

# Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen

## Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur

(Dr.-Ing.)

von Dipl.-Ing. Thomas Knetsch

geb. am 24. September 1971 in Detmold

genehmigt durch die Fakultät für Verfahrens - und Systemtechnik  
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Ulrich Hauptmanns  
Prof. Dr.-Ing. Leonidas Kamarinopoulos  
Dr. Bert Raeymaekers

Eingereicht am 30. Oktober 2003

Promotionskolloquium am 02. Juli 2004

## **Danksagung**

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Anlagentechnik und Anlagensicherheit des Instituts für Apparate und Umwelttechnik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg.

Für die Möglichkeit der Bearbeitung des Themas, die vielen Anregungen, fachlichen Unterstützungen und die angenehme Arbeitsatmosphäre möchte ich mich besonders bei dem Leiter des Lehrstuhls für Anlagentechnik und Anlagensicherheit Herrn Prof. Dr.-Ing. Ulrich Hauptmanns bedanken.

Weiterhin danke ich Prof. Dr.-Ing. Leonidas Kamarinopoulos für das Interesse sowie die Bereitschaft zur Übernahme des Korreferats.

Herrn Dr. Bert Raeymaekers von der InfraServ GmbH & Co. Gendorf KG danke ich besonders für die Bereitstellung der Informationen zur industriellen Kläranlage und die fortwährende, die Arbeit fördernde fachliche Unterstützung sowie die bereitwillige Übernahme des Korreferats. Dank gilt auch den Mitarbeitern des Produktbereichs Entsorgung, die mich immer mit Informationen und Daten versorgt haben.

Prof. Dr.-Ing. habil. Siegfried Bussenius<sup>†</sup> danke ich für die vielen Hinweise, Anregungen und immer währende Bereitschaft zur Diskussion bei der Anfertigung meiner Arbeit. Die vielen Stunden kritischer Auseinandersetzung werden unvergessen bleiben.

Danken möchte ich auch allen Mitarbeitern des Lehrstuhls, die mich bei der Durchführung und Anfertigung der Arbeit unterstützt haben.

Ganz herzlich möchte ich mich bei meinen Eltern und meiner Frau Claudia für ihre Geduld und Unterstützung bedanken sowie bei meiner Tochter Lina, die oft auf ihren Papa verzichten musste.

Glindenberg, im August 2004

## **Zusammenfassung**

Ingenieurmäßige Berechnungen sind mit Unsicherheiten behaftet. Diese betreffen die verwendeten Modelle sowie deren Eingangsdaten. Im allgemeinen werden Unsicherheiten in Auslegungsrechnungen nicht explizit berücksichtigt; stattdessen werden Rechenergebnisse mit empirischen Sicherheitsfaktoren beaufschlagt. Dies geschieht, um unzureichende und möglicherweise gefährdende Auslegungen technischer Systeme zu vermeiden, andererseits führt dies häufig zu übermäßigen Auslegungen. Will man realistischere Systeme erstellen, so müssen die Modell- und Datenunsicherheiten in das mathematische Modell einbezogen werden. Dazu müssen die Unsicherheiten mathematisch beschrieben, dargestellt und durch die Rechnung getragen werden.

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Verfahren für die Auslegung von Anlagen der Verfahrenstechnik entwickelt. Dies ermöglicht es, Modell- und Datenunsicherheiten zu berücksichtigen mit dem Ziel, realitätsnäher zu planen und somit die Sicherheit der Anlage zu verbessern. Die Modellierung beruht dann auf einer breiteren Basis an Wissen und wird dadurch auf ein besseres, höheres Niveau gehoben.

Das hier vorgestellte Verfahren beinhaltet die Auswahl und Implementierung einer Methode zur Beschreibung und Berücksichtigung von Unsicherheiten in Auslegungsrechnungen sowie deren Fortpflanzung. Des Weiteren werden die unsicheren Rechenergebnisse bewertet.

Es wurde an zwei Industriebeispielen erfolgreich gezeigt, dass durch den Einsatz des entwickelten Verfahrens eine Wahrscheinlichkeitsaussage über die Einhaltung vorgeschriebener Grenzwerte möglich ist. Der Vergleich von Messdaten mit berechneten Werten zeigte, dass die Berücksichtigung von Unsicherheiten bei Simulation gegenüber der konventionellen Vorgehensweise realitätsnähere Werte liefert. Eine Nutzung dieses Verfahrens im Vorfeld der Planung ermöglicht es, Abweichungen zwischen Simulation (Auslegung) und Realität (nach dem Bau eines Apparates oder der Errichtung einer Anlage) zu minimieren.

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>EINLEITUNG</b>	<b>1</b>
1.1	STAND DER FORSCHUNG	2
1.2	ZIELSTELLUNG DER ARBEIT	8
1.3	ABGRENZUNG UND VORGEHENSWEISE	10
1.4	GLIEDERUNG DER ARBEIT	11
<b>2</b>	<b>UNSICHERHEITEN</b>	<b>13</b>
2.1	BEGRIFFSBESTIMMUNGEN	14
2.2	PROBABILISTISCHE BEHANDLUNG VON UNSICHERHEITEN	15
2.2.1	<i>Modellunsicherheit</i>	15
2.2.2	<i>Datenunsicherheit</i>	21
2.2.3	<i>Behandlung aleatorischer und epistemischer Unsicherheiten</i>	29
2.2.3.1	Zusammenhang zwischen Unsicherheit und Information	29
2.2.3.2	Behandlung nach VGW 1	33
2.2.3.3	Behandlung nach VGW 2	33
2.2.4	<i>Unsicherheit und Entropie</i>	34
2.3	FORTPFLANZUNG VON UNSICHERHEITEN DURCH RECHNUNGEN	37
2.3.1	<i>Monte-Carlo-Methode</i>	37
2.3.2	<i>Darstellung und Auswertung</i>	40
2.3.3	<i>Zufallszahlen</i>	43
<b>3</b>	<b>KONZEPT ZUR BERÜCKSICHTIGUNG DER UNSICHERHEITEN</b>	<b>48</b>
<b>4</b>	<b>AUSLEGUNG VON APPARATEN UNTER BERÜCKSICHTIGUNG VON ALEATORISCHEN UND EPISTEMISCHEN DATENUNSICHERHEITEN</b>	<b>50</b>
4.1	MODELL ZUR SIMULATION DES DYNAMISCHEN VERHALTENS EINES KONDENSATORS	51
4.2	BEHANDLUNG UND FORTPFLANZUNG DER UNSICHERHEITEN DER EINGABEPARAMETER	58
4.2.1	<i>Abhängigkeiten der Parameter von der Temperatur, dem Druck und der Gaszusammensetzung</i>	59
4.2.2	<i>Behandlung der unsicheren Parameter</i>	65
4.2.3	<i>Entropie als Entscheidungskriterium</i>	71
4.3	SIMULATION EINES KONDENSATORS UNTER BETRIEBSBEDINGUNGEN	73
<b>5</b>	<b>SIMULATION UND ANALYSE EINER KOMPLEXEN BIOLOGISCHEN KLÄRANLAGE UNTER BERÜCKSICHTIGUNG VON MODELL- UND PARAMETERUNSICHERHEITEN SOWIE STOCHASTISCHER EFFEKTE</b>	<b>77</b>
5.1	PRINZIP DES BELEBUNGSVERFAHRENS	79
5.2	ANFORDERUNG UND LÖSUNGSANSATZ	80
5.3	MODELLIERUNG VON ABWASSERREINIGUNGSANLAGEN	84

5.3.1	<i>Beschreibung der Abwasserreinigungsanlage</i>	84
5.3.1.1	Anlage vor dem Umbau	84
5.3.1.2	Ertüchtigte biologische Reinigungsanlage (Anlage nach dem Umbau)	85
5.3.2	<i>Dynamisches Modell für die Simulation von komplexen Belebtschlammverfahren</i>	86
5.3.3	<i>Parameter</i>	88
5.4	BEHANDLUNG UND FORTPFLANZUNG DER STOCHASTISCHEN EFFEKTE UND UNSICHERHEITEN VON MODELLPARAMETERN	91
5.4.1	<i>Modellunsicherheiten</i>	91
5.4.2	<i>Datenunsicherheiten</i>	95
5.5	UMSETZUNG DES KONZEPTS	96
5.5.1	<i>Auswahl der Simulationssoftware</i>	96
5.5.2	<i>Strategie der Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten</i>	98
5.5.3	<i>Umsetzung der Kläranlage in SIMBA</i>	101
5.6	DYNAMISCHE SIMULATION DER ABWASSERREINIGUNGSANLAGE	102
5.6.1	<i>Kalibrierung des Modells</i>	103
5.6.2	<i>Modellierung der modifizierten Abwasseranlage</i>	105
5.6.3	<i>Modellierung der umgebauten Abwasseranlage</i>	110
5.7	ZUSAMMENFASSUNG DER KLÄRANLAGENANALYSE	113
<b>6</b>	<b>ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK DER ARBEIT</b>	<b>115</b>
<b>7</b>	<b>LITERATUR</b>	<b>117</b>
	<b>ANHANG</b>	<b>131</b>
A1	VERTEILUNGEN UND TRANSFORMATIONSGLEICHUNGEN	131
A2	DATEN UND TABELLEN ZUM WÄRMETAUSCHER	137
A3	DATEN UND TABELLEN ZUR KLÄRANLAGE	147

## BILDVERZEICHNIS

Bild 1-1: Veranschaulichung des Sicherheitskonzepts technischer Anlagen .....	10
Bild 2-1: Strategie bei der Modellierung technisch naturwissenschaftlicher Zusammenhänge.....	16
Bild 2-2: Prinzipielle Vorgehensweise bei Fall E3 .....	18
Bild 2-3: Normierte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für den Datensatz aus Tabelle 2-3.....	28
Bild 2-4: Zusammenhang zwischen Information und Unsicherheit bezogen auf ein Modell .....	31
Bild 2-5: Ablauf der Analyse für ein Modell unter Einbeziehung der stochastischen Parameter während einer Simulation – Umsetzung der VGW 1 .....	39
Bild 2-6: Aufbau der Ergebnismatrix $\mathbb{A}_{(m,n,k)}$ .....	41
Bild 2-7: Ergebnisdarstellung einer simulierten Prozessgröße.....	42
Bild 3-1: Globale Struktur des Verfahrens (Vorgehensweise der Analyse).....	48
Bild 4-1: Teilanlage Reichgasreinigung .....	51
Bild 4-2: Schema des Wärmetauschers (a) und des Temperaturprofils über einer Zelle (b) .....	53
Bild 4-3: Erwärmung einer Flüssigkeit bei einer konstanten Umgebungstemperatur $T_w$ über die Länge $L$ des Kondensators [142].....	54
Bild 4-4: Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches $\overline{c_{p,i}}$ , aufgetragen über Temperatur und Druck für unterschiedliche Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2.....	61
Bild 4-5: Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches $\overline{c_{p,i}}$ , aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar bei unterschiedlichen Zusammensetzungen (siehe Tabelle 4-2) .....	62
Bild 4-6: Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches $\overline{c_{p,i}}$ , aufgetragen über den Druck, bei einer Temperatur von 131,9°C bei unterschiedlichen Zusammensetzungen (siehe Tabelle 4-2) .....	62
Bild 4-7: Darstellung der Temperatur- und Druckabhängigkeit für die spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches $\overline{c_{p,i}}$ (Messung April 1997) .....	63

Bild 4-8: Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches $\overline{c_{p,i}}$ , aufgetragen über der Temperatur bei einem Druck von 19,4 bar bei der Gaszusammensetzung vom April 1997 (siehe Tabelle 4-2) .....	63
Bild 4-9: Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches $\overline{c_{p,i}}$ , aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar bei der Gaszusammensetzung vom April 1997 (siehe Tabelle 4-2) .....	64
Bild 4-10: Histogramm von $\overline{c_{p,i}}$ bei 10000 Spielen .....	70
Bild 4-11: VGW 1 bei der Modellierung des Wärmetauschers .....	71
Bild 4-12: VGW 2 bei der Modellierung des Wärmetauschers .....	71
Bild 4-13: Simulierte Kondensatorausgangstemperaturen (Fälle 1 und 2) für unterschiedliche Kondensatstände nach VGW 1 .....	74
Bild 4-14: Simulierte Kondensatorausgangstemperaturen (Fälle 1 und 2) für unterschiedliche Kondensatstände nach VGW 2 .....	75
Bild 5-1: Behandeltes Abwasser nach Behandlungsarten. ....	78
Bild 5-2: Prinzip des Belebungsverfahrens zur Abwasserreinigung .....	79
Bild 5-3: Eingangs- und Zielgrößen bei der statischen Bemessung und der dynamischen Simulation von Kläranlagen [160] .....	81
Bild 5-4: Prinzipskizze der biologischen Reinigungsstufe vor Umbau .....	85
Bild 5-5: Prinzipskizze der ertüchtigten biologischen Reinigungsstufe .....	86
Bild 5-6: Stoffgruppen und Prozesse des ASM1 .....	87
Bild 5-7: Vergleich der Modellansätze .....	93
Bild 5-8: Strategie zur Kläranlagensimulation unter Berücksichtigung von Unsicherheiten .....	99
Bild 5-9: Vereinfachtes Verfahrensfliessbild der modifizierten Kläranlage in SIMBA ..	101
Bild 5-10: Submodell des Blocks „BLB Nitri“ .....	101
Bild 5-11: Unter-Submodell des Blocks „BLB Nitri“ .....	102
Bild 5-12: Ergebnisse der Kalibrierung – CSB (1-2) .....	104
Bild 5-13: Ergebnis der Kalibrierung – Nitrat (3-4) .....	104
Bild 5-14: Ergebnisse der Kalibrierung – Ammonium (5-6) .....	105
Bild 5-15: Ergebnis der Simulationen – CSB (1-2) .....	107
Bild 5-16: Ergebnis der Simulationen – Nitrat (3-4) .....	108
Bild 5-17: Ergebnis der Simulationen – Ammonium (5-6) .....	109
Bild 5-18: Ergebnis der Simulationen nach Umbau – CSB .....	112

Bild 5-19: Ergebnis der Simulationen nach Umbau – Nitrat .....	112
Bild 5-20: Ergebnis der Simulationen nach Umbau – Ammonium .....	112
Bild A 1: Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches $\bar{\lambda}_i$ aufgetragen über Temperatur und Druck für unterschiedliche Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2..	137
Bild A 2: Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches $\bar{\lambda}_i$ aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2.....	138
Bild A 3: Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches $\bar{\lambda}_i$ aufgetragen über den Druck, bei einer Temperatur von 131,9°C, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2.....	138
Bild A 4: Darstellung der Temperatur- und Druckabhängigkeit für die Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches $\bar{\lambda}_i$ (Messung April 1997).....	139
Bild A 5: Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches $\bar{\lambda}_i$ aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2.....	139
Bild A 6: Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches $\bar{\lambda}_i$ aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2.....	140
Bild A 7: Dynamische Viskosität des Gasgemisches $\bar{\eta}_i$ aufgetragen über Temperatur und Druck für unterschiedliche Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2.....	140
Bild A 8: Dynamische Viskosität des Gasgemisches $\bar{\eta}_i$ aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2.....	141
Bild A 9: Dynamische Viskosität des Gasgemisches $\bar{\eta}_i$ aufgetragen über den Druck, bei einer Temperatur von 131,9°C, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2.....	141
Bild A 10: Darstellung der Temperatur- und Druckabhängigkeit für die Dynamische Viskosität des Gasgemisches $\bar{\eta}_i$ (Messung April 1997).....	142

Bild A 11: Dynamische Viskosität des Gasgemisches $\overline{\eta}_i$ aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2.....	142
Bild A 12: Dynamische Viskosität des Gasgemisches $\overline{\eta}_i$ aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2.....	143
Bild A 13: Dichte des aufzuheizenden Gasesgemisches $\overline{\rho}_i$ aufgetragen über Temperatur und Druck für unterschiedliche Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2.....	143
Bild A 14: Dichte des aufzuheizenden Gasesgemisches $\overline{\rho}_i$ aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2.....	144
Bild A 15: Dichte des aufzuheizenden Gasesgemisches $\overline{\rho}_i$ aufgetragen über den Druck, bei einer Temperatur von 131,9°C, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2.....	144
Bild A 16: Darstellung der Temperatur- und Druckabhängigkeit für die Dichte des aufzuheizenden Gasesgemisches $\overline{\rho}_i$ (Messung April 1997).....	145
Bild A 17: Dichte des aufzuheizenden Gasesgemisches $\overline{\rho}_i$ aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2.....	145
Bild A 18: Dichte des aufzuheizenden Gasesgemisches $\overline{\rho}_i$ aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2.....	146

## TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 2-1: Fälle die bei der Behandlung von Modellen zu unterscheiden sind .....	16
Tabelle 2-2: Fälle, die bei der Behandlung von Daten zu unterscheiden sind .....	22
Tabelle 2-3: Datensatz .....	27
Tabelle 2-4: Situationen die eine unterschiedliche Behandlung von Unsicherheiten begründen.....	30
Tabelle 4-1: Eingangsparameter des Kondensatormodells .....	58
Tabelle 4-2: Reichgasanalyse des Zulaufstromes .....	59
Tabelle 4-3: Parameterabhängigkeit von Temperatur, Druck und Zusammensetzung des Reichgases.....	65
Tabelle 4-4: Eingangstemperatur des Gasgemisches in den Kondensator $T_{ie}$ .....	66
Tabelle 4-5: Bestimmung der optimalen Verteilung für $T_{ie}$ .....	66
Tabelle 4-6: Beschreibung der unsicheren Größen .....	67
Tabelle 4-7: Auslegungs- und Betriebsparameter .....	68
Tabelle 4-8: Sprungantwortzeit infolge eines Temperatursprunges $T_{ie}$ von 388,5 auf 392,5K .....	75
Tabelle 5-1: Voraussetzungen zur dynamischen Simulation einer Kläranlage [6].....	84
Tabelle 5-2: Stoffgruppen ASM1 (Vektor $\underline{x}_{BB}$ ) .....	87
Tabelle 5-3: Stöchiometrische und kinetische Parameter ASM1 (Vektor $\underline{y}_{PKSF}$ ).....	89
Tabelle 5-4: Daten zum Bild 5-7 .....	94
Tabelle 5-5: Programme zur dynamischen Simulation von Kläranlagen auf der Grundlage des ASM 1 .....	96
Tabelle 5-6: Simulationsstadien .....	100
Tabelle A 1: Stoffdaten der Komponenten bei $T = 131,9^{\circ}\text{C}$ und $p = 19,4$ bar.....	137
Tabelle A 2: Zusammenhänge zwischen den im ASM 1 und modifizierten ASM 1 definierten Stoffgruppen und Prozessen .....	148
Tabelle A 3: Differentialgleichungen für die Umsetzungen der im ASM 1 definierten Stoffgruppen .....	150
Tabelle A 4: Darstellung des Modellansatzes ASM 1 in der Matrixschreibweise.....	151
Tabelle A 5: Stöchiometrische und kinetische Parameter ASM1 unter Berücksichtigung der stochastischen Effekte und Datenunsicherheiten.....	152

Tabelle A 6: Regen- und Temperaturwerte im BLB unter Berücksichtigung der stochastischen Effekte und Datenunsicherheiten (Daten Stochastik Modul).....	152
Tabelle A 7: Zulaufdaten des Regenereignisses .....	153
Tabelle A 8: Parameter für den allgemeinen Ansatz zur Bestimmung der temperaturabhängigen kinetischen Parameter des ASM1 (Modell M <sub>1</sub> und M <sub>2</sub> ) .....	153
Tabelle A 9: Eingabedatei des Modells für Simulationsstadium 1 und 2 (Zeitraum: 10.09.1997 bis 01.10.1997) .....	153
Tabelle A 10: Eingabedatei des Modells für Simulationsstadium 3 (Zeitraum: 26.11.2001 bis 22.12.2001) .....	153
Tabelle A 11: Zu- und Ablaufparameter im Simulationszeitraum 27.11.01 bis 23.12.01.....	155
Tabelle A 12: Zu- und Ablaufparameter im Simulationszeitraum 26.11.2001 bis 22.12.2001 .....	156

## SYMBOLVERZEICHNIS

### Alphanumerische Anfangszeichen

a	Verteilungsparameter, oberer beobachteter Grenzwert, Gleichverteilung
$A_{\text{eff}}$	effektive Austauschfläche des Wärmetauschers
$A_{(m,n,k)}$	Ergebnismatrix, Index (k) gibt die Seite an, die Indizes (n, m) bestimmen die Zeile (n) und Spalte (m) im Rahmen der Seite
b	Verteilungsparameter, unterer beobachteter Grenzwert, Gleichverteilung
b	Verteilungsparameter, Formparameter, Weibullverteilung
b	Verteilungsparameter, Formparameter, Gammaverteilung
$b_A$	Zerfallskonstante, autotroph
$b_H$	Zerfallskonstante, heterotroph
c	Konzentration, Edukt
c	Verteilungsparameter, Betaverteilung
$\overline{c_{p,i}}$	spezifische Wärmekapazität, Gasgemisch
$c_{p,\text{st}}$	spezifische Wärmekapazität, Stahl
d	Tage
d	Verteilungsparameter, Betaverteilung
D	Maß für die Güte der Darstellung beim Anpassungstest, Summe der quadrierten Differenzen zwischen empirischen und theoretischen Werten
E	Erwartungswert einer Verteilung
E	Aktivierungsenergie
$f_p$	Anteil partikulärer Produkte am Zerfall von Biomasse
$F(x_k)$	theoretische Wahrscheinlichkeitsverteilung mit den Werten $x_k$
$\hat{F}_k$	empirische Verteilungsfunktion
H	Höhe des Kondensatstandes
$i_{XB}$	Stickstoffgehalt der Biomasse
$i_{XP}$	Stickstoffgehalt von $X_P$

$k$	Geschwindigkeitskonstante einer Reaktion
$k$	Wärmedurchgangskoeffizient
$k_0$	prä-exponentieller Faktor, Arrheniusansatz
$k_a$	Ammonifikationsgeschwindigkeit
$k_h$	maximale Hydrolyserate
$K$	Anzahl aller Werte / Parameter / Komponenten
$K_{ALK,A}$	Sättigungsbeiwert Alkalinität, autotroph
$K_{ALK,H}$	Sättigungsbeiwert Alkalinität, heterotroph
$K_d$	Sterbekoeffizienten
$K_{NH}$	Sättigungsbeiwert
$K_{NHNO}$	Schaltfaktor für die $NO_3$ -Inkorporation, heterotroph
$K_{NO}$	Sättigungsbeiwert
$K_{O,A}$	Sättigungsbeiwert
$K_{O,AN}$	Sättigungsbeiwert Hydrolyse unter anaeroben Bedingungen
$K_{O,H}$	Sättigungsbeiwert
$K_S$	Sättigungsbeiwert, heterotroph
$K_X$	Sättigungsbeiwert Hydrolyse
$L$	Likelihood-Funktion
$L$	Höhe des Wärmetauschers
$J$	Anzahl aller Modelle
$M$	Modell
$\tilde{M}_k$	molare Masse
$\overline{M \cdot c_p}$	Speicherkapazität einer Zelle
$\tilde{n}_k$	molare Stoffmenge
$N$	Anzahl aller Werte für einen Parameter
$N$	Anzahl aller Monte-Carlo-Spiele

NA	Anzahl der Spiele bei der die aleatorischen Parameter variieren, äußere Simulation (Stufe 1)
NE	Anzahl der Spiele, bei der die epistemischen Parameter variieren, innere Simulation (Stufe 2)
p	Wahrscheinlichkeit
P	Wahrscheinlichkeit für die Abweichung vom Mittelwert
P	Anzahl aller epistemisch beeinflussten Parameter
Q	Regenmenge
r	Reaktionsgeschwindigkeit
$r_a$	Rohraußenradius
$r_i$	Rohrinnenradius
R	Anzahl aller aleatorisch beeinflussten Parameter
R	allgemeine Gaskonstante ( $R = 8,313 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ )
R	Anzahl der Rohre im Wärmetauscher
$R_f$	Verschmutzungsfaktor
$s^2$	Verteilungsparameter, Varianz, Normalverteilung
$s^2$	Verteilungsparameter, Varianz, Log-Normalverteilung
$\hat{s}^2$	Verteilungsparameter, geschätzte Varianz
$\hat{s}_r^2$	Verteilungsparameter, asymptotisch erwartungstreue Schätzung für $s^2$
S	Standardabweichung
S	(Shannon-)Entropie
S	gelösten Komponenten im ASM1
$S(\dots \dots)$	bedingte Entropie
$S_{ALK}$	Alkalinität
$S_I$	biologisch inerte, gelöste org. Stoffe
$S_{NH}$	Ammoniak und Ammonium-Stickstoff
$S_{ND}$	biologisch abbaubarer, gelöster org. gebundener Stickstoff

$S_{NO}$	Nitrat- und Nitrit-Stickstoff
$S_O$	Sauerstoff
$S_S$	biologisch rasch abbaubare, gelöste org. Stoffe, Substrat
$t$	Zeit
$T$	Temperatur
$T_i$	Gastemperatur im Wärmetauscher
$T_{ie}$	Eingangstemperatur des Gases in den Wärmetauschers
$T_{ia}$	Ausgangstemperatur des Gases aus dem Wärmetauscher
$V$	Varianz
$\dot{V}_i$	Reichgasvolumenstrom
$\tilde{V}$	Molvolumen ( $\tilde{V} = 22,4136$ l/mol)
$V_k$	Volumenanteil jeder Einzelkomponente
$\dot{W}$	Kapazitätsstrom
$\underline{x}_{BB}$	Vektor, Stoffgruppen im ASM1
$x_{i,j}$	epistemischer Parameter
$X$	partikuläre Komponenten im ASM1
$X_{05}$	5% Fraktile einer Verteilung
$X_{95}$	95% Fraktile einer Verteilung
$X_{BA}$	aktive autotrophe Biomasse
$X_{BH}$	aktive heterotrophe Biomasse
$X_I$	biologisch inerte, partikuläre org. Stoffe
$X_{ND}$	biologisch abbaubarer, partikulärer org. gebundener Stickstoff
$X_P$	partikuläre Zerfallsprodukte der Biomasse
$X_S$	biologisch langsam abbaubare, org. Stoffe
$y_{i,j}$	aleatorischer Parameter
$\underline{y}_{PKSF}$	Vektor, stöchiometrische und kinetische Parameter ASM1

$Y_A$	Ausnutzungskoeffizient autotroph
$Y_H$	Ausnutzungskoeffizient heterotroph
$Z$	Anzahl aller Zellen
$Z_n$	Zufallszahl, gleich verteilt zwischen [0,1]

### Griechische Anfangszeichen

$\alpha_a$	Wärmeübertragungskoeffizient, Kondensationsteil
$\alpha_w$	Wärmeübertragungskoeffizient, Kondensatstau
$\overline{\alpha}_i$	Wärmeübertragungskoeffizient, Gasgemisch
$\varepsilon$	vorgegebene relative Abweichung, Tschebyschewsche Ungleichung
$\gamma$	Eulerzahl (~2,7182)
$\Gamma$	Gammaverteilung
$\eta$	Verteilungsparameter, Maßstabparameter, Weibullverteilung
$\overline{\eta}_i$	dynamische Viskosität, Gasgemisch
$\eta_g$	Korrekturfaktor für $\mu_H$ unter anoxischen Bedingungen
$\eta_h$	Korrekturfaktor für Hydrolyse unter anoxischen Bedingungen
$\eta_{H,AN}$	Korrekturfaktor Hydrolyse unter anaeroben Bedingungen
$\overline{\lambda}_i$	Wärmeleitfähigkeit, Gasgemisch
$\lambda$	Verteilungsparameter, Exponentialverteilung
$\lambda$	Verteilungsparameter, Maßstabparameter, Gammaverteilung
$\lambda_{st}$	Wärmeleitfähigkeit, Stahl
$\mu$	Verteilungsparameter, Mittelwert, Normalverteilung
$\mu$	Verteilungsparameter, Mittelwert der Logarithmen, Log-Normalverteilung
$\hat{\mu}$	Verteilungsparameter, geschätzter Mittelwert
$\hat{\mu}_A$	maximale Wachstumsgeschwindigkeit, autotrophe Biomasse

$\hat{\mu}_H$	maximale Wachstumsgeschwindigkeit, heterotrophe Biomasse
$\mu_{ges}$	Gesamtwachstumsrate der Mikroorganismen
$\pi$	Zahl Pi
$\rho$	Korrelationskoeffizient
$\bar{\rho}_i$	mittlere Dichte, Gasgemisch
$\rho_{st}$	Dichte, Stahl
$\sigma^2$	Varianz
$\xi$	Druckverlustkoeffizient

### **Mathematische Operatorzeichen**

$\Delta$	Differenz
$d$	gewöhnliches Differenzial
$\partial$	partiellles Differenzial
<b>mod</b>	Modulo-Operation
$\Sigma$	Summe
$f(x)$	Funktion, allgemein

### **Abkürzungen**

AB	Ablauf Ausgleichsbehälter
AGB	Ausgleichsbecken
ANKA	Ablauf Nachklärbecken filtriert
ANKO	Ablauf Nachklärbecken original
ASM	Activated Sludge Model
BLB	Belebungsbecken
BSB	Biochemischer Sauerstoffbedarf
CSB	Chemischer Sauerstoffbedarf

CSTR	idealer Rührkesselreaktor
EWG	Einwohnergleichwert
IAWPRC	Task Group on Mathematical Modelling for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment
IAWQ	International Association on Water Quality
LOCA	Analysen des Kühlmittelausfalles
NK	Nachklärbecken
o. U.	Simulation ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten
PSA	probabilistische Sicherheitsanalysen
RS	Rücklaufschlamm
ÜSS	Überschussschlamm
$VBB_{\text{gesamt}}$	gesamtes Nutzvolumen der Belebungsbecken
Vd	Denitrifikationsbeckenvolumen
VGW	Vorgehensweise
VK	Vorklärung
WHG	Gesetz zur Ordnung des Wasserhaushalts
ZARA	zentrale Abwasserreinigungsanlage, Kläranlage
ZR	Zeitraum

### **Dimensionslose Kennzahlen**

Nu	Nusselt Zahl
Pr	Prandtlzahl
Re	Reynoldszahl

## 1 Einleitung

Die Entwicklung und die Planung neuer Verfahren, die Errichtung, der Betrieb und die Sanierung von Anlagen erfordert in immer stärkerem Maße den Einsatz moderner Auslegungsmethoden, die auf der Verwendung geeigneter mathematischer Modelle und den dazu erforderlichen (zumeist experimentellen) Daten beruhen, da nur so die zweckmäßige Beschaffenheit und funktionelle Sicherheit technischer Systeme gewährleistet werden kann. Dies ist weitgehend unabhängig von der Art der konkret vorliegenden Verfahren oder Anlagen und betrifft chemische Reaktoren und Apparate ebenso wie Abwasserreinigungsanlagen und vieles andere mehr.

Die Modellierung dient der Findung von Auslegungsentscheidungen bei komplexen Systemen. Durch sie sollen die Zusammenhänge zwischen verschiedenen Eingabedaten und den Ausgangsgrößen verdeutlicht und die Reaktion des Systems bei Veränderungen der Eingangsdaten herausgestellt werden.

Zentrale Bedeutung hat demnach die Qualität der Modellierung, die durch die verwendeten Modelle und Daten bestimmt wird. Da Modelle und Daten nur eine Annäherung an die Realität darstellen [1], sind alle Ingenieurberechnungen mit Unsicherheiten behaftet [1, 2]. Bleiben Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen unberücksichtigt, so kann dies zu unzureichenden und möglicherweise gefährdenden Auslegungen technischer Systeme führen [3]. Gewöhnlich versucht man die Unsicherheiten durch Sicherheitsfaktoren auszugleichen [4]. Allerdings ist bei Nutzung von Sicherheitsfaktoren nicht auszuschließen, dass sowohl unzureichende Auslegungen als auch Überauslegungen möglich sind, wodurch die Störanfälligkeit der Anlage steigen kann [5, 6]. Das Problem der adäquaten Berücksichtigung von Unsicherheiten steigt mit der Komplexität der Modellierung; die Vorhersage zukünftiger Systemzustände wird schwieriger [7]. Deshalb ist es sinnvoller, die Unsicherheiten explizit zu berücksichtigen und somit die Wahrscheinlichkeit für Fehlauslegungen zu senken [3]. Dadurch wird die Modellierung auf ein höheres Niveau gehoben. Die sich daraus ergebenden Vorteile sind vornehmlich [4]:

- Die genutzte Informationsbasis bei der Anlagen- und Apparateauslegung wird unter Einbeziehung des vorhanden relevanten Wissens breiter. Es können Informationen aus Experimenten sowie bestehenden vergleichbaren Anlagen berücksichtigt werden.
- Die unterschiedliche Qualität der Eingangsdaten wird berücksichtigt. Der Einfluss des unterschiedlichen Informationsgehaltes der Daten spiegelt sich im Endergebnis wider.
- Die Glaubwürdigkeit der Ergebnisse wächst.
- Eine Quantifizierung der Auswirkungen von Sicherheitszuschlägen wird möglich. Man erhält damit eine Entscheidungsgrundlage für die Sicherheitsfaktoren.
- Es ergeben sich Hinweise für Bereiche, in denen Modelle und Daten verfeinert werden sollten.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, Methoden zu entwickeln, um Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen explizit zu berücksichtigen. Damit kann realitätsnäher geplant werden und die Anzahl von Anforderungen an die Sicherheitseinrichtungen einer Anlage reduziert werden. Im Ergebnis wird die Anlagensicherheit erhöht. An zwei Industriebeispielen wird dies mit Erfolg gezeigt.

## **1.1 *Stand der Forschung***

Geht man näher auf den Begriff Unsicherheit und seine Verwendung ein, so stellt man fest, dass dieser Begriff sowohl als subjektiver Ausdruck für Unwissen bezüglich eines Sachverhalts und einen entsprechenden emotionalen Zustand verwendet wird, als auch als objektiver Ausdruck dafür, dass zukünftige Ereignisse noch nicht festgelegt sind [8]. Mithin stellt sich die Frage, ob Unsicherheit ein Phänomen ist, eine Eigenschaft der realen Welt oder ein Bewusstseinszustand für eine Situation, in welcher der Mensch sich zu Phänomenen äußert. Dies ist allerdings eine philosophische Frage, die nicht von einem Ingenieur beantwortet werden muss [7].

In den Wissenschaften existieren Definitionen für Unsicherheit nur in begrenztem Maß seit dem Beginn dieses Jahrhunderts. In den Ingenieurwissenschaften wurde

der Begriff der Unsicherheit als Synonym für Zufall, Stochastik, Statistik oder Wahrscheinlichkeit angesehen. Bedingt durch die Erkenntnis, dass die alleinige Fokussierung bei der Modellentwicklung auf die Verfeinerung, z. B. Rechnungen mit mehr Zellen, mehr Gleichungen, etc. nicht ausreichend ist, wird seit Anfang der sechziger Jahre der Begriff der Unsicherheit differenzierter betrachtet. Es werden Methoden zur ihrer Behandlung entwickelt, da Unsicherheiten einen entscheidenden Einfluss auf die rechnerische Auslegung technischer Systeme haben können [9].

Die Ergebnisse von Ingenieurberechnungen basieren auf Modellen und Daten, die nicht genau bekannt sind. Dabei ist zu unterscheiden zwischen Unsicherheiten aufgrund von [9]

- zufälligen Variationen von Einflussgrößen (aleatorische Unsicherheit),
- ungenauer Kenntnis (epistemische Unsicherheit).

Aleatorische Unsicherheiten gehen direkt in die Ingenieurberechnungen ein als Folge der stochastischen Natur der entsprechenden Einflussgrößen (z. B. unterschiedliche Wetterlagen) [9], werden jedoch bislang üblicherweise nicht berücksichtigt.

Epistemische Unsicherheiten sind die Folge ungenauer Kenntnis fester und für den beobachteten Zeitraum als fest vorausgesetzter Größen wie Wahrscheinlichkeiten, zu erwartender Häufigkeiten oder der Parameter physikalischer Modelle. Hinzu kommt, dass häufig Gesetzmäßigkeiten nur näherungsweise beschrieben werden oder beschrieben werden können (z. B. Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Temperatur und Druck) [9].

In der Literatur [10] findet man für die oben aufgeführten Begriffe eine Vielzahl von Beschreibungen, wobei die Unterscheidung bis hin zu den ersten formalen Ansätzen der Wahrscheinlichkeitstheorie im 17. Jahrhundert zurückverfolgbar ist [11].

In [12, 13, 14] findet man generelle Ausführungen zur Unterscheidung der oben aufgeführten Begriffe. Es wird die Diskussion unter dem Aspekt der Erhellung der Unsicherheit betrieben, um die Berechnungen technischer Systeme sicherer zu gestalten mit dem Ergebnis, dass die Unterscheidung für den Analytiker theoretisch

ist [12, 13]. Ihre Anwendung soll vermeiden, dass Unsicherheiten durch Vermengen von Gründen unberücksichtigt bleiben. Winkler [15] sieht dafür jedoch keine zwingende Notwendigkeit; sollte jedoch eine Unterscheidung eingeführt werden, ist die in [12] vorgestellte Vorgehensweise anzuwenden (vgl. Abschnitt 2.2.3.3).

In [16, 17], die u. a. auf den Arbeiten von Apostolakis [12, 13] aufbauen, wird die Unterscheidung und Behandlung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten näher untersucht, mit dem Ergebnis, dass abhängig von der Fragestellung eine unterschiedliche Behandlung empfohlen wird. Auf die einzelnen Situationen wird in Abschnitt 2.2.3.1 eingegangen. [18] spiegelt den derzeitigen Stand der Behandlung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten und deren Behandlung in probabilistischen Sicherheitsanalysen (PSA) wider. Die dort vorgestellten Methoden gehen aber nicht auf die Auslegung von Anlagen ein. Hier werden beide Typen von Unsicherheiten mit probabilistischen Methoden unterschiedlich behandelt. Im Gegensatz dazu wird in [19] die Auffassung vertreten, dass aleatorischen Unsicherheiten mit intervallmathematischen Methoden und epistemische Unsicherheiten probabilistisch behandelt werden müssen. Hingegen wird in [15] die Ansicht vertreten, dass man nicht nur die probabilistische Methode anwenden sollte sondern auch keine Unterscheidung in der Behandlung der beiden Unsicherheiten vorzunehmen ist [14, 20].

Die Untersuchung in der Literatur bezüglich der Behandlung von Unsicherheiten bei der Modellierung komplexer Systeme zeigt, dass die Unsicherheiten zur besseren Behandlung in folgende drei Haupttypen zu unterteilen sind, die aleatorische wie auch epistemische Unsicherheiten beinhalten [10, 21, 22, 23, 24]:

- 1 Modellunsicherheiten;
- 2 Unsicherheiten in den Daten bzw. Parametern, die für das Modell benötigt werden und
- 3 Unsicherheiten bzgl. des zukünftigen Zustandes des Systems.

Betrachtet man die Haupttypen im Detail, so können Modellunsicherheiten vorhanden sein infolge [21]

- 1.1 von Mängeln in der Abbildung der Realität,
- 1.2 von notwendigen mathematischen Vereinfachungen und
- 1.3 von numerischen Ungenauigkeiten oder bzgl. Anzahl, Art und Wirkung eventuell vorhandener Programmfehler, falls ein Programm verwendet wird.

Bezüglich der Daten lassen sich unter anderem folgende Ursachen anführen [3, 4, 25, 26]:

- 2.1 Systematische Fehler (wegen Verzerrungen in Messapparaten und experimentellen Verfahren),
- 2.2 Übertragungsfehler (Scale-up Probleme von Labordaten auf industrielle Bedingungen),
- 2.3 unzureichende Kenntnis der notwendigen Berechnungsdaten (bedingt durch fehlenden Erkenntnisstand),
- 2.4 Zufallsfehler und statistische Schwankungen (aufgrund unvermeidbarer Messfehler),
- 2.5 Veränderlichkeit (infolge von zeitlichen Schwankungen einer Größe mit der Zeit, z.B. die des Wärmeübergangskoeffizienten aufgrund von Strömungsinstabilitäten),
- 2.6 inhärente Zufälligkeiten (z.B. der Einfluss des Wetters auf die Dichte von Stoffen bei deren Lagerung).

Die Gründe für die Unsicherheiten bezüglich des zukünftigen Zustandes des Systems beruhen oftmals auf [22, 27, 28]

- 3.1 der ungenügenden Berücksichtigung der Einflüsse aus dem Zusammenwirken der Komponenten.
- 3.2 Möglichen Linearisierungen anstelle Berücksichtigungen nicht linearer Zusammenhänge, die z. B. zu chaotischem Verhalten führen können.
- 3.3 Nichtberücksichtigungen numerischer Ereignisse mit Einfluss auf den modellierten Sachverhalt.

Die Punkte 1.2 bis 2.3, 3.2 und 3.3 sind den reduzierbaren und die Punkte 2.4 bis 2.6 den nicht reduzierbaren Unsicherheiten zuzuordnen [4, 20, 26]. Die Punkte 1.1 und

3.1 können beiden Arten von Unsicherheiten zugeordnet werden [21]. Das ist eine pragmatische Klassifizierung die davon ausgeht, dass alle Unsicherheiten, die nicht mit vertretbarem Aufwand zu reduzieren sind, aleatorische Unsicherheiten sind. Die übrigen werden den epistemischen Unsicherheiten zugeordnet.

Die Erkenntnis, dass alles Planen auf Wahrscheinlichkeitserwägungen beruht, hat schon früh dazu geführt, anstelle von Sicherheitsfaktoren die Versagenswahrscheinlichkeit zu ermitteln (vgl. [29]). Diese ersten Ansätze im Bereich der Strukturmechanik haben sich zu einem eigenen Forschungsbereich „Stochastische Strukturmechanik“ weiterentwickelt (vgl. [30, 31, 32]). Ansätze zur Behandlung von Unsicherheiten in technischen Berechnungen findet man ab Ende der 60´er Jahre in der verfahrenstechnischen [33, 34, 35, 36] sowie speziell in der abwassertechnischen Literatur [37, 38, 39]. Dabei geht es um die Optimierung der Auslegung von Prozessen, Anlagen und Reaktoren unter ökonomischen und systemtechnischen Gesichtspunkten. In der aufgeführten Literatur werden nur wenige Parameter, vornehmlich die Auslegungsparameter (prä-exponentielle Faktoren oder Kostenfaktoren), als unsicher angenommen und in Form von Fehlergrenzen behandelt [35, 36]. In [34] wird eine Verteilungsfunktion (Rechteckverteilung) für eine unsichere Größen unterstellt und mit dem Erwartungswert dieser Funktion gerechnet wird. Lediglich in [39] wird die Nutzung dieser Methode zur Quantifizierung von Sicherheitsfaktoren angesprochen, aber nicht ausgeführt.

Diwekar [40] erweiterte das Konzept (vgl. [34]); er bietet unterschiedliche Verteilungsfunktionen zur Beschreibung unsicherer Eingangsparemeter an. Im Gegensatz zu den vorgenannten Arbeiten, die lediglich Parametersätze als Ausgabewerte liefern, werden in [40] Dichtefunktionen, Wahrscheinlichkeitsverteilungen und Maßzahlen zur Bestimmung des Einflusses der Unsicherheiten der Eingangsparemeter auf die Endergebnisse angegeben. Diese sind Ergebnis der Anwendung von Monte-Carlo Simulationen zur Fortpflanzung der Unsicherheiten durch die Rechnung. Damit sind Grundlagen für Auslegungsentscheidungen bei unsicheren Daten gelegt, die nach Angaben der Verfasser dem Vergleich unterschiedlicher Technologien, der Kostenanalyse, der Überauslegung, der Fehler- und Sensitivitätsanalyse, der Risikoanalyse, der

Festlegung von Forschungsprioritäten und dem Management sowie der Planung von Forschung dienen können, wobei allerdings keinerlei Betrachtungen zur Anlagensicherheit erfolgen.

In der Anlagensicherheit spielen Unsicherheiten auf mehreren Gebieten eine Rolle. Zunächst seien probabilistische Risikoanalysen genannt. Bereits in der ersten großen Untersuchung dieser Art, der Rasmussen Studie 1975 [41], und in ihrer deutschen Nachfolgeuntersuchung [42] wurden Unsicherheiten der Eingangsgrößen und ihr Einfluss auf das Endergebnis systematisch erfasst, ohne jedoch die aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten in den Ergebnissen zu charakterisieren [3, 14]. Dadurch wurden umfangreiche theoretische Arbeiten initiiert, die unter anderem in [43] und [44] ihren Niederschlag fanden. Schwerpunkt der Arbeiten war die Behandlung von Unsicherheiten von Ausfallraten für technische Komponenten und von Wahrscheinlichkeiten menschlicher Fehler, sowie die stochastischen Randbedingungen bei Unfallfolgenrechnungen. Studien auf dem Gebiet der Risiken verfahrenstechnischer Anlagen wurden hingegen ohne Berücksichtigung von Unsicherheiten durchgeführt [45, 46]. Dies gilt auch für die danach, insbesondere in den Niederlanden durchgeführten Untersuchungen. Einen Überblick findet man in [9].

Der zweite bedeutende Aspekt schließt unmittelbar an die obigen Ausführungen an. Die Sicherheit einer Anlage wird bestimmt durch die Anzahl der Anforderungen an die Sicherheitssysteme, deren Nichtverfügbarkeit im Anforderungsfall und Ausfallwahrscheinlichkeit während des Anforderungsfalls. Somit bietet sich die Möglichkeit der Erhöhung der Sicherheit durch Senkung der drei genannten Parameter. Die Auslegung unter Berücksichtigung von Unsicherheiten erlaubt es mit größerer Wahrscheinlichkeit Anlagenbetriebsbereiche so zu legen, dass Parameterüberschreitungen, die zu Anforderungen an Sicherheitssysteme führen, seltener werden. Dies wird in einer Reihe von Arbeiten deutlich. Dabei werden in [47] Fragen aus der Kernreaktorsicherheit behandelt, während [49, 50] auf Unsicherheiten in Berechnungen der chemischen Verfahrenstechnik eingehen. [51, 52, 53] zeigen die Berücksichtigung von Unsicherheiten in der Umwelttechnik und [54] den Einfluss und die Behandlung der Einkoppelung von Störgrößen in stromführende Kabel und Schaltbausteine, d. h. von Unsicherheiten auf

sicherheitstechnisch relevante elektrotechnische Berechnungen, wobei nur [4] neben der Berücksichtigung von Unsicherheiten Ansätze zur Interpretation dieser liefert.

Der dritte Aspekt betrifft die Abschätzung von Unfallfolgen. Diese hängen entscheidend von stochastischen Parametern ab. Genannt seien beispielhaft Leckgrößen und -lagen bei Stofffreisetzungen oder Abflugwinkel und Abflugenergie von Behälterbruchstücken, die in [55] und [56] mit probabilistischen Methoden behandelt werden.

Die Identifizierung und Berücksichtigung von Unsicherheiten bei Ingenieurberechnungen spielt auf Grund des großen Gefahrenpotentials von Chemieanlagen, Kernkraftwerken und anderen komplexen Systemen eine zentrale Rolle [43, 57]. Bisher sind lediglich auf dem Gebiet der Kerntechnik Programmsysteme zu finden, die die Berücksichtigung von Unsicherheiten zulassen. In den meisten Fällen sind sie auf bestimmte Anwendungsbereiche beschränkt und auf spezielle Probleme zugeschnitten, wie z. B. Probabilistische Modelle für die Ausbreitung von Bränden in Kabeltrassen, die Einschätzung von Unsicherheiten die verbunden sind mit einem Kernschmelzeunfall, etc. [58]. Diese Programmsysteme sind jedoch nicht für die Auslegung konzipiert. Bis heute finden sich außer auf dem vorgenannten Gebiet keine ganzheitlichen Konzepte zur Berücksichtigung von Unsicherheiten mit dem Ziel, die Anlagensicherheit zu erhöhen. Diese Tatsache bestätigt den Bedarf für die Entwicklung eines integrierten Verfahrens.

## ***1.2 Zielstellung der Arbeit***

In der vorliegenden Arbeit wird ein Verfahren entwickelt, das es ermöglicht, Modell- und Datenunsicherheiten zu berücksichtigen, die in ingenieurmäßigen Berechnungen für Auslegungsentscheidungen vorhanden sind, unter dem Aspekt, realitätsnäher zu planen und somit die Anlagensicherheit zu verbessern. Die Modellierung wird dadurch auf ein besseres, höheres Niveau gehoben. Will man realistischere Systeme erstellen, so müssen die Modell- und Datenunsicherheiten in das mathematische Modell einbezogen werden [10, 59]. Dazu müssen die Unsicherheiten mathematisch

beschrieben, dargestellt und durch die Rechnung getragen werden. Das Verfahren wird für die Auslegung von Anlagen der Verfahrenstechnik entwickelt, lässt sich aber ohne Schwierigkeiten auf andere Industrieanlagen übertragen. Es beinhaltet die Auswahl und Implementierung einer Methode zur Beschreibung und Berücksichtigung von Unsicherheiten in Auslegungsrechnungen sowie deren Fortpflanzung. Des Weiteren werden die unsicheren Rechenergebnisse statistisch ausgewertet.

Es wird gezeigt, dass durch die Berücksichtigung von Unsicherheiten bei der Modellierung eine Wahrscheinlichkeitsaussage über die Einhaltung vorgeschriebener Grenzwerte möglich ist. Der Vergleich von Messdaten mit berechneten Werten soll zeigen, dass die Berücksichtigung der im vorigen Abschnitt angesprochenen Unsicherheiten bei Simulation gegenüber der konventionellen Vorgehensweise realitätsnähere Werte liefert. Eine Nutzung dieses Verfahrens im Vorfeld der Planung ermöglicht es, Abweichungen zwischen Simulation (Auslegung) und Realität (nach dem Bau eines Apparates oder der Errichtung einer Anlage) zu minimieren. Dadurch wird eine realitätsnähere Planung erreicht. Bei diesem Verfahren werden mehr Informationen als bei einer konventionellen Modellierung verarbeitet. Die Berücksichtigung der Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen führt zu einer Reduktion der (erwarteten) Häufigkeit der auslösenden Ereignisse und somit zu einer Absenkung der (erwarteten) Störfallhäufigkeit. Bei den auslösenden Ereignissen handelt es sich um Ausfälle aufgrund unzureichender Auslegung, solche haben in der Vergangenheit schon zu schweren Unfällen geführt (vgl. [59, 60]).

Die Einordnung von Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen in das Sicherheitskonzept technischer Anlagen wird am Bild 1-1 deutlich, das die Vorgehensweise einer probabilistischen Sicherheitsuntersuchung darstellt.

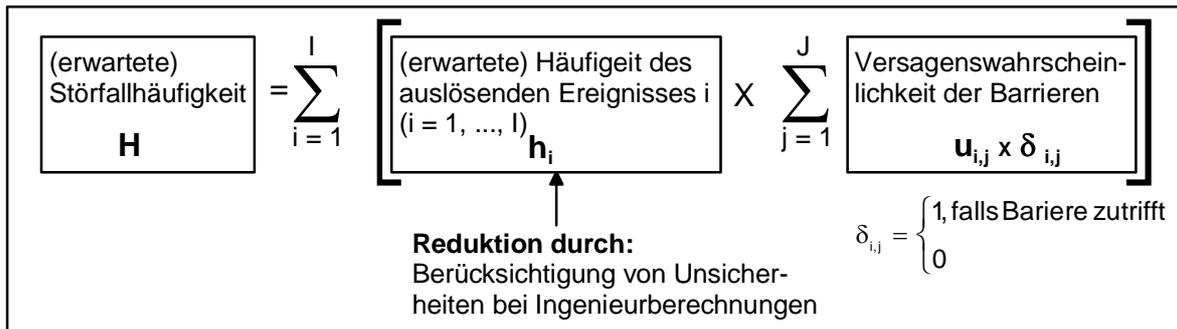


Bild 1-1: Veranschaulichung des Sicherheitskonzepts technischer Anlagen

### 1.3 Abgrenzung und Vorgehensweise

Es wird ein Verfahren zu Berücksichtigung von Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen entwickelt. Dazu werden die vorhandenen Erkenntnisse über Unsicherheiten, deren Unterscheidung, Definitionen, Gründe für ihr Auftreten sowie Methoden zu ihrer Beschreibung, Behandlung und Fortpflanzung gesichtet und zusammengestellt. Die vorhandenen Methoden zur Behandlung und Fortpflanzung von Unsicherheiten werden bezüglich ihrer Anwendbarkeit für die Bearbeitung verfahrenstechnischer Problemstellungen untersucht. Der Widerstreit, der zwischen unterschiedlichen Methoden zur Behandlung von Unsicherheiten besteht (siehe Kapitel 2), wird nicht diskutiert. Ebenso bleiben menschliche Fehler oder Unsicherheiten, die aus diesen resultieren, unberücksichtigt sowie Unsicherheiten, die sich beim Betrieb der Anlage durch das Versagen von Komponenten oder Teilsystemen ergeben. Berücksichtigt werden die im Folgenden näher beschriebenen Punkte.

- Das Hauptkriterium bei der Untersuchung der Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen ist die Entwicklung einer Methode, die die Berücksichtigung von Unsicherheiten in Auslegungsrechnungen ermöglicht. Dabei soll die Voraussetzung geschaffen werden, alle zur Verfügung stehenden Informationen mit einzubeziehen und eine Wahrscheinlichkeitsaussage über die Einhaltung von Grenzwerten zu treffen. Die Anwendung dieser Methode kann die erwartete Häufigkeit (Störfall) auslösender Ereignisse reduzieren.

- Parallel zum Hauptkriterium werden zwei weitere Aspekte zur Erhöhung der Akzeptanz und der praktischen Anwendbarkeit in der Anlagensicherheit berücksichtigt; zum einen wird die Berücksichtigung der Unsicherheiten mit möglichst geringem numerischem Aufwand und zum anderen, falls möglich, durch Ergänzung vorhandener Software zur Simulation verfahrenstechnischer Systeme und Apparate erfolgen.

Erste Tests der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Vorgehensweise werden anhand eines einfachen, häufig eingesetzten Apparates in verfahrenstechnischen Anlagen, einem Wärmetauscher, gezeigt. Dieser ist im vorliegenden Fall Teil einer Anlage zur industriellen Erzeugung von Reichgas. Es werden im Gegensatz zur konventionellen, vorliegenden verfahrenstechnischen Auslegung Parameterunsicherheiten und die stochastische Zusammensetzung des Gasstroms in der stationären und dynamischen Simulation berücksichtigt. Weiterhin wird die Auswirkung auf die verfahrenstechnische Auslegung des Apparates gezeigt.

Daran anschließend wird die Vorgehensweise zur Berücksichtigung von Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen bei der Untersuchung einer komplexen, biologischen industriellen Kläranlage unter dem Gesichtspunkt der Erhöhung der Anlagensicherheit eingesetzt. Dazu erfolgt die dynamische Simulation der Kläranlage unter Einbezug von Modell- und Datenunsicherheiten sowie stochastischer Effekte.

#### **1.4 Gliederung der Arbeit**

Nachdem in Abschnitt 1.1 der Stand von Forschung und Technik bei der Berücksichtigung von Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen aufgezeigt wurde, beschreiben die Abschnitte 1.2 und 1.3 die Möglichkeiten und Grenzen der entwickelten Vorgehensweise. Im Anschluss an diesen Abschnitt wird in Kapitel 2 auf Unsicherheiten, wie Begriffsbestimmungen, deren Behandlung und Fortpflanzung, näher eingegangen. Danach erfolgt eine Übersicht zur Strategie der Vorgehensweise. In Kapitel 4 wird die Vorgehensweise anhand eines industriell

eingesetzten Kondensators und in Kapitel 5 einer industriellen biologischen Kläranlage überprüft. Abschließend werden die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick gegeben.

## 2 Unsicherheiten

In diesem Kapitel werden die Methoden zur Beschreibung von Unsicherheiten in der Anlagensicherheit gesichtet und zusammengestellt. Die aufgeführten Methoden werden bezüglich ihrer Anwendbarkeit in dem zu erstellenden Verfahren untersucht. Es werden Begriffsdefinitionen gegeben und die probabilistische Behandlung und Fortpflanzung von Unsicherheiten mittels der Monte-Carlo-Simulation erläutert [62, 63, 64]. Dabei wird der Zusammenhang zwischen Information und Unsicherheit aufgezeigt und der Begriff der Entropie eingeführt.

Zur Berücksichtigung von Unsicherheiten in Ingenieurrechnungen stehen derzeit eine beträchtliche Anzahl von Theorien und Methoden zur Verfügung, von denen die folgenden im Zusammenhang mit der Anlagensicherheit zu finden sind.

- Methoden der Fehlerrechnung [65, 66, 67, 68, 69],
- Intervallmathematische Methoden [50, 70, 71, 72, 73],
- Möglichkeitstheorie [74, 75],
- Evidenz (Dempster-Shafer) Theorie [76, 77, 78, 79],
- Fuzzy-Set Theorie [80, 81, 82, 83, 84] und
- Probabilistische Theorie (Kolmogoroff, Koopmans, Bayes etc.) [59, 84, 85, 86, 87, 88, 89].

In der Literatur findet man eine Vielzahl von Gründen für die Behandlung von Unsicherheiten und nahezu ebenso viele Methoden [81]. Die Untersuchung der hier aufgeführten Methoden zeigt, dass es keine allgemeingültige Definition für Unsicherheit und deren Behandlung gibt [7]. Daraus resultiert der Widerstreit bezüglich der Eignung der einzelnen Methoden [19].

Unsicherheiten können durch Wahrscheinlichkeiten mathematisch beschrieben werden [15]. Dazu stellt die Wahrscheinlichkeitstheorie geeignete Methoden zur Verfügung. Die Verwendung von Wahrscheinlichkeiten hat sich in Sicherheitsuntersuchungen durchgesetzt [12, 90]. Aus diesem Grund wird im weiteren Verlauf der Arbeit zur Behandlung aller Unsicherheiten diese Theorie

angewendet. Dabei werden die Unsicherheiten durch Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschrieben und durch die Gesamtrechnung hindurch getragen, so dass sich die „Eingangs-Unsicherheiten“ im Endergebnis widerspiegeln.

Die entscheidenden Vorteile der probabilistischen Behandlung von Unsicherheiten sind dabei:

- Die Theorie der Wahrscheinlichkeit ist die beste bekannte und am meisten verwandte, um Unsicherheit zu quantifizieren [3].
- Es gibt klare und eindeutige Regeln für mathematische Operationen.
- Die Nutzung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen bietet den Vorteil, dass am Ende der Berechnungen direkt eine Wahrscheinlichkeitsaussage getroffen werden kann.

## **2.1 Begriffsbestimmungen**

Häufige in dieser Arbeit benutzte Begriffe werden folgend definiert.

- Ein **Parameter** ist die Variable, die als Zeichen für ein beliebiges Element einer vorgegebenen Menge, dem Grundbereich dieses Parameters, steht. Daten bilden den Grundbereich der Variablen. D.h. ein Parameter  $X$  kann  $x_1, \dots, x_n$  Daten haben [91].
- Als **Modelle** werden jene gegenständlichen oder formalen Gebilde bezeichnet, die die Systeme mit mehr oder weniger großem Abstraktionsgrad darstellen. Ein Modell steht für einen Zusammenhang [92].
- Von **Modellunsicherheit** wird gesprochen, wenn nicht sicher ist, ob das Modell das Realsystem unter Berücksichtigung der zu beantwortenden Fragestellung ausreichend genau beschreibt [28].
- Unter **Modellierungsunsicherheit** wird verstanden, ob im jeweiligen Modell alle Einflüsse auf das Modell, oder im Modell selbst, erfasst sind und alle Beziehungen richtig wieder gegeben werden [93].

- **Parameterunsicherheit** steht in einem direkten Zusammenhang mit der Modellierungsunsicherheit und bedeutet, dass eine Variable im Modell nicht sicher ist. D. h. ob alle Einflüsse dieser Variablen hinreichend genau im Modell und auf andere Parameter berücksichtigt werden [28].

Wobei anstelle von „**Parameter**“ häufig auch „**Daten**“ oder „**Eingabe**“ verwandt wird [28].

## **2.2 Probabilistische Behandlung von Unsicherheiten**

Bei der Anwendung der probabilistischen Methode zur Behandlung der Unsicherheiten erfolgt deren Beschreibung durch Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Mithin werden statistische Methoden mit ingenieurtechnischen Berechnungen verbunden. Es wird gezeigt, mit welcher Methode Modell- und Daten- bzw. Parameterunsicherheiten mittels Wahrscheinlichkeitsverteilungen quantifiziert werden können.

### **2.2.1 Modellunsicherheit**

Ein Modell dient der mathematischen Abbildung von Vorgängen in Natur und Gesellschaft, wobei die Natur nur unvollkommen wiedergegeben wird [108]. So kann ein Wärmetauscher durch Energieströme [94], ein Zellenmodell [95] oder eine dreidimensionale Behandlung der Stoff- und Energieaustauschprozesse [96] beschrieben werden. Auswahl und Einsatz der Modelle ist von der Fragestellung abhängig. Dabei unterscheidet sich der Grad der Modellfeinheit / Komplexität.

Da die Leistungsfähigkeit der Computer in den letzten Jahren enorm gestiegen ist, können immer komplexere Modelle zur Simulation eingesetzt werden. Dies erfolgt oft in Erwartung immer besserer Rechenergebnisse. Dies wird jedoch nicht immer erfüllt, da die Fähigkeit eines Modells, einen Systemzustand korrekt vorherzusagen, nicht zuletzt von der Beziehung zwischen Modellqualität und Eingangsdaten abhängt [97]. Mitunter bilden einfachere Modelle besser den Systemzustand ab als komplexe.

Der Grund liegt darin, dass komplexere Modelle zusätzliche Annahmen treffen müssen und Parameter erfordern, die selbst wieder mit Unsicherheiten behaftet sein können, d. h., die Ansprüche an Qualität und Quantität von Eingangsdaten einfacher Modelle sind niedriger [28, 97].

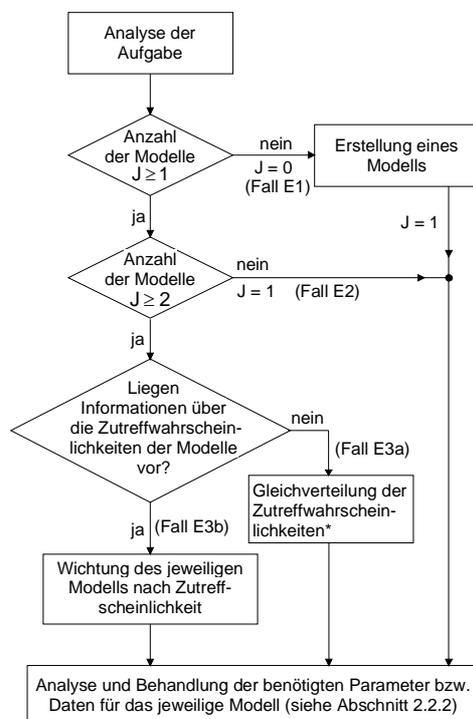
Den Standardrahmen für die probabilistische Behandlung von Modellunsicherheiten bilden [12, 15, 22, 98, 99, 100]. Besonders ist dabei der Übersichtsartikel [100] hervorzuheben. Vorgehensweisen zur pragmatischen Umsetzung sind in [28, 105] zu finden. Daraus lassen sich die in Tabelle 2-1 aufgeführten, zu unterscheidenden Fälle bei unterschiedlicher Anzahl von vorliegenden Modellen, entnehmen. Sie sind im Bild 2-1 dargestellt.

**Tabelle 2-1: Fälle, die bei der Behandlung von Modellen zu unterscheiden sind**

---

Fall E1:	Es ist kein Modell verfügbar ( $J = 0$ ).
Fall E2:	Es ist ein Modell verfügbar ( $J = 1$ ) oder
Fall E3:	Es steht mehr als ein Modell zur Verfügung ( $J \geq 2$ ).
	a Es liegen keine Informationen über die Qualitäten der Modelle vor, d.h. mit welchen Wahrscheinlichkeiten sie zutreffen (Zutreffwahrscheinlichkeiten) oder
	b Es liegen Zutreffwahrscheinlichkeiten für die Modelle vor.

---



\*Prinzip des unzureichenden Grundes (J. Bernoulli und P. S. Laplace)

**Bild 2-1: Strategie bei der Modellierung technisch naturwissenschaftlicher Zusammenhänge**

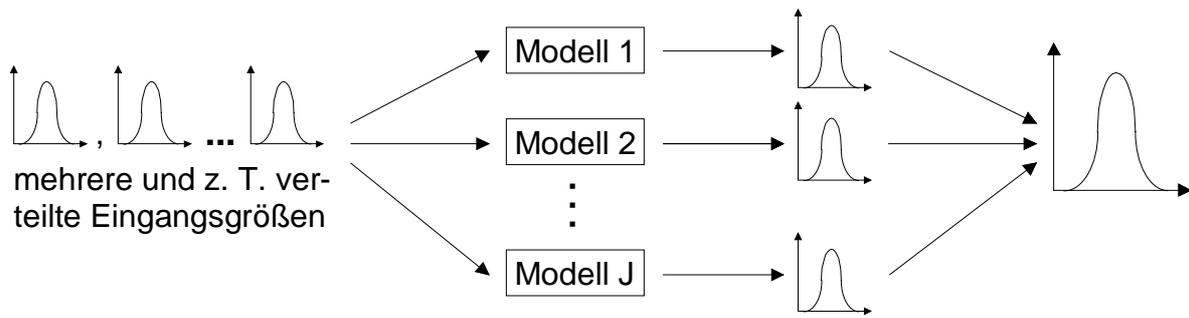
Das Schema in Bild 2-1 stellt die Vorgehensweise bei der probabilistischen Behandlung von Modellunsicherheiten im Verfahren dar. Mithin ist zu Beginn eine Analyse durchzuführen, ob es überhaupt ein Modell (M) für den betreffenden Zusammenhang gibt, bzw. ob der Kenntnisstand so weit entwickelt ist, dass ein Modell erstellt werden kann. Gibt es evtl. alternative Modelle? Dabei beschreibt J die Anzahl aller zur Verfügung stehenden Modelle.

Wenn sich bei der Analyse der Aufgabenstellung herausstellt, dass kein adäquates Modell zur Beschreibung vorliegt ( $J=0$ ; Fall E1), muss zuerst ein Modell erstellt werden. Nach Erstellung des Modells erfolgt die Beschaffung und Behandlung (siehe Abschnitt 2.2.2) der für das Modell notwendigen Daten- bzw. Parameter [28].

Im Fall E2, nur ein Modell ist zur Lösung der Aufgabenstellung einsetzbar (Vollständigkeit,  $J=1$ ), geht man direkt zur Beschaffung und Behandlung der für das Modell notwendigen Daten- bzw. Parameter über [28].

Im Fall E3 stehen mehrere alternative Modelle ( $M_j$  mit  $j = 1, \dots, J \geq 2$ ), z. B. aufgrund unterschiedlicher Ansätze zur Beschreibung des vorliegenden Problems zur Verfügung. Man geht hier davon aus, dass jedes Modell den wahren Zusammenhang adäquat aber mit unterschiedlicher nicht bekannter Qualität beschreibt und keine gegenseitige Ausschließung zutrifft. (Es ist bekannt oder wird nicht ausgeschlossen, dass keines den wahren Zusammenhang beschreibt.) Dann kann man dem Ansatz eines so genannten „Supermodells“ (vgl. [101]) folgen. Es werden dabei die alternativen Modelle in einem Modell subsumiert und den Alternativen werden Wahrscheinlichkeiten für ihr Zutreffen zugeordnet. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von dem Mischen von Modellen [102]. Dies bedingt die Prüfung, ob Informationen über die Güte der Modelle (Zutreffwahrscheinlichkeiten) vorliegen oder beschaffbar sind.

Das Bild 2-2 zeigt die dem Fall E3 zugrunde liegende Vorgehensweise.



**Bild 2-2: Prinzipielle Vorgehensweise bei Fall E3**

Ist  $p_j$  die Wahrscheinlichkeit dafür, dass Modell  $j$  den wahren Zusammenhang beschreibt, dann gilt [28]

$$\sum_{j=1}^J p_j = 1 \quad (2-1)$$

Im Fall der absoluten Ignoranz (Fall E3a) ist wie folgt vorzugehen: Wenn keinerlei Informationen dafür vorliegen, dass ein Modell ( $M_1$ ) eher eintritt/zutrifft als ein anderes Modell ( $M_2$ ), dann ist es vernünftig anzunehmen, dass der Eintritt von  $M_1$  und  $M_2$  mit einer gleichen Wahrscheinlichkeit zu veranschlagen ist [103]. Dies wird auch das „Prinzip des unzureichenden Grundes“ genannt, mit dem sich schon J. Bernoulli und P. S. Laplace auseinander gesetzt haben [104].

In [105] wird eine Methode zur Berechnung der Flugbahnen von Trümmerstücken bei Tankexplosionen beschrieben. Diese Trümmerstücke, die beim vollständigen Zerplatzen von Behältern entstehen können, stellen ein ernstes Problem in der Anlagensicherheit dar. Ein typisches Beispiel dafür ist eine Dampfwellenexplosion (BLEVE: “Boiling Liquid Expanding Vapour Explosion“) aufgrund einer Überhitzung des Behälters, wie er sich 1976 in Mexiko City ereignet hat.

In diesem Artikel wird u. a. die Behandlung von Modellunsicherheiten aufgezeigt. Die Unsicherheit besteht bezüglich der Bestimmung der Anfangsgeschwindigkeit der Bruchstücke. Sie geht entscheidend in die Berechnung deren Flugbahnen mit ein. Nach sorgfältiger Auswahl und Abschätzung stehen drei Modellgleichungen ( $M_1$  bis  $M_3$ ) zur Bestimmung der Abfluggeschwindigkeit zur Verfügung. Da keine unterschiedliche Präferenz für  $M_1$  bis  $M_3$  vorliegt, werden alle Gleichungen als gleich

gut zur Beschreibung angesehen. Mithin wird die Zutreffwahrscheinlichkeit mit  $\frac{1}{3}$  für jede Gleichung angegeben. Es gilt mit  $k= 1, \dots, 3$ :

$$p_k = P(X = k) = \frac{1}{3}. \quad (2-2)$$

D. h., führt man eine Vielzahl von Berechnungen der Flugbahnen (Simulationen) durch, so beträgt die Wahrscheinlichkeit, dass zur Berechnung der Flugbahn eines der Modelle, z. B.  $M_1$ , eingesetzt wird,  $\frac{1}{3}$ .

Es lässt sich dieses verallgemeinert formulieren: Sollten die Zutreffwahrscheinlichkeiten für mehrere Modelle als gleich angesehen werden gilt mit:  $k= 1, \dots, K$ :

$$p_k = P(X = k) = \frac{1}{K}. \quad (2-3)$$

Sind die Zutreffwahrscheinlichkeiten der Modelle bestimmt, wird für jedes Modell, analog der Vorgehensweise von Fall E2 vorgegangen, indem direkt zur Beschaffung und Behandlung der für das Modell notwendigen Daten- bzw. Parameter übergegangen wird.

Sollten wie Fall E3a mehrere alternative Modelle zur Verfügung stehen und zusätzlich noch Informationen über deren Gütegrad vorliegen ist wie folgt vorzugehen (Fall E3b). Der Gütegrad jedes Modells wird, wenn nicht schon in dieser Form vorliegend, mit einer Zutreffwahrscheinlichkeit bewertet, wobei die Gl. 2-1 beachtet werden muss [28, 93]. Die Vorgehensweise bei der Ermittlung der Eintrittswahrscheinlichkeit wird in [59, 99, 101] ausführlich beschrieben. An einem Beispiel bei dem unterstellt wird, dass das Gewicht der verwendeten Modelle eine unsichere Größe ist und deshalb durch eine Verteilung, z. B. Beta-Verteilung, beschrieben wird und der Erwartungswert sowie die Standardabweichung für  $M_2$  vorliegen, soll die Vorgehensweise verdeutlicht werden.

Will man die Auswirkung einer Freisetzung von Chlor in Bodennähe auf einem Standort in einer bestimmten Entfernung von der Quelle berechnen, so stehen dazu

zwei Modelle zur Verfügung (Roberts Modell ( $M_1$ ) und Sutton Modell ( $M_2$ )) (vgl. [61]). Bezüglich der beiden Modelle weiß man, dass das Modell  $M_2$  neueren Datums ist und deshalb dem Modell  $M_1$  vorzuziehen ist. Jedoch liefert auch  $M_2$  keine befriedigende Lösung; es hat in der Folge noch weitere Entwicklungen gegeben. Die Zutreffwahrscheinlichkeit kann in diesem Beispiel durch eine Beta-Verteilung, siehe Gl. (2-4), beschrieben werden (vgl. [106]). Es stehen der Erwartungswert  $E(M_2)$  und die Standardabweichung  $S(M_2)$  zur Verfügung (Grundlage der Daten vgl. [61]).

$$f(p_2) = \frac{\Gamma(c+d)}{\Gamma(c) \cdot \Gamma(d)} p_2^{c-1} \cdot (1-p_2)^{d-1}; \quad 0 \leq p_2 \leq 1 \quad (2-4)$$

Dabei sind  $c$  und  $d$  die Parameter der Verteilung. Zur Bestimmung der beiden Parameter lassen sich die beiden folgenden Gleichungen formulieren.

$$E(p_2) = \frac{c}{c+d} \quad (2-5)$$

und

$$V(p_2) = [S(p_2)]^2 = \frac{c \cdot d}{(c+d+1) \cdot (c+d)^2} \quad (2-6)$$

Die Lösung des Systems der zwei voranstehenden Gleichungen ergibt  $c$  und  $d$ . Der Algorithmus zur Erzeugung der entsprechenden Zufallszahlen wird in Anhang A1 Gl. (A-11) gezeigt.

Weiter ist das komplementäre Ereignis von  $M_1$  zu berechnen, es gilt

$$E(1-p_1) = 1 - E(p_1) \quad (2-7)$$

Die Berechnung von  $M_1$  und  $M_2$  erfolgt indem die beiden Gleichungen in eine Monte-Carlo Rechnung eingebettet werden, wobei das Gewicht der Modelle gemäß dem oben beschriebenen Schema berücksichtigt wird [107].

Sollten mehr als zwei Modelle vorliegen, wird die Dirichlet-Verteilung Gl. (2-8) benutzt (vgl. [106]).

$$f(M_1, \dots, M_J) = \Gamma(\Theta) \cdot \prod_{j=1}^J \left( \frac{M_j^{\Theta_j - 1}}{\Gamma(\Theta_j)} \right); \quad \sum_{j=1}^J M_j = 1; \quad \sum_{j=1}^J \Theta_j = \Theta \quad (2-8)$$

Erläuterungen findet man im Anhang A1, ebenso wird dort die Erzeugung Dirichlet verteilter Zufallszahlen gezeigt. Im Abschnitt 4.2.2 wird die Dirichlet-Verteilung angewendet.

Die Behandlung der unsicheren Daten der beiden Modelle [100] erfolgt wie im folgenden Abschnitt beschrieben wird.

### 2.2.2 Datenunsicherheit

Realitätsgehalt und Nutzen eines Modells hängen von der Qualität des Modells, der Qualität der notwendigen Eingabedaten und dem Zusammenspiel beider ab [28].

Dies lässt sich am Beispiel der Frage, wie geeignet das Gaußsche Modell für die atmosphärische Ausbreitung von Schadstoffen im Vergleich zu aufwendigeren Verfahren wie etwa dem Teilchenverfolgungsmodell ist, erläutern. Beim Gauß Modell sind die Ausbreitungsparameter relativ gut bekannt, das Modell selbst ist jedoch recht einfach. Beim Teilchenverfolgungsmodell hingegen sind die Eingangsdaten nicht gut genug bekannt; das Modell selbst beschreibt allerdings die zu modellierenden Zusammenhänge in großem Detail und gut.

Gewöhnlich wird ein Modell ausgewertet, indem man einen einzigen Datensatz von Eingabeparametern nutzt (Punktwerte). Will man Unsicherheiten berücksichtigen, werden die unsicheren Eingangsparameter nicht als feste Größen sondern als Zufallsvariable aufgefasst. Ihr zufälliges Verhalten auf Grund einer oder mehrerer Ursachen wird durch Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschrieben wie auch schon in

Gl. (2-4) - (2-6) gezeigt. Die Parameter der Verteilungen werden auf Basis der verfügbaren Daten geschätzt oder, falls erforderlich, durch Expertenbeurteilung bestimmt.

Daraus ergeben sich die folgenden bei der Strategieentwicklung zu berücksichtigenden Punkte: [108]

- Überprüfung der zur Verfügung stehenden Daten,
- Identifizierung des zugrunde liegenden Verteilungstyps,
- Schätzung der Parameter und
- Bestimmung der Anpassungsgüte.

Bei der Überprüfung der Daten für den jeweiligen Modellparameter können die in Tabelle 2-2 aufgeführten Fälle (vgl. [4, 26]) auftreten, die alle eine unterschiedliche Behandlung erfordern.

**Tabelle 2-2: Fälle, die bei der Behandlung von Daten zu unterscheiden sind**

---

Fall D1: Mehrere Werte stehen zur Verfügung.
Fall D2: Es stehen zwei Werte zur Verfügung.
Fall D3: Ein Wert und eine generische Aussage bzgl. der Unsicherheit sind verfügbar.
Fall D4: Nur ein Wert ist verfügbar.

---

Die einfachste Situation liegt bei Eintritt der Fälle D1 oder D2 vor, wenn zwei oder mehr Werte zur Verfügung stehen.

Abhängig von den Daten können verschiedene Verteilungen geeignet sein. Die folgende pragmatische Methode wird dazu angewendet. Basierend auf den Daten werden die Parameter der folgenden Verteilungstypen geschätzt, indem man die „Maximum Likelihood Methode“ (vgl. Johnson et al. [106]) nutzt. Diese Methode ist relativ einfach und einsichtig und erfüllt dennoch die statistischen Gütekriterien (vgl. [109]) unverzerrt hinreichend [108, 110]. Aus diesem Grund ist sie weit verbreitet und für einige Verteilungen in dem verwendeten Programm MATLAB<sup>1</sup> implementiert. Die ausgesuchten, folgenden Verteilungen bilden eine breite Basis von

---

<sup>1</sup> Mathematiksoftware: MATLAB Relies 12 , Firma The MathWorks, Inc.

Wahrscheinlichkeitsverteilungen und werden für ein Verfahren zur Berücksichtigung von Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen als geeignet angesehen (vgl. [3, 106, 110, 111]).

- (1) Normalverteilung,
- (2) log-Normalverteilung,
- (3) Weibull Verteilung,
- (4) Gamma Verteilung,
- (5) Beta Verteilung,
- (6) Rechteckverteilung,
- (7) Dreieckverteilung und
- (8) Exponentialverteilung.

Nachfolgend wird die „Methode der kleinsten Quadrate“ zur Ermittlung der optimalen Verteilung erläutert. In [112] wird diese bei den Auswertungen von Zuverlässigkeitskenngrößen, welche die Grundlage probabilistische Sicherheitsanalysen darstellen, angewendet.

Einfach und bereits für wenige Daten (>2) lässt sich die Güte der Darstellung durch folgendes Maß bewerten:

$$D = \sum_{k=1}^K \left[ \hat{F}_k - F(x_k) \right]^2 \quad (2-9)$$

In Gl. (2-9) ist K die Gesamtzahl der zur Verfügung stehen Werte für  $x_k$  ( $x_k = 1, \dots, K$ ) und  $F(x_k)$  die zur Auswertung herangezogene theoretische Wahrscheinlichkeitsverteilung mit den Werten  $x_k$ .

Die empirische Verteilungsfunktion  $\hat{F}_k$  in Gl. (2-9) wird dabei zweckmäßigerweise wie folgt berechnet (vgl. [113]):

$$\hat{F}_k = \frac{k - 0,375}{K + 0,25} \quad (2-10)$$

Wählt man nun die Verteilungen (1) bis (8), so erlaubt die Berechnung von D diejenige als besonders geeignet auszuwählen, für die D den kleinsten Wert hat. Diese Verteilung, welche die geringste quadratische Abweichung hat, wird dann als die optimale Verteilung für den jeweiligen Parameter ausgewählt (vgl. [4, 26, 112]). Dazu wurde das ursprüngliche FORTRAN-Programm ANPA modifiziert und in das MATLAB Programm ANPA2 umgesetzt, so dass alle Programmmodule des Verfahrens in derselben Programmiersprache vorliegen und Schnittstellenprobleme ausgeschlossen werden. Für einen Datensatz bestimmt das Programm die optimale Verteilung aus den vorgelegten Verteilungen (1) bis (8) sowie deren Parameter.

Stellvertretend für die grundsätzliche Vorgehensweise im Umgang mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung, die sich als geeignet für Beschreibung der Daten eines Parameters herausgestellt hat, soll dies für die Logarithmische Normalverteilung gezeigt werden. Details der anderen Verteilungen, die im Programm ANPA2 hinterlegt sind, sind im Anhang A1 gegeben. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) der log- Normalverteilung wird beschrieben durch

$$f(x) = \frac{1}{sx\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(\ln x - \mu)^2}{2s^2}\right) \quad x > 0 \quad (2-11)$$

In Gl. (2-11) ist x die Zufallsvariable,  $\mu$  der Mittelwert der Logarithmen von x und  $s^2$  die entsprechende Varianz.

Mittels der Maximum-Likelihood-Methode (MLE) werden die Parameter der Gl. (2-11) geschätzt. Da die Verteilungsparameter der log-Normalverteilung analog zur Normalverteilung geschätzt werden und anschließend dann  $x_n$  durch  $\ln x_n$  ersetzt wird, wird die MLE anhand der Normalverteilung gezeigt (vgl. [111]).

Ausgangspunkt dieser Schätzmethode sind die konkreten Werte  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_N$  die z. B. für einen Parameter vom Umfang N vorliegen. Man bezeichnet das als Stichprobe. Unterstellt man, dass die Grundgesamtheit der Stichprobe normalverteilt

voneinander ist und die Dichte der Funktion durch die folgende Gleichung (Normalverteilung) beschrieben wird,

$$f(x) = \frac{1}{s\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(x - \mu)^2}{2s^2}\right) \quad (2-12)$$

dann erhält man als Likelihood-Funktion

$$L = \frac{1}{s^N (2\pi)^{\frac{1}{2}N}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \left(\frac{x_n - \mu}{s}\right)^2\right\}. \quad (2-13)$$

Die Likelihood-Funktion ist für feste Beobachtungswerte  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  eine Funktion der beiden unbekannt Parameter  $\mu$  und  $s^2$ . Bei der Maximierung von  $L$  und  $\ln L$  ergeben sich gleiche Ergebnisse. Man nutzt die Tatsache das  $\ln L$  einfacher zu maximieren ist.

Zur Aufstellung der Maximum-Likelihood-Gleichungen

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \mu} = 0, \quad \frac{\partial \ln L}{\partial s^2} = 0 \quad (2-14)$$

bildet man

$$\ln L = -\frac{N}{2} \ln(2\pi) - \frac{N}{2} \ln s^2 - \frac{1}{2s^2} \sum_{n=1}^N (x_n - \mu)^2 \quad (2-15)$$

und damit

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \mu} = \frac{1}{s^2} \sum_{n=1}^N (x_n - \mu) = 0, \quad (2-16)$$

sowie

$$\frac{\partial \ln L}{\partial s^2} = -\frac{N}{2s^2} + \frac{1}{2(s^2)^2} \sum_{n=1}^N (x_n - \mu)^2 = 0 \quad (2-17)$$

Die Auflösung des Gleichungssystems nach  $\mu$  bzw.  $s^2$  ergibt die beiden Schätzwerte für die Parameter  $\mu$  und  $s^2$  der Normalverteilung.

$$\hat{\mu} = \bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n \quad (2-18)$$

und

$$\hat{s}_r^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_n - \bar{x})^2 = \frac{N}{N-1} \hat{s}^2. \quad (2-19)$$

Um die Schätzer für die log-Normalverteilung zu erhalten, wird in den Gleichungen (2-18) und (2-19)  $x_n$  durch  $\ln x_n$  ersetzt.  $\hat{s}_r^2$  ist eine asymptotisch erwartungstreue Schätzung für  $s^2$ . Durch Multiplikation mit dem Faktor  $\frac{N-1}{N}$  erhält man daraus die erwartungstreue Schätzung  $\hat{s}^2$  [114].

$$\hat{\mu} = \bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln x_n \quad (2-20)$$

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N (\ln x_n - \bar{x})^2 \quad (2-21)$$

$N$  ist dabei wieder die Anzahl der vorhandenen Werte, die für  $x$  verfügbar sind. Zwischen  $\mu$  und dem Median oder dem 50% Fraktile (50% der Werte liegen oberhalb und 50% unterhalb) gilt folgende Beziehung

$$x_{50} = e^{\mu}. \quad (2-22)$$

Der Erwartungswert ist gegeben durch

$$E[X] = \exp\left(\mu + \frac{s^2}{2}\right). \quad (2-23)$$

Die log-Normalverteilung wird gewöhnlich durch ihren Unsicherheitsfaktor  $K_{95}$  gekennzeichnet, der wie folgt mit der Standardabweichung ( $s$ ) zusammenhängt

$$K_{95} = e^{1,6449 \cdot s} \quad (2-24)$$

Der Faktor 1,6449 entspricht der 95% Grenze der Standardnormalverteilung. Mit Hilfe von  $K_{95}$  kann man das 5% und 95%-Fraktile wie folgt ermitteln

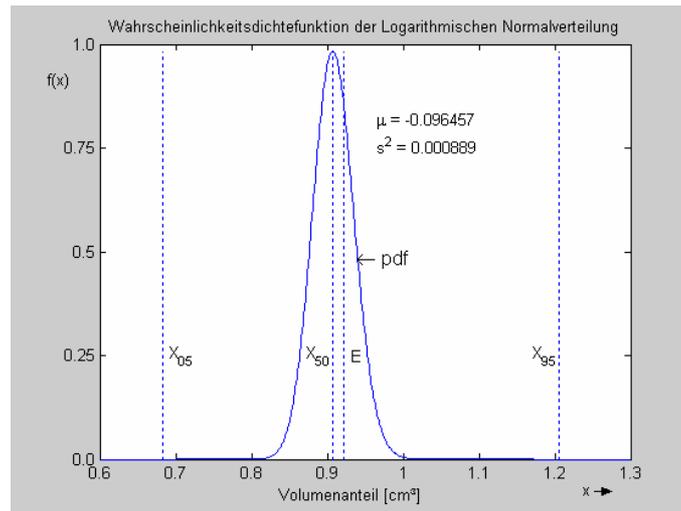
$$x_{05} = \frac{x_{50}}{K_{95}} \quad \text{und} \quad x_{95} = x_{50} \cdot K_{95} \quad (2-25)$$

D.h. 90% der Werte der Verteilung liegen zwischen diesen beiden Fraktile.

Ein Beispiel soll dieses verdeutlichen. Das Programm ANPA2 hat für den in Tabelle 2-3 aufgeführten Datensatz von gemessenen Volumenanteilen einer Komponente an einem Gasstrom in einer Industrieanlage die log-Normalverteilung als die optimale Verteilung ermittelt. Dabei sind die Parameter  $\hat{\mu}$  und  $\hat{s}^2$  mittels der Gleichungen (2-20) und (2-21) berechnet worden. Bild 2-3 zeigt die zugehörige (normierte) Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) gemäß Gl. (2-11).

**Tabelle 2-3: Datensatz, Volumenanteile einer Komponente an einer Gasmischung bei 25°C [cm<sup>3</sup>]**

0,86290	0,88200	0,89980	0,90010	0,92230	0,92890	0,93010	0,94110
---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------



**Bild 2-3: Normierte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für den Datensatz aus Tabelle 2-3**

Stehen genau zwei Werte a und b für einen Parameter zur Verfügung (vgl. Tabelle 2-2 Fall D2), wird angenommen, dass der „wahre“ Wert für diesen Parameter zwischen diesen beiden Grenzen a und b einschließlich dieser liegt, und in diesem Bereich gleichwahrscheinlich ist [4, 26]. Die Begründung liefert die Informationstheorie: es ist das „Prinzip des unzureichenden Grundes“ (vgl. den vorigen Abschnitt) [104]. Mithin wird eine konstante Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zur Beschreibung der Daten dieses Parameters verwandt.

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & \text{wenn } b \geq x \geq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2-26)$$

Die Verteilungsparameter b und a stellen den oberen und den unteren beobachteten Grenzwert dar.

Sollte nur ein Wert und eine generische Aussage bzgl. der Unsicherheit zur Verfügung (vgl. Tabelle 2-2 Fall D3) stehen, wird dieser Wert in der Mitte des Fehlerbereiches bei einer angenommenen Gleichverteilung (Gl. (2-26)) platziert [4, 26].

Sollte nur ein Wert und keine weitere Information vorhanden sein (vgl. Tabelle 2-2 Fall D4), wird der Fehlerbereich durch den Experten geschätzt. Zur Abschätzung der Wahrscheinlichkeit eignet sich in diesem Fall die Tschebyschewsche Ungleichung [115]:

$$P\{|x - \mu| \geq \varepsilon\} \leq \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2} \quad (2-27)$$

Mit dieser Ungleichung können die Wahrscheinlichkeiten für verschiedene Abweichungen vom Mittelwert abgeschätzt werden. Dabei wird der vorhandene Wert als Mittelwert  $\mu$  eingesetzt und die Varianz  $\sigma^2$  durch den Experten geschätzt, so dass dann die Wahrscheinlichkeit für die Überschreitung einer vorgegebenen relativen Abweichung  $\varepsilon$  berechnet werden kann.

Für die Simulation werden Zufallswerte benötigt, die der jeweiligen Verteilung und der sie charakterisierenden Parameter entsprechen. Diese Zufallszahlen werden gemäß den Beschreibungen des Abschnitts 2.3.3 bestimmt.

## **2.2.3 Behandlung aleatorischer und epistemischer Unsicherheiten**

### ***2.2.3.1 Zusammenhang zwischen Unsicherheit und Information***

An einem klassischen Beispiel aus der Probabilistik wird die Schwierigkeit der Aufdeckung der Gründe, durch die die Unsicherheit eingebracht wird, gezeigt. Nach Apostolakis [12] werden diese auch als Ursprungsunsicherheiten bezeichnet.

Münzwurf: Unter der Annahme, dass es sich um eine ideale Münze handelt, ist es einsichtig, der Möglichkeit, dass die Münze nach dem nächsten Wurf „Kopf“ zeigt, die Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{2}$  zuzuordnen. Beim ersten Hinsehen wird man sicherlich zu der Erkenntnis gelangen, dass die Unsicherheit über den Ausgang des Spiels, auf welcher Seite die Münze landet, nicht reduzierbar ist. Diese Feststellung der Nichtreduzierbarkeit wird dadurch widerlegt, in dem man die Informationen über den Münzwurf erhöht. Wenn bekannt ist, welche Seite zum Wurfbeginn sichtbar ist, die Fallhöhe der Münze, die Anfangsgeschwindigkeit, der Wurfwinkel, der Wind, die

Materialeigenschaften der Unterlage, auf die die Münze fällt usw. kann man mit Hilfe der physikalischen Gesetze sicher oder nahezu sicher die Seite vorher sagen, auf welche die Münze fallen wird. Somit ist diese Unsicherheit grundsätzlich doch reduzierbar (vgl. [15]).

Die Ursprungsunsicherheit ist damit eine Funktion, die vom Stand des Wissens abhängt bzw. von den Informationen; dies umfasst sowohl subjektive Informationen als auch „harte Daten“. Diese Erkenntnis stellt für sich allein keine Besonderheit dar, bekommt aber in Verbindung mit der Frage ob aleatorische und epistemische Unsicherheiten gleich oder ungleich zu behandeln sind, ein besonderes Gewicht.

Demzufolge ist zu prüfen, wann aleatorische und epistemische Unsicherheiten unterschiedlich behandelt werden sollen und ob dieses Auswirkung auf die Ergebnisse der Vorgehensweise hat.

In [16] sind dazu die in Tabelle 2-4 genannten Situationen aufgeführt. Bei Eintritt einer dieser Situationen wird eine unterschiedliche Behandlung der Unsicherheiten empfohlen.

**Tabelle 2-4: Situationen, die eine unterschiedliche Behandlung von Unsicherheiten begründen [16]**

---

Nachrechnung von Experimenten
Probabilistische Sicherheitsanalysen (PSA)
Analysen des Kühlmittelausfalles (LOCA)
Einschätzung einer Unfall-Managementstrategie
Einschätzung der Abfallbeseitigungsperformance
Berechnung der Personendosis infolge einer radioaktiven Freisetzung

---

Die in der vorliegenden Arbeit behandelte Fragestellung kann keiner dieser Situationen eindeutig zugeordnet werden. Da diese Tabelle nach Angaben der Verfasser nicht den Anspruch auf Vollständigkeit erhebt, wird im Folgenden überprüft, ob hier eine unterschiedliche Behandlung vorgenommen werden sollte.

Für die weitere Behandlung werden die folgenden Definitionen eingeführt:

Vorgehensweise 1 (VGW 1):

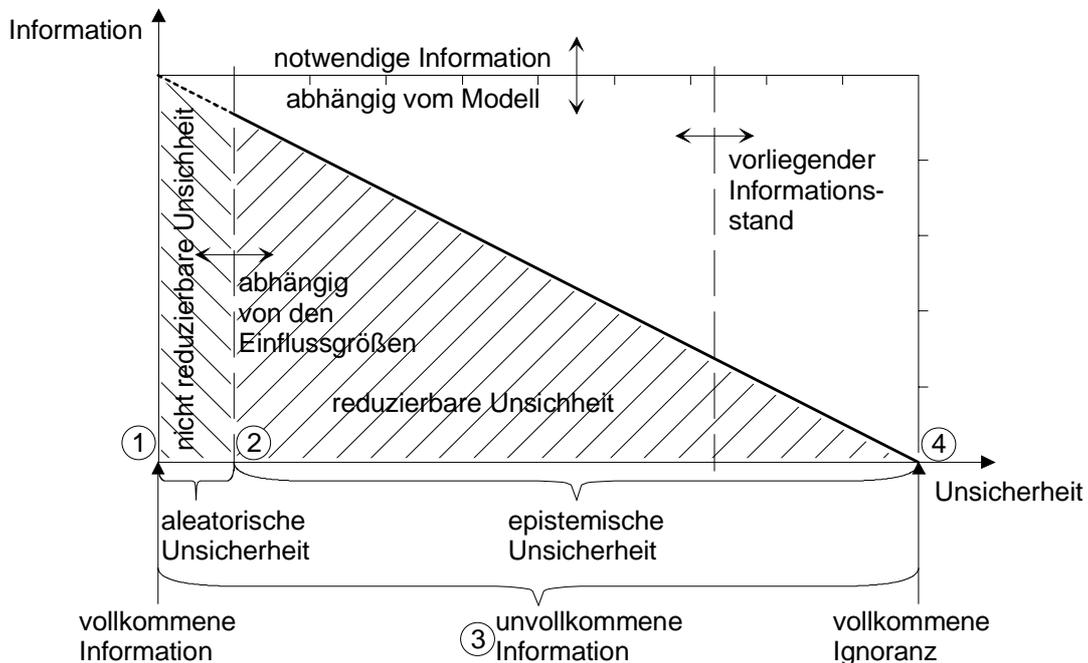
Die aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten werden mathematisch gleich behandelt.

Vorgehensweise 2 (VGW 2):

Die aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten werden so behandelt, wie in [18] vorgeschlagen. D. h., im Gegensatz zu VGW 1 werden die jeweiligen epistemischen Unsicherheiten durch subjektive Wahrscheinlichkeitsverteilungen ausgedrückt.

Da die Beantwortung der Frage ob VGW 1 oder VGW 2 angewendet wird, von der Situation (vgl. Tabelle 2-4) abhängig ist, ist zu prüfen, ob es eine objektive Vergleichsgröße gibt, die eingeführt werden kann.

Aus diesem Grund wird der Zusammenhang zwischen Unsicherheit und Information analysiert und in Bild 2-4 für ein Modell dargestellt.



**Bild 2-4: Zusammenhang zwischen Information und Unsicherheit bezogen auf ein Modell**

Im Bild 2-4 sind alle denkbaren Fälle ① bis ④ des Informationsstandes zum Zeitpunkt der Entscheidung erfasst und nachfolgend beschrieben: [104]

- ① Vollkommene Information bezüglich aller Einflussgrößen und Daten des Modells.
- ② Vollkommene Information bezüglich der bestimmaren Einflussgrößen und Daten des Modells.
- ③ Unvollkommene Information bezüglich der Einflussgrößen des Modells und Daten.
- ④ Vollkommene Ignoranz bezüglich der Einflussgrößen und Daten des Modells.

Wobei die Fälle ① und ④ als theoretische Grenzfälle des Falls ③, der unvollkommenen Information, aufgefasst werden können [104]. Ergänzend zu [104] ist hier noch der Fall ② eingeführt worden. Dieser Fall stellt den Punkt dar, den man bestenfalls erreichen kann. Denn wie schon eingangs beschrieben, lassen sich nur die epistemischen, nicht aber die aleatorischen Unsicherheiten reduzieren oder gar eliminieren. Es ist also immer eine Unsicherheit vorhanden, selbst wenn der theoretisch denkbare Fall ② erreicht wird, bei dem alle Kenntnissstandsunsicherheiten beseitigt sind. Es verbleibt eine Restunsicherheit, die auf stochastische Effekte zurückzuführen ist [12].

Im Bild 2-4 wird die epistemische und die aleatorische Unsicherheit im Begriff der unvollkommenen Information zusammengefasst. Wenn die unterschiedliche Behandlung der Unsicherheiten (VGW 1 oder VGW 2) einen Einfluss auf die Ergebnisse hat, muss sich das in der Informationsmenge ausdrücken.

Die unter dem Namen *Informationstheorie* bekannt gewordene mathematische Theorie der Nachrichtenübertragung ist von C. E. Shannon im Jahr 1948 entwickelt worden [116]. Zur Messung der Information wird dabei die aus der Thermodynamik bekannte Entropie genutzt [117, 118]. Hier gilt ebenso wie für ein thermodynamisches System: „Ist eine Situation klar organisiert, d.h. wird sie nicht durch ein großes Maß an Zufälligkeit oder Auswahlmöglichkeit charakterisiert, dann ist die Entropie niedrig (vgl. [116]).“

In Analogie zur informationstheoretischen Interpretation der Entropie wird hier der Informationsumfang eines Zustandes festgelegt. Demnach ist die Entropie für den o. a. Vergleich der Vorgehensweisen als Größe geeignet [117, 119, 120]. Mithin kann mittels dieser Vergleichsgröße eine Entscheidung getroffen werden, ob aleatorische und epistemische Unsicherheiten unterschiedlich behandelt werden müssen. Dabei sind nicht die absoluten Werte sondern deren Differenz von Interesse. Wird kein signifikanter Entropieunterschied festgestellt, werden die aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten gleich behandelt. – Die Berechnung und Auswahl wird am Beispiel der Berechnung eines Wärmetauschers gezeigt.

### **2.2.3.2 *Behandlung nach VGW 1***

Aleatorische und epistemische Unsicherheiten werden durch Zufallszahlen der jeweils zugewiesenen Wahrscheinlichkeitsverteilung entsprechend beschrieben und mit einer Monte-Carlo-Simulation durch das Modell getragen. Es wird bei jedem Spiel ein neuer Eingangsparametersatz gebildet, der sowohl für die aleatorischen Unsicherheiten als auch für die epistemischen neu bestimmte Werte enthält.

### **2.2.3.3 *Behandlung nach VGW 2***

Die aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten werden mathematisch so behandelt, wie es in [18] für PSA's vorgeschlagen wird. Daraus ergibt sich, dass zwar wieder die aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten durch Wahrscheinlichkeiten beschrieben werden, jedoch im Gegensatz zur Behandlung nach VGW 1 werden die Unsicherheiten mit zwei „ineinander verschachtelten“ Monte-Carlo-Simulationen durch die Rechnung getragen. D. h., es wird zuerst eine Stichprobe gezogen, in der Werte für die Größen mit aleatorischen Unsicherheiten festgelegt werden und dann wird der Einfluss der epistemischen Unsicherheiten auf die Monte-Carlo-Simulation berücksichtigt. Die daraus ergebende Prozedur ist dann, dass die Monte-Carlo-Simulation viele Male mit zufällig gemäß ihren Verteilungen gewählten Werten der kenntnisunsicheren Größen wiederholt wird. Das ist eine Monte-Carlo-Simulation der Monte-Carlo-Simulation und wird auch als „doppelte

Randomisierung“ oder „zweistufige Zufallsauswahl“ bezeichnet. Dabei variiert die äußere Simulation (Stufe 1) die Werte der stochastischen Variablen und die innere Simulation (Stufe 2) die Werte der kenntnisunsicheren Größen. Näher wird auf die Monte-Carlo-Methode in Abschnitt 2.3.1 eingegangen.

## 2.2.4 Unsicherheit und Entropie

In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie man eine Information messen kann. Wie bereits im vorangehenden Abschnitt angesprochen, soll dabei die Entropie als Vergleichsgröße (Ordnungsmaß) verwendet werden [120]. Der hier verwendete Begriff stammt aus dem Gebiet der Informationstheorie. Die gezeigten Gleichungen werden nicht bewiesen oder hergeleitet; wesentlich ist nicht der Absolutwert der Entropie, sondern das Verhältnis zwischen den Entropien, ermittelt für VGW 1 und VGW 2. Nähere Informationen wie Beweise und Herleitungen zur Methode der Entropie im Zusammenhang mit dem Begriff der Information findet man in [117, 120, 121], praktische Anwendungen und Erläuterungen in [122].

Ziel ist es, durch den Einsatz der Entropie eine Verteilungsdichtefunktion zu ermitteln, die neben den vorhandenen Randbedingungen minimale Informationen beinhaltet. Die Entropie dient somit als ein Maß für den Grad der Unbestimmtheit, die in der Kenntnis der Variablen  $x$  liegt [116]. Für stetige Zufallszahlen ist die (Shannon-)Entropie definiert durch

$$S = -\int f(x) \ln[f(x)] dx . \quad (2-28)$$

Dabei bedeutet  $f(x)$  die Verteilungsdichtefunktion der Variablen  $x$ . Nach Ruelle [123] ist die Entropie  $S$  die Menge von Zufall, die in dem System steckt. Für diskrete Variable die nur die Werte  $p_i$  ( $i = 1, \dots, I$ ) annehmen können, gilt

$$S = -\sum_{i=1}^I p_i \cdot \ln p_i . \quad (2-29)$$

Nachfolgend sind die integrierten Gleichungen für die Normal-, Log-normal- und die Weibullverteilung gegeben. Sie wurden den jeweils angegebenen Literaturstellen entnommen. Mit anderen in Betracht kommenden Verteilungen wird so verfahren, dass die jeweilige Verteilung in Gl. (2-28) eingesetzt und anschließend integriert wird [111].

Durch Integration der Gl. (2-28) kann man die Entropie für die Normalverteilung nach Gl. (2-30) und für die Log-Normalverteilung nach Gl. (2-31) mit den Parametern  $\mu$  und  $s$  berechnen (vgl. [122]).

$$S_{\text{normal}} = \ln(s_{\text{normal}} \cdot \sqrt{2\pi}) + \frac{1}{2} \quad (2-30)$$

$$S_{\text{log-n}} = \mu_{\text{log-n}} + \ln(s_{\text{log-n}} \cdot \sqrt{2\pi}) + \frac{1}{2} \quad (2-31)$$

Integriert man die Gl. (2-28), kann man die Entropie für die Weibullverteilung mit Gl. (2-32) berechnen (vgl. [106]). Dabei sind  $\eta$  und  $b$  die Parameter der Verteilung und  $\gamma$  ist die Eulerzahl ( $\sim 2,7182$ ).

$$S_{\text{weib}} = \frac{(b-1)\gamma}{\eta + b} + \log(b) + 1 \quad (2-32)$$

Die Anwendung der oben aufgeführten Gleichungen ermöglicht es, die Entropie der Simulationsergebnisse zu berechnen. Dabei ist zu prüfen, ob die Parameter, die von epistemischen Unsicherheiten betroffen sind, von der Festlegung der aleatorischen Größen abhängig sind. Bei VGW 1 geht man davon aus, dass alle Parameter stochastisch unabhängig voneinander sind. VGW 2 sieht eine Beeinflussung der epistemischen Größen durch die aleatorischen Größen vor [18].

Es gilt für die Entropie statistisch nicht verbundener Zahlen, d.h. die Parameter werden als unabhängig voneinander betrachtet (VGW 1): [118, 122]

$$S(A_1, \dots, A_R, E_1, \dots, E_P) = \sum_{r=1}^R S(A_r) + \sum_{p=1}^P S(E_p) \quad (2-33)$$

R ist die Anzahl aller aleatorischen und P die Anzahl aller epistemisch unsicheren Parameter. Die Entropie wird für die VGW 1 nach Gl. (2-34) berechnet. Dabei ist  $f(x_{i,j})$  die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für jeden Parameter und  $x_{i,j}$  die Variable dieser Funktion. N ist die Anzahl aller Monte-Carlo-Spiele.

$$S_{VGW1} = - \sum_{j=1}^{R+P} \sum_{i=1}^N f(x_{i,j}) \ln[f(x_{i,j})] \quad (2-34)$$

Die Entropie für VGW 2, bei der die epistemischen Parameter abhängig von den aleatorischen sind, wird gemäß Gl. (2-36) ermittelt. Dabei gilt

$$S(A_1, \dots, A_R, E_1, \dots, E_P) = \sum_{r=1}^R S(A_r) + \sum_{p=1}^P S(E_p | (A_1, \dots, A_r)) \quad (2-35)$$

In Gl. (2-35) bezeichnet  $S(E_p | A_1, \dots, A_r)$  die bedingte Entropie. Hier bezeichnet  $y_{i,j}$  die aleatorischen Parameter und  $x_{i,j}$  die epistemischen Parameter. NA ist die Anzahl der Spiele bei der die aleatorischen Parameter variieren, d. h., äußere Simulation (Stufe 1) und NE steht für die Anzahl der Spiele, bei der die epistemischen Parameter variieren, innere Simulation (Stufe 2).

$$S_{VGW2} = - \left[ \sum_{j=1}^R \sum_{i=1}^{NA} f(y_{i,j}) \ln[f(y_{i,j})] + \sum_{j=1}^P \sum_{i=1}^{NE} f(x_{i,j} | (y_1, \dots, y_r)) \ln[f(x_{i,j} | (y_1, \dots, y_r))] \right] \quad (2-36)$$

$$NA + NE = N$$

Sollte sich bei der notwendigen Überprüfung der Parameter auf Abhängigkeit keine Abhängigkeit herausstellen, gilt [118]

$$S(E|A) = S(E). \quad (2-37)$$

Dies bedeutet, dass zwischen VGW 1 und VGW 2 kein Unterschied besteht. Damit bringt eine unterschiedliche Behandlung der aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten keinen Unterschied im Ergebnis.

Die Anwendung der Gleichungen (2-34) und (2-36) erfolgt in Abschnitt 4.2.3.

## **2.3 Fortpflanzung von Unsicherheiten durch Rechnungen**

Sind die Eingangsgrößen einer Rechnung unsicher, so muss sich das auch im Ergebnis widerspiegeln. Im Wesentlichen werden zwei Methoden zur Fortpflanzung von Unsicherheiten eingesetzt, nämlich die Momentenmethode und die Monte-Carlo-Methode. In der Praxis ist die Auswahl der eingesetzten Methode von der Komplexität der Modelle abhängig. D. h., lässt sich das Modell mit einfachen algebraischen Gleichungen beschreiben, kann die Rechenzeit sparende Momentenmethode eingesetzt werden [124]. Handelt es sich allerdings um Modelle, die durch eine Vielzahl gekoppelter Differentialgleichungen beschrieben werden, wie es bei der Simulation einer komplexen, biologischen Kläranlage der Fall ist, wird sicherlich nur die Anwendung der Monte-Carlo-Methode zum Ziel führen. Da im Gegensatz zur Momentenmethode der Einsatz der Monte-Carlo-Methode universell ist, wird nur diese im Folgenden weiter betrachtet.

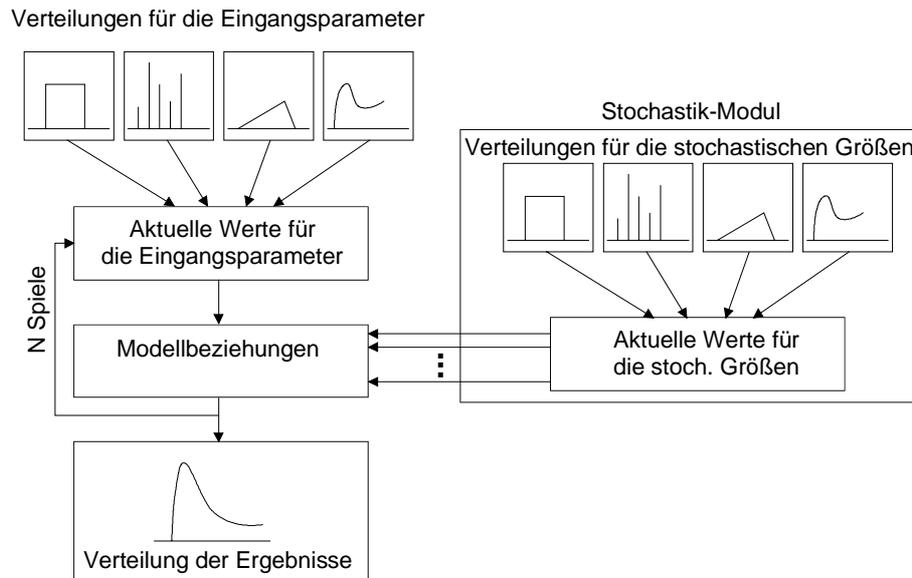
### **2.3.1 Monte-Carlo-Methode**

Der Einsatz der Monte-Carlo-Methode zur Simulation, fand ihren Ursprung im Jahre 1949 und wurde von J. v. Neumann und S. Ulam im Zusammenhang mit der Berechnung neutronenphysikalischer Probleme entwickelt. Sie ist mittlerweile in allen Gebieten der Wissenschaft weit verbreitet. Dabei gibt es bis heute keine einheitliche Definition dieser Methode. In [62] wird sie anders als z. B. in [63] oder [125] definiert [58]. Nach [92] kann die Methode zur Modellierung von Zufallsgrößen mit dem Ziel, spezielle Eigenschaften ihrer Verteilungen zu berechnen, eingesetzt werden. Allgemein gesagt, ist die Monte-Carlo-Methode ein numerisches Verfahren zur Lösung mathematischer Probleme mit Hilfe von Zufallsgrößen [64]. Da die Methode einfach und allgemein anwendbar ist, kann sie zur Lösung sehr komplexer Aufgaben herangezogen werden (vgl. [126]).

Bei der Simulation sind zwei Punkte zu unterscheiden und jeder ist mittels des Monte-Carlo-Verfahrens zu behandeln. Zum einen die deterministischen Modelle mit stochastischen Rand- oder Anfangsbedingungen. Zerplatzt zum Beispiel ein Behälter, so sind Abflugwinkel und Energie eines Bruchstückes, die zur Berechnung von dessen Flugbahn benötigt werden, stochastisch. Zum anderen die Modelle, bei denen die Parameter der Differentialgleichungen stochastisch sind, so genannte Modelle mit stochastischen Differentialgleichungen. Will man ein Belebungsbecken in einer biologischen Kläranlage simulieren, um dessen Effizienz zu ermitteln, muss man starke Regenfälle bedingt durch Gewitter oder Unwetter und den damit verbundenen Temperaturabfall und die starke hydraulische Belastung mit berücksichtigen. Gewitter und Unwetter sind dabei typische stochastische Ereignisse [127], die bei der Rechnung zu beachten sind.

In der Anlagensicherheit wird man sehr häufig mit Problemen konfrontiert, die auch die Einbeziehung von atmosphärischen Bedingungen erfordern. Zu deren Lösung werden vielfach Modelle eingesetzt, bei denen nicht nur die Daten der Eingangsparameter unsicher sind, sondern zusätzlich noch stochastische Effekte berücksichtigt werden müssen, z. B. Naturereignisse.

Jedes zu berücksichtigende Modell wird wie folgt behandelt. Es wird eine bestimmte Zahl an Simulationsdurchläufen durchgeführt, wobei für jede Simulation ein zufälliger Datensatz für die Eingangsparameter des Modells aus den korrespondierenden Verteilungen erzeugt wird. Die stochastischen Größen, falls vorhanden, die während einer Simulation in das Modell eingehen, werden mit einem Stochastik-Modul realisiert. Dieses Modul liefert die zufälligen Änderungen für jeden Parameter während eines Simulationsdurchlaufes. Dabei wird der Wert für den jeweiligen Parameter aus dessen korrespondierender Verteilung erzeugt. D. h. für einen in diesem Modul realisierten Parameter, dass sich der Wert für diesen Parameter zu zufälligen Zeitpunkten während einer Simulation entsprechend seiner korrespondierenden Verteilung ändert. Bild 2-5 zeigt die Vorgehensweise für ein Modell und die Einbindung des Stochastik-Moduls.



**Bild 2-5: Ablauf der Analyse für ein Modell unter Einbeziehung der stochastischen Parameter während einer Simulation – Umsetzung der VGW 1**

Bei der praktischen Durchführung einer Monte-Carlo-Simulationsrechnung ist die Festlegung der notwendigen Anzahl an Spielen  $N$ , um einen relativen Fehler mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit nicht zu übersteigen, zu beachten.

Sie ist in der Regel

$$\sim \sqrt{D/N}, \quad (2-38)$$

wobei  $D$  eine Konstante ist [64]. Hieraus ist folgendes zu ersehen: Will man den Fehler auf  $1/10$  verkleinern, so muss man  $N$  auf das 100fache vergrößern.

Für die in der Praxis in Betracht kommenden Verteilungen wird meistens mit einem Stichprobenumfang von  $N \geq 30$  gerechnet [92]. Da jedoch die Approximation umso schlechter ausfällt, je mehr die Wahrscheinlichkeitsverteilung von der Normalverteilung abweicht, entsteht bei der direkten Monte-Carlo-Simulation als wesentlicher Nachteil die langsame Konvergenz [92]. Diese Methode wird auch als Crude-Monte-Carlo-Methode bezeichnet, d. h., als Monte-Carlo-Verfahren ohne Varianzreduktion. Die Konvergenz kann aber unter bestimmten Voraussetzungen durch entsprechende Modifikationen verbessert werden. Auf diese Varianzreduzierenden Verfahren, wie z. B. Verfahren der gewichteten Stichproben,

Benutzung von korrelierten Hilfsvariablen, Benutzung von antithetischen Variablen, Verfahren der geschichteten Stichproben, um nur die bekanntesten und effizientesten zu nennen, die u. a. in den Grundlagenwerken [62] und [128] detailliert beschrieben sind, wird aus den folgenden Gründen nicht näher eingegangen. Die Methode mit varianzreduzierender Funktion bietet gegenüber der direkten Methode lediglich den Vorteil einer Konvergenzbeschleunigung; dies aber nur unter der Voraussetzung, dass eine geeignete varianzreduzierende Funktion gefunden wird, da die Wahl eines ungünstigen Wertes zu einer weit größeren Varianz als im direkten Verfahren führen kann [92]. Dieses erfordert eine geschickte Wahl; so steht dem Gewinn an Rechenzeit auf Grund mangelnder Vorschriften für die Bestimmung ein hoher mathematischer Aufwand gegenüber. Die Reduzierung der notwendigen Anzahl von Spielen braucht nicht in allen Fällen weiterverfolgt zu werden, da die Leistung der Computer ständig ansteigt und mithin Fragen der Rechenzeit eine zunehmend geringere Rolle spielen. Aus diesem Grund wird die Varianzreduktion nicht weiter betrachtet. Denn auch in der neusten Literatur (vgl. [129]) wird die direkte Methode als geeignet angesehen, und selbst die komplexe Simulation einer Kläranlage auf einem Standard PC benötigt für  $N = 10000$  Spiele eine vertretbare Rechenzeit von nur einigen Stunden.

In dem entwickelten Verfahren wurde deshalb unter den oben aufgeführten Gesichtspunkten ein Stichprobenumfang für jedes Modell von 10000 festgelegt.

### **2.3.2 Darstellung und Auswertung**

Zur Darstellung und Auswertung der Simulationen wird eine Matrix  $\mathbb{A}_{(m,n,k)}$  für alle Modelle ( $M_1 \dots M_J$ ) erzeugt, aus der dann die Ergebnisverteilung generiert wird.

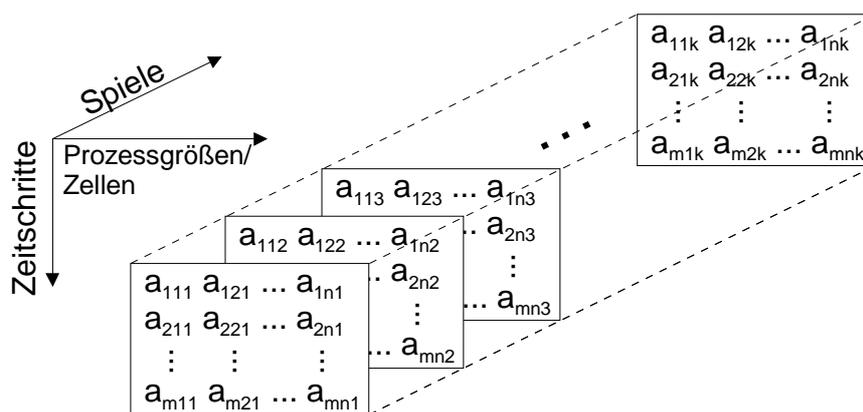
In diese Matrix  $\mathbb{A}_{(m,n,k)}$  wird das Ergebnis jeder Monte-Carlo Rechnung (Spiel) gespeichert (vgl. Bild 2-5). Der Aufbau der Matrix ist folgendermaßen strukturiert: Der Index ( $k$ ) gibt die Seite an, die Indizes ( $n, m$ ) bestimmen die Zeile ( $n$ ) und Spalte ( $m$ ) im Rahmen der Seite.

Dabei wird für jedes Modell ( $M_1 \dots M_J$ ) die Anzahl an Spielen ( $N_1 \dots N_J$ ) festgelegt.

Die Gesamtzahl aller Spiele für alle Modelle  $\left( \sum_{j=1}^J N_j \right)$  ist gleich die Anzahl der Seiten

k. So dass die Ergebnisse von  $M_1$  in die Seiten  $k=1$  bis  $k=N_1$ , die Ergebnisse von  $M_2$  in die Seiten  $k= N_1 +1$  bis  $N_2$  gespeichert werden, bis hin zur Speicherung der Ergebnisse von  $M_J$ , die dann in den Seiten  $k=N_{J-1}+1$  bis  $N_J$  erfolgt.

Das Bild 2-6 zeigt den Aufbau einer dreidimensionalen numerischen Ergebnismatrix, bei der hier jede Spalte für eine Zelle oder Prozessgröße steht und in die Zeilen der Wert einer Zelle bei einem Zellenmodell oder einer Prozessgröße zu einer fest vorgegebenen Prozesszeit geschrieben wird. Für jedes Spiel wird dann eine weitere Seite erzeugt.



**Bild 2-6: Aufbau der Ergebnismatrix  $A_{(m,n,k)}$**

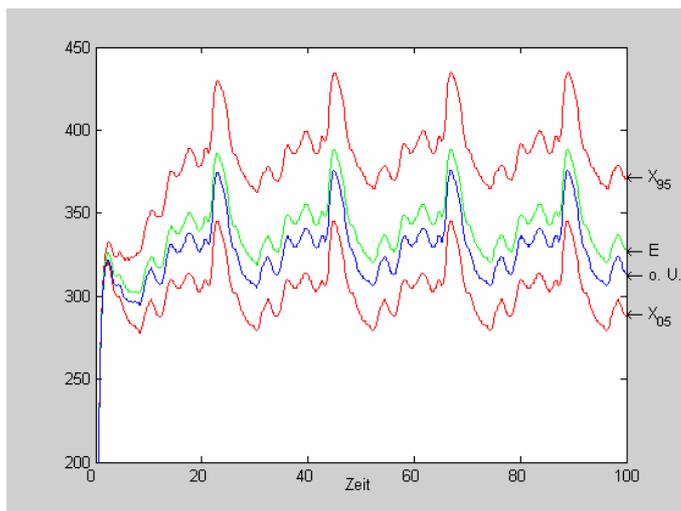
Erfordert eine Problemstellung weitere Dimensionen der Matrix, so kann dieses einfach realisiert werden. Das Programm MATLAB lässt N Dimensionen zu, wobei für N kein maximaler Wert angegeben ist. Der Zugriff auf ein N-dimensionales Feld geschieht ähnlich wie auf dreidimensionale Ergebnismatrizen (Felder): Feld (Zeile, Spalte, 3. Dimension, 4. Dimension, ...)

Die in Bild 2-5 erwähnten Modellbeziehungen werden oftmals durch Differentialgleichungen beschrieben. Damit eine Vergleichbarkeit der Simulationsergebnisse möglich ist, sind die Anzahl der Schritte und deren Schrittweite zu fixen Zeitpunkten bei der numerischen Lösung der Differentialgleichungen vorzugeben, so dass der Wert des entsprechenden

Parameters oder der Zelle in jedem Spiel zum gleichen Zeitpunkt berechnet wird. Somit werden in dem Verfahren nur Gleichungslöser eingesetzt die dieses erlauben. Die Notwendigkeit der Fixierung der Zeitpunkte gilt im Besonderen für die Vergleichbarkeit von Simulationen mit unterschiedlichen Modellen, d. h., wenn man ein so genanntes „Supermodell“, wie bereits in Abschnitt 2.2.1 beschrieben, erzeugt.

Mithin können die Ergebnisse aller Modelle in der Matrix  $A_{(m,n,k)}$  gespeichert werden. Wobei  $k = N \cdot J$  ist. Dabei ist  $N$  die Anzahl der Spiele während der Simulation und  $J$  die Anzahl der Modelle (vgl. Abschnitt 2.2.1). In der Regel kann dieses Datenmaterial adäquat durch eine Log-Normalverteilung approximiert werden [92]. Als Erweiterung wird hier die Möglichkeit gegeben, aus den vorgelegten Verteilungen (siehe Abschnitt 2.2.2) mit dem Programm ANPA2 diejenige Verteilung zu bestimmen, die die Ergebnisse am besten beschreibt.

Die Darstellung der Ergebnisse erfolgt, indem das  $X_{05}$  und  $X_{95}$  Fraktile sowie der Erwartungswert z. B. über der Zeit aufgetragen werden. Bild 2-7 zeigt dies qualitativ für eine simulierte Prozessgröße, deren Ergebnisdaten mittels einer Log-Normalverteilung approximiert wurden. Ebenso ist das Ergebnis der Simulation dieser Prozessgröße ohne Berücksichtigung von Unsicherheiten über der Zeit aufgetragen (vgl. [130]).



Zeichenerklärung:

$X_{95}$ : 95 % Fraktile

E: Erwartungswerte

$X_{05}$ : 5 % Fraktile

o. U.: Prozessgröße ohne Berücksichtigung von Unsicherheiten

**Bild 2-7: Ergebnisdarstellung einer simulierten Prozessgröße**

### 2.3.3 Zufallszahlen

Die Monte-Carlo-Methode beruht auf der Nutzung von Zufallszahlen. Die Methode zur Erzeugung von Zufallszahlen im Intervall [0,1] muss folgende Anforderungen bezüglich der Güte erfüllen [108, 126].

- Unabhängigkeit
- Gleichverteilung
- Besetzungsdichte
- Effizienz
- Reproduzierbarkeit

Hier werden die Zufallszahlen, die auch Pseudozufallszahlen genannt werden da sie aufgrund eines Algorithmus zustande kommen, nach der Kongruenzmethode von D. H. Lehmer [131] bestimmt, die diese Anforderungen erfüllt [108, 126, 131].

$$X_{i+1} = (a \cdot X_i + c) \bmod m \quad (2-39)$$

Da dieses Verfahren an vielen Stellen in der Literatur [126, 131, 132] sowie in der Online Hilfe des Programms MATLAB [133] beschrieben ist, wird nur mit einigen Anmerkungen auf das Verfahren eingegangen.

Der Startwert  $X_0$  kann selbst vorgegeben werden oder wird wie die Werte  $a$ ,  $c$  und  $m$  von Herstellern von Mathematik- und Compilerprogrammen mit entsprechender Güte geliefert. Dies ist wichtig, da diese Parameter entscheidenden Einfluss auf die Länge des Zyklus haben, d. h. ab wann eine bereits aufgetretene Zufallszahl als Ergebnis der Modulo-Operation erneut erscheint. Sowie auf die Intervallgrenzen, d. h. wie „nah“ man an 0 und 1 liegende Zahlen erzeugen kann. Verwendet man das Programm MATLAB, beträgt der Zyklus etwas mehr als zwei Billionen, die kleinste Zahl 0,00000000046566 und die größte Zahl 0,99999999953434 [133]. Es kann also davon ausgegangen werden, dass Gleichverteilte Zufallszahlen im Intervall [0,1] mit hinreichender Güte zur Verfügung stehen. Des Weiteren ist bei der Verwendung von MATLAB die Möglichkeit gegeben, jede Simulation mit derselben Zufallszahl zu starten

(Standardeinstellung) oder einen individuell festgelegten Startwert zu verwenden, z. B. durch die Systemuhr.

Wie bereits oben aufgeführt, werden jedoch nicht nur Zufallsgrößen für die Simulation gefordert, die der Gleichverteilung im Intervall [0,1] gehorchen. Es ist demnach erforderlich, mit Hilfe dieser gleichverteilten Zufallszahlen Zufallszahlen zu generieren, die den gewählten Verteilungen entsprechen. Diese Transformation soll hier, wie auch schon bei der Behandlung der Datenunsicherheiten, anhand der Logarithmischen Normalverteilung, stellvertretend für alle anderen Verteilungen, gezeigt werden. Alle weiteren Transformationsgleichungen zur Generierung der benötigten Zufallszahlen, die dem jeweiligen Verteilungstyp entsprechen, sind ebenso wie auch die Verteilungen im Anhang A1 zu finden.

Dabei wird ein Gleichungssystem N-mal ausgewertet. – Anzahl der Spiele für ein Modell. – Wenn  $Z_{n,1}$  und  $Z_{n,2}$  zwei von einander unabhängige, zwischen [0,1] gleich verteilte Zufallszahlen sind, dann gilt für log-normal verteilte Werte [126]

$$X_n = \exp\left(\sqrt{-2 \cdot \ln Z_{n,1}} \cdot \cos(2 \cdot \pi \cdot Z_{n,2}) \cdot \hat{s} + \hat{\mu}\right) \quad n = 1, \dots, N \quad (2-40)$$

Wobei n für das n-te Spiel steht.

Bei der bis jetzt vorgestellten Vorgehensweise erzeugt man voneinander unabhängige Zufallsgrößen für jeden unsicheren Parameter, der durch eine Zufallsgröße beschrieben werden soll. D. h., man erzeugt einen eindimensionalen Vektor, der sich aus voneinander unabhängig erzeugten Zufallszahlen zusammensetzt und somit einen beliebigen Eingangsparametersatz für das j-te Modell im n-ten Spiel darstellt. Diese Vorgehensweise ist so lange erlaubt, wie die Parameter voneinander unabhängig sind.

In der Realität besteht jedoch auch die Notwendigkeit, Zufallsvektoren zu bilden, deren Komponenten (Parameter) nicht unabhängig voneinander sind. An dem folgenden Beispiel soll dieses verdeutlicht werden.

Grundlage für die quantitative Beschreibung des zeitlichen Ablaufs einer chemischen Reaktion ist deren Kinetik; sie gibt den funktionalen Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit der Reaktion und den sie beeinflussenden Größen wieder [134]. Die Bestimmung und Interpretation der folgenden Parameter kann einen signifikanten Einfluss auf die Rechenergebnisse haben, wie Hauptmanns [26] aus der Behandlung von durchgehenden Reaktionen zeigt.

Bei den meisten Reaktionen nimmt die Geschwindigkeit zu, wenn man die Temperatur erhöht. So steigt z. B. bei der Hydrolyse von Essigsäuremethylester die Geschwindigkeit zwischen 25 °C und 35 °C um den Faktor 1,82 an. Bei der Hydrolyse von Rohrzucker steigt sie im gleichen Temperaturintervall um den Faktor 4,13.

Die Geschwindigkeit  $r$  einer Reaktion kann beispielsweise wie folgt beschrieben werden.

$$r = kc_1c_2 \quad (2-41)$$

Hierin ist  $k$  die Geschwindigkeitskonstante der Reaktion deren Temperaturabhängigkeit durch den Arrheniusansatz beschrieben wird und  $c_1$  sowie  $c_2$  stehen für die Konzentrationen der Edukte.

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2-42)$$

Dabei werden der prä-exponentielle Faktor  $k_0$  ( $P_1$ ), und die Aktivierungsenergie  $E$  ( $P_2$ ) in einem Versuch bestimmt und weisen deshalb einen Zusammenhang auf. Die Unabhängigkeitsannahme würde daher zu unrealistischen Merkmalskombinationen führen. Dies gilt für eine Vielzahl von Größen und muss mit berücksichtigt werden (vgl. [4]).

Die Korrelation zwischen den Zufallsvariablen bedeutet keineswegs, dass eine höhere Ausprägung einer Größe in jedem Fall auch eine höhere Ausprägung bei der

anderen Größe bedingt; nur treten derartige Kombinationen mit einer höheren Wahrscheinlichkeit auf als andere. Daraus ergibt sich für die Ziehung von Zufallszahlen, dass der Wert des ersten gezogenen Parameters bei der Ziehung des zweiten Parameters einen Einfluss haben muss und dies somit in die Berechnung eingeht.

Um korrelierte mehrdimensionale Zufallsgrößen zu generieren stehen unterschiedliche Methoden zur Verfügung. Gewöhnlich verwendet man Kovarianzmatrizen, um Korrelationen zwischen normalverteilten Zufallsgrößen herzustellen. Eine alternative Form ist der Weg über bedingte Verteilungen [108]. Die Anwendung dieser Methoden ist für die Normalverteilung vergleichsweise einfach und vielfach dokumentiert (vgl. [135]). Denn die Normalverteilung besitzt den Vorteil, dass auch die Summe von Zufallszahlen zu demselben Verteilungstyp gehört. Dies gilt jedoch nicht für andere Verteilungen, wie z. B. Rechtecks- oder Exponentialverteilungen. Für diese haben Lawrance / Lewis [136] mehrere Modelle entwickelt.

Unterstellt man, dass es sich bei den beiden Parametern um korrelierte normalverteilte Zufallsvariablen handelt, so kann man die entsprechenden Zufallszahlen wie folgt bestimmen. Zuerst schätzt man den Korrelationskoeffizienten  $\rho$ . Dieser steht für den Zusammenhang der Parameter [137].

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^K (x_{i,1} - \bar{x}_1)(x_{i,2} - \bar{x}_2)}{\sqrt{\sum_{i=1}^K (x_{i,1} - \bar{x}_1)^2 (x_{i,2} - \bar{x}_2)^2}} \quad (2-43)$$

Dabei sind  $x_{i,1}$  und  $x_{i,2}$  die zur Verfügung stehenden Daten für  $P_1$  und  $P_2$ .  $K$  ist die Gesamtzahl aller Werte für einen Parameter. Bedingung ist hier, dass die gleiche Anzahl an Werten für jeden Parameter vorliegt, d. h.  $K_1 = K_2 = K$ . Im Folgenden steht der Index 1 für  $k_0$  und der Index 2 für  $E$ .

$$\bar{x}_1 = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K x_{i,1} \quad \text{und} \quad \bar{x}_2 = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K x_{i,2} \quad (2-44)$$

Mit Hilfe der nachstehenden Gleichungen lassen sich korrelierte zweidimensionale Zufallszahlen erzeugen. Es werden unabhängige, standardnormalverteilte Zufallszahlen  $Y_{n,1}$  und  $Y_{n,2}$  mit Gl. (2-45) und Gl. (2-46) erzeugt, und dann berechnet man  $X_{n,1}$  und  $X_{n,2}$  mit den Gl. (2-47) und (2-48).

$$Y_{n,1} = \left( \sqrt{-2 \cdot \ln Z_{n,1}} \cdot \cos(2\pi \cdot \ln Z_{n,2}) \right) \quad n = 1, \dots, N \quad (2-45)$$

$$Y_{n,2} = \left( \sqrt{-2 \cdot \ln Z_{n,1}} \cdot \sin(2\pi \cdot \ln Z_{n,2}) \right) \quad n = 1, \dots, N \quad (2-46)$$

$$X_{n,1} = \hat{\mu}_1 + \hat{s}_1 Y_{n,1} \quad n = 1, \dots, N \quad (2-47)$$

$$X_{n,2} = \rho \cdot X_{n,1} + (1-\rho) \cdot \left( \hat{\mu}_2 + \hat{s}_2 Y_{n,2} \right) \quad n = 1, \dots, N \quad (2-48)$$

Geht man davon aus, dass die Parameter  $P_1$  und  $P_2$  gleichverteilt, korreliert sind und durch eine Gleichverteilung beschrieben werden, dann werden die entsprechenden Zufallsgrößen wie folgt bestimmt.

$$X_{n,1} = a_1 + Z_{n,1} \cdot (b_1 - a_1) \quad n = 1, \dots, N \quad (2-49)$$

$$X_{n,2} = a_2 + Z_{n,1} \cdot (b_2 - a_2) \quad n = 1, \dots, N \quad (2-50)$$

Die Parameter  $a$  und  $b$  stellen den unteren und den oberen beobachteten Grenzwert der zur Verfügung stehenden Daten für den jeweiligen Parameter dar.

Gleichungen zur Erzeugung von Zufallszahlen die anderen Verteilung entsprechen, sind im Anhang A1 zu finden.

### 3 Konzept zur Berücksichtigung der Unsicherheiten

In Kapitel 2 wurden die theoretischen Vorgehensweisen zur Behandlung von Unsicherheiten mit der probabilistischen Methode dargelegt. Demnach muss das zu Verfahren die folgenden Punkte beinhalten:

- Berücksichtigung unterschiedlicher Modelle, siehe Abschnitt 2.2.1.
- Berücksichtigung der Parameter- und Datenunsicherheiten, siehe Abschnitt 2.2.2 in Verbindung mit Abschnitt 2.2.3.
- Berücksichtigung der VGW 1 und VGW 2, siehe Abschnitt 2.2.3.

Das in Bild 3-1 dargestellte Verfahren zeigt schematisch die Umsetzung der erforderlichen Punkte in eine Programmumgebung.

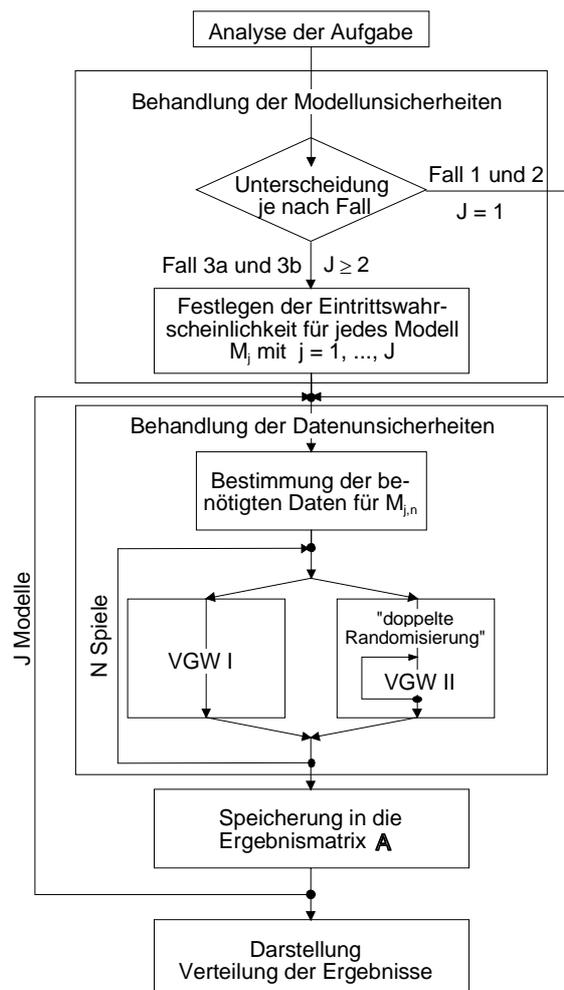


Bild 3-1: Globale Struktur des Verfahrens (Vorgehensweise der Analyse)

Mithin wurde das Verfahren wie folgt in das MATLAB Programm BOX\_UNCER umgesetzt. Wobei BOX\_UNCER eine Programmbox ist, in der unterschiedliche Programme implementiert werden können. Diese Programme können sowohl aus selbst entwickelter als auch aus kommerzieller Software bestehen.

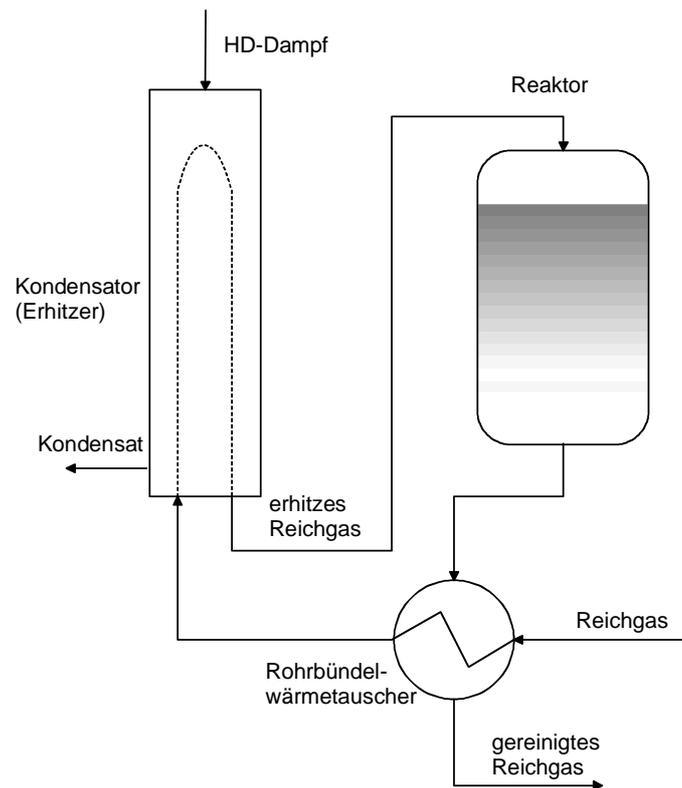
BOX\_UNCER besteht aus dem HAUPTPROGRAMM sowie der RANDOMBOX und mindestens einer EINGABEBOX. Das HAUPTPROGRAMM ruft die einzelnen Boxen auf und koordiniert die Parameterübergabe an die entsprechend eingebunden Programme. Ebenfalls erfolgt im HAUPTPROGRAMM der Aufruf des Modells oder der Modelle. In der jeweiligen EINGABEBOX sind die Eingangsparameter für ein Modell einzutragen. Dazu werden für jeden Parameter der Verteilungstyp, die Verteilungsparameter und die Zuordnung zu den aleatorischen oder epistemischen Unsicherheiten eingegeben. Damit kann die VGW 1 und VGW 2 im Programmkonzept umgesetzt werden. Durch ein STOCHASTIKMODUL, welches eine weitere EINGABEBOX für jedes Modell darstellt, können stochastische Effekte realisiert werden, die während eines Spiels mit in die Berechnung eingehen sollen. Die RANDOMBOX erzeugt die entsprechenden zufälligen Werte für jeden Parameter.

Somit ist die Umgebung geschaffen, Modell- und Datenunsicherheiten sowie stochastische Effekte zu berücksichtigen. Mit dem Ergebnis, dass alle zur Verfügung stehenden Informationen in das Verfahren einbezogen werden und der unterschiedlichen Qualität der Daten und Modelle Rechnung getragen wird.

## **4 Auslegung von Apparaten unter Berücksichtigung von aleatorischen und epistemischen Datenunsicherheiten**

In diesem Kapitel wird das Verfahren zur Berücksichtigung von Unsicherheiten auf die dynamische Modellierung eines industriell eingesetzten Apparates unter typischen Betriebsbedingungen angewendet. Es wird ein dynamisches Modell entwickelt; die in dieses verfahrenstechnische Modell eingehenden unsicheren Parameter werden aufgezeigt, behandelt und durch die Rechnung getragen. Diese Unsicherheiten spiegeln sich im Ergebnis wider. Somit kann der Auslegungsbereich quantifiziert und Fehlinterpretationen unwahrscheinlicher werden. Es werden die entstehenden Vorteile durch Anwendung dieses Verfahrens für die Auslegung und Planung in Bezug auf die Erhöhung der Anlagensicherheit gezeigt, indem die Modellierung verbessert wird. Der Vergleich von Simulations- mit Betriebsdaten bringt den Beweis. Des Weiteren wird mittels des Vergleichs der Entropie von VGW 1 und VGW 2 die Frage der unterschiedlichen Behandlung der Unsicherheiten im Verfahren beantwortet.

Bei dem zu simulierenden Apparat handelt es sich um einen Kondensator, der als Vorwärmer in einer Anlage eingesetzt wird, in der Sauerstoff, der in kleinen Mengen in einem Gasstrom (Reichgas) enthalten ist, unter Bildung von Wasser reagiert. Die quantitative Zusammensetzung und die Temperatur des Reichgases sind stochastisch, d. h. sie sind nicht vorherseh- und beeinflussbaren Schwankungen unterworfen. Beide Größen haben einen signifikanten Einfluss auf die Leistung des Kondensators. Durch zu hohe Reichgastemperaturen kommt es häufiger zu Problemen während des Betriebes, die eine Abschaltung der Teilanlage bedingen, um eine Schädigung eines nach geschalteten Katalysators zu vermeiden. In Bild 4-1 ist die Teilanlage ohne Messstellen skizziert.



**Bild 4-1: Teilanlage Reichgasreinigung**

Kurzbeschreibung der o. a. Teilanlage: Das aus dem Werksnetz bezogene Reichgas wird mit dem den Reaktor verlassenden Gasstrom in einem Rohrbündelwärmetauscher vorgewärmt. Danach strömt es durch den Kondensator (Erhitzer), der mit Hochdruckdampf gespeist wird. Das heiße Gas wird dann in einem temperaturempfindlichen Festbettreaktor katalytisch von Sauerstoff und Alkenen befreit und im Gegenstrom mit dem ungereinigten Reichgasstrom im Wärmetauscher gekühlt.

#### **4.1 Modell zur Simulation des dynamischen Verhaltens eines Kondensators**

Es wurde ein für die Beschreibung der Aufgabenstellung benötigtes Modell entwickelt, da kein adäquates Modell zur Verfügung stand (Fall E1; J=0; siehe Abschnitt 2.2.1). Danach folgt die Analyse der Parameter auf Unsicherheit und der Qualität der Daten.

Der betrachtete Apparat ist ein Kondensator vertikaler Bauart mit Regelung, der im Gegenstrom betrieben wird (Gegenstromrohrbündelwärmetauscher). Bild 4-2 zeigt das Modell für den Wärmetauscher. Dieser dient zur Aufheizung von Gas durch Ausnutzung der Kondensationsenthalpie des Hochdruckdampfes (HD), der von oben in den Apparat eingeleitet wird. Die Ausgangstemperatur ( $T_{io}$ ) des Gases wird geregelt, indem man die Menge des Kondensatstandes ändert, wodurch die effektive Wärmeübertragungsfläche für die Kondensation variiert.

Der Vergleich der in der Literatur zu findenden Werte für die Wärmeübertragungskoeffizienten [138]

- Wasser bei freier Strömung:  $\alpha_w = 200 \dots 800 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$  und
- Kondensierender Dampf:  $\alpha_w = 2000 \dots 100\,000 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$ ,

zeigt eine große Differenz;  $\alpha_w$  (Kondensation)  $\gg \alpha_w$  (heißes Wasser). Aus diesem Grund wird die Wärmeübertragung im Bereich des aufgestauten Kondensates vernachlässigt.

Vorliegende Betriebsbedingungen des Kondensators sind:

- Temperatur Hochdruckdampf: 271 °C,
- Temperatur Kondensat: 271 °C,
- absoluter Druck: 5,6 MPa und
- Austrittstemperatur aus dem Kondensator: 150 °C  $\pm$  1,8 °C.

Die Auswertung von Prozessdaten aus mehreren Monaten liefert:

- Der Druck im System schwankt mit etwa  $\pm 0,2$  bar um 19,4 bar.
- Die Temperatur des Eingangstromes variiert im Bereich von 112 bis 127 °C.

Unter diesen Bedingungen siedet das Kondensat nicht, so dass ein möglicher Einfluss auf die Wärmeübertragung durch Sieden nicht berücksichtigt werden muss [139]. Die Veränderungen des Kondensatstandes werden simuliert, indem die Wärmeübertragungsfläche reduziert oder vergrößert wird.

Zur Modellierung wird der Apparat geteilt. In dem einen Teil findet die Kondensation statt, im anderen wird die Wärme zwischen dem Gas und dem aufgestautem Kondensat übertragen.

Die Rohre des Kondensationsteiles sind vertikal in finite Volumen (Zellen) unterteilt. Jede Zelle wird als ein idealer Rührkesselreaktor (CSTR) angesehen. Der Kondensator wird als eine Reihenschaltung von CSTRs modelliert [140].

Es gelten die folgenden Voraussetzungen:

- Der Volumenstrom  $\dot{V}_i$  wird für die Berechnung als konstant betrachtet.
- Die geringen Druckschwankungen und der geringe Druckabfall im Apparat werden vernachlässigt.
- Für jede Zelle wird die gleiche Außentemperatur angenommen.
- Die Wärmeübertragung im Bereich des aufgestauten Kondensates wird vernachlässigt.
- Für jede Zelle wird derselbe Wärmedurchgangskoeffizient  $k$  benutzt.

Um das dynamische Verhalten des Kondensators zu beschreiben, muss eine Mengen- und Energiebilanz abgeleitet und gelöst werden. Im Gegensatz zu Botsch et. al. [141] wird für die flüssige Phase keine Bilanz aufgestellt, da die Wärmeübertragung hauptsächlich durch Kondensation stattfindet.

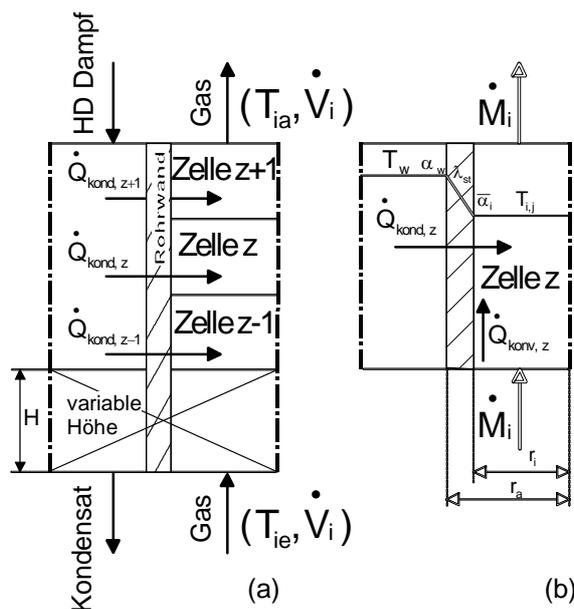
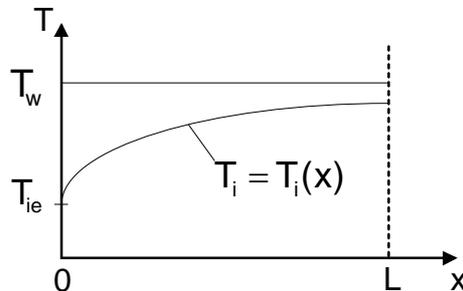


Bild 4-2: Schema des Wärmetauschers (a) und des Temperaturprofils über einer Zelle (b)

Das erforderliche Anfangsprofil für die dynamische Simulation wird analytisch aus Gl. (4-1) berechnet, die das stationäre Verhalten beschreibt (vgl. Bild 4-3).



**Bild 4-3: Erwärmung einer Flüssigkeit bei einer konstanten Umgebungstemperatur  $T_w$  über die Länge  $L$  des Kondensators [142]**

$$\frac{dT_i}{T_i - T_w} = - \frac{k \cdot A_{\text{eff}} \cdot dx}{\dot{W} \cdot (L - H)} \quad (4-1)$$

Wird die Randbedingung  $T_i(x=0) = T_{ie}$  gesetzt, erhält man die Außentemperatur als eine Funktion von  $x$

$$T_i(x) = (T_{ie} - T_w) \cdot e^{-\left(\frac{k \cdot A_{\text{eff}} \cdot x}{\dot{W} \cdot (L - H)}\right)} + T_w \quad (4-2)$$

mit  $\dot{W} = \bar{\rho}_i \cdot \dot{V}_i \cdot \bar{c}_{p,i}$  (4-3)

Die spezifische Wärmekapazität des Gasmisches  $\bar{c}_{p,i} = f(c_{p,i,k}(T,p), \tilde{n}_k, \tilde{M}_k)$  wird wie folgt berechnet [143]:

$$\bar{c}_{p,i} = \frac{1}{\sum_{k=1}^K (\tilde{n}_k \cdot \tilde{M}_k)} \sum_{k=1}^K (\tilde{n}_k \cdot \tilde{M}_k \cdot c_{p,i,k}) \quad (4-4)$$

Hierbei beschreibt  $K$  die Anzahl aller Komponenten,  $\tilde{M}_k$  deren molare Masse und  $\tilde{n}_k$  die molare Stoffmenge einer jeden Komponente im Gas. Zu beachten ist, dass  $c_p$  temperatur- und druckabhängig ist. Die  $c_{p,i,k}$  Daten für Komponenten im relevanten

Druck- und Temperaturbereich im Reichgas stammen aus der ASPEN Datenbank und sind im Anhang A2 für die Temperatur 131,9 °C bei einem Druck von 19,4 bar in Tabelle A 1 gegeben. Die Diskussion einzelner Parameter bezüglich Temperatur- und Druckabhängigkeit erfolgt im Abschnitt 4.2.1.

Die mittlere Dichte des Gasstromes  $\bar{\rho}_i = f(\rho_{i,k}(T,p), V_k)$  ist ebenfalls abhängig von Temperatur, Druck und Volumenanteil ( $V_k$ ) jeder Einzelkomponente. Sie wird nach Gl. (4-5) berechnet.

$$\bar{\rho}_i = \frac{1}{\sum_{k=1}^K V_k} \sum_{k=1}^K (\rho_{i,k} \cdot V_k) \quad (4-5)$$

Der Wärmedurchgangskoeffizient  $k$  ist durch Gl. (4-6) gegeben.

$$\frac{1}{k} = \frac{1}{\alpha_i} + \frac{r_i}{\lambda_{st}} \ln\left(\frac{r_i}{r_a}\right) + \frac{1}{\alpha_a} \cdot \frac{r_i}{r_a} + R_f \quad (4-6)$$

In Gl. (4-6) ist  $R_f$  der Verschmutzungsfaktor. Setzt man die relevanten Daten für die Parameter der Gl. (4-6) ein, zeigt sich, dass  $k$  von dem gaseitigen Wärmeübertragungskoeffizienten  $\bar{\alpha}_i$  dominiert wird. Deshalb werden nur die Unsicherheiten dieses Parameters berücksichtigt, der wir folgt berechnet wird.

$$\bar{\alpha}_i = \frac{Nu \cdot \bar{\lambda}_i}{r_i} \quad (4-7)$$

Für  $Nu$  gilt [145]:

$$Nu = \frac{\xi/8(Re-1000)Pr}{1+12.7\sqrt{\xi/8}(Pr^{2/3}-1)} \left(1 + \left[\frac{2r_i}{L}\right]^{2/3}\right) \quad (4-8)$$

mit dem Druckverlustkoeffizienten  $\xi$  [145].

$$\xi = (1.82 \lg \text{Re} - 1.64)^{-2} \quad (4-9)$$

Die Reynolds- und Prandtlzahl werden auf Grundlage der Angaben im VDI-Wärmeatlas berechnet [145]. Die dynamische Viskosität des Eingangsgasstromes  $\overline{\eta}_i$  geht als Term in der Reynoldszahl ein und ist von der Reichtgaszusammensetzung abhängig. Sie ist daher ein unsicherer Parameter, der wie folgt berechnet wird.

$$\overline{\eta}_i = \frac{1}{\sum_{k=1}^K (\tilde{n}_k \cdot \tilde{M}_k)} \sum_{k=1}^K (\tilde{n}_k \cdot \tilde{M}_k \cdot \eta_{i,k}) \quad (4-10)$$

Die mittlere Wärmeleitfähigkeit des Gasmisches  $\overline{\lambda}_i$  aus Gl. (4-7) wird nach Gl. (4-11) bestimmt.

$$\overline{\lambda}_i = \frac{1}{\sum_{k=1}^K (\tilde{n}_k \cdot \tilde{M}_k)} \sum_{k=1}^K (\tilde{n}_k \cdot \tilde{M}_k \cdot \lambda_{i,k}) \quad (4-11)$$

Die effektive Austauschfläche des Wärmetauschers  $A_{\text{eff}}$  wird berechnet, indem man Gl. (4-7) nutzt

$$A_{\text{eff}} = R \cdot \pi \cdot (r_a + r_i) \cdot (L - H) \quad (4-12)$$

R ist dabei die Anzahl der Rohre im Wärmetauscher,  $r_a$  ihr Außen- und  $r_i$  ihr Innendurchmesser, L seine Höhe und H ist der Kondensatstand. Das Zellenmodell wird genutzt, um das dynamische Verhalten des Wärmetauschers zu simulieren (siehe Bild 4-2). Die Mengen- und die Energiebilanz werden für jede Zelle z gemäß

$$\overline{M} \cdot c_p \cdot \frac{dT_z}{dt} = \dot{Q}_{\text{konv},z} + \dot{Q}_{\text{kond},z} \quad (4-13)$$

$$\dot{Q}_{\text{konv},z} = -\dot{V} \cdot \overline{\rho}_i \cdot \overline{c}_{p,i} \cdot (T_{i,z} - T_{i,z-1}) \quad (4-14)$$

$$\dot{Q}_{\text{kond},z} = -k \cdot \frac{A_{\text{eff}}}{Z} \cdot (T_{i,z} - T_w) \quad (4-15)$$

erstellt, wobei  $Z$  die Zahl aller Zellen ist. Die Speicherkapazität  $\overline{M \cdot c_p}$  einer Zelle ist gegeben durch

$$\overline{M \cdot c_p} = \left[ \overline{\rho_i} \cdot r_i^2 \cdot \overline{c_{p,i}} + \rho_{st} \cdot (r_a^2 - r_i^2) \cdot c_{p,st} \right] \cdot R \cdot \pi \cdot (L - H). \quad (4-16)$$

Zur Vereinfachung werden die Parameter  $\psi$  und  $\zeta$  eingeführt

$$\psi = \frac{\dot{W}}{\overline{M \cdot c_p}} \quad (4-17)$$

$$\zeta = \frac{k \cdot A_{eff}}{Z \cdot \overline{M \cdot c_p}} \quad (4-18)$$

Wenn man die Gleichungen (4-14) und (4-15) in Gl. (4-13) einsetzt, erhält man für jede Zelle  $z$

$$\frac{dT_{i,z}}{dt} = -\Psi (T_{i,z} - T_{i,z-1}) \cdot (T_{i,z} - T_w) \quad z = 1, \dots, Z \quad (4-19)$$

Das gekoppelte System nicht-linearer Differentialgleichungen erster Ordnung (Gl. (4-19)) wird mittels des in MATLAB integrierten Solvers *ode45*<sup>2</sup>, der auf dem Runge-Kutta Verfahren 5. Ordnung basiert, gelöst.

Die Untersuchung des Einflusses der Diskretisierung der Wärmeübertragungsfläche auf die zu berechnende Gl. (4-19) ergab, dass keine signifikante Veränderungen der Ergebnisse bei  $Z > 50$  mehr auftraten.

---

<sup>2</sup> MATLAB-Funktion, die für die numerische Integration von Differentialgleichungen vorgesehen ist.

## 4.2 Behandlung und Fortpflanzung der Unsicherheiten der Eingabeparameter

In Tabelle 4-1 sind die Eingangsparameter für das Kondensatormodell aufgeführt.

**Tabelle 4-1: Eingangsparameter des Kondensatormodells**

Parameter / Bezeichnung	Symbol	Einheit
1. Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches	$\overline{c_{p,i}}$	[J / kg K]
2. Wärmeübertragungskoeffizient bzw.	$\overline{\alpha_i}$	[W/m <sup>2</sup> K]
– Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches und	$\overline{\lambda_i}$	[W/m K]
– dynamische Viskosität des Gasgemisches	$\overline{\eta_i}$	[10 <sup>-4</sup> Pa s]
3. Dichte des aufzuheizenden Gasgemisches	$\overline{\rho_i}$	[kg/(n)m <sup>3</sup> ]
4. Reichgasvolumenstrom	$\dot{V}_i$	[(n)m <sup>3</sup> /h]
5. Eingangstemperatur des Gases	$T_{ie}$	[K]
6. Verschmutzungsfaktor	$R_f$	[m <sup>2</sup> K/W]
7. Temperatur des Hochdruckdampfes	$T_w$	[K]
8. spezifische Wärmekapazität von Stahl	$c_{p,st}$	[J / kg K]
9. Wärmeleitfähigkeit von Stahl	$\lambda_{st}$	[W/m K]
10. Dichte von Stahl	$\rho_{st}$	[kg/m <sup>3</sup> ]
11. Wärmeübertragungskoeffizient	$\alpha_w$	[W/m <sup>2</sup> K]
12. Rohrrinnenradius	$r_i$	[m]
13. Rohraußenradius	$r_a$	[m]
14. Anzahl der Rohre im Wärmetauscher	$R$	
15. Höhe des Wärmetauschers	$L$	[m]

Die Bestimmung der Unsicherheiten der einzelnen Parameter erfordert eine differenzierte Betrachtung. Die Parameter eins bis sechs werden als unsichere Größe behandelt und in Abschnitt 4.2.1 diskutiert. Die Daten für die Parameter sieben bis zehn und zwölf bis 15 sind hinreichend genau bestimmte Werte. Deren Unsicherheiten können ebenso vernachlässigt werden wie der Einfluss des Parameters elf, wie Abschnitt 4.1 erläutert. Mithin werden für die Parameter sieben bis 15 die Auslegungswerte eingesetzt.

#### 4.2.1 Abhängigkeiten der Parameter von der Temperatur, dem Druck und der Gaszusammensetzung

Die Parameter eins bis drei sind vom Volumenanteil  $V_k$  jeder Komponente am Gasstrom, sowie den spezifischen Daten der Einzelkomponente abhängig (siehe Abschnitt 4.1). Aus diesem Grund wird zuerst das Reichgas analysiert und dann der Einfluss der Zusammensetzung sowie die Druck- und Temperaturabhängigkeit auf die genannten Parameter untersucht. Ziel ist die Ermittlung der gegenseitigen Abhängigkeiten, um anschließend den Gasstrom unter Beachtung aller signifikanten Einflussgrößen modellieren zu können. So wird die Forderung aus [12], auf die Ursprungsunsicherheit zurückzugehen, erfüllt.

Tabelle 4-2 zeigt Analysen des Gasgemisches für den Zeitraum April 1997 bis November 1997, sowie den jeweiligen Messfehler. Es handelt sich hierbei um Werte die bei ähnlichem Betriebszustand der Anlage (Temperatur, Druck, Betriebsverhalten, usw.) gemessen wurden. Mithin sind die Werte repräsentativ und vergleichbar.

**Tabelle 4-2: Reichgasanalyse des Zulaufstromes**

		Reichgasanalyse des Zulaufstroms [Vol.-%]							
Komponente		Apr 97	Mai 97	Jun 97	Jul 97	Aug 97	Sep 97	Okt 97	Nov 97
Wasserstoff	H <sub>2</sub>	92,23%	89,98%	92,98%	90,01%	93,01%	88,20%	94,01%	86,09%
Methan	CH <sub>4</sub>	2,46%	4,25%	2,52%	4,23%	3,16%	4,18%	2,01%	4,01%
Ethen	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	0,38%	0,45%	0,34%	0,34%	0,49%	0,97%	0,59%	1,68%
Propen	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	0,03%	0,03%	0,02%	0,04%	0,04%	0,09%	0,05%	0,12%
Kohlenmonoxid	CO	0,71%	0,64%	0,54%	0,73%	0,41%	0,88%	0,88%	1,60%
Stickstoff	N <sub>2</sub>	0,72%	1,28%	1,01%	1,01%	0,38%	1,49%	0,36%	2,01%
Kohlendioxid	CO <sub>2</sub>	3,41%	3,09%	2,53%	3,48%	2,49%	3,88%	1,78%	3,99%
Ethan	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0,06%	0,07%	0,05%	0,03%	0,02%	0,08%	0,07%	0,09%
Sauerstoff	O <sub>2</sub>	0,00%	0,11%	0,10%	0,11%	0,00%	0,15%	0,13%	0,16%
	Messfehler	0,00%	0,28%	0,00%	0,02%	0,00%	0,08%	0,02%	0,05%

Betrachtet man den Druckbereich von 19 bis 20 bar, so wird der Bereich in dem die Druckschwankungen liegen gut abgedeckt. Bedingt durch die vom Prozess vorgegebene maximale Austrittstemperatur des Gases aus dem Kondensator und die vom Werksnetz bestimmte minimale Eintrittstemperatur in diesen, liegt der Temperaturbereich im Apparat zwischen 112 und 151,8 °C. Die gemittelte Temperatur liegt bei 131,9 °C.

Berechnet man die thermodynamischen Eigenschaften bei unterschiedlichen Zusammensetzungen des Gasstromes mit den entsprechenden Gleichungen (4-4, 4-5, 4-10, 4-11) im Temperaturbereich 100 bis 200 °C und im Druckbereich 19 bis 20 bar und stellt diese dar, so sind Aussagen bezüglich der Abhängigkeit von Druck, Temperatur und Zusammensetzung des Gasstromes möglich.

Die Stoffdaten der Komponenten für die Parameter  $c_p$ ,  $\rho$ ,  $\lambda$  und  $\eta$  bei  $T = 131,9$  °C und  $p = 19,4$  bar sowie deren molaren Massen sind der Tabelle A 1 zu entnehmen (vgl. [144]). Die Stoffdaten für die übrigen Temperaturen und Drücke wurden der ASPEN<sup>3</sup> Datenbank entnommen worden. Da die im Gasstrom enthaltenen Komponenten unter den Betriebsbedingungen wie ideale Gase behandelt werden dürfen (vgl. [146, 147]), darf die folgende Beziehung zur Bestimmung der molaren Stoffmenge verwendet werden.

$$n = \frac{V}{\tilde{V}} \quad (4-20)$$

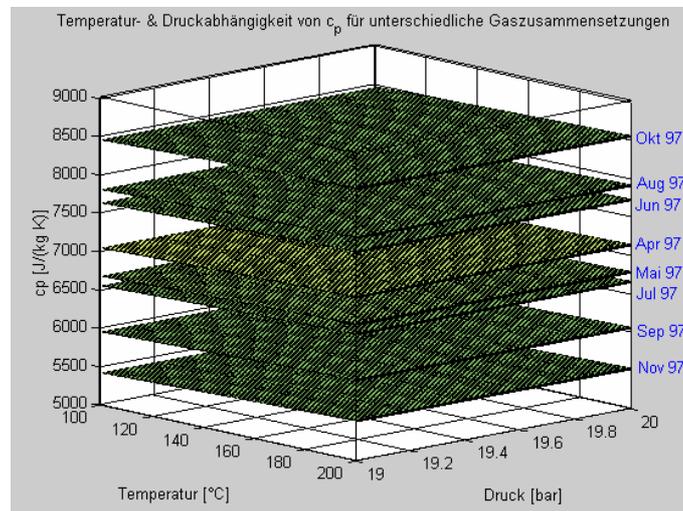
Wobei  $n$  für die Anzahl der Mole,  $V$  das Volumen und  $\tilde{V}$  für das Molvolumen ( $\tilde{V} = 22,4136$  l/mol) steht. Setzt man in die Gl. (4-20) die Daten aus Tabelle 4-2 für  $V$  und  $\tilde{V}$  ein, kann man die molare Stoffmenge jeder Komponente berechnen.

In Bild 4-4 ist die spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches  $\overline{c_{p,i}}$  [J / kg K] über der Temperatur und dem Druck aufgetragen. Sie wird mittels Gleichung (4-4)

---

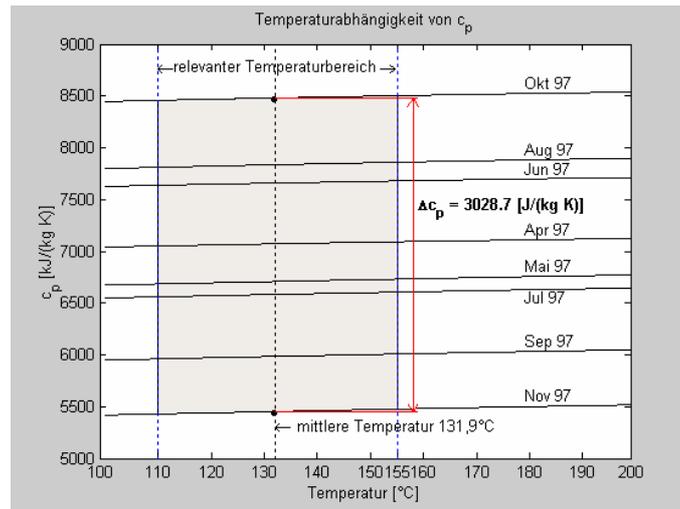
<sup>3</sup> Advanced System for Process Engineering (ASPEN), Programm der Firma Aspen Technology, Inc.; führender Hersteller von Prozesssimulationssoftware incl. umfangreicher Datenbanken für die Industrie.

berechnet. Dieser Parameter wird hier stellvertretend für die Wärmeleitfähigkeit  $\overline{\lambda}_i$ , dynamische Viskosität  $\overline{\eta}_i$  und Dichte  $\overline{\rho}_i$  betrachtet. Die entsprechenden analogen Bilder für diese Parameter sind im Anhang A2 aufgeführt.

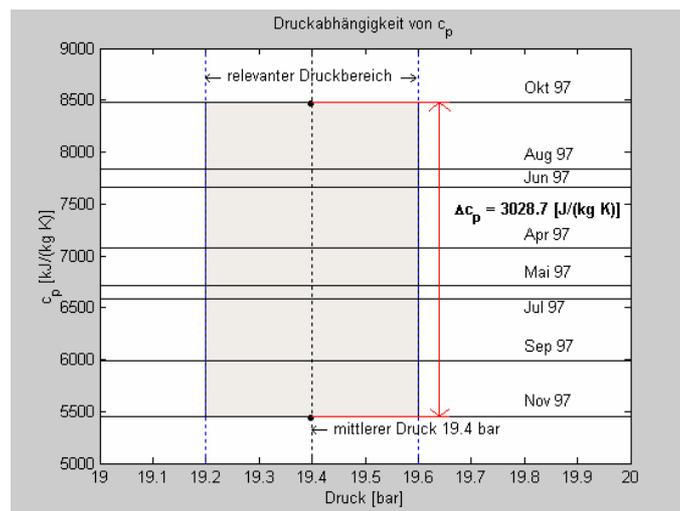


**Bild 4-4: Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches  $\overline{c}_{p,i}$ , aufgetragen über Temperatur und Druck für unterschiedliche Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2**

Aus Bild 4-4 ist ersichtlich, dass die Zusammensetzung des Gasstromes einen erheblichen Einfluss auf  $\overline{c}_{p,i}$  hat. Temperatur- und Druckschwankungen sind hingegen vernachlässigbar. Diese Aussage wird anhand der folgenden Bilder detaillierter gezeigt. Nachfolgend wird die Abhängigkeit von  $\overline{c}_{p,i}$  bzgl. der Gasstromzusammensetzung untersucht. Dazu wird  $\overline{c}_{p,i}$  über der Temperatur bei einem Druck von 19,4 bar in Bild 4-5 und in Bild 4-6 über den Druck bei einer Temperatur von 131,9 °C aufgetragen.



**Bild 4-5: Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches  $\overline{c_{p,i}}$ , aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar bei unterschiedlichen Zusammensetzungen (siehe Tabelle 4-2)**

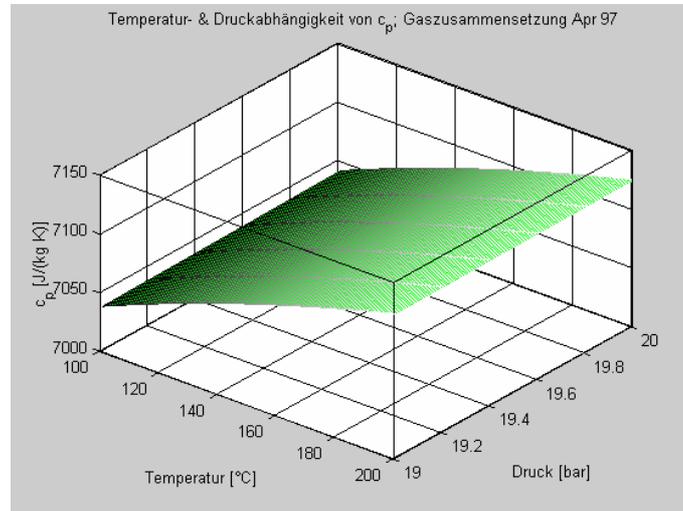


**Bild 4-6: Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches  $\overline{c_{p,i}}$ , aufgetragen über den Druck, bei einer Temperatur von 131,9°C bei unterschiedlichen Zusammensetzungen (siehe Tabelle 4-2)**

Die maximale Differenz  $\overline{\Delta c_{p,i}}$ , bedingt durch die unterschiedliche Zusammensetzung des Gasstromes, liegt bei 3028,7 J/(kg K). Es wird die Sensitivität dieses Parameters bezüglich Veränderungen in der Zusammensetzung des Gasstromes deutlich.

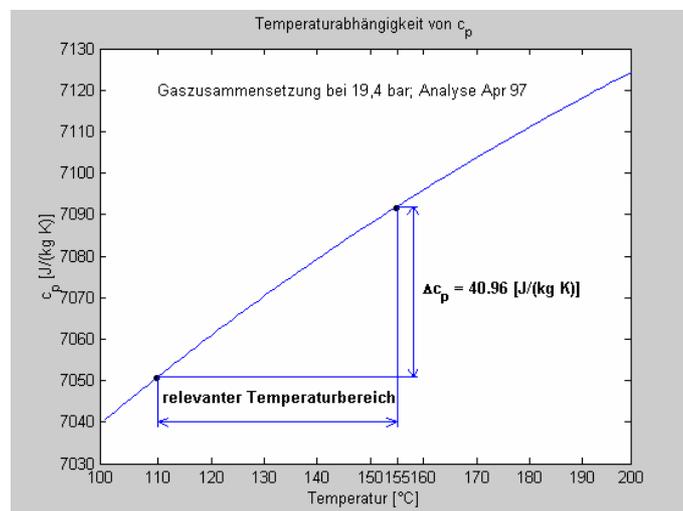
Da Temperatur- und Druckveränderungen fast keinen Einfluss auf  $\overline{c_{p,i}}$  haben, wird in den folgenden Bildern anhand einer beliebig ausgewählten Gasanalyse aus Tabelle

4-2, April 1997, gezeigt. Bild 4-7 zeigt den Gesamtzusammenhang und gibt einen Überblick.



**Bild 4-7: Darstellung der Temperatur- und Druckabhängigkeit für die spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches  $\overline{c_{p,i}}$  (Messung April 1997)**

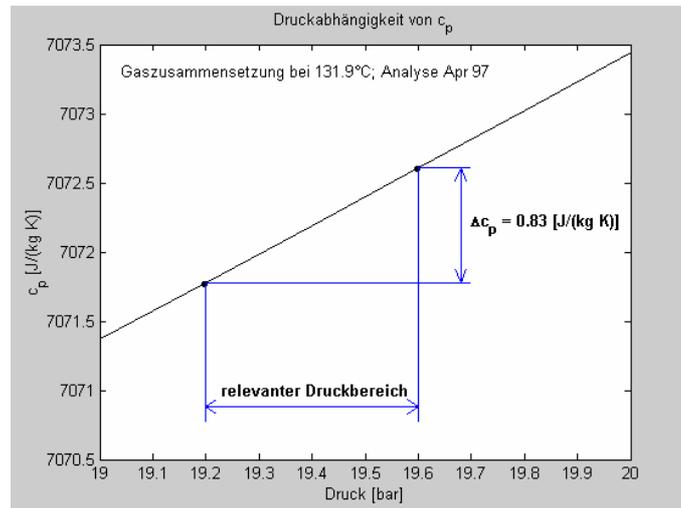
Das folgende Bild 4-8 verdeutlicht den minimalen Einfluss der Temperatur auf  $\overline{c_{p,i}}$ .



**Bild 4-8: Spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches  $\overline{c_{p,i}}$ , aufgetragen über der Temperatur bei einem Druck von 19,4 bar bei der Gaszusammensetzung vom April 1997 (siehe Tabelle 4-2)**

Die maximale Differenz von  $\overline{c_{p,i}}$ , bei dieser Gaszusammensetzung beträgt zwischen den Eckwerten des relevanten Temperaturbereichs nur 40,96 J/(kg K).

Trägt man  $\overline{c_{p,i}}$  über den Druck auf, wird deutlich, dass die Druckabhängigkeit vernachlässigt werden kann, da sie nahezu null ist, wie Bild 4-9 zeigt. Die Differenz beträgt im betrachteten Bereich 0,83 J/(kg K).



**Bild 4-9: Spezifische Wärmekapazität des Gasmisches  $\overline{C_{p,i}}$ , aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar bei der Gaszusammensetzung vom April 1997 (siehe Tabelle 4-2)**

Es ist festzuhalten, dass die Schwankungen der Komponentenanteile einen um Größenordnungen höheren Einfluss auf  $\overline{c_{p,i}}$  als die betrachteten Temperatur- oder Druckveränderungen haben.

Die Abhängigkeiten der Parameter  $\overline{\lambda}_i$ ,  $\overline{\eta}_i$  und  $\overline{\rho}_i$  von Temperatur und Druck im Arbeitsbereich sowie der Zusammensetzung des Reichgases sind im Anhang A2 dargestellt.

**Tabelle 4-3: Parameterabhängigkeit von Temperatur, Druck und Zusammensetzung des Reichgases**

Abhängigkeit	maximale Differenz			
	$\overline{c_{p,i}}$ [J / kg K]	$\overline{\lambda_i}$ [W/m K]	$\overline{\eta_i}$ [10 <sup>-7</sup> Pa s]	$\overline{\rho_i}$ [kg/(n)m <sup>3</sup> ]
<b>Stoffliche Zusammensetzung</b> bei 131,9 °C und 19,4 bar	3028,70	0,0149	5,6	1,2654
<b>Temperatur</b> im Bereich 110 bis 155 °C bei 19,4 bar, Gasanalyse April 1997	40,96	0,0182	9,0	0,2937
<b>Druck</b> im Bereich 19,2 bis 19,6 bar bei 131,9 °C, Gasanalyse April 1997	0,83	2,0 E-5	0	0,0519

Zusammenfassend wird festgestellt: Die Analyse der Parameter  $\overline{c_{p,i}}$ ,  $\overline{\alpha_i}$ , bzw.  $\overline{\lambda_i}$  und  $\overline{\eta_i}$ ,  $\overline{\rho_i}$ , bezogen auf deren Abhängigkeit von Temperatur, Druck und Substanz, zeigt, dass die Temperatur- und Druckabhängigkeit im Hinblick auf den Einfluss der unterschiedlichen Gaszusammensetzung vernachlässigt werden können. Die Berechnung der thermodynamischen Daten erfolgt im Weiteren bei einer Temperatur von 131,9 °C und einem Druck von 19,4 bar.

#### 4.2.2 Behandlung der unsicheren Parameter

Die Überprüfung der zur Verfügung stehenden Betriebs- und Auslegungsdaten zeigt, dass mehrere Werte für jeden unsicheren Parameter bzw. jede Komponente zur Verfügung stehen. Mithin wird die in Abschnitt 2.2.2 (Fall D1) beschriebene Methode angewendet.

Dabei werden die optimalen Verteilungen für die Parameter  $T_{ie}$  und  $\dot{V}_i$  mit dem MATLAB-Programm ANPA2 bestimmt. Beispielhaft wird dies anhand von  $T_{ie}$  gezeigt. Da die Eingangstemperatur vor dem Rohrbündelwärmetauscher (vgl. Bild 4-1) gemessen wird, stehen keine direkten Messwerte zur Verfügung. Aus diesem Grund müssen die  $T_{ie}$  Werte über ein Modell berechnet werden. Dies geschieht mit einem Standardberechnungsmodell für Rohrbündelwärmetauscher (siehe [94, 145]). Das Modell ist in [148] speziell für die Anwendung auf diesem Fall näher beschrieben und überprüft. Der Tabelle 4-4 sind die berechneten, anzupassenden Betriebsdaten für  $T_{ie}$  zu entnehmen.

**Tabelle 4-4: Eingangstemperatur des Gasgemisches in den Kondensator  $T_{ie}$**

$T_{ie}$ [K]	
<i>Temperatur</i>	<i>Häufigkeit</i>
391	3
393	1
395	18
397	13
399	14
401	28
403	60
405	36
407	43
409	24
411	23
413	18
415	11
417	11
419	13
421	2
423	1
<i>392,5</i>	<i>Auslegungswert</i>

Das Ergebnis der Auswertung mit dem Programm ANPA2 für  $T_{ie}$  ist in Tabelle 4-5 dargestellt.

**Tabelle 4-5: Bestimmung der optimalen Verteilung für  $T_{ie}$**

Verteilungstyp	Quadratische Abweichung
Normalverteilung	0,33337
Logarithmische Normalverteilung	0,30600
Weibullverteilung	3,64440
Gammaverteilung	0,31420
Rechteck Verteilung	19,0600
Dreieck Verteilung	5,96170
Exponential Verteilung	31,1750

Die Log-Normalverteilung ist die optimale Verteilung zur Beschreibung der Daten für diesen Parameter. Die Bestimmung der optimalen Verteilung für den Parameter  $\dot{V}_i$  erfolgt analog; für diesen wird die Weibullverteilung bestimmt.

Der Verschmutzungsfaktor  $R_f$  wird mittels einer rechtsseitigen Dreiecksverteilung beschrieben. Die Verteilung wurde festgelegt und nicht mit dem Programm ANPA2 bestimmt. Hier weiß man aus der Erfahrung, dass die rechtsseitige Dreiecksverteilung

solche Werte am besten approximiert (vgl. [149]). – Die Verschmutzung nimmt mit der Betriebszeit des Apparates zu und wird nach dessen Reinigung zurückgesetzt. Die Verschmutzungsfaktor könnte auch gemessen werden.

Es wird bei den Parametern  $\overline{c_{p,i}}$ ,  $\overline{\alpha_i}$ , bzw.  $\overline{\lambda_i}$  und  $\overline{\eta_i}$ ,  $\overline{\rho_i}$  nur die Abhängigkeit von der stofflichen Zusammensetzung des Reingasstromes berücksichtigt. Basierend auf den Messdaten des Eingangsgasstroms aus Tabelle 4-2 werden die Fraktionen seiner Komponenten ( $x_k$ ) mittels einer Dirichlet Verteilung beschrieben [106].

$$f(x_1, \dots, x_{K+1}) = \Gamma(\Theta) \cdot \prod_{k=1}^{K+1} \left( \frac{x_k^{\Theta_k - 1}}{\Gamma(\Theta_k)} \right); \quad \sum_{k=1}^{K+1} x_k = 1; \quad \sum_{k=1}^{K+1} \Theta_k = \Theta \quad (4-21)$$

In Gl. 4-21 steht  $x_{K+1}$  für den Messfehler (vgl. Tabelle 4-2). Die entsprechenden Zufallswerte werden mit Gl. (A–22) aus dem Anhang A1 erzeugt.

Die Parameter  $\overline{c_{p,i}}$ ,  $\overline{\alpha_i}$ ,  $\overline{\lambda_i}$ ,  $\overline{\eta_i}$  und  $\overline{\rho_i}$  werden dann unter Berücksichtigung der Fluktuationen der stofflichen Zusammensetzung des Eingangsgasstromes unter Verwendung der entsprechenden Gleichungen aus Abschnitt 4.1 berechnet.

In Tabelle 4-6 sind die Komponenten und Parameter, die sie beschreibende Wahrscheinlichkeitsverteilung, der Grund für die Unsicherheit und die Parameter der Verteilung aufgeführt.

**Tabelle 4-6: Beschreibung der unsicheren Größen**

	Verteilung	Grund	Parameter					
			$\mu$	s	a	b	$\eta$	$\Theta$
Wasserstoff H <sub>2</sub> [Vol.-%]	Dirichlet	aleatorisch						359,8
Methan CH <sub>4</sub> [Vol.-%]	Dirichlet	aleatorisch						13,14
Ethen C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> [Vol.-%]	Dirichlet	aleatorisch						2,663
Propen C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> [Vol.-%]	Dirichlet	aleatorisch						0,5475
Kohlenmonoxid	Dirichlet	aleatorisch						3,386

	Verteilung Grund		Parameter					
			$\mu$	$s$	$a$	$b$	$\eta$	$\Theta$
CO [Vol.-%]								
Stickstoff N <sub>2</sub> [Vol.-%]	Dirichlet	aleatorisch						3,386
Kohlendioxid CO <sub>2</sub> [Vol.-%]	Dirichlet	aleatorisch						12,20
Ethan C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> [Vol.-%]	Dirichlet	aleatorisch						0,5918
Sauerstoff O <sub>2</sub> [Vol.-%]	Dirichlet	aleatorisch						0,2884
Messfehler	Dirichlet	aleatorisch						0,1873
Volumenstrom $\dot{V}_i^*$ [(n)m <sup>3</sup> /h]	Weibull	aleatorisch				9,7E-5	4,7744	
Eingangstemperatur Gas T <sub>ie</sub> [K]	Log-normal	aleatorisch	6,0049	0,0158				
Verschmutzungsfaktor R <sub>f</sub> [m <sup>2</sup> K/W]	r.-seitige Dreieck	epistemisch			0,0002	0,0004		

\* Standardbedingungen (0°C, 1013mbar)

In der Tabelle 4-7 sind die zur Verfügung stehenden Daten für die Eingabeparameter von Gl. (4-19) aufgeführt. Fall 1 ist der für die Auslegung des Kondensators verwendete Datensatz und berücksichtigt keine Unsicherheiten in der Simulation. D.h., es werden in die Auslegungsrechnung feste Werte eingesetzt. Fall 2 ist der für die Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten verwendete Datensatz. Für die Modellparameter Nr. 7 bis 15 (siehe Tabelle 4-1) werden, wie oben beschrieben, in beide Datensätze die Auslegungswerte eingesetzt. Die Komponenten zur Simulierung des Reichgasstromes sind noch einmal in Tabelle 4-7 mit aufgeführt.

**Tabelle 4-7: Auslegungs- und Betriebsparameter**

		Verteilungstyp	Wert
Spez. Wärmekapazität Reichgas $\overline{C_{p,i}}$ [J / kg K] <sup>1)</sup>	Fall 1	Punktwert	6330
Wärmeleitfähigkeit Reichgas $\overline{\lambda}_i$ [W/m K] <sup>1)</sup>	Fall 1	Punktwert	0,220
Dynamische Viskosität Reichgas $\overline{\eta}_i$ [10 <sup>-4</sup> Pa s] <sup>1)</sup>	Fall 1	Punktwert	0,158
Dichte Reichgas $\overline{\rho}_i$ [kg/(n)m <sup>3</sup> ] <sup>1) 2)</sup>	Fall 1	Punktwert	0,210

		Verteilungstyp	Wert
Volumenstrom Reichgas $\dot{V}_i$ [(n)m <sup>3</sup> /h] <sup>2)</sup>	Fall 1	Punktwert	15857
	Fall 2	Weibull	siehe Tabelle 4-6
Eingangstemperatur Reichgas $T_{ie}$ [K]	Fall 1	Punktwert	392,500
	Fall 2	Log-normal	siehe Tabelle 4-6
Verschmutzungsfaktor $R_f$ [m <sup>2</sup> K/W]	Fall 1	Punktwert	0,0002
	Fall 2	rechts. Dreieck	siehe Tabelle 4-6
Temperatur Hochdruckdampf $T_w$ [K]	Fall 1 & Fall 2	Punktwert	540,150
Spez. Wärmekapazität Stahl $c_{p,st}$ [J / kg K]	Fall 1 & Fall 2	Punktwert	500
Wärmeleitfähigkeit Stahl $\lambda_{st}$ [W/m K]	Fall 1 & Fall 2	Punktwert	35
Dichte Stahl $\rho_{st}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Fall 1 & Fall 2	Punktwert	7800
Wärmeübertragungskoeffizient $\alpha_w$ [W/m <sup>2</sup> K]	Fall 1 & Fall 2	Punktwert	12713
Rohrinnenradius $r_i$ [m]	Fall 1 & Fall 2	Punktwert	0,015
Rohraußenradius $r_a$ [m]	Fall 1 & Fall 2	Punktwert	0,020
Anzahl der Rohre im Wärmetauscher R	Fall 1 & Fall 2	Punktwert	67
Höhe des Wärmetauschers L [m]	Fall 1 & Fall 2	Punktwert	0,780
Wasserstoff H <sub>2</sub> [Vol.-%]	Fall 2	Dirichlet	siehe Tabelle 4-6
Methan CH <sub>4</sub> [Vol.-%]	Fall 2	Dirichlet	siehe Tabelle 4-6
Ethen C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> [Vol.-%]	Fall 2	Dirichlet	siehe Tabelle 4-6
Propen C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> [Vol.-%]	Fall 2	Dirichlet	siehe Tabelle 4-6
Kohlenmonoxid CO [Vol.-%]	Fall 2	Dirichlet	siehe Tabelle 4-6
Stickstoff N <sub>2</sub> [Vol.-%]	Fall 2	Dirichlet	siehe Tabelle 4-6
Kohlendioxid CO <sub>2</sub> [Vol.-%]	Fall 2	Dirichlet	siehe Tabelle 4-6
Ethan C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> [Vol.-%]	Fall 2	Dirichlet	siehe Tabelle 4-6
Sauerstoff O <sub>2</sub> [Vol.-%]	Fall 2	Dirichlet	siehe Tabelle 4-6

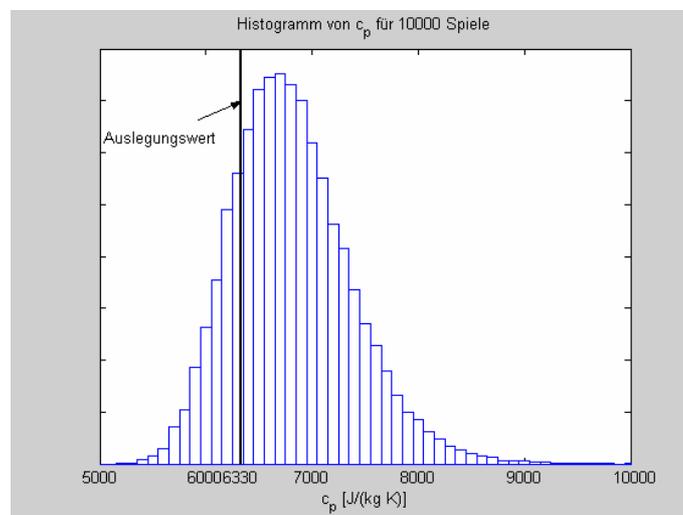
<sup>1)</sup> Auslegungstemperatur 175°C, -druck 19,4 bar

<sup>2)</sup> Standardbedingungen (0°C, 1013mbar)

Mittels Monte- Carlo- Simulation (vgl. Abschnitt 2.3.1) werden die Unsicherheiten durch das Modell getragen. Dazu werden im vorliegenden Fall N = 10000 Berechnungen durchgeführt, wobei für jede Berechnung ein zufälliger Datensatz aus den korrespondierenden Verteilungen (Fall 2) mit Hilfe der Transformationsgleichungen (siehe Anhang 1) erzeugt wird. Das Ergebnis jeder Berechnung wird gespeichert, und durch eine Log-Normalverteilung approximiert.

Die Anzahl der Spiele ist auf Grund der Rechenzeit (weniger als zwei Minuten) für die gesamte Simulation von untergeordneter Bedeutung.

Am Beispiel des aufzuheizenden Reichgasstromes wird die erläuterte Methode angewandt. Bild 4-10 zeigt die berechneten  $\overline{c_{p,i}}$  Werte in einem Histogramm. Bei der Simulation des Kondensators (Fall 2) werden die Werte für diesen Parameter in Gl. (4-19) eingesetzt. Ebenfalls ist in Bild 4-10 der Auslegungswert für  $\overline{c_{p,i}}$  eingetragen. Dieser Wert wird bei der Auslegungsrechnung (Fall1) in Gl. (4-19) eingesetzt. Damit wird in Bild 4-10 deutlich, welche Unterschiede sich bei der Berücksichtigung der Unsicherheiten für diesen Parameter ergeben.



**Bild 4-10: Histogramm von  $\overline{c_{p,i}}$  bei 10000 Spielen**

Die Vorgehensweise bei der Simulation nach VGW 1 ist in Bild 4-11 dargestellt und die nach VGW 2 in Bild 4-12. Der Unterschied zwischen VGW 1 und VGW 2 besteht darin (vgl. Kapitel 2), dass bei VGW 2 im Gegensatz zu VGW 1 zwei Schleifen durchlaufen werden. Eine innere mit NE Spielen und eine äußere mit N Spielen.

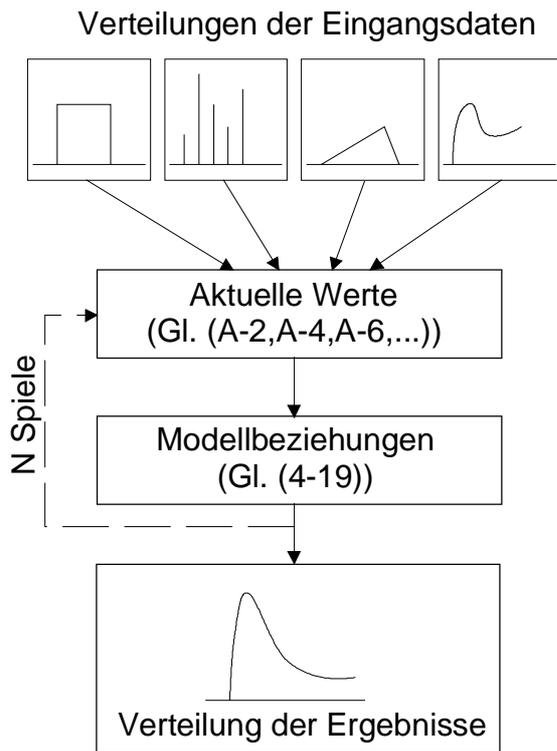
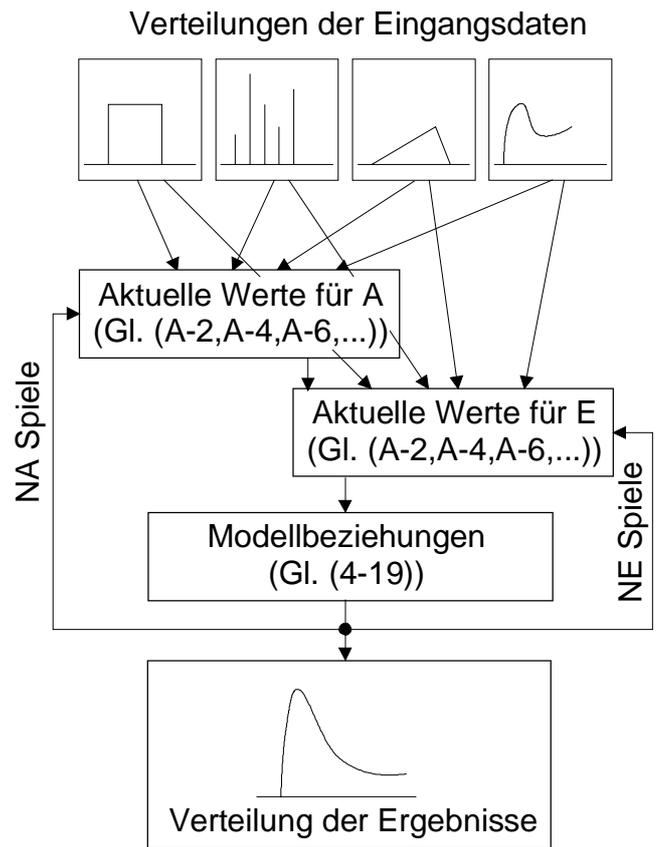


Bild 4-11: VGW 1 bei der Modellierung des Wärmetauschers



**Erläuterung**  
 A: Aleatorische Parameter  
 E: Epistemische Parameter

Bild 4-12: VGW 2 bei der Modellierung des Wärmetauschers

### 4.2.3 Entropie als Entscheidungskriterium

Die Entropien (vgl. Abschnitt 2.2.4) werden nach den folgenden Gleichungen berechnet um damit eine Entscheidung für VGW 1 oder VGW 2 zu erhalten.

Berechnung der Entropie für VGW 1 nach Gl. (2-34):

$$S_{VGW1} = - \sum_{j=1}^{R+P} \sum_{i=1}^N f(x_{i,j}) \ln[f(x_{i,j})] \quad (2-34)$$

Berechnung der Entropie für VGW 2 nach Gl. (2-36):

$$S_{VGW2} = - \left[ \sum_{j=1}^R \sum_{i=1}^{NA} f(y_{i,j}) \ln[f(y_{i,j})] + \sum_{j=1}^P \sum_{i=1}^{NE} f(x_{i,j} | (y_1, \dots, y_r)) \ln[f(x_{i,j} | (y_1, \dots, y_r))] \right] \quad (2-36)$$

Jedoch gilt hier nach Überprüfung der unsicheren Parameter, dass die epistemischen Größen nicht durch die aleatorischen Größen beeinflusst werden. Insofern hat sich keine Abhängigkeit herausgestellt.

Die Überprüfung erfolgte, indem drei Rechnungen durchgeführt und die Ergebnisse miteinander verglichen wurden. Es wurde eine Rechnung durchgeführt bei der für die unsicheren Parameter die Erwartungswerte (Punktwerte) der Verteilungen eingesetzt worden sind, und es wurde nach den beschriebenen Methoden (VGW 1 und VGW 2) simuliert. Die Ergebnisse der Rechnung unter Verwendung der Punktwerte entsprachen den Erwartungswerten der Verteilungen bei der Simulation unter Anwendung der Methoden. Dies deutet darauf hin, dass die Variablen unabhängig voneinander sind. Nimmt man die Unabhängigkeit an, gilt [118]

$$S(E|A) = S(E). \quad (2-37)$$

Die Folge ist, zwischen VGW 1 und VGW 2 besteht kein Unterschied und damit ist keine unterschiedliche Behandlung der aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten nötig.

$$S_{VGW1} = S_{VGW2} \quad (4-22)$$

Mithin sind die Ergebnisse von Gl. (2-34) und Gl. (2-36) identisch. Daraus lässt sich ableiten, dass es für die Simulation des Kondensators gleich ist, ob nach VGW 1 oder VGW 2 vorgegangen wird. Diese Feststellung und die Annahme der Unabhängigkeit der Variablen wird durch die Simulationsergebnisse in Abschnitt 4.3 bestätigt.

### **4.3 Simulation eines Kondensators unter Betriebsbedingungen**

Die Gastemperatur am Wärmetauscheraustritt ( $T_{ia}$ ) soll  $423,2 \text{ K} \pm 1,8 \text{ K}$ , durch Variation des Kondensatstandes zwischen 0 und 0,76 m, betragen. Wird die Höchsttemperatur überschritten, kann der nachgeschaltete Katalysator beschädigt werden. Bei zu niedriger Temperatur hat das Austrittsgas nicht die geforderten Eigenschaften.

Verlässt  $T_{ia}$  den tolerierbaren Temperaturbereich infolge von Schwankungen in der Zusammensetzung des Reichgases und / oder der Betriebsparameter, z. B. der Wärmetauschereingangstemperatur ( $T_{ie}$ ), und kann dies nicht kompensiert werden weil die Wärmeaustauschfläche gar nicht ( $H= 0\%$ ) oder vollständig ( $H= 100\%$ ) mit Kondensat beaufschlagt ist, wird die Anlage abgefahren.

$T_{ia}$  wird mit dem in Abschnitt 4.1 beschriebenen Modell berechnet, wobei der Kondensatstand fixiert (Punktwerte  $H = 0, 10, 20, \dots, 100\%$ ) und  $Z = 50$  Zellen ist. Dabei werden zur Berechnung von  $T_{ia}$  für jeden Kondensatstand bei VGW 1  $N = 10000$  Spiele und bei VGW 2 NA und NE = 5000 Spiele durchgeführt.

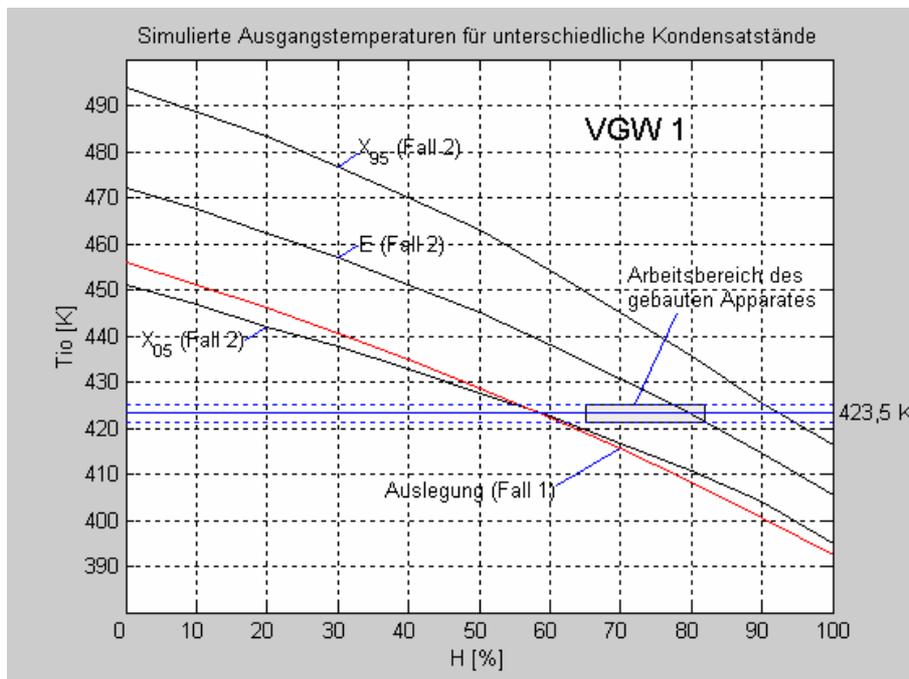
Für Fall 1 (vgl. Tabelle 4-7) werden die Ergebnisse durch Verwendung von Punktwerten (konventionelle Vorgehensweise) als Eingangsdaten in der Simulation ermittelt. D. h. z. B. für  $\overline{c_{p,i}}$ , dass der Auslegungswert aus Tabelle 4-7 eingesetzt wird. Andere Werte, die sich für diesen Parameter durch unterschiedliche Gaszusammensetzungen ergeben und in Bild 4-10 dargestellt sind, werden nicht berücksichtigt. Für Fall 2 wird  $T_{ia}$  unter Nutzung aller verfügbaren Werte gemäß Abschnitt 4.2 nach VGW 1 und VGW 2 berechnet.

Die Ergebnisse nach VGW 1 für  $T_{ia}$  werden in Bild 4-13 gezeigt; die nach VGW 2 in Bild 4-14. Beim Vergleich der beiden Bilder wird die Feststellung aus Abschnitt 4.2.3 bestätigt. Die unterschiedlichen Vorgehensweisen liefern gleiche Ergebnisse. Daraus ergibt sich, dass nur VGW 1 weiter beachtet wird.

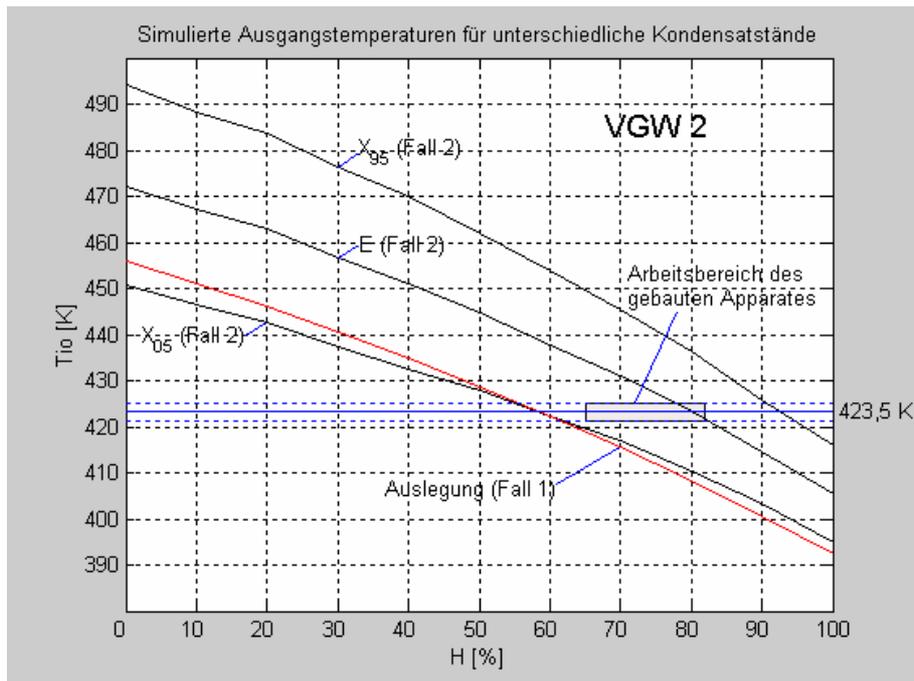
Im Folgenden wird das Bild 4-13 interpretiert.

Für Fall 2 werden die Ergebnisse für  $T_{ia}$  in dem Sinne interpretiert, dass die Ausgangstemperatur aus dem Wärmetauscher mit einer Wahrscheinlichkeit von  $p$  [ $p=0,05$  (5% Fraktile),  $0,5$  (Mittelwert) oder  $0,95$  (95% Fraktile)] unterhalb der angezeigten Werte bleiben wird. Demgegenüber liefert die konventionelle Berechnung (Fall 1) einen Wert unterhalb des Erwartungswertes, der in Bild 4-13 gegeben ist, z.B. bei  $T_{ia} = 428,72\text{K}$  mit  $H=50\%$ . Es ist offensichtlich, dass abhängig von der Wahl des Parametersatzes für die Berechnung die Möglichkeit besteht, eine Über- als auch eine Unterdimensionierung der erforderlichen Wärmeübertragungsfläche vorzunehmen und somit die Eigenschaften des Kondensators negativ zu beeinflussen.

Weiterhin ist es erkennbar, dass unter Einbeziehung aller verfügbaren Werte für die Eingangsparameter (Fall 2) die realen Arbeitsbedingungen besser wiedergegeben werden als unter Verwendung der Auslegungswerte (Fall 1). Dies wird durch die Betriebsdaten bestätigt (grau schraffierter Bereich im Bild 4-13). Mithin lassen Berechnungen allein mit den Auslegungsdaten keine zufrieden stellende Aussage bezüglich der Betriebsbedingungen zu.



**Bild 4-13: Simulierte Kondensatorausgangstemperaturen (Fälle 1 und 2) für unterschiedliche Kondensatzustände nach VGW 1**



**Bild 4-14: Simulierte Kondensatorausgangstemperaturen (Fälle 1 und 2) für unterschiedliche Kondensatzstände nach VGW 2**

Als nächstes wird die Sprungantwort von  $T_{ia}$  auf eine plötzliche Änderung der Gaseingangstemperatur ( $T_{ie,1} = 388.5\text{K}$  auf  $T_{ie,2} = 392.5\text{K}$ ) mit den Datensätzen für Fall 1 und 2 berechnet. Das System ist nicht geregelt und  $H$  ist auf 50% fixiert.

Die Sprungantwortzeiten sind Tabelle 4-8 zu entnehmen. Vergleicht man das Ergebnis der beiden Datensätze, so liegt der Wert, der sich mit den Auslegungsdaten (Fall 1) ergibt, unter dem 5% Fraktile der Log-Normalverteilung, die die Ergebnisse von Fall 2 approximiert. Das deutet an, dass die Reserven zur Regelung des Systems überschätzt wurden.

**Tabelle 4-8: Sprungantwortzeit infolge eines Temperatursprunges  $T_{ie}$  von 388,5 auf 392,5K**

	Fall 1	Fall 2
Punktwert [s]	10	
5% Fraktile [s]		12
Erwartungswert [s]		14
95% Fraktile [s]		16

Auf Basis des untersuchten industriell eingesetzten Kondensators werden die ersten Aussagen auf Anwendbarkeit des Verfahrens zur Berücksichtigung von Unsicherheiten bei Ingenieurberechnungen getroffen.

- Stochastische Effekte und Datenunsicherheiten sind immer vorhanden und können eine beachtliche Auswirkung auf Parameter, die für die Auslegung von Prozessapparaten benötigt werden, haben.
- Durch deren Berücksichtigung werden alle zur Verfügung stehenden Informationen erfasst und in die Simulation mit einbezogen.
- Die Simulation eines Apparates unter Einbeziehung stochastischer Effekte und Unsicherheiten lässt eine bessere Voraussage der Betriebsbedingungen zu als eine nach der konventionellen Auslegungsmethode.
- Es muss keine unterschiedliche Behandlung der aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten vorgenommen werden.

## **5 Simulation und Analyse einer komplexen biologischen Kläranlage unter Berücksichtigung von Modell- und Parameterunsicherheiten sowie stochastischer Effekte**

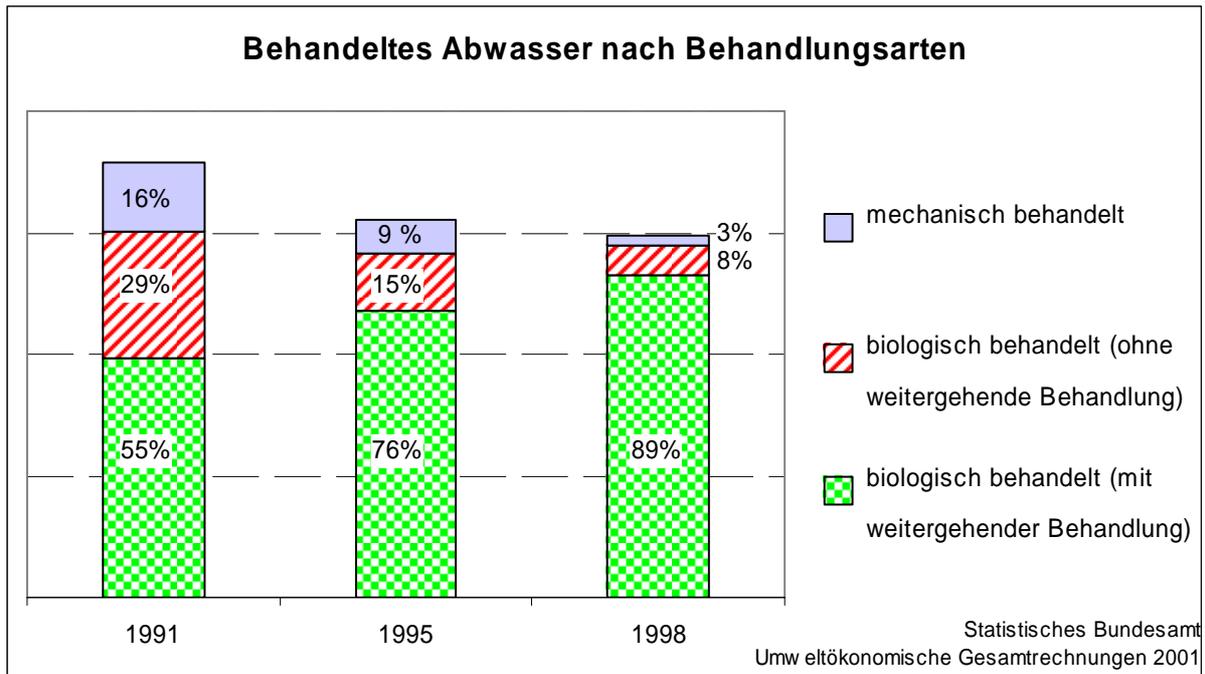
Gemäß der Agenda 21, die im Juni 1992 auf der Umweltkonferenz in Rio de Janeiro verabschiedet wurde, ist Wasser als natürliche Ressource zu schützen. Da nahezu jede chemische Produktionsanlage Wasser für verschiedene Zwecke nutzt, ist der Behandlung ihrer Abwässer besondere Beachtung zu schenken.

Die neue EU-Wasserrahmenrichtlinie (Richtlinie 2000/60/EG) schafft dazu einen einheitlichen Rahmen zum Schutz des Wassers, zeigt Kriterien zur Beurteilung und Erhaltung der Wasserressourcen auf und trägt damit zur nachhaltigen Wassernutzung bei [150]. Die Umsetzung dieser Richtlinie des Europäischen Parlaments und des Rates vom 23. Oktober 2000 zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik schafft das Gesetz zur Ordnung des Wasserhaushalts (WHG) [151].

Unter Umweltgesichtspunkten ist die Entnahme von Wasser aus der Natur und die Einleitung von Abwasser in die Natur in mehrfacher Hinsicht von Bedeutung. Wobei im Folgenden nur auf die Abgabe von Wasser in die Natur näher eingegangen wird.

Im Jahr 1998 wurden allein in Deutschland 38,6 Mrd. m<sup>3</sup> Abwasser in die Natur eingeleitet. Dazu trug die Chemische Industrie mit etwa 2,9 Mrd. m<sup>3</sup> Abwasser bei. D. h. es entfielen auf sie 7,6% des Gesamtaufkommens. Derzeit werden in Deutschland etwa 10.000 kommunale und mehrere tausend industrielle Kläranlagen betrieben.

Die Qualität der Behandlung von Abwasser hat sich seit Anfang der 90er Jahre deutlich erhöht. Der Anteil biologischer Verfahren mit weitergehender Behandlung an der Gesamtmenge des behandelten Abwassers erhöhte sich im Zeitraum 1991 bis 1998 von 55 % auf 89 %. Der Anteil des allein mechanisch behandelten Abwassers verminderte sich von 16 % auf 3 %, wie Bild 5-1 zu entnehmen ist.



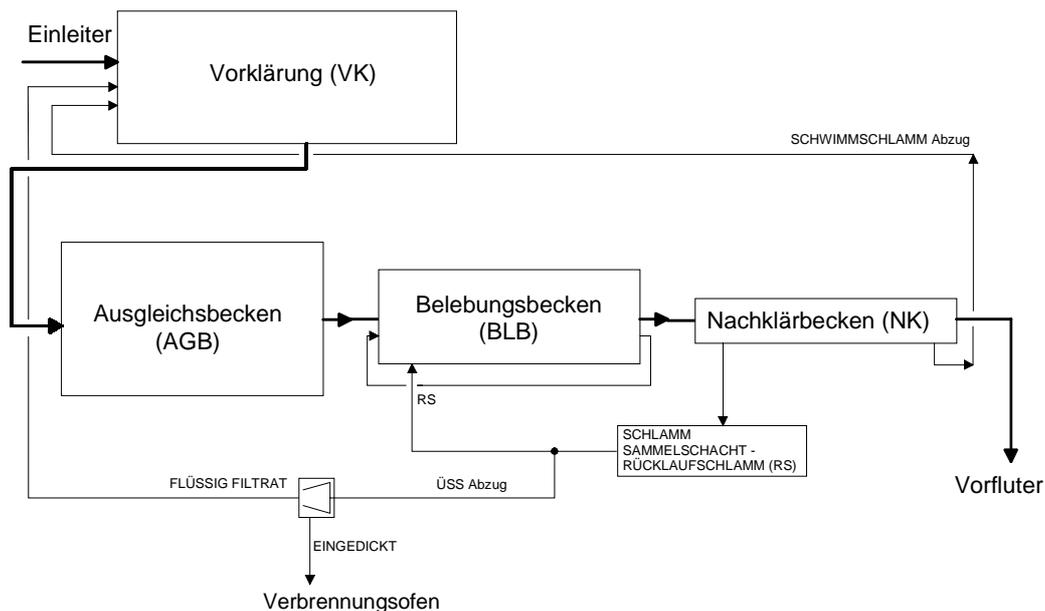
**Bild 5-1: Behandeltes Abwasser nach Behandlungsarten.**

Die Planung und der Betrieb solcher Anlagen stellen den Ingenieur vor immer größere Aufgaben. Insbesondere deshalb, da das Problem der Gewässerreinigung verstärkt in den Blickpunkt der öffentlichen Umweltschutzdiskussionen gerückt ist. Dies hat zu einer Verschärfung der abwasserrelevanten Rechtsnormen wie beispielsweise des Wasserhaushaltsgesetzes [151], der Landeswassergesetze etc. geführt. Dohmann [152] hat schon 1989 darauf hingewiesen, dass mehr als 50% der für den Umweltbereich in den letzten Jahren in Kraft getretenen Gesetze und Verordnungen abwasserrelevant sind. Die Zahlen und Fakten verdeutlichen den Stellenwert biologischer Kläranlagen, insbesondere der in der Chemischen Industrie. Die Folgen dieser Entwicklung sind strengere Anforderungen an die Prozessstabilität und Betriebssicherheit der Kläranlagen. Betriebsstörungen werden heute nicht mehr hingenommen [153]. Die Forderung nach scharfer Einhaltung von Grenzwerten verlangt eine verlässliche Planung zum sicheren Betrieb von Kläranlagen. Dazu trägt, wie gezeigt wird, die Berücksichtigung von Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen bei.

Die Definitionen der nachfolgend verwendeten Fachausdrücke aus dem Abwasserwesen können der DIN 4045 "Abwassertechnik; Begriffe" entnommen werden [154].

## 5.1 Prinzip des Belebungsverfahrens

Industrielle Abwässer werden heute überwiegend nach dem so genannten Belebungsverfahren gereinigt. Bild 5-2 zeigt das Prinzip einer industriellen Kläranlage [155, 156].



**Bild 5-2: Prinzip des Belebungsverfahrens zur Abwasserreinigung**

Dieses Verfahren führt gewissermaßen räumlich konzentriert und zeitlich gerafft die Selbstreinigungsprozesse der Natur durch. Das Wasser wird zunächst mechanisch vorgeklärt, d. h. ungelöste anorganische und organische Abwasserinhaltsstoffe werden weitgehend im Vorklärbecken eliminiert. Vor allem die im Wasser gelösten Stoffe, wie organische Kohlenstoffverbindungen, Ammonium ( $\text{NH}_4$ ), Nitrat ( $\text{NO}_3$ ) und Phosphat gelangen dann über das Ausgleichsbecken in die Belebungsbecken. Dort wird das vorgeklärte Abwasser mit Mikroorganismen in Kontakt gebracht, gut durchmischt und ausreichend belüftet. Anschließend werden die flockenbildenden Mikroorganismen in horizontal durchströmten Nachklärbecken durch Sedimentation vom gereinigten Abwasser getrennt. Der Zuwachs an Biomasse aufgrund des Wachstums der Mikroorganismen, infolge des Substratangebotes in Form organischer Abwasserinhaltsstoffe, wird als Überschussschlamm (ÜSS) aus dem

Abwasserreinigungsprozess abgezogen, eingedickt, entwässert und deponiert oder verbrannt.

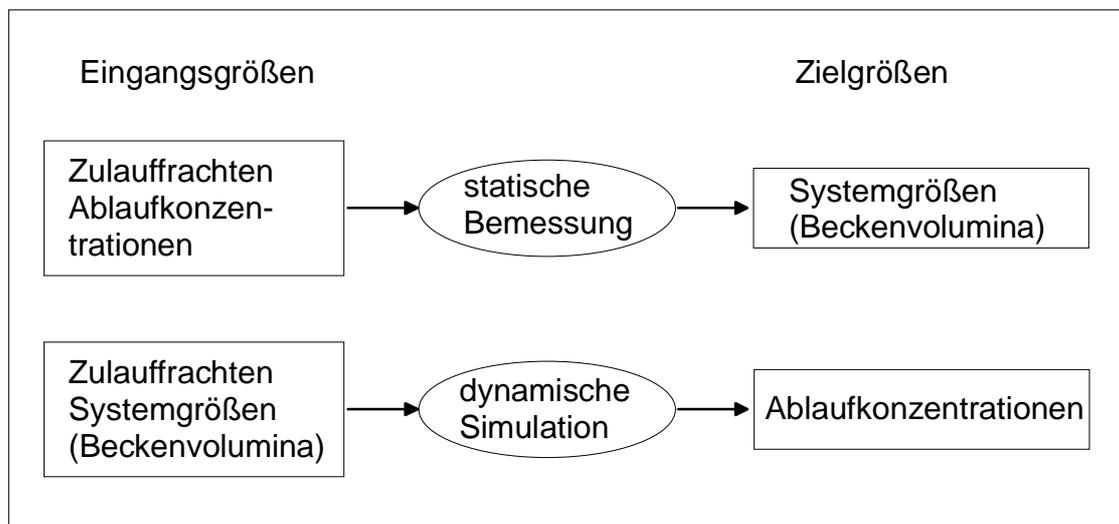
Der heute vom Gesetzgeber geforderte weitgehende Abbau der anorganischen Stickstoffverbindungen wird durch entsprechend große Becken und eine damit verbundene längere Verweilzeit der Mikroorganismen (Schlammalter) erreicht. Dies ist die Bedingung dafür, dass spezielle Bakterien heranwachsen können, die Ammonium in Nitrat umwandeln können (Nitrifikation). Die Reduktion des Nitrats zu gasförmigen Stickstoff (Denitrifikation) erfolgt in unbelüfteten Beckenabschnitten bzw. sehr wenig belüfteten Beckenabschnitten.

## ***5.2 Anforderung und Lösungsansatz***

Wie jede Ingenieurberechnung so sind auch die Modelle und Eingangsdaten zur Planung und Auslegung von Kläranlagen mit Unsicherheiten behaftet. Datenunsicherheiten beziehen sich hauptsächlich auf die Kenntnisse bezüglich der stöchiometrischen und kinetischen Parameter der in der Biologie ablaufenden Reaktionen (epistemische Unsicherheiten) und auf die stochastischen Effekte, wie z.B. Gewitter oder starke Temperaturschwankungen (aleatorische Unsicherheiten) [157]. Die Modellunsicherheiten kommen dadurch zum Ausdruck, dass die verwendeten Modelle unterschiedlich das Gesamtwachstum der Mikroorganismen simulieren. Zusätzlich laufen in einer Kläranlage mehrere biochemische Prozesse parallel ab, die sich gegenseitig beeinflussen. Somit ist das Auslegen und Betreiben einer Anlage, die nitrifiziert und denitrifiziert, eine komplexe Aufgabe. Änderungen der Betriebsweise haben oftmals gleichzeitig mehrere Effekte; dabei kann es vorkommen, dass neben der gewünschten Veränderung eines Parameters bei einem oder mehreren anderen Parametern Gegenteiliges eintritt.

Derzeit beruht die Auslegung von Abwasserreinigungsanlagen auf langjährigen Erfahrungen mit der Abwassertechnik [5]. Jedoch mangelt es dabei an Eingangsinformationen für die Simulation des nicht stationären Verhaltens solcher komplexer Systeme [158]. Daher werden die dynamischen Simulationen als zu

unsicher angesehen. Dies erklärt, weshalb sich die dynamische Simulation von Kläranlagen erst langsam etabliert, obwohl sie eine notwendige Ergänzung der stationären Berechnungsmethoden ist, auf der die Auslegung derzeit beruht [6]. Im Gegensatz zur statischen (Bautechnischen) Auslegung, bei der für statisch bemessene Lastfälle die erforderlichen Beckenvolumina von Kläranlagen berechnet werden, wird bei der dynamischen Simulation das Betriebsverhalten der Anlagen simuliert. Bild 5-3 verdeutlicht den Unterschied zwischen der statischen Bemessung und der dynamischen Simulation.



**Bild 5-3: Eingangs- und Zielgrößen bei der statischen Bemessung und der dynamischen Simulation von Kläranlagen [160]**

Die Unsicherheiten in der nicht stationären Auslegung glaubt man durch großzügig gewählte Sicherheitsfaktoren in der Bemessung auszugleichen. Im Ergebnis bedeutet das, dass bei zu großen Sicherheitsfaktoren Fehlplanungen erfolgen können, so dass die Überwachungswerte nicht eingehalten werden oder die Abwasserreinigung durch eine zu große Auslegung zu teuer wird. Des Weiteren kann die Störanfälligkeit der Anlage steigen [5, 6]. Sollten die Sicherheitsfaktoren zu klein gewählt sein, besteht ebenfalls die Möglichkeit einer Fehlplanung, mithin wird die geforderte Güte des Abwassers nicht erreicht.

Nachfolgend wird eine Anlage zur Beseitigung der auf einem Chemiewerksgelände anfallenden Prozessabwässer betrachtet. In diesem Chemiewerk werden hauptsächlich organische Zwischenprodukte sowie Kunststoffe hergestellt. Die

Anlage ist eine einstufige Belebungsanlage, die zweistraßig ausgeführt ist. Der biologische Teil besteht aus zwei parallel beschickten Belebungsbecken und jeweils zwei Nachklärbecken. Das gereinigte Abwasser wird in einen Fluss geleitet.

Ausgangspunkt für die Wahl dieser Anlage war, dass bei ihr mehrere betriebliche Schwierigkeiten auftraten, was unter anderem an der mangelhaften Sauerstoffversorgung lag. Die Einhaltung der behördlich vorgegebenen Grenzwerte konnte nicht mit ausreichender Sicherheit durch die bestehende Anlage gewährleistet werden, so dass eine Ertüchtigung der Anlage durchgeführt wurde. Die Anlage wurde auf Grundlage von stationären und nichtstationären Berechnungen mit großen Sicherheitsfaktoren umgebaut. Der Ausbaugrad der Anlage wurde dabei nicht erhöht, d .h. der Einwohnergleichwert (EWG<sup>4</sup>), der ein Umrechnungswert aus dem Vergleich von industriellem Schmutzwasser mit häuslichem Schmutzwasser ist, wurde nicht verändert.

Zur dynamischen Auslegung und Dimensionierung von Kläranlagen wird heute weltweit überwiegend das "Activated Sludge Model No. 1" (ASM 1) [160] der IAWPRC<sup>5</sup> (heute IAWQ<sup>6</sup>) eingesetzt, das in Deutschland vor allem durch die Habilitationsschrift von Gujer [161] bekannt wurde [161, 162, 163, 164, 165]. Zur Beschreibung der wesentlichen physikalischen, biologischen, biochemischen und chemischen Prozesse berücksichtigt das Modell 13 verschiedene Stoffe und acht Umwandlungsprozesse. Mit ihnen werden das Abwasser und der Belebtschlamm charakterisiert. Es werden vor allem die biokinetischen Reaktionen modelliert. Die Zahl der Parameter ist auf fünf stöchiometrische und 14 kinetische begrenzt. Die Anpassung dieser Parameter an die Verhältnisse in realen Anlagen erfordert einen erheblichen Aufwand [166]. Basierend auf dem ASM 1 existieren noch weitere Modelle, die „modifizierte ASM1“, „ASM 2“ und „ASM 3“.

---

<sup>4</sup> Der EWG wird u. a. über den Biochemischen Sauerstoffbedarf in fünf Tagen (BSB<sub>5</sub>) definiert und beträgt 60 g BSB<sub>5</sub> pro Einwohner und Tag.

<sup>5</sup> Task Group on Mathematical Modelling for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment

<sup>6</sup> International Association on Water Quality

Das ASM1 und modifizierte ASM 1 unterscheiden sich nur geringfügig, unter anderem dadurch, dass sie unterschiedlich das zeitliche Verhalten des Substratabbaus simulieren. Das ASM 2 stellt zwar eine wesentliche Erweiterungen des ASM 1 dar, jedoch gelten die im Belebtschlammmodell Nr. 1 (ASM 1) benutzten stöchiometrischen Parameter auch für das Belebtschlammmodell Nr. 2 (ASM 2) [167]. Dieses berücksichtigt weitere Stoffe und beinhaltet erweiterte reaktionskinetische Terme. Da dieses Modell aber in einzelnen Aspekten noch umstritten ist, wird nicht weiter auf das Belebtschlammmodell Nr. 2 eingegangen. Weitere Ausführungen dazu finden sich in [167, 168]. Beim ASM 3 im Vergleich zum ASM 1 wurde die Speicherung organischer Substrate als zusätzlicher Prozess eingeführt. Außerdem wurde der Zerfallsprozess (Lyse) durch eine endogene Respiration ersetzt. Das ASM 3 kann als überarbeitete Version des ASM 1 verstanden werden, es liegen jedoch noch keine Erfahrungen im industriellen Einsatz vor [169].

Somit werden ohne Verlust der Allgemeingültigkeit des Verfahrens als Grundlage für die Beschreibung der wesentlichen Prozesse, das ASM 1 und das modifizierte ASM 1 verwendet, da diese als hinreichend genau für die Simulation der oben aufgeführten Zielstellung angesehen werden [160, 161, 162]. Zuverlässige Eingangsdaten standen für viele der am Prozess beteiligten Parameter der untersuchten Kläranlage zur Verfügung, mit Ausnahme der Daten, die mit den oben beschriebenen epistemischen und aleatorischen Unsicherheiten behaftet sind. Diese Unsicherheiten sind, wie oben beschrieben, bei den Auslegungsrechnungen für die Ertüchtigung der Anlage nicht berücksichtigt worden.

Nachfolgend werden diese Unsicherheiten und zusätzlich die Modellunsicherheiten, die den Substratabbau betreffen, repräsentiert durch das ASM1 und modifizierte ASM1, berücksichtigt. Die Folge davon ist, dass die genutzte Informationsbasis breiter wird. Mit dieser erweiterten Eingangsinformation wird die Simulation des dynamischen Verhaltens der Anlage durchgeführt.

Es wird gezeigt, dass die so erzielten Ergebnisse wesentlich näher an den Messdaten der Anlage liegen als die verwendeten Berechnungen für die Ertüchtigung. Dies erklärt, warum die ertüchtigte Anlage Betriebsprobleme hat. Diese

hätten vermieden werden können, wenn diese Methode zur Modellierung unter Berücksichtigung von Modell- und Datenunsicherheiten verwendet worden wäre.

### **5.3 Modellierung von Abwasserreinigungsanlagen**

In der folgenden Tabelle sind Voraussetzungen aufgeführt, die zur dynamischen Kläranlagensimulation erfüllt werden müssen.

**Tabelle 5-1: Voraussetzungen zur dynamischen Simulation einer Kläranlage [6]**

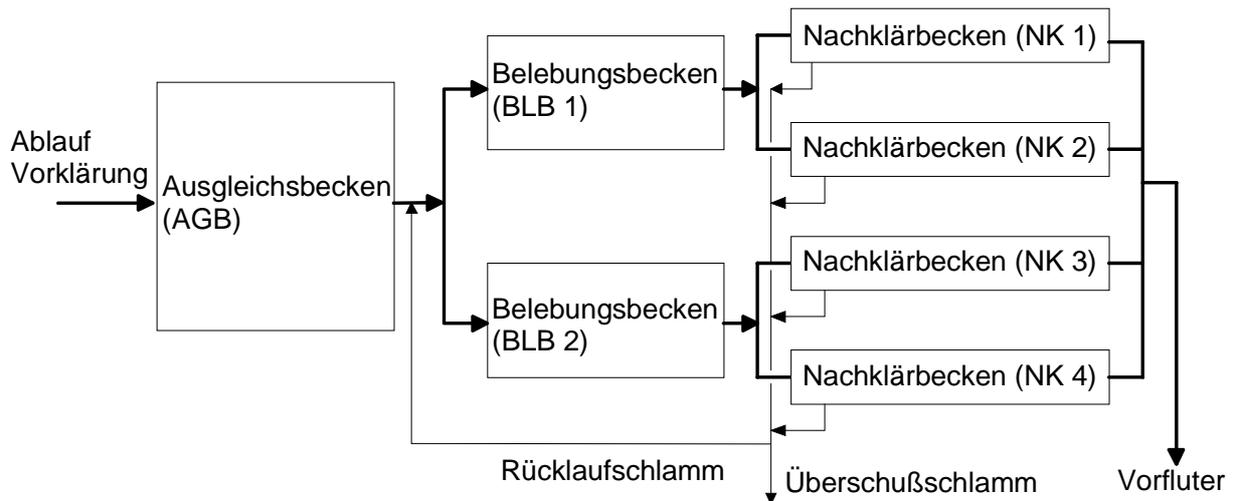
- 
- |   |
|---|
| <ol style="list-style-type: none"><li>1. Beschreibung der wesentlichen physikalischen, biologischen, biochemischen und chemischen Prozesse der Anlage, (siehe Abschnitt 5.3.2 und 5.4.1).</li><li>2. Kenntnis von Zufluss und Beschaffenheit des Abwassers als Ganglinie oder in hinreichend kleinen Messintervallen, (liegen gesichert vor).</li><li>3. Messung oder Abschätzung des Durchströmverhaltens der Becken, (liegen gesichert vor).</li><li>4. Erhebung von stöchiometrischen und kinetischen Parametern der speziellen Anlage, (siehe Abschnitt 5.3.3 und 5.4.2).</li></ol> |
|---|
- 

#### **5.3.1 Beschreibung der Abwasserreinigungsanlage**

##### **5.3.1.1 Anlage vor dem Umbau**

Die Kläranlage (biologischer Teil mit Vorspeicher) besteht im Wesentlichen aus einem Vorspeicher, der mit dem Ablauf der Vorklärung gespeist wird. Der Vorspeicher ist mit Rührwerken und Belüftern ausgerüstet, um eine Vermischung zu gewährleisten und die Sedimentation zu minimieren.

Dem Vorspeicher schließt sich eine zweistraßige Belebungsanlage an. Die beiden mit Oberflächenbelüftern ausgestatteten Belebungsbecken besitzen jeweils ein Nutzvolumen von 1800 m<sup>3</sup> ( $V_{BB_{gesamt}} = 3600 \text{ m}^3$ ). Nach den Belebungsbecken werden jeweils zwei Nachklärbecken parallel durchströmt. Bei den Nachklärbecken handelt es sich um längsdurchströmte Becken, die eine Tiefe von 1,53 m aufweisen. Die Länge der Becken beträgt 30 m. Der gereinigte Ablauf der Kläranlage wird in den angrenzenden Fluss geleitet. Bild 5-4 zeigt die Abwasserreinigungsanlage vor Umbau als Prinzipskizze.

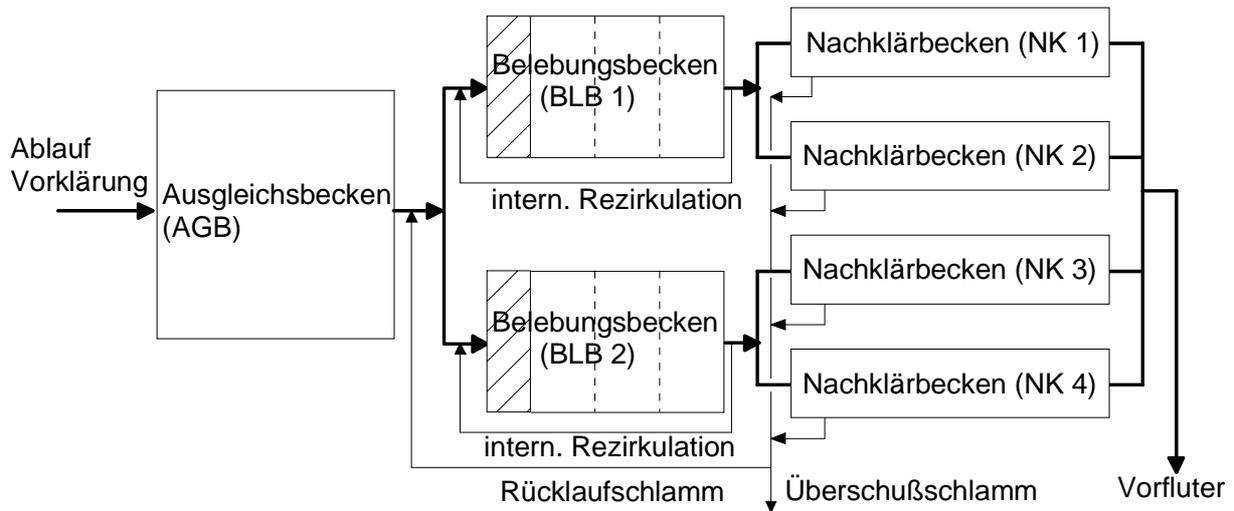


**Bild 5-4: Prinzipskizze der biologischen Reinigungsstufe vor Umbau**

Die Auslegungsgröße der bestehenden Anlage beträgt 96666 EGW.

### **5.3.1.2 Ertüchtigte biologische Reinigungsanlage (Anlage nach dem Umbau)**

Die ertüchtigte Belebungsanlage wird in Bild 5-5 dargestellt und nachfolgend beschrieben: Die Belebungsbecken sind in Kaskadenbauform mit vorgeschalteter anoxischer Zone zur Denitrifikation ausgeführt. Das Beckenvolumen ist von 3600 m<sup>3</sup> auf  $V_{BB_{gesamt}} = 3850 \text{ m}^3$  vergrößert worden, wobei das Denitrifikationsbeckenvolumen  $V_d = 425 \text{ m}^3$  beträgt. Des Weiteren sind die Beckentiefen der nachgeschalteten Nachklärbecken vergrößert worden. Dadurch ergibt sich, insbesondere im Einlauf- und Auslaufbereich, eine hydraulisch günstige Strömungsverteilung. Bestehende Turbulenzen im Nachklärbecken, die das Absetzen des Schlammes zusätzlich behindern, werden reduziert. Mithin wird eine verbesserte Sedimentation und Abtrennung des Belebtschlammes erreicht. Es ist ein interner Rücklauf vom Auslauf der Belebungsbecken in den Zulaufbereich realisiert worden. Dieser gewährleistet den Nitratrücktransport in die anoxische Zone. Die Belüftung erfolgt über den Eintrag feinblasiger Druckluft.



**Bild 5-5: Prinzipskizze der ertüchtigten biologischen Reinigungsstufe**

### 5.3.2 Dynamisches Modell für die Simulation von komplexen Belebtschlammverfahren

Das Modell ASM1 beschreibt ausschließlich Umwandlungsprozesse, die in aerober und anoxischer Umgebung auf verschiedene Fraktionen der organischen Stoffe und des Stickstoffs im Abwasser einwirken. Das Modell beinhaltet keine Beschreibung von Transportprozessen und ist auf Erhaltungssätzen in Matrixschreibweise aufgebaut (siehe Tabelle A 4).

Im ASM1 werden insgesamt 13 Stoffgruppen berücksichtigt, die im Modell durch Konzentrationen beschrieben werden. Daraus folgt ein System aus gekoppelten nichtlineare Differentialgleichungen (siehe Tabelle A 3). Einige Stoffgruppen definieren sich nur durch ihre Rolle bei den im Belebtschlamm ablaufenden biologischen Vorgängen. Sie werden in äquivalentem chemischem Sauerstoffbedarf je Volumeneinheit [g CSB/m<sup>3</sup>] gerechnet. Im ASM1 werden alle gelösten Komponenten mit S bezeichnet, und alle partikulären Komponenten mit X. Es handelt sich dabei um folgende Stoffgruppen: S<sub>i</sub>, S<sub>s</sub>, X<sub>i</sub>, X<sub>s</sub>, X<sub>BH</sub>, X<sub>BA</sub>, X<sub>P</sub>, S<sub>O</sub>, S<sub>NO</sub>, S<sub>NH</sub>, S<sub>ND</sub>, X<sub>ND</sub>, S<sub>ALK</sub>, die in Tabelle 5-2 aufgeführt sind und im Vektor  $\underline{x}_{BB}$  zusammengefasst werden. Bild 5-6 zeigt die Zusammenhänge der Stoffgruppen und Prozesse im ASM1. Es handelt sich um ein deterministisches Modell. Den Prozessgleichungen liegen Hypothesen über biochemische Prozessabläufe zugrunde. Nähere Angaben dazu findet man in [160, 162].

Tabelle 5-2: Stoffgruppen ASM1 (Vektor  $X_{BB}$ )

$S_I$	Biologisch inerte, gelöste org. Stoffe	[g CSB/m <sup>3</sup> ]
$S_S$	Biologisch rasch abbaubare, gelöste org. Stoffe (Substrat)	[g CSB/m <sup>3</sup> ]
$X_I$	Biologisch inerte, partikuläre org. Stoffe	[g CSB/m <sup>3</sup> ]
$X_S$	Biologisch langsam abbaubare, org. Stoffe	[g CSB/m <sup>3</sup> ]
$X_{BH}$	Aktive heterotrophe Biomasse	[g CSB/m <sup>3</sup> ]
$X_{BA}$	Aktive autotrophe Biomasse	[g CSB/m <sup>3</sup> ]
$X_P$	Partikuläre Zerfallsprodukte der Biomasse	[g CSB/m <sup>3</sup> ]
$S_O$	Sauerstoff	[-g CSB/m <sup>3</sup> ]
$S_{NO}$	Nitrat- und Nitrit-Stickstoff	[g N/m <sup>3</sup> ]
$S_{NH}$	Ammoniak und Ammonium-Stickstoff	[g N/m <sup>3</sup> ]
$S_{ND}$	Biologisch abbaubarer, gelöster org. gebundener Stickstoff	[g N/m <sup>3</sup> ]
$X_{ND}$	Biologisch abbaubarer, partikulärer org. gebundener Stickstoff	[g N/m <sup>3</sup> ]
$S_{ALK}$	Alkalinität	[mol/m <sup>3</sup> ]

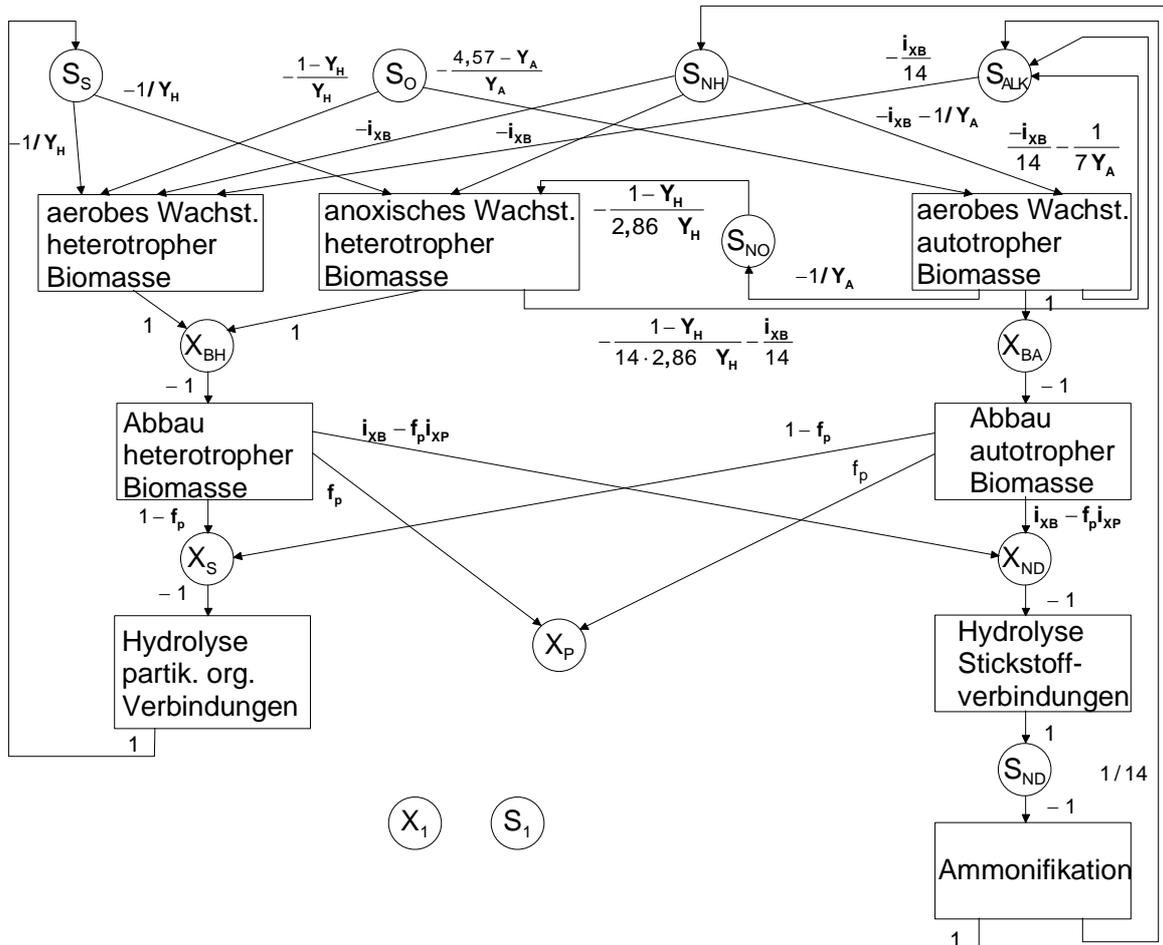


Bild 5-6: Stoffgruppen und Prozesse des ASM1

Modelliert werden die wesentlichen Prozesse des Abbaus von Kohlenstoffverbindungen (CSB), der Nitrifikation und der Denitrifikation sowie des Wachstums der beteiligten Mikroorganismen. Wie aus den beteiligten Stoffgruppen und Reaktionen ersichtlich, werden in dem verwendeten Belebtschlammmodell die Prozesse der chemischen und biologischen Phosphatelimination nicht modelliert.

Dem ASM1 liegt die Voraussetzung zugrunde, dass der pH-Wert konstant und nahe dem neutralen Wert ist [160, 161]. Begründet ist dies damit, dass obwohl bekannt ist, dass der pH-Wert viele kinetische Parameter beeinflusst, jedoch die bekannten biochemischen Zusammenhänge zur mathematischen Beschreibung dieser Beeinflussungen nicht ausreichen.

Das Differentialgleichungssystem (siehe Anhang A3, Tabelle A 3) wird iterativ durch numerische Ansätze nach Runge-Kutta (4./5. Ordnung) gelöst.

### **5.3.3 Parameter**

Die Konzentrationen der Stoffe bzw. Stofffraktionen im verwendeten Modell werden durch acht Umwandlungsprozesse beeinflusst, die das Wachstum und den Sauerstoffbedarf der heterotrophen Mikroorganismen, die Denitrifikation, den Zerfall von Mikroorganismen, den Abbau von kolloidalen und partikulären organischen Stoffen sowie die Nitrifikation beschreiben. Es sind insgesamt fünf stöchiometrische Parameter erforderlich. Hierfür stehen heute mehrere zuverlässige Werte zur Verfügung [157, 160, 161, 171, 172]. Umfangreiche kinetische Ausdrücke beschreiben die Prozessgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von den lokalen Umweltbedingungen (Zustandsgrößen). Hierzu sind 14 kinetische Parameter notwendig, die mehreren dominanten Einflussgrößen unterliegen. Diese Einflussgrößen sind Temperatur, pH-Wert, Toxizität, etc. [161]. Weitergehende Informationen zum Modell, die nicht primär für diese Arbeit notwendig sind, findet man im Anhang A3.

Von diesen Größen wird einzig die Temperatur im ASM 1 und modifizierten ASM 1 explizit berücksichtigt. Sie beeinflusst alle Reaktionsgeschwindigkeiten, die in ihrer

Dimension den Anteil  $[T^{-1}]$  haben [160] (siehe Tabelle 5-3). Die Temperaturabhängigkeit wird mit der Beziehung von Arrhenius beschrieben. Die Temperaturkoeffizienten der kinetischen Prozesse sind nicht Teil des IAWQ-Modells. Die in den jeweiligen Programmen zugrunde gelegten Temperaturkoeffizienten spiegeln deshalb die Ansichten der jeweiligen Autoren wider [157, 160, 161, 171, 172, 173].

Für einige der kinetischen Parameter liegen Schätzwerte vor, andere müssen innerhalb von Erfahrungsgrenzen abwasserspezifisch erhoben werden, dabei sind die meisten Parameter nicht genau bestimmbar [170]. Es ist festzustellen, dass es zurzeit keine einheitliche Methodik für die Bestimmung der Eingangsgrößen für die Modellierung gibt. Tests zur Ermittlung der kinetischen und stöchiometrischen Daten sowie der Rohwasserzusammensetzung sind aufwendig und liefern stark streuende Ergebnisse [171].

Die Freiheitsgrade im ASM1 sind aufgrund der Vielzahl an kinetischen und stöchiometrischen Parametern sehr groß [170]. Es gibt derzeit nur Versuche, Anhaltspunkte für einen gültigen Parametersatz zu finden. Der Parametersatz setzt sich wie folgt zusammen:  $Y_H$ ,  $Y_A$ ,  $i_{XB}$ ,  $i_{XP}$  und  $f_p$  sind die stöchiometrischen Parameter und  $\hat{\mu}_H$ ,  $K_S$ ,  $K_{O,H}$ ,  $K_{NO}$ ,  $b_H$ ,  $b_A$ ,  $\eta_g$ ,  $\eta_h$ ,  $k_h$ ,  $K_X$ ,  $\hat{\mu}_A$ ,  $K_{NH}$ ,  $K_{O,A}$  sowie  $k_a$  sind die kinetischen Parameter im ASM1 Modell.  $K_{ALK,H}$ ,  $K_{ALK,A}$ ,  $K_{O,AN}$ ,  $\eta_{H,AN}$  und  $K_{NHNO}$  sind zusätzlich benötigte Parameter des modifizierten ASM1 Modells [6]. In der Tabelle 5-3 werden diese Parameter näher beschrieben und im Vektor  $\underline{y}_{PKSF}$  zusammengefasst. Insgesamt ist das ASM1 als ein „hochgradig unbestimmtes System“ anzusehen [170].

**Tabelle 5-3: Stöchiometrische und kinetische Parameter ASM1 (Vektor  $\underline{y}_{PKSF}$ )**

$Y_H$	Ausnutzungskoeffizient heterotroph	[gCSB/gCSB]
$Y_A$	Ausnutzungskoeffizient autotroph	[gCSB/gN]
$i_{XB}$	Stickstoffgehalt der Biomasse	[gN/gCSB]
$i_{XP}$	Stickstoffgehalt von $X_p$	[gN/gCSB]
$f_p$	Anteil partikulärer Produkte am Zerfall von Biomasse	[-]

$\hat{\mu}_H$	max. Wachstumsgeschwindigkeit (heterotrophe Biomasse)	[1/d]
$K_S$	Sättigungsbeiwert (heterotroph)	[gCSB/m <sup>3</sup> ]
$K_{O,H}$	Sättigungsbeiwert	[gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> ]
$K_{NO}$	Sättigungsbeiwert	[gNO <sub>3</sub> -N/m <sup>3</sup> ]
$b_H$	Zerfallskonstante (heterotroph)	[1/d]
$b_A$	Zerfallskonstante (autotroph)	[1/d]
$\eta_g$	Korrekturfaktor für $\mu_H$ unter anoxischen Bedingungen	[-]
$\eta_h$	Korrekturfaktor für Hydrolyse unter anoxischen Bedingungen	[-]
$k_h$	maximale Hydrolyserate	[1/d]
$K_X$	Sättigungsbeiwert Hydrolyse	[-]
$\hat{\mu}_A$	maximale Wachstumsgeschwindigkeit (autotrophe Biomasse)	[1/d]
$K_{NH}$	Sättigungsbeiwert	[gNH <sub>3</sub> -N/m <sup>3</sup> ]
$K_{O,A}$	Sättigungsbeiwert	[gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> ]
$k_a$	Ammonifikationsgeschwindigkeit	[m <sup>3</sup> CSB/(g d)]
$K_{ALK,H}$	Sättigungsbeiwert Alkalinität (heterotroph)	[mol/m <sup>3</sup> ]
$K_{ALK,A}$	Sättigungsbeiwert Alkalinität (autotroph)	[mol/m <sup>3</sup> ]
$K_{O,AN}$	Sättigungsbeiwert Hydrolyse unter anaeroben Bedingungen	[gCSB/m <sup>3</sup> ]
$\eta_{H,AN}$	Korrekturfaktor Hydrolyse unter anaeroben Bedingungen	[-]
$K_{NHNO}$	Schaltfaktor für die NO <sub>3</sub> -Inkorporation (heterotroph)	[gN/m <sup>3</sup> ]

Die Gründe für die oben angesprochenen Unsicherheiten sind unter anderem:

1. Systematische Fehler (wegen Verzerrungen in Messapparaten und experimentellen Verfahren).
2. Übertragungsfehler (Scale-up Probleme von Labordaten (meist Batch-Tests „Standversuch“) auf industrielle Bedingungen (Versuchs- oder Großanlage „Durchlaufbetrieb“)).
3. Unzureichende Kenntnis der notwendigen Berechnungsdaten (bedingt durch nicht ausreichend langen oder möglichen Testbetrieb).
4. Zufallsfehler und statistische Schwankungen (aufgrund unvermeidbarer Messfehler).
5. Veränderlichkeit (infolge zeitlicher Schwankungen einer Größe mit der Zeit, z.B. der maximalen Wachstumsrate der nitrifizierenden Biomasse  $\mu_{A,max}$ ).

6. Inhärente Zufälligkeiten (z.B. die Zusammensetzung anfallenden Abwassers; u. a. schwankt der Anteil an rasch abbaubaren, gelösten organischen Stoffen  $S_S$  stark mit den Zulaufverhältnissen, bedingt durch den Einfluss des Wetters in Form von Regenfällen und Temperaturschwankungen sowie von unterschiedlichen Betriebsweisen vieler Anlagen an Werktagen und Wochenenden).

In der Literatur [5, 157, 160, 161, 171, 172, 173] sind, aus den oben genannten Gründen, mehrere unterschiedliche, akzeptierte Werte für fast jeden kinetischen und stöchiometrischen Parameter verfügbar. Es sind sogar Widersprüche bezüglich der Sensitivität einzelner Parameter zu finden [171]. Gewöhnlich wird für jeden Parameter einer unter mehreren verfügbaren Werten ausgewählt. Somit wird ein zufälliger Datensatz zusammengestellt, welcher der Berechnung zugrunde gelegt wird. In diesem Verfahren werden diese Unsicherheiten und die des Modells, wie im Folgenden beschrieben, berücksichtigt.

## ***5.4 Behandlung und Fortpflanzung der stochastischen Effekte und Unsicherheiten von Modellparametern***

### **5.4.1 Modellunsicherheiten**

Die Grundlagen der biochemischen Umsetzung bestehen darin, dass Bakterien Substrate für ihren Energiestoffwechsel sowie zum Aufbau neuer Zellen nutzen [174].

Das zugrunde liegende Prinzip des Zellwachstums beruht auf dem in der Zelle als chemischer Miniaturreaktor existierenden komplexen Netzwerk von enzymkatalytischen Umwandlungsreaktionen. Dabei werden aus einer Vielzahl von Substraten neue Zellmasse und ausgeschiedene Biochemikalien produziert. Zur mathematischen Betrachtung des Zellwachstums wird in der Regel angenommen, dass alle anderen Substrate bis auf ein Substrat, bezogen auf die Absorptionskapazität der Zelle, im Überschuss vorhanden sind, während dieses eine Substrat limitierend wirkt [174].

Setzt man die enzymkatalysierte Reaktion mit der reaktionshemmenden Substratkonzentration in Beziehung und wird bei der Enzymreaktion davon ausgegangen, dass die Konzentration des reaktionsbegrenzenden Enzyms proportional der Zellkonzentration ist, lässt sich die formale Reaktionskinetik über das Zellwachstum

$$\frac{dS_B(t)}{dt} = \mu(t) \cdot S_B(t) \quad (5-1)$$

beschreiben, wobei

$$\mu(t) = \mu_{\max} \frac{S_S(t)}{[K_S + S_S(t)]} \quad (5-2)$$

als Wachstumsrate bezeichnet wird, welche als klassische Monod-Gleichung bekannt ist [5]. Die Wachstumsrate gibt allgemein an, wie viel Biomasse pro Zeiteinheit bezogen auf die Biomasse die im System vorhanden ist, produziert wird. Entscheidend ist, dass eine mathematische Beziehung zwischen Wachstumsrate und maximaler Wachstumsrate hergestellt wird, bei der einerseits die Wachstumsrate gegen Null geht, wenn die Substratkonzentration gegen Null geht, und andererseits die aktuelle Wachstumsrate nicht die maximale übersteigt.

Tritt der Fall auf, dass die Zellwachstumsrate durch zwei Substrate begrenzt wird, lässt sich die Zellwachstumsrate durch

$$\mu(t) = \mu_{\max} \frac{S_S(t)}{[K_S + S_S(t)]} \frac{S_O(t)}{[K_O + S_O(t)]} \quad (5-3)$$

darstellen, was in [174] als erweiterte Monod-Gleichung beschrieben wird. Die beiden Monod-Gleichungen sind empirisch abgeleitet, basieren aber auf der Enzymtheorie von Michaelis-Menten (siehe u. a. [174]). – In der Abwasserreinigung hat sich der Monod-Ansatz entsprechend Gl. (5-3) etabliert.

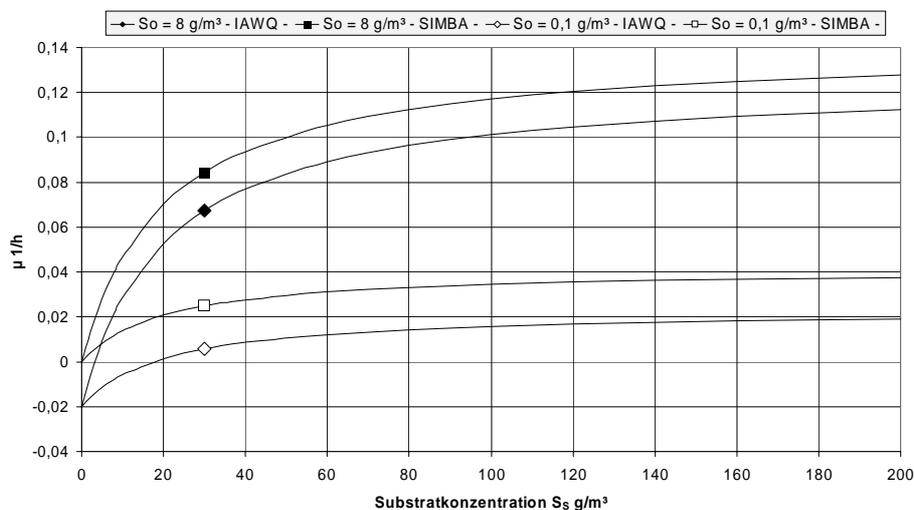
An dieser Stelle soll auf die Modellunsicherheit in Bezug auf die Verwendung des ASM1 und eines modifizierten ASM1 eingegangen werden. Es wird hier stellvertretend für die Einzelprozesse auf das Gesamtwachstum eingegangen. Für die Gesamtwachstumsrate der Mikroorganismen, also die Summe aus Wachstum und Zerfall, wird im original ASM1 die Gleichung

$$\mu(t)_{\text{Ges}} = \mu_{\text{max}} \frac{S_s(t)}{[K_s + S_s(t)]} \frac{S_o(t)}{[K_o + S_o(t)]} - K_d \quad (5-4)$$

mit dem Sterbekoeffizienten  $K_d$  verwendet [161, 162, 174]. Im modifizierten ASM1 [6, 175] wird die ebenso akzeptierte, erweiterte Gleichung verwendet, mit der sich das Gesamtwachstum der Mikroorganismen für den Fall zweier reaktionsbestimmender Substrate direkt bestimmen lässt.

$$\mu(t)_{\text{Ges}} = \mu_{\text{max}} \frac{S_s(t)}{[K_s + S_s(t)]} \frac{S_o(t)}{[K_o + S_o(t)]} \frac{S_{\text{ALK}}(t)}{[K_{\text{ALK}} + S_{\text{ALK}}(t)]} - K_d \quad (5-5)$$

Das Bild 5-7 zeigt den Vergleich der  $\mu$ -S-Kurven und den Einfluss der Sauerstoff- ( $S_o$ ) und Substratkonzentrationen ( $S_s$ ) auf das Zellwachstum für die unterschiedlichen Modellansätze. Mehr Informationen über Gültigkeit und Grenzen der Gl. (5-4) findet man in [5, 160, 161, 165], über die Gl. (5-5) in [6, 175].



**Bild 5-7: Vergleich der Modellansätze**

Aus dem Bild 5-7 ist zu erkennen, dass bei Anwendung verschiedener kinetischer Ansätze (Gl. (5-4) und Gl. (5-5)) sich stark unterschiedliche Wachstumsraten ergeben. Die verwendeten Werte für die Gleichungen sind in Tabelle 5-4 aufgeführt. Die Punktwerte wurden [5] entnommen. Die Unsicherheiten dieser Parameter werden im Abschnitt 5.4.2 behandelt.

**Tabelle 5-4: Daten zum Bild 5-7**

$\mu_{\max}$ [ $\text{h}^{-1}$ ]	$S_0$ [ $\text{g}/\text{m}^3$ ]	$K_S$ [ $\text{g}/\text{m}^3$ ]	$K_O$ [ $\text{g}/\text{m}^3$ ]	$K_d$ [ $\text{h}^{-1}$ ]	$S_{\text{ALK}}$ [ $\text{mol}/\text{m}^3$ ]	$K_{\text{ALK}}$ [ $\text{mol}/\text{m}^3$ ]
0,15	0,1 und 8	20	0,25	0,02	7	0,1

Bei Mikroorganismen hängt das Zellwachstum von einer Vielzahl von Faktoren ab. Hier wird auf die einschlägige Literatur verwiesen [163, 157, 174]. In [165, 170] wird festgestellt, dass es derzeit keinen Konsens über der mathematischen Modellierung und Beschreibung des Zellwachstums gibt.

Das Ergebnis der durchgeführten Analyse des Modells zeigt eine Modellunsicherheit. Sie besteht in der Frage, ob in dem Modell die Gl. (5-4) oder Gl. (5-5) zur Beschreibung des Zellwachstums einzusetzen ist. Diese Unsicherheit wird mit der in Abschnitt 2.2.1, Fall E3 beschriebenen Vorgehensweise behandelt. Dabei wird bei Verwendung der Gl. (5-4) im Modell ASM 1 dieses als ein eigenständiges betrachtet und bei Verwendung der Gl. (5-5) ebenfalls. D. h. es stehen zwei Modelle zur Verfügung, die wie folgt bezeichnet werden:

- $M_1$  (ASM 1), wenn in das ASM 1 die Gl. (5-4) und
- $M_2$  (modifiziertes ASM 1), wenn in das ASM 1 die Gl. (5-5) eingesetzt wird.

Somit ist die Anzahl der Modelle  $J = 2$ .

Da keine Informationen über den Gütegrad der beiden Modelle vorliegen, jedoch die Gleichungen (5-4) und (5-5) für den gleichen Gültigkeitsbereich angegeben sind, werden die Ergebnisse jeder Gleichung mit der Wahrscheinlichkeit von  $1/2$  verwendet (vgl. [105]), d. h. aus der Gleichung (2-3) ergibt sich für  $J = 2$

$$p(M_1) = p(M_2) = 1/2 \quad (5-6)$$

Diese Auswahl wird durch eine konstante Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion gemäß Gl. (A–12) dargestellt, siehe Anhang A1.

#### **5.4.2 Datenunsicherheiten**

Für die Modellierung der Reinigung von industriellen Abwässern sind die Parameter durch aufwendige Experimente zu erheben [161, 157]. Über die Probleme beim Messen von Werten in Kläranlagen findet man in [173, 176, 177] einen guten Überblick. In [165] wird auf die Auswirkungen der Parameterunsicherheit bei der Planung von Kläranlagen unter Verwendung der ATV 131 [179] eingegangen. Es wird gezeigt, dass Belebungsanlagen, die nach der ATV 131 bemessen sind, bei Belastungsspitzen den erforderlichen Sauerstoffbedarf abdecken, jedoch bei geringerer Belastung die Sauerstoffbelastung nicht auf das nötige Maß gedrosselt werden kann.

In [157] sind qualitative sowie quantitative Methoden zur Bestimmung der erforderlichen Parameter für das ASM1 gegeben. Jedoch sind diese Methoden in der Praxis oft viel zu zeitaufwendig (vgl. [5]), so dass häufig nicht abgesicherte Parametersätze verwendet werden, die dann iterativ an die Messdaten angepasst werden [157, 166].

Zur Darstellung der Daten werden nachfolgend verschiedene Verteilungen verwendet (Tabelle A 5– Fall 2). Die Auswahl der Verteilungen erfolgt mit dem Programm ANPA2 (vgl. Abschnitt 2.2.2). Details der Verteilungen, die sich als optimal herausgestellt haben, werden im Anhang A1 gegeben.

Die Informationen aus [5, 157, 160, 161, 167, 162, 163, 165, 170, 171, 172, 173, 177, 178] über die Bestimmung und Werte der kinetischen und stöchiometrischen Parameter des ASM 1 ( $M_1$  und  $M_2$ ) bilden die Datenbasis für die statistische Behandlung dieser Parameter. Besonders [5, 173, 177, 178] vermitteln einen guten

Überblick über das Spektrum der zur Verfügung stehenden Informationen und die Schwierigkeiten bei der Kalibrierung.

Wie in Kapitel 4 am Beispiel des Kondensators mittels der Entropie gezeigt wurde ist die Behandlung der Unsicherheiten nach VGW 1 gerechtfertigt.

Tabelle A 5 zeigt die zur Verfügung stehenden Daten für die kinetischen und stöchiometrischen Parameter des ASM1 ( $M_1$  und  $M_2$ ) und gibt deren Verteilungsart an. Die Datensätze der Fälle 1 und 3 beinhalten nur Punktwerte. Die Datensätze der Fälle 2 und 4 geben für den jeweiligen Parameter die mit ANPA2 bestimmte optimale Verteilung an. In diesen Datensätzen werden die Datenunsicherheiten berücksichtigt. Für die restlichen Modellparameter werden in allen Fällen Betriebsdaten verwendet.

Mittels der Monte- Carlo- Simulation (vgl. [126]) werden die Unsicherheiten durch das Modell getragen. Dazu wird im vorliegenden Fall für jede Modellvariante  $N= 10000$  gewählt. Das Ergebnis jeder dieser Berechnungen wird in der Ergebnismatrix gespeichert und durch eine Log-Normalverteilung approximiert.

## 5.5 Umsetzung des Konzepts

### 5.5.1 Auswahl der Simulationssoftware

Auf der Basis des ASM 1 findet man verschiedene Programme zur dynamischen Simulation von Kläranlagen. Eine Auswahl der in der verfügbaren Literatur beschriebenen Systeme ist in Tabelle 5-5 aufgeführt.

**Tabelle 5-5: Programme zur dynamischen Simulation von Kläranlagen auf der Grundlage des ASM 1**

<b>Programmname</b>	<b>Ersteller</b>	<b>Kurzbeschreibung</b>
ARASIM	ISA der RWTH Aachen in Zusammenarbeit mit der Universität Passau (Lehrstuhl für Informatik)	Modelldatenbank unter dem Simulationssystem SIMPLEX II; verschiedene Modelle für die Nachklärung.
BIOSEDI		Nachklärbeckenmodell nach Härtel [180]; Biomassenzusammensetzung im IAWQ-Modell,

Programmname	Ersteller	Kurzbeschreibung
SIMBA	Institut für Automation und Kommunikation e.V. Magdeburg/ Barleben	um mineralischen Feststoffanteil erweitert. Simulationspaket unter der Oberfläche MATLAB/SIMULINK (Fa. Mathworks Inc.); Nachbildung erfolgt vollgraphisch; ASM 1 und ASM 2 sind enthalten; alle Module zur Nachbildung des abwasserseitigen Teils einer Kläranlage sind vorhanden; eigene Modelle des Anwenders können implementiert werden; Regelungsbausteine können einbezogen werden.
Programm Nr. 111/Nr. 112/ Nr. 113	aqua-System AG (Winterthur, Schweiz)	Ein- und zweistufige Belebtschlammssysteme; maximal 6 beliebig große Reaktorteile können in Serie geschaltet werden. (Vom Markt genommen.)
GPS-X	Fa. Hydromantis (Kanada)	Sehr umfangreiches System auf Basis der Simulationssprache ACSL; ermöglicht das Erstellen dynamischer Modelle und die interaktive Simulation.
SimWorks	Fa. Hydromantis (Kanada)	Programm für die dynamische Simulation; es können keine neuen Modelle entwickelt werden.
AQUASSIM	Swiss Federal Institute for Environmental Science and Technology (EAWAG)	Weiterentwicklung von ASIM, ebenfalls primär für Forschung und Lehre entwickelt.
ASIM* *Vorläufer von AQUASSIM	W. Gujer (ETH Zürich)	Entwickelt für Forschung und Lehre.

Die aufgelisteten Programme in Tabelle 5-5 werden nicht detaillierter beschrieben. Folgende Eigenschaften charakterisieren das Simulationsprogramms SIMBA 3.4+:

- Das Programm läuft unter dem Betriebssystem MS Windows.
- SIMBA 3.4+ ist ein Unterprogramm (Toolbox) der Simulationssoftware MATLAB/SIMULINK. Somit ist die Nutzung der vielfältigen Programmiermöglichkeiten von MATLAB/SIMULINK für die Einbindung der Simulationssoftware in das Verfahren möglich.
- SIMBA 3.4+ ist ein „offenes System“. Es ermöglicht dem Nutzer die Einbindung eigener Modellansätze unter Verwendung der grafischen Oberfläche und des gesamten Programmgerüsts. Dadurch kann man Einfluss auf die Struktur, die Parameterübergaben sowie auf die zugrunde liegenden Differentialgleichungen nehmen.
- Seit der Markteinführung im Jahre 1995 hat sich SIMBA zum Marktführer für die dynamische Simulation von Kläranlagen entwickelt. Es wird teilweise auch bereits von den staatlichen Aufsichtsbehörden (in Nordrhein-Westfalen) als

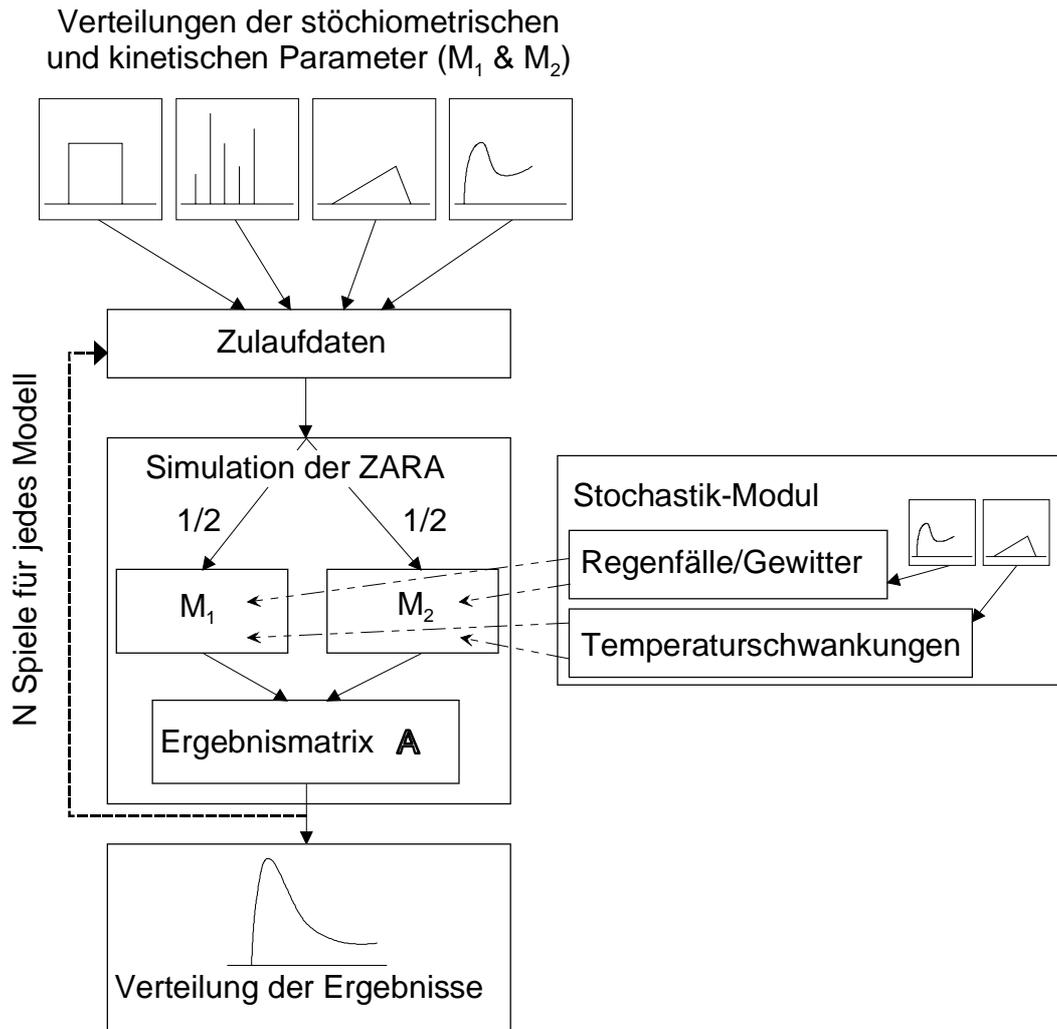
Prüfinstrument eingesetzt [159]. Ebenfalls gibt es an verschiedenen Hochschulen Arbeitsgruppen, die dieses Programm für Forschungsarbeiten einsetzen und Programmentwicklungen durchführen.

Da es bei der Umsetzung des Verfahrens die Einbindung der Berücksichtigung von Unsicherheiten geht, ist es notwendig, eine Simulationssoftware einzusetzen, die programmierbar und anerkannt in der Praxis ist, Schnittstellen zu FORTRAN und MATLAB bietet und zeitoptimiert arbeitet.

Da SIMBA diese Anforderungen erfüllt und als letzte und benutzerfreundlichste Entwicklung derzeit den neusten Stand der Software zur dynamischen Simulation darstellt [173] und für Planungen und Simulationen von industriellen Kläranlagen eingesetzt wird, kommt es in dieser Arbeit zur Anwendung.

### **5.5.2 Strategie der Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten**

In Bild 5-8 wird zusammenfassend die Vorgehensweise der Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten dargestellt.



**Bild 5-8: Strategie zur Kläranlagensimulation unter Berücksichtigung von Unsicherheiten**

Für jeden unsicheren stöchiometrischen und kinetischen Parameter wird mittels des Programms ANPA2 die optimale Verteilung aus vorhandenen Daten bestimmt. Dieser Vektor mit den unsicheren Parametern  $y_{\text{PKSF}}$  gilt sowohl für das Modell  $M_1$  als auch für das Modell  $M_2$ .

Die Auswertung der „Regendatei“ des Kläranlagenbetreibers lieferte die Daten, die zur Bestimmung der Verteilungen für die auftretenden Regenfälle und für die üblichen Temperaturschwankungen in der Belebung verwendet werden.

Es folgt die Erklärung der angewendeten Strategie. Es gibt zwei Zeiträume, die es zu unterscheiden gilt:

- Der Zeitraum vor dem Umbau der Kläranlage (ZR 1) und
- den Zeitraum nach dem Umbau der Kläranlage (ab Mitte 2001) (ZR 2).

Die Unterscheidung begründet sich durch unterschiedliche Ablaufwerte, die in den Simulationen als Messdaten berücksichtigt werden. Daraus folgen die drei in Tabelle 5-6 aufgeführten Simulationsstadien.

**Tabelle 5-6: Simulationsstadien**

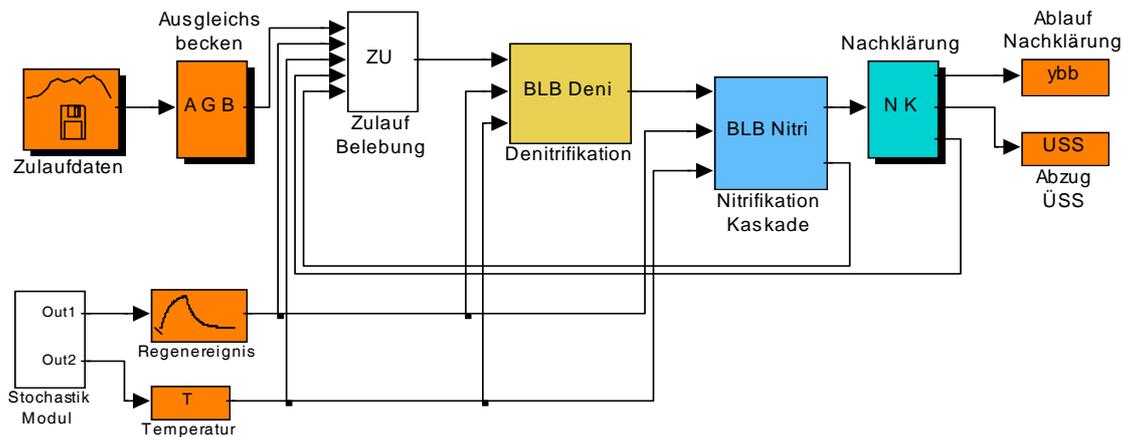
- 
- |    |  |
|----|--|
| 1) | Kalibrierung des Modells. D.h. die Abbildung der realen Kläranlage in Simba wird mittels vorliegender Messdaten aus ZR 1 angepasst.  |
| 2) | Simulation der modifizierten Anlage mit und ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten im ZR 1. Vergleich der Rechenergebnisse miteinander. D.h. im Planungsstadium wird die Modifikation der Anlage simuliert, es stehen daher keine Messdaten zur Verfügung. |
| 3) | Simulation der umgebauten Anlage mit und ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten im ZR 2. Vergleich der Rechenergebnisse mit Messdaten der Ablaufwerte aus ZR 2.  |
- 

Das entwickelte Verfahren zur Berücksichtigung von Unsicherheiten unterscheidet sich wie folgt von der konventionellen Vorgehensweise ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten:

- Beide Modelle gehen in das Simulationsergebnis mit ein,
- im Vektor  $\underline{y}_{PKSF}$  werden die Parameterunsicherheiten einbezogen,
- stochastische Effekte aufgrund von starken Regenfällen/Gewittern werden berücksichtigt und
- die Temperatur in der Belebung variiert während der Simulation, bedingt dadurch, dass Wetterveränderungen in die Rechnung eingehen.

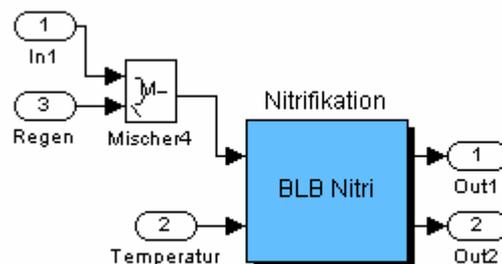
### 5.5.3 Umsetzung der Kläranlage in SIMBA

In Bild 5-9 wird ein vereinfachtes Verfahrensfliessbild der modifizierten Kläranlage im Simulationsprogramm SIMBA dargestellt. Es werden hier auf Grund der Übersicht Einzelblöcke samt Pumpen und Mischern zu Komplexen zusammengefasst.

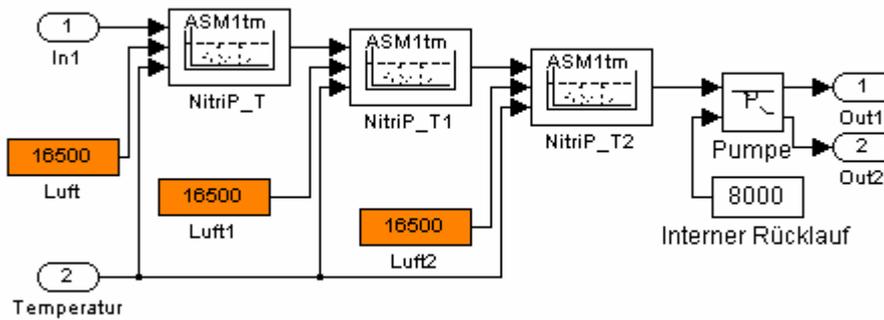


**Bild 5-9: Vereinfachtes Verfahrensfliessbild der modifizierten Kläranlage in SIMBA**

Das folgende Bild zeigt das dem Block „BLB Nitri“ hinterlegte Submodell. In diesem ist die Kaskadierung der Nitrifikationsbecken samt den Eingangssignalen für die Temperatur noch einmal in einem Block zusammengefasst, der in Bild 5-11 aufgeschlüsselt dargestellt wird.



**Bild 5-10: Submodell des Blocks „BLB Nitri“**



**Bild 5-11: Unter-Submodell des Blocks „BLB Nitri“**

Diesen Masken sind teilweise wieder Blöcke hinterlegt, welche die Differentialgleichungen abbilden. Näheres hierzu findet man in der Hilfe für MATLAB und SIMULINK. Eine gute Einführung in diese Thematik gibt [181].

## **5.6 Dynamische Simulation der Abwasserreinigungsanlage**

Die Simulation der Kläranlage wird in zwei Zeiträumen (ZR 1 und ZR 2) vollzogen. Für die folgende Vorgehensweise werden die vom Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen erarbeiteten Grundsätze zur Simulation von Kläranlagen beim Einsatz von SIMBA (vgl. [159]) berücksichtigt.

Im Simulationsstadium 1 (siehe Tabelle 5-6) wird mit einer für das Jahr 1997 repräsentativen Ganglinie die vor dem Umbau betriebene Kläranlage simuliert (Zeitraum 10.09.1997 bis 01.10.1997). Dabei ist nicht die Länge des Zeitraums sondern die Charakteristik der vorkommenden Lastfälle entscheidend [170]. Die Kalibrierung erfolgt durch Parameteranpassung.

Danach wird im Simulationsstadium 2 die modifizierte Kläranlage mit vergrößertem Beckenvolumen und vorgeschalteter Denitrifikation modelliert. Dabei wird einerseits ein fester, wie bei der Kalibrierung des Modells nur von der Temperatur abhängiger

Satz von kinetischen und stöchiometrischen Parametern in das Modell  $M_1$  eingesetzt (Fall 1). Andererseits ein Satz, der die stochastischen Effekte und Datenunsicherheiten der einzelnen Parameter berücksichtigt (Fall 2). Im Fall 2 wird durch Simulation mit  $M_1$  und  $M_2$  auch die Modellierungsunsicherheit im ASM 1 berücksichtigt.

Abschließend wird im Simulationsstadium 3 die modifizierte Kläranlage mittels einer repräsentative Ganglinie (Zeitraum: 26.11.01 bis 22.12.01) simuliert. – Der Umbau der Kläranlage erfolgte auf Grund der Simulationsergebnisse von Fall 1 Mitte 2001. – Die Simulation erfolgt für Fall 3 ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten und Fall 4 unter Berücksichtigung der Unsicherheiten.

### **5.6.1 Kalibrierung des Modells**

Für die Kalibrierung wird der Zeitraum 10.09.1997 bis zum 01.10.1997 gewählt. In diesem Zeitraum sind zwei Nitrat- und eine Ammoniumspitze im Ablauf der Anlage zu finden, die nachgebildet werden sollen. Die Simulation wird bei einer Temperatur von 25°C durchgeführt.

Die Stabilität der Rechenergebnisse wird dadurch gewährleistet, dass die Rechnung mit derselben Ganglinie wiederholt durchgeführt wird. Das Simulationsprogramm zählt dabei die Simulationszeit in Tagen linear hoch. Zwischen den einzelnen Tagesdaten wird linear interpoliert. Die Kalibrierung des Modells zeigt, dass ein Simulationszeitraum von 100 Tagen reicht, um stabile Werte zu erzielen.

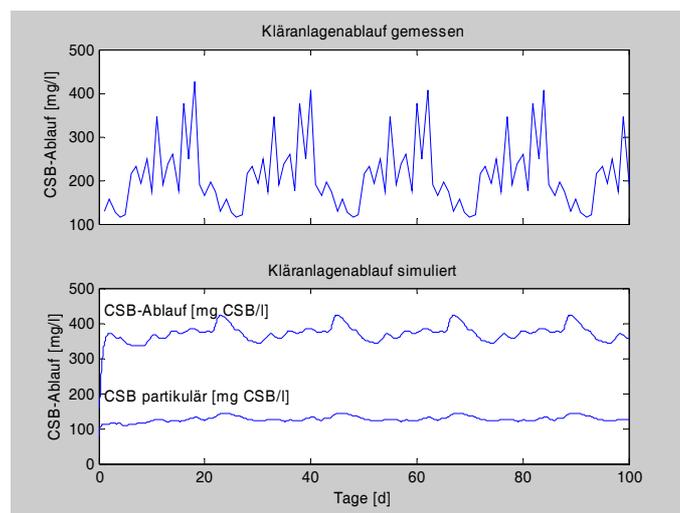
Der Zulauf-CSB zur biologischen Reinigungsanlage muss für die Simulation in drei Bestandteile aufgeteilt werden: Leicht abbaubarer CSB, schwer abbaubarer CSB und Rest-CSB. Die Aufteilung wird so vorgenommen, dass eine Übereinstimmung mit den CSB-Betriebswerten im Ablauf der Anlage vorliegt.

Der Anteil der Stickstofffraktion, die in die Biomasse eingebaut wird, sowie der Überschussschlamm werden mit dem Ertragskoeffizienten  $Y_h$  abgeschätzt, wobei mit

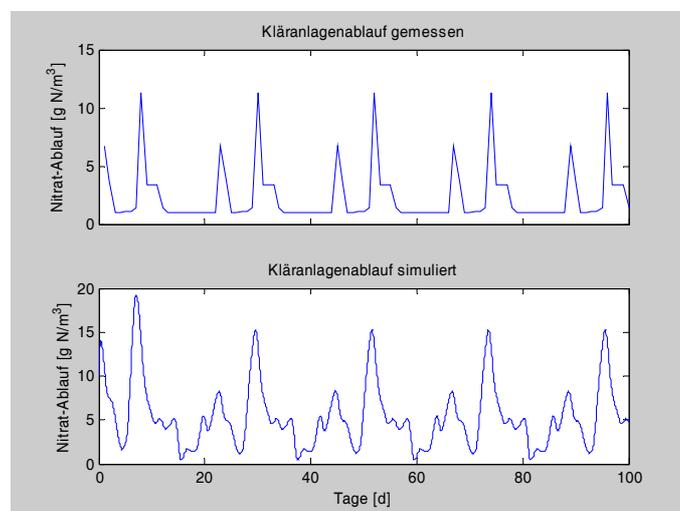
$Y_h = 0,19 \text{ kg/kg}$  ein sehr niedriger Ertragskoeffizient angesetzt wird. Dieser wurde vom Planer für die Auslegung der Ertüchtigung der bestehenden Anlage gewählt.

Die abtreibende Biomasse aus der Nachklärung wird dem partikulären CSB gleichgesetzt. Dabei wird in der Simulation angenommen, dass aus der Nachklärung ein gewisser Prozentsatz an Biomasse abtreibt. Die Summe aus gelöstem und partikulärem CSB im Ablauf der Nachklärung ergibt den Gesamt-CSB im Ablauf der Anlage.

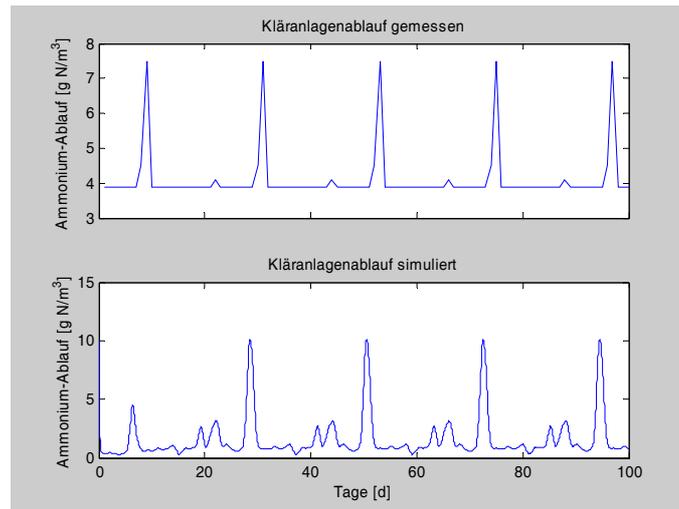
Mit der so gebildeten Eingabedatei (siehe Tabelle A 9) werden alle Simulationen durchgeführt. In Bild 5-15 bis Bild 5-17 sind die Ergebnisse der Simulation zusammengestellt.



**Bild 5-12: Ergebnisse der Kalibrierung – CSB (1-2)**



**Bild 5-13: Ergebnis der Kalibrierung – Nitrat (3-4)**



**Bild 5-14: Ergebnisse der Kalibrierung – Ammonium (5-6)**

Es ist deutlich zu erkennen, dass sowohl die Nitrat- als auch die Ammoniumspitzen im Ablauf der Anlage gut nachgebildet werden. Lediglich beim CSB treten in der Realität größere Schwankungen auf.

Bei der Simulation wurde angenommen, dass sich die Zusammensetzung des Abwassers während der Simulation nicht verändert. Weiterhin wird ein konstanter prozentualer Wert als Biomassenantrieb angesetzt. Diese Näherungen haben Auswirkungen auf die CSB-Simulation. Außer der Nachbildung der größeren Spitzen ist eine korrekte Simulation des CSB nicht möglich.

### 5.6.2 Modellierung der modifizierten Abwasseranlage

Im Folgenden wird das Betriebsverhalten der modifizierten Belebungsanlage mit einem vergrößerten Belebungsbeckenvolumen ( $V_{BB_{gesamt}} = 3850 \text{ m}^3$ ) und vorgeschalteter Denitrifikation ( $V_d = 425 \text{ m}^3$ ) simuliert. Die Zulaufdatei (Tabelle A 9), die bei der Kalibrierung des Modells verwendet wurde, wird für die Simulationen (Fall 1 und 2) beibehalten. Es wird mit einem konstanten Trockensubstanzgehalt (TS-Gehalt) von 4 g/l gerechnet. Dies lässt einen direkten Vergleich zwischen den Ergebnissen der Kalibrierung und den Simulationsergebnissen der Fälle 1 und 2 zu.

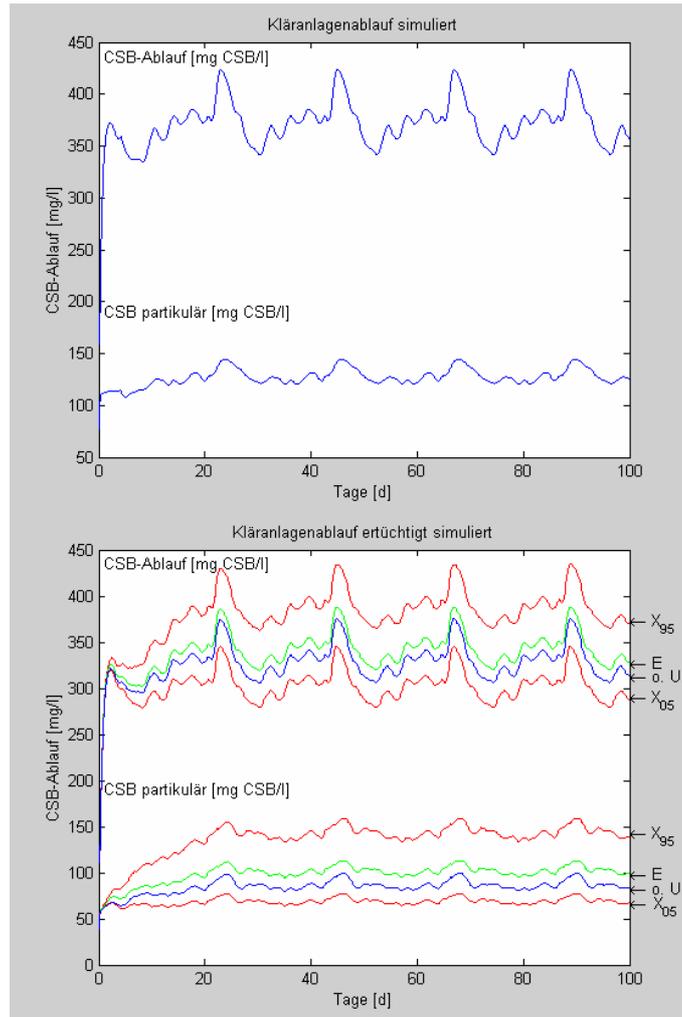
Für Fall 1 werden die Ergebnisse durch Verwendung von Punktwerten (konventionelle Vorgehensweise) als Eingangsdaten in der Simulation ermittelt. Für  $\hat{\mu}_H$  heißt dies beispielsweise, dass der Auslegungswert gemäß Tabelle A 5, Fall 1

eingesetzt wird. Die übrigen für diesen Parameter in der Literatur aufgeführten Werte werden nicht berücksichtigt. Die Temperatur beträgt 25°C.

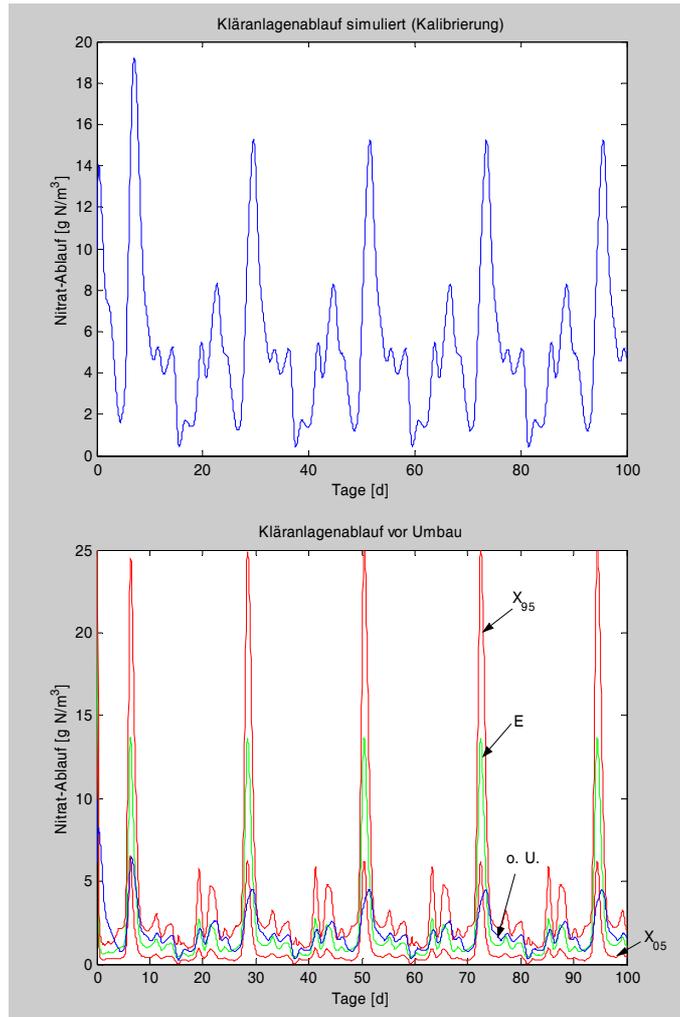
Für Fall 2 wird die Simulation unter Nutzung aller verfügbaren Werte, d. h. auch unter Einbeziehung des Stochastik-Moduls, für  $M_1$  und  $M_2$  berechnet. Die Auswertung erfolgt wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben. Die Ergebnisse sind in den Bildern 5-15 bis 5-17 dargestellt. Dabei ist jeweils in der oberen Grafik noch einmal die Kalibrierung aufgetragen und in der unteren Grafik sind die Kurven für die Simulation ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten (Fall 1) und mit Berücksichtigung der Unsicherheiten (Fall 2) dargestellt. Die Temperatur wird durch eine Log-Normalverteilung mit Erwartungswert 25°C beschrieben.

Erläuterung der Beschriftungen der Kurven in den Bildern:

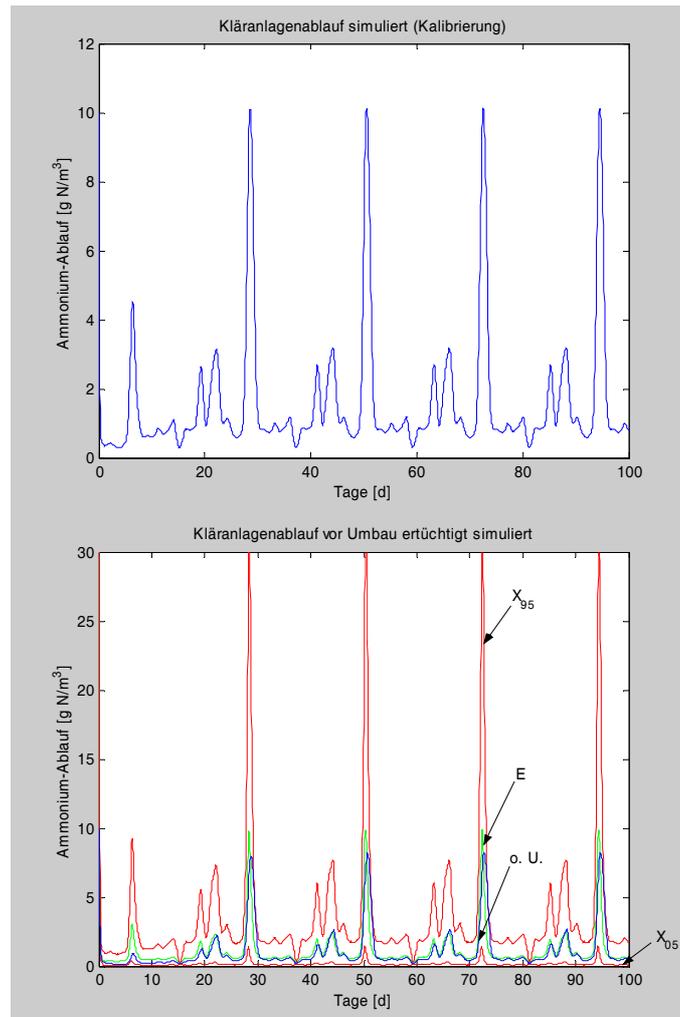
- o. U. Simulation ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten (Fall 1).
- $X_{05}$  Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten (05% Fraktile) (Fall 2).
- E Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten (Erwartungswert) (Fall 2).
- $X_{95}$  Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten (95% Fraktile) (Fall 2).



**Bild 5-15: Ergebnis der Simulationen – CSB (1-2)**



**Bild 5-16: Ergebnis der Simulationen – Nitrat (3-4)**



**Bild 5-17: Ergebnis der Simulationen – Ammonium (5-6)**

Die Simulation für Fall 1 und Fall 2 zeigt, dass die Ammoniumspitzen durch die Vergrößerung des Beckenvolumens und der besseren Sauerstoffversorgung abnehmen. Durch die vorgeschaltete Denitrifikation (Rücklaufverhältnis<sup>7</sup> = 200%) wird eine deutliche Stickstoffelimination erreicht.

Für Fall 2 werden die Ergebnisse in dem Sinne interpretiert, dass die Ammonium-, Nitrat- und CSB-Ablaufkonzentrationen mit einer Wahrscheinlichkeit von  $p$  [ $p=0,05$  (5% Fraktile), 0,5 (Mittelwert) oder 0,95 (95% Fraktile)] unterhalb der angezeigten Werte bleiben werden. Demgegenüber liefert die konventionelle Berechnung (Fall 1), bei der nur das Modell  $M_1$  verwandt wurde, Werte unterhalb der Erwartungswerte von

---

<sup>7</sup> Rücklaufverhältnis: Verhältnis des Rücklaufschlammzuflusses zum Abwasserzufluss in das Belebungsbecken [154]

Fall 2. Dies wird deutlich, wenn man stellvertretend für alle Simulationsergebnisse den Ammonium-Ablauf zum gleichen Zeitpunkt in Bild 5-17 (6) Fall 2 mit Fall 1 im selben Bild z.B. bei  $t = 28d$  vergleicht. Die Simulationsergebnisse werden von den Fraktilen (5% und 95%) des Falles 2 eingeschlossen. D.h. im Fall 1 scheint es sich um keine konservative Auslegung zu handeln, da zu erwarten ist, dass die Ablaufwerte für Ammonium-, Nitrat- und CSB höher liegen werden. Es ist bekannt, dass abhängig von der Wahl des Parametersatzes für die Berechnung die Möglichkeit existiert, eine Fehldimensionierung der erforderlichen Beckengrößen und Belüftungseinrichtungen vorzunehmen und somit die Eigenschaften der Anlage zu beeinflussen.

Erkennbar ist, dass unter Anwendung des Verfahrens (Einbeziehung aller verfügbaren Werte für jeden Parameter des Vektors  $\underline{y}_{PKSF}$  (Fall 2) und beider Modelle) Bereiche für die Ergebnisse angegeben werden können. Dies ist bei der Verwendung von Punktwerten nicht möglich (Fall 1).

Aus Bild 5-15 bis Bild 5-17 ist ersichtlich, dass die Erwartungswerte von Fall 2 immer oberhalb der Simulationsergebnisse von Fall 1 liegen. Wird die Planung aufgrund der Simulationsergebnisse ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten erfolgen, ist die Wahrscheinlichkeit, dass nach der Ertüchtigung der Anlage Probleme z. B. bezüglich des Ammoniums auftreten können, recht hoch.

Wenn man die Simulationsergebnisse unter Anwendung des Verfahrens für die Planung zu Grunde gelegt hätte, hätte dies Einfluss auf die Dimensionierung der Anlage gehabt und diese wäre anders geplant worden, da die Eintrittswahrscheinlichkeiten für die Ammonium- oder Nitrat- oder CSB-Ablaufkonzentrationen höher sind als die bei der Planung angesetzt.

### **5.6.3 Modellierung der umgebauten Abwasseranlage**

Nach dem Umbau der Kläranlage Mitte 2001 erfolgte die Simulationen für diese Anlage. In diesem Abschnitt wird der Nachweis erbracht, dass die Simulation der Abwasserreinigungsanlage unter Berücksichtigung der Unsicherheiten die

Messdaten besser abbildet als die herkömmliche und somit genauere Vorhersagen von Anlagenzuständen möglich sind.

Zur Vervollständigung der Nachweisführung wird das kalibrierte Modell mit einer neuen Zulaufdatei (vgl. Tabelle A 10) aus der Ganglinie (Zeitraum: 26.11.01 bis 22.12.01) simuliert. Um die Vergleichbarkeit der Simulationsergebnisse aus Abschnitt 5.6.2 zu gewährleisten, wird auch hier mit einem Trockensubstanzgehalt (TS-Gehalt) von 4 g/l gerechnet.

Für Fall 3 werden die gleichen Punktwerte wie für Fall 1 aus Tabelle A 5 als Eingangsdaten für die Simulation verwendet. Für Fall 4 wird der gleiche Parametersatz wie Fall 2 zur Simulation verwandt.

Die Auswertung erfolgt wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben. Die Ergebnisse der Simulationen sowie die Messdaten im Ablauf der Anlage sind in Bild 5-18 für den CSB Gehalt, in Bild 5-19 für den Nitrat Gehalt und in Bild 5-20 für den Ammonium Gehalt, dargestellt.

Erläuterung der Beschriftungen der Kurven in den Bildern:

- o. U. Simulation ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten (Fall 3).
- X<sub>05</sub> Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten (05% Fraktile) (Fall 4).
- E Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten (Erwartungswert) (Fall 4).
- X<sub>95</sub> Simulation unter Berücksichtigung der Unsicherheiten (95% Fraktile) (Fall 4).

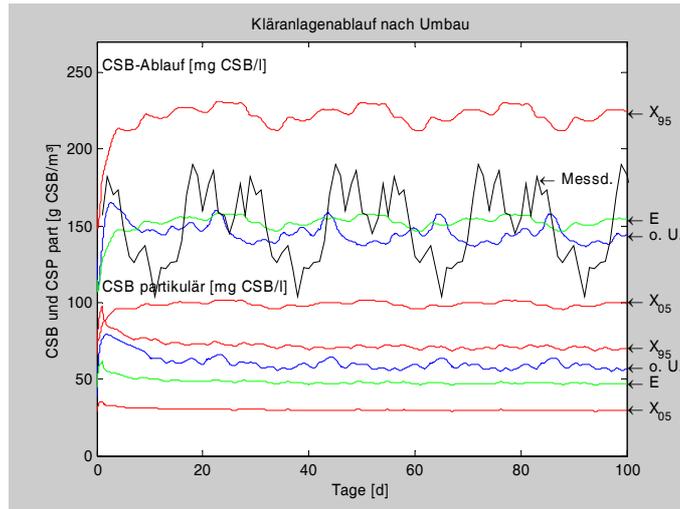


Bild 5-18: Ergebnis der Simulationen nach Umbau – CSB

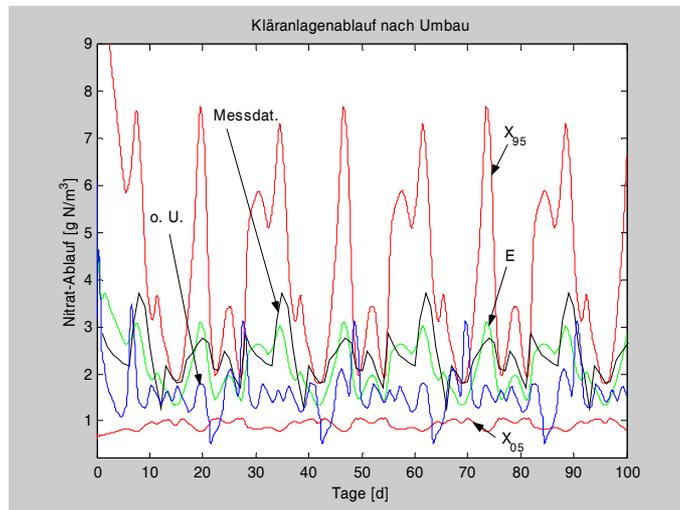


Bild 5-19: Ergebnis der Simulationen nach Umbau – Nitrat

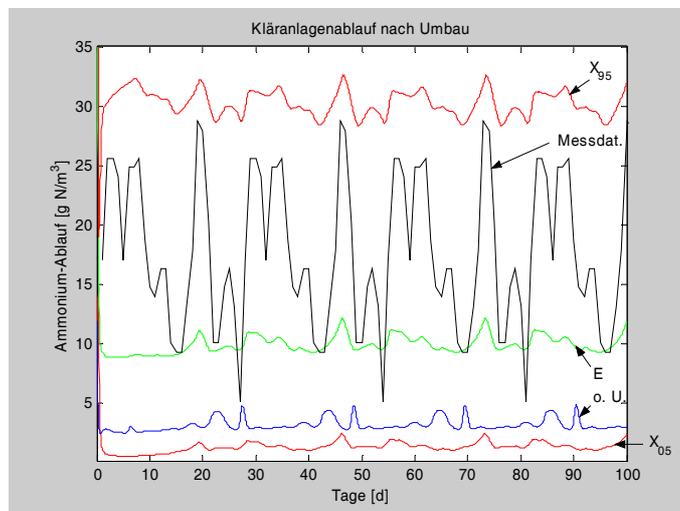


Bild 5-20: Ergebnis der Simulationen nach Umbau – Ammonium

Beim Vergleich der Fälle 3 und 4 mit den Messdaten zeigt sich, dass unter Berücksichtigung der Unsicherheiten eine realistischere Simulation erreicht wird. Im speziellen, dass die Erwartungswerte für CSB, Nitrat und Ammoniumwerte immer oberhalb der Rechenergebnisse ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten und näher an den Messdaten liegen. Die 5% und 95% Fraktile schließen die Messdaten immer ein. Mithin ist eine konservative Aussage bzgl. der zu erwartenden Reinigungsleistung möglich.

### ***5.7 Zusammenfassung der Kläranlagenanalyse***

Wie jede Ingenieurberechnung sind Modelle und Eingangsdaten zur Planung und Auslegung von Kläranlagen mit Unsicherheiten behaftet. Datenunsicherheiten beziehen sich hauptsächlich auf die Kenntnisse bezüglich der stöchiometrischen und kinetischen Parameter der in der Biologie ablaufenden Reaktionen (epistemische Unsicherheiten) und auf die stochastischen Effekte, wie z.B. Gewitter oder starke Temperaturschwankungen (aleatorische Unsicherheiten). Die Modellunsicherheiten werden dadurch ausgedrückt, dass die verwendeten Modelle, Activated Sludge Model No. 1 (ASM 1) und modifiziertes ASM 1, unterschiedlich das zeitliche Verhalten des Substratabbaus simulieren. Zusätzlich laufen in einer Kläranlage mehrere biochemische Prozesse parallel ab, die sich gegenseitig beeinflussen. Somit ist das Auslegen und Betreiben einer Anlage eine komplexe Aufgabe.

In dem vorliegenden Kapitel wurden diese Unsicherheiten und zusätzlich die Modellunsicherheiten die den Substratabbau betreffen, repräsentiert durch das ASM1 und modifizierten ASM1, berücksichtigt. Die Konsequenz daraus ist, dass die genutzte Informationsbasis breiter wird. Mit dieser erweiterten Annäherung wurde die Simulation des dynamischen Verhaltens der Anlage durchgeführt.

Es wurde gezeigt, dass die so erzielten Ergebnisse wesentlich näher an den Messdaten der Anlage liegen als die Auslegungsberechnungen für die Ertüchtigung. Somit ist eine verbesserte Prognose in Bezug auf die Auswirkung verschiedener

Lastfälle auf die Ablaufwerte möglich, und es können Wahrscheinlichkeitsaussagen über die Einhaltung von Grenzwerten getroffen werden. Die Zuverlässigkeit und damit die Akzeptanz von dynamischen Kläranlagensimulationen kann auf diese Weise gesteigert werden. Weiterhin kann diese Vorgehensweise dafür genutzt werden, Sicherheitsparameter, die im ASM1 und erweiterten ASM1 nicht enthalten sind, festzulegen.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick der Arbeit

Die Verwendung geeigneter mathematischer Modelle und der dazu erforderlichen Daten sind für die Auslegung von Apparaten und Anlagen erforderlich, da nur so die zweckmäßige Beschaffenheit und funktionelle Sicherheit technischer Systeme gewährleistet werden kann. Mithin hat die Modellierung und deren Qualität für die Funktionsfähigkeit und Sicherheit der Anlage eine zentrale Bedeutung.

Da Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen immer vorhanden sind und einen entscheidenden Einfluss auf die Modellierung und Simulation von Prozessapparaten und Industrieanlagen haben können, werden in der entwickelten Vorgehensweise die Unsicherheiten identifiziert, behandelt und durch die Rechnung getragen, so dass sich diese im Rechenergebnis wieder finden. Dies erfolgt, damit alle zur Verfügung stehenden Informationen einbezogen werden und somit die Aussagefähigkeit der Modellrechnungen erhöht wird. Auf diese Art kann vermieden werden, dass eine Genauigkeit der Berechnung unterstellt wird, die in Wahrheit nicht vorhanden ist und unreflektiert Auslegungsentscheidungen zugrunde gelegt wird. Wenn Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen unberücksichtigt bleiben, so kann dies möglicherweise zu unzureichenden und gefahrträchtigen Auslegungen technischer Systeme führen.

An den beiden Industriebeispielen wurde erfolgreich gezeigt, dass die erzielten Ergebnisse nach dem in dieser Arbeit entwickelten Verfahren wesentlich näher an den Messdaten der einzelnen Beispiele liegen als die Auslegungsrechnungen nach der konventionellen Methode. Die Abweichungen der Auslegungsrechnungen von den Betriebsdaten hätten in beiden Fällen vermindert werden können, wenn die Vorgehensweise zur Modellierung unter Berücksichtigung von Modell- und Datenunsicherheiten in der jeweiligen Auslegungsprozedur bzw. Simulation verwendet worden wäre. Somit kann durch die Berücksichtigung von Unsicherheiten in Ingenieurberechnungen realitätsnäher geplant werden.

Die getrennte Behandlung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten führte nicht zu einer signifikanten Verbesserung innerhalb der Zielstellung.

Insgesamt lassen sich die Vorteile des vorgestellten Verfahrens wie folgt zusammenfassen:

- Identifizierung der Unsicherheiten in der ingenieurmäßigen Aufgabenstellung.
- Unsicherheiten werden durch die Rechnung getragen.
- Korrelierte Parameter können als solche behandelt werden.
- Alle zur Verfügung stehenden Informationen für eine Modellierung können erfasst werden. Dies beinhaltet sowohl unterschiedliche Modelle zur Beschreibung, als auch unterschiedliche Werte für einen Parameter. Die Modellierung beruht dann auf einer breiteren Basis an Wissen und wird dadurch auf ein besseres, höheres Niveau gehoben; die Ergebnisse werden aussagekräftiger.
- Die unterschiedliche Qualität der Eingangsdaten wird berücksichtigt (z. B. verlässlich bestimmte auf der einen Seite, ingenieurmäßig Abschätzungen auf der anderen Seite).
- Die Anwendung des Verfahrens bei der Modellierung ermöglicht eine verbesserte Vorhersage in der Simulation.
- Die Unsicherheiten spiegeln sich im Simulationsergebnis wieder.
- Durch die Entropie wird eine Vergleichsgröße eingeführt, die zur Prüfung herangezogen werden kann, ob zwischen aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten zu unterscheiden ist.

Als Erweiterung des Themas bietet sich an, die Interpretation von Ergebnisunsicherheiten zu untersuchen und somit auf die Frage einzugehen, in welcher Form und inwieweit Ergebnisunsicherheiten die daraus zu ziehenden Schlüsse und Entscheidungen beeinflussen.

Weiterhin sollte geklärt werden, ob durch Möglichkeitsbetrachtung und Dempster-Shafer Theorie anstelle oder im Verbund mit Wahrscheinlichkeitsbetrachtungen eine weitere Verbesserung der Aussagequalität zu erzielen ist.

## 7 Literatur

1. Eyth, M.: Hinter Pflug und Schraubstock: Die Abenteuer eines Ingenieurs im vorigen Jahrhundert, Dt. Verlag-Anstalt, Stuttgart 1987.
2. Davis, P. A. and N. E. Olague: Treatment of Modeling Uncertainties in Total System Safety Assessments, in: Apostolakis, G. (Ed.), Proceedings of the International Conference on Probabilistic Safety Assessment (PSAM), Vol. 1, pp. 649-652, 1991.
3. Morgan, G. M. and M. Henrion: *Uncertainty: A Guide to dealing with Uncertainty in Quantitative Risk and Policy Analysis*, Cambridge University Press, New York 1990.
4. Hauptmanns, U.: *Determination of uncertainties in safety studies for nuclear and chemical plants and their interpretation*, in Lydersen, S., Hansen, G. K. and H. A. Sandtorv (eds.), Proceedings of the European Conference on Safety and Reliability – ESREL '98, Trondheim/Norway, 16-19 June 1998, Vol.1, p. 443-450.
5. Vallejos, G. G.: *Dynamische Prozesssimulation der biologischen Abwasserbehandlung in gekoppelten Prozesssystemen*; Fortschritt-Berichte, VDI Reihe 15: Umwelttechnik, Nr. 200, 1998.
6. Otterpohl, R.: *Dynamische Simulation zur Unterstützung der Planung und des Betriebes von kommunalen Kläranlagen*, Gewässerschutz-Wasser-Abwasser (GWA) des Institutes für Siedlungswasserwirtschaft der RWTH Aachen, Band 151, Aachen 1995.
7. Zimmermann, H.-J.: *A fresh perspective on uncertainty modelling: Uncertainty vs. uncertainty modelling*, in: Ayyub, B.M. and M.M. Gupta, M.M. (Eds.), Uncertainty analysis in engineering and sciences: fuzzy logic, statistics and neural network approach, pp. 354-366, 1997.
8. Metzler *Philosophie Lexikon: Begriffe und Definitionen*, Prechtel, P. und F.-P. Burkard (Hrsg.), 2. Auflage, Weimar 1999.
9. Hauptmanns, U. and W. Werner: *Engineering Risks – Evaluation and Valuation*, Springer Verlag, Berlin 1991.
10. Oberkampf, W. L.; Helton, J. C.; Joslyn, C. A.; Wojtkiewicz, S. F. and S. Ferson: *Challenge Problems: Uncertainty in System Response Given Uncertain*

- Parameters*, Workshop on Epistemic Uncertainty, Albuquerque, New Mexico, August 6-7, 2002. ([www.sandia.gov/epistemic/challenge.htm](http://www.sandia.gov/epistemic/challenge.htm))
11. Hacking, I: *The Emergence of Probability*, Cambridge University Press, Cambridge 1975.
  12. Apostolakis, G. E.: *The concept of probability in safety assessments of technological systems*, Science, Vol. 250, pp. 1359-1364, 1990.
  13. Apostolakis, G. E.: *A Commentary on Model Uncertainty*, in: Mosleh, A, Siu, N. Smidts, C. and C. Lui (Eds.), *Proceedings of Workshop on Model Uncertainty: Its Characterization and Quantification*, A., Annapolis, MD, October 20-22, 1993. (Ebenso veröffentlicht als Report: NUREG/CP-0138, US Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC, 1994)
  14. Helton, J. C. and D. E. Burmaster, Guest Editors: *Treatment of Aleatory and Epistemic Uncertainty*, Special Issue of Reliability and System Safety, Vol. 54, nos. 2-3, 1996.
  15. Winkler, R. L.: *Uncertainty in Probabilistic Risk Assessment*, Reliability Engineering and System Safety, Vol. 54, pp. 127-132, 1996.
  16. Hofer, E.: *When to separate uncertainties and when not to separate*, Reliability Engineering and System Safety, Vol. 54, pp. 113-118, 1996.
  17. Parry, G. W.: *The characterization of uncertainty in Probabilistic Risk Assessments of complex systems*, Reliability Engineering and System Safety, Vol. 54, pp. 119-126, 1996.
  18. Hofer, E., Kloos, M., Krzykacz-Hausmann, Peschke, J. und M. Sonnenkalb: *Methodenentwicklung zur simulativen Behandlung der Stochastik in probabilistischen Sicherheitsanalysen der Stufe 2*, GRS - A - 2997, 2001.
  19. Ferson, S. and L. R. Ginzburg: *Different methods are needed to propagate ignorance and variability*, Reliability Engineering and System Safety, Vol. 54, pp. 133-144, 1996.
  20. Apostolakis, G. E.: *The distinction between aleatory and epistemic uncertainties is important: An example from the inclusion of aging effects into PSA*, in: Modarres, M. (Ed.), *PSA '99 International Topical Meeting on Probabilistic Safety Assessment*, Vol. I, Washington, DC, August 22-26, 1999.
  21. Galleos, D. P. and E. J. Bonano: *Consideration of Uncertainty in the performance assessment of radioactive waste disposal from international perspective*, Reliability Engineering and System Safety, 42, pp. 111-123, 1993.

22. Draper, D.; Hodges, J. S.; Leamer, E. E., Morris, C. N. and D. B. Rubin: *A Research Agenda for Assessment and Propagation of Model Uncertainty*, RAND, 1987.
23. PRA Working Group: *A Review of NRC Staff Uses of Probabilistic Risk Assessment*, NUREG-1489, U. S. Nuclear Regulatory Commission USNRC, Washington DC, 1994.
24. Preyssl, C.: *Unschärfe Risikoanalyse - Theorie und Anwendungen*, Atominstitut der Österreichischen Universitäten, AIAU, Wien 1986.
25. Ibrahim, A. and B. M. Ayyub: *Uncertainties in risk-based inspection of complex systems*, in: Ayyub, B.M., Gupta, M.M. and L.N. Kanal (Eds.), *Analysis and Management of Uncertainties – Theory and Applications*, 1992.
26. Hauptmanns, U.: *Uncertainty and the calculation of safety-related parameters for chemical reactions*, J. Loss Prev. Process Ind. Vol. 10, No. 4, pp. 243-247, 1997.
27. Sutter II, G.W.; Barnthouse, L.W. and R. V. O'NEILL: *Treatment of Risk in Environmental Impact Analysis*, Environmental Management 11 (3): 295-303, 1987.
28. Hofer, E.: *Berücksichtigung von Modellunsicherheiten in Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen von Rechenmodellergebnissen*; GRS 1994.
29. Mayer, M: *Die Sicherheit der Bauwerke und ihre Berechnungen nach Grenzkraften anstatt nach zulässigen Spannungen*, Springer Verlag, Berlin 1926.
30. Zerna, W. (Hrsg.): *Probabilistische Methoden im konstruktiven Ingenieurbau*, Konstruktiver Ingenieurbau, Vulkan-Verlag, Essen Heft 25/26, 1976.
31. Schuëller, G. I. and M. Shinozuka: *Stochastic methods in structural dynamics*, Martinus Nijhoff Publishers, 1987.
32. Marek, P; Guštar, M. und L. Bathon: *Tragwerksbemessung von deterministischen zu probabilistischen Verfahren*, ACADEMIA (Verlag der Akademischen Wissenschaften der Tschechischen Republik), Prag 1998.
33. Rudd, D. F. and C. C. Watson: *Strategy of process engineering*, Wiley Verlag, New York, 1968.
34. Watanabe, N; Nishimura, Y. and M. Matsubara: *Optimal design of chemical processes involving parameter uncertainty*, Chemical Engineering Science, Vol. 28, pp. 905-913, 1973.

35. Nishida, N.; Ichikawa, A. and E. Tazaki: *Synthesis of Optimal Process Systems with Uncertainty*, Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., Vol. 13, No. 3, pp. 209-214, 1974.
36. Dittmar, R. and K. Hartmann: *Calculation of Optimal Design Margins for Compensation of Parameter Uncertainty*, Chem. Eng. Sci., Vol. 31, pp. 563-568, 1976
37. Berthouex, P. M. and L. B. Polkowski: *Optimum Waste Treatment Plant Design Under Uncertainty*, Water Pollution Control Federation Journal, Vol. 42, No. 9, pp. 1589-1613, 1970.
38. Tarrer, A. R., Grady, L. C. P., Lim, H. C. and L. P. Koppel: *Optimal Activated Sludge Design Under Uncertainty*, Am. Soc. Civil. Eng., Journal of Env. Engineering Div., Vol. 102(EE3), pp. 657-673, 1976.
39. Chen, M. S. K.; Erickson, L. E. and L.-t. Fan: *Consideration of Sensitivity and Parameter Uncertainty in Optimal Process Design*, Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., Vol. 9, No.4, 1970.
40. Diwekar, U. M. and E. S. Rubin: *Stochastic Modelling of Chemical Processes*, Computers chem. Engng., Vol. 15, No. 2, pp. 105-114, 1991.
41. US NRC (Nuclear Regulatory Commission): *Reactor Safety Study. An Assessment of Accident Risks in US-Commercial Nuclear Power Plants*, WASH 1400 (NUREG-75/014), US Nuclear Regulatory Commission, Washington DC 1975.
42. Der Bundesminister für Forschung und Technologie (Hrsg.): *Deutsche Risikostudie Kernkraftwerke: Eine Untersuchung zu den durch Störfälle in Kernkraftwerken verursachten Risiko*, Köln 1979.
43. Der Bundesminister für Forschung und Technologie (Hrsg.): *Deutsche Risikostudie Kernkraftwerke - Phase B*, GRS-72, Köln 1990.
44. US NRC (Nuclear Regulatory Commission): *Severe accident risks: An assessment for five US nuclear power plants*, Vols 1 and 2 NUREG-1150, US Nuclear Regulatory Commission, Washington DC 1991.
45. Canvey: *An investigation of potential hazards from operations in the Canvey Island/Thurrock Area*, London 1978.
46. *Risk analysis of six potentially hazardous industrial objects in the Rijnmond Area. A Pilot Study* Dordrecht, Holland/ Boston, U.S.A./London, England 1982.

47. Aldemir, T.; M. Belhadj and L. Dinca: *Process reliability and safety under uncertainties*, Reliability Engineering and System Safety, Vol. 52, pp. 211-225, 1996.
48. Chaudhuri, P. D. and U. M. Diwekar: *Synthesis under uncertainty with simulators*, Computers chem. Engng., Vol. 21, No. 7, pp. 733 – 738, 1997.
49. Kutscher, S.: *Verfahrenstechnische Berechnungen mit Parametertoleranzen*, VDI Fortschrittsberichte Reihe 3 Nr. 391, 1995.
50. Colditz, S.: *Untersuchungen zur Flexibilität und Parameterunsicherheit bei verfahrenstechnischen Prozessen*, VDI Fortschrittsberichte Reihe 3 Nr. 474, 1996.
51. Hoybye, J. and D. Rosbjerg: *Effect of Input and Parameter Uncertainties in Rainfall-Runoff Simulations*, Journal of Hydrologic Engineering 1999, pp 214-224.
52. Lei, J. and W. Schiling: *Parameter Uncertainty Propagation Analysis for Urban Rainfall Runoff Modelling*, Wat. Sci. Tech. Vol 29, No. 1-2, pp. 145-154, 1994.
53. Warwick, J. J.: *Optimizing water quality modelling in an uncertain environment*, Wat. Sci. Tech. Vol. 24, No. 6, pp. 41-48, 1991.
54. Hauptmanns, U. and M. Großkopf: *Accounting for stochastic quantities in calculating interference voltages*, J. Loss Prev. Process Ind. Vol. 14, pp. 11-16, 2001.
55. Hauptmanns, U.: *A Monte-Carlo Based Procedure for Treating the Flight of Missiles from Tank Explosions*, in Schuëller, G. I. and P. D. Spanos (eds.) 2001 Balkema, Rotterdam, pp. 583-589. MCS 2000. Proceedings of the International Conference on Monte Carlo Simulation, 18-21 June 2000, Monte Carlo. (Ebenso veröffentlicht in J. of Probabilistic Engineering Mechanics, Vol. 16, pp. 307-312, 2001).
56. Hauptmanns, U.: *A procedure for analysing the flight of missiles from explosions of cylindrical vessels*, J. Loss Prev. Process Ind. Vol. 14, pp. 395-402, 2001.
57. US NRC (Nuclear Regulatory Commission): *PRA Procedures Guide. An Assessment of Accident Risks in A Guide to the Performance of Probabilistic Risk Assessment for Nuclear Power Plants*, NUREG/CF 2300 Vol. 2, US Nuclear Regulatory Commission, Washington DC 1983.
58. Hendayun, M.: *Integration von Verfahren zur Unsicherheitsanalyse in ein dynamisches Simulationsprogramm und Untersuchungen zur*

- Rechengenauigkeit und Aufwand*, Dissertation, TU Berlin, Fachbereich Verfahrenstechnik, Umwelttechnik, Werkstoffwissenschaften, Berlin 1997.
59. Siu, N.; Karydas, D and J. Temple: *Bayesian Assessment of modeling uncertainties: application to fire risk assessment*, in: Ayyub, B.M., Gupta, M.M. and L.N. Kanal (Eds.), *Analysis and Management of Uncertainties – Theory and Applications*, 1992.
60. Kletz, T.: *Learning from accidents*, 2nd edition, Butterworth-Heinemann Ltd, 1994.
61. Lees, F. P.: *Loss Prevention in the Process Industries, Hazard Identification, Assessment and Control*, Vol. 1, Butterworth-Heinemann, Oxford 1996.
62. Hammersley, J. M. and D. C. Handscomb: *Monte Carlo Methods*, Chapman and Hall, London, 1979 (1964).
63. Rubinstein, R. Y.: *Simulation and the Monte-Carlo-Method*, John Wiley and Sons, 1981.
64. Sobol, I. M.: *Die Monte-Carlo-Methode*, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1991.
65. DIN *Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen*, Beuth Verlag GmbH, 1995.
66. International Organization for Standardization, *Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement*, 1995.
67. Coleman, H.W. and W. G. Steele: *Some Considerations in the Propagation of Systematic and Random Errors into an Experimental Result*, *Experimental Uncertainty in Fluid Measurements*, ASME FED Vol. 58, ASME, New York, 1987, pp. 57-62.
68. Coleman, H.W. and W. G. Steele: *Engineering Application of Experimental Uncertainty Analysis*, *AIAA Journal*, Vol. 33, No. 10, 1995.
69. Coleman, H.W. and W. G. Steele: *Experimentation and uncertainty analysis for engineers*, 2. ed., Wiley Verlag, New York, 1999.
70. Gruhn, G und G. Fichtener: *Untersuchungen der Flexibilität verfahrenstechnischer Systeme*, *Chemische Technik* 40 (1988), Nr. 12, S. 505-512.
71. Colditz, S. und G. Gruhn: *Intervallmathematische Auswertung komplexer verfahrenstechnischer Modelle*, *Chem.-Ing.-Techn.* 66 (1994), Nr. 12, S.1651-1654.

72. Gruhn, G.; Kutscher, S. und S. Colditz: *Kriterien für kritische Reaktorzustände bei Parameterunsicherheit*, Chem.-Ing.-Techn. 67 (1995), Nr. 2, S.176-179.
73. Gruhn, G. und S. Colditz: *Intervallmathematische Methoden in der Prozesstechnik - Flexibilität und Unschärfe*, Chem.-Ing.-Techn. 68 (1996), Nr. 6, S.509-517.
74. Richei, A.: *Bewertung und Optimierung der Mensch-Maschine-Schnittstelle unter Nutzung der Fuzzy Set Theorie*, Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Maschinenbau, Bochum 1998.
75. Mohamed, S. and A. K. McCowan: *Modelling project investment decisions under uncertainty using possibility theory*, International Journal of Project Management 19, pp. 231-241, 2001.
76. Shafer, G.: *A Mathematical Theory of Evidence*, Princeton University Press, Princeton, NJ 1976.
77. Klir, G. J. and M. J. Wierman: *Uncertainty-based information: elements of generalized information theory*, 2nd, corr. ed., Physica-Verlag, Heidelberg 1999.
78. *Uncertainty modelling using Dempster-Shafer theory for improving detection of weld defects*, Pattern recognition letters: an official publication of the International Association for Pattern Recognition, Bd. 24 (2003), 1, pp. 547-564.
79. Institute for Operations Research and the Management Sciences: *Special issue on the Dempster-Shafer theory of evidence*, Wiley, Netherlands, Hoboken 2003.
80. Dubois, D. and Prade, H.: *Fuzzy Sets: A Survey of Engineering Applications*, European Symposium on Computer Aided Process Engineering 2, pp. 373-380.
81. Dong, W. M.; Chiang, W.-L. and F. S. Wong: *Propagation of Uncertainties in Deterministic Systems*, Computer & Structures, Vol. 26, No. 3, pp. 415-423, 1987.
82. Bier, V. M.: *Fuzzy set theory, probability theory, and truth functionality*, in: Ayyub, B.M., Gupta, M.M. and L.N. Kanal (Eds.), *Analysis and Management of Uncertainties – Theory and Applications*, 1992.
83. Reddy, R. K. and A. Haldar: *A random-fuzzy reliability analysis of engineering systems*, in: Ayyub, B.M., Gupta, M.M. and L.N. Kanal (Eds.), *Analysis and Management of Uncertainties – Theory and Applications*, 1992.
84. Klir, G. J.: *Probabilistic versus possibilistic conceptualization of uncertainty*, in: Ayyub, B.M., Gupta, M.M. and L.N. Kanal (Eds.), *Analysis and Management of Uncertainty - Theory and Applications*, pp. 13-25, Amsterdam 1992.

85. Gnedenko, B. W.: *Lehrbuch der Wahrscheinlichkeitstheorie*, Verlag Harri Deutsch, 10. Auflage, Frankfurt am Main 1997.
86. Box, G. E. P. and G. C. Tiao: *Bayesian inference in statistical analysis*, Wiley, New York 1992. Originally published: Reading, Mass.: Addison-Wesley Pub. Co., 1973.
87. de Finetti, B.: *Theory of probability: a critical introductory treatment*, Vol. 1, Wiley, Chichester 1993. Reprint
88. de Finetti, B.: *Theory of probability: a critical introductory treatment*, Vol. 2, Wiley, Chichester 1993. Reprint
89. Kolmogorov, A. N. (Ed): *Mathematical logic, algebra, number theory, probability theory*, Vol. 1, 2. Ausgabe, Birkhaeuser, Basel 2001.
90. Apostolakis, G. E.: *The interpretation of probability in probabilistic safety assessments*, Reliab. Engng System Safety, Vol. 23, pp. 247-252, 1988.
91. Bartsch, H.-J.: *Mathematische Formeln*, 22. Auflage, VEB Fachbuchverlag, Leipzig 1989.
92. VDI 4008 Blatt 6: *Monte-Carlo-Simulation*, 4/1999.
93. Siu, N. and G. E. Apostolakis: *On the Quantification of Modeling Uncertainties*, Transactions of the 8th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, Vol. M2, pp. 375-378, North-Holland, Amsterdam, 1985.
94. Martin, H.: *Heat Exchangers*, Hemisphere Publishing Corporation, 1992.
95. Mayer, R. and R. Numrich: *Dynamic simulation of falling film apparatus*, International Conference on Nuclear Engineering Vol1-Part A pp. 409-418 ASME (1996).
96. Kukral, R.: *Modelle zur Beschreibung der Zustandsänderungen in Rohrbündelwärmeübertragern bei zeitlich veränderlichen Betriebsbedingungen*, VDI Fortschrittsberichte Reihe 19 Nr. 76, 1994.
97. Warwick, J. J.: *Interplay between Parameter Uncertainty and Model Aggregation Error*, Water Resources Bulletin, Vol. 25, No. 2, pp.275-283, 1989.
98. Laskey, K. B.: *Implications of model uncertainty for the practice of risk assessment*. In *Model Uncertainty: Its characterization and quantification*, NUREG/CP-0138 (eds Mosleh, A. et al.) USNRC, 1994, pp. 31-40.
99. Winkler, R. L.: *Model uncertainty: probabilities for models?* In *Model Uncertainty: Its characterization and quantification*, NUREG/CP-0138 (eds Mosleh, A. et al.) USNRC, 1994, pp. 107-116.

100. Draper, D.: *Assessment and Propagation of Model Uncertainty*, J. Royal Stat. Soc. B (1995) 57, No. 1, pp. 45-97.
101. Mosleh, A., Siu, N., Smidts, C. and C. Lui (eds): *Model Uncertainty: Its characterization and quantification*, NUREG/CP-0138 US Nuclear Regulatory Commission USNRC, Washington DC, 1994.
102. Mosleh, A.: *Model Uncertainty and Its Implications in Probabilistic Risk Assessments*, 9<sup>th</sup> International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, Lausanne, August 17-21, 1987.
103. Hirshleifer, J. and Riley, J. G.: *The Analytics of Uncertainty and Information*, Cambridge University Press, 1992.
104. Mag, W.: *Grundzüge der Entscheidungstheorie*, Verlag Vahlen: München, 1990.
105. Hauptmanns, U.: *A Monte-Carlo based procedure for treating the flight of missiles from tank explosions*, J. of Probabilistic Engineering Mechanics, Vol. 16, pp. 307-312, 2001.
106. Johnson, N. L.; Kotz, S. and N. Balakrishnan: *Continuous Univariate Distributions – Volume 1*; John Wiley & Sons: New York, 1994.
107. Hartung, J.: *Statistik*, Oldenbourg Verlag, 9. Auflage, 1993.
108. Liebl, F.: *Simulation*, Oldenbourg Verlag, 1992.
109. Graybeal, W. T. and U. W. Pooch: *Simulation: Principles and Methods*; Boston 1980.
110. VDI 4009 Blatt 7: Numerische Verfahren zur Bestimmung von Verteilungsparametern in der Zuverlässigkeitsrechnung, 9/1985.
111. Kendall's *Advanced Theory of Statistic, Volume 1, Distribution Theory*, Sixth Edition, John Wiley & Sons Inc., New York 1994.
112. Doberstein, H.; Hauptmanns, U.; Hoemke, P.; Verstegen, C. und J. Yllera: *Ermittlung von Zuverlässigkeitskenngrößen für Chemieanlagen*, GRS-A-1500, Datenband 1 und 2, 10/1988.
113. Martz, H. F. and R. A. Waller: *Bayesian Reliability Analysis*, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore 1982.
114. Storm, R.: *Wahrscheinlichkeitsrechnung, mathematische Statistik und statistische Qualitätskontrolle*, Fachbuchverlag Leipzig, 10. Auflage, Köln 1995.
115. Rosanow, I. A.: *Wahrscheinlichkeitstheorie*, Wissenschaftliche Taschenbücher Band 68, Pergamon Press, Oxford 1972.

116. Shannon, C. E. and W. Weaver: *Mathematische Grundlagen der Informationstheorie*. Übersetzung der englischsprachigen Originalausgabe: *The Mathematical Theory of Communication* von 1949. Oldenbourg Verlag, München 1976.
117. Wolkenstein, M. W.: *Entropie und Information*, Akademie-Verlag, DDR, Berlin 1990.
118. Schwarz, R.: *Nachrichtenübertragung 1, System und Informationstheorie*, Oldenbourg Verlag, München 1993.
119. Mathar, R.: *Informationstheorie: Diskrete Modelle und Verfahren*, Teubner Verlag, Stuttgart 1996.
120. Quadt, R.: *Verallgemeinerte Entropiekonzepte und Anwendungen in der Theorie dynamischer Systeme und in der Informationstheorie*, Shaker, Aachen 1992. Ebeling, W.; Freund, J. und F. Schweitzer: *Komplexe Strukturen: Entropie und Information*, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig 1998.
121. Gzyl, H.: *The Method of Maximum Entropy*, Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences - Vol. 29, World Scientific Publishing, 1995.
122. Cooke, R.M.: *Experts in Uncertainty*, Oxford University Press 1991.
123. Ruelle, D.: *Zufall und Chaos*, Springer-Verlag, Berlin 1993.
124. Hauptmanns, U.: Analytical Propagation of Uncertainties through Fault Trees, Reliability Engineering and System Safety, 76, pp. 327-329, 2002.
125. Kleijnen, J. P. C.: *Statistical Techniques in Simulation*, Part I, Marcel Dekker, 1974.
126. Ripley, B. D.: *Stochastic Simulation*; John Wiley & Sons: New York, 1987.
127. Friedrich, H. und C. Lange: *Stochastische Prozesse in Natur und Technik*, Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 1999.
128. Spanier, J. and E. M. Gelband: *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*, Addison-Wesley Publishing Company, 1969.
129. Marseguerra, M. and E. Zio: *Basics of the Monte Carlo Method with Application to System Reliability*, LiLoLe-Verlag GmbH (Publ. Co. Ltd.), Hagen, 2002.
130. Knetsch, T. and U. Hauptmanns: *Integration of stochastic effects and data uncertainties into the design of a wastewater treatment plant*, in: Zio, E., Demichela, M. and N. Piccinini (eds.) Proceedings of the European Conference on Safety and Reliability - ESREL 2001, Turino/Italy, 16-20 September 2001, Vol.3, pp. 1779 - 1786.

131. Gentle J. E.: *Random Number Generation and Monte Carlo Methods*, Springer, 1998.
132. Fishman, G. S.: *Monte Carlo, Concepts, Algorithms, and Applications*, Springer Verlag, New York, 1999.
133. Moler, C.: *Random thoughts*, MATLAB News & Notes, 1995.
134. Baerns, M.; Hofmann, H. und A. Renken: *Chemische Reaktionstechnik, Lehrbuch der Technischen Chemie, Band 1*, 2. Auflage, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1992.
135. Fishman, G. S.: *Concepts and Methods in Discrete Event Digital Simulation*; Springer Verlag, New York, 1973.
136. Lawrance, A. J. and P. A. W. Lewis: *Simple Dependent Pairs of Exponential and Uniform Random Variables*; Operations Research, Vol. 31, 6, pp. 1179-1197, 1983.
137. Hartung, J. und B. Elpelt: *Multivariate Statistik*, Oldenbourg Verlag, 5. Auflage, 1995.
138. Meyer, G. und E. Schiffner: *Technische Thermodynamik*, VEB Fachbuchverlag Leipzig, 4. Auflage 1989
139. Wagner, W. und A. Kruse: *Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf. Der Industrie-Standard IAPWS-IF97 für die thermodynamischen Zustandsgrößen und ergänzende Gleichungen für andere Eigenschaften*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1998.
140. Westerterp, K. R.; Van Swaaij, W. P. M. and A. A. C. M. Beenackers: *Chemical Reactor Design and Operation*; John Wiley & Sons Inc.: Chichester, 1987.
141. Botsch, T. W. und K. Stephan: *Dynamische Simulation von Wärmeübertragern*. Chem.-Ing.-Techn. 1995, 4, 449.
142. Holmann, J. P.: *Heat Transfer*, McGraw – Hill Book Company: 1992.
143. Beitz, W. und K.-H. Küttner (Hrsg.): *Dubbel, Taschenbuch für den Maschinenbau*; 18. Auflage, Springer Verlag: Berlin Heidelberg New York, 1995.
144. Daubert, T. E. and R. P. Danner: *Data Compilation Tables of Properties of Pure Components*; Design Institute for Physical Data, American Institute of Chemical Engineering, New York, 1985.
145. Verein Deutscher Ingenieure: *Wärmeatlas*; VDI - Verlag GmbH: 9. Auflage, Düsseldorf, 2002.

146. Christen, H. R.: Chemie, Verlage Diesterweg/Salle, Sauerländer, 4. Auflage, 1984.
147. Reid, R. C., Prausnitz, J. M. and B. E. Poling: *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill, fourth edition, 1987.
148. Knetsch, T.: *Dynamische Modellierung eines Wärmetauschers und eines Kondensators als Grundlage für eine Fehlerfrüherkennung*, Otto-von-Guericke Universität, Fakultät für Maschinenbau, Institut für Apparate- und Umwelttechnik, Abteilung Anlagentechnik und Anlagensicherheit, Diplomarbeit 1997.
149. Cullen, A. C. and H. C. Frey: *Probabilistic Techniques in Exposure Assessment*, Plenum Press, New York, 1999.
150. Statistisches Bundesamt (Hrsg.): Bericht des Statistischen Bundesamtes zu den Umweltökonomischen Gesamtrechnungen (UGR) 2001
151. *Gesetz zur Ordnung des Wasserhaushalts (WHG)*, Stand: Neugefasst durch Bek. v. 19. 8.2002 I 3245.
152. Dohmann, M. : *Zukünftige Entwicklungen in der Abwassertechnik, Korrespondenz Abwasser*, 11 (1989), S. 1258-1279.
153. Wagner, W. : *Optimierung der Sicherheit und Zuverlässigkeit von Kläranlagen auf der Basis von Risikoanalysen*, Dissertation, Universität Kaiserslautern, Fachbereich Architektur/ Raum- und Umweltplanung/ Bauingenieurwesen, Kaiserslautern 1992.
154. DIN 4045: *Abwassertechnik Begriffe*, Beuth Verlag GmbH, Dezember 1985.
155. Günthert, F. W. und H. Teichmann: *Bemessung von kommunalen Kläranlagen*, Expert Verlag, 1998.
156. Bever, J.; Stein, A. und H. Teichmann: *Weitergehende Abwasserreinigung, Stickstoff- und Phosphorelimination, Sedimentation und Filtration*, R. Oldenbourg Verlag München Wien 1993.
157. Kappeler, J.; Gujer, W.: *Estimation of Kinetic Parameters of Heterotrophic Biomass under Aerobic Conditions and Characterization of Wastewater for Activated Sludge Modelling*, Wat. Sci. Tech. Vol. 25, No. 6, pp. 125-139, 1992.
158. Kroiss, H.: *Modell und Wirklichkeit in der Abwasserreinigung*, Wiener Mitteilungen, Band 137, S. 236-251, 1997.

159. Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen (LUA): *Simulation kommunaler Kläranlagen - Hinweise zur Anwendung der dynamischen Simulation am Beispiel von SIMBA*, Merkblätter Nr. 15, 1998.
160. International Association on Water Pollution Research and Control: Activated Sludge Model No.1, Scientific and Technical Reports No.1: IAWPRC Task Group on Mathematical Modelling for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment, London 1986.
161. Gujer, W.: Ein dynamisches Modell für die Simulation von komplexen Belebtschlammverfahren, EAWAG, Habilitationsschrift 1985.
162. Grady, Jr., C. P. L.; Gujer, W.; Henze, M.; Marais, G. v. R. and T. Matsuo: A model for single-sludge wastewater treatment systems, in: Henze, M. (Ed.): *Modelling of Biochemical Wastewater Treatment*, Wat. Sci. Tech., Vol. 18, No. 16, pp. 47-61, 1986.
163. Ante, A.; Besche, H.-U.; Voß, H.: Modellierung der Mikrokinetik der erhöhten biologischen Phosphatelimination, Fakultät Maschinenwesen, Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik, RWTH Aachen, 1993.
164. Longdong, J.; Kolisch, G.; Holthausen, E. und J. Alex: *Ein neuer Ansatz zur Ableitung von Modellstrukturen für die dynamische Simulation kommunaler Kläranlagen*, Korrespondenz Abwasser 45, Nr. 4, S. 717-723, 1998.
165. Nowak, O.: Ziele, Vorbedingungen und Grenzen der Anwendung der dynamischen Simulation, Wiener Mitteilungen, Band 137, S. 35-82, 1997.
166. Tschui, M.: Optimierung von Kläranlagen durch Anwendung dynamischer Simulationskonzepte, aqua-System ag, Winterthur 1990.
167. International Association on Water Pollution Research and Control: Activated Sludge Model No. 2, Scientific and Technical Reports No.3: IAWPRC Task Group on Mathematical Modelling for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment Processes, London 1995.
168. Henze, M.; Gujer, W.; Mino, T.; Matsuo, T.; Wentzel, M. and G. v. R. Marais: Van Loosdrecht, M. C. M.: *Activated Sludge Model No. 2d ASM2D*; Wat. Sci. Tech. Vol. 39, No. 1, pp. 165-182, 1999.
169. Gujer, W.; Henze, M. and T. Mino: Van Loosdrecht, M. C. M.: *Activated Sludge Model No. 3*; Wat. Sci. Tech. Vol. 39, No. 1, pp. 183-193, 1999.
170. ATV – Arbeitsbericht: Simulation von Kläranlagen, Korrespondenz Abwasser 44, S. 2064-2074, 1997.

171. Müller, V.: Modellkalibrierung anhand der Ergebnisse von halbtechnischen Versuchen, Wiener Mitteilungen, Band 137, S. 83-117, 1997.
172. Longdong, J. und P. Wachtl: Chemisch-biologische Untersuchungen als Grundlage für die Anwendung dynamischer Simulationsmodelle für Belebungsanlagen, AWT Abwassertechnik, Heft 2, S. 51-54, 1995.
173. Liebeskind, M.: Parameter für die dynamische Simulation kommunaler Abwasserreinigungsanlagen, Gewässerschutz, Wasser, Abwasser 171, Aachen 1999.
174. Moser, A.: Bioprocess Technologies: Kinetics and Reactors, Springer-Verlag, Wien 1988.
175. Ifak system GmbH, Benutzerhandbuch SIMBA® 3.4+, Simulation der biologischen Abwasserbehandlung, 2000.
176. Seibert-Erling, G.: Regelungstechnische Analyse einer Kläranlage, VDI Fortschrittsberichte, Reihe 15 Nr.100, 1992.
177. Henze, M.: *Characterisation of Wastewater for Modelling of Activated Sludge Processes*, Wat. Sci. Tech. Vol. 25, No. 6, pp. 1-15, 1992.
178. Bornemann, C.; Freund, M.; Longdong, J.; Nowak, O.; Otterpohl, R. und T. Rolfs: *Hinweise zur dynamischen Simulation von Belebungsanlagen mit dem Belebtschlammmodell Nr. 1 der IAWQ*, Korrespondenz Abwasser 45, Nr. 3, S. 455-462, 1998.
179. Abwassertechnische Vereinigung: Bemessung von einstufigen Belebungsanlagen; ATV – DVWK – A 131, 2000.
180. Härtel, L.: *Modellansätze zur dynamischen Simulation des Belebtschlammverfahrens*, Darmstadt: Schriftenreihe WAR, Band 47, 1990.
181. Hoffmann, J.: *MATLAB und SIMULINK, Beispielorientierte Einführung in die Simulation dynamischer Systeme*, Addison-Wesley-Longmann, 1998.
182. Benker, H.: *Statistik mit MATHCAD und MATLAB, Einführung in die Wahrscheinlichkeitsrechnung und mathematische Statistik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 2001.

## Anhang

### **A1 Verteilungen und Transformationsgleichungen**

Folgend sind die verwandten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen und die jeweilige Transformationsgleichungen, um die entsprechenden Zufallswerte zu generieren, angegeben. Die Voraussetzung zur Anwendung der Transformationsgleichung ist, dass es sich bei  $Z_{n,1}$ ,  $Z_{n,2}$  und  $Z_{n,3}$  um drei von einander unabhängige, zwischen  $[0,1]$  gleich verteilte Zufallszahlen handelt. [126] Hier steht  $n$  für das  $n$ -te Spiel. Die Erzeugung der Zufallszahlen  $Z_{n,1}$ ,  $Z_{n,2}$  und  $Z_{n,3}$  erfolgt wie in Abschnitt 2.3.3 beschrieben. Es wird dazu der Befehl „rand“ in MATLAB verwendet, dem die Kongruenzmethode hinterlegt ist. [133] Die Parameter der Verteilungen die mittels MLE ermittelt werden, sind hier nicht explizit aufgeführt. Diese sind in dem weiterentwickelten MATLAB Programm ANPA2 enthalten. Das Programm bedient sich dabei zum großen Teil der hinterlegten Funktionen 'Verteilung'fit der Statistik Toolbox. Für nähere Erläuterungen wird auf MATLAB Fachliteratur verwiesen, z. B. [182]. Auch kann anstelle der Transformationsgleichungen oftmals die ebenfalls in der Toolbox enthaltenen Zufallszahlengeneratoren verwandt werden. Dieses ist insbesondere für die Generierung von Gamma verteilten Zufallszahlen praktisch.

#### **1. Normalverteilung**

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) der Normalverteilung ist gegeben durch

$$f(x) = \frac{1}{s\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(x - \mu)^2}{2s^2}\right) \quad x > 0 \quad (\text{A-1})$$

In Gl (A-1) ist  $\mu$  der Mittelwert von  $x$ , und  $s^2$  ist die entsprechende Varianz. Mit Gleichung (A-2) werden die entsprechenden Realisierungen bestimmt.

$$X_n = \left(\sqrt{-2 \cdot \ln Z_{n,1}} \cdot \cos(2\pi \cdot \ln Z_{n,2})\right) \cdot s_{\text{normal}} + \mu_{\text{normal}} \quad n=1, \dots, N \quad (\text{A-2})$$

## 2. Log-Normalverteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) der Log-Normalverteilung ist gegeben durch

$$f(x) = \frac{1}{sx\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(\ln x - \mu)^2}{2s^2}\right) \quad x > 0 \quad (\text{A-3})$$

In Gl (A-3) ist  $\mu$  der Mittelwert der Logarithmen von  $x$ , und  $s^2$  ist die entsprechende Varianz. Mit Gleichung (A-4) wird der entsprechende Zufallswert bestimmt.

$$X_n = \exp\left(\left(\sqrt{-2 \cdot \ln Z_{n,1}} \cdot \cos(2\pi \cdot \ln Z_{n,2})\right) \cdot s_{\log-n} + \mu_{\log-n}\right) \quad n=1, \dots, N \quad (\text{A-4})$$

## 3. Weibullverteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) Weibull verteilter Daten lautet.

$$f(x) = \eta \cdot b(\eta \cdot x)^{b-1} \exp\left(-(\eta \cdot x)^b\right) \quad (\text{A-5})$$

In Gl. (A-5) ist  $\eta$  der Maßstab- und  $b$  der Formparameter der Verteilung. Der entsprechende Zufallswert wird gemäß Gl. (A-6) bestimmt.

$$X_n = \frac{1}{\eta} \left(-\ln Z_{n,1}\right)^{1/b} \quad n=1, \dots, N \quad (\text{A-6})$$

## 4. Gamma-Verteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) für Gamma verteilte Daten lautet.

$$f(x) = \frac{\lambda^k x^{k-1} \exp(-\lambda x)}{\Gamma(k)}, \quad 0 \leq x \leq \infty, \lambda, b > 0 \quad (\text{A-7})$$

Wobei  $\lambda$  der Maßstab- und  $b$  der Formparameter der Verteilung ist. Die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion benötigt einen Wert für die Gammafunktion  $\Gamma(k)$ , der für ganzzahlige  $k$  gleich  $(k-1)!$  ist. Bei anderen Werten für  $k$  muss man entweder numerische Routinen oder Tabellen verwenden. Der entsprechende Zufallswert wird gemäß der nachfolgend beschriebenen Routine bestimmt. Es sind dabei drei Fälle zu unterscheiden, die dann eine unterschiedliche Vorgehensweise bedingen.

Fall 1,  $k$  ist ganzzahlig:

$$X_n = -\frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^k \ln Z_{n,1} \quad (\text{A-8})$$

Fall 2,  $k$  ist nicht ganzzahlig und kleiner 1:

1. Schritt: Bildung der Zufallszahlen  $Z_{n,1}$ ,  $Z_{n,2}$  und  $Z_{n,3}$
2. Schritt: Prüfen, ob  $Z_{n,1}^{1/k} + Z_{n,2}^{1/(1-k)} \leq 1$ , falls nein zurück zu Schritt 1, sonst Schritt 3

$$3. \text{ Schritt: } X_n = \frac{1}{\lambda} (-\ln Z_{n,3}) \frac{Z_{n,1}^{1/k}}{Z_{n,1}^{1/k} + Z_{n,2}^{1/(1-k)}} \quad (\text{A-9})$$

Fall 3,  $k$  ist nicht ganzzahlig und größer 1:

Dann generiert man ein  $X_1$  mit  $\lambda$  und einem ganzzahligen  $k_1$  nach Gl. (A-8) und ein  $X_2$  mit  $\lambda$  und einem nicht ganzzahligen  $k_2$ , wobei  $k_2 < 1$  ist, nach Gl. (A-9). Durch Addition von  $X_1$  und  $X_2$  erhält man die gewünschte Zufallsvariable  $X$ .

$$X = X_1 + X_2, \text{ mit } \lambda \text{ und } k = k_1 + k_2$$

## 5. Beta Verteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) der Beta Verteilung ist gegeben durch:

$$f(x) = \frac{1}{B(c,d)} x^{c-1} (1-x)^{d-1}; \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (\text{A-10})$$

$$\text{wobei } B(c,d) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(d)}{\Gamma(c+d)}.$$

Dabei sind  $c$  und  $d$  die Parameter der Verteilung. Die Zufallszahlen werden gemäß dem folgenden Algorithmus erzeugt.

1. Schritt: Bildung der Zufallszahlen  $Z_{n,1}$  und  $Z_{n,2}$
2. Schritt: Prüfen, ob  $Z_{n,1}^{1/c} + Z_{n,2}^{1/d} \leq 1$ , falls nein zurück zu Schritt 1, sonst Schritt 3
3. Schritt:  $X_n = \frac{Z_{n,1}^{1/c}}{Z_{n,1}^{1/c} + Z_{n,2}^{1/d}}$  (A-11)

## 6. Gleich- oder Rechteck-Verteilung

Weiterhin wurde die konstante Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) für einige Parameter verwendet, die wie folgt lautet:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & \text{wenn } b \geq x \geq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A-12})$$

Die Parameter  $b$  und  $a$  stellen den oberen und den unteren beobachteten Grenzwert dar. Die entsprechenden Zufallswerte werden mit Gl. (A-13) berechnet.

$$X_n = a + (b - a) \cdot Z_{n,1} \quad n=1, \dots, N \quad (\text{A-13})$$

## 7. Dreieckverteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) der Dreieck Verteilung ist gegeben durch Gl. (A–14). Die aus der Dreieck Verteilung abgewandelte Rechtseitige Dreieckverteilung, die zu Beschreibung von Werten angewandt wurde, wird durch die Gl. (A–17) beschrieben.

$$f(x) = \begin{cases} \frac{b - |x - a|}{b^2}; & \text{wenn } a - b \leq x \leq a + b \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A–14})$$

Die Parameter  $b$  und  $a$  stellen den oberen und den unteren beobachteten Grenzwert dar. Die entsprechenden Zufallswerte werden je nach Wert der erzeugten Zufallszahl  $Z_{n,1}$  mit Gl. (A–15) oder Gl. (A–16) erzeugt.

$$X_n = a - b + b(2Z_{n,1})^{1/2}; \quad 0 \leq Z_{n,1} \leq 0,5 \quad (\text{A–15})$$

$$X_n = a + b - b(2 - 2Z_{n,1})^{1/2}; \quad 0,5 \leq Z_{n,1} \leq 1,0 \quad (\text{A–16})$$

### bzw. Rechtsseitige Dreieckverteilung

$$f(x) = \begin{cases} \frac{2 \cdot b}{(b - a)^2} - \frac{2 \cdot x}{(b - a)^2}, & \text{wenn } b \geq x \geq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A–17})$$

Die Parameter  $b$  und  $a$  stellen den oberen und den unteren beobachteten Grenzwert dar. Die entsprechenden Zufallswerte werden mit Gl. (A–18) erzeugt.

$$X_n = b + (a - b) \cdot \sqrt{1 - Z_{n,1}} \quad (\text{A–18})$$

## 8. Exponentialverteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) für exponential verteilte Daten lautet:

$$f(x) = \lambda \exp(-\lambda x) \quad 0 \leq x \leq \infty \quad (\text{A-19})$$

Dabei ist  $\lambda$  der Parameter der Verteilung. Die Zufallswerte werden nach der folgenden Gleichung bestimmt.

$$X_n = -\frac{1}{\lambda} \ln Z_{n,1} \quad (\text{A-20})$$

## 9. Dirichlet Verteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) für Dirichlet verteilte Daten lautet:

$$f(x_1, \dots, x_{K+1}) = \Gamma(\Theta) \cdot \prod_{k=1}^{K+1} \left( \frac{x_k^{\Theta_k - 1}}{\Gamma(\Theta_k)} \right); \quad \sum_{k=1}^{K+1} x_k = 1; \quad \sum_{k=1}^{K+1} \Theta_k = \Theta \quad (\text{A-21})$$

Dirichlet Verteilte Zufallszahlen erhält man mittels der Gammaverteilter Zufallszahlen mit  $\lambda = 1$ , (siehe Gl. (A-8) und (A-9)) die für jedes  $x_c$  erzeugt und dann normiert werden, d. h.

$$X_{k,n} = \frac{\Gamma_{k,n}}{\sum_{k=1}^{K+1} \Gamma_{k,n}} \quad n = 1, \dots, N \quad (\text{A-22})$$

Wobei  $n$  eine  $\Gamma_{c,n}$  eine Gamma verteilte Zufallszahl ist.

## A2 Daten und Tabellen zum Wärmetauscher

Tabelle A 1: Stoffdaten der Komponenten bei  $T = 131,9^\circ\text{C}$  und  $p = 19,4 \text{ bar}$

	H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	CO	N <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	O <sub>2</sub>
$c_p$ [kJ/kg-K]	14,51	2,61	2,00	2,09	1,07	1,06	1,00	2,31	0,96
$\lambda$ [kg/m <sup>3</sup> ]	1,15	9,29	16,79	27,18	15,99	16,00	26,15	18,28	18,39
$\rho$ [W/(m K)]	0,23	0,05	0,04	0,03	0,03	0,03	0,03	0,04	0,04
$\eta$ [Pa s]	1,10E-5	1,43E-5	1,35E-5	1,16E-5	2,22E-5	2,24E-5	1,98E-5	1,23E-5	2,59E-5
$\tilde{M}$ [kg/kmol]	2,02	16,04	28,05	42,08	28,01	28,01	44,01	30,07	32,00

Im Folgenden sind die Bilder für die Parameter  $\bar{\lambda}_i$ ,  $\bar{\eta}_i$  und  $\bar{\rho}_i$  aufgeführt.

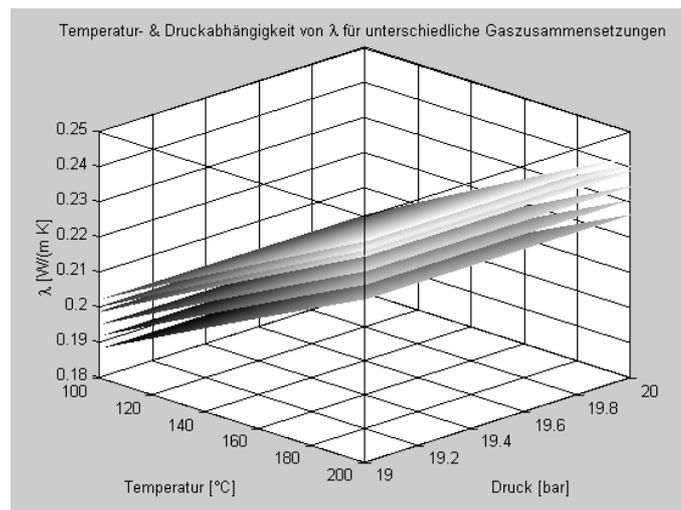
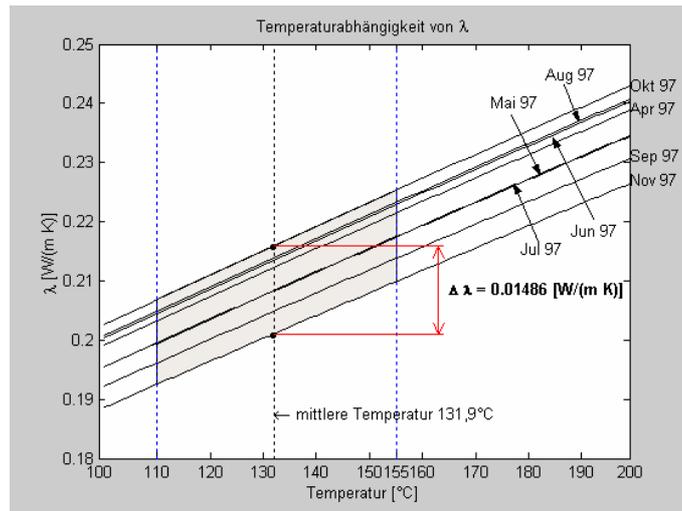
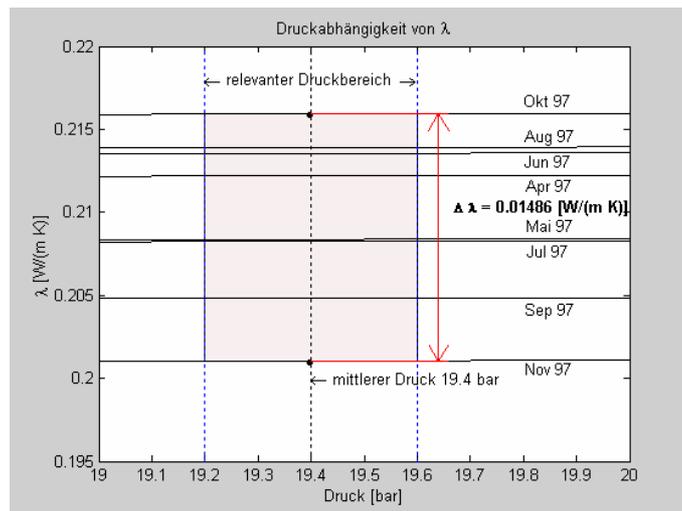


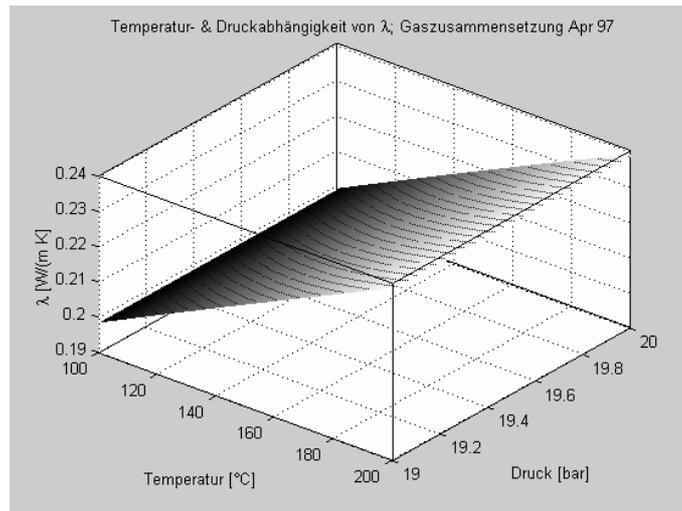
Bild A 1: Wärmeleitfähigkeit des Gasmisches  $\bar{\lambda}_i$  aufgetragen über Temperatur und Druck für unterschiedliche Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2



**Bild A 2:** Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches  $\overline{\lambda}_i$  aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2

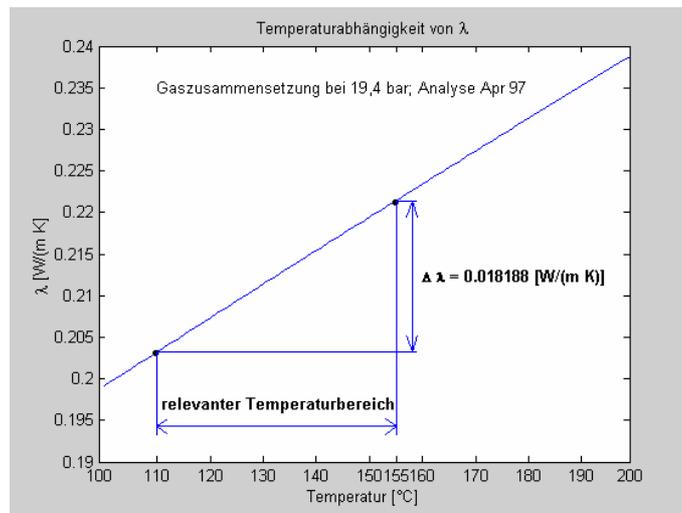


**Bild A 3:** Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches  $\overline{\lambda}_i$  aufgetragen über den Druck, bei einer Temperatur von 131,9°C, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2

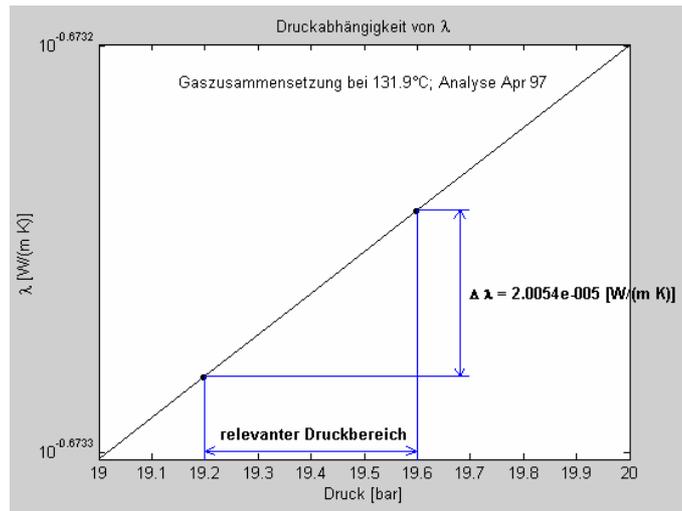


**Bild A 4: Darstellung der Temperatur- und Druckabhängigkeit für die Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches  $\bar{\lambda}_i$  (Messung April 1997)**

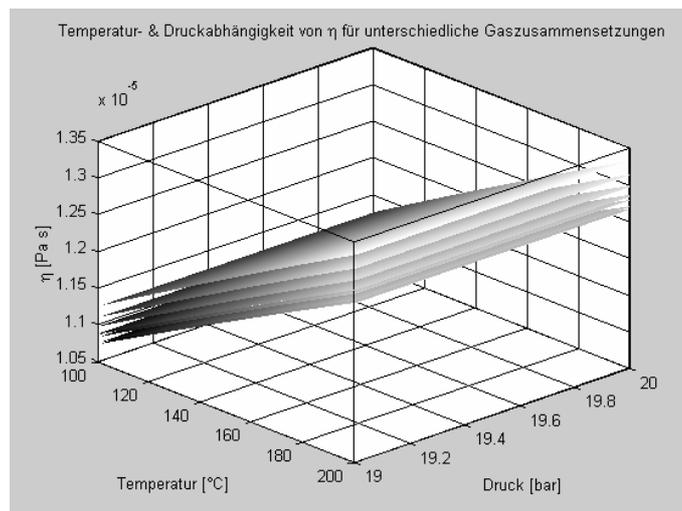
Das Bild folgende verdeutlicht noch einmal den Einfluss der Temperatur auf  $\bar{\lambda}_i$ .



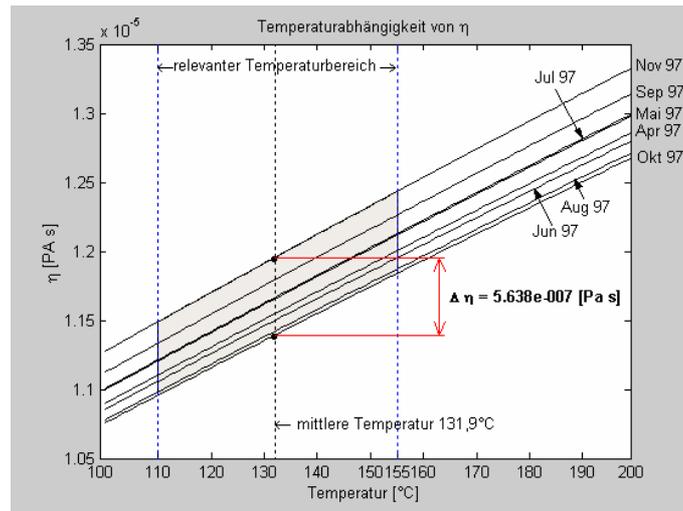
**Bild A 5: Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches  $\bar{\lambda}_i$  aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2**



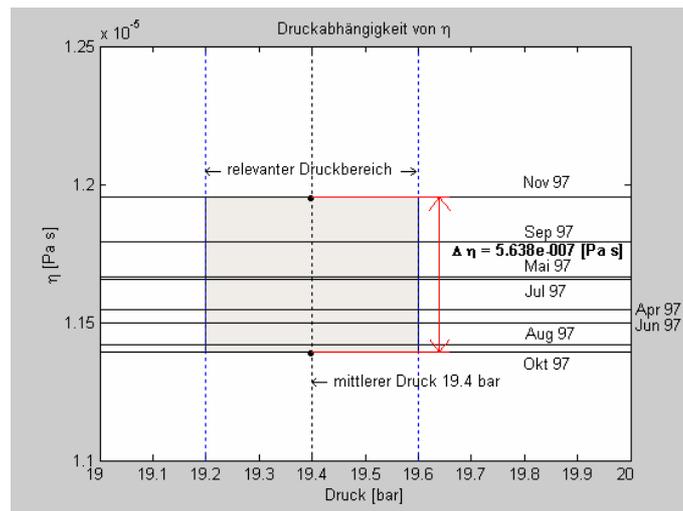
**Bild A 6: Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches  $\overline{\lambda}_i$  aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2**



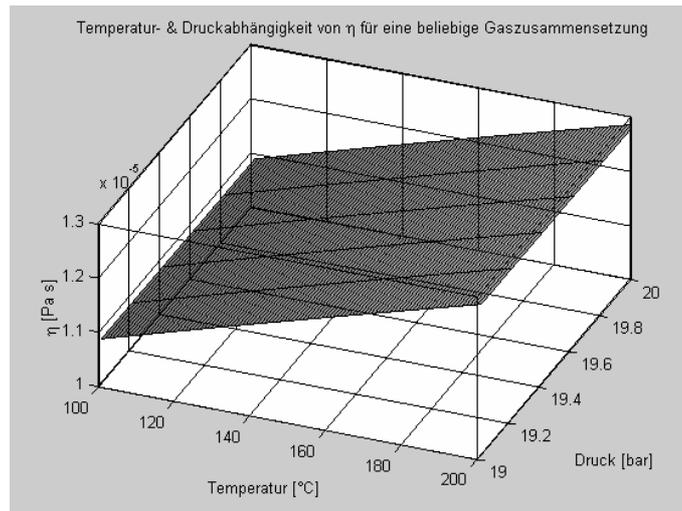
**Bild A 7: Dynamische Viskosität des Gasgemisches  $\overline{\eta}_i$  aufgetragen über Temperatur und Druck für unterschiedliche Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2**



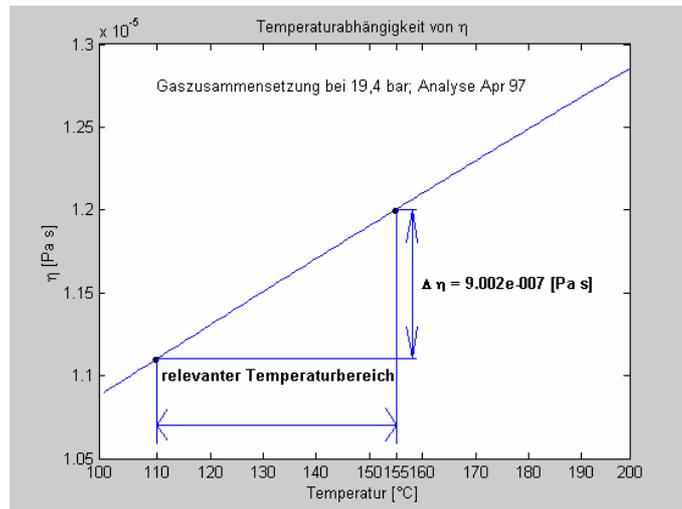
**Bild A 8: Dynamische Viskosität des Gasgemisches  $\eta_i$  aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2**



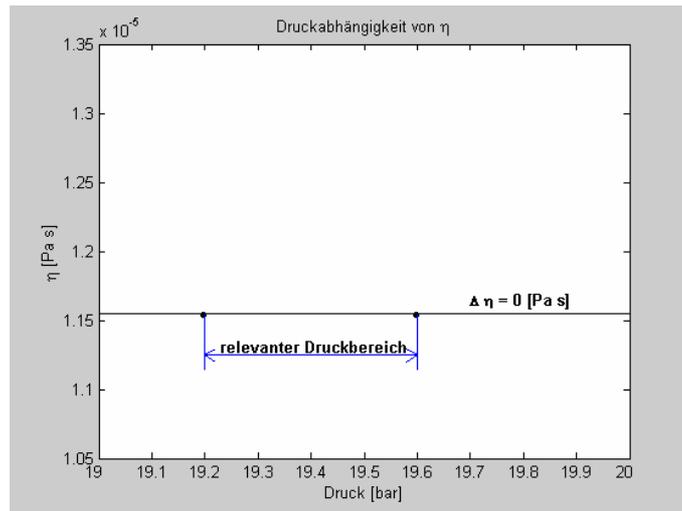
**Bild A 9: Dynamische Viskosität des Gasgemisches  $\eta_i$  aufgetragen über den Druck, bei einer Temperatur von 131,9°C, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2**



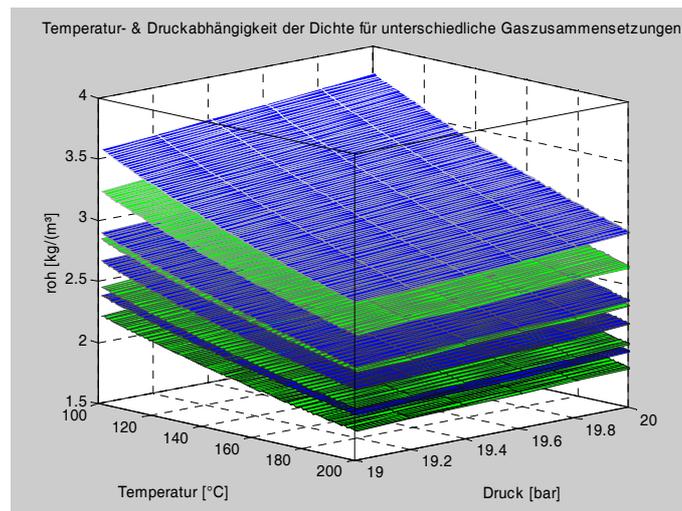
**Bild A 10: Darstellung der Temperatur- und Druckabhängigkeit für die Dynamische Viskosität des Gasgemisches  $\eta_i$  (Messung April 1997)**



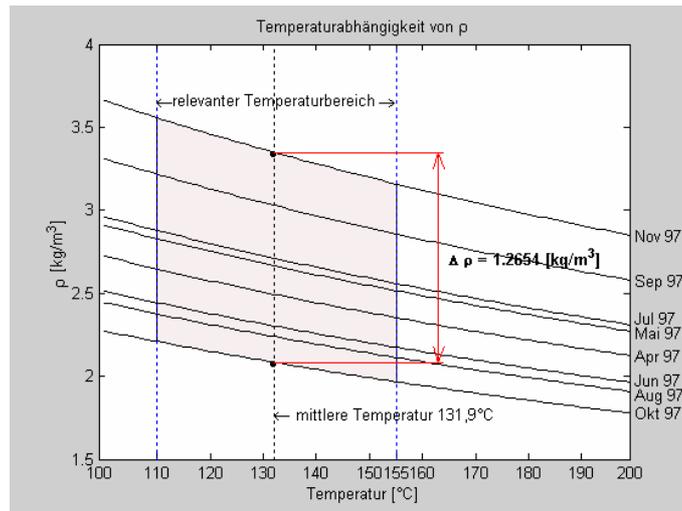
**Bild A 11: Dynamische Viskosität des Gasgemisches  $\eta_i$  aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2**



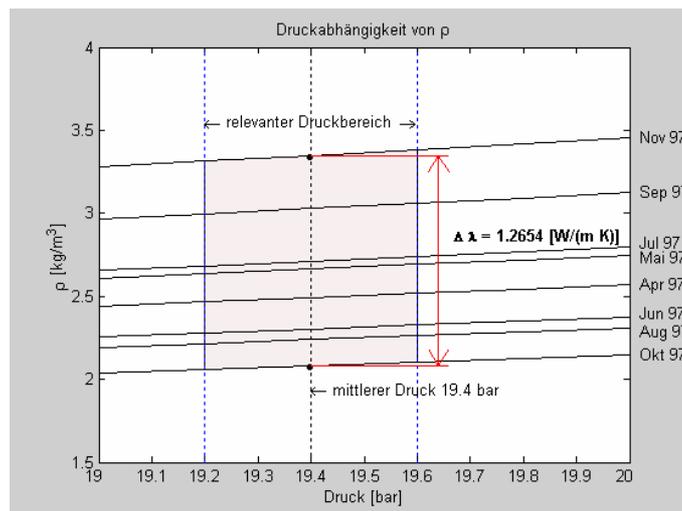
**Bild A 12:** Dynamische Viskosität des Gasgemisches  $\bar{\eta}_i$  aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2



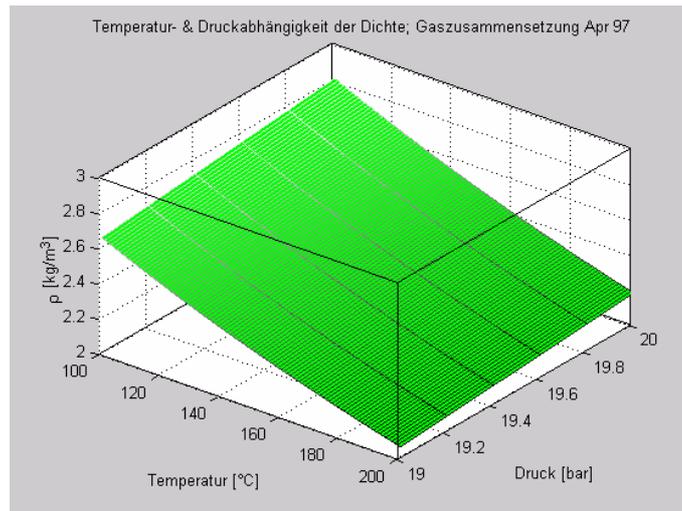
**Bild A 13:** Dichte des aufzuheizenden Gasgemisches  $\bar{\rho}_i$  aufgetragen über Temperatur und Druck für unterschiedliche Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2



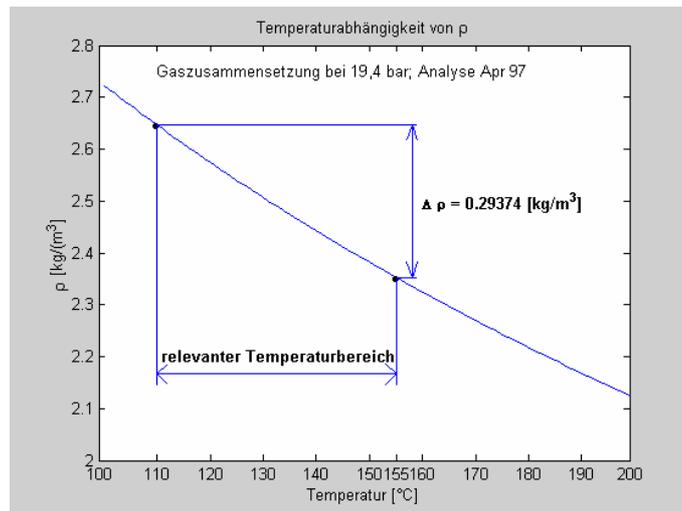
**Bild A 14:** Dichte des aufzuheizenden Gasgemisches  $\overline{\rho}_i$  aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2



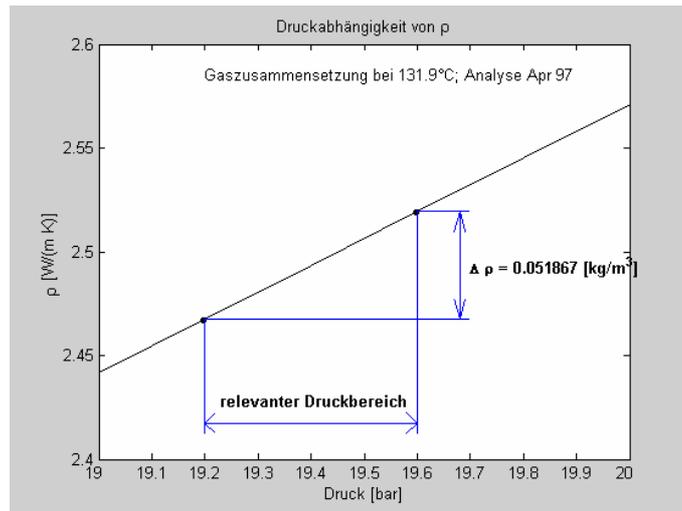
**Bild A 15:** Dichte des aufzuheizenden Gasgemisches  $\overline{\rho}_i$  aufgetragen über den Druck, bei einer Temperatur von 131,9°C, bei unterschiedlichen Zusammensetzungen, siehe Tabelle 4-2



**Bild A 16:** Darstellung der Temperatur- und Druckabhängigkeit für die Dichte des aufzuheizenden Gasmisches  $\bar{\rho}_i$  (Messung April 1997)



**Bild A 17:** Dichte des aufzuheizenden Gasmisches  $\bar{\rho}_i$  aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2



**Bild A 18:** Dichte des aufzuheizenden Gasgemisches  $\bar{\rho}_i$  aufgetragen über der Temperatur, bei einem Druck von 19,4 bar, bei der Gaszusammensetzung vom April 1997, siehe Tabelle 4-2

### **A3 Daten und Tabellen zur Kläranlage**

Weitergehende Informationen zum ASM 1:

Folgende acht biologische Prozesse beeinflussen die Konzentrationen der in Tabelle 5-2 aufgeführten Stoffgruppen.

Stoffgruppen:

1. Aerobes Wachstum heterotropher Biomasse
2. Anoxisches Wachstum heterotropher Biomasse (Denitrifikation)
3. Aerobes Wachstum autotropher Biomasse (Nitrifikation)
4. Ammonifikation
5. Abbau heterotropher Biomasse
6. Abbau autotropher Biomasse
7. Hydrolyse partikulärer organischer Verbindungen
8. Hydrolyse der Stickstoffverbindungen

Die in Bild 5-6 veranschaulichten Beziehungen zwischen den Stoffgruppen und Prozessen des ASM 1 sind in Tabelle A 2 zusammengefasst. Die daraus resultierenden Differentialgleichungen zur Beschreibung der zeitlichen Konzentrationsänderungen der 13 betrachteten Stoffgruppen sind in Tabelle A 3 aufgeführt.

Zur übersichtlichen Darstellung der im ASM 1 enthaltenen Stoffgruppen und Prozesse sowie im Hinblick auf die Umsetzung des Modellansatzes in ein Simulationsprogramm wurde eine spezielle Matrixschreibweise entwickelt. In Tabelle A 4 ist das ASM 1 in dieser Schreibweise dargestellt [160, 162]. Die kinetischen Ausdrücke zur Beschreibung der Reaktionsgeschwindigkeiten der im Modellansatz erfassten Umsetzungsvorgänge werden als Prozessgeschwindigkeiten  $p_j$  bezeichnet. In der äußeren rechten Spalte (Tabelle A 4) sind die Ausdrücke für die Prozessgeschwindigkeiten  $p_j$  des in der jeweiligen Zeile angeordneten Prozesses aufgeführt. Die grundlegende Bedeutung der Monod-Kinetik für das ASM 1 spiegelt

sich deutlich in diesen Formulierungen wider. Bei Prozessen, für die mehrere Substrate limitierend sind (z. B. Prozess 2) bzw. bei denen eine Sauerstofflimitierung vorliegt (z. B. Prozess 1), werden in dem entsprechenden Ausdruck für die Prozessgeschwindigkeit die Monod-Terme der limitierend wirkenden Stoffgruppen multiplikativ miteinander verknüpft. Für die Abbauprozesse der autotrophen bzw. heterotrophen Biomasse werden einfache lineare Beziehungen (Absterberate) angesetzt.

Aus der Matrix (Tabelle A 4) lässt sich für jede der im Modell definierten Stoffgruppen die Gleichung für die beobachtete Umwandlungsgeschwindigkeit  $r_i$  ableiten. Die dazu erforderliche Vorgehensweise wird am Beispiel der autotrophen Biomasse  $X_{BA}$  demonstriert. Die Stoffgruppe  $X_{BA}$  ist in Spalte 6 der Matrix angeordnet. Innerhalb dieser Spalte finden sich lediglich in den Zeilen 3 und 5 Einträge. Damit wird die Konzentration der autotrophen Biomasse lediglich durch die in den genannten Zeilen eingetragenen Prozesse beeinflusst. Das aerobe Wachstum der autotrophen Biomasse (Zeile 3) führt zu einer Zunahme der Stoffgruppe  $X_{BA}$  mit dem stöchiometrischen Faktor  $n_{j,i} = +1$  (im Schnittpunkt von Zeile 3 und Spalte 6), wohingegen der Abbau der autotrophen Biomasse (Zeile 5) eine Abnahme der Stoffgruppe  $X_{BA}$  mit dem stöchiometrischen Faktor  $n_{j,i} = -1$  bewirkt (im Schnittpunkt von Zeile 5 und Spalte 6).

**Tabelle A 2: Zusammenhänge zwischen den im ASM 1 und modifizierten ASM 1 [179] definierten Stoffgruppen und Prozessen**

Stoffgruppe i	Prozesse, die zur Zunahme der Konzentration der Stoffgruppe i führen	Prozesse, die zur Abnahme der Konzentration der Stoffgruppe i führen
$S_i$	- (inerte Stoffgruppe)	- (inerte Stoffgruppe)
$S_s$	<ul style="list-style-type: none"> <li>Hydrolyse partikulärer organischer Verbindungen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Aerobes Wachstum heterotropher Biomasse</li> <li>Anoxisches Wachstum heterotropher Biomasse</li> </ul>
$X_i$	- (inerte Stoffgruppe)	- (inerte Stoffgruppe)
$X_s$	<ul style="list-style-type: none"> <li>Abbau heterotropher Biomasse</li> <li>Abbau autotropher Biomasse</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Hydrolyse partikulärer organischer Verbindungen</li> </ul>
$X_{BH}$	<ul style="list-style-type: none"> <li>Aerobes Wachstum heterotropher Biomasse</li> <li>Anoxisches Wachstum heterotropher Biomasse</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Abbau heterotropher Biomasse</li> </ul>
$X_{BA}$	<ul style="list-style-type: none"> <li>Aerobes Wachstum autotropher Biomasse</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Abbau autotropher Biomasse</li> </ul>

Stoffgruppe i	Prozesse, die zur Zunahme der Konzentration der Stoffgruppe i führen	Prozesse, die zur Abnahme der Konzentration der Stoffgruppe i führen
$X_P$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Abbau heterotropher Biomasse</li> <li>• Abbau autotropher Biomasse</li> </ul>	
$S_O$		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aerobes Wachstum heterotropher Biomasse</li> <li>• Aerobes Wachstum autotropher Biomasse</li> </ul>
$S_{NO}$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aerobes Wachstum autotropher Biomasse</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Anoxisches Wachstum heterotropher Biomasse</li> </ul>
$S_{NH}$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ammonifikation</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aerobes Wachstum heterotropher Biomasse</li> <li>• Anoxisches Wachstum heterotropher Biomasse</li> <li>• Aerobes Wachstum autotropher Biomasse</li> </ul>
$S_{ND}$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Hydrolyse partikulärer organischer N-Verbindungen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ammonifikation</li> </ul>
$X_{ND}$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Abbau heterotropher Biomasse</li> <li>• Abbau autotropher Biomasse</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Hydrolyse partikulärer organischer N-Verbindungen</li> </ul>
$S_{ALK}$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Anoxisches Wachstum heterotropher Biomasse</li> <li>• Ammonifikation</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aerobes Wachstum heterotropher Biomasse</li> <li>• Aerobes Wachstum autotropher Biomasse</li> </ul>

**Tabelle A 3: Differentialgleichungen für die Umsetzungen der im ASM 1 [179] definierten Stoffgruppen**

Stoffgruppe i	Beobachtete Umwandlungsgeschwindigkeit $r_i$ (bezogen auf den Originalansatz ASM 1)
$S_i$	$r_{S_i} = \frac{dS_i}{dt} = 0$ (inerte Stoffgruppe)
$S_S$	$r_{S_S} = \frac{dS_S}{dt} = - \left[ \frac{1}{Y_H} \cdot \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot X_{BH} \right] - \left[ \frac{1}{Y_H} \cdot \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \cdot \eta_g \cdot X_{BH} \right] + \left\{ k_H \cdot \frac{X_S / X_{BH}}{K_X + X_S / X_{BH}} \cdot \left[ \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_H \cdot \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] \cdot X_{BH} \right\}$
$X_i$	$r_{X_i} = \frac{dX_i}{dt} = 0$ (inerte Stoffgruppe)
$X_S$	$r_{X_S} = \frac{dX_S}{dt} = [(1-f_P) \cdot b_H \cdot X_{BH}] - [(1-f_P) \cdot b_A \cdot X_{BA}] - \left\{ k_H \cdot \frac{X_S / X_{BH}}{K_X + X_S / X_{BH}} \cdot \left[ \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_H \cdot \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] \cdot X_{BH} \right\}$
$X_{BH}$	$r_{X_{BH}} = \frac{dX_{BH}}{dt} = \left[ \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot X_{BH} \right] + \left[ \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \cdot \eta_g \cdot X_{BH} \right] - [b_H \cdot X_{BH}]$
$X_{BA}$	$r_{X_{BA}} = \frac{dX_{BA}}{dt} = \left[ \mu_A \cdot \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) \cdot X_{BA} \right] - [b_A \cdot X_{BA}]$
$X_P$	$r_{X_P} = \frac{dX_P}{dt} = [f_P \cdot b_H \cdot X_{BH}] - [f_P \cdot b_A \cdot X_{BA}]$
$S_O$	$r_{S_O} = \frac{dS_O}{dt} = - \left[ \left( \frac{1-Y_H}{Y_H} \right) \cdot \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot X_{BH} \right] \left[ \left( \frac{4,57-Y_H}{Y_H} \right) \cdot \mu_A \cdot \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) \cdot X_{BA} \right]$
$S_{NO}$	$r_{S_{NO}} = \frac{dS_{NO}}{dt} = - \left[ \left( \frac{1-Y_H}{2,86 \cdot Y_H} \right) \cdot \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{O,H} + S_{NO}} \right) \cdot \eta_g \cdot X_{BH} \right] + \left[ \left( \frac{1}{Y_A} \right) \cdot \mu_A \cdot \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) \cdot X_{BA} \right]$
$S_{NH}$	$r_{S_{NH}} = \frac{dS_{NH}}{dt} = - \left[ (i_{XB}) \cdot \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot X_{BH} \right] - \left[ (i_{XB}) \cdot \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \cdot \eta_g \cdot X_{BH} \right] + \left[ \left( i_{XB} \cdot \frac{1}{Y_A} \right) \cdot \mu_A \cdot \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) \cdot X_{BA} \right] + [k_A \cdot S_{ND} \cdot X_{BH}]$
$S_{ND}$	$r_{S_{ND}} = \frac{dS_{ND}}{dt} = - [k_A \cdot S_{ND} \cdot X_{BH}] + \left\{ k_H \cdot \frac{X_S / X_{BH}}{K_X + X_S / X_{BH}} \cdot \left[ \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_H \cdot \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] \cdot X_{BH} \cdot \left( \frac{X_{ND}}{X_S} \right) \right\}$
$X_{ND}$	$r_{X_{ND}} = \frac{dX_{ND}}{dt} = [(i_{XB} - f_P \cdot i_{XP}) \cdot (b_H \cdot X_{BH})] + [(i_{XB} - f_P \cdot i_{XP}) \cdot (b_A \cdot X_{BA})]$
$S_{ALK}$	$r_{S_{ALK}} = \frac{dS_{ALK}}{dt} = \left[ \left( \frac{i_{XB}}{14} \right) \cdot \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot X_{BH} \right] + \left[ \left( \frac{1-Y_H}{14 \cdot 2,86 \cdot Y_H} - \frac{i_{XB}}{14} \right) \cdot \mu_H \cdot \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \cdot \left( \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \cdot \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \cdot \eta_g \cdot X_{BH} \right] \cdot \left[ \frac{1}{14} \cdot k_A \cdot S_{ND} \cdot X_{BH} \right]$

**Tabelle A 4: Darstellung des Modellansatzes ASM 1 in der Matrixschreibweise [160, 162]**

Stoffgruppe →	i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Prozessgeschwindigkeit $\rho_j$ [ML <sup>-3</sup> T <sup>-3</sup> ]
j Process ↓	S <sub>I</sub>	S <sub>S</sub>	X <sub>I</sub>	X <sub>S</sub>	X <sub>B,H</sub>	X <sub>B,A</sub>	X <sub>P</sub>	S <sub>O</sub>	S <sub>NO</sub>	S <sub>NH</sub>	S <sub>ND</sub>	X <sub>ND</sub>	S <sub>ALK</sub>		
1 Aerobes Wachstum von X <sub>BH</sub>		$\frac{1}{Y_H}$				1			$-\frac{(1-Y_H)}{Y_H}$					$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\mu_H \cdot \left(\frac{S_S}{K_S+S_S}\right) \cdot \left(\frac{S_O}{K_{O,H}+S_O}\right) \cdot X_{BH}$
2 Anoxisches Wachstum von X <sub>BH</sub>		$\frac{1}{Y_H}$				1			$-\frac{(1-Y_H)}{2,86 Y_H}$					$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\mu_H \cdot \left(\frac{S_S}{K_S+S_S}\right) \cdot \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H}+S_O}\right) \cdot \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO}+S_{NO}}\right) \cdot \eta_g \cdot X_{BH}$
3 Aerobes Wachstum von X <sub>BA</sub>							1		$-\frac{(4,56-Y_A)}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$				$-\frac{i_{XB}}{14} - \frac{1}{7Y_A}$	$\mu_A \cdot \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH}+S_{NH}}\right) \cdot \left(\frac{S_O}{K_{O,A}+S_O}\right) \cdot X_{BA}$
4 Abbau von X <sub>BH</sub>					1-f <sub>p</sub>	-1		f <sub>p</sub>						$-i_{XB} - f_p i_{XP}$	$b_H X_{B,H}$
5 Abbau von X <sub>BA</sub>					1-f <sub>p</sub>		-1	f <sub>p</sub>						$-i_{XB} - f_p i_{XP}$	$b_A X_{B,A}$
6 Ammonifikation											1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$
7 Hydrolyse partikulärer organischer Verbindungen		1			-1										$k_H \cdot \frac{X_S/X_{BH}}{K_X+X_S/X_{BH}} \cdot \left[ \left(\frac{S_O}{K_{O,H}+S_O}\right) + \eta_H \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H}+S_O}\right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO}+S_{NO}}\right) \right]$
8 Hydrolyse partikulärer organischer Stickstoffverbindungen												1	-1		$\rho_7 (X_{ND} / X_S)$
Umwandlungsrate [ML <sup>-3</sup> T <sup>-1</sup> ]	$r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$														

**Tabelle A 5: Stöchiometrische und kinetische Parameter ASM1 unter Berücksichtigung der stochastischen Effekte und Datenunsicherheiten**

		Verteilungstyp	Punktwert	$\mu$	s	$\eta$	a	b
$Y_H$	Fall 1-4	Punktwert	0,19					
$Y_A$	Fall 1-4	Punktwert	0,24					
$i_{XB}$	Fall 1-4	Punktwert	0,086					
$i_{XP}$	Fall 1-4	Punktwert	0,06					
$f_p$	Fall 1-4	Punktwert	0,08					
$G_{\mu H}^*$	Fall 1&3	Punktwert	6					
	Fall 2&4	Weibull				0,138554		8,9972
$K_S$	Fall 1&3	Punktwert	20					
	Fall 2&4	log-normal		1,5432	0,7518			
$K_{O,H}$	Fall 1&3	Punktwert	0,2					
	Fall 2&4	Rechteck					0,2	0,5
$K_{NO}$	Fall 1-4	Punktwert	0,5					
$G_{bH}^*$	Fall 1&3	Punktwert	0,62					
	Fall 2&4	Rechteck					0,19	0,62
$G_{bA}^*$	Fall 1&3	Punktwert	0,15					
	Fall 2&4	Rechteck					0,05	0,15
$\eta_g$	Fall 1&3	Punktwert	0,8					
	Fall 2&4	Rechteck					0,4	1,0
$\eta_h$	Fall 1&3	Punktwert	0,4					
	Fall 2&4	Rechteck					0,5	0,7
$G_{kh}^*$	Fall 1&3	Punktwert	3					
	Fall 2&4	Rechteck					1,0	10
$G_{KX}^*$	Fall 1&3	Punktwert	0,03					
	Fall 2&4	Rechteck					0,01	0,033
$G_{\mu A}^*$	Fall 1&3	Punktwert	0,8					
	Fall 2&4	Rechteck					0,78	0,88
$K_{NH}$	Fall 1&3	Punktwert	1,0					
	Fall 2&4	log-normal		-0,71431	0,89967			
$K_{O,A}$	Fall 1&3	Punktwert	0,4					
	Fall 2&4	Rechteck					0,3	0,6
$G_{ka}^*$	Fall 1-4	Punktwert	0,08					
$K_{ALK,H}$	Fall 1-4	Punktwert	0,1					
$K_{ALK,A}$	Fall 1-4	Punktwert	0,25					
$K_{O,AN}$	Fall 1-4	Punktwert	0,2					
$\eta_{H,AN}$	Fall 1-4	Punktwert	0,65					
$K_{NHNO}$	Fall 1-4	Punktwert	0,1					

\* Die Parameter  $\mu_H$ ,  $b_H$ ,  $b_A$ ,  $k_h$ ,  $K_X$ ,  $\mu_A$ ,  $k_A$  sind Funktionen (siehe allgemeiner Ansatz und die dazugehörigen Werte Tabelle A 8)

**Tabelle A 6: Regen- und Temperaturwerte im BLB unter Berücksichtigung der stochastischen Effekte und Datenunsicherheiten (Daten Stochastik Modul)**

		Verteilungstyp	Punktwert	$\mu$	s
Regenmenge* Q	Fall 1&3	Punktwert	0		
	Fall 2&4	Normal		0,37254	12,05
Temperatur	Fall 1&3	Punktwert	25		
	Fall 2&4	Log-normal		3,3304	0,06708

\* Die Regenwahrscheinlichkeit beträgt nach Auswertung der Daten 0,51.

**Tabelle A 7: Zulaufdaten des Regenerereignisses**

SI	SS	XI	XS	XBH	XBA	XP	SO	SNO	SNH	SND	XND	SALK	Q
2.56	7.8	3.84	8.64	2.76	0	0	0.5	0.01	2.323	0.478	0.1	7	Zufallswert

**Tabelle A 8: Parameter für den allgemeinen Ansatz zur Bestimmung der temperaturabhängigen kinetischen Parameter des ASM1 (Modell M<sub>1</sub> und M<sub>2</sub>)**

**Allgemeiner Ansatz:**  $f(T) = G \cdot \exp(-P(20 - T))$

P	$f_{\mu H}(T)$	$f_{bH}(T)$	$f_{bA}(T)$	$f_{kH}(T)$	$f_{kX}(T)$	$f_{\mu A}(T)$	$f_{kA}(T)$
	0.069	0.11	0.098	0.11	0.11	0.098	0.069

**Tabelle A 9: Eingabedatei des Modells für Simulationsstadium 1 und 2 (Zeitraum: 10.09.1997 bis 01.10.1997)**

t	SI	SS	XI	XS	XBH	XBA	XP	SO	SNO	SNH	SND	XND	SALK	Q
1	294	323	294	559	0	0	0	6	0	18	5	5	8	7264
2	268	295	268	509	0	0	0	6	0	11	3	3	8	7827
3	254	279	254	483	0	0	0	6	0	13	3	3	8	8149
4	232	255	232	441	0	0	0	6	0	8	2	2	8	7488
5	244	268	244	464	0	0	0	6	0	7	2	2	8	6267
6	222	244	222	422	0	0	0	6	0	9	2	2	8	6640
7	218	240	218	414	0	0	0	6	0	27	7	7	8	8324
8	220	242	220	418	0	0	0	6	0	19	5	5	8	7482
9	212	233	212	403	0	0	0	6	0	11	3	3	8	8053
10	236	260	236	448	0	0	0	6	0	12	3	3	8	7733
11	244	268	244	464	0	0	0	6	0	10	3	3	8	6573
12	224	246	224	426	0	0	0	6	0	12	3	3	8	7036
13	226	249	226	429	0	0	0	6	0	10	2	2	8	7508
14	258	284	258	490	0	0	0	6	0	12	3	3	8	6374
15	250	275	250	475	0	0	0	6	0	13	3	3	8	7114
16	244	268	244	464	0	0	0	6	0	4	1	1	8	6487
17	248	273	248	471	0	0	0	6	0	10	2	2	8	6979
18	254	279	254	483	0	0	0	6	0	9	2	2	8	7501
19	244	268	244	464	0	0	0	6	0	9	2	2	8	7675
20	240	264	240	456	0	0	0	6	0	15	4	4	8	6868
21	252	277	252	479	0	0	0	6	0	9	2	2	8	6524
22	234	257	234	445	0	0	0	6	0	14	4	4	8	8858

**Tabelle A 10: Eingabedatei des Modells für Simulationsstadium 3 (Zeitraum: 26.11.2001 bis 22.12.2001)**

t	SI	SS	XI	XS	XBH	XBA	XP	SO	SNO	SNH	SND	XND	SALK	Q
0	220	241	220	417	0	0	0	6	0	2	8	8	8	3819
1	175	192	175	332	0	0	0	6	0	17	7	7	8	3944
2	199	219	199	377	0	0	0	6	0	20	8	8	8	3515
3	198	217	198	375	0	0	0	6	0	20	8	8	8	3841
4	175	193	175	333	0	0	0	6	0	18	7	7	8	4079
5	173	190	173	328	0	0	0	6	0	17	7	7	8	3615
6	183	201	183	347	0	0	0	6	0	23	7	7	8	3356
7	183	201	183	348	0	0	0	6	0	32	7	7	8	3189
8	218	240	218	415	0	0	0	6	0	23	8	8	8	3826
9	206	227	206	391	0	0	0	6	0	11	8	8	8	4080
10	188	206	188	357	0	0	0	6	0	9	7	7	8	3515
11	193	212	193	367	0	0	0	6	0	13	7	7	8	3930
12	202	222	202	384	0	0	0	6	0	7	8	8	8	3337
13	210	231	210	399	0	0	0	6	0	6	8	8	8	2847

t	SI	SS	XI	XS	XBH	XBA	XP	SO	SNO	SNH	SND	XND	SALK	Q
14	216	237	216	409	0	0	0	6	0	1	8	8	8	3634
15	223	246	223	424	0	0	0	6	0	1	8	8	8	3645
16	210	231	210	399	0	0	0	6	0	6	8	8	8	3132
17	217	238	217	412	0	0	0	6	0	14	8	8	8	3123
18	205	226	205	390	0	0	0	6	0	20	8	8	8	3420
19	200	220	200	380	0	0	0	6	0	30	8	8	8	3602
20	200	220	200	380	0	0	0	6	0	24	8	8	8	3595
21	225	247	225	427	0	0	0	6	0	7	9	9	8	3279
22	234	257	234	444	0	0	0	6	0	1	9	9	8	4200
23	221	243	221	421	0	0	0	6	0	6	8	8	8	3556
24	221	243	221	419	0	0	0	6	0	12	8	8	8	3127
25	222	244	222	422	0	0	0	6	0	12	8	8	8	3301
26	215	236	215	408	0	0	0	6	0	5	8	8	8	2881

**Tabelle A 11: Zu- und Ablaufparameter im Simulationszeitraum 27.11.01 bis 23.12.01**

	AB1 24H-Probe CSB-Küvette mg/l	AB1 24H-Probe CSB-Fracht kg/d	AB1 Wassermenge m³/d	AB1 24H-Probe Ammonium mg/l	ANKA 24H-Probe CSB mg/l	ANKO 24H-Probe CSB mg/l	ANKA 24H-Probe CSB-Fracht kg/d	ANKO 24H-Probe CSB-Fracht kg/d	ANKO Wassermenge m³/d	ANKO 24H-Probe Ammonium mg/l	ANKO 24H-Probe Nitrat mg/l	ANKO 24H-Probe Nitrit mg/l
10.09.1997	1470	10678	7264	18	114	128	812	911	7121	< 3,9	5,8	0,9
11.09.1997	1340	10488	7827	11	147	158	1285	1381	8741	< 3,9	3,7	
12.09.1997	1270	10349	8149	13	120	126	1039	1091	8655	< 3,9	1	
13.09.1997	1160	8686	7488	8,2	116	114	1050	1031	9048	< 3,9	1	
14.09.1997	1220	7646	6267	7,2	120	122	927	943	7729	< 3,9	1,1	0,02
15.09.1997	1110	7370	6640	9	135	215	914	1456	6770	< 3,9	1,1	
16.09.1997	1090	9073	8324	27	158	231	1208	1766	7644	< 3,9	1,4	
17.09.1997	1100	8230	7482	19	158	194	1444	1773	9137	4,5	9,2	2,11
18.09.1997	1060	8536	8053	11	187	248	1417	1880	7579	7,5	3,3	0,1
19.09.1997	1180	9125	7733	12	117	175	997	1491	8522	< 3,9	3,3	0,1
20.09.1997	1220	8019	6573	10	189	346	1418	2596	7502	< 3,9	3,3	0,05
21.09.1997	1120	7880	7036	12	187	190	1250	1270	6682	< 3,9	1,4	
22.09.1997	1130	8484	7508	9,5	206	238	1477	1707	7172	< 3,9	1	
23.09.1997	1290	8222	6374	12	195	260	1468	1957	7527	< 3,9	1	
24.09.1997	1250	8892	7114	13	172	177	1276	1313	7420	< 3,9	1	< 0,01
25.09.1997	1220	7914	6487	3,9	184	376	1368	2796	7437	< 3,9	1	
26.09.1997	1240	8654	6979	9,9	146	248	1004	1750	6876	< 3,9	1	
27.09.1997	1270	9526	7501	8,5	183	426	1357	3011	7417	< 3,9	1	< 0,01
28.09.1997	1220	9364	7675	8,5	146	190	1121	1459	7678	< 3,9	1	
29.09.1997	1200	8242	6868	15	156	166	1218	1296	7809	< 3,9	1	
30.09.1997	1260	8220	6524	9,1	182	195	1187	1272	6523	< 3,9	1	
01.10.1997	1170	10364	8858	14	161	173	1323	1422	8220	< 4,1	1	< 0,01

**Legende:**

AB 1 Ablauf Ausgleichsbehälter

ANKA Ablauf Nachklärbecken filtriert

ANKO Ablauf Nachklärbecken original

**Tabelle A 12: Zu- und Ablaufparameter im Simulationszeitraum 26.11.2001 bis 22.12.2001**

	AB1 24H-Probe CSB-Küvette mg/l	AB1 24H-Probe CSB-Fracht kg/d	AB1 Wassermenge m³/d	AB1 24H-Probe Ammonium mg/l	ANKA 24H-Probe CSB mg/l	ANKO 24H-Probe CSB mg/l	ANKA 24H-Probe CSB-Fracht kg/d	ANKO 24H-Probe CSB-Fracht kg/d	ANKO Wassermenge m³/d	ANKO 24H-Probe Ammonium mg/l	ANKO 24H-Probe Nitrat mg/l	ANKO 24H-Probe Nitrit mg/l
26.11.2001	1098	4070	3819	17,9	108	166	341	538	3285	11,6	0,66	1,95
27.11.2001	873	3456	3944	20,2	113	157	386	533	3320	17,1	0,79	2,34
28.11.2001	993	3608	3515	17,9	138	182	485	639	3127	25,6	0,88	2,83
29.11.2001	988	3791	3841	17,9	143	170	552	606	3281	25,6	0,81	2,62
30.11.2001	877	3576	4079	14,8	135	173	470	604	3534	24,1	0,75	1,83
01.12.2001	863	3107	3615	21,0	122	150	354	437	2968	17,1	0,72	1,22
02.12.2001	913	3065	3356	21,7	100	130	270	350	2728	24,8	0,70	0,58
03.12.2001	915	2866	3189	28,7	100	126	283	357	2278	24,8	1,02	1,86
04.12.2001	1092	4108	3826	24,1	108	132	359	437	3181	25,6	0,88	1,70
05.12.2001	1030	4204	4080	17,9	120	137	431	490	3648	18,6	0,84	1,55
06.12.2001	938	3463	3515	17,9	98	122	324	401	3095	14,8	0,88	1,43
07.12.2001	965	3786	3930	23,3	85	104	289	356	3440	14,0	0,81	1,40
08.12.2001	1010	3371	3337	16,3	90	123	252	345	2781	16,3	0,84	1,34
09.12.2001	1050	2909	2847	16,3	88	122	206	285	2277	16,3	0,88	1,28
10.12.2001	1078	3895	3634	17,9	79	126	249	397	3145	10,1	0,81	1,19
11.12.2001	1117	4083	3645	18,6	82	127	259	400	3201	9,3	0,75	1,07
12.12.2001	1050	3286	3132	23,3	83	140	203	341	2576	9,3	0,70	1,13
13.12.2001	1083	3383	3123	28,0	93	170	242	441	2604	13,2	0,95	1,34
14.12.2001	1025	3443	3420	28,0	103	190	294	549	2910	17,9	0,93	1,52
15.12.2001	1000	3599	3602	25,6	110	183	342	572	3133	28,7	0,95	1,67
16.12.2001	1000	3596	3595	21,0	103	160	322	498	3110	28,0	0,93	1,83
17.12.2001	1123	3687	3279	14,8	98	177	284	510	2893	20,2	0,95	1,70
18.12.2001	1169	4879	4200	20,2	106	186	410	718	3863	10,1	0,88	1,25
19.12.2001	1107	4064	3556	24,1	98	158	321	516	3209	10,1	0,81	1,25
20.12.2001	1103	3531	3127	24,8	82	157	236	452	2727	14,8	0,90	1,58
21.12.2001	1110	3733	3301	23,3	89	145	258	422	2825	16,3	0,86	1,46
22.12.2001	1073	3091	2881	18,6	85	155	206	376	2446	13,2	0,72	1,22

## **Lebenslauf und persönliche Daten**

Name: Thomas Knetsch  
Geburtstag und -ort: 24.09.1971 in Detmold

### *Schulbildung:*

1978 - 1982 Grundschule Heinrich, Paderborn  
1982 - 1991 Gymnasium Schloß Neuhaus, Paderborn (Abitur)

### *Studium:*

10/91 - 09/94 UNI-GH-Paderborn (Maschinenbau) (Vordiplom)  
05/94 - 07/94 Morton Machine Company Ltd., Newhouse, Scotland  
(Auslandspraktikum)  
10/94 - 09/97 Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg  
(Thermischer Maschinenbau / Verfahrenstechnik)

Diplomarbeit: „Dynamische Modellierung eines Wärmetauschers und eines Kondensators als Grundlage für eine Fehlerfrüherkennung“ am Lehrstuhl für Anlagentechnik und Anlagensicherheit, ausgezeichnet mit dem Förderpreis des VDI (Magdeburger Bezirksverein)

*Ergänzungsstudium:* Sicherheitstechnik, Abschluss 02/00 als staatlich anerkannter Sicherheitsingenieur

### *Dissertation:*

10/97 – 11/03 Arbeit an der Dissertation an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg während der Zeit als Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Anlagentechnik und Anlagensicherheit der Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik

Magdeburg, 30.10.2003