

infernum

Mathematische Methoden
und Modelle
in der Umweltwissenschaft



Fraunhofer Institut
Umwelt-, Sicherheits-,
Energietechnik UMSICHT



FernUniversität in Hagen

Inhalt

1	Einleitung	1
1.1	Motivation und Ziel	1
1.2	Einführung in das Thema.....	1
2	Definitionen	3
2.1	Systeme.....	3
2.2	Simulatoren und Modelle	4
2.3	Modellierung	6
2.4	Anwendung der Simulation	8
2.4.1	Berechnungen und Simulationsexperimente	8
2.4.2	Auslegung.....	9
2.5	Einführungsbeispiel	10
2.6	Zusammenfassung	14
2.7	Aufgaben	15
3	Mathematische Methoden.....	16
3.1	Modellierungsstrategien	16
3.1.1	Datengetriebene Modelle: Polynome	17
3.1.2	Datengetriebene Modelle: Neuronale Netze.....	21
3.1.3	Physikalisch begründete Modelle.....	24
3.2	Lösungsalgorithmen	26
3.2.1	Nichtlineare Gleichungssysteme	27
3.2.2	Differentialgleichungssysteme	31
3.3	Untersuchungsmethoden.....	33
3.3.1	Gaußsche Fehlerfortpflanzung	34
3.3.2	Sensitivitätsanalyse	35
3.3.3	Monte-Carlo-Simulation	35
3.3.4	Optimierung.....	37
3.4	Aufgaben	39
4	Bilanzraum und Bilanzierung	41
4.1	Bilanzierung.....	41
4.2	Massenerhaltungssatz und Massenbilanz	42
4.3	Energieerhaltungssatz und Energiebilanz.....	44
4.3.1	Konvektiver Energiestrom	45
4.3.2	Übertragene Wärmeströme.....	45
4.3.3	Systemarbeit	45
4.4	Anwendungen der Bilanzgleichungen.....	45

4.5 Aufgaben.....	47
5 Chemisch-physikalische Effekte	48
5.1 Chemische Reaktionen.....	48
5.1.1 Stöchiometrie.....	48
5.1.2 Reaktionsenthalpie.....	49
5.1.3 Chemische Gleichgewichtsreaktionen.....	49
5.1.4 Reaktionskinetik	50
5.1.5 Heterogene Katalyse.....	51
5.2 Physikalische Gleichgewichte.....	53
5.2.1 Dampf-Flüssigkeitsgleichgewicht	53
5.2.2 Löslichkeitsgleichgewicht	55
5.3 Stofftransport	56
5.4 Bewertungskriterien	59
5.4.1 Konzentrationsangaben.....	59
5.4.2 Umsatz, Ausbeute und Selektivität.....	60
5.4.3 Emissionsgrenzwerte	60
5.4.4 Löslichkeit	61
5.5 Aufgaben.....	62
6 Spezielle Anwendungen	63
6.1 Verbrennungsrechnung	63
6.2 Flowsheeting und Anlagensimulation.....	67
6.3 Ausbreitungsrechnung	72
6.4 Aufgaben.....	80
A Anhang.....	81
A.1 Symbolverzeichnis.....	81
A.2 Literatur	85
A.3 Lösungen der Aufgaben.....	87
A.3.1 Zu Kapitel 2	87
A.3.2 Zu Kapitel 3	88
A.3.3 Zu Kapitel 4	90
A.3.4 Zu Kapitel 5	93
A.3.5 Zu Kapitel 6	96
A.4 Bildverzeichnis	99
A.5 Glossar	103

..... 47
 48
 48
 48
 49
 49
 50
 51
 53
 53
 55
 56
 59
 59
 60
 60
 61
 62
 63
 63
 67
 72
 80
 81
 81
 85
 87
 87
 88
 90
 93
 96
 99
 103

1 Einleitung

Zur Definition und zur Bewertung umwelttechnischer Maßnahmen werden zunehmend computergestützte Methoden eingesetzt. Mit der Verbreitung computergestützter Verfahren in der Technik erhalten mathematische Methoden und Modelle bei der Entwicklung, der Überwachung und der Beurteilung umweltgerechter technischer Systeme eine Bedeutung, die mit dem Fortschritt der EDV-Technik und der theoretischen Kenntnisse auch in der Umweltwissenschaft weiter zunehmen wird. Gerade, wenn es um die Bewertung von Verfahren bezüglich ihrer umwelttechnischen Eigenschaften geht, ist die Nutzung entsprechender Methoden erforderlich, um belastbare quantitative Aussagen zu erhalten. Dies gilt sowohl für die Planung von technischen Anlagen als auch für die Betrachtung technischer Einrichtungen im Normalbetrieb und bei Störungen.

1.1 Motivation und Ziel

Bei der Ermittlung oder der Prüfung der umwelttechnischen Eigenschaften von Stoffen, Verfahren, Prozessen und Anlagen werden heute sehr viele Informationen rechnerisch ermittelt. Die zum Erhalt der Daten erforderlichen Methoden sind Bestandteil der Information, wie auch ein Messverfahren immer zusätzlich zu einem Messwert mitgeteilt werden sollte. Dies ist insofern wichtig, als die Methode sowohl bei der rechnerischen als auch bei konventionellen empirischen Untersuchungen immer Einfluss auf das Ergebnis hat. Daher ist eine Kenntnis und Beurteilungsfähigkeit der Methodik unabdingbar.

In der Kurseinheit sollen Kenntnisse über das Instrumentarium und die wesentlichen Methoden der computerunterstützten Berechnungs- und Modellierungstechnik vermittelt werden. Dazu sind Oberstufenkenntnisse in Algebra und Differentialrechnung erforderlich. Die Übungsaufgaben können mit dem Taschenrechner aber auch mit Tabellenkalkulationsprogrammen auf dem PC bearbeitet werden. Spezielle EDV-Kenntnisse sind nicht erforderlich, wenn auch ein gewisses Grundverständnis und Interesse vorhanden sein sollte.

Sie sollten nach dem Durcharbeiten des Kursmaterials in der Lage sein, die Vorgehensweise zur Durchführung von Berechnungen und Simulationsstudien sowie die dabei entstehenden Ergebnisse kritisch zu reflektieren und zu beurteilen. Hierzu werden Sie wichtige Methoden erlernen und anhand von einfachen Beispielen anwenden, um die wesentlichen Probleme und Schwachstellen zu erkennen. Sie sollten allerdings immer beachten, dass die Möglichkeit des theoretischen Verständnisses komplexer Zusammenhänge niemals ein Mittel zur Beherrschung der Komplexität ist, sondern lediglich eine Untersuchungsmethode darstellt, die kritisch zu beurteilen ist. Ein wesentliches Ziel des Kurses ist daher auch, die Vermittlung einer gewissen Sensibilität gegenüber technischen Informationen, bei denen man sich in jedem Einzelfall sehr genau über die Informationsquellen und die Art der Informationsermittlung Klarheit verschaffen muss.

1.2 Einführung in das Thema

Die Behandlung physikalischer Systeme mit theoretischen Methoden basiert auf mathematischen Gleichungen, die in der Regel physikalische Größen miteinander verknüpfen. Physikalische Größen beschreiben Eigenschaften von Stoffen oder Phänomene – sie bestehen hierbei fast immer aus zwei Bestandteilen, dem Zahlenwert und einer Einheit. Die Einheit einer Größe kann innerhalb einer Größenart (z. B. Temperatur) gewechselt werden, wenn der Zahlenwert entsprechend angepasst wird.

Größen, Zahlen,
Einheiten