

Neuronale Netze als Grundlage für die Analyse und Optimierung von Flockungsprozessen in der Praxis der Trinkwasseraufbereitung

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau der
Universität Duisburg-Essen
zur Erlangung des akademischen Grades

DOKTOR-INGENIEURIN

genehmigte Dissertation

von

Silke Strugholtz

aus

Lippstadt

Referent: Prof. Dr.-Ing. habil. Rolf Gimbel

Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Hans-Dieter Kochs

Tag der mündlichen Prüfung: 07.07.2009

Kurzfassung

Die Modellierung von Prozessen der Trinkwasseraufbereitung wird durch zunehmende Qualitätsanforderungen, aber auch durch hohe Anforderungen an die Betriebssicherheit und einen erhöhten Kostendruck an Bedeutung gewinnen. Neuronale Netze stellen eine innovative und bisher in der Trinkwasseraufbereitung selten eingesetzte Verfahrensweise dar, auf Basis von Prozessdaten Modelle zu trainieren und die Modelle selbst oder Erkenntnisse aus der Modellierung in der Praxis der Trinkwasseraufbereitung umzusetzen. Der Hauptvorteil dieser Methode liegt in der Fähigkeit der neuronalen Netze, auch ohne detaillierte Kenntnisse grundlegender Mechanismen stark nichtlineare Zusammenhänge abbilden zu können.

Ziel dieser Arbeit war es, die Grundlagen für das Training der neuronalen Netze zu erarbeiten und das Vorgehen bei der Modellierung an dem Beispiel eines in einer konventionellen Trinkwasseraufbereitungsanlage integrierten Flockungsprozesses aufzuzeigen. Des Weiteren sollte die Online-Fähigkeit der Modelle auch unter Gesichtspunkten der Prozessoptimierung unter Beweis gestellt werden. Neben diesen eher betriebstechnischen Gesichtspunkten wurde der Einsatz neuronaler Netze als wissenschaftlich nutzbares statistisches Analysewerkzeug untersucht.

So konnten auf Basis historischer Daten aus dem Wasserwerk Obermaubach, betrieben durch die Stadtwerke Düren, erfolgreich neuronale Netze trainiert werden, um die Trübung im Ablauf der Flockungsstufe über einen Zeithorizont von einer Stunde in die Zukunft vorherzusagen. Aufbauend auf den Vorhersagen aus der Trübungsmodellierung wurde eine Optimierungsstrategie zur Anpassung der Flockungsmitteldosierung auf Basis einer Kostenfunktion entwickelt und das Optimierungspotential auf etwa 10 % Kosteneinsparung abgeschätzt. Um die Anwendbarkeit des Systems in der Praxis zu testen, wurden die neuronalen Netze mit Daten aus dem Prozess in Echtzeit gespeist, so dass online Vorschläge für eine optimale Flockungsmitteldosierung ausgegeben wurden, die dem entsprechend vom Betriebspersonal von Hand im Prozess eingestellt wurden. In ersten Versuchen wurde die Einsatzfähigkeit in der Praxis nachgewiesen, und es konnte gezeigt werden, dass durch die Umsetzung der Optimierungsvorschläge die zu erwartende Kosteneinsparung erreicht werden kann.

Durch eine Sensitivitätsanalyse konnte des Weiteren nachgewiesen werden, dass die im neuronalen Netz abgebildeten statistischen Zusammenhänge zwischen den Modellparametern visualisiert und zu einer Interpretation der Intensität des Einflusses der verschiedenen Eingangsgrößen und von deren Wechselwirkungen untereinander herangezogen werden können. Die gefundenen Zusammenhänge stimmen mit Datenanalysen und Ergebnissen aus Laboruntersuchungen überein.

Somit konnte im Rahmen dieser Arbeit eine hohe Leistungsfähigkeit von neuronalen Netzen für die Abbildung stark nichtlinearer Zusammenhänge und deren Einsatzfähigkeit in Online-Systemen zur Betriebsoptimierung bewiesen werden. Des Weiteren bietet die Sensitivitätsanalyse unter wissenschaftlichen Gesichtspunkten ein hohes Potential für die Evaluierung von Zusammenhängen stark nichtlinearer Systeme. Aus den Ergebnissen konnten daher vielfältige Ansätze für weitere praxisbezogene Einsatzmöglichkeiten und Forschungsvorhaben abgeleitet werden.

Vorwort

Die Vorliegende Arbeit entstand während der meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Energie- und Umweltverfahrenstechnik, Bereich Wassertechnik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau im Rahmen des von RWE Energy AG und RWE Aqua GmbH geförderten Forschungsprojekts „Optimale Einstellung von Flockungsbedingungen durch eine dynamische Regelung mittels Künstlicher Neuronaler Netze“.

Herrn Professor Dr. Rolf Gimbel danke ich sehr herzlich für die Möglichkeit zur Promotion und für sein Vertrauen in meine Arbeit. Die interessanten Diskussionen und seine kritischen Anmerkungen haben sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Herrn Professor Dr. Hans-Dieter Kochs vom Lehrstuhl für Informationslogistik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften danke ich sehr herzlich für die Übernahme des Korreferats und die intensive Auseinandersetzung mit meiner Arbeit.

Ein ganz besonderer Dank gilt Dr. Achim Mälzer, Anja Rohn und Dr. Jörg Gebhard sowie meinen studentischen Hilfskräften Mathis Keller, Linn Wilfert und Benjamin Kühle, die mich bei der Fertigstellung dieser und anderer Arbeiten jederzeit tatkräftig unterstützt haben. Die herzliche und freundschaftliche Atmosphäre hat mir gezeigt, dass eine Promotion nicht nur aus harter Arbeit besteht, sondern auch viel Freude bereiten kann.

Ferner möchte ich mich bei allen Kollegen, meinen Freunden und nicht zuletzt bei meiner Familie bedanken, die meine Arbeit in verschiedenster Form begleitet und unterstützt haben. Besonders bedanke ich mich bei Marita Rissmann für die liebe seelische und moralische Unterstützung, bei Dr. Ralph Hobby, Dr. Stefan Panglisch und Dr. Andreas Nahrstedt, die meine Arbeit mit ihrem Wissen und ihrer Erfahrung bereichert haben sowie bei meiner Mutter Renate Strugholtz und bei Simone Weitz für die Korrektur meiner Arbeit.

Mein größter Dank gilt meinem Freund Carsten Müller, der immer an mich geglaubt hat und mich immer wieder ermutigt hat, meine Ziele unbeirrt aller äußeren Umstände zum Trotz zu verfolgen. Ohne seine Toleranz und sein gleichzeitiges Vermögen, mir zu zeigen, dass es noch andere wichtige Dinge gibt, wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Neuronale Netze zur Modellierung von Trinkwasseraufbereitungsanlagen	1
1.2	Problemstellung und Zielsetzung	3
2	Stand der Technik	6
2.1	Neuronale Netze	6
2.1.1	Entstehung und Anwendung	6
2.1.2	Aufbau und Eigenschaften	8
2.1.3	Der Backpropagation-Algorithmus	13
2.2	Der Flockungsprozess und seine Modellierung mit neuronalen Netzen	18
2.2.1	Die Bedeutung der Flockung in der Trinkwasseraufbereitung	18
2.2.2	Mechanismen der Flockung	18
2.2.3	Die Kinetik der Flockung	22
2.2.4	Einflussfaktoren auf den Flockungsprozess	23
2.2.5	Modellierung von Flockungsprozessen	28
3	Modellierung eines Flockungsprozesses	33
3.1	Vorgehen bei der Modellierung	33
3.2	Datenakquise und Aufbereitung der Datenbasis	36
3.2.1	Beschreibung des Wasserwerks	36
3.2.2	Festlegung der Modellgrenzen	38
3.2.3	Auswahl der Modellierungsparameter und -zeiträume	40
3.2.4	Analyse des Verweilzeitverhaltens	43
3.2.5	Umgang mit Zeitverhalten	46
3.3	Trübungsmodellierung	47
3.3.1	Prüfung der Modellierbarkeit und Vergleich der Verweilzeitmodelle	49
3.3.2	Einfluss von Zeitverhalten	51
3.3.3	Vergleich verschiedener Modellierungsansätze	52
3.3.4	Prüfung des Einflusses des pH-Werts nach Flockungsmitteldosierung	54
3.3.5	Reduktion der Eingangsgrößen	56
3.3.6	Spezialistenmodell	61
3.3.7	Vergleich des neuronalen Netzes mit Regressionsmodellen	63
3.4	Partikelzahlmodellierung	65

4	Optimierung des Flockungsprozesses	67
4.1	Optimierungsansätze	67
4.2	Umsetzung der Optimierungsansätze im Wasserwerk Obermaubach	68
4.3	Kostenfunktion	70
4.4	Bestimmung der optimalen Flockungsmittelkonzentrationen für die Optimierungsansätze im Vergleich	75
4.5	Abschätzung des Optimierungspotentials	77
4.6	Umsetzung im Online Betrieb	80
5	Evaluierung von Zusammenhängen	87
5.1	Einfluss einer Mittelwertbildung	87
5.2	Vergleich der Talsperrenwässer untereinander	89
6	Potentiale neuronaler Netze in der Trinkwasseraufbereitung	98
7	Zusammenfassung	105
8	Anhang	107
8.1	Zu neuronalen Netzen	107
8.1.1	Beschreibung der Vorgehensweise bei der Modellierung unter Berücksichtigung der Software NeuroModel	107
8.1.2	Radiale-Basisfunktionen Netze	126
8.1.3	Self organizing Maps	128
8.1.4	Optimierung von Prozessen auf Basis neuronaler Netze mit Hilfe Genetischer Algorithmen	129
8.1.5	Bestimmung des Optimierungspotentials	130
8.2	Zum modellierten Wasseraufbereitungsprozess	133
8.2.1	Beschreibung des Wasserwerks Obermaubach	133
8.2.2	Messgeräte	137
8.2.3	Modellierte Zeiträume	138
8.3	Glossar	139
9	Abkürzungsverzeichnis	142
10	Literatur	147

1 Einleitung

1.1 Neuronale Netze zur Modellierung von Trinkwasseraufbereitungsanlagen

Der Einsatz von Prozessmodellierung und -simulation in der Trinkwasseraufbereitung hat in den letzten Jahren stark zugenommen. Nicht zuletzt der stetig wachsende Druck strenger werdender Trinkwasserrichtlinien und vor allem Fragen nach Betriebskosten und Betriebssicherheit erfordern ein immer besseres Prozessverständnis und die Möglichkeit, frühzeitig in den Prozess eingreifen zu können. Dieses bedeutet jedoch den Einsatz möglichst genauer Prognosemodelle, die in der Lage sind, das Prozessverhalten im Voraus bestimmen zu können, um dem Betreiber einer Aufbereitungsanlage die Möglichkeit zu geben, mit Gegenmaßnahmen zu agieren und nicht erst auf bereits eingetretene Prozessschwankungen zu reagieren.

Eine Prozessmodellierung kann mechanistisch oder empirisch erfolgen. Wünschenswert ist eine mechanistische Modellbildung, d.h. die vollständige und eindeutige mathematische Beschreibung eines Systems mit all seinen Einflussgrößen. Solche so genannten „White-Box-Modelle“ erlauben neben der Vorhersage bekannter Zusammenhänge auch eine Extrapolation zur Evaluierung nicht bekannter Zustände. Eine mechanistische Modellbildung ist jedoch in der Trinkwasseraufbereitung aufgrund der komplexen physikalischen und chemischen Wechselwirkungen in den einzelnen Prozessen sowie der betriebstechnischen Gegebenheiten und der örtlich und jahreszeitlich variierenden Rohwasserqualität oft nur schwer und stark vereinfachend möglich, da das Wissen um grundlegende Mechanismen nicht ausreichend vorhanden ist. Daher wird in der Regel der Weg der empirischen Modellbildung gewählt, häufig basierend auf Versuchen im Labor- oder Pilotanlagenmaßstab. Die hier gewonnenen Erkenntnisse können anschließend auf den Großanlagenbetrieb übertragen werden, wobei ein nicht zu unterschätzendes Problem durch das Scale-up auf den größeren Maßstab entstehen kann. Rein empirische Modelle werden auch als „Black-Box-Modelle“ bezeichnet, da sie auf gemessenen Daten basieren und zunächst keinerlei Prozessverständnis voraussetzen. Daher besitzen diese Modelle auch nur Gültigkeit in den von den Daten abgedeckten Wertebereichen. Modelle, die auf naturwissenschaftlichen Grundprinzipien basieren, aber Parameter zur Anpassung nicht bekannter Zusammenhänge enthalten, werden auch als „Grey-Box“ oder halbempirische Modelle bezeichnet und lassen in gewissem Rahmen eine Extrapolation auf unbekanntere Bedingungen zu. Allerdings stoßen diese Modelle gerade bei stark nichtlinearen Zusammenhängen häufig an ihre Grenzen, da viele Annahmen getroffen werden müssen, um das Modell nicht zu komplex und damit betriebstechnisch nicht mehr umsetzbar werden zu lassen. Zusätzlich ziehen Prozessänderungen oder eine Veränderung der Rohwasserqualität oft einen immensen Aufwand nach sich, um die Modellparameter wieder an die neuen Gegebenheiten anzupassen.

Da es sich bei Trinkwasser um ein lebensnotwendiges Gut handelt, sind die Qualitätsstandards und Vorgaben zu deren Sicherung entsprechend hoch. Aufgrund der stetigen Qualitätskontrolle und der Weiterentwicklung von Prozessen durch Labor- und Pilotanlagenversuchen liegt in der Trinkwasseraufbereitung üblicherweise umfassendes Datenmaterial vor. Zur Abbildung der stark nichtlinearen Prozesse bieten sich daher empirische, datengetriebene Modellansätze wie neuronale Netze an.

Die enorm hohe Leistungsfähigkeit und das hohe Abstraktionsvermögen des menschlichen Gehirns durch die einfache Verknüpfung tausender Nervenzellen haben zur Entwicklung der neuronalen Netze als Abbild der Funktionsweise des Gehirns geführt. Zusammengesetzt aus einfachen Bausteinen, den so genannten Neuronen, sind sie in der Lage, durch Gewichtung von Informationen stark nichtlineare und komplexe Zusammenhänge zu lernen und abzubilden. Während einer Lernphase werden die Verbindungen zwischen den Neuronen durch ein Training mit Beispieldaten derart modifiziert, dass Zusammenhänge durch das neuronale Netz beschrieben werden können. Nach dem Training kann das Netz auf neue, unbekannte Situationen angewandt werden - das gelernte Wissen wird verallgemeinert (Generalisierung). Daher weisen neuronale Netze eine Reihe menschlicher Eigenschaften auf. Informationen werden in – im Vergleich zum Gesamtsystem – einfachen Strukturen parallel verarbeitet und verteilt gespeichert. Damit sind sie tolerant gegenüber internen und externen Fehlern und können auch veräuschte Daten verarbeiten (Foody, 1997). Sie weisen eine hohe selbständige Lernfähigkeit auf, ohne dass das Netz explizit programmiert werden muss. Durch die verteilte, assoziative Speicherung von Informationen besitzen sie die Eigenschaft, Zusammenhänge zu generalisieren und auf unbekannte, auch nicht vollständige Informationsmuster zu übertragen. Im technischen Sinne enthalten neuronale Netze eine hohe Zahl an Freiheitsgraden, die sie zur Abbildung auch stark nichtlinearer Zusammenhänge befähigen.

Diese Eigenschaften machen die Attraktivität der neuronalen Netze zur Modellierung von Trinkwasseraufbereitungsanlagen aus. Durch die einfachen Strukturen lassen sie sich auf die verschiedensten Probleme mit verhältnismäßig geringem Aufwand anwenden, so dass der Anwender weder ein detailliertes Wissen über den mathematischen Algorithmus zum Training der neuronalen Netze noch Programmierungskennntnisse mitbringen muss. Weiterhin unterliegen sie im Gegensatz zu halbmechanistischen Modellen einem geringeren Wartungsaufwand, da ein einfaches Nachtraining neuer Datenmuster in den meisten Fällen ausreichend ist. Ein hoher Aufwand liegt demgegenüber in der Auswahl und Aufbereitung der Daten, da im Gegensatz zu mechanistischen Modellen weitaus mehr Daten erforderlich sind und die notwendige Menge mit zunehmender Nichtlinearität und damit höherer Zahl an benötigten Freiheitsgraden überproportional steigt. Weiterhin ist die Tatsache, dass es sich um „Black-Box-Modelle“ handelt ein Nachteil, wenn es dem Anwender bei der Modellierung um eine Verbesserung des Prozessverständnisses geht.

Da grundsätzlich kein detailliertes Prozessverständnis für ein Training erforderlich ist, steigt die Gefahr, durch eine ungünstige Wahl an Eingangsgrößen falsche Zusammenhänge zu trainieren und zu abstrahieren. Daher kommt dem Expertenwissen der Betreiber von Trinkwasseraufbereitungsanlagen eine hohe Bedeutung zu, da sie dadurch in der Lage sind, aufgrund ihrer Betriebserfahrungen das Verhalten der neuronalen Netze zu beurteilen und eine sinnvolle Wahl der Eingangsgrößen zu gewährleisten (Al-Shayji und Liu, 2002). Trotz der genannten Einschränkungen stellen neuronale Netze eine zukunftsweisende Technologie dar, um Prozesse zu modellieren, bei denen auf konventionellem Wege bisher keine zufrieden stellenden Resultate erzielt werden konnten.

1.2 Problemstellung und Zielsetzung

Dass neuronale Netze bereits in den verschiedensten Feldern der Trinkwasseraufbereitung eingesetzt werden, zeigen eine Reihe von Studien und auch technische Umsetzungen, angefangen mit der Vorhersage von Rohwasserqualitätsgrößen (Maier und Dandy, 1996, Zhang und Stanley, 1997) über die Vorhersage zum Wasserbedarf (Baxter et al., 2001), bis hin zu verschiedenen Aufbereitungsverfahren. Große Verbreitung finden neuronale Netze hier vor allem in der Modellierung von Flockungsprozessen (Mirsepassi et al., 1995, Stanley et al., 2000, Valentin und Denoeux, 2001, Maier et al., 2004) und Membranverfahren (Cabassud et al., 2002, Shetty und Chellam, 2003, Chellam, 2005, Strugholtz et al., 2008). Dabei lassen sich die Ziele der Modellierung durch die in Abbildung 1.1 gezeigten Punkte zusammenfassen.

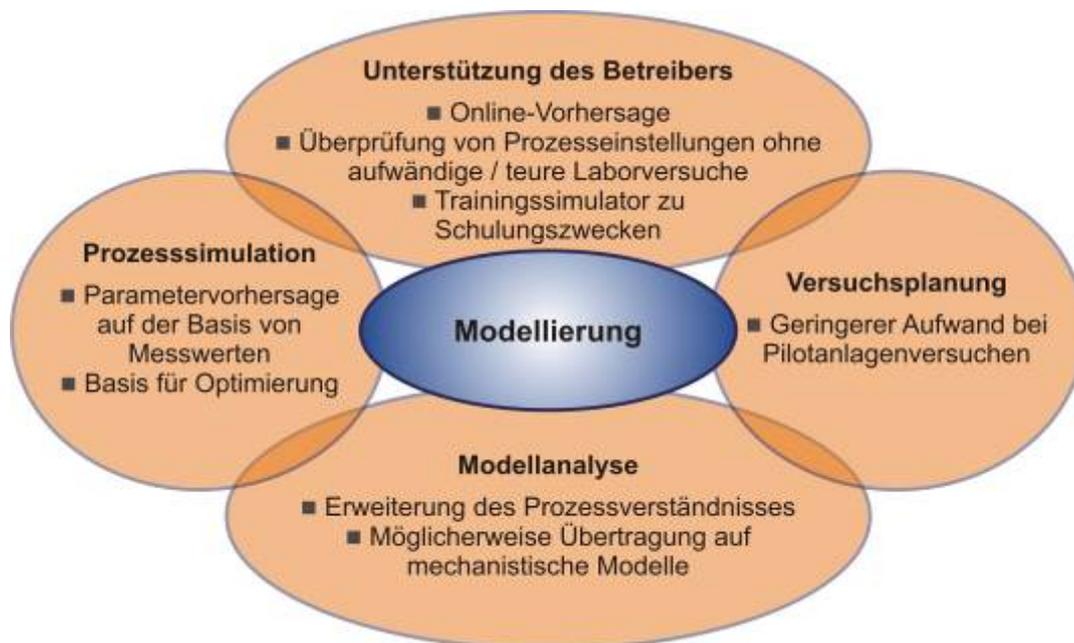


Abbildung 1.1: Ziele der Modellierung mit neuronalen Netzen (nach Strugholtz et al., (2008))

Zum einen sollen die Modelle einer reinen Prozesssimulation dienen, um auf der Basis von aktuellen Messwerten eine Parametervorhersage (z.B. Trübung nach Flockung oder transmembrane Druckdifferenz bei Membranverfahren) zu treffen und zum anderen bei einer ausreichenden Genauigkeit die Basis für eine Optimierung liefern. Diese Modelle können in das Prozessleitsystem (PLS) des laufenden Wasserwerksbetriebs eingebunden werden, um den Betreiber durch eine Online-Vorhersage zu unterstützen und ihm gleichzeitig die Möglichkeit zu geben, Einstellungen zu testen, ohne auf aufwändige, häufig auch kostenintensive Labor- oder Pilotanlagenversuche zurückgreifen zu müssen. Im Rahmen einer solchen Umsetzung ist es auch möglich, diese Simulationstools zu Schulungszwecken einzusetzen.

Unter Berücksichtigung der Eigenschaften neuronaler Netze und der Literatur zu ihrer Anwendung zeigt sich, dass sie schnell zu Ergebnissen führen können. Bei näherer Betrachtung steckt jedoch sehr viel Erfahrung der Anwender im Training und der Anwendung neuronaler Netze, wofür es keine standardisierten Vorgaben geben Baxter et al. (2001), so dass nur wenige Anwendungen für einen Betreiber von Trinkwasseraufbereitungsanlagen sinnvoll nutzbar sind. In

der Regel werden keine Angaben über Grenzen der Einsetzbarkeit gemacht und eine Sicherheitsprüfung der Vorhersagen über eine Validierung mit unbekanntem Testdaten hinaus wird im Anwendungsfall nur in den seltensten Fällen durchgeführt (Zhang und Stanley, 1999, Strugholtz et al., 2008). Daher werden im Rahmen dieser Arbeit die Grundlagen neuronaler Netze erarbeitet und das Vorgehen bei der Modellierung unter Berücksichtigung der Limitierungen bezüglich der Einsetzbarkeit am Beispiel eines Flockungsprozesses erläutert. Die Verwertung der Ergebnisse spielt vor allem für die technische Umsetzung der Modelle im realen Betrieb des beschriebenen Trinkwasseraufbereitungsprozesses eine Rolle.

Demgegenüber ist jedoch auch die wissenschaftliche Interpretation der Modelle von Bedeutung. neuronalen Netzen wird häufig vorgeworfen „Black-Box-Modelle“ zu sein, so dass man keine neuen Erkenntnisse erlangen und gewonnenes Wissen in den Modellen umsetzen kann. Aufgrund ihres Prinzips können neuronale Netze auch als statistisches Auswertungswerkzeug vorhandener Daten angesehen werden. Durch das Training werden grundlegende Zusammenhänge, die in den trainierten Daten vorhanden, aber aufgrund der hohen Nichtlinearität zwischen den Modellparametern häufig nicht explizit erkennbar sind, im neuronalen Netz abgebildet. Es gibt jedoch Verfahren, um genauere Einsicht in das Verhalten der Netze zu erlangen und damit möglicherweise Zusammenhänge zu visualisieren, die man grob in analytische und synthetische Methoden aufteilen kann (Mielke, 2007). Die analytischen Methoden beziehen sich auf die Analyse der Gewichte bzw. das Verhalten der Untereinheiten, also der Neuronen. Verschiedene Eingabemuster erzeugen unterschiedliches Verhalten, das in Bezug auf qualitative Zusammenhänge ausgewertet werden kann. Untersuchungen dazu hat Chellam (2005) durchgeführt. Jedoch hat er darauf hingewiesen, dass es sich hierbei nur um qualitative Aussagen handelt. Eine genauere Untersuchung, ob die gefundenen Zusammenhänge sinnvoll sind, erfolgte nicht. Synthetische Methoden betrachten das Netz als Funktion zur Abbildung der Eingangsgrößen auf die Ausgangsgrößen. Somit lassen sich über kleine Veränderungen der Eingangsgrößen die Auswirkungen auf die Ausgangsgrößen abschätzen und visualisieren (Panglisch et al., 2008). Die Ergebnisse können zum einen genutzt werden, um die Zahl der Eingangsgrößen auf die tatsächlichen Einflussgrößen zu reduzieren, zum anderen können sie für die Interpretation der Zusammenhänge zwischen den so gefundenen Einflussgrößen herangezogen werden. Die genannten Untersuchungen stellen erste Ansätze dar, Zusammenhänge in der Trinkwasseraufbereitung zu visualisieren und zu interpretieren. Die Übertragbarkeit auf andere Verfahren der Trinkwasseraufbereitung und die Möglichkeiten und Grenzen dieses Verfahrens sollen im Rahmen des zweiten Teils dieser Arbeit beleuchtet und an dem Beispiel des zuvor modellierten Flockungsprozesses dargestellt werden. Die gefundenen Ergebnisse sollen soweit wie möglich abstrahiert und interpretiert werden und zu einer Erweiterung des Prozessverständnisses der Flockung beitragen.

Da es sich bei neuronalen Netzen um eine junge Technologie handelt, die in Deutschland im Bereich Trinkwasser bisher wenig Verbreitung gefunden hat, soll im Rahmen dieser Arbeit weiterhin ein stark anwendungsbezogenes Konzept erarbeitet werden, das den Neueinstieg in die Modellierung erleichtert und bei der Beantwortung genereller Fragen Hilfestellungen leisten kann. Aufgrund der hohen Qualitätsanforderungen an das Trinkwasser und vor allem deren sicherer Einhaltung bestehen gegenüber Modellen, die im Online-Betrieb der Aufbereitungsanlagen eingesetzt werden können, häufig Vorbehalte, gerade wenn Schlagworte wie künstliche

Intelligenz oder Lernen anhand von Messdaten fallen. Einsicht in die Verfahrensweise bei der Erstellung und Umsetzung, aber auch in die Bewertung der grundsätzlichen Eignung solcher Modelle, um damit die Hemmschwelle zum Einsatz neuer, zukunftsweisender Technologien herabzusetzen, bietet der Anhang dieser Arbeit.

2 Stand der Technik

2.1 Neuronale Netze

2.1.1 Entstehung und Anwendung

Die Entwicklung neuronaler Netze blickt im Kontext intelligenter Systeme auf eine vergleichsweise lange Historie zurück. Während Fuzzy Control und Expertensysteme Entwicklungen der neueren Zeit darstellen (Nowinski, 1994), legten Warren McCulloch und Walter Pitts bereits 1943 die ersten Grundlagen für die Entwicklung konnektionistischer Strukturen, d.h. untereinander verbundener einfacher Elemente, und konnten in ihrem Aufsatz „A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity“ (McCulloch und Pitts, 1943) zeigen, dass es durch die Verknüpfung einfacher Elemente, den so genannten „McCulloch-Pitts“-Neuronen, unter anderem möglich ist, logische Funktionen wie UND und ODER darzustellen. Obwohl sie noch keine praktischen Anwendungen aufzeigten, inspirierte ihr Aufsatz doch viele Forscher, so dass heute sehr weit gefächerte, fachübergreifende Anwendungsgebiete und Arten neuronaler Netze existieren.

Frühe Anwendungen neuronaler Netze gehen auf die Abbildung von vernetzten Nervenzellen und die verteilte Repräsentation von Informationen im Gehirn zurück (Hebb, 1988, Lashley, 1988). Vor allem die von Donald O. Hebb 1949 entwickelte Hebb'sche Lernregel (Hebb, 1988) ist noch heute Grundlage der meisten in neuronalen Netzen verwendeten Lernverfahren, so auch der später beschriebenen Delta-Regel. Der erste Neurocomputer (Mark I Perceptron) wurde von Frank Rosenblatt, Charles Wightman und Mitarbeitern am MIT für Mustererkennung eingesetzt und bestand aus 512 motorgetriebenen Potentiometern, die jeweils eines der variablen Gewichte darstellten (Rosenblatt, 1958). Die Grundform des Perzeptrons ist im Anhang beschrieben.

Die verschiedenen Varianten des Perzeptrons, die Rosenblatt in seinem Buch „Principles of Neurodynamics“ 1959 darstellte (Rosenblatt, 1958), wurden 1969 von Marvin Minsky und Seymour Papert in „Perceptrons“ (Minsky und Papert, 1988) mathematisch analysiert. Sie konnten nachweisen, dass die verschiedenen Klassen nicht in der Lage waren, wichtige Probleme wie das in Zell (2003) ausführlich dargestellte XOR- oder das connectivity-Problem (Unterscheidung, ob eine gegebene Figur aus einer einzelnen oder aus mehreren separaten Figuren besteht) zu repräsentieren. Der Rückschluss, dass auch mächtigere Modelle diese Probleme nicht lösen könnten, führte zu einer Stagnation der Entwicklung neuronaler Netze. Erst Anfang der 1980er Jahre nahm das Interesse durch Aufsätze von Hopfield (1984) und vor allem Rumelhart et al. (Rumelhart et al., 1986, Rumelhart und McClelland, 1986) wieder zu. Obwohl Paul Werbos bereits 1974 in seiner Dissertation den Backpropagation-Algorithmus entwickelte (Werbos, 1974), gelangte dieses Verfahren erst durch den Vergleich mit bisherigen Lernverfahren als sehr schnelles und robustes, mehrstufiges und vorwärtsgerichtetes Netz durch Rumelhardt und McClelland zu großer Beachtung (Rumelhart und McClelland, 1986). Durch das beschriebene Verfahren konnten Probleme wie das XOR-Problem gelöst werden.

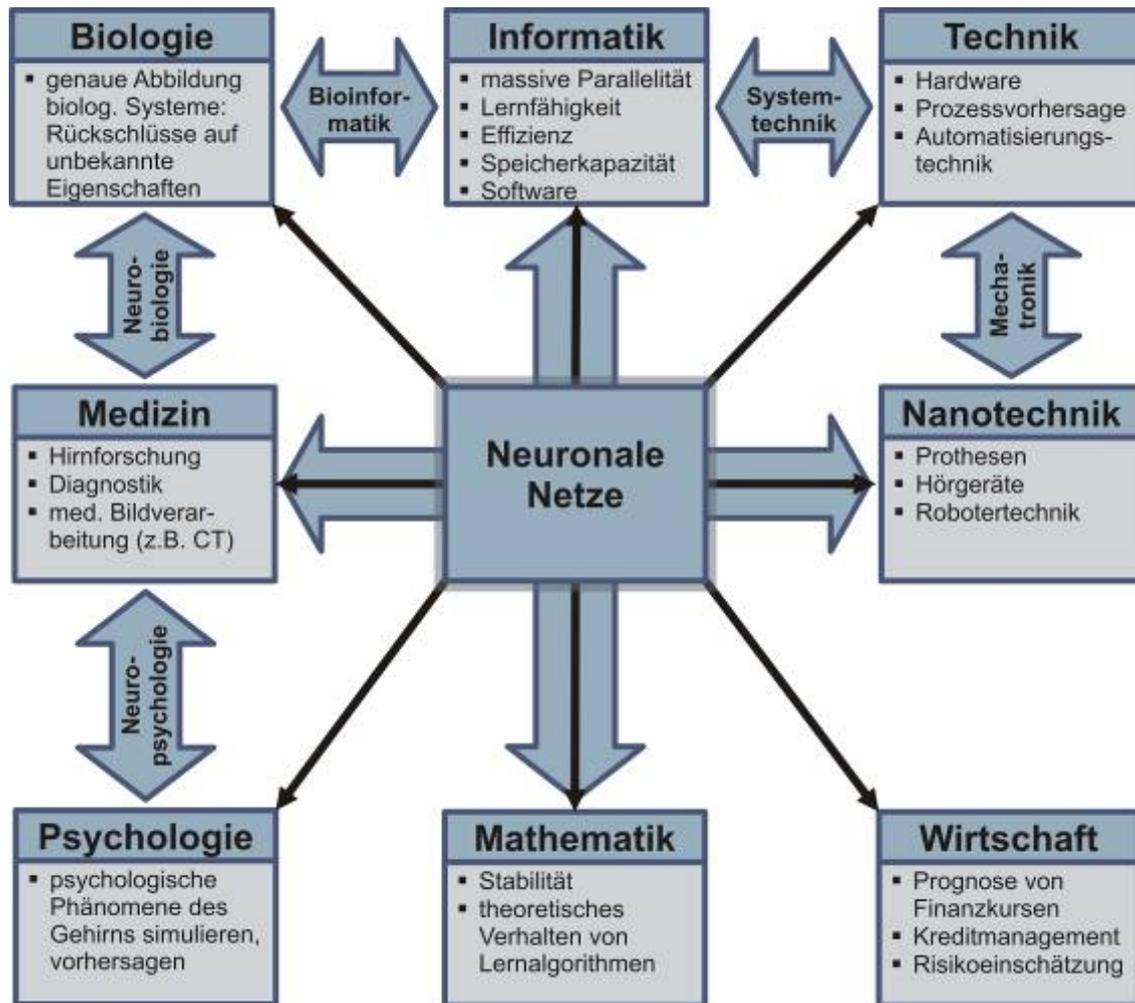


Abbildung 2.1: Anwendungs- und Forschungsgebiete neuronaler Netze

Abbildung 2.1 zeigt eine Übersicht über verschiedene Gebiete und einige Beispiele für Anwendungen, in denen heute bereits erfolgreich neuronale Netze eingesetzt oder in denen aussichtsreiche Forschungsvorhaben durchgeführt werden (Rehkugler und Kerling, 1995, Fuser, 1999, Bogdan, 2000, Krause et al., 2000, Zell, 2003, Mälzer et al., 2008, Soon et al., 2008). Dabei erhebt die Darstellung keinerlei Anspruch auf Vollständigkeit, soll jedoch zeigen, wie breit gefächert und vor allem interdisziplinär die Anwendungen sind. Gerade im Bereich der Biologie und Medizin im Schnittpunkt mit der Informatik haben sich nicht zuletzt durch die stark gestiegene Leistungsfähigkeit künstlicher neuronaler Netze und stetig steigende Kapazität von Rechnern neue Forschungsgebiete wie Neurobiologie, Bioinformatik oder Neuropsychologie entwickelt, deren Ziel es ist, ein möglichst genaues Abbild der natürlichen Vernetzung von Neuronen zu schaffen und dadurch beispielsweise Rückschlüsse auf verschiedene unbekannte Eigenschaften des Nervensystems oder die Funktionsweise des Gehirns zu ziehen. Im Gegensatz zur direkten Abbildung von biologischen Systemen kommt es im Bereich der technischen Anwendungen nicht immer auf die biologische Plausibilität der Vernetzung und Aktivität der neuronalen Netze an, sondern beispielsweise in der Automatisierungstechnik eher auf die Stabilität und Echtzeitfähigkeit der Anwendungen.

2.1.2 Aufbau und Eigenschaften

Ein weiterer Begriff, der oft als Synonym für neuronale Netze verwendet wird, ist der Konnektionismus, der weniger das biologische Vorbild in den Vordergrund stellt, sondern die große Anzahl einfacher Elemente, die über ihre Verbindungen miteinander kommunizieren können. Ein neuronales Netz oder auch konnektionistisches Modell besteht demnach aus einer bestimmten Anzahl N von Neuronen, die über eine Anzahl V von Verbindungen, die unterschiedlich gewichtet sind, Nachrichten austauschen. Dabei kann jedes Neuron Eingänge von beliebig vielen Verbindungen empfangen, kann aber nur genau eine Ausgabe an beliebig viele weitere Neuronen weitergeben. Über die empfangenen Signale erhält jedes Neuron gewichtete Informationen aus der Außenwelt, bewertet und verarbeitet diese zu einer einzigen Information, die es wiederum an die Außenwelt abgibt. Abbildung 2.2 zeigt die Ähnlichkeit der menschlichen Zellstruktur mit dem konnektionistischen System eines neuronalen Netzes. Wichtigstes Element der Interaktion im Nervensystem ist der Zellkörper, der über seinen Ausgang, das Axon, und die Dendriten, die Ausläufer des Axons, mit anderen Zellkörpern verschaltet ist. So verfügt der Zellkörper über mehrere Eingänge (Dendriten), aber nur über einen Ausgang (Axon) zur Weiterleitung chemischer Signale. Die Zellkerne der Zellkörper erhalten aktivierende, hemmende oder keine Signale in unterschiedlicher Stärke von verknüpften Zellkörpern und verarbeiten diese. Das resultierende Ausgangssignal wird über das Axon und somit über die Synapsen, die die Informationen des Ausgangssignals gewichten, und die Dendriten als elektrochemische Information an andere Zellkörper weitergegeben. Allerdings ist die Vernetzung der menschlichen Nervenzellen aufgrund von Rückkopplungen und getakteten Interaktionen wesentlich komplexer als ihre Umsetzung in neuronalen Netzen.

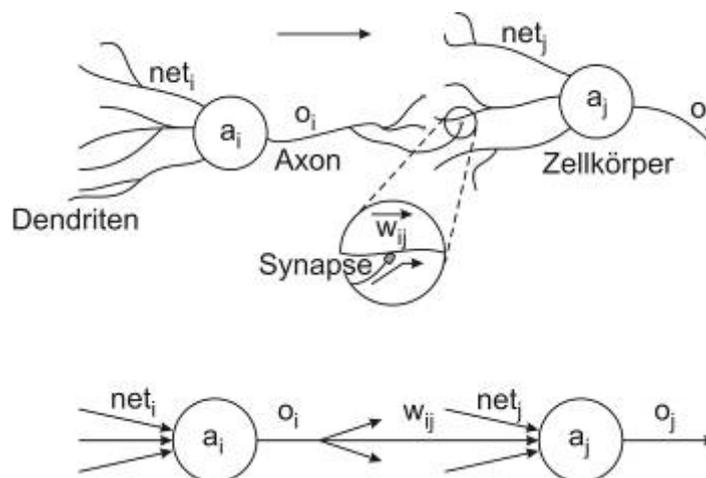


Abbildung 2.2: Übertragung der menschlichen Zellstruktur in ein mathematisches Modell (nach Zell (2003))

Die kleinste Einheit eines neuronalen Netzes, das Neuron (auch Knoten, Zelle, Unit, Element), verarbeitet die Informationen, die von anderen Neuronen übergeben werden, und leitet sie weiter. Verknüpft werden die einzelnen Neuronen durch ein Verbindungsnetzwerk, so dass ein neuronales Netz auch als gerichteter und gewichteter Graph angesehen werden kann, wobei die Knoten des Graphen die Neuronen sind und die Kanten als Verbindungen bezeichnet werden, die jeweils ein bestimmtes Gewicht besitzen. Das Gewicht (weight) als Verbindung zwi-

schen Zelle i und Zelle j wird mit w_{ij} bezeichnet, die Gewichtsmatrix aus allen einzelnen Netzgewichten mit W . Für die Gewichtung können drei Fälle unterschieden werden:

- 1 $w_{ij} = 0$: es existiert keine Verbindung zwischen den Neuronen
- 2 $w_{ij} > 0$: das nachfolgende Neuron wird um den Betrag von w_{ij} gestärkt
- 3 $w_{ij} < 0$: das nachfolgende Neuron wird um den Betrag von w_{ij} gehemmt

Ziel des Einsatzes neuronaler Netze ist es, aus verschiedenen Eingangsgrößen gewünschte Ausgangsgrößen zu generieren. Dieser Prozess wird auch als Lernen bezeichnet. In der Regel wird dieses mit Hilfe der Anpassung der Netzgewichte durch die wiederholte Präsentation von Trainingsmustern erreicht. Die einfachen Bausteine der neuronalen Netze erlauben sehr unterschiedliche Methoden der Strukturierung und des Lernens. Daher existieren je nach Anwendungsfall verschiedene Algorithmen, die auch als Lernregeln bezeichnet werden. Grundsätzlich kann Lernen auf drei verschiedene Weisen erfolgen:

- Überwachtes Lernen: In den Trainingsdaten liegen für die Eingangsmuster die korrekten Ausgabemuster vor, d.h. es existiert ein externer Lehrer, der das genaue Ergebnis des Eingangsmusters kennt. Auf diese Weise werden die Gewichte des Netzes so angepasst, dass das Netz die gegebenen Ausgabemuster selbständig assoziieren und dies im Sinne einer Generalisierung auch auf unbekannte, ähnliche Eingangsmuster übertragen kann.
- Bestärkendes Lernen: Hier liegen keine konkreten Ausgabemuster vor, jedoch gibt ein externer Lehrer für jedes Eingangsmuster vor, ob das Ausgabemuster richtig oder falsch assoziiert wurde.
- Unüberwachtes Lernen: Beim unüberwachten Lernen werden keine externen Informationen vorgegeben, d.h. es existiert kein externer Lehrer. Bei diesem Lernverfahren werden ähnliche Eingabemuster zu ähnlichen Kategorien klassifiziert. Ein Beispiel für dieses Lernverfahren sind die *self-organizing maps* oder auch Kohonen-Netze (Kohonen, 2001). Weitere Informationen zu dieser Klasse sind im Anhang zu finden.

Die Neuronen werden innerhalb des Verbindungsnetzwerks des neuronalen Netzes in Schichten angeordnet. Im einfachsten Fall gibt jedes Neuron seinen Ausgang an alle Neuronen der Folgeschicht weiter. Es bestehen keine Rückkopplungen zwischen Neuronen der gleichen oder vorangehenden Schicht(en). Abbildung 2.3 zeigt ein solches dreistufiges *feedforward*-Netz. Es besteht aus einer Schicht Eingabeneuronen (input layer), deren Zahl der der Eingangsparameter entspricht, aus 0 bis n verdeckten Schichten (hidden layer) und einer Schicht Ausgangsneuronen (output layer), die der Zahl der Ausgangsgrößen entsprechen. Die Zahl der Neuronen je verdeckter Schicht ist variabel. Die Definition der Stufen eines neuronalen Netzes ist in der Literatur nicht einheitlich und bezieht sich in dieser Arbeit auf die Anzahl der Schichten mit trainierbaren Verbindungen, in dem in Abbildung 2.3 gezeigten Beispiel aus drei Stufen.

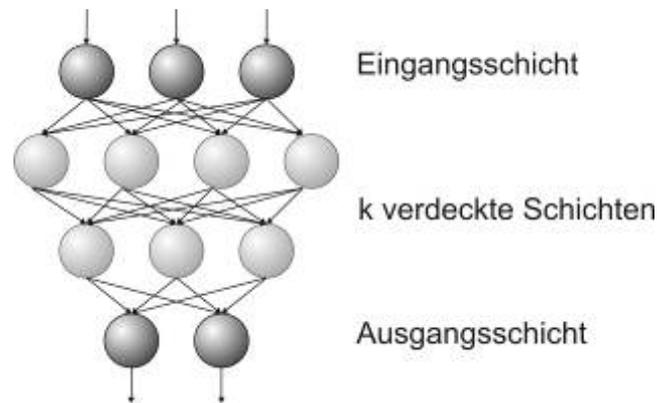


Abbildung 2.3: Beispiel eines dreistufigen feedforward-Netzwerks

Die am häufigsten anzutreffenden Strukturen neuronaler Netze betreffen die *feedforward*-Netze und die Netze mit Rückkopplungen. Feedforward-Netze sind üblicherweise ebenerweise verbunden, einige Anwendungen können jedoch *shortcut-connections*, d.h. Verbindungen, die eine oder mehrere Schichten Neuronen in Richtung der Ausgangsschicht überspringen (Abbildung 2.4a), notwendig machen. Rückkopplungen können direkt erfolgen, das heißt, der Ausgang eines Neurons wird als ein Eingang des gleichen Neurons verwendet, so dass sich das Neuron selbst verstärkt oder hemmt. Eine indirekte Rückkopplung sendet Ausgänge von Neuronen an Neuronen vorangehender Schichten zurück, um bestimmte Bereiche der Eingangsneuronen oder Eingangsmerkmale stärker zu berücksichtigen. Bei der lateralen Rückkopplung bestehen Verbindungen zwischen Neuronen der gleichen Schicht. Dieses bewirkt, dass nur ein Neuron oder eine Gruppe von Neuronen aktiv wird, indem von dort hemmende Signale an die anderen Neuronen weitergegeben werden, häufig verbunden mit einer direkten aktivierenden Rückkopplung. So kommt es zu einer so genannten „*The winner takes it all*“-Situation. Vollständig verbundene Netze sind auch als Hopfield-Netze bekannt, wobei diese keine direkten Rückkopplungen enthalten und die Netze symmetrisch aufgebaut sind (Hopfield, 1984). Ein Beispiel eines Netzes mit Rückkopplungen ist in Abbildung 2.4b gezeigt. Da es sich bei dem in dieser Arbeit verwendeten Netztyp um ein feedforward-Netz handelt, wird im Folgenden nicht weiter auf Netze mit Rückkopplungen eingegangen.

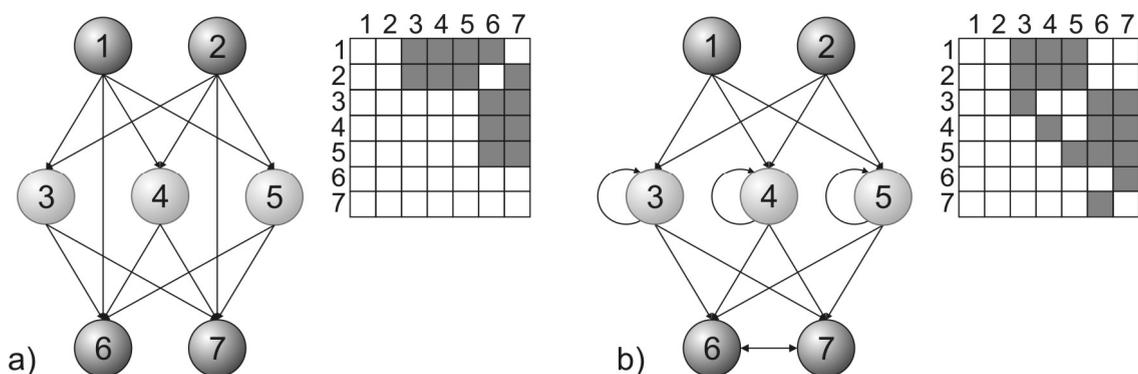


Abbildung 2.4: Beispiele für Verbindungsnetzwerke mit Verbindungsmatrizen. a) Feedforward-Netzwerk mit shortcut connections; b) Netz mit direkten und lateralen Rückkopplungen

Der Grund für die Leistungsfähigkeit der neuronalen Netze liegt in der zum Gesamtsystem einfachen Strukturierung und der verteilten Wissensrepräsentation. Das bedeutet, dass Informatio-

nen aus den Eingangsmustern in den Gewichten verteilt und inhaltsbezogen, d.h. assoziativ gespeichert sind. Hierdurch sind neuronale Netze in der Lage, das gelernte Wissen zu generalisieren und auf ähnliche Eingangsmuster anzuwenden. Die Ausgänge der einzelnen Neuronen, in Verbindung mit ihren Gewichten, führen in jedem einzelnen der verbundenen Neuronen zu einer bestimmten Aktivierung, die wiederum jeweils zu einem Ausgangssignal verarbeitet wird und an die folgenden Neuronen weitergegeben wird. Das Vorgehen ist in Abbildung 2.5 gezeigt.



Abbildung 2.5: Verarbeitung von Informationen in einem neuronalen Netz

Die Nettoeingabe eines Neurons j wird allgemein mit net_j bezeichnet und berechnet sich durch die Summation des Produkts der Ausgaben o_i der vorangehenden Neuronen i mit den Gewichten der Verbindungen w_{ij} zum Neuron j .

$$net_j(t) = \sum_i o_i(t) w_{ij} \quad (2.1)$$

Diese Funktion wird auch als Propagierungsfunktion bezeichnet.

Das Neuron j liegt in einem bestimmten Aktivierungszustand $a_j(t)$ vor. Durch die Aktivierungsfunktion f_{act} berechnet sich der neue Aktivierungszustand des Neurons j $a_j(t+1)$ aus der alten Aktivierung $a_j(t)$, der Nettoeingabe net_j und einem Schwellwert θ_j nach der allgemeinen Formel:

$$a_j(t+1) = f_{act}(a_j(t), net_j(t), \theta_j) \quad (2.2)$$

Die Ausgabe o_j einer Zelle j ergibt sich durch die Ausgabefunktion f_{out} aus der Aktivierung a_j der Zelle j .

$$o_j = f_{out}(a_j) \quad (2.3)$$

In vielen Fällen entspricht die Ausgabe o_j der Aktivierung a_j .

Der Aktivierungszustand kann diskret oder kontinuierlich sein. Kontinuierliche Aktivierungen können zwar alle reellen Werte zulassen, die meisten Anwendungen basieren jedoch auf nicht-linearen, häufig sigmoiden Aktivierungsfunktionen (auch Transferfunktionen genannt), die im Intervall von $[0,1]$ oder $[-1,1]$ liegen. Diskrete Aktivierungen werden in manchen Netzen aus theoretischen Gründen verlangt, die meist durch binäre Werte $\{0,1\}$ oder $\{-1,1\}$ realisiert werden. Abbildung 2.6 zeigt verschiedene Aktivierungsfunktionen.

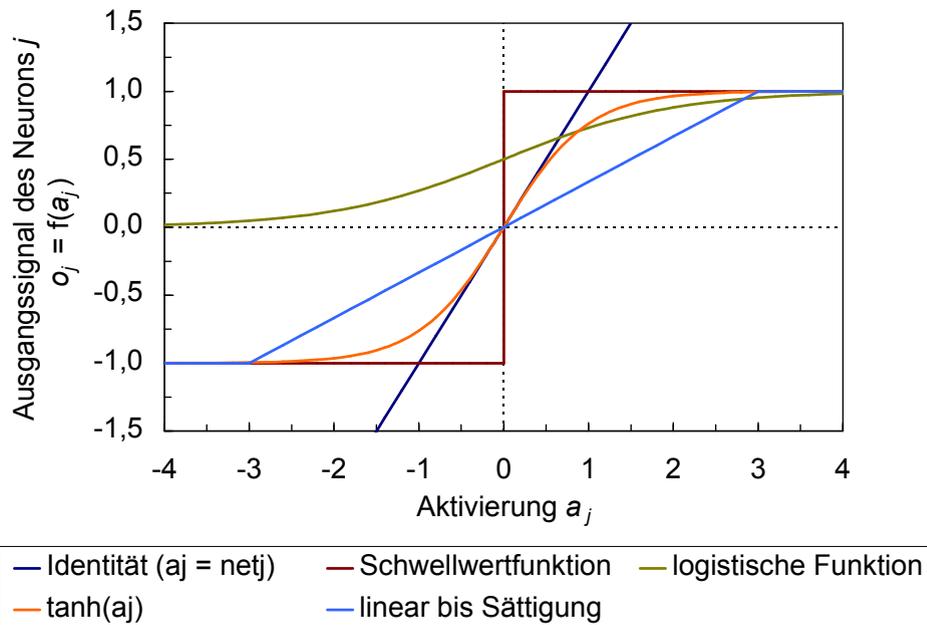


Abbildung 2.6: Beispiele für Aktivierungsfunktionen

Der Schwellwert gibt den Punkt an, ab dem ein Neuron im Falle binärer Aktivierungen feuert, im Falle einer kontinuierlichen Aktivierung ab dem es stark aktiv ist. Mathematisch betrachtet gibt der Schwellwert für kontinuierliche Aktivierungen die Stelle der höchsten Steigung monoton wachsender Funktionen an. Für die technische Umsetzung des Schwellwerts gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten. Eine ist die Berücksichtigung des Schwellwerts im Neuron selbst. In diesem Fall müssen die Schwellwerte ähnlich der Netzgewichte trainiert werden, wodurch der Programmierungsaufwand steigt. Der Netzeingang $net_j(t)$ ergibt sich wie bereits beschrieben zu

$$net_j(t) = \sum_i o_i(t) w_{ij} \quad (2.4)$$

die Aktivierung a_j zu

$$a_j(t+1) = f_{act}(a_j(t), net_j(t) - \theta_j) \quad (2.5)$$

Die biologisch unplausible aber mathematisch einfachere Methode stellt das zusätzliche Bias-Neuron dar, das einen konstanten Ausgang von 1 liefert und ebenso wie alle anderen Verbindungen über Gewichte verfügt. Sie bietet aber den Vorteil, dass die Gewichte mit den übrigen Gewichten trainiert werden können und bei den Lernregeln nicht der Sonderfall des Schwellwerts berücksichtigt werden muss. So folgt für den Netzeingang

$$net_j(t) = \left(\sum_i o_i(t) w_{ij} \right) - \theta_j \quad (2.6)$$

und für die Aktivierung

$$a_j(t+1) = f_{act}(a_j(t), net_j(t)) \quad (2.7)$$

Eine der bekanntesten Lernregeln für die Anpassung der Netzgewichte ist die Delta-Regel, ein Spezialfall der im nächsten Kapitel ausführlich beschriebenen Backpropagation-Regel. Die Gewichtsänderung bei Anwendung der Delta-Regel ist proportional zur Differenz δ_j zwischen der erwarteten Ausgabe t_j (*teaching input*) und der aktuellen Aktivierung a_j des Neurons j .

$$\Delta w_{ij} = \eta o_i (t_j - a_j) = \eta \delta_j o_i \quad (2.8)$$

Hier ist Δw_{ij} die Änderung des Gewichts w_{ij} und η eine Konstante, die als Lernrate bezeichnet wird und die Schrittweite der Fehleranpassung beschreibt. Durch den Vergleich mit einer Lerneingabe handelt es sich bei der Delta-Regel um ein überwachtes Lernverfahren. Voraussetzung für die Anwendbarkeit ist ein einstufiges Netz mit linearer Aktivierungsfunktion.

2.1.3 Der Backpropagation-Algorithmus

Eines der am weitesten verbreiteten Verfahren zur Anpassung der Netzgewichte in der Prozessmodellierung ist der Backpropagation-Algorithmus nach Rumelhart et al. (1986), der bei Multilayer-Perzeptron Netzen (MLP-Netzen) angewandt wird. Hierbei handelt es sich um ein Gradientenabstiegsverfahren. Trägt man den Fehler des neuronalen Netzes gegen die Gewichte auf, so erhält man eine n-dimensionale Fehlerfläche, in der es gilt, das globale Minimum zu finden. Abbildung 2.7 zeigt das Verfahren stellvertretend für ein Netzgewicht.

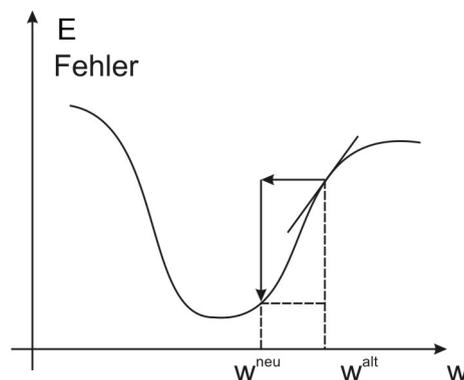


Abbildung 2.7: Anpassung eines Netzgewichts durch Gradientenabstieg

Verallgemeinert ergibt sich die Änderung aller Netzgewichte um einen Bruchteil des negativen Gradienten der Fehlerfunktion zu

$$\Delta W = -\eta \nabla E(W). \quad (2.9)$$

Der Faktor η gibt die Schrittweite des Gradientenabstiegs an und wird als Lernrate bezeichnet. Für ein einzelnes Gewicht gilt entsprechend

$$\Delta w_{ij} = -\eta \frac{\partial E(W)}{\partial w_{ij}}. \quad (2.10)$$

Bei dem Backpropagation-Algorithmus handelt es sich um ein überwachtes Lernverfahren. Daher bezieht sich der Fehler E_p eines Trainingsmusters p (*pattern*) auf die Differenz zwischen der Lerneingabe t_{pj} , also dem erwarteten Ausgang, und dem tatsächlichen Ausgang o_{pj} des Neurons j , wobei in der Regel der quadratische Abstand zugrunde gelegt wird. Der Faktor $\frac{1}{2}$ wird eingesetzt, da in der weiteren Herleitung der Backpropagationregel während einer Differenzierung der Faktor 2 entsteht und sich so gegen den hier eingesetzten Faktor herauskürzt.

$$E_p = \frac{1}{2} \sum_j (t_{pj} - o_{pj})^2 \quad (2.11)$$

Der Gesamtfehler ergibt sich folglich aus der Summe der Fehler über alle Trainingsmuster.

$$E = \sum_P E_P \quad (2.12)$$

Somit gilt für die Anpassung der einzelnen Netzgewichte

$$\Delta W_{ij} = -\eta \frac{\partial E(W)}{\partial W_{ij}} = \sum_P -\eta \frac{\partial E_P}{\partial W_{ij}} \quad (2.13)$$

Aus dieser Grundgleichung lassen sich sowohl die einfachere Delta-Regel als auch die Backpropagation-Regel ableiten, worauf an dieser Stelle verzichtet werden soll. Beide Ableitungen können beispielsweise Zell (2003) entnommen werden. In beiden Fällen sieht das Ergebnis der Ableitung zunächst gleich aus

$$\Delta W_{ij} = \eta \sum_P o_{pi} \delta_{pj} \quad (2.14)$$

wobei das δ_{pj} für beide Regeln unterschiedlich definiert ist.

$$\delta_{pj} = \begin{cases} t_{pj} - o_{pj} & \text{für die einfache Delta - Regel} \\ -\frac{\partial E_P}{\partial \text{net}_{pj}} & \text{für die Backpropagation - Regel} \end{cases} \quad (2.15)$$

Wie aus Gleichung (2.15) erkennbar ist, müssen für die Backpropagation-Regel weitere Ableitungen folgen. Zunächst sei jedoch darauf hingewiesen, dass es sich bei diesem Ergebnis um das so genannte *batch-* oder *offline-Training* handelt. Hierbei werden dem Netz zunächst alle Trainingsmuster präsentiert und alle Fehleränderungen je Muster $\Delta_p W_{ij}$ aufsummiert, bevor die Netzgewichte ΔW_{ij} endgültig angepasst werden. Nachteilig an diesem Verfahren ist jedoch der hohe Speicheraufwand für alle einzelnen Fehleränderungen $\Delta_p W_{ij}$ und vor allem die Beschränkung auf die innerhalb des Trainings präsentierten Muster. Ein Nachtraining mit neuen Mustern ist nicht möglich. Aus diesen beiden Gründen wird in der Praxis meist das *online-Training* bevorzugt, bei dem die Gewichte nach jeder Präsentation eines Trainingsmusters angepasst werden.

$$\Delta_p W_{ij} = \eta o_{pi} \delta_{pj} \quad (2.16)$$

Für die Bestimmung des Fehlers δ_{pj} der Backpropagation-Regel muss unterschieden werden, ob es sich bei dem Neuron j um eine Ausgabezelle oder um eine Zelle einer verdeckten Schicht handelt. Ist Neuron j eine Ausgabezelle, kann der Fehler des Gewichts direkt aus dem Vergleich mit der Lerneingabe bestimmt werden. Ist Neuron j jedoch eine verdeckte Zelle, hat dieses Neuron bei allen k Nachfolgezellen einen Fehler verursacht. Daher ist der Fehler δ_{pj} abhängig von allen gewichteten Fehlern δ_{pk} der Nachfolgeschicht. Der zweite Faktor, der sich aus der partiellen Ableitung des Fehlers E_P aus Gleichung (2.15) ergibt, ist die Ableitung der Aktivierungsfunktion, so dass für δ_{pj} im *online-Training* gilt

$$\delta_{pj} = \begin{cases} f'_{act}(\text{net}_{pj})(t_{pj} - o_{pj}) & \text{falls } j \text{ eine Ausgabezelle ist} \\ f'_{act}(\text{net}_{pj}) \sum_k (\delta_{pk} W_{jk}) & \text{falls } j \text{ eine verdeckte Zelle ist} \end{cases} \quad (2.17)$$

Aus Gleichung (2.17) erkennt man wiederum die Verwandtschaft zur Delta-Regel, wenn man voraussetzt, dass es sich bei Anwendung der Delta-Regel um ein einschichtiges Netz mit linearer Aktivierungsfunktion handeln muss. Die Aktivierungsfunktion bei dem Backpropagation-

Algorithmus muss stetig differenzierbar sein. In den meisten Fällen wird eine Sigmoidfunktion, d.h. s-förmige Aktivierungsfunktion, meist in Form einer logistischen Funktion oder als Funktion $\tanh(x)$, eingesetzt, da sie sensibel auf Signale großer und vor allem kleiner Amplitude reagiert, in ihrem Wertebereich beschränkt ist und ihre größte Stabilität bzw. die größte Steigung im Bereich des Arbeitspunkts (Schwellwert ϑ) hat, wobei sie aber im Gegensatz zur binären Schwellwertfunktion stetig differenzierbar ist. Die logistische Funktion ist gegeben durch

$$o_{pj} = f_{act}(net_{pj}) = \frac{1}{1 + e^{-net_{pj}}} \quad (2.18)$$

Durch Ableitung der logistischen Funktion, erhält man aus Gleichung (2.17) die folgende, häufig in der Literatur gegebene Form:

$$\delta_{pj} = \begin{cases} o_{pj}(1 - o_{pj})(t_{pj} - o_{pj}) & \text{falls } j \text{ eine Ausgabezelle ist} \\ o_{pj}(1 - o_{pj}) \sum_k (\delta_{pk} w_{jk}) & \text{falls } j \text{ eine verdeckte Zelle ist} \end{cases} \quad (2.19)$$

Eine weitere Konsequenz aus Gleichung (2.17) betrifft das Verfahren des Backpropagation-Algorithmus. Ausgehend von der Abweichung zwischen der gewünschten Lerneingabe und der Ausgabe des neuronalen Netzes werden die Fehler des Netzes rückwärts angepasst. Diesem rückwärts gerichteten Lernverfahren verdankt der Algorithmus auch seinen Namen. Abbildung 2.8 zeigt ein Schema eines Backpropagation-Netzes und das Vorgehen bei dem Training.

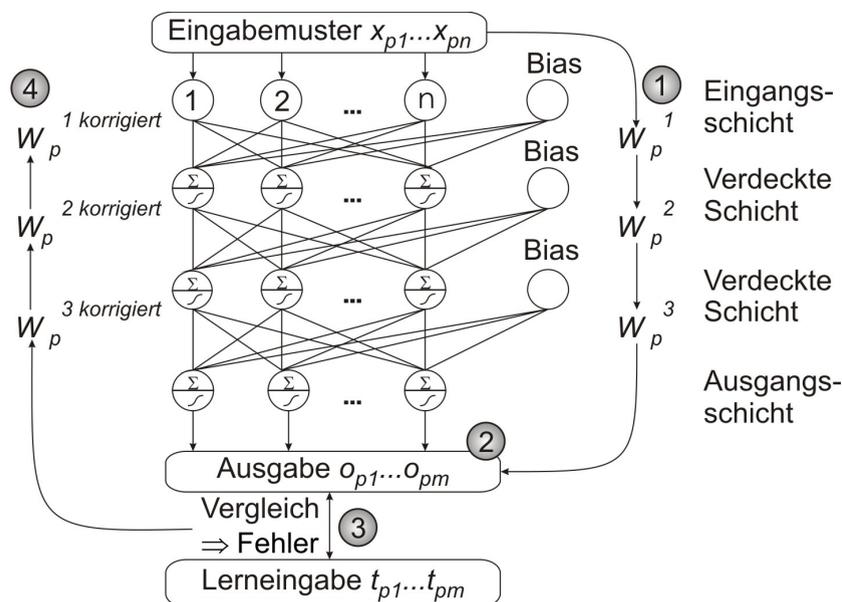


Abbildung 2.8: Backpropagation-Algorithmus. Die grau hinterlegten Zahlen entsprechen den unterhalb genannten Schritten

Folgende Schritte werden bei *online*-Backpropagation durchlaufen:

1. Initialisierung der Netzgewichte: Die Netzgewichte werden zunächst zufällig festgelegt.
2. *Vorwärtspropagierung*: Dem Netz wird ein Trainingsmuster präsentiert. Für jedes Neuron der Folgeschicht werden bei Verwendung eines Bias-Neurons die Netzeingabe net_{pj} ent-

sprechend Gleichung (2.6) und die Aktivierung bzw. die Ausgabe o_{pj} des jeweiligen Neurons nach Gleichung (2.18) berechnet und die Ausgaben an die Neuronen der Folgeschicht weitergegeben, bis die Ausgabe der Ausgangsschicht erreicht ist.

3. Vergleich der Ausgabe der Neuronen der Ausgangsschicht mit der Lerneingabe, also der erwarteten Ausgabe.
4. *Rückwärtspropagierung*: Anpassung der Netzgewichte nach Gleichung (2.19), ausgehend von den Gewichten der Ausgangsschicht zurück bis zu den Gewichten der ersten verdeckten Schicht.
5. Weiter mit Schritt 2: Dem Netz werden nacheinander alle Trainingsmuster des Trainingsdatensatzes präsentiert. Wurden alle Trainingsmuster eines Trainingsdatensatzes durchlaufen, spricht man auch von einer Epoche. Die Trainingsmuster werden in mehreren Epochen präsentiert, wobei in jeder Epoche eine andere Reihenfolge gewählt wird, damit das neuronale Netz nicht die Reihenfolge der Datensätze assoziiert.
6. Beendigung des Trainings, wenn nach Ablauf einer Epoche der Gesamtfehler des neuronalen Netzes einen vorgegebenen Wert unterschreitet oder das Training abgebrochen wird, beispielsweise nach Durchlaufen einer maximalen Anzahl an Epochen.

Nach dem bisher beschriebenen Verfahren ist der einzige anpassbare Parameter die Lernrate η . Es gibt jedoch eine Reihe von Problemen bei den Lernverfahren, von denen an dieser Stelle einige nur kurz angesprochen werden sollen, da sie zwar interessant, aber für den weiteren Verlauf der Arbeit nicht ausschlaggebend sind.

Je höher ein neuronales Netz dimensioniert ist, desto größer wird die Gefahr, aufgrund der zunehmenden Zerklüftung der Fehlerfläche in ein lokales Minimum zu laufen und dort hängen zu bleiben. Hier wird die Anpassung der Lernrate besonders wichtig, wobei allerdings keine Regel existiert, wonach sie einzustellen ist (Zell, 2003). Nach Rumelhart et al. (1986) sollte die Lernrate so groß wie möglich eingestellt werden, ohne dass es zu Oszillationen kommt. Grundsätzlich gilt (Atlan-tec, 2007):

Große Lernraten führen zu:

- Schneller Konvergenz
- Überspringen lokaler Optima (Fehlerminima)
- Schwingungsneigung des neuronalen Netzes

Kleine Lernraten führen zu:

- Sehr langsamer Konvergenz
- „festlaufen“ in lokalen Optima
- hohe Konvergenzstabilität

Oszillationen und weitere Probleme durch eine zerklüftete Fehlerfläche sind in Abbildung 2.9 gezeigt.

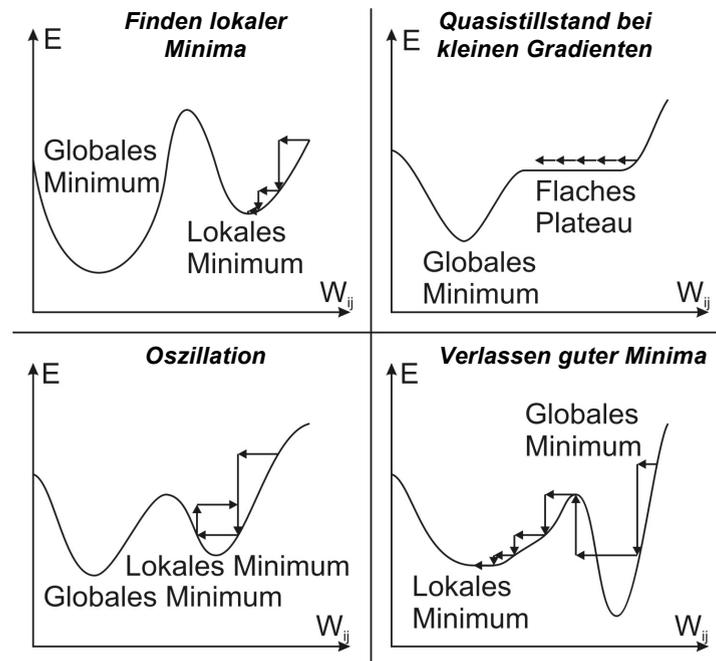


Abbildung 2.9: Probleme beim Auffinden des globalen Minimums

Ein weiteres Hindernis des Gradientenabstiegsverfahrens stellen flache Plateaus dar, denn da sich die Anpassung der Gewichte am Betrag des Gradienten orientiert, ergibt sich bei einem völlig flachen Plateau ein Nullvektor, der auch in lokalen oder globalen Minima auftritt. Bei einem geringen Gradienten steigt zumindest die Zahl der Iterationsschritte stark an. Um diesem Problem entgegenzuwirken, erfolgte nach Rumelhart et al. (1986) das Hinzufügen des Momentum-Terms α , der die Schrittweite durch Einbeziehung der letzten Gewichtsänderung $\Delta_p w_{ij}(t)$ an die Form der Fehlerfläche anpasst. Backpropagation mit Momentum-Term wird auch oft als *Konjugierte Gradientenverfahren* bezeichnet.

$$\Delta_p w_{ij}(t+1) = \eta \sigma_{pj} \delta_{pj} + \alpha \Delta_p w_{ij}(t) \quad (2.20)$$

Der Momentum-Term bewirkt eine erhöhte Gewichtsänderung bei flachen Plateaus, verringert hingegen ihre Änderung in stark zerklüfteten Gebieten. Übliche Werte für diesen Faktor liegen zwischen 0,2 und 0,99, wobei ein Bereich zwischen 0,6 und 0,9 als besonders günstig angesehen wird (Zell, 2003).

Auch bei Minima mit steilen Flanken, bei denen es durch Überspringen des Minimums auf die jeweils gegenüberliegende Seite der Schlucht zu Oszillation kommen kann, wirkt sich der Momentum-Term günstig aus und eliminiert bestenfalls dieses Problem. Hinderlich können sich der Momentum-Term und die Erhöhung der Schrittweite hingegen bei sehr engen, guten Minima auswirken, die bei zu großen Gewichtsänderungen einfach übersprungen werden.

Ein weiteres Problem betrifft die Anpassung der Netzgewichte. Werden alle Netzgewichte zu Beginn des Trainings gleich angelegt, werden die Netzgewichte je Schicht abgesehen von den Gewichten der Ausgangsschicht immer gleich sein. Dieser Effekt wird auch *symmetry breaking* genannt. Sind die Gewichte jeder Verbindung gleich initialisiert, so erhält jedes Neuron der letzten verdeckten Schicht in der Summe den gleichen Fehler. Da sich die Gewichte der verdeckten Schichten proportional zu den gewichteten Fehlern der Vorgängerschicht ändern, müssen

die Gewichte der verdeckten Schichten konstant bleiben. Diesem Problem kann man einfach entgegenwirken, indem die Netzgewichte zu Beginn des Trainings zufällig initialisiert werden (Rumelhart et al., 1986). Eine Wahl möglichst kleiner zufälliger Initialisierungen bewirkt, dass die Netzeingaben bei einem Schwellwert von $\theta = 0$ und einer logistischen Aktivierungsfunktion im Bereich der größten Steigungen liegen, so dass sich die Anpassung der Netzgewichte stark beschleunigt (Zell, 2003).

2.2 Der Flockungsprozess und seine Modellierung mit neuronalen Netzen

2.2.1 Die Bedeutung der Flockung in der Trinkwasseraufbereitung

Die Flockung ist eines der am häufigsten eingesetzten Verfahren zur Trinkwasseraufbereitung. Sie dient in erster Linie der Entfernung fein verteilter, kolloidaler Trübstoffe im Größenbereich von 10 nm bis 1 μm und kleiner suspendierter partikulärer Inhaltsstoffe über 1 μm , bei denen die Sedimentationszeiten für technische Anwendungen zu groß sind. Ziel ist die Agglomeration dieser Partikel zu größeren Verbänden durch die Zugabe von Flockungsmitteln. In dem Zuge werden auch an den Teilchen haftende organische Verunreinigungen und Spurenmetalle sowie Mikroorganismen (Viren, Bakterien und Protozoen) in die Flocken eingebunden. Spielen bei der Flockung Fällungsprozesse eine Rolle, kann auch ein Teil der gelösten organischen und anorganischen Stoffe abgetrennt werden. Auf diese Weise kann die Färbung des Wassers durch Huminstoffe reduziert und die Gefahr der Bildung von Nebenprodukten aus organischen Stoffen durch eine abschließende Desinfektion mit Chlor verringert werden.

Vorrangig ist die Flockung bei der Aufbereitung von Oberflächenwasser anzutreffen, da dieses praktisch immer Trübstoffe enthält, sie kann aber auch eine Rolle bei der Aufbereitung von Grundwasser spielen, sobald Fällungsverfahren wie Enteisenung, Entmanganung oder Entcarbonisierung eingesetzt werden. Je nach anfallendem Feststoffanteil durch die Flockung wird die weitergehende Aufbereitung in der Regel durch Filtration oder Flotation gewährleistet, wobei bei einem hohen Feststoffanteil eine Sedimentation als Zwischenstufe zur Grobreinigung eingesetzt wird. Die Flotation ist ein recht seltenes Verfahren, das jedoch gerade bei spezifisch leichten Trübstoffen und Flocken vorteilhaft sein kann. In den letzten Jahren hat auch die Membrantechnik in Kombination mit einer Flockung zur direkten Trinkwasseraufbereitung stark an Bedeutung gewonnen (Lerch et al., 2003).

2.2.2 Mechanismen der Flockung

Neben der Größe der Partikel spielt bei der Flockung die Stabilisierung der kolloidalen Dispersion eine große Rolle, die zum einen durch negative Ladung an der Grenzfläche zwischen Kolloid und Wasser und den damit verbundenen elektrostatischen Abstoßungskräften und zum anderen durch die Hydratisierung von hydrophilen Kolloidoberflächen entsteht.

Die verantwortlichen Mechanismen zur Entstehung von Oberflächenladungen auf Partikeln im Wasser wurden durch (Stumm und Morgan, 1962) beschrieben. Oberflächenladungen entstehen durch die Ionisierung von funktionellen Gruppen wie z.B. $-\text{COOH}$, $-\text{OH}$ oder $-\text{NH}_2$. Die resultierenden Ladungen sind vom pH-Wert des Wassers abhängig, wobei positive Ladungen nur bei sehr geringen pH-Werten auftreten. Somit tragen Kolloide in natürlichen Wässern prak-

tisch immer negative Ladungen. Bei Tonmineralien können auch Ionenaustauschvorgänge für eine negative Oberflächenladung verantwortlich sein. Die so genannten Gitterimperfectionen sind jedoch weitestgehend unabhängig von äußeren Einflüssen. Ein weiterer Mechanismus ist die Adsorption grenzflächenaktiver, ionischer Stoffe, zu denen auch viele natürliche Stoffe wie Huminstoffe oder Alginat zählen. Da jedoch nie reine Kolloide vorliegen, ist eine Vorhersage der exakten Oberflächenladung nicht möglich.

Durch die negative Oberflächenladung entsteht nach Modellvorstellungen von Gouy und Chapman eine diffuse elektrische Doppelschicht, da zum Ausgleich der negativen Ladungen weitaus mehr positiv geladene Ionen (Gegenionen) von dem negativ geladenen Partikel angezogen werden als gleichgeladene (Coionen). Aufgrund der Brown'schen Molekularbewegung bleiben die Gegenionen jedoch nicht an der Oberfläche haften sondern halten sich nur statistisch verteilt bevorzugt in der Nähe der Partikel auf. Diese Modellvorstellung wurde durch Stern erweitert, der annimmt, dass die Ionengröße die innere Grenze des diffusiven Teils der Doppelschicht limitiert, da das Zentrum eines Ions nur entsprechend seines (hydrierten) Radius an die Partikeloberfläche herankommen kann, ohne adsorbiert zu werden. Aus dieser Modellvorstellung resultiert die Darstellung der diffusen Schicht bestehend aus zwei Teilen, wobei die innere Sternschicht der Breite eines hydrierten Ionendurchmessers entspricht (s. Abbildung 2.10). Die Reichweite des Potentials liegt im Bereich von 2 bis 25 nm und hängt von Ladung und Konzentration der Gegenionen in Lösung ab. Da die Ionen der Sternschicht an der negativ geladenen Oberfläche festgehalten werden, bildet sich bei Elektrophorese an der Grenze der Sternschicht eine Scherfläche aus. Aus der Wanderungsgeschwindigkeit (elektrophoretische Beweglichkeit) der Ionen kann das Potential an der Scherfläche bestimmt werden (Zetapotential ψ_m). Die Debye-Länge λ gibt den Abstand von der Partikeloberfläche bei Abfall des Potentials auf das 1/e-fache an und bestimmt die Reichweite der elektrostatischen Abstoßung.

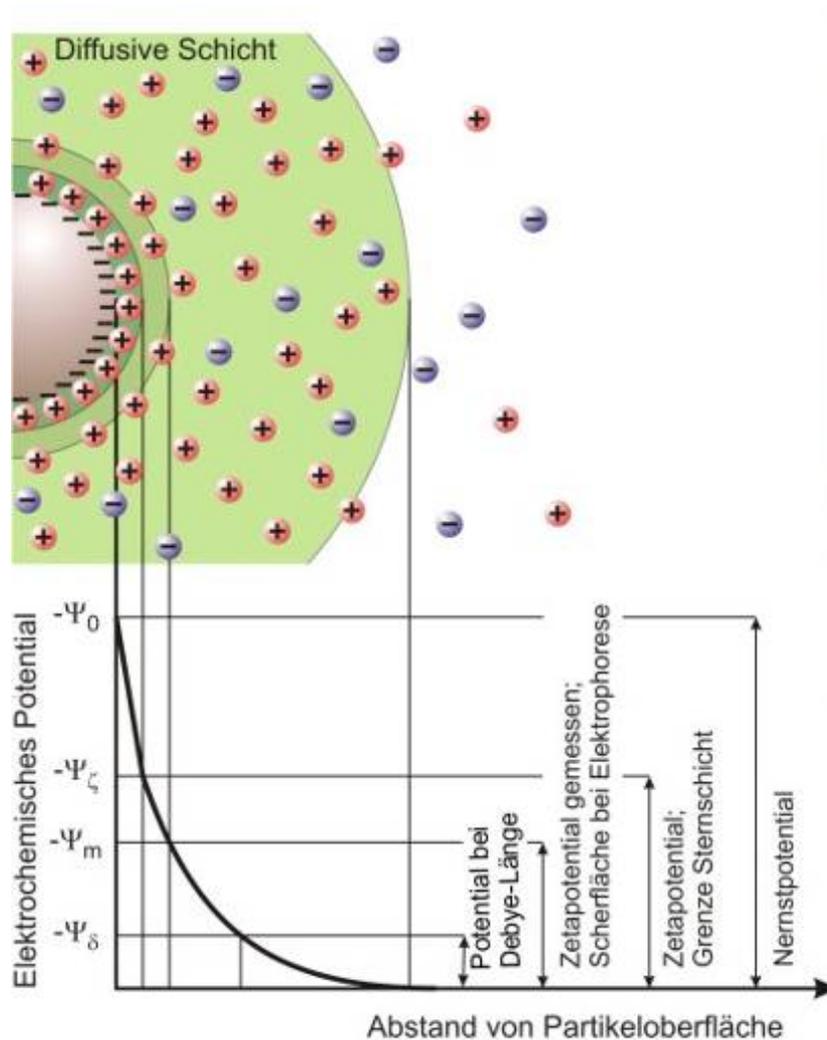


Abbildung 2.10: Ausbildung einer elektrischen Doppelschicht bei negativ geladenen Kolloiden

Ziel der Flockung ist es, die Reichweite der elektrostatischen Abstoßung soweit herabzusetzen, dass van-der-Waalsche Anziehungskräfte überwiegen und Partikel sich zusammenlagern können. Dieser Vorgang wird auch als Entstabilisierung bezeichnet. Van-der-Waals-Kräfte beruhen auf nicht vollkompensierten Ladungs- oder Potentialeffekten oder ungleich verteilten Ladungen im Mikraufbau der Materie (fluktuierende Dipole) und bewirken ein Bestreben zur Zusammenlagerung von Partikeln (Jekel, 2004). Die elektrostatische Abstoßung durch die elektrische Doppelschicht wirkt den van-der-Waals-Kräften entgegen und ist in größerem Abstand zur Partikeloberfläche dominierend. Häufig reicht die kinetische Energie der Partikel jedoch nicht aus, um das aus der Summe der elektrostatischen Abstoßung und van-der-Waals-Anziehung resultierende Potential zu überwinden, um in die Region hoher van-der-Waals-Anziehung zu gelangen (Resultierende 1 in Abbildung 2.11). Entsprechend liegen die Partikel stabilisiert in der Suspension vor. Durch die Entstabilisierung wird die elektrostatische Abstoßung so weit herabgesetzt, dass die kinetische Energie der Partikel ausreicht, um das Maximum des Potentials zu überwinden (Resultierende 2 in Abbildung 2.11), bzw. dass das Maximum in der Summenkurve aufgehoben wird.

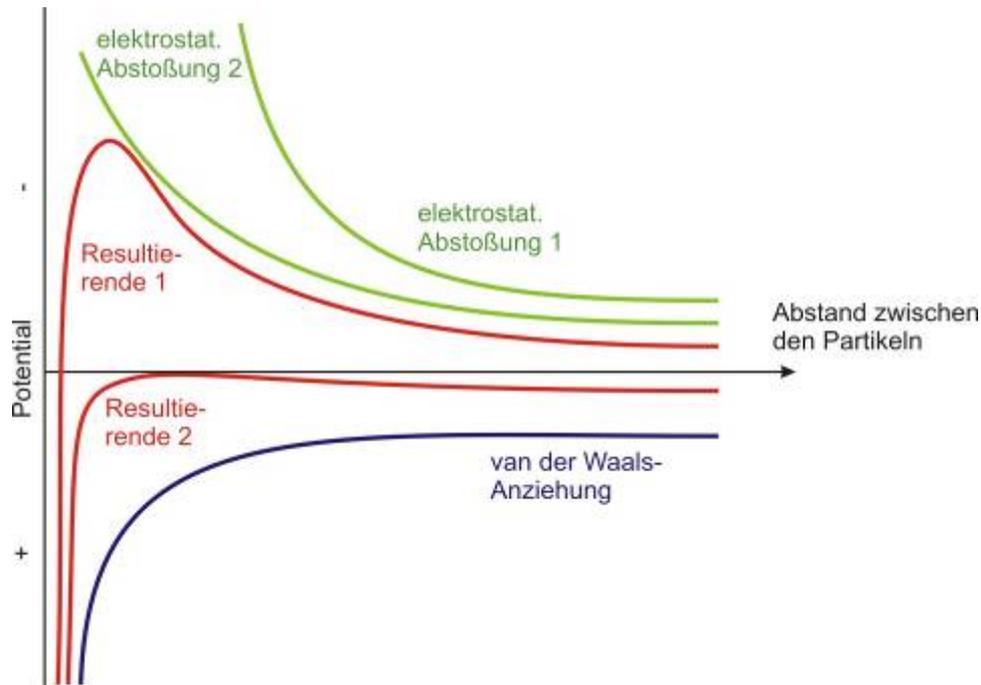
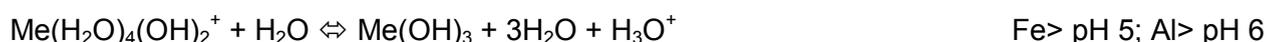


Abbildung 2.11: Schema der Wechselwirkung zwischen elektrostatischer Abstoßung und van-der-Waals-Anziehung

Die Dicke der elektrostatischen Doppelschicht hängt von der Konzentration und Ladung der Gegenionen ab. Durch Erhöhung der Konzentration und/oder Ladung lässt sich daher die Reichweite der elektrostatischen Abstoßung (Debye-Länge λ) soweit herabsetzen, dass van-der-Waals-Kräfte wirksam werden können. Diese Methode spielt in der Trinkwasseraufbereitung jedoch keine große Rolle, da die Ionenstärke durch die notwendige Ionenkonzentration die Trinkwassergrenzwerte überschreiten würde.

Daher werden positiv geladene Flockungsmittel zugesetzt, die durch Adsorption die negative Oberflächenladung neutralisieren. Als Flockungsmittel werden Salze des dreiwertigen Eisen- oder Aluminiumions eingesetzt. An die Metallkationen lagern sich aufgrund der hohen Ladung sechs Wassermoleküle unter Bildung von Hexaquo-Komplexen $\text{Me}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$ an, die nur in stark saurem Medium beständig sind und mit steigendem pH-Wert fortlaufend hydrolysiert werden ($\text{Me} = \text{Al}^{3+}$ bzw. Fe^{3+}) (Baes und Mesmer, 1976).



Die gelösten hydrolysierten Zwischenprodukte neigen zur Polymerisation (z.B. $\text{Al}_3(\text{OH})_4^{5+}$), sind stark kationisch geladen und zeigen eine hohe Tendenz zur Anlagerung an negative Feststoffoberflächen. Der Ersatz nur eines Wassermoleküls durch ein Hydroxidion erhöht die Adsorptionsfähigkeit der Hydrolyseprodukte deutlich (Stumm und O'Melia, 1968). Vor allem bei Gegeni-

onen mit hoher Ladungsdichte kann es jedoch auch zu einer Ladungsumkehr und damit erneuter Restabilisierung kommen.

Bei mittleren pH-Werten (pH6 für Al; pH5 für Fe) bilden sich unlösliche Neutralverbindungen $\text{Me}(\text{OH})_3$ als voluminöse Niederschläge in Flockenform mit so geringer Löslichkeit der Hydroxide, dass die Metalle im pH-Optimum weitgehend entfernt werden können. Die Hydroxide schließen andere disperse Feststoffe in die entstehenden Flocken ein. Aus diesem Grund wird der Prozess auch als Mitfällung bezeichnet. Die Eigenschaften der Kolloide haben hier keinen Einfluss auf den Flockungsvorgang. Die Dosiermenge ist wenig abhängig von der Trübstoffkonzentration und es besteht keine Restabilisierungsgefahr. Al-/Fe-Hydroxo-Verbindungen können auch mit organischen Verbindungen reagieren, so dass ein zum gelösten organischen Kohlenstoff (DOC) proportionaler Mehrverbrauch an Flockungsmittel verursacht wird (Amirtharajah und Tambo, 1991).

Die Mitfällung spielt auch eine Rolle bei der Entstabilisierung von hydrophilen Kolloiden, wo elektrostatische Abstoßungskräfte aufgrund der starken Hydratisierung eine untergeordnete Rolle spielen. Zur Einbindung in die Flocken kommt es wahrscheinlich durch Komplexbildung der Metallionen mit Liganden wie Phosphaten, Pyrophosphaten, Salicylaten oder Oxalaten, die häufig als funktionelle Gruppen hydrophiler Kolloide vorkommen (Jekel und Gimbel, 1994).

Ein weiterer Mechanismus der Entstabilisierung ist die Adsorptionsbrückenbildung, bei der geradkettige, wasserlösliche Polymere mit Molmassen von ca. 10^4 bis 10^7 g/mol Brücken zwischen zwei Partikeln durch Adsorption auf zwei Partikeloberflächen bilden. Die Möglichkeit der Brückenbildung hängt sowohl von der Menge der freien Polymergruppen als auch vom Belegungsgrad der Partikel mit Polymer ab (Hunter, 2001). Polymere werden in der Regel als sogenannte Flockungshilfsmittel eingesetzt und dienen der Verbesserung des Flockungsprozesses und der Bildung voluminöser, schersfester und gut abtrennbarer Flocken.

Der Einsatz von Flockungsmitteln und Flockungshilfsmitteln wird auch begrifflich getrennt. Die Phase der Entstabilisierung und Beginn der Zusammenlagerung von Partikeln vor Zugabe von Flockungshilfsmitteln heißt Koagulation, während der Prozess bei Einsatz von langkettigen Polymeren zur Bildung großer Flocken mittels Adsorptionsbrückenbildung im Allgemeinen als Flocculation bezeichnet wird.

2.2.3 Die Kinetik der Flockung

Die Entstabilisierung ist ein Vorgang, der im Sekundenbereich stattfindet. Entscheidend ist daher eine möglichst schnelle und gleichmäßige Einmischung der Flockungsmittel. Der erste sehr schnelle Schritt der Flockung wird als perikinetische Flockung bezeichnet, bei dem die Diffusion der Partikel durch Brownsche Molekularbewegung überwiegt und somit auf eine Partikelgröße kleiner als $1\mu\text{m}$ beschränkt ist. Für die anfängliche Koagulationsrate, d.h. die Abnahme der Teilchenzahl N pro Zeiteinheit t , mit dem Kollisionswirksamkeitsfaktor α_p gilt:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\alpha_p \cdot \frac{4kT}{3\mu} \cdot N^2 \quad (2.21)$$

Bei dem zweiten, häufig geschwindigkeitsbestimmenden Schritt der Flockenbildung überwiegt der konvektive Transport der Partikel. Hier ist die Aufprägung eines Geschwindigkeitsgradienten

ten G notwendig, um durch unterschiedliche Teilchengeschwindigkeiten den Kontakt der Partikel untereinander zu ermöglichen. Dieser Schritt wird auch als orthokinetische Flockung bezeichnet. Für die Koagulationsrate durch konvektiven Transport in der Anfangsphase gilt mit dem Kollisionswirksamkeitsfaktor α_o und der gesamten Feststoffvolumenkonzentration Φ :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\alpha_o \cdot \frac{4}{\pi} \cdot \Phi \cdot G \cdot N \quad (2.22)$$

Diese Beziehung gilt streng genommen nur für konstante Geschwindigkeitsgradienten. In der Praxis wird für ein Flockungsbecken mit Rührer häufig ein mittlerer Geschwindigkeitsgradient genutzt (DVGW, 1987).

$$\bar{G} = \left[\frac{P}{\mu \cdot V} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.23)$$

Die Flockenbildungsgeschwindigkeit ist nach Gleichung (2.22) somit von der Anzahl der Partikel und dem Energieeintrag abhängig. Ein größerer Energieeintrag bewirkt zwar eine höhere Flockenbildungsgeschwindigkeit, mit steigendem Energieeintrag nimmt jedoch der Einfluss der Scherkräfte zu, so dass die Flockengröße hierdurch limitiert wird. In der Praxis kann diesen einander entgegenwirkenden Effekten beispielsweise durch mehrstufige Flockungsreaktoren mit fallendem Schergradienten bzw. Energieeintrag Rechnung getragen werden.

Der Kollisionswirksamkeitsfaktor α beschreibt das Verhältnis erfolgreicher Kollisionen zur Gesamtzahl der Kollisionen, da nicht alle Kollisionen zu permanenter Aggregation führen. Der Erfolg einer Kollision hängt von sterischen, hydrodynamischen, elektrostatischen und elektrodynamischen Wechselwirkungen ab (Mälzer et al., 2002).

2.2.4 Einflussfaktoren auf den Flockungsprozess

Für eine optimale Einstellung der Flockungsbedingungen spielen verschiedene Parameter, sowohl betriebstechnische Faktoren als auch Rohwasserqualitätsmerkmale, eine Rolle. Dies sind vor allem die Partikelkonzentration, die Art des Flockungsmittels und seine Konzentration, der pH-Wert und die Temperatur. Aber auch Vorbehandlungsmaßnahmen wie die Ozonung oder Wasserinhaltsstoffe wie organische Stoffe können den Flockungsprozess maßgeblich beeinflussen.

Abbildung 2.12 zeigt den Einfluss der Flockungsmittelmenge und der Partikelkonzentration bei einem konstanten pH-Wert, der in etwa im Bereich zwischen pH 4 und pH 5 liegt. Zu beachten ist bei dieser Darstellung, dass sich die verschiedenen Zonen durch eine Veränderung des pH-Werts verschieben oder verändern können.

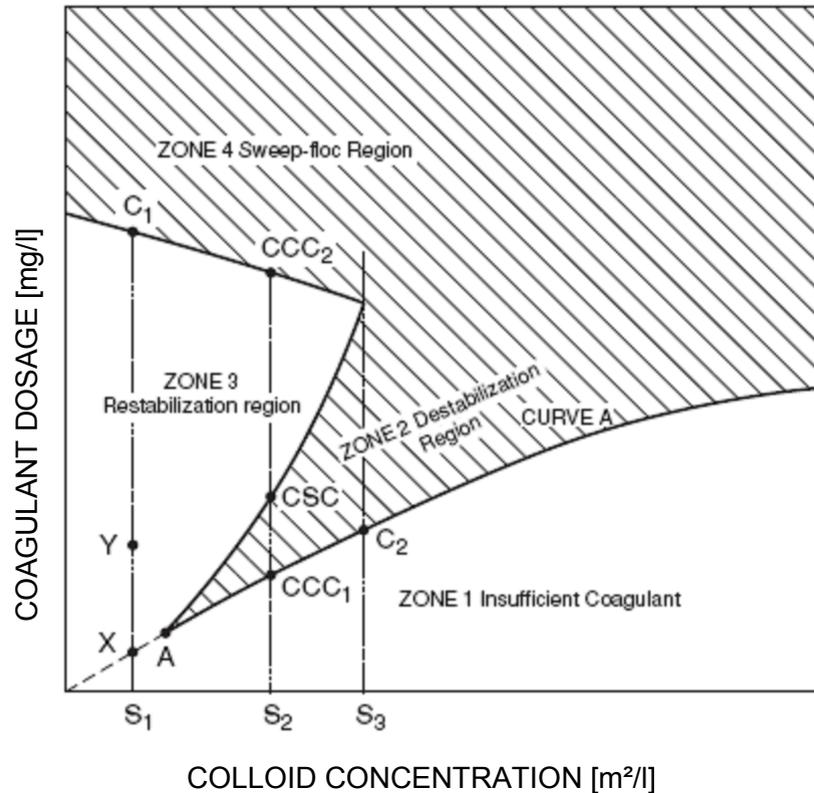


Abbildung 2.12: Einfluss der Partikelkonzentration und der Flockungsmittelmenge auf die Flockung bei konstantem pH-Wert (nach Stumm und O'Melia (1968))

Bei sehr niedrigen Partikelkonzentrationen ist die Flockenbildung aufgrund der niedrigen Partikel-Partikel Wechselwirkung problematisch. Eine Flockung wird erst bei hohen Flockungsmittelkonzentrationen durch Mitfällung, auch Sweep-Koagulation genannt, möglich.

Bei steigender Partikelkonzentration entsteht mit zunehmender Flockungsmittelzugabe zunächst eine Zone, in der die Entstabilisierung durch Adsorption von Flockungsmittel dominierend ist. In einem kurzen Bereich kann es zu einer Restabilisierung kommen, durch weitere Erhöhung der Flockungsmittelkonzentration gelangt man in einen Bereich, in dem der Flockungsprozess auf Mitfällung beruht. Die Zone der Entstabilisierung durch Adsorption wird mit zunehmender Partikelkonzentration breiter, so dass bei hoher Partikelkonzentration der Bereich der Restabilisierung entfällt und die Entstabilisierungszone direkt in den Bereich der Mitfällung übergeht.

Die Grenze für unzureichende Flockungsmittelzugabe (CURVE A in Abbildung 2.12) beschreibt mit zunehmender Kolloidkonzentration die Form einer Sättigungskurve, so dass hier die Modellvorstellung von Gouy-Chapman greift, die beinhaltet, dass die Kolloidkonzentration keinen Einfluss auf die Flockungsmittelmenge hat, die für eine ausreichende Destabilisierung notwendig ist. Adsorptionsvorgänge spielen in diesem Fall eine untergeordnete Rolle. Der Flockungsprozess wird durch die Kompression der elektrischen Doppelschicht aufgrund zunehmender Ionenstärke dominiert.

Gerade bei Verwendung von Al^{3+} - und Fe^{3+} -Salzen spielt der pH-Wert eine sehr große Rolle, da hierdurch die Art der Hydrolyseprodukte und damit die Art des Flockungsprozesses eingestellt werden kann.

Bei niedrigen pH-Werten liegen vorwiegend aquo-Metallionen vor, die schlecht adsorbieren. Daher ist eine Flockung nur durch die Kompression der elektrischen Doppelschicht mit entsprechend hoher Flockungsmittelkonzentration möglich. Mit steigendem pH-Wert nimmt die Zahl der Hydrolyseprodukte zu, so dass Adsorptionsvorgänge immer stärker in den Vordergrund treten. Bei geringen Partikelkonzentrationen kann somit die Gefahr der Restabilisierung bestehen. Im mittleren pH-Bereich entstehen vermehrt schwer lösliche Hydroxidverbindungen, wodurch die Mitfällung durch Hydroxidflocken die dominierende Rolle spielt. Darüber hinaus steigt die Zahl negativ geladener Hydrolyseprodukte, die die Flockung zunehmend erschweren. Die optimalen pH-Bereiche für eine Flockung sind für beide Metallsalze unterschiedlich, wobei die Flockung bei Einsatz von Fe^{3+} -Salzen weniger sensitiv auf Änderungen des pH-Werts reagiert als bei Al^{3+} -Salzen, da der Bereich der vorherrschenden Hydroxidverbindungen bei Eisen wesentlich breiter und die Löslichkeit wesentlich geringer ist (Amirtharajah und Mills, 1982, Johnson und Amirtharajah, 1983). Das Phasendiagramm für Eisen ist in Abbildung 2.13 gezeigt.

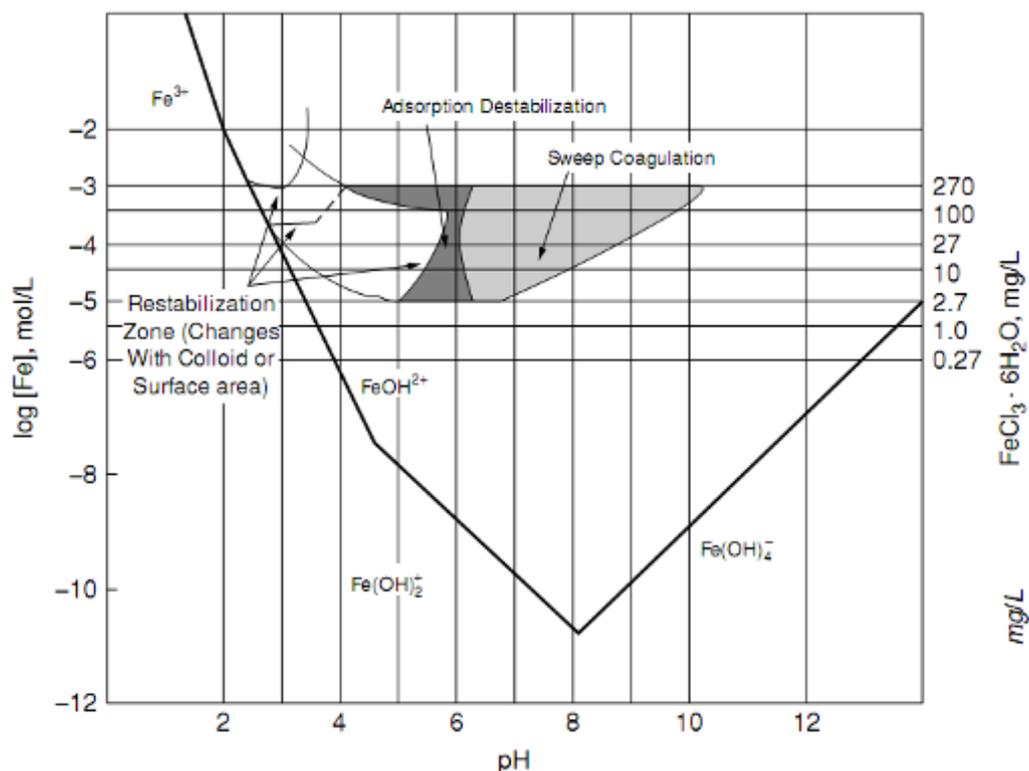


Abbildung 2.13: Phasendiagramm für Eisen (Bratby, 2006), (nach Johnson und Amirtharajah (1983))

Wie Gleichung (2.22) zeigt, ist der geschwindigkeitsbestimmende Schritt – die orthokinetische Flockung – abhängig vom Energieeintrag. Dabei nimmt die Flockenbildungsgeschwindigkeit mit zunehmendem Energieeintrag zu. Die sich bildende Flockengröße und damit die Abnahme der Teilchenzahl werden jedoch mit steigendem Energieeintrag durch die Wirkung von Scherkräften, die zu einer Zerstörung der Flocken führen, limitiert. Der Zusammenhang ist schematisch in Abbildung 2.14 dargestellt.

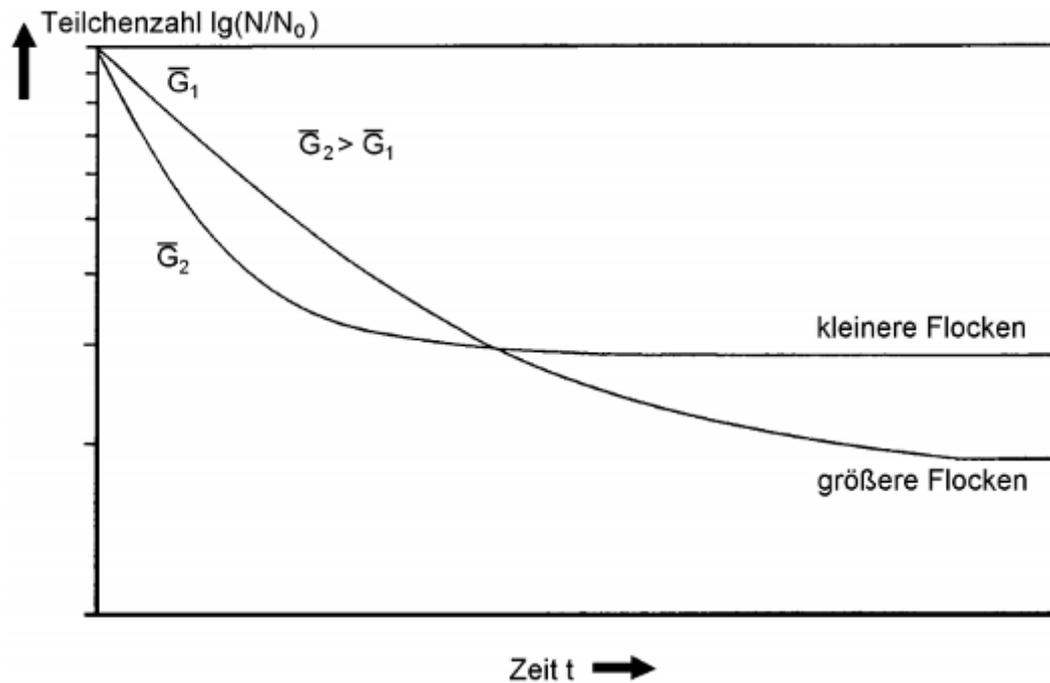


Abbildung 2.14: Einfluss des Energieeintrags aufgrund unterschiedlicher Geschwindigkeitsgradienten auf die Flockenbildung (Jekel, 2004)

Demnach spielt die Flockenstabilität eine große Rolle im Flockungsprozess. Yeung und Pelton (1996) wiesen nach, dass kein Zusammenhang zwischen der Größe und der Stabilität von Flocken besteht, so dass die in warmem Wasser gebildeten größeren Flocken (Hanson und Cleasby, 1990) nicht zwangsläufig stabiler sein müssen. Kleine Flocken haben im Mittel eine höhere Dichte und sind wahrscheinlich dadurch stabiler, dass mehr Kontaktpunkte zwischen den Partikeln aufgrund einer höheren Packungsdichte entstehen (Dyer und Manning, 1999). Die Stabilität der Flocken ist abhängig von der Scherrate; die größte Stabilität wird jedoch nicht am Flockungsmaximum erreicht (Yeung et al., 1997). Fitzpatrick et al. (2004) zeigen eine mit höherer Temperatur abnehmende Stabilität der Flocken, ein erneutes Flockenwachstum ist jedoch bei höheren Temperaturen besser, wobei die ursprüngliche Flockengröße in der Regel nicht wieder erreicht wird (Yukselen und Gregory, 2002). Bei eisenhaltigen Flockungsmitteln entstehen unabhängig von der Temperatur stabilere Flocken als bei aluminiumhaltigen (Hanson und Cleasby, 1990).

Die Temperatur führt vor allem bei sehr niedrigen Werten unter 5°C - 10°C zu einer deutlichen Verschlechterung der Flockung. Zunächst nimmt die Löslichkeit von $\text{Fe}(\text{OH})_3$ und $\text{Al}(\text{OH})_3$ mit abnehmender Temperatur ab und das pH-Optimum steigt leicht an (Letterman et al., 1999). Bei sehr niedrigen Temperaturen verläuft die Flockung langsamer (Hanson und Cleasby, 1990), wobei sich die niedrigere Geschwindigkeit vor allem in der Flockenbildungsphase nicht aber beim Flockenwachstum bemerkbar macht (Xiao et al., 2008). Zudem sind die bei niedrigen Temperaturen gebildeten Flocken kleiner (Hanson und Cleasby, 1990, Fitzpatrick et al., 2004) und negative Temperatureffekte wirken sich deutlicher bei stark verdünnten Suspensionen aus (Letterman et al., 1999). Änderungen der Temperatur machen sich stärker bei Mitfällung bemerkbar als bei Adsorptionsmechanismen (Morris und Knocke, 1984). Die Fällungsrate ist bei der Mitfällung jedoch unabhängig von der Temperatur. Die sinkende Trübungselimination ist auf

eine geringere Partikelgröße zurückzuführen, so dass weniger Partikel durch die Fällungsprodukte eingeschlossen oder angelagert werden.

Grundsätzlich zeigen aluminiumhaltige Flockungsmittel eine stärkere Temperaturabhängigkeit als eisenhaltige (Morris und Knocke, 1984, Fitzpatrick et al., 2004), die bei niedrigerer Trübung noch stärker ausgeprägt ist (Johnson und Amirtharajah, 1983, Morris und Knocke, 1984). Die Temperaturabhängigkeit nimmt mit höheren Aluminium-Konzentrationen ab (Fitzpatrick et al., 2004). Nach Hanson und Cleasby (1990) liegt die schlechtere Wirksamkeit von aluminiumhaltigen Flockungsmitteln bei niedriger Temperatur an einer Verschiebung des pH-Optimums für die Mitfällung. Durch Anpassung des pH-Werts bei konstanten pOH nach

$$pH + pOH = pK_W^* \quad (2.24)$$

entsprechend der Temperaturabhängigkeit des pK_W -Werts mit

$$pK_W^* = 0,01706 \cdot T + \frac{4470,99}{T} - 6,0875 \quad (2.25)$$

könnten negative Temperatureffekte abgefangen werden (Van Benschoten et al., 1992). Die gleiche Effektivität wie bei höheren Temperaturen ist jedoch nicht erreichbar (Kang und Cleasby, 1995). Weitere Gründe für die schlechtere Wirksamkeit aluminiumhaltiger Flockungsmittel können eine niedrigere Flockendichte (Hanson und Cleasby, 1990) und eine niedrigere Aggregatgröße sein (Morris und Knocke, 1984).

Einen großen Teil der Forschung im Bereich der Flockung nimmt die Elimination von organischen Stoffen ein, vor allem aufgrund ihrer Eigenschaft als Vorstufe für die Nebenproduktbildung bei der Desinfektion, aber auch durch die Färbung des Wassers sowie Geruchs- und Geschmacksbildung (Exall und Vanloon, 2000). Der größte Teil organischer Substanzen ist natürlichen Ursprungs und wird häufig mit NOM (natural organic matter) bezeichnet. NOM besteht hauptsächlich aus Huminstoffen, wie Humin- und Fulvinsäuren. Sie entstehen bei der Zersetzung von Pflanzenmaterial und können sowohl partikulär als auch gelöst vorliegen. Fulvinsäuren haben ein niedrigeres Molekulargewicht als Huminsäuren, sind im sauren Milieu besser löslich und allgemein hydrophiler als Huminsäuren (Jekel, 2004). Durch die sehr unterschiedlichen Eigenschaften (hydrophil, hydrophob) und funktionellen Gruppen der Huminstoffe ist die Flockbarkeit verschiedener Moleküle sehr unterschiedlich (Krasner und Amy, 1995, Bose und Reckhow, 2007). Zur Abtrennung des DOC sind polynukleare Hydroxokomplexe der Metalle besonders wirksam, weshalb die DOC-Entfernung durch eine Erniedrigung des pH-Werts verbessert werden kann. Das Optimum der DOC-Elimination stimmt dadurch nicht mit dem Optimum zur Trübungseliminierung überein und auch der Restgehalt an Flockungsmittel ist am DOC-Entfernungsmaximum höher (Jekel, 2004).

Die Flockung wird auch durch vorhergehende Aufbereitungsstufen wie der Ozonung beeinflusst. Die Ozonung als Vorstufe der Flockung dient bei der Aufbereitung von Oberflächenwasser zum einen der Desinfektion des Wassers, indem Mikroorganismen inaktiviert werden und sich nachfolgend besser abtrennen lassen. Zum anderen erfolgt eine Oxidation von Trübstoffen und v.a. hochmolekularen organischen Wasserinhaltsstoffen. Durch die Strukturveränderung können die Flockung und, für nachfolgende mögliche Aufbereitungsstufen wie der Aktivkohlefiltration, die biologische Abbaubarkeit verbessert werden. Die Oxidation von zweiwertigen Eisen-

und Manganionen spielt eine untergeordnete Rolle. Positive Effekte, die durch eine Vorozonung bezüglich der Trübungselimination auftreten, werden oft unter dem Begriff „Mikroflockenbildung“ zusammengefasst oder werden als Ozon induzierte Partikelstabilisierung bezeichnet (Bratby, 2006). Allerdings wirkt sich die Mikroflockenbildung eher bei Wässern mit niedrigem DOC-Gehalt aus, während sie bei Wässern mit mittlerem bis hohem DOC-Gehalt nicht auftritt (Becker und O'Melia, 2001). In der Regel spielt die Vorozonung für die Abtrennung organischer Wasserinhaltsstoffe eine Rolle, da die organischen Inhaltsstoffe durch die Ozonung zu kleineren niedermolekularen, oft hydrophileren und damit häufig schlechter adsorbierbaren Molekülen umgewandelt werden oder sich die negative Oberflächenladung erhöht und damit der Flockungsmittelbedarf steigt (Edwards und Benjamin, 1992, Schneider und Tobiasson, 2000, Becker und O'Melia, 2001). Bei niedrigen Ozondosierungen kann aber auch die Zahl hydrophober neutraler Moleküle mit mittlerem Molekulargewicht zunehmen, die sich durch eine Flockung gut entfernen lassen (Yan et al., 2007).

2.2.5 Modellierung von Flockungsprozessen

Die Einstellung optimaler Flockungsbedingungen ist erfahrungsgemäß stark von der aktuellen Rohwasserqualität abhängig und wird häufig durch Jar-Tests ermittelt, da die Zusammenwirkung und die Stärke des Einflusses verschiedener Wasserparameter oft nicht bekannt sind. Diese Tests sind jedoch sehr zeitaufwändig und werden nur in bestimmten Zeitabständen durchgeführt, so dass eine direkte Reaktion auf Änderungen der Wasserqualität nicht möglich ist. Eine weitere, aber selten eingesetzte Möglichkeit zur Einstellung optimaler Flockungsbedingungen ist der Einsatz eines Streaming Current Detector (SCD), der in Abhängigkeit eines Wasserstandards eine Über- oder Unterdosierung von Flockungsmittel anzeigt. Die optimale Flockungsmittelkonzentration muss dann jedoch wieder in Jar-Tests bestimmt werden. Außerdem ist der Einsatz eines SCD kostenintensiv und kann nicht an jede Wasserqualität angepasst werden (Valentin und Denoeux, 2001).

Im regulären Wasserwerksbetrieb werden die Einstellungen daher weitestgehend aufgrund der Erfahrung der Betreiber festgelegt, welche sich in der Regel auf ein bis zwei Schlüsselgrößen konzentrieren, die sich als wichtig herausgestellt haben. Durch dieses sehr statische Verfahren werden Flockungsmittel häufig entweder in zu geringer oder zu hoher Konzentration zudosiert und es können sich im erzeugten Trinkwasser – gerade bei starken Niederschlagsereignissen – Qualitätsprobleme in mikrobiologischer Hinsicht ergeben. Weiterhin kommt es in diesen Wasserwerken zu einem nicht notwendigen Verbrauch der Flockungsmittel und zu einem erhöhten Anfall von Wasserwerksschlämmen. Diese Einbußen in qualitativer als auch in wirtschaftlicher Hinsicht wären bei einer dynamischen Regelung der Flockungsmittelzugabe nicht zu verzeichnen.

Basis einer dynamischen Regelung der Flockungsbedingungen ist die Erstellung eines Prozessmodells. Allerdings ist eine deterministische Modellentwicklung aufgrund der stark nichtlinearen Beziehungen von physikalischen, chemischen und prozesstechnischen Parametern sehr schwierig (Baxter et al., 1999, Yu et al., 2000). Aus diesem Grund bieten sich datengetriebene Black Box Modelle wie neuronale Netze an, die mittlerweile erfolgreich in verschiedenen Bereichen der Wasseraufbereitung eingesetzt werden (Baxter et al., 2001, Cabassud et al.,

2002, Zhang et al., 2007, Mälzer et al., 2008) und häufig anderen statistischen oder halbempirischen Modellansätzen überlegen sind (Yu et al., 2000, Liu und Kim, 2008).

Als Netzwerktypen kommen im Bereich der Modellierung von Trinkwasseraufbereitungsprozessen Multilayer-Perzeptron Netzwerke (MLP) mit dem in Kapitel 2.3 beschriebenen Backpropagation-Algorithmus in Frage oder die im Anhang (Kapitel 8.1.2) kurz beschriebenen Radiale-Basisfunktionen Netze (RBF) (Chen und Kim, 2006). Obwohl in den meisten Untersuchungen MLP-Netze eingesetzt werden, zeigten Chen und Kim (2006), dass RBF-Netze eine leistungsstarke Alternative zu MLP-Netzen darstellen, da MLP-Netze beim Training vergleichsweise langsam konvergieren, leicht in lokale Minima laufen und nicht in der Lage sind, Overfitting zu erkennen. Letzteres Problem kann jedoch bei MLP-Netzen durch eine Validierung mit unbekanntem Testdaten behoben werden, die in allen Untersuchungen durchgeführt wird. Im Falle eines Overfitting nimmt die Vorhersagegenauigkeit deutlich ab, so dass eine Generalisierbarkeit der trainierten Datenmuster auf unbekannte Daten durch das neuronale Netz nicht mehr nachgewiesen werden kann. RBF-Netze lassen sich leichter initialisieren, sind schneller im Training und laufen stabiler. Demgegenüber benötigen sie jedoch eine wesentlich höhere Anzahl an Neuronen und liefern nur in der Nähe bekannter Stützstellen verlässliche Ergebnisse, während MLP-Netze in Grenzen extrapolationsfähig sind (Zell, 2003). Die Anpassung der Netzwerkarchitektur erfolgt in der Regel durch Ausprobieren (Baxter et al., 2002c, Al-Abri und Hilal, 2008). Für MLP-Netze geben Stanley et al. (2000) Netze mit einer verdeckten Schicht an Neuronen, linearer Transferfunktion in der Eingangsschicht und logistischer Transferfunktion in der verdeckten und Ausgangsschicht sowie Backpropagation zur Anpassung der Netzgewichte als optimal an. Zur Datenvorverarbeitung werden zunehmend *Self organizing maps (SOM)* eingesetzt, die zum einen zu einer Clusterung der Daten (Valentin und Denoeux, 2001, Zhang et al., 2007), zum anderen aber auch zu einer Erkennung und Entfernung bzw. Berichtigung von Messfehlern (Rustum und Adeloje, 2007) verwendet werden können.

Die Modellierbarkeit des Flockungsprozesses ist sowohl auf der Basis von Daten aus Großanlagen (Mirsepassi et al., 1995, Gagnon et al., 1997, Zhang und Stanley, 1997, Baxter et al., 1999, Yu et al., 2000, Valentin und Denoeux, 2001, Mälzer et al., 2008) als auch auf der Basis von Daten aus Versuchsanlagen und Jar-Tests (Leeuwen et al., 1999, Maier et al., 2004) mit meist hoher Genauigkeit gegeben. Für den Einsatz im großtechnischen Prozess ist zwar auch eine Modellbildung aufgrund von Jar-Tests oder des Betriebs von Versuchsanlagen möglich, die den Vorteil bieten, mehr Analysenparameter als im Großanlagenbetrieb online messbar oder stärkere bzw. nicht optimale Parametervariationen zu berücksichtigen, es besteht hier aber die Problematik des Scale-Up (Baxter et al., 1999, Maier et al., 2004).

Typische Parameter zum Training der neuronalen Netze sind die Rohwasserqualitätsgrößen pH-Wert, Trübung, Temperatur, Sauerstoff, Leitfähigkeit, Färbung, Alkalinität, DOC und SAK_{254} sowie Betriebsparameter wie Flockungsmittel- und Polymerkonzentration und Durchsatz (Gagnon et al., 1997, Zhang und Stanley, 1997, Baxter et al., 1999, Valentin und Denoeux, 2001, Maier et al., 2004, Mälzer et al., 2008). Als Zielgrößen wurden zum einen die Flockungsmittelmenge (Mirsepassi et al., 1995, Leeuwen et al., 1999, Yu et al., 2000, Valentin und Denoeux, 2001, Bae et al., 2006) und zum anderen Wasserqualität nach Flockung gewählt (Zhang und Stanley, 1999, Baxter et al., 2002c, Maier et al., 2004, Mälzer et al., 2008). Nach (Maier et al., 2004) ist nicht nur die Resttrübung zur Charakterisierung des Flockungserfolgs von Bedeu-

tung, sondern zusätzlich die Färbung, der SAK_{254} und die Restaluminiumkonzentration. Zum Training der Netze sollten historische Daten zumindest über ein Jahr vorliegen, um die jahreszeitlich bedingten veränderlichen Rohwasserqualitäten vollständig abzudecken (Baxter et al., 2001), ansonsten müssen neue Datenmuster durch Nachtraining eingebunden werden (Valentin und Denoeux, 2001). Häufig kann durch das Training von Spezialistenmodellen eine Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit erreicht werden. Spezialistenmodelle bieten sich vor allem zur Berücksichtigung jahreszeitlich bedingter Schwankungen (Gagnon et al., 1997) oder zur Abbildung seltener Szenarien instabilen Betriebs wie beispielsweise hoher Färbung im Ablauf der Flockung nach Starkregenfällen (Baxter et al., 1999) an. Grundsätzlich sollte beim Einsatz neuronaler Netze auch die Wirtschaftlichkeit der Messungen in Betracht gezogen werden, denn eine hohe Anzahl an Analysenparametern kann aufgrund der großen Zahl an benötigten Stützstellen zu hohen Kosten führen. Daher sollte geprüft werden, inwieweit eine Modellierung mit online erfassbaren Parametern möglich ist (Shetty und Chellam, 2003). Auch ein möglicherweise hoher Wartungsaufwand der Online-Messgeräte zur Sicherstellung der notwendigen Messgenauigkeit sollte nicht außer Acht gelassen werden.

Neben der reinen Vorhersage der Wasserqualität nach der Flockung ist die modellbasierte Bestimmung der optimalen Flockungsmittelkonzentration interessant. Eine Möglichkeit ihrer Bestimmung ist das Arbeiten mit Inversmodellen (Zhang und Stanley, 1999, Maier et al., 2004). Hier werden die manipulierbaren Variablen als Ausgang verwendet und die Sollwerte der Zielgrößen als Eingang, so dass für die gewünschte Wasserqualität nach der Flockung beispielsweise die notwendige Flockungsmittelkonzentration vorhergesagt wird. Für diese Methode muss jedoch eine eindeutige Lösung existieren, d.h. die gewünschte Wasserqualität bei gegebener Rohwasserqualität darf nur mit einer Flockungsmittelkonzentration erreichbar sein. Diese lineare Separierbarkeit ist jedoch nicht zwangsläufig gegeben. Um dieses Problem und das ungenauer Vorhersagen zu lösen, arbeiten Zhang und Stanley (1999) mit einem Prozessmodell, das die Trübung nach der Flockung vorhersagt und einem Inversmodell, das auf Basis dieser Trübung die notwendige Flockungsmittelkonzentration angibt. Da die Flockungsmittelkonzentration auch eine Eingangsgröße des Prozessmodells ist, müsste die Flockungsmittelkonzentration aus dem Inversmodell idealerweise der Flockungsmittelkonzentration entsprechen, die in das Prognosemodell eingegangen ist. Ist dieses nicht der Fall, wird die Flockungsmittelkonzentration im Eingang des Prozessmodells so lange angepasst, bis die Abweichung zu der Vorhersage aus dem Inversmodell minimal ist und die Trübung, die das Prozessmodell vorhersagt, der gewünschten Wasserqualität entspricht. Aus den Flockungsmittelkonzentrationen, für die diese Voraussetzungen gegeben sind, kann der Betreiber eine Einstellung für den Prozess übernehmen.

Als Alternative zu Inversmodellen nutzen Baxter et al. (2002b) einen Suchalgorithmus, um alle Kombinationen für Flockungsmittel- und Flockungshilfsmittelkonzentration sowie den Durchsatz durch die Flockungsstufe festzulegen, die die Wasserqualitätsanforderungen nach der Flockung erfüllen. Aus diesen Kombinationen wurde die selektiert, die den notwendigen Durchsatz sicherstellte. Die Entscheidung für eine bestimmte Flockungsmittel- und Flockungshilfsmittelkonzentration wurde im Anschluss über den Wasserabgabepreis und die Kosten für Flockungs(hilfs)mittel getroffen. Diese Art der Optimierung, in der die manipulierbaren Variablen häufig in äquidistanten Schritten durchlaufen werden, um die Reaktion des neuronalen Netzes

in Bezug auf das Betriebsoptimum auszuwerten, wird auch in anderen Bereichen der Trinkwasseraufbereitung wie beispielsweise der Membrantechnik eingesetzt (Cabassud et al., 2002, Curcio et al., 2006). Der Nachteil an diesem Verfahren sind eine zunehmende Komplexität und ein deutlich zunehmender Rechenaufwand mit steigender Anzahl der Optimierungsparameter. Aus diesem Grund bieten sich für mehrdimensionale Optimierungsprobleme genetische Algorithmen an, durch die verschiedene mögliche Betriebseinstellungen gleichzeitig bei relativ geringem Rechenaufwand getestet werden können. Die Effektivität des Einsatzes von genetischen Algorithmen zur Prozessoptimierung konnte durch Chen und Seidel (2002) und Strugholtz et al. (2008) gezeigt werden. Durch eine solche Prozessoptimierung auf Basis von neuronalen Netzen könnten Kosteneinsparungen in diesem Fall für Membranprozesse um bis zu 60 % erreicht werden.

Die Sicherheit einer Prognose spielt bei allen Optimierungsansätzen eine große Rolle, die aber nur in seltenen Fällen berücksichtigt wird. Zhang und Stanley (1999) erreichen eine zuverlässige Prognose durch die Kopplung eines Prozess- mit einem Inversmodell. Dieses Verfahren ist bei höherdimensionalen Problemen allerdings kaum noch umzusetzen. Hier bieten sich eher die Verfahren nach Valentin und Denoeux (2001) sowie Panglisch et al. (2008) und Strugholtz et al. (2008) an, bei denen jeder Vorhersage ein Vertrauensintervall zugeordnet wird. Dieses Vertrauensintervall kann als Sicherheitsschranke in der Optimierung eingesetzt werden, so dass kein Optimierungsvorschlag zugelassen wird, der zu weit entfernt von einer Stützstelle des neuronalen Netzes liegt (Strugholtz et al., 2008). Ein anderes Problem im Großanlagenbetrieb ist, dass durch die Einstellung der manipulierbaren Variablen durch den Betreiber Qualitätsvorgaben eingehalten werden müssen, ein neuronales Netz aber abhängig ist von den trainierten Datenmustern und dadurch nur zwischen den verschiedenen Möglichkeiten der Einstellungen, die durch den Betreiber vorgegeben wurden, interpolieren kann (Gagnon et al., 1997). Eine Erweiterung der Datenbasis – möglicherweise auf Kosten der Betriebsstabilität und der Wasserqualität – ist hier häufig nicht durchsetzbar.

Bei den meisten Optimierungsansätzen wurde nur die Wasserqualität nach der Flockung berücksichtigt. Nach Rietveld et al. (2008) sollte eine Optimierung jedoch auch die Wechselwirkungen der unterschiedlichen Aufbereitungsstufen unter Garantierung der Qualitätsvorgaben für das aufzubereitende Wasser einbeziehen. Ein integrativer Optimierungsansatz unter Berücksichtigung der Filtrationsstufe in Anschluss an die Flockung und Sedimentation wurde bisher nur von Mälzer et al. (2008) beschrieben.

Zwar beschäftigen sich Forschungsarbeiten zu neuronalen Netzen zunehmend mit dem Einsatz zu Optimierungszwecken, allerdings sind nur wenige Untersuchungen in der Trinkwasseraufbereitung zur Nutzung der neuronalen Netze als statistisches Analysewerkzeug in Bezug auf die Erfassung möglicher Einflussgrößen auf den jeweils modellierten Prozess zu finden. Hierunter ist keine zu Flockungsprozessen bekannt. Eine genauere Untersuchung von Einflussfaktoren wurde lediglich zur Reduktion der Eingangsgrößen genutzt (Mirsepassi et al., 1995, Valentin und Denoeux, 2001), aber nicht zur Interpretation von möglichen Mechanismen. Chen und Seidel (2002) nutzten ein neuronales Netz mit drei Eingangsgrößen, um durch die Interpolation zwischen den einzelnen Stützstellen aus Laborversuchen zur Membranfiltration Oberflächen-Plots zu generieren, mit deren Hilfe sie den gesamten Datenraum abdecken und interpretieren

konnten. Weitere Verfahren der Netzanalyse bei mehrdimensionalen Modellansätzen können in synthetische und analytische Methoden unterschieden werden (Mielke, 2007).

Die analytische Methode der Sensitivitätsanalyse bezieht sich auf die Analyse der Gewichte bzw. das Verhalten der Untereinheiten, also der Neuronen. Verschiedene Eingabemuster erzeugen unterschiedliches Verhalten, das in Bezug auf qualitative Zusammenhänge ausgewertet werden kann. Ein solches Verfahren nach Garson (1991, 1998) nutzte Chellam (2005) zur qualitativen Evaluierung von Einflussfaktoren auf die Abnahme des Permeatfluxes bei der Mikrofiltration von polydispersen Suspensionen im Crossflow.

Synthetische Methoden betrachten das neuronale Netz als Funktion zur Abbildung der Eingangsgrößen auf die Ausgangsgrößen. Hier wird die Reaktion der Ausgangsgröße auf eine unabhängige kleine Veränderung der einzelnen Eingangsgrößen an unterschiedlichen Punkten des neuronalen Netzes statistisch ausgewertet. Mit Hilfe dieser Methode lassen sich mittlere und extremale Reaktionen der Ausgangsgröße auf Änderungen in den Eingangsgrößen darstellen (Strugholtz et al., 2006, Panglisch et al., 2008). Durch dieses Verfahren ließen sich die wichtigen Einflussgrößen auf einen Membranprozess selektieren und deren Wirkung auf die Permeabilität für verschiedene Prozesszustände erklären.

3 Modellierung eines Flockungsprozesses

Die Modellierung eines Flockungsprozesses sowie die spätere Entwicklung einer Optimierungsstrategie und Evaluierung von Zusammenhängen mit Hilfe neuronaler Netze soll am Beispiel des Wasserwerks Obermaubach, das durch die Stadtwerke Düren (SWD) betrieben wird, gezeigt werden. In dem Wasserwerk wird Rohwasser aus einem kleinen Staubecken aufbereitet, das durch mesotrophe Talsperren gespeist wird, die auch als Vorfluter für Kläranlagen dienen, was zu mikrobieller und virulogischer Belastung des Wassers führt. Die Aufbereitung eines solchen Rohwassers stellt hohe Anforderungen an den Aufbereitungsprozess. In mesotrophen Gewässern überwiegt die Produktion organischer Substanz aus anorganischen Substanzen in der oberen lichtdurchfluteten Schicht der Talsperren gegenüber dem Abbau und der Mineralisierung dieser Substanzen in der tiefer liegenden lichtarmen Schicht. Hierdurch kommt es zeitweise zu einer Produktion großer Algenmengen, die die Aufbereitung erheblich erschweren kann. Die hierdurch bedingte Bildung von Geruchs- und Geschmacksstoffen kann schon bei sehr geringen Konzentrationen zu einer Geschmacksbeeinträchtigung des Trinkwassers führen. Hinzu kommt, dass Talsperrenwässer in der Regel sehr mineralienarm und weich sind, was die Flockungsbedingungen zusätzlich verschlechtert. Zu den genannten Aspekten kommen starke jahreszeitliche Schwankungen der Wasserqualität, die durch temperaturbedingte Umwälzungs- und Stagnationsprozesse des Talsperrenwassers hervorgerufen werden.

Darüber hinaus werden an eine Flockungs- und Filtrationsstufe eines Wasserwerks zur Talsperrenwasseraufbereitung auch unter Gesichtspunkten einer guten Abtrennung polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoffe, die über Haushalte und aus landwirtschaftlichen Betriebsabwässern eingetragen werden, hohe Anforderungen gestellt. Um die Prozesssicherheit und die Qualität des Trinkwassers zu gewährleisten, wird daher gefordert, dass der Trübungsgrad im Ablauf einer Filterstufe einen Grenzwert von 0,1 FNU nicht überschreiten sollte. Weitere Informationen zum Thema Talsperrenwasseraufbereitung können Bernhardt (1983) und Hoyer, (1998) entnommen werden.

Aufgrund der beschriebenen Rahmenbedingungen ist zu prüfen, inwiefern es möglich ist, einen Flockungsprozess, an den extrem hohe Anforderungen gestellt werden und bei dem mit stark wechselnden Einflussfaktoren zu rechnen ist, mit hoher Genauigkeit durch das Training neuronaler Netze auf Basis konventioneller Online-Messtechnik abzubilden, um später Optimierungsstrategien entwickeln zu können, die eine Erhöhung der Betriebssicherheit und eine Verbesserung der Wirtschaftlichkeit des Verfahrens ermöglichen.

3.1 Vorgehen bei der Modellierung

Die Modellierung mit neuronalen Netze findet nach dem in Abbildung 3.1 gezeigten Schema statt. Jedes Netz wird grundsätzlich nur mit einer Ausgangsgröße trainiert, da sich ansonsten unterschiedliche Einflüsse der Eingangsgrößen auf die jeweilige Ausgangsgröße überlagern und Sensitivitätsanalysen nicht mehr eindeutig interpretiert werden können.

Die Modellierung und Analyse der neuronalen Netze wurde mit der Software *NeuroModel* der Firma *aquatune – Dr. Gebhardt & Co. GmbH* durchgeführt. Die Software arbeitet nach dem Konjugierte Gradientenverfahren mit speziellen Algorithmen zur Verbesserung der Konvergenz.

Die Konfiguration der Netze wird durch ein Expertensystem übernommen, zur Netzoptimierung können jedoch Parameter wie Lernrate oder Momentum-Term frei gewählt werden. Aufgrund des Expertensystems für die Konfiguration der neuronalen Netze findet das Training selbst automatisiert statt, so dass an dieser Stelle üblicherweise nicht eingegriffen werden muss. Während der Modellierung wird ein patentierter Algorithmus eingesetzt, bei dem fünf neuronale Netze nacheinander trainiert und deren Abweichungen miteinander verglichen werden. Mit Hilfe des so genannten *SecurityNet* kann für jede Vorhersage ein Vertrauensintervall angegeben werden (Froese, 1997) (s. Anhang, Kapitel 8.1.1.5, S. 113). Vor der eigentlichen Modellierung findet eine hierarchische Datenclustering aus einer Kombination des ISODATA-Verfahrens nach Ball und Hall (1965) und des Fuzzy-Divisive-Hierarchical-Clustering-Algorithmus (FDH) nach Dumitrescu et al. (1994) statt. Die Cluster, auch Typicals genannt, werden auf der Basis der Messgenauigkeiten der einzelnen Messgeräte gebildet (Atlan-tec, 2007). Im Zuge der Clusterung findet eine Konsistenzprüfung der Datensätze auf der Basis der Messgenauigkeiten statt, bei der fehlerhafte Datensätze entfernt werden (s. Anhang, Kapitel 8.1.1.4, S.111).

Eine Sensitivitätsanalyse der Netze zum Aufzeigen von Zusammenhängen zwischen den einzelnen Eingangsgrößen und der Ausgangsgröße im Anschluss an das Training kann auf zwei Weisen durchgeführt werden. Zum einen wird die Änderung der Ausgangsvariablen bei Änderung jeder einzelnen Eingangsvariablen um $\pm 0,5$ % ihres Wertebereichs an jedem Typical bestimmt, während die übrigen Werte der Variablen des Typicals fest gehalten werden. Die Einzelsensitivitäten werden für jede Eingangsgröße statistisch ausgewertet und als Extremalwert bzw. Mittelwert in Form von Balkendiagrammen ausgegeben. Zum anderen kann für jeden einzelnen Typical die Änderung der Ausgangsgrößen bei unabhängiger Variation von ein oder zwei Eingangsgrößen über ihren Wertebereich als Kurvenverlauf in 2D- oder 3D-Diagrammen dargestellt werden. Bei der 2D-Auftragung kann der Einfluss einer Eingangsgröße entweder für einen Typical oder für 100 verschiedene zufällig ausgewählte Typicals ausgewertet werden (s. Anhang, Kapitel 8.1.1.7, S.119).

Weitergehende Informationen zum Vorgehen bei der Modellierung mit neuronalen Netzen, zur Software sowie Beispiele zum Vorgehen und zur Bewertung von Ergebnissen sind im Anhang zu finden (Kapitel 8.1.1, S. 107).

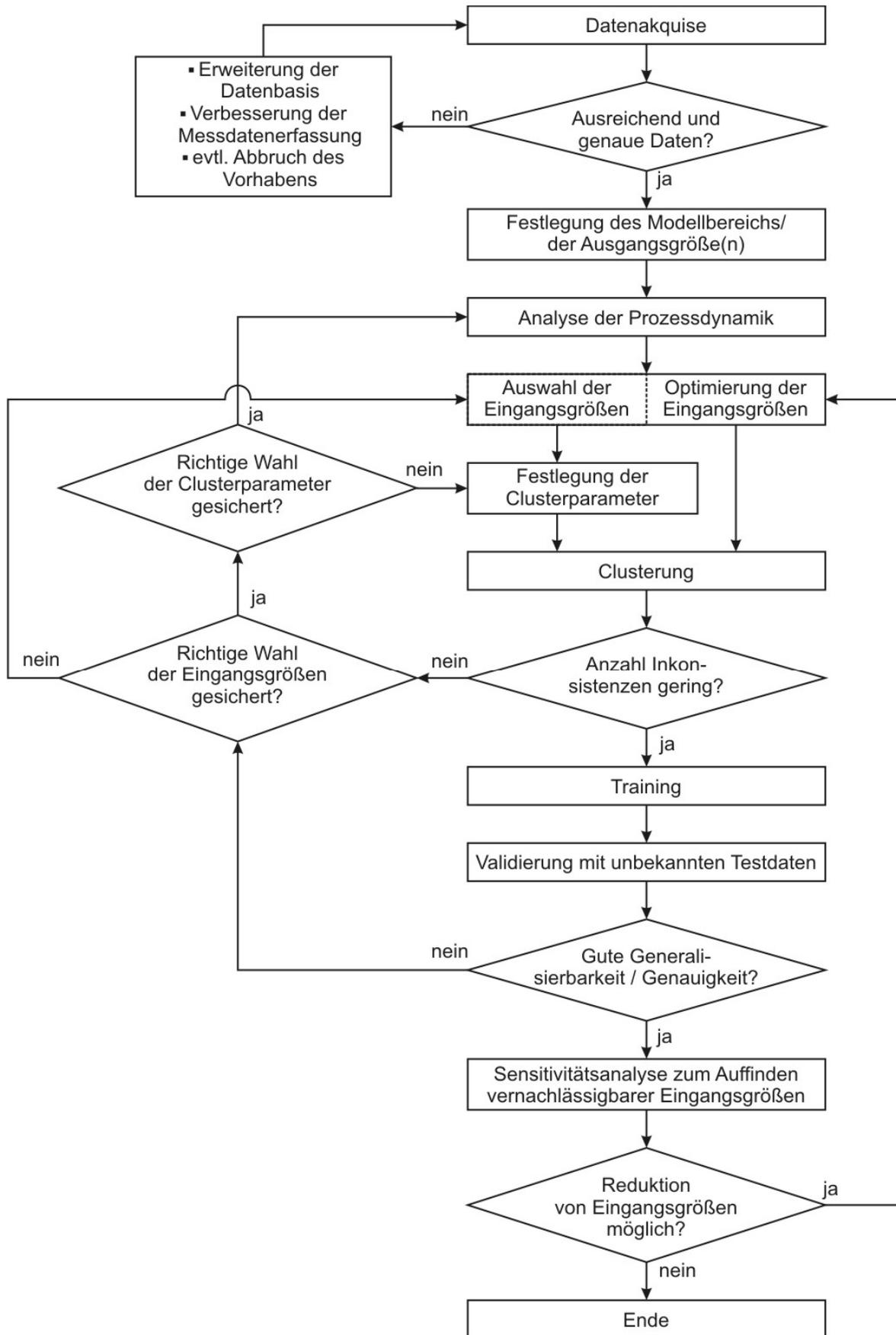


Abbildung 3.1: Vorgehen bei der Modellierung von neuronalen Netzen

3.2 Datenakquise und Aufbereitung der Datenbasis

3.2.1 Beschreibung des Wasserwerks

Im Wasserwerk Obermaubach werden ca. 5 Mio. m³/a Oberflächenwasser aufbereitet. Wie Abbildung 3.2 zeigt, besteht das Werk aus den Stufen

- Mikrosiebung
- Ozonung
- Flockung mit FeCl₃ bei einem nach Flockungsmittelzugabe durch Kalkmilch konstant eingestellten pH-Wert ohne Zusatz von Flockungshilfsmitteln
- Sedimentation in einem Lamellenabscheider mit intermittierendem Schlammabzug
- Druckfiltration in sechs Doppelstockfiltern
- Aktivkohleadsorption

Eine detaillierte Beschreibung der Anlage, Angaben zum Flockungsmittel und Weißkalkhydrat zur Kalkmilchherstellung können dem Anhang (Kapitel 8.2.1) entnommen werden.

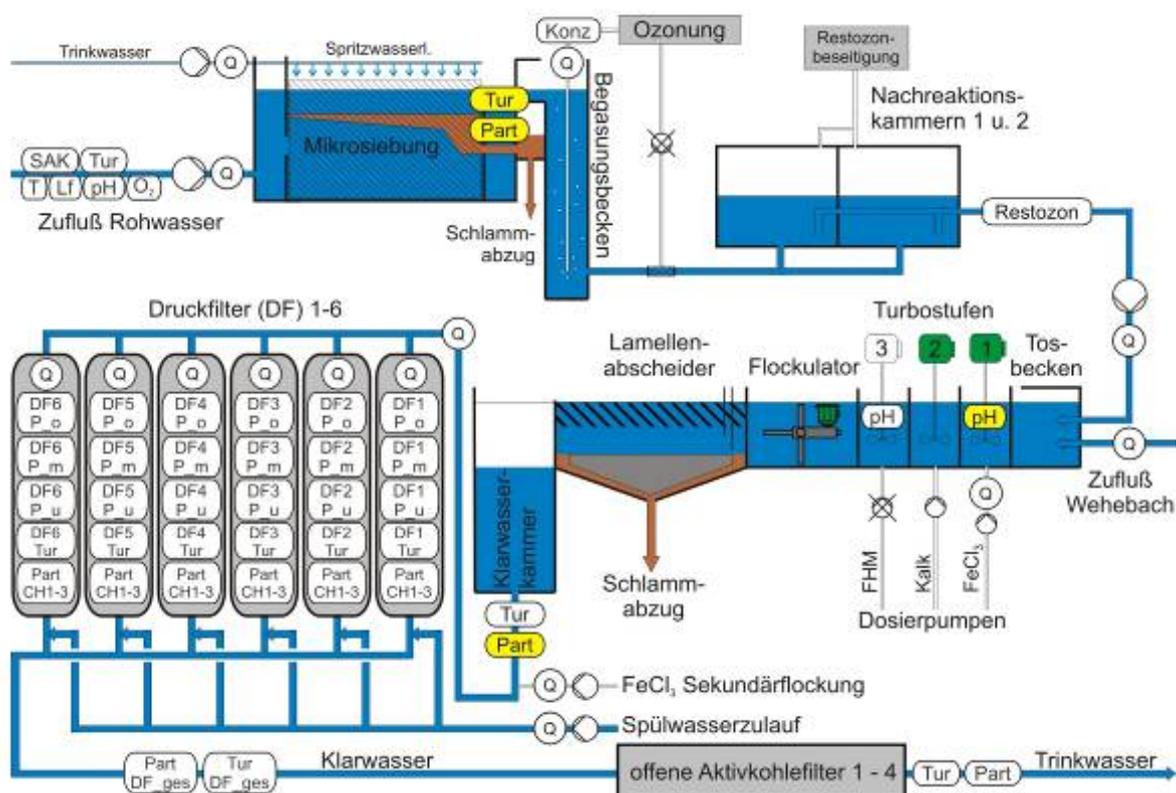


Abbildung 3.2: Schema des Wasserwerks Obermaubach (gelb eingezeichnete Messstellen wurden während des Projekts nachgerüstet)

In der Anlage wurde im Frühjahr 2006 eine neue Ozonanlage in Betrieb genommen, die seit September 2006 vollständig messtechnisch erfasst wird, so dass Daten ab dem 27.09.2006 für die Modellierung berücksichtigt werden konnten. Eine Umstellung der Siebmaschenweite der Mikrosiebe von 3 µm auf 10 µm zur Reduzierung des Spülwasserverbrauchs im Januar 2007 wurde für die Modellierung vernachlässigt. Weitere Besonderheiten des Prozesses betreffen die Rohwasserquelle und eine Notversorgung des Wasserwerks. Das Rohwasser wird dem Ablauf des Staubeckens Obermaubach entnommen, das aus der Rur- und der Urftalsperre gespeist wird. Das Zulaufmanagement wird durch den Wasserverband Eifel-Rur (WVER) übernommen.

Es können alle Mischungsverhältnisse beider Talsperren eingestellt werden. Die Besonderheit liegt in der unterschiedlichen Wasserbeschaffenheit beider Talsperren, die sich vor allem in der Ionenbilanz und der Pufferkapazität bemerkbar macht. Sie ist in Tabelle 3.1 gezeigt.

Als Indikator für die Zuordnung der einzelnen Wässer wurde die Leitfähigkeit herangezogen, die in Abhängigkeit des Mischungsverhältnisses der Talsperrenwässer ausgewertet wurde. Der Zusammenhang für das Mischungsverhältnis ist im Anhang (Abbildung 8.24, S. 135) angegeben. Da im Wasserwerk Obermaubach nur in seltenen Fällen Wasser aus einer Talsperre alleine aufbereitet wird, wurden als Grenzwerte für die Leitfähigkeit die Werte gewählt, bei dem 80 % des Wassers aus der Rurtalsperre (unter 155 $\mu\text{S}/\text{cm}$) bzw. aus der Urftalsperre (über 215 $\mu\text{S}/\text{cm}$) stammten. Alle anderen Zusammensetzungen werden als Mischwasser bezeichnet. Zu beachten ist, dass sich die Leitfähigkeit von der Rurtalsperre zur Urftalsperre nahezu verdoppelt und dieser Anstieg äquivalent zum Anstieg der Ionenstärke ist, die für die Rurtalsperre in etwa bei 1,9 mmol/l und für die Urftalsperre bei etwa 3,5 mmol/l liegt. Da die Leitfähigkeit als Online-Messung zur Verfügung steht und in der Modellierung dementsprechend als Eingangsgröße verwendet werden kann, wird die Leitfähigkeit bei der Diskussion mechanistischer Zusammenhänge im Rahmen der Arbeit als Synonym für die Ionenstärke verwendet.

Tabelle 3.1: Mittlere Ionenbilanzen und Säurekapazitäten der aufzubereitenden Wässer (Auswertung der Labordaten aus den Jahren 2004-2007)

	Leitfähigkeit $\mu\text{S}/\text{cm}$	Ca^{2+} mg/l	Mg^{2+} mg/l	Fe^{2+} mg/l	Mn^{2+} mg/l	Na^+ mg/l	K^+ mg/l	NH_4^+ mg/l	Cl^- mg/l	NO_2^- mg/l	NO_3^- mg/l	SO_4^{2-} mg/l	PO_4^{3-} mg/l	$\text{K}_{\text{S}4,3}$ mmol/l
Rurtalsperre	134	10,8	3,6	0,07	0,069	9,87	1,95	0,02	17,9	0,011	8,9	13,1	0,06	0,5
Mischwasser	181	14,9	5,3	0,08	0,076	13,06	2,23	0,03	23,7	0,013	11,2	15,3	0,09	0,7
Urftalsperre	238	21,4	7,1	0,08	0,110	14,88	3,63	0,04	27,4	0,027	10,4	16,4	0,13	1,2

Die Notversorgung wird der Wehebachtalsperre entnommen und direkt in die Flockung geleitet. Um die Zuleitung stetig zu spülen, wird in regelmäßigen Abständen Wasser aus der Wehebachtalsperre in die Flockung gefahren, wobei jedoch einen Anteil von 10 % an der Gesamtwassermenge in der Regel nicht überschritten wird. Zeiträume, in denen das Wasserwerk zu 100 % aus der Wehebachtalsperre gespeist wurde, wurden aufgrund fehlender Online-Rohwasserqualitätsmessungen der Wehebachtalsperre nicht in die Modellierung einbezogen. Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass im Sommer 2007 eine Fischtreppe am Staubecken Obermaubach gebaut wurde, so dass das Staubecken zwischen April 2007 und Oktober 2007 nicht gefüllt war.

Im Vorfeld der Modellierung wurden von SWD Grenzwerte vorgegeben, die im Prozess eingehalten werden müssen. Sie sind in Tabelle 3.2 aufgeführt.

Tabelle 3.2: Einzuhaltende Grenzwerte

	Minimum	Maximum	Einheit
Ozonung			
Restozon nach Nachreaktionskammer	-	0,1	mg/l
Flockung/Sedimentation			
Zugabe vom Flockungsmittel (FeCl ₃)	-	12	mg/l
pH-Wert in der Flockung	7,2	8,2	-
Trübung nach Sedimentation	-	2	FNU
Druckfilterstufe			
Partikelzahl > 1µm im Ablauf der Druckfilterstufe	-	20	#/ml
Trübung im Ablauf der Druckfilterstufe	-	0,1	FNU
Filterlaufzeit der einzelnen Druckfilter	12	72	h
Partikelzahl > 1µm im Ablauf der einzelnen Druckfilter	-	300	#/ml
Trübung im Ablauf der einzelnen Druckfilter	-	0,1	FNU

3.2.2 Festlegung der Modellgrenzen

Zur Beurteilung des Flockungserfolgs sollten nach Maier et al. (2004) nicht nur die Trübung sondern auch die Färbung, der SAK₂₅₄ und die Resteisenkonzentration herangezogen werden. Durch die Vorozonung werden die Färbung der SAK₂₅₄ jedoch schon deutlich reduziert (Färbung ca. 65 %, SAK₂₅₄ ca. 50 %); die Resteisenkonzentration überschreitet zwar nach der Flockung noch den Trinkwassergrenzwert, wird aber nach einer Sekundärflockung durch die Druckfilterstufe soweit reduziert, dass die Werte deutlich unterhalb des Grenzwerts von 0,2 mg/l liegen. Da die einzuhaltenden Grenzwerte in Tabelle 3.2 die Partikelzahl im Ablauf der einzelnen Druckfilter einbeziehen und dieser Wert neben der Trübung als Kriterium für die Filtrerrückspülung herangezogen wird, sollte die Partikelzahl nach der Sedimentation als Indikator für den Flockungserfolg berücksichtigt werden.

Zur Modellierung des Flockungsprozesses wurde die Modellierungsgrenze hinter der Sedimentationsstufe gezogen. Im Sinne einer integrierten Prozessoptimierung nach Rietveld et al. (2008) muss jedoch die Filtrationsstufe im Anschluss an die Sedimentation bei der Optimierung einbezogen werden. Die Beeinflussung der Flockung durch die vorhergehenden Aufbereitungsstufen Mikrosiebung und Ozonung wurde durch Datenanalyse und Einbeziehung von Messwerten als Eingangsgrößen in der Modellierung berücksichtigt und evaluiert. Da zu Beginn keine Partikelmessungen vor der Druckfilterstufe vorlagen und die Trennleistung der Mikrosiebung sowie die Auswirkung der Flockungsmitteldosierung vor Einstellung des pH-Werts nicht beurteilt werden konnte, wurde die Online-Analytik um folgende Messstellen erweitert:

- Trübungs- und Partikelmessung nach Mikrosiebung
- pH-Wert nach Flockungsmittelzugabe
- Partikel nach Sedimentation

Trotz Vorfiltration konnte die Partikelzahl nach der Mikrosiebung nicht zuverlässig erfasst werden, da es im Messraum des Partikel-Messgeräts immer wieder zu biologischem Wachstum kam. Als Ersatzgröße für die Partikelzahl musste die Rohwassertrübung als Eingangsgröße in das neuronale Netz verwendet werden, die in einem kurzen Abschnitt, im dem zuverlässige

Messungen der Partikelzahl nach der Mikrosiebung vorlagen (s. Abbildung 3.3), eine hohe Korrelation mit der Partikelzahl aufwies. Die Partikelzahl nach der Sedimentation ließ sich besser erfassen, aber auch hier war die Messung mit einem hohen Wartungsaufwand verbunden.

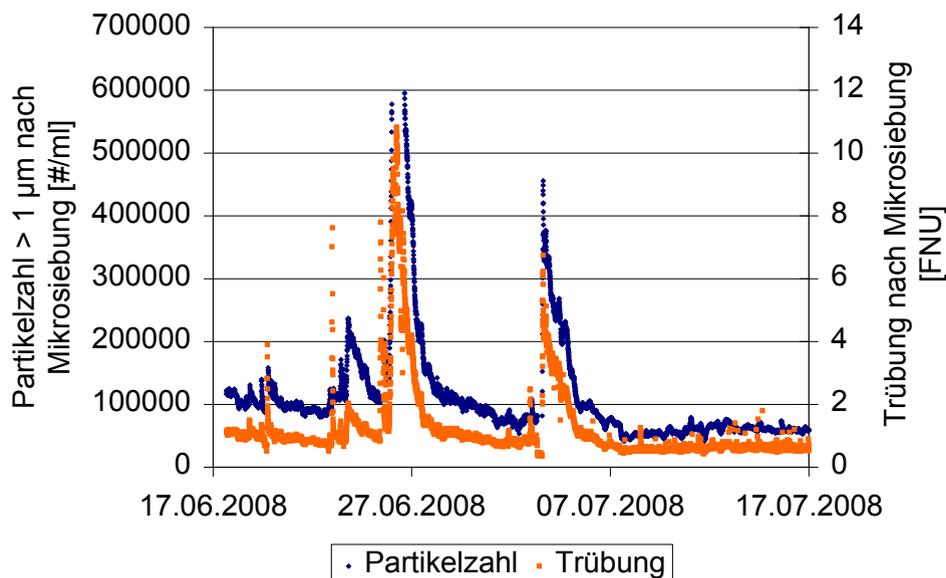


Abbildung 3.3: Korrelation zwischen Partikelzahl > 1 µm nach der Mikrosiebung mit der Trübung im Rohwasser

Nach der Erweiterung der Messtechnik standen die in Tabelle 3.3 gezeigten online gemessenen Parameter für eine Modellierung zur Verfügung. Für den Anlagendurchsatz ist stellvertretend die Summe des Zuflusses zur Flockung aus den vorhergehenden Aufbereitungsstufen und der Wehebachtalsperre angegeben.

Für die Modellierung lag ein umfangreiches Datenmaterial vor, das mindestens alle 3 min in einer Datenbank der SWD abgelegt wurde. Da sich die Änderungsdynamik der in einem Wasserwerk gemessenen Parameter in der Regel eher im Bereich von Stunden bewegt, ist der Zeitabstand zwischen den einzelnen Datensätzen ausreichend. Ab Februar 2008 wurde eine eigene Datenbank mit Fernzugriff eingerichtet, in der die Daten alle 5 min abgelegt wurden.

Online-Daten aus dem Großanlagenbetrieb sind üblicherweise mit Messfehlern behaftet, die beispielsweise durch Wartungsarbeiten oder den Ausfall von Messgeräten auftreten. Messfehler innerhalb einer einzelnen Messgröße wurden vor der Modellierung mit der im Anhang gezeigten Methode aus der Datenbasis entfernt. In den Daten können aber auch inkonsistente Datensätze enthalten sein, in denen mehrere Variable fehlerbehaftet sind. Diese sind über das im Anhang beschriebene Verfahren und optisch oft nicht mehr zu erkennen, werden aber durch den Clusteralgorithmus erkannt und aus der Modellierungsdatenbasis entfernt.

Tabelle 3.3: Statistische Größen der Modellparameter

Messung	Bezeichnung	Einheit	Minimum	Maximum	Mittelwert	Standardabweichung
Rohwasser						
Trübung	RW_Tur	FNU	0,4	64,6	3,5	3,0
Temperatur	RW_T	°C	2,70	17,79	8,87	3,03
SAK ₂₅₄ (unfiltriert)	RW_SAK	1/m	4,8	20,0	7,9	1,7
pH-Wert	RW_pH	-	6,79	8,00	7,40	0,22
Sauerstoff	RW_O2	mg/L	5,9	12,3	9,3	1,7
Leitfähigkeit	RW_Lf	µS/cm	104	275	172	35
Ozonung						
Menge (Konz.: 150 mg/l)	O3_Q	Nm ³ /h	3,8	19,2	9,4	2,9
Restozonkonzentration	O3_Rest	mg/L	0,00	1,00	0,08	0,08
Flockung						
Anlagendurchsatz	F_WEH_Q	m ³ /h	240	937	492	85
Fe ³⁺ -Konzentration	FM_Fe	mg/L	6,4	15,6	8,9	1,6
pH-Wert nach FeCl ₃	FM_pH	-	2,72	6,99	5,94	0,87
pH-Wert nach Kalkmilch	F_pH	-	6,80	8,00	7,57	0,19
Ablauf Sedimentation						
Trübung	F_Tur	FNU	0,3	5,1	1,2	0,6
Partikel > 1µm	F_Part_CH1	#/ml	720	19800	6339	4463

3.2.3 Auswahl der Modellierungsparameter und -zeiträume

Zur Beurteilung der Trennleistung des Mikrosiebs wurde im Ablauf eine Trübungsmessung eingebaut. Wie Abbildung 3.4 beispielhaft zeigt, unterscheidet sich die Trübung im Ablauf der Mikrosiebung auch bei Trübungsspitzen nur unwesentlich von der Rohwassertrübung, so dass die Trübung durch den durch das Mikrosieb nicht abtrennbaren Feinanteil dominiert wird. Die Trübung im Ablauf der Mikrosiebung wurde daher bei der Modellierung nicht mit berücksichtigt.

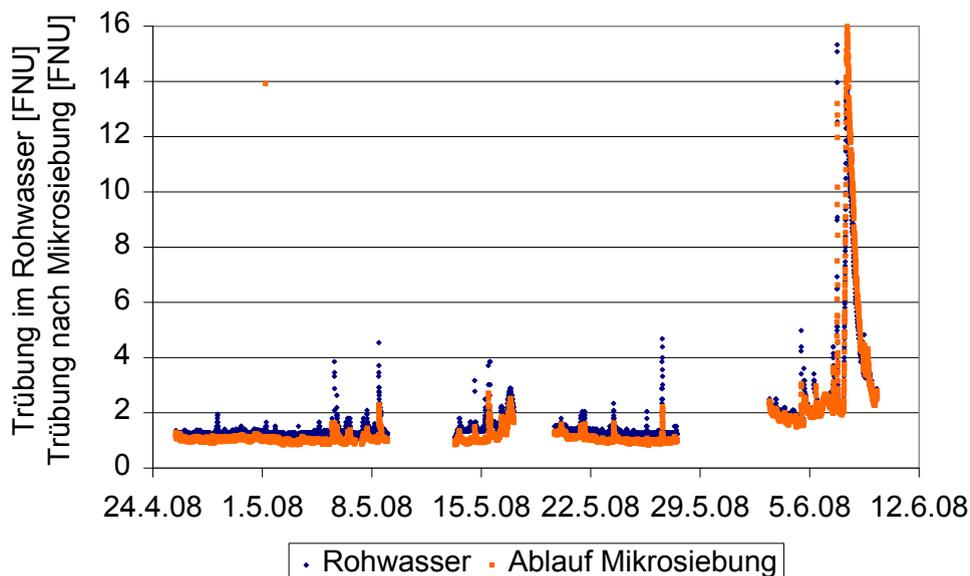


Abbildung 3.4: Vergleich der Trübung im Ablauf der Mikrosiebung mit der Rohwassertrübung

Der pH-Wert nach Kalkmilchdosierung (F_{pH}) wurde im betrachteten Zeitraum auf konstante Werte eingestellt, die nur selten variiert wurden. Schwankungen entstanden nur durch Ausfall der Kalkmilchdosierung. Aus diesem Grund ist der pH-Wert als Eingangsgröße in das neuronale Netz möglicherweise vernachlässigbar. Da es sich bei diesem Wert jedoch um eine potenzielle Optimierungsgröße handelt, wurde der Parameter zunächst in der Modellierung berücksichtigt. Nicht berücksichtigt wurde der Energieeintrag in der Flockungsstufe, da alle Rührwerke aus betrieblichen Gründen mit einer konstanten Drehzahl betrieben wurden.

Da bei der Modellierung sowohl die Trübung als auch die Partikelzahl im Ablauf der Sedimentation betrachtet werden mussten, waren zwei neuronale Netze aufzubauen. Für das Partikelzahlmodell wurden alle Partikel $> 1 \mu\text{m}$ berücksichtigt. Das Trübungsmodell sollte auf Basis der Rohwassertrübung erstellt werden und das Partikelzahlmodell auf Basis der Rohwassertrübung und der Partikel $> 1 \mu\text{m}$ im Ablauf der Mikrosiebung. Die Partikel im Ablauf der Mikrosiebung wurden bei der Trübungsmodellierung nicht mit berücksichtigt, da die Daten erst wesentlich später erfasst wurden und sich somit die Datenbasis zu stark reduziert hätte. Auch der pH-Wert nach Flockungsmitteldosierung wurde erst nachträglich aufgezeichnet. Daher wurde er zunächst bei der Modellierung nicht berücksichtigt, sein Einfluss aber durch ein separates Modell geprüft. Als Modellparameter ergaben sich so die in Tabelle 3.4 aufgelisteten Größen.

Tabelle 3.4: Modellierungsparameter und Messgenauigkeiten für den Clusteralgorithmus für das Trübungs- und Partikelzahlmodell

Eingangsgrößen	Bezeichnung	Messgenauigkeit	Einheit
<i>Rohwasser</i>			
Trübung	RW_Tur	1,5	FNU
Temperatur	RW_T	0,06	°C
SAK ₂₅₄ (unfiltriert)	RW_SAK	0,2	1/m
pH-Wert	RW_pH	0,02	-
Sauerstoff	RW_O2	0,3	mg/L
Leitfähigkeit	RW_Lf	3	$\mu\text{S/cm}$
<i>Ozonung</i>			
Menge (Konz.: 150 mg/l)	O3_Q	0,2	Nm^3/h
Restozonkonzentration	O3_Rest	0,02	mg/L
<i>Flockung</i>			
Anlagendurchsatz	F_WEH_Q	5	m^3/h
Fe ³⁺ -Konzentration	FM_Fe	0,1	mg/L
pH-Wert nach FeCl ₃	FM_pH	0,02	-
pH-Wert nach Kalkmilch	F_pH	0,02	-
Zielgrößen			
<i>Ablauf Sedimentation</i>			
Trübung	F_Tur	0,4	FNU
Partikel $> 1 \mu\text{m}$	F_Part_CH1	1000	#/ml

Bei den Angaben muss zwischen der Bezeichnung Zielgröße und Ausgangsgröße unterschieden werden. Tabelle 3.4 gibt die Zielgrößen an, die durch das Modell letztendlich wiedergegeben werden sollte. Diese Größe muss aber nicht zwangsläufig die Ausgangsgröße des neuronalen Netzes sein. Es können sich auch berechnete Ausgangsgrößen für die Modellierung an-

bieten, die anschließend wieder in die gewünschte Zielgröße umgerechnet werden. Weiterhin sind dort die Messgenauigkeiten verzeichnet, die für den Clusteralgorithmus zugrunde gelegt wurden. Eine Liste der Messgerätespezifikationen, aus denen die Messgenauigkeiten festgelegt wurden, ist im Anhang (Kapitel 8.2.2, S. 137) zu finden. Modellierungen zur Prüfung der Einstellung der Messgenauigkeit werden im Rahmen dieser Arbeit nicht gezeigt.

Der spektrale Absorptionskoeffizient SAK_{254} im Rohwasser wird unfiltriert gemessen. Um den Einfluss der Trübung aus den Daten zu eliminieren, wurde der online gemessene SAK_{254} mit den Laborwerten verglichen und der online gemessene Wert, wie in Abbildung 3.5 gezeigt, einer linearen Korrektur unterzogen.

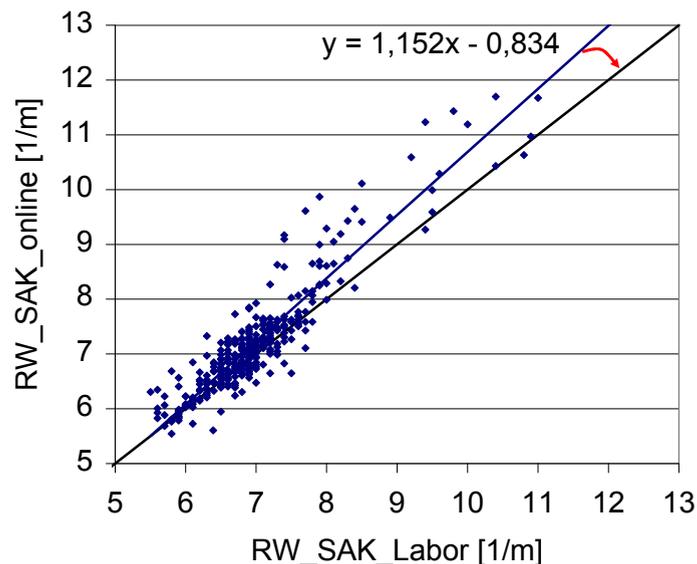


Abbildung 3.5: Linearkorrektur des online gemessenen SAK_{254} -Werts zur Elimination des Trübungseinflusses

Aufgrund der umfangreichen Datenbasis war es nicht notwendig, alle Daten für das Training der neuronalen Netze zu verwenden. Über weite Strecken konstante Zustände wurden in der Modellierung nicht berücksichtigt, sondern im Anschluss durch eine Validierung auf Übertragbarkeit geprüft. Als Datenbasis für die Modellierung wurden Zeiträume ausgewählt, in denen besondere Vorkommnisse zu verzeichnen waren:

- Trübungspeaks im Rohwasser
- Hohe SAK_{254} -Konzentrationen im Rohwasser
- Änderungen des Rohwassermischungsverhältnisses
- Häufige Umstellung der Flockungsmittelkonzentration
- Schwankungen der Trübung im Ablauf der Sedimentation
- Daten nach Ablass und Wiederbefüllung des Staubeckens Obermaubach im Zuge des Baus der Fischtreppe
- Daten aus veränderten Fahrweisen zur Erweiterung der Datenbasis

Eine vollständige Zusammenfassung der modellierten Datenzeiträume ist im Anhang (Tabelle 8.3, S. 138) zu finden.

3.2.4 Analyse des Verweilzeitverhaltens

Der Wasseraufbereitungsprozess ist mit Verweilzeiten behaftet, so dass Ursache und Wirkung in der Rohdatenbank nicht innerhalb eines Datensatzes aufgezeichnet werden. In der Literatur zur Modellierung von Flockungsprozessen sind keine genauen Angaben zum Umgang mit Zeitverhalten gegeben. Bei der Arbeit mit Tagesmittelwerten spielen die Verweilzeiten keine Rolle mehr. Soll jedoch das aktuelle Prozessverhalten prognostiziert werden, ist eine kausalrichtige Zuordnung der Daten notwendig, so dass für die Modellierungen die Auswirkungen von Änderungen in der Rohwasserqualität auf die folgenden Aufbereitungsstufen in einem Datensatz erfasst werden. Ein weiteres Resultat der zeitgenauen Zuordnung der Messwerte ist die Möglichkeit, das Prozessverhalten über den Zeitraum, der zwischen der letzten Messung und der vorherzusagenden Größe liegt, vorherzusagen. Dieses gibt dem Betreiber der Anlage die Möglichkeit, frühzeitig auf Änderungen in der Rohwasserqualität reagieren zu können. Bei der Arbeit mit Tagesmittelwerten kann ein Vorhersagehorizont durch die Modellierung mit Tagesmittelwerten von zurückliegenden Tagen als Eingangsgrößen erreicht werden (Mirsepassi et al., 1995).

Aufgrund der Durchsatzschwankungen, die nicht wie vorgesehen vollständig über Wasserspeicher abgefangen werden, wäre eine dynamische Berücksichtigung der Verweilzeit anhand des Anlagendurchsatzes sinnvoll. Da dieses jedoch bei großen Datenmengen mit einem hohen Rechenaufwand verbunden ist, ist zunächst eine Abschätzung des Einflusses der Verweilzeit durch die Bestimmung einer mittleren Verweilzeit sinnvoll. Dieses führt zwar in der Regel zu einer Verbreiterung der Verteilung der Vorhersagefehler bei der Modellierung, ermöglicht aber – unter Voraussetzung einer äquidistanten Aufzeichnung der Datensätze – eine wesentlich vereinfachte Datenaufbereitung durch Verschieben von Datenspalten gegeneinander entsprechend der mittleren Verweilzeit. Auch beim Einsatz der Modelle im Online-Betrieb ist dieses Vorgehen von Vorteil, da die einzelnen Messstellen lediglich mit einem Totzeitglied entsprechend der jeweiligen Verweilzeit zwischen Messstelle und Ausgangsgröße versehen werden müssen. Der Vorteil einer dynamischen Berücksichtigung der Verweilzeit ist neben der höheren Modellgenauigkeit die Möglichkeit einer modellgestützten Berücksichtigung von Mischungsvorgängen durch eine gezielte zeitgesteuerte Aggregation von Messwerten, beispielsweise in der Begasungskammer der Ozonung oder in den Flockungsbecken.

Eine mittlere Verweilzeit lässt sich zum einen aus der Auswertung der hydraulischen Gegebenheiten (SWD, 2007) und aus den Messwerten selbst bestimmen. Die Füllstände der einzelnen Becken werden im Betrieb weitestgehend konstant gehalten, so dass zur Berechnung der theoretischen Verweilzeiten die mit Wasser gefüllten Volumina der einzelnen Aufbereitungsstufen nach Tabelle 3.5 als konstant angenommen werden können. Für den Lamellenabscheider wurde nur der durchströmte Beckenteil berücksichtigt, nicht aber die Schlammabsetzzone. Die Rohrleitungsvolumina können vernachlässigt werden.

Tabelle 3.5: Füllvolumina der einzelnen Aufbereitungsstufen und theoretische Verweilzeiten bei minimalem, mittlerem und maximalem Anlagendurchsatz

	Füllvolumina [m ³]	Verweilzeit bei 240 m ³ /h [min]	Verweilzeit bei 500 m ³ /h [min]	Verweilzeit bei 940 m ³ /h [min]
Siebmaschine	341	85	41	22
<i>Verweilzeit Siebmaschine [min]</i>		85	41	22
Begasungskammer 1	29	7	3	2
Begasungskammer 2	29	7	3	2
Nachreaktionskammer 1 (55 %)	110	27	13	7
Nachreaktionskammer 2 (55 %)	111	28	13	7
<i>Verweilzeit Ozonung [min]</i>		70	33	18
Tosbecken	41	10	5	3
Flockungsstufe 1	41	10	5	3
Flockungsstufe 2	41	10	5	3
Flockungsstufe 3	40	10	5	3
Flocculator	162	40	19	10
Lamellenabscheider	322	80	39	21
Klarwasserkammer (70 %)	59	15	7	4
<i>Verweilzeit Flockung/Sedimentation [min]</i>		176	85	45
<i>Gesamtverweilzeit [min]</i>		331	159	85

Aus den zuvor getroffenen Annahmen ergibt sich für die Modellierung mit konstanter Verweilzeit das in Abbildung 3.6 gezeigte Verweilzeitschema. Aufgrund des Zeitabstands von 3 min bzw. 5 min zwischen den einzelnen Datensätzen wurden die Messstellen der Restozonkonzentration und der Flockungsstufe vereinfachend als zeitgleich gemessen angenommen.

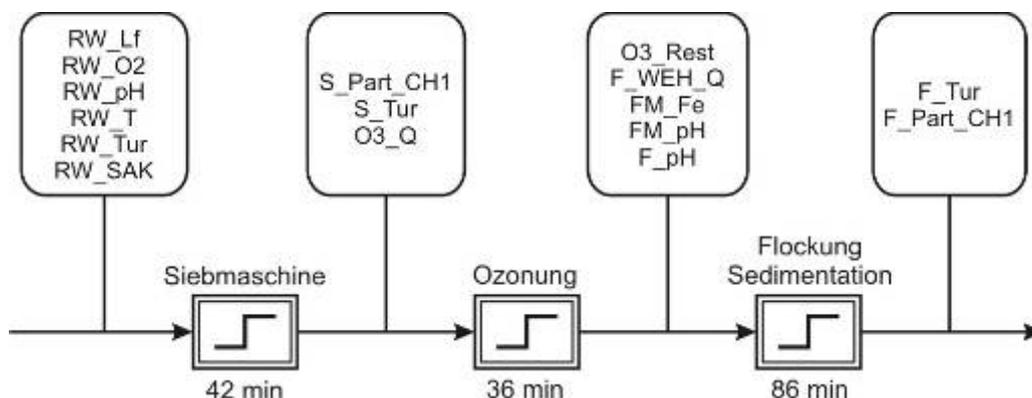


Abbildung 3.6: Verweilzeitmodell entsprechend der Hydraulik mit Zuordnung der Messstellen (bei 492 m³/h Anlagendurchsatz)

Zur Bestimmung der Verweilzeiten aus den Messwerten wurden Zeiträume ausgewertet, in denen sich Messwerte schnell änderten und die Antwort auf die Änderung der Messwerte in den folgenden Stufen nachverfolgt werden konnte. Das Verweilzeitverhalten aus Messwerten konnte unter der Voraussetzung, dass sich nur die beiden verglichenen Größen veränderten, für die folgenden Abschnitte bestimmt werden:

- Rohwasser-Mikrosiebung: Messwerte Trübung im Rohwasser und nach Mikrosiebung
- Rohwasser-Ablauf Sedimentation: Messwerte Leitfähigkeit, Trübung oder SAK_{254} im Rohwasser und Trübung im Ablauf der Sedimentation (Der SAK_{254} weist zum Teil eine höhere Korrelation mit der Trübung nach Sedimentation auf als die Rohwassertrübung selbst)
- Flockung-Ablauf Sedimentation: Messwerte pH-Wert nach Kalkmilchdosierung bei Ausfall der Kalkmilchdosierung oder Flockungsmitteldosierung und Trübung im Ablauf der Sedimentation

Aus der Auswertung zu verschiedenen Zeitpunkten ergaben sich die in Abbildung 3.7 gezeigten mittleren Verweilzeiten im Vergleich zu den aus der Hydraulik berechneten theoretischen Verweilzeiten. Da die Verweilzeiten bei unterschiedlichen Durchsätzen bestimmt wurden, wurden alle Werte auf den für die Modellierung zugrunde gelegten mittleren Durchsatz von $492 \text{ m}^3/\text{h}$ umgerechnet. Wie die zusätzlich angegebene Standardabweichung zeigt, sind die Werte zum Teil mit einem verhältnismäßig hohen Fehler behaftet. Gerade für die Verweilzeit zwischen Flockung und Ablauf Sedimentation konnten überwiegend nur Bereiche ausgewertet werden, in denen die Kalkmilchdosierung kurzfristig ausfiel, da die Einstellung der Flockungsmittelkonzentration in der Regel über die Trübung und Leitfähigkeit an die Änderung der Rohwasserqualität gekoppelt ist, so dass keine unabhängige Auswirkung gewährleistet werden konnte. Die Verweilzeit zwischen Rohwasser und Mikrosiebung war aufgrund der eindeutigen Korrelation zwischen der Trübung vor und nach der Mikrosiebung hingegen gut auszuwerten.

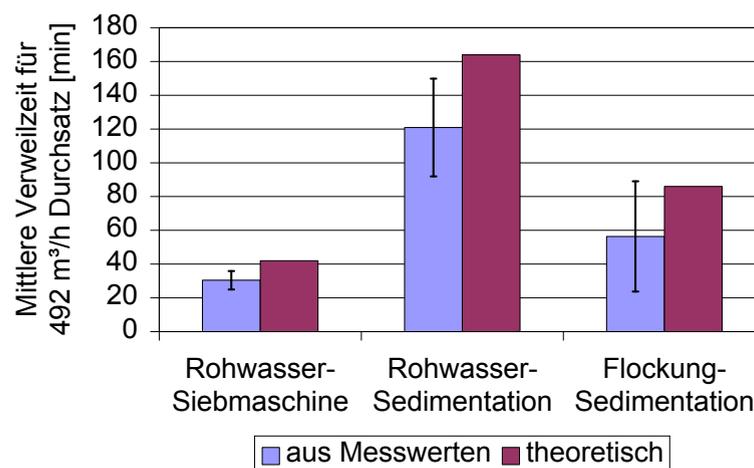


Abbildung 3.7: Mittlere Verweilzeiten aus Messwerten bestimmt im Vergleich zu den aus der Hydraulik berechneten theoretischen Verweilzeiten

Die Auswertung der Verweilzeiten aus den Messwerten zeigt eine deutlich kürzere Aufenthaltszeit der Wasserinhaltsstoffe in den jeweiligen Stufen als sich aufgrund des Durchsatzes durch die gegebenen Beckenvolumina ergeben würde. Für die Berechnung der theoretischen Verweilzeit lassen sich Totvolumina nur in begrenztem Maße abschätzen, so dass sich hierdurch die Diskrepanz zwischen der aus den Messwerten abgelesenen und der theoretischen Verweilzeit ergibt. Entsprechend dem hydraulischen Verweilzeitmodell in Abbildung 3.6 ergibt sich das Verweilzeitmodell aus der Messwertanalyse wie in Abbildung 3.8 dargestellt.

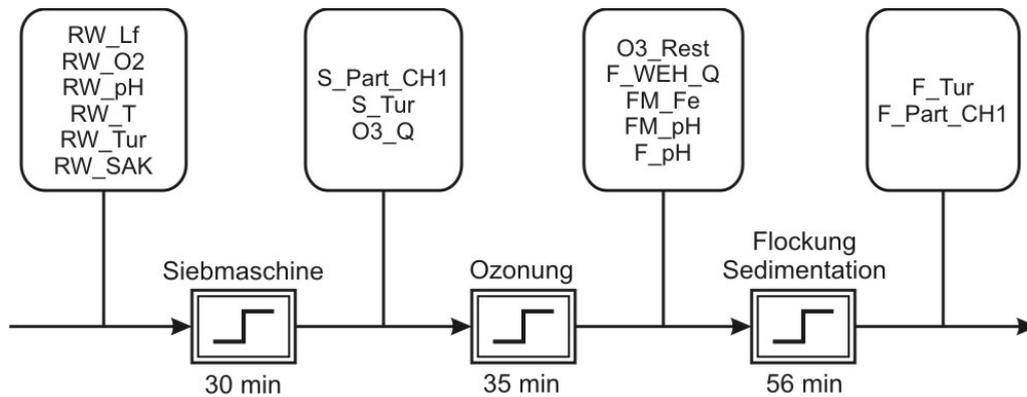


Abbildung 3.8: Verweilzeitmodell entsprechend der Messwertanalyse mit Zuordnung der Messstellen

Setzt man die in Abbildung 3.6 und Abbildung 3.8 gezeigten Modelle im Online-Betrieb ein, wird für die Berücksichtigung der Verweilzeit von den vorherzusagenden Parametern Trübung und Partikelzahl nach Sedimentation zurückgerechnet. Diese Größen sind vorhersagbar, wenn alle Messgrößen, die zu deren Abbildung notwendig sind, gemessen worden sind, was nach Kalkmilchzugabe zur Einstellung des konstanten Flockungs-pH-Werts erreicht ist. Die zuvor erfassten Messwerte nach der Mikrosiebung und im Rohwasser müssen entsprechend ihrer Verweilzeiten zwischengespeichert werden. Für die Vorhersage der Trübung oder Partikelzahl im Ablauf der Sedimentation ergäbe sich nach den Verweilzeitmodellen in Abbildung 3.6 und Abbildung 3.8 ein Vorhersagehorizont von 106 min für das Hydraulikmodell, während bei der Auswertung der Messwerte ein Wert von 56 min erreicht würde.

3.2.5 Umgang mit Zeitverhalten

Vorwärtsgerichtete MLP-Netze ohne Rückkopplungen können dynamisches Prozessverhalten nicht abbilden (Isermann, 2008), so dass Prozessabschnitte mit einem solchen Verhalten von der Modellierung mit der hier verwendeten Software ausgeschlossen werden sollten, wenn die Modellgenauigkeit negativ beeinflusst würde. Zu dynamischem Prozessverhalten können schnelle Änderungen im Durchsatz sowie die Neueinstellung der Flockungsmittelkonzentration führen. Die übrigen Messgrößen ändern sich so langsam, dass das System linear reagieren kann.

Dynamisches Prozessverhalten, das durch Änderungen in den beiden Größen hervorgerufen worden sein könnte, wurde herausgefiltert, indem die Ableitung des Durchsatzes und der Flockungsmittelkonzentration nach der Zeit gebildet und Bereiche mit hoher Steigung, also großer Änderungsdynamik, aus den Datensätzen entfernt wurden. Ein Beispiel in Abbildung 3.9 zeigt die Datenbasis mit allen Datensätzen in dunkelblau, also auch mit instationären Zuständen, und in rot die Daten nach Reduktion auf quasistationäre Zustände. Bereiche mit hoher Änderungsdynamik wurden bei den roten Datensätzen entfernt.

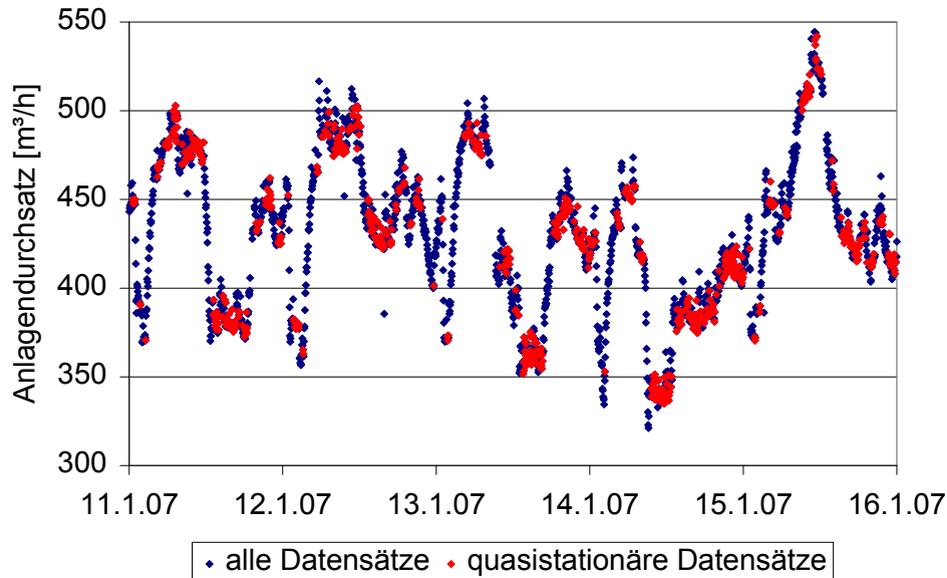


Abbildung 3.9: Elimination von Datensätzen, die zu dynamischem Prozessverhalten führen könnten

3.3 Trübungsmodellierung

Der standardmäßige Modellierungsansatz ist die direkte Vorhersage der Wasserqualität nach der Flockung, z.B. Baxter et al. (2002a) und Maier et al. (2004). Als Ausgangsgröße wurde daher zunächst die Trübung nach Sedimentation betrachtet, da hier ein umfangreiches Datenmaterial vorlag. Für diese Ausgangsgröße wurden die Verweilzeitmodelle nach Abbildung 3.6 und Abbildung 3.8 verglichen sowie der Einfluss dynamischen Prozessverhaltens evaluiert. Nach Festlegung dieser Rahmenbedingungen wurden weitere Modellierungsansätze getestet.

Das Training der neuronalen Netze erfolgte nach dem in Abbildung 3.1 gezeigten Schema. Für die Modellierung der Trübung nach Sedimentation wurden die in Tabelle 3.4 gezeigten Parameter mit der jeweils angegebenen Messgenauigkeit für den Clusteralgorithmus verwendet. Die Auswertung der Modelle erfolgte anhand der statistischen Auswertung der Fehler für die Validierung der Modelle mit Trainingsdaten, also Clusterdatensätzen, und mit dem Netz unbekannt Testdaten. Bei der Auswahl der Testdaten wurden die unterschiedlichen Rohwasserquellen berücksichtigt, indem Bereiche ausgewählt wurden, in denen das Staubecken Obermaubach nur von einer einzigen Talsperre gespeist bzw. Mischwasser aufbereitet wurde. Die Testdaten sind in Abbildung 3.10 bis Abbildung 3.12 dargestellt (Zeiträume: Rurtalsperre: 15.08.2007-22.08.2007, Mischwasser: 05.07.2008-05.08.2008, Urftalsperre: 03.09.2007-10.09.2007). Zur Auswertung der Modellgenauigkeit wurden der Mittelwert, der absolute Mittelwert, die Standardabweichung der Fehlerverteilung sowie der Korrelationskoeffizient (RSQ) herangezogen, wobei sich die Fehler jeweils auf den Wertebereich der Zielgröße beziehen. Die Berechnungsgrundlagen sind im Anhang angegeben. Der Wertebereich der Trübung nach Sedimentation betrug 10 FNU (0 - 10 FNU).

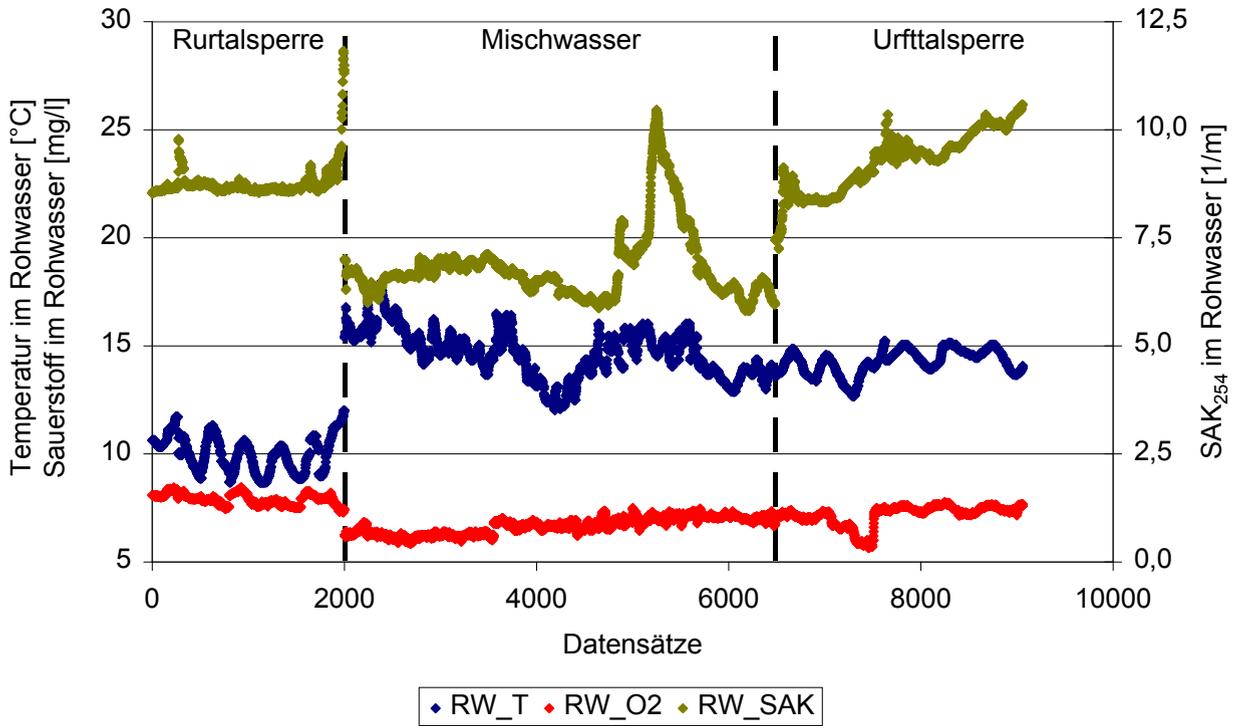


Abbildung 3.10: Testdaten: Rohwasserparameter Temperatur, Sauerstoff und SAK₂₅₄

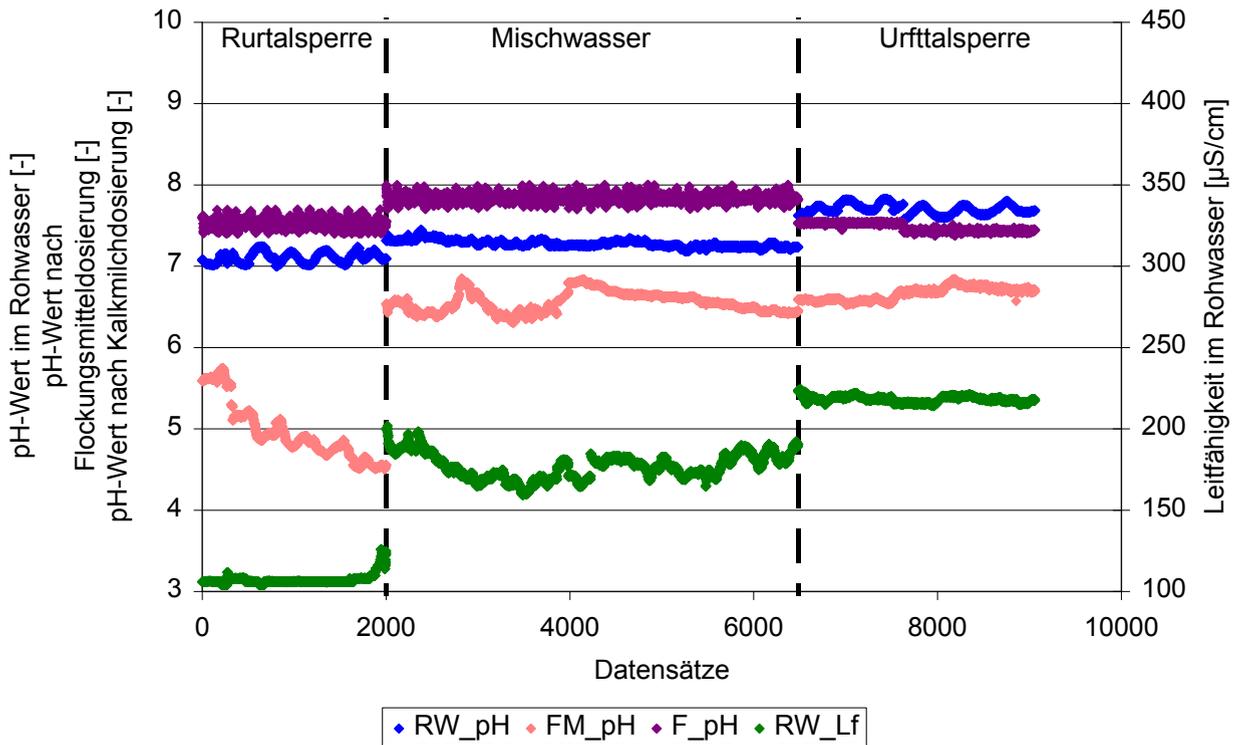


Abbildung 3.11: Testdaten: pH-Werte und Leitfähigkeit

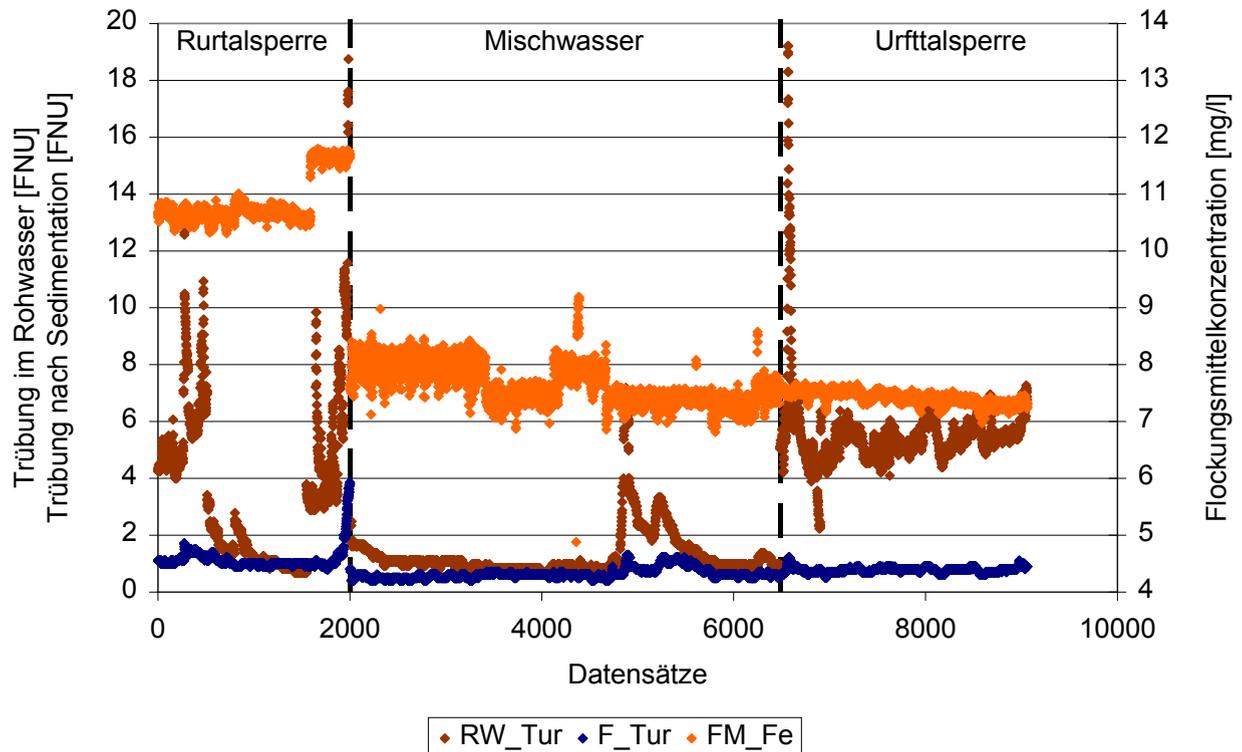


Abbildung 3.12: Testdaten: Trübung und Flockungsmittelkonzentration

3.3.1 Prüfung der Modellierbarkeit und Vergleich der Verweilzeitmodelle

Die Ergebnisse für die Vorhersage der Trübung nach Sedimentation zeigen eine grundsätzlich gute Modellierbarkeit. Auch die Generalisierungsfähigkeit der Netze durch Übertragung auf unbekannte Testdaten, dargestellt in Abbildung 3.13, konnte nachgewiesen werden. Größere Abweichungen ergeben sich bei der Validierung mit den Daten aus dem Zeitraum, in dem das Staubecken Obermaubach nur aus der Rurtalsperre gespeist wurde. Aber auch hier wurde eine Abweichung von +/- 5 % nur selten überschritten.

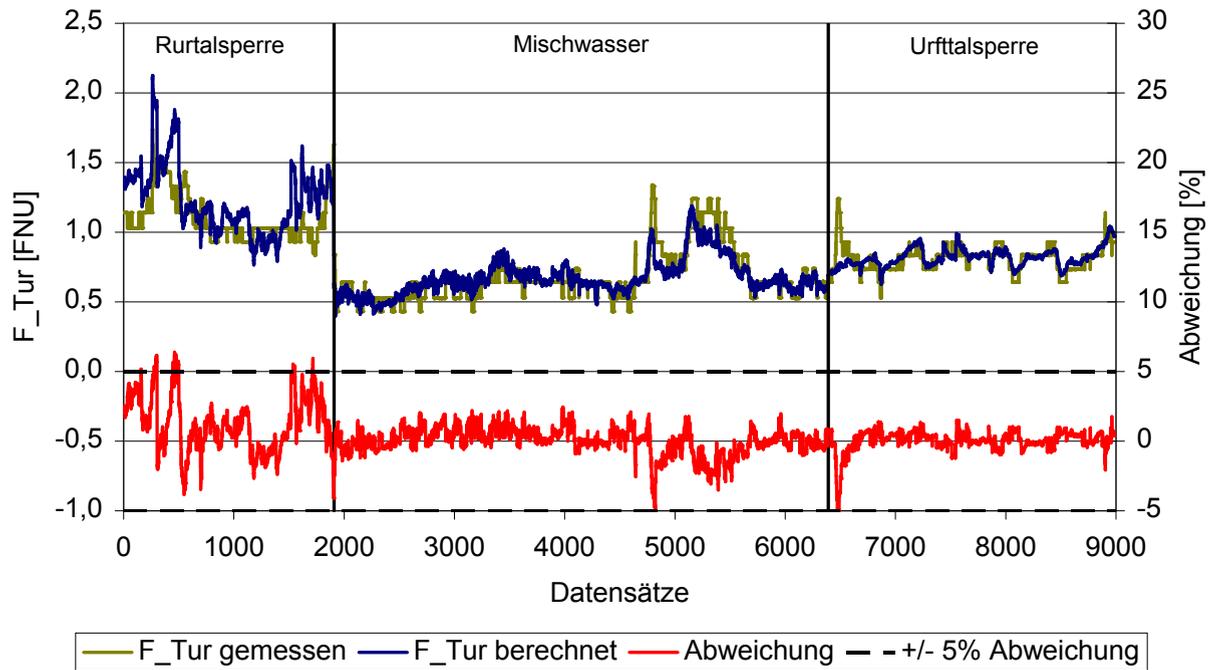


Abbildung 3.13: Validierung mit Testdaten (Verweilzeit aus den Messwerten)
Rurtalsperre: 15.08.2007-22.08.2007,
Mischwasser: 05.07.2008-05.08.2008,
Urftalsperre: 03.09.2007-10.09.2007

Bei Gegenüberstellung der beiden Verweilzeitmodelle nach Abbildung 3.6 und Abbildung 3.8 erweist sich das Verweilzeitmodell aus den Messwerten bei Validierung mit Trainings- und Testdaten als das geringfügig bessere Modell (s. Abbildung 3.14). Die Zahl an inkonsistenten Werten wich nicht deutlich voneinander ab. Aufgrund der schwierigen Auswertbarkeit von Totvolumina und einer geringfügig höheren Modellgenauigkeit war eine Festlegung der Verweilzeiten aus Messwerten sinnvoller, auch wenn diese, wie Abbildung 3.7 zeigt, mit recht hohen Fehlern behaftet war.

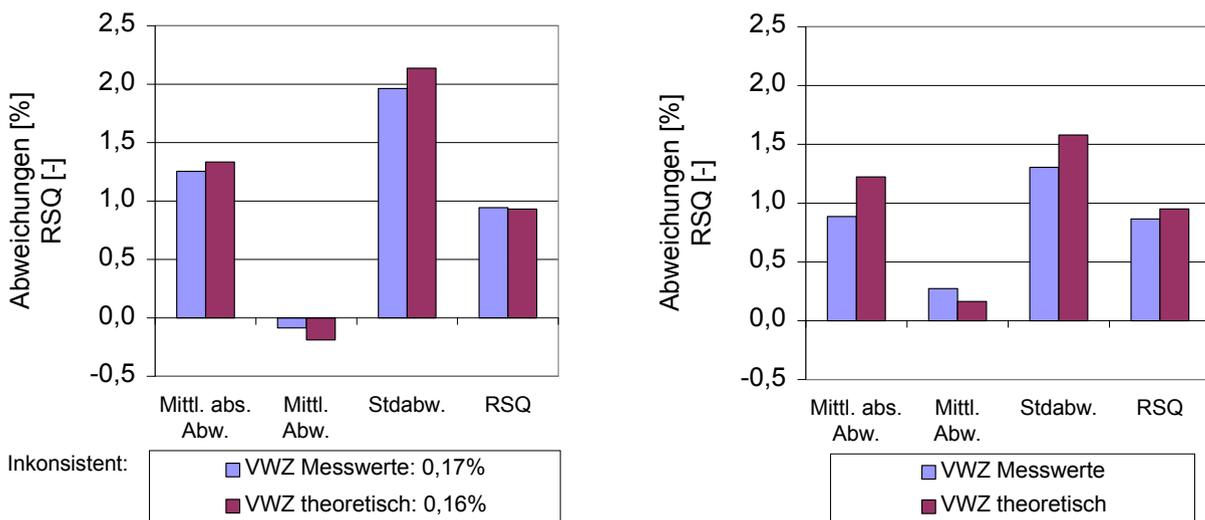


Abbildung 3.14: Ergebnisse der Validierung mit Trainingsdaten (links; mit Angabe der Inkonsistenzen) und Testdaten (rechts) für Verweilzeiten (VWZ) bestimmt aus den Messwerten und der Anlagenhydraulik

3.3.2 Einfluss von Zeitverhalten

Zur Berücksichtigung des dynamischen Prozessverhaltens wurden die Ableitungen des Durchsatzes und der Flockungsmittelmenge nach der Zeit gebildet und Datensätze mit hoher Änderungsdynamik, d.h. hohen Steigungen, vernachlässigt.

Der Vergleich des Trainingsergebnisses bei Reduktion der Daten auf quasistationäre Zustände mit dem Modell, das für alle Datensätze trainiert wurde, weist bei der Fehlerverteilung ein geringfügig besseres Ergebnis bei Reduktion der Daten auf quasistationäre Zustände auf (vgl. Abbildung 3.15 links). Der Korrelationskoeffizient ist für beide Modelle gleich. Die Zahl der Inkonsistenzen nahm durch die Reduktion nicht ab, obwohl dynamisches Prozessverhalten zu einer erhöhten Anzahl von Inkonsistenzen führen sollte, da gerade in diesen Bereichen gleiche Eingangsmuster zu unterschiedlichen Ausgangsmustern führen können.

Bei der Validierung mit Testdaten, in Abbildung 3.15 rechts, wurden für beiden Modelle die gleichen Datensätze zur Validierung verwendet, ohne sie zuvor auf quasistationäre Zustände zu reduzieren. Hier weist das quasistationäre Modell bei der Fehlerverteilung geringfügig bessere Werte auf.

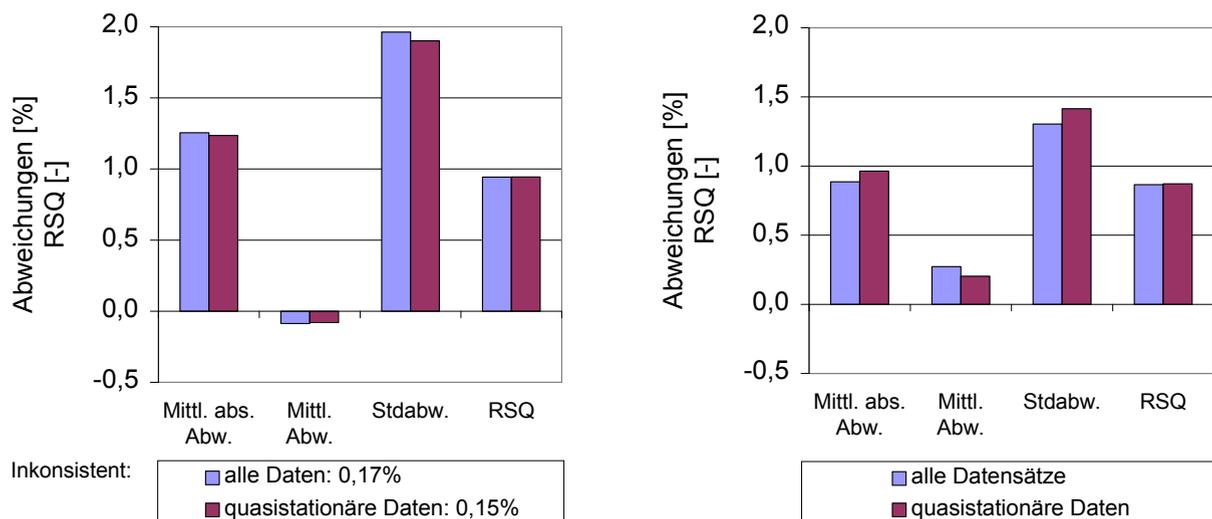


Abbildung 3.15: Ergebnisse der Validierung mit Trainingsdaten (links) mit Angabe der Inkonsistenzen und der Testdaten (rechts) bei Modellierung mit allen Datensätzen im Vergleich zu quasistationären Datensätzen

Aus den in Abbildung 3.15 gezeigten Ergebnissen ergibt sich kein deutlicher Vorteil für die Reduktion auf quasistationäre Zustände. Spielt Prozessdynamik eine Rolle, müsste die Validierung des quasistationären Modells mit quasistationären Daten zu einer höheren Genauigkeit führen, als die Validierung mit den Daten, die zu dynamischem Verhalten führen könnten.

Wie Abbildung 3.16 zeigt, ist kein deutlicher Unterschied in den beiden Validierungen zu erkennen; die Validierung mit quasistationären Daten weist erwartungsgemäß geringfügig bessere Werte auf. Daten mit Prozessdynamik werden jedoch auch mit so hoher Genauigkeit vorhergesagt, dass die Vorhersagen durchaus verwendbar sind. Aus diesem Grund können für die folgenden Modellierungen alle Datensätze berücksichtigt werden. Das Ergebnis ist auch von Vorteil bei Einsatz der Modelle im Online-Betrieb, da auf aufwändige Filter zur Erkennung dynamischen Verhaltens verzichtet werden kann.

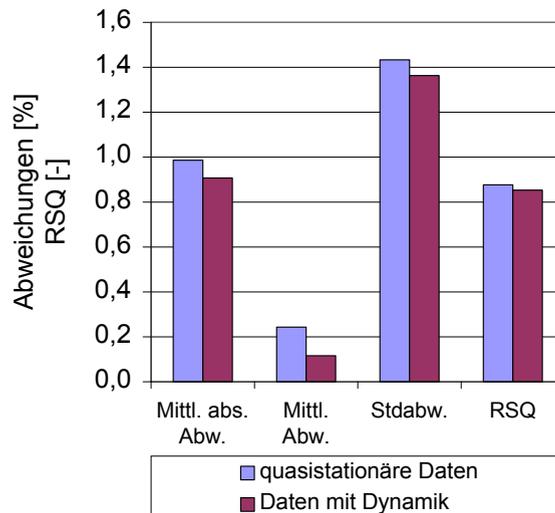


Abbildung 3.16: Validierung des quasistationären Modells mit quasistationären Daten und mit Daten, die zu dynamischem Prozessverhalten führen könnten

3.3.3 Vergleich verschiedener Modellierungsansätze

Zur Festlegung der Rahmenbedingungen wurde nur die direkte Trübungsmodellierung betrachtet. Eine weitere Möglichkeit ist die Modellierung des Flockungserfolgs im Sinne der Reduktion der Trübung bezogen auf die Rohwasserqualität. Auf diese Weise wird die Wirkung des Aufbereitungsprozesses berücksichtigt. Der eigentlich stattfindende Prozess ist eine Reduzierung der im Rohwasser enthaltenen Partikelfracht, indem die Partikel durch Zugabe eines Flockungsmittels in Flocken eingebunden und anschließend durch Sedimentation entfernt werden. Die Entfernung der Trübungsfracht kann aus den Messwerten bestimmt und als Ausgangsgröße des neuronalen Netzes verwendet werden.

Die Trübungsfracht im Ablauf der Sedimentation $F_{Tur_Load_red}$ berechnet sich aus der Rohwassertrübung RW_Tur , der Trübung nach Sedimentation F_Tur sowie den Durchsätzen im Rohwasser RW_Q und nach der Sedimentation KW_Q zu

$$F_{Tur_Load_red} = RW_Tur \cdot RW_Q - F_Tur \cdot KW_Q. \quad (3.1)$$

Sollte dieser Ansatz im Online-Betrieb, d.h. prädiktiv, eingesetzt werden, ist diese Methode jedoch nur bei konstantem Durchsatz sinnvoll, da der Durchsatz KW_Q im Ablauf der Sedimentation auch eine zukünftige Größe darstellt und bei nicht konstantem Durchsatz so nur eine Abschätzung getroffen werden könnte oder eine prädiktive Wasserbedarfsmodellierung notwendig wäre, um auf die zu erwartende Trübung zurückrechnen zu können. Ein weiteres Problem dieses Modellierungsansatzes ist die starke Spreizung des Wertebereichs, die durch die Frachtberechnung von hohen Trübungsspeaks im Rohwasser hervorgerufen wird. Hierdurch gehen nicht-lineare Zusammenhänge zwischen den Eingangsgrößen aller anderen Datenmuster im Rauschen unter. Wie die Sensitivitätsanalyse eines solchen Frachtmodells in Abbildung 3.17 zeigt, wird das Modell durch den Einfluss der Rohwassertrübungsfracht dominiert. Außerdem weisen die Einzelsensitivitäten aller Eingangsgrößen sehr geringe Wertebereiche auf (blauer Balken), was zeigt, dass die eigentlich zu erwartenden nichtlinearen Zusammenhänge durch die Wertebereichspreizung auf lineare reduziert werden.

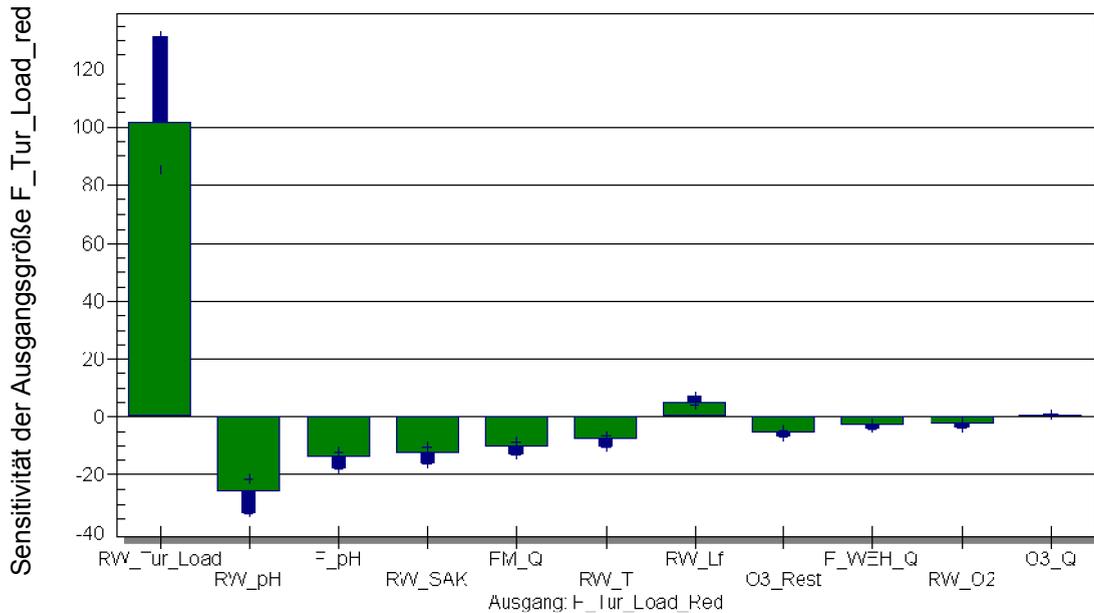


Abbildung 3.17: Sensitivitätsanalyse des Frachtmodells

Bezieht man die Trübung nach Sedimentation auf die Trübung im Rohwasser erhält man auch ein Maß für den Flockungserfolg, bei dem keine Spreizung des Wertebereichs und in der Berechnung keine zusätzlich vorherzusagende Größe auftritt. Wie in Abbildung 3.18 gezeigt wird, ist das Ergebnis für das Trübungsverhältnis *Tur_red* bis auf eine hohe mittlere Abweichung zunächst recht gut, durch Zurückrechnung auf die gewünschte Zielgröße Trübung nach Sedimentation (*F_Tur* aus *Tur_red*) zeigt sich jedoch, dass die Modellgenauigkeit im Vergleich zur direkten Modellierung der Trübung (*F_Tur* direkt) deutlich schlechter ausfällt.

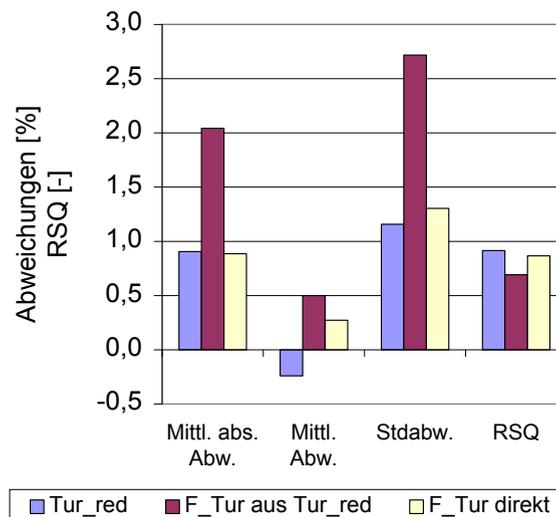


Abbildung 3.18: Modellierung des Trübungsverhältnisses im Vergleich zur direkten Trübungsmodellierung (Validierung mit Testdaten; Wertebereich der Ausgänge: 10 FNU)

Anhand der Ergebnisse zeigt sich, dass für die Trübungsmodellierung die Abbildung direkter Messwerte besser geeignet ist. Erfahrungen in der Modellierung von Abwasseraufbereitungsanlagen zeigen oft eine höhere Modellgenauigkeit bei Modellierung von Abbauraten, wahrscheinlich aus dem Grund, dass dort Langzeiteffekte aufgrund der Biologie eine größere Rolle spielen.

Auch die Generalisierungsfähigkeit der neuronalen Netze bleibt länger erhalten, d.h. häufiges Nachtraining neuer Datenmuster ist nicht notwendig (Gebhardt, 2008).

Erfahrungen bei der Modellierung des Flockungsprozesses zeigen, dass die Generalisierungsfähigkeit der Modelle nicht sehr lange erhalten blieb, was einen hohen Aufwand in der Wartung der Modelle mit sich führte. Zum einen lag die Notwendigkeit eines stetigen Nachtrainings neuer Datenmuster im gezeigten Beispiel an den Rahmenbedingungen durch den Bau der neuen Fischtreppe, zum andern kommt es durch jahreszeitlich bedingte Veränderungen der Wasserqualität immer wieder zu neuen Situationen, die durch das Modell abgedeckt werden müssen. Daher sollten für eine Modellierung im Trinkwasserbereich Daten von mindestens einem Jahr ohne extreme Veränderungen im Prozess für eine Modellierung zur Verfügung stehen.

3.3.4 Prüfung des Einflusses des pH-Werts nach Flockungsmitteldosierung

Üblicherweise wird der Flockungs-pH-Wert vor und nicht, wie im gegebenen Prozess, nach Flockungsmitteldosierung eingestellt. Der pH-Wert nach Flockungsmitteldosierung FM_pH hängt unter anderem von den Puffereigenschaften des Rohwassers ab, die aufgrund der unterschiedlichen Talsperrenwässer wie in Tabelle 3.1 (s. S. 37) gezeigt, sehr unterschiedlich sind. Ein Indikator für die Rohwasserquelle ist die Leitfähigkeit, die neben der Trübung als Leitgröße zur Einstellung der Flockungsmittelmenge genutzt wird. Bei sehr niedriger Leitfähigkeit (Rurtalsperre) wird in der Regel die höchste Eisenkonzentration dosiert. Da das Wasser der Rurtalsperre sehr schlecht gepuffert ist, fällt der pH-Wert nach Flockungsmittelzugabe in den sauren Bereich. Inwiefern das Absinken des pH-Werts und das darauf folgende Anheben auf den Flockungs-pH-Wert den Flockungsprozess beeinflusst, war nicht klar. Daher wurde die Online-Messtechnik um eine pH-Messung nach Flockungsmitteldosierung erweitert. Die Daten lagen zwischen Mitte August und Ende September 2007 und ab Mitte Februar 2008 vor. Da die Flockungsmitteldosierung in Abhängigkeit der Leitfähigkeit dosiert wird und der pH-Wert nach Flockungsmitteldosierung durch das unterschiedliche Pufferverhalten der Rohwässer beeinflusst wird, sollte der gesamte Datenraum zwischen Leitfähigkeit und Flockungsmitteldosierung mit Datensätzen abgedeckt sein. Durch die reduzierte Datenbasis wurde jedoch nicht der komplette Bereich der Flockungsmitteldosierungseinstellungen abhängig von der Leitfähigkeit abgedeckt. Gerade Bereiche mit niedriger Leitfähigkeit sind unterrepräsentiert, da im genannten Zeitraum das Wasserwerk selten hauptsächlich aus der Rurtalsperre gespeist wurde. Da neuronale Netze nur in begrenztem Maße extrapolationsfähig sind, sollten gerade für Extrembereiche Datensätze vorhanden sein. Wie Abbildung 3.19 zeigt, sind die Eckpunkte des Datenraums (niedrige Leitfähigkeit - niedrige Eisenkonzentration, niedrige Leitfähigkeit - hohe Eisenkonzentration, usw.) weitestgehend abgedeckt, so dass die Ergebnisse der Modellierungen als repräsentativ angenommen werden können.

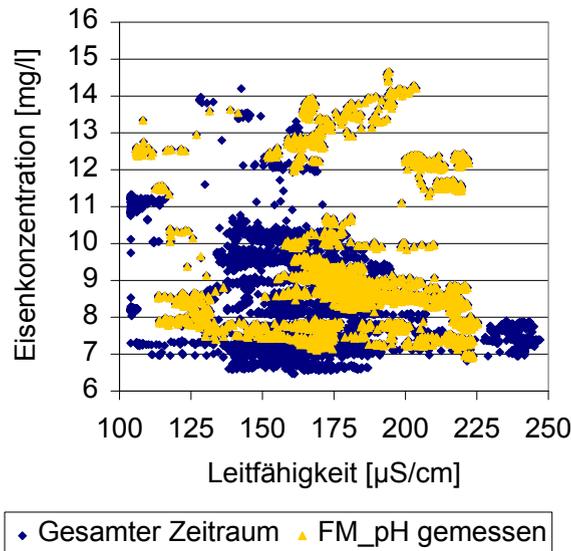


Abbildung 3.19: Abdeckung des Datenraums der Flockungsmitteldosierung abhängig von der Leitfähigkeit im Zeitraum, in dem der pH-Wert nach Flockungsmitteldosierung gemessen wurde, im Vergleich zum gesamten Modellierungszeitraum

Der Vergleich des Modells unter Berücksichtigung des pH-Werts nach Flockungsmitteldosierung mit dem entsprechenden Modell ohne den entsprechenden Eingang weist bei der Validierung mit Trainingsdaten keinen deutlichen Unterschied auf (s. Abbildung 3.20 links). Bei der Validierung mit Testdaten ist eher eine Verschlechterung des Ergebnisses zu erkennen (s. Abbildung 3.20 rechts). Entsprechend ist zu vermuten, dass eine Einstellung des pH-Werts vor oder nach Flockungsmittelzugabe keinen Einfluss auf den Flockungsprozess hat und das kurzfristige Absinken des pH-Werts durch das Flockungsmittel die Flockung nicht verändert. Als Indikator für die Rohwasserquelle und damit für die Pufferung des Wassers ist die Leitfähigkeit als Eingangsgröße in das neuronale Netz ausreichend. Sie weist eine hohe Korrelation von 0,81 mit dem pH-Wert nach Flockungsmitteldosierung auf. Damit kann der pH-Wert nach Flockungsmitteldosierung als Eingangsgröße vernachlässigt werden.

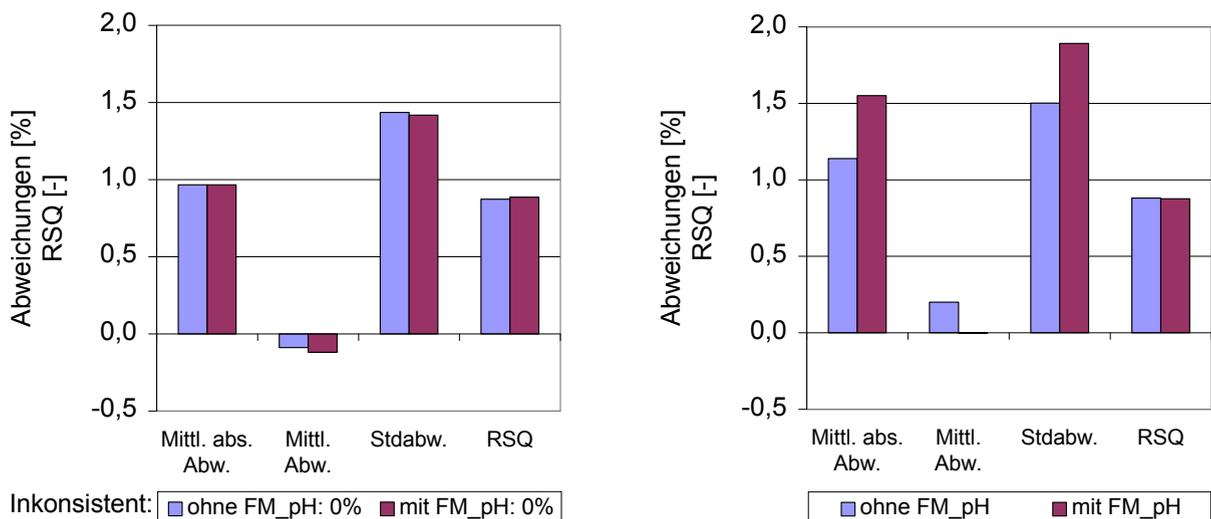


Abbildung 3.20: Vergleich der Modellierungen mit und ohne FM_pH für die Validierung mit Trainingsdaten (links) und mit Testdaten (rechts)

Dieses Ergebnis konnte auch durch Jar-Tests gestützt werden, bei denen Flockungsversuche mit Einstellung des Flockungs-pH-Wertes vor und nach Flockungsmittelzugabe auf einen für den Prozess typischen pH-Wert von 7,8 durchgeführt wurden. Das Ergebnis ist in Abbildung 3.21 gezeigt.

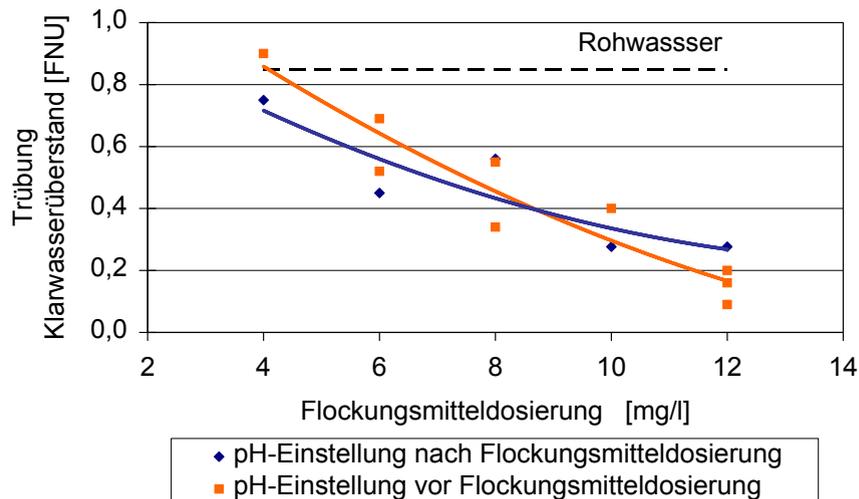


Abbildung 3.21: Jar-Tests mit Einstellung des Flockungs-pH-Werts vor und nach Flockungsmitteldosierung

3.3.5 Reduktion der Eingangsgrößen

Die direkte Modellierung der Trübung nach Sedimentation wies bereits gute Ergebnisse auf, so dass die gewählten Eingangsgrößen ausreichend waren, das System abzubilden. Die verschiedenen Wasserqualitätsgrößen und Prozessparameter wirken sich jedoch unterschiedlich auf die Zielgröße aus. Anhand von Sensitivitätsanalysen lassen sich Parameter finden, die den Prozess entweder gar nicht oder so geringfügig beeinflussen, dass sie vernachlässigt werden können. Zur Durchführung, Darstellung und Interpretation von Sensitivitätsanalysen sei an dieser Stelle noch einmal auf den Anhang verwiesen.

In der Sensitivitätsanalyse für die direkte Trübungsmodellierung in Abbildung 3.22 sind die mittleren Sensitivitäten und der Wertebereich der Einzelsensitivitäten aufgetragen. Am stärksten wirken sich die Rohwassertrübung RW_Tur und der SAK_{254} RW_SAK aus. Auch die Temperatur spielt erwartungsgemäß eine große Rolle. Die Leitfähigkeit RW_Lf als Indikator für die Rohwasserzusammensetzung hat zwar im Mittel nur einen durchschnittlichen Einfluss, kann sich aber im Extremfall stark negativ auswirken. Im Gegensatz dazu weisen die Restozonkonzentration $O3_Rest$ und die Ozonmenge $O3_Q$ eine niedrige mittlere Auswirkung und vor allem eine geringe Schwankungsbreite der Einzelsensitivitäten auf, was vermuten lässt, dass die Ozonung die Flockung bezüglich der Trübung wenig beeinflusst.

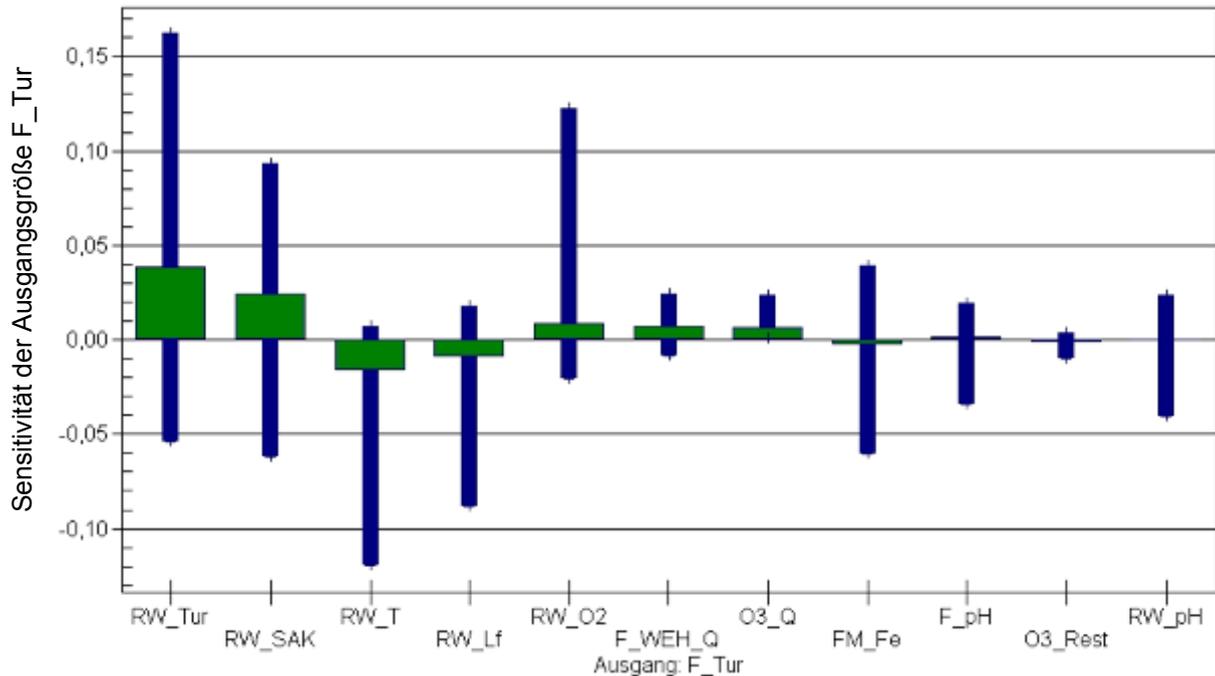


Abbildung 3.22: Sensitivitätsanalyse für die direkte Trübungsmodellierung

Um dieses zu untermauern bietet sich die Betrachtung des Kurvenverlaufs bei unabhängiger Variation der Restozonkonzentration bzw. Ozonmenge an 100 verschiedenen Datenpunkten bei Auftragung gegen die Trübung nach Sedimentation an. Wie Abbildung 3.23 und Abbildung 3.24 zeigen, wirkt sich die Restozonkonzentration nicht auf die Trübung nach Sedimentation aus, die Ozondosierung bei niedriger Trübung nach Sedimentation zwar nur geringfügig, zunehmend jedoch bei höheren Trübungswerten. Daher ist die Restozonkonzentration wahrscheinlich vernachlässigbar, die Ozondosierung ist aber möglicherweise in bestimmten Bereichen von Bedeutung.

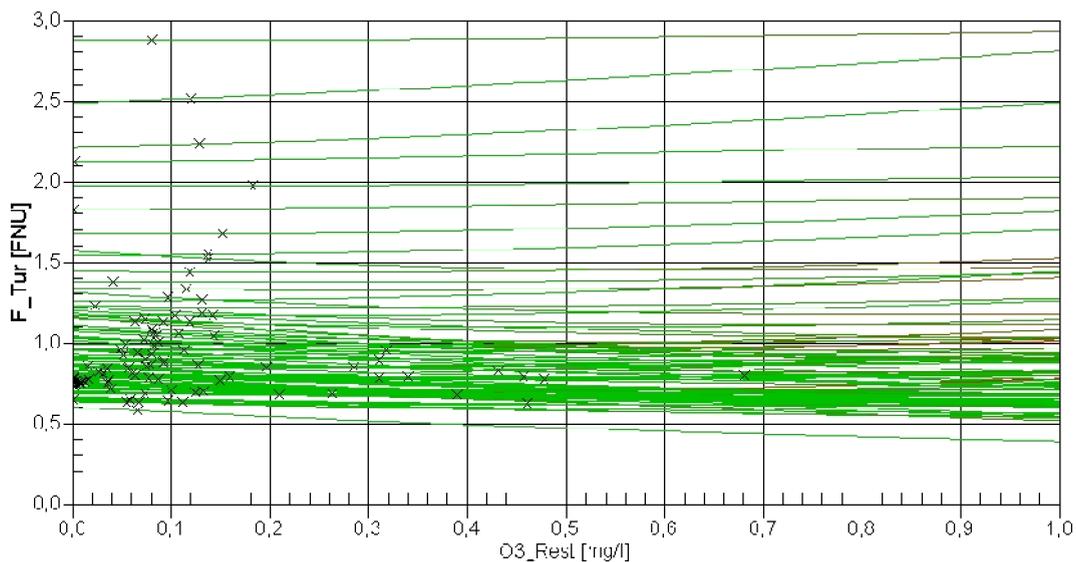


Abbildung 3.23: Auswirkung der Restozonkonzentration auf die Trübung nach Sedimentation für 100 verschiedene Datenpunkte

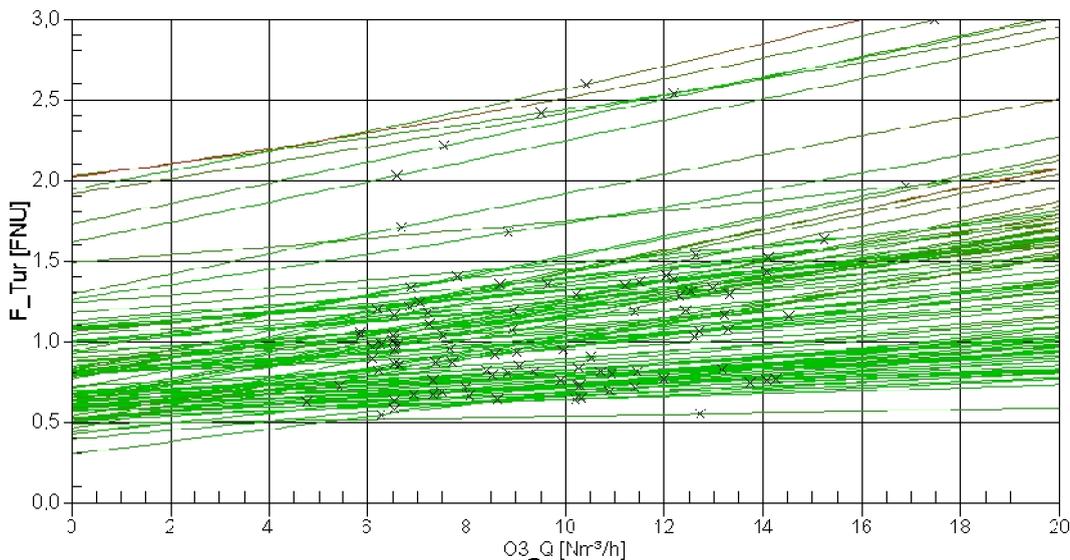


Abbildung 3.24: Auswirkung der Ozondosierung auf die Trübung nach Sedimentation für 100 verschiedene Datenpunkte

Die Ozonung könnte sich durch Mikrofloccenbildung positiv auf die Flockung auswirken (Bratby, 2006), was aber aus der Auswertung der Trübung vor und nach der Ozonung aus den Laboranalysen nicht nachgewiesen werden kann (vgl. Abbildung 3.25). Dieses Ergebnis stimmt auch mit den aus der Literatur bekannten Untersuchungsergebnissen überein. Nach (Becker und O'Melia, 2001) tritt die Mikrofloccenbildung bei mittleren bis hohen DOC-Gehalten nicht ein, Der DOC-Gehalt liegt im Rohwasser dieses Wasserwerks bei durchschnittlich 2,8 mg/l, also im mittleren Bereich.

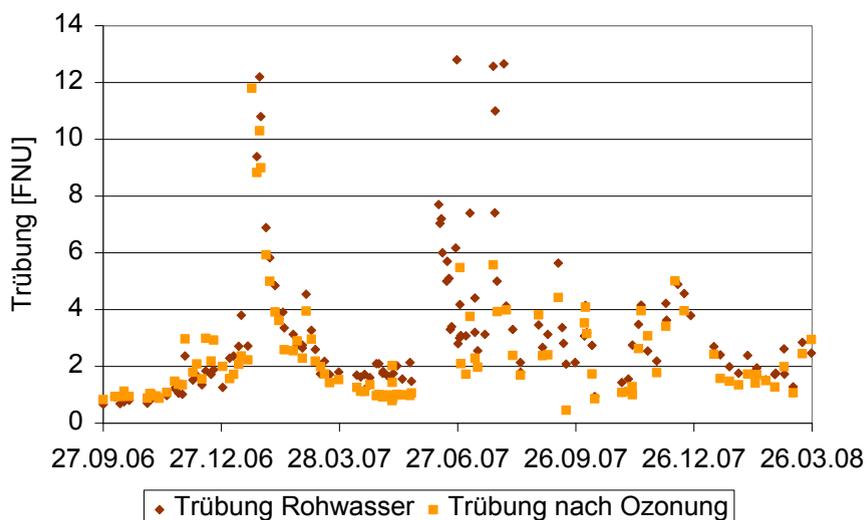


Abbildung 3.25: Überprüfung möglicher Mikrofloccenbildung durch die Ozonung

Auch der pH-Wert nach Flockungsmitteldosierung, der während des betrachteten Zeitraums nur drei Mal variiert wurde, weist eine relativ geringe Sensitivität und in weiten Teilen konstante Verlaufslinien (Abbildung 3.26) auf. Zwar ist der Wertebereich der Einzelsensitivitäten nicht unerheblich, aufgrund der weitestgehenden Konstanz des Wertes sollte eine Vernachlässigbarkeit der Größe jedoch geprüft werden.

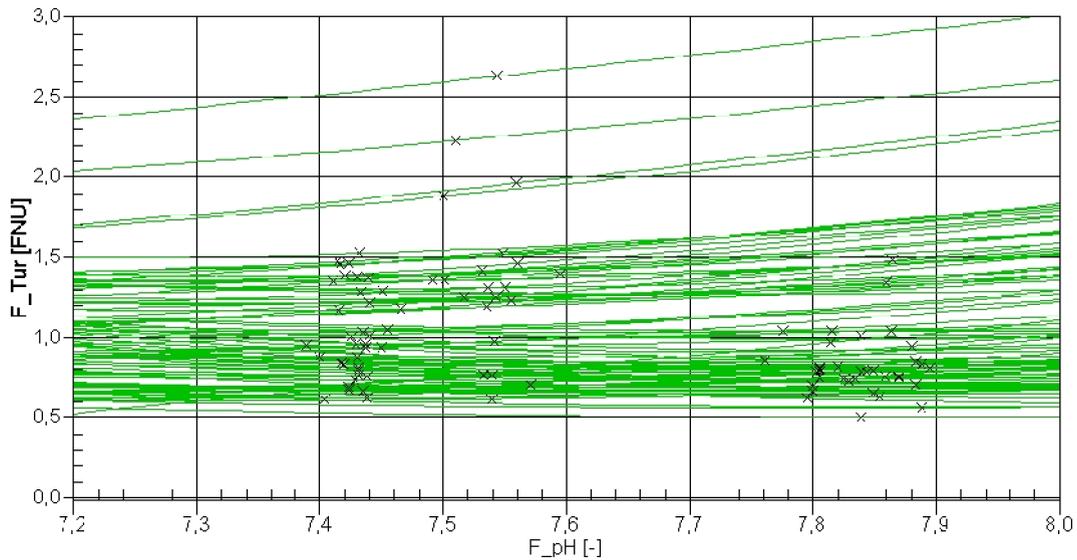


Abbildung 3.26: Einfluss des pH-Werts nach Kalkmilchdosierung auf die Trübung nach Sedimentation

Im ähnlich niedrigen Sensitivitätsbereich wie die Werte der Ozonung liegt nach Abbildung 3.22 auch der Durchsatz F_{WEH_Q} . Das Verlaufsdiagramm für 100 verschiedene Datenpunkte ist in Abbildung 3.27 dargestellt.

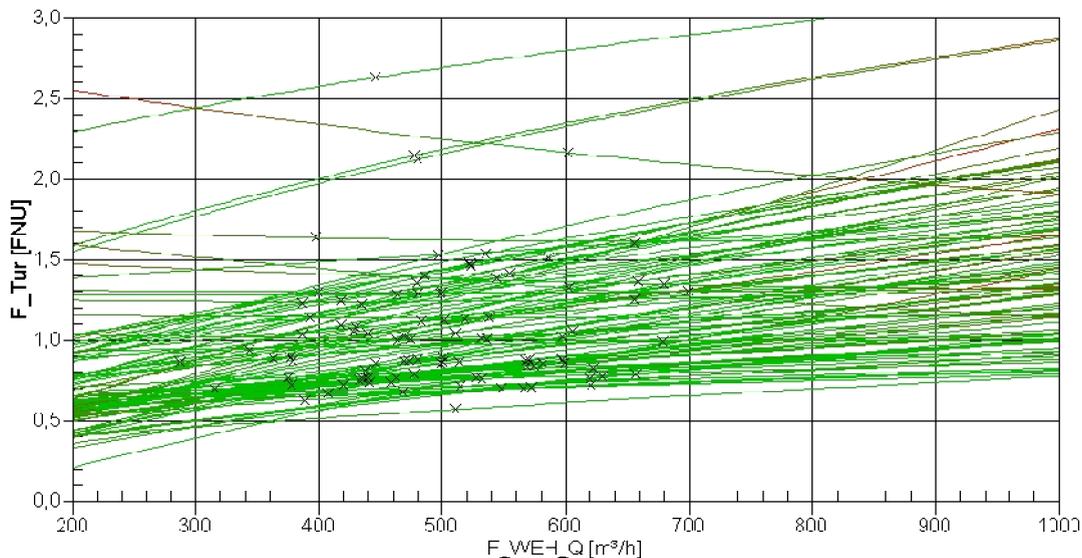


Abbildung 3.27: Einfluss des Durchsatzes auf die Trübung nach Sedimentation

Der Durchsatz weist einen gering positiven aber gleichmäßigen Einfluss auf die Zielgröße auf und ist ein Maß für die Verweilzeit in der Anlage. Mit höherem Durchsatz und damit sinkender Verweilzeit in der Flockung nimmt die Trübung im Ablauf der Sedimentation erwartungsgemäß zu. Der geringe Einfluss der Verweilzeit steht auch im Einklang mit der Auswertung der beiden Verweilzeitmodelle in Abbildung 3.14 die sich trotz großer Unterschiede in den berücksichtigten Verweilzeiten nach Abbildung 3.7 in der Modellgenauigkeit nicht sehr stark voneinander unterscheiden. Die Größe sollte wegen ihrer technischen Bedeutung trotz geringer Sensitivität nicht vernachlässigt werden.

Aufgrund der oben gezeigten Sensitivitätsanalysen wurden die Größen Restozonkonzentration $O3_{Rest}$, Ozondosierung $O3_Q$ und pH-Wert nach Flockungsmittelzugabe F_{pH} schrittweise als Modelleingänge beim Training herausgenommen.

Wie Abbildung 3.28 zeigt, ist die Validierung mit Trainingsdaten für alle Modelle vergleichbar gut. Die Zahl der inkonsistenten Datensätze ist insgesamt zwar sehr gering, steigt aber für das Modell ohne Berücksichtigung der Ozonung und des pH-Werts nach Kalkmilchdosierung auf das Doppelte an. Der Unterschied in den Modellen zeigt sich erst bei der Validierung mit unbekanntem Testdaten. Hier steigt der Fehler bei Vernachlässigung der Ozonung und des pH-Werts nach Flockungsdosierung deutlich an, auch der RSQ-Wert wird geringfügig schlechter. Die Ozonung spielt für die Modellierung der Trübung demnach keine Rolle. Dieses kann zum einen bedeuten, dass die Ozonung die Flockung grundsätzlich nicht beeinflusst, aber auch, dass die Ozonung optimal eingestellt ist und sich gleich bleibend auf die Flockung auswirkt. Was Ausschlag gebend ist, kann an dieser Stelle nicht geprüft werden, da die Anlage immer mit Ozonung betrieben wurde. Der pH-Wert nach Kalkmilchdosierung hat aufgrund der konstanten Einstellung erwartungsgemäß einen geringen Einfluss, sollte aber nicht vernachlässigt werden. Die Wichtigkeit dieses Parameters als Eingangsgröße könnte auch in der Anordnung der Daten im Datenraum liegen. Vergleichbare Rohwasserqualitäten mit vergleichbarer Flockungsmitteldosierung würden ohne Berücksichtigung des pH-Werts nach Flockungsmitteldosierung zu einem Clusterdatensatz zusammengefasst, obwohl durch einen unterschiedlichen pH-Wert nach Kalkmilchdosierung eigentlich ein anderer Zustand abgebildet werden sollte. Da der Parameter aber insgesamt einen geringen Einfluss aufweist, macht sich dieser Effekt nicht extrem bemerkbar.

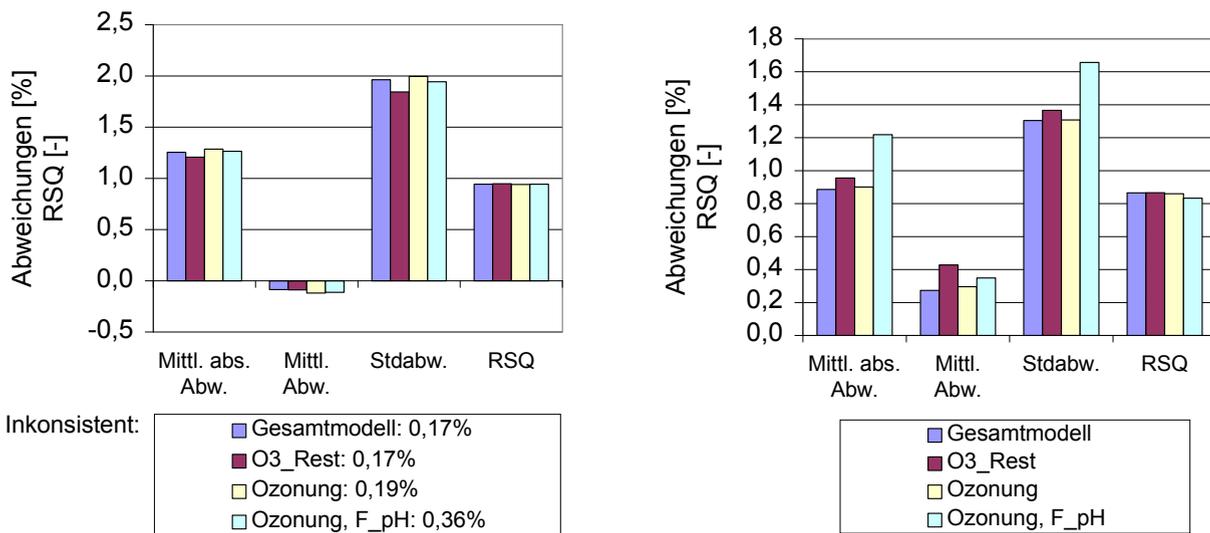


Abbildung 3.28: Validierung mit Trainingsdaten (links) und Testdaten (rechts) für die Reduktion der Eingangsgrößen

Die bisherigen Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse zeigen, dass der Flockungsprozess weitaus stärker von der Rohwasserqualität abhängt als von den Flockungsbedingungen selbst und die vorhergehenden Aufbereitungsstufen Mikrosiebung und Ozonung bei den gegebenen Einstellungen für den Flockungsprozess nicht von Bedeutung sind. Weitere Auswertungen hierzu sind in Kapitel 5 zu finden.

3.3.6 Spezialistenmodell

Zur Verbesserung der Modellgenauigkeit kann das Training von Spezialistenmodellen notwendig sein. Hierbei werden Daten, die in irgendeiner Weise besondere Situationen repräsentieren, gesondert modelliert. Beispielsweise haben Gagnon et al. (1997) Spezialistenmodelle zur Berücksichtigung jahreszeitlicher Schwankungen oder Baxter et al. (1999) zur Abbildung instabiler Betriebszustände eingesetzt. Unter Berücksichtigung der Aufbereitung von Wasser aus zwei verschiedenen Talsperren und der schlechteren Vorhersagegenauigkeit der Trübung für Rurtalsperrenwasser liegt eine Separierung der Daten nach den verschiedenen Talsperrenwässern nahe. Daher wurde zur Verbesserung der Modellgenauigkeit für das Rurtalsperrenwasser die Leitfähigkeit im resultierenden Trübungsmodell auf die Obergrenze von 155 $\mu\text{S}/\text{cm}$ begrenzt und die Daten wurden separat modelliert. Wie Abbildung 3.29 zeigt, konnte die Modellgenauigkeit hierdurch jedoch nicht verbessert werden.

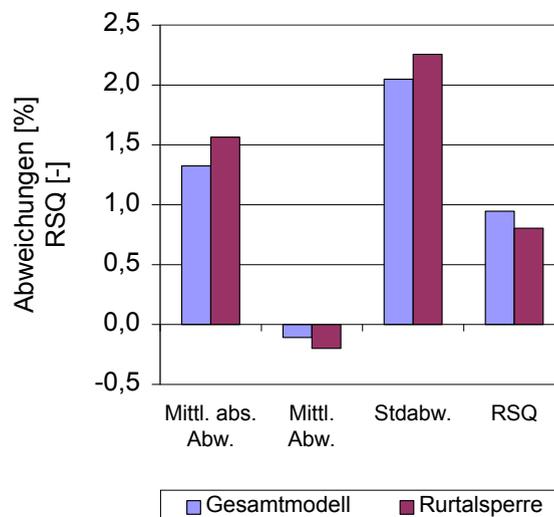


Abbildung 3.29: Abbildung des Rurtalsperrenwassers im Gesamtmodell und in einem Spezialistenmodell

Aus Sicht der Mechanismen der Flockung handelt es sich bei Rurtalsperrenwasser um das schwieriger aufzubereitende Wasser, da durch die niedrige Leitfähigkeit bzw. Ionenstärke die Kompression der elektrischen Doppelschicht wesentlich geringer ist als bei der Urfttalsperre und damit die Reichweite der elektrostatischen Abstoßungskräfte höher ist. Damit haben die Partikel eine höhere Potentialdifferenz bei der gegenseitigen Annäherung zu überwinden, um in den Bereich hoher van-der-Waals-Anziehung zu gelangen (vgl. Resultierende 1 in Abbildung 2.11, S. 21). Dementsprechend sinkt der Kollisionswirksamkeitsfaktor α in der Gleichung für die Abnahme der Primärpartikel durch die Flockung und es ist wahrscheinlich, dass bei der Flockung von Rurtalsperrenwasser im Vergleich zu Urfttalsperrenwasser kleinere Flocken gebildet werden, was aus Beobachtungen des Anlagenbetriebs auch bestätigt werden konnte. Ein zusätzlicher Grund für die kleinere Flockengröße könnte der niedrige Gehalt an Ca^{2+} -Ionen im Rurtalsperrenwasser sein (vgl. Tabelle 3.1, S. 37). Ca^{2+} -Ionen sind gerade bei Vorozonung dafür bekannt, mit den bei der Ozonung entstehenden Carboxylgruppen von NOM koordinative Bindungen zu bilden. Sie können damit zu einer Kompensation der durch die Ozonung erhöhten negativen Oberflächenladung oder zu einer Partikelentstabilisierung durch Brückenbildung beitragen (Chandrankanth und Amy, 1996).

Durch die kleineren Flockengrößen spielt die Sedimentierbarkeit eine wesentlich größere Rolle. Die Modellgenauigkeit könnte daher wahrscheinlich durch Berücksichtigung der Eigenschaften der Flocke, wie Größe, Dichte, Stabilität und Sedimentationsverhalten, verbessert werden, was jedoch online mangels entsprechender Betriebsmessgeräte für diese Parameter nicht möglich ist.

Durch den Flockungsprozess wird die Rohwassertrübung üblicherweise reduziert. Weitergehende Datenanalysen haben jedoch gezeigt, dass seltene Situationen auftreten, in denen die Trübung nach Sedimentation höher ist als im Rohwasser. Teilt man die Trainingsdaten anhand der Differenz zwischen Rohwassertrübung und Trübung nach Sedimentation, ergibt sich bei Validierung für die Daten mit einer negativen Differenz, also einer unzureichenden Flockung/Sedimentation, mit 2,1 % eine deutlich höhere Abweichung als für die übrigen Daten, bei denen eine Genauigkeit von 1,3 % erreicht wird.

Betrachtet man die Flockungsmitteldosierung in Abhängigkeit der Schlüsselgrößen Rohwassertrübung und Leitfähigkeit, so wird deutlich, dass eine unzureichende Flockung/Sedimentation in der Regel bei geringer Rohwassertrübung kleiner 1,5 FNU und niedriger Leitfähigkeit unter 120 $\mu\text{S}/\text{cm}$, unabhängig von der Flockungsmittelkonzentration, auftritt. Durch den niedrigen Feststoffgehalt und den durch die geringe Pufferkapazität des Rurtalsperrenwassers bis auf Werte um pH 4,5 stark absinkenden pH-Wert kommt es zu einer Umladung und Restabilisierung der Partikel im Wasser (vgl. Abbildung 2.12, S. 24). Feststoffe im Wasser wirken bei der Ausfällung von Eisenhydroxidflocken zusätzlich wie Kristallisationskeime. Bei niedriger Rohwassertrübung entstehen daher während des Anhebens des Flockungs-pH-Werts mit Kalkmilch durch den niedrigen Feststoffgehalt wahrscheinlich eher hochvoluminöse, gelartige Flocken mit niedriger Dichte, die sich sehr schlecht absetzen lassen. Zur Verbesserung des Flockungsprozesses wäre in solchen Situationen daher die Erhöhung der Feststoffkonzentration, z.B. durch Schlammrückführung, sinnvoll.

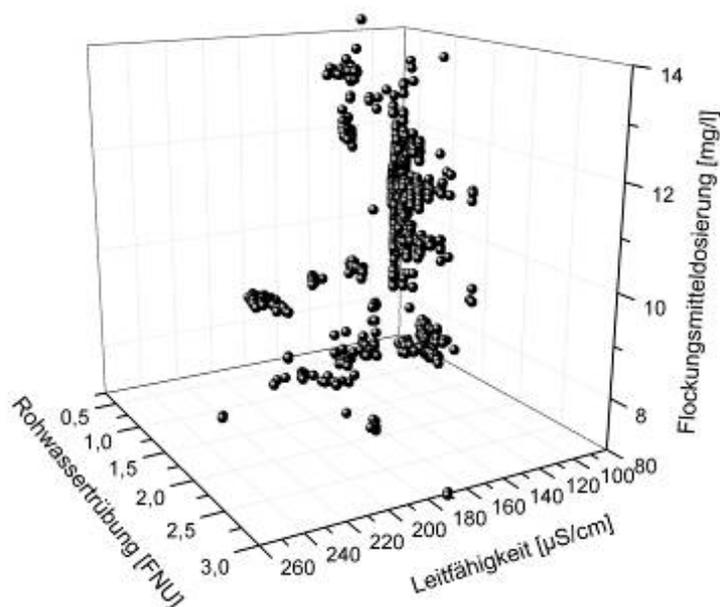


Abbildung 3.30: Datenpunkte bei unzureichender Flockung/Sedimentation

Da es sich um zwei grundsätzlich verschiedene Prozesssituationen handelt und die Sedimentation durch die ungünstigen Flockungsbedingungen in der Bilanz beider Prozesse durch die unzureichende Flockenabtrennung einen wesentlich höheren Einfluss hat, wurden die Daten anhand der Trübungsdifferenz getrennt und einzeln modelliert. Durch das Training des Spezialistenmodells für den Bereich der unzureichenden Flockung/Sedimentation konnte eine deutliche Verbesserung der Abbildungsgenauigkeit erreicht werden. Wie Abbildung 3.31 zeigt, konnte vor allem die Korrelation zwischen Messwert und Vorhersage des Messwerts deutlich verbessert werden. Während für die Datensätze im Gesamtmodell ein RSQ-Wert von 0,65 erreicht wurde, wurden die Werte im Spezialistenmodell mit einem RSQ-Wert von 0,86 abgebildet. Die Modellgenauigkeit stieg von 2,1 % bei Abbildung im Gesamtmodell auf 1,3 % bei Abbildung im Spezialistenmodell, was der gleichen Genauigkeit bei der Abbildung des regulären Flockungsprozesses entspricht.

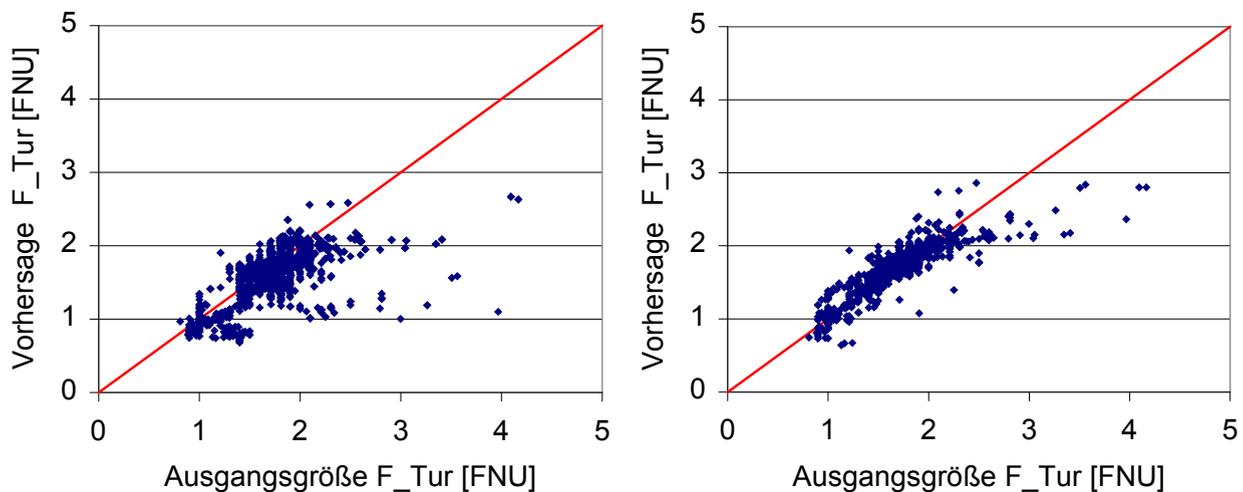


Abbildung 3.31: Korrelation der Daten für unzureichende Flockung/Sedimentation im Gesamtmodell (links) und im Spezialistenmodell (rechts)

Im Online-Betrieb sollte dementsprechend ein Basismodell für alle Betriebspunkte, bei denen eine Reduzierung der Rohwassertrübung erreicht wird, und ein Spezialistenmodell für unzureichende Flockung/Sedimentation mit einer höheren Trübung im Ablauf der Sedimentation als im Rohwasser eingesetzt werden.

3.3.7 Vergleich des neuronalen Netzes mit Regressionsmodellen

Die Leistungsfähigkeit der neuronalen Netze wurde für das Basismodell mit der klassischen Modellbildung einer linearen und nichtlinearen Regression verglichen. Für die nichtlineare Regression wurde ein Polynom zweiter Ordnung gewählt, wobei die Eingangsgrößen in Gleichung (3.2) durch die Variable x_i repräsentiert werden und a_i und b_i die anzupassenden Konstanten sind.

$$F_Tur = \sum_{i=1}^9 a_i x_i + b_i x_i^2 \quad (3.2)$$

Die Anpassung der Konstanten wurde mit der Software *DataFit 9* durchgeführt. Um eine gute Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten, wurden die Trainingsdaten des neuronalen Netzes nach Reduzierung der Eingangsgrößen als Datenbasis gewählt.

Wie Abbildung 3.32 zeigt, weist das neuronale Netz im Vergleich zu den Regressionsmodellen sowohl bei der Validierung mit Trainingsdaten als auch mit unbekannten Testdaten die besseren Ergebnisse auf, wobei der Unterschied der Abweichungen bei den Testdaten nicht mehr so deutlich ausfällt, wie bei den Trainingsdaten. Interessanterweise ist das nichtlineare Regressionsmodell nicht deutlich besser als das lineare Regressionsmodell.

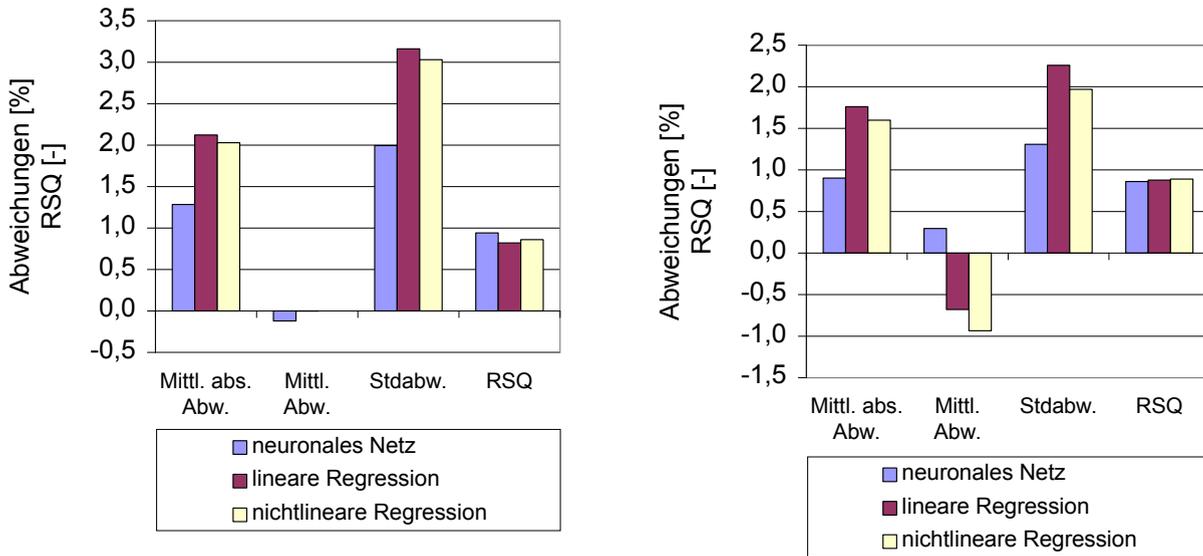


Abbildung 3.32: Validierung mit Trainingsdaten (links) und mit unbekannten Testdaten (rechts) zum Vergleich des neuronalen Netzes mit Regressionsmodellen

Die höhere Leistungsfähigkeit des neuronalen Netzes wird vor allem bei der Betrachtung des Verlaufsdigramms, wie in Abbildung 3.33 gezeigt, deutlich. Schwierig vorherzusagen ist die Trübung nach Sedimentation in beiden Fällen, wenn das Staubecken Obermaubach nur aus der Rurtalsperre gespeist wird. Zeitbereiche, in denen Mischwasser und Urftalsperrenwasser aufbereitet werden, können durch das neuronale Netz besser abgebildet werden. Gerade bei Aufbereitung des Urftalsperrenwassers wird der Kurvenverlauf der Trübung nach Sedimentation durch das neuronale Netz besser verfolgt. Nur die erhöhte Trübung nach Sedimentation durch den Rohwassertrübungspeak im Mischwasser wird durch das nichtlineare Regressionsmodell genauer vorhergesagt.

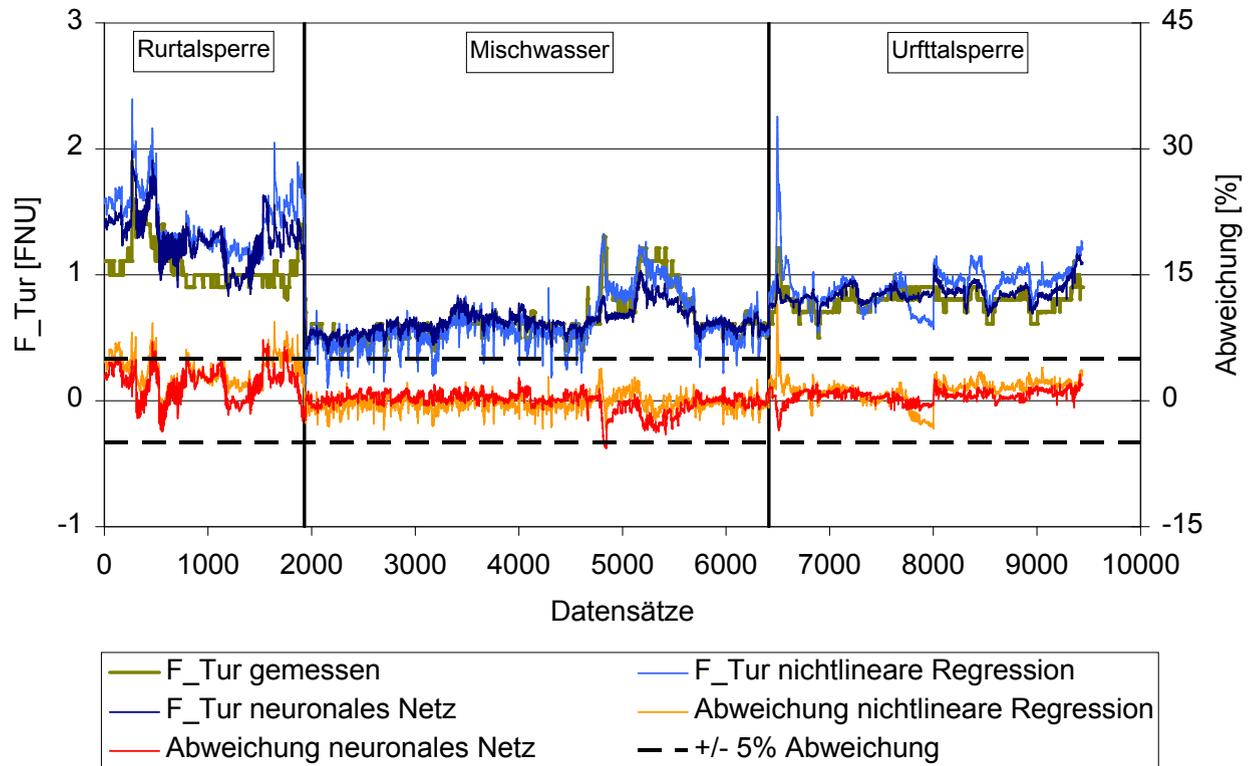


Abbildung 3.33: Verlaufsdigramm für die Validierung mit Testdaten zum Vergleich des neuronalen Netzes mit dem nichtlinearen Regressionsmodell

3.4 Partikelzahlmodellierung

Das Partikelzahlmodell wurde mit den gleichen Eingangsgrößen wie das Trübungsmodell trainiert, da die Partikelzahl nach der Siebmaschine als Eingangsgröße aufgrund der schwierigen messtechnischen Erfassung vernachlässigt werden musste (vgl. Tabelle 3.4, S. 41). Der Modellierungszeitraum umfasste die Daten vom 17.06.2008 bis zum 09.09.2008. Aufgrund der wenigen Daten wurde zunächst auf eine Abtrennung von Testdaten verzichtet. Da die Messwerte der Partikelzahl nach Sedimentation eine hohe Streuung aufwiesen, wurde neben der Modellierung mit Einzelwerten auch die Modellierung von Stundenmittelwerten durch eine gleitende Mittelwertbildung getestet. Die Ergebnisse für die Validierung mit Trainingsdaten sind in Abbildung 3.34 gezeigt. Es ergibt sich kein deutlicher Unterschied in der Modellierung von Einzelwerten oder Stundenmittelwerten.

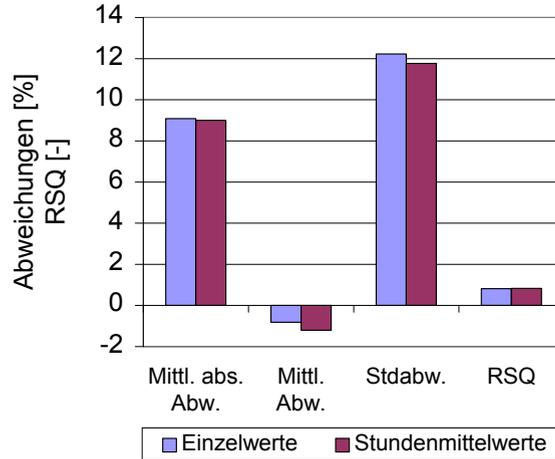


Abbildung 3.34: Validierung der Partikelzahlmodelle mit Trainingsdaten

Die Betrachtung des Verlaufsdiagramms in Abbildung 3.35 zeigt, dass zwar der Trend des Verlaufs der Partikelzahl wiedergegeben werden kann, aber die Vorhersage schon bei der Validierung mit Trainingsdaten mit hohen Unsicherheiten behaftet ist. Die Partikelzahl ist demnach modelltechnisch schwer abbildbar. Ein Grund dafür könnte die fehlende Eingangsgröße der Partikelzahl nach der Mikrosiebung sein, für die die Korrelation mit der Trübung im Rohwasser nur für einen sehr kurzen Zeitraum nachgewiesen werden konnte. Insgesamt lieferte das Partikelmessgerät nach Sedimentation zwar vertrauenswürdige Ergebnisse, jedoch kann nicht ausgeschlossen werden, dass durch das Eintreten von Flocken in den Messbereich die Erfassung der Partikelzahl fehlerhaft sein könnte. Durch die regelmäßige automatische Spülung der Durchflusszelle wird eine Verblockung jedoch verhindert.

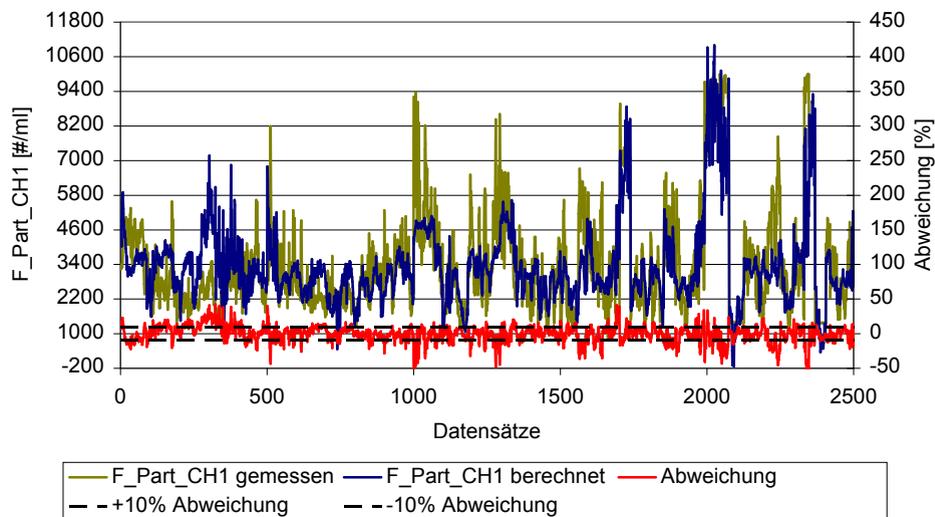


Abbildung 3.35: Verlaufsdiagramm der Validierung des Partikelzahlmodells mit Trainingsdaten

4 Optimierung des Flockungsprozesses

Die Eingangsgrößen des neuronalen Netzes lassen sich in Störgrößen, d.h. nicht beeinflussbare Parameter, und manipulierbare Variablen, d.h. Stellgrößen des Prozesses, aufteilen. Stellgrößen, die im beschriebenen Wasseraufbereitungsprozess prinzipiell manipulierbar wären, sind:

- Durchsatz F_{WEH_Q}
- Ozondosierung $O3_Q$
- Flockungsmitteldosierung FM_Fe
- Flockungs-pH-Wert F_pH

Der Durchsatz wird entsprechend des Wasserbedarfs geregelt und kann daher nicht als Optimierungsparameter verwendet werden. Der zu optimierende Flockungsprozess wird, wie in Kapitel 3.3.5 gezeigt, nicht von der Ozonung beeinflusst, so dass diese Größe nicht berücksichtigt werden muss. Der Flockungs-pH-Wert muss zwar als Eingangsgröße in das neuronale Netz berücksichtigt werden, bietet allerdings aufgrund der niedrigen Sensitivität nur ein deutlich geringeres Optimierungspotential als die Flockungsmitteldosierung. Daher wurde die Größe in Absprache mit dem Betriebspersonal des Wasserwerks Obermaubach nicht als Optimierungsparameter freigegeben. Aus diesem Grund ist die Flockungsmitteldosierung die einzig manipulierbare Variable, über die der Flockungsprozess optimal eingestellt werden kann.

4.1 Optimierungsansätze

Für eine Optimierung können je nach Ziel zwei verschiedene Ansätze verfolgt werden. Die einfachere der beiden Varianten ist die direkte Optimierung der Ausgangsgröße des neuronalen Netzes durch den Vergleich mit einem Zielwert. Durch den Optimierer werden die manipulierbaren Variablen so eingestellt, dass die Abweichung zwischen Ausgangsgröße des neuronalen Netzes und dem Zielwert bei Einhaltung eines Sicherheitsgrenzwerts minimal wird. Diese Option ist in Abbildung 4.1 gezeigt.

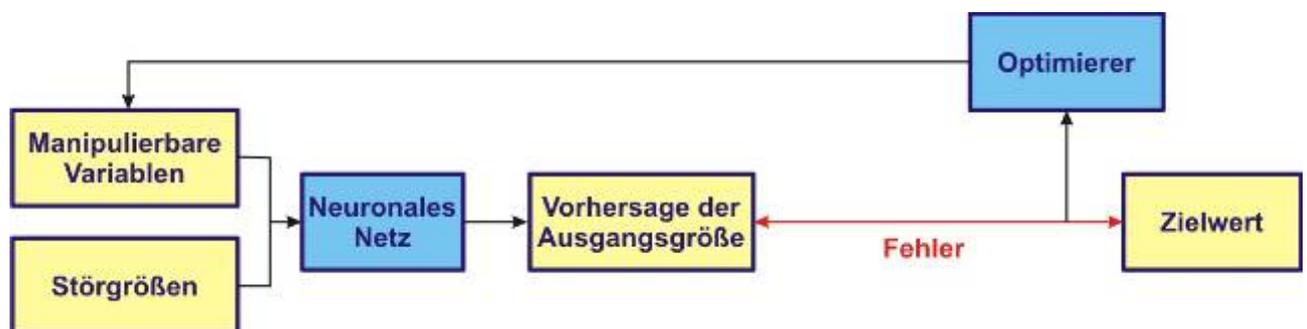


Abbildung 4.1: Einfache Optimierung der Ausgangsgröße des neuronalen Netzes

Gerade bei einer integrierten Prozessoptimierung, bei der nachfolgende Prozessschritte einbezogen werden, oder im Zuge einer Kostenoptimierung ist es sinnvoll, eine Optimierungsfunktion zu bilden, die die Ausgangsgröße, aber auch Störgrößen und manipulierbare Variablen, verarbeitet. Das Resultat der Optimierungsfunktion kann, wie Abbildung 4.2 zeigt, wiederum mit einem Zielwert verglichen werden.

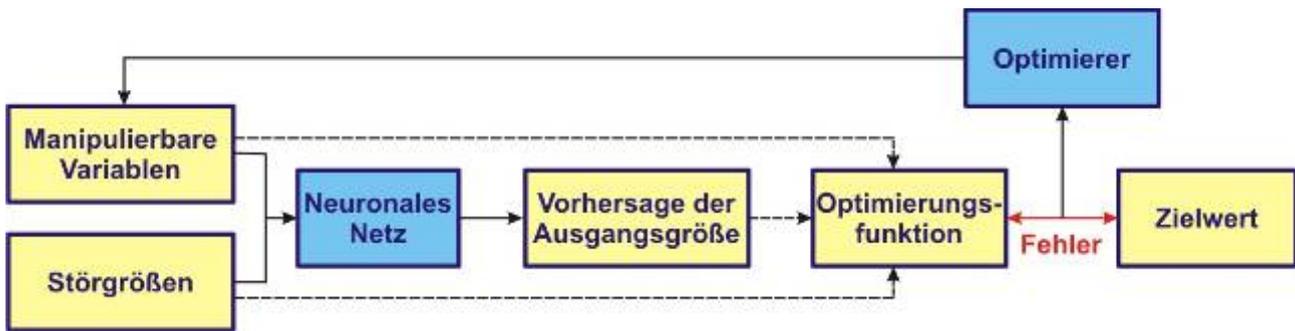


Abbildung 4.2: Prozessoptimierung auf Basis einer Optimierungsfunktion

4.2 Umsetzung der Optimierungsansätze im Wasserwerk Obermaubach

Die in der Flockung und Filtration entstehenden Aufbereitungskosten setzen sich aus den Kosten für Flockungsmittel, Kalkmilch, Schlammentsorgung, Produktionskosten für das Filtrerrückspülwasser und den Energiekosten für die Luft- und Wasserspülung der Druckfilter zusammen. Für die Schlammentsorgung in die öffentliche Kanalisation wurde vom Entsorger eine Pauschale in Abhängigkeit von der dosierten Flockungsmittelmenge erhoben. Die Spülwasserproduktions- und Energiekosten für die Luft- und Wasserspülung wurden für durchschnittlich 200 Rückspülungen je Druckfilter im Jahr 2006 nach dem im Anhang angegebenen Spülprogramm (s. Tabelle 8.1, S. 137) ermittelt. Wie Abbildung 4.3 zeigt, entstehen die Hauptkosten zu rund jeweils einem Drittel durch Flockungsmittel, Schlammentsorgung und Spülwasserproduktion. Die Kalkmilch- und Energiekosten für die Filtrerrückspülung sind vernachlässigbar klein.

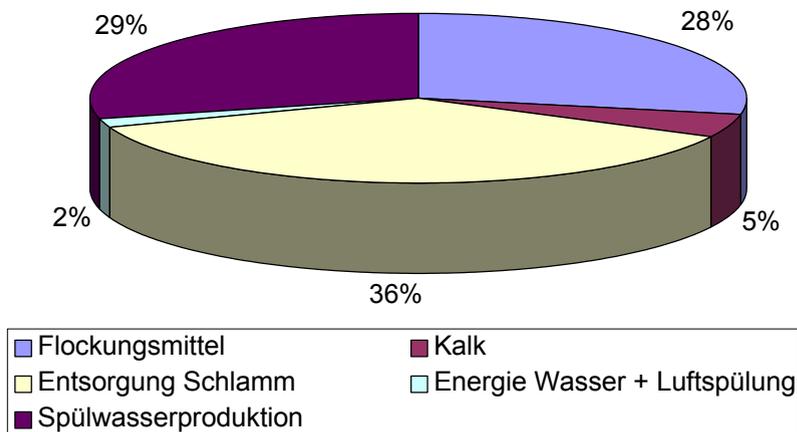


Abbildung 4.3: Aufbereitungskosten für die Flockungs- und Druckfilterstufe im Jahr 2006 (SWD, 2007)

Aufgrund der hohen Kosten der Spülwasserproduktion für die Filtrerrückspülung musste zur Optimierung des Flockungsprozesses die nachfolgende Filtrationsstufe berücksichtigt werden. Die Rückspülung der einzelnen Druckfilter wird entweder durch das Überschreiten einer maximalen Partikelzahl $> 1 \mu\text{m}$ von 300 \#/ml , einer maximalen Trübung von $0,1 \text{ FNU}$ oder einer maximalen Filtrationsdauer von 72 h ausgelöst (vgl. Tabelle 3.2, S. 38). Der Druckverlust spielt keine Rolle. Betrachtet man die Filterlaufzeit in Abhängigkeit der Trübungsfracht (Abbildung 4.4) bzw. Partikelzahl-Fracht (Abbildung 4.5), die von den Druckfiltern je Filterlauf im Mittel abgeschieden wur-

de, so zeigt sich, dass die Filterlaufzeit mit zunehmender abgeschiedener Fracht kürzer wird. Der Zusammenhang zwischen Filterlaufzeit und Fracht-Abscheidung wurde durch eine nichtlineare Regression bestimmt.

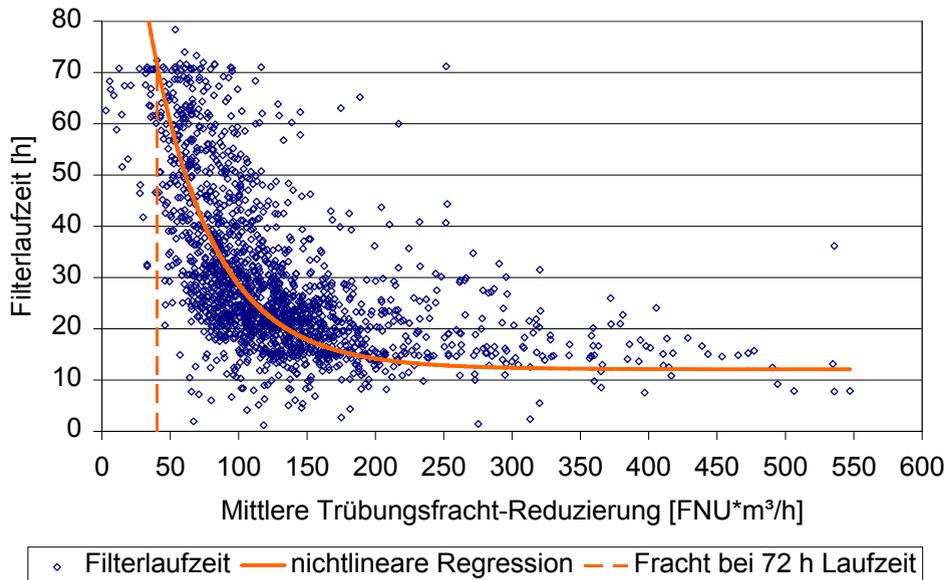


Abbildung 4.4: Mittlere Trübungsfracht-Reduzierung

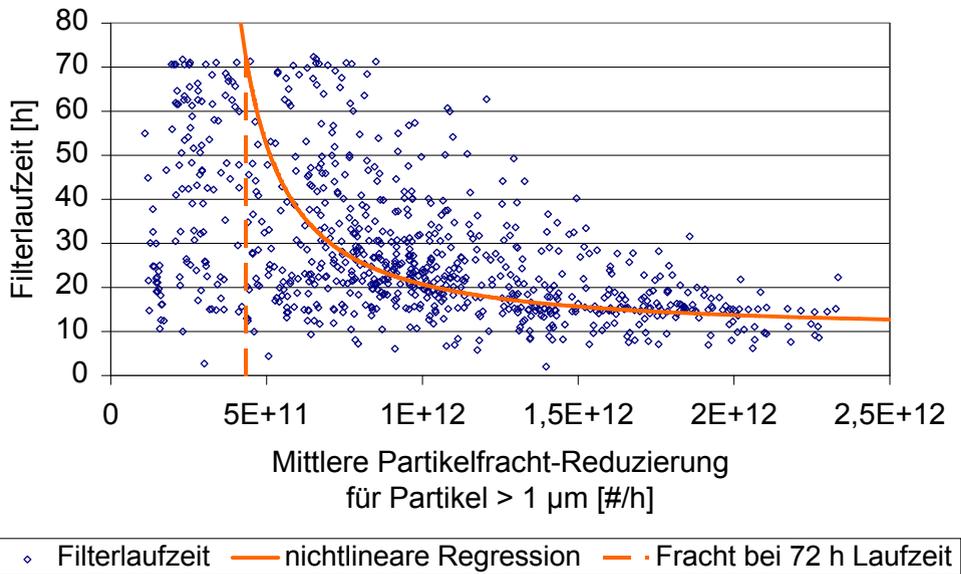


Abbildung 4.5: Mittlere Partikelfracht-Reduzierung

Unter der Annahme, dass die Trübung und Partikel vollständig von den Druckfiltern zurückgehalten werden, ließ sich für einen mittleren Durchsatz von 100 m³/h je Druckfilter ein Grenzwert im Zulauf der Filter für die Trübung von 0,4 FNU und für die Partikel > 1µm von 4300 #/ml bestimmen, der erreicht werden müsste, um eine maximale Filterlaufzeit von 72 h zu gewährleisten. Diese Qualitätsvorgaben könnten in einem einfachen Optimierungsansatz, wie in Abbildung 4.1 gezeigt, für das Trübungs- und das Partikelzahlmodell als Zielwert eingesetzt werden.

Bei diesem Ansatz werden nur die Wasserqualität im Ablauf der Sedimentation sowie eine Verlängerung der Filterlaufzeit und einer damit verbundenen Reduktion der Rückspülkosten berücksichtigt. Eine Verringerung der Trübung bzw. der Partikelzahl im Ablauf der Sedimentation kann jedoch einen Mehrverbrauch an Flockungsmittel und damit verbunden eine erhöhte Menge zu entsorgenden Schlamm mit sich führen. Die dadurch entstehenden höheren Kosten werden in diesem Optimierungsansatz nicht berücksichtigt. Da die Druckfilterstufe jedoch die Wasserqualitätsvorgaben aufgrund der Kriterien für die Rückspülung garantiert, ist es nicht notwendig, bestimmte Wasserqualitätsvorgaben nach der Sedimentation einzuhalten. Dadurch ist es möglich, Kosten, die in der Flockungsstufe entstehen, gegen die Kosten für die Rückspülung der Druckfilter über eine Optimierungsfunktion entsprechend Abbildung 4.2 abzuwägen. Die Auswirkung dieses Optimierungsansatzes wird nach Aufstellung der Kostenfunktion an einem Beispiel verdeutlicht.

4.3 Kostenfunktion

Aufgrund der Verteilung der Kosten nach Abbildung 4.3 ist der zweite Optimierungsansatz mit einer Kostenfunktion sinnvoll. Da die Wasserqualität nach der Sedimentation aufgrund der nachfolgenden Druckfilterstufe nicht optimal sein musste, konnte die Optimierungsfunktion im Sinne einer Minimierung der Gesamtkosten K_{ges} entsprechend

$$K_{ges} = K_{Flockungsmittel} + K_{Schlamm} + K_{Filterspülung} \rightarrow \min \quad (4.1)$$

formuliert werden.

Die Kosten für das Flockungsmittel ($K_{Flockungsmittel}$ [€/h]) wurden aus der zugesetzten Menge Flockungsmittel (Fe^{3+} [kg/h]) und den spezifischen Flockungsmittelkosten ($k_{Fe^{3+}}$ [€/kg Fe^{3+}]) berechnet.

$$K_{Flockungsmittel} = Fe^{3+} \cdot k_{Fe^{3+}} \quad (4.2)$$

Die Schlammmentsorgungskosten ($K_{Schlamm}$ [€/h]) ergaben sich aus der zugesetzten Flockungsmittelmenge (Fe^{3+} [kg/h]) und den spezifischen Schlammmentsorgungskosten ($k_{Schlamm}$ [€/kg Fe^{3+}]).

$$K_{Schlamm} = Fe^{3+} \cdot k_{Schlamm} \quad (4.3)$$

Die Kosten für die Filterrückspülung ($K_{Filterspülung}$ [€/h]) wurden aus den Kosten für eine Filterrückspülung ($K_{Einzelspülung}$ [€]) bezogen auf die Filterlaufzeit (FLZ_{min} [h]) multipliziert mit der Anzahl der Filter in Betrieb ($n_{Betrieb}$ [-]) bestimmt.

$$K_{Filterspülung} = n_{Betrieb} \frac{K_{Einzelspülung}}{FLZ_{min}} \quad (4.4)$$

Neben der Begrenzung der Filterlaufzeit durch Überschreiten eines Grenzwertes der Trübung (FLZ_{Tur}) und der Partikelzahl $> 1\mu m$ (FLZ_{Part}) ist ein weiteres Kriterium die maximale Filterlaufzeit $FLZ_{max} = 72$ h, die nicht überschritten werden sollte. In der Kostenfunktion nach Gleichung (4.4) muss die Filterlaufzeit des Kriteriums berücksichtigt werden, welches bei der jeweiligen Wasserqualität nach der Sedimentation zum Optimierungszeitpunkt die Rückspülung auslösen würde, d.h. welches zu einer minimalen Filterlaufzeit führen würde.

$$FLZ_{min} = \min(FLZ_{Tur}, FLZ_{Part}, FLZ_{max}) \quad (4.5)$$

Die Filterlaufzeit streut abhängig von der Trübungs- und Partikelfracht sehr stark, wodurch die Abschätzung der Filterlaufzeit selbst mit einer relativ hohen Unsicherheit behaftet sein wird. Da auch die Vorhersage der Partikelzahl im Ablauf der Sedimentation lediglich den Trend wiedergibt, aber auch hohe Abweichungen aufweist, ist es sinnvoll, die Filterlaufzeit anhand der deutlich genauer zu prognostizierenden Trübung nach Sedimentation abzuschätzen. Die Rückspülung der Druckfilter wird, wie Abbildung 4.6 zeigt, in 80% der Fälle durch das Erreichen des Filterrückspülkriteriums Trübung eingeleitet, so dass die Vernachlässigung des Rückspülkriteriums Partikelzahl gerechtfertigt ist.

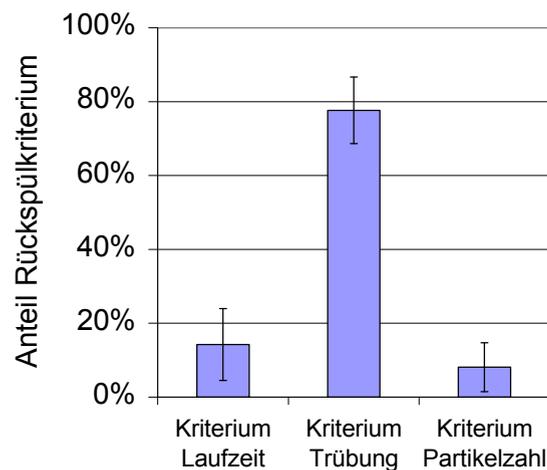


Abbildung 4.6: Verteilung der Kriterien Laufzeit, Trübung und Partikelzahl, die zu einer Rückspülung der Druckfilter geführt haben für die Jahre 2006 bis 2008

Die Filterlaufzeit wurde durch eine nichtlineare Regression, wie bereits in Abbildung 4.4 gezeigt, und durch ein neuronales Netz abgeschätzt. Durch die nichtlineare Regressionsrechnung mit dem Programm DataFit 9 ergab sich folgender Zusammenhang:

$$FLZ_{Tur} = \left(\frac{\text{Trübungsfracht} + 1891}{2127,6} \right)^{-42,2} + 12,1 \quad (4.6)$$

Für das neuronale Netz wurden die Mittelwerte der Eingangsgrößen, die für die Trübungsmo- dellierung verwendet wurden, und der Trübung nach Sedimentation selbst über die Länge jedes Filtrationszyklus bestimmt. Diese Mittelwerte dienten als Eingangsgrößen in ein neuronales Netz zur Vorhersage der Filterlaufzeit. Das Training des neuronalen Netzes wurde exemplarisch für die Daten aus dem Jahr 2007 durchgeführt. Eine Zusammenstellung der Eingangsgrößen ist in Tabelle 4.1 gezeigt.

Tabelle 4.1: Eingangsgrößen und Wertebereiche für das neuronale Netz zur Vorhersage der Filterlaufzeit

Eingangsgrößen	Bezeichnung	Einheit	Minimum	Maximum	Mittelwert	Standardabweichung
Rohwasser						
Trübung	RW_Tur	FNU	0,7	57,4	5,3	6,7
Temperatur	RW_T	°C	4,94	15,21	9,31	2,64
SAK ₂₅₄ (unfiltriert)	RW_SAK	1/m	5,7	20,0	8,7	2,1
pH-Wert	RW_pH	-	6,79	8,17	7,39	0,28
Sauerstoff	RW_O2	mg/L	5,1	13,3	9,0	1,6
Leitfähigkeit	RW_Lf	µS/cm	101	267	152	31
Flockung						
Anlagendurchsatz	F_WEH_Q	m³/h	351	811	547	85
Fe ³⁺ -Konzentration	FM_Fe	mg/L	6,5	15,1	8,9	2,2
Ablauf Sedimentation						
Trübung	F_Tur	FNU	0,4	4,7	1,4	0,6
Ausgangsgröße						
Druckfilterstufe						
Filterlaufzeit	tf	h	1	35	22	7

Das neuronale Netz gibt den Trend der Filterlaufzeit zwar wieder, allerdings werden vor allem lange Filterlaufzeiten deutlich unterschätzt. Das Ergebnis der Validierung mit Trainingsdaten ist in Abbildung 4.7 gezeigt.

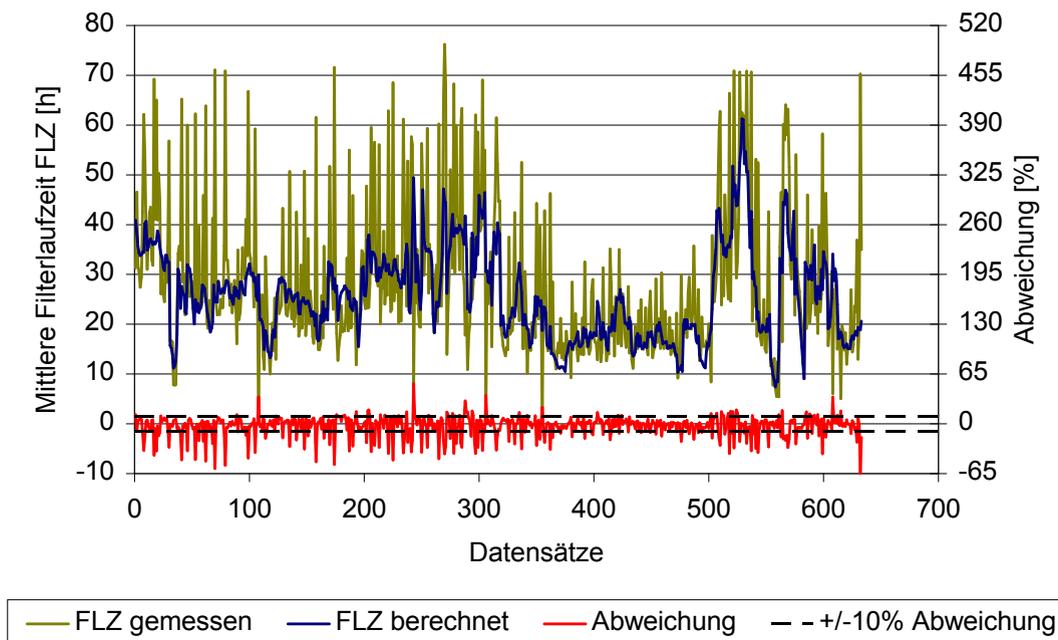


Abbildung 4.7: Validierung der Vorhersage der Filterlaufzeit mit Trainingsdaten unter Verwendung des Eingangs Anlagendurchsatz (mittl. abs. Fehler: 9,3 %)

Wie aus Abbildung 4.8 zu entnehmen ist, sind die Abweichungen des Regressionswerts gegenüber dem tatsächlichen Messwert der nichtlinearen Regression gleichverteilt, während sich bei Auswertung der Verteilung aus dem neuronalen Netz eine deutliche Schiefe im negativen Bereich ergibt.

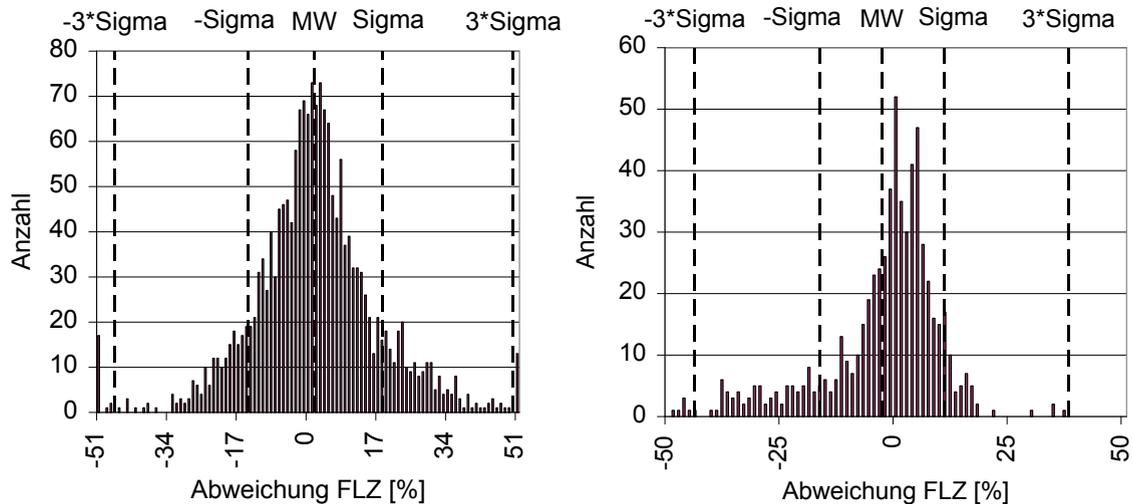


Abbildung 4.8: Vergleich der Fehlerverteilung zur Abschätzung der Filterlaufzeit für die nichtlineare Regression (links) und das neuronale Netz (rechts)

Die hohen Abweichungen kommen durch das Druckfiltermanagement zustande. Der einzelne Filterdurchsatz und die aktuelle Filtergeschwindigkeit sind unbekannt, da der Anlagendurchsatz nicht gleichmäßig auf die fünf gleichzeitig betriebenen Druckfilter aufgeteilt wird. Das macht die Beurteilung der Filterlaufzeit als Resultierende im Wechselspiel zwischen Filterbeladung und Filtergeschwindigkeit schwierig. Gerade bei Filterlaufzeiten über ca. 35-40 h kann schon eine geringe Verringerung der Filtergeschwindigkeit infolge zunehmender Filterbeladung eine deutliche Verlängerung der Filterlaufzeit (s. Abbildung 4.9) hervorrufen. Maßgeblich hierfür sind die Transportmechanismen im Filter, die zu einem Kontakt zwischen Partikel und abscheidender Oberfläche führen, und die Partikelhaftung (Gimbel und Nahrstedt, 2004). Zum einen steigt mit einer geringeren Filtergeschwindigkeit die Transportwirksamkeit, d. h. die Kontaktwahrscheinlichkeit zwischen Partikel und abscheidender Oberfläche aufgrund von Sedimentationsmechanismen (Partikel über $1\mu\text{m}$) und Diffusionsmechanismen (Partikel unter $1\mu\text{m}$) und zum anderen nimmt die Partikelhaftwahrscheinlichkeit durch die geringeren hydrodynamischen Ablösekräfte zu. Dabei überwiegt wahrscheinlich ein starker Einfluss der Haftkräfte in und auf den sich ausbildenden Beladungsschichten. Vermutlich liegen bei kurzen Filterlaufzeiten derart ungünstige Randbedingungen für die Partikelhaftung vor, dass die Filterlaufzeit von einer Verringerung der Filtergeschwindigkeit nur wenig profitiert, wohingegen die Voraussetzungen bei längeren Filterlaufzeiten und höheren Beladungen grundsätzlich sehr viel günstiger sein müssen und deutliche Laufzeitverlängerungen resultieren.

Werden die Filter daher bei niedrigem Anlagendurchsatz mit einem geringeren Durchsatz als einem fünftel des Anlagendurchsatzes beaufschlagt, macht sich die deutliche Laufzeitverlängerung mit abnehmendem Durchsatz bzw. zunehmender Differenz zwischen anteiligem Anlagendurchsatz und tatsächlichen Filterdurchsatz zunehmend bemerkbar. Durch diesen Effekt kommt es ab einer Filterlaufzeit von 35 h bis 40 h zu einer kontinuierlich zunehmenden Unterschätzung der Filterlaufzeit durch das neuronale Netz (s. auch Abbildung 4.11 links).

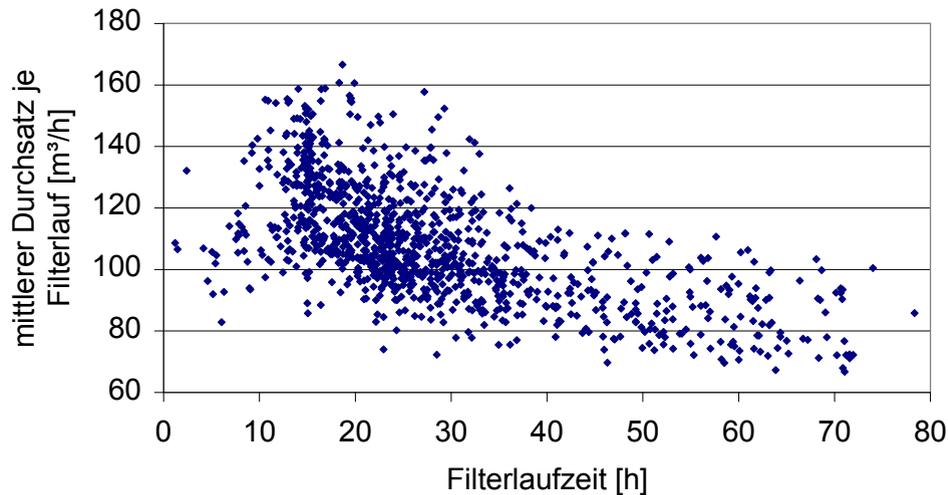


Abbildung 4.9: Abhängigkeit der Filterlaufzeit vom mittleren Durchsatz je Filterlauf

Verfrühtes Durchbrechen der Filter durch Lastwechsel, die entstehen, wenn ein Filter in Rückspülung, bzw. ein anderer Filter wieder in Betrieb geht, treten in der Regel bei bereits recht hoher Beladung der Druckfilter, aber unabhängig von der Filterlaufzeit auf. Der hierdurch resultierende verfrühte Abbruch eines Filtrationszyklus kann daher sowohl bei hohen als auch bei niedrigen Filterlaufzeiten auftreten und würde eher zu einer Verbreiterung der Fehlerverteilung führen, als zu dem in Abbildung 4.11 gezeigten systematischen Fehler.

Bei der Modellierung mit dem Anlagendurchsatz als Eingangsgröße wird eine gleichmäßige Beaufschlagung der Druckfilter vorausgesetzt. Durch Ersetzung des Eingangs Anlagendurchsatz F_{WEH_Q} durch den tatsächlichen mittleren Durchsatz je Filter und Filterlauf kann die Modellgenauigkeit wesentlich verbessert werden (vgl. Abbildung 4.10). Der mittlere Fehler sank von 9,3 % auf 4,0 % und der RSQ-Wert stieg von 0,66 auf 0,93 (s. Abbildung 4.11).

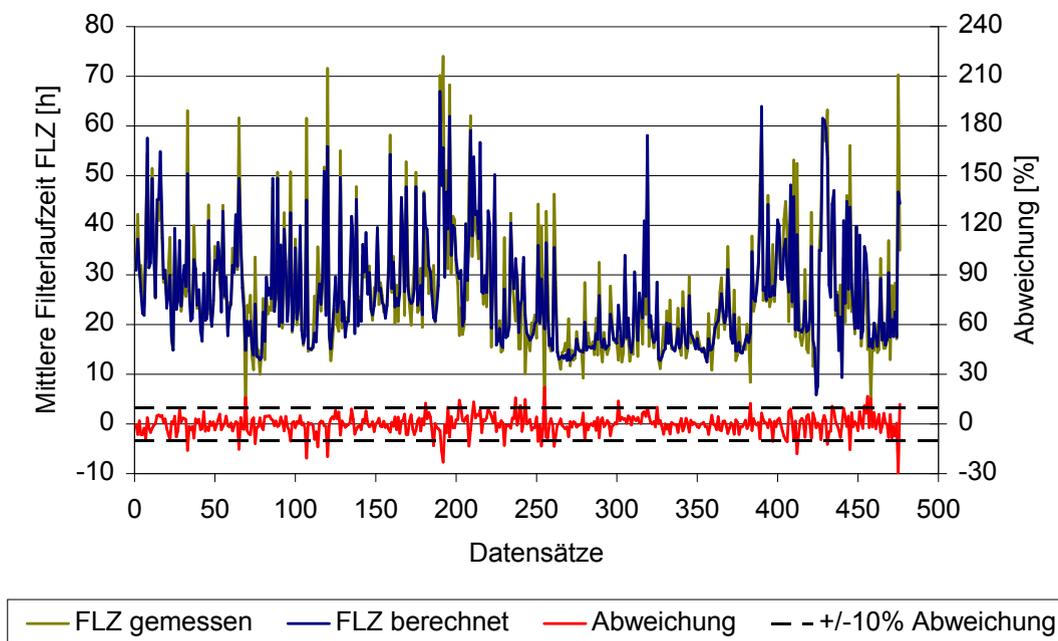


Abbildung 4.10: Validierung der Vorhersage der mittleren Filterlaufzeit mit Trainingsdaten unter Verwendung des Eingangs Filterdurchsatz

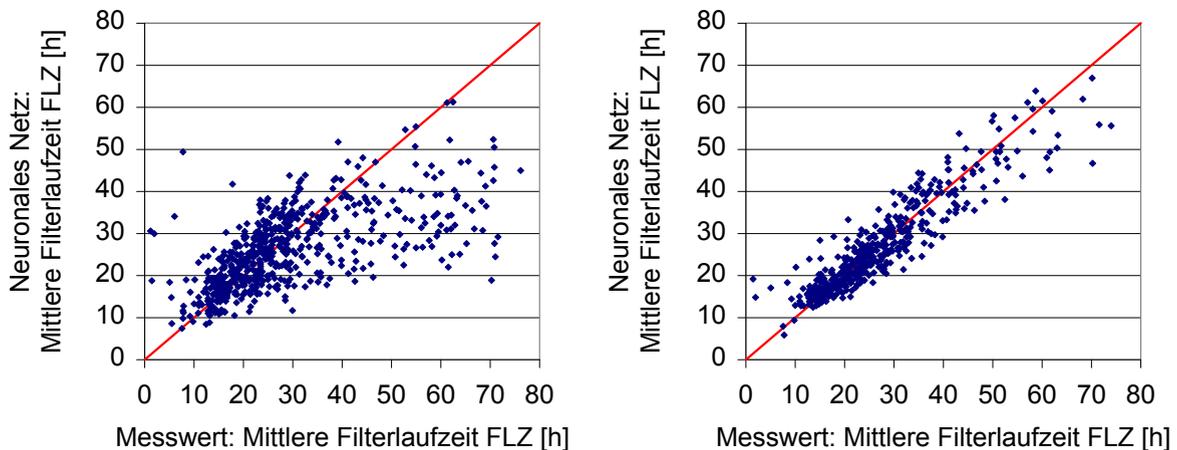


Abbildung 4.11: Korrelation der Vorhersage des neuronalen Netzes mit dem Messwert der mittleren Filterlaufzeit bei Verwendung des mittleren Anlagendurchsatzes (links) und des mittleren Filterdurchsatzes (rechts) als Eingangsgröße

Da der Filterdurchsatz jedoch durch die ungleichmäßige Aufteilung des gesamten Anlagendurchsatzes auf die einzelnen Druckfilter nicht vorherzubestimmen ist, kann nur das neuronale Netz mit dem mittleren Anlagendurchsatz als Eingangsgröße verwendet werden, welches in der Genauigkeit etwa dem Regressionsansatz entspricht. Aufgrund der symmetrischeren Fehlerverteilung und der einfacheren Umsetzung in der Optimierungsfunktion wurde daher für die Abschätzung der Filterlaufzeit in der Kostenfunktion der Regressionsansatz gewählt.

4.4 Bestimmung der optimalen Flockungsmittelkonzentrationen für die Optimierungsansätze im Vergleich

Die Trübung nach Sedimentation kann durch die Anpassung der Flockungsmittelmenge beeinflusst werden. Je nach Rohwasserzusammensetzung existieren verschiedene Optima für eine minimale Ablauftrübung der Sedimentation. Wie Abbildung 4.12 zeigt, gibt es zwei relativ breite Optima im Bereich um 7,5 mg/l und bei hohen Flockungsmittelkonzentrationen, wobei der Grenzwert von 12 mg/l nicht überschritten werden darf. Die in Schwarz eingezeichneten Kreuze auf den einzelnen Linien zeigen die Lage der jeweiligen Datenpunkte an, von denen aus die Flockungsmittelmenge über den Wertebereich variiert wurde. Diese liegen zwar häufig in der Nähe des Optimums, aber im Sinne einer Trübungsminimierung kommt es auch zu Über- bzw. Unterdosierungen der Flockungsmittelmenge. Zur Optimierung der Trübung nach Sedimentation, möglichst auf einen Ablaufwert von 0,4 FNU, um die Filterrückspülkosten zu minimieren, muss vom Optimierer das Minimum auf der zu der vorgegebenen Rohwasserqualität passenden Kurve gefunden werden. Wie aus Abbildung 4.12 deutlich wird, ist nicht zu erwarten, dass für die verschiedenen Rohwässer eine Ablauftrübung von 0,4 FNU erreicht werden kann.

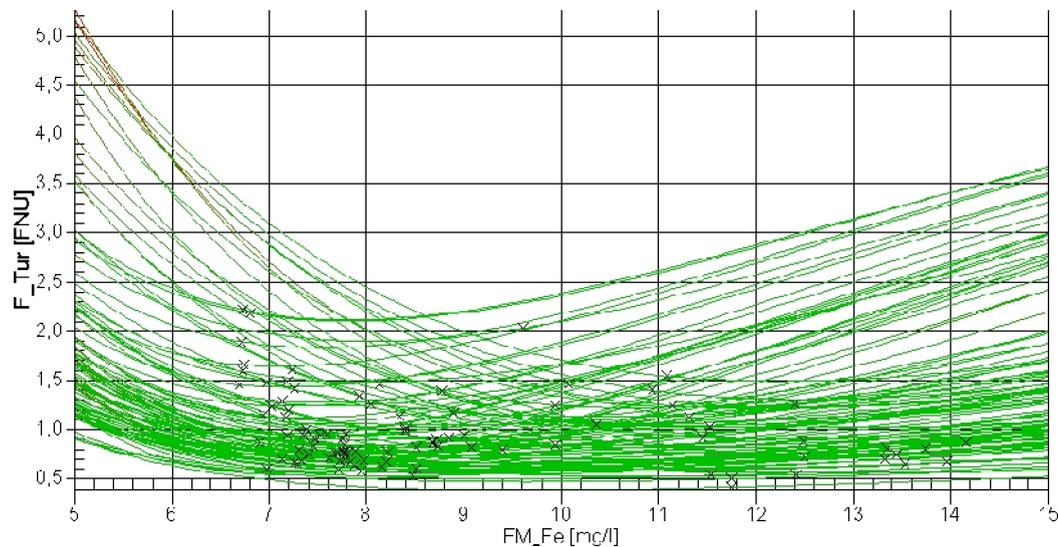


Abbildung 4.12: Einfluss der Flockungsmitteldosierung auf die Trübung nach Sedimentation für verschiedene Rohwasserzusammensetzungen

Durch die angegebene Kostenfunktion können die Kosten, die in der Flockungsstufe entstehen, gegen die Kosten der Filtrerrückspülung abgewogen werden. Daher muss bei der Kostenoptimierung nicht zwangsläufig die Flockungsmittelmenge für eine minimale Trübung nach Sedimentation auf den in Abbildung 4.12 gezeigten Kurven gefunden werden.

In Abbildung 4.13 ist die Kostenoptimierung für zwei Beispiele dargestellt. Die Kosten in der Flockung sind nur abhängig von der zudosierten Flockungsmittelmenge und daher in allen Fällen gleich. Die Kosten für die Filtrerrückspülung sind abhängig von der Trübung nach Sedimentation. In Beispiel 1 ergeben sich durchschnittlich höhere Kosten, da das Trübungsniveau im Ablauf der Sedimentation mit 2,2 FNU deutlich höher ist, als in Beispiel 1 mit 0,7 FNU. Nach dem in Abbildung 4.4 dargestellten Zusammenhang zwischen abgeschiedener Trübungsfracht und Filterlaufzeit ändert sich die Filterlaufzeit bei hoher Fracht deutlich stärker, so dass in Beispiel 1 eine Verringerung der Trübung nach Sedimentation zu einer deutlichen Einsparung in den Kosten der Filtrerrückspülung führt und somit höhere Kosten in der Flockung in Kauf genommen werden können. In Beispiel 2 führt eine Verringerung der Trübung nach Sedimentation jedoch zu keiner deutlichen Verlängerung der Filterlaufzeit, so dass hier eine Kosteneinsparung in der Flockungsstufe mit einer dadurch bedingten geringfügig höheren Filterlaufzeit sinnvoller ist.

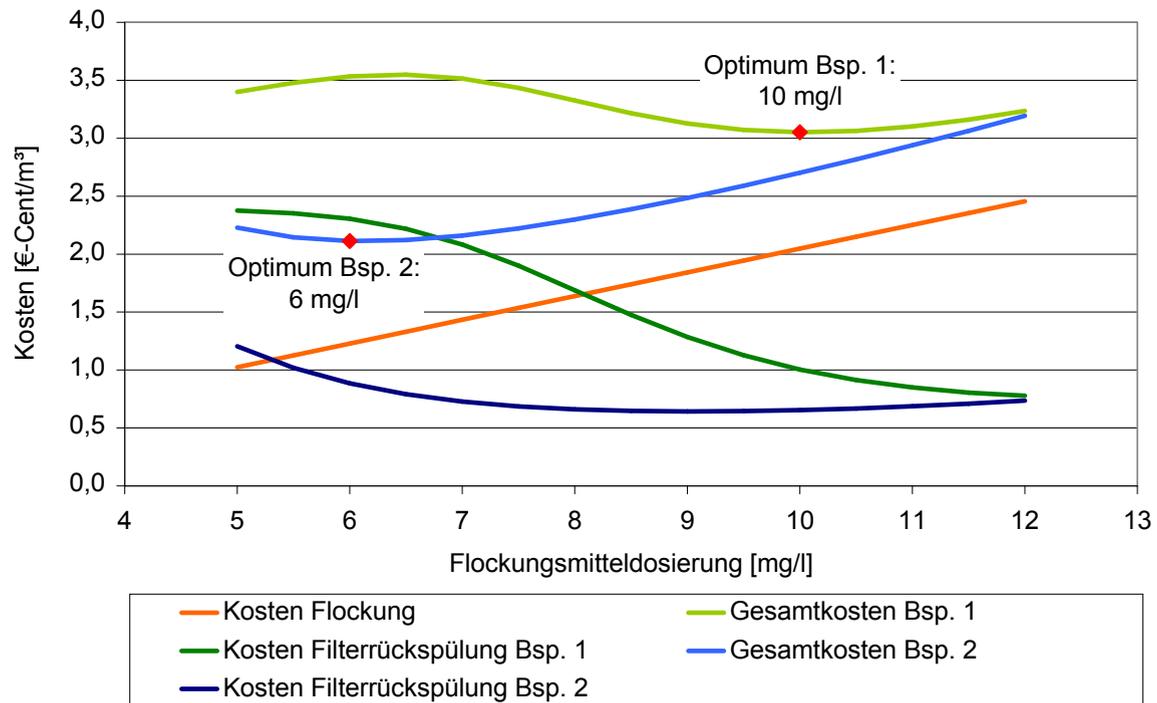


Abbildung 4.13: Optimierung der Flockungsmitteldosierung für zwei Beispieldatensätze

4.5 Abschätzung des Optimierungspotentials

Da die Flockungsmittelmenge die einzig manipulierbare Variable war, war der Einsatz eines komplexen Optimierers, z.B. auf Basis eines genetischen Algorithmus (s. Anhang) wie von Strugholtz et al. (2008) beschrieben, nicht notwendig. Zur Abschätzung des Optimierungspotentials wurde für Stundenmittelwerte der übrigen Eingangsgrößen der Wertebereich der Flockungsmittelmenge in Schritten von 0,5 mg/l durchlaufen und die Vorhersage des neuronalen Netzes aufgezeichnet.

Bei der Optimierung ist die Einhaltung einer ausreichenden Sicherheit der Prognose für die Umsetzung im Prozess unerlässlich. Durch das SecurityNet-Verfahren wird für jede Vorhersage auch ein Vertrauensintervall angegeben, das als Sicherheitsschranke eingesetzt werden kann. Bei den gezeigten Ergebnissen für die Optimierung wurden nur Prognosen zugelassen, die einen SecurityNet-Wert von 0,2 FNU nicht überschritten. Der Wert wurde anhand der Verteilung der SecurityNet-Werte der Validierung mit Trainingsdaten festgelegt. Da die Trainingsdatensätze alle mit hoher Genauigkeit abgebildet wurden, wurde der SecurityNet-Wert als Grenzwert gewählt, der für 99 % aller Trainingsdatensätze erreicht wurde.

Für den ersten Optimierungsansatz wurde der Netzausgang mit den Zielwerten für die Trübung von 0,4 FNU verglichen. Die Flockungsmittelmenge, die bei Einhaltung des SecurityNet-Werts am nächsten an den gegebenen Zielwerten lag, wurde als optimal ausgewählt.

Im Falle des zweiten Optimierungsansatzes über die Optimierungsfunktion nach Gleichung (4.1) wurden aus den Vorhersagen des neuronalen Netzes die Gesamtkosten für die Flockungs- und Filtrationsstufe bestimmt. Die Flockungsmittelmenge, die die niedrigsten Gesamtkosten bei ausreichender Sicherheit der Prognose ergab wurde als optimal ausgewählt.

Als Daten zur Abschätzung des Optimierungspotentials wurden die Stundenmittelwerte der Trainingsdatenbasis des Basismodells zugrunde gelegt. Die Daten umfassen zwar nicht einen vollen Jahreszyklus, es sind aber Daten aus jeder Jahreszeit enthalten, so dass die Ergebnisse als repräsentativ angenommen werden können.

Wie Abbildung 4.14 zeigt, ist es mit dem ersten Optimierungsansatz nicht möglich, die Zieltrübung von 0,4 FNU durchweg zu erreichen. Dieses kann zum einen daran liegen, dass eine solche Zieltrübung aufgrund der Rohwasserqualität grundsätzlich nicht erreichbar ist, zum anderen kann es an der Sicherheitsschranke liegen, durch die garantiert wird, dass keine unsicheren Prognosen zugelassen werden. Der Hauptgrund bestand jedoch darin, dass keine Trübungsvorhersagen bei variabler Flockungsmitteldosierung mit ausreichender Genauigkeit vorlagen, die das gewünschte Optimierungsziel ergaben. Dieses bedeutet jedoch nicht, dass das Optimierungsziel grundsätzlich nicht erreicht werden könnte. Hierzu müsste jedoch die Optimierung umgesetzt und die Datenbasis schrittweise erweitert werden.

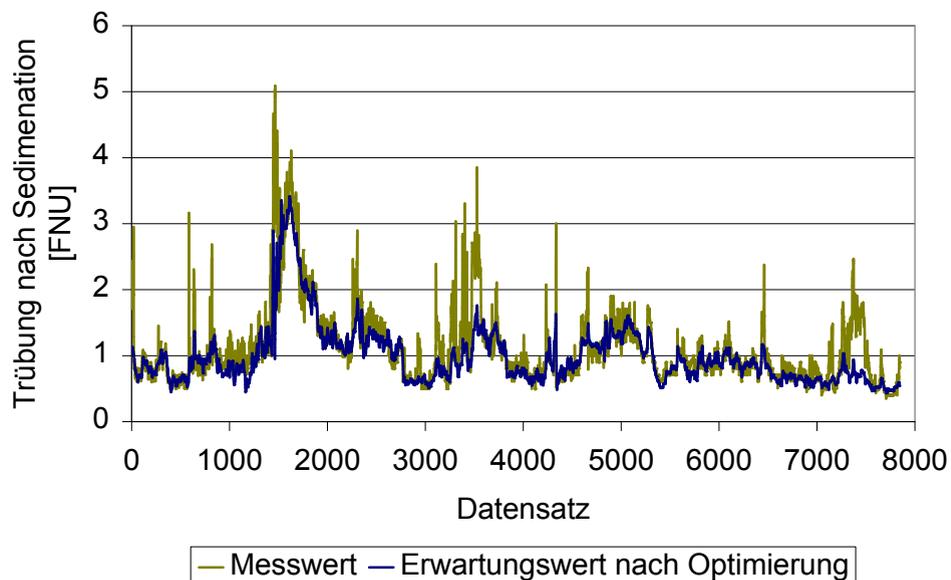


Abbildung 4.14: Optimierung der Trübung auf einen Zielwert von 0,4 FNU

Die entsprechende Flockungsmitteldosierung, die zu den in Abbildung 4.14 gezeigten Trübungen führen würde, ist in Abbildung 4.15 gezeigt. Hier wird die eingestellte Eisenkonzentration zum Teil über-, zum Teil unterschritten. Da auch keine deutlich niedrigere Trübung erreicht werden konnte, wodurch die Kosten für die Filterrückspülung reduziert würden, barg dieser Optimierungsansatz weder für die Wasserqualität nach der Sedimentation noch in Bezug auf die Aufbereitungskosten ein deutliches Optimierungspotential.

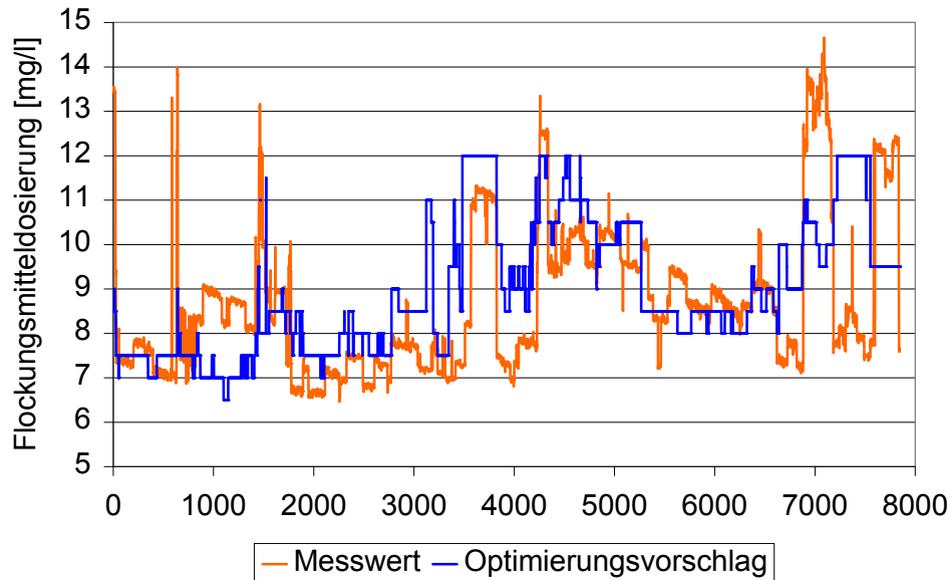


Abbildung 4.15: Vorschläge für eine optimale Flockungsmittelkonzentration zum Erreichen einer Zieltrübung von 0,4 FNU

Demgegenüber wurden bei Umsetzung des zweiten Optimierungsansatzes zur Optimierung der Aufbereitungskosten der Flockungs- und Druckfilterstufe für die Trübung nach Sedimentation, wie Abbildung 4.16 zeigt, zum Teil wesentlich höhere Werte zugelassen, die zu höheren Kosten in der Filterrückspülung führen würden.

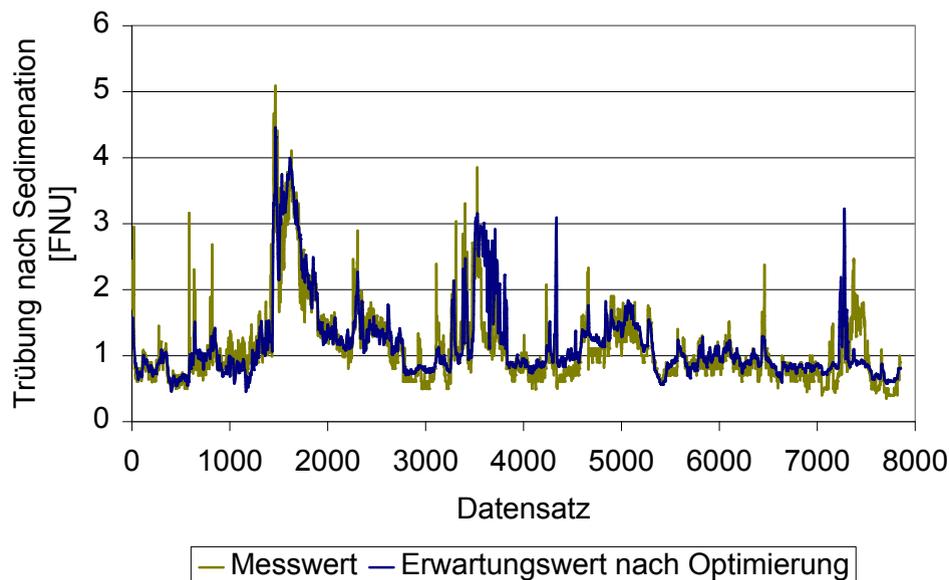


Abbildung 4.16: Auswirkung der optimierten Aufbereitungskosten auf die Trübung nach Sedimentation

Betrachtet man hingegen die als optimal vorgeschlagene Flockungsmittelmenge in Abbildung 4.17, so zeigen sich hier deutliche Ersparnisse. Die eingestellte Flockungsmittelmenge wird an fast allen Punkten unterschritten. Aufgrund der dadurch stark reduzierten Kosten in der Flockungsstufe werden die Mehrkosten in der Druckfilterstufe weit überkompensiert, so dass eine durchschnittliche Kostenersparnis von 10 % erreicht werden könnte.

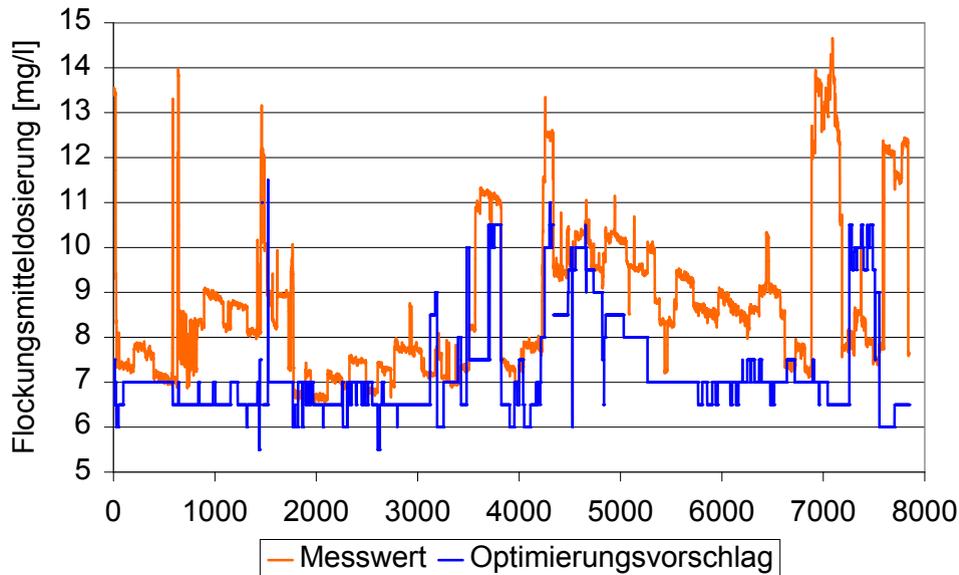


Abbildung 4.17: Vorschläge für eine optimale Eisenkonzentration zum Erreichen minimaler Aufbereitungskosten

Die Ergebnisse der beiden Optimierungsansätze zeigen, dass eine reine Optimierung der Wasserqualität nach der Flockung nicht zwangsläufig zu einer Verringerung der Aufbereitungskosten führen muss. Vorschläge für eine optimale Flockungsmittelkonzentration, die aufgrund der Vorhersage über einen Zeithorizont von etwa einer Stunde getroffen werden können, tragen aber dadurch auf jeden Fall zu einer Erhöhung der Betriebssicherheit bei.

Ist es im Rahmen einer integrierten Prozessoptimierung möglich, die Wasserqualität durch nachfolgende Stufen zu garantieren, lässt sich die Flockung in Relation zu nachfolgende Stufen so anpassen, dass neben der Betriebssicherheit durch frühzeitige Eingriffsmöglichkeiten auch ein höheres Kosteneinsparpotential erreicht werden könnte.

4.6 Umsetzung im Online Betrieb

Das Optimierungssystem im Online-Betrieb arbeitet auf der Basis von Online-Messungen, die aus dem vorhandenen Automatisierungssystem ausgelesen werden (s. Abbildung 4.18). Der OPC-Server bildet dabei die Schnittstelle zwischen dem Automatisierungssystem und den Programmen des Optimierungssystems. Auf dem Simulations-PC schreibt eine Datenbank die Online-Messwerte aus dem Automatisierungssystem und die Werte aus der Online-Simulation im Abstand von 5 min auf. Im Simulationsprogramm *APC Professional* werden die Online-Daten verarbeitet, die Trübungs-Prognosen der neuronalen Netze bestimmt und die Daten an den Optimierer gegeben sowie der Optimierungsvorschlag wieder zurück gelesen. Die Werte der Online-Simulation werden in einem Anzeige-Programm ausgegeben, das über eine Netzwerk-Verbindung auch auf den Arbeitsplatz-PCs des Betreibers eingerichtet werden kann.

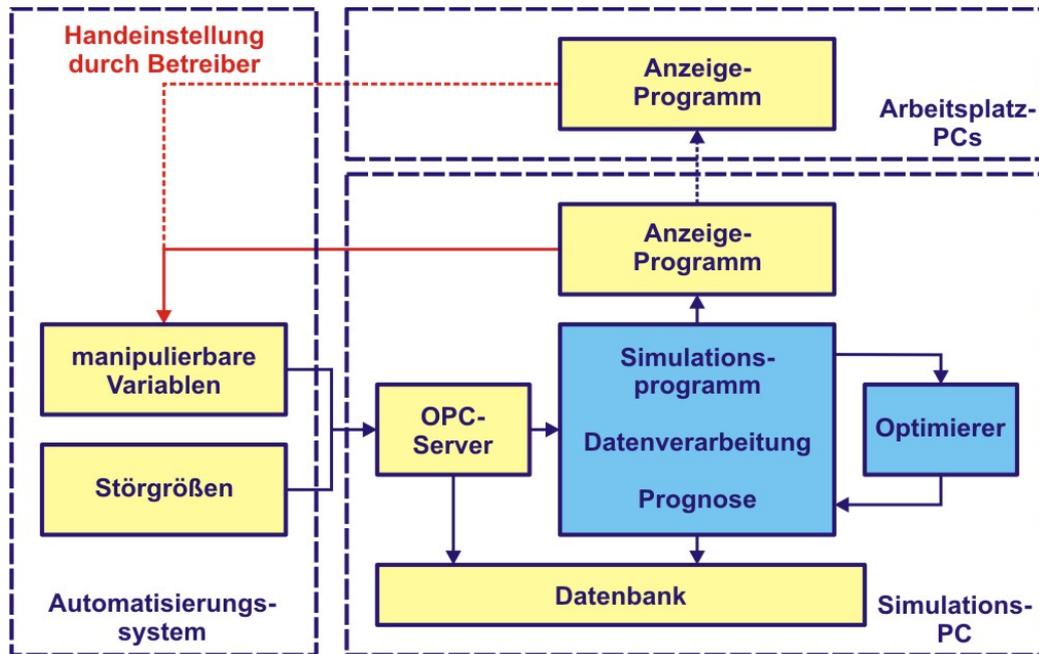


Abbildung 4.18: Optimierungssystem in Online-Betrieb

Die Datenverarbeitung in *APC Professional* umfasst die kausalrichtige Zuordnung der Eingangsgrößen in die neuronalen Netze im Sinne der Berücksichtigung der in Kapitel 3.3.1 festgelegten mittleren Verweilzeit, die Umschaltung zwischen dem Basis- und Spezialistenmodell, die Überwachung von Grenzwerten und eine Schrittweitenbegrenzung des angezeigten Optimierungsvorschlags. Durch die minutengenaue Überwachung der Rohwasserbedingungen wird jede Minute ein neuer Optimierungsvorschlag ausgegeben. Eine stetige Anpassung durch den Betreiber ist jedoch unpraktikabel und nicht notwendig. Daher wird ein neuer Optimierungsvorschlag erst ausgegeben, wenn sich die Aufbereitungskosten um mehr als eine einstellbare Differenz ändern. Als Optimierer wird in der Simulationsumgebung testweise ein genetischer Algorithmus auf Basis der Prognosemodelle eingesetzt. Die Umschaltung des Basis- und Spezialistenmodells in der Optimierungssoftware *GenOpt* erfolgt aus *APC Professional* heraus. Ein Schema der Online-Simulation ist in Abbildung 4.19 gezeigt.

Die Anzeige gibt die Messwerte, die als Eingangsgrößen in die neuronalen Netze und den Optimierer eingehen, die Prognose der Trübung in einer Stunde, den Optimierungsvorschlag und die zu erwartende Trübung in einer Stunde bei Umsetzung des Optimierungsvorschlags aus. Für die Prognosewerte der Trübung aus dem jeweils aktiven Prognosemodell und aus dem Optimierer werden außerdem die SecurityNet-Werte zur Beurteilung der Vorhersagegenauigkeit angezeigt. Die Optimierungsvorschläge werden per Hand durch den Betreiber umgesetzt. Da sich das System in der Testphase befindet, kann so die Plausibilität der Vorschläge durch das Bedienpersonal geprüft werden. Die Anzeigeoberfläche ist in Abbildung 4.20 gezeigt. Zur Unterstützung des Personals ist im unteren Bereich der Anzeige ein Feld für Statusmeldungen vorgesehen, das im Falle ungenauer Prognose Warnmeldungen angibt.

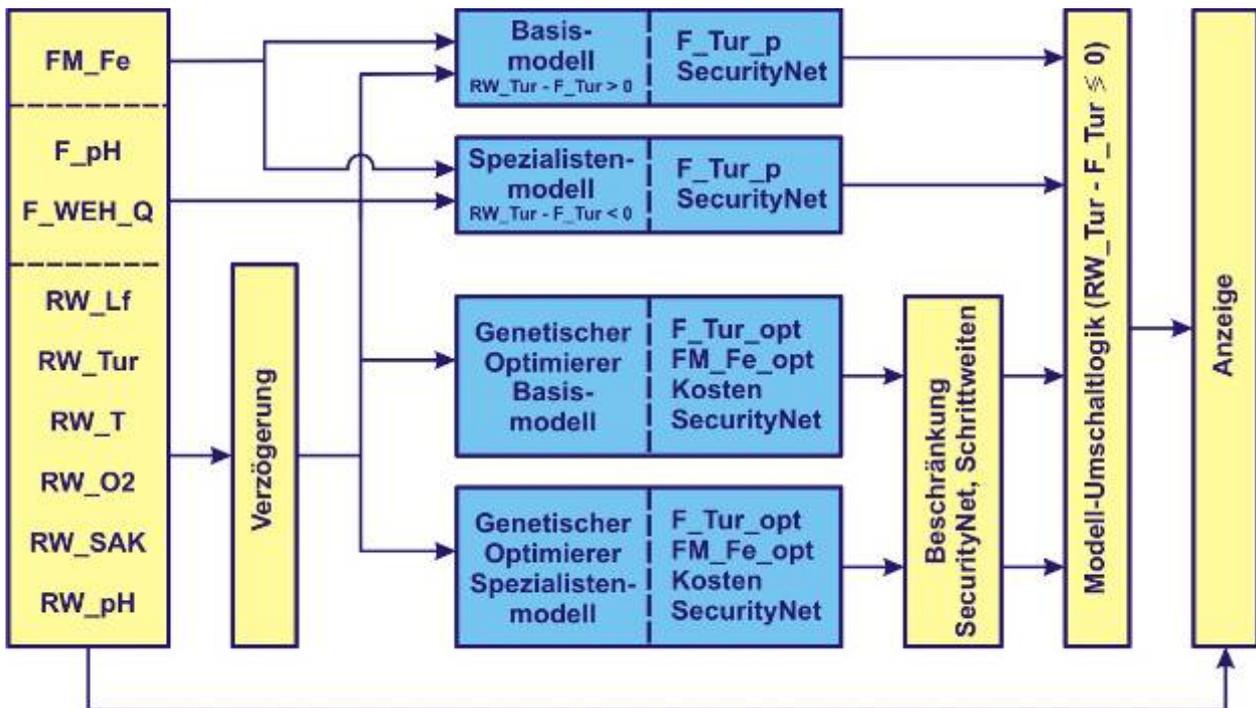


Abbildung 4.19: Schema der Online-Simulation

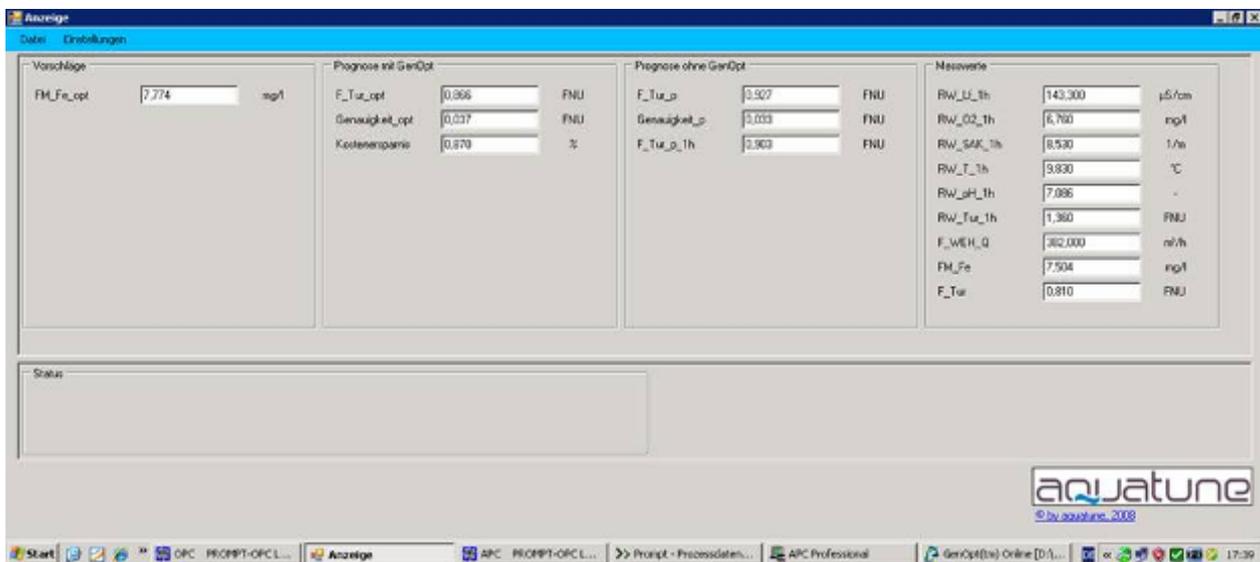


Abbildung 4.20: Screenshot des Anzeige-Programms der Online-Simulation

Mit der Umsetzung der angezeigten Optimierungsvorschläge wurde Ende Oktober 2008 begonnen. Aus Gründen der Datenverarbeitung wurde für die Bestimmung der optimalen Flockungsmittelkonzentration ab dem 08.10.2008 zunächst das Modell ohne den pH-Wert nach Flockungsmitteldosierung F_{pH} als Eingangsgröße eingesetzt, und nicht wie das in Kapitel 3.3.5 hergeleitete optimale Modell mit F_{pH} . Grund hierfür waren starke Reglerschwankungen bedingt durch die schwierige Einstellung des pH-Werts nach der Flockungsmitteldosierung. Diese Schwankungen waren durch Mittelwertbildung oder Tiefpassfilterung nicht zu eliminieren.

Erste Ergebnisse der Optimierung im Vergleich zum zu erwartenden Betriebsverhalten durch die Einstellung der aufgrund der Betriebserfahrungen ermittelten optimalen Flockungsmitteldosierung wurden für die Zeit vom 01.11.2008 bis zum 24.11.2008 ausgewertet. Für diesen Zeitraum wurde aufgrund der oben genannten Schwierigkeiten bei der Messung des pH-Werts nach Kalkmilchdosierung eine Validierung des Modells mit und ohne F_{pH} durchgeführt. Wie Abbildung 4.21 zeigt, war die Genauigkeit des online eingesetzten Modells ohne Verwendung von F_{pH} entgegen der theoretischen Herleitung in diesem Zeitraum deutlich besser. Weitere Analysen haben ergeben, dass sich die Modelle mit und ohne pH-Wert nur in dem gezeigten Zeitraum so deutlich unterscheiden. Validierungen beider Modelle mit allen vorhandenen Daten vom 16.11.2006 bis zum 31.10.2008 weisen eine mittlere absolute Genauigkeit von jeweils 1,5 % bzw. 0,15 FNU bei einem Korrelationskoeffizienten von 0,89 für das Modell mit F_{pH} und 0,90 für das Modell ohne F_{pH} auf. Die Ergebnisse zeigen, dass eine Verwendung des Modells ohne F_{pH} im Online-Betrieb zulässig und aufgrund der einfacheren Umsetzung auch sinnvoll ist; warum sich die Modellabweichungen im gezeigten Zeitraum jedoch so deutlich unterscheiden, kann anhand der Datenlage abgeschätzt werden. Eine mögliche Erklärung ist die Kombination an Datenmustern, die sich durch die niedrige Temperatur unter 10°C im November gegenüber allen vorhandenen Daten deutlich einschränkt. Datenanalysen zeigen, dass bei entsprechend geringen Temperaturen nur ein Vergleichszeitraum mit einem den Bedingungen im November entsprechenden pH-Wert F_{pH} von 7,8 vorhanden war, der sich jedoch in der weiteren Kombination der Daten deutlich von den Bedingungen im November unterscheidet. Beispielsweise wurde mit 6,6 mg/l bedingt durch die Umsetzung der Flockungsmittelvorschläge deutlich weniger Flockungsmittel eingesetzt als im Vergleichszeitraum mit 9,2 mg/l. Zusätzlich waren sowohl die Rohwassertrübung und die Trübung nach Sedimentation höher als im November. Unter Vernachlässigung des pH-Werts ergaben sich bei Temperaturen unter 10°C mehr Datenmuster, die den Bedingungen im November wesentlich näher kamen, so dass hierdurch die Genauigkeit des Modells ohne F_{pH} als Eingangsgröße möglicherweise höher war. Für die Verwendung des Modells mit F_{pH} als Eingangsgröße hätte entsprechend der abweichenden Datenmuster für den Zeitraum im November ein Nachtraining stattfinden müssen.

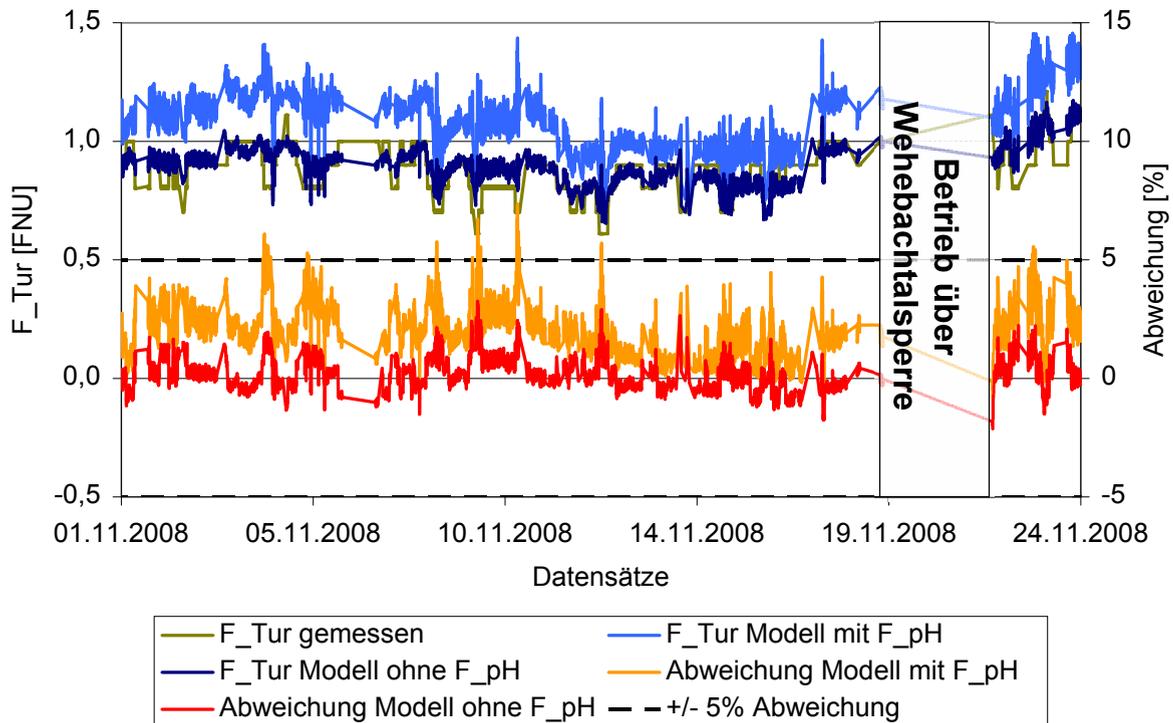


Abbildung 4.21: Vergleich der Vorhersage des KNN mit dem tatsächlichen Messwert vom 01.11.2008 bis zum 24.11.2009

In Abbildung 4.22 sind die Ergebnisse der Umsetzung der Optimierungsvorschläge gezeigt. Im regulären Betrieb hinterlegt im Prozessleitsystem (PLS) eine Tabelle 4.2 entsprechende Aufstellung der einzustellenden Flockungsmittelmenge anhand der Leitgröße Leitfähigkeit als Indikator für das Mischungsverhältnis aus Rur- und Urftalsperrenwasser. Die Rohwassertrübung RW_{Tur} als Haupteinflussfaktor (s. 3.3.5, S. 57) bleibt hierbei jedoch unberücksichtigt.

Tabelle 4.2: Sollwerte der Flockungsmitteldosierung für verschiedene Leitfähigkeiten

Leitfähigkeit [$\mu\text{S}/\text{cm}$]	Sollwert der Flockungsmitteldosierung [mg/l]
> 90	10,9
> 108	9,8
> 111	8,3
> 134	7,4

Die durch den Optimierer vorgeschlagene Flockungsmittelmenge liegt durchweg unter dem früheren Sollwert von 7,4 mg/l. Allerdings wurde der angezeigte Optimierungsvorschlag im gezeigten Zeitraum nicht immer nachgeregelt. Die zum Teil höher dosierte Flockungsmittelmenge kam jedoch nicht durch Änderungen der Betriebseinstellung zustande, sondern durch den Einsatz einer anderen Dosierpumpe für das Flockungsmittel und durch die Neubefüllung des Flockungsmittel tanks und den dadurch gestiegenen Gegendruck. Die Flockungsmittelmenge wird im Betrieb nicht durch die Vorgabe einer bestimmten Menge sondern durch die prozentuale Förderleistung der Pumpe eingestellt, so dass die tatsächlich dosierte Menge stark von den oben genannten Eingriffen beeinflusst wird.

Ein häufig zu beobachtendes plötzliches Absinken des Optimierungsvorschlags ist auf eine deutliche und schnelle Reduzierung des Anlagendurchsatzes zurückzuführen. Dieser Effekt trat meist in den frühen Morgenstunden ein, wenn die Anforderungsmenge für das Trinkwasser vom Wasserspeicher sank.

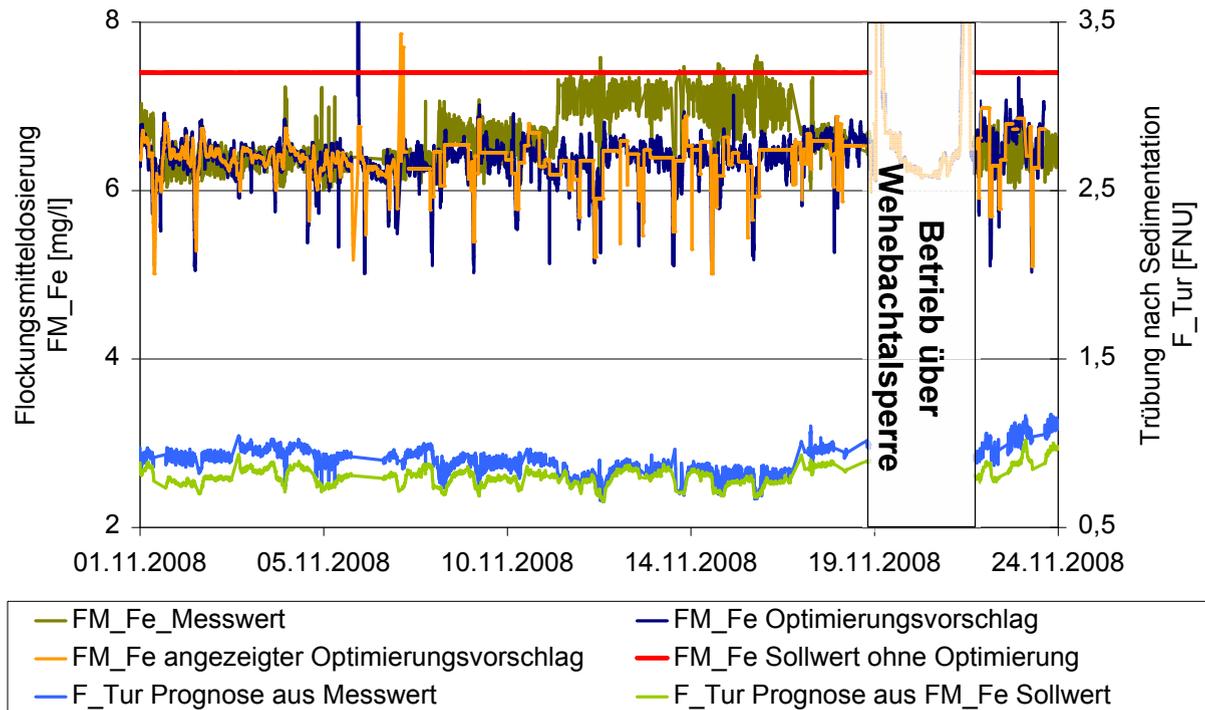


Abbildung 4.22: Umsetzung der Optimierungsvorschläge im Vergleich zur simulierten Fahrweise ohne Übernahme der Optimierungsvorschläge

Die Abschätzung der Einsparung gegenüber der früheren nicht optimierten Betriebsweise erfolgte mit Hilfe einer Simulation der Trübung nach Sedimentation durch das Modell ohne F_{pH} als Eingangsgröße unter Vorgabe des konstanten Sollwerts für die leitfähigkeitskorrelierte Flockungsmitteldosierung von 7,4 mg/l. Die Kostenersparnis des optimierten Betriebs gegenüber dem nicht optimierten Betrieb, wurde durch den Vergleich dieser beiden Szenarien nach Gleichung (4.7) bestimmt.

$$\text{Kostenersparnis} = \frac{\text{Kosten ohne Optimierung} - \text{Kosten mit Optimierung}}{\text{Kosten ohne Optimierung}} \cdot 100\% \quad (4.7)$$

Entsprechend der weiteren Annahmen zur Berechnung der Einsparung nach Kapitel 8.1.5 im Anhang ergab sich für den gezeigten Zeitraum eine Einsparung von 1,8 %.

Durch Simulation der Trübung nach Sedimentation unter Verwendung der Vorschläge des Optimierers für die Flockungsmitteldosierung wurden zusätzlich die Kosten mit Optimierung, die bei kontinuierlicher Umsetzung entstanden wären, bestimmt. Dementsprechend ergab sich das Einsparpotential bei kontinuierlicher Umsetzung der Optimierungsvorschläge nach Gleichung (4.7) als theoretisch mögliche Kostenersparnis gegenüber dem nicht optimierten Betrieb bei einer Flockungsmitteldosierung von 7,4 mg/l zu 2,2 %. Somit wurde im Untersuchungszeitraum das mögliche Optimierungspotential trotz unregelmäßiger Umsetzung nahezu ausgeschöpft.

Nach Fortsetzung des Projekts über den Tag der Einreichung dieser Arbeit hinaus konnte bis Ende April 2009 eine mittlere Einsparung von 3,6 % erreicht werden bei einem Maximalwert von 17 %. Die im Gegensatz zu dem in Kapitel 4.5 bestimmten theoretischen Einsparpotential von 10 % verhältnismäßig geringen Einsparungen kamen aufgrund des extrem kalten Winters sowie der Einschränkung des Optimierungspotentials durch nach November formulierte betriebliche Anforderungen an die Trübung im Ablauf der Sedimentation (maximal 1,5 FNU) und die Flockungsmittelmenge (minimal 6 mg/l) zustande. Das Optimierungspotential bei kontinuierlicher Umsetzung der Optimierungsvorschläge unter den genannten betrieblichen Beschränkungen hätte bei 4,3 % und einem Maximalwert von 23 % gelegen. Die genauen Ergebnisse zur Umsetzung der Optimierungsvorschläge können (Mälzer, 2009) entnommen werden.

Unabhängig von den denkbar ungünstigen Umständen im Untersuchungszeitraum durch eine außergewöhnliche Häufung von besonderen Rohwasserqualitäten und Betriebssituationen und den daraus resultierenden geringen Kosteneinsparungen sollte auch die Unterstützung des Wasserwerksbetreibers durch das Optimierungssystem im Hinblick auf die Qualitätssicherung berücksichtigt werden. Da das System in der Lage ist, auf veränderte Rohwassersituationen schnell mit der Berechnung neuer Betriebseinstellungen unter Berücksichtigung vorgegebener Soll- und Grenzwerte zu reagieren, trägt es zu einer Erhöhung der Betriebssicherheit bei.

5 Evaluierung von Zusammenhängen

Im folgenden Kapitel wird die Aussagekraft der Sensitivitätsanalysen des Basismodells beleuchtet. Dabei soll die Darstellung keinen Anspruch auf Vollständigkeit erheben, sondern an einzelnen Beispielen herausstellen, inwiefern die Sensitivitätsanalysen nutzbar sind und durch weitergehende Datenauswertung und Laborversuche stützbar Resultate liefern. Ferner muss berücksichtigt werden, dass es sich bei der Sensitivitätsanalyse um eine statistische Auswertung der im Modell abgebildeten Datenmuster handelt. Daher stellen die Ergebnisse der Analysen nie einen Beweis sondern lediglich Hinweise auf mögliche Zusammenhänge dar.

Da die Einzelsensitivitäten nur in den seltensten Fällen streng normalverteilt sind, wurde als Darstellungsform der klassische Box-Plot nach Tukey (1977) gewählt, der durch die Darstellung des Medians, des ersten und dritten Quartils und der Extremwerte einen umfassenderen Überblick über die Werteverteilung ermöglicht, als das in NeuroModel implementierte Box Diagramm.

5.1 Einfluss einer Mittelwertbildung

Durch die verteilte Speicherung von Informationen verschiedener Datenmuster ist es bei der Modellierung mit neuronalen Netzen interessant, wie die Daten zeitlich aufzuarbeiten sind, um die Modelle im Anschluss sinnvoll für eine Analyse nutzen zu können. Neben der bisher gezeigten Modellierung mit Einzelwerten im Abstand von mehreren Minuten wäre auch eine Modellbildung mit Stunden- oder Tagesmittelwerten denkbar, vor allem weil hierdurch die Datendichte deutlich reduziert werden könnte. Um den Einfluss der Mittelwertbildung zu evaluieren, wurden entsprechend dem Basismodell zwei Modelle mit den Stundenmittelwerten und den Tagesmittelwerten der jeweiligen Eingangsgrößen trainiert, die eine vergleichbare Modellgenauigkeit wie das Modell basierend auf Einzelwerten aufwiesen. Die Modelle wurden jeweils einer Sensitivitätsanalyse unterzogen.

Wie die Diagramme in Abbildung 5.1 zeigen, gehen durch die Mittelwertbildung über einen Tag sehr viele Informationen verloren. Dieses zeigt sich zum einen an dem geringeren Gesamtwertebereich der Einzelsensitivitäten, aber auch an der kleinen Differenz zwischen dem ersten und dritten Quartil. Das Modell wird deutlich von der Rohwassertrübung dominiert. Der SAK_{254} weist nur eine sehr geringe Sensitivität auf. Zwischen den Stundenmittelwerten und Einzelwerten ist der Effekt nicht mehr deutlich erkennbar. Zwar hat auch hier die Rohwassertrübung einen höheren Einfluss, aber der Einfluss der anderen Eingangsgrößen, auch des SAK_{254} , nimmt gegenüber den Tagesmittelwerten zu und ist nahezu vergleichbar mit den Einzelwerten. Bei den Einzelwerten steigt der Einfluss des SAK_{254} gegenüber der Rohwassertrübung im Vergleich zu den Stundenmittelwerten noch einmal an.

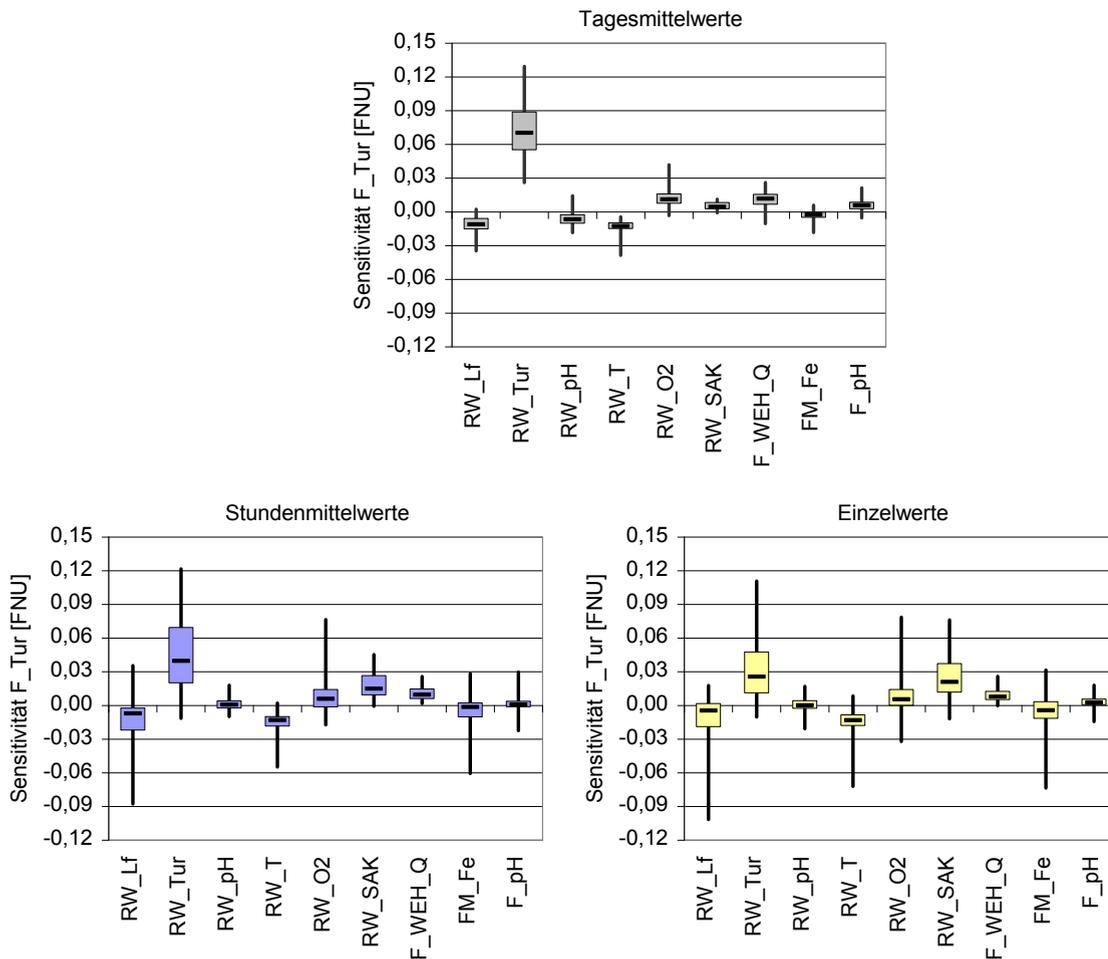


Abbildung 5.1: Sensitivitätsanalysen der Modelle auf Basis von Einzelwerten, Stundenmittelwerten und Tagesmittelwerten im Vergleich unter Angabe des 1. und 3. Quartils (Box), des Medians (schwarze Linie) und der minimalen und maximalen Einzelsensitivitäten (Whisker)

Die Ergebnisse zeigen, dass eine Modellierung des gegebenen Wasseraufbereitungsprozesses mit Tagesmittelwerten keine sinnvollen Ergebnisse liefert. Zwar lassen sich grobe Zusammenhänge finden und mit der der Modellierung mit Einzelwerten entsprechenden Genauigkeit abbilden, aber für eine Auswertung von Zusammenhängen ist das Modell nicht geeignet, da zu viele Informationen verloren gehen. Deutlich wird der Effekt beispielsweise bei der Betrachtung der Kurvenschar der Flockungsmitteldosierung. Im Vergleich zu Abbildung 4.12 sind in der Kurvenschar des Tagesmittelwertmodells nach Abbildung 5.2 keine deutlichen Optima für die Flockungsmitteldosierung mehr erkennbar, so dass sich dieses Modell auch für eine Optimierung der Flockungsmittelkonzentration nicht eignen würde.

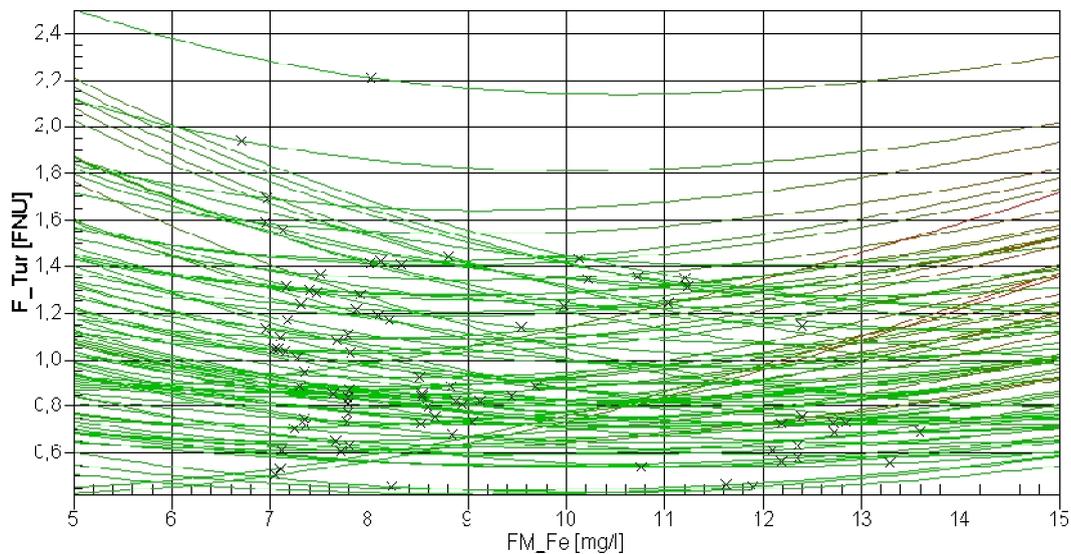


Abbildung 5.2: Einfluss der Flockungsmittelkonzentration auf die Trübung nach Sedimentation im Tagesmittelwertmodell

Die Modellierung mit Stundenmittelwerten zeigt zwar tendenziell ähnliche Sensitivitäten, allerdings gehen auch hier aufgrund der deutlichen Veränderung des Verhältnisses zwischen Rohwassertrübung und SAK_{254} möglicherweise durch die glättend wirkende Mittelwertbildung interessante Informationen verloren. Dieses Ergebnis verdeutlicht, dass sich Schwankungen in der Wasserqualität direkt und innerhalb eines kurzen Zeitfensters auswirken. Bei den modellierten Prozessstufen werden keine Wasseraufbereitungsverfahren betrachtet, bei denen Langzeiteffekte eine Rolle spielen, wie dieses beispielsweise durch das Fouling bei Membranverfahren der Fall ist. In dem Fall wäre zu erwarten, dass der Unterschied zwischen einer Modellierung mit Tagesmittelwerten und Stundenmittelwerten nicht so deutlich ausfallen würde.

5.2 Vergleich der Talsperrenwässer untereinander

In der Modellierung hat sich ein deutlicher Unterschied in der Modellgenauigkeit für die unterschiedlichen Talsperrenwässer ergeben. Auch die Trübung nach Sedimentation ist abhängig von dem aufzubereitenden Wasser. Daher ist zu erwarten, dass die Einflüsse der einzelnen Eingangsgrößen für die Talsperrenwässer unterschiedlich ausgeprägt sind. Aus diesem Grund wurden die Einzelsensitivitäten anhand der Leitfähigkeit nach den einzelnen Talsperrenwässern separiert. Dieses Vorgehen hat sich für die Sensitivitätsanalyse als sehr sinnvoll erwiesen, da sich bei den anfänglichen Ansätzen zur Interpretation der Analysen gezeigt hat, dass Informationen nur durch eine möglichst weitgehende Trennung vorab bekannter, verschiedener Betriebssituationen extrahierbar sind.

Bei der Beurteilung der Sensitivitätsanalysen muss entsprechend die unterschiedliche Verteilung der Messwerte abhängig von der Rohwasserquelle beachtet werden. Die statistischen Kenngrößen sind in Tabelle 5.1 gegeben.

Tabelle 5.1: Statistische Größen der Trainingsdaten abhängig von der Rohwasserquelle

	RW_Lf µS/cm	RW_Tur FNU	RW_pH -	RW_T °C	RW_O2 mg/l	F_pH -	RW_SAK 1/m	F_WEH_Q m³/h	FM_Fe mg/l	F_Tur FNU
<i>Rurtalsperre</i>										
Minimum	104	0,97	6,80	5,16	5,1	6,80	6,5	277	6,4	0,50
Maximum	155	36,86	7,67	15,62	12,1	7,90	14,2	765	14,5	4,81
Mittelwert	130	4,91	7,21	10,25	8,3	7,56	8,5	519	9,2	1,51
Standard- abweichung	18	3,70	0,18	2,35	1,6	0,19	0,9	89	1,8	0,69
<i>Mischwasser</i>										
Minimum	155	0,47	6,84	2,70	5,2	7,35	5,1	278	5,5	0,30
Maximum	215	43,97	7,91	17,79	12,1	7,90	14,3	882	14,9	5,11
Mittelwert	177	2,97	7,43	9,34	8,6	7,65	7,0	483	8,7	0,97
Standard- abweichung	15	3,02	0,17	3,39	1,8	0,19	1,0	83	1,8	0,48
<i>Urftalsperre</i>										
Minimum	215	0,97	7,27	4,66	5,1	7,18	5,0	261	6,7	0,37
Maximum	247	14,95	8,00	17,78	10,8	7,90	10,9	754	12,6	2,10
Mittelwert	226	3,61	7,69	12,29	8,1	7,50	7,5	493	7,9	0,74
Standard- abweichung	9	2,17	0,16	3,17	1,7	0,16	1,5	81	1,2	0,16

Der höchste Einfluss geht nach Abbildung 5.3 (obere Reihe) von den Wasserinhaltsstoffen aus, charakterisiert durch die Rohwassertrübung und den SAK₂₅₄. Neben diesen Größen spielen beim Rurtalsperrenwasser die Rohwasserparameter Leitfähigkeit, Temperatur und Sauerstoffgehalt sowie die Flockungsmittelmenge eine Rolle. Die unterschiedlich hohen Sensitivitäten der Rohwassertrübung könnten unter anderem auf Rohwassertrübungspeaks zurückzuführen sein, da im Mischwasser entsprechend der höchsten Sensitivität auch der höchste Maximalwert erreicht wurde (vgl. Tabelle 5.1). Um die Verfälschung der Sensitivitäten durch den Einfluss von Extremsituationen durch Rohwassertrübungspeaks auszuschließen, sind in Abbildung 5.3 (untere Reihe) die Sensitivitätsanalysen nur für Werte mit einer Rohwassertrübung unterhalb von 5 FNU gezeigt.

Wie die Darstellung jedoch zeigt, sind keine deutlichen Unterschiede in den Verteilungen der Einzelsensitivitäten nach Beschränkung der Rohwassertrübung auf 5 FNU gegenüber dem gesamten Datenraum zu erkennen. Lediglich der Einfluss des Rohwasser-SAK₂₅₄ ist bei Aufbereitung von Rurtalsperrenwasser geringer. Der höhere Einfluss des SAK₂₅₄ ist jedoch, wie später noch gezeigt wird, auf einen Einzelfall zurückzuführen und nicht auf eine grundsätzliche Veränderung durch die Beschränkung auf normale Rohwassertrübungswerte.

Evaluierung von Zusammenhängen

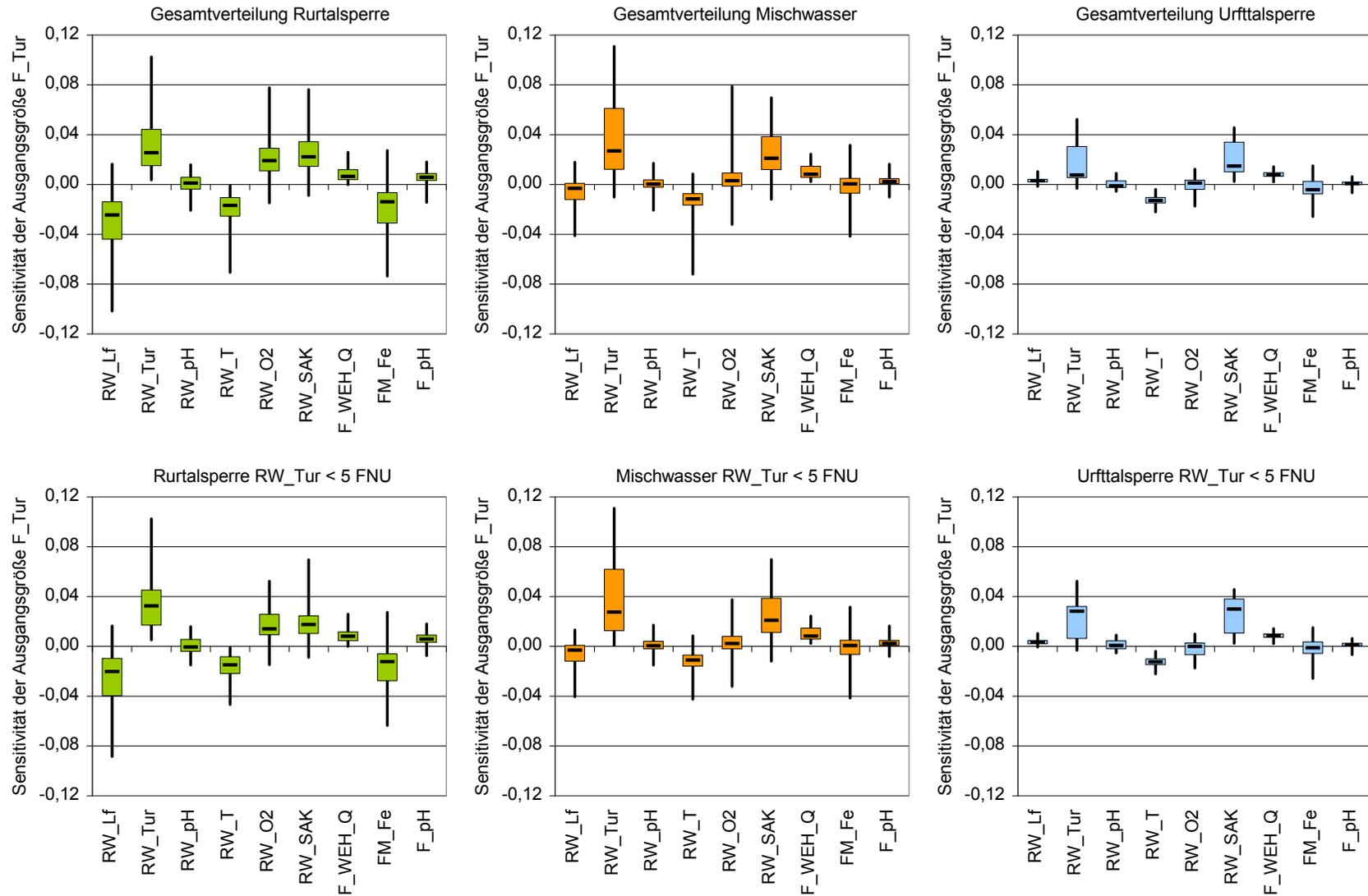


Abbildung 5.3: Sensitivitätsanalysen der verschiedenen Talsperrenwässer im Vergleich (obere Reihe: alle Daten, untere Reihe: nur Daten bei einer Rohwassertrübung unter 5 FNU)

Außerdem nimmt die Schwankungsbreite der Einzelsensitivitäten aller Eingangsgrößen bei Urftalsperrenwasser gegenüber Rurtalsperrenwasser und Mischwasser deutlich ab. Die Haupteinflussfaktoren bei der Aufbereitung von Urftalsperrenwasser und Mischwasser sind deutlich besser zu beurteilen. Hier spielen vor allem die Trübung und der SAK_{254} eine große Rolle. Hinzu kommen der Temperatureinfluss auf den Flockungsprozess sowie auf die Viskosität des Wassers, die das Absetzverhalten in der Sedimentation verändert, und ein relativ gesehen hoher Einfluss der Verweilzeit. Die bessere Einschätzbarkeit des Prozesses und, bei der Aufbereitung von Urftalsperrenwasser, die geringere Schwankungsbreite der Einflussfaktoren zeigen sich auch im Ergebnis der Flockung. In beiden Fällen sind die Einzelsensitivitäten der Flockungsmitteldosierung um den Nullpunkt, also um das Flockungsoptimum, verteilt, wobei die Verteilung beim Urftalsperrenwasser noch wesentlich enger ist, während sich beim Rurtalsperrenwasser eine deutliche Verschiebung in den negativen Bereich ergibt. Entsprechend der Verteilung wird die niedrigste mittlere Ablauftrübung beim Urftalsperrenwasser erreicht (vgl. Tabelle 5.1).

Die Ergebnisse aus dem Vergleich der verschiedenen Wasserzusammensetzungen korrespondieren auch mit den Ergebnissen der Modellierung. Die höhere Variabilität der Einflussfaktoren und höhere Zahl der wesentlichen Einflussfaktoren bei der Rurtalsperre bedingen die schlechtere Vorhersagequalität der Modelle (vgl. Abbildung 3.13, S. 50). Die beste Vorhersagequalität war bei der Aufbereitung von Urftalsperrenwasser zu verzeichnen.

Eine Betrachtung der Kurvenschar der Flockungsmittelmenge für die Rurtalsperre zeigt eine in vielen Fällen hohe Unterdosierung, aber auch einige Kurven, die ihr Minimum bei vergleichsweise niedrigen Flockungsmittelmengen haben (s. Abbildung 5.4). Diese Kurven lassen sich einer Rohwasserqualität zuordnen, die nur ein Mal aufgetreten ist und sich durch eine hohe Rohwassertrübung bei niedriger Temperatur und hoher Sauerstoffkonzentration auszeichnet. Dieser Einzelfall ist dementsprechend nicht repräsentativ und wird daher im Folgenden vernachlässigt. Er hat auch zu der bereits angesprochenen hohen Sensitivität des SAK_{254} geführt, die nach Vernachlässigung der Einzelsensitivitäten für Rohwassertrübungen über 5 FNU nicht mehr vorhanden war.

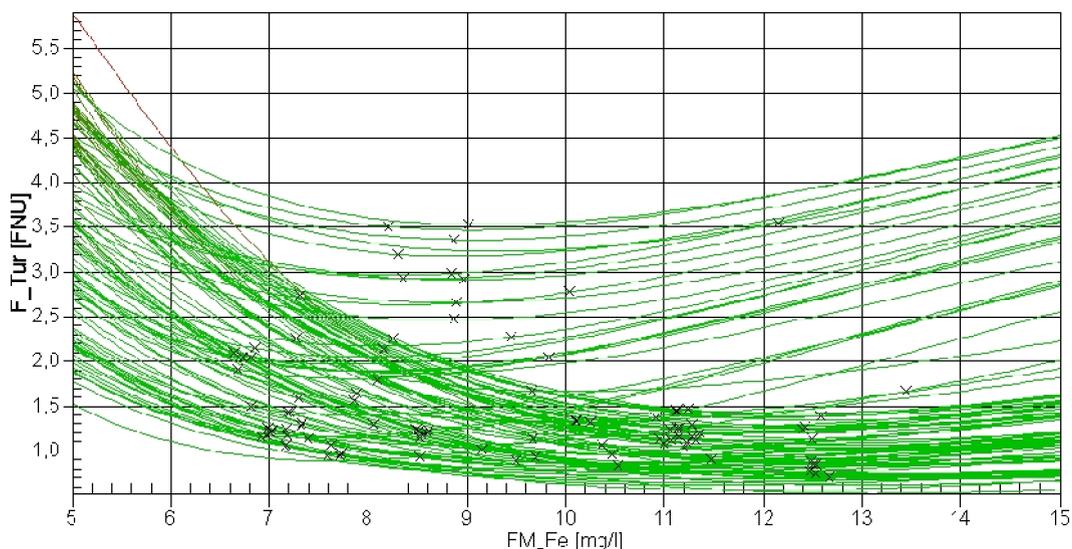


Abbildung 5.4: Einfluss der Flockungsmittelkonzentration auf die Trübung nach Sedimentation für die Aufbereitung von Rurtalsperrenwasser

Durch Beschränkung der Matrix aus Einzelsensitivitäten auf Situationen, in denen die Einzelsensitivitäten der Flockungsmitteldosierung im Bereich des Optimums liegen, verändert sich die Verteilung der Einzelsensitivitäten wie in Abbildung 5.5 rechts dargestellt. Bemerkenswert ist, dass das Optimum der Flockungsmitteldosierung auch mit einer deutlich niedrigeren Sensitivität des pH-Werts nach Flockungsmitteldosierung einhergeht, so dass hier eine optimale Einstellung beider Flockungsparameter erreicht ist. Weiterhin ist die Verteilung der Leitfähigkeit wesentlich in Richtung des Nullpunkts verschoben, was bedeutet, dass sie im Bereich des Flockungsoptimums einen wesentlich geringeren Einfluss auf die Trübung im Ablauf der Sedimentation hat. Auch der SAK₂₅₄ weist einen niedrigeren Einfluss auf. Es kommt vielmehr stärker auf den Feststoffgehalt im Rohwasser an.

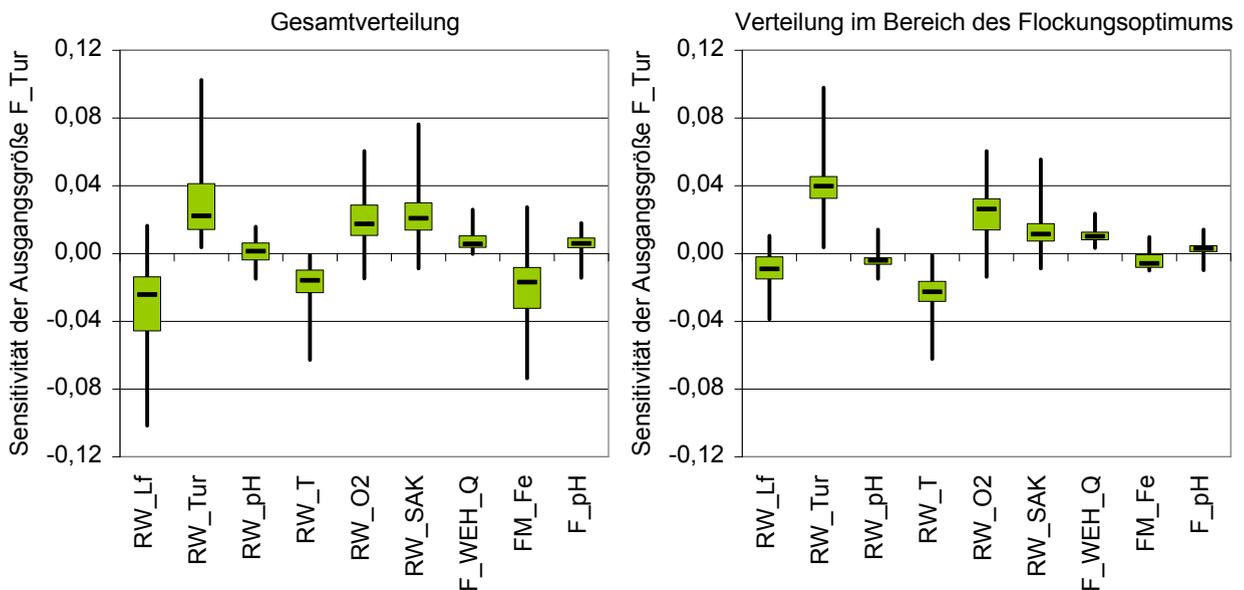


Abbildung 5.5: Verteilung der Einzelsensitivitäten im Bereich des Flockungsoptimums im Vergleich zur Gesamtverteilung

Unter Vernachlässigung der Sondersituation zeigen alle Kurven der Kurvenschar in Abbildung 5.4 in ein Optimum bei etwa 12 mg/l, d.h. es wurde häufig unterdosiert. Eine optimale Flockungsmittelkonzentration von 12 mg/l konnte für das Rurtalsperrenwasser auch durch Jar-Tests bestätigt werden.

Durch die Einstellung des pH-Werts mit Kalkmilch erst nach der Flockungsmittelzugabe, sinkt der pH-Wert aufgrund der geringen Pufferung des Wassers bei hoher Flockungsmittelkonzentration stärker ab. Da sich dadurch alle Gleichgewichte zwischen Eisen und Hydroxidion in Richtung gelöster und eher positiv geladener Spezies verschieben, ist die Adsorption von positiv geladenen Eisenhydroxid-Spezies der dominierende Wirkmechanismus der Flockung, der bis pH-Werte um etwa 5 zunächst eine bessere Entstabilisierung aufgrund der Ladungsneutralisation negativ geladener Partikeloberflächen verursacht, unterhalb von pH 5 aber auch eine Restabilisierung durch Ladungsumkehr verursachen kann. (vgl. Abbildung 2.13, S. 25). Aufgrund der Entstabilisierung durch Ladungsneutralisation wird die Reichweite der elektrostatischen Abstoßungskräfte deutlich herabgesetzt. Dieser Zusammenhang spiegelt sich in der

deutlich weniger negativen Verteilung der Einzelsensitivitäten der Leitfähigkeit am Flockungsoptimum gegenüber der Gesamtverteilung wider (vgl. Abbildung 5.5).

Weiterhin ist der Prozess der Ladungsneutralisation durch Adsorption stärker von der Feststoffkonzentration abhängig als die Mitfällung (vgl. Abbildung 2.12, S. 24). Wie Abbildung 5.6 zeigt, steigt die Trübung nach Sedimentation gerade bei niedrigen Rohwassertrübungen stark an, im weiteren Verlauf hat jedoch eine zunehmende Rohwassertrübung einen immer geringeren Einfluss. Bei niedriger Rohwassertrübung werden zunächst eher kleinere, schlechter sedimentierbare Flocken gebildet, so dass die Trübung nach Sedimentation stärker ansteigt. Mit zunehmender Feststoffkonzentration geht der Bereich der Entstabilisierung durch Adsorptionsprozesse direkt in den Bereich der Mitfällung über, in dem die Feststoffkonzentration im Rohwasser keinen wesentlichen Einfluss mehr hat. Unterhalb von etwa 11 mg/l ist die Flockungsmittelmenge für eine Entstabilisierung nicht ausreichend. Restabilisierungsprozesse und eine damit verbundene unzureichende Flockung bzw. Sedimentation spielen hier keine Rolle, da die dazugehörigen Datensätze ausschließlich im Spezialistenmodell verwendet wurden (Kapitel 3.3.6).

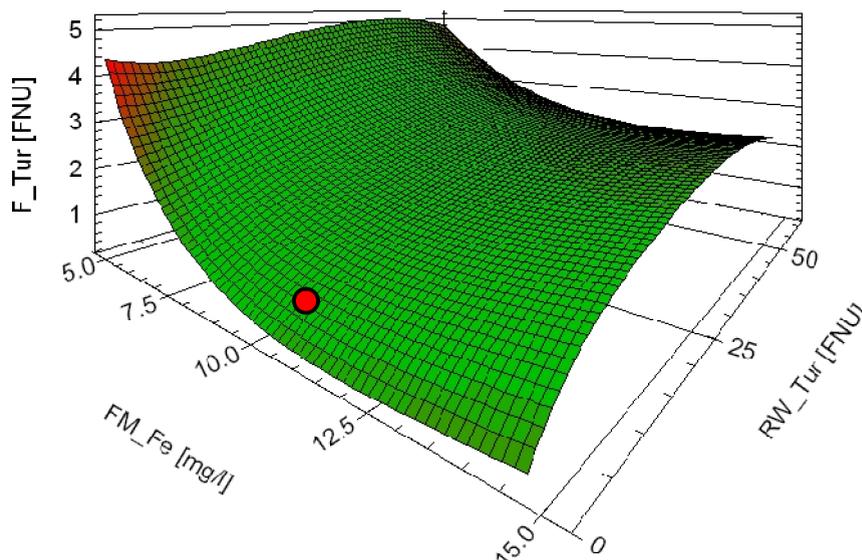


Abbildung 5.6: Einfluss der Flockungsmittelmenge und der Rohwassertrübung auf die Trübung nach Sedimentation (der rote Punkt bezeichnet die ungefähre Lage der Stützstelle)

Vergleicht man die Matrix der Einzelsensitivitäten im Bereich des Flockungsoptimums bei Aufbereitung des Rurtalsperrenwassers mit dem des Urftalsperrenwassers ist kein wesentlicher Einfluss der Leitfähigkeit und auch des Rohwasser-pH-Werts mehr erkennbar. Durch höhere Pufferung des Urftalsperrenwassers sinkt der pH-Wert nach Flockungsmittelzugabe nicht so stark ab wie bei Aufbereitung des Rurtalsperrenwassers. Dadurch überwiegen schon zu Beginn der Flockung Mitfällungsprozesse, so dass hierdurch und bedingt durch die höhere Leitfähigkeit bzw. Ionenkonzentration elektrostatische Abstoßungskräfte nur noch eine untergeordnete Rolle spielen. Bezüglich des SAK_{254} fällt ein höherer Einfluss beim Urftalsperrenwasser auf (s. Abbildung 5.7). Der größere Bereich zwischen 1. und 3. Quartil beim Urftalsperrenwasser kommt durch eine veränderte Rohwasserqualität im Zuge des Fischtreppenbaus zustande. Hier

sind die Sensitivitäten jedoch durchweg sehr gering, so dass die grundsätzliche Aussage hierdurch nicht berührt wird.

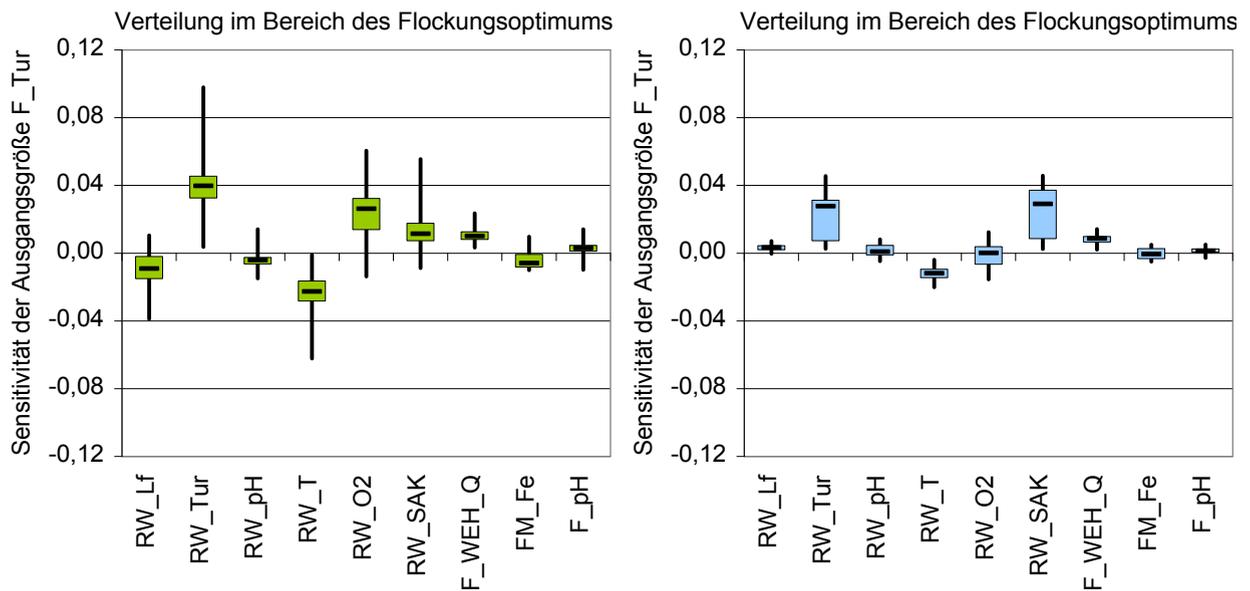


Abbildung 5.7: Verteilung der Einzelsensitivitäten im Bereich des Flockungsoptimums für das Rurtalsperrenwasser (links) im Vergleich zum Urfttalsperrenwasser (rechts)

Die Auswertung der Laboranalysen für den Normalbetrieb bei Rohwassertrübungen unter 5 FNU zeigt in Abhängigkeit der Talsperrenwässer nach Abbildung 5.8 einen niedrigeren SAK_{254} im Rohwasser bei Aufbereitung von Urfttalsperrenwasser als bei Rurtalsperrenwasser. Durch die Ozonung wird im Anschluss ein unabhängig vom Rohwasser konstanter SAK_{254} erzeugt. Die Ursache hierfür ist wahrscheinlich die zum DOC proportionale Dosierung des Ozons. Aufgrund zu weniger Messwerte des DOC im Rohwasser kann eine direkte Korrelation zwischen DOC und SAK_{254} zwar nur vermutet werden, sie ist aber sehr wahrscheinlich, da derartige Korrelationen in vielen Wässern nachgewiesen wurden (Frimmel und Kumke, 1999). Entsprechend des höheren SAK_{254} wird für das Rurtalsperrenwasser mehr Ozon dosiert, als für das Urfttalsperrenwasser.

Nach der Flockung ist für das Urfttalsperrenwasser ein höherer Anteil des SAK_{254} zu erkennen, was bedeutet, dass in der Flockung bei Aufbereitung von Urfttalsperrenwasser weniger SAK_{254} aus dem Wasser entfernt wird, als bei Rurtalsperrenwasser. Der Unterschied ist zwar nur gering, betrachtet man jedoch entsprechend der Eingangsgröße des SAK_{254} im Rohwasser die insgesamt entfernte SAK_{254} -Menge, so ist eine deutlich höhere Entfernung des SAK_{254} für das Rurtalsperrenwasser zu erkennen. Dieser Zusammenhang ist wahrscheinlich die Ursache für die unterschiedlich hohen Sensitivitäten der Eingangsgröße SAK_{254} im Rohwasser für die beiden Talsperrenwässer.

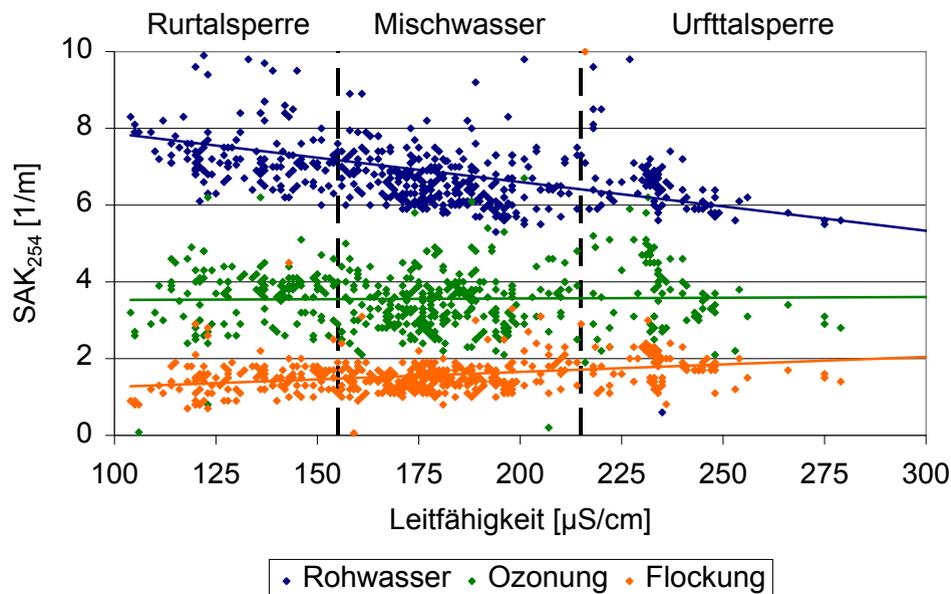


Abbildung 5.8: SAK₂₅₄-Gehalt in den verschiedenen Aufbereitungsstufen

Ein Grund für die bessere Fällung des SAK₂₅₄ im Rurtalsperrenwasser könnte die geringe Pufferkapazität und das dadurch bedingte stärkere Absinken des pH-Werts nach Flockungsmittelzugabe sein, da das Optimum zur Entfernung organischer Wasserinhaltsstoffe bei niedrigeren pH-Werten liegt (Jekel, 2004). Durch die Reaktion des organischen Hintergrunds mit den polynuklearen Hydroxokomplexen des Flockungsmittels wird zusätzlich ein höherer Flockungsmittelbedarf verursacht, was sich auch in den Jar-Tests zeigte. Hier wurde für das ozonte Wasser unabhängig vom Rohwasser eine optimale Flockungsmittelmenge von 12 mg/l für die Abtrennung des SAK₂₅₄ nachgewiesen. Daher stimmt das Flockungsoptimum bezüglich der Trübungselimination mit dem für die SAK₂₅₄-Elimination bei Aufbereitung von Rurtalsperrenwasser überein, während das Optimum zur Trübungselimination für Urftalsperrenwasser bei Flockungsmittelmengen etwa zwischen 7 und 9 mg/l liegt (s. Abbildung 5.9). Für das Urftalsperrenwasser liegt bezüglich der Trübungseliminierung leider kein eindeutiges Ergebnis aus Jar-Tests vor, da ausgehend von einer bereits niedrigen Rohwassertrübung insgesamt sehr gute Flockungsergebnisse erzielt werden konnten.

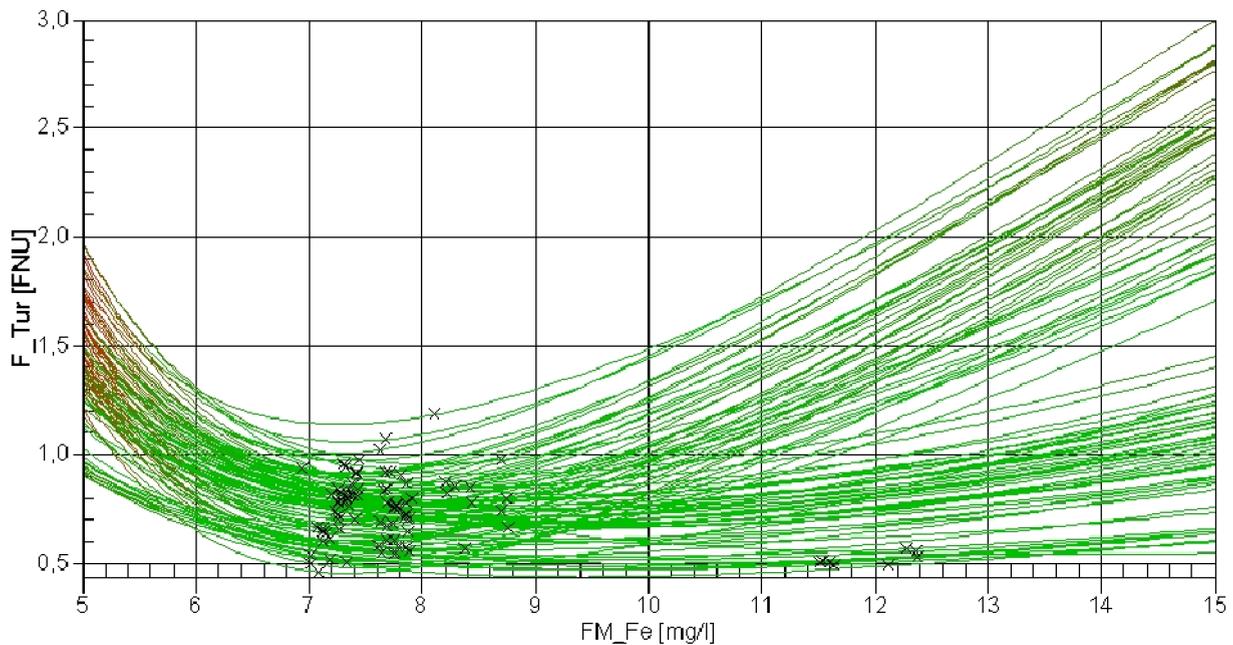


Abbildung 5.9: Einfluss der Flockungsmittelkonzentration auf die Trübung nach Sedimentation für die Aufbereitung von Rurtalsperrenwasser

Resultierend kann durch die gezeigten Sensitivitätsanalysen nachgewiesen werden, dass die Ergebnisse mit Erkenntnissen aus reinen Datenanalysen und Jar-Tests übereinstimmen und somit die für die Flockung aus der Theorie auch zu erwartenden Zusammenhänge abgebildet werden. Aus diesem Grunde stellen Sensitivitätsanalysen eine gut geeignete Methode dar, statistisch in den Daten vorhandene Zusammenhänge zu visualisieren und für eine Interpretation zugänglich zu machen. Da die gewählten Eingangsgrößen nur die Analyse globaler Zusammenhänge zulässt, können die gezeigten neuronalen Netze jedoch nicht zur Erweiterung des Prozessverständnisses der Flockung beitragen. Hierzu wäre das Training neuronaler Netze auf Basis von Jar-Tests interessant. Gerade in Bezug auf den Einfluss des sehr heterogen zusammengesetzten NOM auf die Flockung, auch in Zusammenhang mit einer Vorozonung, existiert ein umfangreiches Datenmaterial u.a. durch die Aufspaltung des NOM in verschiedene Stoffgruppen mit unterschiedlichen Eigenschaften (z.B. Krasner und Amy (1995), Chandrakanth und Amy (1996), Leeuwen et al. (2002), Yan et al. (2007)). Allerdings bestehen vielfältige, sich zum Teil auch widersprechende Interpretationsansätze, die größtenteils auf Basis von zwei- bis dreidimensionalen Darstellungen der Messwerte gebildet werden. Hier könnten neuronale Netze ein großes Potential darstellen, auch mehrdimensionale Zusammenhänge zu visualisieren und Ansätze für eine weitergehende Interpretation zu liefern.

6 Potentiale neuronaler Netze in der Trinkwasseraufbereitung

Die Modellierung von Prozessen der Trinkwasseraufbereitung wird durch zunehmende Qualitätsanforderungen, aber auch durch hohe Anforderungen an die Betriebssicherheit und einen erhöhten Kostendruck an Bedeutung gewinnen. Aus den in der Einleitung bereits beschriebenen vielfältigen Möglichkeiten einer Modellbildung stellen neuronale Netze eine innovative und bisher in der Trinkwasseraufbereitung selten eingesetzte Verfahrensweise dar, auf Basis von Prozessdaten Modelle zu trainieren und die Modelle selbst oder Erkenntnisse aus der Modellierung in der Praxis der Trinkwasseraufbereitung umzusetzen. Der Hauptvorteil dieser Methode liegt in der Fähigkeit der neuronalen Netze auch ohne detaillierte Kenntnisse grundlegender Mechanismen stark nichtlineare Zusammenhänge abbilden zu können.

Für das Training der neuronalen Netze können, wie im Rahmen dieser Arbeit gezeigt, online aufgezeichnete Daten aber auch Laboranalysen oder aber auch auf Basis mechanistischer Modelle berechnete Parameter verwendet werden. Zur Konfiguration der Netze gibt es bereits vielfältige Software (Hinweise hierzu sind im Anhang in Kapitel 8.1.1.1, S. 107 gegeben), so dass hier nicht zwangsläufig tiefgehende Kenntnisse neuronaler Netze notwendig sind. Für die Modellierung von Verfahren der Trinkwasseraufbereitung hat sich bisher vor allem die Verwendung von MLP- aber auch RBF-Netzen bewährt, wobei MLP-Netze aufgrund der zwar beschränkten, aber in Grenzen gegebenen Extrapolationsfähigkeit gewisse Vorteile aufweisen.

Die bisher aus der Literatur bekannten Anwendungen und auch die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen die hohe Leistungsfähigkeit der neuronalen Netze. Dabei sind sie ebenso pragmatischen Herangehensweisen wie der Bildung von Regressionsmodellen deutlich überlegen. Das reine Training der neuronalen Netze ist in der Regel bei der Verwendung spezieller Software verhältnismäßig schnell durchzuführen. Ein hoher Aufwand ist demgegenüber bei der Auswahl der Trainingsparameter und der Aufbereitung der Daten zu verzeichnen. Vor allem bei einer hohen Datendichte stellt die Aufbereitung hohe Anforderungen an den Anwender der neuronalen Netze. Dafür ergeben sich jedoch häufig schon alleine durch die intensive Beschäftigung mit den Daten neue Erkenntnisse über Zusammenhänge zwischen einzelnen Messgrößen.

Limitierungen bei der Anwendbarkeit neuronaler Netze bestehen vor allem in der messtechnischen Erfassbarkeit einzelner Einflussgrößen. Wie in Kapitel 3.5 am Beispiel der Partikelmodellierung gezeigt, kann neben der Messgenauigkeit der Geräte selbst auch ein nicht vertretbarer Wartungsaufwand ein Ausschlusskriterium sein. Weiterhin können Messwerte durch diffuse, nicht statistisch auftretende Effekte so verfälscht werden, dass ein Einsatz als Eingangsgröße in ein neuronales Netz nicht mehr möglich ist, bzw. der zu modellierende Prozess durch die unbekanntes und messtechnisch nicht greifbaren Einflussgrößen nicht abbildbar ist. Wie Panglich et al. (2008) gezeigt haben, war eine Methode zur Vorhersage der transmembranen Druckdifferenz in einem kombinierten Flockungs-Membranprozess, die an einer Versuchsanlage mit keramischen Membranen entwickelt wurde, nicht auf eine Pilotanlage mit kapillaren Polymermembranen übertragbar. Im Gegensatz zur keramischen Membran zeigte sich bei der Messung der transmembranen Druckdifferenz ein stark nichtlineares Verhalten, das durch verschiedene, nicht messbare Faktoren wie beispielsweise unterschiedliches Fouling- und Rückspülverhalten in den einzelnen Kapillaren hervorgerufen worden sein könnte. Häufig lassen sich solche Limitierungen jedoch durch die Entwicklung anderer Vorgehensweisen, wie zum Beispiel Mittelwertbildungen, umgehen, durch die zwar einzelne Aspekte nicht mehr abgebildet werden können,

aber eine grundsätzliche Einsetzbarkeit beispielsweise für Optimierungszwecke dennoch gegeben sein kann. So wurden von Panglich et al. (2008) Modelle auf Basis von Tagesmittelwerten trainiert, durch die eine optimale Einstellung der Rückspülbedingungen zwar nicht mehr möglich, eine Vorgabe optimaler Flockungsparameter aber noch immer gegeben war.

Für die Auswahl der Trainingsparameter und den Modellierungsansatz gibt es über das im Anhang dargestellte Konzept zur Verwendung neuronaler Netze hinaus keine zu standardisierende Vorgehensweise. Sie ist abhängig von den jeweiligen Prozessen und der Zielsetzung. Es können jedoch einige generelle Hinweise gegeben werden. Grundsätzlich ist es gerade bei der Aufbereitung von Oberflächenwasser notwendig, Daten über einen ganzen Datenzyklus vorliegen zu haben, um jahreszeitlich bedingte Schwankungen vollständig abbilden zu können. Bei Prozessen, die sehr direkt auf Rohwasserqualitätsschwankungen reagieren, wie die in dieser Arbeit dargestellte Modellierung des Flockungsprozesses, ist es sinnvoll, mit Daten mit einem relativ kurzen Zeitabstand ohne Mittelwertbildung zu trainieren, da sich gezeigt hat, dass schon durch die Bildung von Stundenmittelwerten Informationen verloren gehen können. Bei Prozessen, bei denen Langzeiteffekte eine Rolle spielen, wie beispielsweise bei Membranverfahren durch das Fouling, kann – je nach Fragestellung – eine Mittelwertbildung zu ähnlich guten Ergebnissen führen. Hierdurch kann oftmals auch der Aufwand der Datenaufbereitung reduziert werden, da einzelne Ausreißer nicht mehr so stark ins Gewicht fallen. Die Reduzierung auf Tagesmittelwerte bietet zusätzlich die Möglichkeit, auch Labordaten und damit online nicht erfassbare Einflussgrößen in die Modellierung einbeziehen zu können.

Bei der Modellierung von kontinuierlichen Prozessen ist auch aus betriebstechnischer Sicht häufig eine Modellierung mit Einzelwerten interessant. Hierdurch wird eine kausalrichtige Zuordnung der Messwerte durch die Berücksichtigung der Anlagenverweilzeit notwendig. Durch diesen Schritt ist eine Vorhersage der Ausgangsgröße über den Zeithorizont zwischen der Messung dieser Größe und der letzten Messung des vorhergehenden Aufbereitungsschritts möglich. Werden diese Modelle zu Optimierungszwecken eingesetzt, ist eine rechtzeitige Anpassung der Betriebsparameter an sich verändernde Rohwasserqualitäten möglich. Wenn, wie in dieser Arbeit, der Prozess hauptsächlich von den Rohwasserqualitätsparametern abhängig ist, so ist es wahrscheinlich, dass die Berücksichtigung einer mittleren Verweilzeit und eine Vernachlässigung der Prozessdynamik möglich ist, da sich die Veränderung dieser Parameter und die Reaktion des Prozesses darauf eher im Bereich von Stunden bewegen.

Im Zuge der Modellierungen hat sich gezeigt, dass Spezialistenmodelle in der Regel dann eingesetzt werden sollten, wenn sich grundsätzliche Veränderungen im Prozessverhalten ergeben. Die Trennung nach unterschiedlichen Rohwasserqualitätsmerkmalen hingegen führte zu keiner Verbesserung der Modellgenauigkeit. Durch das Training von Spezialistenmodellen kommt es in der Regel zusätzlich zu einer Verschlechterung der Übertragbarkeit der Modelle, da durch die Trennung der Daten die Anzahl der verschiedenen Datenmuster verringert wird. Der Mehraufwand durch die Notwendigkeit des Nachtrainings neuer Datenmuster lohnt sich demnach nur, wenn eine deutliche Verbesserung der Modellgenauigkeit zu erreichen ist.

Durch die zu Beginn dieses Kapitels bereits erwähnten Anforderungen an den Betrieb von Trinkwasseraufbereitungsanlagen ist die Anwendung der Modelle im Online-Betrieb von besonderem Interesse. Sobald während des Trainings die Generalisierungsfähigkeit der neuronalen Netze unter Beweis gestellt werden konnte, ist ein Einsatz als reines Prognosemodell oder im

Rahmen eines Optimierungssystems ohne weiteres möglich. Es muss jedoch sichergestellt werden, dass die vom System ausgegebenen Prognosen bzw. Optimierungsvorschläge über eine ausreichende Genauigkeit verfügen. Bei der Planung eines Online-Einsatzes sollte beachtet werden, dass ein Ausbau der vorhandenen Online-Messtechnik notwendig sein kann, die in ein bestehendes System eingebunden und vom Bedienpersonal zusätzlich überwacht werden muss. Auch die technische Umsetzung des Systems selbst kann mit hohem Aufwand verbunden sein.

Wie bei der Modellierung kann auch bei der Umsetzung von Prozesssimulations- und Optimierungsanwendungen keine generelle Vorgehensweise angegeben werden. Die reine Prozesssimulation verarbeitet statt historischer Daten nun online gemessene und in Echtzeit übertragene Daten, so dass keine zusätzlichen Arbeiten außer der technischen Realisierung der Anbindung notwendig sind. Die auf Basis der Modelle zu entwickelnde Optimierungsstrategie richtet sich nach den Anforderungen des Betriebs und wird generell nach Gesichtspunkten zur Verbesserung der Wasserqualität und damit der Betriebssicherheit oder aber zur Optimierung der Betriebskosten ausgerichtet.

Die Kosten, die einem Betreiber einer Trinkwasseraufbereitungsanlage entstehen, richten sich nach dem Umfang des Projekts und entstehen hauptsächlich durch die Entwicklung der Prognose- oder Optimierungssysteme (Gebhardt, 2008). Weitere Kosten fallen für die Bereitstellung der notwendigen Hardware und die Lizenzierung der Software an. Die Hardware umfasst in der Regel einen Rechner mit Betriebssystem und die Schnittstellen für die Online-Anbindung. Entstehen keine zusätzlichen Kosten durch eine notwendige Erweiterung der Messtechnik, liegt der Anteil an den Gesamtkosten bei etwa 5 % bis 10 %. Der Anteil für die Lizenzierung liegt für reine Prognoseprojekte im Bereich von 20 % und kann je nach Aufwand bei Optimierungsprojekten auf 30 % bis 40 % ansteigen. Insgesamt kann von einem Projektvolumen von etwa 50.000 € bis 150.000 € ausgegangen werden, wobei der ROI (Return of invest) nach Erfahrungen der Firma aquatune zwischen 9 bis 25 Monaten liegt. Ein ROI, der einen Zeitraum von drei Jahren überschreitet, ist wirtschaftlich in der Regel uninteressant, wobei aber ein Zugewinn an Betriebssicherheit auch ein Argument für eine Projektierung sein kann.

Für den Betreiber kann es interessant sein, Prognosemodelle auch in einem Trainingssimulator oder zu Testzwecken einzusetzen. So können Prozesseinstellungen am System vorab getestet werden und der Betreiber kann zusätzliche Erfahrungen in Bezug auf die Reaktion des Prozesses auf Veränderungen sammeln. Daneben kann eine solche Anwendung auch genutzt werden, um das Vertrauen in das Simulationssystem zu erhöhen. Ein Trainingssimulator, der allerdings nicht für die Online-Anwendung gedacht ist, sondern auf Basis der Trainingsdaten erstellt ist, ist in Abbildung 6.1 gezeigt. Als Netz dient das in Kapitel 3.3.5 entwickelte Basismodell zur Vorhersage der Trübung nach Sedimentation. Hier hat der Anwender die Möglichkeit, Trainingsdatensätze auszuwählen, die Eingangsgrößen zu verändern und die Reaktion der Trübung nach Sedimentation auf die Veränderungen zu beobachten. Zusätzlich werden auch die entstehenden Kosten nach der in Kapitel 4.3 angegebenen Kostenfunktion getrennt nach Aufbereitungsstufen (Flockung und Filtration) und als Gesamtkosten angegeben. Gerade diese Angabe kann für erfahrenes Betriebspersonal interessant sein, die zwar häufig über intensive Erfahrungen im Betrieb des Prozesses verfügen, aber diese nicht immer unter dem Gesichtspunkt der Betriebskosten betrachten. Um einen Einblick in die wichtigen Einflussfaktoren der

gewählten Betriebssituation zu geben, werden auch die jeweiligen Einzelsensitivitäten angegeben. Dabei werden die Einzelsensitivitäten des gewählten Datensatzes festgehalten und die Einzelsensitivitäten denen der jeweils aktuell getesteten Einstellung gegenübergestellt. Für eine professionelle Umsetzung wäre eine Erweiterung der Oberfläche mit Darstellung der Anlage entsprechend des PLS sinnvoll, die es dem Anwender erlauben würde, sich in einer bekannten Umgebung zu bewegen.

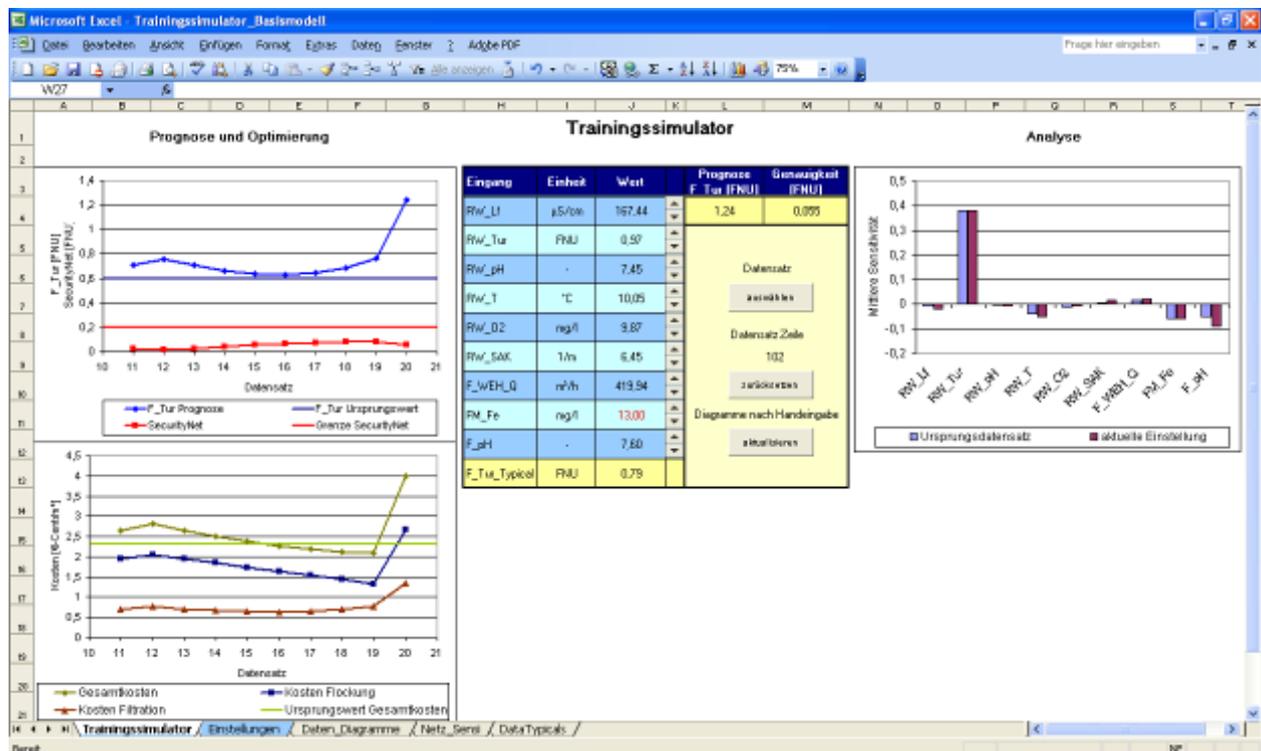


Abbildung 6.1: Beispiel eines Trainingssimulators für die Anwendung des im Rahmen dieser Arbeit modellierten Flockungsprozesses

In dem Zusammenhang steht auch die Simulation von gesamten Trinkwasseraufbereitungsanlagen. Ein Beispiel hierfür ist das vom BMBF geförderte Projekt „Modellierung mehrstufiger Trinkwasseraufbereitungsanlagen mittels eines expertensystem-basierten Simulationsmodells (METREX)“. Ziel des Projektes war die Entwicklung einer Simulationsumgebung, die dem Anwender zum einen eine Prozesssimulation, beispielsweise zu Optimierungszwecken, bietet und ihn bei der Auslegung und Dimensionierung einzelner Aufbereitungsstufen unterstützen sollte. In einer solchen Software, durch die aufgrund des modularen Aufbaus die Verknüpfung verschiedener Trinkwasseraufbereitungsstufen zur Simulation verschiedener Aufbereitungsstrategien möglich ist, würde sich auch der Einsatz neuronaler Netze anbieten. Gerade der gezeigte Flockungsprozess in Kombination mit der Sedimentation würde sich hierzu eignen, da durch die Selektion der notwendigen Eingangsgrößen in Kapitel 3.3.5 gezeigt werden konnte, dass sich der Prozess allein auf Basis von Rohwasser- und Flockungsparametern unter Vernachlässigung der zwischengeschalteten Aufbereitungsstufen Mikrosiebung und Sedimentation modellieren ließ.

Des Weiteren wäre auch ein Einsatz von Prognosemodellen in Soft-Sensoren denkbar, indem Netze trainiert werden, die in der Lage sind, nur aufwändig im Labor messbare Größen in Echt-

zeit vorherzusagen. So könnten auch für eigentlich nicht online messbare Größen Messgeräte entwickelt werden, die zu einer deutlichen Verbesserung der Prozessüberwachung und Betriebssicherheit beitragen könnten. Bestenfalls wäre auch ein Einsatz solcher Sensoren als Regler denkbar. Ein bereits in der Praxis eingesetzter Soft-Sensor auf Basis neuronaler Netze ist beispielsweise ein Sensor der Firma Coperion zur Bestimmung des Melt Flow Index, ein Parameter für die Fließeigenschaften von thermoplastischen Formmassen insbesondere in der Polyolefin-Industrie (Coperion, 2006).

Zur Sicherung einer hohen Trinkwasserqualität bestehen steigende Anforderungen bezüglich der Abtrennung von Spurenstoffen, wie beispielsweise von Arzneimitteln. Diese Stoffe werden regelmäßig im Ablauf von Kläranlagen und in Oberflächengewässern sowie gelegentlich sogar im Trinkwasser nachgewiesen (BLAC, 2003, LANUV, 2007). Die Einteilung der einzelnen Stoffe bezüglich ihrer Umweltrelevanz und Abtrennbarkeit in einzelnen Kompartimenten des Wasserkreislaufs ist aufgrund der stark divergierenden Eigenschaften der Spurenstoffe schwierig. Daher gibt es Bestrebungen, Modelle zur Charakterisierung verschiedenster Spurenstoffe anhand unterschiedlicher Merkmale bezüglich ihres Verhaltens in den verschiedenen Kompartimenten zu entwickeln. Hier könnte sich ein Potential für die Anwendung von SOMs ergeben, da diese in der Lage sind, hochdimensionale Eingangsvektoren aufgrund von Ähnlichkeitsbeziehungen auf so genannten Karten abzubilden, die eine geringere Dimension als die der Eingangsvektoren aufweisen. In der Regel sind diese Karten zweidimensional und erlauben dem Betrachter durch die Clusterung der Daten und einer Zuordnung ähnlicher Datenmuster in beieinander liegenden Bereichen der Karten die Daten auf Zusammenhänge zu untersuchen. Ein weiterer Vorteil der SOMs ist, dass auch unbekannte Datenmuster aufgrund der Ähnlichkeitsbeziehungen unterschiedlichen Regionen zugeordnet werden können und so auch für unbekannte Stoffe Vorhersagen bezüglich deren Charakteristik zu treffen sind.

Aus wissenschaftlicher Sicht ist die Eigenschaft der neuronalen Netze, die in den Daten vorhandenen Zusammenhänge in der Netzstruktur verteilt zu speichern, von Bedeutung. Diese gelernten Zusammenhänge aus dem Netz zu extrahieren und zu visualisieren, bietet ein großes Potential, Prozesse zu analysieren und unbeeinflusst von eigenen Vorstellungen Informationen über die Wichtigkeit verschiedener Eingangsgrößen zu erhalten.

Ein wichtiger Aspekt einer solchen Sensitivitätsanalyse ist ihre Nutzung zur Selektion wichtiger Eingangsgrößen. Durch die sukzessive Vernachlässigung von Eingangsgrößen mit niedriger Sensitivität, wie in Kapitel 3.4.5 gezeigt, können die Netze auf die wichtigen Einflussgrößen reduziert und damit auch optimiert werden. Noch interessanter als in der gezeigten Anwendung ist die Selektion wichtiger Einflussgrößen bei Berücksichtigung von Laboranalysen. Wie Panglisch et al. (2008) zeigen konnten, war es möglich, aus 20 online und im Labor gemessenen Eingangsgrößen neun Eingangsgrößen zu extrahieren, durch die der Prozess vollständig beschrieben werden konnte. Durch die Reduktion der Eingangsgrößen konnte die Modellgenauigkeit gleichzeitig weiter verbessert werden. Die als wichtig identifizierten Parameter waren zum größten Teil für den Prozess bekannte Einflussgrößen. Es stellte sich jedoch heraus, dass zwei weitere Eingangsgrößen von mindestens ebenso hoher Wichtigkeit waren, die aber bei Datenanalysen zuvor nicht als solche betrachtet worden waren. Der Grund des hohen Einflusses war jedoch nicht eindeutig feststellbar. Beide Parameter korrelieren mit der Rohwasserqualität und könnten so als Ersatzgrößen für andere Parameter von Bedeutung sein. Um dieses zu verifizie-

ren oder andere Gründe herauszufinden, können gezielte Untersuchungen durchgeführt werden. Eine Sensitivitätsanalyse ist demnach hervorragend geeignet, unterstützend zur weiteren Versuchsplanung beizutragen.

Mögliche Wechselwirkungen der einzelnen Eingangsgrößen untereinander herauszuarbeiten bedarf eines tiefgehenden Prozessverständnisses und intensiver Datenarbeit, um aus den Sensitivitätsanalysen die gewünschten Informationen herausfiltern zu können. Im Zuge der in Kapitel 5 dargestellten Sensitivitätsanalyse hat es sich gezeigt, dass eine Trennung unterschiedlicher Betriebssituationen zwingend notwendig ist, um überhaupt Ansätze für eine Interpretierbarkeit finden zu können. So wäre ohne die Bestimmung der Einzelsensitivitäten und deren Trennung nach den einzelnen Talsperrenwässern keine Analyse möglich gewesen. Dieses impliziert jedoch auch, dass ein neuronales Netz für eine Sensitivitätsanalyse so viele Datenmuster wie möglich enthalten sollte und nur dann Spezialistenmodelle trainiert werden sollten, wenn sich Betriebssituationen ergeben, die bezüglich der Wechselwirkungen der Eingangsgrößen oder der Wechselwirkungen unterschiedlicher implizit abgebildeter Prozesse deutliche Veränderungen aufweisen.

Die grundsätzliche Herangehensweise bei der Sensitivitätsanalyse kann sehr unterschiedlich aussehen. Panglisch et al. (2008) konnten die Oberflächendiagramme nutzen, um sowohl Wechselwirkungen als auch Entwicklungen des Prozesses herauszuarbeiten. Diese Vorgehensweise bot sich durch die Reaktion des Prozesses auf eine sich ändernde Rohwasserqualität oder veränderte Prozesseinstellungen über einen längeren Zeithorizont an. Mit Hilfe dieser Methode konnten auf den Oberflächen der Einfluss der Veränderung einzelner Eingangsgrößen auf den Prozessverlauf und mögliche Verbesserungen der Betriebseinstellungen anschaulich nachverfolgt werden. Die im Zuge dieser Auswertung herausgearbeiteten Vorschläge für eine optimale Einstellung der Betriebsparameter konnte durch eine Optimierungsrechnung mit genetischen Algorithmen bestätigt werden.

Die Verwendung der Oberflächendiagramme war bei dem in Kapitel 5 untersuchten Flockungsprozess hingegen eher ungeeignet. Hier waren die Auswertung der Verteilung der Einzelsensitivitäten und die Veranschaulichung der Auswirkungen auf den Prozess in Form der Kurvenscharen besser nutzbar. Da in den Kurvenscharen durch die Abbildung 100 verschiedener Stützstellen unterschiedliche Wechselwirkungen gleichzeitig dargestellt werden können, ist der Einsatz dieser Methode gerade bei Prozessen, die kurzfristig auf Veränderungen der Rohwasserqualität reagieren, sinnvoller.

Im Zuge der Sensitivitätsanalyse kann auch eine Betrachtung der Fehlerverteilung des neuronalen Netzes selbst interessant sein. So hat sich bei der Untersuchung der Membranverfahren durch Panglisch et al. (2008) gezeigt, dass durch die fehlende Eingangsgröße zur Charakterisierung der Deckschichtbildung bei geringer Deckschichtbildung auf den Membranen die Ausgangsgröße Permeabilität eher überschätzt und bei größerer Deckschichtbildung eher unterschätzt wurde.

Die Sensitivitätsanalyse kann nur die Zusammenhänge wiedergeben, die statistisch in den Daten vorhanden sind. Häufig können als wichtig identifizierte Parameter auch stellvertretend den Einfluss anderer Faktoren abbilden. Hierdurch kann es bei zu unkritischer Betrachtung auch zu Fehlinterpretationen kommen. Bei kritischem Umgang ist die Sensitivitätsanalyse jedoch ein

sehr gutes Werkzeug, um die Evaluierung von Wechselwirkungen der Einflussfaktoren auf einen Prozess zu unterstützen oder überhaupt auch erst zu ermöglichen, das Prozessverständnis zu intensivieren und Hinweise für weiteres Untersuchungspotential zu liefern. Dieses ist gerade für die Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf Modelle, trainiert auf Basis von Laborversuchen, interessant, da durch Laboranalysen ein weit reichendes Spektrum an Einflussgrößen abgedeckt werden kann. Ein Beispiel hierfür wäre die Evaluierung des Einflusses von NOM auf den Flockungsprozess.

Somit bieten neuronale Netze sowohl für praktische Anwendungen als auch unter wissenschaftlichen Gesichtspunkten vielfältige Einsatzmöglichkeiten und sind nicht nur aufgrund der hohen zu erzielenden Modellgenauigkeit und guten Umsetzbarkeit im Online-Betrieb sondern auch durch die Möglichkeit, die statistisch in den Daten vorhandenen und im Modell abgebildeten Informationen durch Sensitivitätsanalysen visualisieren, interpretieren und abstrahieren zu können, anderen empirischen, datengetriebenen Modellansätzen weit überlegen.

7 Zusammenfassung

Ziel der Arbeit war es, die Grundlagen für das Training der neuronalen Netze zu erarbeiten und das Vorgehen bei der Modellierung an dem Beispiel eines in einer konventionellen Trinkwasseraufbereitungsanlage integrierten Flockungsprozesses aufzuzeigen. Des Weiteren sollte die Online-Fähigkeit der Modelle auch unter Gesichtspunkten der Prozessoptimierung unter Beweis gestellt werden. Neben diesen eher betriebstechnischen Gesichtspunkten wurde der Einsatz neuronaler Netze als wissenschaftlich nutzbares, statistisches Analysewerkzeug untersucht.

So konnten auf Basis historischer Daten aus dem Wasserwerk Obermaubach erfolgreich neuronale Netze trainiert werden, um die Trübung im Ablauf der Flockungsstufe über einen Zeithorizont von einer Stunde in die Zukunft vorherzusagen. Hierzu wurden zunächst der Einfluss der Anlagenverweilzeit und die Auswirkung von dynamischem Prozessverhalten auf die Modellgüte geprüft. Anschließend wurden aus den vorhandenen Online-Messwerten die Eingangsgrößen selektiert, die notwendig waren, um den Flockungsprozess mit hoher Genauigkeit abbilden zu können. Dabei konnte gezeigt werden, dass es möglich war, die resultierende Wasserqualitätsgröße Trübung nach Sedimentation aus der mit konventioneller Messtechnik zu erfassenden Rohwasserqualität und den Flockungsbedingungen selbst vorherzusagen, wobei die Rohwasserzusammensetzung den Haupteinflussfaktor auf das Flockungsergebnis darstellte. Die Modellgüte war unabhängig von den vorhergehenden Aufbereitungsstufen Mikrosiebung und Ozonung. Für die Trübungsprognose wurde zusätzlich ein Spezialistenmodell trainiert, durch das die Modellgenauigkeit für Bereiche unzureichender Flockung und Sedimentation, d.h. Bereiche, in denen die Trübung nach Sedimentation höher war als im Rohwasser, gegenüber einer Abbildung in einem Gesamtmodell verbessert werden konnte.

Um belastbare Modelle auch hinsichtlich eines Online-Einsatzes zu erhalten, war ein ständiges Nachtraining neuer Datenmuster notwendig. Daten lagen seit Herbst 2006 vor. Im Sommer 2007 wurde am Staubecken Obermaubach eine Fischtreppe gebaut, weswegen das Staubecken zwischenzeitlich abgelassen werden musste. Durch diese Maßnahme entstanden neue Datenmuster, die zwar nicht dem regulären Betrieb entsprachen, aber wertvolle Stützstellen mit abweichender Wasserzusammensetzung darstellten. Letztendlich waren Daten über ein Jahr regulären Betriebs notwendig, um eine durchgehend gute Vorhersagequalität zu gewährleisten.

Neben der Vorhersage der Trübung wäre auch eine Modellierung der Partikelzahl im Ablauf der Sedimentation wünschenswert gewesen. Die hierzu im Verlauf der Dissertation implementierte neue Partikel-Messtechnik war jedoch mit einem hohen Wartungsaufwand und Unsicherheiten in der Messgenauigkeit verbunden und konnte im Ablauf der Mikrosiebung (erste Stufe des Aufbereitungsprozesses) nicht erfolgreich betrieben werden. Entsprechend zeigten die Partikelmodelle zwar Tendenzen auf, lieferten aber keine belastbaren Ergebnisse, die eine weitere Verwertung für den Online-Einsatz erlaubt hätten.

Aufbauend auf den Vorhersagen aus der Trübungsmodellierung wurde eine Optimierungsstrategie zur Anpassung der Flockungsmitteldosierung auf Basis einer Kostenfunktion entwickelt und das Optimierungspotential auf etwa 10 % Kosteneinsparung abgeschätzt. Der Kostenfunktionsansatz unter Abwägung der Kosten in der Flockung, durch das eingesetzte Flockungsmittel und den kostenpflichtig zu entsorgenden Flockungsschlamm, gegenüber den Kosten für die

Rückspülung der nachfolgenden Druckfilterstufe konnte gewählt werden, da die Wasserqualität durch die Druckfilter gewährleistet wurde und demnach keine besonderen Vorgaben für die Höhe der Trübung nach Sedimentation bestanden. Die Filterlaufzeit wurde über ein Regressionsmodell abgeschätzt. Eine Modellierung der Filterlaufzeit mit einem neuronalen Netz war mit hoher Vorhersagegenauigkeit nur mit der exakten Kenntnis des mittleren Filterdurchsatzes je Filtrationszyklus für jeden der fünf gleichzeitig betriebenen Druckfilter möglich. Aufgrund des Filtermanagements entspricht dieser jedoch nicht dem für alle Druckfilter exakt gleichen anteiligen Anlagendurchsatz, so dass bei dem Training des Netzes mit dem bekannten Anlagendurchsatz gerade bei langen Filterlaufzeiten und hohen Differenzen des tatsächlichen mittleren Filterdurchsatzes zum anteiligen mittleren Anlagendurchsatz ein hoher systematischer Fehler in der Abschätzung der Filterlaufzeit entstand.

Eine reine Minimierung der Trübung nach Sedimentation hätte zu keiner Prozessoptimierung geführt. Durch die zu erwartende geringe Verbesserung der Wasserqualität hätten zwar längere Filterlaufzeiten und damit niedrigere Kosten in der Filterspülung erreicht werden können, die Einsparungen wären jedoch durch höhere Kosten in der Flockung überkompensiert worden.

Um die Anwendbarkeit des beschriebenen Systems zu testen, wurden die neuronalen Netze mit Online-Daten aus dem Prozess in Echtzeit gespeist und durch die Optimierungsstrategie wurden online Vorschläge für eine optimale Flockungsmitteldosierung ausgegeben, die vom Betriebspersonal von Hand im Prozess eingestellt wurden. In ersten Versuchen wurde die Einsatzfähigkeit in der Praxis nachgewiesen und es konnte gezeigt werden, dass durch die Umsetzung der Optimierungsvorschläge die zu erwartende Kosteneinsparung erreicht werden kann. Die Reduktion der dosierten Flockungsmittelmenge um durchschnittlich 1 mg/l führte zu keiner Veränderung der Trübung nach Sedimentation, so dass durch geringere Flockungsmittel- und Schlammentsorgungskosten eine Reduktion der Betriebskosten um etwa 7 % erreicht wurde. Zur Verbesserung des vorgegebenen Optimierungsvorschlags muss noch geprüft werden, warum scheinbar für kurze Zeiträume ein anderes Optimum mit einem deutlich geringeren Wert für die vorgeschlagene Flockungsmittelmenge ausgegeben wird.

Durch eine Sensitivitätsanalyse konnte nachgewiesen werden, dass die im neuronalen Netz abgebildeten statistischen Zusammenhänge visualisiert und zu einer Interpretation der Intensität des Einflusses der verschiedenen Eingangsgrößen und von deren Wechselwirkungen untereinander herangezogen werden können. Dabei stimmen die gefundenen Zusammenhänge mit Datenanalysen und Ergebnissen aus Jar-Tests überein. Bei vielen sich überlagernden Wechselwirkungen aufgrund verschiedener Betriebssituationen ist eine Trennung vorab bekannter unterschiedlicher Situationen sinnvoll. In der dargestellten Sensitivitätsanalyse konnten so Unterschiede in der Aufbereitung der zwei Talsperrenwässer mit unterschiedlichen Rohwassereigenschaften herausgearbeitet werden.

Somit konnte im Rahmen dieser Arbeit eine hohe Leistungsfähigkeit von neuronalen Netzen für die Abbildung stark nichtlinearer Zusammenhänge und deren Einsatzfähigkeit in Online-Systemen zur Betriebsoptimierung gezeigt werden. Des Weiteren bietet die bisher nur in wenigen bekannten Fällen eingesetzte Sensitivitätsanalyse unter wissenschaftlichen Gesichtspunkten ein hohes Potential für die Evaluierung von Zusammenhängen stark nichtlinearer Systeme. Aus den Ergebnissen konnten daher vielfältige Ansätze für weitere praxisbezogene Einsatzmöglichkeiten und Forschungsvorhaben abgeleitet werden.

8 Anhang

8.1 Zu neuronalen Netzen

8.1.1 Beschreibung der Vorgehensweise bei der Modellierung unter Berücksichtigung der Software NeuroModel

8.1.1.1 Vorüberlegungen zur Verwendung neuronaler Netze

Im Vorfeld der Modellierung sollte grundsätzlich überlegt werden, ob ein Einsatz neuronaler Netze bei dem gegebenen Problem überhaupt sinnvoll ist, oder ob andere Modellierungsansätze besser geeignet sind. Fragen, die bei der Entscheidung berücksichtigt werden sollten, sind:

- **Existieren Gesetzmäßigkeiten?** Eine mechanistische Modellierung ist hier wesentlich sinnvoller, da eine eindeutige Wissensrepräsentation gewährleistet ist und mechanistische Modelle im Gegensatz zu neuronalen Netzen extrapolationsfähig sind.
- **Bestehen Vermutungen über Zusammenhänge zwischen einzelnen Parametern, sind aber nicht explizit bekannt?** In diesem Fall sind Black-Box Ansätze sinnvoll. Vor allem bei stark nichtlinearen Zusammenhängen zwischen vielen Parametern sind neuronale Netze geeignet. Sind Teilaspekte mechanistisch modellierbar, ist auch die Entwicklung eines Hybridmodells möglich.
- **Liegen genügend Daten vor?** Wichtig ist, dass der gesamte Prozess mit allen vermuteten Einflussgrößen abgebildet werden kann. Das Fehlen wichtiger Eingangsgrößen könnte zu einer hohen Fehlerquote in der Modellierung führen, aber auf jeden Fall zu Problemen in der Generalisierbarkeit der trainierten Netze. Weiterhin ist eine umfassende Abdeckung des Datenraums wichtig, da neuronale Netze nur in sehr beschränktem Maße extrapolationsfähig sind.
- **Ist die Qualität der Daten ausreichend?** Die Qualität des Modells hängt wie bei allen Modellen von der Qualität der Datenlage ab, auch wenn die Toleranz der neuronalen Netze gegenüber stark verrauschten oder fehlerhaften Daten verhältnismäßig hoch ist.

Nach der grundsätzlichen Entscheidung zur Modellierung eines Problems mit neuronalen Netzen stellt sich die Frage nach der zu verwendenden Software. Es gibt zahlreiche Software, die zum Teil auch als Freeware über das Internet zur Verfügung gestellt wird. Eine Übersicht gibt folgende Internetseite: <ftp://ftp.sas.com/pub/neural/FAQ.html> (Part 6 und Part 7). Einige Entscheidungshilfen zur Auswahl der Software sind in Mielke (2007) enthalten. Grundsätzlich sollte unterschieden werden, ob es um das Verständnis und die Verwendung der neuronalen Netze im biologisch-mathematischen Sinne geht oder ob sie als Werkzeug für eine (Prozess-) Modellierung angesehen werden. Dazu sollte zunächst das Ziel des Projekts in Bezug auf die Nutzung der neuronalen Netze klar definiert werden. Im Falle einer Prozessmodellierung in der Trinkwasseraufbereitung sind folgende Ziele für die Auswahl ausschlaggebend:

- Modellierung der Aufbereitungsprozesse
- Bessere Trinkwasserqualität bei schwankender Rohwasserqualität
- Erhöhung der Trinkwasserausbeute
- Erhöhung der Betriebssicherheit
- Kosteneinsparungen

- Besseres Verständnis der Auswirkung der Rohwasserzusammensetzung auf den Aufbereitungsprozess
- Optimierung der Prozesssteuerung

Bei den Zielen stehen somit anwendungstechnische Interessen im Vordergrund. Daher sollte die Software

- nicht zu komplex sein und nicht zu genaue Kenntnisse von neuronalen Netzen sowie Programmierkenntnisse voraussetzen, aber die Fähigkeit besitzen, auch komplizierte Zusammenhänge abbilden zu können,
- über eine ausreichende Schnelligkeit beim Training verfügen, da gerade zur Abschätzung von Einflussgrößen das Training vieler Netze notwendig sein kann,
- Möglichkeiten der Analyse der trainierten Netze bieten,
- Einblick in die Netzstruktur gewährleisten,
- einer ständigen Wartung unterliegen, damit auch neuere Erkenntnisse über das Training neuronaler Netze implementiert sind,
- über Schnittstellen verfügen, damit die neuronalen Netze auch online im Betrieb getestet oder für eine weitere Optimierung eingesetzt werden können,
- und kompatibel zur bestehenden Standard-Software sein (z.B. Windows, Excel, Access).

8.1.1.2 Akquise von Daten und Bewertung bezüglich ihrer Modellierbarkeit

Bei der Akquise der Daten ist der Kontakt zum Betreiber von großer Wichtigkeit. Um eine sinnvolle Modellierung durchführen zu können, ist gerade zu Beginn für die Auswahl der richtigen Messstellen und deren Aufteilung in Ein- und Ausgangsgrößen die Betriebserfahrung möglichst umfassend abzufragen. Grundsätzlich sollte zunächst die Intention des Betreibers bezüglich der Modellierung geklärt werden. Steht die Vorhersage des Prozessverlaufs und darauf aufbauend die Optimierung zwecks Kosteneinsparung und Betriebssicherheit im Vordergrund oder möchte der Betreiber über die Analyse der neuronalen Netze die Zusammenhänge einzelner Größen in seinem Prozess evaluieren? Diese Fragen sind entscheidend für die Auswahl der Modellierungsparameter und für die spätere Art der Datenaufbereitung. Bei einer Prozessmodellierung sollte weitestgehend auf Online-Daten zurückgegriffen werden, da diese in der Regel in größerem Umfang zur Verfügung stehen und kostengünstiger erhoben werden können, während bei der Evaluierung möglicher Zusammenhänge auch die Verwertung von Analysedaten aus dem Labor interessant sein kann. Die Verwertung von Analysedaten beeinflusst die Datenaufbereitung und Modellierung in sofern, dass hier die Anzahl der zur Verfügung stehenden Daten stark reduziert ist.

Nachdem die Zielvorstellungen geklärt sind, ergeben sich weitere Fragen, die grundsätzlich zwei Bereiche betreffen und zwar die Datenlage an sich und den Betrieb der Anlage samt bestehender Erfahrungen. Ausgangspunkt für die Diskussion ist, den Aufbau der Anlage zu analysieren und zu klären, welche Aufbereitungsschritte in die Modellierung einzubeziehen sind. Anhand eines Fließbildes sollten die einzelnen Aufbereitungsschritte geklärt werden und in Bezug auf das Ziel die Grenzen für die Modellierung gezogen werden. Nicht immer macht es Sinn, den gesamten Prozess einzubeziehen, häufig hat jedoch die betrachtete Aufbereitungsstufe direkte

Auswirkungen auf folgende Stufen, die gerade bei einer Kostenoptimierung nicht vernachlässigt werden können.

Fragen, die bezüglich der Datenlage geklärt werden sollten sind:

- **Welche Daten stehen zur Verfügung und in welchem Zeitintervall werden sie aufgezeichnet bzw. im Labor gemessen?** Das Zeitintervall zwischen einzelnen Datensätzen sollte ausreichend klein sein, um die Dynamik des Prozesses abzubilden. Die Analysedaten sollten mit möglichst genauem Zeitstempel aufgezeichnet sein, um sie Online-Daten genau zuzuordnen zu können.
- **Sind alle wichtigen Größen in ausreichender Häufigkeit erfasst?** Zum einen kann es sein, dass Schlüsselgrößen gar nicht erfasst werden. Hier ist eine Erweiterung der Messtechnik in Betracht zu ziehen, wobei immer die Frage nach der Verfügbarkeit einer geeigneten Messtechnik, dem (Kosten-)Aufwand für den Einbau und der Zeitspanne für das Sammeln von ausreichend Daten für eine Modellierung berücksichtigt werden sollte. Zum anderen kann eine Erweiterung der Laboranalytik über einen gewissen Zeitraum sinnvoll sein, um die Datendichte zu erhöhen und die Dynamik der Größe genauer abschätzen zu können.
- **Sind alle Messwerte genau definiert bzw. können sie einem bestimmten Betriebszustand genau zugeordnet werden?** Dieses betrifft beispielsweise die Zuordenbarkeit von Laboranalysen zu Online-Messungen, die eine minutengenaue Erfassung des Probenahmezeitpunkts notwendig machen kann, oder die Aufzeichnung verschiedener Prozessbedingungen mit unterschiedlicher Wirkung unter einem Oberbegriff, ohne dass sie im Nachhinein voneinander getrennt werden können.
- **Wie ist die Dynamik des Prozesses?** Dieses betrifft die anschließende Datenaufbereitung gerade in Bezug auf die Frage, ob Mittelwertbildungen sinnvoll sind oder wie der Zeitabstand zwischen Einzelwerten bei Online-Daten mindestens sein sollte.
- **Wie sieht die Varianz der Daten aus?** Beide Extrema, sowohl über weite Zeiträume konstant gehaltene Parameter oder Parameter mit großen Wertebereichen, können zu Problemen in der Modellierung führen, beispielsweise aufgrund einer zu geringen Varianz, um eine Größe später für eine Optimierung nutzen zu können oder weil die Dynamik eines Parameters bei zu großen Wertebereichen im Rauschen untergehen kann.

Diese Fragen sollten möglichst ausführlich behandelt werden, da die Datenlage über den Erfolg der Modellierung entscheidet. Daher sollte im Rahmen der Akquise ein charakteristischer Datensatz über einen gewissen Zeitraum angefordert werden, der einer statistischen Voruntersuchung unterzogen werden kann. Bestehen Bedenken über die Qualität der Daten oder ist der Aufwand für eine Erweiterung der Datenbasis zu hoch, sollte schon an dieser Stelle über die Sinnhaftigkeit des Projekts entschieden werden, da die Datenaufbereitung einen sehr großen Raum der Modellierung einnimmt und schon zu Beginn den Aufwand und die Kosten des Projekts enorm erhöhen kann. Die gestellten Fragen sind im Wesentlichen anwendbar auf bestehende Anlagen, sollten aber auch als Grundlage für die Planung von (Versuchs-)Anlagen einbezogen werden, bei denen der Einsatz neuronaler Netze in Erwägung gezogen wird.

Im Anschluss sind möglichst genaue Angaben zum Anlagenbetrieb und zu bestehenden Erfahrungen zu erfragen:

- Wie wird die Anlage gefahren, welche Größen werden wonach und wie geregelt?
- Welche Grenzwerte sollten eingehalten werden?
- Was sind die Schlüsselgrößen des Prozesses?
- Welche (nicht beeinflussbaren) Störgrößen wirken vermutlich auf das System?
- Welche Zusammenhänge werden zwischen Größen vermutet?
- Wo liegen die verfahrenstechnischen Schwierigkeiten?
- Wie sieht das Verweilzeitverhalten des Prozesses aus? Für eine Echtzeitmodellierung mit neuronalen Netzen sind die Daten kausalrichtig zuzuordnen, d.h. Ursache und Wirkung müssen in einem Datensatz vereint sein. Zur Abschätzung der Verweilzeit werden Beckenvolumina, Angaben zu den Rohrleitungen und Positionen der Mess- und Probenahmestellen benötigt. Eine grobe Abschätzung kann durch Datenanalyse von sprunghaften Änderungen eines Parameters getroffen werden, die sich durch den gesamten Prozess nachverfolgen lassen.
- Wie hoch ist die Bereitschaft, in den Prozess einzugreifen und wo liegen die technischen Limitierungen? Da neuronale Netze nicht extrapolationsfähig sind, kann es Sinn machen, den Prozess an Grenzen zu fahren, um die Datendichte in selten auftretenden Zuständen zu erhöhen. Möglicherweise wären Veränderungen einzelner Parameter sinnvoll, die jedoch aus technischen/betrieblichen Gründen auch weiterhin konstant gehalten werden sollen.
- Welche Messgeräte werden eingesetzt und wie hoch ist deren Genauigkeit? Diese Frage spielt in der weiteren Datenaufbereitung mit der Software NeuroModel eine zentrale Rolle, gibt jedoch auch schon im Vorfeld eine Information über das Rauschen der Daten.
- Existiert ein Betriebshandbuch, um Prozessunstetigkeiten im Nachhinein nachvollziehen zu können?
- Gab es Veränderungen der Betriebsbedingungen und Anlagenumbauten, die berücksichtigt werden sollten?

Grundsätzlich sollte bei der Datenabfrage möglichst darauf geachtet werden, die Daten in einem für die Aufbereitung und Modellierung sinnvollen Format übergeben zu bekommen.

8.1.1.3 Die Auswahl der Trainingsparameter und der Datenbasis

Der Auswahl der Trainingsparameter kommt eine große Bedeutung zu und ist entscheidend für den Erfolg des Projekts. Dabei gibt es keine standardisierte Vorgehensweise. Die Auswahl basiert vorrangig auf der Erfahrung des Betriebs und des Projektbearbeiters (Al-Shayji und Liu, 2002, Baxter et al., 2002c). Grundsätzlich stellt sich die Frage, welche Einflussgrößen zu vermuten sind und ob diese unter Berücksichtigung wirtschaftlicher Gesichtspunkte bestenfalls durch Online-Messungen direkt erfasst oder durch Online-Messungen ersetzt werden können, die die Information über die Einflussgröße implizit enthalten (Shetty und Chellam, 2003). Für die Auswahl geeigneter Eingangsgrößen können Korrelationsanalysen (Gagnon et al., 1997), Principal Component Analysen (Al-Shayji und Liu, 2002) und genetische Algorithmen (Bowden et al., 2005a, Bowden et al., 2005b) unterstützend herangezogen werden. Die Wahl der Ausgangsgröße richtet sich nach den Modellierungsanforderungen.

Eine häufige Limitierung bei aufwändigen Anlagen ist die Leistungsfähigkeit der Modellierungssoftware, die nur eine bestimmte Anzahl an Eingangsgrößen bei sinnvoller Rechenzeit zulässt.

Bei der Software NeuroModel können bis zu 50 verschiedene Eingangsgrößen zum Training herangezogen werden, was eine Selektion wichtiger Eingangsgrößen auf der Basis von Sensitivitätsanalysen und eine stetige Reduktion der Parameter bis auf die tatsächlich wichtigen zulässt. Optimale Netze sollten 15 Eingangsgrößen jedoch nicht überschreiten (Atlas-tec, 2007). Auf diese Weise können auch Eingangsgrößen berücksichtigt werden, denen zunächst keine große Bedeutung beigemessen wird, die sich möglicherweise für das Netztraining doch als wichtige Größen herausstellen.

Bei der Auswahl der Datenbasis ist vor allem darauf zu achten, dass alle möglichen Prozesszustände abgedeckt sind, da neuronale Netze nur in engen Grenzen bis ca. 5 % Abweichung vom Wertebereich der Trainingsdaten extrapolationsfähig sind. Je nach Aufgabenstellung können sehr viele Datensätze auflaufen. Hier ist es nicht immer notwendig alle Datensätze zu berücksichtigen. Stationäre Zustände brauchen nur in dem Maße einbezogen werden, wie es dem Anteil instationärer Zustände entspricht. Weiterhin kann bei Zeitreihen der Abstand zwischen den einzelnen Datensätzen soweit reduziert werden, dass die Dynamik des Prozesses nicht verloren geht. Zu berücksichtigen ist, dass ein Teil der Daten für eine Validierung des neuronalen Netzes mit unbekanntem Testdaten, d.h. zur Abschätzung der Generalisierbarkeit, zurückgelegt werden.

8.1.1.4 Datenaufbereitung

Gerade Online-Daten sind häufig mit Fehlern behaftet, die vor der Modellierung aus der Datenbasis entfernt werden sollten. Durch die unterschiedlichen Kurvenverläufe und Wertebereiche der einzelnen Parameter sowie Zeitsprünge und Datenlücken waren statistische Methoden zur Eliminierung von Messfehlern, wie der durch Uhl (2000) auf die Verwendung von Zeitreihen angepasste Ausreißertest nach Grubbs (1950) bzw. Grubbs und Beck (1972) (alle zitiert in Uhl (2000)) oder der Z-Test nach McBean und Rovers (1998) (zitiert in Rustum und Adeloje (2007)) nicht sinnvoll einsetzbar. Beide Methoden beruhen auf statistischen Parametern wie Mittelwert und Standardabweichung einer Stichprobe, die selbst stark von den Ausreißern abhängig sind. Des Weiteren unterliegen sie zum Teil Annahmen, wie beispielsweise beim Z-Test die Voraussetzung einer Normalverteilung der Stichproben, die jedoch nicht immer zulässig sind.

Als erfolgreichste Methode hat sich der Einsatz eines Grenzwertfilters anhand der Wertebereiche der einzelnen Messgrößen zur Eliminierung grober Ausreißer und Begrenzung der Steigung der Parameter herausgestellt. Die jeweils zugelassene Steigung kann individuell für jeden Parameter an den Kurvenverlauf angepasst werden. Die Methode ist für große Datenmengen leicht in gängigen Datenverarbeitungsprogrammen zu automatisieren. Eine optische Prüfung der Konsistenz von Datenverläufen, gerade in Bezug auf falsche Aufzeichnungen durch defekte Messgeräte, ist jedoch unumgänglich.

Aktuelle Forschungsansätze prüfen den Einsatz neuronaler Netze zur Mustererkennung, in der Regel von *Self organizing maps (SOM)*, zur Erkennung von Messfehlern. Vorteil dieser Methode ist, dass nicht, wie mit statistischen Werkzeugen, nur Ausreißer, sondern auch falsche Aufzeichnungen durch defekte Messgeräte erkannt und fehlerhafte Datensätze berichtigt werden können, so dass keine Datensätze zur Modellierung verloren gehen (Rustum und Adeloje, 2007).

Vor dem Training der neuronalen Netze kann eine Clustering der Daten von Vorteil sein, vor allem wenn Zeitreihen mit stetig wiederkehrenden Mustern zu erwarten sind. Durch die Clustering wird zum einen der Einfluss des Messrauschens abgeschwächt, zum anderen werden Prozesszustände, die immer wieder angefahren werden, zu einem Muster zusammengefasst, so dass der gesamte Datenraum möglichst gleichmäßig abgedeckt wird. Neuere Entwicklungen zur Datenclustering nutzen auch hier SOMs (Rustum und Adeloje, 2007).

Zur Datenclustering in NeuroModel ist ein hierarchischer Clusteringalgorithmus implementiert, der nach einer Kombination des ISODATA-Verfahrens nach Ball und Hall (1965) und des Fuzzy-Divisive-Hierarchical-Clustering-Algorithmus (FDH) nach Dumitrescu et al. (1994) arbeitet. Der genaue Algorithmus wird von der Firma Atlan-tec nicht offen gelegt, das Prinzip ist jedoch im Handbuch der Software ausführlich beschrieben (Atlan-tec, 2007). Der Clusteringalgorithmus basiert auf den Messfehlern der einzelnen Prozessvariablen und fasst alle Datensätze, die sich aufgrund ihres Messrauschens überschneiden, zu einem Clusterdatensatz oder Typical zusammen. Dabei wird von der niedrigsten quadrierten euklidischen Distanz D ausgegangen, nämlich der Summe der Quadrate der Einzeldistanzen x_{p1i} und x_{p2i} aller n Eingangsgrößen zweier Datensätze x_{p1} und x_{p2} .

$$D(x_{p1}, x_{p2}) = \sum_{i=1}^n (x_{p1i} - x_{p2i})^2 \tag{8.1}$$

Die beiden Datensätze mit der niedrigsten Distanz werden zu einem neuen Datensatz mit doppeltem Gewicht zusammengefasst (s. Abbildung 8.1).

Der Vorteil zu anderen Clusteringalgorithmen, beispielsweise dem k-means-Algorithmus, ist, dass die Zahl der zu bildenden Cluster nicht vorgegeben werden muss und dadurch – unter Voraussetzung einer genauen Vorgabe der Messgenauigkeiten – keine Datensätze, die nicht zu einem Prozesszustand gehören, zusammengefasst werden. Daher kommt der Erfassung der Messfehler der einzelnen Modellparameter eine große Bedeutung zu. Zu beachten ist, dass unter Umständen auch externes Rauschen einen Messfehler verursachen kann, der bei der Clusterkonfiguration berücksichtigt werden sollte.

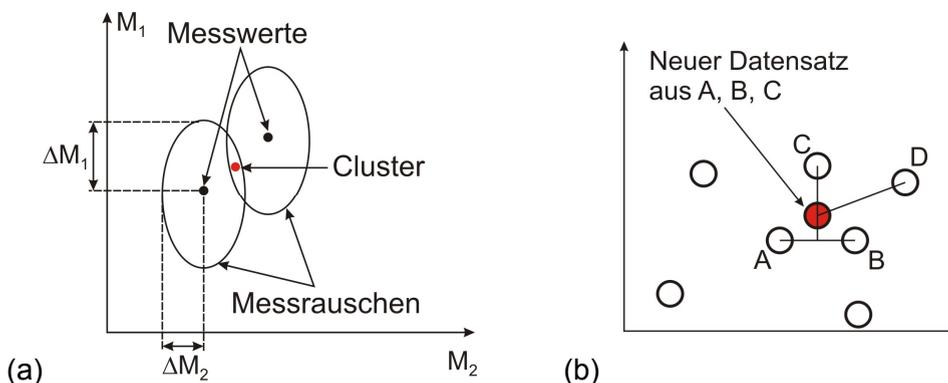


Abbildung 8.1: Bildung von Clustern (a) anhand des Messrauschens der Prozessvariablen nach (b) der kleinsten quadrierten euklidischen Distanz (nach Atlan-tec (2007))

Nicht in allen Fällen ist gesichert, dass die aufgezeichneten Daten dem wahren Zustand entsprechen, denn es kann immer wieder zu Ausreißern beispielsweise durch Messfehler oder ver-

tauschte Analysen kommen. Unter der Annahme, dass jedes Eingangsmuster eindeutig einem Ausgangsmuster zugeordnet werden kann, wird, wie Abbildung 8.2 verdeutlicht, im Rahmen des Clusterverfahrens die Übereinstimmung der Eingangsmerkmale mit den Ausgangsmerkmalen geprüft. Stimmen bei zwei Datensätzen, die sich um weniger als das Messrauschen unterscheiden und demnach zu einem Clusterdatensatz gehören, die Ausgänge nicht im Rahmen ihres Messrauschens überein, werden beide Datensätze als inkonsistent entfernt.

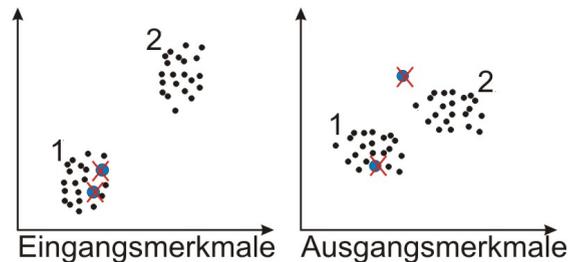


Abbildung 8.2: Entfernung von inkonsistenten Datensätzen im Rahmen des Clusterverfahrens (nach Atlan-tec (2007))

Ist die Zahl der inkonsistenten Datensätze sehr hoch (im Handbuch wird ein Wert von 20 % angegeben, da aufgrund einer schnellen Performance immer beide Datensätze, also auch der richtige, entfernt werden (Atlan-tec, 2007), sollte die Datenbasis überprüft werden. Gründe für eine hohe Zahl an Inkonsistenzen können eine falsche Wahl der Messfehler, das Fehlen wichtiger Eingangsgrößen, so dass die Eingangsmerkmale derart verzerrt nicht mehr mit den entsprechenden Ausgängen vergleichbar sind, oder aber eine ungenaue kausalrichtige Zuordnung der Daten sein.

8.1.1.5 Trainingsablauf

Für das Training neuronaler Netze müssen verschiedene Parameter angepasst werden. Dieses sind zum einen die Lernrate, der Momentum-Term, zum anderen ist die Güte eines neuronalen Netzes auch stark abhängig von der Initialisierung der Netzgewichte. Es gibt jedoch keine festen Regeln, wie diese Parameter einzustellen sind. Zur Anpassung der Netzgewichte wird das neuronale Netz mehrmals mit den Trainingsdaten durchlaufen, wobei ein Durchlauf als Epoche bezeichnet wird. Das Training wird beendet, wenn entweder eine bestimmte Genauigkeit oder eine vorgegebene Anzahl von Epochen erreicht wird. Die Genauigkeit des neuronalen Netzes wird auch durch die Anzahl der Freiheitsgrade, also der Zahl von Neuronen und verdeckten Schichten bestimmt, wobei in der Regel eine verdeckte Schicht ausreichend ist (Stanley et al., 2000). Wird das Netz zu häufig von den Datensätzen durchlaufen oder werden zu viele Neuronen hinzugefügt, besteht die Gefahr des Overfittings, d.h. das Netz wird sehr genau an die vorhandenen Daten angepasst, kann aber das Gelernte nicht mehr generalisieren, also auf unbekannte Datensätze anwenden. Aus dem Grund wird aus dem Trainingsdatenbestand ein Teil der Daten zu einem internen Test während des Trainings zurückgelegt und der Trainingserfolg bei Hinzufügen eines Neurons oder nach dem Durchlaufen einer Epoche getestet. Bei Overfitting nimmt der Fehler des neuronalen Netzes, wie in Abbildung 8.3 gezeigt, bei den internen Testdaten wieder zu.

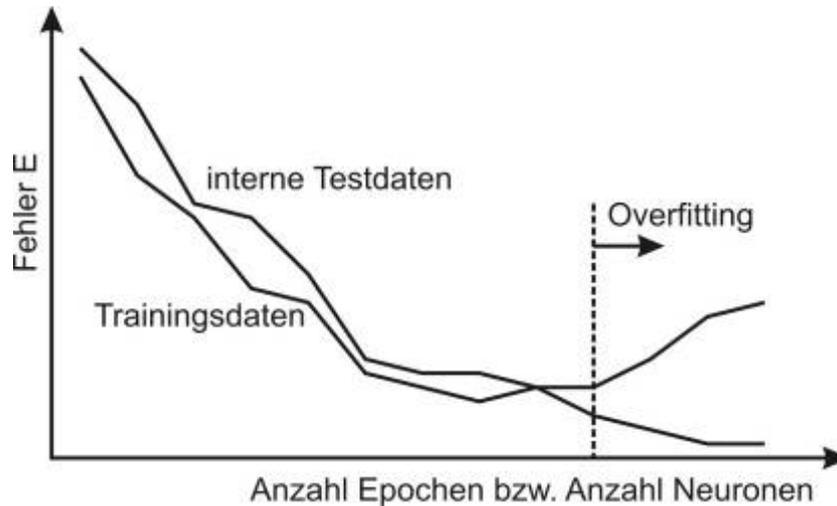


Abbildung 8.3: Overfitting bei Durchlaufen zu vieler Epochen bzw. Hinzufügen zu vieler Neuronen

Für ein optimales Trainingsergebnis ist weiterhin eine bestimmte Anzahl an Datensätzen DS in Abhängigkeit der Anzahl der Eingangsgrößen EG notwendig, damit das System statistisch bestimmt ist. Sie ergibt sich aus

$$p = 1 + 3^n . \quad (8.2)$$

Diese Zahl wird jedoch in der Praxis meistens nicht erreicht. Daher muss die Übertragbarkeit des neuronalen Netzes auf unbekannte Datensätze nachgewiesen werden, indem entweder aus den für das Training vorgesehenen Datensätzen Daten für die Validierung separat abgelegt und nicht für das Training verwendet werden oder zu einem anderen Zeitpunkt gemessene Werte herangezogen werden.

Die Software NeuroModel nutzt den Backpropagation-Algorithmus mit speziellen algorithmischen Verfahren zur Verbesserung der Konvergenz, die auf dem Konjugierte Gradientenverfahren basieren. Bei dem genauen Algorithmus handelt es sich um Firmen Know-how und ist somit nicht bekannt.

Anders als in Kapitel 2.1.2 definiert, werden die Neuronen der Eingangsschicht in NeuroModel als Eingabeknoten und die erste verdeckte Schicht als Eingabeschicht oder Input-Layer bezeichnet. NeuroModel arbeitet mit einer verdeckten Schicht Neuronen. Demnach handelt es sich laut der Definition in Kapitel 2.1.2 um ein dreistufiges Netz. Die Anzahl der Neuronen der verdeckten Schicht wird abhängig von der Stärke der Nichtlinearität automatisch angepasst (Atlan-tec, 2007). Die Einstellung der Modellierungsparameter und -kriterien wie maximale Neuronenzahl, Lernrate, Momentum-Term, Netzinitialisierung oder Trainingsabbruch ist zunächst durch ein Expertensystem festgelegt, zur späteren Netzoptimierung ist jedoch eine freie Wahl der Netzeinstellungen möglich.

Die Güte eines neuronalen Netzes ist abhängig von der Initialisierung der Anfangsgewichte. Um ein optimales Netz zu erhalten, ist in der Software das so genannte SecurityNet implementiert, das ein Training der gleichen Datensätze in fünf Durchläufen mit unterschiedlicher Initialisierung durchführt, so dass eine Beurteilung der Netzgüte anhand statistischer Verfahren möglich ist. Die Abschätzung des Fehlers im Bewertungsmodul durch Mittelwertberechnung E_m der Einzelfehler E_i und nachfolgender Bestimmung der Standardabweichung R_s nach

$$R_s = \sqrt{\sum_{i=1}^5 (E_i - E_m)^2} \quad (8.3)$$

mit

$$E_m = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 E_i \quad (8.4)$$

ermöglicht den Vergleich mit einem gegebenen Grenzwert. Dieses Vorgehen ist in einem Europa Patent über „Verfahren zur Erkennung von fehlerhaften Vorhersagen in einer neuromodell-gestützten oder neuronalen Prozessregelung“ abgedeckt (Froese, 1997). Abbildung 8.4 zeigt ein Schema dieses Verfahrens.

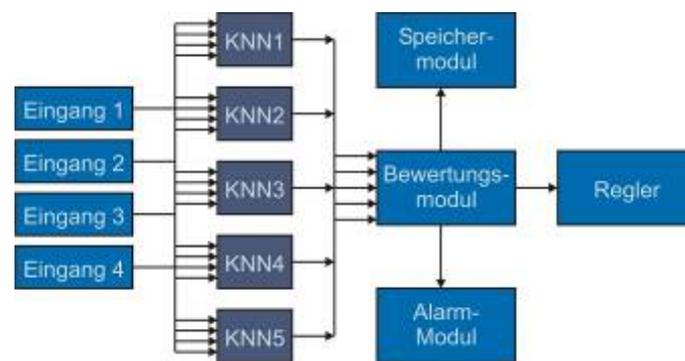


Abbildung 8.4: Prinzip des SecurityNet (Froese, 1997)

Wird dieses System zur Prozessregelung eingesetzt, gibt das Alarmmodul eine Warnmeldung bei Überschreitung dieses Grenzwertes aus. Eine Speicherung der Messgrößen, die zu dem Vorhersagefehler geführt haben, in einem Speichermodul ermöglicht die Einbeziehung dieser Werte für ein neues Training, so dass diese Störgröße zur späteren Regelung abgebildet ist.

Die Ergebnisse des SecurityNet können auch zur Interpretation der Netzgüte herangezogen werden. Innerhalb von Kausalitätsgrafiken oder Validierungsgrafiken ist eine Abschätzung möglich, in welchen Bereichen das Netz besonders gute Ergebnisse liefert. Hieraus können bei erfolgreicher Abbildung der Zielgröße Empfehlungen abgeleitet werden, die es ermöglichen, die Fahrweise des Prozesses zu optimieren, aber auch nicht bekannte Abhängigkeiten der einzelnen Eingangsgrößen untereinander und ihre Auswirkungen auf die Zielgröße zu erklären.

8.1.1.6 Validierung der Modelle

Auf die Notwendigkeit einer Validierung mit unbekanntem Testdaten wurde im Vorfeld bereits mehrfach eingegangen. Aber auch die Validierung mit den Trainingsdaten ist zur genaueren Abschätzung des Trainingserfolgs sinnvoll.

Zur Bestimmung der Abweichung E_{pj} für ein Trainingsmuster p der Ausgangsgröße j eines neuronalen Netzes wird die Differenz der Netzausgabe o_{pj} von der Lerneingabe t_{pj} (Clusterdatensätze der Ausgangsgröße) auf den Wertebereich der Lerneingabe, d.h. auf die Differenz der Obergrenze OG_j von der Untergrenze UG_j der Lerneingabe, bezogen.

$$E_{pj} = \frac{o_{pj} - t_p}{OG_j - UG_j} \quad (8.5)$$

Häufig wird die Abweichung statt auf den Wertebereich auch auf die Lerneingabe bezogen. Dabei kann es jedoch zur Division durch Null kommen bzw. der Fehler geht bei Werten nahe Null gegen unendlich. Um eine Vergleichbarkeit verschiedener Ergebnisse zu garantieren, werden OG_j und UG_j fest eingestellt.

Der Gesamtfehler des neuronalen Netzes wird als mittlere absolute Abweichung $E_{j,abs}$ aller m Trainingsmuster p angegeben.

$$E_{j,abs} = \frac{1}{m} \sum_{p=1}^m |E_{pj}| \quad (8.6)$$

Neben der mittleren absoluten Abweichung ergibt die Korrelation zwischen Netzausgabe und Lerneingabe ein Maß der Übereinstimmung des Verlaufs der Netzausgabe und Lerneingabe. Der Korrelationskoeffizient einer Stichprobe ergibt sich zu

$$RSQ_j = \frac{\frac{1}{m-1} \sum_{p=1}^m (o_{pj} - \bar{o}_j)(t_{pj} - \bar{t}_j)}{\sqrt{\frac{1}{m-1} \sum_{p=1}^m (o_{pj} - \bar{o}_j)^2} \cdot \sqrt{\frac{1}{m-1} \sum_{p=1}^m (t_{pj} - \bar{t}_j)^2}} \quad (8.7)$$

Außerdem werden die Lageparameter mittlere Abweichung $E_{j,m}$ und Standardabweichung $R_{s,j}$ der Fehlerverteilung betrachtet.

$$E_{j,m} = \frac{1}{m} \sum_{p=1}^m E_{pj} \quad (8.8)$$

$$R_{s,j} = \sqrt{\frac{1}{m-1} \sum_{p=1}^m (E_{pj} - E_{j,m})^2} \quad (8.9)$$

Die in Gleichung (8.5) bis (8.9) bestimmten statistischen Parameter zur Beurteilung der Netzgüte beziehen sich auf die Beurteilung des Trainingserfolgs. Bei der Prüfung der Generalisierungsfähigkeit des Netzes mit unbekanntem Testdaten werden die Kenngrößen entsprechend berechnet, nur werden die Netzausgaben nicht mehr mit den Lerneingaben sondern mit den vorherzusagenden Messwerten verglichen.

Die mittlere Abweichung liefert zunächst einen ersten Eindruck der Netzgüte. Wichtiger sind jedoch der RSQ-Wert und die Standardabweichung der Fehler, da diese Werte ein Maß für die Anpassung an den tatsächlichen Kurvenverlauf und die Breite der Fehlerverteilung sind. Betrachtet man die Anzahl aller aufgetretenen Fehler in einem Histogramm (siehe Abbildung 8.5, links), erhält man bei einem erfolgreichen Training idealerweise eine sehr enge gaußförmige Fehlerverteilung. In einem Korrelationsdiagramm, bei Auftragung des Messwerts gegen die Vorhersage, sollten alle Werte möglichst nahe der Winkelhalbierenden liegen (siehe Abbildung 8.5, rechts). Bei der in dieser Abbildung dargestellten Validierung mit Trainingsdaten handelt es sich um ein gutes Modell, das alle notwendigen Eingangsgrößen berücksichtigt.

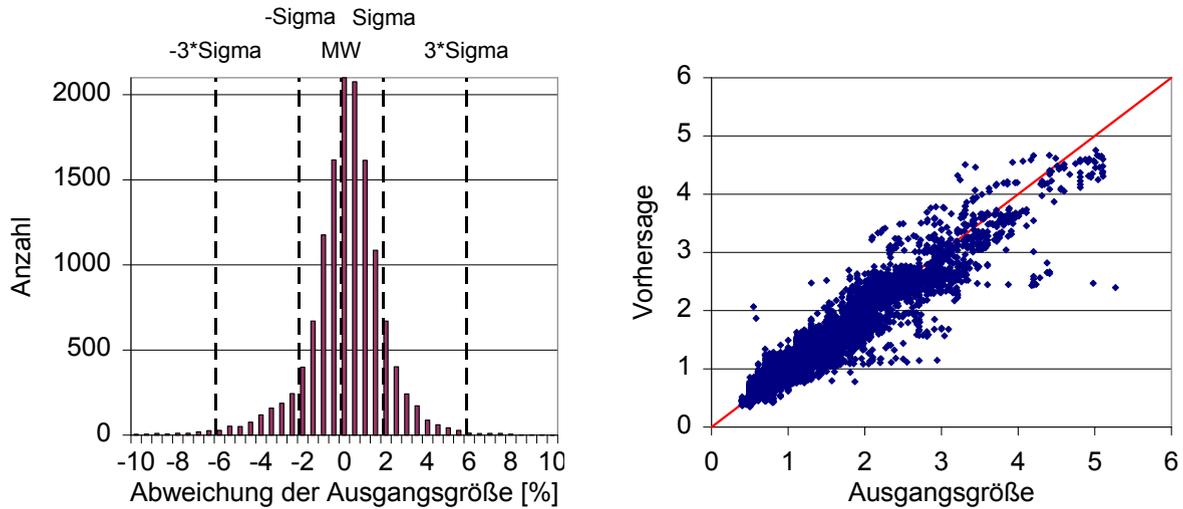


Abbildung 8.5: Histogramm und Korrelationsdiagramm eines guten neuronalen Netzes

Beide Darstellungsweisen bieten zusätzlich die Möglichkeit, das Verhalten des Netzes zu charakterisieren. Eine Schiefe Lage im Histogramm weist auf eine Über- oder Unterschätzung der tatsächlichen Messwerte hin. Im Korrelationsdiagramm lässt sich diese Schiefe Lage häufig näher spezifizieren. Oft lassen sich hier Systematiken erkennen, indem Abweichungen in einem bestimmten Datenbereich auftreten.

Treten bei Validierung des Trainingsnetzes hohe Abweichungen auf, sollten die Konfiguration des Clusteralgorithmus und Wahl der Eingangsgrößen geprüft werden. In diesem Fall ist in einem Histogramm keine Normalverteilung zu erkennen, die Datenpunkte im Korrelationsdiagramm weichen deutlich von der Winkelhalbierenden ab oder es kann eine Verschiebung des Maximums vom Nullpunkt bei sonstiger Normalverteilung des Histogramms auftreten. Auch einzelne Ausreißer in den Trainingsdaten können zu einer Nullpunktverschiebung im Histogramm führen.

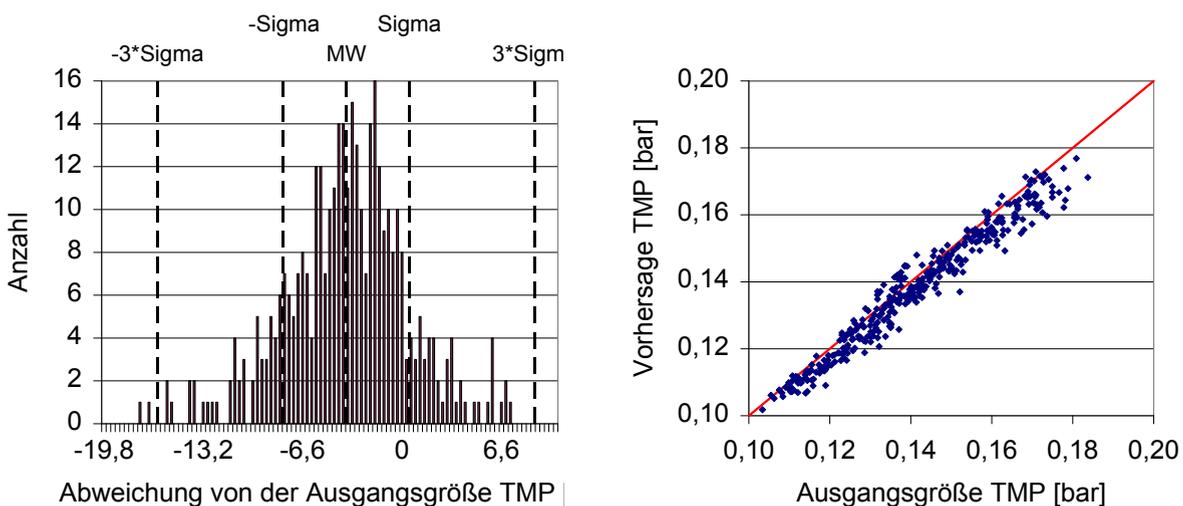


Abbildung 8.6: Nullpunktverschiebung durch eine zu große Messgenauigkeit einer Eingangsgröße

Die Auswertung der Ergebnisse zur Validierung mit Testdaten sollte immer im Vergleich zum Validierungsergebnis mit den Trainingsdaten gesehen werden. Eine Nullpunktverschiebung des

Maximums der Fehlerverteilung bei der Validierung mit Testdaten ist meist darauf zurückzuführen, dass die Validierungsdaten nicht den Typicals der Trainingsdaten entsprechen. Größere Abweichungen können möglicherweise auf Overfitting hindeuten, sind aber meist auf eine Veränderung der Datenmuster gegenüber den Trainingsmustern zurückzuführen. Dieses kann vor allem der Fall sein, wenn Daten aus einem anderen Zeitraum verwendet werden, in dem sich einige Parameter verändert haben, häufig auch so stark, dass das neuronale Netz extrapolieren muss. In diesem Fall müssen die neuen Datenmuster in einem Nachtraining in das neuronale Netz eingebunden werden.

Liegen die Testdaten als Zeitreihe vor, ist auch die Betrachtung der Validierung als Verlaufsdigramm, wie in Abbildung 8.7 gezeigt, sinnvoll, da dort eine zeitliche Zuordnung von Veränderungen möglich ist, gerade wenn im Prozess etwas verändert wurde oder sich Parameter verändert haben. Diese Darstellung ist weiterhin bei der Präsentation von Ergebnisse wichtig, da sie für einen unabhängigen Betrachter einfacher zu fassen ist.

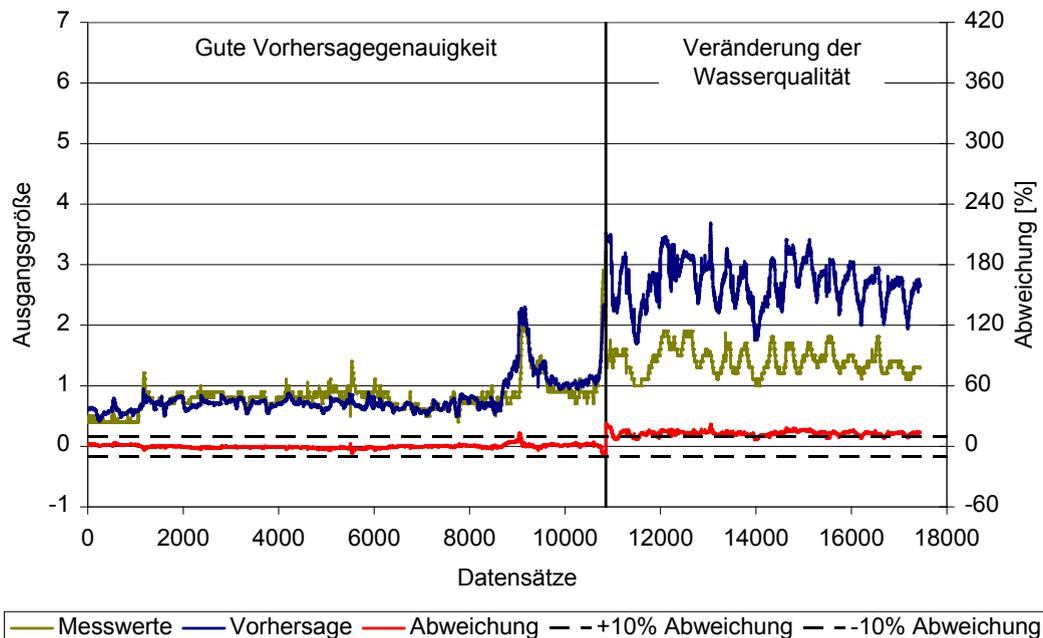


Abbildung 8.7: Verlaufsdigramm für zwei verschiedene Zeitbereiche

Grundsätzlich sollte immer geprüft werden, wie sich die Abweichungen darstellen und ob eine Systematik zu erkennen ist. Zusammen mit den Ganglinien der einzelnen Messstellen kann häufig herausgearbeitet werden, wodurch die Abweichungen zustande kommen und ob es gegebenenfalls auch ausreichend ist, Daten nachzutrainieren oder ob tatsächlich wichtige Eingangsgrößen fehlen. Ein Beispiel für die Veränderung von Eingangsgrößen ist in Abbildung 8.7 gezeigt. Hier hat sich die Rohwasserqualität deutlich verändert, so dass das neuronale Netz extrapolieren musste. Es ist aber auch eine konstante Abweichung im zweiten Zeitbereich zu erkennen, was darauf hindeutet, dass diese Abweichung hauptsächlich durch die Veränderung eines Parameters hervorgerufen wurde. Im Histogramm ist dieses wie in Abbildung 8.8 gezeigt, durch eine bimodale Fehlerverteilung mit einem zweiten etwas breiteren Peak zu erkennen. Im Korrelationsdiagramm hingegen ist die Veränderung nicht so gut zu spezifizieren.

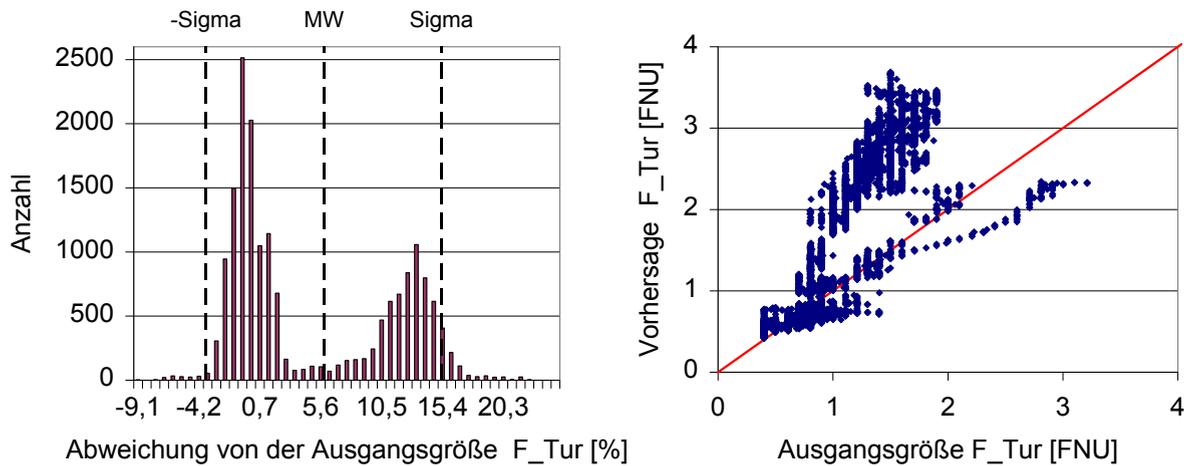


Abbildung 8.8: Darstellung der Validierung aus Abbildung 8.7 als Histogramm und Korrelationsdiagramm

Neben dem Validierungsergebnis sollte auch immer die Zahl an inkonsistenten Daten im Auge behalten werden. Ein weiteres Kriterium zur Beurteilung der Netzgüte stellt der SecurityNet-Wert dar (siehe Kap.8.1.1.5, S. 115). Wird dieser zu hoch, fehlen möglicherweise Informationen oder die Abdeckung des Datenraums ist nicht ausreichend. In diesem Fall sollten nachträglich Daten durch gezielte Versuche erzeugt werden, die diesen Bereich besser beschreiben.

8.1.1.7 Analyse der Modelle

Nach erfolgreichem Training mit einer Normalverteilung der Modellfehler ohne Nullpunktverschiebung und ausreichend guter Generalisierbarkeit auf unbekannte Testdaten können neuronale Netze einer Sensitivitätsanalyse unterzogen werden.

Bei der Sensitivitätsanalyse in NeuroModel wird das neuronale Netz als Black-Box betrachtet. Kenntnisse über den genauen Aufbau des Netzes sind nicht notwendig. Das neuronale Netz wird lediglich als Funktion zur Abbildung der Eingangsgrößen auf die Ausgangsgröße angesehen. In diesem Fall wird die Empfindlichkeit des Netzausgangs gegenüber der Änderung jedes Modelleingangs berechnet. Indem für alle Eingangsparameter an jedem Punkt des neuronalen Netzes die partielle Ableitung bestimmt wird, kann eine statistische Auswertung der Ableitungen Aufschluss über die Stärke und die Richtung der Auswirkung jeder einzelnen Eingangsgröße auf die Ausgangsgröße geben. Durch die Nichtlinearität der Modelle ist es jedoch unmöglich an einer Position im Werteraum die Steigung für alle Dimensionen zu bestimmen, da die Steigung in Richtung einer Variablen auch von der Einstellung der anderen Variablen abhängt. Daher werden die Steigungen in Richtung der Veränderung einer Eingangsgröße an den verschiedenen Trainingsmustern p , also den Typicals der Trainingsdaten, berechnet. D.h. es wird die Empfindlichkeit des Netzausgangs o gegenüber der Änderung jedes Modelleingangs x_n an allen p Stützstellen bestimmt.

$$S_{pn} = \frac{\partial o_p}{\partial x_{pn}} \quad (8.10)$$

Eine statistische Auswertung der Ableitungen kann Aufschluss über die Stärke und die Richtung der Auswirkung jeder einzelnen Eingangsgröße auf die Ausgangsgröße geben.

In der konkreten Anwendung wird die Änderung der Ausgangsvariablen bei Änderung jeder einzelnen Eingangsvariablen um $\pm 0,5$ % ihres Wertebereichs an jedem Typical bestimmt, während die übrigen Variablen des Typicals festgehalten werden. Zur Berechnung der Steigungen wird immer der Betrag von 1% vom Wertebereich gewählt, da eine Normierung auf 1 im Nenner bei unterschiedlichen Einheiten der Messgrößen keine vernünftige Vergleichbarkeit bietet. Die Abhängigkeit vom Wertebereich muss demnach bei der Interpretation der Ergebnisse berücksichtigt werden. Die so bestimmten Einzelsensitivitäten werden statistisch ausgewertet.

Im Folgenden werden die einzelnen Analysemöglichkeiten anhand des in Kapitel 3.3.5 dargestellten Basismodells vorgestellt. Eine Kenntnis des Modells ist jedoch für das Verständnis nicht notwendig. Die Nomenklatur der Eingangsgrößen ist daher nicht wichtig und wird nicht weiter spezifiziert. Für die einzelnen Diagramme werden zum einen die Berechnungsgrundlagen angegeben, zum anderen werden die Auswirkungen an einzelnen Beispielen erklärt. Da die Sensitivitäten für jeden Parameter eine unterschiedliche Einheit haben, wird in den Diagrammen, die keine prozentuale Verteilung darstellen, auf die Angabe der Einheiten verzichtet.

Die mittlere Sensitivität, wie in Abbildung 8.9 gezeigt, zeigt den Mittelwert $S_{n,m}$ aller positiven und negativen Einzelsensitivitäten jeder einzelnen Eingangsgröße für alle m Datensätze und gibt damit an, ob die Größe im Mittel positiv oder negativ auf die Ausgangsgröße wirkt. Sie berechnet sich zu

$$S_{n,m} = \frac{1}{m} \sum_{p=1}^m \frac{\partial o_p}{\partial X_{pn}} \quad (8.11)$$

Im Mittel zeigt die Größe RW_{pH} beispielsweise die niedrigste mittlere Sensitivität.

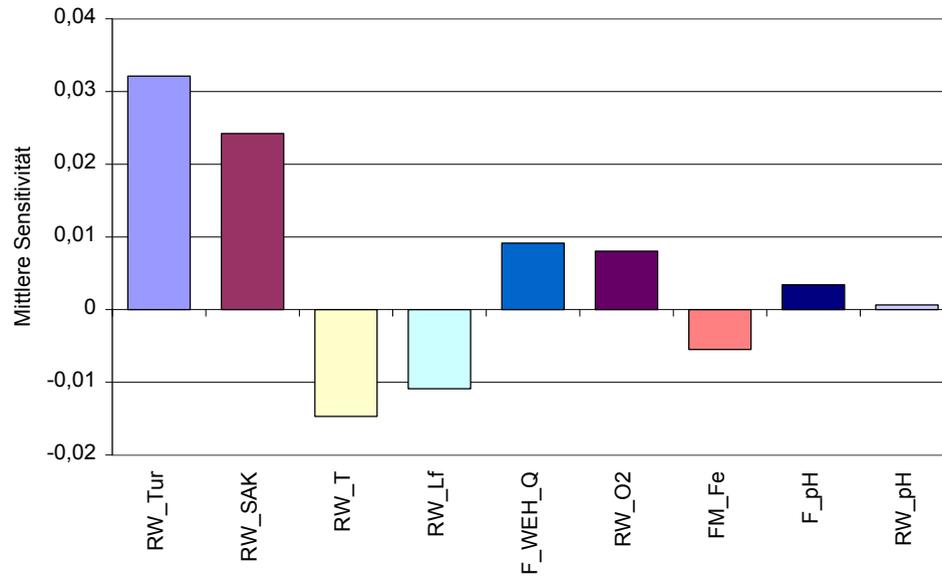


Abbildung 8.9: Mittlere Sensitivität für die Ausgangsgröße F_{Tur}

Durch Mittelwertbildung der betragsmäßigen Absolutwerte aller positiven und negativen Einzelsensitivitäten für jede Eingangsgröße in Bezug auf die betragsmäßige Gesamtsensitivität wird dargestellt, wie stark sich eine Eingangsgröße absolut auf die Ausgangsgröße auswirkt.

$$S_{n,m,abs} = \frac{\frac{1}{m} \sum_{p=1}^m \left| \frac{\partial o_p}{\partial x_{pn}} \right|}{\sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{m} \sum_{p=1}^m \left| \frac{\partial o_p}{\partial x_{pj}} \right| \right)} \quad (8.12)$$

Nach Abbildung 8.10 weist die Größe RW_{pH} absolut einen etwas höheren Einfluss auf, als im Mittel, während RW_{Tur} beispielsweise im Mittel und absolut eine hohe Auswirkung zeigt. Der Unterschied zwischen beiden Eingangsgrößen lässt sich durch den Wertebereich der positiven und negativen Einzelsensitivitäten verdeutlichen.

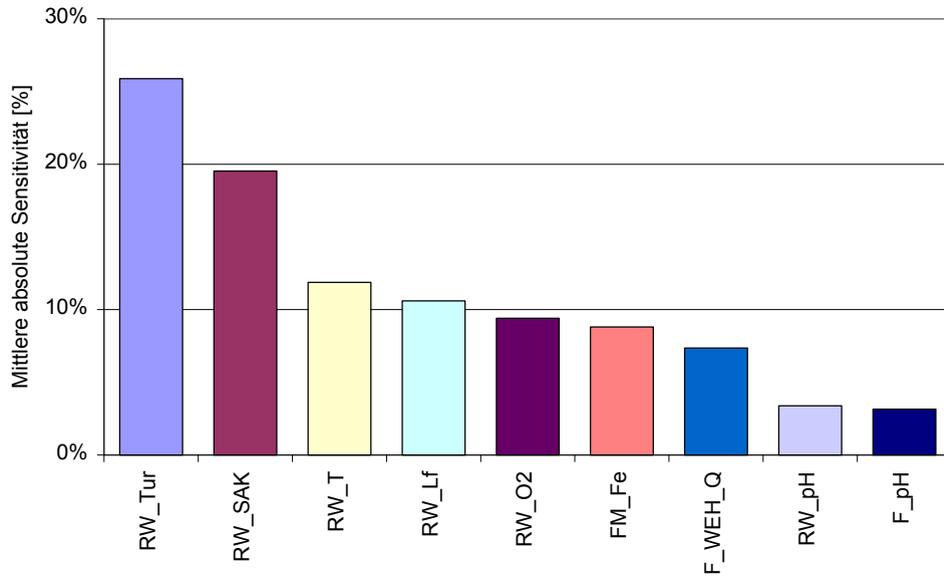


Abbildung 8.10: Mittlere absolute Sensitivität für die Ausgangsgröße F_{Tur}

Abbildung 8.11 zeigt das Boxdiagramm, in dem die mittlere Sensitivität (grün) sowie der Wertebereich zwischen maximaler und minimaler Einzelsensitivität für jede Eingangsgröße dargestellt sind. Der Wertebereich ist in Blau dargestellt mit einem Kreuz für die Extremwerte. Aus dem Diagramm ist zu entnehmen, dass die Größe RW_{pH} sich sowohl positiv als auch negativ auswirkt, so dass sie im Mittel fast keinen Einfluss zeigt. Die Eingangsgröße RW_{Tur} hingegen hat nur eine geringe negative, aber eine stark positive Auswirkung, so dass sich im Mittel die hohe positive Sensitivität ergibt. Weiterhin ist der Wertebereich der Eingangsgröße RW_{pH} höher als der von F_{pH} , so dass sich hierdurch die im Vergleich zur mittleren eine höhere absolute Sensitivität als für F_{pH} ergibt.

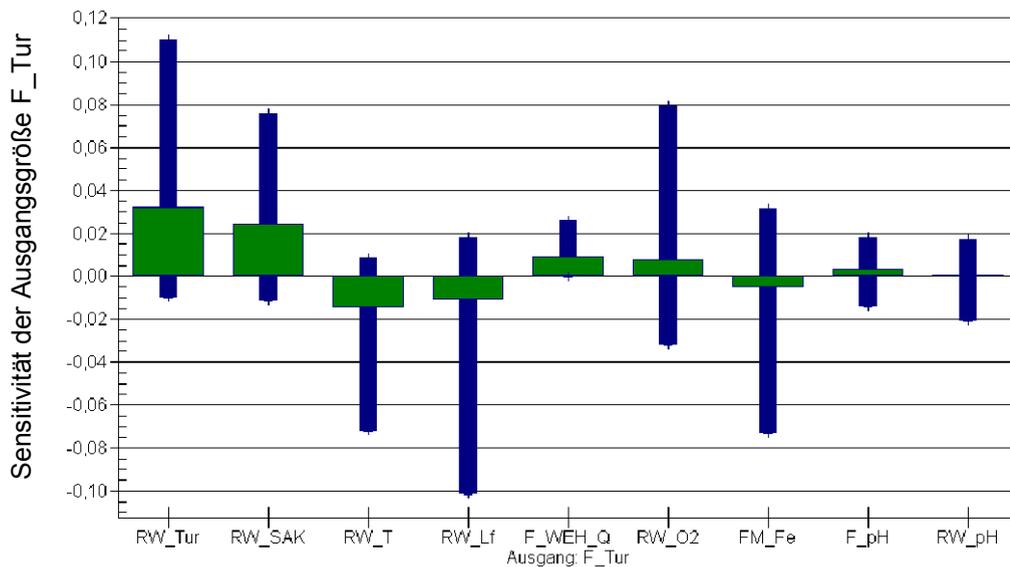


Abbildung 8.11: Boxdiagramm für die Ausgangsgröße F_{Tur}

Bei stark nichtlinearen Zusammenhängen kann eine Eingangsgröße zwar im Mittel eine recht geringe Auswirkung auf die Ausgangsgröße haben, im Extremfall aber die Ausgangsgröße sehr

stark beeinflussen. Daher ist die Betrachtung der Extremalsensitivität wie sie Abbildung 8.12 zeigt wichtig und kann bei der Analyse von Prozessinstabilitäten Hinweise auf mögliche Ursachen geben. Die Extremalsensitivität lässt sich wie folgt bestimmen:

$$S_{n,max} = \frac{\max_p \left| \frac{\partial o_p}{\partial x_{pn}} \right|}{\sum_{j=1}^n \max_p \left| \frac{\partial o_p}{\partial x_{pj}} \right|} \quad (8.13)$$

Die maximale absolute Sensitivität kann auch dem absoluten Maximum des Wertebereichs im Boxdiagramm in Abbildung 8.11 entnommen werden. Die größte absolute Auswirkung zeigt dort die Größe *RW_Tur* und ist demnach in Abbildung 8.12 als erster Wert angegeben.

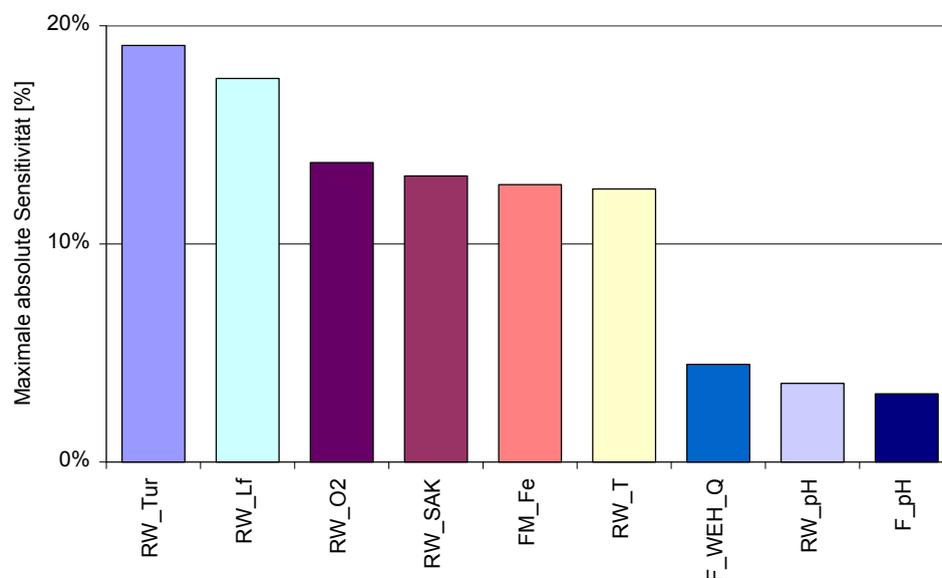


Abbildung 8.12: Maximale absolute Sensitivität für die Ausgangsgröße *F_Tur*

Aus dem Boxdiagramm lässt sich durch den Wertebereich der minimalen und maximalen Einzelsensitivitäten auf den ersten Blick die Stärke der Nichtlinearität eines Modells ablesen. Ist der Wertebereich nahezu nicht zu erkennen, sind die Zusammenhänge der einzelnen Eingangsgrößen und der Ausgangsgröße linear.

Zusammenhänge zwischen einzelnen Ein- und Ausgangsgrößen lassen sich auch grafisch als Kurvenverlauf auswerten, indem dargestellt wird, wie sich die Ausgangsgröße verändert, wenn ein oder zwei Eingangsgrößen an einzelnen Stützstellen des neuronalen Netzes systematisch innerhalb ihres Wertebereiches variiert werden. Diese Methode liefert eine zusätzliche Information zur Güte des neuronalen Netzes, da erwartete Zusammenhänge geprüft werden können. Darüber hinaus bietet sie aber auch die Möglichkeit, das Verhalten des neuronalen Netzes zu analysieren und unbekannte Zusammenhänge zu evaluieren.

Abbildung 8.13 zeigt die Auswirkung der Eingangsgröße *FM_Fe* auf die Ausgangsgröße *F_Tur*. Ausgehend von einer Vorhersage des Modells für einen bestimmten Arbeitspunkt, einem Typical des Trainingsdatensatzes, wird die Größe *FM_Fe* über den gesamten Wertebereich variiert und die Reaktion der Ausgangsgröße *F_Tur* auf diese Veränderung dargestellt, während alle anderen Eingangsgrößen konstant gehalten werden. Dabei muss berücksichtigt werden, wie

weit von einem bekannten Zusammenhang extrapoliert wird. Eine Information hierüber gibt der SecurityNet-Wert. Im gezeigten Beispiel ist der SecurityNet-Wert als rote Hüllkurve dargestellt. Je weiter man sich von dem Arbeitspunkt zu niedrigeren Werten der Eingangsgröße FM_{Fe} entfernt, desto breiter wird das Vertrauensintervall bzw. desto schlechter die Vorhersagegenauigkeit. Im Gegensatz dazu verändert sich das Vertrauensintervall zu hohen Werten kaum. Ein Grund hierfür kann sein, dass in entsprechenden Betriebssituationen selten Werte im unteren Bereich von FM_{Fe} erreicht wurden.

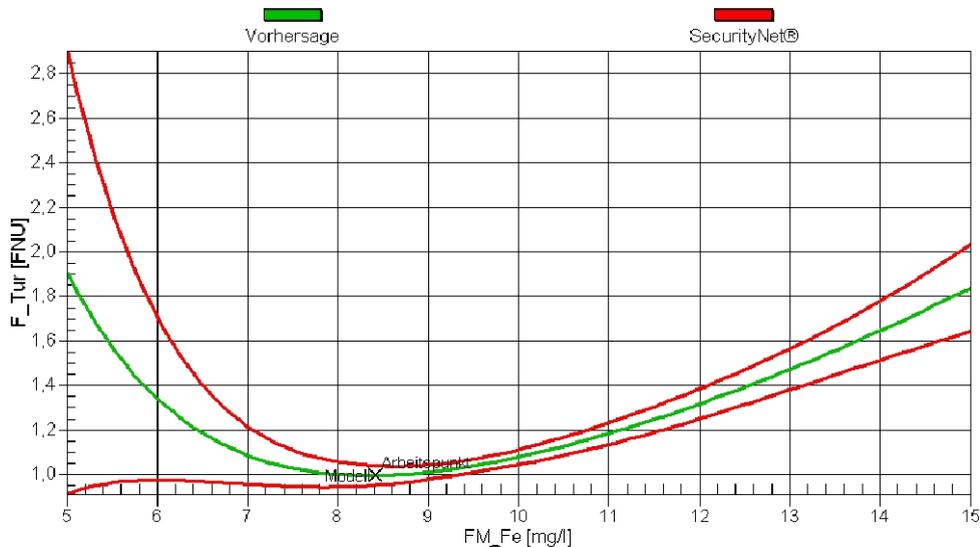


Abbildung 8.13: Einfluss der Eingangsgröße FM_{Fe} auf die Ausgangsgröße F_{Tur}

Gerade bei Laborversuchen, in denen alle Größen einstellbar sind, kann der SecurityNet-Wert für eine gezielte Versuchsplanung genutzt werden. Auch für die Optimierung auf Basis neuronaler Netze ist das Vertrauensintervall der Vorhersage zwingend notwendig, da durch die Beschränkung des SecurityNet-Wertes sichergestellt werden kann, dass keine Optimierungsvorschläge herausgegeben werden, bei denen zu stark von bekannten Zusammenhängen extrapoliert wird.

In der in Abbildung 8.13 gezeigten Kurve muss immer beachtet werden, wie die Kombinationen der anderen Eingangsgrößen an dem jeweiligen Arbeitspunkt aussehen. Dadurch können sich die Kurven und die Lage der Arbeitspunkte deutlich voneinander unterscheiden. Einen Eindruck darüber, wie sich die Größe an verschiedenen Punkten des Datenraums verhält, kann mit Hilfe von Abbildung 8.14 näher untersucht werden, in der die Kurvenverläufe der Eingangsgröße FM_{Fe} an 100 verschiedenen Arbeitspunkten, d.h. für 100 unterschiedliche Kombinationen der Eingangsgrößen, dargestellt sind. Die Kurven werden mit zunehmendem Security-Net-Wert rot. Über die Darstellung kann der Einfluss der Eingangsgröße für verschiedenste Prozesszustände evaluiert werden. In Abbildung 8.14 ist so beispielsweise eine kleine Kurvenschar mit einer positiven Steigung zu erkennen. Da sich dieses Verhalten deutlich von den anderen Kurven unterscheidet, ist es durch die Zuordnung zu einem Prozesszustand oft möglich, das Prozessverhalten an einer solchen Stelle genauer zu beleuchten. Die Betrachtung der Kurvenscharen kann auch zur Validierung der Extremalsensitivitäten herangezogen werden, da eine extremale Sensitivität durch einen einzigen Ausreißer hervorgerufen werden kann.

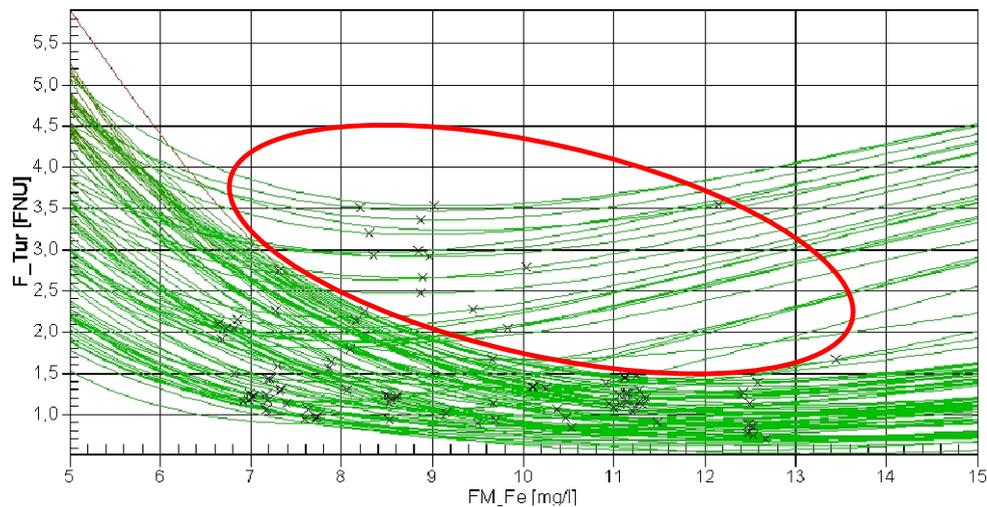


Abbildung 8.14: Einfluss der Eingangsgröße FM_Fe auf die Ausgangsgröße F_Tur an 100 verschiedenen Arbeitspunkten

Nicht immer ist die Kurvenschar geeignet, um mögliche Zusammenhänge herauszuarbeiten. In diesem Fall gibt die Betrachtung des Einflusses zweier Eingangsgrößen auf die Ausgangsgröße für einen bestimmten Arbeitspunkt möglicherweise genaueren Aufschluss. Ein solches Oberflächendiagramm ist in Abbildung 8.15 gezeigt. Mit zunehmendem SecurityNet-Wert färbt sich die Oberfläche wiederum zunehmend rot.

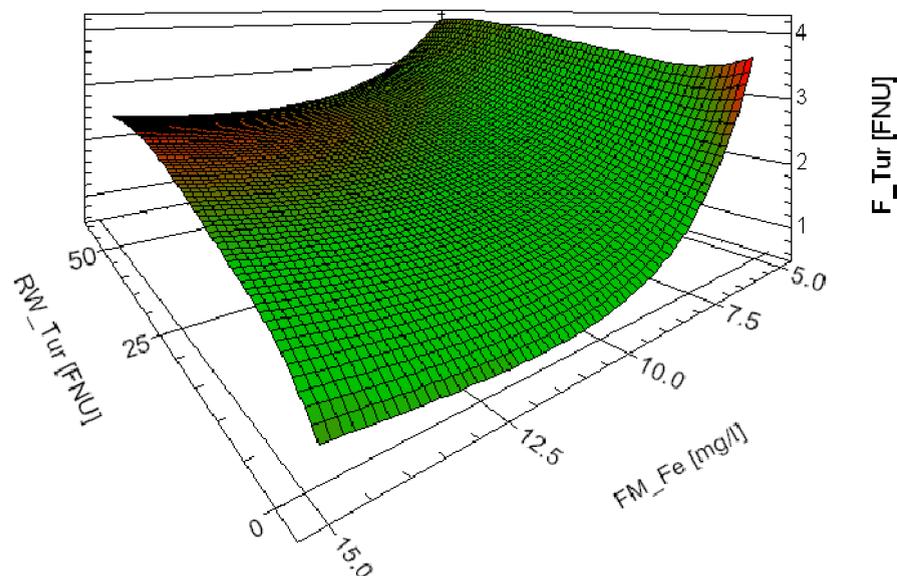


Abbildung 8.15: Einfluss zweier Eingangsgrößen auf die Ausgangsgröße F_Tur

Bei der Interpretation der Ergebnisse muss im Auge behalten werden, dass immer die Auswirkung der Veränderung einer Eingangsgröße auf die Ausgangsgröße ausgewertet wird. Streng genommen ist dieses jedoch nur für linear unabhängige Eingangsgrößen zulässig. Gerade bei der Anwendung neuronaler Netze im Trinkwasserbereich trifft man jedoch immer wieder auf naturgegebene Korrelationen zwischen verschiedenen Parametern. Hierauf muss bei der Interpretation der Ergebnisse Rücksicht genommen werden. Im Zweifelsfall muss versucht werden, korrelierende Parameter miteinander zu verknüpfen oder eine der beiden korrelierenden Eingangsgrößen zu vernachlässigen. Wird ein systematischer Zusammenhang zwischen einzelnen Modellparametern gefunden, ist damit jedoch nicht bewiesen, dass ein tatsächlicher Zusam-

menhang besteht. Es kann nur gezeigt werden, dass ein solcher Zusammenhang höchstwahrscheinlich möglich oder nicht möglich ist. Sollen neuronale Netze einer Sensitivitätsanalyse unterzogen werden, ist es sinnvoll, nur mit einer Ausgangsgröße zu arbeiten, denn ansonsten wird beim Netztraining zwischen unterschiedlichen Einflüssen der Eingangsgrößen auf die verschiedenen Ausgangsgrößen gemittelt.

Eine optimale Sensitivitätsanalyse kann nur bei optimaler Abdeckung des gesamten Wertebereichs erreicht werden. Je geringer die Datenmengen ist oder je ungleicher die Datensätze verteilt sind, desto stärker können verschiedene Sensitivitätsanalysen voneinander abweichen. Eine Reproduzierbarkeit der Analyse eines Modells sollte jedoch für eine Interpretation der Diagramme gegeben sein.

Neben der Evaluierung möglicher Zusammenhänge kann die Sensitivitätsanalyse auch zur Optimierung des neuronalen Netzes, bzw. zur Selektion wichtiger Eingangsgrößen genutzt werden. Gerade wenn nicht klar ist, welche Größen wirklich für das Training des neuronalen Netzes wichtig sind, bietet es sich an, zunächst mit allen vermuteten Eingangsgrößen zu trainieren und im Anschluss eine Sensitivitätsanalyse durchzuführen. Aufgrund des Ergebnisses kann ausgewertet werden, welche Größen einen geringen Einfluss haben. Diese können im nächsten Trainingsdurchlauf vernachlässigt werden. Durch eine Validierung des reduzierten Netzes kann beurteilt werden, ob die Vernachlässigung der Eingangsgröße zulässig ist und zu keiner deutlichen Verschlechterung des Modells führt. Häufig kann durch diese Methode die Netzgenauigkeit sogar weiter erhöht werden.

8.1.2 Radiale-Basisfunktionen Netze

Aufgrund der großen Datenmenge und der dadurch resultierenden verschiedenen Arbeitsbereiche ist eine Clusterung der Daten vorteilhaft. Da die Radiale Basisfunktionen Netze (kurz RBF-Netze) aufgrund ihres Prinzips eine Art Clusterung vornehmen, werden sie als Alternative zu Multilayer-Perzeptron Netzen eingesetzt.

Radiale-Basisfunktionen Netze wurden 1989 von Girosi und Poggio (1989) entwickelt (zitiert in Zell (2003)). Sie arbeiten mit nur einer Schicht verdeckter Neuronen (siehe Abbildung 8.16), die eine spezielle radialsymmetrische Aktivierungsfunktion, meist die Gaußsche Glockenkurve, besitzen, so dass nur eine lokale Aktivierung der Neuronen im Gegensatz zu der globalen Aktivierung der Multilayer-Perzeptron Netze auftritt. Eine hohe Aktivierung tritt nur ein, wenn die Eingabemuster in der Nähe einer Stützstelle liegen. Dem Vorteil einer gesicherten Vorhersage durch die Nähe einer Stützstelle steht der Nachteil gegenüber, dass die Netze hierdurch nur begrenzt interpolationsfähig und nicht wie Multilayer-Perzeptron Netze zumindest in begrenztem Maße extrapolationsfähig sind. Vorteilhaft ist weiterhin die direkte, nicht-iterative Berechnung der Gewichte, da nur eine Schicht an Neuronen vorhanden ist.

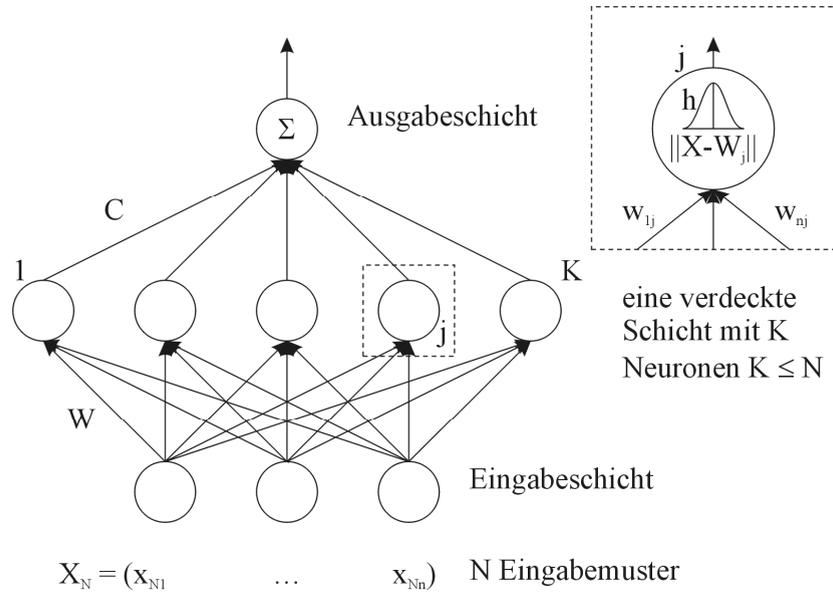


Abbildung 8.16: Radiale-Basisfunktionen Netz nach Zell (2003)

Bei der Interpolation mit Zentrumsfunktionen entsprechen die Eingabemuster den Gewichtsvektoren ($W_i = X_i$), die Anzahl der Neuronen ist somit gleich der Anzahl der Trainingsvektoren. Variabel ist die Breite der radialen Basisfunktionen h_i , bei der Gaußschen Glockenkurve ihre Varianz. Die Überlappungen der einzelnen Basisfunktionen, wie in Abbildung 8.17 gezeigt, sind verantwortlich für die Anpassungsgenauigkeit an das jeweilige Problem.

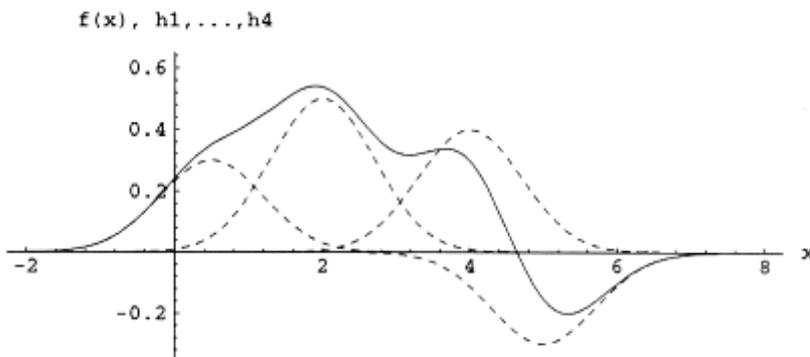


Abbildung 8.17: Abbildung der Zielgröße durch die Überlappung der Basisfunktionen Zell (2003)

Die Ausgangsgewichte c_i können aufgrund der Übereinstimmung der Anzahl der Neuronen mit der Anzahl der Trainingsvektoren exakt anhand des linearen Gleichungssystems mit N Gleichungen und N Unbekannten bestimmt werden.

$$f(X_j) = \sum_{i=1}^N c_i h_i(\|X_j - X_i\|) = y_j \tag{8.14}$$

8.1.3 Self organizing Maps

Bei den Self organizing maps oder auch selbstorganisierenden Karten, die von Kohonen (1982) publiziert wurden, handelt es sich um einschichtige neuronale Netze, die mit einem unüberwachten Lernverfahren trainiert werden. Durch das Training werden hochdimensionale Eingangsvektoren auf geringer dimensionierte, häufig zweidimensionale so genannte Karten abgebildet. Hierdurch kommt es zu einer Clusterung der Daten und einer Zuordnung ähnlicher Datenmuster in beieinander liegenden Bereichen der Karten. Der Vorteil dieses Verfahrens liegt in der Möglichkeit, auch unbekannte Datenmuster verarbeiten zu können, da diese über Ähnlichkeitsbeziehungen unterschiedlichen Regionen auf der Karte zugeordnet werden können. Hierdurch können hochdimensionale Eingabemuster durch die Reduktion auf wenige, meist zwei Ebenen anschaulich visualisiert und auf deren Ähnlichkeit untersucht werden.

Bei Self organizing maps sind alle Neuronen miteinander verknüpft und besitzen einen Gewichtsvektor. Die Anzahl der Komponenten des Gewichtsvektors entspricht der der Eingangsvektoren. Während des Trainings werden die untereinander verknüpften, auf der Karte zunächst ungeordnet verteilten Neuronen entsprechend der Ähnlichkeit der Datenmuster in den Trainingsdaten auf der Karte gruppiert angeordnet. Ein Blockradius legt die Nachbarschaftsbeziehungen der Neuronen untereinander fest. Neuronen, die sich in einem bestimmten Radius um ein bestimmtes Neuron befinden, werden als Nachbarn bezeichnet.

Vor Beginn des Netztrainings werden die Gewichte zufällig mit Werten aus dem Eingaberaum initialisiert. Während des Trainings wird das Neuron gesucht, dessen Gewichtsvektor die größte Ähnlichkeit zum Eingabemuster aufweist. Der Gewichtsvektor des so genannten Gewinnerneurons wird entsprechend der Lernregel angepasst. Ebenso werden die Gewichtsvektoren der Neuronen in der Nachbarschaft des Gewinnerneurons um einen kleineren Betrag angepasst, wobei die Nachbarschaft durch den Blockradius begrenzt wird. Das Prinzip ist schematisch in Abbildung 8.18 dargestellt.

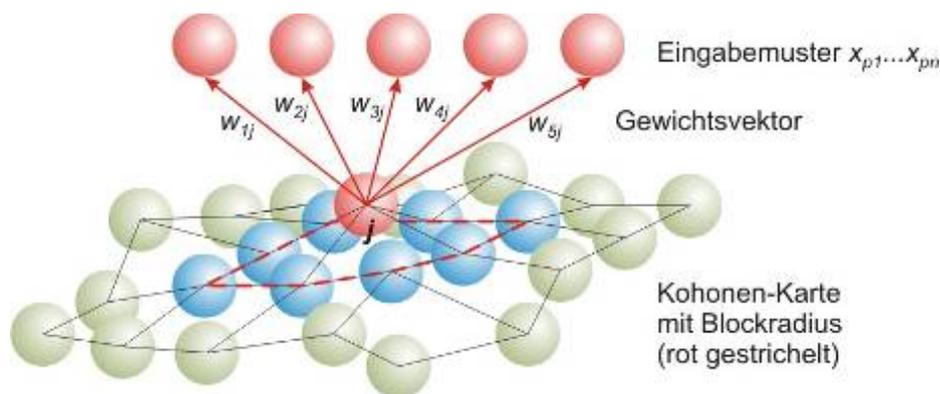


Abbildung 8.18: Struktur der Self organizing maps und Prinzip der Anpassung der Netzgewichte

Aufgrund dieses Prinzips ordnen sich die Neuronen mit ähnlichen Eingabemustern in der gleichen Region der Kohonen-Karte an. Entsprechend ergibt sich auch, dass Trainingsmuster, die in den Daten öfter vorhanden sind, größere Regionen der Karte abdecken und so detaillierter abgebildet werden.

Sind die Gewichtsvektoren zunächst zufällig initialisiert, besitzt die Kohonen-Karte zunächst keine Struktur, sie wirkt wie zusammengefallen. In den ersten Schritten werden die Neuronen daher durch die Wahl einer großen Lernrate zunächst grob in der Gitterstruktur ausgerichtet. Dieser Vorgang wird auch als Entfaltung der Kohonen-Karte bezeichnet. Durch kleiner werdende Lernrate, also geringerer Veränderungen der Gewichtsvektoren, und Verringerung des Blockradius findet zum Ende des Trainings eine Feinausrichtung der Neuronen auf der Kohonen-Karte statt. Eine vollständig entfaltete Karte ist in Abbildung 8.19 gezeigt.

Die Anpassung des Gewichtsvektors findet nach folgendem Algorithmus statt:

$$W_j(t+1) = W_j(t) + \eta(t)h_{cj}(t)[X(t) - W_j(t)] \quad (8.15)$$

Dabei ist die Lernrate $\eta(t)$ eine Funktion der Zeit und nimmt zur Grobjustierung zunächst sehr schnell und zur Feinjustierung später langsamer ab. In der Regel wird eine monoton fallende Funktion mit $0 < \eta(t) < 1$ eingesetzt. Der Blockradius wird durch die Distanzfunktion $h_{cj}(t)$, die auch im Laufe des Trainings abnimmt, definiert. Häufig wird hier statt der Zeit auch der Distanzparameter d zur Beschreibung der Größe der Umgebung angegeben, mit $d \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$.

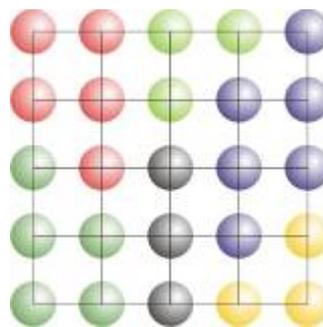


Abbildung 8.19: Die vollständig entfaltete Kohonen-Karte repräsentiert unterschiedliche Datenmuster in verschiedenen Regionen

Weitere Informationen zu Self organizing Maps können Kohonen (2001) entnommen werden.

8.1.4 Optimierung von Prozessen auf Basis neuronaler Netze mit Hilfe Genetischer Algorithmen

Da neuronale Netze ein Abbild des realen Prozesses innerhalb der trainierten Wertebereiche darstellen, können sie für eine Optimierung genutzt werden. Durch Variation der manipulierbaren Variablen kann die Auswirkung der Veränderung dieser Größen abgeschätzt und so eine optimale Einstellung gefunden werden. Gerade bei stark nichtlinearen Zusammenhängen oder einer großen Anzahl an manipulierbaren Variablen bieten sich dazu so genannte Genetische Algorithmen an. Sie können für eine gegebene Funktion, die in diesem Fall das neuronale Netz als Abbildungsfunktion des zu optimierenden Prozesses darstellt, durch einen speziellen Suchalgorithmus die optimale Kombination an Stellgrößen für ein vorgegebenes Optimierungsziel ausgeben.

Genetische Algorithmen basieren auf der Evolutionstheorie nach Darwin („Survival of the fittest“). Hier werden Datensätze mit verschiedenen Prozesseinstellungen binär codiert in so genannte Chromosomen überführt, die dann genetischen Prozessen, nämlich Selektion, Crosso-

ver und Mutation, unterzogen werden (siehe Abbildung 8.20). Durch dieses Verfahren können verschiedene Einstellungen der Stellgrößen zur gleichen Zeit getestet werden, wobei immer Chromosomen mit der höchsten „Fitness“ überleben. Die Fitness wird durch eine Optimierungsfunktion beschrieben, beispielsweise der Minimierung der Konzentration eines Wasserqualitätsparameters oder der Maximierung einer Kostenfunktion. Weitere Informationen zu Genetischen Algorithmen können (Schöneburg et al., 1994) entnommen werden.

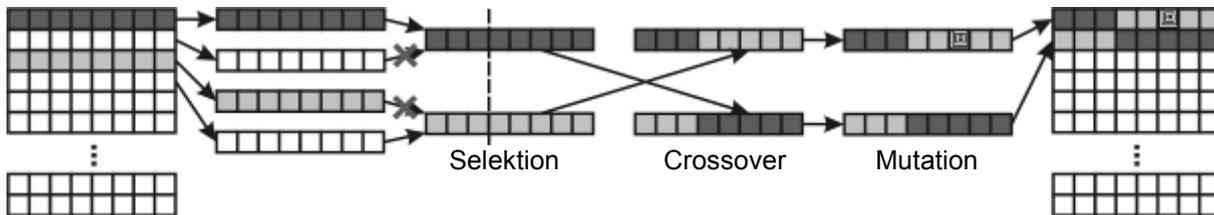


Abbildung 8.20: Prinzip Genetischer Algorithmen

Wichtig bei dem Einsatz Genetischer Algorithmen sowie anderer Optimierungsverfahren ist, dass feste Grenzwerte vorgegeben werden, in denen sich der Optimierer bewegen darf. Hierbei spielt die Vorhersagegenauigkeit des hinterlegten neuronalen Netzes eine große Rolle, denn je niedriger die Vorhersagegenauigkeit für eine durch den Optimierer vorgeschlagene optimale Kombination der Stellgrößen ist, desto größer wird die Gefahr, dass Einstellungen übernommen werden, die zu einem instabilen Prozessverhalten führen würden. Um die Sicherheit der Vorhersage zu garantieren, kann im Optimierer der SecurityNet-Wert für die Vorhersage des neuronalen Netzes begrenzt werden (s. Kapitel 3.5 und 3.7). Des Weiteren können zusätzliche Schranken vorgegeben werden, die beispielsweise durch die Begrenzung der Schrittweite der Veränderung der einzelnen Stellgrößen einen zu starken Eingriff in den Prozess oder eine Grenzwertüberschreitung verhindern.

8.1.5 Bestimmung des Optimierungspotentials

In der praktischen Umsetzung von Optimierungssystemen tritt die Frage nach dem Optimierungspotential bzw. den möglichen Einsparungen auf.

Bei der exakten Bestimmung des Einsparpotentials bzw. der tatsächlich erreichten Einsparungen einer bestimmten Anlage oder eines bestimmten Prozesses kommen gleich mehrere prinzipielle Schwierigkeiten zusammen:

1. Bei der Betrachtung eines bestimmten Zeitraums, werden mindestens zwei, wenn nicht sogar drei verschiedene Szenarien miteinander verglichen, von welchen nur eines in der Realität durchgeführt wurde bzw. durchgeführt werden kann. Es sind folglich nur die Ergebnisse eines Szenarios mit Sicherheit bekannt. Die Ergebnisse der anderen Szenarien beruhen auf Simulationen und Annahmen und sind deshalb mit Unsicherheiten behaftet.
2. Bei der Betrachtung zweier Vergleichszeiträume besteht das Problem, dass die Ergebnisse eines Szenarios nicht allein von den Betriebseinstellungen (die manuell oder durch den Einsatz eines Online-Optimierers vorgenommen werden) abhängig sind, sondern auch von den Störgrößen (z.B. Jahreszeit, Rohwasserquelle, Rohwassereigenschaften).

3. Die Entwicklung von Optimierungsstrategien erfolgt anhand bestimmter Annahmen, die in der Regel auch Beschränkungen bezüglich der Sicherheit von Optimierungsvorschlägen berücksichtigen. Im Zuge der Umsetzung können hierzu jedoch weitere aus betriebstechnischer Sicht sinnvolle Grenzen hinzukommen, die bei der Entwicklung nicht berücksichtigt werden konnten, da sie zunächst nicht bekannt waren.
4. Bei der technischen Umsetzung werden die vom Optimierungssystemen ausgegebenen Optimierungsvorschläge oft nicht kontinuierlich vom System an das Prozessleitsystem übergeben sondern werden diskontinuierlich manuell umgesetzt, um eine Plausibilitätsprüfung durch das Personal zu ermöglichen. Aus diesem Grund kann das vollständige Optimierungspotential nicht ausgeschöpft werden.

Diese Effekte machen einen Vergleich von Szenarien und die exakte Bestimmung des Optimierungspotentials bzw. der tatsächlich erreichten Einsparungen in der praktischen Umsetzung der Optimierungsvorschläge schwierig. Es ist daher wichtig zu definieren

- welche Größen verglichen werden
- welche Bedingungen bezüglich der Störgrößen während des Vergleichszeitraums vorlagen
- unter welchen Annahmen die Vergleichsszenarien erstellt wurden
- welche Grenzen dem Optimierungssystem gesetzt wurden.

Unter Berücksichtigung dieser Bedingungen ist es durchaus möglich, auch für komplexe Prozesse mit ständig schwankenden Betriebsbedingungen aussagekräftige Vergleiche durchzuführen. Eine wichtige Voraussetzung dafür ist das Vorliegen von validierten Modellen mit bekannten Prognosegenauigkeiten.

Die Kostenersparnis des optimierten Betriebs gegenüber dem nicht optimierten Betrieb, wird durch den Vergleich dieser beiden Szenarien bestimmt, so dass sich die Ersparnis entsprechend ergibt aus

$$\text{Kostenersparnis} = \frac{\text{Kosten ohne Optimierung} - \text{Kosten mit Optimierung}}{\text{Kosten ohne Optimierung}} \cdot 100\% \quad (8.16)$$

Hierbei ist zwischen dem theoretischen Einsparpotential und der tatsächlich erreichten Ersparnis zu unterscheiden. Bei der Bestimmung des Einspar- oder Optimierungspotentials ist der ursprüngliche Anlagenbetrieb zur Bestimmung der Kosten ohne Optimierung bekannt, der optimierte Zustand zur Bestimmung der Kosten mit Optimierung muss simuliert werden. Die tatsächlich erreichte Kostenersparnis gründet sich auf die Messwerte, die durch die Umsetzung der Optimierungsvorschläge erfasst werden, während das Szenario des ursprünglichen Betriebs ohne Optimierung simuliert werden muss.

Eine Unsicherheit bei dem Vergleich der beiden Szenarien mit und ohne Optimierung resultiert aus der Vorhersagegenauigkeit des Modells, das für die Simulation des unbekanntes Szenarios herangezogen wird. Um eine Verfälschung des Ergebnisses mit der Modellabweichung zu vermeiden, wird auch aus den tatsächlich gemessenen Werten durch das gleiche Modell, das zur Simulation des unbekanntes Szenarios verwendet wurde, die Ausgangsgröße des Modells prognostiziert. Unter der Annahme, dass die Modellabweichung unabhängig von der Höhe des

Wertes der manipulierbaren Variablen ist, hebt sich die Modellabweichung bei dem Vergleich der Kosten beider Szenarien nach Gleichung (8.16) heraus. In Abbildung 8.21 ist ein Beispiel für den Zeitraum der Umsetzung der Optimierungsvorschläge im November 2008 nach Kapitel 4.6 gezeigt. Hier ist das Szenario nach Umsetzung der Optimierungsvorschläge bekannt, während für den ursprünglichen Betrieb ohne Optimierung bezüglich der Einstellung der manipulierbaren Variable Flockungsmitteldosierung Annahmen getroffen wurden. Ohne Prognose der Ausgangsgröße des Modells Trübung nach Sedimentation F_{Tur} weist die nach Gleichung (8.16) berechnete Einsparung deutliche Schwankungen und vor allem auch negative Einsparungen auf. Da die im Optimierer verwendete Optimierungsfunktion nach Kapitel 4.3 jedoch auf einer Kostenfunktion basiert und im gezeigten Zeitraum keine besonderen Schranken eingehalten werden mussten, dürfte die berechnete Einsparung minimal den Wert Null annehmen und zwar dann, wenn die Betriebsbedingungen ohne die Umsetzung von Optimierungsvorschlägen bereits optimal gewesen wären. Wird die Ausgangsgröße F_{Tur} auch aus den Messwerten prognostiziert, heben sich die Modellfehler weitestgehend heraus, so dass für diesen Zeitraum eine mittlere Einsparung von rund 2 % ermittelt werden konnte.

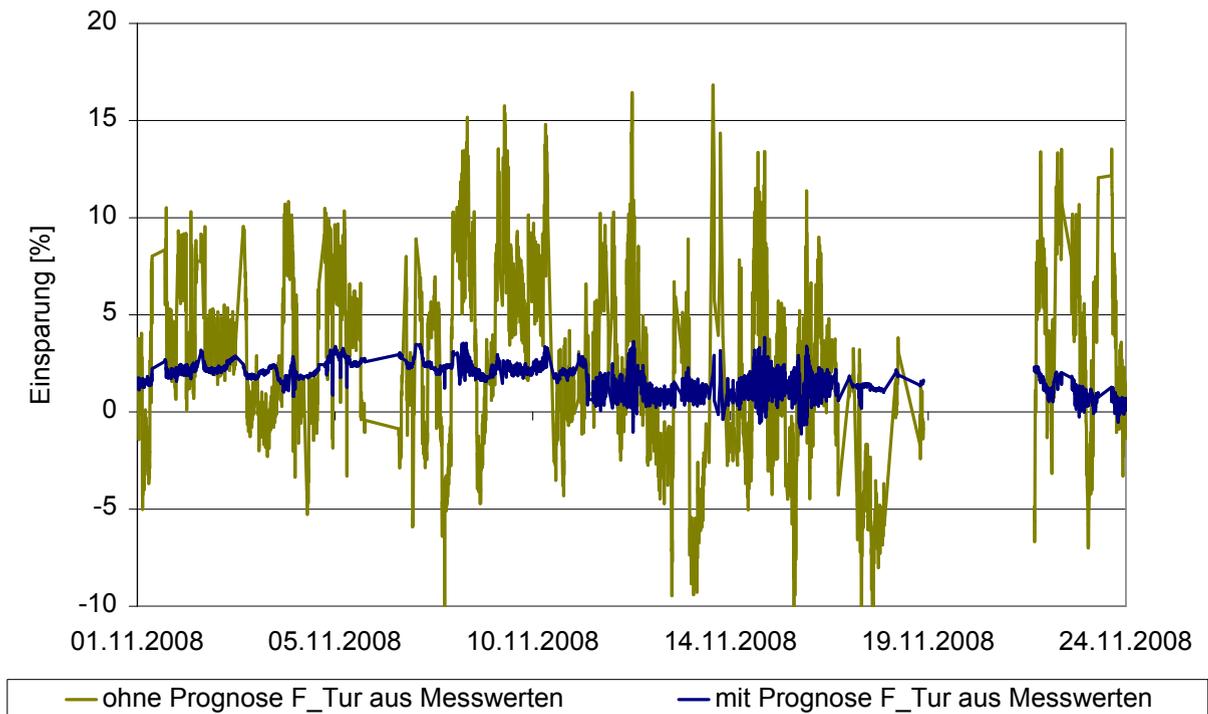


Abbildung 8.21: Vergleich der Berechnung der Kosteneinsparung mit und ohne Prognose der Ausgangsgröße F_{Tur} für das tatsächlich gemessene Szenario

Unter den genannten Annahmen lässt sich das theoretische Optimierungspotential einer Anlage mit relativ hoher Genauigkeit bestimmen, da das Szenario des nicht optimierten Betriebs mit Messwerten belegt ist, so dass auch alle Handeingriffe des Betriebspersonals bekannt sind. Demgegenüber ist die Bestimmung der tatsächlich erreichten Einsparung nach der Umsetzung von Optimierungsvorschlägen gerade in der Trinkwasseraufbereitung mit Unsicherheiten behaftet, da die Betriebsparameter in der Regel nach Erfahrungswerten situationsbedingt eingestellt werden. Diese Erfahrungswerte sind zudem häufig personenabhängig und lassen sich so wenn überhaupt nur mit hohem Aufwand erfassen. Die einzige Grundlage, die für die Bestimmung der

Kostensparnis üblicherweise herangezogen werden kann, sind allgemeine Betriebsvorschriften oder Richtwerte. Ein Beispiel hierfür ist die im Hauptteil dieser Arbeit beschriebene leitfähigkeitskorrelierte Flockungsmitteldosierung (Kapitel 4.6), bei der andere wichtige Störgrößen wie beispielsweise die Rohwassertrübung unberücksichtigt bleiben. Daher entspricht eine Kosteneinsparungsrechnung nach Umsetzung der Optimierungsvorschläge in einem solchen Fall eher einem Richtwert.

8.2 Zum modellierten Wasseraufbereitungsprozess

8.2.1 Beschreibung des Wasserwerks Obermaubach

Das Wasserwerk Obermaubach der Stadtwerke Düren (SWD) bereitet ca. 5 Mio. m³/a Oberflächenwasser auf. Wie Abbildung 8.22 zeigt, besteht es aus den Stufen

- Mikrosiebung
- Ozonung
- Flockung
- Sedimentation
- Druckfiltration
- Aktivkohleadsorption.

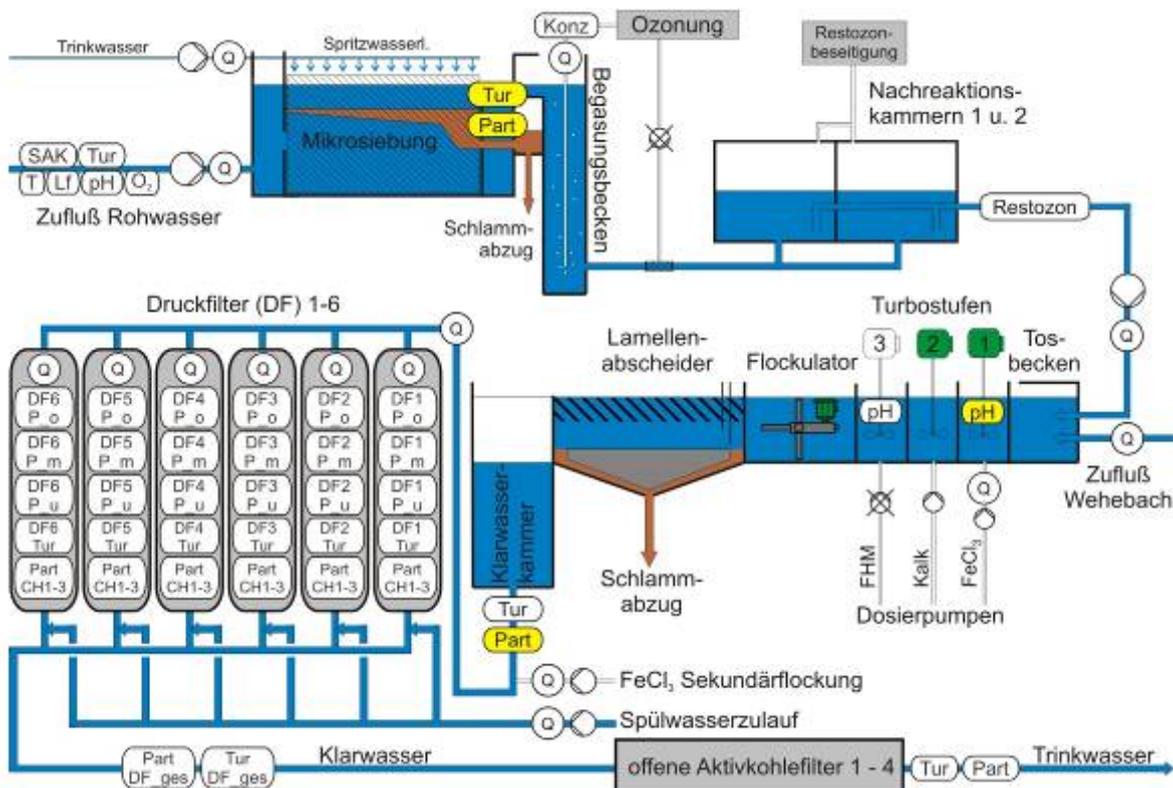


Abbildung 8.22: Schema des Wasserwerks Obermaubach (gelb eingezeichnete Messstellen wurden während des Projekts nachgerüstet)

Das Rohwasser wird der Rur im Unterlauf des Staubeckens Obermaubach entnommen. Dieses Staubecken ist Teil eines großen Talsperrensystems in der Eifel und wird aus zwei anderen Stauesen, der Urftalsperre und der Rurtalsperre gespeist (s. Abbildung 8.23). Die Einspeisung wird vom WVER geregelt und unterliegt daher ständigen Schwankungen. Die Wasserqualität

beider Talsperren ist sehr unterschiedlich und kann anhand der Leitfähigkeit nach Abbildung 8.24 charakterisiert werden.

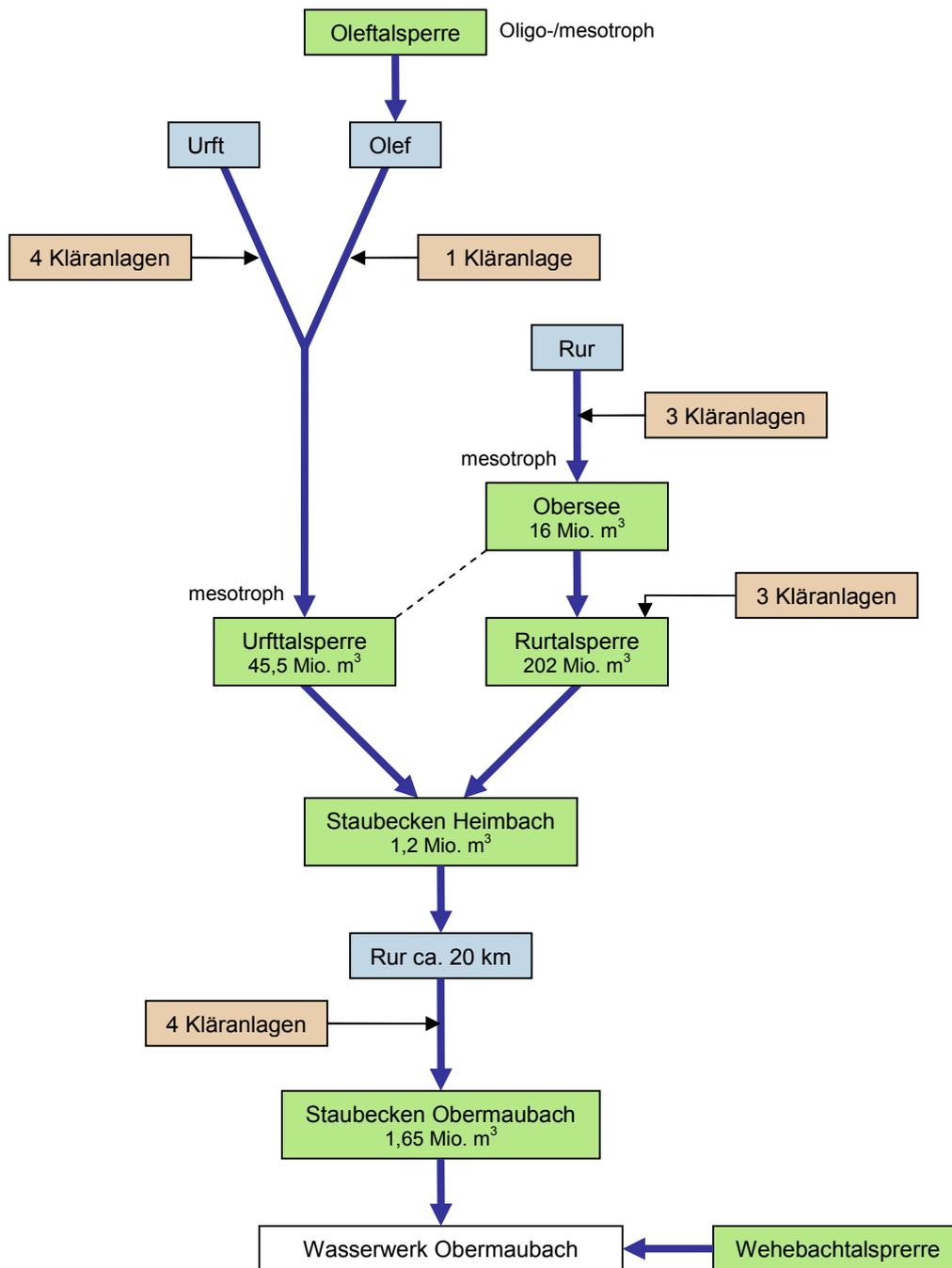


Abbildung 8.23: Speisung des Wasserwerks Obermaubach aus der Urft- und der Rurtalsperre

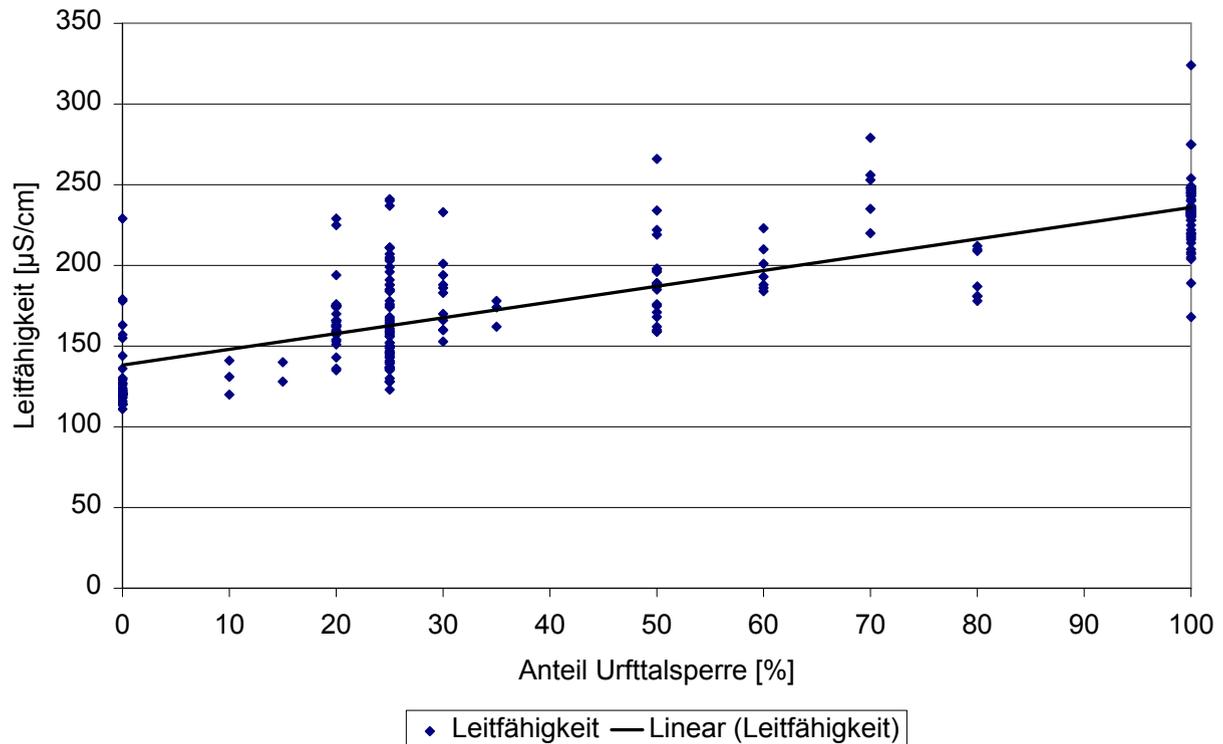


Abbildung 8.24: Bestimmung der Wasserzusammensetzung anhand der Leitfähigkeit

Das Wasserwerk kann alternativ auch über eine getrennte Zuleitung als Notversorgung unabhängig von der Rur zu 100 % über die Wehebachtalsperre betrieben werden. In diesem Fall wird das Wasser direkt ohne vorherige Mikrosiebung und Ozonung geflockt. Im Normalbetrieb wird diskontinuierlich ein Strom von ca. 40 bis 55 m³/h (Anteil am Rohwasser <10 %) aus der Wehebachtalsperre entnommen und vor der Flockung eingespeist, um die Leitungen ständig zu spülen.

Im Rohwasser werden Temperatur (RW_T), Trübung (RW_Tur), SAK₂₅₄ (RW_SAK), Sauerstoffgehalt (RW_O2), pH-Wert (RW_pH), Leitfähigkeit (RW_Lf) und die entnommene Rohwassermenge (RW_Q) online erfasst. Die für die Einstellung der Flockungsmittelkonzentration interessante Rohwassertrübung liegt im Schnitt bei etwa 2,5 FNU, kann aber z.B. durch Niederschläge innerhalb von 2-5 h auf (max.) 80-90 FNU steigen. Als Extremsituationen werden Zeiträume definiert, in denen das Rohwasser der Rur eine Trübung von über 5 FNU aufweist. Aufgrund der Speisung des Stausbeckens Obermaubach aus zwei verschiedenen Talsperren, wird die Flockungsmittelkonzentration neben der Trübung anhand der Leitfähigkeit eingestellt.

Die insgesamt drei Mikrosiebe wurden bis Januar 2007 mit einer Maschenweite von 3 μm betrieben. Sie wurden mit dieser Maschenweite ursprünglich zum Schutz gegen Cryptosporidien angeschafft, waren aber nicht mehr in dem Maße notwendig, so dass seit Januar 2007 Siebe mit einer Maschenweite von 10 μm eingesetzt werden, um den Spülwasserbedarf zu reduzieren.

Die Ozonanlage wurde Anfang 2006 erneuert. Ozon mit einer Ozonkonzentration von 150 g/m³ wird etwa mengenproportional zum DOC (1:1) dosiert, bzw. auf einen vorgegebenen Restozon Gehalt eingestellt. Als Messwerte liegen die Ozonkonzentration, Ozondosierung und die Restozonkonzentration vor. Die Restozonkonzentration sollte in jedem Fall weniger als 0,1 mg/l

betragen, aufgrund von Geruchsbeeinträchtigungen wird jedoch eine Restozonkonzentration von 0,03 mg/l angestrebt.

Die Flockungsanlage besteht aus drei Turbostufen (Einmischung, Kalkmilchdosierung, Flockungshilfsmitteldosierung), wobei die drei Rührkammern nicht über Tauchwände getrennt sind, so dass die Strömungsführung von Kammer zu Kammer nicht eindeutig ist. Im Anschluss folgen eine Aggregationsstufe mit Paddelrührer (Aufenthaltszeit ca. 10 min) und die Sedimentation. Geflockt wird mit 40%-iger FeCl_3 -Lösung des Produkts Kemira-PIX-111 der Firma Kemira, Hanau (Dichte: 1430 kg/m^3 , Eisengehalt: 197 g Eisen/l Produkt). Die Dosierung wird entsprechend dem Durchsatz eingestellt, der sich aus der Menge ozonten Wassers und dem periodischen Zufluss aus der Wehebachtalsperre zusammensetzt. Die Einmischung des Flockungsmittels erfolgt über einen Schlauch in der ersten Kammer direkt in den Zufluss des ozonten Wassers. Zusätzlich wird in etwas weiterem Abstand zum Zufluss mit konstanter Drehzahl gerührt.

Der pH-Wert wird erst im Anschluss in der zweiten Turbostufe mit Kalkmilch auf einen konstanten Wert eingestellt, der zwischen pH 7,2 und pH 8,4 liegen sollte. Die Kalkmilch wird im Wasserwerk aus dem Weißkalkhydrat CL90 (Klasse 1/Typ A) aus dem Werk Messinghausen der Firma Rheinkalk hergestellt. Die Endeinstellung des Trinkwasser-pH-Werts wird vor der Verteilung ins Netz mit NaOH vorgenommen. Die Dosierung der Kalkmilch erfolgt mit einer Schlauchpumpe, wobei die Dosiermenge jedoch nicht direkt erfasst wird.

Ein Flockungshilfsmittel wird derzeit nicht eingesetzt, da dies in der Vergangenheit zu Verbackungen in den Schnellfiltern geführt hatte. Die dritte Turbostufe wird daher nicht genutzt. Aufgrund der Gefahr einer Anreicherung von Mikroorganismen wird ohne Schlammrückführung aus der Sedimentation (Kontaktschlamm) gefahren.

Nach der Sedimentation über einen Lamellenabscheider kann die Trübung zeitweise bis zu 5 FNU betragen, liegt aber in der Regel unter 1,2 FNU. Der Schlammabzug aus der Sedimentationsstufe erfolgt alle 1,5 h für einen konstanten Zeitraum und mit konstanter Pumpleistung.

Dem Wasser nach Sedimentation wird vor den folgenden Druckfiltern noch einmal eine geringe Menge Flockungsmittel zugesetzt. Im oberen Teil der sechs Doppelstockfilter befindet sich ein Zweischichtfilter mit Hydro-Anthrasit N, Körnung 2 der Firma Akdolit (1,4 mm - 2,5 mm) und Filtersand (0,7 mm - 1,25 mm). Der untere Einschichtfilter besteht aus einer Sandschüttung mit einer Körnung von 0,3 mm - 0,5 mm. Trübung und Partikelzahlen (Channel1: $>1\mu\text{m}$, Channel2: $>2\mu\text{m}$, Channel3: $>20\mu\text{m}$) werden im Ablauf jedes einzelnen Druckfilters und im Gesamtablauf der gesamten Druckfilterstufe gemessen. Im Gesamtablauf der Druckfilterstufe werden nur Partikel/ml $>1\mu\text{m}$ erfasst. Die Trübung im Ablauf der gesamten Druckfilterstufe liegt durchschnittlich bei etwa 0,05 FNU und es werden im Mittel weniger als 15 Partikel/ml im Bereich $>1 \mu\text{m}$ gemessen. Von den parallel betriebenen Druckfiltern ist jeweils ein Filter im Standby bis der nächste Filter rückgespült werden muss. In dieser Zeit wird er jedoch mit einer geringen Menge von etwa $20 \text{ m}^3/\text{h}$ durchflossen, damit Anfahrswankungen ausgeglichen werden. Das Wasser wird gleichmäßig auf alle fünf Filter in Betrieb verteilt, d.h. auch die Durchsatzschwankungen der gesamten Anlage werden auf die Filter verteilt. Das Anfahren der Filter erfolgt langsam, Erstfiltrat wird zeitgesteuert abgeschlagen. Rückgespült wird spätestens nach 72 Stunden, im Normalbetrieb nach 20-32 h. Als Kriterium dient die Partikelmessung (300 Partikel/ml $> 1\mu\text{m}$) oder Trübung $> 0,1$ FNU. Der Druckverlust ist üblicherweise sehr gering und spielt als Kriterium

für die Rückspülung daher keine Rolle. Das Rückspülwasser wird der Reinwasserkammer vor Abgabe des Wassers an den Wasserspeicher entnommen. Dazu wird der Zufluss zum Wasserspeicher gedrosselt, die Anlage aber mit der gleichen Aufbereitungsleistung gefahren. Das Spülwasser ist demnach Trinkwasser, bei dem jedoch der pH-Wert zur Einstellung des Kalk-Kohlensäuregleichgewichts noch nicht angepasst ist. Die Spülung selbst wird mit Wasser/Luft/Wasser im Wechsel nach einem festen Zeitplan entsprechend Tabelle 8.1 durchgeführt.

Tabelle 8.1: Zeiten für die Filterrückspülung

	Oberschicht [s]	Unterschicht [s]
Wasser	180	300
Luft	300	120
Wasser	480	300

Die offenen Filter im Anschluss an die Druckfilterstufe sind mit Aktivkohle gefüllt (PC830) und werden mit ca. 4m³/h durchströmt. Von insgesamt acht Filterbecken sind vier in Betrieb. Biologischer Abbau (DOC) erfolgt laut Angaben von SWD in den Aktivkohlefiltern nicht. Die Aktivkohlefilter werden zur Adsorption betrieben. Im Ablauf wird eine sehr gute Wasserqualität erreicht, in dem keine Partikel mehr nachweisbar sind.

Die Desinfektion des Trinkwassers erfolgt vor der Verteilung mit Cl₂ und UV.

8.2.2 Messgeräte

Tabelle 8.2: Angaben zu den verwendeten Messgeräten

Eingangsgrößen	Einheit	Messgerät	Messgenauigkeit
<i>Rohwasser</i>			
Trübung	RW_Tur FNU	Hach 1720c	± 2 % v. Messw. (0-30 FNU) ± 5 % v. Messw. (30-100 FNU)
Temperatur	RW_T °C	WTW pH160R	± 0,01°C
SAK ₂₅₄ (unfiltriert)	RW_SAK 1/m	Lange UVAS sc / Dr. Lange sc100	± 0,06 1/m
pH-Wert	RW_pH -	WTW pH160R	± 0,01
Sauerstoff	RW_O2 mg/l	WTW TriOxmatic 700	± 0,1 mg/l
Leitfähigkeit	RW_Lf µS/cm	WTW LF 161 TR	1% v. Messw.
<i>Ozonung</i>			
Menge (Konz.: 150 mg/l)	O3_Q Nm ³ /h	Yokogawa RAMC	nach Richtl. VDE/VDI3513 Bl. 2
Restozonkonzentration	O3_Rest mg/l	W&T(Beierlorzer) Dep4	± 0,01 mg/l
<i>Flockung</i>			
Anlagendurchsatz	F_WEH_Q m ³ /h	E&H Flowtec Viromag Typ:Plusmag V	± 0,2 - 0,5 % v. Messw.
Durchsatz Flockungsmittel	FM_Q l/h	E&H Flowtec Viromag Typ:Promag A	± 0,2 - 0,5 % v. Messw.
pH-Wert nach FeCl ₃	FM_pH -	Hamilton Plast Gel-Elektrode / sc100	± 0,01
pH-Wert nach Kalkmilch	F_pH -	WTW pH160R	± 0,01
Ausgangsgrößen			
<i>Ablauf Sedimentation</i>			
Trübung	F_Tur FNU	Hach 1720c	± 2 % v. Messw. für 0-30 FNU
Partikel > 1µm	F_Part_CH1 #/ml	Pamas WaterViewer	

8.2.3 Modellierte Zeiträume

**Tabelle 8.3: Modellierte Zeiträume und Angaben zum Auswahlkriterium (Mischwasser-
seraufbereitung fand in allen Zeiträumen statt)**

Modellierte Zeiträume	Anmerkungen zum Betrieb
16.11.2006 - 22.03.2007	hoher Rohwassertrübungspk durch Starkregenereignis
15.05.2007 - 23.05.2007	hoher SAK ₂₅₄ Gehalt durch Ablassen der Talsperre zum Bau der Fischtreppe
28.06.2007 - 14.08.2007	Rurtalsperrenwasser, Urfttalsperrenwasser bei abgelassenem Staubecken
11.09.2007 - 28.09.2007	Rurtalsperrenwasser, Urfttalsperrenwasser bei abgelassenem Staubecken Hohe Rohwassertrübung, hoher SAK ₂₅₄ Gehalt
01.11.2007 - 23.12.2007	hoher SAK ₂₅₄ Gehalt nach Wiederbefüllung des Staubeckens
14.02.2008 - 04.07.2008	Frühjahrs- /Sommerwasser nach Wiederbefüllung des Staubeckens Rurtalsperrenwasser, Urfttalsperrenwasser bei wiederbefülltem Staubecken

8.3 Glossar

Abbildung	Kalibrierung des neuronalen Netzes, so dass die Ausgangsgrößen aus den Eingangsgrößen vorhergesagt werden können; Funktionaler Zusammenhang zwischen Ein- und Ausgangsgrößen in Form eines neuronalen Netzes
Aktivierungsfunktion	Bestimmt die Aktivierung des Neurons, d.h. ob das Neuron hemmende, aktivierende oder keine Signale an verknüpfte Neuronen weitergibt; häufig sigmoide Funktionen
Ausgangsschicht (output layer)	Letzte Schicht von Neuronen, die die Netzausgabe ausgeben; Anzahl entspricht der der Ausgangsgrößen
Backpropagation	Iterativer Algorithmus zur Anpassung der Netzgewichte auf Basis eines Gradientenabstiegsverfahrens
Delta-Regel	Regel zur Anpassung der Netzgewichte bei überwachten Lernverfahren einstufiger Netze mit linearer Aktivierungsfunktion
Eingangsschicht (input layer)	Erste Schicht eines neuronalen Netzes zur Übergabe der Netzeingaben, Anzahl der Neuronen entspricht der der Eingangsgrößen
Feedforward Netz	Informationsfluss nur in Richtung der Ausgabeschicht
Feuern	Neuronen sind aktiv und geben ein bestärkendes Signal an verknüpfte Neuronen
Generalisierung	Übertragung der gelernten Zusammenhänge auf unbekannte Datensätze
Gewichtung	Verbindungen zwischen den Neuronen werden mit Gewichten versehen. Über die Anpassung der Netzgewichte erfolgt das Lernen, d.h. die Anpassung des Netzes an vorgegebene Trainingsmuster.
Inkonsistenzen	Während der Clusterung entfernte Datensätze, wenn bei Vergleich zweier Datensätze mit gleichen Eingabemustern die Ausgabemuster nicht übereinstimmen
Kanten	Mathematische Bezeichnung der Verbindungen zwischen Neuronen
Kausalrichtige Zuordnung von Daten	Ursache und Wirkung werden zeitlich übereinstimmend zu einem Datensatz zusammengefasst, um Prozessdynamik abzubilden
Klassen neuronaler Netze	Arten neuronaler Netze (z.B. Multilayer-Perzeptron Netze, Radiale-Basisfunktionen-Netze, Kohonen-Netze)

Knoten	Mathematische Bezeichnung von Neuronen
Konjugierte Gradientenverfahren	Minimumsuche auf der Fehlerfläche eines neuronalen Netzes durch iterative Anpassung der Netzgewichte, wobei die Schrittweite der Fehlerminimierung an die Fehlerfläche angepasst wird.
Konnektionismus, konnektionistische Strukturen	Verknüpfung einfacher Elemente; gewichtete Verknüpfung von Neuronen zur verteilten Speicherung von Informationen
Lernen	Anpassung der Gewichte eines neuronalen Netzes auf Grundlage vorgegebener Trainingsmuster; man unterscheidet zwischen überwachtem, bestärkendem und unüberwachtem Lernen
Lernrate	Schrittweite bei der Anpassung der Netzgewichte
Momentum-Term	Anpassung der Schrittweite zur Einstellung der Netzgewichte an die Fehlerfläche, sie nimmt mit zunehmender Flachheit der Fehlerfläche zu
Multilayer-Perzeptron Netze MLP-Netze	Klasse neuronaler Netze mit feedforward Struktur in mehreren Ebenen und ohne shortcut connections; Anpassung der Netzgewichte erfolgt meist mit dem Backpropagation-Algorithmus
Netzausgaben	Wert, den ein Neuron ausgibt, stimmt häufig mit der Aktivierung eines Neurons überein
Netzeingaben	Summe des Produkts aus Gewicht und Netzausgabe aller mit dem Eingang eines Neurons verknüpften Neuronen
Neuronen (Knoten, Zelle, Unit, Element)	Verarbeitung von Informationen aus anderen Neuronen und Weiterleitung der Information zu anderen Neuronen oder als Netzausgabe
Overfitting	Tritt ein, wenn dem Netz beim Training die Datensätze zu häufig präsentiert oder zu viele Neuronen hinzugefügt werden; Netz wird sehr genau an vorhandene Datenmuster angepasst, aber Generalisierung ist nicht mehr möglich
Perzeptron	Geht auf Frank Rosenblatt zurück; bezeichnet einzelnes Neuron mit anpassbaren Gewichten und einem Schwellwert. Durch Anordnung solcher Neuronen in mehreren Schichten entsteht z.B. MLP-Netz
Radiale-Basisfunktionen Netze (RBF-Netze)	Klasse neuronaler Netze mit feedforward Struktur und einer Schicht verdeckter Neuronen; haben radialsymmetrische Aktivierungsfunktionen

Rückkopplungen	<p>Weitergabe des Ausgangs eines Neurons an Neuronen der Vorgängerschichten oder der gleichen Schicht; Unterscheidung zwischen</p> <p>Indirekter Rückkopplung: Ausgang eines Neurons wird an Neuronen vorhergehender Schichten zurückgegeben</p> <p>Direkter Rückkopplung: Ausgang eines Neurons ist Eingang des gleichen Neurons</p> <p>Laterale Rückkopplung: Verbindung zwischen Neuronen der gleichen Schicht</p>
Schwellwert	<p>Wert ab dem ein Neuron aktiv wird</p>
Self organizing maps (SOM)	<p>Einschichtige neuronale Netze, mit einem unüberwachten Lernverfahren. Abbildung hochdimensionaler Eingangsvektoren auf geringer dimensionierte, häufig zweidimensionale so genannte Karten</p>
Shortcut connection	<p>Verbindungen, die eine oder mehrere Schichten Neuronen in Richtung der Ausgangsschicht überspringen</p>
Sigmoide	<p>Monoton steigende, stetig differenzierbare s-förmige Funktion, z.B. $\tanh(x)$; Aktivierungsfunktion in den Neuronen</p>
Training	<p>Anpassung der neuronalen Netze an vorgegebene Datenmuster</p>
Trainingsmuster	<p>Unterschiedliche Zusammenhänge zwischen den Ein- und Ausgangsgrößen, die in den Trainingsdaten enthalten sind und durch das neuronale Netz abgebildet werden sollen</p>
Validierung	<p>Prüfung der Generalisierbarkeit; vor allem wichtig, wenn neuronale Netze statistisch unterbestimmt sind, d.h. wenn nicht genügend Datensätze zum Training vorlagen</p>
Verdeckte Schicht (hidden layer)	<p>Schichten von Neuronen zwischen der Ein- und Ausgangsschicht; Neuronenzahl muss an Datenbasis angepasst werden, nimmt mit zunehmender Nichtlinearität zwischen den Datenmustern zu</p>
XOR-Problem	<p>Engl. „eXclusive OR“; wird als typisches Beispiel für neuronale Netze verwendet. Bei zwei Eingangsneuronen und einem Ausgangsneuron werden nur die binären Werte 0 und 1 verwendet. Soll als Netzausgabe nur für die Wertepaare (0, 1) bzw. (1, 0) der Wert 1 erreicht werden, ist ein zweistufiges Netz notwendig. Durch einstufige Netze ist dieser Zusammenhang nicht darstellbar</p>

9 Abkürzungsverzeichnis

Lateinische Buchstaben

a_i	Aktivierung des Neurons i	-
c_j	Ausgangsgewicht bei RBF-Netzen	-
c_t	Flockungsmittelmenge	mg/l
D	quadrierte euklidische Distanz	-
d	Distanzparameter bei Self organizing maps	-
E	Gesamtfehler des neuronalen Netzes	-
E_i	Fehler eines einzelnen neuronalen Netzes (SecurityNet)	-
$E_{j,abs}$	Betragsmäßig absoluter Modellfehler der Fehlerverteilung aller Trainingsmuster für eine Ausgangsgröße j	-
$E_{j,m}$	Mittlerer Modellfehler der Fehlerverteilung aller Trainingsmuster für eine Ausgangsgröße j eines neuronalen Netzes	-
E_m	Mittlerer Fehler des SecurityNet	-
E_p	Modellfehler für ein Trainingsmuster p	-
E_{pj}	Modellfehler für ein Trainingsmuster p der Ausgangsgröße j	-
f_{act}	Aktivierungsfunktion	-
Fe^{3+}	Zugesetzte Flockungsmittelmenge	kg/h
FLZ_{max}	Maximal zulässige Filterlaufzeit	h
FLZ_{min}	minimale Filterlaufzeit	h
FLZ_{Part}	Filterlaufzeit bei Erreichen des Abbruchkriteriums Partikel	h
FLZ_{Tur}	Filterlaufzeit bei Erreichen des Abbruchkriteriums Trübung	h
f_{out}	Ausgabefunktion	-
G	Geschwindigkeitsgradient	1/s
\bar{G}	mittlerer Geschwindigkeitsgradient	1/s
$h_{oj}(t)$	Distanzfunktion bei Self organizing maps	-
h_j	Aktivierungsfunktion bei RBF-Netzen	-
k	Anzahl der verdeckten Schichten eines neuronalen Netzes	-
$K_{Einzelspülung}$	Kosten für die Rückspülung eines Druckfilters	€

Abkürzungsverzeichnis

$K_{\text{Filterst\u00fclung}}$	Kosten f\u00fcr die Filterr\u00fccksp\u00fclung	€/h
$K_{\text{Flockungsmittel}}$	Kosten f\u00fcr das Flockungsmittel	€/h
K_{ges}	Gesamtkosten des Flockungsprozesses	€/h
K_{Schlamm}	Kosten f\u00fcr die Entsorgung des Flockungsschlamm	€/h
$k_{\text{Fe}^{3+}}$	spezifische Flockungsmittelkosten	€/kg Fe ³⁺
k_{Schlamm}	spezifische Schlammmentsorgungskosten	€/kg Fe ³⁺
m	Anzahl der Ausgangsgr\u00f6\u00dfen eines neuronalen Netzes	-
N	Teilchenzahl	-
n	Anzahl der Eingangsgr\u00f6\u00dfen eines neuronalen Netzes	-
n_{Betrieb}	Anzahl der gleichzeitig betriebenen Druckfilter	-
net_i	Netzeingabe des Neurons i	-
net_j	Netzeingabe des Neurons j	-
net_{pj}	Netzeingabe des Neurons j f\u00fcr das Trainingsmuster p	-
o	Netzausgabe des Ausgangsneurons eines neuronalen Netzes mit einer Ausgangsgr\u00f6\u00dfe	variabel
OG	Obergrenze	variabel
o_i	Netzausgabe des Neurons i	-
o_j	Netzausgabe des Neurons j (auch des Ausgangsneurons j)	variabel
o_{pi}	Netzausgabe des Neurons i f\u00fcr das Trainingsmuster p	variabel
o_{pj}	Netzausgabe des Neurons j (auch des Ausgangsneurons j) f\u00fcr das Trainingsmuster p	variabel
P	\u00dcber R\u00fchrwerk eingetragene Leistung	kg/m ² /h ³
p	Trainingsmuster, Lerneingaben	-
pK_W^*	Ionenprodukt des Wassers	-
R_s	Standardabweichung bei SecurityNet	-
$R_{s,j}$	Standardabweichung der Fehlerverteilung aller Trainingsmuster f\u00fcr eine Ausgangsgr\u00f6\u00dfe j eines neuronalen Netzes	-
RSQ_j	Korrelationskoeffizient der Fehlerverteilung aller Trainingsmuster f\u00fcr eine Ausgangsgr\u00f6\u00dfe j eines neuronalen Netzes	-
S	Feststoffkonzentration	m ² /l

Abkürzungsverzeichnis

$S_{n,m}$	Mittelwert der Einzelsensitivitäten für die Eingangsgröße x_n	variabel
$S_{n,m,abs}$	Mittlere absolute Sensitivität für die Eingangsgröße x_n	variabel
$S_{n,max}$	Extremalsensitivität für die Eingangsgröße x_n	variabel
S_{pn}	Einzelsensitivität des Netzausgangs o gegenüber der Änderung der Eingangsgröße x_n für das Trainingsmuster p	variabel
T	Temperatur	K
t	Zeit	s
t_j	Lerneingabe (erwartete Ausgabe) des Ausgangsneurons j	variabel
\bar{t}_j	Mittelwert über alle Trainingsmuster der Ausgangsgröße j	variabel
t_{pj}	Lerneingabe (auch erwartete Ausgabe) des Ausgangsneurons j für das Trainingsmuster p	variabel
UG	Untergrenze	variabel
V	Reaktorvolumen	m ³
W	Matrix aller Gewichte eines neuronalen Netzes	-
w_{ij}	Einzelgewicht der Verbindung zwischen Neuron i und j	-
w_{ik}	Einzelgewicht einer Verbindungen zwisch Neuron i und dem verdecken Neuron k	-
x_n	Eingangsgröße in ein neuronales Netz	variabel
x_{pn}	Einzelwert einer Eingangsgröße eines neuronalen Netzes	variabel

Griechische Buchstaben

α	Momentum-Term	-
α_o	Kollisionswirksamkeitsfaktor (orthokinetische Flockung)	-
α_p	Kollisionswirksamkeitsfaktor (perikinetische Flockung)	-
δ_j	Fehler der aktuellen Aktivierung a_j des Ausgangsneurons j gegenüber der erwarteten Ausgabe (Lerneingabe) t_j	-
δ_{pj}	Fehler der in dem Neuron j für das Trainingsmuster p verursacht wird; falls j ein Ausgangsneuron ist: Fehler der aktuellen Aktivierung a_j des Ausgangsneurons j gegenüber der erwarteten Ausgabe (Lerneingabe) t_{pj} für das Trainingsmuster p	-
δ_{pk}	Fehler der in dem verdeckten Neuron k für das Trainingsmuster p verursacht wird	-

Abkürzungsverzeichnis

Θ_j	Schwellwert des Neurons j	-
Ψ_m	gemessenes Zeta-Potential; Scherfläche bei Elektrophorese	V
Ψ_o	Nernst-Potential	V
Ψ_δ	Potential bei der Debye-Länge λ	V
Ψ_ζ	Zeta-Potential; Grenze Sternschicht	V
μ	dynamische Viskosität	kg/m/s
Φ	Feststoffvolumenkonzentration	m ³ /m ³
η	Lernrate	-
λ	Debye-Länge	m

Konstanten

k	Boltzmann-Konstante	J/K
-----	---------------------	-----

Dimensionsbehaftete Abkürzungen

DOC	gelöster organischer Kohlenstoff	mg/l
F_{Part_CH1}	Partikel > 1 μ m im Ablauf der Sedimentation	#/ml
F_{pH}	pH-Wert nach Kalkmilchdosierung	-
F_{Tur}	Trübung im Ablauf der Sedimentation	FNU
$F_{Tur_Load_Red}$	Reduzierte Trübungsfracht	FNUm ³ /h
F_{WEH_Q}	Anlagendurchsatz	m ³ /h
FLZ	Filterlaufzeit	h
FM_{Fe}	Flockungsmitteldosierung	mg/l
FM_{pH}	pH-Wert nach Flockungsmitteldosierung	-
FM_Q	Durchsatz Flockungsmittel	l/h
KW_Q	Durchsatz im Ablauf der Sedimentation	m ³ /h
$O3_Q$	Ozondosierung	Nm ³ /h
$O3_Rest$	Restozonkonzentration	mg/l
RW_Lf	Rohwasserleitfähigkeit	μ S/cm
RW_{O2}	Sauerstoffgehalt im Rohwasser	mg/l
RW_{pH}	pH-Wert im Rohwasser	-

Abkürzungsverzeichnis

<i>RW_Q</i>	Rohwasserdurchsatz	m ³ /h
<i>RW_SAK</i>	<i>SAK</i> ₂₅₄ im Rohwasser	1/m
<i>RW_T</i>	Rohwassertemperatur	°C
<i>RW_Tur</i>	Rohwassertrübung	FNU
<i>RW_Tur_Load</i>	Trübungsfracht im Rohwasser	FNUm ³ /h
<i>SAK</i> ₂₅₄	Spektraler Absorptionskoeffizient bei 254 nm	1/m
<i>SAK</i> ₄₃₆	Spektraler Absorptionskoeffizient bei 436 nm	1/m
<i>Tur_red</i>	Verhältnis zwischen Trübung nach Sedimentation und Rohwassertrübung	-
<i>VWZ</i>	Verweilzeit	min

Sonstige Abkürzungen

<i>2D</i>	zweidimensional
<i>3D</i>	dreidimensional
<i>FDH</i>	Fuzzy-Divisive-Hierachical-Clustering-Algorithmus
<i>Me</i>	Abkürzung für Al ³⁺ bzw. Fe ³⁺
<i>MLP</i>	Multilayer-Perzeptron
<i>NOM</i>	Natural organic matter
<i>PLS</i>	Prozessleitsystem
<i>RBF</i>	Radiale-Basisfunktion
<i>ROI</i>	Return of invest
<i>SCD</i>	Streaming Current Detector
<i>SOM</i>	Self organizing maps
<i>SWD</i>	Stadtwerke Düren
<i>WVER</i>	Wasserverband Eifel-Rur

10 Literatur

Al-Abri, M., Hilal, N. (2008): Artificial neural network simulation of combined humic substance coagulation and membrane filtration. *Chemical Engineering Journal* 141(1), 27-34

Al-Shayji, K.A., Liu, Y.A. (2002): Predictive modeling of large-scale commercial water desalination plants: Data-based neural network and model-based process simulation. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 41(25), 6460-6474

Amirtharajah, A., Mills, K.M. (1982): Rapid-Mix Design for Mechanisms of Alum Coagulation. *Journal American Water Works Association* 74(4), 210-216

Amirtharajah, A., Tambo, N. (1991): Mixing in Water Treatment. In: *Mixing in Coagulation and Flocculation*. A. Amirtharajah, M. Clark, R. R. Trussell (Hrsg.), AWWA Research Foundation,

Atlan-tec (2007): Handbuch zur Software Neruo-Model. In: Atlan-tec

Bae, H., Kim, S., Kim, Y.J. (2006): Decision algorithm based on data mining for coagulant type and dosage in water treatment systems. *Water Science and Technology* 53(4-5), 321-329

Baes, C.F., Mesmer, R.E. (1976): The hydrolysis of cations. In: John Wiley & Sons

Ball, G.H., Hall, D.J. (1965): ISODATA, A novel method of data analysis and pattern classification. In: *Technical Report AD 699616*, Stanford Research Institute, Menlo Park, CA

Baxter, C.W., Shariff, R., Stanley, S.J., Smith, D.W., Zhang, Q., Saumer, E.D. (2002a): Model-based advanced process control of coagulation. *Water science and technology: a journal of the International Association on Water Pollution Research* 45(4-5), 9-17

Baxter, C.W., Shariff, R., Stanley, S.J., Smith, D.W., Zhang, Q., Saumer, E.D. (2002b): Model-based advanced process control of coagulation. *Water Science and Technology* 45(4-5), 9-17

Baxter, C.W., Stanley, S.J., Zhang, Q. (1999): Development of a full-scale artificial neural network model for the removal of natural organic matter by enhanced coagulation. *Journal of Water Supply: Research and Technology - AQUA* 48(4), 129-136

Baxter, C.W., Stanley, S.J., Zhang, Q., Smith, D.W. (2002c): Developing artificial neural network models of water treatment processes: a guide for utilities. *J. Environ. Eng. Sci.* 1, 201-211

Baxter, C.W., Zhang, Q., Stanley, S.J., Shariff, R., Tupas, R.R.T., Stark, H.L. (2001): Drinking water quality and treatment: The use of artificial neural networks. *Canadian Journal of Civil Engineering* 28, 26-35

Becker, W.C., O'Melia, C.R. (2001): Ozone: Its effect on coagulation and filtration, pp. 81-88

Literatur

- Bernhardt, H. (1983): Aufbereitung von Wasser aus Seen und Talsperren. In: *DVGW-Schriftenreihe Wasser Nr. 206*. Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfaches e.V. (Hrsg.), Eschborn,
- BLAC (2003): Arzneimittel in der Umwelt - Auswertung der Untersuchungsergebnisse. Behörde für Umwelt und Gesundheit Freie Hansestadt Hamburg, Institut für Hygiene und Umwelt im Auftrag des Bund/Länderausschuss für Chemikaliensicherheit (BLAC) (Hrsg.)
- Bogdan, M. (2000): Neuronale Netze: Nervengesteuerte Prothese. *Deutsches Ärzteblatt, Supplement: Praxis Computer* 97(40), 36
- Bose, P., Reckhow, D.A. (2007): The effect of ozonation on natural organic matter removal by alum coagulation. *Water Research* 41(7), 1516-1524
- Bowden, G.J., Dandy, G.C., Maier, H.R. (2005a): Input determination for neural network models in water resources applications. Part 1 - Background and methodology. *Journal of Hydrology* 301(1-4), 75-92
- Bowden, G.J., Maier, H.R., Dandy, G.C. (2005b): Input determination for neural network models in water resources applications. Part 2. Case study: Forecasting salinity in a river. *Journal of Hydrology* 301(1-4), 93-107
- Bratby, J. (2006): Coagulation and Flocculation in Water and Wastewater Treatment. In: IWA
- Cabassud, M., Delgrange-Vincent, N., Cabassud, C., Durand-Bourlier, L., Laine, J.M. (2002): Neural networks: a tool to improve UF plant productivity. *Desalination* 145(1-3), 223-231
- Chandranth, M.S., Amy, G.L. (1996): Effects of ozone on the colloidal stability and aggregation of particles coated with natural organic matter. *Environmental Science and Technology* 30(2), 431-443
- Chellam, S. (2005): Artificial neural network model for transient crossflow microfiltration of polydispersed suspensions. *Journal of Membrane Science* 258(1-2), 35-42
- Chen, H., Kim, A.S. (2006): Prediction of permeate flux decline in crossflow membrane filtration of colloidal suspension: a radial basis function neural network approach. *Desalination* 192(1-3), 415-428
- Chen, J.C., Seidel, A. (2002): Cost optimization of nanofiltration with fouling by natural organic matter. *Journal of Environmental Engineering-Asce* 128(10), 967-973
- Coperion (2006): Neues MFI-System misst mit neuronalen Netzen. *incontact - Das Coperion Kundenmagazin* 01, 27

Literatur

Curcio, S., Calabro, V., Iorio, G. (2006): Reduction and control of flux decline in cross-flow membrane processes modeled by artificial neural networks. *Journal of Membrane Science* 286(1-2), 125-132

Dumitrescu, D., Sarbu, C., Pop, H. (1994): A Fuzzy Divisive Hierarchical Clustering Algorithm for the Optimal Choice of Sets of Solvent Systems. *Analytical Letters* 27(5), 1031 - 1054

DVGW (1987): DVGW Technische Mitteilungen Merkblatt W 217, Flockung in der Wasseraufbereitung, Teil 1: "Grundlagen". In: Eschborn

Dyer, K.R., Manning, A.J. (1999): Observation of the size, settling velocity and effective density of flocs, and their fractal dimensions. *Journal of Sea Research* 41(1-2), 87-95

Edwards, M., Benjamin, M.M. (1992): Effect of preozonation on coagulant-NOM interactions. *Journal / American Water Works Association* 84(8), 63-72

Exall, K.N., Vanloon, G.W. (2000): Using coagulants to remove organic matter. *Journal / American Water Works Association* 92(11), 93-102

Fitzpatrick, C.S.B., Fradin, E., Gregory, J. (2004): Temperature effects on flocculation, using different coagulants. *Water Science and Technology* 50(12), 171-175

Foody, G.M., Arora, M. K. (1997): An evaluation of some factors affecting the accuracy of classification by an artificial neural network. *International Journal of Remote Sensing* 18(4), 799-810

Frimmel, F.H., Kumke, M.U. (1999): Optische Parameter zur Stoffcharakterisierung vom Trinkwasser bis zum Abwasser. In: *Postprints der Universität Potsdam: Mathematisch-Naturwissenschaftliche Reihe ; 25*, Universität Potsdam

Froese, T. (1997): Verfahren zur Erkennung von fehlerhaften Vorhersagen in einer neuromodell-gestützten oder neuronalen Prozessregelung. *European Patent EP 0 762 245 A1*

Füser, K. (1999): Neuronale Netze: Kreditentscheid per Künstlicher Intelligenz. *Kreditpraxis* 1, 11-13

Gagnon, C., Grandjean, B.P.A., Thibault, J. (1997): Modelling of coagulant dosage in a water treatment plant. *Artificial Intelligence in Engineering* 11(4), 401-404

Garson, G.D. (1991): Interpreting neural network connection weights. *AI Expert* 6, 47-51

Garson, G.D. (1998): Neural networks - An Introductory Guide for Social Scientists. In: SAGE Publications Ltd

Gebhardt, J. (2008): Mündliche Aussage

Literatur

- Gimbel, R., Nahrstedt, A. (2004): Grundlagen der Tiefenfiltration. In: *DVGW-Fortbildungskurse Wasserversorgungstechnik für Ingenieure und Naturwissenschaftler, Kurs 6: Wasseraufbereitungstechnik für Ingenieure, DVGW-Schriftenreihe Wasser*, Oldenburg Industrieverlag
- Girosi, F., Poggio, T. (1989): A theory of networks for approximation and learning. In: *A.I. Memo*, MIT Press
- Grubbs, F. (1950): Sample criteria for testing outlying observations. *Ann. Math. Statist.* 21(1), 27-58
- Grubbs, F., Beck, G. (1972): Extension of sample sizes and percentage points for significance tests of outlying observations. *Technometrics* 14(4), 847-853
- Hanson, A.T., Cleasby, J.L. (1990): The Effects of Temperature on Turbulent Flocculation - Fluid-Dynamics and Chemistry. *Journal American Water Works Association* 82(11), 56-73
- Hebb, D.O. (1988): The Organization of Behavior. In: Wiley
- Hopfield, J.J. (1984): Neurons with Graded Response Have Collective Computational Properties like Those of Two-State Neurons. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 81(10), 3088-3092
- Hoyer, O. (1998): Innovative Verfahren bei der Aufbereitung von Talsperrenwässern. *bbr* 7, 18-30
- Hunter, R.J. (2001): Foundations of Colloid Science. In: Vol. 1 and 2, Oxford University Press
- Isermann, R. (2008): Mechatronische Systeme. In: Springer
- Jekel, M.R. (2004): Flockung, Sedimentation und Flotation. In: *DVGW-Fortbildungskurse Wasserversorgungstechnik für Ingenieure und Naturwissenschaftler, Kurs 6: Wasseraufbereitungstechnik für Ingenieure, DVGW-Schriftenreihe Wasser*, Oldenburg Industrieverlag
- Jekel, M.R., Gimbel, R. (1994): Optimal dosing of coagulants and flocculants. In: Berichte aus dem IIWW Rheinisch-Westfälischen Institut für Wasserforschung gemeinnützige GmbH, Mülheim, Band 10; Eigenverlag
- Johnson, P.N., Amirtharajah, A. (1983): Ferric-Chloride and Alum as Single and Dual Coagulants. *Journal American Water Works Association* 75(5), 232-239
- Kang, L.S., Cleasby, J.L. (1995): Temperature effects on flocculation kinetics using Fe(III) coagulant. *Journal of Environmental Engineering* 121(12), 893-901
- Kohonen, T. (1982): Self-organized formation of topologically correct feature maps. *Biological Cybernetics* 43, 59-69

Kohonen, T. (2001): Self-Organizing Maps. In: Springer

Krasner, S.W., Amy, G. (1995): Jar-test evaluations of enhanced coagulation. *Journal American Water Works Association* 87(10), 93-107

Krause, S.D., Baginski, S.M., Kochs, H.-D., Koch, M., Esser, G. (2000): Fehlerdetektion durch neuronale Netze bei der Schweißnahtüberwachung laserstrahlgeschweißter Tailored Blanks. *atp* 42(7)

LANUV (2007): Literaturstudie zum Eintrag von Arzneimitteln und deren Verhalten und Verbleib in der Umwelt. Ministerium für Umwelt und Naturschutz. Landwirtschaft und Verbraucherschutz des Landes NRW (LANUV NRW) (Hrsg.)

Lashley, K.S. (1988): In Search of the Engram. In: *Neurocomputing: foundations of research*. J. A. Anderson, E. Rosenfeld (Hrsg.), MIT Press, 57-63

Leeuwen, v.J., Chow, C., Fabris, R., Withers, N., Page, D., Dirkas, M. (2002): Application of a fractionation technique for better understanding of the removal of natural organic matter by alum coagulation. *Water Science and Technology: Water Supply* 2(5-6), 427-433

Leeuwen, v.J., Chow, C.W.k., Bursill, D., Dirkas, M. (1999): Empirical mathematical models and artificial neural networks for the determination of alum doses for treatment of southern Australian surface waters. *Journal of Water Supply Research and Technology-Aqua* 48(3), 115-127

Lerch, A., Hagemeyer, G., Panglisch, S., Gimbel, R. (2003): Trinkwasseraufbereitung von Oberflächengewässern mittels Flockung / Ultrafiltration. *Membrantechnik in der Wasseraufbereitung und Abwasserbehandlung -Perspektiven, Neuentwicklungen und Betriebserfahrungen im In- und Ausland-*, Aachen

Letterman, R.D., Amirtharajah, A., O'Melia, C.R. (1999): Coagulation and flocculation. *Water Quality and Treatment*

Liu, Q.F., Kim, S.H. (2008): Evaluation of membrane fouling models based on bench-scale experiments: A comparison between constant flowrate blocking laws and artificial neural network (ANNs) model. *Journal of Membrane Science* 310(1-2), 393-401

Maier, H.R., Dandy, G.C. (1996): The use of artificial neural networks for the prediction of water quality parameters. *Water Resources Research* 32(4), 1013-1022

Maier, H.R., Morgan, N., Chow, C.W.K. (2004): Use of artificial neural networks for predicting optimal alum doses and treated water quality parameters. *Environmental Modelling & Software* 19(5), 485-494

Literatur

Mälzer, H.-J., Hobby, R., Lerch, A., Gimbel, R., Lordick, N., Rumianek, M., Petersen, J., Kochs, H.-D. (2002): Modellierung mehrstufiger Trinkwasseraufbereitungsanlagen mittels eines expertensystem-basierten Simulationsmodells (METREX). Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) Forschungsvorhaben 02 WT 9814/9 (Hrsg.)

Mälzer, H.-J., Strugholtz, S., Gebhardt, J., Nahrstedt, A., Panglisch, S., Gimbel, R., Zach, W. (2008): Artificial Neural Networks for online control of coagulation in drinking water treatment. *World Filtration Congress 10, Leipzig*

Mälzer, H.-J., Strugholtz, S., Rohn, A., Gebhardt, J., Nahrstedt, A., Gimbel, R. (2009): RWE-Forschungsbericht: Optimale Einstellung von Flockungsbedingungen durch eine dynamische Regelung mittels künstlicher neuronaler Netze. *IWW Rheinisch Westfälisches Institut für Wasserforschung*

McBean, E.A., Rovers, F.A. (1998): Statistical procedures for analysis of environmental monitoring data and risk assessment. In: Prentice-Hall

McCulloch, W., Pitts, W. (1943): A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biology* 5(4), 115-133

Mielke, A. (2007): Neuronale Netze. www.andreas-mielke.de

Minsky, M., Papert, S. (1988): Perceptrons. In: MIT Press

Mirsepasi, A., Cathers, B., Dharmappa, H.B. (1995): Application of artificial neural networks to the real time operation of water treatment plants. *IEEE International Conference on Neural Networks - Conference Proceedings*,

Morris, J.K., Knocke, W.R. (1984): Temperature Effects on the Use of Metal-Ion Coagulants for Water-Treatment. *Journal American Water Works Association* 76(3), 74-79

Nowinski, G. (1994): Lernfähige konnektionistische Strukturen in der Automatisierungstechnik. *at - Automatisierungstechnik* 42(1-11), A1-A40

Panglisch, S., Strugholtz, S., Rohn, A., Mälzer, H.-J., Nahrstedt, A., Dördelmann, O., Becker, A. (2008): Neuronale Netze in der Membranfiltration. Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) Forschungsvorhaben 02 WT 0661 (Hrsg.)

Rehkugler, H., Kerling, M. (1995): Einsatz Neuronaler Netze für Analyse- und Prognosezweicke. *Betriebswirtschaftliche Forschung und Praxis* 3, 306-324

Rietveld, L., van der Helm, A., van Schagen, K., van der Aa, R., van Dijk, H. (2008): Integrated simulation of drinking water treatment. *Journal of Water Supply: Research and Technology - AQUA* 57(3), 133-141

Rosenblatt, F. (1958): The Perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychological Review* 65, 386-408

Rumelhart, D.E., Hinton, G.E., Williams, R.J. (1986): Learning representations by back-propagating errors. *Nature* 323(6088), 533-536

Rumelhart, D.E., McClelland, J.L. (eds) (1986): Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition. MIT Press

Rustum, R., Adeloje, A.J. (2007): Replacing outliers and missing values from activated sludge data using Kohonen self-organizing map. *Journal of Environmental Engineering* 133(9), 909-916

Schneider, O.D., Tobiasson, J.E. (2000): Preozonation effects on coagulation. *Journal / American Water Works Association* 92(10), 74-87

Schöneburg, E., Heinzmann, F., Feddersen, S. (1994): Genetische Algorithmen und Evolutionsstrategien. In: Addison-Wesley Verlag

Shetty, G.R., Chellam, S. (2003): Predicting membrane fouling during municipal drinking water nanofiltration using artificial neural networks. *Journal of Membrane Science* 217(1-2), 69-86

Soon, C.S., Brass, M., Heinze, H.-J., Haynes, J.-D. (2008): Unconscious determinants of free decisions in the human brain. *Nature Neuroscience*

Stanley, S., Baxter, C., Zhang, Q., Shariff, R. (2000): Process Modeling and Control of Enhanced Coagulation. In: *AwwaRF Research Report*, American Water Works Association

Strugholtz, S., Panglisch, S., Gebhardt, J., Gimbel, R. (2006): Modeling and optimization of ceramic membrane microfiltration using neural networks and genetic algorithms. *Water Practice & Technology* 1(4)

Strugholtz, S., Panglisch, S., Gebhardt, J., Gimbel, R. (2008): Neural networks and genetic algorithms in membrane technology modelling. *Journal of Water Supply: Research and Technology - AQUA* 57(1), 23-34

Stumm, W., Morgan, J.J. (1962): Chemical aspects of coagulation. *Journal / American Water Works Association* 54(8), 971-991

Stumm, W., O'Melia, C.R. (1968): Stoichiometry of coagulation. *Journal / American Water Works Association* 60(5), 514-539

SWD (2007): Beckenvolumina, Auskunft per mail.

Tukey, J.W. (1977): Exploratory data analysis. In: Addison-Wesley

- Uhl, W. (2000): Einfluss von Schüttungsmaterial und Prozessparametern auf die Leistung von Bioreaktoren bei der Trinkwasseraufbereitung; Dissertation, Gerhard Mercator Universität Duisburg. In: Berichte aus dem IIWW Rheinisch-Westfälischen Institut für Wasserforschung gemeinnützige GmbH, Mülheim, Band 31; Eigenverlag
- Valentin, N., Denoeux, T. (2001): A neural network-based software sensor for coagulation control in a water treatment plant. *Intelligent Data Analysis* 5, 23-39
- Van Benschoten, J.E., Edzwald, J.K., Rahman, M.A. (1992): Effects of temperature and pH on residual aluminium for alum and polyaluminium coagulants. *Water Supply* 10(4), 49-54
- Werbos, P.J. (1974): Beyond Regression: New Tools for Prediction and Analysis in the Behavioral Sciences, Harvard University, Cambridge, MA
- Xiao, F., Ma, J., Yi, P., Huang, J.C.H. (2008): Effects of low temperature on coagulation of kaolinite suspensions. *Water Research* 42(12), 2983-2992
- Yan, M., Wang, D., Shi, B., Wang, M., Yan, Y. (2007): Effect of Pre-ozonation on Optimized Coagulation of a Typical North-China Source Water. *Chemosphere* 69(11), 1695-1702
- Yeung, A., Gibbs, A., Pelton, R. (1997): Effect of shear on the strength of polymer-induced flocs. *Journal of Colloid and Interface Science* 196(1), 113-115
- Yeung, A.K.C., Pelton, R. (1996): Micromechanics: A new approach to studying the strength and breakup of flocs. *Journal of Colloid and Interface Science* 184(2), 579-585
- Yu, R.F., Kang, S.F., Liaw, S.L., Chen, M.C. (2000): Application of artificial neural network to control the coagulant dosing in water treatment plant. *Water Science and Technology* 42(3-4), 403-408
- Yukselen, M.A., Gregory, J. (2002): Breakage and Re-formation of Alum Flocs. *Environmental Engineering Science* 19(4), 229-236
- Zell, A. (2003): Simulation neuronaler Netze. In: Oldenburg Wissenschaftsverlag GmbH
- Zhang, Q., Stanley, S.J. (1997): Forecasting raw-water quality parameters for the North Saskatchewan River by neural network modeling. *Water Research* 31(9), 2340-2350
- Zhang, Q., Stanley, S.J. (1999): Real-Time Water Treatment Process Control with Artificial Neural Networks. *Journal of Environmental Engineering* 125(2), 152-160
- Zhang, Q.J., Shariff, R., Smith, D.W., Cudrak, A., Stanley, S.J. (2007): Artificial neural network real-time process control system for small utilities. *Journal American Water Works Association* 99(6), 132-144

Tabellarischer Lebenslauf

Silke Strugholtz

geboren am 04 Mai 1977 in Lippstadt

ledig

Schulische Laufbahn

1983 - 1987	Grundschule St. Pankratius, Anröchte
1987 - 1996	Friedrich-Spee-Gymnasium, Rüthen
1996	Abitur

Studium

1996	Immatrikulation an der Universität Dortmund Fachbereich Chemietechnik
1998	Diplom-Vorprüfung
2002	Diplom-Hauptprüfung

Berufliche Tätigkeit

2002 - 2003	Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik, Fachbereich Bio- und Chemieingenieurwesen der Universität Dortmund
2003 - 2008	Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Energie- und Verfahrenstechnik, Bereich Wassertechnik, Fakultät Ingenieurwissenschaften der Universität Duisburg-Essen
Seit 2009	Applikationsingenieurin bei der Firma Atlan-tec

Herne, den 07.07.2009