

Modellierung auf der Dokumentationsebene und Einsatz von Datenbanken zum Reuse von Teilmodellen

S. Kuntsche, R. Kraus, H. Arellano-Garcia, G. Wozny
Technische Universität Berlin

03.03.2011

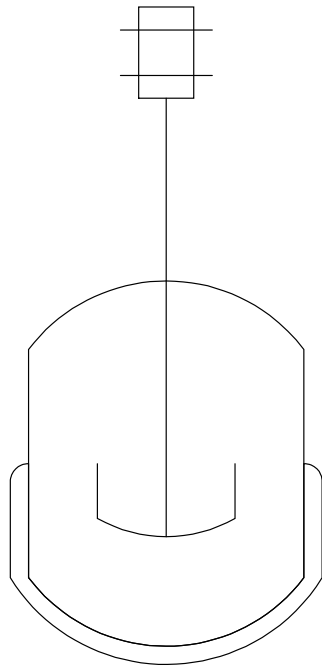
8. Symposium Informationstechnologien für Entwicklung und
Produktion in der Verfahrenstechnik

1. MOSAIC
 - ▶ Motivation
 - ▶ Konzept und Grundlagen

2. Modularität
 - ▶ Ziele und Möglichkeiten
 - ▶ Wiederverwendung von Gleichungssystemen
 - ▶ Anwendungsbeispiel

3. Anwendungsbeispiel

4. Zusammenfassung und Ausblick



Zusammenarbeit?

Matlab

Aspen

Fortran

$$\rho = aT + bT^2$$

$$\rho = aT + bT^2 + cT^3$$

$$\rho = \frac{a}{b \cdot 1 + \left(1 - \frac{T}{c}\right)^d}$$



Stoffeigenschaften

$$x_i P_i^{LV} = y_i P$$

$$x_i \gamma_i \varphi_i^{LV} P_i^{LV} = y_i \varphi_i^V P$$



Phasengleichgewicht

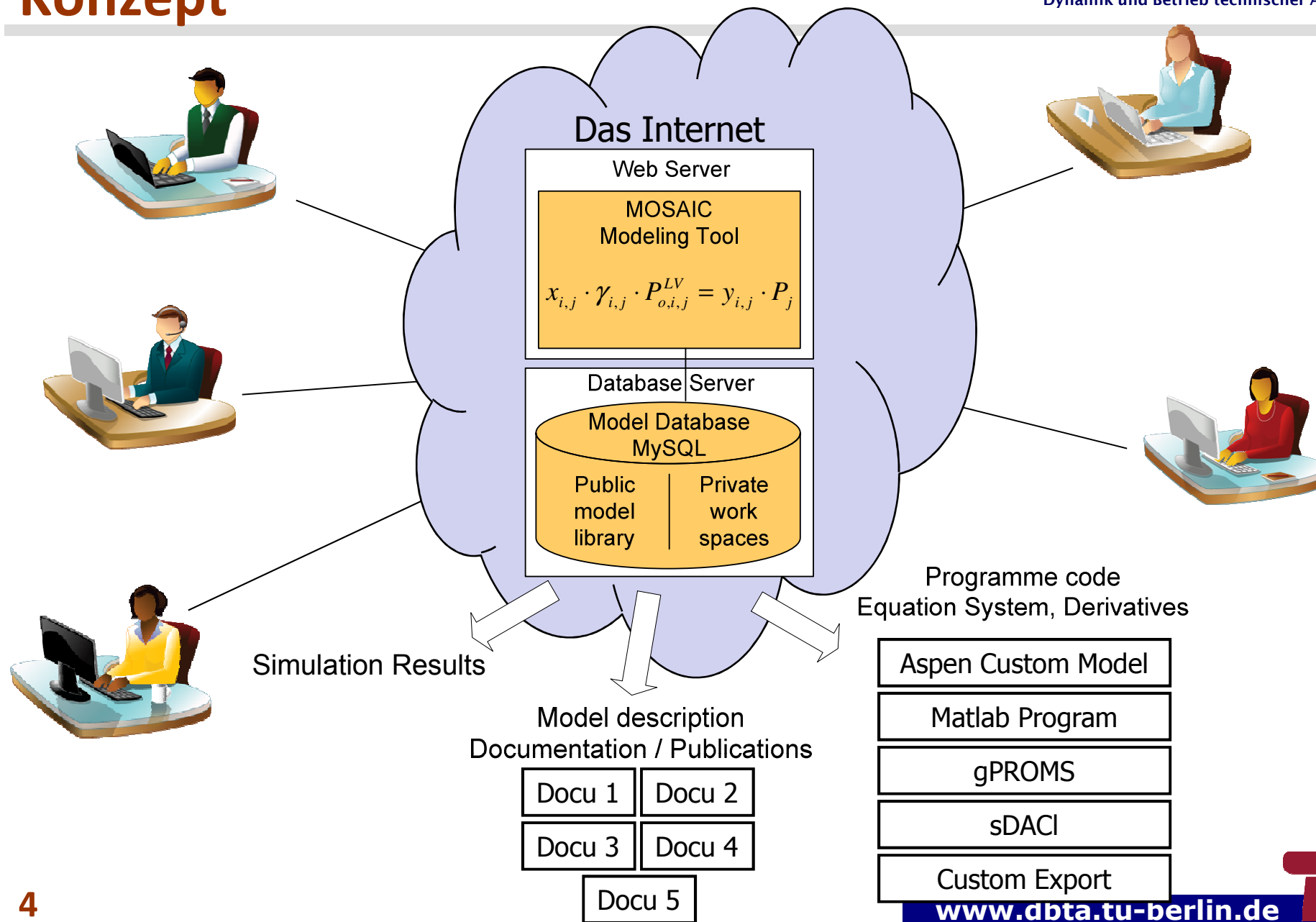
$$\frac{dc_C}{dt} = k_{AB} c_A c_B$$

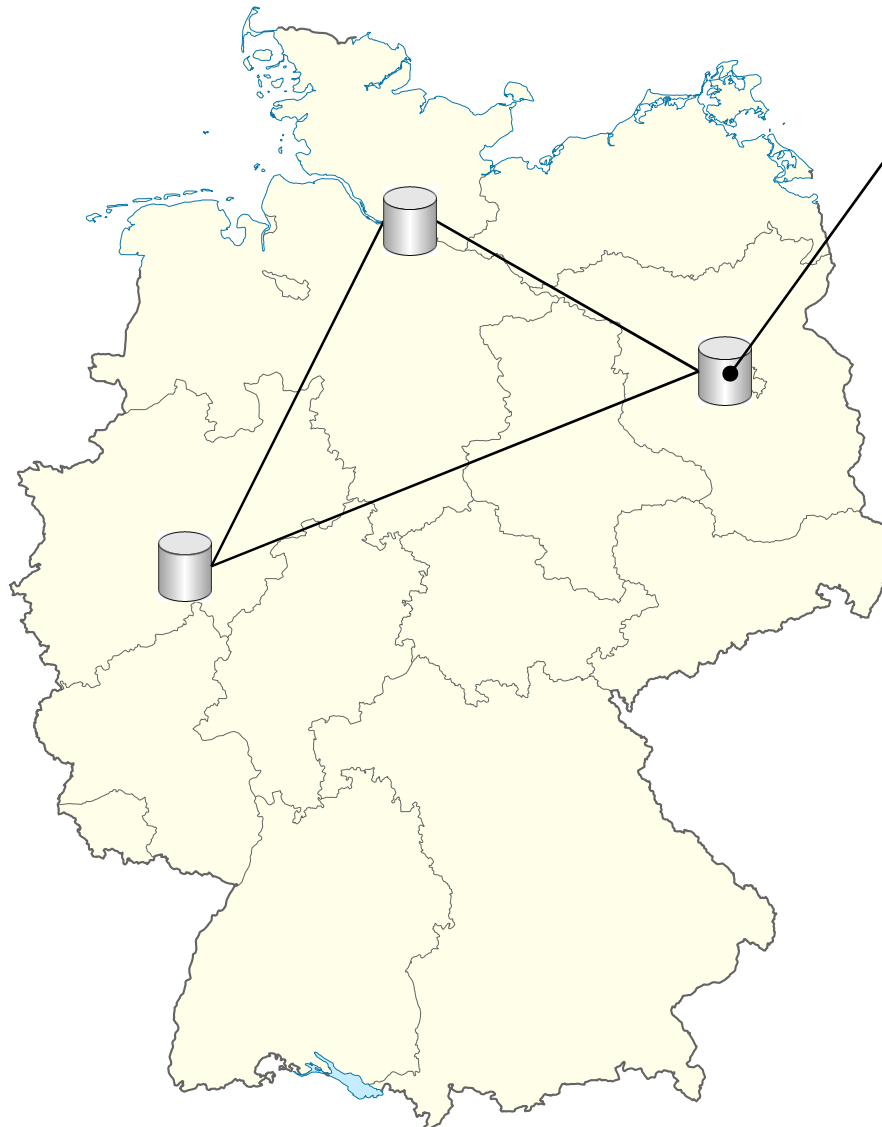
$$\frac{dc_D}{dt} = k_{AB} c_A c_B - k_{DB} c_D c_B$$



Kinetik

Konzept

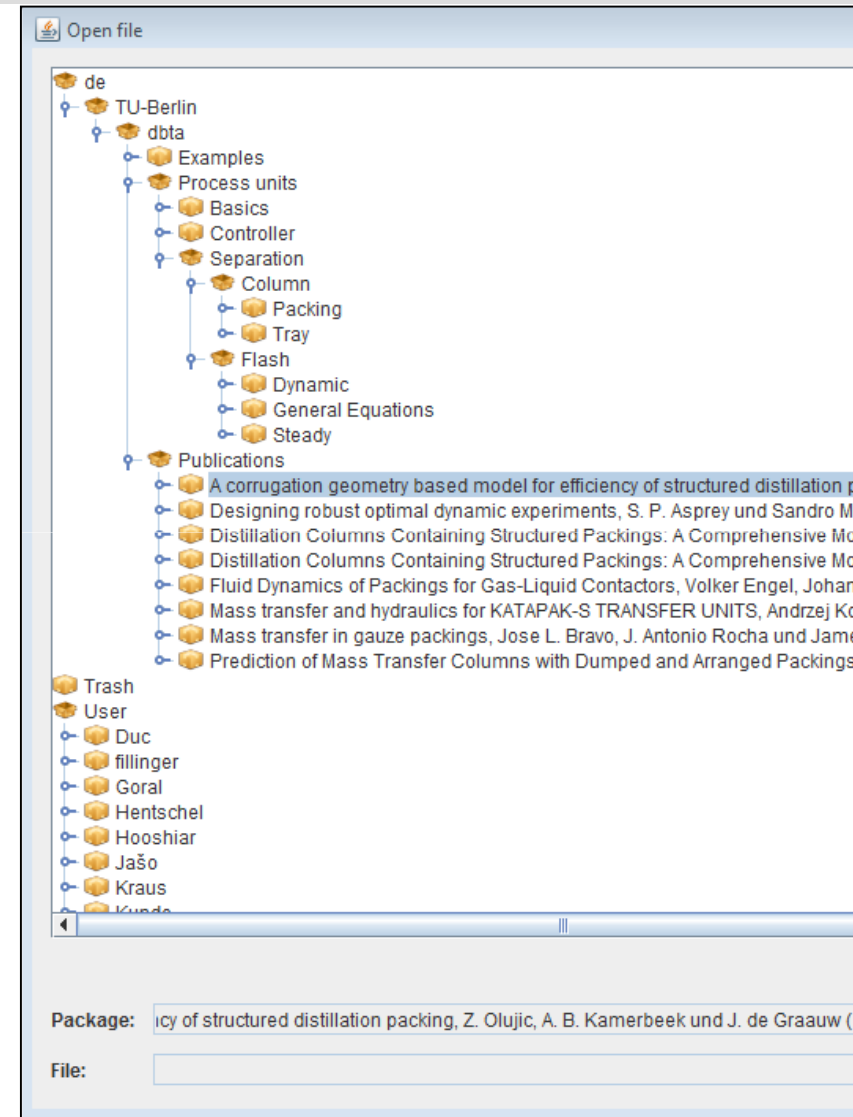




- ▶ Zentraler Zugriff auf MOSAIC
 - ▶ Java-Applet
 - ▶ Einfache Verwaltung
 - ▶ Einheitliche Version
- ▶ Dezentrale Ablage der Modelle
 - ▶ Datenhoheit der Standorte
 - ▶ Umfangreiche Möglichkeiten bei der Zugriffsbeschränkung

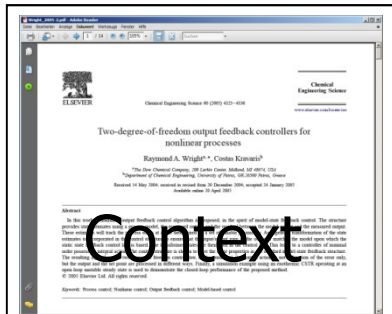
Zugriff auf die Modelldatenbank

- ▶ Eindeutige Paketbezeichnungen
- ▶ Hierarchische Namensgebung
 1. Top Level Domain
 2. Organisation
 3. Fachbereich
 4. Paket – Namen

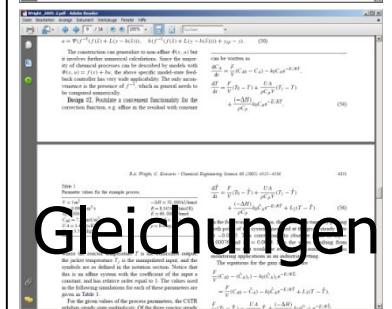


Analogie zu Veröffentlichungen

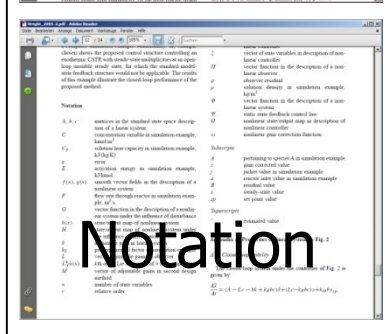
Artikel Übersicht



Context



Gleichungen



Notation

Artikel Gleichungen

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V}(C_{A0} - C_A) - k_0 C_A e^{-E/RT},$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V}(T_0 - T) + \frac{UA}{\rho C_p V}(T_j - T) + \frac{(-\Delta H)}{\rho C_p} k_0 C_A e^{-E/RT},$$

Notation

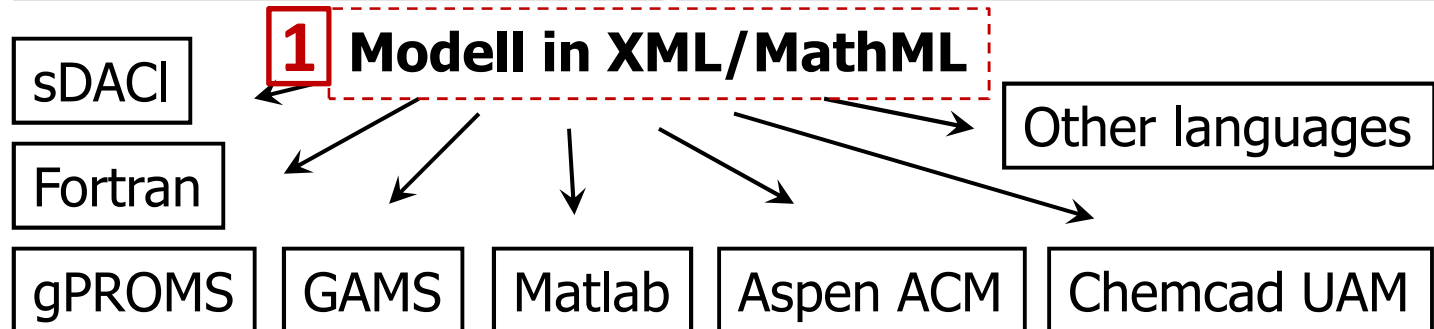
C	concentration variable in simulation example, kmol/m^3
<i>Subscripts</i>	
A	pertaining to species A in simulation example

MOSAIC

Equations	Functions
$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V} \cdot (C_{A0} - C_A) - k_0 \cdot C_A \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T}}$	
$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V} \cdot (T_0 - T) + \frac{UA}{\rho \cdot C_p \cdot V} \cdot (T_j - T) + \frac{(-\Delta H)}{\rho \cdot C_p} \cdot k_0 \cdot C_A \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T}}$	

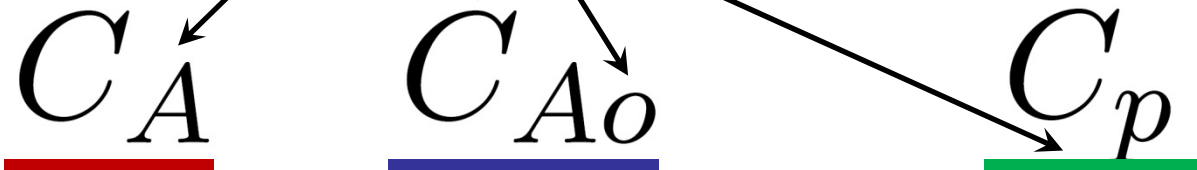
Notation

Base Names	Superscripts	Subscripts	Indices
Name ^			Description
ρ			solution density [kg/m ³]
C			concentration variable [kmol/m ³], solution heat capacity [kJ/(kg K)]
Base Names	Superscripts	Subscripts	Indices
Name ^			Description
A			pertaining to species A



Variablen Namen und Notationen

Variablen:



Wird von MOSAIC bei der Übertragung des Modells aus MathML erkannt.

Variable C_A besteht aus

- Basis C, Notation Information: 'concentration variable [kmol/m3]...'
- Index A, Notation Information: 'pertaining to species A'

1. MOSAIC

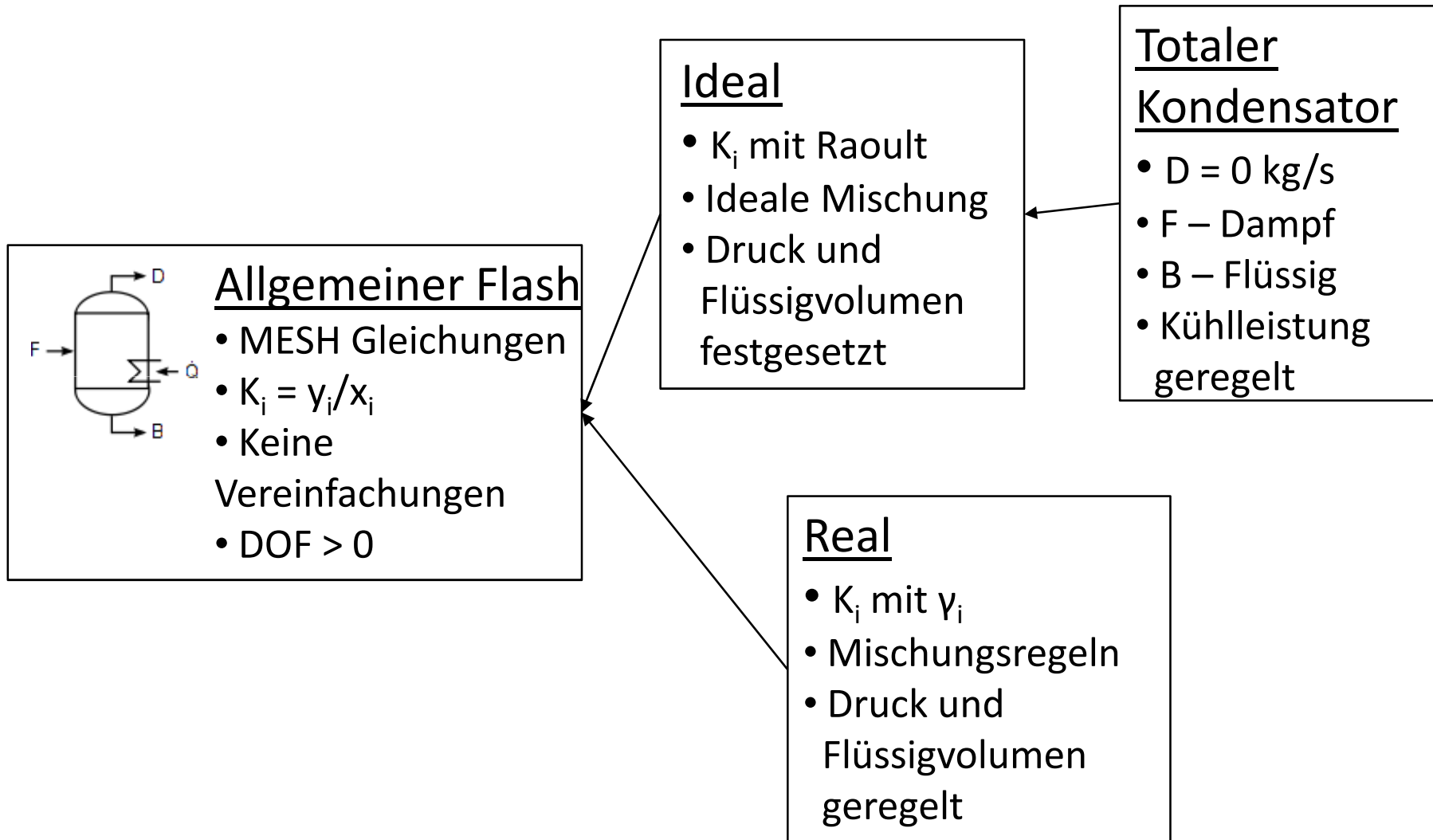
- ▶ Motivation
- ▶ Konzept und Grundlagen

2. Modularität

- ▶ Ziele und Möglichkeiten
- ▶ Wiederverwendung von Gleichungssystemen
- ▶ Anwendungsbeispiel

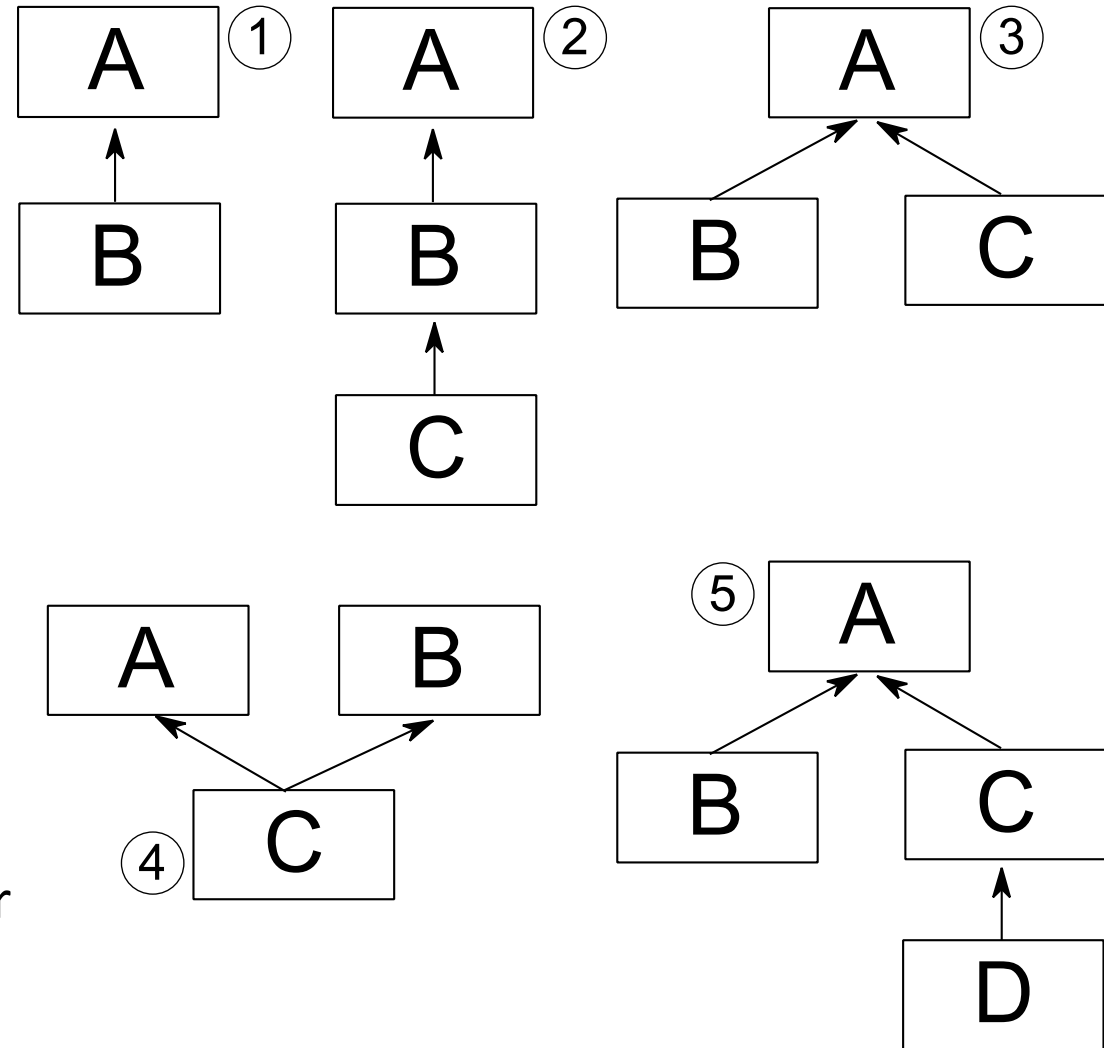
3. Anwendungsbeispiel

4. Zusammenfassung und Ausblick



Ziele - Modularität

- ▶ Wiederverwenden von Gleichungen und Gleichungssystemen
- ▶ Vermeiden von Redundanz
- ▶ Weniger Fehler bei der Modellierung



1. Erweitern des Gleichungssystems A mit weiteren Elementen
2. Erweitern über mehrere Ebenen
3. A als allgemeine Grundlage für Gleichungssystem B und C
4. Mehrfachvererbung
5. Kombinationen

Zusammenfügen in ein Gleichungssystem

Zwei Gleichungen werden
getrennt gespeichert:

'eq_I': $0 = a \cdot (1 - x)$

'eq_II': $0 = b \cdot (y - x^2)$

Ziel:

Existierende Gleichungen
zu einem Gleichungssystem
verschalten

Gleichungssystem:

$$0 = a \cdot (1 - x)$$

$$0 = b \cdot (y - x^2)$$

Traditionell:

Zuweisung nötig -> extra Gleichungen (z.B. in Modelica:)

$$\text{eq_I.x} = \text{eq_II.x} \quad \text{unerwünscht}$$

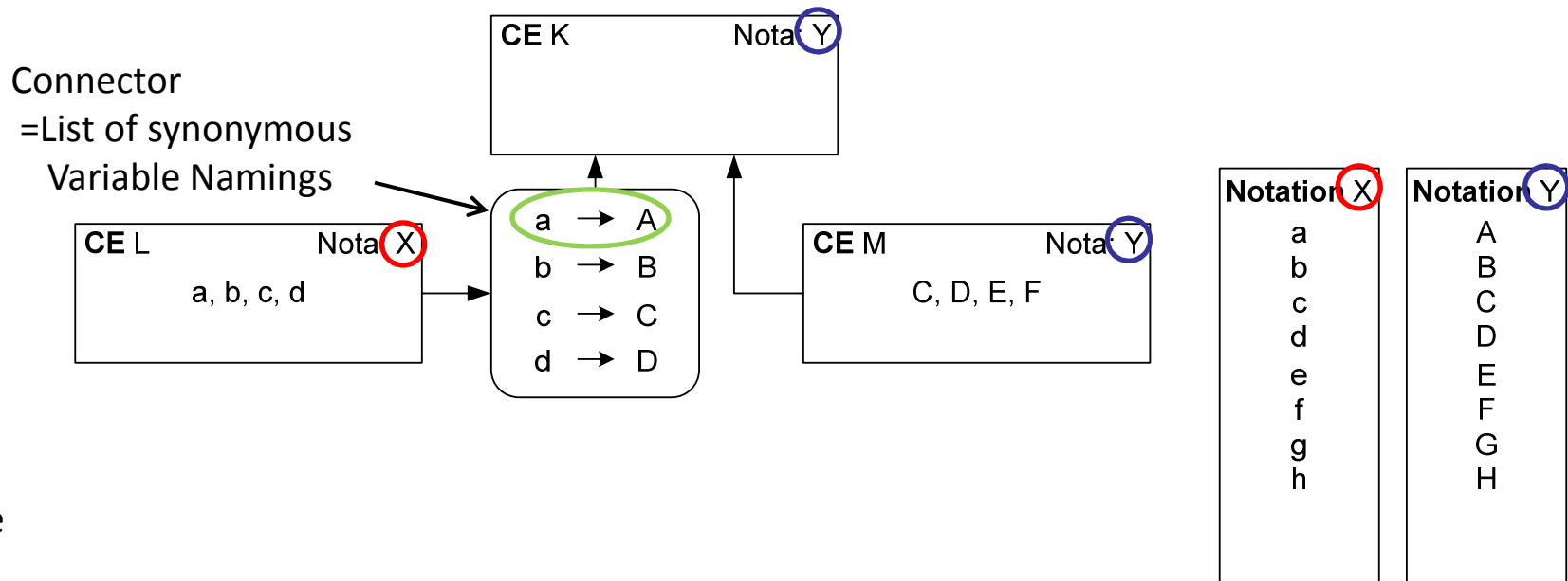
In MOSAIC

- ▶ Gleichungen werden einzeln gespeichert
- ▶ Extra Gleichungen werden vermieden
- ▶ Abgleichen der Variablen

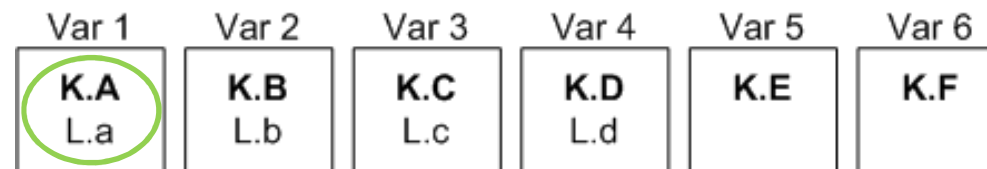
Einbinden von Gleichungselementen "Integrate"

"Integrate" : Verwenden einer Notation, Übersetzen der Variablen in den Namensraum

CE – Connected Element
= Gleichung oder Gleichungssystem



Resultiere

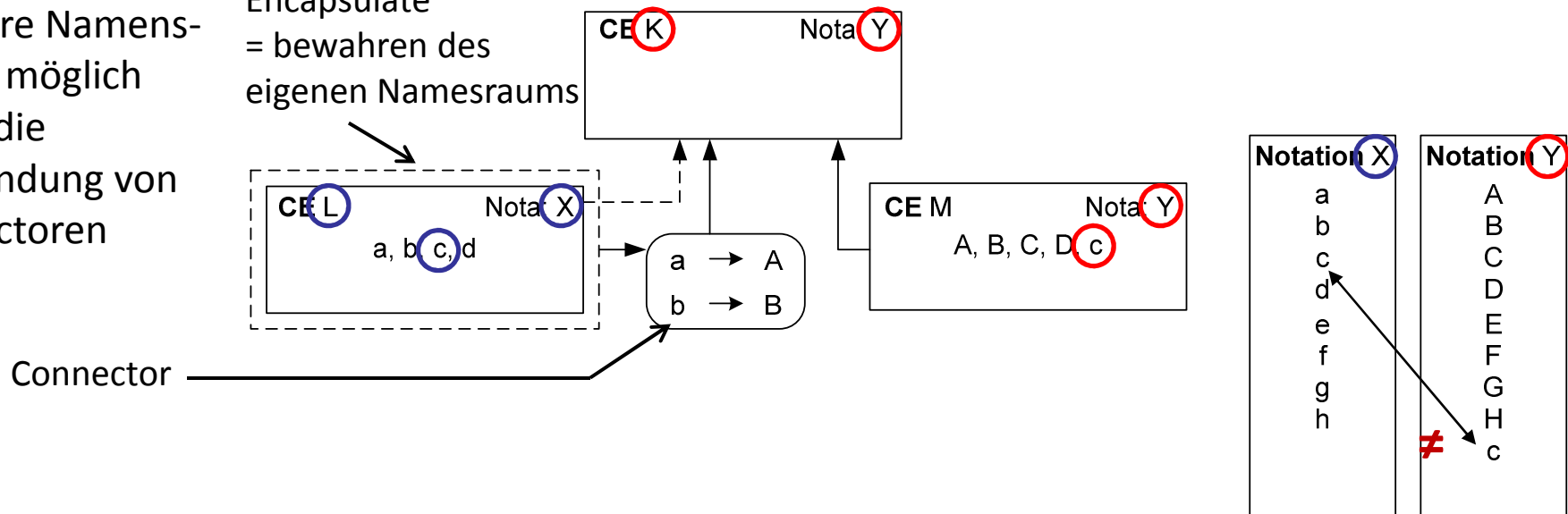


Einbinden von Gleichungselementen "Encapsulate"

"Encapsulate" :

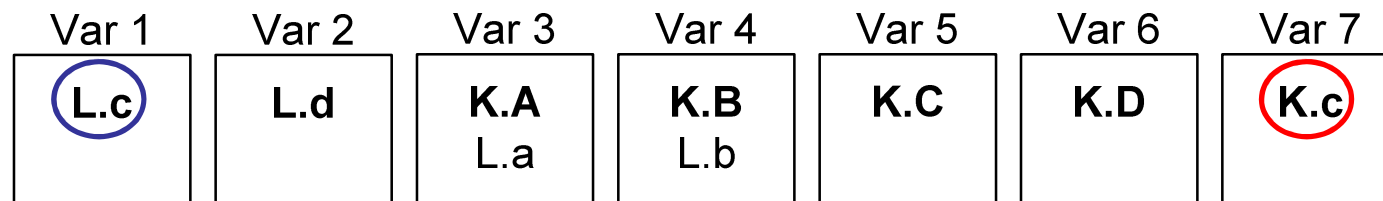
Mehrere Namens-
räume möglich
durch die
Verwendung von
Connectoren

Encapsulate
= bewahren des
eigenen Namesraums



CE – Connected Element
= Gleichung oder Gleichungssystem

Unterschiedliche Bedeutung



1. MOSAIC

- ▶ Motivation
- ▶ Konzept und Grundlagen

2. Modularität

- ▶ Ziele und Möglichkeiten
- ▶ Wiederverwendung von Gleichungssystemen
- ▶ Anwendungsbeispiel

3. Anwendungsbeispiel

4. Zusammenfassung und Ausblick

Beispiel - Reaktor OCM - Prozess

k	Reaction	i	Species
1	$CH_4 + \frac{1}{4}O_2 \Rightarrow \frac{1}{2}C_2H_6 + \frac{1}{2}H_2O$	1	CH_4
		2	O_2
2	$\frac{1}{2}C_2H_6 + \frac{1}{4}O_2 \Rightarrow \frac{1}{2}C_2H_4 + \frac{1}{2}H_2O$	3	C_2H_4
		4	C_2H_6
3	$CH_4 + 2O_2 \Rightarrow CO_2 + 2H_2O$	5	H_2O
4	$\frac{1}{2}C_2H_4 + \frac{3}{2}O_2 \Rightarrow CO_2 + H_2O$	6	CO_2

$$r_k = k_{o,k} \cdot e^{-\frac{E_{A,k}}{R \cdot T}} \cdot C_{a,k}^{m_k} \cdot C_{b,k}^{n_k}$$

$$r_i = \sum_{k=1}^{NK} c_k \cdot r_k$$

$$\frac{dC_i^t}{dl} = r_i \cdot w \cdot \frac{A}{v^t}$$

k	k_o	E_A	C_a	m	C_b	n	$i \setminus k$	1	2	3	4
1	1.2	99000	$C_{i=1}^t$	0.8	$C_{i=2}^t$	1.1	1	-1	0	-1	0
2	2e-4	6000	$C_{i=4}^t$	0.8	$C_{i=2}^t$	1.0	2	-1/4	-1/4	-2	-3/2
3	1.5e-2	51000	$C_{i=1}^t$	0.4	$C_{i=2}^t$	1.5	3	0	1/2	0	-1/1
4	2e-16	220000	$C_{i=3}^t$	0.8	$C_{i=2}^t$	1.6	4	1/2	-1/2	0	0
							5	1/2	1/2	2	1
							6	0	0	1	1

Modellansicht in MOSAIC

Generische Gleichungssystem mit Gleichungen und Funktionen

Equations	Functions
Conn	
$\frac{d C_i}{d l} = r_i \cdot w \cdot \frac{A}{V_i}$	

Equations	Functions
Function	
Location: example_fixed_bed_reactor/kinetics_func.xml	
$r_k^b(C_{i=1}, C_{i=2}, e, R, T) = k \cdot (e)^{-\frac{E}{R \cdot T}} \cdot (C_{i=1})^m \cdot (C_{i=2})^n$	
Description: reaction kinetics based on arrhenius equation and two concentrations	
No. of usages: 4	
Location: example_fixed_bed_reactor/kinetics_func_applied.xml	
$r_c^a(r_{k=1}, r_{k=2}, r_{k=3}, r_{k=4}) = a \cdot r_{k=1} + b \cdot r_{k=2} + c \cdot r_{k=3} + d \cdot r_{k=4}$	
Description: reaction kinetic ocm weighted application of reaction kinetics to all components	
No. of usages: 1	

Modellansicht in MOSAIC

Instanziertes Gleichungssystem (Hier nur Gleichungen)

Equation System	Indexing	Instance	Info	Variable Specification	Parameter Specification	Evaluation	Results
Equation Instance							
(0)							
$\frac{d C_{i=1}^t}{d l} = r_{i=1} \cdot w \cdot \frac{A}{v_t}$							
(1)							
$\frac{d C_{i=2}^t}{d l} = r_{i=2} \cdot w \cdot \frac{A}{v_t}$							
(2)							
$\frac{d C_{i=3}^t}{d l} = r_{i=3} \cdot w \cdot \frac{A}{v_t}$							
(3)							
$\frac{d C_{i=4}^t}{d l} = r_{i=4} \cdot w \cdot \frac{A}{v_t}$							
(4)							
$\frac{d C_{i=5}^t}{d l} = r_{i=5} \cdot w \cdot \frac{A}{v_t}$							
(5)							
$\frac{d C_{i=6}^t}{d l} = r_{i=6} \cdot w \cdot \frac{A}{v_t}$							

Equations Functions

Connected El

$$\frac{dC_i}{dt} = r_i \cdot \frac{A}{v_t}$$

Equations Functions

Function

Location: example_fixed_bed_reactor/kinetics_func.m

$$r_k^b(C_{i=1}, C_{i=2}, e, R, T) = k \cdot (e)^{-\frac{E}{R \cdot T}} \cdot (C_{i=1})^m \cdot (C_{i=2})^n$$

Matlab unterstützt Funktionen.

Funktionen werden • direkt eingefügt **und**
• bei der Berechnung aufgerufen

```
function [std_r_b] = fun_example_fixed_bed_reactor_kinetics_func(std_C_i1, std_C_i2, std_e, std_R, std_T,
    std_r_b = std_k * power((std_e), - (std_E)/(std_R * std_T)) * power((std_C_i1), std_m) * power((:
    ...
function [DYDX] = calculateDifferentials(X, Y, PARAMS)
    e0_r_k2 = fun_example_fixed_bed_reactor_kinetics_func(e0_C_t_i4, e0_C_t_i2, e0_e, e0_R, e0_T, f0
    e0_r_i1 = fun_example_fixed_bed_reactor_kinetics_func_applied(e0_r_k1, e0_r_k2, e0_r_k3, e0_r_k4
    DYDX(1) = e0_r_i1 * e0_w * (e0_A)/(e0_v_t);
    DYDX(2) = e0_r_i2 * e0_w * (e0_A)/(e0_v_t);
    DYDX(3) = e0_r_i3 * e0_w * (e0_A)/(e0_v_t);
    ...
```

Matlab ODE Funktionsaufruf

Code für den Aspen Custom Modeller

Equations Functions

$$\frac{dC_i}{dt} = r_i \cdot \frac{A}{V_t}$$

Equations Functions

Location: example_fixed_bed_reactor/kinetics_func.xml

$$r_k^b(C_{i=1}, C_{i=2}, e, R, T) = k \cdot (e)^{-\frac{E}{R \cdot T}} \cdot (C_{i=1})^m \cdot (C_{i=2})^n$$

**Aspen Custom Modeller
unterstützt keine Funktionen.**

- Functionen werden
- umgewandelt in algebraische Gleichungen und
 - in zu dem Gleichungssystem hinzugefügt

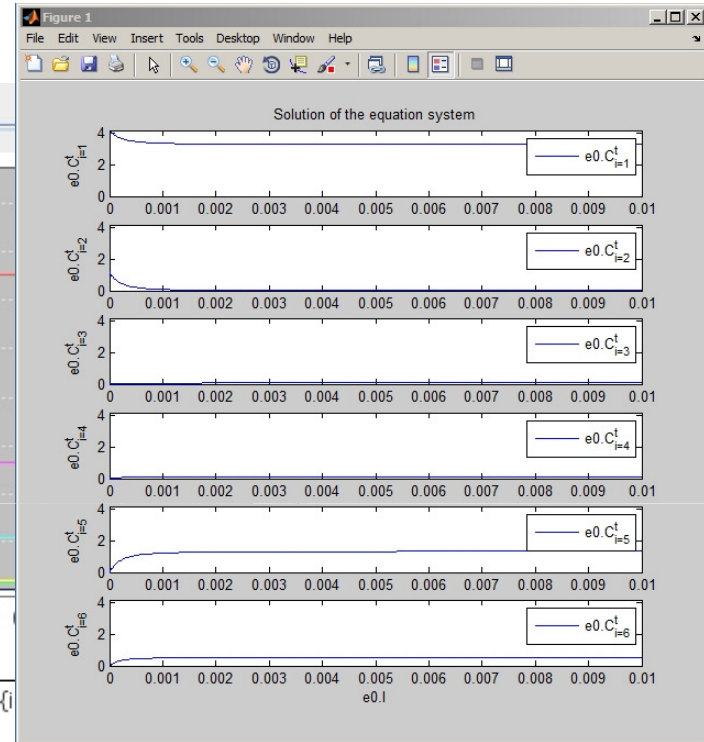
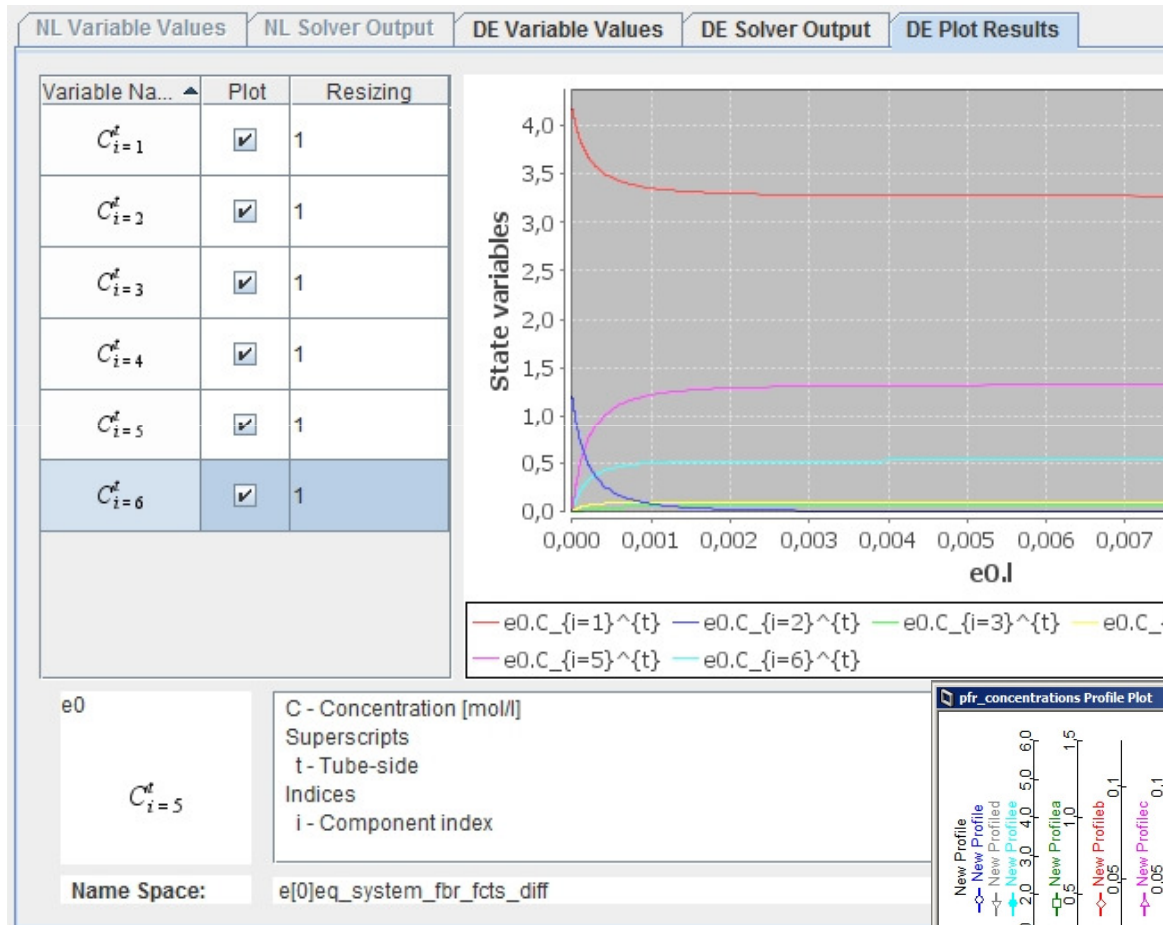
```

for i in [1:e0_1.endnode] do
  e0_C_t_i1(i).ddx = e0_r_i1(i)*e0_w*(e0_A)/(e0_v_t);
  e0_C_t_i2(i).ddx = e0_r_i2(i)*e0_w*(e0_A)/(e0_v_t);
  ...
  0 = e0_r_k2(i) - (f0_k_k2*((e0_e))^( -(f0_E_k2)/(e0_R*e0_T) )*((e0_C_t_i4(i)))^(f0_m_k2))*((e0_C_t_i2(i)) ...
  0 = e0_r_i1(i) - (f1_a_c1*e0_r_k1(i) + f1_b_c1*e0_r_k2(i) + f1_c_c1*e0_r_k3(i) + f1_d_c1*e0_r_k4(i));
  ...
  0 = e0_r_i6(i) - (f1_a_c6*e0_r_k1(i) + f1_b_c6*e0_r_k2(i) + f1_c_c6*e0_r_k3(i) + f1_d_c6*e0_r_k4(i));
endfor
  
```

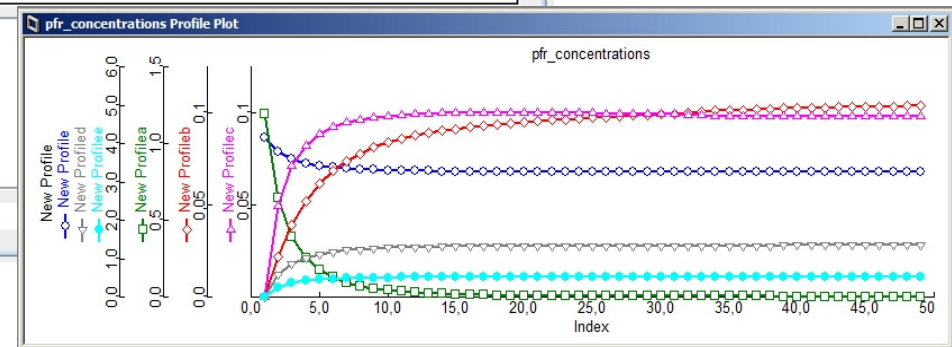
Gleichungen des DAE-Systems
im Aspen Custom Modeler

MOSAIC ↓

Matlab →



Aspen Custom Modeler →



Zusammenfassung

- ▶ MOSAIC, eine webbasierte Modellierungsumgebung
- ▶ Dezentrale Ablage der Modellkomponenten
- ▶ Ansatz für modulare Modellierung

Ausblick

- ▶ Bewertungsmechanismen für die Gleichungssysteme
- ▶ Entwurf und Anbindung einer Datenbank für Messwerte
- ▶ Berechnung höherer Ableitungen z.B. für die Optimierung mit dem hauseigenen Löser sDACI und optimale Versuchsplanung

Danke für Ihre Aufmerksamkeit!

Die Arbeit wird von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen des Transregio-Sonderforschungsbereiches SFB/TR 63 InPROMPT „Integrierte chemische Prozesse in flüssigen Mehrphasensystemen“ gefördert.