

Eine webbasierte Modellierungsumgebung für Code-Generierung*

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

Technische Universität Berlin, 10623 Berlin

Trotz vorhandener Modelle in den kommerziellen Simulatoren wie z.B. Aspen[®], gPROMs[®], ChemCAD[®] besteht ein Bedarf an angepassten Modellen zur verbesserten Prozessbeschreibung und/oder zur dynamischen Simulation und Optimierung von Nichtstandardanwendungen. Die Modellentwicklung, der Test und die Validierung stellen aufwendige Arbeitsschritte dar. In diesem Beitrag wird eine neue Modellierungsumgebung (MOSAIC) und einen hierarchischen Modellierungsansatz vorgestellt, mit welcher der Unterschied zwischen Literatur bzw. Dokument- und Computermodell beseitigt wird. Der Übertragungsschritt vom physikalisch-chemischen Modell zum Computermodell stellt eine große Fehlerquelle dar, die mit diesem Ansatz minimiert wird. Hierfür wird die Notation als getrenntes und obligatorisches Modellelement eingeführt, das von Gleichungen, Gleichungssystemen und Funktionen verwendet wird. Der neue Ansatz arbeitet mit zweidimensionalen symbolischen Formulierungen für die Darstellung mathematischer Formeln. Der mathematische und strukturelle Inhalt der Modelle wird in XML und MathML hinterlegt. Geeignete Datenstrukturen werden eingeführt, um Modelle mit verschiedenen Notationen miteinander zu vereinen. Dabei weist die neue Modellierungsumgebung einen hohen Grad an Modularität auf. Gleichungen werden in getrennten Strukturen und unabhängig von Gleichungssystemen definiert.

Im eigens entwickelten hierarchischen Lösungsansatz werden systematisch Gleichungssysteme aus existierenden Gleichungen oder anderen Gleichungssystemen zusammengesetzt. Die Verwendung von Notationen erlaubt dabei eine Verbindung der Variablen zwischen den Gleichungen, die ohne die Einführung zusätzlicher Gleichsetzungen auskommt. Die in XML/MathML hinterlegten Modelle stellen abstrakte Anweisungen zur Code-Generierung dar. Derzeit stehen in MOSAIC Code-Generatoren für C/C++, Matlab[®], gPROMS[®], Aspen Custom Modeller[®], GAMS[®] und Fortran zur Verfügung. Der generierte Programmcode kann wahlweise entweder in der Entwicklungsumgebung gelöst oder für die weitere Berechnung in anderen Umgebungen wie oben angegeben verwendet

werden. Um die Verwendung des vorgeschlagenen Lösungsansatzes sowie der Modellierungsumgebung zu demonstrieren, wird eine Technikumsanlage zur Untersuchung der Hydraulik von Kolonneneinbauten unter Verwendung verschiedener Modellansätze dynamisch unter MOSAIC aus einem Dokument modelliert. Anschließend wird das Gleichungssystem exemplarisch nach gPROMs[®] exportiert und dort gelöst. Die Messungen aus der Technikumsanlage werden dazu genutzt, die Simulationsergebnisse der verschiedenen Modellansätze zu validieren und zu bewerten. Weitere in der Modelldatenbank von MOSAIC implementierten Modelle wie z.B. Nichtgleichgewichtsmodelle für reaktive Kolonnen, Reaktoren, Membranreaktoren werden vorgestellt. Eine graphische Nutzerumgebung unterstützt und überwacht dabei den gesamten Modellierungsprozess.

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