

Vorverarbeitungswerkzeug für die Simulationsumgebung DIVA zur Diskretisierung von Prozessmodellen mit der Linienmethode*

R. Köhler

Institut für Systemdynamik und Regelungstechnik, Universität Stuttgart

Pfaffenwaldring 9, D-70550 Stuttgart, Germany

email: koehler@isr.uni-stuttgart.de, fax: ++49-711-685-6371

Abstract

Köhler R.: Preprocessing Tool for Method-of-Lines Discretization of Process Models in the Simulation Environment DIVA. For an accurate description of a wide variety of chemical engineering processes, distributed parameter models have to be used which are described by partial differential equations (PDEs). Such PDE models must be preprocessed for application of the DIVA simulation environment, which provides efficient numerical methods for differential algebraic equations (DAEs). This contribution presents the preprocessing tool SYPPROT for computer-aided discretization of PDE into DAE models by means of the Method of Lines.

1 Einführung

Die numerische Simulation ist heutzutage ein Standardwerkzeug für die Entwicklung von verfahrenstechnischen Prozessen und Anlagen. Für dieses Anwendungsgebiet stehen speziell entwickelte Modellierungs- und Simulationsumgebungen zur Verfügung. Es handelt sich dabei um gleichungsorientierte Modellierungswerkzeuge [Pantelides and Barton, 1993, Marquardt, 1996], die eine deklarative Beschreibung eines mathematischen Modells für komplexe Prozesse unterstützen [Pantelides and Britt, 1995]. Diese Programmpakete verfügen über eine allgemeine Modellierungssprache, welche die Definition von Differential-Algebra-Gleichungen (DAEs) für zeitkontinuierliche Modelle sowie ereignisdiskrete Beschreibungen gestattet. Für die Untersuchung von DAE-Modellen steht in den Werkzeugen eine Bibliothek von numerischen Methoden zur Verfügung. Dabei handelt es sich v.a. um effiziente Verfahren zur numerischen Integration, die speziell für DAE-Modelle entwickelt worden sind. Oftmals wird dazu die dünn besetzte Struktur der DAE-Systeme ausgenutzt - man spricht dann von *Sparse-Numerik* oder *Sparse-Matrix-Technik*.

Mit DAE-Modellen kann eine große Bandbreite verfahrenstechnischer Apparate und Prozesse beschrieben werden. Für eine hinreichend genaue Beschreibung von verfahrenstechnischen Prozessen ist jedoch vielfach die Verwendung von örtlich verteilten Modellen, d.h. partiellen Differentialgleichungen (PDEs), notwendig. Das betrifft Prozesse mit ausgeprägten Ortsprofilen, die

*Dieser Beitrag stellt die deutsche Kurzfassung der englisch sprachigen Dissertation [Köhler, 2002] dar, die unter der Betreuung von Prof. Dr.-Ing. Dr.h.c. M. Zeitz am Institut für Systemdynamik und Regelungstechnik angefertigt wurde.

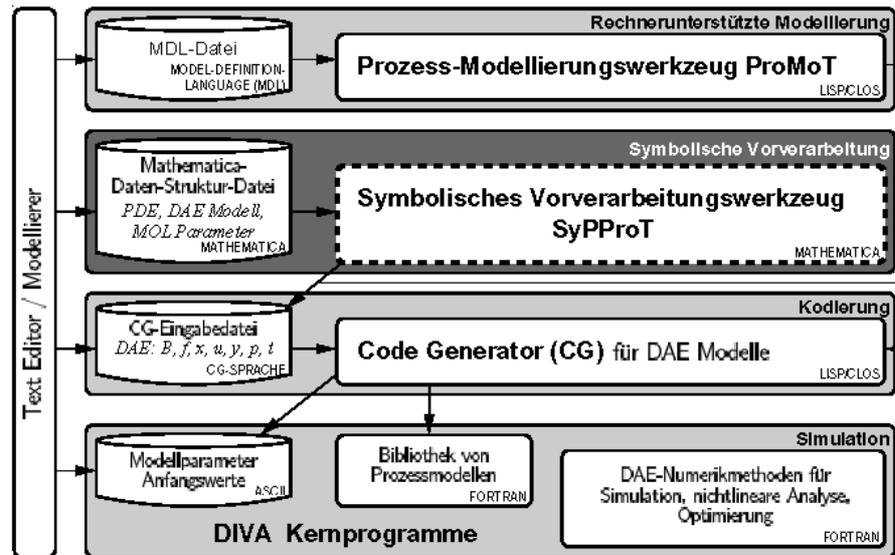


Abbildung 1: Architektur der Simulationsumgebung DIVA mit den Werkzeugen zur rechnerunterstützten Modellierung (PROMOT), zur symbolischen Vorverarbeitung (SYPPROT) und zur automatischen Kodierung (CODE GENERATOR) sowie den Kernprogrammen zur Simulation (Modell-Bibliothek, Parameterierung, DAE-Numerik) [Mohl et al., 1997, Köhler et al., 2001b].

sich oft durch steile und wandernde Fronten auszeichnen. Damit stellt sich für die Anlagensimulation die Aufgabe, die verwendeten Teilmodelle mit konzentrierten und verteilten Parametern auf eine einheitliche DAE-Form zu bringen.

Zur Umformung von PDEs in DAEs bietet sich die *Linienmethode (Method of Lines – MOL)* an [Schiesser, 1991]. Dabei wird die kontinuierliche Ortsvariable diskretisiert und eine PDE durch eine begrenzte Anzahl von zeitabhängigen gewöhnlichen Differentialgleichungen (ODEs) und ggf. algebraischen Gleichungen (AEs) für die Ortsränder approximiert. Dazu werden Ortsableitungen durch Näherungen ersetzt, die auf dem diskreten Ortsgitter basieren. Durch diese Approximationen erhält man aus einer PDE ein dünn besetztes DAE-System, das eine Bandstruktur besitzt. Zur Lösung der approximierten Modelle sind Sparse-Numeriken für DAE besonders gut geeignet.

Der Auswahl eines geeigneten Diskretisierungsverfahrens kommt eine besondere Bedeutung zu, weil es für die grosse Vielfalt von örtlich verteilten Prozessmodellen kein universal geeignetes MOL-Diskretisierungsschema gibt. Zwar sind mit Standardverfahren wie Finite-Differenzen- und Finite-Volumen-Verfahren mit Approximationen niedriger Ordnung meistens hinreichend genaue Simulationsergebnisse möglich. Der dazu erforderliche hohe Stützstellenzahl führt allerdings zu einem erheblichen Rechenaufwand. Deshalb sind Verfahren entwickelt worden, die mit vergleichsweise wenigen Stützstellen eine genaue Lösung erlauben. Dabei werden adaptive Techniken verwendet, die bspw. die Approximationen der Ortsableitungen oder die Verteilung der Gitterstützstellen an den Lösungsverlauf anpassen [Wouwer et al., 2001]. Eine Effizienzsteigerung erfordert, dass der für die Adaption anfallende zusätzliche Rechenaufwand kleiner ist, als der Rechenzeitgewinn, der durch die Einsparung an Stützstellen entsteht. Meist bedingt dies eine gewisse Spezialisierung auf bestimmte Typen von PDE-Modellen.

Aufgrund der Vielfalt an MOL-Diskretisierungsschemata und der Komplexität von verfahrenstechnischen Prozessmodellen ist für die Anwendung der Linienmethode eine rechnerunterstützte Vorverarbeitung der Modellgleichungen notwendig. Damit soll der Benutzer von fehlerträchtigen Arbeiten entlastet werden, die bei der Implementierung der diskretisierten Gleichungen entste-

hen [Marquardt, 1991]. Hinsichtlich einer genauen und effizient zu berechnenden Lösung, ist die Auswahl eines MOL-Verfahrens für ein bestimmtes PDE-Modell oft schwierig und gelingt nur selten auf Anhieb. Deshalb ist eine wiederholte Anwendung der Linienmethode mit unterschiedlichen Diskretisierungsschemata unvermeidlich. Auch dabei kann der entstehende Aufwand mit Hilfe einer Rechnerunterstützung minimiert werden. Das erfordert ein entsprechendes Werkzeug, das eine Palette von einfach anwendbaren Diskretisierungsschemata bereit stellt.

Eine solche Vorverarbeitung ist in der Simulationsumgebung DIVA [Kröner et al., 1990, Holl, 1994, Mohl et al., 1997] prototypisch untersucht und implementiert worden [Räumschüssel, 1998]. Dabei wurden die Vorverarbeitungs-Funktionalitäten durch unterschiedliche Programme bereitgestellt, die eigene Datenformate für die Modelle verwendet haben, wie beispielsweise das Programm PDEDIS zur MOL-Diskretisierung von PDE-Modellen [Räumschüssel, 1998]. Die Architektur von DIVA umfasst vier unabhängig benutzbaren Programmschichten und ist in Abbildung 1 dargestellt. Dabei steht die mit einem einheitlichen Datenformat abgebildete symbolische Vorverarbeitung zwischen der rechnerunterstützten Modellierung mit dem Modellierungswerkzeug PROMOT [Tränkle, 2000, Tränkle et al., 2000] und der automatischen Kodierung der Simulationsmodelle mit dem CODE GENERATOR (CG) [Räumschüssel, 1998].

Das Vorverarbeitungswerkzeug unterstützt den Benutzer bei der Umformung von Gleichungen in die von DIVA benötigte Standardform von DAE-Modellen. Als Ergebnis der Vorverarbeitung wird eine CG-Eingabedatei erzeugt, die das symbolische Prozessmodell in der DIVA-Standardform enthält und anschliessend vom CODE GENERATOR in den Simulationscode für DIVA übersetzt wird. Die Modell-Bibliothek und die numerischen Methoden für DAE bilden die unterste Schicht der Simulationsumgebung DIVA. Aufgrund der statischen Speicherplatzverwaltung von DIVA müssen die simulierten DAE-Modelle eine feste Ordnung besitzen.

Dies ist der Ausgangspunkt für die Untersuchung von MOL-Diskretisierungsverfahren für verfahrenstechnische Prozessmodelle und deren Implementierung in einem Vorverarbeitungswerkzeug für die Simulationsumgebung DIVA. Daraus ergeben sich die in [Köhler, 2002] untersuchten Aufgabenpunkte. Bei der betrachteten Klasse von örtlich verteilten Modellen für verfahrenstechnische Prozess handelt es sich um hyperbolische und parabolische PDE, die in einer Vektor-Notation beschrieben werden. Darauf basierend wird untersucht, welche MOL-Schemata sich für die DAE-Numerik in DIVA eignen. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die feste DAE-Ordnung eine Änderung der Gleichungsanzahl während eines Simulationsexperiments verbietet. Das schliesst MOL-Verfahren mit adaptiven Ortsgittern aus, die mit einer variablen Anzahl von Stützstellen arbeiten.

Für die Implementierung der rechnerunterstützten MOL-Diskretisierung wird das von Räumschüssel vorgeschlagene Konzept für ein Vorverarbeitungswerkzeug [Räumschüssel, 1998] aufgegriffen und für die zur MOL-Diskretisierung benötigten Funktionalitäten erweitert. Dieses Konzept sieht ein einheitliches Datenformat zur Modelldefinition für alle Vorverarbeitungs-Funktionalitäten vor. Die dazu entworfene MATHEMATICA-Daten-Struktur [Räumschüssel, 1998] wird für die Eingabe von verteilten Prozessmodellen um die Definitionen von PDEs, Ortsgittern und MOL-Schemata erweitert. Die MOL-Diskretisierung wird als ein separates Programm-Modul des Vorverarbeitungswerkzeugs realisiert. Dieses MOL-Modul besteht aus mehreren Untermodulen, in denen die symbolischen Umformungen der Modellgleichung durchgeführt werden, die zur Anwendung der verschiedenen MOL-Schemata notwendig sind.

Die Anwendung der rechnerunterstützten Vorverarbeitung zur Diskretisierung von Prozessmodellen mit Hilfe der Linienmethode wird anhand der örtlich verteilten Modellgleichungen eines Zirkulations-Festbett-Reaktor-Modells illustriert. Dieses Modell besteht aus mehreren miteinander verkoppelten Ortsbereichen [Kienle et al., 1995, Mangold et al., 1999]. Das Verhalten des

Reaktors ist durch wandernde Reaktionsfronten gekennzeichnet und damit ein realitätsnaher Test für die Anwendung von MOL-Verfahren.

2 Verteilte Prozessmodelle in der Simulationsumgebung DIVA

Zur Beschreibung der betrachteten verfahrenstechnischen Prozesse mit ausgeprägten Profilen entlang einer Ortskoordinate werden örtlich 1-dimensional verteilte Modelle verwendet. Deren Gleichungen sind gekoppelte PDEs für den Zustandsvektor $x(z, t)$. Die PDEs sind bis zu zweiter Ordnung im Ort z und erster Ordnung in der Zeit t . Die Anfangsbedingungen sind als örtliche Profile $x^0(z)$ gegeben. Dazu passende Randbedingungen hängen von dem Eingangsvektor $u(t)$ mit $b = z_{min}, z_{max}$ ab. Die Ausgänge $y(z, t)$ stellen ausgewählte Zustände an diskreten Ortsstellen dar.

$$A \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial x}{\partial z} \right) + \frac{\partial F}{\partial z} + \sigma(x, u, p, z, t) \quad t > t_0, \quad z \in (z_{min}, z_{max}) \quad (1a)$$

$$x(z, t_0) = x_0(z) \quad z \in [z_{min}, z_{max}] \quad (1b)$$

$$0 = D_b(x, v_b, p, t) \frac{\partial x}{\partial z} + F_b(x, v_b, p, t) \quad t > t_0, \quad z \in \{z_{min}, z_{max}\} \quad (1c)$$

$$y = \mathcal{H}(x) \quad t > t_0, \quad z \in [z_{min}, z_{max}] \quad (1d)$$

Die Matrizen $A(x, u, p, z, t)$, $D(x, u, p, z, t)$ und der Vektor der Quellfunktionen $\sigma(x, u, p, z, t)$ können von Zustands- $x(z, t) \in \mathbb{R}^n$ und Eingangsvariablen $u(z, t)$ sowie von Parametern p und von z und t abhängen. Die Flussfunktion $F(x, u, p, z, t)$ beschreibt den konvektiven Transport. Im Hinblick auf die Verschaltung von Simulationsmodellen in DIVA sind für jedes Apparate- oder Prozessmodell Ausgangsvariablen $y(z, t)$ zu definieren. Als Ausgangsvariablen sind nur Zustandsvariablen erlaubt. In diesem Sinne weist der Operator \mathcal{H} ausgewählte Zustände den Ausgangsvariablen zu. Mit der Formulierung (1a) können sowohl hyperbolische als auch parabolische Modelle dargestellt werden, die die Beschreibung von konvektiven, diffusiven und dispersiven Effekten sowie von chemischen Reaktionen erlauben.

Darüber hinaus können Integralterme mit Hilfe der Quellfunktionen $\sigma(x, u, p, z, t)$ dargestellt werden, wie diese in partiellen Integro-Differentialgleichungen (IPDEs) für Populationsbilanzen auftreten. Da jedoch ausser für sehr einfache Populationsmodelle eine effiziente Anwendung der Linienmethode prinzipiell schwierig ist [Motz et al., 2002], wird auf eine detaillierte Darstellung der MOL-Behandlung von IPDEs verzichtet.

Für eine Anwendung der in DIVA verfügbaren DAE-Numeriken zur Simulation eines örtlich verteilten Prozesses ist eine Umformung des PDE-Modells (1) in die DIVA-Standardmodellform erforderlich. Die in DIVA verwendete linear implizite DAE-Form mit einem differentiellen Index von eins lautet :

$$B(x, u, p, t) \cdot \frac{dx}{dt} = f(x, u, p, t) \quad t > t_0 \quad (2a)$$

$$x(t_0) = x^0 \quad (2b)$$

$$y = H \cdot x \quad t \geq t_0 \quad (2c)$$

Die Zustände $x(t)$, Eingänge $u(t)$ und Ausgänge $y(t)$ hängen von der Zeit t ab. Die linke Seite-Matrix $B(x, u, p, t)$ und der Funktionsvektor $f(x, u, p, t)$ können außerdem von Parametern p sowie den Zuständen und Eingängen abhängen. Die Ausgangsmatrix H ordnet dem Ausgangsvektor y ausgewählte Zustände zu. Der Übersichtlichkeit halber sind in (2) ereignisdiskrete Beschreibungen nicht berücksichtigt. Diesbezüglich wird auf [Köhler et al., 2001a] verwiesen.

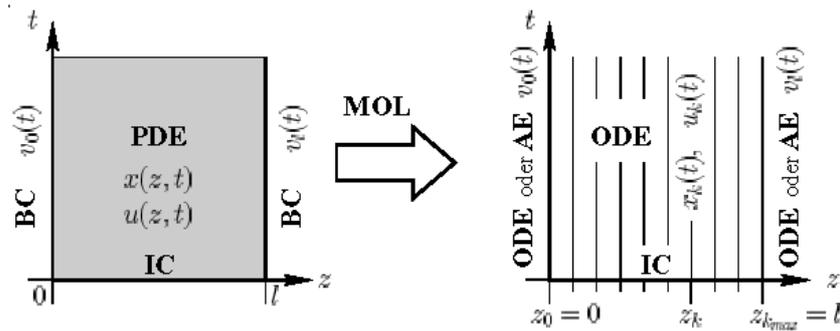


Abbildung 2: Method-of-Lines (MOL) zur Umformung von partiellen Differentialgleichungen (PDEs) und Randbedingungen (BCs) in gewöhnliche Differentialgleichungen (ODEs) und algebraische Gleichungen (AEs) [Schiesser, 1991].

Die Umformung eines PDE-Modells (1) in die DAE-Form (2) ist mit Hilfe der Linienmethode möglich. Die Diskretisierung des Ortsbereichs in k Stützstellen bedingt für den Zustandsvektors $\mathbf{x}(z, t) \in \mathbb{R}^n$ eine Approximation durch $\mathbf{x}_k(t) \in \mathbb{R}^n, k = 0(1)k_{max}$.

3 Linienmethode – Method of Lines (MOL)

In Abbildung 2 ist das Vorgehen der Linienmethode zur Ortsdiskretisierung von PDEs und BCs veranschaulicht. Dabei wird zuerst die kontinuierliche Ortskoordinate z auf ein Ortsgitter mit diskreten Stützstellen $z_k, k = 0(1)k_{max}$ abgebildet. In Abhängigkeit der Diskretisierungsmethode lassen sich die in den PDEs und BCs auftretenden Ortsableitungen durch Näherungen ersetzen, wobei die Randbereiche gegebenenfalls gesondert behandelt werden müssen. Eine PDE mit BCs wird damit durch eine begrenzte Zahl von ODEs und algebraischen Gleichungen am Rand approximiert.

3.1 Diskretisierung des Ortsbereichs

Bei der Diskretisierung des Ortsbereichs ist zu beachten, dass der Gitterpunktabstand des Ortsgitters entscheidend für die Größe des Diskretisierungsfehlers und damit die Genauigkeit der Lösung ist. Die einfachste Art der Ortsdiskretisierung ist die Verwendung eines äquidistanten Ortsgitters. Darauf basierende Approximationen niedriger Ordnung führen auf vergleichsweise einfache Gleichungen. Für eine ausreichend genaue Lösung ist aber vielfach ein sehr kleiner Stützstellenabstand notwendig, der zu einem hohen Rechenaufwand führt.

Ein Ansatz zur Verbesserung der Lösungsgenauigkeit ist die Verwendung von adaptiven Gittern. Dabei wird versucht, die Gitterpunkte dort zu platzieren, wo sie für eine genaue Lösung benötigt werden. Bei adaptiven Gittern wird zwischen statischen und bewegten Gittern unterschieden [Flaherty, 1989, Wouwer et al., 2001]. Statische Gitter werden in bestimmten Zeitintervallen an den Lösungsverlauf angepasst, indem an geeigneten Stellen Gitterpunkte hinzugefügt oder gelöscht werden. Dieser Vorgang wird auch als *Static Regridding* bezeichnet. Hingegen werden bei bewegten Gittern die Gitterpunkte kontinuierlich dem Lösungsverlauf angepasst. Dazu werden die Gleichungen auf ein mitbewegtes Koordinatensystem transformiert und es werden zusätzliche Gittergleichungen erzeugt, die den Verlauf der Gitterpunktbewegungen bestimmen. Man spricht von *Dynamic Regridding* oder *Moving-Grid-Verfahren*.

3.2 Diskretisierung der Ortsableitungen

Bei der Linienmethode werden die Ortsableitungen durch Näherungen ersetzt, die auf dem Gitter des diskretisierten Ortsbereichs basieren. Eine PDE wird also durch ODEs in den Stützstellen des Ortsgitters approximiert. Die benötigten Approximationen hängen von den verwendeten Diskretisierungsmethoden ab, die entweder die differentielle oder die integrale Form der PDE benutzen.

Die differentielle PDE-Form (1a) wird für die Finite-Differenzen-Methode benutzt. Die zu approximierenden Ortsableitungen sind daher von erster und zweiter Ordnung. Deren Finite-Differenzen-Schemata können mit Hilfe von Taylor-Reihen- oder Polynomansätzen hergeleitet werden [Schiesser, 1991]. Die Approximationsschemata ersetzen die partiellen Ableitungen in (1a) und werden deshalb genau an den Stützstellen des Ortsgitters benötigt.

Die nachfolgend angegeben integrale Form der PDE ist der Ausgangspunkt für die Anwendung der Finite-Volumen-Methode [Patankar, 1980]:

$$\int_{z_{k-}}^{z_{k+}} A \frac{\partial x}{\partial t} = \left[D \frac{\partial x}{\partial z} \right]_{z_{k-}}^{z_{k+}} + [F]_{z_{k-}}^{z_{k+}} + [\sigma]_{z_{k-}}^{z_{k+}} \quad t > t_0, \quad k = 1(1)k_{max} \quad (3)$$

Als *Finites Volumen* oder *Zelle* wird ein Ortsabschnitt um z_k mit $z \in [z_{k-}, z_{k+}]$ bezeichnet. Zellränder benachbarter finiter Volumen sind dabei identisch: $z_{k-} = z_{k-1+}$, $z_{k+} = z_{k+1-}$. Gleichung (3) beschreibt die zeitliche Änderung des Zustands $x(z, t)$ für eine Zelle k . Die benötigten Approximationen betreffen Ortsableitungen nullter und erster Ordnung an den Zellrändern $z_{k\pm}$.

Die Anwendung von Finite-Differenzen- und Finite-Volumen-Schemata zur Approximation der Ortsableitungen erfordert unterschiedliche Vorgehensweisen für die Diskretisierung von PDEs. Die wesentlichen Merkmale beider in SYPROT implementierten Diskretisierungsmethoden werden im Folgenden kurz beschrieben.

- **Finite-Differenzen-Schemata**

Die in [Köhler, 2002] verwendeten Finite-Differenzen-Schemata werden mit Hilfe von frei konfigurierbaren Lagrange-Polynomen bestimmt. Für die Ortsableitungen erster und zweiter Ordnung werden individuelle Approximationspolynome eingesetzt. Um mögliche Oszillationen an den Randbereichen zu vermeiden, kann die Polynomordnung erniedrigt werden. Eine Extrapolation von Approximationspunkten außerhalb des betrachteten Ortsbereichs wird durch die *Sliding-Differences*-Technik verhindert. Die Funktionalität entspricht damit weitgehend dem Programm PDEDIS [Pfeiffer and Marquardt, 1996] und dessen Neuimplementierung zur Inbindung in DIVA [Räumschüssel, 1998].

- **Finite-Volumen-Schemata**

Örtlich numerisch stabile Finite-Volumen-Schemata verwenden stückweise konstante und lineare Profile zur Approximation der Zellrandwerte. Der Vorteil der Finite-Volumen-Verfahren beruht auf der Einhaltung der Erhaltungseigenschaft. Durch die Verwendung der integralen Form der PDE werden die erforderlichen Approximationen an den Zellrändern benötigt. Sofern identische Approximationen an einem Zellrand für beide angrenzenden Zellen verwendet werden, wird die Erhaltungseigenschaft nicht verletzt [Patankar, 1980].

Für Probleme mit steilen Fronten in den Lösungsprofilen sind die Finite-Differenzen- und Finite-Volumen-Schemata nur eingeschränkt tauglich. Approximationen niedriger Ordnung benötigen sehr feine Gitter, um ausreichend genaue Lösungen zu berechnen. Das bedingt entsprechend lange Rechenzeiten. Approximationen höherer Ordnung können zu numerisch bedingten lokalen örtlichen Oszillationen führen. Zwei Ansätze, die diesbezüglich Abhilfe versprechen, werden in [Köhler, 2002] eingehender untersucht und im Vorverarbeitungswerkzeug implementiert.

- **Hoch auflösende Verfahren**

Hoch auflösenden Verfahren, die von Harten [Harten, 1983] eingeführt wurden, verbinden

eine hohe Approximationsordnung mit numerisch stabilen Lösungen. Dabei spielt die *Total-Variation-Diminishing* (TVD)-Eigenschaft eine wichtige Rolle. Diese Verfahren basieren auf der integralen PDE-Form (3). Die erforderlichen Näherungen betreffen hauptsächlich die Zellrandwerte der Flussfunktion $[F]_{k-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}$. Dazu werden Approximationen höherer Ordnung eingesetzt, die mit Hilfe spezieller nichtlinearer Begrenzungsfunktionen (*Limiter*) dafür sorgen, dass keine lokalen örtlichen Oszillationen auftreten [LeVeque, 1992]. Aufgrund der Verwendung der integralen PDE-Form lassen sich hochauflösende Verfahren als Finite-Volumen Methode in das MOL-Modul des Vorverarbeitungswerkzeugs implementieren. Die Limiter-basierten Approximationen werden dazu als weitere Profile für die Zellrandwerte der Flussfunktion den einfacheren Profilannahmen der Finite-Volumen-Methode hinzugefügt. Bei den sogenannten *Slope-Limiter*-Verfahren unterscheiden sich die Approximationen vielfach nur durch die verwendeten *Limiter*-Funktionen [LeVeque, 1998]. Da diese einfach zu implementieren sind, werden im Vorverarbeitungswerkzeug eine ganze Reihe von hochauflösenden Schemata (MC-, MinMod-, Robust-Upwind-, Superbee-, van Leer-Limiter) zur Verfügung gestellt.

• **Moving-Grid-Verfahren**

Das in [Köhler, 2002] genauer untersuchte Moving-Grid-Verfahren von Dorfi und Drury basiert auf dem Gleichverteilungsprinzip [Dorfi and Drury, 1987, Furzeland et al., 1990]. Dazu wird eine so genannte Monitorfunktion verwendet, die ein Maß für den lokalen Diskretisierungsfehler darstellt. Die Gitterpunkte werden so verteilt, dass der Quotient aus Monitorfunktion und Gitterpunktabstand über den gesamten Ortsbereich nahezu konstant ist. Der Diskretisierungsfehler erster Ordnung im Ort wird damit näherungsweise gleich verteilt. Das Verfahren arbeitet mit einer konstanten Anzahl von Gitterpunkten und ist sowohl mit Finite-Differenzen- als auch mit Finite-Volumen-Schemata kombinierbar. Für eine glatte Verteilung der Gitterpunkte sorgen eine örtliche und eine optionale zeitliche Gitterglättung. Das vergleichsweise robuste Verfahren [Furzeland et al., 1990, Wouwer et al., 1997] wird mit Hilfe zweier einfach interpretierbarer Parameter zur Gitterglättung an das Problem angepasst.

4 Vorverarbeitungswerkzeug SYPPROT

Wie aus Abbildung 1 zu entnehmen, besteht die Aufgabe des Vorverarbeitungswerkzeugs SYPPROT darin, die für ein DAE- und PDE-Prozessmodell von DIVA benötigte linear implizite Gleichungsform (2) zu generieren. Dies erfolgt mit einer rechnerunterstützten MOL-Diskretisierung von PDE-Modellen. Die Untersuchung von MOL-Verfahren im Hinblick auf eine MOL-Implementierung in das Vorverarbeitungswerkzeug von DIVA ist ein wesentlicher Bestandteil von [Köhler, 2002].

4.1 Architektur

Das von Räumschüssel [Räumschüssel, 1998] vorgeschlagene Konzept für ein Vorverarbeitungswerkzeug sieht, wie in Abbildung 3 dargestellt, für jede Vorverarbeitungsfunktion separate Programm-Module vor. Eines dieser Modul dient der rechnerunterstützten MOL-Diskretisierung von PDE-Modellen. Darüber hinaus beinhaltet das Vorverarbeitungswerkzeug eine zentrale Datenstrukturverwaltung, die die aktuellen Modellinformationen enthält. Die Datenstrukturverwaltung steuert außerdem die Programm-Module sowie die Ein- und Ausgabeprogramme in SYPPROT und hat damit eine Schnittstellenfunktion für die entsprechenden Programme. Zur Repräsentation von PDE- und DAE-Modellen wird eine in MATHEMATICA realisierte Datenstruktur verwendet. Die Eingabe erfolgt entweder mit Hilfe eines Text-Editors oder dem *Notebook Front End*, der grafischen Benutzeroberfläche von MATHEMATICA. Dabei wird der Benutzer

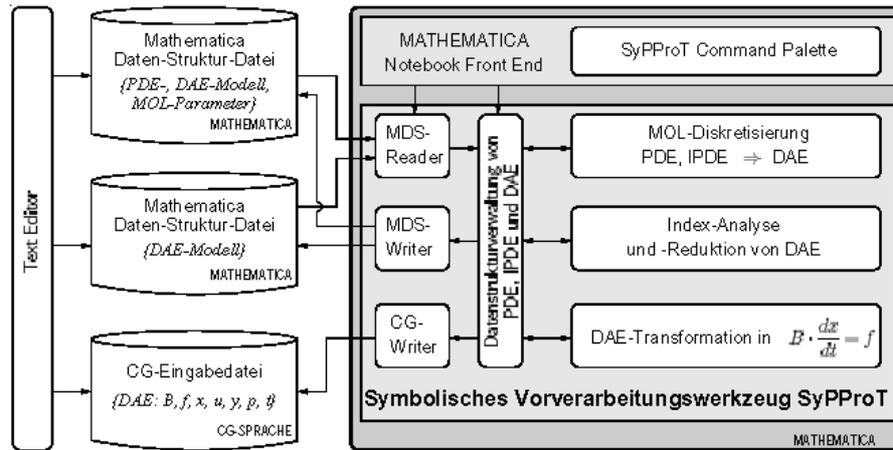


Abbildung 3: Architektur des symbolischen Vorverarbeitungswerkzeugs SYPPROT.

durch die SYPPROT *Command Palette* unterstützt, die eine interaktive Eingabe der Modelldefinition in MATHEMATICA gestattet. Die Ausgabe des vorverarbeiteten DAE-Modells erfolgt schließlich als CG-Eingabedatei.

4.2 MATHEMATICA-Daten-Struktur

Die MATHEMATICA-Daten-Struktur (MDS) ist ein einheitliches Datenformat für örtlich konzentrierte und verteilte Prozessmodelle. Die ursprünglich nur für konzentrierte Prozessmodelle entworfene MDS [Bredt, 1996, Räumschüssel, 1998] wurde deshalb für verteilte Prozessmodelle erweitert. Mit diesen Weiterentwicklungen ist die Darstellung von PDEs und BCs sowie von ortsabhängigen Parametern und Variablen möglich. Außerdem werden zur Anwendung der MOL-Diskretisierung die Definition eines Ortsgitters und des Diskretisierungsschemas benötigt. Diese zur MOL-Anwendung erforderlichen Informationen werden im Folgenden als MOL-Parameter bezeichnet.

4.3 Symbolische Vorverarbeitung zur MOL-Diskretisierung

Die rechnerunterstützte MOL-Diskretisierung erfolgt in drei Schritten: (i) MOL-Diskretisierung von PDE und BC in DAE, (ii) Umformung in die DIVA-Standardform und (iii) Ausgabe in eine CG-Eingabedatei. Der interne Programmablauf und die Programmstruktur für den ersten Schritt der MOL-Diskretisierung sind in Abbildung 4 dargestellt.

Das zentrale Diskretisierungsprogramm koordiniert für jede Gleichung die Informationsbeschaffung hinsichtlich ausgewählter MOL-Parameter. Außerdem erfolgt damit die Ansteuerung der Untermodule. Als erstes Untermodul ist das Programm-Modul des Moving-Grid-Verfahrens den Modulen der Approximationsschemata vorgeschaltet. In diesem Untermodul werden die verteilten Modellgleichungen ggf. auf mitbewegte Gitterkoordinaten transformiert und die Gittergleichungen erzeugt. Danach verzweigt der Programmablauf in die Untermodule der Finite-Differenzen- oder Finite-Volumen-Methoden zur Erzeugung der diskretisierten Modellgleichungen. Im Programm-Modul für Finite-Volumen wird aus der vom Benutzer eingegebenen PDE-Form (1a) die integrale Form (3) abgeleitet. Für die Randzellen eines Ortsbereichs werden außerdem die BCs berücksichtigt. Die anschließende Approximation der verbleibenden unbekannt Zellrandwerte greift auf Schemata niedriger Ordnung oder hoch auflösende Verfahren zurück.

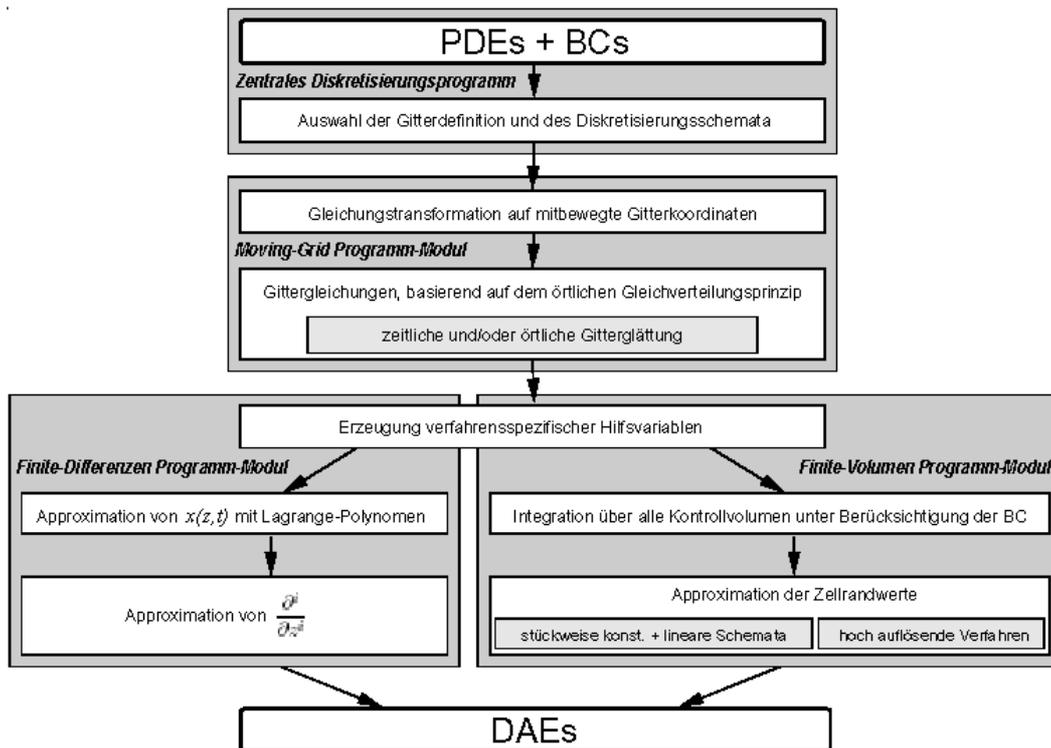


Abbildung 4: Ablauf und Programm-Module der MOL-Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen (PDEs) und Randbedingungen (BCs) im Vorverarbeitungswerkzeug SYPPROT.

5 Anwendungsbeispiel für MOL-Vorverarbeitung

Als Anwendungsbeispiel für die Vorverarbeitung zur MOL-Diskretisierung wird das Modell eines Zirkulations-Festbett-Reaktors (ZFBR) verwendet. Das ZFBR-Modell ist ein komplexes Beispiel für die MOL-Anwendung aufgrund von drei energetisch und stofflich miteinander verkoppten Ortsbereichen des Reaktors. Die Dynamik des Reaktors ist durch wandernde Reaktionsfronten gekennzeichnet. Darüber hinaus wurden eine Reihe von örtlich verteilten Prozessmodellen (Festbettadsorber, katalytischer Festbettreaktor, TMB Chromatographie-Prozess, Polymerisationsreaktoren) mit Hilfe der automatischen MOL-Diskretisierung des Vorverarbeitungswerkzeugs behandelt und mit DIVA simulationstechnisch untersucht.

5.1 PDE-Modell des Zirkulations-Festbett-Reaktors (ZFBR)

Das PDE-Modell des ZFBR besteht aus den PDEs für Energie- und Materialbilanzen für die drei Ortsbereiche des Innenrohrs (I – Inner Tube), der Reaktorschleife (L – Reactor Loop) und des Aussenrohrs (O – Outer Tube). Abbildung 5 zeigt neben den Zuständen der Temperaturen T^j und der Molanteile x_i^j mit $i = 1, 2$ und $j \in \{I, L, O\}$ die Anordnung der Ortsbereiche und deren einheitliche Ortskoordinate $z \in [0, l_{loop} + 2l_{tube}]$. Die Kopplungen der in Richtung der Ortskoordinate aneinander grenzenden Ortsbereiche des Innenrohrs und der Schleife sowie der Schleife und des Aussenrohrs werden mit Hilfe von Innenrandbedingungen (IBCs) für Gleichheit der Wärme- und Stoffflüsse modelliert. Das Innen- und das Aussenrohr sind durch Wärmeaustausch quer zur Ortskoordinate z thermisch verkopptelt.

Das PDE-Modell des ZFBR umfaßt insgesamt 9 PDEs, 4 BCs und 8 IBCs. Zur Ortsdiskretisierung wurde die Finite-Volumen-Methode mit verschiedenen Approximationsschemata angewendet. Zwei unterschiedlich diskretisierte Modelle werden nachfolgend verglichen: Modell (I) wird

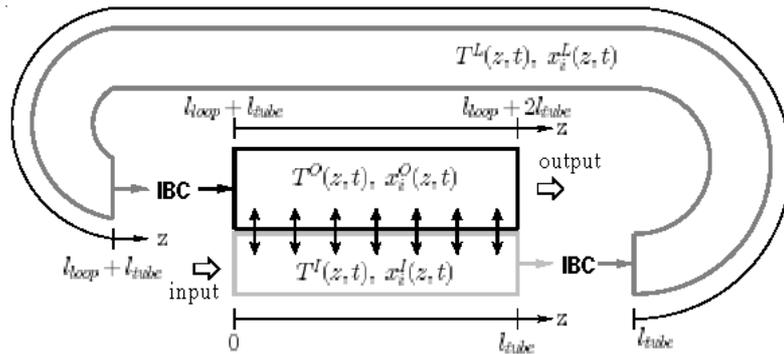


Abbildung 5: Schema des Zirkulations-Festbett-Reaktors mit den Ortsbereichen des Innenrohrs (I), der Reaktorschleife (L) und des Aussenrohrs (O).

mit stückweise konstanten und linearen Profilannahmen auf einem äquidistanten Gitter von 400 und 500 Stützstellen für die Ortsbereiche der Rohre und der Schleife diskretisiert und umfaßt daher nach der MOL-Vorverarbeitung 3900 Gleichungen; Modell (II) verwendet statt den stückweise konstanten Profilannahmen MC-Limiter-Schemata für die PDEs der Energiebilanzen und *van Leer*-Limiter für die PDEs der Materialbilanzen. Die Stützstellenanzahl reduziert sich dabei auf ein Zehntel, was 390 Gleichungen bedeutet.

Für die Eingabe des ZFBR-Modells in das Vorverarbeitungswerkzeug wird die gesamte Modellinformation in der MATHEMATICA-Daten-Struktur (MDS) dargestellt. Dazu stehen verschiedene MDS-Funktionen bereit, die die Definitionen von Parametern, Variablen, Gleichungen, MOL-Parametern und Prozessgrößen zur Grafikausgabe erlauben. Die Definition der PDEs, BCs und IBCs erfolgt mit Hilfe der MDS-Funktion zur Gleichungsdefinition `SystemsEquations[]`. Dabei werden die Gleichungen jedes Ortsbereichs in einem MDS-Objekt `Distributed[]` zusammengefaßt. Zur Kopplung zweier in Richtung der Ortskoordinate angrenzender Ortsbereiche werden IBCs in einem MDS-Objekt `Coupling[]` eingegeben. Jeder Gleichung wird eine benutzerdefinierte Diskretisierungsmethode zugeordnet. Der folgende Auszug zeigt stark verkürzt die Funktion `SystemsEquations[]` mit der PDE-Definition für die Energiebilanz des Innenrohrs (Zeilen 1-9) und die MDS-Funktion `Discretizations[]` zur Definition der Finite-Volumen Methode `FVlimiter` mit Hilfe der MDS-Funktion `FVMethod[]` (Zeilen 10-12):

```

1  SystemEquations[
2    Distributed[ Domain -> "Tube[z]",
3                Scope   -> { ...
4                Scalar[ rhoCp D[Ti[z,t],t] == - rhoCp v_i D[Ti[z,t],z]
5                        + lam D[Ti[z,t],{z,2}] + Qpex[z,t]
6                        - Summands[dhr[j] rreak[j][z,t],{j,1,NC}],
7                LowerBound -> ..., UpperBound -> ...
8                Discretization -> "FVlimiter" ... } ],
9    Distributed[...], Coupling[...], Coupling[...] ];
10 Discretizations[
11   FVMethod[ FVlimiter, Profile -> { "upwind", "piecewise-linear" },
12           Limiter -> "MC" ] ];

```

Das in den Zeilen 11-12 angegebene Verfahren definiert das für Modell (II) verwendete Upwindbasierte Limiter-Schemata (MC-Limiter) zur Approximation der konvektiven Terme $[F]_{k-}^{k+}$ und die stückweise linearen Approximationen der dispersiven Terme $[D \frac{\partial x}{\partial z}]_{k-}^{k+}$ in (3). Im Falle von Modell (I) fehlt in der Definition der Finite-Volumen-Methode in Zeile 12 das Argument für den Limiter.

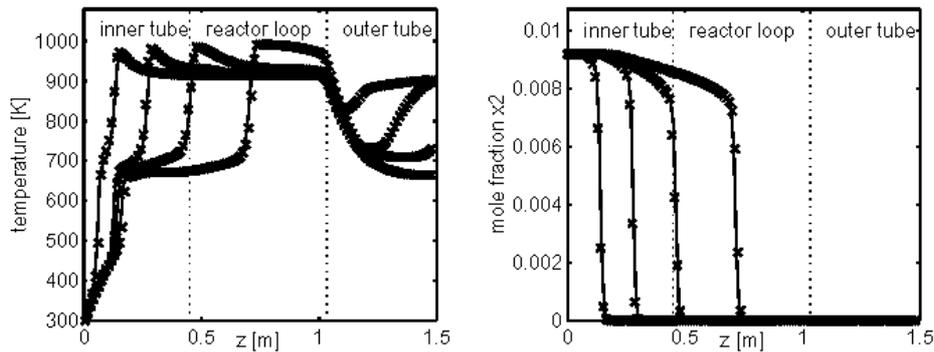


Abbildung 6: Vergleich der Ortsprofile $T(z, t_i)$ und $x_2(z, t_i)$, $t_i = 200/700/1300/4000s$ von ZFBR-Simulationen mit Finite-Volumen Diskretisierung: (–) stückweise konstante Profilannahmen und (×) hochauflösende Schemata für Approximationen von $\partial F/\partial z$ mit 1300 bzw 130 Gitterpunkten.

5.2 Vorverarbeitung zur MOL-Diskretisierung

Die MOL-Diskretisierung des ZFBR-Modells mit dem Vorverarbeitungswerkzeug SYPPROT erfolgt in der Symbolsprache MATHEMATICA. Nach dem Einladen der Vorverarbeitungsprogramme sind nur zwei SYPPROT-Befehle notwendig, um aus dem PDE-Modell des ZFBR in MDS eine CG-Eingabedatei des diskretisierten DAE-Modells zu erzeugen. Der Befehl `AutomaticDiscretization[]` führt die Ortsdiskretisierung des PDE-Modells anhand der vom Benutzer definierten MOL-Schemata durch. Das Zwischenergebnis ist ein DAE-Modell in Form der MDS. In diesem Modell sind die diskretisierten ODEs und AEs innerhalb der MDS-Funktion `SystemEquations[]` in `Lumped[]`-Objekten gruppiert. Jedes `Lumped[]`-Objekt entspricht dabei einem `Distributed[]`- oder `Coupling[]`-Objekt des ursprünglichen PDE-Modells. Zur Umformung in die DIVA-Standardmodellform (2) und zur Erzeugung einer entsprechenden CG-Eingabedatei wird das Kommando `WriteCGFile[]` verwendet. Damit ist die MOL-Diskretisierung des ZFBR-Modells abgeschlossen. Mit Hilfe des `CODE GENERATORS` wird das DIVA Simulationsmodell automatisch erzeugt. Dieser Ablauf ist für Modell (I) und (II) identisch. Um die beiden Simulationsmodelle des ZFBR zu kodieren, genügt es den MDS-Kode des PDE-Modells entsprechend zu ändern. Das betrifft die Definition der Finite-Volumen-Methode und die Anzahl der Stützstellen des Ortsgitters.

Die für beide Modelle annähernd gleichen Simulationsergebnisse der Temperatur $T(z, t)$ und des Molanteils $x_2(z, t_i)$ sind in Abbildung 6 gezeigt. Die dargestellten Reaktionsfronten des autonomen periodischen Betriebs des Reaktors wandern in Richtung des Reaktorausgangs. Dabei liegen die Rechenzeiten des mit Limiter-Schemata diskretisierten Modells (II) um einen Faktor 4.4 niedriger als bei Modell (I).

6 Bewertung

Die entwickelte und implementierte Linienmethoden-Diskretisierung des Vorverarbeitungswerkzeugs SYPPROT unterstützt den Benutzer der Simulationsumgebung DIVA bei der Ortsdiskretisierung von verteilten Prozessmodellen. Die damit zur Verfügung stehende automatische Approximation von PDE-Modellen durch DAE-Modelle erlaubt die Anwendung der leistungsfähigen DAE-Numerikmethoden von DIVA zur Untersuchung verteilter Prozessmodelle. Das bedeutet eine wesentliche Entlastung von den ansonsten manuell durchzuführenden und fehleranfälligen Schritten zur Anwendung der Approximationen und Kodierung der diskretisierten Modellgleichungen. Für eine praxistaugliche Rechnerunterstützung zur Linienmethoden-Diskretisierung

waren in dieser Arbeit die folgenden beide Aspekte besonders wichtig:

- Die Bereitstellung einer vergleichsweise umfangreichen Palette von MOL-Diskretisierungsverfahren ist nötig, um für die große Vielfalt verfahrenstechnischer Prozessmodelle hinreichend genaue Lösungen effizient berechnen zu können. Dazu sind neben klassischen Finite-Differenzen- und Finite-Volumen-Schemata mit Approximationen niedriger Ordnung auch moderne Verfahren mit adaptiven Ansätzen untersucht und implementiert worden. Dabei handelt es sich um hoch auflösende Schemata und um ein Moving-Grid-Verfahren. Bei deren Einsatz werden deutliche Reduktionen sowohl der erforderliche Zahl an Stützstellen des Ortsgitters als auch der benötigten Rechenzeiten festgestellt, um steile Fronten hinreichend genau auflösen zu können. Allerdings sind trotz der vergleichsweise guten Robustheit die effizienteren Schemata nicht in jedem Fall problemlos anwendbar. Bei dem Moving-Grid-Verfahren können beispielsweise verfahrensbedingte Diskretisierungsfehler bei bestimmten Modellen zu Lösungen mit falschen Frontpositionen führen [Li et al., 1998]. Bei den hoch auflösenden Verfahren darf das Verhältnis von Orts- zu Zeitschrittweite für numerisch stabile Lösungen nicht beliebig sein. Die notwendige Validierung der Simulationsergebnisse erfordert gegebenenfalls die wiederholte Anwendung verschiedener MOL-Schemata.
- Die Definitionen von Gleichungen verteilter Prozessmodelle ist von Definitionen der MOL-Parameter zur Ortsdiskretisierung zu trennen, um eine einfache Anwendung unterschiedlicher MOL-Schemata zu ermöglichen. Diese Anforderung wurde bei den Erweiterungen der MATHEMATICA-Daten-Struktur als einheitliches Datenformat für PDE- und DAE-Modelle umgesetzt. Der Einsatz verschiedener MOL-Verfahren kommt daher ohne langwierige Reimplementierungen der Modellgleichungen aus.

Die Perspektiven für das Vorverarbeitungswerkzeugs liegen zum einen in der Ausweitung der behandelbaren Prozessmodelle. Beispielsweise gestattet die Einbindung von zentralen Schemata hoch auflösender Verfahren die Behandlung von Modellen mit wechselnder Strömungsrichtung. Zum anderen kann durch die Kopplung von SYPPROT mit dem Modellierungswerkzeug PROMOT [Tränkle, 2000, Tränkle et al., 2000] der Simulationsumgebung DIVA eine noch weitergehende Benutzerunterstützung erreicht werden.

Danksagung

Untersuchung, Entwicklung und Anwendung des Vorverarbeitungswerkzeugs für die Simulationsumgebung DIVA wurden von der Deutschen Forschungsgemeinschaft im SFB 412 gefördert. Besonderer Dank gebührt Prof. Dr.-Ing. Dr.h.c. M. Zeitz für die ausgezeichnete Betreuung und Unterstützung dieser Arbeiten.

Literatur

- [Bredt, 1996] Bredt, S. (1996). Datenstrukturen und Schnittstellen für die symbolische Vorverarbeitung von Differential-Algebra-Simulationsmodellen in MATHEMATICA. Studienarbeit, Institut für Systemdynamik und Regelungstechnik, Universität Stuttgart.
- [Dorfi and Drury, 1987] Dorfi, E. and Drury, L. O. (1987). Simple Adaptive Grids for 1-D Initial Value Problems. *J. Comput. Phys.*, 69:175–195.
- [Flaherty, 1989] Flaherty, J. (1989). *Adaptive methods for partial differential equations*. SIAM Publications.
- [Furzeland et al., 1990] Furzeland, R., Verwer, J., and Zegeling, P. A. (1990). A Numerical Study of three Moving Grid Methods for One Dimensional Partial Differential Equations which are based on the Method of Lines. *J. Comput. Phys.*, 89:349–388.
- [Harten, 1983] Harten, A. (1983). High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *J. Comput. Phys.*, 49:357–393.

- [Holl, 1994] Holl, P. (1994). *Entwicklung und Einsatz eines dynamischen Simulators für verfahrenstechnische Prozesse*, Fortschrittsberichte VDI Reihe 3 Nr. 359. VDI-Verlag, Düsseldorf.
- [Kienle et al., 1995] Kienle, A., Lauschke, G., Gehrke, V., and Gilles, E. D. (1995). On the dynamics of the circulation loop reactor – Numerical methods and analysis. *Chem. Engng. Sci.*, 50(15):2361–2375.
- [Köhler, 2002] Köhler, R. (2002). Preprocessing Tool for Method-of-Lines Discretization of Process Models in the Simulation Environment DIVA. Eingereichte Dissertation, Universität Stuttgart.
- [Köhler et al., 2001a] Köhler, R., Küpper, S., and M., Z. (2001a). Kontinuierlich-ereignisdiskrete Prozessmodelle für die Simulationsumgebung DIVA. In *Problems of Simulation and Computer Aided Design of Dynamic Systems*, volume 29, pages 56–63. Scientific Papers of Donetsk State Technical University, Donetsk, Ukraine.
- [Köhler et al., 2001b] Köhler, R., Mohl, K., Schramm, H., Zeitz, M., Kienle, A., Mangold, M., E. Stein, and Gilles, E. (2001b). Method of Lines within the Simulation Environment DIVA for Chemical Processes. In Wouwer, A. V., Saucez, P., and Schiesser, W., editors, *Adaptive Method of Lines*, pages 367–402. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton/USA.
- [Kröner et al., 1990] Kröner, A., Holl, P., and Marquardt (1990). DIVA - An Open Architecture for Dynamic Simulation. *Comput. Chem. Engng.*, 14:1289–1295.
- [LeVeque, 1992] LeVeque, R. (1992). *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser Verlag, Basel-Boston-Berlin.
- [LeVeque, 1998] LeVeque, R. (1998). *Finite Difference Methods for Differential Equations*. <http://www.amath.washington.edu/~rjl/booksnotes.html>.
- [Li et al., 1998] Li, S., Petzold, L., and Yuhe, R. (1998). Stability of Moving Mesh Systems of Partial Differential Equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20:719–738.
- [Mangold et al., 1999] Mangold, M., Kienle, A., Gilles, E., Richter, M., and Roschka, E. (1999). Coupled Reaction Zones in a Circulation Loop Reactor. *Chem. Engng. Sci.*, 54:2597–2607.
- [Marquardt, 1991] Marquardt, W. (1991). Dynamic Process Simulation – Recent Progress and Future Challenges. In Ray, W. H. and Arkun, Y., editors, *Chemical Process Control – CPC IV*, pages 131–180. CACHE, South Padre Island.
- [Marquardt, 1996] Marquardt, W. (1996). Trends in Computer-Aided Process Modeling. *Comput. Chem. Engng.*, 20:591–609.
- [Mohl et al., 1997] Mohl, K. D., Spieker, A., Köhler, R., Gilles, E. D., and Zeitz, M. (1997). DIVA - A simulation environment for chemical engineering applications. In *Informatics, Cybernetics and Computer Science (ICCS-97)*, *Collected Volume of Scientific Papers*, pages 8–15. Donetsk State Technical University, Donetsk, Ukraine.
- [Motz et al., 2002] Motz, S., Mitrović, A., and Gilles, E. (2002). Comparison of numerical methods for the simulation of dispersed phase systems. *submitted for Chem. Engng. Sci., Special Issue: First Symposium on Particulate Processes 2001, MPI-Magdeburg*.
- [Pantelides and Barton, 1993] Pantelides, C. C. and Barton, P. I. (1993). Equation-oriented dynamic simulation: current status and future perspectives. *Supplement to Comput. Chem. Engng.*, 17:S263–S285.
- [Pantelides and Britt, 1995] Pantelides, C. C. and Britt, H. I. (1995). Multipurpose Process Modelling Environments. In Biegler, L. T. and Doherty, M. F., editors, *Conference on Foundations of Computer-Aided Process Design*, pages 128–141. CACHE Publications.
- [Patankar, 1980] Patankar, S. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. McGraw-Hill Book Company, Washington, New York, London.
- [Pfeiffer and Marquardt, 1996] Pfeiffer, B.-M. and Marquardt, W. (1996). Symbolic Semi-Discretization of Partial Differential Equation Systems. *Mathematics and Computers in Simulation*, 42:617–628.
- [Räumschüssel, 1998] Räumschüssel, S. (1998). *Rechnerunterstützte Vorverarbeitung und Codierung verfahrenstechnischer Modelle für die Simulationsumgebung DIVA*. VDI Fortschritt-Berichte Nr. 20/270, VDI-Verlag, Düsseldorf.
- [Schiesser, 1991] Schiesser, W. (1991). *The Numerical Method of Lines: Integration of Partial Differential Equations*. Academic Press, San-Diego.
- [Tränkle, 2000] Tränkle, F. (2000). *Rechnerunterstützte Modellierung verfahrenstechnischer Prozesse für die Simulationsumgebung DIVA*. VDI Fortschritt-Berichte Nr. 20/309, VDI-Verlag, Düsseldorf.
- [Tränkle et al., 2000] Tränkle, F., Zeitz, M., Ginkel, M., and Gilles, E. (2000). PROMOT: A modeling tool for chemical processes. *Mathematical and Computer Modeling of Dynamical Systems*, 6:283–307.
- [Wouwer et al., 1997] Wouwer, A. V., Saucez, P., and Schiesser, W. (1997). Some user-oriented comparisons of adaptive grid methods for partial differential equations in one space dimension. *Applied Numerical Mathematics*, 26:1–14.
- [Wouwer et al., 2001] Wouwer, A. V., Saucez, P., and Schiesser, W., editors (2001). *Adaptive Method of Lines*. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton/USA.