

# VERFAHRENSTECHNISCH ORIENTIERTE PARALLELE SIMULATIONSUMGEBUNG

K. Bondareva, V. Svjatnyj

Nationale technische Universität Donezk, Fakultät für Rechentechnik  
und Informatik

svjatnyj@cs.dgtu.donetsk.ua

## **Abstract**

*K. Bondareva, V. Svjatnyj, Technologically-oriented parallel simulation environment. The architecture and functions of technologically-oriented parallel simulation environment is considered. Decomposition approach of hierarchical models is described.*

## **Einführung**

Verfahrenstechnische Prozesse und Produktionsanlagen (VTP/VTA) stellen wichtige moderne industrielle Technologien dar. Typische verfahrenstechnische Problemstellungen betreffen Projektierung, Prozess-Automatisierung, Prozess-Überwachung, Qualitätssicherung, optimale Prozessführung, Sicherheitsanalyse und Vorhersage des Prozessverhaltens, Vermeidung gefährlicher Betriebszustände und Behebung von Störfällen sowie Lösung von Umweltschutzproblemen. Verfahrenstechnische Prozesse gehören zu den komplexen (oft sicherheitskritischen) dynamischen Systemen (DS). Die Komplexität dieser Systeme drückt sich in einer Vielzahl von Eigenschaften aus: Nichtlinearität der Modellgleichungen, räumliche Verteilung der Modelle, große Dimensionen der verfahrenstechnischen Fließbilder (VFB), Integration verschiedener Grundoperationen in multifunktionalen Apparaten, mehrere aktive Elemente mit nichtlinearen zustandsgrößenabhängigen Charakteristiken, wesentliches mehrfaches und hierarchisches Zusammenwirken der regelbaren Prozeßgrößen, zahlreiche verfahrenstechnisch bedingte Rückkopplungen sowie gleichzeitige Einflüsse von deterministischen und stochastischen Störungen. Nur wenige, sehr vereinfachte Aufgaben der dynamischen Verfahrenstechnik kann man analytisch lösen. Deshalb hat die Entwicklung der Methoden und Mittel der Modellierung und Simulation, sowie der modernen Simulationsstrategien eine zunehmende theoretische und praktische Bedeutung in der Verfahrenstechnik und in der angewandten Simulationstechnik [1]. Eine VTP/VTA-Dekomposition auf einzelne Prozesse und Apparate, die modulare Entwicklung, Testsimulation und Verifikation der Modelle von Prozessen und Apparaten sowie die Komposition

der vorbereiteten und getesteten Module zu einer VTP/VTA-Gesamtsimulation bilden die Grundlage der modularen Simulation in der Verfahrenstechnik. Während der VTP/VTA-Modellkomposition entsteht eine Komplexitätsschwelle, ab welcher es sinnvoll ist, die Modellierung und Simulation der VTP/VTA auf parallelen Rechnerarchitekturen zu betrachten. Eine effiziente parallele Simulation verfahrenstechnischer Prozesse erfordert weitergehende allgemeine Entwicklungskonzepte und parallelisierungsorientierte prozessnahe Betrachtungen der zu simulierenden VTP/VTA, weil die Parallelisierungsansätze und für die Implementierung geeigneten parallelen Simulationsalgorithmen wesentlich von den Prozesseigenschaften und Aufgabenstellungen abhängig sind. Im Beitrag wird ein Entwicklungskonzept für eine verfahrenstechnisch orientierte parallele Simulationsumgebung (VTOPSU) vorgeschlagen.

### **Verfahrenstechnische Prozesse (VTP) und Anlagen (VTA) als Objekte der Modellierung und Simulation**

Die formale VTP/VTA-Beschreibung als mathematisches Modell (Abb.1) beinhaltet zwei wesentliche Teile: eine Topologiebeschreibung und eine Beschreibung des dynamischen Verhaltens. Die verfahrenstechnischen Fließbilder (VFB) sind dekompositionsfähig in detaillierte Schemata [2, 3] und stellen zusammen mit den erforderlichen formalen Abbildungen der Objektkopplungen die VTP/VTA-Topologiebeschreibung dar. Auf der Anlagenebene präsentiert ein Verfahrensfließbild

$$VFB = VM(B_1, \dots, B_p)$$

die durch die Verbindungsmatrix  $VM$  beschriebene Zusammenhänge zwischen den blockartig dargestellten  $p$  komplexen verfahrenstechnischen Anlagen und Apparaten. Auf der ersten Dekompositionsebene wird jeder Block  $B_i$  in  $m_i$  durch die Matrix  $VMB_i$  verbundene Unterblöcke  $C_i$  zerlegt:

$$B_i = VMB_i(C_{i1}, \dots, C_{imi})$$

Hier sind  $i$  – Blocknummer in VFB,  $j$  – Unterblocknummer auf der ersten Dekompositionsebene. Eine weitere Dekomposition auf der zweiten Ebene ergibt die folgende Darstellung der  $C_{ij}$ -Unterblöcke durch  $n_j$   $D_{ij}$ -Elemente, die mit den Matrizen  $VMC_{ij}$  verbunden sind:

$$C_{ij} = VMC_{ij}(D_{ij1}, \dots, D_{ijnj})$$

Die dritte Dekompositionsebene ergibt eine ähnliche Zerlegung der  $D_{ijk}$ -Elemente in weiter nicht zerlegbare  $e_k$  Unterelemente:

$$D_{ijk} = VMD_{ijk}(E_{ijk1}, \dots, E_{ijkek})$$

Hier wird  $k = 1, \dots, n_j$  als Elementenummer auf der zweiten Dekompositionsebene benutzt.

Das dynamische Verhalten der VTP/VTA als Objekte mit konzentrierten (OKP) und verteilten (OVP) Parametern wird durch algebraische und gewöhnliche Differentialgleichungssysteme sowie durch partielle Differentialgleichungen beschrieben. Die Gleichungen werden für die Unterelemente  $E_{ijkl}$  ( $l = 1, \dots, e_k$ ) hergeleitet und rechnerunterstützt zu komplexen Gleichungssystemen zusammengesetzt [1, 2, 3].

Die Anforderungen an die VTP/VTA-Simulationsumgebungen werden so formuliert: die Modelle sollen die dynamischen Prozesse in realen komplexen verfahrenstechnischen Anlagen mit ingenieurmäßiger Genauigkeit widerspiegeln; die Modellbeschreibung und Darstellung der Simulationsergebnisse sollen eine benutzerfreundliche Form sowie die mit den physikalischen Begriffen übereinstimmende Bezeichnungen der Prozessvariablen haben; wegen der Komplexität der Gleichungssysteme und der großen Dimension von modellrelevanten Daten ist die rechnerunterstützte Modellerstellung mit minimal möglichem von den Modellentwicklern geleistetem Arbeitsaufwand vorzusehen; mit Hilfe der Simulationsmodelle sollen Echtzeitprobleme gelöst werden können; es sollen hochentwickelte Visualisierungsmittel und eine Benutzeroberfläche (ein Dialogsystem) vorhanden sein; eine Realisierbarkeit in heterogenen Rechnerarchitekturen unter Anwendung von modernen Informationstechnologien ist vorzusehen; Schnittstellen zu CAPE-Werkzeugen, Trainingssimulatoren und Simulationssystemen sollten vorhanden sein; die Simulationsprogramme sollten objektorientiert mit den anwendungsbezogenen Schnittstellen realisiert werden; Benutzerfreundlichkeit sollte im Sinne einer systemtechnischen und ergonomischen Eigenschaft gegeben sein, die es den Benutzern erlaubt, sich auf die Lösung der verfahrenstechnischen Probleme zu konzentrieren, ohne mit der wirklich vorhandenen Komplexität der Simulationsoftware konfrontiert zu werden; eine rechnerunterstützte Versuchsplanung sollte möglich sein. Weitere Ziele sind die Vererbung der positiven Eigenschaften der Simulationsprogramme von vorigen Generationen [1], die Wiederverwendbarkeit der Simulationsoftware, Algorithmen, Verfahren, Simulationsdatenbanken etc sowie ein hochentwickeltes dialogunterstütztes Simulationsdatenbanksystem; schließlich sollen VTP/VTA-Modelle mit konzentrierten und örtlich verteilten Parametern auf Basis einheitlicher methodischer Grundlagen sowie mit der gleichen integrierten Simulationsoftware modelliert und simuliert werden.

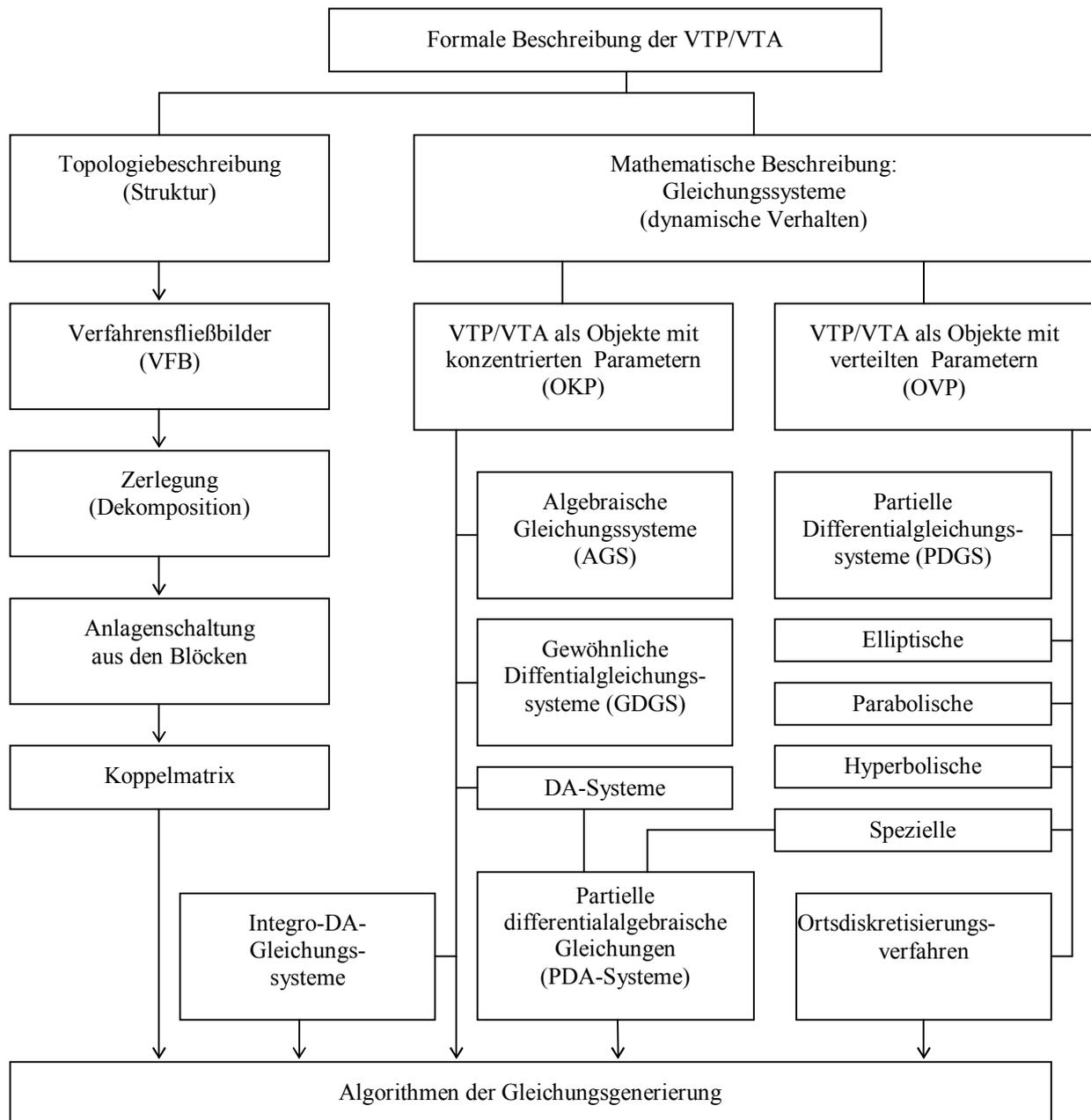


Abb. 1. VTP/VTA als Objekte der Modellierung und Simulation

### ***VTOPSU-Funktionalität und Struktur***

Die vorgesehene VTOPSU-Funktionalität umfasst die rechnergestützte dialogbasierte Lösung folgender Aufgabenblöcke bei der parallelen Modellierung und Simulation von verfahrenstechnischen Prozessen und Anlagen (Abb.2): Darstellung der VTP/VTA-Topologie, Generierung der durch die Anlagenverschaltung bestimmten Gleichungssysteme in der von

numerischen Lösungsverfahren geforderten Form; Erstellung der virtuellen parallelen VTP/VTA-Simulationsmodelle unter Berücksichtigung der möglichen Parallelisierungsansätze; Devirtualisierung der Simulationsmodelle und ihre Zuordnung zu parallelen Zielrechnerarchitekturen; Generierung des parallelen Programms für die Zielrechnerarchitektur, welche die zugeordnete Simulationsmodelle realisiert; Initialisierung, Parameterzuweisung und Debugging der parallelen VTP/VTA-Simulationsmodelle, ihre iterative Qualitätsverbesserung; effiziente parallele Lösung der für die VTP/VTA-Simulationsmodelle relevanten Gleichungssysteme mit der Visualisierung von des erhaltenen dynamischen Verhaltens der Prozesse und Anlage; Aufbau der parallelen VTP/VTA-Modellbibliothek, die Wiederverwendung der parallelen Simulationsmodelle, eine Realisierung der verfahrenstechnischen Modellierungssystematik heterogenen verteilten Rechnernetze. Diese Funktionalität wird durch entsprechende systemtechnische Organisation der VTOPUSU realisiert. VTOPUSU gehört zu den komplizierten HW/SW-Systemen, deren Entwicklung soll auf dem OO-Ansatz mit der UML-Technologie sowie mit der Dekomposition auf bestimmte Mengen der Subsysteme erfolgen. Solche Entwicklungsorganisation erlaubt nebenläufige Bearbeitung der Teilprojekte (Entwicklungsaufgaben) und eine Erhaltung der Zwischenergebnisse, die zu den arbeitsfähigen Versionen der Simulationsumgebung führen. Das VTOPUSU-Subsystem ist eine Teilkomponente der Hardware, Systemsoftware und Simulationssoftware, die benutzerfreundlich eine gewisse Gruppe von inhaltlich nahen Funktionen auf entsprechenden parallelen VTP/VTA-Modellierungs- und Simulationsetappen realisiert. Es werden folgende Subsysteme und ihre Funktionen betrachtet: Benutzeroberfläche (BOF); ein Subsystem paralleler Gleichungslöser; ein Datenbanksystem; ein Lastbalancierungssystem; ein Datenaustauschsystem; ein Subsystem zur Betriebsorganisation von verteilten Rechen-, Kommunikations- und Simulationsressourcen durch Netzwerk-Informationstechnologie.

VTOPUSU-Systemsoftware (SSW) beinhaltet MIMD-Betriebssysteme, MPI-Installation, den BOF-Systemteil, die Netzsoftware und weitere SSW-Komponenten, die die HW-Basis von VTOPUSU unterstützen.

VTOPUSU-Simulationssoftware ist vollfunktionell im Rahmen der vorgeschlagenen Subsysteme unterer Nutzung vorhandener relevanter Anwendersoftware zu entwickeln. Einige Subsysteme werden den SW-Systemteil und SW-Simulationsteil beinhalten. Zu den wichtigen SimSW-Komponenten gehören die Bibliotheken der parallelen numerischen Lösungsverfahren für die VTP/VTA-Gleichungssysteme sowie eine verfahrenstechnisch orientierte parallele Simulationssprache.

### ***Ansätze zur Parallelisierung der VTP/VTA Simulationsmodelle***

**Topologischer Ansatz:** Die Verfahrensfließbilder (VFB) beinhalten prinzipiell eine MIMD-Parallelität und können als ein Ausgangspunkt für die Entwicklung der parallelen VTP/VTA-Simulationsmodelle betrachtet werden. Die Zerlegung der VFB-Komponenten in einzelne Apparate, Phasen und Phasengrenze (elementare Strukturelle Modellbausteine) erzeugt eine Anlagenschaltung als detaillierte, aber noch virtuelle Modellstruktur, die für eine Zuordnung auf vorhandene Zielrechnerarchitektur geeignet ist. Diese Modellstruktur kann man benutzen, um eine Verbindung zwischen der Topologieanalyse und der notwendigen Gleichungsgenerierung zu konzipieren. Dabei soll dem zerlegten VFB eine virtuelle Struktur des objektorientierten MIMD-Simulationsmodells entsprechen, die einerseits auf der Benutzerebene für die Modellspezifikation dient und sich andererseits für die weitere Devirtualisierung der Modelltopologie eignet. Der topologische Ansatz definiert eine weitere mögliche Granularität der parallelen virtuellen und devirtualisierten Simulationsmodelle.

Der **block-orientierte Ansatz** wird für die Darstellung der MIMD-Prozesse verwendet und geht von der Idee der Lösung von DA-Gleichungssysteme durch Rechenschaltungen aus, die aus einzelnen Funktionsblöcken entsprechend der Formen von Gleichungen erstellt werden. Diese Idee wurde in konventionellen block-orientierten (BO) Simulationssprachen (ISRSIM, SIMULINK u.a.) realisiert und erfordert bei der Anwendung in VTOPSU neue Mittel für die rechner unterstützte Erstellung der Anlagenverschaltungen bei der Komposition der BO-Prozesse und devirtualisierten BO-Simulationsmodelle kompletter VTP/VTA.

Der **gleichungs-orientierte Ansatz** wird für die Darstellung der MIMD-Prozesse verwendet und geht von der Idee der Lösung von DA-Gleichungssystemen mit Hilfe von funktionellen Operatoren aus, die nach den Regeln von algorithmischen Programmiersprachen entsprechend der Formen von Gleichungen geschrieben werden. Diese Idee wurde in konventionellen gleichungs-orientierten (GO).

Simulationssprachen (ACSL u.a.) realisiert und erfordert bei der Anwendung in VTOPSU neue Methoden für die rechnerunterstützte Erstellung der Operatoranweisungen bei der Komposition der GO-Prozesse und devirtualisierten GO-Simulationsmodelle gesamter VTP/VTA.

Der **SPMD-orientierte Ansatz** (Same Programm Multiple Data) beruht auf der Idee der Berechnungen von Zustandsvektorkomponenten in einzelnen MIMD-Prozessoren, die die Prozesse der iterativen Lösung von Cauchy-Aufgaben für DA-Systeme vollfunktionell realisieren. Diese Ansätze werden in VTOPSU untersucht.

### ***Zusammenfassung und Ausblick***

Es wurde ein Konzept einer verfahrenstechnisch orientierten parallelen Simulationsumgebung vorgeschlagen. Eine Dekomposition der

verfahrenstechnischen Fließbilder bildet die Modellhierarchie mit den Verbindungsmatrizen, die topologische Information für die Gleichungsgenerierung und für die Parallelisierung von Gleichungslösern beinhaltet. Die Implementierungen und Untersuchungen zeigen, dass die VTOPSU-Systemorganisation neue Perspektiven effizienter Simulation komplexer verfahrenstechnischer Systeme eröffnet. Die Realisierung des VTOPSU-Konzeptes wird von der FRTI und vom MPI im Rahmen der Forschungsk Kooperation durchgeführt.

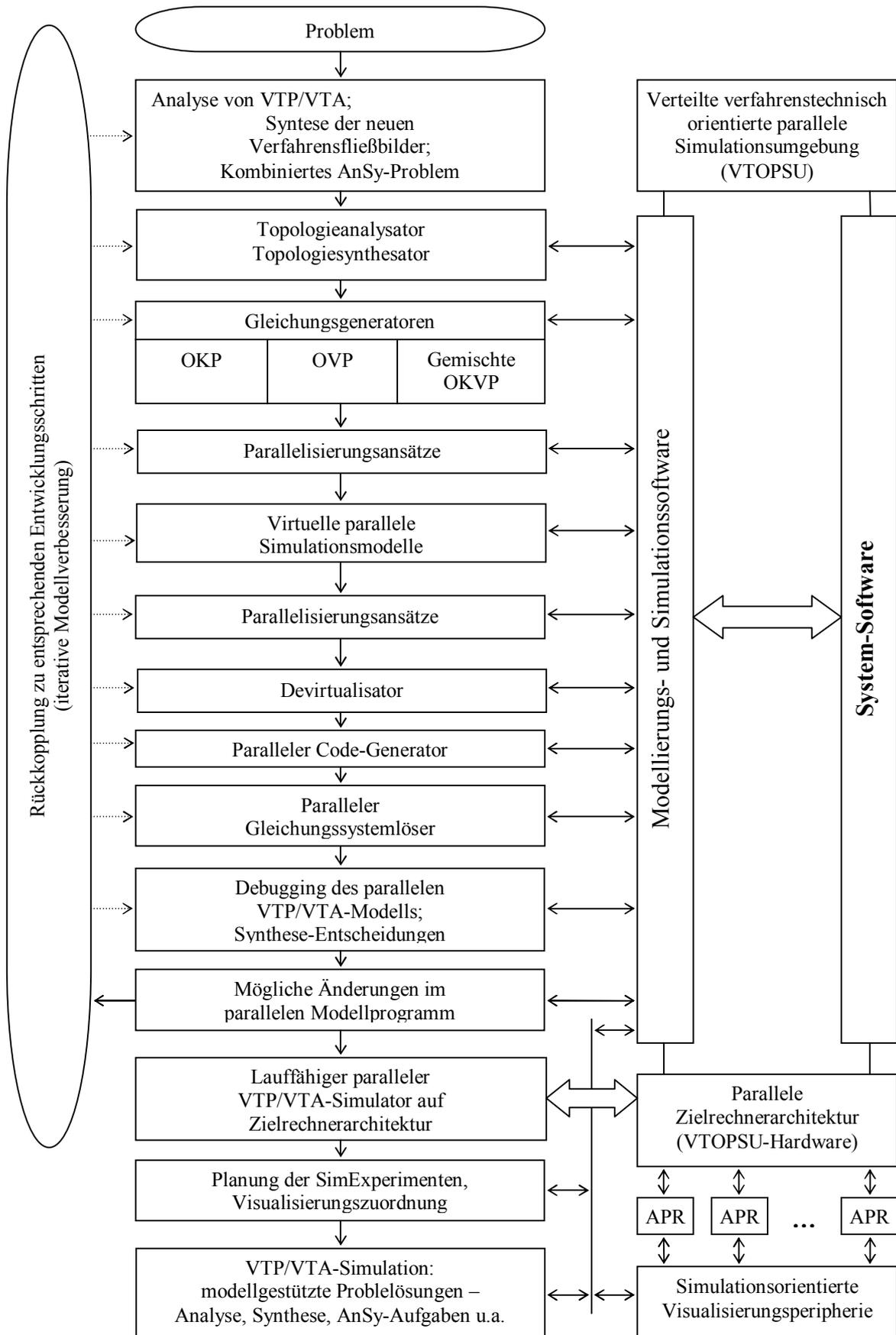


Abb. 2. Strukturdarstellung der VTOPSU

### ***Literaturverzeichnis***

- [1] Zeitz, M.: Simulation verfahrenstechnischer Prozesse. In: Problems of Simulation and Computer Aided Design of Dynamic Systems. . In: Problems of Simulation and Computer Aided Design of Dynamic Systems. Scientific Papers of Donetsk State Technical University, Vol. 29, Sevastopol: <<Weber>> 2001, 48-55
  
- [2] E.D.Gilles. Netzwerktheorie verfahrenstechnischer Prozesse. Chemie Ingenieur Technik(69), Weinheim 1997, S.53-65.
  
- [3] Borchardt, J.: Newton-type decomposition methods in large-scale dynamic process simulation. In: Computers and Chemical Engineering 25 (2001), 951-961.

Дата надходження до редакції 10.10.2006 р.