

Ein Framework für verteilte Co-Simulation

Simulationen cross-industrieller Netzwerke im Projekt Carbon2Chem®

02.07.2019 | [Henning Wagner](#), Jonas Grundler, Dr. Andreas Diekmann
thyssenkrupp TechCenter Control Technology

engineering.tomorrow.together.

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

IN KOOPERATION MIT



Fraunhofer
UMSICHT

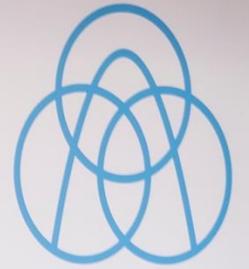


thyssenkrupp



Was ist ein cross-industrielles Netzwerk?

Verbund aus Anlagen unterschiedlicher industrieller Sektoren, die über Stoff- und Energieströme gekoppelt sind, um die **wirtschaftliche und ökologische Gesamteffizienz** zu steigern.



thyssenkrupp

engineering.
tomorrow
together.



Carbon2Chem[®]: Hüttengase als

Rohstoff für Chemikalien

Projektpartner in Carbon2Chem®

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Nouryon

Fraunhofer
UMSICHT

EVONIK
KRAFT FÜR NEUES

Z
B
T

cec



EAT

RUHR
UNIVERSITÄT
BOCHUM RUB

BASF
We create chemistry

thyssenkrupp

covestro

ITNC | RWTH AACHEN
UNIVERSITY

AIT | RWTH AACHEN
UNIVERSITY

LIT | RWTH AACHEN
UNIVERSITY

CCAT
Catalytic Center

SIEMENS
Ingenuity for life

Fraunhofer
ISE

thyssenkrupp

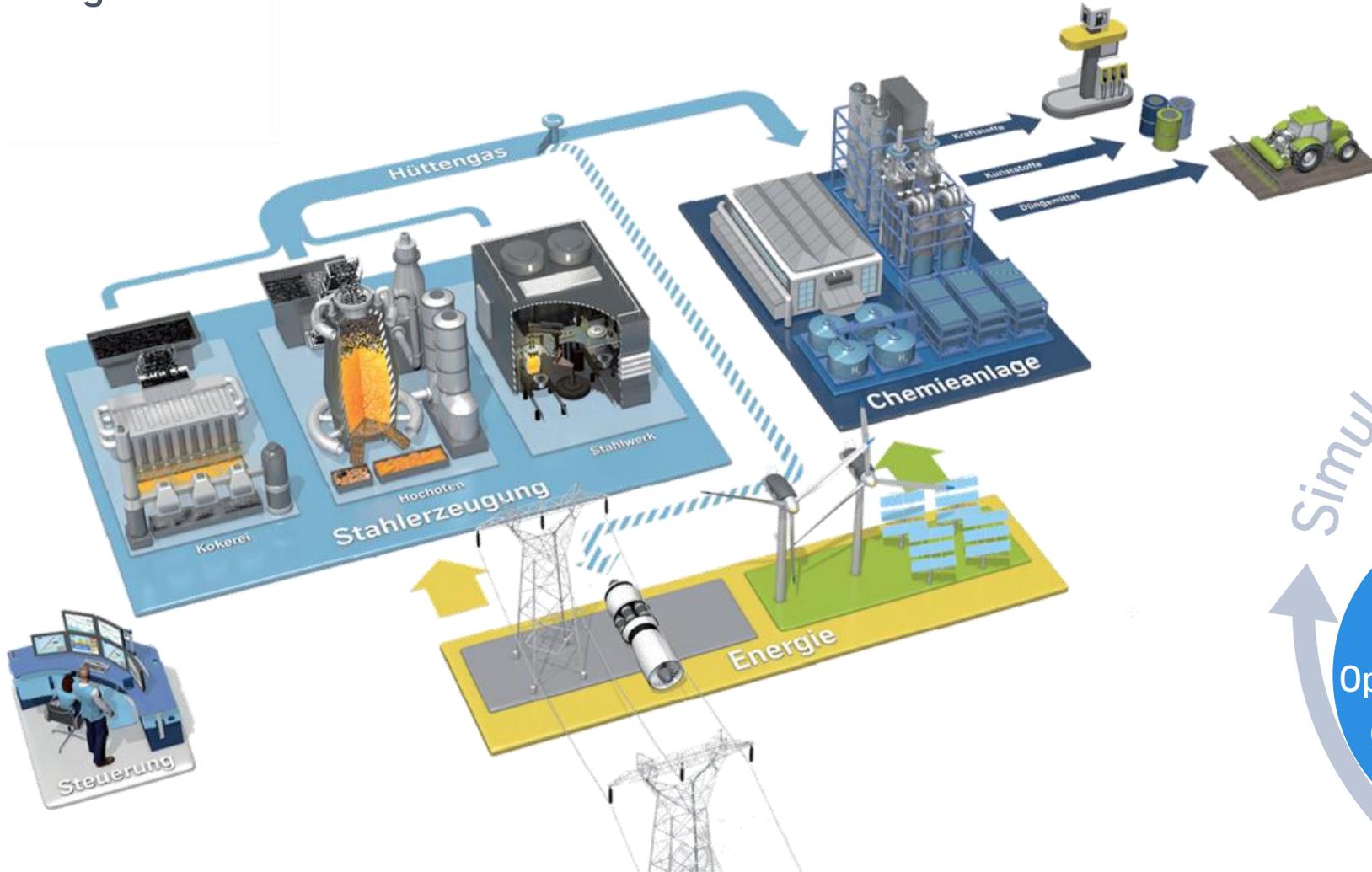
THE LINDE GROUP

CLARIANT



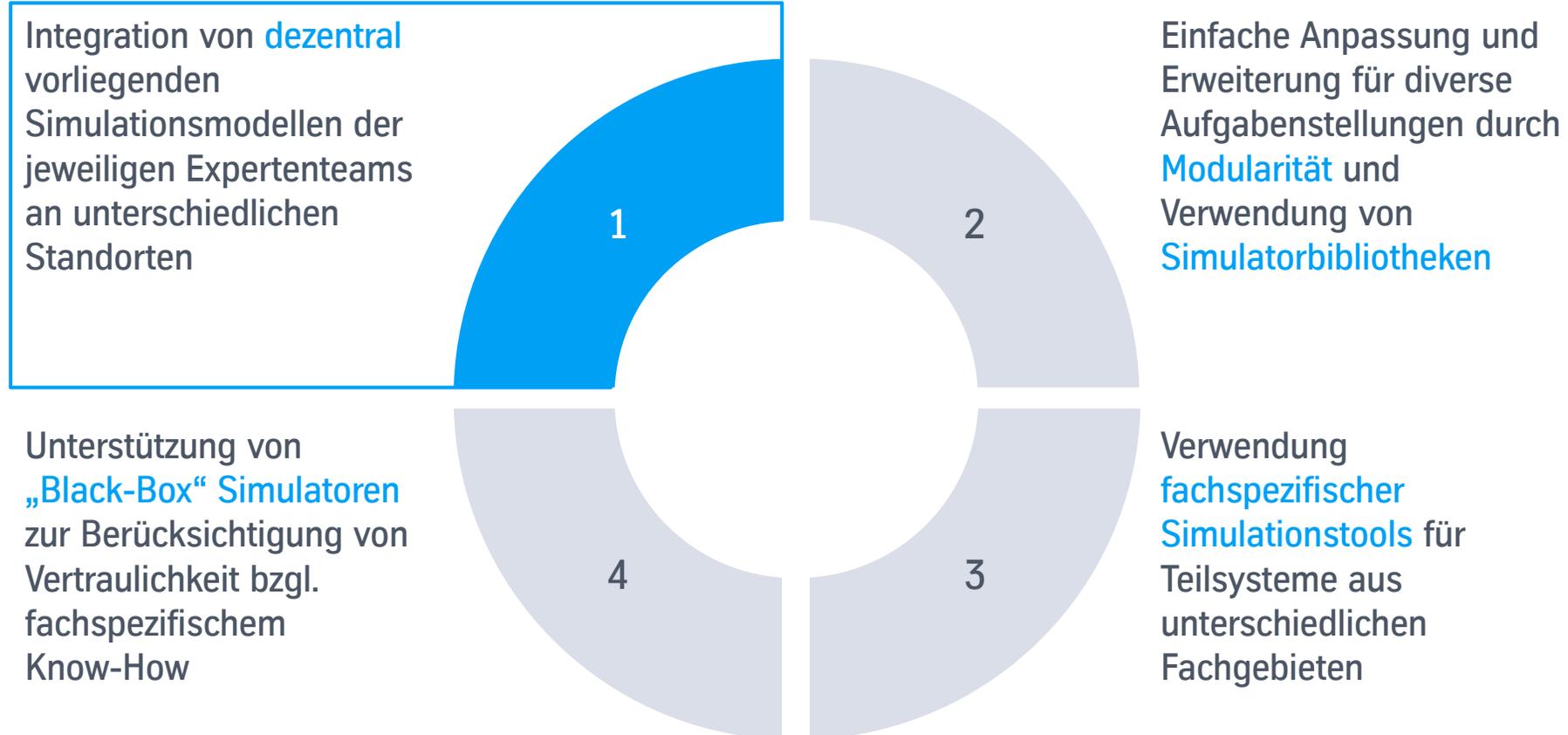
Simulation eines Carbon2Chem[®] Anlagenverbundes

Aufgaben der Simulation



Simulation eines Carbon2Chem[®] Anlagenverbundes

Anforderungen an die Simulation

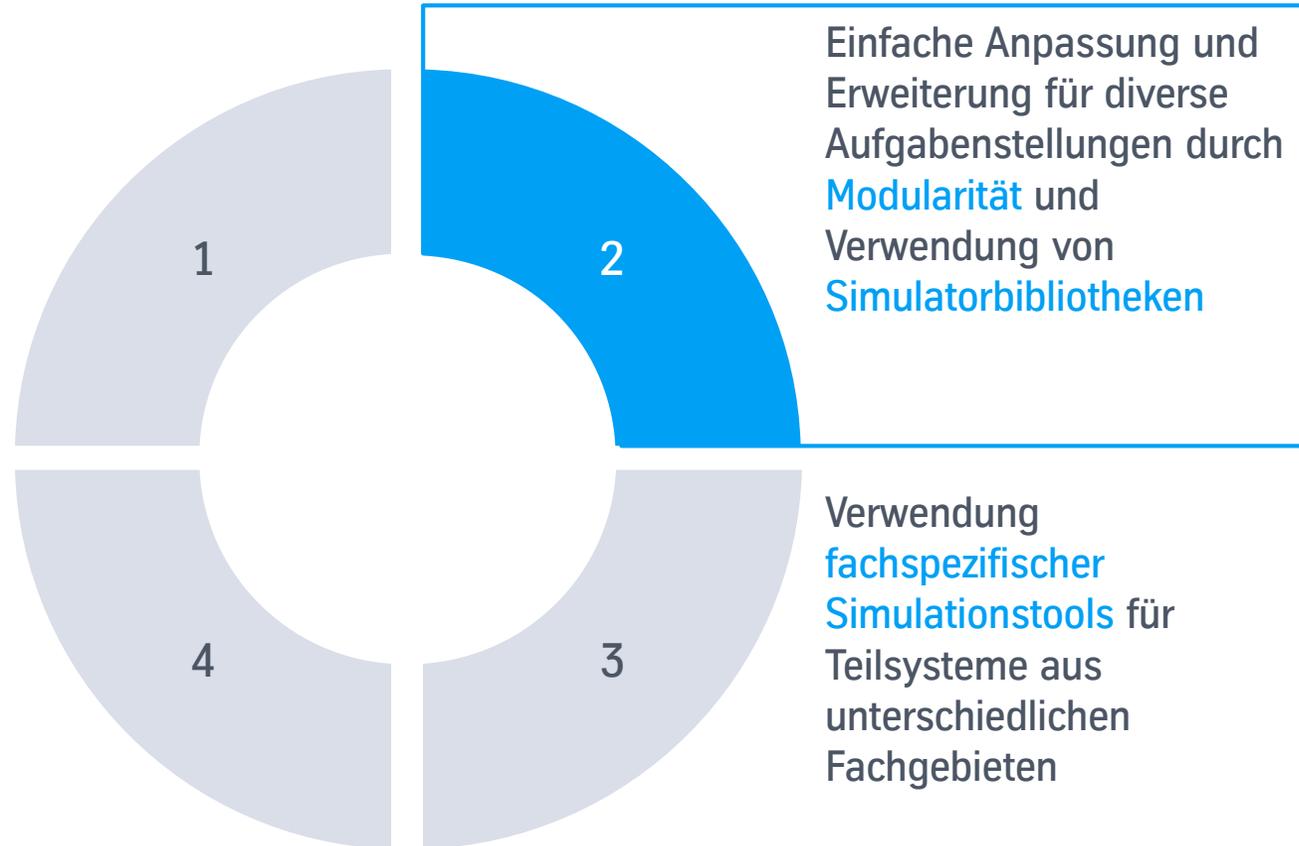


Simulation eines Carbon2Chem[®] Anlagenverbundes

Anforderungen an die Simulation

Integration von **dezentral** vorliegenden Simulationsmodellen der jeweiligen Expertenteams an unterschiedlichen Standorten

Unterstützung von „**Black-Box**“ Simulatoren zur Berücksichtigung von Vertraulichkeit bzgl. fachspezifischem Know-How

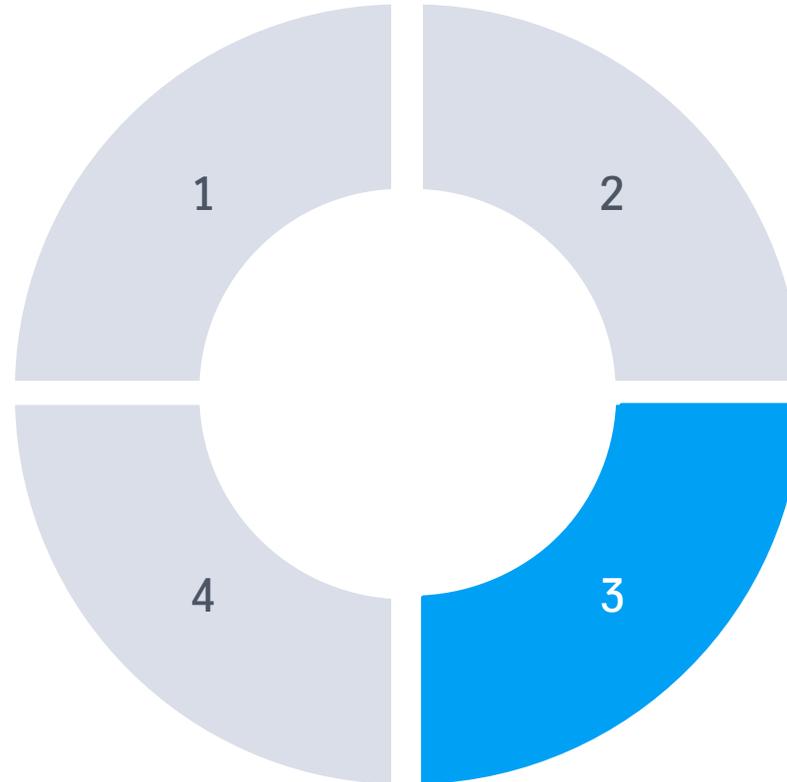


Simulation eines Carbon2Chem[®] Anlagenverbundes

Anforderungen an die Simulation

Integration von **dezentral** vorliegenden Simulationsmodellen der jeweiligen Expertenteams an unterschiedlichen Standorten

Unterstützung von „**Black-Box**“ Simulatoren zur Berücksichtigung von Vertraulichkeit bzgl. fachspezifischem Know-How



Einfache Anpassung und Erweiterung für diverse Aufgabenstellungen durch **Modularität** und Verwendung von **Simulatorbibliotheken**

Verwendung **fachspezifischer Simulationstools** für Teilsysteme aus unterschiedlichen Fachgebieten

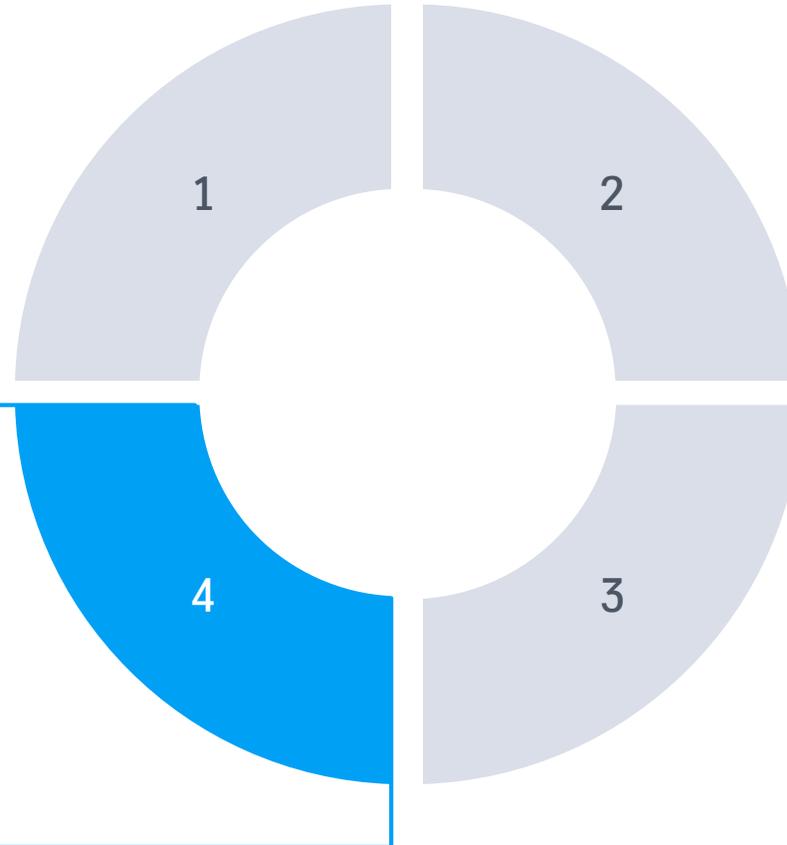


Simulation eines Carbon2Chem[®] Anlagenverbundes

Anforderungen an die Simulation

Integration von **dezentral** vorliegenden Simulationsmodellen der jeweiligen Expertenteams an unterschiedlichen Standorten

Unterstützung von „**Black-Box**“ Simulatoren zur Berücksichtigung von Vertraulichkeit bzgl. fachspezifischem Know-How



Einfache Anpassung und Erweiterung für diverse Aufgabenstellungen durch **Modularität** und Verwendung von **Simulatorbibliotheken**

Verwendung **fachspezifischer Simulationstools** für Teilsysteme aus unterschiedlichen Fachgebieten



Simulation eines Carbon2Chem[®] Anlagenverbundes

Anforderungen an die Simulation

Integration von **dezentral** vorliegenden Simulationsmodellen der jeweiligen Expertenteams an unterschiedlichen Standorten

Unterstützung von „**Black-Box**“ Simulatoren zur Berücksichtigung von Vertraulichkeit bzgl. fachspezifischem Know-How



Einfache Anpassung und Erweiterung für diverse Aufgabenstellungen durch **Modularität** und Verwendung von **Simulatorbibliotheken**

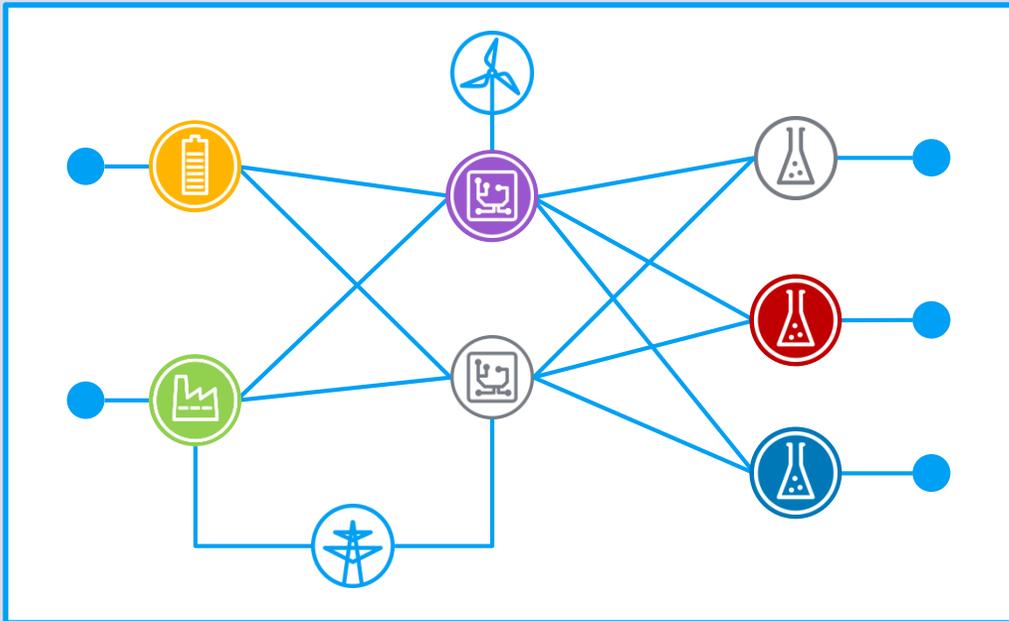
Verwendung **fachspezifischer Simulationstools** für Teilsysteme aus unterschiedlichen Fachgebieten



Was ist Co-Simulation?

Mathematische Modellierung des Anlagenverbundes

$$(*) \left\{ \begin{array}{l} \text{Icon 1} \quad F_1(\mathbf{u}_1, \dot{\mathbf{u}}_1, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) = 0 \\ \vdots \\ \text{Icon n} \quad F_n(\mathbf{u}_n, \dot{\mathbf{u}}_n, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) = 0 \end{array} \right.$$

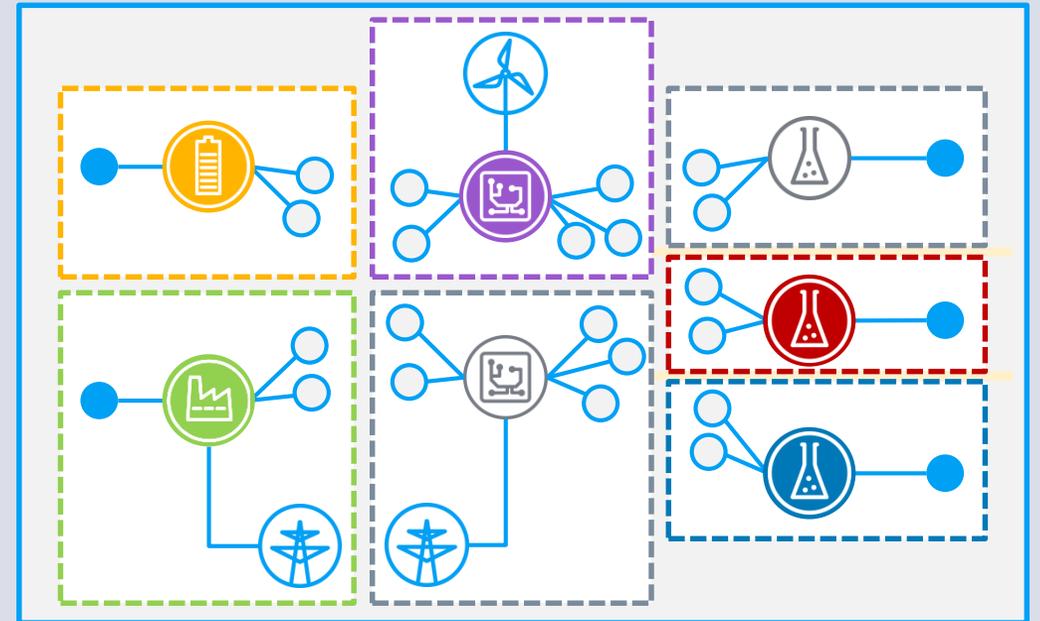


Zerlegung des Anlagenverbundes in unabhängige Teilsysteme F_i mittels Ersetzen von \mathbf{v} durch \mathbf{v}_i

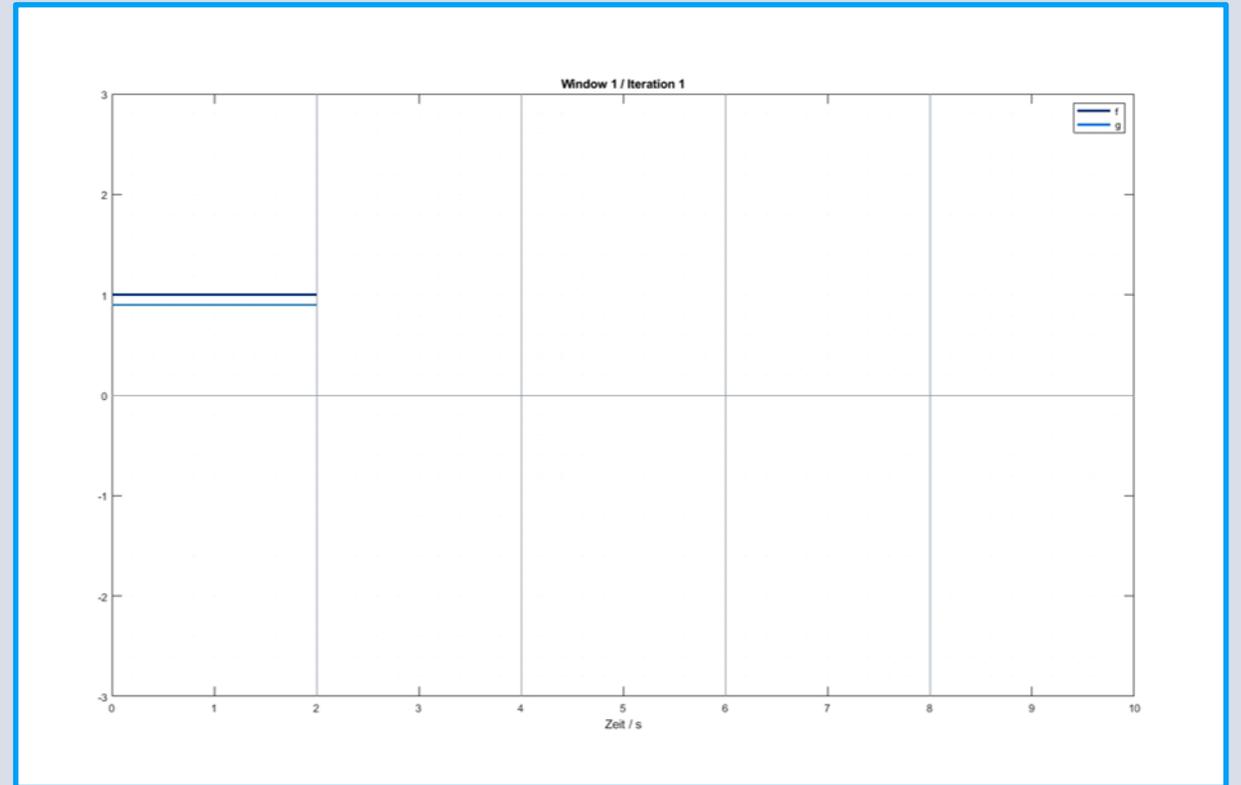
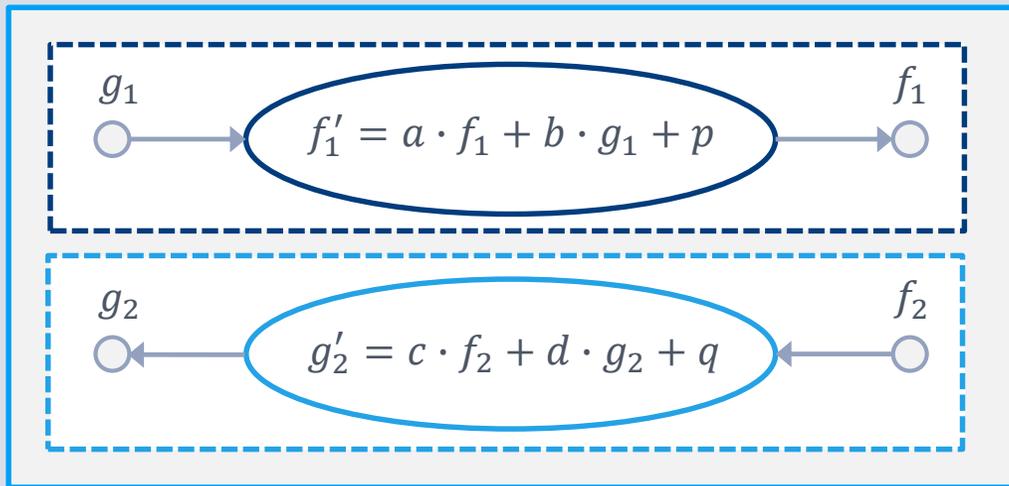
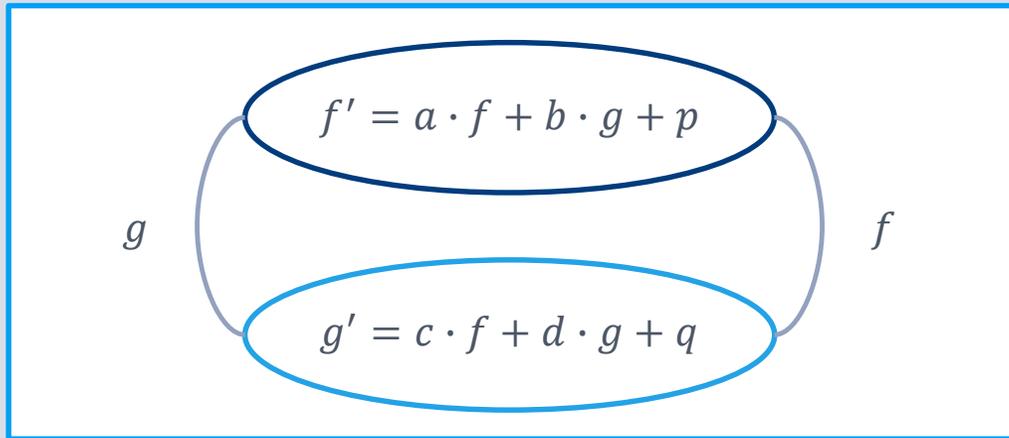
$$F_i(\mathbf{u}_i, \dot{\mathbf{u}}_i, \mathbf{v}_i, \dot{\mathbf{v}}_i, t) = 0$$

Kopplungsbedingungen:

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}, \quad \dot{\mathbf{v}}_i = \dot{\mathbf{v}}$$



Iterationsverfahren Wave-Form Relaxation



Kopplungsbedingungen: $f_1 = f_2, \quad g_1 = g_2$



1

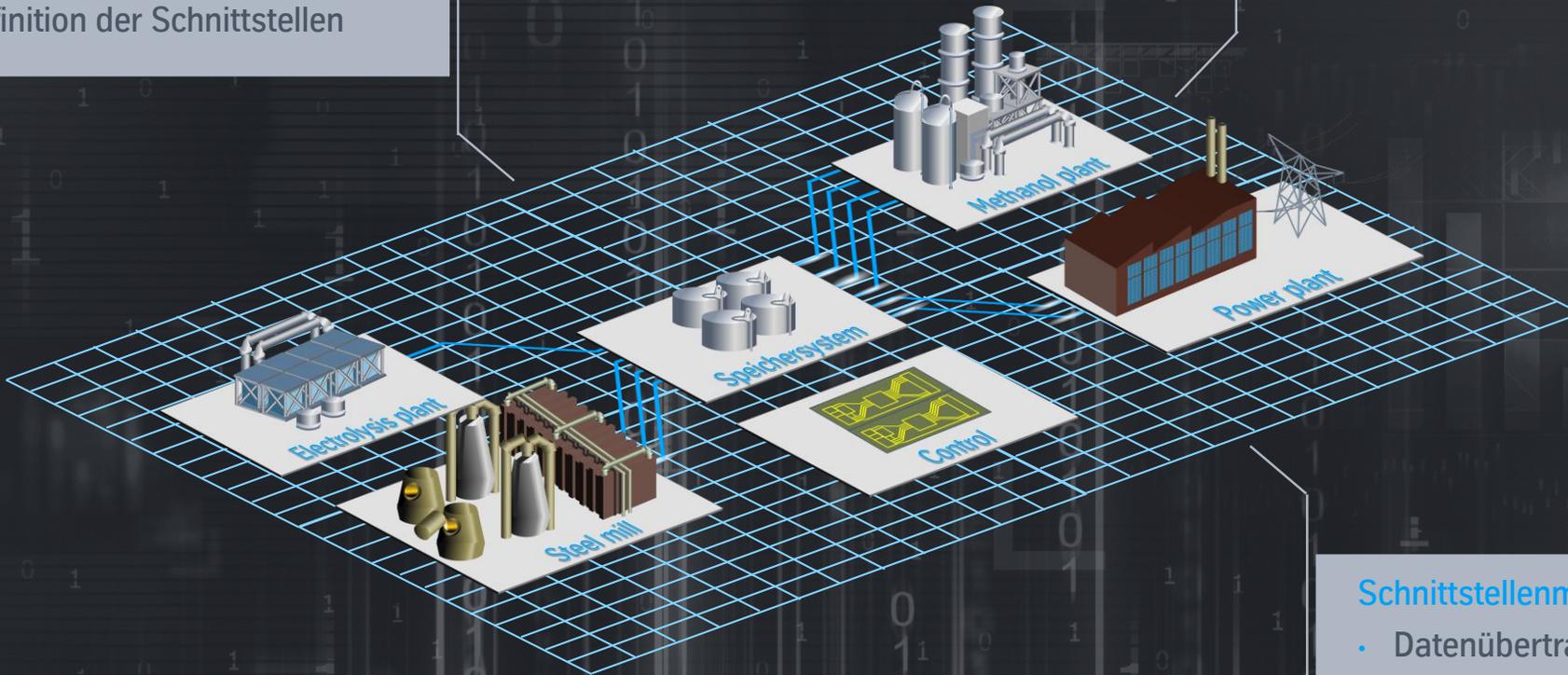
Software Architektur

- Softwarekomponenten
- Definition der Schnittstellen

2

Simulatoren

- Modelle
- Lösungsverfahren



3

Schnittstellenmodule

- Datenübertragung
- Simulationsverwaltung

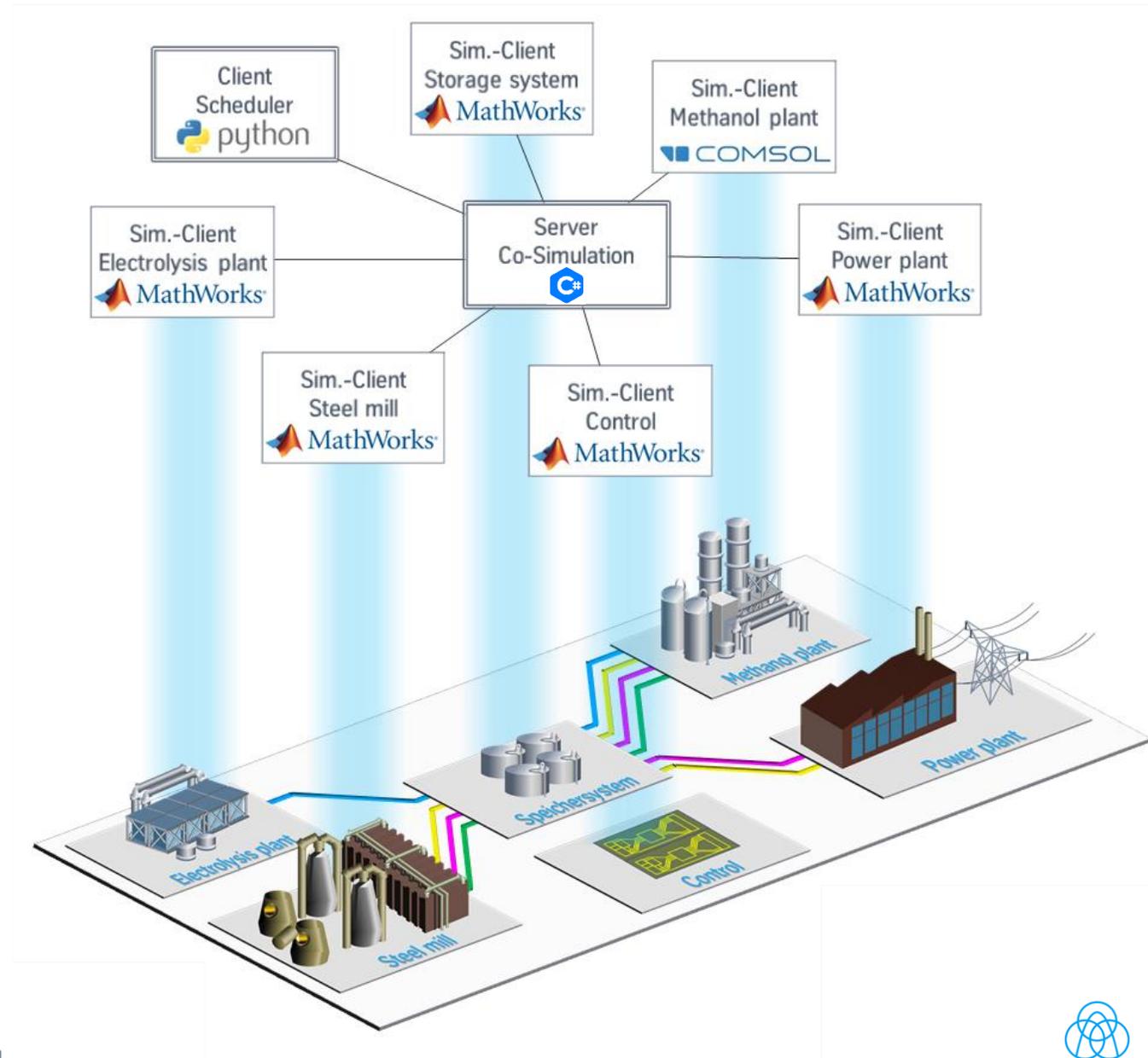


Das Carbon2Chem[®] Co-Simulations-Framework

- Server-Client Architektur
- Verschlüsselte webbasierte Kommunikation (WebSocket) über definiertes Interface
- Lösungsverfahren der Gesamtsimulation in Client „Scheduler“ implementiert
- Modelle und deren lokale Solver in speziellen Simulationsprogrammen implementiert
- Integration von Simulatoren über konfigurierbare WebSocket-Clients

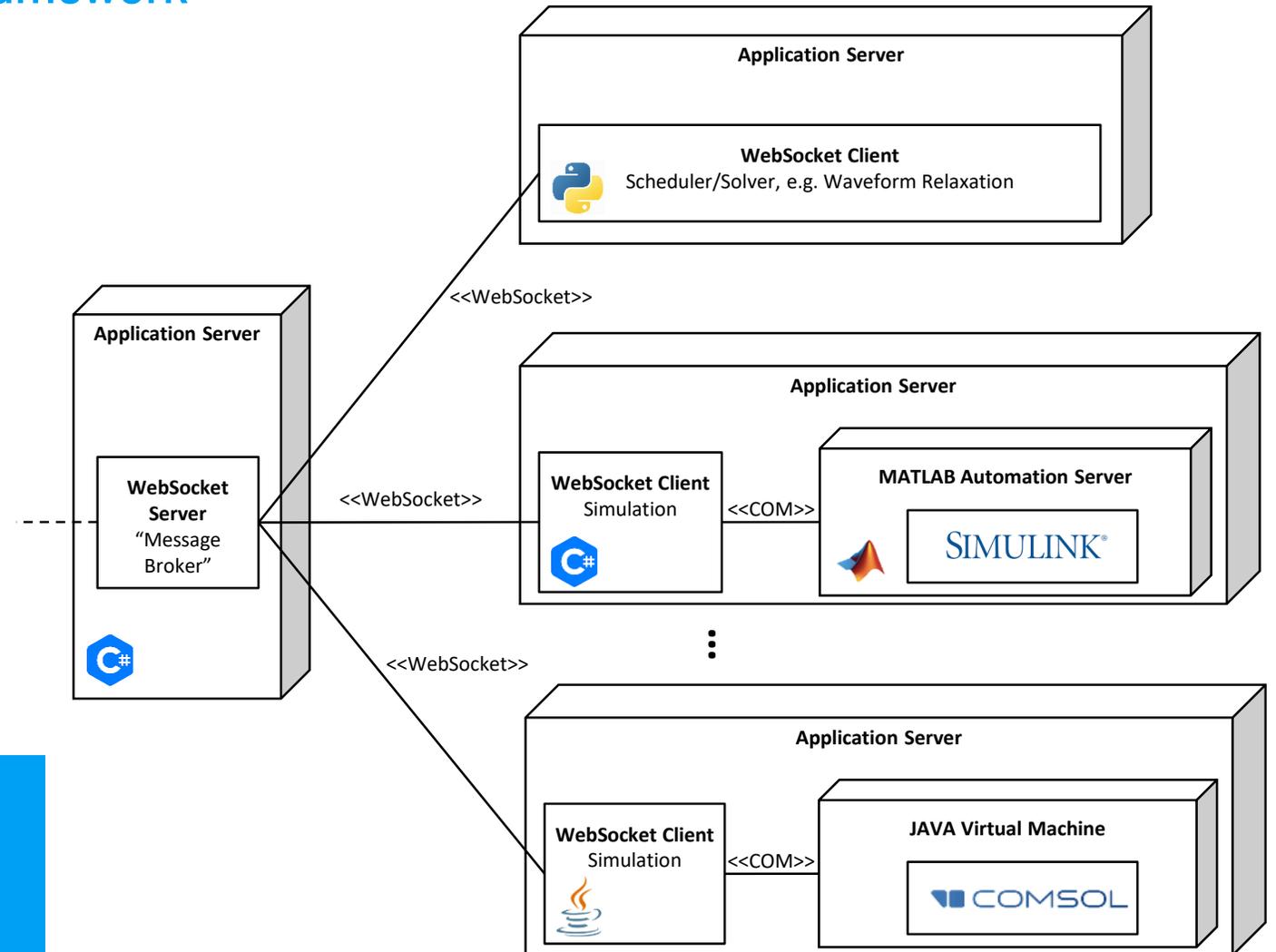
Interface Standards auf

- Modellebene
- Numerik-Ebene
- Software-Ebene



Das Carbon2Chem[®] Co-Simulations-Framework

- Server-Client Architektur
- Verschlüsselte webbasierte Kommunikation (WebSocket) über definiertes Interface
- Lösungsverfahren der Gesamtsimulation in Client „Scheduler“ implementiert
- Modelle und deren lokale Solver in speziellen Simulationsprogrammen implementiert
- Integration von Simulatoren über konfigurierbare WebSocket-Clients



Interface Standards auf

- Modellebene
- Numerik-Ebene
- Software-Ebene

usw., z.B.  



Integration von MATLAB® & SIMULINK® Modellen

1 Automation Server

- Lesen und Schreiben von Variablen
- Ausführen von Kommandos aus externer Software

2 Simulink Callbacks

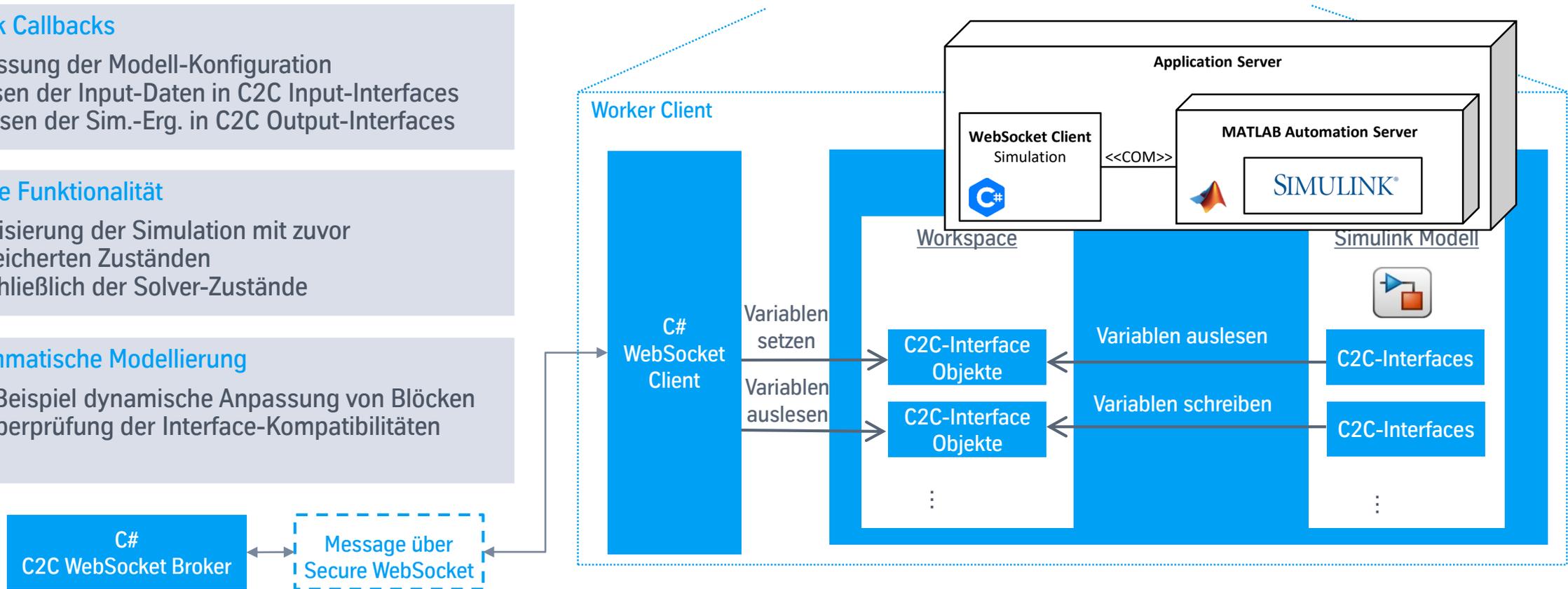
- Anpassung der Modell-Konfiguration
- Einlesen der Input-Daten in C2C Input-Interfaces
- Auslesen der Sim.-Erg. in C2C Output-Interfaces

3 SimState Funktionalität

- Initialisierung der Simulation mit zuvor gespeicherten Zuständen
- Einschließlich der Solver-Zustände

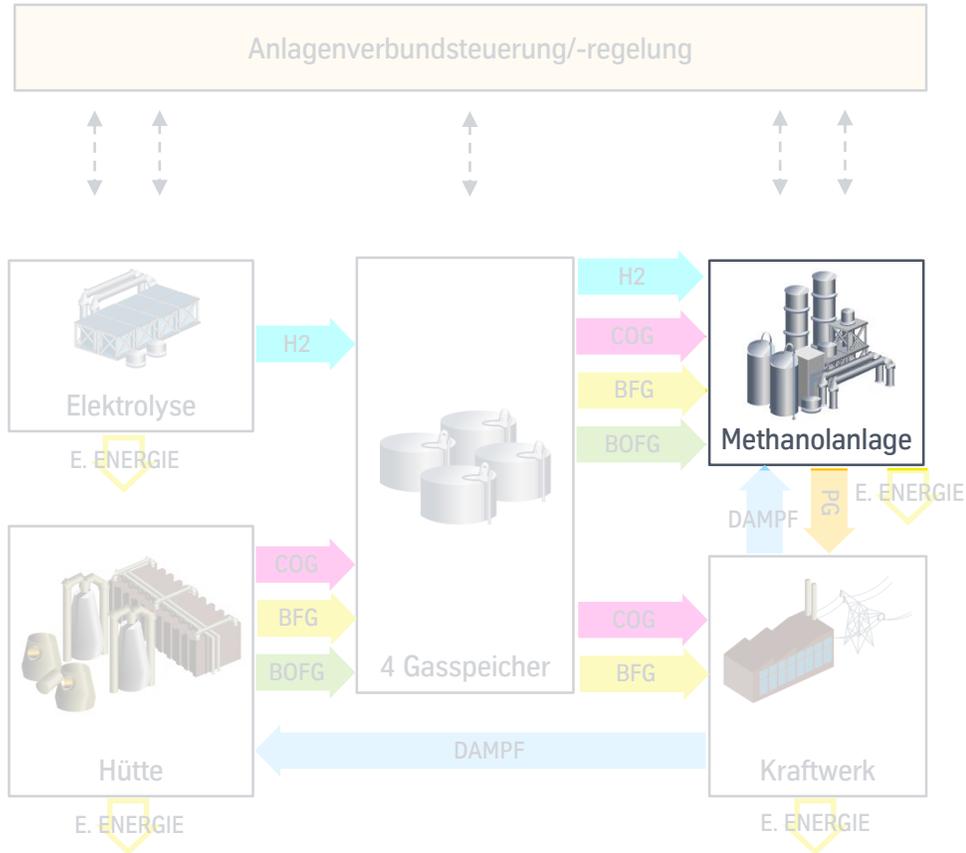
4 Programmatische Modellierung

- Zum Beispiel dynamische Anpassung von Blöcken zur Überprüfung der Interface-Kompatibilitäten



Beispiel eines Anlagenverbundmodells

Anlagenverbund



Modellbeispiel Methanolanlage

Flowsheet-basiertes Modell einer Methanolanlage

The flowsheet shows the following steps:

- Inputs: COG, BFG, and H₂ enter the 'Gas-reinigung' (gas cleaning) unit.
- The cleaned gas goes to 'Gas-verdichtung' (gas compression).
- The compressed gas then enters a reactor (represented by a vertical vessel with a stirrer).
- From the reactor, the stream goes to a separator for 'Rohmethanol' (crude methanol) and 'Purge-Gas' (purge gas).
- The 'Rohmethanol' goes to a 'Destillation' (distillation) unit to produce the final 'Produkt' (product).

DGL-basiertes Modell eines Methanolreaktors

Energieerhaltung:

$$\frac{dT_R}{ds}(s) = L_R \frac{1}{\rho_R(s) c_{pm,R}(s) u_R(s)} \cdot \left[\sum_j (1 - \Phi_R) \rho_s r_{R,j}(s) (-\Delta \tilde{h}_{R,j}(s)) + \alpha_{R,W} \frac{4}{d_i} (T_{R,W} - T_R(s)) \right]$$

Massenerhaltung:

$$u_R(s) = \tilde{m}_{R,flux} / \rho_R(s)$$

Druckverlust:

$$\frac{dp_R}{ds}(s) = L_R \left[-k_{R,p1} \frac{(1 - \Phi_R)^2}{\Phi_R^3} \frac{\eta_R(s)}{d_{R,p}^2} u_R(s) - k_{R,p2} \frac{(1 - \Phi)}{\Phi_R^3} \frac{\rho_R(s)}{d_{R,p}} u_R^2(s) \right]$$

$$\eta_R(s) = k_{R,\eta1} + k_{R,\eta2} T_R(s)$$

Chemische Reaktion:

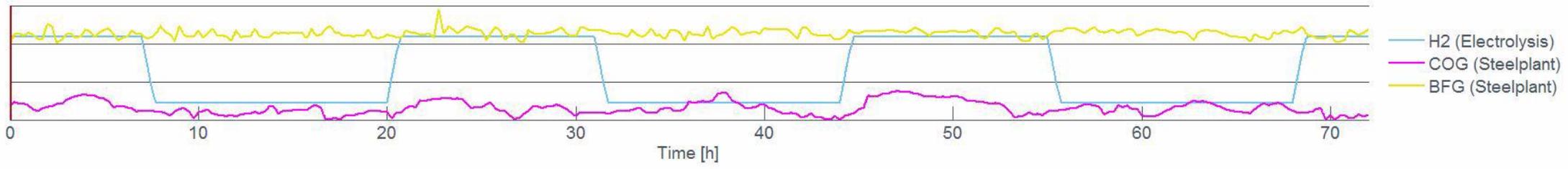
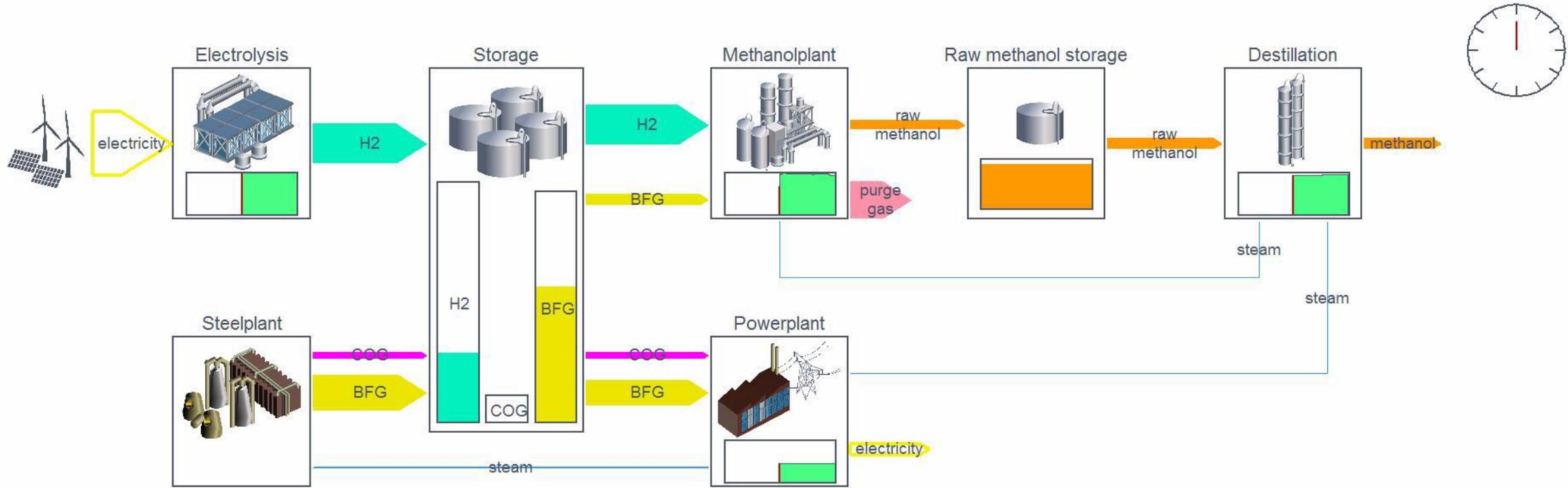
$$\frac{d\Psi_{R,i}}{ds}(s) = \frac{(1 - \Phi_R) L_R \rho_s M_R(s)}{u_R(s) \rho_R(s)} \left[\sum_j v_{R,i,j} r_{R,j}(s) - \Psi_{R,i}(s) r_{R,ges}(s) \right]$$

$$r_{R,ges}(s) = \sum_i \sum_j v_{R,i,j} r_{R,j}(s)$$

$r_{R,1}(s), r_{R,2}(s)$ u. $r_{R,3}(s)$ nach Graaf

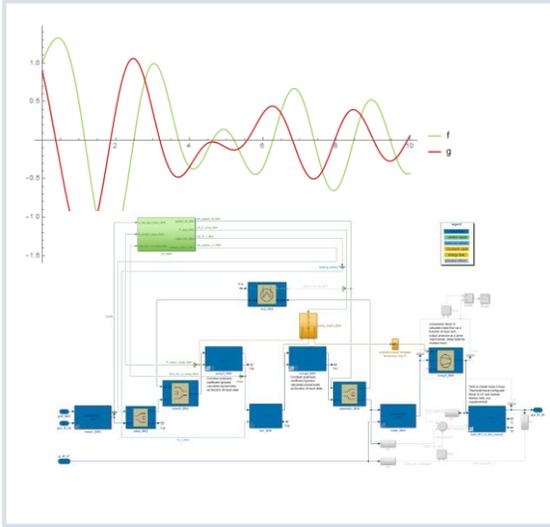
Gasgesetz:

$$\rho_R(s) = \frac{M_R(s) p_R(s)}{R_g T_R(s)}$$



Wie geht's weiter?

Von der Forschung bis zur Anlage



Forschung & Entwicklung

Erweiterungen Simulationsframework:

- Optimierung Lösungsverfahren
- Anbindung weiterer Simulationstools (Aspen, ChemCad,...)



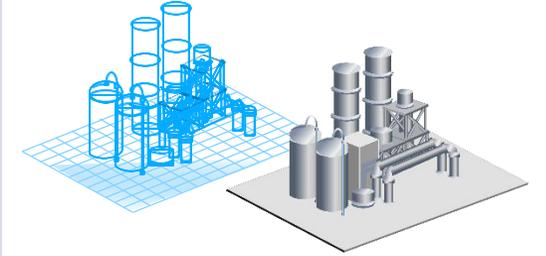
Engineering

Anbindung realer Anlagen
(Carbon2Chem® Technikum in Duisburg)



Konstruktion
Installation
Inbetriebnahme

Nutzung zur virtuellen Inbetriebnahme



Betrieb

Nutzung als Chemical Digital Twin

Die Arbeitsgruppe



Entwicklung Co-Simulationsframework

- Thorsten Wack
- Evren Yildiz
- Thomas Bieseke

- Dr. Andreas Diekmann
- Dr. Qinghua Zheng

Modellierung

- Dr. Stefan Schlüter
- Torsten Hennig

- Jonas Grundler

Prozesslogistische Steuerung

- Dr. Björn Hunstock
- Mathias van Beek

- Henning Wagner

