



NAMUR - Interessengemeinschaft
Automatisierungstechnik der Prozessindustrie e.V.

AK-PRAXIS

Austausch von Simulationsmodellen in der Prozessindustrie

Stand: 2024-10-08

AK 1.3.1 Informationsmodelle und Werkzeuge – Untergruppe Simulation

Verfasser: Jonathan Mädler, TU Dresden
Claudia Guadarrama Serrano, Bayer
Isabell Viedt, TU Dresden
Tamás Farkas, RWTH Aachen
Dr. Julia Semrau, Bayer
Dr. Wilhelm Otten, WOtten Consulting, DEXPI
Dr. Stefan Krämer, Bayer
Dr. Andreas Schüller, YNCORIS

AK-Leiter: Dr. Andreas Schüller, YNCORIS

Diese AK-PRAXIS spiegelt die Erfahrungen der Mitglieder im AK 1.3.1 wider und ist im Rahmen des Arbeitskreises abgestimmt. Sie hat nicht den Konsensgrad einer NAMUR-Empfehlung oder eines NAMUR-Arbeitsblatts. Mit einer AK-PRAXIS hat der Arbeitskreis die Möglichkeit, zeitnah eigene Erfahrungen für interessierte Leser zur Verfügung zu stellen.

1 Warum brauchen wir Simulationsmodelle und deren Austausch?

Es ist unbestritten, dass wir Simulationsmodelle in der Prozessindustrie brauchen. Eine Auslegung eines kontinuierlichen Verfahrens ist heute ohne den Einsatz eines Simulationswerkzeugs, welches das Verhalten der verfahrenstechnischen Grundoperationen unter Nutzung von physikalisch-chemischen Stoffdaten beschreibt, kaum noch vorstellbar. Die Simulationsmodelle liefern Stoff- und Energiebilanzen und die wesentlichen Auslegungsdaten der Verfahrensschritte als Basis für die Verfahrensplanung. Aber auch in späteren Phasen des Lebenszyklus werden heute Simulationswerkzeuge eingesetzt, z.B. zur Operator-Schulung, Inbetriebnahme-Unterstützung und zur Optimierung des laufenden Betriebs. Optimierung im laufenden Betrieb geschieht zum einen offline, indem die Simulationsdaten mit den Betriebsdaten validiert und dann mit Hilfe stationärer Simulationen Verfahrensverbesserungen entwickelt werden, zum anderen werden dynamische Simulationsmodelle online für das Monitoring des Anlagenzustands oder in Modellprädiktiven Reglern eingesetzt. Die Anforderungen an die Prozesssimulation sind im entsprechenden Positionspapier der Dechema [1] beschrieben.

Das Simulationsmodell oder auch „Verhaltensmodell“ ist nach aktuellem Verständnis das dritte Teilmodell des Digitalen Zwillings einer Prozessanlage, neben dem Strukturmodell für Prozess/Anlage und dem Operationsmodell (vgl. Abb. 1).

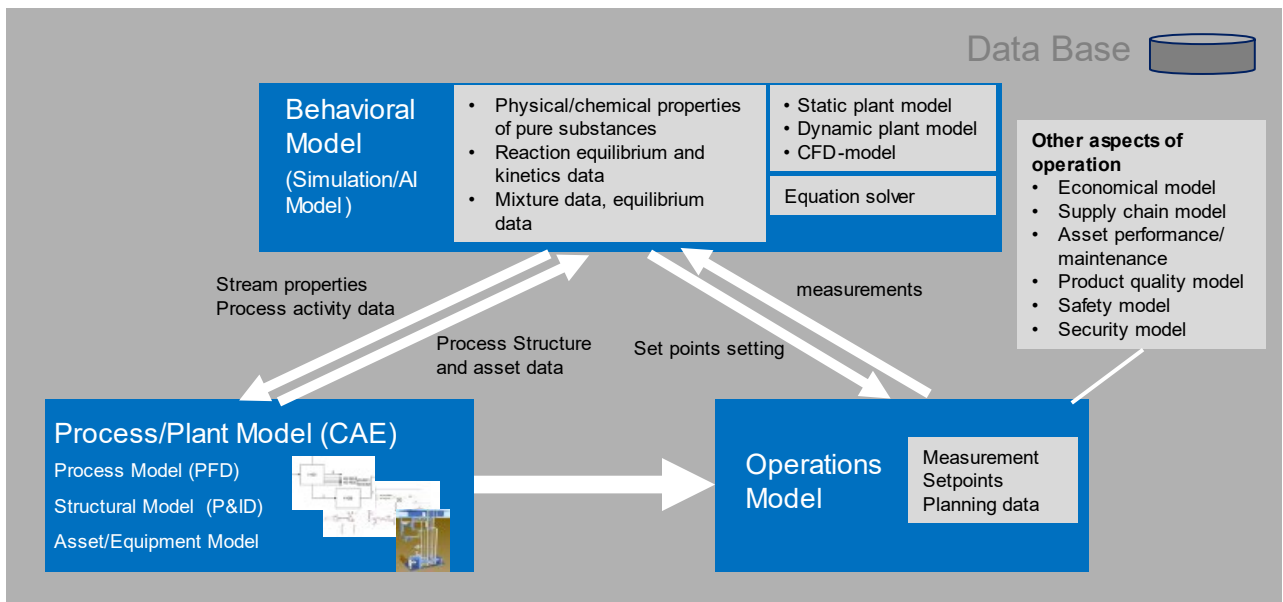


Abb.1: Komponenten des digitalen Zwillings in der Prozessindustrie

Die Simulationen wurden bisher im Wesentlichen von den Prozesseignern, meist den größeren Chemieunternehmen, selbst durchgeführt, da der Prozess und damit auch die Simulation Kern-Know-How der Unternehmen sind.

Je mehr die Prozessindustrie an Reife zunimmt und sich in Richtung Modularisierung entwickelt, umso häufiger werden Komponenten der Anlagen komplett von Anlagenbauern geliefert, die auch die Auslegung dieser Komponenten vorgenommen haben. Das Wissen über das Verhalten dieser Komponente liegt also beim Anlagenbauer. Der Betreiber hat aber ein großes Interesse, das Verhalten der Komponente zu kennen und das Verhaltensmodell in sein Gesamtanlagenmodell zu integrieren, um das Verhalten der Gesamtanlage beschreiben und optimieren zu können. Das ist heute schon bei Package-Units der Fall. Das Engineering der Zukunft verlangt daher, dass das Verhaltensmodell (also das Simulationsmodell) vom Anlagenbauer in geeigneter Weise bereitgestellt und in das Simulationsumfeld des Anlagenbetreibers integriert werden kann.

Bezüglich der Struktur wurde diskutiert, ob z.B. das Module Type Package (MTP) eine zusätzliche Funktion „Simulation“ enthalten müsste. Das MTP ist aber ein „Operations model“ welches die Integration der Module in den Process Orchestration Layer (POL) und die Steuerung des Anlagenbetriebs ermöglicht. Da das Simulationsmodell in allen Lebensphasen des Asset Lifecycle eingesetzt wird, ist es sinnvoller das Simulationsmodell getrennt vom „Operationsmodell“ zu halten, wie es in Abb. 1 dargestellt ist.

2 Anforderungen

Die Prozessindustrie stellt teilweise besondere Anforderungen an Methoden und Technologien zum Austausch von Simulationsmodellen. Für die Nutzung und Ausführung von Simulationen, insbesondere für die Integration verschiedener Teilmodelle, wird Kontextinformation benötigt, damit diese entsprechend der Zielstellung konfiguriert werden können. Das entsprechende Konfigurieren ist typischerweise ein aufwendiger Prozess, bei dem Domänenexpertise benötigt wird, um die Modelle und die Parameter interpretieren zu können. Daher brauchen Simulationsmodelle Beschreibungen, die ihre Einbindung und Integration in Simulationen ermöglichen.

Metadaten zu Simulationsmodellen sollten zum einen das Simulationsobjekt (= reales Asset) spezifizieren und gleichzeitig das Modell inklusive seines Verwendungszwecks, getroffener Annahmen, Schnittstellen, Lösungsverfahren, etc. beschreiben. Sowohl die Einbindung der Simulationsdatei als auch ihre Metadaten sollten auf Basis offener, herstellerunabhängiger Standards erfolgen, sodass die Austauschbarkeit gewährleistet wird. Dabei muss die Qualität des Simulationsmodells ab- und zugesichert werden können, während ggf. die IP der beteiligten Stakeholder zu wahren ist. In Abb. 2 sind die wesentlichen Anforderungen an die Metadaten zusammengefasst.



Abb. 2: Metadaten für die Weitergabe eines Simulationsmodells im Überblick

Wollen wir Simulationsmodelle zur Unterstützung der verschiedenen Aufgaben innerhalb des Anlagenlebenszyklus als Assets zusammen mit realen Package-Units oder - im Fall modularer Anlagen nach VDI 2776 - Process Equipment Assemblies (PEAs) austauschen, müssen wir den jeweiligen Anwendungsfall bzw. den „Verwendungszweck“ dieser Modelle klar definieren. Nicht jeder Anwendungsfall innerhalb des konventionellen Anlagenlebenszyklus für die Arbeit mit Package-Units oder PEAs im Anlagenengineering relevant. Zum Beispiel ist es nicht sinnvoll interne Teilmodelle einer Package-Unit oder PEA für den Test des internen Automatisierungssystems auszutauschen, da dieses innerhalb einer Package-Unit oder PEA bereits entworfen, implementiert und getestet sein sollte. Interessant sind dagegen Simulationsmodelle, die das verfahrenstechnische und automatisierungstechnische Verhalten einer PEA als ein Ganzes nach außen beschreiben und so Fragestellungen auf Anlagenebene beantworten.

3 Stand der Technik

Functional Mock-Up Interface (FMI) als offener Standard für den Austausch von Simulationsmodellen liefert Möglichkeiten zur Charakterisierung von Modellschnittstellen und Lösungsverfahren (z.B. Model Exchange oder Co-Simulation). Bei Model Exchange werden Modelle durch Differentialgleichungen beschrieben, die vom Löser des Gesamt-Simulationswerkzeugs berechnet werden, während bei Co-Simulation Modelle von ihren Simulatoren zusammen mit den Solvern als lauffähiger Code exportiert werden.

Ansätze zur formalen Beschreibung des Verwendungszwecks eines Modells sind dabei jedoch noch kaum entwickelt. Darüber hinaus ist FMI als Standard für den Austausch dynamischer Simulationsmodelle nicht auf die spezifischen Anforderungen der verfahrenstechnischen Simulation angepasst. So sieht der Standard beispielsweise nativ keine Möglichkeit für die Integration von Stoffdatenmodellen in Unit Operation-Modelle vor. Darüber hinaus unterstützt der Standard nur dynamische Simulation. Prozesssimulation für das Anlagendesign basiert aber in der Regel auf statischer Simulation.

Im Rahmen der Analyse im Arbeitskreis wurden verschiedene Testszenarien am Beispiel einer vereinfachten Kälteanlage durchgeführt. Hierbei konnte die technische Machbarkeit gezeigt werden.

Der Computer Aided Process Engineering (CAPE)-OPEN-Standard unterstützt dagegen die Integration von Stoffdatenmodellen und auch die stationäre Simulation. Hingegen ist hier aber Stand heute keine dynamische Simulation möglich, der Export von Modellen wird von kommerziellen Werkzeugen in der Regel nur mangelhaft unterstützt. Insgesamt ist der Standard weniger verbreitet und ausgereift.

Die Ansätze für den Test und die Zertifizierung von Simulationsmodellen stehen noch am Anfang ihrer Entwicklung. Stand der Technik sind hier die Verifikation- und Validierungs- (V&V)-Methoden, die sich auf die Genauigkeit und den Gültigkeitsbereich als Qualitätskriterien für Simulationsmodelle fokussieren. Werden Simulationsmodelle als Assets weitergegeben, rücken weitere Kriterien wie beispielsweise Robustheit und Performance zusätzlich in den Fokus. Testgetriebene Entwicklung und FCM¹-Modelle aus dem Bereich der Softwareentwicklung liefern hier vielversprechende Ansatzpunkte zur Erweiterung.

Der IP-Schutz stellt im Zusammenhang mit verfahrenstechnischer Simulation nach wie vor eine größere Herausforderung dar. Aufgrund der hohen Nichtlinearität und Steifigkeit verfahrenstechnischer Simulationsmodelle haben sich in den letzten Jahren gleichungsbasierte Lösungsverfahren durchgesetzt. Diese können aber nur beschränkt eingesetzt werden, wenn das Modell verschlüsselt und somit die Modellgleichungen dem Solver unzugänglich sind. Alternative Ansätze sind blocksequentielle Lösungsverfahren für die statische und Co-Simulation für die dynamische Simulation, bei denen die Einzelmodelle jeweils verschlüsselt vorliegen können. Weitere Lösungsansätze befassen sich entweder mit der alternativen Darstellung des Modells, um die Information zu verschleiern, oder mit fortgeschrittenen Lösungsverfahren.

4 Nutzung der Verwaltungsschale zum Austausch von Simulationsmodellen

Simulationsmodelle sind als Verhaltensmodelle Teil des Digitalen Zwillings verfahrenstechnischer Anlagen. Daher ist die Verwaltungsschale eine mögliche Technologie zum Austausch der Simulationsmodelle. Simulationsmodelle werden über den gesamten Lebenszyklus der Anlagen für die Auslegung, die Inbetriebnahme und Optimierung im Betrieb genutzt. Sie sollten nur in Ausnahmefällen Teil von Strukturmodellen (CAE) oder Operationsmodellen wie beispielsweise des MTPs sein. Daher sollten Simulationsmodelle als eigenständiger Teil z.B. in die Verwaltungsschale (Asset Administration Shell, AAS) integrierbar sein, welches den Rahmen für verschiedene digitale Teilmodelle zur Beschreibung realer Assets bildet. In einer Arbeitsgruppe der IDTA [2] wurde ein Teilmodell der Verwaltungsschale entwickelt, das die Anforderung der Fertigungstechnik abgedeckt. Die AAS, die für die Abbildung des Asset-Lebenszyklus in der Fabrikautomation entwickelt wurde, muss für die Spezifika der Prozessindustrie adaptiert werden. Mit der Ergänzung der in der Prozessindustrie genutzten funktionalen Anlagenstruktur entsprechend der Anlagenstruktur des DEXPI-Standards [3] kann es jedoch auch die Anforderungen der Prozessindustrie zum Austausch von Simulationsmodellen erfüllen.

5 Fazit

Die Bedeutung von Simulationsmodellen als digitale Assets ist unbestritten und wird weiterwachsen. Aus den oben formulierten Anforderungen und den vorhandenen Methoden und Technologien resultiert erheblicher Forschungs- und Entwicklungsbedarf. Das bereits existierende Teilmodell der Verwaltungsschale bietet jedoch bereits heute einen Rahmen zur Übertragung von Meta-Informationen der Simulationsmodelle. Die Arbeiten im Arbeitskreis fließen in eine Publikation ein, in der weitere Details zu den hier andiskutierten Anforderungen und dem Stand der Technik einfließen. Auch die genannten Beispiele werden dort ausführlich vorgestellt.

6 Literatur

- [1] Process Simulation – Fit for the future? Position paper of the ProcessNet working Committee Process Simulation, Process Synthesis and Knowledge Processing, 2021
- [2] Provision of Simulation Models, https://industrialdigitaltwin.org/wp-content/uploads/2023/01/IDTA-02005-1-0_Submodel_ProvisionOfSimulationModels.pdf, abgerufen 30.01.2024.
- [3] DEXPI working group: DEXPI P&ID Specification 1.3 <https://dexpi.org/wp-content/uploads/2020/09/DEXPI-PID-Specification-1.3.pdf>, abgerufen 30.01.2024.

¹ Faktoren (F) beschreiben die gewünschten Eigenschaften der Software. Kriterien (C) werden diesen Faktoren zugeordnet und durch Metriken (M) geprüft.