

# *Ontwikkelingen van de Tools voor het Modelleren én het Simuleren*

Peter A. Vanrolleghem

BIOMATH, Universiteit Gent, België



NVA Workshop, Utrecht, 14/11/97

De Modelorganisatie: De Toekomst van Modelleren en Procesautomatisering

1 van 10

## *Enkele Termen*

Modelbouw: Opbouw van een representatie van de realiteit in wiskundige vergelijkingen

*Gebruiksvriendelijk, Hergebruik van kennis*

Simulatie: Virtueel experimenteren met een representatie van de realiteit waarover vragen gesteld worden

*Snel, Accuraat*

niet enkel simuleren, maar alle berekeningen die met een model gebeuren, bv. ontwerp, proefopzet, MBPC, onzekerheidsanalyse,...

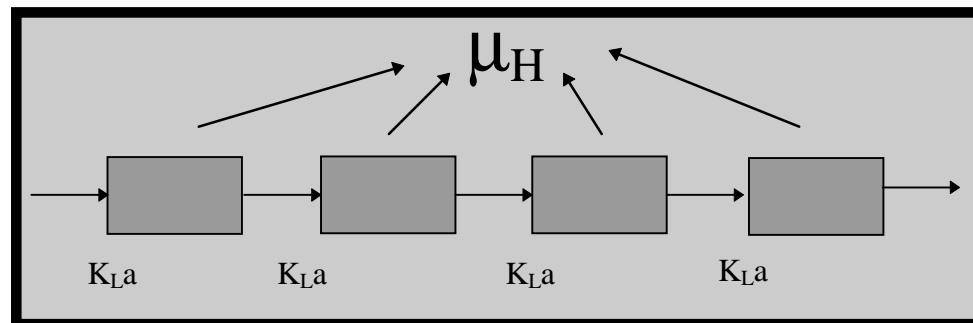
=> *“Modelgebruik”*



# Modelbouw

(Gebruiksvriendelijk, Hergebruik)

- (i) Begeleide werkwijze (matrix-voorstelling, eenheden check, ...)
- (ii) Groeiende bibliotheek van kant-en-klare modellen (WWW)
- (iii) Uitwisselbaarheid van modellen (*EU Modellica standaard*)
- (iv) Hiërarchische modelbouwwijze (encapsulation) (Spaghetti)



## *Modelbouw (vervolg)*

- (v) Hiërarchische Modellenbank, *bv.*  $\mu_H \rightarrow \mu \rightarrow Monod(S_S) \rightarrow T(Arrhenius)$
- (vi) Controllers/Sensoren ook opgenomen in modellenbank
- (vii) Verschillende “formalismen” in 1 modelbouwomgeving
  - ODE en algebraïsche vergelijkingen
  - PDE, *bv.* nabezinkers, biofilms
  - Impliciete vergelijkingen, *bv.*  $0 = K_L a (C_s - C) - OUR$
  - Niet-causale vergelijkingen, *bv.* splitters, Unitank
  - Transferfunctiemodellen *bv.* electrodes, controllers
- (viii) Opgave van het “Experimental Frame” van een model
- (ix) Modelselectie ondersteunt door doelstellingspecificatie



# *Modelgebruik*

(Snel, Accuraat, Gebruiksvriendelijk)

- ⇒ Simulatie
- ⇒ Parameterschatting
- ⇒ Sensitiviteitsanalyse
- ⇒ Proefopzet (Optimal Experimental Design)
- ⇒ Onzekerheidsanalyse / Risico-analyse
- ⇒ Optimalisatie (controller tuning, ontwerp)
- ⇒ Model-based Predictive Control, BOS



## *Modelgebruik: Simulatie*

- (i) Experiment manager (bijhouden van simulatie-runs)
- (ii) Experimental Frame check (binnen beperkingen van model ?)
- (iii) Numerieke algorithmen + compilatie
- (iv) Symbolische manipulatie voor optimalisatie van de code



## *Modelgebruik: Parameterschatting*

- (i) Aanwending Experimental Frame (parameter bounds)
- (ii) Numerieke algorithmen
- (iii) Covariantie-analyse (betrouwbaarheid / identificeerbaarheid van par.)
- (iv) Sensitiviteitsanalyse (ter selectie van te schatten parameters)
- (v) Multi-respons / Multi-experiment (bv. Respirometer + Volle schaal)
- (vi) Analyse van de residuelen



## *Modelgebruik: Proefopzet*

- (i) Optimalisatieprobleem (zelfde algorithmen als voor par. schatting)
  - ⇒ Selectie van meetfrequentie + -duur
  - ⇒ Bepaling van experimentele condities
  - ⇒ Selectie van meetvariabele(n), -apparatuur en -locatie
- (ii) Proefopzet voor parameterschatting
- (iii) Proefopzet voor modeldiscriminatie





## *Modelgebruik: Optimalisatie van WZI's*

- (i) Optimalisatieprobleem (zelfde algoritmen als voor par. schatting)
- (ii) Doorlichting en Optimalisatie van werking (bv. Flow distribution)
- (iii) Tuning van regelaars (i.p.v. manuele tuning)
- (iv) Doorrekenen van een ontwerp onder dynamische condities
- (v) Cost-Benefit analyse (Kapitaal- vs. Werkingskosten)
- (vi) Risico-analyse ( $\approx$  onzekerheidsanalyse , sensitiviteitsanalyse)



# *Stellingen*

- (i) Modelbouw en -gebruik: autocatalytisch proces geïnitieerd
- (ii) Toename van ervaring verloopt exponentieel (bv. calibratie)
- (iii) Uitwisseling van ervaring dient gestimuleerd  
(bv. gebruikersplatforms, uitwisselbaarheid modellenbank)
- (iv) Softwaretools worden steeds krachtiger,  
laten meer ingewikkelde vraagstellingen toe,  
maar beschermen de gebruiker tegen gebeurlijke ongevallen
- (v) Cost-Benefit is aangetoond (maar presentatie dient objectiever)

