Notizen PSDM

**Requirements:**

-direkt über txt Datei hat bei mir nicht funktioniert

-nachdem das BWB Lan gekappt war, war es aber möglich die einzelnen Teile manuell über den Anaconda promt zu installieren (über pip install bzw. pip install -e beim PSDM)

Um den github Link zum IX Modell ausführen zu können musste ich noch git installieren (<https://git-scm.com/downloads>)

-zusätzlich musste ich noch *shinywidgets* installieren

**Start:**

**-**wenn ich die app.py Datei in Spyder öffne und das skript ausführe passiert nichts (auch keine Fehlermeldung)

-wenn ich *C:\Users\BWXP883\Documents\Modellierung\Water\_Treatment\_Models\ShinyPy-GAC>python app.py* im Anaconda promt eingebe passiert auch nichts

-wenn ich am Skriptende von app.py *app.run()* ergänze bekomme ich in Spyder folgende Fehlermeldung:

*RuntimeError: asyncio.run() cannot be called from a running event loop*

-Aufruf über Anaconda promt funktioniert dann aber

**Programmbenutzung:**

**Input Data**

**Adsorbent Characteristics**

Der „Advanced“ Reiter passt eher zu Adsorption Properties, da es die Kinetikparameter ja stoffabhängig sind (Reiter doch nötig für IX)

**NOM**

-keine Fehlermeldung, wenn falsches Dateiformat (z.B. Spaltenbezeichnung nicht „m“ und „c“)

-noch keine Möglichkeit DOC-Fraktionen automatisch zu übernehmen für Test mit Ablaufdaten

-vielleicht Übersicht mit prozentualer Anzeige der DOC Fraktionen ergänzen (für m= 0, z.B. c0 = 20%, c1=31%...)

-fehlende Einheit an Achsenbeschriftung plot

**Adsorption properties**

-es gibt keine Möglichkeit beim Kf\_Wert den PSDM default einzugeben (Spurenstoff in µg/L und AK in g/L)

-die Einheit des Kf Wertes wird nicht abgespeichert + bei der Berechnung wird der Zahlenwert des Kf Wertes in der PSDM default Einheit µg/g / (µg/L)^n verwendet

-es kann nicht zwischen verschiedenen Wässern unterschieden werden + es kann keine Info zum Wasser gegeben werden bei dem die Isotherme ermittelt wurde (TW, GW, MW…pH Wert, DOC etc.)

**Data**

-Es fehlt eine Möglichkeit bei Effluent und Influent zwischen den verschiedenen Adsorbersteps zu unterscheiden

-Wenn man nochmal eine neue Datei auswählt fügt sich der alte an den neuen Datensatz, es fehlt eine „clear“ option oder dass der neue Datensatz automatisch den alten ersetzt.

**Simulation**

**Setup**

-Fehlermeldungen werden nicht ausgegeben

-Einstellungen nr, nz, ne limitieren/ Hinweis anzeigen

-Stop App funktioniert nicht bei mir

**Results**

-effluent hat influent label

-es fehlen effluent Datenpunkte zum Vergleich

**TRM**

TRM fit klappt noch nicht (evtl Anpassung Startwert / Einheiten Umrechnung nötig). Ich hatte im Batch die Spurenstoffdaten in mgC/L und den DOC ebenfalls (nicht wie vorhin behauptet beides in µg/L). Falls man beides in µg/L hätte müssten die vorgeschlagenen Kf Werte nochmal angepasst werden

Übernahme von Daten in GUI klappt super, Testlauf für DBK klappt aber noch nicht. Evtl. wegen noch fehlender DL Anpassung?

Sinnvoll wäre, wenn die TRM Komponenten im plot auch als Summe TRM (=DOC) auftauchen. Bzw. falls ein zweistufiges Verfahren geplant ist müssten die TRM Komponenten wieder zu einer Summe zusammengeführt werden bevor sie in die nächste Stufe gehen

**IX Modell**

Die EPA Beispieldatensätze für IX sind bei mir schon in der R shiny Applikation nicht lauffähig (bzw. es wird schon etwas geplottet aber sieht nach nem numerisch instabilen run aus). Evtl. weg lassen? … und mal versuchen IX übers TRM zu modellieren? Dafür hätte ich Daten da (aus Rubens BA). Der Einfluss der Ionen müsste dann indirekt zumindest bei den Isothermen berücksichtigt sein.