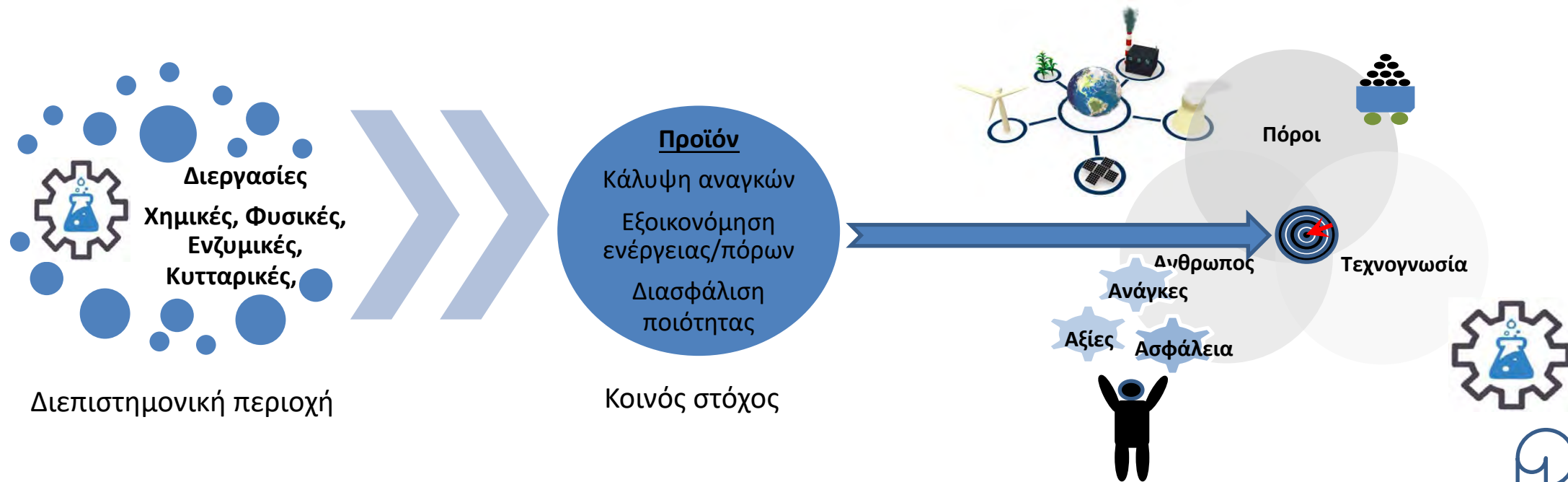




Υπολογιστική Μηχανική Διεργασιών

Προκλήσεις και προοπτικές

Ανδρέας Γ. Μπουντουβής
Πρύτανης ΕΜΠ



- ☐ Ανάγκη για νέα προϊόντα: φάρμακα, υλικά, ένζυμα, καταλύτες ...
- ☐ Προσαρμογή σε διεθνείς κανονισμούς (π.χ. Περιορισμός περιεκτικότητας S στα ναυτιλιακά καύσιμα από 3.5 % σε 0.5 %)
- ☐ Αντικατάσταση επικίνδυνων/σπάνιων α' υλών
- ☐ Αξιοποίηση εναλλακτικών πηγών ενέργειας
- ☐ Στροφή σε παραγωγή κοντά στην κατανάλωση (reshoring)
- ☐ Ενσωμάτωση νέων τεχνολογιών πληροφορικής/τεχνητής νοημοσύνης (Big Data)

Διεργασίες Χημικής Μηχανικής: Digital Twins

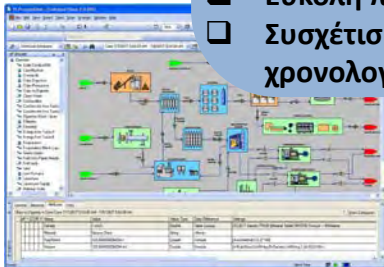


Advanced Solutions
OPC Connectivity
Honeywell Users Group 2015
Randall Richel
HUG Americas June 2015

Βάσεις δεδομένων διεργασιών (real-time)

Operational Historians (Pi- OSISoft Ltd, Honeywell Uniperformance PHD...)

- Η Χημική βιομηχανία έχει επενδύσει σε συστήματα διαχείρισης δεδομένων
- Σταδιακή διείσδυση και σε άλλους κλάδους (π.χ. Φαρμακοβιομηχανία)
- ☐ Συλλογή/αποθήκευση δεδομένων της διεργασίας (In-line/off line)
- ☐ Εύκολη πρόσβαση και ανάλυση δεδομένων
- ☐ Συσχέτιση δεδομένων από διαφορετικές πηγές και χρονολογίες



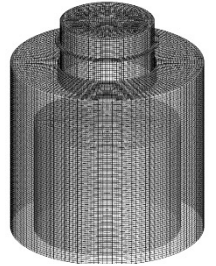
Δεδομένα

Πείραμα
Προσομοίωση

Λεπτομερή μοντέλα διεργασιών μεγάλης κλίμακας

Κώδικες υπολογιστικής ρευστομηχανικής (ANSYS/Fluent, COMSOL, OPEN Foam...)

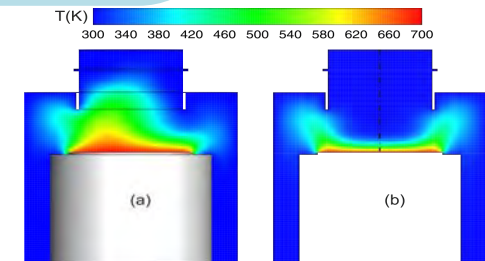
- ☐ Υπολογιστική ανάλυση σε πολλές κλίμακες
- ☐ Επίλυση για μεγάλο αριθμό μεταβλητών και πολλές παραμέτρους διεργασίας
- ☐ Παράλληλη επεξεργασία
- ☐ Εύχρηστη γραφική απεικόνιση
- ☐ Εύχρηστα/αποδοτικά εργαλεία για ερευνητικούς σκοπούς και τη βιομηχανία.



Δεδομένα



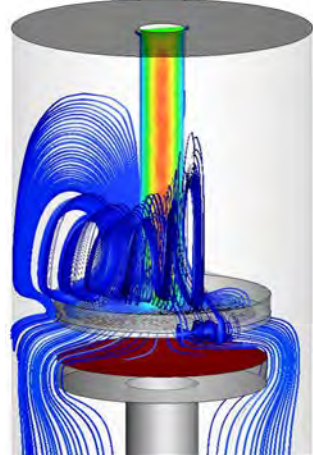
Πληροφορία



CRISP-DM: Cross Industry Standard Process for Data Mining



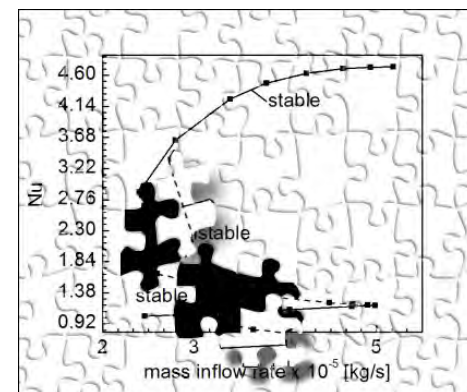
- Επιχειρηματική κατανόηση: Καθορισμός στόχων/δεικτών επίτευξης στόχων
- Αξιολόγηση κατάστασης: Διαθεσιμότητα & ποιότητα δεδομένων, ανθρώπινων πόρων, υποδομών
- Προετοιμασία δεδομένων: Επιλογή, Ομογενοποίηση, Κατάταξη δεδομένων
- Μοντέλα αξιοποίησης δεδομένων
- Αξιολόγηση αποτελεσμάτων
- Εφαρμογή νέας πληροφορίας & αξιολόγηση επίτευξης αρχικού στόχου



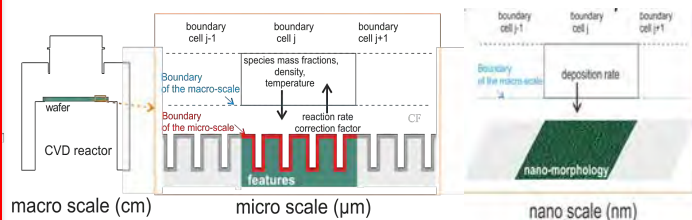
Παράδειγμα: Χημική Απόθεση από Ατμό Chemical Vapor Deposition (CVD)

- Αλληλεπίδραση φυσικών φαινομένων με χημικές αντιδράσεις
- Ελλιπής γνώση δικτύου Χημικών Αντιδράσεων
- Σύνθετες γεωμετρίες
- Μεγάλης κλίμακας μοντέλα/υψηλό κόστος επίλυσης

Πρόκληση :Μη γραμμικότητα Πολλαπλότητα λύσεων



Πρόκληση: ΠΟΛΛΑΠΛΕΣ ΚΛΙΜΑΚΕΣ Απόθεση σε μικρο/νανο-τοπογραφία (Αλληλεπίδραση μακροσκοπικού με Μοντέλο σε μικρο/νανο-κλίμακα)



Πρόκληση : Διερεύνηση με Υπολογισμούς μεγάλης κλίμακας

Άγνωστη
κινητική

3-D
(1.2M cells grid)

Μοντέλο Κινητικής #1

Μοντέλο Κινητικής #2

...

Μοντέλο Κινητικής #n

Υπολογισμός ρυθμού
απόθεσης και σύγκριση
με πειράματα

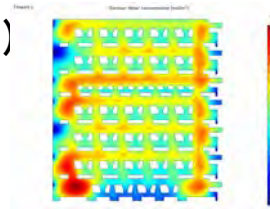
Funding: CERATIZIT Luxembourg S.à r.l
PhD Candidate : Paris Papavasileiou, ChemEng NTUA
P.I. : Dr. Eleni Koronaki, NTUA & ULux

Study approaches: Is there a optimal blend?

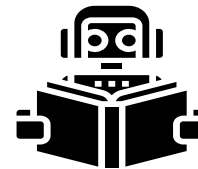
- Experimental (eg. [1])



- Computational Fluid Dynamics (CFD)
(equation-based) (eg. [2])



- Machine Learning (ML) (data-based) (eg. [3])



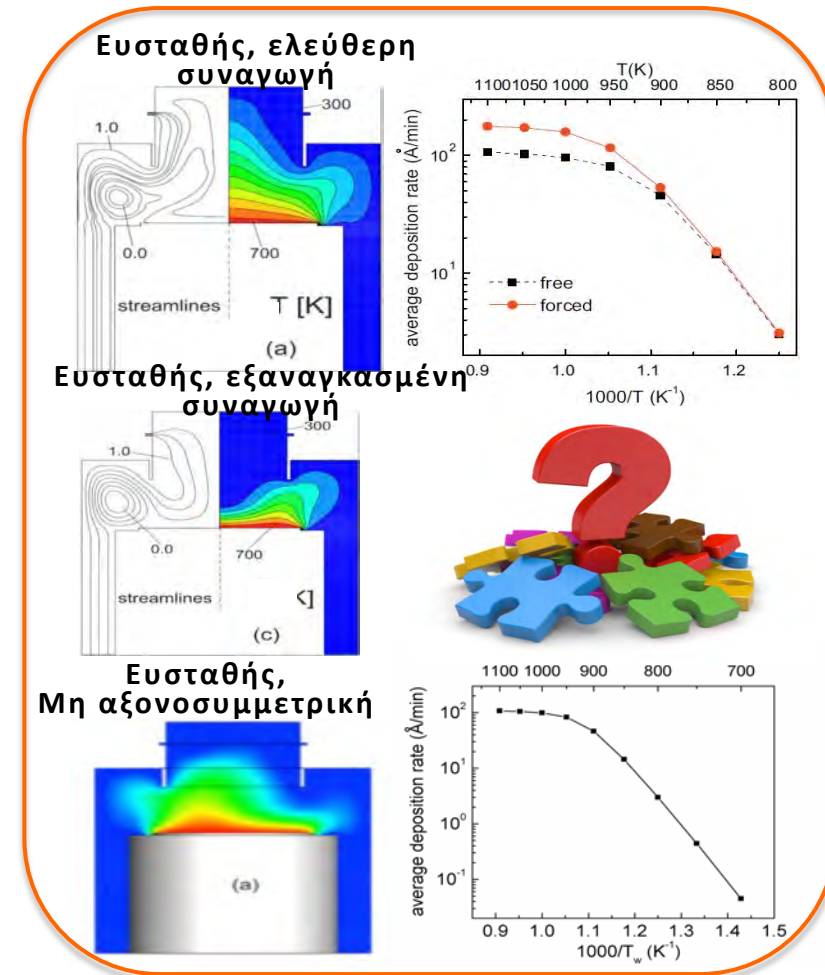
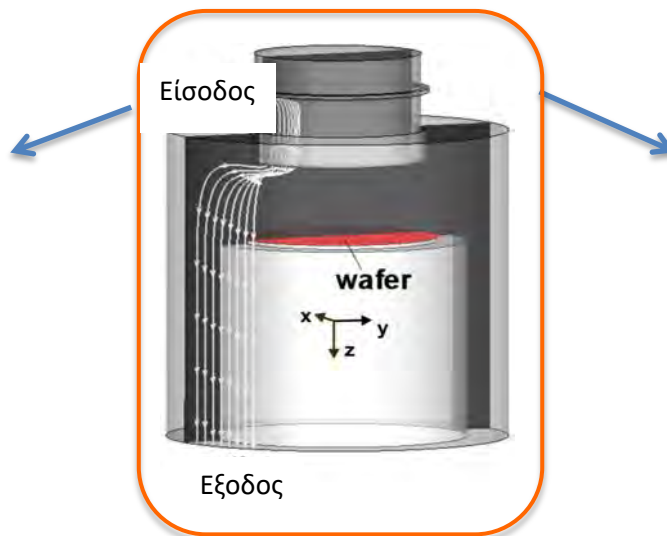
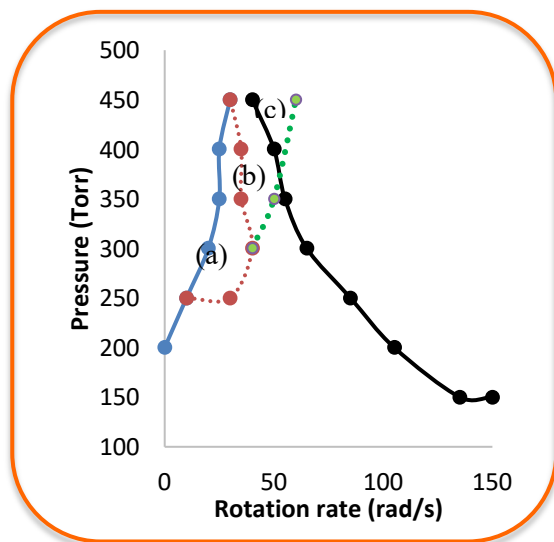
What to chose?
How to blend?

[1] D. Hochauer *et al.*, (2012) *Surface and Coatings Technology*, vol. 206, no. 23, pp. 4771–4777.

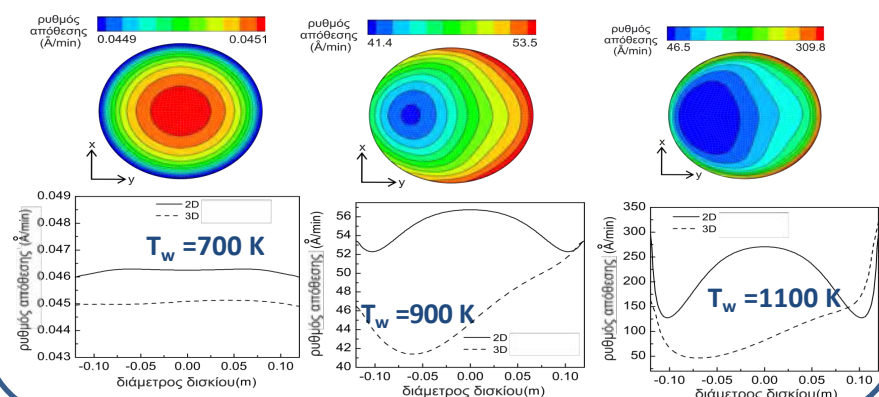
[2] R. Spencer, P. Gkinis, E. D. Koronaki, D. I. Gerogiorgis, S. P. A. Bordas, and A. G. Boudouvis, (2021) *Computers & Chemical Engineering*, vol. 149, p. 107289.

[3] M. Bertolini, D. Mezzogori, M. Neroni, and F. Zammori, (2021) *Expert Systems with Applications*, vol. 175, p. 114820.

Προκλήσεις στην Υπολογιστική Ανάλυση Διεργασιών: Πολλαπλότητα λύσεων



Επίδραση πολλαπλότητας στο υμένιο

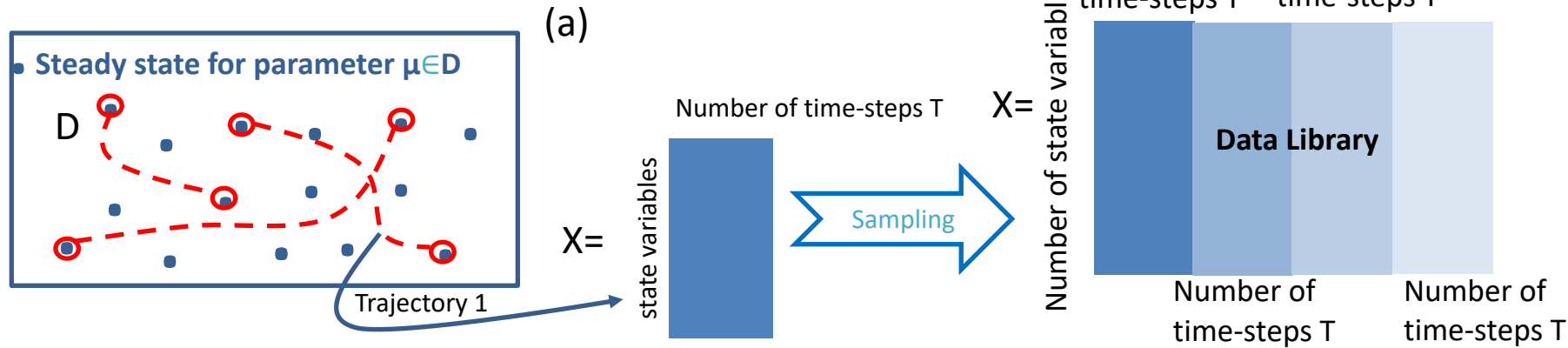


N. Cheimarios, E. D. Koronaki and A. G. Boudouvis, *Chemical Engineering Journal* **181-182**, 516 (2012).

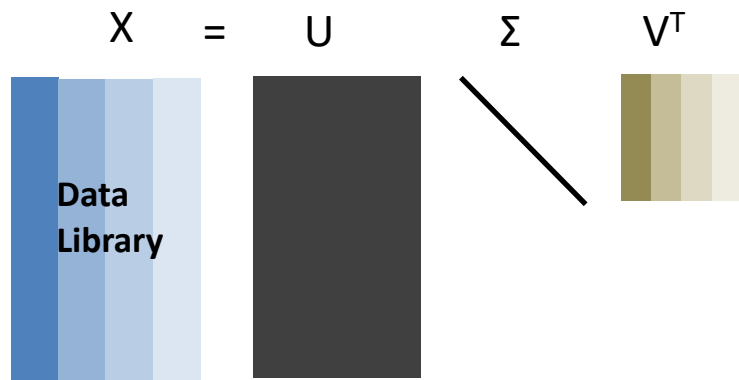
E. D. Koronaki, N. Cheimarios, H. Laux and A. G. Boudouvis, *ECS Solid State Letters* **3**, P37 (2014).

Μείωση τάξης μοντέλου (Reduced order modeling)

1. Συλλογή δεδομένων: $\frac{dx}{dt} = f(x; t; \mu)$



2. Singular value Decomposition



3. Μείωση τάξης

$$\Phi = [u_1, u_2, \dots, u_p]$$

p : dominant modes

Μείωση τάξης μοντέλου (Reduced order modeling)

Πλήρες μοντέλο
(full order model)

$$\frac{dx}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}; t; \mu)$$

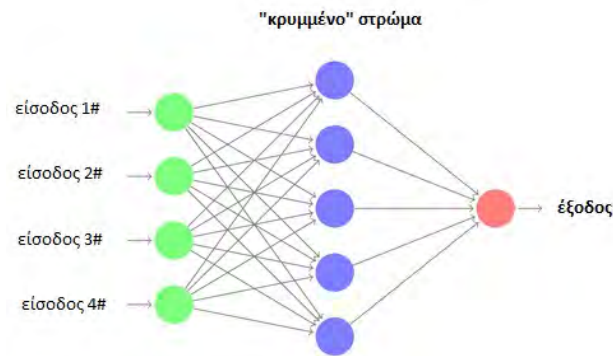
$$\mathbf{x}(0, \mu) = \mathbf{x}^0(\mu)$$

$$\mathbf{x}'(t) = \Phi \mathbf{a}(t)$$



Μοντέλο μειωμένης τάξης
(reduced order model)

Οι συντελεστές $\mathbf{a}(t)$
προκύπτουν από
νευρωνικά δίκτυα



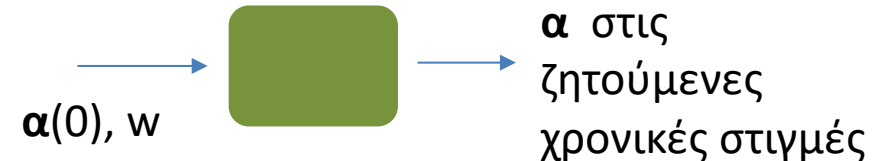
$$\alpha_{\text{new}} = f(\sum_{i=1}^n w_i \alpha_i + b)$$

Activation equation Impartiality term

Εκπαίδευση Νευρωνικού



Εφαρμογή Νευρωνικού



Εφαρμογή μοντέλου μειωμένης τάξης: επιτάχυνση 3D υπολογισμών

Πρόβλημα: Μοντέλο διεργασίας απόθεσης, 3D με αντιδράσεις: (~20 M άγνωστοι)

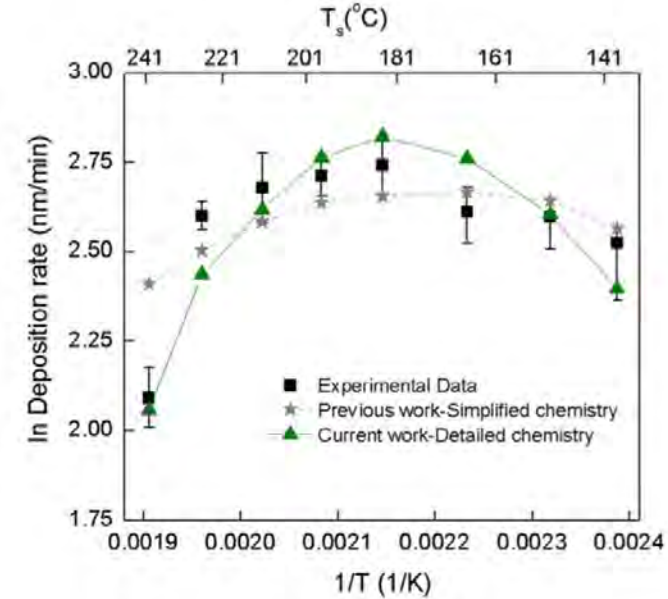
Δεδομένα από CFD μοντέλο με αραιό πλέγμα
(υπολογισμοί χαμηλού κόστους)

Μοντέλο μειωμένης τάξης
(μέθοδοι snapshot-POD & Artificial Neural Networks)

Πρόβλεψη πεδίου ταχυτήτων & κατανομή
θερμοκρασίας

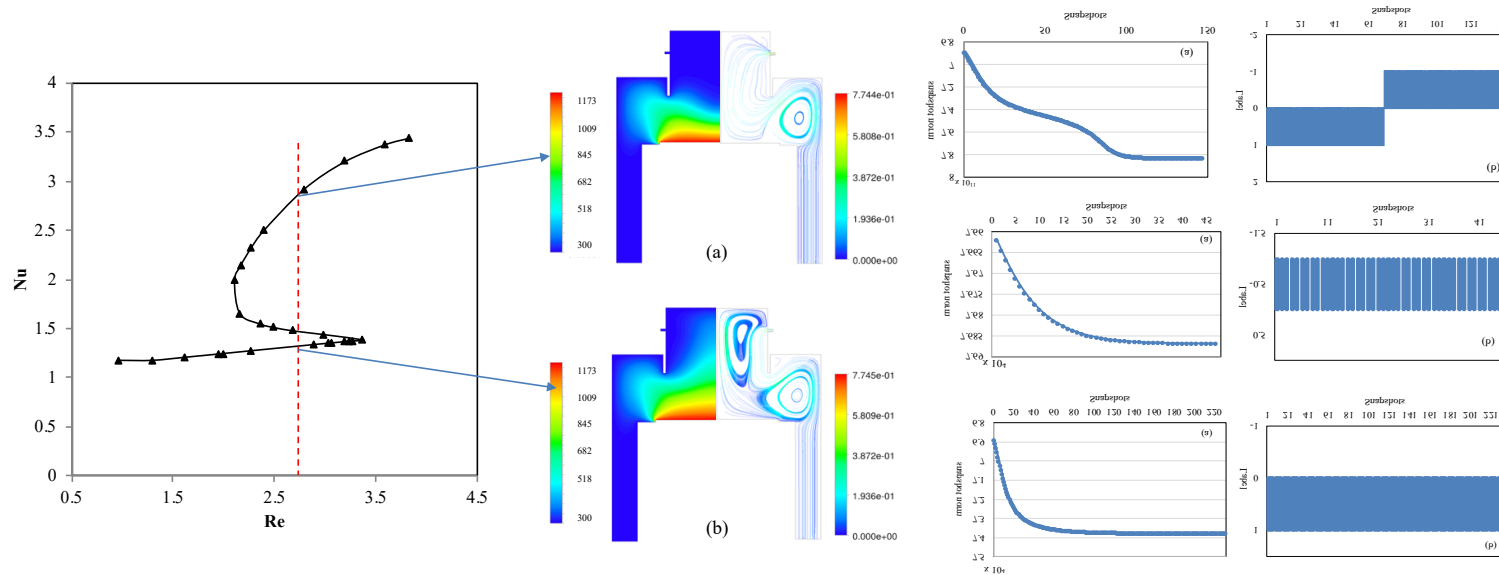
Μοντέλο μεγάλης κλίμακας με αντιδράσεις

Πρόβλεψη ρυθμού απόθεσης και σύγκριση με
πειράματα αποτελέσματα

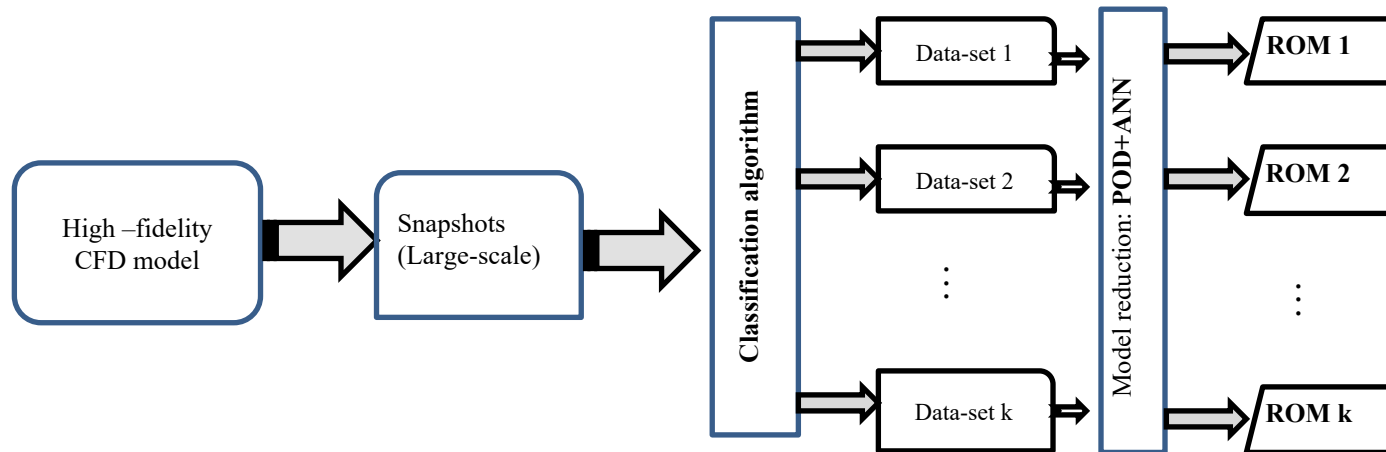


	Χωρίς αντιδράσεις	Με αντιδράσεις
Λεπτομερές μοντέλο	6.5 CPU h x 12 cores = 78 core hours	7.5 CPU h x 12 cores = 90 core hours
Μοντέλο μειωμένης τάξης	17 CPU min (~0,25 h) – 1 επεξεργαστής	3 CPU h x 12 cores = 36 core hours
Επιτάχυνση	x 312	x 2.5

Εφαρμογή μοντέλου μειωμένης τάξης: Πολλαπλότητα λύσεων



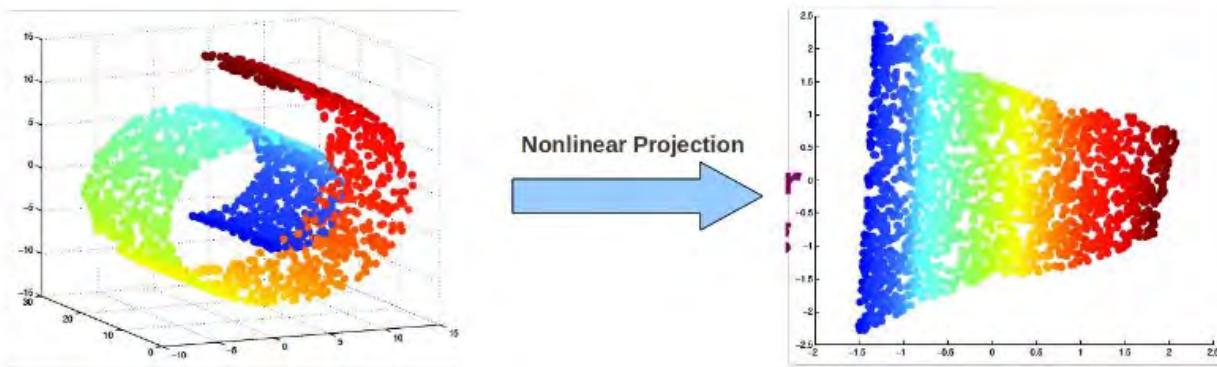
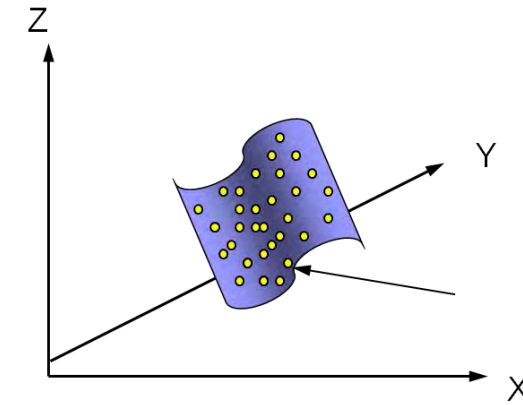
Αλγόριθμος ταξινόμησης:
Support Vector Machines (SVM)



Μοντέλο μειωμένης τάξης: Μη γραμμικές μέθοδοι

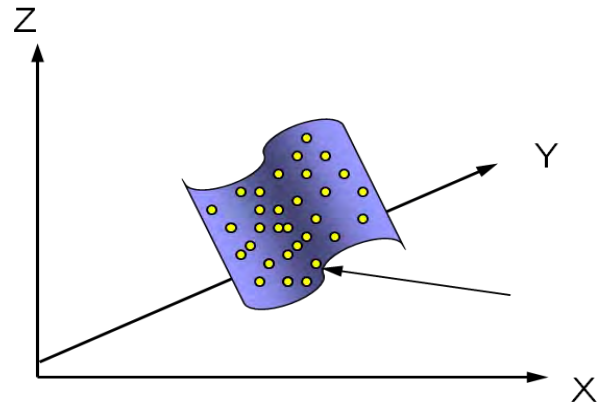
Εκμάθηση πολλαπλότητας (manifold learning)

- Υποθέτει ότι τα δεδομένα ζουν σε μικρής διάστασης πολλαπλότητα
 - Η μορφή δεν είναι γνωστή εκ των προτέρων
- Αρκετές μεθοδολογίες:
 - Locally Linear Embedding (LLE)
 - Isomap
 - Laplacian Eigenmaps
 - Diffusion Maps



«Ξετιλύγοντας» την πολλαπλότητα

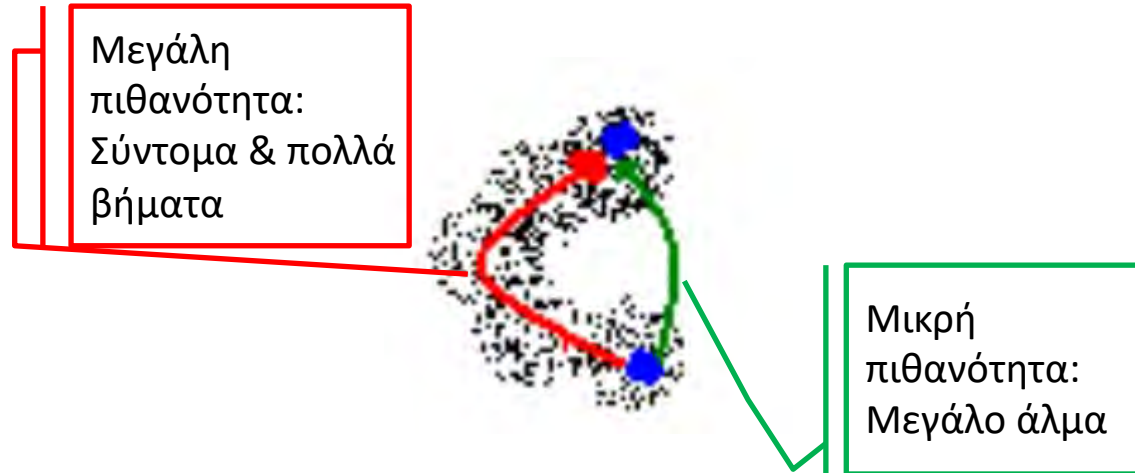
Μοντέλο μειωμένης τάξης: Diffusion maps



1. Δεδομένα
2. Πίνακας συσχέτισης : Gaussian Kernel
 $k(X_i, X_j) = \exp(-||X_i - X_j||^2 / \epsilon)$
3. Markov chain
 $P(X_i, X_j) = k(X_i, X_j) / d(X_i)$
 $d(X_i) = \sum_j k(X_i, X_j)$
4. Ιδιοτιμές λ_i , ιδιοδιανύσματα ϕ_i

5. Diffusion map

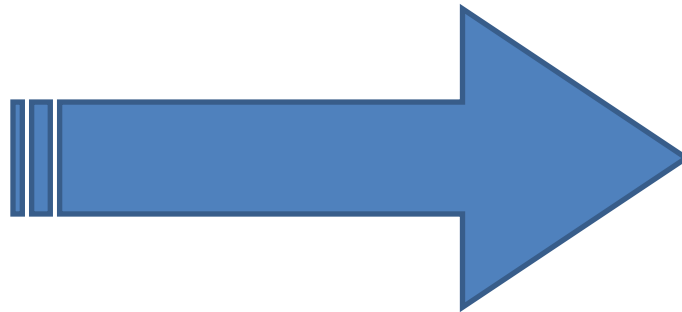
$$\Psi_t(\mathbf{y}_i) = \begin{pmatrix} \lambda_1^t \phi_{i,1} \\ \lambda_2^t \phi_{i,2} \\ \vdots \\ \lambda_M^t \phi_{i,M} \end{pmatrix}$$



Διαδικασία μείωσης τάξης

1. Δεδομένα στο χώρο μεγάλης διάστασης
2. Μετάβαση στο χώρο μικρής διάστασης (Nyström extension)
3. Χρονική ολοκλήρωση στο χώρο μικρής διάστασης
4. Μετάβαση στο χώρο μεγάλης διάστασης

Industry 4.0: Work in progress...



Στο ΕΜΠ

Δρ. Ελένη Κορωνάκη, ΕΔΙΠ

Δρ. Νίκος Χειμαριός

Δρ. Γιώργος Κόκκορης

Δρ. Γιάννης Αβιζιώτης

Δρ. Γιώργος Γάκης

Δρ. Παύλος Γκίνης

Πάρις Παπαβασιλείου, Υποψ. Διδάκτορας

Θάνος Νίκας, Χημ. Μηχ.

Εκτός ΕΜΠ

Prof. Yannis Kevrekidis, Johns Hopkins U.

Dr. Constantin Vahlas, INP/CNRS Toulouse

Prof. Brigitte Caussat, ENSIACET-INP Toulouse

Prof. Stephane Bordas, Univ. Luxembourg