

Zuwendungsempfänger: ifak. e.V. Magdeburg Werner-Heisenberg-Str. 1, 39106 Magdeburg	Förderkennzeichen: 02WA0576
Vorhabenbezeichnung	
Verbundprojekt: Exportorientierte FuE auf dem Gebiet Abwasser	
Kernprojekt C: Simulation und Konzepte der Abwasserbehandlung	
Teilprojekt C3.2: Toolkit – Softwareumsetzung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2005-31.10.2008	

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem o. g. Förderkennzeichen gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.

ifak – Institut für Automation und Kommunikation e. V. Magdeburg

Werner-Heisenberg-Straße 1

D-39106 Magdeburg

Germany

Telephone: +49-391-990140, Fax: +49-391-9901590

Internet: <http://www.ifak.eu>

Bearbeitet durch:

Dr. Jens Alex

im Bereich Informationsmanagement für Umwelt und Automation

Magdeburg, 22.12.2008

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	8
2	Zielstellung	10
3	Stand der Technik	12
3.1	Einleitung	12
3.2	Visualisierung von Modellergebnissen	12
3.3	Software zur Bemessung von Abwasserreinigungsanlagen in Deutschland	13
3.4	Simulation von Abwasserreinigungsanlagen	14
4	Planung und Ablauf des Vorhabens	15
4.1	Aufgabenteilung	15
5	Aufzählung der wichtigsten wissenschaftlich-technischen Ergebnisse und wesentlicher Ereignisse	17
5.1	Modellierung von Abwassersystemen	17
5.1.1	Einführung	17
5.1.2	Gleichungsparser	23
5.2	Grafischer Editor	25
5.2.1	Überblick Editor	25
5.2.2	Toolkit spezifische Klassen.....	27
5.2.3	Benutzung des Fließbild-Editors.....	28
5.2.4	Modelleditor	31
5.3	Rechenkern Simulation	32
5.3.1	Vorgesehene Funktion	32
5.3.2	Berechnung der Volumenströme	33
5.3.3	Berechnung der Konzentrationen	37
5.3.4	Berechnung der finanztechnischen Kategorien und des Ressourcenverbrauchs.....	42
5.3.5	Qualitative Bewertung	42
5.3.6	Zeitscheibensimulation	43

5.4	Rechenkern zur Bemessung	45
5.4.1	Realisierung	45
5.5	Implementierung Parametrierung	47
5.5.1	Realisierung	48
5.6	Support Implementierung Verfahrenskomponenten	52
5.7	ExpoTool Datenbank	52
5.8	Konzept Ergebnispräsentation	53
5.8.1	Erforderliche Funktionen	53
5.8.2	Sankey-Darstellung	53
5.8.3	Projektdokumentation	54
5.8.4	Projektvergleich	56
5.8.5	Ablageoptionen	59
5.9	Usability, Migrationskonzepte, Dokumentation	60
6	Geplante Nutzung der Ergebnisse	60
6.1	Wirtschaftliche und wissenschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende	60
6.2	Wissenschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende	61
6.3	Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit	61
7	Literatur	62
8	Anhang	64
8.1	Kommandos Bedienung Systemeditor	64
8.2	Dateiformate	65

Abbildungsverzeichnis

Bild 1:	Struktur Gesamtprojekt (entnommen aus http://dbs-lin.ruhr-uni-bochum.de/wasserverbund/).....	8
Bild 2:	Struktur Kernprojekt C.....	9
Bild 3:	Einordnung des „Toolkits“ in den Gesamtverbund	9
Bild 4:	Auszug XML-Schema globale Einstellungen.....	18
Bild 5:	Definition eines Stoffstroms im Prototypen.....	19
Bild 6:	XML Schema zur Beschreibung einer Komponente.....	21
Bild 7:	Modelleditor.....	25
Bild 8:	Klassendiagramm Editor	26
Bild 9:	Spezifische Toolkitklassen des Editors	27
Bild 10:	Projektfenster und Blockbibliothek	28
Bild 11:	Erzeugen von Kopien	29
Bild 12:	Erzeugen eines Teilmodells (Macro).....	30
Bild 13:	Inhalt des Teilmodells.....	31
Bild 14:	Konfigurationsdialog des Expo-Blocks	31
Bild 15:	Beispiel 1.....	35
Bild 16:	Berechnete Volumenströme Beispiel 1	37
Bild 17:	Gleichungen für die Konzentrationen	38
Bild 18:	Berechnete Konzentrationen.....	41
Bild 19:	Kostenkategorien	42
Bild 20:	Beschreibung eines Moduls mit qualitativen Kriterien	43
Bild 21:	Dialog zur Vorgabe des Zeithorizontes	44
Bild 22:	Beispielsystem mit Dialog zur Vorgabe von Zeitreihen	44
Bild 23:	Dialog zur Beschreibung eines Bemessungsablaufes.....	46
Bild 24:	Prinzipieller Ablauf einer Bemessung.....	47
Bild 25:	Parameterdialog.....	48
Bild 26:	Parameterdialog, GIS Angaben	49

Bild 27:	Definition einer Ortsmarke	50
Bild 28:	Darstellung von Modulen in Google-Earth.....	51
Bild 29:	Darstellung eines 3D-Modells in Google-Earth.....	51
Bild 30:	Darstellung der P-Frachten in kg/P/d als Shankey-Diagramm	53
Bild 31:	Projektdokumentation	54
Bild 32:	Dokumentation in Excel.....	55
Bild 33:	Shankey-Diagramm für Gesamt-N	56
Bild 34:	Auswahl zu vergleichender Ergebnisse.....	56
Bild 35:	Ergebnisvergleich	57

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Attribute eines Qlist Elementes	18
Tabelle 2:	Attribute Quality Element	19
Tabelle 3:	Attribute FracProp Element.....	20
Tabelle 4:	Attribute Element model.....	21
Tabelle 5:	Kindelemente model	22
Tabelle 6:	Funktionen	23
Tabelle 7:	Konvergenzgeschwindigkeit	41
Tabelle 8:	Weitere GEO-Parameter für 3D-Modell	50
Tabelle 9:	Darstellungsarten von Vergleichsdaten	57
Tabelle 10:	Maus-Kommandos	64
Tabelle 11:	Tastatur-Kommandos	65

1 Einleitung

Der zweite Teil des Forschungsverbundes „Exportorientierte Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Wasserver- und -entsorgung“ wird durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert und umfasst die Themenbereiche Abwasserbehandlung und Wasserwiederverwendung. Im Rahmen des Teil II: Abwasserbehandlung und Wasserwiederverwendung kooperieren 11 deutsche Universitäten, eine Fachhochschule und mehrere Industriepartner innerhalb von 24 Teilprojekten. Ziel des Verbundprojektes ist es, auch im Bereich der Abwasserbehandlung und Wasserwiederverwendung deutsches Wissen und die vielfältigen praktischen Erfahrungen auf diesem Gebiet verstärkt für die internationale Zusammenarbeit verfügbar zu machen. Der Weg hierzu ist die Anpassung deutscher Technologie an die unterschiedlichen Randbedingungen internationaler Märkte. Die 24 Teilprojekte sowie die in ihnen geleistete Forschungs- und Entwicklungsarbeit gliedern sich in die nachstehend dargestellte Projektstruktur.

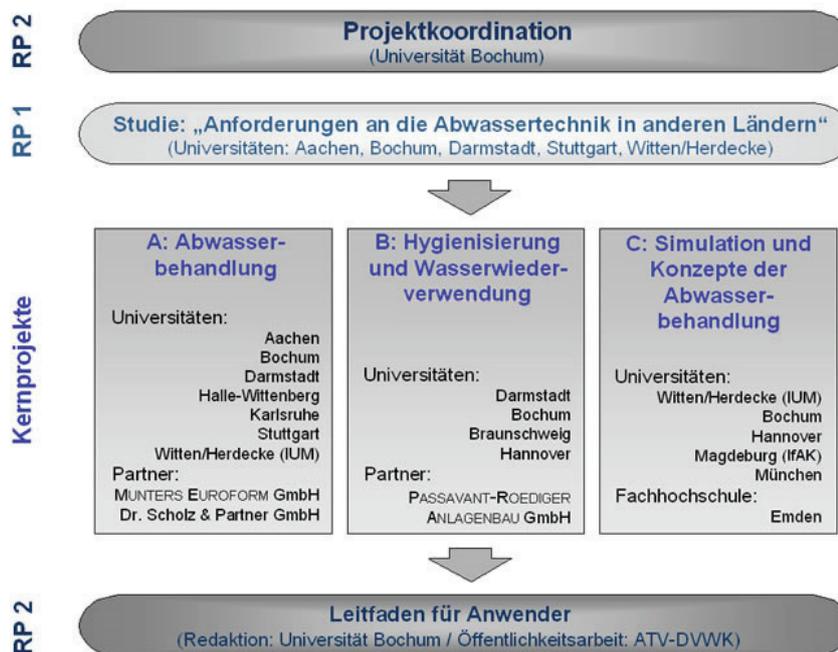


Bild 1: Struktur Gesamtprojekt (entnommen aus <http://dbs-lin.ruhr-uni-bochum.de/wasserverbund/>)

Das hier vorgestellte Teilprojekt ist im Kernprojekt C: Simulation und Konzepte der Abwasserbehandlung angesiedelt (Siehe Bild 2).

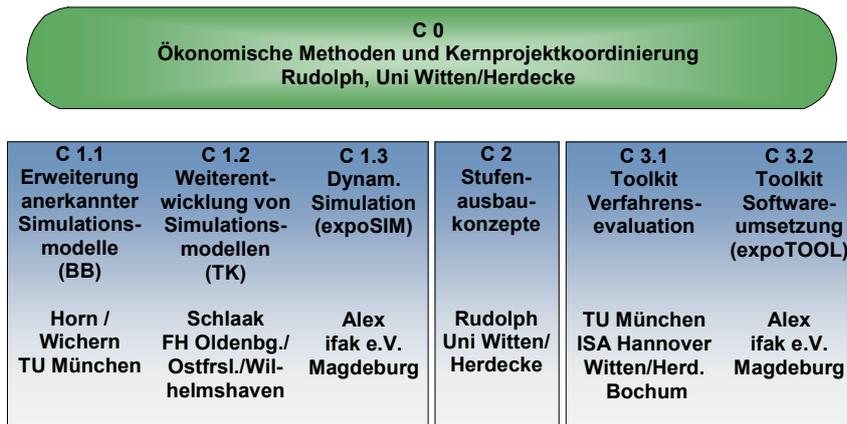


Bild 2: Struktur Kernprojekt C

Dieser Bericht beschreibt das Teilprojekt C 3.2.

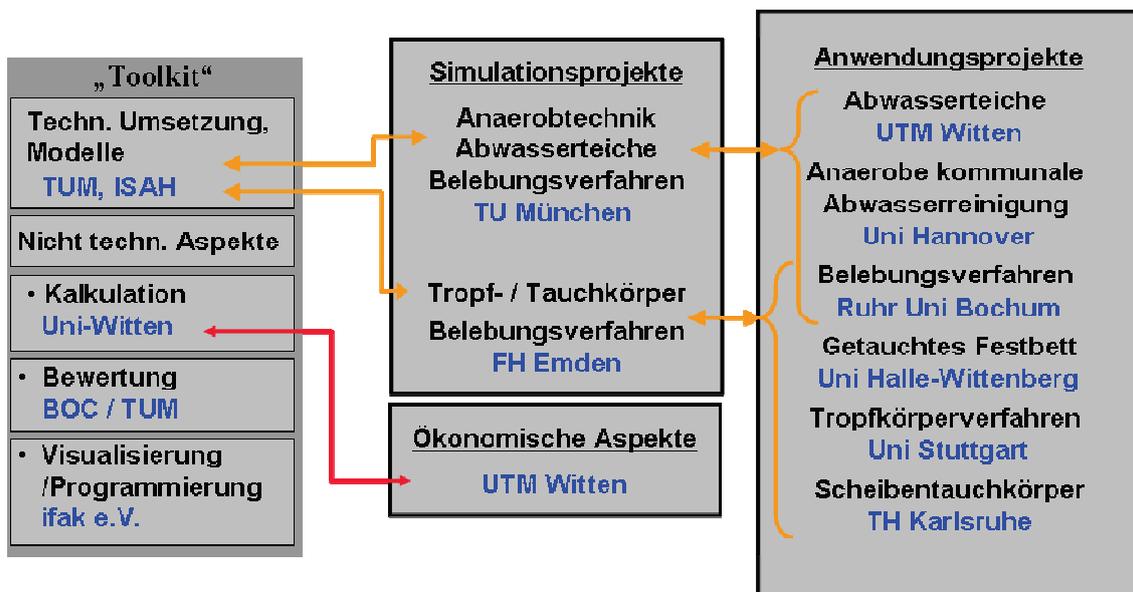


Bild 3: Einordnung des „Toolkits“ in den Gesamtverbund

2 Zielstellung

Im Rahmen des beantragten Forschungsvorhabens sollte ein Software-Toolkit erstellt werden, das anhand eines Kriterienkataloges eine objektive Projektbewertung und einen Variantenvergleich von kommunalen Abwasserreinigungsanlagen unter verschiedenen länderspezifischen Randbedingungen ermöglicht. Hierfür werden Daten aus der Wirtschaftlichkeitsbetrachtung, der Bemessung und Modellierung grafisch aufgearbeitet und in geeigneter Weise visualisiert. Es war geplant, eine Methode zu erarbeiten, die es erlaubt, die einzelnen Berechnungsverfahren mit einer offenen Schnittstelle zu verknüpfen.

So wird dem Anwender die Möglichkeit gegeben, anhand einer verständlichen und visuell ansprechenden Darstellung einem Entscheidungsträger technische und ökonomische Daten sowie die Auswahlkriterien für ein Reinigungsverfahren zu präsentieren. Diese Informationen werden zusammen mit den grundsätzlichen Prinzipien und Betriebsweisen des Abwasserreinigungsverfahrens anhand von Grafiken vorgestellt.

Folgende Eigenschaften wurden für den Rechenkern des ExpoTool-Systems beim Projektstart postuliert:

Offenes System: Neue Verfahrenskomponenten können zu jeder Zeit durch Systementwickler und Anwender integriert werden. Hierzu sind in textlicher Form, ohne die Voraussetzung von Programmierkenntnissen, die erforderlichen Informationen in einem entsprechenden Dialog einzugeben. Zu jedem Verfahrensmodule können, wenn erforderlich, ein oder mehrere Bemessungsverfahren integriert werden.

Freie Verschaltung: Die im System vorhandenen Verfahrensböcke können beliebig verschaltet werden, um reale Abwassersystem unter z.B. Einbeziehung vorhandener Stufen und für Stufen-Ausbaulösungen abbilden zu können. Einfache Hilfs-Komponenten, wie ein Modul zur Zusammenführung zweier Abwasserströme oder zur Aufteilung von Strömen, werden hierzu entwickelt.

Kompatibilität zur Simulation: Das entwickelte Toolkit wird kompatibel zur dynamischen Simulation entwickelt. Insbesondere wird es in dem Simulationssystem SIMBA einen Modellblock geben, der stationäre Verfahrenskomponenten, die in ExpoTool vorhanden sind, in ein dynamisches Simulationsmodell integrieren kann. Die mathematische Beschreibung des Modells wird in beide Richtungen ausgetauscht werden können.

Plattformunabhängigkeit: Wesentliche Komponenten des Rechenkerns, insbesondere der Parser für Gleichungen und der zugeschnittene Lösungsalgorithmus für das nichtlineare Gleichungssystem, werden so entwickelt, dass eine Migration in andere Laufzeitsystem (z.B. Java) zu einem späteren Zeitpunkt einfach möglich ist.

WEB-kompatibel: Durch den Einsatz geeigneter Softwarestrategien wird eine Portierung des Systems in WEB-basierte Content-Management-Systeme vorbereitet.

Zur Visualisierung der umfangreichen Modelldaten werden verschiedene Blöcke aufgebaut.

Stoffstromdarstellung (Shankey): wichtigstes Werkzeug für den Systemüberblick, Fließbilder für Volumenstrom und alle in dem einheitlichen Stoffstromvektor definierten Frachten

Tabellarische Präsentation, Variantenvergleiche, Bilanzen: Berechnungsergebnisse des ExpoTools werden in einem eigenen XML-Format abgelegt. Es werden Standardsoftware-Technologien eingesetzt, um daraus Dokumente für verschiedene Anwendersichten zu erzeugen. Dokumente vorrangig als HTML, evtl. PDF

Verfahrensübersichten: Aus dem konfigurierten Fließbild werden Informationen über die Platzierung der Komponenten extrahiert, zusammen mit einheitlichen Verfahrensdarstellungen werden daraus Fließbilder als Dokument erzeugt.

Die Entwicklung des beschriebenen Werkzeuges erfolgte in Kooperation mit den Partnern

- Technische Universität München, Lehrstuhl für Wassergüte und Abfallwirtschaft, Prof. Dr.-Ing. Horn
- Universität Hannover, Institut für Siedlungswasserwirtschaft und Abfalltechnik, Prof. Rosenwinkel
- Institut für Umwelttechnik und Management an der Universität Witten/Herdecke gGmbH, Prof. Rudolph
- Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Siedlungswasserwirtschaft und Umwelttechnik, Prof. Orth

In diesem Bericht werden die Ergebnisse des Projektpartners ifak e.V dargestellt. Folgende Aufgabenstellungen wurden in diesem Teilprojekt bearbeitet.

- Entwicklung eines Systemkonzeptes eines allgemeinen Verfahrensmoduls in Zusammenarbeit mit der Uni Hannover und der Uni München
- Entwicklung eines grafischen Editors und der grafischen Darstellung der Verfahren bzw. des Reinigungskonzeptes
- Entwicklung des Rechenkerns für die Simulation
- Entwicklung des Rechenkerns für die Bemessung

- Implementierung der biologischen/ chemischen Parametrierung sowie Erstellung der notwendigen Datenbanken
- Unterstützung bei der Einbindung der wirtschaftlichen Aspekte und des Kriterienkataloges
- Entwicklung einer Ergebnispräsentation, eines Berichtsgenerators und der Shankey-Diagramme zur Darstellung der Stoffbilanzen

3 Stand der Technik

3.1 Einleitung

Entscheidungen darüber, ob, wann und welches Verfahren zur kommunalen Abwasserklärung realisiert wird, werden häufig nicht von Fachleuten getroffen, sondern von den zuständigen politischen Entscheidungsträgern. Deshalb kommt es in der Praxis darauf an, vernünftige Lösungen leicht und verständlich darstellen zu können.

Hierfür werden Bausteine als Komponenten für eine Visualisierung entwickelt, welche fallspezifisch vereinfacht und für die Verfahren Belebungsanlage, Biofilmanlage, Anaerobanlage und Teichanlage durchgeführt werden können. Hierfür wird das Toolkit entwickelt und bereitgestellt, mit dem sowohl eine Berechnung als auch eine ansprechende Darstellung der Ergebnisse zu realisieren ist. Ein Kriterienkatalog wird dann unter Berücksichtigung wirtschaftlicher Aspekte Hinweise für die Auswahl des sinnvollsten Verfahrens geben. Eine derartige Software, die somit unabhängig von Verkaufsinteressen einzelner Firmen Ergebnisse erzielt und zudem für jedermann zugänglich oder erwerbbar ist, stellt somit eine wesentliche dem Gedanken der Nachhaltigkeit verpflichtete Neuerung dar.

3.2 Visualisierung von Modellergebnissen

Derzeit werden in den unterschiedlichen Fachbereichen der technischen Modellierung Visualisierungsverfahren angewandt. Diese reichen von einfachen tabellari-schen Gegenüberstellungen bis hin zu umfangreichen 3-dimensionalen Grafiken und „begehbaren Modellen“. Insbesondere im Bereich Computer Aided Design (CAD) und Computational Fluid Dynamics (CFD) kommen Visualisierungsverfahren zum Einsatz, die die Ergebnisse der Modellierung aufarbeiten und derart darstellen, dass eine Interpretation möglich wird.

Im Bereich der Abwasserreinigung werden derzeit, in Abhängigkeit vom Anwendungsfall, 2-D- und 3-D-Grafiken angewendet, wobei 3-dimensionale Grafiken ei-

ne untergeordnete Rolle spielen und hauptsächlich bei Strömungsuntersuchungen angewendet werden. Bei der Modellierung von Nachklärbecken werden beispielsweise derartige Grafiken angewandt.

Bei der dynamischen Simulation der biologischen Vorgänge in Abwasserreinigungsanlagen kommen hauptsächlich 2-dimensionale Verfahren zum Einsatz. Zur Gegenüberstellung von Mess- und Modellergebnissen, beispielsweise während der Modellkalibrierung, werden die Konzentrations- und Frachtverläufe mittels Graphen gegenübergestellt, um die Qualität des Modellabgleichs darstellen zu können. Die Bewertung der Qualität des Abgleichs wird derzeit meist visuell durchgeführt.

Im Bereich der statischen Modellierung wird vielfach mit der Gegenüberstellung von Zahlenwerten in Form von Tabellen gearbeitet. Zudem werden die Bilanzen grafisch aufgearbeitet und dargestellt.

Die Anwendung von grafischen Methoden ist abhängig von den Möglichkeiten des bearbeitenden Ingenieurs. Daher unterscheiden sich die Methoden zur Darstellung von Ergebnissen stark und erschweren einen Vergleich. Das Toolkit liefert erweiterte grafische Möglichkeiten, um die Modellierung anwenderfreundlich zu gestalten.

3.3 Software zur Bemessung von Abwasserreinigungsanlagen in Deutschland

Im Folgenden werden die wichtigsten Programme für die Berechnung von Abwasserreinigungsanlagen in Deutschland vorgestellt.

DENIKApus (ROSENWINKEL et al., 2001): Entwickelt vom Institut für Siedlungswasserwirtschaft und Abfalltechnik, Universität Hannover (ISAH). Dient der Bemessung und Optimierung von biologischen Abwasserreinigungsanlagen. Beinhaltet die Berechnung nach ATV-DVWK A131 (1991, 2000), Hochschulgruppenansatz HSG (1989, 1993), Merkblatt M210 für SBR-Anlagen sowie zahlreiche Erweiterungen zur vermehrten biologischen und chemischen Phosphorelimination, Membranbelebungsanlagen, Teichanlagen, Kaskadendenitrifikation, etc. Umfangreichstes und meistverkauftes Programm (>150 Lizenzen) für die stationäre Berechnung von Abwasserreinigungsanlagen in Deutschland. Mehrsprachige Software. Ein Kostenbaustein ist nicht enthalten.

ARABER (2001): Programm der RWTH Aachens, ebenso zur Auslegung von Abwasserreinigungsanlagen unter Berücksichtigung der Ansätze nach A131 und HSG. Auch hier wäre ein Kostenbaustein sinnvoll. Liegt in der aktuellen Version unter dem Namen Design2Treat vor.

AQUA-DESIGNER: Software der Firma BITCONTROL. Interessante Alternative zu den erstgenannten Produkten, da Ergebnisse anhand von Projektplänen ausgegeben werden. Hier wird exakt nach A131, HSG und M210 gerechnet. Erweiterungen der

Algorithmen und Verfahren sind weniger als in den ersten beiden Programmen zu finden.

BELEBUNGSEXPERT: Die Software ist begleitend zur neuen A131 von der ATV/DVWK entwickelt worden. In dieser Software ist ausschließlich die Bemessung von Belebungsanlagen nach dem A131 (2000) möglich. Damit beschränkt sich die Software auf Abwasserreinigungsanlagen für kommunales Abwasser. Kostenmodule finden sich auch in diesem Tool nicht.

Bei allen drei genannten Produkten stellt sich ein Kostenbaustein als fehlend heraus, um die verschiedenen Planungsvarianten zu bewerten. Hier und in der internationalen Anwendbarkeit besteht Handlungs- und Entwicklungsbedarf für das Toolkit. Zudem liegen die Ergebnisse als Zahlenmaterial vor und müssen durch den planenden Ingenieur aufgearbeitet werden. Dabei stellen die einzelnen Programme unterschiedlich umfangreiche Werkzeuge zur grafischen Aufarbeitung zur Verfügung. Diese reichen zumeist nicht zur Darstellung der komplexen Ergebnisse aus. Es kommen somit Produkte von Drittanbietern zum Einsatz, so dass die grafische Auswertung abhängig ist vom Bearbeiter und keine Durchgängigkeit und somit Vergleichbarkeit gegeben ist.

3.4 Simulation von Abwasserreinigungsanlagen

Auch für die dynamische Simulation von Abwasserreinigungsanlagen gibt es verschiedene Programme.

SIMBA (2002, ALEX et al): Programm zur dynamischen Simulation der Abwasserreinigung. Bietet auf Basis von MATLAB/SIMULINK eine Vielzahl von Möglichkeiten der Berechnung für Belebungsanlagen und Vorklärung, Kanal, Gewässer und Biofilmen. Einsatz auch in der Steuerungstechnik. Mit mehr als 200 Lizenzen Marktführer dieser Sparte in Deutschland, entwickelt durch das Institut für Automation und Kommunikation e.V.. Das ifak ist Projektpartner im Toolkit-Projekt.

AQUASIM (REICHERT et al., 2001): Entwickelt von der ETH Zürich, weitverbreitetes Programm vor allem an Hochschulen. Bietet im Bereich der Modellimplementierung neue Ansätze. Für die Gewässergütesimulation und bei Biofilmen viele Möglichkeiten.

GPSX: Software aus Kanada zur dynamischen Simulation der Abwasserreinigung, besonders im Ausland weiter verbreitet. Entwickelt von der Firma HYDROMANTIS.

WEST: Das Softwarepaket West (vertrieben durch MostForWater) ist ein offenes Softwarepaket zur Modellierung und dynamischen Simulation von Abwasserreinigungsanlagen als auch von Kanalsystemen oder Fließgewässern. Es können, ähnlich wie in SIMBA, neue Modelle aufgebaut und implementiert werden.

Allen Simulationsprogrammen ist gemeinsam, dass sie zu einem großen Teil auf Grundlage der Modelle der International Water Association rechnen. Hier sind im Bereich der Belebungsanlagen die ASM-Modelle (HENZE et al., 2000), für Anaerobanlagen das ADM 1 (BATSTONE et al., 2002) und für die Gewässergüte das RWQM No 1. (REICHERT et al., 2000) zu nennen.

Auch hier bieten die unterschiedlichen Programme Möglichkeiten der Visualisierung der Ergebnisse an. Aufgrund der unterschiedlichen Programmstrukturen ergeben sich auch verschiedene Möglichkeiten. Bei den Anwendungen, die als geschlossenes Programmpaket konzipiert sind, werden grafische Ergebnisauswertungen mitgeliefert. Bei offenen System, wie z.B. bei SIMBA, basiert das Simulationsprogramm auf einer Basismodellierungssoftware (im Beispiel Matlab/Simulink) und nutzt die grafischen Auswertungsmöglichkeiten der jeweiligen Programmumgebung. Der Nutzer ist in der Lage, in Abhängigkeit der persönlichen Programmkenntnis, die umfangreichen Funktionen selber zu nutzen. Es ergeben sich auch hier sehr uneinheitliche Auswertungen, die nur schwer miteinander zu vergleichen sind.

Durch das Toolkit wird eine zweckmäßige Erweiterung bestehender Software vollzogen. Es werden vereinfachte international anwendbare Ansätze implementiert, die Ergebnisse kundenfreundlich anhand der Auswahlkriterien aufbereitet und zusätzlich Kostenaspekte berücksichtigt.

4 Planung und Ablauf des Vorhabens

4.1 Aufgabenteilung

Die Durchführung des Projektes erfolgte in enger Zusammenarbeit zwischen den Teilprojekten der TU München / Uni Bochum / Uni Witten / Uni Hannover / ifak e.V.. Die Aufgaben im Bereich der Toolkitentwicklung wurden folgendermaßen aufgeteilt:

TU München:

- Erstellung der Kriterienliste in Zusammenarbeit mit der Universität Bochum
- Einbindung des Leitfadens in das Toolkit in Zusammenarbeit mit der Universität Bochum
- Entwicklung der Programmkonzeption und Programmentwicklung in Zusammenarbeit mit der Universität Hannover und dem Institut für Automation und Kommunikation e.V., Magdeburg
- Berechnung von Demolastfällen mit dem Toolkit, Kalibrierung und Verifizierung des Toolkits
- Erstellung einer Dokumentation für das Toolkit in Zusammenarbeit mit der Universität Hannover

Uni Bochum:

- Erstellung der Kriterienliste in Zusammenarbeit mit der Universität München
- Einbindung des Leitfadens in das Toolkit in Zusammenarbeit mit der TU München

Uni Hannover:

- Entwicklung der Programmkonzeption und Programmentwicklung in Zusammenarbeit mit der Universität Hannover und dem Institut für Automation und Kommunikation e.V., Magdeburg
- Erstellung einer Dokumentation für das Toolkit in Zusammenarbeit mit der Universität Hannover

Uni Witten:

- Entwicklung von Methoden zur Wirtschaftlichkeitsrechnung und Finanzierung

Institut für Automation und Kommunikation e.V. (ifak):

- Entwicklung eines Systemkonzeptes als allgemeines Verfahrensmodul in Zusammenarbeit mit der Uni Hannover und Uni München
- Entwicklung eines grafischen Editors und der grafischen Darstellung der Verfahren bzw. des Reinigungskonzeptes
- Entwicklung des Rechenkerns für die Simulation
- Entwicklung des Rechenkerns für die Bemessung
- Implementierung der biologischen/ chemischen Parametrierung sowie Erstellung der notwendigen Datenbanken
- Unterstützung bei der Einbindung der wirtschaftlichen Aspekte und des Kriterienkataloges
- Entwicklung einer Ergebnispräsentation, eines Berichtsgenerators und der Shankey-Diagramme zur Darstellung der Stoffbilanzen

5 Aufzählung der wichtigsten wissenschaftlich-technischen Ergebnisse und wesentlicher Ereignisse

5.1 Modellierung von Abwassersystemen

5.1.1 Einführung

Ein Abwassersystem besteht aus einer oder mehreren funktionalen Komponenten. Jede dieser funktionalen Komponenten wird in einer einheitlichen, formalisierten Form beschrieben. Diese formalisierte Beschreibung umfasst:

- mathematische Beschreibung der abwassertechnischen Funktion,
- mathematische Beschreibung von Investitionskosten,
- mathematische Beschreibung der Betriebskosten (unterteilt in Kategorien),
- mathematische Beschreibung des Energieverbrauchs/ der Energieerzeugung,
- textliche Beschreibung des Verfahrens,
- grafische Beschreibung des Verfahrens (Symbol, Detailbild).

In diesem Arbeitspaket wird ein entsprechendes Konzept entwickelt, das diese Funktionen erfüllt. Eine allgemeine Komponente ist definiert als eine funktionale Einheit, in die ein oder mehrere Abwasser-/Schlammströme eintreten und aus der mehrere Abwasser-/Schlammströme austreten. Diese Ströme können z.B. Rohabwasser, mechanisch gereinigtes Abwasser, Kläranlagenablauf, Überschussschlamm oder ähnliches sein. Um eine Vereinheitlichung zur Systembeschreibung und -bewertung realisieren zu können, wird definiert, dass jeder dieser Ströme durch einheitliche Variablen beschrieben wird.

In diesem Arbeitspaket wurde ein entsprechendes Konzept entwickelt, das diese Funktionen erfüllt.

Zur Beschreibung von Abwassersystemen, die aus einzelnen Komponenten bestehen, ist es erforderlich, dass die Beschreibung der einzelnen Komponenten in einer vergleichbaren Art und Weise erfolgt und dass die Stoffströme, die von einer Komponente zur andern fließen, in identischer Weise beschrieben werden. Hieraus resultiert die Notwendigkeit, Festlegungen zu treffen, die dann für alle Komponenten bzw. für eine in sich geschlossene Untermenge von Systemkomponenten gelten.

Der aktuelle Projektstand definiert die folgenden systemweit gültigen Eigenschaften:

- Stoffstrom-Typen,
- Stoffstrom-Eigenschaften,
- Finanz-Kategorien (Investition),
- Finanz-Kategorien (Betrieb),
- Ressourcen-Kategorien (Investition),
- Ressourcen-Kategorien (Betrieb).

Diese Festlegungen werden in einer XML-Datei verwaltet. Die wichtigste Festlegung ist, welche Typen von Stoffströmen prinzipiell beschrieben werden sollen. Im Rahmen dieses Projektes wird es nur einen erlaubten Stoffstrom-Typen geben, einen Abwasser/Schlamm-Strom. Die XML-Datei mit den globalen Eigenschaften folgt einem festgelegtem Schema, das mit der Technologie XML-Schema [W3C] formal beschrieben wird. In Bild 5 ist eine grafische Darstellung eines Teils dieses Schemas zu sehen.

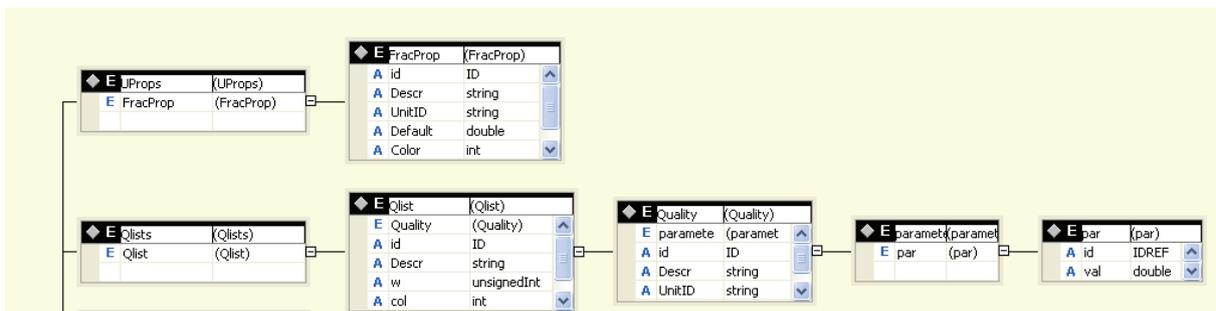


Bild 4: Auszug XML-Schema globale Einstellungen

Alle Stromdefinitionen werden im dem Element `Qlists` abgelegt. Die Definition eines Stoffstromes erfolgt mit einem `Qlist` Element. Dieses Element wird mit den Attributen aus Tabelle 1 beschrieben.

Tabelle 1: Attribute eines `Qlist` Elementes

Name	Beschreibung
id	Eindeutiger Name des Stoffstroms, im Projekt wird WW für den Abwasser/Schlammstrom definiert
Descr	ein Beschreibungstext zur Erläuterung des Stoffstroms
w	Breite der Linie, die den Strom im grafischen Fließbild repräsentiert (in Pixel)
col	Farbe der Linie, die den Strom im grafischen Fließbild repräsentiert (in Pixel)

Die Vorgabe dieser Eigenschaften kann im realisierten Softwarewerkzeug mit dem in Bild 5 dargestellten Dialog eingestellt werden.

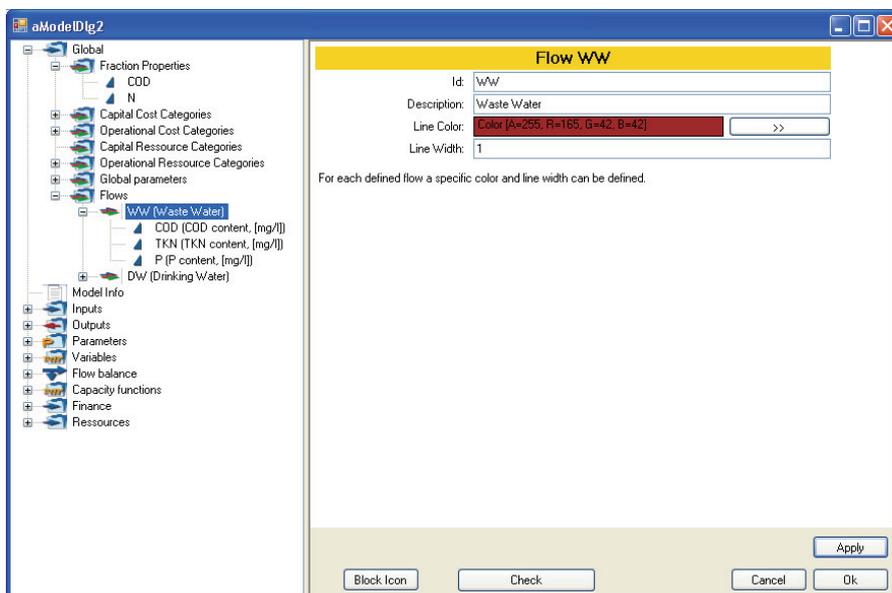


Bild 5: Definition eines Stoffstroms im Prototypen

Darüber hinaus besitzt das Qlist Element weitere Kindelemente (Quality), mit denen die Fraktionen (Konzentrationen) zur Beschreibung des Stoffstromes festgelegt werden. Die Anzahl und Reihenfolge dieser Elemente definiert einen Konzentrationsvektor, der zur Beschreibung dieses Stoffstroms verwendet wird.

Ein Quality Element wird mit den folgenden Attributen beschrieben:

Tabelle 2: Attribute Quality Element

Name	Beschreibung
id	Eindeutiger Name der Stoffgruppe/Fraktion
Descr	ein Beschreibungstext zur Erläuterung der Fraktion
UnitID	Einheit der Fraktion

Ein Quality Element besitzt eine Auflistung von Eigenschaften (parameter), die die definierte Fraktion weitergehend beschreibt. Diese Eigenschaften werden verwendet, um im Fließbild einer Anlage bestimmte Summenparameter (z.B. CSB) oder Einzelgrößen (z.B. Phosphor) berechnen und darstellen zu können. Welche dieser Eigenschaften systemweit bekannt sind, wird in der Liste UProps festgelegt. Jedes FracProp Element dieser Liste definiert eine dieser Größen.

Tabelle 3: Attribute FracProp Element

Name	Beschreibung
id	Eindeutiger Name der Stoffgruppe/Fraktion
Descr	ein Beschreibungstext zur Erläuterung der Fraktion
UnitID	Einheit der Fraktion
Default	Standardwert der Eigenschaft
Color	Farbe, die zur Darstellung dieser Eigenschaft im Fließ-Diagramm verwendet wird

Zur Festlegung des Detaillierungsgrades des Konzentrationsvektors zur Beschreibung des Abwasser-/Schlammstromes werden mit den Projektpartnern anhaltende Diskussionen geführt.

Neben der Beschreibung eines Abwasserstroms werden wie oben dargestellt auch einheitliche Bewertungskategorien eingeführt. Auf eine ausführliche Beschreibung wird hier verzichtet.

Jede Einzelkomponente wird aus technologischer und finanztechnischer Sicht beschrieben. In Bild 5 ist die grafische Darstellung des XML-Schemas zur Beschreibung einer Komponente gegeben.

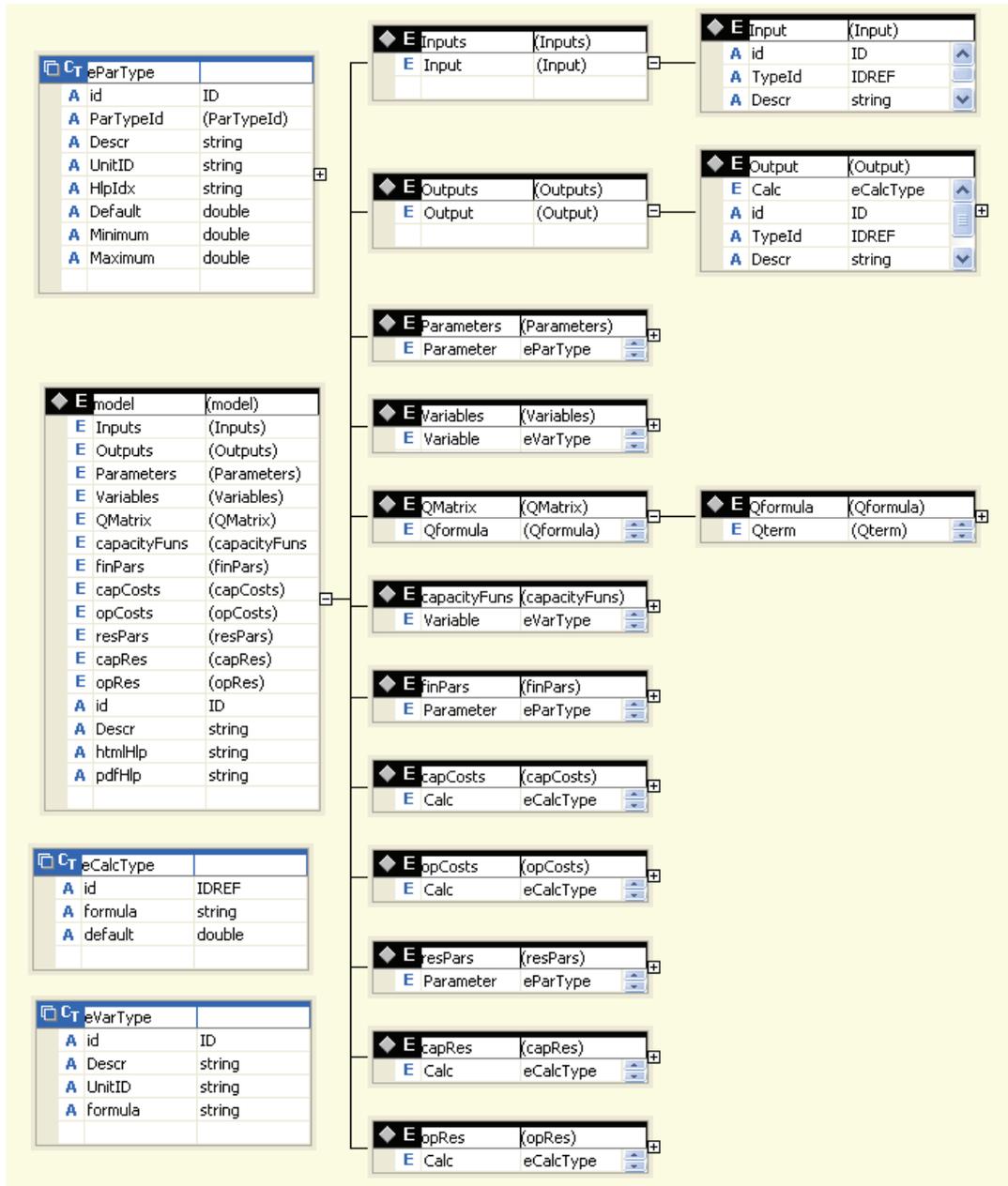


Bild 6: XML Schema zur Beschreibung einer Komponente

Jedes Modell einer Einzelkomponente ist durch eine Anzahl von Attributen und Kindelementen beschrieben. Die folgenden Attribute wurden bisher festgelegt:

Tabelle 4: Attribute Element model

Name	Beschreibung
Id	Eindeutiger Name des Komponenten-Modells
Descr	ein Beschreibungstext zur Erläuterung der Komponente

htmlHlp	Referenz auf eine HTML-Datei mit näheren Erläuterungen der Komponente
pdfHlp	Referenz auf eine pdf-Datei mit näheren Erläuterungen der Komponente

Über die Kindelemente werden folgende Informationen verwaltet:

Tabelle 5: Kindelemente model

Name	Beschreibung
Inputs	Liste mit der Definition der Eingänge (Stoffströme, die in die Komponente hinein fließen)
Outputs	Liste mit der Definition der Ausgänge (Stoffströme, die aus der Komponente heraus fließen) Für alle Stoffe (Fraktionen) im Stoffvektor jedes Ausgangs müssen Formeln angegeben werden, wie sich diese Konzentration als Funktion von Eingangsströmen und technologischen Parametern berechnet.
Parameters	Liste mit Parametern, die diese Komponente beschreiben und die für die Berechnung der technologischen Funktion benötigt werden
Variables	Liste mit Hilfsvariablen, die zur Berechnung der technologischen Funktion, konkret der Konzentrationen der Fraktionen der Ausgangsströme, benötigt werden Variablen werden durch Formeln, die Parameter, Konzentrationen von Eingangsströmen oder zuvor definierte Variablen enthalten können, definiert.
QMatrix	Eine Auflistung von linearen Gleichungen, die als Randbedingung bezüglich der Eingangs- und Ausgangsvolumenströme verwendet werden, in der Regel die Volumenbilanz der Komponente.
capacityFuns	Ein Auflistung von Funktionen, die die Auslastung der Komponente in einer Betriebssituation beschreibt, für eine Nominallast von 0 bis 100 % muss die Funktion Werte von 0 bis 1 annehmen.
finPars	Liste mit zusätzlichen Parametern, die für finanztechnische Berechnungen benötigt werden
capCosts	Liste mit den Berechnungsformeln der verschiedenen (globalen) Kategorien für die Errichtungskosten einer Komponente
opCosts	Liste mit den Berechnungsformeln der verschiedenen (globalen) Kategorien für die Betriebskosten einer Komponente
capRes	Liste mit den Berechnungsformeln der verschiedenen (globalen) Ressourcen-Kategorien für die Errichtung einer Komponente
opRes	Liste mit den Berechnungsformeln der verschiedenen (globalen) Ressourcen-Kategorien für den Betrieb einer Komponente

5.1.2 Gleichungsparser

Das Konzept für eine verallgemeinerte Verfahrensdarstellung wurde in einer Weise implementiert, die eine einfache Erweiterung durch Nicht-Informatiker erlaubt. Es ist nicht sinnvoll, die Gleichungen in einer Programmiersprache zu formulieren und dann fest zu kompilieren. Vielmehr müssen die Gleichungen zur Systembeschreibung in einer textuellen Form verwaltet werden, die durch Abwasseringenieure leicht verstanden werden kann. Neue Verfahrenskomponenten können dadurch zu jeder Zeit von Systementwicklern und Anwendern integriert werden.

Daraus entsteht die Notwendigkeit, dass das zu entwickelnde System diese Gleichungen zur Laufzeit interpretieren, prüfen und berechnen kann. Der hierzu erforderliche Parser (Softwarekomponente zum semantischen und syntaktischen Analysieren von Texten) wird hier beschrieben.

Die Systembeschreibung bzw. die Gleichungen zum Systementwurf erfordern, dass die systembeschreibenden Gleichungen explizit nach den jeweils abhängigen Größen umgestellt werden und in einer Weise sortiert werden, dass alle Variablen einer Gleichung durch die vorherigen Gleichungen explizit bestimmt werden.

Der Gleichungsparser (basierend auf einem public domain Paket [dotMath]) erlaubt die Verwendung von Operatoren für die Berechnung arithmetischer Ausdrücke wie Addition (Operator +), Subtraktion (Operator -), Multiplikation (Operator *), Division (Operator /) und Potenz (Operator ^).

Relationale Operatoren, die im Ergebnis eine boolesche Variable ergeben, können für Ausdrücke, die Bedingungen erfordern, genutzt werden: und &&, oder ||, Identität ==, kleiner als <, größer als >, kleiner gleich <=, größer gleich >= und ungleich != oder <>.

Darüber hinaus können die in Tabelle 6 aufgelisteten Funktionen verwendet werden.

Tabelle 6: Funktionen

Funktionsname	Beschreibung	Anzahl Argumente
abs	Absolutwertbildung	1
acos	Arcus-Kosinus-Funktion	1
asin	Arcus-Sinus-Funktion	1
atan	Arcus-Tangens-Funktion	1
ceiling	Aufrunden auf den nächst höheren Inte-	1

gerwert		
cos	Kosinus-Funktion	1
cosh	Kosinus-Hyperbolicus-Funktion	1
exp	Exponential-Funktion (Potenz zur Basis e)	1
floor	Abrunden auf den nächst kleineren Integerwert	1
if	Bedingung. Das erste Argument sollte ein relationaler Ausdruck sein. Ist dieses Argument wahr (true, !=0), ist das Ergebnis der Funktion gleich dem zweiten Argument (if), ansonsten gleich dem dritten Argument (else).	3
log	natürlicher Logarithmus (ln)	1
log10	Logarithmus zur Basis 10	1
max	Maximalwert	2-n
min	Minimalwert	2-n
round	Runden auf den nächstgelegenen Integerwert	1
sin	Sinus-Funktion	1
sinh	Sinus-Hyperbolicus-Funktion	1
sqrt	Quadratwurzel	1
sign	Vorzeichen-Funktion (Ergebnis =1, wenn der Ausdruck positiv ist; Ergebnis=-1, wenn das Argument negativ ist und 0, wenn das Argument identisch 0 ist)	1
tan	Tangens Funktion	1
tanh	Tangens-Hyperbolicus-Funktion	1

Für die Systembeschreibung (technologische Funktion) eines Moduls müssen die folgenden Informationen bereitgestellt werden:

- Gleichungen zur Festlegung von Randbedingungen zu den zu- und ablaufenden Abwasserströmen und
- Gleichungen zur Berechnung der Ablaufkonzentrationen.

Optional können Parameter definiert werden, die für die Beschreibung der technologischen Funktion benötigt und durch den Anwender des Tools vorgegeben werden (z.B. Beckenvolumen). Zur Vereinfachung der Formulierung der Gleichungen

bzw. um komplexere mathematische Berechnungen zu ermöglichen, können rekursiv Hilfsvariablen definiert werden, die bei der Formulierung der Gleichungen zur Bestimmung der Ablaufkonzentrationen verwendet werden dürfen.

Die gesamte Formulierung des Modells der technologischen Funktion eines Moduls erfolgt in einem Editor. In Bild 7 ist das Fenster dieses Editors dargestellt.

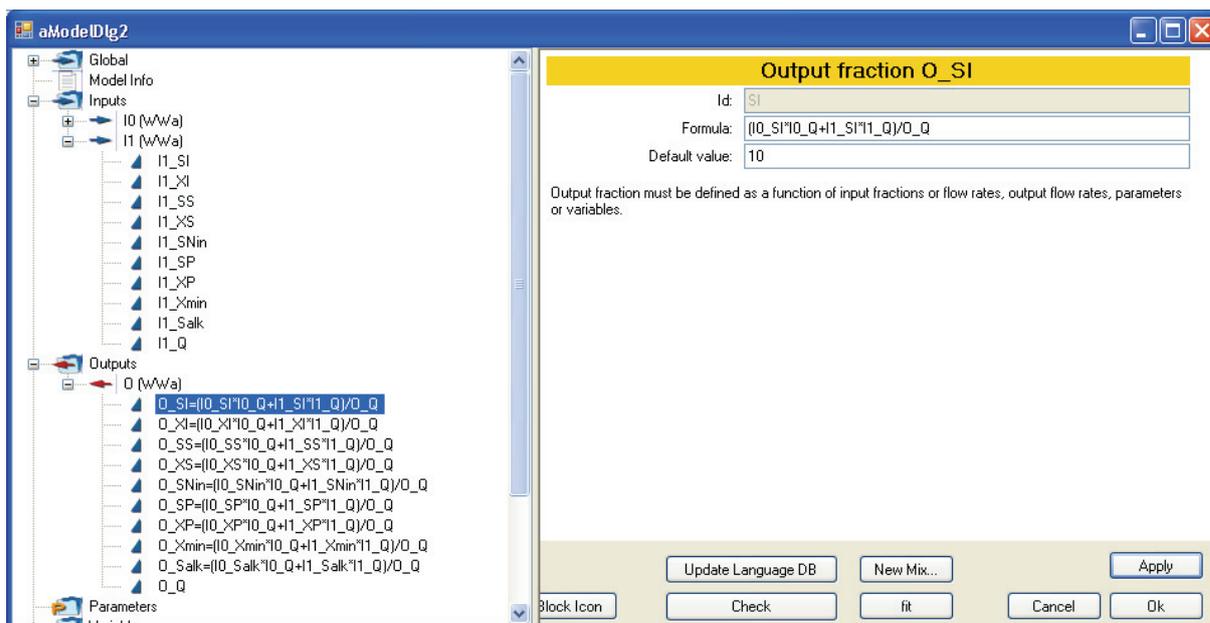


Bild 7: Modelleditor

In der Baumansicht auf der linken Seite des Fensters ist die Auflistung der Positionen, für die Informationen und mathematische Gleichungen erforderlich sind, zu sehen. In diesem Beispiel wird die Funktion eines Mischbauwerks beschrieben. Die Gleichung zur Berechnung der Konzentration der ersten Stoffgruppe im Vektor zur Beschreibung des Ablaufs ist im rechten Teil des Fensters dargestellt. Hier wird eine einfache Gleichung zur Berechnung der Mischkonzentration angegeben. Dieses einfache Bauwerk benötigt keine Parameter oder Hilfsvariablen zur Formulierung der Gleichungen für die Ablaufkonzentrationen.

5.2 Grafischer Editor

5.2.1 Überblick Editor

Die im System vorhandenen Verfahrensblöcke können beliebig verschaltet werden, um reale Abwassersysteme unter Einbeziehung vorhandener Stufen und für

Stufen-Ausbaulösungen abbilden zu können. Die Verschaltung der für eine Lösung erforderlichen Verfahrenskomponenten erfolgt mit einem grafischen Editor.

Der grafische Editor wurde als wieder verwendbare Klassenbibliothek in der Programmiersprache C# 2.0 für das .Net-Framework von Microsoft entwickelt.

In Bild 8 ist eine Übersicht dieser Klassenbibliothek dargestellt. Ein Fleißbild wird innerhalb der Klasse aDiagramm verwaltet. Jedes Diagramm besteht aus einer Anzahl von Blöcken (Klasse aBlock) und einer Anzahl von Verbindungslinien (aLine).

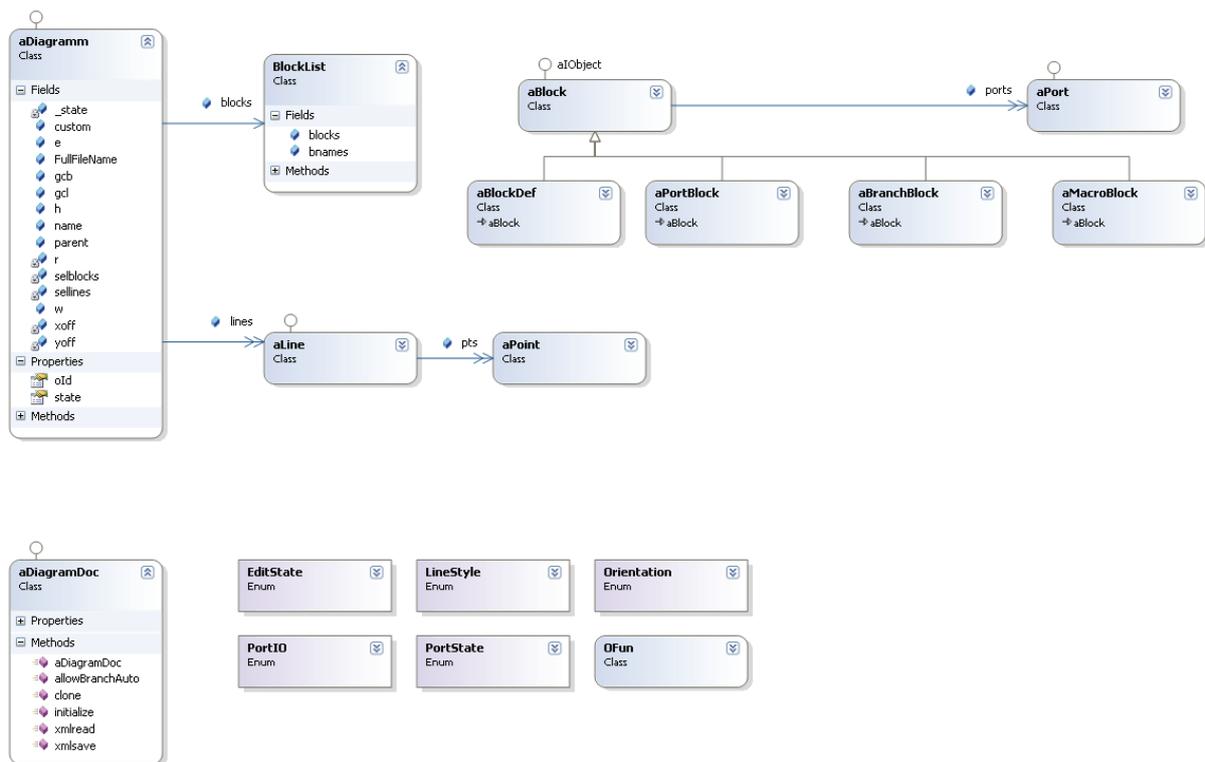


Bild 8: Klassendiagramm Editor

Für die Nutzung des Editors müssen aus den Grundobjekten aBlock und aLine anwendungsspezifische Objekte abgeleitet werden. Bereits in der Klassenbibliothek des generischen grafischen Editors werden mehrere von aBlock abgeleitete Klassen definiert. Dies sind insbesondere:

aPortBlock: Ein Block, der eine Verbindung von Teil-Fließbildern zum übergeordneten Fließbild repräsentiert,

aBranchBlock: Ein Block, der im Fall eines Signalflussplans eine Signalverzweigung repräsentiert und

aMacroBlock: ein Block, der in einem Fließbild ein eingebettetes Teilfließbild repräsentiert.

Die Klasse aDiagramm implementiert alle Funktionen, die zur interaktiven Erstellung von Fließbildern erforderlich sind. Die Klasse aDiagramDoc definiert die anwendungsspezifischen Anpassungen und Daten eines Fließbildes.

Für die persistente Ablage von Fließbildern wird ein XML-Format verwendet.

5.2.2 Toolkit spezifische Klassen

Zur Realisierung des Toolkits wurden folgende Klassen abgeleitet:

aExpoBlock: Abgeleitete Klasse von aBlock, realisiert ein Modul des zu bewertenden Verfahrens

aExpoLine: Abgeleitete Klasse von aLine, realisiert eine Verbindungslinie

aExpoDoc: definiert die spezifischen Eigenschaften eines Projekt-Dokumentes, abgeleitet von aDiagramDoc

expoStatic: Statische Klasse, die die globalen Einstellungen enthält.

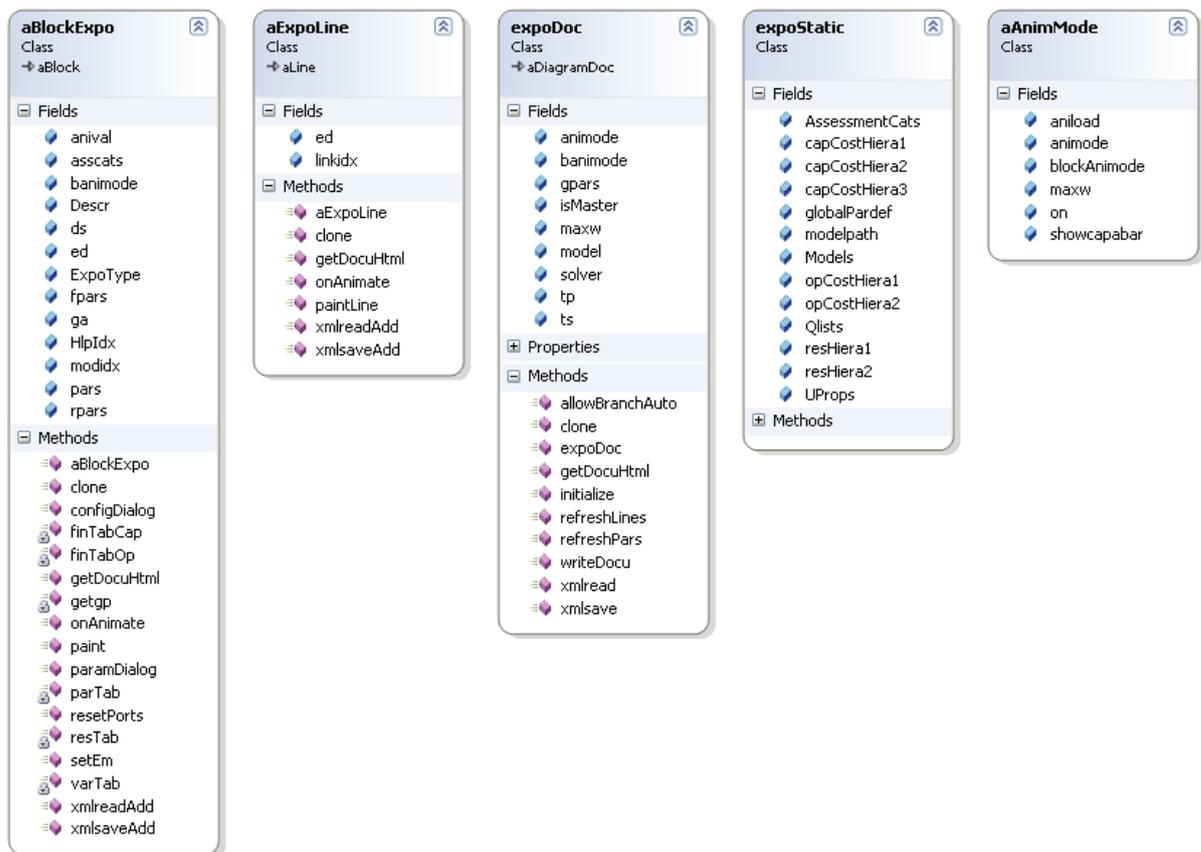


Bild 9: Spezifische Toolkitklassen des Editors

5.2.3 Benutzung des Fließbild-Editors

Nach dem Start der Anwendung öffnet sich ein Fenster mit zwei Eingabebereichen, wie in Bild 10 dargestellt. Im linken Bereich kann ein Abwassersystem grafisch definiert werden. Der rechte Bereich dient zum Darstellen von Eigenschaften und Berichten.

Um ein neues System zu erstellen, sollte als erster Schritt über den Menüpunkt Open in new Window... eine Bibliothek mit Expo Komponenten geöffnet werden. In diesem Fenster kann dann die gewünschte Komponente markiert werden (Links-Klick) und in die Zwischenablage kopiert werden (Edit|Copy oder **Ctrl+C**). Im Zeichenbereich des Projektfensters kann der Block dann eingefügt werden (Edit|Paste oder **Ctrl+V**).

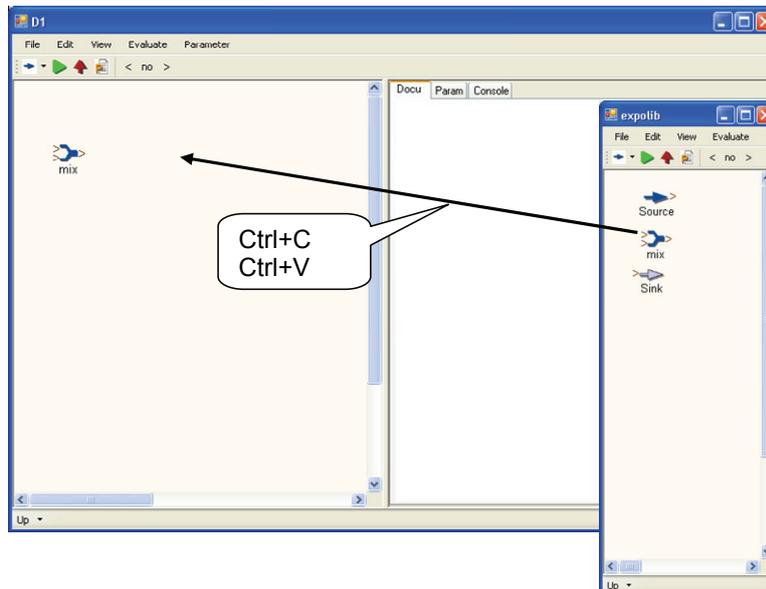


Bild 10: Projektfenster und Blockbibliothek

Das Einfügen per Drag & Drop von einem Fenster in ein anderes wird in der bisherigen Version von ExpoTool noch nicht unterstützt. Innerhalb eines Fensters können Blöcke mit **Links-Klick & Drag** verschoben werden. Mit **Rechts-Klick & Drag** wird eine Kopie der Komponente erstellt und verschoben.

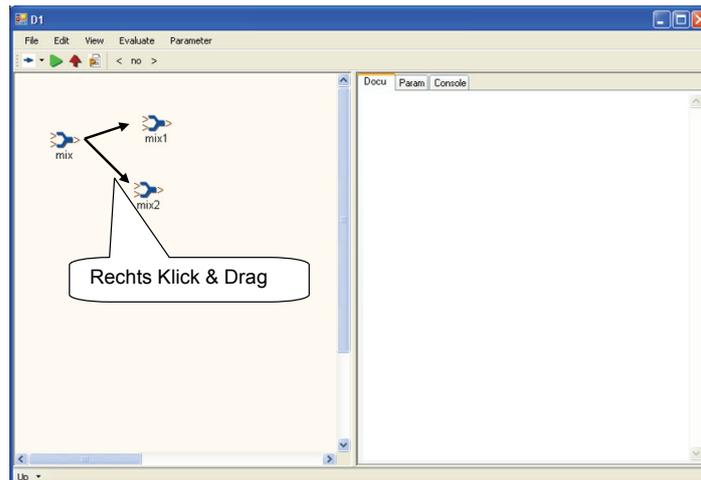


Bild 11: Erzeugen von Kopien

Komponenten können durch Linien miteinander verbunden werden. Diese Linien repräsentieren Abwasser- und Schlammströme. Zum Erzeugen einer Linie muss zunächst auf einen der möglichen Ausgangsverbinder (Port) einer Komponente mit Links-Klick geklickt werden. Die Ein- und Ausgangsverbinder einer Komponente werden durch > Symbole repräsentiert. Nachdem auf einen Verbinder geklickt wurde, befindet man sich in der Linienzeichen-Betriebsart des Editors. Jeder weitere Klick erzeugt einen Linien-Eckpunkt der Verbindungslinie. Mit einem abschließenden Links-Klick auf einen Eingangsverbinder einer Komponente wird die Verbindung geschlossen. Mit einem Rechts-Klick kann der Linienzeichenmodus auch ohne eine vollständige Verbindung zu zeichnen abgebrochen werden. Die Linie kann dann später durch Anklicken des Endpunktes weiter gezeichnet werden. Bei einer erfolgreichen Verbindung wird ein Eingangsverbinder durch ein gefülltes Dreieck (Pfeilspitze) und ein Ausgangsverbinder unsichtbar dargestellt. Beim Versuch, eine ungültige Verbindung zu erzeugen, wird eine Fehlermeldung ausgegeben.

Gezeichnete Komponenten und Verbindungslinien können nachträglich verschoben werden. Hierzu müssen die zu verschiebenden Komponenten zunächst markiert werden. Eine einzelne Komponente kann man durch einen Links-Klick anwählen. Bei einer markierten Komponente wird rechts unten ein kleines schwarzes Kästchen angezeigt. Markierte Linien haben schwarze Kästchen an Ihren Eckpunkten. Mehrere Komponenten kann man durch weitere Shift+Links-Klicks anwählen. Alternativ kann auch ein Auswahlrechteck verwendet werden. Ein solches Rechteck erzeugt man durch einen Links-Klick & Drag in die freie Zeichenfläche.

Wenn die Anordnung der Komponenten in einem Fenster zu umfangreich oder zu unübersichtlich wird, kann das Modell auch hierarchisch gegliedert werden (Siehe Bild 12).

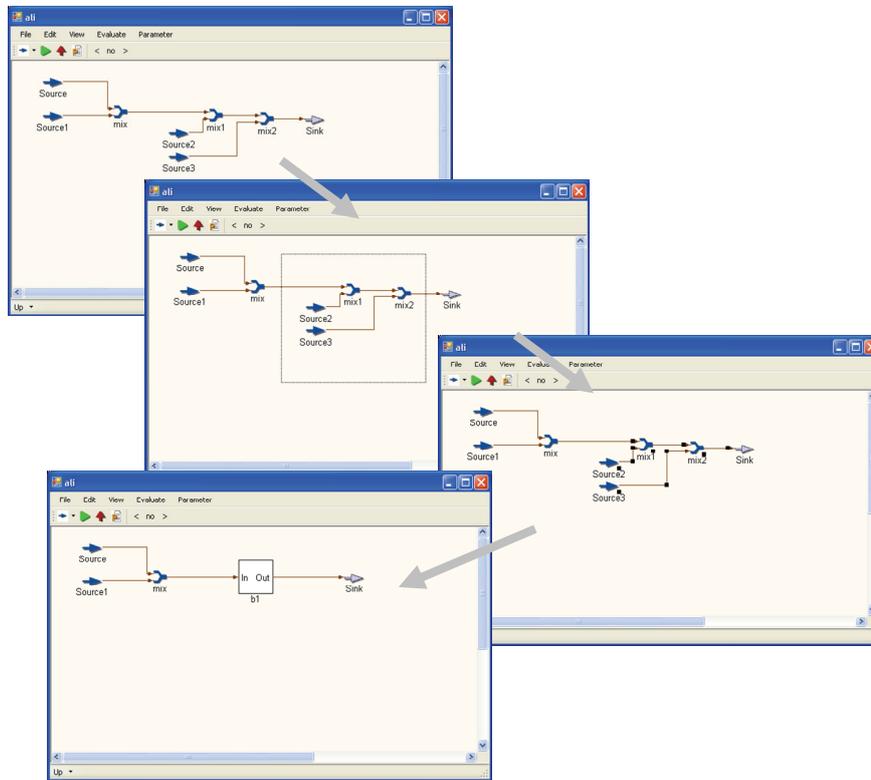


Bild 12: Erzeugen eines Teilmodells (Macro)

Hierzu muss der Bereich des Modells, der zu einem Teilmodell zusammengefasst werden soll, durch ein Auswahlrechteck markiert werden. Anschließend kann über den Menüpunkt Edit|Create Macro oder das Tastaturkürzel **Ctrl+D** das Teilsystem (Macro) gebildet werden. Mit einem Doppel-Klick kann das Teilmodell geöffnet werden. Für das oben dargestellte Beispiel sieht das dann wie folgt aus.

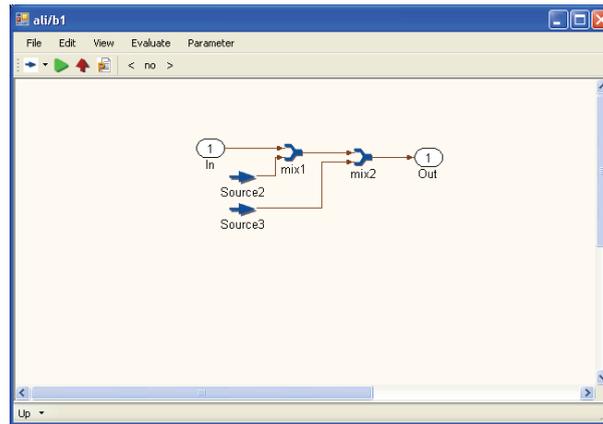


Bild 13: Inhalt des Teilmodells

An der Titelzeile des Editors ist ersichtlich, dass man sich in einem Teilsystem befindet. Der dargestellte Name besteht aus dem Modellnamen und mit „/“ getrennt dem Teilsystemnamen. Das Modell kann beliebig tief geschachtelt werden.

5.2.4 Modelleditor

Zum Öffnen des Modelleditors muss ein Block mit dem zu bearbeitenden Modellansatz mit der rechten Maustaste angeklickt werden. Dann öffnet sich der Konfigurationsdialog des Expo-Blocks (Siehe Bild 14).

Parameter	Value	Unit
maxCap	2000	m3/d
fCon	10	?
fuel m3	2	l/m3

Bild 14: Konfigurationsdialog des Expo-Blocks

Durch die Angabe des Modellnamens wird festgelegt, welche Funktion der Block im Fließbild repräsentiert. Der Modellname ist gleichzeitig der Name einer Datei im Ordner [expotool]/models mit der Erweiterung .xml. Im vorliegenden Fall also expo_mix.xml.

Durch den Button kann eine vorhandene XML-Datei ausgewählt werden. Diese Datei muss aber im Verzeichnis [expotool]/models liegen. Der Button öffnet schließlich den Modelleditor, mit dem das Modell der Komponente editiert werden kann.

5.3 Rechenkern Simulation

5.3.1 Vorgesehene Funktion

Das zu entwickelnde System muss in der Lage sein, das vorgegebene Abwassersystem zu simulieren. Aus der Vorgabe von Zulaufbedingungen und der vorgegebenen Struktur und Dimensionierung des Abwassersystems ist zu berechnen, wie sich die Ablaufwerte und alle internen Stoffströme hieraus ergeben. Die hier durchzuführende Simulation ist eine sogenannte stationäre Berechnung, in der ein stabiler stationärer Betrieb unter Vernachlässigung dynamischer Übergänge berechnet wird. Um diese Berechnung (Simulation) ausführen zu können, muss ein Berechnungskern konzipiert und implementiert werden, der in der Lage ist, die textuell vorliegenden Gleichungen, die durch den in A3 analysierten Parser in eine interne Datenstruktur überführt werden, numerisch zu berechnen. Des Weiteren ist ein spezieller Lösungsalgorithmus zu implementieren, der in der Lage ist, ein nichtlineares Gleichungssystem zu lösen. Dieser Algorithmus wird erforderlich, da durch verfahrensbedingte Rückführung von Stoffströmen (z.B. Prozesswasser) im allgemeinen Fall keine explizite Lösung möglich ist. Als Lösungsansätze werden zwei Verfahren untersucht. Zum einen wird ein Levenberg-Marquardt-Algorithmus zur Lösung des Problems (System nichtlinearer, algebraischer Gleichungen) implementiert. Als Alternative wird ein empirischer Algorithmus, der auf einer Umwandlung des algebraischen Gleichungssystems in ein DGL-System (Dynamisierung) und die Anwendung eines numerischen DGL-Lösers (z.B. Runge-Kutta) beruht, betrachtet.

Zur Berechnung der technologischen Funktion eines Abwassersystems wurde ein Berechnungsansatz entwickelt, der einen guten Kompromiss bezüglich Flexibilität und Offenheit im Hinblick auf Erweiterungen und die unterschiedlichen Fragestellungen auf der einen Seite und Performance und spezielle Anpassung an die Projektanforderungen auf der anderen Seite bietet.

Stichpunktartig lässt sich die Berechnung der Funktion eines Abwassersystems mit dem gewählten Ansatz in die folgenden drei Phasen einteilen:

Berechnung der Volumenströme des Systems basierend auf den für jede Komponente definierten Randbedingungen (lineare Gleichungen) durch Formulierung eines zentralen linearen Gleichungssystems und Lösung desselben,

Berechnung der Konzentrationen der Ausgangsströme der einzelnen (vorher sortierten) Komponenten als Funktion der Volumenströme und der Konzentration der Eingangsströme. Für rückkopplungsfreie Systeme erfolgt die Berechnung in einem Zug, da die Komponenten vor der Berechnung nach der gegenseitigen Abhängigkeit sortiert werden. Existieren Rückkopplungen, z.B. durch rezirkulierte Stoffströme, kann die Berechnung der Konzentrationen iterativ erfolgen.

Berechnung der finanztechnischen Kategorien und des Ressourcenverbrauchs

5.3.2 Berechnung der Volumenströme

Für jeden Block werden beliebig viele lineare Randbedingungen für die Eingangs- und Ausgangsvolumenströme formuliert:

$$\begin{aligned} c_1 &= a_{1,1} Q_{in1} + a_{1,2} Q_{in2} + \dots + b_{1,1} Q_{out1} + b_{1,2} Q_{out2} + \dots \\ c_2 &= a_{2,1} Q_{in1} + a_{2,2} Q_{in2} + \dots + b_{2,1} Q_{out1} + b_{2,2} Q_{out2} + \dots \\ &\dots \end{aligned} \quad (1)$$

mit

c_i Konstante

$a_{i,j}$ Faktor für zulaufende Ströme

$b_{i,j}$ Faktor für ablaufende Ströme

Q_{in_j} Volumenstrom Zulauf j

Q_{out_j} Volumenstrom Ablauf j

Zum Beispiel würde ein Block **b1**, der eine Kläranlage beschreibt, typischerweise einen Zulauf (Q_{in1}) und zwei Ausläufe (Q_{out1} – Ablauf der Anlage, Q_{out2} – produzierter Schlamm) besitzen. Aus der Volumenbilanz für das Wasser resultiert zunächst:

$$0 = Q_{in1} - Q_{out1} - Q_{out2} \text{ d.h. } (c_1=0, a_{1,1}=1, b_{1,1}=-1, b_{1,2}=-1) \quad (2)$$

Zusätzlich kann angenommen werden, dass eine konstante Menge Überschussschlamm (Q_{ex}) abgezogen wird:

Spalte für die beiden Ausgangsströme. Jeder Block trägt so viele Zeilen wie als Randbedingungen definiert wurden zu dem Gleichungssystem bei.

Um eine eindeutige und exakte Lösung des Gleichungssystem zu ermöglichen, muss die Koeffizientenmatrix F den vollen Rang n_q (n_q ist gleich der Anzahl der auftretenden Ströme) besitzen. Dies bedingt, dass als notwendige Lösungsbedingung die Anzahl der Zeilen gleich der Anzahl der Spalten ist. Werden weniger Zeilen definiert, ist das System unterbestimmt und es existieren unendlich viele Lösungen. Werden mehr Gleichungen definiert, ist das System überbestimmt. In diesem Fall könnte nur eine Näherungslösung, z.B. über die Methode der kleinsten Quadrate, bestimmt werden. Für die im Projekt betrachteten Fragestellungen kann davon ausgegangen werden, dass sich immer eine eindeutig bestimmte Lösung ergibt:

$$\underline{q} = \mathbf{F}^{-1} * \underline{c} \quad (5)$$

Zur numerischen Lösung des Gleichungssystems wird eine „public domain“ Programmibibliothek verwendet ([Mapack]). Die Lösung wird über eine LU-Zerlegung ermittelt.

Zur Verdeutlichung dieses Ansatzes soll ein einfaches Beispiel eingeführt werden. In Bild 5 ist ein einfaches Verfahrensmodell dargestellt. 6 Blöcke werden durch 6 Volumenströme verbunden.

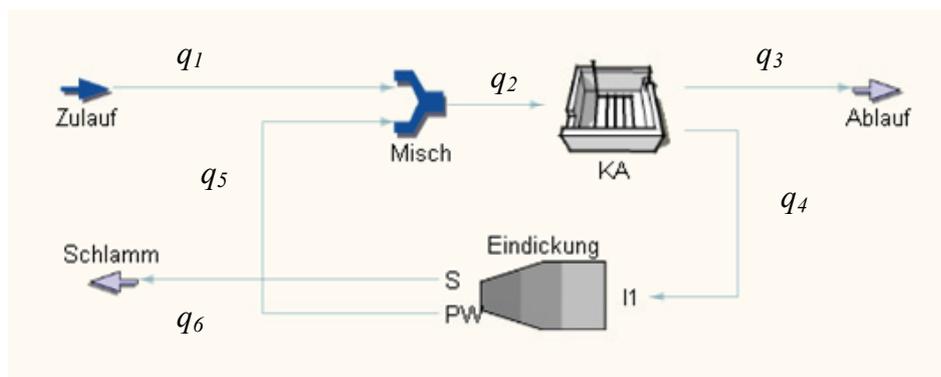


Bild 15: Beispiel 1

Die einzelnen Blöcke definieren die folgenden Volumenstrom-Randbedingungen:

Block **Zulauf**:

$$9000 = q_1$$

In Bild 16 sind die Ergebnisse grafisch dargestellt.

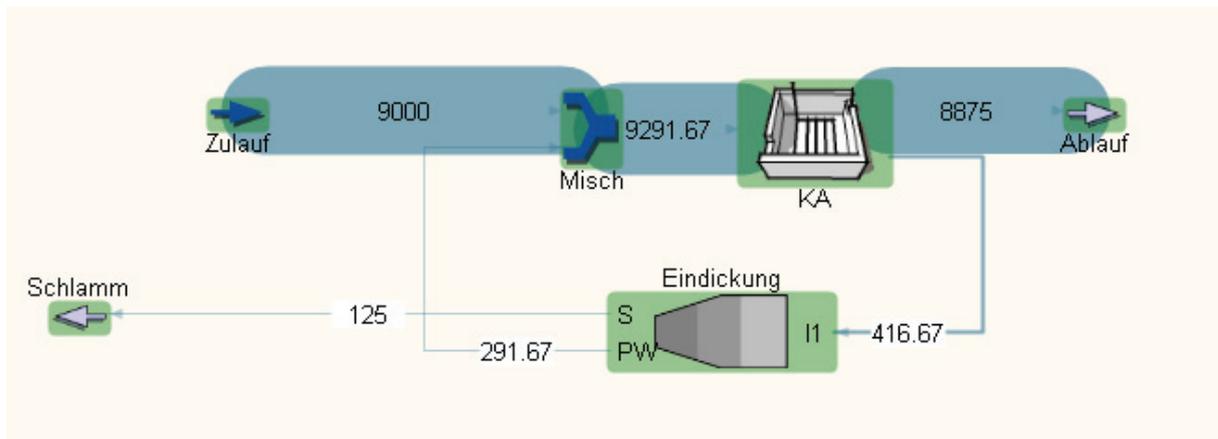


Bild 16: Berechnete Volumenströme Beispiel 1

In dem vorliegenden Prototyp müssen die Koeffizienten des Gleichungssystems als konstante Parameter definiert werden. Die Berechnung von Volumenströmen als Funktion anderer berechneter Größen (z.B. Konzentrationen) wird nicht zugelassen.

5.3.3 Berechnung der Konzentrationen

Für die Berechnung der Konzentrationen der Inhaltsstoffe wird folgender Ansatz verwendet. In jedem Block werden die Konzentrationen der Eingangsströme als bekannt vorausgesetzt. Die Konzentration der Ausgangsströme muss als Funktion der

- Eingangskonzentrationen,
- Ein- und Ausgangsvolumenströme,
- Block-Parameter,
- Block-Variablen

beschrieben werden.

Für den Block **Misch** in Beispiel 1 werden z.B. die in Bild 17 dargestellten Gleichungen definiert.

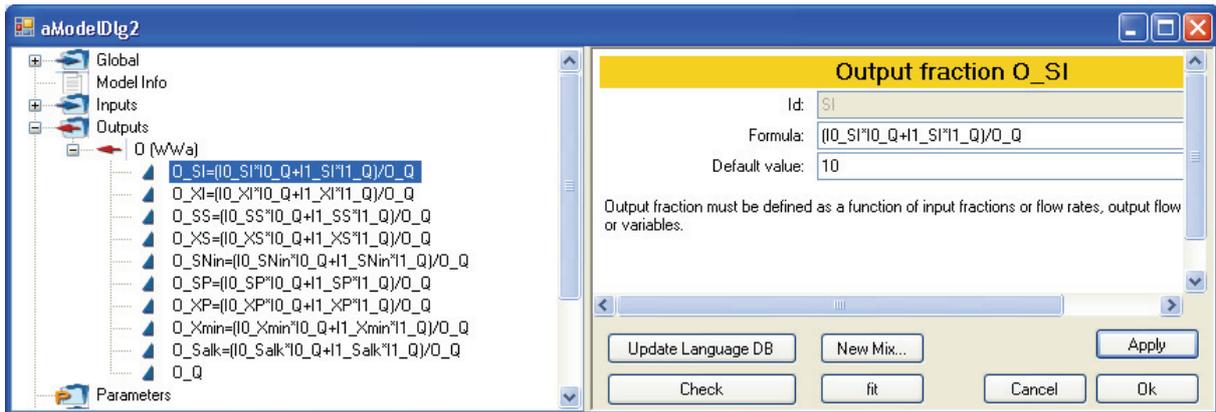


Bild 17: Gleichungen für die Konzentrationen

Damit die korrekten Ergebnisse berechnet werden können, ist es erforderlich, dass die Konzentrationen der Eingangsströme bereits berechnet sind, wenn der jeweilige Block seine Ausgangskonzentrationen berechnet. Daher ist eine Sortierung der Blöcke vor der Berechnung erforderlich. Wird während des Sortierens festgestellt, dass es Blöcke gibt, deren Ablaufkonzentrationen jeweils wechselseitig voneinander abhängen, kann die Berechnung nicht einfach explizit ausgeführt werden. Es entsteht ein implizites algebraisches Gleichungssystem, das mit entsprechenden mathematischen Methoden gelöst werden muss.

Während des Sortierens werden alle verbindenden Stoffströme, die nicht explizit berechnet werden können, markiert. Die Konzentrationen dieses Stoffstroms werden als Variablen des impliziten algebraischen Gleichungssystems angenommen. (Es kann nicht unterschieden werden, ob nur einzelne Konzentrationen im Vektor Ergebnis einer impliziten Berechnung sind, da die Analyse der Abhängigkeiten nur auf der Ebene von Blöcken durchgeführt werden.)

Für das in Bild 15 eingeführte Beispiel ergibt sich die folgende Sortierreihenfolge:

- Block **Eindickung**
- Block **Zulauf**
- Block **Misch**
- Block **KA**
- Block **Ablauf**
- Block **Schlamm**

Ein Stoffstrom wurde markiert, da er sich nicht explizit berechnen lässt:

- Strom von Block **KA** Ausgang Nr.2 zum Block **Eindickung** Eingang Nr.1

Die Konzentrationsvektoren \underline{c}_i aller Ströme, die markiert wurden, werden zu einem Vektor unbekannter algebraischer Größen \underline{x} zusammengefasst.

$$\underline{c}_i = \begin{bmatrix} c_{i,1} \\ \text{M} \\ c_{i,nc} \end{bmatrix}, \underline{x} = \begin{bmatrix} \underline{c}_1 \\ \text{M} \\ \underline{c}_{na} \end{bmatrix} \quad (6)$$

mit

nc	Anzahl der Konzentrationen im Abwasservektor (z.Z. 10),
na	Anzahl der algebraisch abhängigen Stoffstrom- vektoren.

Für den Fall der korrekt berechneten Konzentrationen muss gelten, dass eine erneute Berechnung der Konzentrationen des Vektors \underline{x} dieselben Ergebnisse liefert:

$$\underline{x} = G(\underline{x}) \quad (7)$$

bzw.

$$\underline{0} = \underline{x} - G(\underline{x}) \quad (8)$$

mit

$G(x)$	Gleichungssystem zur Berechnung des Kon- zentrationenvektors x
--------	---

Zur Lösung diese Problems wurden unterschiedliche Lösungsalgorithmen implementiert. Als erste Variante wird ein einfacher Iterationsalgorithmus („Iterator“) implementiert. In jeder Iteration k werden die folgenden Funktionen berechnet:

$$\underline{x}(k+1) = G(\underline{x}(k)) \quad (9)$$

$$\underline{e}(k) = \underline{x}(k+1) - \underline{x}(k) \quad (10)$$

$$\underline{g}(k) = \underline{e}(k) \underline{e}(k)' \quad (11)$$

Die Iteration wird beendet, wenn

- Konvergenz festgestellt wird, d.h. der Fehler (Summe der Quadrate der Abweichung der Konzentrationen von einer Iteration zur nächsten) kleiner wird als eine bestimmte Toleranz ($tolf$) oder
- eine Divergenz des Algorithmus festgestellt wird ($g(k) > g(k-1)$) oder
- bis zu einer Maximalzahl von Iterationen ($k > maxiter$) keine Konvergenz festgestellt werden konnte.

Um den Algorithmus in schwierigeren Fällen zu stabilisieren, wurde eine zweite Version dieses Algorithmus implementiert („Iterator damped“). Um einen Iterationsschritt zu vermeiden, der zu einer Verschlechterung des Ergebnisses führt, wird ein Dämpfungsfaktor für eine u. U. notwendige Verkleinerung eines Iterationsschrittes eingeführt.

In jeder Iteration k werden die folgenden Funktionen berechnet:

$$\underline{x}(k+1) = \underline{x}(k) + d * (G(\underline{x}(k)) - \underline{x}(k)) \quad \text{mit } d=1, 1/2, 1/4, \dots \quad (12)$$

$$\underline{e}(k) = \underline{x}(k+1) - \underline{x}(k) \quad (13)$$

$$g(k) = \underline{e}(k) \underline{e}(k)' \quad (14)$$

Hier wird der Dämpfungsfaktor solange d verkleinert, wie die Güte einer neuen Iteration schlechter ist als die vorhergehende Güte.

Zur Verbesserung der Konvergenzgeschwindigkeit wurde weiterhin ein gedämpftes Newton-Raphson-Verfahren implementiert (siehe z.B. [Engelen-Müllges und Reuter]). Für diesen allgemeinen Gleichungssystemlösalgorithmus wurde das folgende Gleichungssystem angenommen:

$$0 = F(\underline{x}) = \underline{x} - G(\underline{x}) \quad (15)$$

Die Berechnung erfolgt dann mit der folgenden Iteration:

$$\underline{x}(k+1) = \underline{x}(k) - d * \mathbf{J}^{-1}(k) \underline{x}(k) \quad \text{mit } d=1, 1/2, 1/4, \dots \quad (16)$$

mit der Jacobimatrix \mathbf{J} , die numerisch ermittelt wird.

Das sehr einfache Beispiel 1 wurde mit den verschiedenen Varianten mit folgendem Aufwand und folgender Konvergenzgeschwindigkeit berechnet:

Tabelle 7: Konvergenzgeschwindigkeit

Method	Iteration	Güte g
Iterator:	1	1.279684045350415
	2	0.00087559854858091735
	3	8.62550780844815E-07
Funktionsaufrufe: 4		
Iterator damped	1	1.279684045350415
	2	0.00087559854858091735
	3	8.62550780844815E-07
Funktionsaufrufe: 6		
Newon-Raphson	1	7254014.4137646193
	2	2.9704962999416153E-11
Funktionsaufrufe: 20		

In diesem Fall liefern alle Verfahren schnell und zuverlässig das gewünschte Ergebnis (Siehe Bild 18)

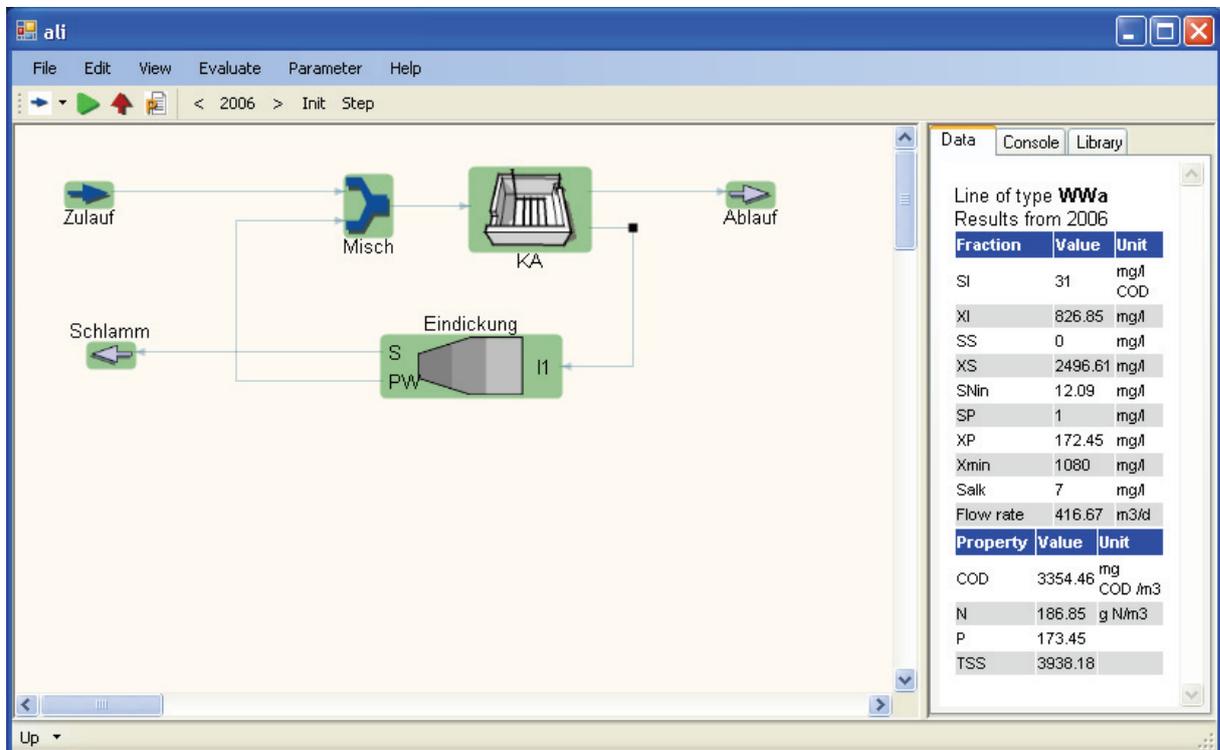


Bild 18: Berechnete Konzentrationen

Die Konvergenzgeschwindigkeit des Newton-Raphson-Verfahrens ist hierbei signifikant besser, aber der numerische Aufwand ist auf Grund der numerischen Ermittlung der Jacobi-Matrix dennoch höher. Im Verlauf des Projektes wird mit realistischeren und anspruchsvolleren Beispielsystemen die Performance der implementierten Algorithmen getestet werden.

5.3.4 Berechnung der finanztechnischen Kategorien und des Ressourcenverbrauchs

Basierend auf den berechneten Stoffströmen und den konstruktiven Parametern können Invest- und Betriebskosten berechnet werden. Dazu können weitere Parameter definiert werden (Finanz-Parameter) und dann Formeln angegeben werden, um verschiedene Kostenpositionen zu berechnen. Jede Kostenposition kann mit mehreren Schlüsseln Kostenkategorien zugeordnet werden.

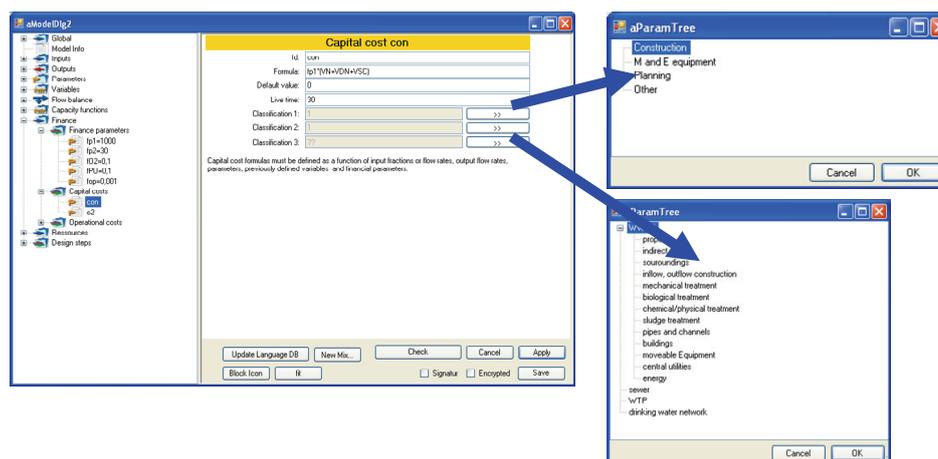


Bild 19: Kostenkategorien

Diese Zuordnung bildet später die Basis bei der Berechnung von zusammengefassten Kosten.

Auf gleiche Weise können Ressourcen für die Errichtung von Bauwerken und der Ressourcenverbrauch im Betrieb spezifiziert werden.

5.3.5 Qualitative Bewertung

Um Projekte auch nach nicht quantifizierbaren Kriterien bewerten zu können, kann global eine Liste qualitativer Kriterien frei definiert werden. Als Festlegung wurde eingeführt, dass gewählte Kriterien kleinere Werte für eine bessere Bewertung annehmen sollen. Jedes Kriterium wird dann in Prozentangaben definiert, wobei nur verbale Stufen angeboten werden.

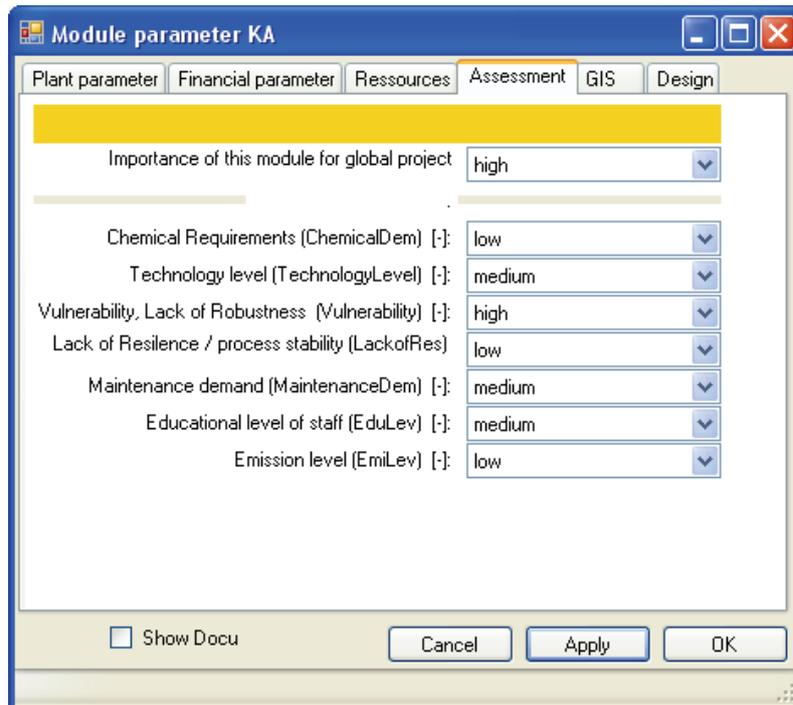


Bild 20: Beschreibung eines Moduls mit qualitativen Kriterien

Für die Anwendung im Abwasser Toolkit wird festgelegt, dass jedes Kriterium in drei Stufen (low=0;medium=50;high=100;) charakterisiert wird. Um eine Gesamtbewertung eines Projektes, das aus mehreren Modulen besteht, realisieren zu können, wird zusätzlich eine Wichtung jedes Moduls im Projektkontext vorgenommen. Hier werden vier Stufen definiert: (no=0;low=20;medium=50;high=100;).

5.3.6 Zeitscheibensimulation

Der Rechenkern wurde so erweitert, dass die Systemsimulation für eine Serie von Zeitscheiben durchgeführt werden kann, in der jeweils andere Bedingungen (Parameter) gesetzt werden können. Das Werkzeug erlaubt nun die Definition einer Zeitbasis (Monat, Quartal, Halbjahr oder Jahr) und die Festlegung eines Startzeitpunktes und die Anzahl zu simulierender Zeitscheiben (Siehe Bild 21).



Bild 21: Dialog zur Vorgabe des Zeithorizontes

Darüber hinaus kann jeder Parameter des Systems nun als Zeitreihe vorgegeben werden. In Bild 22 wird für das im Vorgängerbericht eingeführte Beispielsystem, über den per Menüpunkt geöffneten Zeitreiheneditor, ein beliebiger Blockparameter als Zeitreihe definiert. Hier sind das die Zulaufmenge und die CSB-Konzentration im Zulauf.

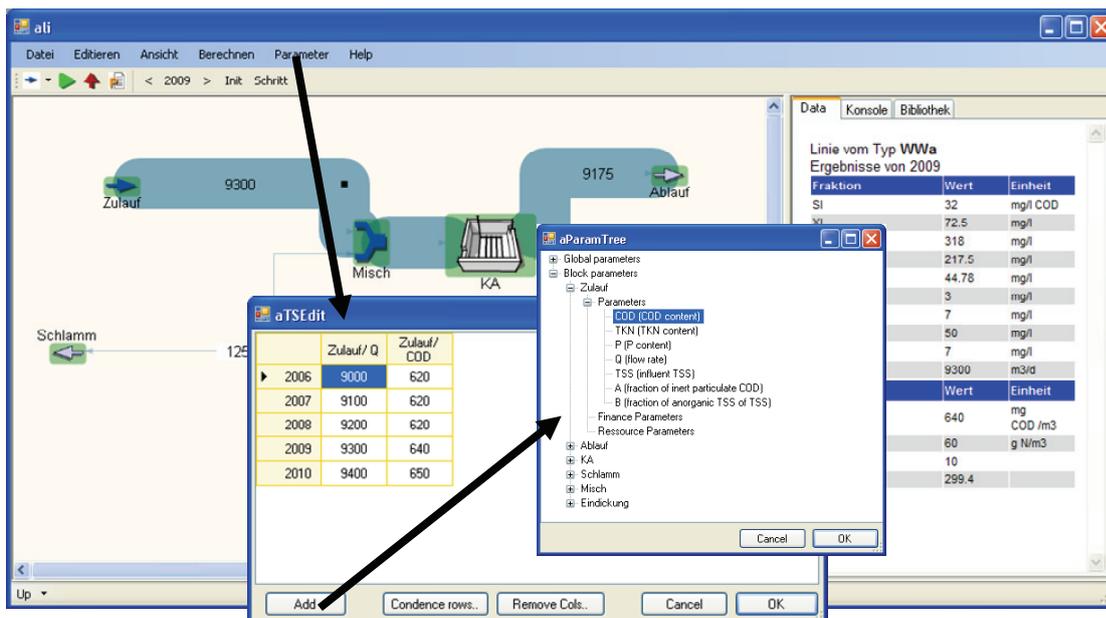


Bild 22: Beispielsystem mit Dialog zur Vorgabe von Zeitreihen

Entsprechend des vorgegebenen Zeithorizontes kann in dem Zeitreiheneditor für jede Zeitscheibe ein Wert des Parameters vorgegeben werden. Die anschließende Berechnung erstellt dann für jede Zeitscheibe alle Ergebnisse (Volumenströme, Konzentrationen, Kosten und Ressourcenverbrauch). In Bild 22 sind z.B. bereits die Ergebnisse für das Jahr 2009 visualisiert.

5.4 Rechenkern zur Bemessung

Bild 25 demonstriert, wie die Parametrierung der System-Parameter erfolgen kann. Es wird ein Dialog geöffnet, der die Festlegung der Auslegungsparameter der Anlage, wie z.B. die Größe der einzelnen Becken, erlaubt. Hier können durch erfahrende Anwender direkt die Auslegungsparameter eingegeben werden. In vielen Fällen ist aber die Dimensionierung eine schwierige Aufgabe, die den Einsatz spezieller Bemessungs- und Planungswerkzeuge erfordert. Auch für diese Aufgabe soll das ExpoTool eine unaufwendig zu bedienende Lösung bieten. Es wird angenommen, dass optional für jede Verfahrenskomponente beliebig viele Bemessungsansätze verwaltet werden können. Ein Bemessungsansatz ist in diesem Zusammenhang eine System von Gleichungen, mit dem die System-Parameter (wie z.B. Beckenvolumen) aus Vorgaben berechnet werden können. Softwaretechnisch wird eine Lösung angestrebt, in der zunächst ein Bemessungsverfahren aus einer Liste verfügbarer Ansätze ausgewählt wird. Für dieses Bemessungsverfahren wird dann ein weiteres Fenster geöffnet, in dem die Design-Parameter (z.B. Zulauffrachten, gewünschte Ablaufwerte, Design-Temperatur etc.) eingegeben werden. Nach Betätigung eines entsprechenden OK-Buttons werden das Anlagen-Design durchgeführt, die System-Parameter (z.B. Beckenvolumen) berechnet und die berechneten System-Parameter in die entsprechende Maske, wie in Bild 25 abgebildet, eingetragen. Für die Auswahl und Festlegung der Prozess-Parameter (z.B. maximale Wachstumsraten, Yield) wird von der Auswahl eines Standard-Parametersatzes für die gewünschte Zielregion ausgegangen. Eine nachträgliche Veränderung einzelner Parameter wird ermöglicht. Ein ähnliches Vorgehen wird auch für die Kriterien-Parameter realisiert.

5.4.1 Realisierung

Neben der Systemsimulation sollen in das Werkzeug auch Entwurfsberechnungen, Auslegungsberechnungen integriert werden. Hierzu wurde die Modellbeschreibung eines Moduls um die optionale Vorgabe von Entwurfsvorschriften ergänzt. Zur Verallgemeinerung eines Bemessungsablaufes wurde definiert, dass

- eine Bemessung aus eine Folge von Bemessungsschritten besteht,
- jeder Bemessungsschritt hat genau einen Vorgängerschritt, es sei denn, es ist der erste Schritt,
- jeder Bemessungsschritt hat keinen, einen oder mehrere Folge-Schritte,

- hat ein Bemessungsschritt keinen Folgeschritt, handelt es sich um einen finalen Bemessungsschritt, der als Ergebnis die Dimensionierungsparameter des betreffenden Moduls liefert und
- hat ein Bemessungsschritt mehr als einen möglichen Folge-Schritt, kann der Anwender interaktiv den gewünschten Folge-Schritt auswählen (für Entwurf-/Verfahrensalternativen).

In jedem Entwurfsschritt werden Variablen definiert, die entweder als Vorgaben durch den Anwender auszufüllen sind oder die über eine Berechnungsvorschrift aus Variablen, die in Vorgängerschritten definiert wurden, berechnet werden, optional aber durch den Anwender überschrieben werden können.

In Bild 23 ist die Erweiterung des Modelleditors dargestellt, mit der sich eine Sequenz von Bemessungsschritten definieren lässt.

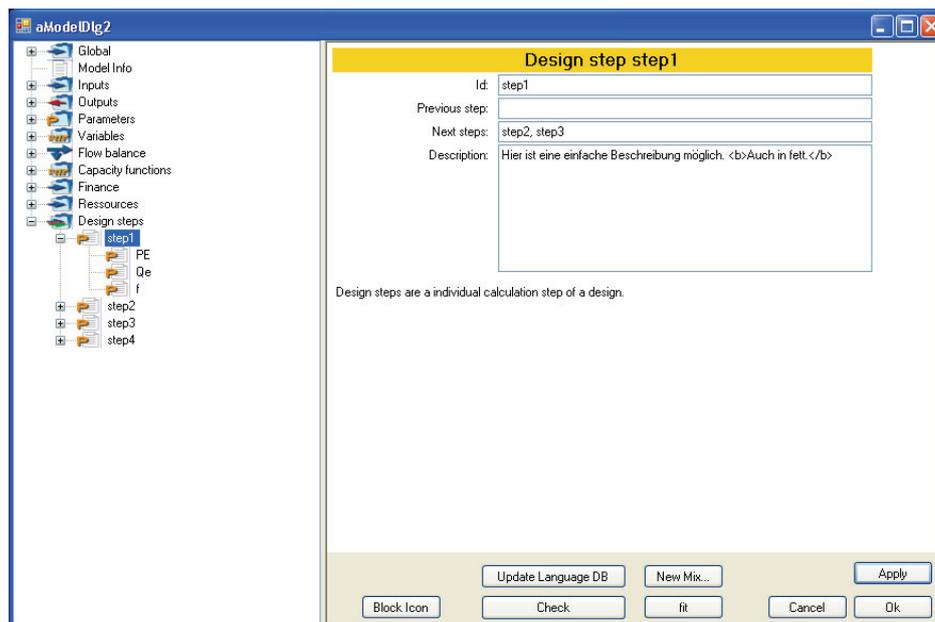


Bild 23: Dialog zur Beschreibung eines Bemessungsablaufes

Die Sequenz der Berechnungen für eine Bemessung lässt sich auf diese Art und Weise definieren. Wenn für ein Modul eine Bemessungsvorschrift definiert wurde, kann im Parameterdialog unter dem Reiter Design die definierte Bemessungsvorschrift ausgeführt werden (Siehe Bild 23). Mit jedem Schritt vergrößert sich der Dialog um die neu berechneten Variablen. Werden zuvor definierte Variablen nachträglich modifiziert, verkleinert sich der Dialog.

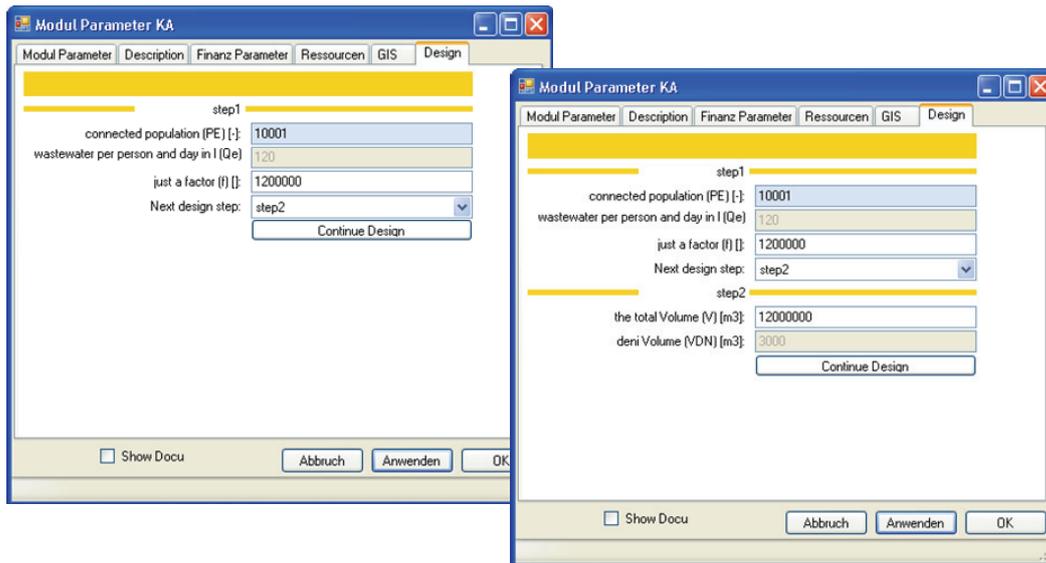


Bild 24: Prinzipieller Ablauf einer Bemessung

Am Ende der Bemessungsberechnung können die Dimensionierungsparameter als Parameter des Moduls übernommen werden.

5.5 Implementierung Parametrierung

Durch Doppelklick auf den Verfahrensblock (siehe A1) wird ein Dialog geöffnet, der die Auswahl von unterschiedlichen Gruppen von Eigenschaften der Verfahrensstufe erlaubt. So könnten z.B. über entsprechende Buttons Dialoge für die Parametergruppen geöffnet werden:

- Systemparameter
- Prozessparameter
- Spezielle Parameter für die Kosten-, Energie- und Kriterienberechnung.

Unter Systemparametern werden Parameter verstanden, die für jede Anlage individuell durch die Anlagenplanung vorgegeben werden müssen. Typische Beispiele hierfür sind Beckenvolumina, Rohrdurchmesser, Pumpenkapazitäten und ähnliches. Prozessparameter sind dagegen Parameter, die nicht durch den Planer vorgegeben werden können, aber dennoch die Leistung des Verfahrens mitbestimmen. Typische Beispiele hierfür sind biologische Parameter wie maximale Wachstumsraten oder der Ertragskoeffizient (Yield) oder auch Parameter, die die Abwasserzusammensetzung beschreiben, wie z.B. der Anteil partikulären und inerten CSBs. Die Prozessparameter können nicht frei vorgegeben werden, sondern müssen mit möglichst wenig Aufwand für die örtlichen Gegebenheiten bestimmt wer-

den. Im Rahmen dieses Projektes wird angenommen, dass für typische Zielregionen eine Datenbank gefüllt wird, die die Prozessparameter für wichtige Verfahren enthält.

5.5.1 Realisierung

Durch Doppelklick auf ein Modul wird ein Dialog geöffnet, der die Auswahl von unterschiedlichen Gruppen von Eigenschaften der Verfahrensstufe erlaubt (Siehe Bild 25).

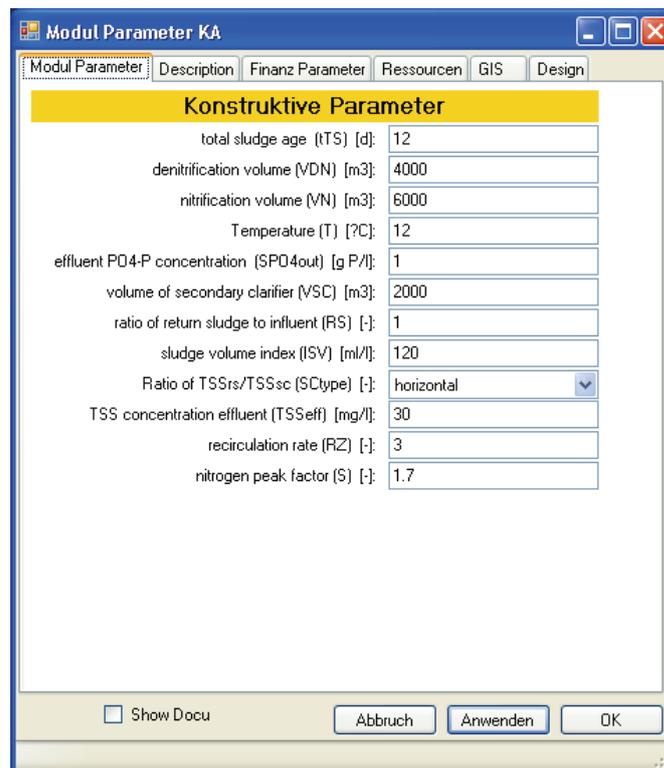


Bild 25: Parameterdialog

So könnten z.B. über entsprechende Reiter Dialoge für Parametergruppen geöffnet werden:

- Modulparameter
- Finanzparameter
- Ressourcenparameter
- GIS-Parameter

Unter Modulparameter werden Parameter verstanden, die für jede Anlage individuell durch die Anlagenplanung vorgegeben werden müssen. Typische Beispiele hierfür sind Beckenvolumina, Rohrdurchmesser, Pumpenkapazitäten und ähnliches.

Finanz- und Ressourcenparameter definieren zusätzliche Angaben, die für die Berechnung von Kosten und Ressourcenverbrauch notwendig sind.

Für die Variantenpräsentation ist optional die Angabe geografischer Referenzen vorgesehen (GIS-Parameter, siehe Bild 26). Die georeferenzierte Präsentation ist auf das Zusammenspiel mit dem Werkzeug Google-Earth ausgerichtet.

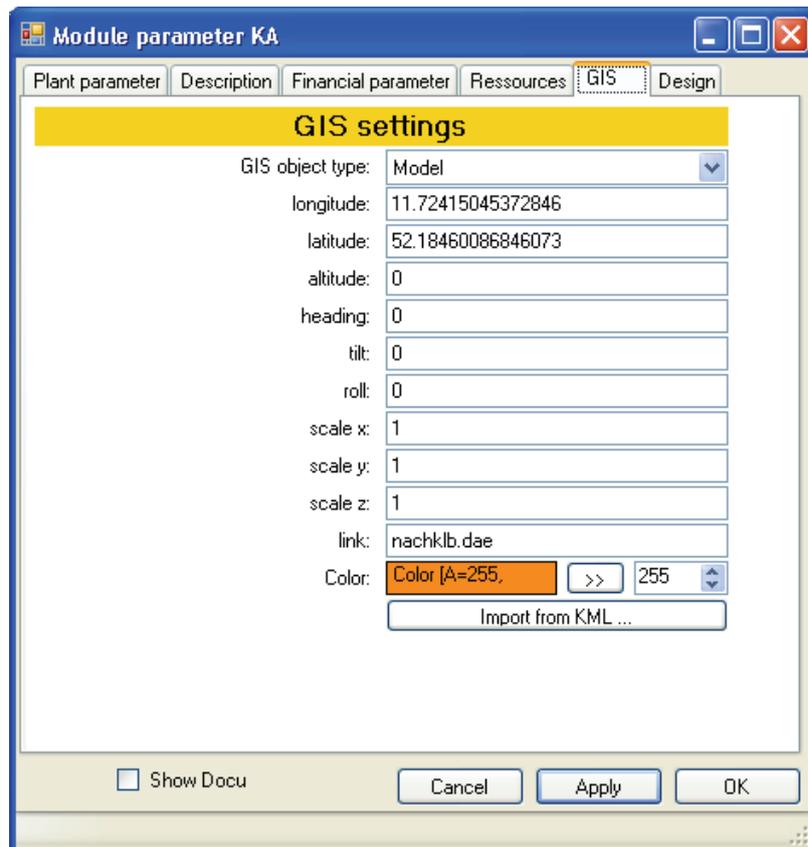


Bild 26: Parameterdialog, GIS Angaben

Für die Präsentation des Moduls kann zwischen den folgenden Optionen gewählt werden:

none Es ist keine georeferenzierte Darstellung des Moduls vorgesehen

Placemark Das Modul wird über eine Ortsmarke (Symbol) dargestellt. In diesem Fall sind die Geo-Koordinaten des entsprechenden Punktes einzugeben (longitude, latitude, altitude). Das Symbol wird aus dem Symbol des Moduls innerhalb des Toolkits übernommen.

Model Es wird ein 3D-Modell des Moduls visualisiert. Das Modell muss im Format Collada vorliegen (.dae). Für die Erstellung dieses Modells kann u.a. das Werkzeug SketchUp verwendet werden.

Polygon Es wird eine Fläche, die durch eine Anzahl von Berandungspunkten definiert ist, visualisiert.

Für die Festlegung der Ortskoordinaten kann ebenfalls Google-Earth verwendet werden. Im ersten Schritt wird eine Ortsmarke (Placemark) in Google-Earth definiert (siehe Bild 27). Breite und Länge können dann manuell in den Dialog übernommen werden.

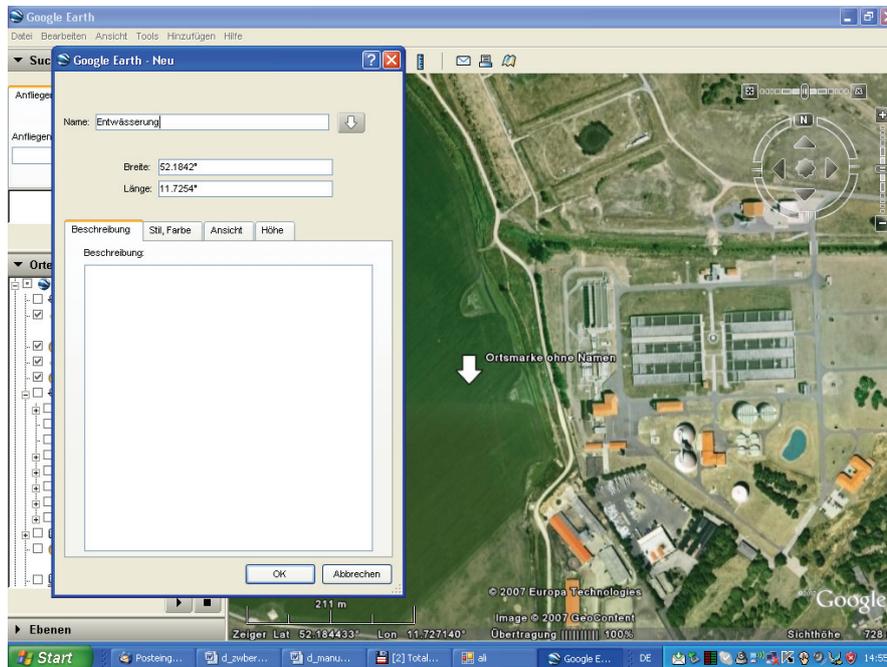


Bild 27: Definition einer Ortsmarke

Alternativ können aber auch beliebige Ortsmarken aus einer Sammlung von Ortsmarken (.kml Datei) gelesen werden.

Wenn ein 3D-Modell dargestellt werden soll, sind weitere Parameter vorzugeben:

Tabelle 8: Weitere GEO-Parameter für 3D-Modell

heading	Höhen-Offset [m]
tilt	Drehung des Modells um die Höhenachse
roll	Drehung des Modells um die Längsachse
scale x	Skalierung des Modells entlang der x-Achse
scale y	Skalierung des Modells entlang der y-Achse
scale z	Skalierung des Modells entlang der z-Achse
link	Name des Modells (*.dae), muss im Unterverzeichnis ./collada/models stehen

In Bild 28 und Bild 29 sind Beispiele für die Visualisierung über Ortsmarken und 3-Modelle dargestellt.

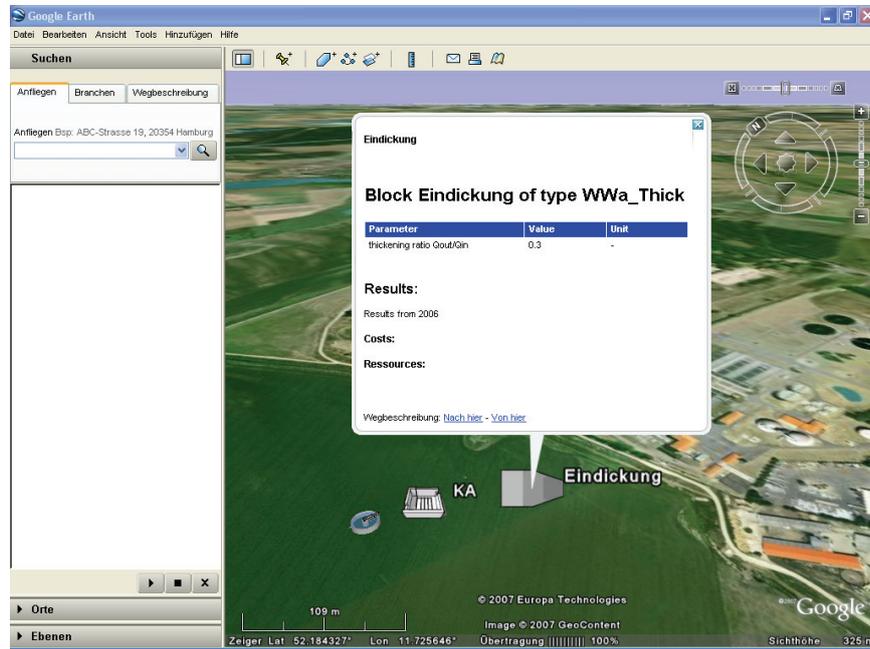


Bild 28: Darstellung von Modulen in Google-Earth



Bild 29: Darstellung eines 3D-Modells in Google-Earth

5.6 Support Implementierung Verfahrenskomponenten

Für die einzelnen exportrelevanten Verfahrenskomponenten werden durch die Projektpartner, insbesondere TUM und ISAH, die formalisierten Beschreibungen recherchiert und in das System integriert. Neben der wasserwirtschaftlichen Expertise sind auch eine Reihe mathematischer und informationstechnischer Randbedingungen zu beachten. Als verantwortlicher Partner für das Systemkonzept und auf Grund der auf diesem Gebiet vorliegende Expertise wird das ifak in diesem Arbeitspaket die siedlungswasserwirtschaftlichen Partner bei dieser Aufgabe unterstützen. In diesem Zusammenhang sind entsprechende Workshops geplant.

A8 Support Implementierung Bemessung, Kriterien: Ähnlich wie für die Implementierung der Module zur stationären Verfahrenssimulation, sind Bemessungsansätze durch die Partner (insbes. TUM und ISAH) zu implementieren. In diesem Arbeitspaket liefert das ifak hierfür Unterstützung. Darüber hinaus wird den verantwortlichen Partnern für die ökonomischen und sonstigen Kriterien der Verfahrenskomponenten bei der Implementierung Unterstützung gewährt.

5.7 ExpoTool Datenbank

Implementierung von Projekt- und Verfahrensdatenbank; Ergänzend zur mathematischen Beschreibung werden textliche und verschiedene bildliche Beschreibungen der Verfahrensstufe verwaltet:

- Verfahrenskomponenten (Funktion und Beschreibung),
- Bemessungsansätze,
- Prozessparameter,
- Projekte.

Als Technologie wird auf die konsequente Nutzung von XML gesetzt. Als Ablage werden Dateien im Dateisystem des Rechners verwendet. Es werden einzelne Dateien für

- die Definition einzelner Module (Modell, Bemessungsvorschriften),
- die Definition von globalen Projekteinstellungen (Szenario) mit den jeweils länderspezifischen Bedingungen
- und Projekte, bestehend aus der Verschaltung und der Parametrierung von Modellen

vorgesehen.

Es werden zu diesem Zweck zwei unterschiedliche XML-Schema-Definitionen erstellt.

5.8 Konzept Ergebnispräsentation

5.8.1 Erforderliche Funktionen

Wesentlicher Bestandteil des zu entwickelnden Systems ist eine aufgabengerechte Präsentation der Berechnungsergebnisse. Insbesondere ist den Anforderungen unterschiedlicher Zielgruppen (Ingenieure, Management, Behörden) gerecht zu werden. Folgende Komponenten sind vorgesehen:

Stoffstromdarstellung (Shankey): Wichtigstes Werkzeug für den Systemüberblick, Fließbilder für Volumenstrom und alle in dem einheitlichen Stoffstromvektor definierten Frachten

Tabellarische Präsentation, Variantenvergleiche, Bilanzen: Berechnungsergebnisse des ExpoTools werden in einem eigenen XML-Format abgelegt. Es werden Standardsoftware-Technologien eingesetzt, um daraus Dokumente für verschiedene Anwendersichten zu erzeugen. Dokumente vorrangig als HTML, evtl. PDF

Verfahrensübersichten: Aus dem konfigurierten Fließbild werden Informationen über die Platzierung der Komponenten extrahiert. Zusammen mit einheitlichen Verfahrensdarstellungen werden daraus Fließbilder als Dokument erzeugt.

5.8.2 Sankey-Darstellung

Von diesen Vorgaben ist die Präsentation von Shankey-Diagrammen bereits vollständig realisiert, wie z.B. in Bild 30 dargestellt.

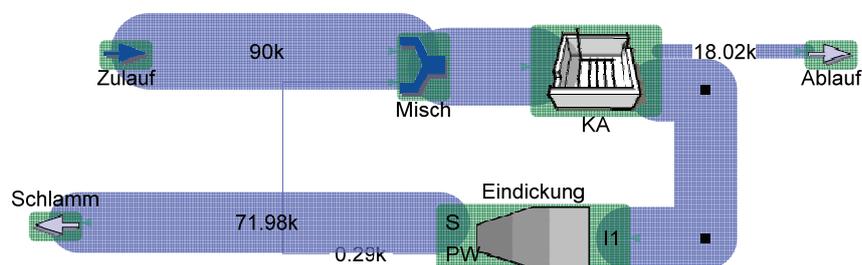


Bild 30: Darstellung der P-Frachten in kg/P/d als Shankey-Diagramm

5.8.3 Projektdokumentation

Der Export der Berechnungsergebnisse erfolgt immer als XML-Datei, wobei verschiedene XML-Formate (Schema) berücksichtigt werden.

Ergebnisse von Szenarioberechnungen werden über das Menü Ergebnisse verwaltet. Berechnungsergebnisse können in Ergebnisdateien gespeichert werden (*.res). Die Ergebnisdateien sind XML-Dateien, die alle Informationen enthalten, um das Projekt bewerten zu können. Über den Menüpunkt **Projekt|Doku** wird der aktuelle Projektstand dokumentiert. Das Ergebnis wird im HTML-Format im Projektfenster unter dem Reiter Doku dargestellt.

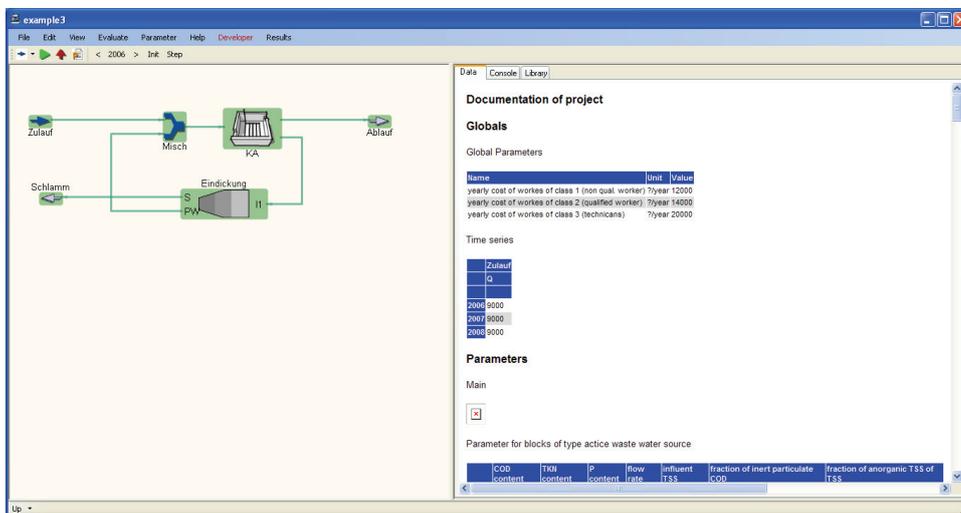


Bild 31: Projektdokumentation

Diese Dokumentation wird gleichzeitig als HTML-Datei mit dem Projektnamen und dem Anhang „_docu.htm“ und als Excel-Datei mit dem Projektnamen und dem Anhängsel „_docu.xls“ gespeichert. In dieser Datei werden unter

- Globals: die Globalen Einstellungen (Parameter und Zeitreihen) dokumentiert,
- Parameters: die Parameter Block-Typ-weise sortiert dargestellt,
- Results for all Blocks: alle Einzelergebnisse dokumentiert,
- Flows: Alle Konzentrationen in allen Strömen für jeden Zeitschritt und
- Aggregates: alle Ergebnisse zusammengefasst.

	2006	2007	2008	total
Operational costs (Cat1)				
energy (1)	314028,062	314028,062	314028,062	942084,186
chemicals (2)	0	0	0	0
equipment (3)	0	0	0	0
non qualified worker (4)	0	0	0	0
qualified worker (5)	1000	1000	1000	3000
engineer (6)	0	0	0	0
miscellaneous (7)	240000	240000	240000	720000
staff (8)	241000	241000	241000	723000
maintenance (9)	547,945205	547,945205	547,945205	1643,83562
total	555576,007	555576,007	555576,007	1666728,02
Operational costs (Cat2)				
Not used. (1)	547,945205	547,945205	547,945205	1643,83562
total	555576,007	555576,007	555576,007	1666728,02
Operational resources (Cat1)				
Energy [kW]	41,8666667	41,8666667	41,8666667	125
Spatial Dem	0	0	0	0
Precipitants	0	0	0	0
Carbon sour	0	0	0	0
CO2 equival	0	0	0	0
Operational resources (Cat2)				
Not used. (1)	0	0	0	0
Capital costs (Cat1)				
Construction	12025000			
M and E equ	3600000			
Planning (3)	0			

Bild 32: Dokumentation in Excel

Neben der tabellarischen Zusammenfassung der Ergebnisse können viele Ergebnisse direkt im Fließbild dargestellt werden. Aus den Konzentrationen der berechneten Einzelstoffe können frei definierbar aggregierte Stoffgrößen berechnet werden. Zur Zeit sind dies der Gesamt-CSB, Gesamt-N, Gesamt-P, der Trockensubstanzgehalt und der Volumenstrom von Wasser.

Die resultierenden Frachten werden im Fließbild als sogenanntes Shankey-Diagramm visualisiert. In diesem Diagramm werden die Größen der Frachten über die Strichstärke dargestellt. Zusätzlich werden die Zahlenwerte animiert.

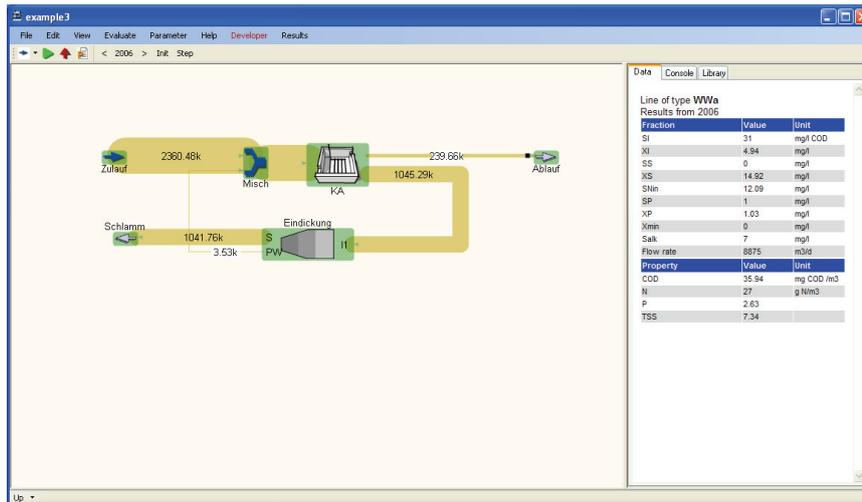


Bild 33: Shankey-Diagramm für Gesamt-N

Über den Menüpunkt **File|Save Layout as EMF..** kann diese Ergebnisgrafik als EMF-Datei abgelegt werden.

5.8.4 Projektvergleich

Im Menüpunkt **Ergebnisse|Vergleich** wird ein Fenster geöffnet, das die Auswahl von zu vergleichenden Ergebnissen ermöglicht.

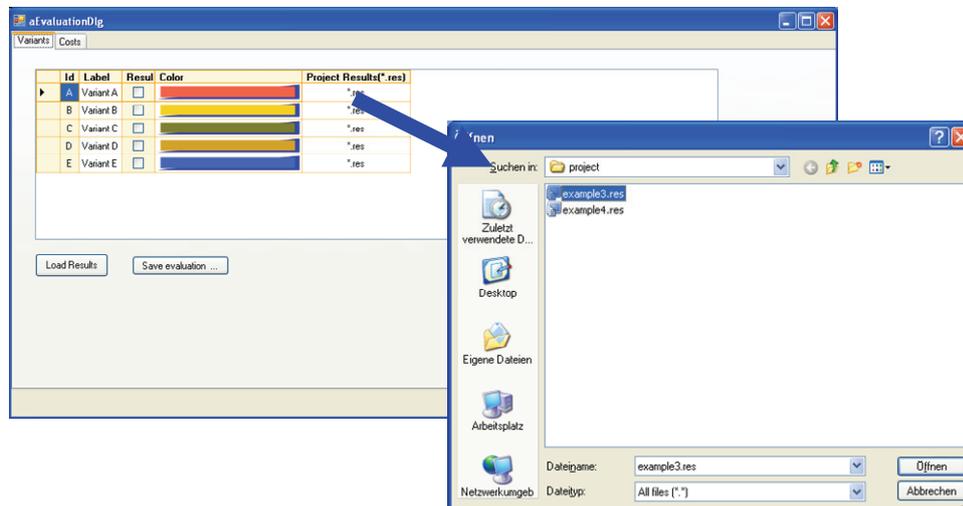


Bild 34: Auswahl zu vergleichender Ergebnisse

Es können bis zu 5 Varianten jeweils verglichen werden. Mit **Load Results** werden die Ergebnisse geladen. Unter dem Reiter **Costs** werden die Ergebnisse dann tabellarisch zusammengefasst.

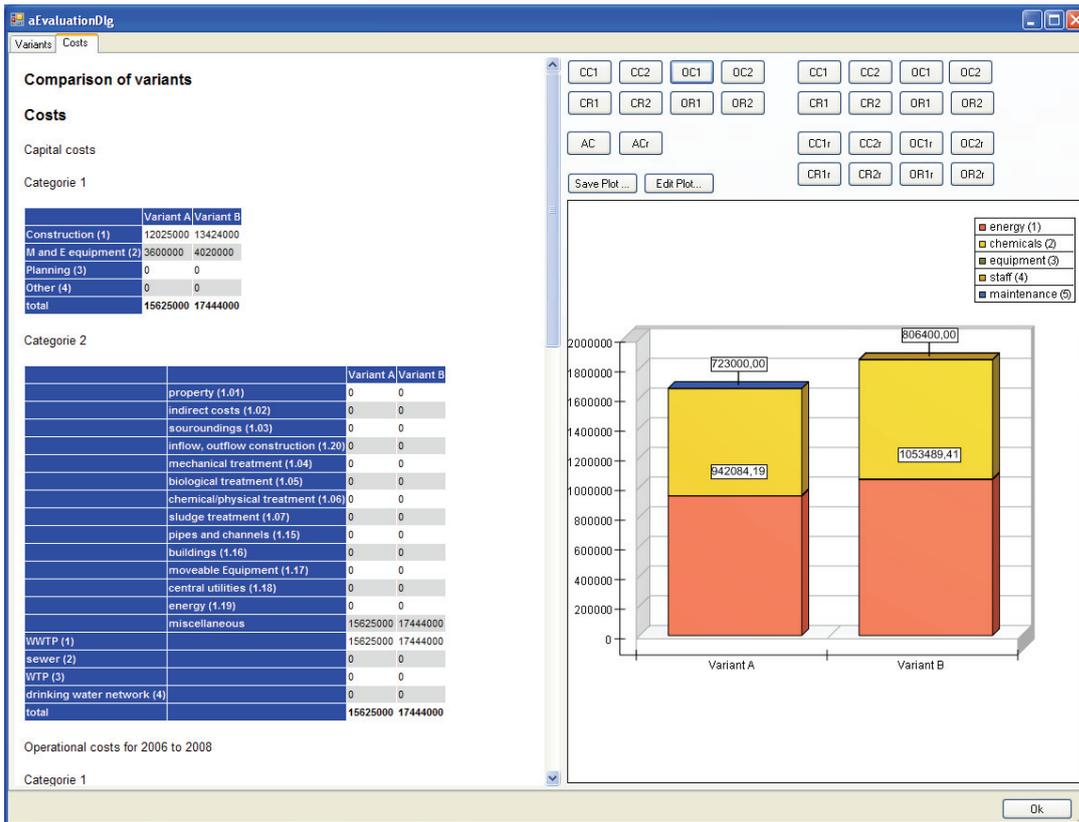
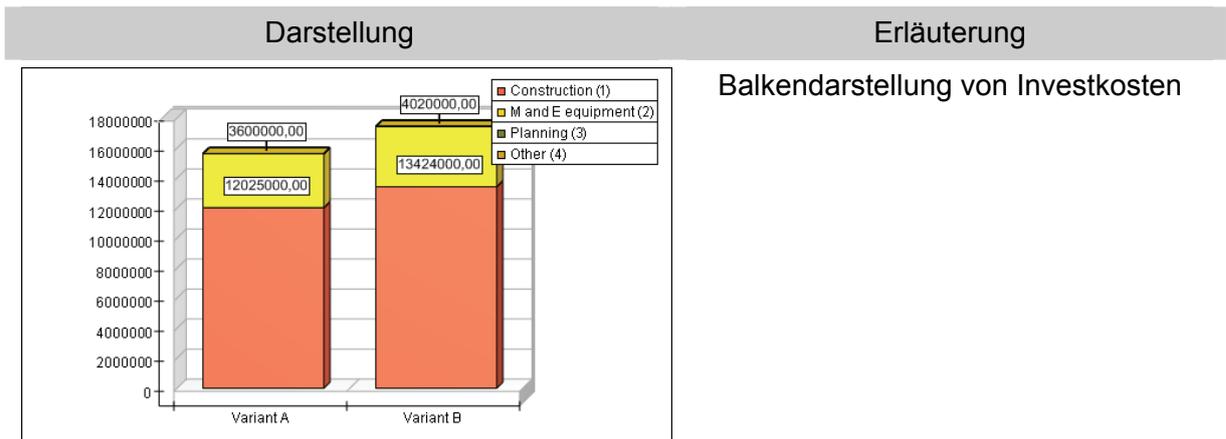
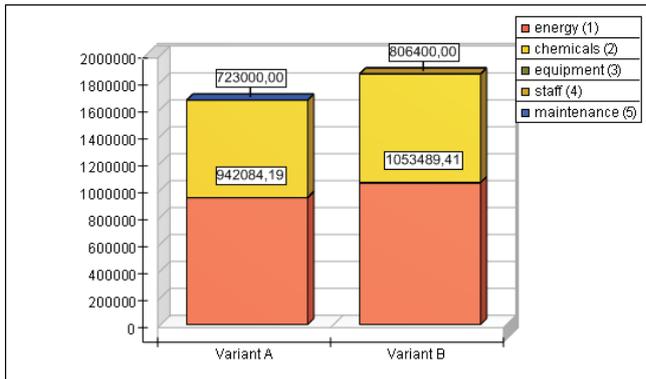


Bild 35: Ergebnisvergleich

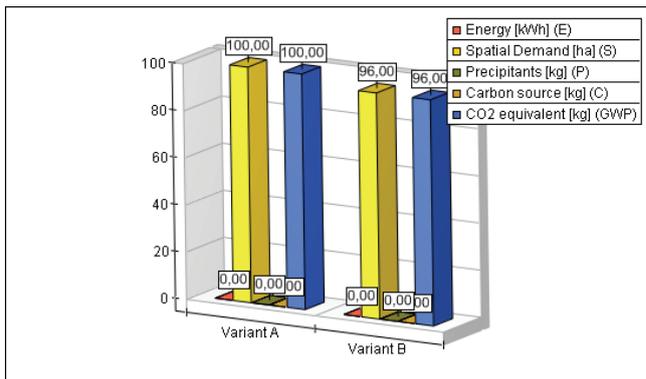
Über ein Knopf-Feld können dann grafische Ergebnisdarstellungen erzeugt werden.

Tabelle 9: Darstellungsarten von Vergleichsdaten

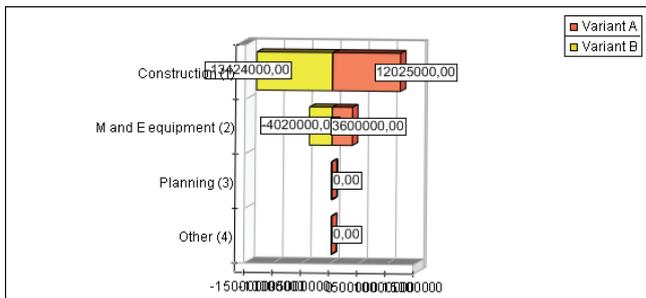




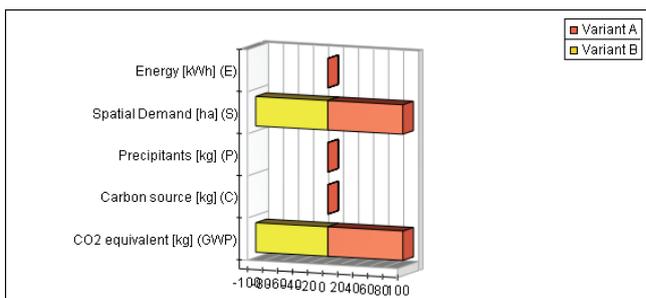
Balkendarstellung von Betriebskosten



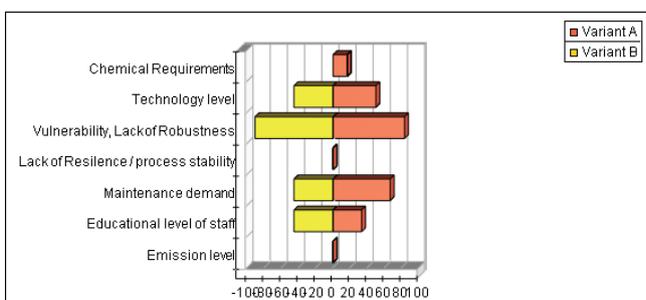
Balkendarstellung von Bau-Ressourcen und Betriebsressourcen



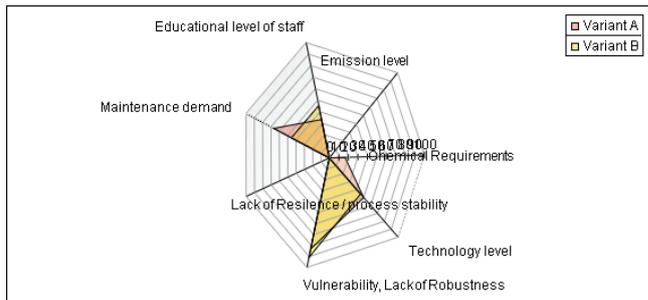
Tannenbaumdarstellung von Invest und Betriebskosten



Tannenbaumdarstellung von Ressourcen



Tannenbaumdarstellungen von Qualitativen Kriterien



Spinnennetzdiagramme von Kosten, Ressourcen und qualitativen Kriterien

5.8.5 Ablageoptionen

Jedes definierte Modul kann mit verschiedenen Optionen abgelegt werden. Im Standardfall werden die Modul-Definitionen unverschlüsselt und unsigniert als XML-Datei abgelegt. Als Extension wird *.MDF verwendet.

Um das Know-how von Anwendern des Toolkits schützen zu können, gibt es die Option, das Modul verschlüsselt abzulegen. Als Verschlüsselungsmethode wird der DES (Data Encryption Standard)-Algorithmus verwendet. Dieser Algorithmus arbeitet mit einem symmetrischen Schlüssel. Dieser Schutz muss als relativ schwach eingeschätzt werden, da der Schlüssel in der Software abgelegt werden muss. Vom Schutz-Niveau entspricht dieses Vorgehen in etwa der Ablage des Know-hows als kompilierter Code. Für den Zugang zu den Modul-Gleichungen ist vom Ersteller ein Passwort vorzugeben. In diesem Fall haben die Modul-Dateien die Extension *.MDX.

Um die Integrität von erstellten Modulen sicherzustellen, wird als zweiter Mechanismus eine digitale Unterschrift vorgesehen. Auf Wunsch wird das Modul signiert abgelegt. Über den Code des Moduls wird ein SHA1-Hash (160 Bits) gebildet, der dann mit dem privaten Schlüssel eines asymmetrischen Schlüsselpaares verschlüsselt wird. Der öffentliche Schlüssel und die Signatur (verschlüsselter Hash) werden an das Modul angehängt. Als asymmetrischer Verschlüsselungsalgorithmus kommt der RSA-Algorithmus (2048 Bits) zum Einsatz. Die Anwendung dieser Methode erlaubt sowohl die Prüfung der Integrität einer Modulbeschreibung als auch die Authentifizierung des Modul-Erstellers. Modul-Ersteller müssen jedoch die von Ihnen verwendeten Schlüssel über unabhängige Wege publizieren (den öffentlichen Schlüssel).

Beim Abspeichern eines Moduls stehen damit die vier folgenden Optionen zu Verfügung:

- unverschlüsselt und unsigniert als *.MDF,

- verschlüsselt und unsigniert als *.MDX,
- verschlüsselt und signiert als *.MDX,
- unverschlüsselt und signiert als *MDF.

5.9 Usability, Migrationskonzepte, Dokumentation

Die Benutzbarkeit des entwickelten Werkzeugs wird zusammen mit den Projektpartnern an Hand realistischer Beispielszenarien analysiert. Verschiedene Rollen (Planer, Betreiber, Management) werden bei diesem Test gespielt und Anpassungswünsche an das Werkzeug zusammengetragen. Weiterhin werden in diesem Arbeitsschritt Konzepte definiert, die eine Weiterentwicklung des Werkzeugs und den Übergang auf andere Softwareplattformen ermöglichen. Eine technische Dokumentation des Systems wird vervollständigt.

6 Geplante Nutzung der Ergebnisse

6.1 Wirtschaftliche und wissenschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende

Neben den im Antrag dargestellten wirtschaftlichen Perspektiven der im Projekt durchgeführten Entwicklungen zeichnet sich ab, dass auch einzelne Komponenten der im Projekt notwendigen Entwicklungen für den Antragsteller eine Bereicherung des Portfolios verfügbarer Software-Komponenten darstellen. Die grafischen Bedienoberflächen, Visualisierung von Stoffströmen (Sankey) usw. werden sich auch unabhängig in Produkten und Projekten sinnvoll nutzen lassen.

Auch das geplante Softwaresystem (Toolkit) hat einen prototypischen Entwicklungsstand, der über den geplanten Stand hinausgeht und bereits Interesse bei Projektpartnern und Dritten findet. Zur Zeit werden folgende Anwendungen ange-dacht:

- Werkzeug für Grobplanungen mit multikriterieller Bewertung,
- Akquisesystem für Anlagenbauer und Projektentwickler,
- Werkzeug zur Bestandsaufnahme und Bestandsdokumentation.

Neu gegenüber dem letzten Bericht mit Fortschreibung des Verwertungsplans ist die folgende Option. Unabhängig von den oben skizzierten Anwendungen deutet sich eine Quernutzung auch für eine Produktentwicklung eines dynamischen Simulationssystems für die vereinfachte Anwendung durch Planer an. Mit dieser

Entwicklung könnte die Produktfamilie SIMBA des ifak um ein interessantes Produkt erweitert werden.

6.2 Wissenschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende

Wie im Antrag geplant, ist abzusehen, dass innerhalb des Toolkit-Projektes detaillierte Erkenntnisse zur Bemessung und Betriebsoptimierung verschiedener Verfahrensweisen in eine Software integriert werden. Darüber hinaus werden eine Kostenrechnung für Abwasserreinigungsanlagen und der Kriterienkatalog entwickelt und implementiert. Die Auswertung der Untersuchungen zu verschiedenen Abwasserreinigungssystemen im Ausland kann direkt im Toolkit erfolgen und anhand von Grafiken visualisiert werden. Eine medientaugliche Darstellung der gängigen Berechnungsverfahren erlaubt zudem, eine wirksame dreidimensionale Präsentation bei Verhandlungen vor Ort zu erstellen.

Von wissenschaftlich nachhaltigem Interesse werden die Lösungen zur verallgemeinerten Darstellung von Funktionsbeschreibung und Bemessungsalgorithmen von Abwasserreinigungskomponenten sein. Auch die Ansätze zur multikriteriellen Bewertung von Szenarien und der integrierte Ansatz zur funktionellen, ökologischen und ökonomischen Bewertung von Varianten werden wertvolle Ergebnisse darstellen.

6.3 Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit

Wie bei Projektbeantragung erhofft, gestaltet sich die Entwicklung des Systems in eine Richtung, die eine Überführung in vermarktungsfähige Softwarelösungen nahe legt. Es wird über unterschiedliche Ausprägungen des Systems für die unmittelbaren Projektpartner und eine Verkaufsversion nachgedacht.

Wichtiges Argument für eine gute Erfolgsaussicht sind innovative funktionelle Inhalte in dem entwickelten System.

Weitere Nutzungen sind im Erfolgskontrollbericht dargestellt.

7 Literatur

- [Alex et al. 2007] Alex, J.; Wichern, M.; Spring, V.; Halft, n.; Ahnert, M.; Frehmann, T.; Hobus, I.; Langergraber, G.; Plattes, M.; Winkler, S.; Woerner, D.: *A method to use dynamic simulation in compliance to stationary design rules to refine WWTP planning*. 10th IWA Conference LWWTP, Poster Proceedings 125-128 (2007).
- [Alex 2007] Alex, J.: *Simulation – gereift für die praktische Anwendung*. Mess- und Regelungstechnik in abwassertechnischen Anlagen, 20.11.2007, Wuppertal (2007).
- [ATV A131] ATV-DVWK-Arbeitsblatt A 131: *Bemessung von einstufigen Belebungsanlagen*. Abwassertechnische Vereinigung, Hennef (2000).
- [Batstone et al. 2002] Batstone, D.J.; Keler, J.; Angelidaki, I.; Kalyuzhnyi, S.V.; Pavlovstathis, S.G.; Rozzi, A.; Sanders, W.T.M.; Siegrist, H.; Vavilin, V.A.: *Anarobic Digestion Model No. 1*. IWA Task Group on Mathematical Modelling of Anaerobic Digestion Processes, IWA Scientific and Technical Report No. 13, 2002.
- [Bornemann et al. 1998] Bornemann, C.; Londong, J.; Freund, M.; Nowak, O.; Otterpohl, R.; Rolfs, T.: *Hinweise zur dynamischen Simulation von Belebungsanlagen mit dem Belebtschlammmodell Nr. 1 der IAWQ*. KA 45(3), 455-462.
- [Copp et al. 2003] Copp, J.B.; Jeppsson, U.; Rosen, C.: *Towards an ASM1 – ADM1 state variable interface for plant-wide wastewater treatment modeling*. Proc. WEFTEC 2003, Los Angeles, California, USA, Oct. 11-15, 2003.
- [dotMath] dotMath Equation Compiler by Steve Hebert and Hebert Software Services, LL, Copyright 2001-2004.
- [Engelen-Müllges und Reuter] Engelen-Müllges, G.; Reuter, F.: *Formelsammlung zur numerischen Mathematik mit Standard FORTRAN77 Programmen*. 123-125.
- [HSG 1989] Böhnke, B.: *Bemessung der Stickstoffelimination in der Abwasserreinigung*. Korrespondenz Abwasser KA, 9/89, 1046-1061.
- [Henze et al. 2000] Henze, M.; Gujer, W.; Mino, T.; van Loosdrecht, M.: *Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2D and ASM3*. IWA Scientific and Technical Report No.9. IWA Publishing, London, UK, 2000.
- [Koch et al. 2000] Koch, G.; Kühni, M.; Gujer, W.; Siegrist, H.: *Calibration and Validation of Activated Sludge Model 1046-no. 3 for Swiss Municipal Wastewater*. Wat. Res. Vol. 34, No. 14, pp. 3580-3590, 2000.
- [Mapack] Lutz Roeder's Mapack for .NET, September 2000. Adapted from Mapack for COM and Jama routines. <http://www.aisto.com/roeder/dotnet>.
- [Metcalf und Eddy 1991] METCALF & EDDY (1991) *Wastewater Engineering – Treatment, Disposal, Reuse*, Mc Graw-Hill International Editions.

- [Rieger et al. 2001] Rieger, L.; Koch, G.; Kühni, M.; Gujer, W.; Siegrist, H. (2001): *The EAWAG Bio-P module for Activated Sludge Model No. 3*. Water Res. 35(16), 3887-3903.
- [SIMBA 2006] *SIMBA 5.2. Handbuch*. Institut für Automation und Kommunikation ifak Magdeburg e. V., Barleben (2006).
- [Takacs et al. 1991] Takács, I.; Patry, G.G.; Nolasco, D. (1991): *A dynamic model of the thickening/clarification process*. Water Res. 25(10), 1263-1271.
- [Volcke et al. 2006] Volcke, E.I.P.; van Loosdrecht, M.C.M.; van Vanrolleghem P.A. (2006). *Continuity-based model interfacing for plant-wide simulation: a general approach*. Wat. Res..

8 Anhang

8.1 Kommandos Bedienung Systemeditor

Tabelle 10: Maus-Kommandos

Kommando	Beschreibung
<u>Links-Klick</u> auf den Namen einer Komponente	Öffnet einen Dialog zum Editieren des Komponentennamens. Namen müssen innerhalb einer Ebene des Diagramms eindeutig sein. Wird ein bereits vorhandener Name eingegeben, wird automatisch ein geeigneter eindeutiger Name erzeugt.
<u>Links-Klick</u> auf eine Linie	Markieren der Linie (der zwei Nachbarknoten oder des einen gewählten Knotens), Entmarkieren aller zuvor markierten Elemente
<u>Links-Klick</u> in Zeichenfläche	Entmarkieren aller markierten Elemente
<u>Shift+Links-Klick</u> auf eine Komponente	Markieren der angewählten Komponente, zuvor markierte Elemente bleiben markiert
<u>Links-Klick & Drag</u> auf eine Komponente	Markieren der angewählten Komponente, Entmarkieren aller zuvor markierten Elemente, Verschieben der Komponente
<u>Links-Klick & Drag</u> auf das Markierungskästchen einer Komponente	Verändern der Größe der betreffenden Komponente
<u>Links-Klick & Drag</u> in Zeichenfläche	Erzeugt ein Auswahlrechteck und markiert alle darin befindlichen Elemente
<u>Rechts-Klick</u> auf eine Komponente	Öffnet einen optionalen Konfigurationsdialog der Komponente (nur im Editier-Modus)
<u>Rechts-Klick</u> und ziehen im Zeichenfeld	Verschiebt das Modell im Fenster (Pan-Modus)
<u>Doppel Klick</u> auf eine Komponente	Öffnet den Parameter-Dialog der Komponente
<u>Doppel Klick</u> auf ein Teilmodell (Macro)	Öffnet das Teilmodell

Tabelle 11: Tastatur-Kommandos

Kommando	Beschreibung
Ctrl+R Edit Rotate	Dreht markierte Komponenten um 90°
Ctrl+X Edit Cut	Fügt die markierten Element in die interne Zwischenablage ein und entfernt sie aus dem aktuellen Diagramm
Ctrl+C Edit Copy	Fügt eine Kopie der markierten Element in die interne Zwischenablage ein
Ctrl+V Edit Paste	Kopiert die in der internen Zwischenablage enthaltenen Elemente in das Diagramm
Del Edit Clear	Löscht die markierten Elemente
Ctrl+A Edit Select All	Markiert alle Elemente des Diagramms
Ctrl+D Edit Create Macro	Erzeugt aus den markierten Elementen einen neuen Macro-Block

8.2 Dateiformate

Für die Projekte werden folgende Dateiformate verwendet:

Extension	Beschreibung
SDF	Projektdatei Scenario Definition File Format zur Beschreibung eines Szenarios (Fließbild)
GDF	Globale Einstellungen Global Definition File Format zur Definition von globalen Einstellungen (Szenarioübergreifend), Definition der Modulbibliothek, steht im models Unterverzeichnis
MDF	Modul Definition Module Definition File Beschreibung eines Moduls, steht im models Unterverzeichnis
MDX	Modul Definition verschlüsselt Module Definition File im verschlüsselten Format Beschreibung eines Moduls, steht im models Unterverzeichnis
LDF	Language Definition File Ressourcendatei mit den Sprachdaten
RES	Ergebnisdateien

