

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΠΛΑΙΣΙΟ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΜΕΙΩΜΕΝΗΣ ΤΑΞΗΣ**ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΧΗΜΙΚΗΣ ΑΠΟΘΕΣΗΣ ΑΠΟ ΑΤΜΟ****Π. Α. Γκίνης*, Ε. Δ. Κορωνάκη, Α. Γ. Μπουντουβής**

Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα

(*pgkinis@chemeng.ntua.gr)**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Παρουσιάζεται μια υπολογιστική μεθοδολογία ανάπτυξης μοντέλων μειωμένης τάξης (Reduced Order Model: ROM) με εφαρμογή στη διεργασία Χημικής Απόθεσης από Ατμό (Chemical Vapor Deposition: CVD)^[1]. Η διεργασία CVD παράγει εξειδικευμένα υμένια (λεπτές επιστρώσεις) που χρησιμοποιούνται σε ένα ευρύ φάσμα προϊόντων και άλλες διεργασίες. Τα λεπτά αυτά υμένια παράγονται από αέριες πρόδρομες ενώσεις που εισέρχονται σε ειδικά σχεδιασμένους αντιδραστήρες μαζί με τα φέροντα αέρια και συμμετέχουν σε ένα δίκτυο ομογενών και ετερογενών χημικών αντιδράσεων. Η περιγραφή και πρόβλεψη της συμπεριφοράς του αντιδραστήρα απαιτεί σύνθετα μοντέλα υπολογιστικής ρευστομηχανικής (Computational Fluid Dynamics: CFD) που περιλαμβάνουν τις μη γραμμικές εξισώσεις μεταφοράς ορμής, ενέργειας, μάζας και χημικών συστατικών σε τρεις διαστάσεις του χώρου μαζί με το δίκτυο χημικών αντιδράσεων για την απόθεση του λεπτού υμενίου στο θερμαινόμενο υπόστρωμα του αντιδραστήρα. Η επίλυση τέτοιων συστημάτων εκατομμυρίων αγνώστων απαιτεί σημαντικούς υπολογιστικούς πόρους και χρόνο και καθιστά επιτακτική την ανάγκη ανάπτυξης μοντέλων μειωμένης τάξης.

Η μείωση της διάστασης (τάξης) του προβλήματος, βασίζεται στο συνδυασμό της Μεθόδου των Στιγμιότυπων (Method of Snapshots) που αποτελεί μία παραλλαγή της Ανάλυσης Κυρίων Συνιστωσών (Proper Orthogonal Decomposition: POD) και κατάλληλα εκπαιδευμένων τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Στιγμιότυπα καλούνται οι διαδοχικές καταστάσεις όπως υπολογίζονται από το μοντέλο CFD, καθώς το σύστημα μεταβαίνει από μια μόνιμη κατάσταση σε μια άλλη. Στη συγκεκριμένη εφαρμογή, τα στιγμιότυπα παράγονται από ένα CFD μοντέλο χωρίς αντιδράσεις, που εφαρμόζει ένα αραιότερο του δέοντος πλέγματος διακριτοποίησης. Στόχος είναι η ανάπτυξη ενός μοντέλου μειωμένης τάξης, ικανοποιητικής ακρίβειας, που βασίζεται σε χαμηλής ευκρίνειας δεδομένα που λαμβάνονται με χαμηλό υπολογιστικό κόστος.

Τα στιγμιότυπα χρησιμοποιούνται για να υπολογιστεί μια βάση (συνήθως χαμηλής διάστασης) του χώρου που τα περιέχει, καθώς και για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων για την γρήγορη πρόβλεψη των χρονικά εξαρτώμενων συντελεστών του μοντέλου μειωμένης τάξης. Η πρόβλεψη του μοντέλου οπωσδήποτε δεν είναι ικανοποιητική λόγω της χαμηλής ευκρίνειας δεδομένων από τα οποία κατασκευάστηκε, όμως επαρκής ώστε όταν τροφοδοτείται σε ένα πλήρες, μεγάλης κλίμακας μοντέλο της διεργασίας, αυτό να συγκλίνει σε σημαντικά μικρότερο χρόνο. Το γεγονός αυτό οδηγεί σε αξιοσημείωτη επιτάχυνση υπολογισμών για την παραμετρική ανάλυση της διεργασίας και την εμβάθυνση στα φυσικά φαινόμενα και τις χημικές αντιδράσεις που επικρατούν^[2,3].

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Schilders, W. H., Van der Vorst, H. A., Rommes, J. (2008), "Model order reduction: theory, research aspects and applications." Vol. 13 Springer, Berlin.
- [2] Gkinis, P. A., Koronaki, E. D., Skouteris, A., Aviziotis, I. G., Boudouvis, A. G. (2019), "Building a data-driven Reduced Order Model of a Chemical Vapor Deposition process from low-fidelity CFD simulations." Chemical Engineering Science, in press.
- [3] Koronaki, E. D., Gkinis, P.A., Beex, L., Bordas, S.P.A., Theodoropoulos, C., Boudouvis, A. G. (2019), "Classification of states and model order reduction of large scale Chemical Vapor Deposition processes with solution multiplicity." Computers & Chemical Engineering, Vol 121, pp. 148-157.