

Data Preparation Package

Das DECHEMA Data Preparation Package (DPP) ist ein Programmpaket zur Anpassung und Regression von thermodynamischen Modellen. Über ein Plugin-Interface können beliebige Modelle zur Berechnung thermodynamischer Stoffgrößen genutzt werden.

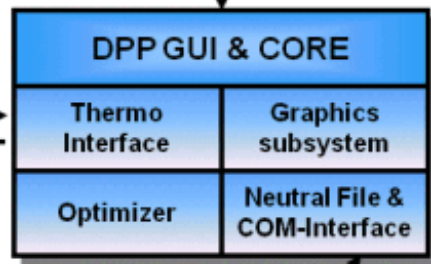
DPP: The Architecture

Thermodynamic Modules

- IK-CAPE
- Aspen Properties
- Simulis
- Multiflash
- Custom



Calc.



End User

Simulators

- Aspen
- ProSim
- Multiflash



Model Parameters

Raw Data

Databases

- DETHERM
- DIPPR
- NIST
- ...



DPP Overview

Das DECHEMA Data Preparation Package DPP ist Teil der [DETHERM-Software-Suite](#) und schließt die Lücke zwischen den in DETHERM enthaltenen Rohdaten und modellbasiert arbeitenden Prozeßsimulatoren. Es erlaubt

- die grafische Darstellung und Bewertung von Datensätzen
- Regression von Modellparametern
- Vergleich von Modellen miteinander

Architektur

Die DPP-Hauptbestandteile haben die folgende Funktion:

- **GUI & CORE:** Das GUI (Graphical User Interface) als Schnittstelle zwischen Endanwender und dem darunterliegenden Programm ist für die Darstellung von Modellen und damit verbundenen (Roh)daten optimiert. Der DPP CORE indessen ist im wesentlichen für den Informationsaustausch und die Konfiguration der im folgenden beschriebenen Hauptmodule zuständig.
- **Graphics Subsystem:** Das grafische Subsystem erlaubt die Darstellung von gemessenen (Roh)daten, mittels Modellen berechneter Daten, wie auch davon abgeleiteter Daten in einer Vielzahl unterschiedlicher grafischer Darstellungen.
- **Neutral File Interface:** erlaubt das Lesen und Schreiben von thermophysikalischen (Roh)daten wie auch Modellparametern im neutralen IK-CAPE PPDx Format. Daten von einer Vielzahl von Datenbanken bzw. Quellen können auf diese Weise eingelesen werden. Die regressierten Modellparameter können auf dieselbe Weise von einer Vielzahl von Prozesssimulatoren genutzt werden.
- **THERMO Interface:** Das DPP System selbst enthält kein internes Thermodynamik-Modul. Anstelle dessen kann eine beliebiges Thermodynamik-Paket mit offener Schnittstelle im Verbund mit DPP genutzt werden. Derzeit sind Schnittstellen zu folgenden Prozeßsimulatoren enthalten:
 - [Aspen Properties](#)
 - [AVEVA Process Simulation](#)
 - [IK-CAPE](#) Thermodynamik

- [Multiflash](#) (KBC)
- [Simulis](#)
- **Optimizer:** Der Optimierer ist das Kernelement des DPP Programms.

Der Optimierer

Der Optimierer ist allerdings in der Lage für n Datensätze in m Gruppen einen gemeinsamen Zielfunktionswert zu berechnen. Für jeden der m Blöcke kann dabei eine separate Ziel- wie auch Fehlerfunktion verwendet werden. Um den Zielfunktionswert zu minimieren, werden die jeweiligigen Modellparameter variiert. Aufgrund dieses Ansatzes können mittels DPP **verschiedenartige Datensätze gleichzeitig und simultan mit jeweils eigenen Fehlerfunktionen korreliert** werden (z.B. gleichzeitige Anpassung von VLE-, LLE-, HE-, Gamma unendlich und azeotropen Daten). Dabei kann in jedem Einzelfall die Vorgehensweise mit einem Maximum-Likelihood Algorithmus für die Berechnung der "wahren" Meßwerte kombiniert werden.

Enthaltene Algorithmen

- Simplex-Nelder-Mead
- Powell
- Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
- modifizierter Gauß-Newton
- Levenberg-Marquardt

Enthaltene Fehlerfunktionen

- Least-Squares
- Chi-Square
- Absolut
- Robust (auf Basis einer *Cauchy*- oder *Lorentz*-Verteilung)

Weitere Informationen

Wenn Sie an weiteren Information über das Data Preparation Package DPP wie auch an Preisen interessiert sind, senden Sie uns bitte eine [kurze Nachricht](#).

DECHEMA
 Informationssysteme &
 Datenbanken
 - Dr.-Ing. U. Westhaus -
 Telefon: ++49 69 / 75 64-229
 Telefax: ++49 69 / 75 64-418
 Kontakt per [E-Mail](#)
