

INTEROPÉRABILITÉ DE COMPOSANTS DE MODÉLISATION OPPORTUNITÉS ET PERSPECTIVES

B. BRAUNSCHWEIG¹, P. ROUX²

Institut Français du Pétrole

Division Informatique Scientifique Mathématiques Appliquées

¹ & 4 avenue de Bois Préau

92852 Reuil Malmaison Cédex, France

Mél : Bertrand.Braunschweig@ifp.fr

² Centre d'Etudes et de Développements Industriels

69390 Vernaison Cédex, France

Mél : Pascal.Roux@ifp.fr

Résumé. Nous présentons quelques exemples des possibilités offertes par le standard CAPE-OPEN pour l'interopérabilité de composants de modélisation de procédés. Cette présentation apporte un complément à la description technique du standard faite par Jean-Pierre Belaud et coll. dans cette même conférence. Nous développons également le futur que l'on peut entrevoir pour les logiciels de modélisation, à la fois en s'appuyant sur les outils de l'internet (XML, web services, ontologies et web sémantique etc.) et sur les techniques d'apprentissage et d'adaptation qui donnent aux composants des capacités d'autonomie telles que décrites par IBM dans son manifeste 'autonomic computing' et dans les programmes de recherche mondiaux.

Abstract. We show through illustrative examples the power of the CAPE-OPEN interface standards for computer-aided process engineering; this complements the paper by Belaud et al. in this conference, which presents the technical elements of the standard. Then we look at perspectives offered by further developing the standards, taking advantage of internet technologies such as web services, XML, ontologies web languages for the semantic web, and adaptative technologies i.e. machine learning, autonomic computing and multi-agent systems.

Mots Clés. CAPE-OPEN, TRIZ, COGents, Web Services, Evolution des logiciels de modélisation, simulation multi-agents

INTRODUCTION: INTEROPERABILITE DE COMPOSANTS DE MODELISATION DE PROCEDES

La définition de standards ouverts pour l'interopérabilité de composants de modélisation de procédés a été l'objectif des projets CAPE-OPEN et Global CAPE-OPEN, coopération majeure entre les acteurs principaux du domaine sur plus de cinq ans. Les projets, aujourd'hui terminés, ont produit des standards d'interfaces appelés "standard CAPE-OPEN". Ces projets se sont terminés en mars 2002 avec, en plus de la publication de la version 1.0 du standard, l'existence d'une offre commerciale de logiciels compatibles notamment chez les fournisseurs AspenTech, Hyprotech, PSE, Prosim, Belsim, Infochem et avec la création de l'organisme « CO-LaN » de maintien et développement du standard.

Les composants de modélisation de procédés (CMP) développés pourront présenter ces interfaces ; les Environnements de Modélisation de Procédés (EMP) pourront être adaptés de manière à accueillir des CMPs conformes aux standards. Grâce à ces développements, les ingénieurs de procédés pourront faire cohabiter des logiciels de sources hétérogènes au sein de leurs applications, répondant ainsi aux exigences de modélisation actuelles. Que de chemin a été effectué depuis la déclaration d'intention, présentée à la conférence SIMO96 par l'un d'entre nous [Braunschweig 1996]!

Le standard CAPE-OPEN 1.0 est présenté dans [Belaud 2002a] [Belaud 2002b], [Braunschweig 2002]. Notre but n'est pas de donner une n-ième présentation du standard, le fait qu'il existe et soit opérationnel suffit pour la suite. La présentation de Belaud et coll., dans cette même conférence, donne suffisamment d'informations sur CAPE-OPEN 1.0. pour la compréhension de la suite de cet article.

CE QUI EST REALISABLE AVEC CAPE-OPEN AUJOURD'HUI

Depuis la conclusion des projets CAPE-OPEN et Global CAPE-OPEN, l'interopérabilité entre composants de modélisation de procédés est démontrée et appliquée dans les principaux environnements commerciaux. Elle offre des opportunités de développement de solutions à haute valeur ajoutée, permettant aux industriels de mieux concevoir, opérer, optimiser et superviser leurs procédés.

Les partenaires du projet Global CAPE-OPEN ont pu constater les possibilités offertes par le standard. En voici quelques illustrations. Dans cette section, des noms de produits sont donnés, qui sont bien entendu propriétés de leurs auteurs respectifs. De plus, Aspen+ et Hysys sont considérés comme des logiciels différents, même si l'acquisition attendue de Hyprotech par Aspentech devrait conduire à terme à un rapprochement des deux environnements. Mais cela ne change rien au principe.

- ◆ **Un composant de calcul de propriétés physiques et thermodynamiques** développé par une société, **peut être utilisé de la même manière au sein de divers EMPs**. Par exemple, Multiflash, produit de la PME britannique Infochem, peut être utilisé de manière identique pour des simulations effectuées avec Aspen+, gPROMS ou Hysys. Ainsi, l'utilisateur économise le temps passé à la configuration des calculs de propriétés pour ces trois environnements, et a de plus une garantie d'homogénéité des méthodes et des résultats. Ceci est obtenu par simple encapsulation du serveur thermodynamique au standard CAPE-OPEN.
- ◆ **Un EMP compatible CAPE-OPEN peut faire appel à plusieurs serveurs de calculs de propriétés thermodynamiques** de manière quasi transparente. Par exemple, la version compatible CAPE-OPEN de Hysys peut être configurée pour utiliser soit la thermodynamique propriétaire de Hyprotech (COM Thermo), soit le serveur Properties Plus d'Aspentech, soit Multiflash d'Infochem, soit le serveur "maison" SPIP de l'IFP. Cette configuration peut se faire sur la base du remplacement immédiat du serveur unique pour le procédé concerné, ou même de la combinaison de plusieurs serveurs, chacun traitant un sous-ensemble du schéma (moyennant des précautions sur la base enthalpique, précautions, non inhérentes au standard, à prendre dès que des modèles thermodynamiques différents sont utilisés). Ainsi, le concepteur d'un modèle de procédés peut expérimenter diverses méthodes de calculs de propriétés et choisir la meilleure pour le cas à traiter, sans passer un temps important en interfaçage ou en saisie de données. Le concepteur peut également faire appel au meilleur module thermodynamique pour chaque partie de son procédé, une souplesse apportée naturellement par le portage de l'EMP au standard (c'est-à-dire, par l'introduction de l'API CAPE-OPEN "Thermo" dans l'EMP).
- ◆ **Un modèle d'opération unitaire** comme, par exemple, un réacteur chimique propriétaire, développé par un opérateur ou par un bailleur de procédés, **peut être utilisé de manière transparente par les environnements compatibles CAPE-OPEN**. Ainsi, le modèle générique de réacteur "FIBER" (FIXed BEd Reactor) de l'IFP fonctionne de la même manière dans la plupart des environnements commerciaux de modélisation, sans qu'il soit besoin d'une quelconque intervention de codage ou même de recompilation. Le bailleur peut ainsi servir sans effort divers clients qui chacun imposent l'utilisation d'un logiciel de simulation spécifique dans leur organisation. Ceci provient simplement de la mise en conformité des appels aux principales fonctions du modèle d'opération unitaire : inclusion dans un schéma, connexion des ports d'entrée-sortie, spécification des paramètres du modèle, vérification de la calculabilité du modèle, appel au calcul, et publication des résultats.
- ◆ Réciproquement, et ceci est un des principaux intérêts du standard, un développeur de modèle, utilisant un EMP disposant des interfaces d'opérations unitaires CAPE-OPEN, peut **inclure des opérations unitaires externes de manière extrêmement aisée**, par sélection dans la liste des opérations unitaires compatibles disponibles. Ainsi, lors du choix d'un équipement spécifique (pompe, compresseur, échangeur etc..), le concepteur du modèle peut tester rapidement l'adéquation de l'équipement au besoin du procédé, et ainsi choisir rapidement une solution technique optimale. Aujourd'hui, avec la version actuelle du standard, cette fonction nécessite que

les modèles d'opérations unitaires soient physiquement installés sur la machine du modélisateur. Demain, grâce au développement des services d'identification de composants sur l'internet, il sera possible de balayer un catalogue de modèles disponibles sur le réseau, de télécharger les composants potentiellement intéressants, de les introduire "à chaud" dans la simulation, et donc d'obtenir très rapidement une évaluation. Les équipementiers de l'industrie chimique et de procédés ne sont pas encore suffisamment informés de cette possibilité, qui est réelle, et qui peut apporter des bénéfices extrêmement importants à ceux qui sauront l'utiliser.

- ◆ Grâce au nouveau module commercial GO:CAPE-OPEN, un **modèle d'opération unitaire "orienté équations"** écrit en gPROMS (de Process Systems Enterprise Ltd), quelque complexe qu'il soit, **peut être automatiquement inséré** comme objet "GO:CAPE-OPEN" dans un EMP compatible, sans le moindre effort. Tout développeur de modèles d'opérations unitaires avec gPROMS peut bénéficier de cette fonctionnalité.
- ◆ L'introduction d'une interface CAPE-OPEN autour d'un module de mécanique des fluides (tel que Fluent, par exemple) fonctionnant sur station de travail, permet d'**utiliser le code de CFD à l'intérieur d'une simulation de procédé** fonctionnant sur PC. Des exemples ont été implémentés et présentés aux partenaires de Global CAPE-OPEN. Attention, bien évidemment, dans ce cas, les temps de calcul de chaque section du procédé sont à prendre en considération. Avec les performances actuelles, le lien entre le schéma et le réacteur CFD doit se faire avec une période d'échantillonnage supérieure au pas de résolution de la simulation. Si le module CFD est installé sur un supercalculateur très performant, ou une grappe de PC, cette limitation peut tomber, mais nous n'en n'avons pas encore l'expérience.
- ◆ Les exemples précédents reposent sur les interfaces CAPE-OPEN pour les opérations unitaires et les serveurs de calculs de propriétés physiques et thermodynamiques. En fait, la version 1.0 du standard, publiée en mars 2002 [COLAN 2002], comporte **une dizaine d'autres interfaces** pour plusieurs catégories de composants de modélisation: bases de données de propriétés physiques, schémas cinétiques, pseudo-composants et fractions pétrolières, solveurs numériques, optimisation linéaire et non linéaire, estimation de paramètres et validation de données, disposent également de spécifications. Les exemples illustratifs déclinés ci-dessus peuvent être transposés pour la plupart des composants faisant l'objet de spécifications: utilisation de banques de données de corps purs différentes dans une simulation, ou utilisation de la même banque de données dans plusieurs environnements, réutilisation de schémas cinétiques, choix du meilleur solveur pour une application etc.

Une première liste, non exhaustive, d'EMP et de CMP compatibles CAPE-OPEN a été publiée dans la lettre d'information CAPE-OPEN Update [Braunschweig 2002]. Cette lettre étant disponible au téléchargement sur le site internet www.colan.org, nous ne la reproduisons pas ici. La suite de l'article propose des voies d'évolutions possibles pour les logiciels de modélisation.

PERSPECTIVES LIEES AUX TENDANCES D'EVOLUTION DES LOGICIELS

La notion d'approche modulaire pour les logiciels s'est raffinée progressivement en prenant les formes successives de sous-programmes, de modules, de packages, de types abstraits, d'objets, et aujourd'hui de composants interopérables. Ce raffinement progressif du système technique complexe qu'est un code de modélisation de procédés n'est pas un cas isolé : l'évolution du logiciel vers les composants peut se placer dans le cadre des tendances d'évolution des systèmes techniques, telle qu'analysées par le chercheur russe Genrich Altshuller dans sa théorie TRIZ[Altshuller 2000]. Dans cette théorie, qui s'intéresse aux mécanismes de l'innovation scientifique et technologique, Altshuller a notamment identifié un certain nombre de schémas génériques suivis par les systèmes techniques au cours de leur évolution. Le lecteur intéressé par les multiples aspects de TRIZ (les quarante principes de résolution des problèmes techniques, la matrice de résolution des contradictions, les huit lois d'évolution des

systèmes techniques, la représentation substance-champs, l'algorithme ARIZ) peut se reporter à l'ouvrage d'Altshuller. Nous nous concentrons, pour les besoins de cet article, sur deux tendances d'évolution : **Segmentation** et **Dynamisation**, qui, bien que développés à l'origine pour les systèmes physiques, s'appliquent au moins partiellement aux logiciels en général, et aux logiciels de modélisation de procédés en particulier [Braunschweig & Irons 2002].

La tendance "segmentation" décrit l'évolution des systèmes monolithiques vers des systèmes segmentés, puis en poudre ou liquide, puis gazeux et finalement à base de champs. La figure 1, tirée du logiciel TechOptimizer de Invention Machine, illustre ce schéma.

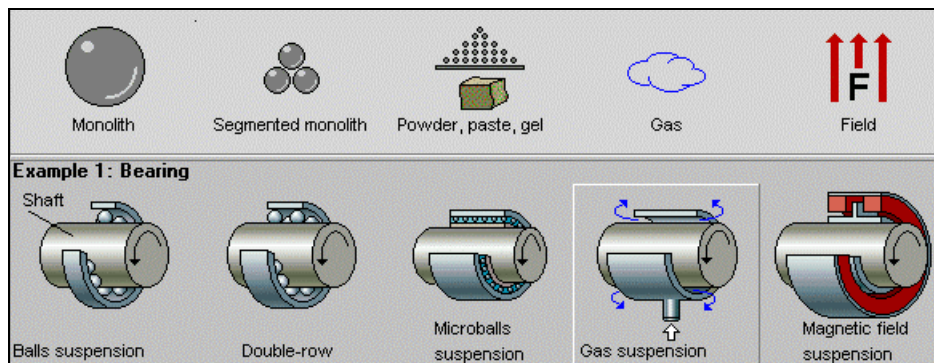


Figure 1 : la tendance «Segmentation»

Appliqué au logiciel, le schéma se traduit immédiatement. La première étape est la réalisation des grands systèmes monolithiques. C'est ce que les informaticiens ont développé pendant des années, aussi bien pour la gestion que pour les codes scientifiques.

La deuxième étape est le découpage de ces codes en petits morceaux que l'on assemble. C'est la situation actuelle, l'industrie du logiciel est en train de vivre cette transition. La modularité, les objets, les composants, relèvent de cette phase.

Cette évolution s'est faite progressivement. On a d'abord séparé les données des traitements grâce aux bases de données dans les années 1970-1980. Les données pouvaient alors évoluer indépendamment des traitements. Puis, on a écrit les interfaces pour les rendre indépendantes des traitements et des données. Cette évolution s'est concrétisée par la multiplication des architectures « n-tier » (au sens anglo-saxon de « tier », « niveau » ou « étage »), dont les plus connues sont les fameuses architectures « 3-tier », données/application/interface.

Les étapes suivantes donnent lieu à des changements de substance. La matière des logiciels évolue jusqu'à les faire disparaître dans un « fluide » ou un « champ logiciel » dont la nature reste encore mystérieuse à nos yeux. A ce niveau, introduisons la Dynamisation :

1. Permettre aux caractéristiques d'un objet, d'un environnement, ou d'un processus, de changer pour s'optimiser ou trouver une condition opératoire optimale
Exemple: des feux de circulation dont la période s'adapte au trafic ou au temps.
2. Diviser un objet en parties en mouvement les unes par rapport aux autres.
Exemple: Saab a conçu un cylindre fait de deux parties en mouvement relatif, permettant de modifier le volume de la chambre de combustion.
3. Si un objet ou un processus est rigide ou inflexible, le rendre souple ou flexible.
Exemple: un 4x4 dont la garde au sol change en fonction de la route

Cette tendance ajoute la notion centrale d'auto-adaptation, que l'on voit effectivement apparaître en ce moment dans les logiciels. Ceci provient notamment des besoins de personnalisation de services sur le web ou sur les systèmes mobiles : téléphones, cartes à puces, organisateurs de poche, par exemple doivent pouvoir reconfigurer leurs logiciels en fonction de leur environnement. Les technologies les

plus récentes (EJB, Web Services) visent à procurer cette flexibilité par l'intégration et la configuration de composants en temps réel sur une application en fonctionnement, de même que l'on peut brancher « à chaud » un périphérique sur un PC ou un Mac.

En complément du support middleware, qui fournit les capacités d'auto-adaptation par les possibilités d'intégration dynamiques de composants respectant les standards ouverts, nous étudions l'intérêt des systèmes multi-agents pour doter les codes de modélisation de comportements dynamiques intelligents.

AGENTS LOGICIELS POUR LA MODELISATION DE PROCÉDES

Aujourd'hui, il est possible à un utilisateur d'assembler une simulation en combinant des CMPs aux interfaces standardisées, au sein d'un EMP compatible. L'architecture CAPE-OPEN donne une place centrale à cet EMP. Nous examinons comment dépasser cette organisation en donnant à chaque CMP un comportement autonome d'agent logiciel, capable de se coordonner avec les autres agents pour résoudre un problème de simulation posé par un utilisateur. Le projet européen IST COGents [Braunschweig & coll. 2002] développe un prototype d'une telle architecture, qui est illustrée par le scénario suivant d'aide à la conception de modèle, un des scénarios mis en œuvre dans le projet:

- ◆ Un utilisateur décrit son problème en utilisant une ontologie du domaine de la modélisation, qui permet de définir l'objet de la simulation et les données connues ;
- ◆ Le problème est transmis à un EMP capable de dialoguer avec un catalogue de composants compatibles, disponibles localement, sur un intranet, ou sur l'internet;
- ◆ L'EMP transmet le problème au catalogue qui entame à son tour un dialogue avec les 'COGents' (composants "agentifiés") susceptibles d'être utilisés dans la solution informatique ;
- ◆ Il se forme ainsi un ou plusieurs réseaux de 'COGents' qui vont tenter de simuler le procédé ;
- ◆ Les simulations sont éventuellement confrontées aux données expérimentales disponibles, et une sélection s'effectue sur la base de la qualité de restitution de ces données ; cette sélection peut elle-même faire intervenir d'autres agents d'observation et d'optimisation ;
- ◆ Le modèle de procédé est le résultat de cette sélection.

Les technologies pour réaliser ce scénario existent et ne demandent qu'à être utilisées:

- ◆ Langages description d'ontologies de domaine pour représenter simplement les concepts manipulés : le langage DAML+OIL, utilisant XML, s'impose actuellement comme standard pour les ontologies dont a besoin le web sémantique;
- ◆ Langages de descriptions de services logiciels : WSDL (Web Services Description Language), WSFL (Web Services Flow Language), eux aussi utilisant XML, sont de bons candidats pour l'échange de fonctionnalités sur le web;
- ◆ Catalogues de services : le système d'enregistrement et de découvertes de services UDDI (Universal Description, Discovery and Integration) permet de réaliser de tels catalogues de services interrogeables par les clients logiciels potentiels;
- ◆ Plates-formes multi-agents : ces plates-formes, et notamment celles qui sont compatibles avec les standards FIPA (Foundation for Intelligent Physical Agents), permettent à des agents logiciels intelligents de communiquer entre eux indépendamment de leur implémentation et de leur localisation, à condition qu'ils partagent la même ontologie de domaine, pour se comprendre;
- ◆ Business rules : les COGents doivent conduire des raisonnements à plusieurs niveaux, sur la constitution du besoin de modélisation, sur l'appariement entre le besoin et les services proposés, comme dans [Sycara 1999], sur la composition dynamique de services. Pour cela, les

environnements à base de règles tels que CLIPS permettent de doter les agents de comportements "raisonnés" - à défaut de pouvoir être réellement qualifiés d'intelligents;

- ◆ Apprentissage : c'est par l'introduction de fonctions adaptatives que le système peut accroître sa capacité de résolution de problèmes: adaptation des composants eux-mêmes par optimisation de leurs paramètres sur un ensemble de problèmes donnés ; adaptation des modèles par optimisation de l'ensemble des composants utilisés pour l'implémentation, par exemple en utilisant des algorithmes d'évolution artificielle sélectionnant et recombinaison des populations de modèles potentiels pour un problème donné.
- ◆ Et enfin, bien entendu, le standard d'interopérabilité sans lequel rien ne serait possible...

CONCLUSION

La modélisation de procédés est une technologie jeune : elle a tout au plus quarante ans. On peut s'attendre à des évolutions majeures dans les quarante prochaines années! D'une part, sur les éléments de modélisation eux-mêmes - meilleure prise en compte des phénomènes, modélisation multi-échelle, meilleure résolution numérique etc. - objets de la majorité des articles publiés dans le domaine, mais qui n'est pas celui de cet article. D'autre part, et c'est notre propos, sur l'implémentation informatique de ces modèles, bénéficiant des progrès des technologies de l'information et de la communication (voir aussi [Braunschweig & Gani 2002]). Nous avons brossé un scénario possible, mais ce n'est pas le seul. Songez qu'actuellement, au Japon, il est possible d'être connecté en permanence à l'internet grâce aux liaisons téléphoniques mobiles à haut débit - 128Kbits/s disponibles en tous lieux : rien n'interdit que le scénario ci-dessus soit déroulé dans un train à grande vitesse fonçant vers la raffinerie à simuler!

REMERCIEMENTS

Le projet COGents : Agent-Based Architecture For Numerical Simulation bénéficie du soutien du programme "Information Society Technologies" du cinquième Programme Cadre de Recherche et Développement de la Commission Européenne, contrat IST-2001-34431.

BIBLIOGRAPHIE

[Altshuller 2000] Altshuller G. (2000) The innovation algorithm : TRIZ, systematic innovation and technical creativity; Technical innovation center, Worcester (Mass.)

[Belaud 2002a] Belaud J.-P., Braunschweig B., Pons M., (2002) Open Software Architecture For Process Simulation : The Current Status of CAPE-OPEN Standard, ESCAPE-12 conference.

[Belaud 2002b] Belaud J.P. et coll., (2002) Standardisation effort in inter-component communication for process industry software SIMO 2002, Toulouse, France, 2002

[Braunschweig 1996] Braunschweig B. (1996) CAPE-OPEN et OS-Cape, Vers un Standard pour la Simulation de Procédés, SIMO 1996, Toulouse, France, Octobre 1996

[Braunschweig, 2002] B. L. Braunschweig, The CAPE-OPEN standard version 1.0, CAPE-OPEN Update Issue 02 <http://www.colan.org/public/cape-open-update.phtml> From the technical room, pp 14-21, 2002

[Braunschweig & coll. 2002] B. Braunschweig, E.S. Fraga, Z. Guessoum, D. Paen, D. Piñol, A. Yang, (2002) Cogents: Cognitive Middleware Agents to Support e-CAPE. e-Work conference, Prague, Octobre 2002

[Braunschweig & Gani 2002] Braunschweig B., Gani R. (editors), (2002) Software Architectures and Tools for Computer Aided Process Engineering, Elsevier (in print).

[Braunschweig & Irons 2002] Braunschweig, B. Irons, K. (2002), TRIZ and the evolution of CAPE tools: From FLOWTRAN® to CAPE-OPEN® and beyond, ESCAPE-12 conference

[COLAN 2002] CO-LaN, CAPE-OPEN Laboratories Network web portal, www.colan.org

[Sycara 1999] Sycara K., Klusch M., Widoff S., Lu J., (1999) Dynamic Service Matchmaking Among Agents in Open Information Environments, SIGMOD Record (ACM Special Interests Group on Management of Data), Vol. 28, No. 1, March, 1999, pp. 47-53.