

## **ENPRO 2.0 – ModuLA**

### Module im Lebenszyklus einer prozesstechnischen Anlage Anwendungen für integrierte Modelle

Als Teil der Initiative  
des Projektverbundes ENPRO 2.0  
im Rahmen der Förderinitiative „Energieeffizienz in der Industrie“  
des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie

## **Auszug aus dem 3. Zwischenbericht**

Förderkennzeichen	03ET1594A
Zuwendungsempfänger	AixCAPE e.V. Peterstraße 2 52062 Aachen
Projektleiter:	Marcus Soemers
Berichtszeitraum:	01.07.2019 - 31.12.2019
Fälligkeitsdatum:	11.02.2020
Einreichungsdatum:	10.02.2020

## Anwendungsbeispiel

# Verfahrensentwicklung und Prozessoptimierung

Als eine wesentliche Herausforderung im Anwendungsbeispiel *Verfahrensentwicklung und Prozessoptimierung* wurde die Verknüpfung von Informationen über verschiedene Grenzen hinweg erkannt. Diese Grenzen sind einerseits die Phasen im Lebenszyklus von der Planung einer (modularen) Anlage bis hin zur Optimierung der Anlage im Betrieb, andererseits die Skalierung vom Labor über das Technikum bis hin zum Weltmaßstab. Erworbenes Wissen und Erfahrungen bei der Verfahrensentwicklung sollen archiviert und für künftige Entwicklungsaufgaben verfügbar gemacht werden.

Zur Validierung und Veranschaulichung der Ergebnisse haben wir im Berichtszeitraum einen Softwaredemonstrator entwickelt, den wir im Folgenden im Rahmen eines Szenarios vorstellen.

*In einer existierenden Flüssig-Flüssig-Extraktion soll das Lösemittel ausgetauscht werden, da es die vorgeschriebenen Ökotox-Kriterien nicht erfüllt.*

Dies ist ein Beispiel, das die Anpassung bzw. Optimierung eines existierenden Prozesses erfordert. Es gibt vielfältige andere Motivationen, wie z.B. die Verbesserung der Energieeffizienz durch Nutzung innovativer Apparatetechnologien oder geänderte Vorschriften zur Abwasserbehandlung bzw. Regulierungen im Allgemeinen. Insgesamt wird deutlich, dass ein Anlagenbetreiber in die Lage versetzt werden muss, auf veränderte Anforderungen zeitnah reagieren zu können.

*Folgende Aktionen müssen zum Wechsel des Lösemittels durchgeführt werden: die Auswahl eines neuen Lösemittels, die Anpassung des geplanten Prozesses (d.h. der Simulation) und schließlich die Anpassung der geplanten Anlage (durch Apparateauswahl und Anpassung des zugehörigen R&Is). Im Detail sind dazu die folgenden Informationen und Schritte notwendig:*

- 1. Zunächst müssen Informationen zum existierenden Prozess gesichtet und bereitgestellt werden.*

Der *Digital Twin Explorer* (s. Abbildung 1) bietet genau diese Funktionalität: Lebenszyklus-Informationen, die der *Digital Twin Integrator* über eine einheitliche Schnittstelle bereitstellt, können vom Nutzer im *Digital Twin Explorer* abgerufen und gepflegt werden.<sup>1</sup> Dies beinhaltet z.B. Informationen zu einem Unternehmen, zu verschiedenen Standorten, den zugehörigen Anlagen und den Anlagenteilen bis hin zu den modularen

---

<sup>1</sup>Im Folgenden beziehen wir uns im Interesse besserer Lesbarkeit einheitlich auf den *Digital Twin Explorer*, um die Funktionalität des Softwaredemonstrators zu beschreiben, auch wenn im Hintergrund der *Digital Twin Integrator* einen wesentlichen Anteil daran hat.

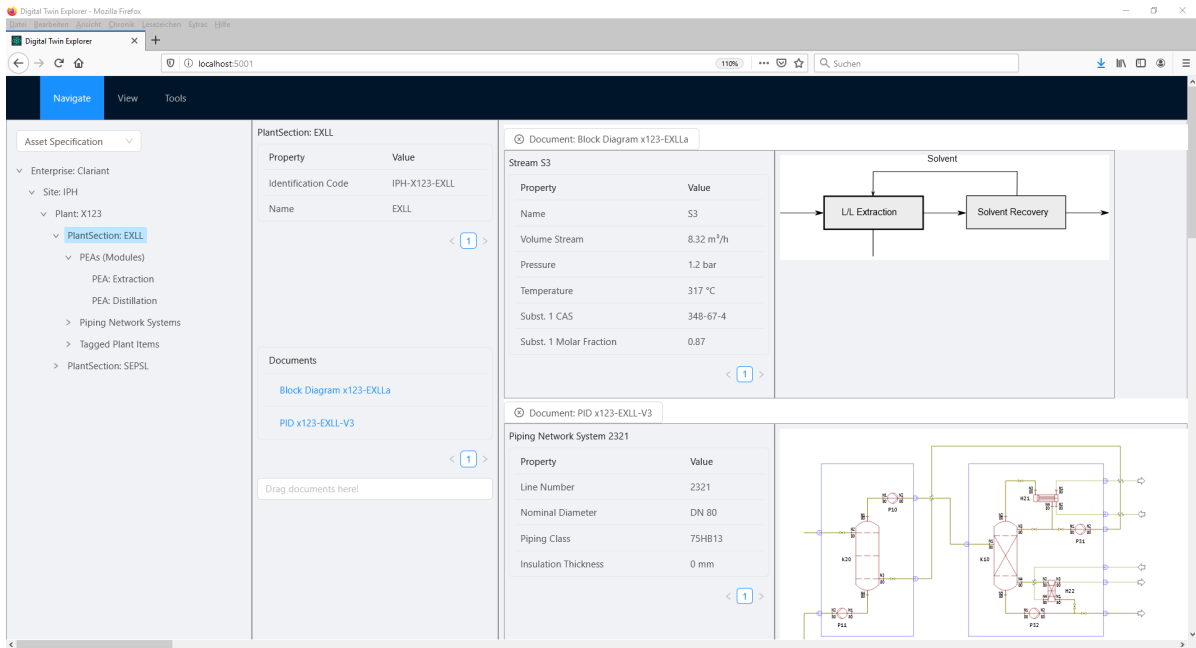


Abbildung 1: Browsen von Lebenszyklus-Informationen im *Digital Twin Explorer*.

Prozesseinheiten (PEAs) eines Anlagenteils. Im Szenario besteht der Anlagenteil, der die Flüssig-Flüssig-Extraktion realisiert, aus zwei PEAs, nämlich einer Extraktions- und einer Destillations-PEA. Zu beiden PEAs sind die zugehörigen Apparatetechnologien hinterlegt, die Extraktions-PEA ist im existierenden Prozess mit einer Siebbodenkolonne realisiert.

Zum Anlagenteil sind weitere Informationen verfügbar. Das Verfahrensfließbild enthält die beiden Unit Operations *LL-Extraction* und *Solvent Recovery* sowie den verbindenden Lösemittelstrom. Zu diesem Strom können Stoff-, Simulations- und Betriebsdaten abgefragt werden, wie z.B. der Name des zugehörigen Stroms in der Simulation, die CAS-Nummer des Lösemittels oder die Temperatur des Stoffstroms im Betrieb. Außerdem ist das zugehörige R&I des Anlagenteils verfügbar. Da die Informationen aus beiden Dokumenten miteinander verknüpft (integriert) sind, kann zu dem Lösemittelstrom im Verfahrensfließbild auch direkt die zugehörige Rohrleitung im R&I identifiziert werden.<sup>2</sup> Zur Rohrleitung sind weitere Informationen verfügbar, wie z.B. der Nenndurchmesser und die Materialklasse.

2. Nun wird ein neues Lösemittel ausgewählt, das die Ökotox- und weitere Kriterien erfüllt (beispielsweise muss sichergestellt werden, dass das Material der Rohrleitungen für das neue Lösemittel geeignet ist). Der Verteilungskoeffizient zu diesem neuen Lösemittel ist im Szenario nicht bekannt, wird aber für die Entscheidung, ob die momentan betriebene

<sup>2</sup>Die Verknüpfung zwischen Lösemittelstrom und Rohrleitung wird im *Digital Twin Explorer* durch Blinken beider Elemente visualisiert und ist deshalb in Abbildung 1 nicht zu erkennen.

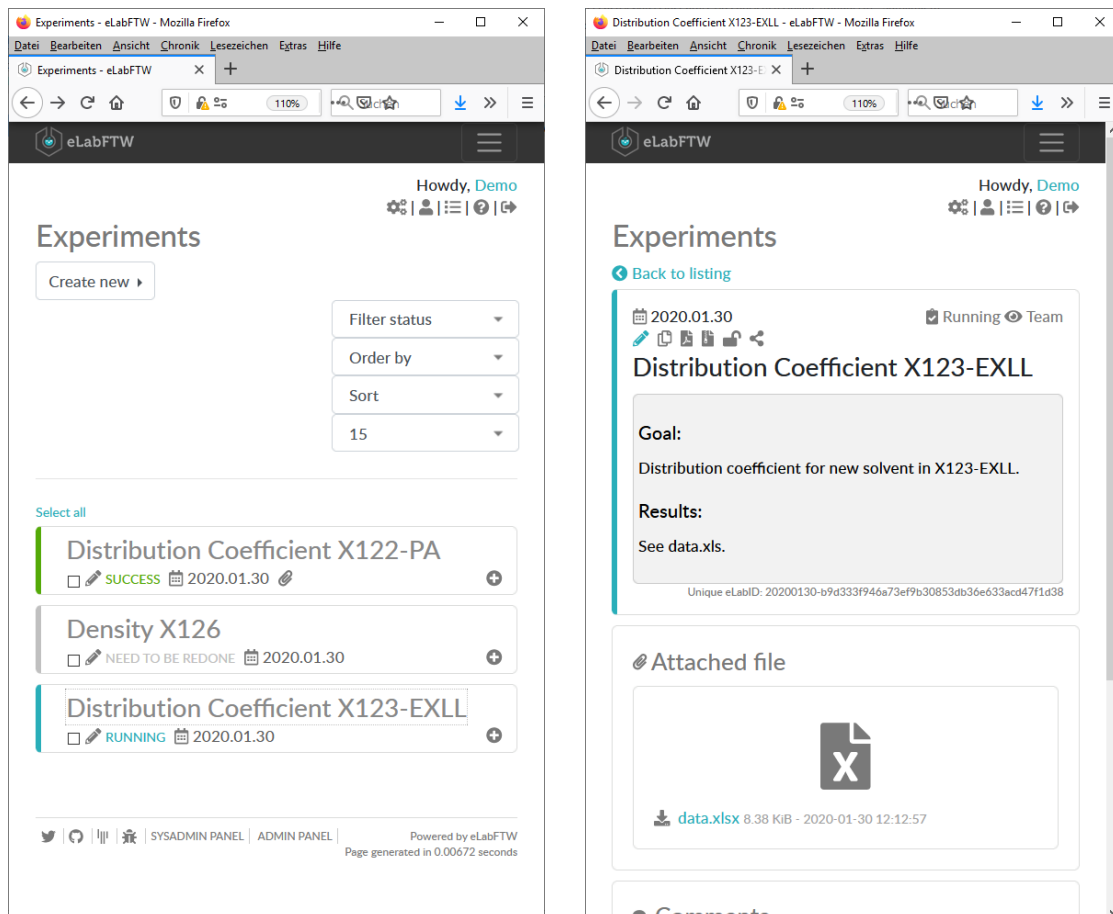


Abbildung 2: Verwaltung von Labordaten in *eLabFTW*.

*Apparatetechnologie (Siebbodenkolonne) noch geeignet ist, benötigt. Deshalb werden die entsprechenden Experimente durchgeführt und mit einem üblichen Labordaten-Werkzeug erfasst. Insbesondere werden Messdaten in einer Excel-Tabelle dokumentiert.*

Zur Demonstration wird hier das freie Werkzeug *eLabFTW*<sup>3</sup> genutzt. Abbildung 2 zeigt links eine Liste der in *eLabFTW* hinterlegten Experimente und rechts Details zum Experiment *Distribution Coefficient X123-EXLL*, insbesondere eine Download-Möglichkeit für die Excel-Tabelle *data.xlsx*.

Im *Digital Twin Explorer* werden die Daten aus dem Laborexperiment direkt als Information zu dem Anlagenteil hinterlegt, der die Flüssig-Flüssig-Extraktion realisiert; dazu kann das Experiment *Distribution Coefficient X123-EXLL* aus der Liste in Abbildung 2 direkt in den Bereich *Documents* im *Digital Twin Explorer* geschoben werden. Neue Informationen lassen sich so leicht integrieren, so dass sie für die Zukunft verfügbar und systematisch abrufbar werden.

<sup>3</sup><https://www.elabftw.net>

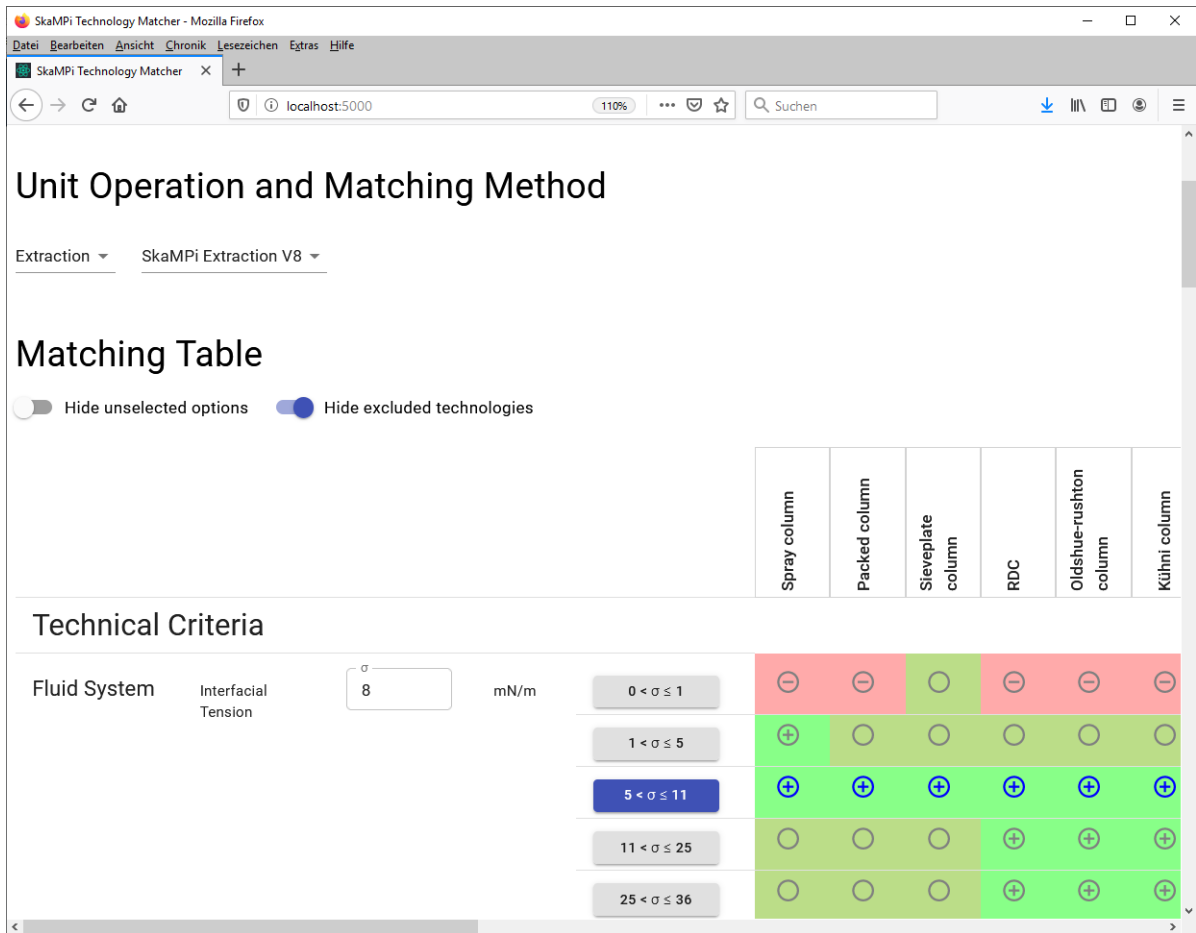


Abbildung 3: Bewertung von Extraktionstechnologien im *SkaMPi Technology Matcher*.

3. Mithilfe der bekannten Stoffdaten etc. wird die Simulation des Teilprozesses erneut durchgeführt.

Eine Integration der Simulation kann ähnlich wie bei den Labordaten erfolgen. Dieser Schritt wird im Software-Prototypen zur Zeit nicht unterstützt.

4. Im nächsten Schritt wird überprüft, ob die aktuell verwendete Apparate-technologie noch in Kombination mit dem neuen Lösemittel betrieben werden kann und ob evtl. bereits bessere (innovativere) Technologien, z.B. unter dem Aspekt der Energieeffizienz, zur Verfügung stehen.

Dazu kann die im Projekt ENPRO 2.0 SkaMPi entwickelte Methode angewendet werden, die auf Grundlage einiger Kenngrößen wie z.B. der Oberflächenspannung und der Dichtedifferenz des neuen Lösemittels (Eigenschaften des Fluidsystems) oder des Volumenstroms (Prozessparameter) eine Bewertung von Technologien ermöglicht. Im Szenario ergibt sich, dass die aktuell genutzte Apparate-technologie nicht mehr

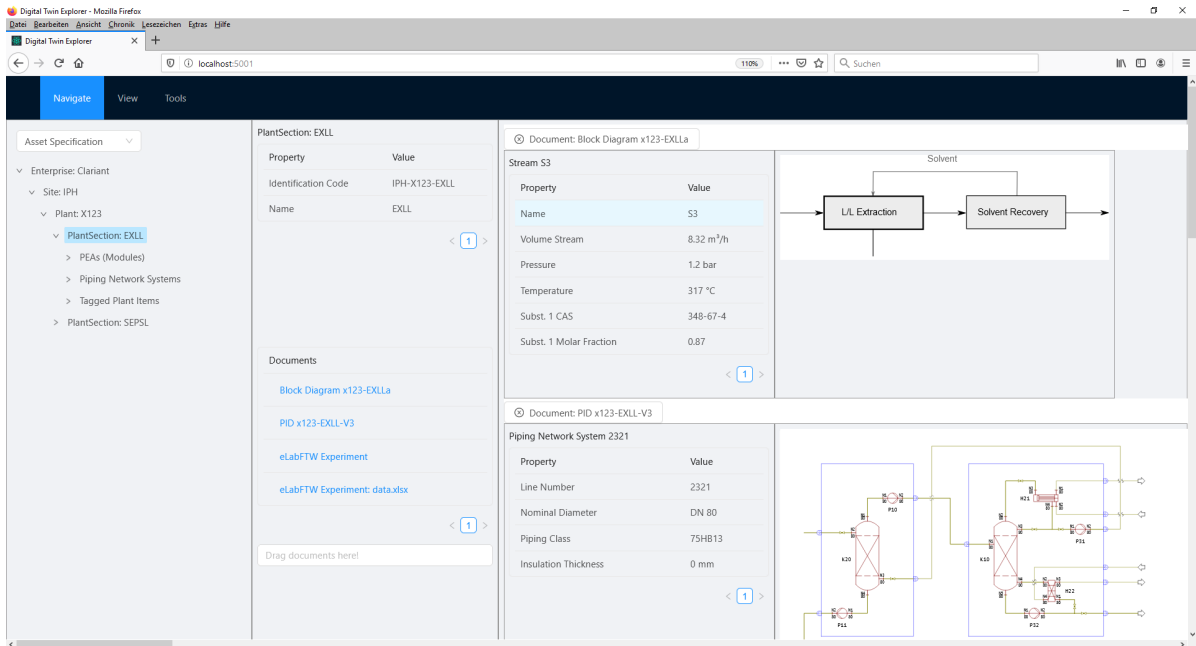


Abbildung 4: Aktualisiertes R&I mit Packungskolonnen-PEA im *Digital Twin Explorer*.

*adäquat ist und die Packungskolonne am besten geeignet ist, da sie mit vergleichsweise geringem Aufwand aus der aktuell genutzten Technologie durch Umbau realisiert werden kann.*

Im Projekt *ENPRO 2.0 SkaMPi* hat AixCAPE die beschriebene Methode im *SkaMPi Technology Matcher* (s. Abbildung 3) implementiert. Der *SkaMPi Technology Matcher* wurde bewusst als eigenständiges Werkzeug unabhängig vom *Digital Twin Explorer* realisiert und *a posteriori* mit ihm integriert. Stoff- und Prozessgrößen, die für die Technologiebewertung relevant sind, können automatisiert aus dem *Digital Twin Explorer* in den *SkaMPi Technology Matcher* übernommen werden.

5. *Nach Auswahl einer neuen Extraktions-PEA, z.B. aus einem Hersteller-Katalog, wird das zugehörige R&I aktualisiert.*

Im vorliegenden Fall (keine komplexen strukturellen Änderungen) kann das R&I im *Digital Twin Explorer* automatisiert aktualisiert werden (s. Abbildung 4). In anderen Fällen würde das bisherige R&I als *veraltet* markiert werden; die eigentliche Bearbeitung würde in einem üblichen CAE-Werkzeug erfolgen.

6. *Zu einem späteren Zeitpunkt wird die ganze Historie der Teilanlage für die Flüssig-Flüssig-Extraktion abgefragt, inklusive aller Änderungen.*

Die Informationen im *Digital Twin Explorer* umfassen nicht nur den aktuellen Zustand der Teilanlage wie z.B. die Extraktions-PEA mit der Packungskolonne. Auch die

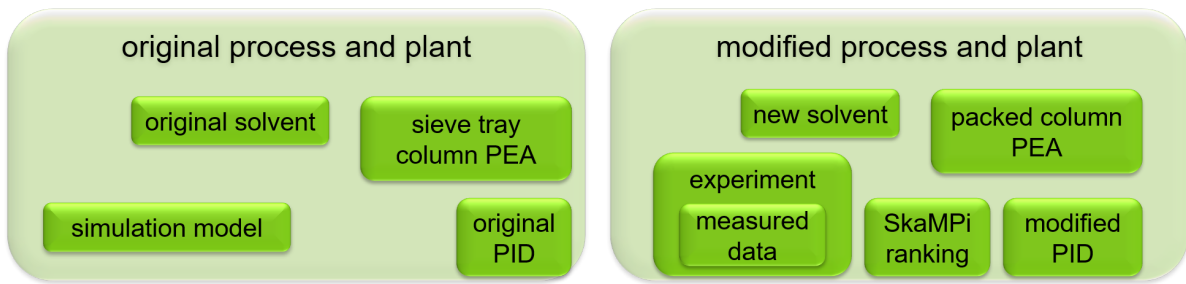


Abbildung 5: Historische und aktuelle Informationen im *Digital Twin Explorer*.

Information, dass diese PEA ursprünglich mit einer Siebbodenkolonne realisiert war und im Rahmen neuer Anforderungen an das Lösemittel basierend auf der *SkaMPi Methodik* ersetzt wurde, ist verfügbar. Abbildung 5 zeigt schematisch die insgesamt verfügbaren Informationen.

Das beschriebene Szenario wurde auf der PAAT 2019 vorgestellt. Das dort gezeigte Demonstrationsvideo<sup>4</sup> ist online verfügbar.

## Danksagung

Die Autoren danken dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie sowie dem Projektträger Jülich für die finanzielle Unterstützung im Rahmen der ENPRO-Initiative. Allen Projektbeteiligten aus ENPRO 2.0 ModuLA (FKZ 03ET1594A) und ENPRO 2.0 SkaMPi (FKZ 03ET1525A-E) sei gedankt für die gute Zusammenarbeit.

Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses  
des Deutschen Bundestages

<sup>4</sup>[www.enpro-initiative.de/ModuLA.html](http://www.enpro-initiative.de/ModuLA.html)