

POSITIONSPAPIER

Trenntechnik 4.0



IMPRESSUM

Autoren:

Torsten Brinkmann
Christoph Ehlers
Marcus Grünwald
Andreas Jupke
Carsten Knösche
Thomas Runowski
Jens-Uwe Repke

Das vorliegende Positionspapier entstand aus mehreren Diskussionen im ProcessNet Temporärer Arbeitskreis Separation Units 4.0. Die Autoren möchten allen beteiligten Kollegen, die so am Papier mitgewirkt haben, recht herzlich danken.

Herausgeber

ProcessNet Temporärer Arbeitskreis Separation Units 4.0

Verantwortlich im Sinne des Presserechts

DECHEMA e.V.
Dr. Andreas Förster
Theodor-Heuss-Allee 25
60486 Frankfurt am Main

Erschienen im Juni 2021

Bildnachweise

Titel: Bayer AG, Leverkusen/D

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|----|
| Motivation | 2 |
| Chemische Industrie im Wandel - Herausforderungen an die Trenntechnik | 3 |
| Schutz der Umwelt und Klimawandel | 4 |
| Verfügbarkeit von Rohstoff- und Energiequellen | 5 |
| Globalisierung und Intensivierung des wirtschaftlichen Wettbewerbs | 7 |
| Digitalisierung | 8 |
| Empfehlungen für Forschung, Entwicklung und Lehre | 11 |

Motivation

Vor dem Hintergrund drängender gesellschaftlicher Herausforderungen sowie technischer Neuentwicklungen kann, muss und wird die Trenntechnik von morgen technische Lösungen bereit stellen, die die Ökobilanz und die Wirtschaftlichkeit chemischer Prozesse maßgeblich verbessern. Das vorliegende Positionspapier stellt diesen Sachverhalt ausführlich dar und gibt Empfehlungen für Forschung, Entwicklung und Lehre, wie diesen Herausforderungen begegnet werden kann. Der Text basiert in seiner Struktur auf den wesentlichen Inhalten des 58. Tutzing-Symposium Separation Units 4.0 (Sept 2019) und richtet sich an interessierte LeserInnen aus allen Teilen der Gesellschaft.

Chemische Industrie im Wandel – Herausforderungen an die Trenntechnik

Heute leben rund 7,7 Milliarden Menschen auf der Erde, deren Bedarf an elektrischer Energie 20000 TWh pro Jahr übersteigt und die jährlich über 30 Milliarden Tonnen Kohlendioxid in die Atmosphäre abgeben. Abgesehen davon, dass die natürlichen fossilen Ressourcen der Erde endlich und damit alternative Rohstoffquellen erforderlich sind, führt die derzeitige Ressourcennutzung zu erheblichen Umweltproblemen, einschließlich gravierender Klimaveränderungen. Um Wohlergehen und weitere wirtschaftliche Entwicklung auch zukünftig sicherzustellen, müssen Lösungen für diese globalen Herausforderungen gefunden werden.

In der Konsequenz stehen wir vor einer tiefgreifenden Energiewende, die zu einer Diversifizierung unserer Energiequellen führen wird. Neben grünem Strom werden (bereits vergessene) Energieträger wie Wasserstoff, synthetische Kraftstoffe oder sogar Ammoniak intensiv in Wissenschaft und Gesellschaft diskutiert. Aber auch neue Rohstoffquellen und CO₂-arme chemische Wertschöpfungsketten werden beforscht. Dazu zählen alle P2X- und CCSU-Technologien (Power to X bzw. Carbon Capture, Storage and Usage) aber insbesondere auch biotechnologische Herstellungsverfahren. Die Wirtschaftlichkeit dieser Prozesse wird wesentlich durch die notwendigen Trennschritte zur Reinigung von Wertprodukten oder Abströmen und zur Rückführung von Lösungsmitteln oder unverbrauchten Reaktanten bestimmt. Effiziente Trennverfahren sind deshalb ein Schlüssel für nachhaltige und zugleich wirtschaftliche Prozesse.

Neben der Energie- und Rohstoffwende stellt die Globalisierung die Unternehmen vor neue Herausforderungen. Nationen wie China und Indien sind nicht mehr nur Konkurrenten im Massenmarkt, sondern auch ernstzunehmende Technologieinnovatoren im Feinchemikalien- und Pharmabereich. Die sich aus dieser Entwicklung ergebende Intensivierung des wirtschaftlichen Wettbewerbs erfordert eine Verkürzung von Entwicklungszyklen und eine zunehmende Flexibilisierung der Produktion. Das ist wiederum nur mit technologischen Innovationen, nicht zuletzt im Bereich der Trennverfahren, zu erreichen.

Schon heute beeinflussen digitale Technologien alle Bereiche der Gesellschaft. Digitale Lösungen versprechen mehr Effizienz aber auch mehr Effektivität. Damit sind sie zu einem der wichtigen Innovationstreiber für die Weiterentwicklung der Trenntechnologien geworden. Sie helfen, Trennoperationen besser zu beschreiben, neue Lösungen zu entwickeln, Apparate effizienter auszulegen und optimal zu betreiben.

Schutz der Umwelt und Klimawandel

Nachhaltigkeit ist in der heutigen Zeit nicht nur ein Schlüsselfaktor für Innovation, sondern auch eine wichtige Forderung unserer Gesellschaft. Die im Pariser Klimaabkommen und in den siebzehn Sustainable Development Goals der Vereinten Nationen definierten Klima- und Nachhaltigkeitsziele bilden die Basis für die europäische Nachhaltigkeitsstrategie. Diese wurde im Dezember 2019 von der neugewählten Europäischen Kommission vorgestellt. Eine Präzisierung dieser Pläne erfolgte durch den im März 2020 präsentierten „Circular Economy Action Plan“, als zentrales Element des EU Green Deals.

Eine zirkuläre Wirtschaft setzt auf Wiederverwendung oder Recycling von einmal produzierten Wertprodukten zur Reduktion des CO₂-Fußabdrucks und Minimierung des Ressourcenverbrauchs. Neben der thermischen Verwertung sind zwei Wege für die chemische Industrie dabei von Bedeutung: Die direkte Verwertung von Abfall- und Nebenproduktströmen innerhalb chemischer Prozesse ist schon heute in modernen Verbundstandorten Stand der Technik. Der andere Weg besteht in der stofflichen Wiederverwertung von zurückgeführten Abfällen aus Wertprodukten. Um diese als Sekundärrohstoffe einsetzen zu können, bedarf es robuster Verfahren und einer entsprechenden trenntechnischen Aufarbeitung der zurückgeführten Abfallströme.

Darüber hinaus gelten die Speicherung und Nutzung von CO₂ als Schlüsseltechnologien, um die Ziele des Pariser Klimaabkommens zu erreichen. Eine Herausforderung ist die energieeffiziente und wirtschaftliche Abtrennung von Kohlendioxid aus Abgasströmen. Prinzipiell kommen hierbei verschiedene Trennoperationen wie z. B. Absorption, Adsorption oder Membranverfahren in Frage. Die herausfordernde Aufgabe im Bereich der Trenntechnik liegt dann in der gleichzeitigen Optimierung der Apparate, ihrer Verschaltung sowie der zur Verwendung kommenden Hilfsstoffe und Energieströme nach wirtschaftlichen und energetischen Kriterien.

Neben den Auswirkungen des Ausstoßes klimaschädlicher Gase auf unser Ökosystem stellen auch andere umweltschädliche Emissionen ein Problem für unsere Gesellschaft dar, das es zu lösen gilt. End-of-Pipe-Technologien zur Reinigung von Abgasen und Abwässern gewinnen daher weiter an Bedeutung. Beispiele dafür sind die Abtrennung von Salzfrachten aus Abwässern sowie die Abtrennung von Medikamentenresten oder Mikroplastik aus kommunalen Abwasserströmen.

Während in der Vergangenheit der Fokus häufig ausschließlich auf der Wirtschaftlichkeit eines Verfahrens lag, spielen Umwelt- und Klimaaspekte zunehmend eine zentrale Rolle bei der Entscheidung, welche Produkte über welche Wege hergestellt werden. Technische Innovationen im Bereich der Trenntechnik sind ein entscheidender Enabler für wirtschaftlich erfolgreiche, industrielle Prozesse mit einer verbesserten Ökobilanz.

Thesen:

- » Klima- und Nachhaltigkeitsziele erfordern Verfahren mit verbesserter Ökobilanz
- » Trenntechnik ist ein entscheidender Enabler für energetisch und stofflich effiziente Verfahren

Beispiele sind:

- » End-of-Pipe Lösungen
- » Speicherung und Nutzung von CO₂
- » Technologien zur Rezyklierung von Hilfsstoffen
- » Direktverwertung von Abfall- und Nebenproduktströmen innerhalb der Prozesse
- » Aufbereitung rückgeführter Abfälle als Sekundärrohstoffe

Verfügbarkeit von Rohstoff- und Energiequellen

Die endliche Verfügbarkeit fossiler Rohstoffe und zunehmende Umweltprobleme erzwingen einen Wandel in der Rohstoffbasis und bei der Verwendung von Energiequellen. Als Konsequenz werden sich Wertschöpfungsketten und Energieversorgungskonzepte ändern. Um die Klimaauswirkungen unserer Produktion zu begrenzen, muss der Ausstoß an Kohlendioxid drastisch beschränkt werden. Das ist auf lange Sicht nur durch einen weitgehenden Verzicht auf die Verwendung fossiler Energieträger möglich. An deren Stelle werden zunehmend regenerative Energiequellen, wie etwa Strom aus Sonnen- oder Windenergie, treten.

Aufgrund absehbar hoher Energiegestehungskosten werden auch in der Zukunft Verfahren zur Erhöhung der Energieeffizienz, wie Energieintegration, Kombination

und Verschmelzung unterschiedlicher Trennoperationen und andere Möglichkeiten der Prozessintensivierung im Fokus der technologischen Entwicklung bleiben. Bekannte aber bisher weniger genutzte Technologien werden zusätzlich an Bedeutung gewinnen. Beispiele hierfür sind Wärmepumpen und -transformatoren. Welche Technologien wo zukünftig eingesetzt werden hängt dabei von den Randbedingungen ab und kann nicht pauschal beantwortet werden. Hier werden Auslegungs- und Bewertungsmethoden benötigt, um schnell und effizient für alle Phasen des Technologielebenszyklus effektive Entscheidungen treffen zu können.

Die endliche Verfügbarkeit fossiler Energieträger und die zunehmende Bedeutung von regenerativ erzeugtem Strom für die Energieversorgung unserer Prozesse wirkt



die Frage nach einer optimalen Architektur für unsere Versorgungssysteme auf. Sind zentrale Lösungen, möglicherweise über den Zwischenenergieträger Dampf, oder dezentrale Lösungen direkt in den Produktionsanlagen oder sogar am einzelnen Apparat wirtschaftlich vorzuziehen? Abhängig von der Beantwortung dieser Frage müssen neue Lösungen für die zum Einsatz kommenden Trennoperationen geschaffen werden (Power to Heat).

Neben „Power to Heat“- Konzepten bieten elektrochemische Trennprinzipien die Möglichkeit, elektrischen Strom direkt auf stofflicher Ebene wertschöpfend einzusetzen, indem Hilfsstoffe durch elektrochemische Reaktionen ersetzt werden.

Auf dem Weg zu einer nachhaltigen, klimaneutralen Wirtschaft wird es zu einer zunehmenden Diversifizierung der genutzten Energiequellen kommen (Energimix). Die Verfügbarkeit dieser Quellen ist natürlichen Schwankungen und großen regionalen Unterschieden (Sonne, Wind) unterworfen. Deshalb werden Technologien benötigt, die einen effizienten Umgang mit Versorgungsfluktuationen ermöglichen (z.B. neue Speichertechnologien oder dynamischer Betrieb von Produktionsanlagen). Das stellt neue Anforderungen an den realisierbaren Lastbereich unserer Trenntechnologien. Weiterhin ist zu erwarten, dass aus erneuerbarem Strom gewonnener Wasserstoff zunehmend als Rohstoff genutzt wird. Die Verteilung, z.B. über Co-Transport im Erdgasnetz oder mit Hilfe von wasserstoffaufnehmenden organischen Flüssigkeiten (Liquid Organic Hydrogen Carriers, LOHC) schafft neue Anwendungsfälle für Trennverfahren.

Auf lange Sicht wird nicht nur die Nutzung fossiler Quellen zur Energiegewinnung abnehmen, sondern auch die Verfügbarkeit derselben als Rohstoffe für unsere klassischen Wertschöpfungsketten. Die Verwendung von erneuerbaren Rohstoffen hängt dabei von solchen Faktoren wie Wirtschaftlichkeit, neuen Geschäftsmöglichkeiten, Risikominimierung und Nachhaltigkeit ab. Alternative Herstellverfahren beinhalten auch neue Herausforderungen an die Trenntechnologien.

Die zunehmende Bedeutung biotechnologischer Prozesse erfordert Lösungen, um mit den spezifischen Problemen dieser Technologie umzugehen. Während in petrochemischen Verfahren überwiegend unpolare fossile Rohstoffe in organischen Lösungsmitteln zu trennen sind, liegen die Produkte aus biotechnologischen Synthesen meist in verdünnten wässrigen Lösungen vor, die neben den Mikroorganismen auch Reste des Substrats,

des Nährmediums sowie gelöste Salze bzw. Elektrolyte und weitere Stoffwechselprodukte enthalten. Energieeffiziente Trenntechnologien gewinnen deshalb an Bedeutung und müssen für den Einsatz in biotechnologischen Prozessen weiterentwickelt werden. Aufgrund der Temperaturempfindlichkeit vieler auf biologischem Weg hergestellten Produkte sind „kalte“ Verfahren zur Trennung von Wertstofflösungen erforderlich. Die Bedeutung von nicht-destillativen Verfahren in diesem Bereich wird zunehmen.

Nicht alle Wertschöpfungsketten werden durch biologische Verfahren ersetzt werden können. Alternativen basieren zum Beispiel auf der Synthese von Grundchemikalien aus nicht fossilen Bausteinen unter Verwendung regenerativer Energie. Diese Verfahren werden im Allgemeinen unter dem Begriff Power to X (P2X) zusammengefasst. Die Trenntechnologien nach dem Syntheschritt unterscheiden sich nicht wesentlich von den heutigen Verfahren. Die Gesamtwirtschaftlichkeit derartiger Prozesse leidet aber oft unter hohen Energiebedarfen und Umwandlungsverlusten. Damit erlangen Maßnahmen zur Erhöhung der Energieeffizienz insbesondere in den Aufarbeitungsschritten eine hohe Bedeutung. Dazu zählen Verfahren zur Wiederverwendung von Wärme (z.B. Brüdenkompression, Wärmepumpen), Maßnahmen zur Prozessintensivierung als auch andere, bisher nicht so häufig in der chemischen Technik eingesetzte Trennverfahren (z.B. Membrantrennungen, Adsorptionsverfahren etc.)

Zusammengefasst ergeben sich folgende Thesen zur Weiterentwicklung der Trenntechnik:

- » Verfahren der Energieintegration werden weiterhin eine bedeutende Rolle spielen.
- » Lösungen zur Aufwertung von Wärmeströmen zum Beispiel durch Einsatz von Brüdenverdichtern, Wärmepumpen und -transformatoren gewinnen an Bedeutung.
- » Flexible Apparate mit großen Lastbereichen sind Voraussetzung für den dynamischen Betrieb von Produktionsanlagen bei schwankender Verfügbarkeit von regenerativen Energien.
- » Wirtschaftliche biotechnologische Herstellverfahren erfordern Technologien zur energieeffizienten Abtrennung von Wertstoffen aus wässrigen Lösungen sowie Technologien zur Reduktion von Hilfsstoffen zur Vermeidung von Salzemissionen.

Globalisierung und Intensivierung des wirtschaftlichen Wettbewerbs

Die chemische Industrie in Deutschland steht mit allen Produkten der Bereiche Grund- bzw. Basischemikalien und Fein-, Spezial- und Pharmachemikalien im internationalen Wettbewerb. Als energieintensive Industrie mit hoher Automatisierung ist sie kapitalintensiv, hochgradig abhängig von lokalen gesetzlichen und politischen Rahmenbedingungen, der Rohstoff- und Energieversorgung im Lande, weiterhin vom Umweltschutz und vom Zugriff auf den Kapitalmarkt. Laut VCI kommt es am Pharmastandort Deutschland zu einer „schleichenden Verlagerung der Forschung“ in Richtung USA und China und „Der Kostendruck führt dazu, dass immer mehr Teilschritte der Produktion nicht mehr wirtschaftlich in Europa durchgeführt werden können.“⁽¹⁾ Die Ausgangssituationen, die zu erwartende Entwicklung und die potentiellen Gegenmaßnahmen sind aber prinzipiell unterschiedlich, je nachdem ob Commodities oder Produkte der Fein-/Spezialchemie (Life Science) betrachtet werden.

Bei Commodities ist der Preis der wichtigste Hebel. Die Vorteile, die sich durch Verfügbarkeit von Rohstoffen und Energiequellen ergeben, lassen sich kaum ausgleichen. Zur Reduktion von Herstellkosten werden World-Scale-Anlagen gebaut. Diese Anlagen stellen hohe Ansprüche an die Technologie und die Prozesse und zwar nicht nur während der Produktionsphase unter Vollast. Hohe Liefertreue erfordert auch ein genaues Einhalten der Zeitpläne beim An- und Abfahren (Stillstandsmanagement) und die Herstellkosten dürfen auch bei einer Minderauslastung bei Markteintritt und zu Krisenzeiten nicht „durch die Decke gehen“. Der Industriestandard befindet sich hier bereits seit geraumer Zeit auf einem hohen technischen Niveau. Ein Verbleib von World-Scale-Anlagen in Europa (oder in Händen europäischen Firmen) wird dennoch nur mittels innovativer Produktionsverfahren (d.h. Produkt- und Prozessinnovation) gelingen, welche selbst schnell entwickelt und kostengünstig realisiert werden müssen.

Bei der Feinchemie spielt der Preis eine zunehmend wichtigere Rolle. Die Herstellungskette ist nicht nur bei der Pharmaindustrie typischerweise vielstufig und häu-

fig wird für jede Stufe separat bewertet, wo diese produziert werden soll: intern/extern, europäische oder asiatische „Contract Manufacturing Organizations“ (CMO). Wettbewerbsfähig werden Produzenten durch hohe Flexibilität und dementsprechend flexibel muss die Produktion aufgestellt sein. Flexibilisierung geht sicherlich mit Digitalisierung einher – China realisiert das mittels „Blue Sky-Initiative“ zentral gesteuert für den gesamten Industriezweig. Aber COVID-19 hat auch die Risiken einer globalisierten Lieferkette aufgezeigt.

Sowohl in der Feinchemie als auch bei den Commodities sichert Innovation mit hoher Umsetzungsgeschwindigkeit den Standort – Veränderung ist der neue stationäre Zustand. Informationen aus der Produkt- oder Prozessentwicklung, gespeichert in Modellen und Datenbanken, müssen den Produktionsprozessen schon beim Start-up zur Verfügung stehen. Und umgekehrt müssen Erkenntnisse aus Produktionsdaten direkt die Entwickler bei der Optimierung unterstützen. Die Innovation kann dabei in einer umweltfreundlichen Herstellungsart, einem hohen Maß an Rezyklierung, einem toleranten Produktionsprozess für Edukte aus biotechnologischer Herstellung oder in der direkten Nutzung elektrischer Energie liegen. Für die Aufgaben der Trenntechnik heißt das ganz konkret: aufwändige Experimente zur Prozessentwicklung oder zum Scale-up werden dank gesteigerter Rechnerleistung teilweise durch weniger aufwändige Simulationen ersetzen; die Trennapparate der Prozessentwicklung lassen sich leicht zu den Trennapparaten der Produktion skalieren und umgekehrt; der Lastbereich der Trennapparate (inklusive Sensorik und Aktorik) ermöglicht einen dynamische Anlagenbetrieb, der sich mit den Energiespitzen der regenerativen Energien harmonisieren lässt; die Instrumentierung der Trennapparate in der Produktion ermöglicht oder vereinfacht zukünftig die Auswertung und Analyse von Prozessdaten mittels Maschine-Learning-Methoden; die höherwertige Energieform Strom ersetzt adäquat genutzt (z.B. Zufuhr von Wärme bei sehr hohen Temperaturen oder mittels Brüdenkompression) und in großem Stil Wärmen fossilen Ursprungs.

(1) VCI Position Kompakt, Pharmastandort Deutschland, Stand: 1. September 2020

Digitalisierung

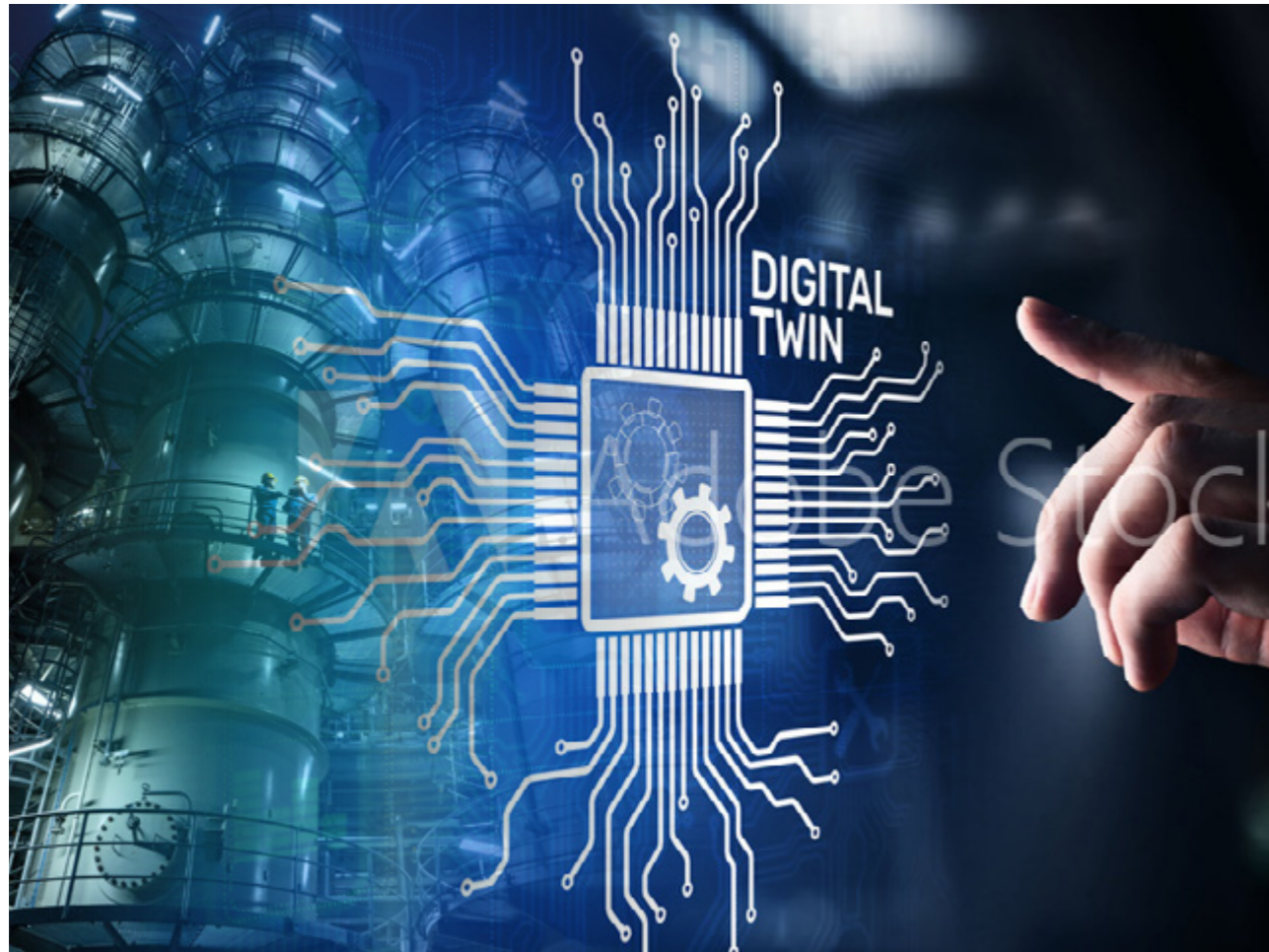
Neue Technologien bieten technische Antworten für bestehende und kommende Herausforderungen. Dies gilt ebenfalls für die Digitalisierung, die Einzug in die chemische Industrie und damit auch in die Fluidverfahrenstechnik hält.

Nach vielen plakativen Veröffentlichungen der letzten Jahre zu den Möglichkeiten der Digitalisierung drängen sich nun verstärkt Fragen nach greifbaren Anwendungsszenarien auf: Was genau soll durch eine verstärkte Digitalisierung in der Verfahrenstechnik erreicht werden? Welche bislang nicht gelösten Herausforderungen können durch Digitalisierung angegangen werden? In welcher Größenordnung können durch Digitalisierung

Kostenersparnisse und Effizienzsteigerungen im Ressourceneinsatz erzielt werden?

In der Diskussion kristallisieren sich zunehmend drei Themenbereiche heraus, die durch die Digitalisierung grundlegend beeinflusst werden:

- » Digitale Modelle – hierunter fällt auch der oft angeführte „Digital Twin“
- » Digitale Workflows und automatisierter Datenaustausch
- » Intelligenter Betrieb von Apparaten und Prozessen



Modelle

Modelle sind die wohl wichtigsten Werkzeuge des **Verfahreningenieurs**. Sie werden beim Entwurf von Trennsequenzen, der Auslegung von Trennapparaten, der Lösung von Betriebsproblemen und der Optimierung von ganzen Trennprozessen eingesetzt.

Mit Blick auf die Digitalisierung lassen sich folgende Entwicklungstendenzen identifizieren:

- » Modelle werden immer komplexer.
- » Datengetriebene Modelle komplettieren zunehmend die bisherigen physikalisch fundierten Modelle oder dienen als Brücke zwischen mechanistischen Modellen verschiedener Skalen in Zeit und Raum. Darüber hinaus wird die Verflechtung von datengetriebenen und physikalisch fundierten Modellen enger, so dass sich enorm leistungsfähige virtuelle Abbilder ergeben.
- » Die Menge an verfügbaren Daten aus Experimenten und Prozessen steigt stetig und erfordert intelligente Methoden der effizienten Aufbereitung und -nutzung wie zum Beispiel zur Ableitung von Modellen aus diesen Daten.
- » Modellgestützte Optimierung (on- und off-line) gewinnt weiter an Bedeutung.
- » Das Aufstellen und die Nutzung von Modellen in Simulationen erfordert immer mehr Rechenleistung. Cloud-Computing und die Nutzung von High Performance Computern nimmt deshalb zu.
- » Modelle wandeln sich von einem individuellen Werkzeug eines einzelnen Ingenieurs zu einem Teil des Technologiepakets. Sie werden zunehmend nicht nur von Experten, sondern auch von anderen Stakeholdern genutzt.
- » Die Formulierung, die Parametrierung und die Pflege von Modellen erfordern erhebliche Ressourcen. Dazu werden Managementsysteme zum Verwalten, Warten und Weiterentwickeln von Modellen gebraucht.

Workflows und Datenaustausch:

In unserer arbeitsteiligen und interdisziplinären Arbeitswelt sind Workflows von grundlegender Bedeutung. Um wirtschaftliche Wettbewerbsfähigkeit zu garantieren,

müssen diese so effizient wie möglich gestaltet werden. Schnittstellen stellen dabei eine der größten Herausforderungen dar. Wichtige Workflows sind sowohl in den Bereichen **Forschung und Entwicklung** (Erforschung der naturwissenschaftlichen Grundlagen, Entwicklung, Optimierung und Troubleshooting von Prozessen), **Engineering** (Planung, Bau und Wartung von Anlagen) und **Produktions- und Supply-Chain-Planung** als auch in der **Anlagen- und Arbeitssicherheit** zu finden.

Von der Digitalisierung wird sich ein erheblicher Effizienzgewinn in den Arbeitsabläufen erwartet. Gründe hierfür sind:

- » Schlecht oder nur lose verknüpfte Anwendungen mit ineffizienten Schnittstellen lassen sich nahezu nahtlos miteinander verbinden.
- » Es kann digital sichergestellt werden, dass alle Stakeholder mit den gleichen Daten und Informationen arbeiten (single point of truth).
- » Darüber hinaus lassen sich Datenübergaben automatisieren, so dass neben einer Effizienzsteigerung auch eine geringe Fehleranfälligkeit erreicht werden kann.
- » Digitale Werkzeuge erlauben das gleichzeitige Arbeiten mehrerer Personen an Aufgaben (co-working).

Gleichzeitig definieren diese Punkte auch die Entwicklungsfelder für die Zukunft. So ist es eine zentrale Herausforderung, wie der Datenaustausch zwischen den an einem Projekt beteiligten Unternehmen und Dienstleistern effizient gestaltet werden kann. Zurzeit kommen dafür auf Grund der heterogenen Softwarelandschaft größtenteils „schwachdigitale“ Formate wie PDF, CSV-Dateien und Listen im Textformat zum Einsatz. Durch die hiermit verbundene manuelle Datenübertragung geht viel Zeit verloren, entstehen unnötige Fehlerquellen und Investitionshürden durch teures Engineering. Die Weiterentwicklung von Standards wie DEXPI und die Verknüpfung mit weiteren Datenformaten jenseits der Verfahrenstechnik ist ein entscheidender Baustein, um hier wesentliche Kostenersparnisse zu erzielen. Dies betrifft natürlich auch den **Übergang vom Bau in den Betrieb** und das Pflegen der Anlagendaten über den gesamten Lebenszyklus hinweg. In der BIM-Welt (Building Information Modeling) sind hierzu in den letzten Jahren große Fortschritte zu Anwendungsfällen, Datenformaten, Datenpflege und Lebenszyklus erzielt worden. Hieraus

zu lernen ist eine wesentliche Aufgabe für die weitere Digitalisierung in der Verfahrenstechnik.

Viel Energie fließt derzeit in die Entwicklung von digitalen Zwillingen (**Digital Twin**). Häufig gemeint sind hierbei monolithische Datenkonglomerate, in denen alle Informationen, Funktionen, Modelle einer Anlage hinterlegt sind. Währenddessen wird in der Automobilindustrie und der Produktionstechnik der „**Digital Thread**“ – der digitale Faden, der alle digitalen Zwillinge oder digitalen Datenrepositorien miteinander zu einer dezentralen Struktur verwebt – diskutiert. Die chemische Industrie wird hier noch viel Energie in Methoden, Formate und Werkzeuge fließen lassen müssen.

Betrieb von Trennapparaten und -prozessen

Die Wirtschaftlichkeit von Produktionsprozessen wird nicht zuletzt vom Grad der Beherrschung der Anlagen durch das Bedienpersonal bestimmt. Dazu zählen nicht nur die **Automatisierung** des Normalbetriebs, sondern auch die Optimierung von Anfahr- und Abfahrprozessen, die **vorausschauende Planung von Wartungsmaßnahmen** und die kontinuierliche **Anpassung des Betriebs** an sich ändernde Rahmenbedingungen wie Rohstoffpreise und Eduktqualitäten.

Sich schon heute deutlich abzeichnende digitale Entwicklungsfelder für die Zukunft sind:

- » Monitoring von Apparaten und Prozessen ggf. kombiniert mit Online-Optimierung (datengetrieben oder modellgetrieben)
- » Kontinuierliche Zustandsbewertung von Apparaten und Maschinen (datengetriebene Modelle, Predictive Maintenance)
- » Ausstattung von Apparaten und Maschinen mit smarten Sensoren

Wie in allen wichtigen Industriezweigen spielt die Digitalisierung auch in der Trenntechnik eine dominierende Rolle und kann durch inhärente Ressourcen- und Energieeffizienz zu den Zielen der Nachhaltigkeit beitragen. Die Trenntechnik der Zukunft wird verschiedenste Aspekte beinhalten, wie etwa modellgesteuerten Betrieb, Modularisierung sowie ggfs. **das Erstarke technologisch neuerer und nicht-thermischer Trennungen** und der damit verbundene Bedarf an prädiktiven Modellen zur Beschreibung des Trennverhaltens, z.B. in Membranen, Extraktions-, Adsorptions- oder Kristallisationsapparaten. Die Flexibilisierung und Modularisierung kann dazu beisteuern, die Prozess- und Produktentwicklung für Spezial- und Agrochemikalien und Pharmazeutika zu beschleunigen und damit zum nachhaltigen Erfolg der Industrie beisteuern.

Empfehlungen für Forschung, Entwicklung und Lehre

Folgt man den Ausführungen der Roadmap „Chemie2050“, einer Studie aus 2019 von DECHEMA und FutureCamp für den VCI, dann müssen neben den bisher schon laufenden Anstrengungen auf dem Pfad der Effizienzsteigerungsmaßnahmen zwangsläufig große Schritte, wenn nicht sogar Sprünge auf dem sogenannten „Technologiefeld“ beschriftet werden. Die damit avisierten und oben vielgenannten „neuen Technologien und Methoden“ müssen entwickelt und am Ende implementiert und betrieben werden. Zum einen ist dies hinsichtlich konkreter technischer Anwendungen sicherlich die originäre Aufgabe der Forschungs- und Entwicklungsabteilungen in den Unternehmen der chemischen Industrie, zum anderen müssen die entsprechenden Grundlagen bzw. grundlegenden Methoden an den Uni-

versitäten, Hochschulen und Forschungsinstitutionen erforscht und letztlich auch gelehrt werden. Nicht zuletzt die heute ausgebildeten Ingenieure, sind die Forscher, Entwickler und Betreiber von morgen und übermorgen.

Lehre

In Bezug auf die Lehre besteht in der Welt der Verfahrenstechnik wohl fast einheitlich die Meinung, dass die Grundausbildung in den Bachelor- und Masterstudiengängen schon heute die wesentlichen Fähigkeiten vermittelt, die neuen Verfahrens- und Prozessvarianten verfahrenstechnisch fundiert entwickeln zu können. Gleichwohl ergibt sich auf der Grundlage der oben genannten Veränderungsprozesse die Notwendigkeit ein-



zelne Elemente der Curricula bzw. den Fokus einzelner Module zu verändern. In diesem Zusammenhang sind folgende Themenschwerpunkte zu nennen:

- » Digitalisierung der Übungs- und Praktikumseinheiten
- » Methoden des Datenmanagement und der Datenauswertung (KI, Machine Learning, etc.)
- » Modellierungs-, Simulations- und Bewertungsmethoden
- » Prozesse und Apparate für klein- bis mitteltonnagige Produkte
- » Regenerative Energie- und Rohstoffquellen (Verfügbarkeiten, Volatilitäten, etc.)
- » Aufbereitung biotechnologisch hergestellter Produkte

Eine nicht unerhebliche Fragestellung ist dabei die Entscheidung zwischen der Aufnahme komplett neuer Module und der Integration neuer Inhalte in bestehende Veranstaltungsformate. Ein gangbarer Mittelweg könnte aber auch die Bildung von neuen Vertiefungsbereichen oder empfohlenen Entwicklungspfaden für zukünftige Reakkreditierungsverfahren sein. In jedem Fall sinnvoll ist die Aufnahme der oben genannten Themenschwerpunkte in die Grundlagenfächer Mathematik, Informatik, Physik, Bio(techno)logie und Chemie, da so schon in einer frühen Phase des Studiums eine fundierte Basis gelegt werden kann.

Ein zweiter Gesichtspunkt hinsichtlich der verfahrenstechnischen Ausbildung ergibt sich aus der oben beschriebenen Veränderung hin zu interdisziplinären bzw. hybriden Lösungsansätzen für neue Prozesse und Apparate. Die Studierenden müssen diesbezüglich zusätzliches Rüstzeug für ihr zukünftiges Berufsleben im Rahmen der akademischen Ausbildung erwerben: Zu verstehen, wie energietechnische und verfahrenstechnische Prozesse miteinander wechselwirken (können), wie elektrotechnische Neuentwicklungen auf dem Gebiet der Sensoren sinnvoll in chemischen Produktionsanlagen eingesetzt werden können oder wie sich neue flexible Produktionskonzepte aus der Supply-Chain eines Produktes ableiten lassen, erfordert nicht zusätzliches fachliches Wissen, sondern vielmehr ein Verständnis für die Sprache der anderen Disziplin. Neue Veranstaltungsformate sind deshalb zwingend in die Curricula zu integrieren. Insbesondere seien an dieser Stelle Methoden

wie Forschendes Lernen und Projektarbeiten in interdisziplinären Gruppen genannt. So ausgebildete Ingenieure werden sich mit Sicherheit auch im oben skizzierten, verschärften globalen Wettbewerb weiterhin behaupten können.

Forschung & Entwicklung:

Hinsichtlich der oben geforderten Sprunginnovationen lassen sich jeweils prozess- bzw. produktbezogen eine Vielzahl relevanter unternehmensspezifischer Entwicklungsziele benennen. An dieser Stelle soll jedoch nur auf die **Forschungsfelder** eingegangen werden, in denen es im Bereich der Fluidodynamik und Trenntechnik **einer gemeinsamen Anstrengung von Industrie und Akademia** bedarf:

Als eine der wichtigsten Herausforderungen ist mit Sicherheit die bereits benannte Verkürzung der Entwicklungszeiten für neue Produkte, Prozesse und Apparate auf der Grundlage voll digitalisierter Entwicklungs- und Auslegungsmethoden zu nennen. Im Bereich der Trenntechnik sind dabei insbesondere die Methoden einer validierten mehrphasigen Strömungssimulation und der Modellierung und Simulation von Phasenbildungsvorgängen notwendige Voraussetzung. In diesem Zusammenhang sei auf die oben beschriebenen zu erwartenden Veränderungsprozesse im Bereich der Chemischen Industrie hingewiesen, mit denen sich maßgeblich auch die zu prozessierenden Edukt- und Produktportfolios hin zu größeren Molekülen verändern. Zudem müssen thermodynamische Modelle für elektrolythaltige Lösungen weiterentwickelt werden. Die Klasse der Gas-Flüssig-Reaktionen wird zunehmend an Bedeutung gewinnen. Demnach wird es nur mit einer (experimentell) validierten Simulation großer Apparatevolumina, in denen Vorgänge auf Mikro- bzw. Meso-Skala ablaufen, gelingen, Phänomene wie zum Beispiel die Rinnsalbildung auf Packungs- bzw. Katalysatoroberflächen, die Belagsbildung in Reaktions- und Trennapparaten, die Feststoffbildung in Kristallisationsprozessen oder die Blasendynamik in Bodenkolonnen und Blasensäulen so zu berücksichtigen, dass eine direkte Übertragung vom Labor- in den Produktionsmaßstab sicher gelingt.

Ein weiteres Forschungsfeld mit hohem Innovationspotential stellen hybride bzw. integrierte Apparatekonzepte dar. Die Kombination mehrerer trennender und reagierender Funktionalitäten in einem Apparatevolumen wurde in den beiden letzten Jahrzehnten zwar schon intensiv untersucht, allerdings lag der Fokus dabei auf

Reaktivdestillationen, der Integration von Membranverfahren in Destillations- und Reaktionsprozesse und gasführende Apparate (Multifunktionale Reaktoren und Katalysatoren). In der Regel standen dabei Prozesse der großtonnagigen Synthesen im Vordergrund. Mit der Veränderung der Portfolios hin zu klein- und mittelvolumigen Produkten, aber auch mit der Biologisierung der Syntheserouten, werden zunehmend Lösungsansätze für kleinere und flexiblere Apparatekonzepte benötigt.

Um eine Modellierung der technologisch neueren Verfahren mit derselben prädiktiven Qualität wie für die etablierteren Trenntechnologien sicherzustellen, sind zusätzliche Forschungsarbeiten z.B. zum Stofftransport und der Thermodynamik in Membranen, Adsorbentien oder Flüssig-Flüssig-Systemen für weite Temperatur-, Druck und Konzentrationsbereiche notwendig.

Nicht zuletzt sei auch die zukünftig sich stark verändernde Energieversorgung der Prozesse adressiert. Im Energiesystem der Zukunft wird in Mitteleuropa Nutzenergie vorrangig als Strom aus Windkraft und Photovoltaik zur Verfügung stehen. Damit werden strombasierte Herstellungsverfahren attraktiv und die Prozessindustrie wird insgesamt zunehmend elektrifiziert werden. Für die thermische Trenntechnik ist die Bereitstellung von Prozesswärme für thermische Trennverfahren essenziell. Dafür sind passfähige Power-to-Heat-Konzepte zu entwickeln. Diese müssen intelligent ausgelegt sein, um Wärme bedarfsgerecht bereitzustellen, Wärmeverluste zu minimieren und die betriebliche Flexibilität nicht zu stark einzuschränken. Darüber hinaus ergeben sich im Rahmen der Elektrifizierung von Trennapparaten Möglichkeiten, neue Ansätze zur Prozessintensivierung umzusetzen.

Das Verständnis und die bewusste Ausnutzung der Prozessdynamik werden zunehmend eine wichtige Rolle spielen. Sei es bei der Intensivierung von Stofftransportvorgängen im Sekundenbereich, bei der Integration von stoff- und wärmespeichernden Funktionalitäten in periodisch betriebenen hybriden bzw. multifunktionalen Apparaten im Minuten- und Stundenbereich oder für Prozesse, die im Stunden- bis Tagebereich flexibel betrieben werden; in zunehmenden Maße werden instationäre Betriebsmodi mithilfe von dynamischen Simulationen zu beschreiben und auszulegen sein. Von daher sollten Forschungsvorhaben gezielt zur robusten Entwicklung dynamischer Simulationsmethoden und darauf anwendbaren Optimierungsmethoden vorangetrieben werden.

Eine Brückenfunktion zwischen mehr grundlegender und anwendungsbezogener Forschung in der Industrie kann hier die außeruniversitäre Forschung durch den Betrieb großskaliger Infrastrukturen bieten. Beispiele hierfür sind Demonstrationsanlagen, Großgeräte für die Materialforschung oder auch rechen-technische Einrichtungen (High Performance Computing).

Zusammengefasst wird deshalb empfohlen auf den folgenden Forschungsthemen von Industrie und Academia breit getragene Forschungsinitiativen zu initiieren:

- » Entwicklung von Methoden für eine validierte mehrphasige Strömungssimulation und für die Abbildung von Phasenbildungsvorgängen zur Auslegung von Stofftrennungen
- » Entwicklung mehrskaliger Modellansätze zur (experimentell) validierten Simulation großvolumiger Apparatevolumina
- » Entwicklung von für die Chemische Industrie passfähigen Energieeintrags- und Energieverwertungskonzepten (Elektrifizierung)
- » Entwicklung hybrider bzw. integrierter Apparatekonzepte insbesondere kleinere und flexiblere Anlagenkonzepte
- » Entwicklung dynamischer Simulationsmethoden (inklusive von Optimierungsverfahren) und deren Übertragung und Anwendung auf reale Probleme



DECHEMA

Gesellschaft für Chemische Technik
und Biotechnologie e.V.

Theodor-Heuss Allee 25
60486 Frankfurt am Main

Telefon: 069 7564-0

Telefax: 069 7564-117

E-Mail: info@dechema.de