



Chemische Industrie

Die chemische Industrie ist als Zulieferer für die Kunststoffindustrie, aber auch für die Agrar- und Nahrungsmittelbranche, von großer Bedeutung für Wirtschaft und Gesellschaft. In Deutschland, der größten Chemienation Europas, nimmt sie einen essentiellen Platz ein. Wir unterstützen Unternehmen in der chemischen Industrie sowohl in der Prozess- als auch in der Produktionsoptimierung; unsere Werkzeuge sind hier Modellierung, Simulation und Optimierung (MSO).

KI trifft auf 100 Jahre Ingenieurskunst

Die Innovationsplattform KEEN (Künstliche Intelligenz Inkubator Labore in der Prozessindustrie) soll den Einsatz von KI-Technologien und KI-Methoden in der Prozessindustrie beschleunigen. Mitarbeitende des Bereichs »Optimierung« bringen ihr Know-how rund um die Digitalisierung der chemischen Produktion in das Projekt ein.

Die chemische Industrie gilt seit mehr als 100 Jahren als treibend für Fortschritt in Deutschland. Das Projekt KEEN vereint insgesamt 20 Start-ups, Konzerne und Forschungseinrichtungen. Zusammen arbeiten die Beteiligten daran, die Erfahrungen der traditionell wissensbasierten Industriewelt mit den Möglichkeiten der Künstlichen Intelligenz auf neue Wege zu führen. Denn klar ist: »KI alleine wird nicht funktionieren. Es kommt darauf an, Wissen und Daten zusammenzubringen, um in der Praxis einen Nutzen zu entfalten«, sagt PD Dr. Michael Bortz.

Was wäre wenn ...

Dafür gibt es am Fraunhofer ITWM zwei Teilprojekte: Im ersten Schritt müssen Stoffe und Stoffgemische modelliert werden, damit KI für eine Vorhersage von Stoffeigenschaften genutzt werden kann. Im zweiten Schritt folgt die Durchführung von Prozesssimulationen. »Erst wenn wir wissen, wie sich Stoffe verhalten, können wir beispielsweise überhaupt ein Verfahren zur Trennung entwerfen«, so Bortz.

Konkret arbeitet das Team an einem Entscheidungsunterstützungssystem, mit dem »was-wäre-wenn«-Szenarien in Echtzeit durchgeführt werden können. Durch den Einsatz von KI gelingt es auch bei rechenintensiven und zeitaufwändigen Prozesssimulationen, die Auswirkungen von Änderungen im Prozess in Echtzeit darzustellen: »Wir setzen KI-Modelle auf, die wir mit Simulationsdaten trainieren, und die dann erheblich schneller rechnen und



sogar echtzeitfähig sein können«, beschreibt Bortz die Vision.

Drei große Forschungsbereiche

Das KEEN-Konsortium erforscht drei große Themenbereiche: die Modellierung von Prozessen, Produkteigenschaften und Anlagen, das Engineering sowie die Realisierung selbstoptimierender Anlagen. Die Forschungsarbeiten laufen bis 2023. Bis 2025 sollen die ersten kommerziellen KI-Produkte für die Prozessindustrie verfügbar sein. Das Projekt wird zu 60 Prozent gefördert vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie und verfügt über Gesamtfördermittel von 23 Millionen Euro.

Kontakt

PD Dr. Michael Bortz
Abteilungsleiter »Optimierung –
Technische Prozesse«
Telefon +49 631 31600-4532
michael.bortz@itwm.fraunhofer.de



Weiterführende Informationen gibt es auf der Website unter www.itwm.fraunhofer.de/keen

Chemische Formulierungen risikoarm optimieren



Gute Entscheidungsgrundlagen sind das Ziel von FORCE.

Ein erfolgreiches Produkt zu verändern, erfordert gewissen Mut. Kosten und Nutzen müssen miteinander abgewogen werden, um die Entscheidung auf soliden Grundlagen zu treffen. Im Projekt FORCE (Formulations and Computational Engineering) entwickeln Forschende des Fraunhofer ITWM ein System, das solche Entscheidungen unterstützt.

Der Mensch ist ein Gewohnheitstier. Wenn das Lieblingsshampoo sich plötzlich anders anfühlt, empfinden viele das als störend und wechseln eventuell das Produkt beim nächsten Kauf. »Unternehmen tun sich nicht leicht damit, chemische Formulierungen erfolgreicher Produkte zu verändern, ganz gleich, ob das im kosmetischen Bereich ist oder in anderen Branchen«, sagt Dr. Peter Klein, der als Wissenschaftler im Bereich »Optimierung« das Projekt FORCE leitet.

Konsequenzen abschätzen – Entscheidungen treffen

Ziel von FORCE ist es, ein Business Decision Support System (BDSS) zu entwickeln, das speziell auf die Optimierung chemischer Formulierungen zugeschnitten ist. Das softwaregestützte Optimierungs- und Entscheidungssystem soll die Geschäftsprozesse der Produktoptimierung, Entwicklung und der Qualitätskontrolle abdecken. Um möglichst nah an den Be-



Links: Zehn internationale Projektpartner waren an FORCE beteiligt – zum Auftakt kam das gesamte Team zusammen.

Rechts: Neuer Duft, andere Haptik? Veränderungen im Produktionsprozess müssen gut überlegt sein.



dürfnissen der Industrie zu sein, werden Fallbeispiele aus drei unterschiedlichen Unternehmen mit ihren speziellen Produkten herangezogen: Projektpartner sind Dow Benelux (PU-Schäume zur Wärmeisolierung), Megara Resins SA (PU-basierte Flüssigkeiten für Farben, Lacke oder Druckerpatronen) sowie Unilever UK Central Resource Ltd. (Shampoos).

»Produktionsprozesse sind komplex. Wer in diese eingreift, muss sehr viele Parameter berücksichtigen«, so Klein. »Unsere Plattform soll dem Nutzenden daher offenlegen, was

welche Stellschrauben bewirken und verschiedene Optionen aufzeigen.« Letztlich gehe es immer darum, bestmögliche Kompromisse zwischen Zielen zu finden, die miteinander im Konflikt stehen. Das System zeigt seinen Anwenderinnen und Anwendern die bestmöglichen Kompromisse anhand von Pareto-Fronten.

Interaktive Entscheidungsfindung

Für eine Entscheidungsstrategie stellt man dabei beispielsweise gegenüber, welche Stoffe man in ihren Konzentrationsverhältnissen verändern kann und erhält dann Ergebnisse, die es zu bewerten gilt: »Dann heißt es abwägen. Man stellt zum Beispiel die Produktionskosten der Qualität gegenüber«, beschreibt Klein ein typisches Dilemma. »Diesen Prozess können wir durch eine interaktive Entscheidungsfindung unterstützen, etwa indem wir simulieren, dass sich durch die Veränderung von Attributen aus dem chemischen Prozess die Konsistenz eines Shampoos ändert. Auf dieser Basis kann man entscheiden, ob das Produkt auch weiterhin der Erwartungshaltung seiner Zielgruppe entspricht und ob die eingesparten Produktionskosten für die spürbare Veränderung am Produkt in Kauf zu nehmen sind.«

Zusätzlich bindet das BDSS auch Nebenbedingungen ein, etwa die Gesetzgebung oder bestimmte Standardwerte, die auch veränderbar sein müssen: Ändert sich eine Verordnung, müssen die Performanzindikatoren in der Formel erneuert werden. Für die Nutzerinnen und Nutzer der Software heißt das, dass sie ein Optimierungsproblem inklusive neuer Nebenbedingungen immer wieder überprüfen können. »Gleiches gilt für den Preis, wenn man Produktions- und Materialkosten mit technischen Wünschen zusammenbringt: Wir können verschiedene Zutaten für ein gleiches Ergebnis simulieren und dabei die Kostenfrage überprüfen.«

Das Projekt FORCE startete im Januar 2017 und endete nach Verlängerung im März 2021. Es wird im Rahmen der Säule »Leadership in Enabling Industrial Technologies LEIT« des EU Programms H2020 gefördert.

 Weiterführende Informationen gibt es auf unserer Website unter www.itwm.fraunhofer.de/force

Kontakt

Dr. Peter Klein
Bereich »Optimierung«
Telefon +49 631 31600-4591
peter.klein@itwm.fraunhofer.de



Take a seat – Simulation der PU-Schaumexpansion beim Spritzgießen von Autositzen

Autositze haben eine komplexe Struktur: Rahmen, tragende Strukturen, Heizsysteme sowie Rücken- und Sitzpolster. Letztere werden aus Polyurethanschäumen (PU-Schaum) hergestellt – oft auch in unterschiedlichen Härtegraden. Das ITWM-Tool FOAM simuliert den Expansionsprozess bei der Herstellung solcher PU-Schäume – und zwar in beliebigen Geometrien und mit der Möglichkeit, Schaumbildung sowie die Schaumdichte bereits digital vorab zu berechnen.

Simulation ermöglicht Vorhersage: Wie breitet sich Schaum aus?

Optimales Ausschäumen als komplexer Prozess

Der Prozess unterteilt sich in folgende Schritte: Zunächst wird das Material in eine offene Form gespritzt, dabei fängt der Schaum bereits an zu expandieren. Danach wird die Form geschlossen und es ist möglich, das Fließen des Schaumes durch Kippen in eine bestimmte Richtung zu beeinflussen. In der geschlossenen Form dehnt sich der Schaum weiter aus, bis er den gesamten Hohlraum ausfüllt. Sowohl Einspritzwege als auch die Menge des Materials sind für die Einspritzphase bedeutend, um am Ende des Prozesses eine gleichmäßige Schaumdichte zu erhalten.

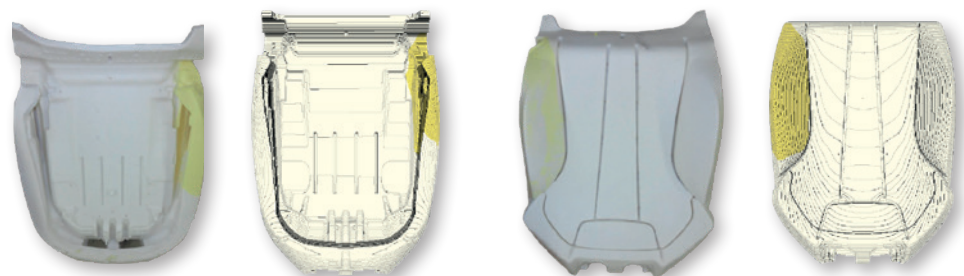
Zu beachten ist zudem, dass beim Aufschäumen Kohlendioxid freigesetzt wird. Dieser Gasüberschuss wird meist durch Entlüftungen aus der Form abgeführt. Dabei ist wiederum die Anordnung der Entlüftungen wichtig, da eine falsche Platzierung zu Gasblasen oder großen Hohlräumen führen kann. All diese genannten

Aspekte im Prozess berücksichtigen wir mit unserem Tool FOAM in der Simulation.

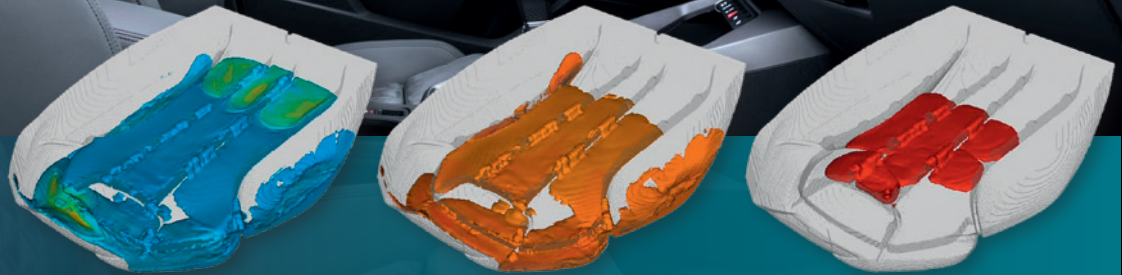
Projektziel und Zusammenarbeit: Vom Experiment zur Simulation

Ziel des Projekts zwischen Fehrer Automotive, Audi und unserem Institut ist es, diese Stärken von FOAM zu validieren. Dabei lag unser Augenmerk vor allem auf der Vorhersage der Expansion von PU-Schaum – auch in einer realen Autositzgeometrie. Letztere wurde von Audi zur Verfügung gestellt, während Fehrer Automotive die Durchführung der Experimente übernahm.

Zu Beginn des Projekts wählte das Team zwei Schaumsysteme aus und führten für jedes System von Fehrer vereinfachte Schaumexpansionsversuche durch. Diese gaben Aufschluss über die zeitliche volumetrische Expansion sowie die Entwicklung der Schaumtemperatur. Eine bestimmte Menge Schaummaterial wurde in ein zylindrisches Rohr eingespritzt. Die



Die Simulationen (jeweils rechts) zeigen die sehr gute qualitative Übereinstimmung mit den Experimenten bezüglich der Lage einer Gießbahn (gelb) in Ober-/Unteransicht.



»Das ITWM hat eine einzigartige Kompetenz in der virtuellen Abbildung komplexer physikalischer Prozesse, von der physikalischen und mathematischen Modellierung bis zur effizienten numerischen computergestützten Berechnung. Die Zusammenarbeit mit dem ITWM ist stets angenehm und unkompliziert.«

Dr.-Ing. Johannes Spahn
Audi AG

Schaumhöhe wurde an der Mittellinie und die Schaumtemperatur an der Sensorposition fünf cm vom Boden gemessen. Diese Daten stellten die Basis für den Identifikationsschritt der Eingangsparameter des FOAM-Modells dar. Auf dieser Grundlage kalibrierten wir die Eingabedaten des Modells so, dass sie mit den Experimenten übereinstimmten.

Nach erfolgreicher Modellkalibrierung wurden Validierungstests in einer Kasten geometrie durchgeführt, dabei wurden verschiedene Konfigurationen getestet. In allen Fällen galt es eine Materialmenge in den offenen Kasten einzuspritzen. Die Form wurde nach dem Schuss mit einem transparenten Deckel geschlossen und die Schaumausdehnung mit einer Kamera ge-

filmt. So konnte die Entwicklung der Schaumfront genau beobachtet und zur Validierung der Simulationsergebnisse genutzt werden. Zwischen solchen Experimenten, auch mit der realen Autositzgeometrie von Audi, und der Simulation konnten sehr gute qualitative Übereinstimmung festgehalten werden.

FOAM hat sich als Simulationstool zur Vorhersage der Schaumströmungsausdehnung in komplexen Bereichen bewiesen. Es ermöglicht die Erprobung verschiedener Injektionspfade und der korrekten Entlüftungspositionierung in frühen Designphasen. Mit dem Einsatz von FOAM sparen Unternehmen nicht nur eine große Anzahl an experimentellen Versuchen, sondern auch Zeit und Kosten.

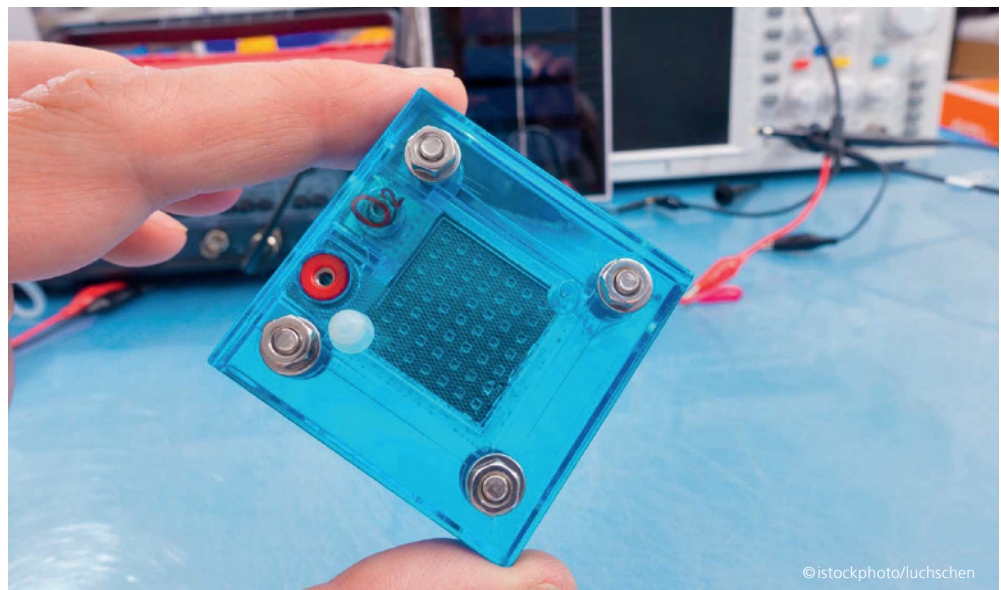
Kontakt

Dr. Dariusz Niedziela
Abteilung »Strömungs- und
Materialsimulation«
Telefon +49 631 31600-4545
dariusz.niedziela@itwm.fraunhofer.de



Weiterführende Informationen inklusive Simulationsvideos gibt es auf der Website unter www.itwm.fraunhofer.de/pu-simulation-autositz

Wasserstoffelektrolyse im Kleinen verstehen – Großes für grünere Energie erreichen



Wasserstofftechnologien gelten als wegbereitend für klimaneutrale Mobilität, als hoffnungstragend für die klimaneutrale Gestaltung der Energiewirtschaft und der chemischen Industrie. Doch dafür gilt es die chemischen Prozesse der Zellen besser zu verstehen. Ein Team der Abteilung »Transportvorgänge« unterstützt bei der Auslegung und Optimierung der Zellen mit neuartigen Simulationsmethoden.

Die Brennstoffzelle scheint der ideale Fahrzeugantrieb: leise, sauber und unabhängig von Öl. Der dafür benötigte Wasserstoff kann über die Elektrolyse aus grünem Strom gewonnen werden. Eine Elektrolysezelle ähnelt einer Brennstoffzelle, nur dass der gesamte Prozess umgekehrt abläuft: Unter Einsatz von elektrischer Energie wird Wasserstoff durch die Aufspaltung von Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff gewonnen. Eine Zelle besteht unter anderem aus zwei metallischen Platten (Bipolarplatte) und einer Membran. »Ganz entscheidend für die Leistung der Zelle ist die Strömungsdynamik der Bipolarplatte«, so Dr. Christian Leithäuser aus der Abteilung »Transportvorgänge«. »Diese wollen wir so gestalten, dass der entstehende Sauerstoff ausreichend schnell abge-

leitet wird, um die Zelle effizienter zu machen. Dazu simulieren wir ein Multiphysics-Problem und nutzen Formoptimierungsmethoden.«

Doktorarbeit mündet in Simulationstool CASHOCS zur Auslegung

Diese Thematik der »Auslegung von Bipolarplatten für die Wasserstoff-Elektrolyse« hat sein Kollege Sebastian Blauth in seiner Doktorarbeit genauer untersucht: »Auf Basis meiner Arbeit ist ein Open-Source-Softwarepaket mit dem Namen CASHOCS entstanden«, berichtet Blauth. Das steht für »Computational, Adjoint-Based Shape Optimization and Optimal Control Software«. »Inzwischen ist CASHOCS ein ge-

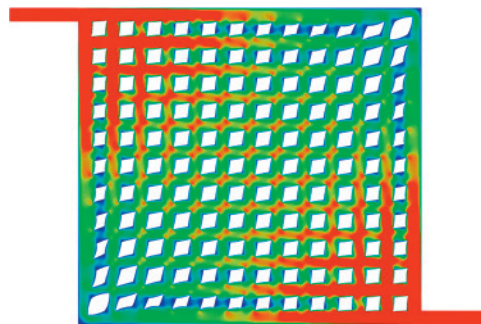
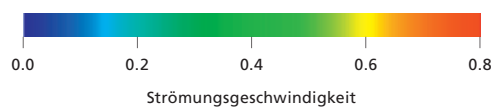
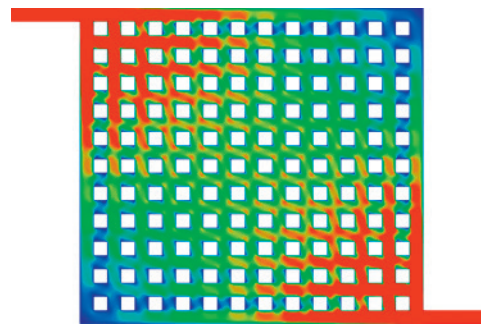
nerisches Werkzeug, das wir jetzt auch für die Auslegung von chemischen Reaktorkomponenten einsetzen«. Ähnliche Fragestellungen ergeben sich bei der strömungsdynamischen Stackauslegung. Auch hier ist es wichtig, dass alle Zellen möglichst gleichmäßig und ohne größere Druckverluste angeströmt werden.

Beispiel PEM-Elektrolyse: Frei von Todzonen optimieren

Bei der Proton Exchange Membrane (PEM) Elektrolyse wird über die Bipolarplatte auf der Anodenseite Wasser zugeführt. Dieses wird ebenfalls durch die Zuführung von Energie in Wasserstoff (H₂) und Sauerstoff (O₂) aufgespalten. Der Wasserstoff wandert durch die Membran und wird auf der Kathodenseite aufgefangen. Der entstehende Sauerstoff muss über die Bipolarplatte auf der Anodenseite abgeführt werden, damit die Zelleffizienz nicht sinkt.

Die Bipolarplatte sollte also immer gleichmäßig durchströmt sein – ohne sogenannte Todzonen, aus denen der Sauerstoff nicht schnell genug entweicht. Die Grafik rechts illustriert die Auslegung mit dem Tool CASHOCS. Oben ist das Referenzdesign dargestellt mit der Zuführung in der linken oberen Ecke und dem Abfluss in der rechten unteren Ecke. Die Strömungsgeschwindigkeit ist über die Farbigkeit abgebildet. In der linken unteren und der rechten oberen Ecke der Referenz-Bipolarplatte befinden sich Todzonen mit schlechter Durchströmung. Die untere Grafik zeigt eine bereits optimierte Bipolarplatte. Der Algorithmus des Tools manipuliert die Referenzgeometrie so lange auf geschickte Weise, bis eine gleichmäßige Durchströmung bestmöglich erreicht ist. Die optimierte Bipolarplatte ist dann frei von Todzonen.

Insbesondere eröffnet ein solcher Ansatz mit digitalem Zwilling einen detaillierten Einblick in die komplexen Vorgänge innerhalb der Mi-



Optimiertes Stack-Design: Zwei Bipolarplatten vor und nach der Formoptimierung.

Blau Bereiche sind Todzonen mit unzureichender Durchströmung (Referenz oben, Optimierung unten).

crostrukturen, der rein experimentell gar nicht möglich wäre. In die Zukunft geschaut: Eine Umsetzung des neuen Designs ist mittlerweile mit additiven Fertigungsverfahren problemlos möglich. Die Entwicklungsergebnisse werden so in die nächste Generation von Elektrolysezellen einfließen.

Kontakt

Dr. Christian Leithäuser
Abteilung »Transportvorgänge«
Telefon +49 631 31600-4411
christian.leithaeuser@
itwm.fraunhofer.de



Mehr zum Schwerpunkt »Strömungsdynamische Prozessauslegung«
www.itwm.fraunhofer.de/tv-prozessauslegung



Mehr zum Tool CASHOCS: www.pypi.org/project/cashocs/