

Der digitale Zwilling: Erlernen aktueller Methoden in der (Bio-) Reaktionstechnik zur Prozessmodellierung und -simulation anhand der Software gPROMS

1 Antragsteller/in

Lehrstuhl Bioprozesstechnik

Dr. Georg Hubmann, Prof. Stephan Lütz

Lehrstuhl Reaction Engineering and Catalysis

M.Sc. Lisa Eckendörfer, M.Sc. Moritz Langer, Prof. Hannsjörg Freund

2 Kurzbeschreibung des Projektes

In der (Bio-)Reaktionstechnik werden in zunehmendem Maße Verfahren und Prozesse in Form von komplexen dynamischen Reaktormodellen zur Steuerung und Optimierung von chemischen und biokatalytischen Verfahren abgebildet, auch besser bekannt als digitaler Zwilling (digital twins). Um die Grundlagen zur Erstellung und Nutzung eines digitalen Zwillings den Studierenden näherzubringen, sollen in den Lehrveranstaltungen Bioreaktionstechnik und Reaktionstechnik zukünftig Übungen zur Modellierung und Simulation von komplexen Reaktionssystemen und Reaktionsnetzwerken in chemischen und biokatalytischen Verfahren erstellt werden. In diesen Übungen sollen Studierende in einfacher und intuitiver Weise reaktionstechnische Systeme modellieren und simulieren, um damit auch die Komplexität eines dynamischen Reaktionsablaufes und dessen mathematische Beschreibung anhand von Modellen und den jeweiligen Kennzahlen besser nachvollziehen zu können. Im Rahmen der Module Bioengineering II und Technische Chemie für die Bachelorstudiengänge Bio- und Chemieingenieurwesen werden die bestehenden Vorlesungs- und Übungseinheiten der Veranstaltungen Reaktionstechnik (1a & 1b) sowie Bioreaktionstechnik ergänzt, um die Grundlagen und Prinzipien der Modellierung und Analyse für die chemische Katalyse und Biokatalyse im Rahmen der Erstellung eines digitalen Zwillings zu vermitteln. Durch Modellierung, Implementierung und Simulation in der Software gPROMS, eine Standard-Software zur Modellierung und Analyse von Prozessen im Bereich der Verfahrenstechnik, sollen die Grundlagen der (Bio-)Reaktionstechnik gefestigt werden sowie die Studierenden eingeführt werden in die Modellierung dynamischer Reaktionssysteme.

3 Details zum Projekt

3.1 Istzustand vor Beantragung

Die Vorlesungen Bioreaktionstechnik und Reaktionstechnik vermitteln die Grundlagen der Reaktionstechnik von chemischen und biokatalytischen Prozessen. Die Basis beider Veranstaltungen bilden die Lehr- und Forschungstätigkeiten von Prof. David Agar und Prof. Hannsjörg Freund sowie Prof. Stephan Lütz. Um ein grundlegendes Verständnis der reaktionskinetischen Modellierung und der Reaktormodellierung zu lehren, werden reale Systeme zunächst unter stark vereinfachenden Annahmen betrachtet. Die daraus resultierenden Modellgleichungen lassen sich dann häufig analytisch lösen, was das Verständnis der grundlegenden Zusammenhänge vereinfacht. In der aktuellen Forschung und der industriellen Praxis hat allerdings die detaillierte Modellierung unter Verwendung numerischer Methoden dank rasanter Weiterentwicklung von Rechenkapazität und Modellierungsansätzen an außerordentlicher Bedeutung gewonnen. Diese Methoden erlauben inzwischen auch die Erstellung von digitalen Zwillingen und ermöglichen dadurch eine effiziente Prozessanalyse und -optimierung. Diesen veränderten Anforderungen an angehende Bio- und

Chemieingenieur*innen soll daher Rechnung getragen werden und die Veranstaltungen - insbesondere die Übungseinheiten - grundlegend überarbeitet werden. Um die Kenntnisse und Fähigkeiten der Studierenden im Hinblick auf die Analyse realer Systeme weiter zu festigen und entsprechendes Transferwissen im Bereich digitale Prozesse zu generieren sollen daher das Grundlagenwissen und die modernen Methoden der Prozessmodellierung und -simulation miteinander verknüpft werden.

3.2 Projektziel/Projektbeschreibung

Ziel des Projektes ist die Verbesserung der Qualität der Veranstaltung Bioreaktionstechnik und Reaktionstechnik durch Aktualisierung und Erweiterung im Zusammenhang mit der Erstellung und Nutzung des digitalen Zwillings in der (Bio-)Reaktionstechnik. In einem gemeinsamen QVM-Projekt der Lehrstühle Bioprozesstechnik (BPT) und Reaction Engineering & Catalysis (REC) sollen dahingehend neue Vorlesungs- und Übungseinheiten zur integrativen Modellierung eines Reaktionsprozesses unter Verwendung von state-of-the-art Software etabliert werden. Die bestehenden Vorlesungs- und Übungseinheiten sollen hierfür erweitert werden mit Lernbeispielen zur Modellierung, Analyse und Simulation von chemischen und biokatalytischen Reaktionsprozessen. Die neuen und überarbeiteten Vorlesungseinheiten sollen insbesondere den Studierenden im Bachelorstudium des Bio- und Chemieingenieurwesens die Theorie und die Methoden des digitalen Zwillings und dessen Bedeutung für die Prozesswissenschaften vermitteln. In den neuen Vorlesungs- und Übungseinheiten sollen daher über die allgemeinen Grundlagen der Reaktormodellierung hinaus Kenntnisse zur Modellierung komplexer realer Systeme und Simulation mit numerischen Methoden gelehrt werden. Begleitend zur Einführung in die Modellierung komplexer Systeme werden neue Übungen zur Erstellung, Analyse und Simulation eines digitalen Zwillings im Bereich der chemischen und biokatalytischen Verfahren erstellt. Als Modellierungsplattform soll dazu die Prozesssoftware gPROMS der Firma PSE verwendet werden. Durch neue Übungseinheiten mit praxisnahen chemischen und biokatalytischen Prozessen sollen Theorie und Methoden weiter vertieft werden. Die Software gPROMS ermöglicht den Studierenden dabei ein intuitives Lernen von Prozessmodellierungen anhand verschiedener Beispiele. PSE bietet hierfür die entsprechenden Lehrmaterialien zur Einführung in die Software und zur Reaktionsmodellierung auf ihrer Lernplattform PSE Academic Teaching Highway (PATH)¹ an, die für die weitere Verwendung in den Lehrveranstaltungen eingesetzt und den Bedürfnissen entsprechend angepasst werden können. Die erlernten Kompetenzen in der Reaktionsmodellierung sollen mittels einer komplexen Übungsaufgabe zur Modellerstellung, Analyse und Simulation eigenständig vertieft werden. Diese Übung ist Grundlage der Prüfungsvorleistung in beiden Lehrveranstaltungen und wird entsprechend anteilig für die Klausur angerechnet. Mittels eigenständiger Arbeit sollen die Studierenden sich hierfür in die Prozesssoftware einarbeiten, erlernte Inhalte aus den Vorlesungen auf konkrete Reaktionsprozesse und damit die Thematik der (Bio-)Reaktionstechnik anwenden und weiter vertiefen. Durch die Überarbeitung und Ergänzung der Veranstaltungen Bioreaktionstechnik und Reaktionstechnik können die Studierenden Grundlagen der Modellierung dynamischer Reaktionssysteme in industriellen Verfahren erlernen und Einblicke in die Nutzung von digitalen Zwillingen erhalten.

3.3 Einzelmaßnahmen, Schritte etc.

Die folgenden Einzelmaßnahmen zur Überarbeitung der Veranstaltungen Bioreaktionstechnik und Reaktionstechnik im Modul Bioengineering II und Technische Chemie der Bachelorstudiengänge Bio- und Chemieingenieurwesen sind geplant:

¹ <https://www.psepath.com/>

1. Konzeption und Überarbeitung der bestehenden und neuen Vorlesungseinheiten für die Veranstaltungen Bioreaktionstechnik und Reaktionstechnik
2. Optional: Beschaffung weiterer Lehlizenzen (sofern erforderlich) der Software gPROMS und Implementierung im PC-Pool; Fortbildungsmaßnahmen für die Dozent*innen und Übungsleiter*innen durch eine/en geschulte/en Trainer*in für die Software gPROMS
3. Konzeption und Überarbeitung der Vorlesungs- und Übungseinheiten im Hinblick auf die komplexe Prozessmodellierung:
 - a. Einführung in die Modellierung mit der Software gPROMS
 - b. Erstellung einer Übungseinheit für eine chemische Reaktion in einem Grundreaktortyp
 - c. Erstellung einer Übungseinheit für eine biokatalytische Reaktion/Fermentation in einem Grundreaktortyp
 - d. Erstellung einer komplexen Hausaufgabe zur (Bio-)Reaktionsmodellierung als Teil der Prüfungsvorleistung
4. Implementierung der neuen Übungseinheiten im PC-Pool, Abstimmung der Vorlesungen und Übungseinheiten für den PC-Pool
5. Durchführung der Übungen in den Veranstaltungen Bioreaktionstechnik und Reaktionstechnik
6. Evaluation der neuen Vorlesungs- und Übungseinheiten mittels Fragebogen und Einarbeitung der Kritik

3.4 Geplante Laufzeit

Das Projekt soll im August 2022 gestartet werden mit einer Gesamtlaufzeit von 7 Monaten. Die neuen Übungen sollen zum Wintersemester 2022/23 zur Verfügung stehen.

3.5 Indikatoren zur Evaluation des Projektes

- Neue Vorlesungs- und Übungseinheiten sind erstellt für das kommende Wintersemester 2022/23
- Die Veranstaltungen Bioreaktionstechnik und Reaktionstechnik sind mit den ergänzenden Inhalten und Modellierungsübungen im neuen Format im Wintersemester 2022/23 durchgeführt
- Die Vorlesungs- und Übungseinheiten wurden evaluiert und ggf. überarbeitet für die kommenden Veranstaltungen

3.6 Nachhaltigkeit/Verstetigung

Bei erfolgreicher Durchführung der Veranstaltungen werden die Vorlesungs- und Übungseinheiten regelmäßig im Wintersemester für die Bioreaktionstechnik und Reaktionstechnik im Modul Bioengineering II und Technische Chemie für die Bachelorstudiengänge Bio- und

Chemieingenieurwesen angeboten. Durch die Verstetigung des QVM-Projektes wird eine aktuelle Methodenkompetenz hinsichtlich der Grundlagen der Modellierung dynamischer Reaktionssysteme in industriellen Verfahren in den Studiengängen Bio- und Chemieingenieurwesen gewährleistet. Nach erfolgter Aufbauarbeit wird die Betreuungsarbeit über die Lehrstühle sichergestellt. Des Weiteren wird ein Übertrag und eine mögliche Verwendung der Software gPROMS für andere Vorlesungen geprüft. Als konkrete mögliche Beispiele können hier die Veranstaltung Mikrobioreaktionstechnik, die Vertiefung im Wahlmodul Data Science in Bioengineering, Systembiotechnologie, die Vertiefungsveranstaltung Reaktionstechnik und eine geplante Vertiefung des Lehrstuhls REC zum Thema Modellierung genannt werden. Aber auch darüber hinaus können weitere Verknüpfungen mit bestehenden Veranstaltungen der Fakultät BCI durchgeführt werden.