

ve Produktionsprozesse zu entwickeln, klimaneutrale Energiequellen zu nutzen und mit Recycling weniger Ressourcen zu verbrauchen. „Wir haben viele Ideen und Möglichkeiten, uns diesem Ziel zu nähern“, sagt Franz Kirchhoff, Leiter der Abteilung für Prozessmodellierung und Konzeptionierung bei Covestro. „Deshalb brauchen wir ein Werkzeug, das uns hilft, schnell und effizient die wirtschaftlichen, technischen und nachhaltigen Vorteile eines Produktionsprozesses einzuschätzen.“

Dafür nutzt Covestro den Aveva Process Simulator, der mit den Covestro-Prozessmodellen sowie gängigen Materialien und Molekülen für die Polymerproduktion vertraut ist. Herstellprozesse für Polymere sind schwer zu simulieren, da sie feste Produktionsschritte und die Prinzipien der Thermodynamik berücksichtigen müssen. Nötig ist eine flexibel anpassbare Software, welche die Grundlagen der Polymerproduktion auf neue Prozesse anwenden kann.

Auf dem Weg zur Klimaneutralität sind biobasierte Materialien aus nachwachsenden Rohstoffen wichtig, weshalb Covestro diese Moleküle in die Simulationen einfließen lässt. Zudem geht es um recycelbare Polymere, die sich als Teil der Kreislaufwirtschaft wiederverwenden lassen – das schont Ressourcen und spart das Entsorgen der chemischen Substanzen. Um die Polymerherstellung günstiger und nachhaltiger zu gestalten, simuliert Covestro Verfahren mit Variablen wie niedrigeren Temperaturen, verringertem Druck und nachhaltig erzeugtem Dampf.

Simulationen für den Vorsprung

Um zu prüfen, wie skalierbar die simulierten Verfahren und neuartigen Polymere sind, führt die Software alle Daten zusammen. Dabei lassen sich Gleichungen für Fließschemata in den Process Simulator

integrieren. Die offene Architektur mit eingebauter Skripterstellung in Python erlaubt es, die Software anzupassen, um sie für Sensitivitätsanalysen und Rastersuchen nach Parametern wie Temperatur und Druck zu optimieren. Durch das Verknüpfen mit Microsoft Excel lassen sich die Daten für Massen- oder Energiebilanzen exportieren und über die Schnittstelle aktualisieren. Die automatisierte Übertragung beugt zudem Fehlern und Zeitverlusten vor, die beim manuellen Datenübertragen häufig sind.

Präzise und schnell verfügbare Simulationsergebnisse sollen Covestro auf dem Markt der biobasierten und recycelbaren Polymere einen Vorsprung sichern. Werden neue nachhaltige Verfahren zunächst mit einer Prozesssimulationssoftware modelliert, lässt sich schnell von der Konzeptions- zur Testphase übergehen. Mit geringem Programmieraufwand lassen sich mehrere Szenarien erproben, um nur in die Prozesse und Materialien mit den größten Erfolgchancen zu investieren. Covestro etabliert nun aufgrund der Simulationsergebnisse erste Laborversuche, um die Vorhersagen der Simulationen zu verifizieren und Testläufe der neuen Produktionsprozesse durchzuführen.

Fazit

Die chemische Industrie muss zügig agieren, um die Wende zur Nachhaltigkeit zu schaffen. Kluge Lösungen können sich immens auf viele weitere Industriezweige auswirken. Die digitale Transformation, Connected Industrial Ecosystems und die Prozesssimulation bieten dabei nicht nur die Möglichkeit, Produktionsprozesse zu optimieren, sondern auch die Grundlagen der Kreislaufwirtschaft in die Tat umzusetzen. ■

Lisa Wee arbeitet als Global Head of Sustainability bei Aveva.

Blick nach Asien

Markierter Harnstoff | Chinas Jahresbedarf an ^{14}C für Wissenschaft und Medizin beträgt etwa 100 Curie. 40 Curie davon dienen dazu, *Helicobacter pylori* mit markiertem Harnstoff nachzuweisen. Den chinesischen Markt deckt das Kernkraftwerk Qinshan in der Provinz Zhejiang mit einem Verbund, der isotonenmarkierte Verbindungen herstellt. An der Massenproduktion von ^{177}Lu und ^{90}Y -Verbindungen wird gearbeitet.

Hydroxylamin | Ein Team an der University of Science and Technology of China hat Hydroxylamin mit einem plasma-elektrochemischen Kaskadenprozess unter Normaldruck bei Raumtemperatur erzeugt. Dabei lieferte die Plasmabehandlung von Umgebungsluft und Wasser eine Salpetersäurelösung. Ein Bismutkatalysator elektroreduzierte diese selektiv zu Hydroxylamin. *Nat. Sustain.*, doi: 10.1038/s41893-024-01330-w

Benzin aus Polyethylen | Ein chinesisches Team hat Polyethylen in Benzin gewandelt. Dieses bestand vor allem aus verzweigten Alkanen mit einer Oktanzahl von 88 (handelsüblich: 86,6). Die Umsetzung dauerte 4 Stunden bei $240\text{ }^\circ\text{C}$. *Nat. Chem.*, doi: 10.1038/s41557-024-01506-z

Gegen infektiöse Mücken | Die Anteile an Dengue-Fieber und Zika-Infektionen Erkrankter unterscheiden sich in benachbarten Provinzen im Südwesten Chinas. Im Darm der Mücken in weniger infizierten Gebieten unterbinden glukonsäurebildende Darmbakterien die Infektion. Dieses Mikrobiom stammt aus Brutgewässern und Pflanzennektar. Nun wollen die Forscher in Provinzen mit hohem Infektionsrisiko Pflanzen kultivieren, die das Mikrobiom der Stechmücken ändern. *Zum Science-Artikel: t1p.de/p1gao*

Rolf Schmid, www.bio4business.eu