

DeSimplify

Creating the configurable Process Modelling Architecture that acknowledges the complexity of chemical production systems

Programm / Ausschreibung	KS 24/26, COMET 2024, COMET-Module 2024	Status	laufend
Projektstart	01.01.2026	Projektende	31.12.2029
Zeitraum	2026 - 2029	Projektlaufzeit	48 Monate
Keywords	chemical process industry, process simulation, digital twin, CFD, DEM		

Projektbeschreibung

Die chemische Industrie steht am Anfang aller Wertschöpfungsketten, wodurch sie eine zentrale Rolle in der Umsetzung des European Green Deal einnimmt. Digitalisierung gilt als wegweisender Enabler für nachhaltige Prozesskonzepte und Arbeitsabläufe. Die Industrie hat durch die Anwendung modernster Modellierungstechniken damit begonnen, (große) Datensätze zur Optimierung der Prozesse zu nutzen. Der nächste Schritt ist die Einführung von Künstlicher Intelligenz (KI)/Maschinellern (ML), um zuverlässige Digitale Zwillinge (DT) bereitzustellen. Das etablierte anlagenbasierte Konzept der Industrie 4.0 konzentriert sich primär auf die reibungslose Automatisierung der Fertigung durch nahtlosen Informationsaustausch über eine standardisierte Architektur, berücksichtigt aber nicht die Komplexität der chemischen Prozessindustrie, was in einer stark vereinfachten Darstellung resultiert. Die inhärente Komplexität chemischer Prozesse liegt in der Vielfalt der Stoffumwandlungen und Phasenübergänge, die sich über Raum und Zeit hinweg erstrecken. Industrielle (bio-)chemische Prozesse finden auf großen, makroskopischen Skalen statt, beruhen aber im Kern auf mikroskopischen Mechanismen in unterschiedlichen, aber interagierenden Längen- und Zeitskalen (d. h. physikalische, chemische und biologische Phänomene). Hochauflösenden, detailgetreuen Modelle, die für die Realisierung eines modellbasierten digitalen Zwillings (Model-Based Digital Twin, MB-DT) erforderlich sind, sind derzeit zu langsam und auf einzelne Prozessschritte limitiert.

DeSimplify begegnet dieser Herausforderung mit isaPMA, einer integrierten, intelligenten und innovativen Prozessmodellierungsarchitektur, deren Hauptziele darin bestehen, (i) den Trade-off zwischen Genauigkeit und Geschwindigkeit zu überwinden durch Einführung der notwendigen Komplexität für eine präzise virtuelle Prozessdarstellung und (ii) flexible, wiederverwendbare und nachhaltige Workflows zu generieren. Es wird eine parallelisierte Open-Source-Plattform für die detaillierte und effiziente Simulation industrieller Multi-Skalen- und Multi-Physik-Workflows einschließlich der für die (bio)chemische Prozessindustrie erforderlichen Funktionalitäten entwickelt. Außerdem werden Richtlinien, Arbeitsabläufe und Werkzeuge für die Erstellung von schnellen und robusten Surrogatmodellen auf Grundlage von High-Fidelity-Simulationsdaten für die weitere Implementierung in Echtzeitarchitekturen entwickelt. isaPMA berücksichtigt die FAIR-Modellierungsprinzipien, basiert auf offenen Plattformstandards, ist erweiterbar und kann neue Entwicklungen, einschließlich datenbasierter Modelle, einfach aufnehmen.

DeSimplify wird eine normative Architektur liefern, die auf die speziellen Anforderungen der chemischen Industrie und darüber hinaus konfigurierbar und aufgebaut ist. Das ist die zukunftsweisende Technologie, die benötigt wird, um den Weg

für eine MB-DT-basierte Prozesssteuerung zu ebnen. Sie wird eine integrierte, ganzheitlich ausgelegte Prozesssimulation ermöglichen und dabei Echtzeitfähigkeit und flexible Konfiguration gewährleisten, was Interoperabilität zwischen verknüpften Modellkomponenten und die Wiederverwendbarkeit von gekoppelten Modellierungsmethoden erlaubt. Eingebettet in das übergeordnete CHASE-Forschungskonzept wird die komplexe Architektur über eine KI-gestützte Translationsebene auch für Nicht-Experten zugänglich gemacht. Die Forschungsaktivitäten von DeSimplify werden einerseits durch die Expertise unseres Zentrums gestützt, das Modellierungskennntnisse, Data Science und industrielles Domänenwissen vereint. Zusammen mit 17 (einschließlich 11 internationalen) Partnern aus Wissenschaft und Industrie und deren aktiver Beteiligung am internationalen wissenschaftlichen Sounding Board von DeSimplify wird sich CHASE als international anerkannte Spitzenforschungseinrichtung etablieren, mit einem starken Leistungsversprechen für die Umsetzung modellbasierter digitaler Zwillinge in die Praxis.

Abstract

Through its upstream positioning, the chemical industry has a significant impact on all value chains, resulting in a pivotal enabling role for the realisation of the European Green Deal. Digitalisation is expected to enable sustainable process designs and operations. By applying state-of-the-art modelling techniques, the industry started to leverage (big) data for optimising unit operations. As a next step, Artificial Intelligence (AI)/Machine Learning (ML) shall be introduced to deliver reliable Digital Twins (DT). The established, asset-based concept of industry 4.0 focuses mainly on smooth automation of manufacturing through seamless sharing of information through a standardized architecture but does not acknowledge the complexity of the chemical process industries resulting in oversimplified representations. The inherent complexity of chemical processes lies in the diversity of material conversions and phase transitions that evolve in space and time. Industrial (bio-)chemical processes take place on large, macroscopic scales, but at their core, they are entirely based on microscopic mechanisms at different but interacting length and time scales (i.e. physical, chemical, and biological phenomena). High-resolution, high-fidelity models required to realize a Model-Based Digital Twin (MB-DT) are currently too slow and limited to specific unit operations.

DeSimplify tackles this challenge by creating an integrated, smart, and advanced Process Modelling Architecture (isaPMA) with (i) the elimination of the accuracy-speed trade-off re-introducing as much complexity as necessary for accurate virtual process representation and (ii) the versatile, reusable, and sustainable workflow generation as its core objectives. A multi-architecture parallelized open-source platform for detailed and efficient simulation of industrial multi-scale, multi-physics unit operations including the needed functionalities for (bio)chemical process industries will be built. Guidelines, workflows and tools for deriving fast and robust surrogate models based on the high-fidelity simulation data will be established for further implementation in real-time architectures. isaPMA establishes FAIR modelling principles, is based on open platform standards, extendible, and readily accommodates new developments including data-based models.

DeSimplify will deliver a normative architecture configurable to and built on the specific requirements of the chemical industries and beyond. This is the breakthrough technology needed to pave the way for MB-DT based process control. It will enable integrated, end-to-end process simulation while ensuring real-time capability and flexible configuration permitting interoperability between linked model constituents and re-usability of coupled modelling methods. Embedded into the overall CHASE research concept, the complex architecture will be made accessible to non-expert users via an AI-based translation layer. DeSimplify's research activities are backed, on the one hand, by the expertise of our centre, combining modelling expertise, evolving data sciences and industrial domain knowledge. Together with 17 new (including 11 international) partners from science and industry and their active involvement in DeSimplify's international scientific sounding board, CHASE will establish itself as a top research institution of international recognition, with a strong value

proposition for bringing Model-Based Digital Twins into practice.

Projektkoordinator

- Competence Center CHASE GmbH

Projektpartner

- Boehringer Ingelheim RCV GmbH & Co KG
- Festo SE & Co. KG
- Karlsruher Institut für Technologie Institut für Chemische Verfahrenstechnik (CVT)
- Next Generation Recyclingmaschinen GmbH
- Technical University of Denmark Department of Chemical and Biochemical Engineering
- Technische Universität Wien Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und technische Biowissenschaften
- Thermoplastkreislauf GmbH.
- Universität Linz Department of Particulate Flow Modelling
- Universität Linz Institut für Chemische Technologie Organischer Stoffe
- Universität Wien Department für Funktionelle und Evolutionäre Ökologie