



H2Mare-Projekt PtX Wind

Entwicklung dynamischer Simulationsmodelle von offshore Power-to-X-Prozessen
für den Einsatz in digitalen Zwillingen

Sachbericht zum Verwendungsnachweis Teil II: Langfassung

Stand:	31.03.2026
Einreichungsdatum (TIB):	31.03.2026
Partnerin/Partner:	Max-Planck-Gesellschaft, vertreten durch das Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme
Autorin/Autor:	Alexander Geschke, Luisa Peterson, Kai Sundmacher
Fördertitel:	Verbundvorhaben H2Mare_VB2: PtX-Wind – Offshore Power-to-X-Prozesse
Förderkennzeichen:	03HY302M
Laufzeit:	01.04.2021 – 31.12.2025
Disclaimer:	<i>Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der Autorin/beim Autor/den Autoren.</i>

Gefördert durch:



Bundesministerium
für Forschung, Technologie
und Raumfahrt



Finanziert von der
Europäischen Union
NextGenerationEU

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	5
Symbolverzeichnis	6
Abbildungsverzeichnis	9
Tabellenverzeichnis	11
Ausführliche Darstellung der durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse im Vergleich zur ursprünglichen Vorhabensbeschreibung	13
I.1 Ursprüngliche Vorhaben	13
I.2 Offizielle Vorhabensänderungen und Abgrenzung der Arbeiten	13
I.3 Fortschritte	14
Definition und Struktur eines digitalen Zwillings	14
Pilotanlage und erweiterte Automatisierung	16
Modellentwicklung und -anwendung	20
Verwendung der Zuwendung	24
I.4 Darstellung der wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises	24
I.5 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten	24
Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse im Sinne des Verwertungsplans	25
Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens während der Laufzeit	26
Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen nach Nr. 5 der NKBF/NABF	27
Literaturverzeichnis	33

Abkürzungsverzeichnis

1D	Eindimensional
2D	Zweidimensional
ANN	Artificial Neuronal Network
AP	Arbeitspaket
Ar	Argon
BMBF	Bundesministerium für Bildung und Forschung
CH ₄	Methan
CNN	Convolutional Neural Network
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
DVGW-EBI	Deutscher Verein des Gas- und Wasserfaches e.V., Engler-Bunte-Institut
EWMA	Exponentially Weighted Moving Average
GN-SINDy	Greedy Nonlinear-SINDy
H ₂	Wasserstoff
He	Helium
IR	Infrarotspektroskopie
KIT-IMVT	Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Mikroverfahrenstechnik
MFC	Massendurchflussregler
MPI-PSE	Arbeitsgruppe Prozesstechnik des Max-Planck-Instituts für Dynamik komplexer technischer Systeme, Magdeburg
MS	Massenspektrometrie
N ₂	Stickstoff
NMPC	Nonlinear Model Predictive Control
OPC	Open Platform Communications

PEM	Proton Exchange Membrane
PLS	Prozessleitsystem
PtM	Power-to-Methane
PtJ	Projektträger Jülich
PtX	Power-to-X
qDoE	Quasi-stationäres DesiS of Experiments
RWGS	Reverse-Watergas-Shift
SINDy	Sparse Identification of Nonlinear Dynamical Systems
SiL	Software-in-the-Loop
ST-GNN	Spatio-Temporal Graph Neural Networks
UAP	Unterarbeitspaket
UniS-IER	Universität Stuttgart, Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung
UniS-IAS	Universität Stuttgart, Institut für Automatisierungstechnik und Softwaresysteme
WLD	Wärmeleitfähigkeitsdetektor

Symbolverzeichnis

Lateinische Symbole

c_p	Spezifische isobare Wärmekapazität	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
D	Durchmesser des Reaktors	mm
d_p	Durchmesser der Katalysatorpartikel	mm
$\mathcal{D}_{r, \text{CO}_2}^{\text{eff}}$	Effektiver Diffusionskoeffizient von Kohlenstoffdioxid	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
M_{CO_2}	Molare Masse von Kohlenstoffdioxid	g mol^{-1}
r	Radiale Reaktorkoordinate	m

T	Temperatur	°C
T_C	Kühlmitteltemperatur	°C
T_{HS}	Hot Spot Temperatur	°C
T_{max}	Maximale Reaktortemperatur	K
t	Zeit	s
u	Strömungsgeschwindigkeit	$m\ s^{-1}$
u_{in}	Strömungsgeschwindigkeit am Einlass	$m\ s^{-1}$
\dot{V}_{CH_4}	Volumenstrom von Kohlenstoffdioxid am Reaktorauslass bezogen auf Standarddruck und Standardtemperatur	$nL\ min^{-1}$
\dot{V}_{CO_2}	Volumenstrom von Kohlenstoffdioxid am Reaktorauslass bezogen auf Standarddruck und Standardtemperatur	$nL\ min^{-1}$
$\dot{V}_{CO_2,in}$	Volumenstrom von Kohlenstoffdioxid am Reaktoreinlass bezogen auf Standarddruck und Standardtemperatur	$nL\ min^{-1}$
X	Umsatz an Kohlenstoffdioxid	-
$y_{CO_2,in}$	Massenbruch am Reaktoreintritt von Kohlenstoffdioxid	-
z	Axiale Reaktorkoordinate	m
Griechische Symbole		
ΔH_R	Molare Reaktionsenthalpie	$J\ mol^{-1}$
ε_R	Festbettporosität	-
Λ_r	Radialer Wärmedispersionskoeffizient	$W\ m^{-1}\ K^{-1}$
Λ_z	Axialer Wärmedispersionskoeffizient	$W\ m^{-1}\ K^{-1}$
ρ	Gasdichte	$kg\ m^{-3}$
ρ_{in}	Gasdichte am Einlass	$kg\ m^{-3}$
$(\rho c_p)_{eff}$	Effektive volumenbezogene Wärmekapazität	$J\ m^{-3}\ K^{-1}$
σ_{eff}	Effektive Reaktionsrate	$mol\ m^{-3}\ s^{-1}$

Abbildungsverzeichnis

<i>Abbildung 1: Schematische Architektur eines digitalen Zwillings.</i>	<i>15</i>
<i>Abbildung 2: Anlagenschema zur Methanisierung der Arbeitsgruppe Prozesstechnik, Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Magdeburg.</i>	<i>16</i>
<i>Abbildung 3: Detailliertes schematisches Schnittmodell der Reaktoreinheit mit integriertem thermooptischen Sensorfasersystem.</i>	<i>17</i>
<i>Abbildung 4: Strukturbild des erweiterten Automatisierungskonzepts.....</i>	<i>18</i>
<i>Abbildung 5: Experimentell realisierte Trajektorien der Stellgrößen und der Ausgangsgrößen des qDoE</i>	<i>19</i>
<i>Abbildung 6: Zeitliche Entwicklung der Prozessgrößen während der Emulation eines Solar-Lastprofils.</i>	<i>19</i>
<i>Abbildung 7: Ergebnisse der Experimente und Modellierung im Rahmen des qDoE für ein lineares Modell sowie ein Artificial Neural Network.....</i>	<i>21</i>
<i>Abbildung 8: Validierung der Operator-Inference-Methode mit experimentellen Daten aus dem Methanisierungsreaktor.....</i>	<i>22</i>

Tabellenverzeichnis

<i>Tabelle 1: Erfolgte Veröffentlichungen</i>	27
---	----

Ausführliche Darstellung der durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse im Vergleich zur ursprünglichen Vorhabensbeschreibung

I.1 Ursprüngliche Vorhaben

Das Teilvorhaben der Abteilung Prozesstechnik des Max-Planck-Instituts für Dynamik komplexer technischer Systeme in Magdeburg (MPI-PSE) zielte darauf ab, dynamische Simulationsmodelle verschiedener Power-to-X-Prozesse (PtX) für den Einsatz in einem digitalen Zwilling zu entwickeln. Im Mittelpunkt standen modellbasierte Beschreibungen der wesentlichen Prozessschritte einer PtX-Kette, darunter verschiedene Elektrolyseverfahren (Proton Exchange Membrane (PEM), alkalische Elektrolyse, Festoxidelektrolyse), des Reverse-Wassergas-Shift-(RWGS)-Prozess sowie unterschiedliche Syntheserouten zu Basischemikalien wie die Methanisierung, die Fischer-Tropsch-Synthese, die Methanol- und die Ammoniaksynthese. Ergänzend sollten Modelle für Utility-Systeme und die Wasseraufbereitung entstehen.

Die Modelle sollten auf den grundlegenden Stoff-, Energie- und Impulsbilanzen basieren und durch geeignete Ansätze der Thermodynamik, Transportphänomene und Reaktionskinetik ergänzt werden. Die Parametrierung der Modelle sollte über Literaturangaben, Datenbanken und Partnerdaten erfolgen, während die Validierung auf experimentellen Betriebsdaten aus dem Arbeitspaket 1 (AP1) beruhen sollte. Ein weiteres Ziel war die Entwicklung echtzeitfähiger Modelle. Dafür sollten Methoden der Modellreduktion, der Surrogatmodellierung sowie verschiedene datengetriebene und hybride Ansätze untersucht und weiterentwickelt werden.

Darüber hinaus war die Integration der Modelle in den digitalen Zwilling vorgesehen. Dies umfasste die Gestaltung geeigneter Schnittstellen, die Sicherstellung numerischer Stabilität sowie die Vorbereitung der Modelle für eine robuste und echtzeitnahe Auswertung. Die Zusammenarbeit mit anderen Arbeitspaketen, insbesondere aus AP1 und AP4, war hierfür ein zentraler Bestandteil.

I.2 Offizielle Vorhabensänderungen und Abgrenzung der Arbeiten

Am 02.05.2022 wurde in einem Abstimmungsgespräch zwischen Luisa Peterson (MPI-PSE), Alexander Geschke (MPI-PSE), Daniel Dittler (UniS-IAS), Gökhan Demirel (UniS-IER), Philipp Rentschler (KIT-IMVT) und Ruth Schlautmann (DVGW-EBI) eine Neuabgrenzung der Zuständigkeiten im Projekt vereinbart. Ziel war es, Doppelarbeiten zu vermeiden und die Arbeiten klar zwischen den Partnern optimiert zu strukturieren. Das IMVT übernahm im UAP 1.9 die dynamischen Gesamtkettenmodelle der PtX-Prozesskette entwickeln. Das MPI-PSE konzentrierte sich fortan stärker auf die methodische Ausgestaltung eines digitalen Zwillings, der fortan am Beispiel einer institutsinternen CO₂-Methanisierungsanlage aufgebaut werden sollte.

Zentrale Voraussetzung für einen validierbaren digitalen Zwilling war, dass die Anlage hochwertige und dynamisch aussagekräftige Betriebsdaten liefern konnte. Diese Daten dienten als Grundlage, um Modelle zu validieren, zu aktualisieren und später adaptiv an den realen Betrieb anzupassen. Ziel war die Realisierung eines nahezu autonomen experimentellen Betriebs der Anlage durch die Erweiterung der Automatisierung über den Stand der Technik hinaus. Hierfür sollte eine effiziente Datenkommunikation geschaffen werden. Zudem sollte durch die Integration weiterer Schnittstellen die Online-Verknüpfung komplexer Modelle mit dem Datenfluss der Anlage gewährleistet werden, um während des Betriebs prozessbegleitende Simulationen durchführen zu können.

Parallel dazu wurde definiert, dass das MPI-PSE geeignete Modelle für den digitalen Zwilling entwickeln sollte. Diese Modelle mussten vor allem echtzeitfähig sein und sich an neue Daten flexibel anpassen lassen. Dafür eignen sich datengetriebene und hybride Ansätze besonders gut. Sie können sowohl als lernfähige Prozessmodelle eingesetzt werden, als auch als Surrogatmodelle für die im UAP 1.9 entwickelten Gesamtprozesskettenmodelle dienen. Mit diesen Aktivitäten unterstützte das MPI-

PSE den Aufbau einer echtzeitfähigen Modellbasis, die später in den digitalen Zwilling integriert werden könnte.

I.3 Fortschritte

Die Arbeiten im Berichtszeitraum konzentrierten sich auf den Aufbau eines prototypischen digitalen Zwillings für die am Institut vorhandene CO₂-Methanisierungsanlage im Pilotmaßstab. Dabei verzahnte der gewählte Ansatz konzeptionelle, experimentelle und modellbasierte Tätigkeiten eng miteinander. Als Ausgangspunkt diente die Definition einer geeigneten Struktur für PtX-Wind-Anwendungen, welche die Basis für die gezielte Weiterentwicklung der realen Anlage bildete. Parallel dazu entstanden mechanistische, reduzierte und datengetriebene Modelle, um die spätere Integration in den digitalen Zwilling vorzubereiten. Die folgenden Unterkapitel gliedern diese Fortschritte entlang der drei zentralen Bausteine: Definition und Struktur des digitalen Zwillings, Pilotanlage und Automatisierung sowie Simulationsmodelle.

Definition und Struktur eines digitalen Zwillings

Im Rahmen des Arbeitspakets AP 4.4 wurde am MPI-PSE eine konsistente Definition und technische Struktur eines digitalen Zwillings für PtX-Prozesse erarbeitet. Der digitale Zwilling wurde dabei nicht als einzelnes Simulationsmodell verstanden, sondern als ein gekoppeltes Gesamtsystem aus realer Anlage, Sensorik, Dateninfrastruktur und adaptiven Modellen. Diese Sichtweise folgte etablierten Definitionen, nach denen ein digitaler Zwilling einen kontinuierlichen Datenaustausch zwischen dem physischen System und dem seinem digitalen Abbild erfordert (1).

Im Kontext des Projekts PtX-Wind diente der digitale Zwilling dazu, dynamisch betriebene Prozesse abzubilden, den Anlagenzustand in Echtzeit zu überwachen und modellgestützte Vorhersagen bereitzustellen. Aufbauend auf der Literatur wurde der digitale Zwilling als ein System definiert, das reale Messdaten nutzt, um Modelle kontinuierlich zu aktualisieren und so die Abweichung zwischen Simulation und realem Betrieb zu minimieren (2). Diese enge Kopplung ist insbesondere für nichtstationäre Betriebsweisen und stark schwankende Randbedingungen, wie sie häufig im Offshore-Betrieb auftreten, von zentraler Bedeutung.

Aus dieser Definition wurden im Projektverlauf funktionale Anforderungen abgeleitet. Eine zentrale Anforderung ist die Echtzeitfähigkeit der eingesetzten Modelle bei einer gleichzeitig für die Anwendung ausreichenden Genauigkeit. Nur so kann der Anlagenzustand synchron abgebildet und z.B. für Zwecke des Monitorings oder der Optimierung genutzt werden. Darüber hinaus muss der digitale Zwilling numerisch stabil sein und mit Messrauschen sowie unvollständigen oder zeitlich verzögert eintreffenden Daten umgehen können. Ein kontinuierlicher Abgleich zwischen Modell und Anlage ist erforderlich, um Drift, Alterungseffekte oder veränderte Betriebsbedingungen zu erkennen. Diese Anforderungen entsprechen den in der Literatur beschriebenen Kernmerkmalen industrieller digitaler Zwillinge (3).

Auf Basis dieser Anforderungen wurden die wesentlichen Bausteine des digitalen Zwillings identifiziert. Den physischen Kern bildet die reale CO₂-Methanisierungsanlage mit erweiterter Sensorik. Sie liefert zeitlich hochaufgelöste Messdaten der Temperaturen, der Drücke und der Stoffströme. Eine Daten- und Kommunikationsschicht stellt sicher, dass diese Daten strukturiert erfasst, gespeichert und für die Modellierung verfügbar gemacht werden können. Die Modellschicht umfasst sowohl mechanistische als auch datengetriebene Modelle. Ergänzt wird sie durch eine Surrogatschicht, die speziell auf Recheneffizienz ausgelegt ist und die Echtzeitfähigkeit des Gesamtsystems sicherstellt. Eine schematische Darstellung dieser Struktur ist in Abbildung 1 gezeigt.

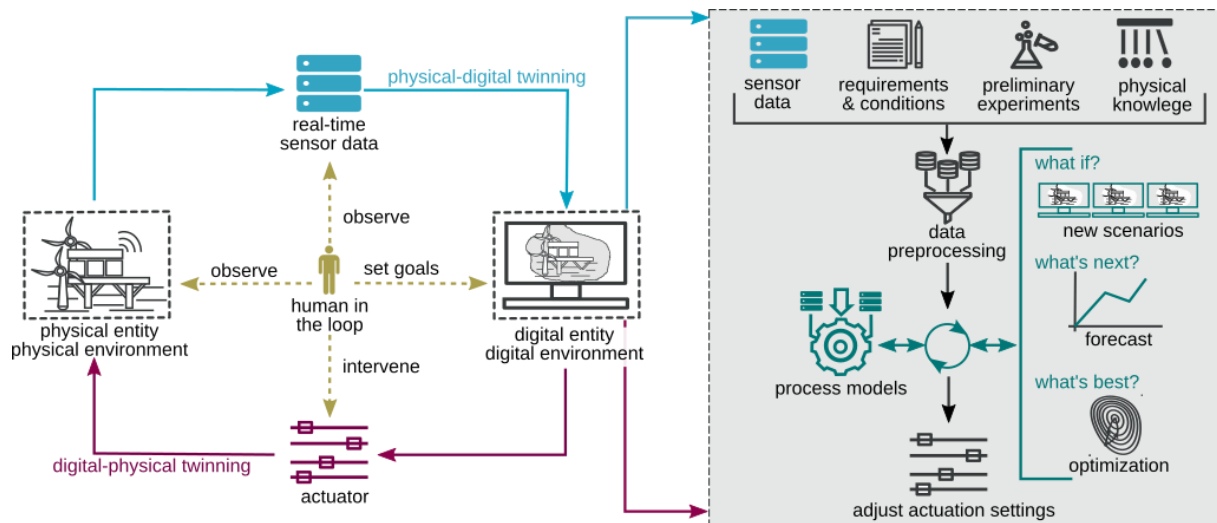


Abbildung 1: Schematische Architektur eines digitalen Zwillings für PtX-Prozesse mit realer Anlage, Daten- und Kommunikationsschicht sowie mechanistischen Modellen, datengetriebenen Modellen und Surrogatmodellen (vergl. (4)).

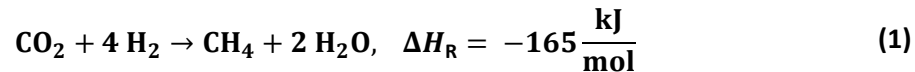
Im Berichtszeitraum wurde eine interne Architektur für den digitalen Zwilling entwickelt und prototypisch umgesetzt. Diese Architektur verbindet die reale Anlage über eine automatisierte Datenerfassung mit einer digitalen Modellumgebung. Messdaten werden vorverarbeitet und sowohl für die parallele Simulation als auch für die Aktualisierung datengetriebener Modelle genutzt. Mechanistische Modelle dienen dabei als Referenz, während datengetriebene Modelle zur schnellen Approximation komplexer Zusammenhänge eingesetzt werden. Dieser modulare Aufbau folgt dem in der Literatur empfohlenen Ansatz, unterschiedliche Modellklassen gezielt zu kombinieren, um Genauigkeit und Rechenzeit in Einklang zu bringen (2).

Ein besonderer Fokus lag auf der Kombination mechanistischer und datengetriebener Modelle. Während mechanistische Modelle eine hohe Interpretierbarkeit bieten, sind sie für den Echtzeitbetrieb oft zu rechenintensiv und daher zu langsam. Datengetriebene Modelle, etwa neuronale Netze oder lineare Mehrgrößenmodelle, ermöglichen sehr schnelle Vorhersagen, benötigen jedoch hochwertige Trainingsdaten. Durch hybride Ansätze können die Vorteile beider Modellklassen kombiniert werden (3).

Mit der erarbeiteten Definition und der entwickelten Architektur wurde eine belastbare Grundlage für den weiteren Ausbau des digitalen Zwillings geschaffen. Die Struktur ist modular aufgebaut und erlaubt sowohl die Integration zusätzlicher Modelle als auch die Anbindung weiterer Anlagen oder Prozessstufen. Damit leistet das MPI-PSE einen wesentlichen Beitrag zur methodischen Entwicklung digitaler Zwillinge für dynamisch betriebene PtX-Anlagen im Rahmen von PtX-Wind.

Pilotanlage und erweiterte Automatisierung

Für die Erstellung des prototypischen digitalen Zwillings wurde die Pilotanlage zur CO₂-Methanisierung



ausgewählt (s. (5), (6)). Entscheidend dafür war nicht nur der bereits hohe Automatisierungsgrad, sondern auch die umfassende Analytik, die industrielle Relevanz der Anlagengröße sowie der kontextuelle Bezug zur Power-to-Methane (PtM)-Kette, in der die Methanisierung einen zentralen Prozessschritt darstellt. Das Anlagenfließbild ist in Abbildung 2 gezeigt.

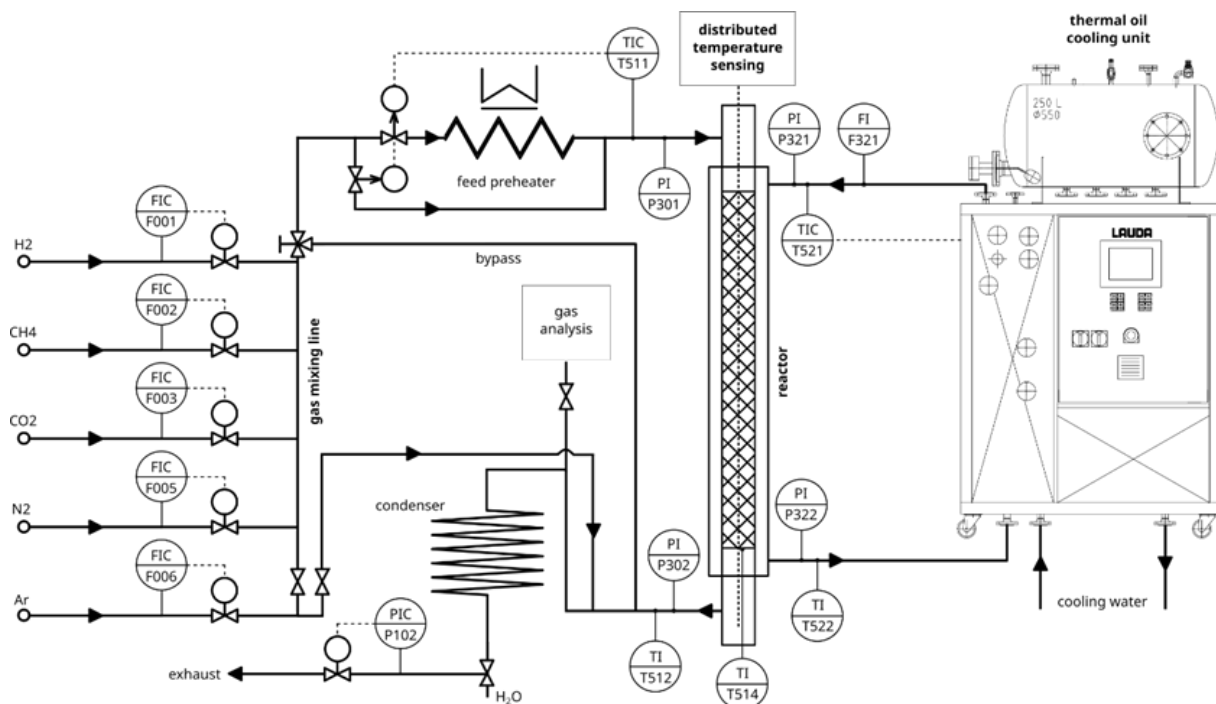


Abbildung 2: Anlagenschema zur CO₂-Methanisierung der Abteilung Prozesstechnik, Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Magdeburg.

Auf der linken Seite von Abbildung 2 ist die Gasversorgung der Anlage schematisch dargestellt. Die zur Verfügung stehenden Eduktgase, Wasserstoff (H₂), Methan (CH₄), Kohlendioxid (CO₂), Helium (He), Stickstoff (N₂) und Argon (Ar), werden zunächst über eine zentrale Kompressorstation auf den vorgegebenen Vordruck gebracht. Die Dosierung der einzelnen Gase erfolgt über ansteuerbare Massendurchflussregler (MFCs), die eine präzise Einstellung der jeweiligen Gasströme ermöglichen. Die vorgegebenen Mengen der Komponenten werden anschließend in einer Gasmischstrecke kombiniert, in der das Synthesegas gemäß der gewünschten Zusammensetzung homogen gemischt wird. Der Reaktor besteht aus einem doppelwandigen Edelstahlrohr. Im Inneren befindet sich eine katalytisch aktive Schüttung, durch die das Reaktionsgas strömt. Die Abmessungen des Reaktors sind in Abbildung 3 dargestellt. Die Katalysatorschüttung ist gleichzeitig mit einem thermooptischen Sensorfasersystem ausgestattet, das es ermöglicht, das Temperaturprofil entlang der gesamten Reaktorlänge örtlich und zeitlich mit hoher Auflösung zu erfassen. Der äußere Ringspalt des Reaktors dient der Kühlung und ist mit Thermalöl gefüllt, das über einen Lauda-Wärmetauscher (Abbildung 2, rechts) temperiert wird.

Der Wärmetauscher umfasst zwei miteinander gekoppelte Kreisläufe. Einen Speicherkreislauf, in dem kälteres Thermalöl vorgehalten wird und einen Heizkreislauf, der direkt mit dem Reaktor verbunden

ist. Beide Kreisläufe werden über elektrische Heizelemente beheizt. Um die Reaktortemperatur zu senken, wird kälteres Thermalöl aus dem Speicherkreislauf in den Heizkreislauf gepumpt, während heißes Öl aus dem Heizkreislauf in den Speicherkreislauf zurückgeführt wird. Dabei wird das heiße Öl über eine Kühlstrecke mit Brunnenwasser abgekühlt, bevor es dem Speicherkreislauf wieder zugeführt wird. Die Flüssigkeitszirkulation wird durch Pumpen gewährleistet.

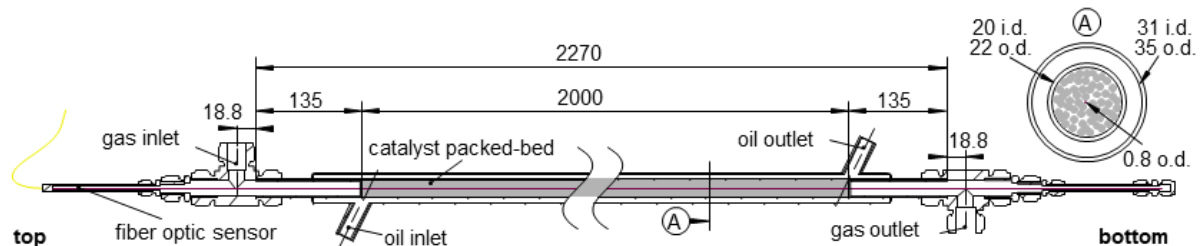


Abbildung 3: Detailliertes schematisches Schnittmodell des Festbett-Rohrreaktors zur CO₂-Methanisierung mit dem integrierten thermooptischen Sensorfasersystem zur Erfassung des axialen Temperaturprofils.

Nach der Reaktion wird das Produktgas zunächst über einen Kondensator geführt, um das bei der Methanisierung entstehende Wasser abzutrennen. Dieser Schritt schützt die nachgeschaltete Analytik vor Feuchtigkeitsschäden. Ein definierter Anteil des getrockneten Produktgases wird über einen Coriolis-MFC in die Analysenstrecke geleitet, während der Rest über eine Abgasleitung aus dem System abgeführt wird. Die Menge des in die Analytik geleiteten Gases ist einstellbar.

Die chemische Zusammensetzung des Produktgases wird durch eine mehrstufige Analytik erfasst. Zunächst erfolgt eine kontinuierliche Messung mittels Wärmeleitfähigkeitsdetektion (WLD) und Infrarotspektroskopie (IR), die Echtzeitdaten über den Reaktionsfortschritt liefern. Anschließend wird (dazu redundant) die Zusammensetzung des Gases mittels durch Massenspektrometrie (MS) bestimmt. Die gesamte Anlage ist mit einer Vielzahl zusätzlicher Sensoren, Überwachungs- und Regelungseinrichtungen ausgestattet. Alle Messdaten werden zentral im Prozessleitsystem SIMATIC S7-400 Siemens erfasst, verarbeitet und zur Prozessüberwachung sowie zur Datenanalyse genutzt.

Ausgehend von der ursprünglichen Anlage wurde diese im Zuge der Entwicklung eines digitalen Zwillings kontinuierlich weiterentwickelt. Wie in Abbildung 4 dargestellt, liegt der Schwerpunkt des digitalen Zwillings auf einer bidirektionalen Datenkommunikation zwischen der physischen Anlage und ihrer virtuellen Darstellung. Dementsprechend wurde eine dedizierte Kommunikationsebene über Open Plattform Communications (OPC) mithilfe der Programmiersprache Python zwischen dem Prozessleitsystem (PLS) und einer virtuellen Umgebung implementiert, die eine Datenübertragung in beide Richtungen ermöglicht.

Die virtuelle Umgebung ist als Automation-System betitelt und integriert zentral Datenbanken, Skripte, Programme sowie Prozessmodelle. Diese Komponenten sind miteinander verknüpft und ermöglichen einen flexiblen, nutzerorientierten Datenaustausch. Je nach Anwendungsfall und gewünschtem Mehrwert können die einzelnen Elemente autonom oder auf Anforderung Daten austauschen, wodurch sich adaptive, reaktive und prädiktive Funktionen realisieren lassen. Das Ergebnis dieser interaktiven Zusammenarbeit wird über die bidirektionale Schnittstelle in Echtzeit der physischen Anlage zur Verfügung gestellt, sei es zur Steuerung, Simulation oder Prozessoptimierung.

Darüber hinaus fungiert das Automation-System als universelle Schnittstelle, die die Integration heterogener Datenquellen ermöglicht. So konnten beispielsweise Messdaten aus Geräten, die nicht direkt mit der PLS kompatibel waren, wie das DTS oder das MS, in Echtzeit online bereitgestellt und für das Prozessleitsystem abrufbar gemacht werden. Dies eröffnet neue Möglichkeiten für ein verbessertes Monitoring, eine frühzeitige Störungserkennung sowie die Durchführung sicherer und effizienterer Experimente durch präzisere Prozessführung und datenbasierte Entscheidungsfindung.

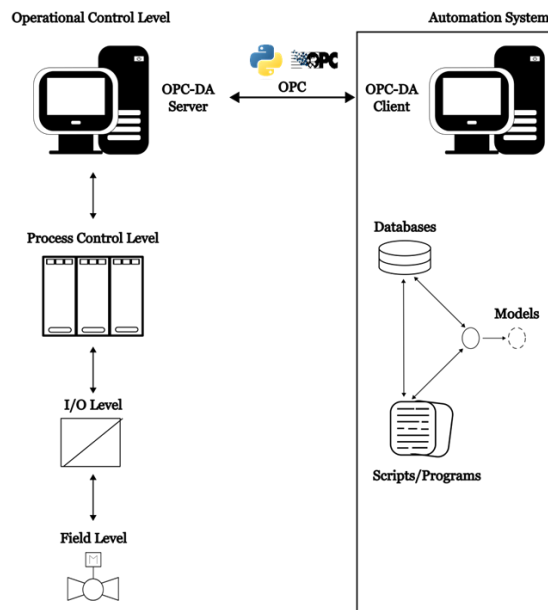


Abbildung 4: Strukturbild des erweiterten Automatisierungskonzepts.

Zudem wurde im Rahmen des Projekts ein Software-in-the-Loop (SiL)-Ansatz für die Methanisierungsanlage entwickelt. Die Ergebnisse zeigen, dass SiL als Basis des digitalen Zwillings dienen kann. Durch die Integration von Prozessmodellen, Datenbanken und Programmen in einer gemeinsamen Umgebung ermöglicht der SiL-Ansatz die frühzeitige Validierung und Testung der Systemverknüpfungen. Insbesondere lassen sich Interaktionen zwischen Modellen, Datenflüssen und Programmabläufen bereits in der Entwicklungsphase simulieren und optimieren. Dies trägt maßgeblich dazu bei, die spätere Implementierung in der physischen Anlage zu beschleunigen, Fehler zu reduzieren und die Gesamtentwicklungszeit zu verkürzen.

Durch die Entwicklung des prototypischen digitalen Zwillings wurde eine umfassende digitale Plattform geschaffen, die eine Vielzahl komplexer und bisher nicht oder nur eingeschränkt realisierbarer Abläufe ermöglicht. So konnten automatisierte Experimente in verschiedenen Betriebsmodi durchgeführt werden, darunter stationäre, quasi-stationäre und dynamische Experimente, sowie spezifische Untersuchungen wie Hysterese-Experimente und hypothetische Recycle-Experimente. Der digitale Zwilling unterstützt zudem die Kalibrierung und Validierung der MFCs sowie der Analytik, was die Datenqualität und Zuverlässigkeit der Messergebnisse signifikant erhöht. Besonders wertvoll ist die Eigenschaft, dass Experimente unter der Anlage schädigenden Prozessbedingungen automatisch abgebrochen werden. Der digitale Zwilling überwacht kritische Parameter in Echtzeit und kann bei Überschreitung von Grenzwerten automatisch reagieren. Zudem wird die Gasversorgung online überwacht und die Entfernung von kondensiertem Wasser automatisch ausgeführt. Die Online-Prozessauswertung und die integrierte Prozesssimulation ermöglichen sowohl einen kontinuierlichen Modell-Anlagen-Abgleich als auch Vorhersagen über das Prozessverhalten. Insgesamt bietet der prototypische digitale Zwilling eine robuste, sichere und effiziente Basis für die Forschung und Entwicklung. Das aufgebaute System kann auf andere Prozesse und Anlagen transferiert werden. Beispielhaft sind Ergebnisse für die quasi-stationären Experimente (Abbildung 5) und für das Abfahren eines hypothetischen Solarprofils (Abbildung 6) gezeigt. Diese komplexen experimentellen Abläufe konnten nur aufgrund des dargestellten Konzeptes des prototypischen digitalen Zwillings realisiert werden.

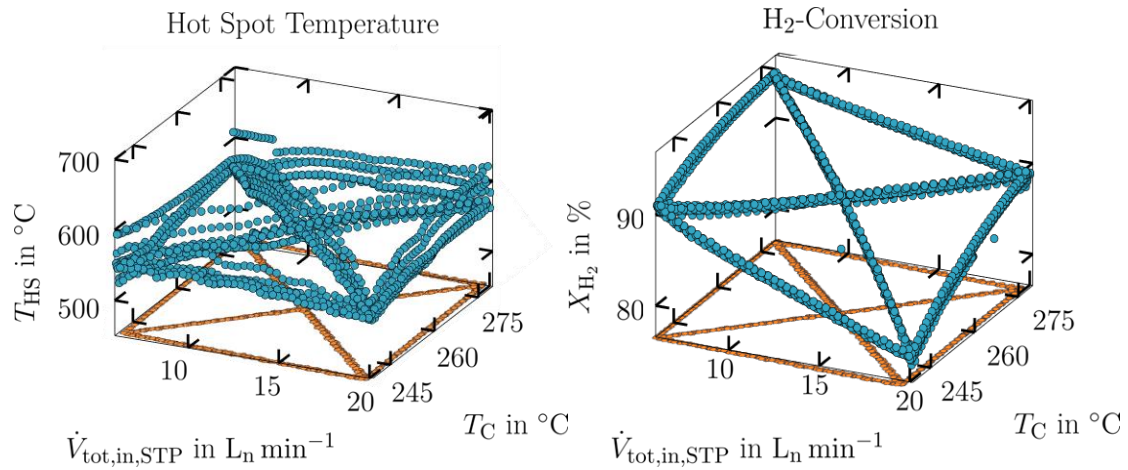


Abbildung 5: Experimentell realisierte Trajektorien der Stellgrößen (Kühlmitteltemperatur und Eintrittsvolumenstrom, orange) und der Ausgangsgrößen (Hot-Spot-Temperatur links, Umsatz rechts, blau) des qDoE.

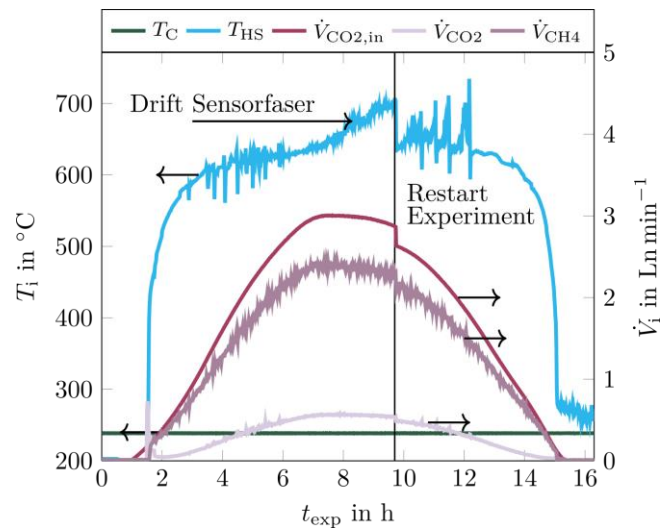


Abbildung 6: Zeitliche Entwicklung der Prozessgrößen während der Emulation eines Solar-Lastprofils. Gezeigt sind die Verläufe der Hot-Spot-Temperatur (T_{HS}), der Kühltemperatur (T_C), des CO_2 -Eingangsstroms ($\dot{V}_{CO_2,in}$) sowie der CO_2 - (\dot{V}_{CO_2}) und CH_4 -Ausgangsströme (\dot{V}_{CH_4}). H_2 wird stöchiometrisch zusammen mit CO_2 entsprechend Gl. (1) dosiert.

Modellentwicklung und -anwendung

Die Entwicklung leistungsfähiger Modelle bildet den Kern des digitalen Zwillings. Um den unterschiedlichen Anforderungen im Betrieb gerecht zu werden, wurde im Berichtszeitraum ein hierarchischer aufgebauter Modellpool etabliert. Dieser folgt dem "fit-for-purpose"-Prinzip. Je nach Aufgabenstellung (z.B. hochpräzise Prozessanalyse oder schnelle Echtzeit-Regelung) kommen unterschiedliche Modelltypen zum Einsatz (2).

Mechanistische Modelle

Mechanistische Modelle beschreiben die physikalisch-chemischen Grundlagen der Methanisierung und basieren auf gekoppelten Stoff- und Energiebilanzen für den CO₂-Umsatz und die Temperatur. In der Projektlaufzeit wurden sowohl ein eindimensionales (1D) als auch ein zweidimensionales (2D) Reaktormodell entwickelt. Letzteres umfasst unter gewissen vereinfachenden Annahmen eine Stoffmengen sowie eine Energiebilanz:

$$\varepsilon_R \frac{\partial X}{\partial t} = -u \frac{\partial X}{\partial z} + \mathfrak{D}_{r,CO_2}^{\text{eff}} \left(\frac{\partial^2 X}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial X}{\partial r} \right) + \frac{M_{CO_2}}{\rho y_{CO_2, \text{in}}} (1 - \varepsilon_R) \sigma_{\text{eff}}$$

$$(\rho c_p)_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = -u_{\text{in}} \rho_{\text{in}} c_p \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] + \Lambda_r \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \Delta H_R (1 - \varepsilon_R) \sigma_{\text{eff}}$$

Eindimensionales Reaktormodell: Als Ausgangspunkt dient ein polytropes 1D-Reaktormodell. Dieses wurde in Anlehnung an Zimmermann et al. (7) implementiert und nutzt die dort beschriebenen Korrelationen. Experimentelle Untersuchungen an der Pilotanlage zeigten vernachlässigbare Druckverluste und einen dominierenden konvektiven Transport, weshalb axiale Dispersion und Impulsbilanz vereinfacht wurden. Aufgrund der hohen Steifigkeit des Systems wird der Kvaerno5-Solver zur zeitlichen Integration verwendet. Die Parametrierung erfolgte mittels Bayesscher Optimierung an 15 stationären Experimenten. Dabei offenbarte sich ein Zielkonflikt: Das Modell ist nicht in der Lage, gleichzeitig das axiale Temperaturprofil und den Umsatz am Reaktorausgang präzise abzubilden. Die Parametrierung wurde daher so gewählt, dass der axiale Temperaturverlauf korrekt wiedergegeben wird. Dies führt jedoch dazu, dass der Umsatz im 1D-Fall systematisch überschätzt wird. Dennoch konnte dieses 1D Modell erfolgreich genutzt werden, um umfangreiche, rauschfreie Datensätze für Lastwechsel-Szenarien als Trainingsbasis für Surrogatmodelle zu generieren. Um diese systematische Abweichung zu kompensieren, wurde eine nachgelagerte Korrektur mittels multivariater linearer Regression implementiert. Diese ermittelt in Abhängigkeit der Eingangsgrößen einen Skalierungsfaktor, um die Umsatzprognose entsprechend abzusenken. Die Gültigkeit dieses pragmatischen Korrekturansatzes beschränkt sich dabei auf den validierten Interpolationsraum.

Zweidimensionales Reaktormodell: Zur Untersuchung radialer Effekte wurde ergänzend ein zweidimensionales pseudo-homogenes Modell implementiert ($\Lambda_r(r)$ -Modell), das Korrelationsfunktionen für die effektive Wärmeleitfähigkeit nutzt (8). Die Berücksichtigung radialer Gradienten ist aufgrund des Rohr-zu-Partikel-Verhältnisses der Pilotanlage ($D/d_p \approx 7,75$) physikalisch geboten. Die Parameterschätzung erfolgte analog zum 1D-Modell als Zweiziel-Optimierungsproblem. Als Randbedingung wurde die Temperatur der äußeren Sensorfaser festgesetzt, mit dem Ziel, den Verlauf der inneren Sensorfaser sowie den Umsatz am Reaktorausgang bestmöglich abzubilden. Die Auswertung zeigte jedoch, dass das Modell die real auftretenden starken radialen Gradienten unterschätzt. Es gelingt in der Regel nur, den inneren Temperaturverlauf zufriedenstellend abzubilden, während der Umsatz zwar genauer als im 1D-Modell vorhergesagt, aber weiterhin überschätzt wird.

Bewertung und Einsatzgebiete: Im Vergleich zu datengetriebenen Ansätzen ist die Erstellung dieser mechanistischen Modelle aufwendig und der Rechenaufwand deutlich höher, was ihren direkten Einsatz in schnellen Regelkreisen limitiert. Für die detaillierte Prozessanalyse, das Training von Surrogatmodellen und als virtuelle Sensorik ("Ground Truth" für nicht messbare Größen) sind sie aufgrund ihrer physikalischen Konsistenz jedoch unverzichtbar, da sie plausible Aussagen auch außerhalb des zuvor experimentell erkundeten Betriebsbereichs erlauben.

Datengetriebene Modelle

Wie bereits erwähnt, zeigte sich im Projektverlauf, dass die mechanistischen Modelle selbst nach umfangreicher Adaption nicht in der Lage waren, die Prozessdaten der Anlage im stationären Betrieb vollständig abzubilden. Aus diesem Grund wurde untersucht, inwieweit rein datengetriebene Modelle zur Beschreibung des stationären Prozessverhaltens geeignet sind.

Zur Generierung einer hinreichenden Datenbasis wurde ein quasi-stationäres, kontinuierliches 2^k -Design of Experiments (qDoE) konzipiert und durchgeführt. Im Anschluss wurden sowohl ein lineares Modell als auch ein Artificial Neural Network (ANN) an diese Daten angepasst und evaluiert. Die entsprechenden Ergebnisse sind in Abbildung 7 dargestellt.

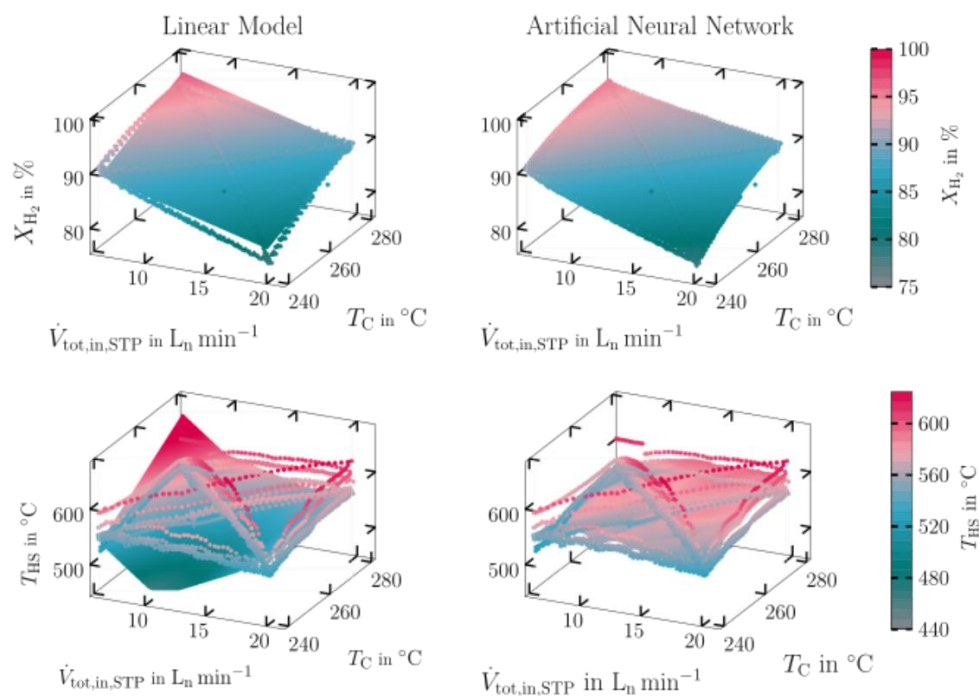


Abbildung 7: Ergebnisse der Experimente und Modellierung im Rahmen des qDoE. Dargestellt ist die Güte der Wiedergabe des Umsatzes und der Hot-Spot-Temperatur in Abhängigkeit von der Kühlmitteltemperatur und dem Eintrittsvolumenstrom durch ein lineares Modell (links) sowie durch ein Artificial Neural Network (ANN, rechts).

Dabei zeigt sich, dass der Umsatz von einem linearen Modell fast genauso präzise vorhergesagt werden kann wie von dem deutlich komplexeren ANN. Wesentliche Unterschiede treten jedoch bei der Hot-Spot-Temperatur (T_{HS}) auf. Das einfache lineare Modell stößt hier an seine Grenzen, was vermutlich auf das nichtlineare Verhalten dieser Größe in Bezug auf die Eingangsparameter zurückzuführen ist. Das ANN hingegen bildet dieses Verhalten deutlich besser ab. Aufgrund der durch das qDoE ermöglichten dichten Datengrundlage könnten ANNs zukünftig ein vielversprechendes Werkzeug zur Digitalisierung von Anlagen darstellen.

Angesichts der Relevanz des lastflexiblen Betriebs bei PtX-Prozessen konzentrierte sich das Vorhaben im weiteren Verlauf auf die dynamische, datengetriebene Prozessmodellierung. Diese bietet den Vorteil gegenüber der mechanistischen Modellierung, dass die Rechenzeit für Echtzeit-Regelungsaufgaben ("Outer-Loop"-Anwendungen) deutlich geringer ausfällt.

Die datengetriebenen Prozessmodelle fungierten nicht nur als reine Surrogate zur Beschleunigung der mechanistischen Simulationen, sondern wurden als eigenständige Modelle konzipiert, die ihre Dynamik direkt aus Trainingsdaten, seien es synthetische Daten oder reale Messreihen, erlernen können (Systemidentifikation). Es wurden drei Architekturen vergleichend untersucht und weiterentwickelt.

Der vielversprechendste Ansatz im Berichtszeitraum war die sog. „Operator Inference“. Diese Methode kombiniert klassische Modellordnungsreduktion mit datengetriebener Systemidentifikation. Die hochdimensionale Dynamik wird mittels Hauptkomponentenanalyse auf einen niedrigdimensionalen Unterraum projiziert. Anschließend werden die Systemmatrizen für eine polynomiale Struktur (hier quadratisch) mittels Regression gelernt (9).

Um die Nichtlinearitäten des Methanisierungsprozesses, insbesondere die wandernden Hot Spots, genauer abbilden zu können, wurde das Framework um einen neuronalen Decoder (basierend auf Convolutional Neural Networks (CNN)) erweitert. Anstatt die Zustände linear in den physikalischen Raum zurückzuprojizieren, lernt das CNN die nichtlineare Rekonstruktion. Dies senkte den Rekonstruktionsfehler für das Temperaturfeld signifikant auf unter 1 %, was mit einfachen linearen Ansätzen nicht erreichbar war (vgl. Abbildung 8).

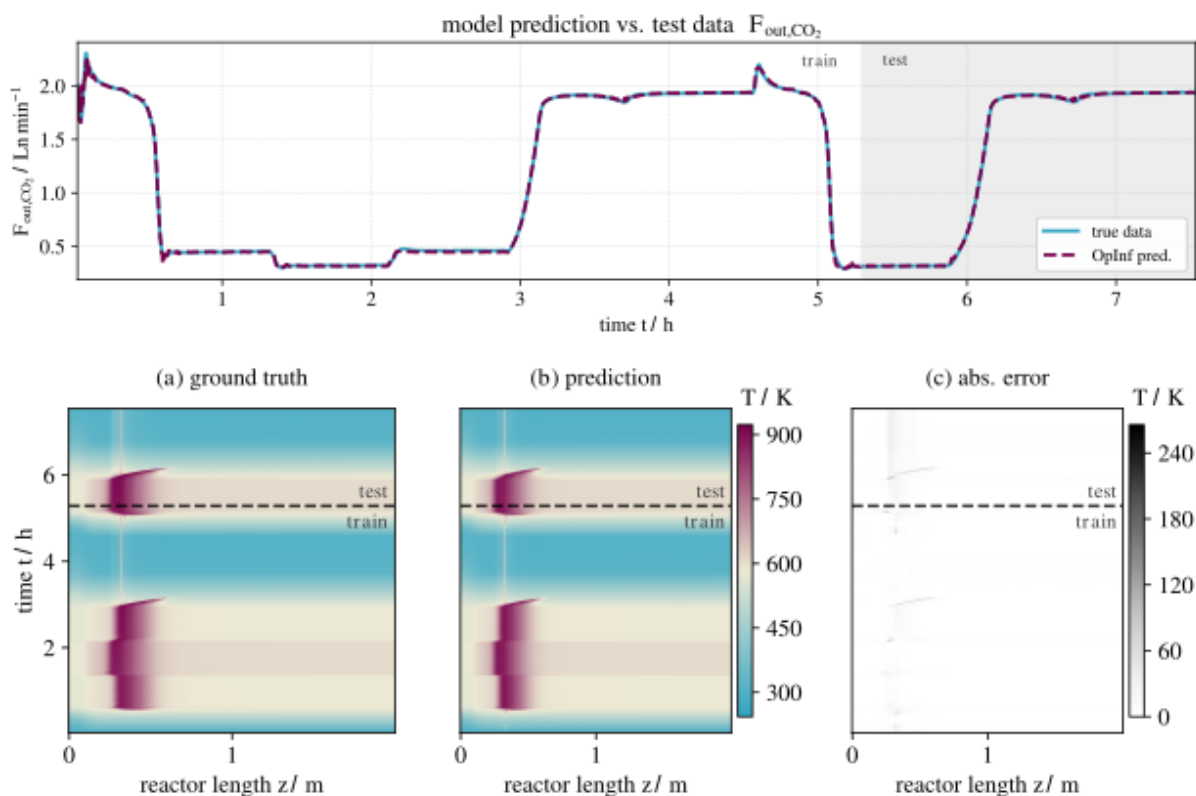


Abbildung 8: Oben: CO₂-Durchfluss am Auslass im Zeitverlauf mit Messungen und Vorhersagen. Unten: Raum-zeitliche Temperaturfelder (Zeit vertikal, Reaktorlänge horizontal); (a): gemessen, (b): Operator-Inference, (c): absoluter Fehler zwischen den experimentellen Daten und den Operator-Inference-Vorhersagen. Trainings- und Testregionen sind in beiden Diagrammen angegeben.

Ergänzend wurden Spatio-Temporal Graph Neural Networks (ST-GNN) und Greedy Nonlinear SINDy (GN-SINDy) evaluiert.

- **ST-GNNs** nutzen eine Graphenstruktur zur Abbildung der Reaktor-Geometrie und Aufmerksamkeitsmechanismen zur Erfassung von zeitlichen Abhängigkeiten. Sie zeigten in dem hier betrachteten PtX-Anwendungsbeispiel eine sehr hohe Genauigkeit (< 0,3 % Fehler), benötigen jedoch vergleichsweise große Trainingsdatensätze (> 10.000 Samples).
- **GN-SINDy** identifiziert die zugrundeliegenden Differentialgleichungen mittels Sparse Regression. Dieser Ansatz ist dateneffizient (benötigt nur ca. 0,02 % der Daten) und liefert interpretierbare Gleichungen. Allerdings ist der Fehler bei schnellen zeitlichen Änderungen höher (bis zu 6,5 %), da hochfrequente Dynamikanteile häufig herausgefiltert werden (10).

Anwendungen

Die entwickelten Modelle wurden in erste Anwendungen für den digitalen Zwilling überführt.

Erweitertes Monitoring: Nach der erfolgreichen Integration des mechanistischen 1D-Modells in den prototypischen digitalen Zwilling war dessen parallele Nutzung im Rahmen des realen Anlagenbetriebs möglich. Das Modell wurde zu einer erweiterten Überwachung herangezogen, indem die relevanten Eingangsgrößen online aus dem PLS bezogen und in definierten Zeitintervallen Simulationen durchgeführt wurden. Hierdurch ließen sich nicht nur die Abweichungen zwischen Modellsimulationen und Anlagedaten während des Betriebs quantifizieren, sondern auch dem Nutzer detaillierte Informationen, wie etwa das Umsatzprofil über die Reaktorlänge, bereitstellen. Dieser Ansatz fungiert als Softsensor und ermöglicht Echtzeiteinblicke in den Reaktor ohne den Einsatz kostenintensiver Messtechnik, wie sie für Profil- oder Zapfstellenreaktoren benötigt wird. Abschließend wurde im Berichtszeitraum evaluiert, inwiefern dieser Mehrwert an Informationen für eine optimierte Prozesssteuerung genutzt werden kann.

Drift-Erkennung und Modell-Trigger: Zur Adressierung der Herausforderung einer langfristigen Synchronisation zwischen digitalem Modell und realer Anlage wurde im Rahmen einer Masterarbeit ein theoretisches Framework zur Erkennung von Modellabweichungen entwickelt. Da kritische Fehlerszenarien (z. B. beschleunigte Deaktivierung) an der realen Pilotanlage schwer gezielt herbeiführbar sind, erfolgte die Methodenentwicklung und Validierung in einer reinen Simulationsumgebung. Hierzu wurde ein "Pseudo-Reaktor" implementiert, der realitätsnahe Störgrößen, Rauschprofile und offshore-typische Lastwechsel (basierend auf Windzeitreihen) generiert. Der Fokus lag auf der Identifikation signifikanter Abweichungen zwischen diesem Pseudo-Reaktor und der Modellvorhersage mittels statistischer Methoden der Prozesskontrolle (CUSUM und EWMA). Um eine robuste Erkennung zu gewährleisten, wurde eine modulare Systematik entwickelt, welche die Parameter dieser Methoden durch einen automatisierten Optimierungsansatz anpasst. Ziel war die Maximierung der Erkennungsgüte (F1-Wert) bei gleichzeitiger Minimierung von Fehlalarmen. Die Untersuchungen zeigten, dass eine modifizierte relativ geglättete EWMA-Methode (Exponentially Weighted Moving Average) in Kombination mit Savitzky-Golay-Filtern die leistungsfähigste Strategie darstellt. Das erarbeitete Framework bietet somit die konzeptionelle Grundlage, um in zukünftigen Ausbaustufen bei detektierter Drift automatisiert Gegenmaßnahmen, wie eine Ursachenanalyse mittels multivariater Statistik oder eine Neukalibrierung des Modells, einzuleiten.

Optimale Steuerung (Optimal Control): Basierend auf dem Operator Inference-Modell wurde eine Open-Loop-Optimalsteuerung demonstriert. Ziel war die Maximierung des Umsatzes unter Einhaltung strikter Temperaturgrenzen ($T_{\max} \leq 700 \text{ K}$) während dynamischer Lastwechsel. Da die direkte Nutzung neuronaler Netze in der Optimierung häufig zu physikalisch ungültigen oder instabilen Lösungen führt, wurde eine hierarchische Strategie entwickelt. Der Optimierer nutzt primär das robuste, reduzierte polynomiale Modell zur Berechnung der Trajektorie. Der neuronale Decoder fungiert im Hintergrund

als hochgenaue Prüfinstanz ("Sicherheits-Check"). Prognostiziert der Decoder eine Verletzung der Temperaturgrenzen, wird der zulässige Bereich für den Optimierer iterativ punktwise eingeschränkt ("Back-off"-Strategie). Das Ergebnis zeigte, dass der Reaktor auf diese Weise sicher an seiner physikalischen Belastungsgrenze gefahren werden kann, was den Stoffumsatz im Vergleich zu konservativen Betriebsstrategien signifikant steigerte.

Verwendung der Zuwendung

I.4 Darstellung der wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Die Hauptposition der Projektausgaben bildeten, dem Arbeitsplan entsprechend, die Personalkosten für das qualifizierte wissenschaftliche Personal. Diese Mittel finanzierten die Arbeiten am Anlagenbetrieb, der mechanistischen und datengetriebenen Modellierung, der Automatisierung sowie der Datenanalyse. Unterstützend wurden studentische Hilfskräfte abgerechnet, die insbesondere Zuarbeiten im Bereich der AVEVA-Prozesssimulation, bei SiL und in der Datenvorverarbeitung leisteten.

Neben den Personalkosten setzten sich die Ausgaben im Wesentlichen wie folgt zusammen: Ein signifikanter Anteil der Sachausgaben entfiel auf die Beschaffung von Prozessgasen, die als zentrale Betriebsmittel für den Betrieb der Methanisierungsanlage und die Durchführung der Messkampagnen essenziell waren. Zur Steigerung der Datenqualität für den digitalen Zwilling wurde in verbesserte Messtechnik investiert, insbesondere durch die interne Beschaffung einer neuen Sensorfaser für die hochauflösende Temperaturmessung im Reaktor. Hinzu kamen laufende Ausgaben für Verschleiß- und Ersatzmaterialien (z. B. Dichtungen, technische Kleinkomponenten) sowie interne Infrastrukturkosten zur Sicherstellung der Medienversorgung (Strom, Gas). Im Bereich der Software-Infrastruktur stellte der Erwerb einer mehrjährigen AVEVA-Lizenz (für fünf Nutzer) eine größere Einzelposition dar. Diese Investition war notwendig, um die Simulationsumgebung und die Prozessabbildung im digitalen Zwilling realisieren zu können.

Für den Umbau und die Anpassung der Pilotanlage an die spezifischen Anforderungen der dynamischen Experimente wurden interne Werkstatteleistungen in Anspruch genommen. Darüber hinaus fielen Kosten für interne IT-Dienstleistungen an, die die Bereitstellung von Rechenkapazitäten, die Datensicherung sowie die Installation und Wartung der spezialisierten Simulationssoftware umfassten.

Reisekosten entstanden zum einen durch Dienstreisen zu den H2Mare-Verbundtreffen, die der Projektabstimmung und Schnittstellendefinition dienten. Zum anderen wurden Mittel für den Besuch nationaler und internationaler Fachkonferenzen aufgewendet, um die Projektergebnisse (z. B. zur datengetriebenen Regelung) dem Fachpublikum vorzustellen.

I.5 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Die Förderung des Vorhabens war eine essenzielle Voraussetzung, um die komplexen wissenschaftlich-technischen Herausforderungen im Bereich der dynamischen Prozessführung von PtX-Anlagen zu bewältigen. Der Umbau sowie der kontinuierliche Betrieb der Methanisierungsanlage waren unerlässlich, um reale, dynamische Daten für die Entwicklung eines validen digitalen Zwillings zu generieren. Da rein simulierte Daten die physikalischen Realitäten bei Lastwechseln nur unzureichend abbilden, war die Erweiterung der Sensorik und der Infrastruktur zwingend erforderlich. Nur so konnten hochwertige Messdaten in der notwendigen Frequenz und Qualität erfasst werden, die als Basis für die Testung lernfähiger Modelle dienten.

Die parallele Entwicklung mechanistischer und datengetriebener reduzierter Modelle war notwendig, um die Lücke zwischen präziser physikalischer Beschreibung und der für die Regelung erforderlichen

Echtzeitfähigkeit zu schließen. Diese Arbeiten trugen direkt zur Erreichung der Ziele des Arbeitspakets 4.4 (Aufbau eines digitalen Zwillings) bei. Die eingesetzten Personalressourcen waren dem Arbeitsaufwand angemessen, da insbesondere die Automatisierung der Anlage und die Durchführung experimenteller Messkampagnen interdisziplinäres Fachwissen erforderten. Unterstützung durch die Werkstatt und die IT-Abteilung des MPI-PSE war dabei notwendig, um einen sicheren Anlagenbetrieb sowie ein performantes Datenmanagement technisch zu gewährleisten. Die Reisemittel dienen dem essenziellen fachlichen Austausch im Konsortium und der Verbreitung der Ergebnisse. Die Angemessenheit der Mittelverwendung wird durch die konkreten technischen Erfolge belegt. So konnte die Anlage nicht nur über den Stand der Technik hinaus automatisiert, sondern eine stabile Struktur für langfristige, reproduzierbare Messkampagnen etabliert werden, was ohne die Förderung in dieser Tiefe nicht möglich gewesen wäre.

Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse im Sinne des Verwertungsplans

Das MPI-PSE verfolgt als Forschungseinrichtung primär eine wissenschaftliche Verwertung der Ergebnisse. Mit dem im Vorhaben realisierten prototypischen digitalen Zwillings gelang dabei ein entscheidender methodischer Schritt. Es konnte demonstriert werden, dass eine modellgestützte Prozessführung prinzipiell in der Lage ist, die Dynamik realer PtX-Anlagen auch unter volatilen Bedingungen abzubilden und perspektivisch für Regelungsaufgaben in Echtzeit nutzbar zu machen. Dieser "Proof-of-Concept" dient als Validierung, dass die Lücke zwischen theoretischer Optimierung und physischem Anlagenbetrieb mittels moderner Algorithmen geschlossen werden kann.

Die erarbeiteten Lösungen bilden eine technologische Referenzarchitektur für die Digitalisierung in der chemischen Reaktions- und Verfahrenstechnik. Insbesondere die modular aufgebaute Pipeline zur Datenerfassung und -vorverarbeitung ist nicht auf die Methanisierung beschränkt, sondern lässt sich auf andere Prozessschritte entlang der Wasserstoff-Wertschöpfungskette übertragen. Durch die Definition klarer Anforderungen an Sensorik und Datenqualität wurde zudem eine Orientierungshilfe geschaffen, die die industrielle Implementierung solcher Systeme zukünftig beschleunigen und den Einstieg für Anwender vereinfachen kann.

Für das Institut selbst liegt der wesentliche Nutzen in der synergetischen Erweiterung der Kompetenzen. Neben den Fortschritten an der Schnittstelle von Systemverfahrenstechnik und angewandter Mathematik (hybride Surrogate, Optimierung) wurde tiefgehendes Wissen im Bereich der Automatisierungstechnik und dem sicheren Betrieb dynamischer Pilotanlagen aufgebaut. Die enge Verzahnung von experimenteller Datengewinnung und datengetriebener Modellierung ermöglicht es dem Institut, nachfolgende Forschungsaktivitäten zu betreiben, die auf weitere Effizienzsteigerungen und Energieeinsparungen bei PtX-Prozessen abzielen.

Die konkrete Verwertung der Ergebnisse erfolgt durch die kontinuierliche Publikation in renommierten Fachzeitschriften sowie die Präsentation auf nationalen und internationalen Konferenzen. Ein wesentlicher Aspekt ist dabei der "Open Science"-Gedanke. Sowohl die generierten experimentellen Datensätze als auch der entwickelte Modellierungscode wurden öffentlich zugänglich gemacht (z. B. via Repositorien), um Reproduzierbarkeit zu gewährleisten und der wissenschaftlichen Gemeinschaft weiterführende Arbeiten zu ermöglichen. Diese Kombination aus publiziertem Wissen, validierten Modellen und etablierter Infrastruktur bildet zudem die Basis für die Beantragung neuer Forschungsförderungen, um die entwickelten Methoden auf komplexere Prozessketten zu übertragen.

Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens während der Laufzeit

Während der Projektlaufzeit (2021-2025) ist das Interesse an digitalen Zwillingen im Kontext der Wasserstoffwirtschaft stark gestiegen. Es wurden diverse Großprojekte bekannt, die digitalen Zwillinge jedoch mit einer anderen Zielsetzung als der hier verfolgten Prozessoptimierung einsetzen:

- **HyBit (Hydrogen for Bremen's industrial transformation):** Dieses Vorhaben nutzt eine "Virtuelle Transformationsplattform", um die Umstellung des Bremer Stahlwerks auf Wasserstoff abzubilden. Der Fokus liegt hierbei auf makroskopischen Szenario-Analysen, Logistik und techno-ökonomischer Machbarkeit, nicht auf der dynamischen Regelung der chemischen Reaktoren.
- **FORE-PAIR (Start 2025):** Dieses Projekt erweitert den digitalen Zwilling um autonome Unterwasserrobotik zur Inspektion von Offshore-Plattformen. Der digitale Zwilling dient hier primär für die vorausschauende Instandhaltung (Predictive Maintenance) der physischen Struktur, adressiert jedoch nicht die Prozessführung von PtX-Anlagen.

Hinsichtlich der experimentellen Validierung von Advanced Control Strategien (wie NMPC) an realen PtX-Pilotanlagen ist ein breiter Durchbruch weiterhin ausgeblieben. Dem Projektteam sind im Wesentlichen zwei international führende Arbeitsgruppen bekannt, die vergleichbare Ansätze zur Kopplung von Experiment und fortgeschrittener Regelung publiziert haben, sich jedoch in wesentlichen Punkten vom hier verfolgten Ansatz unterscheiden:

- **Gruppe von Panagiotis D. Christofides (UCLA, USA):** Diese Gruppe veröffentlichte mehrere Arbeiten zur Regelung der elektrifizierten Dampfreformierung (Steam Methane Reforming, SMR). Zwar wurde hier die Anwendung von NMPC experimentell demonstriert, die Validierung beschränkt sich jedoch auf Aufbauten im kleineren Labormaßstab.
 - *Exemplarische Veröffentlichung: Estimation-based model predictive control of an electrically-heated steam methane reforming process. Cui, Xiaodong, et al. s.l.: Digital Chemical Engineering, 2024, Vol. 11. 10.1016/j.dche.2024.100153.*
- **Gruppe von Alexander Mitsos (RWTH Aachen / FZ Jülich):** Diese Gruppe fokussiert sich in ihren Arbeiten primär auf die elektrifizierte Biodiesel- und Glycerolproduktion. Obwohl umfangreiche theoretische und modellbasierte Untersuchungen zur "Plantwide Control" vorliegen, wurde die vollständige Schließung des Regelkreises (Closed-Loop) mit direkter Rückkopplung der Stellgrößen zur realen Anlage in den relevanten Arbeiten noch nicht vollzogen.
 - *Exemplarische Veröffentlichung: Dynamic modeling and plantwide control of a production process for biodiesel and glycerol. El Wajeh, Mohammad, Mhamdi, Adel and Mitsos, Alexander. 27, s.l.: Industrial & Engineering Chemistry Research, 2023, Industrial & Engineering Chemistry Research, Vol. 62, pp. 10559--10576. 10.1021/acs.iecr.3c00934.*

Das eigene Vorhaben konnte somit seine spezifische fachliche Nische, die Echtzeit-Optimierung dynamischer PtX-Reaktoren im Pilotmaßstab mittels reduzierter Modelle bei geschlossenem Regelkreis, unbeeinflusst von externen Entwicklungen weiterverfolgen.

Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen nach Nr. 5 der NKBF/NABF

Tabelle 1: Erfolgte Veröffentlichungen

Jahr der Veröffentlichung	Art der Veröffentlichung	Titel	Autoren
2026	Konferenzvortrag eingereicht (ReactEng26)	Quadratic reduced-order models for dynamic Power-to-X operation	Peterson, Luisa; Geschke, Alexander; Goyal, Pawan Kumar; Gosea, Ion Victor; Bremer, Jens; Zimmermann, Ronny, Tobias; Benner, Peter; Sundmacher, Kai
2026	Konferenzvortrag eingereicht (ReactEng26)	Experimental Insights into Stationary and Dynamic Pilot-Scale Fixed-Bed Reactor Operation with Core-Shell Catalyst Pellets for Power-to-Methane	Geschke, Alexander; Peterson, Luisa; Zimmermann, Ronny, Tobias; Sundmacher, Kai
2026	Geplanter Artikel	Data-driven reduced-order model for optimal control of dynamically operated Power-to-X reactors	Peterson, Luisa; Geschke, Alexander; Goyal, Pawan Kumar; Gosea, Ion Victor; Bremer, Jens; Zimmermann, Ronny, Tobias; Benner, Peter; Sundmacher, Kai
2026	Geplanter Artikel	Catalyst pellet design for mitigating thermal runaway in wall-cooled fixed bed reactors	Geschke, Alexander; Peterson, Luisa; Zimmermann, Ronny, Tobias; Sundmacher, Kai
2026	Geplanter Artikel	A Data-Driven Framework for Modeling a Pilot-Scale Fixed-Bed Reactor for CO ₂ Methanation	Geschke, Alexander; Bremer, Jens; Sundmacher Kai

2025	Artikel (Computers & Chemical Engineering)	Digital twins in process engineering: An overview on computational and numerical methods	Peterson, Luisa; Gosea, Ion Victor; Benner, Peter; Sundmacher, Kai
2025	Artikel (IEEE Transactions on Automation Science and Engineering)	Towards digital twins for power-to-X processes: Comparing surrogate models for a catalytic CO ₂ methanation reactor	Peterson, Luisa; Forootani, Ali; Sanchez Medina, Edgar Ivan; Gosea, Ion Victor; Sundmacher, Kai; Benner, Peter
2025	Konferenzbandbeitrag (arXiv Preprint) + Vortrag	Model-Based Control for Power-to-X Platforms: Knowledge Integration for Digital Twins	Dittler, Daniel; Frank, Peter; Hildebrandt, Gary; Peterson, Luisa; Jazdi, Nasser; Weyrich, Michael
2025	Konferenzbandbeitrag (Systems and Control Transactions) + Vortrag	Physics-Informed Graph Neural Networks for Modeling Spatially Distributed Dynamically Operated Processes	Khalid, Md Meraj; Peterson, Luisa; Medina, Edgar Ivan Sanchez; Sundmacher, Kai
2025	Konferenzbeitrag (Digital Twins in Engineering 2025) + Vortrag	Comparing Surrogate Models for Real-Time Dynamic Reactor Simulations	Peterson, Luisa; Forootani, Ali; Sanchez Medina, Edgar Ivan; Gosea, Ion Victor; Benner, Peter; Sundmacher, Kai
2025	Poster (Konferenz, Abstract veröffentlicht)	Reduced-Order Modeling for a Methanation Reactor by Harnessing the Effectiveness of Nonlinear Decoders	Peterson, Luisa; Goyal, Pawan Kumar; Gosea, Ion Victor; Benner, Peter; Sundmacher, Kai
2025	Konferenzvortrag (AIChE Annual Meeting 2025)	Enabling Load-Flexible Fixed-Bed Reactor Operation with Core-Shell Catalyst Pellets	Zimmermann, Ronny Tobias; Geschke, Alexander; Sundmacher, Kai

2025	Konferenzvortrag (ReactEng25)	Experimental Validation of the Core-Shell Catalyst Pellet Concept in a Fixed-Bed Tubular Reactor	Geschke, Alexander, Zimmermann, Ronny Tobias; Sundmacher, Kai
2025	Artikel (Energy Conversion and Management)	Cost-scaling of large Power-to-Methanol plants supplied with wind power and CO ₂ from direct air capture: A Chile case study	Svitnič, Tibor; Sundmacher, Kai
2025	Masterarbeit	Detection and Management of Model Drift in a Catalytic CO ₂ Methanation Reactor in the Context of an Offshore PtX Process	Burhenne, Kai
2025	Bachelorarbeit	Konzeption und Evaluierung von Zeitreihenmodellen für die Ersatzmodellierung eines dynamischen, kontinuierlich durchmischten Rührkesselreaktors	Bühnemann, Isabel
2025	Masterarbeit	Spatial-temporal neural networks for the modeling of controlled process engineering systems	Khalid, Md Meraj
2024	Artikel (Computers & Chemical Engineering)	Challenges in data-based reactor modeling: A critical analysis of purely data-driven and hybrid models for a CSTR case study	Peterson, Luisa; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai
2024	Konferenzbandbeitrag (Elsevier, CACHÉ 53) + Vortrag	Learning reduced-order models for dynamic CO ₂ methanation using operator inference	Peterson, Luisa; Goyal, Pawan; Gosea, Ion Victor; Bremer, Jens; Benner, Peter; Sundmacher, Kai
2024	Konferenzvortrag (AIChE Annual Meeting 2024)	Stability-Guaranteed Inference of Reduced-Order Models with Control of Power-to-X Processes	Peterson, Luisa; Goyal, Pawan Kumar; Pontes Duff, Igor; Gosea, Ion Victor; Bremer, Jens; Benner, Peter; Sundmacher, Kai
2024	Konferenzvortrag (ACHEMA 2024)	A Smart Catalytic Fixed-Bed Reactor for CO ₂ Methanation	Zimmermann, Ronny Tobias; Geschke,

			Alexander; Peterson, Luisa; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai
2024	Poster (AIChE Annual Meeting 2024)	Learning a Data-Driven Reactor Model from Experimental Data of a Continuously Operated Fixed-Bed CO ₂ Methanation Reactor on Pilot-Scale	Geschke, Alexander; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai
2024	Artikel (Chemie Ingenieur Technik)	Core-Shell Catalyst Pellets for CO ₂ Methanation in a Pilot-Scale Fixed-Bed Reactor	Geschke, Alexander; Zimmermann, Ronny Tobias; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai
2024	Artikel (Procedia CIRP)	Digital Twin to Enhance Offshore Power-to-X Platforms with Operational Alarm Management	Bodenstein, Frederike; Dieckmann, Stefan; Dittler, Daniel; Geschke, Alexander; Jazdi, Nasser; Weyrich, Michael
2024	Artikel (Automation 2024)	Konzept zur Unterstützung des Alarmmanagements auf Basis des intelligenten Digitalen Zwillings für Offshore-PtX Plattformen	Bodenstein, Frederike; Dieckmann, Stefan; Dittler, Daniel; Geschke, Alexander; Jazdi, Nasser; Weyrich, Michael
2024	Artikel (Energy Conversion and Management)	Identifying standard and simple designs of Power-to-Methanol processes: The costs of complexity reduction	Svitnič, Tibor; Sundmacher, Kai
2024	Bachelorarbeit (Zusammenarbeit mit der Universität Stuttgart)	Implementierung einer Anomalieerkennung für synthetisch erzeugte Daten eines Reaktormodells für die Methanisierung im H ₂ Mare-Projekt	Arvind, Pradyumin

2024	Bachelorarbeit (Zusammenarbeit mit der Fakultät für Mathematik OvGU und Robert Bosch GmbH)	Herleitung und Analyse hybrider Lösungsstrategien für chemische Reaktionsmodelle mit Hilfe von AI Methoden	Köppe, Richard
2023	Konferenzbandbeitrag (Elsevier, CACHÉ 52, ESCAPE- 33) + Vortrag (ReactEng23) + Poster ESCAPE-33	Hybrid modeling of the catalytic CO ₂ methanation using process data and process knowledge	Peterson, Luisa; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai
2023	Konferenzbandbeitrag (Springer, ENUMATH) + Vortrag	Learning reduced-order quadratic- linear models in process engineering using operator inference	Gosea, Ion Victor; Peterson, Luisa; Goyal, Pawan; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai; Benner, Peter
2023	Masterarbeit	Technoökonomische Machbarkeitsstudie zur Übertragung des konventionellen Haber-Bosch-Prozesses von der Onshore- zur autarken Offshore- Produktion	Prieß, Tobias
2023	Bachelorarbeit	Methodenentwicklung zur dynamischen Online- Prozessanalyse mittels Massenspektrometrie für eine Pilotanlage zur Methanisierung	Smatko, Violetta
2021	Pressemeldung	Leitprojekt H2Mare soll über 100 Mio. Euro Förderung vom BMBF erhalten – Förderung für Verbundprojekt PtX-Wind jetzt bewilligt	Ebel, Gabriele; Sundmacher, Kai

Literaturverzeichnis

1. **Grieves, Michael and Vickers, John.** Digital twin: Mitigating unpredictable, undesirable emergent behavior in complex systems. *Transdisciplinary perspectives on complex systems: New findings and approaches*. s.l. : Springer, 2016, pp. 85-113.
2. **Willcox, Karen, et al.** *Foundational research gaps and future directions for digital twins*. Washington DC : National Academies Press Washington, 2023.
3. *The digital twin--your ingenious companion for process engineering and smart production*. **Bamberg, Andreas, et al.** s.l.: Wiley Online Library, 2021, Chemical Engineering & Technology, Vol. 44, pp. 954-961. 6.
4. *Digital twins in process engineering: An overview on computational and numerical methods*. **Peterson, Luisa, et al.** s.l. : Elsevier, 2025, Computers & Chemical Engineering, Vol. 193, p. 108917.
5. **Bremer, Jens.** Advanced Operating Strategies for Non-Isothermal Fixed-Bed Reactors Exemplified for CO₂ Methanation. *Dissertation*. Magdeburg : s.n., 11 16, 2020.
6. *Core-Shell Catalyst Pellets for CO₂ Methanation in a Pilot-Scale Fixed-Bed Reactor*. **Geschke, Alexander, et al.** 2024, Chemie Ingenieur Technik, pp. 1718-1725.
7. *Load-flexible fixed-bed reactors by multi-period design optimization*. **Zimmermann, Ronny Tobias, Bremer, Jens and Sundmacher, Kai.** s.l. : Elsevier, 2022, Chemical Engineering Journal, Vol. 428, p. 130771.
8. *A new heat transfer correlation suited for the design of fixed-bed reactors via numerical optimization*. **Pietschak, Alexander, Dixon, Anthony G. and Freund, Hannsjörg.** s.l. : Elsevier, 2020, Chemical Engineering Science, Vol. 220, p. 115614.
9. *Towards digital twins for Power-to-X: Comparing surrogate models for a catalytic CO₂ methanation reactor*. **Peterson, Luisa, et al.** s.l. : IEEE, 2025, IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, pp. 1-1.
10. *GN-SINDy: Greedy sampling neural network in sparse identification of nonlinear partial differential equations*. **Frootani, Ali, et al.** 2024, arXiv preprint.

