

Verfahrenstechnik mit System

P

Produktionsprozesse bestehen aus so genannten Grundoperationen. Bei der Herstellung eines Medikaments, dessen Wirkstoff aus einer Pflanze gewonnen wird, könnte ein stark vereinfachter Herstellungsprozess aus den folgenden Grundoperationen bestehen:

1. Mechanisches Zerkleinern des Pflanzenmaterials;
2. Extrahieren des Wirkstoffs mit einem flüssigen Extraktionsmittel, genau wie das Extrahieren der Geschmacks- und Duftstoffe aus dem Tee mit dem Extraktionsmittel Wasser;
3. Aufkonzentrieren des Wirkstoffs, ähnlich dem Aufkonzentrieren von Alkohol beim Destillieren von Schnaps;
4. Vermischen mit weiteren Wirkstoffen;
5. Kristallisieren der Wirkstoffe, ähnlich der Salzgewinnung durch Verdunstung von Meerwasser sowie
6. Pressen des Wirkstoffpulvers in Tablettenform.

Die Aufgabe der Verfahrenstechnik besteht im Wesentlichen darin, die Abfolge der Grundoperationen festzulegen und diese anschließend im Detail auszulegen, um so zu einem betriebswirtschaftlich wie ökologisch hocheffizienten Herstellungsprozess zu gelangen. Bei der Medikamentenherstellung könnte also die Frage zu klären sein, ob die mechanische Zerkleinerung notwendig ist und ob die Beimischung weiterer Wirkstoffe vor oder nach der Aufkonzentrierung erfolgen soll. Bei realen Prozessen mit einer Vielzahl von Prozessschritten und oftmals gänzlich unterschiedlichen Herstellungsoptionen, entstehen so schnell viele tausend alternative Kombinationen von Grundoperationen, die zum gewünschten Produkt führen.

Steht die Folge von Grundoperationen fest, müssen diese im Detail ausgelegt werden. So wäre im Beispiel unter anderem zu klären, welches Extraktionsmittel, bei welcher Temperatur und welchem Druck im zweiten Prozessschritt zum Einsatz kommen soll. Die Komplexität der Frage „Was ist der optimale Prozess“ ist dabei so hoch, dass

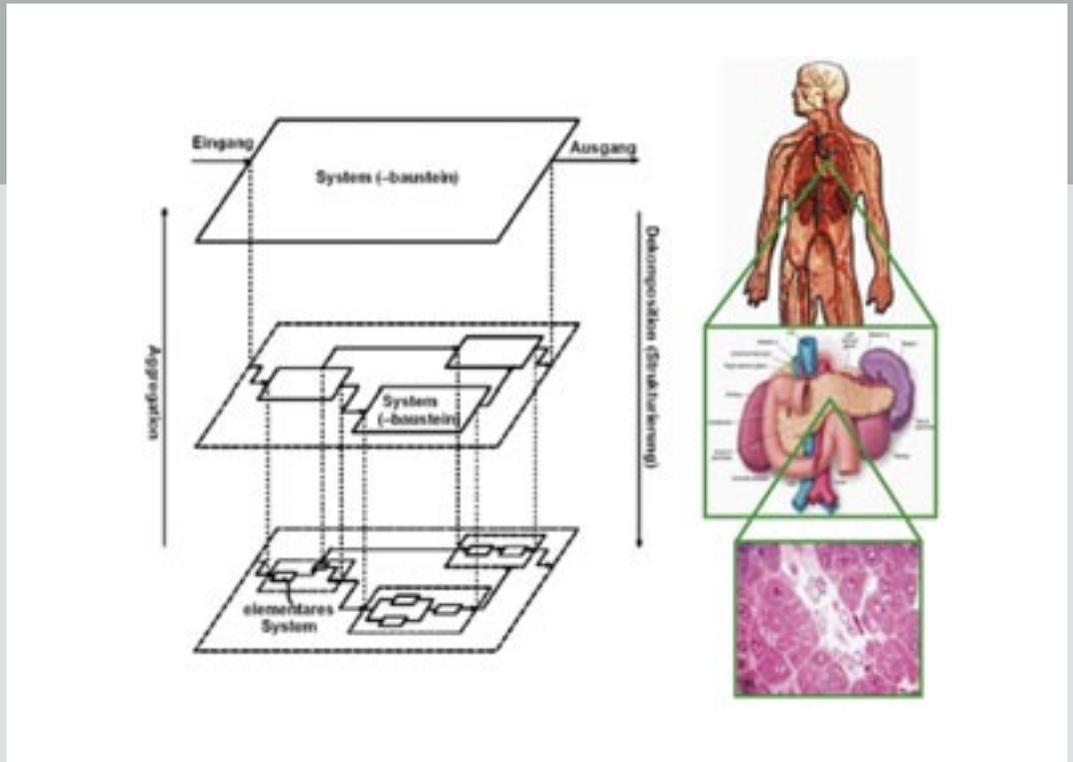


Bild 1: Aufbau eines Systems aus Teilsystemen, links allgemein und rechts am Beispiel des Menschen.

bei den meisten Prozessen eine rigorose Beantwortung nicht möglich ist. Daher hat sich in der Verfahrenstechnik ein Mix aus Heuristiken und einfachen – beispielsweise grafischen – Auslegungsmethoden etabliert, um effizient gute Prozessalternativen zu finden und die notwendigen Grundoperationen auszulegen.

Was unterscheidet nun die Systemverfahrenstechnik von der klassischen Verfahrenstechnik, deren Betätigungsfelder gerade beschrieben wurden? Um diese Frage beantworten zu können muss man sich die Wurzeln der Systemverfahrenstechnik angucken, die mehr in der System- als in der Verfahrenstechnik liegen. Es ist also zunächst wichtig, die Systemtechnik und deren Wurzeln zu erläutern und zu verstehen. Grundlage der Systemtechnik ist die Allgemein Systemtheorie, die in den 1930er Jahren von Ludwig von Bertalanffy, einem Biologen, erfunden und in ihren Grundzügen formuliert wurde. Sie stellt eine über alle Wissenschaftsbereiche hinweg gleichermaßen verwendbare Methodik zur Analyse und Synthese

se komplexer Systeme bereit. Komplexe Systeme bestehen aus einer großen Zahl von miteinander wechselwirkenden Teilsystemen, die über eine Reihe von Detaillierungs- oder Abstraktionsebenen nach Bedarf verfeinert oder vergrößert werden können. Bild 1 zeigt den Aufbau eines Systems, links abstrakt und schematisiert, rechts am Beispiel eines Menschen, der – unter anderem – aus unterschiedlichen Organen besteht, welche wiederum aus unterschiedlichen Zellen aufgebaut sind, die selbst wieder aus Organellen bestehen.

Die Allgemeine Systemtheorie beschäftigt sich dabei mit der Systemanalyse, also dem Beschreiben und Verstehen von Aufbau, Verhalten und Funktion – künstlicher und natürlicher – Systeme, der Synthese zur Entwicklung und Umsetzung künstlicher Systeme, die vorgegebenen Anforderungen genügen, und der Repräsentation von Systemen mit Hilfe von (semi-)formalen und mathematischen Modellen.

Offensichtlich muss ein solches Modell die Effekte auf allen betrachteten Skalen berücksichtigen, wenn man zufriedenstellende Lösungen erarbeiten will. Bei dieser Mehrskalen-Modellierung werden nicht nur die bestimmenden Effekte auf einer

Systemebene – und damit auf einer bestimmten Größen- oder Zeitskala – modelltechnisch erfasst. Vielmehr ist es auch erforderlich, die direkte Kopplung zwischen den Phänomenen auf den unterschiedlichen Skalen zu berücksichtigen. Dies lässt sich gut an dem schon kurz angeschnittenen Beispiel „Mensch“ diskutieren. Ein verabreichtes Medikament gelangt über den Darm in die Blutbahn und von dort in einzelne Zellen, wo es den Stoffwechsel der Zelle beeinflusst. Die Veränderungen, die es dort bewirkt, beeinflussen wiederum den gesamten Organismus, so dass zum Beispiel die Körpertemperatur abnimmt. Es ist direkt klar, dass ein Modell, das zur Optimierung eines Medikamentes genutzt werden soll, Effekte auf Ebene der in den Zellen ablaufenden biochemischen Stoffwechsel-Reaktionen genauso berücksichtigen muss wie Effekte auf Ebene ganzer Organe oder des gesamten Menschen.

Diese Mehrskaligkeit zeigt ganz deutlich, dass der Systembegriff sehr weit gefasst sein muss. Wie auch Bild 1 zeigt, kann ein System ein einzelnes Molekül, eine einzelne Zelle, ein Organ, ein Mensch, eine Gruppe von Menschen oder die gesamte Menschheit sein. Die Fokussierung auf eine bestimmte

Ganzheitlich und modellgestützt die Realität verbessern

Betrachtungstiefe folgt aus dem Ziel, das mit der Systembeschreibung verfolgt wird. So interessieren sich Molekularbiologen für die Zelle und ihre Bestandteile, Mediziner für die Organe und ihr Zusammenspiel und Soziologen für eine Gruppe von Menschen und ihr Verhalten in einem gesellschaftlichen Umfeld. Der Charme der Allgemeinen Systemtheorie ist, dass ihr Instrumentarium unabhängig vom Wissenschaftsgebiet und von der konkret verfolgten Fragestellung generelle Gültigkeit hat. Diese Allgemeingültigkeit geht zu Lasten der Leistungsfähigkeit für die Lösung einer konkreten Aufgabenstellung. Das Rahmenwerk der Allgemeinen Systemtheorie muss daher für konkret betrachtete Systeme ausgestaltet und verfeinert werden.

Eine spezielle Klasse von Aufgabenstellungen wird in diesem Sinne in der Systemtechnik betrachtet: ein künstliches System optimal zu planen, zu gestalten, zu betreiben und schließlich auch wieder stillzulegen. Ein künstliches System ist dabei nicht – wie man schlechthin meinen könnte – auf eine technische Einrichtung, eine Maschine, ein Fahrzeug oder eine Produktionsanlage beschränkt. Das System kann sowohl die Auslieferung eines Paketes wie auch eine Raffinerie zur Herstellung von Super-Benzin sein.

Das letzte Beispiel ist speziell aus dem Aufgabengebiet der Systemverfahrenstechnik, denn diese ist wiederum nichts anderes als Systemtechnik, angewandt auf Fragestellungen aus dem Gebiet der Verfahrenstechnik.

Der Schritt, verfahrenstechnische Fragestellungen systemtechnisch anzugehen liegt dabei sehr nahe, da jeder verfahrenstechnische Prozess direkt

als ein System betrachtet werden kann. Das eingangs erwähnte Beispiel des Medikamentenherstellungsprozesses zeigt zum Beispiel deutlich den systematischen Aufbau eines Herstellungsprozesses aus Grundoperationen.

Die Aufgabe der Systemverfahrenstechnik besteht nun darin, einen verfahrenstechnischen Prozess während seiner ganzen Lebensdauer auf unterschiedlichen Längen- und Zeitskalen zu betrachten. Dabei sind im Wesentlichen folgende Aufgaben zu lösen und Anforderungen zu erfüllen, die im Verlauf im Detail erklärt werden:

- die Planung eines Prozesses;
- der Entwurf eines Prozesses;
- die Regelung eines Prozesses;
- der Betrieb einer Anlage.

Die Frage ist nun, wie sich Planung, Entwurf, Regelung und Betrieb optimal gestalten lassen. Die Beantwortung dieser Frage ist schwierig, denn der Methodenkasten der Systemverfahrenstechnik ist umfangreich und je nach Problemstellung sind unterschiedliche Lösungsansätze sinnvoll. In jedem Fall wird die Lösungssuche aber durch gezielte Anwendung mathematischer Modelle des Prozesses zur Vorhersage ihres Verhaltens unterstützt, die abhängig von der Aufgabenstellung mit verschiedenen Details ausgestattet entwickelt und mit der Realität abgeglichen werden müssen.

Systemverfahrenstechnik: Ganzheitlich zum optimalen Produktionsprozess

Seit der Einführung der Computertechnik in den 1950er Jahren besteht zunehmend die

Möglichkeit, immer komplexere Systeme im Computer nachzubilden. Gelingt eine realitätsnahe Abbildung eines Prozessschrittes oder ganzen Prozesses im Computer, so kann dieses Prozessmodell genutzt werden, um die oben genannten Aufgaben systematisch und unter Abwägung aller Einflussgrößen wie Produktqualität, Ressourcenverbrauch, Wirtschaftlichkeit, Sicherheit oder Umweltverträglichkeit zu lösen. Ein solcher ganzheitlicher, durch mathematische Modellierung, numerische Simulation und Optimierung unterstützter Lösungsansatz macht den Kern der Systemverfahrenstechnik aus.

Die erste Aufgabe, Prozessplanung oder Prozesssynthese, ist im Fall des Beispielprozesses Medikamentenherstellung also die Bestimmung der optimalen Abfolge von Grundoperationen, um zum gewünschten Produkt zu kommen. Es ist dabei unmittelbar klar, dass bei genauer Betrachtung und bei komplexen, aus vielen Grundoperationen bestehenden Prozessen schnell eine sehr hohe Anzahl von alternativen Prozessdenkbar ist. Die systematische Analyse und Bewertung dieser Alternativen ist nur mit mäßig detaillierten mathematischen Modellen und mit effizienten numerischen Verfahren möglich.

Steht die Abfolge der Grundoperationen fest, so ist dies erst der Startpunkt für den Prozessentwurf. Jede einzelne Grundoperation muss im Detail ausgelegt werden.

Eine Aufgabe in Prozessentwurf und -optimierung wäre etwa die Auslegung der Extraktion. Hier müssen zahlreiche Fragen beantwortet werden. Zum einen muss ein geeignetes Extraktionsmittel bestimmt werden. Ist dieses gefunden, müs-

sen Temperatur und Druck, oder genauer, die Verläufe von Temperatur und Druck bestimmt werden, die eine optimale Extraktion des gewünschten Wirkstoffs erlauben.

Gelingt es, den Vorgang der Extraktion mit Hilfe eines mathematischen Modells detailgenau nachzubilden, so lassen sich diese Fragen prinzipiell mit dessen Hilfe, mit einem Experiment im Rechner also, beantworten. Sind beispielsweise die Wechselwirkungen zwischen Extraktionsmittel, Druck, Temperatur und dem Extraktionsprozess hinreichend genau verstanden und in einem Modell implementiert, so lassen sich das optimale Extraktionsmittel samt optimalem Temperatur- und Druckverlauf rigoros vorausberechnen.

Bei beiden bisher betrachteten Aufgaben handelt es sich mathematisch betrachtet um Optimierungsprobleme, die mit Hilfe von Prozessmodellen gelöst werden. Das Ergebnis einer solchen rigorosen Optimierung bestimmt die Abfolge und die Ausgestaltung der Grundoperationen und ist damit gewissermaßen der Bauplan für die Anlage. Ein Fehler in dieser Phase wirkt sich also auf die gesamte Betriebsdauer der Anlage aus und hat hohe Kosten zur Folge. Dementsprechend müssen die verwendeten Modelle ausreichend genau sein und alle für die Bearbeitung der Aufgabenstellung wesentlichen Phänomene berücksichtigen. Leider sind gerade in dieser Phase auch die Unsicherheiten oft sehr hoch, so dass es besonders schwierig ist, aussagekräftige Prozessmodelle zu entwickeln. Doch auch dieses Problem kann systematisch betrachtet und gelöst werden, dazu muss die Unsicherheit einfach im Modell berücksichtigt

werden. So einfach dieser Ansatz auch klingt, er führt zu sehr komplexen Optimierungsproblemen deren Lösung Gegenstand der aktuellen Forschung ist.

Ist die Anlage fertig geplant und gebaut, warten weitere systemverfahrenstechnische Fragestellungen. Die erste Aufgabe, die es dabei zu lösen gilt, ist die so genannte Echtzeit-Optimierung. Auch hierbei handelt es sich um ein Optimierungsproblem, das jedoch nicht nur einmal zu Planungszwecken, sondern immer wieder während des Betriebs in Echtzeit gelöst werden muss. Ziel ist es beispielsweise, den optimalen Verlauf von Druck und Temperatur während der Extraktion zu bestimmen. Hier ändern sich die optimalen Werte laufend, zum Beispiel auf Grund einer sich ändernden Rohstoffqualität, etwa je nach Anbaugesicht, Lagerung und Jahrgang. Das Optimierungsproblem muss also immer wieder neu gelöst werden, wobei die Frequenz von der Geschwindigkeit der relevanten Änderungen im Prozess bestimmt wird. Hier muss also eine optimale Lösung innerhalb eines vom Prozess vorgegebenen Zeitfensters gefunden werden.

Gelingt dies, ist der optimale Betrieb noch immer nicht sichergestellt. Dazu bedarf es noch einer funktionierenden Prozessregelung, die garantiert, dass die optimalen Betriebsbedingungen auch eingehalten werden. Hierfür haben sich wiederum Modelle als hilfreich erwiesen, da sie es erlauben, das Prozessverhalten vorausszusagen. Diese Vorhersage kann nun genutzt werden, um Änderungen an den so genannten Regelgrößen, beispielsweise ein Kühlmittelstrom, gezielt so vorzunehmen, dass der Prozess zu

jedem Zeitpunkt optimal betrieben wird. Diese Art der Regelung bezeichnet man auch als modellprädiktive Regelung. Wird der Prozess geregelt, ohne ein Modell zur Verfügung zu haben, so kann die Regelung immer nur reagieren, mit Hilfe der Modellvorhersage allerdings können störende Einflüsse schon erkannt und eliminiert werden, bevor sie sich auf den Prozess auswirken. Offensichtlich ist hier eine besonders schnelle Berechnung erforderlich, da das Modell in Echtzeit eine zuverlässige Vorhersage des erwarteten Prozesszustands liefern muss, bevor sich dieser in der Realität einstellt.

Systemverfahrenstechnik

In der AVT-Prozesstechnik wird insbesondere auf den Gebieten Prozesssynthese, Echtzeitoptimierung, Regelung und Modellidentifikation geforscht.

In der Prozesssynthese werden unter anderem so genannte Short-Cut-Methoden zur Berechnung von Trennsequenzen entwickelt. Als Short-Cut-Methoden bezeichnet man dabei Berechnungsmethoden, die effizient die Abschätzung relevanter Prozessgrößen erlauben. Eine Trennsequenz ist eine Abfolge von Trennschritten, die es ermöglicht, auch aus Vielstoffgemischen einzelne Reinstoffe zu separieren. In jedem Trennschritt wird dabei der Gesamtstrom in zwei Teilströme aufgeteilt. Sollen so aus einem flüssigen Gemisch aus neun Stoffen, alle Reinstoffe gewonnen werden, sind Trennaufgaben zu berechnen. Mit in der AVT-Prozesstechnik entwickelten Methoden ist es möglich, dies auf 120 Berechnungen zu reduzieren, ohne dabei Informationen zu verlieren. Mit einer solchen umfassenden Betrachtung lassen sich deutlich energiesparen-

dere Anlagen bei reduziertem Investitionsbedarf bestimmen.

Auch auf dem Gebiet der Echtzeitoptimierung sind die Aachener Wissenschaftler aktiv. Den Schwerpunkt bildet hier das Softwarepaket „DyOS“. Dieses ermöglicht es komplexe, so genannte Optimalsteuerungsprobleme effizient und robust zu lösen. Neben der Anwendung von Modellen, spielt auch deren Entwicklung eine wichtige Rolle in der Forschung. Schließlich können die oben beschriebenen Methoden nur angewandt werden, wenn ein valides Prozessmodell vorliegt.

Mit nachwachsenden Rohstoffen vom Produkt zum Prozess

Als interdisziplinäre Wissenschaft an der Schnittstelle zwischen Biologie, Chemie, Physik, angewandter Mathematik und Informatik muss die Systemverfahrenstechnik auch in Zukunft darauf achten, zum einen die Schnittstelle zu diesen Professionen zu pflegen und weiterzuentwickeln, zum anderen aber auch die eigene Identität zu wahren, weiterzuentwickeln und zu schärfen. Die Kernkompetenz der Systemverfahrenstechnik muss dabei ihre Funktion als Methodenintegrator sein und bleiben. Gleichzeitig müssen eben diese Methoden auf neue Aufgabenstellungen angewandt werden um sie so zu verbessern und weiterzuentwickeln.

Neue Aufgaben werden dabei in naher und mittelfristiger Zukunft vor allem durch den bevorstehenden Rohstoffwandel generiert. Die chemische Industrie basiert heutzutage im Wesentlichen auf Grundchemikalien, die aus Erdöl gewonnen werden. Mit sinkender Verfügbarkeit des Erdöls und den damit verbundenen steigenden

Preisen, wird sich ein Wandel vollziehen hin zu der Herstellung von Grundchemikalien aus nachwachsenden Rohstoffen. Hierfür müssen in kurzer Zeit völlig neue Prozesse erdacht und umgesetzt werden, die neuartige und vielfältig gestaltbare biogene Rohstoffe zu neuen, an die molekulare Struktur der Rohstoffe angepasste Produkte umsetzen.

Die Bewertung und Auslegung dieser Prozesse muss dabei großteils von der Systemverfahrenstechnik geleistet werden, so dass hier auf die kommende Generation von Wissenschaftlern spannende und vielfältige Fragestellungen warten, deren Lösung einen wesentlichen Einfluss auf die zukünftige Lebens- und Wohlstandssituation haben wird. Die Aachener Verfahrenstechnik beschäftigt sich mit diesen Problemen beispielsweise im Exzellenzcluster „Maßgeschneiderte Kraftstoffe aus Biomasse“.

Autoren:

Dipl.-Ing. Claas Michalik ist Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl AVT- Prozesstechnik. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Marquardt ist Inhaber des Lehrstuhls für AVT-Prozesstechnik.