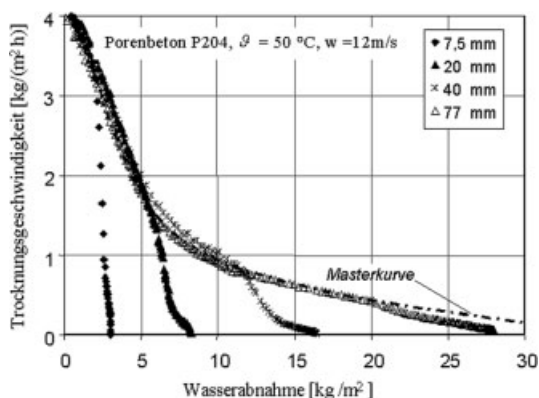


Die Abbildung zeigt die gemessenen Trocknungsverlaufskurven für Porenbetonplatten unterschiedlicher Dicke von 7,5 mm bis 77 mm bei 50 °C und einer Luftgeschwindigkeit von 12 m/s. Nach kurzem Abschnitt der konstanten Trocknungsgeschwindigkeit laufen die Kurven für alle Plattendicken längs einer Masterkurve. Für jede Plattendicke gibt es einen gewissen Zeitpunkt an dem sich der Kurvenverlauf in Abhängigkeit von der Plattendicke ändert.

Abbildung.

Gemessene Trocknungsverlaufskurven für Porenbetonplatten unterschiedlicher Dicke bei 50 °C und einer Luftgeschwindigkeit von 12 m/s.



G Computational Chemical Engineering

Prozessoptimierung

G-01

Online-Analytik zur Prozessführung**

Dr. G. Dünnebier*¹⁾

E-Mail: guido.duennebier@bayertechnology.com

Dr. A. Bamber²⁾

¹⁾ BAYER TECHNOLOGY SERVICES GMBH, Leverkusen;

²⁾ MERCK KGAA, Darmstadt.

Sichere, leistungsfähige und damit auch wirtschaftlich optimale Prozessführung in der chemischen Industrie ist mehr denn je auf Messdaten aus den betreffenden Prozessen an-

gewiesen. Die Ansprüche an Dateneigenschaften und Datenqualität haben sich dabei in der letzten Dekade spürbar gewandelt. Zunehmend werden zur Regelung stoffspezifische Informationen, z. B. Sätze von Einzelstoffkonzentrationen, eingesetzt.

Der Einsatz von online Analytik in Kombination mit Prozessführung birgt ein enormes wirtschaftliches Potential, wobei sich zusätzlich zu den Einsparungen durch den bloßen Einsatz von online Analytik (z. B. im Bereich Laboranalytik) durch die Kombination mit Prozessführung weitere Benefits, wie z. B. geringerer Energieverbrauch, erhöhte Ausbeute oder höhere Kapazität, realisieren lassen.

Ein steiniger Weg führt jedoch zur Ausschöpfung dieser wirtschaftlichen Potentials, weshalb die Zahl der realisierten Anwendungen erst in den letzten Jahren stetig wächst. Die bessere Qualität und Zuverlässigkeit der Messdaten, Fortschritte in der Einbindung der Geräte in die PLT-Systemwelt und wachsendes Vertrauen in diese Technologie ermöglichten dieses Wachstum.

Der zentrale Teil dieses Beitrags veranschaulicht die Möglichkeiten der Kombination von online Analytik und Prozessführung an einem breiten Spektrum von Beispielen, wie einer Batch-Destillationskolonnen, einer kontinuierlichen destillativen Isomerentrennung, der Regelung von Müllverbrennungsanlagen und der Automatisierung einer kompletten Feinchemieanlage. Hierbei kommen vornehmlich spektrometrische Messmethoden zum Einsatz.

Aus den Erfahrungen und Problemen der bisherigen Projekte lassen sich Wünsche und Regeln sowohl für die Definition und Abwicklung solcher Projekte in einem interdisziplinären Team als auch für die systemtechnische Anbindung der online-Analytik an das Leitsystem ableiten.

G-02

Indirect Hard Modeling – Ein Verfahren zur Analyse bandenförmiger Messsignale

Dipl.-Ing. E. Kriesten*¹⁾

Dr.-Ing. F. Alsmeyer²⁾

Prof. Dr.-Ing. W. Marquardt¹⁾

¹⁾ Lehrstuhl für Prozesstechnik, RWTH Aachen, D-52056 Aachen.

²⁾ AixCAPE e.V., Intzestraße 1, D-52072 Aachen

In der Online-Prozessüberwachung und der experimentellen Analyse kommen zur Bestimmung von Konzentrationen in Mischungen häufig Messverfahren zum Einsatz, die bandenförmige Signale liefern. Als Beispiele sind hier die Gaschromatographie und nicht-invasive optische Verfahren wie die Spektroskopie zu nennen. Zur Auswertung des Messsignals werden chemometrische Verfahren eingesetzt, die mit Hilfe eines Kalibrier-Modells die gesuchte Konzentration bestimmen.

** Vortrag des NAMUR Arbeitskreises 2.2, „Prozessführung“ auf der NAMUR Hauptsitzung 2003, Nov 2003, Lahnstein unter Mitarbeit von Dr. J. BAUSA (BASF AG), J. LAMERS (HENKEL KGAA), Dr. O. LORENZ (SIEMENS AXIVA), Dr. U. PIECHOTKA (DEGUSSA AG), R. PIONTEK (KRUPP UHDE GMBH), C. VERMUM (OXENO OLEFINCHEMIE) sowie Dr. M. FRIEDRICH (BAYER TECHNOLOGY SERVICES GMBH), Dr. M. HAJDUK (DEGUSSA AG) und Dr. C. SAAL (MERCK KGAA)

In der Praxis haben sich vorwiegend datengetriebene, sog. soft modeling Verfahren, wie bspw. partial least squares (PLS), etabliert. Phänomenologische hard modeling Verfahren, die eine Modellierung der Signale durch überlagerte parametrisierte Bandenfunktionen vornehmen, sind aufgrund komplexer physikalischer Zusammenhänge weniger verbreitet. Die bestehenden Verfahren weisen allerdings drei wesentliche Nachteile auf:

- Trotz molekularer Wechselwirkungen werden lineare Ansätze verwendet.
- Es werden große Kalibrierdatensätze benötigt.
- Hard modeling Verfahren erfordern eine manuelle Bearbeitung jedes einzelnen Messergebnisses.

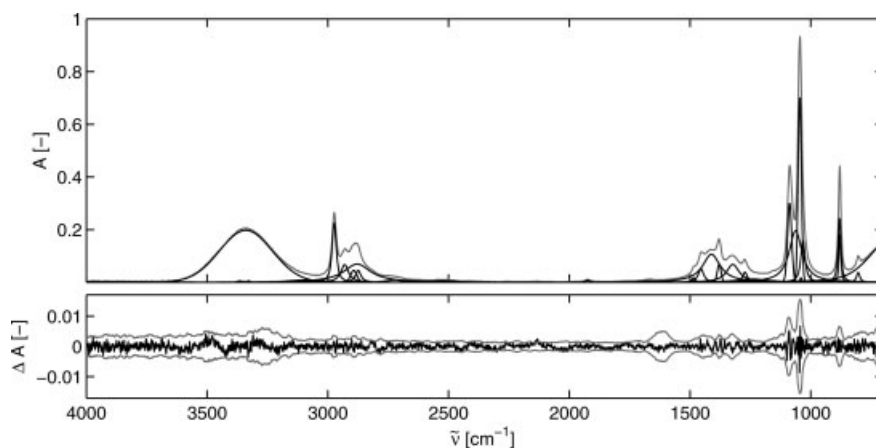
Am Lehrstuhl für Prozesstechnik ist ein neues phänomenologisches sog. indirect hard modeling Verfahren entwickelt worden, bei dem die Nachteile nicht auftreten [1]. Es basiert auf der Modellierung der Mess-Signale durch eine gewichtete Summe von Reinstoffmodellen, die ihrerseits durch hard modeling, also durch eine gewichtete Summe von Bandenfunktionen generiert werden. Aus den Reinstoff-Gewichten, die durch Optimierung bestimmt werden, lassen sich mit einer Kalibriermethode die Konzentrationen berechnen. Auf diese Weise kann die Menge der erforderlichen Kalibrierdaten deutlich reduziert werden. Intermolekulare Wechselwirkungen, die zu Bandenverschiebungen und -formänderungen führen, werden durch die Anpassung der Parameter betroffener Bandenfunktionen im Optimierungsschritt nachgebildet (s. Abb.).

Das Verfahren ist in Matlab implementiert und mit einer leicht bedienbaren grafischen Oberfläche ausgestattet, die dem Anwender eine Reihe nützlicher Funktionen zur Verfügung stellt. Neben der manuellen Modellierung der bandenförmigen Signale kann auch eine optimierungs-basierte automatische Methode eingesetzt werden.

In dem Beitrag sollen nach einer Präsentation der Grundlagen aktuelle Weiterentwicklungen des Analyseverfahrens vorgestellt werden, die zu einer deutlichen Reduktion des manuellen Arbeitsaufwands bei der Kalibration führen und eine automatisierte Auswertung ermöglichen. Abschließend soll die Leistungsfähigkeit des Verfahrens in konkreten Anwendungsbeispielen aufgezeigt werden.

- [1] F. Alsmeyer, W. Marquardt, H.-J. Koß, *Appl. Spectrosc.* 2004, 58 (8).

Abbildung.



G-03

Trendbasierte Aufbereitung von Prozessdaten – Anwendung auf praktische Problemstellungen

Dr.-Ing. F. Alsmeyer*¹⁾

E-Mail: alsmeyer@aixcape.org

Prof. Dr.-Ing. W. Marquardt²⁾

¹⁾ AixCAPE, Intzestraße 1, D-52072 Aachen;

²⁾ Lehrstuhl für Prozesstechnik, RWTH Aachen, Templergraben 55, D-52056 Aachen.

Messdaten aus laufenden Produktionsprozessen werden mit Hilfe von „Process Historians“ oder Prozessinformationsmanagementsystemen (PIMS) immer häufiger längerfristig archiviert. Die Analyse dieser Daten macht Prozessoptimierungen bezüglich Produktionskosten und Produktqualität, die Fehlersuche bei Produktions- oder Qualitätsproblemen oder präventive Instandhaltungsmaßnahmen möglich – zumindest im Prinzip. In der Praxis werden diese Möglichkeiten aber unzureichend genutzt. Hierfür gibt es eine Reihe von Gründen. Reale Prozessdaten sind dadurch charakterisiert, dass sie in großer Menge und in schlechter Qualität vorliegen: Fehlende oder fehlerhafte Werte oder stark miteinander korrelierte Größen seien hier genannt. Bei absatzweisen Produktionsprozessen erschwert die unterschiedliche Dauer einzelner Kampagnen eine direkte vergleichende Analyse. Herkömmliche Analysemethoden, wie sie etwa in Statistikpaketen bereitgestellt werden, sind mit dieser kombinierten Problematik überfordert.

Dieser Beitrag beschreibt die Anwendung eines neuen, aus der Forschung stammenden Ansatzes [1] auf Problemstellungen aus der Praxis. Der Ansatz basiert auf der Erkennung von zeitlichen Mustern in den Daten, so genannten Trends (s. Abb.). Unter diesen Oberbegriff fallen Sonderfälle wie stationäre Zustände oder lineare Verläufe einer Messgröße. Er vereinfacht die Sichtung großer Datensätze, auch wenn sehr viele Größen parallel gemessen wurden. Für die weitergehende Analyse brauchen dann lediglich die als relevant erkannten Prozesszeiträume betrachtet

zu werden. Um die neue Methode auf reale Problemstellungen anwenden zu können, wurde ein prototypisches Softwarewerkzeug aus der Forschung erweitert, so dass auch die Analyse von Datensätzen mit mehreren Millionen Messpunkten keine Schwierigkeiten bereitet. Außerdem musste das methodische Vorgehen bei der Analyse gegenüber kleineren Problemstellungen verfeinert werden. Insgesamt ist die entwickelte Methodik damit reif für eine Anwendung in der Praxis.