



NAMUR - Interessengemeinschaft

Automatisierungstechnik der Prozessindustrie e.V.

AK-PRAXIS

Beschreibung der Schnittstelle APC / PAT

Stand: 2024-02-19

AK 2.2 Prozessführung und AK 3.6.3 PAT-Innovationen

Verfasser: Tobias Eifert, Covestro
Thomas Höfer, INEOS in Köln
Stefan Krämer, Bayer
Achim Küpper, Covestro
Uwe Piechottka, Evonik
Volker Rossmann, Bayer
Albert Tulke, Bayer
AK-Leiter:
- Volker Rossmann AK 2.2
- Albert Tulke AK 3.6.3

Diese AK-PRAXIS spiegelt die Erfahrungen der Mitglieder im AK 2.2 und 3.6.3 wider und ist im Rahmen des Arbeitskreises abgestimmt. Sie hat nicht den Konsensgrad einer NAMUR-Empfehlung oder eines NAMUR-Arbeitsblatts. Mit einer AK-PRAXIS hat der Arbeitskreis die Möglichkeit, zeitnah eigene Erfahrungen für interessierte Leser zur Verfügung zu stellen.

Das in diesem Dokument gewählte generische Maskulinum bezieht sich zugleich auf die männliche, die weibliche und andere Geschlechteridentitäten. Zur besseren Lesbarkeit wird auf die Verwendung männlicher und weiblicher Sprachformen verzichtet. Alle Geschlechteridentitäten werden ausdrücklich mitgemeint, soweit die Aussagen dies erfordern.

Inhalt

1	Einleitung	3
2	Ziel	3
3	APC und PAT: Begriffsklärung und Mehrwert	4
3.1	APC	4
3.2	PAT	4
3.3	Mehrwert der Kombination von PAT und APC	5
4	Projektablauf & organisatorische Schnittstellen	5
4.1	Einleitung	5
4.2	Wie stellt man eine bereichsübergreifende Zusammenarbeit sicher	6
4.2.1	PAT-Projekte	6
4.2.2	APC-Projekte	7
4.2.3	Gemeinsame Projekte und Implementierungsstrategie	8
4.3	Wie sieht ein gemeinsames Projekt von PAT und APC technisch aus	8
4.4	Informationsaustausch zwischen allen Projektpartnern	9
5	Arbeitsmodell der Zusammenarbeit zwischen APC und PAT	10
5.1	Einleitung	10
5.2	Direkter Kontakt oder Potenzialstudie	10
5.3	Festlegung der Regelungsstruktur und Betrachtung der stoffspezifischen Methoden	11
5.4	Auslegung des Regelsystems	13
5.5	Implementierung und Inbetriebnahme	14
5.5.1	Machbarkeitsstudie	14
5.5.2	Detailengineering	14
5.5.3	Implementierung	14
5.6	Maintenance	15
6	Beispiele guter Kooperationen	15
6.1	Vorarbeiten	15
6.2	Regelung der Produktion von Antikörpern	15
6.3	Erkennung von Foulingprozessen in der Bypassleitung eines GC	16
6.4	Regelung eines Abwasserstroms auf Basis von pH-Messungen	17
7	Schlussfolgerung/Zusammenfassung	18
8	Literaturverzeichnis	19

1 Einleitung

Das Kernziel einer Produktionsanlage in der chemischen Industrie ist die Herstellung des gewünschten Produkts in gewünschter Qualität. Dies soll möglichst kosten- und ressourcenoptimal sowie reproduzierbar erfolgen.

Die Fachbereiche Advanced Process Control (APC) und Prozessanalysetechnik (PAT) stellen unabhängig voneinander technische Methoden zur Verfügung, um dieses Ziel zu erreichen. Während die Prozessregelung typischerweise für den stabilen Betrieb der Anlage sorgt, ist das Ziel der APC häufig eine optimale Fahrweise der Anlage. Die Methoden der PAT hingegen werden typischerweise für die Qualitätssicherung eingesetzt.

Die Kombination der Messwerte der PAT mit Methoden der APC können in der Produktion für einen großen Mehrwert sorgen. Da beide Fachabteilungen sich möglicherweise in getrennten Organisationsbereichen finden, APC z.B. im Umfeld der Prozessleittechnik, PAT z.B. im Umfeld Verfahrenstechnik, ist dieser Mehrwert nicht immer leicht zu heben. Es besteht daher ein Bedarf zur Beschreibung der Zusammenarbeit und Schnittstellen zwischen diesen beiden Fachabteilungen.

Der konkrete Nutzen der Prozessführung auf der Basis online-analytischer Methoden kann sich aus den folgenden Komponenten zusammensetzen:

- gleichmäßige Produktqualität auf hohem Niveau, wie z.B. verbesserte Reinheit und Farbzahl
- Kapazitätssteigerung der Gesamtanlage
- deutliche Reduktion der benötigten Zahl von Laboranalysen
- und wesentlich verbesserte Bedienbarkeit und Betriebsstabilität der Anlage
- Beitrag zur Verringerung der CO₂-e Emission

In der reifen Industrie Europas finden viele Projekte an bestehenden Anlagen statt, die vom Betrieb initiiert werden. Bei diesen Optimierungsprojekten in Brownfield-Anlagen kommt es immer wieder dazu, dass nur eine der beiden Abteilungen involviert wird. Da aber nur beide Expertisen zusammen das beste Optimierungsergebnis liefern und getrennte Arbeit oft zu Doppelarbeit führt, ist es wichtig, von Anfang an koordiniert zu handeln.

Werden neue Greenfield-Anlagen gebaut, bei denen die einzelnen Schritte der Planung und Projektabwicklung in der Regel durch firmeninterne Vorgaben detailliert beschrieben werden, kann die Einbeziehung und Zusammenarbeit der Fachabteilungen APC und PAT in einer frühen Phase von Vorteil sein. Unternehmen sollten daher in der Projektabwicklung die Einbeziehung der beiden Abteilungen passend vorsehen.

2 Ziel

Es ist das Ziel dieses Dokuments, den Modus einer guten Zusammenarbeit zwischen APC und PAT zu beschreiben. Für diese Zusammenarbeit sind folgende Fragen von Bedeutung:

- Wie stellt man eine bereichsübergreifende Zusammenarbeit sicher?
- Wie sieht ein gemeinsames Projekt von APC und PAT technisch aus?
- Welche Informationen müssten zwischen beiden Welten ausgetauscht werden, um zu sinnvollen Ergebnissen zu kommen?
- Wie sieht ein Arbeitsmodell für die Projektabwicklung und Zusammenarbeit aus?
Wie verändert ein gemeinsames Projekt möglicherweise die einzeln ausgeführten Projekte und worin besteht der Mehrwert?

In den folgenden Kapiteln wird ausgeführt, wie eine strukturierte und effiziente Zusammenarbeit erfolgen kann, und so für das Unternehmen ein optimales Ergebnis erreicht wird. Dazu werden geeignete Abläufe, Schnittstellen, Dokumente und eine gemeinsame Datenstruktur und Datenablage beschrieben, die bei der gemeinsamen Bearbeitung von Projekten nützlich sind. Die Vorteile dieser Zusammenarbeit werden mit Praxisbeispielen belegt.

3 APC und PAT: Begriffsklärung und Mehrwert

3.1 APC

Eine allgemeingültige Definition des Begriffs „Advanced Process Control (APC)“ gibt es nicht. Vielmehr kann man eher von einem fließenden Übergang von konventioneller Regelung hin zu Advanced Process Control [1] sprechen. Die in der Regel mit PI- bzw. PID-Reglern realisierte automatisierungstechnische Grundausstattung einer Anlage bildet dabei die Basis für alle zusätzlich implementierten gehobenen Regelkonzepte. Moderne Prozessleitsysteme bieten die Möglichkeit die Basisautomatisierung mit Hilfe von

- Verhältnisregelungen,
- Kaskadenregelungen,
- Störgrößenaufschaltungen,
- Override-Regelungen,

u.a. zu verbessern. Diese Methoden werden auch als „Advanced Regulatory Control“ zusammengefasst und nutzen im Allgemeinen keine oder sehr einfache Modelle.

Advanced Process Control wird häufig als Synonym für „Model Predictive Control“ verwendet. Hierbei ist ein über Sprungantworten in der Anlage ermitteltes lineares Modell die Grundlage. Die Berechnung der Stellgrößen erfolgt in jedem Zeitschritt aus der Minimierung der Abweichung des prädizierten Verlaufs der Regelgrößen von einem Sollverlauf. Auf Grund des linearen Modells eignen sich diese Regler besonders für kontinuierliche Anlagen. Für Batch-Prozesse oder stark nichtlineare Prozesse werden auch robuste nichtlineare MPCs mit physikalischen Modellen und unsicheren Parametern eingesetzt. Modellgestützte prädiktive Regler werden in der Regel außerhalb des Prozessleitsystems auf separaten Rechnern implementiert, die z.B. über eine OPC-Schnittstelle mit dem Prozessleitsystem verbunden sind.

Eine weitere Möglichkeit zur Verbesserung der Wirtschaftlichkeit einer Anlage ist der Einsatz von „Real-Time Optimization“ (RTO). Auf Basis des derzeitigen Anlagenzustands wird mit Hilfe eines stationären Modells der Anlage, Informationen über Kosten und Preise eine Kostenfunktion minimiert. Die Variablen der Kostenfunktion sind Sollwerte, die dann an den unterlagerten, modellprädiktiven Regler übergeben werden. Während die Zeitschritte des modellprädiktiven Reglers die Größenordnung Minuten haben, liegen sie beim Optimierer im Bereich mehrerer Stunden bis Tage.

Die verschiedenen Ebenen der Automatisierung werden in Veröffentlichungen als hierarchisches Modell oder als Pyramide dargestellt. In der untersten Ebene befindet sich die Stellgeräte und die Messtechnik. Darüber Funktionen zum Schutz von Personen, Umwelt und Apparaten. Anschließend folgen die modellgestützten Regelungen und schließlich die Online-Optimierung. Weitere Ebenen können Monitoring Systeme für einzelne Regelkreise und den Anlagenzustand sein.

3.2 PAT

Prozessanalysetechnik (PAT) hat im Gegensatz zur Labormesstechnik das Ziel prozessnah, zeitnah sowie ziel- und zweckgebunden Messwerte zur Verfügung zu stellen, die über das Messen der Standardparameter wie Druck, Temperatur und Durchfluss hinaus gehen. Dabei kommen chemische und physikalische, für die Auswertung auch mathematische Techniken und Methoden zum Einsatz [2].

Die PAT stellt somit relevante Informationen für die Produktqualität und Prozessoptimierung zur Verfügung, und liefert somit Beiträge zur Nachhaltigkeit. Besonders wichtig sind dabei die örtliche Betrachtung der Messung, die typischerweise mit inline, online und atline angegeben wird sowie die zeitliche Betrachtung die mit online oder offline, besser real-time, angegeben wird [3].

PAT-Messungen bieten auch den Vorteil, dass die Messwerte automatisch ins PLS oder PIMS übertragen werden und dass eine vollautomatisch laufende PAT-Messung möglicherweise kostengünstiger als eine Laboranalytik ist. Eine Kombination aus Standardmessungen und möglicherweise PAT-Messungen zur Berechnung einer nicht messbaren Größe werden auch als Soft Sensoren bezeichnet.

Typische Aufgaben einer PAT-Messung im Kontext der Prozessoptimierung sind die Analyse der Qualität von Rohstoffen und Produkten, das Erkennen des Reaktionsfortschritts, die Zusammensetzung von Zwischenprodukten und der Ersatz von Laboranalytik. Um eine Anlage betreibbar zu halten, gibt es PAT-Messungen, um die Genehmigung aufrechtzuerhalten wie das Erkennen von explosionsfähigen Gemischen, Leckage oder Giftstoffen sowie die Beurteilung von Abgas- und Abwasserqualität.

Während die PAT-Messung am Prozess in Echtzeit eingesetzt wird und entsprechende Aufwände verursacht, wird die langsame und meist für die Prozessoptimierung nicht einsetzbare Labormessung als technische Referenz angesehen, die die PAT-Messung validiert.

3.3 Mehrwert der Kombination von PAT und APC [4 - 7]

APC und PAT wurden in der Vergangenheit oft mit unterschiedlichen Zielen unabhängig voneinander projiziert und implementiert. Während der Einsatz von APC entweder die stabile oder die optimale Prozessführung war, wurden PAT-Messungen oft als regelmäßige Kontrolle der Produktqualität unter Vermeidung von Probenahmen und Laboranalysen eingesetzt. Oft führte dies dazu, dass die APC gar nicht betrachtet hat, dass sie ggf. mit einer zusätzlichen Messung bessere Ergebnisse erzielen könnte. Im Bereich der PAT wiederum wurde möglicherweise die Verunreinigung eines Produktstroms im ppm-Bereich mit langen Abtast- und Totzeiten gemessen, dessen Änderung aber nicht für eine Regelung eingesetzt werden konnte. APC-Regelungen, die solche, eher dazu ungeeigneten PAT-Messungen einsetzen, müssen sehr aufwändig aufgebaut und gewartet werden, da die PAT-Messung im Vergleich zur dominierenden Zeitkonstante des Regelungsproblem den einzigen Messwert, der der Optimierung dient, nicht in Echtzeit (oder real-time) zur Verfügung stellt, gleichzeitig jedoch auch nicht ausfallen darf oder falscher Werte anzeigen sollte. Es wird daher häufig noch eine Ersatzmessung wie Temperatur benötigt, die als Teil eines unterlagerten Regelkreises schnell auf Störungen reagiert und die bei Ausfall der PAT-Messung als Rückfallkonzept dient.

Als allgemeines Beispiel kann die optimale Regelung einer Destillationskolonne dienen: Für die Qualitätssicherung wird in diesem fiktiven Beispiel die Reinheit des Kopfprodukts mittels Gaschromatographie (GC) mit einer Abtastzeit von 120 Minuten und mit einer signifikanten Zeitverzögerung zwar langsam, aber regelmäßig und hochgenau gemessen. Gibt es jedoch eine Störung in der Kolonne oder der Messung, kann man diese, wenn die GC-Messung eine Abweichung zeigt, nicht mehr ausregeln. Die PAT-Messung wurde nie mit dem Ziel einer Regelung projiziert.

Arbeiten PAT und APC zusammen, kann eine Messung projiziert werden, die beispielsweise mit geringerer Genauigkeit die Zulaufzusammensetzung und die Zusammensetzung der flüssigen Phase auf einem sensitiven Boden der Kolonne regelmäßig und schnell misst. NIR ist hierzu ein geeignetes Messverfahren, welches jedoch die ppm-Auflösung des Produktstroms nicht erreicht. Die Regelung ist dann zwar deutlich besser, jedoch entfällt die hochgenaue Qualitätssicherung. Diese kann dann entweder über ein Modell aus der NIR-Messung oder weiterhin über eine GC-Messung erfolgen. Die Messung der Qualität per GC kann dann zusätzlich dafür eingesetzt werden, die Kolonne langfristig an einer energie- und ressourcenoptimalen Qualitätsgrenze als Nebenbedingung zu fahren. Die hier beschriebene Struktur ist dann zwar teurer, aber auch effektiver und muss über eine gezielte Kosten-Nutzen-Bewertung gerechtfertigt werden.

4 Projektablauf & organisatorische Schnittstellen

4.1 Einleitung

Aufgrund ihrer Leistungsmerkmale lassen sich Online-Analytik und Prozessführung optimal kombinieren, um die Wirtschaftlichkeit chemischer Produktionsprozesse zu verbessern. Es bedarf hierzu integrierter Planungs- und Implementierungskonzepte (s. Abbildung 1 auf Seite 8).

APC- und PAT-Projekte haben für sich gesehen einige Gemeinsamkeiten im Ablauf und in Bezug auf Schnittstellen zu Drittgewerken. Bei gemeinsamen APC und PAT-Projekten ist insbesondere der Weg vom ersten Gespräch mit dem jeweiligen Bedarfsträger (z.B. Betriebsleiter) für einen später effizienten Projektverlauf von entscheidender Bedeutung. Einige Beispiele für mögliche Anfragen der Bedarfsträger sind in Tabelle 1 (s.

Seite 12) zusammengefasst. Das folgende Kapitel zeigt auf, welche Fragen und Schnittstellen hierfür relevant sind.

Für die Bearbeitung größerer Investitionsprojekte zum Neubau von Greenfield-Anlagen gibt es typischerweise definierte Vorgaben, die die Zusammenarbeit der Fachdisziplinen APC und PAT beschreibt. Die folgenden Ausführungen beschreiben daher die Zusammenarbeit in – typischerweise kleineren – Optimierungsprojekten in bestehenden Anlagen. Dabei können verschiedene Projekttypen unterschieden werden, die sich im darüber definieren, über welches der beiden Gewerke die Initiierung des Projektes erfolgt.

4.2 Wie stellt man eine bereichsübergreifende Zusammenarbeit sicher

4.2.1 PAT-Projekte

In der Projektanbahnung von PAT-Projekten ist zunächst die genaue Spezifizierung der Messaufgabe der erste Schritt. Hierbei sollten der Bedarfsträger sowie der zuständige PAT-Kollege insbesondere auf den Hintergrund der Messung eingehen. Dabei kann eine Machbarkeitsstudie nötig werden, die zunächst klärt welche Analyseverfahren für die Messaufgabe die optimale Lösung darstellt.

Ein Beispiel ist die Installation eines neuen Analysegerätes oder der Ersatz einer bestehenden PAT-Messung durch ein neues Gerät. Der erste Fall wird typischerweise durch den Betrieb angestoßen, z.B. aufgrund gesteigerter Anforderungen an die Qualitätssicherung oder zur Einsparung von Laborkosten. Im zweiten Fall kann die Initiative auch von Seiten der PAT ausgehen, wenn der Weiterbetrieb der zu ersetzenden Messung etwa aus technischen Gründen nicht mehr möglich ist oder eine kostengünstigere Alternative verfügbar ist.

Wird ein bestehendes Gerät ausgetauscht oder wesentliche Eigenschaften des Gerätes geändert, so ist zu prüfen, ob dieses bereits in einer APC-Applikation genutzt wird. Dies sollte in der entsprechenden Dokumentation zugänglich sein und lässt sich ansonsten anhand der Leitsystemkonfiguration feststellen. Ist dies der Fall, so sind die Anforderungen der APC-Applikation bei der Auswahl und Konfiguration des neuen Gerätes zu berücksichtigen, damit die Funktion der Applikation auch nach Austausch sichergestellt ist. Sollten diese Anforderungen der betrieblichen Prozessleittechnik nicht zweifelsfrei bekannt sein, so sollte Kontakt zur APC-Fachabteilung aufgenommen werden.

Beispiel 1: Kurz nach der Aufnahme von Sprungantworten für einen MPC-Regler wurde das chemometrische Auswertemodell der Spektroskopie optimiert. Hierdurch passte die Verstärkung der Sprungantwortmodelle nicht mehr. Die Regelgüte reduzierte sich so weit, dass die Aufnahme der Sprungantworten für die betroffenen Signalpfade der Übertragungsmatrix wiederholt werden musste.

Beispiel 2: Ein in einer Regelung verwendetes Photometer wurde ausgetauscht. Dadurch verschob sich der Absolutwert der Messung (bei der genannten Messstelle wurden nur relative Änderungen verfolgt, nicht der Absolutwert). Es war eine Korrektur des Reglersollwerts erforderlich, damit die Anlage weiter am richtigen Betriebspunkt gefahren werden konnte.

Unter Umständen ergibt sich durch den Austausch des Gerätes auch die Möglichkeiten, dieses in einer APC-Applikation zu nutzen, obwohl das mit dem Altgerät bislang nicht erfolgte oder nicht möglich war. Dies kann beispielsweise der Fall sein, wenn sich durch den Austausch die für den Einsatz in der APC-Applikation wesentlichen technischen Eigenschaften des Analysegerätes verbessern. Dies können beispielsweise Genauigkeit, Reproduzierbarkeit, Zuverlässigkeit oder Abtast- und Totzeit sein.

Gleiches gilt auch bei der Installation gänzlich neuer Analysegeräte. Auch hier kann sich die Möglichkeit ergeben, die neue Messung über den zunächst angedachten Einsatzzweck hinaus auch zur Prozessführung mit APC-Methoden zu nutzen. Je nach Gesamtprojektziel könnte dies auch den oder die Messorte betreffen.

Beispiel 3: Im Rahmen eines APC-Projektes sollte ein Regelungskonzept für eine destillative Isomentrennung entwickelt werden. Eine Messung der Produktqualität stand nicht zur Verfügung. Das Temperaturprofil der Kolonne war nicht stark ausgeprägt, so dass auch auf eine Temperaturregelung verzichtet werden musste. Stattdessen wurde entschieden, die Kolonne mit jeweils festem Dampf/Zulauf-

und Rücklaufverhältnis zu fahren. Durch die Einhaltung von Sicherheitsabständen konnte zwar die Produktqualität auch im Falle von Störungen eingehalten werden, dies ging allerdings zu Lasten von Energieverbrauch und Anlagenkapazität. Zu einem späteren Zeitpunkt wird zur Qualitätssicherung eine PAT-Messung im Produktstrom installiert. Würde diese neue Messung auch für die Regelung der Kolonne eingesetzt, ließen sich Kapazitätssteigerungen und Energieeinsparungen realisieren.

In allen Fällen ist es sinnvoll, bereits vor Bestellung des Gerätes zu klären, ob sich aus der Anwendung zur Regelung zusätzliche Anforderungen ergeben können, die unter Umständen kostengünstig erfüllt werden können. Dies könnte beispielsweise die Konfiguration einer bestimmten Abtastzeit oder die Bereitstellung von zusätzlichen Statussignalen sein. Häufig ist im betrieblichen Umfeld bekannt, ob es in der betreffenden Teilanlage bereits APC-Aktivitäten gegeben hat. Gegebenenfalls könnte auch die APC-Fachabteilung angefragt werden. Dies sollte insbesondere dann geschehen, wenn es Hinweise dafür gibt, dass es bei der betreffenden Teilanlage Potenzial für eine Verbesserung der Regelung geben könnte.

Ebenfalls sinnvoll ist eine Liste mit allen installierten Analysegeräten in Form einer Datenbank zu pflegen. Diese könnte automatisch Meldungen generieren, über die die APC-Fachabteilung bei Änderungen informiert wird. Dabei ist es wünschenswert, wenn die Information, dass eine PAT-Messung Teil einer komplexen Regelung ist oder sein soll, in entsprechender Form dokumentiert wird.

Einen Sonderfall stellen sogenannte Softsensoren dar, bei denen eine Zielgröße nicht direkt gemessen, sondern basierend auf vorhandenen Messungen mit Hilfe eines Modells geschätzt wird. Hierdurch ist eine Vorhersage zwischen den eigentlichen Messzyklen in kürzeren Zeitabständen möglich. Eine solche Berechnung kann für den konkreten Anwendungsfall ausreichen. Es kann daher im Einzelfall sinnvoll sein, bei der Anfrage nach einer Analysemessung zusammen mit der APC-Fachabteilung zu klären, ob auch der Einsatz eines solchen Softsensors infrage kommt. Eine Erweiterung ist die Kombination eines günstiges Analysegeräts mit einfachem Messprinzip, wie z.B. Ultraschall, mit anderen Messungen zu einem Softsensor. Oft reicht dann die Installation der günstigen Messung in Kombination mit einem Data-Science- und APC-Projekt aus.

4.2.2 APC-Projekte

Die Vorgehensweise bei der Durchführung von APC-Projekten zur Prozessoptimierung ist im NAMUR-Arbeitsblatt NA87 „Prozessführung für kleinere und mittlere Anlagen“ [8] beschrieben. Sie gliedert sich in vier aufeinanderfolgende Schritte:

- Projektdefinition und Potenzialanalyse
- Zusammentragen von Prozessinformationen
- Entwicklung von Problemlösung
- Umsetzung der Maßnahmen

Abhängig von den Randbedingungen des konkreten Projekts ist eine Beteiligung der PAT in allen vier Projektphasen möglich mit einem Schwerpunkt zu Beginn der Projektdefinition und in der Problemlösungsphase, wobei bei der Abwicklung von APC-Projekten verschiedene Fälle auftreten.

Im Idealfall ist das für die Regelung erforderliche Analysegerät bereits vorhanden und erfüllt die Anforderungen der APC-Applikation, was sich der Projektleiter von der PAT-Fachabteilung bestätigen lässt.

Im zweiten Fall ist zwar ein Analysengerät vorhanden, aber für die Regelung ohne weiteres nicht direkt nutzbar, da es die Anforderungen nicht erfüllt. In diesem Fall ist zu prüfen, ob die vorhandene Installation ertüchtigt werden kann, möglicherweise auch softwareseitig, oder ob ein Austausch durch ein anderes Gerät sinnvoll ist.

Im dritten Fall ist die Kenntnis einer wesentlichen Prozessgröße zur Lösung der Regelaufgabe erforderlich. Dann ist zu prüfen, ob diese Prozessgröße mit PAT-Methoden unter Einhaltung der Anforderungen der APC-Applikation gemessen werden kann. In diesem Fall sollte ein gemeinsames oder zusätzliches PAT-Projekt hierzu initiiert werden.

Nach abgeschlossenen Projekten ist die Information, ob eine PAT-Messung für eine Automatisierungsaufgabe genutzt wird, in dem jeweiligen PAT-Datenblatt zu vermerken.

4.2.3 Gemeinsame Projekte und Implementierungsstrategie

Bei gemeinsamen Projekten ist zu Beginn bereits definiert, dass beide Gewerke benötigt werden, um das Projektziel erreichen zu können. Das Projektteam muss die Zusammenarbeit unter den Gewerken über die gesamte Projektlaufzeit sicherzustellen können.

4.3 Wie sieht ein gemeinsames Projekt von PAT und APC technisch aus

Bei gemeinsamen Projekten von APC und PAT sind folgende Punkte für ein erfolgreiches Projekt zu beachten.

Für den PAT-Teil in einem gemeinsamen Projekt ergeben sich zusätzliche Fragen hinsichtlich Genauigkeit, Langzeitstabilität und Echtzeitfähigkeit, die einen Einfluss auf die APC-Regelung haben. Ebenso könnte der Wunsch nach der Messung weiterer Komponenten oder die Bereitstellung weiterer Signale (z.B. Statussignale oder Gültigkeitsbereiche) den PAT-Scope verändern. Für den APC-Teil ist relevant, dass die Datenkommunikation und die entsprechende Einbindung der nötigen Systeme ins Prozessleitsystem gegeben sind.

Für den erfolgreichen Projektabschluss werden weitere Gewerke benötigt, insbesondere die PLT, die sich um die Datenkommunikation kümmert, muss in der Ressourcen- und Zeitplanung einbezogen werden. Der organisatorische Ablauf muss Raum für alle nötigen Projektphasen lassen. So ist zum Beispiel die finale Kalibrierphase komplexer spektroskopischer Methoden mit chemometrischer Modellierung in der Regel erst nach Inbetriebnahme möglich. Dementsprechend kann für die Planung von APC-Sprungversuchen die zur Verfügung stehenden Ressourcen im QM-Betriebslabor als Referenzanalytik für die PAT-Kalibration von entscheidender Bedeutung sein.

Im Rahmen der Integration von Online-Analytik in die Prozessführung gilt bei gemeinsamen Projekten, dass sich technische Anforderungen von APC und PAT gegenseitig bedingen können. Dementsprechend ist es wünschenswert, wenn die Implementierungsstrategie um die Durchführung einer FMEDA (Failure Mode, Effects and Diagnostic Analysis) im Vorfeld der Kosten-Nutzen-Rechnung erweitert [9] wird. Abbildung 1 zeigt einen schematischen Ablauf einer solchen Implementierungsstrategie.

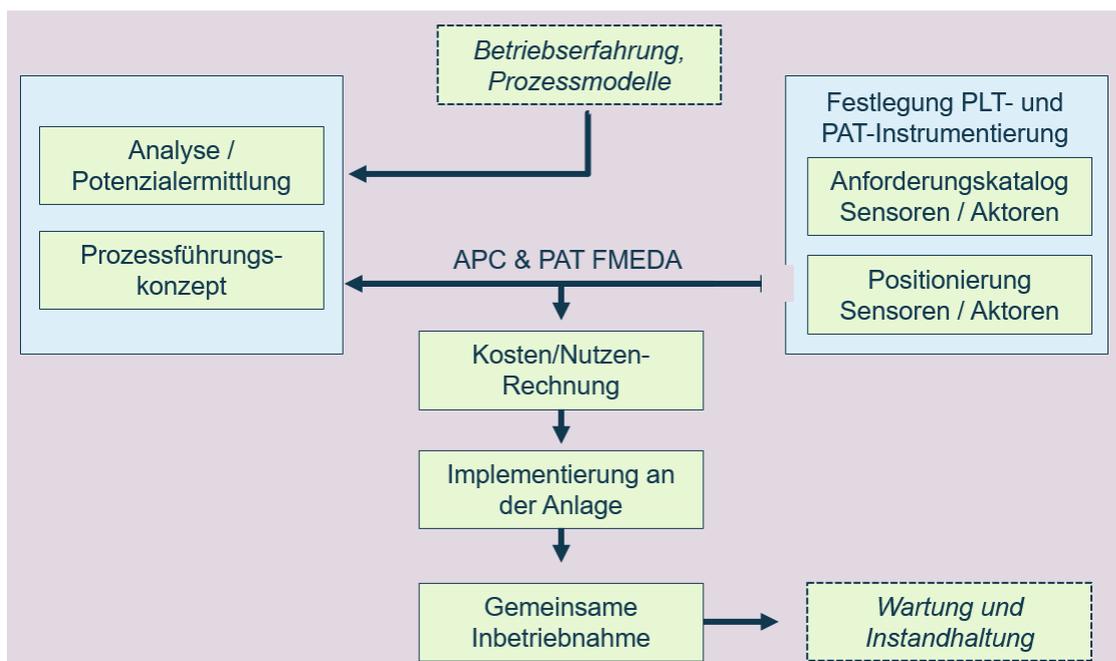


Abbildung 1: Implementierungsstrategie und schematischer Ablauf einer für die Integration von Online-Analytik in die Prozessführung

Dabei könnten sich durch eine FMEDA auch mehrere Umsetzungsszenarien ergeben, die dann betriebswirtschaftlich beurteilt werden könnten.

Bevor der technische Inhalt des gemeinsamen Projekts ausgetauscht wird, muss eine gemeinsame Strategie für die Integration von Online-Analytik in die Prozessführung festgelegt werden. Diese sollte sowohl die Anforderungen an die PAT-Messung als auch die APC-Regelung berücksichtigen und potenzielle Risiken und Nutzen bewerten. Eine Möglichkeit, dies zu tun, ist die Durchführung einer FMEDA, die möglichen Fehlerquellen, deren Auswirkungen und Abhilfemaßnahmen identifiziert. Die Ergebnisse einer FMEDA können dann in eine Kosten-Nutzen-Rechnung einfließen, die verschiedene Umsetzungsszenarien vergleicht.

4.4 Informationsaustausch zwischen allen Projektpartnern

Um in einem gemeinsamen Projekt zu sinnvollen Ergebnissen zu kommen, müssen vor dem detaillierten Austausch der technischen Inhalte zunächst die organisatorischen und kaufmännischen Inhalte geklärt werden:

- Es ist festzulegen, wer die jeweiligen Ansprechpartner auf den jeweiligen Seiten sind und wer für was im Projekt zuständig ist. Hier hilft eine Projektcharta.
- Die Kosten einer PAT-Messung können bis zu 50% eines APC-Projektes betragen und beeinflussen die Projektgenehmigung maßgeblich. Hier sollte im Vorfeld eines Projektantrags grob abgeschätzt werden, was die PAT-Messung kostet und welchen Benefit das APC-Projekt mit und ohne PAT-Messung hat. In einigen Fällen gibt es auch die Möglichkeit über Ersatzmaßnahmen z.B. Softsensoren und Offline-Analytik einen gewissen Teil des eigentlichen Benefits zu heben.
- Die Bestellung, Lieferung und Einbau einer PAT-Messung kann oft Monate in Anspruch nehmen. Des Weiteren kann eine PAT-Messung sehr oft nicht im laufenden Betrieb eingebaut werden und es ist ein Stillstand der Anlage nötig. Dies kann ein APC-Projekt im schlimmsten Fall um Jahre verzögern. Um dennoch in dieser Zeit den größtmöglichen Benefit zu heben, können Teile der APC-Anwendung schon vorher implementiert werden. Je nach Benefit ist ein Kurzstillstand sinnvoll. Die gemeinsame Projektplanung muss diese Themen berücksichtigen.

Technisch

- Die gemeinsame Auswahl des Einbindungspunktes der Messung in den Prozess ist für ein optimales Ergebnis essenziell. Hierbei müssen nicht nur das Messergebnis betrachtet werden, sondern auch die Machbarkeit und die Kosten. In vielen Fällen kann die Messung dort eingebunden werden, wo sie optimal wäre. In manchen Fällen ist dies jedoch nur mit großem Aufwand möglich. Hier müssen dann auch alternative Möglichkeiten diskutiert und die Nachteile, Kosten und Risiken betrachtet werden.
- Es ist oft so, dass die Abteilung APC ihre Bedarfe vorgibt und die Abteilung PAT sagt, was messtechnisch realisierbar ist. In vielen Fällen passen die Bedarfe und die Möglichkeiten überein. Passen diese nicht überein, so müssen gegebenenfalls alternative Möglichkeiten oder aufwändigere Lösungen betrachtet oder auf einen Teil der Bedarfe oder des Benefits verzichtet werden.

Es ist sinnvoll die folgenden Informationen zwischen den Abteilungen PAT und APC auszutauschen und schriftlich festzuhalten (eine Vorlage für weitere Projekte ist hier sinnvoll):

- Zu messende Komponente/n im Produktstrom oder Eigenschaft des Produktstroms
- Messbereich
- Einheit
- Nachweisgrenze
- Auflösung der Messung
- Zykluszeit der Messung
- APC: Wie oft muss eine Messung erfolgen?
- PAT: Wie oft kann eine Messung erfolgen?
- Die Kernfrage ist, ob die Messung für die Regelaufgabe echtzeitfähig ist, wobei auch nicht echtzeitfähige Messungen für langfristige Fahrweiskorrekturen eingesetzt werden können.
- Information, dass eine neue Messung vorhanden ist

- Status der Messung, z.B. Ausfall, Funktionskontrolle, außerhalb der Spezifikation, Wartungsbedarf[10]
- PAT-Messungen müssen in der Regel aufgrund ihrer Komplexität häufiger gewartet und kalibriert werden. Die Messung steht dann der APC-Anwendung nicht zur Verfügung, wofür eine Rückfallstrategie gebraucht wird. Alle Seiten müssen die Häufigkeit und Dauer der Wartung und deren Auswirkungen kennen. Ein Prozess, wie der Betrieb mit dieser Situation umgeht, muss entwickelt werden

APC-Anwendungen sind über ihre Modelle teilweise in der Lage, kurzfristige Probleme der PAT-Messung aufzudecken oder auszugleichen. Mit der richtigen Prüfung der PAT-Messung vor dem Einsatz in der APC können Schwingungen, „eingeschlafene“ Messungen, oder Messungen die stark rauschen entdeckt werden. Hier kann dann gemeinsam mit der Abteilung PAT auf Fehlersuche gegangen werden.

5 Arbeitsmodell der Zusammenarbeit zwischen APC und PAT

5.1 Einleitung

In Abbildung 2 werden die typischen Projektphasen eines APC/PAT-Projekts dargestellt. Anhand dieser Projektphasen wird im Folgenden das Arbeitsmodell zwischen APC und PAT beschrieben.

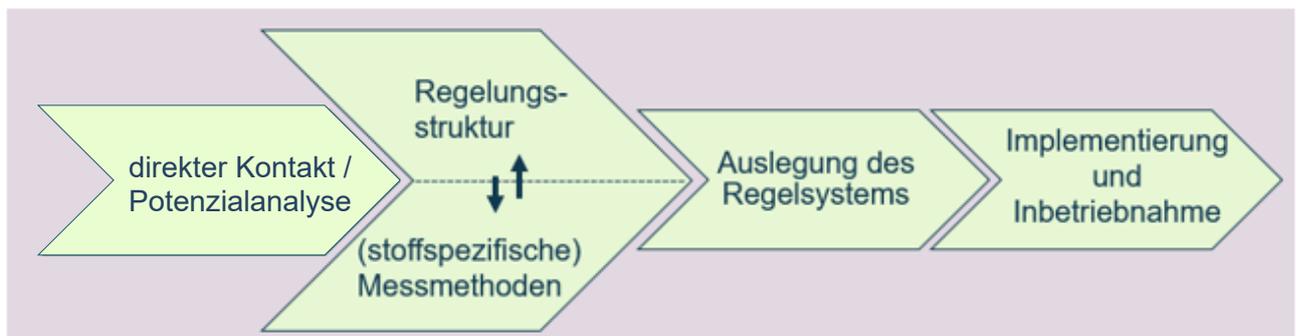


Abbildung 2: Typische Phasen eines Projekts zu einer automatisierten Prozessführung

5.2 Direkter Kontakt oder Potenzialanalyse

Die Gewerke PAT und APC werden häufig vom Betrieb kontaktiert, damit ein konkretes Problem gelöst wird. Die Aufgabenstellung ist dann oft unspezifisch.

Alternativ zu einem bestehenden Problem entsteht der Wunsch nach Verbesserung der Prozessführung im Rahmen einer (allgemeinen) Potenzialanalyse, wobei Bedarf, Kosten und Nutzen einer weitergehenden Automatisierung ermittelt werden. Grundsätzlich sollten dabei die Vorteile und Möglichkeiten der Implementierung sowohl einer APC-Lösung als auch eines PAT-Sensors betrachtet werden.

Dazu gilt es, wesentliche Zielgrößen oder kritische Prozessparameter zu bestimmen, deren präzisere Regelung wirtschaftliche Vorteile in der Produktion versprechen. Um den Nutzen einer verbesserten Prozessführung abzuschätzen, ist es zweckmäßig, die Schwankungsbreite dieser Zielgrößen hinsichtlich gleichmäßigerer Produktqualität, geringerem Ressourcenverbrauch oder erhöhter Produktionskapazität zu betrachten.

Eine Verringerung der Schwankungsbreite durch Prozessführungsmaßnahmen ermöglicht dann in den nachfolgenden Schritten eine weitergehende Automatisierung der Prozessführung, die dann oft unmittelbar zu wirtschaftlicheren Betriebsbedingungen und/oder Steigerung der Nachhaltigkeit des Prozesses führt. Oftmals wird eine optimale Fahrweise durch das Ansteuern eines Betriebspunkt in der Nähe einer Prozessgrenze erreicht, wie z.B. die Annäherung an die untere Grenze der Produktreinheit oder ein minimaler spezifischer Energieverbrauch über den gesamten Arbeitsbereich.

Als Teil der Potenzialanalyse wird ein grobes Regelungskonzept entworfen, gegebenenfalls mit unterschiedlichen Varianten. Eine Betrachtung der Komplexität sowie eventuell erforderlicher Investitionen in mess- und automatisierungstechnische Komponenten bildet die Grundlage für eine Abschätzung der Kosten für Entwicklung, Implementierung und Instandhaltung.

Auf der Basis der somit entwickelten Kosten/Nutzen-Betrachtung fällt die Entscheidung über das weitere Vorgehen. Abbildung 3 beschreibt den Ablauf für beide Fälle und Tabelle 1 (s. Seite 12) realisiert diesen Ablauf beispielhaft für einen Rührkesselreaktor.

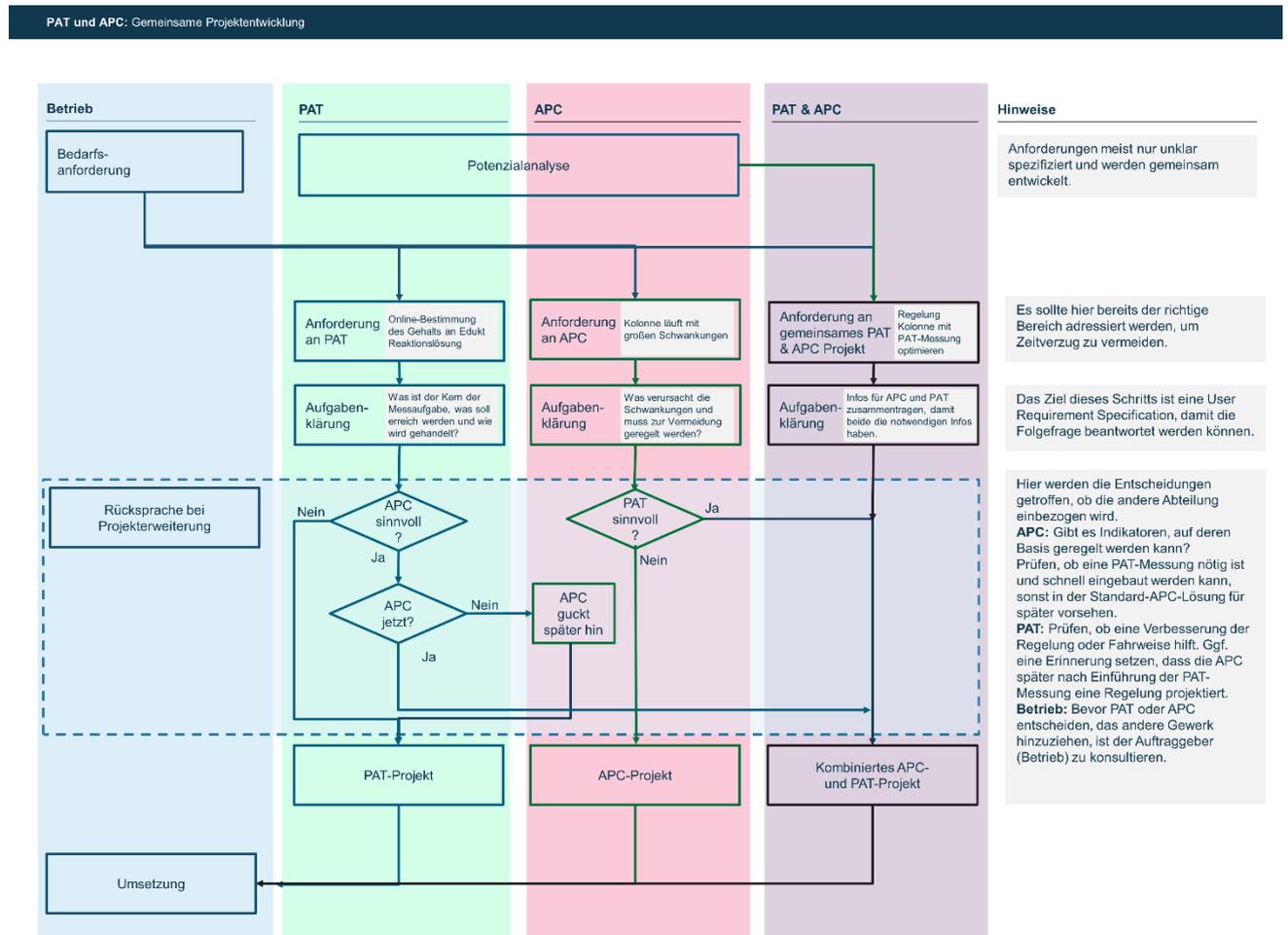


Abbildung 3: Von der Anforderung bis zur Umsetzung

5.3 Festlegung der Regelungsstruktur und Betrachtung der stoffspezifischen Methoden

In der zweiten Phase wird die Struktur des Prozessführungskonzeptes entwickelt. Dazu werden die benötigten Mess- und Stellgrößen sowie die entsprechenden Messorte festgelegt. Hier ist es von entscheidender Bedeutung, dass Fachleute aus Regelungs- und Verfahrenstechnik sehr eng mit den Experten der Prozessanalysetechnik zusammenarbeiten, damit die Anforderungen der Prozessführung durch Auswahl geeigneter Messverfahren möglichst gut und kostengünstig erfüllt werden.

Tabelle 1: Analyse am Beispiel einer Regelung eines Rührkessels

	APC	PAT
Problemstellung einzeln	Rührkessel hat große Temperaturschwankungen und dadurch sind immer wieder einzelne Batches off-spec	Produkt aus Rührkessel hat Qualitätsschwankungen, die nur im Sammelbehälter auffallen, wenn eine Laborprobe gezogen wird. Online-Bestimmung des Gehalts an Edukt oder Produkt in Reaktionslösung.
Aufgabenklärung	<p>Klärung der Aufgabe: was verursacht die Schwankungen (Ursachenanalyse) und was muss geregelt werden, um die Schwankungen zu verhindern?</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ist die Regelungsstruktur richtig? 2. Sind die Regler gut eingestellt? 3. Gibt es verschiedene Arbeitspunkte? 4. Ist das Heiz-Kühl-System richtig ausgelegt? <p>Weitere Fragen ergeben sich im Klärungsgespräch</p>	<p>Klärung der Anfrage: was ist der Kern der Messaufgabe, was soll mit den Messdaten erreicht werden, und wie wird auf die Messdaten reagiert?</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Gibt es große Schwankungen im Reaktor? 2. Bilden sich unerwünschte Nebenprodukte? 3. Ist die Reaktion schon vollständig abgelaufen? 4. Stimmt die Produktqualität? <p>Weitere Fragen ergeben sich im Klärungsgespräch</p>
Einbeziehung der anderen Disziplin	<p>Gibt es neben der Temperatur weitere Indikatoren, auf deren Basis geregelt werden kann wie Dichte, pH, Leitfähigkeit oder Zusammensetzung?</p> <p>Wenn eine PAT-Messung hilft, PAT-Ingenieurs einschalten.</p> <p>Prüfen, ob eine PAT-Messung schnell eingebaut werden kann, sonst in der Standard-APC-Lösung für später vorsehen.</p>	<p>Gibt es neben der Qualitätsmessung ein Regelungsproblem – schwanken z.B. wichtige Messungen wie Druck und Temperatur?</p> <p>Wenn eine Verbesserung der Regelung oder Fahrweise hilft, ist APC-Ingenieur einschalten.</p> <p>Alternativ eine Erinnerung setzen: APC-Ingenieur kann z.B. 6 Monate nach Einführung der PAT-Messung im Betrieb nach Nutzen der Daten und Bedarf einer Regelung nachfragen.</p>
Kombinierter Ansatz	<p>Bei Bedarfsanalyse Infos für APC und PAT zusammentragen, damit bei Potenzialanalyse der jeweils andere Partner die notwendigen Infos zur Bewertung des Potenzials hat, wie z.B.</p> <p>Rührkessel</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Wird der Reaktionsendpunkt bestimmt oder nach Zeit gefahren? 2. Wird die Qualität des Endprodukts bestimmt? 3. PAT: Wie wird der Reaktionsverlauf beobachtet (Temperatur, Messung von pH, Leitfähigkeit, Trübung, Viskosität, chemische Zusammensetzung)? 4. PAT: Welche der Messungen werden online durchgeführt? 5. APC: Gibt es nur eine Basisregelung (Massenerhaltung wie z.B. Durchfluss/ Füllstand, Feed, Druck, Temperatur, ...)? Wenn ja, welche? 6. APC: Gibt es eine APC-Lösung? Falls ja, auf Basis welcher Messung, und ist diese Regelung modellbasiert? <p>Potenzialanalyse und Prüfung, ob PAT resp. APC weiteren Mehrwert bringt (Ansprechen von Netzwerk)</p>	

Regelstruktur und Messmethodik sind eng miteinander verbunden. Zwischen ihnen bestehen vielfältige Abhängigkeiten, die bereits in einem frühen Konzeptstadium angemessen berücksichtigt werden müssen.

Die Auswahl und Zuordnung von Mess- und Stellgrößen sowie die Festlegung von Messorten bestimmen entscheidend, wie leistungsfähig ein Regelsystem sein kann, aber auch, wie komplex es ausgelegt werden muss.

Ist im konkreten Anwendungsfall der Einsatz stoffspezifischer Messungen zweckmäßig, so sind schon bei der Auswahl einer geeigneten Messung aus Sicht der Prozessführung eine Reihe von Kriterien zu beachten und Anforderungen festzulegen:

- **Messfrequenz und Echtzeitfähigkeit:** Für den Einsatz im geschlossenen Regelkreis muss das Abtastintervall zwischen zwei Messungen im Vergleich zur dominierenden Systemzeitkonstanten hinreichend klein sein.
- **Empfindlichkeit:** Die fragliche Stoffeigenschaft, z.B. die Konzentration einer Komponente, muss messtechnisch mit der notwendigen Empfindlichkeit erfasst werden.
- **Sensitivität:** Die Messung muss an einer Stelle im Prozess platziert sein, an der die erfasste Prozessgröße sensitiv gegenüber Störungen ist.

- **Kausalität:** Es muss bekannt sein, mit welchen Stellgrößen die Prozessgröße beeinflusst werden kann
- **Messort:** Die Wahl des Messorts bestimmt die Verzögerung der Reaktion der Regelgröße auf eine Stellgrößenänderung und somit, wie schnell die Feedback-Regelung eingestellt werden kann.
- **Genauigkeit:** Die Anforderungen an die Richtigkeit und Genauigkeit (Präzision) der Messung ergeben sich aus der Spezifikation der Messaufgabe.
- **Reproduzierbarkeit:** Im Idealfall bleiben Richtigkeit und Genauigkeit der Messergebnisse über der Betriebsdauer konstant. In der Realität kann es dagegen zu systematischen (z. B. Drift) oder unsystematischen (z. B. Fehlmessung) Abweichungen kommen.
- **Verfügbarkeit:** Um die Vorteile automatisierter Prozessführung auszuschöpfen ist es notwendig, dass die verwendeten Messgeräte ebenso wie die anderen Komponenten im Regelkreis hoch verfügbar sind. Für den Fall, dass die Messung z.B. auf Grund von Wartungsarbeiten nicht zur Verfügung steht, ist festzulegen, wie die Regelung sich dann Verhalten soll (z.B. Regelung weiterhin in Betrieb mit Halten letzter Messwert oder Regelung wird ausgeschaltet).

Alle notwendigen Informationen über Eigenschaften des Prozessfluid, wie z.B. die chemische Zusammensetzung (Haupt- und Nebenbestandteile sowie Spuren), und physikalische Kenngrößen wie z.B. Druck, Temperatur und Strömung an der Messstelle werden in Form des PAT-Messstellenblattes [11] dokumentiert.

Da der Aufwand für eine SIL-Qualifizierung einer PAT-Messeinrichtung in der Regel sehr hoch ist, oder dieses nicht möglich ist, muss der Fall der Nichtverfügbarkeit der Messung daher zuverlässig ausgewiesen werden, wann

- das PAT-Gerät gewartet werden muss
- gerade gewartet wird
- nicht ausreichend durchströmt wird
- die Messung vordefinierte Grenzen verletzt
- das PAT-Gerät selbst erkennt, dass ein Fehler vorliegt

Der Fall der Nichtverfügbarkeit der Messung muss der Feedback-Regelung über ein Qbad-Signal angezeigt werden und diese dann ausgeschaltet werden bzw. die Stellgröße für den Zeitraum der Nichtverfügbarkeit eingefroren werden.

Zusätzlich zu den vorgenannten Kriterien, die Messerfolg und Verwendbarkeit für die automatisierte Prozessführung betreffen, spielen die Kosten für Installation und Instandhaltung (*cost of ownership*) eine wichtige Rolle. Im konkreten Anwendungsfall muss der optimale Kompromiss in Bezug auf die Prozessführungsaufgabe gefunden werden. So kann beispielsweise der Einsatz einer kostengünstigen, aber relativ unempfindlichen Messmethode, durch die Wahl eines geeigneten Messortes sinnvoll werden. Es ist zu prüfen, ob dann das modifizierte Prozessführungskonzept weiterhin ein akzeptables Regelungsergebnis erwarten lässt. Wenn nicht müssen andere, empfindlichere Messverfahren eingesetzt werden. In einem solchen Entscheidungsprozess ist ein tiefes Verständnis des Produktionsprozesses von grundlegender Bedeutung. In optimaler Weise kann dieses Verständnis aus der Analyse eines Simulationsmodells des Produktionsprozesses resultieren, an dem Sensitivitätsstudien durchgeführt werden können.

Bezüglich der erreichbaren Messfrequenz sind die Anforderungen an Online-Messungen in vielen Fällen geringer als bei der Messung sekundärer Variablen, wie z. B. Druck- oder Durchfluss. Für die stoffspezifischen Messungen genügen häufig Wiederholungsraten im Minutenbereich. Allerdings führen Messungen, die nicht *inline* arbeiten, aufgrund des Probentransportes zum Analysengerät durchaus zu nennenswerten Totzeiten.

5.4 Auslegung des Regelsystems

Nachdem die Regelungsstruktur festgelegt ist, erfolgt die eigentliche Auslegung des Regelungskonzeptes im engeren Sinne. Zu diesem Zweck wird die Online-Analysenmethode ebenso betrachtet wie die konventionelle Messung einer sekundären Variablen. Für die Lösung der Regelungsaufgabe steht eine Vielzahl bewährter Verfahren zur Verfügung.

Für Einzelregelkreise wird in den meisten Fällen ein PID-Regler (Basisregelung), gegebenenfalls mit Störgrößen-aufschaltung oder in Kaskade mit unterlagerten Regelkreisen (Advanced Regulatory Control, ARC) zum Einsatz kommen. Für komplexe Aufgabenstellungen können weiterführende Regelungsmethoden, z.B. basierend auf modellgestützten Verfahren (Advanced Process Control, APC) bis hin zu modellprädiktiver Regelung (Model Predictive Control, MPC) verwendet werden.

Nachdem die Auslegung des Regelsystems erfolgt ist, wird untersucht, ob die gewählte(n) Online-Analysenmethode(n) die definierten Anforderungen der Messaufgabe erfüllt.

5.5 Implementierung und Inbetriebnahme

5.5.1 Machbarkeitsstudie

Zunächst werden in einer Machbarkeitsstudie im Labor oder im Prozess erste orientierende Messungen an Proben mit bekannten Gehalten an Analyten durchgeführt, um zu prüfen, ob mittels der ausgewählten Messmethode im gewünschten Arbeitsbereich verlässliche Werte erhalten werden. Alle zu prüfenden Messmethoden werden dabei nacheinander betrachtet.

Durch die ersten orientierenden Messungen kann erkannt werden, ob eine oder mehrere der geprüften Messmethoden die gestellte Messaufgabe erfolgreich lösen können. Mit diesen, im Sinne der Messaufgabe erfolgsversprechenden Messmethoden werden weitere Messungen an weiteren Proben, oder ggf. auch Mehrfachmessungen an bereits eingesetzten Proben durchgeführt, um die relevanten statistischen Kenndaten der Methode wie Richtigkeit, Präzision, Arbeitsbereich und Nachweisgrenze in Bezug auf die Messaufgabe näher bestimmen zu können. Dabei werden auch bei Bedarf Einflüsse der realen Probenmatrix betrachtet.

Die Machbarkeitsstudie ist dann abgeschlossen, wenn eine genügend große Datenbasis für eine statistische Auswertung mit hinreichender Signifikanz vorliegt, anhand derer die Eignung der eingesetzten Messmethoden für die Lösung der Messaufgabe eingeschätzt werden kann.

5.5.2 Detailengineering

Für die am besten geeignete Messmethode wird nun das Detailengineering inklusive Festlegung der Einbauposition der Sonde durchgeführt. Im Anschluss wird die entsprechende Hardware wie z.B. Messgerät, Sonde und Zubehör beschafft. Parallel erfolgt dazu das Detailengineering der Regelungshardware sowie die Programmierung der Regelungssoftware.

In der Regel wird die Funktion der Regelung und der PAT-Soft- und Hardware vor der Implementierung des Regelsystems im Betrieb in einem Test beim Hersteller (*factory acceptance test – FAT*) auf Einhaltung der Spezifikation geprüft.

5.5.3 Implementierung

Die Implementierung der Regelungstechnik erfolgt entweder direkt im PLS oder auf einem separaten Rechner, der über eine Schnittstelle Daten mit dem PLS austauscht. Nach Einbau des Regelsystems erfolgt eine erste einfache Prüfung der Funktion aller Komponenten und der Anschlüsse (*Loopcheck*). Bei komplexen PAT-Messungen mit multivariater Datenanalysen muss in der Regel, die im Rahmen der Machbarkeitsstudie erstellte, primäre Kalibration noch an die realen Bedingungen mittels Referenzanalytik angepasst werden. Erst wenn sichergestellt ist, dass die Messwerte der PAT-Messung zuverlässig sind, kann die implementierte Regelung des Prozesses in Automatik betrieben werden.

Die Überprüfung der Funktion (Validierung) erfolgt im Betrieb (*site acceptance test - SAT*) durch den Vergleich des Regelprogramms mit dem Blockschaltbildes (Design). Das Zusammenspiel des zu implementierenden Systems bestehend aus PAT-Messung und der Regelung mit den programmierten Funktionen wird mit dem Prozessleitsystem (PLS) auf Plausibilität geprüft.

Die Inbetriebnahme des Regelsystems erfolgt bevorzugt als sogenanntes *hot comissioning* (bei laufender Anlage), da Fehler direkt bemerkbar und damit behebbar sind.

Der Beleg für eine Erreichung des Projektziels bzw. die optimierten Prozess-Performance, wie z.B. eine Verringerung des Energieverbrauches, kann durch ein entsprechendes Dashboard dargestellt werden. Gegebenenfalls ist für den Beleg ein Datensammeln und -auswerten über einen längeren Zeitraum erforderlich.

5.6 Maintenance

Der Aufwand für Unterhalt und Pflege eines neu implementierten Regelsystems unterteilt sich in die Wartungstätigkeiten an der PAT-Messung und der eigentlichen Regelung inkl. des hinterlegten Programms (Software).

Für die PAT-Messung wird ein spezifischer Instandhaltungsplan erstellt und z.B. im SAP hinterlegt. Durch die Instandhaltung soll ein möglichst störungsfreier Betrieb der Hardware und ggfs. des chemometrischen Modells bzw. der Kalibrierung gewährleistet werden. Diese Instandhaltungstätigkeiten können durch entsprechende betriebsnahe Fachabteilungen oder durch Externe durchgeführt werden.

Für die eigentlichen Regelung inkl. des hinterlegten Programms sind keine regelmäßige Wartungsaktivitäten erforderlich. Etwa drei Monate nach der Inbetriebnahme sollte zwischen dem Betrieb und den beteiligten Fachgewerken APC und PAT ein Feedback-Gespräch zur Funktion und Zuverlässigkeit des implementierten Regelsystems erfolgen. Die Regelgüte kann nach Bedarf und Kritikalität weiterhin mit angepasster Frequenz (z.B. täglich, wöchentlich, ...) beobachtet werden, z.B. per remote im MES oder PIMS.

Wartungsaktivitäten an der Regelung erfolgen anlassbezogen. So können sich aus der Änderung der Softwareumgebung wie z.B. der Migration des PLS auf eine höhere Version, Austausch von Aktuatoren oder PAT-Messungen Bedarfe nach Modellanpassungen bei Einsatz von MPC ergeben.

6 Beispiele guter Kooperationen

6.1 Vorarbeiten

Die NAMUR-Arbeitsblätter NA87 und NA113 beschäftigen sich mit der Umsetzung von APC-Regelungen und der Nutzung von PAT in APC-Regelungen. Die dort dargestellten Beispiele sind auch Beispiele für erfolgreiche, möglicherweise gemeinsame, Projekte, beschreiben jedoch hauptsächlich die Anforderungen an die PAT für die Prozessführung. Die wachsende Verbreitung von Online-Analytik dient als Motivation, um die Prozessführung auf der Basis von PAT-Messungen weiter zu verbessern. Auch fast 20 Jahre nach den Arbeitsblättern sind gemeinsam aufgesetzte Projekte noch kein Standard. Die eher organisatorischen Hürden, den Prozessführungsgedanken schon im frühen Planungszustand von Online-Analytik zu berücksichtigen oder die PAT bei APC-Projekten einzubinden sind weiterhin existent. Ebenso ist es weiterhin schwierig eine PAT-Messung für ein APC-Projekt zu rechtfertigen. Dieses letzte Kapitel dient der beispielhaften Darstellung von Projekten, die die Entwicklung in den vorherigen Kapiteln untermauern.

6.2 Regelung der Produktion von Antikörpern

Bei Bayer wurde über viele Jahre ein Schema entwickelt, mit dem langfristig laufende Fermentationen, in denen mit Säugetierzellen Antikörper für die Krankheitsbekämpfung hergestellt werden, optimal gefahren werden können. Die Fermentationen laufen über mehrere Tage. Dabei muss am Anfang das Zellwachstum angeregt werden und in einem zweiten Schritt müssen maximal viele Antikörper produziert werden. Während der Laufzeit werden die klassischen Parameter wie Druck und Temperatur kontinuierlich gemessen. Andere Qualitätsparameter stehen durch eine Probenahme einmal täglich zur Verfügung und müssen dazwischen geschätzt werden.

Als komplexe APC-Methode wurde ein robuster Multistage NMPC (nichtlineare modellprädiktive Regelung) ausgewählt. Das Modell wird dem Prozess angepasst und auch zur Schätzung benutzt. Hierbei zeigt sich, dass die Vorhersage der Qualitätsparameter (Soft Sensor) zwischen den täglichen Probenahmen nicht gut genug war, um die gewünschte Verbesserung der Fermentation zu erreichen. Nach dieser Erkenntnis wurde zusätzlich eine Raman-Sonde in den Prozess eingebracht, die die Glukosekonzentration einmal pro Stunde

misst. Durch diese zusätzliche PAT-Messung war es möglich, den Titer der Fermentation signifikant zu erhöhen. Abbildung 4 erklärt das implementierte Regelungssystem [12].

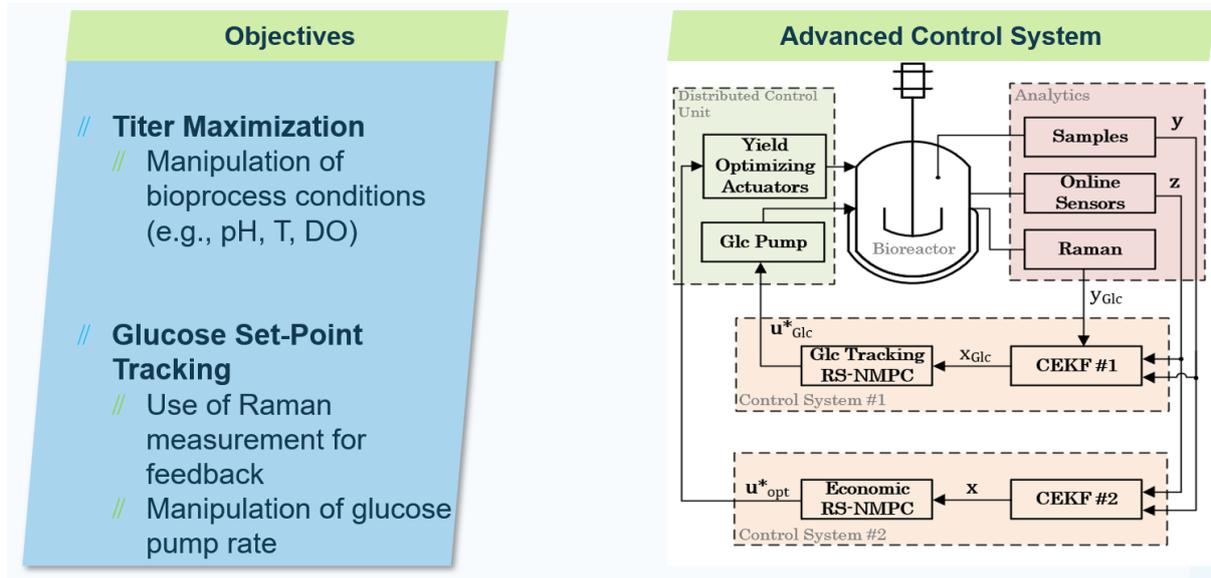


Abbildung 4: Darstellung des implementierten Regelungssystems inklusive der Zielsetzung

Das Beispiel kombiniert auf der technischen Ebene alle oben beschriebenen Themen. Das Ziel war eine Prozessoptimierung mit APC, für die am Ende eine Messung fehlte. Es wurde versucht, sie mit einem Soft Sensor auszugleichen, was nicht gelang. An dieser Stelle wurde die Zusammenarbeit mit der PAT eingesetzt, um die Prozessführung durch eine weitere Qualitätsmessung zu verbessern. Die Zusammenarbeit zwischen den drei Gewerken APC, PAT und Produktion hat an dieser Stelle sehr gut funktioniert. Möglicherweise hätte die noch frühere Einbindung der PAT schneller zu besseren Ergebnissen geführt, APC-Ingenieure lassen sich allerdings oft von dem theoretischen Erfolg von Soft Sensoren und Zustandsschätzern führen und denken vielleicht an die physikalische Messung zu spät.

6.3 Erkennung von Foulingprozessen in der Bypassleitung eines GC

In petrochemischen Anlagen werden zur Bestimmung der Konzentrationen in Produktströmen zu einem großen Anteil Online-Gaschromatographen (GC) eingesetzt. Dazu wird ein gewisser Teil des Produktstroms kontinuierlich dem GC zugeführt. Jedoch benötigt der GC zur Analyse nur eine geringe Menge des Produktstroms. Der Hauptteil des abgeführten Produktstroms wird über einen sogenannten Bypass am GC vorbeigeführt und anschließend wieder in Anlage eingespeist.

In Brownfield-Anlagen kommt es noch häufig vor, dass der zum GC abgeführte Produktstrom nicht gemessen wird, und damit nicht überwacht werden kann. Da es sich um Leitungen mit einem geringen Querschnitt handelt, kommt es hin und wieder vor, dass sich die Bypass-Leitung langsam zusetzt (*Fouling*). Dadurch erhöht sich die Zeit, die das Produkt vom Entnahmepunkt bis zum GC braucht. Diese Zeit kann sich bis in den Bereich von mehreren Stunden erhöhen. Da es sich um einen schleichenden Foulingprozess handelt, bekommt der Anlagenfahrer dieses Problem erst sehr spät mit. Dies kann er zum Beispiel daran erkennen, dass die Temperaturen in einer Kolonne nicht mehr mit der gemessenen Konzentration korrelieren. Anschließend beginnt dann die Fehlersuche durch die Kollegen der PLT und PAT.

Bei INEOS in Köln konnte jedoch mehrfach durch einen schönen Nebeneffekt eines Modellprädiktiven Mehrgrößenregler (MPC) das Problem der Zusetzung des Bypasses sehr schnell erkannt werden. Der MPC verfügt über ein Modell der Anlage und kann zu jedem Zeitpunkt das Verhalten der Anlage vorhersagen. Da Modelle nie zu 100% die Anlage nachbilden können, kommt es immer zu einer Differenz zwischen der Vorhersage durch das Anlagenmodell und dem wirklichen Verhalten der Anlage. Setzt sich die Bypass Leitung jedoch zu,

so erhöht sich die Differenz zwischen der Vorhersage durch das Anlagenmodell und dem wirklichen Verhalten der Anlage. Überschreitet die Differenz einen gewissen Schwellwert, so wissen wir, dass es in der Anlage zu einer größeren Veränderung gekommen ist. Diesen Effekt nutzen die APC-Ingenieure dann, um frühestmöglich das Zusetzen der Bypassleitung zu erkennen und die PAT darüber zu informieren.

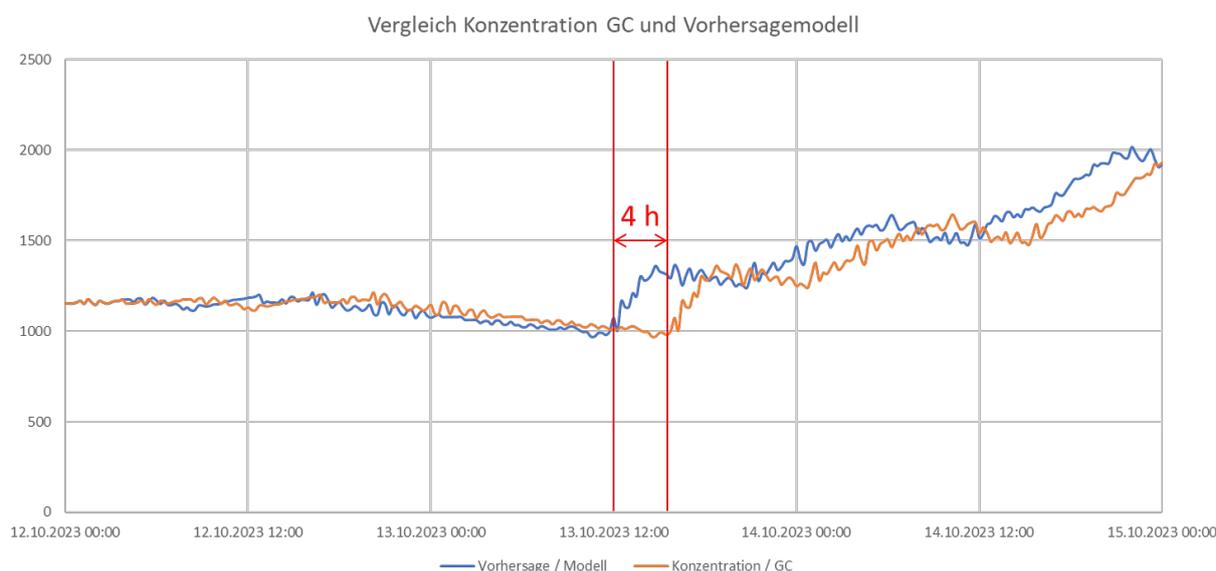


Abbildung 5: Vergleich der wirklich gemessenen Konzentrationen am GC und der Vorhersage durch das Modell

Dieses Beispiel zeigt, dass eine Zusammenarbeit zwischen den Abteilungen PAT und APC nicht nur im Projekt selbst wichtig und hilfreich ist, sondern auch im laufenden Betrieb von GCs und APC-Applikationen.

6.4 Regelung eines Abwasserstroms auf Basis von pH-Messungen

Das folgende Beispiel ist eine Regelung des pH-Werts in einem zweistufigen Verfahren mit Mischer und Pufferbehälter durch Zufuhr von HCl und NaOH. Es wird das Abwasser von zwei Straßen behandelt, welches auf einen möglichst neutralen pH-Wert eingestellt werden muss. Die Einhaltung des Grenzwerts der Organik im Abwasser im nachfolgenden Prozessschritt ist von eben diesem pH-Wert abhängig.

Für eine erfolgreiche Regelung ist eine gut kalibrierte pH-Messung Grundvoraussetzung. Hier würde eine größere pH-Abweichung (d.h. größer 0,2) die Reserve des Regelkreises kompensieren – die aggressiv eingestellte Regelung würde also schwingen bzw. im Normalbetrieb bei einer Berücksichtigung eines größeren möglichen Fehlers der pH-Messung schlechter gedämpft sein (d.h. den Sollwert überschwingen). Während des Projekts wurden in Abstimmung mit der Produktion und den PAT-Kollegen die pH-Messungen direkt hinter dem Mischer der ersten Stufe positioniert, um Verzögerungen als Teil des Regelkreises zu reduzieren und den Regelkreis zu beschleunigen, so dass größere Betriebs-Störungen ausregelt werden können. Außerdem wurde die zunächst engere Vorgabe für das Betriebsfenster des pH-Werts abgeschwächt, um Abschaltungen zu vermeiden.

Ohne die Zusammenarbeit zwischen APC und PAT hätte der Projekterfolg, hier die Möglichkeit größere Betriebsstörung ausregeln zu können und Abschaltungen zu vermeiden, nicht im vollen Umfang erreicht werden können.

7 Schlussfolgerung/Zusammenfassung

Optimierungsprojekte in Brownfield-Anlagen – insbesondere in der reifen Industrie Europas – erfordern ein koordiniertes Handeln der beteiligten Gewerke APC und PAT, um ein möglichst gutes Ergebnis erreichen zu können. In den vorangegangenen Kapiteln wurden für die Kombination von APC und PAT verschiedene Schnittstellen beschrieben und Möglichkeiten der Zusammenarbeit aufgezeigt.

Das gemeinsame Projektziel – chemische Prozesse möglichst effizient, ressourcenschonend, reproduzierbar und mit der größtmöglichen bzw. geforderten Produktqualität fahren zu können – sollte zu Projektbeginn zunächst gemeinsam betrachtet werden.

Dabei führt die anfängliche Betrachtung zu einer Entscheidung, die möglicherweise eine Lösung mit reduziertem Umfang präferiert. Hierfür wurden entsprechende Werkzeuge beschrieben und durch verschiedene Beispiele in der Umsetzung aufgezeigt. Es sollte auch berücksichtigt werden, dass nicht jede prozessspezifische Anfrage ein Optimierungsprojekt darstellt, welches holistisch betrachtet werden muss.

Durch den holistischen Ansatz wird der Ist-Zustand optimiert, und dies im optimalen Fall im Quantum über der Summe der Einzelmaßnahmen. Dies bedeutet, dass durch die gemeinsame Bearbeitung durch APC und PAT dem Betrieb ein Mehrwert entsteht. Dieser Mehrwert entsteht entweder unmittelbar nach der Implementierung der Maßnahmen oder durch eine höhere Robustheit bzw. Einregelbarkeit des Prozesses bei zukünftigen Veränderungen.

Unabhängig der Gründe, warum in der Historie APC- und PAT-Maßnahmen nicht gemeinsam koordiniert verfolgt wurden, sind die Argumente für eine kooperative APC/PAT Betrachtungen so weitreichend, dass auch bei etablierten Prozessen oder Regelkonzepten der Status Quo hinterfragt werden sollte, um ggf. Anpassungen durchzuführen. Dabei bietet ein gut abgestimmtes und zeitlich koordiniertes Vorgehen den Vorteil, dass das in dieser Situation bestehende Momentum - sprich das Bestreben des Betriebs einen Prozess zu optimieren – genutzt wird.

Der holistische Ansatz passt auch zu den Oberthemen Digitalisierung und Nachhaltigkeit in der NAMUR Technologie-Roadmap Prozess-Sensoren 2017+ [13]. Dort ist aufgeführt „Der Wandel zu einer nachhaltigen industriellen Wertschöpfung [...] wird ohne die konsequente Nutzung digitaler Technologien nicht gelingen (Sensorik, Automatisierung, Regelstrategien)“. Weiter heißt es in der Roadmap: „Um verbleibende Optimierungspotentiale in Anlagen heben zu können, wird Prozessanalysetechnik (PAT) in höheren Regelkonzepten (APC) verwendet. [...] So können deren Kapazitäten unter Einhaltung der Qualitätsanforderungen erhöht werden“.

8 Literaturverzeichnis

- [1] K.F. Früh, U. Maier; Handbuch der Prozessautomatisierung; Vulkan-Verlag GmbH; 6. Edition (22. November 2017)
- [2] Prozessanalytik, Kessler, WILEY-VCH Verlag, 2006, S. 5
- [3] Minnich, C., Hardy, S. and Krämer, S. (2016), Stopping the Babylonian Confusion: An Updated Nomenclature for Process Analyzers in PAT Applications. Chemie Ingenieur Technik, 88: 694-697. <https://doi.org/10.1002/cite.201500188>
- [4] Krämer, S. and Wegner, H. (2009), Onlineanalytik verbessert Prozessführung. Nachr. Chem., 57: 434-435. <https://doi.org/10.1002/nadc.200963609>
- [5] Dünnebier, G. and Bamberg, A. (2004), Online-Analytik zur Prozessführung. Chemie Ingenieur Technik, 76: 1467-1474. <https://doi.org/10.1002/cite.200406178>
- [6] G. Dünnebier, M. Friedrich, M. Gerlach, R. Hotop, A. Weinig, T. Schmidt, Automatisierungstechnische Praxis (atp) 2003,45 (12), 24.
- [7] G. Dünnebier, M. Friedrich, M. Gerlach, R. Hotop, A. Weinig, T. Schmidt, Automatisierungstechnische Praxis (atp) 2004,46 (1), 26.
- [8] NAMUR-Arbeitsblatt NA87 - Prozessführung für kleinere und mittlere Anlagen
- [9] NAMUR-Arbeitsblatt NA113 - Online-Analytik zur Prozessführung
- [10] NAMUR-Arbeitsblatt NA107 - Selbstüberwachung und Diagnose von Feldgeräten
- [11] NAMUR-Arbeitsblatt NA16 - Planung von prozessanalytentechnischen PLT-Einrichtungen
- [12] Rubin Hille, Heiko Brandt, Vera Colditz, Jens Classen, Lukas Hebing, Matthäus Langer, Steffen Kreye, Tobias Neymann, Stefan Krämer, Jens Tränkle, Helmut Brod, Alexander Jockwer, Application of Model-based Online Monitoring and Robust Optimizing Control to Fed-Batch Bioprocesses, IFAC-PapersOnLine, Volume 53, Issue 2, 2020, Pages 16846-16851, ISSN 2405-8963, <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2020.12.1204>.
- [13] Technologie-Roadmap Prozess-Sensoren 2017+, Industrie; Hrsg.: NAMUR, VDI-GMA, 2021