

# Datengetriebene Optimierung von Prozessen

## Hybride Modellierung hilft, die Effizienz von Chemieanlagen zu steigern

Die Auslegung von Anlagen durch klassische First-Principle-Modelle ist ein „alter Hut“ für Prozessingenieure, denn das ist Teil des Studiums und beschäftigt seit gut hundert Jahren eine ganze Fachdisziplin. Die Erstellung von Modellen existierender Anlagen, welche diese ausreichend genau wiedergeben ist hingegen nach wie vor eine Herausforderung, die aber mit entsprechendem Fachwissen und Projektaufwand realisiert werden kann. Soll jedoch ein Modell kontinuierlich helfen, den effizienten Betrieb einer Anlage zu ermöglichen, ist Fachwissen aus vielerlei Bereichen gefragt. Doch bringen die Digitalisierung sowie die Fortschritte im Bereich des maschinellen Lernens auch neue Chancen für die Optimierung chemischer Prozesse?

Auf den ersten Blick kann es erscheinen, dass die Optimierung chemischer Prozesse ein „gelöstes“ Problem ist. Doch ob das stimmt, hängt nicht zuletzt von der Betrachtungsweise, der geforderten Genauigkeit und vor allem aber dem Optimierungsziel ab. Technisch machbar mit unendlichen Ressourcen ist (fast) alles. Ein stationäres Modell zur Auslegung eines Anlagenkonzeptes ist eine Basis die als Stand der Technik angesehen werden kann. Doch bereits wenn ein solches Modell mit den realen Beobachtungen aus einer Anlage in Einklang gebracht werden soll, kann dies eine Herausforderung darstellen. Sollen Vorhersagen in die Zukunft getroffen und die Dynamik der Anlage erfasst werden, wird der Aufwand höher.

Optimierung kann unterschiedlich umgesetzt werden:

Einerseits auf Basis eines statischen Modells als Debottlenecking eines Prozesses, oft im Rahmen eines einmaligen Projekts. Diese Art der „offline“-Optimierung ist eher Stand der Technik.

Andererseits als eine „online“-Optimierung des laufenden Betriebs, in welche kontinuierlich die aktuellen Daten eingehen. Hier sind dann robuste dynamische Modelle gefragt, die mit der sich ändernden betrieblichen Wirklichkeit klarkommen müssen. Dies erfordert neue Ansätze – und dafür bieten Digitalisierung sowie Industrie 4.0 Chancen.



### Kontinuierliche Optimierung des Anlagenbetriebs

Im Fokus liegt zunehmend die kontinuierliche Optimierung des Anlagenbetriebs. Um zum Erfolg zu kommen, gibt es verschiedene Herangehensweisen. Letztendlich geht es immer darum, eine passende Modellstruktur und anschließend passende Parameter zu finden. Die Lehrbuchmethode ist die Flow-sheet-Modellierung, wo mittels bekannter Zusammenhänge die gesamte Anlage und alle Unit Operations dargestellt werden. Hier ist das Auffinden von Parametern für Phasengleichgewichte (VLE-Daten) oder den Wärmeübergang oft zeit- und damit kostenintensiv. Selbst wenn alle Parameter gefunden werden können, bleibt eine Lücke zu den Beobachtungen aus der realen Anlage – und so werden einige Parameter an Anlagenanpassungen angepasst.

Für eine gute Beschreibung der Anlage braucht es aktuelle, hochaufgelöste Daten aus der Anlage. Da jedoch eine Produktionsanlage kein unveränderliches Asset ist, geht es nicht nur darum, einmalig unter Aufsicht eine Anpassung durchzuführen, sondern automatisch: Eine erfolgreiche kontinuierliche Optimierung bedeutet, dass die Modelle „operativ“ betrieben werden und mit den veränderlichen Bedingungen „mitlernen“.

Folglich bietet es sich an, Modelle operativ zu betreiben: Wie auch der Produktionsprozess selbst, auf Performance und Qualität überwacht. Dieser Prozess wird als „Machine Learning Operations“ (MLOps) bezeichnet. Hier können wir in der chemischen Industrie auf die Fortschritte und Erfahrungen aufbauen,

die in anderen Industrien etabliert wurden.

### Flexibilität und Anpassungsfähigkeit

Doch rein an Daten zu lernen, reicht in der Chemie nicht aus. Aus der Verfahrenstechnik ist schon viel über die Anlagen bekannt und auch weshalb sogenannte hybride Modelle zur Optimierung Vorteile aufweisen. Hierbei handelt es sich, wie es der Name suggeriert um einen Mittelweg zwischen den klassischen First-Principle-Modellen und den ausschließlich datengetriebenen Blackbox-Modellen. Konzeptionell nutzt man als Basis ein datengetriebenes Modell, z.B. ein neuronales Netzwerk, und erweitert dieses mit Blöcken, in welchen die aus der Prozess- und Verfahrenstechnik bekannten Details abgebildet sind. Es geht darum, die Flexibilität und Anpassungsfähigkeit mit den fundamentalen Zusammenhängen zu kombinieren. Neu ist diese Idee nicht, doch ist eine erfolgreiche Umsetzung erst heutzutage möglich, da nun sowohl der Zugang zu Daten als auch entsprechende Rechnerkapazitäten und passende Software verfügbar sind.

Allerdings benötigen diese Modelle sehr viel Rechenleistung, so dass sich die flexibel und praktisch unbegrenzt verfügbaren Kapazitäten in der Cloud anbieten. Als Folge bedeutet dies, dass die benötigten Daten vom Produktionsstandort in die Cloud kommen müssen – also von dem Bereich der Operational Technology (OT) in die Domäne der Information Technology (IT).

### Sicherheit als Grundvoraussetzung

IT-Sicherheit ist, wie auch die betriebliche Sicherheit in der Anlage,

### ZUR PERSON

#### Sebastian Werner

ist seit seiner Promotion in Chemischer Reaktionstechnik an der Universität Erlangen-Nürnberg 2011 stetig als IT-affiner Chemieingenieur an den Schnittstellen von Simulation, Datenverarbeitung, Katalyse und Verfahrenstechnik tätig. Nach einem 32-monatigen Postdoc-Aufenthalt an der University of California, Berkeley, in den USA trat er 2014 bei Clariant ein, wo er zunächst F&E-Rollen in der Geschäftseinheit Catalysts innehatte und sich später mit der Digitalisierungsstrategie befasste. 2017 startete er das Clariant-Technologie-Spin-off Navigance, wo er als Chief Technology Officer und Geschäftsführer tätig ist. Neben seiner Lehrtätigkeit an der Universität Erlangen ist er in der Fachgruppe „Maschinelles Lernen“ der German DataScienceSociety aktiv.



eine absolute Grundvoraussetzung. Richtlinien der NAMUR, wie z.B. NE175 und NE177 umreißen sehr gut die Prinzipien, um auf der sicheren Seite zu sein. Es empfiehlt sich die Zusammenarbeit mit spezialisierten Dienstleistern, der Einsatz von kryptographisch gesicherten Verbindungen vom Standort in die Cloud sowie ein „Push“-Prinzip, bei dem kein externer Zugriff möglich ist, sondern nur das „Versenden“ von Daten in Richtung Cloud. Dies reduziert das Risiko schadhafter Zugriffe von außen enorm.

Datengetriebene Optimierung von Prozessen mittels hybrider Modelle kann den Betrieben auch im Hinblick auf die stetig wachsende

Komplexität der Anlagen und den gleichzeitigen Wissensverlust durch viele in den Ruhestand gehende Anlagenfahrer helfen. Mit dem stärkeren Blick auf Nachhaltigkeit rückt neben den Zielen von gesteigerter Effizienz und Energieeinsparungen auch ein auf den Carbon Footprint

optimierter Prozess als zukünftiger Wettbewerbsvorteil in den Fokus.

Sebastian Werner, Chief Technology Officer und Geschäftsführer, Navigance GmbH, München

■ sebastian.werner@navigance.com  
■ www.navigance.com

### KOLUMNE: NEUES AUS DEM VAA



### Befindlichkeitsumfrage 2021: Führungskräfte auch im zweiten Coronajahr zufrieden

Auch im zweiten Jahr der Coronaviruspandemie sind die Führungskräfte in der deutschen Chemie- und Pharmabranche weitgehend zufrieden mit der Personalpolitik ihrer Unternehmen. Das zeigt die aktuelle Befindlichkeitsumfrage des VAA.

Rang 2021	Unternehmen	Rang 2020	Veränderung Rang	Gesamtnote 2021	Gesamtnote 2020	Veränderung Note
1	Schott	2	▲ 1	1,99	2,21	↑ 0,22
2	Covestro	1	▼ -1	2,20	2,20	→ 0,00
3	Boehringer Ingelheim	3	→ 0	2,28	2,28	→ 0,00
4	Lanxess	5	▲ 1	2,50	2,53	▲ 0,03
5	Roche Diagnostics	4	▼ -1	2,55	2,50	▼ -0,05
6	BASF	9	▲ 3	2,62	2,68	▲ 0,06
7	Shell	14	▲ 7	2,65	3,19	▲ 0,54
8	Merck	6	▼ -2	2,68	2,58	▼ -0,10
9	Beiersdorf	7	▼ -2	2,73	2,59	▼ -0,14
10	Baycr	8	▼ -2	2,79	2,68	▼ -0,11
11	Daichi Sankyo	17	▲ 6	2,93	3,28	▲ 0,35
12	Symrise	13	▲ 1	2,93	3,15	▲ 0,22
13	Röhm	neu	neu	2,96	neu	neu
14	Wacker	10	▼ -4	3,02	2,69	▼ -0,34
15	Evonik	11	▼ -4	3,03	2,99	▼ -0,04
16	LyondellBasell	15	▲ -1	3,05	3,23	▲ 0,18
17	Celanese	18	▲ 1	3,07	3,38	▲ 0,31
18	3M	neu	neu	3,14	neu	neu
19	B. Braun Melsungen	12	▼ -7	3,38	3,06	▼ -0,32
20	Clariant	16	▼ -4	3,42	3,25	▼ -0,17
21	Heraeus	19	▼ -2	3,55	3,06	▼ -0,49
22	Sanofi Aventis	20	▼ -2	3,69	3,57	▼ -0,12
23	Axalta Coating Systems	21	▼ -2	3,77	3,92	▼ 0,15
	Durchschnitt			2,83	2,79	▼ -0,04

**Hinweise:** In der VAA-Befindlichkeitsumfrage bewerten die Führungskräfte der chemisch-pharmazeutischen Industrie ihre Befindlichkeit und die Personalpolitik ihrer Unternehmen mit Schulnoten von 1 („sehr gut“) bis 9 („ungenügend“). Bei der Veränderung der Ränge im Vergleich zum Vorjahr ist zu berücksichtigen, dass durch die Aufnahme von 3M und Röhm zwei Unternehmen mehr im Ranking vertreten sind als 2020.

**Legende:**  
 ▲ Drei deutlichste Rang- und Notensverbesserungen  
 ▼ Drei deutlichste Rang- und Notensverschlechterungen  
 ▲ Verbesserung um mindestens drei Ränge/sein Notenzentrum (0,1)  
 ▼ Verschlechterung um bis zu zwei Ränge/sein Notenzentrum (0,1)  
 → Keine Veränderung  
 ▼ Verschlechterung um mindestens drei Ränge/sein Notenzentrum (0,1)

Wie im Vorjahr liegt die Durchschnittsnote für die personalpolitischen Maßnahmen der Unternehmen bei 2,8. Für die Personalpolitik im Kontext mit der Coronakrise vergaben die Befragten mit 1,6 allerdings eine deutlich bessere Bewertung als bei den Kernfragen der Befindlichkeitsumfrage. „Durch die lange andauernde Pandemie hatte und hat auch die Chemie- und Pharmabranche besondere personalpolitische Herausforderungen zu bewältigen. Das Urteil der Führungskräfte zeigt jedoch, dass die Unternehmen hier in den allermeisten Fällen den richtigen Weg gewählt haben“, sagt VAA-Hauptgeschäftsführer Stephan Gilow.

An der Spitze des Umfragerankings steht in diesem Jahr der Mainzer Glaskonzern Schott, gefolgt vom Leverkusener Polymerhersteller Covestro. Die beiden Unternehmen haben somit im Vergleich zum Vorjahr die Plätze getauscht. Hinter Schott und Covestro kann der Pharmakonzern Boehringer Ingelheim seinen dritten Platz aus dem Vorjahr verteidigen.

Mit Shell, Daichi Sankyo und Celanese konnten 2021 drei Unternehmen, deren Konzernmutter nicht in Deutschland ansässig ist, ihre Bewertung deutlich verbessern und im Ranking vorrücken. Der bayerische Chemiekonzern Wacker erhielt dagegen eine deutlich schlechtere Bewertung als im Vorjahr und fiel von Platz zehn auf Platz 14 zurück. 2019 hatte Wacker noch auf dem dritten Platz gelegen. Auch die Umfrageteilnehmer bei B. Braun Melsungen vergaben schlechtere Bewertungen als 2020, sodass der hessische Pharma- und Medizinbedarfshersteller nach Platz zwölf im Vorjahr nun auf Platz 19 von 23 steht.

Die jährliche VAA-Befindlichkeitsumfrage wurde 2021 zum 20. Mal durchgeführt. Sie ist ein anerkanntes und unabhängiges Barometer für die Stimmung der außertariflichen und leitenden Angestellten in der Chemie- und Pharmaindustrie. An der Befindlichkeitsumfrage 2021 von Mitte April bis Mitte Mai beteiligten sich mehr als 2.700 Personen.

Werden Sie jetzt Mitglied im VAA und erhalten Sie CHEManager im Rahmen der Mitgliedschaft kostenlos nach Hause zugestellt.

Der VAA ist mit rund 30.000 Mitgliedern der größte Führungskräfteverband in Deutschland. Er ist Berufsverband und Berufsgewerkschaft und vertritt die Interessen aller Führungskräfte in der chemischen Industrie, vom Chemiker über die Ärztin oder die Pharmazeutin bis zum Betriebswirt.



**JRS CONTRACT MANUFACTURING**  
**Neue Form, bessere Funktion**  
 Maßgeschneiderte Produktmodifizierungen

Mahlen  
 Mischen  
 Granulieren

J. RETTENMAIER & SÖHNE  
 Geschäftsbereich Contract Manufacturing  
 73494 Rosenberg • Tel. +49 7967 152-202  
 www.jrs-cm.de

### Schnelle und effiziente Produkt- und Verpackungsinnovationen

#### SIG investiert in neues Tech Center Europe in Deutschland

Der Schweizer Verpackungsspezialist SIG investiert 12 Mio. EUR in eine Pilotanlage für das neue Tech Center Europe, das in der Nähe der SIG-Packungswerke am deutschen Standort Linnich entstehen wird. Das Technologiezentrum wird dazu beitragen, die Entwicklung neuer Produkt- und Verpackungsinnovationen zu beschleunigen, um vor

allem der weiter wachsenden Nachfrage nach besonders nachhaltigen Verpackungslösungen gerecht zu werden. Das Tech Center Europe wird ein wichtiger Hebel sein, um die Entwicklung und Validierung solcher Verpackungslösungen und innovativer Verpackungsmaterialien noch schneller und effizienter zu machen.

### Vollautomatisches Reinigungssystem für Wärmetauscherplatten

#### Alfa Laval eröffnet Service Center in Deutschland

Alfa Laval eröffnet in Frechen eines der größten Zentren für Plattenwärmetauscher weltweit. Der nachhaltige Standort kann fast 100% des eingesetzten Wassers recyceln. Das rund 5.200 m<sup>2</sup> große Service Center für Kunden in Deutschland, Österreich und der Schweiz sowie in Frank-

reich und den Benelux-Ländern hat die dreifache Kapazität des zweitgrößten Alfa Laval-Standorts dieser Art in Japan. Ein vollautomatisches Reinigungssystem für Wärmetauscherplatten ermöglicht kurze Servicezeiten. Zudem werden 95% des während der Rekonditionierung an-

fallenden Abwassers aufbereitet: Frischwasser wird nur ergänzt, um die Verdunstung zu kompensieren. Als Teil seiner Nachhaltigkeitsstrategie hat sich Alfa Laval das Ziel gesetzt, bis 2030 das gesamte, in allen Prozessen des Unternehmens anfallende Abwasser zu recyceln. (mr) ■