

POSITIONSPAPIER

Prozesssimulation – Fit für die Zukunft?

Positionspapier des ProcessNet-Arbeitsausschusses
Modellgestützte Prozessentwicklung und -optimierung,
2021



IMPRESSUM

Autoren:

Dr. Sönke Bröcker	Evonik Operations GmbH, Hanau
Dr. Regina Benfer	BASF SE, Ludwigshafen
Dr. Michael Bortz	Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern
Prof. Dr. Sebastian Engell	TU Dortmund
Dr. Carsten Knösche	BASF SE, Ludwigshafen
Dr. Andreas Kröner	Linde GmbH, Engineering Division, Pullach

Das vorliegende Positionspapier entstand aus mehreren Diskussionen im ProcessNet-Arbeitsausschuss „Modellgestützte Prozessentwicklung und -optimierung“. Die Autoren möchten allen beteiligten Kollegen, die so am Papier mitgewirkt haben, recht herzlich danken.

Herausgeber

ProcessNet-Arbeitsausschuss „Modellgestützte Prozessentwicklung und -optimierung“

Verantwortlich im Sinne des Presserechts

DECHEMA e.V.
Dr. Andreas Förster
Theodor-Heuss-Allee 25
60486 Frankfurt am Main

Erschienen im März 2021

Bildnachweise

Titel: v.l. © snapfoto105-Fotolia; Evonik Operations GmbH; S. 9: © Prostock-studio-stock.adobe.com;
S. 14: © kras99-stock.adobe.com

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	2
Status quo der Prozesssimulation	3
Zukünftige Herausforderungen	6
Anbindung an Daten des Prozesslebenszyklus – Aktualität und Nachhaltigkeit	7
Einbindung datengetriebener Modelle – Genauigkeit und Vorhersagefähigkeit	8
Einbindung datengetriebener Modelle – Genauigkeit und Vorhersagefähigkeit	9
Intensivere Nutzung der Prozesssimulation in der Produktion	12
Stoffdaten – Einheitliche Verwaltung als Ziel	13
Neue Aspekte für die Ausbildung	14
Zusammenfassung – Ein Konzept für die Prozesssimulation 2025+	15

Einleitung

Seit den Anfängen in den 1970er Jahren hat die Prozesssimulation eine beachtliche Entwicklung durchlaufen. So ist es heute möglich, sehr umfangreiche Prozesse oder gar Prozessverbunde mit komplexem Stoffverhalten stationär und dynamisch mit hoher Genauigkeit zu modellieren und zu simulieren. Dies umfasst nicht nur konventionelle chemische Prozesse, sondern auch viele Spezialprozesse zum Beispiel aus der Bio- oder Polymerchemie. Auch die Kopplung fluider Prozesse mit Feststoffsimulationen ist heute in einer Simulation ebenso darstellbar wie die Integration von CFD-Ansätzen in Anlagenmodellen. Aufgrund dieser vielfältigen Möglichkeiten ist die Prozesssimulation ein etabliertes und unverzichtbares Werkzeug bei der Entwicklung, Auslegung und Optimierung chemischer Prozesse geworden.

Zukünftig wird die Prozesssimulation noch an Bedeutung gewinnen, wenn die Digitalisierung in der chemischen Industrie weiter voranschreitet. Die umfassenden Informationen über bestehende oder mögliche Zustände der Prozesse, die die Prozesssimulation liefern kann, werden in vielfältige übergeordnete Anwendungen einfließen und damit von einem größeren Anwenderkreis genutzt werden. Fließbildsimulationen werden sich dabei von einem persönlichen Werkzeug des einzelnen Ingenieurs zur Lösung spezifischer Problemstellungen zu einem integralen Bestandteil des Technologiepakets entwickeln. Aus dieser Entwicklung resultieren eine Reihe von Anforderungen an die Prozesssimulation. Für die Vernetzung der Prozesssimulation mit anderen Anwendungen sind offene Schnittstellen, Modularisierung und

effiziente Datenanbindungen unerlässlich. Die Nutzung der Prozesssimulation in übergeordneten Anwendungen bringt zusätzliche Anforderungen mit sich wie höhere Genauigkeit, robustere Konvergenz und kürzere Rechenzeiten. Neue Lösungsansätze hierfür sind mit der fortschreitenden Digitalisierung absehbar, da sie einen effizienten Zugang zu umfassenden Informationen sowie sehr flexible datenbasierte Modellierungsmöglichkeiten bereitstellt. Sie ermöglichen die Einbindung realer Daten in Simulationen und die Komplettierung physikalischer Modelle mit datengetriebenen Ansätzen.

Angesichts des anstehenden Wandels der Prozesssimulation zum integralen Bestandteil einer vernetzten Umgebung stellt sich die Frage, ob die heute existierenden Methoden und Werkzeuge zur Prozesssimulation bereits den hierfür erforderlichen Anforderungen gerecht werden oder welche Entwicklungen notwendig sind. Dieser Frage widmet sich dieses Positionspapier aus der Sicht von Anwendern der deutschen chemischen Industrie, die im ProcessNet-Arbeitsausschuss „Modellgestützte Prozessentwicklung und -optimierung“ vertreten sind. Es stellt ein gemeinsames Verständnis der Ausschussmitglieder dar und ist an Entwickler und Anwender von Simulationssoftware aus Industrie, Hochschulen und Entwicklungsinstituten adressiert. Das Positionspapier beschreibt die derzeitige Situation und stellt zukünftige Herausforderungen mit möglichen Lösungsansätzen für eine zukünftige Simulationslandschaft als Bestandteil einer vernetzten Umgebung dar.

Status quo der Prozesssimulation



In der chemischen Industrie unterstützen Prozesssimulationen den gesamten Lebenszyklus eines chemischen Prozesses von der Entwicklung, über den Entwurf und Bau bis hin zur Optimierung des Betriebes. Um diese Unterstützung effizient gewährleisten zu können, müssen die Prozessmodelle für die einzelnen Phasen möglichst reibungslos entlang des Lebenszyklus entwickelt werden. Dies erfolgt in den Unternehmen, indem umfangreiche Programmsysteme zumeist eines Herstellers eingesetzt werden. Unternehmen mit eigenen Inhouse-Simulatoren haben diese zusätzlich in ihre Arbeitsabläufe integriert. Die umfassenden Programmsysteme wurden in den letzten Jahrzehnten von wenigen Herstellern langfristig entwickelt und decken stationäre und dynamische Simulationen für Conti- und Batch-Anlagen sowie viele Spezialanwendungen ab. Auch wenn diese Systeme sehr vielfältig sind, so existiert bis heute noch keine Simulationsumgebung, die alle Aspekte des Lebenszyklus eines Prozesses hinreichend gut abbilden kann. Die Nutzung der Programmsysteme stellt daher nicht zwingend eine optimale Lösung für die Prozessindustrie dar. Diese ist vielmehr auch an offenen, modularen Lösungen für die einzelnen Aspekte des Lebenszyklus interessiert. Neben dem Vorteil, für jeden Aspekt das optimale Simulationswerkzeug nutzen zu können, würde das offene Konzept auch die starke Abhängigkeit von den Anbietern der Programmsysteme verringern.

Heutige kommerzielle Prozesssimulatoren sind als eigenständige Werkzeuge entwickelt worden und sind derzeit weitgehend als geschlossene, autarke Systeme konzipiert. Sie umfassen alle notwendigen Funktionalitäten für die Prozesssimulation. Hierzu gehören ein Modul zur Berechnung der Stoffdaten und Reaktionen, die Modelle für die Prozessschritte sowie numerische Gleichungslöser und Optimierer. Neben diesen Funktionalitäten benötigt die Prozesssimulation die Strukturinformationen des Prozesses, das heißt, die Verknüpfungen der einzelnen Prozessschritte, die zumeist in Form eines Fließbildes eingegeben werden. Schließlich sind noch Informationen zur Fahrweise notwendig, die über Spezifikationen in die Prozesssimulation einfließen. Die Grafik stellt das unabhängige Gesamtsystem für eine konventionelle Prozesssimulation dar.

Die Nutzung eines umfassenden einheitlichen Programmsystems für die Prozesssimulation hat sich in den meisten Unternehmen bisher erfolgreich etabliert. Ein wesentlicher Grund hierfür ist die Vereinheitlichung, Reduzierung und Pflege von Schnittstellen, über die Ergebnisse aus Prozesssimulationen in die Systeme der Unternehmen fließen. Dies reicht von Auslegungsdaten für das Engineering bis hin zu Prozessmodellen für Echtzeitoptimierungen im Betrieb. Für all diese Informationsflüsse wurden in den Unternehmen im Laufe der Zeit zahlreiche Schnittstellen erstellt, die häufig speziell auf

die jeweils eingesetzte Simulationssoftware zugeschnitten sind. Damit wurde in den Unternehmen bisher eine hohe Effizienz in den Arbeitsabläufen erreicht, die allerdings mit einer starken Abhängigkeit von der jeweils eingesetzten Simulationssoftware einhergeht. Ein Wechsel der Simulationssoftware ist in den Unternehmen daher aufgrund der starken Einbindung in die Infrastruktur nur langfristig mit sehr hohem Aufwand möglich.

Die Eigenständigkeit der einzelnen kommerziellen Softwarepakete behindert den Austausch von Simulationsmodellen zwischen verschiedenen Prozesssimulatoren. Es besteht derzeit keine übergreifend genutzte, einheitliche Fließbildsprache für die Prozessstruktur, die einen einfachen Austausch von Modellen oder eine automatische Erzeugung von Fließbildsimulationen ermöglichen würde. Eine noch größere Herausforderung als der Transfer der Prozessstruktur stellt jedoch die Übertragung der Berechnungsmodelle für Stoffdaten und Reaktionen dar. In den verschiedenen Prozesssimulatoren stehen unterschiedliche Stoffdaten- und Reaktionsmodelle zur Auswahl, die nur auf interne Parameterdatenbanken der Simulatoren zurückgreifen. Stoffdaten- und Reaktionsmodelle sind daher sehr tief in die Prozesssimulatoren integriert und dementsprechend schwer zu migrieren. Andererseits stellen die erstellten Modelle einen hohen Wert für die Unternehmen dar, da viel Aufwand und schätzenswertes Know-how in deren Erstellung einfließen. Der Austausch von Simulationsmodellen zwischen verschiedenen Prozesssimulatoren ist für Industrieunternehmen durchaus

von Bedeutung bei Entwicklungskooperationen oder Firmenzusammenschlüssen, Nutzung von Lizenzverfahren oder bei der Übertragung einer Prozesssimulation auf eine spezielle Software wie zum Beispiel bei Operator-Trainingssystemen. Derzeit ist die Übertragung eines bestehenden Prozess- oder Apparatemodells in eine neue Softwareumgebung nur mit hohem manuellem Aufwand möglich.

Die Interoperabilität von Prozesssimulationen ist bei weitem nicht ausreichend entwickelt. So erfordert die Einbindung externer Modelle in eine Prozesssimulation häufig noch einen hohen Aufwand, da die Prozesssimulatoren zumeist individuelle interne Schnittstellen zwischen ihren Modulen nutzen. Zwar stellen die meisten Prozesssimulatoren Schnittstellen zur Einbindung externer Module zur Verfügung, doch sind diese Schnittstellen in der Regel Simulator-spezifisch. Der Ansatz, fertige spezialisierte Modelle von Herstellern, Lizenzgebern oder aus der Hochschulforschung in Prozesssimulationen einzusetzen, ist damit sehr eingeschränkt. Auch das Zusammenspiel von Prozesssimulationen unterschiedlicher Hersteller in übergeordneten Verbundsimulationen ist nicht einfach und schnell realisierbar. Dabei versuchen Unternehmen gerade zunehmend, durch Verbundoptimierungen neue Potentiale zu heben. Für einen umfassenden Einsatz von Prozessmodellen ist auch die Einbindung vertraulicher firmeninterner Datensätze zum Beispiel für Kostenallokation, alternative Kapazitäten oder Reserven notwendig.

CAPE-OPEN ist eine Initiative von Anwendern und Herstellern von Prozesssimulatoren mit dem Ziel, einheitliche Schnittstellen zum Austausch von Modellen zu definieren. CAPE-OPEN bietet damit prinzipiell die Möglichkeit einer offenen Softwareumgebung mit austauschbaren Modulen. Leider werden die CAPE-OPEN-Schnittstellen nicht von allen Prozesssimulatoren in vollem Umfang unterstützt. Bei der Einbindung von Stoffdatenmodellen über die CAPE OPEN-Schnittstelle zeigen sich zudem bisher noch Performancedefizite gegenüber den nativen Stoffdatenberechnungen innerhalb der Simulatoren. Dies verlangsamt Prozesssimulatoren spürbar, da ein erheblicher Teil des numerischen Aufwandes in Prozesssimulationen auf die Berechnung der Stoffdaten entfällt.

Die Einführung technischer Neuerungen erfolgt in den kommerziellen Softwarepaketen zur Prozesssimulation zum Teil sehr verzögert, da die Hersteller der Simulationssoftware aufgrund des Umfangs der Programmsysteme und der Breite der Anforderungen naturgemäß in der Umsetzung limitiert sind. Einzelne Unternehmen haben häufig nur geringen Einfluss auf die Einführung neuer Entwicklungen in den kommerziellen Prozesssimulatoren. Unternehmen mit eigenen Inhouse-Simulatoren können dagegen sehr viel flexibler ihre Ideen umsetzen, sodass diese Unternehmen in den letzten Jahren aufgrund der schnellen Einführung neuer Ansätze, die im Umfeld der Digitalisierung aufkamen, technologische Vorsprünge erzielen konnten.

Die Anpassung von Apparatemodellen an spezifische Anforderungen des Prozesslebenslaufs hinsichtlich Modellannahmen, Erhaltungsgrößen, Randbedingungen oder phänomenologische Korrelationen ist in vielen Fällen nur sehr eingeschränkt möglich. Einerseits können Teile des Apparatemodells nicht hinreichend dokumentiert sein, oder es stehen keine Softwareschnittstellen für anwendungsspezifische Ergänzungen zur Verfügung. Dies führt dazu, dass auf Prozessmodellebene anwendungs- oder bearbeiterspezifische Ergänzungen enthalten sind, die die Komplexität des Fließbilds erhöhen, und oft nicht hinreichend dokumentiert sind.

Die simulationstechnische Unterstützung des gesamten Prozesslebenszyklus erfordert zukünftig, dass neben der stationären Prozesssimulation die dynamische Simulation einen viel breiteren Raum einnehmen wird. Allerdings sind beim Übergang von einem stationären zu einem dynamischen Prozessmodell vielfältige Modellannahmen zu treffen, wofür ein Anwender in den gegenwärtig verfügbaren Prozesssimulatoren nur unzureichend Unterstützung erfährt. Mit der Erstellung eines dynamischen Prozessmodells beginnt deshalb der Modellierungsvorgang häufig von neuem.

In den einzelnen Abschnitten des Prozesslebenslaufs werden in den Unternehmen von unterschiedlichen Bearbeitern in unterschiedlichen Abteilungen Simulationen erstellt, erweitert oder verändert. All dies führt zu einer Vielzahl von Prozesssimulationen für unterschiedliche Aspekte, die zu verwalten und zu aktualisieren sind. Derzeit unterstützt kein kommerzieller Anbieter von Prozesssimulatoren umfassend die Dokumentation, Verwaltung und Aktualisierung von Prozesssimulationen im Prozesslebenslauf. Da das Problem der Aktualisierung, Wiederverwendung und Verwaltung in den Unternehmen bereits zu Effizienzverlusten führt, besteht seitens der Industrie durchaus der Wunsch nach einem geeigneten Modell-Managementsystem. Dabei sollte ein Modell-Managementsystem mehrere Simulationsumgebungen verwalten können, auch im Hinblick auf zukünftige modulare, offene Systeme.

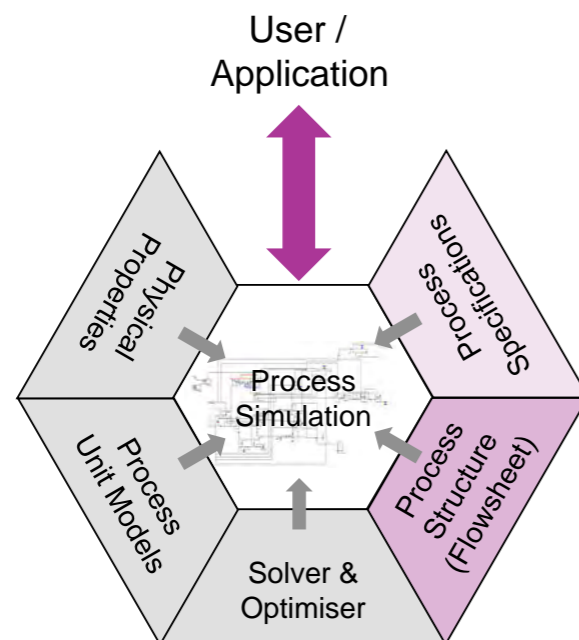


Abb. 1: Gesamtsystem einer konventionellen Prozesssimulation

Zukünftige Herausforderungen

Ursprünglich sind Prozesssimulatoren als eigenständige Ingenieurwerkzeuge entwickelt worden, um die Prozessentwicklung zu unterstützen. Heute findet die Prozesssimulation eine weitaus breitere Anwendung, da Simulationsmodelle mittlerweile das Verhalten chemischer Prozesse in unterschiedlichen Facetten detailliert beschreiben können. Prozesssimulationen unterstützen Entscheidungen in Planung und Betrieb und dienen zudem der Überwachung, Regelung und Optimierung von Prozessen. Zukünftig wird die Nutzung der Prozesssimulation noch weiter zunehmen, da die chemische Industrie intensiv an der Entwicklung digitaler Zwillinge für ihre Wertschöpfungsketten arbeitet. Im digitalen Zwilling kommt der Prozesssimulation eine zentrale Rolle als Verhaltensmodell des chemischen Prozesses zu. In diesem Wandel entwickeln sich Fließbildsimulationen immer mehr von einem persönlichen Werkzeug des einzelnen Ingenieurs zur Lösung spezifischer Problemstellungen zu einem integralen Bestandteil des Technologiepakets mit einem erweiterten Anwenderkreis. Aus dieser Entwicklung ergeben sich eine Reihe von Konsequenzen für die Prozesssimulation.

- » Modularisierung der Prozesssimulatoren zur besseren Einbindung in das Technologiepaket
- » Offene, standardisierte Schnittstellen zu anderen Prorampaketen
- » Vernetzung mit anderen Anwendungen und Erweiterung des Anwenderkreises
- » Datenanbindung

In Zukunft werden auch Prozesssimulationen von datengetriebenen Methoden profitieren. Mögliche Anwendungen sind die Identifikation von interessanten Betriebspunkten in großen Datensätzen, die Erstellung effizient auswertbarer Surrogatmodelle und die Komplementierung physikalisch basierter Modelle mit Modellteilen, die auf Messdaten beruhen. Auf die anstehenden Herausforderungen für die Prozesssimulation wird im Folgenden eingegangen.

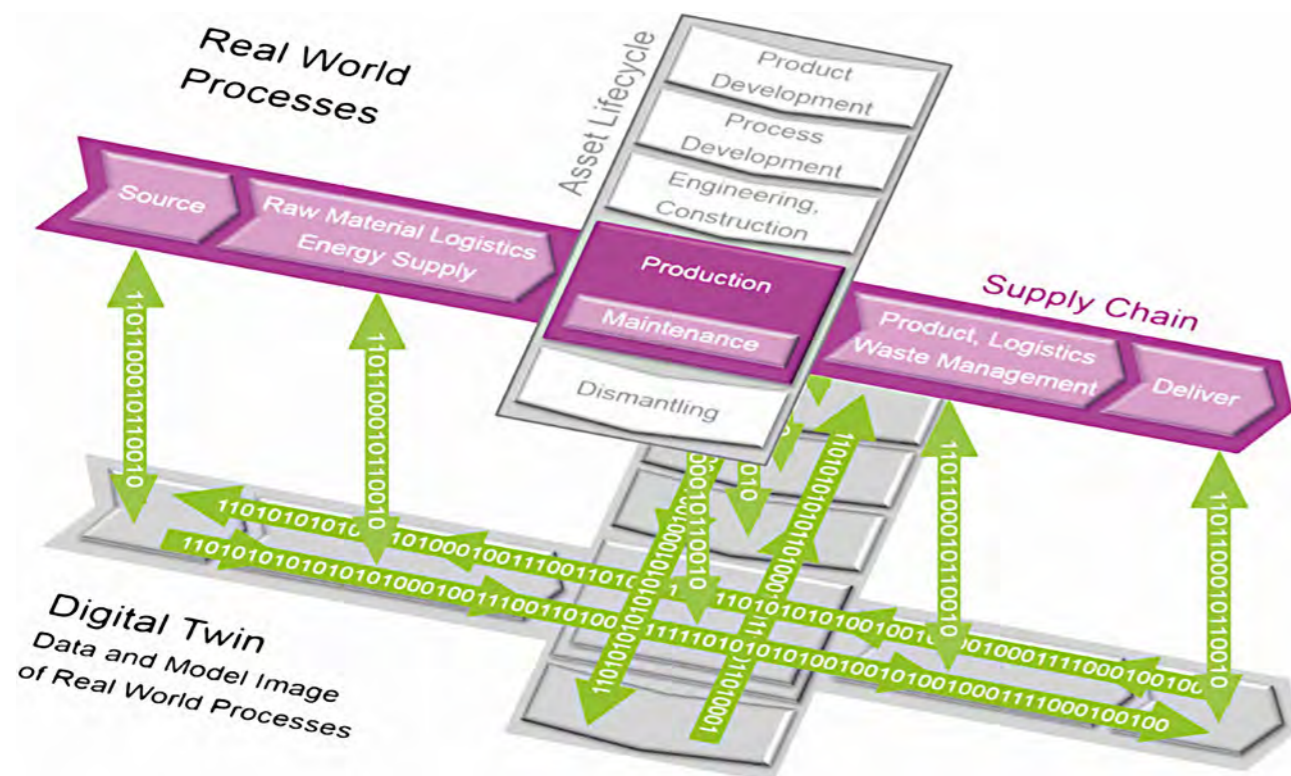


Abb. 2: Digitaler Zwilling der Wertschöpfungsketten in der chemischen Industrie. Prozesssimulation ist zentraler Bestandteil als Verhaltensmodell für den Prozess

Anbindung an Daten des Prozesslebenszyklus – Aktualität und Nachhaltigkeit

Ein Ziel der Digitalisierung in der chemischen Industrie ist die schnelle und strukturierte Verfügbarkeit von Daten aus dem Prozesslebenszyklus. Das heißt, die Strukturinformationen über den aktuellen Stand der Anlagen werden zukünftig fortlaufend aktualisiert und effizient verfügbar sein. Dies umfasst die Verschaltung der einzelnen Prozessschritte sowie die Spezifikation der aktuell eingesetzten Apparate. In den Prozesssimulatoren sind diese Informationen derzeit fest eingegeben und müssen manuell an den aktuellen Stand angepasst werden. Es liegt daher nahe, die Prozesssimulation zukünftig mit den verfügbaren Daten aus dem Prozesslebenszyklus zu verknüpfen und damit die Möglichkeit zu schaffen, die Struktur der Simulationsmodelle automatisch zu aktualisieren. Dies wäre ein wichtiger Schritt zur Lösung des oben angesprochenen langjährigen Problems, Simulationsmodelle nachhaltig aktuell zu halten. Zudem könnten die Arbeitsabläufe in der Prozessentwicklung und -optimierung erheblich effizienter werden. So würden zum Beispiel die Informationen über eine neue Rohrleitung oder einen ersetzten Wärmetauscher direkt nach den ausgeführten Arbeiten in das CAE-Datensystem fließen und könnten dann auch unmittelbar in der Prozesssimulation verfügbar sein. Andererseits könnten auch Ergebnisse aus Simulationsstudien direkt in die CAE-Systeme einfließen. Einschränkend soll hier aber betont werden, dass die Verknüpfung der Daten des Prozesslebenszyklus mit der Prozesssimulation nur einen ersten Schritt darstellt, denn auf Seiten der Prozesssimulation wirft die automatische Aktualisierung Fragestellungen wie die Modellierung neu eingefügter Prozessschritte oder sogar die Konvergenz der automatisch aktualisierten Prozesssimulation auf.

Der Nutzen einer engeren und nachhaltigen Verzahnung zwischen der Prozesssimulation und den CAE-Systemen, in denen die Arbeitsabläufe des Prozesslebenslaufs abgebildet werden, ist von den Softwareherstellern erkannt worden. Als Konsequenz entstanden in der letzten Zeit enge Kooperationen zwischen Herstellern von CAE-Systemen und Simulationssoftware, die zum Teil sogar in Übernahmen mündeten. Unternehmen, die Simulationssoftware und CAE-Systeme von zwei kooperierenden Partnern im Einsatz haben, werden von dieser Entwicklung sehr profitieren, erhöhen aber gleichzeitig auch ihre Abhängigkeit von den Partnern. Insgesamt wäre aber eine offene,

systemunabhängige Verbindung zwischen Prozesssimulation und CAE-System von Vorteil, da so beliebige Systeme frei miteinander kombiniert werden können.

Vom Entwurf bis zum Betrieb eines Prozesses gibt es verschiedene Anwendungsbereiche für Prozesssimulationen, hierzu zählen

- » konzeptioneller Verfahrensentwurf (auch Short-cut-basiert),
- » Prozess- und Apparatedesign,
- » Offline-Optimierung und Engpassanalysen,
- » virtuelle Inbetriebnahme,
- » Trainingssimulator sowie
- » Betrieb, Echtzeitoptimierung, Zustandsüberwachung, vorausschauende Wartung.

Zwischen diesen Anwendungsbereichen bestehen derzeit spürbare Brüche, bei denen Wissen in Form von Modellen zum Teil verloren geht. Gleichzeitig nimmt die Verfügbarkeit von Labor- und Prozessdaten im Laufe der Entwicklung zu. Daher wäre es wünschenswert, zukünftig mehr Modell- und Datendurchgängigkeit zu erreichen. Dies ist auch ein Ziel der Digitalisierung.

Voraussichtlich wird die Durchgängigkeit nicht mit einem einzigen Simulationstool, wie wir es heute kennen, erreicht werden können. So hat der Modellentwickler ganz andere Anforderungen an ein Simulationsmodell als eine Betriebsmannschaft, gleiches gilt für die Nutzung der Daten. Die Herausforderung für eine zukünftige Simulations- und Datenumgebung besteht darin, die Durchgängigkeit von Daten und Modellen zu verbessern, und gleichzeitig die „richtigen“, angepassten Mensch-Maschine-Schnittstellen (Maschine = Computer) zur Verfügung zu stellen.

Diese Überlegung muss in einer intelligenten Softwarearchitektur berücksichtigt werden. Dabei geht es um Schnittstellen, aber auch um gute Entwicklungsumgebungen für Teams. Zentrale Modellverwaltungssysteme („Model Repositories“), die mit Intelligenz für Nutzeranforderungen und Konsistenz in der Softwarearchitektur ausgestattet sind, können hier ein Ansatz sein.

Einbindung datengetriebener Modelle – Genauigkeit und Vorhersagefähigkeit

Prozesssimulatoren basieren derzeit auf rigorosen und empirischen Modellen für die physikalischen und chemischen Stoffeigenschaften sowie für die Apparate im Prozess. Da einerseits nicht alle Effekte in einem realen Prozess in einer Prozesssimulation erfasst werden können und andererseits die verwendeten rigorosen und empirischen Modelle die Realität nur annähernd abbilden, treten stets Abweichungen zwischen Simulationsergebnissen und realen Prozessdaten auf. Prozessdaten spiegeln dabei die Realität, allerdings auch Messfehler, wider und werden im Rahmen der Digitalisierung sehr viel leichter und umfassender zugänglich. Zudem stehen heute datengetriebene Modelle zur Verfügung, die flexibel an große mehrdimensionale Datenmengen angepasst werden können. Diese Anpassung („machine learning“) liefert rein datenbasierte Modelle, die zumeist keine physikalisch-chemischen Grundlagen haben und deren Extrapolierbarkeit daher außerhalb des angepassten Datenbereichs sehr unsicher ist. Selbst im angepassten Bereich müssen hinreichend vielfältige und verlässliche Daten für die Anpassung zur Verfügung stehen.

Um die Genauigkeit von Prozesssimulationen zu erhöhen, werden zukünftig vermehrt hybride Systeme entstehen, die einen klassischen rigoros-empirischen Modellanteil und einen datengetriebenen Modellanteil haben werden. Es müssen Konzepte erarbeitet werden, wie die beiden Anteile miteinander je nach Anwendungsfall zu kombinieren sind. So können datengetriebene Modelle zum Beispiel zu Beginn einer Prozessentwicklung nur die Modellierung der Stoffdaten unterstützen, während die Prozessmodellierung aufgrund fehlender Daten in diesem frühen Entwicklungsstadium rigoros bleibt. Demgegenüber können Prozesssimulationen für die Regelung und Optimierung von Bestandsanlagen mit umfangreicher, verfügbarer Datenhistorie für den Betriebsbereich einen datengetriebenen Modellanteil einbeziehen, um die realen Effekte genauer zu beschreiben. Die Herausforderung liegt insgesamt darin, je nach Anwendung die Erfahrung aus den realen Prozessdaten mit den rigoros-empirischen Kenntnissen zu kombinieren, um genaue und extrapolationsfähige Modelle zu erstellen. All dies muss schließlich flexibel, übersichtlich und benutzerfreundlich in Prozesssimulatoren eingearbeitet werden.

Derzeit gehören datengetriebene Modelle noch nicht zu den Standardmodellen kommerzieller Prozesssimulatoren und müssen aufwändig als externe Software über Schnittstellen angebunden werden. Sicherlich ist für die Ausführung von Prozesssimulationen eine effiziente Einbindung von datengetriebenen Modellen notwendig. Es bleibt aber die Frage, ob die datengetriebenen Modelle Bestandteil der Prozesssimulatoren werden sollen. Die Prozesssimulatoren müssten dann auch entsprechende Werkzeuge zum Training der datengetriebenen Modelle zur Verfügung stellen. Flexibler wäre es, geeignete Schnittstellen zu erstellen und die datengetriebenen Modelle zusammen mit dem Training extern zu belassen. Damit wäre auch sichergestellt, dass Neuerungen in der rasch fortschreitenden Entwicklung der datengetriebenen Methoden zeitnah in die Prozesssimulation einfließen könnten.

Die Vorhersagegenauigkeit datengetriebener Modelle hängt nicht allein von der Anzahl der zur Anpassung genutzter Daten ab, sondern wird maßgeblich auch durch deren Verteilung im Anwendungsbereich bestimmt. Es müssen daher Methoden und Werkzeuge zur Sensitivitätsanalyse und Versuchsplanung zur Verfügung stehen, mit deren Hilfe bestimmt werden kann, wo welche Daten im Anwendungsbereich notwendig sind, um eine möglichst hohe Vorhersagegenauigkeit der Modelle zu erreichen. Insbesondere bei mehrdimensionalen Problemen ist es notwendig, die Menge der benötigten Daten nicht zu stark anwachsen zu lassen und trotzdem eine ausreichende Zuverlässigkeit der Modelle zu erreichen. Während der Simulation muss die Einhaltung des Gültigkeitsbereichs der datenbasierten Modellteile ständig überwacht werden, da deren sinnvolle Extrapolierbarkeit nicht zwingend gewährleistet ist.

Geschwindigkeit, Robustheit und Optimierung



Die zukünftige, erweiterte Nutzung der Prozesssimulation in neuen Anwendungen setzt hohe Rechengeschwindigkeiten und Robustheit voraus. So erzwingt zum Beispiel die Nutzung der Prozesssimulation bei Onlineregulungen sehr robuste und zuverlässige Lösungen im Betriebsfenster. Soll die Prozesssimulation dagegen Entscheidungen in der Planung unterstützen, sind sehr viele, schnelle Lösungen in einem erweiterten Parameterbereich erforderlich. Dies gilt insbesondere für multikriterielle Optimierungen, die zunehmend als Unterstützung von Entscheidungen eingesetzt werden. Um robuste und schnelle Simulationen zu gewährleisten, muss vermieden werden, dass Prozesssimulationen unnötig lange in physikalisch unzulässigen Parameterbereichen nach Lösungen suchen. Hierfür sind zukünftig Methoden zu entwickeln, mit denen der Bereich gültiger Parameter abgeschätzt werden kann.

In vielen Unternehmen entstehen zunehmend Möglichkeiten für High Performance Computing durch eigene Rechnercluster oder die Nutzung von Cloud Computing. Diese Entwicklung nutzt die Prozesssimulation bisher nur in geringem Maße. Es ist aber nach den Erfahrungen aus der Vergangenheit absehbar, dass die zunehmende Rechenleistung dazu führen wird, die Prozesssimulation zur Lösung immer komplexerer und umfangreicherer Fragestellungen einzusetzen. Beispiele hierfür sind

- » umfangreichere Fließbilder bis hin zu Verbänden mit Zusammenschaltung einzelner Prozesssimulationen
- » zunehmende Modellierungstiefe für Stoffdaten, Reaktionen und Grundoperationen
- » Anbindung der Prozesssimulation an andere Bereiche wie CFD, Equipment Health Monitoring, Supply Chain etc.
- » Optimierungen und Varianten für zunehmend komplexere Verschaltungen
- » dynamische Simulationen mit mehr Varianten und größerer Modellierungstiefe

Prozesssimulationen müssen für diese Entwicklung auf den High Performance Computing-Systemen lauffähig sein. Für die Einbindung der Prozesssimulation in komplexe übergeordnete Anwendungen sind hier wiederum die offenen Schnittstellen ein entscheidender Baustein.

Die heutigen kommerziellen Prozesssimulatoren nutzen eigene, integrierte Gleichungslöser. Diese Löser sind vom Hersteller vorgegeben und Teil des Softwarepakets. Es besteht keine Möglichkeit, externe Gleichungslöser einzusetzen. Dabei sind heutzutage bereits sehr leistungsfähige Gleichungslöser in breit zugänglichen Programmibliotheken verfügbar, und es findet eine stetige

Weiterentwicklung statt. Dieses Potential leistungsfähiger Lösungsalgorithmen für nichtlineare Gleichungssysteme kann derzeit für die Prozesssimulation nicht vollständig gehoben werden. Ein offenes Konzept, die Formulierung der physikalisch-chemischen Zusammenhänge und die Erstellung des Gleichungssystems von dessen Lösung zu entkoppeln und externe Gleichungslöser einzubinden, wird in kommerziellen Prozesssimulatoren nicht angeboten. Ansätze dazu wären, einerseits Schnittstellen für die Einbindung externer Gleichungslöser bereitzustellen und andererseits Residuen und Ableitungen des Gleichungssystems für numerische Lösungsalgorithmen zu exponieren. In Forschung und Entwicklung werden solche offenen Konzepte erfolgreich angewendet. Zudem liegt in vielen Unternehmen durchaus die Kompetenz vor, um komplexe Simulationen hinsichtlich Konvergenz und Geschwindigkeit mit einem offenen Konzept zu optimieren.

Generell benötigen Unternehmen in ihren Projekten vielfach Innovationen und Methoden aus den Hochschulen und Forschungsinstituten. Prinzipiell sollte daher die Möglichkeit für Universitäten und Forschungsinstitute bestehen, Lösungen für spezielle Aufgabenstellungen bei der Simulation, Optimierung oder Datenverarbeitung

zu entwickeln und effizient mit den Prozesssimulatoren zu verbinden. Auch hierfür müssen geeignete Schnittstellen vorhanden sein.

Bei der Optimierung setzen kommerzielle Prozesssimulatoren durchweg auf interne Algorithmen, wobei es prinzipiell möglich ist, eine Prozesssimulation auch an externe Optimierer eigener Wahl anzubinden. Dies ist jedoch aufwändig und mit Performanceverlusten verbunden. Der externe Optimierer führt dann eine Suche nach dem Optimum mit Hilfe von Prozesssimulationsrechnungen durch, wobei meist ableitungsfreie Verfahren verwendet werden müssen. Alternative Löser könnten eingesetzt werden, wenn das Gleichungssystem der Prozesssimulation inklusive der Ableitungen exportiert werden könnte. Dann könnten die Optimalitätsbedingungen mit effizienten Verfahren direkt ausgewertet werden. Leider bieten die kommerziellen Prozesssimulatoren noch nicht die notwendigen Informationen, um die Freiheit zu haben, diesen Weg zu beschreiten.

Datengetriebene Modelle können sehr komplexe, mehrdimensionale Zusammenhänge gut beschreiben. Sie können daher auch als Ersatz- oder Surrogatmodelle für gesamte Prozesssimulationen oder Teilen daraus

verwenden und liefern sehr schnelle und robuste Simulationsmodelle. Zur Erstellung von Surrogatmodellen werden zunächst mit herkömmlichen Prozesssimulationen automatisiert mit einer geeigneten Explorationsstrategie Simulationsrechnungen im interessierenden Parameterbereich durchgeführt. Nachfolgend werden die Surrogatmodelle an die Ergebnisse der Simulationen angepasst. Prinzipiell können in die Anpassungen der Surrogatmodelle auch reale Daten aus Betrieb, Technikum oder Labor mit einfließen, was zu einem hybriden Ansatz führt. Die Simulationsrechnungen können aufgrund langsamer Konvergenz und aufwendiger Numerik der ursprünglichen Prozesssimulationen sehr langwierig werden, daher sind Methoden zur Versuchsplanung in der Entwicklung, um die Zahl der zu berechnenden Variationen gering zu halten. Dabei ist ein iteratives Vorgehen anzustreben: Es wird zunächst ein Screening mit niedriger Punktdichte durchgeführt. Die Nutzer entscheiden dann darüber, welche Bereiche des gesamten Designraums feiner aufgelöst werden sollen. Hierbei sollte die ursprüngliche Prozesssimulation unverändert bleiben. Insgesamt wird bei der Nutzung von Surrogatmodellen der Rechenaufwand von der eigentlichen Anwendung auf die Modellanpassung vorverlagert.

Neben der Geschwindigkeit hat der Einsatz von Surrogatmodellen noch weitere Vorteile gegenüber der direkten Nutzung der ursprünglichen Prozesssimulationen.

- » Deutlich reduzierte Konvergenzprobleme z.B. durch effiziente Auswertung oder Vermeidung von Unstetigkeiten,
- » unter Umständen Möglichkeit der globalen Optimierung auf dem Ersatzmodell (hängt von dessen Struktur ab),
- » unabhängig von Installation und Lizenz für Prozesssimulationssoftware oder Einzelmodelle,
- » keine vertieften Kenntnisse zur Bedienung der Simulationssoftware erforderlich,
- » offene Schnittstellen sowie
- » hybrider Ansatz mit Einbindung externer Daten möglich.

Durch die Nutzung dieser Vorteile von Surrogatmodellen werden sich die Anwendungsbereiche für Prozesssimulationen in Planungs- und Entwicklungsabteilungen sowie in der Produktion absehbar deutlich erweitern.

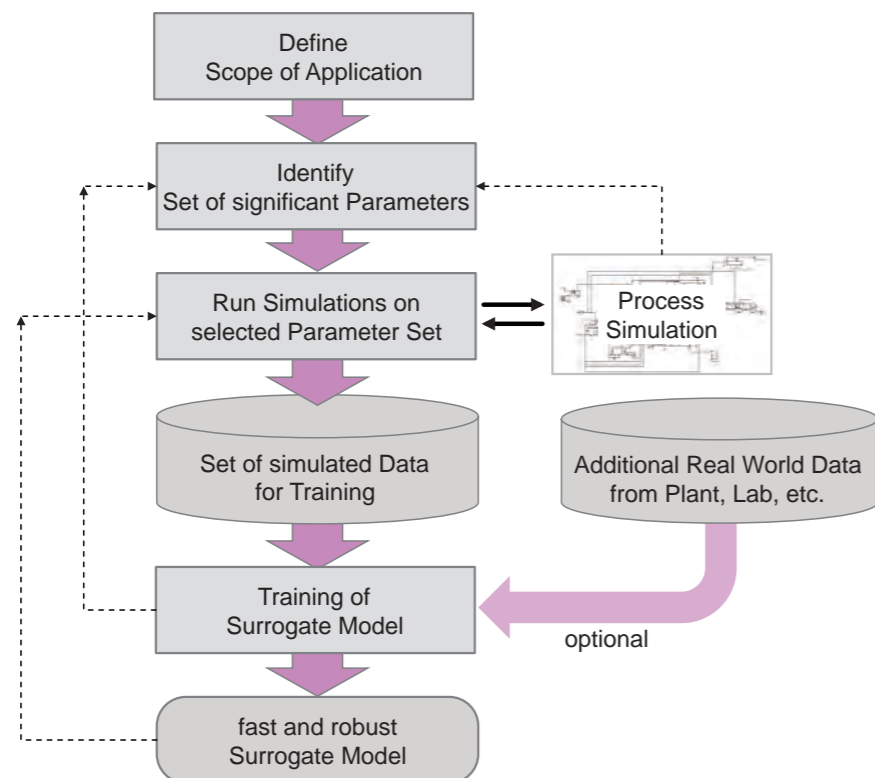


Abb. 3: Vorgehen zur Erstellung eines Surrogatmodells auf Basis von Prozesssimulationen unter Einbeziehung realer Daten aus Produktion und Entwicklung

Intensivere Nutzung der Prozesssimulation in der Produktion

Prozesssimulationen sind Abbilder der realen chemischen Prozesse, über deren Verhalten sie Daten und Informationen liefern. Eigentlich sollten die Betriebsmannschaften daher einen direkten Zugriff auf Prozesssimulationen haben, um unmittelbar Informationen zum Betrieb des jeweiligen Prozesses abrufen zu können. Dies kann von einem Monitoring des Betriebes, über Fallstudien bis hin zu Empfehlungen zur Fahrweise durch Echtzeitoptimierungen reichen. Der unmittelbare Zugriff auf Prozesssimulationen ist in den Anlagen bei weitem noch kein Standard. Neben den Kosten sind die Hauptursachen hierfür die Pflege und Aktualisierung der Simulationsmodelle, deren Genauigkeit und die Bedienbarkeit der Prozesssimulatoren.

Für die Pflege und Aktualisierung der Simulationsmodelle ist die CAE-Anbindung wie oben beschrieben ein erster notwendiger Schritt. Allerdings werden sich die Modelle für die Anwendung in der Produktion (beispielsweise Trainingssimulatoren oder Production Optimizer) von den Modellen der Prozessentwicklung teilweise unterscheiden, und die Fragestellung, wer die Modelle für die Produktion pflegt und so für Betrieb und Erhalt sorgt, ist damit nicht umfassend geklärt. Dies könnte in einem, oben bereits erwähnten, Modell Managementsystem erfolgen, das aus Unternehmenssicht sehr wünschenswert ist. In diesem System würden auch die Anwendungen in der Produktion verwaltet.

Der Zugriff auf historische und aktuelle Betriebsdaten aus Prozesssimulationen heraus stellt heutzutage kein Problem mehr dar, sodass die Einbindung datengetriebener Modelle auch bei komplexen Prozessen für ausreichende Genauigkeit und Übereinstimmung mit der Realität sorgen wird. Auch Surrogatmodelle können hier zukünftig als ausreichend schnelle und robuste Lösungen genutzt werden.

Für die Nutzung in der Produktion sind oft dynamische Modelle erforderlich, deren Entwicklung einen nicht unerheblichen zusätzlichen Aufwand erfordert. Es wäre wünschenswert, den Übergang von stationären zu dynamischen Modellen und Simulationen besser zu unterstützen damit das in die stationären Simulationen bereits eingeflossene Wissen effizient genutzt wird. Außerdem dürfen stationäre und dynamische Simulationen

nicht „auseinanderdriften“, das stationäre Verhalten darf nur in geringem Maß voneinander abweichen. Die unmittelbare Berechnung eines stationären Zustandes mit einem dynamischen Modell wäre hier von großem Vorteil. Die Entwicklung datenbasierter Modelle von dynamischen Vorgängen stellt besondere Anforderungen an die verfügbaren Daten, weil nicht nur der interessante Betriebsbereich im Sinne der Bereiche von Prozessvariablen abgedeckt werden muss, sondern auch der relevante Teil des dynamischen Verhaltens.

Die Nutzung von Prozesssimulationen zur Steuerung, Regelung und Optimierung von Prozessen stellt eine besondere Herausforderung dar, insbesondere wenn die Simulationen nicht nur Empfehlungen für das Bedienpersonal liefern, sondern direkt auf den Prozess zugreifen sollen. Es muss sichergestellt werden, dass die Simulationen entweder den gesamten Betriebsbereich abdecken oder das Verlassen ihres Gültigkeitsbereichs anzeigen. Gerade für datengetriebene Modelle müssen für diese Anforderung geeignete Prüfmethode erarbeitet werden. Auch der Einsatz von Prozesssimulationen in Good Manufacturing Practice (GMP)-Umgebungen ist denkbar. Jedoch fehlen derzeit noch entsprechende Verfahren zur GMP-Zertifizierung von Simulationen mit den zugehörigen Computersystemen.

Die Bedienung von Prozesssimulatoren ist vielfach nicht für die Nutzung durch Betriebspersonal konzipiert. Für einen Einsatz in der Produktion muss daher die Bedienung von Prozesssimulatoren entsprechend konfigurierbar werden, um alle Anforderungen des Betriebspersonals erfüllen zu können. Ein Rollenkonzept mit entsprechenden Berechtigungen für die unterschiedlichen Anwender wäre hier eine Lösung. Darüber hinaus sollte eine einfache, intuitive Bedienung über ein Fließbild möglich sein. Ein ganz wesentlicher Aspekt ist auch, die Möglichkeit zwischen stationärer und dynamischer Simulation in einem Prozesssimulator einfach in beide Richtungen umschalten zu können. Diese Funktionalität ist selbstverständlich von generellem Interesse, doch gerade bei Betriebsmannschaften würde es die Akzeptanz der Prozesssimulation heben, wenn stationäre und dynamische Untersuchungen in einer Umgebung durchgeführt werden könnten.

Stoffdaten – Einheitliche Verwaltung als Ziel

Die Berechnung der Stoffdaten ist integraler Bestandteil aller kommerziellen Prozesssimulatoren und umfasst eine Auswahl von Modellen zur Berechnung der physikalischen Eigenschaften mit den zugehörigen Modellparametern. Innerhalb der Simulatoren sind die Modelle untereinander kombinierbar und die Parameter frei zugänglich. Bearbeiter der Simulationen können daher die Berechnung der Stoffdaten individuell gestalten, sodass prinzipiell jede Simulation ihre eigene Stoffdatenmethode mit sich trägt. Diese Individualität kann umfassende, zeitaufwändige Neuanpassungen erfordern, wenn Prozesssimulationen zwischen verschiedenen Softwares transferiert werden sollen. Hierin liegt häufig der bei weitem aufwendigste Schritt bei einem Softwarewechsel und die größte Hürde. Ein weiteres Problem liegt in der Verwaltung der Stoffdaten innerhalb von Unternehmen in dieser Konstellation, da prinzipiell gleiche Prozesse mit unterschiedlichen Stoffdaten berechnet werden können. Dabei sind Stoffdaten eigentlich universell und prozessunabhängig. Die Verwaltung der Stoffdatenberechnung sollte daher aus den Simulatoren herausgezogen werden mit dem Ziel, in einem Unternehmen einheitliche Stoffdatenberechnungen für die Prozesse zu gewährleisten und damit auch den hohen Wert der firmeninternen Stoffdaten zu sichern und strukturiert zugänglich zu machen.

Der erste Schritt hierzu ist eine Beschränkung der Stoffdatenberechnung auf die Methoden, die für die jeweiligen Prozesse im Unternehmen am besten geeignet sind. Für diese Methoden müssen die zugehörigen Parameter bestmöglich angepasst und in einer zentralen Datenbank abgelegt und gepflegt werden.

In den Prozesssimulatoren können die Stoffdatenberechnungen nun folgendermaßen realisiert werden. Sofern die ausgewählten Berechnungsmethoden für die Stoffdaten in den Prozesssimulatoren verfügbar sind, können diese dort verwendet werden. Jedoch muss die Bereitstellung der Modellparameter von außen aus der zentralen Parameterdatenbank erfolgen. Innerhalb der Prozesssimulatoren muss gewährleistet werden, dass nur die ausgewählten Berechnungsmethoden zur Auswahl stehen.

Alternativ könnte die Stoffdatenberechnung in einem externen Modul mit Zugriff auf die zentrale Parameterdatenbank erfolgen. Dieser Ansatz hat den Vorteil, dass

dieses externe Modul nicht nur in Prozesssimulatoren verwendet werden kann, sondern auch für andere Anwendungen im Unternehmen. Damit kann eine durchgängige Berechnung der Stoffdaten unternehmensweit über die Prozesssimulation hinaus realisiert werden.

Die meisten kommerziellen Prozesssimulatoren haben Schnittstellen, über die die Stoffdatenberechnungen eingebunden werden können. CAPE-OPEN ist solch eine standardisierte Schnittstelle, die von einigen kommerziellen Prozesssimulatoren unterstützt wird. Eine externe Stoffdatenberechnung mit Anbindung über Schnittstellen führt nach bisherigen Erfahrungen stets zu einem Performanceverlust gegenüber der nativen internen Berechnung. Neure Entwicklungen in der CAPE-OPEN Community zielen auf eine Steigerung der Effizienz der Schnittstellensoftware. Ein möglicher Ansatz zur Lösung dieses Performanceproblems wäre es, ein externes Stoffdatenberechnungsmodul mit einer überschaubaren Zahl von ausgewählten Methoden zu erstellen und dieses Modul im Quellcode den Herstellern der Prozesssimulatoren zur Verfügung zu stellen. Diese könnten das Modul dann direkt in ihren Simulator einbinden. Einen vergleichbaren Ansatz verfolgte die IK-CAPE-Initiative in den 1980er Jahren.

Datengetriebene Modelle sind auch für die Modellierung physikalischer Stoffdaten und Reaktionen einsetzbar. Dabei können KI-Techniken zur Abschätzung fehlender Stoffdaten und zur Steigerung der Genauigkeit bestehender Modelle genutzt werden. Herausfordernd ist es dabei sicherzustellen, dass thermodynamische Grundbeziehungen eingehalten werden, um konsistente Resultate zu erhalten. Zudem müssen die angepassten Modelle im gesamten Anwendungsbereich zuverlässige Ergebnisse liefern. Kritisch sind hier mögliche Extrapolationen. Auch wenn datengetriebene Stoffdatenmodelle für Prozesssimulationen noch in der Entwicklung sind, müssen sie in Prozesssimulatoren kurzfristig verfügbar werden.

Für die Modellierung chemischer Reaktionen gelten ähnliche Umstände wie für die Stoffdatenmodellierung. Auch die Reaktionsmodelle sind mit ihren Parametern tief in den Prozesssimulatoren integriert, frei konfigurierbar und nur schwer zu migrieren. Es kann daher für die Verwaltung und Modellierung von chemischen Reaktionen ein analoges Vorgehen gewählt werden.

Neue Aspekte für die Ausbildung



Mit dem Wandel der Prozesssimulation vom eigenständigen Ingenieurwerkzeug für spezifische Fragestellungen hin zu einem integralen Bestandteil des Technologiepakets ändern sich auch die Anforderungen an die Entwicklerinnen und Entwickler von Prozessmodellen und -simulationen. Während sich früher Ingenieure und Naturwissenschaftler das zusätzliche Wissen über Numerik, Informatik und Mathematik noch im Job oder nebenbei aneignen konnten, sind die zukünftigen Anforderungen vielfältiger und umfangreicher, sodass sie bereits in der Ausbildung vermittelt werden müssen. Die Grundlagen von stationären und dynamischen Simulationen müssen im Studium vermittelt werden, in Designprojekten und Abschlussarbeiten sollten entsprechende Werkzeuge eingesetzt werden. Darüber hinaus erfordert die Einbindung in das Technologiepaket auch Wissen über Datenstrukturen, IT-Architekturen, Schnittstellen, Programmierung in modernen Systemen und Sprachen etc. Wichtig ist hierbei insbesondere die effektive Zusammenarbeit in interdisziplinären Teams.

Der Einsatz datengetriebener Modelle setzt Kenntnisse über die verschiedenen, einsetzbaren Ansätze, deren Möglichkeiten und Grenzen voraus. Hier sind praktische Erfahrungen in Studienarbeiten oder Praktika wichtig,

um ein fundierten Bezug zu den Möglichkeiten und Grenzen der datengetriebenen Modellierung zu gewinnen. In den Unternehmen werden Prozesssimulationen zunehmend umfangreicher und komplexer. Komplexe Simulationen sollten daher auch für die Ausbildung verfügbar sein, um einen Eindruck zu vermitteln, welcher Aufwand hier notwendig ist. Ein Beispiel wären Echtzeitsimulatoren größerer Anlagen für Studien des dynamischen Verhaltens.

Bei allen Neuerungen mit den zusätzlichen Anforderungen soll nicht vergessen werden, dass das Ziel die Modellierung realer Prozesse ist, wofür der Ersteller ein gutes Verständnis des Prozesses haben muss. Eine solide Grundausbildung in den klassischen Ingenieurfächern bleibt daher unerlässlich und darf nicht eingeschränkt werden. Nur sie ermöglicht es dem Entwickler von Prozesssimulationen, die Simulationsergebnisse zu verstehen und zu bewerten.

Zusammenfassung – Ein Konzept für die Prozesssimulation 2025+

Abbildung 4 zeigt die Struktur einer Prozesssimulation mit den Erweiterungen, die sich aus den zukünftigen Anforderungen ergeben. Das Konzept der autarken, geschlossenen Prozesssimulationsumgebungen aus Abbildung 1 wird sich danach zunehmend in ein offenes System flexibler Komponenten, das in eine digitale Infrastruktur eingebunden ist, wandeln. Die wichtigsten Erweiterungen sind dabei hier noch einmal zusammengefasst:

- » Transparente und umfassend akzeptierte offene Schnittstellen zwischen Softwarekomponenten
- » Anbindung an die Daten des Prozesslebenszyklus für eine automatische Aktualisierung der Prozessstruktur
- » Anbindung an Betriebsdaten für aktuelle prozessbegleitende Simulationen
- » Entkopplung von Stoffdaten und Prozesssimulation zur zentralen Verwaltung der konsistenten Stoffdatenberechnung in unterschiedlichen Anwendungen

- » Einbindung von datenbasierten Modellen mit Training an historische Betriebsdaten
- » Umschaltung zwischen dynamischer und stationärer Simulation und Sicherung der Konsistenz zwischen beiden
- » Öffnung für externe Prozessmodelle zur Einbindung spezialisierter Modelle
- » Öffnung für externe Gleichungslöser und Optimierer zur Verbesserung der Rechengeschwindigkeit und Robustheit
- » Bereitstellung des Prozessmodells in impliziter ($o=f(x,u)$) oder expliziter ($x=f(u)$) Form mit Ableitungen für externe mathematische Lösungsverfahren.

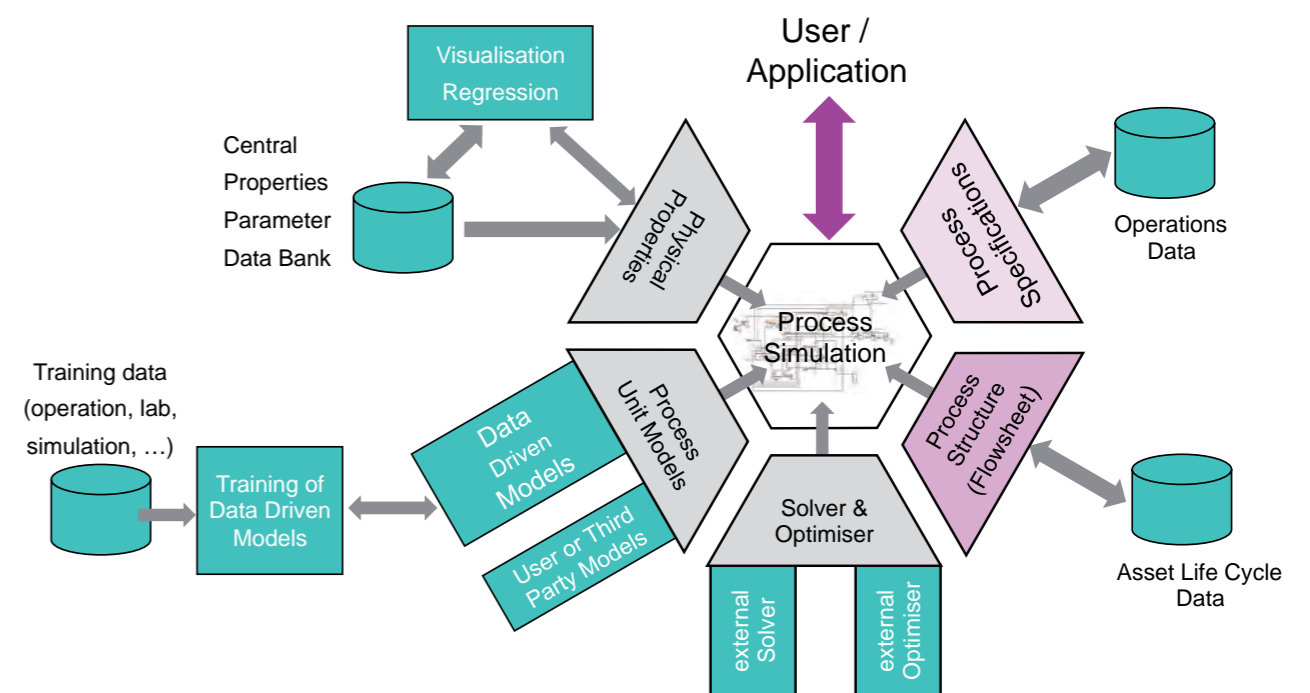


Abb. 4: Struktur der zukünftigen Prozesssimulation (Surrogatmodell der Gesamtsimulation nicht dargestellt, siehe Abb. 3)

DECHEMA

Gesellschaft für Chemische Technik
und Biotechnologie e.V.

Theodor-Heuss Allee 25
60486 Frankfurt am Main

Telefon: 069 7564-0

Telefax: 069 7564-117

E-Mail: info@dechema.de