

# Neue Software-Lösung für die chemische Industrie

Ein Team aus den Abteilungen »Optimierung – Technische Prozesse« und »Transportvorgänge« hat gemeinsam ein Softwarepaket für die Simulation und Optimierung von Batch-Destillationsprozessen bei Industrieunternehmen entwickelt – inspiriert von der Fernwärmesimulation. Das kommt der Produktion hochspezialisierter Chemikalien oder Medikamente zugute.



»Die Batch-Destillation ermöglicht es zum Beispiel, spezielle Pharmazeutika in geringer Menge relativ schnell herzustellen oder auch Versuche in einem überschaubaren Zeitraum durchzuführen«, sagt Prof. Dr. Michael Bortz. »In Branchen wie der Pharmaindustrie oder der Feinchemie gibt es Stoffe, die kontinuierlich in gleicher Qualität hergestellt werden müssen. Ein Batch ist eher eine Sonder-Edition: Hier kommt es für spezielle Fälle auf bestimmte Eigenschaften an.«

Batch-Destillationsprozesse sind daher sehr dynamisch. Das heißt, die Stoffzusammensetzungen, Temperaturen, Drücke und Ströme in der Destillationskolonne sind zeitabhängig, der Prozess ist inhärent nicht-stationär. Um diese dynamische Betriebsführung angemessen zu unterstützen, wird ein dynamisches Simulationsmodell benötigt.

## Software simuliert verschiedene Use-Cases

Das Tool, das bereits bei Unternehmen im Einsatz ist, kann insbesondere Kosten und Nutzen abwägen, beispielsweise, wie lange es dauert und wie teuer es wird, wenn eine Chemikalie

besonders rein sein soll. Das zugrunde liegende Modell besteht aus einem Satz von nicht-linearen algebraischen und Differentialgleichungen. Diese bilden die in der Realität vorhandenen Freiheitsgrade und Gütekriterien ab, um die Batch-Reaktionen optimal auszugestalten: Wie müssen Stoffe hinzudosiert werden? Was passiert, wenn andere Hilfsstoffe genommen werden? Wie sieht eine optimale Rücklauftrajektorie aus? »Dabei denken wir rückwärts und definieren den Weg vom Ziel ausgehend«, so Bortz. »Unsere Softwareprodukte erlauben es, interaktiv Verbesserungspotenzial zu entdecken und unterstützen dabei, die optimale Lösung zu finden.«

## Expertise aus den eigenen Reihen zusammengeführt

Spannend ist auch der Impuls für das Softwarepaket: Aus Gesprächen mit der Abteilung »Transportvorgänge« über deren Lösungen für die Fernwärmesimulation entstand die Idee, deren Algorithmen für die Batch-Destillation anzupassen. »Beide Abteilungen haben aktiv am Projektergebnis gearbeitet und die Expertise gemeinsam für das Projekt genutzt«, berichtet Bortz.

## Kontakt

Prof. Dr. Michael Bortz  
Abteilungsleiter »Optimierung –  
Technische Prozesse« und stellvertre-  
tender Bereichsleiter »Optimierung«  
Telefon +49 631 31600-4532  
michael.bortz@itwm.fraunhofer.de

