

ACHEMA 2015 Trendbericht

Moderne Prozessentwicklung

ACHEMA

Neue Prozesse für neue Herausforderungen:

- Prozessintensivierung als Antwort auf Kostendruck, Rohstoff- und Energiepreise und Umweltfragen
- Simulation kann den Bedarf an Pilotversuchen reduzieren, während sich mit neuer Analysetechnik und Software mehr aus experimentellen Daten herausholen lässt
- "Soft skills" werden immer wichtiger, wenn Projektteams über den Globus verstreut arbeiten

Obwohl der Chemie-, Pharma-, Öl- und Gasindustrie ein gewisser Konservatismus zu eigen ist, suchen diese Branchen doch ständig nach neuen, besseren Produkten oder nach billigeren, umweltfreundlicheren Herstellungsverfahren für bekannte Produkte. Einen neuen Prozess zu entwickeln kann bis zu einem Jahrzehnt dauern. Grundlage dafür ist die Zusammenarbeit von Experten mit sehr unterschiedlichen Sichtweisen, oft länderübergreifend oder weltweit. Neue computergestützte Simulationen gehen dabei Hand in Hand mit der traditionellen Kreativität von Wissenschaftlern und Ingenieuren. Ziel sind sichere, wirtschaftliche und nachhaltige Produktionsprozesse.

Die Prozessentwicklung schlägt den Bogen vom Reagenzglas im Labor zu großindustriellen Anlagen. Die Zielsubstanz kann eine Bulkchemikalie sein, von der Tausende von Tonnen vertrieben werden, oder ein Biopharmazeutikum, dessen Produktionsvolumen kaum den Kilogramm-Maßstab erreicht. Wenn ein Produkt neu in den Markt gebracht werden soll, stehen bei der Prozessentwicklung die Produktqualität, die Anlagensicherheit und die Umweltauswirkungen, Kapital- und Betriebskosten sowie das wirtschaftliche Risiko auf dem Prüfstand, einschließlich der Markteinführungszeit. Ist das Produkt schon eingeführt, geht es den Entwicklern typischerweise um einen Prozess, der besser ist als die etablierten Routen. Vielleicht suchen sie aber auch nach Wegen, Alternativen zu IP-geschützten

Verfahren von Wettbewerbern zu eröffnen, wenn das Produkt selbst nicht geschützt ist. Die Prozessentwicklung ist fest im wissenschaftlich-technischen Bereich verwurzelt. Weil sie sich aber auf viele Bereiche auswirkt, verschiedenste Disziplinen koordiniert werden müssen und sie einen hohen kreativen Anteil hat, bedarf sie auch ausgeprägter Managementfähigkeiten.

Erdölraffinerien und Hersteller von Bulkchemikalien sind einem hohen Kostendruck sowie hohen Ansprüchen an die Zuverlässigkeit der Prozesse ausgesetzt. Sie müssen deshalb auf Anhieb das richtige Prozessdesign entwickeln. Hersteller von Pharmazeutika unterliegen zusätzlichen Einschränkungen, denn pharmazeutische Prozesse sind sehr schwierig abzuändern, wenn sie einmal von den Behörden zugelassen worden sind. Zwischen diesen beiden Extremen sind die Feinchemikalien-Hersteller angesiedelt. Sie brauchen flexible Anlagen, um Produkte und Prozesse häufig wechseln zu können. Mit Entwicklungszyklen in der Größenordnung von Jahren und Anlagen, deren Lebensdauer Jahrzehnte umfasst, sind die Prozessindustrien fast schon sprichwörtlich konservativ, wenn es um die Einführung neuer Technologien geht. Doch das Prozessdesign entwickelt sich weiter, unter anderem aufgrund von Faktoren wie:

- Verbesserte Unit Operations (Prozessintensivierung) und Katalysatoren
- Neue Design-Methoden (Computersimulation und vernetzte Komponenten)
- Neue Methoden der Mess- und Regeltechnik
- Einschränkungen bei der Versorgung mit Rohstoffen und Medien wie Energie und Kühlwasser
- Druck auf Sicherheits- und Umweltparameter, einschließlich des Trends zu bio-basierten Rohstoffen
- Druck aus dem wirtschaftlichen und regulatorischen Umfeld (zum Beispiel die Notwendigkeit, Markteinführungen zu beschleunigen)

Die Aussteller der ACHEMA 2015 decken ein weites Spektrum an Kompetenzen für die Prozessentwicklung ab. Unter ihnen sind Technologie-Lizenzgeber, Anlagenplaner und -bauer, Spezialisten für Simulation und Prozesskontrolle, Hersteller von Komponenten und die Chemikalienhersteller.

Unit Operations und Fortschritte in der Chemie

Unit Operations wie chemische Reaktionen, Mischen, Flüssig-Flüssig-Extraktion, Filtration oder Trocknen bilden das Herz jedes herkömmlichen chemischen Prozesses. Veränderungen bei diesen grundlegenden Schritten haben gewöhnlich die stärksten Auswirkungen auf die Prozessentwicklung.

Batchreaktoren sind flexibel und erleichtern die Rückverfolgbarkeit von Produkten, deshalb werden sie bevorzugt für Feinchemikalien und Pharmazeutika eingesetzt. Kontinuierliche Reaktoren sind dagegen kosteneffizienter, leichter hochzuskalieren und oft sicherer. Aktuelle Berichte über kontinuierliche Prozesse bei der Herstellung von aromatischen Aminen in der pharmazeutischen Industrie oder von Zwischenstufen für die Produktion des Herbizids Glyphosat belegen, dass die Entscheidung zwischen Batch- oder kontinuierlichen Verfahren nach wie vor nicht immer eindeutig ist.

Katalysatoren sind ein wesentlicher Teil vieler industrieller Prozesse und ein Bereich, der sich dank verbesserter Computersimulationen und automatisierter Screening-Technik rasch weiterentwickelt. Ein selektiverer Katalysator kann die Ausbeute erhöhen und Trennschritte einsparen. Neue Katalysatoren eröffnen den Zugang zu neuen Produkten. Die Jowat AG (Detmold, Deutschland) beispielsweise setzt einen Prozess ein, der bei Novomer Inc (Waltham, MA, USA) entwickelt wurde, um Polypropylencarbonat (PPC)-Polyol herzustellen. Dieser „grüne“ Kunststoff kann aus Kohlendioxid aus industriellen Abgasen produziert werden. Der Novomer-Prozess basiert auf einem geschützten Kobalt-Katalysator.

Der Begriff "Prozessintensivierung" umfasst Technologien, um den ökologischen Fußabdruck einer Anlage zu verringern oder den Energieverbrauch zu senken, indem Verfahrensschritte kombiniert oder Triebkräfte erhöht werden. Ein Beispiel ist die Reaktivdestillation (s.u.), die die Komplexität einer Anlage dadurch verringern kann, dass Reaktion und Trennung in derselben Säule ablaufen.

Anlagen, die Mischen, thermische Umsetzung und Abdampfung viskoser Produkte kombinieren, sind ein Spezialgebiet der deutschsprachigen Länder, und verschiedene Hersteller werden diese Technologie auf der ACHEMA vorstellen. Indem mehrere separate Komponenten durch eine einzige ersetzt werden und der Einsatz von Lösungsmitteln reduziert oder ganz vermieden wird, können einfachere, wirtschaftlichere Prozesse gleichzeitig bessere Produktqualitäten liefern.

Noch einen Schritt weiter geht die "reagenzlose Synthese", die nicht nur auf Lösungsmittel verzichtet, sondern auch auf Chemikalien für die Umsetzung. Stattdessen werden die Reaktionen durch Elektrizität, Licht oder Ultraschall getrieben.

In komplexen Anlagen ist die Wärmerückgewinnung der Schlüssel für eine hohe Energieeffizienz. Dasselbe gilt für Wasser - mit Blick auf die Auswirkungen auf die Umwelt, besonders in wasserarmen Regionen. Es ist allerdings nicht immer einfach zu entscheiden, wie dies am besten umzusetzen ist. Mit dem Pinch-Designansatz lassen sich die Wiedergewinnungsraten erheblich steigern, indem der Bedarf an Wärme und Wasser an die vorhandenen Quellen angepasst wird.

Charakterisierung, Simulation, Mess- und Regeltechnik

Upscaling ist die größte ingenieurtechnische Herausforderung bei der Entwicklung neuer Prozesse. Ein einfaches Beispiel: bei einer exothermen Reaktion wie einer Nitrierung steigt die Wärmemenge, die abgeführt werden muss, beim Übergang von 100 g im Labor zu 1 t in der Fabrik um den Faktor 10.000. Doch die verfügbare Oberfläche vergrößert sich nur um das Fünfhundertfache. Die Wärmeübertragung muss also 20 Mal so effektiv sein wie im Labor.

Ausgangspunkt für das Scale-Up ist ein tiefgehendes Verständnis der physikalischen und chemischen Eigenschaften der Ausgangsstoffe, der Produkte und aller Zwischen- und Nebenprodukte. Die Reaktionskalorimetrie und die Messung der physikalischen Eigenschaften von Pulvern sind Beispiele für Charakterisierungsmethoden, die in der letzten Zeit Fortschritte gemacht haben.

Es wird aber immer ein Wunschtraum bleiben, alle relevanten Eigenschaften im Labor zu vermessen. Daten aus Pilotanlagen und bestehenden Produktionsanlagen sind deshalb unverzichtbar, und auch hier helfen neue Technologien weiter. Moderne Systeme für die Prozesskontrolle und drahtlose Netzwerke können Prozessdaten auch aus schwer zugänglichen Bereichen übermitteln. Methoden wie die Tomografie, akustische Analyse und Online-Spektrometer und Massenspektrometer (zusammengefasst unter dem Begriff „Prozessanalytik“ (PAT)) machen sichtbar, was wirklich in Stahlrohren und Kesseln vor sich geht.

Natürlich müssen Ingenieure sich auch genau mit den großskaligen Apparaten und Anlagen auskennen, die sie einsetzen wollen. Mathematische Modelle sind dabei hilfreich, sei es in Gestalt der traditionellen Prozesssimulation (sowohl statisch wie dynamisch), Computational Fluid Dynamics (CFD) oder der neueren „Multiskalen“- oder „Multi-physikalischen“ Modellierungsmethoden.

Verbesserte Modellierung schlägt sich auch in besserer Prozesskontrolle nieder. Auf dem Process Development Symposium 2014 des American Institute of Chemical Engineers (AIChE) erläuterte Professor Jürgen Hahn vom Rensselaer Polytechnic Institute (Troy, NY, USA), wie dank moderner Kontrollmethoden die Reaktivdestillation von einer akademischen Kuriosität zur Technologie für den industriellen Einsatz wird. Demzufolge ist die Reaktivdestillation eine vielversprechende Methode zur Entfernung des Benzols aus dem Raffinat in Raffinerien – aber die enge Verknüpfung von Reaktion und Massentransfer führt zu einer komplexen Dynamik, die bisher schwer zu beschreiben und zu kontrollieren war. Dynamische Simulationsmethoden wie die gPROMS-Modellierungsumgebung von Process Systems Enterprise (London, UK) erleichtern diese Aufgabe enorm.

Die anhaltende Bedeutung von Pilotanlagen

Wie sorgfältig auch immer ein Stoff im Labor charakterisiert wurde, im großen Maßstab zeigen sich neue und manchmal gefährliche Eigenschaften. Gründe dafür sind Verunreinigungen, Korrosion, Fouling und Unterschiede bei Fließ-, Mischungs- und Wärmeübertragungsmustern.

Die Prozessentwicklung schließt deshalb traditionell ein "Pilotstadium" zwischen Labor und industrieller Anlage ein. Pilotanlagen können im Maßstab von wenigen Kilogramm bis einigen Tonnen reichen, je nach Produkt. Auch wenn durch Verbesserungen bei der Modellierung das Pilotstadium in kleinerem

Maßstab umgesetzt oder ganz ausgelassen werden kann, werden Pilotanlagen auf absehbare Zeit wichtig bleiben.

Die Motive für den Einsatz von Pilotanlagen können unterschiedlich sein: Zum einen geht es darum zu zeigen, dass ein neuer Prozess überhaupt umsetzbar ist, zum zweiten werden Daten für das Scale-Up gewonnen, und drittens werden ausreichende Produktmengen hergestellt, um das Interesse potenzieller Kunden zu gewinnen. In der dreijährigen Studie wurden 30 nordamerikanische Unternehmen der chemischen und pharmazeutischen sowie der Öl- und Gasindustrie befragt. Einige Firmen gaben an, alle neuen Prozesse zu pilotieren. Andere wählten die Prozesse anhand des Scale-Up-Risikos aus, dass durch individuelle Einschätzungen, systematische Auswertungen oder „Stage Gate“-Technik, bei der Forschungsideen einer Serie formalisierter Überprüfungen unterzogen werden. Unit Operations wie die Flüssig-Flüssig-Extraktion oder das Mischen von Flüssigkeiten sind nach Aussage der Teilnehmer nach wie vor schwierig zu modellieren, und so bleibt die Pilotanlage ein wichtiger Datenlieferant für das Scale-Up.

Das Streben nach Nachhaltigkeit

Viele der diskutierten Design-Methoden verbessern die Umweltverträglichkeit von Anlagen, in dem sie Abfall vermindern, Prozesskomplexität reduzieren oder im Fall neuer Katalysatoren niedrigere Reaktions Temperaturen möglich machen.

Zusätzlich fördert das Bestreben, eine biobasierte chemische Industrie zu etablieren, die Entwicklung zahlreicher neuer Prozesse. Eines von vielen Beispielen: Laut einer aktuellen Ankündigung wird Bayer Material Science AG (Leverkusen, Deutschland) zukünftig Penta-methylen-diisocyanat, ein neuartiges Vernetzungsmittel für Lacke und Klebstoffe, herstellen, dessen Kohlenstoff zu 70 % aus Biomasse stammt. Die Produktion soll 2016 bis zu 20.000 Jahrestonnen umfassen. Die Möglichkeit Ethanol aus cellulosehaltigen Reststoffen statt aus Nahrungspflanzen zu gewinnen, hängt entscheidend von der Entwicklung neuer Enzyme und anderer Aufschlussmethoden ab, um das holzige Material aufzuschließen.

Der Wunsch, negative Umweltfolgen zu mindern und die Notwendigkeit, in trockenen Regionen aktiv zu werden – verschärft durch die Perspektive des Klimawandels – fördert die Entwicklung von "Zero-Liquid-Discharge" (ZLD)-Anlagen. Luftgekühlte Wärmetauscher und membranbasierte Abwasseraufbereitung sind Beispiele für Technologien, die die Grundlage für ZLD-Anlagen bilden.

Umweltaspekte sind auch ausschlaggebend für die zunehmende Nutzung strukturierter Software-Werkzeuge in Verbindung mit den "weichen" Management-Fähigkeiten, die man braucht, um die Beiträge von Chemikern, Biomedizinern, Verfahreningenieuren und anderen unterschiedlichen Kulturen zusammenzuführen, die gemeinsam an der Entwicklung neuer Prozesse arbeiten. Shaibal Roy von DuPont, USA, hat beim Process

Development Symposium der AIChE darauf hingewiesen, dass Nachhaltigkeit inzwischen zusammen mit technischer Machbarkeit und Wirtschaftlichkeit ein wesentliches Kriterium für neue Prozesse darstellt. Auf der AICHEMA werden alle drei Aspekte diskutiert – denn für eine erfolgreiche Prozessindustrie kann auf keines von ihnen verzichtet werden.