



Industrieprozesse erfordern genaue Kontrolle – andernfalls wird nicht das Produkt, sondern Sondermüll produziert.

Big Brother in der CHEMIE

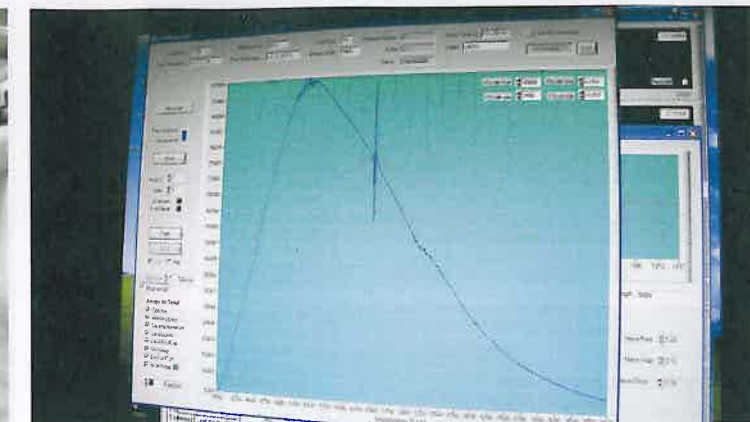
Die Überwachung chemischer Prozesse ist alles andere als trivial. Im K-Projekt PAC haben sich Forscher und Unternehmen zusammengeschlossen, um innovative Methoden der PROZESSANALYTIK zu entwickeln.

TEXT: REINHARD KLEINDL

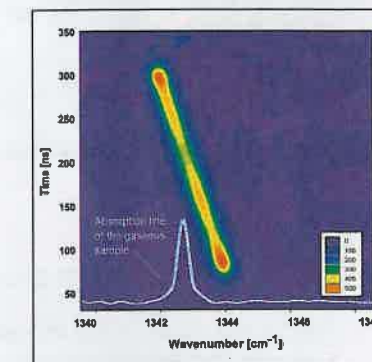
Nein, es geht nicht um das Internet: Wenn Wolfgang Märzinger von „Online-Überwachung“ spricht, dann meint er neue Strategien der Prozessanalytik in der chemischen Industrie. Konkret: Die Überwachung von laufenden Prozessen in Echtzeit. Das ist das zentrale Thema des kürzlich gestarteten K-Projekts PAC (Process Analytical Chemistry). Ein typisches Beispiel könnte ein Kessel mit mehreren Hektolitern Flüssigkeit sein, in denen eine chemische Reaktion abläuft. Um sicherzugehen, dass alles nach Plan läuft, müssen Proben genommen werden. Bisher geschieht das meist händisch, die Proben werden in ein Labor gebracht, in der Regel außerhalb des Unternehmens, wo sie von Chemikern analysiert werden. Das hat Tradition und funktioniert meist ausreichend gut. Allerdings: „Es ist nicht immer problemlos möglich“, erklärt Märzinger, der am „Research Center for Non Destructive Testing“ (RECENDT) forscht. Manche Prozesse arbeiten mit giftigen Substanzen oder unter hohem Druck. Die Substanzen sind zum Teil krebserregend, andere wiederum so giftig, dass allein der Haut-

kontakt tödlich sein kann. „Die Arbeiter tragen Anzüge wie Astronauten, wenn sie solche Proben nehmen.“ Dennoch bleibt ein Unfallrisiko. Sicherheitsprobleme sind aber nur ein Aspekt. Das Nehmen von Proben und ihre Auswertung brauchen zudem Zeit, was Unsicherheiten mit sich bringt. Manche Prozesse laufen wie am Fließband ab, zum Beispiel Reaktionen in Mikroreaktoren, wo kontinuierlich Ausgangsstoffe zufließen und das Produkt abfließt. Nach dem Ziehen einer Probe dauert es im besten Fall eine halbe Stunde, oft aber auch viel länger, bis aus dem Labor ein Ergebnis bekannt ist. „Dazwischen vertraut man darauf, dass alles passt“, erklärt Märzinger.

Prozesse im Blindflug. Diese Zeiten können auch deutlich länger sein, wenn das Labor nicht besetzt ist. „Früher gab es in Krems ein Labor, das 24 Stunden täglich, sieben Tage die Woche besetzt war. Heute arbeiten viele Prozesse von Freitag bis Montag im Blindflug“, so Märzinger. Wenn in dieser Zeit etwas schiefgeht, kann es durchaus passieren, dass die Anlage Sondermüll produziert. Es wäre viel angenehmer, alle relevanten Werte in Echtzeit direkt



Die Echtzeiterfassung von Messwerten ermöglicht eine exakte Steuerung von chemischen Prozessen.



Klassische Laboranalytik funktioniert gut, sie ist aber vergleichsweise langsam.

Spektroskopische Methoden erlauben eine berührungslose Analyse von Substanzen und Stoffgemischen.

auf einem Display an der Maschine abzulesen. Genau das zu realisieren ist das Ziel der Partner des Forschungsnetzwerks. Diese Aufgabe ist nicht trivial: Es gilt, komplexe Labormethoden zu ersetzen. Ein Labor braucht nicht nur Messgeräte, sondern auch jemanden, der die Ergebnisse interpretiert. Für automatisierte Messungen kommen Spektrometer infrage: Mit Licht bestrahlt, hinterlassen chemische Substanzen einen charakteristischen „Fingerabdruck“, weil sie bestimmte Farben besser absorbieren als andere. Es bilden sich „Absorptionsspektren“. Für die chemische Industrie ist der Bereich des nahen Infrarotlichts besonders interessant, also Wärmestrahlung in der Nähe des sichtbaren Lichts. Sonden, die solche Spektren aufzeichnen, gibt es zu kaufen, die-

se Technologie ist bereits verfügbar. Ein Computer soll die Muster identifizieren und Informationen über die Zusammensetzung liefern. In der Praxis sind die Ergebnisse aber nicht immer eindeutig: Bei Gemischen von verschiedenen Flüssigkeiten überlagern sich auch die typischen Absorptionsspektren. Außerdem gibt es immer wieder Ungenauigkeiten. Es braucht eine intelligente Software, um daraus die relevanten Informationen herauszufiltern und richtig zu interpretieren. „Dafür wird die Software trainiert“, erklärt Thomas Natschläger vom Software Competence Center Hagenberg (SCCH). Während die Sonde erste Daten sammelt, werden weiterhin händisch Proben genommen und im Labor analysiert. So können die Spektren mit den Labordaten verglichen

werden, ein Modell wird erstellt und in die Software implementiert. Im Rahmen des PAC-Projekts will man über diese gebräuchliche Vorgangsweise hinausgehen. „Es wäre oft interessant zu wissen, wie verlässlich die Ergebnisse der Messungen sind“, so Natschläger. Die Forscher arbeiten daran, Mechanismen zur Selbstdiagnose zu entwickeln, womit die Software selbst die Plausibilität der Ergebnisse abschätzen und rückmelden kann. Ein anderer interessanter Fall tritt auf, wenn die Sonde kaputtgeht und ausgetauscht werden muss. Beim oben beschriebenen Prozess des Kalibrierens der Software müssen bis zu 20 Proben genommen und analysiert werden, was für jede einzelne Probe mehrere hundert Euro kosten kann. Die Analyse ist damit aber sehr »

ZUM K-PROJEKT

DAS K-PROJEKT PAC (Process Analytical Chemistry) wurde Anfang Februar offiziell im Rahmen des Kompetenzzentrenprogramms Comet gestartet. Hauptsitz des auf vier Jahre angelegten Projekts ist Linz, es gibt zudem Niederlassungen in Lenzing und in Wien. Geleitet wird das K-Projekt vom oberösterreichischen Forschungsunternehmen RECENDT. Das Budget liegt bei rund 4,9 Millionen Euro (von Bund, Land OÖ und den Firmenpartnern).

UNTER DEN VIELEN PARTNERN findet sich das „Who's who“ der österreichischen Chemieindustrie – von OMV und Borealis über Lenzing und Dynea bis hin zu Brau Union und Salinen Austria. Bei den wissenschaftlichen Partnern sind neben in- und ausländischen Universitäten auch die beiden Comet-Zentren SCCH (Hagenberg) und Wood Comet beteiligt.

FOTOS: DYNEA AUSTRIA (2), TMG, TU WIEN, RECENDT



„Die Methoden sollen stabil, sicher und schnell sein.“

ROBERT HOLZER, RECENDT, KONSORTIALFÜHRER VON PAC



Viele verschiedene Parameter müssen erfasst werden – das geht nur mit ausgefeilten Softwarepaketen.

» genau auf die verwendete Sonde abgestimmt. Im schlimmsten Fall muss mit dem Wechseln der Sonde die ganze Kalibrierung wiederholt werden. Es wäre wünschenswert, dieselbe Modellgüte mit weniger Aufwand zu erreichen. Man spricht von „Transfer-Learning“.

Eine besondere Herausforderung für die Forscher sind nichtlineare Effekte. Bisher arbeitet man mit linearen Modellen. Das bedeutet, dass Gemische verschiedener Stoffe so behandelt werden, als wären sie unabhängig voneinander und das Spektrum einfach eine Überlagerung der Spektren für die einzelnen Stoffe. Das ist aber nicht immer der Fall. Auch wenn man mehr erfahren will als nur die Mengen der Stoffe, kommen die linearen Modelle an ihre Grenzen. Die Forscher arbeiteten an der Entwicklung von Methoden, die über den linearen Bereich hinausgehen.

Unterschiedlichste Unternehmen sind interessiert an den Anwendungsmöglichkeiten und haben sich als Partner dem PAC-Projekt angeschlossen, darunter mehrere Unternehmen aus Krems. Dynea etwa, ein weltweit agierendes Unternehmen mit Niederlassung in Krems, stellt verschiedenste Arten von Klebstoffen und Beschichtungen her, unter anderem Harze.

Die Prozesse bei der Herstellung von Harzen sind besonders sensibel. Die Schwierigkeit dabei ist, dass der Pro-

zess genau zum richtigen Zeitpunkt gestoppt werden muss, um die optimale Qualität zu erreichen. Stellt man zu spät ab, entstehen schädliche Nebenprodukte – es gibt also wenig Spielraum. In der Praxis bedeutet dies, dass alle 15 Minuten händisch eine Probe entnommen werden muss. Man arbeitet an einer automatisierten Lösung.

Ein weiteres Partnerunternehmen ist Krems Chemie Chemical Services. Hier hat man es mit Feinchemikalien zu tun: etwa Flammenschutzmittel als Additive für Kunststoffe. Diese sind giftig – hier ist Sicherheit ein Thema. Borealis ist Weltmarktführer bei der Herstellung von Kunststoff mit bestimmten Härteeigenschaften. In einem „Extruder“, einer Maschine, die wie ein Fleischwolf anmutet, werden Chemikalien gemischt, durch eine Lochscheibe gepresst und mit einem Messer zerkleinert. So entsteht Kunststoffgranulat. Normalerweise werden die Ausgangsstoffe im Extruder nur mechanisch gemischt.

Die Produzenten wollen ständig **Informationen** über die Prozesse.



Bei der Kunstharzherstellung ist der genaue Zeitpunkt entscheidend, wann die chemische Reaktion gestoppt wird.

In diesem Fall läuft im Inneren aber zudem eine chemische Reaktion ab, die dem Kunststoff besondere Festigkeitseigenschaften verleiht. Dieser ungewöhnliche Prozess soll in der Maschine überwacht werden. Beim Linzer Unternehmen Nufarm stellt man Pflanzenschutzmittel her. Dass hier Sicherheitsfragen auftauchen, überrascht nicht: Die Chlorphenole, mit denen gearbeitet wird, sind hochgiftig, was die Probenahme schwierig macht. Automatisierte Messmethoden sollen Abhilfe schaffen.

Reinheit von Gasen. Die OMV interessiert sich für Möglichkeiten, die Reinheit von Gasen zu messen. Man erzeugt hochreine Gase und will geringste Verunreinigungen sofort feststellen. Wissenschaftlicher Partner ist dabei die TU Wien. Bei der Lenzing AG stellt man Viskosefasern her. Diese bestehen aus Zellulose, deren Faserstruktur erst aufgelöst wird, um daraus neue, synthetische Fasern zu erzeugen. Lenzing will den Herstellungsprozess an verschiedenen Stellen überwachen, um die ganze Fertigungskette nach Optimierungsmöglichkeiten zu scannen. Das Holzkompentenzentrum Wood ist hier stark beteiligt.

Die Brau Union hat ebenfalls mit (bio-)chemischen Aufgabenstellungen zu tun und will die Qualität von Bier überwachen. Man sucht nach einer neuen Labormethode, um

die Bitterkeit zu messen. Der Mensch erweist sich hier als Feinschmecker: Der bittere Geschmack von Bier hängt von einigen sehr niedrig konzentrierten Stoffen ab, deren Analyse sehr teuer ist. Im Unterschied zu anderen Teilprojekten geht es hier nicht um Online-Analyse – man wünscht sich, mittels Infrarotspektroskopie erst einmal neue Methoden fürs Labor zu bekommen.

„Die Unternehmen wünschen sich Methoden, die stabil, sicher und schnell sind“, sagt Robert Holzer vom Konsortialführer RECENDI, Projektleiter des PAC-Projekts. „Trotz verschiedenster Anwendungen gibt es einen großen gemeinsamen Nenner: Die Auswertung ist überall ähnlich.“ Es läuft also darauf hinaus, die Chemiker in den Labors zu unterstützen, aber in manchen Fällen sogar zu ersetzen. Ist das nicht auch fragwürdig? „Hier besteht tatsächlich Konfliktpotenzial“, gibt Märzinger zu und erzählt von Laborleitern, die den Einsatz automatisierter Methoden bekämpft hätten. Er weist aber auf die Sicherheits- und Qualitätsprobleme hin. „Außerdem darf man die Standortproblematik nicht außer Acht lassen: Wir in Europa müssen höchste Qualität produzieren, um uns weltweit behaupten zu können. Dafür müssen wir Energie- und Rohstoffeffizienz und den Umweltschutz verstärkt berücksichtigen.“ Und dafür sei die Online-Prozessanalytik notwendig. ■