

Jerzy BAŁDYGA

e-mail: j.baldyga@ichip.pw.edu.pl

Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej, Politechnika Warszawska, Warszawa

Inżynieria produktu a inżynieria chemiczna

Wstęp

Niniejsza praca dotyczy obecnych i przyszłych wyzwań, jakie inżynierii chemicznej i procesowej stawia zasadniczy cel, któremu dyscyplina ta jest poświęcona, czyli wytwarzanie produktów przemysłu chemicznego, czy szerzej produktów całego szeregu przemysłów przetwórczych. Zauważmy, że orientacja na produkt nie jest dla nas, inżynierów chemików i inżynierów procesowych, niczym nowym. Powszechnie zaakceptowana definicja inżynierii chemicznej i procesowej mówi, że jest to nauka techniczna, która wykorzystuje podstawy matematyki, fizyki, biologii i chemii do opisu i realizacji procesów, w których materia ulega przemianom fizykochemicznym, prowadzącym do jej pożądanej formy, czyli produktu. W ramach tej dyscypliny bada się podstawy teoretyczne procesów przemiany materii i opisuje się tworząc tzw. modele matematyczne. Modele takie, po weryfikacji eksperymentalnej, wykorzystuje się do projektowania urządzeń i przewidywania przebiegu procesów przetwórczych, sterowania procesami, bezpiecznego ich prowadzenia itp. Jak widać, w centrum zainteresowania jest tu proces.

Poważne zmiany jakie zaszły w przemyśle chemicznym i przemysłach pokrewnych w ciągu ostatnich kilkunastu lat doprowadziły do wykształcenia się nowej dyscypliny naukowej, inżynierii produktu, która obejmuje projektowanie produktu (*product design*) i jego wytwarzanie (*product manufacturing*). Zmiany, które do tego doprowadziły miały zarówno kontekst naukowy, jak też przemysłowy i społeczny. Do niedawna przemysł chemiczny był zdominowany przez wytwórców takich produktów masowych, jak benzen, amoniak, nawozy sztuczne czy polietylen. W ostatnich trzydziestu latach nastąpiły gwałtowne zmiany; zmiany te, wymuszone wysyceniem się rynku, rozpoczęły się od konsolidacji i restrukturyzacji firm w latach osiemdziesiątych ubiegłego wieku. Optymalizowano wtedy przy użyciu technik komputerowych zarówno metody projektowania procesowego, jak też strukturę zatrudnienia. Spowodowało to kilkuletnie zawirowania na rynku pracy i związane z tym obniżenie zainteresowania studiami technicznymi, jednak problem nie został rozwiązany i powrócił po kilku latach. W rezultacie firmy podjęły trzy rodzaje działań: (i) odejście od przemysłu chemicznego, (ii) skoncentrowanie się na półproduktach i produktach masowych przy zaniechaniu badań naukowych oraz (iii) skupienie się na wytwarzaniu produktów specjalnych o dużej wartości dodanej, takich jak farmaceutyki, kosmetyki, pigmenty, katalizatory czy materiały dla przemysłu elektronicznego, przy jednoczesnej intensyfikacji badań naukowych. Tę ostatnią opcję wykorzystwały najbardziej znaczące firmy i ona właśnie wyznacza obecnie kierunek rozwoju nowoczesnego przemysłu chemicznego. Spowodowało to również zmiany na rynku pracy i w kulturze korporacyjnej. Nie wywołało to zmniejszenia zainteresowania zatrudnianiem absolwentów kierunku inżynierii chemicznej i chemików, wymusiło jednak zmianę sposobu i miejsca ich zatrudnienia w firmach. Mianowicie szybko maleje liczba specjalistów zatrudnionych przy produkcji produktów masowych, rośnie zaś zatrudnienie w obszarze produktów specjalnych i w firmach konsultingowych; nie ma już specjalistów od jednego produktu, pojawiają się specjaliści od projektowania produktów. Specjalista inżynierii chemicznej nie może dla przykładu ograniczać swojej działalności do badania i wdrażania procesów i operacji jednostkowych, czy nawet ich integracji, a winien współpracować z jednej strony z jednostką badawczą, z drugiej ze specjalistami od marketingu, sprzedaży i produkcji. To właśnie wymusza zmiany w kulturze korporacyjnej, prowadząc do zaniku organizacji opartej na funkcjach, gdzie różne oddziały mają odmienną odpowiedzialność (działy marketingu, badawcze, inżynierii, produkcji i sprzedaży pełnią kolejną swoje funkcje), do bardziej elastycznej i szybciej działającej organizacji dla projektu, gdzie wymienione działy formują zespół zarządzający, obejmujący przedstawicieli wszystkich wymienio-

nych działów, który pozwala na jednoczesną aktywność tych działów w projekcie i kreuje efekty synergiczne. Odchodzi się też od strategii determinowanych przez posiadane technologie (*technology push*), zastępując ją strategią determinowaną przez rynek (*market pull*). Autorytet zarządzania, *Peter Drucker* [1] twierdzi, że „są tylko dwie ważne funkcje w biznesie: marketing i innowacyjność, a wszystko pozostałe to koszty”. Powyższe fakty prowadzą do koncepcji inżynierii produktu, czyli do zaprojektowania produktu oraz opracowania sposobu jego wytwarzania w odpowiednim procesie. Metody inżynierii chemicznej uzupełniane są w tym celu o metody i procedury inżynierii produktu, jednak nie są przez nie zastępowane. Wśród teoretyków zarządzania mówi się o koncepcji NPD (*New Product Design*), promującej strategię innowacyjności wśród menadżerów [2].

Projektowanie produktu chemicznego

Projektowanie produktu polega na takim projektowaniu procesu, aby zapewnić uzyskanie produktu o zadanej specyfikacji. *Cussler i Mogridge* [3] wyróżniają cztery etapy projektowania produktu: (i) należy rozpocząć od zdefiniowania potrzeb konsumenta, które produkt winien spełniać, (ii) zaproponować szereg metod umożliwiających spełnienie tych potrzeb, przede wszystkim zdefiniować właściwości wybranych produktów, które tę potrzebę spełniają, (iii) przeprowadzić selekcję pomysłów i produktów, i (iiii) w końcu określić jak można ten produkt wytworzyć w przemyśle. Inżynieria chemiczna i procesowa zajmuje się na pewno ostatnim etapem wymienionej sekwencji działań, polegającym na ścisłym zdefiniowaniu procesu i doborze odpowiedniej aparatury. Czyni się to często bazując na doświadczeniu i intuicji badacza i inżyniera. Etap drugi ma po części charakter heurystyczny, po części opiera się na ścisłej analizie poprzez jednoczesne korzystanie z nauk podstawowych i inżynierskich, zaś etap trzeci, etap selekcji, korzysta po części z metodologii optymalizacji procesów. Oba etapy, zależnie od specyfiki produktu, reprezentują problemy projektowania molekularnego i projektowania mieszanin.

Z procedurami projektowania i inżynierii produktu wiążą się swoiste im metody i język. Przez produkt chemiczny (też strukturalny o mikrostrukturalnych własnościach, agrochemiczny, biochemiczny, biomedyczny) rozumiemy tu bądź produkt, który jako taki ma pożądane cechy, lub dodatek, który poprawia lub generuje pożądane cechy; mamy tu rodzaj produktów nazywanych formulacjami (mieszanek, powłoki, dodatki...). Matematyczne postawienie problemu przedstawiam za pracą [4]; polega ono na zdefiniowaniu: zmiennych ciągłych \bar{x} (składy, przepływy, zmienne projektowe) i dyskretnych \bar{y} (identyfikatory procesów jednostkowych, składników itp.), funkcji celu F_{OBJ} , ograniczeń $h_i(\bar{x})$ opartych na równościach i $g_j(\bar{x})$ opartych na nierównościach. Ogólnie przybiera to postać zależności (1), (2) i (3) dla $i = 1, 2, 3 \dots$ oraz $j = 1, 2 \dots$

$$F_{OBJ} = \max [C^T \bar{y} + \bar{f}(\bar{x})] \quad (1)$$

$$h_i(\bar{x}) = 0 \quad (2)$$

$$l_j \leq g_j(\bar{x}) \leq u_j \quad (3)$$

gdzie $i = 1$ oznacza zbiór ograniczeń projektowych (np. dotyczących ciśnienia, zużycia energii na ogrzewanie), $i = 2$, równań modelowych (np. bilanse składników, masy, pędu, energii, populacji), $i = 3$ reguł mieszania, praw generacji struktur molekularnych, z kolei $j = 1$ oznacza ograniczenia w specyfikacji projektowania procesu, a $j = 2$ ograniczenia związane ze środowiskiem naturalnym (np. emisji). Ograniczone są też oczywiście zmienne \bar{x} i \bar{y} , zaś $\bar{f}(\bar{x})$ oznacza wektor funkcji celu, na ogół nieliniowych. Zależności te zawierają modele własności pro-

jektowanego produktu, czyli zależność interesujących nas własności od struktury i składu produktu. Wszystkie te zależności definiują zintegrowany problem projektowania procesu i produktu. Najczęściej spotykamy się z problemami cząstkowymi, np. dla zal. (1) razem z $i = 3$ i $j = 2$ mamy poszukiwanie optymalnych molekuł i/lub mieszanin, zależnie od postawienia problemu. Techniki rozwiązywania tego problemu bazują na metodach prób i błędów, programowania matematycznego i metodach hybrydowych; prowadzi to do metod wspieranego komputerowo projektowania produktu (*computer-aided product design CAPD*), gdzie wyróżnić można CAMD (*computer-aided molecular design*) i CAM^bD (*computer-aided mixture/blend design*).

W przypadku metody CAMD, mając wybrane bądź zadane bloki budulcowe molekuł i własności produktu, rozwiązuje się problem odwrotny (*reverse problem*) w stosunku do określania własności na podstawie struktury molekularnej, poszukując molekuł o odpowiedniej strukturze. Używa się metody udziałów grupowych [5], modelowania molekularnego [6], QSAR (*quantitative structure-activity relationship*) [7].

W przypadku metody CAM^bD, mając określony zestaw substancji i wymagania dotyczące własności produktu, należy wyznaczyć optymalną mieszaninę bądź mikrostrukturę produktu. Do ścisłego rozwiązania problemu potrzebne są modele własności produktu dla mieszanin i mikrostruktur. Dobre modele własności dostępne są jedynie dla nielicznych mieszanin (benzyny, oleje silnikowe) lub struktur (np. lokalizacja depozytów w układzie oddechowym w zależności od rozkładu rozmiarów i morfologii cząstek inhalowanego leku). W takich przypadkach wykorzystanie strategii rozwiązywania problemu odwrotnego jest możliwe i wskazane. Jednak w większości przypadków takich jak te, gdy własności dyspersji koloidalnych, emulsji, mikrostruktur wynikające z morfologii produktu i jego struktur molekularnych determinują cechy użytkowe produktu, modelami własności nie dysponujemy. W rezultacie, pełna procedura daje jednoznaczne rozwiązania jedynie w przypadku stosunkowo prostych procesów i niezbyt skomplikowanych wymagań odnośnie właściwości produktów, potwierdzają to również twórcy i propagatorzy metody CAM^bD [4].

Wykorzystanie metod inżynierii chemicznej do problemów inżynierii produktu

Metoda inżynierii chemicznej i procesowej pozwala na rozwiązywanie problemu produktu, poprzez efektywne połączenie elementów analizy odwrotnej i metod powiększania skali bazując w pierwszym etapie procedury na analizie stałych czasowych i przestrzennych procesu. Otrzymane w ten sposób parametry procesowe są weryfikowane i uściślane w drugim etapie procedury poprzez wykorzystanie metod modelowania matematycznego bazujących na bilansach masy, składników, pędu, energii i populacji, wykorzystując często w tym celu modele CFD uzupełnione dodatkowymi modelami zjawisk i procesów w postaci UDF (*user defined functions*) lub podobnie konstruowane prostsze modele hybrydowe.

Rozpocznijmy od prostego przykładu. Wiadomo, że wielu pożądanym reakcjom chemicznym towarzyszą niepożądane reakcje uboczne, które powodują powstawanie produktów niepożądanych, co powoduje niepotrzebne zużycie surowca oraz utrudnia wydzielenie produktu, jego oczyszczanie i formułowanie. Rozważmy układ 2 równoległych lub szeregowo-równoległych homogenicznych reakcji chemicznych rzędu drugiego, z których pierwsza jest pożądana i bardzo szybka, zatem kontrolowana przez mieszanie, druga zaś jest znacznie wolniejsza. Aby wpływ drugiej reakcji był pomijalny, jej szybkość musi być znacznie mniejsza od efektywnej szybkości reakcji pierwszej, czyli od szybkości mieszania. Oznacza to, że stałe czasowe mieszania winne być znacznie mniejsze od stałej czasowej drugiej reakcji, τ_{r2} ; definicje adekwatnych stałych czasowych można znaleźć w pracach [1, 8, 9]. Wymaga to intensyfikacji burzliwości i w konsekwencji eliminuje wpływ pewnych mechanizmów, dla przykładu efekt mieszania w obszarze lepkościowo-konwekcyjnym (stała τ_E) zanika kosztem mieszania bezwładnościowo-konwekcyjnego (stała τ_S), ponieważ $\tau_E/\tau_S \propto Re_L^{-1/2}$, gdzie $Re_L = u'L/\nu = 4k^2/(9\varepsilon v)$.

Wymagamy w rezultacie, aby $\tau_S \ll \tau_{r2}$ lub $L^{2/3}/\varepsilon^{1/3} \ll 1/(k_2 c_0)$.

Oznacza to, że należy minimalizować skalę wirów L (poprzez dobór skali procesu, geometrii reaktora...), zwiększać wydatek energetyczny, ε , obniżać stężenie substratów, c_0 . Jednak obniżenie c_0 obniża również stężenie produktu, a zgodnie z wykresem *Sherwooda* mamy *cena sprzedaży = const/(stężenie po reakcji)*, co oznacza, że koszt zateżnienia produktu może znacznie przeważać nad kosztami separacji zanieczyszczeń i warto kompensować efekty wzrostu stężenia, zwiększonym wydatkiem energetycznym i doбором geometrii układu. Po tej wstępnej analizie prowadzi się modelowanie przy użyciu modeli CFD, a następnie weryfikuje wyniki symulacji prowadząc badania eksperymentalne, patrz dla przykładu [1, 8]. Po walidacji, modele te mogą być stosowane do projektowania i powiększania skali procesów. Podobne procedury zastosowano do reakcji złożonych, prowadzonych w układach dwufazowych ciecz-ciecz [10].

Innymi układami wielofazowym, dla których stosowano proponowaną procedurę, są układy, w których produkt jest wytrącany, aby wytworzyć proszki lub zawiesiny o ściśle określonych właściwościach. Wykorzystuje się w tym celu mieszanie roztworu substratu z plynami w stanie nadkrytycznym. Dla przykładu, jeśli chcemy wprowadzać lek do płuc, to poza wymaganiami związanymi z morfologią i strukturą krystalograficzną rozmiary cząstek winny być równe ok. 2 μm przy małym rozrzucie rozmiarów, o czym mówi analiza odwrotna. Inne rozmiary będą przydatne do depozycji w oskrzelach. Dalszy krok inżynierii i analizy odwrotnej, to zaprojektowanie profilu przesylenia, który zapewni wytrącanie pożądanego cząstek, zaś w kolejnym kroku należy określić warunki przepływu, mieszania i reakcji chemicznej bądź wysalania, które taki profil zapewnią. Analiza stałych czasowych pozwala zidentyfikować zasadnicze parametry, na które proces jest czuły i oszacować ich wartości, patrz [9, 11] i cytowane tam prace. Dalsze kroki to modelowanie CFD i weryfikacja doświadczalna modeli, co umożliwi efektywne zaprojektowanie procesu zapewniającego pożądaną produkt.

Jako przykład powiększania skali rozważa się wspomniany wyżej proces wytrącania cząstek leku do inhalacji. W oparciu o stałe czasowe mieszania, nukleacji i wzrostu kryształów określono kryteria podobieństwa, po czym zweryfikowano ich stosowalność prowadząc doświadczenia w trzech skalach: laboratoryjnej, pilotowej i małej skali produkcyjnej oraz symulacje numeryczne CFD [9].

Przykładem optymalizacji doboru aparatury do procesu są rozważania nad sposobami dyspersji aglomeratów zbudowanych z nanocząstek, bazując na porównaniu wydatków energetycznych na deaglomerację [12].

Wnioski

Wykazano, że metodologia inżynierii chemicznej i procesowej jest kluczowa dla efektywnego projektowania produktu. Inżynieria produktu korzysta z osiągnięć inżynierii chemicznej, a rozwój nowych koncepcji i metod w obszarach związanych z produktem jest ściśle związany, a często uwarunkowany, rozwojem inżynierii chemicznej.

LITERATURA

- [1] P. F. Drucker: *Innovation and Entrepreneurship Practices and Principles*, Harper & Row, New York, 1985.
- [2] C. Tomkovic, Christopher Miller: *J. Prod. Innov. Manag.* **17**, 413 (2000).
- [3] E.L. Cussler, G.D. Moggridge: *Chemical product design*. Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [4] R. Gani: *Computers and Chemical Engineering* **28**, 2441 (2004).
- [5] K.V. Camrada, C.D. Maranas: *Ind. Eng. Chem. Res.* **38**, 1884 (1999).
- [6] D. Livingstone: *Data Analysis for Chemists: Application to QSAR and Chemical Product Design*, Oxford University Press, Oxford, UK, 1995.
- [7] W. Sippl, J.M. Conteras, I. Parrot, Y.M. Rival, C.G. Wermuth: *Journal of Computer-Aided Molecular Design* **15**, 516 (2001).
- [8] J. Baldyga: *Chemical and Process Engineering* **29**, 777 (2008).
- [9] J. Baldyga, R. Czarnocki, B. Yu. Shekunov, K.B. Smith: *Chem. Eng. Res. Des.* **88**, 331 (2010).
- [10] J. Baldyga: 19th International Congress of Chemical and Process Engineering, CHISA 2010, papers 963, 1771.
- [11] J. Baldyga, D. Kubicki, B. Yu. Shekunov, K.B. Smith: *Chem. Eng. Res. Des.* doi:10.1016/j.cherd.2010.02.016
- [12] J. Baldyga, W. Orciuch, L. Makowski, M. Malski-Brodzicki, K. Malik: *Chem. Eng. Proc.* **46**, 851 (2007).