

# Trends und zukünftiger Bedarf in der Computer-unterstützten Verfahrensentwicklung

Dr. Norbert Asprion  
BASF SE

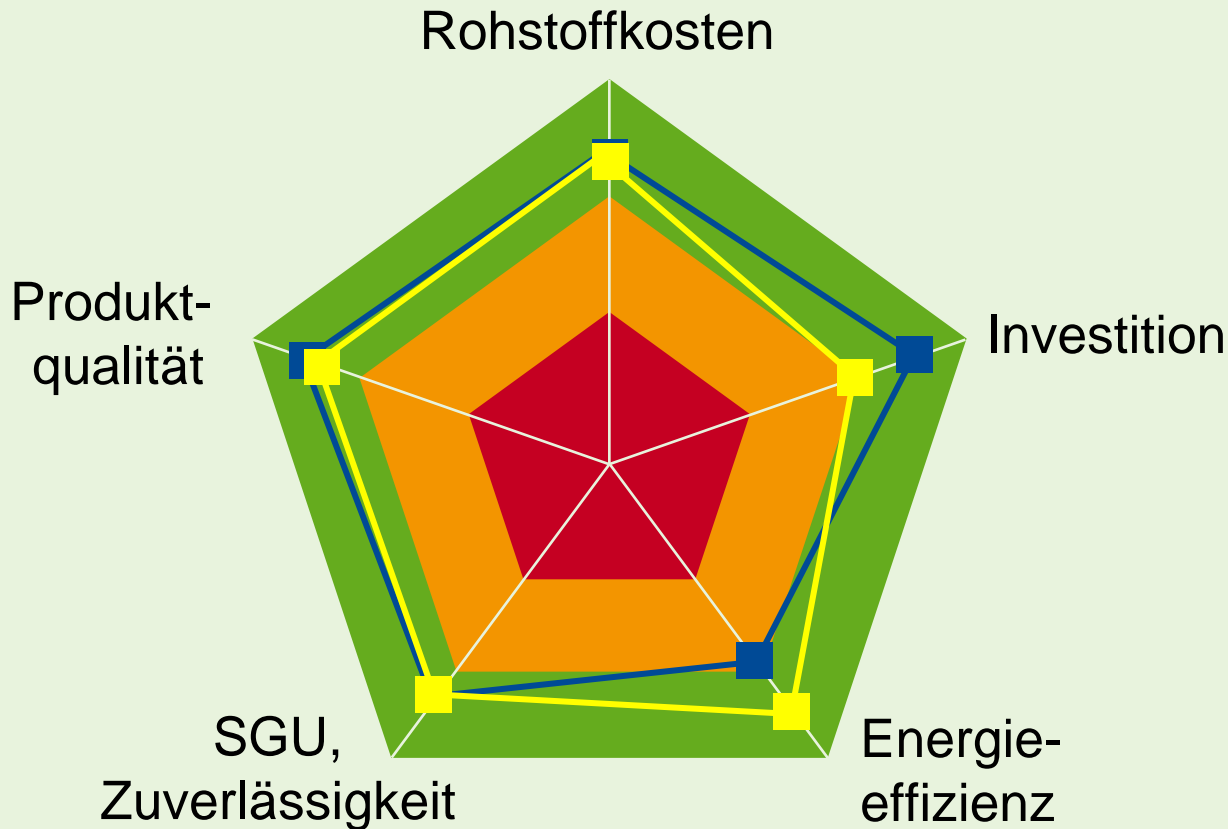
Aachen, 25.03.2010

 **BASF**

The Chemical Company

# Verfahrensentwicklung in der chemischen Industrie

## Eine multikriterielle Optimierung



### Parameter:

- Rohstoffquelle, Hilfsenergien
- Prozess Konfiguration
- Betriebsparameter
- Apparate
- ...

Zeitabhängig:  
Rohstoff-, Energie- und Apparatekosten, Wissen

# Verschiedene Ansätze für verschiedene Projekttypen

## Neuer Prozess

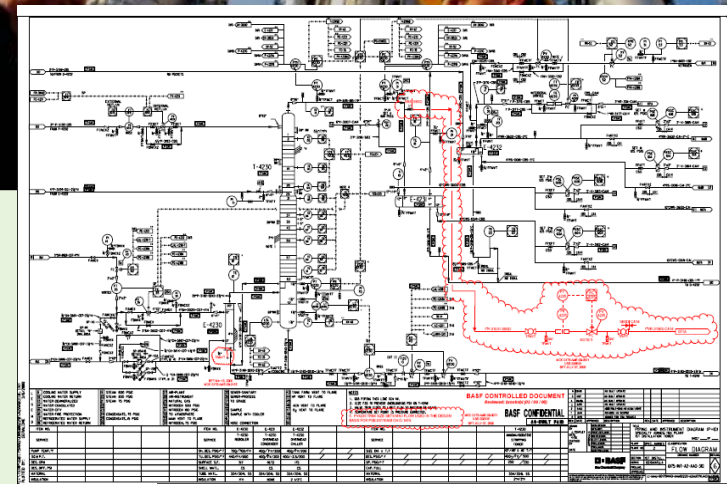
*Konzept 3*

*Konzept 2*

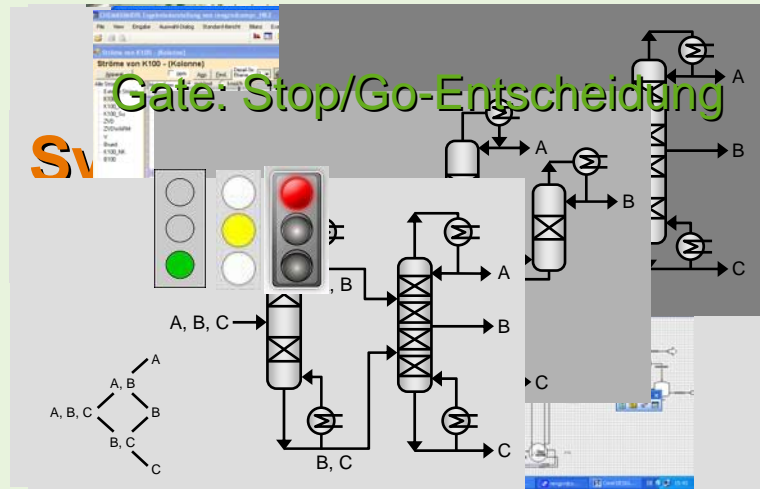
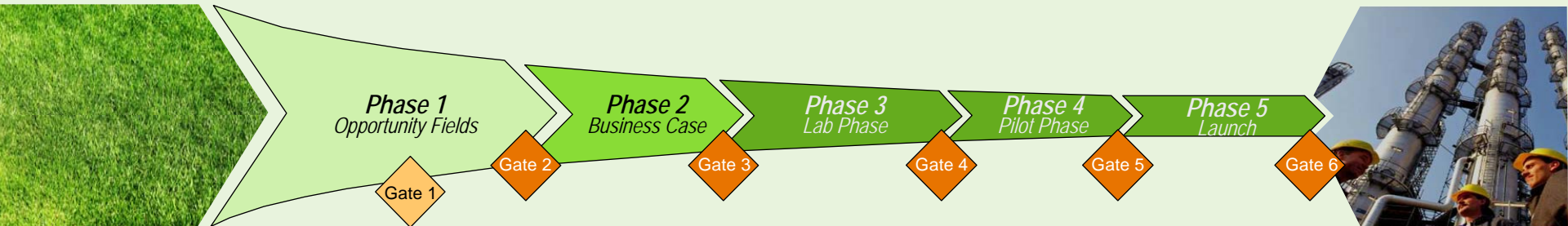
*Konzept 1*



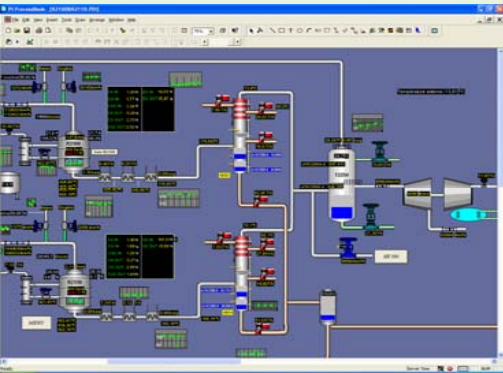
## Existierende Anlage (verbessern, erweitern)



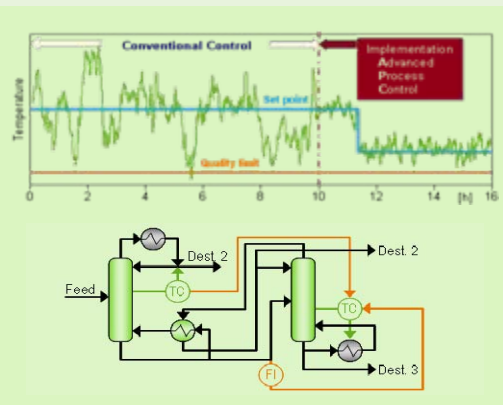
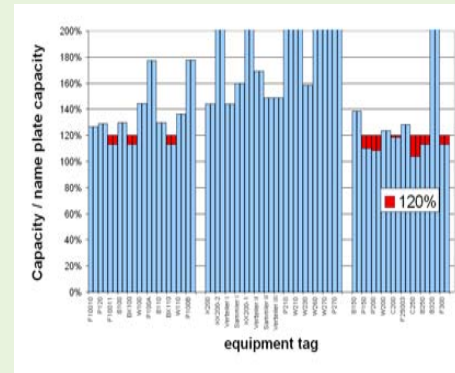
# Neue BASF Verfahrensentwicklungen erfolgen nach Phasen gestuft



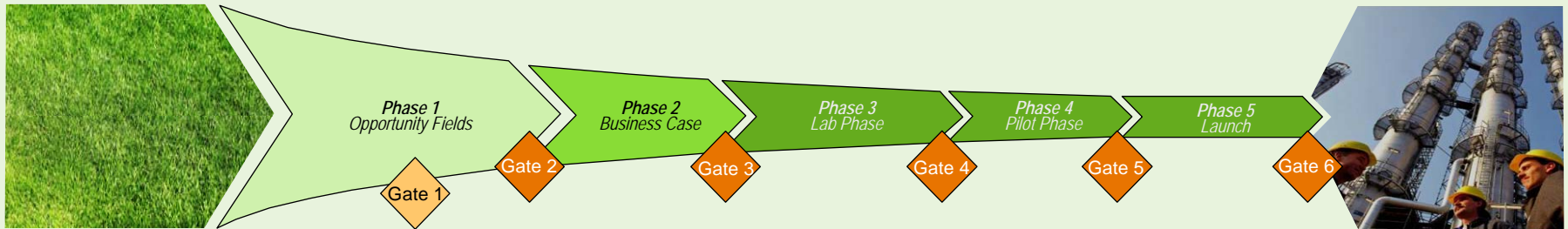
# Stetige Verbesserung von Prozessen in existierenden BASF Anlagen



Kosten-  
schätzung



# Computergestützte Methoden in den Entwicklungsphasen



Stoffdatenmodellierung



Exergieanalyse



Reaktionsmodellierung



Optimierung



Conceptual Design



Kosten



Simulation



Betriebsdatenvergleich

Design Check

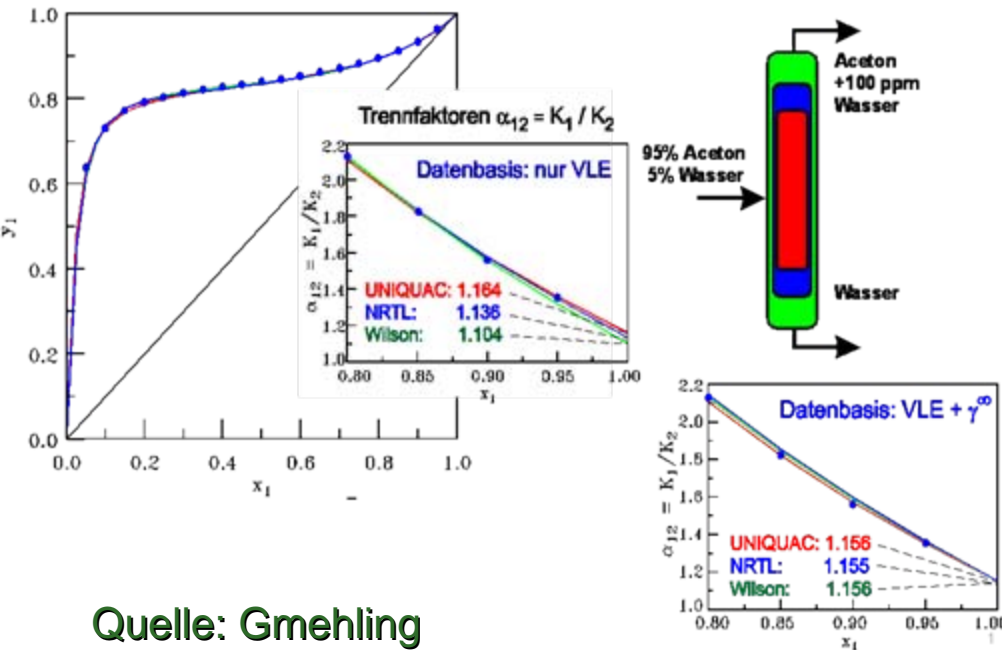


Nutzung im  
Produktionsbetrieb

# Stoffdatenmodellierung

## Basisdaten Aufarbeitung

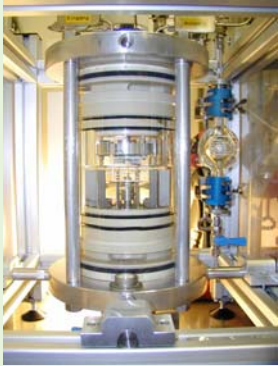
Beispiel Aceton - Wasser



- Konsistente Modelle
- Regressionstools mit überlagerten chemischen Gleichgewichten (z.B. FA-Systeme, Elektrolyte)
- Stabilitätsanalyse und Berücksichtigung bei der Parameteranpassung (Elektrolyte)
- Auswirkungen der Genauigkeit der Stoffdaten auf Simulationsergebnis von Interesse
- Anpassung von Stoffdaten in der Simulation

# Reaktionsmodellierung

## Basisdaten Synthese



Doppelrührzelle



Laminarstrahlkammer

- Gleiche Modell- und Datenbasis für
  - Versuchsauswertung,
  - Apparateauslegung und
  - Gesamtsimulation

- Vernünftige kinetische Ansätze (Lage des thermodynamischen Gleichgewichts)
- Auswertung von mehreren Datensätzen im Simulationstool
- Anpassung von kinetischen Parametern
- Mehrskaligkeit

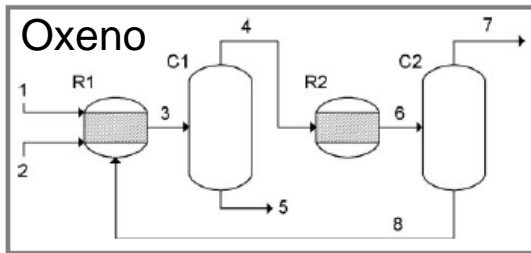
# Conceptual Design

## Machbarkeit und Variantenvergleich

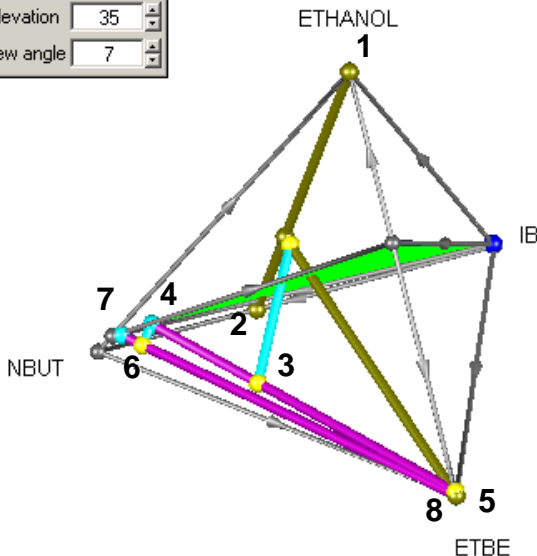
- Analyse der Phasengleichgewichte
  - Machbarkeitsanalyse
  - Variantenvergleich
  - Erste Massenbilanzen (Startwerte)
  - AixCape-Projekt INSYNTO
    - $\infty/\infty$ -Analyse (Prof. Hasse)
    - RKM (Prof. Marquardt)
  - Elementare Prozessfunktionen (Prof. Sundmacher)
- Einbetten in Workflow
  - Phasenweises Vorgehen (Douglas)
  - Superstrukturen

Infinity-Infinity Analysis: feas\_etbe\_huelsprocess\_do\_mod\_unifac.mat

File Graphics Numerics



D3Navigator	
Azimuth	-95
Elevation	35
View angle	7



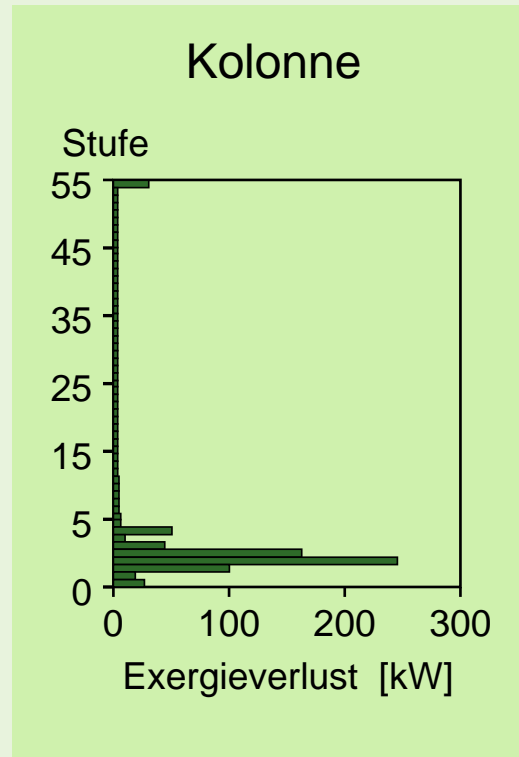
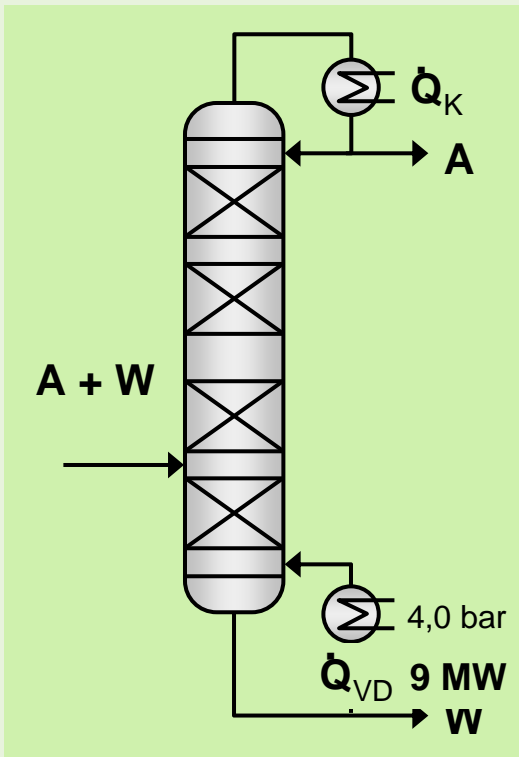
Target Selector	
IB	0.25
NBUT	0.25
ETHANOL	0.25
ETBE	0.25



# Exergieanalyse

## Betrachtung von Energieniveaus

- Quantifiziert Exergieverluste für alle Apparate
- Identifikation von Stellen mit hohen Exergieverlusten
- Verfahrensvergleiche
- Methodiken zur sinnvollen Reduktion von Exergieverlusten

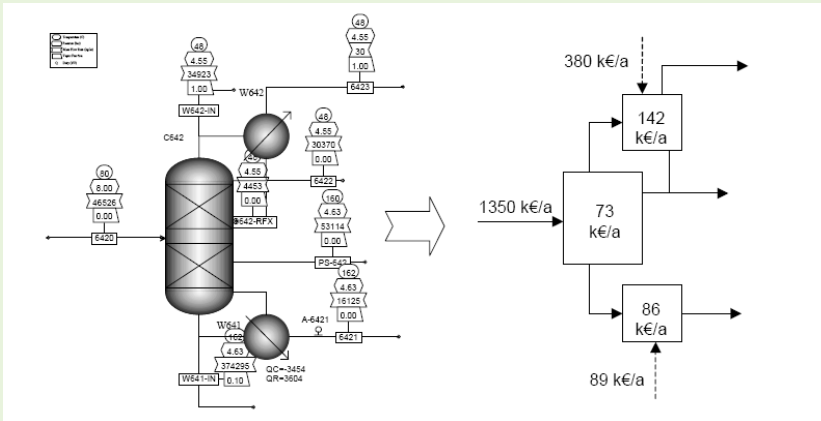
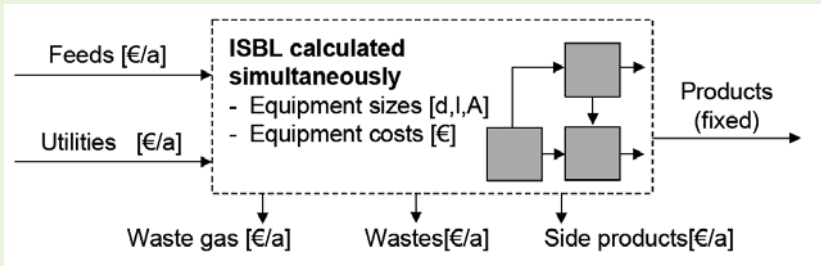


Exergieverlust

in kW	Ex <sup>V</sup>
Kolonne	875
Kondensator	2366
Verdampfer	758
Σ	4000

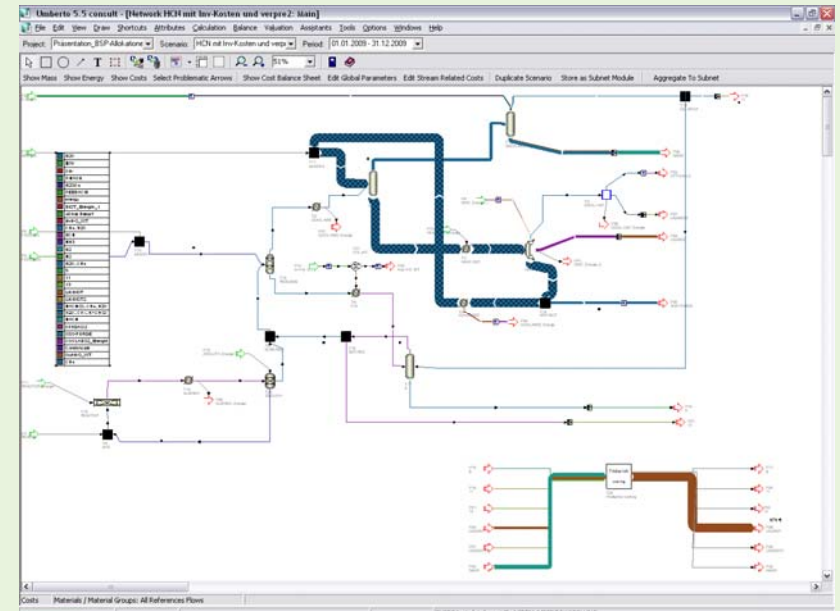
# Kosten

## Ermittlung, Analyse und Optimierung



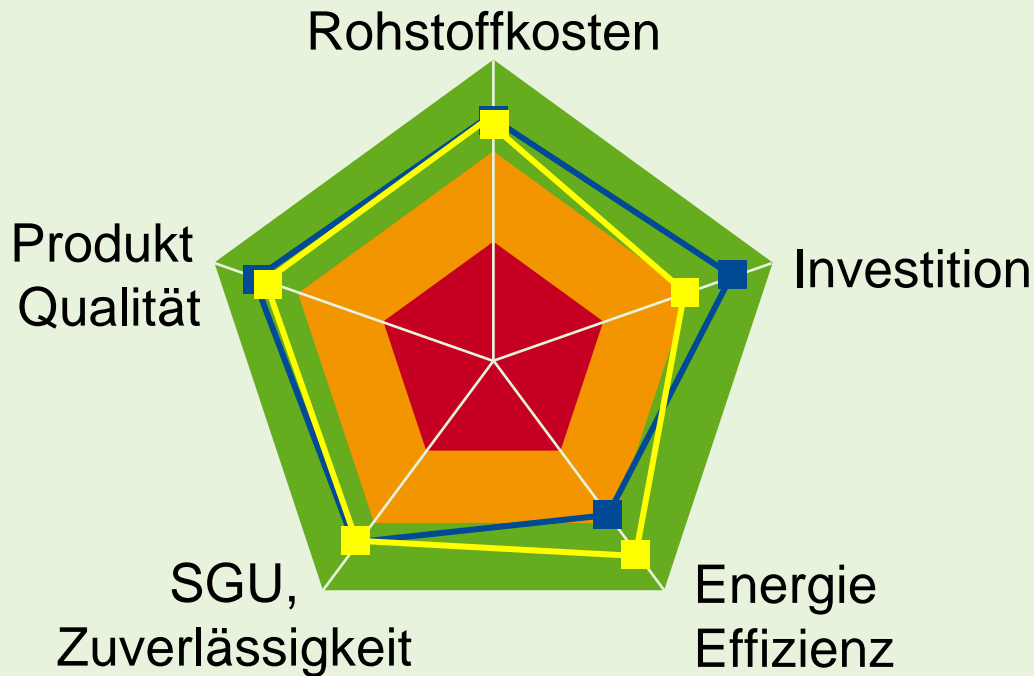
Wiesel und Polt (2006)

- Short-cut design tools, Kostenschätzung, Abschreibungen
- Rohstoff-, Energie-, und Entsorgungskosten
- Kostenoptimierung (intelligent total cost minimization (i-TCM) für Neuanlage, Revamp)



- Auch interne Ströme interessant
- Kostenverteilungsschlüssel
- Visualisierung (Sankey)

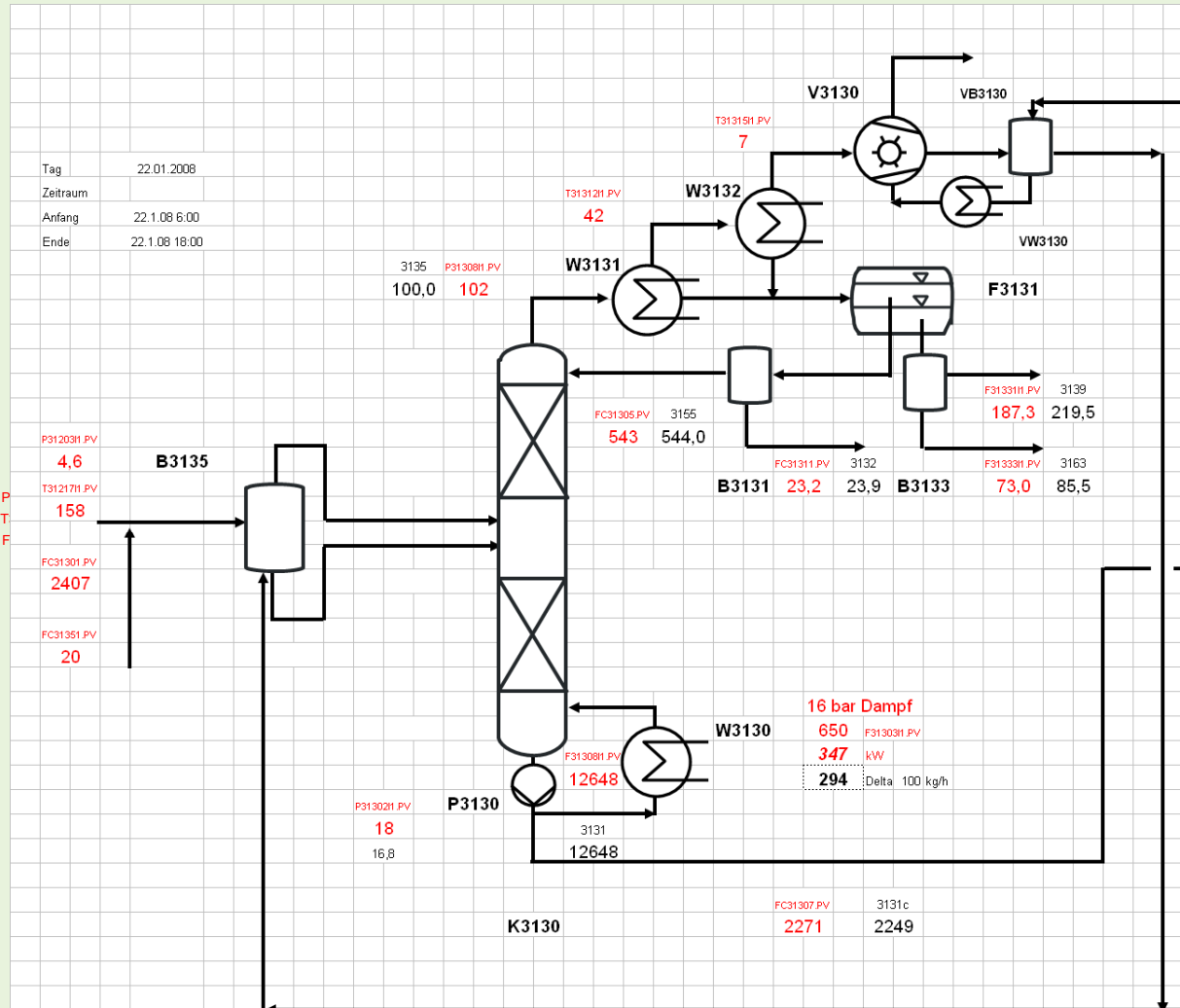
# Optimierung von chemischen Herstellungsverfahren



- Vortrag Hr. Welke
  - Black-box Optimierung  
→ Umformulierung
  - Pareto-Optimierung
- Modellgrenzen (T, p, x, m)
- Disjunkte Probleme/  
Mixed Integer Nonlinear  
Programming (MINLP)
  - Phasengrenzen  
(Modellumschaltung)
  - Superstrukturen  
(vernetzte Rechner)

# Betriebsdatenvergleich

## Validierung der Simulation



**Zuordnungsliste BDIS Messtelle zu Chemasim-Eigenschaft**

*Nach Änderungen: Die Liste und dann auch die Chemasim-Kennung speichern!*

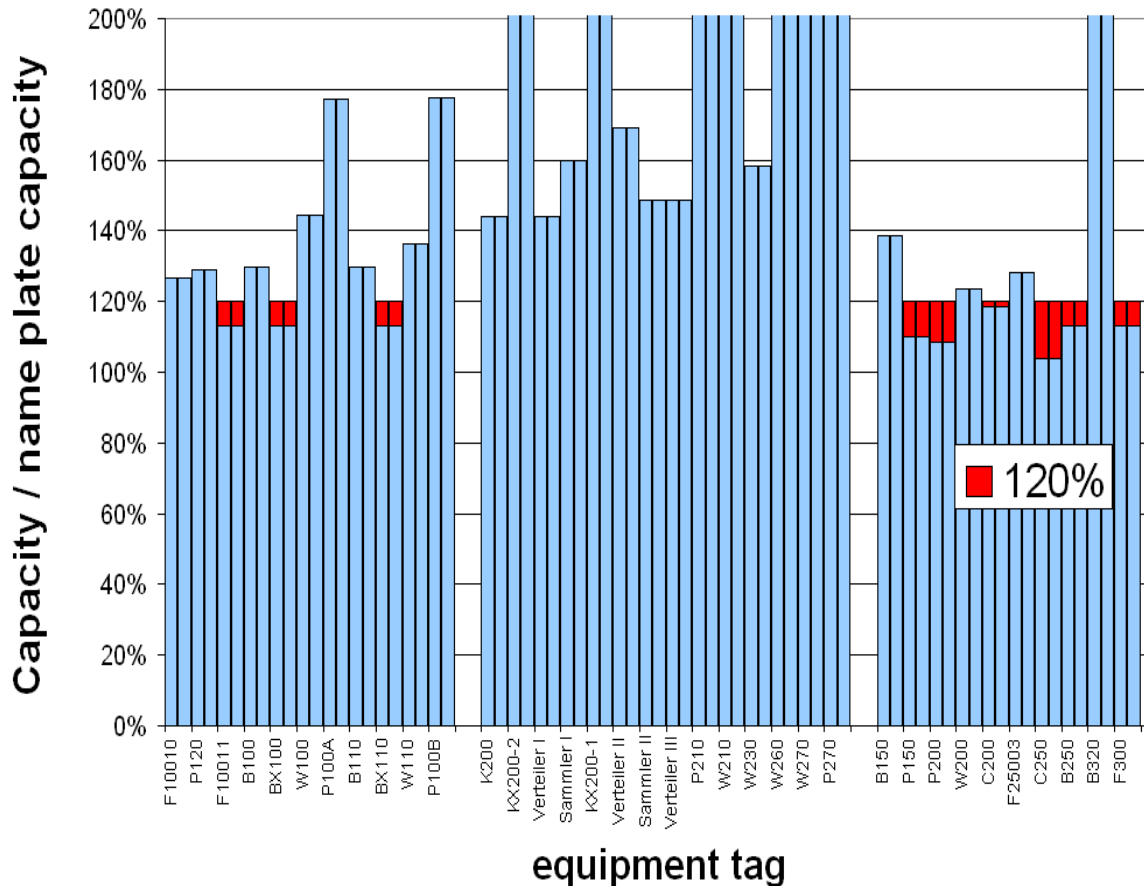
**Zeitraum:**  
von: 22.01.2008 06:00  
bis: 22.01.2008 18:00

Anzeige in Visio	Messtelle	Wert aus BDIS	Einheit BDIS	BDIS Wert mit Chem. Einheit	Chem. Strom Name	Chem App. Name	Stufen Nr.	Chem. Eigenschaft
1	FC31301.PV	2406,646	kg/h	2407		3121		Mengenstrom (kg/h)
1	PC31203.PV	4,600034	bar	4,6		3121		Druck (bar)
1	T312171.PV	158,4193	°C	158,4		3121		Temperatur (°C)
0	T313081.PV	84,08559	°C	84,09		K3130	43	Temperatur (°C)
0	T31307.PV	118,3479	°C	118,3		K3130	40	Temperatur (°C)
0	T313070.PV	120,1115	°C	120,1		K3130	38	Temperatur (°C)
0	T313071.PV	121,7474	°C	121,7		K3130	37	Temperatur (°C)
0	T313052.PV	141,2413	°C	141,2		K3130	30	Temperatur (°C)
0	T313051.PV	146,7117	°C	146,7		K3130	22	Temperatur (°C)
0	T313041.PV	169,9999	°C	170		K3130		Temperatur (°C)
0	T313031.PV	169,9085	°C	169,9		K3130		Temperatur (°C)
0	T313024.PV	170,8131	°C	170,8		K3130		Temperatur (°C)
0	T313023.PV	171,04	°C	171		K3130		Temperatur (°C)
0	T313022.PV	171,5819	°C	171,6		K3130		Temperatur (°C)
0	T313021.PV	172,2431	°C	172,2		K3130		Temperatur (°C)
0	T313011.PV	172,8444	°C	172,8		K3130		Temperatur (°C)
1	F313081.PV	12,64833	m3/h	12,65		3131		Mengenstrom (kg/h)
1	FC31305.PV	543,0579	kg/h	543,1		3155		Mengenstrom (kg/h)
1	F313011.PV	12,64833	m3/h	12,65		3131		Mengenstrom (kg/h)
1	FC31305.PV	543,0579	kg/h	543,1		3155		Mengenstrom (kg/h)
1	FC31311.PV	23,23034	kg/h	23,23		3132		Mengenstrom (kg/h)
1	F313311.PV	187,3411	kg/h	187,3		3139		Mengenstrom (kg/h)
1	F313331.PV	72,96722	kg/h	72,97		3163		Mengenstrom (kg/h)
1	P313081.PV	102,0222	mbar	102,0		3135		Druck (bar)
1	T31312.PV	41,9672	°C	41,97		3134		Temperatur (°C)
1	T313151.PV	7,438198	°C	7,438		3143		Temperatur (°C)
1	FC31307.PV	2270,75	kg/h	2271	3131c			Temperatur (°C)
0	FC31303.PV	650,0171	kg/h	650		W3130		Mengenstrom (kg/h)

Integration der Betriebsdaten in die Simulation

# Designcheck

## Bewertung von Erweiterungsoptionen

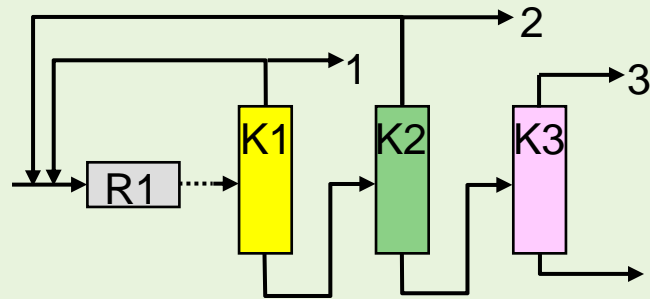


■ Vergleich der aktuellen Betriebsweise mit Designgrenzen

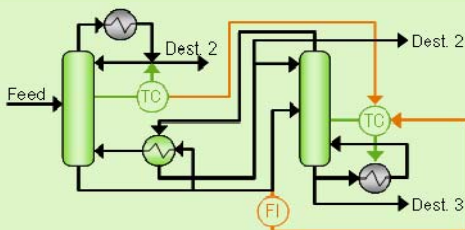
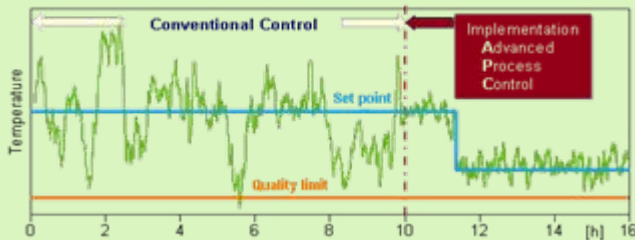
■ Übersicht über Debottlenecking-Maßnahmen in Abhängigkeit von der Kapazität

■ Angabe der Designlimits bzw. Ermittlung in Simulation

# Nutzung der Simulation in Produktionsbetrieben



- Variantenrechnungen (Sensitivitätsanalysen)
- Optimierung im Betrieb (z.B. Produktverteilung)
- Trainings-/ Schulungssimulator
- Advanced Process Control



- Robustheit (Startwertmanagement)
- Reduzierter Eingabe/Ausgabedatensatz
- Advanced Process Control
  - Betriebsdaten als Eingaben (Genauigkeit)
  - Andere Spezifikationen (Ungleichungen)
  - Optimierung → Betriebsparameter
- Modellübertragung: stationär ↔ dynamisch (z.B. für sicherheitstechnische Fragestellungen)

# Zusammenfassung

- Neue Verfahren müssen möglichst optimal eine Reihe verschiedener Kriterien erfüllen
- Phasenweiser Prozess führt zum Ziel
- Gates (Haltepunkte) helfen Projektfortschritt zu kontrollieren
- Methoden liefern Fakten für Stop/Go-Entscheidung am Gate
- Trends und Bedarf bei Methoden aufgezeigt für
  - Frühe Phase der Verfahrensentwicklung
  - Abschließende Optimierung und Bewertung
  - Nutzung/Optimierung im Produktionsbetrieb

