

Insynto – An integrated synthesis toolbox

M. Wiedau (AixCAPE e.V.), A. Harwardt (RWTH Aachen University, AVT.PT)

C. Buchaly (Bayer Technology Services), J. Schallenberg (Evonik),

O. Ryll (BASF SE), P. Chasanis (Lanxess Deutschland)

Zur Kosten- und Zeiteinsparung beim verfahrenstechnischen Entwurf chemischer Anlagen müssen bereits in der frühen Planungsphase geeignete Methoden zur Machbarkeitsuntersuchung und zur Berechnung des Energiebedarfs zur Verfügung stehen. Die hohe Robustheit bei der Berechnung und die Möglichkeit einer Analyse mit wenig Spezifikationen machen Shortcut-Verfahren dabei zu einem geeigneten Screening-Werkzeug. Um das Potenzial dieser Shortcut-Verfahren auszunutzen, wurde 2008 das Insynto-Projekt (Integrated synthesis toolbox) ins Leben gerufen, in welchem sich die Organisation für Forschungstransfer, AixCAPE e.V., sowie Partner aus der Industrie zusammen geschlossen haben, um gemeinsam eine Softwareplattform zur Prozesssynthese zu schaffen. In enger Kooperation mit BASF, Bayer Technology Services, Evonik und Lanxess Deutschland konnte sowohl die Rektifikationskörper-Methode (RBM) [1], als auch die rechnergestützte ∞/∞ -Analyse [2] in Insynto integriert werden. Mit der ∞/∞ -Analyse kann hierbei die Machbarkeit destillativer Trennungen auf der Basis von Rückstands- bzw. Destillationsliniendiagrammen analysiert werden. Für die mittels ∞/∞ -Analyse als machbar identifizierte Trennung kann in Insynto der Mindestenergiebedarf mit der RBM, einem Pinch-basierten Shortcut-Verfahren bestimmt werden. Insynto ermöglicht die Berücksichtigung von nicht-idealem Gemischverhalten und Azeotropen, wobei verschiedene GE-Modelle und Zustandsgleichungen zur Berechnung des Dampf-Flüssig-Gleichgewichts zur Auswahl stehen. Durch die Verwendung von Machbarkeitstest und Shortcut-Verfahren kann mit dem Software-Werkzeug Insynto eine schnelle Aussage über Machbarkeit und Mindestenergiebedarf einer destillativen Trennung gemacht werden. Die hierbei gewonnen Information können anschließend als Ausgangspunkt einer rigorosen Simulation oder Optimierung genutzt werden. Neben der Einzelkolonnenbetrachtung umfasst das Insynto Projekt auch die Optimierung von Fließbildern mit Hilfe der ∞/∞ -Analyse. Hierzu werden gemeinsam mit den Kooperationspartnern Fallstudien durchgeführt.

[1] Bausa, R, v. Watzdorf R., Marquardt, W. "Shortcut Methods for Nonideal Multicomponent Distillation: 1. Simple Columns", AIChE Journal, 1998, Vol 44, No 10

[2] Ryll, O., Blagov, S., Hasse, H. „Rechnergestützter konzeptioneller Entwurf von Destillations-/Reaktionsprozessen“, Chemie Ingenieur Technik 2008, 80, No. 1-2