

Umberto und Aspen Plus im Vergleich

Anwendung im Umfeld betrieblicher Stoffstromanalysen in der chemischen Industrie

Bernd H. Schlüter *)

Das Flowsheeting-System **Aspen Plus** ist in der chemischen Industrie ein verbreitetes Simulationsprogramm u. a. zur Prozessentwicklung sowie Planung und Auslegung verfahrenstechnischer Anlagen. Ebenso wie die Bilanzierungssoftware **Umberto** wird es zur **Lösung von Fragestellungen im Umfeld von betrieblichen Stoff- und Energieströmen** eingesetzt.

Vor diesem Hintergrund sollten die möglichen **Einsatzgebiete** sowie die **signifikanten Unterschiede** von Umberto und Aspen Plus genauer untersucht werden. Dazu wurde die **Modellierung von Stoff- und Energieströmen, der Einsatz für Prozessoptimierungen, die betriebliche Kostenrechnung, die produkt- und verfahrensbezogene Ökobilanzierung** sowie die **Funktionalität und Ergebnisdarstellung** verglichen. Als Ergebnis wurden die Eigenschaften sowie die gemeinsamen, spezifischen und schwerpunktmäßigen Einsatzgebiete der Simulationsprogramme gegenübergestellt und ein ausgewähltes Praxisbeispiel untersucht.

umberto

Kurzbeschreibung/Ziele:

- Umberto ist für Produkt-, Betriebs- und Prozessbilanzen ausgerichtet.
- Darstellung, Analyse, Simulation von Stoff-, Energie- und Kostenströmen.
- Detaillierungsgrad der Prozessaufgliederung ist frei modellierbar.
- Schachtelprozesse und Rückführungen (Recyclingschleifen) sind möglich.
- Anlagen/Prozesse und auftretende Stoffströme werden grafisch dargestellt.
- Leistungsfähige Kostenrechnung (fixe und variable Kosten) ist integriert.
- Übersichtliche Darstellung von Mengen-/Kostenströmen incl. Wirkungen.
- Mehrere ökologische Bewertungsverfahren stehen zur Verfügung.
- Kennzahlen können frei definiert und ausgewertet werden.
- Berechnung verschiedener Szenarien und deren Gegenüberstellung.

Ressourcenfokus:

Rohstoffe, Inhalts- und Hilfsstoffe Vorprodukte, Wasser, Energie, Abwasser, Abfall, Abwärme können mit beliebiger Detailtiefe erfasst werden.

Rechenmethoden:

Input-/Output-Bilanzen werden sequentiell/iterativ aus lin. Gleichungssystemen berechnet, Ökobilanzen und Kostenströme für Gesamtnetz und Einzelprozesse.

Maße/Einheiten:

Alle Maße sowie Summenparameter, Wirkungsbilanzmethoden und Bewertungen sind möglich (BUWAL, MIPS, UBA usw.), Einheitenumrechnung.

Dateninput/Datenoutput:

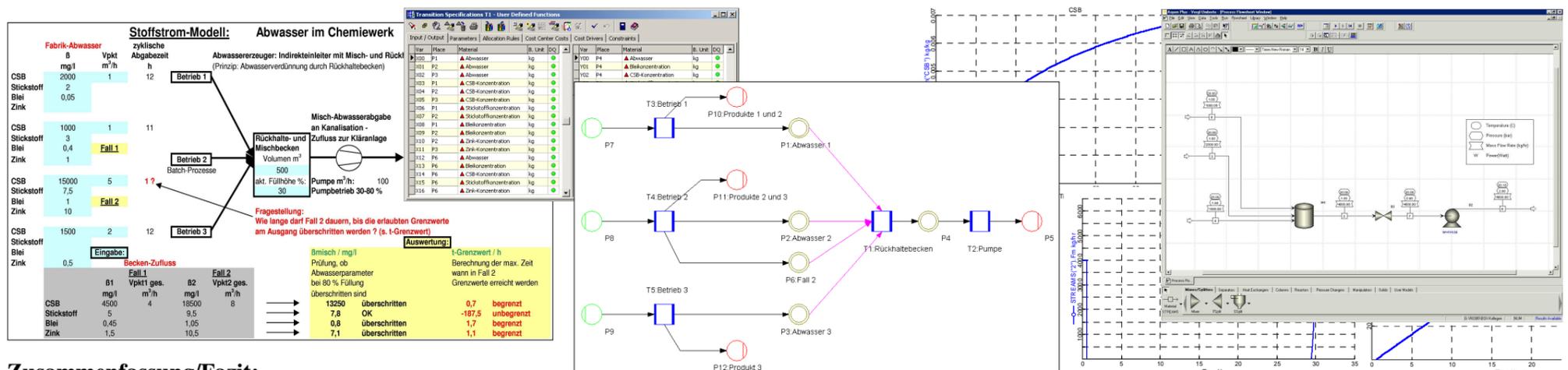
- Umfangreiche Prozess-Bibliothek, z. B. für Transporte, Vor- und Nachketten, Energieerzeugung, Abfallbehandlung, Grund- und Werkstoffherstellung.
- Über bekannte Mengenströme können unbekannte ausgerechnet werden.
- Übersichtliche Outputs, Sankeys, Charts, Zeitreihen, Kennzahlen, Kosten.
- Gestaltungsmöglichkeiten der Sankey-Diagramme, Tabellen, Grafiken.

Beispiele für Einsatzmöglichkeiten:

- Schwerpunkt liegt bei ökonomischen und ökologischen Gesichtspunkten des betrieblichen Stoff- und Energiestrommanagements und der stoffstrombasierten Kostenrechnung, z. B. Kostenoptimierung durch Stoffstromoptimierung, Ermittlung interner Verrechnungspreise, Lösemittelbilanzen, Emissionsberechnungen.
- Prozessoptimierung, z. B. Schwachstellenanalyse durch Materialflussanalysen, Auswirkungen von Einzelmaßnahmen (wie Recycling) auf Gesamtprozess, Verfahrensbewertung anhand umweltbezogener Kennzahlen, Szenario-Analysen, Entscheidungsunterstützung für Produkt- und Technologieoptionen.
- Produkt- und verfahrensbezogene Ökobilanzierung, Life Cycle Assessment (LCA), z. B. Methionin-Studie der Degussa, Umweltverträglichkeitsanalysen.

Praxisbeispiel „Misch- und Rückhaltebecken für Mischabwasser im Chemiewerk“:

Für den Softwarevergleich wurde eine aktuelle Problemstellung gewählt. Für ein Chemiewerk sollten die Mischabwasser-Stoffströme aus den Produktionsbetrieben anhand der Schadstofffrachten analysiert und die Wirkungsweise eines Misch- und Rückhaltebeckens unter Beachtung der wechselnden Betriebsweise und der Schadstoffgrenzwerte untersucht werden. Es sollte die Beckengröße dimensioniert und die Allokation der Stoffe auf die Produkte ermittelt werden. Für die Problemstellung wurden ausgehend von einer vereinfachten Modellrechnung mit MS-Excel verschiedene Modellierungen mit Umberto und Aspen Plus durchgeführt und verglichen.



Zusammenfassung/Fazit:

Die Gegenüberstellung der Programme Umberto und Aspen Plus zur Problemlösung im Umfeld von betrieblichen Stoff- und Energieströmen hat ergeben, dass beide Systeme - wie am ausgewählten Beispiel belegt - für die Modellbildung und Simulation in der chemischen Industrie erfolgreich eingesetzt werden können. Es hat sich aber gezeigt, dass die Modellierungen effektiver sind, wenn die Programme aufgrund ihrer spezifischen Ausrichtung und Funktionsweise eingesetzt werden. Umberto sollte daher eher bei grundlegenden Fragestellungen zu Stoff- und Energieströmen und Aspen Plus bei konkreten technischen Auslegungsaufgaben verwendet werden.

*) Autor: Dipl.-Phys. Ing. Dipl.-Umweltwiss. Bernd H. Schlüter, Degussa AG, Abt. Engineering/IT-Systeme, 45764 Marl, E-Mail: bernd.schluter@degussa.com [9/2004]

Aspen Engineering Suite (Aspen Plus® und andere Module)

Kurzbeschreibung/Ziele:

- Bei Aspen Plus liegt der Fokus auf der Auslegung von Anlagen und Verfahren.
- Für Verfahrensdesign werden Flowsheets, stat./dyn. Modellierung angeboten.
- Organisation u. Optimierung der Stoff- und Energieausnutzung in Anlagen.
- Pinch-Programm zur Optimierung von Wärme- und Kälteflüssen.
- Simulation von Verfahren incl. Thermodynamik und Reaktionskinetik.
- Detaillierungsgrad der Prozessaufgliederung ist frei modellierbar.
- Schachtelprozesse und Rückführungen (Recyclingschleifen) sind möglich.
- Kennzahlen können frei definiert und ausgewertet werden.

Ressourcenfokus:

Stoffe (bis auf Elementebene), Bedarf und Überschüsse von Wärme und Kälte.

Rechenmethoden:

Lineare Gleichungssysteme, sequenziell-modular Ansatz, thermodynamische Enthalpiebilanzierung und -berechnung, Simulation, Pinch-Methode.

Maße/Einheiten:

Masse, Mole, Volumen, chemische Zusammensetzung und Interaktion, Energieinhalte, Einheitenumrechnung.

Dateninput/Datenoutput:

- Stoff- und Energieinputs/-outputs in beliebigen Einzelschritten berechenbar.
- Bei dynamischer Simulation auch der zeitliche Verlauf.
- Verfolgung der Stoffzusammensetzung bei chem. Umsetzungen möglich.
- Komponententrennung unter Berücksichtigung thermischer Trenntechniken.
- Sehr große Stoffdatenbank mit phys./chem./verfahrenstechn. Stoffkennwerten.
- Umfangreiche Prozess- und Anlagenbibliothek als Simulationsgrundlage.
- Plausibilitätsprüfung und Bilanzierung der beteiligten Stoffe.
- Outputs mit z. B. Temperatur und Druckverlauf je Anlagenteil.
- Grafischer Überblick der Stoff- und Energieflüsse.

Beispiele für Einsatzmöglichkeiten:

- Auf Basis physikalischer, chemischer und verfahrenstechnischer Gesetzmäßigkeiten und Stoffdaten wird schwerpunktmäßig das Verhalten von Prozessen und Anlagen im Detail simuliert, z. B. Zusammensetzung von Stoff- und Koppelproduktströmen, Berechnung thermodynamischer Stoffgrößen (z. B. in Abhängigkeit von Druck, Temperatur), technische Auslegung von Reaktoren, Kolonnen und Wärmetauschern usw., Simulation mit verschiedenen Steuerungsmethoden (z. B. feste Reaktortemperatur).
- Prozessoptimierung, z. B. Optimierung der Stoff- und Energieausnutzung beim Bau/Betrieb chemischer Anlagen, Sensitivitätsanalysen von Einflussgrößen, Analysen zur Kreislaufwirtschaft und zum integrierten Umweltschutz.