

EDV-gestützte Simulation industrieller Stoff- und Energieströme mittels des kommerziellen Flowsheeting-Systems ASPEN Plus - dargestellt am Beispiel der Eisen- und Stahlindustrie -

Andreas Sieverdingbeck, Bernd Engels, Thomas Spengler
und Otto Rentz¹

Abstract

Der Entwurf und die Auswahl von Kreislaufwirtschaftskonzepten für Unternehmen der Prozeßindustrie können durch Modellieren und Simulation mit Flowsheeting-Systemen erleichtert werden. Bisherige Modellierungsansätze, die in der Regel entweder grundlagenbezogen oder rein empirisch sind, sind für komplexe, vernetzte Prozesse mit nichtlinearem Verhalten nur bedingt geeignet. In diesem Beitrag werden daher die problemadäquate Simulation mit Hilfe des Flowsheeting-Systems ASPEN Plus anhand eines Anwendungsbeispiel aus dem Bereich der Eisen- und Stahlindustrie vorgestellt.

The design and selection of recycling management concepts for process industry can be facilitated by modelling and simulation with flowsheeting systems. Former modelling approaches which were mostly fundamental orientated or pure empirical are rarely suitable for complex, linked processes with non linear behaviour. Therefore this paper presents an approach for the problem adequate modelling with the flowsheeting system ASPEN Plus with an example from of the iron and steel industry.

1 Einleitung

Bedingt durch das im Oktober 1996 in Kraft getretene Kreislaufwirtschafts- und Abfallgesetz (KrW-/AbfG) stehen Produktionsunternehmen vor der vom Gesetzgeber gestellten Aufgabe einer weitestgehenden Schließung der betrieblichen Stoffkreisläufe. Die Erfüllung dieser Aufgabe ist in der Regel mit der Implementierung neuer, produktionsintegrierter Umweltschutzmaßnahmen und damit mit Investitionen ver-

¹ Institut für Industriebetriebslehre und Industrielle Produktion (IIP) Universität Karlsruhe (TH), Hertzstraße 16, 76187 Karlsruhe, e-mail: Andreas.Sieverdingbeck@wiwi.Uni-Karlsruhe.de

bunden. Diese können in einer Größenordnung von bis zu 100 Millionen DM (im Fall eines integrierten Hüttenwerks) liegen. Gleichzeitig werden durch die zu implementierenden Maßnahmen (Veränderungen interner Kreislaufführungen, Neubau von Anlagen, ...) die innerbetrieblichen Stoffkreisläufe und die entstehenden Emissionen in die Umweltmedien Luft, Boden und Wasser signifikant beeinflusst. Weiterhin können sie die erzielbare Produktqualität negativ beeinflussen. Hieraus ergibt sich die Notwendigkeit, im Vorfeld der Entscheidung zu prüfen, ob und wie sich die Prozeßmodifikation bzw. Neuanlage auf den bestehenden Produktionsverbund auswirkt. Da die Produktionsaggregate der Prozeßindustrie in der Regel ein nichtlineares Verhalten, z.B. bezüglich der Faktorverbräuche bei Faktorsubstitutionen, aufweisen, ist eine nichtlineare, problemadäquate Abbildung der einzelnen Produktionsaggregate sowie des gesamten, vernetzten Produktionssystems notwendig. Gleichzeitig lassen sich die benötigten Daten zur Abschätzung des Systemverhaltens nicht oder nur unzureichend aus den vorhandenen Betriebsdaten ableiten, da in der Regel eine Extrapolation über bestehende Datensätze hinaus nicht möglich ist.

Ziel des Beitrages ist die Präsentation einer problemadäquaten Modellierungsmethodik, die es erlaubt, die technischen, ökonomischen und ökologischen Auswirkungen produktionsintegrierter Umweltschutzmaßnahmen in vernetzten Produktionssystemen ex ante zu bestimmen. Hierbei bauen die ökonomischen Bewertungen auf (Spengler et al. 1998) auf, während (Rentz et al. 1997) und (Sieverdingbeck et al. 1998) das Fundament der technischen Auswertungen bilden.

2 Methoden zur Modellierung industrieller Produktionssysteme

Zur Abbildung von Produktionssystemen oder einzelner Anlagen findet in den unterschiedlichen Wissenschaftsbereichen eine Reihe von Methoden Anwendung. Diese reichen von linearen Input-Output Modellen auf empirischer Grundlage bis hin zu naturwissenschaftlich fundierten Modellen, die sowohl chemische als auch physikalische Vorgänge auf Grundlagenebene einbeziehen. Hierbei werden in den Ingenieurwissenschaften zur Beschreibung von Verfahren und Verfahrensstufen häufig Prozeßmodelle verwendet, die basierend auf naturwissenschaftlichen Grundlagen versuchen, die Prozesse im Detail zu beschreiben. Hierzu zählen im Bereich der Metallurgie zum Beispiel die zur Anlagensteuerung verwendeten Konvertermodelle oder verschiedene zur Beschreibung des Hochofens erstellte Modelle (vergl. z.B. (Zeisel 1996)). Vorteile dieser Modelle sind die detaillierte Berücksichtigung der die Prozesse bestimmenden Vorgänge und das weitgehende Aufbauen auf naturwissenschaftlichen Grundlagen. Nachteile dieser Modellierungsweise liegen darin, daß in der Regel die unter Gesichtspunkten der Kreislaufwirtschaft relevanten Substanzen (wie Zink, Blei, Chlor und Alkalien) nicht berücksichtigt werden, daß die Entwicklungszeiten für solche Prozeßmodelle meist im Bereich mehrerer Jahre liegen

und in der Tatsache, daß bedingt durch die Zielsetzung der Modelle nur selten Verknüpfungsmöglichkeiten zu einem anderen Modell der Prozeßkette gegeben sind. Im Gegensatz zu diesem grundlagenorientierten Vorgehen der Ingenieurwissenschaften werden in den Wirtschaftswissenschaften und im Bereich der Ökobilanzierung häufig lineare Modelle in Form von Input-Output-Bilanzen der einzelnen Prozesse und Prozeßketten verwendet (Spengler et al. 1998). Vorteile dieser linearen Vorgehensweise liegen in der relativ einfachen Erstellung der Modelle und darin, daß sich auch mehrere Prozeßstufen, wie es z.B. im Rahmen der Prozeßökobilanzierung notwendig ist, abbilden lassen. Nachteile dieser Modellierungsmethode liegen besonders in der Linearisierung des in der Regel nichtlinearen Prozeßverhaltens und in der Nichtberücksichtigung der Wechselwirkungen der Inputstoffe eines Prozesses begründet. Da die hier vorgestellten Modellierungsansätze in ihren üblichen Formen nur sehr begrenzt zur Untersuchung innovativer Konzepte und Technologien zum produktionsintegrierten Umweltschutz verwendet werden können, war die Entwicklung einer Methode notwendig, die die Vorteile beider Ansätze vereint und ihre Nachteile vermeidet. Im Rahmen des vom BMBF geförderten Forschungsvorhabens „Produktionsintegrierte Umweltschutzmaßnahmen in der Eisen- und Stahlindustrie.“, wurde am Institut für Industriebetriebslehre und Industrielle Produktion der Universität Karlsruhe (TH) eine für die Kreislaufwirtschaft in Unternehmen der Eisen- und Stahlindustrie adäquate Modellierungsmethodik entwickelt. Darauf aufbauend wurde ein Simulationssystem entwickelt, daß sowohl auf grundlagenbezogenen als auch auf empirischen Ansätzen beruht.

3 Flowsheet basierte Modellierung²

Die stationäre Flowsheet Simulation stellt ein in der Verfahrenstechnik bewährtes Werkzeug dar. Sie wird u.a. zur Prozeßentwicklung, Planung und Auslegung verfahrenstechnischer Anlagen eingesetzt. Der Aufbau kommerziell verfügbarer Flowsheeting - Programme kann primär anhand der zugrundeliegenden Lösungsstrategien unterschieden werden. Bei der sequentiell-modularen Vorgehensweise werden die einzelnen verfahrenstechnischen Grundoperationen wie Mischen, Trennen usw. zu einem Fließbild verknüpft und nacheinander, in ihrer Prozeßreihenfolge berechnet. Demgegenüber steht das simultane Lösungsprinzip, bei dem die Stoff-, Impuls- und Energiebilanzen der einzelnen Teilaggregate mit den Verknüpfungsvariablen der Prozeßstruktur in einer Matrix zusammengefaßt und simultan gelöst werden. Im weiteren wird der sequentiell modulare Ansatz vorgestellt, da sich dieser bei der problemadäquaten Modellierung im Rahmen von Planungsproblemen zum umweltintegrierten Produktionsmanagement (vgl. z.B. (Rentz et al. 1997), (Penkuhn 1997)) als zielführend erwiesen hat.

² Dieser Abschnitt basiert überwiegend auf (Lohe/Futterer 1995)

Beim sequentiell modularen Ansatz werden die einzelnen Unit Operations nacheinander berechnet. Hierbei dienen die Ausgangsströme der vorgeschalteten Einheiten als Eingangsdaten für die nachfolgend zu berechnende Unit Operation. Die Berechnungsreihenfolge entspricht dabei grundsätzlich der Flußrichtung der Stoff- und Energieströme. Der prinzipielle Aufbau sequentiell modularer Flowsheeting-Programme ist in Abbildung 1 dargestellt.

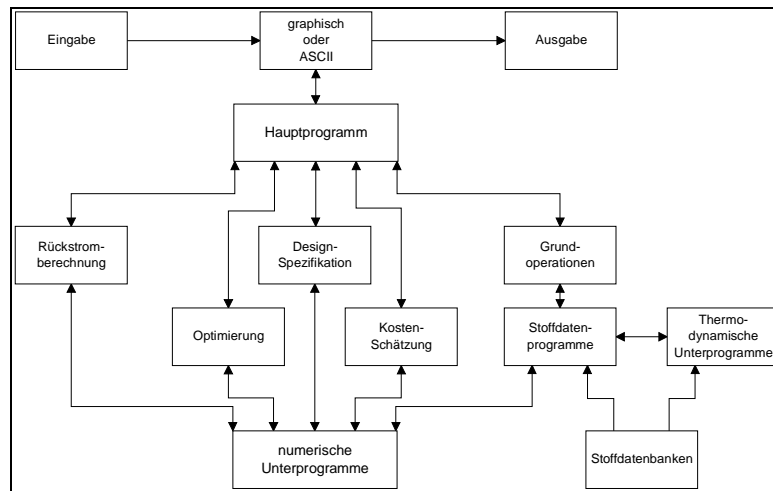


Abbildung 1

Aufbau sequentiell modularer Flowsheeting Programme (Lohe/Futterer 1995)

Das Hauptprogramm verwaltet und koordiniert die Berechnung des Flowsheets. Die Eingabe des Flowsheets sowie die Ausgabe der Ergebnisse erfolgen heute meist über graphische Benutzeroberflächen. Allerdings sind in der Regel die Ein- und Ausgabe auch über programmeneigene Programmiersprachen möglich. Die zum Aufbau der Flowsheets benötigten Unit Operations sowie die Modelle zur Bestimmung der Stoffdaten und zur Berechnung thermodynamischer Größen liegen in der Regel in Form von Unterprogrammen oder eigenständigen Programmen vor. Aufbauend auf den von im System enthaltenen Stoffdatenbanken bereitgestellten Informationen lassen sich so die chemischen und physikalischen Vorgänge innerhalb der Unit-Operations berechnen. Die in kommerziell verfügbaren Flowsheeting Systemen enthalten Datenbanken umfassen zum Teil Stoffdaten (z.B. Reinstoffdaten, Mischungsparameter,...) von über 2400 chemischen Verbindungen pro Datenbank. Als weitere Bestandteile umfassen diese Systeme Module von bis zu über 80 verfahrenstechnische Unit Operations.

4 Das Flowsheeting System ASPEN Plus

Das Flowsheeting-System ASPEN Plus ist ein in der chemischen Verfahrenstechnik weit verbreitetes Programm. Es gehört zur Gruppe der sequentiell modular arbeitenden Simulationsprogramme und wird bei einer Reihe von Unternehmen (z.B. DOW, BASF, Lurgi und Uhde) und Forschungseinrichtungen eingesetzt. Seine Anwendung auf metallurgische Prozesse, besonders auf die Verfahren der Eisen- und Stahlerzeugung, wie sie im Rahmen dieses Beitrags vorgestellt wird, stellt wissenschaftliches Neuland dar. Im folgenden wird zunächst die Abbildung von Stoff- und Energieströmen mit ASPEN Plus diskutiert, um im Anschluß daran die wichtigsten Unit Operations vorzustellen.

Abbildung von Stoff- und Energieströmen: Ausgangspunkt der Modellierung von Stoff- und Energieströmen mit ASPEN Plus ist die Definition einer Komponentenliste. Hierbei werden alle innerhalb eines Produktionssystems relevanten chemischen Elemente und Verbindungen in einer Liste erfaßt. Die Darstellung der Stoffströme erfolgt in Form eines Vektors, bei dem die Elemente des Vektors den Massen- oder Molanteilen der einzelnen Komponenten entsprechen. Der Massen- oder Molenstrom des Stoffstroms wird, ebenso wie die Temperatur und der Druck, durch einen Skalar vorgegeben. Energieströme werden durch ihren Betrag und ihre Flußrichtung definiert.

MIXER: Eine der häufigsten Aufgaben von Unit Operations ist das Zusammenführen von mehreren Stoff- oder Energieströmen. Hierzu findet das in ASPEN Plus enthaltene Grundmodell MIXER Verwendung. Das Ergebnis dieser Unit Operation ist ein aus den Inputströmen durch (komponentenweise) Addition gebildeter Stoff- oder Energiestrom. Anwendungsbeispiele für das Modul MIXER in den entwickelten Modellen sind z.B. der Einsatz als aggregiertes Modell der Mischbetten im Bereich der Sinteranlage oder der Möllierung im Bereich des Hochofens und als Hilfsmittel zur Bestimmung der Energiebilanz zusammengesetzter Modelle.

SPLITTER: Die Unit Operation FSPLIT (Flow-Split) ist ein Stoffstromteiler, bei dem die Ausgangsströme in ihren Zusammensetzungen und Eigenschaften dem eingehenden Stoffstrom entsprechen. Hierbei wird für jeden der ausgehenden Stoffströme ein Verteilungsparameter definiert. Dieser kann sowohl als Absolutwert (z.B. in [t/h]) als auch als Anteil des Gesamteingangs ([%]) definiert werden. Diese Verteilungsparameter können auch unter Verwendung von Fortranblöcken verändert und somit als mathematische Funktionen dargestellt werden. Hierdurch ist es möglich, in Abhängigkeit von ausgewählten Parametern des Inputstroms, beispielsweise der Konzentration einer Komponente, die Verteilungsparameter und damit die Verteilung der einzelnen Komponenten auf die Outputströme zu verändern. Einsatzbereiche für diese Unit Operation innerhalb der erstellten Modelle liegen z.B. in der Variation von Bypassströmen und in der Aufteilung von Energieströmen.

Seperatoren: Während die Unit Operation FSPLIT nur in der Lage ist einen Stoffstrom in mehrere Teilströme identischer Zusammensetzung aufzuteilen, bieten

die in ASPEN Plus implementierten Separatoren (SEP und SEP2) die Möglichkeit der Definition von Verteilungsfaktoren für jede einzelne Komponente der Stoffliste. Diese Möglichkeit der komponentenweisen Eingabe von Verteilungskoeffizienten kann z.B. zur Abbildung des unterschiedlichen physikalischen Verhaltens der einzelnen Komponenten genutzt werden, z.B. unterschiedliche Verweilzeiten innerhalb eines Modellteils, oder zur Abbildung des unterschiedlichen Verstaubungsverhaltens der Komponenten. Weiterhin können diese Unit-Operations zur Anpassung eines Gesamtmodells an reale Betriebsdaten eingesetzt werden. Analog zu den Splintern ist es auch bei den Separatoren möglich, mathematische Zusammenhänge zwischen den Verteilungskoeffizienten und Parametern der Eingangsstoffströme (z.B. Zusammensetzung) unter Verwendung von Fortranblöcken zu formulieren.

Heizaggregate: Die Unit Operation HEATER erwärmt oder kühlt einen eingehenden Stoffstrom auf eine definierte Temperatur und wird daher in der Regel zur Abbildung von Heiz- oder Kühlaggregaten eingesetzt. In der Unit Operation HEATER werden bei vorgegebener Temperatur und gegebenem Druck die sich einstellenden Phasen bestimmt. Innerhalb der erstellten Modelle wird die Unit Operation HEATER in der Regel zum Aufheizen bzw. Abkühlen einzelner Gas-, Flüssigkeits- oder Feststoffströme verwendet.

Reaktoren: Zur Berechnung chemischer Gleichgewichte, bzw. zur Simulation verfahrenstechnischer Reaktoren, stellt ASPEN Plus sieben verschiedene Reaktormodelle zur Verfügung. Im Rahmen der hier vorgestellten Modelle werden zwei dieser Reaktortypen verwendet. Es handelt sich hierbei um den als Gibbs Reaktor bezeichneten RGIBBS und den stöchiometrischen Reaktor RSTOIC, die im folgenden beschrieben werden. Zur Berechnung von chemischen Reaktions- und Phasengleichgewichten stellt ASPEN Plus die Unit-Operation **RGIBBS** bereit. Mit diesem Reaktor werden in Abhängigkeit der vorzugebenden Reaktionsbedingungen (Druck und Temperatur, Druck und Wärmebedarf oder Temperatur und Wärmebedarf) die chemischen Gleichgewichte berechnet. Die Bestimmung des Gleichgewichts erfolgt hierbei über die Minimierung der freien (Gibbsschen) Enthalpie. Die Verteilung der an den Reaktionen beteiligten chemischen Komponenten auf die entstehenden Phasen (z.B. Gasphase oder Roheisen) kann zum einen benutzerdefiniert, zum anderen durch im Reaktormodell enthaltene Algorithmen erfolgen. Die Bereitstellung der notwendigen Daten zur Berechnung der Gleichgewichte (z.B. Reaktionsenthalpien) erfolgt durch die in ASPEN Plus integrierten Datenbanken. Die Unit-Operation RGIBBS ist eines der wichtigsten Werkzeuge zur Modellierung metallurgischer Verfahren. Der Reaktor-Typ **RSTOIC** dient zur Berechnung von chemischen Reaktionen mit bekannter Stöchiometrie, d.h. Reaktionen, bei denen die Produkte und das Verhältnis von Produkten zu Edukten bekannt sind. Er wird im Rahmen der problemadäquaten Modellierung vor allem zur Abbildung von Reaktionszonen mit definiertem Verhalten und zur Zuordnung von ausgewählten Komponenten in definierte Phasen genutzt. In Abbildung 2 sind einige der in ASPEN Plus zur Darstellung von Reaktoren und Strömen verwendete Symbole dargestellt.

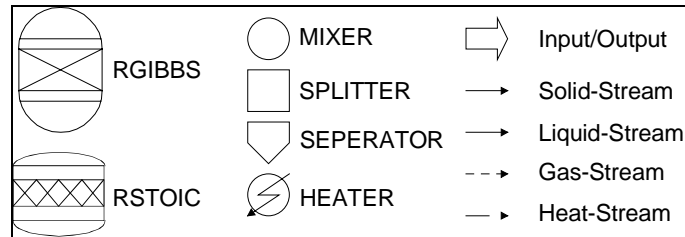


Abbildung 2
Beispiele für in ASPEN Plus verfügbare Unit-Operations

Steuerungselemente: Flowsheeting Systeme wie ASPEN Plus stellen unterschiedliche Methoden zur Steuerung zur Verfügung. Hierbei können zum einen die Variablen der im Modell enthaltenen Stoff- und Energieströme (z.B. Mengenstrom) gesteuert werden, zum anderen lassen sich aber auch Größen innerhalb der im Flowsheet enthaltenen Unit-Operations (z.B. Reaktortemperaturen) beeinflussen. Es lassen sich zwei mögliche Wege der Steuerung unterscheiden; die Steuerung mit Fortranblöcken, die auch als Feed-Forward-Kontrolle bezeichnet wird, und die mit Designspezifikationen (Feed-Back-Kontrolle). **Fortranblöcke** ermöglichen die Eingabe eigener Befehls- und Berechnungsroutinen in die Berechnungssequenz des Flowsheets. Somit lassen sich u.a. Inputvariablen berechnen und vorgeben sowie Daten während des Simulationslaufs anzeigen. Ein wichtiger Einsatzbereich ist die Steuerung von Stoffstromparametern, wenn sich der Zielwert aus den zum Berechnungszeitpunkt bekannten Daten berechnen läßt. Müssen Parameter gesteuert werden, die sich erst aus Daten berechnen lassen, die nach dem Berechnungspunkt als Ergebnisse vorliegen, werden Designspezifikationen verwendet. Mit Hilfe von **Designspezifikationen** werden für bestimmte Parameter innerhalb eines Flowsheets, die normalerweise bei der Simulation berechnet werden, Zielwerte vorgegeben, die ASPEN Plus dann durch die Variation einer oder mehrerer Simulationsvariablen einstellt. So läßt sich z.B. eine geforderte Reaktortemperatur bei der Verbrennung von Kohle mit Luft oder ein bestimmter Sauerstoffgehalt im Abgas durch Variation der Luftzufuhr erreichen. Für jede Designspezifikation muß neben dem betroffenen Parameter, sein Zielwert, eine Fehlertoleranz und ein Größenintervall für die Simulationsvariablen angegeben werden. Zur Lösung der Designspezifikation wird eine Konvergenzschleife erstellt, die in die Berechnungssequenz des Flowsheets eingeordnet und iterativ gelöst wird.

Konvergenz: Die Berechnung des Flowsheets erfolgt in ASPEN Plus nach dem sequentiell modularen Ansatz, bei dem die Unit-Operations nacheinander berechnet werden und der Output des Vorgängers als Input in den Nachfolger eingeht. Beim Auftreten von Rückführungen wird eine Konvergenzschleife in einem Konvergenzblock festgelegt, die einen der betroffenen Ströme schneidet und nach Schätzung

eines Startwertes die Zusammensetzung und thermodynamischen Größen dieses Stroms konvergiert. Das Erstellen einer Konvergenzschleife kann, bei kleineren Konvergenzschleifen, von ASPEN Plus automatisch erfolgen; liegen größere oder verschachtelte Konvergenzen vor, ist es notwendig, die Konvergenzen benutzerdefiniert vorzugeben. ASPEN Plus verfügt über sieben Konvergenzalgorithmen, von denen der geeignetste für den jeweiligen Anwendungsfall ausgewählt werden kann. Eine ausführliche Beschreibung der Algorithmen wird in den Handbüchern gegeben (ASPEN 1998). Die geeignete Auswahl des zu schneidenden Stroms und die Vorgabe sinnvoller Startwerte für die entsprechenden Größen, wie z.B. die Konzentration bestimmter Elemente im Strom, beschleunigt die Konvergenz der Berechnung.

Berechnungssequenz: Die Abfolge der im Flowsheet enthaltenen Unit-Operations, Steuerungselemente und Konvergenzroutinen wird durch die sogenannte Berechnungssequenz gesteuert. In ASPEN Plus sind Algorithmen zur Bestimmung der Sequenz enthalten, die bei kleinen Flowsheets mit wenigen Rückführungsschleifen und Verschachtelungen eingesetzt werden können. Bei großen Flowsheets mit vielen Verschachtelungen und Rückführungen ist der Einsatz von benutzerdefinierten Sequenzen angezeigt. Hierbei können auch mehrere, gegebenenfalls ineinander geschachtelte Sequenzen verwendet werden.

Sensitivitätsanalysen: Mit Hilfe von Sensitivitätsanalysen läßt sich die Sensitivität des als Flowsheet dargestellten Prozesses bei Variation ausgewählter Einflußgrößen untersuchen. Das Haupteinsatzgebiet ist die Darstellung und Untersuchung von Simulationsergebnissen in Abhängigkeit anderer Größen, z.B. der Größe eines Inputstroms oder der Konzentration einer ausgewählten Komponente. Zur Definition der Sensitivitätsanalyse im Modell werden die zu variierenden und die zu tabellierenden Variablen benannt, wobei auch hier komplexe Abhängigkeiten mit Hilfe von mathematischen Funktionen in Fortranblöcken dargestellt werden können. Die Ausgabe der Ergebnisse erfolgt graphisch oder in Tabellenform.

5 Integriertes Hüttenwerk zur Eisen- und Stahlerzeugung

Die Herstellung von Stahlhalbzeugen und Produkten erfolgt in der Regel in einem zweistufigen Produktionsprozeß. In der ersten, der metallurgischen Prozeßstufe, wird aus überwiegend oxidischen Eisenträgern flüssiger Rohstahl erzeugt. In der zweiten, weiterverarbeitenden Prozeßstufe wird der flüssige Rohstahl zunächst zu Halbzeugen vergossen und anschließend umgeformt und gegebenenfalls veredelt. Unter dem Gesichtspunkt einer Produktionplanung unter Emissionsgesichtspunkten ist es zielführend, nur die metallurgische Prozeßstufe zu betrachten. Im folgenden werden die wichtigsten Aggregate dieser Stufe kurz beschrieben und die Besonderheiten der Stahlerzeugung vor dem Hintergrund einer notwendigen Modellierung herausgearbeitet. Weiterhin werden die wichtigsten Kuppelproduktströme diskutiert. Ziel der metallurgischen Stufe eines integrierten Hüttenwerks, die schematisch in

Abbildung 3 dargestellt ist, ist die Erzeugung von flüssigem Rohstahl aus Eisenerzen unter Verwendung von Reduktionsmitteln (überwiegend Koks) und verschiedener sogenannter Zuschläge (Kalk, Legierungsmittel, ...). Es handelt sich hierbei um eine mehrstufige Produktion, in der zunächst aus den Inputströmen ($I_{SA,1} - I_{SA,n}$) wie feinkörnigen Eisenträgern (sogenannten Feinerzen und Konzentraten) und Zuschlägen das Zwischenprodukt Sinter erzeugt wird. Weiterhin werden in der Sinteranlage eine Reihe von Reststoffen verwertet, die zunächst in einer Kreislaufstoffvorbereitung konditioniert werden. Neben dem Zielprodukt Sinter fallen unter anderem ein mit Staub beladener Abgasstrom (E_{SA}) sowie ein Reststoff (Filterstaub) (R_{SA}) an. Der entstehende Sinter wird mit weiteren Einsatzmaterialien ($I_{HO,1} - I_{HO,m}$) im Hochofen zu Roheisen verarbeitet. Neben einer direkt verwertbaren Schlacke ($R_{HO,3}$), die unter anderem im Straßenbau oder bei der Zementherstellung eingesetzt werden kann, fallen zwei weitere staub- bzw. schlammförmige Reststoffe ($R_{HO,1}$ und $R_{HO,2}$) an, die teilweise in der Sinteranlage eingesetzt werden können. Der verbleibende Anteil muß entweder fremdentsorgt oder deponiert werden. Das kohlenstoffhaltige Roheisen wird im Stahlwerk unter Verwendung von Sauerstoff und Zuschlägen ($I_{SW,1} - I_{SW,k}$) zu Rohstahl verarbeitet. Hier fällt neben zwei staubförmigen Reststoffen ($R_{SW,1}$ und $R_{SW,2}$), eine Stahlwerkschlacke an, die im Straßen- und Wegebau Verwendung findet.

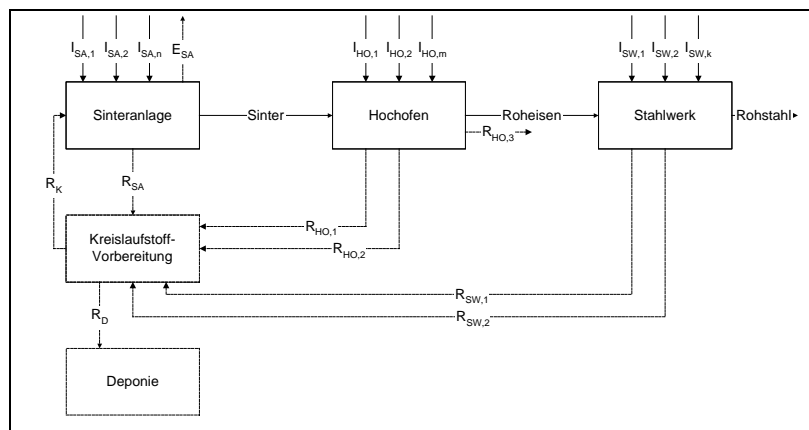


Abbildung 3
Schematischer Aufbau eines integrierten Hüttenwerks

Eine entscheidende Gemeinsamkeit der betrachteten Produktionsaggregate liegt in ihrem nichtlinearen Verhalten und in der Möglichkeit, aus einer Vielzahl unterschiedlicher Einsatzmaterialien ein Zielprodukt zu produzieren. So werden beispielsweise im Referenzwerk ca. 15 Erzsorten zur Produktion des Roheisens eingesetzt, die prinzipiell gegeneinander ausgetauscht werden können. Weiterhin ergibt sich durch die Rückführung der Reststoffe eine mehrfach zyklische Struktur des Pro-

duktionssystems. Es lassen sich aus diesen Randbedingungen u.a. die folgenden Anforderungen an zu erstellende Prozeßmodelle der Aggregate eines integrierten Hüttenwerks definieren:

- Beschreibung des gewählten Prozesses und Berechnung der Stoffströme (Menge und Zusammensetzung),
- Bestimmung der Auswirkungen des Einsatzes von Kuppelprodukten auf den vernetzten Prozeß,
- Bestimmung der durch den Kreislaufstoffeinsatz hervorgerufenen Variation der Faktorverbräuche,
- Kopplungsmöglichkeiten mit anderen Modellen und
- Beschreibung der Auswirkungen prozeßintegrierter Umweltschutzmaßnahmen und Stoffflußvariationen auf einzelne Prozesse und den vernetzten Gesamtprozeß.

6 Flowsheeting-Modelle metallurgischer Prozesse

Die Ausrichtung der einzelnen Prozeßmodelle im Spannungsfeld zwischen empirischer und grundlagenorientierter Verfahrensabbildung richtet sich nach verschiedenen Gesichtspunkten. Der zentrale Punkt ist, daß alle Prozesse problemadäquat, d.h. an den Anforderungen der Investitionsbewertung, der Kreislaufwirtschaft und der taktisch-strategischen Produktionsplanung orientiert, modellhaft abgebildet werden müssen. Unter dieser Zielsetzung ist es entscheidend, daß alle Prozeßmodelle soweit nötig grundlagenbasiert sind, und soweit möglich auf empirischen Ergebnissen aufbauen. Ein weiterer Punkt ist die verfügbare Datenlage zu einem Anlagentyp und die Komplexität des untersuchten Prozesses. Die Modellierung der einzelnen Prozesse und der in Abbildung 2 dargestellten Prozeßkette erfolgt mit dem vorgestellten Flowsheeting System ASPEN Plus. Hierbei war es nötig, eine auf metallurgische Prozesse abgestimmte Modellierungsstrategie zu entwickeln. Diese ist gemeinsam mit der Beschreibung der erstellten Prozeßmodelle und den erstellten Modellverknüpfungen in (Rentz et al. 1997) dargestellt. Am Beispiel des Hochofens soll dieses Vorgehen verdeutlicht werden. Beim Hochofen handelt es sich um einen nach dem Gegenstromprinzip arbeitenden Schachtofen, bei dem die von oben in den Ofen eingebrachten Materialien (Erze, Koks und Zuschläge) mit den von unten eingebrachten Gasen reagieren. Hierbei werden die Eisenoxide der eingebrachten Erze zu metallischem Eisen sowie einige Gangartbestandteile (z.B. Siliziumoxid) reduziert.

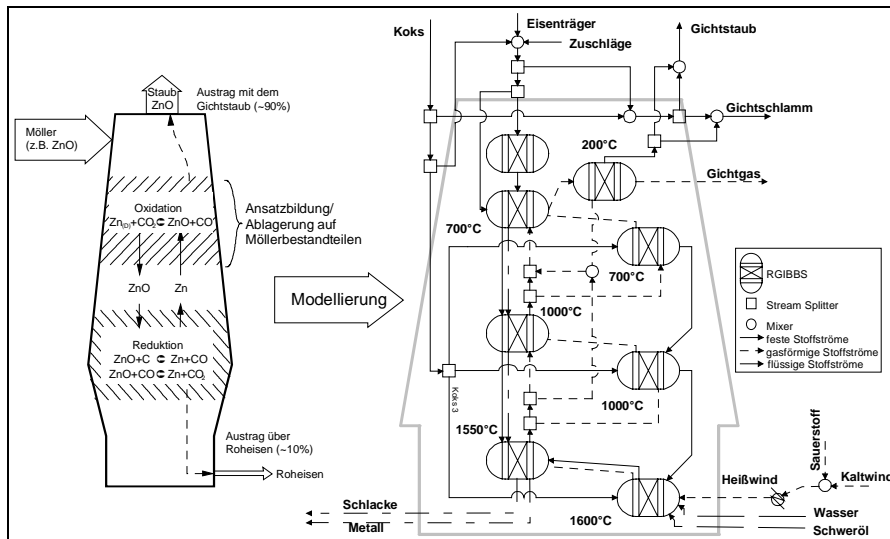


Abbildung 4
Schematische Darstellung des mit ASPEN Plus erstellten Hochofenmodells

Bedingt durch den Gegenstrom von Gas und Feststoffen und das Temperaturprofil im Ofenraum, bilden einige der in den Einsatzmaterialien enthaltenen Komponenten (in Abbildung 4 (links) am Beispiel des Zinks dargestellt) Kreisläufe aus. Diese wirken sich wiederum stark auf die Verbräuche an Energieträgern und Reduktionsmitteln (besonders Koks) aus, so daß sie im Modell abgebildet werden müssen. Daneben ist es notwendig, die Reaktionen der für das Zielprodukt (Roheisen) und die Kuppelprodukte relevanten chemischen Elemente adäquat abzubilden. Hieraus resultiert das in Abbildung 4 (rechts) schematisch dargestellte Modell eines Hochofens, das in ASPEN Plus realisiert wurde. Mit seiner Hilfe ist es möglich, die unter der gegebenen Problemstellung der Kreislaufwirtschaft benötigten technischen Daten (Faktorverbräuche, Kuppelproduktmengen und Zusammensetzungen) zu berechnen. Es besteht aus ca. 35 Unit Operations, die durch ca. 80 Stoff- und Energieströme verknüpft sind. Hierbei werden über 15 verschiedene Inputströme berücksichtigt. Die erstellten Einzelmodelle können aus bis zu 120 Unit Operations bestehen. Werden die erstellten Einzelmodelle zu einem Gesamtmodell des Hüttenwerks verknüpft und wird dieses mit dem Modell einer produktionsintegrierten Umweltschutzmaßnahme gekoppelt, ergeben sich Flowsheets mit über 300 Unit Operations und mehr als 500 Stoffströmen.

Neben der in (Spengler et al. 1998) vorgestellten Verwendung problemadäquater Flowsheeting Modelle zur techno-ökonomischen Bewertung produktionsintegrierter Umweltschutzmaßnahmen ergeben sich als weitere Einsatzbereiche der Vergleich unterschiedlicher Betriebsweisen produktionsintegrierter Umweltschutzmaßnahmen sowie die Ermittlung der Auswirkungen von Änderungen in unternehmensinternen

Verwertungskreisläufen. In Abbildung 5 ist als Beispiel die Veränderung des Verbrauchs des Inputfaktors Koks dargestellt. Dieser Auswertung liegt eine Kombination aus den Modellen der Sinteranlage und des Hochofens zugrunde (vgl. Abbildung 2). Hierbei werden die Rückführungsraten der staub-/schlammförmigen Kuppelprodukte variiert.

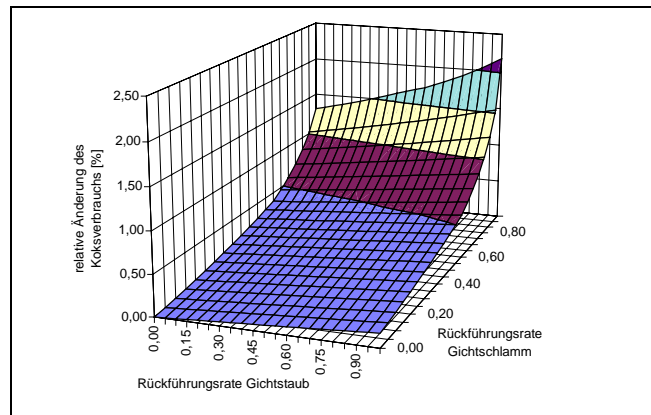


Abbildung 5
Berechnete Faktorverbräuche

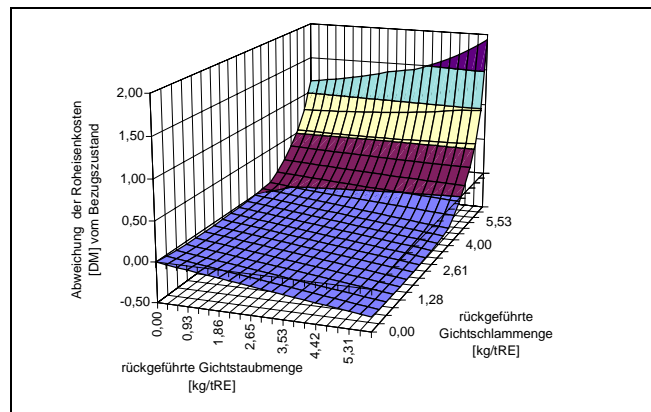


Abbildung 6
Auf Basis von Simulationsergebnissen bestimmte Änderung der Roheisenkosten

Die vorgestellte Sensitivitätsanalyse umfaßt 420 Simulationen, die unter Verwendung von ASPEN Plus 9.2 berechnet wurden. Wird das aus der Simulation bestimmte Mengengerüst der Faktorverbräuche mit dem zugehörigen Preisgerüst gekoppelt, läßt sich z.B. die in Abbildung 6 dargestellte Änderung der Produktkosten (Roheisenkosten) in Relation zu einem gewählten Ausgangszustand bestimmen. Auf Basis dieser Kostenfläche lassen sich in Verbindung mit den zuvor ermittelten technischen Kenngrößen mögliche Potentiale zur Steigerung des innerbetrieblichen Recyclings identifizieren.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Bedingt durch Vorgaben des Gesetzgebers, wie sie z.B. im Kreislaufwirtschafts- und Abfallgesetz (KrW-/AbfG) festgeschrieben sind, wird die Umsetzung neuartiger Konzepte zur Schließung von Stoffkreisläufen in der Prozeßindustrie notwendig. Der Entwurf und die Auswahl geeigneter Konzepte hierzu kann durch Prozeßmodellierung und -simulation erleichtert werden. Herkömmliche Modellierungsansätze der Ingenieur- und Wirtschaftswissenschaften sind für komplexe, vernetzte Prozesse mit nichtlinearem Verhalten nur bedingt tauglich. Die entwickelte Methodik der problemadäquaten Modellierung, die auf dem vorgestellten kommerziellen Flowsheetingsystem ASPEN Plus basiert, erweist sich als geeignet, alternative Konzepte zum integrierten Umweltschutz zu analysieren und zu vergleichen. An einem Anwendungsbeispiel aus der Eisen- und Stahlindustrie wurden die Fähigkeiten und Potentiale der entwickelten Modellierungsmethodik aufgezeigt. Neben der Analyse von Konzepten zur Kreislaufwirtschaft ermöglicht die problemadäquate Modellierung die Simulation unternehmensübergreifender Recyclingverbünde. Sie unterstützt das Auffinden geeigneter Betriebsparameter und fördert damit eine emissionsarme Produktion. Sie dient als Werkzeug zur Vorbereitung taktisch-strategischer Entscheidungen in Unternehmen, besitzt aber auch sinnvolle Anwendungen im operativen Bereich, die zukünftig verstärkt untersucht werden.

Danksagungen

Die Autoren bedanken sich beim Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie und bei der Salzgitter AG Stahl und Technologie für die Unterstützung der vorgestellten Forschungsarbeiten.

Literatur

- Lohe, B.; Futterer, E. (1995): *Stationäre Flowsheet-Simulation*, in: Schuler, H. (Hrsg.): *Prozeßsimulation*, Weinheim
- Rentz, O.; Spengler, T.; Hähre, S.; Sieverdingbeck, A. (1997): *Prozeßintegrierte Umweltschutzmaßnahmen in der Eisen- und Stahlindustrie*, Abschlußbericht des BMBF-Forschungsvorhabens 01VQ9429/0

- Sieverdingbeck, A.; Engels, B.; Spengler, T.; Rentz, O. (1998): *Determination of Technical and Economic Effects of Process Integrated Environmental Measures in the Iron and Steel Industry* Vortrag im Rahmen des UN/ECE Seminars „On Economic Effects of Clean Technologies, Energy and Waste Management in the Steel Industry
- Spengler, T.; Hähre, S.; Sieverdingbeck, A.; Rentz, O. (1998): *Stoffflußbasierte Umweltkostenrechnung zur Bewertung industrieller Kreislaufwirtschaftskonzepte*, in: Zeitschrift für Betriebswirtschaft 2/98 S. 147 - 174
- Penkuhn, T. (1997): *Umweltintegriertes Stoffstrommanagement in der Prozeßindustrie*, Frankfurt/Main
- Aspen Technology Inc. (Hrsg.) (1998): Aspen Plus User Guide, Release 10 documentation set, Cambridge
- Zeisel, H. (1996): *Mathematische Modellierung und numerische Simulation der Vorgänge im Hochofen*, Linz