

## Chemisch-physikalische Modellierung chemietechnischer Prozesse

Zur Stoff-, Massen- und Energiebilanzierung verfahrenstechnischer Anlagen bietet die chemisch-physikalische Modellierung leistungsfähige Möglichkeiten. Die Abt. Thermische Prozesstechnik arbeitet als Werkzeug mit dem Programmpaket *ChemCAD* der Fa. Chemstations (Houston, USA). Es wird genutzt für:

- Die Vorbereitung experimentell orientierter Projekte zur Abschätzung sinnvoller Versuchseinstellungen
- Die Simulation von Prozessen hinsichtlich unbekannter Betriebszustände oder anderen Einsatzstoffen durch Übernahme von Versuchsergebnissen
- Bei neuen Verfahrensideen zur Abschätzung der Machbarkeit, Aufstellung einer ersten Stoff-, Massen- und Energiebilanz sowie Änderungen verfahrenstechnischer Parameter für auf der Bilanz aufbauende kommerzielle Betrachtungen.

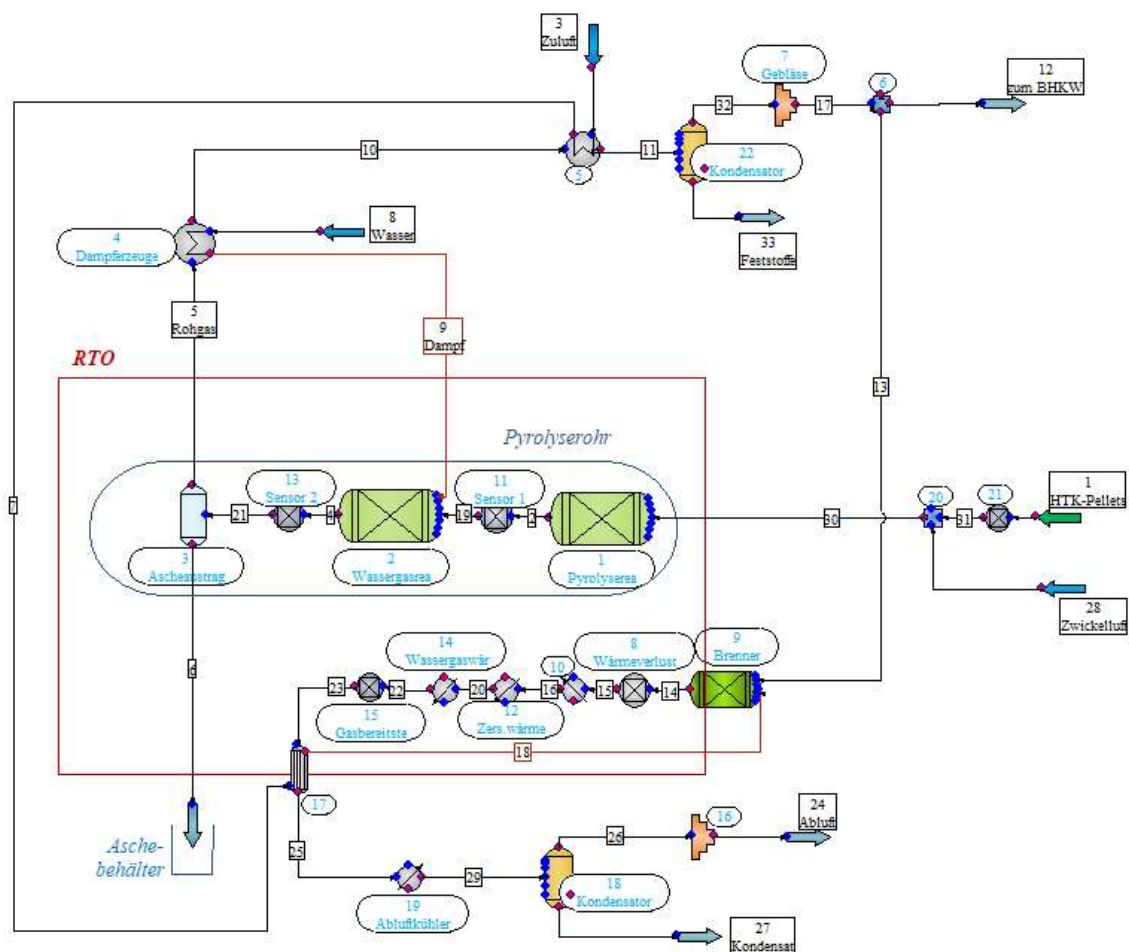
### 1. Pyrolyse kohlenstoffreicher Materialien incl. Gasbehandlung

Experimentelle Projekte mittels Pyrolyse stellen einen Schwerpunkt der Abteilung dar. Ziel ist meist die Gewinnung eines heizwertreichen Gases, von ölhaltigem Kondensat oder eines hochwertigen Kokes. Da Basis i.d.R. die Umsetzung kohlenstoffhaltiger Materialien ist, bietet sich die chemisch-physikalische Modellierung zur Versuchsvor- und -nachbereitung an. In einem Vorzeigeprojekt, nämlich die Verfahrensentwicklung des WAHRHEIT-Konzeptes mit der Fa. WAHRHEIT-Anlagenbau GmbH (Rhauderfehn) im Rahmen eines ZIM-Kooperationsvorhabens, ermöglichte die begleitende Modellierung eine effektive Versuchsplanung und -durchführung.

Die Umsetzung des realen Grundfließbildes in das Modell zeigt **Bild 1**.

Es umfasst alle wesentlichen Reaktionen und Wärmetauscher vom Biomasseeintrag bis zum Produktgas Richtung BHKW incl. Koks- und Abluftaustrag, Brenner und Dampferzeuger.

Das Beispiel ist verfahrenstechnisch komplex. Die traditionelle Stärke von ChemCAD in der Kohlenwasserstoffchemie aber kommt selbst in der Pyrolyse, wo die meisten ablaufenden Reaktionen unbekannt sind, gut zur Geltung.



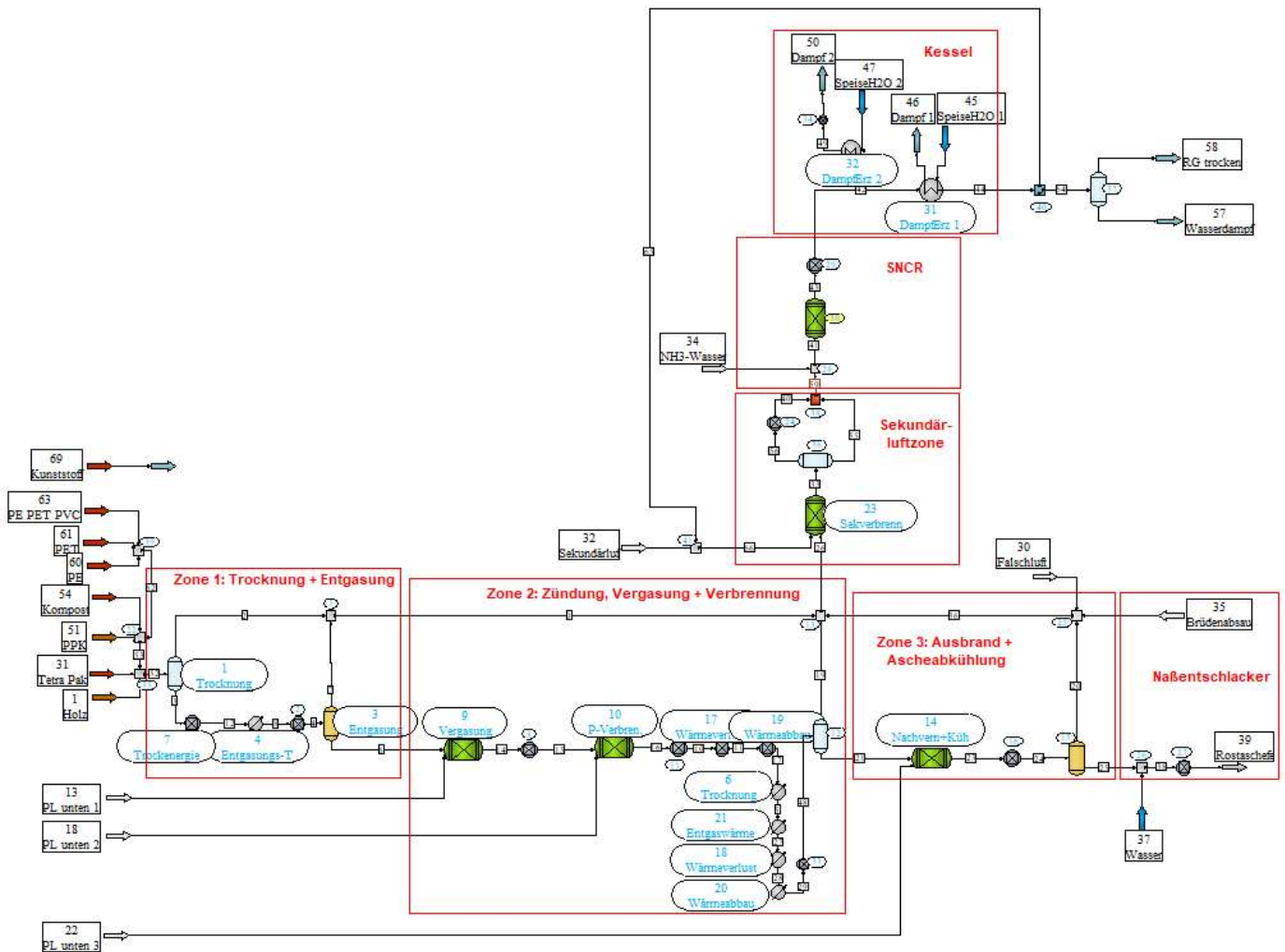
**Bild 1:** Apparate-Grundfließbild des WAHRHEIT-Konzeptes in der Modellierung [Quelle: Ab. TP]

## 2. Rostmodell für die Abfallverbrennung

Gegenüber der Pyrolyse völlig andere Randbedingungen besitzt die Abfallverbrennung auf dem Rost: Die meisten Reaktionen sind von der Stöchiometrie und vom ungefähren Umsatz her bekannt; Feuerung und Kessel sind nach bekannten Grundsätzen her konstruiert; ferner liegt viel Erfahrung aus F&E sowie dem Betrieb kommerzieller Anlagen vor. Daher kann die Modellierung auf einer guten Wissensbasis aufbauen. Die Reaktoren sind sehr genau einstellbar.

Das ChemCAD-Grundfließbild eines exemplarischen Verbrennungsrostes für Abfälle zeigt **Bild 2**. Die Strukturierung der Anlage erfolgte gemäß Zonen und Baugruppen. Als Ausgangspunkt der Rechnungen müssen die brennstofftechnischen Eigenschaften des Abfalls wie Heizwert, Elementarzusammensetzung, Asche- und Wassergehalt u.ä. bekannt sein. Dabei ist es denkbar, den Abfall als Gemisch von Fraktionen mit bekannten Einzeleigenschaften zu behandeln.

Somit ist es z.B. möglich, bei neuen Stoffen schnell die Abgaszusammensetzung als Funktion verfahrenstechnischer Einstellungen zu berechnen und Sensitivitätsanalysen durchzuführen.

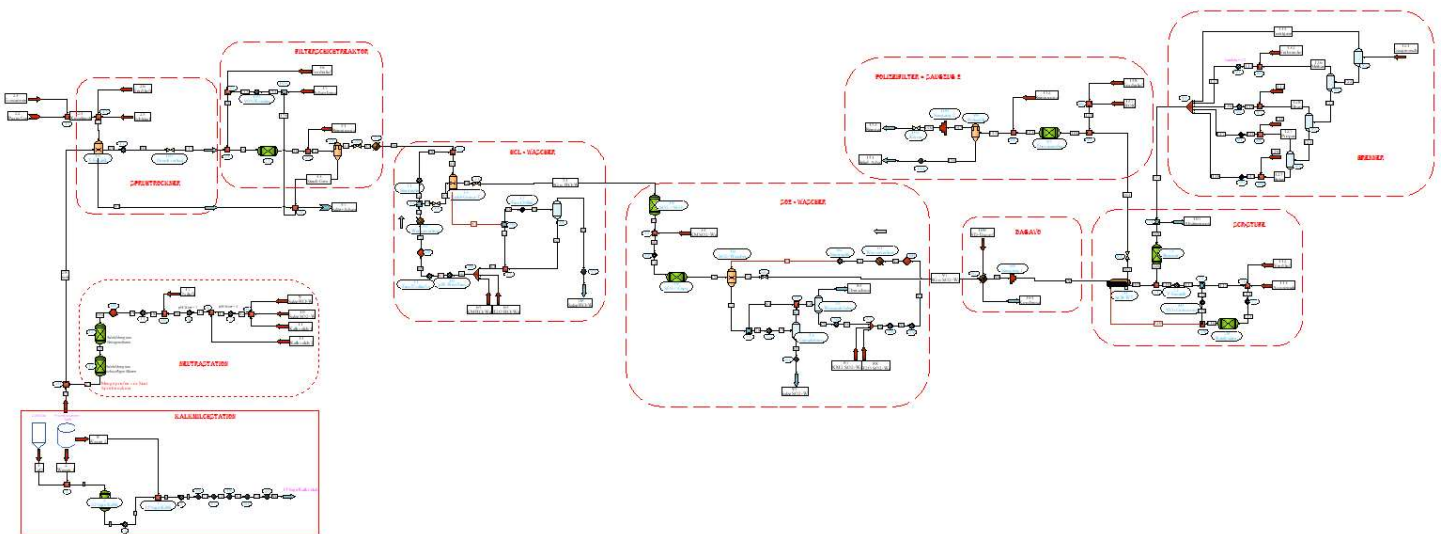


**Bild 2:** ChemCAD-Grundfließbild der Feuerung einer Abfallverbrennungsanlage mittels Rost  
[Quelle: Ab. TP]

### 3. Abgasreinigung mit Wäschern nach Müllverbrennungsanlagen

Der Gesetzgeber stellt mit der 17. BImSchV hohe Anforderungen an das Reingas, welches den Kamin verläßt. In den 90er Jahren des letzten Jahrhunderts führte dies bei Neuanlagen häufig zu chemietechnisch sehr aufwändig aufgebauten Abgasreinigungen. **Bild 3** vermittelt für eine beispielhafte Anlage davon einen Eindruck.

Das ChemCAD-Modell beinhaltet Entstaubung, Quenche, HCl- und SO<sub>2</sub>-Wäscher, SCR und Aktivkohlefilter sowie die dazugehörigen Nebenanlagen wie Kalkmilchstation und Erdgasbrenner. Somit dürfte es nahezu alles enthalten, was technisch möglich ist. Für reale Anlagen sind dann Abstriche relativ einfach möglich.



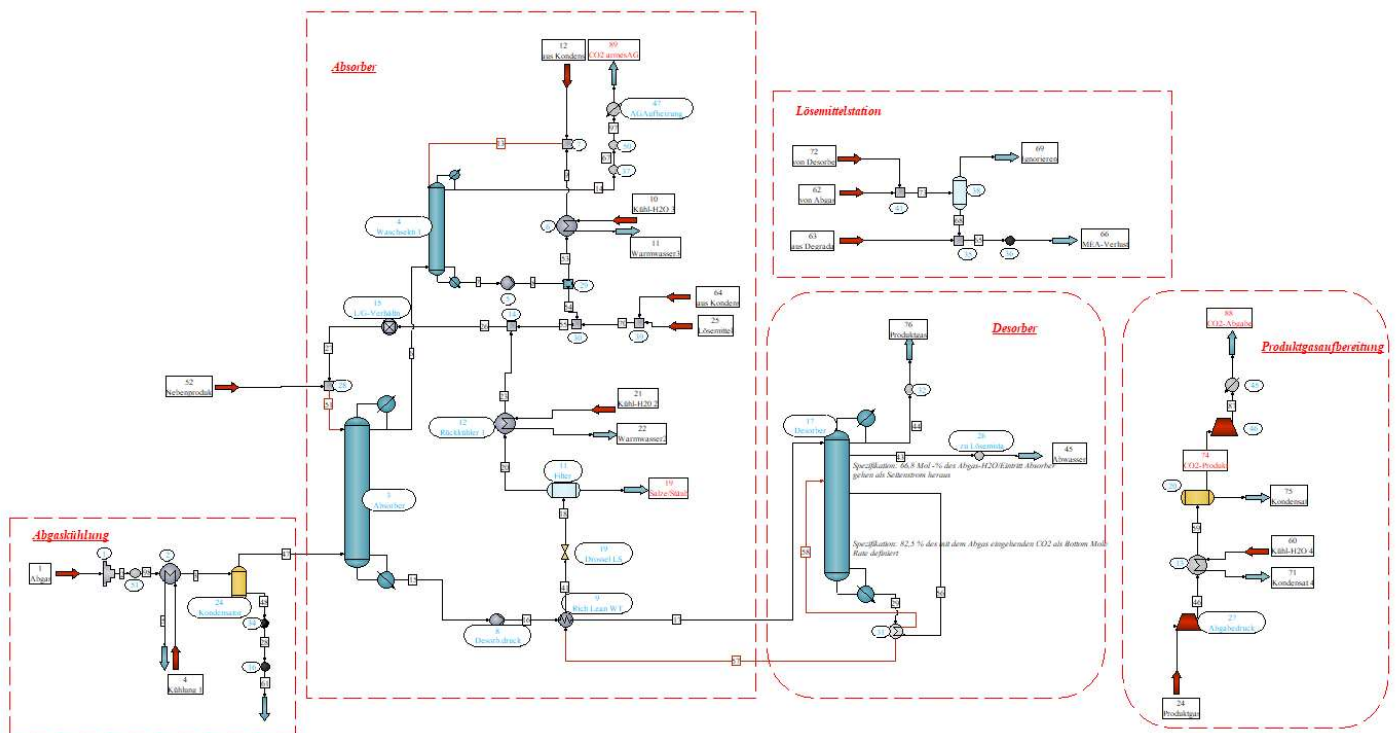
**Bild 3:** Grundfließbild einer Abgasreinigungsstrecke mit Wäschern, SCR und Nebenanlagen in ChemCAD [Quelle: Ab. TP]

#### 4. CO<sub>2</sub>-Wäsche mit Aminen

In Deutschland und durch die EU wird die CO<sub>2</sub>-Abscheidung aus dem Abgas von Verbrennungsanlagen politisch und mit hohem Zeitdruck für die Betreiber vorangetrieben. Eine Möglichkeit auf dem Stand der Technik ist die Aminwäsche. Im Rahmen eines vom BMWK geförderten Verbundvorhabens entstand bei CUTEC zwecks Versuchsbegleitung ein ChemCAD-Modell (s. **Bild 4**).

Es basiert auf einer extra für Amine programmierten Thermodynamik. Für die apparatetechnische Umsetzung wurde, auf EU-Ebene reichlich vorhandene, F&E-Projekte zurückgegriffen. So entstand eine praxisnahe Struktur, bestehend aus Abgaskühlung, Absorber mit NH<sub>3</sub>-Stufe, Desorber und Produktgasaufbereitung.

F&E-Aufgaben der Zukunft dürften die energetische Optimierung, der Einsatz neuer Lösungsmittel und die Produktgasaufbereitung sein. Da noch kein CO<sub>2</sub>-Abnahmemarkt etabliert, der Energiebedarf bisher hoch und die Stabilität der Lösungsmittel verbesserungswürdig ist, kann die chemisch-physikalische Modellierung sicher eine kostengünstige Begleitung von experimenteller Entwicklung und kommerzieller Planungen sein.



**Bild 4:** ChemCAD-Grundfließbild einer Aminwäsche nach der Abgasreinigung einer Abfallverbrennungsanlage [Quelle: Ab. TP]

### Ansprechpartner

Dr.-Ing. Stefan Vodegel

- Abt. Thermische Prozesstechnik -

**Tel.:** +49 5323 72-6122

**email:** stefan.vodegel@cutec.de