

BestMasters

Oliver Schmitz

Modellbasierte Untersuchung der CO₂-Abscheidung aus Kraftwerksabgasen

Vergleich zweier Alkanolamine

 Springer Vieweg

BestMasters

Mit „BestMasters“ zeichnet Springer die besten Masterarbeiten aus, die an renommierten Hochschulen in Deutschland, Österreich und der Schweiz entstanden sind. Die mit Höchstnote ausgezeichneten Arbeiten wurden durch Gutachter zur Veröffentlichung empfohlen und behandeln aktuelle Themen aus unterschiedlichen Fachgebieten der Naturwissenschaften, Psychologie, Technik und Wirtschaftswissenschaften.

Die Reihe wendet sich an Praktiker und Wissenschaftler gleichermaßen und soll insbesondere auch Nachwuchswissenschaftlern Orientierung geben.

Oliver Schmitz

Modellbasierte Untersuchung der CO₂-Abscheidung aus Kraftwerksabgasen

Vergleich zweier Alkanolamine

Oliver Schmitz
Paderborn, Deutschland

BestMasters

ISBN 978-3-658-12447-2

ISBN 978-3-658-12448-9 (eBook)

DOI 10.1007/978-3-658-12448-9

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Springer Vieweg

© Springer Fachmedien Wiesbaden 2016

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsgesetz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung des Verlags. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Der Verlag, die Autoren und die Herausgeber gehen davon aus, dass die Angaben und Informationen in diesem Werk zum Zeitpunkt der Veröffentlichung vollständig und korrekt sind. Weder der Verlag noch die Autoren oder die Herausgeber übernehmen, ausdrücklich oder implizit, Gewähr für den Inhalt des Werkes, etwaige Fehler oder Äußerungen.

Gedruckt auf säurefreiem und chlorfrei gebleichtem Papier

Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH ist Teil der Fachverlagsgruppe
Springer Science+Business Media (www.springer.com)

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis.....	V
Abbildungsverzeichnis.....	IX
Tabellenverzeichnis.....	XV
Symbolverzeichnis.....	XIX
Abkürzungsverzeichnis.....	XXIII
1 Einleitung.....	1
1.1 Motivation.....	1
1.2 Stand der Technik.....	3
1.3 Aufgabenstellung & Zielsetzung.....	5
1.4 Vorgehensweise.....	7
2 Theoretische Grundlagen.....	9
2.1 Modellierungskonzepte reaktiver Trennverfahren.....	9
2.1.1 Generelle Aspekte.....	9
2.1.2 Gleichgewichtsstufenmodell.....	10
2.1.3 Kinetisch basiertes Modell.....	12
2.1.4 Prozesssimulator.....	18
2.2 Modellparameter.....	21
2.2.1 Thermodynamische Gleichgewichte.....	21
2.2.2 Chemische Gleichgewichte.....	24
2.2.3 Physikalische Stoffdaten.....	26
2.2.4 Stofftransport- und fluiddynamische Eigenschaften.....	30
2.2.5 Reaktionskinetiken.....	35

2.3	Alkanolamine als chemische Absorptionsmittel für CO ₂	36
2.3.1	Definition - Alkanolamine	37
2.3.2	Beschreibung der verwendeten Absorbens	37
3	Modellaufbau	39
3.1	Prozessdarstellung	39
3.2	Reaktionssysteme	42
3.2.1	MEA-CO ₂ -System	44
3.2.2	AMP-CO ₂ -System	45
3.3	Übersicht vorgegebener Prozessparameter	48
3.4	Numerische Diskretisierung	49
3.4.1	MEA-CO ₂ -System	52
3.4.2	AMP-CO ₂ -System	56
3.5	Modellvalidierung	62
3.5.1	MEA-CO ₂ -System	62
3.5.2	AMP-CO ₂ -System	65
4	Parameterstudien – MEA vs. AMP	73
4.1	Betrachtung der <i>base case</i> Simulationen	73
4.1.1	Kohlebefeuerter Kraftwerksprozess	76
4.1.2	Gasbefeuerter Kraftwerksprozess	81
4.2	Sensitivitätsanalyse – Untersuchung ausgewählter Einflussparameter	85
4.2.1	Absorberhöhe	86
4.2.2	L/G-Verhältnis	91
4.2.3	Temperatur im Reboiler	95
4.2.4	Druck im Desorber	99
4.2.5	Konzentration des Alkanolamins in Lösung	103

4.2.6	Temperatur des eintretenden Absorbens.....	108
4.3	Parameteroptimierung.....	112
4.3.1	Formulierung der Ziele.....	112
4.3.2	Vorgehensweise zur Wahl der Parameter.....	114
4.3.3	Tabellarische Ergebnisübersicht.....	116
4.3.4	Illustration der Ergebnisse.....	117
5	Fazit.....	123
5.1	Diskussion der Ergebnisse.....	123
5.2	Kritische Gesamtbewertung.....	128
5.3	Handlungsempfehlung.....	131
6	Zusammenfassung und Ausblick.....	135
7	Literaturverzeichnis.....	139

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Gleichgewichtsstufenmodell vs. rate-based Modell.....	12
Abbildung 2:	Prinzipiskizze des Zweifilmmodells.....	13
Abbildung 3:	Strukturformel des MEA (links) sowie des AMP (rechts).....	37
Abbildung 4:	Genereller Aufbau eines CO ₂ -Absorption-Desorption-Kreislauf- prozesses.....	39
Abbildung 5:	Modell des CO ₂ -Absorption-Desorption-Kreislaufprozesses in der Simulationsumgebung Aspen Custom Modeler®.....	40
Abbildung 6:	Konzentrationsprofile im Gas- und Flüssigfilm für instantan ablaufende (links) und schnell ablaufende (pseudo-first order) Reaktionen (rechts) unter Anwendung der Film-Theorie.....	50
Abbildung 7:	Absorptionsrate Ψ_{abs} als Funktion der Anzahl axialer Diskrete Nax für den Absorber des MEA-CO ₂ -Systems.	52
Abbildung 8:	Absorptionsrate Ψ_{abs} als Funktion der Anzahl radialer Filmsegmente Nfilm sowie des Distributionsfaktors m für den Absorber des MEA-CO ₂ -Systems (Kohle-Fall).....	53
Abbildung 9:	Absorptionsrate Ψ_{abs} als Funktion der Anzahl radialer Filmsegmente Nfilm sowie des Distributionsfaktors m für den Absorber des MEA-CO ₂ -Systems (Gas-Fall).....	54
Abbildung 10:	Desorptionsrate Ψ_{des} als Funktion der Anzahl axialer Diskrete Nax für den Desorber des MEA-CO ₂ -Systems (Kohle-Fall).....	55
Abbildung 11:	Desorptionsrate Ψ_{des} als Funktion der Anzahl radialer Filmsegmente Nfilm sowie des Distributionsfaktors m für den Desorber des MEA-CO ₂ -Systems (Kohle-Fall).....	55
Abbildung 12:	Absorptionsrate Ψ_{abs} als Funktion der Anzahl axialer Diskrete Nax für den Validierungsabsorber des AMP-CO ₂ -Systems.....	56

Abbildung 13: Absorptionsrate Ψ_{abs} als Funktion der Anzahl radialer Filmsegmente N_{film} sowie des Distributionsfaktors m für den Validierungsabsorber des AMP-CO ₂ -Systems.....	57
Abbildung 14: Absorptionsrate Ψ_{abs} als Funktion der Anzahl axialer Diskrete N_{ax} für den Absorber des AMP-CO ₂ -Systems.	58
Abbildung 15: Absorptionsrate Ψ_{abs} als Funktion der Anzahl radialer Filmsegmente N_{film} sowie des Distributionsfaktors m für den Absorber des AMP-CO ₂ -Systems (Kohle-Fall).	59
Abbildung 16: Absorptionsrate Ψ_{abs} als Funktion der Anzahl radialer Filmsegmente N_{film} sowie des Distributionsfaktors m für den Absorber des AMP-CO ₂ -Systems (Gas-Fall).	59
Abbildung 17: Desorptionsrate Ψ_{des} als Funktion der Anzahl axialer Diskrete N_{ax} für den Desorber des AMP-CO ₂ -Systems (Kohle-Fall).....	60
Abbildung 18: Desorptionsrate Ψ_{des} als Funktion der Anzahl radialer Filmsegmente N_{film} sowie des Distributionsfaktors m für den Desorber des AMP-CO ₂ -Systems (Kohle-Fall).....	61
Abbildung 19: Parity Plot - Absorptionsrate Ψ_{abs} aller Testläufe A1 – A10.....	63
Abbildung 20: Parity Plot – Austrittstemperatur Gas aller Testläufe A1 – A10.	64
Abbildung 21: Parity Plot – Austrittstemperatur Absorbens aller Testläufe A1 – A10.	64
Abbildung 22: CO ₂ -Konzentrationsprofile für die simulierten (Linien) und experimentellen (Symbole) Ergebnisse für R4, R7 und R9 in der Gas- (links) und Flüssigphase (rechts).....	68
Abbildung 23: Parity Plot - Absorptionsrate Ψ_{abs} aller Testläufe R1 – R11.....	69
Abbildung 24: Temperaturprofile für die simulierten (Linien) und experimentellen (Symbole) Ergebnisse für R4 (links), R7 (Mitte) und R9 (rechts).....	70
Abbildung 25: Parity Plot – Austrittstemperatur Gas aller Testläufe R1 – R11.	71

Abbildung 26: Parity Plot - Austrittstemperatur Absorbens aller Testläufe R1 - R11.	72
Abbildung 27: CO ₂ -Konzentrationsprofile des base case Kohle-Falls im <i>Absorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 9).....	76
Abbildung 28: CO ₂ -Konzentrationsprofile des base case Kohle-Falls im <i>Desorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 9).....	76
Abbildung 29: Temperaturprofile des base case Kohle-Falls im <i>Absorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 9).....	77
Abbildung 30: Temperaturprofile des base case Kohle-Falls im <i>Desorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 9).....	78
Abbildung 31: Flüssig- (links) und Gasbelastung (rechts) im <i>Absorber</i> für den base case Kohle-Fall (Bedingungen laut Tabelle 9).	79
Abbildung 32: CO ₂ -Konzentrationsprofile des base case Gas-Falls im <i>Absorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 9).....	81
Abbildung 33: CO ₂ -Konzentrationsprofile des base case Gas-Falls im <i>Desorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 9).....	81
Abbildung 34: Temperaturprofile des base case Gas-Falls im <i>Absorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 9).....	83
Abbildung 35: Temperaturprofile des base case Gas-Falls im <i>Desorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 9).....	83

Abbildung 36: Flüssig- (links) und Gasbelastung (rechts) im <i>Absorber</i> für den base case Gas-Fall (Bedingungen laut Tabelle 9).....	84
Abbildung 37: Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Absorberhöhe (MEA).....	87
Abbildung 38: Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation der Absorberhöhe (MEA).....	88
Abbildung 39: Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Absorberhöhe (AMP).....	89
Abbildung 40: Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation der Absorberhöhe (AMP).....	89
Abbildung 41: Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation des L/G-Verhältnisses (MEA).....	91
Abbildung 42: Darstellung energetischen Effizienz bei Variation des L/G-Verhältnisses (MEA).....	92
Abbildung 43: Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation des L/G-Verhältnisses (AMP).....	93
Abbildung 44: Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation des L/G-Verhältnisses (AMP).....	93
Abbildung 45: Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Reboiler-Temp. (MEA).....	96
Abbildung 46: Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation der Reboiler-Temp. (MEA).....	96
Abbildung 47: Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Reboiler-Temp. (AMP).....	97
Abbildung 48: Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation der Reboiler-Temp. (AMP).....	98
Abbildung 49: Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation des Absorber-Druckes (MEA).....	100

Abbildung 50:	Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation des Absorber-Druckes (MEA).....	100
Abbildung 51:	Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation des Absorber-Druckes (AMP).....	101
Abbildung 52:	Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation des Absorber-Druckes (AMP).....	102
Abbildung 53:	Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Amin-Konz. (MEA).....	105
Abbildung 54:	Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation der Amin-Konzentration (MEA).....	105
Abbildung 55:	Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Amin-Konz. (AMP).....	106
Abbildung 56:	Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation der Amin-Konzentration (AMP).....	107
Abbildung 57:	Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Abs.-Temperatur (MEA).....	109
Abbildung 58:	Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation der Abs.-Temperatur (MEA).....	110
Abbildung 59:	Darstellung der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Abs.-Temperatur (AMP).....	110
Abbildung 60:	Darstellung der energetischen Effizienz bei Variation der Abs.-Temperatur (AMP).....	111
Abbildung 61:	CO ₂ -Konzentrationsprofile des optimierten Kohle-Falls im <i>Absorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 35).....	117
Abbildung 62:	CO ₂ -Konzentrationsprofile des optimierten Kohle-Falls im <i>Desorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 35).....	118

Abbildung 63: Temperaturprofile des optimierten Kohle-Falls im <i>Absorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 35).	118
Abbildung 64: Temperaturprofile des optimierten Kohle-Falls im <i>Desorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 35).	119
Abbildung 65: Flüssig- (links) und Gasbelastung (rechts) im <i>Absorber</i> für den optimierten Kohle-Fall (Bedingungen laut Tabelle 35).	119
Abbildung 66: CO ₂ -Konzentrationsprofile des optimierten Gas-Falls im <i>Absorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 35).	120
Abbildung 67: CO ₂ -Konzentrationsprofile des optimierten Gas-Falls im <i>Desorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 35).	120
Abbildung 68: Temperaturprofile des optimierten Gas-Falls im <i>Absorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 35).	121
Abbildung 69: Temperaturprofile des optimierten Gas-Falls im <i>Desorber</i> für das Absorbens (links) und das Gas (rechts) (Bedingungen laut Tabelle 35).	121
Abbildung 70: Flüssig- (links) und Gasbelastung (rechts) im <i>Absorber</i> für den optimierten Gas-Fall (Bedingungen laut Tabelle 35).	122

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Thermodynamische Eigenschaften und die entsprechenden Berechnungsmethoden.....	20
Tabelle 2:	Auswahl einiger Stoffdaten von MEA und AMP.....	38
Tabelle 3:	Koeffizienten zur Berechnung der temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten (MEA-System).....	45
Tabelle 4:	Koeffizienten zur Berechnung der temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten (AMP-System).....	47
Tabelle 5:	Übersicht der Abgasstromwerte.....	48
Tabelle 6:	Experimentelle Ergebnisse für das MEA-CO ₂ -System gemäß (Notz, 2010).....	62
Tabelle 7:	Experimentelle Ergebnisse für das AMP-CO ₂ -System.....	65
Tabelle 8:	Vergleich experimenteller und modellbasierter Absorptionsrate Ψ_{abs}	69
Tabelle 9:	Übersicht der base case Simulationen.....	74
Tabelle 10:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Absorberhöhe (MEA).....	87
Tabelle 11:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation der Absorberhöhe (MEA).....	88
Tabelle 12:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Absorberhöhe (AMP).....	88
Tabelle 13:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation der Absorberhöhe (AMP).....	89
Tabelle 14:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation des L/G-Verhältnisses (MEA).....	91
Tabelle 15:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation des L/G-Verhältnisses (MEA).....	92

Tabelle 16:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation des L/G-Verhältnisses (AMP).....	92
Tabelle 17:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation des L/G-Verhältnisses (AMP).....	93
Tabelle 18:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Reboiler-Temperatur (MEA).....	95
Tabelle 19:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation der Reboiler-Temperatur (MEA).....	96
Tabelle 20:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Reboiler-Temperatur (AMP).....	97
Tabelle 21:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation der Reboiler-Temperatur (AMP).....	97
Tabelle 22:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation des Absorber-Druckes (MEA).	99
Tabelle 23:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation des Absorber-Druckes (MEA).	100
Tabelle 24:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation des Absorber-Druckes (AMP).....	101
Tabelle 25:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation des Absorber-Druckes (AMP).....	101
Tabelle 26:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Amin-Konzentration (MEA).....	104
Tabelle 27:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation der Amin-Konzentration (MEA).....	105
Tabelle 28:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Amin-Konzentration (AMP).....	106
Tabelle 29:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation der Amin-Konzentration (AMP).....	106

Tabelle 30:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Abs.-Temperatur (MEA).....	109
Tabelle 31:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation der Abs.-Temperatur (MEA).....	109
Tabelle 32:	Ergebnisse der Ab-/Desorptionseffizienz bei Variation der Abs.-Temperatur (AMP).....	110
Tabelle 33:	Ergebnisse der energetischen Effizienz bei Variation der Abs.-Temperatur (AMP).....	111
Tabelle 34:	Zielgrößen der Absorptionsraten.....	113
Tabelle 35:	Übersicht der optimierten Simulationen.....	116
Tabelle 36:	Vergleich ausgewählter Eigenschaften beider Alkanolamine (MEA, AMP).....	127