

Integration und strukturelle Optimierung verschiedener chemischer Syntheserouten zur Abgasnutzung bestehender Stahlproduktionsanlagen

7 - Industrie

Matthias Sadlowski¹⁽¹⁾, Mathias van Beek⁽¹⁾

⁽¹⁾Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik (UMSICHT)

Motivation und zentrale Fragestellung

Neben dem Energieerzeugungssektor ist die kohlebasierte Stahlproduktion der zweitgrößte industrielle Emittent des klimaschädlichen Treibhausgases Kohlendioxid [1]. Eine Vermeidung dieser Emission ist spätestens seit dem Pariser Klimaabkommen von 2015 auch ein Ziel von politischem Interesse. Für diesen Wandel wird im Forschungsprojekt *Carbon2Chem*[®] ein neuartiger Verbund aus Stahl- und Chemieproduktion geschaffen. Hier arbeiten interdisziplinäre Partner aus Industrie und Wissenschaft an einer wirtschaftlichen und ökologischen Lösung dieser Problemstellung [2]. Die kohlenstoffhaltigen Prozessgase aus einem bestehenden Stahlwerk sollen in verschiedene kohlenstoffbasierte Wertprodukte transformiert werden, anstatt sie zur lokalen Strom- und Wärmeerzeugung im Werk zu verwenden.

Die grundlegende Fragestellung dieser Arbeit ist die optimale Struktur und Technologieauswahl für verschiedene Syntheserouten anhand von energiewirtschaftlichen Szenarien. Die Ausgangssituation beinhaltet das Modell zur Methanolsynthese aus den Prozessgasen und einer regenerativen Wasserstoffquelle, die am Stromnetz angeschlossen ist. Das Ziel der Arbeit ist es, das Modell um die Herstellung von Düngemitteln, Kunststoffen und weiteren Kraftstoffen zu erweitern und ein wirtschaftliches und nachhaltiges Prozesskonzept für verschiedene Szenarien darzulegen.

Ausgangssituation

Es wird nicht das betriebliche Optimum einer Teilanlage, sondern ein globales Optimum der Struktur des Gesamtsystems bestimmt. Um die Komplexität und die Flexibilität der einzelnen Prozesse, sowie den wirtschaftlichen und nachhaltigen Nutzen des Gesamtsystems mit hinreichender Genauigkeit nachzubilden, hat sich im Projektverlauf die multikriterielle gemischt-ganzzahlige Optimierung (mixed-integer linear programming, MILP) als geeignetes Werkzeug erwiesen [3,4]. Diese Methodik sorgt dafür, dass bei einer konvexen Modellbeschreibung ein einzelnes globales Optimum durch einen hoch performanten Solver in relativ kurzer Zeit berechnet werden kann. Das Modell beinhaltet eine Betrachtung aller Massen- und Energieströme der jeweiligen Teilanlagen. Die Anlagen werden mit einer linearen Zielfunktion einer multikriteriellen Betrachtung unterzogen, um die Wirtschaftlichkeit und Nachhaltigkeit zu bewerten und daraus das optimale Prozesskonzept zu ermitteln. Implementiert sind Gasspeicher, die Gasaufbereitung und die chemische Synthese für das Wertprodukt Methanol. Des Weiteren ist der betriebsinterne Kraftwerkspark zur Eigen- und Fremdversorgung mit Strom und Wärme, sowie eine regenerative und flexible Wasserstoffherzeugung eingebunden.

Modellerweiterung und Zielsetzung

In Zukunft wird das bestehende MILP-Modell um weitere Syntheserouten für ein höheres Produktspektrum erweitert. Das Produkt Harnstoff ist zum Beispiel auf dem Düngemittelmarkt stark etabliert [5]. Zudem bietet es das Potential, CO₂ direkt und zusätzlich den Stickstoff aus den Prozessgasen einzubinden. Diese Synthese benötigt einen hohen Wasserstoffbedarf, der elektrolytisch aus der multikriteriellen Betrachtung wirtschaftlich und nachhaltig hergestellt werden muss. Ein Vergleich verschiedener Technologien zur Wasserstoffherstellung ist daher essentiell. Es werden mehrere Technologien mit einer Superstruktur in das mathematische Modell integriert und anhand von ausgewählten Szenarien und ihren individuellen technologischen Randbedingungen miteinander verglichen. Dadurch kann das optimale Prozesskonzept für verschiedene Szenarien bestimmt werden. Ein schematischer Ablauf der Superstrukturoptimierung ist in Abbildung 1 skizziert. Zusätzlich zur Harnstoffsynthese werden die Vorprodukte für die Herstellung von Polymeren implementiert. Die Polymersynthese ist ein sensibler Prozess, der keine großen Lastwechsel bei gleichbleibender Produktqualität zulässt. Für einen sicheren Betrieb muss daher eine konstante Versorgung

¹ Jungautor, Fraunhofer UMSICHT, Osterfelder Str. 3, 46047 Oberhausen, Telefon: +49 208 8598 1580
E-Mail: matthias.sadlowski@umsicht.fraunhofer.de

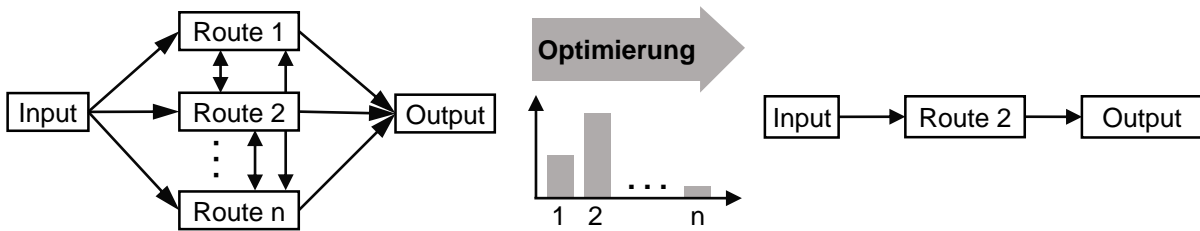


Abbildung 1: Exemplarischer Ablauf einer Superstrukturoptimierung zur optimalen Technologieauswahl

mit Edukten in vordefinierter Reinheit vorliegen. Hierbei werden die Anlagen für die großtechnisch eingesetzten Vorprodukte für Polycarbonate (DPC) und Polyurethane (TDI) modelliert. Bei der Polymersynthese werden Edukte verwendet, die sich nicht aus den Prozessgasen des Stahlwerks extrahieren lassen. Der Ansatz der wirtschaftlichen Betrachtung, soll daher über einen externen Zukauf oder eine interne Erzeugung, wie z. B. Chlor aus der Chlor-Alkali-Elektrolyse, erfolgen. Weitere zu untersuchenden Syntheserouten sind die Herstellung von den höheren Alkoholen Ethanol, Propanol und Butanol, sowie das Kraftstoffzusatzmittel Oxymethylenether (OME). Alle beschriebenen Prozesse und Produkte besitzen diverse individuelle technologische Charakteristiken, die es im Rahmen der Arbeit zu identifizieren und hinreichend genau zu modellieren gilt. In Abbildung 2 ist ein grobes Strukturbild zur Übersicht der am relevantesten Massen- und Energieströme der übergeordneten Hauptmodelle grafisch dargestellt. Der Eingang besteht aus den ins Modell einfließenden Daten, wie beispielsweise Marktszenarien der Edukte und Produkte, Prozessgasmassenströmen etc. und der Ausgang sind die entstehenden Produkte des Gesamtsystems.

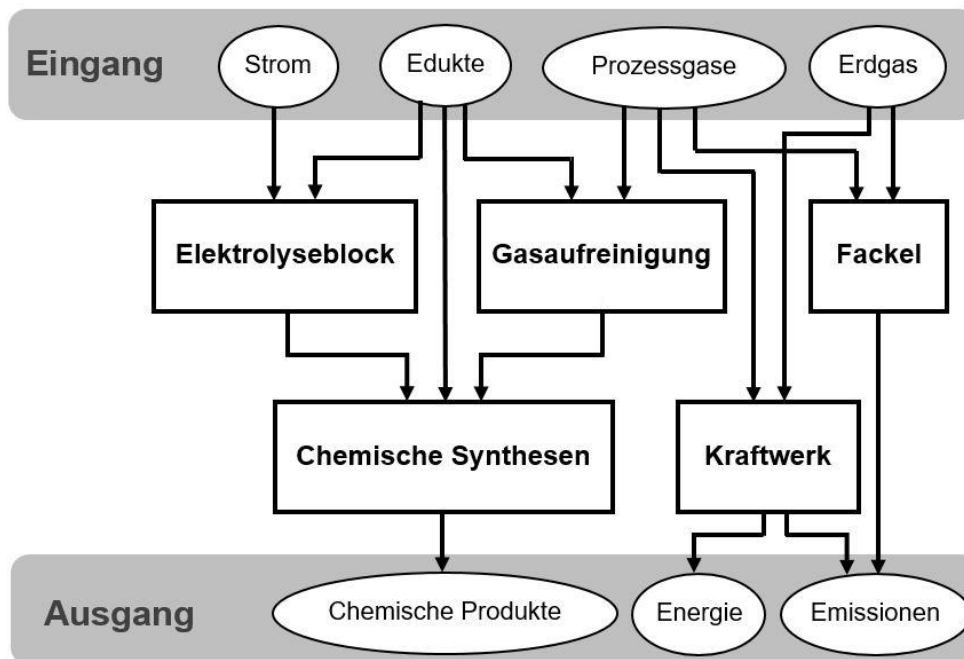


Abbildung 2: Stark vereinfachtes Strukturbild der chemischen Prozessgasnutzung aus dem Stahlwerk.

Literatur

- [1] IEA (International Energy Agency), "Energy Technology Transitions for Industry - Strategy for the Next Industrial Revolution", Paris, 2009
- [2] Hiesinger, H. Pressekonferenz Carbon2Chem, „Carbon2Chem: Branchenübergreifende Innovation für Klimaschutz und Energiewende“, Duisburg, 2016
- [3] van Beek, M. "A review of Mathematical Programming in Integrated Iron- and Steelmaking", Chemie Ingenieur Technik, 2018
- [4] Kallrath, J. „Gemischt-ganzzahlige Optimierung: Modellierung in der Praxis“, Springer, 2013
- [5] Stießel, S., Berger, A., Fernández Sanchis, E.M. and Ziegmann, M. „Methodology for the Evaluation of CO₂-Based Syntheses by Coupling Steel Industry with Chemical Industry“, Chemie Ingenieur Technik, 2018