

**DBFZ Report Nr. 5**

**Optimierung und Bewertung von Anlagen zur  
Erzeugung von Methan, Strom und Wärme aus  
biogenen Festbrennstoffen**

Stefan Rönsch

**Optimierung und Bewertung von Anlagen zur  
Erzeugung von Methan, Strom und Wärme aus biogenen  
Festbrennstoffen**

Vom Promotionsausschuss der  
Technischen Universität Hamburg-Harburg  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)  
genehmigte Dissertation

von  
Stefan Rönsch

aus  
Kaltenkirchen

2011

Gutachter:  
Prof. Dr.-Ing. Martin Kaltschmitt  
Prof. Dr.-Ing. Georg Fieg

Tag der mündlichen Prüfung:  
13. Juli 2011

## **Danksagung**

Die letzten Jahre, in denen diese Arbeit entstand, waren von vielen Gesprächen und Diskussionen auf fachlicher und persönlicher Ebene geprägt. Nachfolgende Personen möchte ich in diesem Zusammenhang besonders erwähnen.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr.-Ing. Martin Kaltschmitt, der die Betreuung dieser Arbeit mit viel persönlichem Engagement wahrnahm und seinen Finger in zahlreichen Diskussionen auf die wunden Punkte der Arbeit legte. Weiterhin möchte ich meinen Kollegen und Kolleginnen am Deutschen BiomasseForschungsZentrum danken, die sowohl im Büro als auch am Kaffeeautomaten stets ein offenes Ohr für mich hatten. Schließlich und von ganzem Herzen danke ich meiner Freundin und meiner Familie für ihr Verständnis, ihre Unterstützung und Geduld in einer teilweise sehr nervenaufreibenden Zeit.

Stefan Rönsch



## Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis .....</b>	<b>V</b>
<b>1 Einleitung.....</b>	<b>1</b>
1.1 Hintergrund und Problemstellung.....	1
1.2 Zielstellung und Aufbau .....	3
<b>2 Technologien.....</b>	<b>5</b>
2.1 Bereitstellung von SNG und Wärme .....	5
2.1.1 Biomassevorbehandlung .....	5
2.1.1.1 Mechanische Verfahren.....	5
2.1.1.2 Thermische Verfahren .....	6
2.1.1.3 Thermo-chemische Verfahren .....	6
2.1.2 Biomassevergasung.....	7
2.1.2.1 Festbettverfahren .....	8
2.1.2.2 Wirbelschichtverfahren .....	8
2.1.2.3 Flugstromverfahren .....	9
2.1.2.4 Sonderbauverfahren.....	10
2.1.3 Gasreinigung .....	10
2.1.3.1 Partikelentfernung .....	10
2.1.3.2 Teerentfernung .....	12
2.1.3.3 Schwefelentfernung.....	13
2.1.3.4 Stickstoffentfernung .....	13
2.1.3.5 Halogenentfernung .....	14
2.1.3.6 Alkalientfernung .....	14
2.1.4 Methanisierung.....	14
2.1.4.1 Festbettverfahren .....	15
2.1.4.2 Wirbelschichtverfahren .....	16
2.1.5 Roh-SNG-Aufbereitung .....	16
2.1.5.1 Kohlenstoffdioxidentfernung .....	17
2.1.5.2 Gastrocknung.....	18
2.2 Bereitstellung von Strom .....	18
2.2.1 Wärmekraftmaschinen .....	18
2.2.1.1 Wärmekraftmaschinen mit interner Wärmezufuhr.....	19
2.2.1.2 Wärmekraftmaschinen mit externer Wärmezufuhr .....	20
<b>3 Methodische Vorgehensweise .....</b>	<b>21</b>
3.1 Allgemeines Vorgehen .....	21
3.2 Methodik der Analyse.....	22
3.2.1 Entwicklung einer energetischen Analysemethodik .....	22
3.2.1.1 Kenngrößen .....	22
3.2.1.2 Diskussion .....	23
3.2.1.3 Berechnungsmethodik .....	24
3.2.2 Entwicklung einer ökonomischen Analysemethodik.....	27
3.2.2.1 Kenngrößen .....	27
3.2.2.2 Diskussion .....	29
3.2.2.3 Berechnungsmethodik .....	29
3.2.3 Entwicklung einer ökologischen Analysemethodik.....	31
3.2.3.1 Kenngrößen .....	31
3.2.3.2 Diskussion .....	32
3.2.3.3 Berechnungsmethodik .....	32
3.2.4 Programm zur Bilanzierung .....	34

3.2.4.1	Programmaufbau .....	34
3.2.4.2	Stoffdatenmodelle.....	35
3.2.4.3	Funktionseinheiten .....	36
3.2.4.4	Wärmeintegration.....	36
3.3	Methodik der Optimierung .....	37
3.3.1	Entwicklung einer Optimierungsmethodik .....	37
3.3.1.1	Ansätze .....	38
3.3.1.2	Diskussion .....	39
3.3.1.3	Optimierungsmethodik.....	40
3.3.2	Programm zur Optimierung .....	42
3.3.2.1	Programmaufbau .....	42
3.3.2.2	Implementierung der Mutation.....	44
3.3.2.3	Implementierung der Rekombination.....	45
3.3.2.4	Implementierung der Selektion .....	45
3.3.2.5	Einstellung des Optimierungsalgorithmus` .....	45
<b>4</b>	<b>Anlagenkonzepte.....</b>	<b>47</b>
4.1	Anlagenübersicht .....	47
4.2	Anlagenbeschreibung .....	48
4.2.1	Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten .....	48
4.2.2	Langfristig realisierbare Konzeptvarianten.....	51
<b>5</b>	<b>Analyse der Startpunkte der Optimierung .....</b>	<b>53</b>
5.1	Rahmenbedingungen und Datengrundlage.....	53
5.1.1	Bilanzraum .....	53
5.1.2	Energetische Kenngröße .....	53
5.1.3	Ökonomische Kenngröße.....	55
5.1.4	Ökologische Kenngröße.....	57
5.2	Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten.....	58
5.2.1	Energetische Analyse .....	58
5.2.2	Ökonomische Analyse.....	60
5.2.3	Ökologische Analyse.....	61
5.2.4	Diskussion .....	62
5.3	Langfristig realisierbare Konzeptvarianten .....	64
5.3.1	Energetische Analyse .....	64
5.3.2	Ökonomische Analyse.....	65
5.3.3	Ökologische Analyse.....	66
5.3.4	Diskussion .....	67
<b>6</b>	<b>Optimierung Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme.....</b>	<b>69</b>
6.1	Rahmenbedingungen und Datengrundlage.....	69
6.1.1	Optimierungsablauf.....	69
6.1.2	Optimierungsparameter .....	70
6.1.3	Genetische Operatoren .....	72
6.2	Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten.....	73
6.2.1	Energetische Optimierung.....	74
6.2.2	Ökonomische Optimierung .....	74
6.2.3	Ökologische Optimierung .....	75
6.2.4	Diskussion .....	76
6.3	Langfristig realisierbare Konzeptvarianten .....	79
6.3.1	Energetische Optimierung.....	80
6.3.2	Ökonomische Optimierung .....	80
6.3.3	Ökologische Optimierung .....	81

6.3.4 Diskussion .....	82
<b>7 Optimierung Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme .....</b>	<b>84</b>
7.1 Rahmenbedingungen und Datengrundlage .....	84
7.1.1 Optimierungsablauf .....	84
7.1.2 Optimierungsparameter .....	84
7.1.3 Genetische Operatoren .....	86
7.2 Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten .....	88
7.2.1 Energetische Optimierung .....	88
7.2.2 Ökonomische Optimierung .....	89
7.2.3 Ökologische Optimierung .....	89
7.2.4 Diskussion .....	90
7.3 Langfristig realisierbare Konzeptvarianten .....	95
7.3.1 Energetische Optimierung .....	95
7.3.2 Ökonomische Optimierung .....	96
7.3.3 Ökologische Optimierung .....	96
7.3.4 Diskussion .....	97
<b>8 Vergleich der optimierten Konzeptvarianten .....</b>	<b>99</b>
8.1 Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten .....	99
8.1.1 Energetische Kenngröße .....	99
8.1.2 Ökonomische Kenngröße .....	100
8.1.3 Ökologische Kenngröße .....	101
8.1.4 Diskussion .....	102
8.2 Langfristig realisierbare Konzeptvarianten .....	104
8.2.1 Energetische Kenngröße .....	104
8.2.2 Ökonomischen Kenngröße .....	105
8.2.3 Ökologischen Kenngröße .....	106
8.2.4 Diskussion .....	107
<b>9 Zusammenfassung .....</b>	<b>108</b>
<b>10 Literaturverzeichnis .....</b>	<b>111</b>
<b>Anhang 1 – Modellierung .....</b>	<b>122</b>
Anhang 1.1 Verbinder .....	122
Anhang 1.2 Stoffdatenmodelle .....	125
Anhang 1.2.1 Ideale Gase .....	126
Anhang 1.2.2 Ideale Gasgemische .....	129
Anhang 1.2.3 Feststoffe .....	130
Anhang 1.2.4 Feststoffgemische .....	132
Anhang 1.2.5 Organische Stoffgemische .....	132
Anhang 1.2.6 Wasser und Wasserdampf .....	135
Anhang 1.2.7 Reale Fluide .....	139
Anhang 1.3 Funktionseinheiten .....	141
Anhang 1.3.1 Trockner .....	141
Anhang 1.3.2 Allothermer Vergasungsreaktor .....	143
Anhang 1.3.3 Brennkammer .....	146
Anhang 1.3.4 Autothermer Vergasungsreaktor .....	148
Anhang 1.3.5 Reformer .....	149
Anhang 1.3.6 Kompressor/Pumpe/Gebläse .....	150
Anhang 1.3.7 Turbine .....	151
Anhang 1.3.8 Wärmeübertrager .....	153
Anhang 1.3.9 Dampferzeuger .....	154
Anhang 1.3.10 Kondensator .....	155



---

Anhang 1.3.11	Splitter .....	157
Anhang 1.3.12	Mixer .....	158
Anhang 1.3.13	Abscheider .....	159
Anhang 1.3.14	Aminwäsche .....	160
Anhang 1.3.15	Methanisierung .....	161
Anhang 1.3.16	Gasmotor .....	163
Anhang 1.3.17	Gasturbine .....	165
Anhang 1.3.18	Dampfkraftprozess .....	166
Anhang 1.3.19	ORC-Modul .....	166
Anhang 1.3.20	RME-Wäscher .....	167
<b>Anhang 2</b>	<b>– Rahmenannahmen der Prozesssimulation .....</b>	<b>169</b>
<b>Anhang 3</b>	<b>– Stoffströme der Prozesssimulation .....</b>	<b>177</b>
<b>Anhang 4</b>	<b>– Wärmeströme der Prozesssimulation .....</b>	<b>191</b>
<b>Anhang 5</b>	<b>– Optimierungsergebnisse der kurzfristigen Konzeptvarianten .....</b>	<b>197</b>
<b>Anhang 6</b>	<b>– Optimierungsergebnisse der langfristigen Konzeptvarianten .....</b>	<b>200</b>

**Abkürzungen**

atro	Absolut trocken
ppb	Parts per billion
ppm	Parts per million
BAFA	Bundesamt für Wirtschaft und Ausfuhrkontrolle
DIN	Deutsches Institut für Normung
DKP	Dampfkraftprozess
DVGW	Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfaches
DWA	Druckwechseladsorption
EEG	Erneuerbares Energien Gesetz
EEX	European Energy Exchange AG
EN	Europa Norm
FCKW	Fluorchlorkohlenwasserstoffe
FWL	Feuerungswärmeleistung
GM	Gasmotor
GT	Gasturbine
IAPWS	International Association for the Properties of Water and Steam
IEKP	Integriertes Energie- und Klimaprogramm
IF97	Industrie-Formulation 1997
ISO	International Standards Organisation
KWK	Kraft-Wärme-Kopplung
LCA	Life Cycle Assessment
LZA	Luftzerlegungsanlage
MA	Mitarbeiter
MEA	Monoethanolamin
MINLP	Mixed Integer Non Linear Programming
NN	Normalnull
ORC	Organic Rankine Cycle
RME	Rapsmethylester
SGC	Swedish Gas Centre
SNG	Synthetic Natural Gas
SPS	Strompreisstunden
TEG	Triethylenglycol

THG	Treibhausgase
UMSICHT	Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik
USA	United States of America
VDI	Verein Deutscher Ingenieure

**Lateinische Buchstaben**

$a_1, \dots, a_7$	NASA-Koeffizienten
a	Dimensionslose Konstante
b	Barwertfaktor
$b_a$	Preisdynamischer Annuitätenfaktor
b	Kovolumen
$c_p$	Molare/Spezifische isobare Wärmekapazität
$c_v$	Molare/Spezifische isochore Wärmekapazität
d	Konstante
e	Emissionsfaktor
e	Eulersche Zahl
e	Molare/Spezifische Exergie
$f_{\text{Inst}}$	Instandsetzungsfaktor
g	Erdbeschleunigung
$g^R$	Freie (Standard)reaktionsenthalpie
h	Molare/Spezifische Enthalpie
$\hat{h}$	Molare/Spezifische referenzierte Enthalpie
$h'$	Molare/Spezifische Enthalpie auf der Siedelinie
$h''$	Molare/Spezifische Enthalpie auf der Taulinie
$h_v$	Molare/Spezifische Verdampfungsenthalpie
i	Kalkulationszinssatz
j	Preissteigerungsrate
k	Konstante
l	Luftbedarf
m	Masse
$m'$	Masse einer siedenden Flüssigkeit
$m''$	Masse eines gesättigten Dampfes
n	Stoffmenge
o	Sauerstoffbedarf
p	Druck
$p_{\text{me}}$	Effektiver Mitteldruck
q	Zinsfaktor
s	Molare/Spezifische Entropie
$\hat{s}$	Molare/Spezifische referenzierte Entropie

---

t	Zeitindex
u	Spezifische innere Energie
v	Geschwindigkeit
v	Molares/Spezifisches Volumen
w	Wiedergewinnungsfaktor
w	Spezifische Arbeit
x	Dampfgehalt
x	Massenanteil
x	Steigung
y	Stoffmengenanteil
z	Höhe
z	Standard-normalverteilte Zufallszahl
A, ..., E	Shomate-Koeffizienten
A	Annuität
E	Exergie
G	Gestehungskosten
H	Enthalpie
H <sub>u</sub>	Unterer Heizwert
I <sub>0</sub>	Investitionsbetrag
K	Kapitalwert
K	Gleichgewichtskonstante
M	Molmasse
M <sub>P</sub>	Produktionsmenge
P	Leistung
Q	Wärme
R	Ideale Gaskonstante
R <sub>w</sub>	Restwert einer Investition
S <sub>CO</sub>	Kohlenstoffmonoxidschlupf
T	Nutzungsdauer einer Investition
T	Temperatur
T	Treibhausgasemissionen
V	Volumen
W	Arbeit
X	Beladung

**Griechische Buchstaben**

$\alpha$	Verteilungskoeffizient
$\alpha$	Temperaturfunktion
$\beta$	Abscheiderate
$\beta$	Dimensionslose Konstante
$\delta$	Schrittweite
$\eta$	Wirkungsgrad
$\lambda$	Luftverhältnis
$\Pi$	Druckverhältnis
$\sigma$	Standardabweichung
$\mu$	Chemisches Potenzial
$\nu$	Stöchiometrische Koeffizienten
$\varphi$	Relative Feuchte
$\omega$	Azentrischer Faktor

## Indices

Tiefgestellte Indices:

0	Standardbedingungen (in Bezug auf Zustandsgrößen)
0	Bezugszustand (in Bezug auf Zustandsgrößen)
0 <sub>i</sub>	Reinstoff i (in Bezug auf Zustandsgrößen)
0 <sub>j</sub>	Reinstoff j (in Bezug auf Zustandsgrößen)
atro	Absolut trocken (in Bezug auf Brennstoffe)
aus	Austretend (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
c	Kritisch (in Bezug auf Zustandsgrößen)
ein	Eintretend (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
el	Elektrisch (in Bezug auf Wirkungsgrade und Energieströme)
ex	Exergetisch (in Bezug auf Wirkungsgrade)
ges	Gesamt (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
is	Isentrop (in Bezug auf Wirkungsgrade und Zustandsgrößen)
m	Mittelwert (in Bezug auf die spezifische Wärmekapazität)
m	Stöchiometrischer Index (in Bezug auf Kohlenstoff)
n	Stöchiometrischer Index (in Bezug auf Wasserstoff)
max	Maximal (in Bezug auf Zustands- und Kenngrößen)
mech	Mechanisch (in Bezug auf Wirkungsgrade und Energieströme)
min	Minimal (in Bezug auf Zustands- und Kenngrößen)
p	Stöchiometrischer Index (in Bezug auf Schwefel)
q	Stöchiometrischer Index (in Bezug auf Sauerstoff)
s	Sättigungszustand (in Bezug auf Zustandsgrößen)
s	Siedezustand (in Bezug auf Zustandsgrößen)
t	Tripelpunkt (in Bezug auf Zustandsgrößen)
th	Thermisch (in Bezug auf Wirkungsgrade und Energieströme)
u	Stöchiometrischer Index (in Bezug auf Stickstoff)
w	Stöchiometrischer Index (in Bezug auf Chlor)
waf	Wasser- und aschefrei (in Bezug auf Stoffströme)
wf	Wasserfrei (In Bezug auf Stoffströme)
A	Asche (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
A	Auszahlungen (in Bezug auf Annuitäten)

---

AM	Arbeitsmittel (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
AG	Abgas (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
AS	Abscheidung (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
AS	Abfallstoffe (in Bezug auf Emissionen)
B	Betriebsgebundene Auszahlungen (in Bezug auf Annuitäten)
BM	Bettmaterial (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
BS	Brennstoff (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
CO <sub>2</sub> -Äqu	CO <sub>2</sub> -äquivalente Emissionen (in Bezug auf Treibhausgase)
E	Einzahlungen (in Bezug auf Annuitäten)
E	Elter-Individuum (in Bezug auf die Optimierung)
Entsp	Entspannung (in Bezug auf Arbeit und Energie)
FWL	Feuerungswärmeleistung (in Bezug auf Brennstoffe)
G	Gas/Gemisch (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
HE	Hilfsenergien (in Bezug auf Emissionen)
HP	Hauptprodukt (in Bezug auf Energieströme und Emissionen)
HS	Hilfsstoffe (in Bezug auf Emissionen)
IG	Inertgas (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
Inst	Instandsetzungszahlungen (in Bezug auf b <sub>a</sub> )
IS	Inertstoff (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
K	Kapitalgebundene Auszahlungen (in Bezug auf Annuitäten)
K	Koks (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
L	Luft (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
Meth	Methanisierung (in Bezug auf den Methanisierungsdruck)
N	Nachkomme (in Bezug auf die Optimierung)
N	Normzustand (in Bezug auf Gase)
NP	Nebenprodukte (in Bezug auf Energieströme und Emissionen)
NW	Nutzwärme (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
RG	Rauchgas (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
S	Sonstige Auszahlungen (in Bezug auf Annuitäten)
S	Strahlung (in Bezug auf Energieströme)
P	Produkt (in Bezug auf die Gestehungskosten und Emissionen)
PP	Produktionsprozess (in Bezug auf Emissionen)
PW	Phasenwechsel (in Bezug auf Energie)
U	Umgebungsbedingungen (in Bezug auf Zustandsgrößen)
Überh	Überhitzung (in Bezug auf die Dampfüberhitzung)



V	Verbrauchsgebundene Auszahlungen (in Bezug auf Annuitäten)
V	Verlust (in Bezug auf Energieströme)
Verd	Verdichtung (in Bezug auf Arbeit und Energie)
W	Wasser (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)
WD	Wasserdampf (in Bezug auf Stoff- und Energieströme)

Hochgestellte Indices:

c	Chemisch (in Bezug auf die Exergie)
if	Ideale Flüssigkeit (in Bezug auf Stoffströme)
ig	Ideales Gas (in Bezug auf Stoffströme)
l	Flüssig (in Bezug auf Stoffströme)
org	Organisch (in Bezug auf Stoffströme)
s	Stofflich (in Bezug auf die Exergie)
s	Fest (in Bezug auf Stoffströme)
tm	Thermomechanisch (in Bezug auf die Exergie)

## 1 Einleitung

### 1.1 Hintergrund und Problemstellung

Vor dem Hintergrund begrenzter fossiler Energieträger und den damit einhergehenden stark schwankenden Energiepreisen sowie einer wachsenden Sensibilisierung der Bevölkerung für Umwelt- und Klimaauswirkungen zeigen Politik und Energieversorger zunehmend Interesse an alternativen, umweltschonenden Energiebereitstellungstechnologien. Mit diesen soll unter Ausnutzung der bestehenden Infrastruktur die Energieversorgung nachhaltig gestaltet werden. Eine politische Verankerung finden diese Bestrebungen u. a. in der „Renewable Energy Roadmap“ [COM 2006] und dem „Integrierten Energie- und Klimaprogramm“ (IEKP) der Bundesregierung [BMWi 2007].

Unter den verschiedenen Optionen zur umweltverträglichen Energiebereitstellung ist die Nutzung von Biomasse als erneuerbare Kohlenstoffquelle hervorzuheben. Biomasse kann – neben der direkten Umwandlung in Strom und Wärme – durch physikalisch-chemische, bio-chemische und thermo-chemische Konversionsketten in entsprechende Sekundärenergieträger umgewandelt (Abb. 1.1), über die existierende Infrastruktur (z. B. Tankstellennetz, Gasnetz) verteilt und anschließend genutzt werden.

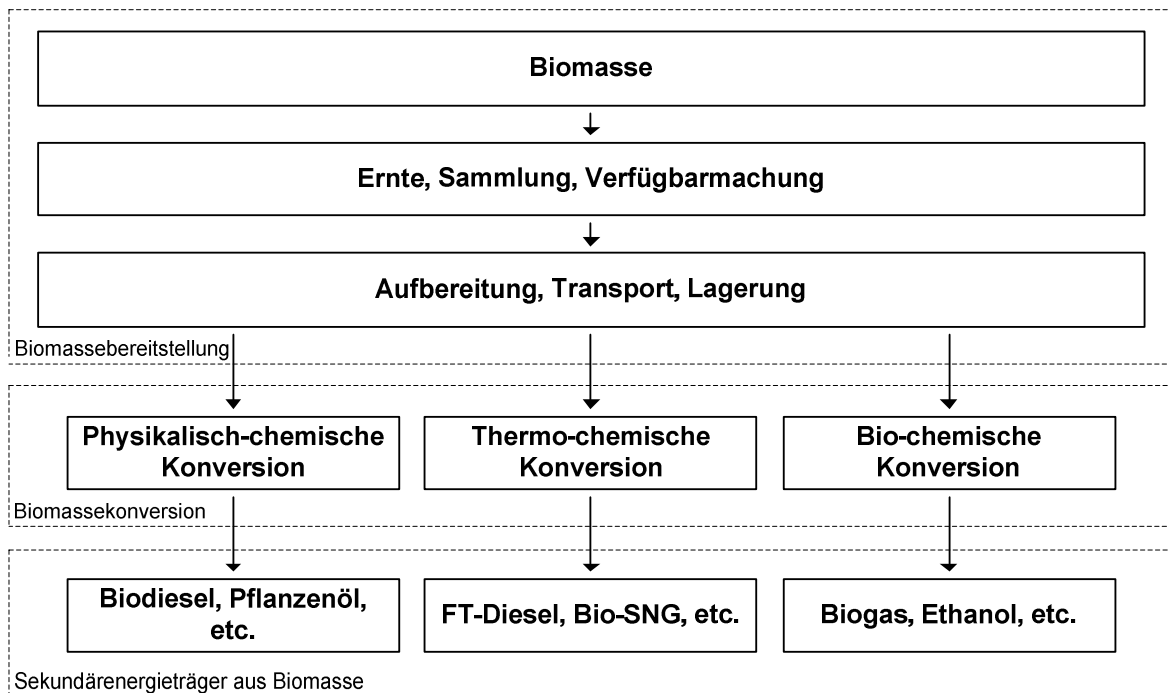


Abb. 1.1 Biomassekonversionspfade in Sekundärenergieträger

Aufgrund der Zunahme des weltweiten Erdgasverbrauchs (Abb. 1.2 [BP 2010]) kommt der Erzeugung von Erdgassubstituten (z. B. Bio Synthetic Natural Gas – Bio-SNG) unter den möglichen Biomassekonversionspfaden eine besondere Bedeutung zu. Neben dem primären Ziel, die anthropogen verursachten Treibhausgasemissionen durch den Einsatz von aus Biomasse erzeugten Erdgassubstituten zu reduzieren, stellen die langjährigen Erfahrungen in Bezug auf das verbrennungstechnische Verhalten sowie das in Deutschland und anderen Ländern flächendeckend ausgebaute Erdgasnetz vielversprechende Voraussetzungen für die Produktion und den Einsatz von Erdgassubstituten dar. Weiterhin ist es möglich, mit der Einspeisung in das Erdgasnetz den Ort der Gasnutzung vom Ort der Gasproduktion zu entkoppeln. Dies ermöglicht u. a. die Versorgung von Gebieten mit

hoher Nachfrage nach erneuerbaren Brenn- bzw. Treibstoffen und die zentrale, großtechnische Nutzung dezentral anfallender Biomasse.

Erdgassubstitute können neben der Aufbereitung von – durch bio-chemische Vergärung erzeugtem – Biogas auch durch die synthetische Umsetzung und Aufbereitung von – durch die thermo-chemische Vergasung biogener Festbrennstoffe erzeugtem – Rohgas hergestellt werden. Beide Konversionsketten sind durch hohe energetische Wirkungsgrade gekennzeichnet und stehen aufgrund der Verwendung unterschiedlicher Biomassen nicht in Konkurrenz zueinander. Da der thermo-chemische Konversionspfad im Vergleich zum bio-chemischen Konversionspfad durch einen hohen technischen Aufwand und damit verbunden durch hohe Investitionen gekennzeichnet ist [Müller-Langer 2009], wird der Risikominimierung des Produktionsbetriebes eine besondere Bedeutung beigemessen. In diesem Zusammenhang stellt die Integration von Stromerzeugungsaggregaten eine Option dar, um der Gefährdung der Anlagenwirtschaftlichkeit durch steigende Strompreise zu begegnen. Bei der Integration der Aggregate stellt sich jedoch die Herausforderung, die Wettbewerbsfähigkeit der SNG-Produktion im Auslegungsbetrieb, d. h. ohne Stromproduktion, nicht einzugrenzen sowie Wärmequellen und -senken der Anlage optimal einzubinden. Aufgrund komplexer Stoff- und Energieströme derzeit im Mittelpunkt der Diskussion stehender Konzeptphilosophien (d. h. Konzepte mit allothermer Wirbelschichtvergasung und nasser Gasreinigung und Konzepte mit autothermer Wirbelschichtvergasung und Heißgasreinigung [Duret 2005], [Zwart 2006], [Graf 2008], [SGC 2008], [Majer 2009], [van der Meijden 2010]) erweist sich die Bewertung des Potenzials der Integration möglicher Stromerzeugungsaggregate gegenüber Anlagen ohne Stromerzeugung allerdings als schwierig. Weiterhin stehen im betrachteten Leistungsbereich diverse Strombereitstellungsaggregate wie Gasmotoren, Gasturbinen, Dampfkraftprozesse und Organic-Rankine-Module (ORC-Module) zur Verfügung. Ein Königsweg ist daher ohne detaillierte Konzeptanalysen nicht offensichtlich.

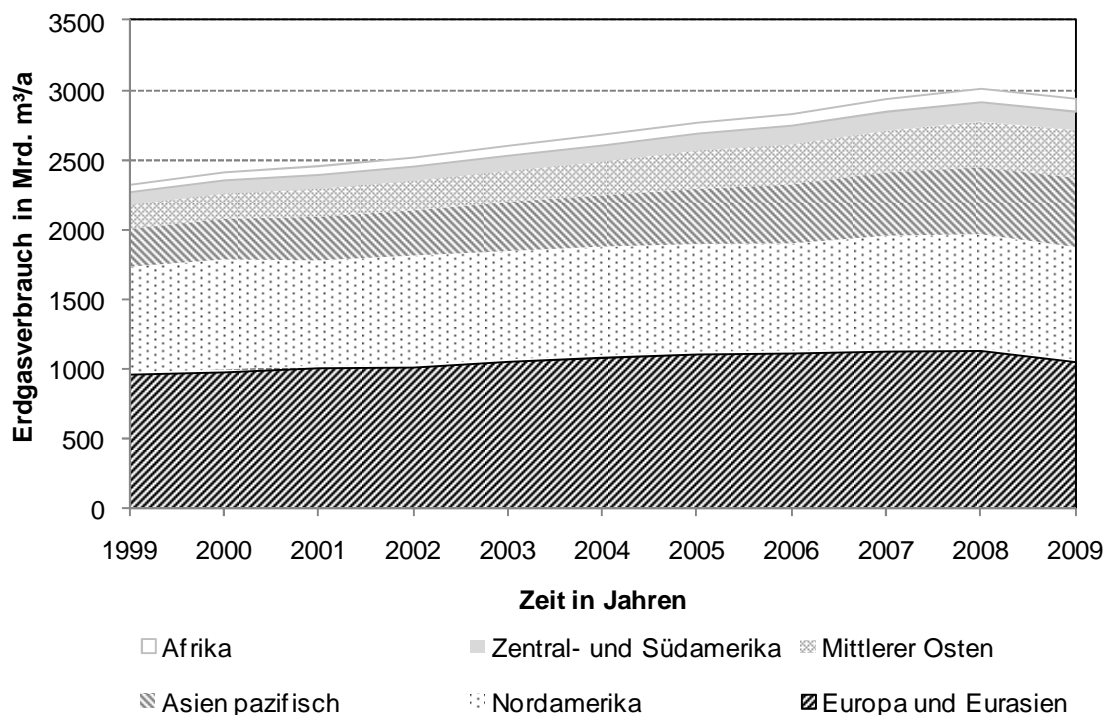


Abb. 1.2 Entwicklung des weltweiten Erdgasverbrauchs in den Jahren 1999 bis 2009 [BP 2010]

## 1.2 Zielstellung und Aufbau

Vor diesem Hintergrund ist das Ziel dieser Arbeit die Entwicklung einer methodischen Vorgehensweise zur Bestimmung und Bewertung des energetischen, ökonomischen und ökologischen Optimierungspotenzials von Bio-SNG-Konzeptvarianten ohne Stromproduktion im Vergleich zu Konzeptvarianten mit Stromproduktion.

Um dieses Ziel zu erreichen, ergibt sich der Aufbau dieser Arbeit entsprechend den folgenden sieben Arbeitsschritten.

**Technologien (Kapitel 2).** Zur technischen Einordnung der betrachteten Konzeptvarianten werden derzeit diskutierte Technologien zur Erzeugung von SNG aus Biomasse beschrieben. In Ergänzung werden – mit Blick auf die Varianten mit Strombereitstellung – neben den fünf Prozessschritten der thermo-chemischen SNG-Erzeugung (Biomassevorbehandlung, Biomassevergasung, Gasreinigung, Methanisierung und Roh-SNG-Aufbereitung) auch Technologien zur Stromproduktion dargestellt.

**Entwicklung einer methodischen Vorgehensweise (Kapitel 3).** In Bezug auf die Methodikentwicklung stehen die Erarbeitung energetischer, ökonomischer und ökologischer Kenngrößen zur Bewertung sowie die Entwicklung eines Algorithmus` zur Optimierung der betrachteten Konzeptvarianten im Mittelpunkt. Zudem beinhaltet die Methodikentwicklung eine programmtechnische Umsetzung sowohl des Optimierungsalgorithmus` als auch der Bilanzierung von für die Kenngrößenberechnung erforderlicher Stoff- und Energieströme.

**Anlagenkonzepte (Kapitel 4).** Zur Anwendung der entwickelten methodischen Vorgehensweise werden exemplarisch verschiedene kurzfristig und langfristig realisierbare Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme definiert. Die kurzfristigen Konzeptvarianten basieren auf der Technologie am Standort Güssing mit allothermer Wirbelschichtvergasung und nasser Gasreinigung. Die langfristigen Konzeptvarianten sind durch eine autotherme Vergasung und Heißgasreinigung charakterisiert.

**Analyse der Startpunkte der Optimierung (Kapitel 5).** Die Analyse der Startpunkte der nachfolgenden Optimierungen umfasst die Bestimmung energetischer, ökonomischer und ökologischer Kenngrößen der zuvor definierten Konzeptvarianten. Die ermittelten Kenngrößen dienen den Optimierungen als Referenzwerte und sollen durch die Optimierungen verbessert werden.

**Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme (Kapitel 6).** Bei der Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme werden deren Auslegungsparameter hinsichtlich energetischer, ökonomischer und ökologischer Kriterien optimiert. Die Kenngrößen dieser optimierten Konzeptvarianten stellen Vergleichswerte für die Bestimmung des Optimierungspotenzials der Varianten mit Stromproduktion dar.

**Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme (Kapitel 7).** Hier werden die Auslegungsparameter der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme – entsprechend der Optimierung der Varianten ohne Stromproduktion – in Bezug auf energetische, ökonomische und ökologische Kriterien optimiert. Dazu werden die Aggregate zur Stromerzeugung u. a. zu- oder abgeschaltet bzw.

deren Last variiert, indem der Optimierungsalgorithmus relevante Gas- und Dampfströme verändert.

**Vergleich der optimierten Konzeptvarianten (Kapitel 8).** Um vielversprechende Konzeptvarianten und deren Auslegungsparameter identifizieren bzw. deren Optimierungspotenzial bewerten zu können, werden die optimierten Varianten zur Erzeugung von SNG und Wärme bezüglich energetischer, ökonomischer und ökologischer Aspekte mit den optimierten Varianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme verglichen.

## 2 Technologien

Gemäß der Zielstellung stehen unterschiedliche Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme im Vordergrund dieser Arbeit (Kapitel 4). Zur Einordnung der Varianten wird im Folgenden ein Überblick über die zur SNG-Erzeugung verwendeten Technologien gegeben. Anschließend werden mögliche Technologien zur Strombereitstellung dargestellt.

### 2.1 Bereitstellung von SNG und Wärme

Der thermo-chemische Prozess zur Bio-SNG-Erzeugung ermöglicht es, biogene Festbrennstoffe (z. B. Holz, Stroh) in methanreiche Gase zu konvertieren, welche nach einer entsprechenden Aufbereitung in das Erdgasnetz eingespeist werden können. Als Nebenprodukt der Bio-SNG-Erzeugung wird zudem Wärme erzeugt. Die Technologien des Bio-SNG-Erzeugungspfades (Abb. 2.1) werden im Folgenden erläutert.

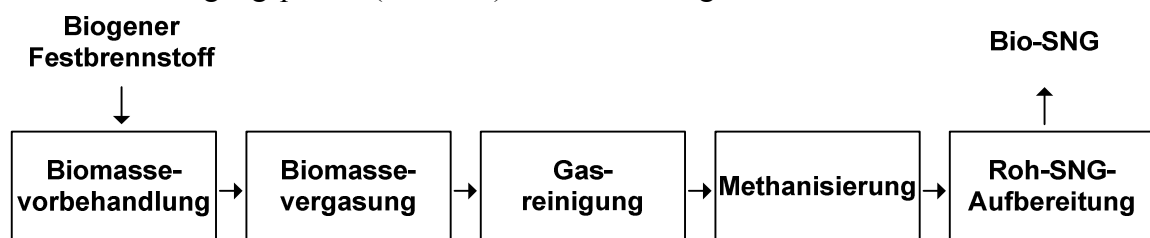


Abb. 2.1 Aufbau des Bio-SNG-Erzeugungspfades

#### 2.1.1 Biomassevorbehandlung

Um einen zuverlässigen Eintrag des Brennstoffs in den Vergasungsreaktor zu ermöglichen sowie optimale Prozessbedingungen zu gewährleisten, müssen biogene Festbrennstoffe aufgrund ihrer inhomogenen Eigenschaften im Vorfeld des eigentlichen Vergasungsprozesses i. Allg. vorbehandelt werden. Dabei liegt der Fokus zum einen auf der Anpassung der Brennstoffstückigkeit an die Anforderungen des Eintragungssystems und des Vergasungsprozesses und zum anderen auf der Trocknung des Brennstoffs zur Minimierung der exergetischen Verluste während der Vergasung [Bolhár-Nordenkampf 2004]. Mit Blick auf die Vorbehandlungsverfahren kann zwischen mechanischer, thermischer und thermo-chemischer Brennstoffvorbehandlung unterschieden werden (Abb. 2.2). Nachfolgend werden die für die Erzeugung von Bio-SNG relevanten Brennstoffvorbehandlungsverfahren beschrieben.

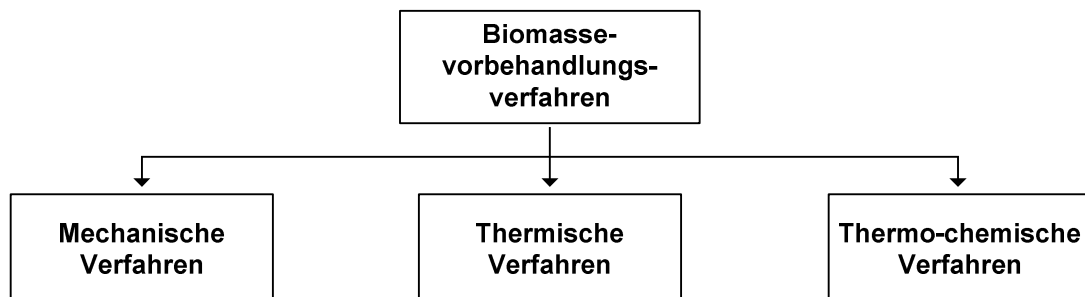


Abb. 2.2 Übersicht Biomassevorbehandlungsverfahren

##### 2.1.1.1 Mechanische Verfahren

Mechanische Vorbehandlungsverfahren umfassen Prozesse zur Zerkleinerung, Siebung/Sortierung und Pressung (Pelletierung, Brikettierung) des Brennstoffs mit dem

Ziel der Einstellung einer homogenen Korngröße bzw. Form der Brennstoffstücke [Kaltschmitt 2009]. Die Anwendung mechanischer Vorbehandlungsverfahren dient zum einen dazu, Blockierungen von Eintragsschnecken und –schleusen vorzubeugen und zum anderen, eine gleichmäßige Strömung im Vergasungsreaktor sicherzustellen. Hacker, Siebe, Windsichter und Brikettieranlagen sind Beispiele für kommerziell verfügbare, technische Umsetzungen mechanischer Biomassevorbehandlungsverfahren.

### **2.1.1.2 Thermische Verfahren**

Die thermische Vorbehandlung dient im Wesentlichen der Heizwertsteigerung, Gewichtsminderung und Qualitätssteigerung der Biomasse durch Trocknungsprozesse. Mit Blick auf die Trocknung von biogenen Festbrennstoffen kann zwischen der natürlichen und der technischen Trocknung (d. h. Trocknung unter Zuhilfenahme von technischen Einrichtungen zur Belüftung bzw. Beheizung) unterschieden werden. Da im Rahmen der Bio-SNG-Produktion und dabei insbesondere im Zusammenhang der Biomassevergasung geringe Wassergehalte (i. Allg. 10 – 20 %) energetisch vorteilhaft sind [Bolhär-Nordenkamp 2004] sowie in der Regel Prozessabwärme zur Verfügung steht, kommt den technischen Trocknungssystemen hier eine besondere Bedeutung zu. In diesen Systemen kann bspw. ein vorgewärmter Luftstrom bzw. ein anderer heißer Gasstrom über das zu trocknende Gut geleitet werden. Dieser nimmt das Wasser des Brennstoffs auf und stellt die erforderliche Verdampfungswärme zur Verfügung. Unter den technischen Trocknungssystemen sind Systeme mit einer Bewegung des Trocknungsgutes hervorzuheben, da diese eine für den Vergasungsprozess vorteilhafte gleichmäßige Brennstofftrocknung ermöglichen [Kaltschmitt 2009]. Beispiele für am Markt verfügbare, technische Trocknungssysteme mit Bewegung des Trocknungsgutes sind Schubwendetrockner, Bandrockner und Drehrohrrockner.

### **2.1.1.3 Thermo-chemische Verfahren**

Die thermo-chemischen Biomassevorbehandlungsverfahren dienen im Zusammenhang von Bio-SNG-Prozessketten in erster Linie dem Ziel, den Brennstoff an die Anforderungen der Vergaser anzupassen und/oder die Energiedichte des Brennstoffs aus logistischen Gründen zu erhöhen. Die Anpassung des Brennstoffs ist insbesondere bei dem Einsatz von Flugstromvergäsern relevant, welche ein zerstäubbares Vergasungsgut voraussetzen. Derzeit stehen im Wesentlichen zwei Vorbehandlungsverfahren zur Diskussion: Torrefizierung [Prins 2005] und Pyrolyse [Lange 2008]. Beide Verfahren finden unter Luftabschluss statt, unterscheiden sich jedoch in Bezug auf die Prozessparameter (Tabelle 2.1) und Produkte [Bridgwater 1999], [Bergman 2005 a], [Bergman 2005 b], [Lange 2008], [Prins 2006 a], [Prins 2006 b]. Bei der Torrefizierung werden lediglich Wasser und leicht flüchtige Bestandteile bei moderaten Temperaturen unter 300 °C [Kaltschmitt 2009] und Aufheizraten unter 50 °C/min [Bergman 2005 c] aus der Biomasse ausgetrieben. Als Hauptprodukt entsteht ein kohleähnlicher Feststoff. Dagegen wird bei der pyrolytischen Zersetzung die Biomasse in die Produkte Gas, kondensierbare Kohlenwasserstoffe (bzw. Pyrolyseöl) und Koks konvertiert. Unter den Pyrolyseverfahren ist insbesondere die Schnell-/Fastpyrolyse für die Vorbehandlung von Biomasse zur nachfolgenden Flugstromvergasung geeignet, da bei geringen Dampfverweilzeiten (< 2 s), hohen Aufheizraten und Temperaturen um etwa 500 °C der Produktanteil an Pyrolyseöl maximiert wird und so – im Gegensatz zu unbehandelter Biomasse bzw. Gas – ein pumpbares Fluid mit hoher Energiedichte erzeugt wird. Um die Prozesseffizienz respektive die Kohlenstoffausnutzung zu verbessern, können die Pyrolyseprodukte Öl und Koks zu sogenanntem Slurry vermischt werden [Dinjus 2004], [Leible 2007].

Tabelle 2.1 Wesentliche Prozessparameter von Torrefizierung und Schnellpyrolyse

	Einheit	Torrefizierung	Schnellpyrolyse
Temperatur	°C	200 - 300	450 - 550
Produktverweilzeit	s	> 1500	< 2
Lambda		0	0

Die Torrefizierung von Biomasse sowie die Erzeugung von Pyrolyseslurry befindet sich jedoch noch in der Entwicklung und kann insbesondere mit Blick auf den Einsatz der Produkte in Vergasern nicht als Stand der Technik bezeichnet werden. Während bei der Vergasung torrefizierter Biomasse im Wesentlichen die durch die Torrefizierung veränderten Brennstoffeigenschaften (z. B. das Ascheschmelzverhalten) weitere Forschungsanstrengungen erfordern, erweisen sich der teilweise saure Charakter des Pyrolyseslurrys sowie die Veränderung der Ölstruktur bei längeren Lagerzeiten (Auswirkung auf Viskosität) als problematisch.

### 2.1.2 Biomassevergasung

Der Begriff „Vergasung“ bezeichnet die thermo-chemische Konversion eines festen respektive flüssigen kohlenstoffhaltigen Brennstoffs in ein brennbares Gasgemisch (sogenanntes Rohgas) mit den Hauptkomponenten  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2$  und – in Abhängigkeit von den Betriebsparametern und dem Vergasungsmittel –  $\text{CH}_4$  bzw.  $\text{N}_2$ . Der prinzipiell endotherme Vergasungsprozess findet bei unterstöchiometrischen Bedingungen ( $\lambda < 1$ ) und unter Anwesenheit eines Vergasungsmittels (z. B. Luft,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ) statt. Neben den Hauptkomponenten befinden sich in Abhängigkeit von der Prozessführung noch diverse Verunreinigungen wie Partikel, Teere, Schwefelverbindungen, Stickstoffverbindungen, Halogenverbindungen und Alkalien im Gas. Sowohl der Anteil dieser Verunreinigungen als auch die Zusammensetzung des erzeugten Gases selbst werden von einer Vielzahl unterschiedlicher Prozessbedingungen beeinflusst und können entsprechend der angewandten Vergasungsbedingungen und -technologien stark variieren [Higman 2003], [Kaltschmitt 2009], [Knoef 2005], [Vogel 2006].

In der Vergangenheit sind im Rahmen der Vergasung von Biomassen eine Vielzahl unterschiedlicher Vergasungsverfahren, die entsprechend ihres Anwendungszwecks durch verschiedene Vor- und Nachteile charakterisiert sind, zum Einsatz gekommen bzw. entwickelt worden. I. Allg. ist die Differenzierung der Verfahren nach den folgenden vier Kriterien üblich [Knoef 2005]:

- Vergasungsmittel (Luft,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$  bzw. Kombinationen)
- Druckniveau (atmosphärisch und druckaufgeladen)
- Wärmeversorgung des Vergasungsprozesses (autotherm und allotherm)
- Reaktordesign

Insbesondere das Design des Vergasungsreaktors hat – nicht zuletzt durch die Beschränkung der verschiedenen Reaktorbauarten auf bestimmte Leistungsbereiche – maßgeblichen Einfluss auf die anschließende Gasnutzung. Unter Berücksichtigung des fluidodynamischen Verhaltens des Brennstoffs im Vergasungsreaktor kann dabei zwischen Festbett-, Wirbelschicht-, Flugstrom- und Sonderbauverfahren unterschieden werden (Abb. 2.3). Ein Überblick über die Charakteristika dieser vier Vergasungsverfahren wird im Folgenden gegeben.



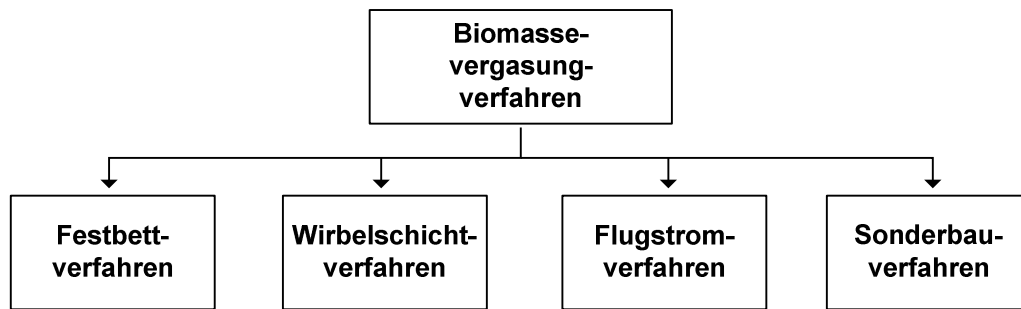


Abb. 2.3 Übersicht Biomassevergasungsverfahren

### 2.1.2.1 Festbettverfahren

Festbettvergaser sind durch einen verhältnismäßig einfachen Reaktoraufbau gekennzeichnet. Der Brennstoff befindet sich dabei als Schüttung im Reaktorinnenraum und wird entweder von unten, oben oder von der Seite vom Vergasungsmittel durchströmt [Lettner 2007]. Aufgrund der limitierten Upscaling-Möglichkeiten (< 20 MW Feuerungswärmeleistung [Knoef 2005]) beim Einsatz von Biomasse als Brennstoff erweisen sich Festbettreaktoren im Vergleich zu anderen Reaktorbauarten allerdings in der für die Bio-SNG-Produktion ökonomisch darstellbaren Leistungsklasse (> 20 MW Brennstoffwärmeleistung) als nachteilig. Aus diesem Grund und wegen der für die Methansynthese problematischen hohen Rohgastebeladungen (insbesondere in Bezug auf Gegenstromvergaser) [Vogel 2007] werden Festbettvergaser im Folgenden nicht näher betrachtet.

### 2.1.2.2 Wirbelschichtverfahren

Wirbelschichtvergaser enthalten ein auf einem Düsenboden liegendes Bett aus feinkörnigem, inerten und ggf. katalytisch wirksamen Material (z. B. Quarzsand), welches durch die Anströmung des durch die Düsen strömenden Vergasungsmittels aufgewirbelt wird. Dabei vermischt sich das Bettmaterial mit dem kontinuierlich eingetragenen Brennstoff zu einem Wirbelbett. Das Wirbelbett verhält sich ähnlich einem Fluid und ist durch eine homogene Brennstoffverteilung gekennzeichnet. Durch die gleichmäßige Vermischung von Brennstoffpartikeln und Bettmaterial können sich keine getrennten Reaktions- und Temperaturzonen ausbilden und die verschiedenen Teilreaktionen parallel bei einer gut regelbaren Temperatur zwischen 700 und 900 °C ablaufen. Verfahrensbedingt sind so im Vergleich zu Festbettverfahren bessere Wärme- und Stoffübertragungen zwischen Gas und Feststoff und damit ein verbesserter Durchsatz bei kompakten Anlagengrößen erreichbar. Als nachteilig in Bezug auf den Einsatz von Wirbelschichtreaktoren erweist sich der verhältnismäßig hohe Staubanteil im erzeugten Rohgas.

Wirbelschichtvergaser können in stationäre und zirkulierende Wirbelschichtvergaser sowie Zweibett-Wirbelschichtvergaser eingeteilt werden [Hofbauer 2007].

- Stationäre Wirbelschichtvergaser. Stationäre Wirbelschichtvergaser sind im Vergleich zu zirkulierenden Wirbelschichtvergasern durch verhältnismäßig niedrige Vergasungsmittelleinströmungsgeschwindigkeiten gekennzeichnet (2 bis 3 m/s). Daher bildet sich als Reaktionsraum ein klar abgegrenztes Wirbelbett aus homogen verteiltem Bettmaterial und Brennstoffpartikeln aus. Der nahezu bettmaterial- und brennstoffleere Raum über dem Wirbelbett wird Freeboard genannt und bietet der austretenden Gasphase Raum für Nachreaktionen. Die Menge ausgetragener Brennstoff- und Bettmaterialpartikel ist aufgrund der niedrigen Strömungsgeschwindigkeit des Vergasungsmittels gering [Knoef 2005]. Ein

Beispiel für stationäre Wirbelschichtvergaser zur Vergasung von Biomasse ist u. a. die Anlage am Standort Skive (Dänemark) [Bush 2008].

- Zirkulierende Wirbelschichtvergaser. In zirkulierenden Wirbelschichtvergasern tritt das Vergasungsmittel mit höheren Geschwindigkeiten in den Vergasungsreaktor ein (5 bis 10 m/s) als bei stationären Verfahren. Dadurch existiert keine klar erkennbare Bettoberfläche mehr, die das Wirbelbett räumlich vom Freeboard trennt. Durch die hohe Einströmgeschwindigkeit des Vergasungsmittels wird zudem ein höherer Feststoffanteil mit dem Rohgas mitgerissen als bei stationären Reaktoren. Dieser muss mit Hilfe eines Zyklons wieder vom Gas getrennt und in den Vergasungsreaktor zurückgeführt werden (ein Teil der Feststoffphase zirkuliert) [Knoef 2005], [Kaltschmitt 2009]. Ein Vorteil von zirkulierenden Wirbelschichtvergasern ist der im Vergleich zu stationären Wirbelbetten hohe Kohlenstoffkonversionsgrad. Ein Beispiel für ein zirkulierendes Wirbelschichtverfahren zur Vergasung von Biomasse ist die Anlage am Standort Värnamo (Schweden) [Stahl 1999].
- Zweitbett-Wirbelschichtvergaser. Diese bestehen aus zwei Wirbelschichtreaktoren: dem Vergasungsreaktor und der Brennkammer. Ähnlich wie beim zirkulierenden Wirbelschichtvergaser wird das vom Gas ausgetragene Bettmaterial durch einen Zyklon vom Rohgas abgetrennt und in den Vergasungsreaktor zurückgeführt. Auf dem Weg zurück in die Brennkammer passiert das Bettmaterial die Brennkammer und wird dort aufgeheizt. Auf diese Weise wird Wärme von der Brennkammer in den Vergasungsreaktor transportiert und dadurch der Wärmebedarf der endothermen Vergasungsreaktionen gedeckt. Aufgrund dieser allothermen Wärmezufuhr in den Vergasungsreaktor kann Wasserdampf als Vergasungsmittel verwendet und damit ein nahezu stickstofffreies Rohgas mit relativ hohem Wasserstoffanteil erzeugt werden. Beispiele für Zweibett-Wirbelschichtverfahren sind u. a. der Vergaser am Standort Güssing (Österreich) [Hofbauer 2002], der Vergaser am Standort Petten (Niederlande) [van der Meijden 2008] und der Vergaser am Standort Burlington (USA) [Paisley 2002].

### 2.1.2.3 Flugstromverfahren

In Flugstromvergasern werden feinkörnige Brennstoffpartikel bzw. Brennstofftropfen innerhalb weniger Sekunden bei Temperaturen zwischen 1300 und 1600 °C und Drücken bis etwa 60 bar vergast [Knoef 2005]. Als Vergasungsmittel wird meist Sauerstoff verwendet. In Bezug auf viele Gasanwendungen erweist sich die Tatsache als vorteilhaft, dass durch die Flugstromvergasung ein nahezu teerfreies Rohgas mit einem sehr geringem Methangehalt bei hohen Kohlenstoffkonversionsraten (> 99 %) produziert wird. Da die Brennstoffe zum Einsatz in Flugstromvergasern zerstäubbar/pumpbar sein müssen, befinden sich für den Einsatz von Biomassen als Brennstoff thermo-chemische Brennstoffvorbehandlungsmethoden (z. B. Pyrolyse, Torrefizierung) in der Diskussion. Diese sind jedoch mit entsprechenden energetischen und prozesstechnischen Aufwendungen verbunden. Neben dem hohen Prozessaufwand für die Produktion von reinem Sauerstoff als Vergasungsmittel und für die Biomassevorbehandlung erweisen sich zudem die extremen Prozessbedingungen (z. B. hohe Vergasungstemperaturen, hohe Vergasungsdrücke) als nachteilig [Higman 2003]. Aus diesen Gründen wird der Einsatz von Flugstromvergasern in erster Linie in Zusammenhang von Anlagenleistungen mehrerer hundert Megawatt Feuerungswärmeleistung diskutiert [Knoef 2005], [Fürnsinn 2008], [Meyer 2007]. Die Konversion von Biomasse in Flugstromvergasern befindet sich derzeit in der Erprobung. Flugstromvergaser werden jedoch zur Vergasung von Kohlen kommerziell angeboten [Hannemann 2007], [Abraham 2009].

### 2.1.2.4 Sonderbauverfahren

Unter die Bezeichnung Sonderbauverfahren fallen Vergasungskonzepte, die nicht direkt den Gruppen Festbettvergaser, Wirbelschichtvergaser oder Flugstromvergaser zugeordnet werden können. Hydrothermale Vergasungsprozesse sowie mehrstufige Vergaser [Huber 2008] sind Beispiele für derartige Vergaser-Sonderbauarten. Mit Blick auf den derzeitigen Entwicklungsstand und den für die thermo-chemische Biomethanproduktion typischen Leistungsbereich sind diese Vergaserbauarten für die Erzeugung von Bio-SNG jedoch in naher Zukunft nicht relevant.

### 2.1.3 Gasreinigung

In Abhängigkeit von den im vorangehenden Abschnitt beschriebenen Vergasungsparametern (Reaktorbauart, Vergasungsdruck, Vergasungstemperatur, Vergasungsmittel etc.) enthält das erzeugte Rohgas verschiedene Verunreinigungen [Köppel 2007]. Um u. a. eine Vergiftung des Katalysators der nachfolgenden Methansynthese (z. B. durch Schwefelverbindungen) sowie Schaden an anderen Anlagenkomponenten (z. B. Abrasion, Heißgaskorrosion an Wärmeübertrageroberflächen) zu verhindern, muss das Rohgas nach Verlassen des Vergasers von diesen Verunreinigungen gereinigt werden [Rönsch 2008]. Zur Gasreinigung sind verschiedene Verfahren am Markt verfügbar. Über die für die Bio-SNG-Produktion relevanten Verfahren (Abb. 2.4) und Technologien wird im Folgenden – nach den zu entfernenden Störstoffen geordnet – ein Überblick gegeben.

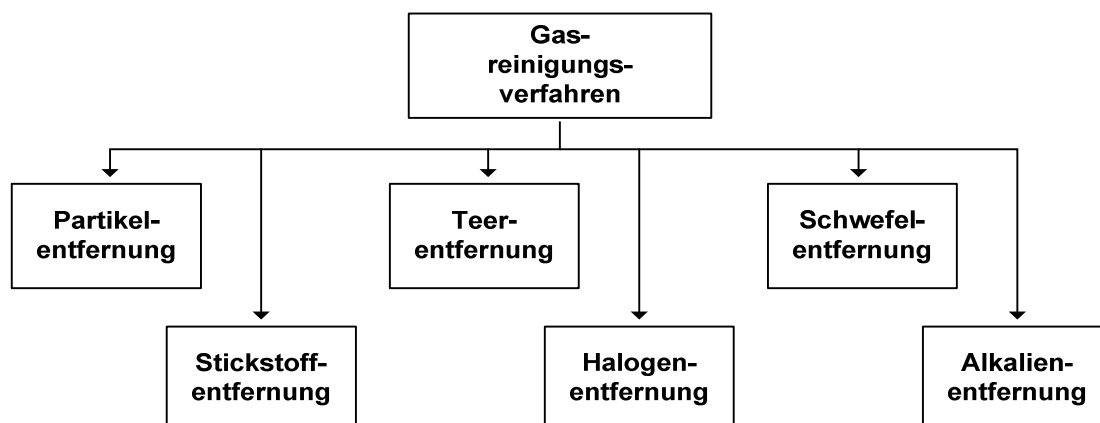


Abb. 2.4 Übersicht Gasreinigungsverfahren

#### 2.1.3.1 Partikelentfernung

Zur Entfernung von Partikeln (z. B. Flugkoks, Staub, Asche, Bettmaterial) aus Gasströmen kommen mechanische, elektrostatische und waschende Verfahren zur Anwendung.

**Mechanische Verfahren.** Mechanische Verfahren zur Partikelabscheidung sind im Vergleich zu elektrostatischen und waschenden Verfahren durch einen geringen anlagentechnischen Aufwand gekennzeichnet. Sie bieten die Möglichkeit, sowohl hohe Partikelfrachten aus dem zu reinigendem Gasstrom zu entfernen (u. a. mit Hilfe von Zyklonen) als auch hohe Gasreinheiten zu erzielen (u. a. mit Hilfe von Filtern).

- **Zyklone.** Zyklone werden i. Allg. zur Grobabscheidung von Partikeln eingesetzt. Dabei wird der Gasstrom zu einer rotierenden Bewegung gezwungen und Partikel sowie ein Teil der Teerfracht durch die entstehenden Zentrifugalkräfte vom Gasstrom getrennt. Zyklone können in Abhängigkeit vom verwendeten Material auch bei verhältnismäßig hohen Temperaturen eingesetzt werden und scheiden je

nach Ausführung mehr als 90 % der Partikel mit einem Durchmesser größer 5 µm ab. Aufgrund ihres Wirkprinzips (Abscheidung durch Fliehkräfte) ist die Abscheidefähigkeit von Partikeln mit Durchmessern kleiner 5 µm in Zyklonen allerdings begrenzt bzw. mit einem hohen technischen Aufwand verbunden. Daher und wegen ihres einfachen Designs sowie des verhältnismäßig geringen Druckverlustes eignen sich Zyklone vornehmlich zur Grobentfernung von Partikeln aus Gasströmen [Beitz 2001], [Vogel 2006].

- **Filter.** Filter sind in verschiedenen Ausführungen am Markt erhältlich. In Abhängigkeit vom Design und den verwendeten Materialien sind Filter in der Lage, auch sehr kleine Partikel mit Durchmessern weit unter 5 µm aus Gasströmen abzutrennen. Grundsätzlich steigt jedoch der Druckverlust mit der Abscheiderate an. Relevante Filtertypen für die Bio-SNG-Produktion sind im Wesentlichen Gewebefilter und Kerzenfilter.

Die Abscheidefähigkeit von Gewebefiltern variiert stark mit der Dicke des Filterkuchens, der in regelmäßigen Abständen z. B. mit Hilfe von Druckluft vom Filter entfernt wird. Ein Nachteil von Gewebefiltern ist der begrenzte Temperaturbereich, in dem sie eingesetzt werden können (bis zu 350 °C – in Abhängigkeit vom verwendeten Material). Durch die Zugabe von Hilfsstoffen wie z. B. Kalk auf den Filter (sogenannte Precoatisierung) kann ein Verkleben des Filters durch kondensierende Teere verhindert sowie eine zusätzliche Teerabscheidung erreicht werden (bis zu 80 %) [Vogel 2006].

Kerzenfilter sind durch hohe Abscheideraten gekennzeichnet und können je nach Einsatzmaterial (üblicherweise Keramik oder Metallgewebe) bei Temperaturen bis zu 900 °C eingesetzt werden. Als nachteilig erweisen sich u. a. die im Vergleich zu anderen Filterbauarten hohen Investitionen sowie die Anfälligkeit, durch kondensierende Teere zu verkleben und durch Alkalien beschädigt zu werden. Kerzenfilter versprechen jedoch vielfältige Einsatzmöglichkeiten in Bezug auf zukünftige Heißgasreinigungsstrecken [Vogel 2006].

**Elektrostatische Verfahren.** Elektrostatische Verfahren scheiden Partikel mit Hilfe elektrischer Felder ab und erzielen sehr hohe Abscheideraten bei geringen Druckverlusten. Sie sind jedoch im Vergleich zu anderen Partikelabscheidern mit einem verhältnismäßig hohen anlagentechnischen Aufwand verbunden. In Bezug auf die Störstoffabtrennung kann zwischen trocken und nass arbeitenden elektrostatischen Separatoren unterschieden werden. Trocken arbeitende elektrostatische Separatoren sind bei Temperaturen von bis zu 500 °C einsetzbar, wobei die Partikel durch mechanisches Klopfen von den Elektroden entfernt werden. Bei nass arbeitenden elektrostatischen Separatoren werden die Partikel durch Wasser von den Elektroden gewaschen. Dabei können auch andere Verunreinigungen wie NH<sub>3</sub>, HCl, H<sub>2</sub>S und kondensierte Teere teilweise mit abgeschieden werden. Der Einsatzbereich von nass arbeitenden elektrostatischen Separatoren ist jedoch bis etwa 65 °C begrenzt [Beitz 2001], [Vogel 2006].

**Waschende Verfahren.** Neben mechanischen und elektrostatischen Verfahren können Partikel auch durch Gaswäschen aus Gasströmen entfernt werden. Als Waschmittel wird i. Allg. Wasser verwendet. Um parallel auch andere Gasverunreinigungen abzuscheiden, können basische oder saure Waschmittel Anwendung finden. Der Aufwand nasser Gaswäschen (z. B. zur Entfernung der ausgewaschenen Partikel aus dem Lösungsmittel) ist jedoch verhältnismäßig groß und die Gaseintrittstemperaturen sind je nach Waschsystem und Waschmittel begrenzt. Ein Beispiel für nasse Gaswäschen ist der so genannte Venturi-

Wäscher, mit dem Reingaspartikelbelastungen zwischen 10 und 20 mg/m<sub>N</sub><sup>3</sup> erreicht werden können [Vogel 2006].

### 2.1.3.2 Teerentfernung

In Ergänzung zu den oben erläuterten Verfahren zur Partikelentfernung, die teilweise in der Lage sind, Teere (z. B. C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>, C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>) in begrenztem Maße abzuscheiden, können Gasströme auch mit Hilfe thermischer, katalytischer, waschender sowie adsorptiver Verfahren von Teeren befreit werden.

**Thermische Verfahren.** Bei Temperaturen von etwa 1200 °C können Teere thermisch in kurzkettingere Kohlenwasserstoffe, Kohlenstoffmonoxid und Wasserstoff gecrackt werden. Für diesen Prozess sind neben hohen Temperaturen lange Verweilzeiten vorteilhaft. Ein sinnvoller Kompromiss zwischen Wirtschaftlichkeit, energetischer Effizienz und zuverlässiger Betriebsweise wurde mit Blick auf die thermischen Crack-Prozesse jedoch noch nicht gefunden.

**Katalytische Verfahren.** Da bei den thermischen Verfahren die Erzeugung des notwendigen Temperaturniveaus (z. B. durch partielle Oxidation des Gases [Klemm 2004] oder durch externe Wärmezufuhr) sich i. Allg. negativ auf die Prozesseffizienz auswirkt, erscheinen katalysatorgestützte Crack-Prozesse bzw. Reformierungsprozesse mit niedrigeren Arbeitstemperaturen (ab etwa 850 °C) energetisch vielversprechend. Dabei kann der Katalysator entweder schon während des Vergasungsprozesses (z. B. als katalytisches Bettmaterial bei Wirbelschichtreaktoren) oder außerhalb des Vergasungsreaktors (z. B. in einem gesonderten Reaktor) mit dem Gasstrom in Kontakt gebracht werden. Bei der Auslegung des Prozesses muss besonderes Augenmerk auf die Gasverweilzeit an der Katalysatoroberfläche und die Vermeidung von Katalysatorvergiftungen durch Gasverunreinigungen gelegt werden. Um hohe Methanerträge bei der Bio-SNG-Produktion zu gewährleisten, gilt es des Weiteren zu vermeiden, dass neben den Teeren auch bereits in der Vergasung erzeugtes Methan zerstört wird. Katalysatorgestützte Prozesse erscheinen insbesondere hinsichtlich der energetischen Effizienz gegenüber rein thermischen Verfahren als vielversprechend, befinden sich allerdings noch im Versuchsstadium [Dayton 2009], [Felix 2007], [Vogel 2006].

**Waschende Verfahren.** Alternativ zur thermischen und katalytisch gestützten Zerstörung der Teere können diese auch durch Gaswäschen aus dem Gasstrom entfernt werden. Dabei werden die Teere und Wasserdampf zunächst zur Kondensation gebracht und anschließend z. B. mit Wasser als Waschmittel aus dem Gasstrom ausgewaschen. Praktisch wird die Teerentfernung durch Gaswäschen derzeit durch eine Vielzahl von unterschiedlichen Wäschertypen realisiert (z. B. Venturi-Wäscher), bei denen sowohl die Teerkondensation als auch das Auswaschen der kondensierten Teere in der Regel in denselben verfahrenstechnischen Apparat integriert sind. Nachteile der waschenden Verfahren sind jedoch die verhältnismäßig geringen Abscheideraten (Restteergehalt: 20 bis 40 mg/m<sub>N</sub><sup>3</sup>) und das anfallende Wasser-Teer-Gemisch, welches aufwändig entsorgt oder aufbereitet werden muss.

Um die Teerabscheideraten waschender Teerentfernungsverfahren zu verbessern, werden zunehmend Waschsysteme mit organischen Lösungsmitteln (z. B. RME) eingesetzt. Diese unpolaren Waschmittel absorbieren die in der Regel ebenfalls unpolaren Teere und führen so zu höheren Teerabscheideraten als Verfahren mit Wasser als Waschmittel. Auf diese Weise kann der Teergehalt im Gas bis auf etwa 10 mg/m<sub>N</sub><sup>3</sup> reduziert werden. Zudem kann

das anfallende Teer-Lösungsmittelgemisch thermisch entsorgt und Wärme bereitgestellt werden [Boerrigter 2006 a], [Vogel 2006], [Rauch 2002].

**Adsorptive Verfahren.** Da Teere in der Regel unpolar sind, können sie prinzipiell auch mit Hilfe hydrophober Adsorbentien (z. B. Aktivkohle) adsorbiert und so vom Gasstrom abgeschieden werden. Bei der Teeradsorption ist jedoch – ähnlich wie bei der Teerentfernung durch Filter – mit einer Verklebung der Adsorbentien zu rechnen. Den Teerabscheideraten sind daher grundsätzlich Grenzen gesetzt.

### 2.1.3.3 Schwefelentfernung

In Abhängigkeit vom verwendeten Brennstoff und den Vergasungsparametern enthält das erzeugte Rohgas unterschiedliche Mengen und Arten an Schwefelverbindungen (z. B.  $\text{H}_2\text{S}$ , COS, Thiophene). Im Rahmen der thermo-chemischen Biomethanproduktion müssen diese Verbindungen insbesondere aufgrund ihrer schädlichen Wirkung auf den Katalysator der Methansynthese entfernt werden. Bei der Schwefelentfernung kann zwischen adsorptiven und absorptiven Verfahren unterschieden werden.

**Absorptive Verfahren.** Um eine effiziente Schwefelabscheidung zu gewährleisten, werden häufig Wäscher mit basischen Waschmitteln (z. B. mit Natriumhydroxidlösung) verwendet, die zwar als erprobte Technologieoptionen betrachtet werden können, jedoch mit dem Aufkommen von Prozessabwasser verbunden sind [Behr 2010]. Bei Anlagen mit großen Gasdurchsätzen kann zudem auf Verfahren aus dem Bereich der Kohlegasaufbereitung (z. B. Rectisolwäschen, Selexolwäschen, Aminwäschen) zurückgegriffen werden. Mit Hilfe dieser Verfahren kann neben Schwefel zudem auch  $\text{CO}_2$  selektiv vom Gasstrom abgetrennt werden (Kapitel 2.1.5.1).

**Adsorptive Verfahren.** Zinkoxid- und Aktivkohlebetten sind kommerziell verfügbare adsorptive Medien, die in der Lage sind, Schwefelverbindungen aus Gasströmen abzuscheiden. Insbesondere durch die Adsorption an ZnO, welches bei Temperaturen zwischen 350 und 450 °C arbeitet, sind äußerst niedrige Schwefelrestkonzentrationen erreichbar (ppb-Bereich), so dass eine Katalysatordeaktivierung in nachfolgenden Syntheseanwendungen ausgeschlossen werden kann. Dabei müssen organische Schwefelverbindungen (z. B. COS, Thiophene) jedoch vor der Adsorption an ZnO hydriert oder gesondert abgeschieden werden [Kolb 2008]. In der Regel wird zur Gasentschwefelung eine Kombination bzw. Hintereinanderschaltung von Aktivkohle- und ZnO-Betten verwendet. Die Aktivkohlebetten dienen dabei i. Allg. zur Grob- und ZnO-Betten zur Feinentschwefelung. Sowohl die Aktivkohle als auch das ZnO müssen jedoch in regelmäßigen Abständen erneuert oder regeneriert werden. Die Schwefeladsorption an Metalloxid-Pellets, Dolomit oder Kalk befindet sich zurzeit noch in der Erprobung [Vogel 2006].

### 2.1.3.4 Stickstoffentfernung

Stickstoffverbindungen (z. B.  $\text{NH}_3$ , HCN) müssen entfernt werden, um den Einspeisebestimmungen der Erdgasnetze gerecht zu werden. Stickstoffverbindungen können durch absorptive, adsorptive und durch katalytische Verfahren aus Gasströmen entfernt werden.

**Absorptive Verfahren.** Absorptive Verfahren zur Stickstoffabscheidung sind, wie die Waschsysteme zur Schwefelabsorption, in vielfachen Ausführungen erprobt und kommerziell verfügbar. Als Waschmedium wird i. Allg. Wasser verwendet. Um die

Abscheiderate der Gaswäschen zur Entfernung von Stickstoffverbindungen zu erhöhen, können saure Waschmittel (z. B. Schwefelsäurelösungen) eingesetzt werden [Behr 2010]. Mit Blick auf die nassen Gasreinigungsverfahren erweisen sich im Besonderen der Anfall von Abwasser und die Tatsache, dass das Gas vor Eintritt in den Wäscher abgekühlt werden muss, als nachteilig.

**Adsorptive Verfahren.** Die Adsorption von Stickstoffverbindungen ist mit Hilfe unterschiedlicher Adsorbentien möglich. In der praktischen Anwendung haben adsorptive Verfahren jedoch aufgrund begrenzter Abscheideraten keine Bedeutung.

**Katalytische Verfahren.** Der Nachteil, das zu reinigende Gas vor Eintritt in absorptiv arbeitende Waschsysteeme kühlen zu müssen, kann durch katalytische Verfahren vermieden werden. Diese arbeiten bei Temperaturen um etwa 850 °C und befinden sich derzeit noch in der Entwicklung. Bei der Erprobung dieser Verfahren zum Einsatz in Prozessketten zur Bio-SNG-Erzeugung muss neben der Vermeidung von Katalysatordeaktivierungen insbesondere darauf geachtet werden, dass bereits im Gas enthaltenes Methan nicht mit zerstört wird [Vogel 2006].

#### 2.1.3.5 Halogenentfernung

Auch Halogenverbindungen (z. B. HCl) haben eine schädliche Wirkung auf die in der Methansynthese eingesetzten Katalysatoren und andere Anlagenkomponenten (z. B. durch die Förderung der Heißgaskorrosion) und müssen daher aus dem Gas entfernt werden. Zur Halogenentfernung aus Gasströmen kommen im Wesentlichen die bereits beschriebenen absorptiven und adsorptiven Verfahren (z. B. basische Gaswäschen, ZnO-Betten, Aktivkohlebetten) zur Anwendung [Vogel 2006].

#### 2.1.3.6 Alkalientfernung

Alkalien (z. B. Na- und K-Verbindungen) führen zur Korrosion an diversen Anlagenkomponenten. Üblicherweise kondensieren Alkalien bei Temperaturen unter 600 °C und können verhältnismäßig einfach mit konventionellen mechanischen Abscheideverfahren (z. B. mit Filtern) aus dem Gas entfernt werden. Insbesondere beim Einsatz von Gasturbinen ist eine vorgeschaltete Entfernung der Alkalien von Bedeutung, da diese im gasförmigen Zustand zu Heißgaskorrosion an den Turbinenschaufeln führen können [Vogel 2006].

#### 2.1.4 Methanisierung

Um den Methangehalt im gereinigten Gas zu erhöhen, wird das Gas durch eine katalysatorgestützte Synthese, die sogenannte Methanisierung, mit Methan angereichert. Dazu werden die Gasbestandteile Kohlenstoffmonoxid und Wasserstoff zu Methan und Kohlenstoffdioxid umgewandelt (Gleichung (2-1)) [Sabatier 1902]. Bei hohem Wasserstoffüberschuss und entsprechenden Prozessbedingungen wird neben Kohlenstoffmonoxid zudem auch Kohlenstoffdioxid zu Methan konvertiert (Gleichung (2-2)).



Um einen hohen Kohlenstoffmonoxidumsatz während der Methanisierung sicherzustellen, ist ein H<sub>2</sub>/CO-Verhältnis von mindesten 3/1 notwendig [Strakey 1975]. Da das zugeführte

Gas jedoch in Abhängigkeit der Prozessparameter des Vergasungsprozesses i. Allg. durch niedrigere  $H_2/CO$ -Verhältnisse gekennzeichnet ist, muss dieses entweder durch Wasserstoffzugabe oder durch die Konvertierung von Kohlenstoffmonoxid in Wasserstoff (und Kohlenstoffdioxid) unter Anwesenheit von Wasser erhöht werden (Gleichung (2-3)).



Aufgrund der Möglichkeit, mit den eingesetzten Katalysatoren (z. B. Nickel) bei erhöhten Drücken und Temperaturen ebenfalls die Wassergas-Shift-Reaktion (Gleichung (2-3)) zu katalysieren, kann die Einstellung eines ausreichenden  $H_2/CO$ -Verhältnisses durch die Wassergas-Shift-Reaktion (u. a. in Abhängigkeit der Katalysatorzusammensetzung, dem Reaktordesign und den Prozessparametern) anstatt in einem gesonderten Shift-Reaktor vor der Methanisierung auch parallel zur Methansynthese erfolgen.

Die Methansynthese wird prinzipiell von allen Metallen der achten Hauptgruppe des Periodensystems der Elemente katalysiert. Aufgrund ihrer Verfügbarkeit und Preisstabilität steht die Verwendung von Nickelkatalysatoren jedoch im Mittelpunkt kommerzieller Projekte [Hedden 1986]. Die Katalysatoren arbeiten i. Allg. in einem weiten Temperatur- und Druckbereich (250 bis 650 °C; 1 bis 80 bar), wobei die Methanisierung gemäß dem chemischen Gleichgewicht insbesondere durch niedrige Temperaturen und hohe Drücke gefördert wird [Higman 2003].

In Bezug auf einen dauerhaften Anlagenbetrieb ist der vorzeitigen Deaktivierung der Nickelkatalysatoren vorzubeugen. So sind die Katalysatoren z. B. empfindlich gegenüber Schwefelverbindungen – und dabei in besonderem Maße gegenüber organischen Schwefelverbindungen [Struis 2009] – sowie gegenüber Carbonylbildung [Lohmüller 1977] und Verkokungserscheinungen [Seemann 2006].

Grundsätzlich können Methanisierungsreaktoren entsprechend dem fluiddynamischen Verhalten ihrer Katalysatoren in Festbett- und Wirbelschichtverfahren unterteilt werden (Abb. 2.5). Beide Verfahren werden im Folgenden beschrieben.



Abb. 2.5 Übersicht Methanisierungsverfahren

#### 2.1.4.1 Festbettverfahren

Aufgrund der stark exothermen Methanisierungsreaktion und der begrenzten radialen und axialen Wärmeabfuhr von Festbettreaktoren kann ein einzelner Festbettreaktor nur unter großem Aufwand bzw. mit geringen Konversionsraten isotherm betrieben werden [Hedden 1986]. Um die Wärmeabfuhr trotzdem zu beherrschen und die Methanisierung auf diese Weise kontrollieren zu können, werden meist mehrere adiabate Festbettreaktoren mit moderaten Konversionsraten und damit auch moderaten Abwärmeströmen miteinander verschaltet. Die Reaktoren werden dabei entweder parallel, in Serie oder als Kombination aus Parallel- und Serienschaltung angeordnet.



Neben der Aufteilung des Konversionsprozesses auf mehrere Reaktoren mit jeweils begrenzten Konversionsraten werden – um die Reaktionswärme kontrollieren zu können – im Wesentlichen zwei weitere Maßnahmen angewandt: Zwischenkühlung und Gasrückführung. Bei der Zwischenkühlung wird das Gas nach dem Austritt aus dem Reaktor in einem Wärmeübertrager abgekühlt. Durch die auf diese Weise erzeugten moderaten Gaseintrittstemperaturen im nachfolgenden Reaktor wird auch die Gasaustrittstemperatur dieses Reaktors begrenzt. Die bei der Zwischenkühlung anfallende Wärme wird häufig zur Dampferzeugung genutzt. Bei der Gasrückführung wird den Reaktoren inertes Kreislaufgas als Verdünnungsmittel zugeführt. Durch das i. Allg. gekühlte Kreislaufgas kann einerseits mehr Wärme aus dem Reaktor abgeführt und andererseits die Aufheizung innerhalb des Reaktors begrenzt werden. In der Regel besitzen die Festbettreaktoren verschiedene Temperaturniveaus, um sowohl die Verweilzeit als auch die Umsatzraten zu optimieren [Höhlein 1977], [Höhlein 1978], [Harms 1979], [Hedden 1986], [Karl 2009].

In der Vergangenheit wurden verschiedene Festbettmethanisierungsverfahren mit interner Gasrückführung und Gaszwischenkühlung entwickelt und können als Stand der Technik bezeichnet werden (u. a. [Eisenlohr 1974], [U.S. Department of Energy 2006], [Haldor Topsoe 2010], [Davy 2010], [Haynes 1976]).

#### **2.1.4.2 Wirbelschichtverfahren**

Im Gegensatz zu Festbettreaktoren findet die Methanisierung in Wirbelschichtreaktoren in einem katalytisch aktiven Wirbelbett statt. Die intensive Bewegung und gleichmäßige Verteilung des Katalysators ermöglicht hohe Wärmeübertragungsraten und homogene Reaktionsbedingungen im gesamten Reaktor. Durch einen Wärmeübertrager im Wirbelbett kann die Reaktionswärme der exothermen Methanisierungsreaktion abgeführt und nahezu isotherme Bedingungen im Reaktor erzeugt werden. Auch bei großen Gasdurchsätzen ist daher die Errichtung eines einzelnen Methanisierungsreaktors in der Regel ausreichend, um einen nahezu vollständigen Kohlenstoffmonoxidumsatz zu realisieren. Als nachteilig beim Einsatz von Wirbelschichtreaktoren erweist sich i. Allg. der hohe Katalysatorverschleiß durch Abrasionserscheinungen im Wirbelbett [Friedrichs 1985], [Seemann 2006].

Unterschiedliche Wirbelschichtmethanisierungen wurden in der Vergangenheit entwickelt und hinreichend erprobt (u. a. [Friedrichs 1985], [Hedden 1986], [Friedrichs 1987], [Seemann 2006], [Kopyscinski 2009]).

#### **2.1.5 Roh-SNG-Aufbereitung**

Um das aus der Methanisierung austretende Gas in das Erdgasnetz einspeisen zu können, muss dieses qualitativ den Anforderungen des Gasnetzes genügen. Nach der Methanisierung ist daher eine Aufbereitung des Roh-SNG notwendig, die im Wesentlichen die Entfernung von Kohlenstoffdioxid, Wasser (Abb. 2.6) sowie gegebenenfalls anderen Gasbestandteilen (z. B. Wasserstoff) umfasst. Die Anforderungen an die Gasqualität richten sich nach den Vorgaben der Arbeitsblätter G 260 und G 262 [DVGW G260], [DVGW G262]. Die Anpassung des Bio-SNG Wobbeindex an den vorgegebenen Netzwert ist in diesem Zusammenhang von besonderer Bedeutung und kann entsprechend den vorliegenden Gasnetzspezifikationen die Vorgaben der DVGW Arbeitsblätter noch übersteigen.

Für die Gasaufbereitungsschritte sind diverse Techniken am Markt verfügbar und finden in den verschiedensten Bereichen (z. B. Kohlegasaufbereitung, Erdgasaufbereitung, Biogasaufbereitung) Anwendung. Relevante Verfahren und Technologien zur Kohlenstoffdioxidentfernung und Gastrocknung sind im Folgenden dargestellt.



Abb. 2.6 Übersicht Roh-SNG-Aufbereitungsverfahren

### 2.1.5.1 Kohlenstoffdioxidentfernung

Mit Blick auf die Kohlenstoffdioxidentfernung kann zwischen absorptiven und adsorptiven Verfahren unterschieden werden.

**Absorptive Verfahren.** Absorptionsprozesse können in physikalische und chemische Absorptionsprozesse eingeteilt werden.

- **Physikalische Absorption.** Bei der physikalischen Absorption wird die gasförmige Komponente aufgrund ihrer hohen Löslichkeit im Lösungsmittel aus dem Gasstrom absorbiert. Zwei bedeutende physikalische Absorptionsprozesse sind der Rectisolprozess [Lurgi 2009] sowie der Selexolprozess [UOP 2009]. Beide Prozesse werden nachfolgend übersichtsweise vorgestellt.

Beim Rectisolprozess wird tiefgekühltes Methanol als Waschmittel verwendet und der Prozess – um ausreichende Absorptionsraten zu erzielen – bei gehobenen Drücken betrieben. Neben CO<sub>2</sub> werden zudem weitere Verunreinigungen absorbiert. Dabei ist mit Blick auf die zur SNG Produktion üblicherweise eingesetzten schwefelempfindlichen Nickelkatalysatoren insbesondere der hohe Schwefelabscheidegrad auf Restgehalte von einigen ppb hervorzuheben. Als nachteilig erweist sich neben der hohen Anlagenkomplexität u. a. ein hoher Energieaufwand zur Methanolkühlung [Hochgesand 1970], [Kohl 1997], [Ullmann's 2006].

Der Selexolprozess nutzt im Wesentlichen Polyethylenglykol als Lösungsmittel und arbeitet wie auch der Rectisolprozess unter Druck, jedoch bei moderaten Temperaturen. Das Spektrum der absorbierbaren Verunreinigungen ähnelt dem des Rectisolprozess. Grundsätzlich werden jedoch geringere Reinheitsgrade in Bezug auf Schwefelverbindungen (etwa 0,1 ppm) erreicht als beim Rectisolprozess. Nachteile des Selexolprozesses sind wie auch beim Rectisolprozess die mit hohen Investitionen verbundene Anlagenkomplexität und zudem verhältnismäßig kostenintensive Waschmittel [Kohl 1997], [Ullmann's 2006].

- **Chemische Absorption.** Bei der chemischen Absorption reagiert die gasförmige Komponente mit dem Waschmedium und bildet so Verbindungen, die mit dem verbleibenden Waschmedium abtransportiert werden. Aminwäschen sind den chemischen Absorptionsprozessen zuzuordnen [BASF 2009] und werden nachfolgend beschrieben.

Die Absorption mit Hilfe von Aminlösungen arbeitet bei niedrigeren Drücken als die physikalische Absorption und erzielt hohe Absorptionsraten bei gleichzeitig geringem Waschmediumdurchsatz. Als Waschmedium wird i. Allg. eine Wasser-Amin-Lösung verwendet, die Kohlenstoffdioxid (und in Abhängigkeit von der Lösung auch Schwefelverbindungen) chemisch bindet. Als problematisch erweisen sich dabei organische Schwefelverbindungen sowie ggf. Nebenreaktionen von

Kohlenstoffmonoxid und Aminlösung. Das Waschmedium wird durch Wärmezufuhr regeneriert. Aminwäschen sind daher durch einen geringen Stromverbrauch, einen hohen Wärmebedarf, eine niedrige Methanabsorption (< 0,1 %) und eine geringere Anlagenkomplexität als der Rectisol- und Selexolprozess gekennzeichnet [Kohl 1997], [Ullmann's 2006].

**Adsorptive Verfahren.** Als technische Adsorbentien kommen u. a. Aktivkohle und Molekularsiebe zum Einsatz [Mersmann 2005]. Ein für die Bio-SNG-Produktion relevantes Adsorptionsverfahren ist die Druckwechseladsorption (DWA). Dieses Verfahren arbeitet unter erhöhtem Druck und nutzt die Eigenschaft der Aktivkohle, mit steigendem Adsorptionsdruck größere Kohlenstoffdioxidfrachten aufnehmen zu können. Da die Aufnahmekapazität der Aktivkohle begrenzt ist, muss diese in regelmäßigen Abständen entladen werden, indem der Adsorptionsdruck reduziert wird. Um trotzdem einen kontinuierlichen Anlagenbetrieb zu gewährleisten, werden in der Regel mehrere Adsorptionsbetten parallel geschaltet und wechselhaft be- und entladen. Im Gegensatz zu Kohlenstoffdioxid werden Gase mit einer geringen Molmasse (z. B. Wasserstoff) schlecht adsorbiert und verbleiben überwiegend im Rohgas. Verhältnismäßig hohe Methan-Koadsorptionsraten stellen in diesem Zusammenhang einen Nachteil der adsorptiven Kohlenstoffdioxidentfernung im Rahmen der Bio-SNG-Produktion dar [Ullmann's 2006].

### 2.1.5.2 Gastrocknung

Um das Roh-SNG zu trocknen, wird dieses zunächst bis unter die Taupunkttemperatur abgekühlt. Dabei kann das Gas zur Verbesserung der Kondensationsrate vorab komprimiert werden. Um das Gas bei Bedarf noch weiter zu trocknen, können wie auch bei der Kohlenstoffdioxidentfernung absorptive oder adsorptive Verfahren eingesetzt werden. Da adsorptive Verfahren (z. B. Adsorption an Silicagel) jedoch meist durch hohe Betriebsaufwendungen gekennzeichnet sind, erscheinen absorptive Verfahren in Rahmen der Bio-SNG-Produktion vorteilhaft. Ein bedeutendes absorptives Verfahren zur Gastrocknung ist die Absorption von Wasser in einem glykolhaltigen Medium.

Glykol-basierte Trocknungsverfahren verwenden i. Allg. Triethylenglykol (TEG) als Absorptionsmedium und erzielen sehr niedrige Wassertaupunkte (bis zu  $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$ ). Zur Regeneration des wasserbeladenen Triethylenglykol muss dieses bis auf etwa  $200\text{ }^{\circ}\text{C}$  erhitzt werden [Kohl 1997].

## 2.2 Bereitstellung von Strom

Elektrische Energie kann mit Hilfe einer Vielzahl unterschiedlicher Technologien bereitgestellt werden. Ein breites Anwendungsfeld nehmen dabei Wärmekraftmaschinen ein, welche sich auf vielfältige Art und Weise in Konzepte zur Erzeugung von SNG integrieren lassen. Im Folgenden werden daher für diese Integration relevante Wärmekraftmaschinen vorgestellt.

### 2.2.1 Wärmekraftmaschinen

Wärmekraftmaschinen wandeln zunächst Wärmeenergie in mechanische Energie und anschließend diese mit Hilfe eines Generators in elektrische Energie um. Eine Möglichkeit zur Unterscheidung von Wärmekraftmaschinen ist die Einteilung in Aggregate mit interner und Aggregate mit externer Wärmezufuhr (Abb. 2.7). Bei ersteren wird die zur Stromerzeugung notwendige Wärme durch interne Verbrennungsprozesse (z. B. Verbrennungsmotoren) und bei letzteren aus einer externen Wärmequelle bereitgestellt (z. B. Dampfkraftprozess). Zur theoretischen Beschreibung von Wärmekraftmaschinen werden in der Regel Kreisprozesse verwendet, die einen Prozess als Folge quasistatischer

Zustandsänderungen charakterisieren [Cerbe 2002]. Der Carnot-Wirkungsgrad  $\eta_c$  ist als Maß des theoretisch möglichen Wirkungsgrades von Wärmekraftmaschinen definiert, die durch einen rechtslaufenden Kreisprozess beschrieben werden können (Gleichung (2-4)).

$$\eta_c = 1 - \frac{T_{ab}}{T_{zu}} \quad (2-4)$$

Der Carnot-Wirkungsgrad ist weder von der Art des Arbeitsmittels noch von der Bauart des Prozesses abhängig, sondern lediglich eine Funktion der mittleren Temperatur der Wärmezufuhr  $T_{zu}$  und der mittleren Temperatur der Wärmeabfuhr  $T_{ab}$  [Cerbe 2002].

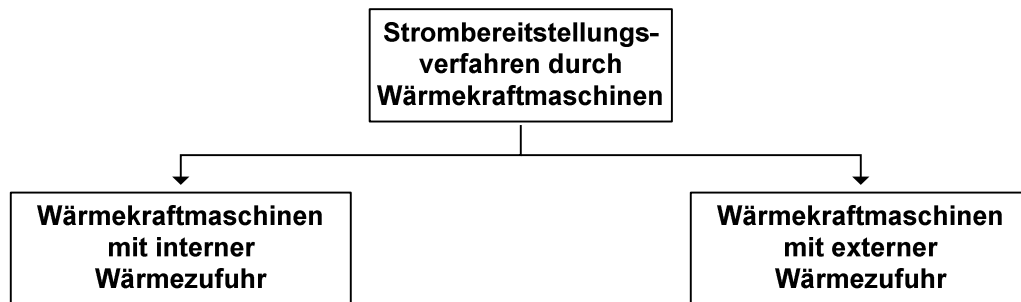


Abb. 2.7 Übersicht Strombereitstellungsverfahren durch Wärmekraftmaschinen

### 2.2.1.1 Wärmekraftmaschinen mit interner Wärmezufuhr

Hinsichtlich der Prozessketten zur Bio-SNG-Erzeugung sind im Wesentlichen Gasmotoren und Gasturbinen als relevante Wärmekraftmaschinen mit interner Wärmezufuhr zu nennen.

**Gasmotoren.** Gasmotoren sind Verbrennungskraftmaschinen, bei denen die chemisch gebundene Energie eines gasförmigen Brennstoffs durch einen internen Verbrennungsprozess zunächst in thermische Energie und anschließend in mechanische Energie überführt wird. Dabei wird i. Allg. ein Luft-Brennstoff-Gemisch in einem Zylinder verdichtet, verbrannt, unter der Abgabe von mechanischer Arbeit expandiert und schließlich aus dem Zylinder ausgeschoben. Gasmotoren zeigen insbesondere in Leistungsbereichen bis  $2 \text{ MW}_{el}$  höhere elektrische Wirkungsgrade (30 bis 45 %) als alternative Technologien wie Gasturbinen. Als nachteilig erweisen sich u. a. ein vergleichsweise hoher Wartungsaufwand sowie die von den Motoren verursachten Emissionen [Vogel 2006]. Weiterhin müssen Brenngase vor dem Einsatz in Gasmotoren abgekühlt werden, um eine ausreichende Verdichtung im Zylinder zu gewährleisten. Dies kann neben exergetischen Verlusten auch mit Problemen wie etwa der Kondensation von Teeren beim Einsatz von unzureichend gereinigten Vergasungsgasen verbunden sein [Karl 2006]. Der Einsatz von Gasmotoren in Zusammenhang mit Biomassevergasungssystemen ist Stand der Technik [Hofbauer 2008].

**Gasturbinen.** Gasturbinen sind nach dem Strömungsprinzip arbeitende Verbrennungskraftmaschinen [Menny 2006] zur Stromerzeugung aus gasförmigen Brennstoffen. Bei Gasturbinenprozessen wird Luft verdichtet und in eine Brennkammer geführt. Der gasförmige Brennstoff wird ebenfalls in diese Brennkammer geführt und dort kontinuierlich bei konstantem Druck verbrannt. Die entstehenden Verbrennungsgase expandieren anschließend in einer Turbine und geben dort ihre Energie ab. Diese Energie dient einerseits zum Antrieb des Luftverdichters und andererseits zum Antrieb eines Generators [Menny 2006]. Gasturbinen sind im Vergleich zu konkurrierenden

Technologien wie Gasmotoren insbesondere durch geringere Bauvolumina, geringere Emissionswerte und einen geringeren Wartungsaufwand gekennzeichnet. Sie werden aufgrund der anteilig steigenden Spaltverluste bei sinkenden Baugrößen vornehmlich im Leistungsbereich ab etwa  $2 \text{ MW}_{el}$  eingesetzt. Die Nutzung von Gasen aus Biomassevergasungssystemen in Gasturbinen befindet sich derzeit in der Erprobung [GWI 2008].

### 2.2.1.2 Wärmekraftmaschinen mit externer Wärmezufuhr

Unter den Wärmekraftmaschinen mit externer Wärmezufuhr kann – neben sich derzeit in der Entwicklung befindlichen Prozessen (z. B. Kalina-Prozess) – zwischen Kreisprozessen mit Wasserdampf als Arbeitsmedium (Dampfkraftprozessen) und organischem Arbeitsmedien (ORC-Module) differenziert werden.

**Kreisprozesse mit Wasserdampf als Arbeitsmedium.** Dampfkraftprozesse sind Kreisprozesse, bei denen thermische Energie zur Stromerzeugung genutzt wird. Das Arbeitsmedium des Kreisprozesses (Wasserdampf) wird dabei zunächst verdichtet, anschließend durch die externe Zufuhr von Wärme verdampft und überhitzt, in einer Turbine o. ä. unter der Abgabe mechanischer Arbeit entspannt und schließlich kondensiert [Cerbe 2002]. Dampfkraftprozesse sind ein etablierter Bestandteil der Kraftwerkslandschaft und kommen in Verbindung mit diversen Wärmequellen (z. B. Kohlefeuerungen) zum Einsatz. Da der maximal erreichbare Wirkungsgrad eines Dampfkraftprozesses durch den Carnot-Wirkungsgrad wiedergegeben wird, ist neben dem Dampfdruck insbesondere die Dampftemperatur entscheidend für den Wirkungsgrad [Menny 2006].

**Prozesse mit organischen Arbeitsmedien.** Organic-Rankine-Cycle (ORC) sind ebenfalls Kreisprozesse, bei denen das Arbeitsmedium verdichtet, verdampft, entspannt und kondensiert wird. Im Gegensatz zu Dampfkraftprozessen wird jedoch ein organisches Arbeitsmittel verwendet, welches für die Nutzung niedrigerer Temperaturniveaus geeignet ist [Karl 2006]. Die positive Steigung der Taulinie organischer Arbeitsmedien im Temperatur-Entropie-Diagramm ermöglicht eine regenerative Vorwärmung des Speisewassers und damit eine Wirkungsgradsteigerung gegenüber Wasserdampfprozessen mit vergleichbaren Dampfparametern. Weiterhin sind ORC-Module durch geringe Wartungsaufwendungen gekennzeichnet und können mit Blick auf die Integration in Biomassevergasungsanlagen als Stand der Technik betrachtet werden.

### 3 Methodische Vorgehensweise

Gemäß der Zielstellung steht die Bestimmung und Bewertung des energetischen, ökonomischen und ökologischen Optimierungspotenzials von Bio-SNG-Konzeptvarianten ohne Stromproduktion im Vergleich zu Konzepten mit Stromproduktion im Fokus der Arbeit. Das zum Erreichen dieser Zielstellung erarbeitete Vorgehen sowie die Methodiken der einzelnen Arbeitsschritte werden im Folgenden vorgestellt.

#### 3.1 Allgemeines Vorgehen

Das entwickelte Vorgehen gliedert sich in vier Arbeitsschritte (Abb. 3.1):

- Analyse der Startpunkte der Optimierung (Kapitel 5)
- Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme (Kapitel 6)
- Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme (Kapitel 7)
- Vergleich der optimierten Konzeptvarianten (Kapitel 8)

**Analyse der Startpunkte der Optimierung.** Bei der Analyse der Startpunkte der Optimierungen werden die definierten Konzeptvarianten hinsichtlich energetischer, ökonomischer und ökologischer Kenngrößen analysiert. Dies hat zum Ziel, die Optimierungsergebnisse mit den Werten vor der Optimierung, d. h. mit den Startpunkten, vergleichen und somit bewerten zu können.

**Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme.** Die Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme hat das Ziel, die bei der Analyse der Startpunkte berechneten Kenngrößen zu verbessern. Im Vordergrund steht dabei eine optimierte Prozessabwärmenutzung.

**Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme.** Das Ziel der Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme ist es ebenfalls, die bei der Analyse der Startpunkte bestimmten energetischen, ökonomischen und ökologischen Kenngrößen zu verbessern. Dabei liegt der Fokus jedoch auf einer Prozessverbesserung durch die zusätzliche Bereitstellung von Strom mit Hilfe von Gasmotoren, Gasturbinen, Dampfkraftprozessen und ORC-Modulen.

**Vergleich der optimierten Konzeptvarianten.** Beim Vergleich der optimierten Konzeptvarianten werden die Varianten ohne und mit Stromerzeugung miteinander verglichen und den Werten der Startpunktanalyse gegenübergestellt. Auf diese Weise kann das energetische, ökonomische und ökologische Optimierungspotenzial der Konzeptvarianten bewertet sowie vielversprechende Prozessauslegungen (d. h. die optimalen Optimierungsparameter) identifiziert werden.

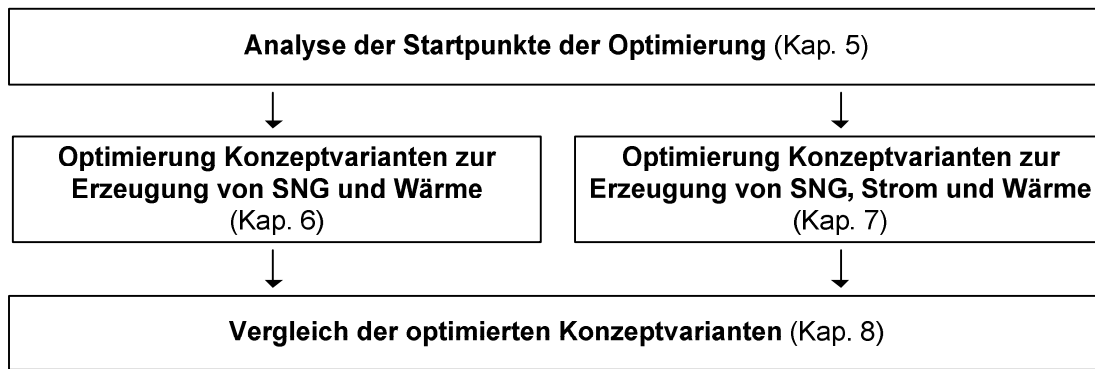


Abb. 3.1 Allgemeines Vorgehen der Arbeit

## 3.2 Methodik der Analyse

Das Ziel der Analyse ist es, unterschiedliche Konzeptvarianten auf der Basis ausgewählter energetischer, ökonomischer und ökologischer Kenngrößen zu beschreiben. Zum einen ist dies in Bezug auf die Bestimmung der Startpunkte der Optimierungen erforderlich, und zum anderen während der Optimierungen selbst zur Berechnung der Optimierungskriterien nach jedem Optimierungsschritt. Im Rahmen der Entwicklung einer entsprechenden Analysemethodik werden daher nachfolgend energetische, ökonomische und ökologische Kenngrößen vorgestellt, diskutiert und die Berechnungen ausgewählter Kenngrößen, welche eine der Zielstellung angemessene Prozesscharakterisierung ermöglichen, beschrieben.

### 3.2.1 Entwicklung einer energetischen Analysemethodik

Die Analyse, der Vergleich und die Bewertung der energetischen Effizienz von Anlagen und Systemen sowie deren Optimierung erfolgt in der Regel auf Basis von Energiekenngrößen. Diese sind dimensionslose oder dimensionsbehaftete Zahlen, die mit Hilfe der Bilanzierungen von Energiemengen ermittelt werden. Die Bilanzierung befindet sich dabei stets in Abhängigkeit des Bilanz- und Betrachtungszeitraumes [VDI 4661]. Wesentliche Energiekenngrößen sind im Folgenden dargestellt und werden anschließend diskutiert.

#### 3.2.1.1 Kenngrößen

**Spezifische Energieverbräuche.** Bei der Analyse und Bewertung verfahrenstechnischer Produktionsprozesse ist der Energieverbrauch des jeweiligen Prozesses von besonderer Bedeutung. Um eine einheitliche Vergleichsbasis des Energieverbrauchs verschiedener Prozesse zu gewährleisten, wird dieser i. Allg. spezifisch angegeben und auf eine Bezugsgröße wie bspw. das Produkt oder die Dienstleistung referenziert. Dabei müssen – neben der zugeführten Brennstoffenergie – auch alle anderen zugeführten Energieformen (z. B. Druckluft, Wärme) berücksichtigt werden. Um einen objektiven Kennwertvergleich verschiedener Prozesse mit Hilfe des spezifischen Energieverbrauchs sicherzustellen, sollten alle aufgewendeten Energien auf Primärenergiebasis einbezogen werden und die Bezugsgröße bei allen Prozessen einheitlich definiert sein. Der spezifische Energieverbrauch ist somit ein Maß für die aufgewendeten Energiemengen eines Produktionsprozesses, nicht aber für dessen exergetische, ökonomische und ökologische Qualität [VDI 4661].

**Wirkungsgrade.** Wirkungsgrade geben das Verhältnis der Zielenergieströme zu den aufgewendeten Energieströmen eines Prozesses an. Bei der Berechnung von

Wirkungsgraden ist einerseits der Betrachtungszeitraum und andererseits die Energiequalität von Bedeutung. Dementsprechend kann zwischen verschiedenen Wirkungsgraden, die diesen Einflussgrößen Rechnung tragen, differenziert werden.

- Energetischer Wirkungsgrad. Der energetische Wirkungsgrad ist definiert als das Verhältnis aus der nutzbaren, abgegebenen Leistung und der zugeführten Leistung. Dabei sind die berücksichtigten Leistungen charakteristisch für einen bestimmten Betriebszustand (z. B. Nennbetrieb) bzw. für Momentanwerte der Anlage [VDI 4661].
- Exergetischer Wirkungsgrad. Der exergetische Wirkungsgrad ist definiert als Verhältnis aus Zielenergie eines Prozesses und insgesamt zugeführter Exergie. Er trägt nicht nur den Energiemengen, sondern auch den Energiequalitäten Rechnung [VDI 4661].
- Nutzungsgrad. Der Nutzungsgrad entspricht dem Quotienten aus der in einem bestimmten Zeitraum abgegebenen Zielenergie eines Prozesses und der in diesem Zeitraum insgesamt zugeführten Energie. Damit berücksichtigt der Nutzungsgrad insbesondere das instationäre Verhalten einer Anlage und schließt u. a. Pausen-, Stillstands-, Leerlauf-, An- und Abfahrzeiten ein [VDI 4661].

**Leistungsbegriffe.** Zur Charakterisierung energietechnischer Anlagen werden verschiedene Leistungsbegriffe (z. B. Brutto-Leistung, Netto-Leistung, Nennleistung, Peak-Leistung) verwendet [VDI 4661]. Diese Begriffe bezeichnen die Ausgangsleistung eines Prozesses abzüglich oder zuzüglich ausgewählter Hilfsenergieströme in unterschiedlichen Betriebszuständen. Dabei sind Leistungsbegriffe grundsätzlich als absolute Kennwerte zu verstehen, die ausschließlich als Maß der Prozessleistung dienen.

### 3.2.1.2 Diskussion

Zur Auswahl einer Kenngröße für die energetische Analyse werden die vorgestellten Energiekenngrößen nachfolgend bezüglich ihrer Vorzüge und Nachteile (Tabelle 3.1) diskutiert.

Tabelle 3.1 Vor- und Nachteile von Energiekenngrößen

	Vorteile	Nachteile
Spezifische Energieverbräuche	- Relative Größen (Bewertung der Effizienz)	- Keine Berücksichtigung der Energiequalität
Wirkungsgrade	- Relative Größen (Bewertung der Effizienz) - Verwendung von Exergie- strömen ermöglicht Berück- sichtigung der Energie- qualität	- Hoher Berechnungs- aufwand bei Verwendung von Exergieströmen - Z. T. abstrakt (z. B. bei der Verwendung von Exergieströmen)
Leistungsbegriffe	- Geringer Berechnungsaufwand	- Absolute Größen (keine Bewertung der Effizienz)

Als relative Kenngröße ermöglichen spezifische Energiebedarfe den Vergleich konkurrierender Verfahren auf der Grundlage einer einheitlichen Bezugsbasis. Als nachteilig erweist sich jedoch, dass die Qualität der betrachteten Energieströme laut Definition unberücksichtigt bleibt [VDI 4661].

Wirkungsgrade sind ebenfalls relative Kenngrößen, die daher den Vergleich konkurrierender Verfahren anhand einer gemeinsamen Bezugsbasis ermöglichen. Im Gegensatz zu den spezifischen Energiebeverbräuchen ist jedoch eine Berücksichtigung der



Energiequalität durch die Wirkungsgradberechnung mit Hilfe von Exergieströmen möglich.

Leistungsbegriffe hingegen sind absolute Kennzahlen zur Prozesscharakterisierung. Eine einheitliche Vergleichsbasis zur Beurteilung unterschiedlicher Prozessalternativen ist somit nicht gegeben.

Mit Blick auf die aufgeführten Energiekennzahlen kombinieren Wirkungsgrade den Vorteil, den Vergleich von Prozessen anhand einer relativen Kenngröße zu ermöglichen und – bei der Wirkungsgradberechnung mit Hilfe von Exergieströmen – eine Bewertung der Energiequalität zuzulassen. Da die Energiequalität insbesondere bei der Analyse von KWK-Aggregaten, die in dieser Arbeit in das Stoff- und Wärmemanagement eines Prozesses integriert werden sollen, von Bedeutung ist, wird der exergetische Wirkungsgrad zur energetischen Analyse herangezogen. Dies bietet einerseits die Möglichkeit, unterschiedliche Produkte gemäß ihrer Energiequalität miteinander zu verrechnen und andererseits Wärmeströmen mit verschiedenen Temperaturniveaus gerecht zu werden.

### 3.2.1.3 Berechnungsmethodik

Der exergetische Wirkungsgrad wird auf der Basis von Prozessbilanzierungen berechnet, die innerhalb des betrachteten Bilanzraumes durchgeführt werden. Dabei wird sowohl der Exergiegehalt von Stoffströmen als auch der von Wärme und elektrischer Energie berücksichtigt (Abb. 3.2).

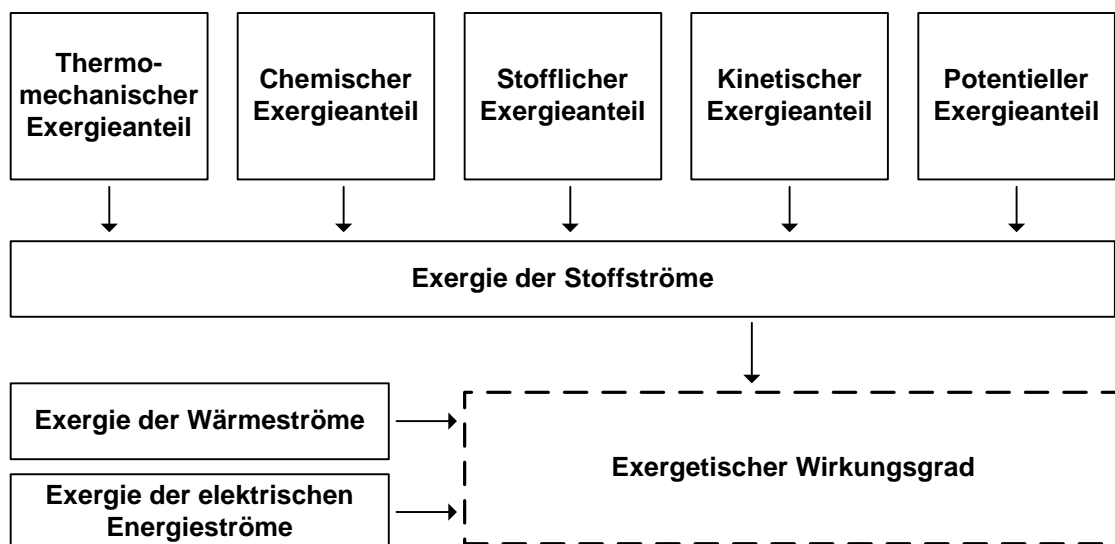


Abb. 3.2 Berechnungsschema des exergetischen Wirkungsgrades

Die grundlegende Berechnungsmethodik der Exergieströme, die Definition des exergetischen Wirkungsgrades sowie die Definition einer zur Exergieberechnung erforderlichen Referenzumgebung werden im Folgenden vorgestellt.

**Exergie der Stoffströme.** Die Exergie von Stoffströmen (d. h. von gasförmigen, festen und flüssigen Substanzen) kann durch das Produkt der spezifischen Exergie  $e_{0i}$  des jeweiligen reinen Stoffes  $i$  und seinem Massenstrom berechnet werden. Die spezifische Exergie setzt sich dabei aus verschiedenen Exergieanteilen zusammen (Gleichung (3-1)) [Lucas 2004].

$$e_{0i}(T, p) = e_{0i}^{tm} + e_{0i}^s + e_{0i}^c + \frac{1}{2} v^2 + g z \quad (3-1)$$

$e_{0i}^m$  bezeichnet den thermomechanischen Anteil an der gesamten Exergie,  $e_{0i}^s$  den stofflichen Anteil,  $e_{0i}^c$  den chemischen Anteil,  $\frac{1}{2} v^2$  den kinetischen Anteil mit der Geschwindigkeit  $v$  des Stoffstroms und  $gz$  den potenziellen Anteil mit der Erdbeschleunigung  $g$  sowie der Höhe  $z$  des betrachteten Systems.

Der thermomechanische Anteil der Exergie kennzeichnet den Teil der Exergie eines Stoffes, der durch sein thermisches und mechanisches Potenzial gegenüber der Umgebung hervorgerufen wird [Lucas 2004]. Er entspricht der reversiblen Arbeit, die gewonnen werden kann, wenn der Druck  $p$  und die Temperatur  $T$  des Stoffes auf den Druck  $p_U$  und die Temperatur  $T_U$  der Umgebung gebracht werden. Dementsprechend erfolgt die Berechnung dieses Exergieanteils auf Basis der Zustandsgrößen Enthalpie  $h_{0i}$  und Entropie  $s_{0i}$  des reinen Stoffes  $i$  (Gleichung (3-2)) [Lucas 2004].

$$e_{0i}^m(T, p) = h_{0i}(T, p) - h_{0i}(T_U, p_U) - T_U (s_{0i}(T, p) - s_{0i}(T_U, p_U)) \quad (3-2)$$

Der stoffliche Anteil der Exergie kennzeichnet den Anteil an der gesamten Exergie eines reinen Stoffes, welcher der reversiblen Arbeit entspricht, die gewonnen wird, wenn der reine Stoff bei Umgebungsdruck und -temperatur ins stoffliche Gleichgewicht mit der Umgebung gebracht wird. Da diese Arbeit ebenfalls der reversiblen Arbeit zur Herstellung – und in diesem Sinne zur Entmischung – der 100 % reinen Komponente aus der Referenzumgebung entspricht, wird dieser Exergieanteil häufig als Mischungs- bzw. Entmischungsexergie bezeichnet [Rücker 2000]. Die Bestimmung des stofflichen Exergieanteils basiert auf der Zusammensetzung der Referenzumgebung und erfolgt in Abhängigkeit des Stoffmengenanteils der betrachteten Komponente  $y_{i,U}$  in der Umgebung als Differenz des chemischen Potentials der reinen Komponente  $\mu_{0i}$  und des chemischen Potentials der Komponente in der Umgebung  $\mu_i$  (Gleichung (3-3)) [Uhlenbruck 2002], [Lucas 2004].

$$e_{0i}^s = \mu_{0i}(T_U, p_U) - \mu_i(T_U, p_U, \{y_{i,U}\}) \quad (3-3)$$

Mit dem Stoffdatenmodell für ideale Gase und der idealen Gaskonstante  $R$  ergibt sich für einen gasförmigen Reinstoff  $i$ , der in der Referenzumgebung ebenfalls als gasförmiger Bestandteil vertreten ist, die Berechnungsgleichung als Funktion der Umgebungstemperatur und des Stoffmengenanteils der Komponente in der Umgebung (Gleichung (3-4)).

$$e_{0i}^{s,ig} = \mu_{0i}^{ig} - \mu_i^{ig} = R T_U \ln \frac{1}{y_{i,U}} \quad (3-4)$$

Analog folgt mit dem Stoffdatenmodell für ideale Flüssigkeiten für einen flüssigen Reinstoff, der auch gasförmig in der Referenzumgebung vertreten ist, die Berechnungsgleichung der stofflichen Exergie mit Hilfe des spezifischen Volumens der reinen Komponente  $v_{0i}$ , der Umgebungstemperatur, des Umgebungsdrucks sowie des Satttdampfdrucks  $p_{s,0i}$  des Reinstoffs (Gleichung (3-5)).

$$e_{0i}^{s,l} = \mu_{0i}^{if} - \mu_i^{ig} = v_{0i}^{if} (p_U - p_{s,0i}(T_U)) - R T_U \ln \frac{p_U}{p_{s,0i}(T_U)} + e_{0i}^{s,ig} \quad (3-5)$$

Der chemische Anteil der Exergie kennzeichnet den Teil der Exergie eines reinen Stoffes, welcher der reversiblen Arbeit entspricht, die gewonnen wird, wenn ein reiner Stoff, der nicht im Umgebungsmodell vertreten ist, bei Umgebungsbedingungen durch eine Reaktion mit Stoffen aus der Umgebung sowie durch Wärmetransfer ins Gleichgewicht mit der Umgebung gebracht wird. Der chemische Anteil der Exergie berechnet sich entsprechend mit Hilfe der stöchiometrischen Koeffizienten der  $n$  Reaktionsedukte  $\nu_j$ , der stofflichen Exergien der Reaktionsedukte und der freien Standardreaktionsenthalpie  $\Delta g_{0,0i}^R$ , die der reversiblen Arbeit  $w_{techn}^{rev}$  zur Herstellung des Stoffes entspricht (Gleichung (3-6)) [Lucas 2004].

$$e_{0i}^c = -\Delta g_{0,0i}^R + \sum_{j=1}^n \nu_j e_{0j}^s \quad (3-6)$$

Die freie Standardreaktionsenthalpie wird aus den Standardbildungsenthalpien  $h_{0,0i}^f$  und Standardentropien  $s_{0,0j}$  der Reaktanden berechnet (Gleichung (3-7)).

$$w_{techn}^{rev} = \Delta g_{0,0i}^R = \sum_{j=1}^n \nu_j h_{0,0j}^f - T_0 \sum_{j=1}^n \nu_j s_{0,0j} \quad (3-7)$$

Die chemische Exergie von Brennstoffen  $e_{BS}$  wie z. B. von Biomasse kann gemäß der vorgestellten Berechnungsgleichung bestimmt werden (Gleichung (3-6)). Sie ist hier jedoch über den unteren Heizwert des jeweiligen Brennstoffs  $H_{u,BS}$  definiert (Gleichung (3-8)) [Rant 1965], [Baehr 2002].

$$e_{BS} = H_{u,BS} \quad (3-8)$$

**Exergie der Wärmeströme.** Neben der Exergie gasförmiger, fester und flüssiger Stoffe ist weiterhin die Exergie von Wärmeströmen  $e_{th}$  von Bedeutung. Dabei ist die Exergie eines Wärmestroms durch die reversible Arbeit definiert, die prinzipiell gewonnen werden kann, wenn die Wärmemenge  $Q$  mit der Temperatur  $T$  auf das Temperaturniveau der Umgebung  $T_U$  gebracht wird (Gleichung (3-9)) [Lucas 2004], [Baehr 1965].

$$e_{th} = \left(1 - \frac{T_U}{T}\right) Q \quad (3-9)$$

**Exergie der elektrischen Energieströme.** Elektrische Energie ist aufgrund ihrer unbeschränkten Umwandelbarkeit in andere Energieformen als reine Exergie definiert [Baehr 1965].

**Exergetischer Wirkungsgrad.** Anhand der dargelegten Exergiegrößen kann schließlich der exergetische Wirkungsgrad berechnet werden. Dieser ist definiert als Verhältnis der  $n$  summierten austretenden Exergieströme  $\dot{E}_{i,aus}$  zu den  $m$  summierten eintretenden Exergieströmen  $\dot{E}_{j,ein}$  (Gleichung (3-10)).

$$\eta_{ex} = \frac{\sum_{i=1}^n \dot{E}_{i,aus}}{\sum_{j=1}^m \dot{E}_{j,ein}} \quad (3-10)$$

**Referenzumgebung.** Da die Qualität der Energie, d. h. die Exergieberechnung, insbesondere von der Umgebung abhängt, ist zur Quantifizierung der Exergie die Definition einer Referenzumgebung notwendig. Diese wird i. Allg. anhand von zwei unterschiedlichen Modellen beschrieben:

- Gleichgewichtsmodelle [Diederichsen 1990], [Ahrendts 1977]
- gleichgewichtsgehemmte Modelle [Szargut 1988], [Szargut 2005]

Bei Gleichgewichtsmodellen müssen sich die Umgebungskomponenten bei Umgebungsdruck und Umgebungstemperatur im vollständigen thermodynamischen Gleichgewicht mit der Umgebung befinden, so dass zwischen ihnen weder Mischungs- noch Entmischungsprozesse oder chemische Reaktionen ablaufen [Baehr 2002]. Da die Bildung einiger dieser Komponenten jedoch in der realen Umgebung gehemmt wird, stehen die Zusammensetzungen der entwickelten Gleichgewichtsmodelle im Widerspruch zu der Zusammensetzung der natürlichen Umgebung. Durch selektive Hemmungen der Gleichgewichte kompensieren gleichgewichtsgehemmte Modelle diesen Nachteil und führen zu einer Referenzumgebung, die durch das Auftreten in der natürlichen Umgebung häufig vorkommender Substanzen gekennzeichnet ist [Rücker 2000]. Daher wird bei den folgenden exergetischen Berechnungen auf das von Szargut [Szargut 1988], [Szargut 2005] definierte gleichgewichtsgehemmte Referenzumgebungsmodell zurückgegriffen.

### 3.2.2 Entwicklung einer ökonomischen Analysemethodik

Neben energetischen Kenngrößen spielen auch ökonomische Aspekte eine wesentliche Rolle bei der Bewertung verfahrenstechnischer Prozesse. In diesem Zusammenhang werden i. Allg. Berechnungen zur Beurteilung der absoluten und/oder relativen Vorteilhaftigkeit einer bzw. mehrerer Investitionen durchgeführt.

Diesen Berechnungen liegen statische oder dynamische Berechnungsmodelle zu Grunde. Während statische Modelle den Planungszeitraum lediglich als eine einzelne Zahlungsperiode behandeln, unterteilen dynamische Modelle den Planungszeitraum in mehrere Zahlungsperioden mit entsprechenden Ein- und Auszahlungen [Götze 2008], [Schneider 1975]. Dabei werden die Daten, welche die Zahlungsperiode charakterisieren, bei statischen Modellen häufig als Durchschnittswerte aus dem Planungszeitraum abgeleitet. Dynamische Modelle bieten hingegen die Möglichkeit, die Ein- und Auszahlungen für jede Zahlungsperiode verschieden zu quantifizieren. Unter Zugrundelegung von finanzmathematischen Rahmenannahmen wie Zinssatz und Preissteigerung führen dynamische Berechnungsmodelle daher insbesondere bei längeren Betrachtungszeiträumen zu einer höheren Genauigkeit im Vergleich zu statischen Modellen. Sie sind jedoch mit einem höheren Rechen- und Datenerhebungsaufwand verbunden [Götze 2008].

Aufgrund der höheren Ergebnisgenauigkeit wird die ökonomische Analyse in dieser Arbeit mit Hilfe dynamischer Berechnungsmodelle durchgeführt. Wesentliche Kenngrößen, die auf der Basis dynamischer Verfahren ermittelt werden können, werden im Folgenden erläutert und diskutiert.

#### 3.2.2.1 Kenngrößen

**Kapitalwert.** Der Kapitalwert  $K$  einer Investition ist der Vermögenszuwachs durch die Investition, berechnet für einen beliebigen Bezugszeitpunkt [Schneider 1975]. Er ergibt sich aus der Summe aller im Planungszeitraum anfallenden und auf den Bezugszeitpunkt der Investition auf- bzw. abgezinsten Ein- und Auszahlungen. Der Kapitalwert misst die Vorteilhaftigkeit einer Investition somit in einer absoluten Größe. Seine Berechnung

basiert auf der Nutzungsdauer der Investition  $T$ , den Einzahlungen  $e_t$  zum Zeitpunkt  $t$ , den Auszahlungen  $a_t$  zum Zeitpunkt  $t$  und dem Kalkulationszinssatz  $i$  (Gleichung (3-11)).

$$K = \sum_{t=0}^T (e_t - a_t) (1+i)^{-t} \quad (3-11)$$

**Annuität.** Die Annuität  $A$  ist als Folge gleich hoher Zahlungen definiert, die in jeder Periode des Betrachtungszeitraumes anfallen [Götze 2008]. Die Annuität ist somit ein durchschnittlicher Zahlungsbetrag, mit dem ein Investor pro Zahlungsperiode rechnen muss. Sie berechnet sich auf der Grundlage des Kapitalwertes, der zur Berechnung der Annuität mit dem Wiedergewinnungsfaktor  $w$  multipliziert wird (Gleichung (3-12)).

$$A = K w = K \frac{(1+i)^T i}{(1+i)^T - 1} \quad (3-12)$$

**Interner Zinsfuß.** Der interne Zinsfuß  $r$  ist jener Zinssatz, zu dem der Kapitalwert einer Investition den Wert Null annimmt. Für diesen Fall gleicht der Barwert der Einnahmen dem Barwert der Ausgaben [Schneider 1975]. Der interne Zinsfuß kann somit als Rendite einer Investition interpretiert werden und wird in der Regel iterativ aus der Berechnungsgleichung des Kapitalwertes bestimmt, indem der dieser gleich Null gesetzt wird (Gleichung (3-13)).

$$K = \sum_{t=0}^T (e_t - a_t) (1+r)^{-t} = 0 \quad (3-13)$$

**Produktgestehungskosten.** Die Produktgestehungskosten  $G_p$  sind definiert als die auf die Produktionsmenge  $M_p$  bezogene Annuität einer Investition (Gleichung (3-14)). Da die Annuität als Folge gleich hoher Zahlungen jeweils einer einzelnen Zahlungsperiode zuzuordnen ist, muss auch die als Bezugsgröße verwendete Produktionsmenge auf eine einzelne Periode bezogen sein. Die Produktgestehungskosten sind daher als finanzmathematische Durchschnittskosten der pro Periode erzeugten Produktmenge zu verstehen.

$$G_p = \frac{A}{M_p} = \frac{K w}{M_p} = \frac{K}{M_p} \frac{(1+i)^T i}{(1+i)^T - 1} \quad (3-14)$$

### 3.2.2.2 Diskussion

Zur Auswahl einer Kenngröße für die ökonomische Analyse werden die Vor- und Nachteile der vorgestellten Kenngrößen gegenübergestellt (Tabelle 3.2) und diskutiert.

Tabelle 3.2 Vor- und Nachteile von ökonomischen Kenngrößen

	Vorteile	Nachteile
Kapitalwert	- Geringer Berechnungsaufwand	- Schlechte Interpretierbarkeit des Ergebnisses (Maß der Vorteilhaftigkeit als absolute Größe)
Annuität	- Gute Interpretierbarkeit des Ergebnisses	- Hoher Berechnungsaufwand
Interner Zinsfuß	- Gute Interpretierbarkeit des Ergebnisses	- Hoher Berechnungsaufwand
Produktgestehungskosten	- Sehr gute Interpretierbarkeit des Ergebnisses (Maß der Vorteilhaftigkeit als spezifische Größe)	- Hoher Berechnungsaufwand

Während die Berechnung des Kapitalwertes als absolute Größe zur Beurteilung der ökonomischen Vorteilhaftigkeit einer Investition mit einem geringen Aufwand verbunden ist, erweist er sich – da er eine absolute Größe ist – in Bezug auf den Vergleich von Investitionsalternativen unterschiedlicher Investitionssummen als ungeeignet. Die Berechnung der Annuität und des internen Zinsfußes sind umfangreicher als die des Kapitalwertes. Diese Kenngrößen erlauben jedoch als relative Größen eine im Vergleich zum Kapitalwert gute Interpretation der Ergebnisse. Die Berechnung der Produktgestehungskosten gestaltet sich im Vergleich zu den drei anderen Größen am aufwändigsten; sie lässt aber eine sehr gute Ergebnisinterpretation zu. So können die Produktgestehungskosten unabhängig von der Höhe des Investitionsbetrages mit denen alternativer Produkte und Konversionsverfahren bzw. mit festen Vergütungssätzen verglichen werden. Aufgrund ihrer sehr guten Interpretierbarkeit werden daher die Produktgestehungskosten als ökonomische Kenngröße verwendet.

### 3.2.2.3 Berechnungsmethodik

Die Berechnung der Produktgestehungskosten erfolgt auf der Basis der Annuität, welche mit Hilfe der dynamischen Annuitätenmethode in Anlehnung an die VDI-Richtlinie 6025 zu den betriebswirtschaftlichen Berechnungen für Investitionsgüter und Anlagen [VDI 6025] sowie in Anlehnung an die VDI-Richtlinie 2067 zur Wirtschaftlichkeit gebäudetechnischer Anlagen [VDI 2067] ermittelt wird. Dabei werden die Annuitäten unterschiedlicher Zahlungsströme zunächst zur Annuität der periodischen Gesamtzahlungen zusammengefasst und anschließend mit Hilfe der periodisch anfallenden Produktionsmenge des Hauptproduktes die Produktgestehungskosten bestimmt (Abb. 3.3).

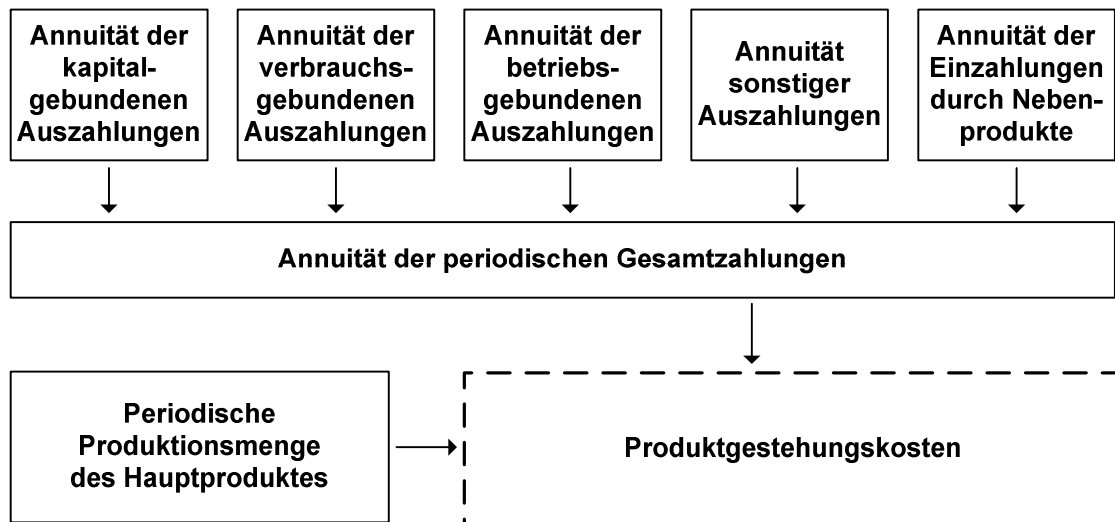


Abb. 3.3 Berechnungsschema der Produktgestehungskosten

Die Berechnung der Annuität sowie die darauf aufbauende Berechnung der Produktgestehungskosten werden im Folgenden vorgestellt.

**Annuität der Gesamtzahlungen.** Die Annuität der Gesamtzahlungen  $A$  berechnet sich aus der Differenz der Annuität der Einzahlungen  $A_E$  und der Annuität der Auszahlungen  $A_A$ . Dabei setzt sich die Annuität der Auszahlungen aus der Summe der Annuität der kapitalgebundenen Auszahlungen  $A_K$ , der Annuität der verbrauchsgebundenen Auszahlungen  $A_V$ , der Annuität der betriebsgebundenen Auszahlungen  $A_B$  und der Annuität der sonstigen Auszahlungen  $A_S$  zusammen (Gleichung (3-15)) [VDI 2067], [VDI 6025].

$$A_A = A_K + A_V + A_B + A_S \quad (3-15)$$

Die Annuität der Einzahlungen  $A_E$  berechnet sich aus den Einzahlungen der ersten Periode  $E_1$  und dem preisdynamischen Annuitätenfaktor der Einzahlungen  $b_{a,E}$  (Gleichung (3-16)).

$$A_E = E_1 b_{a,E} \quad (3-16)$$

Die Annuität der kapitalgebundenen Auszahlungen  $A_K$  wird unter Berücksichtigung des Investitionsbetrages  $I_0$ , des Wiedergewinnungsfaktors  $w$ , des preisdynamischen Annuitätenfaktors für Instandsetzungszahlungen  $b_{a,Inst}$ , des Faktors zur Erfassung der Instandsetzung  $f_K$  (in Prozent vom Investitionsbetrag) und des Restwertes der Investition nach der Nutzungsdauer  $R_w$  berechnet (Gleichung (3-17)).

$$A_K = (I_0 - R_w) w + \frac{f_K}{100} I_0 b_{a,Inst} \quad (3-17)$$

Die Annuitäten der weiteren Auszahlungen, d. h.  $A_V$ ,  $A_B$  und  $A_S$ , werden entsprechend der Annuität der Einzahlungen jeweils durch das Produkt ihres Zahlungsstroms in der ersten Periode und dem zugehörigen preisdynamischen Annuitätenfaktor  $b_a$  berechnet.

Der preisdynamische Annuitätenfaktor zur Bestimmung der Annuitäten ergibt sich für alle Ein- und Auszahlungen einheitlich als Produkt aus dem Wiedergewinnungsfaktor  $w$  und dem Barwertfaktor  $b$ . Allerdings können zur Berechnung des Wiedergewinnungsfaktors

und des Barwertfaktors für die unterschiedlichen Ein- und Auszahlungen unterschiedliche Preissteigerungsraten zu Grunde gelegt werden (Gleichung (3-18)).

$$b_a = wb \quad (3-18)$$

Der Barwertfaktor  $b$  berücksichtigt die Preissteigerungsrate  $j$ . Ist diese gleich null, wird das Produkt aus Barwertfaktor und Wiedergewinnungsfaktor unabhängig vom Zinssatz  $i$  zu eins. Für diesen Fall wirkt sich der Zinssatz nur auf die Annuität der kapitalgebundenen Zahlungen aus, bei deren Berechnung der zinsabhängige Wiedergewinnungsfaktor  $w$  (auch als Annuitätenfaktor bezeichnet) Berücksichtigung findet (Gleichung (3-19)).

$$w = \frac{(1+i)^T i}{(1+i)^T - 1} \quad (3-19)$$

**Produktgestehungskosten.** Basierend auf den vorgestellten Berechnungen der Annuität der Gesamtzahlungen können schließlich die Produktgestehungskosten  $G_p$  berechnet werden. Die Gestehungskosten sind definiert als Verhältnis der Annuität der Gesamtzahlungen  $A$ , welche aus den Annuitäten der einzelnen Ein- und Auszahlungen einer Zahlungsperiode berechnet wird, und der periodischen Produktionsmenge  $M_p$  (Gleichung (3-20)).

$$G_p = \frac{A}{M_p} \quad (3-20)$$

### 3.2.3 Entwicklung einer ökologischen Analysemethodik

Bei der Evaluierung von verfahrenstechnischen Prozessen gewinnen neben der Analyse energetischer und ökonomischer Kenngrößen auch ökologische Aspekte an Bedeutung [COM 2006], [COM 2008], [DIR 2003]. Eine Methode zur Bestimmung potenzieller Umweltauswirkungen des Produktlebensweges von Verfahren, Produkten und Dienstleistungen ist die Ökobilanz (Life Cycle Assessment – LCA) [DIN ISO 14040], [DIN ISO 14044]. Für die ausschließliche Optimierung von Produktionsanlagen ist der Betrachtungsrahmen, den Ökobilanzen aufspannen, jedoch ungeeignet, da anlagentechnische Prozessverbesserungen i. Allg. keinen maßgeblichen Einfluss auf Arbeitsschritte haben, die der Anlage vor- und nachgelagert sind (z. B. Biomassebereitstellung, Produktdistribution). Dennoch ist mit Blick auf die Zielstellung, anthropogene Umweltbelastungen zu minimieren, die Identifikation von Korrelationen zwischen ökologischen und technischen Optimierungskriterien sowie damit einhergehend die Vermeidung von Fehlkonzeptionen zu Lasten der Umweltverträglichkeit erforderlich. Dabei können die in Ökobilanzen verwendeten Kriterien (Wirkungskategorien), mit denen die Umweltauswirkungen beschrieben werden, auch auf kleinere Betrachtungsräume, wie den Bilanzraum einer Produktionsanlage, angewendet werden. Relevante Wirkungskategorien [Müller-Langer 2009], [IFEU 2005] werden im Folgenden vorgestellt und diskutiert.

#### 3.2.3.1 Kenngrößen

**Anthropogener Treibhauseffekt.** Treibhausgase (THG), zu denen neben Kohlenstoffdioxid auch Methan, Ozon, Lachgas und Fluorchlorkohlenwasserstoffe (FCKW) gehören, absorbieren die längerwellige Wärmestrahlung der Erdoberfläche und



emittieren diese gleichmäßig in alle Richtungen. Im Gegensatz zu – für elektromagnetische Strahlung – durchlässigen Gasen trägt diese Rückstrahlung zu einer Temperaturerhöhung der Erdatmosphäre bei. Zur Charakterisierung des Treibhauseffektes wird den Gasen als Wirkungsindikator ein so genanntes Treibhausgaspotenzial zugeordnet, welches die relative Klimawirksamkeit des jeweiligen Gases im Vergleich zu der Klimawirksamkeit von Kohlenstoffdioxid ausdrückt [Pehnt 2001].

**Eutrophierung.** Der Begriff Eutrophierung beschreibt die Nährstoffanreicherung in einem Ökosystem. Eine derartige Anreicherung erfolgt in der Regel durch einen übermäßigen Eintrag von Nitraten und Phosphaten und führt zu einer gesteigerten Pflanzenproduktion, welche wiederum mit einem erhöhten Sauerstoffverbrauch verbunden ist. Als Wirkungsindikator wird das Eutrophierungspotenzial verwendet, das den Beitrag eines Stoffes zur Biomasseproduktion im Vergleich zu Phosphat beschreibt [Pehnt 2001], [IFEU 2005].

**Verbrauch erschöpflicher energetischer Ressourcen.** Aufgrund ihrer begrenzten Verfügbarkeit ist die Aufzehrung erschöpflicher energetischer Ressourcen in Verbindung eines Produktlebensweges zu minimieren. Um den Verbrauch energetischer Ressourcen zu quantifizieren, wird i. Allg. der kumulierte Primärenergieaufwand, der einem Produkt oder einer Dienstleistung zuzuschreiben ist, berechnet [Pehnt 2001].

**Versauerung.** Der übermäßige Protoneneintrag durch Gase wie Stickstoffoxide, Schwefeldioxid und Ammoniak führt bei einer unzureichenden Neutralisation zu einer Verminderung des pH-Wertes und damit zu der Versauerung von Böden und Gewässern. In diesem Zusammenhang dient das Versauerungspotenzial als Wirkungsindikator. Dieses kennzeichnet das chemische Potenzial eines Stoffes  $H^+$ -Ionen zu bilden im Vergleich zu Schwefeldioxid [Pehnt 2001], [IFEU 2005].

### 3.2.3.2 Diskussion

Die dargestellten Wirkungskategorien ermöglichen die Charakterisierung einer Produktionsanlage hinsichtlich unterschiedlicher Umweltauswirkungen. Die Auswahl der betrachteten Wirkungskategorien für eine ökologische Analyse ergibt sich i. Allg. aus ihrer Zielstellung respektive dem Hintergrund. Da – wie eingangs erwähnt – die Minderung anthropogener Treibhausgasemissionen ein wesentlicher Treiber zur Erzeugung von Erdgassubstituten auf der Basis biogener Brennstoffe ist, wird die ökologische Analyse dieser Arbeit exemplarisch anhand der Betrachtung der Wirkungskategorie „anthropogener Treibhauseffekt“ durchgeführt. Mit Bezugnahme auf politische Diskussionen [COM 2006], [COM 2008], [DIR 2003] und nicht zuletzt auf mögliche Anreize, in Technologien mit geringen Kohlenstoffdioxidemissionen zu investieren (z. B. CO<sub>2</sub>-Zertifikatehandel), stellt sich diese Wirkungskategorie außerdem zunehmend als wichtiger Bestandteil der Anlagenplanung dar.

### 3.2.3.3 Berechnungsmethodik

Die Berechnung der Treibhausgasemissionen beruht auf einem Berechnungsschema, welches die produktbezogenen allokierten Treibhausgasemissionen aus der Gesamtheit aller periodisch anfallenden CO<sub>2</sub>-äquivalenten Emissionen und den entsprechenden Produktionsmengen bestimmt (Abb. 3.4).

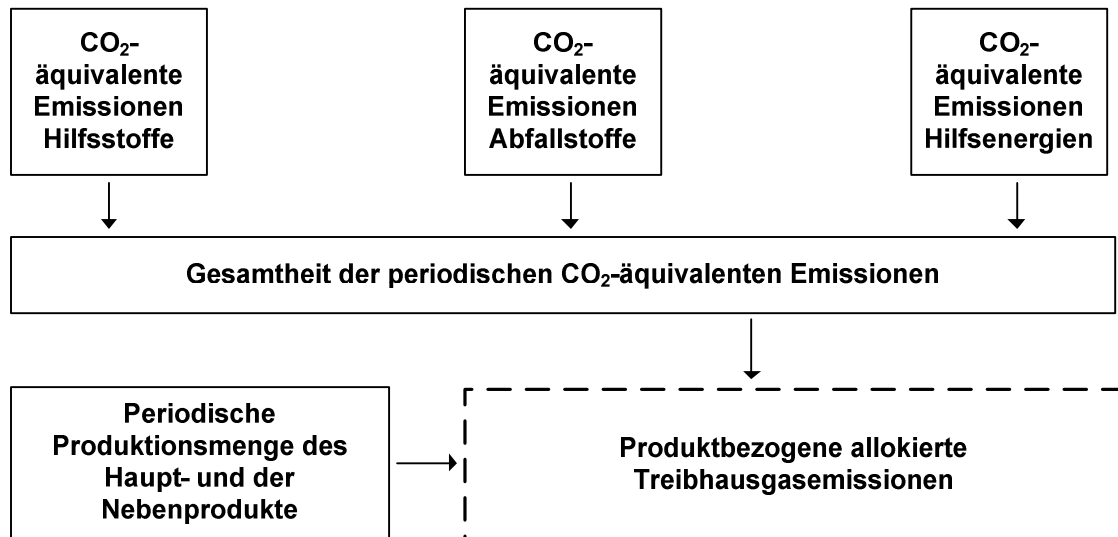


Abb. 3.4 Berechnungsschema der produktbezogenen allokierten Treibhausgasemissionen

Zur Erläuterung des Berechnungsschemas wird im Folgenden die Berechnung der Gesamtheit der periodischen CO<sub>2</sub>-äquivalenten Emissionen und darauf aufbauend die Berechnung der produktbezogenen allokierten Treibhausgasemissionen vorgestellt.

**Gesamtheit der periodischen CO<sub>2</sub>-äquivalenten Emissionen.** Die Gesamtheit der periodisch anfallenden CO<sub>2</sub>-äquivalenten Emissionen des Produktionsprozesses  $T_{PP}$  setzt sich aus den Emissionen  $T_{HS}$  zusammen, die im Zusammenhang mit der Bereitstellung von Hilfsstoffen anfallen, den Emissionen  $T_{AS}$ , die der Entsorgung von Abfallstoffen zuzuordnen sind, und den Emissionen  $T_{HE}$ , die in Verbindung der Hilfsenergiebereitstellung auftreten (Gleichung (3-21)).

$$T_{PP} = T_{HS} + T_{AS} + T_{HE} \quad (3-21)$$

Die Emissionen, die in Verbindung mit der Bereitstellung von Hilfsstoffen anfallen, ergeben sich wiederum aus der Summe der  $n$  Emissionen, die jedem Hilfsstoffen  $i$  zuzuordnen sind (Gleichung (3-22)).

$$T_{HS} = \sum_{i=0}^n T_{HS,i} \quad (3-22)$$

Zur Bestimmung der Emissionen eines Hilfsstoffs wird der jeweilige Stoffstrom  $\dot{n}_{HS,i}$  des Hilfsstoffs mit einem so genannten Emissionsfaktor  $e_{HS,i}$  multipliziert, der die Relevanz des Stoffes in der entsprechenden Wirkungskategorie (Treibhauseffekt) ausdrückt (Gleichung (3-23)).

$$T_{HS,i} = e_{HS,i} \dot{n}_{HS,i} \quad (3-23)$$

Die Berechnung der Emissionen der Abfallstoffe und Hilfsenergien erfolgt analog zur Berechnung der Emissionen, die in Verbindung mit der Bereitstellung der Hilfsstoffe anfallen.

**Produktbezogene allokierte Treibhausgasemissionen.** Zur Berechnung der produktbezogenen allokierten Treibhausgasemissionen  $T_p$  werden die berechneten CO<sub>2</sub>-äquivalenten Emissionen, die periodisch anfallen und dem Hauptprodukt zugeordnet werden können, auf die Menge des Hauptproduktes  $M_{p,HP}$  bezogen. Die dem Hauptprodukt zuzuschreibenden Emissionen werden dabei entsprechend der Allokationsmethode ermittelt. Dies bedeutet, die gesamten Emissionen werden gemäß einer funktionalen Größe, die der Produktionsmenge des Hauptproduktes  $M_{p,HP}$  und der Produktionsmenge der Nebenprodukte  $M_{p,NP}$  zugeordnet werden kann (z. B. der Exergiegehalt), auf diese verteilt (Gleichung (3-24)).

$$T_p = \frac{T_{PP}}{M_{p,HP}} \frac{M_{p,HP}}{M_{p,HP} + M_{p,NP}} = \frac{T_{PP}}{M_{p,HP} + M_{p,NP}} \quad (3-24)$$

### 3.2.4 Programm zur Bilanzierung

Um die in dieser Arbeit angestrebte Analyse durchführen zu können, müssen unterschiedliche Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme in Bezug auf Stoff- und Energiebilanzen ausgewertet werden. Zu diesem Zweck wird ein auf der Software MATLAB Simulink [Hoffmann 1998], [Bode 2006] basierendes Programm zur Berechnung von Stoff- und Energiebilanzen entwickelt. Auf den Einsatz kommerziell verfügbarer Fließschemasimulationsprogramme wird verzichtet und durch die Programmeigenentwicklung ein möglichst flexibles Simulationsprogramm angestrebt. Im Gegenteil zu kommerziellen Programmen ist dieses einfach mit MATLAB-basierten Optimierungsalgorithmen, Regelungen sowie bereits bestehenden Modellen in MATLAB Simulink kombinierbar und zukünftig in Bezug auf dynamische Simulationen erweiterbar. Der Aufbau dieses Simulationsprogramms wird im Folgenden beschrieben.

#### 3.2.4.1 Programmaufbau

Die Berechnungsvorschriften zur Bestimmung der Masse- und Energiebilanzen der betrachteten Konzeptvarianten werden durch ein Netz, bestehend aus Funktionsblöcken und Verbindern, abgebildet. Zur Verbesserung der Übersicht werden Strukturen aus mehreren Funktionsblöcken und Verbindern zu Funktionseinheiten (z. B. Wärmeübertrager, Kompressor) entsprechend den realen Komponenten einer Anlage zusammengefasst (Abb. 3.5).

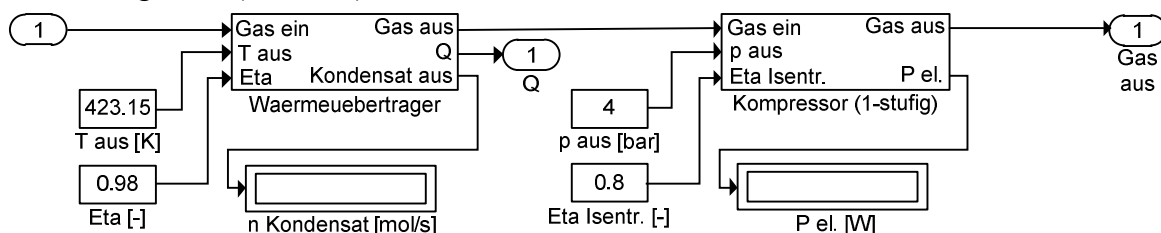


Abb. 3.5 Beispiel zweier Funktionseinheiten

Die Funktionseinheiten werden wiederum zu Prozesseinheiten (z. B. Vergasung, Gasreinigung) zusammengefasst (Abb. 3.6).

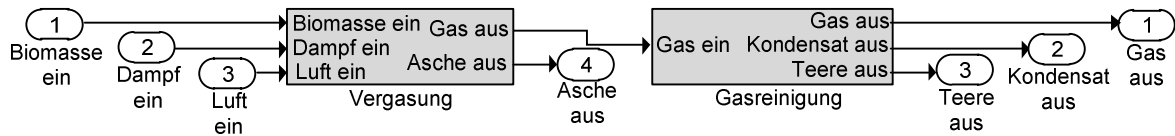


Abb. 3.6 Beispiel zweier Prozesseinheiten

**Funktionsblöcke.** Die Funktionsblöcke entstammen verschiedenen Bibliotheken/Toolboxen und führen in der Regel einfache Rechenoperationen aus (Addition, Iteration). Ein Funktionsblock von besonderer Bedeutung ist die sogenannte „Embedded MATLAB Function“, in die eine beliebige MATLAB Funktion geschrieben bzw. mit der bereits vorhandene Funktionen aus MATLAB aufgerufen werden können. Die Funktionen können wie herkömmliche Funktionsblöcke Werte aus der MATLAB Simulink-Struktur verarbeiten und Ergebnisse in die MATLAB Simulink-Struktur ausgeben. Die Berechnungsvorschriften der hier modellierten Funktionseinheiten (Anhang 1.3) sind im überwiegenden Maß als Programmcode in „Embedded MATLAB Functions“ untergebracht.

**Verbinder.** Die Verbinder können Daten vom Typ Skalar, Vektor oder Matrix zwischen verschiedenen Funktionsblöcken weitergeben. Sie dienen dem Austausch von Daten zwischen den Funktionsblöcken und sind entsprechend den realen Stoffströmen der Konversionsanlage definiert. Dabei sind neben Verbindern, die einfache Skalare weitergeben, drei Grundtypen von Verbindern definiert:

- Verbinder zur Weitergabe von Gasen und Gasgemischen,
- Verbinder zur Weitergabe von Feststoffen und Feststoffgemischen,
- Verbinder zur Weitergabe von organischen Medien.

Zur Verbesserung der Übersichtlichkeit des Simulationsprogramms sowie um Optimierungen des Wärmemanagements von Konversionsanlagen zu ermöglichen, werden zudem zwei weitere Verbinder definiert:

- Verbinder zur Weitergabe einzelner Stoffströme,
- Verbinder zur Weitergabe von Wärmeströmen.

Die aufgeführten Verbinder werden jeweils durch Vektoren mit einer unterschiedlichen Zeilenzahl repräsentiert. Jede Zeile eines Vektors dient dabei als Platzhalter für genau eine charakteristische Größe (z. B. Temperatur, Stoffmengenstrom einer Komponente) der jeweiligen Stoff-, Massen- oder Wärmeströme und kann nur mit einem Wert vom Typ der charakteristischen Größe belegt werden. Eine Übersicht über die Belegung der Zeilen der verschiedenen Verbindergrundtypen ist in Anhang 1.1 gegeben.

### 3.2.4.2 Stoffdatenmodelle

Um Stoff- und Energieströme bilanzieren zu können, sind Zustandsgleichungen erforderlich, die das Verhalten der Stoffe und die Abhängigkeiten ihrer Zustandsgrößen in dem für die Prozesssimulation relevanten Druck- und Temperaturbereich hinreichend genau abbilden [Schuler 1995]. Für die Prozessmodellierung werden Stoffe, deren Zustände und Eigenschaften mit den gleichen Zustandsgleichungen berechnet werden können, zu so genannten Stoffklassen zusammengefasst. Das alle Zustandsgleichungen einer Stoffklasse umfassende Berechnungsmodell wird Stoffdatenmodell genannt. In Anlehnung an die in Anhang 1.1 vorgestellten Verbinder zur Weitergabe von Stoffströmen wird innerhalb der Simulation ebenfalls unterschieden zwischen:

- dem Stoffdatenmodell für ideale Gase und Gasgemische,
- dem Stoffdatenmodell für Feststoffe und Feststoffgemische und
- dem Stoffdatenmodell für organische Verbindungen

Die Stoffdatenmodelle erlauben die Berechnung der Zustandsgrößen der jeweiligen Stoffe für einen definierten Aggregatzustand. Da jedoch bei der Abbildung bestimmter Prozesse (z. B. Dampferzeugung, ORC-Modul) die Arbeitsmedien Phasenwechsel durchlaufen, müssen weitere Stoffdatenmodelle definiert werden, mit denen die Berechnung der Zustandsgrößen der Stoffe für unterschiedliche Aggregatzustände und Phasenwechsel möglich ist. Diese sind:

- Stoffdatenmodell für Wasser und Wasserdampf,
- Stoffdatenmodell für reale Fluide.

Die Berechnungsgleichungen für die fünf genannten Stoffdatenmodelle sind in Anhang 1.2 aufgeführt.

### 3.2.4.3 Funktionseinheiten

Das thermodynamische Verhalten realer Anlagenkomponenten wird im Simulationsprogramm durch so genannte Funktionseinheiten (z. B. Wärmeübertrager, Kompressoren) abgebildet. Die Funktionseinheiten umfassen verschiedene Strukturen von Funktionsblöcken und Verbindern, welche die Rechenoperationen des thermodynamischen Verhaltens darstellen. Die Rechenoperationen der unterschiedlichen Funktionseinheiten sind in Anhang 1.3 dargestellt und basieren auf den in Anhang 1.2 vorgestellten Stoffdatenmodellen zur Berechnung der Zustandsgrößen der in der Prozesssimulation auftretenden Stoffe.

### 3.2.4.4 Wärmeintegration

Bei der Bilanzierung der Bio-SNG-Anlagen müssen eine Vielzahl von Wärmequellen und -senken miteinander verknüpft werden, um den externen Wärmebedarf der Anlagen durch den gezielten Einsatz von Prozessabwärme zu vermeiden bzw. zu reduzieren. Da diese Wärmequellen und -senken jedoch in der Regel durch unterschiedliche Energieströme sowie Temperaturniveaus gekennzeichnet sind (Anhang 4), erweist sich deren optimale Verschaltung in der Regel als Herausforderung.

Im entwickelten Simulationsprogramm werden diese Wärmequellen und -senken durch einen Heißwasserkreislauf und einen Thermoölkreislauf verknüpft oder direkt miteinander verschaltet (bspw. bei der Verbrennungsluftvorwärmung mit Brennkammerabgas). Als besondere Aufgabe stellt sich die bei der Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme vorgesehene Dampferzeugung dar. Ziel der Dampferzeugung ist es, die zur Verfügung stehende Prozessabwärme optimal auszunutzen und Prozessdampf mit maximalen Dampfparametern bereitzustellen.

Um zu ermitteln, ob die zur Verfügung stehende Wärmemenge bzw. das Temperaturniveau für die Dampfproduktion (d. h. für die vom Optimierungsprogramm vorgegebenen Dampfparameter) ausreichend ist, umfasst das entwickelte Simulationsprogramm ein Unterprogramm zur Wärmeanalyse.

Tabelle 3.3 Exemplarische Darstellung der oberen und unteren Temperaturen sowie der Wärmeströme von zwei Wärmequellen und einer Wärmesenke

	Obere Temperatur	Untere Temperatur	Wärmemenge
Wärmequelle 1	1000 K	600 K	-3 MW
Wärmequelle 2	600 K	300 K	-3 MW
Wärmesenke 1	600 K	400 K	4 MW

Das Programm teilt den Temperaturbereich, der von den Wärmequellen und -senken (exemplarisch Tabelle 3.3) insgesamt aufgespannt wird, in bis zu 60 kleinere Temperaturbereiche. Die Grenzen dieser Temperaturbereiche sind durch die oberen und unteren Temperaturen aller Wärmeströme festgelegt. Die Wärmequellen und -senken, die solch einen Temperaturbereich überschneiden, werden anteilig dem entsprechenden Temperaturbereich zugeordnet und für diesen Bereich summiert. Damit ergeben sich Temperaturbereiche, in denen Wärmeüberschuss herrscht und Temperaturbereiche, in denen nicht genügend Wärme vorhanden ist (exemplarisch Tabelle 3.4). Wärmeströme mit negativem Vorzeichen bezeichnen in diesem Zusammenhang zur Verfügung stehende Wärme.

Tabelle 3.4 Exemplarische Darstellung von drei Temperaturbereichen und zugehörigen Wärmeströmen

	Obere Temperatur	Untere Temperatur	Wärmemenge
Temperaturbereich 1	1000 K	600 K	-3 MW
Temperaturbereich 2	600 K	400 K	2 MW
Temperaturbereich 3	400 K	300 K	-1 MW

Die für die Dampfproduktion erforderlichen Wärmeströme zur Speisewasservorwärmung, Verdampfung und Überhitzung werden in die oben beschriebene Rechnung einbezogen. Anschließend wird durch ein weiteres Unterprogramm geprüft, ob die Wärmeströme hoher Temperaturbereiche auch nach erfolgter Dampfproduktion ausreichend zur Deckung des Wärmebedarfs niederer Temperaturbereiche sind und wie viel Fernwärme ggf. zusätzlich aus dem Prozess ausgekoppelt werden kann. Ist die Wärmemenge für die Dampferzeugung nicht ausreichend, so wird ein Teil des erzeugten SNG zur Deckung des verbleibenden Wärmebedarfs verbrannt und so der Wirkungsgrad reduziert bzw. dem Optimierungsalgorithmus das Signal gegeben, dass die entsprechenden Dampfparameter zu hoch sind.

### 3.3 Methodik der Optimierung

Das Ziel der Optimierung ist es, die betrachteten Konzeptvarianten unter energetischen, ökonomischen und ökologischen Gesichtspunkten zu verbessern. Dazu ist die Entwicklung einer Optimierungsmethodik erforderlich. Im Folgenden werden daher verschiedene Optimierungsansätze vorgestellt, diskutiert und eine vielversprechende Optimierungsmethodik abgeleitet.

#### 3.3.1 Entwicklung einer Optimierungsmethodik

Da Optimierungsprobleme in der Verfahrenstechnik sowohl die Optimierung kontinuierlich veränderbarer Prozessvariablen (z. B. Drücke) als auch die Optimierung von

Variablen mit ganzzahligen Werten (z. B. Entscheidungsvariablen zur Integration eines Gasmotors) erfordern, ergeben sich in der Regel so genannte gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme [Grossmann 2002]. Diese Optimierungsprobleme stellen nicht zuletzt aufgrund der Möglichkeit des Auftretens einer Vielzahl lokaler Optima und komplexer Abhängigkeiten zwischen den Variablen hohe Ansprüche an den Lösungsalgorithmus [Vecchiotti 2003]. Um diesen Ansprüchen gerecht zu werden und einen geeigneten Ansatz zur Optimierung auszuwählen, werden im Folgenden die bei derartigen Fragestellungen üblicherweise verwendeten Optimierungsansätze entsprechend ihrer Vor- und Nachteile diskutiert.

### 3.3.1.1 Ansätze

**Heuristische Optimierungsansätze.** Heuristische Methoden beruhen auf der Verarbeitung von Expertenwissen mit dem Ziel, auch komplexe Problemstellungen mit geringem Aufwand beherrschen zu können [Munch 1991]. Die systematische Anwendung des i. Allg. als Bewertungsregeln formulierten Expertenwissens erlaubt eine schnelle und nachvollziehbare Eingrenzung des untersuchten Lösungsraumes. Da in der Praxis jedoch auf eine Problemstellung zumeist mehrere, teilweise gegenläufige Regeln anwendbar sind, ist die Anwendbarkeit heuristischer Methoden limitiert. Dieser Problematik kann in der praktischen Anwendung in begrenztem Maße mit der Einführung von Gewichtungen der Regeln und Nebenrechnungen begegnet werden [Blaß 1997], [Hacker 1980], [Munch 1991].

**Mathematische Optimierungsansätze.** Die mathematischen Optimierungsansätze beschreiben das Optimierungsproblem mit Gleichungssystemen, die entsprechend der Problemstellung sowohl diskrete Entscheidungsvariablen zur Berücksichtigung alternativer Prozessverschaltungen (z. B. Einbindung eines ORC-Moduls) als auch kontinuierliche Prozessvariablen zur Berücksichtigung von zu optimierenden Betriebsparametern (z. B. Drücke) enthalten. Auf diese Weise ergeben sich i. Allg. so genannte „Mixed Integer Non Linear Programming“ (MINLP) Probleme aus gemischt-ganzzahligen Gleichungen [Grossmann 1999], [Grossmann 2002]. Zur Lösung der Gleichungen stehen eine Vielzahl von Algorithmen (z. B. Branch and Bound, Outer Approximation [Noronha 1998], [Rücker 2000]) zur Verfügung, mit deren Hilfe das globale Optimum des Gleichungssystems unter Berücksichtigung der mathematisch formulierten Nebenbedingungen (z. B. ökonomische und ökologische Ziele [Gassner 2009]) ermittelt werden kann. Die Problematik, dass die Optimierung verfahrenstechnischer Anlagen i. Allg. die Formulierung abstrakter und komplexer Gleichungssysteme voraussetzt, ist bei diesem Optimierungsansatz häufig mit hohem Aufwand zur Interpretation der Optimierungsrechnung verbunden [Lohe 1995], [Noronha 1998].

**Thermodynamische Optimierungsansätze.** Die Optimierung der energetischen Effizienz verfahrenstechnischer Prozesse basiert häufig auf physikalischen Überlegungen oder der einfachen Analyse thermodynamischer Kenngrößen (z. B. Wirkungsgrade, Exergieverlust von Anlagenkomponenten). Auf diese Weise können einerseits konzeptionelle und andererseits betriebliche Prozessverbesserungen abgeleitet werden. Thermodynamische Optimierungen sind in der Praxis jedoch nur dann zielführend, wenn die Verbesserung der thermodynamischen Kenngröße mit einem ökonomischen/ökologischen Nutzen einhergeht (z. B. Pinch-Analyse [Linnhoff 1993], [Noël 1998], [Krummenacher 1999]) oder dieser einen untergeordneten Stellenwert hat. Um bei einer thermodynamischen Optimierung die Vernachlässigung ökonomischer und ökologischer Auswirkungen auszuschließen, werden häufig exergo-ökonomische bzw. exergo-ökologische Methoden verwendet, die sowohl

exergetische als auch ökonomische und ökologische Kenngrößen gleichzeitig betrachten und Prozessverbesserungen ableiten [Munch 1991], [Fratzcher 1986], [Szargut 1988], [van Lier 1965], [Rosen 2007].

**Stochastische Optimierungsansätze.** Diese Methoden (z. B. Monte Carlo Optimierung [Kosorok 2000], evolutionäre Algorithmen [Bäck 1996]) sind in der Lage, die Formulierung aufwändiger Gleichungssysteme zu umgehen und durch die Erzeugung einer Vielzahl von Lösungsmöglichkeiten bei der (gelenkt) zufälligen Variation von Entscheidungs- und Prozessvariablen optimumsnahe Lösungen zu bestimmen. Der Nachteil dieser Methode ist offensichtlich die erforderliche Rechenzeit zur Erzeugung der Lösungsmenge. Um diesen Nachteil zu begrenzen, wird die Erzeugung der Zufallszahlen i. Allg. gelenkt [Salomon 1998], [Tarhan 2008].

### 3.3.1.2 Diskussion

Zur Auswahl eines geeigneten Optimierungsansatzes werden die vorgestellten Ansätze im Folgenden entsprechend ihrer Vor- und Nachteile (Tabelle 3.5) diskutiert.

Tabelle 3.5 Vor- und Nachteile von Optimierungsansätzen

	Vorteile	Nachteile
Heuristische Optimierungsansätze	- Geringer Aufwand - Gute Interpretierbarkeit	- Lösung i. Allg. nur in der Nähe des Optimums - Nur begrenzt anwendbar
Mathematische Optimierungsansätze	- Geringer Berechnungsaufwand - Eindeutiges Ergebnis	- Mathematisches Gleichungssystem erforderlich - Schlechte Interpretierbarkeit der Rechnung
Thermodynamische Optimierungsansätze	- Gute Interpretierbarkeit	- Nur physikalische Größen werden direkt berücksichtigt - Ungeeignet für komplexe Probleme
Stochastische Optimierungsansätze	- Gute Interpretierbarkeit	- Lösung i. Allg. nur in der Nähe des Optimums - Hoher Berechnungsaufwand

Im Rahmen der energetischen, ökonomischen und ökologischen Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse werden hohe Anforderungen an den Optimierungsalgorithmus gestellt. Bei der Wahl eines geeigneten Algorithmus ist einerseits der Komplexität und den damit verbundenen internen Wechselwirkungen verfahrenstechnischer Prozesse Rechnung zu tragen. Andererseits muss die Optimierung sowohl in Bezug auf energetische, ökonomische und ökologische Optimierungskriterien anwendbar sein. Dabei beeinflussen die Komplexität und mögliche interne Wechselwirkungen die Stabilität und das Konvergenzverhalten des Algorithmus maßgeblich.

Eine scharfe Eingrenzung optimaler Betriebszustände und Prozesskonfigurationen ist mit Hilfe heuristischer Regeln aufgrund des angestrebten hohen Detaillierungsgrades des zu untersuchenden Produktionsprozesses nur schwer möglich. In diesem Zusammenhang erweist sich auch das Aufstellen eines Gleichungssystems zur Abbildung des zu optimierenden Prozesses und die Interpretierbarkeit einer derartigen Optimierungsrechnung bei mathematischen Ansätzen als diffizil. Rein thermodynamische



Optimierungsmethoden sind für die Optimierung aufgrund der zu berücksichtigenden ökonomischen und ökologischen Optimierungskriterien ungeeignet.

Daher wird das Optimierungsproblem hier mit Hilfe von stochastischen Optimierungsverfahren gelöst. Diese sind in der Lage, die Formulierung heuristischer Regeln sowie abstrakter Gleichungssysteme zu umgehen und Prozesssimulationsprogramme als Berechnungshilfen zu nutzen. Durch die stochastische Erzeugung einer Vielzahl an Lösungsmöglichkeiten unter Einbeziehung eines Prozesssimulationsprogramms wird dem Anwender zudem ein Einblick in den Optimierungsverlauf gegeben. Neben Monte Carlo Optimierungen zählen evolutionäre Algorithmen zu den bedeutendsten stochastischen Optimierungsansätzen. Diese sind als Vertreter der gelenkt stochastischen Optimierungsverfahren zu verstehen und bieten gegenüber herkömmlichen stochastischen Verfahren (z. B. Monte Carlo Verfahren) den Vorteil, sich der Lösung sukzessive zu nähern. Dies verhindert stark voneinander abweichende Parametervorgaben und kommt somit der Stabilität des Prozesssimulationsprogramms, in dem die Parameter verwendet werden, zu Gute. Auf diese Weise werden Systemschwingungen vermieden und das Konvergenzverhalten gefördert.

### 3.3.1.3 Optimierungsmethodik

Evolutionäre Algorithmen sind stochastische Suchverfahren zur Lösung komplexer Optimierungsprobleme. Sie orientieren sich am Vorbild der biologischen Evolution und damit an der Fähigkeit der Natur, sich durch Adaption bzw. Selektion an eine veränderte Umgebung anzupassen [Gerdes 2004], [Darwin bearb. 1984]. Aus neo-darwinistischer Sichtweise [Berry 1982] vollzieht sich die Evolution dabei anhand weniger Mechanismen, die in einer Population wirksam werden. Einer dieser Mechanismen ist die Fortpflanzung von Individuen und die damit verbundene Weitergabe von Erbinformationen. Diese Erbinformationen unterliegen während der Fortpflanzung Variationsprozessen wie Mutation und Rekombination, die gewährleisten, dass nachfolgende Populationen eine Weiterentwicklung ihrer Vorfahren darstellen. Durch anschließende Selektionsprozesse im Wettbewerb um Überleben und Fortpflanzung werden unvorteilhafte Entwicklungen vermieden und es wird sichergestellt, dass nur die überlebensfähigsten Individuen ihre Erbinformationen weitergeben. Entsprechend dieser Kombination von Selektion und Variation entstehen im Laufe der Zeit Individuen, die optimal an die Umweltbedingungen angepasst sind.

Um den Grundgedanken der biologischen Evolution auf die Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse übertragen zu können, müssen die evolutionären Prinzipien und Begriffe abstrahiert und auf ein Optimierungsproblem übertragen werden [Gerdes 2004]. In diesem Sinne bezeichnet der Begriff Individuum eine mathematische Struktur (z. B. ein Vektor), die einer potenziellen Lösung des Optimierungsproblems entspricht [Uhlenbruck 2002]. Die Erbinformationen des Individuums (d. h. die Optimierungsparameter) sind in der Struktur (z. B. in den Zeilen des Vektors) untergebracht. Zusätzlich ist jedes Individuum durch einen Fitnesswert gekennzeichnet. Dieser entspricht dem Wert des Optimierungskriteriums für die Optimierungsparameter des jeweiligen Individuums und ist ebenfalls in der mathematischen Struktur, die das Individuum repräsentiert, untergebracht. Die Menge von Individuen, die den Evolutionsmechanismen unterliegen, wird als Population bezeichnet und entspricht einer Lösungsmenge des Optimierungsproblems. Aus den so genannten Elter-Individuen (Lösungen vor einem Optimierungsschritt) einer Population werden mit Hilfe des Mutations- und des Rekombinationsoperators neue Individuen generiert (Variation der Optimierungsparameter), welche als Nachkommen (variierte Lösungen nach einem

Optimierungsschritt) bezeichnet werden. Die Nachkommen konkurrieren in Bezug auf das Optimierungskriterium – hier durch den Begriff Fitness gekennzeichnet – miteinander. Zur Berechnung der Fitness auf Grundlage der Optimierungsparameter dient die Zielfunktion (z. B. ein Simulationsprogramm) [Uhlenbruck 2002]. Schließlich werden die Nachkommen mit der besten Fitness respektive mit den besten Werten des Optimierungskriteriums anhand des Selektionsoperators ausgewählt und bilden die nachfolgende Population (neue Elter-Individuen) bzw. die optimierte Lösungsmenge (Abb. 3.7).

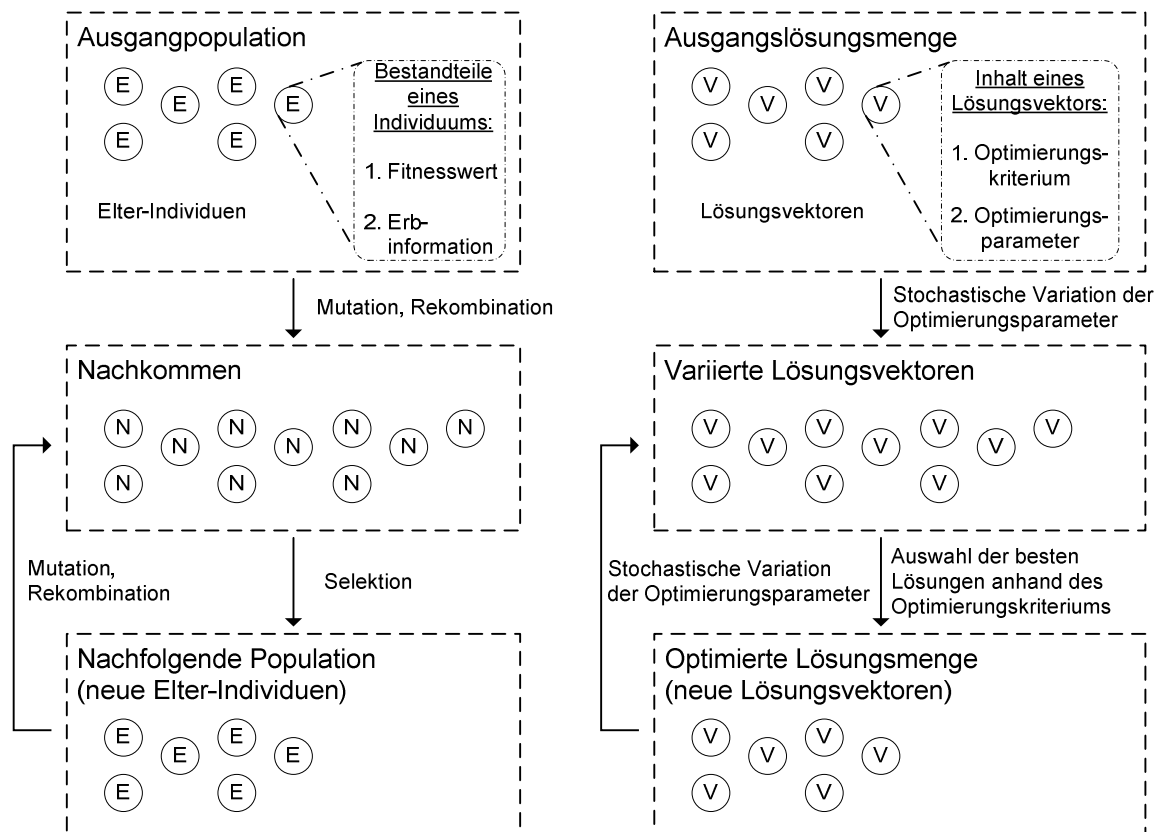


Abb. 3.7 Ablaufschema evolutionärer Mechanismen (links) und deren Übertragung auf ein Optimierungsproblem (rechts)

Die genetischen Operatoren der biologischen Evolution können wie folgt definiert werden [Uhlenbruck 2002], [Gerdes 2004], [Bäck 1996], [Man 1996]:

- Der Mutationsoperator beschreibt eine stochastische Veränderung der Erbinformation (d. h. der Optimierungsparameter) der Elter-Individuen. In der Regel beeinflusst der Mutationsoperator die Erbinformation nur in geringem Maße und dient mit Blick auf das Optimierungsproblem der Annäherung an lokale Optima im Lösungsraum.
- Der Rekombinationsoperator beschreibt die Vermischung der Erbinformation (d. h. der Prozess- und Entscheidungsvariablen) verschiedener stochastisch ausgewählter Elter-Individuen. Mit Bezug auf die Lösung eines Optimierungsproblems hilft der Rekombinationsoperator, den Lösungsraum nach weiteren Optima zu durchsuchen.
- Der Selektionsoperator dient der Auswahl der Elter-Individuen der nachfolgenden Population. Die Selektion orientiert sich dabei an der Fitness der Individuen (d. h. an dem Wert des Optimierungskriteriums) und beruht im übertragenen Sinn auf der von Darwin definierten These „survival of the fittest“ [Darwin bearb. 1984].

Mit Hilfe der vorgenommenen Abstraktion der Evolutionstheorie auf die Bedürfnisse eines Optimierungsproblems kann der Ablauf einer Optimierung nach dem folgenden allgemeinen Programmschema evolutionärer Algorithmen beschrieben werden [Bäck 1996], [Man 1996], [Uhlenbruck 2002]:

```

t = 0;
Erzeuge P(t);
Evaluieren P(t);
Wiederhole bis Abbruchkriterium erfüllt
  P'(t) = Rekombiniere P(t);
  P''(t) = Mutiere P'(t);
  Evaluieren P''(t);
  P(t + 1) = Selektiere P''(t);
  t = t + 1;

```

### 3.3.2 Programm zur Optimierung

Zur Anwendung bzw. Umsetzung der in Kapitel 3.3.1.3 beschriebenen evolutionären Prinzipien auf das betriebliche Optimierungsproblem wird ein auf die Problemstellung zugeschnittenes Optimierungsprogramm entwickelt und die evolutionären Mechanismen entsprechend adaptiert. Um der Gestaltung der genetischen Operatoren ausreichend Raum für Modifikationen zu geben und einen auf die Problemstellung zugeschnittenen Algorithmus zu garantieren, wird bei der Programmierung nicht auf kommerzielle Optimierungsprogramme – und damit einen vorgegebenen Optimierungsablauf – zurückgegriffen.

#### 3.3.2.1 Programmaufbau

Das entwickelte Optimierungsprogramm ist in der Lage, die genetischen Operatoren (Mutationsoperator, Rekombinationsoperator und Selektionsoperator) auszuführen und dient als Schnittstelle zwischen dem Anwender der Prozessoptimierung und dem erstellten Simulationsprogramm zur Bilanzierung von Stoff- und Energieströmen (Kapitel 3.2.4). Der Anwender definiert das Optimierungskriterium (z. B. der exergetische Wirkungsgrad) sowie die Rahmenbedingungen der Prozesse (z. B. der Gasnetzdruck). Das Optimierungsprogramm führt den evolutionären Algorithmus aus; d. h. es erzeugt stochastisch eine erste Menge von Lösungsvektoren (Ausgangspopulation an Individuen) und gibt diese an das Simulationsprogramm weiter. Das Simulationsprogramm verwendet die Prozess- und Entscheidungsvariablen der Vektoren als Eingangswerte und berechnet den Wert des Optimierungskriteriums eines jeden Lösungsvektors (die Fitness der Individuen). Der Wert des Optimierungskriteriums wird in den Vektor des jeweiligen Individuums geschrieben, welcher an das Optimierungsprogramm zurückgegeben wird. Das Optimierungsprogramm vergleicht die Werte des Optimierungskriteriums der einzelnen Individuen und selektiert die besten Lösungen (d. h. die besten Individuen), rekombiniert diese (d. h. kombiniert die Prozess- und Entscheidungsvariablen verschiedener Lösungsvektoren miteinander), mutiert diese (d. h. variiert die Prozessvariablen einiger Lösungsvektoren) und gibt diese als neue, optimierte Lösungsmenge (Nachkommen) an das Simulationsprogramm weiter. Die Arbeitsschritte Mutation, Rekombination, Berechnung der Fitness und Selektion werden wiederholt, bis nach einer ausreichenden Anzahl von Optimierungsschritten/Generationsen das Abbruchkriterium (Kapitel 3.3.2.5) des Algorithmus erfüllt ist und entsprechend den Abbruchbedingungen keine oder nur noch eine verschwindend geringe Verbesserung des Optimierungskriteriums stattfindet. Folglich stellen die Prozess- und

Entscheidungsvariablen des letzten Optimierungsschrittes eine Lösung des Optimierungsproblems dar (Abb. 3.8).

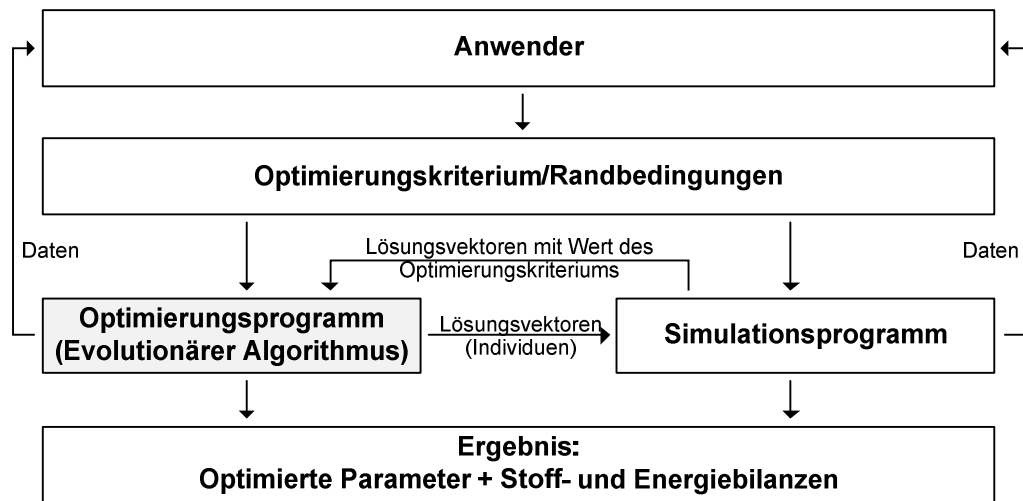


Abb. 3.8 Ablauf der Optimierung

Die Erzeugung einer neuen, optimierten Lösungsmenge (Population) bzw. die Ausführung der genetischen Operatoren (Mutationsoperator, Rekombinationsoperator, Selektionsoperator) durch das Optimierungsprogramm folgt damit im Wesentlichen dem in Kapitel 3.3.1.3 dargestellten allgemeinen Programmschema evolutionärer Algorithmen – beinhaltet jedoch auf das Optimierungsproblem und das Konvergenzverhalten zugeschnittene Anpassungen (Kapitel 6.1 und 7.1). Der Aufbau des Programms ist im Folgenden dargestellt.

$t = 0$ ;  
**Erzeuge**  $P(t)$ ;  
**Evaluieren**  $P(t)$ ;  
**Wiederhole bis Abbruchkriterium erfüllt**  
 $P'(t) = \mathbf{Rekombiniere}$   $P(t)$ ;  
 $P''(t) = \mathbf{Mutiere}$   $P(t)$ ;  
 $P'''(t) = P(t) + P'(t) + P''(t)$ ;  
**Evaluieren**  $P'''(t)$ ;  
 $P(t + 1) = \mathbf{Selektiere}$   $P'''(t)$ ;  
 $t = t + 1$ ;

Der Aufbau der Lösungsvektoren (Individuen), die von dem Optimierungsprogramm an das Simulationsprogramm und von diesem wieder an das Optimierungsprogramm gegeben werden, ist im Rahmen der Prozessoptimierung von zentraler Bedeutung. Sie enthalten zum einen die zu optimierenden Prozess- und Entscheidungsvariablen und zum anderen den Wert des Optimierungskriteriums (den Fitnesswert). Die Individuen der Prozessoptimierungen werden hier durch einen fünfzeiligen Vektor repräsentiert, in dessen erste Zeile der Wert des Optimierungskriteriums geschrieben wird. Die folgenden vier Zeilen beinhalten die Prozess- und Entscheidungsvariablen, welche der Optimierung unterzogen werden (Tabelle 3.6).

Tabelle 3.6 Aufbau eines Lösungsvektors/Individuums

Zeile	Größe
1	Optimierungskriterium
2	Variable 1
3	Variable 2
4	Variable 3
5	Variable 4

Bei der Erstellung des Optimierungsprogramms werden die genetischen Operatoren variabel gestaltet und können entsprechend der Problemstellung und den Bedürfnissen des Anwenders modifiziert werden. Um bei geringer Optimierungszeit gleichzeitig den Verlauf der Optimierung nachvollziehen zu können, muss bei der Einstellung der Operatoren ein Kompromiss zwischen minimaler Konvergenzzeit und maximalen Optimierungsschritten gesucht und gefunden werden.

### 3.3.2.2 Implementierung der Mutation

Der genetische Mutationsoperator beschreibt eine stochastische Veränderung der Erbinformation der Elter-Individuen. Die Variation der Erbinformation (d. h. die Transformation der  $n$  Prozessvariablen  $x_{E,i}$  der Elter-Individuen in die  $n$  Prozessvariablen der Nachkommen  $x_{N,i}$ ) erfolgt dabei durch die Addition eines stochastisch erzeugten Wertes zum Wert des Elter-Individuums (Gleichung (3-25)).

$$x_{N,i} = x_{E,i} + \delta_i z_i \quad (3-25)$$

Der Index  $E$  wird den Größen der Elter-Individuen und der Index  $N$  den Nachkommen zugewiesen.  $z_i$  bezeichnet eine standard-normalverteilte Zufallszahl mit dem Erwartungswert Null und einer Standardabweichung  $\sigma$  gleich 1.  $\delta_i$  bezeichnet die Schrittweite einer Variablen. So ist der Mutationsoperator – bestehend aus der Multiplikation von normalverteilter Zufallszahl und einer Konstanten – ebenfalls als Normalverteilung um den Wert der Prozessvariablen des Elter-Individuums zu verstehen (Abb. 3.9). Die Schrittweite  $\delta_i$  ist dabei gleich der Standardabweichung um den Wert der des Elter-Individuums.

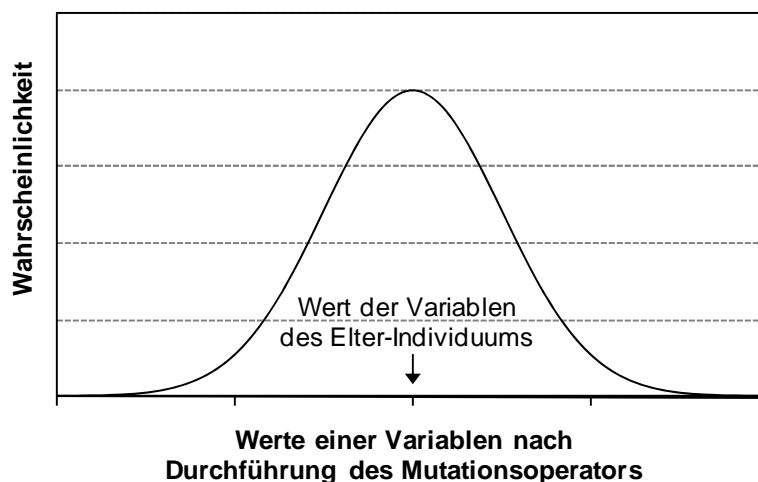


Abb. 3.9 Beispielhafte Darstellung des Mutationsoperators

Da für die Schrittweite im Vergleich zum Betrag der Prozessvariablen des Elter-Individuums in der Regel kleine Werte gewählt werden [Uhlenbruck 2002], ist die Streuung der durch den Mutationsoperator erzeugten Werte um den Erwartungswert – also um den Wert der Prozessvariablen des Elter-Individuums – vergleichsweise klein.

### 3.3.2.3 Implementierung der Rekombination

Der Rekombinationsoperator beschreibt die Vermischung der Erbinformation stochastisch ausgewählter Elter-Individuen. Dabei wird zwischen der Rekombination der Erbinformation zweier Elter-Individuen (bisexuelle Rekombination) und der Rekombination der Erbinformation mehrerer Elter-Individuen (multi-sexuelle Rekombination) unterschieden [Uhlenbruck 2002]. Bei der Durchführung des Rekombinationsoperators des hier entwickelten Optimierungsalgorithmus' wird die Erbinformation des Nachkommens aus der Erbinformation mehrerer Elter-Individuen zusammengesetzt. Das bedeutet, als Prozess- oder Entscheidungsvariable des zu erzeugenden Lösungsvektors (Nachkomme) wird aus allen Lösungsvektoren (Elter-Individuen) eine entsprechende Prozess- oder Entscheidungsvariable zufällig (d. h. durch die Verwendung eines Zufallsgenerators) ausgewählt (Abb. 3.10). Im Gegensatz zur bisexuellen Rekombination wird der Lösungsraum bei der multi-sexuellen Rekombination in einem weiteren Bereich abgetastet und so die Fokussierung des Algorithmus auf ein einzelnes lokales Optimum vermieden.

Lösungsvektor 1 (Elter-Individuum 1)	Lösungsvektor 2 (Elter-Individuum 2)	Lösungsvektor 3 (Elter-Individuum 3)	Nachkomme
–	–	–	–
0,18	0	0	0
105	0	105	105
2,00	5,30	1,80	2,00
1,50	2,50	1,30	1,30

Abb. 3.10 Beispielhafte Darstellung der Durchführung des Rekombinationsoperators

### 3.3.2.4 Implementierung der Selektion

Nach der Durchführung der genetischen Operatoren Mutation und Rekombination werden die variierten Lösungsvektoren (Nachkommen) selektiert. Dabei wird die zu optimierende Größe (z. B. der exergetische Wirkungsgrad) aller Vektoren (Nachkommen) miteinander verglichen und die in Bezug auf diese Größe besten Lösungsvektoren ausgewählt. Die ausgewählten Vektoren stellen die optimierte Lösungsmenge dar (nachfolgende Population), aus der im nächsten Optimierungsschritt wieder neue verbesserte Lösungen (Nachkommen) generiert werden.

### 3.3.2.5 Einstellung des Optimierungsalgorithmus`

Zur Einstellung des Optimierungsalgorithmus` (Abb. 3.11) werden zunächst die Rahmenbedingungen einer Referenzoptimierung festgelegt. Diese beinhalten u. a. die Anzahl der Lösungsvektoren der Ausgangslösungsmenge (Abb. 3.7), die Anzahl der durch Mutation und Rekombination erzeugten Lösungsvektoren sowie die Schrittweiten des Mutationsoperators.

Anschließend wird eine Konvergenzbetrachtung der Referenzoptimierung durchgeführt. Die Konvergenz des Algorithmus ist erreicht, wenn die Veränderung des Optimierungskriteriums über mehrere Optimierungsschritte hinweg minimal, d. h. unter einer vorgegebenen Toleranzgrenze, ist.

Basierend auf der Betrachtung des Konvergenzverhaltens wird eine kritische Schrittzahl festgelegt, nach der die Optimierung enden soll und bis zu der der Algorithmus konvergieren muss. Die kritische Schrittzahl ist demnach das Abbruchkriterium der Optimierung.

Es folgt eine systematische Einstellung der Schrittweiten des Mutationsoperators. Diese wird für jeden Optimierungsparameter separat durchgeführt, indem die Schrittweiten des jeweiligen Parameters vom Anwender verändert werden. Das Ziel dieser Einstellung ist, die Konvergenz des Algorithmus innerhalb der kritischen Schrittzahl sicherzustellen.

Der Erfolg der Schrittweitereinstellung wird durch den Abgleich einer erneuten Konvergenzbetrachtung (auf der Grundlage eines Optimierungsdurchlaufs mit den neu eingestellten Schrittweiten) und der kritischen Schrittzahl überprüft. Konvergiert der Algorithmus innerhalb der kritischen Schrittzahl, wird die Schrittweitereinstellung beibehalten. Konvergiert der Algorithmus nicht innerhalb der kritischen Schrittzahl, wird erneut eine Schrittweitereinstellung vorgenommen.

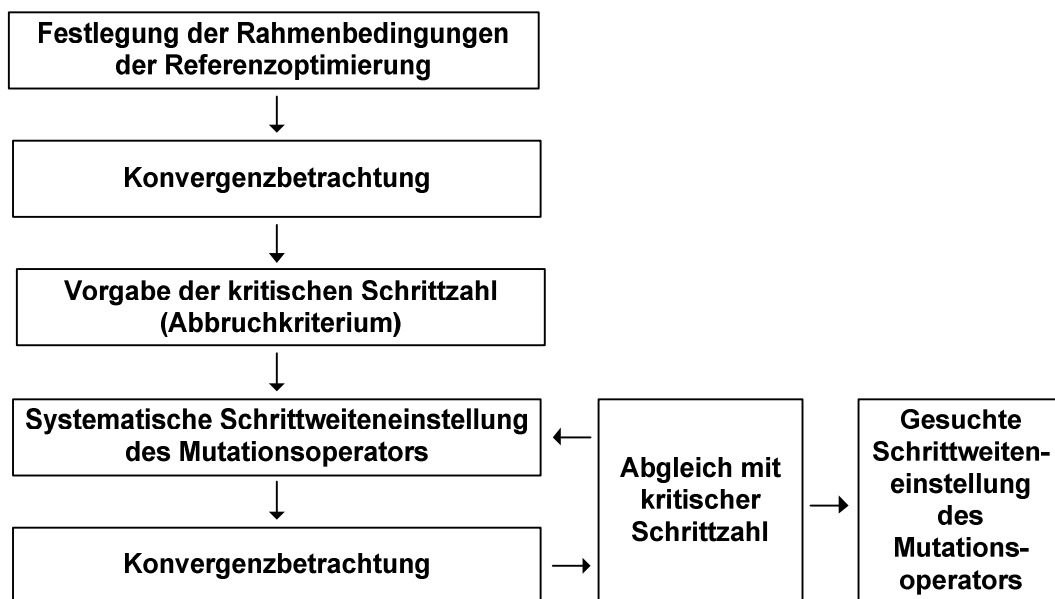


Abb. 3.11 Vorgehen der Schrittweitereinstellung

## 4 Anlagenkonzepte

Aufbauend auf den in Kapitel 2 dargestellten Technologien und Verfahren zur Bio-SNG-Erzeugung werden im Folgenden zehn unterschiedliche Konzeptvarianten vorgestellt, die den Optimierungen dieser Arbeit zu Grunde liegen.

### 4.1 Anlagenübersicht

Fünf Konzeptvarianten beruhen auf einem kurzfristig realisierbaren Basiskonzept mit allothermer Wirbelschichtvergasung und nasser Gasreinigung und fünf weitere Varianten auf einem langfristig realisierbaren Basiskonzept mit autothermer Wirbelschichtvergasung und Heißgasreinigung (vgl. [Duret 2005], [Zwart 2006], [SGC 2008], [Juraščík 2009], [van der Meijden 2010]). Davon erzeugen zwei Konzeptvarianten – eine kurzfristige und eine langfristige Variante – ausschließlich SNG und Wärme. Die acht weiteren Konzeptvarianten dienen der in der Zielstellung geforderten Bestimmung und Bewertung des Optimierungspotenzials von Konzepten, die neben SNG und Wärme ebenfalls Strom bereitstellen. Diese Konzeptvarianten gehen durch die Erweiterung mit Aggregaten zur Stromerzeugung aus dem kurzfristigen und langfristigen Basiskonzept hervor. Im betrachteten Leistungsbereich sind zur Stromerzeugung Gasmotoren, Gasturbinen, Dampfkraftprozesse und ORC-Module von Relevanz (Kapitel 2.2) und werden bei der Erweiterung der Basiskonzepte berücksichtigt (Tabelle 4.1).

Tabelle 4.1 Übersicht der Konzeptvarianten

Bezeichnung	Vergasung	Gasreinigung	KWK-Aggregat	Produkte
VK1	allotherm	nass	–	SNG Wärme
VK2-GMDKP	allotherm	nass	Gasmotor Dampfprozess	SNG Strom Wärme
VK3-GMORC	allotherm	nass	Gasmotor ORC-Modul	SNG Strom Wärme
VK4-GTDKP	allotherm	nass	Gasturbine Dampfprozess	SNG Strom Wärme
VK5-GTORC	allotherm	nass	Gasturbine ORC-Modul	SNG Strom Wärme
VL1	autotherm	heiß	–	SNG Wärme
VL2-GMDKP	autotherm	heiß	Gasmotor Dampfprozess	SNG Strom Wärme
VL3-GMORC	autotherm	heiß	Gasmotor ORC-Modul	SNG Strom Wärme
VL4-GTDKP	autotherm	heiß	Gasturbine Dampfprozess	SNG Strom Wärme
VL5-GTORC	autotherm	heiß	Gasturbine ORC-Modul	SNG Strom Wärme



Die Integration der Wärmekraftmaschinen mit externer Wärmezufuhr erfolgt durch die Nutzung von Wärmeströmen der Prozessstufen Gasreinigung, Methanisierung und Roh-SNG-Aufbereitung. Die Kondensationswärme dieser Wärmekraftmaschinen kann wiederum als Nutzwärme (z. B. in ein Fernwärmenetz) abgegeben werden. Die Integration der Wärmekraftmaschinen mit interner Wärmezufuhr wird durch die Nutzung eines Gasteilstromes realisiert. Die im Zuge des internen Verbrennungsprozesses erzeugte Wärme (im Wesentlichen Abgaswärme) kann anschließend dem Dampfkraftprozess oder dem ORC-Modul zugeführt und Abwärme auf einem niedrigeren Temperaturniveau als Nutzwärme ausgekoppelt werden (Abb. 4.1).

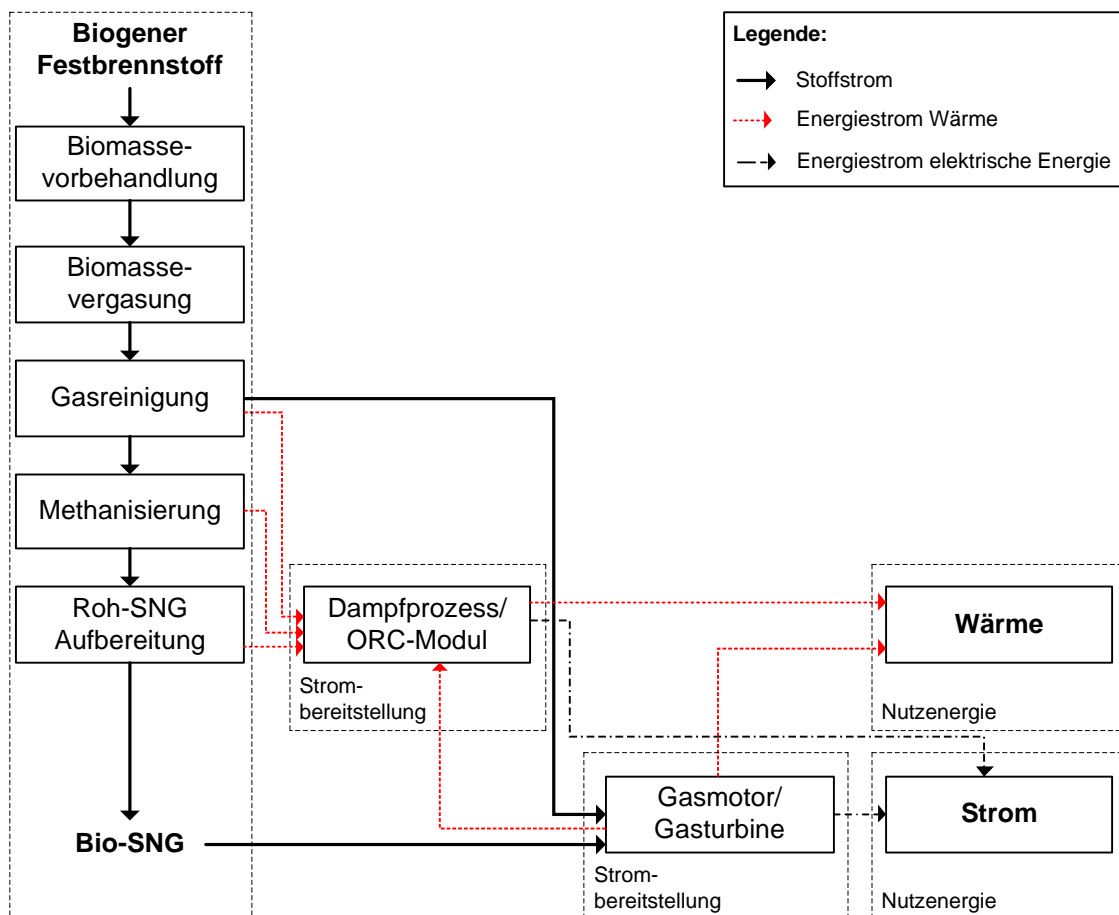


Abb. 4.1 Integration der Stromerzeugungsaggregate in die Basiskonzepte

## 4.2 Anlagenbeschreibung

Nachfolgend werden die den jeweils fünf kurzfristigen und fünf langfristigen Konzeptvarianten gemeinsamen Basiskonzepte im Detail beschrieben sowie Unterschiede der Konzeptvarianten aufgezeigt.

### 4.2.1 Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten

**Kurzfristig realisierbares Basiskonzept.** Im Rahmen dieser Arbeit wird für das Basiskonzept mit allothermer Wirbelschichtvergasung und nasser Gasreinigung exemplarisch die Technologie des am Standort Güssing installierten Demonstrationsprozesses betrachtet [Seiffert 2007], [Rehling 2009]. Zur Analyse und Optimierung wird dieser Demonstrationsprozess mit entsprechenden Modifikationen (u. a. Integration eines Holzhackschnitzeltrockners, Anpassung der Wärme- und Kühlkreisläufe) auf eine Anlagengröße kommerziellen Charakters übertragen (Abb. 4.2).

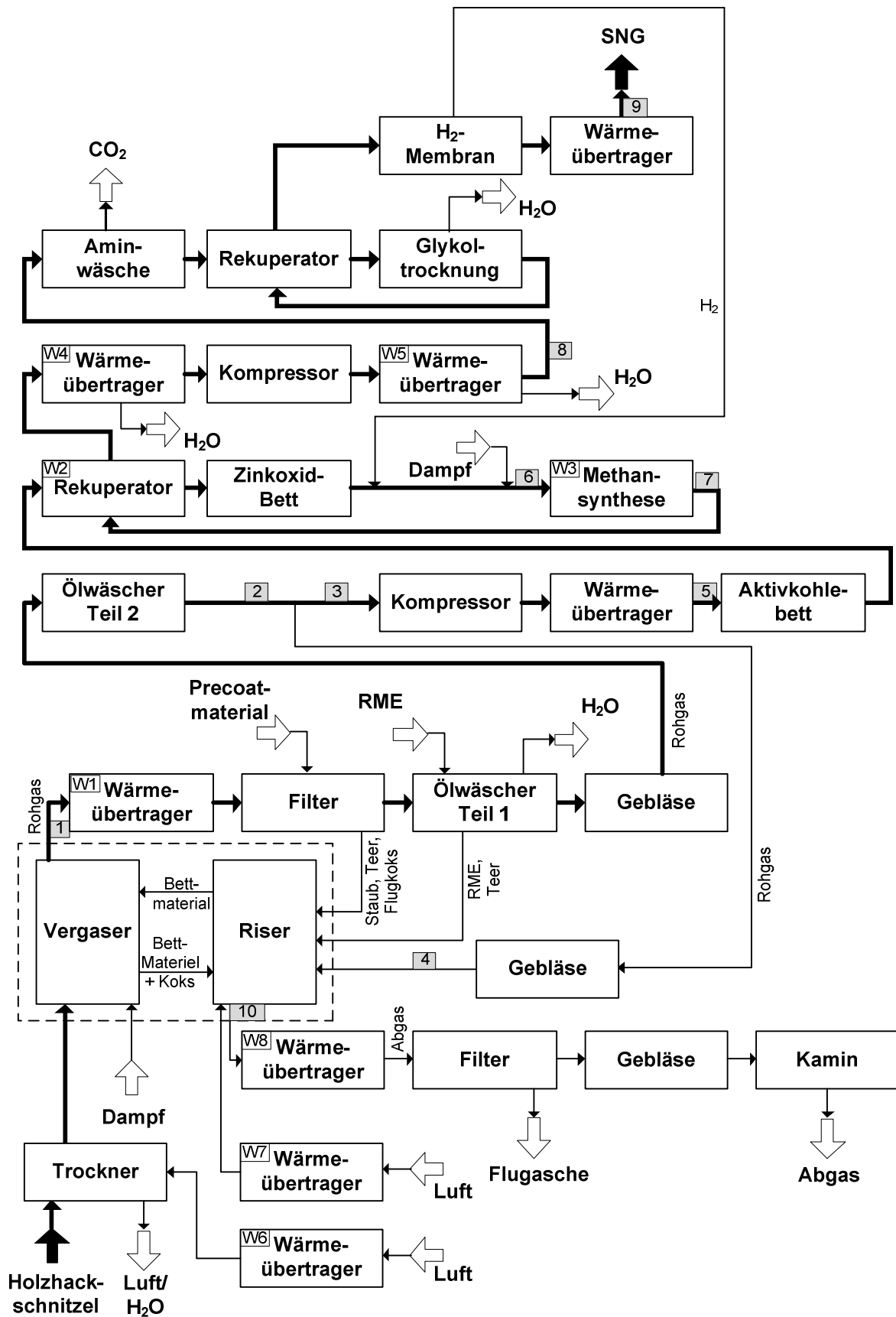


Abb. 4.2 Blockdiagramm des kurzfristig realisierbaren Basiskonzeptes (Stoff- und Wärmeströme an den nummerierten Prozessstellen sind in Anhang 4 und 5 aufgeführt)

Nach einer Trocknung der Holzhackschnitzel mit durch Prozessabwärme vorgewärmter Luft (95 °C) erfolgt die Gaserzeugung analog zur Anlage in Güssing in einer Zweibett-Wirbelschicht. Dabei werden die Hackschnitzel im Vergasungsreaktor bei etwa 850 °C unter Zugabe von Wasserdampf als Vergasungsmittel vergast. Die für die endothermen Vergasungsreaktionen notwendige Wärme wird mit Hilfe von zwischen dem Vergasungsreaktor und einer Wirbelschichtbrennkammer zirkulierendem Bettmaterial (Olivin) in den Vergasungsreaktor eingebracht. In der Brennkammer, die im Gegensatz zum Vergasungsreaktor als zirkulierende Wirbelschicht ausgeführt ist, werden zur Erwärmung des Bettmaterials im Vergasungsreaktor nicht umgesetzter Koks, rückgeführtes Vergasungsrohgas, kokshaltiger Filterkuchen und das Teer-RME-Gemisch aus der Gasreinigung verbrannt [Hofbauer 2002], [Rauch 2002]. Das Abgas der Brennkammer wird in einem Wärmeübertrager auf etwa 150 °C abgekühlt und gefiltert. Das Vergasungsrohgas wird in einem Wärmeübertrager auf etwa 140 °C abgekühlt, in einem precoatisierten Filter von Partikeln, Alkalien sowie teilweise von Teeren befreit und zur weitergehenden Teerentfernung einem Ölwäschersystem zugeführt. In dem mit RME als Solvent arbeitenden Wäschersystem wird das Gas schrittweise auf etwa 10 °C abgekühlt und so Wasser, kondensierbare Kohlenwasserstoffe und organische Schwefelverbindungen vom Gas abgeschieden. Zur Entfernung weiterer Schwefelverbindungen wird der Gasstrom vor Eintritt in den Methanisierungsreaktor zunächst einem Aktivkohlebett zugeführt, anschließend vorgewärmt und in ein ZnO-Bett geleitet. Der Methanisierungsreaktor ist als Wirbelschicht mit Thermoölwärmeübertrager im Wirbelbett ausgeführt [Seemann 2006] und ermöglicht nahezu isotherme Reaktionsbedingungen, bei denen – durch Nickel katalysiert – parallel zur Methanisierungsreaktion auch die Wassergas-Shift-Reaktion abläuft und ungesättigte Kohlenwasserstoffe konvertiert werden. Nach der Methanisierung wird das Roh-SNG abgekühlt, auf 16 bar komprimiert und in einer Aminwäsche Kohlenstoffdioxid abgeschieden. Schließlich erfolgt eine Gastrocknung mit Hilfe von Triethylenglykol (TEG) sowie eine Wasserstoffabtrennung mittels Membranen [Rehling 2009]. Der abgetrennte Wasserstoff wird dem Gasstrom vor der Methanisierung zugeführt. Nach der Membranabtrennung steht das erzeugte Hauptprodukt (Bio-SNG) zur Gasnetzeinspeisung bereit.

**Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten.** Die betrachteten kurzfristigen Konzeptvarianten basieren auf dem Basiskonzept mit allothermer Wirbelschichtvergasung und nasser Gasreinigung.

Die Konzeptvariante VK1 entspricht mit Blick auf die Hauptkomponenten des Gasweges dem Basiskonzept. Sie besitzt jedoch einen Heißwasserkreislauf und einen Thermoölkreislauf zur Wärmeintegration und Dampferzeugung. Strom wird bei Variante VK1 nicht erzeugt.

Die Konzeptvarianten VK2-GMDKP und VK3-GMORC sind zusätzlich zu den Hauptkomponenten des Gasweges mit jeweils zwei Gasmotoren inklusive Turbolader und Abgasbehandlung ausgestattet. Den Motoren wird ein Teilgasstrom nach der Ölwäsche (Teerabscheidung) zugeführt. Zur Abwärmewandlung ist in die Konzeptvariante VK2-GMDKP ein Dampfkraftprozess und in VK3-GMORC ein ORC-Modul integriert, welche in einen Heißwasser- und einen Thermoölkreislauf eingebunden sind.

Anstelle der Gasmotoren besitzen die Konzeptvarianten VK4-GTDKP und VK5-GTORC jeweils eine Gasturbine, die mit dem Hauptprodukt SNG gespeist wird. Abwärme wird wiederum über ein Heißwasser- und Thermoölkreislauf verteilt sowie in einem Dampfkraftprozess bzw. einem ORC-Modul genutzt.

#### 4.2.2 Langfristig realisierbare Konzeptvarianten

**Langfristig realisierbares Basiskonzept.** Das hier untersuchte langfristig realisierbare Basiskonzept arbeitet mit autothermer, druckaufgeladener Wirbelschichtvergasung und Heißgasreinigung (Abb. 4.3). Diese Technologie befindet sich derzeit noch im Entwicklungsstadium, verspricht aber eine Reihe von Vorteilen wie u. a. die kompakte Bauform des druckaufgeladenen Vergasers sowie einen – im Gegensatz zu Konzepten mit nassen Gasreinigungssystemen – weniger komplexen Prozessaufbau.

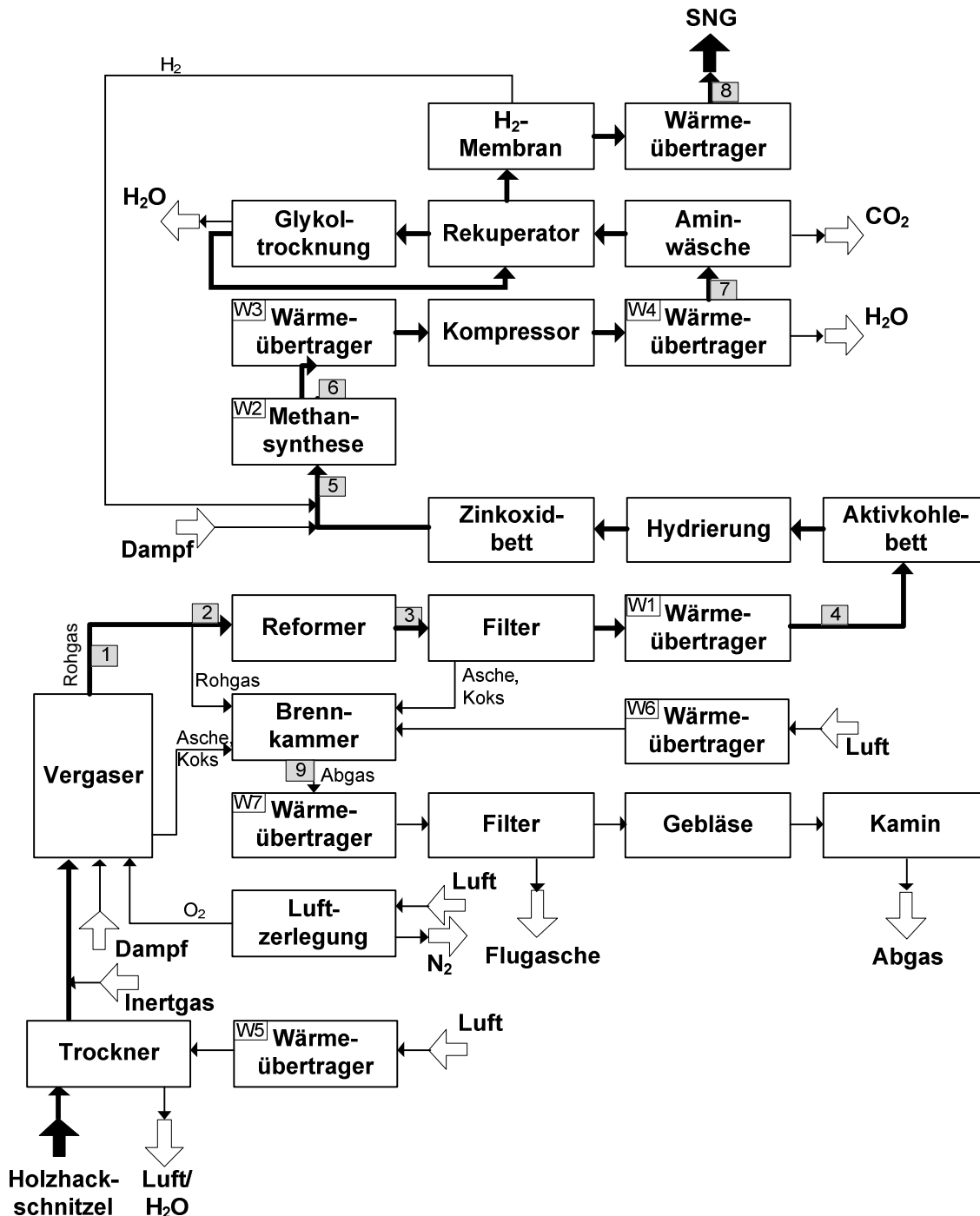


Abb. 4.3 Blockdiagramm des langfristig realisierbaren Basiskonzeptes (Stoff- und Wärmeströme an den nummerierten Prozessstellen sind in Anhang 4 und 5 aufgeführt)

Im betrachteten Prozess (Abb. 4.3) werden Holzhackschnitzel mit vorgewärmter Luft getrocknet und anschließend zusammen mit Kohlenstoffdioxid als Inertgas durch ein Druckschleusensystem dem Vergasungsreaktor zugeführt. Die Vergasung der Holzhackschnitzel findet unter der Zufuhr von Sauerstoff und Wasserdampf als Vergasungsmittel bei einem Druck von 10 bar und einer Temperatur von 950 °C statt. Sauerstoff wird dabei durch eine kryogene Luftzerlegungsanlage bereitgestellt. Um die Teerfracht des im Vergasungsreaktor erzeugten Rohgases zu reduzieren, wird dieses einem Teerreformer zugeführt. In diesem werden die Teere und ebenfalls etwa 80 % [Fürnsinn 2008] des im Gas enthaltenen Methans katalytisch in Wasserstoff und Kohlenstoffmonoxid zerlegt und das Gas auf etwa 850 °C abgekühlt. Die für die endotherme Reformierung erforderliche Wärme wird durch eine Brennkammer bereitgestellt, in der während der Vergasung nicht umgesetzter Koks sowie ein Teil des Rohgases zusammen mit Luft verbrannt werden. Der der Brennkammer zugeführte Koks kommt zum einen aus der Rostasche des Vergasers und zum anderem aus der Filterasche eines sich an den Reformer anschließenden Keramikfilters. Nach diesem Filter wird das Gas auf 300 °C abgekühlt und durch ein Aktivkohlebett, eine Hydrierstufe zur Hydrierung von COS und ein Zinkoxidbett von Schwefelbestandteilen befreit. Die folgenden Prozessschritte entsprechen denen des kurzfristig realisierbaren Anlagenkonzeptes. Das gereinigte Gas wird nach der Zugabe von Wasserdampf einem durch Thermoöl gekühlten Wirbelschichtreaktor zugeführt und der Methangehalt durch den Einsatz von Nickelkatalysatoren erhöht [Seemann 2006]. Das den Methanisierungsreaktor verlassende Gas wird gekühlt, auf 16 bar verdichtet und einer Aminwäsche zur Kohlenstoffdioxidabscheidung zugeführt. Um eine ausreichende Gasqualität zur Netzeinspeisung sicherzustellen wird, das Gas mit Hilfe von Triethylenglykol (TEG) getrocknet sowie Wasserstoff durch Membranen abgetrennt [Rehling 2009].

**Langfristig realisierbare Konzeptvarianten.** Die langfristigen Konzeptvarianten basieren auf dem Basiskonzept mit autothermer Wirbelschichtvergasung und heißer Gasreinigung.

Analog zu den kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten entspricht die Variante VL1 in Bezug auf die Hauptkomponenten des Gasweges dem Basiskonzept und besitzt einen Heißwasser- und einen Thermoölkreislauf zur Wärmeintegration und Dampferzeugung. Eine Stromproduktion ist bei Konzeptvariante VL1 nicht vorgesehen.

Wie die kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten besitzen VL2-GMDKP und VL3-GMORC Gasmotoren sowie einen Dampfkraftprozess bzw. ein ORC-Modul zur Strombereitstellung. Die Gasmotoren werden durch einen Gasteilstrom gespeist, der nach dem Teerreformer vom Hauptgasweg getrennt wird. Zur Wärmestromverschaltung ist wiederum ein Heißwasser- und ein Thermoölkreislauf integriert.

Die Konzeptvarianten VL4-GTDKP und VL5-GTORC besitzen keine Gasmotoren, sondern Gasturbinen, welche durch einen Teilstrom des Hauptproduktes SNG gespeist werden. Zur Stromerzeugung aus Prozessabwärme sind in die Konzepte weiterhin ein Dampfkraftprozess bzw. ein ORC-Modul integriert. Zur Wärmeintegration werden ein Kreislauf mit Heißwasser sowie einer mit Thermoöl verwendet.

## 5 Analyse der Startpunkte der Optimierung

Zur Optimierung von Prozessen ist ein Startpunkt erforderlich, dessen Kennwerte den Optimierungskriterien, die im Zuge der Optimierung zu verbessern sind, zugeordnet werden können. Zur Startpunktbestimmung werden die in Kapitel 4 beschriebenen kurz- und langfristig realisierbaren Konzeptvarianten hinsichtlich der zu optimierenden energetischen, ökonomischen und ökologischen Kenngrößen analysiert.

### 5.1 Rahmenbedingungen und Datengrundlage

Zur Analyse der Startpunkte müssen die Rahmenbedingungen für die in Kapitel 3.2 vorgestellte Analysemethodik festgelegt werden. Dazu werden nachfolgend der betrachtete Bilanzraum definiert, die Berechnungsvorschriften der Kenngrößen an diesen angepasst sowie Rahmenannahmen und -daten zur Berechnung der Kenngrößen dargestellt.

#### 5.1.1 Bilanzraum

Da sich die Produktionsanlagen zur SNG-Erzeugung gemäß der Zielstellung der Arbeit im Betrachtungsmittelpunkt befinden, liegt den Analysen (und Optimierungen) ein Bilanzraum zu Grunde, der ausschließlich den Konversionsprozess der biogenen Festbrennstoffe umfasst (Abb. 5.1). Vorgelagerte Prozessschritte wie die Bereitstellung der Biomasse oder nachgelagerte Schritte wie die Verteilung des Produktes im Gasnetz werden nicht berücksichtigt.

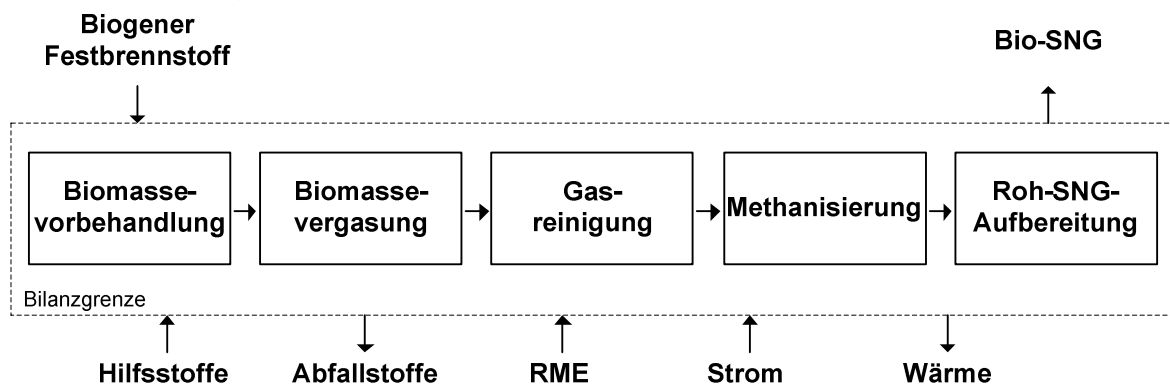


Abb. 5.1 Bilanzraum der Startpunktanalyse

Die biogenen Festbrennstoffe liegen am Eingang des Bilanzraumes in gehackter und ungetrockneter Form vor. Für die Simulationsrechnungen relevante Spezifikationen der Holzhackschnitzel sind in Anhang 2 aufgeführt. Das Hauptprodukt Bio-SNG entspricht am Ausgang des Bilanzraumes den Vorgaben der Arbeitsblätter G 260 und G 262 [DVGW G260], [DVGW G262] und ist auf einen Druck von 16 bar komprimiert. Als Nebenprodukt anfallende Fernwärme wird von der Konversionsanlage auf einem Temperaturniveau von 130 °C abgegeben und die Behandlung bzw. Weiterverarbeitung von Hilfs- und Abfallstoffen ist nicht in der Analyse berücksichtigt.

#### 5.1.2 Energetische Kenngröße

Im Rahmen der energetischen Analyse von Prozessen sind neben Kenngrößen, welche die Energiequantität berücksichtigen, auch Kenngrößen zur Berücksichtigung der Energiequalität von Bedeutung. In diesem Zusammenhang erweist sich insbesondere der exergetische Wirkungsgrad als eine geeignete Kenngröße zur energetischen Prozessanalyse (Kapitel 3.2.1.2). Die Definition des exergetischen Wirkungsgrades für den betrachteten

Bilanzraum sowie wesentliche Rahmenannahmen und -daten der energetischen Analyse werden im Folgenden dargestellt.

Der exergetische Wirkungsgrad  $\eta_{ex}$  der Bio-SNG-Produktionsanlagen kann auf Basis des in Kapitel 5.1.1 beschriebenen Bilanzraumes berechnet werden. Bei der Berechnung findet der Exergiestrom des erzeugten Bio-SNG  $\dot{E}_{SNG,aus}$ , der Exergiestrom der durch den Prozess als Nebenprodukt bereitgestellten elektrischen Energie  $\dot{E}_{el,aus}$ , der Exergiestrom der als Nebenprodukt bereitgestellten Wärme  $\dot{E}_{th,aus}$ , der Exergiestrom des elektrischen Eigenbedarfs des Prozesses  $\dot{E}_{el,ein}$ , der Exergiestrom des in den Prozess eintretenden biogenen Festbrennstoffes  $\dot{E}_{BS,ein}$  und – falls eingesetzt – der Exergiestrom des in den Prozess als zusätzlicher Brennstoff und Waschmittel zugeführten RME  $\dot{E}_{RME,ein}$  Berücksichtigung (Gleichung (5-1)).

$$\eta_{ex} = \frac{|\dot{E}_{SNG,aus}| + |\dot{E}_{el,aus}| + |\dot{E}_{th,aus}|}{|\dot{E}_{BS,ein}| + |\dot{E}_{RME,ein}| + |\dot{E}_{el,ein}|} \quad (5-1)$$

Zur Bestimmung der Exergieströme wird dabei auf die in Kapitel 3.2.1.3 vorgestellte Methodik zurückgegriffen. Die dazu erforderlichen Stoff- und Energieströme werden mit Hilfe des in Kapitel 3.2.4 vorgestellten Prozesssimulationsprogramms abgebildet und ausgewertet. Eine Übersicht der Rahmenannahmen der Prozesssimulation ist in Tabelle 5.1 gegeben.

Tabelle 5.1 Rahmenannahmen der Simulationsrechnungen zur Startpunktanalyse der kurzfristig und langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

	Einheit	Kurzfristige Konzeptvarianten	Langfristige Konzeptvarianten
<b>Anlageneingangsströme</b>			
Biomasse (feucht)	t/h	16,16	16,16
RME	kg/h	66,59	0
<b>Trocknungsparameter</b>			
Trocknungstemperatur	°C	95	95
Brennstoffwassergehalt Trocknereingang	%	40	40
Brennstoffwassergehalt Trocknerausgang	%	20	20
<b>Vergasungsparameter</b>			
Druck Vergasungsreaktor	bar	1,0	10,0
Temperatur Vergasungsreaktor	°C	850	950
Eintrittsverhältnis H <sub>2</sub> O/Biomasse (atro)	kg/kg	0,49	0,27
<b>Brennkammerparameter</b>			
Druck Brennkammer	bar	1,0	1,0
Temperatur Brennkammer	°C	930	1816
Luftverhältnis Brennkammer	mol/mol	1,15	1,15
<b>Methanisierungsparameter</b>			
Druck Methanisierung	bar	4,0	10
Temperatur Methanisierung	°C	300	300

Die Rahmenannahmen der Simulation der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten basieren auf dem Betriebsverhalten der Bio-SNG-Demonstrationsanlage am Standort Güssing mit allothermer Vergasung und nasser Gasreinigung (u. a. [Rehling 2009], [Seemann 2006]). Da zur Produktion von SNG mit autothermer Vergasung und Heißgasreinigungssystemen derzeit keine Demonstrationsanlagen existieren, erfolgt die Festlegung der Rahmenannahmen der langfristig realisierbaren Varianten in Anlehnung an das Betriebsverhalten von in unterschiedlichen Anlagen eingesetzten Prozesskomponenten wie z. B. autotherme Vergaser [Ullmann's 2006], Methanisierungsreaktoren [Seemann 2006] und Reaktoren zur Teerreformierung [Fürnsinn 2008], [Dayton 2009]. Detaillierte Rahmenannahmen der Simulation sind in Anhang 2 aufgeführt.

### 5.1.3 Ökonomische Kenngröße

In Bezug auf ökonomische Analysen verfahrenstechnischer Prozesse stellen die Produktgestehungskosten eine aussagekräftige sowie hinsichtlich ihrer Interpretierbarkeit vorteilhafte Kenngröße dar (Kapitel 3.2.2.2). Im Rahmen dieser Arbeit werden daher die Bio-SNG-Gestehungskosten als Kenngröße zur ökonomischen Analyse verwendet. Im Folgenden werden die Berechnungsvorschrift der Produktgestehungskosten für den betrachteten Bilanzraum definiert sowie die zur Berechnung erforderlichen Rahmenannahmen vorgestellt.

Die Produktgestehungskosten  $G_{SNG}$  ergeben sich als Quotient der jährlichen Annuität und der jährlich erzeugten Menge des Hauptproduktes (Gleichung (5-2)). Die Berechnungsmethodik der jährlichen Annuität  $A$  erfolgt nach Kapitel 3.2.2.3. Die Bezugsgröße, d. h. die jährlich erzeugte Menge des Hauptproduktes, wird im Rahmen der ökonomischen Analyse als durchschnittliche exergetische Jahresleistung  $\dot{E}_{SNG}$  einbezogen.

$$G_{SNG} = \frac{A}{\dot{E}_{SNG}} \quad (5-2)$$

Der Berechnung der Bio-SNG-Gestehungskosten liegen die in Tabelle 5.2 dargestellten Rahmenannahmen zu Grunde.

Tabelle 5.2 Rahmenannahmen der ökonomischen Startpunktanalyse der kurzfristig und langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

	Einheit	Kurzfristige Konzeptvarianten	Langfristige Konzeptvarianten
<b>Kapitalgebundene Zahlungen</b>			
Investitionsbetrag	Mio. €	70	70
Abschreibungszeitraum	a	20	20
Kalkulationszins	%/a	8,0	8,0
Instandsetzungskosten	%/a	2,0 (in Bezug auf $I_0$ )	2,0 (in Bezug auf $I_0$ )
Preissteigerungsrate <sup>a</sup>	%/a	0	0
<b>Verbrauchsgebundene Zahlungen</b>			
Jahresvolllaststunden	h/a	7500	7500
Biomassepreis (atro)	€/t	70	70

<sup>a</sup> Im Rahmen finanzmathematischer Betrachtungen von Energieprojekten wird i. Allg. auf die Berücksichtigung einer Preissteigerungsrate verzichtet, da diese sich über den Betrachtungszeitraum in der Regel sehr volatil verhält und somit nicht realistisch abzubilden ist [Konstantin 2007].



Entsorgungskosten Asche	€/t	150	150
Entsorgungskosten Abwasser	€/t	2	2
Strombezugspreis	€/kWh	0,10	0,10
Preissteigerungsrate	%/a	0	0
<b>Betriebsgebundene Zahlungen</b>			
Personalbedarf	MA/a	16	16
Personalkosten	€/(MA a)	50000	50000
Wartungs- und Reinigungskosten	%/a	3,0 (in Bezug auf I <sub>0</sub> )	3,0 (in Bezug auf I <sub>0</sub> )
Preissteigerungsrate	%/a	0	0
<b>Sonstige Zahlungen</b>			
Versicherung	%/a	1,0 (in Bezug auf I <sub>0</sub> )	1,0 (in Bezug auf I <sub>0</sub> )
Verwaltung	%/a	0,5 (in Bezug auf I <sub>0</sub> )	0,5 (in Bezug auf I <sub>0</sub> )
Unerwartete Kosten	%/a	1,0 (in Bezug auf I <sub>0</sub> )	1,0 (in Bezug auf I <sub>0</sub> )
Preissteigerungsrate	%/a	0	0
<b>Einzahlungen/Erlöse</b>			
Wärmeverkaufspreis	€/kWh	0,03	0,03
Dampfverkaufspreis	€/kWh	0,04	0,04
Preissteigerungsrate	%/a	0	0

Die dargestellten Rahmenannahmen sind aufgrund des verhältnismäßig jungen Entwicklungsstandes der betrachteten Technologie lediglich als Richtwerte zu verstehen. Belastbare Aussagen zur Höhe der Investitionen oder in Bezug auf die Kosten der Biomasse sind derzeit nicht möglich (vgl. [Zwart 2006], [Bush 2008], [Müller-Langer 2009], [UMSICHT 2009], [Rönsch 2009]). Ebenso sind die Dampf- und Wärmeverkaufspreise von der Wärmenachfrage am Anlagenstandort abhängig. Die gewählten Rahmenannahmen dienen daher in erster Linie dem Ziel, die Datengrundlage zur Berechnung der Bio-SNG-Gestehungskosten der unterschiedlichen Konzeptvarianten einheitlich und transparent zu gestalten.

Bei den Konzeptvarianten mit Stromproduktion wird zusätzlich zum Investitionsbetrag, der im Zusammenhang mit der SNG- und Wärmeerzeugung anfällt (Tabelle 5.2), den finanziellen Aufwendungen für die KWK-Aggregate (Gasmotoren, Gasturbine, Dampfkraftprozess und ORC-Modul) Rechnung getragen. So werden für die Aggregate Gasmotor/Gasturbine und Dampfkraftprozess/ORC-Modul spezifische Vorhaltekosten berücksichtigt, die in Abhängigkeit der Leistung der entsprechenden KWK-Aggregate als zusätzliche Investitionen in die Berechnung der Bio-SNG-Gestehungskosten einfließen. Die zusätzlichen Investitionsbeträge werden durch aggregatspezifische Funktionen in Abhängigkeit der erzeugten elektrischen Leistung bestimmt (Tabelle 5.3).

Tabelle 5.3 Funktionen zur Berechnung zusätzlicher Investitionen für Gasmotor, Gasturbine, Dampfkraftprozess und ORC-Modul

KWK-Aggregat	Einheit	Funktion	Quelle
Gasmotor	€/kW <sub>el</sub>	$4361 P_{el}^{-0,330}$	[ASUE 2005]
Gasturbine	€/kW <sub>el</sub> <sup>b</sup>	$466 \left( \frac{P_{el}}{1000} \right)^{-0,245}$	[Konstantin 2007]
Dampfkraftprozess/ ORC-Modul	€/kW <sub>el</sub>	$336272 P_{el}^{-0,762}$	[GMK 2009]

Zur Berücksichtigung der Instandsetzungsaufwendungen der Gasturbine sowie des Dampfkraftprozesses und des ORC-Moduls wird deren Investitionsbetrag zudem um 65 % erhöht. Mit Blick auf die Gasmotoren teilt sich die Investition aufgrund ihrer limitierten Leistungsgröße auf mehrere Motoren auf, deren Investitionsbeträge jeweils gesondert nach der aufgeführten Funktion (Tabelle 5.3) berechnet werden. Die Instandsetzungsaufwendungen der Gasmotoren sind zudem in der leistungsabhängigen Funktion zur Berechnung der zusätzlichen Investitionsaufwendungen inbegriffen.

#### 5.1.4 Ökologische Kenngröße

Als Kriterien zur Beurteilung der ökologischen Konkurrenzfähigkeit des Erdgassubstitutes Bio-SNG werden in dieser Arbeit exemplarisch die Treibhausgasemissionen ermittelt (Kapitel 3.2.3.2). Die an den Bilanzraum angepasste Berechnungsvorschrift der Treibhausgasemissionen sowie wesentliche Rahmenannahmen der Berechnung werden im Folgenden dargestellt.

Zur Berechnung der spezifischen Bio-SNG-Treibhausgasemissionen  $T_{SNG}$ , die in Verbindung des Konversionsprozesses anfallen, wird die Allokationsmethodik verwendet. Dabei werden die jährlichen CO<sub>2</sub>-äquivalenten Emissionen des Produktionsprozesses  $T_{PP}$  unter Berücksichtigung des zuvor definierten Bilanzraumes bestimmt und auf die gesamte jährliche Exergiemenge der drei Produkte SNG, Strom und Wärme ( $\dot{E}_{SNG,aus}$ ,  $\dot{E}_{el,aus}$ ,  $\dot{E}_{th,aus}$ ) bezogen (Gleichung (5-3)).

$$T_{SNG} = \frac{T_{PP}}{\dot{E}_{SNG,aus}} \frac{\dot{E}_{SNG,aus}}{\dot{E}_{SNG,aus} + \dot{E}_{el,aus} + \dot{E}_{th,aus}} = \frac{T_{PP}}{\dot{E}_{SNG,aus} + \dot{E}_{el,aus} + \dot{E}_{th,aus}} \quad (5-3)$$

Die zur Berechnung der Treibhausgasemissionen erforderlichen Emissionsfaktoren (Tabelle 5.4) sind u. a. der Ecoinvent-Datenbank (Datenstand 2007) [Ecoinvent 2007] entnommen.

<sup>b</sup> Die in der Literatur genannten spezifischen Investitionsaufwendungen für Gasturbinenprozesse [Konstantin 2007] wurden basierend auf einem durchschnittlichen Wechselkurs für das Jahr 2007 von 0,73 €/€ von Dollar in Euro umgerechnet.

Tabelle 5.4 Emissionsfaktoren zur Berechnung der Bio-SNG-Treibhausgasemissionen bei der Startpunktanalyse der kurzfristig und langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

	Einheit	Wert
<b>Eintretende Stoffe</b>		
RME	kg/kg	2,5900
Aktivkohle	kg/kg	1,0420
CaCO <sub>3</sub>	kg/kg	0,0100
MEA	kg/kg	3,4700
Ni-Katalysator	kg/kg	11,2300
N <sub>2</sub>	kg/m <sub>N</sub> <sup>3</sup>	0,4300
SiO <sub>2</sub>	kg/kg	0,0200
ZnO	kg/kg	2,9100
<b>Austretende Stoffe</b>		
Aktivkohle (beladen)	kg/kg	0,0000
Asche	kg/kg	0,0025
CH <sub>4</sub>	kg/kg	23,0000
Ni-Katalysator (deaktiviert)	kg/kg	0,0000
Wasser	kg/kg	0,0004
ZnO (beladen)	kg/kg	0,0000
<b>Eintretende Energien</b>		
Eigenbedarf elektrische Energie	kg/MJ <sub>el</sub>	0,1471

Emissionsfaktoren von Stoffen und Energieformen sind – abgesehen von Emissionsfaktoren, die Stoffen direkt zugewiesen werden können (z. B. der Emissionsfaktor von Methan), – keine allgemeingültigen Werte, sondern berechnen sich in Abhängigkeit des Lebensweges. Ein Stoff oder eine Energie kann demnach entsprechend des zugehörigen Lebensweges durch unterschiedliche Emissionsfaktoren gekennzeichnet werden. Die aufgeführten Emissionsfaktoren sind daher als Richtwerte zu verstehen. Bspw. können der elektrischen Energie gemäß ihrer Erzeugung unterschiedliche Emissionsfaktoren zugeordnet werden. Im Rahmen dieser Arbeit basiert der Emissionsfaktor der elektrischen Energie auf der durchschnittlichen Zusammensetzung des europäischen Strommixes.

## 5.2 Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten

Die Ergebnisse der Analyse der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten, d. h. dessen energetische, ökonomische und ökologische Kenngrößen, werden im Folgenden vorgestellt.

### 5.2.1 Energetische Analyse

Als Ergebnis der exergetischen Analyse der fünf kurzfristigen Konzeptvarianten liegen detaillierte Exergiebilanzen vor. Die den Prozessen zugeführten Exergieströme betragen jeweils 54,1 MW (Abb. 5.2). Davon wird den Prozessen etwa 93 % in Form des biogenen Festbrennstoffs, d. h. durch die Holzhackschnitzel, und etwa 6 % in Form von elektrischer

Energie zur Deckung des Stromverbrauchs der Anlage zugeführt. Als zusätzlicher Brennstoff wird zudem RME eingesetzt, welcher in der Ölwäsche Verwendung findet.

Beim Vergleich der als Produkte (SNG, Strom und Wärme) abgeführten Exergien offenbaren sich deutliche Unterschiede zwischen den fünf Konzeptvarianten. Während die Variante ohne Stromerzeugung (VK1) durch die größten als Produkte abgeführten Exergieanteile gekennzeichnet ist, überführen die Varianten mit Gasmotor (VK2-GMDKP, VK3-GMORC) weniger Exergie in die Produkte. Die Varianten mit Gasturbine (VK4-GTDKP, VK5-GTORC) schneiden in Bezug auf den als Produkte abgeführten Exergieanteil am schlechtesten ab. Um daher mit Konzeptvarianten ohne Stromerzeugung konkurrieren zu können, wird an die Optimierung der Varianten mit Stromerzeugung die Bedingung gestellt, mindestens den hier dargestellten exergetischen Startpunkt der Variante ohne Stromerzeugung zu erreichen.

Bei der Betrachtung der unterschiedlichen abgeführten Exergieanteile zeigt sich, dass die Konzeptvariante ohne Stromerzeugung von der zugeführten Exergie etwa 60 % in das Hauptprodukt Bio-SNG umwandelt. Da die Varianten mit Gasmotor und Gasturbine einen Teil des im Vergaser erzeugten Gasstromes zur Stromerzeugung nutzen, fällt ihre SNG-Produktion anteilig zu der insgesamt zugeführten Exergie mit 49 bzw. 25 % geringer aus. Der Anteil des bereitgestellten Stroms dieser Varianten an der insgesamt zugeführten Exergie beträgt 7 bzw. 15 %. Bei den Varianten mit Gasturbine ist der abgeführte SNG-Anteil kleiner als bei den Gasmotorvarianten, da den Turbinen ein größerer Gasstrom zugeführt wird als den Motoren (die Größe der berücksichtigten KWK-Aggregate entsprechen am Markt verfügbarer Baugrößen). Als weiteres Nebenprodukt aller Konzeptvarianten fällt Wärme an. Der Anteil der Wärme ist bei den Varianten mit Stromerzeugung höher als bei der Variante ohne Stromerzeugung, da bei den Verbrennungsprozessen in den KWK-Aggregaten ein Teil der chemisch gebundenen Energie des Gasstromes in Wärme umgewandelt wird.

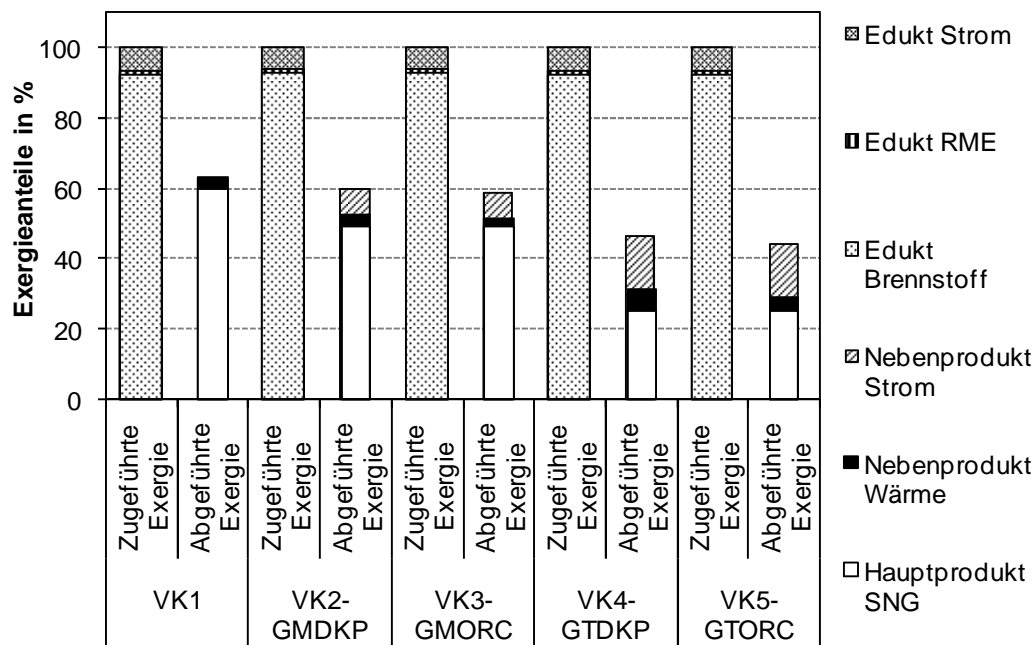


Abb. 5.2 Anteile der zu- und abgeführten Exergieströme an der insgesamt zugeführten Exergie der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten

Die zur energetischen Prozesscharakterisierung verwendeten exergetischen Wirkungsgrade (Tabelle 5.5) ergeben sich mit Hilfe der aufgeführten Exergieanteile (Summe der

Exergieanteile des Hauptproduktes SNG sowie der Nebenprodukte Strom und Wärme) (Gleichung (5-1)).

Tabelle 5.5 Übersicht der exergetischen Wirkungsgrade der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten

	Einheit	VK1	VK2- GMDKP	VK3- GMORC	VK4- GTDKP	VK5- GTORC
$\eta_{ex}$	%	62,9	59,9	58,8	46,4	44,3

### 5.2.2 Ökonomische Analyse

Zur ökonomischen Prozesscharakterisierung werden die Bio-SNG-Gestehungskosten der Konzeptvarianten berechnet. Aufgrund der voneinander abweichenden Kosten und Erlöse (z. B. die Erlöse durch den Verkauf des Nebenproduktes Strom) sowie Hauptproduktmengen sind die fünf Varianten durch unterschiedliche Produktgestehungskosten gekennzeichnet (Abb. 5.3). Diesbezüglich weisen die Konzeptvarianten mit integrierter Stromerzeugung (VK2-GMDKP, VK3-GMORC) – und dabei insbesondere die mit Gasturbine (VK4-GTDKP, VK5-GTORC) – höhere Gestehungskosten auf als das Konzept ohne Stromerzeugung (VK1). Unter der Maßgabe eines aus ökonomischer Sicht wettbewerbsfähigen Anlagenbetriebs müssen die Gestehungskosten der Konzeptvarianten mit integrierten Stromerzeugungsaggregaten demnach durch die Optimierung mindestens das Niveau der Variante ohne Stromerzeugung erreichen.

Bei der Betrachtung der unterschiedlichen Kosten und deren Einfluss auf die Bio-SNG-Gestehungskosten wird deutlich, dass sich insbesondere die kapitalgebundenen Zahlungen bedeutend auf die Höhe der Gestehungskosten auswirken. Diese betragen bei der Konzeptvariante ohne Stromerzeugung etwa 38 % der gesamten Gestehungskosten. Bei den Varianten mit Gasmotor und Gasturbine ist dieser Anteil aufgrund der zusätzlichen Investitionen für die KWK-Aggregate noch höher. Er beträgt 44 bzw. 54 %. Ebenso beeinflussen die durch den Einkauf der Biomasse verursachten Kosten die Bio-SNG-Gestehungskosten maßgeblich. Die aus dem Verkauf der Nebenprodukte Strom und Wärme entstehenden Erlöse wirken sich reduzierend auf die Bio-SNG-Gestehungskosten aus, da sie als Zahlungseingang verbucht werden. Aufgrund der reduzierten SNG-Ausbeuten der Konzeptvarianten mit Stromproduktion sind deren anteilige Kosten – bezogen auf die Hauptproduktmenge (Bio-SNG) – bei gleichen Zahlungsströmen höher als bei der Variante ohne Stromproduktion. Dieser Nachteil wird jedoch durch Erlöse, die durch den Verkauf der Nebenprodukte Strom und Wärme verbucht werden können, teilweise kompensiert.

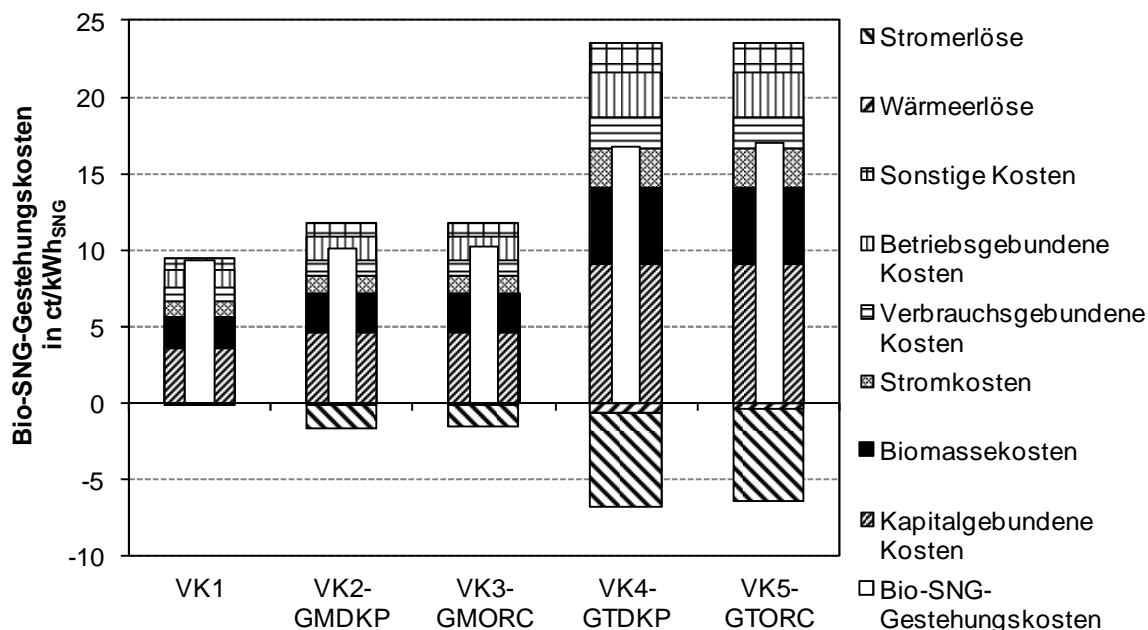


Abb. 5.3 Bio-SNG-Gestehungskosten sowie Kostenanteile und Erlöse der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten

Die Bio-SNG-Gestehungskosten (Tabelle 5.6) setzen sich aus den abgebildeten Kostenanteilen und Erlösen zusammen (Gleichung (5-2)).

Tabelle 5.6 Übersicht der Bio-SNG-Gestehungskosten der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten

	Einheit	VK1	VK2-GMDKP	VK3-GMORC	VK4-GTDKP	VK5-GTORC
$G_{SNG}$	ct/kWh <sub>SNG</sub>	9,3	10,1	10,2	16,3	17,0

### 5.2.3 Ökologische Analyse

Die Treibhausgasemissionen, welche sich für den definierten Bilanzraum (Kapitel 5.1.1) der Konzeptvarianten ergeben, werden als ökologische Kenngröße der jeweiligen Konversionsanlage herangezogen. Mit Hilfe der ermittelten Masse- und Energiebilanzen können die Treibhausgasemissionen der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten und die Anteile der Emissionen verschiedener in den Prozess ein- und austretender Stoff- und Energieströme an den gesamten spezifischen Treibhausgasemissionen ermittelt werden (Abb. 5.4). Dabei sind die Emissionen, die mit dem Bezug von Energie für die Deckung des elektrischen Anlagenbedarfs verbunden sind, bestimmend für die Menge der insgesamt freigesetzten Emissionen (82 bis 83 % der gesamten Emissionen). Als Ergebnisse zeigen sich deutlich voneinander abweichende Treibhausgasemissionen. Die Konzeptvarianten mit Gasturbine (VK4-GTDKP, VK5-GTORC) weisen die höchsten spezifischen Treibhausgasemissionen auf und das Konzept ohne Stromerzeugung (VK1) ist durch die niedrigsten Emissionen gekennzeichnet. Vorteilhaft ist die Integration von Stromerzeugungsaggregaten aus ökologischer Sicht daher nur, wenn durch die Optimierung der hier berechnete Startwert der Konzeptvariante ohne Stromerzeugung erreichbar wird.

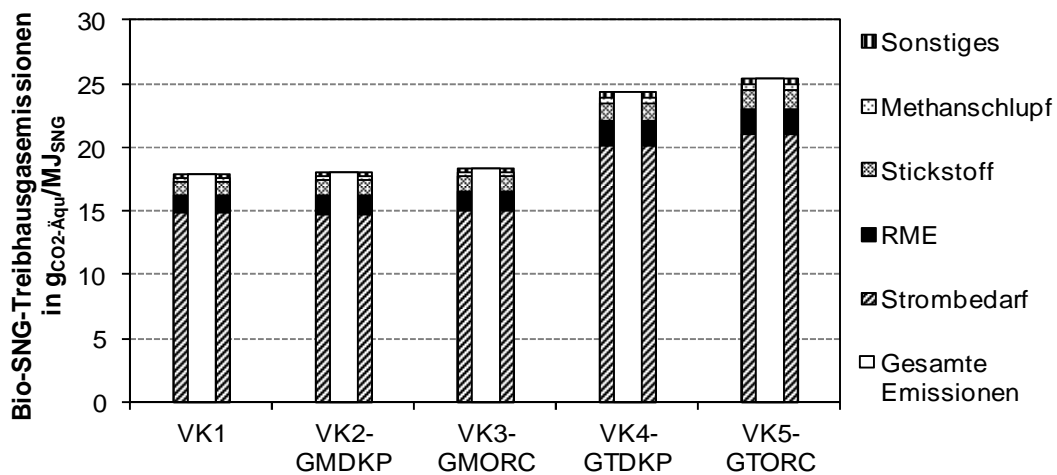


Abb. 5.4 Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten und deren Zuordnung zu Stoff- und Energieströmen

Die Bio-SNG-Treibhausgasemissionen (Tabelle 5.7) ergeben sich aus der Summe der Emissionen, die den zu- und abgeführten Stoff- und Energieströmen zuzuordnen sind (Gleichung (5-3)).

Tabelle 5.7 Übersicht der Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten

Einheit	VK1	VK2-GMDKP	VK3-GMORC	VK4-GTDKP	VK5-GTORC
$T_{SNG}$ gCO <sub>2</sub> -Äqu/MJ <sub>SNG</sub>	17,9	18,1	18,4	24,4	25,4

## 5.2.4 Diskussion

**Monte Carlo Simulation.** Da die Analyse auf der Basis einer Vielzahl von Rahmenannahmen beruht, die bei der Entwicklung und Optimierung neuer Konversionsprozesse zwangsläufig mit Unsicherheiten behaftet sind, wird im Folgenden die Unsicherheit der Ergebnisse untersucht.

Im Mittelpunkt der Analysen steht das hier entwickelte Simulationsprogramm zur Berechnung von Stoff- und Energieströmen, welches zwar an praktische Messwerte (z. B. an Messwerte der Bio-SNG-Demonstrationsanlage am Standort Güssing) angepasst wird, jedoch aufgrund von Vereinfachungen im Rahmen der Modellbildung zwangsläufig Abweichungen im Vergleich zur realen Anlage aufweist. Um daher den Einfluss der Variationen verschiedener Prozessparameter auf das Endergebnis abzuschätzen und damit Aussagen über die Ergebnisunsicherheit bzw. die Fehlerfortpflanzung innerhalb des Simulationsprogramms treffen zu können, soll dieses mit Hilfe der Monte Carlo Simulation [Beucher 2007] untersucht werden.

Die Monte Carlo Simulation ist ein stochastisches Verfahren, mit dessen Hilfe sich i. Allg. Problemen genähert wird, die analytisch nur schwer oder gar nicht zu lösen sind (Kapitel 3.3.1.1). Es fußt im Wesentlichen auf der zufälligen Erzeugung einer Vielzahl von Lösungsmöglichkeiten. So werden im Zusammenhang mit der Abschätzung von Ergebnisunsicherheiten verschiedene Einflussparameter gleichzeitig stochastisch mit einzelnen Unsicherheiten beaufschlagt (u. a. [Kosorok 2000]) und der Einfluss auf das Endergebnis dargestellt [Beucher 2007]. Auf diese Weise können insbesondere Rückschlüsse auf die Fehlerfortpflanzung innerhalb von Übertragungsfunktionen/Simulationsmodellen gezogen werden, da durch die stochastische Erzeugung

einer Vielzahl von Lösungen auch solche Lösungen generiert werden, bei denen sich die Einflüsse der Parametervariationen je nach Art der Übertragungsfunktion und Vorzeichen gegenseitig auslöschen, aber auch potenzieren können. Im Gegensatz zu Sensitivitätsanalysen werden somit verschiedene Prozessparameter gleichzeitig variiert und daher Wechselwirkungen unterschiedlicher Parameterveränderungen erfasst.

Mit Blick auf das Simulationsprogramm dieser Arbeit stehen insbesondere die Prozessschritte Biomassevergasung und Methanisierung aufgrund ihres maßgeblichen Einflusses auf die Prozesseffizienz [Zwart 2006] im Fokus der Untersuchungen. Deshalb werden exemplarisch die folgenden zwei Parameter der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 variiert:

- die Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift Reaktion der Modellierung des Vergasungsreaktors und
- die Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift Reaktion der Modellierung des Methanisierungsreaktors.

Die Variation beider Parameter wird stochastisch in Form einer Gaußschen Normalverteilung mit einer Standardabweichung von 5 % um den Erwartungswert (Ausgangswert des zu variierenden Parameters) realisiert. Die Exergie des erzeugten Bio-SNG wird exemplarisch als Endgröße gewählt, anhand derer der Einfluss der Parametervariation untersucht wird (Abb. 5.5).

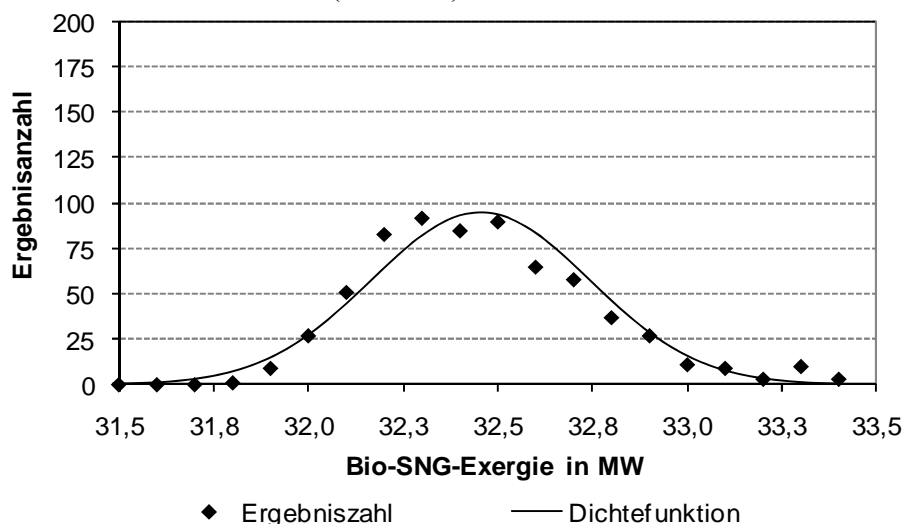


Abb. 5.5 Verteilung der Bio-SNG-Exergie des kurzfristig realisierbaren Anlagenkonzeptes bei stochastischer Variation der Gleichgewichtskonstanten der Wassergas-Shift Reaktionen im Prozessschritt Biomassevergasung und Methanisierung

Es wird deutlich, dass die Abweichung der Exergie des aus der Anlage austretenden Bio-SNG ähnlich wie die stochastisch erzeugten Variationen der Parameter durch eine Gaußsche Normalverteilung angenähert werden kann (Abb. 5.5). Die Abweichung vom Ausgangswert ohne Parametervariation liegt im Durchschnitt bei 0,05 %. Die Standardabweichung der Näherungsfunktion/Dichtefunktion beträgt 0,29 MW (d. h. etwa 0,89 % in Bezug auf den Ausgangswert) und liegt damit deutlich unter dem Wert der Standardabweichung der einzelnen Parametervariationen (5 %). Für die Exergie des austretenden Bio-SNG-Stromes ergibt sich eine maximale positive Abweichung von etwa 0,9 MW (2,8 %) und eine maximale negative Abweichung von 0,6 MW (1,8 %).

Aufgrund der vorliegenden Ergebnisse der Monte Carlo Simulation kann damit festgestellt werden, dass die Veränderung einzelner Prozessparameter auf das Endergebnis der Simulation übertragen wird. Die Veränderung des Endergebnisses gibt die Variation der



Parameter jedoch nur abgeschwächt wieder. Die Simulationsergebnisse unterliegen somit einer geringen Unsicherheit – stellen sich jedoch aufgrund des gedämpften Einflusses einzelner Parameterveränderungen als robust dar.

### **5.3 Langfristig realisierbare Konzeptvarianten**

Die entsprechend der Analysemethodik berechneten energetischen, ökonomischen und ökologischen Kenngrößen der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten werden nachfolgend dargestellt.

#### **5.3.1 Energetische Analyse**

Die Exergieströme, die den langfristig realisierbaren Konzeptvarianten zugeführt werden, betragen in der Summe jeweils 54,0 MW (Abb. 5.6). Davon wird ein Großteil durch den biogenen Brennstoff zugeführt (50,0 MW) und ein geringerer Exergiestrom in Form von elektrischer Energie (4,0 MW). Da anstelle der Ölwäsche ein Teerreformer eingesetzt wird, ist keine RME-Zugabe erforderlich.

In Bezug auf die als Produkte abgeführten Exergien weichen die fünf Konzeptvarianten deutlich voneinander ab. Die Variante ohne Stromerzeugung (VL1) erreicht die höchsten exergetischen Produktausbeuten. Die exergetischen Wirkungsgrade der Konzeptvarianten mit Gasmotor (VL2-GMDKP, VL3-GMORC) ordnen sich im Vergleich dazu etwas niedriger ein. Trotz der druckaufgeladenen Vergasung, die auf den ersten Blick vielversprechend für den Einsatz von Gasturbinen erscheint [Stahl 1999], [Knoef 2005], führen diese Konzeptvarianten (VL4-GTDKP, VL5-GTORC) den geringsten Exergieanteil in Form der Produkte ab. Mit Blick auf die durchzuführenden Optimierungen stellt sich daher für die Konzeptvarianten mit Stromerzeugung die Herausforderung, mindestens den berechneten Wirkungsgrad der Variante ohne Stromproduktion zu erreichen.

Bei der Betrachtung der einzelnen Exergieanteile der Varianten zeigt sich, dass Variante VL1 62 % der zugeführten Exergie in das Hauptprodukt Bio-SNG überführt. Da bei den Varianten mit Stromerzeugung ein Teilgasstrom in elektrische Energie gewandelt wird, ist deren Ausbeute am Hauptprodukt Bio-SNG geringer. Die Varianten mit Gasmotor wandeln 52 % der dem Prozess zugeführten Exergie in SNG um – die Varianten mit Gasturbine nur 27 %. Entsprechend stellen diese Konzeptvarianten etwa 7 bzw. 15 % der den Prozessen zugeführten Exergie in Form von Strom als Nebenprodukt bereit. Wie bei den kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten fällt auch bei den langfristig realisierbaren Varianten zusätzlich Wärme als Nebenprodukt an. Dabei ist der Anteil der zugeführten Exergie, welcher in Wärme gewandelt wird, um so höher je mehr Strom produziert wird.

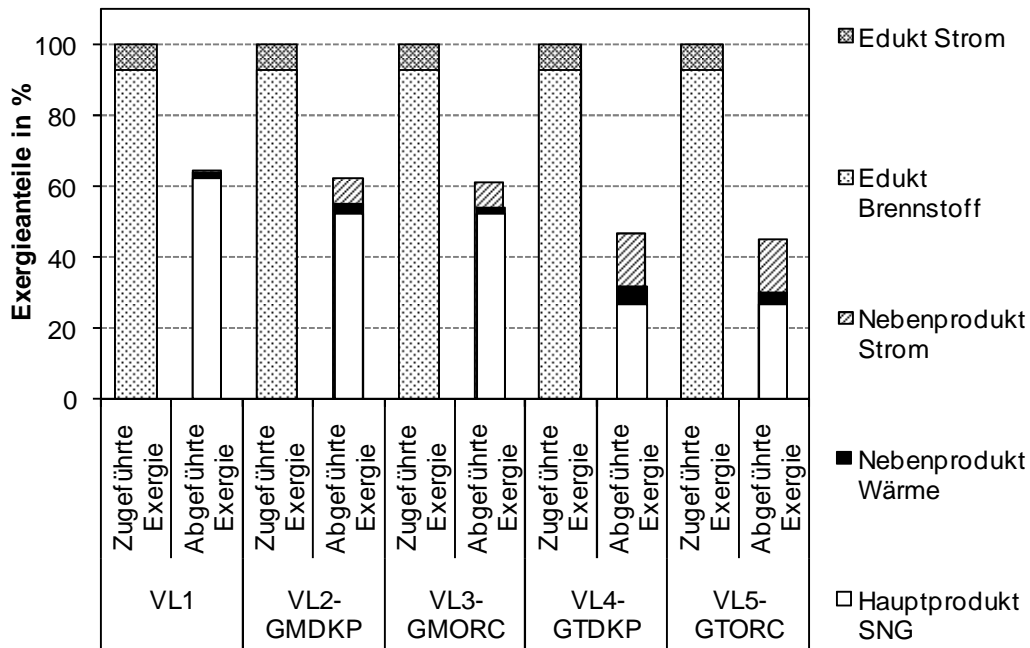


Abb. 5.6 Anteile der zu- und abgeführten Exergieströme an der insgesamt zugeführten Exergie der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

Die exergetischen Wirkungsgrade (Tabelle 5.8) ergeben sich mit Hilfe der aufgeführten Exergienteile (Gleichung (5-1)).

Tabelle 5.8 Übersicht der exergetischen Wirkungsgrade der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

	Einheit	VL1	VL2-GMDKP	VL3-GMORC	VL4-GTDKP	VL5-GTORC
$\eta_{ex}$	%	64,1	61,8	60,8	46,6	44,8

### 5.3.2 Ökonomische Analyse

Als ökonomische Kenngröße werden die Bio-SNG-Gestehungskosten herangezogen. Diese sowie deren verschiedene Kostenanteile und Erlöse stellen sich für die fünf langfristig realisierbaren Konzeptvarianten unterschiedlich dar (Abb. 5.7). Während die Konzeptvariante ohne Stromproduktion (VL1) durch die niedrigsten Gestehungskosten gekennzeichnet ist, weisen die Varianten mit Gasturbine (VL4-GTDKP, VL5-GTORC) die höchsten Gestehungskosten auf. Die Varianten mit Gasmotoren (VL2-GMDKP, VL3GMORC) ordnen sich in Bezug auf ihre Gestehungskosten zwischen diesen Varianten ein, so dass der Startpunkt der Variante ohne Stromproduktion auch hier das Minimalziel der Optimierung der Konzeptvarianten mit Stromproduktion darstellt.

Die kapitalgebundenen Zahlungen und die Kosten, die durch den Einkauf der Biomasse verursacht werden, sind von besonderem Einfluss. Sie haben bei der Konzeptvariante ohne Stromproduktion einen Anteil von etwa 38 bzw. 22 % an den gesamten Bio-SNG-Gestehungskosten. Bei den Varianten mit Gasmotoren und den Varianten mit Gasturbine betragen diese Anteile 44 und 25 % bzw. 54 und 29 %. Die aus dem Verkauf der als Nebenprodukt bereitgestellten Wärme entstehenden Erlöse wirken sich – wie auch beim kurzfristig realisierbaren Anlagenkonzept – reduzierend auf die Bio-SNG-Gestehungskosten aus.

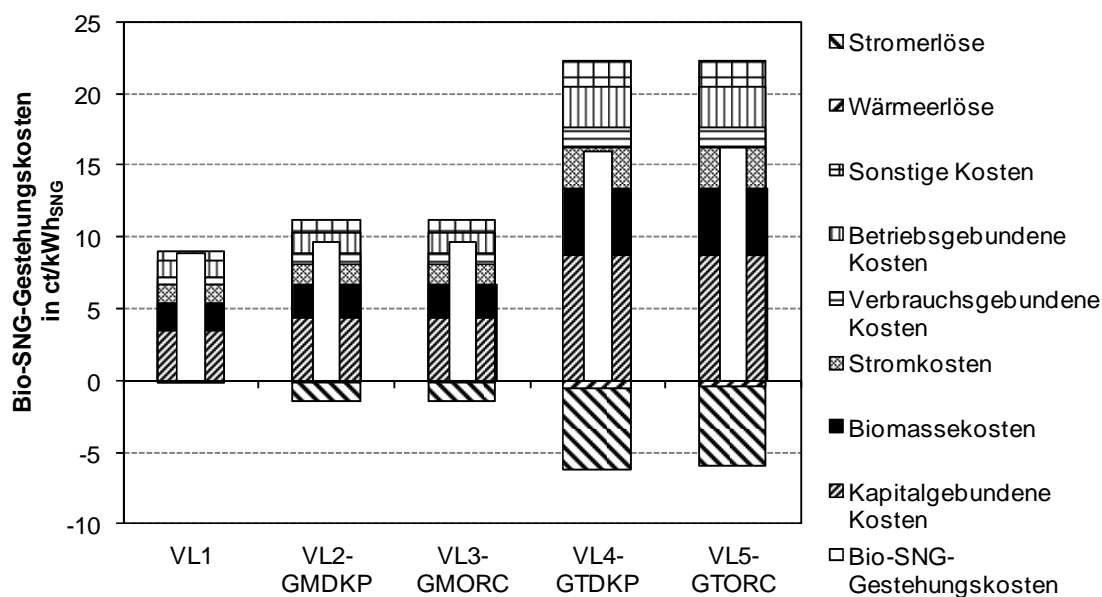


Abb. 5.7 Bio-SNG-Gestehungskosten sowie Kostenanteile und Erlöse der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

Die Bio-SNG-Gestehungskosten (Tabelle 5.9) ergeben sich als Summe der dargestellten Kostenanteile und Erlöse (Gleichung (5-2)).

Tabelle 5.9 Übersicht der Bio-SNG-Gestehungskosten der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

	Einheit	VL1	VL2-GMDKP	VL3-GMORC	VL4-GTDKP	VL5-GTORC
$G_{SNG}$	ct/kWh <sub>SNG</sub>	8,9	9,6	9,7	16,0	16,3

### 5.3.3 Ökologische Analyse

Wie auch bei der Betrachtung der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten können für den definierten Bilanzraum (Kapitel 5.1.1) die Treibhausgasemissionen der langfristig realisierbaren Varianten und die Emissionen in Verbindung verschiedener in den Prozess ein- und austretender Stoff- und Energieströme (z. B. elektrische Energie, Methan) bestimmt werden (Abb. 5.8). Dabei ist insbesondere der Anteil der Emissionen bedeutend, welcher der Deckung des elektrischen Eigenbedarfs der Anlagen zugewiesen werden kann (90 bis 91 % der gesamten Emissionen). Mit Blick auf die voneinander abweichenden Ergebnisse der fünf Konzeptvarianten werden die verhältnismäßig hohen Emissionen, die den Varianten mit Gasturbine (VL4-GTDKP, VL5-GTORC) zugeordnet werden können, sowie die vergleichsweise geringen Emissionen der Variante ohne Stromproduktion (VL1) deutlich. Als Richtwert der Optimierung der Konzeptvarianten mit Stromerzeugung gilt daher der Startpunktwert der Variante ohne Stromerzeugung, da diese hier zu den niedrigsten Emissionen führt.

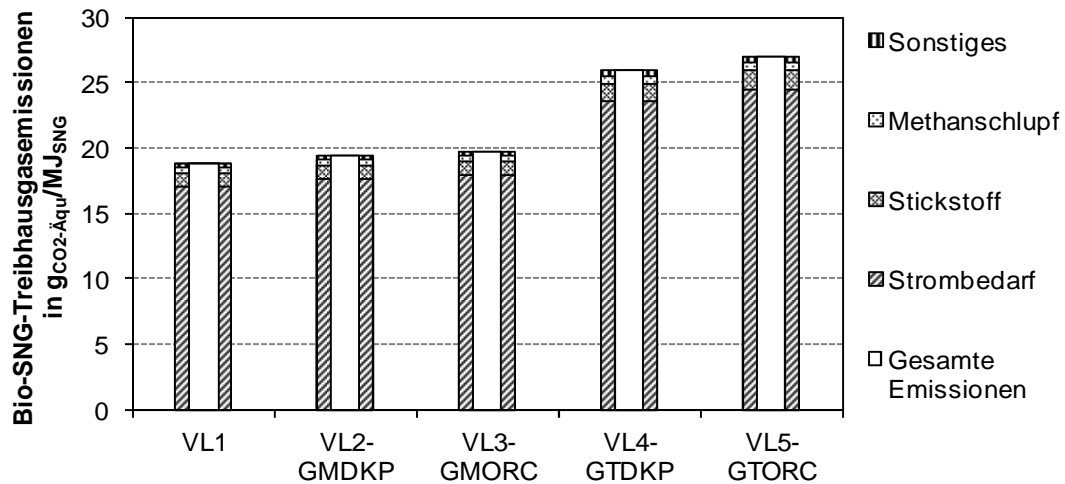


Abb. 5.8 Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten und deren Zuordnung zu Stoff- und Energieströmen

Die Bio-SNG-Treibhausgasemissionen (Tabelle 5.10) ergeben sich aus der Summe der Emissionen, die den zu- und abgeführten Stoff- und Energieströmen zuzuordnen sind (Gleichung (5-3)).

Tabelle 5.10 Übersicht der Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

Einheit	VL1	VL2-GMDKP	VL3-GMORC	VL4-GTDKP	VL5-GTORC
$T_{SNG}$ gCO <sub>2</sub> -Äqu/MJ <sub>SNG</sub>	18,8	19,4	19,7	25,9	26,9

### 5.3.4 Diskussion

**Monte Carlo Simulation.** Da zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme auf Basis der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten – d. h. durch autotherme Vergasung und Heißgasreinigung – derzeit keine Demonstrationsanlage existiert, können die Stoff- und Energieströme der Prozesssimulation nicht mit Messwerten einer Anlage verglichen werden. Zur Bewertung der Kenngrößenberechnung wird daher im Folgenden die Ergebnisunsicherheit der Simulationsrechnung abgeschätzt. Wie in Kapitel 5.2.4 wird dazu die Monte Carlo Simulation angewendet. Durch diese werden zeitgleich verschiedene Parameter der Simulationsrechnung stochastisch verändert. Diese Veränderungen sollen Abweichungen des realen Anlagenbetriebs im Vergleich zur Simulation darstellen. Durch eine Beobachtung der Simulationsergebnisse während der Variation der Parameter kann festgestellt werden, in welcher Weise sich die Parameterveränderungen im Simulationsprogramm fortpflanzen.

Zur Untersuchung der Ergebnisunsicherheit werden exemplarisch die folgenden zwei Parameter der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL1 variiert:

- die Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift Reaktion der Modellierung des Vergasungsreaktors und
- die Gleichgewichtskonstante der Wassergas-Shift Reaktion der Modellierung des Methanisierungsreaktors.

Entsprechend der Untersuchung der kurzfristigen Konzeptvariante (Kapitel 5.2.4) wird die Parametervariation durch zufällig erzeugte Abweichungen vom ursprünglichen Wert des zu variierenden Parameters durchgeführt. Die Abweichungen verteilen sich in Form einer

Gaußschen Normalverteilung mit einer Standardabweichung von 5 % um den Ausgangswert des Parameters. Als Endgröße, anhand derer der Einfluss der Parametervariation untersucht wird, wird der Exergiestrom des Hauptproduktes SNG untersucht (Abb. 5.9).

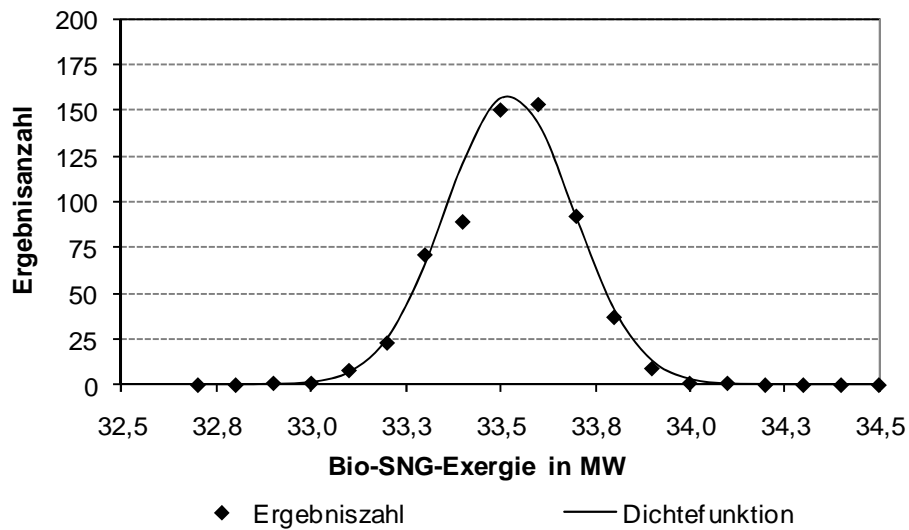


Abb. 5.9 Verteilung der Bio-SNG-Exergie der langfristig realisierbaren Konzeptvariante bei stochastischer Variation der Gleichgewichtskonstanten der Wassergas-Shift Reaktionen im Prozessschritt Biomassevergasung und Methanisierung

Die Monte Carlo Simulation bestätigt die schon bei der Untersuchung der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante (VK1) gewonnene Erkenntnis, dass sich die als Normalverteilung vorgegebenen Parametervariationen bis zum Exergiegehalt des Hauptproduktes fortpflanzen. Dementsprechend kann die durch die Parametervariationen erzeugte Abweichung der Bio-SNG-Exergie ebenfalls durch eine Normalverteilung angenähert werden (Abb. 5.9). Diese Näherungsfunktion besitzt eine Standardabweichung von 0,17 MW (d. h. etwa 0,5 % in Bezug auf den Ausgangswert ohne Parametervariation). Die Parametervariationen (Standardabweichung von 5 %) übertragen sich damit nur in abgeschwächter Form auf das untersuchte Endergebnis. Als maximale positive und negative Abweichungen vom Ausgangswert, d. h. von der Exergie des Bio-SNG, werden 0,5 bzw. 0,7 MW (1,4 bzw. 2,2 %) ermittelt.

Ein von der Simulation abweichendes Betriebsverhalten einzelner realer Anlagenkomponenten spiegelt sich demnach im erzeugten Exergiestrom wider. Wie die Monte Carlo Simulation zeigt, ist dabei jedoch nicht mit einer direkten Fehlerfortpflanzung zu rechnen. Die Parameterabweichungen im Konversionsweg kommen nur gedämpft am Ausgang der Konversionsanlage an.

## 6 Optimierung Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme

Im Folgenden werden die Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme (VK1, VL1) optimiert und die Ergebnisse diskutiert. Die Optimierungen beider Konzeptvarianten basieren auf der in Kapitel 3.3 entwickelten Methodik und werden nacheinander in Bezug auf energetische, ökonomische und ökologische Kriterien durchgeführt. Eine gemeinsame Optimierung der drei Kriterien erfolgt nicht, da nicht ein Pareto-Optimum gefunden, sondern jeweils optimale Werte identifiziert und gegeneinander diskutiert werden sollen. In diesem Rahmen wird – neben der Optimierung des Methanisierungsdruckes – insbesondere die Nutzung der Prozessabwärme verbessert, indem durch die Optimierung mögliche Dampfparameter zur Prozessdampfauskopplung ausgewählt werden.

### 6.1 Rahmenbedingungen und Datengrundlage

Zur Anwendung des entwickelten Optimierungsalgorithmus` muss dieser in Bezug auf das vorliegende Optimierungsproblem angepasst werden. Dies umfasst den Ablauf (d. h. die Durchlaufzahlen des Programms) und die Einstellung der Optimierungsparameter und genetischen Operatoren.

#### 6.1.1 Optimierungsablauf

Der Ablauf der Optimierung folgt dem in Kapitel 3.3.2.1 dargestellten Programmschema. Es enthält jedoch auf das Optimierungsproblem und das Konvergenzverhalten zugeschnittene, übergeordnete Einstellungen, welche insbesondere die unterschiedlichen Durchlaufzahlen des Optimierungsprogramms (z. B. die Anzahl der Optimierungsschritte, die Anzahl der durch Rekombination und Mutation erzeugten Lösungsvektoren) betreffen. Die Festlegung der Einstellungen wird durch eine systematische Vorgehensweise unter Beobachtung des Konvergenzverhaltens durchgeführt (Kapitel 3.3.2.5). Davon ausgehend kann die Konvergenz des Algorithmus in einer der Aufgabenstellung angemessenen Zahl von Optimierungsschritten sichergestellt werden, indem bei einer stochastisch erzeugten Ausgangslösungsmenge von sechs Lösungsvektoren (Vektoren mit Optimierungsparametern) zehn Optimierungsschritte durchgeführt werden. Im Rahmen dieser Optimierungsschritte werden jeweils vier neue Lösungsvektoren erzeugt (zwei durch Rekombination und zwei durch Mutation). Anschließend werden aus der Gesamtheit der auf diese Weise generierten zehn Vektoren die in Bezug auf das Optimierungskriterium besten sechs selektiert und als Grundstock für den nachfolgenden Optimierungsschritt verwendet (Abb. 6.1).

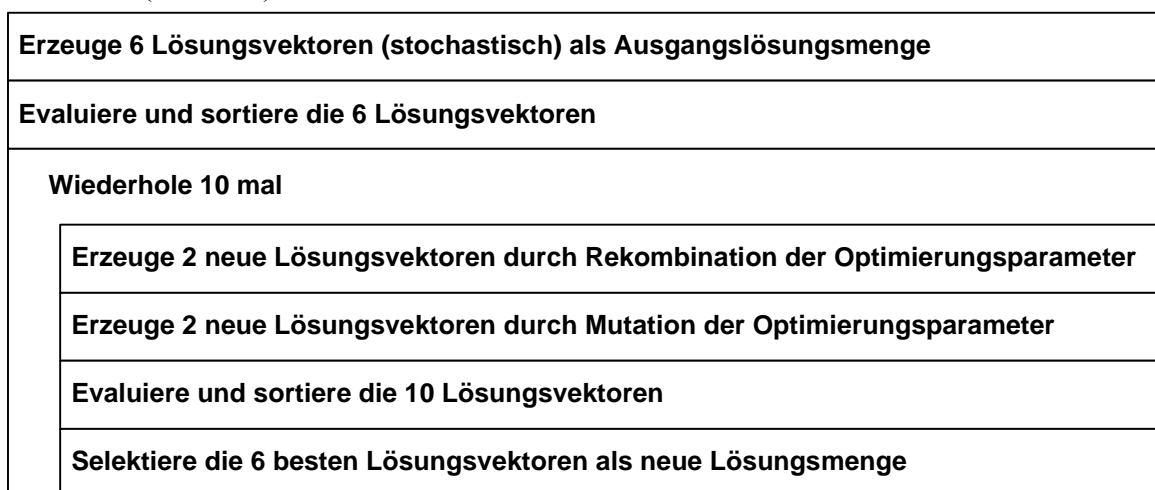


Abb. 6.1 Struktogramm des Optimierungsprogramms mit Durchlaufzahlen

### 6.1.2 Optimierungsparameter

Im Laufe der Optimierung werden ausgewählte Parameter systematisch variiert und so eine Verbesserung des Optimierungskriteriums erzielt. Der Grad der Verbesserung ist dabei vom Einfluss des variierten Parameters auf das Optimierungskriterium abhängig. Somit ist die Auswahl der Optimierungsparameter von entscheidender Bedeutung für das Ergebnis der Optimierung.

Da der Detaillierungsgrad, mit dem das thermodynamische Verhalten des zu optimierenden Prozesses abgebildet wird, jedoch die Gültigkeit und den Einfluss von Parametervariationen bestimmt, sind der Auswahl der Optimierungsparameter Grenzen gesetzt. Das thermodynamische Verhalten der zu optimierende Prozesse wird hier mit einem Fließschemasimulationsprogramm beschrieben (Kapitel 3.2.4), welches für ausgewählte Betriebspunkte mit dem Verhalten realer Prozesse abgeglichen wird. Kinetiken bleiben bei der Modellierung einzelner Prozesskomponenten (z. B. dem Vergaser) unberücksichtigt. Die Möglichkeiten aussagekräftiger Parametervariationen beschränken sich daher in erster Linie auf die Verschaltung respektive Nutzung in den Betriebspunkten auftretender Stoff- und Wärmeströme. Weiterhin können Zustandsgrößen von Komponenten als Optimierungsparameter in Betracht gezogen werden, deren Auswirkungen im Simulationsprogramm durch den realen Anlagenbetrieb überprüft worden sind (z. B. Druck und Temperatur der Methanisierung).

Mit Blick auf die vorliegenden Prozesse zur Erzeugung von SNG und Wärme erweist sich insbesondere die exergetisch effiziente Ausnutzung des Temperaturniveaus von Wärmeströmen als Herausforderung. Die Verwendung von überschüssiger Hochtemperaturwärme zur Dampferzeugung bietet unter der Voraussetzung eines externen Dampfabnehmers eine Möglichkeit, die exergetische, ökonomische und ökologische Prozesseffizienz zu optimieren. Der Fokus der Parametervariationen der Konzepte zur Erzeugung von SNG und Wärme liegt daher auf der Optimierung der Wärmeauskopplung sowie auf der Optimierung des Methanisierungsdruckes, für den an realen Methanisierungsanlagen Gleichgewichtsverhalten nachgewiesen wurde [Seemann 2006]. Die untersuchten Optimierungsparameter (Tabelle 6.1) werden im Folgenden erläutert.

Tabelle 6.1 Übersicht der Optimierungsparameter bei der Optimierung der Konzeptvarianten VK1 und VL1 zur Erzeugung von SNG und Wärme

Größe	Einheit	Platzierung im Lösungsvektor
Sattdampfdruck $p_{Dampf}$	bar	Zeile 2
Stoffmengenstrom Dampf $\dot{n}_{Dampf}$	mol/s	Zeile 3
Temperaturspanne Dampfüberhitzung $\Delta T_{Überh}$	K	Zeile 4
Methanisierungsdruck $p_{Meth}$	bar	Zeile 5

**Sattdampfdruck.** Der Sattdampfdruck  $p_{Dampf}$  bezeichnet den Druck des Dampfes, der neben dem Hauptprodukt SNG als Nebenprodukt erzeugt wird. Mit steigendem Druck nimmt der Exergiegehalt eines Dampfstromes zu, jedoch ebenfalls die zur Dampferzeugung erforderliche Wärmemenge. Somit ist eine Steigerung des Sattdampfdruckes bei konstanter zur Verfügung stehender Wärmemenge mit einer Reduzierung des produzierbaren Dampfstoffmengenstromes verbunden. Der Sattdampfdruck ist als kontinuierlich veränderbare Prozessvariable definiert, d. h. er kann einen beliebigen Wert innerhalb der vorgegebenen Grenzen (Tabelle 6.2) einnehmen. Der Wert wird vom Optimierungsalgorithmus generiert und in einem Lösungsvektor an das

Simulationsprogramm weitergegeben. Zur Überprüfung, ob die zur Verfügung stehende Prozessabwärme zur Dampfproduktion mit den optimierten Dampfparametern ausreichend ist, wird die in Kapitel 3.2.4.4 beschriebene Methodik zur Wärmeintegration angewendet.

**Stoffmengenstrom Dampf.** Der Stoffmengenstrom des als Nebenprodukt erzeugten Dampfes  $\dot{n}_{Dampf}$  ist ebenfalls als kontinuierlich veränderbare Prozessvariable definiert, die einen beliebigen Wert innerhalb der vom Anwender festgelegten Grenzen annehmen kann (Tabelle 6.2). Der Stoffmengenstrom Dampf, der mit Hilfe einer zur Verfügung stehenden Wärmemenge erzeugt werden kann, ist in starkem Maße von den Dampfparametern (Sattdampfdruck, Dampftemperatur) abhängig.

**Temperaturspanne Dampfüberhitzung.** Die Temperaturspanne der Dampfüberhitzung  $\Delta T_{Überh}$  gibt die Temperaturdifferenz zwischen der Dampftemperatur nach der Sattdampfüberhitzung und der zum Sattdampfdruck gehörigen Sattdampftemperatur an. Dabei nimmt die spezifische Exergie eines Dampfstromes mit der Dampftemperatur zu. Die Dampfüberhitzung erfordert jedoch zusätzliche Energie auf einem ausreichend hohen Temperaturniveau. Der erzeugbare Stoffmengenstrom Dampf sinkt dementsprechend mit steigender Dampftemperatur und gleichbleibender zur Verfügung stehender Wärmemenge. Wie auch der Sattdampfdruck und der Stoffmengenstrom des Dampfes, ist auch die Temperaturspanne der Dampfüberhitzung als kontinuierlich veränderbare Prozessvariable definiert, die einen beliebigen Wert innerhalb der vorgegebenen Grenzen annehmen kann (Tabelle 6.2).

**Methanisierungsdruck.** Der Methanisierungsdruck  $p_{Meth}$  ist der Druck, mit dem das gereinigte Vergasungsgas in den Methanisierungsreaktor eintritt. Da der Methanisierungsreaktor isobar modelliert ist (Anhang 1.3.15), entspricht dieser Druck auch dem Reaktionsdruck der Methanisierung. Der Druck beeinflusst neben dem Stromverbrauch der Bio-SNG-Anlage aufgrund der druckabhängigen Methanisierungsreaktion auch die Umsatzraten der Methanisierung.  $p_{Meth}$  ist als kontinuierlich veränderbare Prozessvariable implementiert, der jedoch eine untere und eine obere Grenze gesetzt ist (Tabelle 6.2). Aufgrund der unterschiedlichen Vergasungsdrücke der kurzfristig und langfristig realisierbaren Konzeptvarianten ist die Optimierung des Methanisierungsdruckes bei beiden Konzeptansätzen jedoch verschieden:

- Bei der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 ist die Kompression vor der Methanisierung zweistufig ausgeführt. Kompressor 1 verdichtet das Gas nach dem zweiten Ölwäschersystem zur Teerentfernung auf 1,6 bar. Anschließend verdichtet Kompressor 2 das Gas auf den Methanisierungsdruck. Zwischen beiden Kompressorstufen wird das Gas auf 319 K abgekühlt. Der Ausgangsdruck von Kompressor 2 entspricht somit dem Optimierungsparameter, der zwischen den Grenzen 1,6 und 10 bar vorgegeben wird. Bei der Optimierung des Methanisierungsdruckes wird den Simulationsrechnungen ein Gasenddruck/Einspeisedruck der Bio-SNG-Anlage von 16 bar zu Grunde gelegt, der – mit Rücksicht auf eine geringe Lösungsmittelumlaufzeit und damit verbunden einen geringeren Wärmebedarf zur Aminregeneration bei gehobenen Gasdrücken [Kohl 1997] – durch einen Kompressor 3 nach der Methanisierung und vor der Aminwäsche eingestellt wird. Wird der Ausgangsdruck von Kompressor 2 im Zuge der Prozessoptimierung auf seinen Minimalwert von 1,6 gesetzt, müsste Kompressor 3 zum Erreichen des Gasnetzdruckes von 16 bar ein Druckverhältnis von 10 ohne Zwischenkühlung bewältigen. Um dies zu vermeiden, wird für den Fall der Minimierung des Ausgangsdruckes von Kompressor 2 ein optionaler



Kompressor mit einem Verdichtungsverhältnis von 2,5 direkt vor Kompressor 3 aktiviert (Abb. 6.2). Auf diese Weise können verschiedene Druckniveaus vor und nach der Methanisierung rechnergestützt analysiert und Zwischenkühlungen bei großen Verdichtungsverhältnissen berücksichtigt werden.

- Bei der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL1 ist die Kompression auf den Gasnetzdruck von 16 bar aufgrund der druckaufgeladenen Vergasung bei 10 bar weniger komplex. Da lediglich ein Druckverhältnis von 1,6 zu bewältigen ist, kann auf Kompressor 1 und den optionalen Kompressor nach der Methanisierung (Abb. 6.2) verzichtet werden. Das Optimierungsprogramm regelt somit den Ausgangsdruck eines einzelnen Kompressors vor der Methanisierung. Wird der Gasnetzdruck von diesem Kompressor nicht erreicht, wird das Gas analog zum kurzfristig realisierbaren Konzept nach der Methanisierung und vor der Aminwäsche komprimiert.

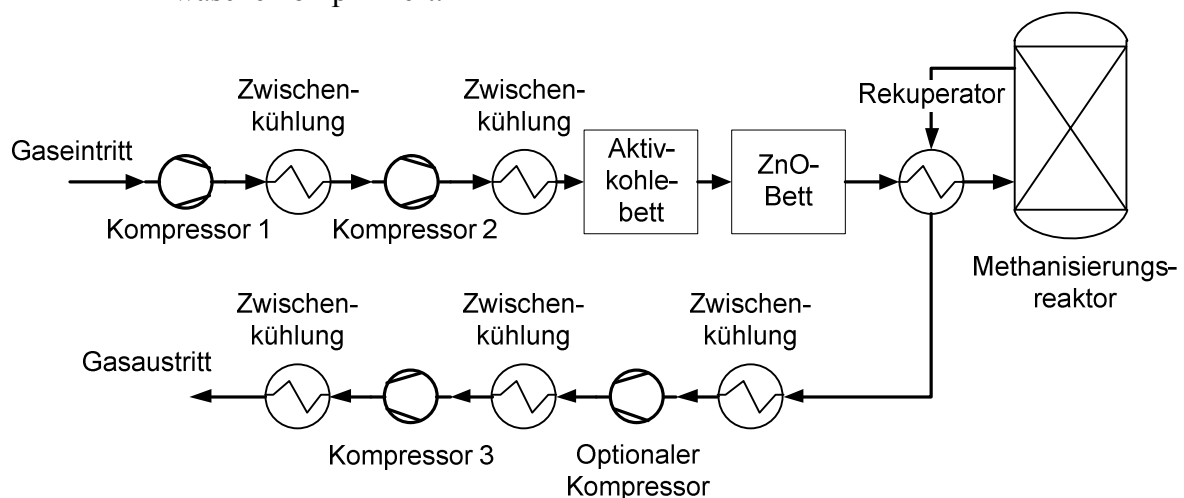


Abb. 6.2 Verschaltung der Kompressoren bei der Optimierung des Methanisierungsdruckes

Da die beiden zu analysierenden Konzeptvarianten VK1 und VL1 durch unterschiedliche Wärmeströme und Prozessdrücke gekennzeichnet sind, müssen für die Optimierungsdurchläufe jeweils an die Varianten angepasste Ober- und Untergrenzen der Optimierungsparameter festgelegt werden (Tabelle 6.2).

Tabelle 6.2 Unter- und Obergrenzen der verwendeten Optimierungsparameter bei der Optimierung der Konzeptvarianten VK1 und VL1 zur Erzeugung von SNG und Wärme

		$p_{\text{Dampf}}$ in bar	$\dot{n}_{\text{Dampf}}$ in mol/s	$\Delta T_{\text{Überh}}$ in K	$p_{\text{Meth}}$ in bar
VK1	Untergrenze	0	0	0	1,6
	Obergrenze	80	150	300	10
VL1	Untergrenze	0	0	0	10
	Obergrenze	80	150	300	16

### 6.1.3 Genetische Operatoren

Die Anwendung genetischer Operatoren und die damit verbundene Variation der Optimierungsparameter bildet den Grundstein evolutionärer Algorithmen. Zur

Durchführung der Optimierung werden die in Kapitel 3.3.2 beschriebenen Operatoren (Mutation, Rekombination, Selektion) in Bezug auf das Optimierungsproblem eingestellt (Kapitel 3.3.2.5). Die Einstellungen werden im Folgenden dargestellt.

**Mutation.** Bei jedem Optimierungsschritt werden zwei neue Lösungsvektoren durch Mutation der Parameter des vielversprechendsten Lösungsvektors des vorherigen Optimierungsschrittes erzeugt. Die Gestaltung des Mutationsoperators des vorliegenden Optimierungsproblems wird systematisch in Abhängigkeit des Konvergenzverhaltens des Algorithmus durchgeführt (Kapitel 3.3.2.5). Dabei kann mit Hilfe einer Steuerung der Schrittweiten, die mit zunehmendem Fortschreiten der Optimierung (zunehmenden Optimierungsschritten) stufenweise reduziert werden (Tabelle 6.3), die Konvergenz des Algorithmus beschleunigt werden. Um die Konvergenzgeschwindigkeit weiterhin zu erhöhen, wird die Parametervariation durch den Mutationsoperator bei jedem Optimierungsschritt jeweils ausschließlich auf die Parameter des vielversprechendsten Lösungsvektors nicht aber auf die Parameter anderer Lösungsvektoren des vorherigen Optimierungsschrittes angewendet.

Tabelle 6.3 Schrittweiten des Mutationsoperators bei der Optimierung der Konzeptvarianten VK1 und VL1 zur Erzeugung von SNG und Wärme

Optimierungsparameter	Schrittweite von Optimierungsschritt 1 – 4	Schrittweite von Optimierungsschritt 5 – 8	Schrittweite von Optimierungsschritt 9 – 12
$p_{Dampf}$	12,00 bar	5,00 bar	5,00 bar
$\dot{n}_{Dampf}$	30,00 mol/s	20,00 mol/s	20,00 mol/s
$\Delta T_{Überh}$	60,00 K	12,50 K	12,50 K
$p_{Meth}$	1,25 bar	1,25 bar	1,25 bar

**Rekombination.** Aus den selektierten Lösungsvektoren des vorherigen Optimierungsdurchlaufs werden bei jedem Optimierungsschritt zwei neue Lösungsvektoren durch Rekombination erzeugt. Der zur Optimierung angewendete Rekombinationsoperator folgt der so genannten multi-sexuellen Rekombinationsvorschrift. Dies bedeutet, die Parameter der pro Optimierungsdurchlauf/Optimierungsschritt (Generation) durch Rekombination generierten Lösungsvektoren werden stochastisch mit Hilfe eines Zufallsgenerators aus den Parametern der sechs besten Lösungsvektoren des vorherigen Optimierungsdurchlaufs ausgewählt. Die multi-sexuelle Rekombination hat gegenüber der bisexuellen Rekombination den Vorteil, dass der Lösungsraum in einem weiteren Bereich durchsucht und so die Fokussierung des Algorithmus auf ein einzelnes lokales Optimum vermieden wird.

**Selektion.** Der Selektionsoperator, der die Startlösungsvektoren des nachfolgenden Optimierungsdurchlaufs aus dem Pool des vorangehenden Optimierungsdurchlaufs auswählt, legt dieser Auswahl das jeweilige Optimierungskriterium (z. B. den exergetischen Wirkungsgrad) zu Grunde. Bei jeder Selektion werden auf diese Weise die sechs besten Lösungsvektoren ausgewählt.

## 6.2 Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten

Auf Basis der vorangehend geschilderten Einstellungen des Optimierungsalgorithmus werden im Folgenden die Ergebnisse der Optimierungen der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante zur Erzeugung von SNG und Wärme (VK1) vorgestellt und diskutiert.

### 6.2.1 Energetische Optimierung

Durch die energetische Optimierung der Konzeptvariante zur Erzeugung von SNG und Wärme (VK1) kann ein exergetischer Wirkungsgrad von 64,7 % erreicht werden (Abb. 6.3). Im Vergleich zum Startpunkt der Optimierung, der durch einen exergetischen Wirkungsgrad von 62,9 % gekennzeichnet ist, entspricht dies einer Wirkungsgradsteigerung von 1,8 % (absolut). Diese Wirkungsgradsteigerung ist auf die Nutzung von Hochtemperaturwärme zurückzuführen, mit der im Gegensatz zum Startpunkt der Optimierung Hochdruckdampf erzeugt wird. Neben dem exergetischen Optimierungspotenzial durch die Nutzung von in der betrachteten Bio-SNG-Konzeptvariante vorhandener Hochtemperaturwärme profitiert der optimierte Prozess von einer geringfügig höheren Hauptproduktausbeute sowie einem niedrigeren Stromverbrauch durch die Optimierung des Methanisierungsdruckes.

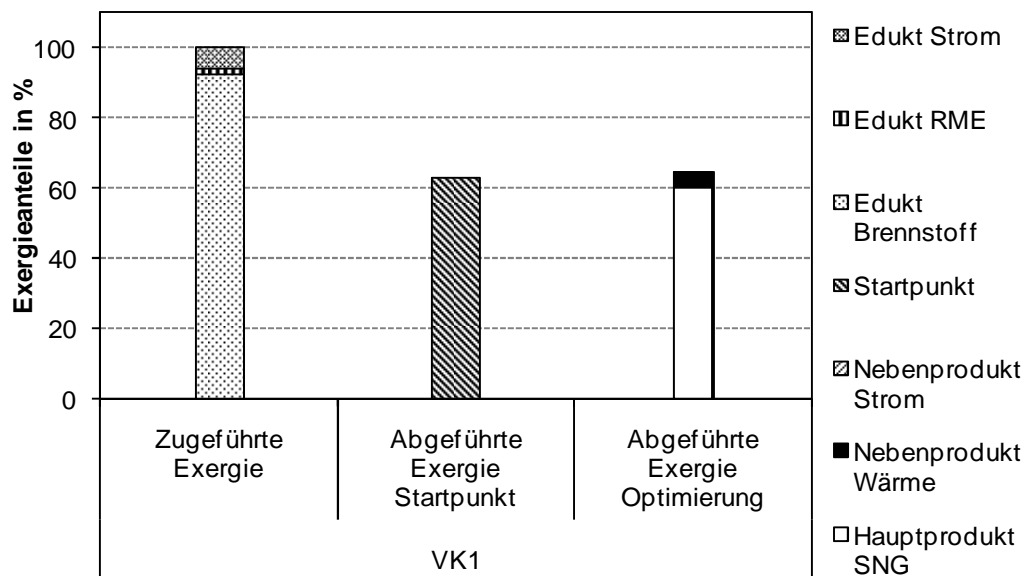


Abb. 6.3 Anteile der zu- und abgeführten Exergieströme an der insgesamt zugeführten Exergie der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 nach der energetischen Optimierung

### 6.2.2 Ökonomische Optimierung

Durch die ökonomische Optimierung der Konzeptvariante VK1 werden Bio-SNG-Gestehungskosten von 9,1 ct/kWh<sub>SNG</sub> erreicht (Abb. 6.4). Unter Berücksichtigung der Gestehungskosten des Startpunktes der Optimierung von 9,3 ct/kWh<sub>SNG</sub> ergibt sich eine Verringerung der Gestehungskosten von 0,2 ct/kWh<sub>SNG</sub>. Entsprechend der energetischen Optimierung ist die verbesserte Nutzung von Hochtemperaturwärme zur Bereitstellung von Hochdruckdampf, der als Nebenprodukt verkauft wird, die Ursache der Gestehungskostenreduktion.

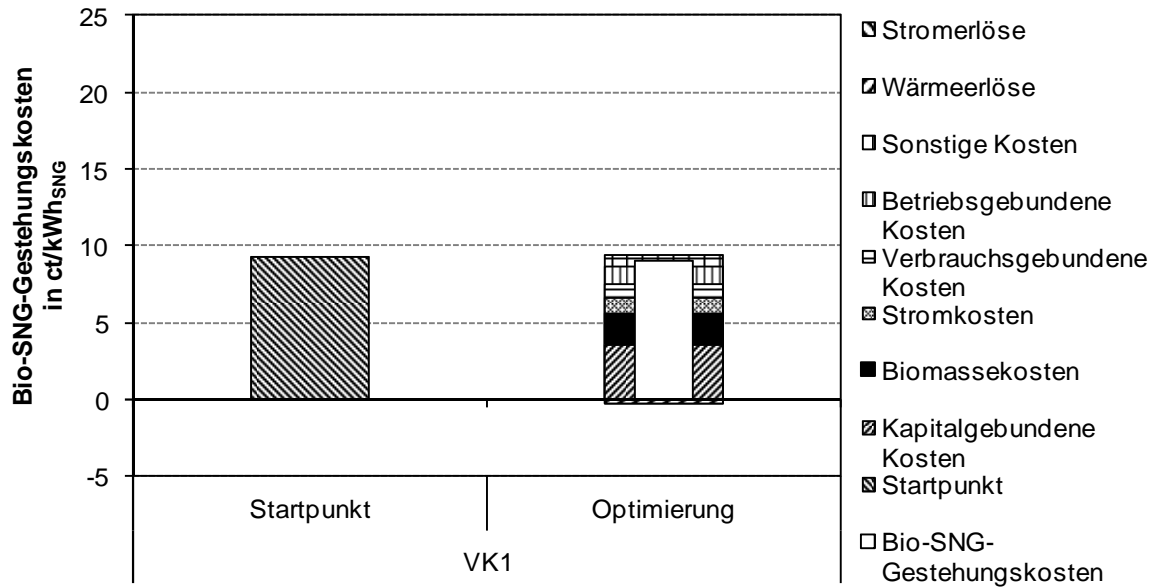


Abb. 6.4 Bio-SNG-Gestehungskosten sowie Kostenanteile und Erlöse der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 nach der ökonomischen Optimierung

### 6.2.3 Ökologische Optimierung

Die ökologische Optimierung der Konzeptvariante VK1 führt zu Bio-SNG-Treibhausgasemissionen von 17,0 g<sub>CO<sub>2</sub>-Äqu</sub>/MJ<sub>SNG</sub> (Abb. 6.5). Dies entspricht einer Senkung der Emissionen von 0,9 g<sub>CO<sub>2</sub>-Äqu</sub>/MJ<sub>SNG</sub> im Vergleich zum Startpunkt der Optimierung. Gemäß der Berechnungsmethodik der Treibhausgasemissionen (Kapitel 3.2.3.3) wird dem Nebenprodukt Wärme ein größerer Anteil der insgesamt anfallenden Emissionen zugeordnet je höher dessen Exergiestrom ist. Die Steigerung der Exergie des Nebenproduktes Wärme durch eine optimierte Nutzung von Hochtemperaturwärme ist daher, wie auch bei der energetischen und ökonomischen Optimierung, der Grund für die Reduktion der Treibhausgasemissionen.

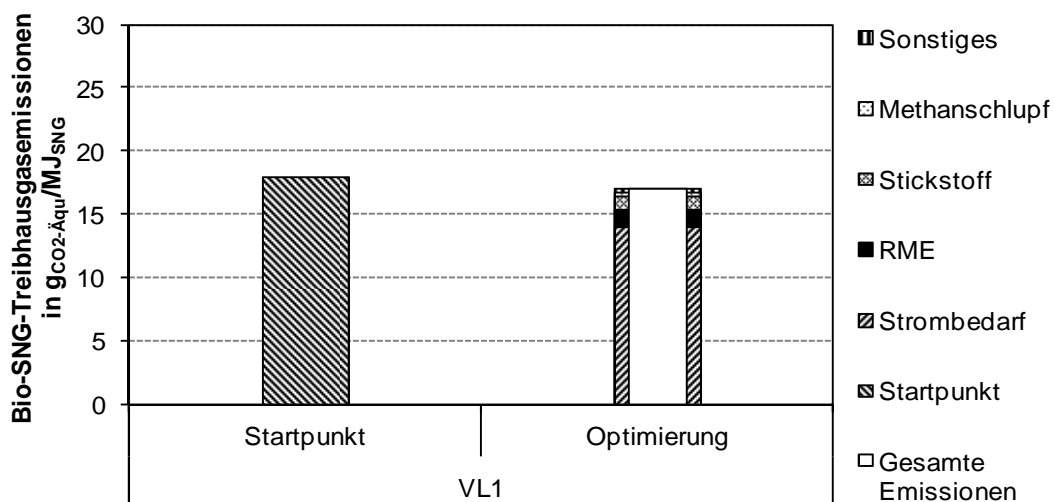


Abb. 6.5 Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 und deren Zuordnung zu Stoff- und Energieströmen nach der ökologischen Optimierung

### 6.2.4 Diskussion

**Verlauf der Optimierung.** Zur Diskussion des Optimierungsverlaufs soll exemplarisch der Verlauf der Optimierung nach dem exergetischen Wirkungsgrad herangezogen werden (Abb. 6.6). Dieser zeigt die Verbesserung bzw. Entwicklung der vier Optimierungsparameter (Sattdampfdruck, Temperaturspanne Dampfüberhitzung, Stoffmengenstrom Dampf, Methanisierungsdruck) sowie den exergetischen Wirkungsgrad während der Optimierung über 10 Optimierungsschritte. Der Verlauf verdeutlicht, dass der exergetische Wirkungsgrad durch die Optimierung stetig verbessert wird. Sowohl der Sattdampfdruck als auch die Temperaturspanne der Dampfüberhitzung nähern sich im Laufe der Optimierung der vorgegebenen Obergrenze an. Der Stoffmengenstrom des Dampfes nimmt einen von den Dampfparametern abhängigen Wert an, der aufgrund der Zunahme dieser Parameter jedoch nicht der vorgegebenen Obergrenze entspricht. Der Methanisierungsdruck sinkt im Zuge der Optimierung auf seinen Minimalwert ab.

Der Algorithmus konvergiert nach acht Optimierungsschritten. Dabei bleiben der Methanisierungsdruck und die Temperaturspanne der Dampfüberhitzung bereits nach zwei Optimierungsschritten unverändert. Der Sattdampfdruck weist nach drei Optimierungsschritten lediglich minimale Veränderungen auf und der Stoffmengenstrom des Dampfes verändert sich bis zum achten Optimierungsschritt, da sein Optimum von der Temperaturspanne der Dampfüberhitzung und dem Sattdampfdruck abhängig ist.

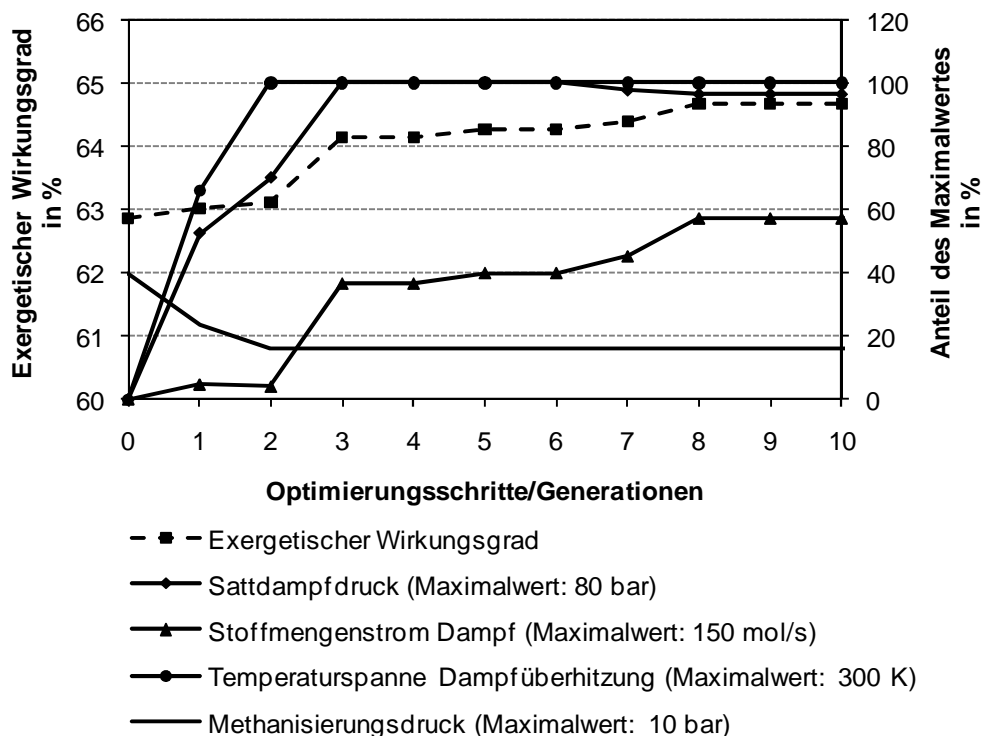


Abb. 6.6 Verlauf der Optimierung des exergetischen Wirkungsgrades der kurzfristig realisierbaren Variante VK1 zur Erzeugung von SNG und Wärme

**Optimierungsparameter.** Bei der Betrachtung der Optimierungsparameter (Abb. 6.7) wird deutlich, dass deren Werte nach der energetischen und ökologischen Optimierung nahezu identisch sind. Der Sattdampfdruck und die Temperatur, um die der erzeugte Dampf überhitzt wird, nähern sich den maximalen Werten an. Der Stoffmengenstrom des Dampfes nimmt bei beiden Optimierungen einen Wert an, der etwa 60 % des vorgegebenen Maximalwertes entspricht, und der Methanisierungsdruck sinkt im Verlauf der Optimierung auf seinen Minimalwert von 1,6 bar (16 % des Maximalwertes von

10 bar) ab. Aus thermodynamischer Sicht ist die Übereinstimmung der Parameter nach der Optimierung mit ihren Minimal- und Maximalwerten offensichtlich: Die Exergie eines Dampfstromes ist um so größer, je höher sein Druck und seine Temperatur sind. Die exergetischen Verluste bei der Methanisierung sind um so niedriger, je geringer der mit dem Reaktionsdruck einhergehende Kohlenstoffmonoxidumsatz ist. Die Wahl der Minimal- und Maximalwerte ist demnach von besonderer Bedeutung und muss an die zu optimierende Anlage (z. B. an die vorhandenen Abwärmertemperaturen) angepasst werden. Die Optimierungsparameter des in Bezug auf die Gesteungskosten optimierten Konzeptes unterscheiden sich von denen der Optimierungen nach energetischen und ökonomischen Kriterien. Der Unterschied liegt in den Rahmenannahmen zur Berechnung der Gesteungskosten begründet, die den Erlös für eine Kilowattstunde Dampf mit 0,04 € festsetzen. Aus diesem Grund ist für die Optimierung der Bio-SNG-Gesteungskosten nicht der Exergiegehalt, sondern die Energiemenge des Dampfes entscheidend. Der Einfluss des Dampfpreises auf das Optimierungsergebnis wird in Abb. 6.9 diskutiert.

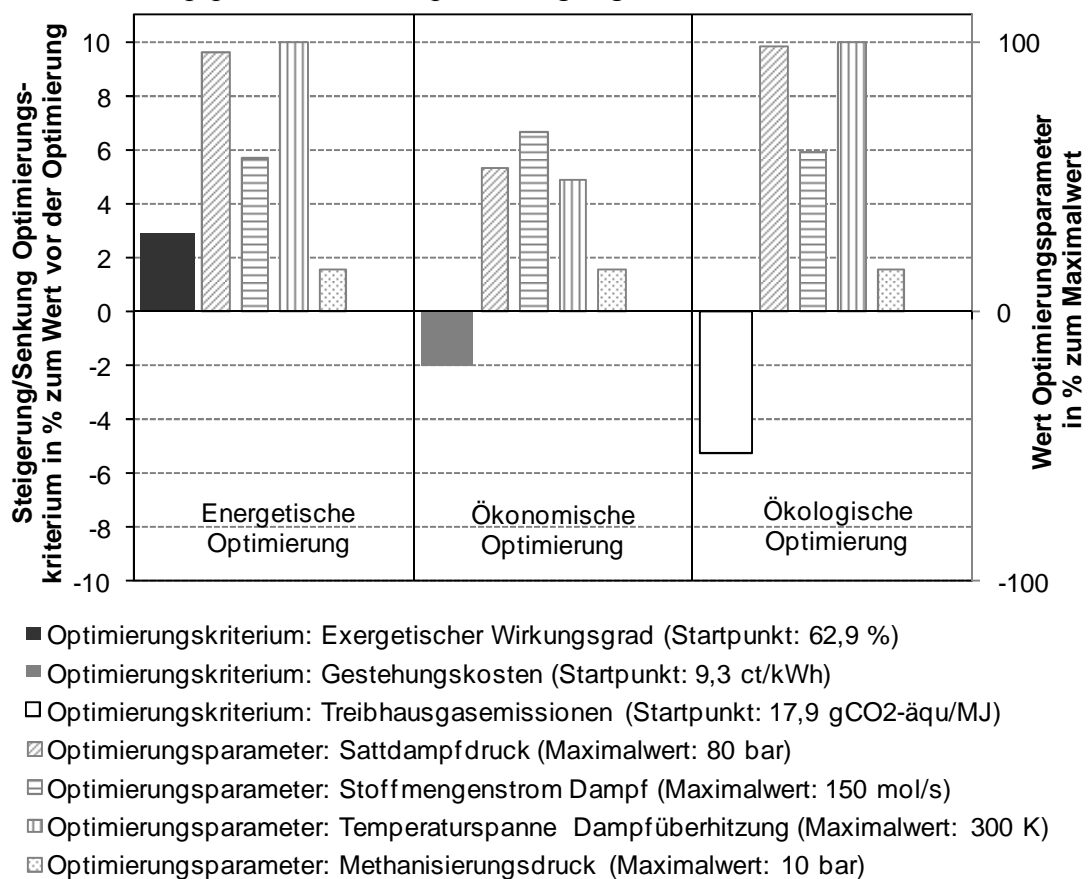


Abb. 6.7 Optimierungskriterium und -parameter der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 zur Erzeugung von SNG und Wärme nach erfolgter Optimierung

**Sensitivität exergetischer Wirkungsgrad.** Der exergetische Wirkungsgrad kann durch die Optimierung um etwa 3,0 % (relativ) im Vergleich zum Ursprungswert bzw. zum Startpunkt der Optimierung gesteigert werden.

Der untersuchte Prozess weist diesen optimalen exergetischen Wirkungsgrad auf, wenn der Sattdampfdruck maximiert wird. Ein hoher Sattdampfdruck wirkt sich insofern positiv auf den exergetischen Wirkungsgrad aus, als dass der Exergiegehalt eines Dampfstromes mit steigendem Druck (und bei konstanter Temperatur) zunimmt. Da die erforderliche

Wärmemenge zur Dampferzeugung mit steigenden Sattdampfdrücken jedoch ebenfalls ansteigt, sind der Maximierung der Dampfdrücke Grenzen gesetzt.

Die Temperaturspanne der Dampfüberhitzung wird im Zuge der Optimierung ebenfalls maximiert und nähert sich der vorgegebenen Obergrenze an. Die Ursache liegt wiederum in dem Exergiegehalt des Dampfes, der mit steigender Temperatur (und bei konstantem Sattdampfdruck) zunimmt. Eine Steigerung der Dampfüberhitzung erfordert jedoch hinreichende Abwärmepemperaturen und ist somit nicht unbegrenzt möglich.

Der Stoffmengenstrom des Dampfes nimmt den Wert an, der bei den optimalen Dampfparametern (Druck und Temperatur) unter Berücksichtigung der zur Verfügung stehenden Wärme maximal erreicht werden kann.

Die maximale Wirkungsgradsteigerung kann bei minimalem Methanisierungsdruck erzielt werden (Abb. 6.8). Dies liegt darin begründet, dass der Strombedarf der Gaskompression vor der Methanisierung höher ist als nach der Methanisierung, da die Methanisierungsreaktionen bei Volumenkontraktion ablaufen und der zu verdichtende Gasstrom durch die Methanisierung reduziert wird. Auch nehmen die exergetischen Verluste bei der Methanisierungsreaktion mit sinkenden Drücken ab, da weniger Kohlenstoffmonoxid umgesetzt wird. Auf diese Weise bleibt ein höherer Anteil an chemischer Energie im Gas enthalten und weniger Methanisierungswärme wird frei.

Bei der Variation des Methanisierungsdruckes (Abb. 6.8) wird zudem deutlich, dass die Steigerung des Wirkungsgrades durch die Einstellung des Methanisierungsdruckes (0,2 % relativ) im Gegensatz zur Wirkungsgradsteigerung durch Dampferzeugung (2,8 % relativ) gering ausfällt.

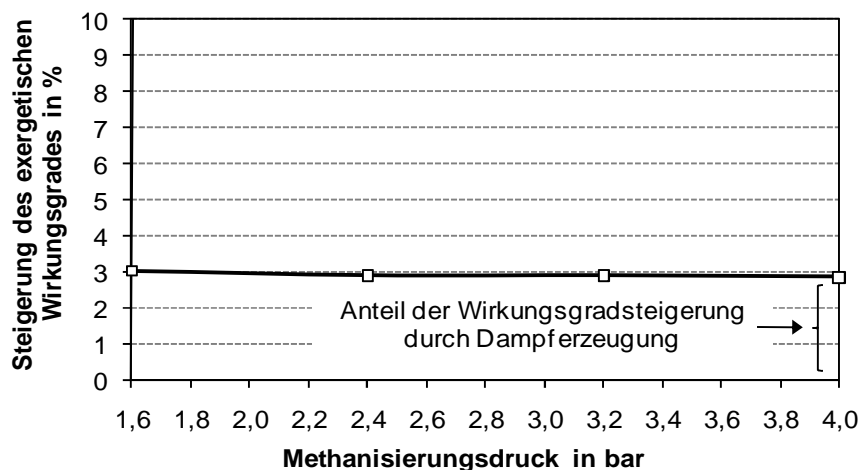


Abb. 6.8 Veränderung des exergetischen Wirkungsgrades bei Variation des Methanisierungsdruckes der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 zur Erzeugung von SNG und Wärme nach erfolgter Optimierung

**Sensitivität Bio-SNG-Gestehungskosten.** Durch die ökonomische Optimierung kann eine Reduktion der Gestehungskosten von etwa 2,3 % bei einem Dampfverkaufspreis von 0,04 €/kWh erreicht werden (Abb. 6.7). Dieses Ergebnis ist durch die Rahmenannahmen (Tabelle 5.2) begründet. Dabei ist insbesondere der Dampfverkaufspreis von Bedeutung, da die Erzeugung und der Verkauf von Prozessdampf einen wesentlichen Hebel der ökonomischen Optimierung darstellen.

Die Variation des Dampfverkaufspreises (Abb. 6.9) verdeutlicht die Spreizung des Optimierungspotenzials. Demnach kann durch eine Dampferzeugung keine Reduktion der Gestehungskosten erreicht werden, sofern der Dampfverkaufspreis gleich oder niedriger dem Fernwärmepreis ist. Eine Dampfproduktion ist demnach nur sinnvoll, wenn der Dampfpreis über dem Fernwärmepreis liegt. Mit steigendem Dampfverkaufspreis erhöht

sich das Optimierungspotenzial. Bspw. können bei einem Dampfverkaufspreis von 0,05 €/kWh die Gestehungskosten um 4,2 % reduziert werden.

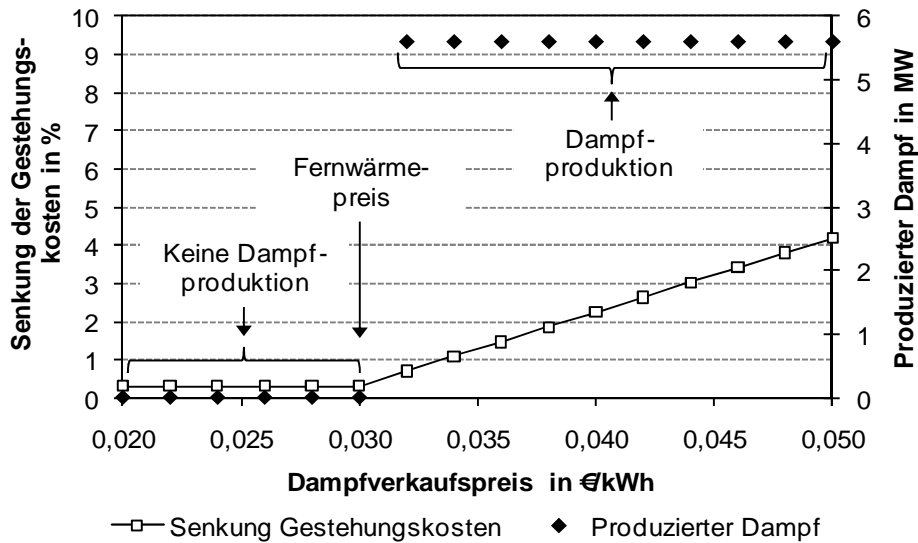


Abb. 6.9 Senkung der Bio-SNG-Gestehungskosten bei Variation des Dampfverkaufspreises der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 zur Erzeugung von SNG und Wärme nach erfolgter Optimierung

**Sensitivität Bio-SNG-Treibhausgasemissionen.** Die Treibhausgasemissionen werden durch die Optimierung um 5,7 % verringert (Abb. 6.7). Ausschlaggebend für die Optimierung ist dabei der Exergiegehalt der als Nebenprodukt bereitgestellten Wärme und des erzeugten Dampfes. Es ist ersichtlich, dass die Erzeugung von Dampf hoher Sattdampfdrücke und Temperaturen im Vergleich zur Fernwärmebereitstellung auf einem Temperaturniveau von 130 °C einen deutlichen Vorteil in Bezug auf die Reduzierung der Treibhausgasemissionen bietet (Abb. 6.10).

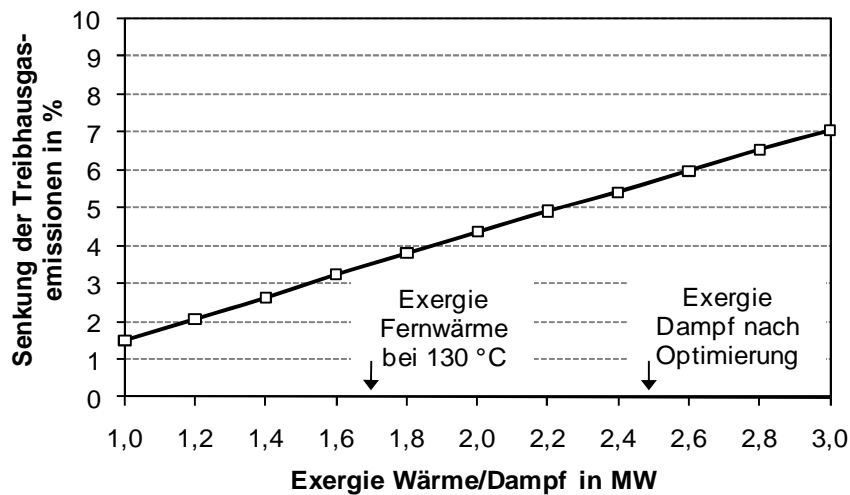


Abb. 6.10 Senkung der Bio-SNG-Treibhausgasemissionen in Abhängigkeit der Exergie der Nebenprodukte Dampf und Wärme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 zur Erzeugung von SNG und Wärme nach erfolgter Optimierung

### 6.3 Langfristig realisierbare Konzeptvarianten

Nach den Ergebnissen der Optimierung der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante werden nachfolgend die Ergebnisse der langfristig realisierbaren Variante zur Erzeugung von SNG und Wärme (VL1) dargestellt und diskutiert.



### 6.3.1 Energetische Optimierung

Entsprechend der kurzfristigen Konzeptvariante kann der exergetische Wirkungsgrad der langfristigen Variante durch die Optimierung gesteigert werden. Die Variante VL1 weist nach der Optimierung einen Wirkungsgrad von 65,3 % auf (Abb. 6.11). Verglichen mit dem Startpunkt der Optimierung bedeutet dies eine Steigerung des Wirkungsgrades von 64,1 % um 1,2 % (absolut). Die Erzeugung von Hochdruckdampf unter Ausnutzung der zur Verfügung stehenden Hochtemperaturwärme sowie die Optimierung des Methanisierungsdruckes sind auch hier die Ursachen für die Wirkungsgradsteigerung. Aufgrund der unter Druck arbeitenden Vergasung bietet die Optimierung des Methanisierungsdruckes jedoch nur ein begrenztes Potenzial. Auch die Prozessabwärmemenge ist bei der eingesetzten Heißgasreinigung im Gegensatz zu Konzeptvarianten mit nasser Gasreinigung (Kapitel 6.2.1) reduziert. Die Wirkungsgradsteigerung fällt im Vergleich zum Startpunkt dementsprechend gering aus.

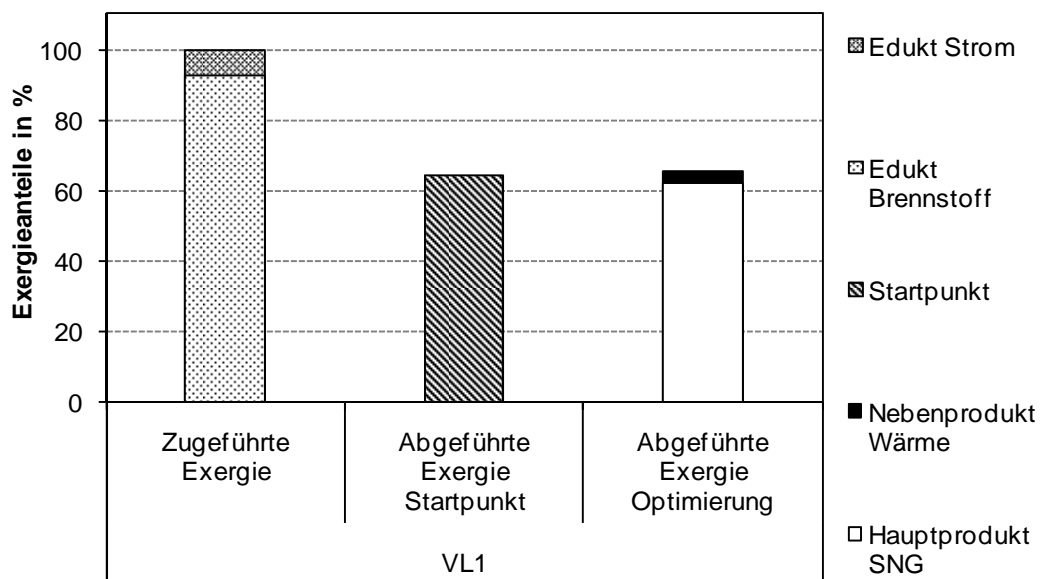


Abb. 6.11 Anteile der zu- und abgeführten Exergieströme an der insgesamt zugeführten Exergie der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL1 nach der energetischen Optimierung

### 6.3.2 Ökonomische Optimierung

Die ökonomische Optimierung der Konzeptvariante VL1 führt zu einer Reduktion der Bio-SNG-Gestehungskosten um 0,1 ct/kWh<sub>SNG</sub> auf 8,8 ct/kWh<sub>SNG</sub> (Abb. 6.12). Die Grundlage dieses Optimierungspotenzials bildet die im Rahmen der Bio-SNG-Produktion anfallende Hochtemperaturabwärme, welche im Vergleich zum Startpunkt der Optimierung zur Erzeugung von Dampf genutzt wird. Die durch den Einsatz der Heißgasreinigung reduzierte Prozessabwärmemenge wirkt sich wiederum limitierend auf das Potenzial der Gestehungskostenminimierung aus.

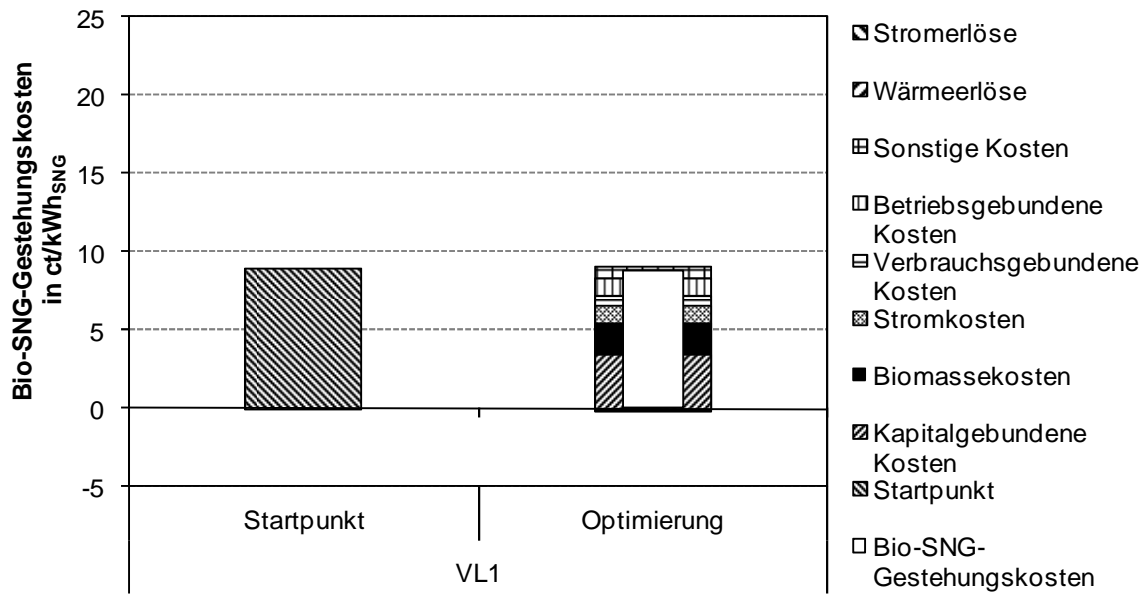


Abb. 6.12 Bio-SNG-Gestehungskosten sowie Kostenanteile und Erlöse der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL1 nach der ökonomischen Optimierung

### 6.3.3 Ökologische Optimierung

Auch die ökologische Kenngröße, die Bio-SNG-Treibhausgasemissionen, welche für den definierten Bilanzraum anfallen, werden durch die Optimierung verringert. Nach der Optimierung durch die Ausnutzung der Hochtemperaturprozesswärme zur Dampferzeugung weist die Variante VL1 Emissionen von  $18,5 \text{ g}_{\text{CO}_2\text{-Äqu}}/\text{MJ}_{\text{SNG}}$  (Abb. 6.13) auf. Dies entspricht im Vergleich zum Startpunkt der Optimierung, für den  $18,8 \text{ g}_{\text{CO}_2\text{-Äqu}}/\text{MJ}_{\text{SNG}}$  berechnet werden, einer Senkung der Emissionen um  $0,3 \text{ g}_{\text{CO}_2\text{-Äqu}}/\text{MJ}_{\text{SNG}}$ . Aufgrund der konzepteigenen Merkmale der langfristigen Variante (Druckvergasung, Heißgasreinigung), birgt die Optimierung des Methanisierungsdruckes und der Prozesswärmenutzung nur ein begrenztes Potenzial.

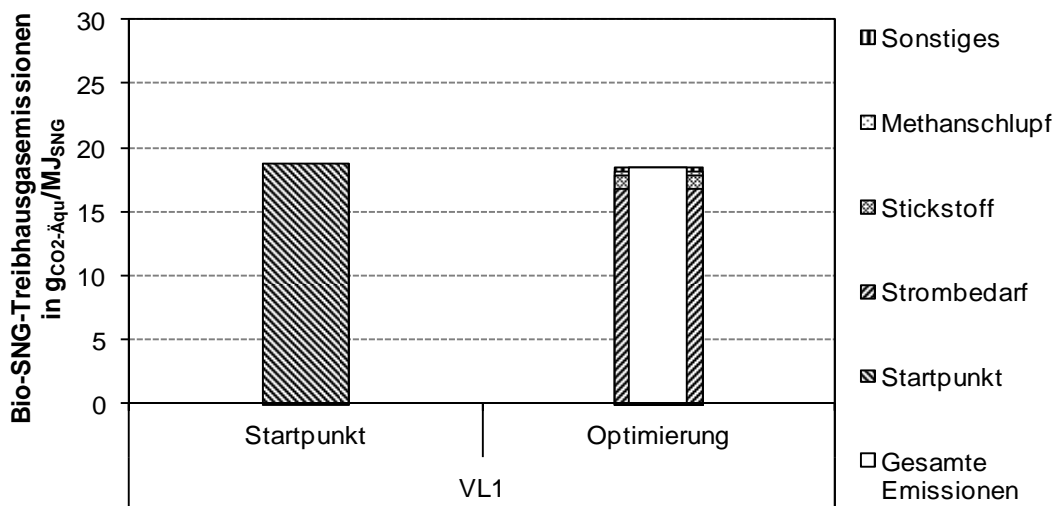


Abb. 6.13 Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL1 und deren Zuordnung zu Stoff- und Energieströmen nach der ökologischen Optimierung

### 6.3.4 Diskussion

**Verlauf der Optimierung.** In Bezug auf die Entwicklung der Optimierungsparameter und -kriterien während der Optimierung gleicht das Verhalten dem der Optimierung der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante. Die Interpretation der Ergebnisse erfolgt demnach entsprechend der Erkenntnisse der Diskussion der Ergebnisse in Kapitel 6.2.4. Die dort beschriebene Tendenz, dass eine kontinuierliche Verbesserung der Optimierungskriterien durch maximale Dampfparameter sowie einen maximalen Dampfmengestrom und einen minimalen Methanisierungsdruck erreicht werden kann, wird exemplarisch durch den Verlauf der Optimierung des exergetischen Wirkungsgrades bestätigt (Abb. 6.14). Jedoch kann der Methanisierungsdruck im Gegensatz zu der Optimierung des kurzfristig realisierbaren Konzeptes aufgrund der druckaufgeladenen Vergasung nicht unter 10 bar gesenkt werden, sondern lediglich auf einem minimalen Level (d. h. auf dem Vergasungsdruck) gehalten werden.

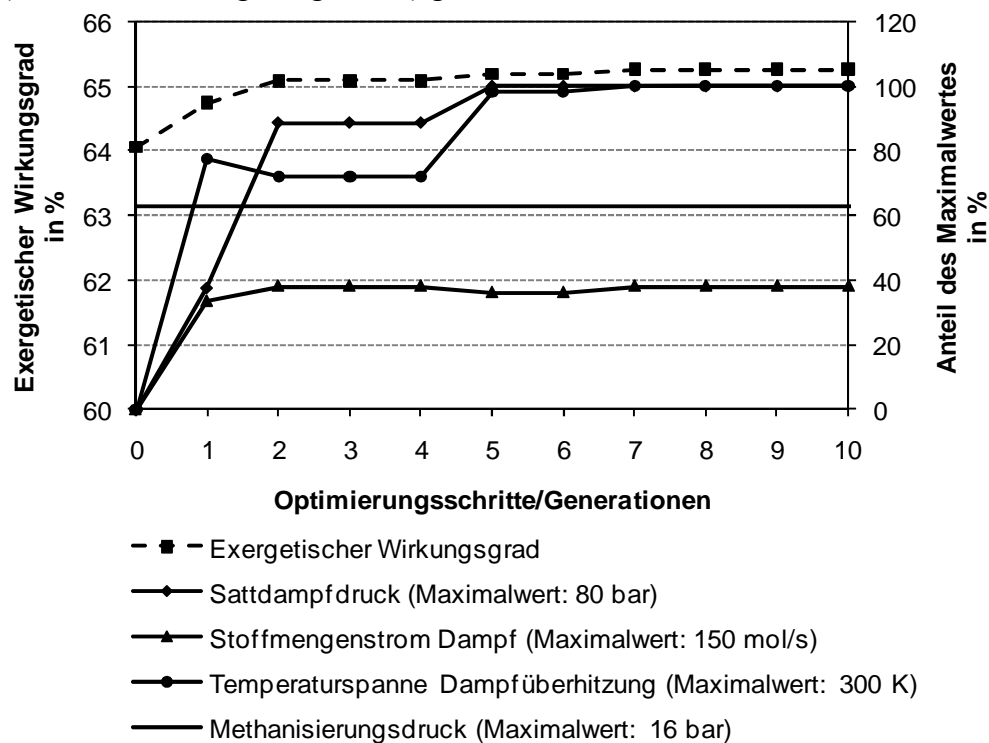


Abb. 6.14 Verlauf der Optimierung des exergetischen Wirkungsgrades der langfristig realisierbaren Variante VL1 zur Erzeugung von SNG und Wärme

**Optimierungsparameter.** Wie bei der Optimierung der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante zur Erzeugung von SNG und Wärme, sind auch nach der energetischen und ökologischen Optimierung der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL1 die Optimierungsparameter nach erfolgter Optimierung nahezu identisch (Abb. 6.15) und durch Sattdampfdrücke und Dampfüberhitzungstemperaturen nahe dem vorgegebenen Maximum (Tabelle 6.2) gekennzeichnet. Der Stoffmengenstrom des Dampfes erreicht nach der Optimierung nur etwa 39 % des Maximalwertes, da die zur Verfügung stehende Wärmemenge zur Dampferzeugung unter Berücksichtigung der optimierten Dampfparameter bereits bei diesem Stoffmengenstrom ausgeschöpft ist.

Die Dampfparameter sind nach der ökonomischen Optimierung vergleichsweise moderat, da die Erlöse für Dampf als Nebenprodukt in erster Linie vom Dampfmassenstrom und nicht von der Dampfexergie abhängen. Der Methanisierungsdruck nimmt nach der

Optimierung – wie auch bei der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante – seinen Minimalwert 10 bar, in diesem Fall 62,5 % seines Maximalwertes von 16 bar, an.

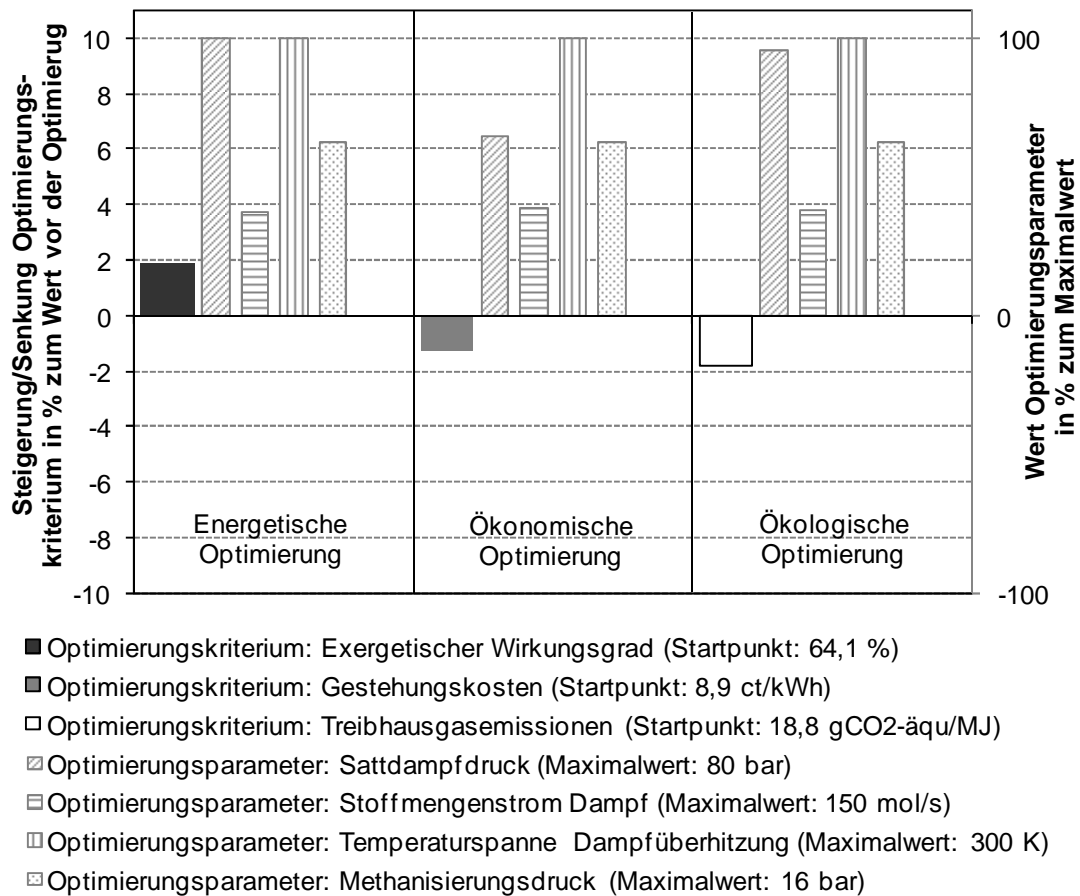


Abb. 6.15 Optimierungsparameter und -kriterien der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL1 zur Erzeugung von SNG und Wärme nach erfolgter Optimierung

## 7 Optimierung Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme

Nach der Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme werden nachfolgend die in Kapitel 4 vorgestellten Varianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme optimiert. Diese Optimierung dient dem Ziel, die Möglichkeit der zusätzlichen Stromerzeugung zur Verbesserung bestehender Konzepte zu evaluieren und vielversprechende Varianten bzw. deren Auslegung zu identifizieren. Dazu werden – neben der Betrachtung des Methanisierungsdruckes – die Aggregate zur Stromerzeugung im Zuge der Optimierung zu- oder abgeschaltet bzw. deren Last variiert, indem relevante Gas- und Dampfströme durch den Optimierungsalgorithmus verändert werden.

### 7.1 Rahmenbedingungen und Datengrundlage

Zur Anpassung und anschließenden Durchführung der in Kapitel 3.3.1.3 erläuterten Methodik der Anwendung evolutionärer Algorithmen muss der Programmablauf des Optimierungsprogramms – und dabei insbesondere die Zahl der Optimierungsschritte – unter Berücksichtigung der Konvergenz an das Optimierungsproblem angepasst werden. Weiterhin müssen die Optimierungsparameter festgelegt und die genetischen Operatoren in Bezug auf die Problemstellung adaptiert werden.

#### 7.1.1 Optimierungsablauf

Der Ablauf der Optimierung entspricht, wie auch die Optimierung in Kapitel 6, dem Programmschema evolutionärer Algorithmen. Die Festlegung der Einstellungen des Optimierungsalgorithmus erfolgt gemäß der in Kapitel 3.3.2.5 definierten Vorgehensweise. Entsprechend werden ausgehend von einer stochastisch erzeugten Ausgangslösungsmenge von sechs Lösungsvektoren (Vektoren mit Optimierungsparametern) zehn Optimierungsschritte durchgeführt. Im Rahmen dieser Optimierungsschritte werden jeweils vier neue Lösungsvektoren erzeugt (zwei durch Rekombination und zwei durch Mutation). Anschließend werden aus der Gesamtheit der auf diese Weise generierten zehn Lösungsvektoren die in Bezug auf das Optimierungskriterium besten sechs Lösungsvektoren selektiert und als Grundstock für den nachfolgenden Optimierungsschritt verwendet (Abb. 6.1).

#### 7.1.2 Optimierungsparameter

Der Optimierung liegen drei Prozess-/Entscheidungsvariablen zu Grunde, die durch den Optimierungsalgorithmus erzeugt bzw. variiert werden. Prozessvariablen (z. B. Drücke) werden mit kontinuierlich veränderbaren Werten belegt. Entscheidungsvariablen können nur mit „ja“ oder „nein“ belegt werden (z. B. repräsentiert durch den minimalen oder maximalen Gasstrom zu einem KWK-Aggregat). Die im Rahmen der Optimierung untersuchten Optimierungsparameter (Tabelle 7.1) werden im Folgenden erläutert.

Tabelle 7.1 Übersicht der Optimierungsparameter bei der Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme

Größe	Einheit	Platzierung im Lösungsvektor
Anteil KWK-Gas $x_{KWK}$	mol/mol	Zeile 2
Stoffmengenstrom Arbeitsmittel (DKP/ORC) $\dot{n}_{DKP/ORC}$	mol/s	Zeile 3
Methanisierungsdruck $p_{Meth}$	bar	Zeile 4

**Anteil KWK-Gas.** Der Anteil an KWK-Gas  $x_{KWK}$  bezeichnet den Gasanteil, der optional einem Gasmotor oder einer Gasturbine zur Stromerzeugung zugeführt werden kann.  $x_{KWK}$  ist dabei als Entscheidungsvariable definiert, d. h., entweder wird dem Gasmotor bzw. der Gasturbine kein Gas zugeführt oder aber die Aggregate werden mit voller Last betrieben. Die Auskopplung des KWK-Gases, das zum Einsatz im Gasmotor bzw. in der Gasturbine vom Hauptgasstrom abgetrennt wird, kann dabei an verschiedenen Prozessstellen erfolgen. Bei den kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten wird das Gas für den Einsatz im Gasmotor, wie auch in der Anlage am Standort Güssing, nach dem ersten Teil des Ölwäschers vom Hauptgasstrom getrennt [Rehling 2009], da das Gas in diesem Prozessabschnitt bereits die erforderliche Reinheit und Temperatur für den Einsatz in Gasmotoren besitzt [Hofbauer 2002].

Bei den langfristig realisierbaren Konzeptvarianten wird das Gas für den Gasmotor nach der Reformierung vom Hauptgasstrom abgezweigt. Der Gasturbine wird das Gas sowohl bei den kurzfristig als auch bei den langfristig realisierbaren Konzepten nach der Roh-SNG-Aufbereitung (nach Methanisierung, CO<sub>2</sub>-Abscheidung und Gastrocknung) zugeführt. An dieser Stelle des Prozesses ist das Gas zwar bereits den Konversionsverlusten der Methanisierung unterlegen, kann jedoch aufgrund des geringeren Gasvolumenstromes nach der Methanisierung und Kohlenstoffdioxidabscheidung für den Einsatz in Gasturbinen effizienter verdichtet werden. Zudem kann auf herkömmliche Erdgas-Gasturbinen, die durch höhere elektrische Wirkungsgrade als Turbinen zur Nutzung von Vergasungsgasen gekennzeichnet sind, zurückgegriffen werden.

**Stoffstrom Arbeitsmittel (DKP/ORC).** Der Stoffmengenstrom des Arbeitsmittels  $\dot{n}_{DKP/ORC}$  dient der Untersuchung der Prozesswärmenutzung durch einen Dampfkraftprozess bzw. durch ein ORC-Modul.  $\dot{n}_{DKP/ORC}$  ist eine kontinuierlich veränderbare Prozessvariable, die den Stoffmengenstrom des Arbeitsmittels des Dampfkraftprozesses/ORC-Moduls regelt und damit festlegt, wie viel Strom mit dem entsprechenden Modul erzeugt wird. Die Verschaltung der Wärmeübertrager ist dabei so gestaltet, dass bei maximalem Arbeitsmittelstrom die Prozessabwärme fast ausschließlich zur Strombereitstellung genutzt wird. Bei der parallelen Anwendung eines Gasmotors oder einer Gasturbine wird die maximale Grenze des Arbeitsmittelstromes angehoben, um auch die Abwärme des Gasmotoren-/Gasturbinenabgases sinnvoll integrieren zu können.

**Methanisierungsdruck.** Der Methanisierungsdruck entspricht dem Druck des in den Reaktor eintretenden Gases und wird als kontinuierlich veränderbare Prozessvariable vom Optimierungsprogramm vorgegeben. Er beeinflusst den Stromverbrauch der Bio-SNG-Produktionsanlage und die Umsatzraten der druckabhängigen Methanisierungsreaktion. Die Optimierung von  $p_{Meth}$  erfolgt gemäß den Spezifikationen in Kapitel 6.1.2.

Aufgrund der verschiedenen Voraussetzungen, die sich aus der Integration der Stromerzeugungsaggregate ergeben (z. B. unterschiedliche Wärmegehalte und unterschiedliche Temperaturniveaus der Abgasströme von Gasmotor und Gasturbine), müssen jeweils verschiedene Unter- und Obergrenzen für die Optimierungsparameter definiert werden (Tabelle 7.2). Diese Unter- und Obergrenzen berücksichtigen sowohl die zur Verfügung stehenden Abwärmeströme und -temperaturen als auch kommerziell angebotene Leistungsklassen der Gasmotoren sowie der Gasturbine. Exemplarisch werden dabei zwei Gasmotoren mit einer elektrischen Leistung von jeweils 1,2 MW<sub>el</sub> und eine Gasturbine mit einer elektrischen Leistung von 5,3 MW<sub>el</sub> betrachtet (Anhang 1.3.15 und Anhang 1.3.16).

Tabelle 7.2 Unter- und Obergrenzen der verwendeten Optimierungsparameter bei der Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme

		$x_{KWK}$	$\dot{n}_{DKP/ORC}$	$p_{Meth}$
		in mol/mol	in mol/s	in bar
VK2-GMDKP	Untergrenze	0	0	1,6
	Obergrenze	0,1812	105 – 155	10,0
VK3-GMORC	Untergrenze	0	0	1,6
	Obergrenze	0,1812	125 – 185	10,0
VK4-GTDKP	Untergrenze	0	0	1,6
	Obergrenze	0,5796	105 – 295	10,0
VK5-GTORC	Untergrenze	0	0	1,6
	Obergrenze	0,5796	125 – 350	10,0
VL2-GMDKP	Untergrenze	0	0	10,0
	Obergrenze	0,1629	70 – 135	16,0
VL3-GMORC	Untergrenze	0	0	10,0
	Obergrenze	0,1629	85 – 160	16,0
VL4-GTDKP	Untergrenze	0	0	10,0
	Obergrenze	0,5743	70 – 260	16,0
VL5-GTORC	Untergrenze	0	0	10,0
	Obergrenze	0,5743	85 – 310	16,0

Aufgrund der unterschiedlichen Unter- und Obergrenzen der Optimierungsparameter werden die Prozessoptimierungen für jede konzeptionelle Erweiterung gesondert durchgeführt.

### 7.1.3 Genetische Operatoren

Zur Anpassung des Optimierungsalgorithmus an das spezifische Optimierungsproblem ist die Adaption der genetischen Operatoren (Mutation, Rekombination und Selektion) erforderlich. Dazu wird auf die in Kapitel 3.3.2.5 vorgestellte Vorgehensweise zurückgegriffen. Die Einstellungen der genetischen Operatoren ähneln im Wesentlichen denen, die bei der Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme (Kapitel 6.1.3) Anwendung finden. Unterschiede sind im Folgenden aufgeführt.

**Mutation.** Der Mutationsoperator wird analog zur der Optimierung der Konzepte zur Erzeugung von SNG und Wärme ausgeführt. So wird auch bei der Optimierung von Konzepten, die zusätzlich in der Lage sind, Strom bereitzustellen, der Mutationsoperator jeweils ausschließlich auf die Parameter des besten Lösungsvektors des vorangehenden Optimierungsschrittes angewendet. Ebenso werden die Schrittweiten des Mutationsoperators stufenweise reduziert (Kapitel 3.3.2.5). Da jedoch andere Optimierungsparameter eingesetzt werden als bei der Optimierung in Kapitel 6, müssen neue Schrittweiten bestimmt werden (Tabelle 7.3).

Tabelle 7.3 Schrittweiten des Mutationsoperators des Optimierungsprogramms bei der Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme

Optimierungsparameter	Schrittweite von Generation 1 – 4	Schrittweite von Generation 5 – 8	Schrittweite von Generation 9 – 12
Kurzfristige Konzeptvarianten:			
$x_{KWK}$	–	–	–
$\dot{n}_{DKP/ORG}$	50,00 mol/s	20,00 mol/s	5,00 mol/s
$p_{Meth}$	0,50 bar	0,50 bar	0,05 bar
Langfristige Konzeptvarianten:			
$x_{KWK}$	–	–	–
$\dot{n}_{DKP/ORG}$	50,00 mol/s	20,00 mol/s	5,00 mol/s
$p_{Meth}$	1,25 bar	1,25 bar	1,25 bar

Der Anteil an KWK-Gas wird nicht mit Hilfe des Mutationsoperators verändert, sondern zeitgleich stochastisch entweder mit dem Maximal- oder Minimalwert belegt. Dies verbessert die Konvergenzgeschwindigkeit des Optimierungsalgorithmus und ist mit der Tatsache begründet, dass die Optima nur bei minimalem oder maximalem Anteil an KWK-Gas auftreten. Deutlich wird dies u. a. anhand der Untersuchung des Stromverkaufspreises bei der Optimierung der Bio-SNG-Gestehungskosten (Kapitel 7.2.4; Abb. 7.8). Diese zeigt, dass die Stromproduktion mit einem Gasmotor erst ab einem bestimmten Stromverkaufspreis zur Minimierung der Bio-SNG-Gestehungskosten beiträgt.

**Rekombination.** Die Implementierung und Ausführung des Rekombinationsoperators erfolgt entsprechend der Beschreibung in Kapitel 6.1.3.

**Selektion.** Auch die Programmierung und Ausführung des Selektionsoperators kann der Beschreibung in Kapitel 6.1.3 entnommen werden.



## 7.2 Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten

Die auf den geschilderten Rahmenbedingungen und Einstellungen beruhenden Ergebnisse der Optimierungen der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme werden nachfolgend vorgestellt und diskutiert.

### 7.2.1 Energetische Optimierung

Die energetische Optimierung der Konzeptvarianten führt bei sämtlichen Varianten mit integrierter Stromerzeugung zu einer Verbesserung des exergetischen Wirkungsgrades (Abb. 7.1). Dieser befindet sich bei allen Varianten in einem ähnlichen Bereich mit einer oberen Grenze von etwa 64,5 %. Die Varianten mit Dampfkraftprozess (VK2-GMDKP, VK4-GTDKP) sind durch einen Wirkungsgrad von 64,5 % und die Varianten mit ORC-Modul (VK3-GMORC, VK5-GT-ORC) durch einen Wirkungsgrad von 63,7 % gekennzeichnet. Die Ausschöpfung des vorhandenen Optimierungspotenzials bei Konzeptvarianten mit Strombereitstellungsaggregaten tritt, wie auch bei den Konzeptvarianten ohne Stromerzeugung, durch die Nutzung von Hochtemperaturwärme zu Tage. Diese wird zur Stromerzeugung in einem Dampfkraftprozess oder ORC-Modul genutzt. Die Last der Gasmotoren und Gasturbinen wird hingegen unter den gegebenen Rahmenbedingungen durch die Optimierung minimiert.

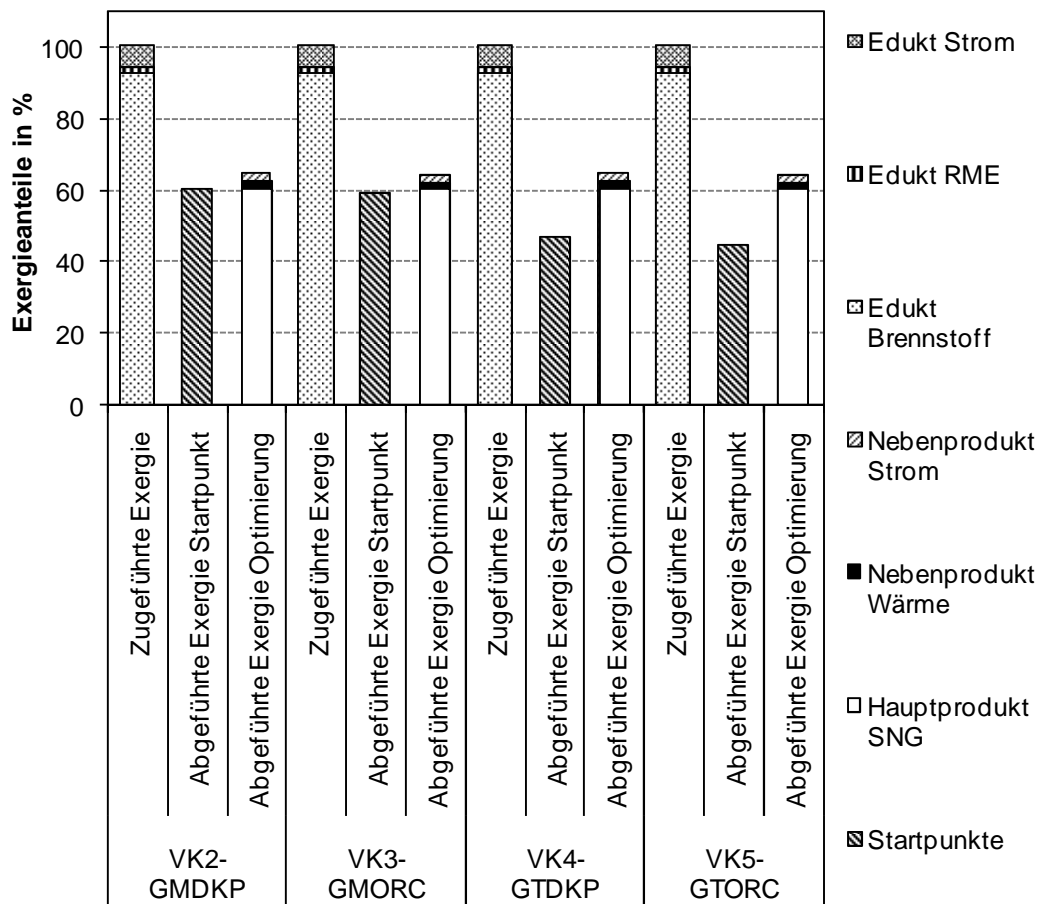


Abb. 7.1 Anteile der zu- und abgeführten Exergieströme an der insgesamt zugeführten Exergie der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten VK2-GMDKP, VK3-GMORC, VK4-GTDKP und VK5-GTORC nach der energetischen Optimierung

### 7.2.2 Ökonomische Optimierung

Wie bei der energetischen Optimierung führt auch die ökonomische Optimierung bei allen betrachteten Konzeptvarianten zur einer Verbesserung der optimierten Kenngröße (Abb. 7.2). Die Varianten weisen nach der Optimierung vergleichbare Bio-SNG-Gestehungskosten zwischen 9,1 ct/kWh<sub>SNG</sub> und 9,2 ct/kWh<sub>SNG</sub> auf. Auch hier sind die Konzeptvarianten mit Dampfkraftprozessen (VK2-GMDKP, VK4-GTDKP) und die Varianten mit ORC-Modul (VK3-GMORC, VK5-GTORC) jeweils durch dieselben Gestehungskosten, d. h. 9,1 ct/kWh<sub>SNG</sub> bzw. 9,2 ct/kWh<sub>SNG</sub>, gekennzeichnet. Die Grundlage der Optimierung bildet im Wesentlichen die Minimierung der Last der Gasmotoren und Gasturbinen.

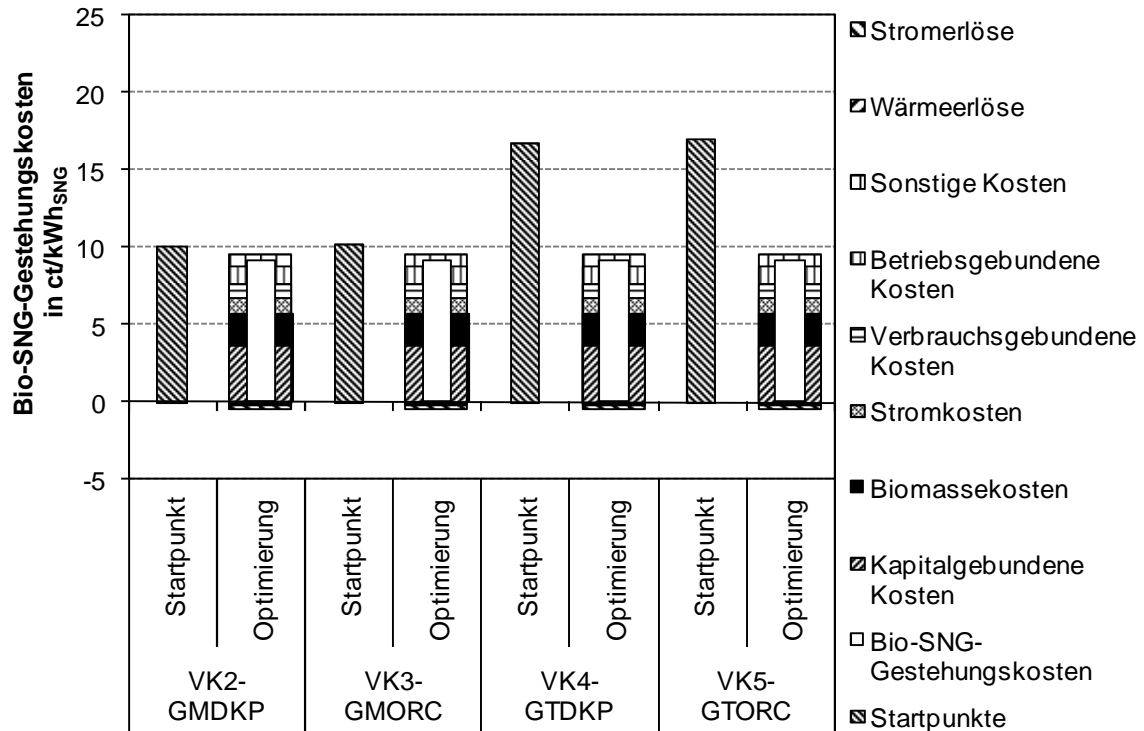


Abb. 7.2 Bio-SNG-Gestehungskosten sowie Kostenanteile und Erlöse der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten VK2-GMDKP, VK3-GMORC, VK4-GTDKP und VK5-GTORC nach der ökonomischen Optimierung

### 7.2.3 Ökologische Optimierung

Durch die ökologische Optimierung werden die Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der betrachteten vier kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten mit integrierten Stromerzeugungsaggregaten abgesenkt und liegen nach der Optimierung in einem Bereich zwischen 17,0 und 17,2 g<sub>CO<sub>2</sub>-Äqu</sub>/MJ<sub>SNG</sub> (Abb. 7.3). Das Optimierungspotenzial wird einerseits durch die Nutzung von Prozesswärme zur Stromerzeugung und andererseits durch die Minimierung der Last der Gasmotoren und Gasturbinen ausgeschöpft. Daher sind die Varianten mit Dampfkraftprozess (VK2-GMDKP, VK4-GTDKP) und die Varianten mit ORC-Modul (VK3-GMORC, VK5-GTORC) jeweils durch dieselben Emissionen gekennzeichnet. Qualitativ sind die Optimierungsergebnisse mit der energetischen und der ökonomischen Optimierung zu vergleichen. Daraus folgt allgemein, dass bei derartigen energetischen Optimierung nicht mit gegenläufigen Ergebnissen bei der Treibhausgasbilanzierung zu rechnen ist.

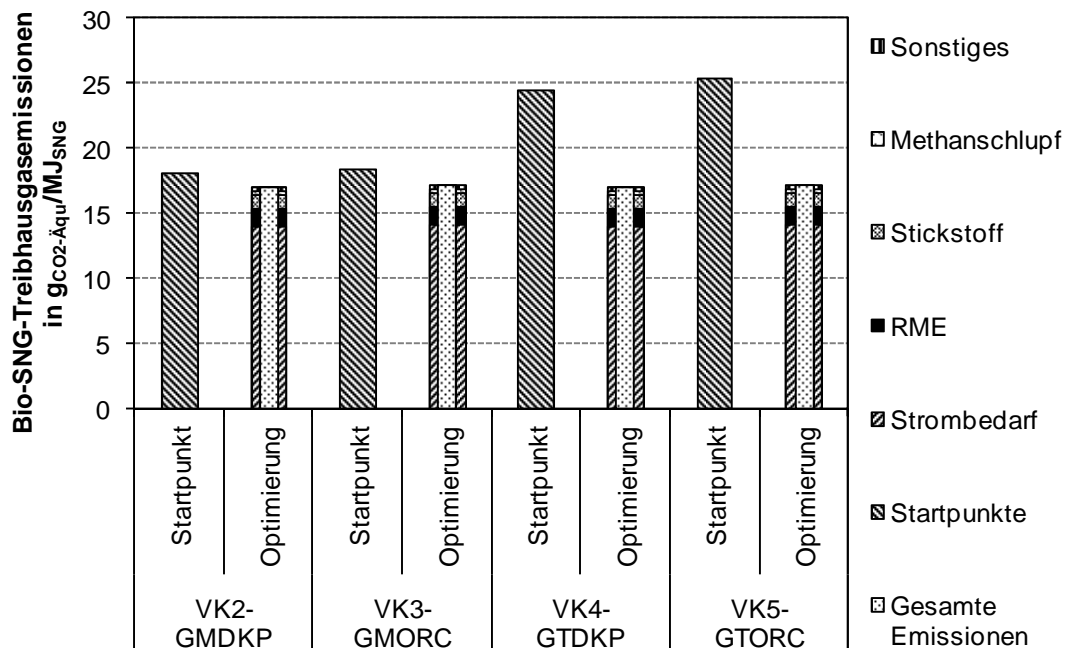


Abb. 7.3 Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten VK2-GMDKP, VK3-GMORC, VK4-GTDKP und VK5-GTORC und deren Zuordnung zu Stoff- und Energieströmen nach der ökologischen Optimierung

#### 7.2.4 Diskussion

Die Diskussion der Ergebnisse der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme wird nachfolgend exemplarisch für die Variante mit Gasmotor und Dampfkraftprozess (VK2-GMDKP) durchgeführt.

**Verlauf der Optimierung.** Der Verlauf der Optimierungen wird exemplarisch mit Hilfe des Verlaufs der Optimierung des exergetischen Wirkungsgrades (Abb. 7.4) diskutiert.

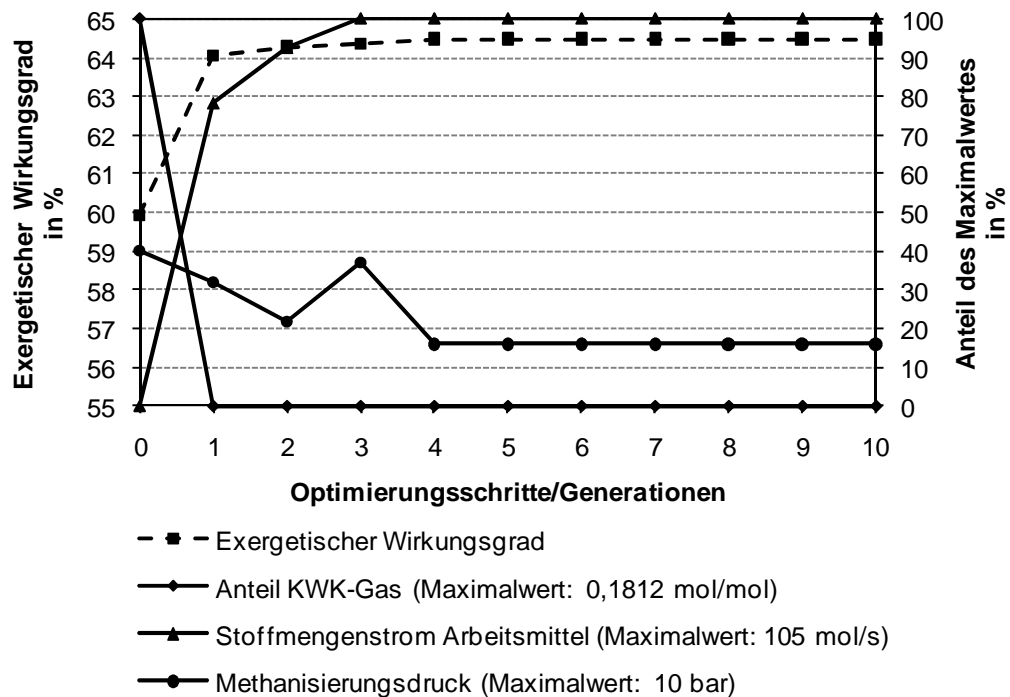


Abb. 7.4 Verlauf der Optimierung des exergetischen Wirkungsgrades der kurzfristig realisierbaren Variante VK2-GMDKP zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme

Der Optimierungsverlauf der drei Parameter (Anteil KWK-Gas, Stoffmengenstrom Arbeitsmittel, Methanisierungsdruck) sowie der Verlauf des exergetischen Wirkungsgrades werden über 10 Optimierungsschritte bzw. Generationen hinweg betrachtet. Der Optimierungsverlauf verdeutlicht eine stetige Verbesserung des exergetischen Wirkungsgrades. Dabei nimmt der Stoffmengenstrom des Arbeitsmittels den Maximalwert und der Methanisierungsdruck sowie der Anteil an KWK-Gas die Minimalwerte an. Aufgrund der an die Problemstellung angepassten Einstellungen des Optimierungsalgorithmus (z. B. Durchlaufzahlen, Schrittweiten der Mutation) konvergiert dieser bereits nach vier Optimierungsschritten. Der Stoffmengenstrom des Arbeitsmittels erreicht sein Optimum nach drei und der Methanisierungsdruck nach vier Optimierungsschritten. Der Anteil an KWK-Gas, dessen Wert als Entscheidungsvariable entweder maximal oder minimal ausfällt, nimmt bereits nach der Erzeugung der Ausgangspopulation (Optimierungsschritt null) seinen Optimalwert an.

**Optimierungsparameter.** Mit Blick auf die Optimierungsparameter der Konzeptvariante VK2-GMDKP wird deutlich, dass der Anteil an KWK-Gas bei allen drei Optimierungen seinen Minimalwert annimmt, d. h. auf null reduziert wird (Abb. 7.5). Der Stoffmengenstrom des Arbeitsmittels wird hingegen bei allen Optimierungen maximiert. Der Methanisierungsdruck nimmt wie auch bei der Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme den Minimalwert von 1,6 bar (etwa 16 % des Maximalwertes von 10 bar) an.

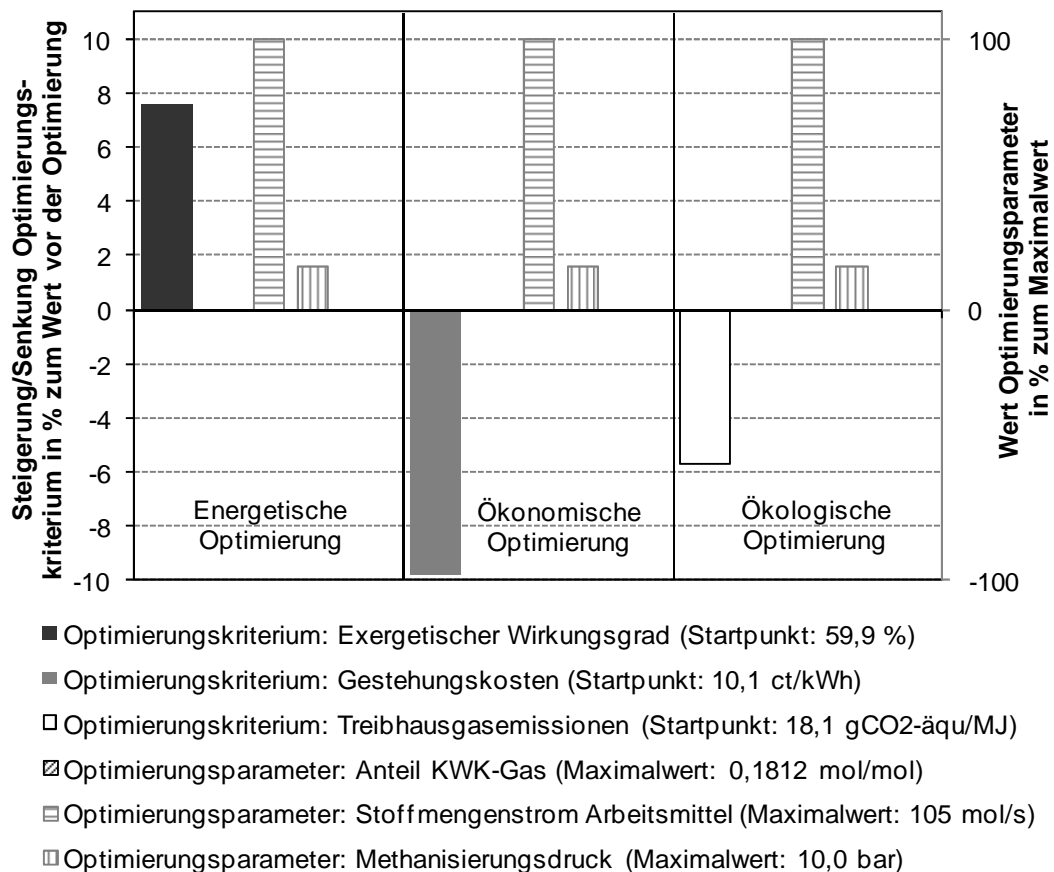


Abb. 7.5 Optimierungsparameter und -kriterien der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK2-GMDKP zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme nach erfolgter Optimierung

**Sensitivität exergetischer Wirkungsgrad.** Der exergetische Wirkungsgrad kann durch die Optimierung um 2,6 % (relativ) gesteigert werden.

Der untersuchte Prozess weist einen optimalen exergetischen Wirkungsgrad auf, wenn das gesamte Vergasungsrohgas zu SNG konvertiert wird; d. h., wenn der Anteil an KWK-Gas gleich null ist. Dies ist auf den verhältnismäßig hohen exergetischen Verlust der motorischen Gasnutzung zurückzuführen, bei der ein großer Anteil der dem Motor zugeführten chemischen Brennstoffenergie in Wärme umgewandelt wird, welche eine deutlich geringere Exergie besitzt als der dem Motor zugeführte Brennstoff. Bei der Methanisierung des Rohgases werden hingegen nur etwa 10 %<sup>c</sup> der chemischen Energie des Gases in Wärme umgewandelt.

Der Stoffmengenstrom des Arbeitsmittels des Dampfkraftprozesses nimmt im Zuge der Optimierung seinen Maximalwert an. Die Umwandlung von Prozessabwärme in elektrische Energie bedeutet also im Vergleich zum Startpunkt der Optimierung eine Steigerung des exergetischen Wirkungsgrades. Dies ist insbesondere darauf zurückzuführen, dass die Prozessabwärme beim Startpunktkonzept auf einem Temperaturniveau von 130 °C aus dem Prozess (z. B. in ein Fernwärmenetz) ausgekoppelt wird. Dabei werden auch Wärmeströme mit gehobenem Temperaturniveau aus exergetischer Sicht entwertet. Im Dampfkraftprozess hingegen wird die Exergie dieser Wärmeströme genutzt bzw. in elektrische Energie konvertiert.

Der Methanisierungsdruck erreicht durch die Optimierung seine vorgegebene Untergrenze. Der Verlauf des summierten Strombedarfs von Kompressor 1, 2 und 3 (Abb. 7.6) bestätigt diese Optimierung und zeigt, dass der summierte Strombedarf grundsätzlich mit sinkendem Ausgangsdruck von Kompressor 1 abnimmt. Dies ist im Wesentlichen auf die Tatsache zurückzuführen, dass der zu komprimierende Stoffmengenstrom nach der Methanisierung reaktionsbedingt im Vergleich zum Eintritt in die Methanisierung deutlich reduziert ist und somit eine Kompression nach der Methanisierung bevorteiligt. Auffällig ist, dass eine Absenkung des Druckverhältnisses von Kompressor 2 im untersuchten Wertebereich ein höheres Potenzial zur Minimierung des Strombedarfs der Anlage aufweist als die Senkung des Ausgangsdrucks von Kompressor 1. Dies liegt u. a. darin begründet, dass das Vergasungsgas beim Eintritt in den Kompressor 1 aufgrund der vorgeschalteten RME-Wäsche eine sehr geringe Temperatur (10 °C) besitzt, die eine effiziente Kompression des Gases ermöglicht. Die Zwischenkühlung nach Kompressor 1 erfolgt hingegen nur bis auf eine Temperatur von 46 °C.

---

<sup>c</sup> Aufgrund des Methananteils im Rohgas wird ein geringerer Anteil der chemischen Rohgasenergie in Wärme umgewandelt (etwa 10%) als bei der stöchiometrischen Methanisierungsreaktion (20%), die sich auf den chemischen Energiegehalt des an der Reaktion beteiligten Wasserstoffs und Kohlenstoffmonoxids im Rohgas bezieht.

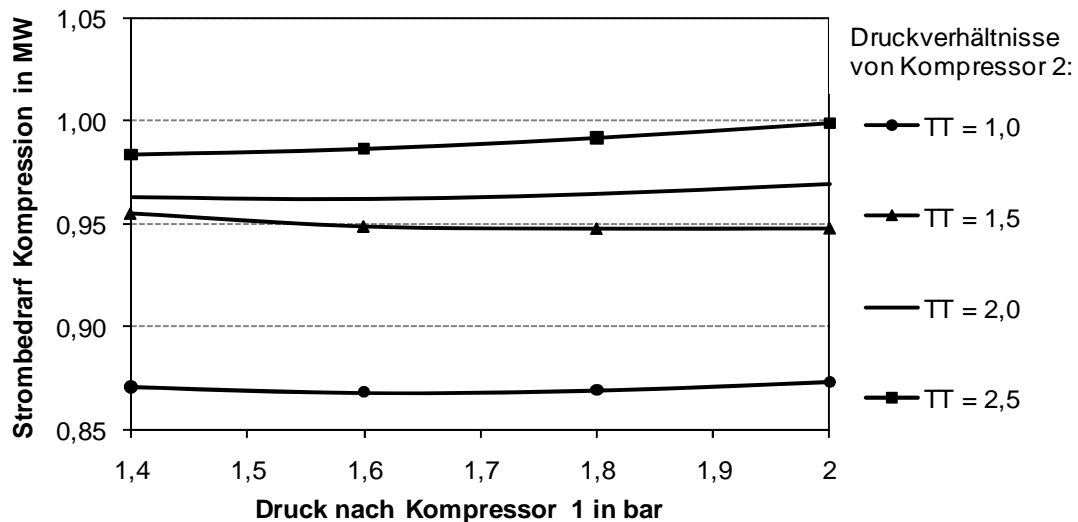


Abb. 7.6 Strombedarf der Gaskompression bei Variation des Ausgangsdrucks von Kompressor 1 und dem Druckverhältnis von Kompressor 2 ( $\Pi$ : Druckverhältnis von Kompressor 2)

Ein weiterer Aspekt, der bei der Optimierung der Kompressionen von Bedeutung ist, ist die Umsetzung von Kohlenstoffmonoxid und Wasserstoff im Methanisierungsreaktor. Während hohe Gaseintrittsdrücke den Umsatz erhöhen, verbleiben bei niedrigen Gaseintrittsdrücken Kohlenstoffmonoxid- und Wasserstofffrachten im Gas. Dies führt auf der einen Seite zu geringeren exergetischen Verlusten während der Methanisierung (Abb. 7.7), gefährdet jedoch auf der anderen Seite die Qualität des erzeugten Roh-SNG.

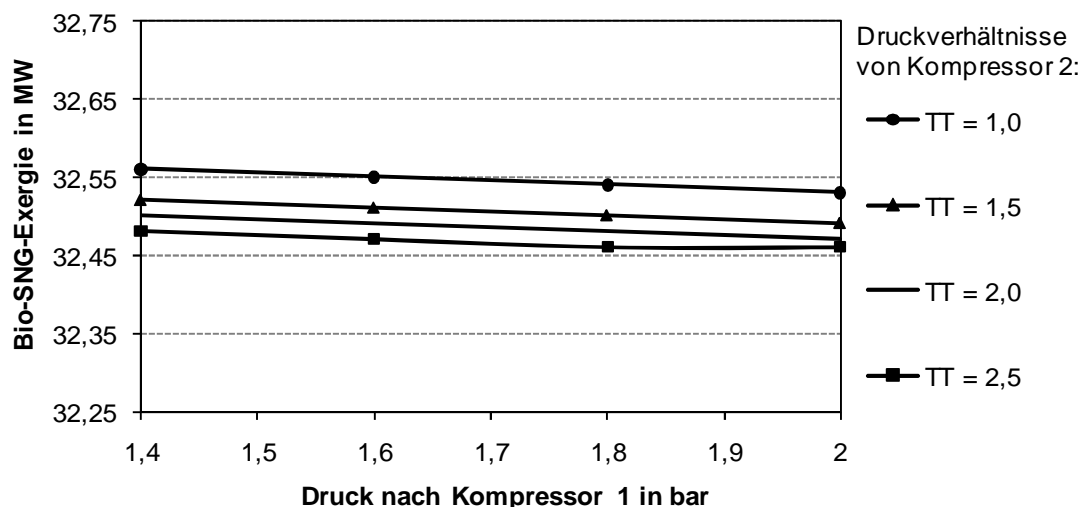


Abb. 7.7 Bio-SNG-Exergie bei Variation des Ausgangsdruckes von Kompressor 1 und dem Druckverhältnis von Kompressor 2 ( $\Pi$ : Druckverhältnis von Kompressor 2)

**Sensitivität Bio-SNG-Gestehungskosten.** Die Optimierung der Bio-SNG-Gestehungskosten der Konzeptvariante VL2-GMDKP weist eine Reduktion der Gestehungskosten um 1,3 % aus (Abb. 7.5). Die dargestellten Ergebnisse (Abb. 7.5) sind jedoch nicht allgemeingültig, sondern spiegeln den optimierten Prozessbetrieb unter Berücksichtigung der zu Grunde liegenden ökonomischen Rahmenbedingungen wider. Insbesondere der Stromverkaufspreis (Grundlage der Optimierungen: 0,10 €/kWh<sub>el</sub>) ist von Bedeutung, da dieser einen maßgeblichen Einfluss auf die Vorteilhaftigkeit der

Stromproduktion sowohl durch die Nutzung von Abwärme im Dampfkraftprozess/ORC-Modul als auch durch die Nutzung eines Gasteilstromes in Gasmotoren/Gasturbinen hat. Bei der Variation des Stromverkaufspreises ergeben sich somit unter Berücksichtigung eines konstanten Strombezugs- und Wärmeverkaufspreises unterschiedliche Stromproduktionsmengen zur Gewährleistung minimaler Bio-SNG-Gestehungskosten (Abb. 7.8). Die durch die Prozessoptimierung ermittelten Betriebseinstellungen besitzen demnach nur einen beschränkten Gültigkeitsbereich für eine Stromvergütung von 0,07 – 0,15 €/kWh<sub>el</sub>. Sinkt der Stromverkaufspreis auf 0,06 €/kWh<sub>el</sub>, ist die Vorteilhaftigkeit der Stromproduktion mit Hilfe des Dampfkraftprozesses (unter Vernachlässigung der Eigenbedarfsdeckung) aufgrund der zusätzlichen Investitionen für den Dampfkraftprozess nicht mehr gegeben. Steigt der Stromverkaufspreis auf 0,16 €/kWh<sub>el</sub> an, sollte ein Teilgasstrom aus ökonomischer Sicht zur Stromproduktion in Gasmotoren genutzt werden. Diese Option ist insbesondere in Verbindung mit gesetzlich festgelegten Einspeisevergütungen (z. B. durch das Erneuerbare Energie Gesetzes – EEG [Bundestag 2008]) von Bedeutung, bei denen die Stromvergütungen über den aktuellen Stromverkaufspreisen liegen können.

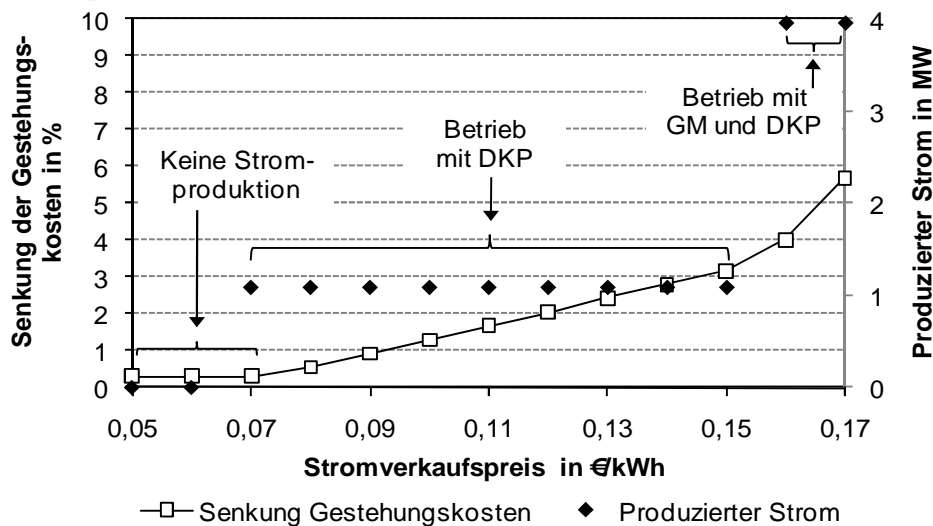


Abb. 7.8 Verlauf der produzierten Strommenge und der Bio-SNG-Gestehungskosten bei Variation des Stromverkaufspreises nach erfolgter Optimierung

**Sensitivität Bio-SNG-Treibhausgasemissionen.** Durch die Optimierung werden die Treibhausgasemissionen der Konzeptvariante VL2-GMDKP, die im betrachteten Bilanzraum freigesetzt werden, um 5,1 % reduziert. Die Berechnungsvorschrift der Bio-SNG-Treibhausgasemissionen ist dabei ausschlaggebend für das Optimierungsverhalten. Die Bio-SNG-Treibhausgasemissionen werden entsprechend dem in Kapitel 3.2.3.3 erläuterten Vorgehen berechnet (Gleichung (5-3)). Als Bezugsgröße der Emissionen wird 1 MJ<sub>SNG</sub> gewählt und die bei der Produktion der drei Produkte (SNG, Strom, Wärme) anfallenden CO<sub>2</sub>-äquivalenten Emissionen gemäß dem Exergiegehalt der Produkte selbigen zugeordnet (allokiert). Erfolgt die Zuordnung der entlang des Produktionsprozesses freigesetzten Emissionen entsprechend dem Energiegehalt der Produkte (SNG, Strom, Wärme) und nicht entsprechend dem Exergiegehalt, ergibt sich ein abweichendes Optimierungsverhalten. Signifikant bei der Minimierung der Treibhausgasemissionen unter Berücksichtigung des Energiegehaltes der Produkte ist der Energiegehalt der Wärme. Während der spezifische Energie- und Exergiegehalt der beiden Produkte SNG und Strom sich gleichen, ist der Energiegehalt eines Wärmestroms in der Regel deutlich größer als sein Exergiestrom. In diesem Sinne sind Prozessweiterungen, bei denen Wärme freigesetzt wird (Gasmotor, Gasturbine), im Rahmen der energetischen

Allokation nicht als nachteilig zu erachten. Aggregate, die Prozessabwärme unter Verlusten in exergetisch hochwertige Energieformen wandeln (Dampfkraftprozess, ORC-Modul), sind hingegen von Nachteil.

### 7.3 Langfristig realisierbare Konzeptvarianten

Nach der Optimierung der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten werden im Folgenden die Optimierungsergebnisse der langfristig realisierbaren Varianten dargestellt und diskutiert.

#### 7.3.1 Energetische Optimierung

Mit Hilfe der energetische Optimierung der langfristigen Konzeptvarianten zur SNG-, Strom- und Wärmeerzeugung erreichen die exergetische Wirkungsgrade Werte bis zu 65,1 % (Abb. 7.9). Die Konzeptvarianten mit Dampfkraftprozess (VL2-GMDKP, VL4-GTDKP) besitzen nach der Optimierung einen Wirkungsgrad von 65,1 % und die Varianten mit ORC-Modul (VL3-GMORC, VL5-GTORC) einen Wirkungsgrad von 64,6 %. Die exergetische Effizienz der Konzeptvarianten wird, wie auch bei den kurzfristigen Varianten, durch die Ausnutzung der zur Verfügung stehenden Hochtemperaturabwärme und eine Minimierung der Last der Gasmotoren und Gasturbinen verbessert.

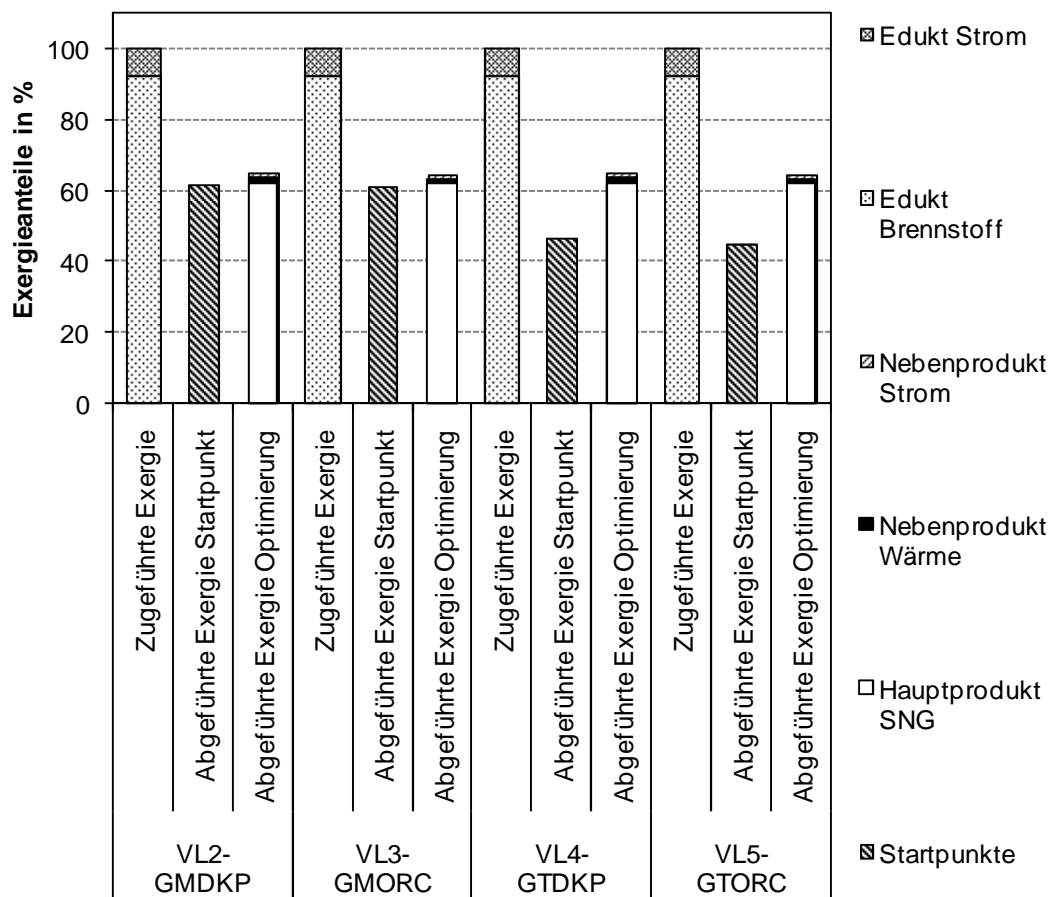


Abb. 7.9 Anteile der zu- und abgeführten Exergieströme an der insgesamt zugeführten Exergie der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten VL2-GMDKP, VL3-GMORC, VL4-GTDKP und VL5-GTORC nach der energetischen Optimierung



### 7.3.2 Ökonomische Optimierung

Die ökonomische Optimierung der vier Konzeptvarianten führt bei sämtlichen Varianten zu Bio-SNG-Gestehungskosten von 8,9 ct/kWh<sub>SNG</sub> (Abb. 7.10). Die Begrenzung der Abwärmemenge durch die Heißgasreinigung spiegelt sich hier deutlich in den Optimierungsergebnissen wider. Wie bei der Optimierung der Variante ohne Stromproduktion (VL1) führt daher die optimierte Nutzung der zur Verfügung stehenden Hochtemperaturwärme zwar zu einer Reduktion der Gestehungskosten, deutliche Unterschiede zwischen den Varianten werden jedoch nicht sichtbar.

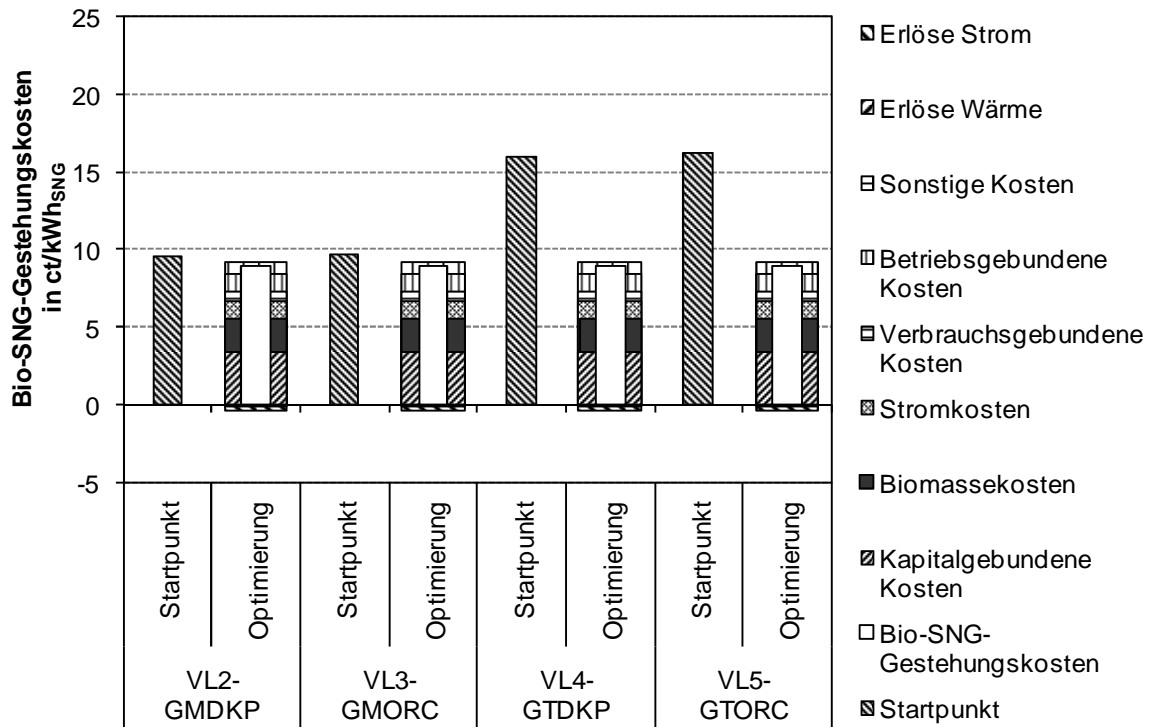


Abb. 7.10 Bio-SNG-Gestehungskosten sowie Kostenanteile und Erlöse der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten VL2-GMDKP, VL3-GMORC, VL4-GTDKP und VL5-GTORC nach der ökonomischen Optimierung

### 7.3.3 Ökologische Optimierung

Auch die ökologische Optimierung folgt qualitativ den Charakteristika der Optimierungen des exergetischen Wirkungsgrades. Verallgemeinert bedeutet dies, dass bei derartigen Optimierungen des exergetischen Wirkungsgrades nicht mit gegenläufigen Ergebnissen der Treibhausgasbilanz zu rechnen ist. Demnach können die Emissionswerte aller vier Konzeptvarianten verbessert werden. Nach der Optimierung liegen die Bio-SNG-Treibhausgasemissionen des betrachteten Bilanzraumes in einem Bereich zwischen 18,7 g<sub>CO<sub>2</sub>-Äqu</sub>/MJ<sub>SNG</sub> und 18,5 g<sub>CO<sub>2</sub>-Äqu</sub>/MJ<sub>SNG</sub> (Abb. 7.11). Dabei weisen die Varianten mit Dampfkraftprozess (VL2-GMDKP, VL4-GTDKP) Emissionen von 18,5 g<sub>CO<sub>2</sub>-Äqu</sub>/MJ<sub>SNG</sub> und die Varianten mit ORC-Modulen (VL3-GMORC, VL5-GTORC) Emissionen von 18,7 g<sub>CO<sub>2</sub>-Äqu</sub>/MJ<sub>SNG</sub> auf.

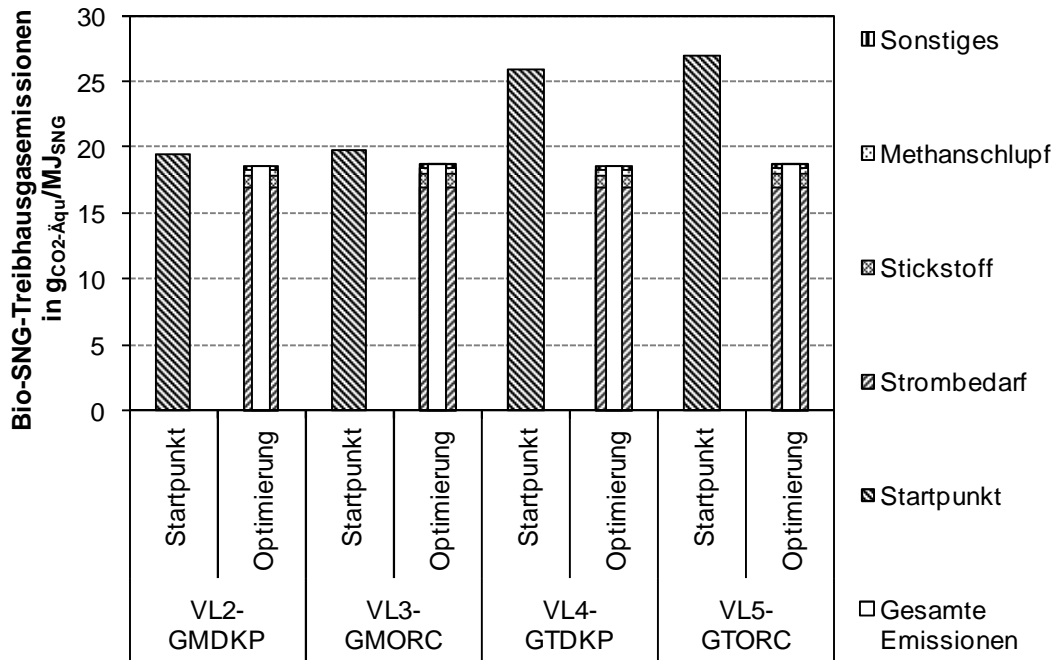


Abb. 7.11 Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten VL2-GMDKP, VL3-GMORC, VL4-GTDKP und VL5-GTORC und deren Zuordnung zu Stoff- und Energieströmen nach der ökologischen Optimierung

### 7.3.4 Diskussion

Die Diskussion der Ergebnisse der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten erfolgt, wie auch bei der Diskussion der kurzfristig realisierbaren Varianten, exemplarisch am Beispiel der Variante mit Gasmotor und Dampfkraftprozess (VL2-GMDKP).

**Verlauf der Optimierung.** Exemplarisch sei hier der Verlauf des exergetischen Wirkungsgrades betrachtet (Abb. 7.12).

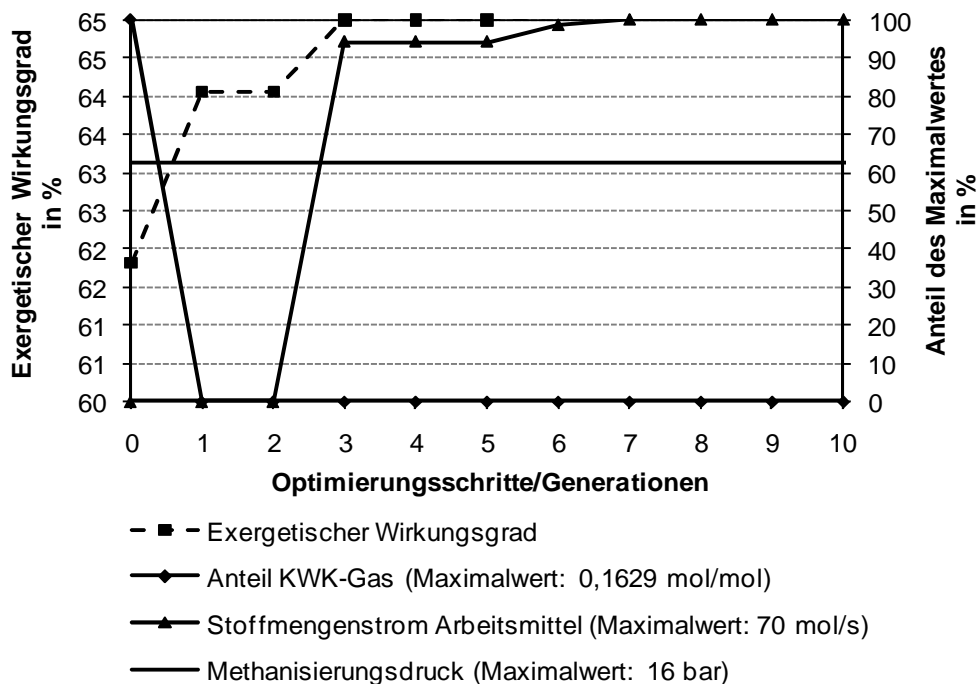


Abb. 7.12 Verlauf der Optimierung des exergetischen Wirkungsgrades der langfristig realisierbaren Variante VL2-GMDKP zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme

Die Entwicklung der Optimierungsparameter und -kriterien der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL2-GMDKP gleicht qualitativ der Entwicklung der kurzfristig realisierbaren Variante (VK2-GMDKP). Daher entspricht die Diskussion bzw. Interpretation der Ergebnisse den Ausführungen in Kapitel 7.2.4. Die Betrachtung des Optimierungsverlaufs verdeutlicht die bei der Optimierung der kurzfristig realisierbaren Varianten in Kapitel 7.2 beobachtete Tendenz, dass eine stetige Verbesserung der Optimierungsparameter durch die Maximierung des Stoffmengenstroms des Arbeitsmittels sowie durch die Minimierung des Anteils an KWK-Gas und des Methanisierungsdruckes erreicht werden kann. Im Unterschied zu den kurzfristig realisierbaren Varianten ist eine Reduzierung des Methanisierungsdruckes aufgrund der druckaufgeladenen Vergasung jedoch nicht möglich.

**Optimierungsparameter.** Wie bei der Optimierung der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten, nimmt der Anteil an KWK-Gas im Laufe der Optimierung seinen Minimalwert null an und der Stoffmengenstrom des Arbeitsmittels wird maximiert (Abb. 7.13). Der Methanisierungsdruck wird im Zuge der Optimierung minimiert, d. h. der Vergasungsdruck von 10 bar bleibt ohne zusätzliche Kompression konstant (62,5 % des Maximalwertes von 16 bar).

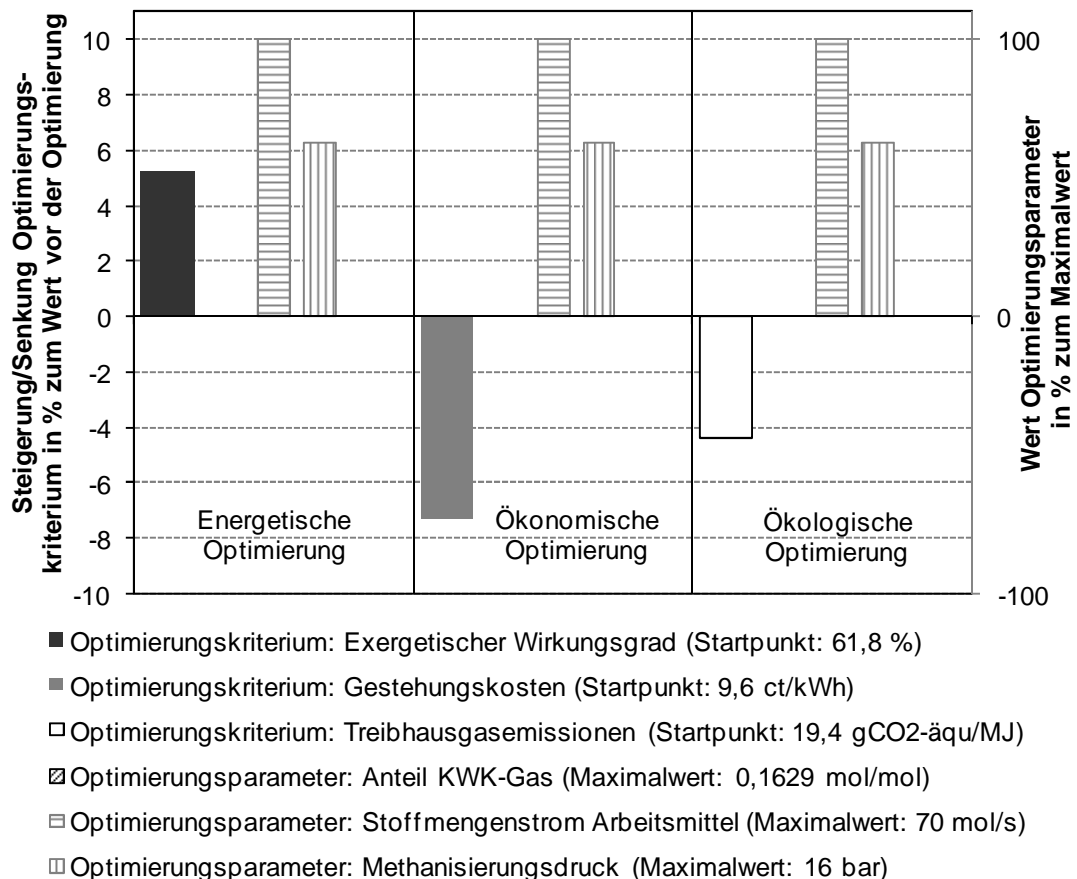


Abb. 7.13 Optimierungsparameter und -kriterien der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL2-GMDKP zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme nach erfolgter Optimierung

## 8 Vergleich der optimierten Konzeptvarianten

In Kapitel 6 werden Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme und in Kapitel 7 Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme optimiert. Nachfolgend werden die Ergebnisse dieser Optimierungen miteinander verglichen und diskutiert.

### 8.1 Kurzfristig realisierbare Konzeptvarianten

Zunächst werden die Ergebnisse der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten gegenübergestellt.

#### 8.1.1 Energetische Kenngröße

Bei der Gegenüberstellung der optimierten energetischen Kenngröße, dem exergetischen Wirkungsgrad, wird deutlich, dass sowohl der Wirkungsgrad der Konzeptvariante ohne als auch die Wirkungsgrade der Varianten mit Strombereitstellungsaggregaten optimiert werden können (Abb. 8.1). Dabei zeigt die Konzeptvariante ohne Stromerzeugung (VK1) den höchsten Wirkungsgrad von 64,7 %. Die Varianten, bei denen die Stromerzeugung mit Hilfe eines Dampfkraftprozesses realisiert wird (VK2-GMDKP, VK4-GTDKP), erreichen einen leicht geringeren Wirkungsgrad von 64,5 % und Varianten mit ORC-Modul (VK3-GMORC, VK5-GTORC) weisen nach der Optimierung einen exergetischen Wirkungsgrad von 63,7 % auf. Es gelingt demnach, den Wirkungsgrad der Varianten mit Dampfkraftprozess durch die Optimierung auf ein vergleichbares Niveau mit der Variante ohne Stromerzeugung zu bringen. Der exergetische Nachteil der Stromerzeugungskonzepte im Startpunkt der Optimierung lässt sich damit durch geeignete Auslegungen (Abwärmenutzung zur Stromerzeugung, Minimierung der Last der Gasmotoren und Turbinen) ausgleichen.

Der Vergleich der Konzepte mit integrierter Strombereitstellung zeigt, dass die Varianten mit Dampfkraftprozess nach der Optimierung zu höheren exergetischen Wirkungsgraden führen (64,5 %) als Prozesse mit ORC-Modul (63,7 %). Diese höheren Wirkungsgrade der Konzeptvarianten mit Dampfkraftprozess können thermodynamisch mit den Frischdampfparametern des Arbeitsmittels begründet werden (480 °C; 36 bar), die nach dem Carnot-Wirkungsgrad (Gleichung (2-4)) [Lucas 2004] unter idealisierten Prozessbedingungen zu höheren elektrischen Wirkungsgraden führen als die Dampfparameter des Arbeitsmittels des ORC-Moduls (300 °C; 5 bar). Die zur Verfügung stehende Prozessabwärme hat also ein ausreichendes Temperaturniveau, um die in Bezug auf den elektrischen Wirkungsgrad vorteilhaften Dampfparameter des Dampfkraftprozesses zu gewährleisten. Auf diese Weise können mit den Varianten mit Dampfkraftprozess im Vergleich zu den Varianten mit ORC-Modul höhere exergetische Anlagenwirkungsgrade erzielt werden. Zudem wird deutlich, dass die Varianten mit Dampfkraftprozess und die Varianten mit ORC-Modul untereinander jeweils dieselben optimierten exergetischen Wirkungsgrade aufweisen (64,5 bzw. 63,7 %). Dies begründet sich durch den Verlauf der Optimierung (Kapitel 7.2.4). Es erreichen diejenigen Prozesseinstellungen maximale Wirkungsgrade, bei denen sich die Last der Gasmotoren und der Gasturbinen minimiert. Somit sind die Varianten VK2-GMDKP und VK4-GTDKP nach der Optimierung, also mit ausgeschalteten Gasmotoren und ausgeschalteter Gasturbine, identisch. Gleiches gilt für die Varianten mit Gasmotor und ORC-Modul sowie Gasturbine und ORC-Modul.

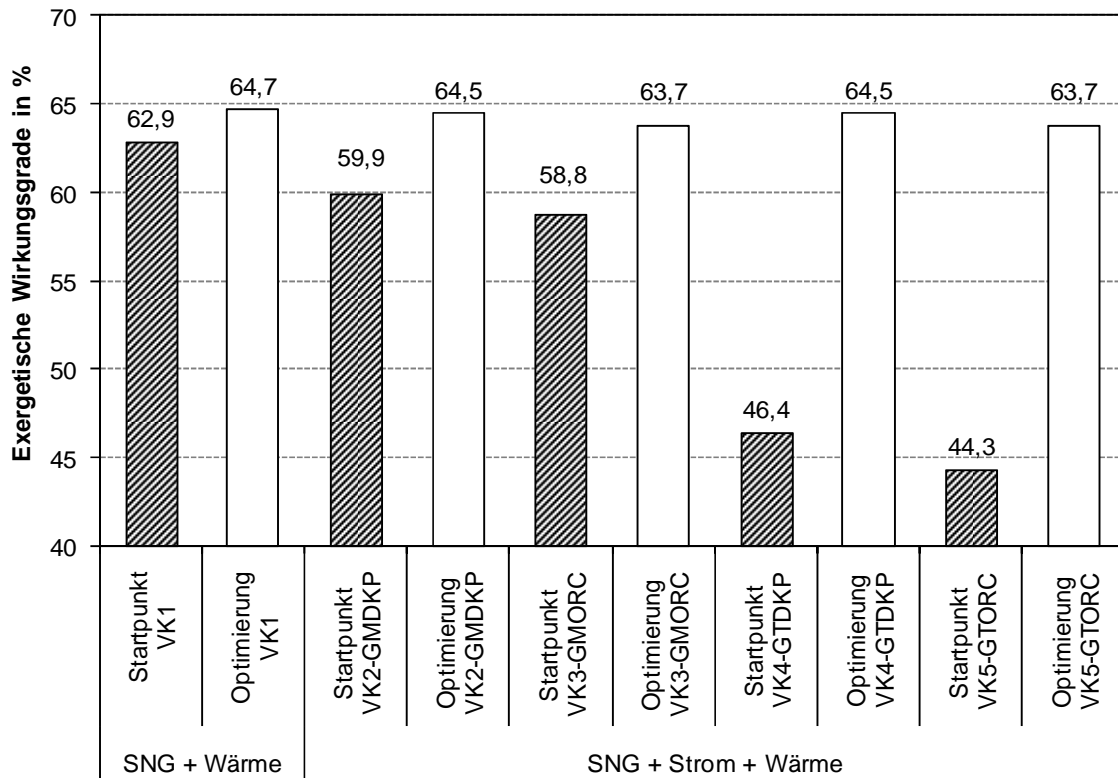


Abb. 8.1 Gegenüberstellung der optimierten exergetischen Wirkungsgrade der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten

### 8.1.2 Ökonomische Kenngröße

Die Gegenüberstellung der Optimierungsergebnisse zeigt sowohl für die Konzeptvarianten ohne als auch für die Varianten mit Stromerzeugungsaggregaten eine Verbesserung der Gestehungskosten durch die Optimierung. Die niedrigsten Gestehungskosten werden durch die Konzeptvariante ohne Stromerzeugung (VK1) sowie durch die Varianten mit Dampfkraftprozess (VK2-GMDKP, VK4-GTDKP) erzielt (Abb. 8.2). Dabei werden die Bio-SNG-Gestehungskosten durch die Optimierung auf 9,1 ct/kWh<sub>SNG</sub> reduziert. Die im Vergleich zu den Dampfpreisen hohen Stromvergütungssätze ermöglichen den Varianten mit Dampfkraftprozess trotz ihres leicht geringeren exergetischen Wirkungsgrad das Erreichen derselben Gestehungskosten wie bei der Variante VK1. Aufgrund der zusätzlichen Investitionen, die in Bezug auf die KWK-Aggregate berücksichtigt werden müssen, weisen die Varianten mit Dampfkraftprozess (VK2-GMDKP, VK4-GTDKP) jedoch nicht derart niedrige Gestehungskosten auf wie die Stromvergütungssätze erwarten lassen. Die Varianten mit Dampfkraftprozess als Stromerzeugungsaggregat und die Varianten ohne Stromproduktion sind daher unter Berücksichtigung der zugrunde gelegten Rahmenbedingungen aus ökonomischer Sicht gleichwertig. Ersterer bieten jedoch die Möglichkeit, durch Eigenstromproduktion wirtschaftliche Risiken in Zusammenhang steigender Strompreise aufzufangen.

Wie bei der Optimierung der exergetischen Wirkungsgrade weisen die Varianten mit ORC-Modul (VK3-GMORC, VK5-GTORC) geringfügig schlechtere Ergebnisse auf als die Varianten mit Dampfkraftprozess (VK2-GMDKP, VK4-GTDKP). Dies kann wiederum mit den Frischdampfparametern der Arbeitsmittel der Prozesse begründet werden. Ebenfalls wird deutlich, dass die erzielten Gestehungskosten der Varianten mit Gasmotoren und Dampfkraftprozess und der Varianten mit Gasturbine und Dampfkraftprozess identisch sind, da sich im Zuge der Optimierung weder der Einsatz von

Gasmotoren nach der Einsatz der Gasturbine als vorteilhaft erweist (Last im Optimum gleich null) und somit im Endergebnis nicht berücksichtigt ist.

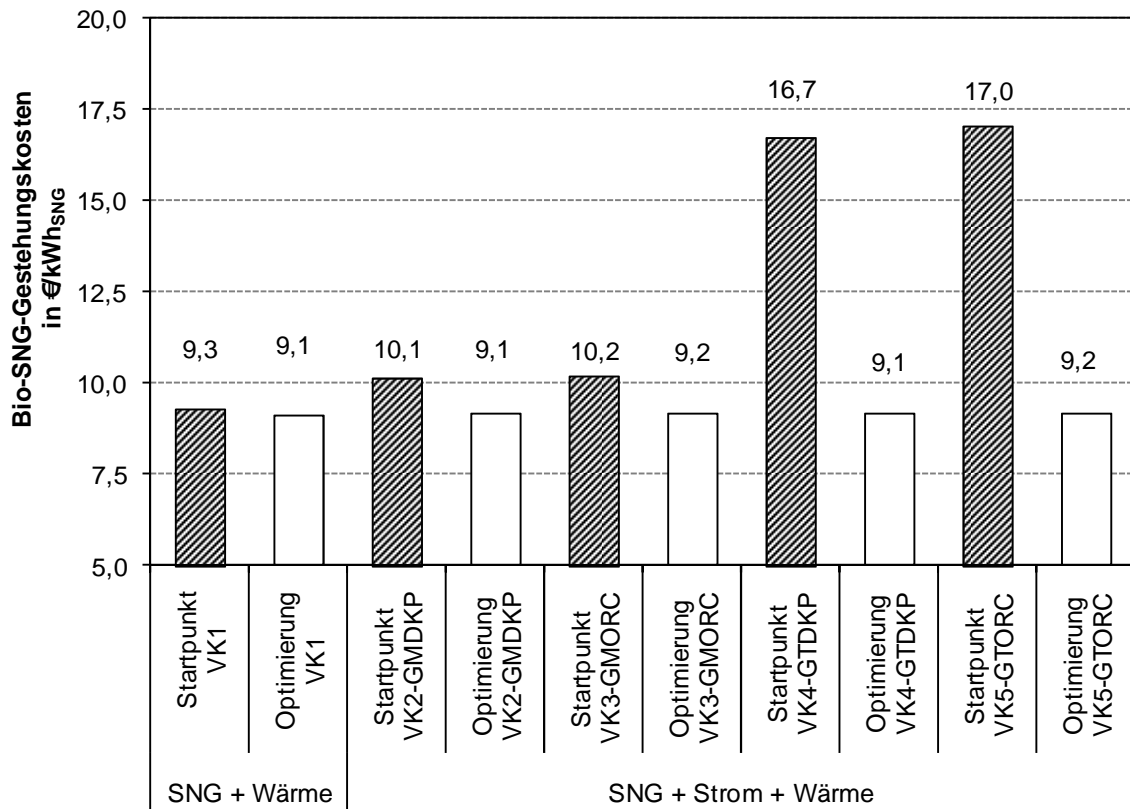


Abb. 8.2 Gegenüberstellung der optimierten Bio-SNG-Gestehungskosten der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten

### 8.1.3 Ökologische Kenngröße

Abschließend werden die Ergebnisse der Minimierung der spezifischen Treibhausgasemissionen betrachtet (Abb. 8.3). Qualitativ gleichen diese Ergebnisse denen der Gestehungskostenoptimierung. Sowohl die Konzeptvarianten ohne Stromerzeugung als auch die Konzeptvarianten mit Stromerzeugung können optimiert werden. Die besten Werte, d. h. Emissionen von  $17,0 \text{ g}_{\text{CO}_2\text{-Äqu}}/\text{MJ}_{\text{SNG}}$ , werden durch die Konzeptvariante ohne Stromerzeugung (VK1) sowie durch die Varianten mit Dampfkraftprozess (GMDKP, VK4-GTDKP) erzielt. Varianten ohne Stromerzeugung und Varianten mit Dampfkraftprozess stellen damit aus ökologischer Sicht gleichwertige Alternativen dar. Wie bei der Betrachtung der optimierten exergetischen Wirkungsgrade und Gestehungskosten ist das Optimierungsergebnis der Varianten mit ORC-Modul (VK3-GMORC, VK5-GTORC) als Folge der niedrigeren Dampfparameter schlechter als das der Varianten mit Dampfkraftprozess (VK2-GMDKP, VK4-GTDKP). Weiterhin repräsentieren die Ergebnisse, wie auch die der energetischen und ökonomischen Optimierungen, Parametereinstellungen, bei denen die Last der Gasmotoren und Gasturbinen minimal ist.

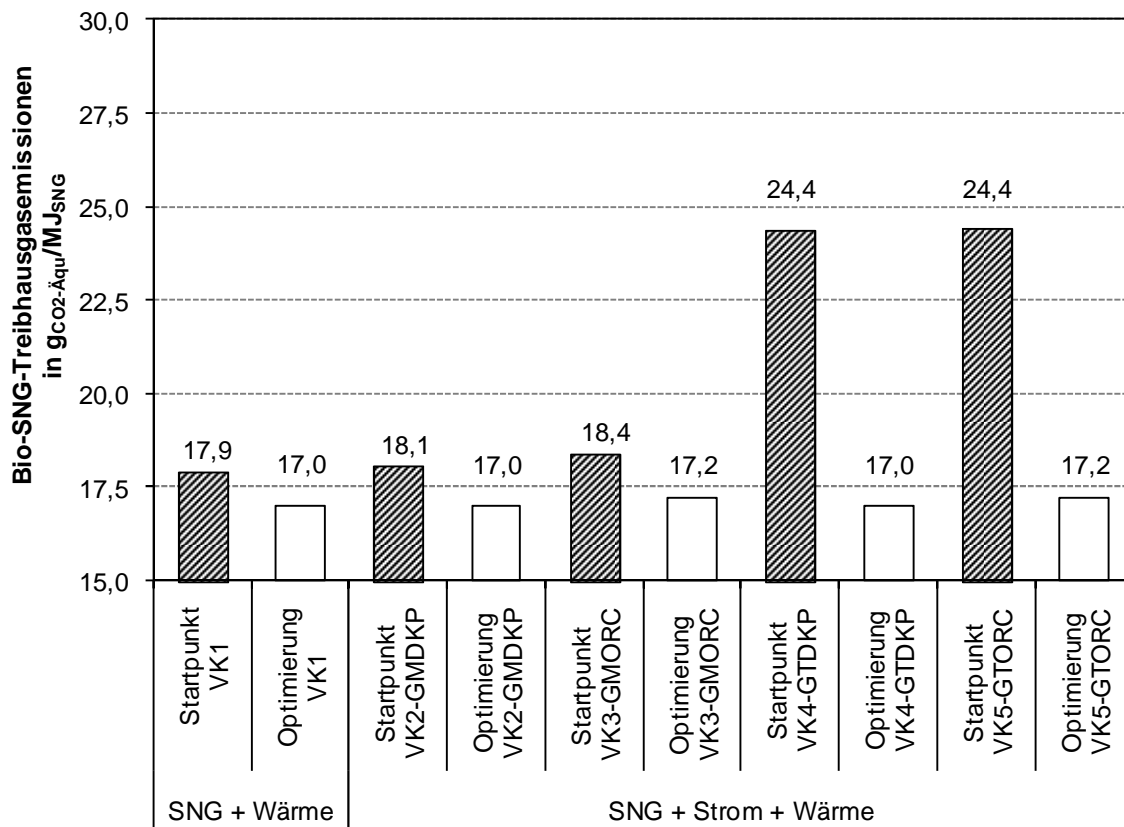


Abb. 8.3 Gegenüberstellung der optimierten Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten

#### 8.1.4 Diskussion

Bei der Gegenüberstellung der Optimierungsergebnisse wird deutlich, dass durch die Integration von KWK-Aggregaten wie Dampfkraftprozessen, die Prozessabwärme zur Strombereitstellung nutzen, ein energetisches, ökonomisches und auch ökologisches Niveau erreicht werden kann, wie es sonst nur bei optimaler Wärmenutzung zur Hochdruckdampferzeugung vorliegt. Dementsprechend bietet die Stromerzeugung durch Dampfkraftprozesse eine Möglichkeit, sowohl dem ökonomischen Risiko steigender Strompreise entgegen zu treten als auch bei Rahmenbedingungen, unter denen eine Prozessdampfproduktion keine Vorteile verspricht (z. B. keine externen Dampfabnehmer), zusätzliche Erlöse zu generieren.

Im Folgenden werden daher die Rahmenbedingungen und ihr Einfluss auf die Wirtschaftlichkeit der untersuchten Konzeptvarianten betrachtet. Dazu wird zum einen der Einfluss unterschiedlicher Strom- und Dampfverkaufspreise sowie zum anderen die Möglichkeit, Strom zu Spitzenlastzeiten zu erzeugen und zu verkaufen, diskutiert.

**Diskussion der Strom- und Dampfverkaufspreise.** Die Rahmenannahmen der Optimierungen und Analysen sind insbesondere in Bezug auf die Berechnung der Gestehungskosten von Relevanz. So weist die Konzeptvariante mit Dampfkraftprozess unter den gewählten Rahmenannahmen nach den Optimierungen vergleichbare Gestehungskosten auf wie die Konzeptvarianten mit Dampfproduktion (VK1).

Die Variation des Stromverkaufspreises (Abb. 8.4) zeigt jedoch, dass dieses Ergebnis nicht allgemeingültig ist. Durch eine Steigerung des Stromverkaufspreises auf etwa 0,113 €/kWh kann mit einem Dampfkraftprozess zur Abwärmenutzung ein höheres Gestehungskostenminderungspotenzial erreicht werden wie durch den Verkauf von

Hochdruckdampf für 0,04 €/kWh. Bei einer weiteren Steigerung des Stromverkaufspreises kann bei einem konstanten Dampfverkaufspreis von 0,04 €/kWh, das Potenzial zur Senkung der Gestehungskosten durch den Verkauf von Dampf sogar deutlich übertroffen werden. Gleichermäßen steigt das Gestehungskostenminderungspotenzial durch den Verkauf von Dampf mit dem Dampfverkaufspreis.

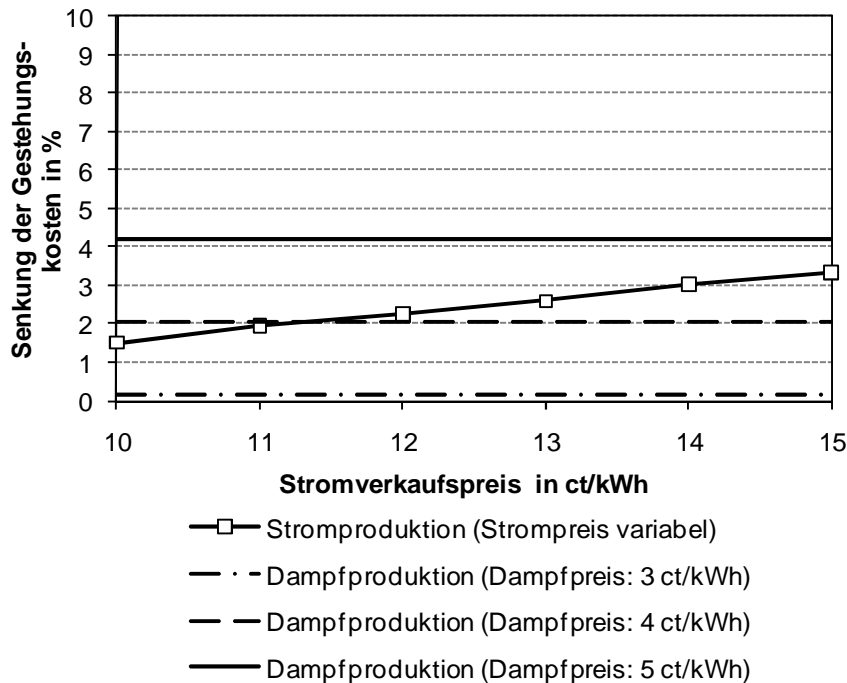


Abb. 8.4 Einfluss des Strom- und Dampfverkaufspreises auf das Potenzial zur Senkung der Bio-SNG-Gestehungskosten am Beispiel der kurzfristig realisierbaren Konzepte

**Erzeugung und Verkauf von Spitzenlaststrom.** Die Optimierungen zur Minderung der Bio-SNG-Gestehungskosten sind vor dem Hintergrund konstanter Stromvergütungssätze zu sehen. Dabei erweisen sich Konzeptvarianten, die Abwärme zur Stromerzeugung in Dampfkraftprozessen nutzen, jedoch auf die motorische Nutzung eines Gasteilstromes verzichten, als vielversprechend. Da der Strompreis an den Handelsbörsen allerdings in Abhängigkeit der Nachfrage stark variiert, können durch den Verkauf von zusätzlichem Strom, der durch die motorische Nutzung eines Gasteilstromes zu Spitzenlastzeiten erzeugt wird, gegenüber den Bio-SNG-Produktionsanlagen mit Dampfkraftprozess u. U. ökonomische Vorteile erzielt werden. Eine Möglichkeit, das Potenzial der Stromproduktion zu Spitzenlastzeiten zu untersuchen, ist die Betrachtung der jährlichen Gutschriften, die in Summe durch den Verkauf von SNG, Wärme und Strom erzielt werden können. Damit sich der Verkauf von zusätzlichem Spitzenlaststrom als lohnenswert erweist, müssen die Spitzenlaststrompreise eine bestimmte Stundenzahl pro Jahr an den Handelsbörsen vorherrschen. Diese minimale Stundenzahl ist jedoch insbesondere vom Erdgaspreis, zu dem das Hauptprodukt SNG verkauft werden kann, und den jährlichen Wärmeabnahmestunden abhängig.

Die Berechnungen zeigen (Abb. 8.5), dass – unter Berücksichtigung der Strompreisstunden der European Energy Exchange AG für das Jahr 2009 – die zusätzliche Stromerzeugung durch Gasmotoren lediglich bei Erdgashandelspreisen von 1 und 2 ct/kWh ökonomische Vorteile verspricht. Bei weniger als 4000 Volllaststunden Wärmeabnahme pro Jahr (Wärmevergütung von 3 ct/kWh) ist der Einsatz von Gasmotoren nur bei einem Erdgaspreis von 1 ct/kWh von Vorteil, da die erforderlichen Spitzenstrompreise für höhere Erdgashandelspreise nur eine unzureichende Anzahl an Stunden im Jahr erreicht werden.



Mit Blick auf einen durchschnittlichen Grenzübergangspreis für Erdgas im Jahr 2009 von etwa 2 ct/kWh [BAFA 2010] scheint der Einsatz von Gasmotoren, um zusätzlich erzeugten Strom zu Spitzenlastpreisen zu verkaufen, somit nur bei voller Wärmeabnahme sinnvoll. Aufgrund der hohen Anzahl an erforderlichen Strompreisstunden (SPS) von Vergütungssätzen zwischen 3 und 4 ct/kWh sind die Vorteile im Vergleich zum Betrieb der Anlage ohne Gasmotor zudem gering und die Installation von Gasmotoren ist außerdem mit zusätzlichen Investitionen bzw. daraus resultierend mit einem erhöhten Risiko verbunden.

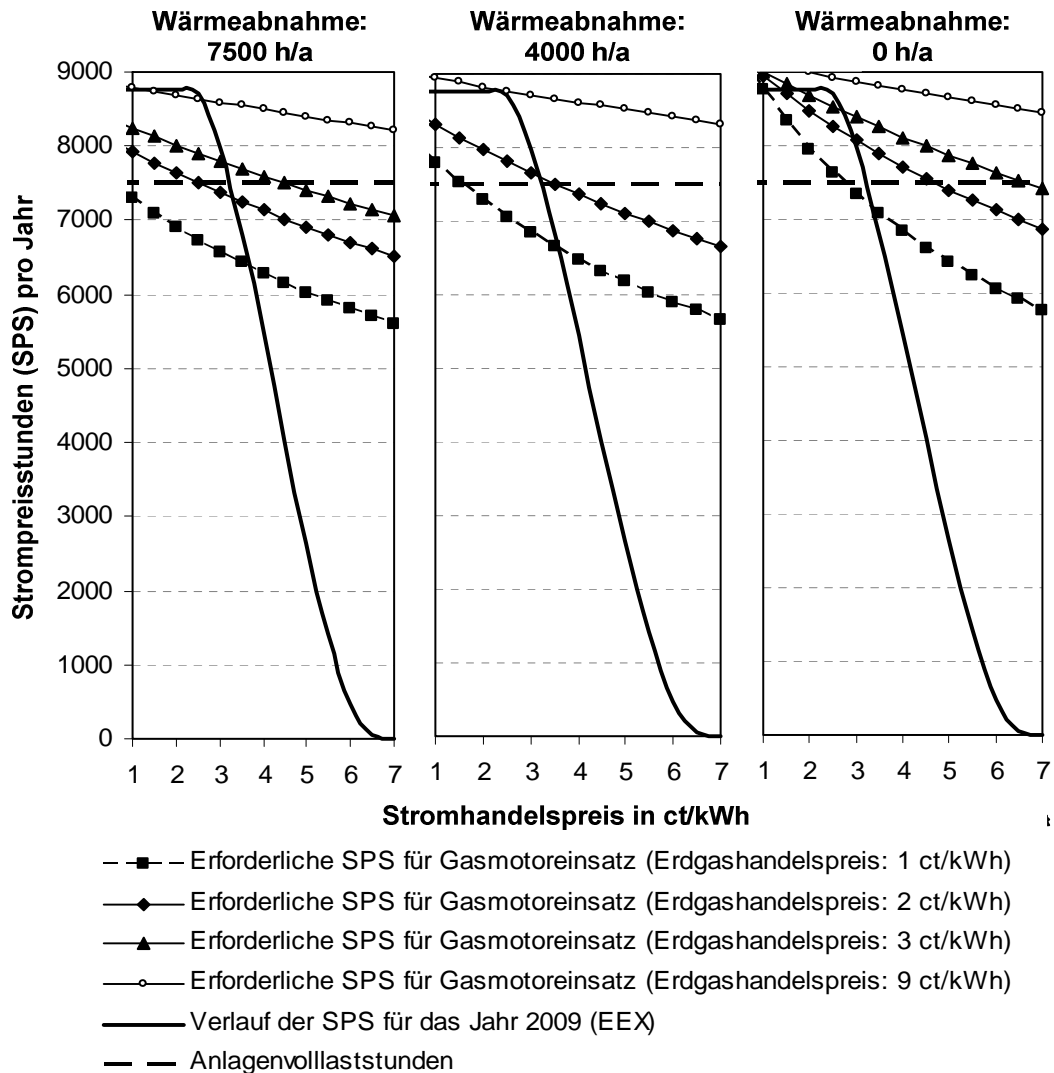


Abb. 8.5 Erforderliche Strompreisstunden für den Einsatz eines Gasmotors zur Erzeugung von Spitzenlaststrom bei unterschiedlichen Erdgashandelspreisen und Wärmeabnahmestunden am Beispiel der kurzfristigen Konzeptvarianten

## 8.2 Langfristig realisierbare Konzeptvarianten

Im Folgenden werden die Optimierungsergebnisse der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten miteinander verglichen.

### 8.2.1 Energetische Kenngröße

Die Ergebnisse der Optimierung des exergetischen Wirkungsgrades der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten (Abb. 8.6) zeigen eine ähnliche Charakteristik wie die

Ergebnisse der kurzfristig realisierbaren Varianten. Demnach wird sowohl durch die Varianten zur Bereitstellung von Prozessdampf als auch durch die Varianten mit integrierter Stromerzeugung eine Optimierung des exergetischen Wirkungsgrades erreicht. Die Variante mit Dampferzeugung (VL1) weist dabei das größte Optimierungspotenzial auf, ihr exergetischer Wirkungsgrad kann von 64,1 auf 65,3 % verbessert werden. Die Varianten mit Dampfkraftprozess erzielen nur geringfügig niedrigere Wirkungsgrade (65,1 %). Demnach kann auch durch Konzeptvarianten mit Stromproduktion bei der effizienten Nutzung von Hochtemperaturwärme in Dampfkraftprozessen und einer Lastminimierung der Gasmotoren und Gasturbinen ein Wirkungsgradniveau nahe dem Optimum erreicht werden.

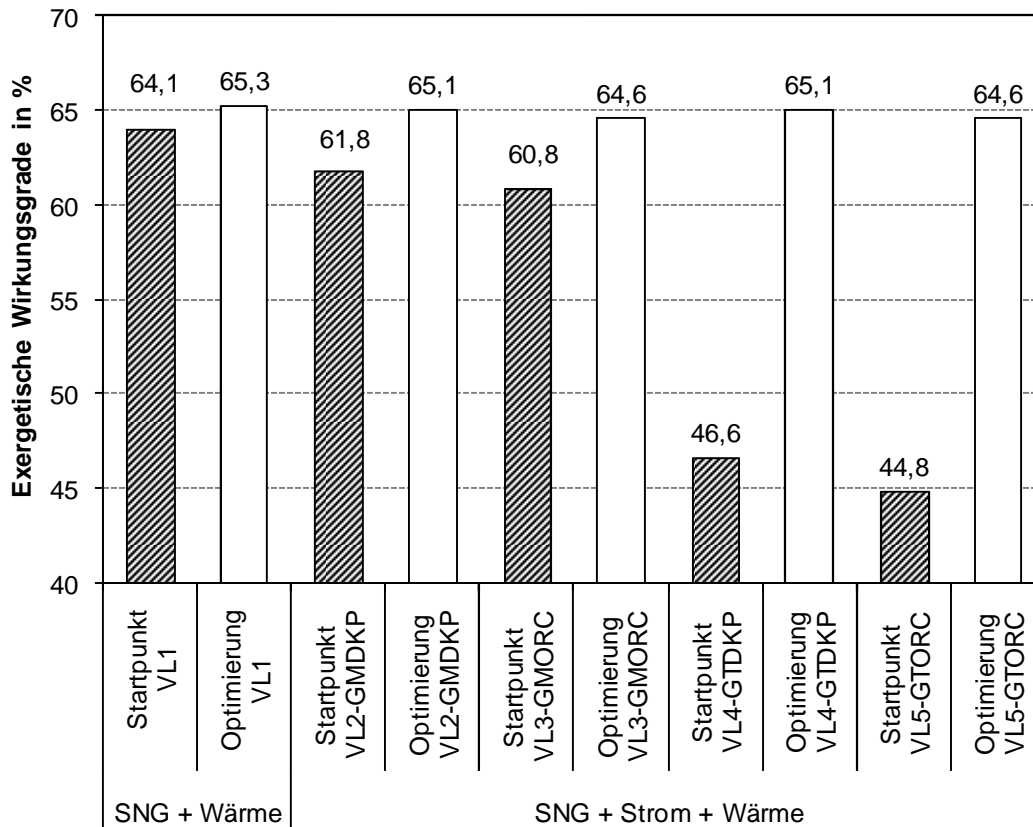


Abb. 8.6 Gegenüberstellung der optimierten exergetischen Wirkungsgrade der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

## 8.2.2 Ökonomischen Kenngröße

Bei der Gegenüberstellung der Ergebnisse der ökonomischen Optimierungen (Abb. 8.7) zeigt sich für alle untersuchten Varianten eine Verbesserung der Gestehungskosten. Dabei weist die Konzeptvariante mit Dampferzeugung (VL1) die niedrigsten Gestehungskosten von 8,8 €/kWh<sub>SNG</sub> auf. Sämtliche Varianten mit Stromerzeugung (VL2-GMDKP, VL3-GMORC, VL4-GTDKP, VL5-GTDKP) erreichen demgegenüber Gestehungskosten von 8,9 €/kWh<sub>SNG</sub>. Unterschiede treten zwischen den Varianten mit Stromerzeugung nicht hervor, da die Stromerzeugungsaggregate, die einen Gasteilstrom in elektrische Energie umwandeln, durch die Optimierung abgeschaltet werden und die zur Verfügung stehende Prozessabwärme aufgrund der eingesetzten Heißgasreinigung so gering ist, dass ein deutlicher ökonomischer Unterschied zwischen Varianten mit Dampfkraftprozess und ORC-Modul nicht sichtbar wird. Der geringe Gestehungskostenunterschied zwischen der Variante ohne Stromproduktion und den Varianten mit Stromproduktion lässt keine klare Empfehlung bezüglich einer optimalen Konzeptvariante zu. Es wird aber durchaus

deutlich, dass Varianten, die Prozessabwärme zur Stromproduktion nutzen, die Möglichkeit bieten, wirtschaftliche Risiken durch steigende Strompreise zu dämpfen ohne in Bezug auf ihre Wettbewerbsfähigkeit (Gestehungskosten) eingeschränkt zu werden.

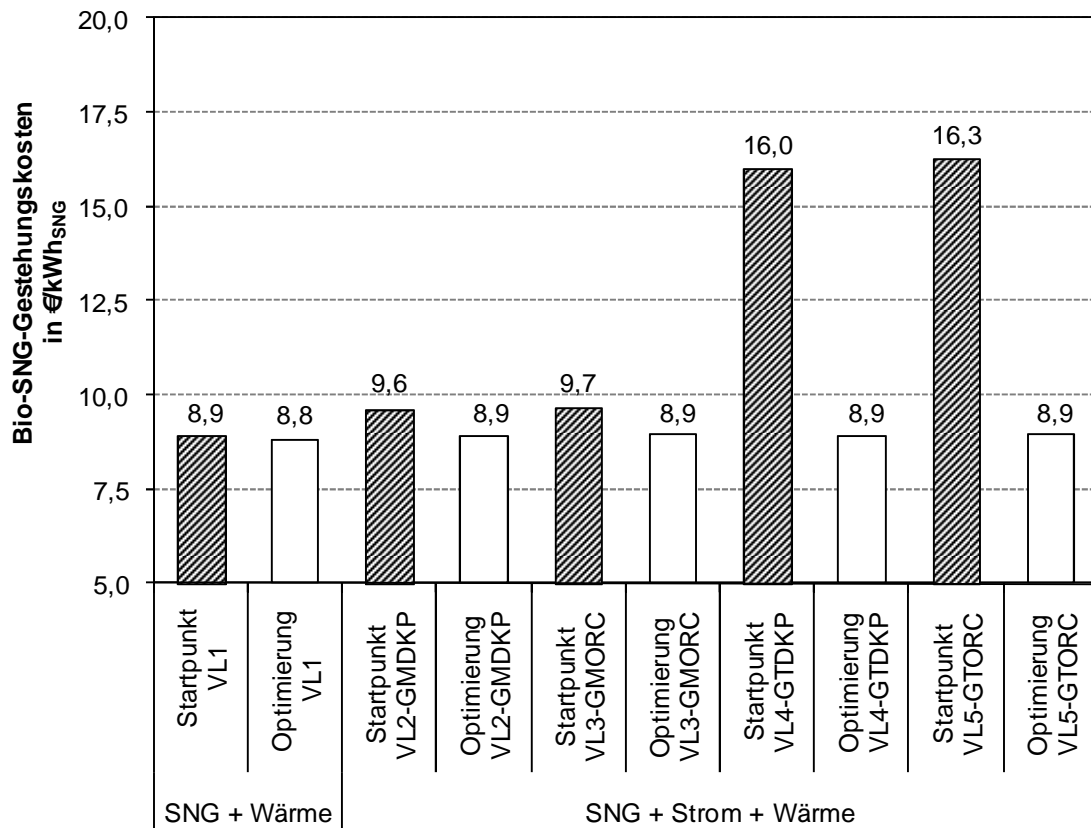


Abb. 8.7 Gegenüberstellung der optimierten Bio-SNG-Gestehungskosten der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

### 8.2.3 Ökologischen Kenngröße

Die Ergebnisse der ökologischen Optimierungen ergeben das gleiche Bild wie die Ergebnisse der exergetischen Optimierung (Abb. 8.8). Sowohl bei der Variante ohne als auch bei den Varianten mit Stromerzeugung werden die Treibhausgasemissionen durch die Optimierung reduziert. Die Konzeptvariante mit Dampferzeugung (VL1) und die Varianten mit Dampfkraftprozess (VL2-GMDKP, VL4-GTDKP) sind mit  $18,5 \text{ gCO}_2\text{-Äqu/MJ}_{\text{SNG}}$  durch die niedrigsten Treibhausgasemissionen gekennzeichnet. Die Emissionen der Varianten mit ORC-Modul (VL3-GMORC, VL5-GTORC) erreichen etwas höhere Werte. Das Optimierungspotenzial der untersuchten Varianten liegt demnach auf einem vergleichbaren Niveau. Dieses ist jedoch in starkem Maße an die zur Verfügung stehende Wärmemenge gebunden.

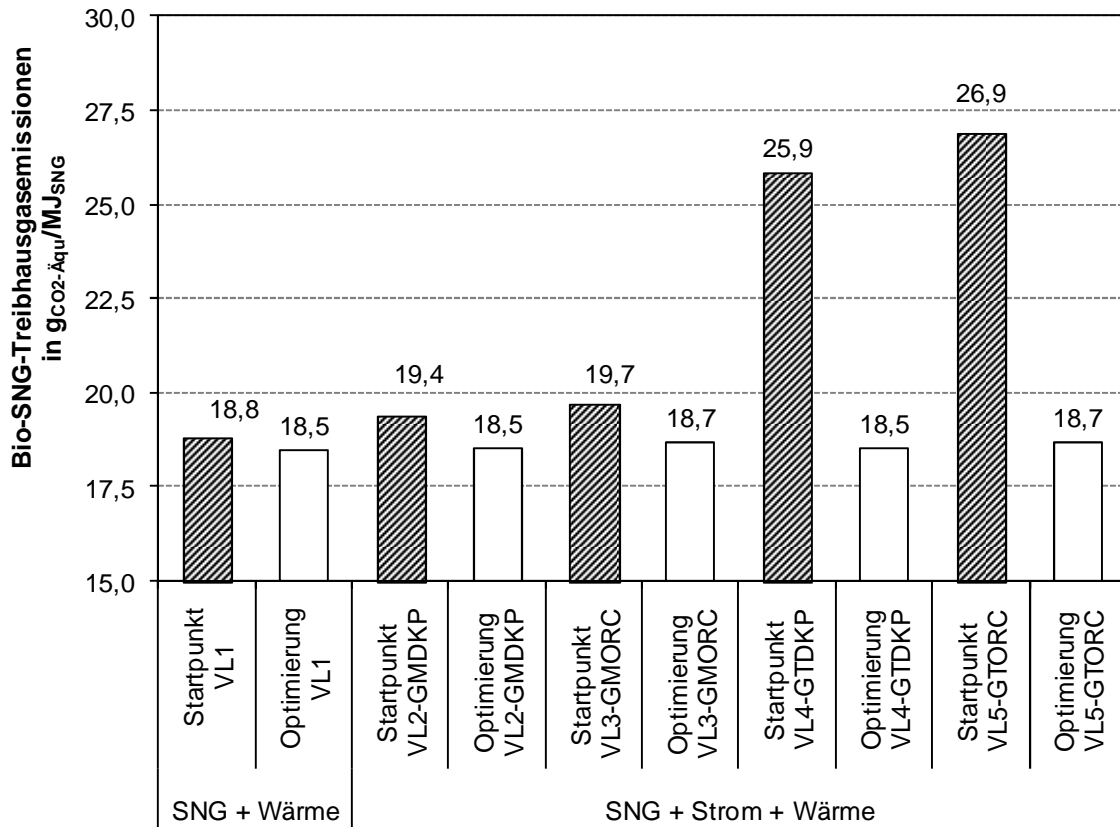


Abb. 8.8 Gegenüberstellung der optimierten Bio-SNG-Treibhausgasemissionen der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten

#### 8.2.4 Diskussion

Durch den Vergleich der optimierten langfristigen Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme mit den Konzeptvarianten mit integrierter Stromerzeugung wird deutlich, dass durch die effiziente Abwärmenutzung zur Stromerzeugung bezüglich des Wirkungsgrades, der Gesteungskosten und der Treibhausgasemissionen ein ähnliches Niveau erreicht werden kann wie bei der Hochdruckdampferzeugung. Die für die kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten durchgeführte Diskussion bezüglich variabler Dampf- und Stromvergütungssätze sowie die Stromerzeugung zu Spitzenlastzeiten ist auch auf die langfristig realisierbaren Varianten übertragbar. Die Rahmenbedingungen sprechen bei externen Dampfabnehmern und hohen Dampfverkaufspreisen für die Variante mit Dampferzeugung. Herrscht hingegen Unsicherheit in Bezug auf Strom- und Dampfverkaufspreise sowie Stromeinkaufspreise, bietet der Einsatz von Dampfkraftprozessen eine Alternative zur Prozessdampf- bzw. Fernwärmeerzeugung, mit der die Abhängigkeit von den Energiepreisen reduziert werden kann.

Bei der Analyse der Stromerzeugung zu Spitzenlastzeiten stehen, wie für die kurzfristigen Konzeptvarianten gezeigt, ebenfalls die Rahmenbedingungen im Vordergrund. Demnach ist eine Stromerzeugung zu Spitzenlastzeiten nur dann ökonomisch sinnvoll, wenn die SNG-Vergütungssätze entsprechend niedrig und die Erlöse durch den Verkauf der bei der Stromerzeugung zusätzlich anfallenden Wärme gesichert sind. Aufgrund der geringen Abwärmemenge des langfristig realisierbaren Konzeptes und dem damit verbundenen geringen Potenzial die Abhängigkeit gegenüber den Strombezugspreisen durch Dampfkraftprozesse zu verringern, ist die Stromerzeugung zu Spitzenlastzeiten durch Gasmotoren bei den langfristigen Konzeptvarianten von größerer Bedeutung als bei den kurzfristig realisierbaren Varianten.

## 9 Zusammenfassung

Die Integration von Strombereitstellungsaggregaten in Anlagen zur Erzeugung von SNG und Wärme verspricht u. a. eine Minimierung des wirtschaftlichen Risikos gegenüber schwankenden Rahmenbedingungen wie bspw. steigenden Strompreisen. Die Bewertung des Potenzials der Integration unterschiedlicher Stromerzeugungsaggregate in Bio-SNG-Anlagen stellt sich jedoch nicht zuletzt aufgrund komplexer Stoff- und Energieströme der Anlagen als Herausforderung dar.

Das Ziel der Arbeit war daher die Entwicklung einer methodischen Vorgehensweise zur Bestimmung und Bewertung des energetischen, ökonomischen und ökologischen Optimierungspotenzials von Bio-SNG-Konzeptvarianten ohne Stromproduktion im Vergleich zu Konzeptvarianten mit Stromproduktion.

Zur Bestimmung und Bewertung des Optimierungspotenzials dieser Konzeptvarianten wurde eine vierstufige Vorgehensweise entwickelt.

- Analyse der Startpunkte der Optimierung. Hier wurden definierte Konzeptvarianten hinsichtlich energetischer, ökonomischer und ökologischer Kennwerte analysiert. Als Kenngrößen dienten der exergetische Wirkungsgrad, die Bio-SNG-Gestehungskosten und die Bio-SNG-Treibhausgasemissionen. Zur Berechnung der für die Kenngrößenbestimmung erforderlichen Stoff- und Energiebilanzen wurde ein Simulationsprogramm entwickelt. Die Unsicherheit der Simulationsergebnisse wurde mit Hilfe der Monte Carlo Methode abgeschätzt.
- Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme. Konzeptvarianten ohne Stromerzeugung wurden in Bezug auf die Kenngrößen optimiert. Zur Optimierung der unterschiedlichen Konzeptvarianten wurde ein Algorithmus auf der Basis evolutionärer Optimierungsmechanismen entworfen und mit dem Simulationsprogramm zur Bilanzierung von Stoff- und Energieströmen verknüpft.
- Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme. Bei dieser Optimierung wurden die Kenngrößen von Varianten mit integrierten Stromerzeugungsaggregaten optimiert.
- Vergleich der Optimierungsergebnisse. Beim Vergleich der Optimierungen wurden die Ergebnisse der Konzeptvarianten ohne Stromerzeugung den Ergebnissen der Varianten mit Stromerzeugung gegenübergestellt. Auf diese Weise konnte das energetische, ökonomische und ökologische Optimierungspotenzial der Konzeptvarianten bzw. die Integration der Stromerzeugung in Bio-SNG-Anlagen bewertet sowie vielversprechende Prozessauslegungen identifiziert werden.

Die methodische Vorgehensweise wurde exemplarisch auf Konzeptvarianten mit allothermer Vergasung und nasser Gasreinigung sowie auf Varianten mit autothermer Vergasung und Heißgasreinigung angewendet. Die Ergebnisse können wie folgt zusammengefasst werden:

- Bei der Analyse der Startpunkte der Optimierungen gelang es, wesentliche Einflussfaktoren der untersuchten Konzeptvarianten auf die Kenngrößenberechnung zu identifizieren. Mit Blick auf die Bestimmung des exergetischen Wirkungsgrades wurden insbesondere die exergetischen Verluste bei der Konversion von Gas in elektrische Energie offensichtlich. Dabei stellt sich auch der Einsatz von Gasturbinen in Kombination mit druckaufgeladenen Vergasungssystemen als nachteilig dar. Bei der Bestimmung der Bio-SNG-Gestehungskosten beeinflussen die kapitalgebundenen Zahlungen sowie die Biomassekosten das Ergebnis wesentlich, während im Rahmen der Berechnung der

spezifischen Treibhausgasemissionen der Stromverbrauch der Bio-SNG-Anlage einen maßgeblichen Anteil an den gesamten Emissionen hat (Kapitel 5).

- Die Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG und Wärme führte zu einer Verbesserung der energetischen, ökonomischen und ökologischen Kennwerte durch die Nutzung von hochwertiger Prozessabwärme zur Dampfbereitstellung. Dabei können auf Basis der zu Grunde liegenden Prozesskonfigurationen Sattdampfdrücke von über 80 bar erreicht werden. Beim Einsatz von Heißgasreinigungssystemen, wie bei den langfristigen Konzeptvarianten, ist das Optimierungspotenzial der Abwärmennutzung gegenüber nassen Gasreinigungen eingeengt. Zudem zeigte die Optimierung, dass die Kompression des Vergasungsrohrgases vor der Methanisierung unter Berücksichtigung des Strombedarfs der Kompression und der exergetischen Verluste der Methanisierungsreaktion nachteilig ist (Kapitel 6).
- Die Optimierung der Konzeptvarianten zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme führte ebenfalls zu einer Verbesserung der betrachteten Kennwerte. Bei der Optimierung wird die Last der Stromerzeugungsaggregate minimiert, die einen Gasteilstrom zur Strombereitstellung nutzen (Gasmotoren, Gasturbinen). Die Last derjenigen Stromerzeugungsaggregate, die Prozessabwärme in elektrische Energie wandeln (Dampfkraftprozesse, ORC-Module), wird hingegen maximiert. Bei der Betrachtung der Optimierungsparameter wurde deutlich, dass diese bei der exergetischen, ökonomischen und ökologischen Optimierung ähnliche Werte annehmen. Die ökonomische und auch ökologische Wettbewerbsfähigkeit einer Konzeptvariante geht demnach mit der energetischen Effizienz einher. Insbesondere ökologische Fehlentwicklungen können daher bei energetischen Optimierungen nahezu ausgeschlossen werden (Kapitel 7).
- Der Vergleich der Optimierungsergebnisse der untersuchten Konzeptvarianten zeigte, dass die Ausnutzung der hochwertigen Prozessabwärme von Bio-SNG-Produktionsanlagen Potenzial für exergetische, ökonomische und ökologische Prozessverbesserungen bietet. Dabei erscheinen sowohl die Erzeugung von Hochdruckdampf als auch die Nutzung der Wärme in Dampfkraftprozessen zur Stromproduktion als Alternativen. Der Einsatz von ORC-Modulen ist aufgrund des hohen Temperaturniveaus der Prozessabwärme nicht empfehlenswert (Kapitel 8).
- Die Integration von Dampfkraftprozessen, die Prozessabwärme zur Stromerzeugung nutzen, erweist sich demnach als geeignete Option, das wirtschaftliche Risiko bei steigenden Strompreisen zu minimieren. KWK-Aggregate, die einen Gasteilstrom zur Bereitstellung elektrischer Energie nutzen, sind dazu ungeeignet, da sie die Wettbewerbsfähigkeit der Bio-SNG-Produktion im Auslegungszustand, d. h. im Vergleich ohne Stromproduktion, einschränken.
- Unabhängig von der Minimierung des wirtschaftlichen Risikos bei steigenden Strompreisen sind Standortbedingungen und ökonomische Rahmenannahmen (z. B. der Dampfverkaufspreis, Stromverkaufspreis) einer Anlage entscheidend für deren Konzeptionierung. Besteht an einem Anlagenstandort kein Bedarf an Prozessdampf, so sollte die Integration eines Dampfkraftprozesses zur Stromproduktion geplant werden (Kapitel 8).
- Der Einsatz von Gasmotoren mit dem Ziel, den auf diese Weise produzierten Strom zu Spitzenlastzeiten mit hohen Stromhandelspreisen zu verkaufen, stellt sich aufgrund der zusätzlichen Investitionsaufwendungen für die Gasmotoren als risikoreiche Option dar. Unter Berücksichtigung der betrachteten Rahmenannahmen verspricht der Verkauf von Spitzenlaststrom lediglich einen geringen ökonomischen Vorteil. Voraussetzung für einen ökonomischen Vorteil

sind der ganzjährige Verkauf von Prozessabwärme und hohe Strompreisstundensätze. Bei steigenden Erdgashandelspreisen oder geringeren Wärmeabnahmestunden entstehen durch den Verkauf des durch Gasmotoren erzeugten Spitzenlaststroms ökonomische Nachteile gegenüber Konzepten, die auf die Stromerzeugung aus einem Gasteilstrom verzichten (Kapitel 8).

Mit Blick auf den vorliegenden Untersuchungsrahmen erweist sich die thermo-chemische Bereitstellung von Erdgassubstituten als vielversprechend, einen Beitrag zu einer nachhaltigen Energieversorgung leisten zu können. Effiziente Wärmenutzungskonzepte zur Dampf- und Stromproduktion erscheinen hierbei als geeignet, Standortgegebenheiten und Rahmenbedingungen optimal auszunutzen.

**10 Literaturverzeichnis**

- [Abraham 2009] Abraham, R.: *Coal processing and fuels from coal*, OIL GAS European Magazin, Vol. 35 (2009), 25-30
- [Ahrendts 1977] Ahrendts, J.: *Die Exergie chemisch reaktionsfähiger Systeme*, VDI-Forschungsheft 579, VDI-Verlag GmbH; Düsseldorf, 1977
- [ASUE 2005] Arbeitsgemeinschaft für sparsamen und umweltfreundlichen Energieverbrauch e.V. (ASUE) (Hrsg.): *BHKW-Kenndaten 2005*, Verlag Rationeller Erdgaseinsatz; Kaiserslautern, 2005
- [Baehr 1965] Baehr, H.D.: *Energie, Exergie, Anergie*, Beitrag in „Energie und Exergie – Die Anwendung des Exergiebegriffs in der Energietechnik“, VDI-Verlag GmbH; Düsseldorf, 1965
- [Baehr 2002] Baehr, H.D. (Hrsg.): *Thermodynamik*, 11. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 3-540-43256-6; Berlin, Heidelberg, New York, 2002
- [BAFA 2010] Bundesamt für Wirtschaft und Ausfuhrkontrolle (BAFA): *EnergieINFO* 2009, <http://www.bafa.de/bafa/de/energie/erdgas/energieinfo/2009/index.html>, Stand: 10.09.2010
- [BASF 2009] BASF: *Amine Waschmaschine*, <http://www.basf.de/de/intermed/news/topstory/archiv/amdea.htm>, Stand: 11.12.2009
- [Bäck 1996] Bäck, T., Schwefel, H.-P.: *Evolutionary computation: An overview*, IEEE International Conference on Evolutionary Computation; Nagoya, 1996
- [Behr 2010] Behr, A., Agar, D.W., Jörissen, J.: *Einführung in die technische Chemie*, 1. Aufl., Spektrum Akademischer Verlag, ISBN: 978-3-8274-2073-2; Heidelberg, 2010
- [Beitz 2001] Beitz, W., Grote, K.-H. (Hrsg.): *Dubbel – Taschenbuch für den Maschinenbau*, 20. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 3-540-67777-1; Berlin, Heidelberg, New York, 2001
- [Bergman 2005 a] Bergman, P.C.A., Boersma, A.R., Zwart, R.W.R., Kiel, J.H.A.: *Torrefaction for biomass co-firing in existing coal-fired power stations*, ECN report, ECN-RX—05-013; Petten, 2005
- [Bergman 2005 b] Bergman, P.C.A.: *Combined torrefaction and pelletisation*, ECN report, ECN-RX—05-073; Petten, 2005
- [Bergman 2005 c] Bergman, P.C.A., Kiel, J.H.A.: *Torrefaction for biomass upgrading*, ECN report, ECN-RX—05-180; Petten, 2005
- [Berry 1982] Berry, R.J.: *Neo-Darwinism*, 1. Aufl., Arnold; London, 1982
- [Beucher 2007] Beucher, O.: *Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik mit MATLAB*, 2. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 978-3-540-72155-0; Berlin, Heidelberg, New York, 2007
- [Blaß 1997] Blaß, E. (Hrsg.): *Entwicklung verfahrenstechnischer Prozesse*, 2. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 978-3-540-61823-2; Berlin, Heidelberg, New York, 1997
- [Blazek 1979] Blazek, C.F., Baker, N.R., Tison, R.R.: *High-Btu coal gasification processes*, Institute of Gas Technology, ANL/CES/TE 79-2; Chicago, 1979
- [BMW i 2007] Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMW i), Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) (Hrsg.): *Bericht zur Umsetzung der in der Kabinettsklausur*



- am 23./24.08.2007 in Meseberg beschlossenen Eckpunkte für ein Integriertes Energie- und Klimaprogramm; Berlin, 2007
- [Bode 2006] Bode, H.: *MATLAB-SIMULINK – Analyse und Simulation dynamischer Systeme*, 2. Aufl., B. G. Teubner Verlag/GWV Fachverlage GmbH, ISBN: 3-8351-0050-5; Wiesbaden, 2006
- [Bolhàr-Nordenkamp 2004] Bolhàr-Nordenkamp, M., Hofbauer, H.: *Biomass gasification combined cycle thermodynamic optimisation using integrated drying*, ASME Turbo Expo 2004: Power for Land, Sea and Air; Wien, 2004
- [Boerrigter 2006 a] Boerrigter, H., Bolhàr-Nordenkamp, M., Deurwaarder, E.P., Eriksson, T., Könemann, J.W., Rauch, R., van Paasen, S.V.B., Palonen, J.: *OLGA optimum - Improvement of the economics of integrated biomass gasification plants by extension of the functionalities of the OLGA tar washer*, ECN report, ECN-E—06-048; Petten, 2006
- [Boerrigter 2006 b] Boerrigter, H., Rauch, R.: *Review of applications of gases from biomass gasification*, ECN report, ECN-RX—06-066; Petten, 2006
- [Boie 1952] Boie, W.: *Beiträge zum feuerungstechnischen Rechnen*, Wissenschaftliche Zeitschrift der Technischen Hochschule Dresden, Vol. 2 (1952/53), 688-718
- [BP 2010] British Petroleum (BP): *BP statistical review of world energy – June 2010*,  
[http://www.bp.com/liveassets/bp\\_internet/globalbp/globalbp\\_uk\\_english/reports\\_and\\_publications/statistical\\_energy\\_review\\_2008/STAGING/local\\_assets/2010\\_downloads/statistical\\_review\\_of\\_world\\_energy\\_full\\_report\\_2010.pdf](http://www.bp.com/liveassets/bp_internet/globalbp/globalbp_uk_english/reports_and_publications/statistical_energy_review_2008/STAGING/local_assets/2010_downloads/statistical_review_of_world_energy_full_report_2010.pdf), Stand: 01.03.2010
- [Brandt 1991] Brandt, F.: *Brennstoffe und Verbrennungsrechnung*, 2. Aufl., Vulkan-Verlag, ISBN: 3-8027-2523-9; Essen, 1991
- [Bridgwater 1999] Bridgwater, A.V., Meier, D., Radlein, D.: *An overview of fast pyrolysis of biomass*, Organic Geochemistry, Vol. 30 (1999), 1479-1493
- [Bundestag 2008] Deutscher Bundestag (Hrsg.): *Gesetz zur Neuregelung des Rechts der Erneuerbaren Energien im Strombereich und zur Änderung damit zusammenhängender Vorschriften*, Bundesanzeiger Verlag; Bonn, 2008
- [Bush 2008] Bush, V.: *Biomass gasification – Experience and current projects*, International Seminar on Gasification 2008 – Production Technologies and Applications; Malmö, 2008
- [Cerbe 2002] Cerbe, G., Hoffmann, H.-J.: *Einführung in die Thermodynamik – Von den Grundlagen zur technischen Anwendung*, 13. Aufl., Carl Hanser Verlag, ISBN: 3-446-22079-8; München, Wien, 2002
- [COM 2006] Commission of the European communities (Hrsg.): *Communication from the commission to the council and the European parliament – Renewable energy roadmap – Renewable energies in the 21<sup>st</sup> century: building a more sustainable future*; COM(2006) 848; Brüssel, 2007
- [COM 2008] Commission of the European communities (Hrsg.): *Proposal for a directive of the European parliament and of the council on the promotion of the use of energy from renewable sources*, COM(2008) 19; Brüssel, 2008

- [Darwin bearb. 1984] Darwin, C.: *Die Entstehung der Arten durch natürliche Zuchtwahl*, Verlag Philipp Reclam jun., Übersetzung; Leipzig, 1984
- [Davy 2010] Davy Process Technology: *CRG Low temperature pre-reforming*, <http://www.davyprotech.com/pdfs/CRG%20Low%20Temp.pdf>, Stand: 04.02.2010
- [Dayton 2009] Dayton, D.C., Raghurir, G.: *Biomass gasification and tar cracking process development*, International Seminar on Gasification 2009 – Gas clean-up and gas treatment; Stockholm, 2009
- [Diederichsen 1990] Diederichsen, C.: *Referenzumgebungen zur Berechnung der chemischen Exergie*, Dissertation; TU Hannover, 1990
- [DIN ISO 10628] Deutsches Institut für Normung e. V. (DIN) (Hrsg.): *DIN EN ISO 10628: Fließschemata für verfahrenstechnische Anlagen – Allgemeine Regeln*, Beuth Verlag GmbH; Berlin, 2001
- [DIN ISO 14040] Deutsches Institut für Normung e. V. (DIN) (Hrsg.): *DIN EN ISO 14040: Umweltmanagement – Ökobilanz – Grundsätze und Rahmenbedingungen*, Beuth Verlag GmbH; Berlin, 2006
- [DIN ISO 14044] Deutsches Institut für Normung e. V. (DIN) (Hrsg.): *DIN EN ISO 14044: Umweltmanagement – Ökobilanz – Anforderungen und Anleitungen*, Beuth Verlag GmbH; Berlin, 2006
- [DIN 51857] Deutsches Institut für Normung e. V. (DIN) (Hrsg.): *DIN 51857: Berechnung von Brennwert, Heizwert, Dichte, relativer Dichte und Wobbeindex von Gasen und Gasgemischen*, Beuth Verlag GmbH; Berlin, 1997
- [Dinjus 2004] Dinjus, E., Henrich, E., Weirich, F.: *A two stage process for synfuel from biomass*, Presentation IEA-Meeting; Wien, 2004
- [DIR 2003] The European Parliament and the Council of the European Union (Hrsg.): *Directive 2003/30/EC of the European Parliament and of the Council on the promotion of the use of biofuels or other renewable fuels for transport*, 2003/30/EC; Brüssel, 2003
- [Duret 2005] Duret, A., Friedli, C., Maréchal, F.: *Process design of synthetic natural gas (SNG) production using wood gasification*, Journal of Cleaner Production, Vol. 13 (2005), 1434-1446
- [DVGW G262] Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfaches e. V. (Hrsg.): *DVGW G 262: Nutzung von Gasen aus regenerativen Quellen in der öffentlichen Gasversorgung*, Beuth Verlag GmbH; Berlin, 2004
- [DVGW G260] Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfaches e. V. (Hrsg.): *DVGW G 260: Gasbeschaffenheit*, Beuth Verlag GmbH; Berlin, 2008
- [Ecoinvent 2007] Swiss Centre for Life Cycle Inventories – Ecoinvent Centre: *The ecoinvent v2 database*, [http://www.pre.nl/ecoinvent/default.htm?gclid=CNqv\\_fn6kqICFQkUzAoddHIhfQ](http://www.pre.nl/ecoinvent/default.htm?gclid=CNqv_fn6kqICFQkUzAoddHIhfQ); Stand: 01.12.2007
- [Eisenlohr 1974] Eisenlohr, K.-H., Moeller, F.W., Dry, M.: *Influence of certain reaction parameters on methanation of coal gas to SNG*, American Chemical Society (ACS), Division of Fuel Chemistry, Preprints, Vol. 19-3 (1974), 1-9
- [Felix 2007] Felix, L.: *Biomass gasification research at the Gas Technology Institute – High temperature gas treatment*; ThermalNet WP2E workshop; Vicenza, 2007

- [Fragol 2009] Fragol Schmierstoff GmbH + Co. KG: *Produkt- und Datenblatt „THERMINOL® 66“*; Mühlheim, 2009
- [Fratzscher 1986] Fratzscher, W., Brodjanskij, M., Michalek, K.: *Exergie – Theorie und Anwendung*, 1. Aufl., VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, ISBN: 3-342-00091-0; Leipzig, 1986
- [Friedrichs 1985] Friedrichs, G., Proplesch, P., Wismann, G., Lommerzheim, W.: *Methanisierung von Kohlevergasungsgasen im Wirbelbett Pilot-Entwicklungsstufe*, Forschungsbericht der Thyssengas GmbH, T 85-106; Duisburg, 1985
- [Friedrichs 1987] Friedrichs, G., Wismann, G.: *Untersuchung über die Einsatzmöglichkeiten gekühlter Gas/Feststoff-Druckwirbelschichten, insbesondere der COMFLUX-Technik für chemische Prozesse*, Forschungsbericht der Thyssengas GmbH, Kurzfassung; Duisburg, 1987
- [Fürnsinn 2008] Fürnsinn, S.: *Outwitting the dilemma of scale – Cost and energy efficient scale-down of the Fischer-Tropsch fuel production from biomass*, 1. Aufl., VDM Verlag Dr. Müller Aktiengesellschaft & Co. KG, ISBN: 978-3-8364-5097-3; Saarbrücken, 2008
- [Gassner 2009] Gassner, M., Maréchal, F.: *Methodology for the optimal thermo-economic, multi-objective design of thermochemical fuel production from biomass*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 32 (2009), 769-781
- [GWI 2008] Gaswärme-Institut e.V. Essen (Projektkoordinator): *Entwicklung flexibler Feuerungssysteme zur Verbrennung von Schwachgasen in Mikrogasturbinen-Brennkammern*, Abschlussbericht AiF Vorhaben, Aktenzeichen 14472 N; Essen, 2008
- [Gerdes 2004] Gerdes, I., Klawonn, F., Kruse, R.: *Evolutionäre Algorithmen – Genetische Algorithmen – Strategien und Optimierungsverfahren - Beispielanwendungen*, 1. Aufl., Vieweg Verlag, ISBN: 3-528-05570-7; Wiesbaden, 2004
- [GMK 2009] Gesellschaft für Motoren und Kraftanlagen mbH (GMK): *Produkttablette ECOCAL® ORC-Modul*, Stand: 01.10.2009
- [Goodrum 1996] Goodrum, J.W., Eiteman, M.A.: *Physical properties of low molecular weight triglycerides for the development of Bio-Diesel fuel models*, Bioresource Technology, Vol. 56 (1996), 55-60
- [Götze 2008] Götze, U. (Hrsg.): *Investitionsrechnung – Modelle und Analysen zur Beurteilung von Investitionsvorhaben*, 6. Aufl., Springer Verlag, ISBN 978-3-540-78872-0; Berlin, Heidelberg, 2008
- [Graf 2008] Graf, F., Köppel, W., Henrich, T., Bajohr, S., Reimert, R.: *Konzepte zur Erzeugung und zur Einspeisung von SNG aus ligninreicher Biomasse*, Beitrag in „DGMMK-Fachbereichstagung „Energetische Nutzung von Biomassen“, DGMMK – Deutsche Wissenschaftliche Gesellschaft für Erdöl, Erdgas und Kohle e.V.; Velen, 2008
- [Grossmann 1999] Grossmann, I.E., Caballero, J.A., Yeomans, H.: *Advances in mathematical programming for the synthesis of process systems*, PI'99 – International Conference on Process Integration; Kopenhagen, 1999
- [Grossmann 2002] Grossmann, I.E.: *Review of nonlinear mixed-integer and disjunctive programming techniques*, Optimization and Engineering, Vol. 3 (2002), 227-252

- [Haldor Topsoe 2010] Haldor Topsoe: *From solid fuels to substitute natural gas (SNG) using TREMP<sup>TM</sup>*,  
[http://www.topsoe.com/business\\_areas/gasification\\_based/Processes/~media/PDF%20files/SNG/Topsoe\\_TREMP.ashx](http://www.topsoe.com/business_areas/gasification_based/Processes/~media/PDF%20files/SNG/Topsoe_TREMP.ashx);  
Stand: 01.02.2010
- [Hacker 1980] Hacker, I.: *Beitrag zur heuristischen Strukturierung verfahrenstechnischer Systeme*, Dissertation; TH Leuna Merseburg, 1980
- [Hannemann 2007] Hannemann, F., Schingnitz, M., Zimmermann, G.: *Siemens IGCC and gasification technology – Today's solution and developments*, 2<sup>nd</sup> International Freiberg Conference on IGCC and XTL Technologies; Freiberg, 2007
- [Harms 1979] Harm, H., Höhle, B., Riensche, E.: *Dokumentation der Energie- und Massenstrombilanzierung für ADAM I im Online-Betrieb*, Forschungsbericht der Kernforschungsanlage Jülich GmbH, Institut für Reaktorbauelemente, Jül-1617; Jülich, 1979
- [Haynes 1976] Haynes, W.P., Forney, A.J.: *High BTU gas from coal: Status and prospects*, Pittsburgh Energy Research Center, report, PERC/IC-76/1; Pittsburgh, 1976
- [Hedden 1986] Hedden, K., Anderlohr, A., Becker, J., Zeeb, H.-P., Cheng, Y.-H.: *Gleichzeitige Konvertierung und Methanisierung CO-reicher Gase*, Forschungsbericht der DVGW-Forschungsstelle am Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe (TH), T 86-044; Karlsruhe, 1986
- [Higman 2003] Higman, C., van der Burgt, M.: *Gasification*, 1. Aufl., Gulf Professional Publishing, Elsevier Science, ISBN: 0-7506-7707-4; Burlington, 2003
- [Hochgesand 1970] Hochgesand, G.: *Rectisol and Purisol – Efficient acid gas removal for high pressure hydrogen and syngas production*, Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 62 (1970), 37 - 43
- [Hofbauer 2002] Hofbauer, H., Rauch, R., Loeffler, G., Kaiser, S., Fercher, E., Tremmel, H.: *Six years experience with the FICFB-gasification process*, 12<sup>th</sup> European Conference and Technology Exhibition on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection; Amsterdam, 2002
- [Hofbauer 2007] Hofbauer, H.: *Wirbelschichtvergasung – Stand der Technik*, Internationale Tagung Thermo-chemische Biomasse-Vergasung für eine effiziente Strom-/Kraftstoffbereitstellung – Erkenntnisstand 2007; Leipzig, 2007
- [Hofbauer 2008] Hofbauer, H.: *Biomass steam gasification – Industrial experience and future prospects*, International Seminar on Gasification 2008 – Production Technologies and Applications; Malmö, 2008
- [Hoffmann 1998] Hoffmann, J.: *MATLAB und SIMULINK – Beispielorientierte Einführung in die Simulation dynamischer Systeme*, 1. Aufl., Addison Wesley Longmann Verlag GmbH, ISBN: 3-8273-1077-6; Bonn, 1998
- [Höhlein 1977] Höhle, B.: *ADAM I – Versuchsanlage zur Methanisierung*, Forschungsbericht der Kernforschungsanlage Jülich GmbH, Institut für Reaktorbauelemente, Jül-1433; Jülich, 1977
- [Höhlein 1978] Höhle, B.: *Methanation - Pilot Plant ADAM I (NFE Project) and other methanation pilot plants*, Forschungsbericht der

- Kernforschungsanlage Jülich GmbH, Institut für Reaktorbauelemente, Jül-1512; Jülich, 1978
- [Huber 2008] Huber, M.B., Koidl, F., Kreutner, G., Giovannini, A., Kleinhappl, M., Roschitz, C., Hofbauer, H., Gruber, F., Krueger, J.: *Mehrstufiges Vergasungssystem: Innovative Möglichkeiten zur Verwertung von Biomasse*, DGMK-Fachbereichstagung; Velen, 2008
- [IFEU 2005] Institut für Energie- und Umweltforschung Heidelberg GmbH (IFEU) (Projektkoordinator): *Ökologische Bewertung von nachwachsenden Rohstoffen: Bewertungsrahmen und Ergebnisse, Gutachten im Rahmen des Deutschen Bundestages*; Heidelberg, 2005
- [Jenbacher 2010] GE Jenbacher GmbH & Co OHG: *Datenblatt zur Motorenserie J616 GS – E61*, Stand: 21.01.2010
- [Juraščík 2009] Juraščík, M., Sues, A., Ptasinski, K.J.: *Exergetic evaluation and improvement of biomass-to-synthetic natural gas conversion*, Energy & Environmental Science, Vol. 2 (2009), 791 - 801
- [Kaltschmitt 2009] Kaltschmitt, M., Hartmann, H., Hofbauer, H. (Hrsg.): *Energie aus Biomasse – Grundlagen, Techniken und Verfahren*, 2. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 978-3-540-85094-6; Berlin, Heidelberg, New York, 2009
- [Karl 2006] Karl, J.: *Dezentrale Energiesysteme – Neue Technologien im liberalisierten Energiemarkt*, 2. Aufl., Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, ISBN: 3-486-57722-0; München, 2006
- [Karl 2009] Karl, J., Baumhagl, C., Kienberger, T.: *Substitute Natural Gas aus Kohle – Technologien und Wirkungsgrade*, 41. Kraftwerkstechnisches Kolloquium – Sichere und nachhaltige Energieversorgung; Dresden, 2009
- [Klemm 2004] Klemm, M.: *Heißentteerung von Brenngas aus der Vergasung von Biomasse durch katalytische partielle Oxidation*, Dissertation; TU Dresden, 2004
- [Knoef 2005] Knoef, H.A.M. (Hrsg.): *Handbook biomass gasification*, 1. Aufl., BTG biomass technology group BV, ISBN: 90-810068-1-9; Enschede, 2005
- [Kohl 1997] Kohl, A.L., Nielsen, R.B. (Hrsg.): *Gas purification*, 5. Aufl., Gulf Publishing Company, Elsevier Science, ISBN 13: 978-0-88415-220-0; Houston, 1997
- [Kolb 2008] Kolb, G.: *Fuel processing for fuel cells*, 1. Aufl., Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, ISBN: 978-3-527-31581-9; Weinheim, 2008
- [Kollmann 1982] Kollmann, F.: *Technologie des Holzes und der Holzwerkstoffe*, 2. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 3-540-11778-4; Berlin, Heidelberg, New York, 1982
- [Konstantin 2007] Konstantin, P.: *Praxisbuch Energiewirtschaft – Energieumwandlung, -transport und -beschaffung im liberalisierten Markt*, 1. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 3-540-35377-1; Berlin, Heidelberg, New York, 2007
- [Kopyscinski 2009] Kopyscinski, J., Schildhauer, T.J., Biollaz, S.M.A.: *Employing catalyst fluidization to enable carbon management in the Synthetic Natural Gas production from biomass*, Chemical Engineering & Technology, Vol. 32 (2009), 343-347

- [Korobov 2003] Korobov, D.: *Untersuchung der Wirkungsgradpotentiale von IGCC-Kraftwerksprozessen*, Dissertation, TU Bergakademie Freiberg; Freiberg, 2003
- [Kosorok 2000] Kosorok, M.R.: *Monte Carlo error estimation for multivariate Markov chains*, Statistics and Probability Letters, Vol. 46 (2000), 85-93
- [Koebe 1997] Köbe, A.: *Neue kubische Zustandsgleichungen für reine Fluide*, Dissertation; TU Hannover, 1997
- [Köppel 2007] Köppel, W.: *Gasreinigung – Stand der Technik*, Internationale Tagung Thermo-chemische Biomasse-Vergasung für eine effiziente Strom-/Kraftstoffbereitstellung – Erkenntnisstand 2007; Leipzig, 2007
- [Krummenacher 1999] Krummenacher, P., Favrat, D.: *Improving pinch analysis based heat integration of single & multi-product batch plants*, PI'99 – International Conference on Process Integration; Kopenhagen, 1999
- [Lange 2008] Lange, S.: *Systemanalytische Untersuchung zur Schnellpyrolyse als Prozessschritt bei der Produktion von Synthesekraftstoffen aus Stroh und Waldrestholz*, Dissertation; Karlsruhe, 2008
- [Leible 2007] Leible, L., Kälber, S., Kappler, G., Lange, S., Nieke, E., Proplesch, P., Wintzer, D., Fürniß, B.: *Kraftstoff, Strom und Wärme aus Stroh und Waldrestholz – Eine systemanalytische Untersuchung*, Wissenschaftliche Berichte, Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse, FZKA 7170; Karlsruhe, 2007
- [Lettner 2007] Lettner, F., Haselbacher, P., Timmerer, H.: *Festbett-Vergasung – Stand der Technik (Überblick)*, Internationale Tagung Thermo-chemische Biomasse-Vergasung für eine effiziente Strom-/Kraftstoffbereitstellung – Erkenntnisstand 2007; Leipzig, 2007
- [Linnhoff 1993] Linnhoff, B.: *Pinch analysis – a state-of-the-art overview*, Trans. IChemE, Part A, Vol. 71 (1993), 503-522
- [Lohe 1995] Lohe, B.: *Exergiebasierte Strukturoptimierung chemischer Anlagen mit MINLP-Algorithmen*, Dissertation; TU Hamburg Harburg, 1995
- [Lohmüller 1977] Lohmüller, R.: *Methansynthese mit kombinierten isothermen und adiabaten Reaktoren*, Linde, Berichte aus Technik und Wissenschaft, Nr. 41; Wiesbaden, 1977
- [Lucas 2004] Lucas, K. (Hrsg.): *Thermodynamik – Die Grundgesetze der Energie- und Stoffumwandlungen*, 4. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 3-540-14014-x; Berlin, Heidelberg, New York, 2004
- [Lurgi 2009] Lurgi GmbH: *Rectisol®-Verfahren*, [http://www.lurgi.com/website/fileadmin/user\\_upload/pdfs/11\\_Rectisol-DE.pdf](http://www.lurgi.com/website/fileadmin/user_upload/pdfs/11_Rectisol-DE.pdf), Stand: 11.12.2009
- [Lüdecke 2000] Lüdecke, C., Lüdecke, D.: *Thermodynamik – Physikalisch-chemische Grundlagen der thermischen Verfahrenstechnik*, 1. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 3-540-66805-5; Berlin, Heidelberg, New York, 2000
- [Man 1996] Man, K.F., Tang, K.S., Kwong, S.: *Genetic algorithms: Concepts and applications*, IEEE Transactions on Industrial Electronics, Vol. 43 (1996), 519-534
- [Majer 2009] Majer, S., Oehmichen, K., Müller-Langer, F., Rönsch, S.: *Indications of Bio-Synthetic Natural Gas production and utilisation on global*

- climate – Results from the EU FP6 project “Bio-SNG”, International Conference on Polygeneration Strategies; Wien, 2009
- [McBride 2002] McBride, B.J., Zehe, M.J., Gordon, S.: *NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species*, NASA report, NASA/TP-2002-211556; Cleveland, 2002
- [Menny 2006] Menny, K.: *Strömungsmaschinen – Hydraulische und thermische Kraft- und Arbeitsmaschinen*, 5. Aufl., B.G. Teubner Verlag / GWV Fachverlage GmbH, ISBN 10: 3-519-46317-2; Wiesbaden, 2006
- [Mersmann 2005] Mersmann, A., Kind, M., Stichlmaier, J. (Hrsg.): *Thermische Verfahrenstechnik – Grundlagen und Methoden*, 2. Aufl., Springer Verlag, ISBN 10: 3-540-23648-1; Berlin, Heidelberg, New York, 2005
- [Meyer 2007] Meyer, B.: *Entwicklungsdefizite und –perspektiven der großtechnischen Gaserzeugung-/reinigung*, Internationale Tagung Thermo-chemische Biomasse-Vergasung für eine effiziente Strom-/Kraftstoffbereitstellung – Erkenntnisstand 2007; Leipzig, 2007
- [Mortimer 2003] Mortimer, C.E., Müller, U.: *Chemie – Das Basiswissen der Chemie*, 8. Aufl., Thieme Verlag, ISBN: 3-13-484308-0; Stuttgart, 2003
- [Munch 1991] Munch, M.: *Rechnergestützte exergetische Analyse, Bewertung und Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse*, Dissertation; TU Hamburg Harburg, 1991
- [Müller-Langer 2009] Müller-Langer, F., Rönsch, S., Weithäuser, M., Oehmichen, K., Seiffert, M., Majer, S., Scholwin, F., Thrän, D.: *Erdgassubstitute aus Biomasse für die mobile Anwendung im zukünftigen Energiesystem*, Deutsches BiomasseForschungszentrum gGmbH, Endbericht zum Forschungsvorhaben FZK 22031005; Leipzig, 2009
- [NIST 2008] U.S. Secretary of Commerce: *NIST Chemistry WebBook – NIST Standard Reference Database Number 69*, <http://webbook.nist.gov/chemistry/>; Stand: 21.01.2010
- [Noël 1998] Noël, G., Boisvert, G.: *Project design in energy efficiency using pinch analysis*, Pulp & paper Canada, Vol. 99 (1998), 103-105
- [Noronha 1998] Noronha, S.: *Rechnergestützte Synthese verfahrenstechnischer Prozesse mit MINLP-Methoden*, Dissertation; TU Hamburg Harburg, 1998
- [Oberberger 2009] Oberberger, I., Thek, G.: *Herstellung und energetische Nutzung von Pellets – Produktionsprozess, Eigenschaften, Feuerungstechnik, Ökologie und Wirtschaftlichkeit*, Schriftenreihe Thermische Biomassenutzung, Band 5, 1. Aufl, Medienfabrik Graz GmbH, ISBN: 978-3-9501980-5-8; Graz, 2009
- [Ogriseck 2006] Ogriseck, K.: *Untersuchung von IGCC-Kraftwerkskonzepten mit Polygeneration und CO<sub>2</sub>-Abtrennung*, Dissertation; Freiberg, 2006
- [Paisley 2002] Paisley, M.A., Overend, R.P.: *Verification of the performance of Future Energy Resources’ SilvaGas<sup>®</sup> biomass gasifier – Operating experience in the Vermont gasifier*, International Pittsburgh Coal Conference; Pittsburgh, 2002
- [Pehnt 2001] Pehnt, M.: *Ganzheitliche Bilanzierung von Brennstoffzellen in der Energie- und Verkehrstechnik*, Dissertation; Universität Stuttgart, 2001
- [Prins 2005] Prins, M.J.: *Thermodynamic analysis of biomass gasification and torrefaction*, Dissertation; Eindhoven, 2005

- [Prins 2006 a] Prins, M.J., Ptasinski, K.J., Janssen, F.J.J.G.: *Torrefaction of wood part 1. – Weight loss kinetics*, Journal of analytical and applied pyrolysis, Vol. 77 (2006), 28-34
- [Prins 2006 b] Prins, M.J., Ptasinski, K.J., Janssen, F.J.J.G.: *Torrefaction of wood part 2. – Analysis of products*, Journal of analytical and applied pyrolysis, Vol. 77 (2006), 35-40
- [Pröll 2004] Pröll, T.: *Potenziäle der Wirbelschichtdampfvergasung fester Biomasse – Modellierung und Simulation auf Basis der Betriebserfahrungen am Biomassekraftwerk Güssing*, Dissertation; TU Wien, 2004
- [Rant 1965] Rant, Z.: *Die Exergieverhältnisse bei der Verbrennung*, Beitrag in „Energie und Exergie – Die Anwendung des Exergiebegriffs in der Energietechnik“, VDI-Verlag GmbH; Düsseldorf, 1965
- [Rauch 2002] Rauch, R., Hofbauer, H.: *Zweibett-Wirbelschichtvergasung in Güssing (A) mit 2MW<sub>el</sub>/4,5MW<sub>th</sub>; Konzept, Betriebserfahrungen und Wirtschaftlichkeit*, 7. Holzenergie-Symposium – Luftreinhaltung und Explosionsschutz bei Holzfeuerungen und Stand der Technik der Holzvergasung; Zürich, 2002
- [Rehling 2009] Rehling, B., Hofbauer, H., Rauch, R., Tremmel, H., Aichernig, C., Schildhauer, T., Biollaz, S., Ulrich, D., Schaub, M.: *Bio-SNG – First results of the IMW pilot and demonstration unit at Güssing*; International Conference on Polygeneration Strategies 2009; Wien, 2009
- [Rosen 2007] Rosen, M.A.: *Exergy concept and its application*, IEEE Canada - Electrical Power Conference 2007; Montreal, 2007
- [Rönsch 2008] Rönsch, S., Dreher, M., Vogel, A., Kaltschmitt, M.: *Erdgassubstitut aus biogenen Festbrennstoffen – Eine technische Analyse*, VGB PowerTech, Vol. 88 (2008), 110-116
- [Rönsch 2009] Rönsch, S., Müller-Langer, F., Kaltschmitt, M.: *Produktion des Erdgassubstitutes Bio-SNG im Leistungsbereich um 30 MW<sub>BWL</sub> – Eine techno-ökonomische Analyse und Bewertung*, Chemie Ingenieur Technik, Vol. 81 (2009), 1417-1428
- [Rücker 2000] Rücker, A.: *Exergetische Methoden in der Prozeßsynthese*, Dissertation; TU Hamburg Harburg, 2000
- [Sabatier 1902] Sabatier, P., Senderen, J.-B.: *Nouvelles synthèses du méthane*, Comptes Rendus Des Séances De L'Académie Des Sciences, Section VI – Chimie, Imprimerie Gauthier-Villars; Paris, 1902
- [Salomon 1998] Salomon, R.: *Evolutionary algorithms and gradient search: Similarities and differences*, IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol. 2 (1998), 45-55
- [Schneider 1975] Schneider, D. (Hrsg.): *Investition und Finanzierung – Lehrbuch der Investitions- Finanzierungs- und Ungewißheitstheorie*, 4. Aufl., Westdeutscher Verlag GmbH, ISBN: 3-531-11110-8; Opladen, 1975
- [Schuler 1995] Schuler, H.: *Prozeßsimulation*, 1. Aufl., VCH Verlagsgesellschaft mbH, ISBN: 3-527-28635-7; Weinheim, 1995
- [Seemann 2006] Seemann, M.: *Methanation of biosyngas in a fluidized bed reactor – Development of a one-step synthesis process, featuring simultaneous methanation, watergas shift and low temperature tar reforming*, Dissertation; ETH Zürich, 2006



- [Seiffert 2007] Seiffert, M., Vogel, A., Hofbauer, H., Kaltschmitt, M., Stucki, S.: *Demonstration of the production and utilization of synthetic natural gas (SNG) from solid biofuels – Presentation of the European project “Bio-SNG”*, 15<sup>th</sup> Biomass Conference & Exhibition; Berlin, 2007
- [SGC 2008] Swedish Gas Centre (SGC) (Hrsg.): *Substitute natural gas from biomass gasification*, Rapport SGC 187, ISRN SGC-R-187-SE; Malmö, 2008
- [Soave 1972] Soave, G.: *Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state*, Chemical Engineering Science, Vol. 27 (1972), 1197-1203
- [Solar 2010] Solar Turbines: *Data sheets “TAURUS 60”*, <http://mysolar.cat.com/cda/files/126882/7/ds60cs.pdf?mode>, Stand: 10.03.2010
- [Ståhl 1999] Ståhl, K., Neergaard, M., Nieminen, J.: *Progress report: Varnamo biomass gasification plant*, 1999 Gasification Technology Conference; San Francisco, 1999
- [Strakey 1975] Strakey, J.P., Forney, A.J., Haynes, W.P.: *Methanation in coal gasification processes*, Pittsburgh Energy Research Center, report, PERC/IC-75/1; Pittsburgh, 1975
- [Streeter 1977] Streeter, A.C.: *Recent development in fluidized-bed methanation research*, Ninth Synthetic Pipeline Gas Symposium; Chicago, 1977
- [Struis 2009] Struis, R.P.W.J., Schildhauer, T.J., Czekaj, I., Janousch, M., Biollaz, S.M.A., Ludwig, C.: *Sulphur poisoning of Ni catalysts in the SNG production from biomass: A TPO/XPS/XAS study*, Applied Catalysis A: General, Vol. 362 (2009), 121-128
- [Szargut 1988] Szargut, J., Morris, D.R., Steward, F.R.: *Exergy analysis of thermal, chemical and metallurgical processes*, 1. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 3-540-18864-9; Berlin, 1988
- [Szargut 2005] Szargut, J., Valero, A., Stanek, W., Valero, A.: *Towards an international legal reference environment*, ECOS 2005 – 18<sup>th</sup> International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems; Trondheim, 2005
- [Tarhan 2008] Tarhan, B., Grossmann, I.E.: *A multistage stochastic programming approach with strategies for uncertainty reduction in the synthesis of process networks with uncertain yields*, Computers & Chemical Engineering, Vol. 32 (2008), 766-788
- [Uhlenbruck 2002] Uhlenbruck, S.: *Zur Unterstützung evolutionärer Algorithmen bei der Kostenoptimierung thermodynamischer Prozesse durch exergoökonomische Prinzipien*, Dissertation; RWTH Aachen, 2002
- [Ullmann's 2006] Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry: Kapitel “Gas production”, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA; 2006
- [UMSICHT 2009] Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik (Projektkoordinator): *Abschlussbericht für das BMBF-Verbundprojekt „Biogaseinspeisung“ – Beseitigung technischer, rechtlicher und ökonomischer Hemmnisse bei der Einspeisung biogener Gase in das Erdgasnetz zur Reduzierung klimarelevanter Emissionen durch Aufbau und Anwendung einer georeferenzierten Datenbank*, Band 3, Synthesegasmethanisierung.

- Verfahrenstechnische und ökonomische Analyse thermochemischer Gaserzeugungs- und Aufbereitungsverfahren; Oberhausen, Leipzig, Wuppertal, Bochum, Essen, Magdeburg, Trier, 2009
- [UOP 2009] UOP LLC: *UOP Selexol<sup>TM</sup> process*, <http://www.uop.com/objects/Selexol.pdf>, Stand: 11.12.2009
- [U.S. Department of Energy 2006] U.S. Department of Energy (Hrsg.): *Practical experience gained during the first twenty years of operation of the Great Plains Gasification Plant and implications of future projects*, Office of Fossil Energy; 2006
- [van der Meijden 2008] van der Meijden, C.M., Veringa, H.J., van der Drift, A., Vreugdenhil, B.J.: *The 800 kW<sub>th</sub> allothermal biomass gasifier Milena*, 16<sup>th</sup> European Biomass Conference & Exhibition; Valencia, 2008
- [van der Meijden 2010] van der Meijden, C.M., Veringa, H.J., Rabou, P.L.M.: *The production of synthetic natural gas (SNG): A comparison of three wood gasification systems for energy balance and overall efficiency*, Biomass and Bioenergy, Vol. 34 (2010), 302-311
- [van Lier 1965] van Lier, J.J.C.: *Der Exergiebegriff im Kraftwerksbetrieb*, Beitrag in "Energie und Exergie – Die Anwendung des Exergiebegriffs in der Energietechnik", VDI-Verlag GmbH; Düsseldorf, 1965
- [VDI 2067] Verein Deutscher Ingenieure e. V. (VDI) (Hrsg.): *VDI 2067: Wirtschaftlichkeit gebäudetechnischer Anlagen – Grundlagen und Kostenrechnung*, Blatt 1, Beuth Verlag GmbH; Berlin, 2000
- [VDI 4661] Verein Deutscher Ingenieure e. V. (VDI) (Hrsg.): *VDI 4661: Energiekenngrößen – Grundlagen – Begriffe – Methodik*, Beuth Verlag GmbH; Berlin, 2003
- [VDI 6025] Verein Deutscher Ingenieure e. V. (VDI) (Hrsg.): *VDI 6025: Betriebswirtschaftliche Berechnungen für Investitionsgüter und Anlagen*, Beuth Verlag GmbH; Berlin, 1996
- [Vecchietti 2003] Vecchietti, A., Lee, S., Grossmann, I.E.: *Modelling of discrete/continuous optimizations problems: Characterization and formulation of disjunctions and their relaxations*, Computers & Chemical Engineering, Vol. 27 (2003), 433-448
- [Vogel 2006] Vogel, A., Bolhàr-Nordenkamp, M., Kaltschmitt, M., Hofbauer, H.: *Analyse und Evaluierung der thermo-chemischen Vergasung von Biomasse*, Schriftenreihe „Nachwachsende Rohstoffe“, Band 29, Teil 1: Technologische und verfahrenstechnische Untersuchungen, Landwirtschaftsverlag GmbH; Münster, 2006
- [Vogel 2007] Vogel, A.: *Dezentrale Strom- und Wärmeerzeugung aus biogenen Festbrennstoffen – Eine technische und ökonomische Bewertung der Vergasung im Vergleich zur Verbrennung*, Dissertation; TU Hamburg Harburg, 2007
- [Wagner 1998] Wagner, W., Kretzschmar, H.-J.: *International steam tables – Properties of water and steam based on the industrial formulation IAPWS-IF97*, 2. Aufl., Springer Verlag, ISBN: 978-3-540-21419-9; Berlin, Heidelberg, 1998
- [Zwart 2006] Zwart, R.W.R., Boerrigter, H., Deurwaarder, E.P., van der Meijden, C.M., van Paasen, S.V.B.: *Production of Synthetic Natural Gas (SNG) from biomass*, ECN report, ECN-E—06-018; Petten, 2006

## Anhang 1 – Modellierung

Wie in Kapitel 3.2.4 beschrieben, ist das entwickelte Simulationsprogramm zur Bilanzierung der Stoff- und Energieströme der Konversionsanlagen aus einem Netzwerk von Funktionsblöcken und Verbindern aufgebaut. Zur Orientierung des Anwenders sind Strukturen aus mehreren Funktionsblöcken und Verbindern entsprechend den realen Komponenten einer Anlage zu Funktionseinheiten (z. B. Wärmeübertrager, Kompressor) zusammengefasst (Abb. 3.5). Um einen Einblick in die Funktionsweise des Simulationsprogramms zu ermöglichen, werden im Verlauf dieses Kapitels die folgenden Strukturelemente bzw. Modellannahmen des Simulationsprogramms beschrieben:

- Verbinder: dienen dem Austausch von Daten zwischen den Funktionsblöcken
- Stoffdatenmodelle: beschreiben die Berechnung der Zustandsgrößen der ausgetauschten Stoffe
- Funktionseinheiten: bilden das thermodynamische Verhalten realer Anlagenkomponenten (z. B. von Kompressoren) ab

### Anhang 1.1 Verbinder

Die Verbinder zum Austausch von Daten zwischen den Funktionsblöcken sind entsprechend den realen Stoffströmen der Konversionsanlage definiert. Dabei werden neben Verbindern, die einfache Skalare weitergeben, drei Grundtypen von Verbindern definiert:

- Verbinder zur Weitergabe von Gasen und Gasgemischen
- Verbinder zur Weitergabe von Feststoffen und Feststoffgemischen
- Verbinder zur Weitergabe von organischen Medien

Zur Verbesserung der Übersichtlichkeit des Simulationsprogramms sowie um Optimierungen des Wärmemanagements von Konversionsanlagen zu ermöglichen, werden zudem zwei weitere Verbinder definiert:

- Verbinder zur Weitergabe von einzelnen Stoffströmen
- Verbinder zur Weitergabe von Wärmeströmen

Verbinder zur Weitergabe von Gasen und Gasgemischen sind Vektoren mit 25 Zeilen, deren Belegung eindeutig definiert ist (Tabelle A.1). Während in den ersten zwei Zeilen des Vektors die Zustandsgrößen Druck und Temperatur des Gasgemisches weitergegeben werden, beinhaltet die dritte Zeile dessen molare Wärmekapazität, die vierte Zeile den gesamten bzw. summierten Stoffmengenstrom und die Zeilen 5 bis 25 die Stoffmengenströme der Komponenten des Gasgemisches. Dabei sind die letzten vier Zeilen keinem Stoff zugewiesen, sondern können bei Bedarf mit beliebigen gasförmigen Stoffen belegt werden.

Tabelle A.1 Vektorbelegung der Verbinder zur Weitergabe von Gasgemischen im Simulationsprogramm

Vektorzeile	Größe	Einheit
1	Druck $p$	bar
2	Temperatur $T$	K
3	Molare Wärmekapazität $c_p$	J/(mol K)
4	Gesamtstoffmengenstrom $\dot{n}_{ges}$	mol/s
5	Stoffmengenstrom Kohlenstoffdioxid $\dot{n}_{CO_2}$	mol/s

6	Stoffmengenstrom Kohlenstoffmonoxid $\dot{n}_{CO}$	mol/s
7	Stoffmengenstrom Wasserdampf $\dot{n}_{H_2O}$	mol/s
8	Stoffmengenstrom Wasserstoff $\dot{n}_{H_2}$	mol/s
9	Stoffmengenstrom Methan $\dot{n}_{CH_4}$	mol/s
10	Stoffmengenstrom Stickstoff $\dot{n}_{N_2}$	mol/s
11	Stoffmengenstrom Ethen $\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s
12	Stoffmengenstrom Naphthalen $\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s
13	Stoffmengenstrom Stickstoffdioxid $\dot{n}_{NO_2}$	mol/s
14	Stoffmengenstrom Sauerstoff $\dot{n}_{O_2}$	mol/s
15	Stoffmengenstrom Toluol $\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s
16	Stoffmengenstrom Ammoniak $\dot{n}_{NH_3}$	mol/s
17	Stoffmengenstrom Schwefelwasserstoff $\dot{n}_{H_2S}$	mol/s
18	Stoffmengenstrom Cyanwasserstoff $\dot{n}_{HCN}$	mol/s
19	Stoffmengenstrom Carbonylsulfid $\dot{n}_{COS}$	mol/s
20	Stoffmengenstrom Chlorwasserstoff $\dot{n}_{HCl}$	mol/s
21	Stoffmengenstrom Schwefeldioxid $\dot{n}_{SO_2}$	mol/s
22	Stoffmengenstrom Platzhalter 1 $\dot{n}_{P11}$	mol/s
23	Stoffmengenstrom Platzhalter 2 $\dot{n}_{P12}$	mol/s
24	Stoffmengenstrom Platzhalter 3 $\dot{n}_{P13}$	mol/s
25	Stoffmengenstrom Platzhalter 4 $\dot{n}_{P14}$	mol/s

Entsprechend dem Verbinder für Gase und Gasmische – jedoch mit nur 9 Zeilen – ist auch der Verbinder für Feststoffe aufgebaut. D. h., dass die ersten beiden Zeilen von den Zustandsgrößen Druck und Temperatur belegt sind, die dritte Zeile von der molaren Wärmekapazität, die vierte Zeile vom Gesamtstoffmengenstrom und Zeilen 5 bis 9 von unterschiedlichen Feststoffmengenströmen (Tabelle A.2).

Tabelle A.2 Vektorbelegung der Verbinder zur Weitergabe von Feststoffen im Simulationsprogramm

Vektorzeile	Größe	Einheit
1	Druck $p$	bar
2	Temperatur $T$	K
3	Molare Wärmekapazität $c_p$	J/(mol K)
4	Gesamtstoffmengenstrom $\dot{n}_{ges}$	mol/s
5	Stoffmengenstrom Calciumsulfat $\dot{n}_{CaSO_4}$	mol/s
6	Stoffmengenstrom Calciumchlorid $\dot{n}_{CaCl_2}$	mol/s
7	Stoffmengenstrom Calciumoxid $\dot{n}_{CaO}$	mol/s
8	Stoffmengenstrom Calciumcarbonat $\dot{n}_{CaCO_3}$	mol/s
9	Stoffmengenstrom Siliziumoxid $\dot{n}_{SiO_2}$	mol/s

Die Weitergabe organischer Medien ist durch Vektoren mit 11 Zeilen charakterisiert (Tabelle A.3). Analog zu den Verbindern der Gasmische sind die ersten zwei Zeilen der Verbinder mit den Zustandsgrößen Druck und Temperatur belegt. Die dritte Zeile des

Vektors beinhaltet den Massenstrom und die vierte Zeile den auf den gesamten Massenstrom bezogenen Wassergehalt des Mediums. Die Zeilen 5 bis 11 kennzeichnen die Zusammensetzung, d. h., in diesen Zeilen sind die unterschiedlichen Massenanteile (bezogen auf den absolut trockenen Massenstrom) angegeben. Diese Darstellungsform ist von Vorteil, da die Zusammensetzung des Mediums – im Gegensatz zu Gasgemischen – weniger verschiedenen Verbindungen/Molekülen zuzuordnen ist, sondern i. Allg. durch die Elementarzusammensetzung charakterisiert wird.

Tabelle A.3 Vektorbelegung der Verbinder zur Weitergabe von organischen Medien im Simulationsprogramm

Vektorzeile	Größe	Einheit
1	Druck $p$	bar
2	Temperatur $T$	K
3	Gesamtmassenstrom $\dot{m}_{ges}$	kg/s
4	Wassergehalt $x_{H_2O}$	kg/kg
5	Massenanteil Kohlenstoff $x_C$	kg/kg
6	Massenanteil Wasserstoff $x_H$	kg/kg
7	Massenanteil Sauerstoff $x_O$	kg/kg
8	Massenanteil Schwefel $x_S$	kg/kg
9	Massenanteil Stickstoff $x_N$	kg/kg
10	Massenanteil Chlor $x_{Cl}$	kg/kg
11	Massenanteil Asche $x_{Asche}$	kg/kg

Die Verbinder zum Austausch einzelner Stoffe besitzen drei Zeilen: Die ersten beiden Zeilen beinhalten den Druck und die Temperatur und die dritte Zeile den Gesamtstoffmengenstrom des einzelnen Stoffes (Tabelle A.4).

Tabelle A.4 Vektorbelegung der Verbinder zur Weitergabe von einzelnen Stoffströmen im Simulationsprogramm

Vektorzeile	Größe	Einheit
1	Druck $p$	bar
2	Temperatur $T$	K
3	Gesamtstoffmengenstrom $\dot{n}$	mol/s

Zur Übertragung von Wärmeströmen ist ein Vektor mit vier Zeilen definiert, der neben der übertragenen Wärmemenge ebenfalls die untere und obere Temperatur des Wärmeüberganges sowie die mittlere molare Wärmekapazität des abgekühlten bzw. erwärmten Mediums enthält (Tabelle A.5). Die Weitergabe zusätzlicher Informationen wie Temperaturen und Wärmekapazitäten ist insbesondere bei detaillierten Analysen des Wärmemanagements (z. B. Pinchanalysen) von Bedeutung.

Tabelle A.5 Vektorbelegung der Verbinder zur Weitergabe von Wärmeströmen im Simulationsprogramm

Vektorzeile	Größe	Einheit
1	Mittlere Wärmekapazität $c_{p,m}$	J/(mol K)
2	Wärmestrom $\dot{Q}$	W
3	Untere Temperatur des Wärmeübergangs $T_u$	K
4	Obere Temperatur des Wärmeübergangs $T_o$	K

## Anhang 1.2 Stoffdatenmodelle

Um Stoff- und Energieströme bilanzieren zu können, sind Zustandsgleichungen erforderlich, die das Verhalten der Stoffe und die Abhängigkeiten ihrer Zustandsgrößen in dem für die Prozesssimulation relevanten Druck- und Temperaturbereich hinreichend genau abbilden [Schuler 1995]. Für die Prozessmodellierung werden Stoffe, deren Zustände und Eigenschaften mit den gleichen Zustandsgleichungen berechnet werden können, zu so genannten Stoffklassen zusammengefasst. Das alle Zustandsgleichungen einer Stoffklasse umfassende Berechnungsmodell wird Stoffdatenmodell genannt. Im Rahmen dieser Arbeit wird in Anlehnung an die in Anhang 1.1 vorgestellten Verbinder zur Weitergabe von Stoffströmen ebenfalls zwischen folgenden Stoffdatenmodellen unterschieden:

- Stoffdatenmodell für ideale Gase
- Stoffdatenmodell für ideale Gasgemische
- Stoffdatenmodell für Feststoffe
- Stoffdatenmodell für Feststoffgemische
- Stoffdatenmodell für organische Verbindungen

Diese Stoffdatenmodelle erlauben die Berechnung der Zustandsgrößen der jeweiligen Stoffe für einen definierten Aggregatzustand. Da jedoch bei der Abbildung bestimmter Prozesse (z. B. Dampferzeugung, ORC-Modul) die Arbeitsmedien Phasenwechsel durchlaufen, müssen weitere Stoffdatenmodelle zu Hilfe gezogen werden, mit denen die Berechnung der Zustandsgrößen der Stoffe für unterschiedliche Aggregatzustände und Phasenwechsel möglich ist:

- Stoffdatenmodell für Wasser und Wasserdampf
- Stoffdatenmodell für reale Fluide

Zur Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften eines Stoffes wird der Bezugszustand mit der Bezugstemperatur  $T_0 = 298,15$  K und dem Bezugsdruck  $p_0 = 1$  bar gewählt. Durch die Definition des Bezugszustandes lassen sich die berechneten Enthalpie- und Entropiewerte einer Stoffklasse mit den berechneten Enthalpie- und Entropiewerten einer anderen Stoffklasse vergleichen, da sowohl die absolute Enthalpie  $H$  als auch die absolute Entropie  $S$  bei der Temperatur  $T$  und dem Druck  $p$  auf die entsprechende Größe im Bezugszustand mit der Temperatur  $T_0$  und dem Druck  $p_0$  bezogen werden. Die auf den Bezugszustand bezogene Enthalpie  $\hat{H}$  bzw. Entropie  $\hat{S}$  ergibt sich aus der Differenz des Absolutwertes und des Bezugswertes der jeweiligen Größe (Gleichung (A-1) und Gleichung (A-2)).

$$\hat{H}(T, p) = H(T, p) - H(T_0, p_0) \quad (\text{A-1})$$

$$\hat{S}(T, p) = S(T, p) - S(T_0, p_0) \quad (\text{A-2})$$

Die Berechnungsgleichungen der unterschiedlichen Stoffdatenmodelle werden im Folgenden beschrieben.

### Anhang 1.2.1 Ideale Gase

**Zustandsbeschreibung.** Im Rahmen der Betrachtung von Anlagen zur synthetischen Biomethanherzeugung sind gasförmige Stoffströme – aufgrund der mit Blick auf den Konversionsweg frühzeitigen Überführung der festen Biomasse in ein brennbares Gasgemisch – von besonderer Bedeutung. Die Berechnung von Gasen und Gasgemischen erfolgt dabei unter der Annahme, dass diese Stoffe ideales Gasverhalten aufweisen. Demnach können gasförmige Stoffe durch die thermische Zustandsgleichung idealer Gase mit Hilfe des Druckes  $p$ , des Volumens  $V$ , der Stoffmenge  $n$ , der idealen Gaskonstante  $R$  und der Temperatur  $T$  charakterisiert werden (Gleichung (A-3)).

$$p V = n R T \quad (\text{A-3})$$

**Enthalpie und Entropie.** Die auf die Bezugstemperatur  $T_0$  bezogene molare Enthalpie  $\hat{h}_{0i}^{ig}$  eines reinen, idealen Gases berechnet sich aus der Differenz der molaren Enthalpie bei der Temperatur  $T$  und der molaren Enthalpie bei der Bezugstemperatur  $T_0$ . Zur Berechnung der Differenz wird das Integral über die molare isobare Wärmekapazität  $c_{p,0i}^{ig}$  gebildet (Gleichung (A-4)) [Baehr 2002].

$$\hat{h}_{0i}^{ig}(T) = h_{0i}^{ig}(T) - h_{0i}^{ig}(T_0) = \int_{T_0}^T c_{p,0i}^{ig}(T) dT \quad (\text{A-4})$$

Die molare Enthalpie eines idealen Gases  $h_{0i}^{ig}$  ist nur temperatur-, nicht aber druckabhängig. Im Gegensatz dazu ist die Entropie  $s_{0i}^{ig}$  eines reinen, idealen Gases sowohl von der Temperatur als auch vom Druck abhängig. Der Temperaturterm gibt die Entropie für eine bestimmte Temperatur beim Bezugsdruck  $p_0$  an und ist auf Grund der unterschiedlichen Wärmekapazitäten der Gase für jedes Gas verschieden. Der zweite, druckabhängige Term ist dagegen unabhängig vom betrachteten Gas. Er liefert bei einem spezifischen Druckniveau für alle Gase den gleichen Wert [Baehr 2002]. Die auf den Bezugszustand bezogene molare Entropie  $\hat{s}_{0i}^{ig}$  eines idealen Gases berechnet sich daher sowohl in Abhängigkeit der Temperatur  $T$  als auch des Druckes  $p$  und ist definiert als Differenz der absoluten Entropie bei der Temperatur  $T$  und dem Druck  $p$  und der Entropie des Bezugszustandes bei  $T_0$  und  $p_0$  (Gleichung (A-5)).

$$\begin{aligned} \hat{s}_{0i}^{ig}(T, p) &= s_{0i}^{ig}(T, p) - s_{0i}^{ig}(T_0, p_0) = \int_{T_0}^T c_{p,0i}^{ig}(T) \frac{dT}{T} - R \ln \frac{p}{p_0} \\ &= s_{0i}^{ig}(T, p_0) - R \ln \frac{p}{p_0} \end{aligned} \quad (\text{A-5})$$

In die Berechnung der Enthalpie und Entropie fließt die molare Wärmekapazität  $c_{p,0i}^{ig}$  ein. Diese ist im betrachteten Zustandsgebiet maßgeblich von der Temperatur abhängig und wird im Rahmen des Simulationsprogramms mit Hilfe der so genannten Shomate-

Gleichung (Gleichung (A-6)) oder dem NASA-Polynom (Gleichung (A-7)) [McBride 2002] berechnet.

$$c_{p,0i}^{ig}(T) = A + B \left( \frac{T}{1000} \right) + C \left( \frac{T}{1000} \right)^2 + D \left( \frac{T}{1000} \right)^3 + E \left( \frac{T}{1000} \right)^{-2} \quad (\text{A-6})$$

$$c_{p,0i}^{ig}(T) = (a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T^1 + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4) R \quad (\text{A-7})$$

Die Koeffizienten  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$  und  $E$  der Shomate-Gleichung sind stoffspezifische Werte, die dem „NIST Chemistry WebBook“ [NIST 2008] entnommen werden. Bei der Modellierung werden die Koeffizienten von 15 unterschiedlichen gasförmigen Stoffen verwendet (Tabelle A.6).

Tabelle A.6 Im Simulationsprogramm verwendete Shomate-Koeffizienten zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazitäten gasförmiger Stoffe

Stoff	Gültigkeitsbereich	Shomate-Koeffizienten				
		$A$	$B$	$C$	$D$	$E$
CH <sub>4</sub>	298 – 1300 K	-0,703029	108,4773	-42,52157	5,862788	0,678565
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	298 – 1200 K	-6,387880	184,4019	-112,9718	28,49593	0,315540
CO	298 – 1300 K	25,56759	6,096130	4,054656	-2,671301	0,131021
CO <sub>2</sub>	298 – 1200 K	24,99735	55,18696	-33,69137	7,948387	-0,136638
COS	298 – 1200 K	34,53892	43,05378	-26,61773	6,338844	-0,327515
H <sub>2</sub>	298 – 1000 K	33,066178	-11,363417	11,432816	-2,772874	-0,158558
HCN	298 – 1200 K	32,69373	22,59205	-4,369142	-0,407697	-0,282399
HCl	298 – 1200 K	32,12392	-13,45805	19,86852	-6,853936	-0,049672
H <sub>2</sub> O	500 – 1700 K	30,09200	6,832514	6,793435	-2,534480	0,082139
H <sub>2</sub> S	298 – 1400 K	26,88412	18,67809	3,434203	-3,378702	0,135882
N <sub>2</sub>	100 – 500 K	28,98641	1,853978	-9,647459	16,63537	0,000117
NH <sub>3</sub>	298 – 1400 K	19,99563	49,77119	-15,37599	1,921168	0,189174
NO <sub>2</sub>	298 – 1200 K	16,10857	75,89525	-54,38740	14,30777	0,239423
O <sub>2</sub>	298 – 700 K	31,32234	-20,23531	57,86644	-36,50624	-0,007374
SO <sub>2</sub>	298 – 1200 K	21,43049	74,35094	-57,75217	16,35534	0,086731

Die Koeffizienten  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ ,  $a_4$ ,  $a_5$ ,  $a_6$  und  $a_7$  des NASA-Polynoms (Tabelle A.7) sind – ebenso wie die Koeffizienten der Shomate-Gleichung – stoffspezifisch und können u. a. Veröffentlichungen der NASA, wie dem Bericht „NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species“ [McBride 2002], entnommen werden. Im Rahmen der Entwicklung des Simulationsprogramms wird das NASA-Polynom insbesondere zur Berechnung der Wärmekapazitäten der im Vergasungsrohgas enthaltenen Teere angewandt.



Tabelle A.7 Im Simulationsprogramm verwendete NASA-Koeffizienten zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazitäten gasförmiger Teere

NASA-Koeffizienten	Stoff	
	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>
$a_1$	-2,877962220 10 <sup>+05</sup>	-2,602845316 10+05
$a_2$	6,133941520 10 <sup>+03</sup>	6,237409570 10+03
$a_3$	-4,574706760 10 <sup>+01</sup>	-5,226095040 10+01
$a_4$	1,936895724 10 <sup>-01</sup>	2,397692776 10-01
$a_5$	-2,304305304 10 <sup>-04</sup>	-2,912244803 10-04
$a_6$	1,459301178 10 <sup>-07</sup>	1,854944401 10-07
$a_7$	-3,790796100 10 <sup>-11</sup>	-4,816619270 10-11
Gültigkeitsbereich	200 – 1000 K	200 – 1000 K

Die auf den Bezugszustand bezogene, molare Enthalpie  $\hat{h}_{0i}^{ig}$  eines reinen, idealen Gases ergibt sich aus der Integration der molaren Wärmekapazität  $c_{p,0i}^{ig}$  über das Temperaturintervall von  $T_0$  bis  $T$  (Gleichung (A-4)) und entspricht damit im  $c_p$ - $T$ -Diagramm der Fläche unter der Kurve, die den Verlauf der Wärmekapazität kennzeichnet (Abb. A.1).

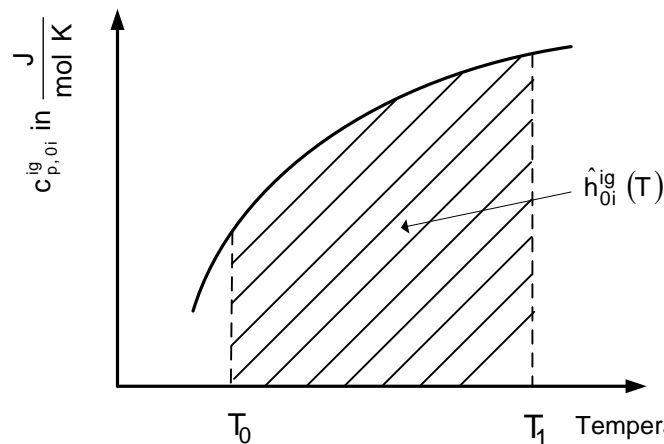


Abb. A.1 Zusammenhang zwischen der molaren Wärmekapazität und der auf den Bezugszustand bezogenen molaren Enthalpie eines reinen, idealen Gases

Die im Simulationsprogramm verwendete Berechnungsgleichung zur Bestimmung der molaren, auf die Temperatur  $T_0$  bezogenen Enthalpie einer Gaskomponente ergibt sich schließlich durch das Auflösen des Integrals in Gleichung (A-4) in Abhängigkeit der Temperatur (Gleichung (A-8)).

$$\hat{h}_{0i}^{ig}(T) = \left( A \frac{(T-T_0)}{1000} + \frac{B}{2} \frac{(T^2-T_0^2)}{1000^2} + \frac{C}{3} \frac{(T^3-T_0^3)}{1000^3} + \frac{D}{4} \frac{(T^4-T_0^4)}{1000^4} - E \left( \frac{1000^2}{T} - \frac{1000^2}{T_0} \right) \right) \quad (\text{A-8})$$

Unter Berücksichtigung des NASA-Polynoms zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazität führt die Auflösung des Integrals in Gleichung (A-4) zu einer etwas veränderten Berechnungsgleichung der auf die Temperatur  $T_0$  bezogenen Enthalpie einer Gaskomponente (Gleichung (A-9)).

$$\hat{h}_{0i}^{ig}(T) = \left( -a_1 (T^{-1} - T_0^{-1}) + a_2 (\ln(T) - \ln(T_0)) + a_3 (T - T_0) + \frac{a_4}{2} (T^2 - T_0^2) + \frac{a_5}{3} (T^3 - T_0^3) + \frac{a_6}{4} (T^4 - T_0^4) + \frac{a_7}{5} (T^5 - T_0^5) \right) R \quad (\text{A-9})$$

Die Berechnung der auf den Bezugszustand referenzierten Entropie erfolgt ebenfalls unter Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmekapazität durch das Auflösen der Integralgleichung (Gleichung (A-5)).

### Anhang 1.2.2 Ideale Gasgemische

**Enthalpie und Entropie.** Zur Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften eines Gasgemisches (z. B. des Vergasungsrohrgases) ist dessen stoffliche Zusammensetzung von Bedeutung. Die Zusammensetzung eines Gasgemisches wird mit Hilfe des Stoffmengenanteiles  $y_i$  beschrieben. Der Stoffmengenanteil  $y_i$  ergibt sich aus dem Stoffmengenstrom der Einzelkomponente  $\dot{n}_i$  und dem Gesamtstoffmengenstrom des Gemisches  $\dot{n}$ . Der Gesamtstoffmengenstrom berechnet sich dabei aus der Summe der  $m$  einzelnen Stoffmengenströme (Gleichung (A-10)) [Baehr 2004].

$$y_i = \frac{\dot{n}_i}{\dot{n}} = \frac{\dot{n}_i}{\sum_{i=1}^m \dot{n}_i} \quad (\text{A-10})$$

Die molare Wärmekapazität  $c_p^{ig}$  und die molare Enthalpie  $\hat{h}_{ig}$  eines idealen Gasgemisches ergeben sich jeweils aus der Linearkombination der entsprechenden Größen der einzelnen Reinstoffe, gewichtet durch die zugehörigen Stoffmengenanteile  $y_i$  (Gleichung (A-11) und Gleichung (A-12)) [Baehr 2002].

$$c_p^{ig}(T) = \sum_{i=1}^m y_i c_{p,0i}^{ig}(T) \quad (\text{A-11})$$

$$\hat{h}^{ig}(T) = \sum_{i=1}^m y_i \hat{h}_{0i}^{ig}(T) \quad (\text{A-12})$$

Die molare Entropie  $\hat{s}_{ig}$  eines idealen Gasgemisches setzt sich nicht nur aus den Anteilen der  $m$  Komponenten zusammen, sondern enthält darüber hinaus einen Mischungsterm. Dieser ist nur von der Zusammensetzung des idealen Gasgemisches, nicht aber von der Temperatur und vom Druck abhängig (Gleichung (A-13)) [Baehr 2002].

$$\hat{s}^{ig}(T, p) = \sum_{i=1}^m y_i \hat{s}_{0i}^{ig}(T, p) - R \sum_{i=1}^m y_i \ln y_i \quad (\text{A-13})$$

Die Zustandsgleichungen für ideale Gase und Gasgemische sind somit in der Lage, den thermodynamischen Zustand der Gasströme in Abhängigkeit von den Größen Druck  $p$ , Temperatur  $T$  und Stoffmengenanteil  $y_i$  wiederzugeben.

**Heizwert.** Zur energetischen Bilanzierung von Prozessen ist weiterhin die Berechnung des Energiegehaltes bzw. des Heizwertes eines Stoffstroms von Bedeutung. Die Berechnung des Heizwertes von Gasgemischen erfolgt im Simulationsprogramm entsprechend der DIN 51857 zur „Berechnung von Brennwert, Heizwert, Dichte, relativer Dichte und Wobbeindex von Gasen und Gasgemischen“ [DIN 51857]. Entsprechend DIN 51857 ergibt sich der molare untere Heizwert  $H_u$  eines Gasgemisches aus der Summe der  $n$  Produkte aus Stoffmengenanteil  $y_i$  und unterem molarem Heizwert  $H_{u,i}$  der Gaskomponenten des Gemisches (Gleichung (A-14)).

$$H_u = \sum_{i=1}^n y_i H_{u,i} \quad (\text{A-14})$$

Die unteren molaren Heizwerte sind für die Bezugstemperatur von 298,15 K in DIN 51857 verzeichnet. Der in DIN 51857 nicht verzeichnete Heizwert der Gaskomponenten  $C_{10}H_8$  wurde mit Hilfe der Standardbildungsenthalpien bei stöchiometrischer Verbrennung berechnet.

### Anhang 1.2.3 Feststoffe

**Zustandsbeschreibung.** Als Feststoffe bzw. Feststoffgemische sind Stoffe definiert, die in dem im betrachteten Zustandsgebiet von Druck und Temperatur ausschließlich als feste Substanzen vorliegen (z. B. Aschen). Feststoffe werden als inkompressibel betrachtet und ihre Zustandsgrößen unabhängig vom Druck bestimmt [Lüdecke 2000].

**Enthalpie und Entropie.** Die auf den Bezugszustand bezogene, spezifische Enthalpie  $\hat{h}_{0i}^s$  ist als Funktion der molaren Wärmekapazität  $c_{p,0i}^s$  definiert (Gleichung (A-15)) [Lüdecke 2000].

$$\hat{h}_{0i}^s(T) = \int_{T_0}^T c_{p,0i}^s(T) dT \quad (\text{A-15})$$

Die auf den Bezugszustand bezogene spezifische Entropie  $\hat{s}_{0i}^s$  ergibt sich ebenfalls als Funktion der molaren Wärmekapazität  $c_{p,0i}^s$  (Gleichung (A-16)) [Lüdecke 2000].

$$\hat{s}_{0i}^s(T) = \int_{T_0}^T c_{p,0i}^s(T) \frac{dT}{T} \quad (\text{A-16})$$

Die zur Berechnung von Enthalpie und Entropie erforderliche temperaturabhängige molare Wärmekapazität wird analog der Berechnung der molaren Wärmekapazität der gasförmigen Teere mit Hilfe des NASA-Polynoms (Gleichung (A-7)) bestimmt. Zur Berechnung sind – wie auch bei der Berechnung gasförmiger Stoffwerte – die NASA-Koeffizienten der auftretenden Stoffe notwendig (Tabelle A.8).

Tabelle A.8 Im Simulationsprogramm verwendete NASA-Koeffizienten zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazitäten fester Stoffe

Nasa-Koeffizienten	Stoffe						
	CaSO <sub>4</sub>	CaCl <sub>2</sub>	CaO	CaCO <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>		
<i>a</i> <sub>1</sub>	-2,983940124 10 <sup>+05</sup>	-3,595768780 10 <sup>-04</sup>	-1,459376440 10 <sup>+05</sup>	-2,583555736 10 <sup>+05</sup>	2,317635074 10 <sup>+04</sup>		
<i>a</i> <sub>2</sub>	0	-8,796495630 10 <sup>+00</sup>	0	0	0		
<i>a</i> <sub>3</sub>	1,359671225 10 <sup>+01</sup>	7,507256910 10 <sup>+00</sup>	7,174205094 10 <sup>+00</sup>	1,197256363 10 <sup>+01</sup>	7,026511484 10 <sup>+00</sup>		
<i>a</i> <sub>4</sub>	5,857230312 10 <sup>-03</sup>	-3,129465934 10 <sup>-06</sup>	-1,959947129 10 <sup>-03</sup>	3,263812299 10 <sup>-03</sup>	1,241925261 10 <sup>-03</sup>		
<i>a</i> <sub>5</sub>	0	7,322886480 10 <sup>-10</sup>	1,291116374 10 <sup>-06</sup>	0	0		
<i>a</i> <sub>6</sub>	0	-8,776403220 10 <sup>-14</sup>	-2,077091735 10 <sup>-10</sup>	0	0		
<i>a</i> <sub>7</sub>	0	4,210486040 10 <sup>-18</sup>	0	0	0		
Gültigkeitsbereich	500 – 1473 K	1000 – 6000 K	500 – 3172 K	500 – 1603 K	848 – 1200 K		

Die im Programm verwendete Berechnungsgleichung der molaren Enthalpie  $\hat{h}_{0i}^s$  (Gleichung (A-15)) ergibt sich schließlich durch die Bildung des Integrals und unter Berücksichtigung der temperaturabhängigen Wärmekapazität (Gleichung (A-17)).

$$\hat{h}_{0i}^s(T) = \left( -a_1 (T^{-1} - T_0^{-1}) + a_2 (\ln(T) - \ln(T_0)) + a_3 (T - T_0) + \frac{a_4}{2} (T^2 - T_0^2) + \frac{a_5}{3} (T^3 - T_0^3) + \frac{a_6}{4} (T^4 - T_0^4) + \frac{a_7}{5} (T^5 - T_0^5) \right) R \quad (\text{A-17})$$

Die Berechnungsgleichung der auf den Bezugszustand referenzierten Entropie (Gleichung (A-16)) erfolgt analog durch die Auflösung des Integrals.

#### Anhang 1.2.4 Feststoffgemische

**Enthalpie und Entropie.** Zur Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften eines Feststoffgemisches (z. B. der Vergasungsasche) ist dessen stoffliche Zusammensetzung von Bedeutung. Die Zusammensetzung eines Feststoffgemisches wird – wie die eines Gasgemisches – mit Hilfe des Stoffmengenanteiles  $y_i$  beschrieben. Der Stoffmengenanteil  $y_i$  ergibt sich aus dem Stoffmengenstrom der Einzelkomponente  $\dot{n}_i$  und dem Gesamtstoffmengenstrom des Gemisches  $\dot{n}$ . Dabei ist der Gesamtstoffmengenstrom definiert als die Summe der  $m$  Stoffströme der einzelnen Komponenten (Gleichung (A-18)) [Baehr 2004].

$$y_i = \frac{\dot{n}_i}{\dot{n}} = \frac{\dot{n}_i}{\sum_{i=1}^m \dot{n}_i} \quad (\text{A-18})$$

Die molare Wärmekapazität  $c_p^s$ , die molare Enthalpie  $\hat{h}^s$  und die molare Entropie  $\hat{s}^s$  eines Feststoffgemisches ergibt sich jeweils aus der Linearkombination der entsprechenden Größen der einzelnen Reinstoffe, gewichtet durch die zugehörigen Stoffmengenanteile  $y_i$  (Gleichung (A-19), Gleichung (A-20) und Gleichung (A-21)) [Baehr 2002].

$$c_p^s(T) = \sum_{i=1}^m y_i c_{p,0i}^s(T) \quad (\text{A-19})$$

$$\hat{h}^s(T) = \sum_{i=1}^m y_i \hat{h}_{0i}^s(T) \quad (\text{A-20})$$

$$\hat{s}^s(T) = \sum_{i=1}^m y_i \hat{s}_{0i}^s(T) \quad (\text{A-21})$$

Aufgrund der Inkompressibilität der Feststoffe ist auch die Entropie – im Gegensatz zu den Berechnungsgleichungen idealer Gasgemische – ausschließlich von der Temperatur abhängig.

#### Anhang 1.2.5 Organische Stoffgemische

**Zustandsbeschreibung.** Unter der Stoffklasse der organischen Stoffgemische sind die Stoffe zusammengefasst, die aus einem komplexen Gemisch organischer Verbindungen bestehen (z. B. Biomasse, Koks, RME, Wärmeübertrageröl). Im Gegensatz zu

Gasgemischen ist die Zusammensetzung organischer Stoffgemische weniger unterschiedlichen Verbindungen bzw. Bestandteilen zuzuordnen, sondern i. Allg. durch die Elementarzusammensetzung des gesamten organischen Stoffgemisches charakterisiert. Dementsprechend setzen sich die Zustandsgrößen eines organischen Stoffgemisches nicht aus den Zustandsgrößen unterschiedlicher Gemischbestandteile zusammen, sondern werden als zusammenfassende Größen in Abhängigkeit der massespezifischen Elementarzusammensetzung für das gesamte organische Stoffgemisch berechnet.

Im Rahmen der simulationstechnischen Berechnungen werden organische Stoffgemische als inkompressibel betrachtet und bei der Berechnung der Enthalpie und Entropie nur die Abhängigkeit von der Temperatur berücksichtigt. Die Vernachlässigung der Druckabhängigkeit ist für inkompressible Medien und für die Betrachtung isobarer Zustandsänderung i. Allg. zulässig [Lüdecke 2000].

**Enthalpie und Entropie.** Die auf den Bezugszustand bezogene spezifische Enthalpie  $\hat{h}^{org}$  ist als Funktion der spezifischen Wärmekapazität  $c_p^{org}$  definiert (Gleichung (A-22)) [Lüdecke 2000].

$$\hat{h}^{org}(T) = \int_{T_0}^T c_p^{org}(T) dT \quad (\text{A-22})$$

Die Berechnung der auf die Temperatur  $T_0$  bezogenen spezifischen Entropie eines inkompressiblen organischen Mediums  $\hat{s}^{org}$  erfolgt ebenso durch eine Integralgleichung in Abhängigkeit der Temperatur (Gleichung (A-23)) [Lüdecke 2000].

$$\hat{s}^{org}(T) = \int_{T_0}^T c_p^{org}(T) \frac{dT}{T} \quad (\text{A-23})$$

Die spezifische isobare Wärmekapazität organischer Stoffgemische  $c_p^{org}$  lässt sich in den betrachteten Temperaturintervallen mit Hilfe eines linearen Ansatzes in Abhängigkeit von der Temperatur beschreiben (Gleichung (A-24)) [Pröll 2004].

$$c_p^{org}(T) = k T + d \quad (\text{A-24})$$

Der lineare Berechnungsansatz berücksichtigt die stoffspezifischen Konstanten  $k$  und  $d$ . Im Rahmen der Modellbildung sind dabei insbesondere die Konstanten des Holzes, des Wärmeträgermediums sowie des RME von Bedeutung (Tabelle A.9).

Tabelle A.9 Im Simulationsprogramm verwendete Konstanten zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazitäten organischer Medien

Stoff	$k$ in J/(kg K <sup>2</sup> )	$d$ in J/(kg K)	Gültigkeits- bereich in K	Quellen
Holz (atro)	4,86	-212,92	273 – 373	[Kollmann 1982]
Wärmeträgermedium <sup>d</sup>	3,65	479,18	273 – 653	[Fragol 2009]
RME	3,35	850	298 – 423	[Goodrum 1996]

<sup>d</sup> Das Verhalten des Wärmeträgermediums wurde anhand von Kenndaten des Thermoöls „THERMINOL 66“ modelliert [Fragol 2009].

Die Integrale der Berechnungsgleichungen der auf den Bezugszustand bezogenen Enthalpie  $\hat{h}^{org}$  (Gleichung (A-22)) und der auf den Bezugszustand bezogenen Entropie  $\hat{s}^{org}$  (Gleichung (A-23)) können unter Berücksichtigung des linearen Ansatzes zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazitäten aufgelöst werden (Gleichung (A-25) und Gleichung (A-26)).

$$\hat{h}^{org}(T) = \int_{T_0}^T c_p^{org}(T) dT = \frac{k}{2} (T^2 - T_0^2) + d (T - T_0) \quad (\text{A-25})$$

$$\hat{s}^{org}(T) = \int_{T_0}^T c_p^{org}(T) \frac{dT}{T} = k (T - T_0) + d \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) \quad (\text{A-26})$$

Für die Berechnung der spezifischen Wärmekapazität koksartiger organischer Verbindungen wird nicht der lineare Berechnungsansatz (Gleichung (A-24)) gewählt, sondern eine Potenzfunktion in Abhängigkeit der Temperatur  $T$ , der idealen Gaskonstante  $R$  und der Molmasse des Kokes  $M_{waf}$  (Gleichung (A-27)) [Pröll 2004].

$$c_{p,K}^{org}(T) = \frac{R}{M_{waf}} \left\{ e^{\left(\frac{380}{T}\right)} \left( \frac{e^{\left(\frac{380}{T}\right)} - 1}{\left(\frac{380}{T}\right)} \right)^{-2} + 2e^{\left(\frac{1800}{T}\right)} \left( \frac{e^{\left(\frac{1800}{T}\right)} - 1}{\left(\frac{1800}{T}\right)} \right)^{-2} \right\} \quad (\text{A-27})$$

Da die Stoffwerte organischer Stoffgemische in der Regel massenspezifisch angegeben werden, sind organische Medien im Rahmen des Simulationsprogramms – und damit im Unterschied zu den Strömen aller anderen Stoffklassen – als Massenströme modelliert. Die Zusammensetzung wird durch den Massenanteil  $x_i$  beschrieben (siehe Anhang 1.1). Der Massenanteil  $x_i$  ergibt sich aus dem Massenstrom der Einzelkomponente  $\dot{m}_i$  und dem Gesamtmassenstrom  $\dot{m}$  (Gleichung (A-28)), welcher als Summe der Massenströme der  $n$  Einzelkomponenten definiert ist [Baehr 2004].

$$x_i = \frac{\dot{m}_i}{\dot{m}} = \frac{\dot{m}_i}{\sum_{i=1}^n \dot{m}_i} \quad (\text{A-28})$$

**Heizwert.** Im Rahmen der energetischen Bilanzierung werden – neben den Heizwerten der Gasströme – ebenfalls die Heizwerte der organischen Verbindungen zur Berechnung von Energieflüssen herangezogen. Die Heizwerte organischer Verbindungen werden basierend auf der Elementarzusammensetzung entsprechend der Formel von Boie berechnet [Boie 1952]. Dabei ergibt sich der untere Heizwert einer wasser- und aschefreien (*waf*) organischen Verbindung  $H_{u,waf}$  in MJ/kg aus den auf die Trockenmasse bezogenen Massenanteilen  $x_i$  der organischen Verbindung (Gleichung (A-29)) [Kaltschmitt 2009].

$$H_{u,waf} = 38,8x_C + 93,9x_H + 10,5x_S + 6,3x_N - 10,8x_O \quad (\text{A-29})$$

Mit Blick auf die Qualität des berechneten Heizwertes muss betont werden, dass die Formel von Boie in Bezug auf biogene Festbrennstoffe mit einem mittleren Fehler von 4 %

zum realen Wert behaftet ist [Kaltschmitt 2009]. Basierend auf der Berechnung des Heizwertes der wasser- und aschefreien Verbindung kann der untere Heizwert der feuchten und aschehaltigen organischen Verbindung mit Hilfe der auf 25 °C bezogenen spezifischen Verdampfungsenthalpie von Wasser  $\Delta h_{v,H_2O}$ , dem Wasseranteil des organischen Verbindung  $x_{H_2O}$  und dem Ascheanteil  $x_{Asche}$  bestimmt werden (Gleichung (A-30)) [Pröll 2004]:

$$H_u = (1 - x_{Asche} - x_{H_2O}) \cdot H_{u,waf} - x_{H_2O} \Delta h_{v,H_2O} \quad (\text{A-30})$$

### Anhang 1.2.6 Wasser und Wasserdampf

**Zustandsbeschreibung.** Da bei der Abbildung bestimmter Prozesse (z. B. Dampfkraftprozess) die Arbeitsmedien Phasenwechsel durchlaufen, sind Stoffdatenmodellen wie zur Berechnung idealer Gase und Gasgemische, die sich ausschließlich auf den gasförmigen Aggregatzustand eines Stoffes beziehen, Grenzen gesetzt. Folglich müssen Stoffdatenmodelle zu Hilfe gezogen werden, mit denen die Berechnung der Zustandsgrößen der Stoffe für unterschiedliche Aggregatzustände und Phasenwechsel möglich ist. Im Rahmen dieser Arbeit werden zur thermodynamischen Berechnung des Zustandes von Wasser und Wasserdampf in Prozessen, in denen das Medium Phasenwechseln unterliegt, die Berechnungsgleichungen des Industrie-Standards IAPWS-IF97 [Wagner 1998] verwendet.

Die IAPWS-IF97 ist ein System von Fundamentalgleichungen zur Berechnung der thermodynamischen Zustandsgrößen von Wasser im fluiden Zustandsgebiet. Die Fundamentalgleichungen der IAPWS-IF97 erlauben die Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften von Wasser und Wasserdampf in Abhängigkeit von Temperatur und Druck sowohl im Gebiet der Flüssigphase, der Gasphase als auch im überkritischen Zustandsgebiet. Um eine hohe Genauigkeit der Gleichungen über das gesamte Zustandsgebiet sicherzustellen, wird dieses in unterschiedliche Bereiche eingeteilt, welche jeweils durch unterschiedliche Gleichungen beschrieben werden. Die Modellierung dieser Arbeit greift auf zwei dieser Bereiche zurück:

- Bereich 1: Flüssiges Wasser ( $273,15 \text{ K} \leq T \leq 623,15 \text{ K}$ ;  $p \leq 1000 \text{ bar}$ )
- Bereich 2: Dampfförmiges Wasser ( $273,15 \text{ K} \leq T \leq 1073,15 \text{ K}$ ;  $p \leq 1000 \text{ bar}$ )

Die Zustandsgleichung für Bereich 1 ist durch die spezifische freie Enthalpie  $g$ , die spezifische Gaskonstante  $R$ , die Temperatur  $T$ , den Druck  $p$ , die dimensionslose freie Enthalpie  $\gamma$ , die Koeffizienten  $I_i$ ,  $J_i$  und  $n_i$  (Tabelle A.10) sowie die Hilfsgrößen  $\pi$  und  $\tau$  definiert (Gleichung (A-31)).

$$\frac{g(p,T)}{RT} = \gamma(\pi, \tau) = \sum_{i=1}^{34} n_i (7,1 - \pi)^{I_i} (\tau - 1,222)^{J_i} \quad (\text{A-31})$$



Tabelle A.10 Im Simulationsprogramm verwendete Koeffizienten zur Berechnung der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf im Phasenbereich 1

$i$	$I_i$	$J_i$	$n_i$	$i$	$I_i$	$J_i$	$n_i$
1	0	-2	0,14632971213167	18	2	3	-0,441418453308 $10^{-5}$
2	0	-1	-0,84548187169114	19	2	17	-0,72694996297594 $10^{-15}$
3	0	0	-0,37563603672040 $10^1$	20	3	-4	-0,31679644845054 $10^{-4}$
4	0	1	0,33855169168385 $10^1$	21	3	0	-0,28270797985312 $10^{-5}$
5	0	2	-0,95791963387872	22	3	6	-0,85205128120103 $10^{-9}$
6	0	3	0,15772038513228	23	4	-5	-0,22425281908000 $10^{-5}$
7	0	4	-0,16616417199501 $10^{-1}$	24	4	-2	-0,65171222895601 $10^{-6}$
8	0	5	0,81214629983568 $10^{-3}$	25	34	10	-0,14341729937924 $10^{-12}$
9	1	-9	0,28319080123804 $10^{-3}$	26	5	-8	-0,40516996860117 $10^{-6}$
10	1	-7	-0,60706301565874 $10^{-3}$	27	8	-11	-0,12734301741641 $10^{-8}$
11	1	-1	-0,18990068218419 $10^{-1}$	28	8	-6	-0,17424871230634 $10^{-9}$
12	1	0	-0,32529748770505 $10^{-1}$	29	21	-29	-0,68762131295531 $10^{-18}$
13	1	1	-0,21841717175414 $10^{-1}$	30	23	-31	0,14478307828521 $10^{-19}$
14	1	3	-0,52838357969930 $10^{-4}$	31	29	-38	0,26335781662795 $10^{-22}$
15	2	-3	-0,47184321073267 $10^{-3}$	32	30	-39	-0,11947622640071 $10^{-22}$
16	2	0	-0,30001780793026 $10^{-3}$	33	31	-40	0,18228094581404 $10^{-23}$
17	2	1	0,47661393906987 $10^{-4}$	34	32	-41	-0,93537087292458 $10^{-25}$

Die beiden Hilfsgrößen  $\pi$  und  $\tau$  können mit Hilfe der Temperatur  $T$  in Kelvin und dem Druck  $p$  in Mega-Pascal bestimmt werden (Gleichung (A-32) und Gleichung (A-33)).

$$\pi = \frac{p}{16,53} \quad (\text{A-32})$$

$$\tau = \frac{1386}{T} \quad (\text{A-33})$$

Im Phasenbereich 2 gilt eine Zustandsgleichung, die neben der spezifischen freien Enthalpie  $g$ , der spezifischen Gaskonstante von Wasser  $R$ , der Temperatur  $T$ , dem Druck  $p$ , der dimensionslosen freien Enthalpie  $\gamma$  und den Hilfsgrößen  $\pi$  und  $\tau$  zwei weitere Hilfsgrößen,  $\gamma^0$  und  $\gamma^r$ , enthält (Gleichung (A-34)).

$$\frac{g(p,T)}{RT} = \gamma(\pi, \tau) = \gamma^0(\pi, \tau) + \gamma^r(\pi, \tau) \quad (\text{A-34})$$

Dabei entspricht die Hilfsgröße  $\gamma^0$  dem Anteil des idealen Gases der spezifischen freien Enthalpie  $g$  und berechnet sich auf der Basis der Hilfsgrößen  $\pi$  und  $\tau$  (Gleichung (A-32) und Gleichung (A-33)) sowie der Koeffizienten  $n_i^0$  und  $J_i^0$  (Tabelle A.11) (Gleichung (A-35)).

$$\gamma^0 = \ln \pi + \sum_{i=1}^9 n_i^0 \tau^{J_i^0} \quad (\text{A-35})$$

Tabelle A.11 Im Simulationsprogramm verwendete Koeffizienten zur Berechnung der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf im Phasenbereich 2 – Teil 1

$i$	$J_i^0$	$n_i^0$	$i$	$J_i^0$	$n_i^0$
1	0	-0,96927686500217 $10^1$	6	-2	0,14240819171444 $10^1$
2	1	0,10086655968018 $10^2$	7	-1	-0,43839511319450 $10^1$
3	-5	-0,56087911283020 $10^{-2}$	8	2	-0,28408632460772
4	-4	0,71452738081455 $10^{-1}$	9	3	0,21268463753307 $10^{-1}$
5	-3	-0,40710498223928			

Die Hilfsgröße  $\gamma^r$  entspricht dem residuellen Anteil der spezifischen freien Enthalpie  $g$ , welcher sich mit Hilfe der Koeffizienten  $I_i$ ,  $J_i$  und  $n_i$  (Tabelle A.12) sowie der Hilfsgrößen  $\pi$  und  $\tau$  ergibt (Gleichung (A-36)).

$$\gamma^r = \sum_{i=1}^{43} n_i \pi^{I_i} (\tau - 0,5)^{J_i} \quad (\text{A-36})$$

Tabelle A.12 Im Simulationsprogramm verwendete Koeffizienten zur Berechnung der Zustandsgrößen von Wasser und Wasserdampf im Phasenbereich 2 – Teil 2

$i$	$I_i$	$J_i$	$n_i$	$i$	$I_i$	$J_i$	$n_i$
1	1	0	-0,17731742473213 $10^{-2}$	23	7	0	-0,59059564324270 $10^{-17}$
2	1	1	-0,17834862292358 $10^{-1}$	24	7	11	-0,12621808899101 $10^{-5}$
3	1	2	-0,45996013696365 $10^{-1}$	25	7	25	-0,38946842435739 $10^{-1}$
4	1	3	-0,57581259083431 $10^{-1}$	26	8	8	0,11256211360459 $10^{-10}$
5	1	6	-0,50325278727930 $10^{-1}$	27	8	36	-0,82311340897998 $10^1$
6	2	1	-0,33032641670203 $10^{-4}$	28	9	13	0,19809712802088 $10^{-7}$
7	2	2	-0,18948987516315 $10^{-3}$	29	10	4	0,10406965210174 $10^{-18}$
8	2	4	-0,39392777243355 $10^{-2}$	30	10	10	-0,10234747095929 $10^{-12}$
9	2	7	-0,43797295650573 $10^{-1}$	31	10	14	-0,10018179379511 $10^{-8}$
10	2	36	-0,26674547914087 $10^{-4}$	32	16	29	-0,80882908646985 $10^{-10}$
11	3	0	0,20481737692309 $10^{-7}$	33	16	50	0,10693031879409
12	3	1	0,43870667284435 $10^{-6}$	34	18	57	-0,33662250574171
13	3	3	-0,32277677238570 $10^{-4}$	35	20	20	0,89185845355421 $10^{-24}$
14	3	6	-0,15033924542148 $10^{-2}$	36	20	35	0,30629316876232 $10^{-12}$
15	3	35	-0,40668253562649 $10^{-1}$	37	20	48	-0,42002467698208 $10^{-5}$
16	4	1	-0,78847309559367 $10^{-9}$	38	21	21	-0,59056029685639 $10^{-25}$
17	4	2	0,12790717852285 $10^{-7}$	39	22	53	0,37826947613457 $10^{-5}$
18	4	3	0,48225372718507 $10^{-6}$	40	23	39	-0,1276808934681 $10^{-14}$
19	5	7	0,22922076367661 $10^{-5}$	41	24	26	0,73087610595061 $10^{-28}$
20	6	3	-0,16714766451061 $10^{-10}$	42	24	40	0,55414715350778 $10^{-16}$
21	6	16	-0,21171472321355 $10^{-2}$	43	24	58	-0,94369707241210 $10^{-6}$
22	6	35	-0,23895741934104 $10^2$				

**Enthalpie und Entropie.** Wie auch bei der Zustandsbeschreibung so werden auch der Berechnung der Enthalpie und Entropie für die beiden Phasenbereiche verschiedene Berechnungsgleichungen zu Grunde gelegt.

Im Bereich 1 sind die Enthalpie  $h_{H_2O}$  und die Entropie  $s_{H_2O}$  – neben der idealen Gaskonstante von Wasser  $R$  und der Temperatur  $T$  – durch die Hilfsgrößen  $\pi$  und  $\tau$ , die dimensionslose freie Enthalpie  $\gamma$  sowie deren partielle Ableitung  $\gamma_\tau$  definiert (Gleichung (A-37) und Gleichung (A-38)).

$$\frac{h(\pi, \tau)}{RT} = \tau \gamma_\tau \quad (\text{A-37})$$

$$\frac{s(\pi, \tau)}{R} = \tau \gamma_\tau - \gamma \quad (\text{A-38})$$

Im Bereich 2 werden die Enthalpie  $h_{H_2O}$  und die Entropie  $s_{H_2O}$  mit Hilfe der oben beschriebenen Hilfsgrößen  $\gamma^0$  und  $\gamma^r$  (Gleichung (A-35) und Gleichung (A-36)), deren partiellen Ableitungen  $\gamma_\tau^0$  und  $\gamma_\tau^r$  sowie der idealen Gaskonstante für Wasser  $R$ , der Temperatur  $T$  und den Hilfsgrößen  $\pi$  und  $\tau$  beschrieben (Gleichung (A-39) und Gleichung (A-40)).

$$\frac{h(\pi, \tau)}{RT} = \tau (\gamma_\tau^0 + \gamma_\tau^r) \quad (\text{A-39})$$

$$\frac{s(\pi, \tau)}{R} = \tau (\gamma_\tau^0 + \gamma_\tau^r) - (\gamma^0 + \gamma^r) \quad (\text{A-40})$$

Als Bezugszustand der IAPWS-IF97 ist der Tripelpunkt des Wassers mit  $T_t = 273,16 \text{ K}$  und  $p_t = 0,0061165 \text{ bar}$  festgelegt [Wagner 1998]. Die Umrechnung der Enthalpie- und Entropiewerte vom Bezugszustand der IAPWS-IF97 zum gewählten Bezugszustand ( $T_0 = 298,15 \text{ K}$ ,  $p_0 = 1 \text{ bar}$ ) kann entsprechend als Differenz der Werte bei der Temperatur  $T$  und dem Druck  $p$  und den Werten bei der Temperatur  $T_0$  und dem Druck  $p_0$  berechnet werden (Gleichung (A-41) und Gleichung (A-42)).

$$\hat{h} = h(T, p) - h(T_0, p_0) \quad (\text{A-41})$$

$$\hat{s}(T, p) = s(T, p) - s(T_0, p_0) \quad (\text{A-42})$$

Im Nassdampfgebiet ist der Zustand eines Reinstoffes hingegen nicht hinreichend durch die Zustandsgrößen Druck  $p$  und Temperatur  $T$  bestimmt, da die Temperatur und der für diese Temperatur spezifische Dampfdruck während des gesamten Verdampfungsprozesses, d. h. im Bereich zwischen Siede- und Taulinie, konstant sind. Zur eindeutigen Bestimmung ist eine weitere Zustandsgröße nötig: der Dampfgehalt  $x_D$ . Der Dampfgehalt ist definiert als Quotient aus der Masse des gesättigten Dampfes  $m''$  und der Gesamtmasse des nassen Dampfes, die sich aus der Masse der siedenden Flüssigkeit  $m'$  und der Masse des gesättigten Dampfes  $m''$  zusammensetzt (Gleichung (A-43)) [Baehr 2002].

$$x_D = \frac{m''}{m' + m''} \quad (\text{A-43})$$

Mit Hilfe des Dampfgehaltes  $x_D$  können die Zustandsgrößen  $v$ ,  $h$  und  $s$  im Nassdampfgebiet berechnet werden (Gleichung (A-44), Gleichung (A-45) und Gleichung (A-46)).

$$x_D = \frac{v - v'}{v'' - v'} \quad (\text{A-44})$$

$$x_D = \frac{h - h'}{h'' - h'} \quad (\text{A-45})$$

$$x_D = \frac{s - s'}{s'' - s'} \quad (\text{A-46})$$

### Anhang 1.2.7 Reale Fluide

**Zustandsbeschreibung.** Das organische Arbeitsmittel des ORC-Moduls ist als reales Fluid modelliert. Die Zustandsgrößen werden mit Hilfe der Gleichung von Redlich-Kwong-Soave beschrieben [Soave 1972]. Diese erfasst unterschiedliche Wechselwirkungen zwischen den Molekülen des Fluids und führt daher im Vergleich zu idealen Stoffdatenmodellen zu abweichenden Zustandsgrößen. Die Zustandsgleichung von Redlich-Kwong-Soave ist eine Weiterentwicklung der Gleichung von van der Waals und in der impliziten Form ein Polynom dritten Grades (Gleichung (A-47)) [Koebe 1997].

$$0 = v^3 - \frac{R T}{p} v^2 + \frac{a \alpha(T) - R T b - b^2 p}{p} v - \frac{a \alpha(T) b}{p} \quad (\text{A-47})$$

Die explizite Form der Redlich-Kwong-Soave-Gleichung ist eine Funktion der Temperatur  $T$  und des spezifischen Volumens  $v$  (Gleichung (A-48)) [Baehr 2002].

$$p(T, v) = \frac{R \cdot T}{v - b} - \frac{a \alpha(T)}{v(v + b)} \quad (\text{A-48})$$

Der Term  $\left(\frac{R T}{v - b}\right)$  wird als Abstoßungsterm bezeichnet und berücksichtigt, dass sich auf Grund des Eigenvolumens der Moleküle der Raum verkleinert, der für deren räumliche Bewegung zur Verfügung steht. Dabei wird der Parameter  $b$  als Kovolumen bezeichnet und ist ein Maß für das Eigenvolumen der Moleküle.

Der Term  $\left(\frac{a \alpha(T)}{v(v + b)}\right)$  beschreibt die bei komprimierten Gasen beobachteten Anziehungskräfte der Moleküle und wird deshalb Anziehungsterm genannt [Koebe 1997].

Die zur Berechnung der Zustandsgrößen erforderlichen Parameter  $a$  und  $b$  sind nur von der kritischen Temperatur  $T_c$  und dem kritischen Druck  $p_c$  des jeweiligen Stoffes abhängig (Gleichung (A-49) und Gleichung (A-50)) [Baehr 2002].

$$a = \frac{1}{27 \beta} \frac{R^2 T_c^2}{p_c} \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{\sqrt[3]{2} - 1}{3} \quad (\text{A-49})$$

$$b = \beta \frac{R T_c}{p_c} \quad (\text{A-50})$$

Die Temperaturfunktion  $\alpha$  wird in Abhängigkeit eines weiteren, stoffspezifischen Parameters, dem azentrischen Faktor  $\omega$ , formuliert (Gleichung (A-51)) [Lüdecke 2000].

$$\alpha(T, \omega) = \left[ 1 + (0,480 + 1,574 \omega - 0,176 \omega^2) \cdot \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad (\text{A-51})$$

Der Druck  $p$  ist über das gesamte Zustandsgebiet, einschließlich dem Nassdampfgebiet, eine Funktion des molaren Volumens  $v$  und der Temperatur  $T$  (Gleichung (A-48)). Allerdings weicht der mit Hilfe der Redlich-Kwong-Soave-Gleichung berechnete Verlauf des Druckes im  $p$ - $v$ -Diagramm innerhalb des Nassdampfgebietes vom realen Verlauf ab. Der Dampfdruck  $p_s$ , und damit der Verlauf im Zweiphasengebiet zwischen der Siede- und der Taulinie, kann jedoch unter Verwendung des Maxwell-Kriteriums korrigiert und an das reale Verhalten angepasst werden (Gleichung (A-52)).

$$p_s(T)(v'' - v') = \int_{v'}^{v''} p(T, v) dv \quad (\text{A-52})$$

Durch das Maxwell-Kriteriums und die explizite Redlich-Kwong-Soave-Gleichung (Gleichung (A-48)) kann der Sattedampfdruck in Abhängigkeit der Temperatur bestimmt werden (Gleichung (A-52)).

$$p_s(T) = \frac{1}{(v'' - v')} \left[ R T \ln \left( \frac{v'' - b}{v' - b} \right) - \frac{a \alpha(T, \omega)}{b} \ln \left( \frac{v'' (v' + b)}{v' (v'' + b)} \right) \right] \quad (\text{A-53})$$

Mit Hilfe des Sattedampfdruckes  $p_s$  können ebenfalls das molare Volumen der siedenden Flüssigkeit  $v'$  sowie das molare Volumen des gesättigten Dampfes  $v''$  bestimmt werden (Gleichung (A-54)).

$$p_s(T) = p(T, v') = p(T, v'') \quad (\text{A-54})$$

**Enthalpie und Entropie.** Mit der Gleichung von Redlich-Kwong-Soave steht somit eine Zustandsgleichung zur Verfügung, mit der die Zustandsgrößen Temperatur  $T$ , Druck  $p$  und spezifisches Volumen  $v$  sowie die spezifische innere Energie  $u$  des gesamten fluiden Zustandsgebietes beschrieben werden können. Diese sind – neben der isochoren Wärmekapazität  $c_{v,0i}^{ig}$  – notwendig, um die Enthalpie  $h$  und die Entropie  $s$  realer Fluide berechnen zu können (Gleichungen (A-55) und Gleichung (A-56)).

$$h(T, v) = u(T, v) + p(T, v) v \quad (\text{A-55})$$

$$s(T, v) = s(T_0, p_0) + \int_{T_0}^T c_{v,0i}^{ig}(T) \frac{dT}{T} + R \ln \frac{v}{v_0} + \int_{\infty}^v \left[ \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v - \frac{R}{v} \right] dv \quad (\text{A-56})$$

Die Berechnung der spezifischen inneren Energie  $u$  erfolgt ebenfalls anhand der genannten Zustandsgrößen und der isochoren Wärmekapazität  $c_{v,0i}^{ig}$  (Gleichung (A-57)).

$$u(T, v) = u(T_0, p_0) + \int_{T_0}^T c_{v,0i}^{ig}(T) dT + \int_{\infty}^v \left[ T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v - p \right] dv \quad (\text{A-57})$$

### Anhang 1.3 Funktionseinheiten

Das thermodynamische Verhalten realer Anlagenkomponenten wird im Simulationsprogramm durch so genannte Funktionseinheiten (z. B. Wärmeübertrager, Kompressoren) abgebildet. Die Funktionseinheiten umfassen verschiedene Strukturen von Funktionsblöcken und Verbindern, welche die Rechenoperationen zur Beschreibung des stationären thermodynamischen Verhaltens beinhalten. Kinetiken bleiben bei der Modellbildung unberücksichtigt. Die Funktionseinheiten dienen demnach der energetischen und stofflichen Bilanzierung in bestimmten (messtechnisch validierten) Betriebspunkten. Die thermodynamischen Rechenoperationen der unterschiedlichen Funktionseinheiten sind im Folgenden dargestellt. Die in Anhang 1.2 vorgestellten Stoffdatenmodelle dienen den Rechenoperationen als Grundlage zur Berechnung der erforderlichen Zustandsgrößen.

#### Anhang 1.3.1 Trockner

Im Trockner wird der Wassergehalt des feuchten Brennstoffs (Biomasse) reduziert, indem dieser von vorgewärmter Luft überströmt wird. Ein Teil des Brennstoffwassers verdunstet und wird von der ihn überströmenden Luft aufgenommen. Die zur Verdunstung des Wassers notwendige Energie wird dem Luftstrom, welcher sich während des Trocknungsprozesses abkühlt, entzogen.

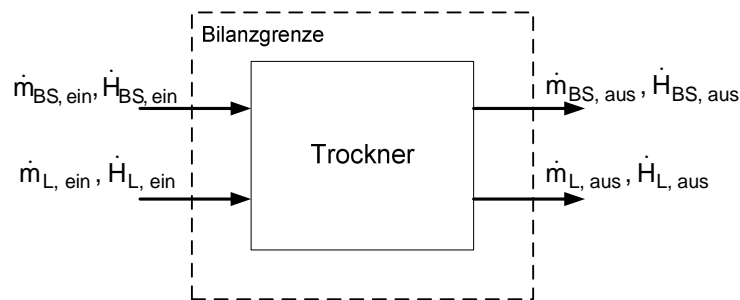


Abb. A.2 Bilanzraum der Funktionseinheit Trockner

Die Massenbilanz um den Bilanzraum des Trockners (Abb. A.2) setzt sich aus dem Massenstrom des feuchten eintretenden Brennstoffs  $\dot{m}_{BS,ein}$ , dem Massenstrom der vorgewärmten Trocknungsluft  $\dot{m}_{L,ein}$ , dem Massenstrom des getrockneten austretenden Brennstoffs  $\dot{m}_{BS,aus}$  und dem Massenstrom der austretenden feuchten Luft  $\dot{m}_{L,aus}$ , die das Trocknungswasser aufgenommen hat, zusammen (Gleichung (A-58)).

$$\dot{m}_{BS,ein} + \dot{m}_{L,ein} = \dot{m}_{BS,aus} + \dot{m}_{L,aus} \quad (\text{A-58})$$

Für die Modellierung und Auslegung des Trockners wird angenommen, dass die Luft den Trockner im gesättigten Zustand, also mit einer relativen Feuchte von  $\phi$  gleich eins, verlässt [Lucas 2004]. Da der Massenstrom  $\dot{m}_{L,wf}$  und die Zusammensetzung  $x_{i,L,wf}$  des trockenen Luftstromes während des gesamten Trocknungsprozesses konstant bleiben, wird die Bilanzierung erleichtert, indem der Massenstrom des Wasserdampfes  $\dot{m}_{wD}$  als Beladung  $X_{wD}$  des trockenen, wasserfreien Luftstromes modelliert wird. Die Berechnung der Beladung ergibt sich unter Berücksichtigung des Sattdampfdruckes  $p_s$  sowie der Molmassen  $M$  des Wasserdampfes und der wasserfreien Luft (Gleichung (A-59)) [Lucas 2004].

$$X_{WD} = \frac{\dot{m}_{WD}}{\dot{m}_{L, wf}} = \frac{M_{H_2O}}{M_{L, wf}} \frac{p_{s, H_2O}}{p - p_{s, H_2O}} = 0,622 \frac{p_{s, H_2O}}{\frac{p}{\varphi} - p_{s, H_2O}} \quad (\text{A-59})$$

Der Massenstrom des trocknen, wasserfreien Brennstoffes bleibt ebenfalls während des gesamten Trocknungsprozesses konstant (Gleichung (A-60)).

$$\dot{m}_{BS, wf} = \dot{m}_{BS, wf, ein} = \dot{m}_{BS, wf, aus} \quad (\text{A-60})$$

Die Massenbilanz des Trockners kann damit in detaillierter Form mit Hilfe des Massenstroms des wasserfreien Brennstoffs  $\dot{m}_{BS, wf}$ , des Massenstroms des mit dem Brennstoff eintretenden Wassers  $\dot{m}_{W, ein}$ , des Massenstroms der trockenen Luft  $\dot{m}_{L, wf}$ , der Beladung der Luft  $X_{WD}$  und des Massenstroms des mit der Biomasse austretenden Wassers  $\dot{m}_{W, aus}$  aufgestellt werden (Gleichung (A-61)).

$$\begin{aligned} \dot{m}_{BS, wf} + \dot{m}_{W, ein} + \dot{m}_{L, wf} (1 + X_{WD, ein}) \\ = \dot{m}_{BS, wf} + \dot{m}_{W, aus} + \dot{m}_{L, wf} (1 + X_{WD, aus}) \end{aligned} \quad (\text{A-61})$$

Der im Brennstoff verbleibende Wassermassenstrom ergibt sich aus dem anfänglichen Wassermassenstrom der Biomasse abzüglich des Wassers, das während der Trocknung von der Luft aufgenommen wird (Gleichung (A-62)).

$$\dot{m}_{W, aus} = \dot{m}_{W, ein} + \dot{m}_{L, wf} (X_{WD, ein} - X_{WD, aus}) \quad (\text{A-62})$$

Da mit Blick auf die simulationstechnische Abbildung des Trockners keine Verluste implementiert sind, ergibt sich die Energiebilanz des Trockner durch die Bilanzierung der mit den ein- und austretenden Massenströmen verbundenen Enthalpieströme (Gleichung (A-63)).

$$\dot{H}_{BS, ein} + \dot{H}_{L, ein} = \dot{H}_{BS, aus} + \dot{H}_{L, aus} \quad (\text{A-63})$$

Die Austrittstemperatur der feuchten Luft  $T_{L, aus}$  wird durch den thermodynamischen Gleichgewichtszustand bestimmt, der sich zwischen der austretenden feuchten Luft und dem austretenden Brennstoff einstellt [Lucas 2004]. Der mit einer Restfeuchte beladene Brennstoff verlässt den Trockner dementsprechend mit der gleichen Temperatur wie die Luft (Gleichung (A-64)).

$$T_{aus} = T_{BS, aus} = T_{L, aus} \quad (\text{A-64})$$

Die detaillierte Energiebilanz des Trockners berücksichtigt neben dem thermodynamischen Gleichgewicht zwischen der Verdunstung des Wassers und dem Abkühlen der Luft zugleich die Erwärmung des Brennstoffes (Gleichung (A-65)).

$$\begin{aligned} 0 = \dot{m}_{BS, wf} \cdot (\hat{h}_{BS, wf, aus} - \hat{h}_{BS, wf, ein}) \\ + \dot{m}_{W, aus} \hat{h}_{W, aus} - \dot{m}_{W, ein} \hat{h}_{W, ein} \end{aligned} \quad (\text{A-65})$$

$$+ \dot{m}_{L, wf} \left( \hat{h}_{L, wf, aus} + X_{WD, aus} \hat{h}_{WD, aus} - \hat{h}_{L, wf, ein} - X_{WD, ein} \hat{h}_{WD, ein} \right)$$

Die Berechnung der Gleichgewichtstemperatur des Trockners  $T_{aus}$ , mit der sowohl die austretende Luft als auch die getrocknete Biomasse den Trockner verlassen, wird anhand der dargestellten Energiebilanz iterativ bestimmt.

### Anhang 1.3.2 Allothermer Vergasungsreaktor

Die Vergasung dient der Überführung der biogenen Festbrennstoffe in ein brennbares Gasmisch. Bei der im Rahmen dieser Arbeit betrachteten allothermen Vergasung besteht die Vergasungseinheit aus einem Vergasungsreaktor und einer Brennkammer. Die Biomasse wird dem Vergasungsreaktor zugeführt und dort unter Zufuhr von Wasserdampf als Vergasungsmittel und Wärme in ein brennbares Gasmisch umgewandelt. Die Wärme wird dem Vergasungsreaktor allotherm durch zwischen dem Vergasungsreaktor und der Brennkammer zirkulierendes Bettmaterial zugeführt. In der Brennkammer wird unter Luftzufuhr unvergaster Kohlenstoff aus dem Vergasungsreaktor und u. a. rezirkuliertes Rohgas verbrannt und das Bettmaterial aufgeheizt. Die Modellierung des allothermen Vergasungsreaktors wird im Folgenden beschrieben. Die Beschreibung der Modellierung der Brennkammer erfolgt gesondert in Anhang 1.3.3.

Die Umwandlung der Biomasse in ein brennbares Gasmisch erfolgt im Vergasungsreaktor unter Zufuhr von Wasserdampf, Inertgas und Bettmaterial als Wärmeträger (Abb. A.3).

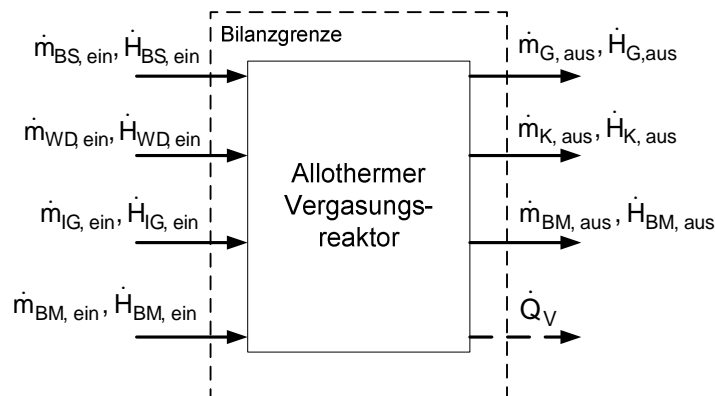


Abb. A.3 Bilanzraum der Funktionseinheit Allothermer Vergasungsreaktor

Die Massenbilanz um den Vergasungsreaktor kann somit mit Hilfe des Massenstromes des eintretenden Brennstoffs  $\dot{m}_{BS, ein}$ , des Massenstroms des eintretenden Dampfes  $\dot{m}_{WD, ein}$ , des Massenstroms des eintretenden Inertgases  $\dot{m}_{IG, ein}$ , des Massenstroms des eintretenden Bettmaterials  $\dot{m}_{BM, ein}$ , des Massenstroms des austretenden Rohgases  $\dot{m}_{G, aus}$ , des Massenstroms des austretenden Koks  $\dot{m}_{K, aus}$  und des Massenstroms des austretenden Bettmaterials  $\dot{m}_{BM, aus}$  aufgestellt werden (Gleichung (A-66)).

$$\dot{m}_{BS, ein} + \dot{m}_{WD, ein} + \dot{m}_{IG, ein} + \dot{m}_{BM, ein} = \dot{m}_{G, aus} + \dot{m}_{K, aus} + \dot{m}_{BM, aus} \quad (\text{A-66})$$

Die Berechnung der aus dem Vergasungsreaktor austretenden Stoffmengenströme erfolgt über eine an Messwerte adaptierte Gleichgewichtsrechnung. Mit Hilfe von fünf Gleichungen werden im Rahmen der Gleichgewichtsrechnung fünf aus dem Reaktor austretende Stoffmengenströme berechnet:

- Stoffmengenstrom Kohlenstoffdioxid



- Stoffmengenstrom Kohlenstoffmonoxid
- Stoffmengenstrom Wasserdampf
- Stoffmengenstrom Wasserstoff
- Stoffmengenstrom Methan

Die fünf Gleichungen dieser Berechnung sind:

- Die Kohlenstoffbilanz des Vergasungsreaktors
- Die Wasserstoffbilanz des Vergasungsreaktors
- Die Sauerstoffbilanz des Vergasungsreaktors
- Das Massenwirkungsgesetz der Wassergas-Shift-Reaktion
- Das Massenwirkungsgesetz der Boudouard-Reaktion

Die drei Stoffmengenbilanzen der aufgeführten Gleichungen ergeben sich entsprechend den jeweiligen Elementenbilanzen um den Vergasungsreaktor. Das Massenwirkungsgesetz für die Wassergas-Shift-Reaktion wird mit Hilfe der Stoffmengenanteile  $y_i$  des austretenden Gases, des Reaktionsdrucks  $p$ , der stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktion  $\nu_i$  und der Gleichgewichtskonstanten  $K$  der Reaktion formuliert (Gleichung (A-67)) [Lucas 2004].

$$K(T)_{\text{Wassergas-Shift}} = \frac{y_{\text{CO}_2}^{\nu_{\text{CO}_2}} y_{\text{H}_2}^{\nu_{\text{H}_2}}}{y_{\text{H}_2\text{O}}^{\nu_{\text{H}_2\text{O}}} y_{\text{CO}}^{\nu_{\text{CO}}}} \left( \frac{p}{p_0} \right)^{\sum_{i=1}^4 \nu_i} \quad (\text{A-67})$$

Das Massenwirkungsgesetz für die Boudouard-Reaktion lautet unter der Voraussetzung, dass feste Substanzen (z. B. Kohlenstoff) nicht im Massenwirkungsgesetz berücksichtigt werden [Mortimer 2003], entsprechend (Gleichung (A-68)).

$$K(T)_{\text{Boudouard}} = \frac{y_{\text{CO}}^{\nu_{\text{CO}}}}{y_{\text{CO}_2}^{\nu_{\text{CO}_2}}} \left( \frac{p}{p_0} \right)^{\sum_{i=1}^2 \nu_i} \quad (\text{A-68})$$

Die reaktionsspezifischen Gleichgewichtskonstanten sind temperaturabhängig und berechnen sich mit Hilfe der idealen Gaskonstante  $R$ , der  $n$  stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktionsedukte und -produkte  $\nu_i$  und des chemischen Potentials der Gaskomponenten  $\mu_{0i}^{\text{ig}}$  bzw. der molaren freien Reaktionsenthalpie  $\Delta g^{R,\text{ig}}$  in Abhängigkeit der Temperatur  $T$  und des Standarddrucks  $p_0$  [Lucas 2004] (Gleichung (A-69)).

$$K(T) = e^{\frac{-\sum_{i=1}^n \nu_i \mu_{0i}^{\text{ig}}}{RT}} = e^{\frac{-\Delta g^{R,\text{ig}}}{RT}} \quad (\text{A-69})$$

Dabei ist das chemische Potenzial der Gaskomponenten durch ihre Temperatur  $T$  sowie durch ihre Enthalpie  $h_{0i}^{\text{ig}}$  und Entropie  $s_{0i}^{\text{ig}}$  definiert (Gleichung (A-70)) [Lucas 2004].

$$\mu_{0i}^{\text{ig}} = h_{0i}^{\text{ig}} - T s_{0i}^{\text{ig}} \quad (\text{A-70})$$

Die temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten können mit Hilfe des Stoffdatenmodells idealer Gase bestimmt werden (Gleichung (A-71)).

$$K(T) = e^{-\frac{\sum_{i=1}^n \nu_i (h_{0i}^{ig} - T s_{0i}^{ig})}{RT}} \quad (\text{A-71})$$

Zur Anpassung der aus dem Vergaser austretenden Gasströme an in der Literatur veröffentlichte bzw. an realen Vergasungsanlagen gemessenen Gasströme (z. B. an der Vergasungsanlage am Standort Güssing [Hofbauer 2002]) werden zur Berechnung der beiden Gleichgewichtskonstanten so genannte Temperaturkorrekturen eingeführt. Die Temperaturkorrekturen sind vom Anwender des Simulationsprogramms fest vorgegebene Werte (siehe Tabelle A.16), um die die Vergasungstemperatur für jede Reaktion individuell modifiziert wird. Das Ziel dieser Temperaturkorrekturen ist es, die Gleichgewichtszusammensetzung der aus dem Vergaser austretenden Gase gezielt zu beeinflussen (vgl. u. a. [Ogriseck 2006], [Korobov 2003]).

Die aus dem Vergaser austretenden Stoffmengenströme weiterer Gaskomponenten, die nicht entsprechend der dargestellten Gleichgewichtsberechnungen bestimmt werden können (z. B.  $C_7H_8$ ,  $C_{10}H_8$ ,  $H_2S$ ,  $NH_3$ ), werden dem Simulationsprogramm als konstante Werte vorgegeben (siehe Tabelle A.16) und entsprechend in der Elementenbilanz berücksichtigt.

Aufgrund des endothermen Charakters der Vergasung muss dem Reaktor Wärme zugeführt werden. Die Berechnung der Wärmemenge ergibt sich unter Zuhilfenahme der Energiebilanz um den Reaktor (Gleichung (A-72)).

$$\dot{H}_{BS, \text{ein}} + \dot{H}_{WD, \text{ein}} + \dot{H}_{IG, \text{ein}} + \dot{H}_{BM, \text{ein}} = \dot{H}_{G, \text{aus}} + \dot{H}_{K, \text{aus}} + \dot{H}_{BM, \text{aus}} + \dot{Q}_V \quad (\text{A-72})$$

Das Gleichungssystem – bestehend aus den fünf unbekanntem Stoffmengenströmen als Variablen und den Elementbilanzen sowie Massenwirkungsgesetzen als Gleichungen – wird iterativ gelöst. Dabei kommt der Einstellung geeigneter Startwerte bei der Existenz unterschiedlicher Lösungsvektoren besondere Bedeutung zu.

### Anhang 1.3.3 Brennkammer

Die im Rahmen des Simulationsprogramms modellierte Brennkammer bildet die Verbrennung von Gasen sowie organischen Verbindungen ab. Dabei können der Brennkammer mehrere Brennstoffe sowie inerte Stoffströme (z. B. Bettmaterial) parallel zugeführt werden.

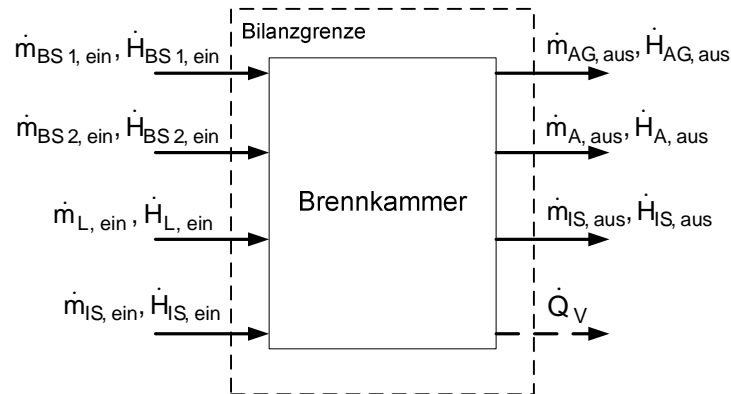
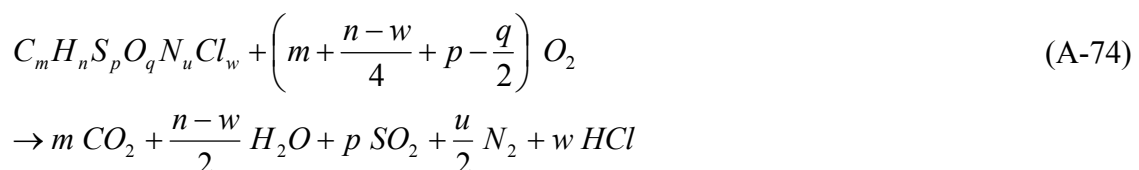


Abb. A.4 Bilanzraum der Funktionseinheit Brennkammer

Die Massenbilanz um den Bilanzraum der Brennkammer (Abb. A.4) folgt unter Berücksichtigung des Massenstroms des ersten eintretenden Brennstoffs  $\dot{m}_{BS1,ein}$ , des Massenstroms des zweiten eintretenden Brennstoffs  $\dot{m}_{BS2,ein}$ , des Massenstroms der eintretenden Luft  $\dot{m}_{L,ein}$ , des Massenstroms des eintretenden Inertstoffes  $\dot{m}_{IS,ein}$ , des Massenstroms des austretenden Abgases  $\dot{m}_{AG,aus}$ , des austretenden Inertstoffes  $\dot{m}_{IS,aus}$  und des Massenstroms der austretenden Asche  $\dot{m}_{A,aus}$  (Gleichung (A-73)).

$$\dot{m}_{BS1,ein} + \dot{m}_{BS2,ein} + \dot{m}_{L,ein} + \dot{m}_{IS,ein} = \dot{m}_{AG,aus} + \dot{m}_{IS,aus} + \dot{m}_{A,aus} \quad (\text{A-73})$$

Der aus der Brennkammer austretende Inertstoffmassenstrom  $\dot{m}_{IS,aus}$  entspricht dem Inertstoffmassenstrom am Brennkammereintritt. Der austretende Aschemassenstrom  $\dot{m}_{A,aus}$  entspricht der Summe der zugeführten Brennstoffaschen. Der Abgasmassenstrom  $\dot{m}_{AG,aus}$  sowie seine Zusammensetzung werden gemäß einer stöchiometrischen Verbrennungsrechnung bestimmt. Die stöchiometrische Verbrennungsrechnung berücksichtigt die in der Elementaranalyse der Brennstoffe aufgelisteten Elemente: C, H, O, N, S und Cl. Es wird angenommen, dass die Oxidationsprodukte  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{SO}_2$  entstehen und der Brennstoffstickstoff zu  $\text{N}_2$  reduziert wird [Brandt 1991]. Der Luftstickstoff nimmt an keiner Reaktion teil, sondern durchläuft die Brennkammer inert. Cl reagiert zu HCl, welches als Bestandteil des Abgases die Brennkammer verlässt [Oberberger 2009]. Der im Brennstoff gebundene Sauerstoff steht für die Oxidation zur Verfügung (Gleichung (A-74)).



Zur Berücksichtigung der Tatsache, dass im Rahmen realer Verbrennungsprozesse Kohlenwasserstoffe i. Allg. nicht vollständig oxidiert werden, kann dem Simulationsmodell der Brennkammer ein Kohlenstoffmonoxidschlupf vorgegeben werden.

Der Kohlenstoffmonoxidschlupf  $S_{CO}$  ist exemplarisch für alle unvollständigen Verbrennungsreaktionen in das Brennkammermodell integriert. Er berechnet sich durch den Quotienten des Stoffmengenstroms Kohlenstoffmonoxid  $\dot{n}_{CO,AG}$  im Abgas zum Stoffmengenstrom Kohlenstoffdioxid im Abgas  $\dot{n}_{CO_2,AG}$  (Gleichung (A-75)).

$$S_{CO} = \frac{\dot{n}_{CO,AG}}{\dot{n}_{CO_2,AG}} \quad (\text{A-75})$$

Die stöchiometrischen Indices  $m, n, p, q, u$  und  $w$  können aus den in der Elementaranalyse der Brennstoffe angegebenen Massenanteilen  $x_i$  und der zugehörigen molaren Masse  $M_i$  der Elemente berechnet werden (Gleichung (A-76)) [Cerbe 1996].

$$m = \frac{x_C}{M_C}, n = \frac{x_H}{M_H}, p = \frac{x_S}{M_S}, q = \frac{x_O}{M_O}, u = \frac{x_N}{M_N}, w = \frac{x_{Cl}}{M_{Cl}} \quad (\text{A-76})$$

Der für die vollständige Verbrennung benötigte stöchiometrische Sauerstoffbedarf  $o_{min}$  (bezogen auf 1 kg Brennstoff) berechnet sich unter Verwendung der stöchiometrischen Indices  $m, n, p, q$  und  $w$  (Gleichung (A-77)) [Brandt 1991].

$$o_{min} = m + \frac{n-w}{4} + p - \frac{q}{2} \quad (\text{A-77})$$

Der Sauerstoff wird der Brennkammer als Bestandteil der Luft zugeführt. Der theoretische Mindestluftbedarf  $l_{min}$  (bezogen auf 1 kg Brennstoff) ergibt sich unter der Berücksichtigung des Stoffmengenanteiles des Sauerstoffes im Luftstrom  $y_{O_2,L}$  (Gleichung (A-78)) [Cerbe 1996].

$$l_{min} = \frac{o_{min}}{y_{O_2,L}} \quad (\text{A-78})$$

In der Praxis wird die Verbrennung unter Luftüberschuss durchgeführt [Brandt 1991]. Das Verhältnis der tatsächlich zugeführten Luftmenge  $l$  zum theoretisch benötigten Mindestluftbedarf  $l_{min}$  wird als Luftverhältnis  $\lambda$  bezeichnet (Gleichung (A-79)).

$$\lambda = \frac{l}{l_{min}} \quad (\text{A-79})$$

Allgemein laufen Verbrennungen bei Luftverhältnissen größer eins ab [Cerbe 1996]. Im Rahmen der simulationstechnischen Abbildung der Brennkammer muss das Luftverhältnis vom Anwender vorgegeben werden (Tabelle A.16).

Mit Hilfe der den in die Brennkammer ein- und austretenden Massenströmen entsprechenden Enthalpieströmen und der Verlustleistung  $\dot{Q}_V$  kann die Energiebilanz um den Bilanzraum der Brennkammer formuliert werden (Gleichung (A-80)).

$$\dot{H}_{BS1,ein} + \dot{H}_{BS2,ein} + \dot{H}_{L,ein} + \dot{H}_{IS,ein} = \dot{H}_{AG,aus} + \dot{H}_{IS,aus} + \dot{H}_{A,aus} + \dot{Q}_V \quad (\text{A-80})$$

Die Verbrennungstemperatur wird unter der Annahme einer adiabaten Brennkammer iterativ aus der Energiebilanz bestimmt.

### Anhang 1.3.4 Autothermer Vergasungsreaktor

Im Gegensatz zur allothermen Vergasung arbeitet die in dieser Arbeit betrachtete autotherme Vergasung ohne Brennkammer zur Wärmeversorgung. Die zur Vergasung des Brennstoffs / der Biomasse erforderliche Wärme wird durch eine Teiloxidation des Brennstoffs sichergestellt. Dazu wird dem Vergasungsreaktor als Vergasungsmittel neben Wasserdampf zusätzlich Sauerstoff zugeführt. Auf den Einsatz von erhitztem Bettmaterial, welches den Vergasungsreaktor bei der allothermen Vergasung mit Wärme versorgt, kann dementsprechend verzichtet werden (Abb. A.5).

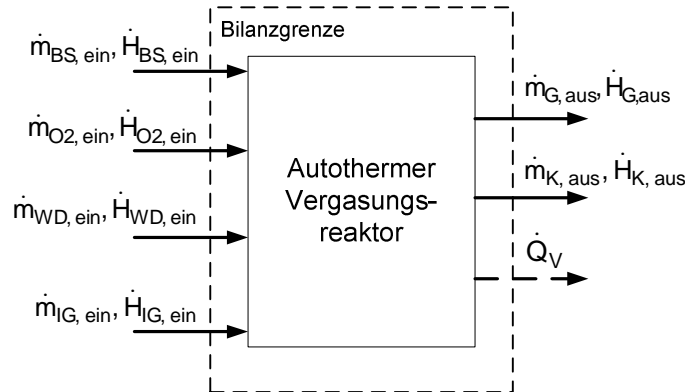


Abb. A.5 Bilanzraum der Funktionseinheit Autothermer Vergasungsreaktor

Die Massenbilanz um den Vergasungsreaktor kann demnach mit Hilfe des Massenstromes des eintretenden Brennstoffs  $\dot{m}_{BS, ein}$ , des Massenstroms des eintretenden Sauerstoffs  $\dot{m}_{O_2, ein}$ , des Massenstroms des eintretenden Dampfes  $\dot{m}_{WD, ein}$ , des Massenstroms des eintretenden Inertgases  $\dot{m}_{IG, ein}$ , des Massenstroms des austretenden Rohgases  $\dot{m}_{G, aus}$  und des Massenstroms des austretenden Kokes  $\dot{m}_{K, aus}$  aufgestellt werden (Gleichung (A-81)).

$$\dot{m}_{BS, ein} + \dot{m}_{O_2, ein} + \dot{m}_{WD, ein} + \dot{m}_{IG, ein} = \dot{m}_{G, aus} + \dot{m}_{K, aus} \quad (\text{A-81})$$

Die Berechnung der fünf aus dem Vergasungsreaktor austretenden Stoffmengenströme erfolgt wie auch beim allothermen Vergasungsreaktor mit Hilfe von fünf Gleichungen:

- Stoffmengenstrom Kohlenstoffdioxid
- Stoffmengenstrom Kohlenstoffmonoxid
- Stoffmengenstrom Wasserdampf
- Stoffmengenstrom Wasserstoff
- Stoffmengenstrom Methan

Die fünf Gleichungen dieser Berechnung sind:

- Die Kohlenstoffbilanz des Vergasungsreaktors
- Die Wasserstoffbilanz des Vergasungsreaktors
- Die Sauerstoffbilanz des Vergasungsreaktors
- Das Massenwirkungsgesetz der Wassergas-Shift-Reaktion
- Das Massenwirkungsgesetz der Boudouard-Reaktion

Zur Anpassung der Vergasungscharakteristika an Messwerte, die an realen Anlagen gemessen wurden, werden – wie auch bei der Modellierung des allothermen Vergasungsreaktors – Temperaturkorrekturen (siehe Tabelle A.17) eingesetzt. Diese sind vom Anwender vorgegebene Werte, mit deren Hilfe die Gleichgewichtskonstanten, die in den Massenwirkungsgesetzen der Wassergas-Shift-Reaktion und der Boudouard-Reaktion

auftreten, modifiziert werden. Auf diese Weise wird die Gleichgewichtszusammensetzung der aus dem Vergasungsreaktor austretenden Stoffströme verändert (vgl. u. a. [Ogriseck 2006], [Korobov 2003]). Da die Vergasung von Holzhackschnitzeln mit Sauerstoff bei einem Druck von 10 bar sich bisher noch in der Entwicklung befindet, kann zur Bestimmung der Temperaturkorrekturen nicht auf Literaturwerte für typische Gaszusammensetzungen sowie Vergasungsmittel- und Inertgasverbräuche zurückgegriffen werden. Daher erfolgt die Bestimmung der Temperaturkorrekturen durch den Abgleich mit Betriebsparametern eines Hochtemperatur-Winkler-Vergasers, der mit Braunkohle bei 950 °C, 10 bar und einem Sauerstoff-Dampf-Gemisch als Vergasungsmittel betrieben wurde [Ullmann's 2006].

Die aus dem Vergaser austretenden Stoffmengenströme weiterer Gaskomponenten, die nicht entsprechend den dargestellten Gleichgewichtsberechnungen bestimmt werden (z. B.  $C_7H_8$ ,  $C_{10}H_8$ ,  $H_2S$ ,  $NH_3$ ), werden dem Simulationsprogramm als konstante Werte vorgegeben (siehe Tabelle A.17) und entsprechend in der Elementenbilanz berücksichtigt.

Der Massenstrom des für die Vergasung erforderlichen Sauerstoffs wird unter Berücksichtigung der vom Anwender vorgegebenen Reaktortemperatur iterativ mit Hilfe der Energiebilanz um den Vergasungsreaktor bestimmt (Gleichung (A-82)).

$$\dot{H}_{BS,ein} + \dot{H}_{O_2,ein} + \dot{H}_{WD,ein} + \dot{H}_{IG,ein} = \dot{H}_{G,aus} + \dot{H}_{K,aus} + \dot{Q}_V \quad (A-82)$$

### Anhang 1.3.5 Reformer

Der bei der Abbildung der betrachteten Konzepte modellierte Reformer dient in erster Linie der Zerstörung von Teeren und höheren Kohlenwasserstoffen. Dazu durchströmt das teerhaltige Gas die im Reformer befindliche Katalysatorschüttung, an deren Oberfläche die im Gas befindlichen Teere umgesetzt werden. Da die Reformingreaktionen endotherm sind, muss dem Reformer zur Gewährleistung eines isothermen Betriebes Wärme zugeführt werden (Abb. A.6). Die Wärme wird durch die heißen Rauchgase einer Brennkammer bereitgestellt.

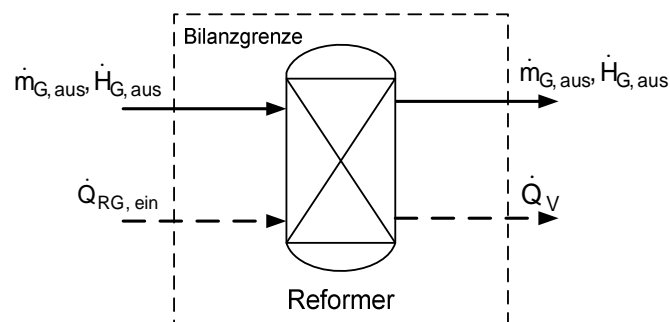


Abb. A.6 Bilanzraum der Funktionseinheit Reformer

Die Massenbilanz um den Reformer ergibt sich mit dem Massenstrom des eintretenden Gases  $\dot{m}_{G,ein}$  und dem Massenstrom des austretenden Gases  $\dot{m}_{G,aus}$  (Gleichung (A-83)).

$$\dot{m}_{G,ein} = \dot{m}_{G,aus} \quad (A-83)$$

Bei der Berechnung der Energiebilanz des Reformers müssen neben den Enthalpieströmen des eintretenden Gases  $\dot{H}_{G,ein}$  und des austretenden Gases  $\dot{H}_{G,aus}$  weiterhin Wärmeverluste

$\dot{Q}_V$  sowie die mit dem Rauchgas der Brennkammer zugeführte Wärme  $\dot{Q}_{RG, ein}$  berücksichtigt werden (Gleichung (A-84)).

$$\dot{H}_{G, ein} + \dot{Q}_{RG, ein} = \dot{H}_{G, aus} + \dot{Q}_V \quad (\text{A-84})$$

Die Umsatzraten der Teere sowie die Betriebstemperatur des Reformers werden vom Anwender der Simulation vorgegeben. Als mögliche Reformingprodukte können Wasserstoff, Kohlenstoffmonoxid und Kohlenstoffdioxid berücksichtigt werden. Da sich mit den Umsatzraten ebenfalls der Energiebedarf des Reformers verändert, wird die der Brennkammer zugeführte Gasmenge automatisch vom Simulationsprogramm eingestellt.

### Anhang 1.3.6 Kompressor/Pumpe/Gebläse

In den vom Simulationsprogramm abgebildeten Kompressoren, Pumpen und Gebläsen wird der Druck des in die Strömungsmaschine eintretenden Mediums unter Zufuhr technischer Arbeit bzw. elektrischer Leistung erhöht.

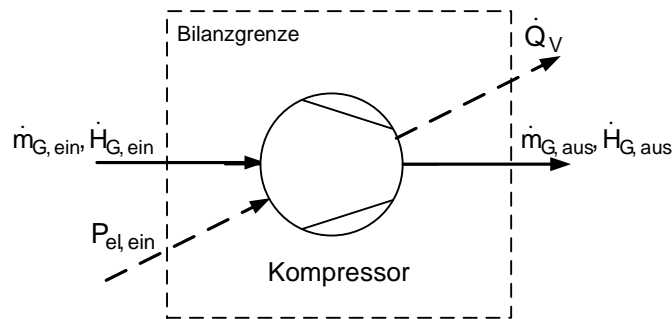


Abb. A.7 Bilanzraum der Funktionseinheit Kompressor

Die Modellierung der Kompressoren, Pumpen und Gebläse wird im Folgenden exemplarisch anhand des Bilanzraumes um einen Gaskompressor (Abb. A.7) beschrieben. Da beim Durchströmen des Kompressors keine Stoffumwandlungsprozesse stattfinden, sind die Stoffmengenanteile der Komponenten im eintretenden Gas  $y_{i, ein}$  gleich den Stoffmengenanteilen im austretenden Gas  $y_{i, aus}$ . Gleiches gilt für den Massenstrom des eintretenden Gases  $\dot{m}_{G, ein}$  und des austretenden Gases  $\dot{m}_{G, aus}$  (Gleichung (A-85)).

$$\dot{m}_{G, ein} = \dot{m}_{G, aus} \quad (\text{A-85})$$

In der Energiebilanz muss neben der mit dem Gas zugeführten Enthalpie  $\dot{H}_{G, ein}$  und der abgeführten Enthalpie  $\dot{H}_{G, aus}$  ein zusätzlicher Wärmeverlust  $\dot{Q}_V$  sowie die der Strömungsmaschine zugeführte elektrische Leistung  $P_{el, ein}$  berücksichtigt werden (Gleichung (A-86)).

$$\dot{H}_{G, ein} + P_{el, ein} = \dot{H}_{G, aus} + \dot{Q}_V \quad (\text{A-86})$$

Im Rahmen der thermodynamischen Berechnungen des Kompressors werden die elektrische Eingangsleistung, der Wärmeverlust sowie die Zustandsgrößen des austretenden Gasstroms aus den vom Anwender vorgegebenen Größen (Druck nach der Strömungsmaschine, isentroper Wirkungsgrad, mechanischer Wirkungsgrad) berechnet. Die elektrische Eingangsleistung  $P_{el, ein}$  ist dabei durch den mechanischen Wirkungsgrad  $\eta_{mech}$  und die Verdichtungsarbeit  $W_{Verd}$  definiert (Gleichung (A-87)).

$$P_{el, ein} = \frac{W_{Verd}}{\eta_{mech}} \quad (A-87)$$

Die Verlustwärme ergibt sich aus der Differenz der elektrischen Eingangsleistung  $P_{el, ein}$  und der Verdichtungsarbeit  $W_{Verd}$  (Gleichung (A-88)).

$$\dot{Q}_V = P_{el, ein} - W_{Verd} \quad (A-88)$$

Zur Berechnung der Verdichtungsarbeit wird die Differenz aus der Enthalpie des eintretenden Gases  $\dot{H}_{G, ein}$  und des austretenden Gases  $\dot{H}_{G, aus}$  gebildet (Gleichung (A-89)).

$$W_{Verd} = \dot{H}_{G, aus} - \dot{H}_{G, ein} \quad (A-89)$$

Die Enthalpie des austretenden Gases  $\dot{H}_{G, aus}$  kann mit Hilfe des isentropen Wirkungsgrades  $\eta_{is}$ , der Enthalpie des eintretenden Gases  $\dot{H}_{G, ein}$  und der Enthalpie des austretenden Gases bei isentroper Zustandsänderung  $\dot{H}_{G, aus, is}$  berechnet werden (Gleichung (A-90)) [Baehr 2002]:

$$\eta_{is, Kompressor} = \frac{\dot{H}_{G, aus, is} - \dot{H}_{G, ein}}{\dot{H}_{G, aus} - \dot{H}_{G, ein}} \quad (A-90)$$

Die Enthalpie des austretenden Gases bei isentroper Verdichtung  $\dot{H}_{G, aus, is}$  kann mit Hilfe der Temperatur des austretenden Gases bei isentroper Zustandsänderung  $T_{G, aus, is}$  bestimmt werden. Diese wird unter Verwendung der Isentropengleichung mit Hilfe der Temperatur des eintretenden Gases  $T_{G, ein}$ , des Drucks des eintretenden Gases  $p_{G, ein}$ , der idealen Gaskonstante  $R$ , der molaren Wärmekapazität  $c_p^{ig}$  und des Drucks des austretenden Gases  $p_{G, aus}$  ermittelt (Gleichung (A-91)).

$$\left( \frac{T_{G, aus, is}}{T_{G, ein}} \right) = \left( \frac{p_{G, aus}}{p_{G, ein}} \right)^{\frac{R}{c_p^{ig}}} \quad (A-91)$$

Der Druck des austretenden Gases  $p_{G, aus}$  wird vom Anwender des Simulationsprogramms vorgegeben. Aufgrund des Einflusses der Gasaustrittstemperatur sowohl auf die Wärmekapazität als auch auf den Gasaustrittsdruck in der Isentropengleichung (Gleichung (A-91)) wird diese iterativ bestimmt.

### Anhang 1.3.7 Turbine

In den vom Simulationsprogramm abgebildeten Turbinen wird das eintretende Medium unter Abfuhr technischer Arbeit bzw. elektrischer Leistung auf ein niedrigeres Druckniveau als das des Eintrittszustandes entspannt.



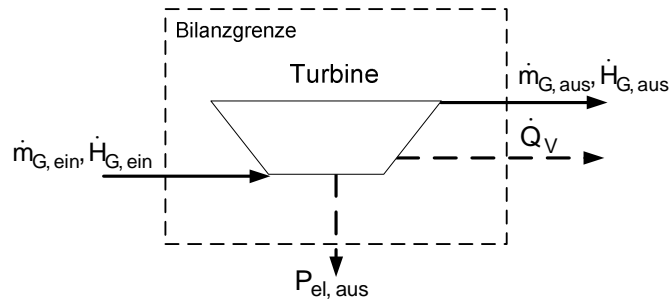


Abb. A.8 Bilanzraum der Funktionseinheit Turbine

Bei der Entspannung finden in der Regel keine Stoffumwandlungen statt. Damit ist – wie auch beim Kompressor – die Zusammensetzung des eintretenden Gases  $y_{i,ein}$  gleich der Zusammensetzung des austretenden Gases  $y_{i,aus}$ . Die Massenbilanz des betrachteten Bilanzraumes (Abb. A.8) ergibt sich aus dem Massenstrom des eintretenden Gases  $\dot{m}_{G,ein}$  und dem Massenstrom des austretenden Gases  $\dot{m}_{G,aus}$  (Gleichung (A-92)).

$$\dot{m}_{G,ein} = \dot{m}_{G,aus} \quad (\text{A-92})$$

In der Energiebilanz muss neben der Enthalpie der mit dem Gas zugeführten Wärme  $\dot{H}_{G,ein}$  und der Enthalpie der mit dem Gas abgeführten Wärme  $\dot{H}_{G,aus}$  ein zusätzlicher Wärmeverlust  $\dot{Q}_V$  sowie die abgeführte elektrische Leistung  $P_{el,aus}$  berücksichtigt werden (Gleichung (A-93)).

$$\dot{H}_{G,ein} = \dot{H}_{G,aus} + \dot{Q}_V + P_{el,aus} \quad (\text{A-93})$$

Die thermodynamischen Berechnungen der Turbine erfolgen in Anlehnung an die Berechnungen der Kompressoren mit Hilfe der isentropen Zustandsgleichung (Gleichung (A-91)) und der Definition des isentropen Wirkungsgrades. Im Gegensatz zu den Verdichtungsrechnungen wird jedoch die im Rahmen der Entspannung bereitgestellte elektrische Leistung  $P_{el,aus}$  berechnet. Die elektrische Ausgangsleistung  $P_{el,aus}$  ist durch den mechanischen Wirkungsgrad  $\eta_{mech}$  und die Entspannungsarbeit  $W_{Entsp}$  definiert (Gleichung (A-94)).

$$P_{el,aus} = W_{Entsp} \eta_{mech} \quad (\text{A-94})$$

Die Verlustwärme ergibt sich aus der Differenz der Entspannungsarbeit  $W_{Entsp}$  und der elektrischen Ausgangsleistung  $P_{el,aus}$  (Gleichung (A-95)).

$$\dot{Q}_V = W_{Entsp} - P_{el,aus} \quad (\text{A-95})$$

Zur Berechnung der Entspannungsarbeit wird – wie auch bei der Berechnung der Verdichtungsarbeit (Gleichung (A-88)) – die Differenz aus der Enthalpie des eintretenden Gases  $\dot{H}_{G,ein}$  und des austretenden Gases  $\dot{H}_{G,aus}$  gebildet (Gleichung (A-96)).

$$W_{Entsp} = \dot{H}_{G,aus} - \dot{H}_{G,ein} \quad (\text{A-96})$$

Grundsätzlich ist zu beachten, dass der isentrope Wirkungsgrad bei Entspannungs- und Verdichtungsprozessen unterschiedlich definiert ist. Bei der Definition des isentropen Wirkungsgrades von Entspannungsprozessen tritt die Enthalpie des austretenden Gases bei isentroper Zustandsänderung  $\dot{H}_{G,aus, is}$  im Nenner auf. Die Differenz aus der Enthalpie des austretenden Gases  $\dot{H}_{G,aus}$  und der Enthalpie des eintretenden Gases  $\dot{H}_{G, ein}$  wird im Zähler aufgeführt (Gleichung (A-97)) [Baehr 2002].

$$\eta_{is, Turbine} = \frac{\dot{H}_{G,aus} - \dot{H}_{G, ein}}{\dot{H}_{G,aus, is} - \dot{H}_{G, ein}} \quad (\text{A-97})$$

Analog zu der Berechnung des Kompressors wird auch bei der Turbine die Gasaustrittstemperatur iterativ ermittelt.

### Anhang 1.3.8 Wärmeübertrager

Wärmeübertrager dienen dem Austausch von Wärme zwischen zwei Medien mit unterschiedlichem Temperaturniveau. Dabei wird der Wärmestrom vom warmen auf das kalte Medium übertragen. Der Bilanzraum des mit Hilfe des Simulationsprogramms modellierten Wärmeübertragers (Abb. A.9) berücksichtigt jedoch lediglich den Massenstrom eines Mediums.

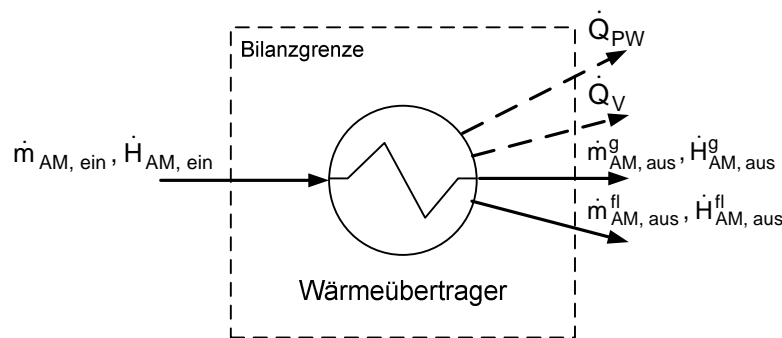


Abb. A.9 Bilanzraum der Funktionseinheit Wärmeübertrager

Im Simulationsprogramm sind zwei Arten von Wärmeübertragern zu unterscheiden:

- Aktive Wärmeübertrager
- Passive Wärmeübertrager

In aktiven Wärmeübertragern gibt der Anwender aktiv eine Zieltemperatur vor, auf die das entsprechende Arbeitsmittel abgekühlt bzw. erwärmt werden soll. Passiven Wärmeübertragern wird ein Wärmestrom zugeführt und die Austrittstemperatur des Arbeitsmittels auf Basis der übertragenen Wärmemenge berechnet. Bei Kühlungsprozessen gasförmiger Stoffströme kann es – je nach Zieltemperatur und Sättigungsgrad des Stoffstroms – zu Kondensationserscheinungen kommen. Die Erwärmung flüssiger Stoffströme führt hingegen unter Umständen zu einer Verdampfung des Arbeitsmittels. Dementsprechend kann das Arbeitsmittel sowohl gasförmig als auch flüssig aus dem Wärmeübertrager austreten. Die Massenbilanz um den Wärmeübertrager ergibt sich damit aus dem Massenstrom des eintretenden Arbeitsmittels  $\dot{m}_{AM, ein}$  sowie des austretenden gasförmigen Arbeitsmittels  $\dot{m}_{AM, aus}^g$  und des austretenden flüssigen Arbeitsmittels  $\dot{m}_{AM, aus}^fl$  (Gleichung (A-98)).

$$\dot{m}_{AM, \text{ein}} = \dot{m}_{AM, \text{aus}}^g + \dot{m}_{AM, \text{aus}}^{\text{fl}} \quad (\text{A-98})$$

Die Energiebilanz um den Wärmeübertrager kann durch die Enthalpie des eintretenden Mediums  $\dot{H}_{AM, \text{ein}}$ , die Enthalpie der austretenden Gasphase  $\dot{H}_{AM, \text{aus}}^g$ , die Enthalpie der austretenden Flüssigphase  $\dot{H}_{AM, \text{aus}}^{\text{fl}}$  und einen Verlustwärmestrom  $\dot{Q}_V$  formuliert werden. Da Kondensationsprozesse jedoch Wärme freisetzen und Verdampfungsprozesse Wärme erfordern, muss die Energiebilanz durch die Wärme des Phasenwechsels  $\dot{Q}_{PW}$  ergänzt werden (Gleichung (A-99)).

$$\dot{H}_{AM, \text{ein}} = \dot{H}_{AM, \text{aus}}^g + \dot{H}_{AM, \text{aus}}^{\text{fl}} + \dot{Q}_V + \dot{Q}_{PW} \quad (\text{A-99})$$

Im Rahmen passiver Wärmerübertrager, bei denen die Austrittstemperatur des Stoffstroms in Abhängigkeit eines zugeführten Wärmestroms berechnet wird, ist zur Unterstützung des Anwenders optional eine Plausibilitätsprüfung der sich ergebenden Temperaturniveaus integriert.

### Anhang 1.3.9 Dampferzeuger

Der im Rahmen des Simulationsprogramms modellierte Dampferzeuger ist eine Abwandlung des im vorherigen Abschnitt beschriebenen Wärmeübertragers. Im Dampferzeuger wird dem eintretenden Medium (Arbeitsmittel) Wärme zugeführt. Dabei wird das flüssige Medium zunächst bis zum Erreichen der Siedetemperatur  $T_s$  vorgewärmt. Unter weiterer Wärmezufuhr wird das Medium isotherm-isobar vollständig verdampft. Anschließend findet eine Überhitzung des entstandenen Sattdampfes bis zur gewünschten Austrittstemperatur  $T_{\text{aus}}$  statt. Dementsprechend kann der Dampferzeuger durch die Hintereinanderschaltung von drei Wärmeübertragern, die die drei Verfahrensschritte Vorwärmung, Verdampfung und Überhitzung abbilden, modelliert werden.

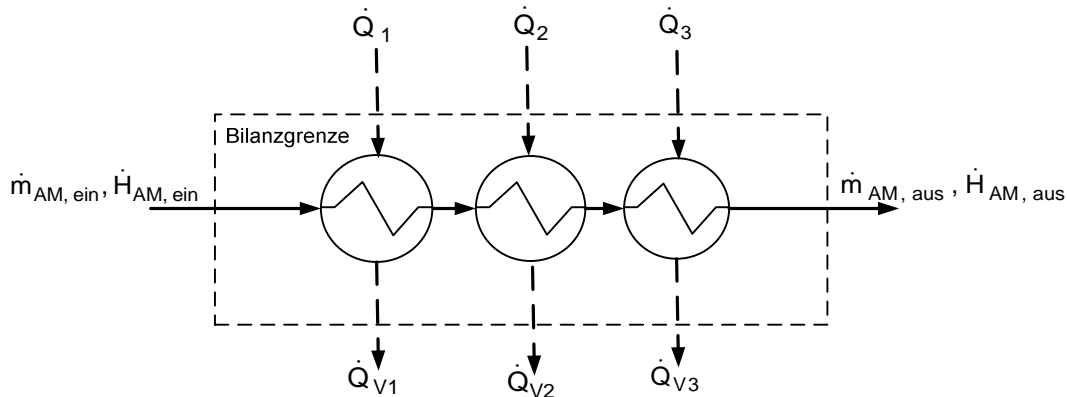


Abb. A.10 Bilanzraum der Funktionseinheit Dampferzeuger

Da dem Dampferzeuger neben dem zu verdampfenden Arbeitsmittel keine weiteren Stoffströme zu- oder abgeführt werden, ergibt sich die Massenbilanz um den Bilanzraum des Dampferzeugers (Abb. A.10) bei vollständiger Verdampfung anhand des eintretenden Massenstroms  $\dot{m}_{AM, \text{ein}}$  und des austretenden Massenstroms  $\dot{m}_{AM, \text{aus}}$  des Arbeitsmittels (Gleichung (A-100)).

$$\dot{m}_{AM, \text{ein}} = \dot{m}_{AM, \text{aus}} \quad (\text{A-100})$$

Die Energiebilanz stellt sich komplexer dar, da neben der zugeführten Enthalpie des flüssigen eintretenden Arbeitsmittels  $\dot{H}_{AM, ein}$  und der abgeführten Enthalpie des dampfförmigen austretenden Arbeitsmittels  $\dot{H}_{AM, aus}$  ebenfalls die zugeführten Wärmeströme zur Vorwärmung  $\dot{Q}_1$ , zur Verdampfung  $\dot{Q}_2$  und zur Dampfüberhitzung  $\dot{Q}_3$  sowie die Verlustwärmern  $\dot{Q}_{V1}$ ,  $\dot{Q}_{V2}$  und  $\dot{Q}_{V3}$  berücksichtigt werden müssen (Gleichung (A-101)).

$$\dot{H}_{AM, ein} + \dot{Q}_1 + \dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 = \dot{H}_{AM, aus} + \dot{Q}_{V1} + \dot{Q}_{V2} + \dot{Q}_{V3} \quad (\text{A-101})$$

Die Berechnung der zuzuführenden/übertragenen Wärmeströme erfolgt auf Basis des thermischen Wirkungsgrades  $\eta_{th}$ , welcher als Verhältnis zwischen genutzter und übertragener Wärme definiert ist. Dabei wird die Nutzwärme aus dem Produkt des Stoffmengenstroms des zu verdampfenden Mediums  $\dot{n}$  und der jeweiligen Enthalpiedifferenz unter Berücksichtigung der Enthalpie des eintretenden Mediums  $\hat{h}_{ein}$ , der Enthalpie des austretenden Mediums  $\hat{h}_{aus}$ , der Enthalpie des Mediums auf der Kondensationslinie  $\hat{h}'$  und der Enthalpie des Mediums auf der Siedelinie  $\hat{h}''$  berechnet. Die drei übertragenen Wärmeströme  $\dot{Q}_1$ ,  $\dot{Q}_2$  und  $\dot{Q}_3$  berechnen sich schließlich durch den Quotienten aus Nutzwärme und thermischem Wirkungsgrad (Gleichung (A-102), Gleichung (A-103) und Gleichung (A-104)).

$$\dot{Q}_1 = \dot{n} \frac{\hat{h}'(T_S) - \hat{h}_{ein}(T_{ein}, p_{ein})}{\eta_{th}} \quad (\text{A-102})$$

$$\dot{Q}_2 = \dot{n} \frac{\hat{h}''(T_S) - \hat{h}'(T_S)}{\eta_{th}} \quad (\text{A-103})$$

$$\dot{Q}_3 = \dot{n} \frac{\hat{h}_{aus}(T_{aus}, p_{aus}) - \hat{h}''(T_S)}{\eta_{th}} \quad (\text{A-104})$$

Die Siedetemperatur  $T_s$  ist entsprechend der Dampfdruckgleichung durch den Druck des eintretenden Mediums  $p_{ein}$  gegeben (Gleichung (A-105)).

$$T_s = T_s(p_{ein}) \quad (\text{A-105})$$

Sowohl die Erwärmung des flüssigen Arbeitsmittels als auch dessen vollständige Verdampfung werden als isobare Zustandsänderungen modelliert. Der im Dampferzeuger auftretende Druckverlust wird allein der Überhitzung des Dampfes zugeschrieben. In der Realität treten auch bei den beiden vorgelagerten Teilschritten Druckverluste auf. Der Druck, mit dem das Medium den Dampferzeuger verlässt, ergibt sich als Differenz aus Eintrittsdruck  $p_{ein}$  und Druckverlust  $\Delta p_V$  (Gleichung (A-106)).

$$p_{aus} = p_{ein} - \Delta p_V \quad (\text{A-106})$$

### Anhang 1.3.10 Kondensator

Auch der Kondensator ist eine Abwandlung des vorgestellten Wärmeübertragers. Der Kondensator bildet den Phasenwechsel des Arbeitsmediums von der gasförmigen Phase

zur flüssigen Phase ab. Dabei wird das Medium auf die Kondensationstemperatur  $T_s$  abgekühlt, anschließend vollständig isotherm-isobar kondensiert und um eine vorgegebene Temperaturspanne  $\Delta T_s$  unterkühlt. Da jeder dieser drei Verfahrensschritte durch die Abgabe einer definierten Wärmemenge gekennzeichnet ist, kann der Kondensator entsprechend dem Dampferzeuger durch eine Reihenschaltung aus drei Wärmeübertragern abgebildet werden.

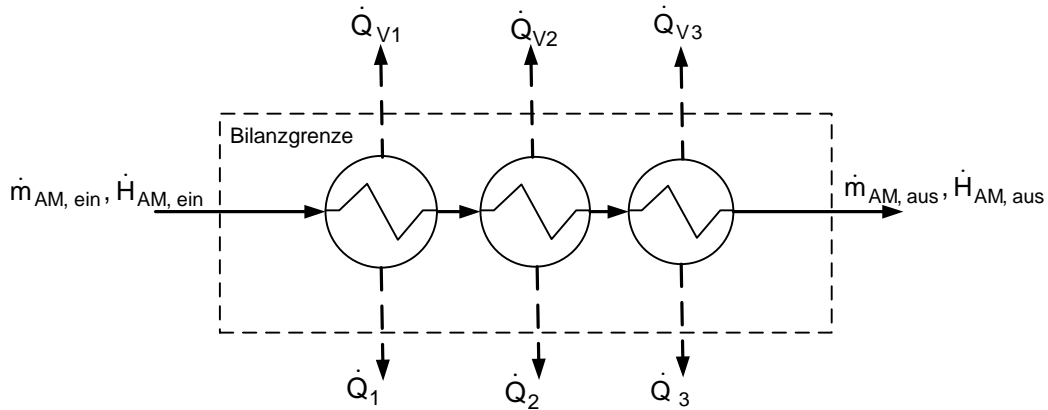


Abb. A.11 Bilanzraum der Funktionseinheit Kondensator

Die Massenbilanz um den Bilanzraum des Kondensators (Abb. A.11) ergibt sich, wie auch die Massenbilanz des Dampferzeugers, mit Hilfe des Massenstroms des eintretenden Arbeitsmittels  $\dot{m}_{AM, ein}$  sowie mit Hilfe des Massenstroms des austretenden vollständig kondensierten Arbeitsmittels  $\dot{m}_{AM, aus}$  (Gleichung (A-107)).

$$\dot{m}_{AM, ein} = \dot{m}_{AM, aus} \quad (\text{A-107})$$

Die Energiebilanz ergibt sich ebenfalls in Anlehnung an die des Dampferzeugers mit der Enthalpie des eintretenden Arbeitsmittels  $\dot{H}_{AM, ein}$ , der Enthalpie des austretenden Arbeitsmittels  $\dot{H}_{AM, aus}$  und den Verlustwärmern  $\dot{Q}_{V1}$ ,  $\dot{Q}_{V2}$  und  $\dot{Q}_{V3}$  – jedoch unter Berücksichtigung der abgeführten Wärmeströme zur Abkühlung  $\dot{Q}_1$ , zur Kondensation  $\dot{Q}_2$  und zur Unterkühlung  $\dot{Q}_3$  des eintretenden Mediums (Gleichung (A-108)).

$$\dot{H}_{AM, ein} = \dot{Q}_1 + \dot{Q}_2 + \dot{Q}_3 + \dot{H}_{AM, aus} + \dot{Q}_{V1} + \dot{Q}_{V2} + \dot{Q}_{V3} \quad (\text{A-108})$$

Die drei Teilwärmeströme ergeben sich mit Hilfe des Stoffmengenstroms des zu kondensierenden Mediums  $\dot{n}$  und der entsprechenden Enthalpiedifferenzen des Mediums unter Berücksichtigung der Enthalpie des eintretenden Mediums  $\hat{h}_{ein}$ , der Enthalpie des austretenden Mediums  $\hat{h}_{aus}$ , der Enthalpie des Mediums auf der Kondensationslinie  $\hat{h}'$  und der Enthalpie des Mediums auf der Siedelinie  $\hat{h}''$ . Die drei freiwerdenden Wärmeströme werden jeweils um den Betrag der Verlustwärme reduziert, indem sie mit dem thermischen Wirkungsgrad  $\eta_{th}$  multipliziert werden (Gleichung (A-109), Gleichung (A-110) und Gleichung (A-111)).

$$\dot{Q}_1 = \eta_{th} \dot{n} \left[ \hat{h}''(T_s) - \hat{h}_{ein}(T_{ein}, p_{ein}) \right] \quad (\text{A-109})$$

$$\dot{Q}_2 = \eta_{th} \dot{n} [\hat{h}'(T_s) - \hat{h}''(T_s)] \quad (\text{A-110})$$

$$\dot{Q}_3 = \eta_{th} \dot{n} [\hat{h}_{aus}(T_{aus}, p_{aus}) - \hat{h}'(T_s)] \quad (\text{A-111})$$

Die Siedetemperatur  $T_s$  ist entsprechend der Dampfdruckgleichung durch den Druck des austretenden Mediums  $p_{aus}$  gegeben (Gleichung (A-112)).

$$T_s = T_s(p_{aus}) \quad (\text{A-112})$$

Der für die Ermittlung der Kondensations- bzw. Siedetemperatur  $T_s$  bestimmende Austrittsdruck  $p_{aus}$  wird aus dem Eintrittsdruck  $p_{ein}$  und dem Druckverlust  $\Delta p_V$  ermittelt (Gleichung (A-113)).

$$p_{aus} = p_{ein} - \Delta p_V \quad (\text{A-113})$$

Die Austrittstemperatur des Mediums  $T_{aus}$  ergibt sich schließlich mit Hilfe der vorgegebenen Temperaturspanne zur Unterkühlung  $\Delta T_3$  und der Siedetemperatur  $T_s$  (Gleichung (A-114)).

$$T_{aus} = T_s - \Delta T_3 \quad (\text{A-114})$$

### Anhang 1.3.11 Splitter

Der Splitter dient der Aufteilung eines Stoffstromes in zwei Teilströme ohne Stoffumwandlungen und Zustandsänderungen.

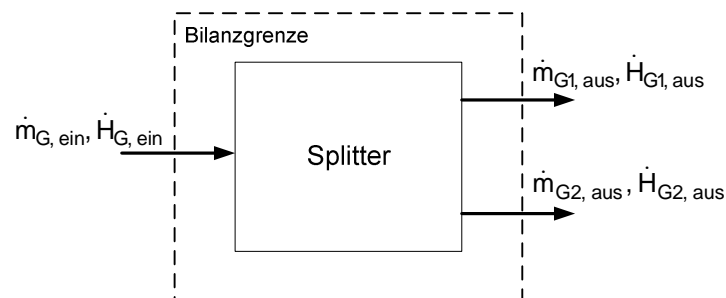


Abb. A.12 Bilanzraum der Funktionseinheit Splitter

Entsprechend des Bilanzraumes um das Modell des Splitters (Abb. A.12) ergibt sich die Massenbilanz des Splitters aus dem Massenstrom des eintretenden Gases  $\dot{m}_{G, ein}$  und den Massenströmen der austretenden Gase  $\dot{m}_{G1, aus}$  und  $\dot{m}_{G2, aus}$  (Gleichung (A-115)).

$$\dot{m}_{G, ein} = \dot{m}_{G1, aus} + \dot{m}_{G2, aus} \quad (\text{A-115})$$

Die Aufteilung des eintretenden Massenstroms auf die austretenden Massenströme ergibt sich mit Hilfe des vom Anwender vorgegebenen Verteilungskoeffizienten  $\alpha$ , welcher als Verhältnis des austretenden Teilmassenstroms  $\dot{m}_{G1, aus}$  zum eintretenden Massenstrom  $\dot{m}_{G, ein}$

definiert ist. Da der Splitter die Zusammensetzung des eintretenden Stoffstromes nicht verändert, ergibt sich der austretende Massenstrom einer jeden im Gesamtmassenstrom enthaltenen Komponente  $\dot{m}_{G1,aus,i}$  aus dem Produkt des Verteilungskoeffizienten und dem eintretenden Massenstrom der entsprechenden Komponente  $\dot{m}_{G,ein,i}$  (Gleichung (A-116)).

$$\dot{m}_{G1,aus,i} = \alpha \dot{m}_{G,ein,i} \quad (\text{A-116})$$

Dabei berechnet sich der Gesamtmassenstrom  $\dot{m}_{G1,aus}$  aus der Summe der  $n$  Massenströme seiner Komponenten  $\dot{m}_{G1,aus,i}$  (Gleichung (A-117)).

$$\dot{m}_{G1,aus} = \sum_{i=1}^n \dot{m}_{G1,aus,i} \quad (\text{A-117})$$

Die Energiebilanz um den Splitter ist gemäß der Massenbilanz durch die Enthalpieströme des eintretenden Stoffstromes  $\dot{H}_{G,ein}$  sowie der Enthalpien der austretenden Stoffströme  $\dot{H}_{G1,aus}$  und  $\dot{H}_{G2,aus}$  definiert (Gleichung (A-118)).

$$\dot{H}_{G,ein} = \dot{H}_{G1,aus} + \dot{H}_{G2,aus} \quad (\text{A-118})$$

Da im Splitter weder Stoffumwandlungen noch Zustandsänderungen ablaufen, sind die spezifischen Enthalpien der austretenden Stoffströme  $\hat{h}_{G1,aus}$  und  $\hat{h}_{G2,aus}$  gleich der spezifischen Enthalpie des eintretenden Stoffstromes  $\hat{h}_{G,ein}$ . Auf eine iterative Lösung der Energiebilanz kann somit verzichtet werden.

### Anhang 1.3.12 Mixer

Im Mixer werden zwei Stoffströme zu einem Stoffstrom zusammengeführt. Dabei können die eintretenden Teilströme hinsichtlich ihrer Zusammensetzung und ihrem thermodynamischen Zustand verschieden sein.

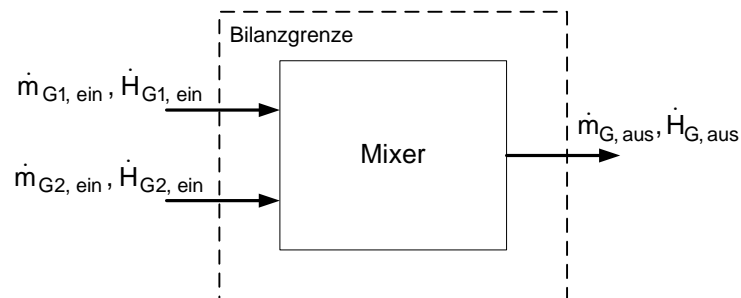


Abb. A.13 Bilanzraum der Funktionseinheit Mixer

Die Massenbilanz des Mixers ergibt sich entsprechend des Bilanzraumes (Abb. A.13) basierend auf den eintretenden Massenströmen  $\dot{m}_{G1, ein}$  und  $\dot{m}_{G2, ein}$  sowie dem austretenden Massenstrom  $\dot{m}_{G, aus}$  (Gleichung (A-119)).

$$\dot{m}_{G1, ein} + \dot{m}_{G2, ein} = \dot{m}_{G, aus} \quad (\text{A-119})$$

Zur Berechnung der Massenströme der einzelnen Komponenten des austretenden Stoffstroms  $\dot{m}_{G,aus,i}$  werden die Massenströme der Komponenten der beiden eintretenden Stoffströme  $\dot{m}_{G1, ein,i}$  und  $\dot{m}_{G2, ein,i}$  addiert (Gleichung (A-120)).

$$\dot{m}_{G,aus,i} = \dot{m}_{G1,ein,i} + \dot{m}_{G2,ein,i} \quad (\text{A-120})$$

Der gesamte austretende Massenstrom  $\dot{m}_{G,aus}$  ergibt sich entsprechend aus der Summe der Massenströme der  $n$  einzelnen austretenden Komponenten  $\dot{m}_{G,aus,i}$  (Gleichung (A-121)).

$$\dot{m}_{G,aus} = \sum_{i=1}^n \dot{m}_{G,aus,i} \quad (\text{A-121})$$

Die Energiebilanz des Mixers ergibt sich aus der Enthalpie der eintretenden Stoffströme  $\dot{H}_{G1,ein}$  und  $\dot{H}_{G2,ein}$  sowie der Enthalpie des austretenden Stoffstromes  $\dot{H}_{G,aus}$  (Gleichung (A-122)).

$$\dot{H}_{G,aus} = \dot{H}_{G1,ein} + \dot{H}_{G2,ein} \quad (\text{A-122})$$

Der Druck des Austrittsstromes  $p_{G,aus}$  entspricht dem niedrigsten Druck der eintretenden Ströme. Stoffströme mit einem höheren Druck werden vor dem Eintritt in den Mixer entsprechend gedrosselt. Die Temperatur des Austrittsstromes wird aufgrund der Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazitäten der austretenden Gaskomponenten iterativ bestimmt. Dabei dient die Energiebilanzgleichung der Iteration als Basis und muss erfüllt werden.

### Anhang 1.3.13 Abscheider

Die Funktionseinheit Abscheider dient der teilweisen Trennung ausgewählter Komponenten vom Gasstrom. Dabei können die Abscheideraten, d. h. der Prozentsatz, um den eine Gaskomponente reduziert wird, vom Anwender der Simulation vorgegeben werden. Abscheider arbeiten isotherm, ohne interne Stoffumwandlung und können manuell mit einem konstanten Druckverlust beaufschlagt werden.

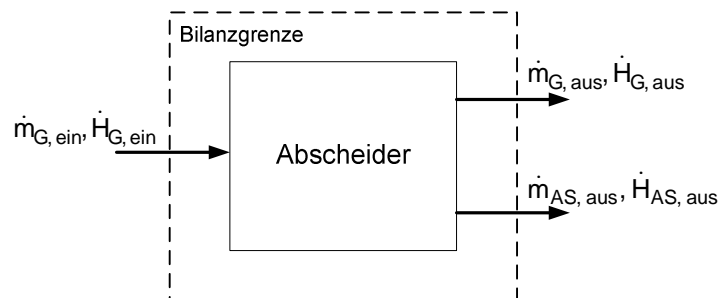


Abb. A.14 Bilanzraum der Funktionseinheit Abscheider

Die Massenbilanz um den Bilanzraum des Abscheiders (Abb. A.14) berechnet sich anhand des eintretenden Gasmassenstroms  $\dot{m}_{G,ein}$ , des Massenstroms des austretenden Gases  $\dot{m}_{G,aus}$  sowie des Massenstroms der Abscheidung  $\dot{m}_{AS,aus}$  (Gleichung (A-123)).

$$\dot{m}_{G,ein} = \dot{m}_{G,aus} + \dot{m}_{AS,aus} \quad (\text{A-123})$$

Dabei ist die Abscheidung einer einzelnen Komponente  $\dot{m}_{AS,aus,i}$  durch das Produkt aus der vom Anwender komponentenweise vorgegebenen Abscheiderate  $\beta_i$  und dem Massenstrom der eintretender Komponente  $\dot{m}_{G,ein,i}$  definiert (Gleichung (A-124)).



$$\dot{m}_{AS,aus,i} = \beta_i \dot{m}_{G,ein,i} \quad (\text{A-124})$$

Der gesamte abgeschiedene Massestrom  $\dot{m}_{AS,aus}$  ergibt sich schließlich aus der Summe aller  $n$  komponentenbezogenen Abscheidungen  $\dot{m}_{AS,aus,i}$  (Gleichung (A-125)).

$$\dot{m}_{AS,aus} = \sum_{i=1}^n \dot{m}_{AS,aus,i} \quad (\text{A-125})$$

Die Energiebilanz berechnet sich entsprechend der Massenbilanz aus den drei Enthalpieströmen  $\dot{H}_{G,ein}$ ,  $\dot{H}_{G,aus}$  und  $\dot{H}_{AS,aus}$ , die den drei Masseströmen zuzuordnen sind (Gleichung (A-126)).

$$\dot{H}_{G,ein} = \dot{H}_{G,aus} + \dot{H}_{AS,aus} \quad (\text{A-126})$$

Eine iterative Lösung der Energiebilanz des Abscheiders ist nicht erforderlich. Die austretenden Massen- und Energieströme ergeben sich eindeutig mit Hilfe der eintretenden Massenströme, deren Zustandsgrößen und der vom Anwender vorgegebenen komponentenspezifischen Abscheideraten.

#### Anhang 1.3.14 Aminwäsche

Die Aminwäsche arbeitet wie ein Abscheider isotherm und kann mit einem Druckverlust beaufschlagt werden. Ebenfalls finden keine Stoffumwandlungen in der Aminwäsche statt. Die Abscheideraten sind entsprechend realen Aminwäschen voreingestellt: Kohlenstoffdioxid wird zu 99 % abgeschieden und Methan zu 0,1 %. Diese Gase verlassen die Aminwäsche als so genanntes Stripgas. In Anlehnung an Aminwäschen, die zur Kohlenstoffdioxidabscheidung in der Praxis eingesetzt werden, weist auch die modellierte Aminwäsche einen Wärmebedarf zur Aminregeneration auf. Die dem Prozess zugeführte Wärme wird wieder mit dem Stripgas abgeführt und durch elektrische Kühlaggregate ausgeglichen.

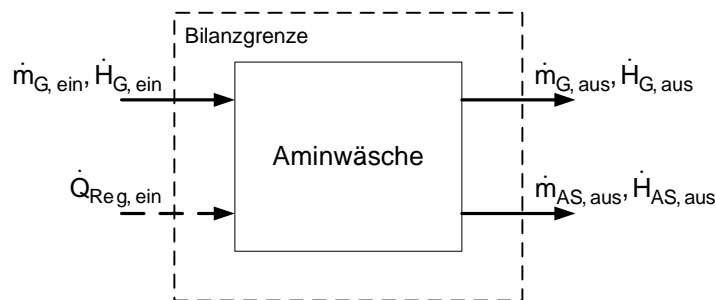


Abb. A.15 Bilanzraum der Funktionseinheit Aminwäsche

Mit Blick auf den Bilanzraum der Aminwäsche (Abb. A.15) kann die Massenbilanz analog zu der des Abscheiders mit Hilfe der drei Massenströme  $\dot{m}_{G,ein}$ ,  $\dot{m}_{G,aus}$  und  $\dot{m}_{AS,aus}$  berechnet werden (Gleichung (A-127)).

$$\dot{m}_{G,ein} = \dot{m}_{G,aus} + \dot{m}_{AS,aus} \quad (\text{A-127})$$

Die Energiebilanz beinhaltet neben den Enthalpieströmen des eintretenden Gases  $\dot{H}_{G, \text{ein}}$ , des austretenden Gases  $\dot{H}_{G, \text{aus}}$  und der Abscheidung  $\dot{H}_{AS, \text{aus}}$  zusätzlich den Wärmestrom zur Aminregeneration  $\dot{Q}_{\text{Reg}, \text{ein}}$  (Gleichung (A-128)).

$$\dot{H}_{G, \text{ein}} + \dot{Q}_{\text{Reg}, \text{ein}} = \dot{H}_{G, \text{aus}} + \dot{H}_{AS, \text{aus}} \quad (\text{A-128})$$

Strahlungsverluste und Energiebedarf zum Antrieb der Lösungsmittelumlaufpumpen sind nicht in der Modellierung berücksichtigt, fließen jedoch indirekt in die Berechnung des Strombedarfs der gesamten Bio-SNG-Anlage ein. Wie auch beim Abscheider ist eine iterative Lösung der Energiebilanz nicht erforderlich. Die austretenden Massen- und Energieströme ergeben sich eindeutig mit Hilfe der eintretenden Massenströme, deren Zustandsgrößen und den vom Anwender komponentenweise vorgegebenen Abscheideraten.

### Anhang 1.3.15 Methanisierung

Die Methanisierung dient der Erhöhung des Methangehaltes im Vergasungsgas durch die katalysatorgestützte Konversion von Kohlenstoffmonoxid und Wasserstoff zu Methan und Wasserdampf (Kapitel 2.1.4). Die Modellierung dieses Prozesses basiert auf einem isobar-isothermen Reaktor, in dem die Stoffumwandlungen entsprechend den chemischen Reaktionsgleichgewichten der Methanisierungsreaktion und der Wassergas-Shift-Reaktion (Gleichung (2-1) und Gleichung (2-3)) ablaufen. Der Reaktionsdruck ist durch den Druck des eintretenden Gases definiert. Die Reaktionstemperatur kann vom Anwender vorgegeben werden.

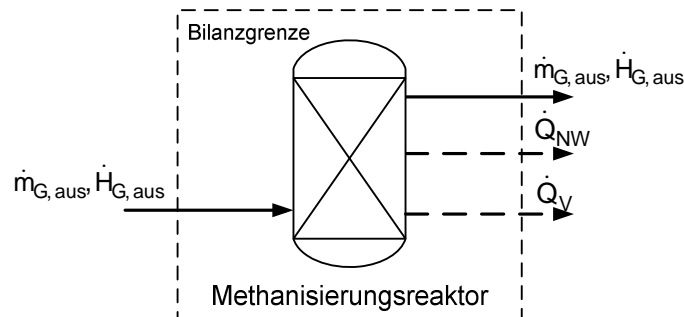


Abb. A.16 Bilanzraum der Funktionseinheit Methanisierung

Da dem Reaktor entsprechend dem Bilanzraum (Abb. A.16) nur das gereinigte Vergasungsgas zugeführt und nach der Methanisierung wieder abgeführt wird, ergibt sich die Massenbilanz um den Reaktor mit dem Massenstrom des eintretenden Gases  $\dot{m}_{G, \text{ein}}$  und dem Massenstrom des austretenden Gases  $\dot{m}_{G, \text{aus}}$  (Gleichung (A-129)).

$$\dot{m}_{G, \text{ein}} = \dot{m}_{G, \text{aus}} \quad (\text{A-129})$$

Aufgrund der im Reaktorinneren ablaufenden Reaktionen entspricht die Zusammensetzung des austretenden Gases nicht der Zusammensetzung des eintretenden Gases. Unter der Annahme, dass der in den Reaktor eintretende Kohlenstoffdioxid-, Kohlenstoffmonoxid-, Wasserdampf-, Wasserstoff- und Methanstoffmengenstrom an den Reaktionen beteiligt ist, können die aus dem Reaktor austretenden Kohlenstoffdioxid-, Kohlenstoffmonoxid-, Wasserdampf-, Wasserstoff- und Methanstoffmengenströme mit fünf Gleichungen bestimmt werden:

- Kohlenstoffbilanz um den Methanisierungsreaktor

- Wasserstoffbilanz um den Methanisierungsreaktor
- Sauerstoffbilanz um den Methanisierungsreaktor
- Massenwirkungsgesetz für die Methanisierungsreaktion
- Massenwirkungsgesetz für die Wassergas-Shift-Reaktion

Die Elementbilanzen ergeben sich entsprechend den eintretenden und austretenden Stoffmengenströmen. Das Massenwirkungsgesetz für die Methanisierungsreaktion wird mit Hilfe der Stoffmengenanteile  $y_i$  des austretenden Gases, des Reaktionsdrucks  $p$ , der stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktion  $\nu_i$  und der Gleichgewichtskonstanten  $K$  der Reaktion formuliert (Gleichung (A-130)) [Lucas 2004].

$$K(T)_{\text{Methanisierung}} = \frac{y_{\text{CH}_4}^{\nu_{\text{CO}_2}} y_{\text{H}_2\text{O}}^{\nu_{\text{H}_2\text{O}}}}{y_{\text{H}_2}^{\nu_{\text{H}_2}} y_{\text{CO}}^{\nu_{\text{CO}}}} \left( \frac{p}{p_0} \right)^{\sum_{i=1}^4 \nu_i} \quad (\text{A-130})$$

Analog kann das Massenwirkungsgesetz für die Wassergas-Shift-Reaktion formuliert werden (Gleichung (A-131)).

$$K(T)_{\text{Wassergas-Shift}} = \frac{y_{\text{CO}_2}^{\nu_{\text{CO}_2}} y_{\text{H}_2}^{\nu_{\text{H}_2}}}{y_{\text{H}_2\text{O}}^{\nu_{\text{H}_2\text{O}}} y_{\text{CO}}^{\nu_{\text{CO}}}} \left( \frac{p}{p_0} \right)^{\sum_{i=1}^4 \nu_i} \quad (\text{A-131})$$

Die reaktionsspezifischen Gleichgewichtskonstanten sind temperaturabhängig und berechnen sich mit Hilfe der idealen Gaskonstante  $R$ , der  $n$  stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktionsedukte und -produkte  $\nu_i$  und des chemischen Potentials der Gaskomponenten  $\mu_{0i}^{\text{ig}}$  bzw. der molaren freien Reaktionsenthalpie  $\Delta g^{R,\text{ig}}$  (Gleichung (A-132)) [Lucas 2004].

$$K(T) = e^{\frac{-\sum_{i=1}^n \nu_i \mu_{0i}^{\text{ig}}}{RT}} = e^{\frac{-\Delta g^{R,\text{ig}}}{RT}} \quad (\text{A-132})$$

Dabei ist das chemische Potenzial der Gaskomponenten durch ihre Temperatur  $T$  sowie durch ihre Enthalpie  $h_{0i}^{\text{ig}}$  und Entropie  $s_{0i}^{\text{ig}}$  definiert (Gleichung (A-133)) [Lucas 2004].

$$\mu_{0i}^{\text{ig}} = h_{0i}^{\text{ig}} - T s_{0i}^{\text{ig}} \quad (\text{A-133})$$

Die temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten können so mit Hilfe des Stoffdatenmodells idealer Gase bestimmt werden (Gleichung (A-134)).

$$K(T) = e^{\frac{-\sum_{i=1}^n \nu_i (h_{0i}^{\text{ig}} - T s_{0i}^{\text{ig}})}{R \cdot T}} \quad (\text{A-134})$$

Aufgrund des exothermen Charakters der Methanisierungsreaktion und der Wassergas-Shift-Reaktion wird neben Wärmeverlusten  $\dot{Q}_V$  und der Enthalpie  $\dot{H}_{G,\text{aus}}$ , die den Reaktor mit dem austretenden Gas verlässt, zusätzlich abgeführte Nutzwärme  $\dot{Q}_{NW}$  in der

Energiebilanz berücksichtigt. Die Energiebilanz ergibt sich schließlich unter Berücksichtigung der mit dem Gas zugeführten Enthalpie  $\dot{H}_{G, \text{ein}}$  (Gleichung (A-135)).

$$\dot{H}_{G, \text{ein}} = \dot{H}_{G, \text{aus}} + \dot{Q}_V + \dot{Q}_{NW} \quad (\text{A-135})$$

Die Lösung des Gleichungssystems um den Bilanzraum der Methanisierung wird – wie auch die der Vergasungsreaktoren – iterativ durchgeführt.

### Anhang 1.3.16 Gasmotor

Gasmotoren dienen der Konversion brennbarer Gasgemische in elektrische Energie und Wärme. Der im Simulationsprogramm enthaltene Gasmotor wird in Anlehnung an Motordatenblätter existierender Holzvergasungsprojekte erstellt. Dabei wird ein Gasottomotor mit Gemischbilder, Turbolader und zweifacher Gemischkühlung als Referenz gewählt [Jenbacher 2010] und der Bilanzraum der Modellierung entsprechend gestaltet (Abb. A.17).

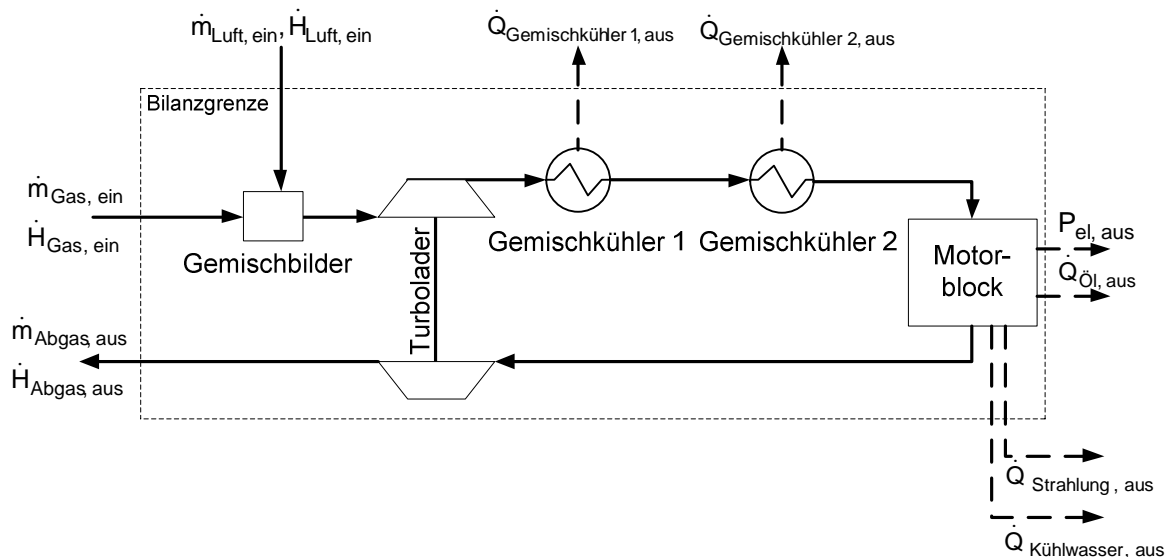


Abb. A.17 Bilanzraum des Gasmotorenprozesses

Die simulationstechnische Abbildung des Gemischbilders, des Turboladers sowie der Gemischkühler basiert auf den bereits vorgestellten Funktionseinheiten Mixer, Kompressor und Wärmeübertrager. Der Motorblock wird gesondert modelliert.

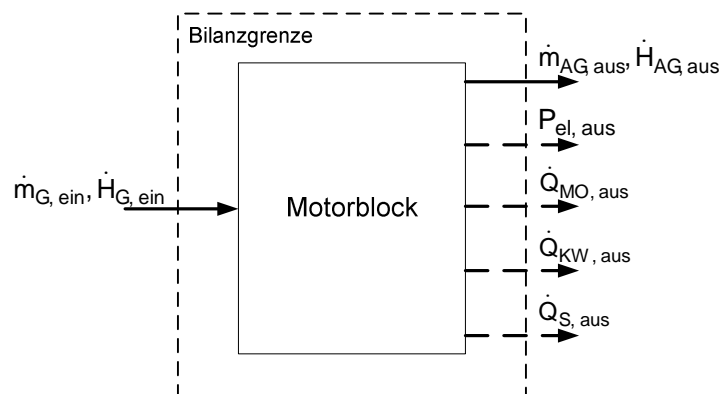


Abb. A.18 Bilanzraum der Funktionseinheit Motorblock

Da dem Reaktionsraum des Motorblocks gemäß des Bilanzraumes (Abb. A.18) neben dem Gemisch  $\dot{m}_{G, \text{ein}}$  keine weiteren Massenströme zugeführt und neben dem Abgas  $\dot{m}_{AG, \text{aus}}$  keine weiteren Massenströme abgeführt werden, ergibt sich die Massenbilanz auf Basis dieser beiden Massenströme (Gleichung (A-136)).

$$\dot{m}_{G, \text{ein}} = \dot{m}_{AG, \text{aus}} \quad (\text{A-136})$$

Die Energiebilanz um den Motorblock gestaltet sich komplexer, da neben der zugeführten Gasleistung (Gemischenthalpie)  $\dot{H}_{G, \text{ein}}$ , der abgeführten elektrischen Energie  $P_{el, \text{aus}}$  und der abgeführten Abgasleistung  $\dot{H}_{AG, \text{aus}}$  ebenfalls Wärme durch das Motoröl  $\dot{Q}_{MO, \text{aus}}$ , das Kühlwasser  $\dot{Q}_{KW, \text{aus}}$  und Strahlung (Verlustwärme)  $\dot{Q}_{S, \text{aus}}$  abgeführt wird (Gleichung (A-137)).

$$\dot{H}_{G, \text{ein}} = P_{el, \text{aus}} + \dot{H}_{AG, \text{aus}} + \dot{Q}_{MO, \text{aus}} + \dot{Q}_{KW, \text{aus}} + \dot{Q}_{S, \text{aus}} \quad (\text{A-137})$$

Der Motorblock wurde dynamisch in Anpassung an das Lastverhalten des Referenzmotors modelliert. D. h., in Abhängigkeit der zugeführten Gasleistung  $P_{G, \text{ein}}$  wird der effektive Mitteldruck der Zylinder des Motors  $p_{me}$  berechnet. Der effektive Mitteldruck berechnet sich dabei mit Hilfe der als Lastverhältnis bezeichneten Steigung  $x$  linear aus der dem Motor zugeführten Gasleistung (Gleichung (A-138)).

$$p_{me} = x P_{G, \text{ein}} \quad (\text{A-138})$$

Die vom Motorblock abgeführten Energieströme ergeben sich schließlich als lineare Größen mit dem Lastverhältnis als Variablen.

Zur Anpassung des Gasmotorenmodells an reale Betriebsbedingungen werden mit Hilfe des Modells simulierte Kennwerte mit den Kennwerten realer Gasmotoren [Jenbacher 2010] abgeglichen (Tabelle A.13) bzw. reale Betriebsparameter auf das Simulationsmodell übertragen.

Tabelle A.13 Herstellerangaben und simulierte Kennwerte des modellierten Gasmotorenprozesses

Parameter	Einheit	Hersteller- angabe	Kennwert Simulation
Luftverhältnis (bei 75 % Last)	mol/mol	2,17	2,17
Ladedruck (bei 75 % Last)	bar	3,3	3,3
Abgastemperatur (bei 75 % Last)	°C	414,0	415,0
Elektrischer Wirkungsgrad (bei 75 % Last)	%	37,4	37,2

Die Bilanzierung des Motorblocks wird in Anlehnung an die der Brennkammer iterativ durchgeführt. Dabei ist die quasi-adiabate Verbrennungstemperatur die Zielgröße der Iteration.

### Anhang 1.3.17 Gasturbine

Die Gasturbine ist ähnlich dem Motor aus verschiedenen Funktionseinheiten zusammengesetzt. Sie besteht aus einer Verschaltung von Kompressor (Luftverdichter), Mixer, Brennkammer und Turbine.

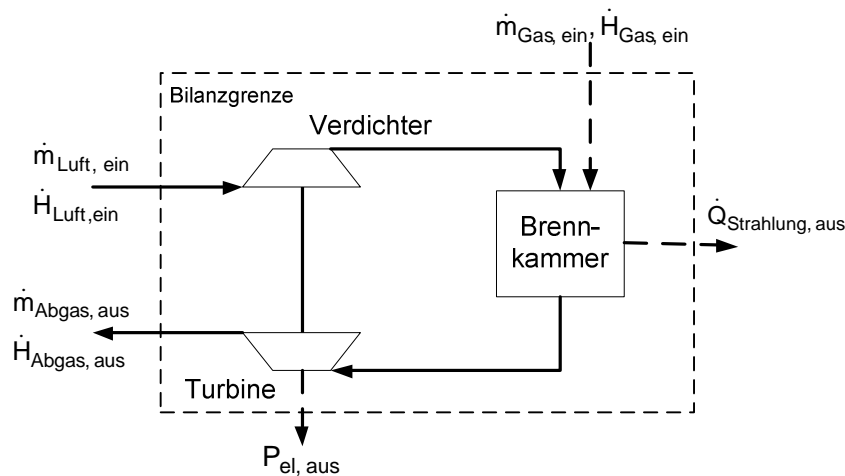


Abb. A.19 Bilanzraum des Gasturbinenprozesses

Die Massenbilanz um den Bilanzraum (Abb. A.19) ergibt sich anhand des Massenstroms des eintretenden Gases  $\dot{m}_{G, ein}$ , des Massenstroms der eintretenden Luft  $\dot{m}_{L, ein}$  und des Massenstroms des austretenden Abgases  $\dot{m}_{AG, aus}$  (Gleichung (A-139)).

$$\dot{m}_{G, ein} + \dot{m}_{L, ein} = \dot{m}_{AG, aus} \quad (\text{A-139})$$

Entsprechend kann die Energiebilanz durch die Enthalpie der eintretenden Luft  $\dot{H}_{L, ein}$ , die Enthalpie des eintretenden Gases  $\dot{H}_{G, ein}$ , die elektrische Leistung  $P_{el, aus}$  sowie die Enthalpie des austretenden Abgases  $\dot{H}_{AG, aus}$  und die Strahlungsleistung  $\dot{Q}_{S, aus}$  definiert werden (Gleichung (A-140)).

$$\dot{H}_{L, ein} + \dot{H}_{G, ein} = P_{el, aus} + \dot{H}_{AG, aus} + \dot{Q}_{S, aus} \quad (\text{A-140})$$

Bei der Modellierung des Gasturbinenprozesses werden die Simulationsparameter (z. B. das Luftverhältnis, die isentropen Wirkungsgrade, die mechanischen Wirkungsgrade) an den Betriebspunkt einer mit Erdgas betriebenen Referenzturbinen (TAURUS 60 der Firma Solar Turbines) angepasst [Solar 2010]. Dabei werden u. a. Kenndaten wie der zugeführte Luftmassenstrom, die Abgastemperatur und die elektrische Turbinenleistung berücksichtigt (Tabelle A.14).

Tabelle A.14 Herstellerangaben und simulierte Kennwerte des modellierten Gasturbinenprozesses

Parameter	Einheit	Herstellerangabe	Kennwert Simulation
Luftmassenstrom	kg/s	21,6	21,6
Abgastemperatur	°C	510,0	510,0
Elektrische netto Leistung (bei etwa 15 °C)	MW <sub>el</sub>	5,50	5,45
Verdichtungsverhältnis (Luftkompressor)	bar/bar	12,2	12,2

Die dargestellten Kenndaten (Tabelle A.14) basieren auf identischen Rahmenannahmen in Bezug auf die Standorthöhe der Gasturbine, die Umgebungstemperatur und die Druckverluste am Eingang und Ausgang der Gasturbine.

### Anhang 1.3.18 Dampfkraftprozess

Die Modellierung des Dampfkraftprozesses basiert auf einer Verschaltung der Funktionseinheiten Pumpe, Wärmeübertrager, Dampferzeuger, Turbine und Kondensator (Abb. A.20), welche in Bezug auf das eingesetzte Arbeitsmedium adaptiert werden. Das Arbeitsmedium des Dampfprozesses ist Wasser bzw. Wasserdampf und wird entsprechend des Stoffdatenmodells für Wasser und Wasserdampf mit Hilfe der Berechnungsgleichungen des Industrie-Standards IAPWS-IF97 [Wagner 1998] modelliert (siehe Anhang 1.2.4).

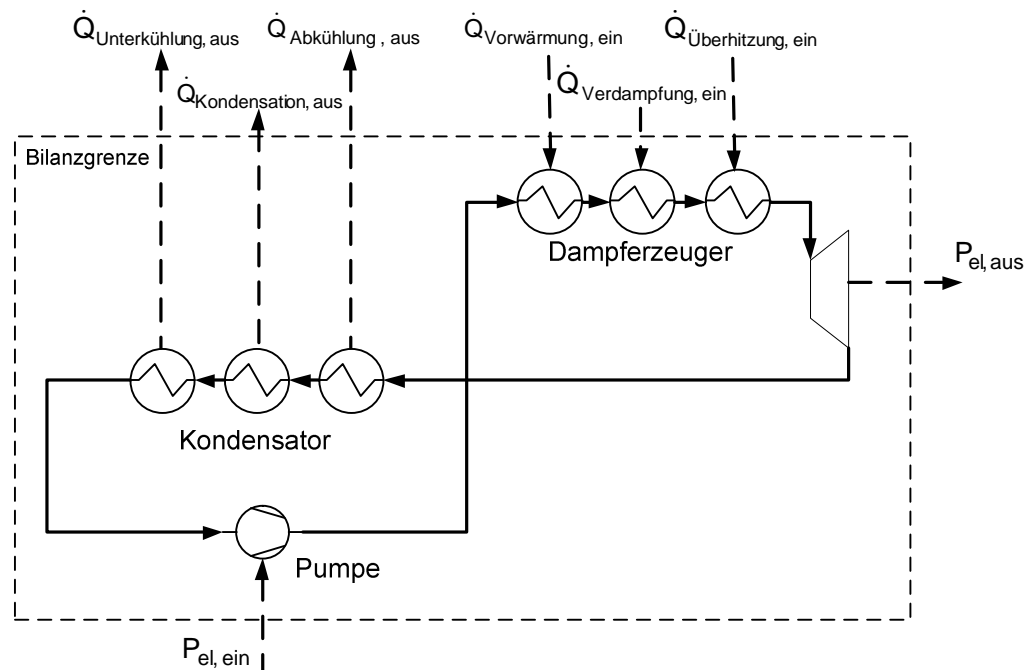


Abb. A.20 Bilanzraum des Dampfkraftprozesses

### Anhang 1.3.19 ORC-Modul

Das ORC-Modul ist analog zum Dampfprozess aufgebaut und besteht ebenfalls aus einer Verschaltung der Funktionseinheiten Pumpe, Wärmeübertrager, Dampferzeuger, Turbine und Kondensator (Abb. A.21), deren Modellierung auf Toluol als Arbeitsmittel basiert. Dabei werden die Zustandgrößen des Toluols gemäß dem Stoffdatenmodell realer Fluide entsprechend den Berechnungsgleichungen von Redlich-Kwong-Soave abgebildet (siehe Anhang 1.2.5).

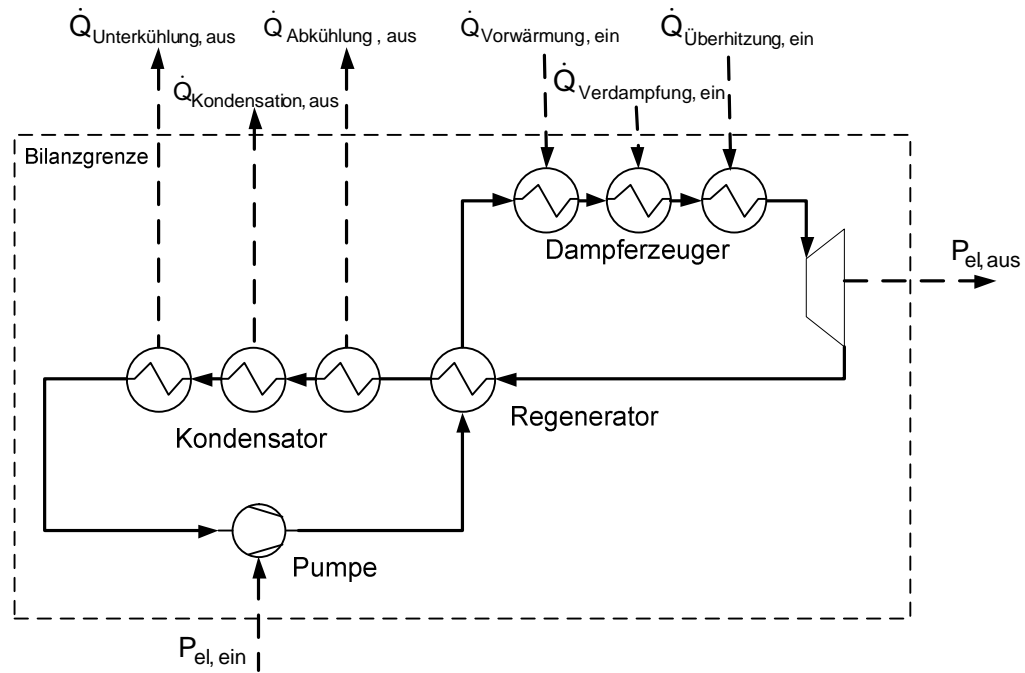


Abb. A.21 Bilanzraum des ORC-Moduls

### Anhang 1.3.20 RME-Wäscher

Der RME-Wäscher ist ein Waschsystem, welches mit RME als Lösungsmittel arbeitet und der Abscheidung teerartiger Gasbestandteile vom Vergasungsrohgas dient. Das Waschsystem besteht aus einer Verschaltung der bereits vorgestellten Funktionseinheiten Abscheider, Pumpe, Wärmeübertrager, Mixer und Splitter. Diese wurden jedoch, da das System mit RME als Lösungsmittel arbeitet, welches als organisches Medium modelliert ist, auf verschiedene Weise modifiziert bzw. erweitert. Der Aufbau des RME-Wäschers ist zweiteilig. Der erste Teil des Systems (Abb. A.22) besteht im Wesentlichen aus den zwei Hauptkomponenten Washkolonne und Dekanter.

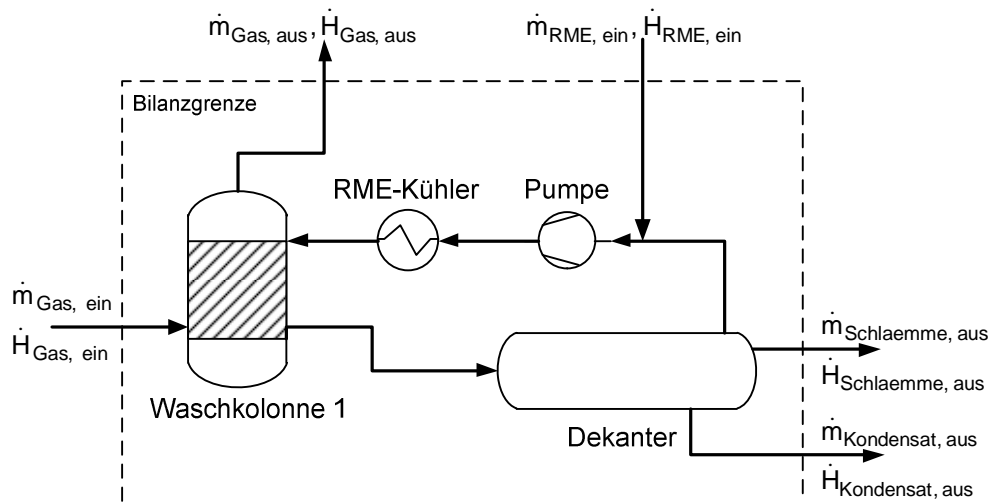


Abb. A.22 Bilanzraum des RME Wäschersystems 1

Dem zweiten Teil des RME-Wäschers (Abb. A.23) wird das aus dem ersten Teil kommende Gas zugeführt. Er beinhaltet neben Pumpen und Wärmeübertragern zwei



Waschkolonnen, einen Dekanter und einen RME-Stripper. Zwischen den beiden Wäschersystemen ist ein Gasgebläse angeordnet.

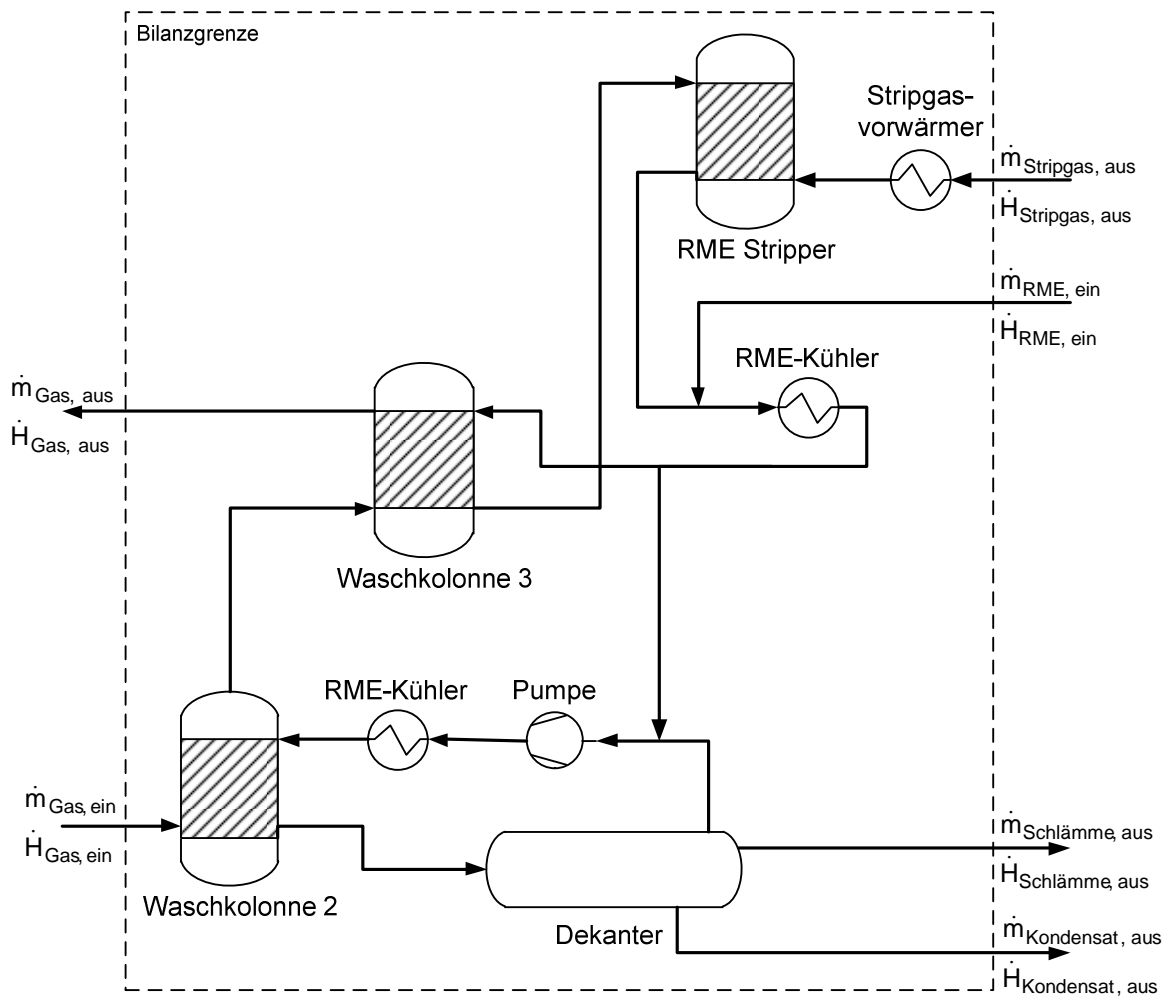


Abb. A.23 Bilanzraum des RME Wäschersystems 2

Die Waschkolonnen (Abb. A.22 und Abb. A.23) sind in Anlehnung an die bereits beschriebenen Abscheider modelliert. Bei der Modellierung wurde jedoch neben dem Gas der Eintritt eines zweiten Mediums (RME) vorgesehen. Dieses zweite Medium nimmt die vom Gas abgeschiedenen Komponenten (Teere, Wasser) auf und verlässt die Waschkolonne zusammen mit diesen.

Die Dekanter (Abb. A.22 und Abb. A.23) sind in Anlehnung an die bereits vorgestellten Splitter modelliert. Die Modellierung berücksichtigt jedoch die Aufteilung des eintretenden Mediums (teer- und wasserhaltiger RME) in drei austretende Stoffströme (Wasser, RME, teerhaltiger RME bzw. Schlämme).

Der RME-Stripper (Abb. A.23) ist ebenso wie die Waschkolonnen in Anlehnung an einen Abscheider modelliert. Als eintretende Medien sind RME und vorgewärmtes Strippgas modelliert. Das Strippgas nimmt die vom RME abgeschiedenen Komponenten auf.

**Anhang 2 – Rahmenannahmen der Prozesssimulation**

Tabelle A.15 Allgemeine Rahmenannahmen der Prozesssimulation

<b>Umgebungsbedingungen:</b>	Einheit	Wert
Höhe (über NN)	m	0,00
Druck	bar	1,00
Temperatur	K	298,15
<b>Definition Umgebungsluft:</b>		
Luftfeuchte	%	60,00
$y_{N_2}$ Luft	vol. %	78,22
$y_{O_2}$ Luft	vol. %	20,73
$y_{CO_2}$ Luft	vol. %	0,03
$y_{H_2O}$ Luft	vol. %	1,02
<b>Definition Biomasse:</b>		
Unterer Heizwert (atro)	MJ/kg	18,56
Wassergehalt	ma. %	40,00
$x_C$ (atro)	ma. %	50,63
$x_H$ (atro)	ma. %	6,02
$x_O$ (atro)	ma. %	41,52
$x_S$ (atro)	ma. %	0,03
$x_N$ (atro)	ma. %	0,35
$x_{Cl}$ (atro)	ma. %	0,02
$x_{Asche}$ (atro)	ma. %	1,43
<b>Definition RME:</b>		
Unterer Heizwert (atro)	MJ/kg	36,87
Wassergehalt	ma. %	0,00
$x_C$ (atro)	ma. %	0,93
$x_H$ (atro)	ma. %	0,05
$x_O$ (atro)	ma. %	0,02
$x_S$ (atro)	ma. %	0,00
$x_N$ (atro)	ma. %	0,00
$x_{Cl}$ (atro)	ma. %	0,00
$x_{Asche}$ (atro)	ma. %	0,00

Tabelle A.16 Rahmenannahmen der Prozesssimulation der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten – Teil Hauptkomponenten

<b>Trockner:</b>	Einheit	Wert
Temperatur Trockner	K	368,15
Kohlenstoffverlust der Biomasse	ma. %	0
Wassergehalt der Biomasse nach Trockner	ma. %	20
<b>Allothermer Vergasungsreaktor:</b>		
Temperatur Vergaser	K	1123,15
Druck Vergaser	bar	1,00
Temperaturkorrektur Wassergas-Shift-Reaktion	K	-133,10
Temperaturkorrektur Boudouard-Reaktion	K	-231,20
Wärmeverluste Vergaser	MW	0,38
Austrittsverhältnis Rohgaskohlenstoff/Biomassekohlenstoff	mol/mol	0,83
Eintrittsverhältnis H <sub>2</sub> O/Biomasse (atro)	kg/kg	0,49
Stoffmengenstrom Inertgas N <sub>2</sub> (Zugabe)	mol/s	2,6
Stoffmengenstrom Rohgas C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	mol/s	6,00
Stoffmengenstrom Rohgas C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	mol/s	0,17
Stoffmengenstrom Rohgas NH <sub>3</sub>	mol/s	0,11
Stoffmengenstrom Rohgas H <sub>2</sub> S	mol/s	0,01
<b>Brennkammer Vergaser:</b>		
Temperatur Brennkammer	K	1203,15
Druck Brennkammer	bar	1,00
Wärmeverluste Brennkammer	MW	0,78
Austrittsverhältnis CO/CO <sub>2</sub>	mol/mol	0,07
Luftverhältnis Brennkammer	mol/mol	1,15
<b>Methanisierung:</b>		
Temperatur Methanisierungsreaktor	K	573,15
Druck Methanisierungsreaktor	bar	4,00
Wärmeverlust Methanisierungsreaktor	MW	0,00
Ethen-Konversion	%	100,00
Eintrittsverhältnis H <sub>2</sub> O/Gas (trocken)	kg/kg	0,15

Tabelle A.17 Rahmenannahmen der Prozesssimulation der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten – Teil Hauptkomponenten

<b>Trockner:</b>	Einheit	Wert
Temperatur Trockner	K	368,15
Kohlenstoffverlust der Biomasse	ma. %	0
Wassergehalt der Biomasse nach Trockner	ma. %	20
<b>Autothermer Vergasungsreaktor:</b>		
Temperatur Vergaser	K	1223,15
Druck Vergaser	bar	10,00
Temperaturkorrektur Wassergas-Shift-Reaktion	K	+180,50
Temperaturkorrektur Boudouard-Reaktion	K	-178,20
Wärmeverluste Vergaser	MW	0,41
Austrittsverhältnis Rohgaskohlenstoff/Biomassekohlenstoff	mol/mol	0,95
Eintrittsverhältnis H <sub>2</sub> O/Biomasse (atro)	kg/kg	0,27
Stoffmengenstrom Inertgas CO <sub>2</sub> (Zugabe)	mol/s	12,00
Stoffmengenstrom Rohgas C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	mol/s	0,00
Stoffmengenstrom Rohgas C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	mol/s	0,17
Stoffmengenstrom Rohgas NH <sub>3</sub>	mol/s	0,11
Stoffmengenstrom Rohgas H <sub>2</sub> S	mol/s	0,01
<b>Luftzerlegungsanlage:</b>		
Stoffmengenstrom O <sub>2</sub> -Produktion	mol/s	32,94
Austrittstemperatur O <sub>2</sub>	K	298,15
Strombedarf	kJ/(mol O <sub>2</sub> )	46,81
<b>Reformer:</b>		
Temperatur Reformer	K	1073,15
Druck Reformer	bar	10,00
Wärmeverlust Reformer	MW	0,00
Methan-Konversion	%	80,00
Ethen-Konversion	%	100,00
Toluol-Konversion	%	100,00
Eintrittsverhältnis H <sub>2</sub> O/Gas (trocken)	kg/kg	0,23
<b>Brennkammer Reformer:</b>		
Temperatur Brennkammer	K	2089,15
Druck Brennkammer	bar	1,00
Wärmeverluste Brennkammer	MW	0,17
Austrittsverhältnis CO/CO <sub>2</sub>	mol/mol	0,07
Luftverhältnis Brennkammer	mol/mol	1,15

---

**Methanisierung:**

---

Temperatur Methanisierungsreaktor	K	573,15
Druck Methanisierungsreaktor	bar	10,00
Wärmeverlust Methanisierungsreaktor	MW	0,00
Ethen-Konversion	%	100,00
Eintrittsverhältnis H <sub>2</sub> O/Gas (trocken)	kg/kg	0,15

---

Tabelle A.18 Rahmenannahmen der Prozesssimulation der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten – Teil Gasreinigungssysteme

<b>Rohgasfilter:</b>	Einheit	Wert
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate Feststoffe	%	100,00
<b>RME-Wäscher 1:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	%	100,00
Abscheiderate C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	%	100,00
<b>RME-Wäscher 2:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	%	100,00
Abscheiderate C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	%	100,00
<b>RME-Wäscher 3:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	%	100,00
Abscheiderate C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	%	100,00
<b>Aktivkohlebett:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate H <sub>2</sub> S	%	90,00
Abscheiderate HCN	%	90,00
Abscheiderate COS	%	90,00
Abscheiderate HCl	%	90,00
Abscheiderate SO <sub>2</sub>	%	90,00
<b>Zinkoxidbett:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate H <sub>2</sub> S	%	99,99
<b>Aminwäsche:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate CO <sub>2</sub>	%	99,00
Abscheiderate CH <sub>4</sub>	%	0,10
Wärmebedarf Aminregeneration	kW/(mol CO <sub>2</sub> )	132,03

<b>Membransystem:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheidung H <sub>2</sub>	mol/s	1,50

Tabelle A.19 Rahmenannahmen der Prozesssimulation der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten – Teil Gasreinigungssysteme

<b>Rohgasfilter:</b>	Einheit	Wert
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate Feststoffe	%	100,00
<b>Aktivkohlebett:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate H <sub>2</sub> S	%	90,00
Abscheiderate HCN	%	90,00
Abscheiderate COS	%	90,00
Abscheiderate HCl	%	90,00
Abscheiderate SO <sub>2</sub>	%	90,00
<b>Zinkoxidbett:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate H <sub>2</sub> S	%	99,99
<b>Aminwäsche:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheiderate CO <sub>2</sub>	%	99,00
Abscheiderate CH <sub>4</sub>	%	0,10
Wärmebedarf Aminregeneration	kW/(mol CO <sub>2</sub> )	132,03
<b>Membransystem:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Temperaturverlust	K	0,00
Abscheidung H <sub>2</sub>	mol/s	1,50

Tabelle A.20 Rahmenannahmen der Prozesssimulation der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten – Teil Gebläse/Verdichter

<b>Rohgasgebläse:</b>	Einheit	Wert
Ausgangsdruck	bar	1,16
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Verbrennungsluftgebläse:</b>		
Ausgangsdruck	bar	1,22
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Trocknungsluftgebläse:</b>		
Ausgangsdruck	bar	1,06
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Rauchgasgebläse:</b>		
Ausgangsdruck	bar	1,04
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Recyclegasgebläse:</b>		
Ausgangsdruck	bar	1,22
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Kompressor 1:</b>		
Ausgangsdruck	bar	1,60
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Kompressor 2:</b>		
Ausgangsdruck	bar	4,00
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Kompressor 3:</b>		
Ausgangsdruck	bar	16,00
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00



Tabelle A.21 Rahmenannahmen der Prozesssimulation der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten – Teil Gebläse/Verdichter

	Einheit	Wert
<b>Verbrennungsluftgebläse:</b>		
Ausgangsdruck	bar	1,22
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Trocknungsluftgebläse:</b>		
Ausgangsdruck	bar	1,06
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Rauchgasgebläse:</b>		
Ausgangsdruck	bar	1,04
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Inertgaskompressor:</b>		
Ausgangsdruck	bar	10,00
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00
<b>Kompressor 1:</b>		
Ausgangsdruck	bar	16,00
Isentroper Wirkungsgrad	%	0,85
Mechanischer Wirkungsgrad	%	1,00

Tabelle A.22 Rahmenannahmen der Prozesssimulation der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten – Teil Wärmeübertrager

	Einheit	Wert
<b>Gesamtheit der Wärmeübertrager:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Wärmeverlust	%	2,00

Tabelle A.23 Rahmenannahmen der Prozesssimulation der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten – Teil Wärmeübertrager

	Einheit	Wert
<b>Gesamtheit der Wärmeübertrager:</b>		
Druckverlust	bar	0,00
Wärmeverlust	%	2,00

### Anhang 3 – Stoffströme der Prozesssimulation

Die nachfolgenden Stoffströme können entsprechend ihren Nummern den jeweiligen Prozessstellen in Abb. 4.2 und Abb. 4.3 zugeordnet werden.

Tabelle A.24 Wesentliche Stoffströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 1

	Einheit	1	2	3
$p$	bar	1,00	1,00	1,00
$T$	K	1123,15	283,00	283,00
$c_p$	J/(mol K)	38,76	31,83	31,83
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	194,43	153,19	125,01
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	33,31	33,31	27,18
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	32,08	32,08	26,18
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	42,95	1,88	1,54
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	62,04	62,04	50,63
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	14,82	14,82	12,09
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	2,94	2,94	2,40
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	6,00	6,00	4,90
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0,17	0	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,11	0,11	0,09
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0,01	0,01	0,01
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{P1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{P12}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{P13}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{P14}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.25 Wesentliche Stoffströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 2

	Einheit	4	5	6
$p$	bar	1,22	4,00	4,00
$T$	K	300,74	319,15	468,91
$c_p$	J/(mol K)	31,85	32,19	33,70
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	28,18	125,01	145,20
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	6,13	27,18	27,18
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	5,90	26,18	26,18
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	0,35	1,54	20,23
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	11,41	50,63	52,13
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	2,73	12,09	12,09
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	0,54	2,40	2,40
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	1,10	4,90	4,90
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,02	0,09	0,09
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0	0,01	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.26 Wesentliche Stoffströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 3

	Einheit	7	8	9
$p$	bar	4,00	16,00	16,00
$T$	K	573,15	353,15	298,16
$c_p$	J/(mol K)	39,83	36,83	34,89
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	107,99	83,03	42,89
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	37,07	37,07	0,00
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	0,13	0,13	0,13
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	26,49	1,53	0,03
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	3,77	3,77	2,27
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	38,04	38,04	37,96
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	2,40	2,40	2,40
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,09	0,09	0,09
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.27 Wesentliche Stoffströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 4

	Einheit	10
$p$	bar	1,00
$T$	K	1202,95
$c_p$	J/(mol K)	34,58
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	262,14
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	37,15
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	2,60
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	27,29
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	0
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	0
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	187,30
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0,02
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	7,78
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0
$\dot{n}_{P11}$	mol/s	0
$\dot{n}_{P12}$	mol/s	0
$\dot{n}_{P13}$	mol/s	0
$\dot{n}_{P14}$	mol/s	0

Tabelle A.28 Wesentliche Stoffströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 1

	Einheit	1	2	3
$p$	bar	10,00	10,00	10,00
$T$	K	1223,15	1223,15	1073,15
$c_p$	J/(mol K)	39,22	39,22	35,79
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	207,89	207,61	232,24
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	46,45	46,39	50,70
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	56,32	56,24	64,25
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	50,86	50,79	34,17
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	38,21	38,16	79,41
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	15,41	15,39	3,08
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	0,34	0,34	0,34
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0,17	0,17	0,17
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,11	0,11	0,11
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0,01	0,01	0,01
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.29 Wesentliche Stoffströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 2

	Einheit	4	5	6
$p$	bar	10,00	10,00	10,00
$T$	K	573,15	573,15	573,15
$c_p$	J/(mol K)	33,31	33,31	40,38
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	232,24	234,93	163,98
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	50,70	50,70	79,32
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	64,25	64,25	0,14
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	34,17	35,37	42,23
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	79,41	80,91	3,11
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	3,08	3,08	38,55
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	0,34	0,34	0,34
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0,17	0,17	0,17
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,11	0,11	0,11
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0,01	0	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.30 Wesentliche Stoffströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 3

	Einheit	7	8	9
$p$	bar	16,00	16,00	1,00
$T$	K	353,15	298,16	2088,58
$c_p$	J/(mol K)	37,81	36,08	36,86
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	122,66	40,89	32,15
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	79,32	0,01	5,46
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	0,14	0,14	0,38
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	0,90	0,03	0,22
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	3,11	1,61	0
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	38,55	38,48	0
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	0,34	0,34	25,03
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0,17	0,17	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	1,06
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,11	0,11	0
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0



Tabelle A.31 Wesentliche Stoffströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 1

	Einheit	1	2	3
$p$	bar	1,00	1,00	1,00
$T$	K	1123,15	283,00	283,00
$c_p$	J/(mol K)	38,76	31,83	31,83
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	194,43	153,19	125,01
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	33,31	33,31	27,18
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	32,08	32,08	26,18
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	42,95	1,88	1,54
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	62,04	62,04	50,63
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	14,82	14,82	12,09
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	2,94	2,94	2,40
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	6,00	6,00	4,90
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0,17	0	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,11	0,11	0,09
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0,01	0,01	0,01
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.32 Wesentliche Stoffströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 2

	Einheit	4	5	6
$p$	bar	1,22	1,50	1,50
$T$	K	300,74	319,15	468,91
$c_p$	J/(mol K)	31,85	32,19	33,70
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	28,18	125,01	145,20
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	6,13	27,18	27,18
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	5,90	26,18	26,18
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	0,35	1,54	20,23
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	11,41	50,63	52,13
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	2,73	12,09	12,09
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	0,54	2,40	2,40
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	1,10	4,90	4,90
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,02	0,09	0,09
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0	0,01	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.33 Wesentliche Stoffströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 3

	Einheit	7	8	9
$p$	bar	1,50	16,00	16,00
$T$	K	573,15	353,15	298,16
$c_p$	J/(mol K)	39,65	36,61	34,56
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	109,16	85,48	44,65
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	37,57	37,57	0,00
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	0,22	0,22	0,22
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	25,41	1,73	0,04
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	6,02	6,02	4,52
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	37,45	37,45	37,38
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	2,40	2,40	2,40
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,09	0,09	0,09
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.34 Wesentliche Stoffströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 4

	Einheit	10
$p$	bar	1,00
$T$	K	1202,95
$c_p$	J/(mol K)	34,58
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	262,14
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	37,15
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	2,60
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	27,29
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	0
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	0
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	187,30
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0,02
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	7,78
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0

Tabelle A.35 Wesentliche Stoffströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 1

	Einheit	1	2	3
$p$	bar	10,00	10,00	10,00
$T$	K	1223,15	1223,15	1073,15
$c_p$	J/(mol K)	39,22	39,22	35,79
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	207,89	207,61	232,24
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	46,45	46,39	50,70
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	56,32	56,24	64,25
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	50,86	50,79	34,17
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	38,21	38,16	79,41
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	15,41	15,39	3,08
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	0,34	0,34	0,34
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0,17	0,17	0,17
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,11	0,11	0,11
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0,01	0,01	0,01
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.36 Wesentliche Stoffströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 2

	Einheit	4	5	6
$p$	bar	10,00	10,00	10,00
$T$	K	573,15	573,15	573,15
$c_p$	J/(mol K)	33,31	33,31	40,38
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	232,24	234,93	163,98
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	50,70	50,70	79,32
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	64,25	64,25	0,14
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	34,17	35,37	42,23
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	79,41	80,91	3,11
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	3,08	3,08	38,55
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	0,34	0,34	0,34
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0,17	0,17	0,17
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,11	0,11	0,11
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0,01	0	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

Tabelle A.37 Wesentliche Stoffströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 3

	Einheit	7	8	9
$p$	bar	16,00	16,00	1,00
$T$	K	353,15	298,16	2088,58
$c_p$	J/(mol K)	37,81	36,08	36,86
$\dot{n}_{ges}$	mol/s	122,66	40,89	32,15
$\dot{n}_{CO_2}$	mol/s	79,32	0,01	5,46
$\dot{n}_{CO}$	mol/s	0,14	0,14	0,38
$\dot{n}_{H_2O}$	mol/s	0,90	0,03	0,22
$\dot{n}_{H_2}$	mol/s	3,11	1,61	0
$\dot{n}_{CH_4}$	mol/s	38,55	38,48	0
$\dot{n}_{N_2}$	mol/s	0,34	0,34	25,03
$\dot{n}_{C_2H_4}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{C_{10}H_8}$	mol/s	0,17	0,17	0
$\dot{n}_{NO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{O_2}$	mol/s	0	0	1,06
$\dot{n}_{C_7H_8}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{NH_3}$	mol/s	0,11	0,11	0
$\dot{n}_{H_2S}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCN}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{COS}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{HCl}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{SO_2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI1}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI2}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI3}$	mol/s	0	0	0
$\dot{n}_{PI4}$	mol/s	0	0	0

### Anhang 4 – Wärmeströme der Prozesssimulation

Die nachfolgenden Wärmeströme können entsprechend ihren Nummern den jeweiligen Prozessstellen in Abb. 4.2 und Abb. 4.3 zugeordnet werden.

Tabelle A.38 Wesentliche Wärmeströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 1

	Einheit	W1	W2	W3
$\dot{Q}$	MW	5,59	0,60	4,38
$T_o$	K	1123,15	453,15	573,15
$T_u$	K	423,15	319,10	573,15

Tabelle A.39 Wesentliche Wärmeströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 2

	Einheit	W4	W5	W6
$\dot{Q}$	MW	1,67	0,33	2,79
$T_o$	K	456,40	440,10	368,15
$T_u$	K	313,15	353,15	304,10

Tabelle A.40 Wesentliche Wärmeströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 3

	Einheit	W7	W8
$\dot{Q}$	MW	2,94	7,30
$T_o$	K	723,15	1203,00
$T_u$	K	318,80	423,15



Tabelle A.41 Wesentliche Wärmeströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 1

	Einheit	W1	W2	W3
$\dot{Q}$	MW	4,40	8,82	1,25
$T_o$	K	1073,15	573,15	573,15
$T_u$	K	573,15	573,15	408,15

Tabelle A.42 Wesentliche Wärmeströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 2

	Einheit	W4	W5	W6
$\dot{Q}$	MW	2,34	2,79	0,39
$T_o$	K	408,15	368,15	723,15
$T_u$	K	313,15	304,10	318,80

Tabelle A.43 Wesentliche Wärmeströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten vor der Optimierung – Teil 3

	Einheit	W7
$\dot{Q}$	MW	0,74
$T_o$	K	1078,15
$T_u$	K	423,15

Tabelle A.44 Wesentliche Wärmeströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 1

	Einheit	W1	W2	W3
$\dot{Q}$	MW	5,59	0,60	4,27
$T_o$	K	1123,15	453,15	573,15
$T_u$	K	423,15	319,10	573,15

Tabelle A.45 Wesentliche Wärmeströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 2

	Einheit	W4	W5	W6
$\dot{Q}$	MW	1,49	0,36	2,79
$T_o$	K	456,40	447,50	368,15
$T_u$	K	313,15	353,15	304,10

Tabelle A.46 Wesentliche Wärmeströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 3

	Einheit	W7	W8
$\dot{Q}$	MW	2,94	7,30
$T_o$	K	723,15	1203,00
$T_u$	K	318,80	423,15

Tabelle A.47 Wärmeströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK1 nach der Optimierung – Dampferzeugung

	Einheit	Speisewasser- vorwärmung	Speisewasser- verdampfung	Dampf- überhitzung
$\dot{Q}$	MW	1,85	2,26	1,35
$T_o$	K	565,00	566,00	867,40
$T_u$	K	298,15	565,00	566,00

Tabelle A.48 Wärmeströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – DKP

	Einheit	Arbeitsmittel- vorwärmung (DKP)	Arbeitsmittel- verdampfung (DKP)	Arbeitsmittel- überhitzung (DKP)
$\dot{Q}$	MW	0,94	3,44	1,01
$T_o$	K	515,40	516,40	753,15
$T_u$	K	423,20	515,40	516,40

Tabelle A.49 Wärmeströme der kurzfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – ORC

	Einheit	Arbeitsmittel- vorwärmung (ORC)	Arbeitsmittel- verdampfung (ORC)	Arbeitsmittel- überhitzung (ORC)
$\dot{Q}$	MW	–	2,71	2,73
$T_o$	K	–	451,60	573,15
$T_u$	K	–	450,60	451,60

Tabelle A.50 Wesentliche Wärmeströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 1

	Einheit	W1	W2	W3
$\dot{Q}$	MW	4,40	8,82	1,25
$T_o$	K	1073,15	573,15	573,15
$T_u$	K	573,15	573,15	408,15

Tabelle A.51 Wesentliche Wärmeströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 2

	Einheit	W4	W5	W6
$\dot{Q}$	MW	2,34	2,79	0,39
$T_o$	K	408,15	368,15	723,15
$T_u$	K	313,15	304,10	318,80

Tabelle A.52 Wesentliche Wärmeströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – Teil 3

	Einheit	W7
$\dot{Q}$	MW	0,74
$T_o$	K	1078,15
$T_u$	K	423,15

Tabelle A.53 Wärmeströme der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL1 nach der Optimierung – Dampferzeugung

	Einheit	Speisewasser- vorwärmung	Speisewasser- verdampfung	Dampf- überhitzung
$\dot{Q}$	MW	1,19	1,59	0,86
$T_o$	K	555,50	556,50	850,00
$T_u$	K	298,15	555,50	556,50

Tabelle A.54 Wärmeströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – DKP

	Einheit	Arbeitsmittel- vorwärmung (DKP)	Arbeitsmittel- verdampfung (DKP)	Arbeitsmittel- überhitzung (DKP)
$\dot{Q}$	MW	0,63	2,30	0,67
$T_o$	K	515,4	516,4	753,1
$T_u$	K	423,2	515,4	516,4

Tabelle A.55 Wärmeströme der langfristig realisierbaren Konzeptvarianten nach der Optimierung – ORC

	Einheit	Arbeitsmittel- vorwärmung (ORC)	Arbeitsmittel- verdampfung (ORC)	Arbeitsmittel- überhitzung (ORC)
$\dot{Q}$	MW	–	1,84	1,86
$T_o$	K	–	451,60	573,10
$T_u$	K	–	450,60	451,60

### Anhang 5 – Optimierungsergebnisse der kurzfristigen Konzeptvarianten

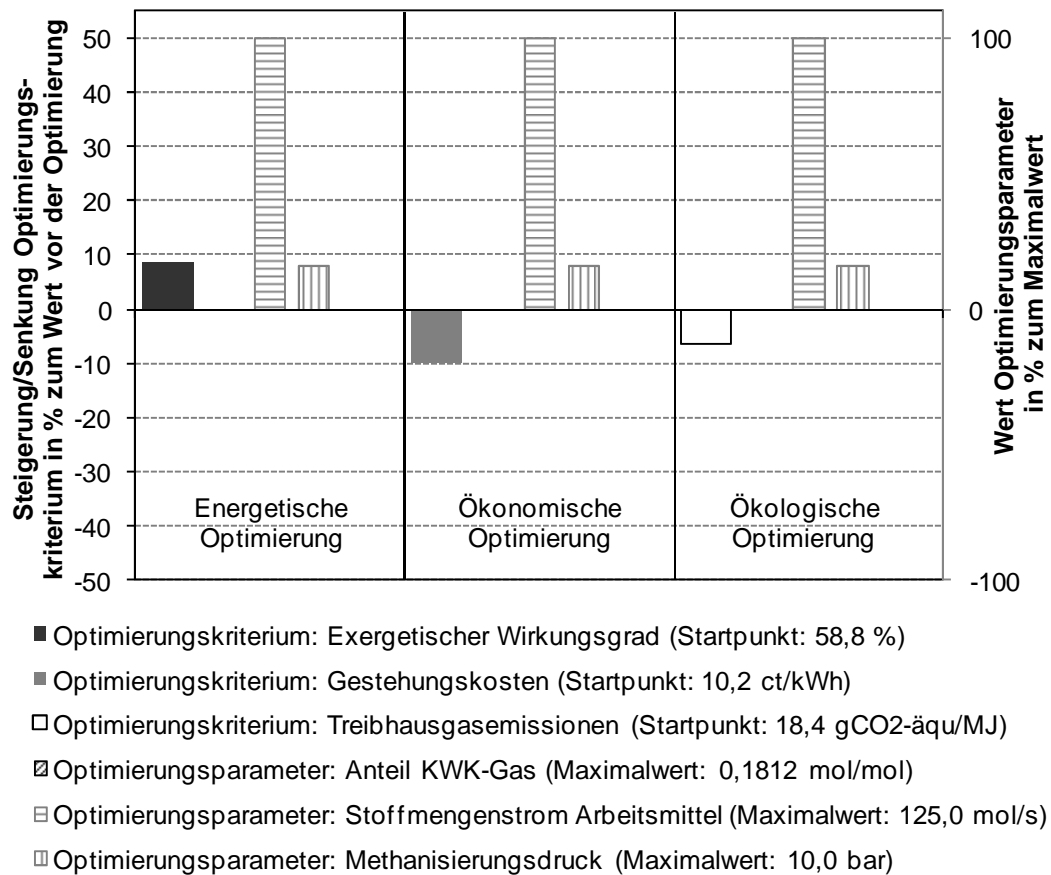


Abb. A.24 Optimierungskriterien und -parameter der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK3-GMORC zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme nach erfolgter Optimierung

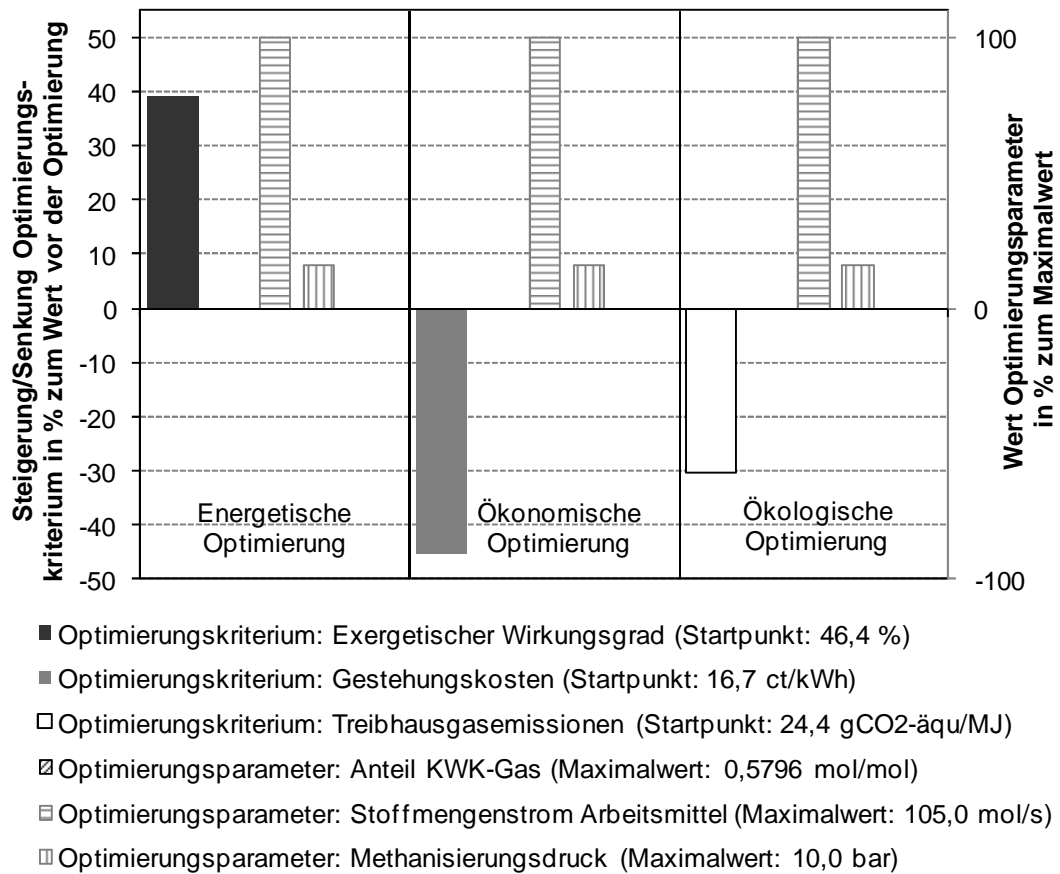


Abb. A.25 Optimierungskriterien und -parameter der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK4-GTDKP zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme nach erfolgter Optimierung

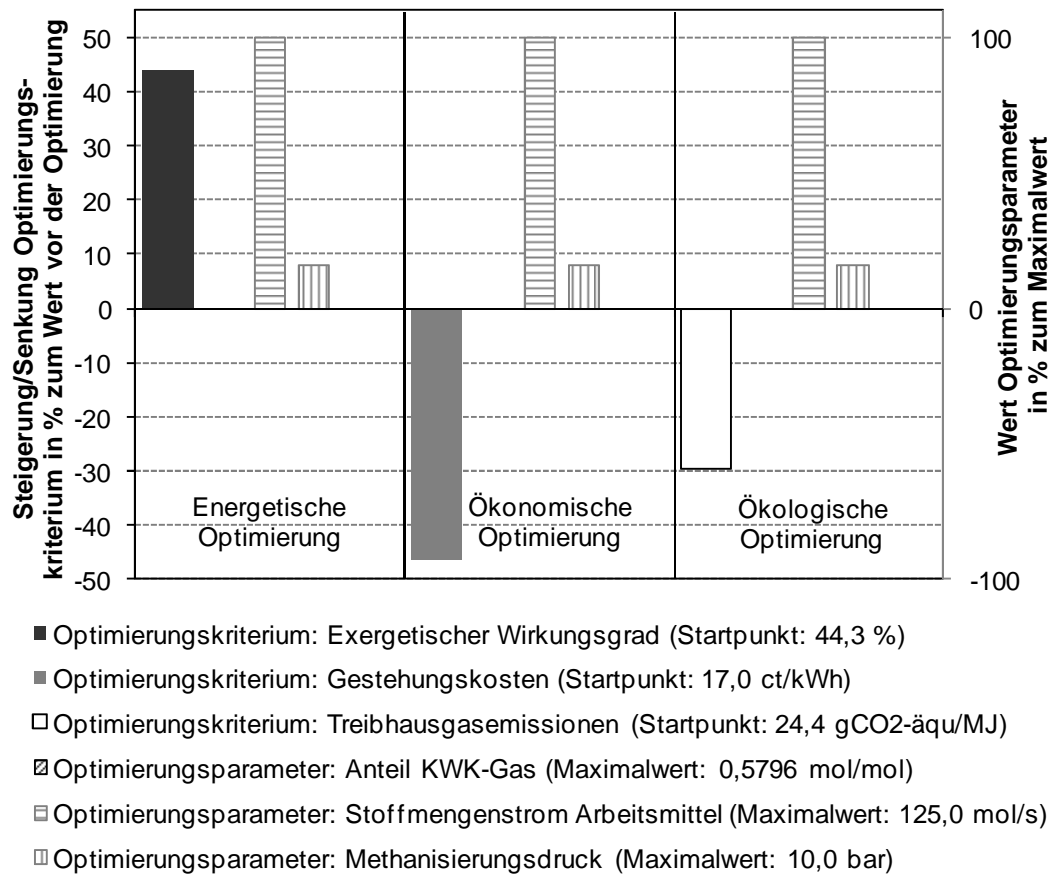


Abb. A.26 Optimierungskriterien und -parameter der kurzfristig realisierbaren Konzeptvariante VK5-GTORC zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme nach erfolgter Optimierung



### Anhang 6 – Optimierungsergebnisse der langfristigen Konzeptvarianten

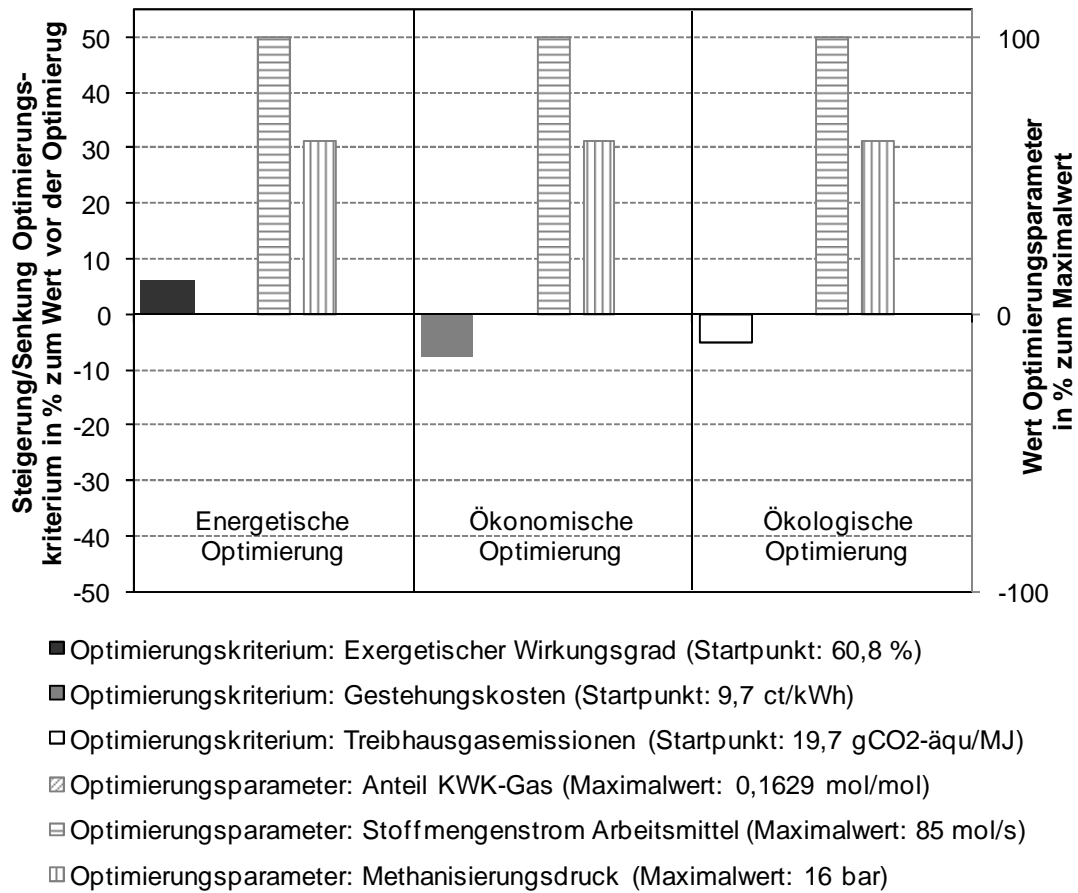


Abb. A.27 Optimierungsparemeter und -kriterien der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL3-GMORC zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme nach erfolgter Optimierung

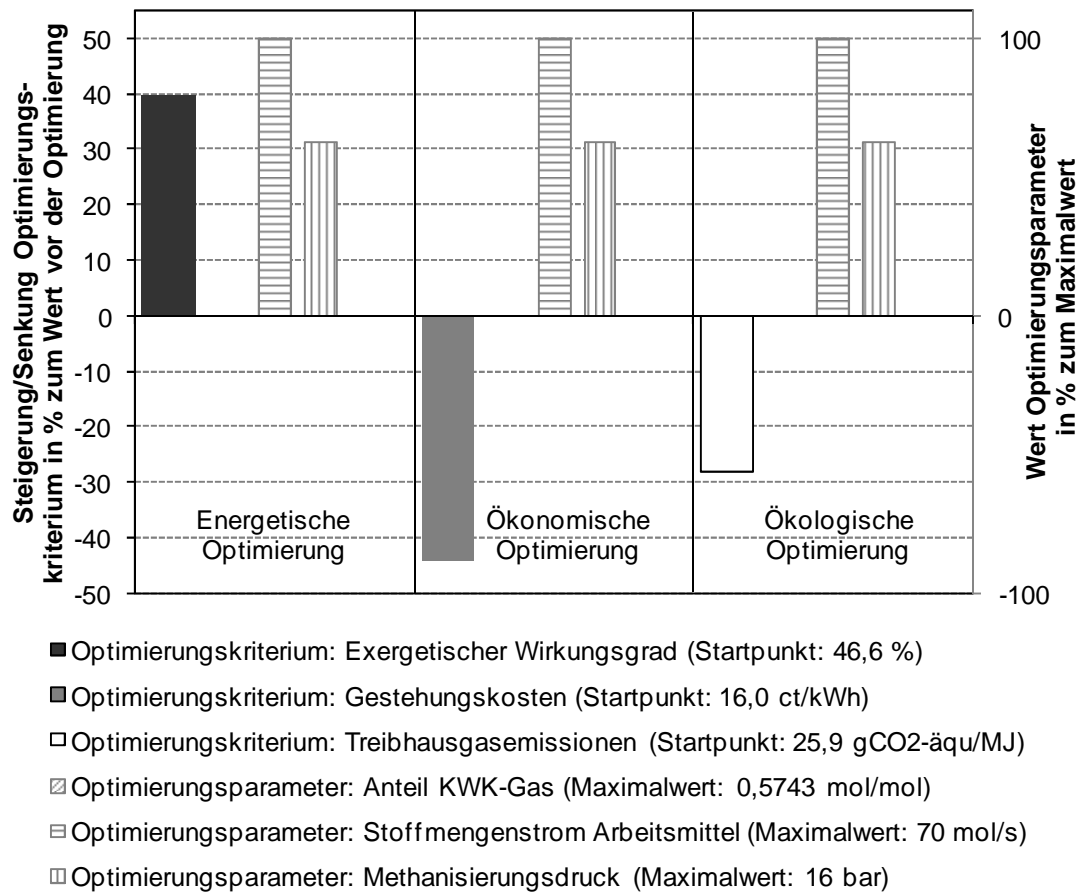


Abb. A.28 Optimierungparameter und -kriterien der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL4-GTDKP zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme nach erfolgter Optimierung

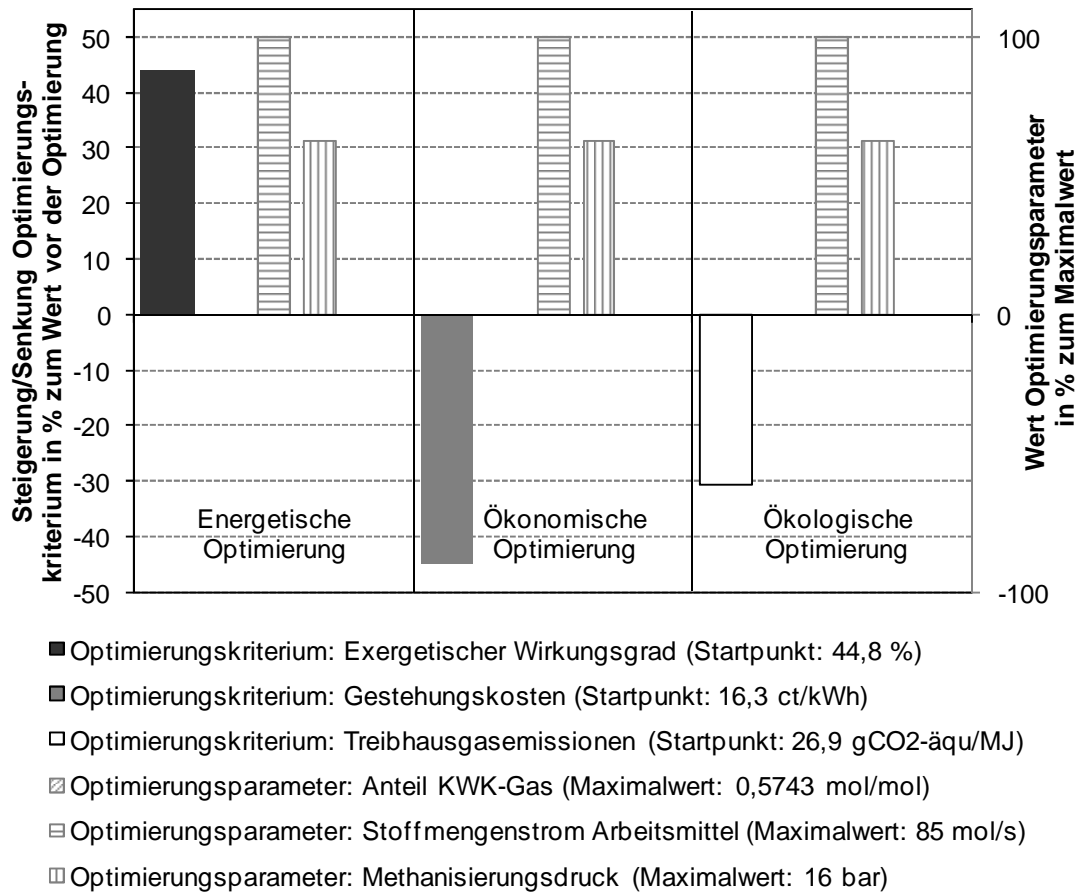


Abb. A.29 Optimierungparameter und -kriterien der langfristig realisierbaren Konzeptvariante VL5-GTORC zur Erzeugung von SNG, Strom und Wärme nach erfolgter Optimierung

## **Lebenslauf**

### **Persönliche Daten:**

Name: Rönsch  
Vorname: Stefan  
Geburtsdatum: 21.01.1981  
Geburtsort: Kaltenkirchen

### **Schulbildung:**

07.1987 – 07.1991 Grundschule Flottkamp in Kaltenkirchen

08.1991 – 06.2000 Gymnasium Kaltenkirchen

### **Zivildienst:**

08.2000 – 06.2001 Janusz-Korczac-Schule  
(Schule für geistig und körperlich behinderte Kinder)

### **Studium:**

09.2001 Beginn des Maschinenbaustudiums an der Fachhochschule Kiel

04.2004 Hochschulwechsel an die RWTH Aachen

07.2004 – 10.2004 Fachpraktikum in der Forschung und Entwicklung der  
Volkswagen AG in Wolfsburg

09.2005 Vordiplom an der RWTH Aachen

02.2006 – 07.2006 Auslandssemester an der Universidad Politécnica de Valencia

10.2006 – 11.2006 Fachpraktikum in der Forschung und Entwicklung der  
Airbus Deutschland GmbH in Hamburg

12.2006 – 03.2007 Anfertigung der Diplomarbeit in Zusammenarbeit mit dem  
Forschungszentrum Jülich und der  
Airbus Deutschland GmbH in Hamburg

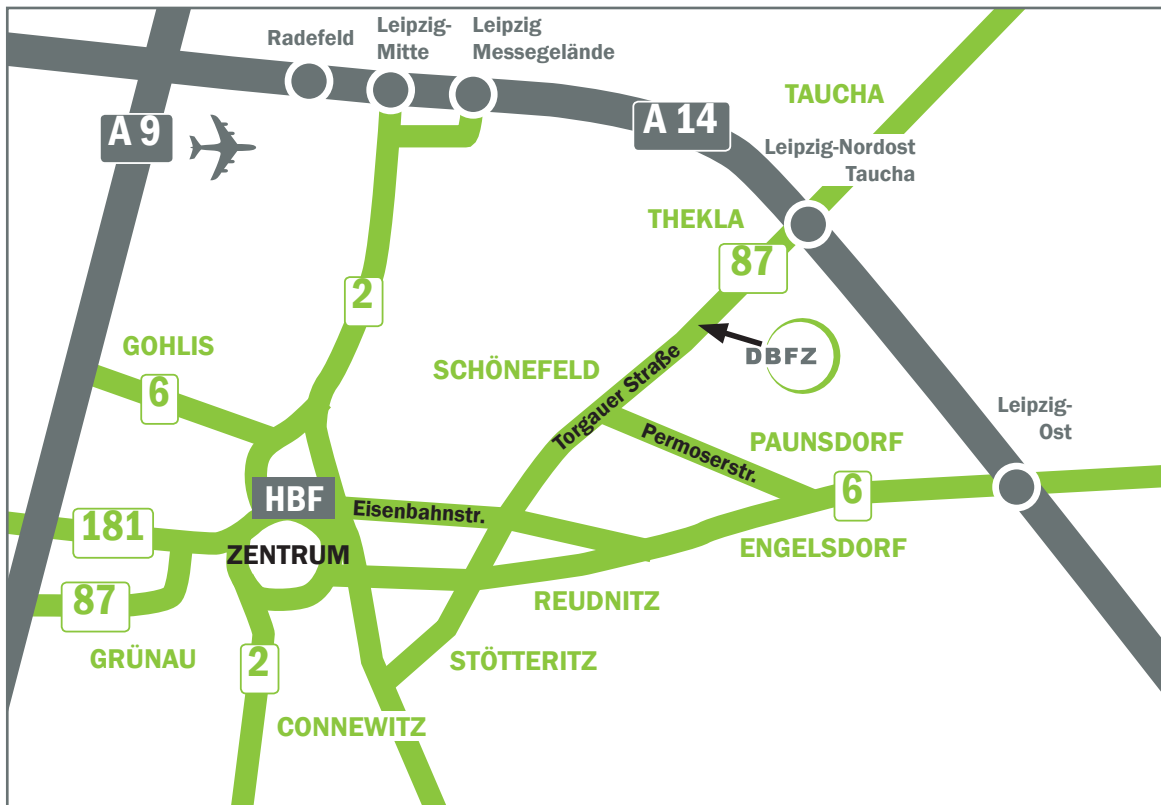
03.2007 Diplom an der RWTH Aachen

### **Berufliche Tätigkeiten:**

07.2007 – 06.2008 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am  
Institut für Energetik und Umwelt gGmbH in Leipzig

Seit 06.2008 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am  
Deutschen BiomasseForschungsZentrum gGmbH in Leipzig

Seit 06.2011 Arbeitsgruppenleiter der Arbeitsgruppe „Prozesssimulation“ am  
Deutschen BiomasseForschungsZentrum gGmbH in Leipzig



### Anfahrt

#### ... mit dem Zug:

Ankunft Leipzig Hauptbahnhof; Straßenbahn Linie 3/3E (Richtung Taucha/Sommerfeld) bis Haltestelle „Bautzner Straße“; Straße überqueren, Parkplatz rechts liegen lassen und geradeaus durch das Eingangstor Nr. 116, nach ca. 150 m links.

#### ... mit dem Auto:

Über die Autobahn A 14; Abfahrt Leipzig Nord-Ost, Taucha; Richtung Leipzig; Richtung Zentrum, Innenstadt; nach Jet Tankstelle links einfahren (siehe „... mit dem Zug“).

#### ... mit der Straßenbahn

Linie 3/3E Richtung Taucha/Sommerfeld bis zur Haltestelle „Bautzner Straße“ (siehe „... mit dem Zug“).

### Impressum

#### Herausgeber

DBFZ Deutsches BiomasseForschungszentrum gemeinnützige GmbH, Leipzig, mit Förderung des Bundesministeriums für Ernährung, Landwirtschaft und Verbraucherschutz aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages.

#### Kontakt

DBFZ Deutsches BiomasseForschungszentrum gemeinnützige GmbH  
Torgauer Straße 116  
D-04347 Leipzig  
Tel.: +49 (0)341 2434-112  
Fax: +49 (0)341 2434-133  
info@dbfz.de  
www.dbfz.de

#### Geschäftsführung

Prof. Dr.-Ing. Frank Scholwin  
(wissenschaftlicher Geschäftsführer)  
Daniel Mayer  
(administrativer Geschäftsführer)

#### DBFZ Report Nr. 5

ISSN: 2190-7943

Bilder: Deutsches BiomasseForschungszentrum (DBFZ), Fotolia

Druck: Fischer Druck

DBFZ, Leipzig 2011

© Copyright: Alle Rechte vorbehalten. Kein Teil dieser Broschüre darf ohne die schriftliche Genehmigung des Herausgebers vervielfältigt oder verbreitet werden. Unter dieses Verbot fällt insbesondere auch die gewerbliche Vervielfältigung per Kopie, die Aufnahme in elektronische Datenbanken und die Vervielfältigung auf CD-ROM.

