

Inhaltsverzeichnis

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

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

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