

Zusammenfassung

Es ist ein weltweites Bestreben aller Industriezweige ihre Prozesse energieeffizienter, ressourcenschonender, wirtschaftlicher und umweltverträglicher zu gestalten. Nur durch die Ausschöpfung aller verfügbaren Potentiale ist es heutzutage noch möglich Prozesse dahingehend weiter zu optimieren. Im Rahmen dieser Arbeit werden durch die Entwicklung eines neuartigen Verfahrens Komponenten aus einem Gasstrom nutzbar gemacht. Durch die Ausschöpfung dieses Potentials kann das hier entwickelte Verfahren Ammoniumhydrogencarbonat als ein neues, marktfähiges Nebenprodukt generieren. Die Implementierung in die Wertschöpfungskette einer großindustriellen Gasaufbereitungsanlage kann ganzheitlich betrachtet den Gesamtprozess optimieren.

Es wurde eine mobile, modulare Pilotanlage entwickelt und konstruiert. Diese Pilotanlage wurde auf dem Gelände der Kokerei *Schwelgern* in Duisburg aufgestellt und im Bypass zur Gasaufbereitungsanlage, die sogenannte Kohlenwertstoffanlage, betrieben. Das Ziel dieser Arbeit ist es ein Kristallisationsmodell mit Hilfe von Populationsbilanzen zu erstellen, welches die komplexen Mechanismen einer technischen Kristallisation unter Realgasbedingungen bei einem kontinuierlichen Prozess abbilden kann. Die Populationsbilanzen werden mit der Standard Method of Moments (SMM) in ein ODE-System transformiert.

Die darauf basierende Parameterschätzung wird auf Grundlage der Datenbasis der Versuchskampagnen mit der Pilotanlage durchgeführt. Die Datenbasis wurde mit Hilfe einer optimierungsbasierten, dynamischen Messdatenvalidierung robuster gemacht. Durch die Verwendung des *Moving Horizon* Zustandsschätzers kann das stetig, mit der steigenden Anzahl an Messdaten, wachsende Optimierungsproblem beherrscht werden.

Ein weiteres Ziel dieser Arbeit ist es die vollständige Auslegung des neuen Verfahrens für den späteren Einsatz in FullScale. Das Nachbehandlungskonzept des generierten neuen Nebenproduktes ist entscheidend für den auf dem Markt zu erzielenden Verkaufspreis und daher essentiell für die Prozesseinführung eines neuen Verfahrens. Hierfür wurden mehrere Prozessrouten im Labor untersucht. Es wird eine Umkristallisation sowie eine Nasswäsche mit verschiedenen Waschmedien ausgelegt und gegenübergestellt.

Abschließend wird in dieser Arbeit die ganzheitliche Betrachtung der Gasaufbereitungsanlage durchgeführt. Es wird die Optimierung des Gesamtprozesses durch die Implementierung des Verfahrens herausgearbeitet.

Abstract

All branches of industry worldwide are striving to make their processes more energy-efficient, resource-saving, economically viable and environmentally compatible. Nowadays, it is only possible to further optimize processes in this respect by making the best use of all available potentials. This research develops a novel process to make components of a gas stream useable. The process developed here generates Ammonium hydrogen carbonate as a new, marketable byproduct. The implementation of this process into the value chain of a full-scale industrial gas processing plant can optimize the overall process.

A mobile, modular pilot plant was developed and constructed. This pilot plant was set up on the site of the *Schwelgern* coking plant in Duisburg and operated in bypass to the by-product plant. The aim of this research is to create a crystallization model with the help of population balances, which can represent the complex mechanisms of a technical crystallization under real gas conditions in a continuous process. The population balances are transformed into an ODE system using the Standard Method of Moments (SMM).

The parameter estimation based on this is carried out on the basis of the database of the experimental campaigns with the pilot plant. The data basis was made more robust with the help of an optimization-based, dynamic measurement data validation. By using the *Moving Horizon* State estimator, the optimization problem, which grows steadily as the number of measured data increases, can be mastered.

A further goal of this research is to fully design the new process for later use in full-scale. The post-treatment concept of the generated new byproduct is crucial for the selling price to be achieved on the market and therefore essential for the process introduction. For this purpose, several process routes are investigated in the laboratory. A recrystallization and a wet wash with different wash media is designed and compared.

Finally, this research produces a comprehensive evaluation of the entire by-product plant by analyzing the optimization achieved through the implementation of the entire process.