

Modellierung einer industriellen Kunststoff Co-Pyrolyse

A.E. Lechleitner, T. Schubert, M. Lehner, Montanuniversität Leoben, Österreich,

W. Hofer, OMV Refining & Marketing GmbH, Schwechat, Österreich,

T. Karner, Prozess-Optimal GmbH, Vorau, Österreich

Pyrolyse von Kunststoffabfällen ist ein attraktiver Prozess, um Kohlenwasserstoffe wieder in den petrochemischen Wertstoffkreislauf zurückzuführen. Daher wurde ein Co-Pyrolyse-Verfahren entwickelt, das Kunststoffe in einem Rohrreaktor crackt und dabei ein Raffinerie Nebenprodukt als Trägermaterial zur Viskositätssenkung verwendet. Um diesen Prozess auf eine kommerzielle Kapazität zu skalieren, wird ein Reaktormodell für eine Simulation benötigt, welches die Produktausbeuten in Abhängigkeit der dynamischen Prozessbedingungen berechnet. Auf Basis einer Pilotanlage im Technikumsmaßstab wird das Modell in Matlab in Kombination mit dem kommerziellen Raffinerie Berechnungstool PetroSim erstellt. Die Modellstruktur bildet das so genannte Lumped Kinetik Modeling, in welchem Stoffgruppen mit ähnlicher Siedelage zu vier Pseudokomponenten kombiniert werden. Details hierzu sind in Schubert et al. (2019) beschrieben. Unter der Annahme von monomolekularen, irreversiblen Reaktionen erster Ordnung sind sechs mögliche Reaktionen für das Vierkomponentensystem darstellbar, für die jeweils die Arrheniusgleichung hinterlegt wird. Da die Temperatur der maßgebliche Faktor bei Pyrolysereaktionen ist, wird das Reaktionsschema simultan mit einer Wärmebilanz verknüpft. Hierfür muss die Endothermie der Reaktionen und die Erwärmung des Reaktionsgemisches dem Wärmeeintrag gegenübergestellt werden. Der Wärmeübergang wird analog zum Strömungssieden gesättigter Flüssiggemische nach VDI Wärmeatlas berechnet. Die Endothermie ist wie die kinetischen Daten der chemischen Reaktionen ein Zielparameter der Modellierung, allerdings wird nur eine mit allen Stoffänderungen gekoppelte Gesamtreaktionsenthalpie errechnet, um die Unbekannten des Modells zu verringern. Die Berechnungsgrundlage bildet eine nichtlineare Parameteranpassung basierend auf Minimierung der Fehlerquadrate, welche stark von den Startwerten abhängt. Dadurch werden diese von einem progressiven Algorithmus erzeugt, welcher das Reaktionsschema stufenweise bis zum bestehenden Modell erweitert. Die Ergebnisse aus der Modellierung stimmen gut mit den experimentellen Daten überein, weshalb dieses für weiterführende Simulationen verwendet wird.

Literatur: Schubert, T. et al. (2019) Fuel Processing Technology 193, S. 204–211