



Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie

Masterarbeit



Thermodynamische Simulation zur
Systemauslegung von zukünftigen HPSR-
Anlagen

Dipl.-Ing. Manuel Andreas Farkas, BSc

Juli 2022



Masterarbeit

Spezifikation von Inhalten, Umfang und Zeitplan

Titel: Thermodynamische Simulation zur Systemauslegung von zukünftigen HPSR Anlagen

Student: Manuel Faraks
Tel.:
E-Mail: Manuel-andreas.farkas@stud.unileoben.ac.at

Betreuer des Lehrstuhls für Eisen und Stahlmetallurgie (ESM):

1. Betreuer (Habillierter): Schenk	Tel.: 03842 402 2200
	Mail: Johannes.Schenk@unileoben.ac.at
2. Betreuer (wiss. MA): Zarl	Tel.: 03842 402 2239
	Mail: Michael-Andreas.Zarl@unileoben.ac.at

Beginn der Arbeit: Juli. 2020
Geplantes Ende der Arbeit: Dez 2020
Verteiler: Schenk, Zarl

1. Kurzbeschreibung der Problemstellung und geplanter Inhalt

Um die Zukunft der Stahlindustrie kohlenstoffarm zu gestalten ist es von Bedeutung Prozesse zu entwickeln, welche anstelle von carbothermischer Reduktion auf wasserstoffbasierte Reduktionsprozesse zurückgreifen.

Einer dieser Prozesse ist die sogenannte Wasserstoff Plasma Schmelzreduktion (HPSR). Die Entwicklung dieser Technologie wird seit 1995 am Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie vorangetrieben. Mittlerweile befindet sich eine Versuchsanlage im Maßstab einer integrierten Miniplant mit einem Investitionsvolumen von ca. 3Mio. € im Bau. Für die weitere Entwicklung des Prozesses ist es notwendig zukünftige Anlagenlayouts miteinander zu vergleichen und somit die Grundlage für den nächsten Schritt des Scale-Ups zu schaffen

Ist-Situation:

Derzeit gibt es nur grundlegende thermodynamische Berechnungen für ein Prozesslayout. Anlagenspezifische Parameter, welche aus der Größe der Anlage resultieren oder Ähnliches sind nicht bzw. nur teilweise berücksichtigt. Des Weiteren ist derzeit nicht bekannt, welches Vorreduktionsaggregat sich am besten in den Prozess einbinden lässt.

Die bestehenden Berechnungen sind derzeit von einer Vielzahl an Annahmen wie z.B.: Abgastemperatur ~1700°C gestützt.



Soll-Situation:

Für unterschiedliche Anlagenlayouts sind thermodynamische Modelle vorhanden welche sowohl CAPEX als auch OPEX abschätzen lassen. Mögliche Anlagenlayouts werden untereinander verglichen und für die Produktionsmengen von 1 t/h (Pilotanlage) und 150 t/h (Industrielle Produktion) auf Basis der Eignung gereiht. Das passende Vorreduktionsaggregat für jede dieser Produktionsmengen ist bekannt und einige der Annahmen bezüglich Berechnung sind durch Versuchsdaten evaluiert und angepasst worden.

Ziel:

Ziel dieser Arbeit ist es die bestehende thermodynamische Simulation in FactSage7.3 zu überarbeiten und zu erweitern. Für die Produktionsmengen von 1 t/h (Pilotanlage) und 150 t/h (Industrielle Produktion) sollen geeignete Anlagenkonzepte erstellt und miteinander verglichen werden. Des Weiteren sollen in praktischen Versuchen Daten wie z.B.: spezifische Abgastemperaturen ermittelt werden.

2. Literaturteil der Arbeit

Erarbeitung folgender Themen:

- Thermodynamische Modelle und Berechnungen in ähnlichen Anlagen
- Grundlagen für die Simulation von thermodynamischen Prozessen

3. Praktischer Teil der Arbeit

- Erstellung der thermodynamischen Simulationen
- Auswertung und Vergleich der erstellten Systeme
- Erstellen einer Matrix zum Vergleich der Anlagenlayouts bei unterschiedlichen Produktionskapazitäten
- Verfahrensbeschreibung für die Erstellung/Bearbeitung von thermodynamischen Systemen mit Hilfe von FactSage 7.3
- Praktische Versuche zur Auswertung von Prozessdaten

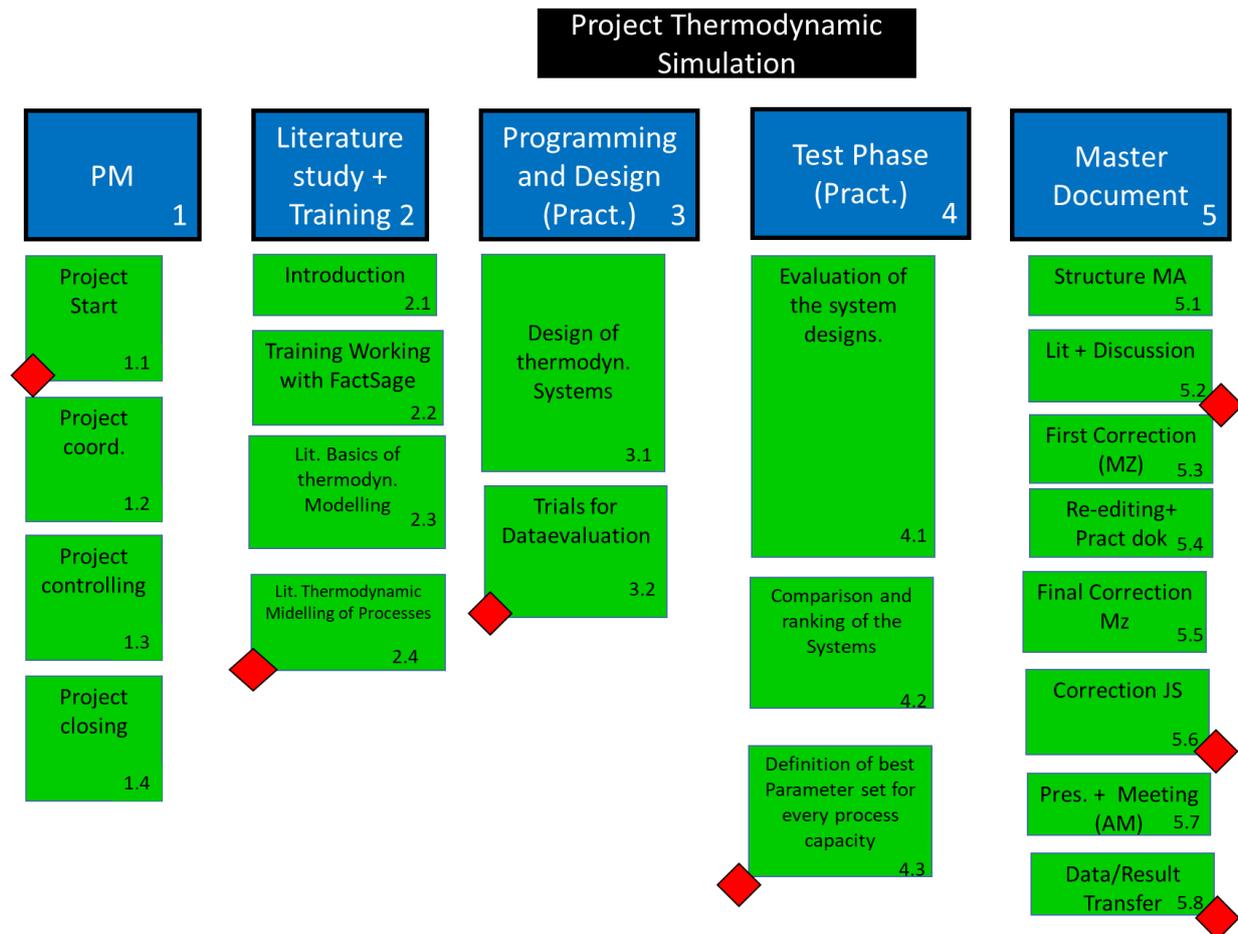
4. Aufgaben des ESM

Seitens des ESM wird die Masterarbeit als Teil der Ausbildung des Studenten für die Erlangung des akademischen Grades eines MSc. betreut und beurteilt.

Dem Studenten wird der Zugang zu Literatur und Literaturdatenbanken für seine Arbeit zur Verfügung gestellt. Software am ESM kann er, soweit es nicht durch Lizenzbestimmungen anders geregelt ist, für die Bearbeitung von Fragestellungen aus der Masterarbeit nutzen. Eine gewerbliche Nutzung ist ausdrücklich ausgeschlossen



5. Zeitplan



Juli					August				September				Oktober				November				Dezember				
KW 27	KW 28	KW 29	KW 30	KW 31	KW 32	KW 33	KW 34	KW 35	KW 36	KW 37	KW 38	KW 39	KW 40	KW 41	KW 42	KW 43	KW 44	KW 45	KW 46	KW 47	KW 48	KW 49	KW 50	KW 51	KW 52
PM(1)																									
1.1																									
1.2																									
1.3																									
1.4																									
LS+TR (2)																									
2.1																									
2.2																									
2.3																									
2.4																									
Programmi																									
3.1																									
3.2																									
Test Pase II																									
4.1																									
4.2																									
4.3																									
Master																									
5.1																									
5.2																									
5.3																									
5.4																									
5.5																									
5.6																									
5.7																									
5.8																									

Leoben, am ...

Für den Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie:

.....

Prof. Johannes Schenk

Für den Studenten:

.....

Manuel Farkas

Kurzfassung

Die Technologieumstellung hin zu einer grünen Produktion stellt die gesamte Stahlindustrie in Europa vor enorme Herausforderungen. Durch mehrere Abkommen, wie z.B.: jenes von Paris, wurde als Ziel der Vereinten Nationen die Verringerung der klimaschädlichen Gase festgelegt. Als Ziel ist eine Klimaneutralität bis zum Jahr 2050 festgelegt worden. [1]

Um einen Teil dieser CO₂-Emissionen zu verringern, wird eine grüne Stahlherstellung angestrebt. Um diesen Prozess des Umdenkens zu starten, wurden eine Serie von Forschungsprojekten in der Eisen- und Stahlindustrie eingeleitet. Einer dieser Ansätze dafür sind Untersuchungen, welche sich mit der Speicherung der erzeugten CO₂-Emissionen beschäftigt. Weitere Ansätze sind die Elektrolyse von Erz, die Verwendung von biomassebasiertem Kohlenstoff und letztendlich die Reduktion von Eisenerz mittels Wasserstoffes. Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Herstellungsrouten mittels Hydrogen Plasma Smelting Reactor (HPSR). Im Zuge der Literaturrecherche soll sowohl die Grundlage zur Simulation thermodynamischer Prozesse näher beschrieben, als auch ähnliche bereits bestehende Modelle einer HPSR-Anlage betrachtet werden. Anschließend wird im Rahmen des praktischen Teils dieser Arbeit die Erstellung eines variablen FactSage®-Modelles zur Massen- und Energiebilanz einer HPSR-Anlage im Pilot- und einer Massenproduktionsnäher beschrieben.

Mit Hilfe der neuen dynamischen Simulation soll dabei ein Vergleich des neuen Anlagenlayouts mit den bereits bestehenden Modellen gezogen werden. Zusätzlich erfolgt in dieser Arbeit ein Vergleich verschiedener Anlagenlayouts mit unterschiedlichen Produktionskapazitäten

Abstract

In order to minimize the effects of the anthropogenic climate change, a technology shift started towards green steel production. The goal through several agreements, such as the Paris Agreement, is to reduce gases that are harmful to the climate. By 2050 the target is to reach domestic net-zero carbon emissions.

The steel producers, for their part, are trying to reduce CO₂ emissions via green steel production. Therefore, many research projects have been launched by the iron and steel industry. One branch deals with ways to produce ore via electrolysis, on with the storage of the produced CO₂ and one with the production of iron through biomass. On specific division is concerned with the production route using hydrogen plasma smelting reactors. The literature review deals with the basis for the simulation of thermodynamic processes. Furthermore there will be discussed some similar already existing models which are calculated statically. The practical part of this work will be a description of a new HPSR plant model and the thermodynamic calculation of it with FactSage®. This model will be based on a mass and energy balance of a pilot and industrial plant.

With a new dynamic simulation, a comparison of the new plant layouts with the existing models will be made. Furthermore, a comparison is made by the variation of parameters for different plant layouts with various different production capacities.



MONTANUNIVERSITÄT LEOBEN
www.unileoben.ac.at

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt, und mich auch sonst keiner unerlaubten Hilfsmittel bedient habe.

Ich erkläre, dass ich die Richtlinien des Senats der Montanuniversität Leoben zu "Gute wissenschaftliche Praxis" gelesen, verstanden und befolgt habe.

Weiters erkläre ich, dass die elektronische und gedruckte Version der eingereichten wissenschaftlichen Abschlussarbeit formal und inhaltlich identisch sind.

Datum 30.06.2022

Unterschrift Verfasser/in
Manuel Andreas Farkas

Danksagung

Bedanken möchte ich mich hierbei bei meinem Arbeitgeber der Montanuniversität Leoben, insbesondere dem Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie für die Möglichkeit der Durchführung sowie der fachlichen Unterstützung dieser Arbeit

Bei Herrn Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Johannes Schenk für die Betreuung meiner Masterarbeit.

Bei Herrn Dipl.- Ing Michael Andreas Zarl alias Rodrigo Zarell für die großartige Unterstützung, Geduld und Hilfestellung bei zahlreichen Fragestellungen.

Bei Michael Papst und Bernhard Gerstl für die Zeit und Geduld bei der Zusammenstellung und Korrektur dieser Arbeit.

Bei Andreas Leitner für die Korrektur und Hilfestellung zur Lösung zahlreicher Probleme über dem einen oder anderen kühlem Erfrischungsgetränk.

Schlussendlich möchte ich großen Dank meiner gesamten Familie und Freunden für die fortwährende Unterstützung entgegenbringen.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	I
Abstract	II
Eidesstattliche Erklärung	III
Danksagung	IV
Inhaltsverzeichnis	V
Allgemeine Formelzeichen	VIII
Akronyme	IX
Abbildungsverzeichnis	XI
Tabellenverzeichnis	XIV
1 Einleitung	1
2 Thermodynamische Grundlagen der Schmelzreduktion	3
2.1 Grundlagen der thermodynamischen Modellierung.....	4
2.2 Eisenerze	6
2.3 Systeme der Wasserstoffplasmaschmelzreduktion	8
2.4 Reduktion von Eisenerzen	13
2.4.1 Ellingham-Richardson-Diagramm.....	15
2.4.2 Baur-Glässner-Diagramm.....	20
3 Gegenüberstellung verschiedener Wasserstoffplasmaschmelzreduktion-Anlagenlayouts	28
3.1.1 Material Vorwärmung und Vorreduktion	32

3.1.2	Schmelzreaktor	32
3.1.3	Elektrischer Energieeintrag	33
3.1.4	Reduktionsmittel	34
3.1.5	Produkte	35
3.2	Vergleich der Konzepte.....	36
4	Berechnungsmodell	40
4.1	Beschreibung der Pilotanlage zur Verarbeitung von einer Tonne Erz pro Stunde 40	
4.2	Beschreibung der industriellen Produktionsanlage zur Verarbeitung von 150 Tonnen Erz pro Stunde.....	46
4.3	Korrektur des Berechnungsmodells	54
4.3.1	Anpassung der Gaszusammensetzungen und der Gastemperaturen	54
4.3.2	Anpassung Dampfkühler	55
4.3.3	Berechnung im Wärmetauscher	55
4.4	Beschreibung der Erweiterungen Berechnungsmodell Zarl-Farkas.....	56
5	Simulation des HPSR-Kreislaufes	60
5.1	Berechnung der 1 th - Anlage	60
5.1.1	Simulation 1	62
5.1.1.1	Ergebnisse Simulation 1	63
5.1.2	Simulation 2	66
5.1.2.1	Ergebnisse Simulation 2	67
5.1.3	Simulation 3	69
5.1.3.1	Ergebnisse Simulation 3	70
5.1.4	Simulation 4	73
5.1.4.1	Ergebnisse Simulation 4	74
5.1.5	Simulation 5	74
5.1.6	Rohauslegung	75
5.2	Berechnung der 150 th – Anlage	77
5.2.1	Simulation 1	78
5.2.1.1	Ergebnisse Simulation 1	80
5.2.2	Simulation 2	86
5.2.2.1	Ergebnisse Simulation 2	87
5.2.3	Simulation 3	90
5.2.3.1	Ergebnisse Simulation 3	90
5.2.4	Rohauslegung	93

5.3	Vergleich der Anlagenkonzepte	96
5.4	Erweiterung der 150 th – Anlage.....	100
6	Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick.....	104
7	Literaturverzeichnis.....	109

Allgemeine Formelzeichen

{ }	Gasphase
[]	Schmelze
()	Schlackenphase
< >	Feuerfestmaterial, nichtmetallische Einschlüsse

Akronyme

Al_2O_3	Aluminiumoxid
Ar	Argon
CaO	Kalziumoxid
CaCO_3	Kalziumkarbonat
CO	Kohlenstoffmonoxid
CO_2	Kohlenstoffdioxid
Fe	Eisen
FeO	Wüstit
Fe_2O_3	Hämatit
Fe_3O_4	Magnetit
G	Freie Enthalpie
GJ	Giga Joule
GOD	Gasoxidationsgrad
H	Enthalpie
H	Wasserstoff
H_2	Wasserstoffmolekül
H_2O	Wasser
HPSR	Hydrogen Plasma Smelting Reactor
K	Gleichgewichtskonstante
kg	Kilogramm
MgO	Magnesiumoxid
MgCO_3	Magnesiumkarbonat
MnO	Manganoxid
Nm^3	Norm Kubikmeter

N	Stoffmenge
O ₂	Sauerstoff
p	Druck
S	Entropie
SiO ₂	Siliziumoxid
T	Temperatur
t	Tonne
WT	Wärmetauscher

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2-1: Mögliches Flussdiagramm zur Gibbs-Energie-Minimierungs-Berechnung	6
Abbildung 2-2: Komprimiertes Zweistoffsystem Eisen-Sauerstoff bei 1 atm [23]	8
Abbildung 2-3: System FeO-Fe ₂ O ₃ mit Sauerstoffsobaren[29]	9
Abbildung 2-4: Löslichkeit von Wasserstoff in Eisen in Abhängigkeit von Temperatur und Druck[35]	12
Abbildung 2-5: Gleichgewicht an gelösten Wasserstoff und gelöstem Sauerstoff in Stahlschmelzen bei 1600 °C [37]	13
Abbildung 2-6: Richardson-Ellingham-Diagramm der Oxide [41]	16
Abbildung 2-7: Richardson-Ellingham Diagramm für Metalloxide[29]	17
Abbildung 2-8: Temperaturabhängigkeit der verschiedenen Wasserstoff-Spezies in einem thermodynamischen Gleichgewicht bei 1 atm [43–45]	18
Abbildung 2-9: Erweiterung des Richardson-Ellingham Diagrammes um verschiedene Wasserstoff-Spezies [42]	19
Abbildung 2-10: Einfluss der Aktivitäten auf das Sauerstoffpotential[19]	20
Abbildung 2-11: Baur-Glässner Diagramm für höhere Temperaturen berechnet [19,49]	21
Abbildung 2-12: Ablaufschema der Wasserstoffreduktion [51]	23
Abbildung 3-1: Fließschema mit Kennzahlen für die HPSR-Anlage berechnet durch Badr [20]	30

Abbildung 3-2: Fließschema mit Kennzahlen für die HPSR-Anlage berechnet durch Plaul [19].....	31
Abbildung 3-3: Einfluss des H ₂ mErz – Verhältnis auf die FeO-Verschlackung, den Gasausnutzungsgrad und das Eisenausbringen [20].....	35
Abbildung 3-4: Schlackenmenge und FeO Gehalt in Abhängigkeit der Basizität B ₄ [19]..	36
Abbildung 4-1: Schematische Darstellung der HPSR-Pilotanlage	41
Abbildung 4-2: Grafische Darstellung des 1 tErzh Berechnungsmodelles mit einzelnen Strömen	44
Abbildung 4-3: Ausschnitt mit den einzelnen Schritten des Macros.....	45
Abbildung 4-4: Schematische Darstellung der HPSR-Massenproduktionsanlage.....	46
Abbildung 4-5: Grafische Darstellung des 150 th Berechnungsmodelles mit einzelnen Strömen	52
Abbildung 4-6: Quellcode der 150 th Massenproduktionsanlage.....	53
Abbildung 4-7: Fließschema mit Kennzahlen für die industrielle HPSR-Anlage berechnet durch Zarl [21].....	58
Abbildung 4-8: Fließschema mit Kennzahlen für die HPSR-Pilotanlage berechnet durch Zarl [21].....	59
Abbildung 5-1: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.1: Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der 1 th Anlage	64
Abbildung 5-2: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.2: Variation der Zuschlagsmenge der 1 th Anlage	66
Abbildung 5-3: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 2: Variation der Zuschlagsmenge der 1 th Anlage	68
Abbildung 5-4: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 3.1: Variation der Abgastemperatur der 1 th HPSR-Anlage.....	71
Abbildung 5-5: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 3.2: Variation der Abstichtemperatur der 1 th HPSR-Anlage	72
Abbildung 5-6: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.1: Variation des Gas Bleeds der 150 th HPSR-Anlage	81

Abbildung 5-7: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.2: Gleichgewichtsberechnung der 150 th HPSR-Anlage.....82

Abbildung 5-8: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.3: Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der 150 th Anlage.....83

Abbildung 5-9: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.4: Variation der Zuschlagsmenge der 150 th Anlage85

Abbildung 5-10: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 2.1: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauscher II der 150 th Anlage.....88

Abbildung 5-11: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 2.2: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauscher I der 150 th Anlage.....89

Abbildung 5-12: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 3.1: Variation der Abgastemperatur der 150 th Anlage91

Abbildung 5-13: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 3.2: Variation der Abstichtemperatur der 150 th Anlage93

Abbildung 5-14: Fließschema der 150 th Anlage mit Kennzahlen98

Abbildung 5-15: Fließschema der 1 th Anlage mit Kennzahlen99

Abbildung 5-16: Grafische Darstellung der Ergebnisse Simulation Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der 150 th Anlage mit angepasster Zuschlagsmenge..... 102

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-I: Einteilung der Eisenminerale nach chemischer Verbindungsart [16].....	7
Tabelle 2-II: Reduktionreaktionen von Eisenoxiden.....	15
Tabelle 2-III: Freie Reduktionsenthalpien der wichtigsten Reduktionsmittel in der Wasserstoffplasmaschmelzreduktion [46,47].....	18
Tabelle 2-IV: Phasengrenzreaktionen nach Katayama und Sorman [58,59].....	25
Tabelle 3-I: Daten der HPSR-Anlagen von Plaul und Badr [19,20].....	37
Tabelle 3-II: Spezifische Kennzahlen der HPSR-Anlagen von Plaul und Badr [19,20].....	38
Tabelle 3-III: Zusammensetzung der Input- und Output-Materialien der Simulationen von Plaul und Badr (alle Zahlen sind in % angegeben) [19,20]	39
Tabelle 4-I: Berechnungsablauf Pilotanlage	42
Tabelle 4-II: Berechnungsablauf Massenproduktionsanlage	47
Tabelle 5-I: Versuchsplan der Pilotanlage mit gesetzten Zielen und Definition der variablen Parameter	61
Tabelle 5-II: Erz- und Zusatzstoffanalyse der Einsatzstoffe (alle Angaben in %)	62
Tabelle 5-III: Ergebnisse Simulation 1.1: Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der 1 th Anlage	63
Tabelle 5-IV: Ergebnisse Simulation 1.2: Variation Zuschlagsmenge der 1 th Anlage	65
Tabelle 5-V: Ergebnisse Simulation 2: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers der 1 th Anlage	67

Tabelle 5-VI: Ergebnisse Simulation 3.1: Variation der Abgastemperatur der 1 th HPSR-Anlage	70
Tabelle 5-VII: Ergebnisse Simulation 3.2: Variation der Abstichtemperatur der 1 th HPSR-Anlage	72
Tabelle 5-VIII: Optimierte Zusatzstoffanalyse für Simulation4 ohne Wärmetauscher und CO ₂ haltige Einsatzstoffe (alle Angaben in %)	73
Tabelle 5-IX: Ergebnisse Simulation 4: Vergleich des vollausgestatteten Anlagenlayouts mit festgelegten Standardparameter und dem Anlagenlayout ohne Vorwärm- und Vorreduktionsanlage der 1 th HPSR-Anlage.....	74
Tabelle 5-X: Ergebnisse Simulation5: Vergleich des vollausgestatteten Anlagenlayouts mit festgelegten Standardparameter und dem Anlagenlayout ohne Wärmetauscher der 1 th HPSR-Anlage.....	75
Tabelle 5-XI: Ergebnisse zur Berechnung der nötigen Rohrdurchmesser der einzelnen Zulaufleitungen jeglicher Aggregate der voll ausgestatten 1 th HPSR-Anlage (alle Einheiten in m).....	76
Tabelle 5-XII: Ergebnisse zur Berechnung der nötigen Rohrdurchmesser der einzelnen Zulaufleitungen jeglicher Aggregate der 1 th HPSR-Anlage ohne Wärmetauscher (alle Einheiten in m)	77
Tabelle 5-XIII: Versuchsplan 150 th Anlage.....	78
Tabelle 5-XIV: Ergebnisse Simulation 1.1: Variation des Gas Bleeds der 150 th Anlage..	80
Tabelle 5-XV: Ergebnisse Simulation 1.2: Gleichgewichtsberechnung des Gas Bleeds der 150 th Anlage	81
Tabelle 5-XVI: Ergebnisse Simulation 1.3: Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der 150 th Anlage	83
Tabelle 5-XVII: Ergebnisse Simulation 1.4: Variation der Zuschlagsmenge der 150 th Anlage	84
Tabelle 5-XVIII: Ergebnisse Simulation 2.1: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers II der 150 th Anlage	87
Tabelle 5-XIX: Ergebnisse Simulation 2.2: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers I der 150 th Anlage	89

Tabelle 5-XX: Ergebnisse Simulation 3.1: Variation der Abgastemperatur der 150 th Anlage	91
Tabelle 5-XXI: Ergebnisse Simulation 3.2: Variation der Abstichtemperatur der 150 th Anlage	92
Tabelle 5-XXII: Ergebnisse zur Berechnung der nötigen Rohrdurchmesser der einzelnen Zulaufleitungen jeglicher Aggregate der voll ausgestatteten 150 th HPSR-Anlage (alle Einheiten in m)	95
Tabelle 5-XXIII: Daten der verschiedenen HPSR-Anlagen im Vergleich [19,20]	96
Tabelle 5-XXIV: Spezifische Kennzahlen der verschiedenen HPSR-Anlagen im Vergleich [19,20]	97
Tabelle 5-XXV: Analyse der angepassten Zusatzstoffe (alle Angaben in %)	100
Tabelle 5-XXVI: Ergebnisse Simulation Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der 150 th Anlage mit angepasster Zuschlagsmenge	101

1 Einleitung

„Ja, wir könnten jetzt was gegen den Klimawandel tun, aber wenn wir dann in 50 Jahren feststellen würden, dass sich alle Wissenschaftler doch vertan haben und es gar keine Klimaerwärmung gibt, dann hätten wir völlig ohne Grund dafür gesorgt, dass man selbst in den Städten die Luft wieder atmen kann, dass Flüsse nicht mehr giftig sind, dass Autos weder Krach machen noch stinken und, dass wir nicht mehr abhängig sind von Diktatoren und deren Ölvorkommen. Da würden wir uns schön ärgern.“ [2]

Mit diesem satirischen Kommentar entgegnet der deutsche Autor Marc-Uwe Kling den Skeptikern des anthropogenen Klimawandels. Gleichzeitig gibt er einen Ausblick auf eine Zukunft, die angestrebt wird, durch Ziele, die sich die Vereinten Nationen durch verschiedene Abkommen gesetzt haben. Eines dieser Ziele ist es, den Anstieg der durchschnittlichen Erdtemperatur so weit wie möglich unter 2 °C zu halten. [3]

Um diese und weitere internationale Verträge erfüllen zu können, streben immer mehr Länder an, den Ausstoß von Treibhausgasen und hier vor allem CO₂ zu verringern bzw. zu minimieren. Im Kyoto-Protokoll ist festgehalten, dass die Emission an Kohlenstoffdioxid von 1990 bis zum Jahr 2050 um 80 % verringert werden soll. Seit 2019 wurden die Ziele nochmals erhöht. Als Ziel hierbei ist eine Klimaneutralität vorgegeben. Dabei muss ein Gleichgewicht der CO₂-Emissionen und der Aufnahme von Kohlenstoff aus der Atmosphäre in Kohlenstoffsenken hergestellt werden. Die jetzigen Vorgehensweisen sehen vor, diese Emissionen durch eine Steigerung der Effizienz der Prozesse zu erreichen, oder eine Substitution kohlenstoffbasierter Energiequellen. [1,4]

Stahl wird für moderne Volkswirtschaften als unverzichtbar angesehen. Es ist anzunehmen, dass die weltweite Nachfrage zunehmen wird, um den steigenden sozialen und

wirtschaftlichen Wohlstandsbedarf zu decken. Dieser Sektor wird vor enorme Herausforderungen gestellt, da er versucht, einen sowohl nachhaltigen als auch einen gleichzeitig wettbewerbsfähigen Weg einzuschlagen. Mit Stand 2019 ist dieser Wirtschaftszweig für etwa 8 % des weltweiten Energiebedarfes und 7 % der CO₂-Emissionen des Energiesektors (einschließlich Prozess Emissionen) verantwortlich. Der größte Teil der erzeugten Menge an CO₂ in der Stahlindustrie fällt bei der Reduktion von Eisenerz durch Kohlenstoff im Hochofen an. Die weltweite Emission dieser Route betrug im Jahr 2019 rund 3,1 Gt CO₂, jene des Elektrolichtbogenofens nur 0,5 Gt CO₂. Zusätzlich zu erwähnen, dass der Reifegrad der konventionellen Hochofen-LD-Konverter-Route eine Steigerung der Effizienz kaum mehr zulässt. Dadurch ist eine weitere Reduzierung der CO₂-Emissionen hier nur noch in einem geringen Ausmaß möglich. [5]

In dieser Arbeit soll der Herstellungsprozess mittels Hydrogen Plasma Smelting Reactor und dessen Simulation nähergebracht werden. Aufgrund des Einsatzes von Wasserstoff als Reduktionsmittel kann der CO₂-Ausstoß deutlich verringert werden. Dieser wird im Prozess direkt mittels Einsatzstoffe und der Kohlenstoffelektrode erzeugt und indirekt durch die Wasserstofferzeugung und den Strombedarf. Im ersten Teil sollen die Grundlagen zur thermodynamischen Simulation beschrieben werden. Besonderes Augenmerk liegt dabei auf den Vorteilen im Reduktionsprozess verschiedener Wasserstoffspezies. Anschließend werden bereits vorhandene, statisch berechnete Modelle näher beschrieben. Kern dieser Arbeit ist die Erstellung eines dynamischen Modelles zur Massen- und Energiebilanz einer HPSR-Anlage mit neuem Anlagenlayout. Dabei werden Anlagen verschiedener Erzeinsatzmengen genauer betrachtet und miteinander verglichen. Des Weiteren sollen die Vor- und Nachteile der Variation verschiedener Parameter näher untersucht werden.

2 Thermodynamische Grundlagen der Schmelzreduktion

In diesem Kapitel werden die thermodynamischen Grundlagen zur Reduktion von Eisenerzen mittels Wasserstoff und Wasserstoff-Plasma näher beschrieben. Dies soll auf Basis der Betrachtung des Richardson-Ellingham- und Baur-Glässner Diagrammes stattfinden.

Durch die komplexen Wechselwirkungen der Einsatzstoffe ist es schwierig, ein System auf Basis kinetischer Ansätze aufzubauen. Die Beschreibung der chemischen Reaktionen auf der Grundlage von kinetischen Daten benötigt eine sehr breite Datenbank welche detaillierte Kenntnisse der Stofftransporte sowie Diffusion- und Konvektionsvorgänge benötigt. Eine Datenbank, die alle Prozesse genau abdeckt existiert jedoch noch nicht. Die thermodynamische Modellierung auf der Basis von Gleichgewichtsbedingungen bzw. der Gibbs-Enthalpie-Minimierung stellt eine gute Näherungsmethodik der komplexen Vorgänge dar. Hierfür ist ebenfalls eine breite Datenbasis von Nöten, besonders die Beschreibung von Mischphasen mit nichtidealen Wechselwirkungen. Dadurch dass einige auftretende Prozesse nicht bis zum Gleichgewichtsumsatz ablaufen, ergeben sich auch hier Schwierigkeiten. Hierfür werden oft Annahmen und Randbedingungen der Simulation getroffen, ohne die eine vollständige Auswertung nicht möglich ist. [6]

2.1 Grundlagen der thermodynamischen Modellierung

Grundlagen des chemischen Gleichgewichts sind in einigen Standardwerken wie Atkins und Kazmaier [7,8] ausführlich behandelt. An dieser Stelle soll hier nur ein kleiner Überblick gegeben werden. [7,8]

Ein System befindet sich im Gleichgewicht, wenn die freie Gibbs'sche Enthalpie ΔG^ϕ bzw. die freie Enthalpie des Systems ein Minimum erreicht hat. Hierfür gibt es grundsätzlich zwei Herangehensweisen, um auf die Zusammensetzung der Reaktionsmischung im Gleichgewicht zu schließen. Für stöchiometrische Reaktionen erfolgt die Berechnung der Zusammensetzung bei bekanntem Druck und Temperatur unter Anwendung des Massenwirkungsgesetzes. Die Zusammensetzung einer Reaktionsmischung wird danach anhand von Tabellenwerken wie von Barin [9] berechnet. Während der Betrachtung komplexer Systeme müssen entsprechende voneinander unabhängige Reaktionsgleichungen untersucht werden. Mit Hilfe des Massenwirkungsgesetzes und der Einhaltung der Massenbilanz ist eine Vorhersage der Zusammensetzung dieser Reaktionen möglich. Diese Methode bringt den Vorteil, durch Vorgabe von Temperatur-Annäherungen einzelner Reaktionen die Kinetik und den Stofftransport dem Gleichgewichtsumsatz anpassen zu können. Ein wesentlicher Nachteil ist jedoch, dass jede unabhängige Reaktionsgleichung bekannt sein muss. Bei steigender Anzahl der Komponenten und der damit verbundenen Komplexität sind die Gleichungssysteme praktisch nicht mehr lösbar. Dies führt zu Einschränkungen dieser Methode. [10]

Aufgrund dieser Tatsache wird für immer komplexer werdende Systeme mit mehreren Phasen und Komponenten die Gleichgewichtszusammensetzung durch die Minimierung der Gibbs-Enthalpie berechnet. Diese setzt sich aus der Summe der Gibbs-Enthalpie aller Phasen zusammen. Die molare Gibbs-Enthalpie einer einzelnen stöchiometrischen Phase wie z.B.: Graphit ist nur von der Temperatur T und dem Druck p abhängig. Bei mehreren Komponenten und unterschiedlichen Phasen ist die molare Gibbs-Enthalpie dG bei konstantem Druck p und konstanter Temperatur T zusätzlich noch von der Zusammensetzung der Mischphase bzw. den Stoffmengen n_i der Phasenkomponenten abhängig. Nach Czeslik [11] ist dies durch die Gleichungen (2-1) bis (2-3) beschreibbar. Der erste Teil der Herleitung stellt hierbei die allgemeine Definition der freien Enthalpie dar. Der nächste Schritt ist Gleichung (2-2), welcher die Notation als vollständiges Differential wiedergibt. Zuletzt wird die Fundamentalgleichung der freien Enthalpie für ein Stoffgemisch angegeben in Gleichung (2-3). [11]

$$G = H - T \cdot S \quad (2-1)$$

$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p, n_i} dT + \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T, n_i} dp + \sum_{i=1}^k \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, p, n_j \neq n_i} dn_i \quad (2-2)$$

$$dG = -S \cdot dT + V \cdot dp + \sum_{i=1}^k \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, p, n_j \neq n_i} dn_i \quad (2-3)$$

Über diese Gleichung (2-1) lässt sich nun das chemische Potential μ_i der Stoffkomponente i in einem komplexen System definieren mit $\mu_i = \frac{\partial G}{\partial n_i}$. Bei idealen Mischungen ist die Gibbs-Enthalpie nur abhängig von den reinen Komponenten und der Wechselwirkung der Komponenten untereinander. Bei realen Bedingungen hingegen können Abweichungen vom Idealverhalten vorkommen wie z.B.: Mischungslücken oder Mischungsenthalpie. [6]

Die thermodynamischen Daten zur Berechnung der Gibbs-Enthalpie sind in Datenbanken hinterlegt. Unter anderem sind die dazugehörige Standardenthalpie und die Standardentropie der reinen Phasenkomponenten enthalten ($T = 25 \text{ °C}$ und $p = 1 \text{ bar}$ gelten als Standardbedingungen). Um die Temperaturabhängigkeit zu Berücksichtigung ist die Wärmekapazität in Abhängigkeit der Temperatur bei konstantem Druck auch gespeichert. Über die Gibbs-Helmholtz-Gleichung sind Gibbs-Enthalpie, Enthalpie und die Entropie miteinander verbunden. Durch die verschiedenen Datenbanken ist es möglich, eine Beziehung der unzähligen Wechselwirkungen zwischen Rein- und Mischungsphasen vorhersagen zu können. Mithilfe von Factsage®, eines der weltweit größten voll integrierten Datenbankensysteme für chemische Thermodynamik, ist der Zugriff auf eine Vielzahl von Datenbanken für spezielle Anwendungen, wie oxidischen Phasen für Schlackenzusammensetzungen gegeben. Der Ausgangspunkt für diese Methoden ist die Definition der chemischen Potentiale aller Spezies und Phasen durch die der Systemkomponenten. Die Gibbs'sche freie Energie wird dann auf die Systemkomponenten so aufgeteilt, dass die Residuen der Massenbilanzgleichungen schrittweise angepasst werden. Für die Beschreibung und Berechnung der Wechselwirkungen in realen Mischungen kommen unterschiedliche Modelle zum Einsatz, wie z.B.:

- Assoziativmodell
- Substitutionelle Mischung
- Untergittermodell
- Quasichemisches Modell
- Zellenmodell

- Gaye Modell
- IMCC (ideal mixing of complex components)

Eine ausführlichere Zusammenstellung und Beschreibung dieser Modelle sind in Werken von Fabrichnaya und Hillert [12,13] gegeben.

Die aktuellen Gibbs-Energieminimierungsroutinen erlauben dem Benutzer eine Reihe von Möglichkeiten, die nicht-idealität des Berechnungssystems zu beschreiben. Im Allgemeinen als Form von den überschüssigen Gibbs-Energien. In **Abbildung 2-1** ist ein Flussdiagramm als Beispiel eines Lösungsweges für nicht-ideale Systeme dargestellt. Die Auflistung ist bei weitem nicht vollständig, da durch ständige Forschung und Updates die Softwarepakete erneuert werden.

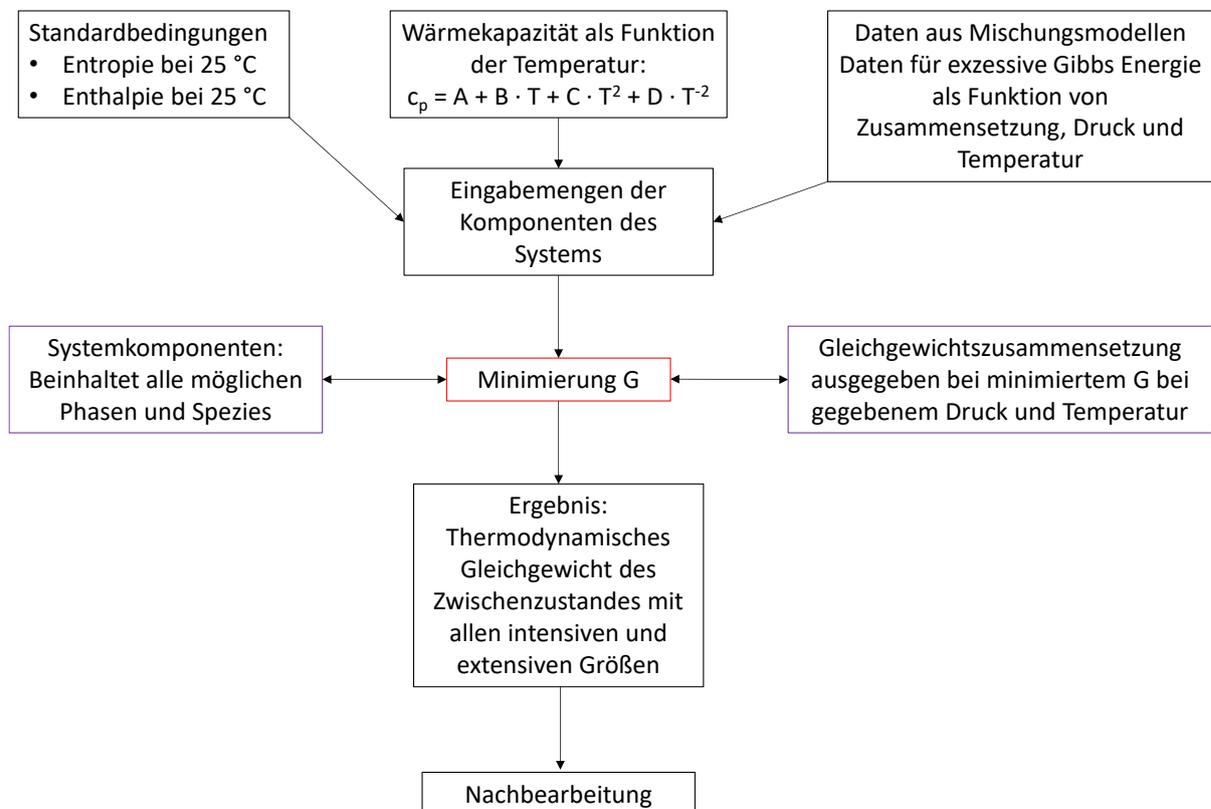


Abbildung 2-1: Mögliches Flussdiagramm zur Gibbs-Energie-Minimierungs-Berechnung

2.2 Eisenerze

In den folgenden Kapiteln werden die Systeme der Wasserstoffplasmaschmelzreduktion nähergebracht. Ausgangsprodukt hierbei stellt das Eisenerz dar. Bei den thermodynamischen

Berechnungen ist die Kenntnis der chemischen Zusammensetzung besonders wichtig. Daher soll hier ein kurzer Überblick über die verschiedenen Eisenerze gegeben werden.

Eisenerze sind Gesteine, aus denen metallisches Eisen wirtschaftlich gewonnen werden kann. Dieses ist mit 5 %, eines der am häufigsten vorkommenden Elemente der Erdkruste. Die Erze liegen in verschiedenen oxidischen, sulfidischen oder anderen Verbindung vor und sind mehr oder weniger mit der Gangart verwachsen. Dies ist jener Anteil des Gesteins, der weder verwendet noch wirtschaftlich genutzt werden kann [14,15]

Je nach ihrer chemischen Zusammensetzung können die Eisenminerale in Oxide, Hydroxide, Carbonate und Sulfide unterteilt werden. In **Tabelle 2-I** sind einige Eisenerze in der Art ihrer Verbindung, ihrem mineralogischen Namen und ihrer chemischen Formel angegeben. [16]

Tabelle 2-I: Einteilung der Eisenminerale nach chemischer Verbindungsart [16]

Chemische Verbindungsart	Mineralname	chemische Verbindung
Eisenoxid	Hämatit	Fe_2O_3
	Magnetit	Fe_3O_4
	Wüstit	FeO
Eisenhydroxide	Limonit/Goethit	FeOOH
Eisencarbonat	Siderit	Fe_2CO_3
Eisensulfid	Pyrit	FeS_2

Die weltweiten Eisenerzressourcen beliefen sich laut Berechnung von 2019 auf 170.000 Mio. metrische t bei einem Eisengehalt von 81.000 Mio. metrischen t. Im Jahr 2019 wurden weltweit rund 2.500 Mio. metrische t Eisenerz mit einem Eisengehalt (ca. 60 %) von 1.500 Mio. metrische t abgebaut. Dabei war ebenfalls eine Abnahme des verwertbaren Eisengehaltes in den Eisenerzen 2019 gegenüber 2018 ersichtlich. Australien, Brasilien, China und Indien sind hierbei als größte Eisenerzproduzenten anzusehen. Erze mit Eisengehalten über 65 % werden als hochwertige angesehen, 62-64 % als mittlere Qualität und weniger als 58 % werden als minderwertige Erze betrachtet. [17,18]

Für die praktischen Versuche von Plaul, Badr und Zarl [19–21] wurde unter anderem Carajás-Feinerz verwendet. Bei den neuesten Versuchen durch Zarl wurden Feinerze mit einer Korngröße von 25-63 μm und 63-125 μm mit einem Mischungsverhältnis von 50:50 eingesetzt.

Dieses Erz zeichnet sich durch einen hohen Eisengehalt von bis zu 66 % und geringen Verunreinigen wie Al_2O_3 und SiO_2 aus. [19–22]

2.3 Systeme der Wasserstoffplasmasmelzreduktion

In diesem Abschnitt soll ein kurzer Einblick in die Gleichgewichte Eisen, Sauerstoff und Wasserstoff nähergebracht werden.

- System Eisen-Sauerstoff

Die am häufigsten abgebauten oxidischen Eisenerze enthalten Eisenverbindungen von Hämatit (Fe_2O_3) mit einem Eisengehalt von ca. 70 wt.-%, Magnetit (Fe_3O_4) mit 72.4 wt.-%. Die Minerale Limonit ($\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$) mit einem Eisengehalt von 60 wt.-% und Siderit (Fe_2CO_3) 48 wt.-% sind wirtschaftlich gesehen nicht so wichtig. Das Zweistoffsystem Eisen-Sauerstoff bei einem Druck von 1 atm und bis zu 40 wt.-% Gewichtsprozent Sauerstoff ist in **Abbildung 2-2** zu sehen. [18]

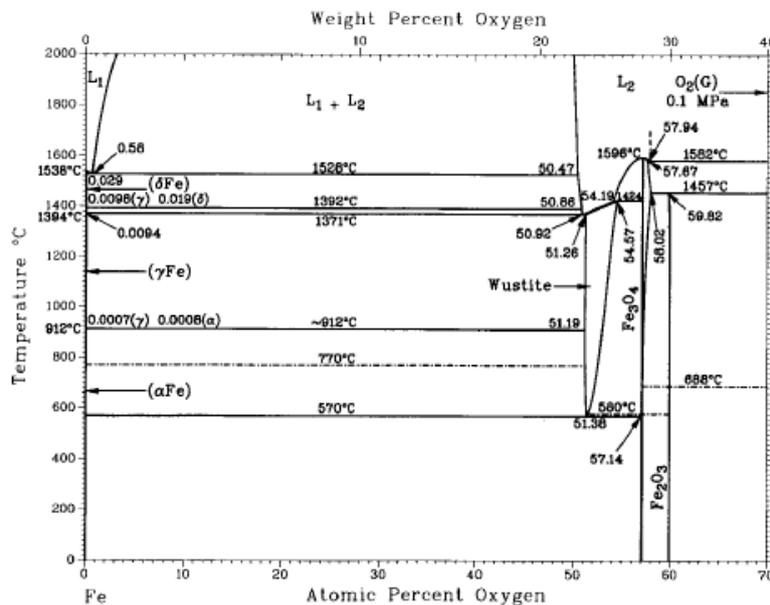


Abbildung 2-2: Komprimiertes Zweistoffsystem Eisen-Sauerstoff bei 1 atm [23]

Eisen kann zwei- oder dreiwertig vorliegen, deshalb gibt es auch unterschiedliche Oxidformen und somit auch mehrere Gleichgewichtsbereiche. Diese sind nicht nur vom Eisengehalt, sondern auch von der vorherrschenden Temperatur abhängig. Fe_2O_3 ist jenes Eisenmineral mit dem meisten gebundenen Sauerstoffgehalt und zerfällt bei 1457 °C zu Fe_3O_4 und O_2 . [24]

Magnetit (Fe_3O_4) ist als Spinell aufgebaut ($\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{FeO}$) und zeigt ab 1000°C Abweichungen von der Stöchiometrie aufgrund der Temperaturabhängigkeit der Kationenanordnung. Der Schmelzpunkt des kongruent schmelzenden Magnetits wird im Bereich von $1589\text{-}1600^\circ\text{C}$ angegeben. [23,25,26]

Wüstit (FeO) ist ein nicht-stöchiometrisches Oxid, welches aus einem defekten NaCl Gittertypen aufgebaut ist. Thermodynamisch stabil ist dieses erst ab einer Temperatur über 570°C und unter sehr niedrigen Sauerstoffpartialdrücken ($p_{\text{O}_2} = 10^{-6}\text{-}10^{-25}$ atm). Der nicht-stöchiometrische Bereich der Fe_{1-x}O Verbindung liegt je nach Temperaturbereich bei $x=0,85\text{-}0,95$. Diese Abweichung von der Stöchiometrie liegt nicht an einem Sauerstoffüberschuss, sondern an einem Eisenmangel aufgrund einer variablen Ladung des Eisens (Fe^{2+} oder Fe^{3+}). Nach thermodynamischen Berechnungen zerfällt Wüstit unter 570°C zu Eisen und Magnetit. Das Vorkommen von Wüstit bei Raumtemperatur ist auf die Trägheit dieser Reaktion zurückzuführen. Das System Eisen-Sauerstoff und seine Existenzgebiete bei verschiedenen Sauerstoffpartialdrücken ist in **Abbildung 2-3** ersichtlich. [23,27,28]

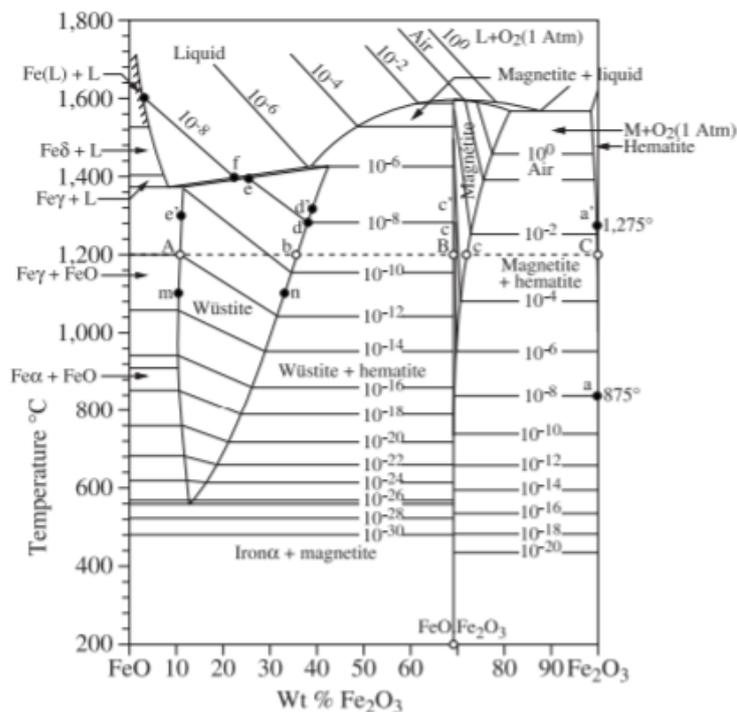


Abbildung 2-3: System FeO-Fe₂O₃ mit Sauerstoffisobaren[29]

Ein besonderer Punkt wird durch die niedrigste Temperatur bestimmt bei der Wüstit eine thermodynamisch stabile Phase bildet. Hier werden Temperaturen von 835 K bei Sauerstoffpartialdrücken von 10^{-23} mbar, sowie neuere Bestimmungen von Barbero et al. [30] einen Wert von 825 K bei $3 \cdot 10^{-24}$ mbar angegeben. Dieser Punkt ist für die

Wasserstoffplasmaschmelzreduktion von besonderer Bedeutung. Das Vorhandensein von vielen niedrig schmelzende Eisenoxidphasen spielt bei der Ausbildung des Schmelzpool eine wichtige Rolle. Dadurch wird auch die Kinetik dieser Reaktion deutlich verbessert. [26,30]

Die Sauerstoffaufnahme in Eisenoxidschmelzen im Temperaturbereich von 1550-1750 °C erfolgt atomar über die Gleichung (2-4). Aufgrund dieser Gleichung ergibt sich, dass die Sauerstoffkonzentration im Eisen gelöst $[O]_{Fe}$ bei konstanter Temperatur T dem Sauerstoffpartialdruck p_{O_2} konstant ist. Die gelöste Menge an Sauerstoff lässt sich über Gleichungen (2-5) und (2-6) mittels der Gleichgewichtskonstante K_1 beschreiben. [31]



$$K_1 = \frac{a_{[O]_{Fe}}}{a_{O_2}^{\frac{1}{2}}} \approx \frac{[O]_{Fe}}{p_{O_2}^{\frac{1}{2}}} \quad (2-5)$$

$$\log K_1 = \frac{8240 K_1}{T} - 1,061$$

$$\log \frac{[O]_{Fe}}{p_{O_2}^{\frac{1}{2}}} = \frac{8240 K}{T} - 1,061 \quad (2-6)$$

$$\log [O]_{Fe} = \frac{1}{2} \log p_{O_2} + \frac{8240 K}{T} - 1,061$$

Die Löslichkeitsgrenze bei flüssigem Eisen- und Eisenoxidschmelzen wurde von Fischer und Schumacher et. al. [32] durch das vollständige Auflösen der Schlackenphase beim Aufheizvorgang und dem Ausfällen während des Abkühlvorganges festgesellt. Dabei konnten zwei Temperaturbereiche definiert werden laut Gleichung (2-7) der Temperaturbereich von 1508-1850°C und Gleichung (2-8) von 1850-2046 °C. [32]

$$\log [O]_{Fe} = - \frac{6629 \text{ }^\circ\text{C}}{T} + 2,939 \quad (2-7)$$

$$\log [O]_{Fe} = - \frac{9830 \text{ }^\circ\text{C}}{T} + 4,496 \quad (2-8)$$

- System Eisen-Wasserstoff

Wasserstoff wird wie Sauerstoff ebenfalls atomar gelöst und über die Gleichung (2-9). Durch das Sieverts'sche Gesetz (2-10) ist bekannt, dass die Auflösung von Wasserstoff in

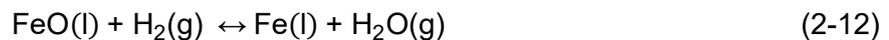
geschmolzenem Reineisen $[H]_{Fe}$ proportional der Wurzel des Wasserstoffpartialdrucks p_{H_2} ist. Dieses Gleichgewicht ist für die Wasserstoffplasmaschmelzreduktion von großer Bedeutung. Für die Gleichgewichtskonstante K_2 gaben Weinstein M. und Elliot J. F. Gleichung (2-11) an, welche in einem Temperaturbereich von 150-1820°C gilt. [33]



$$[H]_{Fe} = K_2 \cdot \sqrt{p_{H_2}} \quad (2-10)$$

$$\log[H]_{Fe} = - \frac{1910 K}{T} - 1,58 \quad (2-11)$$

Für das Gleichgewicht von Wasserstoff H_2 mit flüssigem Eisenoxid $FeO(l)$ und Wasserdampf H_2O mit flüssigem Eisen $Fe(l)$ wurden für die Berechnung der Gleichgewichtskonstante K die Partialdrücke von Wasserstoff p_{H_2} und Wasserdampf p_{H_2O} herangezogen. Die zugrundeliegende Reaktionsgleichung sowie die nötigen Umformungen für die Berechnung von K_3 ist durch die Gleichungen (2-12) bis (2-14) angegeben. [34]



$$K_3 = \frac{\sqrt{p_{H_2O}}}{\sqrt{p_{H_2}}} \quad (2-13)$$

$$\log K_3 = \frac{910 K}{T} - 0,632 \quad (2-14)$$

Die Wasserstofflöslichkeit in reinem Eisen ist in **Abbildung 2-4** dargestellt. Es ist ersichtlich, dass die Löslichkeit mit steigender Temperatur zunimmt. Hierbei sind ebenfalls deutliche Sprünge sowohl bei Phasenumwandlungen als auch dem Schmelzpunkt erkennbar. Bei niedrigen Temperaturen im kubisch raumzentrierten α -Eisen und bei hohen Temperaturbereichen im δ -Eisen sind die Sprünge erklärbar durch die Tatsache, dass der Wasserstoff interstitiell gelöst ist. Somit ist H_2 in diesen Kristallgefügen schlechter löslich als im kubisch flächenzentriertem γ -Eisen. Aufgrund der Zerstörung der Fernordnung beim Übergang vom festen zum flüssigen Eisen, wird die Wasserstoffaufnahme drastisch erhöht. Grund hierfür ist die Vergrößerung der Lücken im Bereich der Nahordnung. [35,36]

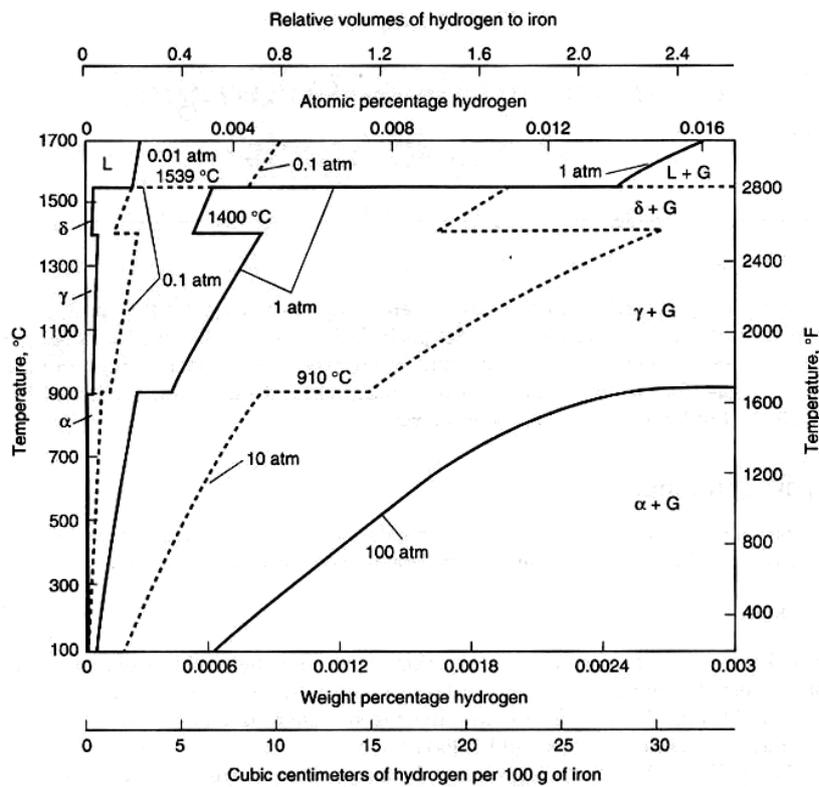


Abbildung 2-4: Löslichkeit von Wasserstoff in Eisen in Abhängigkeit von Temperatur und Druck[35]

- System Eisen-Sauerstoff-Wasserstoff

Die Löslichkeit von Wasserstoff $[H]_{Fe}$ und Sauerstoff $[O]_{Fe}$ in Stahlschmelzen ist über das Gleichgewicht der beiden Stoffe in Lösung, sowie dem Wasserdampfdruck über der Stahlschmelze bestimmt. Bei der Reduktion, dem Sauerstoffabbau in der Schmelze, kann es zu einer Erhöhung des gelösten Wasserstoffes kommen. Dieses Phänomen wird bei beruhigten Schmelzen während des Gießprozesses festgestellt, da das System weit entfernt von einem thermodynamischen Gleichgewicht ist. [37]

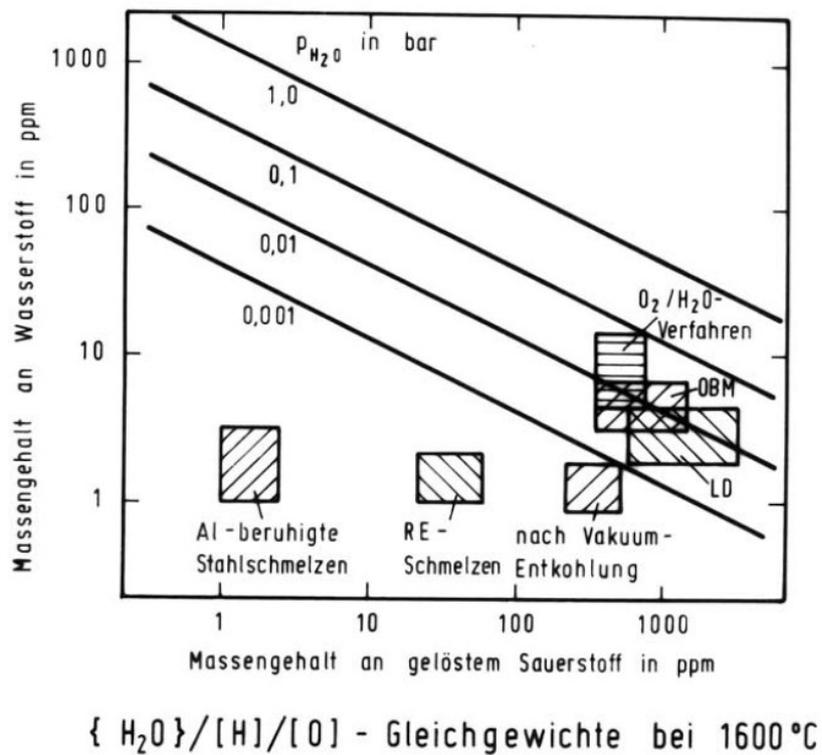


Abbildung 2-5: Gleichgewicht an gelösten Wasserstoff und gelöstem Sauerstoff in Stahlschmelzen bei 1600 °C [37]

Bei Wasserstoffplasma-schmelzreduktionsversuchen wurde festgestellt, dass die Eisenschmelze nach dem Reduktionsvorgang vollständig mit Sauerstoff gesättigt ist. Dabei wurden Werte von 1244 ppm [O] und 1296 ppm [O] bei Reduktionsversuchen mit einem H_2 -Gehalt von 15 % und 20 % auf dem Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie auf der Montanuniversität Leoben gemessen. Erst bei höheren Reduktionsgraden konnten Gesamtsauerstoffgehalte von 270-532 ppm im Metall erreicht werden. In der Theorie gibt es auch ein Gleichgewichtssystem nur mit gelöstem Sauerstoff und Wasserstoff. In den hier beschriebenen Ausführungen hätte dies allerdings keinen Mehrwert, da H_2O als Produkt immer vorhanden ist. Bei den Umsetzungen des Wasserstoffes spielt dieses Gleichgewicht jedoch eine Rolle. [38]

2.4 Reduktion von Eisenerzen

In diesem Kapitel wird die pyrometallurgische Reduktion näher betrachtet. Diese Reduktionsvorgänge umfassen jene Reaktionen, welche bei erhöhten bzw. hohen Temperaturen stattfinden. Während des Vorganges können sowohl die Ausgangsstoffe,

Zwischenprodukte und Endprodukte sowohl in fester, flüssiger und auch in gasförmiger Form vorkommen, anders als bei der Direktreduktion, wo keine Schmelzphase während des Reduktionsprozesses auftritt. [39]

Damit eine Reduktionsreaktion selbständig ablaufen kann, muss die freie Reduktionsenthalpie $\Delta G_{\text{Reduktion}}$ des Reduktionsschrittes negativ sein. In Gleichung (2-15) ist eine allgemeine chemische Reaktion angeführt, anhand welcher die Berechnung und Bestimmung nähergebracht werden soll. [40]



Die freie Standard-Reaktionsenthalpie ΔG^\ominus dieser Reaktion lässt sich über die einzelnen Multiplikatoren v_i und der freien Standard-Reaktionsenthalpie ΔG_i^\ominus der einzelnen Spezies laut Gleichung (2-16) berechnen. [40]

$$\Delta G^\ominus = v_A \Delta G_A^\ominus + v_B \Delta G_B^\ominus - v_C \Delta G_C^\ominus - v_D \Delta G_D^\ominus \quad (2-16)$$

Die freie Standard-Reaktionsenthalpie ist dabei die Änderung der freien Enthalpie beim Übergang der reinen Edukte in reine Produkte, wobei sich bei der Umwandlung alle Spezies in ihren Standardzuständen befinden. Da Reduktionsvorgänge in der Eisenmetallurgie nie bei Standardbedingungen stattfinden und sich nur einem Gleichgewicht annähern muss diese Gleichung um die Gleichgewichtskonstante K , die absolute Temperatur T und die ideale Gaskonstante R zu Gleichung (2-17) erweitert werden. [40]

$$\Delta G = \Delta G^\ominus + R \cdot T \cdot \ln K \quad (2-17)$$

Für ΔG ergeben sich nun folgende Möglichkeiten:

- Fall 1: $\Delta G > 0 \rightarrow$ Reaktion findet nicht spontan statt
- Fall 2: $\Delta G < 0 \rightarrow$ Reaktion findet spontan statt
- Fall 3: $\Delta G = 0 \rightarrow$ Reaktion befindet sich im Gleichgewicht

Für den Fall 3 kann somit Gleichung (2-18) angegeben werden.

$$\Delta G^\ominus = - R \cdot T \cdot \ln K \quad (2-18)$$

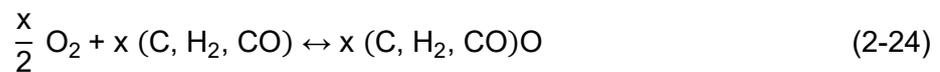
Für die Reduktion von Eisenoxiden kann für Stoffe in der Gasphase näherungsweise die Aktivität a_i durch den Partialdruck p_i ersetzt werden, wodurch sich Gleichung (2-19) ergibt.

$$K = \frac{a_C^{v_C} \cdot a_D^{v_D}}{a_A^{v_A} \cdot a_B^{v_B}} = \frac{p_C^{v_C} \cdot p_D^{v_D}}{p_A^{v_A} \cdot p_B^{v_B}} \quad (2-19)$$

In **Tabelle 2-II** sind Gleichungen (2-20) bis (2-23) angegeben, welche die wichtigsten Reduktionreaktionen von verschiedenen Eisenoxiden darstellen. Für den Abbau des

freigewordenen Sauerstoffes mit verschiedenen Reduktionsmitteln kann die Gleichung (2-24) allgemein angegeben werden.

Tabelle 2-II: Reduktionreaktionen von Eisenoxiden



Diese Reaktionen und weitere Metall/Metalloxid-Transformationen sind im sogenannten Ellingham-Richardson-Diagramm dargestellt. Durch die Zusammenfassung dieser Linien können für pyrometallurgische Reduktionsverfahren bereits wichtige Aussagen und Kenntnisse gewonnen werden.

2.4.1 Ellingham-Richardson-Diagramm

Das Ellingham-Richardson Diagramm benutzt die Gleichungen (2-16) und (2-17) und kombiniert diese. Hierbei werden die Dissoziationsreaktion von Metalloxiden über den Sauerstoffpartialdruck p_{O_2} angegeben. Zur Vereinfachung wird jede Oxidation der Metalle auf folgende Bedingungen festgelegt:

- Die Oxidation findet mit einem mol Sauerstoff statt
- Während der Oxidation herrscht ein konstanter Druck
- Die Aktivitäten der Feststoffe (Metall, Oxide) werden mit eins festgelegt

Somit kann zu Gleichung (2-25) vereinfacht zusammenfassen. Diese kann auch mit der Reaktionsenthalpie ΔH^\ominus , der Reaktionsentropie ΔS^\ominus und der Temperatur T angegeben werden. In **Abbildung 2-6** ist das Richardson-Ellingham Diagramm für ausgewählte Metalle und deren Oxide ersichtlich.

$$\Delta G^\ominus = -R \cdot T \cdot \ln K = R T \cdot \ln p_{\text{O}_2} = \Delta H^\ominus - \Delta S^\ominus \cdot T \quad (2-25)$$

Die Standard-Reaktionsenthalpie zur Bildung der Oxide ist für jedes Metall positiv. Je höher die Affinität zur Bildung eines Metalloxides besteht, desto niedriger liegt die Linie jenes Metalls im unteren Teil des Diagrammes, siehe **Abbildung 2-6**. Mithilfe des Richardson-Ellingham

Diagrammes kann somit festgestellt werden, ob ein Metalloxid oder das Metall unter bestimmten Bedingungen stabiler ist.

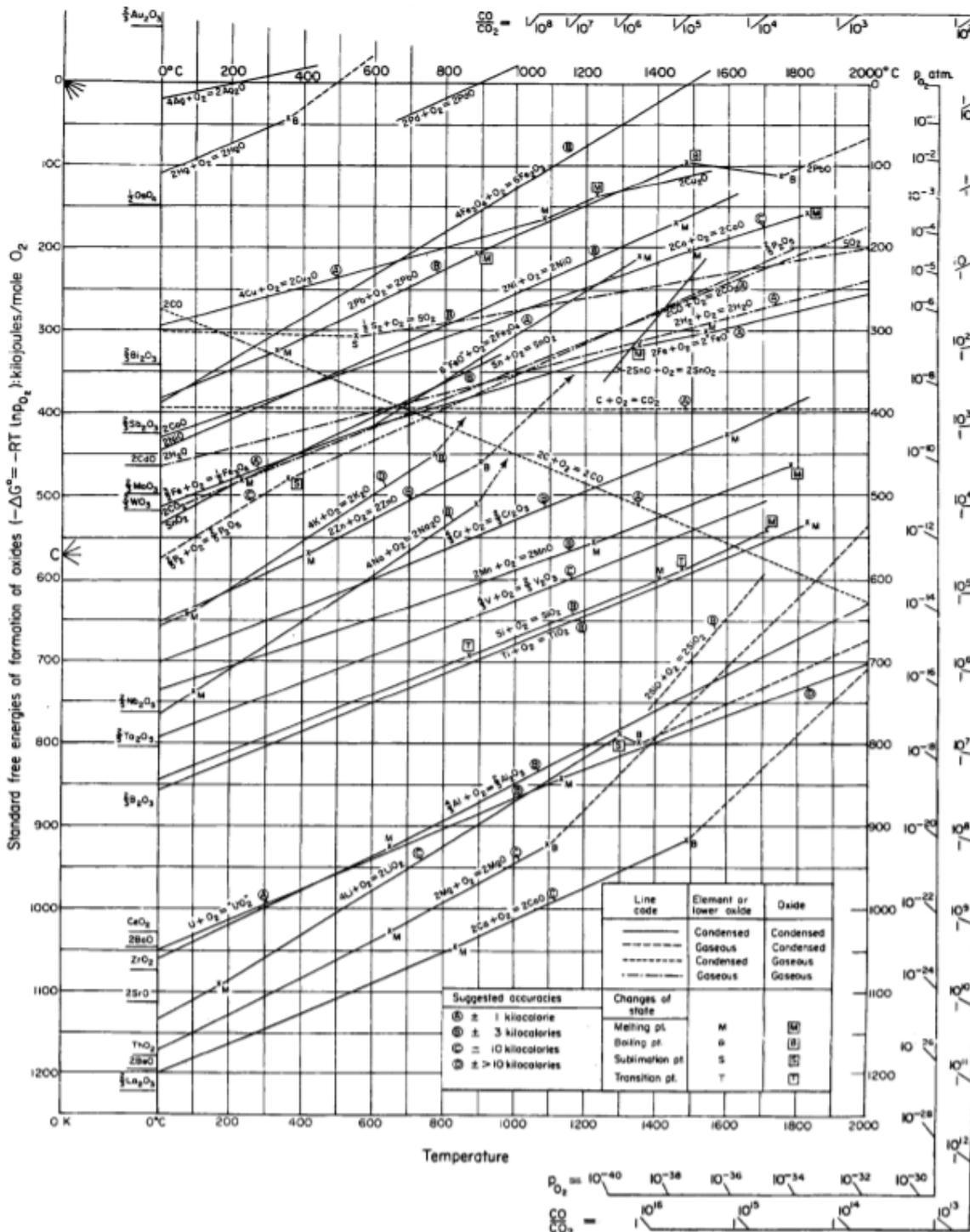


Abbildung 2-6: Richardson-Ellingham-Diagramm der Oxide [41]

In **Abbildung 2-7** sind die Stabilitätsbereiche von Hämatit, Magnetit, Wüstit und Eisen nochmals hervorgehoben bei diversen Sauerstoffpartialdrücken und Temperaturen. Wie bereits in **Kapitel 2.3** erwähnt ist Wüstit erst bei höheren Temperaturen stabil.

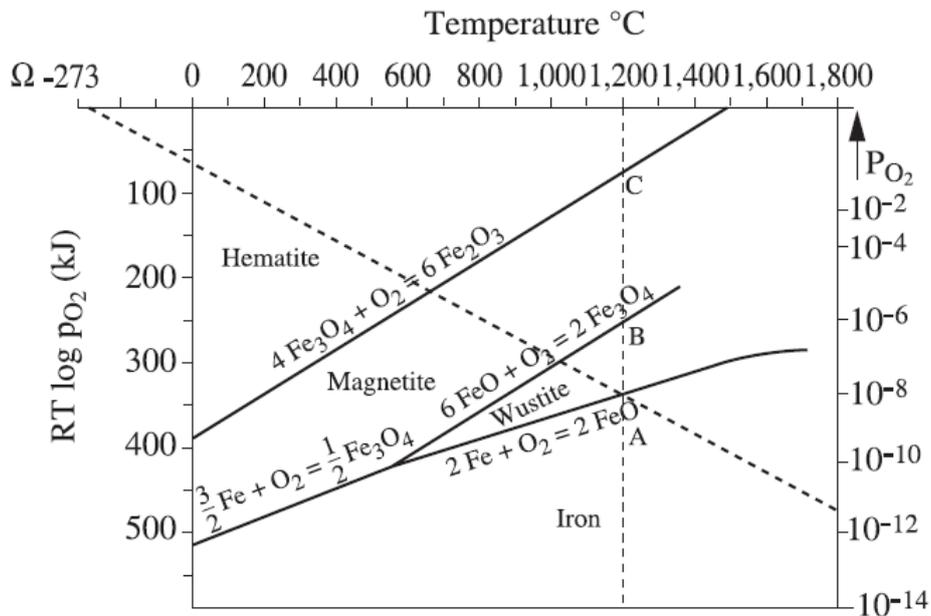


Abbildung 2-7: Richardson-Ellingham Diagramm für Metalloxide[29]

Um nun die Reduktionsvorgänge von Prozessen beurteilen zu können, müssen die beiden Linien der Reaktionspartner im Richardson-Ellingham Diagramm miteinander verglichen werden. Liegt jene eines Metalloxides oder eines Feststoffes wie Kohlenstoff unter jener des Eisenoxides, so wird dieses reduziert. Um die Reduktionskraft von atomarem und angeregtem Wasserstoff aufzeigen zu können, wurde das Richardson-Ellingham Diagramm um jene Spezies erweitert und in **Abbildung 2-9** dargestellt. Durch genauere Betrachtung der Kohlenstoff Linie $2 C + O_2 \leftrightarrow 2 CO$, der Kohlenmonoxid Linie $2 CO + O_2 \leftrightarrow 2 CO_2$ und jener von Wasserstoff $2 H_2 + O_2 \leftrightarrow 2 H_2O$ aus **Abbildung 2-6** ist zu erkennen, dass Kohlenstoff über Temperaturen von 900 °C ein größeres Reduktionspotential als Wasserstoff hat, Kohlenmonoxid jedoch nicht. Bei der Wasserstoffplasmaschmelzreduktion treten aufgrund Temperaturen über 10.000 K im inneren des Lichtbogens nicht nur der molekulare Zustand von Wasserstoff auf. Durch den hohen thermischen Energiegehalt des Plasmas, kann der Wasserstoff höhere (angeregte) Zustände erreichen. Bei ausreichendem Energie Eintrag kann der Wasserstoff auch atomisieren und im Weiteren ionisieren. [42]

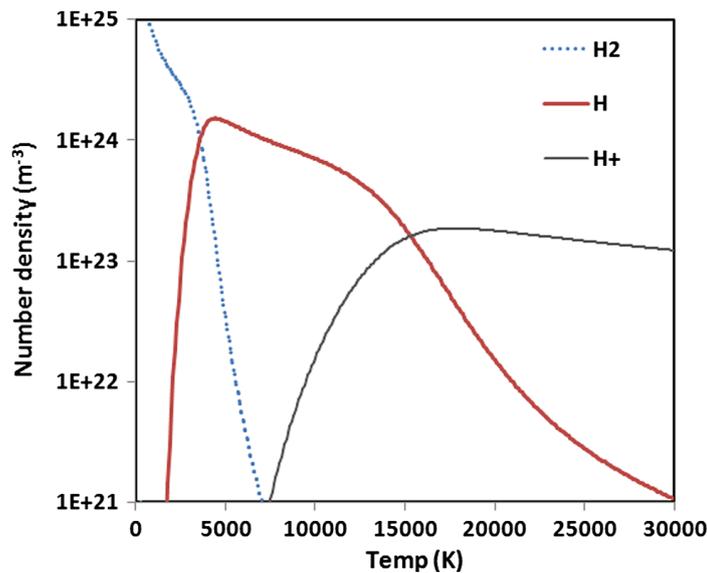
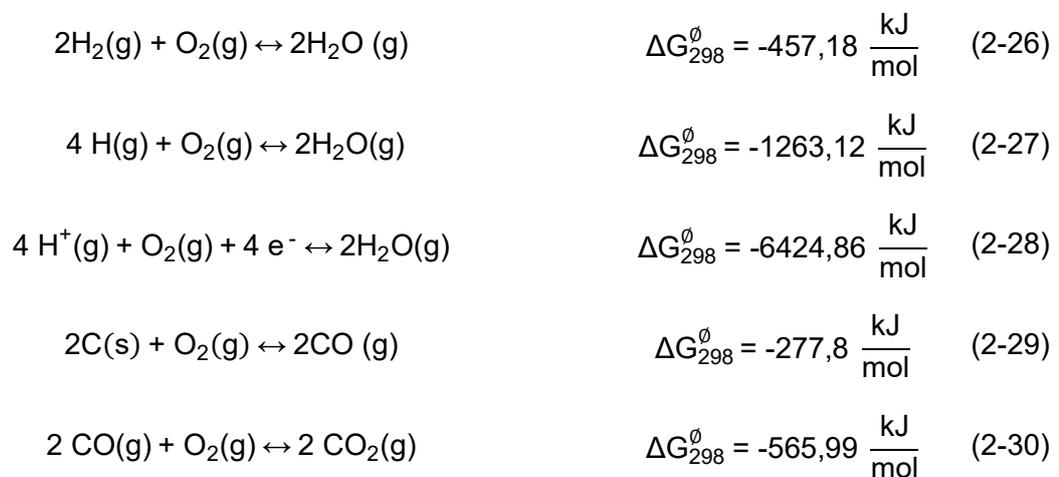


Abbildung 2-8: Temperaturabhängigkeit der verschiedenen Wasserstoff-Spezies in einem thermodynamischen Gleichgewicht bei 1 atm [43–45]

Um die große Reduktionskraft von atomaren H, und ionisierten H⁺ zu zeigen, werden diese in **Tabelle 2-III** mit den Werten der Gleichungen (2-26) bis (2-30) von Wasserstoff H₂, Kohlenmonoxid CO und Kohlenstoff C verglichen. Entscheidend hierbei ist jedoch, dass bei einem Wasserstoffplasma niemals nur eine Spezies vorliegt. Der Dissoziationsgrad und der Ionisationsgrad sind immer nur Momentaufnahmen für eine Temperatur im Lichtbogen. Durch die konzentrierte Energie ist somit nur im inneren des Brennflecks diese Temperatur möglich.

Tabelle 2-III: Freie Reduktionsenthalpien der wichtigsten Reduktionsmittel in der Wasserstoffplasmaschmelzreduktion [46,47]



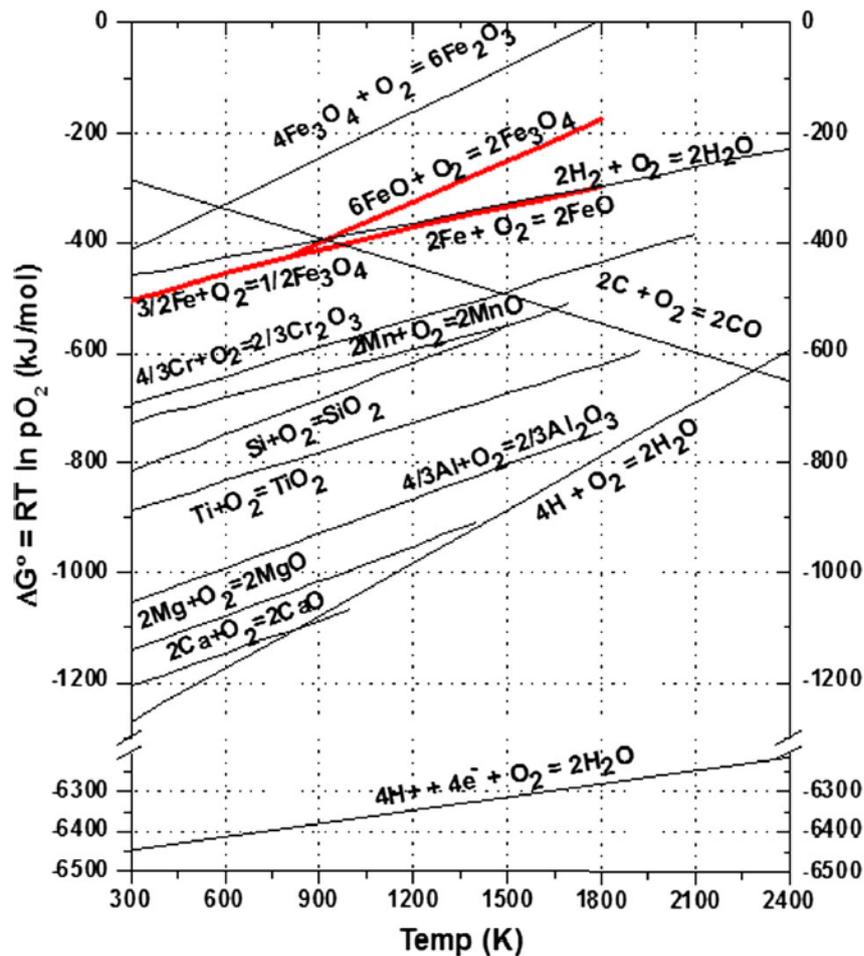


Abbildung 2-9: Erweiterung des Richardson-Ellingham Diagrammes um verschiedene Wasserstoff-Spezies [42]

Bei dieser Betrachtung ist jedoch wichtig, ein Augenmerk auf zwei Punkte zu legen. Einerseits ist die Reduktionen mit festem Kohlenstoff nicht möglich, da typische thermische Plasmen zwischen 5000-20000 K vorliegen. Daher ist die konkurrierende auf Kohlenstoff basierte Reduktion jene mit Kohlenmonoxid CO. Andererseits ist ein weiterer Einfluss auf die Reduktionsfähigkeit die Aktivität der jeweiligen Spezies. Das Sauerstoffpotential wird im Ellingham-Richardson Diagramm mit Aktivitäten des reinen Metalles und der oxidischen Form mit eins angenommen. In der Realität liegen jedoch sowohl das Metall als auch das Metalloxid in gelöster Form in einer Mischung vor. Der Einfluss der Aktivitäten auf das Sauerstoffpotential ist in **Abbildung 2-10** dargestellt. In diesem Fall ist das Sauerstoffpotential eine Geradenfunktion der Form $y = k \cdot x + d$. Hierbei ist die Variable die Temperatur, der Ordinatenabschnitt ist durch ΔH^\ominus gegeben und eine Steigung die durch ΔS^\ominus und dem Verhältnis $\frac{a_{MeO_2}}{a_{Me}}$ definiert wird. [48]

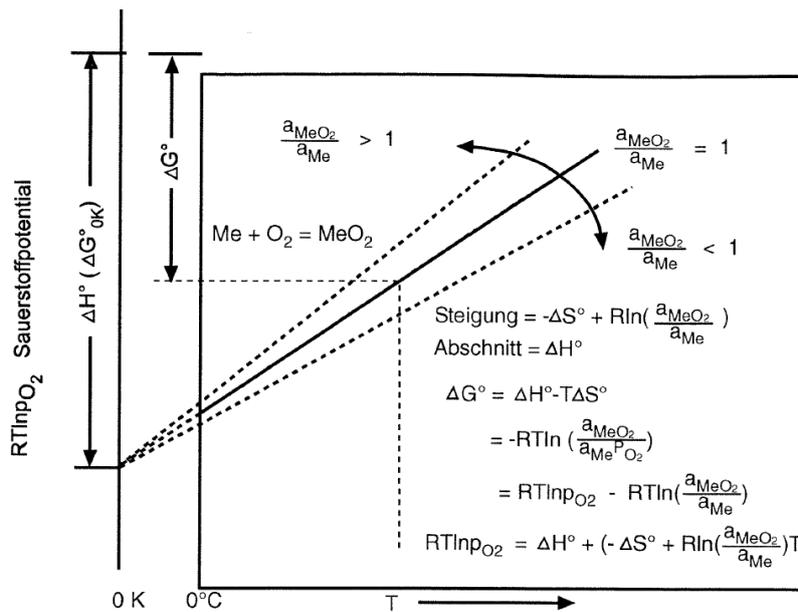


Abbildung 2-10: Einfluss der Aktivitäten auf das Sauerstoffpotential[19]

Bei Reduktionsvorgängen ist es von Vorteil, wenn das Metall nicht in reiner, sondern in verdünnter Form vorliegt. Aufgrund der damit verbundenen Steigung der Gerade, ergibt sich ein höherer Potentialunterschied zwischen dem Reduktionsmittel und dem Metalloxid. Bei naheliegenden Geraden wird dabei der Schnittpunkt hin zu niedrig liegenden Temperaturen verschoben. Hierfür wurde das Baur-Glässner-Diagramm entwickelt, welches speziell für die Eisenoxidreduktion mit Hilfe von Kohlenmonoxid und Wasserstoff wichtige Aussagen treffen kann.

2.4.2 Baur-Glässner-Diagramm

Im Baur-Glässner Diagramm sind die Stabilitätsbereiche der Eisenoxide in Abhängigkeit der Temperatur und den Gleichgewichten von $\frac{CO_2}{CO + CO_2}$ - und $\frac{H_2O}{H_2 + H_2O}$ - Gasmischungen dargestellt, siehe **Abbildung 2-11**.

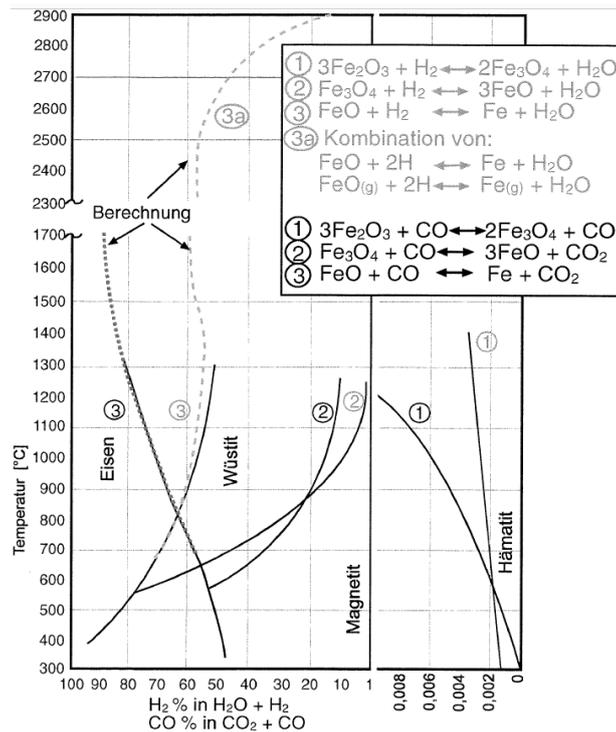


Abbildung 2-11: Baur-Glässner Diagramm für höhere Temperaturen berechnet [19,49]

Die dargestellten Gleichgewichtslinien geben in Abhängigkeit der Temperatur die nötige Gaszusammensetzung an, um das Eisenoxid in die jeweilige stabile Phase des Diagramms überzuführen. Auf der Abszisse sind die Gehalte des Reduktionsmittel H₂ und CO im Verhältnis zu den Reaktionsprodukt H₂O und CO₂ gegeben. Um die Reduktionskraft angeben zu können, wird der Gasausnutzungsgrad bzw. Gasoxidationsgrad GOD herangezogen, welcher in Gleichung (2-31) gegeben ist. Hierbei werden stets die Molenbrüche x_i der Stoffe herangezogen.

$$GOD = \frac{x_{H_2O} + x_{CO_2}}{x_{H_2} + x_{CO} + x_{H_2O} + x_{CO_2}} \quad (2-31)$$

Werden diese Gehalte auf 100 % ergänzt, kann auf den Ausnutzungsgrad des Gasmischtes rückgeschlossen werden. Da dieses Diagramm auf das Richardson-Ellingham-Diagramm aufbaut, werden auch hier die Feststoffaktivitäten mit eins angegeben. Die CO-Linie liegt bis rund 810 °C in Bezug auf die Gasausnutzung günstiger als jene von H₂. Allerdings ist auch hier erkennbar, dass die Wasserstofflinie mit steigender Temperatur (bis 1600 °C) an Reduktionspotential zunimmt. Bei 1300 °C sind bereits 52 % H₂ in einer $\frac{H_2}{H_2O}$ Gasmischung ausreichend um FeO zu Fe zu reduzieren. Bei einer $\frac{CO}{CO_2}$ - Gasmischung wären hingegen rund 83 % an CO nötig [49]

Im Temperaturbereich von 1400-2500 °C ist keine Steigerung der Gasausnutzung bei der Reduktion mit H₂ ersichtlich. Ab 2500 °C ergaben die Berechnungen eine noch größere Gasausnutzung, da die Linie weiter zu niedrigeren Gehalten an H₂O in der $\frac{H_2}{H_2 + H_2O}$ - Gasmischungen steigt. Des Weiteren ist in diesem Diagramm zu erkennen, dass bereits geringe Gehalten an Reduktionsmittel ausreichen, um Fe₂O₃ zu Fe₃O₄ zu reduzieren. Diese Instabilität bei Temperaturen über 900°C führt dabei zu sehr hohen Gasausnutzungsgraden. Die Linien der Gasmischungen geben ebenfalls Auskunft über die Reaktionsenthalpie. Liegt der Stabilitätsbereich einer Phase bei steigender Temperatur bei niedrigeren $\frac{CO}{CO + CO_2}$ - und $\frac{H_2}{H_2 + H_2O}$ - Gehalten, so ist diese Reaktion endotherm, da sie bereits bei geringeren Anteilen von Reduktionsmittel stabil ist (siehe die Reduktion von FeO zu Fe mit einem $\frac{H_2}{H_2O}$ -Gasgemisch). Diese bereits erwähnten Diagramme beruhen stets auf dem thermodynamischen Gleichgewicht und treffen somit keine Aussage darüber, wie lange diese Reaktionen benötigen. Für die Praxis ist wichtig, die Reaktionsabläufe und deren Geschwindigkeiten zu kennen. Durch dieses Wissen können Reaktionen positiv beeinflusst werden oder auch verhindert werden aufgrund kinetischer Hemmung.

- Kinetik der Schmelzreduktion mit Wasserstoff

Zusätzlich zu der Energiebilanz und des Vorzeichens der freien Enthalpie ΔG werden noch Informationen über die Geschwindigkeit benötigt. Dies ist notwendig, um eine Aussage treffen zu können, ob diese Reaktion innerhalb eines wirtschaftlich vertretbaren Zeitfenster stattfindet, oder nicht. [7,8]

Hierbei wird zwischen homogener und heterogener Reaktionskinetik unterschieden. Bei homogener Reaktionskinetik findet eine Reaktion in einer Phase statt, wohingegen bei heterogener Reaktionskinetik mehrere Phasen am thermodynamischen System beteiligt sind. Als Reaktionskomponenten können sowohl Reaktionspartner, Reaktionsprodukte, Inertstoffe oder auch Katalysatoren dienen. [7,8]

Der Ablauf einer heterogenen Reaktion kann hierbei in folgende Teilschritte zerlegt werden, welche in **Abbildung 2-12** dargestellt werden: [50]

1. Diffusion der Edukte durch die Grenzschicht („Film“): Hier werden die Edukte aus dem Strömungskern durch den Film in oberflächennahe Gebiete des Katalysators transportiert
2. Porendiffusion: Aufgrund fehlender Strömungsverhältnisse werden die Edukte durch Diffusion durch die Pore an die Oberfläche des Katalysators transportiert
3. Adsorption der Edukte an der Oberfläche des Katalysators

4. Oberflächenreaktion
5. Desorption der Produkte von der Oberfläche des Katalysators
6. Porendiffusion der Produkte
7. Filmdiffusion der Produkte

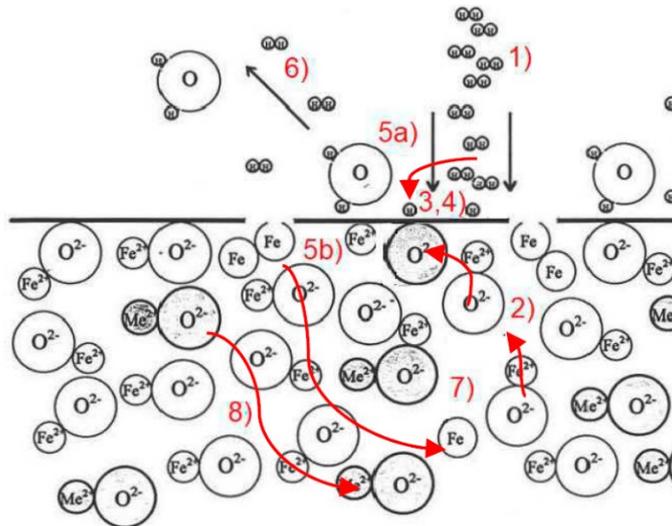


Abbildung 2-12: Ablaufschema der Wasserstoffreduktion [51]

Die Geschwindigkeit der Teilschritte 1-7 hängt sowohl von den lokalen Temperatur- und Konzentrationsunterschieden ab als auch von den Strömungsverhältnissen und physikalisch-chemischen Eigenschaften des Katalysators. Als Katalysator gilt hier das eingesetzte Erz. Bei der Reduktion mit Wasserstoff wird selten mit Katalysatoren gearbeitet. Die messbare Geschwindigkeit eines Prozesses wird stets von dem langsamsten oder der Überlagerung mehrerer ablaufenden Prozessabschnitte bestimmt. [50]

Ist die chemische Oberflächenreaktion der langsamste Teilschritt, kann die Reaktionsgeschwindigkeit v_R der Reaktion mit der Formel für homogene Reaktionen berechnet werden. Für die allgemeine Reaktionsgleichung (2-32) ist die beispielhafte Berechnung durch die Gleichung (2-33) gegeben.



$$v_R = -\frac{1}{a} \cdot \frac{d c_A}{d t} = -\frac{1}{b} \cdot \frac{d c_B}{d t} = -\frac{1}{ac} \cdot \frac{d c_C}{d t} = -\frac{1}{d} \cdot \frac{d c_D}{d t} \quad (2-33)$$

Im Allgemeinen werden empirische Ratengleichungen herangezogen für die Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit v_R , welche eine Funktion einer Konstante k und den Konzentrationsunterschieden ist, siehe Gleichung (2-34).

$$v_R = k \cdot (c_{A1} - c_{A2})^{m_1} \cdot (c_{B1} - c_{B2})^{m_2} \quad (2-34)$$

Diese empirische Gleichung wird unter Annahme folgender Aspekte aufgebaut:

- $m = m_1 + m_2$ wird als Gesamtreaktionsordnung bezeichnet.
- m_i sind oft ganzzahlig und haben nichts mit der Stöchiometrie der Reaktion zu tun
- r_v ist zeitabhängig und kann sich im Verlauf der Reaktion verändern
- die Zeitdimension ist unterschiedlich für jede Gesamtreaktionsordnung
- die einfache Form dieser empirischen Formel berücksichtigt nicht die Konzentrationsänderung der Produkte, sondern nur jener der Edukte ($c_{A1} - c_{A2}$) und ($c_{B1} - c_{B2}$)

Die Diffusionsgeschwindigkeit des Erzteilchens lässt sich mit dem ersten Fick'schen Gesetz beschreiben (Gleichung (2-35)): Die Diffusionsgeschwindigkeit ist abhängig vom Diffusionskoeffizient D , der Oberfläche des Katalysators A , der Grenzschichtdicke δ und dem Konzentrationsunterschied ($c_0 - c_1$).

$$-\frac{dc}{dt} = \frac{D}{A \cdot \delta} \cdot (c_0 - c_1) \quad (2-35)$$

- Teilschritte der Eisenreduktion mittels Wasserstoffplasma

Die Reduktion von Eisenerzen mit einem wasserstoffhaltigen Plasma stellt eine heterogene Reaktion dar. Die auftretenden Phasen hierbei sind die flüssige Oxidschmelze mit adhärerender Grenzschicht und das Wasserstoffplasma darüber. Im Einzelnen lassen sich die Teilschritte wie in **Abbildung 2-12** auf die Wasserstoffplasmareduktion wie folgt einteilen:

1. Transport des Wasserstoffes zur Oxidschmelze:

Je nach Wasserstoff-Spezies muss dieser durch die adhärerende Grenzschicht wandern, die sich über der Oxidschmelze aufgebaut hat. Je nach Zusammensetzung des eingesetzten Plasmas und Eisenerzes kann dieses aus unterschiedlichen Gasen oder Inertgasen bestehen. Bei der Reduktion von festem Eisen und flüssigem Wüstit mit Wasserstoff wurde dabei eine sehr hohe Reduktionsrate festgestellt. Im Vergleich zu Reduktionsversuchen mit festem Wüstit wurden hierbei 20-fache Reduktionsgeschwindigkeiten nachgewiesen laut Ban-Ya [52]. Weitere Untersuchungen fanden mit Gemischen aus CO und H₂ statt. Hierbei stellte sich heraus, dass die Kinetik günstig durch die höheren CO- und H₂-Gehalte beeinflusst wurden. Diese Versuche wurden bei festen Eisenerzen durchgeführt im Temperaturbereich von 700-1100 °C, ohne ein Plasma. Diese Reaktionen können daher nur am Rand des Plasmalichtbogens stattfinden, da im Kern deutlich höhere Temperaturen vorherrschen. Durch das kleinere Wasserstoffmolekül ist anzunehmen, dass dieses besser in Makro- und

Mikroporen vordrängen kann. Bei der Reduktion von Wüstit mittels CO reichen bereits kleinste Zusätze von H₂ aus, um diese Reaktionsgeschwindigkeit zu steigern. Des Weiteren hat Li Wang [53] gezeigt, dass nur ein kleiner Teil des Wasserstoffes sich tatsächlich an der Reduktion beteiligt. Ein weiterer dient als Katalysator und erhöht die Reduktionsgeschwindigkeit deutlich, da auch über die Wassergas-Shift-Reaktion wieder CO₂ zu CO reduziert wird. [52–55]

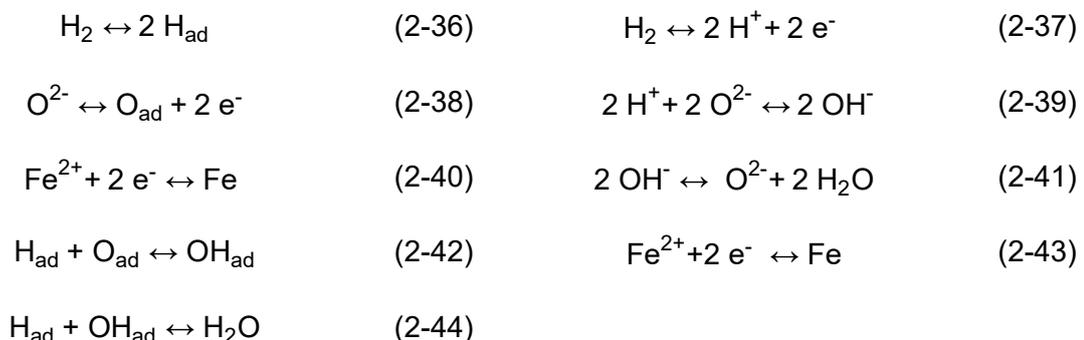
2. Transport von Eisenoxid zu der Oberfläche

An der Oxidschmelze kann sich ebenfalls eine Grenzschicht bilden, durch die Eisen- und Sauerstoffionen gelangen müssen. Diese kann flüssig sein und aus Eisenoxiden und auch Begleitoxiden bestehen, die während der Eisenoxidreduktion entstehen oder bereits im Eisenerz als Gangart vorhanden sind. Es besteht auch die Möglichkeit, dass diese Schicht fest ist aufgrund der ansteigenden Liquidustemperatur und dadurch resultierendem Ausscheiden von erstarrtem Eisen. Der Transport durch die Oxidschmelze wurde von vielen Autoren sowohl bei der Reduktion mittels H₂ als auch mittels C und CO als der langsamste Teilschritt der Reduktion angegeben. Durch den Plasmaimpuls wird in das Schmelzbad jedoch gut durchmischt und die Badbewegung steigert, wodurch die Kinetik gesteigert werden kann. [56–58]

3. Phasengrenzflächenreaktion

Die Phasengrenzflächenreaktionen werden von Katayama et. al. [58] durch Gleichungen auf der linken Seite und von Sorman et. al. [59] auf der rechten Seite in **Tabelle 2-IV** angegeben durch die Gleichungen (2-36) bis (2-44). [58,59]

Tabelle 2-IV: Phasengrenzreaktionen nach Katayama und Sorman [58,59]



Die Bildung von Eisen ist eine Teilreaktion der Phasengrenzreaktionen.

Für das Auftreten von atomarem bzw. ionisiertem Wasserstoff werden von Bäck et. al. [38] Gleichungen (2-45) bis (2-49) als plausibel angegeben.



In der Literatur finden sich nur wenige Aussagen über die Geschwindigkeit dieser Reaktionen, daher ist es schwer zu ermitteln, welche geschwindigkeitsbestimmend sind.

4. Abtransport des gebildeten H₂O

Zum tatsächlichen Abtransport des gebildeten H₂O gibt es nur wenig Hinweise in der Literatur. Nach Li et. al. [53] kann es zur Rückreduktion zu H₂ kommen durch gebildetes CO. Eine weitere Möglichkeit ist die Aufspaltung des H₂O Moleküls zu H₂ und O wodurch das gebildete H₂ in dem Plasma-Brennfleck wieder energetisch angeregt werden kann und zu H und H⁺ ionisiert werden kann. Es ist jedoch auch zu beachten, dass das gebildete H₂O den Durchgang von Wasserstoff-Spezies zu der Eisenoxidschmelze behindern kann, da dieses viel größer ist als H₂ und keine katalytischen Eigenschaften aufweist.

5. Abtransport des Fe

Aufgrund der Oberflächenspannung bildet das Eisen in flüssiger Form Tröpfchen. Diese sinken in einem Gemisch aus Schmelzbad und Feststoff aufgrund der geringen Dichte der Oxidschmelze ab. Durch das Wandern des Brennflecks kann es zu einer Abkühlung der flüssigen Schicht kommen und diese erstarren. Dadurch wird der Abtransport behindert und eine neue Grenzschicht tritt auf, welche die Gesamtreaktion beeinflussen kann. Daher ist Zeit und Badbewegung für die Koagulation der Eisentropfen ein entscheidender Faktor. Größere Tropfen sinken schneller ab und bleiben aufgrund der gespeicherten Wärme länger flüssig. [60]

6. Bildung von Begleitoxiden

Aufgrund der Zugabe von Zuschlägen oder durch die bereits vorhandene Gangart im Eisenerz kann es auch zu einer Anreicherung dieser Begleitoxide an der Oberfläche kommen. Grund hierfür ist die geringere Dichte von SiO₂, Al₂O₃, CaO und MgO. Diese können den Antransport von Eisenoxid an die Oberfläche behindern, sobald sie durch die Badbewegung aufgrund des Plasmabrennflecks nicht entfernt werden. Im Idealfall sollten die Zuschläge mit der Gangart so abgestimmt sein, dass eine niedrig viskose Schlacke, mit niedrigem Schmelzpunkt entsteht.

Des Weiteren sollte auch das umgebende Feuerfestmaterial mit der Schlacke abgestimmt sein, um möglichst wenig Wechselwirkungen hervorzurufen. [59,61,62]

7. Wärmeübertrag

Aufgrund der vorherrschenden Temperaturen bei der Wasserstoffplasmaschmelzreduktion, wird von flüssigen Phasen ausgegangen im Verlauf der Reaktion. Dadurch wird dieser Schritt nicht als geschwindigkeitsbestimmend angesehen, jedoch ist Energie für das Erwärmen, Schmelzen und Reduzieren der Oxide nötig. Die benötigte Energie wird über das Plasma zur Verfügung gestellt, welches wie bereits in **Kapitel 2.4.1** erwähnt im Zentrum Temperaturen von 5000-20000 K erreichen kann. Die Wärmeübertragung findet in einer HPSR-Anlage sowohl über Wärmeleitung, Konvektion und Strahlung statt. Die Wärmeleitung findet über das bereits erschmolzene Einsatzmaterial statt. Dieser Beitrag ist stark abhängig von der Badbewegung, welche durch das Wandern des Brennflecks abhängig ist. Durch den Gasstrom des Plasmas kommt es zur Wärmeübertragung durch Konvektion. Der Anteil der Wärmestrahlung ist von der Lichtbogenleistung abhängig.

3 Gegenüberstellung verschiedener Wasserstoffplasmaschmelzreduktion- Anlagenlayouts

Ziel einer Wasserstoffplasmaschmelzreduktion, auch HPSR-Anlage genannt, ist die direkte und kontinuierliche Erzeugung von Stahl aus günstigen Feinerzen (mit einer Korngröße von 0,1-125 mm). Wie in **Kapitel 2.2** erwähnt, sinkt die mittlere Qualität der Eisenerze. Daher ist es notwendig, diese immer höher aufzuschließen für eine ausreichende Aufkonzentration. Aus diesem Grund werden auch zukünftige Verfahren auf den Einsatz von Feinerzen ausgelegt. In der Dissertation von Plaul und Badr [19,20] wurden bereits Anlagen für die Produktion im industriellen Maßstab mittels Wasserstoffplasmaschmelzreduktion thermodynamisch berechnet. Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Erstellung eines dynamischen Berechnungsmodells, um eine Vielzahl an Parametern variabel einzustellen. Ziel dabei ist die Möglichkeit verschiedene Anlagenlayouts miteinander vergleichen zu können. Die zwei Konzepte einer HPSR-Anlage mit der das thermodynamische Berechnungsprogramm verglichen werden sollen, sind in **Abbildung 3-1** und **Abbildung 3-2** dargestellt. [19,20,63]

Jedes der Anlagenlayouts ist aus denselben Grundelementen aufgebaut. Dazu zählen:

- Materialbunker
- Vorwärm- und Vorrektionsaggregat für Eisenerz und Zuschläge
- HPSR-Anlage
- Wärmeübertrager

- Dampferzeuger
- Wasserabscheider
- Verdichter

Die Reihung bzw. die Platzierung dieser Anlagen variiert bei den verschiedenen Anlagenlayouts.

Das Feinerz und die Zuschläge werden hierbei in einem Aufwärmsschritt auf Temperaturen von 655,8-700 °C vorgewärmt. Durch die reduzierende Atmosphäre und der erhöhten Temperatur kommt es in beiden Anlagen zu einer vollständigen Reduktion des Eisenerzes zu Wüstit. Typische Zuschläge hierfür sind Schlackenbildner wie Kalk, Magnesia, Silika und Aluminiumoxid. Hauptaufgabe dieser Additive ist die Einstellung der Viskosität und des Schmelzpunktes der oxidischen Schmelze. Kalkcarbonat und Magnesiumcarbonat können hier ebenfalls eingesetzt werden, wodurch es durch einen Kalzinierungsschritt zum Abtrennen des gebundenen CO₂ kommt. Dieser Schritt ist jedoch eine Kostenfrage, da die Kalzinierung ein energieintensiver Prozess ist. Des Weiteren muss die Anlage für CO₂ haltiges Abgas ausgelegt werden. In den folgenden Tabellen ist die Bezugsgröße das Produkt der Berechnungen. Dieses wird in der Folge trotz Abwesenheit von Kohlenstoff der Einfachheit halber als Rohstahl bezeichnet (RS).[19,20,63]

GEGENÜBERSTELLUNG VERSCHIEDENER WASSERSTOFFPLASMASCHMELZREDUKTION-ANLAGENLAYOUTS

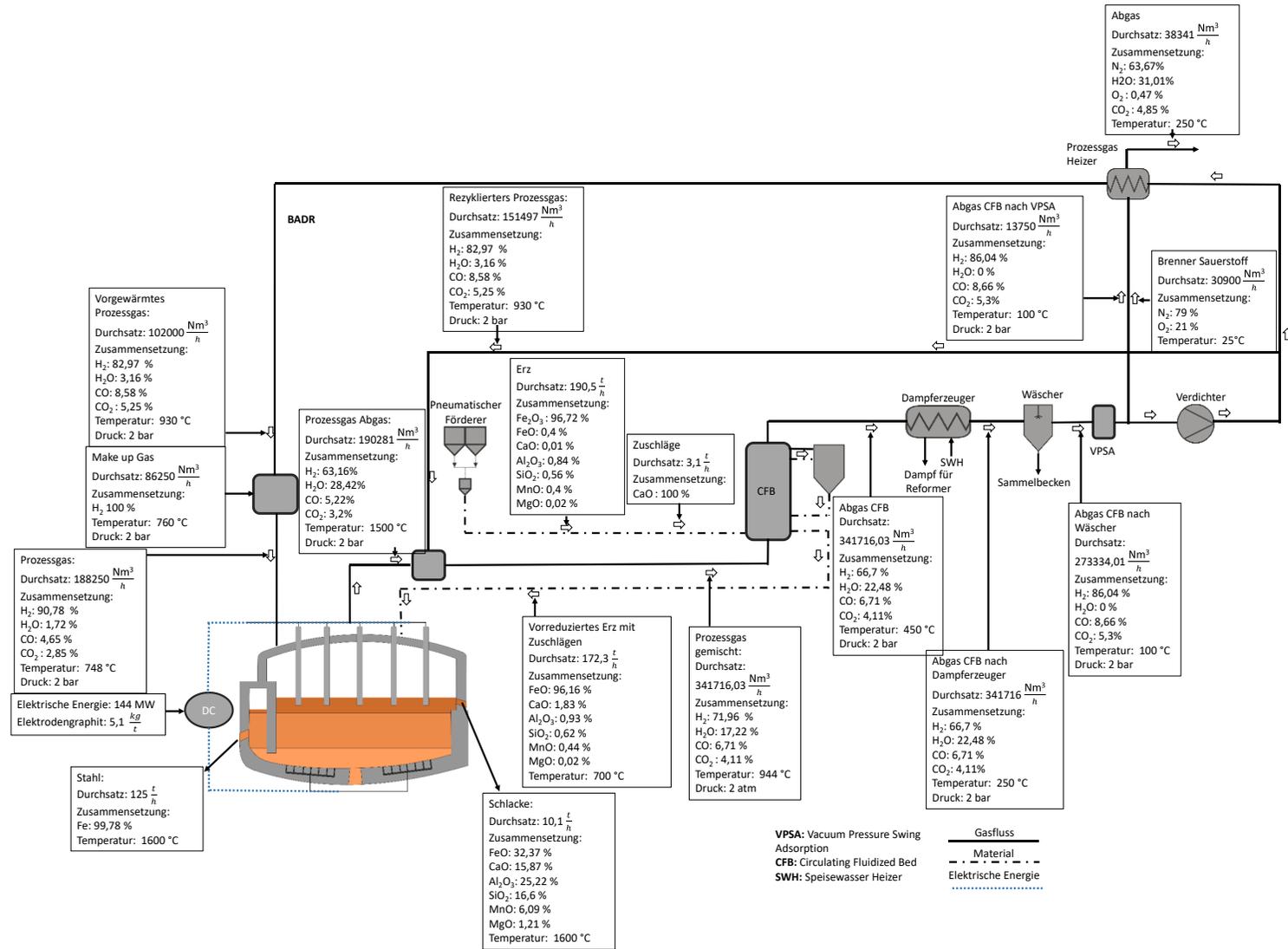


Abbildung 3-1: Fließschema mit Kennzahlen für die HPSR-Anlage berechnet durch Badr [20]

GEGENÜBERSTELLUNG VERSCHIEDENER WASSERSTOFFPLASMASCHMELZREDUKTION-ANLAGENLAYOUTS

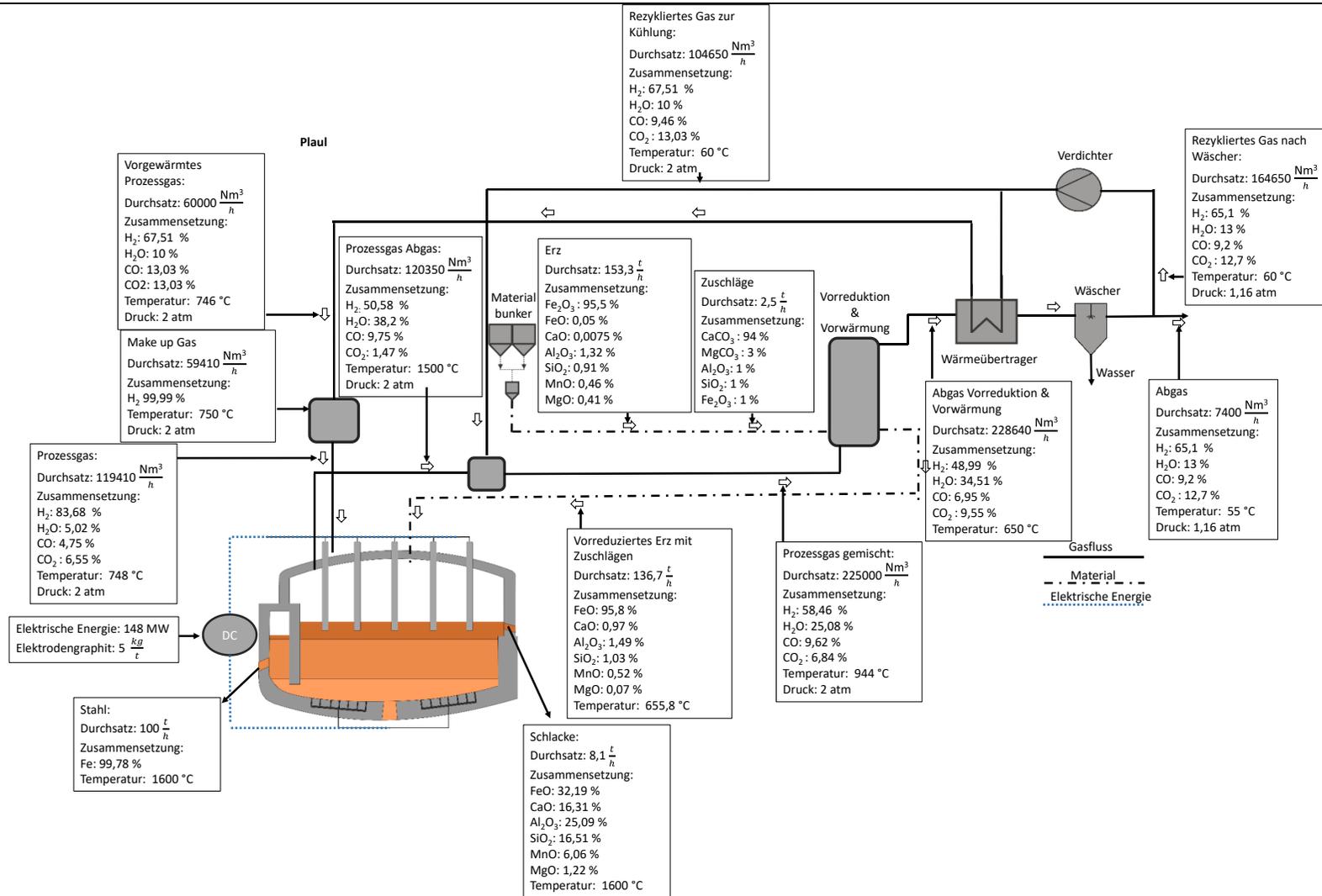


Abbildung 3-2: Fließschema mit Kennzahlen für die HPSR-Anlage berechnet durch Plaul [19]

3.1.1 Material Vorwärmung und Vorreduktion

Die erste Stufe des Prozesses ist die Vorwärmung und die Vorreduktion des Eisenerzes und der Zuschlagsstoffe, weil das Abgas der HPSR-Anlage noch einen hohen Energieinhalt und ein gewisses Reduktionspotential aufweist. Das Prozessgas hat noch einen GOD (siehe Gleichung (2-31)) von ca. 0,21 laut Badr [20] und 0,32 laut Plaul [19]. Des Weiteren wird der Oxidationsgrad des eingesetzten Gases gesteigert, da von einem Wasserstoffausnutzungsgrad von 40 % in der HPSR-Anlage ausgegangen wird. Durch die Vorreduktion und die Vorwärmung des Materials wird der Energiebedarf für den Schmelzprozess deutlich reduziert. Ein genaues Einstellen des Vorreduktionsgrades so wie es bei Direktreduktionsverfahren angestrebt wird, ist nicht erforderlich, wegen der hohen Reduktionsgeschwindigkeiten in einem Wasserstoffplasma-schmelzreaktor. Laut den Berechnungen von Plaul und Badr reicht die Reduktionskraft des Abgases aus, um den Hämatit vollständig in Wüstit umzuwandeln. Als Aggregat wird hier ein zirkulierender Wirbelschichtreaktor gewählt, da er aufgrund des besseren Feststoff/Gas - Austausch und des besseren Wärmeübertrags gegenüber einer Wirbelschicht mit stationärem Wirbelbett bessere Ergebnisse erzielt. [19,20,63]

Ein weiteres Ziel dieses Prozessschrittes ist es, das Abgas auf eine bestimmte Temperatur zu kühlen für den anschließenden Wärmetauscher. Je nach Anlagendesign kann hier vor dem Aggregat bereits ein Teil des rezyklierten Gases zurückgeführt werden, um den Wasserstoffgehalt der Gasmischung für die Vorreduktion zu erhöhen. [19,20]

3.1.2 Schmelzreaktor

Die Auswahl eines geeigneten Reaktortyps für einen großtechnischen Einsatz erfordert eine mehrjährige Entwicklungsarbeit an einer Pilotanlage. Aufgrund der verschiedenen Massen- und Energieströme sind einige Reaktortypen Teil von Forschungsarbeiten. Das Grundprinzip ist jedoch bei jedem Typ gleich. Der Schmelzraum ist aus feuerfestem Material ausgelegt und wird zusätzlich mit Wasser gekühlt. Die Energie wird elektrisch über einen Plasmalichtbogen durch Elektroden übertragen. Die Anzahl dieser kann dabei je nach Energiebedarf variieren. Je nach Reaktortyp können die Elektroden hohl ausgeführt werden, um das Einsatzmaterial direkt in den Plasmalichtbogen einführen zu können. Das Eisenerz kann auch herkömmlich durch ein zusätzliches Chargiersystem direkt in den Schmelzraum eingebracht werden. [20,57,64,65]

Beim damaligen Stand der Technik wird von Spüleinrichtungen im Badbereich abgesehen, da der Impuls des Plasmabogens groß genug ist, um eine Badbewegung zu erzeugen. Bei zukünftig Projekten ist jedoch der Einsatz von Spülgasen und H_2 durch die Bodenelektrode geplant. Allerdings sollten Versuche in diese Richtung unternommen werden, da eine erhöhte Badbewegung das Reduktionspotential erhöht und dadurch mehr Schlacke an die Feuerfest-Ausmauerung gelangt und schützt diese vor der Strahlungsenergie des Plasmalichtbogens. [20,57,64,65]

Beim HPSR-Kreislauf von Plaul [19] werden auch Karbonate wie Kalziumkarbonat $CaCO_3$ und Magnesiumkarbonat $MgCO_3$ als Zuschläge verwendet. Durch Kalzinierungsprozesse dieser Zuschläge und den Einsatz von Kohlenstoffelektroden reichert sich das Gas durch die Wassergas-Shift-Reaktion mit CO und CO_2 an. Das bedeutet, dass nach dem Abgaswäscher ein Teil des Gases entnommen werden muss. Dieses wird über eine separate Leitung abgezweigt und kann aufgrund des großen Heizwertes für weitere Aufheizvorgänge durch Verbrennung herangezogen werden. [19]

3.1.3 Elektrischer Energieeintrag

Der Eintrag der elektrischen Energie findet über Elektroden oder Hohlelektroden statt. In beiden Anlagensystemen wird von einer Kohlenstoffelektrode ausgegangen, wodurch ein gewisser Kohlenstoffabbrand berücksichtigt wird. Dieser wird mit $\sim 5 \frac{kg}{t_{Stahl}}$ angegeben. Der Strom muss mittels einer Gleichstromversorgungseinheit bereitgestellt werden. Wechselstrom kommt bei diesen Anlagen nicht in Frage, da ein konstant brennender Lichtbogen für die Prozessführung besonders wichtig ist. Das Plasma wird über einen übertragenden Lichtbogen von der Kathode zu der Anode erzeugt. Dadurch wird das Schmelzbad zusätzlich aufgeheizt und die Elektrode geschont, weil die Elektronen mit einer hohen Geschwindigkeit auf das Bad auftreffen. Bei Wechselstrom wäre auch die Elektrode dieser Belastung ausgesetzt. Aufgrund der Prozessführung und der sich dauerhaft ändernden Lichtbogeengeometrie lässt sich keine konstante übertragene Lichtbogenleistung festlegen. Bei Kohlenstoffelektroden mit Argon-Plasma und Gleichstrom wurden Temperaturen von 13000 K nahe der Kathode und 10500 K in einem Abstand von 10 mm gemessen. Die Temperaturen wurden durch die Plasmazusammensetzung bestimmt. Hierbei wurden die Emissionslinien der Ar_I - und Ar_{II} -Linien mit Optischer Emissionsspektrometrie OES festgesetzt. Diese Messungen sind stark abhängig von der Art der gemessenen Argon-Spezies. [19,66]

3.1.4 Reduktionsmittel

Zurzeit gibt es eine Vielzahl an Untersuchungen, Wasserstoff kostengünstig und nachhaltig herzustellen. Eine dieser Methoden ist die Dampfreformierung. Hier wird Methan mit Wasserdampf bei Drücken von 3-25 bar und Temperaturen von 700-850 °C in Kontakt gebracht. Das Resultat dieser katalytischen Reformierung ist ein Gasgemisch aus H₂ und CO. Das dabei entstandene CO wird anschließend mit Wasserdampf über die homogene Wassergas-Reaktion zu CO₂ umgesetzt. [67]

Eine weitere Möglichkeit bietet die Elektrolyse von Wasser. In diesem Verfahren wird Wasser mit Hilfe von Strom in H₂ und O₂ zersetzt. Hierbei sind mehrere Varianten der Elektrolyse möglich, die sich im Grunde genommen durch die Elektrodenreaktionen unterscheiden, welche vom Elektrolyten abhängig sind. Varianten sind hierbei die alkalische Wasserelektrolyse, Polymerelektrolytbrennstoffzelle und die Festoxid-Elektrolysezelle. [68]

Die neueren Verfahren, wie Methanpyrolyse wo CH₄ durch den Energieeintrag eines Plasmas katalytisch zu Wasserstoff und Kohlenstoff zersetzt wird, sind zurzeit noch Teil von Forschungsarbeiten. Nach industriellem Maßstab ist zurzeit die Dampfreformierung von Erdgas das wichtigste Verfahren zur Wasserstoffherstellung. Auch der Einsatz von CH₄ direkt als Reduktionsmittel ist laut Badr et. al. [20] möglich, würde jedoch mehr Energie benötigen aufgrund der Aufspaltung des CH₄. Das Reduktionsmittel wird über Wärmetauscher auf Temperaturen von 750-760 °C vorgewärmt. [20,69,70]

In **Abbildung 3-3** ist der Einfluss des $\frac{H_2}{m_{Erz}}$ – Verhältnis in Bezug auf das Eisen-Ausbringen, die FeO-Verschlackung und den Gasausnutzungsgrad nach Badr gegeben.[20] Hierbei ist ersichtlich, dass eine Steigerung des Eisenausbringen und die Verminderung der FeO-Verschlackung erst bei Gasströmen über $800 \frac{m^3_{H_2}}{t_{Erz}}$ möglich ist. Dies hat jedoch eine gleichzeitige Minderung des Gasausnutzungsgrades zufolge. Das bedeutet, dass bei höheren $\frac{H_2}{m_{Erz}}$ – Verhältnis zwar die Ausbeute des Prozesses steigt, jedoch ein deutlich geringerer Anteil an H₂ zu H₂O umgesetzt wird. [20]

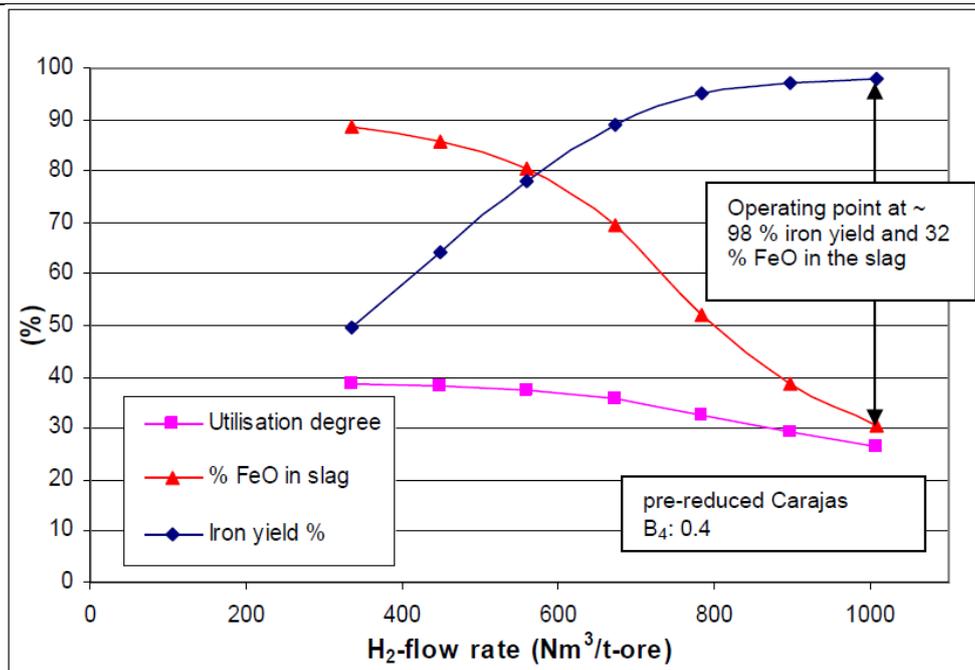


Abbildung 3-3: Einfluss des $\frac{H_2}{m_{Erz}}$ – Verhältnis auf die FeO-Verschlackung, den Gasausnutzungsgrad und das Eisenausbringen [20]

3.1.5 Produkte

Hauptprodukt des Prozesses ist ein kohlenstofffreies Eisen. Dieses wird nach dem Erreichen des gewünschten Reduktionsgrades abgestochen. Hierbei kann die Verweilzeit je nach Betriebsparameter stark schwanken. Laut Plaul et. al. [20] wird ein guter Kompromiss zwischen einem geringen Eisenverlust bei einem Reduktionsgrad von 97 % und einer dabei gleichzeitigen akzeptablen Phosphorreduktion mit rund 50 % angenommen.[19,20]

Ein wichtiges Nebenprodukt des Prozesses ist die Schlacke. Je nach Reduktionsgrad und Zuschlagsmenge liegt diese zwischen $80-133 \frac{kg}{t_{Stahl}}$. Diese Menge liegt deutlich unter jener der konventionellen Stahlwerksroute über den Hochofen-Prozess mit rund $250 \frac{kg}{t_{Roheisen}}$. Vorrangiges Ziel der Schlacke ist es, ein schmelzflüssiges Bad aufrecht zu erhalten, um den Antransport der Eisenoxidpartikel hin zur Reduktionszone zu erhöhen. Dadurch sind sowohl Viskosität und Schmelzpunkt die wichtigsten einzustellenden Parameter. Ein weiteres Ziel dieser Schlacke ist die Verringerung des FeO-Gehaltes. Je nach Einstellung der Basizität B_4 kann der FeO-Gehalt von 48,75 % auf 30 % gesenkt werden. Nachteilig hierbei ist jedoch die erhöhte Schlackenmenge pro Tonne Stahl, siehe **Abbildung 3-4**. [19,20]

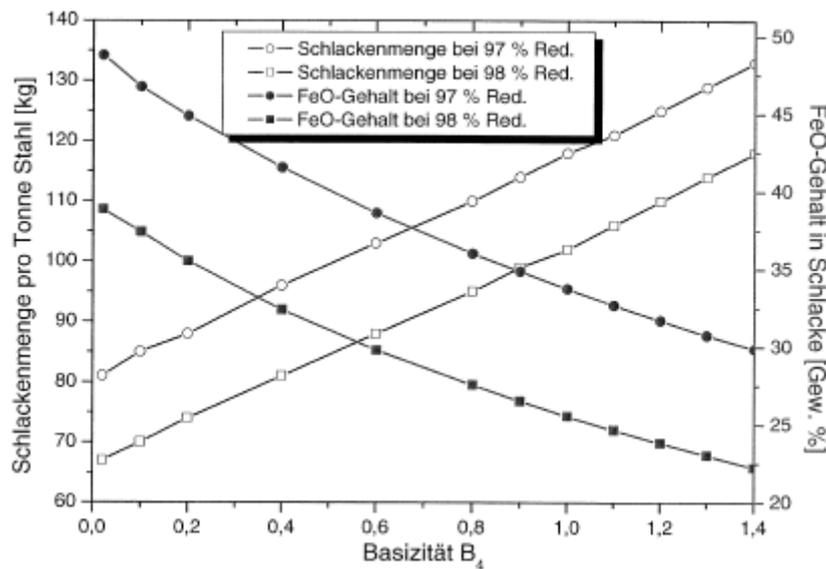


Abbildung 3-4: Schlackenmenge und FeO Gehalt in Abhängigkeit der Basizität B_4 [19]

3.2 Vergleich der Konzepte

Beide Flussschemata sind sehr ähnlich aufgebaut. Um einen Überblick der beiden Systeme zu erhalten sind die wichtigsten Daten in **Tabelle 3-I** und in **Tabelle 3-II** angegeben. Wichtig hierbei ist, dass diese sich nur auf das Einsatzmaterial in der HPSR-Anlage beziehen.

Die bereits berechneten statischen Systeme geben nur den eingesetzten Wasserstoff in der HPSR-Anlage an. Badr gibt als hier als spezifische Gasrate $690 \frac{\text{m}^3}{\text{t}_{\text{Eisen}}}$ an, Plaul $1000 \frac{\text{m}^3}{\text{t}_{\text{Eisen}}}$. Aufgrund der Rezyklierung des Prozessabgases ist der tatsächliche Wert an verwendetem Wasserstoff des gesamten Anlagenlayouts deutlich höher. Bei den spezifischen Daten und Kennzahlen wurde daher die H_2 Menge angegeben welche für beide Reduktionsschritte (Vorreduktion und HPSR) verwendet wird. Somit ergibt sich der eingesetzte Summenwasserstoff aus dem Make Up Gas, dem rezyklierten Prozessgas, das in die HPSR-Anlage gelangt und dem rezyklierten Prozessgas welches als Kühlung für das Reduktionsgas der Vorwärm- und Vorreduktionsanlage verwendet wird. Dieser beträgt bei Plaul $1706 \frac{\text{m}^3}{\text{t}_{\text{Eisen}}}$ und bei Badr $2373 \frac{\text{m}^3}{\text{t}_{\text{Eisen}}}$. Für Badr ergibt sich daher ein deutlich höheres Wasserstoff-Erz-Verhältnis von $1557 \frac{\text{m}^3}{\text{t}_{\text{Erz}}}$, als die angenommenen $1000 \frac{\text{m}^3}{\text{t}_{\text{Erz}}}$ aus **Abbildung 3-3**.

GEGENÜBERSTELLUNG VERSCHIEDENER WASSERSTOFFPLASMASCHMELZREDUKTION-
ANLAGENLAYOUTS

Tabelle 3-I: Daten der HPSR-Anlagen von Plaul und Badr [19,20]

		Einheit	Plaul	Badr
Input-Material	Carajas Erz	$\frac{t}{h}$	152,38	190,5
	Zuschlagsmenge	$\frac{t}{h}$	2,5	3,13
	Wasserstoff	$\frac{Nm^3}{h}$	170572	296577
	Temperatur-Erz	°C	655,8	700
	Temperatur-Reduktionsgas	°C	748	760
Energieeintrag	Reaktor	MW	171	144
Druck	Reaktor	bar	2	2
Output-Material	Eisen	$\frac{t}{h}$	100	125
	Schlacke	$\frac{kg}{t_{RS}}$	81,30	101,08
	Abgas	$\frac{Nm^3}{h}$	120350	102000
	Temperatur-Eisen	°C	1600	1600
	Temperatur-Abgas	°C	1500	1500

Tabelle 3-II: Spezifische Kennzahlen der HPSR-Anlagen von Plaul und Badr [19,20]

		Einheit	Plaul	Badr
Input-Material	Carajas Erz	$\frac{t}{t_{RS}}$	1,52	1,52
	Zuschlagsmenge	$\frac{kg}{t_{RS}}$	25	25
	Wasserstoff	$\frac{Nm^3}{t_{RS}}$	1706	2373
	Wasserstoff Make Up Gas	$\frac{Nm^3}{t_{RS}}$	1000	690
Energieeintrag	Reaktor	$\frac{MWh}{t_{RS}}$	1,48	1,15
Output-Material	Schlacke	$\frac{kg}{t_{RS}}$	81,30	101,08
	Abgas	$\frac{Nm^3}{t_{RS}}$	1204	816

Ein weiterer wichtiger Vergleich hierbei ist die Qualität der Produkte, insbesondere die Eisenausbringung und der FeO-Gehalt der Schlacke. Beide Simulationen gingen von einem Eisenausbringen von 98 % als Startwert aus. Die Ergebnisse sind in **Tabelle 3-III** dargestellt. Bei den Berechnungen wird mit Carajas-Erz als Ausgangsrohstoff begonnen, jedoch mit geringfügigen Änderungen in der Zusammensetzung. Es ist jedoch ersichtlich, dass sowohl die Schlackenzusammensetzung als auch die Eisenausbringung sich in beiden Simulationen sehr ähneln. Des Weiteren ist zu sehen, dass beide Berechnungen einen komplett reduzierten Wüstit als Produkt der Vorwärm- und Vorreduktion liefern.

GEGENÜBERSTELLUNG VERSCHIEDENER WASSERSTOFFPLASMASCHMELZREDUKTION-
ANLAGENLAYOUTS

Tabelle 3-III: Zusammensetzung der Input- und Output-Materialien der Simulationen von Plaul und Badr (alle Zahlen sind in % angegeben) [19,20]

Plaul	Fe	Fe ₂ O ₃	FeO	CaO	Al ₂ O ₃	SiO ₂	MnO	MgO	CaCO ₃	MgCO ₃
Carajas Erz		95,5	0,05	0,0075	1,32	0,91	0,46	0,041		
Zuschläge		1			1	1			94	3
Eisen	99,78									
Schlacke			32,18	16,31	25,09	16,51	6,06	1,22		
Badr	Fe	Fe _{tot}	FeO	CaO	Al ₂ O ₃	SiO ₂	Mn	MgO	CaCO ₃	MgCO ₃
Carajas Erz		67,66	0,4	0,01	0,84	0,56	0,31	0,02		
Zuschläge				100						
Eisen	99,78									
Schlacke			32,37	15,87	25,22	16,6	6,09	1,21		

Ein weiterer Aspekt ist die Abgaszusammensetzung. Aufgrund des Einsatzes von Karbonaten und Kohlenstoffelektroden wird CO und CO₂ im Abgas entstehen. Deswegen ist nach einem bestimmten Durchlauf ein Teil des Gases abzuzweigen, da ansonsten der Anteil im Frischgas stetig steigt. Aufgrund des hohen Heizwertes ist es jedoch notwendig, dieses Abgas weiter zu verarbeiten.

4 Berechnungsmodell

In diesem Kapitel soll das zugrundeliegende Berechnungsmodell von Zarl [21] erklärt werden, inklusive der im Zuge dieser Arbeit erfolgten Erweiterungen. Zuerst wird die Pilotanlage mit einer Kapazität von $1 \frac{t}{h}$ näher beschrieben. Danach wird die industrielle Produktionsanlage mit $150 \frac{t}{h}$ und deren Unterschiede nähergebracht. Die Produktionszahlen beziehen sich jeweils auf die verwendete Menge Eisenerz.

4.1 Beschreibung der Pilotanlage zur Verarbeitung von einer Tonne Erz pro Stunde

In **Abbildung 4-1** ist der schematische Aufbau der modellierten HPSR-Pilotanlage zu erkennen. Der grüne Pfeil in der Mitte stellt hierbei das "Make Up Gas" dar. Über die Materialbunker werden das Erz und die Zuschläge zusammengemischt und der HPSR-Anlage zugeführt. Dieser Materialstrom ist über die strich-punktierte Linie dargestellt. Die benötigte Energie für den Schmelzvorgang und die Reduktion wird über elektrische Energie hinzugeführt. Dieser Energiestrom ist in der **Abbildung 4-1** durch die blau punktierte Linie dargestellt.

Das produzierte Abgas wird über das Abgasrohr abgezogen. Dieser Gasstrom wird mittels der roten Linie dargestellt. Zur Optimierung des Prozesses wird das Abgas zur Dampferzeugung herangezogen, um die Temperatur zu senken und das Abgas in den

Wärmetauscher einspeisen zu können. Anschließend wird das weiter abgekühlte Gas wie beschrieben zur Material Vorwärmung und Vorreduktion herangezogen.

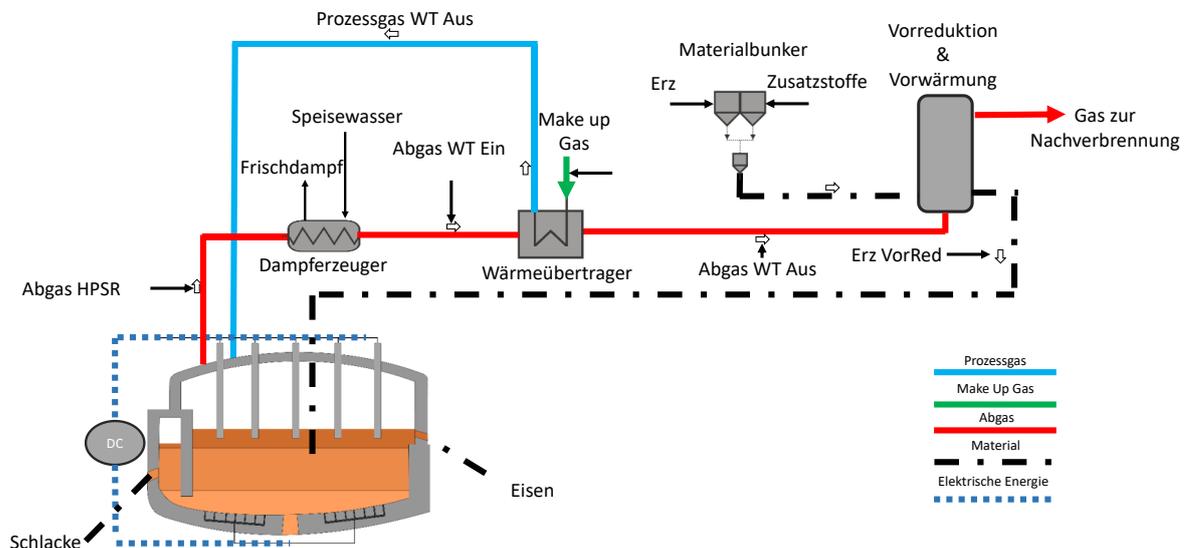


Abbildung 4-1: Schematische Darstellung der HPSR-Pilotanlage

In **Abbildung 4-2** und **Tabelle 4-I** ist das Berechnungsmodell graphisch dargestellt und beschrieben. Die thermodynamischen Berechnungen wurden mittels FactSage® (Version 8.0) mit den Datenbanken „Fact PS“ „FT Oxid“ (jeweils mit Version 8.0) durchgeführt. Weitere benötigte Berechnungen wurden direkt mit der Version Excel 2016 im Excel-Sheet berechnet und in einem Macro programmiert. FactSage® wurde herangezogen, da es sich bereits in vielen metallurgischen Fragestellungen und Simulationen bewährt hat. [20,71]. Die Zahlen in **Abbildung 4-2** stellen ein Gas oder einen Feststoff zu einem bestimmten Zeitpunkt im HPSR-Kreislauf dar und werden in **Tabelle 4-I** näher beschrieben. Die Buchstaben „E“, „F“ bzw. „M“ in der zweiten Spalte sagen aus, ob die Berechnung in Excel „E“, FactSage® „F“ oder im Makro „M“ stattfindet.

Zeile 1-5 dienen in der Berechnung zur Einstellung der Anfangsbedingungen. Diese Startbedingungen werden aus der iterativen Berechnung herausgenommen, um sie unabhängig von den Berechnungen der vorangegangenen Iteration zu machen. Anfangsbedingungen hierbei sind z.B.: Temperatur Erz, Temperatur Zusatzstoffe, $\frac{H_2}{\text{Erzmenge}}$ - Verhältnis etc.. Die Zeilen 7-11 dienen der Berechnung der Vorreduktion und Vorwärmung, die Zeilen 12-18 der HPSR-Anlage selbst, 19-23 der Abgas- und Prozessgasströme und deren Optimierung und 24-25 der spezifischen Daten und der Anlagenauslegung.

Tabelle 4-I: Berechnungsablauf Pilotanlage

Zeile	Programm	Strom Nr.	Beschreibung
1	E		Startwerte für „Erz“ berechnen
2	E		Startwerte für „Zusatzstoffe“ berechnen
3	E		Startwerte für „Make Up“ Gas berechnen
4	M	1	Startwerte für „Erz“ setzen
5	M	2	Startwerte für „Zusatzstoffe“ setzen
6	M		Start der iterativen Berechnung (drei Iterationen)
7	M	1 + 2 → 3	Mischungsberechnung der einzelnen Komponenten des „Erzes und den „Zusatzstoffen“
8	M	11	Startwerte für „Make Up Gas“ setzen
9	F	3+ 9 → 4+10	Berechnung „Erz Vorreduktion“, „Gas zur Nachverbrennung“, Bedingung: Gleichgewicht Ergebnis: Temperatur- und Zusammensetzungsanpassung
10	M	4	Einlesen Erzgemisch nach Vorreduktion und Vorwärmung
11	M	9	Einlesen „Prozessgas WT Aus“ nach Wärmetauscher
12	F	4 + 12 → 5 + 6 + 7	Berechnung „Output“ bestehend aus Eisen und Schlacke, „Abgas HPSR“ Bedingung: Endtemperatur „Output“ Ergebnis: Temperatur und Zusammensetzungsanpassung
13	E		Berechnung „Energieeintrag Elektrisch“ Annahmen: Verluste durch Kühlung, Wirkungsgrad elektrisch/thermisch
14	E		Berechnung Energiebedarf „Erzeugung H ₂ “
15	E		Berechnung „Gesamtenergieverbrauch GJ/t Fe ₂ O ₃ “

16	E		Berechnung „Gesamtenergieverbrauch GJ/t Fe“
17	E	5, 6	Berechnung der spezifischen Daten des Outputs Berechnung: Kohlenstoffabbrand
18	F	7 → 7*	Bedingung: „Abgas HPSR“ kühlt von Endtemperatur „Output“ auf Endtemperatur „Abgas HPSR“ ab Annahme: Kohlenstoffeintrag der Elektrode Ergebnis: Optimierte Zusammensetzung „Abgas HPSR“
19	E, F	7* → 8	Berechnung: Dampferzeuger Bedingung: Temperatur wird mittels Zugabe von Wasser auf Endtemperatur reduziert Annahme: Endtemperatur Ergebnis: Zusammensetzung „Abgas WT Ein“, erforderliche Zugabe an Wasser
20	M, F	8 → 9	Berechnung: Wärmetauscher Bedingung: Iterative Berechnung – Enthalpie Differenz $dH < 100000$ J; Temperaturunterschied < 1 °C Annahme: Enthalpie, Entropie und Temperatur des Gases nach Wärmetauscher, Wärmedurchgangskoeffizient, Fläche Ergebnis: Temperatur „Abgas WT Aus“, „Prozessgas WT Aus“
21	F	9 → 9*	Berechnung: Optimierung Zusammensetzung „Abgas WT Aus“ Bedingung: Temperatur „Abgas WT Ein“ geht über in „Abgas WT Aus“ Ergebnis: Optimierung der Zusammensetzung des „Abgas WT Aus“
22	F	10	Berechnung: Eigenschaften „Gas zur Nachverbrennung“ Bedingung: Temperatur = 40 °C

			Berechnung: Eigenschaften „Make Up Gas“
23	F	11	Bedingung: Konstante Temperatur des Startwertes Ergebnis: Eigenschaften „Make Up Gas“
			Berechnung: „Prozessgas WT Aus“
24	F	12	Bedingung: Temperatur wird erhöht von „Make Up Gas“ auf Temperatur „Prozessgas WT Aus“ Ergebnis: Temperaturanpassung
25	E		Berechnung der spezifischen Daten aller Gase
26	E		Berechnung der benötigten Rohrdurchmesser aller Leitungen Annahme: Konstante Gas-Geschwindigkeiten
27	E		Berechnung der H ₂ -Ausnutzungsgrades

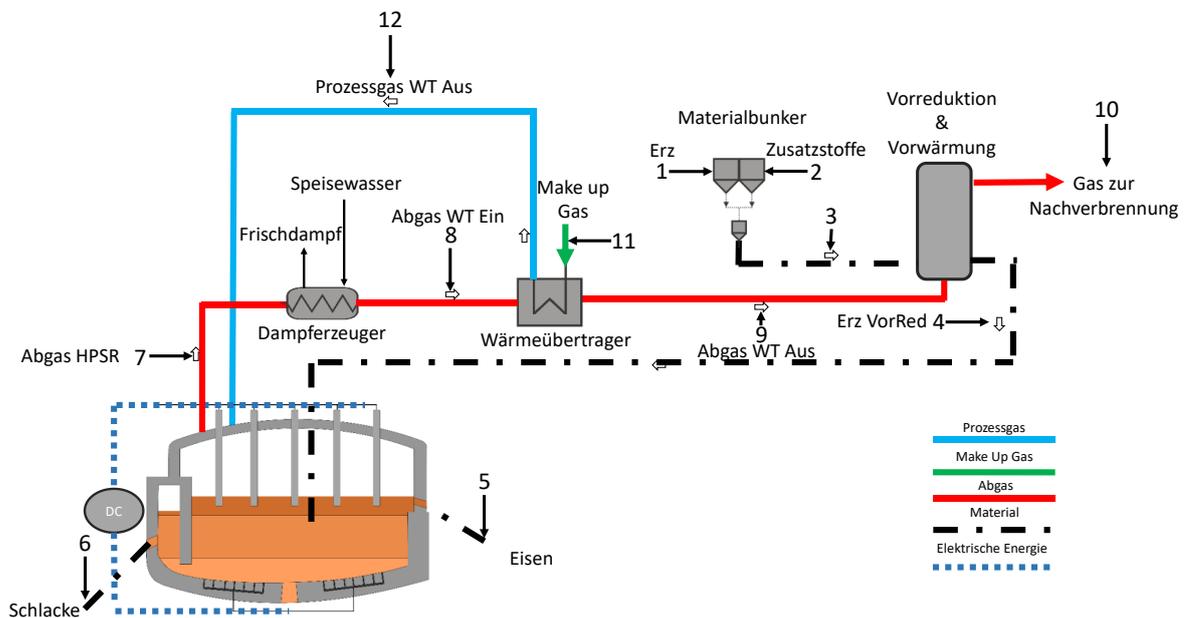


Abbildung 4-2: Grafische Darstellung des $1 \frac{t_{Erz}}{h}$ Berechnungsmodelles mit einzelnen Strömen

```

1 // Farkas, Zarl FactSage-Macro zur Dimensionierung von HPSR Systemen
2 // 20.01.2022
3
4 //Variablendeklaration, Directories
5
6 //Equilib Erz
7
8 + //Start
9 -----
10
11 //Equilib Zuschlaege
12
13 + //Start
14 -----
15
16 *dum = 1 TO 3 //Anzahl der Loops die durchgefuehrt werden
17
18 //Equilib Wirbelschicht
19
20 + //Start
21 -----
22
23 //Equilib HPSR
24
25 + //Start
26 -----
27
28 //Equilib Kohlenstoffabbbrand
29
30 + //Start
31 -----
32
33 //Equilib Abgas WT Ein
34
35 + //Start
36 -----
37
38 //Equilib Abgas WT Aus
39
40 + //Start
41 -----
42
43 //Equilib Abgas WT Aus - Optimierung
44
45 + //Start
46 -----
47
48 //Equilib Gas zur Nachverbrennung
49
50 + //Start
51 -----
52
53 //Equilib Prozessgas WT Aus
54
55 + //Start
56 -----
57
58 //Equilib Make Up Gas
59
60 + //Start
61 -----
62
63 //Komandos
64
65 + //Start
66 -----
67
68 *dum LOOP
69
70 End

```

Abbildung 4-3: Ausschnitt mit den einzelnen Schritten des Macros

In **Abbildung 4-3** ist der Quellcode des Macros zu sehen. Hierbei soll ein Überblick in die einzelnen Abläufe gewährleistet werden, welche in **Tabelle 4-1** beschrieben sind. Die Gesamtlänge sowie die Zeilenanzahl sind im linken grau hinterlegten Rand zu sehen.

Da FactSage® alle Reaktionen und auch Zusammensetzungen in einem thermodynamischen Gleichgewicht berechnet, muss eine Optimierung dieser Berechnungen

stattfinden. Diese werden nach dem **Kapitel** Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden. näher beschrieben, da sie für beide Anlagen anzuwenden sind.

4.2 Beschreibung der industriellen Produktionsanlage zur Verarbeitung von 150 Tonnen Erz pro Stunde

In **Abbildung 4-4** ist der schematische Aufbau der 150 $\frac{t}{h}$ modellierten HPSR-Anlage zu sehen. Wie bereits in **Kapitel 4.1** beschrieben zeigt die blaue Linie den „Prozessgas“-Strom an, die grüne Linie jene des „Make Up Gas“, die rote Linie den „Abgas“-Strom, die schwarze strich-punktierte Linie jene der festen „Materialien“ und die blau strichlierte Linie stellt jene der „elektrischen Energie“ dar.

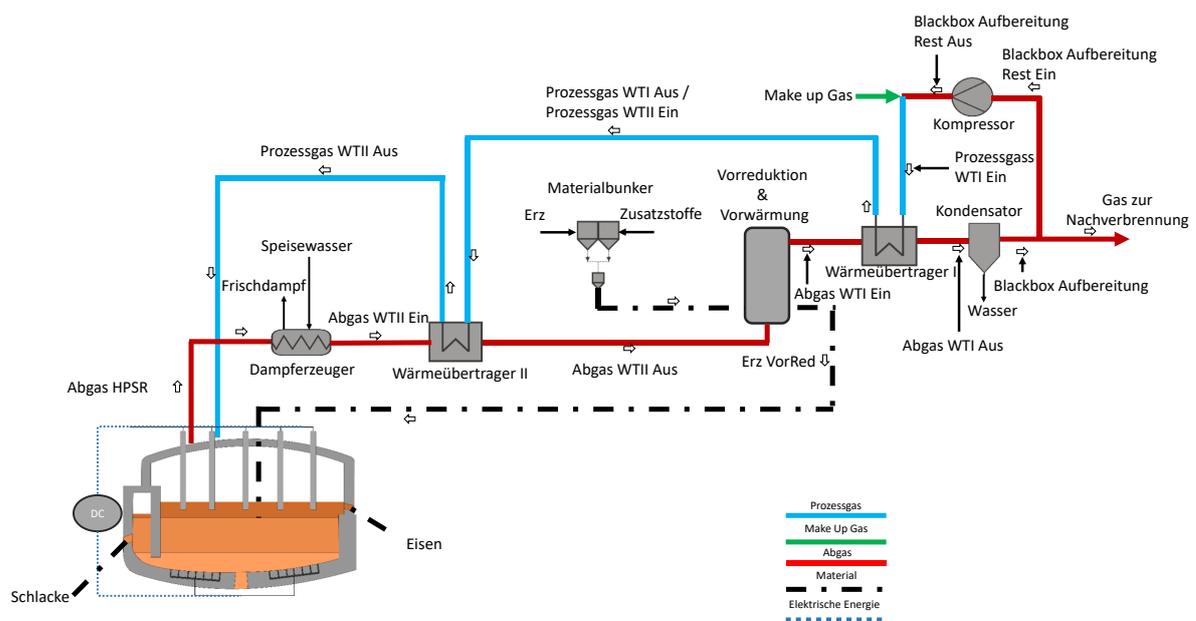


Abbildung 4-4: Schematische Darstellung der HPSR-Massenproduktionsanlage

Auch bei der größeren HPSR-Anlage wird das Erz und die Zuschläge nach den Materialbunkern zusammengemischt. Der Unterschied zur Pilotanlage befindet sich im weiteren Verlauf des Abgases. Hierbei wird dieses durch einen zweiten Wärmetauscher geleitet, um nochmals die Wärmeenergie auf das Prozessgas übertragen zu können. Eine weitere Notwendigkeit ist der Gebrauch einer Abgasreinigung, welche aus einem Tuchfilter mit Wasserabscheidung und einem Kondensator bestehen kann. Dieser dient zur Verringerung der erzeugten Wassermengen im Abgas, bevor dieses zur Nachverbrennung gelangt bzw. recycelt werden kann. Dieser Schritt ist notwendig, um die Wirksamkeit der Nachverbrennung

zu erhöhen und die im System verbleibende Gasmenge zu verringern. Des Weiteren wird der gesamte Gasstrom der Großanlage unter erhöhtem Druck gesetzt, wodurch der Einsatz eines Kompressors vor der Mischung mit dem Make Up Gas unabdingbar wird. In **Abbildung 4-5** und **Tabelle 4-II** sind der Berechnungsablauf der industriellen Produktionsanlage beschrieben sowie graphisch dargestellt. Zeile 1-6 dient hier in der Berechnung für die Eingabe der Anfangsparameter. Als Erweiterung zur Pilotanlage wird der Druck der einzelnen Aggregate zusätzlich vorgegeben. Diese Startwerte werden erneut aus der iterativen Berechnung herausgenommen, da diese während der Berechnung konstant bleiben sollen. Die Zeilen 8-12 dienen zur Berechnung der Vorreduktion und Vorwärmung, die Zeilen 13-19 der HPSR-Anlage (Schmelzvorgang und Reduktion). Die Zeilen 20-34 beschäftigen sich mit der Bearbeitung der Berechnung des rezyklierten Gases und 35-36 der spezifischen Daten und der Anlagenauslegung.

Tabelle 4-II: Berechnungsablauf Massenproduktionsanlage

Zeile	Programm	Strom Nr.	Beschreibung
1	E		Startwerte für „Erz“ berechnen
2	E		Startwerte für „Zusatzstoffe“ berechnen
3	E		Startwerte für „Make Up“ Gas berechnen
4	M	1	Startwerte für „Erz“ setzen
5	M	2	Startwerte für „Zusatzstoffe“ setzen
6	E		Startwerte für Drücke der einzelnen Aggregate setzen
7	M		Start der iterativen Berechnung (drei Iterationen)
8	M	1 + 2 → 3	Mischungsberechnung der einzelnen Komponenten des „Erzes und den „Zusatzstoffen“
9	M	16	Startwerte für „Make Up Gas“ setzen
10	F	3+ 9 → 4+10	Berechnung „Erz Vorreduktion“, „Gas zur Nachverbrennung“, Bedingung: Gleichgewicht Ergebnis: Temperatur- und Zusammensetzungsanpassung

11	M	4	Einlesen Erzgemisch nach Vorreduktion und Vorwärmung
12	M	9	Einlesen „Prozessgas WTII Aus“ nach Wärmetauscher II
13	F	4 + 19 → 5 + 6 + 7	<p>Berechnung „Output“ bestehend aus Eisen und Schlacke, „Abgas HPSR“</p> <p>Bedingung: Endtemperatur „Output“</p> <p>Ergebnis: Temperatur und Zusammensetzungsanpassung</p>
14	E		<p>Berechnung „Energieeintrag Elektrisch“</p> <p>Annahmen: Verluste durch Kühlung, Wirkungsgrad elektrisch/thermisch</p>
15	E		Berechnung Energiebedarf „Erzeugung H ₂ “
16	E		Berechnung „Gesamtenergieverbrauch GJ/t Fe ₂ O ₃ “
17	E		Berechnung „Gesamtenergieverbrauch GJ/t Fe“
18	E	5, 6	Berechnung der spezifischen Daten des Outputs
19	F	7 → 7*	<p>Berechnung: Kohlenstoffabbrand</p> <p>Bedingung: „Abgas HPSR“ kühlt von Endtemperatur „Output“ auf Endtemperatur „Abgas HPSR“ ab</p> <p>Annahme: Kohlenstoffeintrag der Elektrode</p> <p>Ergebnis: Optimierte Zusammensetzung „Abgas HPSR“</p>
20	E, F	7* → 8	<p>Berechnung: Dampferzeuger</p> <p>Bedingung: Temperatur wird mittels Zugabe von Wasser auf Endtemperatur reduziert</p> <p>Annahme: Endtemperatur</p> <p>Ergebnis: Zusammensetzung „Abgas WTII Ein“, erforderliche Zugabe an Wasser</p>

21	M, F	8 → 9	<p>Berechnung: Wärmetauscher II</p> <p>Bedingung: iterative Berechnung – Enthalpie Differenz $dH < 100000$ J; Temperaturunterschied < 1 °C</p> <p>Annahme: Enthalpie, Entropie und Temperatur des Gases nach Wärmetauscher, Wärmedurchgangskoeffizient, Fläche</p> <p>Ergebnis: Temperatur „Abgas WTII Aus“, „Prozessgas WTII Aus“</p>
22	M, F	10 → 11	<p>Berechnung: Wärmetauscher I</p> <p>Bedingung: iterative Berechnung – Enthalpie Differenz $dH < 100000$ J; Temperaturunterschied < 1 °C</p> <p>Annahme: Enthalpie, Entropie und Temperatur des Gases nach Wärmetauscher, Wärmedurchgangskoeffizient, Fläche</p> <p>Ergebnis: Temperatur „Abgas WTI Aus“, „Prozessgas WTI Aus“</p>
23	F	9 → 9*	<p>Berechnung: Optimierung Zusammensetzung „Abgas WTII Aus“</p> <p>Bedingung: Temperatur „Abgas WTII Ein“ geht über in „Abgas WTII Aus“</p> <p>Ergebnis: Optimierung der Zusammensetzung des „Abgas WTII Aus“</p>
24	F	11 → 11*	<p>Berechnung: Optimierung Zusammensetzung „Abgas WTI Aus“</p> <p>Bedingung: Temperatur „Abgas WTI Ein“ geht über in „Abgas WTI Aus“</p> <p>Ergebnis: Optimierung der Zusammensetzung des „Abgas WTI Aus“</p>

			Berechnung: Blackbox, Wasserentfernung, Optimierung der Zusammensetzung „Blackbox Aufbereitung“
25	E, F	11* → 12	Bedingung: Gas muss zu einem gewissen Teil entwässert werden, Temperatur „Blackbox Aufbereitung“ wird festgelegt Ergebnis: Zusammensetzung „Blackbox Aufbereitung“
			Berechnung: Eigenschaften des „Gas zur Nachverbrennung“
26	E, F	13	Bedingung: Temperatur, Prozentsatz Gas Bleed Ergebnis: Menge und Zusammensetzung „Gas zur Nachverbrennung“
			Berechnung: Eigenschaften „Blackbox Aufbereitung Rest Ein“
27	F	14	Bedingung: Temperatur, Prozentsatz Gas Bleed wird abgezogen Ergebnis: Menge und Zusammensetzung „Blackbox Aufbereitung Ein“
			Berechnung: Änderung des Gases der Blackbox Aufbereitung nach dem Kompressor zu „Blackbox Aufbereitung Rest aus“
28	E, F	14 → 15	Bedingung: Temperaturunterschied bei : iterative Berechnung < 1 °C Annahme: Kompressor Eigenschaften, isentrope Verdichtung, Verluste Ergebnis: Temperatur und Zusammensetzung „Blackbox Aufbereitung Rest aus“
29	E		Leistung Kompressor
			Berechnung: Eigenschaften „Make Up Gas Start“
30	F	16	Annahme: Temperatur, Zusammensetzung, Menge Ergebnis: Eigenschaften „Make Up Gas Start“

31	F	16*	<p>Berechnung: Eigenschaften „Make Up Gas“</p> <p>Bedingung: Gas Bleed von H₂ und Ar wird ausgeglichen</p> <p>Annahme: Temperatur, Zusammensetzung, Menge,</p> <p>Ergebnis: Eigenschaften „Make Up Gas“</p>
32	E, F	11* → 17	<p>Berechnung: Mischung von „Make Up Gas“ und „Blackbox Aufbereitung Rest aus“</p> <p>Bedingung: Mischungstemperatur wird bei Mischung berechnet, danach die Änderung der Zusammensetzung</p> <p>Ergebnis: Temperatur, Zusammensetzung und Menge von „Prozessgas WTI Ein“</p>
33	F	16	<p>Berechnung: Eigenschaften „Make Up Gas“</p> <p>Bedingung: Konstante Temperatur des Startwertes</p> <p>Ergebnis: Eigenschaften „Make Up Gas“</p>
34	F	18 → 18*	<p>Berechnung: Optimierung Zusammensetzung „Prozessgas WTI Aus / Prozessgas WT II Ein““</p> <p>Bedingung: Temperatur „Prozessgas WTI Ein“ geht über in „Prozessgas WTI Aus / Prozessgas WT II Ein“</p> <p>Ergebnis: Optimierung der Zusammensetzung des „Prozessgas WTI Aus“</p>
35	F	19 → 19*	<p>Berechnung: Optimierung Zusammensetzung „Prozessgas WTII Aus“</p> <p>Bedingung: Temperatur „Prozessgas WTII Ein“ geht über in „Prozessgas WTII Aus“</p> <p>Ergebnis: Optimierung der Zusammensetzung des „Prozessgas WTII Aus“</p>
36	E		<p>Berechnung der benötigten Rohrdurchmesser aller Leitungen</p> <p>Annahme: Konstante Gas-Geschwindigkeiten</p>
37	E		<p>Berechnung des H₂-Ausnutzungsgrades</p>

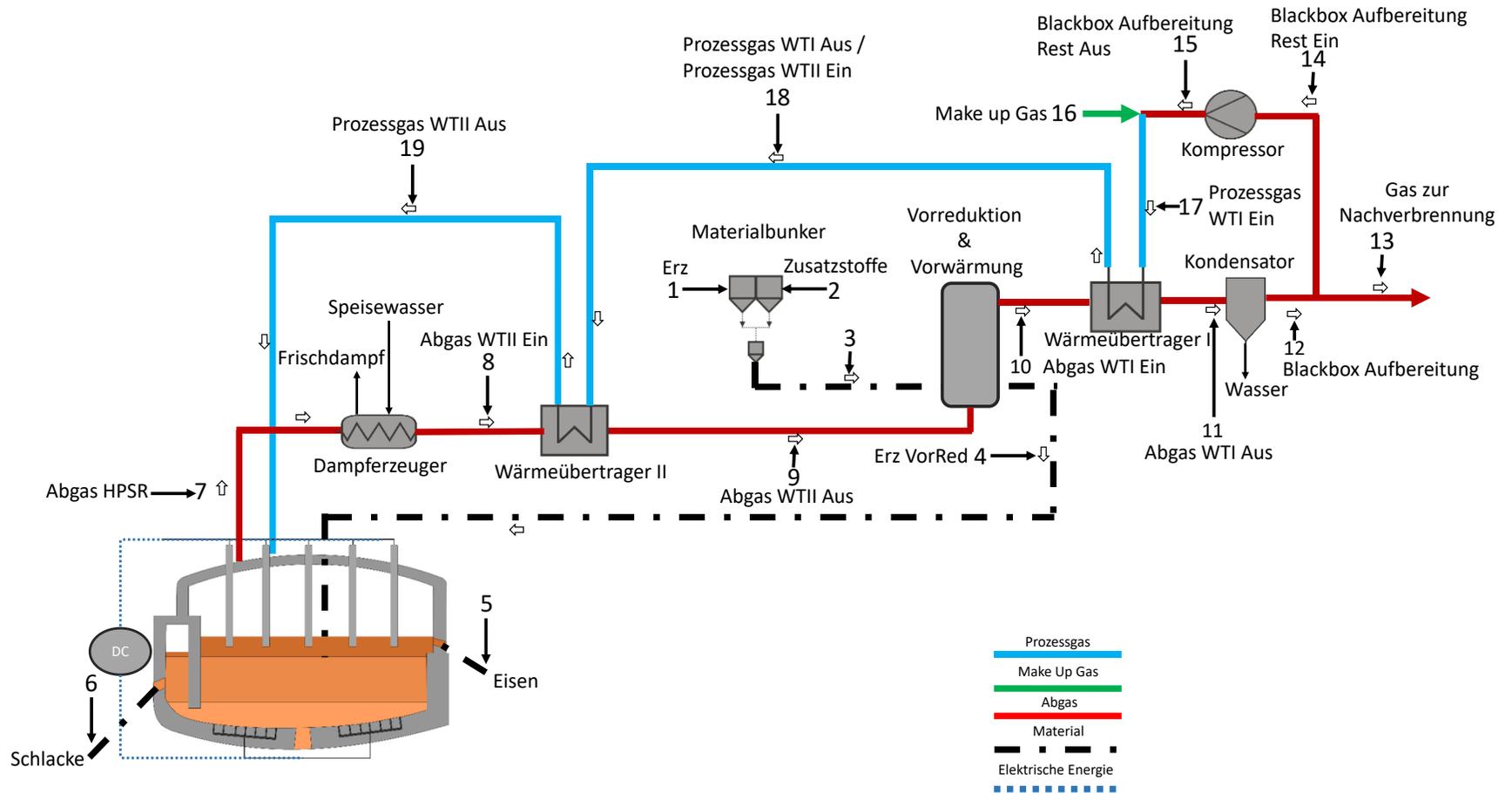


Abbildung 4-5: Grafische Darstellung des 150 $\frac{t}{h}$ Berechnungsmodelles mit einzelnen Strömen

```

1 //Farkas, Zerl FactSage-Macro zur Dimensionierung von HPSR Systemen
2 //03.01.2022
3
4 //Variablen Deklaration, Directories
5
6 ■ //Start
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19 //Equilib Krz
20
21
22
23
24 ■ //Start
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34 //Equilib Zuschlaenge
35
36
37
38
39 ■ //Start
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99
100
101
102
103
104
105
106
107
108
109
110
111
112
113
114
115
116
117
118
119
120
121
122
123
124
125
126
127
128
129
130
131
132
133
134
135
136
137
138
139
140
141
142
143
144
145
146
147
148
149
150
151
152
153
154
155
156
157
158
159
160
161
162
163
164
165
166
167
168
169
170
171
172
173
174
175
176
177
178
179
180
181
182
183
184
185
186
187
188
189
190
191
192
193
194
195
196
197
198
199
200
201
202
203
204
205
206
207
208
209
210
211
212
213
214
215
216
217
218
219
220
221
222
223
224
225
226
227
228
229
230
231
232
233
234

```

Abbildung 4-6: Quellcode der $150 \frac{t}{h}$ Massenproduktionsanlage

In **Abbildung 4-6** sind die Abschnitte des Quellcodes der $150 \frac{t}{h}$ Massenproduktionsanlage zu sehen, welcher in **Tabelle 4-II** beschrieben ist. Es ist ersichtlich, dass das Grundsystem beider Anlagen sich ähnelt und somit nur einige Erweiterung in Vergleich zu **Abbildung 4-5** vorgenommen worden sind.

4.3 Korrektur des Berechnungsmodells

Wie bereits in **Kapitel 4.1** wird mittels FactSage® stets das thermodynamische Gleichgewicht mit gewissen Randbedingungen berechnet. Daher muss eine Anpassung unternommen werden. Des Weiteren müssen für die Berechnung einige Annahmen getroffen werden, auf welche im nächsten Kapitel genauer eingegangen wird.

4.3.1 Anpassung der Gaszusammensetzungen und der Gastemperaturen

Durch die Berechnung der Temperatur der Gase nach dem Wärmetauscher, welche in Zeile 21 und 22 des $150 \frac{t}{h}$ Berechnungsmodelles beschrieben werden, gilt es die Gaszusammensetzung zu optimieren. Jede Berechnung der Temperatur erfolgt unter der Bedingung, dass die Gaszusammensetzung sich nicht verändert. Daher wird nach der Berechnung jeder Gleichgewichtstemperatur eine Korrektur der Gaszusammensetzung vorgenommen. Einen wesentlichen Teil spielt hierbei die Wassergas-Shift-Reaktion, welche in Gleichung (4-1) angegeben wird. [72]



Diese Korrektur findet an jedem Aggregat statt, an dem sich die Temperatur ändert. Die erste Optimierung findet bereits bei „Abgas HPSR“ statt. Hier wird das eingeleitete „Prozessgas WTII Aus“ zur Reduktion verwendet. Aufgrund des Einsatzes einer Kohlenstoffelektrode und den enormen Temperaturen des Plasmas (siehe **Kapitel 2.4**) kommt es zu einer Sublimierung des Kohlenstoffs, welcher mit dem Abgas anschließend abgezogen wird. Der Kohlenstoffabbau wird mit einem Faktor von $5 \frac{\text{kg}_{\text{Grafit}}}{t_{\text{RS}}}$ laut [20] festgelegt und variabel in Excel durch „C-Eintrag Elektrode / kg“ hinterlegt um an das ausgebrachte Eisen angepasst werden zu können.

Die nächsten Optimierungsschritte finden bei den beiden Wärmetauschern statt. Aufgrund der Komplexität der Berechnung der Ausgangstemperaturen wird zuerst angenommen, dass

sich die Gaszusammensetzung in den Wärmetauschern nicht ändert. Im Anschluss wird mittels FactSage® die neue Gaszusammensetzung berechnet mit Eingangs- und der Ausgangstemperatur der Gase.

Die weiteren Anpassungen der Gaszusammensetzung finden nach der „Blackbox“, vor und nach dem Kompressor und nach der Mischung des „Make Up Gases“ mit dem „Blackbox Aufbereitung Rest Aus“ statt.

In der HPSR-Anlage findet eine Anpassung der Temperatur des eingeleiteten Gases an die flüssige Phase statt. Durch den Reaktorraum und den Abzug des Gases findet jedoch im Anschluss eine Abkühlung des „Abgas HPSR“ statt.

4.3.2 Anpassung Dampfkühler

Der Dampfkühler nach der HPSR Anlage ist nötig, um die Eingangstemperatur des „Abgas WT Ein“ für die 1 $\frac{t}{h}$ sowie des „Abgas WTII Ein“ der 150 $\frac{t}{h}$ Anlage zu senken. Aufgrund der Materialeinschränkung für die weitere Verwendung des Abgases wurde eine maximale Abgastemperatur von 1200 °C für beide Anlagen gewählt. Mittels FactSage® wird die benötigte Wasserzugabe ermittelt, um das Abgas abzukühlen. Durch die automatische Berechnung wird hier die Gaszusammensetzung angepasst.

4.3.3 Berechnung im Wärmetauscher

Die Berechnung der Wärmetauscher basiert auf Gleichung (4-2). Sie beinhaltet den Wärmeübertragungskoeffizienten k und die Übertragungsfläche A , welche spezifisch für den Wärmetauscher sind. Beide Werte können für jeden Wärmetauscher als konstant angesehen werden. Des Weiteren werden die Abgas Eingangstemperatur $T_{AG,ein}$, und die Prozessgas Eingangstemperatur $T_{PG, Ein}$ benötigt, welche sich aus den Berechnungen ergeben. Eine Herausforderung bei der Berechnung ist jedoch die Tatsache, dass die Eingangstemperaturen stets bekannt sind, jedoch die Ausgangstemperatur nicht. Hierfür wird eine Abschätzung sowohl für das Abgas $T_{Annahme AG,Ein}$ als auch Prozessgas $T_{Annahme PG,Ein}$ getroffen.

$$\Delta Q = k \cdot A \cdot \frac{(T_{AG,Ein} - T_{Annahme PG,Aus}) - (T_{Annahme AG,Ein} - T_{PG,Ein})}{\ln \frac{(T_{AG,Ein} - T_{Annahme PG,Aus})}{(T_{Annahme AG,Ein} - T_{PG,Ein})}} \quad (4-2)$$

Aus dieser Gleichung ergibt sich eine übertragene Wärmemenge, welche neue Enthalpie Werte für das Abgas und das Prozessgas ergeben. Dieser Berechnungsvorgang ist eine

iterative Berechnung. Diese wiederholt sich so lange, bis die festgelegte Grenze für die Ausgangstemperatur und die Enthalpie Differenz unterschritten wird.

Die Berechnung der $k \cdot A$ -Werte muss stets für jeden Wärmetauscher einzeln berechnet werden, um genaue Ergebnisse zu erhalten. Die Anfangswerte hierfür sind aus [71] entnommen, wo diese für einen Wärmetauscher einer Midrex-Anlage mit ähnlichen Temperaturen berechnet wurden.

4.4 Beschreibung der Erweiterungen Berechnungsmodell Zarl-Farkas

Das Grundmodell, welches mit den spezifischen Kennzahlen in **Abbildung 4-7** und **Abbildung 4-8** dargestellt ist, auf dem diese Arbeit aufgebaut ist, stammt aus der Dissertation Ermittlung der Grundlagen für die Skalierung von Plasma-Schmelzreduktionsreaktoren für die Eisenherstellung von Zarl [21]. Die Neugestaltung des Anlagenlayouts ist auf folgende Gründe zurückzuführen:

- Die Steigerung der Gasmengen, welche durch die Rückspeisung des rezyklierten Prozessgases zur Kühlung des Abgases vor der Vorwärmung und Vorreduktion durch Plaul und Badr berechnet wurde, siehe **Abbildung 3-1** und **Abbildung 3-2** [19] [20]
- Die Steigerung der Lichtbogenstabilität durch Verwendung von Argon im Prozessgas
- Steigerung der Produktivität durch die Verwendung eines weiteren Wärmetauschers
- Leichtere Abtrennung des Abgases mit verbundener Abscheidung des CO und CO₂ durch einen in sich geschlossenen Gaskreislauf

Dieses Grundmodell wurde zum Vergleich der Anlagenmodelle herangezogen. Die beiden modellierten Systeme, auf denen sich diese Arbeiten beziehen, wurden um folgende Punkte erweitert:

- Startwerte für die Erzzusammensetzung:
 - Erzanalyse mit: Fe₂O₃, FeO, CaO, Al₂O₃, SiO₂, MnO und MgO
- Startwerte für die Zusatzstoffzusammensetzung:
 - Zusatzstoffanalyse mit: Fe₂O₃, FeO, CaO, Al₂O₃, SiO₂, MnO, MgO, CaCO₃ und MgCO₃
- Startwert für Elektrodenabbrand
- Verbesserung der Berechnung der Wärmetauscher
- Erweiterung der Gasströme mit CO und CO₂

- Optimierung der Gaszusammensetzung in Bezug auf Wassergas-Shift-Reaktion
- Berechnung und Auslegung des Kompressors

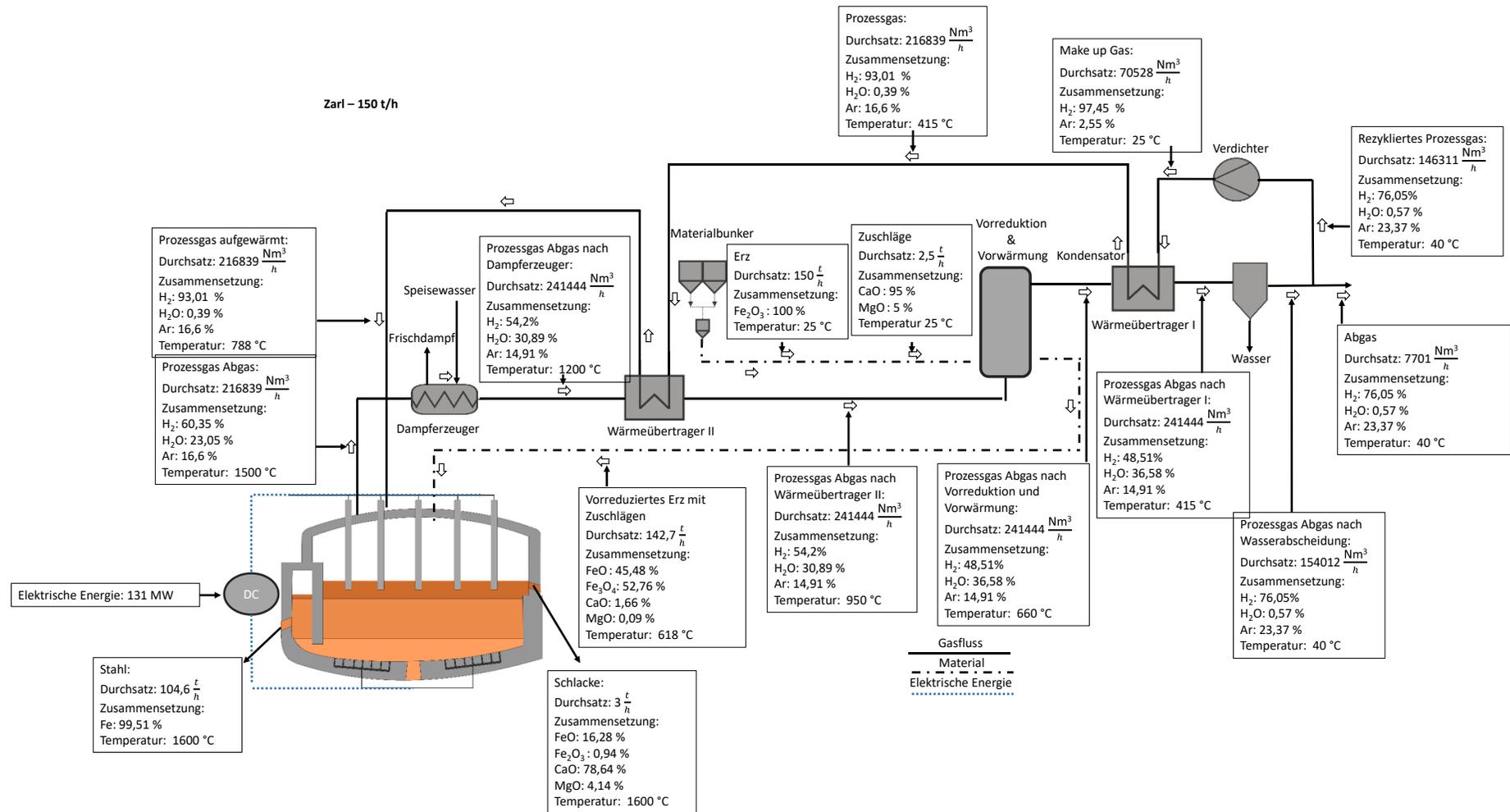


Abbildung 4-7: Fließschema mit Kennzahlen für die industrielle HPSR-Anlage berechnet durch Zarl [21]

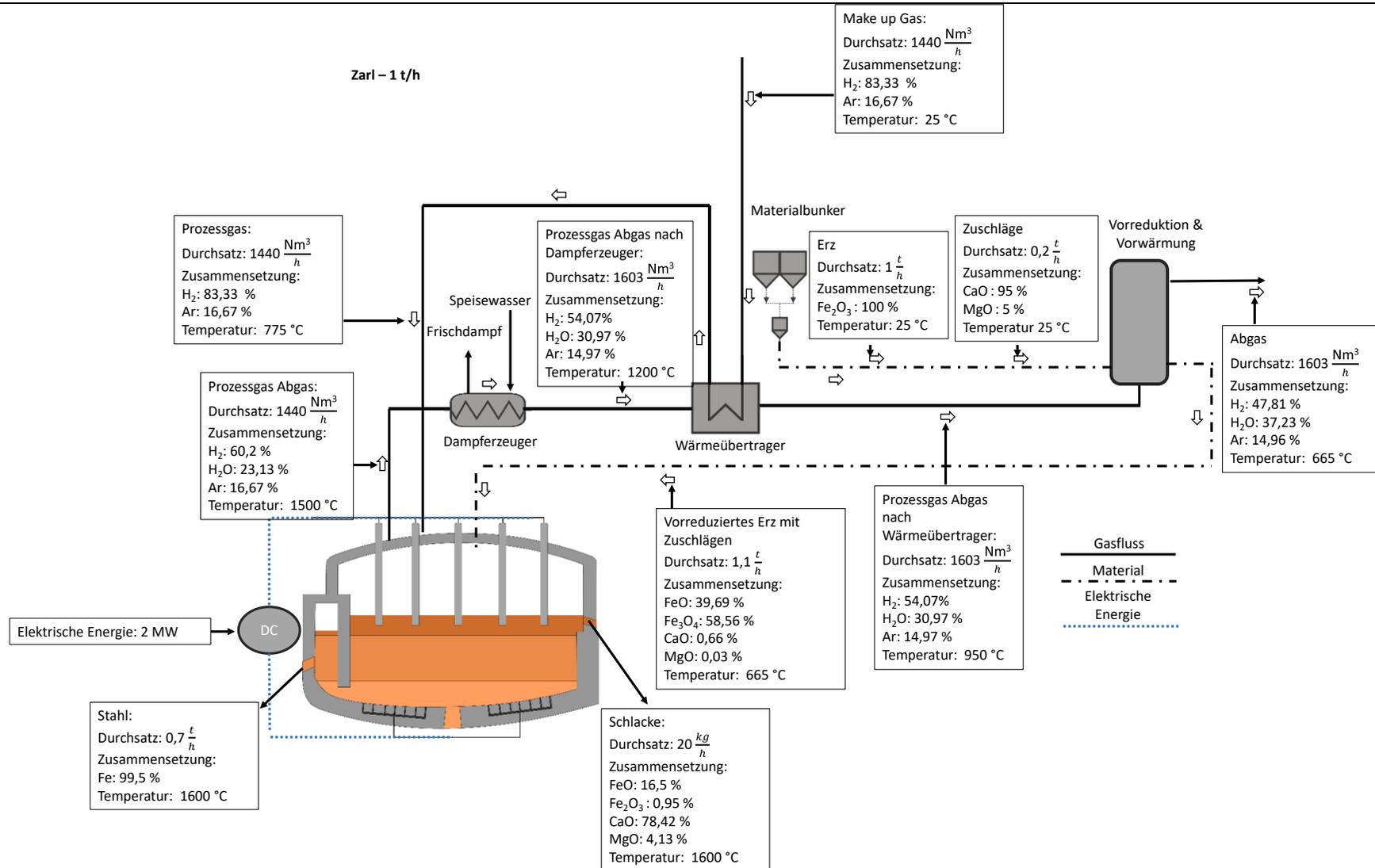


Abbildung 4-8: Fließschema mit Kennzahlen für die HPSR-Pilotanlage berechnet durch Zarl [21]

5 Simulation des HPSR-Kreislaufes

In diesem Kapitel sollen die möglichen Anlagenlayouts der $1 \frac{t}{h}$ - und der $150 \frac{t}{h}$ -Anlagen und deren Auswirkungen auf den Prozess erläutert werden. Die in **Kapitel 4** beschriebenen Modelle werden hierfür herangezogen und mit variablen Startwerten berechnet. Zur Beurteilung welchen Einfluss die einzelnen Parameter haben, wird stets ein Wert variiert und die anderen konstant gehalten. Des Weiteren werden verschiedene Anlagenlayouts simuliert und miteinander verglichen.

5.1 Berechnung der $1 \frac{t}{h}$ -Anlage

Der Simulationsplan für die $1 \frac{t}{h}$ -Anlage ist in **Tabelle 5-I** ersichtlich. Felder mit einem Hacken (✓) geben an, dass dieses Aggregat in Verwendung ist. Mit einem X (✗) markierte Felder zeigen, dass dieses Aggregat in dieser Berechnungsreihe keine Anwendung hat.

Tabelle 5-I: Versuchsplan der Pilotanlage mit gesetzten Zielen und Definition der variablen Parameter

Simulation	Aggregate	Benutzung	Beschreibung
1	Vorreduktion	✓	<u>Aufgabe:</u> Finden geeigneter Prozessparameter
	HPSR	✓	<i>Variation:</i> Wasserstoffzugabe, Zuschlagsmenge
	Wärmetauscher	✓	Ergebnis: Finden geeigneter Prozessparameter für weitere Simulationsschritte
	Abgasfackel	✓	
2	Vorreduktion	✓	<u>Aufgabe:</u> Einfluss der Eingangstemperatur zur Vorreduktion untersuchen
	HPSR	✓	<i>Variation:</i> spezifische Konstanten des Wärmetauschers
	Wärmetauscher	✓	Ergebnis: Einfluss der Eingangstemperatur zur Vorreduktion
	Abgasfackel	✓	
3	Vorreduktion	✓	<u>Aufgabe:</u> Einfluss der HPSR – Parameter untersuchen
	HPSR	✓	<i>Variation:</i> Abstichtemperatur, Abgastemperatur
	Wärmetauscher	✓	Ergebnis: Einfluss der HPSR Parameter auf
	Abgasfackel	✓	
4	Vorreduktion	×	<u>Aufgabe:</u> Einfluss der Vorreduktion untersuchen
	HPSR	✓	<i>Variation:</i> Entfernen der Vorreduktionsanlage
	Wärmetauscher	✓	Ergebnis: Einfluss der Vorreduktion auf den Output
	Abgasfackel	✓	
5	Vorreduktion	✓	<u>Aufgabe:</u> Einfluss des Wärmetauschers untersuchen
	HPSR	✓	<i>Variation:</i> Entfernen des Wärmetauschers
	Wärmetauscher	×	Ergebnis: Einfluss des Wärmetauschers
	Abgasfackel	✓	auf den Output

Für die iterative Berechnung der verschiedenen Anlagenlayouts werden sowohl Erz- als auch Zusatzstoffanalyse angenommen. Das verwendete Erz entspricht der Analyse von Badr, und die Zusatzstoffe werden laut Plaul karbonathaltig gewählt. Die Analyse beider Einsatzstoffe ist in **Tabelle 5-II** zu sehen. [19,20]

Tabelle 5-II: Erz- und Zusatzstoffanalyse der Einsatzstoffe (alle Angaben in %)

	Fe ₂ O ₃	FeO	CaO	Al ₂ O ₃	SiO ₂	MnO	MgO	CaCO ₃	MgCO ₃
Erz	95,5	0,05	0,01	1,32	0,91	0,46	0,04	-	-
Zusatzstoff	1	1	1	1	1	1	1	90	3

5.1.1 Simulation 1

Bei dieser Simulationsreihe sollen geeignete Prozessparameter gefunden werden. Hierfür kommen alle zur Verfügung stehenden Aggregate zum Einsatz. Um repräsentativ die Ergebnisse dieser Simulationen miteinander vergleichen zu können, wird stets nur ein Parameter variiert und die anderen konstant gehalten. Die zu untersuchenden Parameter hierbei sind das Wasserstoff-Erz-Verhältnis und die Zuschlagsmenge.

- Variation $\frac{m_{H_2}^3}{t_{Eisenerz}}$ - Verhältnis

Der Erste variable Parameter, das $\frac{m_{H_2}^3}{t_{Eisenerz}}$ – Verhältnis, dient zum Vergleich mit **Abbildung 3-3**. Die Zuschlagsmenge sowie die spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers werden hierbei konstant gehalten.

Konstante Parameter:

- Zuschlagsmenge: $\frac{1}{60}$ der Erzmengung $\leftrightarrow m_{\text{zuschläge}} = 0,0167 \frac{t}{h}$
- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers: $k \cdot A = 40000 \frac{W}{K}$

Variabler Parameter:

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: Steigerung um $100 \frac{m^3}{h}$ im Bereich von $100-1800 \frac{m^3}{h}$
- Variation der Zuschlagsmenge

Der zweite variable Parameter dient zur Untersuchung des Einflusses der Zuschlagsmenge auf die Eisenausbringung, der prozentuale FeO-Gehalt der Schlacke und den Gasausnutzungsgrad. Bei diesen Berechnungen wird die Übertragungsfläche A des Wärmetauschers erhöht, da sich bei den Simulationen mit variablem $\frac{H_2}{m_{Erz}}$ – Verhältnis zeigte, dass bei höheren Gasströmen der Wärmetauscher nicht ausreichend ausgenutzt wird. Mit

Hilfe von Simulationen wurde $k \cdot A$ so gewählt, dass sich die „Abgas WT Aus“ - Temperatur bei 750-800 °C einstellt, um gute Bedingungen für die Vorreduktion zu erzielen.

Konstante Parameter:

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: $\frac{m_{H_2}^3}{t_{Eisenerz}} = 1500 \frac{m^3}{h}$
- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers: $k \cdot A = 40000 \frac{W}{K}$

Variabler Parameter:

- Zuschlagsmenge: $m_{Zuschläge}$ Steigerung um $0,002 \frac{t}{h}$ im Bereich von $0,002-0,03 \frac{t}{h}$

5.1.1.1 Ergebnisse Simulation 1

In **Tabelle 5-III** und **Abbildung 5-1** sind die Ergebnisse der Versuchsreihe 1: Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses ersichtlich.

Tabelle 5-III: Ergebnisse Simulation 1.1: Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der $1 \frac{t}{h}$ Anlage

Wasserstoff-Erz-Verhältnis / $\frac{m_{H_2}^3}{t_{Eisenerz}}$	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$
100	0,00	71,29	94,95	0,00
200	0,00	88,83	40,24	0,00
300	11,45	88,71	37,26	127,31
400	24,28	88,11	36,65	73,12
500	36,57	87,33	35,96	57,29
600	48,07	86,29	35,14	50,27
700	58,45	84,89	34,11	46,82
800	68,14	82,84	32,71	44,88
900	81,10	77,27	29,24	41,97
1000	89,43	68,20	24,39	41,60
1100	92,00	62,75	21,81	43,20
1200	93,20	59,31	20,21	45,80
1300	94,09	56,19	18,88	48,53

1400	94,78	53,34	17,66	51,32
1500	95,33	50,75	16,58	54,15
1600	95,79	48,30	15,58	57,00
1700	96,84	41,60	12,91	59,95
1800	98,92	15,75	7,02	61,93

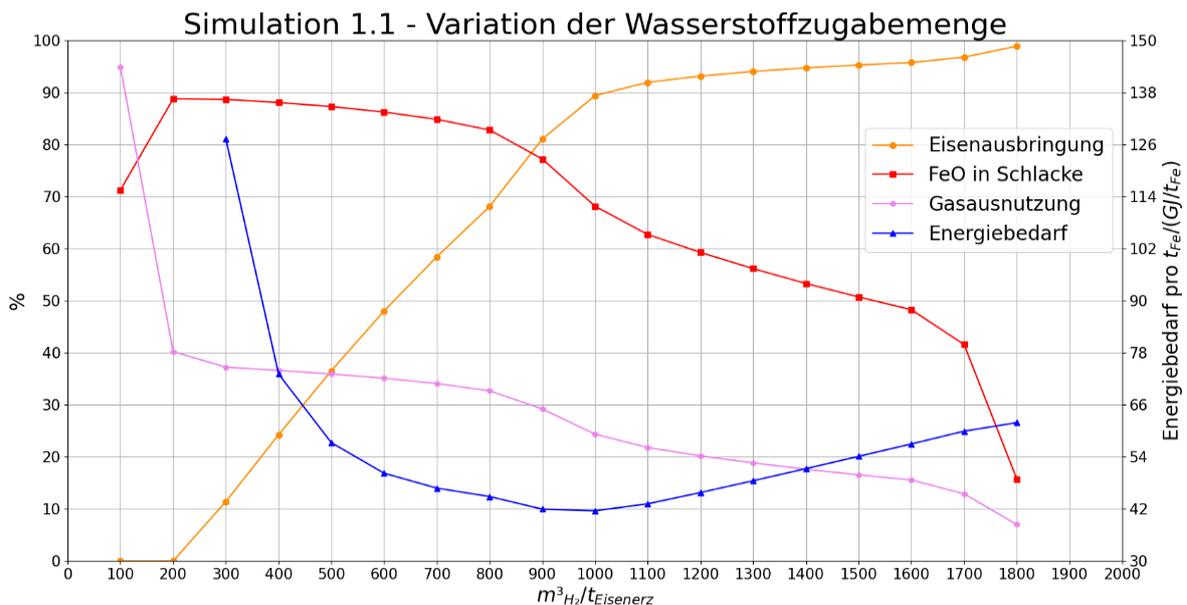


Abbildung 5-1: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.1: Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der 1 $\frac{t}{h}$ Anlage

In Vergleich zu **Abbildung 3-3** ist dabei ersichtlich, dass die Linien Eisenausbringung, FeO in Schlacke und die Gasausnutzung ähnliche Trends, jedoch einen deutlichen Unterschied der einzelnen Werte im direkten Vergleich aufweisen. Bei der Simulation ergeben sich bei einem Wasserstoff-Erz-Verhältnis von 1000 $\frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ markante Punkte, die hier näher betrachtet werden.

Bei den Berechnungen wird an diesem Punkt eine Eisenausbringung von 89,43 % erreicht. Laut Badr liegt dieser bereits bei 98 %.[20] Dieser Wert wird erst bei deutlich höheren Zugaben von 1800 $\frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ erreicht. Hier zeigt sich, dass bei geringer Gasausnutzung trotzdem hohe Werte beim Eisenausbringen erzielt werden aufgrund des hohen spezifischen Wasserstoff-Erz-Verhältnis.

Ein weiterer deutlicher Unterschied liegt hierbei auch in der FeO-Verschlackung. Diese liegt bei Badr bei 32 %. Dieser Wert wird erneut erst bei einem Wasserstoff-Erz-Verhältnis von

1800 $\frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ erreicht, bzw. mit 15,75 % deutlich unterschritten. Bei 1000 $\frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ berechnet sich ein deutlich höherer Wert von 68,2 %, dieser korreliert mit dem Ergebnis der Eisenausbringung.

Die Linie der Gasausnutzung zeigt nicht nur einen ähnlichen Verlauf, sondern die Werte stimmen gut überein. Bei 1000 $\frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ liegt diese bei 24,39 %.

Bei dem Verlauf des Energiebedarfs ist zu erkennen, dass diese von 300-600 $\frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ einen steilen Abfall verzeichnet. Grund hierfür ist die deutliche Zunahme des produzierten Eisens. Anschließend ist ein flacherer Kurvenverlauf zu verzeichnen bis 1000 $\frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$, ab diesem Punkt ist ein Anstieg zu erkennen. Dieser ist auf die Tatsache rückzuführen, dass der Energiebedarf zur Produktion von H_2 linear ansteigt, jedoch die Kurve des Eisenausbringens abflacht. Bei der 1 $\frac{t}{h}$ Anlage liegt der Energiebedarf an dieser Stelle bei 41,6 $\frac{GJ}{t_{RS}}$. Dieser Wert liegt deutlich über jenem bereits etablierter Prozesse zur Produktion von Roheisen, welche bei rund 15 $\frac{GJ}{t_{RS}}$ liegen. [73] Dies ist auf die fehlende Rezyklierung der des Wasserstoffes und die teilweisen geringen Ausnutzungsgrade zurückzuführen.

Bei der zweiten Versuchsreihe wurde die Zuschlagsmenge bei den Berechnungen schrittweise erhöht. Die Ergebnisse sind in **Tabelle 5-IV** und in **Abbildung 5-2** grafisch dargestellt.

Tabelle 5-IV: Ergebnisse Simulation 1.2: Variation Zuschlagsmenge der 1 $\frac{t}{h}$ Anlage

Zuschlagsmenge / $\frac{t}{h}$	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$
0,002	93,00	65,94	22,14	55,29
0,004	92,87	65,39	22,12	55,36
0,006	92,73	64,89	22,09	55,43
0,008	92,60	64,43	22,07	55,51
0,01	92,46	64,01	22,04	55,59
0,012	92,31	63,62	22,01	55,67
0,014	92,17	63,26	21,99	55,76
0,016	92,02	62,93	21,96	55,84

0,018	91,87	62,62	21,93	55,93
0,02	91,72	62,34	21,91	56,02
0,022	91,56	62,08	21,88	56,11
0,024	91,40	61,83	21,85	56,20
0,026	91,24	61,61	21,82	56,29
0,028	91,08	61,40	21,79	56,39
0,03	90,92	61,20	21,77	56,49

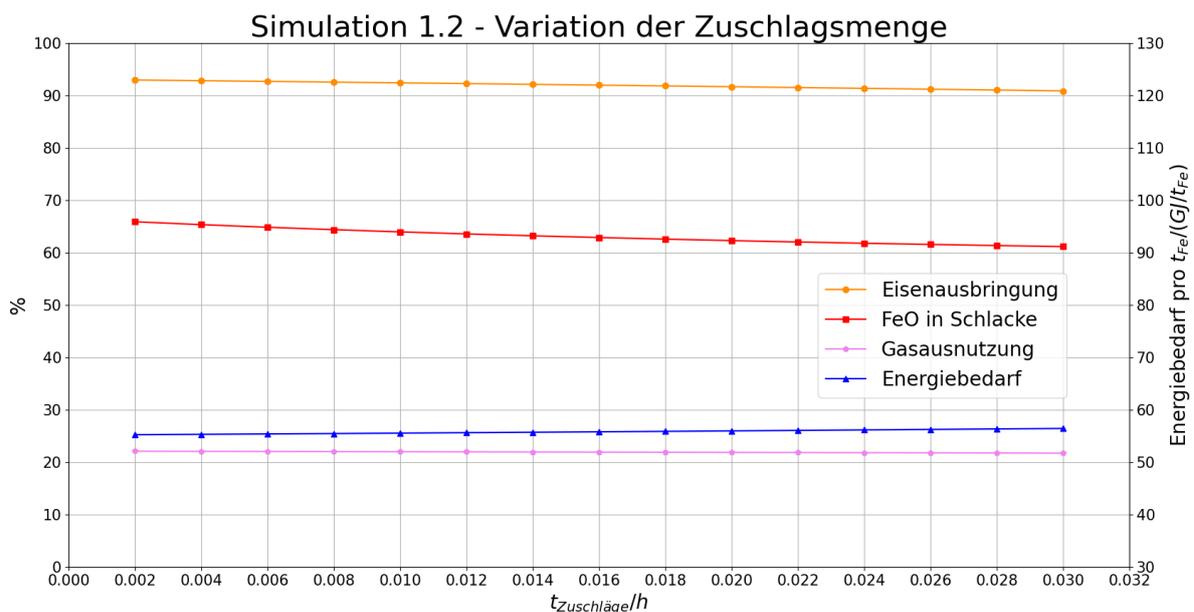


Abbildung 5-2: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.2: Variation der Zuschlagsmenge der 1 $\frac{t}{h}$ Anlage

Hier ist erkennbar, dass sowohl die Eisenausbringung, die Gasausnutzung und der Energiebedarf eine fallende Gerade bilden. Der Grund hierfür liegt in der Verschlackung des Eisens, und des Auftretens von Fe_2O_3 in Schlacke des Outputs. Hierbei wird mehr Eisen in der Schlacke abgebunden als durch zuvor auftretendes FeO. Deshalb sinkt die Eisenausbringung trotz fallendem FeO-Gehalte in der Schlacke.

Die FeO-Gehalte der Schlacke verzeichnen einen leichten Abfall bei Steigerung der Zuschlagsmenge. Dies ist auf die größere Schlackenmenge rückzuführen.

5.1.2 Simulation 2

Bei dieser Simulationsreihe soll der Einfluss der Eingangstemperatur der Vorreduktion („Abgas WT Aus“) näher untersucht werden. Aufgrund der Tatsache, dass die

Eingangstemperatur nicht nur von den spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers abhängig ist, sondern auch von den durchströmenden Gasmengen, müssen diese Parameter so konstant wie möglich gehalten werden. Wie in Formel (4-2) beschrieben, hängt die Änderung der Enthalpie in Bezug auf die spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers mit dem Produkt $k \cdot A$ zusammen. Hierbei soll der Einfluss auf die Eisenausbringung, die FeO-Verschlackung und den Gasausnutzungsgrad in Bezug auf die Eingangstemperatur der Vorreduktion und Vorwärmung dargestellt werden.

Konstante Parameter

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: $\frac{m_{H_2}^3}{t_{Eisenerz}} = 1500 \frac{m^3}{h}$
- Zuschlagsmenge: $\frac{1}{60}$ der Erzmenge $\leftrightarrow m_{Zuschläge} = 0,0167 \frac{t}{h}$

Variabler Parameter:

- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers: Steigerung $k \cdot A$ in $4000 \frac{W}{K}$ Schritten im Bereich $4000-52000 \frac{W}{K}$

5.1.2.1 Ergebnisse Simulation 2

Besonderes Augenmerk bei der Versuchsreihe 2 liegt auf der Abgastemperatur nach dem Wärmetauscher. Diese gibt Auskunft auf die Wirksamkeit der anschließenden Vorwärm- und Vorreduktionsanlage und wie gut das Prozessgas vorgeheizt werden konnte. Die Ergebnisse der Variation des Produktes der spezifischen Kennzahlen $k \cdot A$ sind in **Tabelle 5-V** und grafisch in **Abbildung 5-3** dargestellt.

Tabelle 5-V: Ergebnisse Simulation 2: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers der $1 \frac{t}{h}$ Anlage

Produkt spezifischer Kennzahlen / $\frac{W}{K}$	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$	Temperatur Abgas WT Aus / °C
4000	95,30	50,54	16,55	54,17	1134,63
8000	95,30	50,57	16,58	54,07	1075,86
12000	95,29	50,58	16,59	53,99	1022,89
16000	95,29	50,60	16,59	53,91	974,83
20000	95,29	50,61	16,59	53,89	931,21

24000	94,61	53,75	17,92	54,44	893,09
28000	93,38	58,37	19,97	55,16	858,62
32000	92,04	62,32	21,80	55,95	827,31
36000	91,92	62,62	21,94	55,95	797,35
40000	91,92	62,63	21,94	55,91	770,41
44000	91,91	62,65	21,95	55,87	744,15
48000	91,91	62,66	21,95	55,85	722,71
52000	91,91	62,67	21,96	55,82	699,10

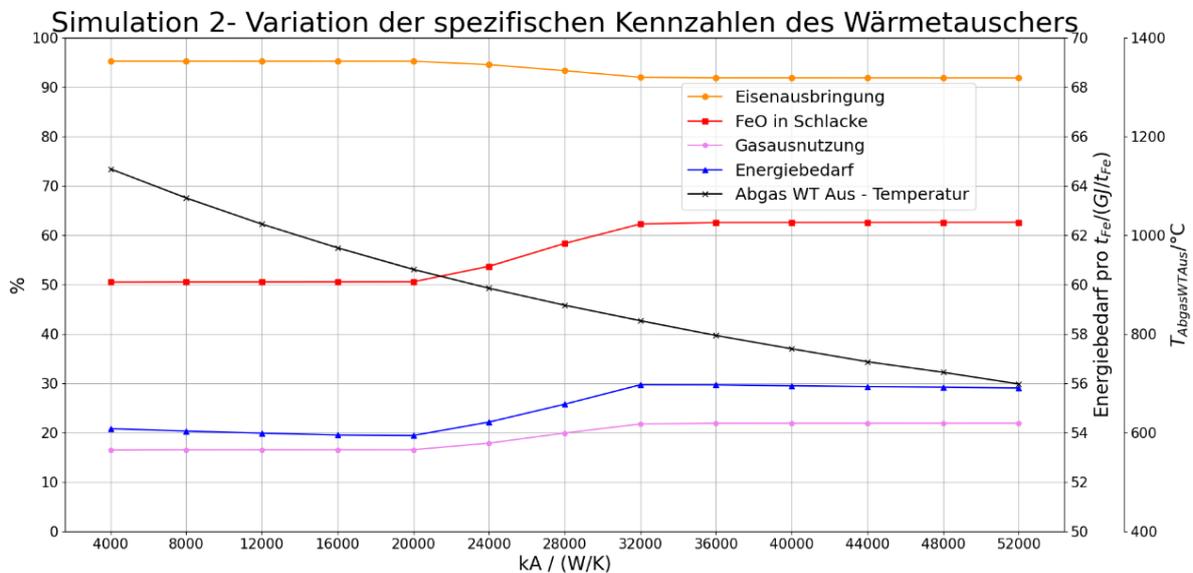


Abbildung 5-3: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 2: Variation der Zuschlagsmenge der 1 $\frac{t}{h}$ Anlage

Bei der Eisenausbringung ist ersichtlich, dass zwischen 4000-20000 $\frac{W}{K}$ die Werte konstant auf ca. 95,3 % bleiben. Dies entspricht einem Temperaturabfall des Abgases aus dem Wärmetauscher von 1134,63 °C auf 931,21 °C. In diesem Bereich bleiben sowohl der FeO-Gehalt der Schlacke mit 50,54-50,61 %, die Gasausnutzung mit 16,55-16,59 % und der Energiebedarf mit 54,17-53,89 $\frac{GJ}{t_{RS}}$ annähernd konstant. Der schwache Abwärtstrend des Energiebedarfes von 54,17 $\frac{GJ}{t_{RS}}$ auf 53,89 $\frac{GJ}{t_{RS}}$ ist auf die starke Wirkung der Vorwärm- und Vorreduktionsanlage zurückzuführen.

Danach erfolgt ein stärkerer Abfall der Eisenausbringung im Bereich von 24000-32000 $\frac{W}{K}$ von 94,61 % auf 92,04 %. Dies entspricht dem Temperaturbereich 893,09-827,31 °C. Im Gegenzug dazu steigen der FeO-Gehalt in der Schlacke auf 62,32 %, die Gasausnutzung auf

21,8 % und der Energiebedarf auf $55,95 \frac{\text{GJ}}{t_{\text{Fe}}}$. In diesem Bereich erfolgt demnach weder eine gute Vorwärmung und Vorreduktion noch eine ausreichende Erwärmung des Prozessgases.

Der Temperaturabfall der gesamten Versuchsreihe verläuft konstant. Bei der Berechnung der spezifischen Kennzahlen im Bereich von $32000\text{-}52000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$ zeigen sich wie im ersten Bereich erneut keine gravierenden Änderungen. Die Eisenausbringung beträgt hier 92,04-91,11 %, der FeO Gehalt der Schlacke 62,32-62,67 %, die Gasausnutzung 21,8-21,96 % und der Energiebedarf $55,95\text{-}55,82 \frac{\text{GJ}}{t_{\text{RS}}}$. Die Konstanz in diesem Bereich lässt darauf schließen, dass hier die Vorwärmung des Prozessgases einen großen Einfluss auf diese Parameter hat. Dies geschieht trotz der immer kleiner werdenden Auswirkung der Vorwärmung und Vorreduktion aufgrund der fallenden Abgastemperatur.

5.1.3 Simulation 3

Simulation 3 ermittelt den Einfluss der HPSR-Parameter. In den vorangegangenen Versuchen wurden stets die Abstich- und die Abgastemperatur konstant gehalten. In dieser Versuchsreihe werden diese beiden Parameter variiert und deren Einfluss untersucht.

Konstante Parameter

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: $\frac{m_{\text{H}_2}^3}{t_{\text{Eisenerz}}} = 1500 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$
- Zuschlagsmenge: $\frac{1}{60}$ der Erzmengung $\leftrightarrow m_{\text{zuschläge}} = 0,0167 \frac{\text{t}}{\text{h}}$
- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers: $k \cdot A = 40000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$
- Abgastemperatur: $T_{\text{Abgas}} = 1500 \text{ }^\circ\text{C}$

Variabler Parameter:

- Abstichtemperatur: Steigerung T_{Abgas} um je 100°C im Bereich von $1600\text{-}1700^\circ\text{C}$

Bei der Variation des zweiten Parameters soll die Abstichtemperatur T_{Abstich} konstant gehalten werden. Aufgrund der Erweiterung des Bereiches der Abgastemperatur der HPSR-Anlage wird die Temperatur nach dem Verdampfungskühler auf $900 \text{ }^\circ\text{C}$ gesenkt.

Konstante Parameter

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis : $\frac{m_{\text{H}_2}^3}{t_{\text{Eisenerz}}} = 1500 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$
- Zuschlagsmenge: $\frac{1}{60}$ der Erzmengung $\leftrightarrow m_{\text{zuschläge}} = 0,0167 \frac{\text{t}}{\text{h}}$

- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers: $k \cdot A = 40000 \frac{W}{K}$
- Abstichtemperatur: $T_{\text{Abstich}} = 1600 \text{ }^\circ\text{C}$
- Abgas WT Ein: $T_{\text{Abgas WT II Ein}} = 900 \text{ }^\circ\text{C}$

Variabler Parameter:

- Abgastemperatur: Steigerung T_{Abgas} um $50 \text{ }^\circ\text{C}$ im Bereich $1000\text{-}1500 \text{ }^\circ\text{C}$

5.1.3.1 Ergebnisse Simulation 3

Bei der Simulationsreihe 3 ist der Einfluss der Output-Parameter Abgastemperatur und Abstichtemperatur untersucht worden. Die Ergebnisse sind in **Tabelle 5-VI** und **Tabelle 5-VII** sowie in **Abbildung 5-4** und **Abbildung 5-5** grafisch dargestellt. Bei der Variation der Abgastemperatur ist jedoch zu beachten, dass der Energiebedarf durch die Gleichgewichtsberechnung bei sinkender Temperatur zunimmt. Diese Temperatur soll jedoch die Verluste der Anlage bis hin zur Abgasleitung darstellen und muss daher als Verlustleistung angesehen werden. Aus diesem Grund wird bei dieser Versuchsreihe der Differenz-Energiebetrag ΔE laut Gleichung (5-1) berechnet. Hierbei wird die Differenz des Energiebedarfes bei $1500 \text{ }^\circ\text{C}$ und der aktuell gewählten Temperatur der gesamten Anlage ($E_{T_{\text{Abgas}}, 1500^\circ\text{C}} - E_{T_{\text{Abgas}}, \text{aktuell}}$) und jener am Dampferzeuger ($E_{\text{Dampfkühler}, 1500^\circ\text{C}} - E_{\text{Dampfkühler}, \text{aktuell}}$) summiert.

$$\Delta E = (E_{T_{\text{Abgas}}, 1500^\circ\text{C}} - E_{T_{\text{Abgas}}, \text{aktuell}}) - (E_{\text{Dampfkühler}, 1500^\circ\text{C}} - E_{\text{Dampfkühler}, \text{aktuell}}) \quad (5-1)$$

Tabelle 5-VI: Ergebnisse Simulation 3.1: Variation der Abgastemperatur der $1 \frac{t}{h}$ HPSR-Anlage

Abgastemperatur / °C	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Differenz- Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{Fe}}$
1000	91,91	62,65	21,92	15,28
1050	91,91	62,65	21,93	13,80
1100	91,91	62,65	21,93	12,32
1150	91,91	62,65	21,93	10,81
1200	91,91	62,65	21,94	9,30
1250	91,91	62,64	21,94	7,78
1300	91,91	62,64	21,94	6,24
1350	91,91	62,64	21,94	4,69

1400	91,92	62,64	21,94	3,14
1450	91,92	62,64	21,94	1,57
1500	91,92	62,64	21,95	0,00

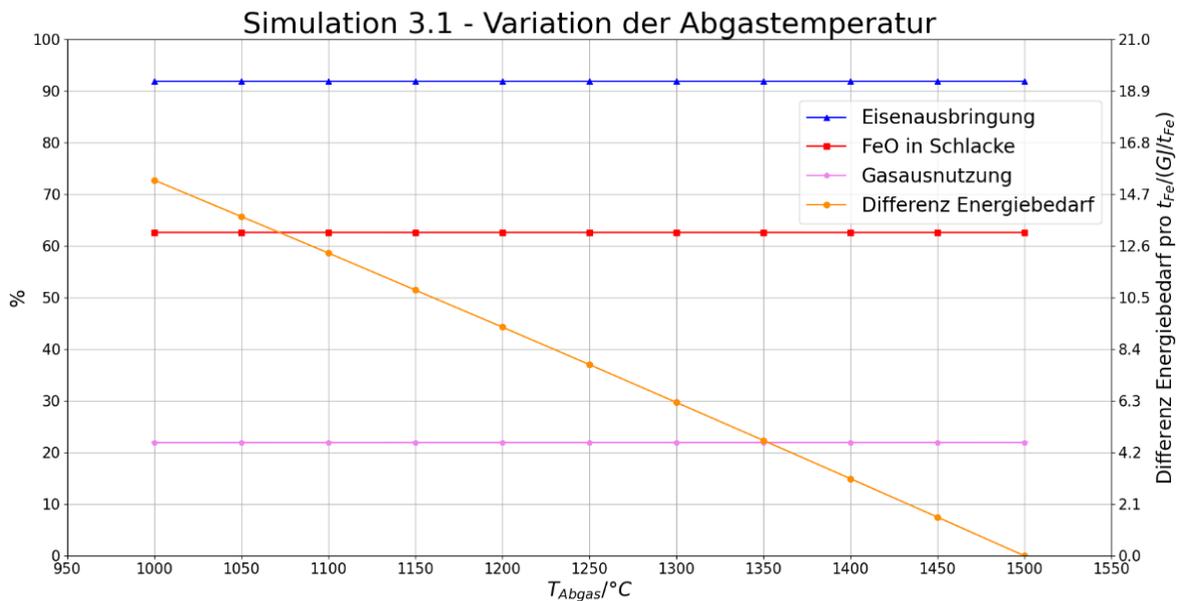


Abbildung 5-4: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 3.1: Variation der Abgastemperatur der 1 $\frac{t}{h}$ HPSR-Anlage

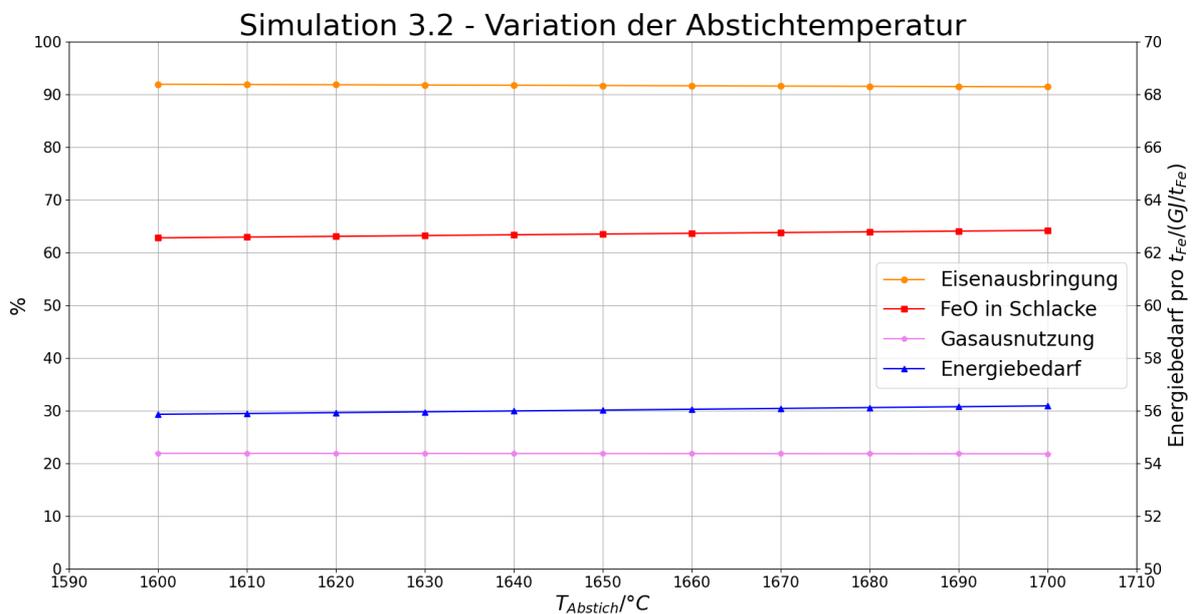
Bei dieser Berechnungsreihe ist ersichtlich, dass sich die Werte der Eisenausbringung mit 91,91 % auf 91,92 %, des FeO-Gehaltes in der Schlacke von 62,65 % auf 62,64 % und die Gasausnutzung mit einer Steigerung von 21,92 % auf 21,95 % bei einer Erhöhung der Abgastemperatur von 1000 °C auf 1500 °C fast nicht verändert.

Die einzig nennenswerte Änderung liegt im Differenz-Energiebetrag, welcher von $15,25 \frac{GJ}{t_{RS}}$ bei 1000 °C auf $1,57 \frac{GJ}{t_{RS}}$ bei bereits 1450 °C Abgastemperatur sinkt. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass die Variation dieses Parameters direkten Einfluss auf die Vorwärmung und Vorreduktion des Erzes, der Zuschläge sowie die Aufwärmung des Prozessgases hat.

Die Ergebnisse der Versuchsreihe zur Variation der Abstichttemperatur sind **Tabelle 5-VII** in und in **Abbildung 5-5** grafisch dargestellt.

Tabelle 5-VII: Ergebnisse Simulation 3.2: Variation der Abstichtemperatur der 1 $\frac{t}{h}$ HPSR-Anlage

Abstichtemperatur / °C	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$
1000	91,97	62,82	21,95	55,87
1050	91,92	62,97	21,94	55,90
1100	91,87	63,12	21,94	55,93
1150	91,82	63,26	21,93	55,97
1200	91,77	63,41	21,92	56,00
1250	91,72	63,55	21,91	56,03
1300	91,68	63,69	21,90	56,06
1350	91,63	63,83	21,89	56,09
1400	91,58	63,97	21,88	56,13
1450	91,53	64,11	21,87	56,16
1500	91,48	64,25	21,86	56,19

**Abbildung 5-5:** Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 3.2: Variation der Abstichtemperatur der 1 $\frac{t}{h}$ HPSR-Anlage

Wie bereits in **Abbildung 5-4** ist hier in **Abbildung 5-5** ersichtlich, dass der Einfluss der Output-Parameter bei der Steigerung der Abstichtemperatur von 1600 °C auf 1700°C keine gravierenden Unterschiede hervorruft. Die Eisenausbringung sinkt von 91,97 % auf 91,48 %

der FeO-Gehalt der Schlacke steigt von 62,82 % auf 64,25 % und die Gasausnutzung sinkt von 21,95 auf 21,86 %. Auch hier ist der Aufwärtstrend im Energiebedarf ersichtlich. Dieser steigt von $55,87 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$ auf $56,19 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$.

5.1.4 Simulation 4

In der vierten Versuchsreihe wird der Einfluss der Vorwärm- und Vorreduktionsanlage untersucht. Aufgrund der Entfernung dieses Aggregates muss hier auch die Zusatzstoffanalyse angepasst werden, da kein CO₂ mehr abgeschieden werden kann.

Konstante Parameter

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: $\frac{m_{\text{H}_2}^3}{t_{\text{Eisenerz}}} = 1500 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$
- Zuschlagsmenge: $\frac{1}{60}$ der Erzmengung $\leftrightarrow m_{\text{Zuschläge}} = 0,0167 \frac{\text{t}}{\text{h}}$
- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers: $k \cdot A = 40000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$

Geänderte Parameter:

- Entfernung des Vorwärme- und Vorreduktionsaggregates
- Anpassung der Zusatzstoffe: Keine CO₂-haltigen Einsatzstoffe

Die verwendete Zusatzstoff Analyse ist in **Tabelle 5-VIII** zu finden.

Tabelle 5-VIII: Optimierte Zusatzstoffanalyse für Simulation4 ohne Wärmetauscher und CO₂ haltige Einsatzstoffe (alle Angaben in %)

	Fe ₂ O ₃	FeO	CaO	Al ₂ O ₃	SiO ₂	MnO	MgO	CaCO ₃	MgCO ₃
Zusatzstoff	1	1	90	1	1	1	5	-	-

Aufgrund der fehlenden Variablen zum Vergleich einzelner Parameter wird hier der Simulation 4 mit den gewählten Grundeinstellungen gegenübergestellt. Hier wurden folgende Parameter festgelegt:

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: $\frac{m_{\text{H}_2}^3}{t_{\text{Eisenerz}}} = 1500 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$
- Zuschlagsmenge: $\frac{1}{60}$ der Erzmengung $\leftrightarrow m_{\text{Zuschläge}} = 0,0167 \frac{\text{t}}{\text{h}}$
- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers: $k \cdot A = 40000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$
- Abstichttemperatur: $T_{\text{Abstich}} = 1600 \text{ }^\circ\text{C}$
- Abgastemperatur: $T_{\text{Abgas}} = 1500 \text{ }^\circ\text{C}$

- Temperatur nach Verdampfungskühler: $T_{\text{Abgas WTII EIN}} = 1200 \text{ °C}$

5.1.4.1 Ergebnisse Simulation 4

Die Ergebnisse im Vergleich mit einer voll ausgestatteten HPSR-Anlage sind in **Tabelle 5-IX** aufgelistet.

Tabelle 5-IX: Ergebnisse Simulation 4: Vergleich des vollausgestatteten Anlagenlayouts mit festgelegten Standardparameter und dem Anlagenlayout ohne Vorwärm- und Vorreduktionsanlage der $1 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ HPSR-Anlage

	Standardparameter	Simulation4
Eisenausbringung / %	91.92	85.52
FeO in Schlacke / %	62.63	66.42
Gasausnutzung / %	21.94	24.55
Energiebedarf / $\frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$	55.91	56.86

In **Tabelle 5-IX** ist ersichtlich, dass die Entfernung des Vorwärm- und Vorreduktionsaggregates deutlichen Einfluss auf die spezifischen Kennzahlen der HPSR-Anlage hat. Im Vergleich zum vollständig ausgeführten Anlagenlayout zeigt sich eine Reduzierung in der Eisenausbringung von 89,8 % auf 85,52 %, bei der FeO-Verschlackung eine Steigerung von 62,63 % auf 66,42 % und im Energiebedarf von $55,91 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$ auf $56,86 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$. Die einzige Verbesserung durch diese Fahrweise zeigt sich in der Gasausnutzung, welche sich von 21,94 % auf 24,55 % steigern lässt.

5.1.5 Simulation 5

Bei der letzten Simulation soll der Wärmetauscher entfernt werden. Daher muss die Abgastemperatur mittels Verdampfungskühler stärker gesenkt werden, was einen höheren H₂O-Gehalt nach sich zieht.

Konstante Parameter:

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: $\frac{m_{\text{H}_2}^3}{t_{\text{Eisenerz}}} = 1500 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$
- Zuschlagsmenge: $\frac{1}{60}$ der Erzmengung $\leftrightarrow m_{\text{Zuschläge}} = 0,0167 \frac{\text{t}}{\text{h}}$
- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers: $k \cdot A = 40000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$

Geänderte Parameter:

- Entfernung des Wärmetauschers
- Temperatur nach Verdampfungskühler: $T_{\text{Abgas WTII EIN}} = 750 \text{ °C}$

Das Anlagenlayout mit der Entfernung des Wärmetauschers wird erneut mit dem voll ausgestatteten Layout, welches in **Kapitel 5.1.4** bereits beschrieben wurde verglichen.

Tabelle 5-X: Ergebnisse Simulation5: Vergleich des vollausgestatteten Anlagenlayouts mit festgelegten Standardparameter und dem Anlagenlayout ohne Wärmetauscher der 1 $\frac{t}{h}$ HPSR-Anlage

	Standard Parameter	Simulation5
Eisenausbringung / %	91,92	90,19
FeO in Schlacke / %	62,63	62,66
Gasausnutzung / %	21,94	21,96
Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$	55,91	55,85
$T_{\text{Erz Vorreduziert}} / \text{°C}$	569,12	585,44
H ₂ O in Reduktionsgas / %	26,33	39,11

Die Ergebnisse im Vergleich der Anlagenlayouts einer voll ausgestatteten HPSR-Anlage und jener ohne Wärmetauscher weisen keine sonderlichen Unterschiede auf. Ein Grund hierfür könnte die gesteigerte Vorwärmung des Einsatzmaterials sein, welche in **Tabelle 5-X** angegeben ist. Diese Steigerung des Wärmehaushaltes ist auf die deutlich größere Menge von H₂O im Abgas nach dem Verdampfungskühler zurückzuführen, welche durch die benötigte Erhöhung der Kühlleistung zustande kommt.

5.1.6 Rohrauslegung

Aufgrund der Sicherheitsrisiken durch den Einsatz von Wasserstoff muss auch auf die Rohrauslegung besonderes Augenmerk gelegt werden. In dieser Arbeit sollen die Dimensionen der Rohre der verschiedenen Anlagen berechnet werden. Dies geschieht laut Horlacher [74] durch die Gleichung (5-2) in der der Volumenstrom \dot{Q} und die Gasgeschwindigkeit v ausschlaggebend sind. Diese Gleichung gilt im Bereich von inneren Drücken $p_i \leq 16 \text{ bar}$ in bei $v = 5\text{-}15 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Bei $p_i > 16 \text{ bar}$ ist eine Strömungsgeschwindigkeit von $20 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ nicht zu überschreiten. Für die Berechnungen wurden die Drücke mit 2 bar, 4 bar und 6 bar angenommen und jeweils für Geschwindigkeiten mit $5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $10 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ und $15 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Der Volumenstrom ist sowohl abhängig von dem vorherrschenden Drücken, als auch der

Temperatur. Deshalb wird der Volumenstrom direkt von Factsage® berechnet und in die Gleichung (5-2) eingegeben.

$$d = \sqrt{\frac{4 \cdot \dot{Q}}{\pi \cdot v}} \quad (5-2)$$

Daher werden entsprechende Strömungsgeschwindigkeiten angenommen und mittels vorhandenen Volumenstrom wird auf den erforderlichen Rohrdurchmesser zurückgerechnet. Die nötigen Rohrprofile für die 1 $\frac{t}{h}$ Pilotanlage werden sowohl für ein voll ausgestattetes als auch ein Anlagenlayout ohne Wärmetauscher berechnet. In **Tabelle 5-XI** und **Tabelle 5-XII** sind die Ergebnisse für die beiden Szenarien zu finden.

Tabelle 5-XI: Ergebnisse zur Berechnung der nötigen Rohrdurchmesser der einzelnen Zulaufleitungen jeglicher Aggregate der voll ausgestatteten 1 $\frac{t}{h}$ HPSR-Anlage (alle Einheiten in m)

Druck / bar	Geschwindigkeit / (ms ⁻¹)	Abgas HPSR	Abgas WT Ein	Abgas WT Aus	Gas zur Nachverbrennung	Prozessgas WT Aus	Make Up Gas
2	5	0.64	0.64	0.62	0.29	0.48	0.30
	10	0.46	0.46	0.44	0.20	0.34	0.21
	15	0.37	0.37	0.36	0.16	0.28	0.18
4	5	0.46	0.46	0.44	0.20	0.34	0.21
	10	0.32	0.32	0.31	0.14	0.24	0.15
	15	0.26	0.26	0.25	0.12	0.19	0.12
6	5	0.37	0.37	0.36	0.16	0.28	0.18
	10	0.26	0.26	0.25	0.12	0.19	0.12
	15	0.21	0.21	0.21	0.10	0.16	0.10

Tabelle 5-XII: Ergebnisse zur Berechnung der nötigen Rohrdurchmesser der einzelnen Zulaufleitungen jeglicher Aggregate der 1 $\frac{t}{h}$ HPSR-Anlage ohne Wärmetauscher (alle Einheiten in m)

Druck / bar	Geschwindigkeit / (ms^{-1})	Abgas HPSR	Abgas WT Ein	Abgas WT Aus	Gas zur Nachverbrennung	Prozessgas WT Aus	Make Up Gas
2	5	0.64	0.57	0.31	0.48	0.31	0.64
	10	0.46	0.40	0.22	0.34	0.22	0.46
	15	0.37	0.33	0.18	0.28	0.18	0.37
4	5	0.46	0.40	0.22	0.48	0.22	0.46
	10	0.32	0.28	0.16	0.34	0.16	0.32
	15	0.26	0.23	0.13	0.28	0.13	0.26
6	5	0.37	0.33	0.18	0.48	0.18	0.37
	10	0.26	0.23	0.13	0.34	0.13	0.26
	15	0.21	0.19	0.10	0.28	0.10	0.21

Beim Vergleich der Anlagenlayouts in Bezug auf die Rohrauslegung sind nur wenige Unterschiede festlegbar. Beachtlich ist jedoch, dass trotz der stärkeren Kühlung, verbunden mit Erhöhung des H_2O -Dampfes, bei der HPSR-Anlage ohne Wärmetauscher nach dem Verdampfungskühler kleinere Rohrdurchmesser benötigt werden.

5.2 Berechnung der 150 $\frac{t}{h}$ – Anlage

Im Unterschied zu der Pilotanlage, werden stets alle Aggregate eingesetzt. Die Anzahl aller Aggregate ist in **Abbildung 4-4** dargestellt. In **Tabelle 5-XIII** ist der Versuchsplan für die 150 $\frac{t}{h}$ Anlage dargestellt. Die gesamten variablen Prozessparameter sind einmal in **Kapitel 5.2.1** unter der Versuchsreihe zum Gas Bleed ersichtlich. Anschließend werden nur noch die neu eingestellten Konstanten sowie die neuen variablen Parameter angeführt.

Tabelle 5-XIII: Versuchsplan 150 $\frac{t}{h}$ Anlage

Simulation	Beschreibung
1	<p><u>Aufgabe:</u> Finden geeigneter Prozessparameter</p> <p><i>Variation:</i> Gas Bleed, Wasserstoffzugabe, Zuschlagsmenge</p> <p>Ergebnis: Finden geeigneter Prozessparameter für weitere Simulationsschritte</p>
2	<p><u>Aufgabe:</u> Einfluss der Eingangstemperatur zur Vorreduktion untersuchen</p> <p><i>Variation:</i> spezifische Konstanten beider Wärmetauscher</p> <p>Ergebnis: Einfluss der Eingangstemperatur zur Vorreduktion</p>
3	<p><u>Aufgabe:</u> Einfluss der HPSR – Parameter untersuchen</p> <p><i>Variation:</i> Abstichtemperatur, Abgastemperatur</p> <p>Ergebnis: Einfluss der HPSR Parameter auf</p>

5.2.1 Simulation 1

- Gas Bleed

Bei den Untersuchungen zu den geeigneten Prozessparametern muss zuerst der Gas Bleed festgestellt werden. Darunter ist die prozentuelle Angabe des Abgases nach der Aufbereitung zu verstehen, die dem System kontinuierlich ausgeschleust wird, um die CO und CO₂ Anreicherung zu unterbinden. Bei der ersten Versuchsreihe dieser Parameteruntersuchung wurden die Gasmengen von H₂O, CO₂ und CO vor Beginn der Berechnung auf 0 gesetzt, um einen Neustart zu simulieren.

Konstante Parameter:

- Erzanalyse
- Zusatzstoffanalyse
- Kohlenstoffeintrag der Elektrode: $m_{\text{Kohlenstoffeintrag}} = 5 \frac{\text{kg}}{t_{\text{RS}}}$
- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: $\frac{m_{\text{H}_2}^3}{t_{\text{Eisenerz}}} = 1500 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$
- Zuschlagsmenge $m_{\text{zuschläge}} \cdot \frac{1}{60}$ der Erzmenge $\leftrightarrow m_{\text{zuschläge}} = 2,5 \frac{t}{h}$
- Spezifische Kennzahlen beider Wärmetauscher: $k \cdot A = 4000000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$
- Abstichtemperatur: $T_{\text{Abstich}} = 1600 \text{ }^\circ\text{C}$
- Abgastemperatur: $T_{\text{Abgas}} = 1500 \text{ }^\circ\text{C}$
- Temperatur nach Verdampfungskühler: $T_{\text{Abgas WTII EIN}} = 1200 \text{ }^\circ\text{C}$

- Wasserabscheidungsfaktor: WAF = 99 %
- Temperatur des aufbereiteten Gases: $T_{\text{Blackbox Aufbereitung}} = 40 \text{ }^\circ\text{C}$
- Temperatur Make up Gas: $T_{\text{Make up Gas}} = 25 \text{ }^\circ\text{C}$
- Druckverlust der Aggregate: $p_{\text{Verlust}} = 0,1 \text{ bar}$
- Anzahl der Iterationen: 10 Loops

Variabler Parameter:

- Gas Bleed: Steigerung im Bereich 0-10 % um jeweils 1%

Zusätzlich zu der Untersuchung der Anreicherung von H_2O , CO_2 und CO im Abgas der HPSR-Anlage muss noch der Einfluss auf die Gleichgewichtsberechnung berücksichtigt werden. Aufgrund der dynamischen Berechnung des Kohlenstoffabbrands der Elektrode reichert sich das Abgas bei jeder Iteration an. Der Grund hierfür liegt in der Annahme, dass der Kohlenstoffeintrag pro Tonne produziertem Eisen einen gewissen Wert annimmt. Aufgrund der geringen Menge und der nötigen Korrektur der chemischen Zusammensetzung des Abgases (siehe 4.3.1) wird dieser Fehler in Kauf genommen.

- Variation $\frac{m_{\text{H}_2}^3}{t_{\text{Eisenerz}}}$ – Verhältnis

Bei der Variation des Wasserstoffeintrages muss, wie bereits in **Kapitel 5.1.1** beschrieben, das Produkt der spezifischen Kennzahlen beider Wärmetauscher $k \cdot A$ herabgesetzt werden. Aus den Berechnungen zur Festlegung des Gas Bleed ist ersichtlich (siehe **Abbildung 5-7**), dass sich das Gleichgewicht zwischen erzeugter Menge H_2O , CO_2 und CO erst nach einigen Iterationen einstellt. Daher werden die Startwerte nachfolgender Berechnungen nicht mehr auf 0 gesetzt, sondern stets mit der vorangegangenen Simulation fortgefahren.

Konstanter Parameter

- Spezifische Kennzahlen beider Wärmetauscher: $k \cdot A = 800000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$
- Gas Bleed: GB = 7%
- Anzahl der Iterationen: 3 Loops

Variable Parameter:

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: Steigerung um $100 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$ im Bereich $100-1800 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$
- Variation der Zuschlagsmenge

Bei der Untersuchung der Zuschlagsmenge ist der Einfluss der Wärmetauscher wieder von größerer Bedeutung, weshalb die spezifischen Kennzahlen dieser erhöht werden. Für die

Vorreduktion und Vorwärmung soll ein Gasgemisch mit einer Temperatur von ca. 750-800 °C zur Verfügung gestellt werden.

Konstante Parameter

- Wasserstoff-Erz-Verhältnis: $\frac{m_{\text{H}_2}^3}{t_{\text{Eisenerz}}} = 1500 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$
- Spezifische Kennzahlen beider Wärmetauscher: $k \cdot A = 4000000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$

Variable Parameter:

- Zuschlagsmenge: Steigerung $m_{\text{zuschläge}}$ um $0,2 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ im Bereich $0,2-3 \frac{\text{t}}{\text{h}}$

5.2.1.1 Ergebnisse Simulation 1

Die ersten Untersuchungen der $150 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ Massenproduktionsanlage beschäftigten sich mit der Auslegung des Gas Bleeds bei kontinuierlichem Betrieb. Hierfür wurde von einem Kaltstart der Anlage ausgegangen, was bedeutet, dass sich kein CO, CO₂ und H₂O im Gaskreislauf befindet. Als Vergleichspunkt wurde hierbei das Abgas der HPSR-Anlage gewählt, da dies bei der Berechnung stets eine konstante Temperatur aufweist. Die Ergebnisse des variablen Gas Bleeds sind in **Tabelle 5-XIV** ersichtlich und in **Abbildung 5-6** grafisch dargestellt.

Tabelle 5-XIV: Ergebnisse Simulation 1.1: Variation des Gas Bleeds der $150 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ Anlage

Gas Bleed / %	CO _{Abgas} / %	CO _{2, Abgas} / %	H ₂ O _{Abgas}
0	0,81	0,05	14,01
1	0,81	0,05	14,01
2	0,80	0,04	14,00
3	0,80	0,04	14,00
4	0,79	0,04	14,00
5	0,79	0,04	14,00
6	0,78	0,04	14,00
7	0,78	0,04	13,99
8	0,77	0,04	13,99
9	0,77	0,04	13,99
10	0,76	0,04	13,99

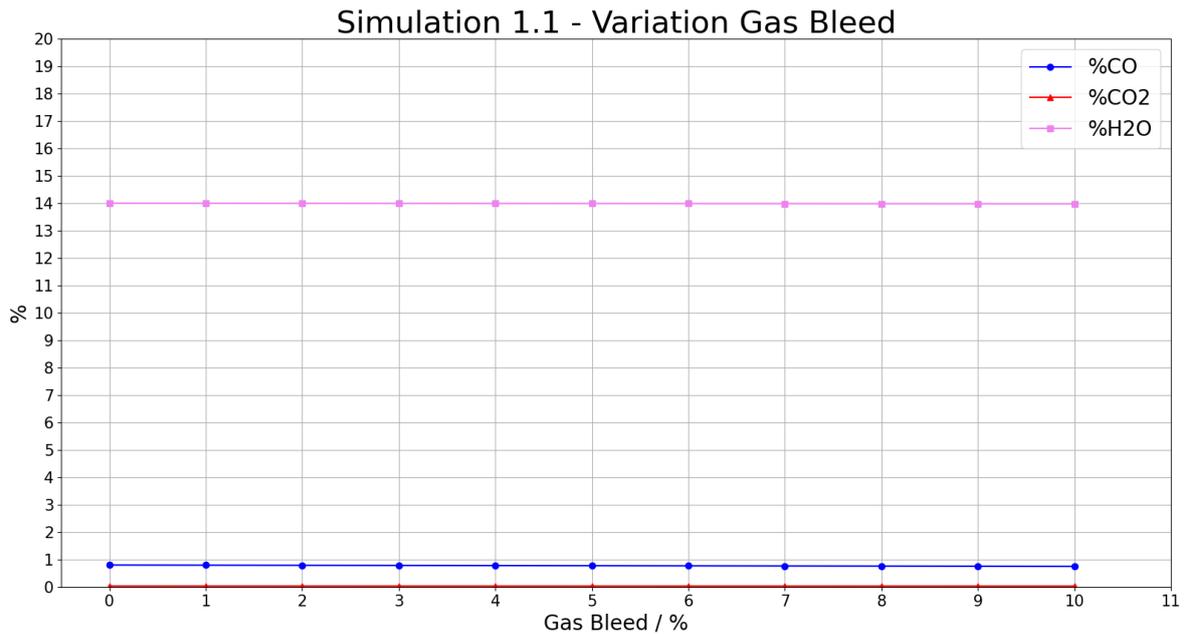


Abbildung 5-6: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.1: Variation des Gas Bleeds der $150 \frac{t}{h}$ HPSR-Anlage

Aufgrund der geringen Aussagekraft dieser Berechnung wurden noch Gleichgewichtsberechnung mit 7 % Gas Bleed durchgeführt. Die Ergebnisse sind in **Tabelle 5-XV** und **Abbildung 5-7** in grafisch dargestellt. Hierfür wurde die Anzahl der iterativen Berechnung von 3 auf 10 erhöht und berechnet. Diese Vorgehensweise soll die zuvor gezeigte dynamische Anreicherung des Kohlenstoffes veranschaulichen. Des Weiteren soll gezeigt werden, ob ein Gas Bleed von 7 % ausreichend ist, um einen kontinuierlichen Betrieb aufrecht erhalten zu können. Hier wurde erneut wieder die Abgaszusammensetzung des Abgases aus der HPSR betrachtet.

Tabelle 5-XV: Ergebnisse Simulation 1.2: Gleichgewichtsberechnung des Gas Bleeds der $150 \frac{t}{h}$ Anlage

Loopanzahl	CO / %	CO ₂ / %	H ₂ O / %
10	2,04	0,12	14,76
20	3,38	0,22	15,61
30	4,27	0,30	16,18
40	4,87	0,35	16,57
50	5,28	0,39	16,83
60	5,56	0,42	17,01
70	5,74	0,44	17,13
80	5,87	0,45	17,21
90	5,96	0,46	17,27
100	6,02	0,47	17,31

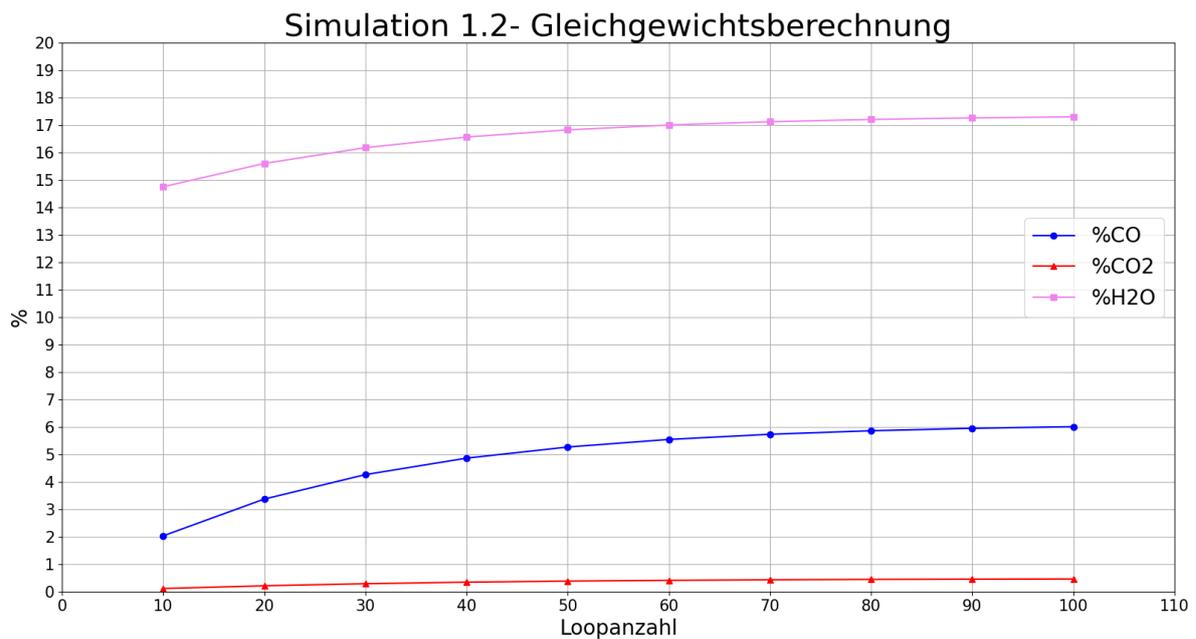


Abbildung 5-7: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.2:

Gleichgewichtsberechnung der $150 \frac{t}{h}$ HPSR-Anlage

In **Abbildung 5-7** und **Tabelle 5-XV** ist ersichtlich, dass die Linien aller drei Gase anfangs stark ansteigen und dann beginnen abzufachen. Die Anreicherung findet bis etwa 70 Loops statt. Ab diesem Punkt sind alle Werte annähernd konstant. Die weitere Anreicherung ist der dynamischen Berechnung des Kohlenstoffabbrandes geschuldet. Aufgrund der Tatsache, dass die Anreicherung von CO, CO₂ und H₂O erst bei einer höheren Anzahl an Iterationen als konstant betrachtet werden kann, wird für die weiteren Berechnungen stets der gleiche Ausgangszustand gewählt, um die Ergebnisse gut miteinander vergleichen zu können. Der Ausgangszustand ist jener Zustand, der sich bei der Simulation der Gleichgewichtsbedingungen nach 70 Iterationen einstellte. Diese Simulation dient nur zur Festlegung der Startwerte des rezyklierten Gases, um die Gaszusammensetzung so nahe wie möglich an einen kontinuierlichen Prozess anpassen zu können.

Die nächste Versuchsreihe befasste sich wie bereits bei der $1 \frac{t}{h}$ Pilotanlage in **Kapitel 5.1.1.1** mit der Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses. Hier sollen erneut Vergleiche mit **Abbildung 3-3** und den Berechnungen von Badr [20] gezogen werden.

Tabelle 5-XVI: Ergebnisse Simulation 1.3: Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der 150 $\frac{t}{h}$ Anlage

Wasserstoff-Erz-Verhältnis / $\frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$
100	0,00	71,29	92,20	0,00
200	0,00	85,46	55,98	0,00
300	0,00	88,22	37,79	0,00
400	6,22	88,84	32,10	130,19
500	19,75	88,27	32,52	46,95
600	32,05	87,56	32,67	32,51
700	43,42	86,66	32,43	26,56
800	59,24	84,63	31,21	21,89
900	74,65	80,49	28,70	19,31
1000	84,23	74,55	25,45	18,31
1100	86,95	71,59	24,07	18,05
1200	88,74	69,05	22,87	18,37
1300	90,32	66,24	21,60	18,68
1400	91,56	63,53	20,41	19,05
1500	92,51	61,02	19,35	19,44
1600	93,30	58,64	18,36	19,86
1700	93,93	56,45	17,47	20,29
1800	94,86	52,65	15,88	20,97

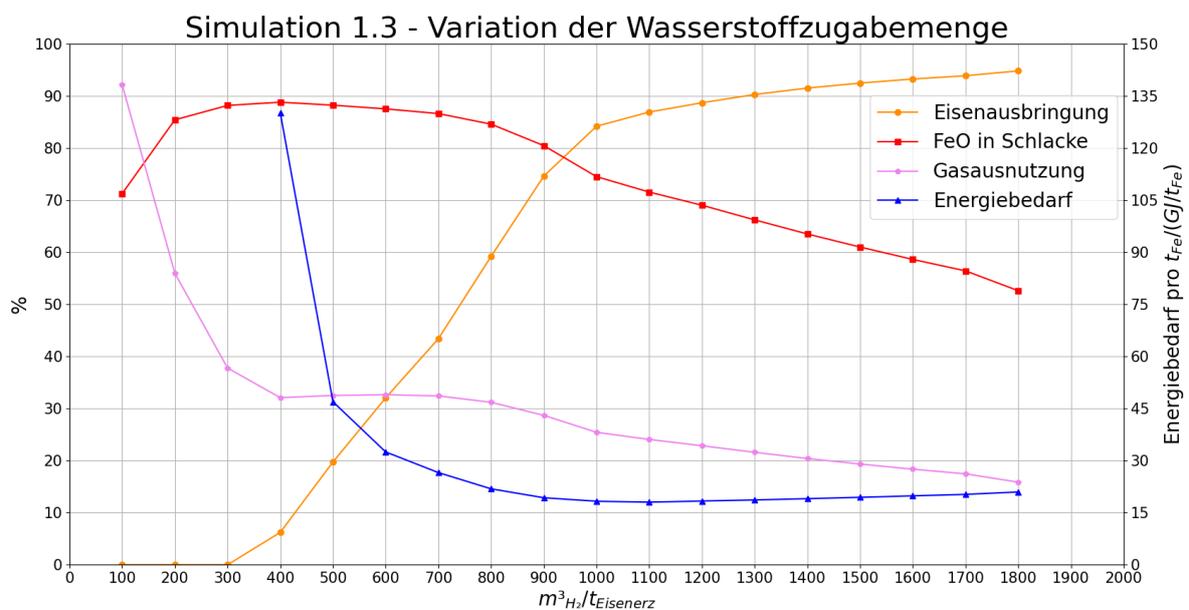


Abbildung 5-8: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.3: Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der 150 $\frac{t}{h}$ Anlage

Tabelle 5-XVI zeigt, dass im Vergleich zur $1 \frac{t}{h}$ Anlage (siehe **Tabelle 5-III**) das erste Eisenausbringen erst ab einem Wasserstoff-Erz-Verhältnis von $400 \frac{m_{H_2}^3}{t_{Eisenerz}}$ und nicht bereits bei $300 \frac{m_{H_2}^3}{t_{Eisenerz}}$. Es ist ebenfalls erkennbar, dass die Verläufe der Linien des Eisenausbringens, der FeO-Verschlackung und der Gasausnutzung ähnliche Verläufe haben, wie jene der $1 \frac{t}{h}$ Anlage. Diese sind jedoch ebenfalls zu höheren Wasserstoff-Erz-Verhältnissen verschoben. So wie in **Kapitel 5.1.1.1** beschrieben, zeigen die Eisenausbringung und die Gasausnutzung für $1000 \frac{m_{H_2}^3}{t_{Eisenerz}}$ erneut niedrigere Werte als von Badr berechnet [20]. Der FeO-Gehalt der Schlacke ist jedoch erneut höher. Die Eisenausbringung liegt bei diesen Berechnungen bei 84,23 %, der FeO-Gehalt der Schlacke bei 74,55 % die Gasausnutzung bei 25,45 %. In **Abbildung 5-8** ist ersichtlich, dass das Eisenausbringen erst bei einem Wasserstoff-Erz-Verhältnis von über $1300 \frac{m_{H_2}^3}{t_{Eisenerz}}$ Werte über 90 % annimmt. Ein Ausbringen von 98 % wird bei diesen Berechnungen nie erreicht. [20] Aufgrund der hohen FeO-Gehalte der Schlacke wird in **Kapitel 5.4** noch näher auf diese Thematik eingegangen.

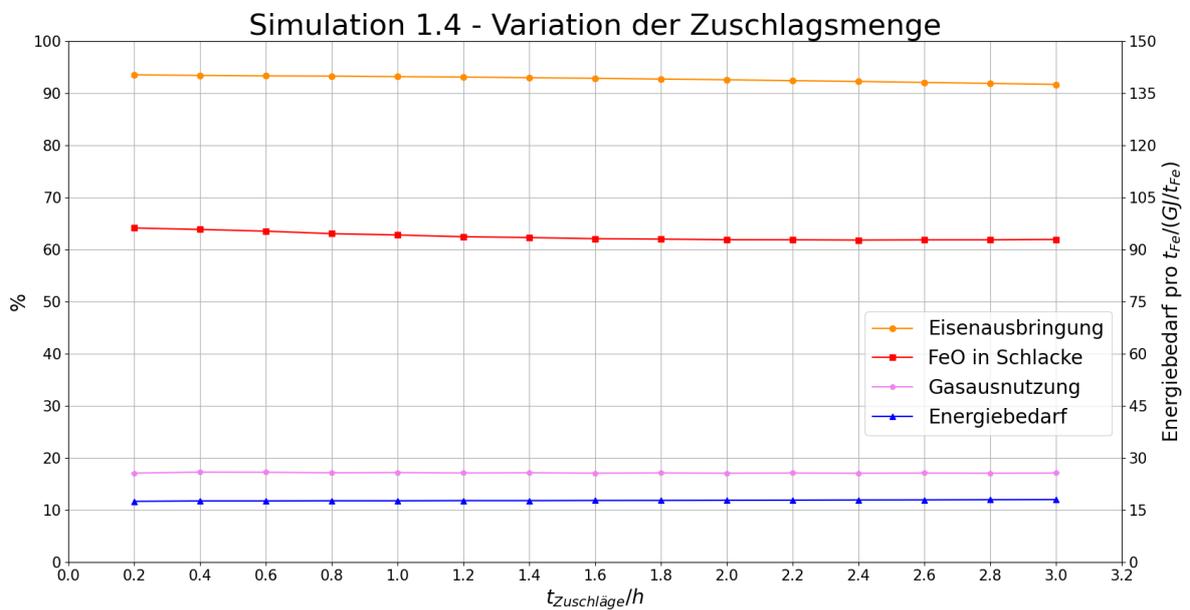
Der Energiebedarf liegt bei der $150 \frac{t}{h}$ Anlage jedoch ersichtlich geringer als bei der $1 \frac{t}{h}$ Anlage. Hier ist dieser bei $18,31 \frac{GJ}{t_{RS}}$, bei der Pilotanlage mit $41,6 \frac{GJ}{t_{RS}}$ jedoch deutlich höher. Bei der Berechnung des Energiebedarfes zeigte sich auch ein geringerer Anstieg bei höheren Wasserstoff-Erz-Verhältnissen, was auf die höhere Eisenausbringung bei diesen Werten rückzuführen ist.

Diese Berechnungen werden wie bereits bei der $1 \frac{t}{h}$ Anlage bei sehr niedrigen Wärmetauscher-Leistungen durchgeführt, weshalb sich die Linien bei angepassten Wärmetauschern noch zu geringeren Wasserstoff-Erz-Verhältnissen verschieben könnten.

Die nächste Versuchsreihe gilt der Untersuchung des Einflusses der Zuschlagsmenge der Massenproduktionsanlage. Dabei werden die eingesetzten Mengen von $0,2-3 \frac{t}{h}$ erhöht.

Tabelle 5-XVII: Ergebnisse Simulation 1.4: Variation der Zuschlagsmenge der 150 $\frac{t}{h}$ Anlage

Zuschlagsmenge / $\frac{t}{h}$	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$
0,2	93,58	64,17	17,13	17,56
0,4	93,46	63,90	17,31	17,68
0,6	93,37	63,57	17,28	17,68
0,8	93,33	63,09	17,18	17,72
1	93,22	62,83	17,23	17,72
1,2	93,15	62,50	17,15	17,77
1,4	93,02	62,34	17,19	17,77
1,6	92,91	62,12	17,13	17,81
1,8	92,76	62,05	17,16	17,83
2	92,63	61,92	17,11	17,88
2,2	92,46	61,91	17,14	17,90
2,4	92,30	61,86	17,11	17,95
2,6	92,11	61,89	17,14	17,98
2,8	91,94	61,90	17,11	18,03
3	91,73	61,98	17,14	18,07

Abbildung 5-9: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 1.4: Variation der Zuschlagsmenge der 150 $\frac{t}{h}$ Anlage

Wie bereits bei der $1 \frac{t}{h}$ Anlage ist in **Tabelle 5-XVII** ersichtlich, dass die Eisenausbringung mit zunehmender Zuschlagsmenge abnimmt. Diese beginnt bei 93,58 % mit $0,2 \frac{t}{h}$ Zuschlägen, und sinkt auf 91,73 % bei einer Zuschlagsmenge von $3,0 \frac{t}{h}$.

Beim FeO-Gehalt in der Schlacke ist bei einer Zuschlagsmenge von $0,2-2 \frac{t}{h}$ ein stärkerer Abfall erkennbar. Diese sinkt in diesem Bereich von 64,17 % auf 61,92 %. Nach weiterer Erhöhung der Zuschlagsmenge fällt der FeO-Gehalt beinahe auf 61,98 %.

Trotz der geringen Schwankung der Gasausnutzung beim Startpunkt mit 17,13 % und am Endpunkt mit 17,14 % sind bei genauer Betrachtung der einzelnen Punkte Unterschiede erkennbar. Das Maximum liegt bei $0,4 \frac{t}{h}$ mit 17,31 %, die minimale Ausnutzung von 17,11 % sowohl bei $2 \frac{t}{h}$, $2,4 \frac{t}{h}$ und $2,8 \frac{t}{h}$. Die Gasausnutzung ist mit ca. 17 % jedoch sehr gering.

Der Energiebedarf zeigt auch hier wie in Simulation1 der kleinen Anlage eine leichte Steigung an, welche auf die Anhebung der benötigten Wärmemenge zum Aufschmelzen der Zuschlagsmenge zurückzuführen ist. Dieser beginnt bei $17,56 \frac{GJ}{t_{RS}}$ und endet bei $18,07 \frac{GJ}{t_{RS}}$.

5.2.2 Simulation 2

Bei dieser Versuchsreihe müssen im Gegensatz zu der Versuchsreihe 2 der Kleinanlage (siehe **Kapitel 5.1.2**) die spezifischen Kennzahlen von zwei Wärmetauschern variiert werden. Als Ergebnis dieser soll somit nicht nur der Einfluss der Eingangstemperatur zur Vorreduktion und Vorwärmung ermittelt werden, sondern auch der Einfluss auf die Aufbereitung des rezyklierten Gases. Um die Wirksamkeit der Wärmetauscher genau untersuchen und vergleichen können, werden jedes Mal dieselben Randbedingungen verwendet, um den Gas Bleed als Einflussfaktor ausschließen zu können.

- Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers II:

Konstanter Parameter

- Zuschlagsmenge: $m_{\text{zuschläge}} = 2,5 \frac{t}{h}$
- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers I: $k \cdot A = 4000000 \frac{W}{K}$

Variable Parameter:

- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers II $k \cdot A$: Steigerung um $400000 \frac{W}{K}$ im Bereich von $800000-5200000 \frac{W}{K}$

- Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers I:

Konstanter Parameter

- Zuschlagsmenge: $m_{\text{zuschläge}} = 2,5 \frac{\text{t}}{\text{h}}$
- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers II: $k \cdot A = 4000000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$

Variable Parameter:

- Spezifische Kennzahlen des Wärmetauschers I $k \cdot A$: Steigerung um $400000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$ im Bereich von 800000 - $5200000 \frac{\text{W}}{\text{K}}$

5.2.2.1 Ergebnisse Simulation 2

Aufgrund der Vergleichbarkeit mit der $1 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ HPSR-Anlage wird der Wärmetauscher II mit den Versuchen der Pilotanlage verglichen. Die Ergebnisse sind in **Tabelle 5-XVIII** und **Abbildung 5-10** in grafisch dargestellt.

Tabelle 5-XVIII: Ergebnisse Simulation 2.1: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers II der $150 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ Anlage

Produkt spezifischer Kennzahlen / $\frac{\text{W}}{\text{K}}$	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$	Temperatur Abgas WT Aus / °C
800000	91,94	62,59	18,01	18,65	1127,52
1200000	91,94	62,59	17,82	18,55	1096,14
1600000	91,94	62,59	17,69	18,47	1070,69
2000000	91,94	62,59	17,57	18,38	1044,32
2400000	91,94	62,59	17,47	18,30	1019,91
2800000	91,94	62,59	17,39	18,23	997,19
3200000	91,94	62,59	17,32	18,15	975,98
3600000	91,94	62,59	17,26	18,09	956,20
4000000	91,94	62,59	17,21	18,02	937,72
4400000	91,94	62,59	17,17	17,96	920,35
4800000	91,94	62,59	17,13	17,91	904,07
5200000	91,94	62,59	17,10	17,86	888,74

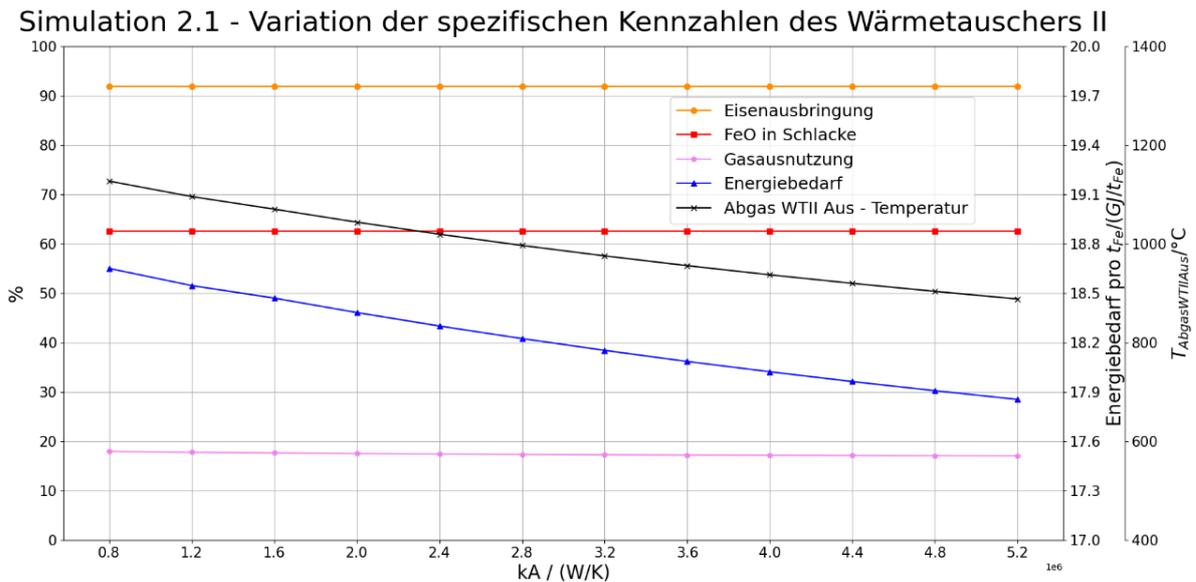


Abbildung 5-10: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 2.1: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers II der $150 \frac{t}{h}$ Anlage

Im Vergleich zur Pilotanlage zeichnen sich bei der Massenproduktionsanlage deutliche Unterschiede ab. Die Eisenausbringung ist über den gesamten Verlauf von $80000 \frac{W}{K}$ bis $5200000 \frac{W}{K}$ konstant auf einem Wert von 91,94 %.

Gleiches gilt für den FeO-Gehalt in der Schlacke, welcher auf einem Wert von 62,59 % stagniert.

Erst bei der Betrachtung der Gasausnutzung zeigen sich Auswirkungen. Diese fällt von 18,01 % auf 17,10 %. Wie bereits in **Kapitel 5.1.1.1** erwähnt ist hier ein Eisenausbringen über 90 % nur möglich, da das spezifische Wasserstoff-Erz-Verhältnis so groß gewählt wurde.

Die gravierendste Differenz im Vergleich mit der Pilotanlage tritt beim Energiebedarf auf. Dieser ist wie in **Abbildung 5-10** ersichtlich in Korrelation zur Abgastemperatur und somit mit der Leistung des Wärmetauschers. Bei der Steigerung des Produktes der spezifischen Kennzahlen $k \cdot A$ des Wärmetauschers I von $8000 \frac{W}{K}$ auf $5200000 \frac{W}{K}$, sinkt der Energiebedarf von $18,65 \frac{GJ}{t_{RS}}$ auf $17,86 \frac{GJ}{t_{RS}}$. Dies entspricht einer Senkung der Abgastemperatur aus dem Wärmetauscher von $1127,52 \text{ }^{\circ}C$ auf $888,74 \text{ }^{\circ}C$.

Die Ergebnisse zur Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers I sind in **Tabelle 5-XIX** und in **Abbildung 5-11** grafisch dargestellt.

Tabelle 5-XIX: Ergebnisse Simulation 2.2: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers I der 150 $\frac{t}{h}$ Anlage

Produkt spezifischer Kennzahlen / $\frac{W}{K}$	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$	Temperatur Abgas WT Aus / °C
800000	91,94	62,59	17,69	18,64	605,16
1200000	91,94	62,59	17,58	18,53	588,59
1600000	91,94	62,59	17,50	18,44	573,33
2000000	91,94	62,59	17,43	18,36	559,16
2400000	91,94	62,59	17,37	18,28	545,96
2800000	91,94	62,59	17,32	18,21	533,70
3200000	91,94	62,59	17,28	18,14	522,26
3600000	91,94	62,59	17,24	18,08	511,50
4000000	91,94	62,59	17,21	18,02	501,48
4400000	91,94	62,59	17,18	17,97	492,03
4800000	91,94	62,59	17,16	17,92	483,13
5200000	91,94	62,59	17,14	17,88	474,74

Simulation 2.2 - Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers I

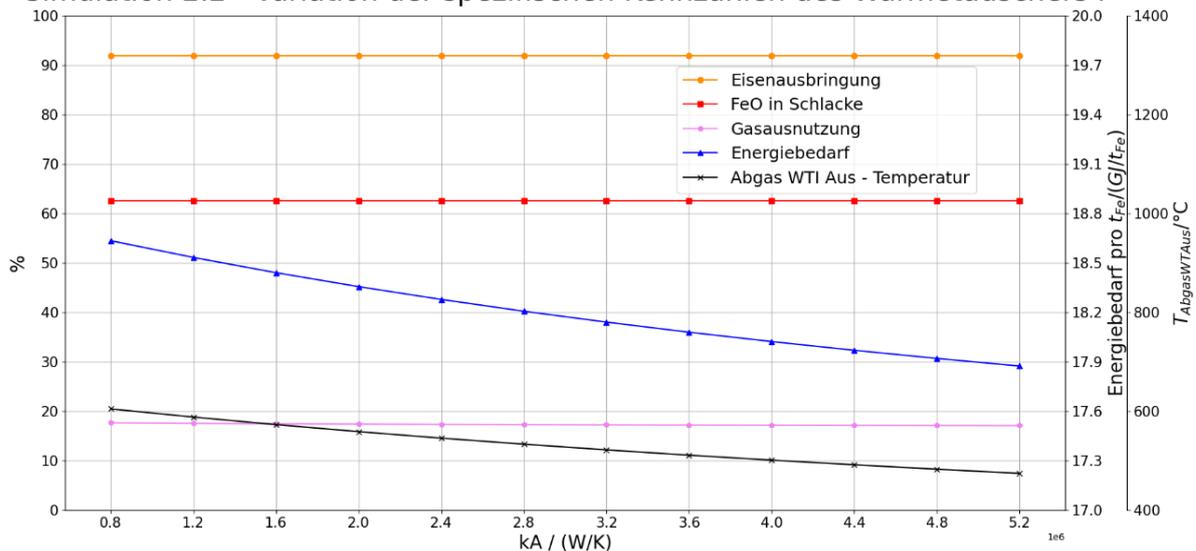


Abbildung 5-11: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 2.2: Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers I der 150 $\frac{t}{h}$ Anlage

Beim Vergleich von **Tabelle 5-XVIII** und **Tabelle 5-XIX** ist erkennbar, dass sowohl das Eisenausbringen mit 91,94 % und der FeO-Gehalt der Schlacke mit 62,59 % die gleichen

Werte annehmen. Diese sind erneut über den gesamten Variationsbereich von 800000-5200000 $\frac{W}{K}$ konstant.

Die Gasausnutzung hat zu Beginn mit 17,69 % einen geringeren Startwert, jedoch fällt dieser nur auf 17,14 % beim Einsatz eines Wärmetauschers mit 5200000 $\frac{W}{K}$.

Der Energiebedarf zeigt erneut Parallelen auf mit der Abgastemperatur. Dieser liegt bei einer Abgastemperatur von 605,16 % bei 18,64 $\frac{GJ}{t_{RS}}$ und bei 474,74 °C bei 17,88 $\frac{GJ}{t_{RS}}$. Dieser Wert liegt im selben Bereich wie bei der Variation der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers II.

5.2.3 Simulation 3

In dieser Berechnungsreihe wird der Einfluss der Abgastemperatur und der Abstichtemperatur der Massenproduktions-HPSR-Anlage untersucht. Für die Variation ersterer muss die Temperatur des Verdampfungskühlers gesenkt werden.

- Variation der Abgastemperatur

Konstante Parameter:

- Spezifische Kennzahlen beider Wärmetauscher: $k \cdot A = 4000000 \frac{W}{K}$
- Temperatur nach Verdampfungskühler: $T_{Abgas\ WTII\ EIN} = 900\text{ °C}$

Variabler Parameter:

- Abgastemperatur T_{Abgas} : Steigerung um 50 °C im Bereich von 1000-1500 °C

- Variation der Abstichtemperatur

Konstante Parameter:

- Temperatur nach Verdampfungskühler: $T_{Abgas\ WTII\ EIN} = 1200\text{ °C}$
- Abgastemperatur: $T_{Abgas} = 1500\text{ °C}$

Variabler Parameter:

- Abstichtemperatur $T_{Abstich}$: Steigerung um 10 °C im Bereich von 1600-1700 °C

5.2.3.1 Ergebnisse Simulation 3

Die Ergebnisse der Versuchsreihe 3.1 Variation der Abgastemperatur bei verminderter Dampfkühlerleistung sind in **Tabelle 5-XX** aufgelistet und in **Abbildung 5-12** grafisch

dargestellt. Wie bereits bei **Kapitel 5.1.3** beschrieben, wird erneut bei der Abgastemperatur die Differenz im Energiebedarf laut (5-1) berechnet.

Tabelle 5-XX: Ergebnisse Simulation 3.1: Variation der Abgastemperatur der 150 $\frac{t}{h}$ Anlage

Abgastemperatur / °C	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Differenz- Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$
1000	86,54	72,10	22,29	9,53
1050	86,52	72,12	22,39	8,60
1100	86,51	72,13	22,43	7,71
1150	86,50	72,15	22,50	6,77
1200	86,49	72,16	22,56	5,82
1250	86,47	72,18	22,62	4,87
1300	86,46	72,19	22,67	3,91
1350	86,45	72,21	22,70	2,94
1400	86,44	72,22	22,74	1,96
1450	86,42	72,23	22,77	0,99
1500	86,41	72,25	22,79	0,00

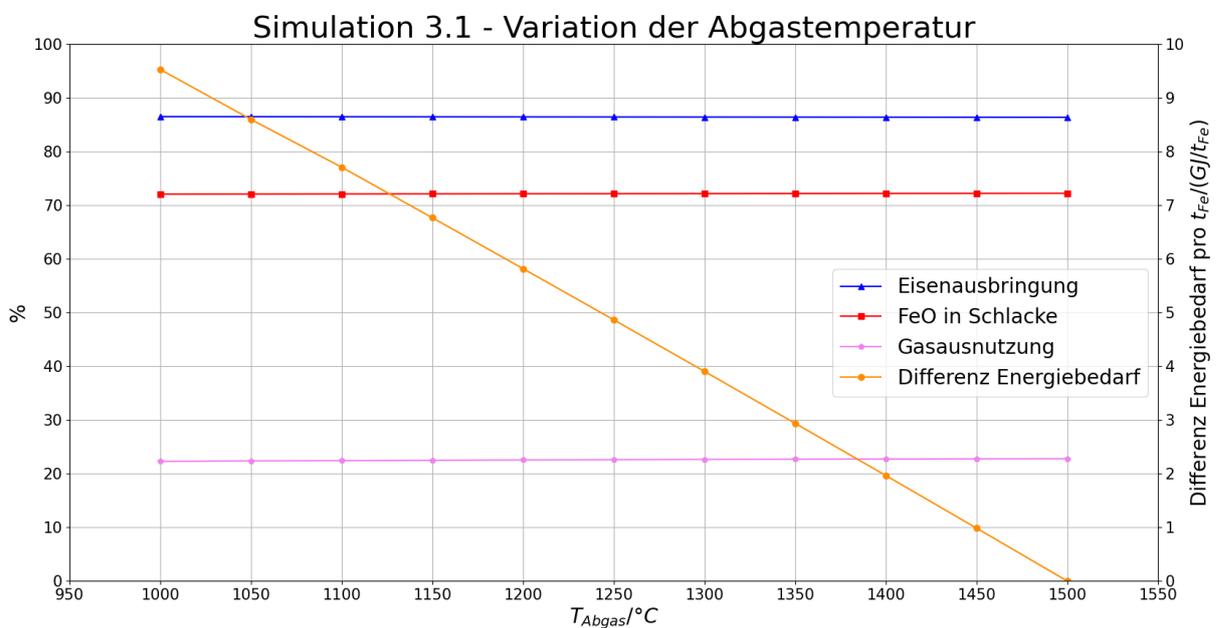


Abbildung 5-12: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 3.1: Variation der Abgastemperatur der 150 $\frac{t}{h}$ Anlage

Im Vergleich der minimalen Steigerung des Eisenausbringens der 1 $\frac{t}{h}$ Anlage bei der Abgastemperaturerhöhung von 1000 °C auf 1500 °C ist bei der Massenproduktionsanlage ein

leichter Abwärtstrend erkennbar. Des Weiteren liegen die Werte von 86,54-86,41 % deutlich unter jenen der Versuche 1-2 mit gleichen Wasserstoff-Erz-Verhältnissen.

Beim FeO-Gehalt der Schlacke ist dieser Trend ebenfalls feststellbar. Bei der Pilotanlage ist ein sehr kleiner Trend zu geringeren Werten ersichtlich, bei der $150 \frac{t}{h}$ Anlage stellt sich eine Anreicherung der Schlacke von 72,1 % auf 72,25 % ein.

In der Gasausnutzung stellen sich ähnliche Verläufe ein im Vergleich zu der $1 \frac{t}{h}$ Anlage, jedoch liegen die Werte mit 22,29-22,79 % knapp über diesen.

Die Differenz-Energiebedarf sinkt mit $9,53 \frac{GJ}{t_{RS}}$ bei einer Abgastemperatur von 1000 °C auf $0,99 \frac{GJ}{t_{RS}}$ bei 1450°C an. Dies Anstieg ähnelt jenem der Pilotanlage.

In **Tabelle 5-XXI** und **Abbildung 5-13** sind die Ergebnisse der Versuchsreihe 3.2 zur Variation der Abstichttemperatur ersichtlich.

Tabelle 5-XXI: Ergebnisse Simulation 3.2: Variation der Abstichttemperatur der $150 \frac{t}{h}$ Anlage

Abstichttemperatur / °C	Eisenausbringung / %	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$
1600	91,94	62,59	17,21	18,02
1610	91,88	62,74	17,20	18,04
1620	91,83	62,90	17,19	18,06
1630	91,78	63,05	17,18	18,08
1640	91,73	63,20	17,17	18,10
1650	91,68	63,35	17,16	18,12
1660	91,62	63,50	17,15	18,14
1670	91,57	63,65	17,14	18,16
1680	91,52	63,79	17,13	18,18
1690	91,47	63,94	17,12	18,20
1700	91,42	64,08	17,11	18,22

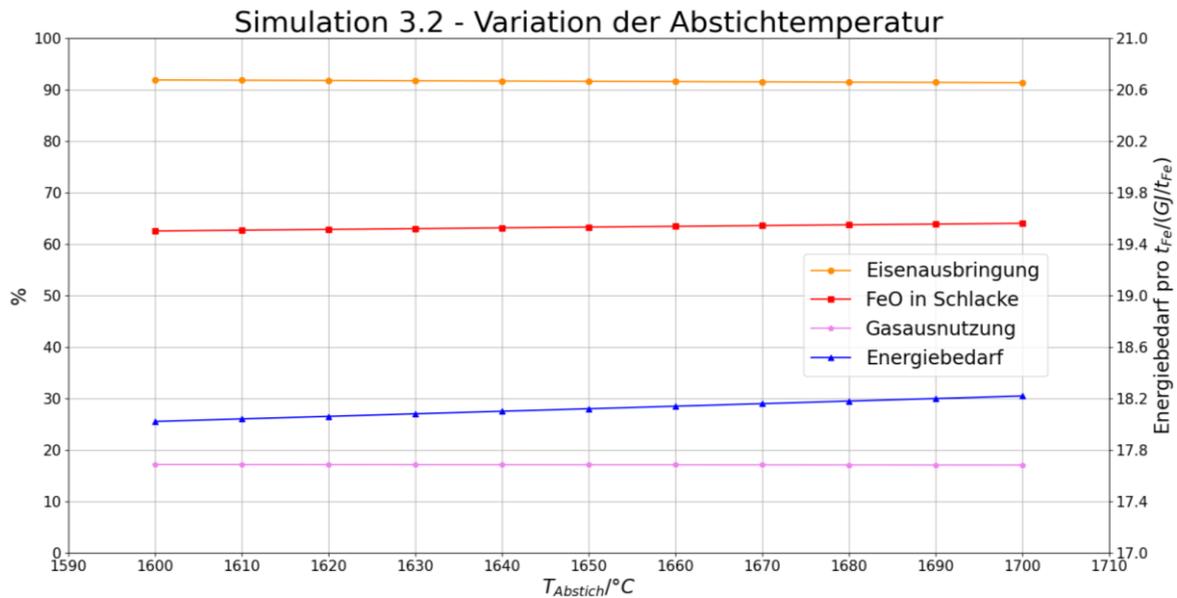


Abbildung 5-13: Grafische Darstellung der Ergebnisse aus Simulation 3.2: Variation der Abstichtemperatur der $150 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ Anlage

Bei der Variation der Abstichtemperatur stellen sich die gleichen Trends wie bei der $1 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ Anlage ein. Die Eisenausbringung sinkt von 91,84 % auf 91,42 %. Im Gegenzug hierbei steigt der FeO Gehalt der Schlacke von 62,59 % auf 64,08 %.

Die Gasausnutzung sinkt von 17,21 % auf 17,11 % erneut bei der Steigerung von 1600 °C auf 1700 °C.

Erneut zeigt sich die Korrelation der Abstichtemperatur mit dem Energiebedarf, was bedeutet, dass trotz höheren Energieeintrags keine Steigerung der Eisenproduktion erzielbar ist. Dieser steigt im Verlauf von $18,02 \frac{\text{GJ}}{t_{\text{RS}}}$ auf $18,22 \frac{\text{GJ}}{t_{\text{RS}}}$ nur gering an.

5.2.4 Rohrauslegung

Bei den Berechnungen zur Rohrauslegung wurden dieselben Parameter gewählt wie bei der Pilotanlage. Als Erweiterung dieser Anlage muss jedoch ein gewisser Druckverlust berücksichtigt werden, welcher pro Aggregat mit 100 mbar festgelegt worden ist. Ein Grund zur Neugestaltung des Anlagenlayouts im Vergleich zu Plaul und Bard, ist die Rohrauslegung. Aufgrund des hohen Sicherheitsaufwandes bei der Verwendung von H_2 wurde ein zirkulierender Kreislauf gewählt, anstatt der Rückführung des Gases zur Kühlung vor der dem Vorwärm- und Vorreduktionsaggregates. Die Standardparameter zur Berechnung dieser Durchmesser sind in **Kapitel 5.2.1** hinterlegt. Auch hier wird nach Gleichung (5-2) der

Rohrdurchmesser berechnet. Die Ergebnisse dieser Berechnung sind in **Tabelle 5-XXII** angegeben. Bei diesen Berechnungen zeigt sich, dass bereits dieses Anlagenlayout einen enormen Bedarf an die Anlagensicherheit stellt. Der größte Durchmesser mit 8,84 m wird nach der Vorwärm- und Vorreduktion bei einer Gasgeschwindigkeit von $5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ benötigt. Hier wird das Prozessgas mit dem thermisch abgetrennten CO_2 aus den Karbonaten der Zusatzstoffe angereichert, weshalb an diesem Punkt der größte Rohrdurchmesser nötig ist. Der Druck auf den sich **Tabelle 5-XXII** bezieht ist hierbei der Druck der am Kompressor und Make up Gas anliegt. Ab diesem Zeitpunkt werden die Druckverluste der Anlagen abgezogen.

Tabelle 5-XXII: Ergebnisse zur Berechnung der nötigen Rohrdurchmesser der einzelnen Zulaufleitungen jeglicher Aggregate der voll ausgestatteten 150 $\frac{t}{h}$ HPSR-Anlage (alle Einheiten in m)

Druck / bar	Durchflussgeschwindigkeit / (m/s)	Abgas HPSR	Abgas WT2 Ein	Abgas WT2 Aus	Abgas WT1 Ein	Abgas WT1 Aus	Blackbox Aufbereitung	Gas zur Nachverbrennung	Frischgas	Blackbox Aufbereitung Rest	Prozessgas WT1 Ein	Prozessgas WT1 Aus / Prozessgas WT2 Ein	Prozessgas WT2 Aus
2	5	8.79	8.71	8.15	8.79	6.97	4.64	1.15	4.57	1.65	3.94	3.84	4.84
	10	6.21	6.16	5.76	6.22	4.93	3.28	0.81	3.23	1.17	2.79	2.72	3.42
	15	5.07	5.03	4.70	5.08	4.02	2.68	0.66	2.64	0.95	2.28	2.22	2.80
4	5	5.96	5.81	5.35	8.79	4.43	2.84	1.16	4.57	1.17	4.33	2.92	3.48
	10	4.21	4.11	3.78	6.21	3.13	2.01	0.82	3.23	0.83	3.06	2.06	2.46
	15	3.44	3.35	3.09	5.07	2.56	1.64	0.67	2.64	0.68	2.50	1.68	2.01
6	5	4.80	4.65	4.27	8.78	3.52	2.23	1.16	4.57	0.96	4.58	2.48	2.89
	10	3.39	3.29	3.02	6.21	2.49	1.58	0.82	3.23	0.68	3.24	1.76	2.04
	15	2.77	2.69	2.47	5.07	2.03	1.29	0.67	2.64	0.55	2.65	1.43	1.67

5.3 Vergleich der Anlagenkonzepte

Um die Konzepte miteinander vergleichen zu können, werden diese nochmals mit den spezifischen Kennzahlen der HPSR-Anlage in **Tabelle 5-XXIII**: und in **Tabelle 5-XXIV**: dargestellt. Des Weiteren ist das Fließschema beider Anlagenkonzepte mit Kennzahlen in **Abbildung 5-14** und **Abbildung 5-15** dargestellt.

Tabelle 5-XXIII: Daten der verschiedenen HPSR-Anlagen im Vergleich [19,20]

	Einheit	Plaul	Badr	Farkas		
Input-Material	Carajas Erz	$\frac{t}{h}$	152,38	190,5	150	1
	Zuschlagsmenge	$\frac{t}{h}$	2,5	3,13	2,5	0,017
	Wasserstoff	$\frac{Nm^3}{h}$	170572	296577	212298,94	1500
	Temperatur-Erz	°C	655,8	700	667,63	569,10
	Temperatur-Reduktionsgas	°C	748	760	661,26	464,90
Energie eintrag	Reaktor	MW	171	144	161,74	2,79
Druck	Reaktor	bar	2	2	2	2
Output-Material	Eisen	$\frac{t}{h}$	100	125	91,68	0,61
	Schlacke	$\frac{kg}{t_{RS}}$	81,30	101,08	181,5	173,51
	Abgas	$\frac{Nm^3}{h}$	120350	102000	287710,32	1806,66
	Temperatur-Eisen	°C	1600	1600	1600	1600
	Temperatur-Abgas	°C	1500	1500	1500	1500

Tabelle 5-XXIV: Spezifische Kennzahlen der verschiedenen HPSR-Anlagen im Vergleich [19,20]

		Einheit	Plaul	Badr	Farkas	
Input-Material	Carajas Erz	$\frac{t}{t_{RS}}$	1,52	1,52	1,63	1,67
	Zuschlagsmenge	$\frac{kg}{t_{RS}}$	25	25	27,27	27,12
	Wasserstoff	$\frac{Nm^3}{t_{RS}}$	1706	2373	2315,67	2440,81
Energieeintrag	Reaktor	$\frac{MWh}{t_{RS}}$	1,48	1,15	3,09	15,53
Output-Material	Schlacke	$\frac{kg}{t_{RS}}$	81,30	101,08	181,5	0,18
	Abgas	$\frac{Nm^3}{t_{RS}}$	1204	816	3138,23	2939,81

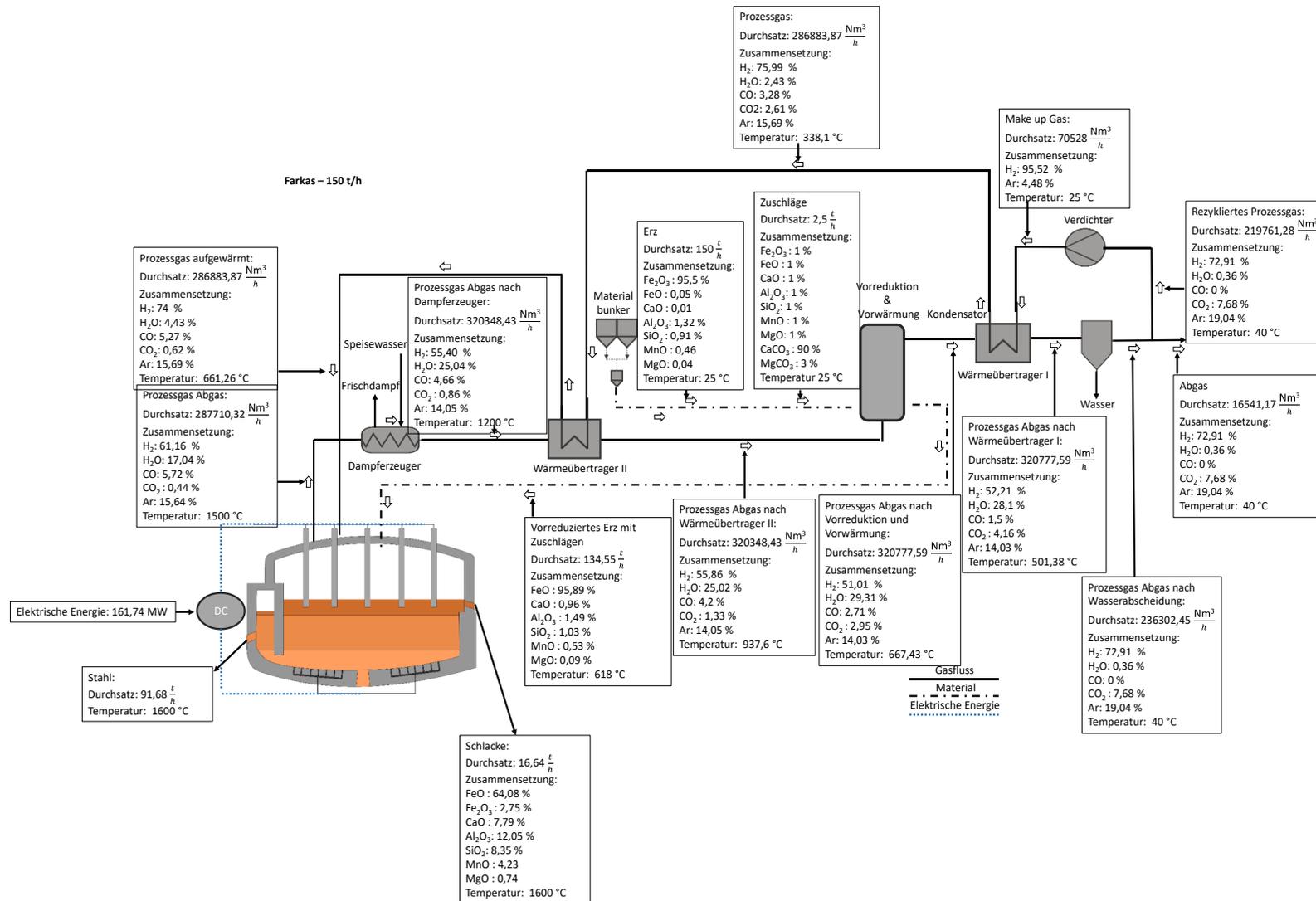


Abbildung 5-14: Fließschema der 150 $\frac{\text{t}}{\text{h}}$ Anlage mit Kennzahlen

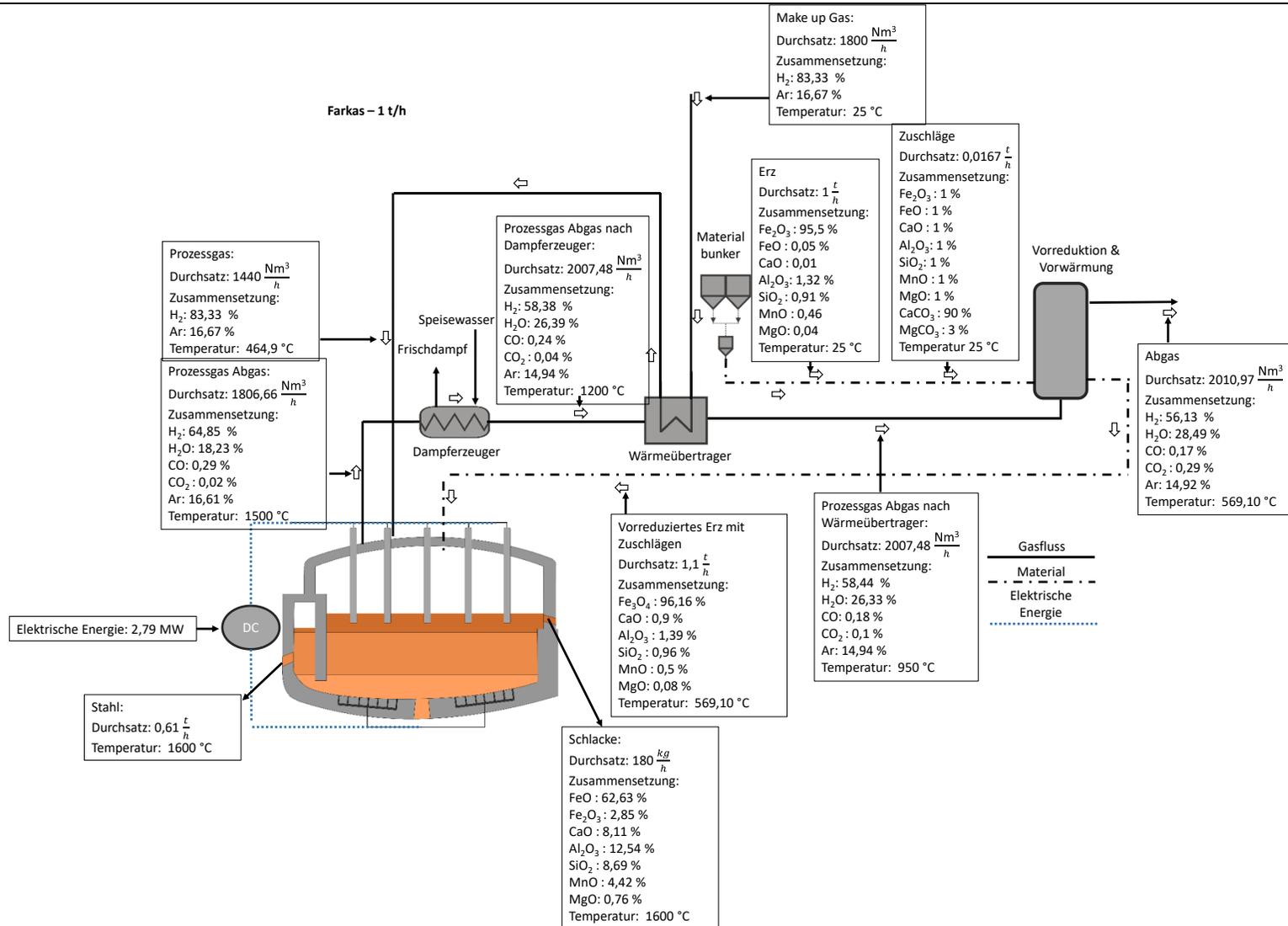


Abbildung 5-15: Fließschema der 1 $\frac{\text{t}}{\text{h}}$ Anlage mit Kennzahlen

5.4 Erweiterung der 150 $\frac{t}{h}$ – Anlage

Die Simulationen aus **Kapitel 5.2** dienen zum Vergleich der bereits bestehenden Anlagenkonzepte von Plaul und Badr. [19,20] In der folgenden Simulationsreihe sollen die gefundenen Daten an reale Bedingungen angepasst werden, wobei diese noch genauer in Zusammenhang mit praktischen Versuchen abgeglichen werden müssen. Hier soll nur das Potential der HPSR-Anlage aufgezeigt werden.

Aufgrund der hohen FeO-Gehalte in der Schlacke soll in dieser Simulation die Schlackenmenge erhöht und die Zuschlagsmenge variiert werden. Die neue Zusammensetzung ist in **Tabelle 5-XXV** zu sehen. Die Menge an Zusatzstoffen wird hierbei von 2,5 $\frac{t}{h}$ auf 16 $\frac{t}{h}$ erhöht. Ziel dieser Zugabe ist dabei die Senkung des FeO-Gehaltes der Schlacke und eine Einstellung der Basizität B_4 , welche durch Gleichung (5-3) berechnet wird. Als Zielwert dieser Berechnung wird $B_4 \approx 1,2$ angegeben. Aufgrund der Erhöhung der Zusatzstoff wurde auch der Gas Bleed erhöht auf 10 %.

$$B_4 = \frac{(CaO) + (MgO)}{(SiO_2) + (Al_2O_3)} \quad (5-3)$$

Tabelle 5-XXV: Analyse der angepassten Zusatzstoffe (alle Angaben in %)

	Fe ₂ O ₃	FeO	CaO	Al ₂ O ₃	SiO ₂	MnO	MgO	CaCO ₃	MgCO ₃
Zusatzstoff	1	1	1	1	16	1	1	75	3

Bei der Erweiterung der 150 $\frac{t}{h}$ -Anlage wird nicht nur die Menge und Zusammensetzung der Schlacke angepasst, es soll auch die Auswirkung der Erhöhung des Gasausnutzungsgrades aufgezeigt werden. Um die Gasausnutzung zu erhöhen, wird davon ausgegangen, dass das gebildete Abgas beim Durchgang durch die Oxidschmelze nochmals mit dieser reagiert (siehe **Abbildung 2-12**). Um einen Vergleich der Ergebnisse zu erreichen können, wird diese Simulation mit der Wasserstoffvariation aus **Kapitel 5.2.1** verglichen. Hierbei wird aufgrund der zeitintensiven Art dieser Simulation die Schleifenberechnung nur angewendet, sobald der Gasausnutzungsgrad unter 25 % fällt. Sobald die Gasausnutzung unter diesen Wert fällt wird die Schleife solange berechnet, bis sich ein Gleichgewicht einstellt, und die Änderung der Gasausnutzung nicht mehr als 0,001 % beträgt. Da bei der Simulation sich jedoch herausstellte, dass die Gasausnutzung weiter steigen kann nach erstmaligem Erreichen dieser

Differenz, muss ein minimaler Gasausnutzungsgrad als Ziel festgelegt werden und nicht die Differenz der Gasausnutzung. Diese muss aufgrund dieser Tatsache händisch festgelegt werden. Die fixierten Gasausnutzungsgrade und die Ergebnisse der Simulationen sind in **Tabelle 5-XXVI** zu sehen und in **Abbildung 5-16** grafisch dargestellt. Es ist jedoch wichtig die Optimierung der Gaszusammensetzung zu berücksichtigen, welche in **Kapitel 4.3.1** beschrieben wurde. Dadurch ist der finale Gasausnutzungsgrad nicht gleich dem fixierten Gasausnutzungsgrad.

Tabelle 5-XXVI: Ergebnisse Simulation Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der $150 \frac{t}{h}$ Anlage mit angepasster Zuschlagsmenge

Wasserstoff- Erz- Verhältnis / $\frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$	Eisenausbringung /%	FeO in Schlacke / %	Gasausnutzung / %	Energiebedarf / $\frac{GJ}{t_{RS}}$	Fixierter Gasausnutzungsgrad / %
100	0,00	66,98	88,98	-	
200	0,00	76,61	65,87	-	
300	0,00	79,97	48,13	-	
400	0,00	81,50	38,80	-	
500	0,00	82,60	31,48	-	
600	0,18	82,09	30,83	5965,95	
700	0,23	80,95	31,00	6070,20	
800	33,89	79,07	30,77	37,53	
900	51,10	75,62	29,27	27,76	
1000	66,88	70,05	27,13	23,45	
1100	73,22	66,43	26,07	22,87	
1200	76,59	63,94	25,09	22,18	
1300	84,21	55,87	24,55	21,66	
1400	92,52	39,05	24,25	21,07	24,7
1500	94,54	32,27	23,12	21,42	23,57
1600	96,49	23,90	21,94	23,59	22,39
1700	96,79	22,36	20,95	24,22	21,321
1800	97,16	20,39	19,95	24,80	20,288

Simulation - Variation der Wasserstoffzugabemenge bei angepasster Zuschlagsmenge

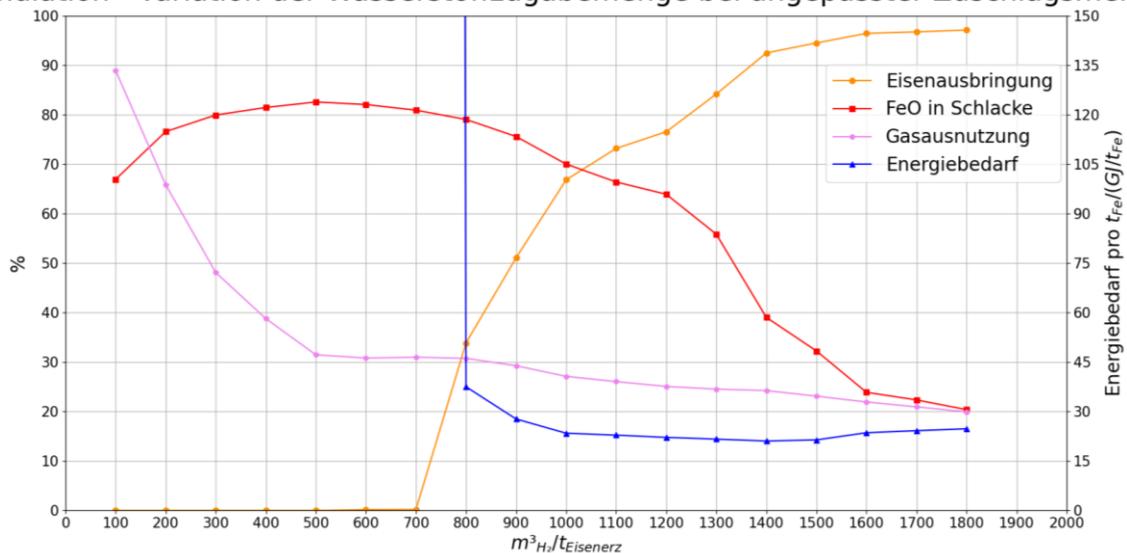


Abbildung 5-16: Grafische Darstellung der Ergebnisse Simulation Variation des Wasserstoff-Erz-Verhältnisses der $150 \frac{t}{h}$ Anlage mit angepasster Zuschlagsmenge

In **Tabelle 5-XXVI** ist ersichtlich, dass im Vergleich zu den Versuchen aus **Kapitel 5.2.1.1** (siehe **Tabelle 5-XVI**) die ersten produzierten Mengen an Rohstahl erst bei $600 \frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ und nicht bereits bei $400 \frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ auftreten. Des Weiteren ist ersichtlich, dass die erzielten Mengen mit einem Ausbringen von 0,18 % und 0,23 % auch deutlich unter den Werten der Simulation mit geringeren Zusatzstoffen liegen. Die Trends der Eisenausbringungen stimmen mit jener der ersten Berechnung überein, jedoch ist der Kurvenverlauf deutlich steiler. Bei $1800 \frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ wird ebenfalls mit 97,16 % ein besserer Ergebnis erzielt.

Der FeO Gehalt der Schlacke weist wiederum den gleichen Verlauf auf wie in **Abbildung 5-8**, jedoch wird die gesamte Linie zu geringeren Werten verschoben. Dies zeigt der Wert der vorher festgelegten Standardparameter ($1500 \frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$) welcher von 61,02 % auf 32,27 % herabgesetzt wurde. Des Weiteren ist in **Abbildung 5-16** bei der steilen Änderung der Kurve von $1300 \frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ auf $1400 \frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ zu sehen, wie sehr sich die Optimierung der Gasausnutzung auswirkt.

Beim Verlauf der Gasausnutzung ist ersichtlich, dass anfangs die Werte etwas unter jenen der normalen Simulation liegen. Jedoch ab $900 \frac{m^3_{H_2}}{t_{Eisenerz}}$ ist die Gasausnutzung mit 29,27 % stets

höher als jene aus **Tabelle 5-XVI**. Auch hier ist die Optimierung der Gasausnutzung ersichtlich, indem die Kurve flacher verläuft bis $1800 \frac{\text{m}^3_{\text{H}_2}}{\text{t}_{\text{Eisenerz}}}$ und dort mit 19,95 % endet.

Die Kurve des Energiebedarfes ist sehr steil zu Beginn, da bei $600 \frac{\text{m}^3_{\text{H}_2}}{\text{t}_{\text{Eisenerz}}}$ und $700 \frac{\text{m}^3_{\text{H}_2}}{\text{t}_{\text{Eisenerz}}}$ nur $0,17 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ und $0,18 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ produziert werden. Bei diesen zwei Simulationen werden $5965,95 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$ und $6070,2 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$ benötigt. Des Weiteren fällt auf, dass der Wert von $20 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$ niemals unterschritten wird und der kleinste Wert von $21,07 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$ bei $1400 \frac{\text{m}^3_{\text{H}_2}}{\text{t}_{\text{Eisenerz}}}$ auftritt.

6 Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick

Durch die Erweiterung des Grundmodelles des neuen Anlagenlayouts konnten die spezifischen Kennzahlen sowohl der $1 \frac{t}{h}$ Pilotanlage als auch der $150 \frac{t}{h}$ Massenproduktionsanlage ermittelt werden. Des Weiteren ist die Umstellung auf ein dynamisches System von Nöten, da somit wesentlich mehr Parameter abgedeckt werden können als bisher. Die Berechnung einer Produktionsanlage kleinerer Erzeinsatzmengen ist notwendig, da in der Entwicklung neuer Anlagen und Prozesse stets gilt, ein gewisses Upscaling zu betreiben. Dabei werden die Produktionsmengen stets gesteigert und die Ergebnisse mit jener einer kleineren Anlage verglichen. Sind die Ergebnisse beider Anlagen gleich oder ähnlich und zufriedenstellend, kann mit der Planung des nächsten Upscaling-Schrittes fortgefahren werden. Falls dem nicht der Fall sein sollte, müssen erneut Änderungen an den Systemen vorgenommen werden. Ein wichtiges Werkzeug zur Voraussage von Ergebnissen bieten hierbei thermodynamische Berechnungen und Simulationen. Hierbei kann stets die Theorie mit der Praxis verglichen werden. Aus den Ergebnissen der praktischen Versuche kann somit z.B. eine Datenbank verbessert oder angepasst werden.

Eine der wesentlichen Änderungen im Vergleich zu den Anlagenkonzepten von Plaul und Badr ist die Zugabe von Argon. Diese ist notwendig, da Versuche des Lehrstuhls für Eisen- und Stahlmetallurgie zeigten, dass die Stabilität des Lichtbogens während des Prozesses deutlich gesteigert wird. Ein weiterer Unterschied ist in der Gasführung ersichtlich. Aufgrund der nötigen hohen spezifischen Gasraten ist eine Aufteilung der Gasströme als

Sicherheitsrisiko zu betrachten. Je höher die Gasmengen werden, desto höher ist der Sicherheitsaufwand der betrieben werden muss. Daher wird der gesamte Gasstrom als Ganzes stets rezykliert. Die ermittelten Werte dieser variablen Berechnungen sollen zukünftiger Forschungsprojekte dienen, um die Theorie mit der Praxis vergleichen zu können. Deshalb wurden bei den Berechnungen sehr viele veränderliche Variablen eingebaut.

Beim Vergleich der beiden Anlagen kann gezeigt werden, dass sowohl das Eisenausbringen, der FeO-Gehalt der Schlacke, die Gasausnutzung und der Energiebedarf ähnliche Trends aufweisen. Der womöglich größte Unterschied liegt jedoch in dem deutlich höheren Energiebedarf der Pilotanlage mit $55,91 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$ zu den benötigten $18,22 \frac{\text{GJ}}{\text{t}_{\text{RS}}}$ in der industriellen Produktionsanlage. Beide Werte beziehen sich auf die Berechnung bei Standardparametern. Der Unterschied dieser Werte liegt sowohl in der Menge an produziertem Eisen, welcher deutlich höher bei der $150 \frac{\text{t}}{\text{h}}$ Anlage liegt, als auch der Rückführung des Gases. Dadurch ist nicht nur eine Verbesserung der Vorwärmung des Prozessgases erreichbar, sondern auch der Energieaufwand zur Produktion von Wasserstoff sinkt deutlich.

Bei den verschiedenen Layouts der Pilotanlage hat sich durch Simulation 5 (siehe **Kapitel 5.1.5**) gezeigt, dass die Verwendung eines Wärmetauschers keine besonderen Verbesserungen bietet. Daraus lässt sich schließen, dass die Erhöhung der Leistung des Vorwärm- und Vorreduktionsaggregates einen deutlich größeren Einfluss auf den spezifischen Kennzahlen der Anlage hat. Hierbei sollte geklärt werden, wie weit das Abgas der HPSR abgekühlt werden muss, um einen sicheren Transport gewährleisten zu können. Dieser Trend zeichnete sich bereits bei der Versuchsreihe der Variation des Produktes der spezifischen Kennzahlen des Wärmetauschers in **Kapitel 5.1.2** ab. Hier wurde gezeigt, dass es drei Bereiche im Einsatz verschiedener Wärmetauscher gibt. Mit einer geringen Wärmeübertragung konnten gute Ergebnisse erzielt werden, da ein heißes Abgas zur Vorwärmung und -reduktion zur Verfügung stand. Im Anschluss darauf erfolgte ein Übergangsbereich bei einer mittleren Übertragungsleistung. Bei Wärmetauschern mit besonders hohen $k \cdot A$, zeigte sich erneut eine Senkung des Energiebedarfes. Hierfür kann als Grund die hohe Vorwärmung des Prozessgases genannt werden.

Des Weiteren zeigte sich durch die Entfernung der Vorreduktion und Vorwärmung in Simulation 4 (siehe **Kapitel 5.1.4**), dass deutlich schlechtere Ergebnisse erzielt wurden als mit Standardparameter und voll ausgestattetem Anlagenlayout. Hierbei wird eine Differenz in der Eisenausbringung von 4,04 % erzielt. Daraus lässt sich schließen, dass das wichtigste Zusatzaggregat der HPSR-Anlage die Vorwärmung- und Vorreduktion ist. Diese bringt somit

nicht nur den Vorteil der Produktivitätssteigerung, sondern ermöglicht auch den variablen Einsatz von Zusatzstoffen wie z.B. Karbonaten.

Bei den Berechnungen der $150 \frac{t}{h}$ Massenproduktionsanlage ist auf die dynamische Berechnung des Kohlenstoffabbrandes hingewiesen worden. Dieser ist nicht nur von der Eisenproduktion abhängig, sondern von den Strömungsverhältnissen, Gaszusammensetzungen und Temperaturen des Plasmas. Hierfür sollten Untersuchungen angestellt werden, um eine Anpassung und gleichzeitige Verbesserung an das Modell vornehmen zu können.

Um Vergleiche mit dem Modell von Badr zu erzielen, wurde **Abbildung 3-3** mehrmals herangezogen. Dabei wird der Einfluss der eingebrachten H_2 -Menge auf die Eisenausbringung, die Eisenverschlackung zu FeO und die Gasausnutzung dargestellt. Bei dem Vergleich sowohl der Pilot- als auch der Massenproduktionsanlage konnte bei der Berechnung festgestellt werden, dass diese Parameter auch von den Wärmetauschern abhängig sind. Diese mussten gedrosselt werden, um vergleichbare Ergebnisse erzielen zu können, da bei geringen Gasflüssen die Wärmeübertragung zu groß wäre. Bei großen Gasmengen wurde jedoch bei der geringen Leistung der Wärmetauscher keine merkliche Vorwärmung des Prozessgases erreicht. Es stellte sich heraus, dass beide Anlagenlayouts nicht die Kennwerte erzielen konnten, die Badr berechnete. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die statisch berechneten Modelle mit einem fixierten Gasausnutzungsgrad berechnet wurden. Für zukünftige Berechnungen kann dieses Modell modular erweitert werden, um diesen Fall abzudecken.

In der Versuchsreihe 3 wurde sowohl bei der $1 \frac{t}{h}$ Anlage als auch der $150 \frac{t}{h}$ Anlage nachgewiesen, dass eine Steigerung der Abstichttemperatur nur zu einem erhöhten Energiebedarf, niedrigerer Gasausnutzung und höherer Eisenverschlackung führt. Bei der Variation der Abgastemperatur zeigte sich, dass diese einen enormen Einfluss auf die Eisenverschlackung hat. Durch die Reduktion der „Abgas WTII Ein“ Temperatur auf $900 \text{ }^\circ\text{C}$ wurden die schlechtesten Werte der Eisenausbringung mit ca. 83,9 % erreicht. Dies lässt sich wie bereits erwähnt auf die Minimierung der Leistung des Vorwärm- und Vorreduktionsaggregates zurückführen.

Die Berechnungen zur Untersuchung des Gas Bleeds zeigten auf, dass erst nach mehreren Iterationen ein gewisses Gleichgewicht erreicht werden konnte. Die Menge an produzierten CO , CO_2 , und H_2O sind im Vergleich zum kontinuierlich ausgeschleusten Gas stets steigend. Eine Erhöhung des Gas Bleeds hieße jedoch ein Abbrennen von teurem Wasserstoff. Daher müsste eine Optimierung vorgenommen werden, die eine dynamische Korrektur zulässt.

Aufgrund der Tatsache, dass die Berechnung auf drei Iterationsschritte festgelegt wurde, müssten somit gewisse Korrekturparameter und Einstellungen verändert werden. Eine Möglichkeit hierbei wäre es, den Kohlenstoffabbrand in Abhängigkeit der eingebrachten Gasmenge, Gaszusammensetzung, Erzmenge und Erzanalyse zu untersuchen und so einen fixen Parameter zu generieren.

Wie in **Tabelle 5-XXIII** und **Tabelle 5-XXIV** ersichtlich, unterscheiden sich die Berechnungen deutlich von Plaul und Badr. Die Input Parameter wurden ähnlich gewählt, um Vergleichbar zu bleiben. Die Temperatur des vorreduzierten Erzes zwischen beiden Berechnungen, jedoch die Prozessgastemperatur liegt deutlich unter jener von Plaul und Badr. Die produzierte Menge Eisen liegt mit $91,68 \frac{t}{h}$ ebenfalls darunter. Bei den spezifischen Kennzahlen lässt sich erkennen, dass die statischen Berechnungen durch feste Annahmen deutlich bessere Werte produzieren, wie die iterative Berechnung durch FactSage®. Aufgrund der variablen Berechnungen mit dem programmierten Macro, können mehrere Szenarien, sowie eine Vielzahl von Variablen für eine grobe Annahme über zukünftige Prozesseinstellungen getroffen werden. Es ist jedoch von Nöten, die Einflussparameter auf die homogene Wassergas-Shift-Reaktion zu untersuchen. Diese kann bei diesem Anlagenlayout sowohl von der Geschwindigkeit des Gases als auch dessen Zusammensetzung abhängig sein.

Wie bereits erwähnt sollen die Berechnungen dieser Arbeit als theoretische Vergleichsbasis dienen. Auf dem Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie findet bereits ein Projekt statt zum Upscaling einer HPSR-Anlage. Hierbei soll das Berechnungsmodell dieser Arbeit als Grundstein dienen und noch erweitert werden. Die Ergebnisse der praktischen Versuche einer Pilotanlage können hierbei mit dieser Arbeit verglichen werden.

Im Weiteren wird bereits der Einfluss von Spurenelementen wie Kupfer oder Begleitelemente wie Phosphor am Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie untersucht. Kupfer spielt hierbei aufgrund des Einsatzes von Schrott eine Rolle. Beim Starten einer HPSR-Anlage muss immer elektrische Leitfähigkeit gegeben sein, daher kann man nicht direkt mit der Chargierung des Erzes starten. Als Einsatzmaterial wird Schrott verwendet, dass aufgrund der hohen Recyclingrate bereits Spuren von Kupfer enthält. Aufgrund des hohen Energieeintrages durch den Lichtbogen kann es zur Verdampfung von diesen Spurenelementen kommen. Sollte dies der Fall sein, ist es notwendig die Berechnungen dahingehend anzupassen.

Weitere wichtige Themen in Zukunft wird der Einfluss der Gangart sein. Auf dem Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie finden hierbei bereits Versuche zur Wahl des richtigen

Feuerfestmaterials statt. Aufgrund des hohen thermischen Eintrages des Lichtbogens sind extreme Anforderungen an dieses zu stellen.

In zukünftigen Projekten ist es notwendig, eine Datenbank zu finden oder bereits bestehende anzupassen auf den Einsatz eines Lichtbogens. Wie bereits in **Kapitel 2.4.1** erwähnt, kann Wasserstoff aufgrund des hohen Energieeintrages atomisieren und später auch im weiteren ionisieren. Dieser Vorgang kann deutlichen Einfluss auf dem Gasausnutzungsgrad haben und diesen steigern. Dadurch wären deutlich geringere Wasserstoff-Erz-Verhältnisse von Nöten. Die Auswirkungen der Optimierung des Gasausnutzungsgrades ist in **Kapitel 5.4** aufgezeigt worden. Durch die Erhöhung der Gasausnutzung können deutlich geringere Gehalte an FeO in der Schlacke erzielt werden. Allerdings müssten die Werte der Gasausnutzung unter realen Bedingungen festgestellt werden und die Simulation an diese realen Gegebenheiten angepasst werden.

7 Literaturverzeichnis

- [1] Schreyer, F., G. Luderer, R. Rodrigues, R.C. Pietzcker, L. Baumstark and M. Sugiyama et al., Common but differentiated leadership: strategies and challenges for carbon neutrality by 2050 across industrialized economies.
- [2] <https://renephoenix.de/marc-uwe-klings#:~:text=Ja%2C%20wir%20k%C3%B6nnen%20jetzt%20was,atmen%20kann%2C%20dass%20die%20FI%C3%BCsse>, Abgerufen am: 25.01.2022.
- [3] UN-BASIS-INFORMATIONEN 54: Das UN-Klimaabkommen von Paris.
- [4] Our Vision for A Clean Planet for All, https://ec.europa.eu/clima/system/files/2018-11/vision_1_emissions_en.pdf, Abgerufen am: 25.01.2022.
- [5] Global Steel Industry's GHG Emissions, <https://www.globalefficiencyintel.com/new-blog/2021/global-steel-industrys-ghg-emissions>, Abgerufen am: 25.01.2022.
- [6] Gottstein, G., Physikalische Grundlagen der Materialkunde, 3. Auflage, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007.
- [7] Atkins, P.W. and J. de Paula, Physikalische Chemie, 5. Aufl., Wiley-VCH-Verl., Weinheim, 2013.
- [8] U. Kazmaier, H.A. Klein, H.P. Latscha (Eds.), Chemie-Basiswissen, 9., vollst. überarb. Aufl., Springer, Berlin, 2007.

- [9] Barin, I., Thermochemical data of pure substances, Third edition, VCH, Weinheim, New York, 2008.
- [10] Binnewies, M., Chemische Gleichgewichte: Grundlagen, Berechnungen, Tabellen, VCH, Weinheim, 1996.
- [11] Czeslik, C., H. Seemann and R. Winter, Thermodynamik, in: C. Czeslik, H. Seemann, R. Winter (Eds.), Basiswissen Physikalische Chemie, 4., aktualisierte Auflage, Vieweg+Teubner, Wiesbaden, 2010, pp. 41–115.
- [12] Fabrichnaya, O.B., S.K. Saxena, P. Richet and E.F. Westrum, Thermodynamic Data, Models, and Phase Diagrams in Multicomponent Oxide Systems, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004.
- [13] Hillert, M., Phase equilibria, phase diagrams and phase transformations: Their thermodynamic basis, 2nd ed., repr, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
- [14] Shaltami, O., D. Morais, F. Fares, F. El Oshebi, H. Errishi and I. Bustany, Iron ores: A review, 2020.
- [15] Bernát, I., The Distribution of Iron in Nature, in: I. Bernát (Ed.), Iron Metabolism, Springer US, Boston, MA, 1983, pp. 9–13.
- [16] Cornell, R.M. and U. Schwertmann, The Iron Oxides: Structure, Properties, Reactions, Occurrences and Uses, Second, completely revised and extended edition, Wiley-VCH GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2003.
- [17] USGS National Minerals Information Center, Iron Ore Data Sheet - Mineral Commodity Summaries 2020.
- [18] Muwanguzi, A.J.B., A.V. Karasev, J.K. Byaruhanga and P.G. Jönsson, Characterization of Chemical Composition and Microstructure of Natural Iron Ore from Muko Deposits, ISRN Materials Science 2012 (2012), 3, pp. 1–9.
- [19] Plaul, J.F., Schmelzreduktion von hämatitischen Feinerzen im Wasserstoff-Argon-Plasma, 2005.
- [20] B.Sc. M.Sc. Karim Badr, Smelting of Iron Oxides using Hydrogen Based Plasmas, Dissertation, Leoben, 2007.
- [21] B.Sc. M.Sc. Michael Zarl, Ermittlung der Grundlagen für die Skalierung von Plasma-Schmelzreduktionsreaktoren für die Eisenherstellung, Dissertation, Leoben, 2021.

- [22] Carajas Iron Ore Mine, <https://www.mining-technology.com/projects/carajas-iron-ore-mine/>, Abgerufen am: 11.01.2022.
- [23] Wriedt, H.A., The Fe-O (Iron-Oxygen) System, JPE 12 (1991), 2, pp. 170–200.
- [24] Verein Deutscher Eisenhüttenleute (Ed.), Schlackenatlas // Slag atlas, 2 // 2. ed., repr, Verl. Stahleisen, Düsseldorf, 1981 // 2012.
- [25] Fleet, M.E., The structure of magnetite, Acta Crystallogr B Struct Crystallogr Cryst Chem 37 (1981), 4, pp. 917–920.
- [26] Darken, L.S. and R.W. Gurry, The System Iron—Oxygen. II. Equilibrium and Thermodynamics of Liquid Oxide and Other Phases, J. Am. Chem. Soc. 68 (1946), 5, pp. 798–816.
- [27] Berthon, J., A. Revcolevschi, H. Morikawa and B. Touzelin, Growth of wustite (Fe_{1-x}O) crystals of various stoichiometries, Journal of Crystal Growth 47 (1979), 5-6, pp. 736–738.
- [28] Muan, A. and E.F. Osborn, Phase equilibria among oxides in steelmaking, Addison-Wesley Pub. Co, Reading, Mass., 1965.
- [29] Vignes, A., Extractive Metallurgy 1: Basic Thermodynamics and Kinetics, 1., Auflage, John Wiley & Sons, New York, NY, 2013.
- [30] Barbero, J.A., M.A. Blesa and A.J.G. Maroto, The Lower Temperature Range of the Wustite Stability Field, Zeitschrift für Physikalische Chemie 124 (1981), 2, pp. 139–147.
- [31] Fischer, W.A. and D. Janke, Elektrochemische Bestimmung der Sauerstoffpartialdrücke in Wasserdampf-Wasserstoff-Gemischen und sauerstoffhaltigen Eisenschmelzen, Archiv für das Eisenhüttenwesen 39 (1968), 2, pp. 89–99.
- [32] Fischer, W.A. and J.F. Schumacher, Die Sättigungslöslichkeit von Reineisen an Sauerstoff vom Schmelzpunkt bis 2046°C, ermittelt mit dem Schwebeschmelzverfahren, Archiv für das Eisenhüttenwesen 49 (1978), 9, pp. 431–435.
- [33] Weinstein, M. and J.F. Elliott, Solubility of hydrogen in liquid iron alloys, Transactions of the American Institute of Mining (1963), pp. 382–393.
- [34] Sakao, H. and K. Sano, Equilibrium between Dissolved Oxygen in Liquid Iron and H₂-H₂O Gas Mixtures, Trans. JIM 1 (1960), 1, pp. 38–42.

- [35] Padhy, G. and Y.-i. Komizo, Diffusible hydrogen in steel weldments, *Trans JWRI* 42 (2013), pp. 39–62.
- [36] San-Martin, A. and F.D. Manchester, The Fe-H (Iron-Hydrogen) system, *Bulletin of Alloy Phase Diagrams* 11 (1990), 2, pp. 173–184.
- [37] Pluschkell, W., *Partialdruckwirkungen bei der Blasstahlerzeugung* (1981).
- [38] Dipl. -Ing. Eduard Bäck, *Schmelzreduktion von Eisenoxiden mit Argon-Wasserstoff-Plasma*, Dissertation, Leoben, 1998.
- [39] Xu, C.C. and D.-q. Cang, A brief overview of low CO₂ emission technologies for iron and steel making, *J. Iron Steel Res. Int.* 17 (2010), 3, pp. 1–7.
- [40] Schreiter, W., *Chemische Thermodynamik: Grundlagen, Übungen, Lösungen*, De Gruyter, Berlin, New York, 2010.
- [41] Ellingham-Richardson diagram, http://web.mit.edu/2.813/www/readings/Ellingham_diagrams.pdf.
- [42] Sabat, K.C. and A.B. Murphy, Hydrogen Plasma Processing of Iron Ore, *Metal and Materi Trans B* 48 (2017), 3, pp. 1561–1594.
- [43] Murphy, A.B., Transport coefficients of air, argon-air, nitrogen-air, and oxygen-air plasmas, *Plasma Chem Plasma Process* 15 (1995), 2, pp. 279–307.
- [44] Murphy, A.B., Transport Coefficients of Hydrogen and Argon–Hydrogen Plasmas, *Plasma Chem Plasma Process* 20 (2000), 3, pp. 279–297.
- [45] Murphy, A.B., Transport coefficients of plasmas in mixtures of nitrogen and hydrogen, *Chemical Physics* 398 (2012), pp. 64–72.
- [46] DEMBOVSKY, V., *Zu Fragen der Thermodynamik und Reaktionskinetik in der Plasmametallurgie*, Neue Hütte (1987), pp. 214–219.
- [47] C. W. Bale, E. Bélisle, P. Chartrand, S. A. Decterov, G. Eriksson, A.E. Gheribi, K. Hack, I. H. Jung, Y. B. Kang, J. Melançon, A. D. Pelton, S. Petersen, C. Robelin, J. Sangster, P. Spencer and M-A. Van Ende, *FactSage*.
- [48] Pawlek, F., *Metallhüttenkunde*, De Gruyter, 1983.
- [49] Hătăărăscu, O., Besonderheiten der Thermodynamik und Kinetik der Eisenoxidreduktion mit Kohlenmonoxid und Wasserstoff, *Archiv für das Eisenhüttenwesen* 51 (1980), 11, pp. 445–448.

- [50] Müller-Erlwein, E., Chemische Reaktionstechnik, Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 1998.
- [51] J. Schenk, Special Metallurgical Process Technology: Lecture Special Metallurgical, Leoben, 2021.
- [52] BAN-YA, S., Y. IGUCHI and T. NAGASAKA, Rate of Reduction of Liquid Wustite with Hydrogen, Tetsu-to-Hagane 70 (1984), 14, pp. 1689–1696.
- [53] Li, J., P. Wang, L. Zhou and M. Cheng, The Reduction of Wustite with High Oxygen Enrichment and High Injection of Hydrogenous Fuel, ISIJ Int. 47 (2007), 8, pp. 1097–1101.
- [54] PIOTROWSKI, K., K. MONDAL, H. LORETHOVA, L. STONAWSKI, T. SZYMANSKI and T. WILTOWSKI, Effect of gas composition on the kinetics of iron oxide reduction in a hydrogen production process, International Journal of Hydrogen Energy 30 (2005), 15, pp. 1543–1554.
- [55] Lyu, Q., Y. Qie, X. Liu, C. Lan, J. Li and S. Liu, Effect of hydrogen addition on reduction behavior of iron oxides in gas-injection blast furnace, Thermochemica Acta 648 (2017), pp. 79–90.
- [56] Müller, H., A. Weigel and H. Wilhelmi, Verfahrenstechnische Grundlagen der Plasma-Schmelzreduktion, Archiv für das Eisenhüttenwesen 54 (1983), 12, pp. 481–486.
- [57] KAMIYA, K., N. KITAHARA, I. MORINAKA, K. SAKURAYA, M. OZAWA and M. TANAKA, Reduction of Molten Iron Oxide and FeO Bearing Slags by H₂-Ar Plasma, ISIJ Int. 24 (1984), 1, pp. 7–16.
- [58] KATAYAMA, H., S. TAGUCHI and N. TSUCHIYA, Reduction of Iron Oxide in Molten Slag with H₂ Gas, Tetsu-to-Hagane 68 (1982), 15, pp. 2279–2286.
- [59] SORMANN, A., Untersuchungen zur Schmelzreduktion von Eisenoxiden mit Wasserstoff als Reduktionsmittel, Dissertation, Leoben, 1992.
- [60] Hellström, K., V.-L. Diaconu and A. Diószegi, Density and thermal expansion coefficients of liquid and austenite phase in lamellar cast iron, China Foundry 17 (2020), 2, pp. 127–136.
- [61] Hoy, C. and S. Luidold, Das Dreistoffsystem Al₂O₃-CaO-SiO₂ – ein Vergleich von berechneten und gemessenen Daten, Berg Huettenmaenn Monatsh 157 (2012), 1, pp. 7–13.

- [62] Sun, H., K. Nakashima and K. Mori, Influence of Slag Composition on Slag–Iron Interfacial Tension, *ISIJ Int.* 46 (2006), 3, pp. 407–412.
- [63] Wiesinger, H., *Bewertung der Wasserstoffschmelzreduktion zur Stahlerzeugung*, 2000.
- [64] Maske, K.U. and J.J. Moore, The application of plasmas to high temperature reduction metallurgy, *High Temperature Technology* 1 (1982), 1, pp. 51–63.
- [65] Toshihiro Kitamura, Kiyoshi Shibata and Koichi Takeda, In-flight Reduction of Fe₂O₃, Cr₂O₃, TiO₂ and Al₂O₃ by Ar-H₂ and Ar-CH₄ Plasma, *ISIJ Int.* 33 (1993), 11, pp. 1150–1158.
- [66] Baronnet, J.-M., E.A. Ershov-Pavlov and S. Megy, Plasma parameters of an argon DC arc with graphite electrodes, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 32 (1999), 19, pp. 2552–2559.
- [67] Abdalla, A.M., S. Hossain, O.B. Nisfindy, A.T. Azad, M. Dawood and A.K. Azad, Hydrogen production, storage, transportation and key challenges with applications: A review, *Energy Conversion and Management* 165 (2018), pp. 602–627.
- [68] Carmo, M., D.L. Fritz, J. Mergel and D. Stolten, A comprehensive review on PEM water electrolysis, *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013), 12, pp. 4901–4934.
- [69] Franchi, G., M. Capocelli, M. de Falco, V. Piemonte and D. Barba, Hydrogen Production via Steam Reforming: A Critical Analysis of MR and RMM Technologies, *Membranes* 10 (2020), 1.
- [70] Bromberg, L., Plasma catalytic reforming of methane, *International Journal of Hydrogen Energy* 24 (1999), 12, pp. 1131–1137.
- [71] Hans-Jörg Baumgartner, *Thermodynamische Modellierung des Betriebs von Direktreduktionsanlagen mit maximalem Anteil an Wasserstoff*, Leoben, 2019.
- [72] Ambrosi, A. and S.E. Denmark, Die Wassergas-Shift-Reaktion in der organischen Synthese, *Angew. Chem.* 128 (2016), 40, pp. 12348–12374.
- [73] Madias, J., Ironmaking and Steelmaking Processes - Greenhouse Emissions, Control, and Reduction - Electric Arc Furnace Chapter, in: 2016, pp. 267–281.

- [74] H.-B. Horlacher, U. Helbig (Eds.), Rohrleitungen 2: Einsatz, Verlegung, Berechnung, Rehabilitation, 2. Aufl. 2018, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2018.