

ERHÖHUNG DER ENERGIE- UND RESSOURCENEFFIZIENZ
UND REDUZIERUNG DER TREIBHAUSGASEMISSIONEN
IN DER EISEN-, STAHL- UND ZINKINDUSTRIE (ERESTRE)

**Erhöhung der Energie- und Ressourceneffizienz
und Reduzierung der Treibhausgasemissionen
in der Eisen-, Stahl- und Zinkindustrie (ERESTRE)**

PRODUKTION UND ENERGIE

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Institut für Industriebetriebslehre und Industrielle Produktion
Deutsch-Französisches Institut für Umweltforschung
Band 2

Eine Übersicht über alle bisher in dieser Schriftenreihe erschienene Bände finden Sie am Ende des Buchs.

Erhöhung der Energie- und Ressourceneffizienz und Reduzierung der Treibhausgasemissionen in der Eisen-, Stahl- und Zinkindustrie (ERESTRE)

Gefördert vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages.
Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Autoren

Dipl.-Umwelting. Hauke Bartusch, Dipl.-Ing. Ana María Fernández Alcalde,
Dr. Magnus Fröhling, Prof. Dr. Frank Schultmann, Dipl.-Wi.-Ing. Frank Schwaderer

Impressum

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
KIT Scientific Publishing
Straße am Forum 2
D-76131 Karlsruhe
www.ksp.kit.edu

KIT – Universität des Landes Baden-Württemberg und
nationales Forschungszentrum in der Helmholtz-Gemeinschaft



Diese Veröffentlichung ist im Internet unter folgender Creative Commons-Lizenz publiziert: <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/de/>

KIT Scientific Publishing 2013
Print on Demand

ISSN 2194-2404
ISBN 978-3-86644-857-5

Erhöhung der Energie- und
Ressourceneffizienz und
Reduzierung der Treibhausgasemissionen
in der Eisen-, Stahl- und Zinkindustrie

ERESTRE

Autoren

Dipl.-Umwelting. Hauke Bartusch,
Dipl.-Ing. Ana María Fernández Alcalde,
Dr. Magnus Fröhling,
Prof. Dr. Frank Schultmann,
Dipl.-Wi.-Ing. Frank Schwaderer

„Gefördert vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages“. „Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor“

Karlsruhe, März 2013

Vorwort

Die Metallerzeugung und -bearbeitung ist durch große Einsatzmengen an Rohstoffen und benötigter Energie sowie verschiedene Kuppelprodukte, insbesondere Schlacken, Stäube, Schlämme und klimarelevante Emissionen charakterisiert. In den vergangenen Jahren wurden aufgrund der wirtschaftlichen Relevanz und rechtlicher Rahmenbedingungen vielfältige Anstrengungen unternommen, Ressourcen- und Energieeinsatz zu verringern, den Anfall von Kuppelprodukten zu vermeiden oder diese zu verwerten. Neben internen Maßnahmen, etwa der Kreislaufführung von Stäuben, hat sich ein Produktions- und Verwertungsnetzwerk etabliert, in dem spezialisierte Recyclingprozesse Kuppelprodukte verarbeiten und somit werthaltige Rohstoffe, insbesondere Eisen und Zink, im Stoffkreislauf halten. Trotz der erzielten Erfolge sind weitere Verbesserungen notwendig, um langfristig steigenden Rohstoff- und Energiepreisen zu begegnen und die Entsorgung werthaltiger Stoffe auf Deponien zu vermeiden sowie notwendige Verringerungen klimarelevanter Emissionen zu erreichen.

Das dem vorliegenden Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben „Erhöhung der Energie- und Ressourceneffizienz und Reduzierung der Treibhausgasemissionen in der Eisen- und Stahlindustrie sowie der Zinkindustrie (ERESTRE)“ hat das Ziel, durch detaillierte techno-ökonomische Analysen sowohl aus ökonomischer als auch aus ökologischer Sicht vorteilhafte und kurzfristig umsetzbare Ressourceneffizienzmaßnahmen zu erarbeiten und hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf die Energieeffizienz und CO₂-Emissionen sowie deren Wirtschaftlichkeit zu bewerten und damit eine Grundlage für die mögliche Umsetzung der Maßnahmen zu schaffen. Während in der Vergangenheit vor allem Verbesserungen einzelner Prozesse erzielt wurden, steht hierbei die übergreifende Betrachtung des Produktions- und Verwertungsnetzwerkes der Eisen- und Stahlindustrie, der Recyclingindustrie sowie der Zinkindustrie im Fokus der Arbeiten. Dies geschieht, um einerseits Problemverlagerungen von einem Prozess auf den anderen zu vermeiden, und andererseits, um die Vernetzung und den gegenseitigen Einfluss von Stoffströmen und Maßnahmen gezielt zu nutzen. Gemeinsam mit den Projektpartnern werden vielversprechende Maßnahmen identifiziert und mit Hilfe eines im Rahmen des Vorhabens entwickelten stoff- und energiestrombasierten Ansatzes technisch, ökonomisch und ökolo-

gisch bewertet. Die Ergebnisse sind zum einen vielversprechende interne und externe Verwertungsmaßnahmen, die weiter verfolgt werden sollten. Zum anderen wird ein Bewertungswerkzeug zur Verfügung gestellt, das auch für Erweiterungen, z. B. im Hinblick auf die Bewertung neuer Prozesse und weiterer Maßnahmen genutzt werden kann.

Wir möchten uns an dieser Stelle bei allen Beteiligten bedanken, die zum erfolgreichen Abschluss dieses Vorhabens beigetragen haben.

Zuvorderst gilt unser Dank dem Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) für die finanzielle Förderung des Vorhabens und Herrn Dr. C. Börner und Frau Dr. E. Strösser für die wissenschaftliche Betreuung seitens des Projektträgers Jülich im Forschungszentrum Jülich von der Antragsphase bis zu dessen Abschluss.

Für Ihre Unterstützung vor allem durch Erhebung und Bereitstellung umfangreichen Datenmaterials, zahlreiche fruchtbare Diskussionen sowie persönliche Unterstützung sind wir unseren industriellen Projektpartnern zu tiefem Dank verpflichtet. Bei ArcelorMittal Eisenhüttenstadt GmbH danken wir daher herzlich Frau I. Böslér, Herrn Dr. J. Hunger, Herrn F. Kutschán, Frau K. Lonzek, Herrn Dr. J. Mernitz, Herrn G. Sickert und Herrn T. Siepert. Ebenfalls möchten wir uns herzlich bei Herrn Dr. H. Apfel, Herrn Dr. M. Fleischer, Herrn J. Greinacher und Herrn Dr. A. Grosse von den Badische-Stahl-Engineering GmbH bedanken. Bei der Befesa Steel Services GmbH gilt unser herzlicher Dank den Herren M. Gamroth, T. Krause, U. Lüke, A. Ruh, Herrn U. Hasche von der Befesa Zinc Freiberg GmbH & Ko. KG und Herrn E. v. Billerbeck von der Befesa Zinc Duisburg GmbH. Ebenfalls möchten wir Herrn Dr. C. Hillmann, Herrn Dr. K.-J. Sassen von der DK Recycling und Roheisen GmbH sehr herzlich danken. Nicht zuletzt sei auch Herrn Dr. P. Scheeren, Herrn F. Tiegges und Herrn F. Nebel von der Xstrata Zink GmbH herzlich gedankt.

Magnus Fröhling

Hauke Bartusch

Frank Schwaderer

Ana María Fernández Alcalde

Frank Schultmann

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	I
Inhaltsverzeichnis	III
Abbildungsverzeichnis	VII
Tabellenverzeichnis	XIII
1 Problemstellung, Zielsetzung und Lösungsweg	1
2 Vernetzung der Eisen- und Stahl- sowie der Zinkindustrie durch Recyclingprozesse	5
3 Eingesetzte Methoden	11
3.1 Fließschemasimulationsbasierte Prozesssimulation.....	11
3.1.1 Aufbau und Funktionsweise der stationären Fließschemasimulation.....	13
3.1.2 Funktionsweise und Einsatzbereich genutzter Grundoperationen der Fließschemasimulation.....	16
3.2 Multiple lineare Regression.....	24
3.3 Entwicklung eines Gesamtansatzes.....	25
4 Berechnung von prozessspezifischen Transformationsfunktionen zur Beschreibung der betrachteten Prozessschritte	31
4.1 Simulation der Stahlherstellung im integrierten Hüttenwerk der AcelorMittal Eisenhüttenstadt GmbH.....	31
4.1.1 Beschreibung der relevanten Prozesse und wesentlicher Stoff- und Energieströme.....	32
4.1.2 Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung.....	37
4.1.3 Erstellung und Kalibrierung der Modelle zur Fließschemasimulation.....	41
4.1.4 Einsatz der Simulation zur Berechnung von benötigten Prozessausgangsgrößen bei unabhängiger Variation relevanter Prozesseingangsgrößen.....	54
4.2 Simulation der Roheisenerzeugung und Verwertung von Reststoffen mit geringen Zinkkonzentrationen im DK-Prozess.....	62

4.2.1	Beschreibung der eingesetzten Prozesse und wesentlicher Stoff- und Energieströme.....	62
4.2.2	Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung	65
4.2.3	Erstellung und Kalibrierung der Modelle zur Fließschemasimulation	67
4.2.4	Einsatz der Simulation zur Berechnung von benötigten Prozessausgangsgrößen bei unabhängiger Variation relevanter Prozesseingangsgrößen.....	72
4.3	Simulation der Stahlherstellung im Elektrolichtbogenofen	75
4.3.1	Beschreibung des Prozesses und wesentlicher Stoff- und Energieströme	76
4.3.2	Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung	78
4.3.3	Erstellung und Kalibrierung des Modells zur Fließschemasimulation	80
4.3.4	Einsatz der Simulation zur Berechnung benötigter Prozessausgangsgrößen bei unabhängiger Variation relevanter Prozesseingangsgrößen.....	85
4.4	Simulation der Verwertung von Reststoffen mit hohen Zinkkonzentrationen im Wälzprozess.....	87
4.4.1	Beschreibung des Prozesses und wesentlicher Stoff- und Energieströme	87
4.4.2	Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung	88
4.4.3	Erstellung und Kalibrierung des Modells zur Fließschemasimulation	89
4.4.4	Einsatz der Simulation zur Berechnung von benötigten Prozessausgangsgrößen bei unabhängiger Variation relevanter Prozesseingangsgrößen.....	91
4.5	Simulation der Laugung zur hydrometallurgischen Gewinnung von Zink bei der XSTRATA.....	92
4.5.1	Beschreibung des Prozesses und wesentlicher Stoff- und Energieströme	92

4.5.2	Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung	95
4.5.3	Fließschemasimulationsmodellerstellung und Kalibrierung.....	96
4.5.4	Untersuchung des möglichen Einsatzes von Wälzoxid in der 2. Jarosit-Stufe der Laugung der hydrometallurgischen Zinkgewinnung	102
5	Berechnung und Bewertung ausgewählter Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz im ERESTRE-Netzwerk	105
5.1	Erstellung eines Gesamtmodells zur Quantifizierung der Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz	105
5.2	Ergebnisse der Szenarien und deren Auswirkungen auf CO ₂ -Emissionen, Energieeffizienz sowie Wirtschaftlichkeit.....	109
5.2.1	Untersuchung der möglichen Verwertung von Wälzschlacke im Elektrolichtbogenofen	110
5.2.2	Untersuchung der möglichen Verwertung von Wälzschlacke im DK-Prozess	115
5.2.3	Interne Rezirkulation des EAF-Staubes und Auswirkungen auf den Wälzprozess.....	120
5.2.4	Bewertung der Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzrohr	124
5.2.5	Interne Verwertung des Gichtstaubes des integrierten Hüttenwerkes und Verwertung im DK-Prozess	126
5.2.6	Bewertung des möglichen Einsatzes von Gichtschlamm des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess	132
5.2.7	Bewertung der internen Verwertung von Konverterschlacke des integrierten Hüttenwerkes.....	135
5.2.8	Bewertung der internen Verwertung von Walzzunder des integrierten Hüttenwerkes	136
5.2.9	Bewertung der möglichen Verwertung von Konverterfilterstaub des integrierten Hüttenwerkes im Wälzprozess und Konverterverdampfungskühlerstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess unter Berücksichtigung der möglichen internen Rezirkulation von Konverterfilterstaub	138

5.2.10	Bewertung der möglichen Verwertung von Konverterverdampfungskühlerstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess ohne Rezirkulation des Konverterfilterstaubes.....	143
5.3	Zusammenfassende Bewertung der Gesamtszenarien.....	145
6	Diskussion des Anwendungsbereichs und der Grenzen der entwickelten Methodik sowie Ausblick mögliche Verwertungen.....	149
6.1	Grenzen der Methodik und Einfluss von Abweichungen der erhobenen Daten auf die Ergebnisse der Szenarien.....	149
6.2	Fortführung der Arbeiten zur Umsetzung der Ergebnisse	151
7	Zusammenfassung	153
	Literaturverzeichnis	157

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Struktur der Eisen- und Stahlindustrie mit externen Recyclingprozessen und Vernetzung mit der Zinkindustrie	7
Abbildung 2: Mögliche Einsatzgebiete von Fließschemasimulation während des Anlagenlebenszyklus	13
Abbildung 3: Verknüpfung von Grundoperationen in der Fließschemasimulation.....	14
Abbildung 4: Struktur einer sequentiell modularen Fließschemasimulation..	15
Abbildung 5: Symbole der Stoffstrommanipulations-Grundoperationen in AspenPlus	17
Abbildung 6: Symbol der Reaktor-Grundoperationen in AspenPlus	22
Abbildung 7: Struktur des ERESTRE-Gesamtansatzes zur ökonomischen und ökologischen Bewertung von Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz.....	29
Abbildung 8: Stoffströme im betrachteten integrierten Hüttenwerk	32
Abbildung 9: Mittlere Zusammensetzung der Sinterbandaufgabe und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Sinter und Staub.....	34
Abbildung 10: Mittlere Zusammensetzung des Möllers und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Roheisen, Hochofenschlacke, Gichtstaub und Gichtschlamm.....	36
Abbildung 11: Mittlere Zusammensetzung des Roheisens sowie des Kühlterschrotts und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Rohstahl sowie Konverterschlacke, Verdampfungskühlerstaub und Filterstaub.....	37
Abbildung 12: System der Mischbetten zur Bereitstellung des Eingangsstoffstromes der Sinteranlage	39
Abbildung 13: Fließschemasimulationsmodell der Sinteranlage des integrierten Hüttenwerkes.....	42
Abbildung 14: Fließschemasimulationsmodell des Hochofens des integrierten Hüttenwerkes.....	47

Abbildung 15: Wesentliche Temperaturzonen und Reaktionszonen des Eisens im Hochofen	48
Abbildung 16: Fließschemasimulationsmodell des Sauerstoffblaskonverters des integrierten Hüttenwerkes	51
Abbildung 17: Verbesserung der Abbildungsgenauigkeit durch Erhöhung der Anzahl der Variationsschritte	55
Abbildung 18: Stoffströme im DK-Prozess	63
Abbildung 19: Mittlere Zusammensetzung der Sinterbandaufgabe und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Sinter und EGR-Staub	64
Abbildung 20: Mittlere Zusammensetzung des Möllers und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Roheisen, Schlacke, Gichtstaub und Zinkkonzentrat.....	65
Abbildung 21: Fließschemasimulationsmodell der Sinteranlage des DK-Prozesses.....	68
Abbildung 22: Fließschemasimulationsmodell des Hochofens, der Winderhitzer und des Kraftwerkes des DK-Prozesses.....	71
Abbildung 23: Stoffströme im Elektrostahlwerk.....	78
Abbildung 24: Mittlere Zusammensetzung des Schrottes und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Rohstahl, Schlacke, Grob- und Filterstaub.....	78
Abbildung 25: Fließschemasimulationsmodell des Elektrolichtbogenofens	81
Abbildung 26: Relevante Stoffströme im Wälzprozess.....	88
Abbildung 27: Mittlere Zusammensetzung der Reststoffe und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Wälzoxid und Wälzschlacke	88
Abbildung 28: Fließschemasimulationsmodell des Wälzprozesses	89
Abbildung 29: Relevante Stoffströme im hydrometallurgischen Zinkgewinnungsprozess.....	94
Abbildung 30: Mittlere Elementarzusammensetzung der Input-Stoffströme Röstgut, Konzentrat und Zellsäure	95

Abbildung 31: Aufteilung der Elemente auf die Output-Stoffströme Pb-Ag-Konzentrat, Jarosit und ungereinigte Neutrallauge.....	95
Abbildung 32: Fließschemasimulationsmodell des Laugungsprozesses zur Zinkgewinnung	97
Abbildung 33: Bewertung der Auswirkungen des Einsatzes von Wälzoxide bei der hydrometallurgischen Zink-Gewinnung der Xstrata. Darstellung der Gesamtmasse der Pb-Ag-Konzentrat-und Jarosit-Ausgangströme sowie des Energieverbrauches in Abhängigkeit des Einsatzes von Wälzoxid.....	103
Abbildung 34: Struktur des ERESTRE-Gesamtmodells.....	106
Abbildung 35: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im EAF auf die CO ₂ -Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten	113
Abbildung 36: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im EAF auf den kumulierten Energieaufwand.....	114
Abbildung 37: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im DK-Prozess auf die CO ₂ -Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten	117
Abbildung 38: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im DK-Prozess auf den kumulierten Energieaufwand	119
Abbildung 39: Auswirkungen der internen Rezirkulation von EAF-Staub auf die CO ₂ -Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten	121
Abbildung 40: Auswirkungen der internen Rezirkulation von EAF-Staub auf den kumulierten Energieaufwand.....	122
Abbildung 41: Auswirkungen der Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzprozess auf die CO ₂ -Emissionen des Wälzprozesses und vorgelagerter Prozessketten	125
Abbildung 42: Auswirkungen der Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzprozess auf den kumulierten Energieaufwand	125

Abbildung 43: Auswirkungen der internen Verwertung von Gichtstaub im integrierten Hüttenwerk auf die CO ₂ -Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten	128
Abbildung 44: Auswirkungen der internen Verwertung von Gichtstaub im integrierten Hüttenwerk den kumulierten Energieaufwand	128
Abbildung 45: Auswirkungen der Verwertung von Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf die CO ₂ -Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten	130
Abbildung 46: Auswirkungen der Verwertung von Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf den kumulierten Energieaufwand.....	131
Abbildung 47: Auswirkungen der Verwertung von Gichtschlamm des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf die CO ₂ -Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten	134
Abbildung 48: Auswirkungen der Verwertung von Gichtschlamm des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf den kumulierten Energieaufwand.....	134
Abbildung 49: Auswirkungen der internen Verwertung von Konverterschlacke im integrierten Hüttenwerk auf die CO ₂ -Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten	136
Abbildung 50: Auswirkungen der internen Verwertung von Konverterschlacke im integrierten Hüttenwerk auf den kumulierten Energieaufwand.....	136
Abbildung 51: Auswirkungen der internen Verwertung von Walzzunder im integrierten Hüttenwerk auf die CO ₂ -Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten	137
Abbildung 52: Auswirkungen der internen Verwertung von Walzzunder im integrierten Hüttenwerk auf den kumulierten Energieaufwand.....	137
Abbildung 53: Auswirkungen der Verwertung von Konverterfilterstaub im Wälzprozess und Konverterverdampfungskühlerstaub im DK-Prozess bei interner Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die	

CO ₂ -Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten	141
Abbildung 54: Auswirkungen der Verwertung von Konverterfilterstaub im Wälzprozess und Konverterverdampfungskühlerstaub im DK- Prozess bei interner Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf den kumulierten Energieaufwand	142
Abbildung 55: Auswirkungen der Verwertung von Konverterverdampfungs- kühlerstaub im DK-Prozess ohne interne Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die CO ₂ -Emissionen	144
Abbildung 56: Auswirkungen der Verwertung von Konverterverdampfungs- kühlerstaub im DK-Prozess ohne interne Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf den kumulierten Energieaufwand	145

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Beispiel einer systematischen, unabhängigen Variation von J Regressanden in zwei Schritten	56
Tabelle 2:	Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für die Sinteranlage des integrierten Hüttenwerkes	59
Tabelle 3:	Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für den Hochofen des integrierten Hüttenwerkes	60
Tabelle 4:	Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für den Konverter des integrierten Hüttenwerkes	61
Tabelle 5:	Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für die Sinteranlage des DK-Prozesses	73
Tabelle 6:	Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für die Sinteranlage des DK-Prozesses	75
Tabelle 7:	Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für den Elektrolichtbogenofenprozess	86
Tabelle 8:	Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für das Wälzrohr	92
Tabelle 9:	Reststoffe und deren Verwertungsoptionen im ERESTRE- Gesamtmodell	109

Tabelle 10:	Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im EAF auf Massen- und Energieströme des EAF und Wälzprozesses	110
Tabelle 11:	Zusammensetzung der Wälzschlacke mit und ohne Wälzschlackeeinsatz im Elektrolichtbogenofen.....	111
Tabelle 12:	Zusammensetzung des EAF-Staubes mit und ohne Wälzschlackeeinsatz im Elektrolichtbogenofen.....	112
Tabelle 13:	Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses.....	116
Tabelle 14:	Konzentration des DK-Zinkkonzentrates im Gesamtmodell mit und ohne Wälzschlackeverwertung im DK-Prozess	117
Tabelle 15:	CO ₂ -Emissionen und kumulierter Energieaufwand bei der Verwertung von Wälzschlacke im EAF und DK-Prozess.....	118
Tabelle 16:	Auswirkungen der internen Rezirkulation von EAF-Staub auf Massen- und Energieströme des EAF und Wälzprozesses	120
Tabelle 17:	Zusammensetzung der Wälzschlacke mit und ohne interner Rezirkulation von EAF-Staub	121
Tabelle 18:	Auswirkungen der Kombination von EAF-Staubrezirkulation und Wälzschlackeverwertung im EAF bzw. DK-Prozess.....	123
Tabelle 19:	Auswirkungen der Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzprozess auf Massen- und Energieströme des Wälzprozesses.....	124
Tabelle 20:	Vergleich des Wälzschlackeeinsatz im DK-Prozess und des Einsatzes von DK-Gichtstaub im Wälzprozess mit der Kombination der beiden Maßnahmen.....	126
Tabelle 21:	Auswirkungen der internen Verwertung von Gichtstaub im integrierten Hüttenwerk auf Massen- und Energieströme des integrierten Hüttenwerkes.....	127
Tabelle 22:	Änderung der Zusammensetzung des AMEH-Gichtstaubes mit und ohne interner Verwertung des Gichtstaubes	127
Tabelle 23:	Auswirkungen der Verwertung von Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses	128

Tabelle 24:	Vergleich der internen Verwertung von AMEH-Gichtstaub mit der Verwertung im DK-Prozess	131
Tabelle 25:	Zusammensetzung des AMEH-Gichtschlammes	132
Tabelle 26:	Auswirkungen der Verwertung von Gichtschlamm des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses	133
Tabelle 27:	Auswirkungen der Verwertung von AMEH-Gichtschlamm im DK-Prozess auf die Zusammensetzung des DK-Zinkkonzentrates ..	133
Tabelle 28:	Auswirkungen der internen Verwertung von Konverterschlacke im integrierten Hüttenwerk auf Massen- und Energieströme des integrierten Hüttenwerkes	135
Tabelle 29:	Auswirkungen der internen Verwertung von Walzzunder im integrierten Hüttenwerk auf Massen- und Energieströme des integrierten Hüttenwerkes	137
Tabelle 30:	Auswirkungen der internen Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die Zusammensetzung des Konverterfilterstaubes.....	138
Tabelle 31:	Auswirkungen der internen Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die Zusammensetzung des Konverterverdampfungs-kühlerstaubes.....	139
Tabelle 32:	Auswirkungen der internen Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die Zusammensetzung der Konverterschlacke.....	139
Tabelle 33:	Auswirkungen der Rezirkulation von Konverterfilterstaub des integrierten Hüttenwerkes auf Massen- und Energieströme des internen Hüttenwerkes.....	140
Tabelle 34:	Auswirkungen des Einsatzes von Konverterverdampfungs-kühlerstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses bei interner Rezirkulation von Konverterfilterstaub	140
Tabelle 35:	Auswirkungen des Einsatzes von Konverterfilterstaub des integrierten Hüttenwerkes im Wälzprozess auf Massen- und Energieströme des Wälzprozesses bei interner Rezirkulation von Konverterfilterstaub.....	141

Tabelle 36:	Auswirkungen des Einsatzes von Konverterverdampfungs- kühlerstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses ohne interne Rezirkulation von Konverterfilterstaub.....	144
Tabelle 37:	Übersicht der Ergebnisse der betrachteten Szenarien.....	146
Tabelle 38:	Auswertung von vielversprechenden Maßnahmenkombinationen	147

1 Problemstellung, Zielsetzung und Lösungsweg

Der Metallerzeugung kommt eine Schlüsselstellung im produzierenden Gewerbe in Deutschland zu. Neben der unmittelbaren wirtschaftlichen Relevanz mit mehr als 1.000 Betrieben, fast 250.000 Beschäftigten und ca. 95 Mrd. € Umsatz im Jahr 2010¹ ist sie auch als Rohstofflieferant zentraler industrieller Wertschöpfungsketten wie dem Maschinen- und Anlagenbau oder dem Fahrzeugbau von Bedeutung. Durch den großen Ressourcen- und Energieeinsatz, große Mengen an anfallenden Kuppelprodukten und Emissionen klimarelevanter Gase und einen starken internationalen Wettbewerb ist die Metallerzeugung in besonderem Maße von langfristig zu erwartenden Steigerungen der Rohstoff- und Energiepreise, knapper und teurer werdenden Deponierungsmöglichkeiten und gesetzlichen Rahmenbedingungen zur Vermeidung und Verringerung von Abfällen und Luftemissionen, wie etwa dem Emissionshandel, betroffen. So beträgt im Jahr 2008 der Energieverbrauch der Metallerzeugung ca. 700 PJ und macht damit ca. 30 % des Energieverbrauchs des produzierenden Gewerbes aus. 56 Mio. t emittiertes CO₂ im Jahr 2007 entsprechen fast 10 % der CO₂-Emissionen des produzierenden Gewerbes (Destatis, 2010). Eine besondere Stellung besitzen in diesem Zusammenhang die in großen Mengen anfallenden Kuppelprodukte, insbesondere Stäube, Schlämme und Schlacken, welche bedeutende Mengen an wertvollen Materialien wie Zink und Eisen enthalten. Es wurden daher in den vergangenen Jahren erhebliche Anstrengungen unternommen, den Anfall dieser Kuppelprodukte zu verringern bzw. sie einer Weiterverwertung zuzuführen. Dies hat dazu geführt, dass verschiedene Kuppelprodukte bereits heute wirtschaftlich verwertet werden, indem sie teilweise intern (d. h. im gleichen Unternehmen) oder auch extern (d. h. in einem anderen Unternehmen, z.T. in spezialisierten Recyclingunternehmen) als Rohstoff eingesetzt werden. So ist es in der Metallindustrie zu einer Vernetzung unterschiedlicher Metallkreisläufe und zur Bildung von Produktions- und Verwertungsnetzwerken, etwa in der Eisen- und Stahlindustrie und der Zinkindustrie, gekommen. Damit ist es vielfach gelungen, eine Steigerung der Ressourceneffizienz durch eine Verringerung primärer Rohstoffe zu erreichen und werthaltige Stoffe im Wirtschaftskreislauf zu halten.

¹ Daten für die Metallerzeugung und erste Bearbeitung der Erzeugnisse (vgl. Genesis-Online, 2011).

Eine solche Kuppelproduktverwertung hat Einfluss auf verschiedene Parameter der involvierten Prozesse. Die spezifischen Einsatzmengen der konventionellen Rohstoffe, der benötigten Energie bzw. Reduktionsmittel und die anfallenden Kuppelprodukte und Emissionen der Prozesse ändern sich und in der Konsequenz auch die Kosten- und Erlössituation. Hierin liegt auch eine große Chance zur effizienten Steuerung der Stoffströme innerhalb des Netzwerkes und damit der Ansatzpunkt des Forschungsvorhabens „Erhöhung der Energie- und Ressourceneffizienz und Reduzierung der Treibhausgasemissionen in der Eisen- und Stahlindustrie sowie der Zinkindustrie (ERESTRE)“. Im Vordergrund steht hierbei, durch gezielte Beeinflussung oder Umlenkung der Kuppelproduktströme repräsentativer Vertreter des Produktions- und Recyclingnetzwerkes der Eisen- und Stahlindustrie sowie der Zinkindustrie in Deutschland Verbesserungen im Hinblick auf die Ressourceneffizienz für das Gesamtnetzwerk zu erreichen, ohne dass (größere) Änderungen der Anlagenstruktur notwendig werden.

Zielsetzung dieses Forschungsvorhabens ist es daher, für die Eisen- und Stahl- sowie die über zinkhaltige Kuppelprodukte verbundene Zinkindustrie durch detaillierte techno-ökonomische Analysen sowohl aus ökonomischer als auch aus ökologischer Sicht vorteilhafte und kurzfristig umsetzbare Ressourceneffizienzmaßnahmen zu erarbeiten. Da bislang keine Ansätze existieren, die eine quantitative Abschätzung der ökonomischen und ökologischen Folgen der Änderung der Zusammensetzung des Stoffstromes bzw. der Verwendung eines bisher noch nicht eingesetzten Sekundärrohstoffs auf Netzwerkebene ermöglichen, wird ein entsprechendes Werkzeug entwickelt. Dieses Werkzeug ermöglicht die Unterstützung im Hinblick auf eine effiziente Stoffstromsteuerung des betrachteten Produktionsnetzwerkes der Eisen- und Stahl- sowie der Zinkerzeugung. Konkret soll dieses Werkzeug eingesetzt werden, um in enger Zusammenarbeit mit den beteiligten Projektpartnern kurzfristig umsetzbare Maßnahmen zur Steigerung der Energie- und Ressourceneffizienz sowie zur Senkung von klimarelevanten Emissionen zu identifizieren, Szenarien auszuarbeiten und diese anschließend zu bewerten. Durch die Betrachtung der ressourceneffizienzsteigernden Maßnahmen im Hinblick auf Energieverbrauch, CO₂-Emissionen und Wirtschaftlichkeit wird eine Entscheidungsgrundlage geschaffen, die die industrielle Durchsetzung vielversprechender Maßnahmen erleichtert.

Aus dieser übergeordneten Zielsetzung ergeben sich die im Folgenden skizzierten und im Forschungsvorhaben verfolgten Teilziele. Zunächst werden mögliche Maßnahmen zur Erhöhung der Ressourceneffizienz in der Eisen- und Stahlindustrie sowie der Zinkindustrie identifiziert. Hierzu ist die deutsche Eisen- und Stahlindustrie, die Zinkindustrie und die sie verbindenden Recyclingprozesse, insbesondere die betrachteten repräsentativen Vertreter, im Hinblick auf solche Maßnahmen zu analysieren. Als Grundlage für eine Bewertung der Verfahren bedarf es dann einer geeigneten Abbildung der einzelnen involvierten Produktionsprozesse. Geeignet heißt in diesem Zusammenhang, dass die Prozessmodelle eine im Hinblick auf die Bewertung notwendige Detaillierung aufweisen, die relevanten Stoff- und Energieströme beinhalten und eine hinreichende Abbildungsgenauigkeit erreichen. Mit den Prozessmodellen werden Variationen von Prozessparametern und Input- und Outputstoff- und -energieströmen betrachtet, die durch die identifizierten Maßnahmen betroffen sind. Da insbesondere auch die Auswirkungen externer, d. h. prozessübergreifender Maßnahmen bewertet werden sollen, ist zudem eine Integration der Einzelprozesse in einem Gesamtmodell des betrachteten Netzwerkes notwendig. Auch dieses hat einen hinreichenden Detaillierungsgrad und eine entsprechende Abbildungsgenauigkeit aufzuweisen. Es muss dabei möglich sein, die identifizierten Maßnahmen in ihren Auswirkungen auf die relevanten Stoff- und Energieströme sowohl für die einzelnen Prozesse als auch für das Netzwerk insgesamt zu berechnen. Mit dem auf diese Weise berechneten Mengengerüst werden die Maßnahmen ökonomisch und ökologisch bewertet. Damit wird eine Basis für weitere Untersuchungen und Arbeiten zur Umsetzung vielversprechender Maßnahmen geliefert. Um möglichst weite Anwendungsfelder zu eröffnen, wird der Ansatz erweiterbar und flexibel gestaltet.

Zur Erreichung dieser Zielsetzung wird zunächst in Kapitel 2 der Ausgangspunkt des Vorhabens näher beschrieben, d. h. die Vernetzung verschiedener Produktionsverfahren der Eisen- und Stahlindustrie über verbundene externe Recyclingverfahren mit der Zinkindustrie. Die auf Basis dieser Analysen und in enger Zusammenarbeit der Projektpartner als vielversprechend identifizierten internen und externen Maßnahmen zur Modifikation bzw. Umlenkung der Stoffströme in dem betrachteten Netzwerk werden dargestellt.

Im Anschluss daran werden in Kapitel 3 die Grundlagen der im Rahmen des Vorhabens eingesetzten Methoden und des verfolgten Gesamtansatzes zur Bewertung der Maßnahmen für das betrachtete Netzwerk erläutert. In den folgenden Kapiteln werden darauf basierend die Arbeiten des Forschungsvorhabens vorgestellt. Kapitel 4 stellt dar, wie die einzelnen Prozessmodelle für die betrachteten Produktionsverfahren als Basis für das integrierte Stoff- und Energiestrommodell erstellt werden. Hierzu werden die Schritte Datenaufnahme, Erstellung und Kalibrierung der thermodynamischen Simulationsmodelle und die Bestimmung linearer Transformationsfunktionen zur Berechnung von Input- und Output-Stoff- und Energieströmen auf Basis von Ergebnissen der Simulationsmodellen erläutert. In Kapitel 5 wird zunächst der Aufbau des integrierten Stoff- und Energiestrommodells mit den linearen Transformationsfunktionen beschrieben. Anschließend folgt die Bewertung der untersuchten Maßnahmen, wobei zunächst die betrachteten Szenarien und die wesentlichen zugrunde liegenden Annahmen erläutert werden. Die Darstellung der Auswirkungen liefert die wesentlichen Stoff- und Energieströme, CO₂-Emissionen, den Energieverbrauch sowie eine ökonomische Einordnung. Zudem wird jeweils der weitere Forschungsbedarf zur Umsetzung skizziert. In Kapitel 6 werden der verfolgte Ansatz des Vorhabens und nächste Schritte zur Umsetzung der identifizierten Maßnahmen sowie zur methodischen Weiterentwicklung diskutiert. Kapitel 7 fasst schließlich die Ergebnisse des Vorhabens zusammen.

2 Vernetzung der Eisen- und Stahl- sowie der Zinkindustrie durch Recyclingprozesse

Energie- und Ressourceneffizienz sind wichtige Wettbewerbsfaktoren der Eisen- und Stahlindustrie. In Deutschland werden jedes Jahr ca. 50 Mio. t Stahl produziert, wobei etwa 35 Mio. t über die Herstellungsrouten des integrierten Hüttenwerkes mit Sinteranlage, Hochofen, und Sauerstoffblaskonverter (LD-Konverter) und ca. 15 Mio. t im Wesentlichen durch Einschmelzen von Schrotten im Elektrolichtbogenofen hergestellt werden. Im Durchschnitt werden für eine Tonne Konverterstahl 1,37 t Eisenerz und 19,3 GJ Energie und für eine Tonne Elektrostahl etwa 5,4 GJ Energie (EIPPC, 2001), (Wirtschaftsvereinigung Stahl, 2008) eingesetzt.

Da sowohl die Rohstoffe als auch die Energie einen wesentlichen Anteil an den Herstellungskosten tragen, wurden in den letzten Jahrzehnten bereits große Fortschritte im Hinblick auf die Ressourcen- und Energieeffizienz gemacht. Von 1980 bis 2007 reduzierte sich der spezifische Energieeinsatz von ca. 30 GJ/t Stahl auf 17,51 GJ/t Stahl. Der Einsatz von Kohlenstoffträgern wie Kohle, Koks und Öl und von elektrischem Strom führt dabei zu klimarelevanten CO₂-Emissionen. Da vielfach Energieträger durch andere kohlenstoffhaltige Materialien substituiert wurden, ist die Einsparung an CO₂-Emissionen im Vergleich zu den Verringerungen des Energieeinsatzes kleiner. So wurden die CO₂-Emissionen von 1987 bis 2007 in der deutschen Eisen- und Stahlindustrie von 1,6 t/t Stahl auf 1,3 t/t Stahl reduziert (Wirtschaftsvereinigung Stahl, 2008). Im gleichen Zeitraum wurde der Einsatz von Schrott in der Stahlerzeugung insgesamt von ca. 9 Mio. t im Jahr 1970 auf 22 Mio. t im Jahr 2007 erhöht. Dabei ging, relativ betrachtet, der Anteil an Schrott im LD-Konverter von ca. 0,22 t/t Stahl in 1970 auf 0,18 t/t Stahl in 2007 zurück. Dagegen erhöhte sich der Anteil bei der Produktion von Elektrostahl von 0,83 t/t Stahl im Jahr 1970 auf 1,04 t/t Stahl (Wirtschaftsvereinigung Stahl, 2008).

In den Produktionsprozessen der Eisen- und Stahlindustrie entstehen Kuppelprodukte. Bei der Stahlproduktion über die Konverterroute fallen Schlacken, Stäube und Schlämme im Umfang von mehreren 100 kg/t Stahl an. In Abhängigkeit der eingesetzten Schrottsorte entstehen 130-160 kg Schlacke und ca. 10 kg Staub pro Tonne produziertem Elektrostahl (EIPPC, 2001). Aus ökonomischer

Sicht wird es immer interessanter, wertvolle Materialien, die in solchen Kuppelprodukten enthalten sind, über internes und externes Recycling in den Stoffkreislauf zurückzuführen. Dadurch hat sich ein Produktions- und Recyclingsnetzwerk in der Eisen- und Stahlindustrie etabliert. Abbildung 1 zeigt die wichtigsten Prozesse und Stoffströme in der Eisen-, Stahl-, Recycling- und angrenzenden Zinkindustrie. Über die Stoffströme, welche die einzelnen Prozesse verbinden, wirken sich Änderungen in Quantität und Qualität, im Besonderen die chemische Zusammensetzung der Kuppelprodukte in einem Prozess auf die verbundenen Prozesse aus. Als Inputströme der internen und externen Recyclingoptionen beeinflussen sie die benötigten Energie- und Rohstoffmengen und darüber hinaus die Produktmengen, -qualitäten sowie die Wirtschaftlichkeit.

Die externen Recyclingprozesse werden dabei in Abhängigkeit des Zinkgehaltes der recycelten Reststoffe aus der Eisen- und Stahlindustrie in Prozesse unterteilt, die zum Recycling von Reststoffen mit geringen, mittleren und hohen Zinkgehalten geeignet sind. Das Hauptprodukt der Recyclingprozesse für Reststoffe mit geringem (und mittlerem) Zinkgehalt stellt dabei Roheisen dar. Als Kuppelprodukt fallen zinkhaltige Materialien an, die als Rohstoff in der Zinkindustrie eingesetzt werden können. Prozesse zum Recycling von Stoffen mit hohen Zinkgehalten fokussieren dagegen die Rückgewinnung des Zinkes und veräußern das produzierte Hauptprodukt ebenfalls an die Zinkindustrie.

Im ERESTRE-Projekt werden die in Deutschland wichtigsten Prozesse aus Abbildung 1 durch einen Projektpartner repräsentiert und ermöglichen somit eine Analyse auf Basis von vor Ort erhobenen Daten. Die Primärstahlerzeugung in integrierten Hüttenwerken ist durch den Projektpartner ArcelorMittal Eisenhüttenstadt GmbH (AMEH) vertreten. Die sekundäre Stahlerzeugung in Elektrolichtbogenöfen wird über die Badische Steel Engineering GmbH in Kehl am Rhein abgebildet. Der Betreiber von drei der vier in Deutschland installierten Wälzrohre zum Recycling von Reststoffen mit hohen Zinkgehalten, die Befesa Steel Services GmbH, ist ebenfalls im Projekt vertreten. Die Verwertung von Reststoffen mit niedrigen Zinkgehalten wird durch die DK Recycling und Roheisen GmbH abgebildet. Als Vertreter der Zinkindustrie ist die Xstrata Zink GmbH, der einzige in Deutschland verbliebene Betreiber einer Zinkelektrolyse, an

ERESTRE beteiligt. Eine detaillierte Beschreibung der relevanten Prozesse sowie Stoff- und Energieströme der Projektpartner findet sich in Kapitel 4.

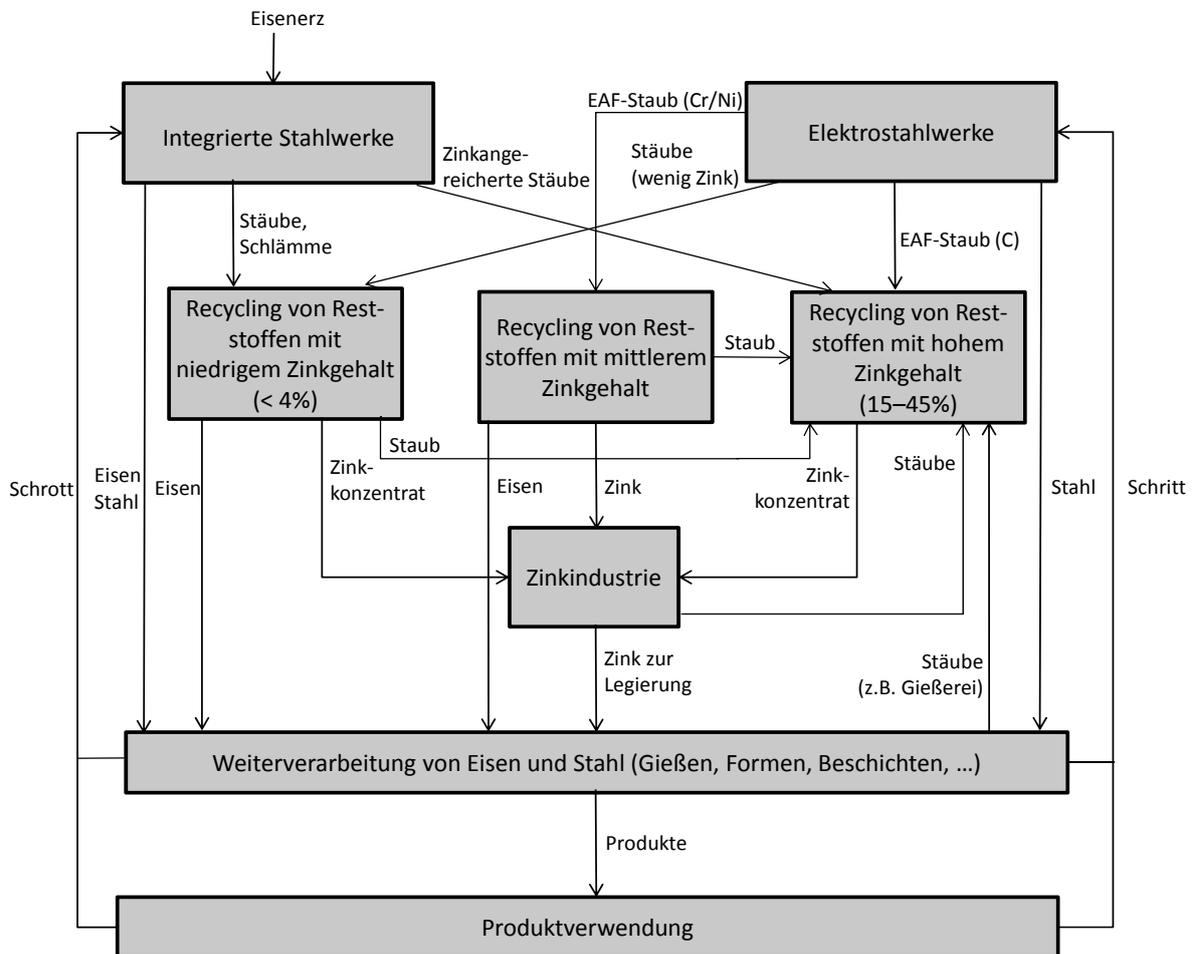


Abbildung 1: Struktur der Eisen- und Stahlindustrie mit externen Recyclingprozessen und Vernetzung mit der Zinkindustrie

Auf Basis der bei den einzelnen Partnern anfallenden Reststoffe und der bereits bestehenden Vernetzung zwischen den Partnern werden Szenarien identifiziert, welche einen Beitrag zur Erhöhung der Ressourceneffizienz leisten können bzw. bereits leisten. Dabei bestehen zwei grundsätzliche Möglichkeiten zur Verwertung von Reststoffen: die interne Verwertung innerhalb und die externe Verwertung außerhalb des Unternehmens, in dem der Reststoff anfällt. Bei der internen Verwertung kann wiederum unterschieden werden zwischen der Verwertung in dem Aggregat, in dem der Reststoff anfällt oder einem vorgelagerten Produktionsprozess. Die Verwertung im gleichen Aggregat wird im vorliegenden Bericht als interne Rezirkulation bezeichnet. Die externe Verwertung erfolgt klassisch in einem spezialisierten Recyclingunternehmen aus einem der drei in Abbildung 1 dargestellten Kategorien zur Behandlung von Reststoffen

mit geringen, mittleren und hohen Zinkgehalten. Darüber hinaus besteht grundsätzlich auch die Möglichkeit, Reststoffe in der primären und sekundären Stahlerzeugung einzusetzen.

Im ERESTRE-Projekt werden in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern folgende Reststoffe und Verwertungsoptionen identifiziert:

- die externe Verwertung von Wälzschlacke im Elektrolichtbogenofen oder im DK-Prozess,
- die interne Rezirkulation von Elektrolichtbogenofenstaub,
- die externe Verwertung von Gichtstaub aus dem DK-Prozess im Wälzprozess,
- die interne Verwertung von Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes über die Sinteranlage oder die externe Verwertung im DK-Prozess,
- die externe Verwertung von Gichtschlamm des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess,
- die interne Verwertung von Konverterschlacke des integrierten Hüttenwerkes über die Sinteranlage,
- die interne Verwertung von nicht ölhaltigem Walzzunder des integrierten Hüttenwerkes über die Sinteranlage,
- die interne Rezirkulation von Konverterfilterstaub des integrierten Hüttenwerkes,
- die externe Verwertung von Konverterfilterstaub des integrierten Hüttenwerkes im Wälzprozess,
- die externe Verwertung von Konverterverdampfungskühlerstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess und
- der Einsatz von Wälzschlacke in der zweiten Jarosit-Stufe der Laugung zur hydrometallurgischen Zinkgewinnung.

Im Rahmen des ERESTRE-Projektes werden diese Szenarien quantifiziert, d. h. Einflüsse auf Energieströme und Massen und Zusammensetzungen von Stoffströmen berechnet. Darauf basierend werden die Szenarien hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf CO₂-Emissionen, Energieeffizienz sowie Wirtschaftlichkeit bewertet.

Im folgenden Kapitel werden zunächst die im ERESTRE-Projekt eingesetzten Methodik der Fließschemasimulation, die Ableitung von Prozessbeschreibun-

gen zur Erstellung des Gesamtmodells zur Szenariobewertung dargestellt. Anschließend werden in Kapitel 4 die Prozesse der beteiligten Projektpartner und die anfallenden Reststoffe sowie die Ableitung der jeweiligen Prozessbeschreibung beschrieben. In Kapitel 5 wird das im ERESTRE-Projekt erstellte Gesamtmodell dargestellt, mit dem die Bewertung der Szenarien durchgeführt wird.

3 Eingesetzte Methoden

Zur Erreichung des Zieles der Beurteilung von Maßnahmen zur Steigerung der Ressourceneffizienz im Hinblick auf ökologische Kriterien, d. h. CO₂-Emissionen und Energieverbrauch, sowie hinsichtlich der Wirtschaftlichkeit ist eine hinreichend genaue Prozessabbildung des betrachteten Netzwerkes erforderlich. Im Folgenden werden mit der Fließschemaprozesssimulation (Abschnitt 3.1) und der multiplen linearen Regression (Abschnitt 3.2) die hierzu eingesetzten Methoden vorgestellt, bevor daraus der methodische Gesamtansatz (Abschnitt 3.3) entwickelt wird.

3.1 Fließschemasimulationsbasierte Prozesssimulation

Zur Quantifizierung der Einflüsse einer Maßnahme auf die betrachteten Prozesse und somit auf die Ressourceneffizienz, den Energieverbrauch und die CO₂-Emissionen ist eine mathematische Beschreibung der Vorgänge im jeweiligen Prozess erforderlich. Die in diesem Projekt betrachteten Prozesse sind dabei dadurch charakterisiert, dass Massen und Zusammensetzungen der ausgehenden Stoffströme sowie die Massen an benötigten Hilfsstoffen und ggf. zuzuführender Energie in hohem Maße von den Massen und Zusammensetzungen der eingehenden Stoffströme beeinflusst werden. Selbst geringe Mengen, bspw. von Zink, können im Hochofen erhebliche Auswirkungen auf den Reduktionsmittelverbrauch und die Masse erzeugter Produkte haben. Andere chemische Elemente, wie z. B. Chlor, bilden Verbindungen, die das Verhalten weiterer Elemente wie Blei, Zink und Alkalien erheblich beeinflussen. So liegt der Siedepunkt von Blei bei 1.745,70 °C und somit bei einer Temperatur, die in vielen pyrometallurgischen Prozessen nicht erreicht wird, weshalb Blei in flüssigen Stoffströmen verbleibt. Der Siedepunkt von PbCl₂ liegt hingegen nur bei 949,61 °C, weshalb Blei unter ausreichender Anwesenheit von Chlor verdampft und in Rückständen der Abgasreinigungsanlagen auftritt. Darüber hinaus beeinflussen sich die Konzentrationen der unterschiedlichen Elemente gegenseitig. Liegt neben Blei z. B. auch das Alkalimetall Kalium vor, so wird Chlor aufgrund der geringeren freien Gibb'schen Energie von -354.327,1 GJ/Mol (1000 °C) gegenüber der Bildung von PbCl₂ von -297.497,7 GJ/Mol (1000 °C) eher Kaliumchlorid bilden. Somit würde Blei also flüssig bleiben. Diese komplexen und untereinander abhängigen chemischen Reaktionen und thermodynamischen Vorgänge in den betrachteten Prozessen erfordern eine detaillierte Berücksichti-

gung bei der Untersuchung verschiedener Szenarien. Als kommerziell verfügbare Lösung zur Modellierung solcher Vorgänge werden Fließschemasimulationsprogramme eingesetzt.

Die Entwicklung der Fließschemasimulation beruht auf den Prinzipien der Systemverfahrenstechnik und geht bis in die fünfziger Jahre zurück (Klatt und Marquardt 2009). Außer aus den Vereinigten Staaten und Großbritannien sind auch aus der ehemaligen DDR von Gruhn et al. (1976) und Gruhn et al. (1977) frühe Veröffentlichungen zum Thema bekannt. In Gruhn et al. (1976, S. 14 - 17) wird ausgehend von einer allgemeinen Systemdefinition als „eine Menge von Elementen und eine Menge von Relationen, die zwischen diesen Elementen besteht“ die Funktion verfahrenstechnischer Systeme als „Durchführung individueller Stoff- und Energiewandlungen“ definiert. Dabei bestehen Elemente verfahrenstechnischer Systeme „aus Prozessen zur Stoff- und Energieumwandlung, zum Stoff- und Energietransport und zur Stoff- und Energiespeicherung. Die Relationen bestehen in den durch Stoff- und Energieströme zwischen den Elementen hergestellten Kopplungen.“ Gegenstand der Systemverfahrenstechnik ist es, auf Grundlage der Gesetzmäßigkeiten der Chemie, der Thermodynamik und der Physik für die einzelnen Elemente mathematische Beschreibungen zur Berechnung dieser Vorgänge derart zu verknüpfen, dass das ganze System berechenbar wird. Fließschemasimulation hat sich aus dem Wissenschaftsbereich der Systemverfahrenstechnik entwickelt und führt diesen Ansatz computerunterstützt weiter, um die oft komplexen und nur zum Teil bekannten chemischen und thermodynamischen Zusammenhänge in stark vernetzten technischen Anlagen der Prozessindustrie modellieren zu können.

Fließschemasimulation wurde zunächst vor allem in der chemischen und petrochemischen Industrie eingesetzt. Dieser Anwendungsbereich wurde inzwischen aber auch auf andere Verfahren der Prozessindustrie, wie der Verbrennungstechnik, der Metallurgie und, in den letzten Jahren verstärkt, der Biotechnologie erweitert. Inzwischen wird Fließschemasimulation in allen Phasen der Prozessentwicklung und -verbesserung eingesetzt (Wozny, 1995) (vgl. Abbildung 2). Bereits in der Phase der Entwicklung neuer Prozessführungen kann auf Basis bekannter bzw. simulierter Stoffdaten sowie durch unterstützende Laborversuche mit Fließschemasimulation eine erste Einschätzung zur Machbarkeit, Wirtschaftlichkeit und Umweltverträglichkeit neuer Verfahren durchgeführt wer-

den. Während der Anlagenplanung können Dimensionierungen von Behältern und Rohrleitungen und damit zu tätige Investitionen bestimmt werden sowie aus Hilfsstoffverbräuchen, Produktmengen, etc. Kosten und Erlöse während der Produktionszeit geschätzt werden. Im laufenden Anlagenbetrieb kann Fließschemasimulation zur Prozessteuerung und -verbesserung eingesetzt werden.

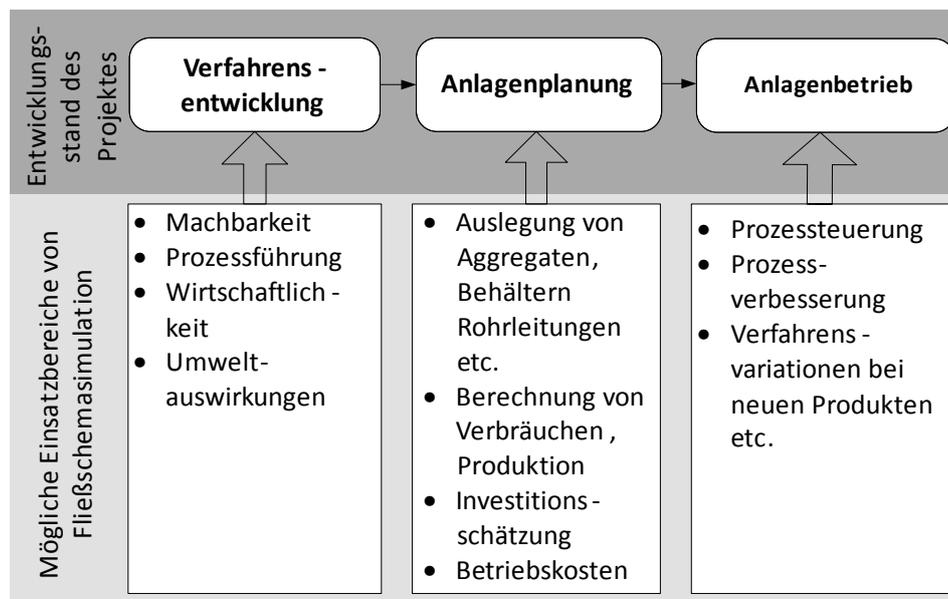


Abbildung 2: Mögliche Einsatzgebiete von Fließschemasimulation während des Anlagenlebenszyklus

Zur Lösung anlagenübergeordneter stoffstromorientierte Planungsprobleme in der Produktionswirtschaft wurden Fließschemasimulationsmodelle u. a. schon von Rentz et al. (1999) und Schultmann (2003) genutzt.

3.1.1 Aufbau und Funktionsweise der stationären Fließschemasimulation

Die Grundstruktur der Fließschemasimulation ergibt sich aus dem Fließschema des zu simulierenden Prozesses. Das Fließschema ist definiert als „zeichnerische Darstellung des Ablaufs, Aufbaus und der Funktion einer verfahrenstechnischen Anlage oder Anlagenteils“ (vgl. DIN EN ISO 10628:2000). Je nach Detaillierungsgrad wird zwischen Grundfließschemata, Verfahrensließschemata sowie Rohrleitungs- und Instrumentenfließschemata unterschieden. Fließschemasimulation nutzt in der Regel den mittleren Detaillierungsgrad der Verfahrensließschemata. Hier werden die genutzten Behälter und Aggregate, deren wesentliche Zustandsgrößen wie Drücke und Temperaturen sowie zu- und abfließende Stoffströme, deren Masse und ggf. Zusammensetzung sowie Energie-

ströme abgebildet. Diese Informationen sind in Form des Fließschemas in der Simulation zu definieren. Zusätzlich ist eine Stoffliste mit den in der Simulation zu berücksichtigenden Verbindungen zu definieren sowie Massenstrom, Zusammensetzung, Temperatur und Druck aller eingehenden Stoffströme und alle eingehenden Energieströme festzulegen. Fließschemasimulation modelliert dann entsprechend des systemverfahrenstechnischen Ansatzes über Massen- und Energiebilanzen den stationären Zustand des Systems, wobei die Systemelemente durch Grundoperationen abgebildet werden (vgl. Futterer und Munsch, 1990). Für jede verfahrenstechnische Operation existiert eine spezialisierte Grundoperation, z. B. zur Berechnung von chemischen Reaktionen, zur Berechnung von Wärmeübergängen und zur Berechnung von Stofftrennungsv erfahren. Für jede Grundoperation sind die thermodynamischen Zustandsgrößen Druck und Temperatur oder die zugeführte Energie sowie ggf. weitere Parameter zu definieren. Die Relationen zwischen den Elementen bilden die sie verknüpfenden Stoff- und Energieströme. Dazu werden aus den in die erste Grundoperation des Modells eingehenden Stoff- und Energieströmen (vgl. Abbildung 3 $m_{1,R1,ein}$, $m_{2,R1,ein}$, $E_{R1,ein}$) anhand der Rechenvorschriften der Grundoperationen (vgl. Abbildung 3 R1) die ausgehenden Stoff- und Energieströme (vgl. Abbildung 3 $m_{1,R1,aus}$) berechnet. Diese dienen als Eingangswerte für die folgende Grundoperation (vgl. Abbildung 3 Sep1) usw. Rückströme (vgl. Abbildung 3 $m_{2,Sep1,aus}$) müssen iterativ berechnet werden.

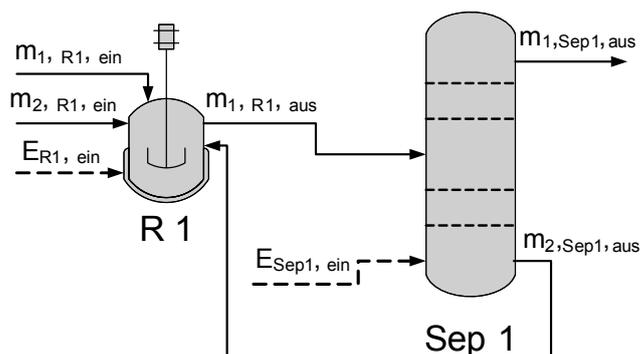


Abbildung 3: Verknüpfung von Grundoperationen in der Fließschemasimulation

Zur Berechnung des Zustandes einer Grundoperation und der daraus resultierenden ausgehenden Stoff- und Energieströme greift die Fließschemasimulation auf Stoffdatenbanken sowie Rechenvorschriften zur Ermittlung von Stoffdaten zurück. Weiterhin existieren Programmmodule, mit deren Hilfe Rückströme, Auslegungsvorschriften, modellinterne Optimierungen und Kosten berechnet

werden können. Die Nutzereingaben und die Ausgabe der Ergebnisse der Simulation an den Benutzer erfolgen über eine grafische Schnittstelle. Für die Kommunikation mit anderen Programmen stehen weitere Schnittstellen bereit (vgl. Abbildung 4).

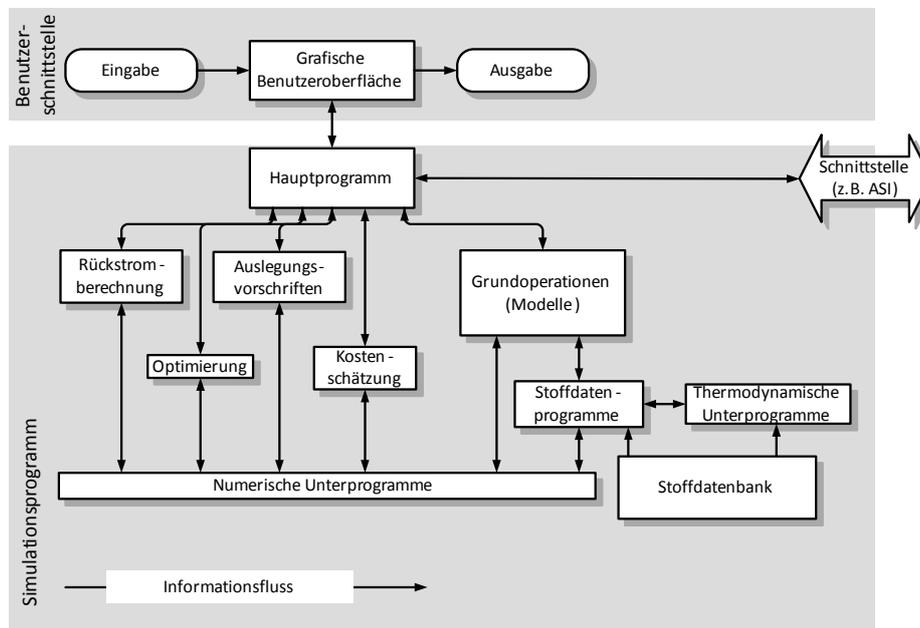


Abbildung 4: Struktur einer sequentiell modularen Fließschemasimulation (in Anlehnung an Lohe und Futterer (1995))

Zur Berechnung der Fließschemasimulation haben sich zwei unterschiedliche Konzepte etabliert:

↳ **Sequentiell modularer Ansatz**

Das Fließschema wird in der Reihenfolge der Grundoperationen berechnet. Rückströme, Optimierungen und Auslegungsvorschriften müssen einzeln iterativ ermittelt werden.

↳ **Simultan gleichungsorientierter Ansatz**

Das definierte Fließschema wird in ein Gleichungssystem überführt. Für Rückströme, Optimierungen und Auslegungsvorschriften werden keine eigenen Iterationsschleifen benötigt, jedoch wird das gesamte Gleichungssystem iterativ gelöst.

Durch die bessere Berechenbarkeit sind in der Regel mit dem simultan gleichungsorientierten Ansatz schneller Ergebnisse zu erzielen bzw. lassen sich komplexere Fließschemata berechnen. Dagegen bietet der sequentiell modulare Ansatz den Vorteil, dass die Ergebnisse für jede Grundoperation nachvoll-

ziehbar und überprüfbar sind. Aus diesem Grund wird im ERESTRE-Projekt der sequentiell modulare Ansatz verwendet. Detailliertere Ausführungen zur Fließschemasimulation liefern Lohe und Futterer (1995), Futterer und Munsch (1990) sowie Biegler (1989).

Zur stationären, sequentiell modularen Fließschemasimulation wird das Programm AspenPlus (2010a) in der Version 2006² eingesetzt, da mit diesem Programm bereits Erfahrungen zur Simulation metallurgischer Prozesse bestehen (vgl. Rentz et al. (1999), Engels (2003), Fröhling (2006)). Grundsätzlich können mit AspenPlus aber auch Simulationen nach dem simultan gleichungsorientierten Ansatz berechnet werden. Neben der Simulation stationärer Zustände bietet AspenPlus auch die Möglichkeit, dynamisches Prozessverhalten zu berechnen. Das Programm verfügt über vordefinierte Blöcke für alle benötigten Grundoperationen und über eine Stoffdatenbank, die alle betrachteten Verbindungen enthält. Erforderliche Informationen zu Stoffeigenschaften können anhand von Näherungsgleichungen aus den Stoffdaten der Datenbank berechnet werden (AspenPlus, 2010c).

3.1.2 Funktionsweise und Einsatzbereich genutzter Grundoperationen der Fließschemasimulation

Im Folgenden werden die in dieser Arbeit genutzten Grundoperationen und Programmfunktionen von AspenPlus beschrieben. Detailliertere Ausführungen auch zu den hier nicht genutzten Grundoperationen finden sich in AspenPlus (2010b) und Rentz et al. (2006).

3.1.2.1 Manipulation von Stoff- oder Energieströmen (Mixer, Splitter, Flash)

In der Grundoperation *Mixer* werden zwei oder mehrere Stoff- oder Energieströme zusammengeführt. Im Fall von Stoffströmen werden die Massen komponentenweise addiert. Die Temperatur des Ausgangsstromes wird als adiabate Mischtemperatur berechnet. Dissoziations- oder Verdünnungsenthalpien werden nicht berücksichtigt. Die Temperaturberechnung kann deaktiviert werden. Zusätzlich kann ein Druckverlust berechnet werden.

² Aktuell ist die Version V7.3, Version 2006 ist jedoch die letzte, die die hier genutzte ASI Bibliothek enthält.

In der Grundoperation *Splitter* werden ein oder mehrere Stoff- bzw. Energieströme in zwei oder mehrere Ströme aufgeteilt. Die resultierenden Stoffströme haben die gleichen intensiven Zustandsgrößen Druck, Temperatur, Zusammensetzung und Dichte. Die Aufteilung kann entweder als absoluter Wert oder als Faktor zwischen 0 und 1 vorgegeben werden.

In der Grundoperation *Flash*³ können ein oder mehrere Stoff- und Energieströme in einen gasförmigen und einen flüssigen und/oder festen Stoffstrom sowie einen Energiestrom aufgetrennt werden. Zur Stromtrennung berechnet die Grundoperation alle Komponenten, die unter dem definierten Druck und definierter oder der sich aus den zugeführten Stoff- und Energieströmen ergebender Temperatur, gasförmig vorliegen. Diese Komponenten werden in den Stoffstrom für gasförmige Substanzen geleitet. Alle anderen Phasen, wie auch mehrere Flüssigphasen und Feststoffe, sind im verbleibenden Stoffstrom enthalten. Die Grundoperation berechnet Dissoziations- und Verdünnungsenthalpien. In Flüssigkeiten gelöste Gase verbleiben im flüssigen Stoffstrom.

Die in der grafischen Darstellung des Fließschemas verwendeten Symbole für die Mixer, Splitter und Flash Grundoperation in AspenPlus zeigt Abbildung 5.

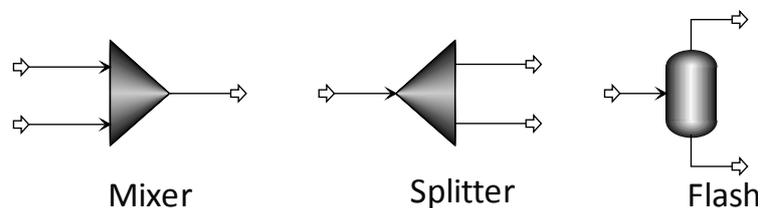


Abbildung 5: Symbole der Stoffstrommanipulations-Grundoperationen in AspenPlus

3.1.2.2 Berechnung chemischer Reaktionen (RStoic, RCSTR, RGibbs)

In der Grundoperation *stöchiometrischer Reaktor* (RStoic) werden Reaktionen bekannter Komponenten mit bekannter Stöchiometrie und bekannten Umsätzen berechnet. Dazu müssen sämtliche an der Reaktion beteiligten $i = \{1, 2 \dots I\}$ Reaktanden R_i mit ihren stöchiometrischen Verhältniszahlen ν_i und $k = \{1, 2 \dots K\}$ und Produkte P_k mit ihrem stöchiometrischen Verhältniszahlen ν_k gemäß Gl. (1) definiert werden.

³ Beschrieben wird die Grundoperation Flash2. AspenPlus verfügt auch über eine Operation Flash3, die in der Lage ist, in mehrere Flüssigphasen und eine Gasphase zu trennen.



Für jeden Reaktanden können Faktoren zwischen 0 und 1 für chemische Umsätze eingestellt werden. Die Reaktionsenthalpien werden durch die Grundoperation auf Basis der aus den Stoffdaten ermittelten molaren Bildungsenthalpien und des zu definierenden Drucks und Temperatur oder der zugeführten Energie berechnet. Diese Grundoperation eignet sich gut, wenn gezielt Hauptreaktionen von Reaktionszonen berechnet oder wenn für einzelne Reaktionen die Enthalpien ermittelt werden sollen.

In der Grundoperation *kinetischer Reaktor* (RCSTR) werden Reaktionen bekannter Komponenten mit bekannter Stöchiometrie in Abhängigkeit ihrer Reaktionsgeschwindigkeiten berechnet. Dazu ist ebenfalls zunächst für jede Reaktion gemäß Gl. (1) die Stöchiometrie sowie der Druck und die Temperatur oder die zugeführte Energie zu definieren. Weiterhin ist das Reaktionsvolumen oder die Aufenthaltszeit festzulegen. Wird das Reaktionsvolumen definiert, wird die Aufenthaltszeit t_R aus dem Quotienten des Reaktionsvolumen V_R und der Summe der Produkte des molaren Anteils n_i mit dem molaren Volumen V_i der Phase i multipliziert mit dem Gesamtmolenstrom N berechnet (AspenPlus, 2010b):

$$(2) \quad t_R = \frac{V_R}{N \cdot \sum_{i=1}^I n_i \cdot V_i}$$

Die Geschwindigkeit einer Reaktion r ist, ein konstantes Reaktionsvolumen vorausgesetzt, durch die Änderung der Konzentration c_i einer Komponente i mit dem stöchiometrischen Koeffizienten ν_i über die Zeit definiert. Die Reaktionsgeschwindigkeit besteht aus einer temperaturabhängigen Komponente $k(T)$ und einer konzentrationsabhängigen Komponente $f(c)$:

$$(3) \quad r = \frac{1}{\nu_i} \frac{dc_i}{dt} = k(T) \cdot f(c)$$

Die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante genannte, temperaturabhängige Komponente wird üblicherweise durch die Arrhenius-Gleichung mit dem Fre-

quenzfaktor (auch Häufigkeitsfaktor, Stoßfaktor) k_0 , der Aktivierungsenergie E_A , der Gaskonstanten R und der Temperatur T beschrieben (Behr et al. 2010):

$$(4) \quad k(T) = k_0 \cdot e^{-\frac{E_A}{R \cdot T}}$$

Die konzentrationsabhängige Komponente ergibt sich aus dem Produkt der Potenzen der Konzentrationen c_i mit den Exponenten n_i der einzelnen Komponenten:

$$(5) \quad f(c) = \prod_i c_i^{n_i}$$

Der Exponent n_i gibt die Reaktionsordnung des Reaktanden an; die Summe aller Exponenten ergibt die Gesamtordnung der Reaktion. Sowohl die Reaktionsordnungen als auch die Frequenzfaktoren müssen experimentell bestimmt werden.

AspenPlus verwendet eine Form der Gleichung für die Reaktionsgeschwindigkeit⁴, die eine Temperaturabhängigkeit des Frequenzfaktors ermöglicht (AspenPlus, 2010b). Zusätzlich kann eine Referenztemperatur T_0 angegeben werden.

$$(6) \quad r = k \cdot T^m \cdot e^{-\frac{E_A}{R \cdot T}} \prod_{i=1}^I c_i^{n_i} \quad \text{bzw.} \quad r = k \left(\frac{T}{T_0} \right)^m \cdot e^{-\frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)} \prod_{i=1}^I c_i^{n_i}$$

Die Grundoperation *Gleichgewichtsreaktor* (RGibbs) wird eingesetzt, wenn zwar die Massen und Zusammensetzungen der eingehenden Stoffströme bekannt, die einzelnen stattfindenden Reaktionen aber unbekannt sind. Hierbei wird im Gegensatz zum kinetischen Reaktor angenommen, dass genug Zeit für alle Reaktionen zur Verfügung steht, um einen Gleichgewichtszustand zu erreichen. Der Druck und die Temperatur oder die zugeführte Energie sind zu definieren. Das Gleichgewicht wird durch Minimierung der freien Enthalpie⁵ bestimmt (vgl. Rentz et al. 2006).

⁴ In AspenPlus können unterschiedliche Methoden zur Berechnung der Reaktionskinetik eingesetzt werden. Die in dieser Arbeit genutzte und hier beschriebene Variante wird Power-Law Berechnung genannt.

⁵ Auch freie Energie oder Gibb'sche Enthalpie.

Das Prinzip beruht auf dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik, aus dem folgt, dass ein abgeschlossenes reversibles Gesamtsystem sich im Gleichgewicht befindet, wenn die Änderung seiner Entropie gleich Null ist (vgl. Froberg, 1994). Die Definition der Entropie lautet dabei wie folgt:

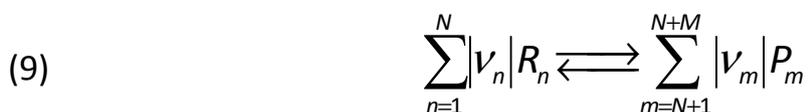
$$(7) \quad dS \equiv \frac{dq_{rev.}}{T}$$

Aus der Definition der freien Enthalpie (Gl. (8)) folgt bei konstantem Druck $dp = 0$, dass im Gleichgewicht auch die Änderung der freien Enthalpie gleich Null sein muss und die freie Enthalpie des Gesamtsystems ein Extremum einnimmt.

$$(8) \quad dG = -S \cdot dT + V \cdot dp$$

Da nach dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik Wärme nur von einem warmen auf einen kälteren Körper übertragen werden kann, gilt mit Gl. (7), dass die Änderung der Entropie immer größer Null sein muss. Demnach muss das Extremum des Gesamtsystems ein Minimum sein.

Bei einer chemischen Reaktion im Gleichgewicht laufen Hin- und Rückreaktion mit gleicher Geschwindigkeit ab:



Bei Elementarreaktionen ist entsprechend der Stoßtheorie die Reaktionsordnung gleich der Anzahl der an einer Reaktion beteiligten Moleküle, d. h. $n_i = \nu_i$ (Behr et al. 2010, S. 43). Bei konstanter Temperatur folgt dann aus den Gleichungen für die Reaktionsgeschwindigkeit (Gl. (3) – Gl. (5)) das Massenwirkungsgesetz:

$$(10) \quad K = \prod_i^{N+M} a_i^{\nu_i}$$

Die aktiven Massen der Reaktionsteilnehmer a_i sind bei idealem Verhalten für Gase der Partialdruck p_i und für Feststoffe und Flüssigkeiten der Molenbruch x_i . Nicht ideales Verhalten wird dadurch berücksichtigt, dass für Gase die Fugazität f_i und für Feststoffe und Flüssigkeiten die Aktivität a_i eingesetzt wird.

Aus der van't Hoff'schen Isotherme bei konstanter Temperatur und mit der Gaskonstanten R (Frohberg 1994, S. 78):

$$(11) \quad \Delta G^0(T) = -RT \ln \prod_i^{N+M} a_i^{v_i}$$

folgt für die Gleichgewichtskonstante K :

$$(12) \quad K = e^{-\frac{\Delta G^0(T)}{RT}}$$

Somit kann die Gleichgewichtskonstante berechnet werden, wenn $\Delta G^0(T)$ bekannt ist. Diese ergibt sich für $p = \text{const.}$ aus der Gibbs-Helmholtz-Gleichung in integrierter Form (Frohberg 1994, S. 53 - 54):

$$\Delta G^0(T) = T \cdot \left[\frac{\Delta G_{298}^0}{298 \text{ K}} - \int_{298 \text{ K}}^T \left(\frac{\Delta H_{298}^0 + \int_{298 \text{ K}}^T \Delta c_p dT}{T^2} \right) dT \right]$$

Mit:

$$(13) \quad \begin{aligned} \Delta G_{298}^0 &= \Delta H_{298}^0 - 298 \text{ K} \cdot \Delta S_{298}^0 \\ \Delta S_{298}^0 &= \sum_i^{N+M} v_i \cdot \Delta S_{298,i}^0 \\ \Delta c_p(T) &= \sum_i^{N+M} v_i \cdot \Delta c_{p,i}(T) \end{aligned}$$

Die Standardbildungsenthalpien ΔH_{298}^0 und -entropien ΔS_{298}^0 sind für viele Stoffe in der Stoffdatenbank von AspenPlus hinterlegt oder können eingegeben werden. Die temperaturabhängige isobare Wärmekapazität $c_p(T)$ wird von AspenPlus mittels des Polynoms $c_p(T) = c_1 + c_2 \cdot T + c_3 \cdot T^2 + c_4 \cdot T^3 + c_5 \cdot T^{-2} + c_6 \cdot T^{-3}$ berechnet. Die Konstanten c_1 bis c_6 sind für gängige Temperaturbereiche für viele Substanzen bereits in der Stoffdatenbank vorhanden, sie können aber zusätzlich auch eingegeben werden.

Die Verteilung der Substanzen auf die unterschiedlichen Phasen kann entweder vorgegeben oder durch die Grundoperation berechnet werden (vgl. Schott, 1964, Gautam und Seider, 1979a-c und White und Seider, 1981). Die Aufteilung

der verschiedenen Phasen auf die ausgehenden Stoffströme erfolgt ebenso entweder durch AspenPlus oder nach Vorgaben des Benutzers. Weiterhin kann der Benutzer Verbindungen aus den eingehenden Stoffströmen festlegen, die nur zu einem gewissen Anteil oder gar nicht in die Gleichgewichtsberechnung mit einbezogen werden sollen. Auf diese Art lassen sich unvollständige Umsätze in das Modell integrieren, wenn eine Ermittlung der detaillierten Kinetik über eine kinetische Grundoperation nicht möglich oder nicht notwendig ist. Zur Überprüfung der Genauigkeit der von AspenPlus berechneten Aufteilung eines Stoffstromes auf die verschiedenen Phasen der ausgehenden Stoffströme sowie deren Zusammensetzung wird im Rahmen des ERESTRE-Projektes die thermochemische Software FactSage⁶ eingesetzt.

Die in der grafischen Darstellung des Fließschemas verwendeten Symbole für die RStoic, RCSTR und RGibbs Grundoperation in AspenPlus zeigt Abbildung 6.

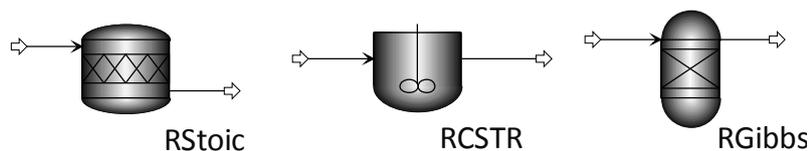


Abbildung 6: Symbol der Reaktor-Grundoperationen in AspenPlus

3.1.2.3 Berechnung von Rückströmen, Rechenblöcken, Auslegungsvorschriften und Sensitivitätsanalysen

Wie bereits erwähnt, müssen im sequentiell modularen Lösungsansatz der Fließschemasimulation Rückströme iterativ berechnet werden (vgl. Biegler et al). So ist z. B. in Abbildung 3 der zur Berechnung von $R1$ benötigte eingehende Stoffstrom $m_{2, Sep1, aus}$ ein Rückstrom aus der erst nach $R1$ berechneten Grundoperation $Sep1$. AspenPlus bietet mehrere Methoden zur iterativen Berechnung solcher Rückströme. Hierzu wird das Fließschema an einem geeigneten Strom aufgetrennt (engl. „tear“). Diese Auftrennung kann durch AspenPlus vorgenommen werden oder durch den Nutzer in einem Konvergenzblock definiert werden. Eine Definition der Schnittströme durch den Nutzer kann sinnvoll sein und die Berechnungszeit für das Fließschema reduzieren, wenn mehrere verschachtelte Iterationen zu berechnen sind. In diesem Fall kann die Rechenzeit reduziert werden, wenn erst eine Iterationsschleife zur Konvergenz geführt wird und dann die zweite berechnet wird (vgl. Gutermuth, 1995). Weiterhin

⁶ Thermochemische Software und Datenbank. Verwendete Version FactSage 6.2.

kann es die Lösungszeit einer Fließschemasimulation beschleunigen, solche Ströme als Schnittströme zu wählen, für die eine besonders gute Schätzung als Startlösung der Iteration möglich ist oder solche, die im Vergleich mit den anderen Stoffströmen nur mit wenigen Komponenten beladen sind. Diese Kriterien sind in der Regel nicht durch die automatischen Algorithmen der Fließschemasimulation zur Bestimmung von Schnittströmen zu erkennen, sondern müssen durch die Prozesskenntnis des Ingenieurs integriert werden.

Als allgemeine Kriterien für eine vorteilhafte Wahl der Berechnungsreihenfolge nennen Lohe und Futterer (1995, S. 91):

- ↳ minimale Anzahl der Ströme,
- ↳ minimale Anzahl der Iterationsvariablen oder die
- ↳ minimale Anzahl der Rückführungen (einschließlich Design-Spezifikationen).

Die einfachste Methode zur Berechnung der Iterationsschritte ist hierbei die *Direct* Methode, bei der als Schätzung für den Schnittstrom das Ergebnis des letzten Iterationsschrittes für den Strom gewählt wird. Nach diesem Verfahren wird die Erreichung einer Konvergenz in der Regel sehr lange Rechenzeit in Anspruch nehmen. Aus diesem Grund stellt AspenPlus noch eine Reihe von beschleunigten Iterationsverfahren bereit (vgl. AspenPlus 2010b, Penkuhn 1997). Bei den beschleunigten Iterationsverfahren, insbesondere bei mehreren verschachtelten Iterationsschleifen, besteht jedoch die Möglichkeit, dass sie für nichtlineare Probleme divergieren (vgl. Lohe und Futterer 1995, S. 91). In der praktischen Anwendung zeigt sich, wie auch schon bei Penkuhn (1997), dass eine geschickte Schnittstromwahl und Vorgabe sinnvoller Startlösungen zu größeren Verbesserungen der Rechenzeit führen, als die Wahl unterschiedlicher beschleunigter Iterationsverfahren.

AspenPlus bietet weiterhin mehrere Möglichkeiten, während der Simulation das Modell zu steuern. Über Rechenblöcke, sogenannte *calculator*, können zur Laufzeit in Abhängigkeit der bereits vorliegenden Ergebnisse andere Modellvariablen berechnet werden. So kann z. B. ein Stoffstrom in einem definierten stöchiometrischen Verhältnis zu einem anderen Stoffstrom, der erst im Verlauf der Simulation berechnet wird, hinzugegeben werden. Rechenblöcke lassen sich entweder über eine während des Simulationsdurchlaufes ausgelesene MS

Excel-Tabellenformel oder über Fortran-Codeblöcke definieren. Mit dem Fortran-Code lassen sich somit auch kompliziertere nutzerspezifische Rechenvorschriften in die Fließschemasimulation integrieren.

Auslegungsvorschriften, sogenannte *design specifications*, werden genutzt, falls Größen zur Modellsteuerung zu ermitteln sind, für die Informationen benötigt werden, die erst zu einem späteren Zeitpunkt der Fließschemaberechnung vorliegen. Mit den Auslegungsvorschriften können für Modellgrößen Zielwerte vorgegeben werden, die während der Berechnung durch iterative Variation ausgewählter Modellvariablen in einem bestimmten Wertebereich mit einer bestimmten Genauigkeit angenähert werden. Mit Hilfe von Auslegungsvorschriften lassen sich z. B. Eingangsstoffströme, die den Prozessen Energie zuführen, wie Brenngas oder Koks, so regeln, dass benötigte Temperaturen erreicht werden. Die Iteration erfolgt nach Methoden, die auch für die Berechnung von Rückströmen eingesetzt werden. Mit den Rechenblöcken und den Auslegungsvorschriften lassen sich somit beide in der Verfahrenstechnik üblichen Konzepte der *feed-forward* und *feed-backward* Steuerung im Modell umsetzen (vgl. Gutermuth 1995).

Um die Auswirkungen verschiedener Größeneinstellungen auf einen Prozess zu untersuchen, besteht in AspenPlus die Möglichkeit, Sensitivitätsanalysen durchzuführen. Hierzu werden eine oder mehrere zu variierende Modellvariablen, zugehörige obere und untere Grenzen und die Schrittweite vorgegeben. Die Fließschemasimulation rechnet dann automatisiert für jeden Schritt einen Durchlauf und stellt gewünschte Ergebnisse tabellarisch und grafisch dar. Die Sensitivitätsanalyse eignet sich gut zur Kalibrierung einzelner Modellgrößen wie Temperaturen in bestimmten Grundoperationen oder Einstellungen für den Frequenzfaktor k in kinetischen Grundoperationen. Dabei wird mittels der Sensitivitätsanalyse untersucht, bei welchen Modelleinstellungen die Modellergebnisse den in der Realität gemessenen Daten möglichst nahe kommen.

3.2 Multiple lineare Regression

Eine häufig verwendete Methode zur Abbildung von verfahrenstechnischen Prozessen stellt die aus der Statistik stammende Regressionsrechnung und dabei insbesondere die multiple lineare Regression dar⁷. Auf Basis von empirisch

⁷ Siehe zu den Ausführungen zur Regressionsanalyse (Fröhling 2006).

ermittelten Betriebsdaten oder mittels der im vorangehenden Abschnitt beschriebenen Prozesssimulation berechneten Daten wird dabei ein funktionaler Zusammenhang zwischen einer zu beschreibenden Größe y (Regressand) und $k=1,\dots,K$ erklärender Größen x_1,\dots,x_K (Regressoren) ermittelt. Ausgangspunkt ist eine Annahme über die Form des zu ermittelnden Zusammenhangs. Im linearen Fall kann dieser wie folgt dargestellt werden (vgl. Bamberg und Baur, 1996, S.225):

$$(14) \quad Y = \alpha + \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_2 + \dots + \beta_k \cdot x_k + \varepsilon,$$

wobei α und β die zu ermittelnden Regressionskoeffizienten und ε einen Fehlerterm darstellen. Werden $i=1,\dots,I$ Messungen durchgeführt, lassen sich Schätzer für das Absolutglied α sowie die weiteren Regressionskoeffizienten nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmen. Hierbei werden die Faktoren α und β so gewählt, dass die Summe der Fehlerquadrate ε^2 der einzelnen Messungen gemäß folgender Formel minimiert werden (vgl. Myers et al, S.8):

$$(15) \quad LS(\beta) = \sum_{i=1}^I (\varepsilon_i)^2 = \sum_{i=1}^I (y_i - \alpha - \sum_{j=1}^K \beta_j x_{ij})^2 \rightarrow Min!$$

Über die Regressionsrechnung lassen sich funktionale Zusammenhänge zwischen Input- und Outputstoffströmen bezogen auf Massen und/oder chemische Zusammensetzungen wie auch technische Parameter abbilden. Hierbei wird vorausgesetzt, dass die zugrunde liegenden Variablen normalverteilt und unabhängig voneinander sind.

Im folgenden Absatz wird dargestellt, wie die Prozesssimulation und die multiple lineare Regression im Rahmen des ERESTRE-Projektes eingesetzt werden, um die Maßnahmen im betrachteten Netzwerk zu quantifizieren und zu bewerten.

3.3 Entwicklung eines Gesamtansatzes

Ziel des Projektes ist es, den Einfluss bestehender und neu untersuchter ressourceneffizienzsteigernder Maßnahmen auf die Energieeffizienz und die CO₂-Emissionen des gesamten betrachteten Netzwerkes abzubilden und die Wirtschaftlichkeit der Maßnahmen zu beurteilen. Hierbei soll das komplexe Verhalten der Prozesse der Metallindustrie berücksichtigt werden. Als Grundlage der Prozessabbildung werden daher Daten genutzt, die bei realen Industriepartnern erhoben werden.

In den Industriebetrieben werden die Daten der unterschiedlichen Stoffströme nicht im gleichen Umfang erhoben. Daten mit Relevanz für die Qualitätssicherung der Produkte werden häufig mehrmals pro Tag erfasst, während Massen und Zusammensetzungen von Reststoffen oft nur im Rahmen der Entsorgung und dann auch nur in Bezug auf für die Entsorgung wichtiger Inhaltsstoffe untersucht werden. Bei Reststoffen, die nur in geringen Mengen anfallen, ergeben sich u.U. Entsorgungsintervalle und damit auch Untersuchungsintervalle von über einem Monat. Die Zusammensetzung einer solchen Probe kann dann kaum noch auf Prozesszustände oder Zusammensetzungen der Eingangsstoffe an einem bestimmten Tag zurückgeführt werden, was aber für eine genaue Prozessbeschreibung erforderlich wäre.

Ein weiteres Problem ist die Genauigkeit der zur Datenerhebung eingesetzten Methoden. Bei den betrachteten Prozessen werden beispielsweise Massenströme häufig über Bandwaagen gemessen. Diese können aber z. B. durch Anhaftungen über systematische Messfehler verfügen. Bei heterogenen Stoffströmen besteht bei der chemischen Analyse das Problem der repräsentativen Probenahme. Eine zweite Probe kann deutlich abweichende Ergebnisse liefern. Außerdem stellt die aus Kosten- und Zeitgründen eingesetzte chemische Analyse eine weitere Schwierigkeit dar. In der Regel werden mit demselben Messverfahren gleichzeitig die Gehalte vieler einzelner chemischer Elemente in einer Probe bestimmt. Ein solches Messverfahren ist auf einen bestimmten Messbereich kalibriert. Liegen die Konzentrationen der zu messenden Elemente weit auseinander, wirken sich Messfehler auf Elemente mit geringen Konzentrationen stärker aus.

Mizelli et al. (2009) beschreiben, wie Betriebsdaten direkt zur Simulation des Prozessverhaltens genutzt werden können. In der Regel ist es aufgrund der möglichen Inkonsistenzen der Daten allerdings nicht sinnvoll, diese direkt zur Prozessbeschreibung zu nutzen, wenn die Daten nicht genau für diesen Zweck mit entsprechenden Qualitätssicherungsmaßnahmen erhoben wurden.

Aus diesem Grund wird im ERESTRE-Projekt der Zwischenschritt der im vorigen Kapitel beschriebenen Fließschemasimulation genutzt. Fließschemasimulation beruht auf im Programm enthaltenen Datenbanken zu real gemessenen Stoffdaten und erprobten Näherungsverfahren zur Berechnung chemischer Reaktionen und thermodynamischer Vorgänge. Daher sind auch Aussagen zum er-

wartbaren Prozessverhalten möglich, auch wenn zur Modellkalibrierung und Verifizierung nur wenige oder ungenaue Daten verfügbar sind. Bei der eingesetzten stationär-sequentiellen Fließschemasimulation sind die einzelnen Vorgänge in allen mittels der Grundoperationen im Modell abgebildeten Reaktionszonen nachvollziehbar und können daher auf Plausibilität geprüft werden. Damit ist eine grundlegende Beurteilung der Abbildungsgenauigkeit auch ohne genaue Daten zum realen Prozess möglich. Die mittels Fließschemasimulation abgebildeten Prozesse der ERESTRE-Projektpartner stellen dann die Basis für die Bewertung der in Kapitel 5 identifizierten Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz dar.

Da die Szenarien teilweise die Einbeziehung von zwei oder mehr Prozessschritten erfordern, wird eine direkte Verknüpfung der insgesamt acht Fließschemasimulationsmodelle zu einem Gesamtmodell aufgrund der Rechenzeiten infolge von Schleifen zwischen den Modellen sowie des Handlings im ERESTRE-Projekt auf Basis eines Versuches mit den Modellen des Elektrolichtbogenofens und Wälzrohres nicht umgesetzt. Stattdessen wird ein bewährter Ansatz zur multiplen linearen Regression unabhängig variiertes Eingangsdaten der Aspen-Plus (ASPENPLUS, 2010a) - Fließschemasimulationsmodelle erweitert (vgl. Rentz et al. 2006).

Im Rahmen des Projektes werden bestehende Fließschemasimulationsmodelle erweitert oder neue erstellt. Dies erfolgt, indem wesentliche Reaktionszonen der zu beschreibenden Prozesse unter Einbeziehung der Experten der Projektpartner identifiziert und im Modell mittels Grundoperationen (vgl. Abschnitt 3.1) abgebildet werden. Die Modelle werden dann durch Einsetzen der bei den Projektpartnern erhobenen eingehenden Stoffströme und Abgleich der Modellergebnisse mit den erhobenen Daten der ausgehenden Stoffströme kalibriert. Da hierzu eine Vielzahl an Modelldurchläufen erforderlich ist, geschieht dies automatisiert durch ein hierzu entwickeltes Steuerprogramm.

Die Ergebnisse der Kalibrierung werden wiederum mit den Experten der Projektpartner abgestimmt. In die kalibrierten Modelle werden, wiederum mittels des Steuerprogramms, Eingangssätze mit systematisch und unabhängig variierten Daten gegeben. Da es sich bei diesen Datensätzen in der Regel um Daten mit mehreren tausend Variationsschritten handelt, werden diese durch ein Matlab Skript generiert. Aus den Simulationsergebnissen lassen sich dann

mittels multipler linearer Regression funktionale Zusammenhänge zwischen Eingangs- und Ausgangsdaten identifizieren.

Für das ERESTRE-Projekt ist es dabei nicht hinreichend, die Massenströme als Ganzes zu betrachten, da die Konzentrationen einzelner Elemente und Verbindungen in den Massenströmen infolge der untersuchten Maßnahmen variieren und die Massen und Zusammensetzung von Produkten und Kuppelprodukten sowie den Bedarf an Reduktionsmitteln, Energie und Zuschlagstoffen determinieren. Daher wird der beschriebene Ansatz zur multiplen linearen Regression auf unabhängig variierte Prozesseingangsdaten auf die Ebene einzelner Verbindungen übertragen, die mittels Fließschemasimulation berechnet werden. Da eine auf einer unabhängigen Variation aller möglichen Verbindungen beruhende Anzahl von AspenPlus-Simulationsläufen nicht rechenbar ist, werden für die einzelnen Prozesse zunächst jeweils repräsentative Verbindungen identifiziert (siehe Kapitel 4).

Die so ermittelten funktionalen Beschreibungen der Prozesse werden im Folgenden Transformationsfunktionen genannt und in einer MS Excel-basierten Datenbank gespeichert. Die Einbettung dieser Datenbank in den ERESTRE-Gesamtansatz ist in Abbildung 7 dargestellt. Darüber hinaus werden in der Datenbank technische Parameter wie Konzentrationen von Zuschlägen und konstante Massenströme erfasst.

Zusammen mit der Definition eines Szenarios, welches bestimmt, welche Reststoffe in welchem Umfang durch welche Verwertungsoption recycelt werden, ermöglichen die Transformationsgleichungen die Berechnung der resultierenden Masse- und Energieströme eines Szenarios. Diese Informationen werden im Gesamtmodell über eine Schnittstelle, welche im GDX-Dateiformat mit Visual Basic for Applications (VBA) realisiert wird, in das ERESTRE-Berechnungs- und Optimierungsmodell übertragen. Dort sind die Transformationsgleichungen der einzelnen Prozesse zu einem Gesamtmodell verknüpft. Das Modell ist in GAMS⁸ als lineares Optimierungsmodell realisiert, wobei für die Berechnung eines Szenarios eine Optimierung zunächst nicht vorgesehen ist. Allerdings kann das implementierte Modell für Optimierungsaufgaben, bspw. für die Berechnung einer möglichst geringen Menge an Einsatzstoffen zur Produktion ei-

⁸ General Algebraic Modeling System. Siehe www.gams.com.

ner bestimmten Menge eines Endproduktes, eingesetzt werden. Darüber hinaus kann über die hohe Flexibilität von GAMS hinsichtlich der Kopplung an verschiedene Solver auch eine Optimierung des Gesamtmodells durchgeführt werden. Diese Möglichkeit wird innerhalb des ERESTRE-Projektes nur zu Testzwecken umgesetzt.

Außerdem wurde im ERESTRE-Projekt auch die Möglichkeit untersucht, eine Stoffstrommanagementsoftware für die Erstellung des Gesamtmodells einzusetzen⁹. Dies ist prinzipiell möglich und bietet den Vorteil einer höheren Übersichtlichkeit sowie Benutzerfreundlichkeit, die über den im Projekt verfolgten Ansatz durch vergleichsweise höheren Programmieraufwand selbst hergestellt werden müsste. Die größere Flexibilität sowie die Möglichkeit, das Modell ggf. auch für Optimierungsrechnungen zu nutzen, gaben den Ausschlag für die Wahl des verfolgten Modellierungsansatzes.

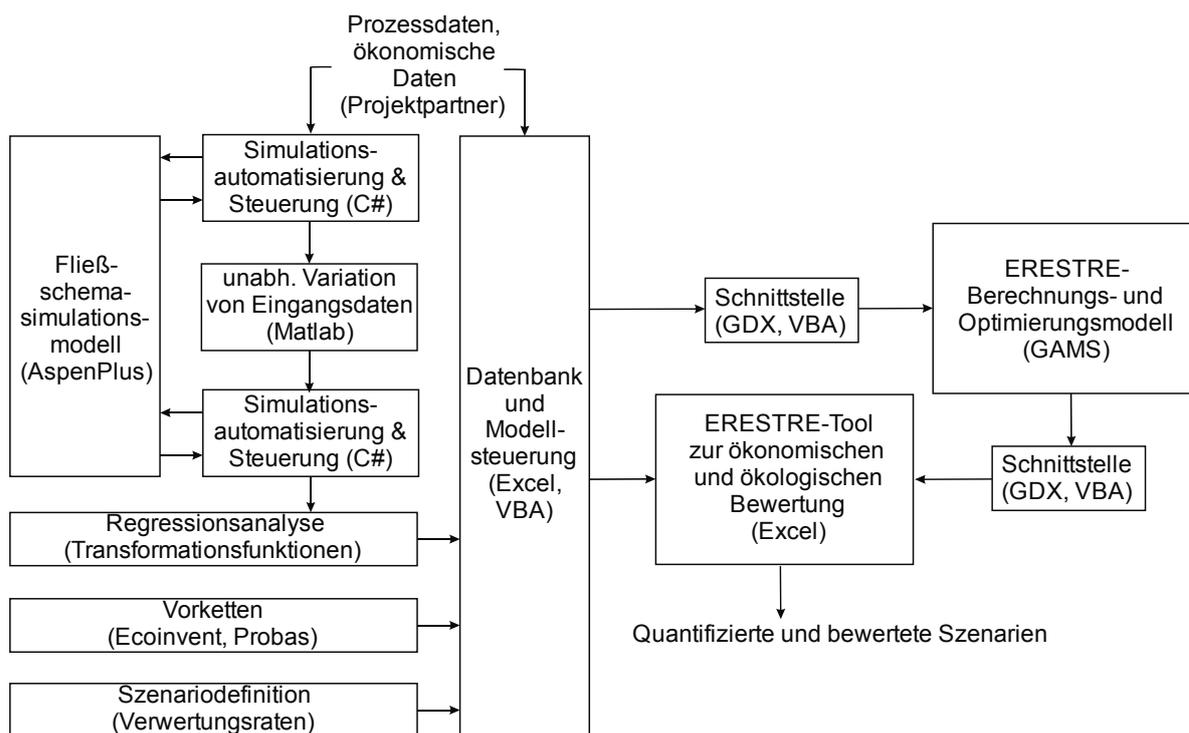


Abbildung 7: Struktur des ERESTRE-Gesamtansatzes zur ökonomischen und ökologischen Bewertung von Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz

Die Ergebnisse des ERESTRE-Berechnungsmodells werden wiederum über eine Schnittstelle in ein in EXCEL erstelltes Tool zur Analyse und Bewertung der Szenarien für die im ERESTRE-Projekt betrachteten Kategorien CO₂, Energieeffizi-

⁹ Verwendet wurde die Software umberto® 5.5

enz und Ökonomie übertragen (siehe Abbildung 7). Die Bewertung der CO₂-Emissionen erfolgt einerseits auf Basis der mit den Transformationsfunktionen berechneten CO₂-Emissionen der einzelnen Prozesse. Zum anderen werden die CO₂-Emissionen der Vorketten aus Daten der Ecoinvent¹⁰-Datenbank des Swiss Centre for Life Cycle Inventories und der ProBas¹¹-Datenbank des deutschen Umweltbundesamtes bewertet. Dabei werden vornehmlich Ecoinvent-Daten verwendet und nur wenn Ecoinvent-Daten nicht vorhanden sind, wird auf ProBas-Daten zurückgegriffen. Die Energieeffizienz der Maßnahmen wird anhand des kumulierten Energieaufwandes (KEA) bewertet. Die entsprechenden Werte für die Vorketten werden wiederum aus den genannten Datenquellen entnommen. Die ökonomische Bewertung basiert auf Kosten und Preisen bzw. Relationen zwischen verschiedenen Kosten und Preisen, die von den Projektpartnern zur Verfügung gestellt werden.

¹⁰ Siehe www.ecoinvent.ch.

¹¹ Siehe www.probas.umweltbundesamt.de.

4 Berechnung von prozessspezifischen Transformationsfunktionen zur Beschreibung der betrachteten Prozessschritte

Die konkrete Ermittlung von prozessspezifischen Transformationsfunktionen erfolgt, wie im vorangehenden Kapitel beschrieben, durch Kombination von Fließschemasimulation mit multipler linearer Regression. Hierzu werden für jeden der im ERESTRE-Projekt betrachteten Prozesse des integrierten Hüttenwerkes, des DK-Prozesses, des Elektrolichtbogenofens, des Wälzprozesses und der Laugung der hydrometallurgischen Zinkgewinnung Fließschemasimulationsmodelle entwickelt und, mit Ausnahme der Laugung der hydrometallurgischen Zinkgewinnung, Transformationsfunktionen bestimmt. In diesem Kapitel werden die hierzu ausgeführten Arbeitsschritte und wesentliche Zwischenergebnisse erläutert.

Hierzu werden zunächst die im jeweiligen Prozess vorhandenen Stoffströme und die dazu vorhandenen Daten beschrieben. Daran schließt die Darstellung der wesentlichen Reaktionszonen, der darin stattfindenden chemischen und thermodynamischen Prozesse und deren Abbildung in den Fließschemasimulationsmodellen mittels Grundoperationen an. Abschließend werden dann die zur Berechnung der Transformationsfunktionen systematisch und unabhängig zu variierenden Eingangsdaten identifiziert und die erhaltenen Transformationsfunktionen dargestellt.

4.1 Simulation der Stahlherstellung im integrierten Hüttenwerk der AcelorMittal Eisenhüttenstadt GmbH

Für die Untersuchung von Maßnahmen zur Steigerung der Ressourceneffizienz sind in dem betrachteten Referenzhüttenwerk insbesondere die Prozessschritte der Erzvorbereitung auf den Mischbetten, die Sinteranlage, die Roheisengewinnung im Hochofen, die Stahlerzeugung im Konverter sowie die Walzwerke relevant. Die wesentlichen stoffumwandelnden Prozesse, die den Ressourcen- und Energieverbrauch sowie die CO₂-Emissionen des integrierten Hüttenwerkes bestimmen, finden dabei auf der Sinteranlage, im Hochofen und im Sauerstoffblaskonverter des Konverterstahlwerkes statt. Aus diesem Grund wird im Folgenden näher auf diese drei Prozessschritte sowie die Bestimmung der Transformationsfunktionen über Datenerhebung, Fließschemasimulation und mul-

multiple lineare Regression eingegangen. Die weiteren Prozessstufen und dort anfallende und ggf. rezirkulierbare Reststoffe werden im Rahmen der Szenarien betrachtet.

4.1.1 Beschreibung der relevanten Prozesse und wesentlicher Stoff- und Energieströme

In Abbildung 8 sind die für das Vorhaben relevanten Prozessschritte und Stoffströme des betrachteten integrierten Hüttenwerkes dargestellt. Mit den Prozessschritten Erzvorbereitung auf den Mischbetten, Sinteranlage, Roheisengewinnung im Hochofen, Stahlerzeugung im Konverterstahlwerk und den Walzwerken existieren im integrierten Hüttenwerk mehrere Aggregate, die Einsatzstoffe benötigen, Produkte erzeugen und an denen Reststoffe anfallen. Ein Teil dieser Reststoffe wird intern anlagenübergreifend im Kreislauf geführt, indem sie über die Mischbetten und die Sinteranlage wieder den Prozessen zugeführt werden. Im Folgenden werden die für die Bestimmung der Transformationsfunktionen wesentlichen Prozessschritte des integrierten Hüttenwerkes näher erläutert.

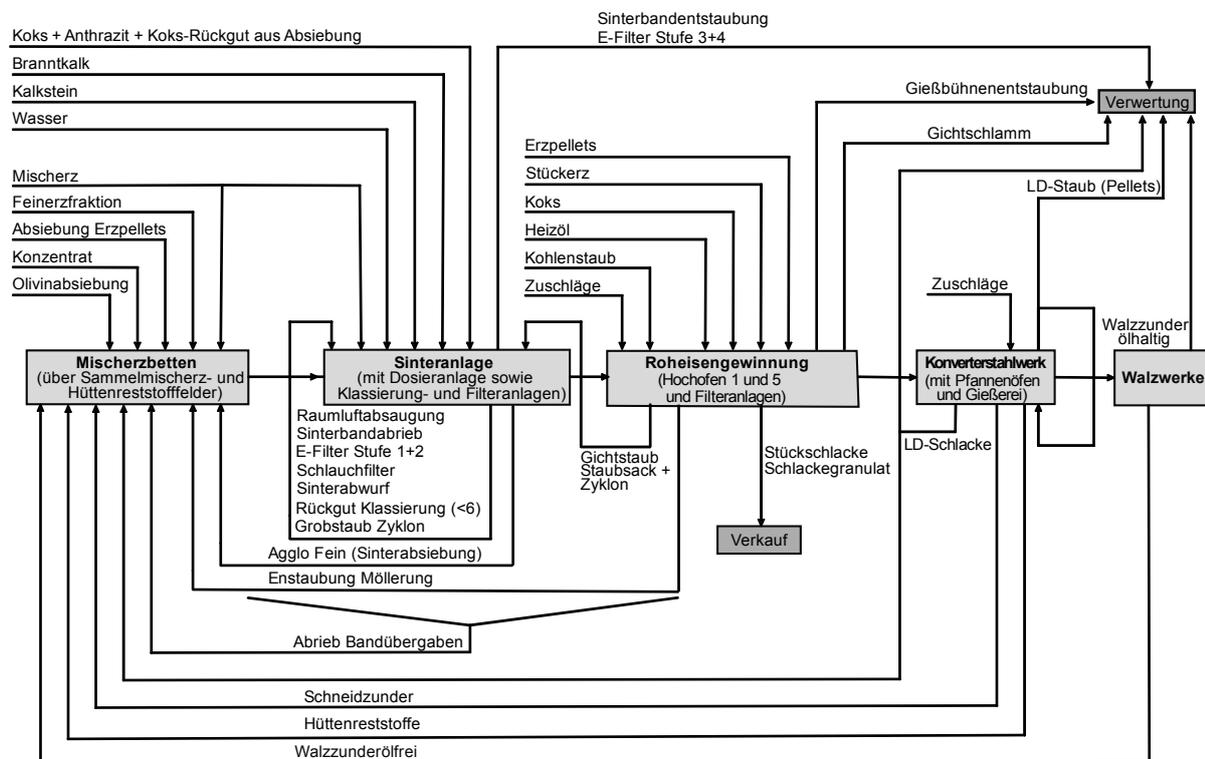


Abbildung 8: Stoffströme im betrachteten integrierten Hüttenwerk

4.1.1.1 Rohstoffbereitstellung über Mischbetten und Sinteranlage

Einsatzzweck der Mischbetten und Sinteranlage ist es, einen Großteil der für den Hochofen benötigten Eingangsstoffe in der vom Hochofenprozess benötigten chemischen Zusammensetzung und mit den benötigten physikalischen Eigenschaften bereitzustellen.

Für einen stabilen Betrieb des gesamten integrierten Hüttenwerksprozesses und primär des Hochofens, ist es wichtig, dass die Eingangsmaterialien in einer homogenen Zusammensetzung vorliegen. Dies wird über die Mischbetten erreicht. Hier werden, je nach zu produzierender Roheisenart und der dafür benötigten Rezeptur, die verschiedenen Erze, wie z. B. Misch- und Feinerze sowie weitere Konzentrate, vermengt. Dies geschieht, indem die einzelnen Stoffe zunächst über Absetzer lagenweise auf Mischbetten aufgebracht werden. Diese Mischbetten werden dann an der sogenannten Kopfseite beginnend wieder abgebaut und somit die angestrebte Homogenisierung erreicht. Neben den Mischbetten für Erz werden auch Mischbetten für Hüttenreststoffe (Walzzunder, Abrieb der Erze und Pellets vom Hochofen und der Sinteranlage, Konverterschlacke und der Olivinabsiebung) betrieben und nach deren Abbau in die Mischerzfelder gegeben (vgl. Abbildung 8). Für Gichtstaub existiert ein weiteres Mischbett. Die Mischbetten sind im ERESTRE-Projekt zu berücksichtigen, da sich aus der Mischung die Zusammensetzung der Eingangsmaterialien der Sinteranlage ergibt.

Zweck der Sinteranlage ist es, durch An- und Verschmelzen der zugeführten Erzkörner und Reststoffe, die für den Hochofen gewünschte Korngrößenverteilung und mechanische Belastbarkeit des Einsatzmaterials zu erzielen. Dies ist wichtig, da der Hochofen als Gegenstromaggregat arbeitet und das Einsatzmaterial von oben zugeführt wird. Es sinkt dann in Form einer selbsttragenden Säule herab. Hierbei muss im Hochofen trotz der hohen Temperaturen und der ablaufenden Reaktionen und Schmelze im unteren Hochofenbereich die Tragfähigkeit erhalten bleiben, um eine gute Durchgasbarkeit zu erreichen.

Zu diesem Zweck wird in der Sinteranlage vor dem Sintervorgang dem aus den Mischbetten zugeführten Material die Feinkornfraktion des im Hochofen eingesetzten Kokses als Energieträger zugemischt. Außerdem werden Kalkstein und Branntkalk hinzugefügt, um im Hochofenprozess die angestrebte chemische

Zusammensetzung und die sich daraus ergebende Viskosität der Schlacke einzustellen. Zusätzlich wird Erz zudosiert (vgl. Abbildung 8). Der Gesamtmaterialstrom aus den Mischbetten mit Koks, Kalkstein und Branntkalk wird in der Sinteranlage auf einen umlaufenden Rost gegeben und mittels Erdgasbrenner entzündet. Der enthaltene Koks verbrennt hierbei und schmilzt die Erzkörner an der Oberfläche an. Diese versintern und erstarren beim Abkühlen wieder. Durch anschließendes Brechen und Klassieren wird die Zielkörnung für den Hochofen eingestellt. Zu grobes Korn wird als Auflage für den Sinterrost direkt zurückgeführt, zu feines Korn wieder der Sinteraufgabe zugemischt. Während des Verbrennungsprozesses entstehen Gase und Stäube. Deren Feinkornfraktion enthält Schadstoffe sowie Verbindungen, die im Sinterprozess unerwünscht sind, und wird entsorgt. Die Grobkornfraktion wird als Kreislaufstoff wieder auf das Sinterband gegeben.

Als Produkt der Sinteranlage entsteht der Fertigsinter, welcher im Hochofen eingesetzt wird. Die Verteilung der chemischen Elemente der Sinterbandaufgabe auf den Fertigsinter und den Staub zeigt exemplarisch Abbildung 9.

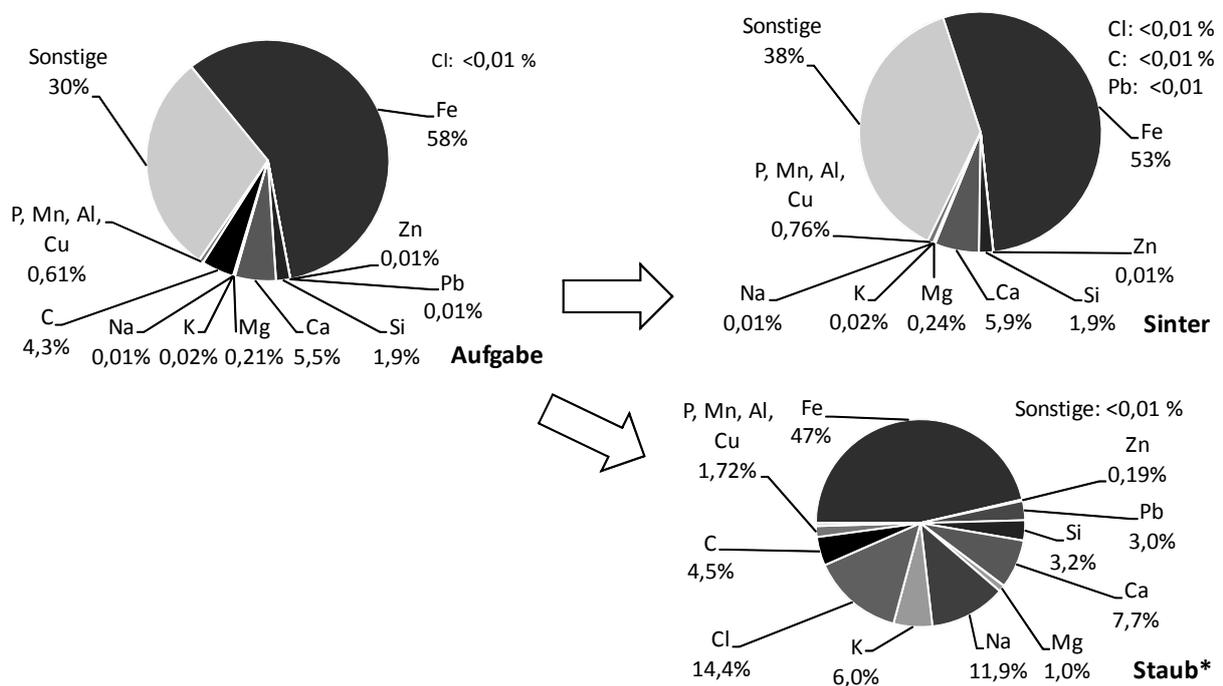


Abbildung 9: Mittlere Zusammensetzung der Sinterbandaufgabe und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Sinter und Staub (Datenreihe „Sonstige“ enthält Oxid-Sauerstoff; Quelle: Mittelwerte der Daten der Projektpartner; *Staubkonzentrationen: Mittelwerte aus European Commission, European IPPC Bureau (2011) S. 100)

4.1.1.2 Roheisenerzeugung im Hochofen

Im Hochofen werden die im Sinter enthaltenen Eisenoxide reduziert und geschmolzen. Das so gewonnene Roheisen dient als Rohstoff der Stahlerzeugung im Konverter. Zur Roheisenerzeugung wird der Hochofen von oben über die Gicht mit dem Sinter, zusätzlichem Erz und Erzpellets sowie Zuschlägen befüllt. Dieser sogenannte Möller sinkt mit dem ebenfalls lagenweise eingebrachten Koks im Ofenschacht nach unten. Im unteren Bereich des Hochofens wird unter Druck sauerstoffangereicherte und erhitzte Luft, der sogenannte Heißwind, eingeblasen. Das Hochofengas durchströmt die herabsinkende Möller-/ Koksäule im Gegenstrom. Die Temperatur im Ofenschacht nimmt nach unten bis auf über 2.000 °C zu. Bei Erreichen der entsprechenden Temperatur reagiert der Kohlenstoff des Kokses mit dem Sauerstoff des Windes zu Kohlenstoffmonoxid. Dieses reduziert im Möller enthaltene Metalloxide. Es bildet sich eine flüssige Eisenphase und eine flüssige Schlackephase, die zusammen abgestochen werden. Schlacke und Roheisen werden unter Ausnutzung des Dichteunterschiedes getrennt. Die Schlacke beinhaltet die Begleitelemente der Einsatzstoffe mit Siedepunkten über den Prozesstemperaturen. Sie findet vor allem in der Bauindustrie eine Verwertung. Roheisen ist das Hauptprodukt des Hochofens. Weiterhin entsteht noch ein staubbeladenes Abgas, das Gichtgas. Dieser Staub wird in zwei Stufen, einem Zyklon und einem Wäscher, abgetrennt. So entstehen eine Grobstaubfraktion (Gichtstaub) und eine wasserhaltige Feinstaubfraktion (Gichtschlamm) (vgl. Abbildung 8). Die Stäube beinhalten neben mechanisch abgetragenem Material vor allem Begleitelemente der Einsatzstoffe mit Siedepunkten deutlich unterhalb der Prozesstemperatur. Die Aufteilung der chemischen Elemente des Möllers auf das Roheisen, die Schlacke und die Stäube zeigt Abbildung 10.

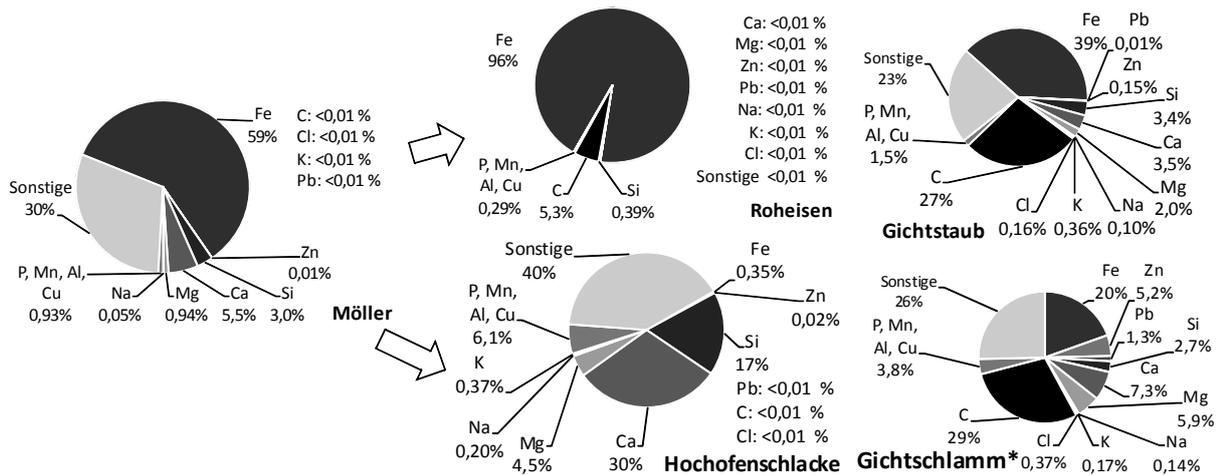


Abbildung 10: Mittlere Zusammensetzung des Möllers und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Roheisen, Hochofenschlacke, Gichtstaub und Gichtschlamm (Datenreihe „Sonstige“ enthält Oxid-Sauerstoff; Quelle: Mittelwerte der Daten der Projektpartner; *Gichtschlammkonzentrationen: Mittelwerte aus European Commission, European IPPC Bureau (2011) S. 312)

4.1.1.3 Stahlerzeugung im Konverterstahlwerk

Roheisen enthält noch einen relativ hohen Anteil an Kohlenstoff, aber auch anderer Elemente wie Silizium, Mangan, Phosphor etc. (vgl. Abbildung 10). Um aus Roheisen Stahl zu erzeugen, muss vor allem der Kohlenstoffanteil verringert werden. Dies erfolgt im Sauerstoffblasverfahren im Konverter. Beim Konverter handelt es sich um ein mit Feuerfestmaterial ausgekleidetes, eingehautes Gefäß, in das chargenweise das flüssige Roheisen gegossen wird. Zur Erzeugung einer Schlackephase und zur Schonung des Feuerfestmaterials werden Zuschläge hinzugegeben. Anschließend wird über eine Lanze Sauerstoff in die Schmelze geblasen. Hierbei werden Kohlenstoff, Silizium, Mangan und Phosphor aber auch ein Teil des Eisens oxidiert und gehen in die Schlacke über bzw. verlassen den Prozess gasförmig als Kohlenmonoxid und Kohlendioxid. Die Oxidationsreaktionen sind exotherm und geben Energie ab. Um eine Überhitzung des Bades zu vermeiden, wird Schrott zu Kühlzwecken zugeschlagen. Das Einblasen und die Gasbildung in der Schmelze erzeugen eine Badbewegung in deren Folge auch Spritzer und Blasen entstehen. Diese werden mit der Abgasabsaugung erfasst, womit sich ein staubbeladenes Abgas bildet. Der Staub schlägt sich als Grobfraktion im Verdampfungskühler nieder und wird als Feinfraktion mit einem Filter abgeschieden. Nach der Sauerstoffzufuhr werden der Stahl und die Schlacke abgegossen. Die Verteilung der mit dem Roheisen und dem Schrott eingetragenen Elemente auf den Rohstahl, die Konverterschlacke und die Staubfraktionen zeigt Abbildung 11.

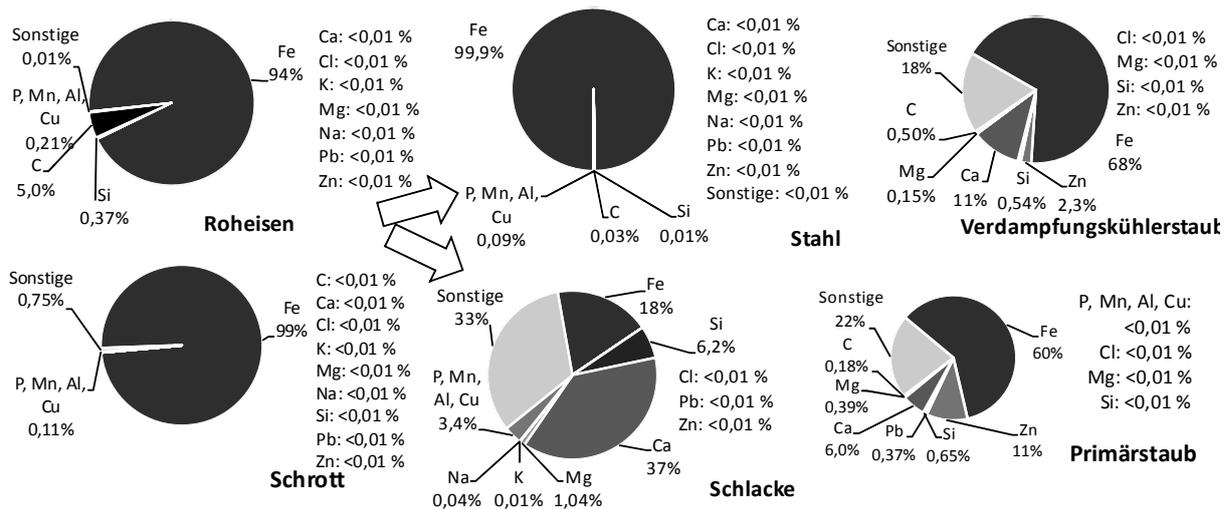


Abbildung 11: Mittlere Zusammensetzung des Roheisens sowie des Kühleisens und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Rohstahl sowie Konverterschlacke, Verdampfungskühlerstaub und Filterstaub (Datenreihe „Sonstige“ enthält Oxid-Sauerstoff; Quelle: Mittelwerte der Daten der Projektpartner)

4.1.2 Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung

Zur Modellierung der im vorherigen Kapitel beschriebenen Prozesse des betrachteten integrierten Hüttenwerkes werden Daten über Massen und Zusammensetzungen sämtlicher ein- und ausgehender Stoffströme benötigt. Dies wird durch die Vielzahl der im Hüttenwerk vorliegenden Ströme erschwert (vgl. Abbildung 8). Weiterhin werden im täglichen Betrieb eines Hüttenwerkes nicht alle Stoffströme in gleicher Häufigkeit und Qualität gemessen und analysiert (vgl. Abschnitt 3.3). In der Praxis bestehen unterschiedlich große Abweichungen der erhobenen Daten zu den tatsächlichen Werten, weshalb vor Nutzung der Daten deren Konsistenz überprüft wird. Im Folgenden wird für jeden modellierten Prozess beschrieben, welche Daten erhoben werden konnten, welche darüber hinaus benötigten Daten zusätzlich berechnet wurden und wie die Konsistenz der Daten beurteilt wird. Als Datenbasis wird für jeden Stoffstrom, soweit möglich, mit einem Tagesmittelwert in [t/h] gerechnet.

4.1.2.1 Rohstoffbereitstellung über Mischbetten und Sinteranlage

Zur Modellierung und Modellkalibrierung der Sinteranlage werden Daten über die Zusammensetzung der Sinterbandaufgabe benötigt. Eine chemische Analyse dieses Stoffstromes erfolgt im täglichen Betrieb nicht. Vielmehr wird die Zusammensetzung aus einer Vielzahl an Informationen berechnet. Das Sinterband wird durch ein System von Bändern und Bunkern direkt in der Sinteranlage be-

stückt. Für jeden Bunker existiert eine Bandwaage mit der folgende Massenströme erfasst werden:

- Koksverbrauch,
- Mischerzverbrauch (Mischerzbett),
- Branntkalk und Kalksteinverbrauch,
- Erzverbrauch (Erz sortenrein und direkt zugegeben),
- Sinterrückgut- und Rostbelagverbrauch und
- Gichtstaubverbrauch.

Branntkalk und das sortenreine Erz werden direkt in die Bunker gefördert. Für beides liegen chemische Analysen in unregelmäßigen Abständen vor, die nicht direkt dem Aufgabezeitpunkt auf das Sinterband zugeordnet werden können. Allerdings schwankt die Zusammensetzung dieser Materialien auch nur wenig. Für diese Stoffe wird daher mit einer konstanten Zusammensetzung nach dem Mittel aller verfügbaren Analysen gerechnet.

Koks, Mischerz, Kalkstein und Gichtstaub werden von den Mischbetten her zugeführt. Das System der Mischbetten, welche Materialien auf welche Mischbetten aufgebracht werden und an welcher Stelle Stoffströme beprobt werden, ist in Abbildung 12 dargestellt.

Bis auf das Mischerzbett werden die Zusammensetzungen der in Abbildung 12 dargestellten Mischbetten analysiert. Die Zusammensetzung des Mischerzes muss daher berechnet werden. Auf das Mischerzfeld werden neben der Erzsorte Erz 1 ein weiteres Erzkonzentrat Erz 2 und Rückströme aus der Absiebung der Erzbunker am Hochofen aufgebracht. Für diese Materialien liegen ebenfalls nur in unregelmäßigen Abständen chemische Analysen vor. Da die Zusammensetzungen nur wenig schwanken, kann jedoch auch mit dem Mittelwert gerechnet werden. Für die Absiebung vom Hochofen wird angenommen, dass das Material in seiner Zusammensetzung der des ursprünglichen Erzes entspricht.

Weiterhin werden die Hüttenreststofffelder abgebaut und lagenweise in das Mischerzfeld eingebaut. Für die Hüttenreststofffelder liegt für jedes aufgebaute Feld eine Analyse vor, die auch zeitlich zugeordnet werden kann. Der Zeitraum, über den ein Mischerzfeld in die Sinteranlage gefördert wird, ist ebenfalls dokumentiert. Aus diesen Informationen werden die Massen und Zusammensetzungen der in die Sinteranlage eingehenden Stoffströme errechnet.

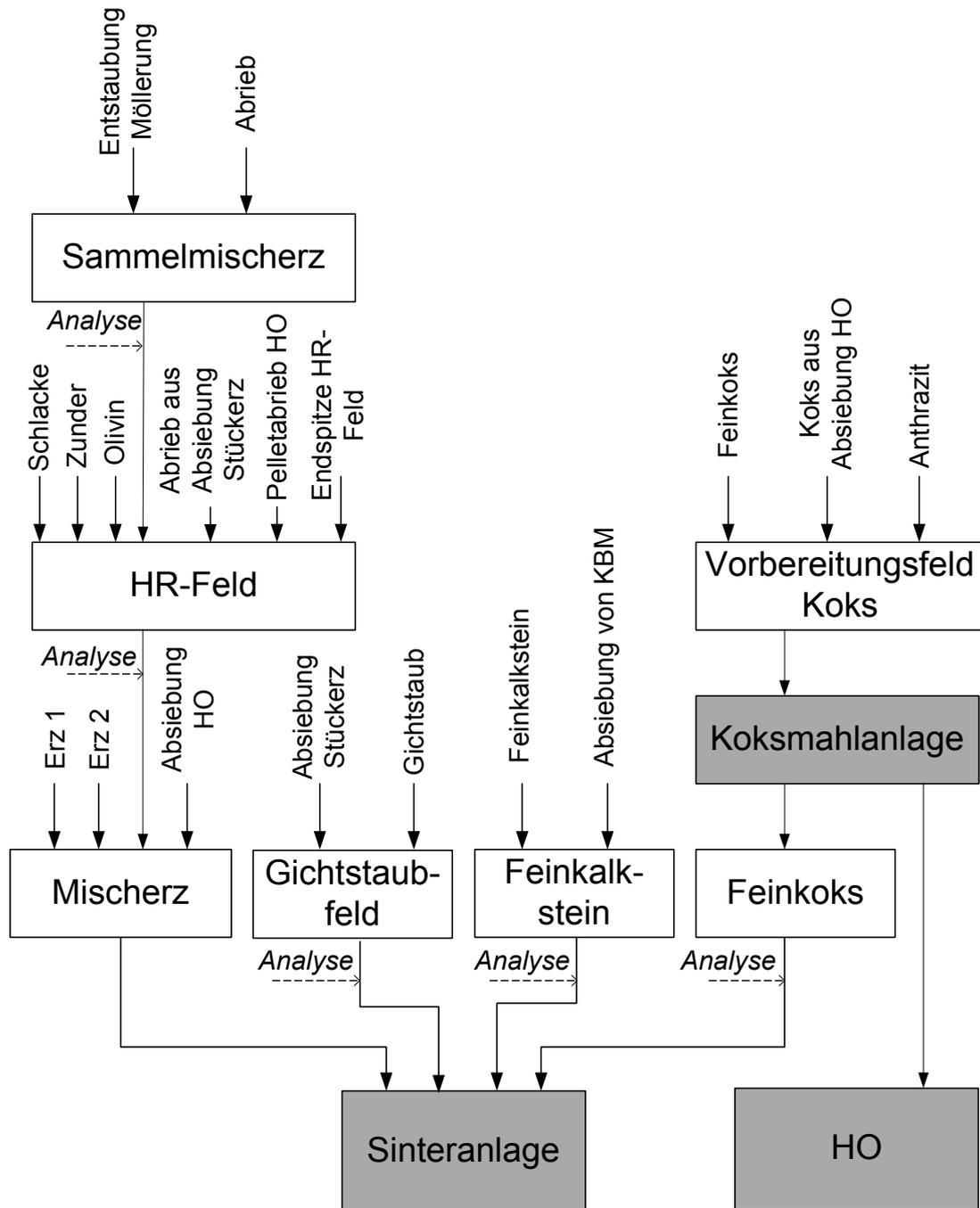


Abbildung 12: System der Mischbetten zur Bereitstellung des Eingangsstoffstromes der Sinteranlage

Für den aus der Sinteranlage ausgehenden Sinter sind Massen und Zusammensetzungen ebenfalls dokumentiert. Für den in der Abgasreinigung der Sinteranlage anfallenden Staub der Filterstufen 1 bis 4 werden weder Massen noch Zusammensetzungen tagesgenau erfasst. Die im Kreislauf geführte Menge des in den Filtern 1 und 2 anfallenden Staubes ist gegenüber den anderen Stoffströmen jedoch so gering, dass durch die Vernachlässigung dieses Stoffstromes nur ein geringer Fehler entsteht. Die Gesamtmasse des täglich anfallenden Staubes wird aus der anfallenden Jahresmasse abgeschätzt. Für die chemische Zusam-

mensetzung werden Verteilungsfaktoren der einzelnen chemischen Elemente aus der Sinteraufgabe auf die Stoffströme Sinter und Staub aus Rentz et al. (2006) abgeleitet.

4.1.2.2 Roheisenerzeugung im Hochofen

Wie in Abbildung 8 bereits dargestellt, gehen neben dem Sinter eine Reihe anderer Stoffströme in den Hochofen ein. Massen und Zusammensetzungen des eingesetzten Sinters, des Erzes und der Erzpellets, der Zuschläge Bauxit und Olivin sowie des Kokes, der Kohle und, wenn benötigt, des Schweröls sind mehrfach am Tag in der Möllerrechnung dokumentiert. Diese enthält jedoch keine Informationen über die zugeführten Massen an Zink, Blei und Chlor.

Von den ausgehenden Stoffströmen werden Massen und Zusammensetzungen des produzierten Roheisens und der Schlacke erfasst. Die Masse des Gichtstaubes und des Gichtschlamms muss anhand des spezifischen Anfalls abgeschätzt werden. Der spezifische Anfall ($m_{\text{Staub/Schlamm}}/m_{\text{Roheisen}}$) wird hierzu aus der jährlichen Anfallmenge und der jährlichen Roheisenproduktion berechnet. Da der Gichtstaub über das System der Mischbetten hüttenintern im Kreislauf geführt wird, liegen in unregelmäßigen Abständen Analysen vor, die aber nicht dem Zeitpunkt des Anfalls des Staubes zugeordnet werden können. Daher wird vereinfachend eine konstante Zusammensetzung des Staubes in Höhe des Mittelwertes aller vorliegenden Analysen angenommen. Für die Zusammensetzung des Gichtschlamms liegen keine Analysen vor, weshalb Literaturwerte (European Commission, 2011, S. 312) verwendet werden.

4.1.2.3 Stahlerzeugung im Konverterstahlwerk

In den Konverter werden zusätzlich zum Roheisen des Hochofens verschiedene Schrottsorten zu Kühlzwecken sowie die Zuschläge FeSi, Erz, Kalk und Dolomitmalk dosiert. Für das Roheisen, welches ca. 70 % des Eiseneintrages liefert, liegen je Charge Aufzeichnungen zu Masse und Zusammensetzung vor. Für alle anderen eingehenden Stoffströme (vgl. Abbildung 8) sind lediglich die Einsatzmassen dokumentiert. Als Zusammensetzungen für die Zuschläge werden Mittelwerte der im Bereich der Mischbetten für diese Materialien durchgeführten Analysen genutzt. Repräsentative Analysen der Zusammensetzung der eingesetzten Kühltrotte sind aufgrund der Heterogenität der Materialien nicht mit vertretbarem Aufwand zu gewinnen. Für die Zusammensetzung des Schrottes

werden daher Expertenschätzungen der Projektpartner eingesetzt. Diese beinhalten jedoch keine Annahmen für die Elemente Zink, Blei, Natrium, Kalium und Chlor, obwohl der Schrott als Hauptquelle dieser Elemente für den Prozess angesehen werden muss.

Für die Massen und Zusammensetzungen des produzierten Rohstahls und der Schlacke liegen für jede Charge Daten vor. Für die Staubfraktionen ist lediglich eine spezifische Masse ($m_{\text{Staub}}/m_{\text{Rohstahl}}$) bekannt. Mit Hilfe dieser werden Staubmassen jeder Charge berechnet. Für die Zusammensetzungen der Staubfraktionen sind Wertebereiche aus Daten des Projektpartners bekannt. Es wird der Mittelwert zwischen oberer und unterer Grenze dieser Wertebereiche angenommen.

4.1.3 Erstellung und Kalibrierung der Modelle zur Fließschemasimulation

Wie bereits in Abschnitt 3.3 dargestellt, sind für die Modellierung der Stoff- und Energieströme im betrachteten Netzwerk der Eisen- und Stahl- sowie Zinkindustrie mathematische Beschreibungen der Umwandlungen in den betrachteten Prozessen erforderlich. Zur Erstellung der Fließschemasimulationsmodelle der Sinteranlage und des Hochofens wird auf bestehende Modelle aus Rentz et al. (2006) zurückgegriffen. Diese werden entsprechend der mit den Experten des Industriepartners identifizierten Anforderungen der Prozesse des integrierten Hüttenwerkes überarbeitet. Das Modell des Konverters wird neu erstellt.

4.1.3.1 Sinteranlage

Wie beschrieben, werden in der Sinteranlage die einzelnen Erzkörner angeschmolzen und damit verbunden, so dass eine mechanische Belastbarkeit bei gleichzeitiger Durchgasbarkeit gegeben ist. Hierzu wird in der realen Anlage die Sinterbandaufgabe (im Modell repräsentiert durch die Stoffströme BRUTTO, LIMEADD und COKEADD, vgl. Abbildung 13) mit einer Schichtdicke von 0,52 m auf das Sinterband gegeben. Ein Brenner entzündet den in der Aufgabemischung enthaltenen Koks an der Oberfläche. Von unten wird ein mit $440.000 \text{ m}^3/\text{h}$ sehr starker Luftstrom mit einem Unterdruck von 16,5 kPa durch das Sinterband gesaugt (vgl. Buchwalder et al. 2008). Dieser Stoffstrom ist als Strom AIR im Modell abgebildet. Während das Sinterband weiterläuft, bewegt

sich die Zone, in welcher der Koks verbrennt, durch die Aufgabeschicht nach unten, bis sie den Sinterrost bzw. die Sinterbandauflage erreicht.

Das Fließschemasimulationsmodell bildet diese Prozessführung durch eine Anordnung der Grundoperationen in drei Zeilen und drei Spalten nach. Während feste und flüssige Verbindungen die Grundoperationen von links nach rechts entsprechend der Bewegungsrichtung des Sinterbandes durchwandern, strömen gasförmige Verbindungen mit dem Prozessluftstrom von oben nach unten (vgl. Abbildung 13).

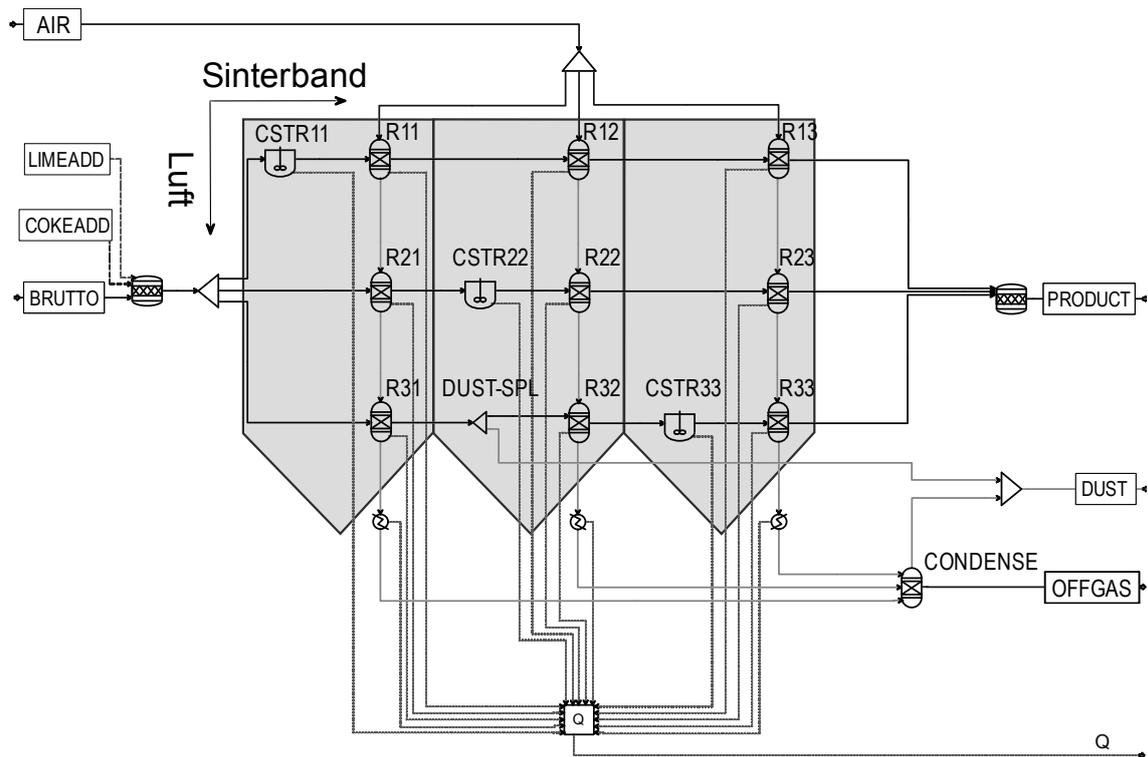


Abbildung 13: Fließschemasimulationsmodell der Sinteranlage des integrierten Hüttenwerkes

Die erste Spalte des Modells mit den Gleichgewichts-Grundoperationen R11, R21, R31 und der kinetischen Grundoperation CSTR11 repräsentiert hierbei den vorderen Teil des Sinterbandes. Die Durchbrennzone liegt am Anfang des Bandes an der Oberfläche. Hier herrschen Temperaturen von ca. 1.200 °C vor. Die dabei stattfindenden chemischen Reaktionen berechnet R11. Durch das langsame Fortschreiten der Durchbrennzone erreichen viele stattfindende Reaktionen das Gleichgewicht, so dass eine Gleichgewichts-Grundoperation zur Berechnung eingesetzt wird. Die Freisetzung von Chloriden wird mittels der kinetischen CSTR11 berechnet. Die hierfür benötigten kinetischen Parameter werden im Rahmen der Kalibrierung (wie auch für die übrigen CSTR des Modells)

ermittelt. Hierzu werden diese Parameter systematisch variiert, bis die Konzentration an Chloriden im Sinter in allen während der Kalibrierung durchlaufenden Datensätzen im Modell möglichst gut mit den Realdaten übereinstimmt. Verbindungen, die bei ca. 1.200 °C fest oder flüssig sind, werden in die Grundoperation R12 weitergeleitet. Gasförmige Verbindungen werden in die Grundoperation R21 weitergeleitet. Die Gleichgewichts-Grundoperation R21 repräsentiert die Zone der Sinterbandaufgabe unter der Durchbrennzone, die von den heißen Gasen der Durchbrennzone durchströmt und dadurch bereits angewärmt wird. In dieser Grundoperation werden die Reaktionen der Gase aus der Durchbrennzone mit der angewärmten Sinteraufgabe berechnet. Feste Verbindungen werden an die Grundoperation CSTR22 weitergegeben, gasförmige an die Gleichgewichts-Grundoperation R31, welche die Reaktionen der noch verbliebenen Gase mit der kalten Sinterbandaufgabe berechnet.

Durch den sehr starken Luftzug werden trotz der Sinterbandaufgabe mit rückgeführtem grobkörnigem Sinter aus den darüber liegenden Schichten Restmengen feinkörniger Bestandteile der Sinterbandaufgabe mit dem Luftstrom mitgerissen. Dies wird im Fließschemasimulationsmodell durch den Splitter DUST-SPL abgebildet. Dieser gibt hierzu einen Teil der Sinterbandaufgabe der unteren Schicht in den Luftstrom ab. Der Verteilungskoeffizient wird im Rahmen der Kalibrierung ermittelt. Hierzu wird, neben den bereits gasförmig in den Luftstrom gelangten Verbindungen, die noch fehlende Gesamtmasse des Staubes in allen während der Kalibrierung durchlaufenden Datensätzen ermittelt und der Verteilungskoeffizient so gewählt, dass die Gesamtstaubmasse im Modell der gemessenen entspricht.

Mit weiterem Fortlaufen der Sinterbandaufgabe wandert die Durchbrennzone und die darunter befindliche Aufwärmzone tiefer in die Sinterbandaufgabe. Oberhalb der Durchbrennzone befindet sich dann eine Abkühlzone, in der die nach der Verbrennung des Kokes verbliebenen Feststoffe und Flüssigkeiten durch den starken Luftstrom wieder gekühlt werden. Außerdem finden ggf. mit dem Sauerstoff der Luft Oxidationsreaktionen statt. Diesen Bereich des Sinterbandes repräsentiert die zweite Spalte der Grundoperationen des Fließschemasimulationsmodells mit den Operationen R12, CSTR22, R22 und R32. Die Gleichgewichts-Grundoperation R12 berechnet hierbei die Reaktionen in der

Abkühlzone. CSTR22 und R22 repräsentieren jetzt die bereits beschriebene Durchbrennzone, R32 die Aufwärmzone.

Im hinteren Bereich des Sinterbandes erreicht die Durchbrennzone den Rost und die Rostaufgabe des Sinterbandes. Die Aufwärmzone ist hier entweder kaum oder gar nicht mehr ausgeprägt. In der Folge gelangen die heißen Gase aus der Durchbrennzone direkt in die Abluft. In diesem Bereich des Sinterbandes treten die höchsten Abgaskonzentrationen von Chloriden, Alkalien, aber auch von Blei und Zink auf. Diese Situation wird durch die dritte Spalte der Grundoperationen im Fließschemasimulationsmodell mit R13, R23, CSTR33 und R33 abgebildet. In der Gleichgewichts-Grundoperation R13 erreichen die Temperaturen nahezu Umgebungsniveau und es liegt fertiger Sinter vor. Hier finden kaum chemische Reaktionen statt. R23 repräsentiert die bereits beschriebene Abkühlzone und CSTR33 und R33 die Durchbrennzone. Aus der dritten Spalte des Modells verlassen die festen und flüssigen Verbindungen das Modell (rechts). Dann schließt eine weitere Grundoperation an, welche die Stoffströme der verschiedenen Lagen wieder vermengt und weiter abkühlt. Der Stoffstrom PRODUCT repräsentiert dann den Sinter.

Die mit heißen Gasen der Durchbrennzone und Staub beladene Abluft des Prozesses wird aus der unteren Zeile der Grundoperationen R31, R32 und R33 abgeführt. Die Abkühlung dieses staubeladenen Gasstromes wird über drei Kühler-Grundoperationen nachgebildet, danach werden die Stoffströme in einer Gleichgewichts-Grundoperation zusammengeführt. Diese berechnet die Kondensation bzw. das Erstarren der heißen Gase aus der Durchbrennzone und repräsentiert gleichzeitig die Staubabtrennung in den Filtern der Sinteranlage. Feststoffe werden als Staubstoffstrom abgetrennt. In Anbetracht des Abscheidegrads der installierten Filter von max. 3.500 mg/m^3 auf weniger als 35 mg/m^3 (vgl. Buchwalder et al. 2008) wird hier vereinfachend eine komplette Abscheidung angenommen. Der Staub der Durchbrennzone wird mit dem mechanisch abgetragenen Staub aus DUST-SPL zusammengeführt und stellt die in der Abgasreinigung abgetrennte Staubfraktion dar (Strom DUST). Alle gasförmigen Bestandteile des Abgasstromes verbleiben im Strom OFFGAS.

Für die Kalibrierung liegen die Daten des der Aufgabemischung zugegebenen Kokes (Stoffstrom COKEADD) und Kalks (LIMEADD) vor. Bei den späteren Rechendurchläufen mit systematisch, unabhängig variierten Datensätzen zur Be-

stimmung der Transformationsfunktionen, müssen die Massen an zugegebenem Koks und Kalk durch das Fließschemasimulationsmodell berechnet werden. Zu diesem Zweck werden zwei Auslegungsvorschriften (vgl. Abschnitt 3.1.2.3) in das Modell integriert. Zur Berechnung des Kokses werden während der Rechendurchläufe mit bekanntem Kokszuschlag die Energieströme im Modell zusammengefasst und im Energiestrom Q bilanziert. Der sich für Q im Mittel aller Durchläufe ergebende Wert wird als Zielwert einer Auslegungsvorschrift in das Modell integriert. Das Modell variiert durch diese Auslegungsvorschrift die zugeführte Koksmasse solange, bis Q wieder dem definierten Wert entspricht. über diese Wärmebilanz kann der zuzuführende Koks berechnet werden. Die Kalkzugabe bestimmt, wie bereits in Abschnitt 4.1.1.1 beschrieben, wesentliche Eigenschaften der Schlacke im Hochofenprozess. Hierzu müssen die Konzentrationen von Kalk mit Magnesiumoxid und Siliziumoxid in einem bestimmten Verhältnis zueinander stehen. Dieses Verhältnis wird als Basizität (vgl. VDEh, 1981) bezeichnet. Aus den vorhandenen Daten zur Kalkzugabe wird die mittlere Basizität des Sinters berechnet. Das Fließschemasimulationsmodell kann dann mit einer Auslegungsvorschrift die Kalkzugabe derart variieren, dass wieder die Zielbasizität erreicht wird.

Weiterhin ist bei der Modellkalibrierung zu berücksichtigen, dass bei den chemischen Analysen aufgrund der eingesetzten Analysemethoden nicht die Konzentration einer Verbindung (wie z. B. ZnO), sondern lediglich die eines Elementes (im Beispiel: Zn) gemessen wird. Trotzdem wird im Ergebnis der Analyse die Konzentration von Verbindungen ausgewiesen. Hierbei wird die gemessene Elementkonzentration auf die derjenigen Verbindung umgerechnet, die in der Metallurgie erfahrungsgemäß in den höchsten Konzentrationen vorliegen. So wird in den erhobenen Daten Kalium als Verbindung K_2O ausgewiesen. Bei gleichzeitigem Vorhandensein von Chlor, was hier der Fall ist, ist es unter Betrachtung des chemischen Gleichgewichts jedoch wahrscheinlicher, dass Kalium als Kaliumchlorid (KCl) vorliegt. Ein Abgleich des sich daraus ergebenden stöchiometrischen Verhältnisses von Kalium und Chlor zeigt zudem, dass dieses recht gut mit dem Verhältnis von Kalium und Chlor in den erhobenen Daten übereinstimmt. Deshalb wird Kalium nicht als K_2O sondern als KCl in das Fließschemasimulationsmodell eingesetzt.

Im Rahmen der Kalibrierung werden, wie oben beschrieben, kinetische Parameter und Verteilungskoeffizienten sowie das Temperaturprofil in den Grundoperationen systematisch angepasst, bis über für alle erhobenen Datensätze eine möglichst gute Übereinstimmung der mit dem Modell berechneten Ausgangsstoffströmen erreicht wird.

4.1.3.2 Hochofen

Der Hochofen ist ein nach dem Gegenstromprinzip betriebener Schachtofen. Während die Feststoffsäule, bestehend aus Möller und Koks, langsam den Schacht herabsinkt, strömt heißes, kohlenmonoxidhaltiges Gas von unten nach oben. Das Fließschemasimulationsmodell basiert ebenfalls auf dieser Struktur (vgl. Abbildung 14). Möller (Stoffstrom BURDEN) und Koks (Stoffstrom COKE) werden von oben nach unten in der Reihenfolge der Grundoperationen SEPMECHD → GIBBS1 → RSTMAGRE / GIBBS2 → RSTRED → GIBBS3 geführt, während die ca. 1.100 °C heiße, um 3,5 % sauerstoffangereicherte und unter 3,95 bar Druck zugeführte Luft (Wind, Stoffstrom HOTBLAST) von unten nach oben über die Grundoperationen GIBBS3 → SEPZNCIR → GIBBS2 → RSTMAGRE geleitet wird.

Der Gegenstrom des Prozessgases führt dazu, dass ein geringer feinkörniger Anteil des Kokses und des Möllers vom Gasstrom mitgerissen und an der Oberseite des Ofens, der sogenannten Gicht, ausgetragen wird. Dieser mechanische Vorgang wird mittels der Grundoperation SEPMECHD abgebildet. Hier wird für jede im Koks und Möller enthaltene Verbindung ein individueller Anteil abgetrennt. Die Höhe dieses Abtrennungsfaktors wird während der Kalibrierung so eingestellt, dass die Konzentration von Verbindungen mit hohem Siedepunkt, die nur mechanisch ausgetragen werden können, im Gichtstaub und Gichtschlamm der gemessenen entspricht.

Der Gasstrom im Hochofen wärmt den herabsinkenden Feststoff auf und kühlt dabei ab (vgl. Abbildung 15). Beim Verlassen des Hochofens hat das sogenannte Gichtgas noch eine Temperatur von ca. 135 °C und einen Druck von 2,5 bar. Direkt nach der Zuführung des Windes in den Hochofen über die sogenannten Blasformen reagiert der enthaltene Sauerstoff O₂ mit dem Kohlenstoff C des Kokses und bildet Kohlenmonoxid CO, welches mit dem Gasstrom im Hochofen aufsteigt.

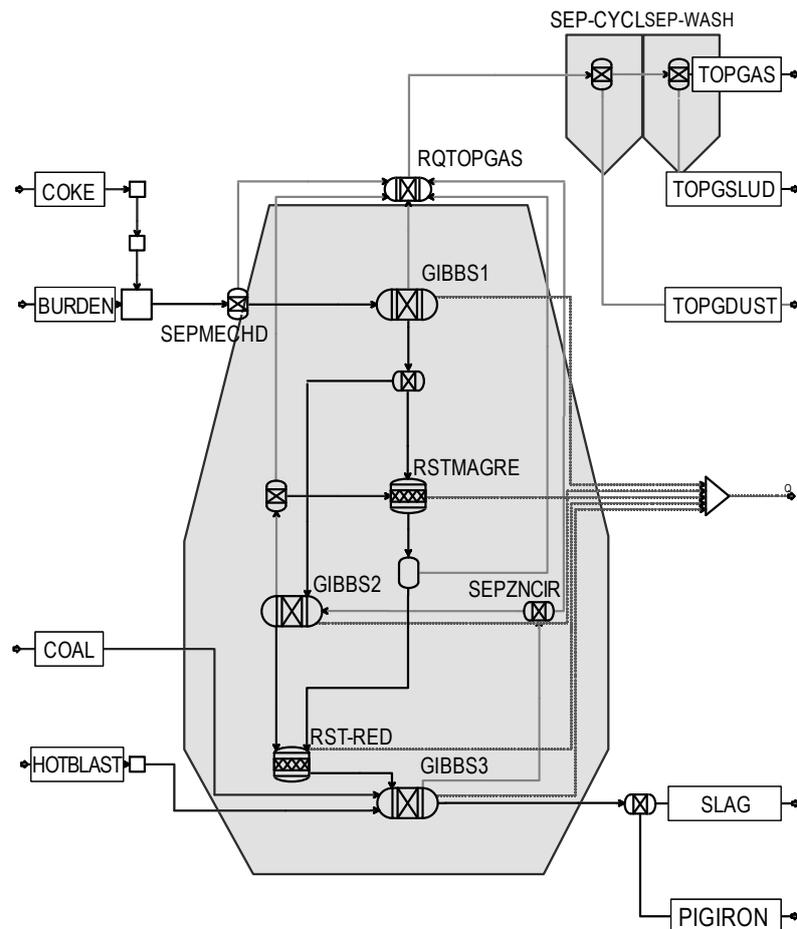


Abbildung 14: Fließschemasimulationsmodell des Hochofens des integrierten Hüttenwerkes

Im oberen Bereich des Ofens, der Vorheizzone, werden der Koks und der Mäler angewärmt. Dabei werden Wasser verdampft und enthaltene Karbonate zersetzt. Das Kohlenmonoxid reagiert mit Hämatit (Fe_2O_3) zu Magnetit (Fe_3O_4) und Kohlendioxid (CO_2). Diese Vorheizzone wird im Fließschemasimulationsmodell durch die erste Gleichgewichts-Grundoperation GIBBS1 bei einer Temperatur von $400\text{ }^\circ\text{C}$ repräsentiert.

Auf die Vorheizzone folgt die Zone der thermischen Reserve und der weiteren indirekten Reduktion des Magnetits über Wüstit (FeO) zu metallischem Eisen (Fe). Hier werden außerdem eine Reihe weiterer Metalloxide wie Zink- oder Bleioxide und Oxide der Alkalien durch Kohlenstoffmonoxid reduziert. Die Reduktion des Magnetits zu Wüstit wird in der kinetischen Grundoperation RSTMAGRE abgebildet. Hierzu wird Magnetit von dem aus GIBBS1 austretenden Stoffstrom abgetrennt und in die Operation RSTMAGRE geleitet. Die restlichen Verbindungen werden an die Gleichgewichts-Grundoperation GIBBS2 weitergeleitet, in der die verbleibenden Reaktionen anderer Verbindungen berechnet

werden. Aus Gründen der besseren Nachvollziehbarkeit der Energieflüsse im Hochofen werden Energiebedarfe stattfindender Phasenwechsel von fest nach flüssig in der Grundoperation RST-RED ermittelt.

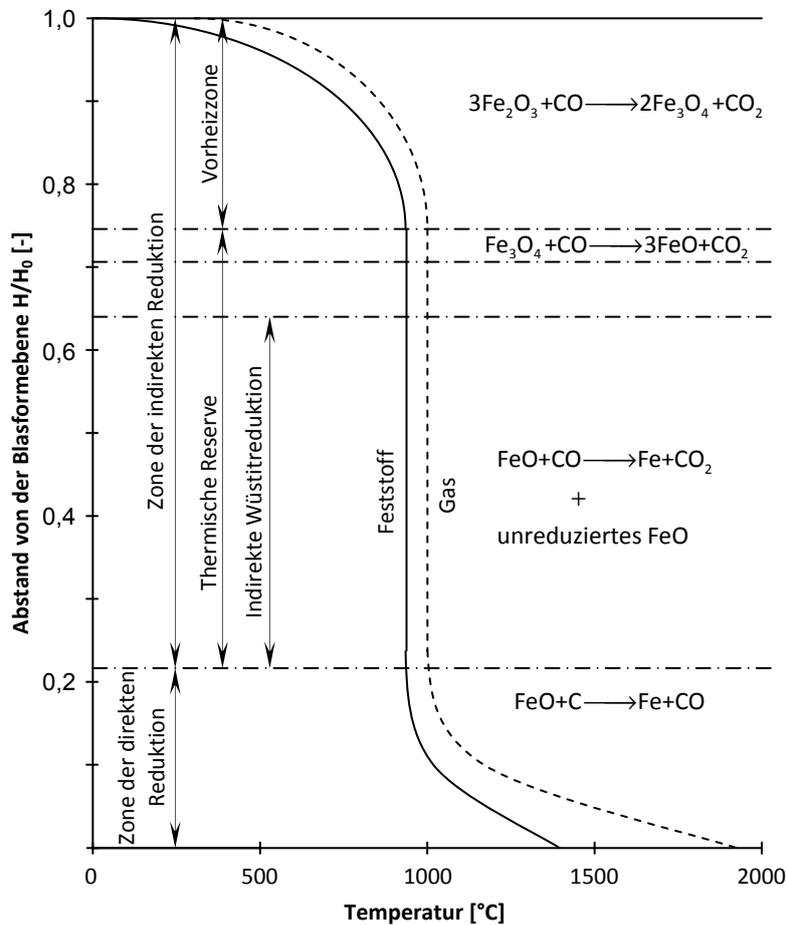
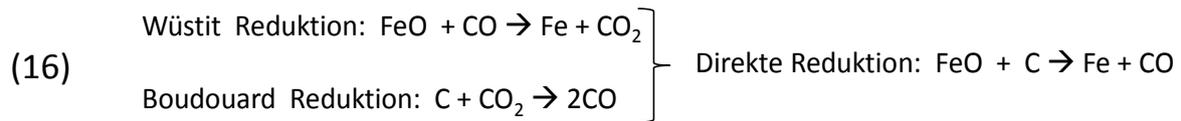


Abbildung 15: Wesentliche Temperaturzonen und Reaktionszonen des Eisens im Hochofen (in Anlehnung an Biswas (1981))

Die letzte Zone im Hochofen stellt der Bereich in Höhe der Blasformen dar. Hier wird neben dem Wind (Stoffstrom HOTBLAST) Kohlenstaub als Ersatzreduktionsmittel (Stoffstrom COAL) eingeblasen. Die Temperaturen erreichen in der Flüssigphase des geschmolzenen Eisens und in der Schlacke ca. 1.600 °C sowie in der Gasphase über 2.000 °C. In diesem Temperaturbereich liegt das Gleichgewicht der Boudouard-Reaktion soweit auf der rechten Seite, dass bei der Wüstitreduktion gebildetes Kohlendioxid sofort wieder mit Kohlenstoff zu Kohlenmonoxid reagiert. Aus der Summe beider Reaktionen ergibt sich dann eine scheinbar direkte Reduktion (vgl. z. B. Turkdogan 1978):



Diese direkte Reduktionszone ist im Fließschemasimulationsmodell durch eine weitere Gleichgewichts-Grundoperation GIBBS3 abgebildet. Die flüssigen Phasen und darin gelöste Gase werden in eine weiteren Separations-Grundoperation weitergeleitet, in der dann die Roheisen- und Schlackenbestandteile in die ausgehenden Stoffströme PIGIRON und SLAG getrennt werden.

Durch die reduzierenden Bedingungen und die hohen Temperaturen in der Zone der direkten Reduktion bilden sich eine Reihe von Gasen, wie z. B. Zink und Alkalien. Diese Gase steigen im Hochofen mit dem Prozessgasstrom auf, bis die Temperaturen soweit abgesunken sind, dass sie ihren Kondensationspunkt erreichen. Sie kondensieren dann an der Möllersäule und sinken mit dieser wieder nach unten. Auf diese Weise entsteht ein sogenannter Zink- bzw. Alkalienkreislauf. Dieser Kreislauf kann dazu führen, dass die genannten Stoffe nicht ausgetragen werden und im Ofen akkumulieren. Sie verringern dann durch die Kondensation an der Möllersäule den durchgasbaren Querschnitt und damit die Effektivität des Ofens. Weiterhin können sich Ansetzungen bilden. Der Anteil der an der Möllersäule kondensierenden Alkalien und des Zinks, bzw. der Anteil des mit dem Prozessgasstrom ausgetragenen Zinks und der Alkalien hängt unter anderem von der Prozesstemperatur ab. Der Zink- und Alkalienkreislauf ist im Modell vereinfachend in die Separations-Grundoperation SEPZNCIR integriert. Ein Teil des Zinks und der Alkalien wird dabei wieder in die Operation GIBBS2 geleitet und somit dem Kreislauf zugeführt. Der verbleibende Anteil verlässt den Abschnitt des Fließschemasimulationsmodells¹², der den Hochofen beschreibt, mit dem Gichtgas. Die Verteilungskoeffizienten für die einzelnen Verbindungen in der Operation SEPZNCIR werden im Rahmen der Kalibrierung systematisch angenähert, so dass die Zink- und Alkalienkonzentration in allen ausgehenden Stoffströmen mit den gemessenen Daten möglichst gut übereinstimmt.

¹² Eine detailliertere Beschreibung des Zink- und Alkalienkreislaufes unter Berücksichtigung der einzelnen teilnehmenden Verbindungen sowie eine Beschreibung der Berücksichtigung im Fließschemasimulationsmodell findet sich in Rentz et al. 2006.

Das staubbeladene Gas, welches den Hochofen aus unterschiedlichen Quellen im Modell über die Gicht verlässt, wird in der Gleichgewichts-Grundoperation RQTOPGAS zusammengefasst. Hier werden Reaktionen und Phasenwechsel berechnet, die beim Abkühlen des Gichtgases stattfinden. Die Abgasreinigung des Hochofens erfolgt zweistufig. In der ersten Stufe werden mittels eines Zyklons vor allem grobkörnige Staubbestandteile abgetrennt. Die hier gebildete Staubfraktion wird Gichtstaub (Strom TOPGDUST) genannt. In der zweiten Stufe, einem Wäscher, werden feinkörnige Partikel ausgewaschen. Diese werden als Gichtschlamm (Strom TOPGSLUD) ausgetragen. Beide Stufen sind im Modell als Separations-Grundoperationen SEP-CYCL und SEP-WASH integriert. Die Verteilungskoeffizienten sind so berechnet, dass die mittlere Zusammensetzungen des modellierten Gichtstaubes und Gichtschlammes dem Mittelwert der gemessenen bzw. angenommenen Konzentrationen entsprechen.

Für jeden Durchlauf mit einem Datensatz zur Kalibrierung des Modells wird eine Gesamtenergiebilanz des Modells unter Berücksichtigung der in den Daten dokumentierten, zugeführten Koksmassen berechnet. Anschließend wird eine Auslegungsvorschrift in das Modell integriert, die es ermöglicht, die benötigte Kokszufuhr zu berechnen, so dass dieselbe Energiebilanz erreicht wird. Da dies in vom bestimmungsgemäßen Betrieb abweichenden Betriebszuständen zu einer Überschätzung der Koksmasse führt, wird eine zusätzliche Schranke in die Auslegungsvorschrift integriert, welche die Kokszufuhr dahingehend begrenzt, dass eine definierte Höchstkonzentration von Kohlenstoff im Roheisen nicht überschritten werden darf. Die Temperaturen der Grundoperationen bleiben während der Kalibrierung konstant.

4.1.3.3 Konverter

Der Sauerstoffblaskonverter im integrierten Hüttenwerk wird im Batch-Verfahren betrieben, wobei die Prozessphasen:

- Einfüllen des Roheisens,
- Einblasen des Sauerstoffs über eine wassergekühlte Lanze (Frischen),
- Zudosieren von Zuschlägen und Kühlschrott während des Frischens und
- Abgießen von Stahl und Schlacke.

aufeinander folgen. Diese Phasen können in einem stationären Fließschemasimulationsmodell so nicht abgebildet werden, da sich die Zusammensetzung der

Schlacke und des Eisenbades sowie der Stäube dynamisch mit der Zeit ändern. Daher wird der Prozess in AspenPlus¹³ so modelliert, dass die einzelnen Prozessphasen jeweils durch hintereinander geschaltete Grundoperationen abgebildet werden, in denen der dann erreichte Zustand einer Prozessphase jeweils stationär angenähert wird (vgl. Abbildung 16).

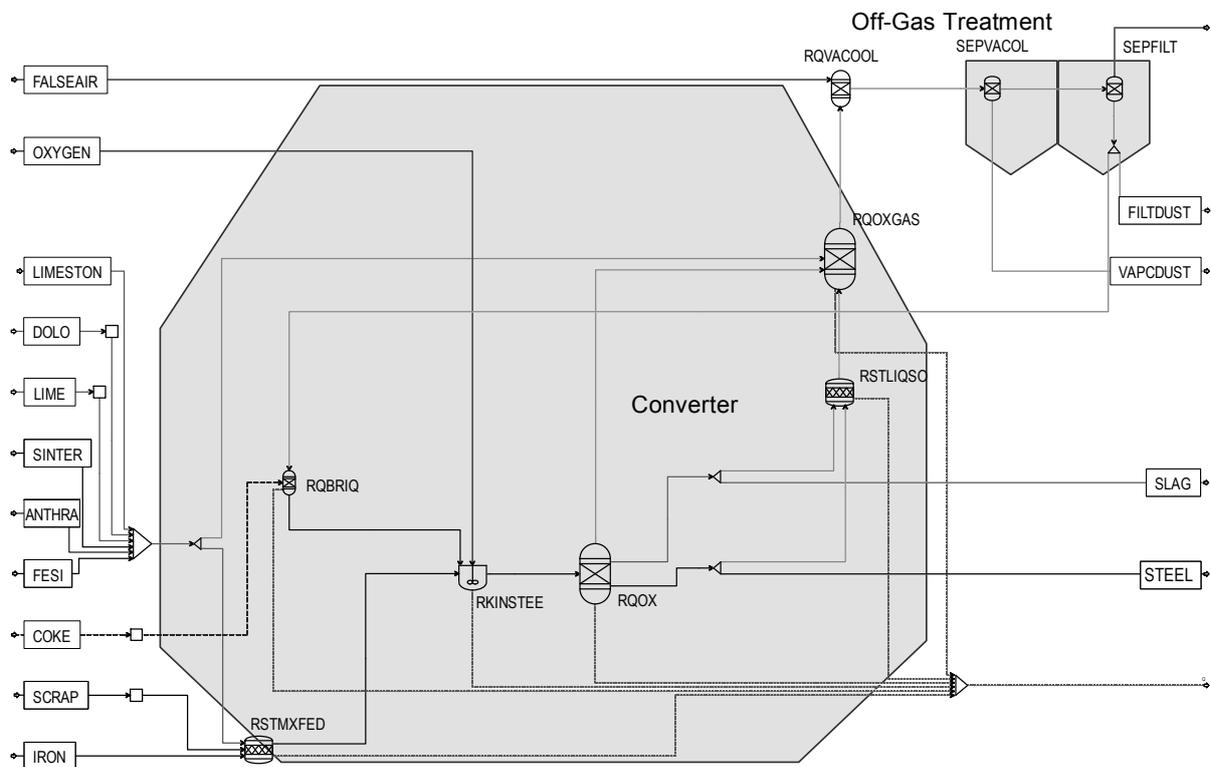


Abbildung 16: Fließschemasimulationsmodell des Sauerstoffblaskonverters des integrierten Hüttenwerkes

Der im Modell zuerst berechnete Vorgang repräsentiert das Aufschmelzen der in festem Zustand zudosierten Zuschläge und des Kühltropfens. Der hierfür benötigte Energieaufwand wird in der stöchiometrischen Grundoperation RSTMXFED ermittelt.

Während des Frischens reagiert der Sauerstoff mit dem Roheisen und den darin gelösten Elementen. Mit Kohlenstoff bildet sich in Folge der Reaktionen Kohlenstoffmonoxid, welches als Gas entweicht. Neben einem kleinen Anteil des Eisens, werden weitere im Roheisen gelöste Elemente wie Silizium mit fortschreitender Blaszeit oxidiert. Diese Oxide akkumulieren in der Schlackephase. Der Anteil der so aus der metallischen Phase abgeschiedenen Elemente hängt

¹³ Das Aspen Engineering Paket beinhaltet auch eine Lösung zum Erstellen dynamischer Modelle. Dieses kann aber Stoffströme der Klasse solids nicht abbilden, die gerade für die Simulation metallurgischer Abläufe in Aspen jedoch wichtig ist.

von der Blaszeit ab und wird daher mit der kinetischen Grundoperation RKINSTE abgebildet. Die kinetischen Parameter der beschriebenen Reaktionen werden während der Kalibrierung so eingestellt, dass das Modell die Verteilung dieser Elemente zwischen Eisen- und Schlackephase entsprechend der erhobenen Originaldaten reproduziert.

Sämtliche weitere Reaktionen, wie z. B. das Verdampfen von am Kühleisenschrott anhaftendem Zink oder enthaltener Alkalien und Chloride werden in der Gleichgewichts-Grundoperation RQOX berechnet. Stahl verlässt das Modell im Stoffstrom STEEL, Schlacke im Stoffstrom SLAG.

Verdampfende Verbindungen gehen in die Gasphase über und werden im Prozess von der Primärabsaugung erfasst. Dabei verringern sich die Temperaturen und Verbindungen, die aus der Flüssigphase verdampft sind, kondensieren und erstarren wieder. Sie werden als Staub mit dem Abgasstrom weiter transportiert. Es werden drei Mechanismen der Staubbildung des Sauerstoffblaskonverters beschrieben (vgl. Schürmann et al. 1995):

- die Gasbildung aufgrund der hohen Temperaturen,
- die mechanische Staubbildung beim Zudosieren von Zuschlägen und Schrott und
- die Ausbildung von Blasen und Spritzern durch Badbewegung.

Diese drei Entstehungsmechanismen für Staub sind im Modell abgebildet. Neben der Gasbildung im RQOX wird die mechanische Staubbildung beim Zudosieren von Zuschlägen durch eine Splitter-Grundoperation direkt nach der Zusammenführung der Stoffströme der Zuschläge im Modell simuliert. Weiterhin werden durch Splitter-Grundoperationen geringe Teile der Stoffströme des Stahls und der Schlacke abgetrennt. Dies bildet die Blasen und Spritzer in Folge der Badbewegung ab. Alle Verteilungsfaktoren der Splitter werden während der Modellkalibrierung eingestellt. Dabei wird zunächst anhand des Abgleichs mit den Originaldaten zur Siliziumkonzentration in den Staubfraktionen der Anteil der Schlacke im Staub ermittelt. Im Staub fehlendes Calciumoxid wird durch Anpassen des Anteils der Staubbildung bei der Zudosierung der Zuschläge ausgeglichen, fehlendes Eisen durch Anpassen der als Spritzer abgetrennten Stahlmasse.

Die Erstarrung von Schlacke- und Stahlblasen und -spritzen während der Absaugung wird in der stöchiometrischen Grundoperation RSTLIQSO abgebildet und sämtliche weitere Reaktionen und Phasenwechsel beim Abkühlen des Abgasstromes in der Gleichgewichts-Grundoperation RQOXGAS. Der Staub fällt im tatsächlichen Prozess in zwei Fraktionen an. Grobstaub wird bereits zum Teil im Verdampfungskühler abgeschieden, der restliche Staub im nachgeschalteten Filter. Dies wird mit den Separations-Grundoperationen SEPVACOL (Verdampfungskühler) und SEPFILT (Filter) modelliert. Die jeweiligen Verteilungskoeffizienten für die einzelnen Verbindungen auf die Staubfraktionen werden in der Kalibrierung derart eingestellt, dass die aus Daten des Projektpartners gegebenen mittleren Konzentrationen der Verbindungen in den Staubfraktionen erreicht werden. Grobstaub verlässt das Modell im Stoffstrom VAPCDUST und Feinstaub im Stoffstrom FILTDUST. Angesichts des hohen Abscheidungsgrades der im realen Prozess eingesetzten Filter von über 99,9 % wird im Modell vereinfachend von einer vollständigen Abscheidung ausgegangen.

Weiterhin wird im Fließschemasimulationsmodell die Möglichkeit vorgesehen, einen zu definierenden Anteil des Filterstaubes intern im Kreislauf zu führen. Hierzu kann vor dem Verlassen der Modellgrenze des Stoffstromes FILTDUST über eine Splitter-Grundoperation ein definierbarer Anteil des Stoffstromes abgetrennt werden. In der Praxis werden die Anlagen für eine solche interne Rückführung von Filterstaub beim Projektpartner vorgehalten. Der Staub kann mit Koks brikketiert und wieder dem Konverter zugeführt werden. Die Zugabe von Koks als Kohlenstoffträger ist nötig, da die im Staub enthaltenen Metalle als Oxide vorliegen und im Prozess wieder reduziert werden müssen. Hierzu ist im Modell ein Rechenblock (vgl. Kapitel 3.1.2.3) integriert, der zur Reduktion der im Staub enthaltenen Metalloxide stöchiometrisch die benötigte Masse an Koks hinzufügt. Die Briketts fallen im realen Prozess in das schmelzflüssige Eisen und werden dadurch schlagartig erhitzt, wobei die beschriebene Reduktion stattfindet. Dies wird im Modell in der Grundoperation RQBRIQ berechnet, falls Staub im Kreislauf geführt wird.

Eine solche Kreislaufführung benötigt sowohl für die Reduktionsreaktionen als auch für die Erhitzung der Briketts Energie. Alle im Modell berechneten Energieströme werden zu einer Energiebilanz zusammengefasst. Während der Kalibrierung wird der Mittelwert dieser Energiebilanz ermittelt. Dieser wird dann

in Form einer Auslegungsvorschrift in das Modell integriert. Hiermit kann später während eines Modelldurchlaufes die Masse des Kühlschrotts so angepasst werden, dass wieder dieselbe Energiebilanz erreicht wird.

Ferner wird dem Prozess magnesiumoxidhaltiger Dolomitkalk zugeschlagen, um das Feuerfestmaterial zu schonen. In das Modell ist daher ein Rechenblock integriert, der die Dolomitkalkmasse so anpasst, dass der Mittelwert der Magnesiumoxdikonzentration der Daten der Kalibrierung eingehalten wird. Auf dieselbe Art wird auch der Kalkzuschlag so eingestellt, dass immer die während der Kalibrierung berechnete mittlere Zielbasizität des Prozesses eingehalten wird.

4.1.4 Einsatz der Simulation zur Berechnung von benötigten Prozessausgangsgrößen bei unabhängiger Variation relevanter Prozesseingangsgrößen

Nach der Kalibrierung der Fließschemasimulationsmodelle werden diese verwendet, um mathematische Zusammenhänge zwischen Ausgangsgrößen wie Massen an Produkten, Kuppelprodukten, benötigten Mengen an Zuschlägen, Reduktionsmittel und Energie, und den Eingangsmassenströmen zu ermitteln. Dies erfolgt durch die in Abschnitt 3.2 beschriebene multiple lineare Regression. Im Folgenden wird zunächst dargestellt, wie die Fließschemasimulationsmodelle und die multiple lineare Regression zusammen eingesetzt werden, um die Transformationsfunktionen zu bestimmen (Abschnitt 4.1.4.1.). Anschließend wird auf die Bestimmung der Transformationsfunktionen für die Sinteranlage, den Hochofen sowie den Konverter des betrachteten integrierten Hüttenwerkes eingegangen (Abschnitte 4.1.4.2-4.1.4.4).

4.1.4.1 Vorgehen zur Bestimmung der Transformationsfunktionen durch Kombination von Fließschemasimulation und multipler linearer Regression

Die Regressionsanalyse wird eingesetzt, um eine Prozessausgangsinformation y_i , wie z. B. einen Massenstrom einer Verbindung in einem ausgehenden Stoffstrom oder den Koks- oder Energieverbrauch eines Prozesses in Abhängigkeit der Eingangsinformationen x_j , wie z. B. Massenströme relevanter Verbindungen in den eingehenden Stoffströmen, zu berechnen. Der Index i bezeichnet dabei

die jeweils zu berechnende Ausgangsinformation (Regressand) und der Index j die Eingangsinformation (Regressor).

Um die für die Regression benötigten Datenreihen zu erzeugen, werden Durchläufe mit den Fließschemasimulationsmodellen durchgeführt. Hierbei werden die Regressoren x_j systematisch und unabhängig voneinander variiert und dabei für jeden Variationsschritt als Modellausgangsinformationen die zugehörigen Werte für die Regressanden y_j berechnet.

Die Anzahl der Variationsschritte v_j , der Startwert und der Abstand zwischen den Schritten für einen Regressoren x_j wird in Abhängigkeit der erhobenen Originaldaten und des Prozessverhaltens festgelegt. Der Wert des ersten und letzten Variationsschrittes wird meistens als 0,1 bzw. 0,9 Quantil der Wertebereiche der Originaldaten gewählt. In Fällen, in denen mit dem Modell Wertebereiche außerhalb der Originaldaten berechnet werden sollen, werden entsprechende größere Wertebereiche gewählt. Allerdings ist anzumerken, dass mit größerer Abweichung des betrachteten Wertebereichs von dem in der Kalibrierung, die gesicherte Abbildungsgenauigkeit des Modells sinkt. Es werden aber keine Werte gewählt, die um mehr als 10 % von dem Wertebereich der Originaldaten abweichen.

Die Anzahl der Variationsschritte wird nach der mit dem Modell zu untersuchenden Fragestellung und dem während der Kalibrierung beobachteten Modellverhalten zwischen 2 und 5 gewählt. Wird bei der Kalibrierung beobachtet, dass das Modellverhalten stark von linearen Zusammenhängen abweicht und damit die zu berechnenden Größen wesentlich beeinflusst, werden mehr Variationsschritte gewählt (vgl. Abbildung 17).

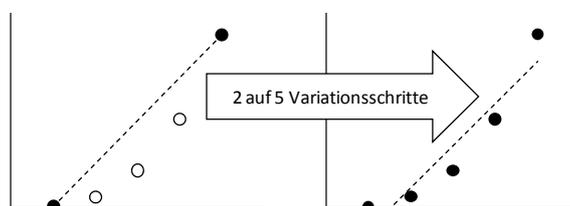


Abbildung 17: Verbesserung der Abbildungsgenauigkeit durch Erhöhung der Anzahl der Variationsschritte

Dabei ist zu beachten, dass sich die Anzahl der benötigten Rechendurchläufe mit dem Fließschemasimulationsmodell D aus der Anzahl J der variierten Regressoren x_j und den Variationsschritten je Regressor v_j ergibt:

$$(17) \quad D = \prod_{j=1}^J v_j$$

In Anbetracht der Lösungsgeschwindigkeit der Fließschemasimulationsmodelle zwischen mehreren Sekunden und mehreren Minuten ist somit die Anzahl der Regressoren und Variationsschritte eingeschränkt. Bei einem Modell, das 5 Minuten zur Berechnung benötigt und in dem 10 unterschiedliche Regressoren berücksichtigt werden, ergibt sich bereits bei zwei Variationsschritten je Regressor die Gesamtrechenzeit zu $5 \text{ min} \cdot 2^{10} = 5.210 \text{ min} = 85,3 \text{ h}$.

Zur Veranschaulichung des Prinzips der systematischen, unabhängigen Variation zeigt Tabelle 1 ein Beispiel einer systematischen unabhängigen Variation von J Regressoren, beginnend mit dem eingehenden Massenstrom von x_1 Fe_2O_3 und x_2 ZnO . Variiert wird dabei in zwei Schritten für Fe_2O_3 zwischen 321 t/h und 341 t/h und ZnO zwischen 0,043 t/h und 0,0625 t/h.

Tabelle 1: Beispiel einer systematischen, unabhängigen Variation von J Regressanden in zwei Schritten

Rechen- durchlauf (d) \ Regressor x_j	Fe_2O_3 [t/h]	ZnO [t/h]	...	J
1	321	0,043	...	
2	341	0,043	...	
3	321	0,0625	...	
4	341	0,0625	...	
...	
D				

Aus den so erzeugten Datenreihen lassen sich, wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, Transformationsfunktionen für den Regressanden y_i ggf. in Abhängigkeit eines Absolutgliedes $\beta_{i,0}$ der Regressionskoeffizienten $\beta_{i,j}$ und der Regressoren x_j aufstellen:

$$(18) \quad y_i = \beta_{i,0} + \sum_j \beta_{i,j} \cdot x_j \quad \forall i = \{1, \dots, I\}, j = \{1, \dots, J\}$$

Das Absolutglied und die Regressionskoeffizienten werden durch multiple lineare Regression ermittelt. Hierzu wird die PROC REC Funktion der Software SAS in Version 9.2 eingesetzt. Die in der Regression genutzten Datenreihen werden einer Vorauswahl unterzogen. Datenreihen von Regressoren, die in der Aus-

wertung der Kalibrierung schlecht mit den Originaldaten übereinstimmen und die nur einen geringen Einfluss auf den Regressanden haben, werden nicht berücksichtigt. So ist bspw. aus der Kalibrierung des Konvertermodells bekannt, dass die Modellierung des Verhaltens der Alkalien aufgrund fehlender Originaldaten nur schlecht verifiziert werden kann. Weiterhin haben die Massenströme der Alkalien einen vernachlässigbaren Einfluss auf viele Modellergebnisse, wie z. B. die Masse des erzeugten Rohstahls oder der Schlacke. Weiterhin wird die STEPWISE-Funktion von SAS genutzt, um Regressoren mit einem nur sehr geringen Beitrag für die Beschreibung eines Regressanden zu eliminieren. Diese Heuristik fügt sukzessive zusätzliche Regressoren hinzu bzw. entfernt bereits im Regressionsmodell enthaltene Regressoren, wobei zur Entscheidung das Bestimmtheitsmaß R^2 verwendet wird. Ist R^2 größer als 0,15 wird der entsprechende Regressor nicht einbezogen bzw. ein bereits berücksichtigter Regressor wieder entfernt.

Die Korrelation zwischen den mit der Fließschemasimulation berechneten Datenreihen und den sich aus den Transformationsfunktionen ergebenden Daten wurde für mehrere Transformationsfunktionen überprüft. Der Korrelationskoeffizient liegt in der Regel über $r = 0,99$, der schlechteste ermittelte Koeffizient lag bei $r = 0,97$. Als Einschränkung erhalten bleibt aber die Tatsache, dass nicht-lineare Vorgänge linear approximiert werden. Die Transformationsfunktionen können daher nur für den engen Wertebereich der Daten des bestimmungsgemäßen Betriebs der betrachteten Anlagen genutzt werden.

4.1.4.2 Sinteranlage

Bei der Berechnung der Datengrundlage für die Erstellung der Transformationsfunktionen für die Sinteranlage des integrierten Hüttenwerkes werden die eingehenden Massenströme von neun Verbindungen variiert. Um die Anzahl der variierten Verbindungen gering zu halten, wird je betrachtetem Element nur eine Verbindung variiert und dabei vereinfachend angenommen, dass die Gesamtmasse des Elementes nur in dieser Verbindung (Hauptverbindung) vorliegt. Da auf Basis der Elementmassen gearbeitet wird, werden hiermit die Massen des betrachteten Elementes, die in anderen Verbindungen vorliegen, in die berücksichtigte Hauptverbindung umgerechnet.

Eisen ist das von der Masse wichtigste Element im Hüttenwerk. Da Eisen in den meisten Erzen als Hämatit (Fe_2O_3) vorliegt und der Großteil des Eisens über das Erz in die Sinteranlage gelangt, wird die Konzentration des Hämatits zur Berechnung der Transformationsfunktionen variiert. Zink wird betrachtet, da es in Reststoffen, vor allem Stäuben und Schlämmen der Abgasreinigungsanlagen, deren Betrachtung der Hauptgegenstand dieses Projektes ist, akkumuliert. Zusätzlich verdampft Zink in den meisten pyrometallurgischen Prozessen und beeinflusst durch die benötigte Verdampfungsenthalpie die Energiebilanz der Prozesse. Es liegt vor allem als ZnO vor. Calcium, Silizium und Magnesium beeinflussen die Basizität der Prozesse. Ihre Konzentrationen bestimmen somit die Masse zuzuführender Zuschläge. Alle drei Elemente liegen hauptsächlich als Oxide vor. Blei und die Alkalien Kalium und Natrium verhalten sich ähnlich wie Zink. Chlor bildet mit vielen Metallen Chloride, die in pyrometallurgischen Prozessen ebenfalls verdampfen und in Stäuben und Schlämmen der Abgasbehandlung akkumulieren. Von allen möglichen Chloriden hat Kaliumchlorid die geringste Gibb'sche freie Energie, weshalb es im Gleichgewicht am ehesten gebildet wird. Daher wird als Chlorid Kaliumchlorid variiert, wobei die Kaliumkonzentration im Kaliumchlorid von der Kaliumkonzentration, die als Oxid eingeht, abgezogen wird. Die Konzentrationen von Manganoxid, Phosphorpentoxid, Aluminiumoxid und Kupferoxid gehen ebenfalls als Eingangsdaten ein, werden jedoch nicht unabhängig voneinander variiert. Diese vier Verbindungen sind im Parameter „Rest“ zusammengefasst.

Bei der Kalibrierung des Modells der Sinteranlage werden vergleichsweise konstante Verteilungen der Elemente auf die Stoffströme Sinter und Staub beobachtet. Wird die Masse einer Verbindung erhöht, so erhöht sich ihr Anteil im Sinter und Staub im betrachteten Betriebsbereich in der Regel im gleichen Verhältnis. Hiervon weichen die Chloride ab, sie haben jedoch aufgrund der geringen Konzentrationen nur einen eingeschränkten Einfluss auf den Prozess. Daher werden die Massenströme aller Verbindungen in zwei Schritten variiert. Lediglich beim Zinkoxid werden drei Schritte berechnet, da Zink in Hinblick auf externe Verwertungsoptionen und auch auf den Zinkkreislauf im Hochofen eine besondere Bedeutung hat. Alle variierten Massenströme eingehender Verbindungen und die Anzahl der Variationsschritte zeigt Tabelle 2.

Tabelle 2: Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für die Sinteranlage des integrierten Hüttenwerkes

x_j	Fe ₂ O ₃	ZnO	CaO	SiO ₂	MgO	PbO	K ₂ O	Na ₂ O	KCl	Rest
Variationsschritte v_j	2	3	2	2	2	2	2	2	2	2
Anz. Modelldurchläufe D	1.536									

Aus der Anzahl der betrachteten Verbindungen und ihrer Variationsschritte ergibt sich eine Gesamtanzahl an Fließschemasimulationsmodellläufen von 1.536. Bei allen Durchläufen werden der Luftstrom im Modell und die Temperaturen der Grundoperationen R11 bis R33 und CSTR11 bis CSTR33 konstant gehalten. Aus den erzeugten Datenreihen werden mit SAS durch multiple lineare Regression die für die Transformationsfunktionen benötigten Regressionskoeffizienten bestimmt. Es werden für folgende Regressanden Transformationsfunktionen berechnet:

- Gesamtmasse und Konzentrationen folgender Verbindungen des Sinters: Fe₃O₄, ZnO, CaO, SiO₂, MgO, PbO, K₂O, Na₂O, KCl, Rest,
- Gesamtmasse des Staubes,
- Verbräuche von Kalk und Koks und
- CO₂-Emissionen.

4.1.4.3 Hochofen

Für den Hochofen gelten bezüglich der Verteilung der in den eingehenden Verbindungen enthaltenen Elemente auf die ausgehenden Stoffströme Roheisen, Schlacke, Gichtstaub und Gichtschlamm ähnliche Annahmen wie für die Sinteranlage. Aus diesem Grund werden die Liste der variierten Verbindungen und die Anzahl der Variationsschritte je Verbindung im Wesentlichen übernommen. Lediglich für Eisen wird angenommen, dass es während des Sinterprozesses zu einer partiellen Reduktion kommt, weshalb hier Magnetit (Fe₃O₄) als eingehende Hauptverbindung gewählt wird. Zusätzlich zu den in Tabelle 2 für die Sinteranlage aufgeführten Verbindungen wird die eingehende Konzentration an Schwefel variiert, da Szenarien betrachtet werden, in denen Reststoffe aus dem Hochofen im DK-Prozess verwertet werden und hier die eingehende Schwefelkonzentration einen Einfluss auf die Abgasreinigung der Sinteranlage hat (vgl. Abschnitt 4.2.3.1). Tabelle 3 zeigt zusammenfassend die zur Ermittlung der

Transformationsfunktionen variierten Datenreihen und die gewählte Anzahl an Variationsschritten je Verbindung.

Tabelle 3: Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für den Hochofen des integrierten Hüttenwerkes

x_j	Fe ₃ O ₄	ZnO	CaO	SiO ₂	MgO	PbO	K ₂ O	Na ₂ O	KCl	S	Rest
Variationsschritte v_j	2	3	2	2	2	2	2	2	2	2	2
Anz. Modelldurchläufe D	3.072										

Aus der Anzahl der variierten Verbindungen und der Variationsschritte ergibt sich, dass für das Hochofenmodell 3.072 Rechendurchläufe notwendig sind, um die für die multiple lineare Regression benötigten Daten zu berechnen. In allen Rechendurchläufen werden die Heißwindtemperatur, der Heißwindsauerstoffgehalt und der Heißwindvolumenstrom sowie der eingeblasene Kohlenstaub, die zugeschlagenen Olivin- und Bauxitmassen und das Temperatur- sowie Druckprofil konstant gehalten.

Für folgende Regressanden y_i werden mittels aus den Datenreihen der Fließschemasimulation die Regressionskoeffizienten berechnet und die sich daraus ergebenden Transformationsfunktionen ermittelt:

- Gesamtmasse und Konzentrationen folgender Inhaltstoffe des Roheisens: Fe, C, Si, Rest,
- Gesamtmasse der Schlacke,
- Gesamtmasse und Konzentrationen folgender Inhaltstoffe des Gichtstaubes: Fe₃O₄, ZnO, CaO, SiO₂, MgO, PbO, K₂O, Na₂O, KCl, C, S, Rest und
- Gesamtmasse und Konzentrationen folgender Inhaltstoffe des Gichtschlammes: Fe₃O₄, ZnO, CaO, SiO₂, MgO, PbO, K₂O, Na₂O, KCl, C, S, Rest.

4.1.4.4 Konverter

Wie bereits beschrieben, enthält das Roheisen neben dem Element Eisen noch weitere gelöste Elemente, von denen hier Kohlenstoff und Silizium sowie von im Massenstrom „Rest“ betrachteten Elementen Mangan variiert werden. Zusätzlich werden Änderungen des Prozesses und der ausgehenden Stoffströme betrachtet, wenn Filterstaub intern im Kreislauf geführt wird. Da somit im Vergleich zur Sinteranlage und zum Hochofen weniger eingehende Größen zu variieren sind, kann die Anzahl der berechneten Variationsschritte erhöht werden.

Dies ist wichtig, da sich, vor allem durch die interne Kreislaufführung, deutlich vom linearen Verhalten abweichende ausgehende Massenströme für die in den Staubfraktionen enthaltenen Verbindungen ergeben. Die Rückführrate wird dabei mit einer Schrittweite von 10 Prozentpunkten zwischen 0 % und 50 % variiert. Die variierten Eingangsgrößen und die Anzahl der Variationsschritte zeigt Tabelle 4.

Tabelle 4: Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für den Konverter des integrierten Hüttenwerkes

x_j	Rückführrate	C	Fe	Si	Mn
Variationsschritte v_j	6	3	7	3	2
Anz. Modelldurchläufe D	756				

Aus der Anzahl der variierten Eingangsgrößen und der Variationsschritte ergibt sich eine Anzahl von zu berechnenden Modelldurchläufen von 756. Während der Modelldurchläufe werden die Blaszeit, die Menge an eingeblasenem Sauerstoff, die Masse an zugeschlagenem FeSi und das Temperaturprofil der Grundoperationen konstant gehalten.

Für folgende Regressanden werden Transformationsfunktionen berechnet:

- Gesamtmasse und Konzentration von Fe und Zn im Stahl,
- Gesamtmasse und Konzentration von Fe_2O_3 , ZnO, CaO, SiO_2 , MgO, K_2O , Na_2O , PbO, Rest in der Schlacke,
- Gesamtmasse und Konzentration von Fe_3O_4 , ZnO, CaO, SiO_2 , MgO, KCl, NaCl, PbO im Filterstaub,
- Gesamtmasse und Konzentration von Fe_3O_4 , ZnO, CaO, SiO_2 , MgO, KCl, NaCl, PbO im Verdampfungskühlerstaub,
- Verbräuche von Kühlschrott, Kalk, Dolomitkalk und Koks sowie
- Emissionen von CO_2 .

4.2 Simulation der Roheisenerzeugung und Verwertung von Reststoffen mit geringen Zinkkonzentrationen im DK-Prozess

Bei den Prozessschritten des DK-Prozesses handelt es sich um eine Kombination aus Rohstoffvorbereitung mit Sinteranlage und einem Hochofen. Im Unterschied zum integrierten Hüttenwerk werden im DK-Prozess jedoch eisenhaltige, oxidische Reststoffe, vorrangig aus der Eisen- und Stahlindustrie, mit einem für den Hochofenprozess zu hohem Zinkanteil verwertet. Der Zinkeintrag in den Hochofen der DK liegt um mehr als den Faktor 200 über dem des in den vorangegangenen Kapiteln beschriebenen Hochofens des integrierten Hüttenwerkes. Im DK-Prozess werden neben zusätzlichem Erz vor allem die Reststoffe Konverterstäube und -schlämme, Walzzunder und Abbrand sowie Gichtschlämme und -stäube eingesetzt (vgl. Hillmann & Sassen, 2006). Eine detaillierte Prozessbeschreibung wie auch eine Beschreibung der Erstellung der hier als Grundlage genutzten Fließschemasimulationsmodelle der Sinteranlage und des Hochofens finden sich in Rentz et al. (2006)¹⁴.

4.2.1 Beschreibung der eingesetzten Prozesse und wesentlicher Stoff- und Energieströme

Die als Einsatzstoffe dienenden oxidischen Reststoffe und Erz werden bei der DK aus verschiedenen Bunkern direkt über Mischer gemischt. Dies ermöglicht auch die Behandlung von Stoffen, die aufgrund ihrer Korngrößenverteilung beim Mischbettverfahren kaum bzw. nicht genutzt werden können. Im Unterschied zum in Abschnitt 4.1 beschriebenen Hochofenprozess des integrierten Hüttenwerkes wird der Hochofen der DK mit einer Basizität im sauren Bereich betrieben. Da die meisten eingesetzten Reststoffe im basischen Bereich liegen, wird als Zuschlag Altsand genutzt. Zum Betreiben des Sinterprozesses wird Koksgrus zugemischt. Die vermischten Eingangsstoffe werden unter Zugabe von Wasser pelletiert (vgl. Abbildung 18). Da in der Einsatzstoffvorbereitung keine wesentlichen Stoffumwandlungen stattfinden und da der Stoffstrom der Pellets als direkter Eingangsstoffstrom zur Sinteranlage kontinuierlich gemessen sowie täglich beprobt und analysiert wird, ist im Weiteren eine Betrachtung der Sinteranlage und des Hochofens ausreichend.

¹⁴ Falls nicht anders dargestellt, sind alle hier dargestellten Informationen aus Rentz et al. 2006 entnommen.

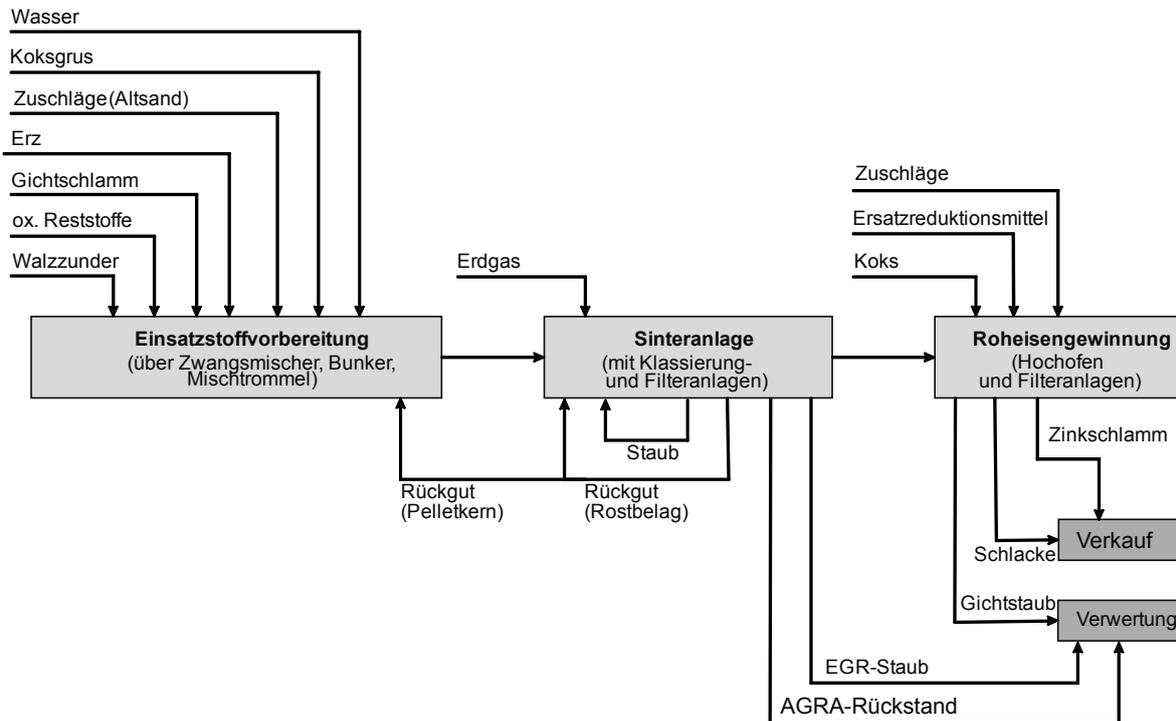


Abbildung 18: Stoffströme im DK-Prozess

4.2.1.1 Rohstoffbereitstellung über die Sinteranlage

In der Sinteranlage werden die Pellets aus der Einsatzstoffvorbereitung auf das Sinterband gegeben, gesintert und mittels eines Stachelbrechers zerkleinert. Unterkorn wird wieder auf die Sinteranlage zurückgeführt und als Sinterbandauflage und Pelletkern eingesetzt, Überkorn nochmal zerkleinert. Hierbei entstehender Staub wird ebenfalls zurückgeführt.

Die Sinteranlage der DK verfügt über eine mehrstufige Abgasbehandlungsanlage, bestehend aus einer elektrischen Gasreinigung (EGR) zur Vorentstaubung, einer Kalkmilcheindüsung zur Entschwefelung, einer Injektion von Braunkohlstaub zur Bindung von Schwermetallen, Dioxinen und Furanen und einem anschließenden Gewebefilter. Als Staubfraktionen aus der Abgasbehandlung fallen somit EGR-Staub und der AGRA-Rückstand des Gewebefilters an.

In den Stäuben akkumulieren vor allem Blei, Alkalien, Chloride und ein geringer Anteil des Zinks, wohingegen die weiteren Bestandteile der Sinterbandaufgabe im Fertigsinter verbleiben (vgl. Abbildung 19)

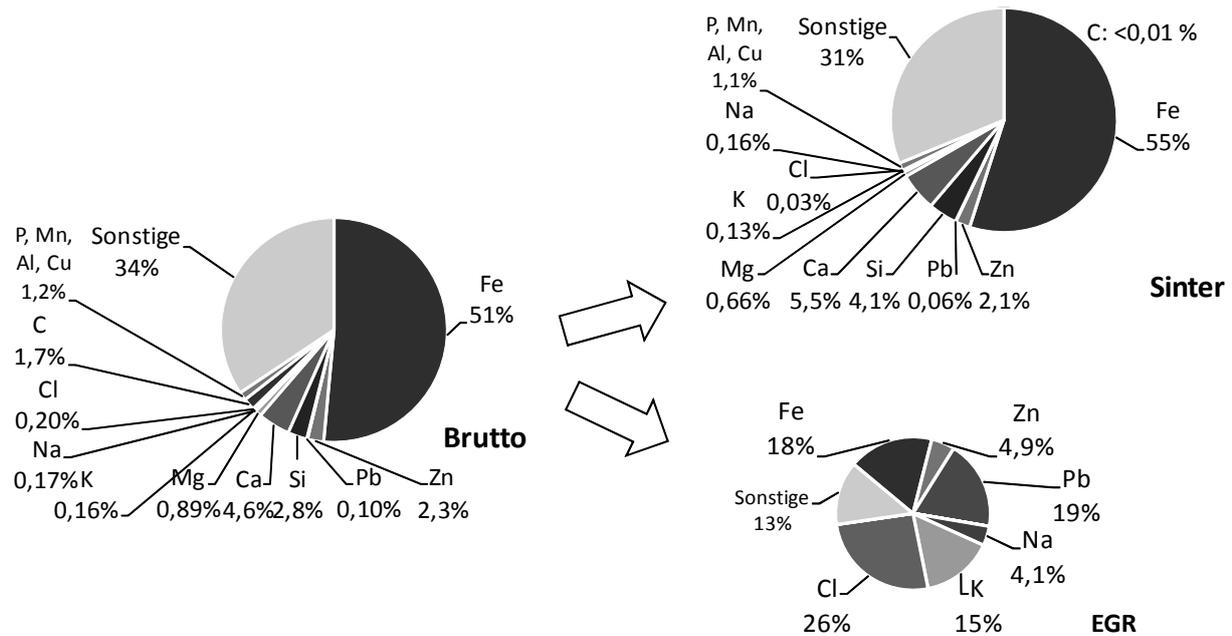


Abbildung 19: Mittlere Zusammensetzung der Sinterbandaufgabe und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Sinter und EGR-Staub (Datenreihe „Sonstige“ enthält Oxid-Sauerstoff; Quelle: Mittelwerte der zur Kalibrierung genutzten Daten der Projektpartner)

4.2.1.2 Roheisenerzeugung im Hochofen

Dem DK-Hochofen wird als Haupteinsatzstoff Fertigsinter der Sinteranlage zugeführt (vgl. Abbildung 18). Weiterhin werden als Eisenträger in geringen Mengen Kreislaufschratt, Separationseisen und Batterien eingesetzt. Als Zuschlag wird Kies und als Reduktionsmittel wird Hochofenkoks über die Gicht zudosiert. Als Prozessluft wird sauerstoffreicherer Heißwind über die Blasformen zugegeben. Ebenfalls auf Höhe der Blasformen kann Ersatzreduktionsmittel eingeblasen werden.

Mit dem Hauptprodukt Roheisen wird Hochofenschlacke als Nebenprodukt abgestochen. Das staubbeladene Gichtgas wird zweistufig in einem Zyklon von Grobstaub (Gichtstaub) und einem Hordenwäscher sowie einem Theisenwäscher vom Feinstaub (Gichtschlamm) gereinigt. Aufgrund der Akkumulation von Zink in den Stäuben, vor allem von Feinstaub und des sehr hohen Zinkeintrags in den Hochofen, handelt es sich beim Gichtschlamm um ein mit ca. 65 Gew.-% sehr zinkreiches Konzentrat, welches als Sekundärrohstoff in der Zinkindustrie eingesetzt wird. Das gereinigte Gichtgas enthält weiterhin einen hohen Kohlenmonoxidanteil. Dieser wird als Brennstoff im hauseigenen Kraftwerk zur Stromerzeugung verwendet. Die Zusammensetzung der Einsatzstoffe

und die Verteilung der darin enthaltenen chemischen Elemente auf die ausgehenden Stoffströme des Hochofens zeigt Abbildung 20.

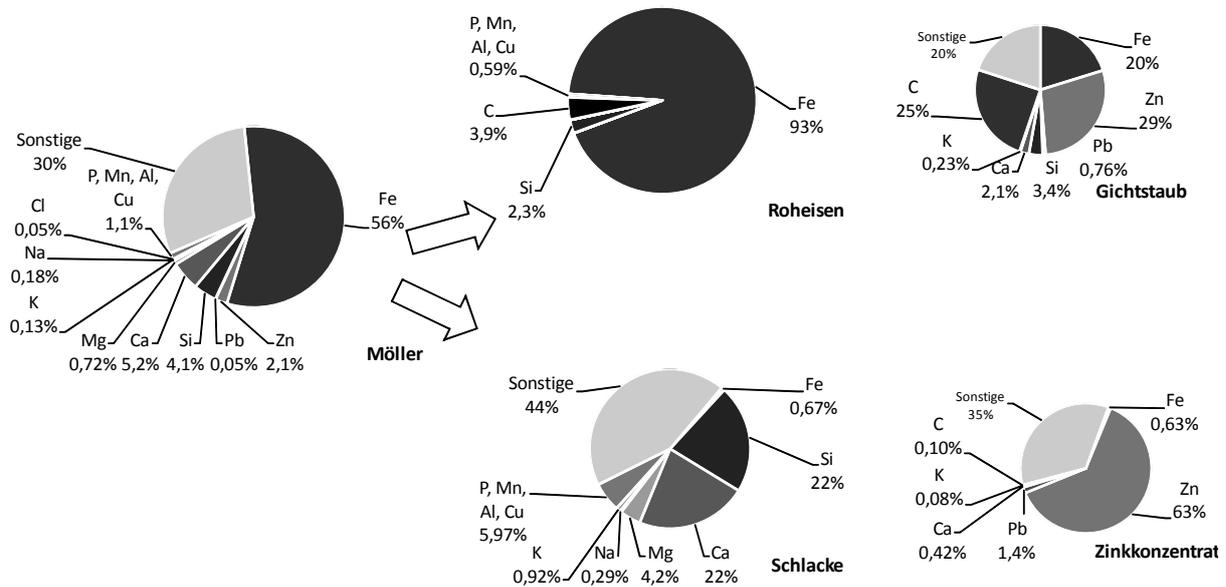


Abbildung 20: Mittlere Zusammensetzung des Möllers und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Roheisen, Schlacke, Gichtstaub und Zinkkonzentrat (Datenerreihe „Sonstige“ enthält Oxid-Sauerstoff; Quelle: Mittelwerte der zur Kalibrierung genutzten Daten der Projektpartner).

4.2.2 Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung

Wie bereits in Abschnitt 4.1.3.2 beschrieben, stellt gerade Zink üblicherweise im Hochofenprozess einen Störstoff dar, dessen Konzentration im integrierten Hüttenwerk daher nach Möglichkeit gering gehalten wird. Im DK-Prozess ist Zink hingegen ein wichtiges Kuppelprodukt. Das Betreiben des Prozesses mit vergleichsweise hohen Zinkkonzentrationen wird neben einigen Besonderheiten in der Prozessfahrweise durch einen hohen Aufwand zur Datenerhebung und Qualitätskontrolle aller wichtigen Stoffströme und Prozessparameter ermöglicht (vgl. hierzu auch Hillmann & Hauck, 2007). Aus diesem Grund liegen bei der DK bis auf wenige Ausnahmen alle zur Modellierung der Prozesse benötigten Daten vor.

4.2.2.1 Rohstoffbereitstellung über Sinteranlage

Als Grundlage der Modellierung der Sinteranlage werden seitens des Projektpartners folgende Daten bereitgestellt:

- Massenströme und Zusammensetzung der Sinterbandaufgabe,
- Massenströme und mittlere Zusammensetzung des Koksgrus,
- Massenströme und Zusammensetzung des Fertigsinters und

- Zusammensetzung des Staubes der elektrischen Gasreinigung.

Bei der eingehenden Sinterbandaufgabe und dem Fertigsinter muss beachtet werden, dass die Probenahmen für die chemischen Analysen und der Massenmessung nicht an denselben Orten in der Anlage erfolgt. Während die chemischen Analysen das Rückgut mit erfassen, ist dies in der Massenmessung nicht enthalten.

4.2.2.2 Roheisenerzeugung im Hochofen

Für die Abbildung des Hochofens werden durch den Industriepartner folgende Daten bereitgestellt:

- Masse und Zusammensetzung des eingesetzten Fertigsinters,
- Masse eingesetzter zusätzlicher Eisenträger (z. B. Kreislaufschrött, Separationseisen und Batterien),
- Masse zugeschlagenen Kieses,
- Masse zugegebenen Kokes und Ersatzreduktionsmittels,
- Volumenstrom, Druck, Temperatur und Sauerstoffgehalt des Windes,
- Masse und Zusammensetzung des Roheisens,
- Masse und Zusammensetzung der Schlacke,
- Masse und Zusammensetzung des Gichtstaubes,
- Masse und Zusammensetzung des Zinkkonzentrats,
- Volumenstrom, Druck, Temperatur, Konzentration von CO, CO₂, H₂ des Gichtgases und
- erzeugte Energie im Kraftwerk.

Somit liegen für alle relevanten ein- und ausgehenden Stoff- und Energieströme Daten vor. Für die Zusammensetzung der zusätzlichen Eisenträger, des Kieses, des Kokes und des Ersatzreduktionsmittels wird mit konstanten Mittelwerten gerechnet, da hier keine tagesgenauen Analysen vorliegen. Da die Zusammensetzung dieser Stoffe nur wenig schwankt und die Massen im Vergleich zum Fertigsinter gering sind, wird dadurch keine wesentliche Minderung der Datenqualität erwartet.

4.2.3 Erstellung und Kalibrierung der Modelle zur Fließschemasimulation

Die Fließschemasimulationsmodelle der Sinteranlage wie auch des Hochofens basieren, wie auch die in Abschnitt 4.1.3.1 und Abschnitt 4.1.3.2 für die Abbildung der entsprechenden Prozesse des integrierten Hüttenwerkes eingesetzten Modelle, auf den Modellen, die in Rentz et al (2006) beschrieben sind. Daher wird im Folgenden nur auf die Unterschiede zu den Modellen in Abschnitt 4.1.3.1 und Abschnitt 4.1.3.2 eingegangen. Die grundsätzliche Abbildung der Reaktionszonen der Prozesse ist bereits in den genannten vorangehenden Abschnitten dargestellt.

4.2.3.1 Sinteranlage

Das Fließschemasimulationsmodell der Sinteranlage bildet durch die grundlegende Struktur einer Anordnung der Grundoperationen in drei Zeilen und drei Spalten das Fortschreiten der Durchbrennzone im Sinterband und die sich unter der Durchbrennzone befindliche Aufwärmzone bzw. die darüber liegende Abkühlzone ab (vgl. Abschnitt 4.1.3.1).

Im Vergleich zur Sinteranlage des integrierten Hüttenwerkes ist für den DK-Prozess die aufgrund des Einsatzes von Reststoffen notwendige, aufwändigere Abgasreinigung zu berücksichtigen. Weiterhin können aufgrund der guten Datenlage Vorgänge im Modell berechnet werden, die den Oxidationsgrad des Sinters verändern.

Der Besonderheit, dass Massenstrommesseinrichtungen für die Sinterbandaufgabe und den Fertigsinter und der Ort der Probenahme für die chemische Analyse nicht übereinstimmen, wird dadurch begegnet, dass die Rückführung des Rückguts durch einen Kreislaufstrom im Modell abgebildet wird. Das dem Modell zugrunde liegende Fließschema zeigt Abbildung 21.

In den im Modellbereich *Cooling Belt* dargestellten Grundoperationen werden Umwandlungen, die den Oxidationsgrad des Eisens betreffen, abgebildet. Beim Sinterband der DK wird das letzte Drittel des Bandes als Abkühlband genutzt. Die Durchbrennzone hat den Rost bereits erreicht und die durch den fertigen Sinter gesogene Luft kühlt den Sinter ab. Im Fließschemasimulationsmodell wird dies durch die Grundoperation COOLER abgebildet. Danach wird mittels

einer Splitter-Grundoperation das Rückgut abgetrennt und der Stoffstrom wieder der Sinterbandaufgabe zugemischt. Das Abtrennverhältnis ist nach dem Mittelwert des im Originalprozess gemessenen Rückgutstoffstroms eingestellt.

Für den verbleibenden Fertigsinter soll im Modell der richtige Oxidationsgrad des Eisens eingestellt werden. Dieser kann in den im Modell eingesetzten Gleichgewichts-Grundoperationen R11 – R33 nicht realistisch berechnet werden, da das Gleichgewicht in der Realität nicht erreicht wird. Im Fließschemasimulationsmodell werden daher zwei stöchiometrische Grundoperationen abgebildet. In der Grundoperation OX wird zunächst der im vorangehenden Modellteil gebildete Wüstite wieder oxidiert, was den realen Bedingungen beim Abkühlen mit Luft entspricht. Der Oxidationsgrad wird dann in der Grundoperation RED eingestellt. Hierzu wird ein Teil des Hämatits im Fertigsinter zu Magnetit reduziert. Dazu wird bereits in Rentz et al. 2006 der funktionelle Zusammenhang zwischen Temperatur der Durchbrennzone und Oxidationsgrad aus Betriebsdaten ermittelt. Entsprechend wird der Umwandlungsgrad im Modell durch eine Auslegungsvorschrift eingestellt.

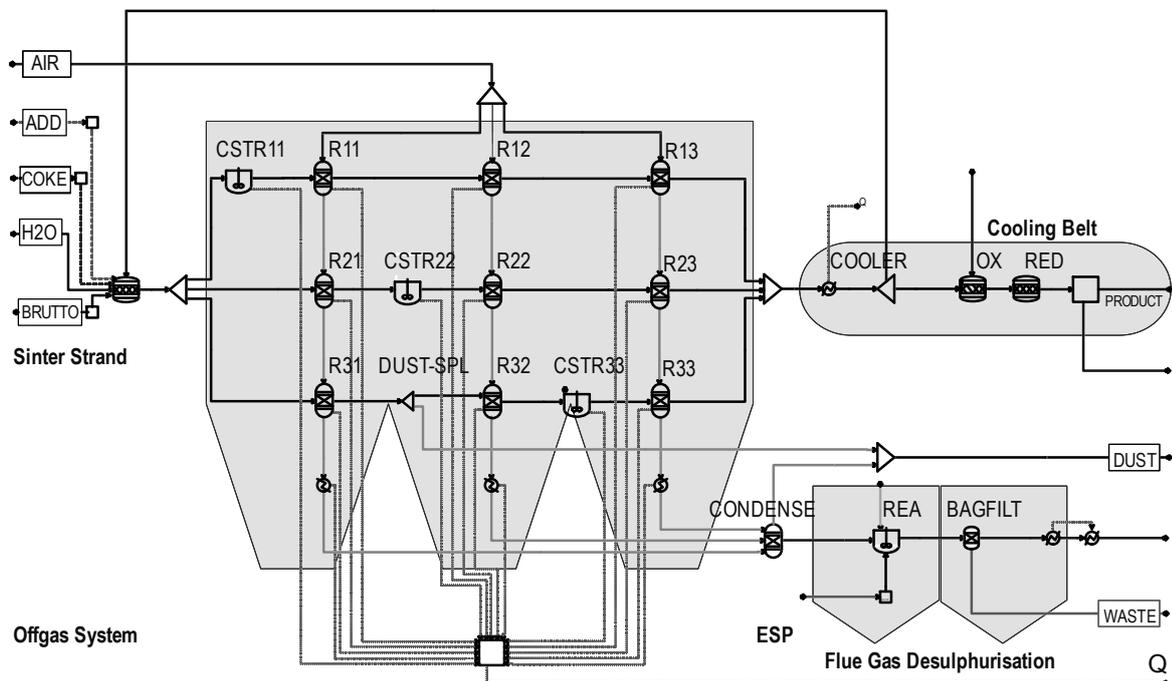


Abbildung 21: Fließschemasimulationsmodell der Sinteranlage des DK-Prozesses

Die zusätzliche Entschwefelungsstufe der Abgasbehandlung ist durch die Grundoperationen REA und BAGFILT im Modell abgebildet. In Rentz et al. 2006 werden kinetische Parameter zur Reaktion von Kalkmilch mit Schwefeldioxid

(SO₂) aus den Betriebsdaten abgeleitet. Diese sind in der kinetischen Grundoperation REA hinterlegt. Mittels einer Auslegungsvorschrift wird im Fließschemasimulationsmodell der Kalkmilchmassenstrom so angepasst, dass der Grenzwert der Anlage für SO₂ eingehalten wird. Somit kann das Modell den Kalkmilchverbrauch in Abhängigkeit der Abgaszusammensetzung berechnen. Feste und flüssige Verbindungen werden dann in der Separations-Grundoperation BAGFILT abgetrennt und bilden den AGRA-Rückstand der zweiten Filterstufe ab (Stoffstrom WASTE).

Weiterhin muss mit dem Modell der Koksgrus- und Sandverbrauch der Sinteranlage berechnet werden. Der Sandverbrauch wird mittels einer Auslegungsvorschrift ermittelt, die den Massenstrom so einstellt, dass die mittlere Basizität der beim Industriepartner erhobenen Daten zum Fertigsinter erreicht wird.

Aus den Daten des Projektpartners ist der Koksgrusverbrauch bekannt. Hieraus wird während der Kalibrierung für jeden Datensatz die Temperatur der Durchbrennzone ermittelt, in dem alle Energieströme im Modell bilanziert und die Temperatur der Durchbrennzone mittels einer Auslegungsvorschrift so gewählt werden, dass die Energiebilanz ausgeglichen ist. Die Mittelwerte dieser Temperaturen werden dann bei der späteren unabhängigen Variation der Eingangsdaten fest eigenstellt und über eine Auslegungsvorschrift wird dann die benötigte Koksgruszudosierung durch die Energiebilanzierung berechnet.

4.2.3.2 Hochofen

Das Fließschemasimulationsmodell des DK-Hochofens bildet in seiner grundsätzlichen Struktur die Reaktionszonen Vorheizzone, indirekte Reduktionszone und direkte Reduktionszone ab. Jede Zone wird durch eine Gleichgewichts-Grundoperation sowie einem kinetischen Reaktor zur Berechnung der indirekten Magnetitreduktion (vgl. Abschnitt 4.1.3.2) modelliert. Auch die Abbildung des Zinkkreislaufes, die Berechnung des Koksverbrauchs mittels einer Auslegungsvorschrift sowie die Gichtgasreinigung und Trennung zwischen Roheisen und Schlacke folgt dem in Kapitel 4.1.3.2 beschriebenen Konzept.

Wie bereits dargestellt, wird der DK-Hochofen mit einem um den Faktor 200 gegenüber normalen Hochöfen höheren Zinkmassenstrom in den Eingangsstoffen gefahren. Dies wird neben der aufwändigen Prozessüberwachung und -steuerung durch die Ofendimensionen und das Temperaturprofil ermöglicht.

Der DK-Ofen hat einen Gestelldurchmesser von nur 5,5 m und ein Arbeitsvolumen von 580 m³ (vgl. Hillmann und Sassen 2006) und damit gegenüber dem ebenfalls in diesem Projekt betrachteten Hochofen des integrierten Hüttenwerkes einen nahezu halb so großen Gestelldurchmesser und ein mehr als dreimal kleineres Arbeitsvolumen. Zusätzlich ist der DK-Ofen im Verhältnis zum Arbeitsvolumen verhältnismäßig kurz. Der DK-Hochofen hat einen spezifischen Koksverbrauch von ca. 700 kg/t Roheisen, der Ofen des integrierten Hüttenwerkes von nur etwa der Hälfte. Insgesamt führt dies dazu, dass der DK-Hochofen mit ca. 350 °C gegenüber dem Hochofen des integrierten Hüttenwerkes eine erheblich höhere Gichtgastemperatur aufweist. Dies ermöglicht den Austrag von deutlich mehr Zink über das Gichtgas. Im Fließschemasimulationsmodell wird dies durch eine entsprechende Anpassung des Temperatur- und Druckprofils abgebildet.

Weitere Unterschiede bestehen in der Abbildung der Siliziumreduktion im Unterofen und ergeben sich aus der Integration der Winderhitzer (Cowper) und des Kraftwerkes (vgl. Abbildung 22).

Zusätzlich zu den in Abschnitt 4.1.3.2 beschriebenen Aspekten werden von Rentz et al. (2006) die Temperaturabhängigkeit der Siliziumreduktion und der Einfluss des Zinkkreislaufes auf das durchgasbare Volumen in der Zone der indirekten Magnetitreduktion des DK-Hochofens des DK-Prozesses untersucht. Im Hochofenprozess wird zugeführtes Siliziumdioxid nicht vollständig reduziert, weshalb eine Berechnung der Reaktion mittels einer Gleichgewichts-Grundoperation den Vorgang nicht realitätsgetreu abbildet. Vielmehr ist die folgende Reaktion temperaturabhängig:



Höhere Temperaturen verschieben das Gleichgewicht nach rechts. Die Siliziumkonzentration im Roheisen kann also innerhalb gewisser Grenzen durch die Temperatur im Unterofen und somit u. a. durch die Koksudosierung gesteuert werden. Diese Temperaturabhängigkeit der Reaktion wird im Modell durch eine zusätzliche kinetische Grundoperation abgebildet, deren kinetische Parameter von Rentz et al. (2006) auf Basis von Betriebsdaten ermittelt werden.

Weiterhin wird das in der kinetischen Grundoperation CST1 verfügbare Reaktionsvolumen zur indirekten Magnetitreduktion in Abhängigkeit des sich im Zink-

kreislauf befindenden Zinks verringert, um die Kondensation des Zinks an der Möllersäule und die sich daraus ergebende kinetische Hemmung im Modell abzubilden. Hierzu wird der funktionelle Zusammenhang zwischen Geschwindigkeit der Magnetitreduktion und Zinkgehalt von Rentz et al. (2006) aus Betriebsdaten abgeleitet und mittels eines Rechenblocks in das Fließschemasimulationsmodell integriert.

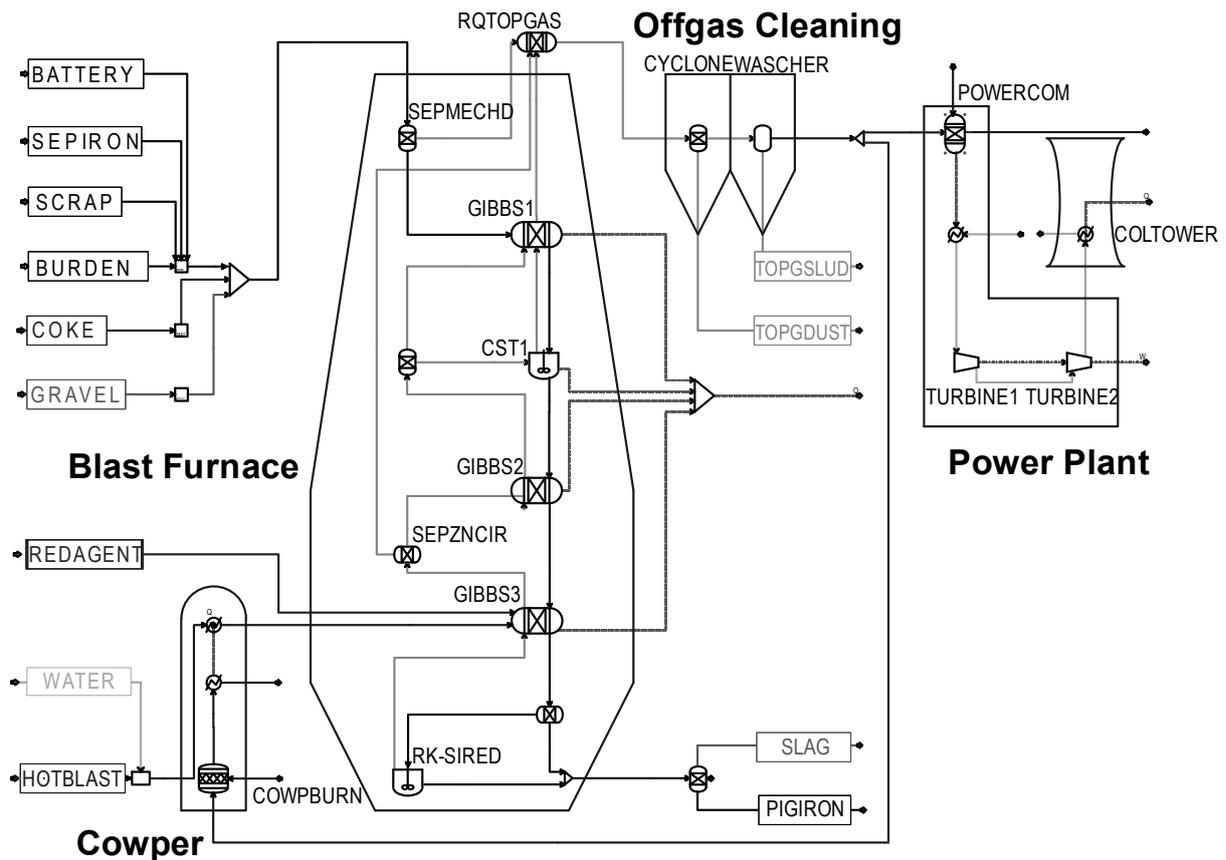


Abbildung 22: Fließschemasimulationsmodell des Hochofens, der Winderhitzer und des Kraftwerkes des DK-Prozesses

Im DK-Prozess wird das Gichtgas zur Winderhitzung in den Cowpern genutzt. Das restliche Gichtgas wird zur Erzeugung elektrischer Energie im Kraftwerk eingesetzt¹⁵. Die Aufteilung des Gichtgases wird im Modell mittels Abbildung der Cowper, einer Auslegungsvorschrift und einer darüber gesteuerten Splitter-Grundoperation berechnet. Die Verbrennung des im Gichtgas enthaltenen CO und H₂ in den Cowpern wird mittels der stöchiometrischen Grundoperation

¹⁵ Dies erfolgt auch im integrierten Hüttenwerk (vgl. Abschnitt 4.1). Hier wird das Brenngas aber über ein hüttenweites Verbundnetz mit mehreren Quellen und Pufferspeichern bereitgestellt, so dass eine Abbildung im Fließschemasimulationsmodell nicht möglich ist.

COWPBURN berechnet. Dieser wird durch einen Rechenblock die stöchiometrisch benötigte Menge an Brennluft zugeführt. Der Volumenstrom an Gichtgas zum Cowper wird so eingestellt, dass genau die zur Erhitzung des Windes benötigte Energie bereitgestellt wird. Das verbleibende Gichtgas wird zu einer Gleichgewichtsgrundreaktion POWERCOM geleitet, wo unter Zudosierung der stöchiometrisch benötigten Luftmenge, wiederum mittels eines Rechenblocks, die Verbrennung im Kraftwerkskessel simuliert wird. Die hierbei freigesetzte Energie wird über eine Erhitzer-Grundoperation auf einen Wasserstoffstrom übertragen, welcher dann in den dampfförmigen Zustand wechselt. Die benötigte Speisewassermasse wird ebenfalls durch einen Rechenblock eingestellt. Der Dampfstrom wird über zwei Turbinen-Grundoperationen entspannt, deren Wirkungsgrad während der Modellkalibrierung so eingestellt wird, dass die tatsächlich erzeugte elektrische Energie bereitgestellt wird. Der Zuschlag von Kies zum DK-Hochofen wird im Modell über eine Auslegungsvorschrift so eingestellt, dass die mittlere Basizität der zur Kalibrierung eingesetzten Daten eingehalten wird.

4.2.4 Einsatz der Simulation zur Berechnung von benötigten Prozessausgangsgrößen bei unabhängiger Variation relevanter Prozesseingangsgrößen

4.2.4.1 Sinteranlage

Wie in Abschnitt 4.1.4 beschrieben, wird das kalibrierte Fließschemasimulationsmodell eingesetzt, um bei unabhängiger Variation der eingehenden Massenströme wesentlicher Verbindungen Datenreihen zu Massen und Zusammensetzungen ausgehender Stoffströme und der Verbräuche an Betriebsmitteln sowie der CO₂-Emissionen der Sinteranlage des DK-Prozesses zu berechnen. Diese Datenreihen werden mittels multipler linearer Regression (vgl. Abschnitt 3.2) zur Berechnung von Transformationsfunktionen eingesetzt. Die Anzahl der Variationsschritte ergibt sich neben der Wichtigkeit der Verbindung aus deren Verhalten im Prozess. Je mehr Variationsschritte gewählt werden, desto besser lässt sich ein nichtlineares Verhalten im Fließschemasimulationsmodell annähern. Aus der Anzahl der variierten Verbindungen und deren Variationsschritte ergeben sich die erforderlichen Rechendurchläufe der Fließschemasimulation, was gleichzeitig die mögliche Anzahl der Variationen und Variationsschritte begrenzt (vgl. Abschnitt 4.1.4.1).

Wesentliche Verbindungen zur Abbildung der Sinteranlage sind vor allem die eingehenden Eisenverbindungen, von denen Hämatit den größten Anteil hat. Zur Berücksichtigung der Basizität werden die Verbindungen CaO, MgO und SiO₂ variiert. Wesentlich für die Staubbildung sind die Alkalien, Chlor sowie Blei und Zink. Es wird davon ausgegangen, dass Chlor am ehesten mit Kalium eine Verbindung eingeht, weshalb es als KCl betrachtet und variiert wird. Die verbleibenden Alkalien sowie Blei und Zink liegen hauptsächlich als Oxide K₂O, Na₂O, PbO und ZnO vor. Der eingehende Massenstrom von Schwefel ist für die Einhaltung der SO₂-Grenzwerte und den daraus resultierenden Kalkmilchverbrauch wichtig. Kohlenstoff in den Reststoffen kann Koksgrus substituieren. Da Eisen das Hauptelement ist und der eingehende Massenstrom der Alkalien nichtlinear die Staubbildung beeinflusst, werden diese Verbindungen in drei Schritten variiert (vgl. Tabelle 5).

Für die Berechnung von Szenarien wird in Abstimmung mit dem Projektpartner festgelegt, dass bisher nicht im DK-Prozess verwertete Reststoffe zusätzlich eingesetzt werden können. Daher wird der Wertebereich zwischen kleinstem und größtem Massenstrom nicht wie bei den anderen Prozessen zwischen dem 0,1- und dem 0,9-Quantil der zur Kalibrierung eingesetzten erhobenen Originaldaten variiert. Stattdessen wird für die größte Variationsstufe der Mittelwert der zur Kalibrierung verwendeten Daten zuzüglich der Massen der potentiell zusätzlich im DK-Prozess eingesetzten Reststoffe verwendet.

Tabelle 5: Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für die Sinteranlage des DK-Prozesses

x_j	Fe ₂ O ₃	ZnO	CaO	SiO ₂	MgO	PbO	KCl	K ₂ O	Na ₂ O	S	C	Rest
Variationsschritte v_j	3	2	2	2	2	2	2	3	3	2	2	2
Anz. Modelldurchläufe D	13.824											

Aus der Anzahl der variierten Verbindungen und der Variationsschritte je Verbindung ergibt sich, dass 13.824 Fließschemasimulationsdurchläufe benötigt werden, um die für die multiple lineare Regression erforderlichen Datenreihen zu berechnen. Während dieser Rechendurchläufe werden das durch den Sinter gesogene Luftvolumen sowie das während der Kalibrierung ermittelte Temperaturprofil konstant gehalten.

Mittels Regressionsanalyse werden für folgende Regressanden die Regressionskoeffizienten für die Transformationsfunktionen berechnet:

- Masse und Konzentrationen folgender Inhaltsstoffe des Sinters: Fe_3O_4 , ZnO , CaO , SiO_2 , MgO , PbO , KCl , NaCl , K_2O , Na_2O , Rest,
- Masse des EGR-Staubes,
- Masse des AGRA-Rückstandes,
- Verbräuche an Koksgrus, Sand und Kalkmilch sowie
- Emissionen von CO_2 .

4.2.4.2 Hochofen

Die im Projekt betrachteten Reststoffe werden im DK-Prozess zunächst über die Sinteranlage zu Fertigsinter verarbeitet. Im Sinterprozess wird der Oxidationsgrad des Eisens erhöht. Aus diesem Grund wird Eisen als Magnetit variiert. In den Reststoffen enthaltener Kohlenstoff und Schwefel werden größtenteils oxidiert, gehen in das Abgas über und sind nicht im Fertigsinter enthalten. Daher wird die Liste der variierten Verbindungen gegenüber der Sinteranlage verändert. Im DK-Hochofenprozess spielt Zink, welches hauptsächlich als Oxid eingetragen wird, eine größere Rolle als die Alkalien, weshalb der Zinkoxid-Massenstrom in drei Schritten variiert wird und der Massenstrom der Alkalien und des Chlors in zwei Schritten (vgl. Tabelle 6).

Nach den vom Projektpartner erhobenen Daten ist im Möller ausreichend Chlor vorhanden, um sowohl KCl als auch NaCl zu bilden. Um mit den Oxiden der Alkalien nicht insgesamt vier Verbindungen unabhängig voneinander variieren zu müssen, werden nur die Massenströme der Elemente K , Na und Cl unabhängig variiert. Daraus werden die Massenströme der Verbindungen KCl , K_2O , NaCl und Na_2O berechnet. Hierzu wird angenommen, dass Chlor zuerst mit Kalium eine Verbindung bildet. Wenn stöchiometrisch mehr Chlor als Kalium vorhanden ist, wird das verbleibende Chlor zusätzlich als NaCl gebunden. Ggf. stöchiometrisch verbleibende Massen der Alkalien werden als deren Oxide berücksichtigt.

Wie bereits bei der Sinteranlage wird die obere Variationsgrenze der jeweiligen Verbindungen aus dem Mittelwert des Massenstromes der Verbindung in den zur Kalibrierung genutzten Daten zuzüglich der Massen der potentiell zusätzlichen Reststoffe gebildet.

Tabelle 6: Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für die Sinteranlage des DK-Prozesses

x_j	Fe_3O_4	ZnO	CaO	SiO_2	MgO	PbO	K^*	Na^*	Cl^*	Rest
Variationsschritte v_j	3	3	2	2	2	2	2	2	2	2
Anz. Modelldurchläufe D	2.304									

* K, Na und Cl werden unabhängig variiert. Diese wurden dann als Verbindungen KCl, NaCl, K_2O und Na_2O in das Modell gegeben. Dabei wird, der Gibbs'schen freien Energie der Verbindungen folgend, verfügbares Cl zuerst als KCl und überschüssiges Cl als NaCl gebunden. Ggf. verbleibende Massen der Alkalien wurden als Oxide in das Modell gegeben.

Aus der Anzahl der in die Fließschemasimulation eingehenden variierten Verbindungen und der Anzahl der Variationsschritte je Verbindung ergibt sich die Gesamtzahl der zu berechnenden Fließschemasimulationsdurchläufe zu 2.304. Während der Simulationsdurchläufe werden der Heißwindvolumenstrom, die Heißwindtemperatur, der Heißwindsauerstoffgehalt, der Ersatzreduktionsmittelmassenstrom und die Massenströme der zusätzlichen Eisenträger konstant gehalten. Auf Basis der Datenreihen der Simulationsergebnisse werden mittels Regressionsanalyse die Regressionskoeffizienten und das Absolutglied für die folgenden Transformationsfunktionen berechnet:

- Gesamtmasse und Konzentration folgender Inhaltstoffe des Roheisens: Fe, Zn, C, Si, Rest,
- Gesamtmasse der Schlacke,
- Gesamtmasse und Konzentration folgender Inhaltstoffe des Gichtstaubes: Fe_3O_4 , ZnO, CaO, SiO_2 , MgO, PbO, KCl, K_2O , NaCl, Na_2O , C, Rest,
- Gesamtmasse und Konzentration folgender Inhaltstoffe des Zinkkonzentrats: Fe_3O_4 , ZnO, CaO, SiO_2 , MgO, PbO, KCl, K_2O , NaCl, Na_2O , C, Rest,
- im Kraftwerk erzeugte elektrische Energie,
- Verbräuche von Kies und Koks sowie
- Emissionen von CO_2 .

4.3 Simulation der Stahlherstellung im Elektrolichtbogenofen

Neben dem integrierten Hüttenwerk ist der Elektrolichtbogenofenprozess das zweite wesentliche in Deutschland genutzte Verfahren zur Stahlherstellung. Im Elektrolichtbogenofen wird Stahlschrott zu Rohstahl eingeschmolzen. Der Prozess beruht somit im Unterschied zum integrierten Hüttenwerk auf dem Einsatz von Sekundärrohstoffen. Im Jahr 2010 werden in Deutschland 30 % des erzeug-

ten Rohstahls im Elektrolichtbogenofenverfahren hergestellt (vgl. Wirtschaftsvereinigung Stahl, 2011).

4.3.1 Beschreibung des Prozesses und wesentlicher Stoff- und Energieströme¹⁶

Der Elektrolichtbogenofen ist ein feuerfest ausgemauertes, gekühltes Gefäß, das mit einem Deckel verschlossen wird, durch den eine oder mehrere Graphitelektroden eingeschoben werden. Wie der Sauerstoffblaskonverter des integrierten Hüttenwerkes wird der Elektrolichtbogenofen im Batch-Verfahren betrieben. Dazu wird bei geöffnetem Deckel zunächst die Ladung eines sogenannten Korbes mit Schrott in den Ofen chargiert. Die Korbladung setzt sich, je nach zu produzierender Stahlsorte, aus unterschiedlichen Massen verschiedener Schrottsorten sowie Korbkohle, Kalk und Dolomitkalk zusammen. Nach dem Chargieren wird der Deckel geschlossen, die Elektroden werden abgesenkt, durch Anlegen einer hohen Stromstärke über die Elektroden ein Lichtbogen mit Temperaturen von bis zu 3.000 °C erzeugt und dadurch der Schrott eingeschmolzen. Danach kann ein bis zwei Mal zusätzlich Schrott chargiert und eingeschmolzen werden. Zur Unterstützung des Schmelzvorgangs sowie um die Zeit zwischen zwei Chargen (tap to tap Zeit) zu verkürzen und damit die Produktivität zu erhöhen, werden Erdgasbrenner eingesetzt. Die Erdgasbrenner richten ihren Flammenstrahl auf den Schrott und schmelzen ihn an der Oberfläche an. Durch die Zugabe von Kalk und Dolomitkalk wird eine Schlackephase erzeugt, die oxidierbare und im Rohstahl unerwünschte Elemente aufnimmt. Durch den Dolomitkalk und einen weiteren Zuschlag wird zusätzlich Magnesiumoxid eingetragen, welches die Konzentration von Magnesiumoxid in der Schlacke erhöht und somit der Abnutzung des Feuerfestmaterials entgegenwirkt.

An den Schritt des Einschmelzens schließt die Phase des Frischens an. Durch Einblasen von Sauerstoff wird die Konzentration von Kohlenstoff, Silizium, Mangan und Phosphor im Rohstahl verringert, da diese Elemente oxidieren und in die Schlacke übergehen. Zusätzlich wird pulverförmiger Kohlenstoff, die sogenannte Blaskohle, in die Schmelze in die Grenzschicht von Stahl und Schlacke eingeblasen. Der Kohlenstoff reagiert mit Sauerstoff zu Kohlenmonoxid, wel-

¹⁶ Die Prozessbeschreibung basiert auf Angaben der Projektpartner und auf Heinen (1997).

ches Gasbläschen bildet und die Schlacke aufschäumt. Die Schaumslagge bildet eine Isolationsschicht über dem Rohstahl, welche Wärme im Stahlbad hält und verhindert, dass der Lichtbogen an die Gefäßwand schlägt und Lärmemissionen mindert. Der Kohlenstoff reduziert ebenfalls z. B. durch das Einblasen von Sauerstoff gebildetes Eisenoxid in der Schlacke. Nach Erreichen der angestrebten Rohstahlzusammensetzung werden die Schlacke und dann der Rohstahl aus dem Ofen abgegossen.

Während des Einschmelzens und Frischens kommt es zur Staubbildung. Die Staubbildungsmechanismen ähneln denen im Sauerstoffblaskonverter des integrierten Hüttenwerkes (vgl. Abschnitt 4.1.3.3). Grobkörniger Staub entsteht durch mechanisches Abplatzen von Krusten oder Beschichtungen des Schrottes während des Chargierens des Korbes in den Ofen und später aufgrund der plötzlichen Erhitzung durch den Lichtbogen. Im weiteren Prozessverlauf entstehen grobkörnige Staubpartikel durch Schlackespritzer und Blasen. Feinkörnigere Staubpartikel bilden sich durch Verdampfen von Elementen und Verbindungen, deren Siedepunkt erreicht wird, wie Zink, Blei, Alkalien und Chloride. Diese verdampfen hauptsächlich während der Einschmelzphase. Zink und Blei werden in der Ofenatmosphäre durch den dort herrschenden Sauerstoffüberschuss oxidiert, erstarren und bilden Feinstaub. Chloride kondensieren und erstarren wieder bei geringeren Temperaturen im oberen Ofenbereich und der Abgasbehandlungsanlage. Das staubbeladene Abgas wird durch ein Loch im Ofendeckel abgesaugt. In der Abgasreinigung fallen ein grobkörniger Staub und ein feinkörniger Filterstaub an. Beide Staubfraktionen werden verwertet, wobei der Filterstaub als EAF-Staub in dem im nächsten Kapitel betrachteten Wälzprozess behandelt wird.

Eine Zusammenfassung der Stoffströme im Elektrolichtbogenofenprozess zeigt Abbildung 23. Die Verteilung der mit dem Schrott und den Zuschlägen in den Elektrolichtbogenofen eingetragenen Elemente auf die ausgehenden Stoffströme Rohstahl, Schlacke, Grobstaub und Filterstaub zeigt Abbildung 24.

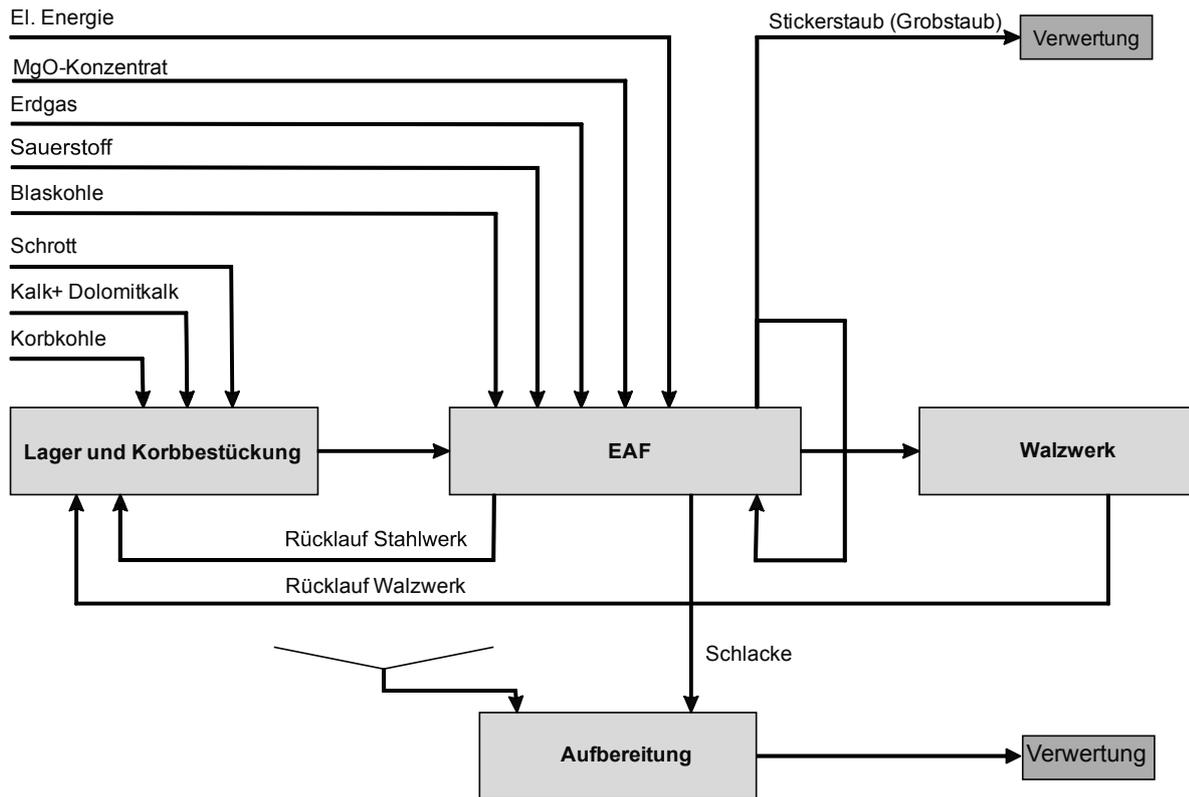


Abbildung 23: Stoffströme im Elektrostahlwerk

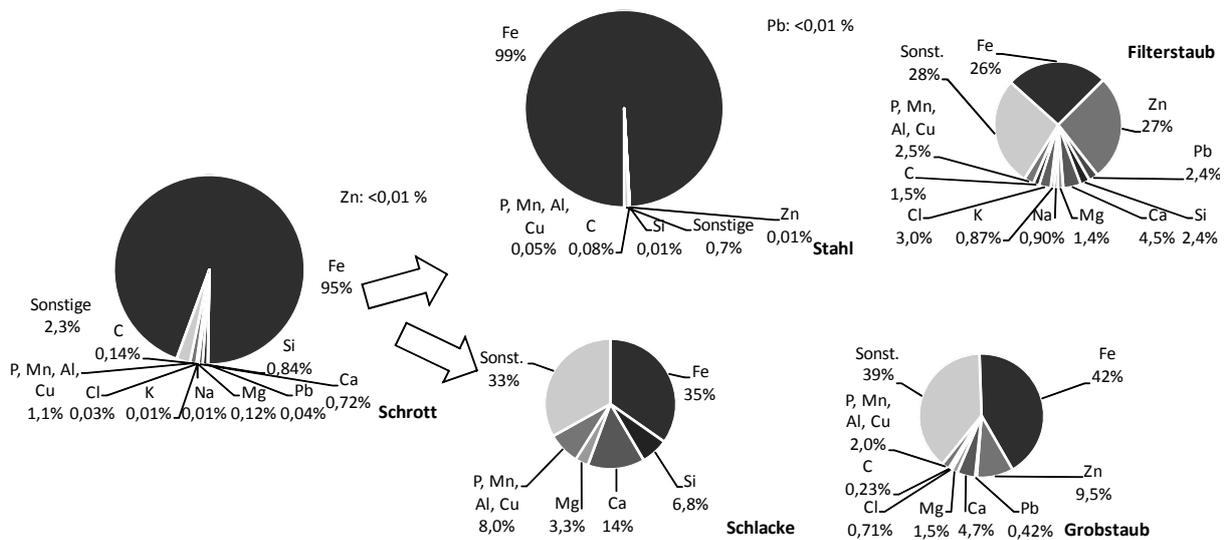


Abbildung 24: Mittlere Zusammensetzung des Schrottes und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Rohstahl, Schlacke, Grob- und Filterstaub (Datenreihe „Sonstige“ enthält Oxid-Sauerstoff; Quelle: Mittelwerte der Daten der Projektpartner)

4.3.2 Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung

Da es sich bei dem Elektrolichtbogenofen um einen Batch-Prozess handelt, werden wesentliche Daten wie die Schrottrezeptur, Zuschläge und Rohstahlzusammensetzung je Charge erfasst. Andere Daten, wie z. B. die Schlackezusam-

mensetzung werden lediglich stichprobenhaft ermittelt. Da für die Kalibrierung des Fließschemasimulationsmodells jedoch die Kenntnis der Massen und Zusammensetzungen der jeweils einander bedingenden ein- und ausgehenden Stoffströme wichtig ist, konnten nur Datensätze zu Chargen genutzt werden, bei denen die Schlackezusammensetzung bestimmt wurde. Stoffströme, die für den eigentlichen Produktionsprozess weniger wichtig sind, werden in längeren Intervallen dokumentiert. Diese Daten können keinen Chargen zugeordnet werden. Daher werden aus der Jahresrohstahlproduktion ein spezifisches Aufkommen berechnet und die mittlere Zusammensetzung angenommen. Insgesamt werden folgende Daten zur Modellerstellung und Kalibrierung genutzt:

- Massen und Zusammensetzungen der chargierten Schrottsorten,
- Massen und mittlere Zusammensetzung der Zuschläge Kalk, Dolomitkalk, MgO-Konzentrat,
- Masse und mittlere Zusammensetzung der Korbkohle,
- Masse und Kohlenstoffkonzentration der Blaskohle,
- Volumenstrom von Sauerstoff und Erdgas,
- Eingelegene elektrische Energie,
- Abstichtemperatur,
- Masse und Zusammensetzung des Rohstahls,
- Masse und Zusammensetzung der Schlacke und
- spezifische Massen und mittlere Zusammensetzung des Grobstaubes und des Filterstaubes.

Aufgrund der Heterogenität des Schrottes ist es nicht möglich, mit verhältnismäßigem Aufwand repräsentative Proben zu gewinnen. Für den Schrott werden daher mittlere Zusammensetzungen angenommen, die auf Erfahrungswerten basieren. Solche Werte liegen jedoch nur für Elemente vor, die einen Einfluss auf die Rohstahlqualität haben (z. B. C, Mn, P, Si, Cr, Cu, etc.). Gehalte an Elementen, die im Staub akkumulieren, wie Zink, Blei, Alkalien, Chloride, sind nicht in gleicher Qualität vorhanden. Um das Fließschemasimulationsmodell sinnvoll einsetzen zu können, werden daher die in den Stäuben erfassten Massen dieser Elemente der Schrottmasse hinzugerechnet. Da ein Großteil der betroffenen Massen der Elemente aus Beschichtungen (z. B. verzinkter Schrott), Resten von Anstrichen oder anhaftenden Kunststoffresten stammt, werden sie der Schrottsorte „Bleche“ zugeschlagen.

4.3.3 Erstellung und Kalibrierung des Modells zur Fließschemasimulation

Wie schon bei der Modellierung des Sauerstoffblaskonverters (vgl. Abschnitt 4.1.3.3) besteht auch bei der Erstellung des Fließschemasimulationsmodells für den Elektrolichtbogenofen das Problem, einen Batchprozess mit in Abhängigkeit von der Prozessphase wechselndem dynamischem Verhalten in einem stationären Modell abzubilden. Daher wird der Prozess so abgebildet, als würden die zeitlich nacheinander ablaufenden Prozesse kontinuierlich hintereinander stattfinden. So besteht das Fließschemasimulationsmodell aus Grundoperationen, welche die Prozesse während des Einschmelzens modellieren und aus Grundoperationen, welche die Abläufe während des Frischens berechnen. Grundoperationen für technische Einrichtungen oder Vorgänge, die sich in beiden Phasen unterscheiden, wie beispielsweise die Brenner, existieren somit zweimal. Zwischen dem Einschmelzen der ersten und der zweiten Korbladung wird im Modell nicht differenziert, da sich die ablaufenden Prozesse ähneln. Stattdessen ist das Modell so aufgebaut, als würden beide Korbladungen zeitgleich eingeschmolzen. Das dem Modell zugrundeliegende Fließschema mit den ein- und ausgehenden Stoffströmen zeigt Abbildung 25.

Die Beladung des Elektrolichtbogenofens wird im Modell durch mehrere Mixer-Grundoperationen abgebildet. Hierzu werden Schrott (Stoffstrom SCRAP), mögliche Reststoffe (Stoffstrom RESIDUE), Korbkohle (Stoffstrom COAL) sowie die Zuschläge Kalk (Stoffstrom LIME), Dolomitkalk (Stoffstrom DOLOLIME) und MgO im Mixer MXFEED zusammengeführt. Um mechanische Staubbildung während des Chargierens zu modellieren, wird in einer darauf folgenden Splitter-Grundoperation ein geringer Teil der Ofenbeladung als Staub abgetrennt.

Der Einschmelzvorgang der Ofenbeladung wird mittels drei Grundoperationen im Modell berechnet. Zunächst wird in der stöchiometrischen Grundoperation RSMELT der Energiebedarf zum Aufwärmen und ggf. zum Phasenwechsel der in der Ofenbeladung enthaltenen Verbindungen ermittelt, ohne dass hier schon chemische Reaktionen berechnet werden. Dies erleichtert die Plausibilitätsprüfung der Energiebilanz des Modells.

Der Einsatz von Brennern während der Aufschmelzphase wird mit einer Gleichgewichts-Grundoperation RVLBMLT simuliert. In die Grundoperation werden

hohen Temperaturen sieden, abgebildet. In der Grundoperation RQMELT verdampfen Stoffe wie Zink, Blei, Alkalien und Chloride, die den Feinstaub bilden.

Der Stoffstrom des mechanisch, während des Chargierens gebildeten Staubes und der Stoffstrom der während des Schmelzens verdampften Verbindungen werden in einer weiteren Gleichgewichtsgrundoperation RQMLTGAS zusammengefasst. In diese Grundoperation wird auch der mit den Injektoren in den oberen Ofenbereich eingeblasene Sauerstoff (Stoffstrom INJECTOX) geleitet. Der somit herrschende Sauerstoffüberschuss führt dazu, dass elementarer Zink oder elementares Blei bzw. in der Schmelze aus der Korbkohle gebildetes Kohlenmonoxid oxidiert werden. Diese Reaktionen sind exotherm und geben Energie an den Prozess ab. Die Reaktionsprodukte und nicht mit Sauerstoff reagierende Gase wie Chloride werden zur Grundoperation RQCOOL geleitet.

In der Schmelze verbleibende Verbindungen werden in den Teil des Fließschemasimulationsmodells gegeben, der die Prozessphase des Frischens abbildet. Während des Frischens eingeblasener Sauerstoff reagiert zunächst mit dem Eisen des Rohstahls zu Eisenoxid (vgl. Jellinghaus, 1994). Diese Reaktion ist exotherm und liefert Energie. Um die Energiebilanz des Modells genauer verfolgen zu können, wird diese Reaktion in der stöchiometrischen Grundoperation RSOX gesondert berechnet. Weiterhin wird während des Frischens über die Brenner Energie und Sauerstoff eingetragen. Den Betrieb der Brenner während des Frischens simuliert die adiabate Gleichgewichts-Grundoperation RVLBOX, deren Brenngas-Stoffstrom ebenfalls in die Grundoperation RSOX geleitet wird. Die Oxidation von in der Eisenschmelze gelöstem Kohlenstoff, Silizium und Mangan¹⁷ geschieht im Prozess nicht vollständig, sondern hängt nichtlinear von der Blaszeit ab. Um diese Reaktionen und ihren Einfluss auf die Energiebilanz abschätzen zu können, werden sie in einer gesonderten kinetischen Grundoperation RKSTEEL abgebildet. Hierzu wird Eisenoxid, Kohlenstoff, Silizium und Mangan aus der Schmelze abgetrennt und in die Grundoperation RKSTEEL geleitet. Hier wird ein Teil des Eisenoxides wieder reduziert und dabei die anderen Elemente oxidiert. Die kinetischen Parameter dieser Reaktionen werden aus den Betriebsdaten abgeleitet. Die Reaktionsprodukte werden wieder mit den restlichen Verbindungen in einer Gleichgewichtsgrundoperation RQSTEEL

¹⁷ Die Entphosphorisierung und Entschwefelung ist im Modell nicht abgebildet, da diese Elemente im übergeordneten Stoff- und Energiestrom des Modells nicht enthalten sind.

zusammengeführt. In dieser wird das sich einstellende Gleichgewicht berechnet, wobei in der Eisenschmelze verbliebener Kohlenstoff sowie Silizium und Mangan von der Berechnung des Gleichgewichts ausgenommen sind. In dieser Grundoperation wird dann die Verteilung der Verbindungen auf die Ofenatmosphäre, die Schlacke und den Rohstahl berechnet. Stahl verlässt das Modell im Stoffstrom STEEL und Schlacke im Stoffstrom SLAG.

In die Ofenatmosphäre entweicht während der Phase des Frischens hauptsächlich Kohlenmonoxid, welches bei der Oxidation des Kohlenstoffs in der Eisenschmelze und des in der Blaskohle enthaltenen Kohlenstoffs gebildet wird. Beim Einblasen der Blaskohle wird davon ausgegangen, dass ein geringer Teil der Kohle von der Abgasabsaugung erfasst wird, da im Staub nichtreagierter Kohlenstoff zu finden ist. Das Kohlenmonoxid aus der Schmelze wird zusammen mit dem geringen Teilstrom der Blaskohle und dem Sauerstoff der Injektoren in die Gleichgewichts-Grundoperation RQOXGAS geleitet, die den Ofenraum über der Schaumslag während des Frischens repräsentiert. Hier wird unter anderem Kohlenmonoxid aus der Schmelze durch Sauerstoffüberschuss oxidiert, was zusätzlich Energie liefert und in der Energiebilanz des Ofens berücksichtigt wird. Zusätzlich wird ein geringer Teilstrom der Schlacke in diese Grundoperation geführt, um das Erfassen von Schlackespritzern der Schaumslag durch die Abgasabsaugung abzubilden.

Das Abgas wird im realen Prozess während des Schmelzens und Frischens kontinuierlich aus dem Ofen abgesaugt, gekühlt und in der Abgasreinigung von Staub befreit. Der Anfall von Grobstaub wird im Modell über die Separations-Grundoperation SEPCYCL und der Anfall von Filterstaub als Feinstaub in der Separations-Grundoperation SEPFILT abgebildet. Die Verteilungskoeffizienten in den beiden Grundoperationen sind so berechnet, dass die mittlere Staubzusammensetzung des Grob- und Filterstaubes erreicht wird. Dabei wird vereinfachend von einer kompletten Abtrennung des Staubes im Filter ausgegangen.

Die Masse an benötigtem Dolomitkalk und Kalk kann durch eine Auslegungsvorschrift im Modell ermittelt werden. Hierzu wird die Masse an Dolomitkalk so eingestellt, dass die mittlere Magnesiumoxidkonzentration aus den zur Kalibrierung eingesetzten Daten erreicht wird. Die zuzuschlagende Kalkmasse wird danach mittels einer Auslegungsvorschrift so gewählt, dass die mittlere Basizität eingehalten ist. Für Simulationsläufe, bei denen für die zuzuführende Ener-

gie keine Daten vorliegen, kann diese über eine Auslegungsvorschrift im Modell berechnet werden. Dabei wird die zugeführte elektrische Energie so angepasst, dass eine ausgeglichene Energiebilanz erreicht wird.

Im Modell sind vier Möglichkeiten der Staubeinstehung integriert, die durch den Abgleich mit erhobenen Daten kalibriert werden müssen. Staub wird gebildet durch:

- mechanische Abtrennung beim Chargieren,
- Verdampfen von Verbindungen mit Siedepunkt unter 1.600 °C beim Schmelzen,
- Verdampfen von Verbindungen im Lichtbogen und
- Erfassen von Schlackespritzern durch die Abgasabsaugung.

Die Stoffströme aus diesen Quellen haben eine jeweils charakteristische Zusammensetzung. Dies ermöglicht es, zu identifizieren aus welchen dieser Quellen sich der Staub anteilig zusammensetzt. Die Kalibrierung der Staubbildung im Modell erfolgt dann so, dass zunächst nur die bei unter 1.600 °C verdampfenden Verbindungen in den Staub gelangen. Danach werden die Abtrennungsgrade der anderen Stoffströme systematisch variiert, bis in der Summe der Massenströme des Grob- und Filterstaubes eine Zusammensetzung erreicht wird, die derjenigen in den Originaldaten möglichst nahe kommt.

Das Fließschemasimulationsmodell wird so erstellt, dass im Rahmen des Projektes ERESTRE identifizierte Szenarien zusätzlich berechnet werden können. So kann über eine Splitter-Grundoperation ein Teil des Filterstaubes über einen Kreislaufstrom wieder in das Modell gegeben werden. Dem liegt die Annahme zugrunde, dass es sinnvoll sein kann, Filterstaub intern zu rezirkulieren, um die Masse an im Wälzprozess nicht verwerteten Verbindungen, wie z. B. Eisenoxide, im Staub zu reduzieren und diese stattdessen im Stahl und der Schlacke zu halten. Für dieses Szenario wird angenommen, dass der Staub zusammen mit der Blaskohle während des Frischens eingeblasen wird. Über einen Rechenblock im Modell wird hierbei die Masse der Blaskohle so erhöht, dass der stöchiometrisch benötigte Kohlenstoff zur Reduktion der im Staub enthaltenen, reduzierbaren Metalloxide zusätzlich zugeführt wird. Der rezirkulierte Staub und die Blaskohle werden dann in einer Gleichgewichts-Grundoperation zusam-

mengeführt, wo diese Reduktionsreaktionen abgebildet werden. Danach wird der Stoffstrom der Schmelze während des Frischens zugeschlagen.

Weiterhin lässt sich mit dem Fließschemasimulationsmodell die Zuladung oxidischer Reststoffe in den Korb simulieren. Hierzu wird der Stoffstrom RESIDUE mit den weiteren Stoffströmen des Schrotts und der Korbkohle zusammengeführt. Über einen Rechenblock wird hierbei zusätzliche Korbkohle (Stoffstrom BACOALAD) in der Masse zugegeben, welche für die Reduktion der in den Reststoffen vorhandenen, reduzierbaren Metalloxide benötigt wird.

Das Fließschemasimulationsmodell wird kalibriert, indem die durch den Projektpartner zur Verfügung gestellten Daten zu den eingehenden Stoffströmen in das Modell gegeben werden und dann, wie beschrieben, kinetische Parameter und Abtrenngrade in Splitter- und Separationsgrundoperationen systematisch angepasst werden, so dass die bereitgestellten Daten der ausgehenden Stoffströme möglichst genau wiedergegeben werden können.

4.3.4 Einsatz der Simulation zur Berechnung benötigter Prozessausgangsgrößen bei unabhängiger Variation relevanter Prozesseingangsgrößen

Im Zusammenhang mit dem in diesem Projekt betrachteten Möglichkeiten zur Ressourceneinsparung sind für den Elektrolichtbogenofen vor allem die Fragestellungen interessant, inwieweit sich eine interne Staubrezirkulation auswirkt und ob in dem Prozess geringe Massen oxidischer Reststoffe eingesetzt werden können. Aus diesem Grund weicht die Ermittlung der Transformationsfunktionen beim Elektrolichtbogenofen von dem Vorgehen bei den in den vorangehenden Abschnitten dargestellten Prozessen ab. Es wird dabei nicht die Zusammensetzung des Haupteinsatzstromes variiert, sondern es wird die Masse und Zusammensetzung noch zusätzlich zudosierter oxidischer Reststoffe variiert und dabei die Schrottzusammensetzung und -masse konstant gehalten. Dem liegt die Annahme zugrunde, dass die Beladung eines Korbes vor allem durch das vom Schrott eingenommene Volumen begrenzt ist und die Schüttdichte der oxidischen Reststoffe hoch genug ist, um sie ohne Verdrängung von Schrott in den Korb zu geben, wo sie freie Zwischenräume ausfüllen. Für den Elektrolichtbogenofenprozess ist bei diesen Reststoffen vor allem die Masse an Eisenoxid wichtig, da hierdurch die zusätzlich erforderliche Korbkohle und der

zusätzlich produzierte Stahl beeinflusst werden. Die Massen von CaO, MgO und SiO₂ beeinflussen die Basizität und die zuzuschlagenden Massen an Kalk und Dolomitmalk. ZnO und PbO beeinflussen ebenfalls die benötigte Korbkohle und zusammen mit Na₂O und K₂O die Staubbildung. Schon enthaltener Kohlenstoff kann wiederum Korbkohle substituieren. Die Massenströme dieser Verbindungen werden in zwei Schritten variiert. Zusätzlich wird eine mögliche Staubrückführung des Filterstaubes in zwei Schritten variiert (vgl. Tabelle 7).

Tabelle 7: Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für den Elektrolichtbogenofenprozess

x _j	Rückföhrtrate	Oxidische Reststoffe									
		FeO	ZnO	CaO	SiO ₂	MgO	PbO	K ₂ O	Na ₂ O	C	Rest
Variationsschritte v _j	2	2	3	2	2	2	2	2	2	2	2
Anz. Modelldurchläufe D	2.048										

Aus der Anzahl der variierten Verbindungen bzw. der Rückföhrtrate und der Anzahl der jeweiligen Variationsschritte ergeben sich 2.048 zu berechnende Fließschemasimulationsdurchläufe. Während dieser Durchläufe werden neben der bereits erwähnten Schrottmasse und Zusammensetzung auch der Einsatz von Injektoren, Brennern und Lanzensauerstoff sowie die sogenannte Power-on Zeit, über die elektrische Energie über die Elektroden zugeföhrt wird, konstant gehalten.

Aus den mit dem Fließschemasimulationsmodell berechneten Datenreihen werden durch multiple lineare Regression die folgenden Transformationsfunktionen ermittelt:

- Gesamtmasse des Rohstahls,
- Gesamtmasse der Schlacke,
- Massen und Konzentrationen der folgenden Inhaltsstoffe des Filterstaubes: ZnO, Fe₃O₄, PbO, NaCl, KCl, C, CaO, SiO₂, MgO, Rest,
- eingesetzte elektrische Energie und Verbräuche von Korbkohle, Blaskohle, Kalk und Dolomitmalk sowie
- Emissionen von CO₂.

4.4 Simulation der Verwertung von Reststoffen mit hohen Zinkkonzentrationen im Wälzprozess

4.4.1 Beschreibung des Prozesses und wesentlicher Stoff- und Energieströme

Der Wälzprozess wird zur stofflichen Verwertung von Reststoffen mit hohen (ca. > 17 Gew.-%) Zinkkonzentrationen (vgl. Ruh & Krause, 2011) eingesetzt. Das Verfahren ist als Beste Verfügbare Technik (BVT) (vgl. European Commission, 2001) eingestuft. Die Verfahrensführung stellt eine Weiterentwicklung der Röstung sulfidischer Zinkerze im Drehrohrofen dar. Beim Großteil der verwerteten Reststoffe handelt es sich um EAF-Stäube, in geringeren Massen werden auch Stäube und Schlämme aus der Zinkbeschichtung eingesetzt.

Hierzu werden die zinkhaltigen Reststoffe unter Zugabe von Koks und Kalk vermischt und unter Eindüsen von Wasser zu Mikropellets verarbeitet. Koks dient als chemisches Reduktionsmittel und Energieträger, Kalk wird zur Einstellung der Basizität benötigt. Die Mikropellets werden in das Wälzrohr, einen Drehrohrofen, gegeben. Hier wird bei ca. 1.100 °C Prozesstemperatur unter Ausnutzung des für Metalle relativ hohen Dampfdrucks von elementarem Zink ein Zinkkonzentrat (Wälzoxid) gewonnen. Die restlichen Verbindungen verbleiben in der Wälzschlacke. Die zum Erreichen der Prozesstemperatur notwendige Energie wird über den Koks zugeführt. Eine feinere Regulierung ist durch Zudosierung von Zusatzkoks und einen Erdgasbrenner möglich. Das Wälzoxid wird, nach einer Wäsche zur Entfernung von Chlor und Alkalien, an die Zinkindustrie veräußert, die Wälzschlacke nach teilweiser Abscheidung und Rückführung von nicht abreagiertem Koks im Deponiebau verwertet.

Zur Abbildung des Prozesses in einem Fließschemasimulationsmodell sind zunächst die Massenströme und Zusammensetzungen der in den zu modellierenden Prozess ein- und ausgehenden Stoffströme zu erfassen. Dies erfolgte im Rahmen einer Begehung der Anlage vor Ort und durch vom Projektpartner bereitgestellte Prozessdaten. Die für den Prozess relevanten Stoffströme zeigt zusammenfassend Abbildung 26. Die mittlere Zusammensetzung der Reststoffe sowie die durch den Prozess erreichte Aufteilung der Elemente auf das Produkt Wälzoxid und die Wälzschlacke zeigt Abbildung 27.

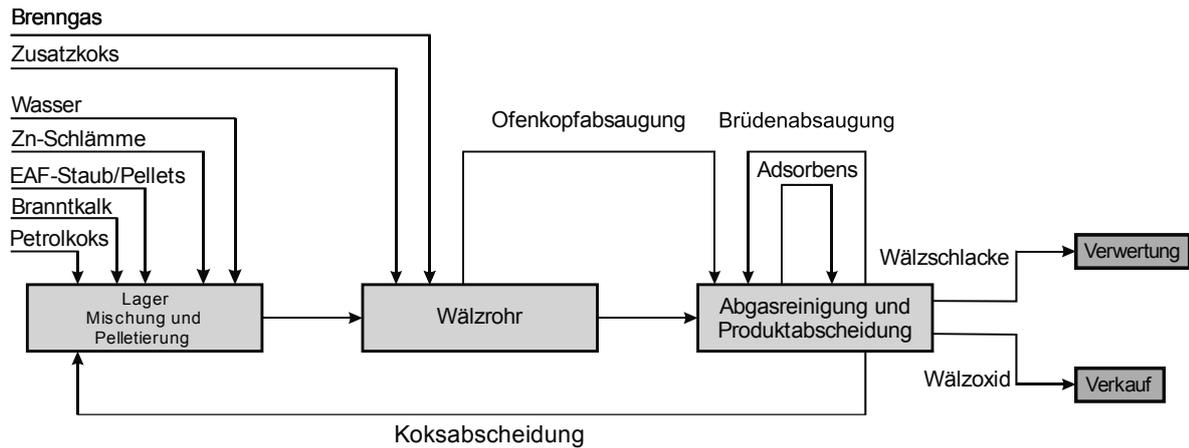


Abbildung 26: Relevante Stoffströme im Wälzprozess

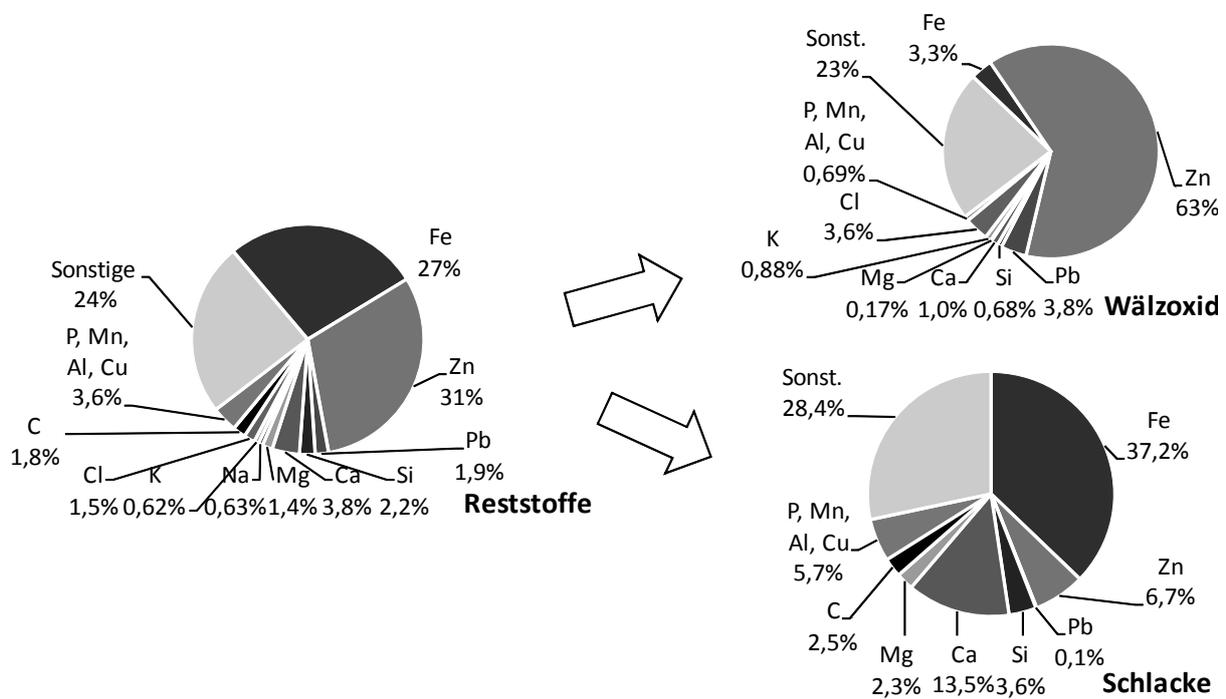


Abbildung 27: Mittlere Zusammensetzung der Reststoffe und Verteilung der enthaltenen Elemente auf Wälzoxid und Wälzschlacke (Datenreihe „Sonstige“ enthält Oxid-Sauerstoff); Quelle: Mittelwerte der zur Kalibrierung genutzten Daten der Projektpartner

4.4.2 Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung

Zum Wälzprozess werden bei dem Industriepartner folgende Daten erhoben:

- Massen und Zusammensetzungen der Aufgabemischung inkl. Koks und Kalkzugabe,
- Massen und Zusammensetzungen des Wälzoxides,
- Zusammensetzung der Wälzschlacke und
- Prozessdaten (u. a. Fuchs- und Schlacketemperatur, Prozessluftgebläsedrehzahlen, Erdgaseinsatz).

die Drehbewegung des Rohres weiter in den unteren Teil des Wälzrohres verlagert, wobei sie langsam durch die heiße Prozessluft und die heiße Rohrwand erwärmt wird. Bei Erreichen der entsprechenden Temperatur reagiert den Pellets zugegebener Koks mit dem Sauerstoff der Prozessluft hauptsächlich zu Kohlenmonoxid (Boudouardreaktion). Bei Temperaturen von ca. 1.000 °C reduziert das Kohlenmonoxid in der Reststoffmischung enthaltene Metalloxide. Dabei gebildetes Zink wie auch Chloride des Bleis und der Alkalien erreichen ihren Siedepunkt und verdampfen in den Gasraum des Ofens. Die Reaktionsgeschwindigkeiten dieses Prozesses sind durch die notwendigen Transportprozesse an der Oberfläche der Pellets kinetisch limitiert. Um diesem Umstand Rechnung zu tragen, werden die Reaktionen der Boudouardreaktion und der Zinkoxidreduktion im Simulationsmodell durch eine kinetische Grundoperation RKIN abgebildet. Die weiteren stattfindenden Reaktionen werden in der nachfolgenden Gleichgewichts-Grundoperation RGGWSOL berechnet. Neben Zink werden auch Oxide des Eisens reduziert. Da der Schmelzpunkt von Eisen deutlich über den Prozesstemperaturen des Wälzrohres liegt, verbleibt dieses im festen Zustand. Im unteren Teil des Wälzrohres wird mittels einer Lanze Luft auf die glühende Schüttung geblasen. Dabei wird vorher reduziertes Eisenoxid wieder oxidiert. Diese Reaktion ist exotherm und ermöglicht es, den Wälzprozess bei bestimmungsgemäßem Betrieb ohne weitere Energiezufuhr zu betreiben. Diese Prozessmodifikation wird nach den Namen der Erfinder¹⁸ SDHL-Prozess genannt. Da die Luft lediglich auf die Oberfläche der Schüttung geblasen wird, reagiert hier nur ein Teilstrom. Dieser Teilstrom wird im Simulationsmodell durch den Trenner SEPSOLSDHL abgespalten. Die Oxidationsreaktionen werden in der stöchiometrischen Grundoperation RSTOSDHL berechnet. Der Bereich der SDHL-Zone ist lokal überhitzt. Hierbei gebildete Gase werden in der Grundoperation SEPSDHL in die Ofenatmosphäre geleitet, verbleibende feste Stoffe verlassen das Modell im Stoffstrom SLAG.

Alle aus der Feststoffschüttung im Wälzrohr in die Gasphase übergehenden Stoffströme werden in der Gleichgewichts-Grundoperation RGGWATMO gebündelt. In dieser Grundoperation werden die Reaktionen berechnet, die ablaufen, wenn die Gase aus der Feststoffschüttung mit der unter Umgebungstemperatur zugeführten Prozessluft reagieren. Hierbei wird das verdampfte

¹⁸ Saage, Dittrich, Hasche, Langbein.

Zink durch den in der Prozessluft enthaltenen Sauerstoff wieder oxidiert. Weiterhin wird auch Kohlenmonoxid zu Kohlendioxid oxidiert. Diese Reaktionen sind exotherm und liefern den Hauptteil der vom Prozess benötigten Energie. Das mit dem erstarrten, staubförmigen Zinkoxid beladene Prozessgas verlässt das Wälzrohr an der oberen Seite. Es wird im Verdampfungskühler auf eine für die nachfolgenden Gewebefilter erforderliche Temperatur herunter gekühlt. Dabei stattfindende Reaktionen und Aggregatzustandswechsel werden mit der Gleichgewichts-Grundoperation SEPVACOL berechnet. Danach erfolgt die Abtrennung des Staubes vom gereinigten Abgas und liefert das Produkt Wälzoxid (Stoffstrom WOX).

Die Kalibrierung erfolgt zunächst mit den aus den Unternehmensdaten bekannten Massen an zugeschlagenem Kalk und zugeführtem Koks. Hierbei werden die mittlere Energiebilanz des Modells und die mittlere Basizität bestimmt. Mit diesen Daten wird eine Auslegungsvorschrift erstellt, mit der das Modell die Masse an zugeführtem Koks so variieren kann, dass dieselbe Energiebilanz erreicht wird. Die Masse an zuzuschlagendem Kalk kann ebenfalls durch einen Rechenblock so bestimmt werden, dass die Zielbasizität erreicht wird.

Das Fließschemasimulationsmodell wird kalibriert, indem vor Ort erhobene Daten zu den Eingangsstoffströmen in das Modell gegeben werden. Daraufhin werden Modellparameter (Faktoren der Stoffstromtrennungen, kinetische Parameter, Temperaturen) der Reihe nach justiert, bis die Modellergebnisse den vor Ort erhobenen Daten zu den Prozessausgangsstoffströmen, abzüglich der in den Input-Output Bilanzen festgestellten Abweichungen, entsprechen.

4.4.4 Einsatz der Simulation zur Berechnung von benötigten Prozessausgangsgrößen bei unabhängiger Variation relevanter Prozesseingangsgrößen

Die wesentlichen Elemente im Wälzprozess sind Eisen, das die Hauptmasse in der Schlacke ausmacht und Zink, das den Hauptteil des Wälzoxides darstellt. In den meisten im Wälzprozess verwerteten Reststoffen hat Eisen noch nicht den höchsten Oxidationsgrad erreicht, weshalb Eisen als Magnetit betrachtet wird. Zink liegt zum größten Teil als Oxid vor. Für die Basizität des Prozesses sind ferner die Konzentrationen von CaO, SiO₂ und MgO von Bedeutung. Einen weiteren Einfluss auf mögliche Verunreinigungen des Wälzoxides haben Blei, wel-

ches in der Regel als Oxid vorliegt, sowie die Alkalien, welche in der Regel als Chloride vorliegen. Kohlenstoff in den Reststoffen kann zuzuführenden Koks substituieren. Eine Zusammenfassung der zur Ermittlung der Transformationsfunktionen variierten Verbindungen und der jeweiligen Variationsschritte zeigt Tabelle 8.

Tabelle 8: Berücksichtigte Modelleingangsinformationen und Anzahl der Variationsschritte zur Berechnung der Datengrundlage zur Erstellung von Transformationsfunktionen für das Wälzrohr

x_j	ZnO	Fe ₃ O ₄	PbO	NaCl	KCl	C	CaO	SiO ₂	MgO	Rest
Variationsschritte v_j	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
Anz. Modelldurchläufe D	1.024									

Aus der Anzahl der variierten Verbindungen und der Variationsschritte ergibt sich, dass zur Berechnung der für die multiple lineare Regression benötigten Datenreihen insgesamt 1.024 Fließschemasimulationsdurchläufe erforderlich sind. Während der Simulationsdurchläufe werden das Temperaturprofil sowie die Volumenströme von zugeführter Prozessluft, SDHL-Luft und Erdgas konstant auf dem Mittelwert der zur Kalibrierung genutzten Daten gehalten. Aus den berechneten Datenreihen werden mittels Regressionsanalyse die folgenden Transformationsfunktionen bestimmt:

- Gesamtmasse und Zinkgehalt des Wälzoxides,
- Gesamtmasse und Konzentration der folgenden Inhaltsstoffe der Wälzschlacke: ZnO, FeO, C, K₂O, Na₂O, PbO, CaO, SiO₂, MgO, Rest,
- Verbräuche von Koks und Kalk sowie
- Emissionen von CO₂.

4.5 Simulation der Laugung zur hydrometallurgischen Gewinnung von Zink bei der XSTRATA

4.5.1 Beschreibung des Prozesses und wesentlicher Stoff- und Energieströme

Heutzutage werden über 80 % des weltweit produzierten Zinks in hydrometallurgischen Verfahren gewonnen, bestehend aus den Schritten Röstung, Laugung und Elektrolyse (*Roasting, Leaching and Electrowinning, RLE*). Beim hydrometallurgischen Verfahren zur Zinkgewinnung wird Zinkerz zunächst im Röstungsprozess oxidiert. Das entstandene Zinkoxid wird anschließend in der Laugungsstufe durch Zugabe von Zellsäure (eine verdünnte Schwefelsäure aus

der Bäderhalle) und 98 %-iger Schwefelsäure extrahiert. Durch eine Elektrolyse der resultierten Zinksulfatlösung in Elektrolysezellen wird schließlich Zink gewonnen.

Das verwendete Zinkerz besteht überwiegend aus Zinkblende (ZnS) und Schwefel (S). Etwa 15 % entsprechen jedoch anderen Metallsulfiden, wie bspw. PbS, FeS₂, CuFeS₂ und Ag₂S. Aufgrund der Zusammensetzung des verwendeten Zinkerzes besteht das beim Rösten erzeugte Zwischenprodukt nicht nur aus ZnO, sondern aus mehreren Stoffen wie ZnFe₂O₄, Fe₂O₃, CuO, PbO, Ag₂O, CdO, CaO, CoO, SiO₂. Da ZnFe₂O₄ und ZnS eine niedrigere Löslichkeit gegenüber den Lösungsmitteln als die anderen Verbindungen aufweisen, ist die vollständige Lösung der Stoffe in einer einzigen Stufe nicht möglich. Darum wird die gesamte Laugung in Neutrallaugung, erste heiß-saure Laugung und zweite heiß-saure Laugung unterteilt. Die Temperatur liegt im Bereich von ca. 60 °C bis 75 °C für die Neutrallaugung und von ca. 85 °C bis 95 °C für die erste und zweite heiß-saure Laugung. Der pH-Wert liegt zwischen eins und vier und variiert zwischen den verschiedenen Laugungs- und Fällungsstufen. Temperatur und pH-Wert sind für die nahezu vollständige Lösung der o.g. Stoffe verantwortlich. Ein Teil der enthaltenen Metalle würde in der Gewinnungselektrolyse ebenfalls mit abgeschieden werden und das Zink verunreinigen, weshalb sie vorher aus der Lösung entfernt werden müssen.

Bevor die Lösung die Gewinnungselektrolyse erreicht, muss sie durch verschiedene Metallfällungsstufen und Eindicker gereinigt werden. Das in der Zinklösung enthaltene Eisen wird durch den Jarositfällungsprozess abgetrennt. Der Jarositprozess ist heutzutage dank des hohen Eisengehalts, der im chemischen Jarosit-Komplex NaFe₃(SO₄)₂(OH)₆ eingebunden wird, und des niedrigen Fremdionengehalts, der bei der Jarositfällung mitadsorbiert wird, der am häufigsten verwendete Prozess (Arslan, 2001). Unter Zugabe von Sauerstoff und/oder Luft wird Eisen(II) auf die für die Fällung benötigte Oxidationsstufe Eisen(III) oxidiert. Des Weiteren ist die Zugabe von Natronlauge für die Bildung des Jarositkomplexes nötig. Ein geringer Anteil des Eisens wird neben dem Jarositkomplex als Eisen(III)Hydroxid ausgefällt. Blei und Silber werden größtenteils als PbSO₄ und AgCl ausgefällt und durch die 2. heiß-saure Laugung getrennt. In einer vor der Elektrolyse liegenden Laugenreinigungsstufe werden Kupfer und Cadmium durch Zementationsreaktionen mit Zinkstaub abgetrennt

und als Nebenprodukte gewonnen. Die Stufen sind durch Rückströme miteinander verbunden und beeinflussen sich daher wechselseitig.

Abbildung 29 fasst die wesentlichen ein- und ausgehenden Stoffströme des beschriebenen Prozesses zusammen. Diese stellen die Grundlage für das im Absatz 4.5.3 erstellte Fließschemasimulationsmodell dar. Prozessdaten und Anlageninformationen werden vom Projektpartner bereitgestellt bzw. im Rahmen von Betriebsbegehungen erhoben.

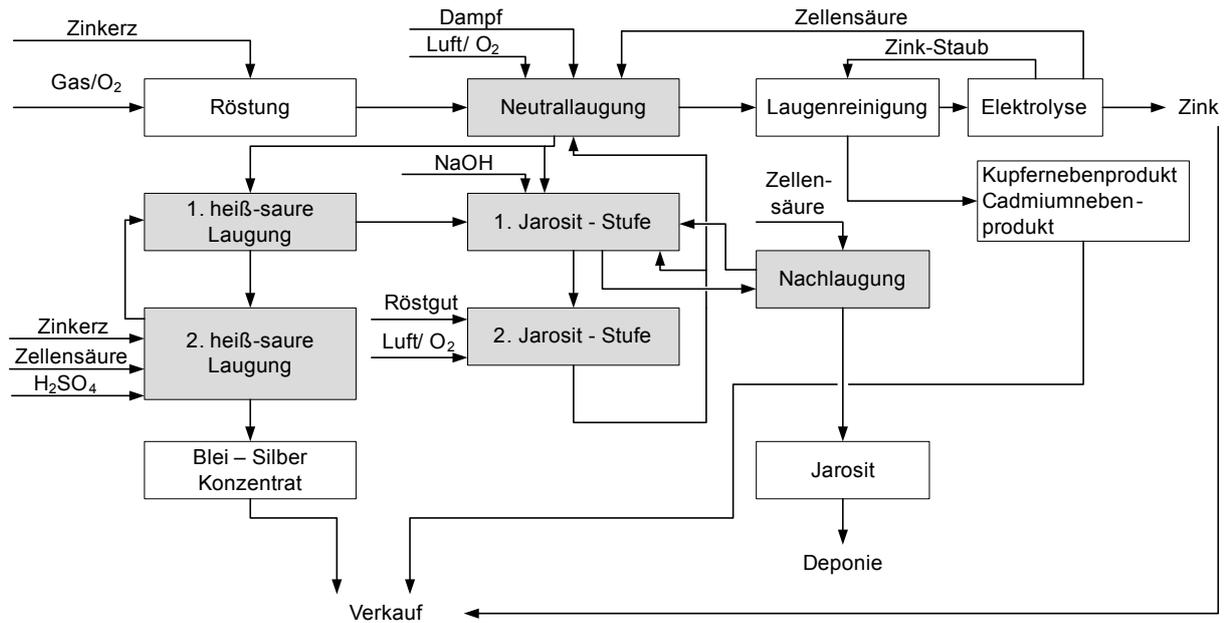


Abbildung 29: Relevante Stoffströme im hydrometallurgischen Zinkgewinnungsprozess

Abbildung 30 und Abbildung 31 zeigen die mittlere Elementzusammensetzung der Inputstoffströme Zellensäure, Röstgut und Konzentrat und die Aufteilung der Elemente auf die drei im Modell betrachteten Output-Ströme Zinksulfatlösung zur Laugenreinigung bzw. ungereinigte Neutrallaugung, Blei-Silber-Konzentrat und Jarosit.

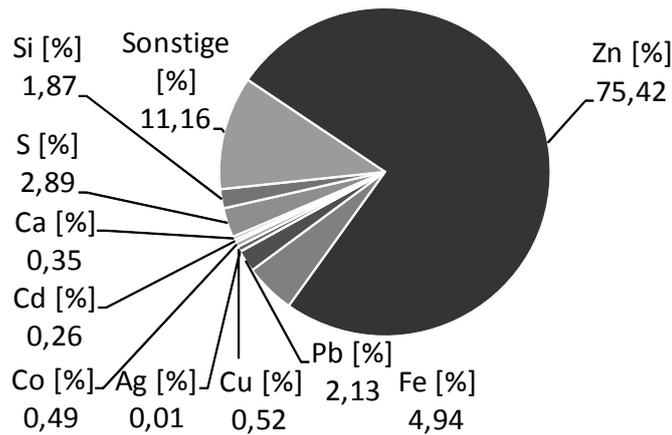


Abbildung 30: Mittlere Elementzusammensetzung der berücksichtigte Elemente in den Input-Stoffströmen Röstgut, Konzentrat und Zellsäure (Quelle: Mittelwerte der Daten der Projektpartner)

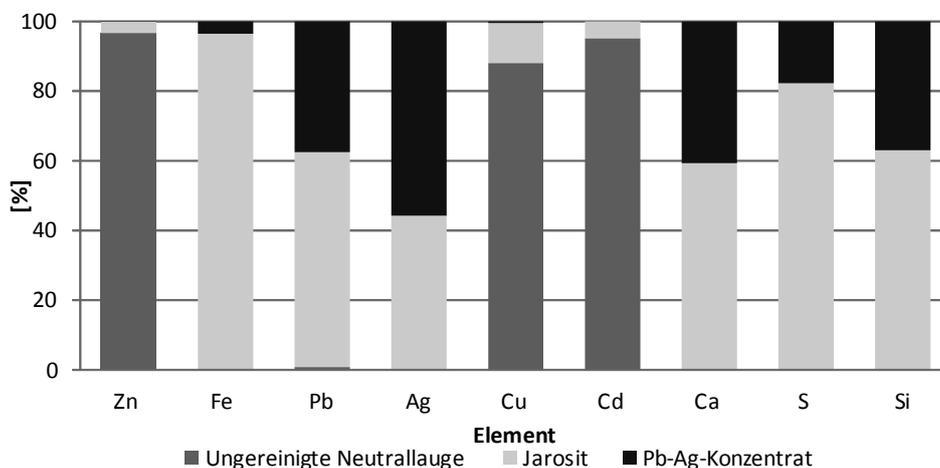


Abbildung 31: Aufteilung der berücksichtigten Elemente auf die Output-Stoffströme Pb-Ag-Konzentrat, Jarosit und ungereinigte Neutrallauge (Quelle: Mittelwerte der Daten der Projektpartner)

4.5.2 Datenerhebung als Grundlage der Modellbildung

Vom Projektpartner Xstrata werden die folgenden Daten bereitgestellt:

- Massen und Zusammensetzungen der Inputströme Röstgut, Konzentrat und Zellsäure sowie Volumenströme von Luft und Schwefelsäure,
- Massen und Zusammensetzungen der Outputströme Blei-Silber-Konzentrat und Jarosit,
- Prozessdaten wie Temperaturen, Konzentration von H_2SO_4 und von $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ sowie pH-Werte von Zwischenströmen,
- Volumen der Reaktoren sowie
- Masse des aus der Zinkelektrolyse gewonnenen Zinks sowie Massen des gewonnenen Kupfers und Cadmiums und das Fließschema der Anlage.

Die Genauigkeit, mit der das entwickelte Simulationsmodell die Vorgänge in der realen Anlage abbildet, hängt sehr stark von der Qualität der Originaldaten ab. Die Massen und die Zusammensetzungen des Blei-Silber-Konzentrats und des Jarosits, die Zusammensetzung der Zellsäuren sowie einige Betriebsdaten werden vor Ort nicht kontinuierlich erfasst. Da das Simulationsmodell auf Basis von Tagesmittelwerten kalibriert wird, müssen die Tagesmassen von Blei-Silber-Konzentrat und Jarosit auf Basis der Monatsmengen geschätzt werden. Der 50 %-ige Natronlaugenstrom und die Luftströme werden mit einem konstanten mittleren Volumenstrom angenommen. Die Temperaturen werden ebenfalls als konstant angenommen. Das beim Laugen nur sporadisch eingesetzte Konzentrat wird im Modell nicht berücksichtigt.

Im Hinblick auf die chemische Zusammensetzung der Inputströme müssen eine Reihe von Annahmen, insbesondere zur Zusammensetzung der Zellsäure in Abstimmung mit dem Projektpartner getroffen werden. Für die in der Anlage im Kreislauf geführte Zellsäure werden Konzentrationsmittelwerte für Pb, Fe, Cd und Cu für die Eingangslösung angenommen sowie die Konzentrationsmittelwert des Silber(I)Oxides Ag_2O für die Zusammensetzung des Röstguts geschätzt. Mit zwei Ausnahmen liegen alle untersuchten Elemente als Oxide vor (ZnO , PbO , CuO , CoO , CaO , CdO , und Ag_2O). Die zwei betrachteten Ausnahmen sind Zink, welches zu einem geringen Anteil als ZnS vorliegt und Eisen, welches zu ca. einem Viertel als Fe_2O_3 vorliegt. Für den Rest wird ZnFe_2O_4 angenommen. Zur Ergänzung der nicht dokumentierten Ein- und Ausgangsdaten werden in Zusammenarbeit mit dem Industriepartner Annahmen getroffen.

4.5.3 Fließschemasimulationsmodellerstellung und Kalibrierung

Auf der Grundlage der vom Projektpartner erhaltenen Daten und Informationen sowie einer Literaturrecherche wird das Fließschemasimulationsmodell für das Laugungsverfahren der Xstrata Zinkhütte mit dem Fließschemasimulationsprogramm AspenPlus erstellt. Das entwickelte stationäre Modell bildet die Stoff- und Energieströme in der Laugungsstufe d. h. in der Neutrallaugungsstufe, der 1. heiß-sauren Laugungsstufe, der 2. heiß-sauren Laugungsstufe, der 1. Jarositstufe, der 2. Jarositstufe und der Jarosit-Nachlaugung ab (vgl. Abbildung 32).

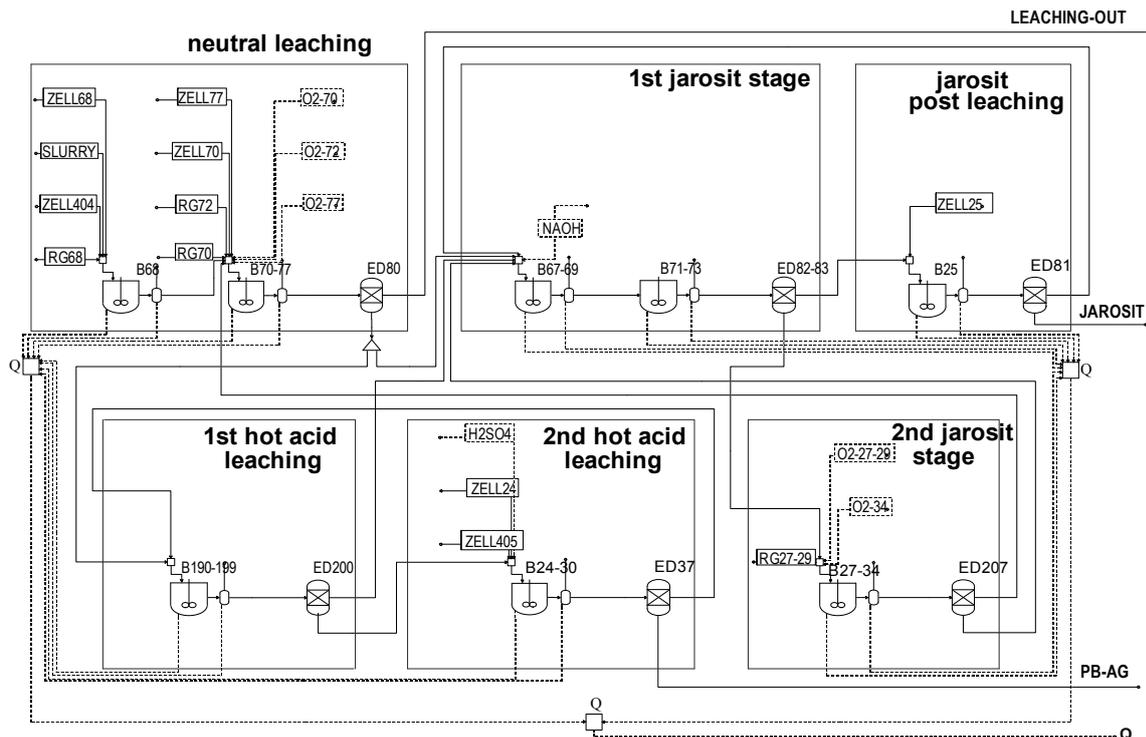
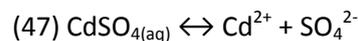
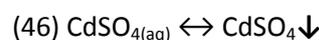
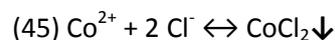
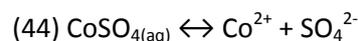
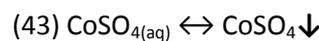
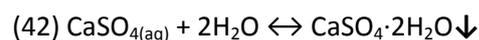
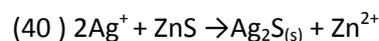
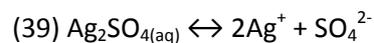
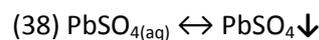
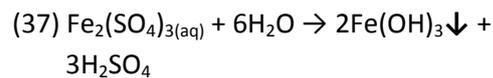
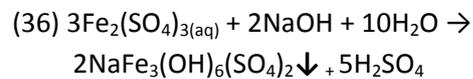
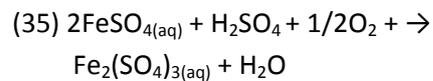
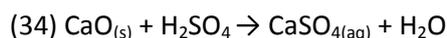
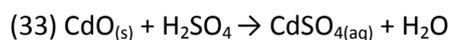
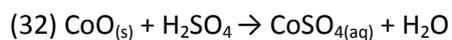
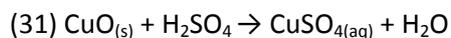
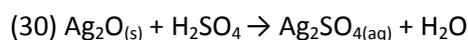
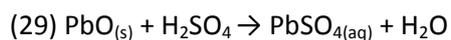
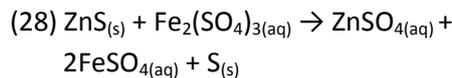
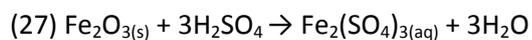
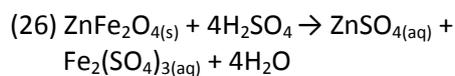
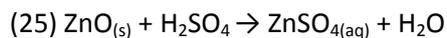
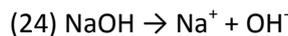
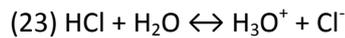
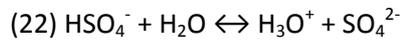


Abbildung 32: Fließschemasimulationsmodell des Laugungsprozesses zur Zinkgewinnung

Im Unterschied zu den anderen im Projekt erstellten Fließschemasimulationsmodellen handelt es sich bei dem Verfahren zur Zinkgewinnung um einen hydrometallurgischen Prozess. In der wässrigen Lösung finden hauptsächlich, in Abhängigkeit von Temperaturen und Säuregehalten, vollständige und partielle Dissoziationsreaktionen sowie Ausfällung und Lösung von Salzen statt. Diese bestimmen neben den Laugungsreaktionen der Metalloxide die vom Prozess ausgehenden Stoffströme. Die betrachteten Reaktionen beziehen sich auf den Lösungsvorgang der Stoffe, d. h. ionische Reaktionen in Lösung und Fällungsreaktionen. Dies wird durch einen sogenannten *Chemistry Block* in AspenPlus nachgebildet. Durch die Minimierung der freien Energie für alle in der Lösung berücksichtigten Reaktionen wird das Gleichgewicht in der Lösung errechnet. Zunächst werden die wesentlichen Gleichgewichtsreaktionen bezüglich der vorhandenen Substanzen identifiziert. Die im Folgenden dargestellten chemischen Reaktionen bilden, mit Schwefelsäure als Lösungsmittel, die Chemie der wässrigen Lösung im Modell ab. Die Laugungsvorgänge der Metalloxide (vgl. Gl. (25-34)), bei denen das Gleichgewicht nicht erreichbar ist, werden durch kinetische Grundoperationen RCSRT (siehe Absatz 3.1.2.2) abgebildet. Aufgrund der eingeschränkten Funktionalität des Chemistry Block muss die Redoxreaktion

des Eisens(II) zu Eisen(III) (vgl. Gl. (35)) durch kinetische Grundoperationen abgebildet werden.



Wegen der Inkompatibilität der kinetischen Grundoperation mit dem Chemistry Block, wird ein Laugungsbehälter durch die in Serie betriebenen Grundoperationen MIXER, RCSTR und FLASH-Reaktor im Modell abgebildet, wobei das von der Temperatur, dem pH-Wert und der Ionenaktivität abhängige chemische Gleichgewicht der Lösung (vgl. Gl. (20-24), Gl. (36-48)) in MIXER und FLASH-Grundoperationen abgebildet wird, während die kinetisch kontrollierten Laugungsreaktionen der Metalloxide (vgl. Gl. (25-35)) lediglich in den RCSTR-Grundoperationen berechnet werden. Die in den Eindickern stattfindende Abtrennung der Feststoffe wird im Modell durch eine Separation-Grundoperation abgebildet.

Das Berechnen einer solchen Kombination von Grundoperationen ist ein sehr zeitaufwändiger Schritt. Um Simulationszeit zu sparen, werden daher die in der Anlage in Kaskaden betriebenen Behälter durch die Summierung des Behältervolumens auf einen Behälter pro Stufe reduziert.

Die aus dem Röstprozess gelieferten Metalloxide (RG68, RG70, RG72 und SLURRY) werden direkt in der Neutrallaugungsstufe (Neutral-Leaching) eingesetzt. Nach der Mischung mit der Zellsäure (ZELL68, ZELL404, ZELL70 und ZELL77) und eines eventuellen Lufteinsatzes (O2-70, O2-72 und O2-77) wird der resultierende, gemischte Stoffstrom den in Serie geschalteten kinetischen Grundoperationen (B68, B70-77) zugeführt. Die kinetisch kontrollierten Laugungsreaktionen finden im Temperaturbereich von 60 °C bis 75 °C (vgl. Gl. (25-34)) statt. Daraufhin wird der aus dem Reaktor ausgehende Stoffstrom in den Flash-Separator eingespeist und hier wieder das sich einstellende chemische Gleichgewicht berechnet (vgl. Gl. (20-24) und Gl.(36-48)). Die nach dem Reaktionsprozess eventuell verbliebene gasförmige Phase und der verdunstete Anteil der Lösung werden durch den oberen Ausgangsstrom des Flash-Reaktors in die Umgebung abgegeben. In der Neutrallaugung wird, entsprechend einem pH-Wert von ca. 1,3 bis ca. 4, der Großteil von ZnO, PbO, CuO, CoO, CaO, CdO, Fe₂O₃ und Ag₂O nahezu vollständig aufgelöst, jedoch verbleiben ZnFe₂O₄ und ZnS fast ungelöst, da sie einen höheren Säuregehalt und Temperaturbereich zur Lösung benötigen. Aufgrund der bei den vorhandenen Bedingungen geringen Löslichkeit der Metallsulfide wird der Großteil des Schwefels von ZnS durch das in Lösung vorliegende Eisen(III) oxidiert, was die Freigabe des Zinks als ZnSO₄ zur Folge hat (vgl. Gl. (28)). Um das Eisen(III)-Eisen(II)-Redox-Gleichgewicht zu halten, wird Luft in den entsprechenden Reaktoren eingeblasen (vgl. Gl. (26-28, 35)). Bei den in der Neutrallaugung vorliegenden Bedingungen werden Pb²⁺, Ag⁺, Ca²⁺ und Fe³⁺ als PbSO₄, AgCl, Ag₂S, CaSO₄·2H₂O und Fe(OH)₃ nahezu vollständig ausgefällt und zusammen mit dem Rest der Feststoffverbindungen aus dem Unterstrom des Eindickers (ED80) der 1. heiß-sauren Laugungsstufe (1st hot acid leaching) zugeführt. Zink wird bei der Eisen(III)-Hydroxid-Ausfällung unter den passenden Einstellungen des Eindickers mit adsorbiert. Die entstandene Zinklösung wird der Laugenreinigung (LEACHING-OUT) zugeführt. Zusätzlich verbleiben Cu²⁺, Co²⁺ und Cd²⁺ sowie weitere Verunreinigungen wie Mg²⁺, Mn²⁺ und Cl⁻ in der Lösung.

Anschließend werden die abgetrennten Feststoffe der Neutrallaugung der 1. heiß-sauren Laugung (B190-199, B24-30) zugeführt und hierbei unter Zugabe von 98 %-iger Schwefelsäure (H_2SO_4), Zellensäure (ZELL405, ZELL24) und bei Temperaturen im Bereich von 80 °C bis 95 °C stärkeren Laugungsbedingungen unterzogen. Dies resultiert in der nahezu vollständigen Lösung des ZnFe_2O_4 bzw. der Oxidationsform des ZnS. Laugungsreaktionen (vgl. Gl. (25-35)) finden lediglich im Behälter (B190-199, B24-30) statt, während das Gleichgewicht der Lösung im Mixer und Flash-Reaktor berechnet wird. Der in der 2. heiß-sauren Laugungsstufe (B24-30) entstehende Blei-Silber-Rückstand wird durch den entsprechenden Eindicker (ED37) abgetrennt (PB-AG). Neben PbSO_4 , AgCl und Ag_2S werden auch $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, CoSO_4 , SiO_2 und der geringe Anteil des nicht reagierten ZnFe_2O_4 sowie ZnS separiert.

Der aus der heiß-sauren Laugungsstufe resultierende Stoffstrom (Überlauf des Eindickers ED200) hat einen hohen Eisengehalt, welcher ausgefällt und abgetrennt werden muss, um die spätere Zinkelektrolyse an den Kathoden nicht zu stören und diese nicht zu verunreinigen. Hierfür wird die saure Zinklösung in die entsprechenden nacheinander geschalteten Eisen-Fällungsreaktoren (B67-69, B71-73, B25) eingeleitet. Das Jarositverfahren beginnt im Reaktor B67-69 (1st jarosit stage) bei einem pH-Wert < 1 unter der erforderlichen Zugabe von Natronlauge (NaOH) in einem Temperaturbereich von 90 °C bis 95 °C. Das dreiwertige Eisen wird in der unlöslichen Jarositverbindung $\text{NaFe}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6$ zurückgehalten und anschließend durch die entsprechenden Eindicker (ED82-83, ED81) aus der Lösung abgetrennt und der Filterpresse zugeführt (JAROSIT). Die Jarositfällung endet bei einem pH-Wert von ca. 1,5. Hierbei wird im Temperaturbereich von 70 °C bis 75 °C in der 2. Jarosit-Stufe (B27-34) Röstgut (RG27-29) zudosiert. Dadurch wird die Lösung neutralisiert. Des Weiteren wird Sauerstoff (O2-27-29) für die Oxidation des Eisens benötigt. Das in der Lösung der 2. Jarosit-Stufe verbleibende Eisen(III) wird durch die Neutralisation als Eisen(III)-Hydroxid ausgefällt. Die bei der Jarositbildung mitgefällten Fremdkationen, Zn^{2+} , Ag^+ , Cu^{2+} , Cd^{2+} und Co^{2+} werden durch die Einstellung der Abtrennung in den Separationsgrundoperationen (ED82-83, ED81) berücksichtigt. PbSO_4 , AgCl , SiO_2 und $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ werden zusammen mit dem Jarosit abgetrennt. Die abgetrennten Feststoffe der 2. Jarosit-Stufe (ED207) und die Lösung der Jarosit-Nachlaugung (ED81) werden zusammen in die 1. Jarosit-Stufe zurückgeführt. Schließlich wird das aus den jeweiligen heiß-sauren Laugungsstufen und Jaro-

sitstufen gewonnene Zink, das etwa 35 % der gesamten Zink-Ausbeute ausmacht, wieder in die Neutrallaugung zurückgeführt. 1. Jarosit-Stufe, 2. Jarosit-Stufe sowie Jarosit-Nachlaugung (jarosit post leaching) folgen wiederum dem für die anderen Stufen dargestellten Verfahrensablauf.

Zur Kalibrierung des Fließschemamodells werden kinetische Parameter der entsprechenden Laugungsreaktionen sowie der Redoxreaktion des Eisens (vgl. Gl. (25-35)), die Verteilungskoeffizienten der jeweiligen Eindicker und Abscheider und die Gleichgewichtskonstanten von bestimmten Dissoziations- und Salzgleichgewichten solange angepasst, bis bei Verwendung von Eingangsdaten des Projektpartners die vom Modell berechneten Prozessausgangsstoffströme den erhobenen Ausgangsdaten der Zwischen- und Endstoffströme entsprechen. Das erstellte hydrometallurgische Modell reagiert sensitiv auf die chemischen Eigenschaften der Lösung bzw. auf die pH-Werte und die ionische Aktivität der Lösung. Je genauer die Lösung nachgebildet werden kann, desto bessere Ergebnisse lassen sich aus dem Modell schließen. Hierzu wird das Löslichkeitsgleichgewicht für bestimmte Verbindungen wie $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ und CdSO_4 mit Hilfe von Regressionsmodellen der Software AspenPlus, welche auf Daten (Temperaturen und zugehörige Zusammensetzungen) aus der Literatur (vgl. Azimi 2007) angewendet werden, abgebildet. Ebenso müssen für thermodynamische Parameter der nicht in der AspenPlus Datenbank erfassten Verbindungen, bspw. von Jarosit, auf Literaturdaten zurückgegriffen werden (vgl. Arslan 2001, Drouet 2002, John 1999, Perry 1997).

Die Abbildung der Löslichkeitsgleichgewichte der Salzfällung in AspenPlus hat einen großen Einfluss auf die Genauigkeit des Modells. Die Komplexität der Lösung aufgrund der zahlreichen Verbindungen stellt eine große Herausforderung für das Modell dar. Außerdem werden Diffusions-Phänomene in den verwendeten RCSTR-Grundoperationen nicht berücksichtigt. Die Laugungsreaktionen sind diffusionskontrollierte Reaktionen, d. h. die Reaktionsgeschwindigkeit wird durch den Stofftransport zwischen der flüssigen Phase und den Festkörpern der Metalloxide bestimmt. Die Kumulierung von festen Reaktionsprodukten wie Schwefel oder von Salzen wie Bleisulfat PbSO_4 an der Oberfläche der Metalloxid-Komplexe behindert graduell die Reaktionsgeschwindigkeit. Das Modell erzielt insgesamt dennoch eine gute Aufteilung der Komponenten in die drei

Ausgangsströme bzw. eine gute Salzbildung in Abhängigkeit der pH-Werte und Temperatur in den jeweiligen Stufen.

4.5.4 Untersuchung des möglichen Einsatzes von Wälzoxid in der 2. Jarosit-Stufe der Laugung der hydrometallurgischen Zinkgewinnung

Das für den betrachteten hydrometallurgischen Prozess entwickelte Fließschemasimulationsmodell unterscheidet sich in vielfacher Hinsicht von den Modellen der betrachteten pyrometallurgischen Prozesse. Die vergleichsweise größere Anzahl der zu definierenden chemischen Reaktionen bzw. Komponenten und Ionen sowie die vier Kreislaufströme erschweren die Konvergenz des Modelles. Für eine Konvergenz ist eine erhebliche Anzahl von Iterationsschleifen notwendig, wobei bereits ein Durchlauf eine vergleichsweise hohe Rechenzeit von ca. einer Stunde aufweist. Aus diesem Grund und da die die Zinkelektrolyse betreffenden Szenarien sich jeweils nur auf einen Prozess auswirken, wird anstelle des Ansatzes über Transformationsfunktionen eine direkte Auswertung der Szenarien mit dem AspenPlus-Modell verfolgt. Demzufolge wird die Laugung nicht in das Gesamtmodell zur Quantifizierung der Szenarien zur Erhöhung der Ressourcen- und Energieeffizienz im betrachteten Netzwerk der Eisen- und Stahlindustrie (siehe Absatz 5.1) integriert.

Durch direkte Fließschemasimulation und anschließende Bewertung wird überprüft, welche Auswirkungen der Einsatz der bei der Verwertung aus dem Wälzrohr anfallenden Wälzoxide auf die hydrometallurgische Zinkgewinnung, die Kuppelprodukterzeugung und die Energiebilanz der Laugungsstufe haben. Hierzu wird der Röstgut-Stoffstrom der 2. Jarosit-Stufe durch den gewaschenen Wälzoxid-Stoffstrom ersetzt. In mehreren Szenarien wird ein Wälzoxid-Anteil von 10 %, 20 %, ..., 100 % betrachtet.

Am Ergebnis des berechneten Szenarios lässt sich erkennen, dass die Erzeugung von Jarosit bei 100 % Einsatz von Wälzoxiden in der Laugungsstufe aufgrund des geringeren Eisengehalts des Wälzoxides leicht zurückgeht (etwa 6 %). Die Zinkgewinnung nimmt dagegen leicht zu (ca. 1 %). Außerdem lässt sich ein geringerer Energieverbrauch bei der Laugungsstufe (etwa 13 %) feststellen (vgl. Abbildung 33). Dies ist insbesondere auf den geringeren Zinkferritgehalt des Wälzoxides zurückzuführen. Einerseits weist Zinkferrit eine hohe spezifische

Wärmekapazität ($C_p=33,15 \text{ cal}/(\text{mol}\cdot\text{K})$) im Vergleich zu den anderen Metalloxiden auf und andererseits wird weniger Jarosit gebildet. Diese beiden Umstände führen zu einem insgesamt geringeren Energieverbrauch, da weniger Energie benötigt wird, um die Temperatur des Zinkferrits zu erhöhen bzw. weniger Energie in der endothermen Reaktion zur Jarositbildung verbraucht wird (vgl. Abbildung 33).

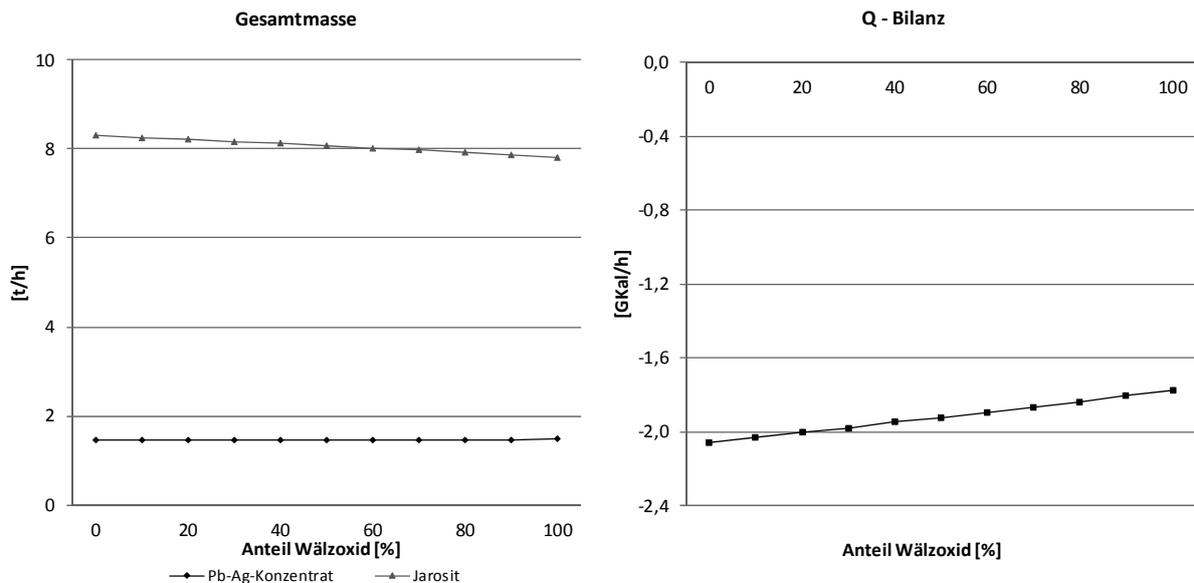


Abbildung 33: Bewertung der Auswirkungen des Einsatzes von Wälzoxid in der hydrometallurgischen Zink-Gewinnung. Darstellung der Gesamtmasse der Pb-Ag-Konzentrat- und Jarosit-Ausgangströme sowie des Energieverbrauches in Abhängigkeit des Einsatzes von Wälzoxid

Als Schlussfolgerung der Untersuchung wird der Einsatz des Wälzoxides in der hydrometallurgischen Zink-Gewinnung positiv bewertet, da geringere Mengen an Jarosit zur Deponierung anfallen und weniger Energie in der Laugung benötigt wird.

Eine wirtschaftliche Abschätzung auf Basis ökonomischen Daten bspw. Betriebskosten, und Transportkosten der Integration der beiden Anlagen ist notwendig, um die Machbarkeit dieser Maßnahme ökonomisch zu bewerten.

5 Berechnung und Bewertung ausgewählter Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz im ERESTRE-Netzwerk

Im vorliegenden Kapitel wird in Abschnitt 5.1 zunächst die Erstellung des Gesamtmodells zur Quantifizierung von Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz im betrachteten Netzwerk der Eisen- und Stahlindustrie dargestellt. Das Gesamtmodell verbindet die im vorangegangenen Kapitel berechneten Transformationsfunktionen der einzelnen Prozesse. In Abschnitt 5.2 werden dann ausgewählte Szenarien mit dem Gesamtmodell untersucht, so dass die im vorangegangenen Kapitel identifizierten Maßnahmen hinsichtlich ihrer ökologischen und ökonomischen Auswirkungen bewertet werden können. Dabei wird auch auf die Rückkopplungen zwischen den einzelnen Szenarien eingegangen und abschließend Gesamtszenarien dargestellt.

5.1 Erstellung eines Gesamtmodells zur Quantifizierung der Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz

Die im vorangegangenen Kapitel bestimmten Transformationsfunktionen der im ERESTRE-Projekt betrachteten Prozesse werden gemäß den Ausführungen in Abschnitt 3.3 in ein Gesamtmodell zur Quantifizierung von Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz im ERESTRE-Netzwerk überführt. Die Struktur dieses Modells ist in Abbildung 34 dargestellt. Dabei werden in Abhängigkeit von konstanten Standardaufgaben wie Schrott oder Reststoffen, die außerhalb des ERESTRE-Netzwerkes anfallen, und den Massenströmen aus vorgelagerten Prozessschritten, die resultierenden Outputmassenströme, die benötigten Zuschläge und Energie sowie die CO₂-Emissionen mit den entsprechenden Transformationsfunktionen berechnet. Für die Massenströme zwischen den Prozessen erfolgt dies jeweils für die in Kapitel 4 festgelegten Verbindungen. Die Definition eines Szenarios besteht in der Festlegung der internen und externen Verwertungsraten, d. h. der Anteile des jeweiligen Reststoffes in den identifizierten Verwertungsoptionen. Davon und von den Standardaufgaben ausgehend können grundsätzlich alle resultierenden Stoff- und Energieströme berechnet werden. Eine Ausnahme bildet dabei das integrierte Hüttenwerk, bei dem die zu produzierende Stahlmasse konstant ist, so dass die jeweils erforderliche Erzmenge berechnet wird.

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

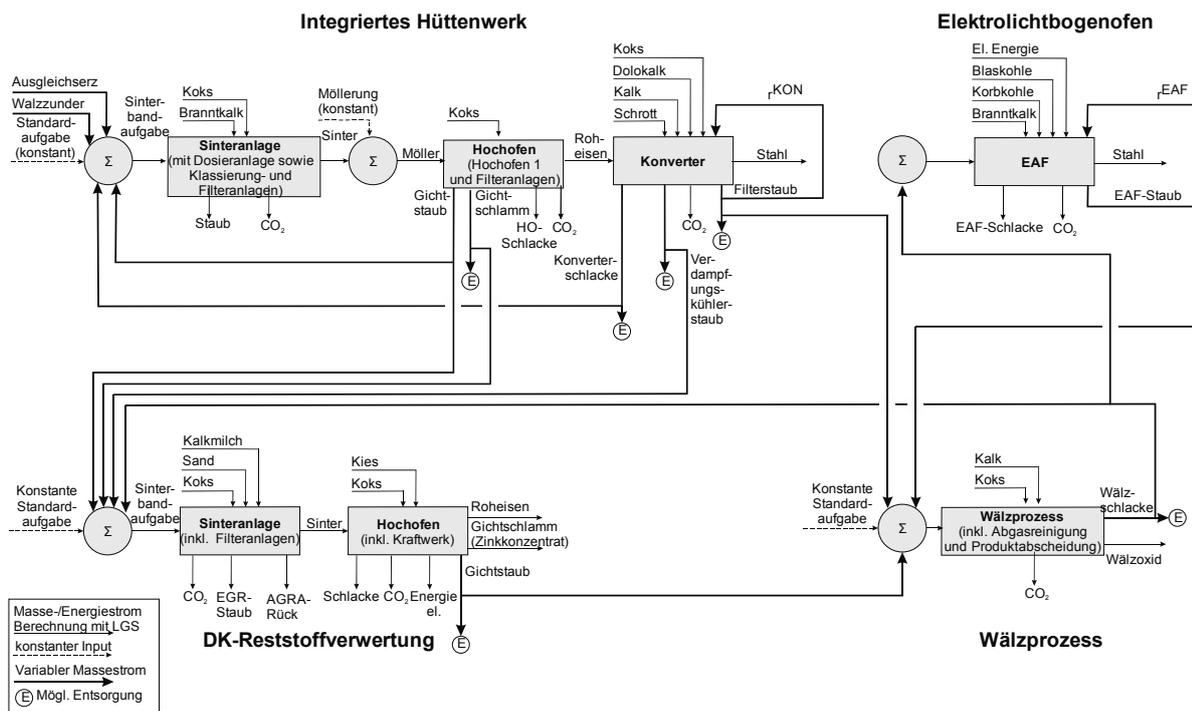


Abbildung 34: Struktur des ERESTRE-Gesamtmodells

Das integrierte Hüttenwerk wird durch die Transformationsfunktionen der Sinteranlage, des Hochofens und des Konverters beschrieben. Die Sinterbandaufgabe besteht im ERESTRE-Gesamtmodell aus einem konstanten Massenstrom, der sich aus der mittleren berechneten Zusammensetzung der tatsächlichen Sinterbandaufgabe (vgl. Abschnitt 4.1.2.1) abzüglich der betrachteten Reststoffe und daher zusätzlich zu den optional in der Sinteranlage einsetzbaren Reststoffen Walzunder, Konverterschlacke und Gichtstaub zusammensetzt. Während Masse und Konzentration von Walzunder im Falle dessen Verwertung ebenfalls konstant sind, handelt es sich bei den beiden anderen Reststoffen um Rückführungen aus dem Hüttenwerksprozess. Die jeweiligen Verwertungsraten werden exogen in Abhängigkeit der Anforderungen des zu untersuchenden Szenarios festgelegt.

Für die Gesamtkapazität des integrierten Hüttenwerkes wird angenommen, dass die ausgebrachte Konverterstahlmenge konstant ist. Infolgedessen ist die zusätzlich direkt über den Bunker in der Sinteranlage der Sinterbandaufgabe zugemischte Erzmasse (vgl. Abschnitt 4.1.1.1) eine variable Größe. Diese wird vom Gesamtmodell so gewählt, dass genau die vorgegebene Stahlmenge unter Berücksichtigung der festgelegten Rückführraten produziert wird.

Die Sinterbandaufgabe wird demnach als Summe aus den genannten Massenströmen und der benötigten Masse des Ausgleichserzes berechnet. Die Transformationsfunktionen der Sinteranlage bestimmen daraus die Massen und gegebenenfalls Zusammensetzungen an produziertem Sinter, Staub und CO₂-Emissionen aus der Sinteranlage und die benötigten Massen an Koks und Branntkalk.

Der Möller wird durch Addition eines konstanten Massenstromes für die Zuschläge des Olivins und Bauxits (vgl. Abschnitt 4.1.1.2) berechnet, wobei die zugeschlagenen Mengen an Koks über eine Transformationsfunktion aus dem Möller berechnet werden. Die restlichen Transformationsfunktionen des Hochofens bestimmen die Massen und Zusammensetzungen von Roheisen, Gichtstaub und -schlamm sowie die Masse der anfallenden Hochofenschlacke und der CO₂-Emissionen.

Die berechneten Werte des Roheisens bestimmen gemeinsam mit der vorgegebenen internen Rückführrate für den Konverterfilterstaub die im Konverter zur Produktion der definierten Stahlmenge benötigten Massen an Kühlschrott, Koks, Kalk und Dolomitkalk, die Massen und Zusammensetzungen der dabei anfallenden Reststoffe (Konverterfilterstaub, Konverterverdampfungskühlerstaub und Konverterschlacke) sowie die CO₂-Emissionen des Prozesses.

Gemäß den Ausführungen in Abschnitt 4.3.4 wird im Elektrolichtbogenofen davon ausgegangen, dass mögliche Massen in den Ofen eingebrachter Wälzschlacke aufgrund ihrer Körnigkeit, und rückgeführte EAF-Staubmassen aufgrund der Einbringung über die Lanze mit der Blaskohle nicht zur Verdrängung von Schrott führen. Daher ist die Masse an Schrott im Gesamtmodell konstant bzw. wird dort nicht abgebildet. Die Transformationsfunktionen des EAF berechnen aus der vorgegebenen Rate zur internen Rezirkulation von EAF-Staub sowie der Masse und Zusammensetzung eingesetzter Wälzschlacke die Auswirkungen auf die Stahlmasse, die Schlackemasse, Masse und Zusammensetzung des EAF-Staubes, die benötigten Mengen an Blaskohle, Korbkohle, Dolomitkalk, Kalk und elektrischer Energie und die CO₂-Emissionen des EAF.

Unabhängig von einer möglichen Rezirkulation wird der EAF-Staub vollständig im Wälzprozess recycelt. Die Aufgabemischung des Wälzprozesses enthält weiterhin einen konstanten Massenstrom zur Abbildung der Reststoffe von Quel-

len außerhalb des betrachteten Netzwerkes sowie die möglicherweise eingesetzten Massen an Gichtstaub aus dem DK-Prozess und den Konverterfilterstaub aus dem integrierten Hüttenwerk. Es wird demnach davon ausgegangen, dass die entsprechenden Wälzrohrkapazitäten verfügbar sind. Mittels der Transformationsfunktionen des Wälzprozesses werden die Zuschläge an Kalk und Koks, die Massen von Wälzoxid und darin enthaltenem ZnO sowie von der Wälzschlacke und die entstehenden CO₂-Emissionen berechnet.

Für die DK-Hüttenreststoffwertung wird in Analogie zum Wälzprozess angenommen, dass die im Projekt betrachteten Reststoffe zusätzlich zu den bereits durch die DK verwerteten Materialien zugeführt werden. Folglich ergibt sich die Masse der DK-Sinterbandaufgabe im Gesamtmodell aus der Summe der Reststoffe anderer Quellen und der optional einsetzbaren Massen an Wälzschlacke sowie Gichtstaub, Gichtschlamm und Verdampfungskühlerstaub aus dem integrierten Hüttenwerk. Aus diesem Aufgabenstrom bestimmen sich mit den Transformationsfunktionen die Masse und Zusammensetzung des Sinters, die Massen an EGR-Staub und dem AGRA-Rückstand sowie die benötigten Massen an Kalkmilch, Sand und Koksgrus. In Abhängigkeit des berechneten Sinters liefern die Transformationsfunktionen des DK-Hochofenmodells die Massen an Roheisen, Zinkkonzentrat, Gichtstaub und CO₂ sowie Zuschläge an Koks und Kies. Für den Gichtstaub und Roheisen werden die Zusammensetzungen und für das Zinkkonzentrat der Anteil an Zinkoxid berechnet. Weiterhin wird die mit dem Gichtgas im DK-Kraftwerk produzierte elektrische Energie berechnet¹⁹.

Zusammenfassend sind in Tabelle 9 die im ERESTRE-Gesamtmodell untersuchten Reststoffe mit den abgebildeten Verwertungsoptionen und den für die Berechnung eines Szenarios möglichen Werten angegeben. Im folgenden Abschnitt werden die einzelnen Verwertungsoptionen isoliert bzw. teilweise als Kombinationen untersucht. In der Spalte Referenzfall sind diejenigen Verwertungsraten angegeben, die jeweils angenommen werden, wenn die zugehörige Verwertungsoption in einem Szenario nicht explizit analysiert wird. Die Werte entsprechen grundsätzlich den in den realen Prozessen bereits realisierten Verwertungsraten. In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse der Szenarioberechnungen und deren Bewertungen detailliert vorgestellt.

¹⁹ Die Produktion elektrischer Energie im integrierten Hüttenwerk wird aufgrund des Verbundhüttengasnetzwerkes nicht berücksichtigt.

Tabelle 9: Reststoffe und deren Verwertungsoptionen im ERESTRE-Gesamtmodell

Quelle	Reststoff	Verwertungsoptionen	Wertebereich	Referenzfall
Elektrolichtbogenofen (EAF)	EAF-Staub	Extern im Wälzprozess	100 %	100 %
		Rückführung EAF	0-40 %	0 %
Wälzprozess	Wälzschlacke	Extern im EAF	0-100 %	0 %
		Extern im DK-Prozess	0-100 %	0 %
DK-Prozess	DK-Gichtstaub	Extern im Wälzprozess	0-100 %	0 %
Integriertes Hüttenwerk	Gichtstaub	Intern über Sinteranlage	0-100 %	100%
		Extern im DK-Prozess	0-100 %	0 %
	Gichtschlamm	Extern im DK-Prozess	0-100 %	0 %
	Konverterschlacke	Intern über Sinteranlage	0-6 %	6 %
	Konverterverdampfungskühlerstaub	Extern im DK-Prozess	0-100 %	0 %
	Konverterfilterstaub	Extern im Wälzprozess	0-100 %	0 %
		Rückführung Konverter	0-40 %	0 %
	Walzzunder	Intern über Sinteranlage	0-100 %	100 %

5.2 Ergebnisse der Szenarien und deren Auswirkungen auf CO₂-Emissionen, Energieeffizienz sowie Wirtschaftlichkeit

Das im vorangegangenen Abschnitt dargestellte Gesamtmodell des ERESTRE-Netzwerkes wird eingesetzt, um mögliche Szenarien zur Erhöhung der Ressourceneffizienz anhand der Auswirkungen auf den kumulierten Energieaufwand, die CO₂-Emissionen sowie die relevanten Kosten und Erlöse zu bewerten. Um die Auswirkungen der im ERESTRE-Projekt identifizierten Reststoffe auf Stoff- und Energieströme, CO₂-Emissionen, Energieeffizienz und Wirtschaftlichkeit zu analysieren, werden für die in Tabelle 9 angegebenen Verwertungsoptionen der Reststoffe jeweils die oberen Grenzen des angegebenen Wertebereichs untersucht, so dass die maximal möglichen Auswirkungen auf die Prozesse dargestellt werden können. Als Referenzfall für in der Realität bereits verwertete Reststoffe wird angenommen, dass der jeweilige Reststoff einer Entsorgung zugeführt wird, die keine Auswirkungen auf die CO₂-Emissionen und die Energieeffizienz hat. Hierbei kann es sich beispielsweise um eine Deponierung, Bergversatz oder Verwertung im Deponiebau handeln. Für diejenigen Reststoffe, für die eine derartige Verwendung oder Verwertung bekannt ist, werden im Rahmen der ökonomischen Bewertung die jeweiligen Kosten für die Alternative angesetzt, falls diese Alternative tatsächlich besteht bzw. mögliche Kosten, falls die Alternative nicht wahrgenommen wird.

5.2.1 Untersuchung der möglichen Verwertung von Wälzschlacke im Elektrolichtbogenofen

Die Wälzschlacke der Befesa wird derzeit im Deponiebau verwertet. Die beiden im ERESTRE-Projekt identifizierten alternativen Verwertungsoptionen im Elektrolichtbogenofen und DK-Prozess werden im vorliegenden Abschnitt untersucht, indem im ERESTRE-Gesamtmodell jeweils die Gesamtmasse der im Wälzrohr am Standort Duisburg produzierten Wälzschlacke den beiden Aggregaten zugeführt wird. In diesem Abschnitt wird zunächst die Verwertung im Elektrolichtbogenofen untersucht, im folgenden Abschnitt 5.2.2 die Verwertung im DK-Prozess. Unberücksichtigt bleiben zunächst andere, gleichzeitig durchführbare Verwertungsoptionen, wie internes Recycling von EAF-Staub oder Einsatz zusätzlicher Reststoffe im Wälzrohr, die einen Einfluss auf die betroffenen Prozesse haben. Damit wird gewährleistet, dass die Effekte isoliert von den anderen Maßnahmen quantifiziert und bewertet werden.

In Tabelle 10 sind die mit dem Gesamtmodell ermittelten relativen Auswirkungen des Einsatzes der Wälzschlacke im Elektrolichtbogenofen auf die Stoff- und Energieströme des Elektrolichtbogenofens und des Wälzrohrs dargestellt. Der Einfluss auf das Wälzrohr rührt aus der Verwertung des EAF-Staubes im Wälzrohr.

Tabelle 10: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im EAF auf Massen- und Energieströme des EAF und Wälzprozesses

EAF	Korbkohle	Blaskohle	El.Energie	Branntkalk	Dolomitkalk	Stahl	Schlacke	EAF-Staub
	+44,94 %	+1,73 %	+7,73 %	+0,07 %	-23,87 %	+1,23 %	+3,68 %	+17,66 %

Wälzprozess	Aufgabe	Koks	Kalk	Wälzoxid (WO)	Zinkoxid im WO	Wälzschlacke
	+6,16 %	-0,32 %	-4,34 %	+30,26 %	+11,45 %	+4,76 %

Es lässt sich zunächst beobachten, dass die benötigte Masse an Korbkohle um fast 50 % ansteigt. Da Eisen, Zink und andere Bestandteile der Wälzschlacke als Oxide vorliegen (siehe Tabelle 11), erklärt sich dieser Anstieg durch den erhöhten Reduktionsmittelbedarf im Vergleich zum metallischen Schrott. Der über die Wälzschlacke eingebrachte Kohlenstoff kann diesen Effekt aufgrund der geringen Konzentration nicht in relevantem Umfang ausgleichen.

In Tabelle 10 wird außerdem ein geringer Anstieg des Bedarfes an Blaskohle ausgewiesen. Da ein zusätzlicher Bedarf an Blaskohle im Fließschemasimulationsmodell des EAF lediglich bei der internen Rezirkulation von EAF-Staub entstehen kann (siehe Abschnitt 4.3.3), ist dieser Effekt auf die Struktur der Transformationsgleichungen zurückzuführen. Da bei Einsatz von Wälzschlacke und gleichzeitiger EAF-Staub-Rezirkulation die Masse an EAF-Staub größer ist als im Fall ohne Wälzschlackeeinsatz, besteht über diesen Weg eine indirekte Abhängigkeit zwischen Wälzschlackeeinsatz im EAF und Blaskohle. Bedingt durch die linearen Transformationsfunktionen, die im Gesamtmodell nicht in Abhängigkeit der Szenarien formuliert sind, kommt es daher auch bei einer Rezirkulationsrate des EAF-Staubes von 0 % zu einer geringfügigen Auswirkung auf die Blaskohle.

Tabelle 11: Zusammensetzung der Wälzschlacke mit und ohne Wälzschlackeeinsatz im Elektrolichtbogenofen

Wälzschlackeeinsatz EAF	FeO	ZnO	PbO	C	CaO	SiO ₂	MgO	Rest	K ₂ O	Na ₂ O
Delta 0 % - 100 %	-4,75 %	7,05 %	20,8 %	-8,86 %	-1,10 %	-2,43 %	-4,40 %	-1,66 %	8,67 %	8,85 %

Durch die Fraktionen an MgO, SiO₂ und CaO in der Wälzschlacke (siehe Tabelle 11) und die sich hieraus ergebende MgO-Konzentration und Basizität werden ca. 20 % des Dolomitskalks eingespart und der Bedarf an CaO wird durch die Maßnahme kaum erhöht. Die zur Einschmelzung der um die Wälzschlacke erhöhten Charge zusätzlich benötigte elektrische Energie bewegt sich bei knapp 10 %.

Das in der Wälzschlacke zu fast 50 % enthaltene Eisenoxid (siehe Tabelle 11) findet sich zu großen Mengen im EAF-Stahl wieder, so dass die Stahlausbringung erhöht werden kann. Dass sich die relative Änderung im unteren einstelligen Prozentbereich bewegt, liegt daran, dass die über die Wälzschlacke eingebrachte Eisenmasse sich ebenfalls in diesem Verhältnis zum chargierten Schrott befindet.

Weitere Bestandteile der Wälzschlacke gehen in die EAF-Schlacke und in den EAF-Staub über, dessen Gesamtmasse sich um nahezu 20 % erhöht. Diese Erhöhung erklärt sich zu 80 % durch aus der Wälzschlacke zurückgewonnenes Zinkoxid. Die Auswirkungen auf die Zusammensetzung des EAF-Staubes sind in

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

Tabelle 12 dargestellt. Die Ergebnisse zeigen, dass über die Verwertung des zusätzlichen und in seiner Zusammensetzung veränderten EAF-Staubes im Wälzrohr über 10 % mehr Zinkoxid im Wälzoxid enthalten ist, so dass durch die Maßnahme neben der Rückgewinnung des Eisens auch die Ressourceneffizienz im Zinkkreislauf verbessert werden kann. Dabei handelt es sich um fast 50 % des ursprünglich in der Wälzschlacke enthaltenen und damit dem Deponiebau zugeführten Zinkoxids. Die restlichen Mengen gehen vor allem in die Schlacke des Elektrolichtbogenofens und in sehr geringer Konzentration, durch die große Stahlmasse jedoch in nicht zu vernachlässigender Menge, in den Stahl über.

Tabelle 12: Zusammensetzung des EAF-Staubes mit und ohne Wälzschlackeeinsatz im Elektrolichtbogenofen

Wälzschlackeeinsatz EAF	ZnO	Fe ₃ O ₄	PbO	NaCl	KCl	C	CaO	SiO ₂	MgO	Rest
Delta 0 % - 100 %	17,9 %	-17,7 %	27,1 %	-17,6 %	-17,3 %	-17,2 %	-	-10,4 %	-17,7 %	-9,18 %

Der Einsatz des veränderten EAF-Staubes im Wälzprozess führt darüber hinaus im ERESTRE-Gesamtmodell zu einem geringfügigen Rückgang des im Wälzprozess eingesetzten Koks. Obwohl über den EAF-Staub auch etwas mehr Kohlenstoff in das Wälzrohr eingebracht wird, kann dieser Effekt nicht mit dem realen Prozess erklärt werden, sondern ist auf Abweichungen bei der Berechnung des Koksbedarfs im Fließschemasimulationsmodell zurückzuführen (siehe Abschnitt 1.1). Der Rückgang an zugeschlagenem Kalk erscheint durch die erhöhte Basizität im EAF-Staub plausibel. Weiterhin steigt infolge des Wälzschlackeeinsatzes im EAF die Gesamtschlackemenge an.

Die Auswirkungen der dargestellten Ergebnisse auf die CO₂-Emissionen des EAF- und Wälzprozesses unter Berücksichtigung von Vorketten und Gutschriften sind in Abbildung 35 dargestellt. Als Gesamtergebnis zeigt sich, dass der Einsatz von Wälzschlacke im Elektrolichtbogenofen zu einer Erhöhung der CO₂-Emissionen führt. Wesentliche Treiber hierfür sind die direkten Emissionen aus dem Elektrolichtbogenofen infolge des deutlich erhöhten Einsatzes an Korbkohle und die Emissionen aus der Bereitstellung der zusätzlich benötigten elektrischen Energie. Ein weiterer relevanter negativer Beitrag entsteht durch den Transport der Wälzschlacke.

Ein Großteil dieser Emissionen kann jedoch durch die Gutschrift für den zusätzlich produzierten Elektrostahl kompensiert werden.

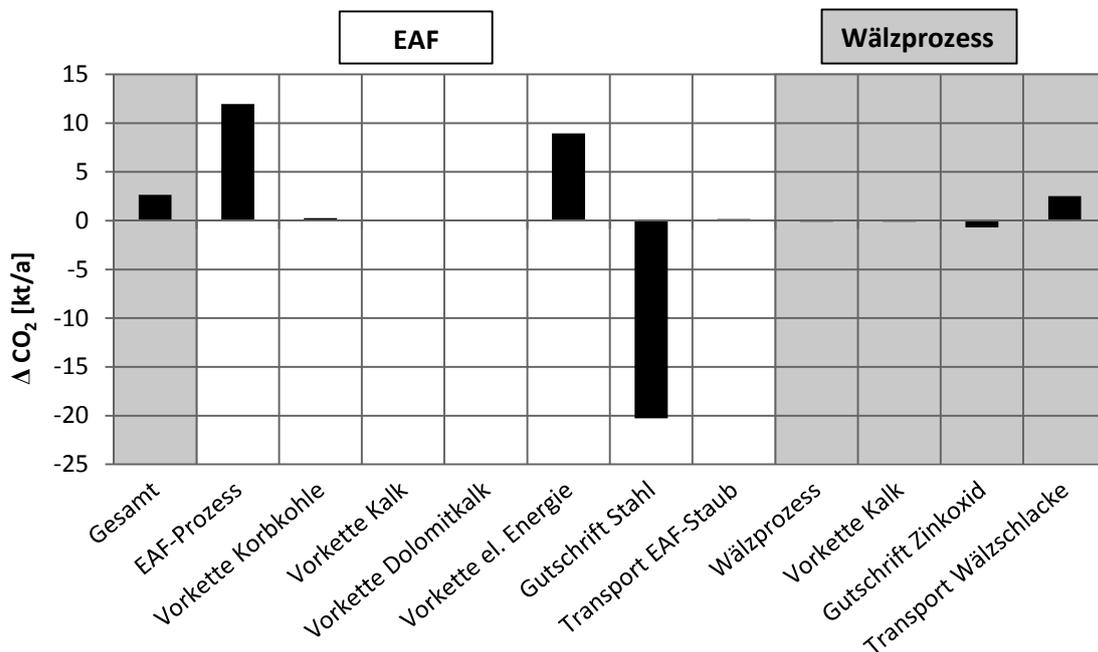


Abbildung 35: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im EAF auf die CO₂-Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten

Abbildung 36 zeigt die Ergebnisse für den kumulierten Energieaufwand. Dies entspricht grundsätzlich den beobachteten Effekten bei den CO₂-Emissionen, d. h. die Erhöhung des Energieaufwandes ist im Wesentlichen durch die Korbkohle, den elektrischen Strom und den Transport der Wälzschlacke begründet. Allerdings werden diese Effekte nun durch die Gutschrift für den Stahl überkompensiert und somit ergibt sich für das Szenario insgesamt eine Reduktion des kumulierten Energieaufwandes.

Hinsichtlich der wirtschaftlichen Bedeutung zeigen die Auswertungen, dass die Wälzschlackeverwertung im EAF unter den betrachteten Rahmenbedingungen ökonomisch vielversprechend ist. Ursächlich hierfür ist die Nutzung des in der Wälzschlacke enthaltenen Eisens im Elektrolichtbogenofen und des enthaltenen Zinks im Wälzrohr, was sich einerseits in den Erlösen durch den Verkauf des zusätzlichen Elektrostahls und andererseits in den Erlösen des Wälzoxides niederschlägt. Ein weiterer, vergleichsweise ebenso wichtiger Effekt ist darauf zurückzuführen, dass die Kosten für die Verwertung der Wälzschlacke eingespart werden können und dieser Einsparung vergleichsweise geringere zusätzli-

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

che Transportkosten der Wälzschlacke zum Elektrolichtbogenofen gegenüberstehen. Somit erscheint das Szenario sowohl für das Wälzrohr als auch als Gesamtszenario auch bei einem niedrigeren Zinkpreisniveau wirtschaftlich. Auch bei einem deutlich geringeren Stahlpreisniveau kann auf Basis der durchgeführten Analysen davon ausgegangen werden, dass die Wirtschaftlichkeit gewährleistet ist, d. h., dass der Anstieg der Kosten für elektrische Energie und Kohle gedeckt werden kann. Der Preis für die elektrische Energie stellt allerdings eine sensitive Größe dar, so dass dessen Erhöhung einen deutlichen Einfluss auf das Gesamtergebnis hat.

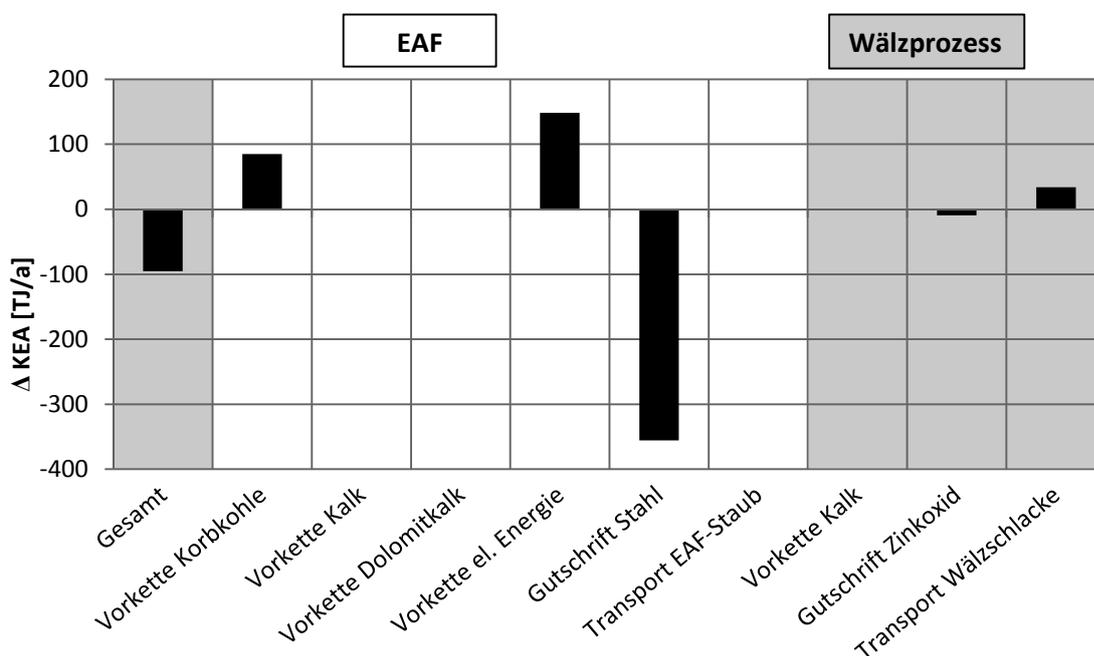


Abbildung 36: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im EAF auf den kumulierten Energieaufwand

Abschließend lässt sich auf Basis der durchgeführten Untersuchung zur Verwertung von Wälzschlacke im EAF feststellen, dass das Szenario attraktiv erscheint und somit in der Folge des ERESTRE-Projektes weiter verfolgt werden sollte. Weiterer Forschungsbedarf besteht hierbei in der Untersuchung des Einflusses von Elementen wie Kupfer, Aluminium und Mangan, die im ERESTRE-Projekt zwar als „Rest“ erfasst werden, jedoch durch ihre große Bedeutung für den Elektrolichtbogenofenprozess detaillierter betrachtet werden müssen. Auf ihre Umsetzbarkeit überprüft werden müssen zudem die Annahmen zu den Kapazitäten, d. h., ob Wälzschlacke tatsächlich im Elektrolichtbogenofen eingesetzt werden kann, ohne Schrott zu verdrängen und ob die benötigten Kapazitäten

im Wälzrohr verfügbar sind, um die zusätzlich produzierten EAF-Staubmengen zu verwerten. Können diese Annahmen nicht bestehen, wird die Wirtschaftlichkeit der Maßnahme deutlich beeinträchtigt. Ein weiterer Aspekt, der bei einer Weiterverfolgung der Maßnahme untersucht werden muss, ist die Implementierung in der Praxis und die damit verbundenen Erfordernisse. So muss bspw. auf dem Gelände des Elektrolichtbogenofens Fläche zur Zwischenlagerung der Wälzschlacke zur Verfügung gestellt werden. Die Chargierung der Wälzschlacke muss ferner in den organisatorischen und logistischen Ablauf integriert werden. Sollte diese Vorgänge zu zeitlichen Verzögerungen im Gesamtprozess führen, ist ebenfalls mit einer erheblichen Beeinträchtigung der Wirtschaftlichkeit zu rechnen.

5.2.2 Untersuchung der möglichen Verwertung von Wälzschlacke im DK-Prozess

Nachdem im vorangegangenen Abschnitt die Möglichkeit der Wälzschlackeverwertung im Elektrolichtbogenofen untersucht wurde, soll nun auf den Einsatz von Wälzschlacke im DK-Prozess eingegangen werden. Hierbei werden analog zum vorangegangenen Szenario die Ergebnisse des ERESTRE-Gesamtmodells für einen vollständigen Einsatz der im Modell anfallenden Wälzschlacke im DK-Prozess berechnet. Die Auswirkungen auf die Massen- und Energieströme der Sinteranlage und des Hochofens der DK sind in Tabelle 13 wiedergegeben.

Dabei ist zunächst zu beobachten, dass ein vollständiger Einsatz der Wälzschlacke des Duisburger Wälzrohres zu einer deutlichen Erhöhung der Auslastung der Anlagen der DK in einer Größenordnung von 10 % führen würde. Infolgedessen steigen die Bedarfe der Energieträger Koksgrus in der Sinteranlage und Koks im Hochofen.

Der DK-Prozess wird mit einer geringeren Basizität als das Wälzrohr gefahren, so dass die Wälzschlacke zu einem Mehrbedarf von 60 % an Sand in der Sinteranlage und einem zusätzlichen Bedarf an Kies in der Möllierung in Höhe von 10 % führt. Weiterhin korreliert die Zunahme der Masse an produziertem Sinter mit der zusätzlich eingesetzten Wälzschlacke. In einer ähnlichen Größenordnung steigt das Staubaufkommen der Sinteranlage.

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

Tabelle 13: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses

DK SA	SB Aufgabe	Koksgruß	Sand	Kalkmilch	Sinter	Staub	AGRA-Rückstand
	+11,68 %	+14,62 %	+58,32 %	-61,70 %	+11,85 %	+13,05 %	-62,48 %

DK HO	Koks	Kies	Roheisen	Gichtstaub	Zinkkonzentrat	ZnO im Zinkkonz.	Schlacke	Energie Kraftwerk
	+5,40 %	+13,56 %	+5,24 %	+16,58 %	+24,62 %	+23,13 %	+18,92 %	+7,92 %

Der Rückgang an Kalkmilch zur Bindung von Schwefeldioxid im Abgasstrom erklärt sich durch den konzentrationsbasierten SO_2 -Grenzwert. Durch die Gesamtzunahme des Abgasvolumenstromes ist somit ein vergleichsweise größerer absoluter Wert zulässig. Damit einhergehend reduziert sich auch die Masse des AGRA-Rückstandes. Da in der vorliegenden Arbeit Schwefel in der Wälzschlacke nicht abgebildet wird, tatsächlich jedoch niedrige Konzentrationen an Schwefel zu erwarten sind, werden diese Werte im ERESTRE-Gesamtmodell tendenziell leicht überschätzt.

Als Resultat der bisherigen Beobachtungen zeigt sich im Hochofenmodell eine um 5 % erhöhte Roheisenproduktion und infolge der stark erhöhten Zuschläge an SiO_2 -Trägern ein deutlich erhöhtes Schlackeaufkommen. Die Roheisenzusammensetzung bleibt nahezu konstant.

Die Massen an Gichtstaub und Zinkkonzentrat nehmen ebenfalls deutlich zu. Dabei erklärt sich die Zunahme beim Zinkkonzentrat zu 85 % durch zusätzliches Zinkoxid aus der Wälzschlacke und darüber hinaus durch etwas mehr Kohlenstoff und Blei aus der eingesetzten Wälzschlacke. Die Auswirkungen auf die Konzentrationen des Zinkkonzentrates im Gesamtmodell sind in Tabelle 14 dargestellt. Die Erhöhung der K_2O Konzentration auf niedrigem Gesamtniveau beruht darauf, dass für K_2O in der Wälzschlacke keine Daten vorlagen und diese Transformationsfunktion unsicher ist (vgl. Abschnitt 4.4.3). Im Falle des Gichtstaubes erklärt sich der Gesamtanstieg zu ca. 50 % durch zusätzliches Zinkoxid, weiterhin erhöhen sich insbesondere die Massen an Fe_3O_4 und Kohlenstoff im Gichtstaub. Die Erhöhung der Produktion elektrischer Energie aus dem Gichtgas im Kraftwerk bewegt sich bei 10 %.

Tabelle 14: Konzentration des DK-Zinkkonzentrates im Gesamtmodell mit und ohne Wälzschlackeverwertung im DK-Prozess

Wälzschlacke DK	ZnO	Fe ₃ O ₄	PbO	KCl	C	CaO	SiO ₂	MgO	Rest	K ₂ O	Na ₂ O
Delta 0 % 100 %	-1,21 %	-17,9 %	45,2 %	100 %	-8,48 %	-5,77 %	8,18 %	-	5,88 %	92,9 %	40 %

In Abbildung 37 sind die Auswirkungen des Wälzschlackeeinsatzes im DK-Prozess auf die CO₂-Emissionen dargestellt. Das Szenario führt demnach zu einer Zunahme der CO₂-Emissionen, die sich im Wesentlichen durch den erhöhten Einsatz an Koksgrus und Koks erklären und zu erhöhten Emissionen der Sinteranlage und des Hochofens führen. Positiv angerechnet werden die Gutschriften aus dem zusätzlich produzierten Eisen, Zinkoxid und der elektrischen Energie.

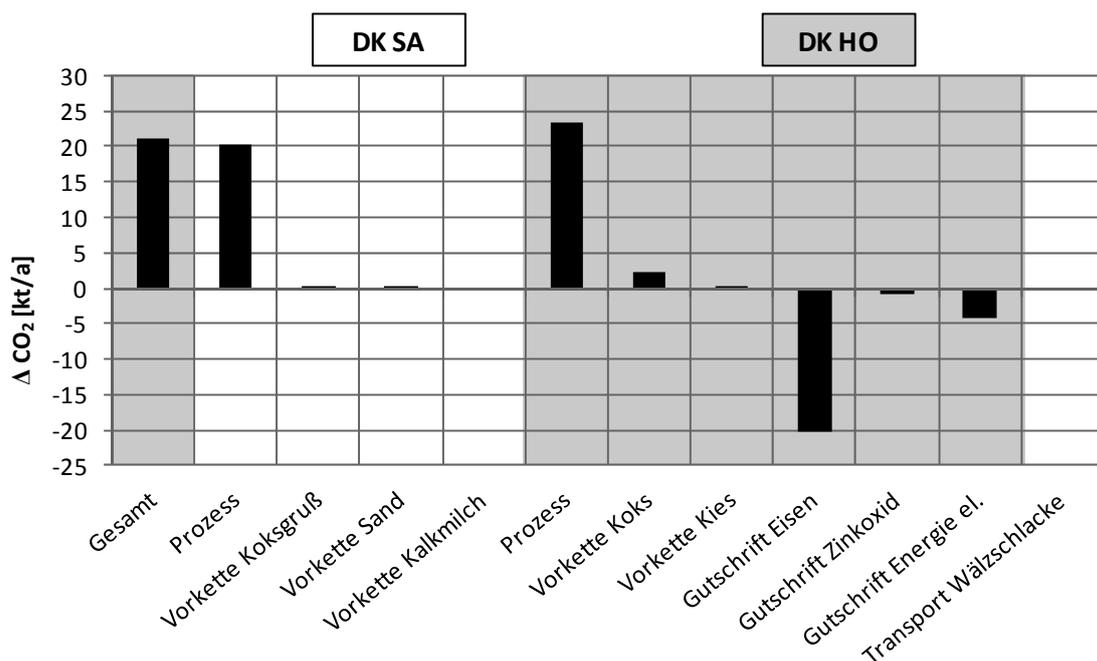


Abbildung 37: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im DK-Prozess auf die CO₂-Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten

Hinsichtlich des kumulierten Energieaufwandes kann für die Wälzschlackeverwertung im DK-Prozess ein positives Gesamtergebnis ausgewiesen werden (vgl. Abbildung 38). Hier können die Gutschriften für das Eisen und die elektrische Energie die Energieaufwendungen in Form des Koksgrus und Kokses überkompensieren. Einen Vergleich zwischen der Wälzschlackeverwertung im Elekt-

rolichtbogenofen und DK-Prozess hinsichtlich der CO₂-Emissionen und des kumulierten Energieaufwandes findet sich in Tabelle 15.

Tabelle 15: CO₂-Emissionen und kumulierter Energieaufwand bei der Verwertung von Wälzschlacke im EAF und DK-Prozess

	Δ CO ₂ [kt/a]	Δ KEA [TJ/a]
Wälzschlackeeinsatz im EAF	2,64	- 95,04
Wälzschlackeeinsatz im DK-Prozess	20,98	- 43,60

Es wird deutlich, dass die Verwertung im Elektrolichtbogenofen im Hinblick auf beide Kategorien besser abschneidet. Dies liegt am unterschiedlichen spezifischen Energiebedarf der Prozesse und am Unterschied zwischen den Basizitäten des Wälzprozesses und des DK-Prozesses, der zu hohen Zuschlägen an Sand und Kies im DK-Prozess führt. Der infolgedessen höhere Gesamtdurchsatz führt zu einer Erhöhung des Energiebedarfs. Weiterhin sei darauf hingewiesen, dass die pro Tonne produziertes DK-Eisen verwendete Gutschrift aus EcoInvent für CO₂ und den KEA geringer als der Wert für EAF-Stahl ist, so dass die Wälzschlackeverwertung im EAF infolgedessen unter CO₂- und KEA-Aspekten besser bewertet wird als im DK-Prozess. Somit wird in dieser Form der Bewertung das Produkt Stahl besser als das Produkt Eisen bewertet.

Bei einem weiteren Vergleich der beiden Verwertungsalternativen auf Basis der berechneten Ergebnisse zeigt sich, dass bei der Wälzschlackeverwertung im DK-Prozess der Anteil an zusätzlichem Roheisen pro Tonne verwerteter Wälzschlacke mit ca. 30 % etwas höher als der Anteil von zusätzlich produziertem Elektrostahl pro Tonne im EAF eingesetzter Wälzschlacke ist (25 %). Über den DK-Prozess kann ebenfalls eine größere Menge des in der Wälzschlacke gebundenen Zinkoxides in das zinkhaltige Produkt Zinkkonzentrat überführt werden als über die Route EAF-Wälzrohr. Bei der Wälzschlackeverwertung im EAF gehen dagegen vergleichsweise größere Anteil des Zinks in den Rohstahl und des Eisens in die Schlacke über. Mit der Wälzschlackeverwertung im DK-Prozess kann somit voraussichtlich eine höhere Ressourceneffizienz erreicht werden.

Die Verwertung der Wälzschlacke im DK-Prozess ist, wie bereits die Verwertung der Wälzschlacke im EAF-Prozess, aus ökonomischer Sicht auf Basis der im ERESTRE-Projekt durchgeführten Untersuchungen empfehlenswert.

Wie bereits bei den ökologischen Kategorien beobachtet, ist der zu erwartende ökonomische Vorteil ebenfalls geringer als bei der möglichen Wälzschlackeverwertung im Elektrolichtbogenofen. Ursächlich hierfür ist wiederum der vergleichsweise höhere Energiebedarf bei der Wälzschlackeverwertung im DK-Prozess.

Abschließend kann festgestellt werden, dass mit dem Wälzschlackeeinsatz im Elektrolichtbogenofen und dem Wälzschlackeeinsatz im DK-Prozess zwei Möglichkeiten zur Verwertung der Wälzschlacke identifiziert wurden, die vor dem Hintergrund der Ergebnisse aus dem entwickelten Gesamtmodell vielversprechend erscheinen und weitergehende Analysen bzw. Betriebsversuche daher befürwortet werden können. Bei dem möglichen Wälzschlackeeinsatz im DK-Prozess ist dabei analog zur Verwertung im Elektrolichtbogenofen detaillierter zu betrachten, ob die in ERESTRE getroffenen Annahmen zur Kapazität des DK-Prozesses und die praktische Umsetzbarkeit der Maßnahme hinsichtlich organisatorischer, zeitlicher und logistischer Prozesse gewährleistet werden können bzw. welchen Einfluss die im ERESTRE-Projekt aggregiert abgebildeten Substanzen wie Phosphor, Mangan und Kupfer im DK-Prozess haben.

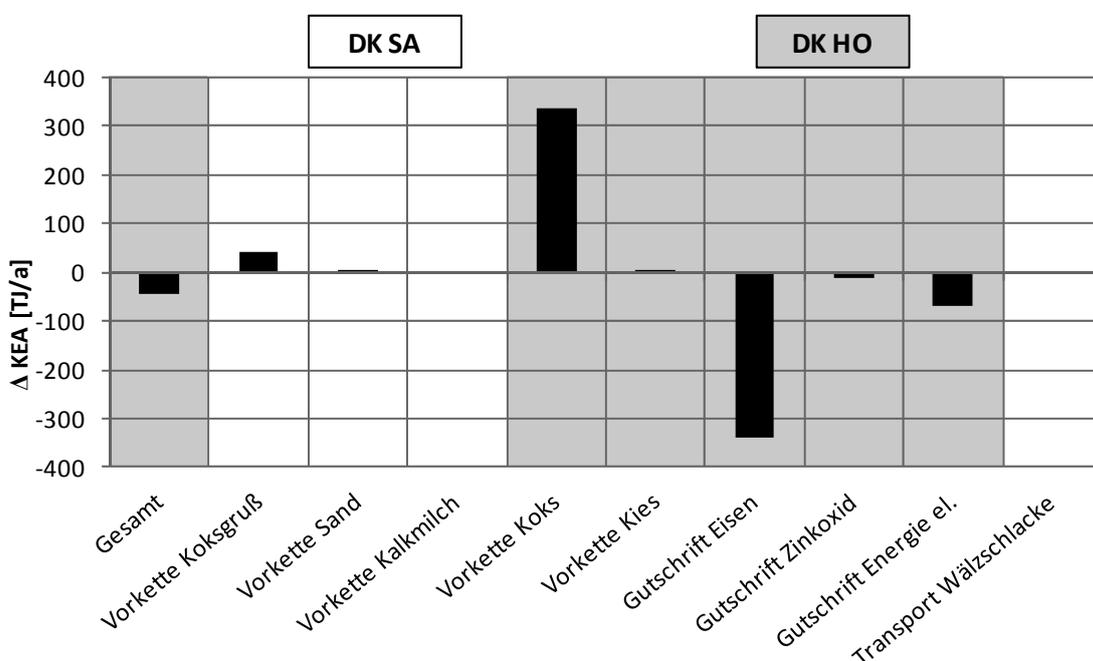


Abbildung 38: Auswirkungen der Verwertung von Wälzschlacke im DK-Prozess auf den kumulierten Energieaufwand

5.2.3 Interne Rezirkulation des EAF-Staubes und Auswirkungen auf den Wälzprozess

Im vorliegenden Abschnitt werden die Auswirkungen einer möglichen Rückführung von EAF-Staub in den Elektrolichtbogenofen mit einer Rückführtrate von 40 % quantifiziert. Für den EAF-Prozess bedeutet das Szenario neben den Anforderungen zur technischen Umsetzung der Maßnahme eine Erhöhung der benötigten Menge an Blaskohle um ca. 20 % und elektrischer Energie um ca. 2 % (siehe Tabelle 16). Bedingt durch das vergleichsweise geringe Aufkommen an EAF-Staub im Vergleich zum Schrotteinsatz erhöht sich die Stahlausbringung relativ betrachtet nur geringfügig.

Tabelle 16: Auswirkungen der internen Rezirkulation von EAF-Staub auf Massen- und Energieströme des EAF und Wälzprozesses

EAF	Korbkohle	Blaskohle	El. Energie	Branntkalk	Dolomitkalk	Stahl	Schlacke	EAF-Staub
	0,00 %	+19,28 %	+2,26 %	0,00 %	0,00 %	+0,23 %	+1,19 %	-30,13 %

Wälzprozess	Aufgabe	Koks	Kalk	Wälzoxid (WO)	Zinkoxid im WO	Wälzschlacke
	-10,50 %	-2,99 %	-8,60 %	-2,64 %	-1,35 %	-13,95 %

Erwartungsgemäß verringert sich das Aufkommen an EAF-Staub zur externen Verwertung im Wälzprozess, so dass im Wälzprozess weniger Koks und Kalk benötigt werden. Darüber hinaus verringert sich die Menge der produzierten Wälzschlacke deutlich um über 10 %, aber auch die Menge an Wälzoxid und des darin enthaltenen Zinkoxides gehen infolge der internen EAF-Staubrezirkulation leicht zurück. Somit kann aus dem Gesichtspunkt der Ressourceneffizienz zwar eine Reduktion der Wälzschlackemasse zugunsten einer erhöhten Ausbringung an Elektro Stahl und EAF-Schlacke, für die ebenfalls eine Verwertungsoption besteht, angeführt werden, allerdings wird weniger Zink in den Stoffkreislauf zurückgeführt als im Referenzfall.

Der stark gestiegene Einsatz an Blaskohle und der leicht gestiegene Bedarf an elektrischer Energie führen zur Erhöhung der CO₂-Emissionen, welche durch die Gutschrift beim Stahl und die Einsparungen beim Wälzprozess nicht vollständig ausgeglichen werden können (siehe Abbildung 39). Beim KEA ergibt sich dagegen eine Einsparung, die allerdings mit ca. 10 TJ/a im Vergleich zum Einsatz von

Wälzschlacke im EAF (Abschnitt 5.2.1) mit 95 TJ/a geringer ausfällt (siehe Abbildung 40).

Eine mögliche interne Rezirkulation von EAF-Staub wirkt sich dabei gegebenenfalls auch auf die in den Abschnitten 5.2.1 und 5.2.2 diskutierte Wälzschlackeverwertung im Elektrolichtbogenofen oder DK-Prozess aus. Die Veränderung der Zusammensetzung der Wälzschlacke mit und ohne interne Rezirkulation des EAF-Staubes sind in Tabelle 17 dargestellt. Die Gesamtmasse an Wälzschlacke verringert sich durch die interne Rezirkulation um ca. 14 % (vgl. Tabelle 16)

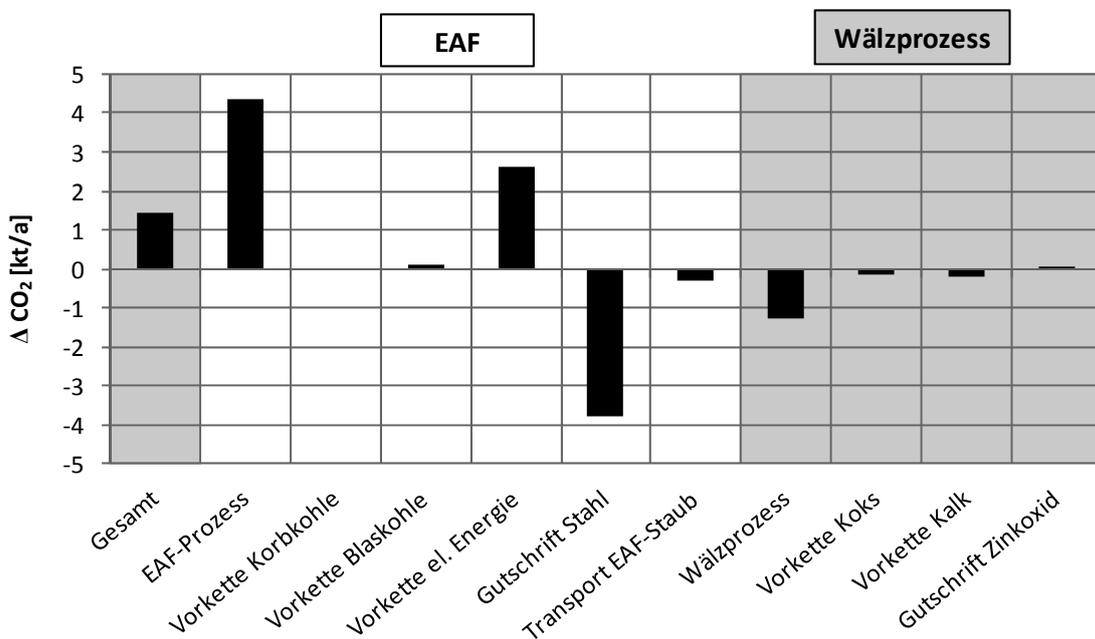


Abbildung 39: Auswirkungen der internen Rezirkulation von EAF-Staub auf die CO₂-Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten

Tabelle 17: Zusammensetzung der Wälzschlacke mit und ohne interner Rezirkulation von EAF-Staub

EAF-Staub-Rezirkulation	ZnO	FeO	PbO	C	CaO	MgO	SiO ₂	Rest
Delta 0 % - 100 %	2,51 %	2,98 %	-5 %	1,71 %	1,72 %	-4,40 %	-1,2 %	-2,51 %

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

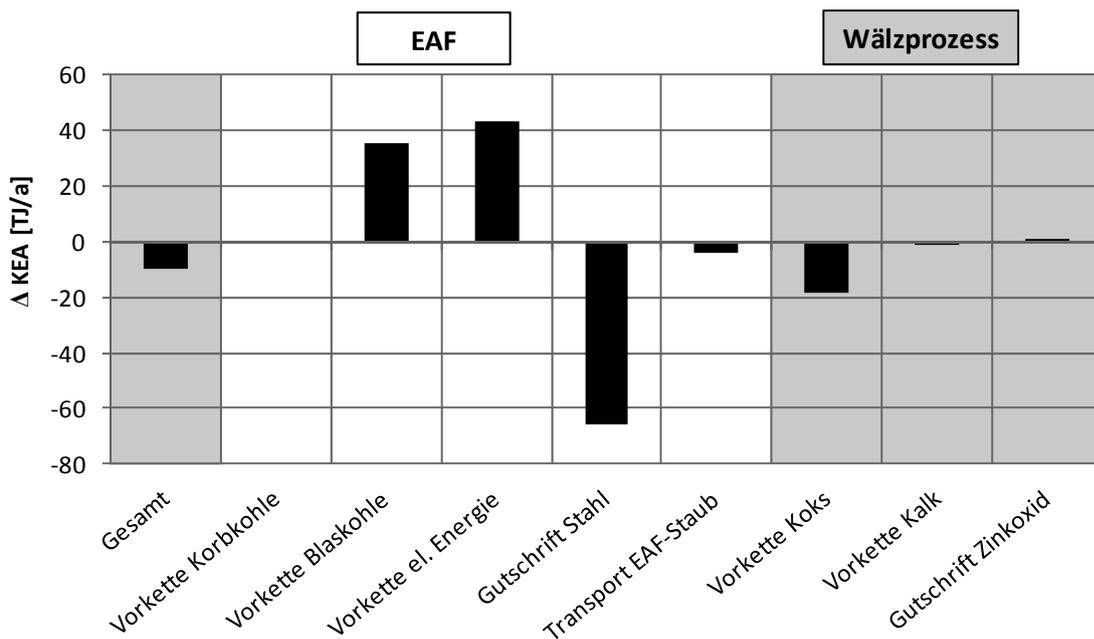


Abbildung 40: Auswirkungen der internen Rezirkulation von EAF-Staub auf den kumulierten Energieaufwand

Die Einflüsse der Kombination von interner EAF-Staubrezirkulation und den beiden betrachteten Alternativen zur Wälzschlackeverwertung auf die CO₂-Emissionen und den kumulierten Energieaufwand sind in Tabelle 18 dem Wälzschlackeeinsatz mit Staubrezirkulation gegenübergestellt. Für die Variante Wälzschlackeeinsatz im EAF führt die zusätzliche EAF-Staubrezirkulation zu einer Verschlechterung bei beiden Werten gegenüber dem alleinigen Wälzschlackeeinsatz. Bei dem Wälzschlackeeinsatz in der DK stellt die Kombination beider Szenarien hingegen eine Verbesserung gegenüber dem alleinigen Wälzschlackeeinsatz im DK-Prozess dar. Dies ist im Wesentlichen auf die geringere Masse an Wälzschlacke infolge der EAF-Staubrezirkulation zurückzuführen.

Bei Betrachtung der ökonomischen Auswirkungen der EAF-Staubrezirkulation (ohne Berücksichtigung der Wälzschlackeverwertung) wird das Szenario aus wirtschaftlicher Sicht insgesamt positiv bewertet. Ursächlich hierfür sind für den EAF-Prozess die Erlöse aus dem zusätzlich produzierten Stahl und für den Wälzprozess die Einsparungen infolge der verringerten Transportkosten für den EAF-Staub. Einen deutlich negativen Einfluss auf die Wirtschaftlichkeit hat dagegen die absolut gesehen verringerte Zinkgewinnung des Wälzprozesses. Daher ist insbesondere bei hohen Zinkpreisen die Wirtschaftlichkeit der Maßnahme gefährdet.

Weitere Risiken bestehen in den nicht betrachteten Kosten zur Durchführung der Kreislaufführung im Elektrolichtbogenofen. Bei der Kombination der Wälzschlackeverwertung im EAF- oder DK-Prozess mit der internen EAF-Staubrezirkulation verringern sich die ökonomischen Vorteile der Wälzschlackeverwertung jeweils um ca. 30 %. Gründe hierfür liegen insbesondere in den höheren Energiekosten des EAFs für Blaskohle und elektrische Energie, den vergleichsweise geringeren Erlösen für Zinkoxid aus dem Wälzprozess und bei der DK an den insgesamt geringeren Massen an zur Verwertung zur Verfügung stehender Wälzschlacke.

Tabelle 18: Auswirkungen der Kombination von EAF-Staubrezirkulation und Wälzschlackeverwertung im EAF bzw. DK-Prozess

	ΔCO_2 [kt/a]	ΔKEA [TJ/a]
Wälzschlackeeinsatz im EAF	2,64	- 95,04
Wälzschlackeeinsatz im EAF und EAF-Staubrezirkulation	3,38	- 90,04
Wälzschlackeeinsatz im DK-Prozess	20,98	- 43,60
Wälzschlackeeinsatz im DK-Prozess und EAF-Staubrezirkulation	18,61	- 52,72

Abschließend lässt sich feststellen, dass aus der ökologischen Bewertung des Szenarios zur internen Rezirkulation von EAF-Staub für die hier untersuchten Prozesse abgeleitet werden kann, dass eine solche Maßnahme einen negativen Einfluss hat. Ursächlich hierfür sind vor allem die hohen Energiebedarfe im Elektrolichtbogenofen und die geringere Zinkoxiderzeugung des Wälzprozesses. Außerdem zeigt die Kombination des Szenarios mit einer möglichen Wälzschlackeverwertung eine Verschlechterung bzw. zumindest keine Verbesserung dieses Szenarios. Ökonomisch gesehen scheint die Maßnahme dagegen vorteilhaft zu sein, wobei die geringeren Zinkoxidmassen ein hohes Risiko für die Wirtschaftlichkeit darstellen. Sollten sich für den Wälzprozessbetreiber Möglichkeiten finden, die durch die Maßnahme frei werdenden Kapazitäten im Wälzprozess für die Verwertung anderer Reststoffe zu nutzen, können die Verluste an Zinkoxid gegebenenfalls kompensiert werden. Theoretisch würden dann aufgrund der gestiegenen Zinkkonzentration im EAF-Staub auch solche Reststoffe in Frage kommen, die im Wälzprozess bisher aufgrund zu geringer Zinkanteile nicht eingesetzt werden.

Generell scheint es über das ERESTRE-Projekt hinausgehend interessant, den hier entwickelten Ansatz zur Untersuchung der EAF-Staubrezirkulation auf an-

dere Elektrolichtbogenöfen zu übertragen, welche über vergleichsweise geringere Zinkoxidkonzentrationen im EAF-Staub verfügen. Hierbei könnte sich für nicht im Wälzrohr verwertbare EAF-Stäube eine Verwertungsoption ergeben bzw. könnte eine Erhöhung des Zinkanteils ausgehend von einem vergleichsweise niedrigen Niveau insgesamt zu anderen Resultaten führen als in der in hier durchgeführten Bewertung.

5.2.4 Bewertung der Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzrohr

Die Auswirkungen einer möglichen Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzprozess auf den Wälzprozess sind in Tabelle 19 dargestellt. Dabei wird für die Bewertung des Szenarios zunächst davon ausgegangen, dass keine Wälzschlacke im DK-Prozess eingesetzt wird.

Tabelle 19: Auswirkungen der Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzprozess auf Massen- und Energieströme des Wälzprozesses

Wälzprozess	Aufgabe	Koks	Kalk	Wälzoxid (WO)	Zinkoxid im WO	Wälzschlacke
	+20,95 %	-9,16 %	+73,26 %	+48,75 %	+17,12 %	+9,92 %

Zu beobachten ist zunächst, dass sich die Auslastung des betrachteten Wälzrohres bei Verwertung der gesamten Staubmenge deutlich erhöht. Aufgrund des höheren Kohlenstoffanteils des DK-Gichtstaubes im Vergleich zu den anderen im Wälzrohr eingesetzten Reststoffen erscheint der absolute Rückgang des für den Wälzprozess benötigten Kohlenstoffes beim Einsatz von DK-Gichtstaub plausibel.

Aufgrund der bereits erwähnten unterschiedlichen Basizitäten des Wälz- und DK-Prozesses steigt dagegen die im Wälzprozess benötigte Kalkmenge um fast 80 % und infolgedessen die Menge an Wälzschlacke um fast 10 % an. Positiv zu bewerten ist dagegen die erhöhte Masse an durch das Wälzrohr produziertem und im Wälzoxid enthaltenem Zinkoxid. Für Wälzoxid erscheint der angegebene Wert überschätzt (siehe auch Abschnitt 1.1).

Hinsichtlich der Kategorien CO₂-Emissionen und kumulierter Energieaufwand zeigt das Szenario, wie in Abbildung 41 und Abbildung 42 dargestellt, eine Verschlechterung bei den CO₂-Emissionen und eine Einsparung des KEAs. Die Ver-

schlechterung der CO₂-Emissionen ist dabei im Wesentlichen auf die Emissionen des Prozesses zurückzuführen. Dagegen ist das positive Ergebnis für den KEA durch die Einsparung von Koks und die Gutschrift für Zinkoxid zu erklären. An dieser Stelle wird deutlich, dass die gegenläufigen Ergebnisse bei CO₂-Emissionen und KEA darauf zurückzuführen sind, dass vergleichsweise viel Kohlenstoff über einen Reststoff, den DK-Gichtstaub, eingebracht wird und daher zwar zusätzliches CO₂ emittiert wird, sich dieser Kohlenstoff aber nicht auf den KEA auswirkt.

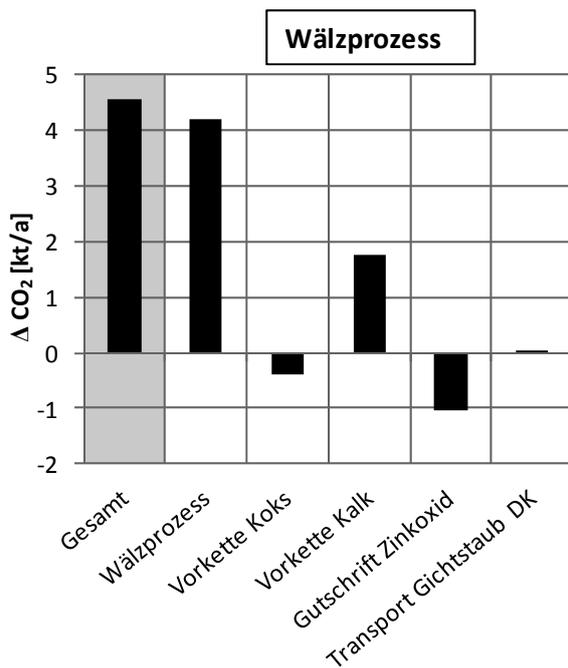


Abbildung 41: Auswirkungen der Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzprozess auf die CO₂-Emissionen des Wälzprozesses und vorgelagerter Prozessketten

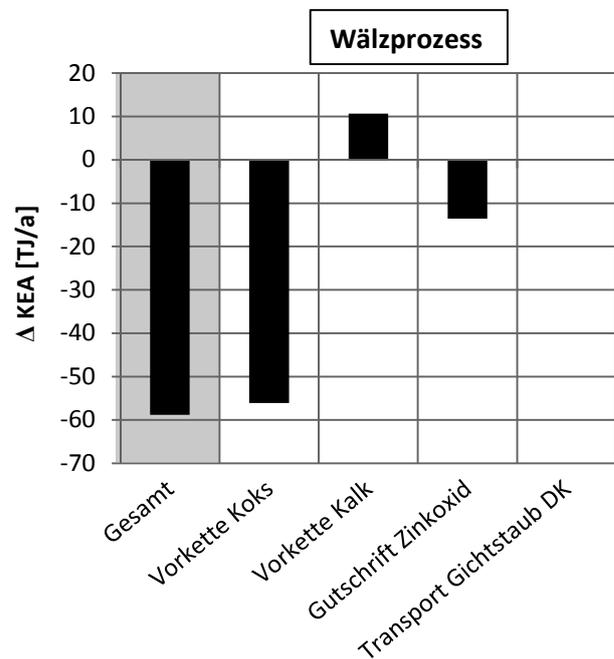


Abbildung 42: Auswirkungen der Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzprozess auf den kumulierten Energieaufwand

Bei einer Kombination der Szenarien Wälzschlackeverwertung im DK-Prozess und DK-Gichtstaubverwertung im Wälzprozess werden im Vergleich zu den einzelnen Maßnahmen die in Tabelle 20 dargestellten Ergebnisse erzielt. Die Kombination beider Maßnahmen führt demnach zu einer Verstärkung der beiden Effekte.

Aus ökonomischer Sicht ist die Verwertung von DK-Gichtstaub sowohl als alleinige Maßnahme als auch in Kombination mit einer möglichen Wälzschlackeverwertung im DK-Prozess durch den vergleichsweise hohen Zinkanteil im

DK-Gichtstaub selbst bei vergleichsweise niedrigen Zinkpreisen und ohne Berücksichtigung von gegebenenfalls anfallenden Gebühren für die Deponierung sinnvoll.

Tabelle 20: Vergleich des Wälzschlackeeinsatz im DK-Prozess und des Einsatzes von DK-Gichtstaub im Wälzprozess mit der Kombination der beiden Maßnahmen

	ΔCO_2 [kt/a]	ΔKEA [TJ/a]
Wälzschlacke im DK-Prozess	20,9	-43,6
DK-Gichtstaub im Wälzprozess	4,6	-58,8
Beide Maßnahmen	27,5	-113,1

5.2.5 Interne Verwertung des Gichtstaubes des integrierten Hüttenwerkes und Verwertung im DK-Prozess

Nachdem in den vorangegangenen Abschnitten die Verwertungsmöglichkeiten von Wälzschlacke, EAF-Staub und DK-Gichtstaub evaluiert wurden, wird in diesem und in den folgenden Abschnitten die Verwertung von Reststoffen, welche im integrierten Hüttenwerk anfallen, betrachtet.

Im vorliegenden Abschnitt wird zunächst die interne Verwertung von Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes quantifiziert und bewertet. Der vollständige Einsatz des Gichtstaubes in der Sinterbandaufgabe über die Mischbetten wird im betrachteten integrierten Hüttenwerk bereits durchgeführt. Die folgenden Analysen verfolgen somit das Ziel, diese bestehende Verwertungsoption mit dem entwickelten Ansatz und somit deren Auswirkungen auf CO_2 -Emissionen und Energieeffizienz zu quantifizieren.

Die Auswirkungen auf die Massenströme der Sinteranlage und des Hochofens sind in Tabelle 21 dargestellt. Da für das integrierte Hüttenwerk vorausgesetzt wird, dass die Konverterstahlproduktion konstant ist, führt der Einsatz von Gichtstaub in der Sinteranlage zu einer Einsparung von Eisenerz in einer Größenordnung von einem Prozent. Dabei hat das Szenario bedingt durch nur marginale Unterschiede in der Zusammensetzung des Roheisens keine bzw. vernachlässigbare Auswirkungen auf das Konverterstahlwerk.

Weitere Auswirkungen auf die Sinteranlage bei interner Verwertung von Gichtstaub sind eine geringfügig höhere Masse der Gesamtaufgabe, da der Eisen-gehalt des Gichtstaubes geringer als der des Erzes ist, ein Kompensation von Kalk durch CaO im Gichtstaub in Höhe von ca. 2 % sowie ein erhöhtes Staub-

aufkommen der Sinteranlage infolge des insgesamt höheren Durchsatzes und des höheren Gehaltes an Chloriden im Gichtstaub gegenüber dem Erz. Der Koksverbrauch der Sinteranlage geht infolge des hohen Koksanteils im Gichtstaub ebenfalls etwas zurück (siehe Tabelle 22).

Tabelle 21: Auswirkungen der internen Verwertung von Gichtstaub im integrierten Hüttenwerk auf Massen- und Energieströme des integrierten Hüttenwerkes

AMEH SA	SB Aufgabe	Koks	Kalk	Erz	Sinter	Staub
	+0,04 %	-0,17 %	-1,44 %	-0,75 %	+0,10 %	+1,34 %

AMEH HO	Koks	Roheisen	Schlacke	Gichtstaub	Gichtschlamm
	-1,43 %	0 %	+0,43 %	-0,32 %	+0,41 %

Das Aufkommen an Hochofenschlacke steigt leicht an, was auf Bestandteile des Gichtstaubes zurückzuführen ist, die nun in die Schlacke übergehen. Die Masse an Gichtstaub wird infolgedessen und durch die Nutzung des enthaltenen Eisens und Kohlenstoffs verringert. Daher gehen die Massen dieser Bestandteile im Gichtstaub zurück, während die Anteile an Zink, Alkalien und Kalk leicht zunehmen. Die Auswirkungen auf die Zusammensetzung des Gichtstaubes des integrierten Hüttenwerkes sind in Tabelle 22 für die beiden Fälle - ohne interne Verwertung und für den 100 %-igen Einsatz von Gichtstaub in der Sinteranlage - dargestellt. Weitere Teile des Zinks finden sich im Gichtschlamm wieder, dessen Gesamtmasse etwas ansteigt.

Tabelle 22: Änderung der Zusammensetzung des AMEH-Gichtstaubes mit und ohne interner Verwertung des Gichtstaubes

Gichtstaub intern	Fe ₃ O ₄	C	ZnO	PbO	CaO	SiO ₂	MgO	Rest	Alkalien (Verb.)	S
Delta 0 % - 100 %	0,31 %	-1,03 %	8,33 %	-	0,90 %	0,52 %	1,66 %	0,42 %	3,57 %	-

Hinsichtlich der betrachteten Umweltaspekte kann, wie Abbildung 43 und Abbildung 44 zu entnehmen ist, sowohl ein positiver Effekt hinsichtlich der CO₂-Emissionen als auch des kumulierten Energieaufwandes beobachtet werden, wobei der Hauptbeitrag durch die Einsparung von Koks erbracht wird und im Falle der CO₂-Emissionen darüber hinaus durch die Gutschrift für das eingesparte Eisenerz. Zur isolierten Bewertung der internen Verwertung von Gicht-

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

staub wird zunächst angenommen, dass für den Fall, dass der Gichtstaub nicht intern eingesetzt wird, eine Verwertungsalternative besteht, die keine Auswirkungen auf CO₂ und KEA hat.

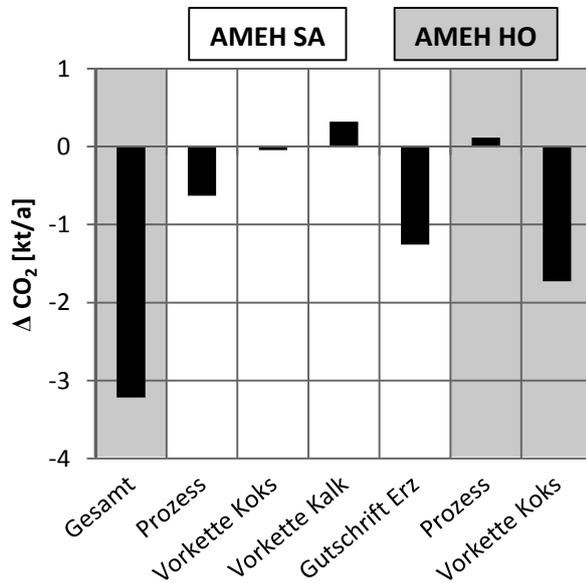


Abbildung 43: Auswirkungen der internen Verwertung von Gichtstaub im integrierten Hüttenwerk auf die CO₂-Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten

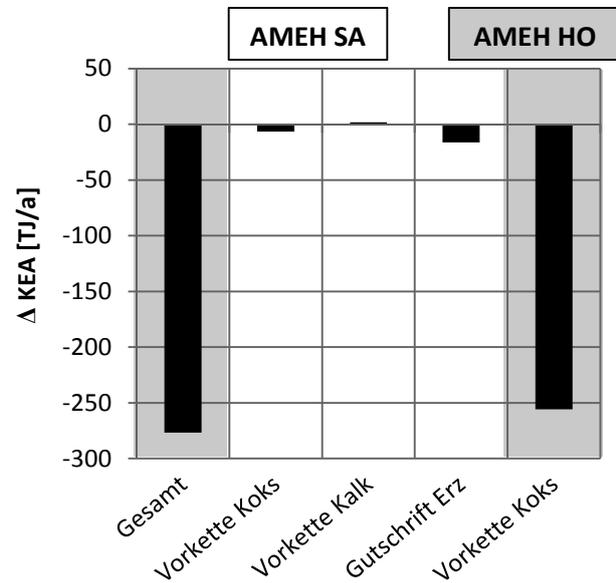


Abbildung 44: Auswirkungen der internen Verwertung von Gichtstaub im integrierten Hüttenwerk den kumulierten Energieaufwand

Als Alternative zur dargestellten internen Verwertung des Gichtstaubes des integrierten Hüttenwerkes wird im Folgenden die Möglichkeit des Einsatzes im DK-Prozess betrachtet. Die Auswirkungen auf den DK-Prozess sind in Tabelle 23 dargestellt. Die Erhöhung der Masse der Sinterbandaufgabe ist analog zum Wälzschlackeeinsatz im DK-Prozess (Abschnitt 5.2.2) auf die Annahme einer konstanten Aufgabe der nicht in ERESTRE betrachteten Reststoffe des DK-Prozesses zurückzuführen.

Der im Gesamtmodell zusätzliche eingesetzte Sand in der Sinteranlage und Kies in der Möllierung resultiert aus der Basizität des Gichtstaubes des integrierten Hüttenwerkes, welche über der Basizität des DK-Prozesses liegt. Die Einsparung von Koksgrus in Höhe von fast 50 % ist auf den hohen Kohlenstoffgehalt des Gichtstaubes zurückzuführen (siehe Tabelle 22). Dabei wird in diesem Szenario tatsächlich absolut mehr Kohlenstoff über den AMEH-Gichtstaub in die DK-Sinteranlage eingebracht als durch den Rückgang an Koksgrus eingespart wird

(absolut ca. 15 kg/h mehr). Tabelle 23 zeigt dabei, dass im Gesamtmodell gleichzeitig mehr Koks in der Möllierung zugegeben wird, so dass insgesamt der Kohlenstoffbedarf im DK-Prozess durch den eingesetzten Gichtstaub zunimmt.

Tabelle 23: Auswirkungen der Verwertung von Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses

DK SA	SB Aufgabe	Koks-grus	Sand	Kalkmilch	Sinter	Staub	AGRA-Rückstand
	+2,94 %	-49,31 %	+2,72 %	+8,91 %	+2,05 %	+2,72 %	+10,17 %

DK HO	Koks	Kies	Roheisen	Gichtstaub	Zinkkonzentrat	ZnO im Zinkkonz.	Schlacke	Energie Kraftwerk
	+1,18 %	+2,70 %	+1,84 %	+1,04 %	+0,30 %	+0,18 %	+2,28 %	+1,14 %

Neben dem bereits erwähnten Anstieg des Koks- und Kiesverbrauches im DK-Hochofenmodell führt die Verwertung des Gichtstaubes des integrierten Hüttenwerkes zu einer Zunahme der Roheisenproduktion um ca. 2 %, an elektrischer Energie aus dem Gichtgas-Kraftwerk um ca. 1 % und jeweils einem erhöhten Aufkommen an Schlacke, Gichtstaub und Zinkkonzentrat.

Der in Tabelle 23 ausgewiesene Mehrbedarf an Kalkmilch ist auf die Schwefelkonzentration im Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes (Tabelle 22) zurückzuführen, welche knapp um das Vierfache höher ist als in der konstanten DK-Sinterbandaufgabe aus Reststoffen anderer Quellen. Der Eintrag des Schwefels in den Gichtstaub erfolgt im Fließschemasimulationsmodell des Hochofens aus dem im Koks enthaltenen Schwefel. Ein Vergleich mit den Originaldaten zeigt, dass der Schwefelanteil im Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes um etwa den Faktor zwei überschätzt wird, so dass auch die in Tabelle 23 angegebenen Werte für Kalkmilch und AGRA-Rückstand überschätzt sind. Betrachtet man allerdings die Auswirkungen auf die CO₂-Emissionen und den kumulierten Energieaufwand des Szenarios in Abbildung 45 und Abbildung 46, so ist festzustellen, dass die Vorkette der Kalkmilch für das Gesamtergebnis der DK eine untergeordnete Rolle spielt.

Die beiden Abbildungen zeigen, dass bei isolierter Betrachtung des DK-Prozesses unter Berücksichtigung des Transportes des Gichtstaubes ein positives Ergebnis bei der Bewertung der CO₂-Emissionen und eine deutliche Einsparung des kumulierten Energieaufwands erzielt werden können. Die wesentli-

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

chen CO₂-Emissionen resultieren dabei aus den beiden Prozessanlagen und dem Transport des Gichtstaubes. Kompensiert werden diese Emissionen von den Gutschriften für das produzierte Eisen und die elektrische Energie sowie dem eingesparten Koks. Die Gesamteinsparung des KEAs fällt vergleichsweise größer aus, da nun die Einsparung von Koksgrus über die Nutzung des im Gichtstaub enthaltenen Kokes und die Gutschrift für das Eisen lediglich von dem zusätzlichen Koks für die Möllierung und dem Energieaufwand für den Transport des Gichtstaubes verringert werden. Der im Gichtstaub enthaltene Kohlenstoff muss dagegen nicht angerechnet werden.

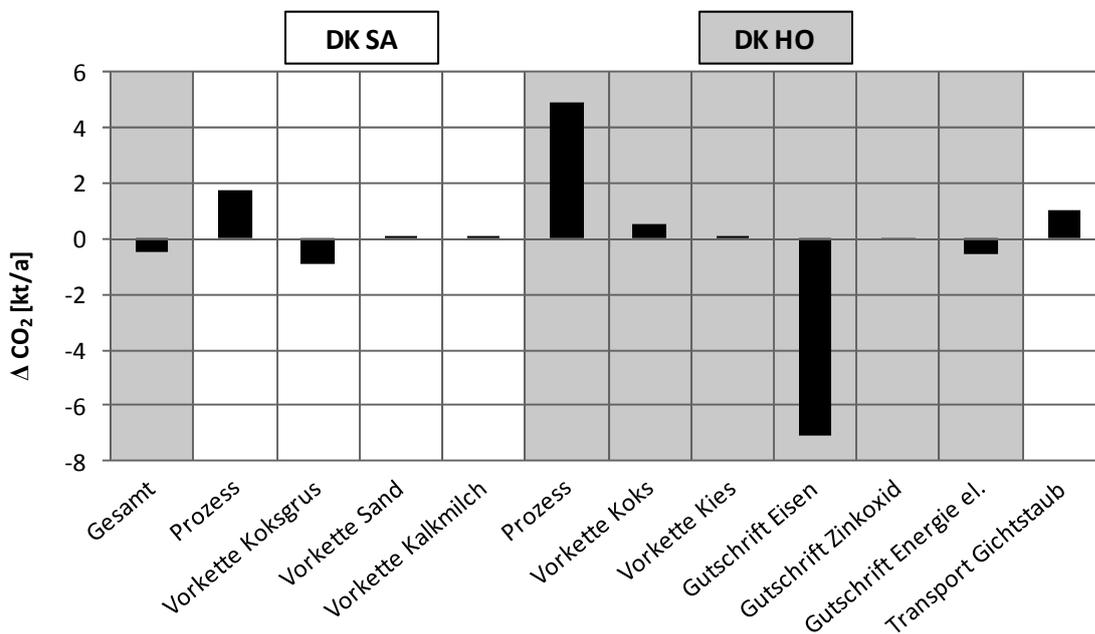


Abbildung 45: Auswirkungen der Verwertung von Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf die CO₂-Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten

Zusammenfassend kann aus der Betrachtung der beiden Verwertungsmöglichkeiten für den Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes festgestellt werden, dass sowohl die interne Verwertung über die Sinteranlage als auch die externe Verwertung im DK-Prozess aus Sicht der betrachteten ökologischen Kriterien sinnvoll sind.

Werden die beiden Alternativen verglichen, kann weiterhin festgestellt werden, dass die interne Verwertung gegenüber der externen Verwertung aus CO₂ und KEA-Sicht zu bevorzugen ist. Hierzu sind in Tabelle 24 die Verschlechterungen,

falls die interne Verwertung im integrierten Hüttenwerk nicht erfolgt, den Verbesserungen bei einer Verwertung im DK-Prozess gegenübergestellt.

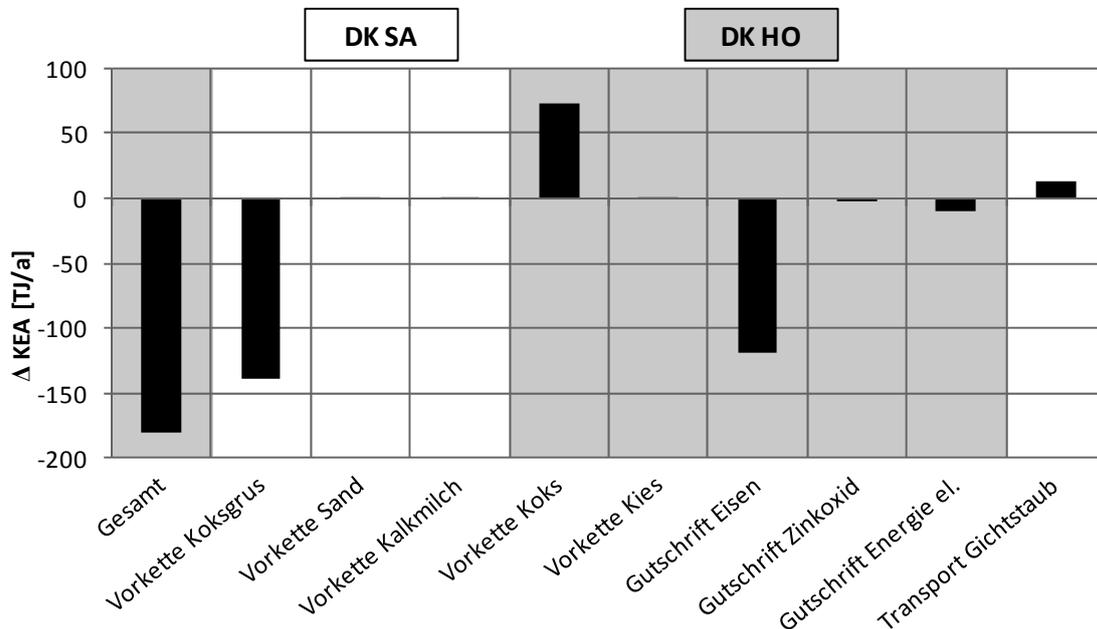


Abbildung 46: Auswirkungen der Verwertung von Gichtstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf den kumulierten Energieaufwand

Tabelle 24: Vergleich der internen Verwertung von AMEH-Gichtstaub mit der Verwertung im DK-Prozess

	Δ CO ₂ [kt/a]	Δ KEA [TJ/a]
AMEH ohne interne Verwertung von AMEH Gichtstaub	+ 3,21	+ 276,76
DK mit interner Verwertung von AMEH-Gichtstaub	- 0,47	- 180,55

Aus wirtschaftlicher Sicht ist die Gichtstaubverwertung des integrierten Hüttenwerkes jeweils isoliert betrachtet sowohl intern als auch im DK-Prozess sinnvoll. Hauptursachen sind bei der internen Verwertung die eingesparten Koksmassen und die Einsparung des Erzes. Im DK-Prozess werden zusätzliche Erlöse durch Roheisen, Zinkkonzentrat und elektrische Energie erzielt. Da mehr Koks eingesetzt werden muss, ist Koks bei der Verwertung im DK-Prozess ein Kostentreiber. Zusätzlich fallen Kosten für den Transport des Gichtstaubes an. Im Vergleich der beiden Verwertungsalternativen ist die interne Verwertung mit einer höheren Wirtschaftlichkeit verbunden. Weiterhin wird das ökonomische Ergebnis stark von den Annahmen bzgl. der Kapazitäten determiniert. Wird in Eisenhüttenstadt statt von einer Einsparung von Eisenerz davon ausge-

gangen, dass zusätzlich Stahl produziert und abgesetzt werden kann, würde die interne Verwertung noch deutlich besser beurteilt werden.

5.2.6 Bewertung des möglichen Einsatzes von Gichtschlamm des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess

Der im integrierten Hüttenwerk neben dem Gichtstaub anfallende Gichtschlamm kommt aufgrund der feinen Körnigkeit und des hohen Zinkanteils für einen internen Einsatz über die Mischbetten bzw. die Sinteranlage nicht in Frage und wird im Moment nicht verwertet. Die Zusammensetzung dieses Stoffstromes ist für das Referenzszenario in Tabelle 25 angegeben.

Tabelle 25: Zusammensetzung des AMEH-Gichtschlammes

Fe ₃ O ₄	C	ZnO	CaO	SiO ₂	MgO	PbO	Alkalien (Verb.)	S	Rest
28,67 %	33,55 %	8,87 %	9,66 %	4,75 %	9,64 %	1,67 %	0,32 %	0,24 %	2,92 %

Die Ergebnisse der im ERESTRE-Projekt mit dem entwickelten Gesamtmodell untersuchten möglichen Verwertung im DK-Prozess sind in Tabelle 26 angegeben. Dabei kann zunächst festgestellt werden, dass bedingt durch den Kohlenstoffanteil im Gichtschlamm von ca. 30 % etwas Koksgrus in der Sinteranlage eingespart werden kann. Zur Einstellung der erforderlichen Basizität muss daneben mit einem erhöhten Sand- und Kiesverbrauch gerechnet werden. Das Gesamtmodell weist weiterhin eine Einsparung bei der Kalkmilch und daher einen niedrigeren AGRA-Rückstand aus, wobei, wie bereits in den vorangegangenen Abschnitten dargestellt, der Grenzwert für SO₂ im Abgasstrom und die Konzentration von Schwefel im eingesetzten Reststoff die bestimmenden Größen sind. Das Hochofenmodell zeigt erwartungsgemäß höhere Ausbringungen der beiden Hauptprodukte sowie an Schlacke, Gichtstaub und elektrischer Energie.

Die Auswirkungen der Gichtschlammverwertung auf die Zusammensetzung des DK-Zinkkonzentrates sind in Tabelle 27 angegeben. Das Ergebnis zeigt auf Basis der modellierten Zusammenhänge, dass eine Verwertung des Gichtschlammes im DK-Prozess möglich erscheint. Die Auswirkung auf die Zusammensetzung des von der DK produzierten Eisen ist marginal.

Tabelle 26: Auswirkungen der Verwertung von Gichtschlamm des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses

DK SA	SB Aufgabe	Koksgrus	Sand	Kalkmilch	Sinter	Staub	AGRA-Rückstand
	+0,33 %	-6,17 %	+0,86 %	-1,26 %	+0,26 %	+0,86 %	-1,11 %

DK HO	Koks	Kies	Roheisen	Gichtstaub	Zinkkonzentrat	ZnO im Zinkkonz.	Schlacke	Energie Kraftwerk
	+0,15 %	+0,89 %	+0,11 %	+0,56 %	+0,94 %	+0,91 %	+0,65 %	+0,26 %

Tabelle 27: Auswirkungen der Verwertung von AMEH-Gichtschlamm im DK-Prozess auf die Zusammensetzung des DK-Zinkkonzentrates

AMEH-Gichtschlamm im DK-Prozess	ZnO	Fe ₃ O ₄	PbO	C	CaO	SiO ₂	MgO	Alkalien (Verb.)	Rest
Delta 0 % - 100 %	-0,02 %	-1,10 %	3,82 %	-0,4 %	-	-0,69 %	-	-	-

Hinsichtlich der Umweltwirkungen zeigt sich bei den CO₂-Emissionen eine Verschlechterung durch die Emissionen aus den Prozessen, die jedoch durch die Gutschriften für Eisen und elektrische Energie nahezu ausgeglichen werden kann.

Die Einsparung des kumulierten Energieaufwandes (siehe Abbildung 48) ist wiederum auf den eingesparten Koksgrus zurückzuführen, wobei die Begründung in Analogie zu den bereits besprochenen Szenarien darin liegt, dass der über den Gichtschlamm eingebrachte Koks zu CO₂-Emissionen beiträgt und somit den Einsparungen des Koksgrus entgegenwirkt, sich bei Betrachtung des KEAs dagegen als Einsparung auswirkt.

Bei Betrachtung der ökonomischen Konsequenzen der Gichtschlammverwertung im DK-Prozess zeigt sich ebenfalls ein positives Ergebnis. Die Erlöse durch zusätzlich produziertes Eisen, Zinkkonzentrat und zusätzlich im Kraftwerk gewonnene elektrische Energie können die Kosten für Koks und die Transportkosten deutlich überdecken. Beim integrierten Hüttenwerk können die Transportkosten durch die gesparte Deponierungsgebühren ebenfalls gedeckt werden.

Abschließend kann daher festgestellt werden, dass die Verwertung des Gichtschlammes aus dem integrierten Hüttenwerk auf Basis der Analysen im EREST-

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

RE-Projekt möglich erscheint und einen positiven Beitrag zur Energie- und Ressourceneffizienz leisten kann. Somit wird für zukünftige Untersuchungen empfohlen, diese Option detaillierter zu betrachten.

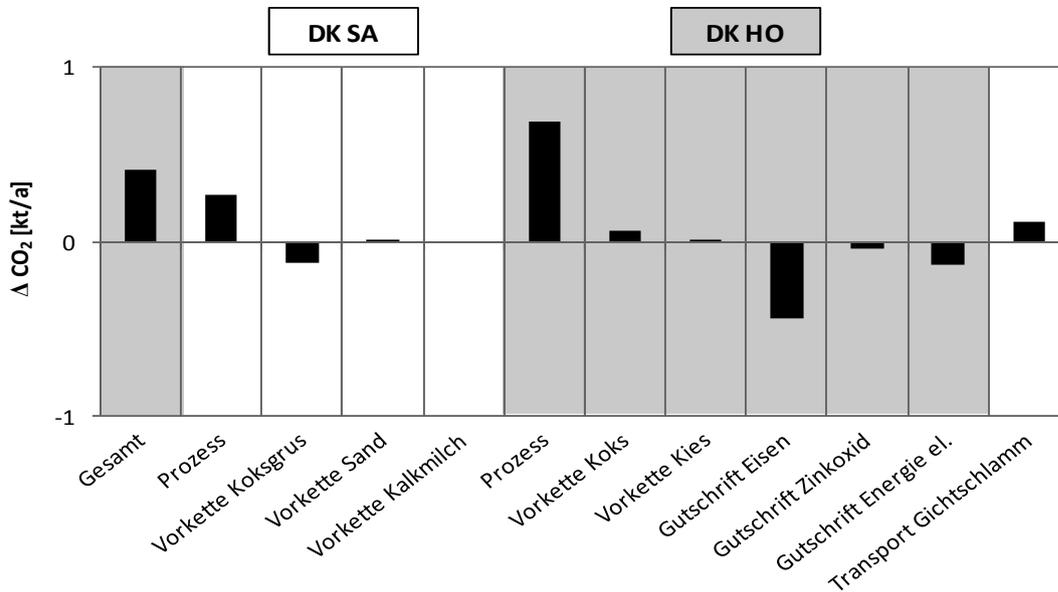


Abbildung 47: Auswirkungen der Verwertung von Gichtschlamm des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf die CO₂-Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten

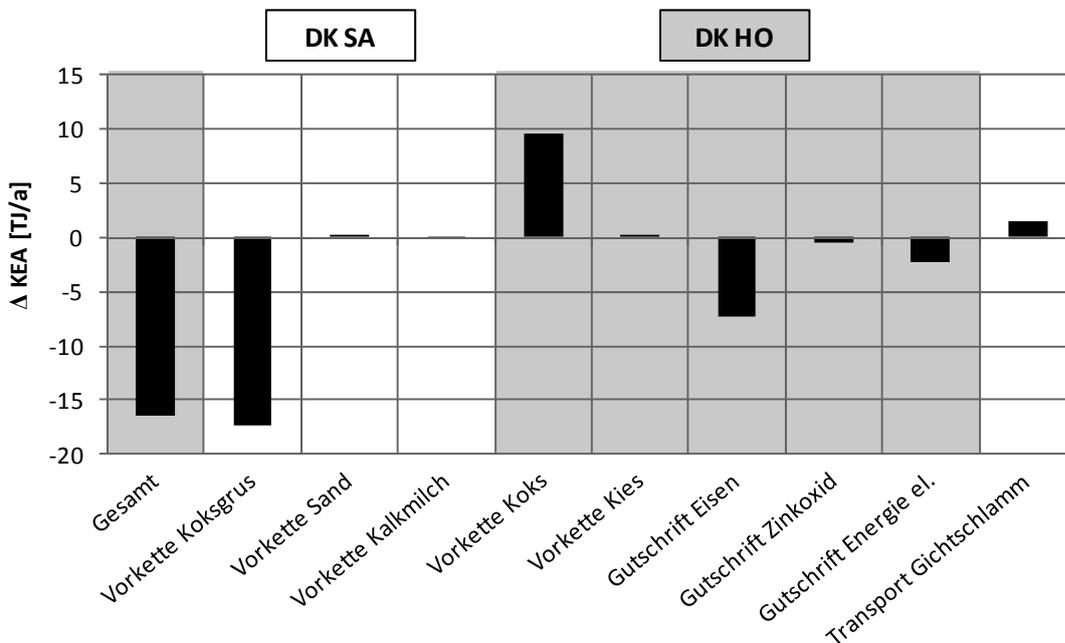


Abbildung 48: Auswirkungen der Verwertung von Gichtschlamm des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf den kumulierten Energieaufwand

5.2.7 Bewertung der internen Verwertung von Konverterschlacke des integrierten Hüttenwerkes

Für die Konverterschlacke des integrierten Hüttenwerkes bestehen grundsätzliche Verwertungsoptionen im Einsatz als Baustoff, als Grundstoff zur Düngemittelherstellung und in der möglichen internen Verwertung über die Sinteranlage. Die interne Verwertung kann aufgrund des Phosphorgehaltes der Konverterschlacke nur eingeschränkt erfolgen. Im Folgenden wird mit dem ERESTRE-Gesamtmodell eine Bewertung der internen Konverterschlackeverwertung von 6 % des Konverterschlackeaufkommens des integrierten Hüttenwerkes durchgeführt.

Aufgrund der konstant gehaltenen Stahlproduktion wirkt sich auch dieses Szenario in relevantem Umfang nur auf die Sinteranlage und den Hochofen aus. Die Änderungen der Massenströme durch die interne Schlackeverwertung sind in Tabelle 28 dargestellt. Infolge der auf die Masse bezogen wichtigsten Bestandteile der Konverterschlacke, Eisen und Kalk, werden durch den Schlackeeinsatz Erz in Höhe von 0,2 % und Kalk im Umfang von 10 % kompensiert. Das Gesamtmodell weist darüber hinaus einen Mehrbedarf an Koks in der Sinteranlage und eine Einsparung an Koks im Hochofen aus. Die Reststoffaufkommen des Hochofens, Schlacke sowie Gichtstaub und -schlamm, erhöhen sich jeweils.

Tabelle 28: Auswirkungen der internen Verwertung von Konverterschlacke im integrierten Hüttenwerk auf Massen- und Energieströme des integrierten Hüttenwerkes

AMEH SA	SB Aufgabe	Koks	Kalk	Erz	Sinter	Staub
	+0,26 %	+0,01 %	-10,18 %	-0,17 %	+0,12 %	+0,10 %

AMEH HO	Koks	Roheisen	Schlacke	Gichtstaub	Gichtschlamm
	-0,09 %	0 %	+0,59 %	+0,06 %	+0,12 %

Die ökologische Auswertung in Abbildung 49 und Abbildung 50 zeigt, dass das Szenario sowohl hinsichtlich der CO₂-Emissionen als auch der Energieeffizienz einen positiven Beitrag leisten kann. Ausschlaggebend sind dabei die Einsparungen an Kalk. Die Einsparung des Kokes in der Möllierung ist dagegen unsicher. Ökonomisch ist die interne Verwertung von 6 % der Konverterschlacke

ebenfalls attraktiv, wobei die Einsparung an Kalk zunächst den größten Vorteil bringt, gefolgt von den Einsparungen des Erzes und Kokses.

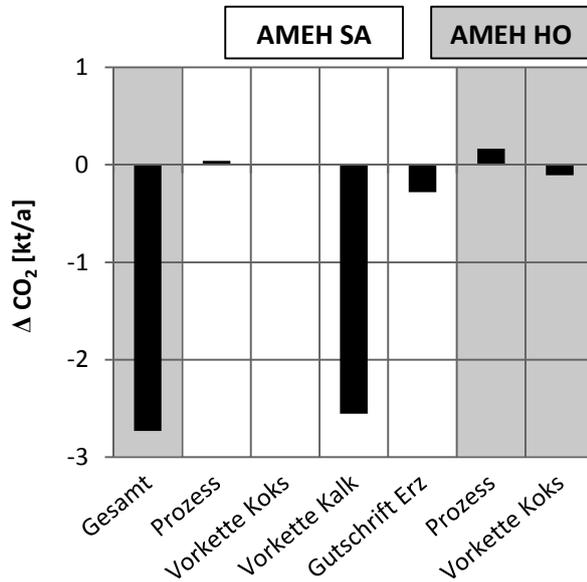


Abbildung 49: Auswirkungen der internen Verwertung von Konverterschlacke im integrierten Hüttenwerk auf die CO₂-Emissionen der Prozesse und vorgelegter Prozessketten

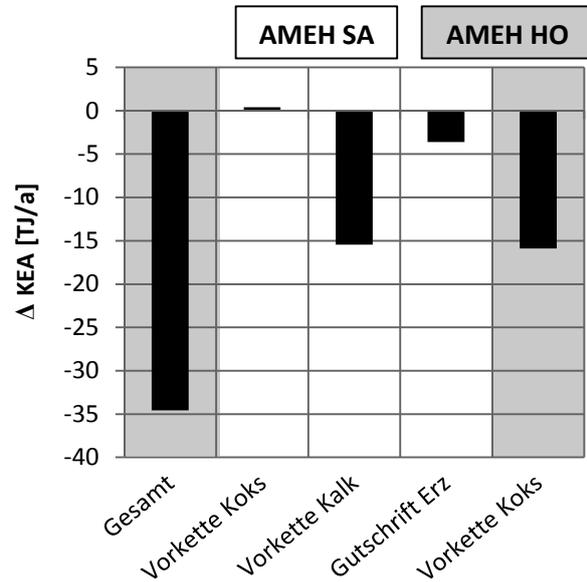


Abbildung 50: Auswirkungen der internen Verwertung von Konverterschlacke im integrierten Hüttenwerk auf den kumulierten Energieaufwand

5.2.8 Bewertung der internen Verwertung von Walzzunder des integrierten Hüttenwerkes

Der Einsatz von nicht ölhaltigem Walzzunder ist ebenfalls eine im integrierten Hüttenwerk bereits umgesetzte Maßnahme zur Steigerung der Ressourceneffizienz und wird im vorliegenden Abschnitt mit dem entwickelten ERESTRE-Gesamtmodell bewertet. Die Ergebnisse für die Massenströme sind in Tabelle 29 dargestellt. Bedingt durch die vergleichsweise geringe Gesamtmasse an Walzzunder sind die Auswirkungen gering, wobei ein leicht erhöhter Bedarf an Koks in der Sinteranlage und Möllierung und ein Rückgang des benötigten Kalles beobachtet werden. Die Zunahme des Koksverbrauchs ist dabei nicht realistisch, da Fe₂O₃ im Erz durch Fe im Walzzunder ersetzt wird. Der Fehler erklärt sich im ERESTRE-Gesamtmodell dadurch, dass aus Gründen der Rechenzeit keine Unterscheidung zwischen den verschiedenen Oxidationsstufen von Eisen für die Aufgabe des Sinterbandsimulationsmodells bei der Erstellung der Trans-

formationsfunktionen erfolgt. Da Walzzunder im Vergleich zum Erz deutlich weniger Silizium einträgt und kein Calcium oder Magnesium enthält, wird eine geringe Einsparung an Kalk erreicht. Realistisch ist auch der Rückgang an Restoffen in Form der Stäube und der Hochofenschlacke, da Walzzunder einen höheren Eisenanteil als Eisenerz hat.

Tabelle 29: Auswirkungen der internen Verwertung von Walzzunder im integrierten Hüttenwerk auf Massen- und Energieströme des integrierten Hüttenwerkes

AMEH SA	SB Aufgabe	Koks	Kalk	Erz	Sinter	Staub
	-0,003 %	+0,005 %	-0,65 %	-0,19 %	-0,01 %	-0,01 %

AMEH HO	Koks	Roheisen	Schlacke	Gichtstaub	Gichtschlamm
	+0,2 %	0 %	-0,06 %	-0,003 %	-0,01 %

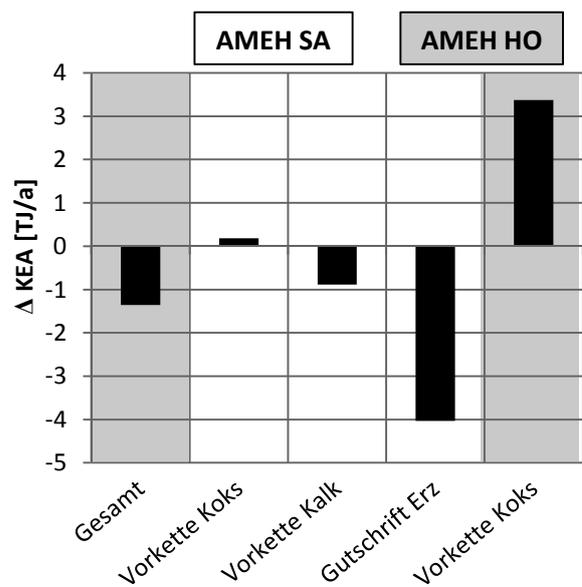
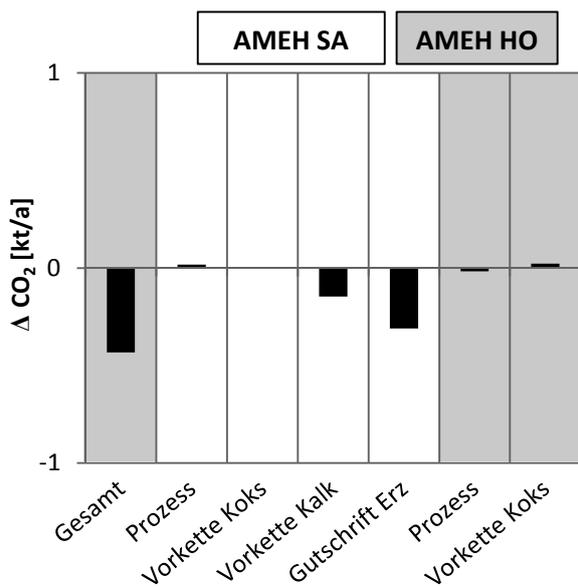


Abbildung 51: Auswirkungen der internen Verwertung von Walzzunder im integrierten Hüttenwerk auf die CO₂-Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten

Abbildung 52: Auswirkungen der internen Verwertung von Walzzunder im integrierten Hüttenwerk auf den kumulierten Energieaufwand

Die in Abbildung 51 und Abbildung 52 dargestellten Ergebnisse der ökologischen Bewertung zeigen einen insgesamt positiven Effekt in beiden betrachteten Kategorien. Da die Hauptbeiträge durch die Gutschriften des Erzes und des Kalks erreicht werden und der nicht korrekt abgebildete zusätzliche Koksbedarf einen negativen Beitrag leistet, wird die Verbesserung jeweils unterschätzt.

Demzufolge ist der Einsatz von Walzzunder aus ökologischer Sicht eine sinnvolle Maßnahme. Bei der Bewertung der Wirtschaftlichkeit zeigt sich, dass die zusätzlichen Kosten des Hochofenkokses durch die Einsparungen an Erz kompensiert werden und das Szenario eine hohe Wirtschaftlichkeit aufweist.

5.2.9 Bewertung der möglichen Verwertung von Konverterfilterstaub des integrierten Hüttenwerkes im Wälzprozess und Konverterverdampfungskühlerstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess unter Berücksichtigung der möglichen internen Rezirkulation von Konverterfilterstaub

Mit einem Zinkgehalt von ca. 2 % kommt der Konverterverdampfungskühlerstaub prinzipiell für eine Verwertung im DK-Prozess in Frage. Der Zinkgehalt von ca. 10 % im Konverterfilterstaub ist jedoch für den DK-Prozess sehr hoch, aber noch nicht ausreichend für eine wirtschaftliche Verwertung im Wälzrohr. Daher wird in diesem Abschnitt zunächst eine interne Rezirkulation des Filterstaubes von 40 % betrachtet, welche das Ziel verfolgt, den Zinkgehalt im Filterstaub für eine Verwertung im Wälzprozess zu erhöhen. Dabei wird, wie in Kapitel 4.1.3.3 beschrieben, angenommen, dass der Filterstaub mit Koks brikettiert wieder eingesetzt wird. Für das Szenario werden im Folgenden die Auswirkungen der internen Rezirkulation des Filterstaubes auf die Prozesse des integrierten Hüttenwerkes sowie die Auswirkung der Verwertung des angereicherten Filterstaubes auf den Wälzprozess und des Verdampfungskühlerstaubes auf den DK-Prozess untersucht.

Zunächst kann anhand der Modellergebnisse beobachtet werden, dass der Zinkoxidanteil, wie angestrebt, im Konverterfilterstaub durch die interne Rezirkulation auf ca. 13 % steigt. Diese Konzentration ist für die Verwertung im Wälzrohr allerdings immer noch sehr gering. Die Zusammensetzung des Staubes mit und ohne Rezirkulation ist in Tabelle 30 angegeben.

Tabelle 30: Auswirkungen der internen Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die Zusammensetzung des Konverterfilterstaubes

Rezirkulation Filterstaub	ZnO	Fe₃O₄	PbO	CaO	SiO₂	MgO
Delta 0 % - 100 %	29,4 %	-5,85 %	30,8 %	-6,08 %	-5 %	0,93 %

Infolge der Rezirkulation ändert sich auch die Zusammensetzung des Verdampfungskühlerstaubes (siehe Tabelle 31). Mit einer Konzentration des Zinkoxides von 3,5 % bei der Rezirkulation des Filterstaubes ist der Reststoff für die Verwertung im DK-Prozess nun weniger gut als ohne die Rezirkulation geeignet.

Tabelle 31: Auswirkungen der internen Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die Zusammensetzung des Konverterverdampfungskühlerstaubes

Rezirkulation Filterstaub	ZnO	Fe ₃ O ₄	PbO	CaO	SiO ₂	MgO
Delta 0 % - 100 %	39,6 %	-1,63 %	38,9 %	-1,51 %	-	4,65 %

Weiterhin wird die Zusammensetzung der Konverterschlacke durch die interne Rezirkulation verändert. Wie Tabelle 32 zu entnehmen ist, geht hierbei der Eisenanteil in der Schlacke zurück, während die Kalk-, Silizium- und Magnesiumgehalte jeweils zunehmen. Dies liegt darin begründet, dass die Transformationsfunktion für Eisen in der Konverterschlacke vor allem vom Kohlenstoffanteil in der Schmelze abhängt, welcher durch den Rückgang von Kühlterschrott und dem höheren Roheiseneinsatz steigt.

Tabelle 32: Auswirkungen der internen Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die Zusammensetzung der Konverterschlacke

Rezirkulation Filterstaub	CaO	SiO ₂	MgO	Rest	Fe ₂ O ₃
Delta 0 % - 100 %	3,74 %	3,74 %	9,05 %	3,83 %	-15,2 %

Durch den Einsatz von 6 % der Konverterschlacke in der Sinteranlage im Referenzszenario wirkt sich die veränderte Masse und Zusammensetzung der Konverterschlacke auch auf die Sinteranlage und den Hochofen des integrierten Hüttenwerkes aus. Dabei geht neben dem Eisengehalt in der Schlacke das Gesamtaufkommen an Konverterschlacke infolge der Rezirkulation um etwa 4 % zurück (vgl. Tabelle 33).

Fast 40 % des Eisens im Filterstaub können durch die Rezirkulation im Stahl genutzt werden, so dass das Gesamtaufkommen an Konverterfilterstaub zugunsten einer Erhöhung der Zinkkonzentration deutlich zurückgeht. Weitere Mengen des Zinks sowie Bleioxid gehen in den Verdampfungskühlerstaub über, dessen Gesamtmasse sich daher infolge der Rezirkulation des Filterstaubes erhöht. Der Koksverbrauch des Konvertermodells zur Kompensation der zusätzlich ein-

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

getragenen Metalloxide (vgl. Abschnitt 4.1.3.3) beträgt dabei 0,3 t/h und die benötigte Menge an Dolomitkalk erhöht sich um 0,5 %.

Tabelle 33: Auswirkungen der Rezirkulation von Konverterfilterstaub des integrierten Hüttenwerkes auf Massen- und Energieströme des internen Hüttenwerkes

AMEH SA	SB Aufgabe	Koks	Kalk	Erz	Sinter	Staub
	+0,64 %	+0,70 %	+3,97 %	+1,11 %	+0,68 %	+0,66 %

AMEH HO	Koks	Roheisen	Schlacke	Gichtstaub	Gichtschlamm
	+0,76 %	+0,64 %	+0,51 %	+0,56 %	+0,56 %

AMEH SW	Schrott	Kalk	Dolomitkalk	Koks*	Konverterstahl	Konverterschlacke	Konverterfilterstaub	Verdampfungskühlerstaub
	-3,97 %	0 %	+0,53 %	0,3 t/h	0 %	-3,72 %	-36,47 %	+1,49 %

* für die Filterstaubbrikettes

Aus Tabelle 33 geht weiterhin hervor, dass der Rückgang an eingesetztem Kühlschrott durch zusätzliches Roheisen ausgeglichen werden muss. Aus diesem Grund und um die zurückgegangene Konverterschlackemenge auszugleichen, wird im Gesamtmodell mehr Erz in der Sinteranlage eingesetzt. Infolgedessen erhöhen sich die Koks- und Kalkverbräuche der Sinteranlage bzw. des Hochofens und die Aufkommen an Sinteranlagenstaub, Gichtstaub und -schlamm sowie Hochofenschlacke.

Die Auswirkungen der Verwertung des Verdampfungskühlerstaubes im DK-Prozess sind in Tabelle 34 dargestellt. Die Verwertung im DK-Prozess führt dabei zu einem erhöhten Bedarf an Koksgrus und Koks sowie Sand und Kies. Die Kalkmilcheinsparung resultiert aus der geringen Schwefelkonzentration im Konverterverdampfungskühlerstaub.

Tabelle 34: Auswirkungen des Einsatzes von Konverterverdampfungskühlerstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses bei interner Rezirkulation von Konverterfilterstaub

DK SA	SB Aufgabe	Koksgrus	Sand	Kalkmilch	Sinter	Staub	AGRA-Rückstand
	+1,16 %	+1,97 %	+2,51 %	-1,24 %	+1,22 %	+0,30 %	-1,26 %

DK HO	Koks	Kies	Roheisen	Gichtstaub	Zinkkonzentrat	ZnO im Zinkkonz.	Schlacke	Energie Kraftwerk
	+0,86 %	+0,72 %	+1,2 %	+1,13 %	+1,29 %	+1,29 %	+0,74 %	+0,95 %

Tabelle 35 zeigt schließlich die Auswirkungen der Verwertung des nun vergleichsweise zinkreicheren Konverterfilterstaubes im Wälzrohr. Es kann beobachtet werden, dass sich die Gesamtaufgabe für den Wälzprozess deutlich erhöht. Für diese Erhöhung muss bei einer tatsächlichen Umsetzung sichergestellt werden, dass entsprechende Kapazitäten im Wälzprozess verfügbar sind.

Weiterhin sind im Szenario ein zusätzlicher Bedarf an Koks und durch die vergleichsweise hohe Basizität im Konverterfilterstaub eine erhebliche Einsparung an Kalk zu verzeichnen. Durch die Verwertung im Wälzprozess kann die Wälzoxidmenge um 10 % erhöht werden, der Anstieg der Wälzschlacke ist auf die erhöhte Aufgabemasse bei vergleichsweise geringer Zinkoxidkonzentration des zusätzlich zugeführten Konverterfilterstaubes zurückzuführen.

Tabelle 35: Auswirkungen des Einsatzes von Konverterfilterstaub des integrierten Hüttenwerkes im Wälzprozess auf Massen- und Energieströme des Wälzprozesses bei interner Rezirkulation von Konverterfilterstaub

Wälzprozess	Aufgabe	Koks	Kalk	Wälzoxid (WO)	Zinkoxid im WO	Wälzschlacke
	+30,63 %	+9,85 %	-53,31 %	+10,30 %	+8,70 %	+28,86 %

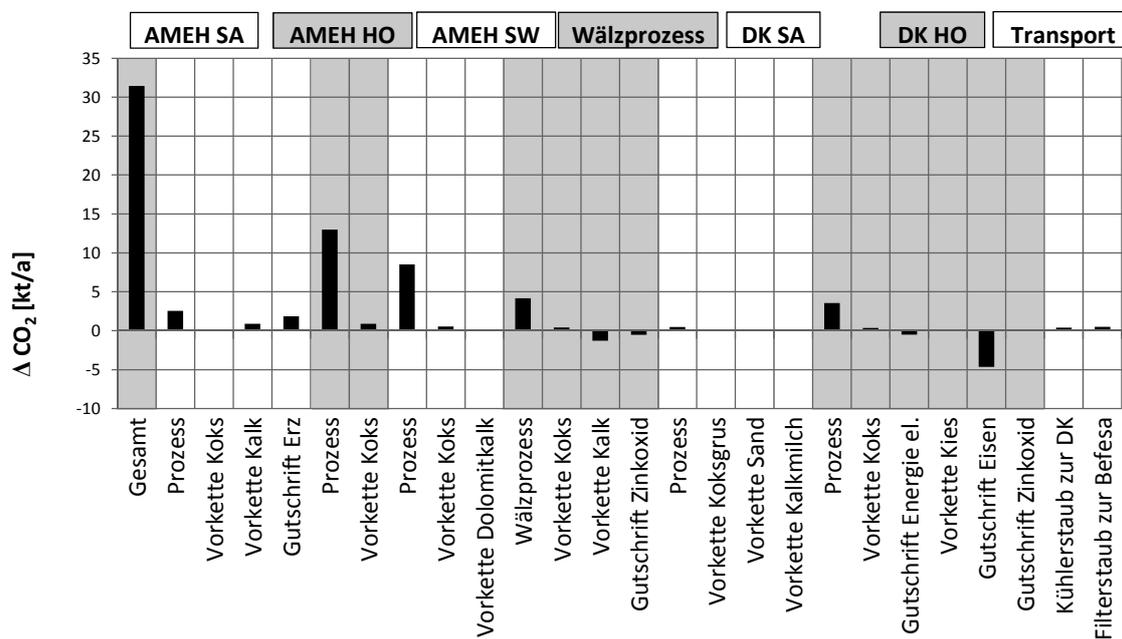


Abbildung 53: Auswirkungen der Verwertung von Konverterfilterstaub im Wälzprozess und Konverterverdampfungskühlerstaub im DK-Prozess bei interner Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die CO₂-Emissionen der Prozesse und vorgelagerter Prozessketten

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

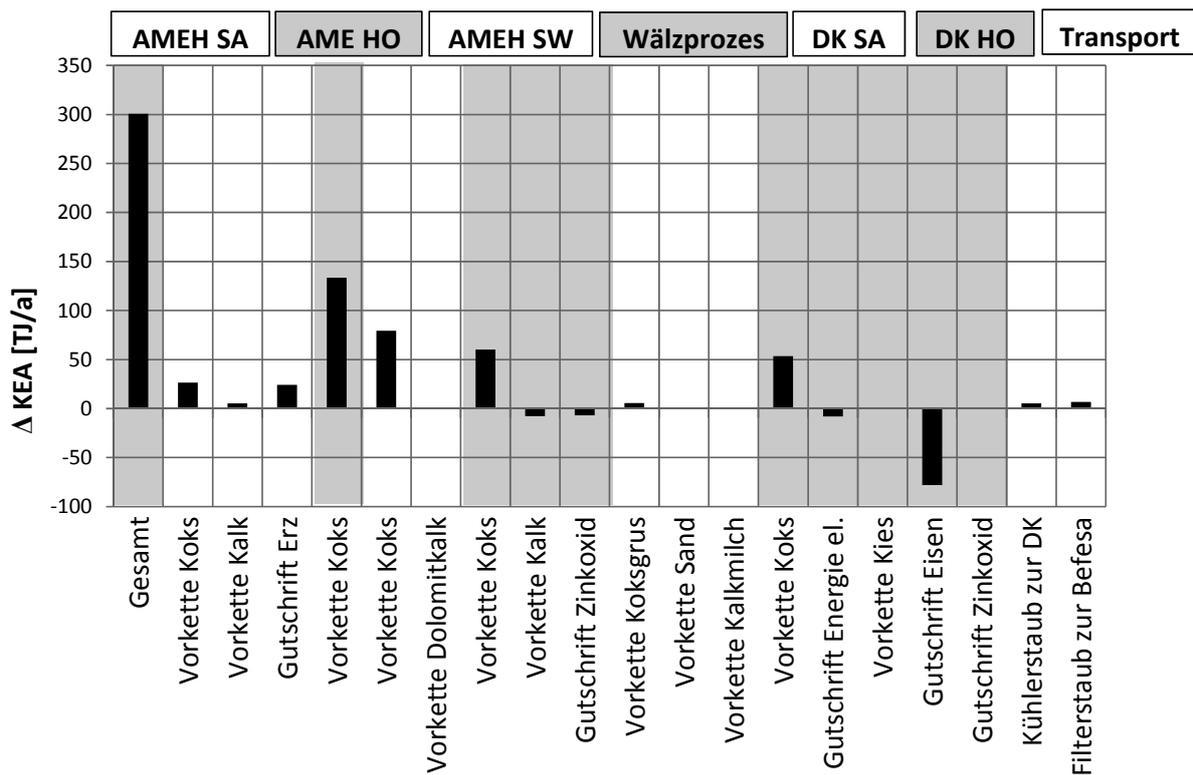


Abbildung 54: Auswirkungen der Verwertung von Konverterfilterstaub im Wälzprozess und Konverterverdampfungskühlerstaub im DK-Prozess bei interner Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf den kumulierten Energieaufwand

Die Auswirkungen des Szenarios auf die CO₂-Emissionen und den kumulierten Energieaufwand sind in Abbildung 53 und Abbildung 54 dargestellt. Hierbei ist zu beobachten, dass das Szenario in beiden Kategorien zu einer Verschlechterung führt. Dies ist vor allem auf die erhöhte Roheisenproduktion zum Ausgleich des Kühleisenschrottes und des damit einhergehenden zusätzlichen Bedarfes an Koks im Hochofen zurückzuführen. Ein erheblicher Beitrag entsteht zudem infolge des Einsatzes von Koks als Kohlenstoffträger zur Reduktion der im Staub enthaltenen Oxide im Konverterstahlwerk. Auch der Wälzprozess führt über den gestiegenen Koksverbrauch zu einer weiteren Verschlechterung der CO₂-Emissionen und des kumulierten Energieaufwandes. Lediglich durch den DK-Prozess kann eine Gutschrift in beiden Kategorien erzielt werden. Dort werden die zusätzlichen Emissionen bzw. Energieaufwendungen im Prozess durch die Gutschriften für Eisen, Zinkoxid und elektrische Energie überkompensiert.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass das betrachtete Szenario vor allem wegen der hohen Energieaufwendungen für die Kreislaufführung im Konverter und infolge der Substitution von Kühleisenschrott durch Roheisen aus ökolo-

gischer Sicht abzulehnen ist. Aus ökonomischer Sicht erscheint das Szenario dagegen grundsätzlich sinnvoll, da bei den beiden Recyclingprozessen durch die Annahme der zusätzlichen Reststoffe jeweils ein zusätzlicher Gewinn durch die erhöhte Erzeugung von Produkten erzielt werden kann, der jeweils die Kosten aus Zuschlägen und Koks sowie den Transporten deckt. Im integrierten Hüttenwerk werden die zusätzlichen Kosten durch den Mehrbedarf an Erz, Koks, Kalk und die zusätzlich anfallenden Reststoffe primär durch die Einsparung an Verwertungskosten gedeckt. Allerdings ist dieses Ergebnis in hohem Maße sensitiv, denn bereits bei einer Kostenerhöhung von etwas über 5 % ist das Szenario für das integrierte Hüttenwerk nicht mehr vorteilhaft. Da durch die Rezirkulation zusätzlich entstehende Kosten, z. B. für die mögliche Pelletierung des Konverterfilterstaubes vor der Rückführung in den Konverter, hier nicht betrachtet werden, kann davon ausgegangen werden, dass eine Wirtschaftlichkeit der Maßnahme für das integrierte Hüttenwerk im Moment nicht gegeben ist.

5.2.10 Bewertung der möglichen Verwertung von Konverterverdampfungskühlerstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess ohne Rezirkulation des Konverterfilterstaubes

Da auf Basis der im vorangegangenen Abschnitt durchgeführten Untersuchungen die Verwertung des Konverterverdampfungskühlerstaubes im DK-Prozess aus ökonomischer und ökologischer Sicht als vielversprechend zu beurteilen ist, wird im vorliegenden Abschnitt die mögliche Verwertung dieses Staubes im DK-Prozess ohne eine interne Rezirkulation des Konverterfilterstaubes betrachtet.

Im Vergleich zu den in Tabelle 34 dargestellten Auswirkungen des Einsatzes von Konverterverdampfungskühlerstaub bei Rezirkulation des Filterstaubes wird, wie in Tabelle 36 aufgeführt, ohne die Rezirkulation, bedingt durch das nun vergleichsweise etwas niedrigere Aufkommen an Verdampfungskühlerstaub, ein leicht verringerter Anstieg der DK-Sinterbandaufgabe beobachtet. Außerdem ergibt sich ein zusätzlicher Bedarf an Koksgrus, Kalk und Koks. Auch die Bildung von Stäuben, sowohl im Sinterprozess als auch im Hochofen, ist ohne Staubrückführung leicht rückläufig, da die Konzentration an Alkalien, Chloriden, Zink und Blei im Konverterverdampfungskühlerstaub niedriger ist.

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

Tabelle 36: Auswirkungen des Einsatzes von Konverterverdampfungskühlerstaub des integrierten Hüttenwerkes im DK-Prozess auf Massen- und Energieströme des DK-Prozesses ohne interne Rezirkulation von Konverterfilterstaub

DK SA	SB Aufgabe	Koksgrus	Sand	Kalkmilch	Sinter	Staub	AGRA-Rückstand
	+1,14 %	+1,87 %	+2,47 %	-1,12 %	+1,21 %	+0,18 %	-1,15 %

DK HO	Koks	Kies	Roheisen	Gichtstaub	Zinkkonzentrat	ZnO im Zinkkonz.	Schlacke	Energie Kraftwerk
	+0,82 %	+0,75 %	+1,20 %	+0,89 %	+0,79 %	+0,76 %	+0,73 %	+0,85 %

Die Ergebnisse der ökologischen Auswertungen in Abbildung 55 und Abbildung 56 zeigen, dass auch bei der Verwertung des Verdampfungskühlerstaubes, der im Basisfall ohne Rezirkulation des Filterstaubes anfällt, in beiden Umweltkategorien ein positiver Beitrag ausgewiesen werden kann. Auch die Bewertung der Wirtschaftlichkeit lässt ein positives Ergebnis erwarten. In den durchgeführten Analysen decken die zusätzlichen Erlöse im DK-Prozess und die Einsparungen von Verwertungskosten die im DK-Prozess und durch den Transport entstehenden Kosten deutlich. Somit erscheint die mögliche Verwertung dieses Reststoffes durch die DK ein Szenario, welches auf Basis der erzielten Ergebnisse detaillierter untersucht werden sollte.

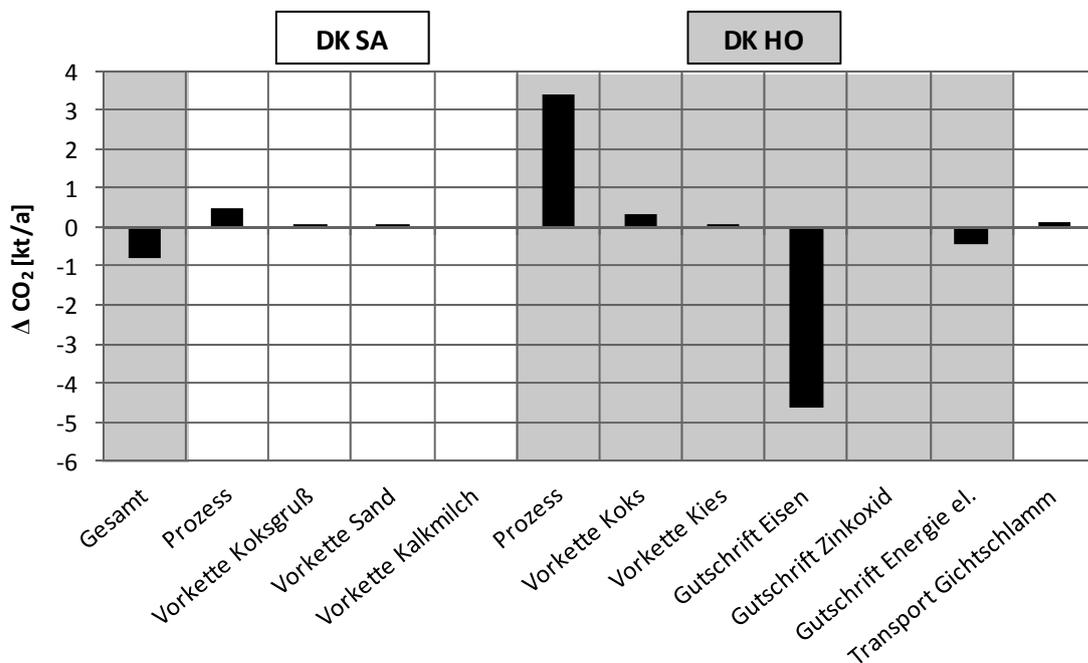


Abbildung 55: Auswirkungen der Verwertung von Konverterverdampfungskühlerstaub im DK-Prozess ohne interne Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf die CO₂-Emissionen

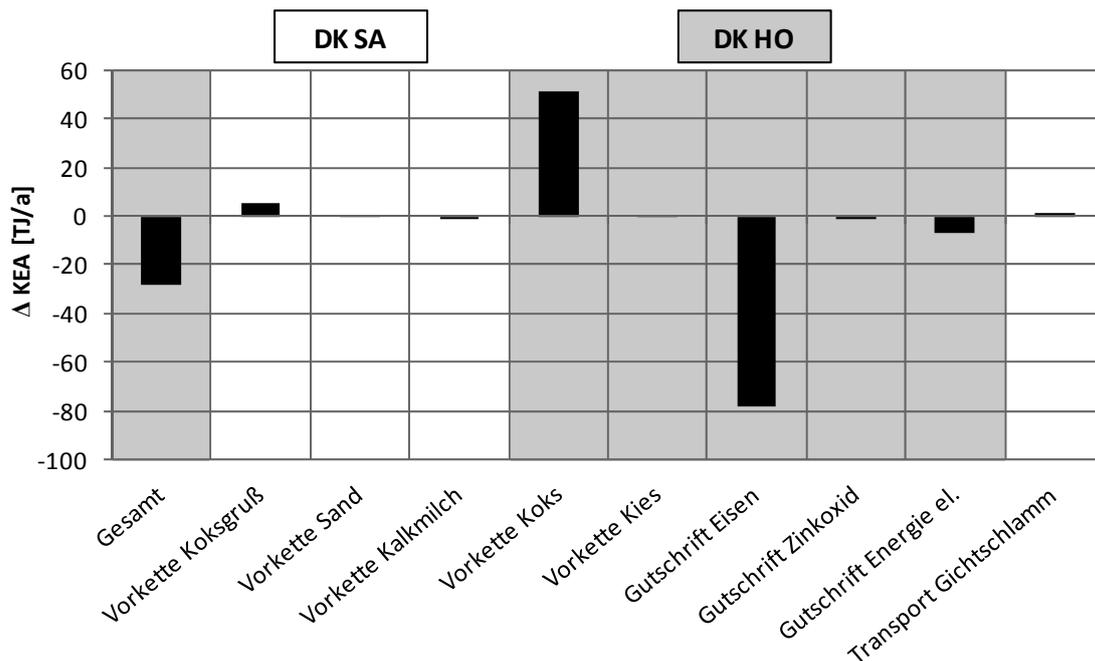


Abbildung 56: Auswirkungen der Verwertung von Konverterverdampfungskühlerstaub im DK-Prozess ohne interne Rezirkulation von Konverterfilterstaub auf den kumulierten Energieaufwand

5.3 Zusammenfassende Bewertung der Gesamtszenarien

In Tabelle 37 sind die Auswirkungen der in den vorangegangenen Abschnitten besprochenen Szenarien auf die CO₂-Emissionen und den kumulierten Energieaufwand dargestellt. Ein positives Vorzeichen steht wiederum für eine mögliche Einsparung.

Die Ergebnisse der Szenarien zeigen, dass einige der betrachteten Maßnahmen zur Erhöhung der Ressourceneffizienz zu einer Erhöhung der CO₂-Emissionen führen. Eine Ausnahme stellt grundsätzlich die interne Verwertung im integrierten Hüttenwerk dar. Die Verwertung des Gichtstaubes kann außerdem auch bei der externen Verwertung im DK-Prozess zu einer Reduktion von CO₂-Emissionen führen, ebenso die Verwertung des Konverterverdampfungskühlerstaubes im DK-Prozess.

Die überwiegende Anzahl der untersuchten Szenarien leistet dagegen einen Beitrag zur Erhöhung der Energieeffizienz, wobei die Verwertung der Gichtstäube aus dem integrierten Hüttenwerk und dem DK-Prozess und eine mögliche Wälzschlackeverwertung die größten Effekte aufweisen. Ökonomisch gesehen sind alle betrachteten Maßnahmen sinnvoll, wobei die in den vorangegangenen Abschnitten diskutierten Unsicherheiten berücksichtigt werden müssen.

5. BERECHNUNG UND BEWERTUNG AUSGEWÄHLTER SZENARIEN

Tabelle 37: Übersicht der Ergebnisse der betrachteten Szenarien

Maßnahme	ΔCO_2 [kt/a]	ΔKEA [TJ/a]
Wälzschlacke im EAF	+2,64	-95,04
Wälzschlacke im DK-Prozess	+20,98	-46,60
EAF-Staubrezirkulation	+1,46	-10,20
EAF-Staubrezirkulation und Wälzschlacke im EAF	+5,10	-37,78
EAF-Staubrezirkulation und Wälzschlacke im DK-Prozess	+18,61	-52,72
DK-Gichtstaub im Wälzprozess	+4,56	-58,84
DK-Gichtstaub im Wälzprozess und Wälzschlacke im DK-Prozess	+27,68	-113,19
Gichtstaub integriertes Hüttenwerk intern	-3,21	-276,76
Gichtstaub integriertes Hüttenwerk im DK-Prozess	-0,47	-180,55
Gichtschlamm integriertes Hüttenwerk im DK-Prozess	+0,41	-16,45
Konverterschlacke integriertes Hüttenwerk intern	-2,73	-34,56
Walzzunder integriertes Hüttenwerk intern	-0,43	-1,36
Rezirkulation von Konverterfilterstaub und Einsatz im Wälzprozess, Konverterverdampfungskühlerstaub im DK-Prozess	+31,45	+300,67
Konverterverdampfungskühlerstaub im DK-Prozess	-0,91	-29,56

Mit dem in ERESTRE entwickelten Gesamtmodell lassen sich über die betrachteten Maßnahmen und Kombinationen von Maßnahmen hinaus beliebige Maßnahmenkombinationen bewerten. In Tabelle 38 sind ausgewählte vielversprechende Kombination von Einzelmaßnahmen zu Gesamtszenarien dargestellt. Bei der Betrachtung der Ergebnisse am unteren Tabellenende wird deutlich, dass die Kombinationen der Maßnahmen durch Wechselwirkungen zwischen den Maßnahmen nicht die Summe der Einzelmaßnahmen darstellen, d. h. dass die Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Szenarien im Gesamtmodell abgebildet werden. Wechselwirkungen entstehen, indem durch eine Maßnahme die Zusammensetzung eines anderen Kuppelproduktes beeinflusst wird, welcher wiederum in einem der betroffenen Aggregate verwertet wird.

Als besonders vielversprechend haben sich im ERESTRE-Projekt die Verwertung der Wälzschlacke im EAF, die Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzprozess, die interne Verwertung von Gichtstaub, Konverterschlacke und Walzzunder im integrierten Hüttenwerk und die Verwertung von Gichtschlamm und Konverterverdampfungskühlerstaub aus dem integrierten Hüttenwerk im DK-Prozess herausgestellt. Die Kombination dieser Maßnahmen bildet das Szenario „Gesamt 1“ in Tabelle 38. Dieses Szenario führt insgesamt zu einer Verbesserung des kumulierten Energieaufwandes und deutlichen ökonomischen Vorteilen.

Der Anstieg der CO₂-Emissionen ist im Vergleich zu den verschiedenen Einzelmaßnahmen aus Tabelle 37 im Gesamtszenario nur geringfügig niedriger. Werden in diesem Szenario zusätzlich 40 % des EAF-Staubes intern rezirkuliert (Szenario „Gesamt 2“), können die Verbesserungen des KEAs und der Wirtschaftlichkeit im ERESTRE-Gesamtmodell geringfügig verbessert werden, während die zusätzlichen CO₂-Emissionen sich fast verdoppeln. Hierbei zeigen sich die Wechselwirkungen zwischen DK-Gichtstaubeinsatz im DK-Prozess, Wälzschlackeeinsatz im EAF und Staubrezirkulation. Der Einsatz von DK-Gichtstaub führt dabei zu einem höheren Aufkommen an Wälzschlacke, was wiederum zu vergleichsweise größeren Vorteilen im EAF und Wälzrohr führt. Szenario „Gesamt 3“ bildet den Fall ab, in dem DK-Gichtstaub nicht im Wälzrohr eingesetzt wird. Hier wirkt sich insbesondere die EAF-Staub-Rezirkulation negativ auf das energetische und ökonomische Gesamtergebnis aus. In diesem Szenario übersteigen die Einsparungen der CO₂-Emissionen durch die interne Verwertung im integrierten Hüttenwerk und die Verwertung des Konverterverdampfungskühlerstaubes im DK-Prozess die zusätzlichen CO₂-Emissionen anderer Maßnahmen. Die Szenarien „Gesamt 4“ und „Gesamt 5“ umfassen dagegen die Wälzschlackeverwertung im DK-Prozess. Analog zu den Betrachtungen der Einzelmaßnahmen ergeben sich hierbei jeweils höhere zusätzliche CO₂-Emissionen und vergleichsweise geringere Einsparungen des KEAs und eine geringere Erhöhung der Wirtschaftlichkeit.

Tabelle 38: Auswertung von vielversprechenden Maßnahmenkombinationen

Maßnahme	Referenz	Gesamt 1	Gesamt 2	Gesamt 3	Gesamt 4	Gesamt 5
Wälzschlacke	-	100 % EAF	100 % EAF	100 % EAF	100 % DK	100 % DK
EAF-Staubrezirkulation	0 %	0 %	40 %	40 %	0 %	40 %
DK-Gichtstaub im Wälzprozess	nein	ja	ja	nein	ja	ja
Gichtstaub integriertes Hüttenwerk	0 % intern	100 % intern				
Gichtschlamm integriertes Hüttenwerk intern	0 % DK	100 % DK				
Konverterschlacke	0 % intern	7 % intern	7 % intern	7 % intern	7 % intern	7 % intern
Walzzunder intern	0 % intern	100 % intern				
Δ CO ₂ [kt/a]	0	+0,99	+1,93	-3,17	+21,48	+25,64
Δ KEA [TJ/a]	0	-526,0	-527,2	-453,2	-464,6	-384,2

6 Diskussion des Anwendungsbereichs und der Grenzen der entwickelten Methodik sowie Ausblick mögliche Verwertungen

6.1 Grenzen der Methodik und Einfluss von Abweichungen der erhobenen Daten auf die Ergebnisse der Szenarien

Ziel des Vorhabens ist die Untersuchung der Auswirkungen von Maßnahmen zur Steigerung der Ressourceneffizienz auf die Energieeffizienz, die Emission von CO₂ und die Wirtschaftlichkeit in einem durch Stoffströme verbundenen Netzwerk der Metallindustrie. Dazu werden unter Berücksichtigung der Interdependenzen der über die beeinflussten Stoffströme miteinander verbundenen Prozesse mit geringem Aufwand erzielbare Verbesserungspotentiale aufgezeigt und systematisch bewertet.

Zur Erreichung dieses Ziels wird ein Ansatz zur hinreichend detaillierten Modellierung dieser Prozesse entwickelt, mit dem Rückkopplungen aus über mehrere Prozesse im Kreislauf geführten Stoffströmen berechnet werden können. Die Modellierung basiert, soweit möglich, auf realen, in den abgebildeten Anlagen erhobenen Daten. Da zur Kalibrierung der Fließschemasimulationsmodelle eine Vielzahl an Daten über einen längeren Zeitraum benötigt wird, werden im normalen Betrieb der Prozesse erhobenen Daten verwendet.

Aufgrund von Abweichungen bei der Datenerhebung und unterschiedlicher Erhebungsintervalle sind in diesen Daten Inkonsistenzen enthalten. Diese Fehler betragen bei gut zueinander passenden Datenreihen ca. +/- 10 % (35 % aller Datenreihen), bei größeren Abweichungen schon ca. +/- 25 % (29 % aller überprüften Datenreihen). Bei einzelnen nur selten gemessenen Werten oder solchen, die geschätzt werden mussten, wurden auch noch höhere Abweichungen beobachtet (37 % aller überprüften Datenreihen). Um trotzdem den Einfluss der zu untersuchenden Maßnahmen auf die Prozesse ohne Betriebsversuche beurteilen zu können, wurden Fließschemasimulationsmodelle der Prozesse erstellt. Mit den Fließschemasimulationsmodellen lassen sich Datenreihen berechnen, bei denen ein- und ausgehende Stoff- und Energieströme konsistent sind, und somit die Ergebnisse im Hinblick auf ihre Plausibilität überprüft werden können. Die Übereinstimmung mit dem Verhalten der realen Prozesse lässt

sich jedoch nur im Rahmen der Genauigkeit der bei den Projektpartnern vor Ort erhobenen Daten validieren. Für einzelne Elemente und Verbindungen, die vor Ort nicht analytisch erfasst werden, ist eine solche Validierung nicht möglich. Dies betrifft häufig Verbindungen der Alkalien in Stoffströmen der Abgasreinigungen der Prozesse.

Um die in den Fließschemasimulationsmodellen modellierten Zusammenhänge im übergeordneten Stoff- und Energiestrommodell abbilden zu können, werden Transformationsfunktionen erzeugt, die mit Regressionsanalysen auf Basis von Fließschemasimulationsdaten berechnet werden. Die Transformationsfunktionen beschreiben Ausgangsgrößen der (Teil-)Prozesse, wie Massenströme von Verbindungen in ausgehenden Stoffströmen oder Energiebedarfe, in Abhängigkeit von Massenströmen einzelner Verbindungen in eingehenden Stoffströmen oder prozessinternen Rückführraten. Die Anzahl benötigter Fließschemasimulationsrechenläufe zur Berechnung dieser Transformationsfunktionen schränkt die Anzahl beschreibbarer Verbindungen in den Stoffströmen des Gesamtmodells ein und führt dazu, dass das in den Fließschemasimulationsmodellen nichtlinear abgebildete Prozessverhalten über den zu betrachtenden Wertebereich linear betrachtet werden muss. Die Transformationen beschreiben den jeweils modellierten Wertebereich. Das Prozessverhalten kann somit für den hier erforderlichen Zweck abgebildet werden, aber Detailinformationen, die in geringerem Maße Energieeffizienz und CO₂-Emissionen beeinflussen, wie z. B. unterschiedliche Oxidierungsgrade des Eisens in den Stoffströmen, werden nicht berücksichtigt. Auch die Massenströme von Elementen mit nur geringen Konzentrationen (z. B. Cu, P, Mn etc.) in den betrachteten Stoffströmen, die aber technisch den Einsatz der Stoffströme begrenzen können, werden in diesem Ansatz nicht berücksichtigt.

Ein weiteres Problem ergibt sich bei der Bewertung der Szenarien durch die in den verwendeten Datenbanken zu Lebenszyklusdaten (Ecoinvent und Probas) enthaltenen Datenunsicherheiten. Da keine Datenbank alle benötigten Werte zur Verfügung stellt, ist eine Kombination beider Datenquellen erforderlich, was durch unterschiedliche Annahmen in den Datenbanken zu Inkonsistenzen führen kann. Darüber hinaus führen unterschiedliche Endprodukte, wie z. B. Stahl und Eisen, zu einem anderen Ansatz in der Ökobilanzierung bzw. zu einem Vorteil höherwertiger Produkte. Weiterhin wird im integrierten Hüttenwerk

von einer begrenzten Kapazität ausgegangen und damit die ökonomische und ökologische Bewertung über einen verminderten oder vermehrten Bedarf an Eisenerz durchgeführt, während bei den anderen Prozessen jeweils freie Kapazitäten unterstellt und somit die zusätzlich produzierten Mengen der Produkte bewertet werden. Da in der in diesem Projekt angewandten Methodik die Schritte Datenerfassung und -aggregation, Fließschemasimulationskalibrierung, Berechnung von Transformationsfunktionen und Bilanzierung von kumuliertem Energieaufwand und CO₂-Emissionen jeweils aufeinander aufbauen, wirken sich Abweichungen in einem Schritt auf die nachfolgenden Schritte aus. Um den Einfluss möglicher systematischer Fehler nicht darzustellen, werden in der Szenarioauswertung in den Kapiteln 5.2 und 5.3 relative Veränderungen betrachtet. Dabei werden Unterschiede einer Maßnahme zur Steigerung der Ressourceneffizienz gegenüber einem Basisszenario bewertet. Relative Fehler sind daher in beiden Szenarien enthalten und eliminieren sich bei der Betrachtung der Differenzen zwischen den beiden Szenarien.

6.2 Fortführung der Arbeiten zur Umsetzung der Ergebnisse

Im ERESTRE-Projekt wird eine systematische und betriebsübergreifende Bewertung der betrachteten, vielversprechenden Maßnahmen zur Erhöhung der Ressourceneffizienz durchgeführt. Dabei wird ein hohes Aggregationsniveau bewusst in Kauf genommen, um die netzwerkweiten Einflüsse von Maßnahmen zur Ressourceneffizienzsteigerung beurteilen zu können. Die Ergebnisse dieser Bewertung wurden und werden mit den Projektpartnern diskutiert und abgestimmt.

Unter den untersuchten Maßnahmen werden vielversprechende Szenarien identifiziert, die in Zukunft in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern konkretisiert und weitergehend analysiert werden sollen.

Das im Projekt erstellte und kalibrierte Fließschemasimulationsmodell der Laugung der hydrometallurgischen Zinkgewinnung ermöglicht es, neben den bereits durchgeführten Bewertungen weitere Untersuchungen durchzuführen. Es ist gut geeignet, um das aufgrund der zahlreichen Rückflüsse sehr komplexe Verhalten der Laugung systematisch zu betrachten. So fällt neben dem Hauptprodukt, der zinkhaltigen Lauge, das Blei-Silber Konzentrat als Nebenprodukt und der Jarosit als Rückstand an. Die Qualität der Lauge beeinflusst die nach-

folgenden Prozessstufen, in denen u. a. noch Cadmium gewonnen wird. Eine Änderung von Rückföhrraten innerhalb der Laugung verändert somit alle ausgehenden Stoffströme. Aufbauend auf diesem Modell, gekoppelt mit Methoden des OR, können unter unterschiedlichen wirtschaftlichen Randbedingungen, wie z. B. Energiepreisen oder Rohstoffpreisen, jeweils optimale Verfahrensföhrungen in Bezug auf Energieeffizienz, CO₂-Emissionen und den Deckungsbeitrag berechnet werden.

Als besonders vielversprechend erscheint aus Energie-, CO₂- und ökonomischer Sicht auch die Verwertung der Wälzschlacke auf Basis der Szenarien in Kapitel 5.2.1, 5.2.2 bzw. 5.2.3. Für eine Entscheidung zur tatsächlichen Realisierung fehlen jedoch noch wichtige Informationen. So ist bei der Stahlherstellung das Verhalten und die Konzentration unter anderem der Elemente und aller ihrer möglichen Verbindungen von Mangan (Mn), Phosphor (P), Kupfer (Cu), Schwefel (S) und Chrom (Cr) ein wichtiges Kriterium für die Qualität des Produktes. Dabei muss berücksichtigt werden, dass im Prozess aus unterschiedlichen Schrottrezepturen mehrere Stahlsorten hergestellt werden und diese unterschiedliche Anforderungen an die Konzentration dieser Elemente haben. In ERESTRE wird mit der hauptsächlich produzierten Stahlsorte und einer gemittelten Schrottrezeptur gearbeitet. Im Sinne einer Verwertung der Ergebnisse des ERESTRE Projektes soll daher eine detailliertere Untersuchung dieser Aspekte erfolgen. Hierbei soll zu Gunsten einer detaillierteren Betrachtung der Wechselwirkungen zwischen den direkt beteiligten Prozessen eine direkte Kopplung zwischen den erstellten Fließschemasimulationsmodellen durchgeführt werden.

7 Zusammenfassung

Ansatzpunkt des diesem Bericht zugrunde liegenden Forschungsprojektes „Erhöhung der Energie- und Ressourceneffizienz und Reduzierung der Treibhausgasemissionen in der Eisen-, Stahl- und Zinkindustrie - ERESTRE“ sind die zahlreichen und in großen Mengen in der Eisen- und Stahlindustrie sowie der Zinkindustrie anfallenden, meist werthaltige Stoffe enthaltende Kuppelprodukte. Durch den mengenmäßig hohen Rohstoff- und Energieeinsatz, die Emissionen klimarelevanter Gase sowie den Anfall von Kuppelprodukten wurden in den vergangenen Jahrzehnten große Anstrengungen zur Schließung von Stoffkreisläufen sowie zur Erhöhung der Energie- und Ressourceneffizienz in der Metallherzeugung unternommen, die zur Implementierung interner Recyclingmaßnahmen und Etablierung externer Recyclingprozesse geführt haben. Innerhalb des so entstandenen Produktions- und Recyclingnetzwerkes der Eisen- und Stahlindustrie sowie der Zinkindustrie ist es Ziel dieses Vorhabens, durch gezielte Beeinflussung und Umlenkung der die Netzwerkpartner verbindenden Stoffströme oder Verwertung bislang noch nicht genutzter Reststoffe kurzfristig umsetzbare Maßnahmen zur Verbesserung der Ressourceneffizienz zu identifizieren und hinsichtlich ihrer Wirkungen unter den Aspekten der Energieeffizienz, des Ausstoßes von CO₂-Emissionen und der Wirtschaftlichkeit zu bewerten.

Hierzu wird ein integrierter stoff- und energiestrombasierter Ansatz zur quantitativen Abschätzung und Bewertung der Auswirkungen von geänderten Rückführraten bzw. der Verwendung bislang nicht eingesetzter Kuppelprodukte entwickelt. In einem integrierten Stoff- und Energiestrommodell werden die entscheidungsrelevanten ökonomischen und ökologischen Größen der einzelnen Akteure, d. h. Betriebe, sowie des Netzwerkes insgesamt abgebildet.

Hierzu werden zunächst für repräsentative Teilprozesse des Produktions- und Verwertungsnetzwerkes der deutschen Eisen- und Stahlindustrie, der Recycling- sowie der Zinkindustrie Fließschemasimulationsmodelle erstellt. Diese umfassen ein integriertes Hüttenwerk, ein Elektrostahlwerk, eine hydrometallurgische Anlage zur Zinkgewinnung sowie den DK-Prozess und das Wälzverfahren. Diese Modelle sind in der Lage, in Abhängigkeit der Änderungen von Prozesseingangsgrößen die Auswirkungen auf Mengen und Qualität der weiteren entscheidungsrelevanten Eingangsstoff- und -energieströme sowie der Aus-

scheidungsrelevanten Eingangsstoff- und -energieströme sowie der Ausgangsstoff- und -energieströme zu berechnen. Dies ermöglicht die unabhängige Variation der Parameter, vor allem der Konzentrationen von Elementen und Verbindungen, die im normalen Betriebsablauf nicht oder nur mit nicht vertretbarem Aufwand durchgeführt werden können. Zudem wird eine thermodynamische Gesetzmäßigkeiten folgende konsistente Berechnung der abhängigen Größen möglich, die im realen Betriebsablauf teilweise durch Messfehler, ungleiche oder fehlende Probenahmen oder Messungen nicht möglich ist.

Die auf Basis von Betriebsdaten kalibrierten Modelle werden eingesetzt, um unabhängig und systematisch die Einflüsse der Parameteränderungen zu untersuchen. Mit Hilfe von multipler linearer Regressionsanalyse werden anschließend lineare Transformationsfunktionen für die Hauptprozessschritte bestimmt. Diese bilden den Kern eines integrierten Stoff- und Energiestrommodells der betrachteten Prozesse, das als lineares Gleichungssystem formuliert wird. Damit können die Auswirkungen der Parameteränderungen, z. B. von Rückführraten, durch die Maßnahmen zur Steigerung der Ressourceneffizienz auf die Stoff- und Energieströme der einzelnen Akteure sowie das betrachtete Netzwerk insgesamt berechnet werden. Das so erhaltene Mengengerüst wird zur technischen Beurteilung sowie zur ökologischen Bewertung hinsichtlich des Ausstoßes an CO₂-Emissionen und des kumulierten Energieaufwandes sowie zur ökonomischen Bewertung verwendet.

Das entwickelte integrierte Stoff- und Energiestrommodell wird eingesetzt, um gemeinsam mit den Projektpartnern als vielversprechend identifizierte interne und externe Maßnahmen zu bewerten. Hierbei handelt es sich um Verwertungsmöglichkeiten für Stäube und Schlämme aus den verschiedenen Gasreinigungsanlagen des integrierten Hüttenwerkes, des DK-Prozesses und des Elektrolichtbogenofens, Schlacken aus dem Sauerstoffaufblaskonverter des integrierten Hüttenwerkes und des Wälzrohrs und ölhaltigen Walzzunder sowie Kombinationen dieser Maßnahmen.

Bei diesem Vorgehen lassen sich die Übereinstimmung der Prozessabbildung mit dem Verhalten der realen Prozesse im Rahmen der Genauigkeit der bei den Projektpartnern vor Ort erhobenen Daten validieren. Die im Rahmen der Betrachtung realer Produktionsprozesse auftretenden Probleme hinsichtlich Datenunsicherheit und -fehlern führen insofern zu nicht oder nur mit nicht ver-

treibbare Aufwand vermeidbaren Einschränkungen hinsichtlich der erreichbaren Abbildungsgenauigkeit. Weiter können aufgrund der durchgeführten netzwerkweiten Betrachtung Detailinformationen, die ebenfalls in geringerem Maße Energieeffizienz und CO₂-Emissionen beeinflussen, etwa unterschiedliche Oxidationsgrade des Eisens in den Stoffströmen, nicht berücksichtigt werden. Zudem wird durch die Verwendung linearer Transformationsfunktionen zur Approximation des in der Realität nichtlinearen Prozessverhaltens eine weitere Vereinfachung vorgenommen.

Trotz der genannten Einschränkungen kann durch das Vorhaben gezeigt werden, dass das Prozessverhalten für den beabsichtigten Zweck, einer ersten Bewertung von Ressourceneffizienzmaßnahmen, hinreichend genau abgebildet werden kann. So ermöglicht der methodische Ansatz, trotz des akteurs- und netzwerkbezogenen Fokus, die wesentlichen entscheidungsrelevanten Parameter, insbesondere stoffliche Charakteristika der zu verwertenden Kuppelprodukte, zu berücksichtigen und die beabsichtigte grundsätzliche Bewertung von Ressourceneffizienzmaßnahmen hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf die Energieeffizienz, CO₂-Emissionen und die Wirtschaftlichkeit in quantitativen Szenariobetrachtungen durchzuführen.

Die Ergebnisse der Bewertungen zeigen für alle untersuchten Maßnahmen neben den zu erwartenden positiven Effekten für die Ressourceneffizienz positive ökonomische Effekte. Diese unterscheiden sich jedoch deutlich untereinander, wobei unterschiedliche Unternehmensgrößen zu beachten sind. Es gibt ökonomisch sehr vielversprechende Maßnahmen, wie die stoffliche Verwertung von Wälzschlacke und die Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzrohr. Hinsichtlich der CO₂-Emissionen zeigt sich, dass die meisten der betrachteten Maßnahmen zu einer Erhöhung führen. Bezüglich der Energieeffizienz sind in der überwiegenden Anzahl der untersuchten Szenarien positive Effekte zu erwarten. Besonders vielversprechend erscheinen die Verwertung der Gichtstäube aus dem integrierten Hüttenwerk und dem DK-Prozess und eine mögliche Wälzschlackeverwertung. Die Untersuchung von Maßnahmenbündeln zeigt, dass Wechselwirkungen zwischen den Maßnahmen existieren. In der Gesamtbetrachtung erscheinen die Verwertung der Wälzschlacke im EAF, die Verwertung von DK-Gichtstaub im Wälzprozess, die interne Verwertung von Gichtstaub, Konverterschlacke und Walzzunder im integrierten Hüttenwerk und die

Verwertung von Gichtschlamm und Konverterverdampfungskühlerstaub aus dem integrierten Hüttenwerk im DK-Prozess besonders vorteilhaft.

Für diese als besonders vielversprechend identifizierten Maßnahmen sollten sich weitere Untersuchungen anschließen, die eine detaillierte Ausarbeitung eines Umsetzungskonzeptes und weitergehende Bewertungen beinhalten. Solche Betrachtungen müssen bislang nicht betrachteter Elemente und Verbindungen berücksichtigen und können bspw. auf einer direkten Kopplung auf Basis der in diesem Vorhaben entwickelten Fließschemasimulationsmodelle durchgeführt werden. Zudem müssten die notwendigen Änderungen in den Prozessen und den Arbeitsabläufen mit ihren Wirkungen auf die betrachteten Zielkriterien, insbesondere auf weitere, bislang nicht oder nur überschlägig berücksichtigte Kostenarten betrachtet werden. Entsprechende Arbeiten zur Vorbereitung einer Umsetzung wurden im Rahmen des Vorhabens angestoßen.

Erweiterungsmöglichkeiten des entwickelten Stoff- und Energiestrommodells bestehen einerseits durch die Untersuchung weiterer Maßnahmen. Weiterhin können die Prozesse von im ERESTRE-Projekt nicht berücksichtigten Industrieunternehmen implementiert und untersucht werden. Darüber hinaus können bislang nicht betrachtete Prozesse, wie z. B. Recycling von Reststoffen mit mittleren Zinkgehalten, integriert werden. Das Modell kann auch eingesetzt werden, um die möglichen Auswirkungen neuer, d. h. derzeit noch in der Entwicklung befindlicher oder in Deutschland noch nicht realisierter, Verfahren auf das Produktions- und Verwertungsnetzwerk der deutschen Eisen- und Stahlindustrie sowie der Zinkindustrie zu bestimmen und somit als Grundlage für strategische Entscheidungen dienen.

Insofern steht durch das erfolgreich durchgeführte Vorhaben neben den Untersuchungen für die Identifikation von vielversprechenden Maßnahmen zur Steigerung der Ressourceneffizienz mit positiven Effekten im Hinblick auf CO₂-Emissionen, Energieverbrauch und Wirtschaftlichkeit ein erweiterbares Werkzeug zur technischen, ökologischen und ökonomischen Bewertung von Maßnahmen zur Erhöhung der Ressourceneffizienz in der deutschen Eisen- und Stahlindustrie, der Recycling- und Zinkindustrie zur Verfügung.

Literaturverzeichnis

- ASPENPLUS (2010a) <http://www.aspentech.com/products/aspem-plus.cfm>. Abruf 2010-10-20
- ASPENPLUS (2010b) AspenPlus Reference, Aspen Technology, Burlington
- ASPENPLUS (2010c) Aspen Physical Property System - Physical Property Methods and Models, Aspen Technology, Burlington
- ARSLAN C, ARSLAN F (2001) Thermochemical review of jarosit and goethite stability regions at 25 and 95 °C. Turkish J.Eng. Env. Sci 27 (2003) 45-52
- AZIMI G, PAPANGELAKIS VG, DUTRIZAC JE (2007) Modelling of calcium sulphate solubility in concentrated multi-component sulphate solutions. Fluid Phase Equilibria 260 (2007) 300-315
- BAMBERG G, BAUR F (1996) Statistik, 9.Auflage. Oldenbourg, München und Wien
- BEHR A, AGAR DW, JÖRISSEN J (2010) Einführung in die Technische Chemie. Spektrum, Heidelberg
- BIEGLER LT (1989) Chemical Process Simulation. Chem. Eng. Prog. 1989 (85):50-61
- BIEGLER LT, GROSSMANN IE, WESTERBERG AW (1997) Systematic methods of chemical process design. Prentice Hall PTR, New Jersey
- BISWAS A (1981) Principles of Blast Furnace Ironmaking. Cootha Publishing House, Brisbane
- BUCHWALDER J, MARGOT H, RICHTER J & LYCHATZ B (2008) Verminderung der Staubemissionen an der Sinteranlage von ArcelorMittal Eisenhüttenstadt. Stahl und Eisen 128 (9) 111-117
- DIN EN ISO 10628:2000, Fließschemata für Verfahrenstechnischen Anlagen – Allgemeine Regeln
- DINARDO O, DUTRIZAC JE (1990) The solubility of silver chloride in sulphate media. Hydrometallurgy 26 (1991) 47-59

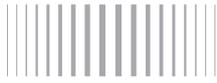
- DROUET C, NAVROTSKY A (2002) Synthesis, characterization and thermochemistry of K-Na-H₃O jarosites. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 67 (2003) 2063-2067
- ENGELS B (2003) Integrierte Logistik- und Verwertungsplanung beim Produktrecycling - dargestellt am Beispiel von Gerätebatterien. Dissertation. VDI-Verlag, Düsseldorf
- EUROPEAN COMMISSION (2001) Integrated Pollution Prevention and Control (IPPC) Reference Document on Best Available Techniques in the Non Ferrous Metals Industries
- EUROPEAN COMMISSION, EUROPEAN IPPC BUEREAUO (2011) Best Available Techniques (BAT) Reference Document for Iron and Steel Production (Draft version 24.06.11). ftp://ftp.jrc.es/pub/eippcb/doc/IS_11_17-06-2011.pdf (Abruf 13-07-2011)
- FRÖHLING M (2006) Zur taktisch-operativen Planung stoffstrombasierter Produktionssystem – Dargestellt an Beispielen aus der stoffumwandelnden Industrie. Deutscher Universitäts-Verlag, Wiesbaden
- FRÖHLING M, SCHWADERER F, BARTUSCH H & RENTZ O (2010) Integrated planning of transportation and recycling for multiple plants based on process simulation. *European Journal of Operational Research* 2010 (207): 958-970
- FROHBERG MG (1994) Thermodynamik für Werkstoffingenieure und Metallurgen - Eine Einführung, 2. Aufl. Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, Stuttgart
- FUTTERER E, MUNSCH M (1990) Flow-Sheeting-Programme für die Prozeßsimulation. *Chem.-Ing.-Tech.* 1990 (62): 9-16
- GAUTAM R, SEIDER WD (1979a) Computation of phase and chemical equilibrium: Part I. Local and Constrained Minima in Gibbs Free Energy, *AIChE Journal*. 1979 (6) 991-999
- GAUTAM R, SEIDER WD (1979b) Computation of phase and chemical equilibrium: Part II. Phase-splitting“. In: *AIChE Journal*. 1979 (6) 999-1006

- GAUTAM R, SEIDER WD (1979c) Computation of phase and chemical equilibrium: Part III. Electrolytic Solutions“. In: AIChE Journal. 1979 (6) 1006 - 1015
- GRUHN G, HARTMANN K, KARDOS J, HELFRICHT R, DIETZSCH L, KAUSCHUS W (1976) Systemverfahrenstechnik I – Modellierung und Simulation verfahrenstechnischer Systeme. VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig
- GRUHN G, HARTMANN K, KARDOS J, HELFRICHT R, DIETZSCH L, KAUSCHUS W (1977) System-verfahrenstechnik II – Bewertung, Optimierung und Synthese verfahrenstechnischer Systeme. VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig
- GUTERMUTH W (1995) Stand, Probleme und zukünftige Weiterentwicklung von kommerziellen Simulationsprogrammen aus Sicht der Anwender. In: Schuler H (Hrsg) Prozesssimulation. VCH Verlagsgesellschaft GmbH, Weinheim
- HEINEN KH (1997) Elektrostahlerzeugung. 4. Aufl. Verlag Stahleisen, Düsseldorf
- HILLMANN C & SASSEN KJ (2006) Solutions for dusts and sludges from BOF process, Stahl und Eisen 126 (11) 149 – 156
- HILLMANN C & HAUKE T (2007) Energieeffizientes Recycling von Eisenreststoffen. Stahl und Eisen 127 (12) 90 – 92
- JELLINGHAUS M (1994) Stahlerzeugung im Lichtbogenofen. 3. Aufl. Verlag Stahleisen, Düsseldorf
- JOHN AD (1999) Langes's, Handbook of Chemistry 15th Edition. McGraw-Hill inc.
- KLATT UK, MARQUARDT W (2009) Perspectives for process systems engineering – Personal views from academia and industry. Comput. Chem. Eng. 2009 (33): 536-550. doi 10.1016/j.compchemeng. 2008.09.002
- LOHE B, FUTTERER E (1995) Stationäre Flowsheet-Simulation. In: Schuler H (Hrsg) Prozesssimulation. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim
- MIZELLI H, MOSER H, HOFER D & REISINGER P (2009) Modelle der Konvertermetallurgie in einer modernen IT-Architektur, BHM Berg- und Hüttenmännische Monatshefte 154 (1), 16 – 19

- MUYERS R H, MOTGOMERY D C, VINING G G (2002) Generalized linear Models: with Applications in Engineering and the Sciences. John Wiley & Sons, New York
- PENKUHN T (1997) Umweltintegriertes Stoffstrommanagement in der Prozeßindustrie – dargestellt am Beispiel der operative Produktionsplanung der Ammoniaksynthese, Dissertation. Peter Lang Frankfurt am Main, Berlin, Bern, New York, Paris, Wien
- PERRY RH, GRENN DW (1997) Perry's, Chemical Engineers' Handbook 7th Edition. McGraw-Hill inc.
- RENTZ O, FRÖHLING M, NEBEL F, SCHULTMANN F & ENGELS B (2006) Integrierter Umweltschutz in der Metallerzeugung: Simulationsgestützte operative Produktionsplanung zur Optimierung metallurgischer Abfallverwertungsprozesse. Universitätsverlag Karlsruhe, Karlsruhe
- RENTZ O, SCHULTMANN F, SPENGLER T, SIEVERDINGBECK A, ENGELS B (1999) Prozessintegrierter Umweltschutz in der Eisen- und Stahlindustrie - Stoff- und Energiestrommanagement in integrierten Hüttenwerken mit Hilfe flowsheetingbasierter Prozesssimulation. Abschlussbericht des BMBF-Forschungsvorhabens „Prozeßintegrierte Umweltschutzmaßnahmen in der Eisen- und Stahlindustrie – Teil 2 – Förderkennzeichen 01RV9701, Institut für Industriebetriebslehre und Industrielle Produktion (IIP), Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
- RUH A & KRAUSE T (2011) The Waelz Process in Europe. In: 3rd Seminar Networking between Zinc and Steel, GDMB Society for Mining, Metallurgy, Ressource and Environment Technology e. V., Heft 125, Clausthal-Zellerfeld, 35 – 46
- SCHOTT GL (1964) Computation of Restricted Equilibria by General Methods, The Journal of Chemical Physics 1964 (7) 2065 - 2066
- SCHULTMANN F (2003) Stoffstrombasiertes Produktionsmanagement – Betriebswirtschaftliche Planung und Steuerung industrieller Kreislaufwirtschaftssysteme. ESV, Berlin

- SCHÜRMAN E, PLOCH A, PFLIPSEN HD & HERWIG U (1995) Chemische Zusammensetzung, Entstehungsmechanismus und Bildungsrate von Konverterstaub. Stahl und Eisen 115 (6) 55 – 61
- STATISTISCHES BUNDESAMT (2010): GENESIS-Online Informationssystem. <https://www-genesis.destatis.de>, Wiesbaden
- TURKDOGAN ET (1978) Blast Furnace Reactions. Metallurgical Transactions B (9B) 163 – 179
- VEREIN DEUTSCHER EISENHÜTTENLEUTE VDEH (1981) Schlackenatlas. Verlag Stahleisen, Düsseldorf
- WHITE CW, SEIDER WD (1981) Computation of phase and chemical equilibrium, part IV: Approach to chemical equilibrium, AIChE Journal 1981 (3) 466-471
- WIRTSCHAFTSVEREINIGUNG STAHL (2011) Stahlerzeugung in Deutschland. http://www.stahlonline.de/Deutsch/Linke_Navigation/Stahl_in_Zahlen/_Dokumente/Stahlerzeugung_in_Deutschland_T.pdf (Abruf 28-07-2011)
- WOZNY G (1995) Simulation in der Verfahrensentwicklung. In: Schuler H (Hrsg) Prozesssimulation. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim

PRODUKTION UND ENERGIE



Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Institut für Industriebetriebslehre und Industrielle Produktion
Deutsch-Französisches Institut für Umweltforschung

ISSN 2194-2404

Die Bände sind unter www.ksp.kit.edu als PDF frei verfügbar
oder als Druckausgabe zu bestellen.

- Band 1** **National Integrated Assessment Modelling zur Bewertung
umweltpolitischer Instrumente.**
Entwicklung des otello-Modellsystems und dessen Anwendung
auf die Bundesrepublik Deutschland. 2012
ISBN 978-3-86644-853-7
- Band 2** **Erhöhung der Energie- und Ressourceneffizienz und
Reduzierung der Treibhausgasemissionen in der Eisen-,
Stahl- und Zinkindustrie (ERESTRE). 2013**
ISBN 978-3-86644-857-5

In der metall erzeugenden- und verarbeitenden Industrie fallen unvermeidbar eine Reihe von wertvollen Kuppelprodukten wie Schlacken, Stäube und Schlämme an. Aufgrund der zunehmenden Verknappung von Rohstoffen und der Emissionen klimarelevanter Gase wie Kohlenstoffdioxid, wurden in den letzten Jahren verstärkte Anstrengungen zur effizienten Nutzung von Ressourcen und Energie unternommen. Zielsetzung des diesem Buch zugrunde liegenden Forschungsvorhabens ist die Untersuchung der Auswirkung von internen und externen Verwertungsmaßnahmen zur Steigerung der Ressourceneffizienz unter Beachtung der Energieeffizienz, CO₂-Emissionen und Wirtschaftlichkeit. Hierzu wurde in Zusammenarbeit mit fünf Industriepartnern repräsentativer Prozesse der Eisen- und Stahlindustrie sowie Recycling- und Zinkindustrie ein unternehmensübergreifendes stoff- und energiestrombasiertes Analyse- und Bewertungsmodell implementiert und angewendet.

Das diesem Buch zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages unter dem Förderkennzeichen 0327428A gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

ISSN 2194-2404

ISBN 978-3-86644-857-5

