

# Die Simulation einer Abwasseranlage mit CHEMCAD

Author: Dipl.-Ing. Wolfgang Schmidt  
Chemstations Deutschland GmbH  
46483 Wesel, Augustastr. 12

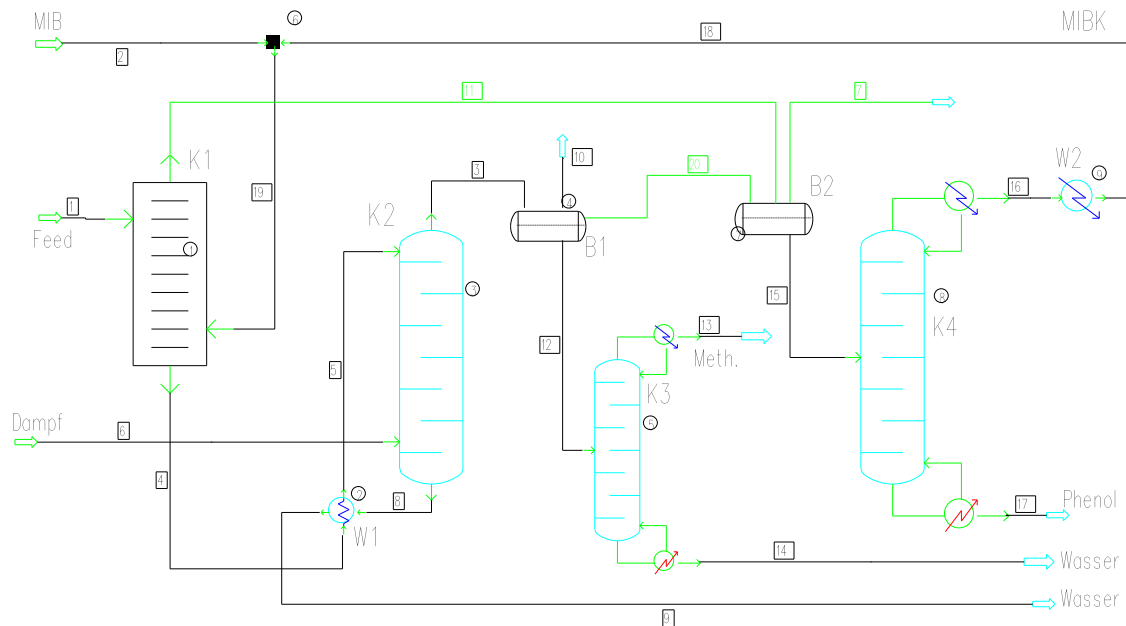
Die Prozeßsimulation CHEMCAD wurde als Computerprogramm entwickelt, um komplexe thermische und chemische Trenn- und Gleichgewichtsprozesse schnell und genau berechnen zu können. Dabei ist es möglich, nicht nur einzelne Prozesse, sondern ein komplettes Fließschema mit komplizierten Verschaltungen als ganzes Verfahren zu simulieren.

Da die Berechnung von Phasengleichgewichten einerseits eine typische Stärke des Prozeßsimulationsprogramms CHEMCAD ist, andererseits Prozesse in der Umwelttechnik vielfach, neben chemischen Reaktionen, auf gerade solchen Gleichgewichtsprozessen beruhen, liegt die Anwendung der Prozeßsimulation für Umweltprozesse nahe. Des weiteren kann man die Flexibilität von CHEMCAD im Bereich Stoffdaten voll nutzen, um Stoffdaten von bekannten und unbekanntem Substanzen abzuschätzen.

In dem hier vorgestellten Simulationsbeispiel geht es um die Reinigung eines mit Phenol und Methanol beladenen Abwassers aus einem praktischen Anwendungsfall. Die Fragestellung besteht darin, ob man das Abwasser entweder unbearbeitet in ein Abwassersystem leitet, oder ob man ein Verfahren entwickelt und anwendet, um das Abwasser aufzubereiten, oder ob man die Ursache selbst der Beladung beseitigt. Die praktische Umsetzung jede der drei Alternativen ist mit Kosten verbunden. Das zur Abwasseraufbereitung notwendige Verfahren wurde mit CHEMCAD entwickelt. Die dazu durchgeführten Schritte sollen hier näher beschrieben werden.

Als Vorlage diente ein Verfahren wie es in Ullmanns Enzyklopädie der Chemie beschrieben wird, bestehend aus Extraktion und Dampfstrippen. Es erfolgten einige Modifikationen mit Hilfe der Prozeßsimulation, so daß letztendlich das daraus resultierende Verfahren in der ersten Vorstudie zur Diskussion gestellt und deren Kosten geschätzt werden konnte.

Das Verfahren besteht aus je einer Extraktions- und Stripp- sowie 2 Redestillationskolonnen. Dabei fällt 3 mal gereinigtes Wasser, jedoch mit unterschiedlichen Restbeladungen an. Das die Reinigung des Wassers nicht automatisch und auf Anhieb mit 100%igem Erfolg gelingt, war zu erwarten. Durch entsprechende Parameteränderungen findet man schnell zu einer optimalen Lösung, da die Prozeßsimulation CHEMCAD das gesamte Fließschema in wenigen Sekunden simuliert und so eine Optimierung schnell erreicht ist.



## Fließschema der Prozess-Simulation einer Abwasseranlage

Die der ersten Kolonne K1 (Extraktionskolonne, im Bild links) zufließenden Ströme bestehen einerseits aus dem beladenen Wasser und andererseits aus dem Extraktionsmittel.

In Strom 1 befindet sich das beladene Wasser, welches der Extraktionskolonne K1 von unten zugeführt wird. Das Wasser ist darin beladen mit Phenol und Methanol. Als Extraktionsmittel ist Methylisobutylketon (MIBK) vorgesehen. Das MIBK wird regeneriert und im Kreislauf geführt. Durch die Rückführung des MIBK im Kreislauf stabilisieren sich geringe Mengenanteile Wasser und Methanol, die aber den Prozeß selbst nicht nennenswert beeinflussen.

Nach Aufbau des Fließschemas mit der Wahl der geeigneten Unit Operation wie Extraktions- und Destillationskolonne sowie Phasenseparator und Wärmeaustauscher genügen zur Simulation die Spezifizierung die Zusammensetzung der Eingangsströme einschließlich Druck und Temperatur, dann die Spezifizierung der Kolonnen und deren Parameter (z.B. Rücklaufverhältnis und Abzugsmengen). Danach kann man die Simulation starten, die beim allerersten Mal einige Minuten braucht, bis sich alle Ströme im Kreislauf stabilisiert haben. Jede weitere Simulation liegt dann zeitmäßig im Bereich von weniger als 1 Minute.

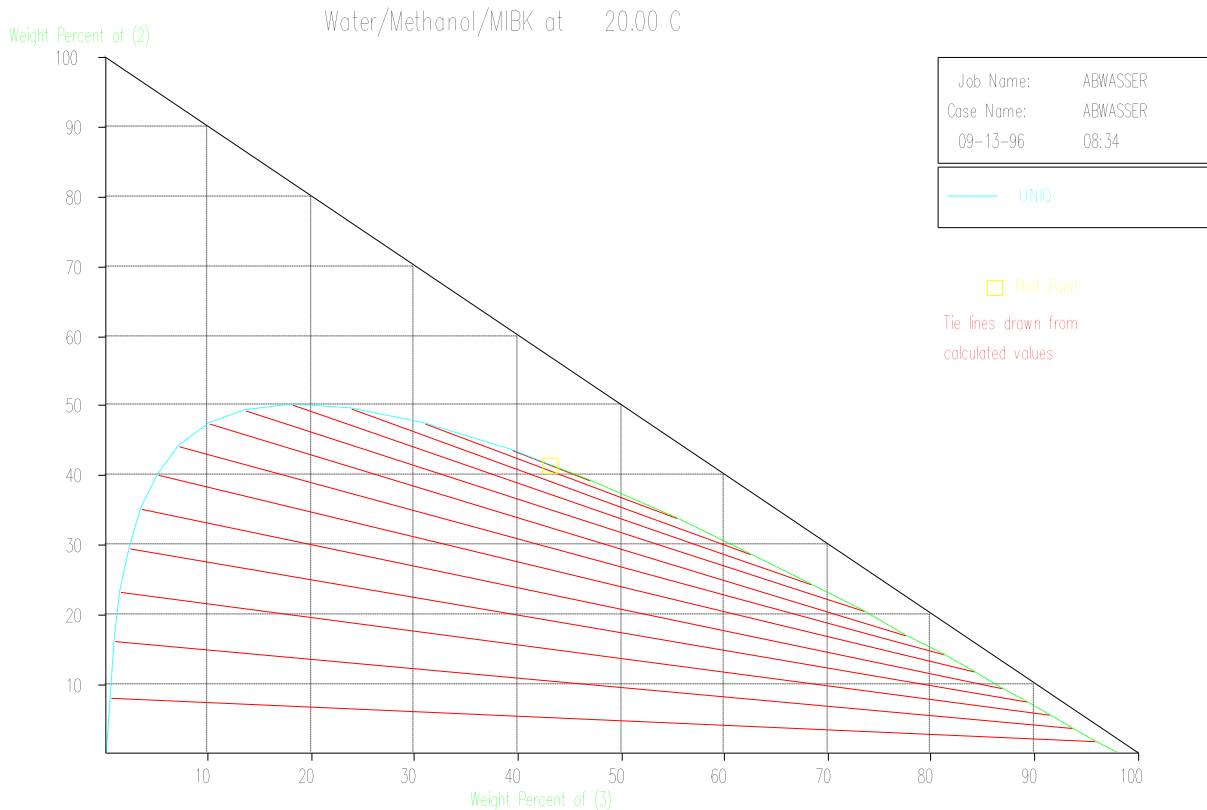
So erhält man nach der Simulation die Massen und Energiebilanz des Prozesses, d.h. die Zusammensetzung aller Ströme einerseits und die Energiemenge der Kolonnen bzw. des Wärmeaustauschers andererseits.

Tabelle der Ein- und Ausgangsströme der Extraktionskolonne in kg/h

Stream No.	1	19	11	4
Stream Name	Feed	MIBK Feed	Beladung	Wasser_Meth
Temp C	20.0000	20.0000	20.0000	20.0000
Pres bar	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Enth MJ/h	-60899.	-4333.9	-4542.2	-60688.
Vapor mole fraction	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Total kmol/h	213.8791	13.5823	15.1276	212.3255
Total kg/h	3999.9525	1074.3665	1219.9472	3853.6278
Total std L m3/h	4.0026	1.3231	1.4539	3.8709
Total std V m3/h	4793.81	304.43	339.06	4758.99
Flowrates in kg/h				
Water	3799.9014	58.5140	58.3155	3800.0813
MIBK	0.0000	1006.8067	992.6320	13.4513
Phenol	160.0393	0.0000	160.0393	0.0000
Methanol	40.0118	9.0458	8.9605	40.0951

Diese Tabelle gibt Einblick in die Massenbilanz der Extraktionskolonne K1. Es ist leicht erkennbar, daß im Ausgangsstrom 11 (Beladung), der am Kopf der Kolonne anfällt, das Phenol praktisch quantitativ herausgeführt wird, während das Methanol noch im Wasser (Strom 4, Wasser\_Meth) verbleibt. Außerdem gerät etwas MIBK durch die Extraktion ins Wasser. Deshalb wird dieses Wasser in einem anschließenden Wärmeaustauscher vorgewärmt und dann in der Kolonne K2 mit Dampf gestrippt. Der Stripddampf im Strom 6 strömt diesem Wasser entgegen und treibt bis auf einen Rest das Methanol fast quantitativ aus. Durch Wahl anderer Kolonnenparameter läßt sich die Restmethanolmenge noch weiter reduzieren. So erhält man den ersten Teil gereinigten Wassers im Strom 8, der die Strippkolonne im Sumpf verläßt.

Im weiteren Schritt geht es darum, die am Kopf der Strippkolonne K2 anfallene Dampfmenge zu kondensieren und die im Kondensat enthaltenen Komponenten aufzuarbeiten: Dies sind MIBK und Methanol und natürlich Wasser. Wie die Simulation im weiteren Verlauf zeigt, entsteht bei 20°C eine Aufteilung in zwei flüssige Phasen. Die leichte Phase, hier dargestellt in Strom 20 enthält überwiegend MIBK, während die schwere Phase im Strom 12 überwiegend Wasser und Methanol enthält. So kann man im Strom 20 MIBK in einem Separator energiesparend gewinnen. Die CHEMCAD-Simulation kann solche Verhältnisse dann sehr genau voraussagen, wenn als geeignete Modelle UNIQUAC, NRTL oder UNIFAC gewählt werden, andererseits aber auch die notwendigen binären Daten, z.B. aus Dechema Veröffentlichungen verwendet werden. Das abgebildete Gleichgewichtsdiagramm zeigt die Konoden des Systems Wasser-Methanol-MIBK wie es der Separatorsimulation zugrunde liegt.



### Flüssig-Flüssig-Gleichgewicht der Mischung Wasser, Methanol, Methylisobutylketon im Separator in Gew.%

Daraus ist erkennbar, daß oberhalb eines Methanolgehaltes von 50 Mol% keine Trennung in zwei flüssige Phasen möglich ist. Wie die abgebildete Tabelle zeigt, liegt der Methanolgehalt des Gemisches im Strom 3 bei 40 Gew.% und der des MIBK bei ca. 14 Gew.%. Damit erhält man immerhin noch eine gute Trennung in zwei flüssige Phasen, nämlich in eine MIBK reiche und eine MIBK arme Phase, bzw. Methanol reiche und arme Phase.

Der Methanol-haltige Strom 12 wird nun der Kolonne K3 zur Redestillation zugeführt, um das Wasser zu reinigen. Dieses Wasser ist, zumindest innerhalb der angezeigten Genauigkeit, frei von allen Belastungen. Die Destillatmengen bestehen lediglich aus Methanol und Resten des MIBK.

Nach der Mischung aller Ströme, die MIBK enthalten, erfolgt die Redestillation in der Kolonne K4, mit dem Ziel, MIBK soweit zu reinigen, daß es wiederverwendet werden und im Kreislauf gefahren werden kann. Es verbleiben nur noch geringe Mengen Wasser und Methanol, die aber den Prozeß nicht negativ beeinträchtigen. Im Sumpf der Kolonne fällt das Phenol an, in dem noch etwas MIBK enthalten ist. Durch Wahl geeigneter Kolonnenparameter läßt sich die Trennung noch verbessern..

Alle Kolonnen in diesem Prozeß wurden für eine erste Simulation minimal, d.h. mit je ca. 10 theoretischen Böden gewählt. Auch die Rücklaufverhältnisse wurden gering angesetzt. Vergrößert man diese Parameter, wird zwangsläufiger Weise die Trennung in jeder Kolonnen besser. Nach einer jeden Parameteränderung startet man die Simulation erneut und erhält in extrem kurzer Zeit das Resultat der Simulation. So kann man sich Schritt für Schritt an eine optimale Konfiguration der Anlage herantasten, bis daß das gewünschte Ergebnis erreicht ist.

Insgesamt hat der Aufbau des hier dargestellten Prozesses nur ca. 1 Arbeitstag in Anspruch genommen. In dem zugrunde liegenden Fall führte das Ergebnis der Simulation zu einer groben Kostenschätzung, mit dem Ergebnis, daß die Reinigung des Abwassers durch den Bau dieser Anlage voraussichtlich signifikant teurer sein wird als entsprechend Verbesserungsmaßnahmen zur Verhinderung der Beladung selbst. Letzteres wurde schließlich in die Tat umgesetzt. Die Simulation mit CHEMCAD lieferte aber innerhalb eines Tages die dazu notwendige Entscheidungshilfe.

1999