

A b s c h r i f t

3440-30/5.01-46

Oberh.-Holten, den 16.10.1941
Betriebskontrolle Vlk/Ka.

Berechnung der theoretischen Ausbeute aus
Synthese und Restgasanalysen

In folgendem soll eine Berechnungsmethode der Ausbeute aus Synthese und Restgasanalysen zur Diskussion gestellt werden.

Die Berechnung benutzt die Restgasanalyse nach der Aktivkohle. Das bedeutet, daß Gasolmengen und gegebenenfalls Benzinnengen, die durchschlagen, in der Ausbeutezahl nicht erfaßt werden. Die berechnete Ausbeute gibt also eine Menge an, die mit der gemessenen Ausbeute übereinstimmen müßte, und zwar die Gesamtausbeute. Eine Trennung nach flüssiger und gasolförmiger Ausbeute ist nicht möglich. Die Berechnung selbst wird nach folgenden Gesichtspunkten ausgeführt:

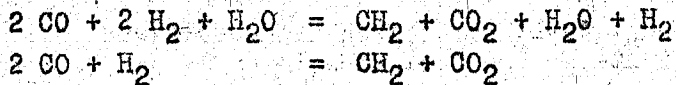
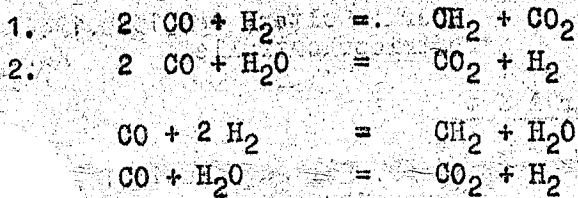
Die Kohlenstoff- und Wasserstoffbilanz muss aufgehen.

Die Umsatzberechnung von CO und H₂ wird getrennt durchgeführt. Von den umgesetzten Mengen werden die einzelnen Reaktionsprodukte, wie CO₂, CH₄ und Reaktionswasser, abgezogen. Als Rest bleibt eine gewisse Menge CO und H₂. Diese beiden Mengen müssen in einem bestimmten Verhältnis stehen, das sich aus dem CO/H₂-Verhältnis in den erzeugten Kohlenwasserstoffen ergibt, das z. B. bei der NS nach Angaben Dr. Grimme (s. Aktennotiz Dr. Schuff v.8.8.41) 1:1,18 betragen soll. Wird diese Verhältniszahl bei Durchrechnen der Analysen bei der N₂- oder Mengenkontraktion nicht erreicht, so muß aus dem Ergebnis geschlossen werden, daß entweder die Kontraktion- oder die Analysenwerte falsch sind. Es ergibt sich nun bei der Rechnung, daß, wenn man eine Unsicherheit in den Analysenwerten für CO und H₂ vor allem im Restgas annehmen will, die Änderung des Umsatzes nur unwesentlich ist und bei einer Variation dieser Werte um eine wesentlich Größe, z. B. 1 Punkt im Restgas, das Verhältnis der für die Kohlenwasserstoffe übrigbleibenden C- und H₂-Mengen sich nur unwesentlich ändert. Erheblich beeinflußt wird aber das Ergebnis durch eine Variation der CO₂-Bildung. Dies kann dadurch erreicht werden, daß man durch Probieren die Kontraktion so lange ändert, bis sich das erforderliche C/H₂-Verhältnis für die erzeugten Produkte ergibt. Die andere Möglichkeit ist die, den CO₂-Wert der Restgasanalyse bei unveränderter Kontraktion zu erhöhen, bis wiederum das gewünschte Verhältnis erreicht ist.

Die Durchrechnung beider Möglichkeiten ergibt, daß die ermittelten Ausbeuten nur um 3-4 g voneinander abweichen, sodaß die Entscheidung über die hier vermuteten Fehlerquellen (Kontraktion oder CO₂-Wert) verhältnismäßig unwesentlich ist, sofern man überhaupt eine der beiden annehmen will.

Zur Berechnung selbst ist noch zu sagen, daß bei jeder CO₂-Bildung angenommen wird, gleichgültig nach welcher Reaktion sie erfolgt, daß für je 1 Mol CO₂ für 2 Mol umgesetztes CO kein H₂ zur Reaktionsbildung notwendig ist.

Wasser



Als Beispiel sind nach dieser Methode die theoretischen Ausbeuten für den Monat September für die DS und NS gerechnet.

DS	CO ₂	C _n H _m	CO	H ₂	CH ₄ +	N ₂	G.Z.
Theor. Sygas	13,9	-	26,7	52,3	0,4	6,7	1,00
Restgas	48,8	0,3	8,7	8,3	11,4	22,5	1,10

N₂-Kontraktion 70,25 %

Sygas	13,9	-	26,7	52,3	0,4	
	14,52	0,09	2,59	2,47	3,39	
	+ 0,62	0,09	24,11	49,83		

CO ₂ -Bildung			- 0,62	+ 0,62		
Reaktionswasser			23,49	50,45	23,49	
			- 3,63	- 6,62		
			19,86	20,34		

Verbrauch		CO		H ₂
für CH ₄ +	3,39 x 1,10 =	3,73	3,39 x 2,10 =	7,12
		- 0,40		- 0,80
		3,33		6,32
für C _n H _m	0,05 x 3,3 =	0,30		0,30
		3,63		6,62

Abänderung der Kontraktion auf 68,3 %

	13,9	-	26,7	52,3	0,4
	15,46	0,10	2,76	2,63	3,61
	+ 1,56		23,94	49,67	
CO ₂ -Bildung			- 1,56	+ 1,56	
			22,38	51,23	
Reaktionswasser				22,38	
				28,85	
CH ₄ + C _n H _m			3,88	7,10	
			18,50	21,75	C/H ₂ = 1,175

Verbrauch	CO	H ₂
CH ₄ +	3,97	7,59
	- 0,40	0,80
	3,57	6,79
C _n H _m	0,31	0,31
	3,88	7,10
Ausbeute	18,50 x 12	= 99,0 g
	22,4	
	21,75 x 2,016	= 19,5 g
	22,4	

118,5 g/Nm³ Sygas = 150 g/Nm³ I-Gas.

Aenderung des CO₂-Restgaswertes:

13,9	-	26,7	52,3	0,4
52,0	0,3	8,7	8,3	11,4
13,9	-	26,7	52,3	0,4
15,48	0,09	2,59	2,47	3,39
1,58		24,11	49,83	

Kontrakt. 70,75 %

CO ₂ -Bildung	- 1,58	1,58
	22,53	51,41
Reaktionswasser	- 22,53	
		28,88

CH ₄ + C _n H _m	- 3,63	- 6,62	
	18,90	22,26	C/H ₂ = 1,178

Ausbeute C	18,90 x 12	= 101,2 g
	22,4	

H ₂	22,26 x 2,016	= 20,0 g
	22,4	
		121,2 g/Nm ³ Sygas
		= 153,2 g/Nm ³ I-Gas

NS	CO ₂	C _n H _m	CO	H ₂	CH ₄ + N ₂	N ₂ -fein	C.Z.
Sygas	14,7	-	26,2	52,2	0,4	6,5	
Restgas	46,9	0,3	6,8	13,4	12,5	20,1	1,08
	14,7		26,2	52,2	0,4		
	16,0	0,1	2,32	4,57	4,26		

CO-Bildung	- 1,30	+ 1,30					
	22,58		48,93				
Reaktionswasser			22,58				
CH ₄ +C _n H _m			4,55	26,45			
			18,03	17,94			
					C/H ₂ = 1:	0,995	

Verbrauch	
CO	H ₂
4,61	8,87
0,40	0,80
4,21	8,07
0,34	0,34
4,55	8,41

Anderung der Kontraktion:

Kontraktion = 63,5 %

	14,7	26,2	52,2	0,4		
	17,12	2,48	4,89	4,56		Verbrauch
	2,42	23,72	47,31			CO
CO-Bildung		2,42	2,42			H ₂
		21,30	49,73			4,93
Reaktionswasser			21,30			0,40
			28,43			4,53
CH ₄ + C _n H _m		4,89	9,06			+ 0,36
		16,41	19,37			+ 0,36

$$C/H_2 = 1 : 1,18$$

Ausbeute: C $\frac{164,1 \times 12}{22,4} = 87,9 \text{ g}$

H₂ $\frac{193,7 \times 2,016}{22,4} = 17,3 \text{ g}$

105,2 g/Nm³ Sygas
134,2 g/Nm³ I-Gas

2. Änderung des CO₂-wertes:

	14,7	26,2	52,2	0,4
	50,0	6,8	13,4	12,5
	14,7	26,2	52,2	0,4
	17,05	2,32	4,87	4,26
	2,35	23,88	47,63	
CO ₂ -Bildung		2,35	2,35	
		21,53	49,98	
Reaktionswasser			21,53	
			28,45	
CH ₄ + C _n H _m		4,55	8,41	
		16,98	20,04	

$$C/H_2 = 1 : 1,18$$

Ausbeute: C $\frac{169,8 \times 12}{22,4} = 90,9 \text{ g}$

H₂ $\frac{200,4 \times 2,016}{22,4} = 18,0 \text{ g}$

168,9 g/Nm³ Sygas
138,0 g/Nm³ I-Gas

Setzt man diese berechneten Werte ein, so ergibt sich folgende Produktion:

1. bei Änderung der Kontraktion:

$$DS \quad \frac{150 \times 23,44 \times 10^6}{10^6} = 3.517 \text{ t}$$

$$NS \quad \frac{134,2 \times 13,73 \times 10^6}{10^6} = \frac{1.843 \text{ t}}{5.360 \text{ t}}$$

und eine mittlere Ausbeute von 144,2 g/Nm³ I-Gas.

2. Änderung des CO₂-wertes:

$$DS \quad \frac{153,2 \times 23,44 \times 10^6}{10^6} = 3.590 \text{ t}$$

$$NS \quad \frac{138,9 \times 13,73 \times 10^6}{10^6} = \frac{1.968 \text{ t}}{5.498 \text{ t}}$$

und eine mittlere Ausbeute von 147,8 g/Nm³ I-Gas.

Die nach der Mengenummessung der BK ermittelte Ausbeute betrug für den Monat September 140,1 g. Sie liegt also 4 - 8 g unter der berechneten.

Die gleiche Rechnung wurde für die I. Dekade Oktober durchgeführt.

Sygas	CO ₂	C _n H _m	CO	H ₂	CH ₄ +	N ₂	C.Z.	
	14,4	-	26,1	52,7	0,4	6,40		
Restgas	47,9	0,3	9,7	8,5	10,6	23,00	1,10	
angenommene Kontraktion							68,2 %	
	14,4	-	26,1	52,7	0,4		Verbrauch	
	15,18	0,09	3,07	2,7	3,36			
	0,78		23,03	50,0			CO H ₂	
CO ₂ -Bildung			0,78	0,78		3,70	7,06	
			22,25	50,78		0,40	0,80	
Reaktionswasser				22,25		3,30	6,26	
				28,53		0,31	0,31	
CH ₄ + C _n H _m			3,61	6,57		3,61	6,57	
			18,64	21,96				
			C/H ₂ = 1,178					
Ausbeute:	C		18,64	12		99,8 g	b. w.	
			22,4					
	H ₂		21,96	2,016		19,8 g		
			22,4					
						119,6 g/Nm ³ Sygas		
						151,8 g/Nm ³ I-Gas		

	CO ₂	C _n H _m	CO	H ₂	CH ₄ +	N ₂	O ₂
Sygas	14,5	-	26,3	52,6	0,4	6,18	
Restgas	47,8	0,9	6,8	14,5	11,8	17,70	1,14
	N ₂ -fein-Kontraktion = 65,1 %						
	gerechnet = 64,8 %						

	CO ₂	CO	H ₂	Verbrauch
	14,5	26,3	52,6	
	16,83	2,39	5,10	
	<hr/>			
+ 2,33				
CO ₂ -Bildung	23,91	47,50		CO
	2,33	2,33		H ₂
Reaktionswasser	21,58	49,83		4,73
		21,58		0,40
				<hr/>
		28,25		4,33
CH ₄ + C _n H _m	5,12	8,88		0,79
				<hr/>
	16,46	19,37		5,12
				8,88

C/H₂ = 1,177

Ausbeute:

C $\frac{164,6 \times 12}{22,4} = 88,2 \text{ g}$

H₂ $\frac{193,7 \times 2,016}{22,4} = 17,4 \text{ g}$

105,6 g/Nm³ Sygas
133,9 g/Nm³ I-Gas

Theoretische Produktion:			
	133,9	x 4 541 700	= 608 t
	151,8	x 8 310 550	= 1 262 t
		<hr/>	
		12 852 250	1 870 t
gefundene Produktion:			1 874 t

Mittlere Ausbeute: 145,5 g/Nm³ I-Gas.
gefundene Ausbeute: 146,1 g/Nm³ I-Gas

Die Berechnung nach dieser Methode führt also zu guter Übereinstimmung mit den gemessenen Werten. Nun ist allerdings zu sagen, daß unsere Restgasanalysen heute bei den A.K.-Anlagen nicht ganz der wirklichen Restgaszusammensetzung bei der Synthese entsprechen. Die Kohlensäure und CH₄ und C₂H₂, die von der A.K.-Anlage II herausgenommen werden, erscheinen über die Rückblasung im Restgas nach A.K. I. Auch die Atmungsgase aus Turm III gehen zur NS. Beide Gasmen-gen verschieben die theoretische Ausbeute zu Ungunsten der NS und umgekehrt zu Gunsten der DS. Weiterhin ist die Restgasanalyse nach A.K. I z. Zt. durch teilweises Rückblasen des C₂H₄-Gases CPH vor die A.K. I verfälscht, sodaß auch hierdurch die Ausbeuteberechnung der NS unsicher wird.

Grundsätzlich erscheint mir die Berechnungsart brauchbar zu sein, vor allem, wenn man schnell die Ausbeute ermitteln will ohne die zeitraubenden Tieftemperaturanalysen abwarten zu müssen. Auch die von der Synthese wirklich erzeugte Gasprobe über Kühler und A.-Kohle zieht, die sämtliche gebildeten Kohlenwasserstoffe und C₂ sicher herausnimmt. Gleichfalls würde sich auf diese Weise die Erzeugung einzelner Öfen oder Stufen schnell ermitteln lassen.

Um die vorgeschlagene Methode exakter zu gestalten, wären noch folgende Bestimmungen erforderlich.

- 1.) Bestimmung des C/H₂-Verhältnisses in der gesamten Produktion
(flüssig und gasförmig) von DS und NS.
- 2.) Bestimmung der C-Zahl in den durchschlagenden ungesättigten Kohlenwasserstoffen, die in vorliegender Beispielrechnung mit 3,3 in Anlehnung an die Hoesch-Methode gerechnet wurden. Diese Zahl ist sicher zu hoch. Es wurde bei der NS mit einem Wert von 2,5 für die I. Dekade Oktober gerechnet, da hier das C_nH_m sicher zu einem großen Teil aus Aethylen der Dubbsanlage bestand. Große Fehler können hierdurch aber nicht eintreten, da der Einfluß des C_nH_m-wertes selbst nicht groß auf das Ergebnis ist.

Ddr.: Alberts
Feist
Schuff
Neweling

gez. V o l k