

Modellierung und Identifikation der Karbonatisierung eines thermochemischen Speichers mit CO₂-Abscheidung

E. Röhm[†], E. Klockow[‡], M. Linder[‡], O. Sawodny[†]

[†]Institut für Systemdynamik, Universität Stuttgart, Waldburgstr. 19, 70563 Stuttgart, Tel: +49(0)711/68566960, E-Mail: emil.roehm@isys.uni-stuttgart.de

[‡]Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e. V., Pfaffenwaldring 38-40, 70569 Stuttgart

Für das Erreichen der Treibhausgasneutralität müssen neben einer weitreichenden Emissionsreduktion auch verbleibende Emissionen durch natürliche oder technische Kohlenstoffsinken ausgeglichen werden. In einem aktuellen Szenario des Umweltbundesamts verbleiben in Deutschland im Jahr 2045 rund 41 Mio. t CO₂-Äquivalente, die durch zusätzliche technische Maßnahmen kompensiert werden müssen [1]. Verfahren zur Abscheidung von CO₂ aus der Umgebungsluft können daher einen wichtigen Beitrag zum Ausgleich schwer vermeidbarer Restemissionen leisten.

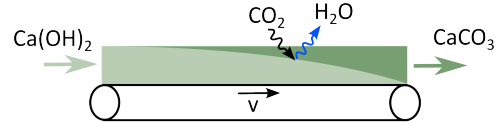
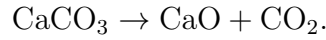
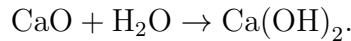


Abbildung 1: Schematische Darstellung eines Fließbandreaktors zur Karbonatisierung einer Ca(OH)₂-Schicht.

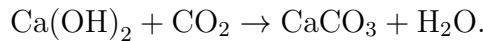
Dafür sind kalziumbasierte Stoffsysteme besonders interessant, da die Ausgangsmaterialien in großen Mengen verfügbar sind. Zusätzlich lässt sich die CO₂-Abscheidung mit der Speicherung von Energie und der Bereitstellung von Wärme verbinden. Die Aufladung des Energiespeichers erfolgt durch die Kalzinierung von Kalziumkarbonat unter Zufuhr von Energie,



Das dabei konzentriert freigesetzte CO₂ kann abgeschieden und einer dauerhaften Speicherung zugeführt werden. Durch die anschließende Hydratisierung von Kalziumoxid wird Wärme freigesetzt, die beispielsweise für Gebäudeheizung und Warmwasserbereitung verwendet werden kann



Das entstandene Kalziumhydroxid bindet danach CO₂ aus der Umgebungsluft und wird wieder zu Kalziumkarbonat umgesetzt,



Damit entsteht ein zyklischer Prozess aus Kalzinierung, Hydratisierung und Karbonatisierung.

Für die Karbonatisierung wird ein Fließbandreaktor (siehe Abbildung 1) betrachtet. Eine poröse Ca(OH)₂-Schicht wird mit der Bandgeschwindigkeit $v(t)$ durch die CO₂-haltige Umgebungsluft transportiert. Die Koordinate x beschreibt die Transportrichtung entlang des Bands und z die Schichthöhenrichtung.

Mit den Zustandsgrößen $C_1(x, z, t)$ als CO₂-Konzentration und $C_2(x, z, t)$ als Ca(OH)₂-Anteil führt die Kombination aus Materialtransport, Diffusion und chemischer Reaktion zu einem nichtlinearen partiellen Differentialgleichungssystem der Form

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + v(t) \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x} = \begin{bmatrix} D \Delta C_1 \\ 0 \end{bmatrix} - \mathbf{r}(\mathbf{C}), \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}.$$

Durch geeignete Vereinfachung lässt sich dies in ein Transportproblem in x -Richtung und ein Diffusionsvorgang mit Reaktion in z -Richtung aufteilen. Zur Beschreibung der Reaktion in der Schicht werden zwei verschiedene Modellansätze untersucht: Ein kinetisches Reaktions-Diffusions-Modell beschreibt den CO_2 -Transport innerhalb der Schicht und die lokale Reaktion mit $\text{Ca}(\text{OH})_2$. Als recheneffiziente Alternative wird ein pseudoanalytisches Frontmodell betrachtet, das den Prozess durch eine fortschreitende Übergangszone zwischen karbonatisiertem und noch nicht karbonatisiertem Material beschreibt. Beide Modelle werden anhand von Versuchen mit unterschiedlichen Schichthöhen und CO_2 -Konzentrationen parametrisiert und verglichen. Zusätzlich wird untersucht, wie eindeutig die Modellparameter aus den verfügbaren Messdaten bestimmt werden können.

Insgesamt bilden die Modellierung und Identifizierbarkeitsanalyse die Grundlage für die spätere Regelung des Fließbandreaktors. Durch eine geeignete Anpassung der Bandgeschwindigkeit soll zukünftig trotz veränderlicher Prozessbedingungen ein vorgegebener Karbonatisierungsgrad am Reaktorausgang eingehalten und gleichzeitig der Materialdurchsatz maximiert werden.

Literatur

- [1] Umweltbundesamt: CARE - Pfade zu Treibhausgasneutralität und Negativemissionen, Dessau-Roßlau, 2026. URL: <https://www.umweltbundesamt.de/themen/klima-energie/klimaschutz-energiepolitik-in-deutschland/szenarien-projektionen/care-pfade-zu-treibhausgasneutralitaet>