

Simulation eines Luftzerlegungsprozesses und Parameterstudie zur Beschreibung des Flexibilisierungspotentials

Dem Fachbereich Ingenieurwissenschaften
der Hochschule Merseburg

vorgelegte

MASTERARBEIT

zur Erlangung des akademischen Grades

MASTER OF ENGINEERING

(M. Eng.)

von

B. Eng. Lars Kriening

geboren am 10.08.1987 in Halle/ Saale

Halle/ Saale, den 05.09.18

Erstgutachter: Prof. Dr.-Ing Andreas Ortwein

Zweitgutachter: Dipl.-Ing. Marcus Kögler

Schlüsselworte

Luftzerlegung, Simulation, Parametervariation, Flexibilisierungspotential

Diese Arbeit wurde im Zeitraum von 01.05.2018 bis 05.09.18 am Fraunhofer Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung im Bereich Konvergente Infrastrukturen bei Dipl.-Ing. Marcus Kögler geschrieben.

Danksagung

Ich möchte an dieser Stelle Herrn Prof. Dr.-Ing. Andreas Ortwein und Herrn Dipl.-Ing. Marcus Kögler für die Betreuung dieser Abschlussarbeit, den konstruktiven Gesprächen und Anmerkungen, danken. Für die tatkräftige Unterstützung und den zahlreichen Hilfestellungen im Umgang mit der Prozesssimulationssoftware ASPEN PLUS V8.8 möchte ich zusätzlich Herrn Dr. rer. nat. Wolfram Heineken danken.

Ein großer Dank gebührt ebenfalls meiner Familie und meinen Freunden. Diese standen zu jeder Zeit hinter mir und unterstützen mich in jeder erdenklichen Situation, welche während der Erstellung dieser Abschlussarbeit auftrat.

Ich danke euch allen

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe.

Alle von fremden Personen erbrachten Dienstleistungen sind als solche gekennzeichnet.

Halle/ Saale, den 05.09.18

Kriening, Lars

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	IV
Tabellenverzeichnis.....	VII
Abkürzungs- und Symbolverzeichnis.....	IX
1 Einleitung und Aufgabenstellung.....	1
1.1 Ausgangssituation.....	1
1.1.1 Prinzip der kryogenen Luftzerlegung	2
1.1.2 Funktionsweise einer kryogenen Luftzerlegungsanlage	2
1.2 Vorarbeiten des Fraunhofer IFF	4
1.2.1 Das Modell einer Luftzerlegungsanlage nach <i>Kooijman</i>	4
1.2.2 Das LZA-Modell in Aspen Plus	5
1.3 Aufgabenstellung dieser Masterarbeit.....	7
2 Luftzerlegungsanlagen	8
2.1 Die Geschichte der Luftzerlegung	8
2.2 Unterscheidung der kryogenen und nicht-kryogenen Luftzerlegung.....	9
2.3 Alternative Luftzerlegungsmethoden	10
2.3.1 Grundlagen der Adsorptionstechnik	10
2.3.2 Das Druckwechselverfahren.....	13
2.3.3 Das MOLTOX™ - Luftzerlegungssystem	15
2.3.4 Membranverfahren	17
2.3.5 Das Ionen-Transportmembran-Verfahren	19
2.4 Zusammenfassung der alternativen Luftzerlegungsmethoden.....	21
3 Wärmeübertrager innerhalb einer Luftzerlegungsanlage.....	23
3.1 Grundlagen der Wärmeübertragung.....	23
3.2 Bauarten verschiedener Wärmeübertrager.....	28
3.2.1 Aufbau und Wirkungsweise eines Platten-Wärmeübertrager.....	28
3.3 Bilanzierung in ASPEN PLUS	30

4	Simulation in ASPEN PLUS	32
4.1	Herleitung der modellierten Anlage	32
4.2	Umsetzung eines Hauptwärmeübertragers in ASPEN PLUS.....	33
4.3	Parametervariationen in den Hauptwärmeübertrager-Modellvariationen..	35
4.3.1	Festlegungen für die Parametervariationen	36
4.3.2	Vorbereitungen für die Parametervariationen.....	37
4.4	Variation der elektrischen Leistungsaufnahmen der Verdichter C1 – C3	44
4.4.1	MHEX-LZA in der FP-Variante	44
4.4.2	MHEX-LZA in der PP-Variante	45
4.5	Variation der Leistungsaufnahmen der Verdichter C1 – C3 mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter.....	46
4.5.1	MHEX-LZA in der FP-Variante	47
4.5.2	MHEX-LZA in der PP Variante.....	48
4.6	Variation der Druckverhältnisse der Verdichter C1 – C3	49
4.6.1	MHEX-LZA in der FP-Variante	49
4.6.2	MHEX-LZA in der PP-Variante	50
4.7	Variation der Druckverhältnisse der Verdichter C1 – C3 mit jeweiligem Isentropen Wirkungsgrad als Parameter	52
4.7.1	MHEX-LZA in der FP-Variante	52
4.7.2	MHEX-LZA in der PP-Variante	53
5	Diskussion der Simulationsergebnisse.....	54
5.1	Der Box-Whisker-Plot.....	55
5.2	Auswertungen der MHEX-LZA in der FP-Variante.....	56
5.3	Auswertung der MHEX-LZA in der PP-Variante.....	57
5.3.1	Diskussion der Simulationsergebnisse des Produktmassenstromes	57
5.3.2	Diskussion der Simulationsergebnisse der Produktreinheit.....	59
6	Zusammenfassung und Ausblick.....	62

6.1	Zusammenfassung der Ergebnisse der Parametervariationen	62
6.1.1	MHEX-LZA in der FP-Variante	63
6.1.2	MHEX-LZA in der PP-Variante	64
6.2	Zusammenfassung der Parametervariationen der MHEX-LZA.....	65
6.3	Dynamisches Modell einer LZA.....	66
6.4	Fazit	67
7	Literaturverzeichnis	70
8	Anhang.....	74
8.1	Flowsheet mit MHEX.....	74
8.2	Übersicht über ausgewählte Bauarten von Wärmeübertragern.....	75
8.3	Spezifikation und Ergebnisse einer frühen Simulation des MHEX	76

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1: Vereinfachtes und idealisiertes Modell einer Luftzerlegungsanlage nach Harry Kooijman; nach [4]	5
Abb. 1.2: Fließbild der Luftzerlegungsanlage nach Kooijman in ASPEN PLUS	6
Abb. 2.1: Eigenerstellte Darstellung mit der Unterscheidung der reversiblen Adsorptionsmittel nach [10].....	10
Abb. 2.2: Prinzipieller Aufbau einer 3-Bett-Adsorptions-LZA nach [14]	12
Abb. 2.3: Vereinfachtes Prozess-Diagramm des MOLTOX-Systems in der PSA-Methode [20]	16
Abb. 2.4: Vereinfachtes Prozess-Diagramm des MOLTOX-Systems in der TSA-Methode [20]	17
Abb. 2.5: Prinzip eines Membranreaktors nach [24]	18
Abb. 2.6: Eigenerstellte Darstellung der prinzipiellen Funktionsweise einer Ionen-Transportmembran nach [27].....	20
Abb. 2.7: Eigenerstellte Prinzipskizze des ITM-Verfahrens mit integrierter Dampf- und Elektroenergieerzeugung nach [26]	21
Abb. 3.1: Prinzipielles Temperaturprofil einer gegenstromgeführten Wärmeübertragung [33].....	24
Abb. 3.2: Prinzipielles Temperaturprofil einer gleichstromgeführten Wärmeübertragung [33].....	24
Abb. 3.3: Prinzipieller stationärer Temperaturverlauf in einer ebenen Wand nach [30], [34].....	27
Abb. 3.4: Prinzipieller instationärer Temperaturverlauf in einer ebenen Wand nach [30], [35].....	27
Abb. 3.5: Prinzipieller Fluidfluss innerhalb eines Platten-Wärmeübertragers [41] .	29
Abb. 3.6: Platte eines Platten-Wärmeübertragers im gebräuchlichsten Oberflächenmuster, dem Chevron-Design [44]	29
Abb. 4.1: Vergleich der Wärmeübertragerleistungen der MHEX-LZA und des originalen Kooijman-Modells	34
Abb. 4.2: Prompt einer fehlerhaft beendeten Simulation in ASPEN PLUS.....	39
Abb. 4.3: Fehlertext einer fehlerhaft beendeten Simulation in ASPEN PLUS.....	39
Abb. 4.4: Darstellung des Arbeitsbereiches in der FP-Variante des LZA-Modells.....	41

Abb. 4.5: Darstellung des Arbeitsbereiches in der PP-Variante des LZA-Modells bezogen auf den Produktmassenstrom.....	42
Abb. 4.6: Darstellung des Arbeitsbereiches in der PP-Variante des LZA-Modells bezogen auf die Produktreinheit.....	43
Abb. 4.7: Histogramm der Produkttemperaturen bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme.....	44
Abb. 4.8: Histogramm der Produktmassenströme bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme.....	45
Abb. 4.9: Histogramm der Reinheit der Produktströme bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme.....	46
Abb. 4.10: Sinnbildliche Darstellung eines isentropen Prozesses [48].....	47
Abb. 4.11: Histogramm der Produkttemperatur bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter.....	48
Abb. 4.12: Histogramm des Produktmassenstromes bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter.....	48
Abb. 4.13: Histogramm der Reinheit des Produktstromes bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme isentropen Wirkungsgrad als Parameter	49
Abb. 4.14: Histogramm der Produkttemperaturen bei der Variation der Druckverhältnisse.....	50
Abb. 4.15: Histogramm des Produktmassenstromes bei der Variation der Druckverhältnisse.....	51
Abb. 4.16: Histogramm der Reinheit des Produktstromes bei der Variation der Druckverhältnisse.....	51
Abb. 4.17: Histogramm der Produkttemperatur bei der Variation der Druckverhältnisse mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter.....	52
Abb. 4.18: Histogramm des Produktmassenstromes bei der Variation der Druckverhältnisse mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter.....	53
Abb. 4.19: Histogramm der Reinheit des Produktstromes bei der Variation der Druckverhältnisse mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter.....	53
Abb. 5.1: Box-Whisker-Plots der Verteilung der Simulationsergebnisse der MHEX-LZA in der FP-Variante.....	56

Abb. 5.2: Box-Whisker-Plots der Verteilung der Simulationsergebnisse der Produktmassenströme der MHEX-LZA in der PP-Variante	58
Abb. 5.3: Box-Whisker-Plots der Verteilung der Simulationsergebnisse der Produktreinheit der MHEX-LZA in der PP-Variante.....	60

Tabellenverzeichnis

Tab. 1.1:	Übersicht der Siedepunkte der für die kryogene Luftzerlegung relevanten Elemente nach [2] bei einem Umgebungsdruck von 1,013 bar	3
Tab. 2.1:	Übersicht der Vor- und Nachteile des PSA- und TSA-Verfahrens zur Regeneration von Adsorbentien nach [16]	14
Tab. 2.2:	Auswahl der für die Luftzerlegung relevanten Elemente mit den dazugehörigen Molekülradien nach [25]	19
Tab. 2.3:	Vergleich der Luftzerlegungsmethoden nach [14], [27]	22
Tab. 3.1:	Beispiel für die Zusammenfassung der Bilanzierung eines MHeatX-Simulationsblockes in ASPEN PLUS.	30
Tab. 3.2:	Auswertung der Zonen-Analyse in ASPEN PLUS mit der Unterteilung in 15 Segmente (Zonen)	31
Tab. 4.1:	Sensibilitäten der einzelnen MHEX-Varianten auf relevante Ausgangsparameter	36
Tab. 4.2:	Erwartungswerte der Produktparameter des Sauerstoff-Produktstromes und der Gesamtleistungsaufnahme der Verdichterstufe	37
Tab. 4.3:	Erläuterungen der am häufigsten aufgetretenen Fehler- und Warnmeldungen	40
Tab. 4.4:	Auszug der exemplarisch geprüften Parameterkonstellationen und der entsprechenden Fehler- bzw. Warnmeldungen	40
Tab. 5.1:	Übersicht der Abkürzungen innerhalb der Box-Whisker-Plots und der zugehörigen Klartexte	54
Tab. 5.2:	Die fünf benötigten Kennwerte einer Verteilung für die Erstellung des Box-Whisker-Plots	55
Tab. 5.3:	Tabellarische Übersicht der Kennwerte für die Simulationen 1 – 4	57
Tab. 5.4:	Tabellarische Übersicht der Kennwerte des Produktmassenstromes für die Simulationen 5 – 8	59
Tab. 5.5:	Tabellarische Übersicht der Kennwerte der Reinheit des Produktmassenstromes für die Simulationen 5 – 8	60
Tab. 8.1:	Ausgewählte Bauarten von Wärmeübertragern nebst relevanter Übertragungsbedingungen und überschlägigen k-Werten [35]	75

Tab. 8.2: Übersicht der Spezifikationen/ Parametrierungen des MHEX in ASPEN PLUS76

Tab. 8.3: Simulationsergebnisse der MHEX-LZA in ASPEN PLUS.....76

Abkürzungs- und Symbolverzeichnis

Abkürzungen

ADE	Abhitzedampferzeuger
ASU	Air Separation Unit; Deutsch: Luftzerlegungsanlage
DEMS	Dynamisches Energiemanagement-System
FP	Feed-Parameter
HPC	High Pressure Column; Deutsch: Hochdruckkolonne
IFF	Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung
ITM	Ionen-Transportmembran
JTK	Joule-Thomson-Koeffizient
KMS	Kohlenstoff-Molekularsieb
LPC	Low Pressure Column; Deutsch: Niederdruckkolonne
LZA	Luftzerlegungsanlage
MHEX	Main Heat Exchanger; Deutsch: Hauptwärmeübertrager
MIEC	Mixed Ionic-Electric Conducting; Deutsch: gemischt ionisch-elektrisch leitend
PP	Produkt-Parameter
PSA	Pressure Swing Adsorption; Deutsch: Druckwechsel-Adsorption
TSA	Temperature Swing Adsorption; Deutsch: Temperaturwechsel-Adsorption
WT	Wärmetauscher
WÜ	Wärmeübertrager

Symbole

Symbol	Einheit	Bedeutung
a	$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$	Temperaturleitfähigkeit
A	m^2	Fläche
A_{f1}	m^2	Strömungsquerschnittsfläche des warmen Fluides
A_{f2}	m^2	Strömungsquerschnittsfläche des kalten Fluides
c_p	$\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$	Spezifische Wärmekapazität

h_1	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$	Eintrittsenthalpie
h_2	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$	Austrittsenthalpie
h_{2s}	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$	Isentrope Austrittsenthalpie
$\dot{H}_{M\text{Aus}}$	W	Enthalpie des Mediums an der Ausgangsseite des Wärmeübertragers
$\dot{H}_{M\text{Ein}}$	W	Enthalpie des Mediums an der Eingangsseite des Wärmeübertragers
k	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}}$	Wärmedurchgangskoeffizient
M_{fl}	$\frac{\text{kg}}{\text{mol}}$	Molare Masse des Fluides
$\dot{m}_{M_i\text{Aus}}$	$\frac{\text{kg}}{\text{s}}$	i -ter Ausgangsmassenstrom
$\dot{m}_{M_i\text{Ein}}$	$\frac{\text{kg}}{\text{s}}$	i -ter Eingangsmassenstrom
\dot{n}	$\frac{\text{mol}}{\text{s}}$	Stoffmengenstrom
p	bar, psia	Druck
p_1	bar	Druck Saugseite
p_2	bar	Druck Druckseite
P_{th}	W	Leistung (thermisch)
\dot{Q}	W	Wärmestrom
\dot{q}	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$	Wärmestromdichte
Q	J	Wärme
$\dot{Q}_{UW\text{Ein}}$	W	Übertragungswärmestrom
$\dot{Q}_{VW\text{Aus}}$	W	Verlustwärmestrom
r_∞	nm	Molekülradius
s	m	Wanddicke
T	K, °C	Temperatur
$T_{\text{fl}1}$	K	Temperatur des warmen Mediums
T_{w1}	K	Temperatur des warmen Mediums an der ebenen Wand

v_{fl1}	$\frac{m}{s}$	Strömungsgeschwindigkeit des warmen Fluides
v_{fl2}	$\frac{m}{s}$	Strömungsgeschwindigkeit des kalten Fluides
\dot{V}_n	$\frac{Nm^3}{h}$	Normvolumenstrom
W	J	Arbeit
W_s	J	Isentrope Arbeit
δ_i	m	Dicke des Filmes an der Wand
ΔT_{gr}	K	Großer Temperaturunterschied des Wärmeübertragers
ΔT_{kl}	K	Kleiner Temperaturunterschied des Wärmeübertragers
ΔT_m	K	Mittlere Temperaturdifferenz
Δx	m	Volumenelement entlang der X-Richtung
η_v	–	Isentroper Verdichterwirkungsgrad
λ	$\frac{W}{K \cdot m}$	Wärmeleitfähigkeit
Π	–	Druckverhältnis zwischen Saug- und Druckseite
ρ	$\frac{kg}{m^3}$	Dichte
ϑ	°C	Celsiustemperatur

Indizes

Symbol Bedeutung

d	Dampfförmig
el	Elektrisch
f	Flüssig
fl	Fluid
Medium	Temperatur des Medium in °C
Rohr	Temperatur des Rohres in °C
th	Thermisch
w	Wand

1 Einleitung und Aufgabenstellung

Dieses Kapitel soll einen Einblick in die Ausgangssituation bieten. Es soll kurzgefasst beschrieben werden, auf welchen Grundlagen das Linde-Verfahren beruht und wie der Prozess der kryogenen Luftzerlegung abläuft. Danach soll auf die Vorarbeiten des Fraunhofer Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung IFF eingegangen werden. Abschließend soll dann die Aufgabenstellung dieser Masterarbeit ausformuliert dargestellt werden.

1.1 Ausgangssituation

Der zunehmende Ausbau erneuerbarer Energiequellen bewirkt, dass das volatile Stromangebot zunehmen wird. Dies macht es erforderlich, dass gerade in den Bereichen, in denen besonders energieintensive Anwendungen oder Prozesse auftreten, eine dem Energieangebot angepasste Betriebsführung eingesetzt wird. Beispiele für besonders energieintensive Prozesse sind in der chemischen Industrie zu finden. Das Land Sachsen-Anhalt fördert in diesem Zusammenhang ein Forschungsvorhaben mit dem Namen „Prozessindustrie 4.0: Vertikale Integration zur Flexibilisierung der chemischen Produktion“, kurz: „FlexChem“.

Ziel dieses Forschungsvorhabens ist es, den Energieverbrauch von Bestandsanlagen durch die vollständige Integration eines dynamischen Energiemanagement-Systems (DEMS) in die Leitsysteme an das volatile Stromangebot anzupassen.

Im Rahmen des Forschungsvorhabens „FlexChem“ sollen ausgewählte verfahrenstechnische Prozesse bezüglich eines Flexibilisierungspotentials bzw. der Flexibilisierungsoptionen, mit dem Fokus auf der Betriebsführung, betrachtet werden. Ein Beispiel für einen besonders energieintensiven Prozess stellt die kryogene Luftzerlegung dar.

Die kryogene Luftzerlegung, auch Linde-Verfahren genannt, bezeichnet dabei einen Prozess, bei dem ein Gasgemisch durch Kompression und anschließende Entspannung verflüssigt wird. Danach kann durch Destillation und Fraktionierung das flüssige Gasgemisch in seine einzelnen Bestandteile zerlegt werden. Dieses Verfahren wird eingesetzt, um im großen Maßstab flüssigen Sauerstoff, Stickstoff, Argon sowie weitere Edelgase zu gewinnen. Vorteil des Linde-Verfahrens ist es, dass der Reinheitsgrad der fraktionierten Flüssiggase sehr hoch ist.

1.1.1 Prinzip der kryogenen Luftzerlegung

Bei der Entspannung bzw. Kompression von idealen Gasen stellt sich keine Temperaturänderung ein. Bei realen Gasen jedoch, wird eine Volumenänderung stets von einer Änderung der Temperatur begleitet. Ob dabei eine Erwärmung oder Abkühlung des Gases auftritt, hängt von der so genannten Inversionstemperatur ab. Die Inversionstemperatur ist ein Maß für die Temperatur, bei welcher der Joule-Thomson-Koeffizient (JTK) für das jeweilige Gas ein Vorzeichenwechsel erfährt. Bei realen Gasen ist er ungleich Null und abhängig von Druck, Temperatur und Art des Gases.

So kann gesagt werden, dass bei einem positiven JTK sich das Gas bei einer Expansion erwärmt und bei einem negativen abkühlt [1]. Das Linde-Verfahren setzt also voraus, dass das zu fraktionierende Gasgemisch, einen JTK kleiner Null besitzt.

1.1.2 Funktionsweise einer kryogenen Luftzerlegungsanlage

Im ersten Schritt der kryogenen Luftzerlegung wird das Gasgemisch (genauer das Luft-Gas-Gemisch) vorgereinigt. Es werden sowohl Festkörper, wie zum Beispiel Staub, als auch gasförmige Bestandteile (CO_2) entfernt. Übrig bleibt dann nur noch ein Gasgemisch aus Sauerstoff, Stickstoff und Argon. Danach wird dieses Gasgemisch in einen mehrstufigen Verdichter mit Zwischenkühler geführt. In diesem Verdichter wird dann das Gasgemisch verflüssigt und in einen Splitter eingeleitet. Dieser Splitter teilt dann den Stoffstrom auf und leitet ihn in die Rektifikationskolonnen ein. Zum einen in eine Hochdruck-Kolonne (kurz: HPC; engl.: High Pressure Column), welche bei einem Druck $p \approx 6 \text{ bar}$ und einer Temperatur $T \approx -180^\circ\text{C}$ arbeitet, zum anderen über einen

Expander in eine Niederdruck-Kolonne (kurz: LPC; engl.: Low Pressure Column) welche bei einem ungefähren Druck von $p \approx 1,2 \text{ bar}$ und einer Temperatur von $T \approx -190^\circ\text{C}$ arbeitet. In der HPC werden dann die unterschiedlichen Siedetemperaturen der eingeleiteten, verflüssigten Luft ausgenutzt. Während der Sauerstoff (O_2) weitestgehend im flüssigen Zustand vorzufinden ist, sind Stickstoff (N_2) und Argon (Ar) noch gasförmig. Innerhalb der HPC fließt dann die flüssige Luft im Gegenstromprinzip über mehrere Rektifikationsböden in den Sumpf der Kolonne. Dadurch kann gewährleistet werden, dass Flüssigkeit sauerstoffhaltiger und das Gas stickstoffhaltiger wird.

Ähnlich ist es in der LPC. Hier wird nach dem Expander flüssige Luft in der Kolonnenmitte eingeleitet. Ferner bekommt die LPC noch einen zusätzlichen Feed¹ aus dem Kolonnenkopf der HPC. In diesem Feed befindet sich bereits in der Gasphase vorliegender Stickstoff, welcher dann über den Kolonnenkopf an der LPC abgenommen wird. Im Sumpf der LPC befindet sich nun ein Sauerstoff-Argon-Gemisch. Da die Siedepunkte beider Elemente nahe beieinander liegen, wird in der Nähe des Sumpfes noch eine separate Argon-Kolonne installiert.

Tab. 1.1: Übersicht der Siedepunkte der für die kryogene Luftzerlegung relevanten Elemente nach [2] bei einem Umgebungsdruck von 1,013 bar

Element	Formelzeichen	Siedetemperatur T / °C
Stickstoff	N_2	-196
Sauerstoff	O_2	-183
Argon	Ar	-186

In diese wird das Sumpfprodukt der LPC eingeleitet, um zum einen das Argon aus dem Gemisch heraus zu destillieren und zum anderen den Reinheitsgrad des flüssigen Sauerstoffs zu erhöhen. Der im Sumpf der LPC befindliche Sauerstoff wird nun über

¹ Feed (engl. Feed „Eispeisung“)

einen Kondensator geleitet, welcher diesen wieder in die Gasphase überführt, woraufhin der Sauerstoff abgenommen werden kann.

1.2 Vorarbeiten des Fraunhofer IFF

In der Prozesssimulations-Software ChemSep ist als Beispielproblem eine idealisierte Luftzerlegungsanlage nach *Harry Kooijman* zu finden. Dieses Modell liefert 60 t hochreinen (98,1 %) Sauerstoff pro Stunde.

1.2.1 Das Modell einer Luftzerlegungsanlage nach *Kooijman*

Kooijman nutzt innerhalb seines Luftzerlegungsanlagen-Modells (LZA) verschiedene idealisierte Parameter und Bauteilanordnungen einer realen LZA.

Im ersten Schritt der Idealisierung wird die separate Verdichterstufe und der Wärmeübertrager, welche für den Feed der LPC zuständig ist, weggelassen. Weiterhin wird der „*Subcooler*“, also der Unterkühler, entfernt. Dies bewirkt, dass die Kälterückgewinnung im Hauptwärmeübertrager niedriger ausfällt und die Kälteverluste steigen.

Eine gemeinsame Einhausung der HPC und LPC soll bewirken, dass die Temperaturunterschiede zwischen dem kondensierenden Stickstoff und dem verdunstenden Sauerstoff möglichst geringgehalten werden.

Im nächsten Schritt der Idealisierung werden die Hoch- und Niederdruckkolonnen, welche sonst üblicherweise in einem Gehäuse sind, separat ausgeführt. Diese separierten Kolonnen wurden dann noch mit kleinen Wärmeverlusten beaufschlagt.

Im letzten Schritt der Idealisierung wurden die Wärme- bzw. Kälteströme entkoppelt. Dies bedeutet, dass nicht wie in realen Anlagen zu finden, die ein- und ausfließenden Ströme durch einen gemeinsamen Wärmeübertrager geführt werden. Bilanziert man jedoch die Wärmemengen der Feedströme und der Produktströme, erhält man ein weitestgehend thermisch ausgeglichenes System. Weitestgehend insofern, dass die Produktströme eine um 0,3 MW größere Wärmemenge aufnehmen, als durch die

Feedströme bereitgestellt werden. Werden in die Bilanzierung der Feed- und Produktströme die Wärmeverluste der Kolonnen mit einbezogen, stellt sich ein thermisches Gleichgewicht ein.

Werden nun die Wärmemengen des Verdampfers der HPC und des Kondensators bilanziert, stellt sich dort ein thermisches Gleichgewicht ein. Gleiches gilt für die Wärmemengen des Verdampfers der Argon-Kolonne und des Cond-ARC-Behälters (vgl. [3]).

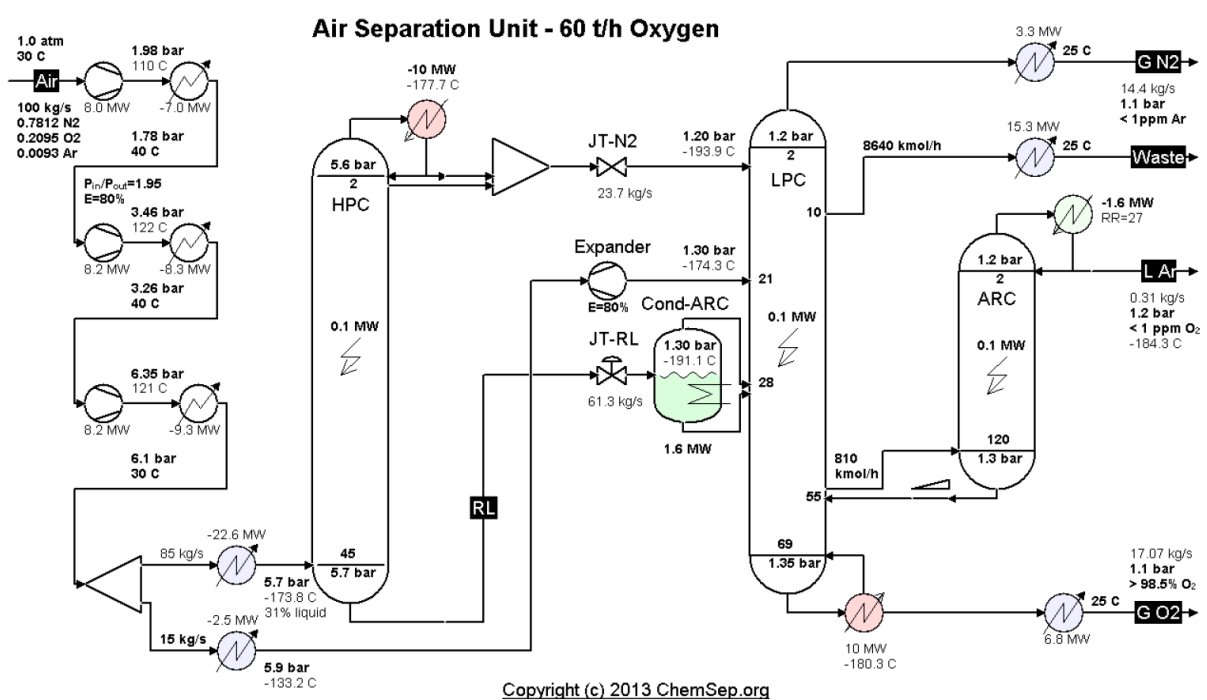


Abb. 1.1: Vereinfachtes und idealisiertes Modell einer Luftzerlegungsanlage nach Harry Kooijman; nach [4]

1.2.2 Das LZA-Modell in Aspen Plus

Dieses vereinfachte und idealisierte Modell nach Kooijman respektive das Fließschema aus diesem Modell wurde in der Prozesssimulations-Software ASPEN PLUS umgesetzt. Die dafür benötigten Komponenten wurden aus dem Fließschema nach [4] übernommen. Die Stoffparameter wurden dabei aus den Standardbibliotheken von ASPEN PLUS genommen. Die Betriebsparameter der Komponenten sind in

Abb. 1.1 Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden. zu sehen. Die Parameter hierfür wurden, soweit sie gegeben waren, aus dem Modell nach Kooijman übernommen. Für alle nicht verfügbaren Werte wurden die Standardwerte und Parameter der Standardbibliotheken genutzt.

An diesem Modell wurden bereits kleinere Parametervariationen vorgenommen, um daraus erste Flexibilisierungspotentiale ableiten zu können. Dabei stellte sich heraus, dass die Anlage sehr sensibel auf Änderungen von Betriebsparametern reagiert. Es wurde beispielsweise die thermische Leistung (P_{th}) des LPC-Verdampfers (Rot dargestellt in Abb. 1.2), in einem Bereich von 9,68 MW_{th} und 10,1 MW_{th}, variiert. Die Ergebnisse dieser Variation wurden dann im Argon-Abfluss (L-Ar in Abb. 1.2) geprüft.

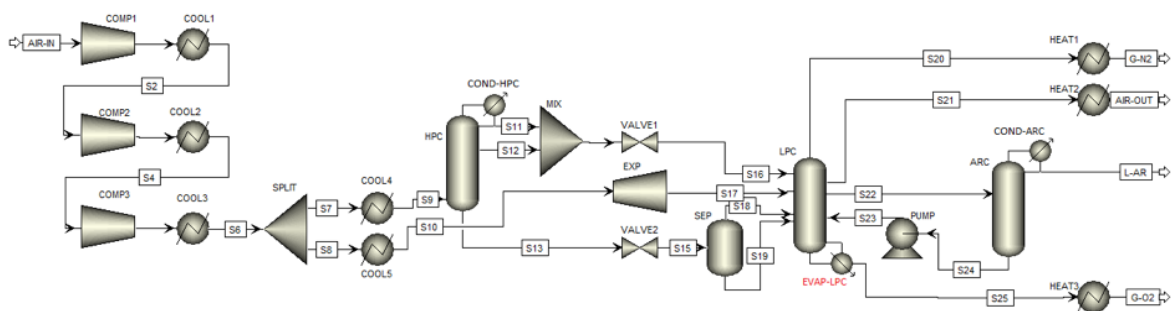


Abb. 1.2: Fließbild der Luftzerlegungsanlage nach Kooijman in ASPEN PLUS

Dabei stellte sich heraus, dass lediglich in einem schmalen Bereich ($P_{th} = 9,715 \text{ MW}_{th} - 9,8 \text{ MW}_{th}$), ausreichend reines Argon gewonnen werden kann. Wenn die thermische Leistung auch nur geringfügig außerhalb dieses Bereiches liegt, kann kein ausreichend reines Argon der Argon-Kolonne entnommen werden. Bei einem Unterschreiten der thermischen Leistung befindet sich eine zu hohe N_2 -Konzentration im Argon-Abfluss. Ist die Leistung zu hoch, ist die O_2 -Konzentration des Produktes zu hoch.

Argon wird beispielsweise beim Schutzgasschweißen eingesetzt, um chemische Reaktionen mit der Umgebungsluft zu verhindern. Wäre Argon nun durch Sauerstoff oder Stickstoff kontaminiert, kann diese Aufgabe nicht mehr richtig wahrgenommen werden. So ist eine sehr hohe Reinheit von Argon unabdingbar.

Weiterhin zeigt diese kleine Parametervariation, eine sehr sensible Reaktion der LZA auf Änderungen der Betriebsparameter.

1.3 Aufgabenstellung dieser Masterarbeit

Zu Beginn dieser Arbeit sollen Literaturrecherchen bezüglich des aktuellen Stands der Technik in der kryogenen Luftzerlegung vorgenommen werden. Danach soll geprüft werden, ob die LZA nach *Kooijman* geeignet ist, die Wärmeübertrager neu zu modellieren oder ob aufgrund der Literaturrecherche ein anderes Modell bevorzugt werden kann.

Es sollen dabei Modellansätze für einzelne Wärmeübertrager gebildet und in das gewählte Luftzerlegungsmodell implementiert werden. Die dafür benötigten Betriebsparameter der Wärmeübertrager müssen ebenfalls erarbeitet werden. Die Implementierung in das stationäre Fließschema soll mit Hilfe der Modellierungs- und Prozesssimulations-Software ASPEN PLUS geschehen.

Um Flexibilisierungspotentiale der Luftzerlegung beziffern zu können, sollen dann an dem gebildeten LZA-Modell Parametervariationen der Eingangsparameter durchgeführt werden. Die Ergebnisse sollen dann Aufschluss über den Betriebszustand der Anlage bei wechselnden Eingangsparametern geben.

Abschließend sollen aus den Simulationsergebnissen Flexibilisierungspotentiale innerhalb einer kryogenen Luftzerlegungsanlage abgeleitet werden. Diese werden dann validiert und verifiziert, um den Flexibilisierungsbeweis oder den Gegenbeweis aufzuzeigen.

2 Luftzerlegungsanlagen

Dieses Kapitel soll einen detaillierteren Einblick in das Thema der Luftzerlegung geben. Zuerst soll ein historischer Abriss der Entstehung der Luftzerlegung gemacht werden. Danach soll auf die generelle Unterscheidung der kryogenen und nicht-kryogenen Luftzerlegung eingegangen werden. Es sollen verschiedene Methoden aufgezeigt werden. Der Teil der nicht-kryogenen Luftzerlegung besitzt im Kontext dieser Arbeit jedoch nur einen informativen Charakter, da der Fokus auf der kryogenen Luftzerlegung liegt. Abschließend sollen die Haupteigenschaften verschiedener alternativer Luftzerlegungsmethoden mit denen, der kryogenen Luftzerlegung verglichen und dargestellt werden.

2.1 Die Geschichte der Luftzerlegung

Durch einen im Jahre 1892 durch die Guinness-Brauerei in Dublin erteilten Auftrag, bekam Carl von Linde die Anregung zum Arbeiten mit tiefen Temperaturen. Es sollte eine Kohlensäureverflüssigungsanlage entwickelt und installiert werden. Auf Basis der durch die Entwicklung gewonnenen Erkenntnisse, begann von Linde, die erste Luftverflüssigungsmaschine zu entwickeln. Er nutzte dabei den von den Forschern Thomson und Joule 1862 beschriebenen Effekt, dass sich Gase bei der Entspannung abkühlen (Joule-Thomson-Effekt). Diese gewonnene Kälte wollte von Linde nutzen, um den Zuluftstrom in die Luftverflüssigungsmaschinen vorzukühlen. Die von Linde entwickelte Maschine war jedoch zunächst nur in der Lage, ein Sauerstoff-Stickstoff-Gemisch im Verhältnis 50:50 - die so genannte Linde-Luft - zu produzieren. Da jedoch von Seiten der Industrie eine zunehmende Nachfrage nach reinem Sauerstoff bestand, mussten die Trennverfahren der Luftzerlegungsanlagen weiter optimiert werden. So wurde ab diesem Zeitpunkt die Rektifikation, also eine fraktionierende Destillation, eingesetzt. Vorteil dieses Verfahrens ist es, dass nun reiner Sauerstoff aus der so genannten Rektifikationskolonne entnommen werden konnte. Als weiteres fassten Carl von Linde und seine Mitarbeiter die Verflüssigungs- und Zerlegungsanlage in einer Apparatur zusammen, sodass der grundlegende Aufbau der heute bekannten LZA, entwickelt war. Nachdem 1902 die erste Anlage zur Sauerstoffproduktion gebaut wurde, ging 1903 in Höllriegelskeuth bei München die erste Produktionsanlage in

Betrieb [5]. Bereits ein Jahr später wurde die erste LZA zur Produktion von Stickstoff entwickelt. 1910 wurde dann das noch heute genutzte Zweisäulen-Rektifikations-Verfahren erfolgreich in einer LZA angewendet[6].

Heute stellen die in LLZA hergestellten Produkte einen wesentlichen Bestandteil vieler industrieller Anwendungen dar. So wird reiner Sauerstoff beispielsweise für Anwendungen in der Stahl- oder Glasindustrie, sowie in der Medizin benötigt. Stickstoff wird vor allem in der chemischen und petrochemischen Industrie, aber auch in Bereichen wie der Lebensmittel- und Getränkeindustrie verwendet. Durch die inerten Eigenschaften wird Stickstoff aber auch genutzt, um es als Schutzgas in explosionsgefährdeten Bereichen einzusetzen. Weiterhin wird nach [7], [8] Stickstoff auch als ein potentieller Energieträger der Zukunft betrachtet. Argon hingegen wird beispielsweise als Schutzgas beim Schweißen oder aufgrund seiner geringen Wärmeleitfähigkeit als wärmeisolierendes Schutzgas in Fensterscheiben benutzt.

Große kryogene Luftzerlegungsanlagen sind heute im Stande, mehr als 3.000 t Sauerstoff oder bis zu 10.000 t Stickstoff pro Tag zu produzieren. Diese Anlagen werden dann auch „tonnage-Plants“ genannt [9]. Im Jahre 1997 wurde in Cantarell, Mexico die größte Luftzerlegungsanlage mit dem Fokus auf Stickstoffproduktion gebaut. Diese Anlage produziert bis zu 5 x 10.000 t Stickstoff pro Tag. 2017 begann der Aufbau der größten LZA überhaupt. In Jamnagar, Indien wird eine LZA errichtet, welche dann 5 x 5.250 t Sauerstoff pro Tag produzieren wird [6].

2.2 Unterscheidung der kryogenen und nicht-kryogenen Luftzerlegung

Das noch heute angewendete Prinzip, Luft mit Hilfe von sehr tiefen Temperaturen zu verflüssigen, um sie dann in die benötigten Bestandteile zu zerlegen, wurde im Laufe der Jahre stets weiterentwickelt. Neben dieser kryogenen Variante wurden auch einige nicht-kryogene Luftzerlegungsmethoden entwickelt. Abhängig von der gewünschten Masse, Reinheit und Art des Produktes, werden diese auch zur Anwendung gebracht. Als die bekanntesten nicht-kryogenen Luftzerlegungsmethoden werden dabei die Adsorptions- und Membrantechnik benannt. Alle diese Methoden haben den gemeinsamen Nachteil, dass sie, in Bezug auf Reinheit und Menge des Produktes nicht an die Parameter von kryogenen LZA herankommen. Eine weitere Methode stellt die

Elektrolyse dar. Da der Fokus bei einem Elektrolyseur jedoch auf der Wasserstoff-Produktion liegt und Sauerstoff nur als Nebenprodukt abfällt, soll diese Methode innerhalb dieser Arbeit nicht weiter beleuchtet werden.

2.3 Alternative Luftzerlegungsmethoden

2.3.1 Grundlagen der Adsorptionstechnik

Der Begriff der Adsorption steht für die Anreicherung gasförmiger oder gelöster Stoffe, das Adsorbat, an der Grenzfläche eines Feststoffes, des Adsorbens oder auch Adsorptionsmittel. Der dabei abzuscheidende Stoff wird als Adsorbiv bezeichnet. Auf der Oberfläche des Adsorbens befinden sich sogenannte aktive Zellen oder auch Poren, welche sowohl homogen, als auch heterogen verteilt sein können. Diese Poren weisen eine Anzahl freier Bindungsatome auf. Je nach eingesetztem Adsorptionsmittel können so unterschiedlichste Stoffe gebunden werden. Die Bindung kann rein physikalisch (Physisorption; reversibel) oder auch chemisch (Chemisorption; meist nicht reversibel) sein.

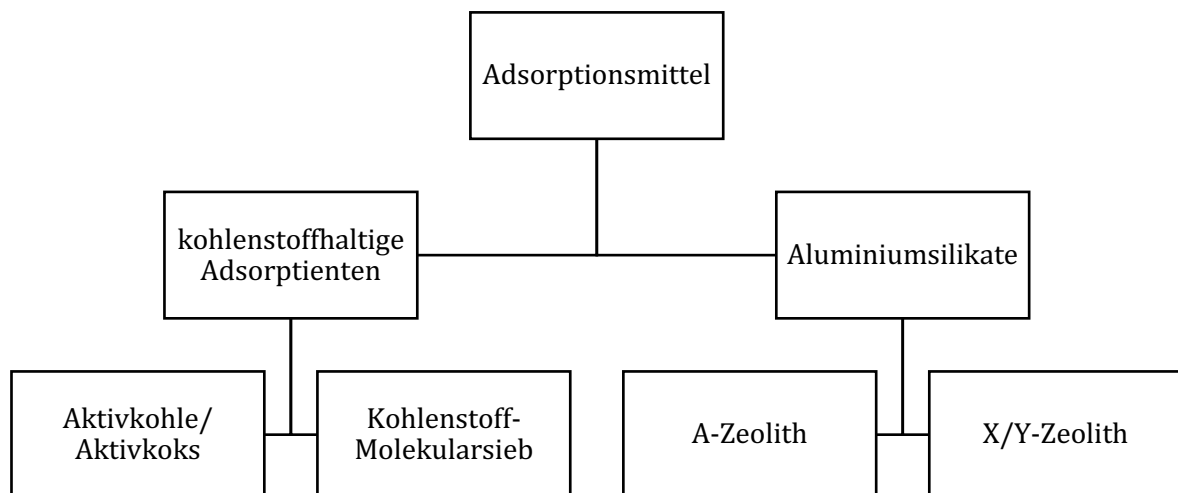


Abb. 2.1: Eigenerstellte Darstellung mit der Unterscheidung der reversiblen Adsorptionsmittel nach [10].

Die weitverbreitetsten Adsorptionsmittel sind zum einen die Zeolithe und zum anderen die kohlenstoffhaltigen Adsorptionsmittel wie zum Beispiel Aktivkohle. Die Adsorption an beiden Mitteln verläuft reversibel. Das bedeutet, dass der an den Poren angelagerte „Fremdstoff“ wieder gelöst werden kann.

Die Grundlage für die Herstellung von Aktivkohle sind kohlenstoffhaltige Rohstoffe wie Holz, Torf, Braun- und Steinkohle oder auch Kokosnussschalen. Die Aktivkohle wird dann meist geformt (in Form von zylindrischen Pellets), gebrochen (Granulat oder Bruchaktivkohle) oder in Form von Pulver mit definierter Korngröße produziert [11]. Die Aktivierung² dieser Rohstoffe kann auf zwei Arten geschehen. Dies sind:

- Gasaktivierung oder
- chemische Aktivierung

Durch die Aktivierung werden hochporöse Adsorbentien mit einer inneren Oberfläche von mehr als 600 m²/g geschaffen [13, S. 98]. In [13, S. 99] wird diesbezüglich ein Größenvergleich angestellt. So wird als Referenzobjekt ein Fußballfeld angeführt. In der Bundesliga hat ein Spielfeld eine Länge von 105 m und eine Breite von 68 m. Dies entspricht einer Fläche von 7.140 m². Bei einer mittleren Oberfläche von 1100 m²/g entspricht dies lediglich 6,5 g der Aktivkohle.

Kohlenstoff-Molekularsiebe (KMS) stellen prinzipiell eine Sonderform der Aktivkohle dar. Diese kommen in der Natur nicht vor und müssen speziell hergestellt werden. Vorteil dieser KMS ist es, dass sie gezielt auf ihre Trennaufgabe hin erzeugt werden können. So können in LZA die KMS so konzipiert werden, dass N₂-Anteile aus der Luft „ausgesiebt“ werden und nur der Sauerstoff respektive das Argon das Sieb passiert [10]. Deshalb kann gesagt werden, dass KMS sehr trennscharf für Sauerstoff- und Zeolithe eher trennscharf für Stickstoffmoleküle sind [14].

² Als Aktivierung bezeichnet man in der Chemie die Überführung eines Reaktanten in einen Zustand oder eine chemische Verbindung, die eine bestimmte Reaktion oder einen Reaktionstyp mit höherer Geschwindigkeit oder Ausbeute ablaufen lässt [12].

Zeolithe können sowohl natürlich (z.B.: in alpinen Klüften oder submarinen heißen Quellen, so genannten „Black Smoker“) als auch in synthetischer Form vorkommen. Sie bestehen aus kristallinen, mikroporösen Alumosilikaten, welche eine Gerüststruktur aufweisen. Diese Struktur ist durchsetzt mit Poren und Kanälen. In der Adsorptionstechnik werden meist die synthetischen Zeolithe A, X und Y verwendet. Durch die spezifische Hohlraumstruktur können Oberflächen von 800 bis 1.000 m²/g erreicht werden [10]. Als Besonderheit in der Kristallstruktur kann hervorgehoben werden, dass die Kationen in den Alumosilikateinheiten nur schwach eingebettet sind. Das bedeutet, dass diese auch leicht wieder entfernt werden können. Diese durch die Entfernung entstehenden Hohlräume innerhalb der Zeolith-Kristalle sind durch ein- oder mehrdimensionale Kanäle miteinander verbunden. An den Stellen, an denen innerhalb des Silikat-Gerüsts Siliziumatome durch Aluminiumatome ausgetauscht werden, entsteht ein negativer Ladungsüberschuss[13]. Dies führt zu einer Affinität von H₂O- oder N₂-Molekülen³.

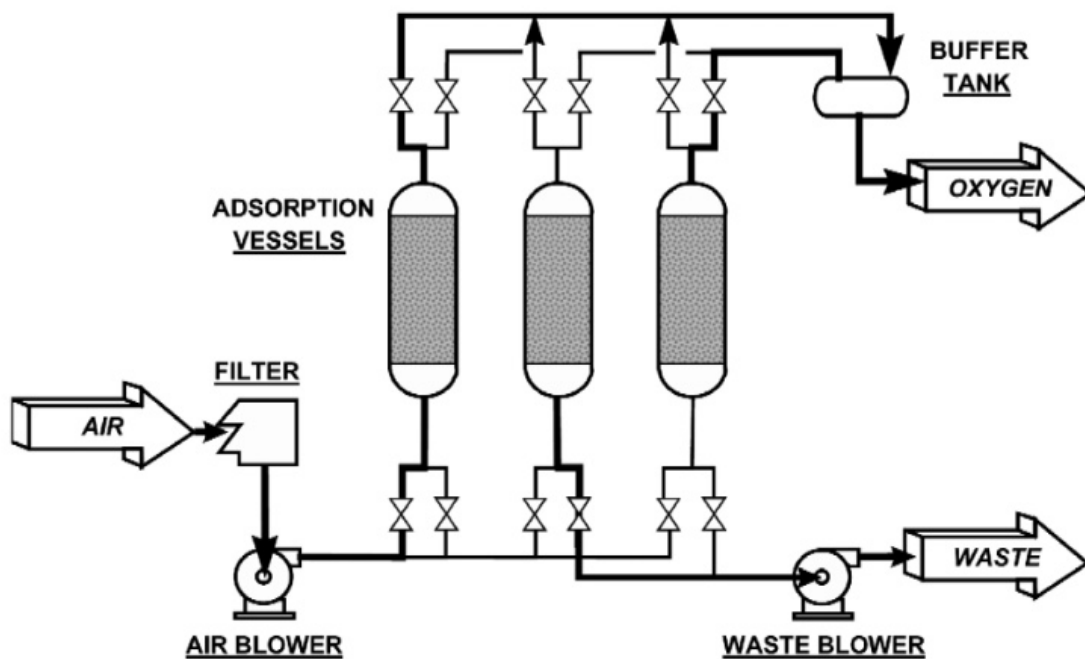


Abb. 2.2: Prinzipieller Aufbau einer 3-Bett-Adsorptions-LZA nach [14]

³ Sowohl H₂O als auch N₂ sind formal positiv geladen[15].

2.3.2 Das Druckwechselverfahren

Da die Adsorptionsmittel nur ein begrenztes Aufnahmevermögen für Adsorbive besitzen, müssen sie in gewissen Zeitabständen geleert werden. Dieser Entleerungsprozess wird auch als Regeneration bezeichnet. Dafür gibt es zwei Methoden.

1. Das Temperaturwechselverfahren, auch TSA (Temperature Swing Adsorption). Bei diesem Verfahren wird die Temperaturabhängigkeit des Adsorbents ausgenutzt. Mit steigender Temperatur sinkt die Aufnahmefähigkeit des Adsorbents. So können die Poren durch Temperaturerhöhung „gezwungen“ werden, adsorbierte Moleküle wieder frei zu geben.
2. Das Druckwechselverfahren, auch PSA (Pressure Swing Adsorption), bezeichnet ein Verfahren, bei dem der Druck innerhalb eines Behälters so weit herabgesetzt wird, dass das Adsorbiv wieder desorbiert wird. Das heißt, dass die aufgenommenen Moleküle die Poren wieder verlassen.

Da jedoch die Durchlaufzeit des PSA geringer ist und die Anwendung einfacher, ist das Druckwechselverfahren meist das gewählte Verfahren [14].

Tab. 2.1: Übersicht der Vor- und Nachteile des PSA- und TSA-Verfahrens zur Regeneration von Adsorbern nach [16]

Angewandte Methode	Vorteile	Nachteile
PSA	<ol style="list-style-type: none"> 1. Einfache und ökonomische Operation 2. Hohe Widerstandsfähigkeit 3. Skalierbare Operation 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Langsamer Prozess 2. Einsatz von elektrischen Kompressoren und Vakuumpumpen 3. Hoher Adsorptionswiderstand aufgrund der großen Partikel
TSA	<ol style="list-style-type: none"> 1. Keine Druckwechsel oder die Nutzung von Kompressoren nötig 2. Kann bereits in das System eingebrachte Abwärme nutzen 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Aufgrund der thermischen Leitfähigkeit und der hohen Porosität schlechte Erwärmung und Abkühlung einzelner Betten 2. Mehrere Betten von Nöten, um einen ununterbrochenen Produktstrom zu realisieren

In der Zeit, in der der Desorptionsvorgang läuft, kann logischer Weise nicht adsorbiert werden. Somit kann der Prozess der adsorptiven Luftzerlegung als diskontinuierlich beschrieben werden. Dies würde eine zwangsläufige Unterbrechung der Produktion bedeuten. Um dies zu verhindern, wurden Verfahren entwickelt, welche eine parallele Regeneration und Produktion erlauben. Ein Beispiel hierfür wäre das so genannte zwei-Bett-Verfahren. In diesem Verfahren werden zwei anstatt nur ein Adsorber genutzt. Diese parallel geschalteten Adsorber ermöglichen nun einen kontinuierlichen Produktionsprozess. In der Zeit, in dem einer der beiden Adsorber regeneriert wird, kann der andere mit der Produktion fortfahren. Aus dem zwei-Bett-Verfahren wurde dann das drei-Bett-Verfahren entwickelt. Dieses Verfahren nutzt einen zusätzlichen, zu den zwei vorhandenen Adsorbern ebenfalls parallel geschalteten, Adsorber. Der Vorteil an diesem Verfahren ist, dass die Trennaufgabe nun auf drei anstatt zwei Adsorber aufgeteilt werden kann. Dadurch wird ermöglicht, dass Adsorber kleiner ausgelegt werden können. Weiterhin sind Adsorptionsanlagen, welche das drei-Bett-

Verfahren nutzen, in der Lage, Volumenströme bis zu $1500 \text{ Nm}^3/\text{h}^4$ zu verarbeiten [10]. In Hao et al. [17] wird von PSA-Anlagen gesprochen, welche mittels einem 16-Bett-Verfahren Kapazitäten von $100.000 \text{ Nm}^3/\text{h}$ erreichen können [18]. Fakhroleslam et al. [19] spricht von Anlagen, welche bis zu 20 Betten haben können. Hierbei wird allerdings nicht auf Kapazitäten eingegangen.

Ungeachtet der Regenerationsmethode, läuft die Luftzerlegung mit Hilfe der Adsorption stets gleich ab. Umgebungsluft wird mit Hilfe von Kompressoren auf Betriebsdruck gebracht. Die komprimierte Luft durchströmt dann einen Adsorber. Je nach gewünschtem Produkt wird dann innerhalb des Adsorbers Stickstoff oder Sauerstoff am Adsorbens adsorbiert. Soll beispielsweise Stickstoff aus der Luft entfernt werden, werden meist Zeolithe als Adsorbentien gewählt. Durch das Entfernen des Adsorbens werden die restlichen Komponenten entsprechend angereichert. Am Adsorberkopf werden dann die maximal angereicherten Gase Argon und Sauerstoff in einen Puffertank geleitet. Dieser sollte nach [10] mindestens das Vierfache Volumen des Adsorbers haben, um in erster Linie Druckschwankungen ausgleichen zu können.

2.3.3 Das MOLTOX™ - Luftzerlegungssystem

Neben den in Kapitel 2.3.1 angesprochenen natürlichen oder synthetisch herstellbaren Materialien, welche sich für eine Adsorption eignen, wurde in den frühen 1990er Jahren ein weiteres Verfahren entwickelt. Dieses Verfahren beruht darauf, dass Sauerstoff von Adsorbentien bei verschiedenen Druck- und Temperaturverhältnissen adsorbiert und wieder desorbiert werden kann. Die Firma Air Products and Chemicals aus den Vereinigten Staaten von Amerika hat, in Zusammenarbeit mit der Firma Energy Concepts Co. und dem United States Department of Energy, die Einsetzbarkeit von Nitraten bzw. Nitriten (Natrium und Kaliumnitrit) als Adsorbentien untersucht.

⁴ Der physikalische Normzustand wird in der DIN 1343 definiert. Der Normvolumenstrom beschreibt dabei, dass das Gas oder Fluid zur Vergleichbarkeit bei einer konstanten Temperatur von $273,15\text{K}$ und bei einem konstanten Druck von $1,01325 \text{ bar}$, fließt.

Der Moltox-Prozess beginnt dabei wie ein gewöhnlicher Adsorptionsprozess. Luft wird angesaugt und auf Betriebsdruck gebracht. In diesem Fall auf rund 180 psia⁵ (pound force per square inch[absolute]; entspricht ca. 12,4 bar). Dann wird die verdichtete Luft von Wasser und Kohlenstoffdioxid befreit, um die Salze in den Adsorber- bzw. Desorber-Kolonnen nicht abzubauen. Danach fließt der Luftstrom so lange durch einen normalen Adsorber bis das Adsorbent gesättigt ist und sowohl ersetzt als auch regeneriert werden muss. Dies geschieht hier mit dem aus dem Prozess gewonnenem Stickstoff [14]. Danach wird die trockene, CO₂-freie Luft über einen Gegenstromwärmeübertrager bei einer Temperatur zwischen 900°F und 1200°F (~480°C – 650°C)⁶ in einen Adsorber geleitet, wo sie auf das geschmolzene Salz trifft [20]. Am Sumpf dieses Adsorbers reagiert dann der Sauerstoff aus der Luft mit dem Salz und wird von hier, nun gebunden in flüssigem Salz, über ein Entspannungsventil in den Kopf einer Desorber-Kolonne eingeleitet.

Am Kopf dieser Kolonne kann dann der gasförmige Sauerstoff abgenommen werden. Das nun sauerstoffarme Salz wird dann mittels eines Wärmeübertragers wieder in die Adsorber-Kolonne geleitet.

Der große Vorteil des TSA-basierenden Prozesses wird darin gesehen, dass die Luft nur auf einen Druck gebracht werden muss, der den Druckabfall während der Luftvorbehandlung überwindet. Jedoch muss stets eine Wärmequelle für den Prozess bereitstehen [14], [20].

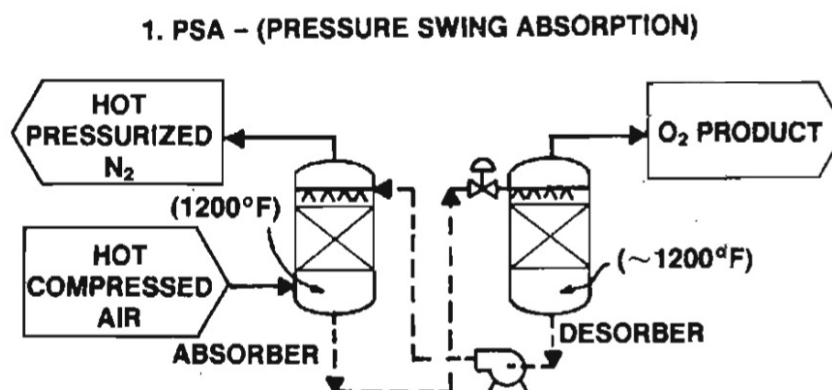


Abb. 2.3: Vereinfachtes Prozess-Diagramm des MOLTUX-Systems in der PSA-Methode [20]

⁵ Umrechnung psia – bar: 1: 0,0689475728

⁶ Umrechnung °C - °F: °C = (°F - 32) / 1,8

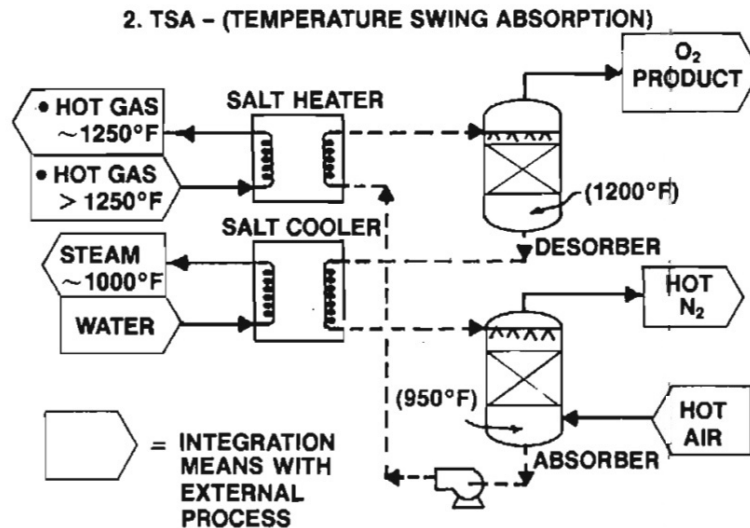


Abb. 2.4: Vereinfachtes Prozess-Diagramm des MOLTTOX-Systems in der TSA-Methode [20]

2.3.4 Membranverfahren

Dieses thermische Trennverfahren wird hauptsächlich genutzt, um flüssige Gemische zu trennen. Es können jedoch auch Gasgemische getrennt werden. Dafür wird eine ortsfeste Membran als Hilfsstoff benötigt. Anfang der 1980er Jahren wurde Shimizu et al. ein Patent auf eine Vorrichtung erteilt, die mit Hilfe von großen Membranflächen auf relativ kleinem Raum, Luftmengen so behandeln können, dass die Temperatur innerhalb von Brennräumen geregelt werden können [21]. Seither wird ständig an Optimierungen des Membranverfahrens geforscht. Das Membranverfahren wird als Schlüsseltechnologie für einen nachhaltigen Prozess und „green engineering development“ gesehen [22], [23]. Oft wird bei dem Membranverfahren der kontinuierliche Betrieb und die Umweltfreundlichkeit (kein Einsatz von chemischen Reaktionen, keine Erzeugung von Abfallprodukten) als signifikanter Vorteil erwähnt.

Dieses Verfahren beruht auf den unterschiedlichen Diffusionsraten von Gasen bzw. Flüssigkeiten. Ein Feedstrom bestehend aus einem Gas- oder Flüssigkeitsgemisch wird in einen Membranreaktor geleitet. Die Membran ist nur für eine bestimmte Komponente des Feeds durchlässig, sodass diese Komponente dann „ausgesiebt“

werden kann. Der Feed wird also in Retentat und Permeat zerlegt. In Abbildung Abb. 2.5 ist das Prinzip des Membranverfahrens, bezogen auf die Luftzerlegung sinnbildlich dargestellt.

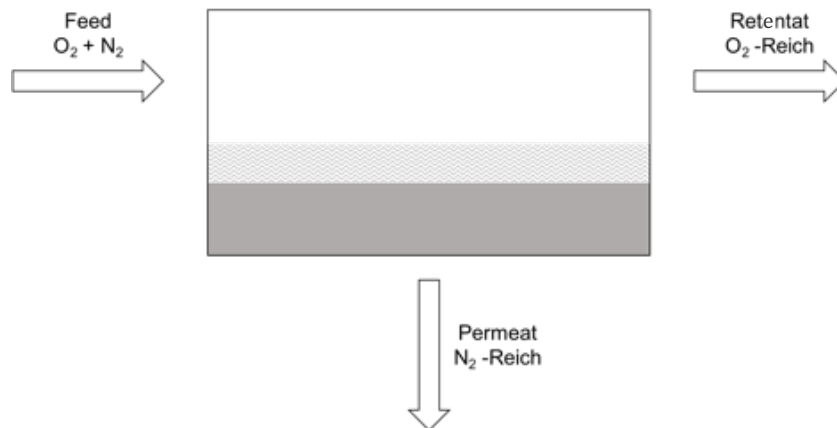


Abb. 2.5: Prinzip eines Membranreaktors nach [24]

Membranverfahren werden, je nach der Art der Trennung, in die mechanischen oder physikalisch-chemischen Trennverfahren eingeordnet. Die Triebkräfte, welche benötigt werden um die abzuscheidende Komponente durch die Membran zu drücken, können Druckdifferenzen, Partialdruckgefälle, Konzentrationsgefälle oder ein elektrisches Potenzialgefälle sein [24].

Im Falle der Luftzerlegung spielen der Durchfluss (Flux) und die Selektivität der Membran, welche Hoch- und Niederdruckseite trennt, eine große Rolle. Sowohl Flux als auch die Selektivität stellen dabei Eigenschaften des Membranmaterials dar. Der angestrebte Durchfluss bestimmt die Membranfläche und ist prinzipiell proportional zum Quotienten aus der Druckdifferenz zwischen Hoch- und Niederdruckseite und der Membrandicke. Eine Proportionalitätskonstante, welche je nach eingesetzter Membran variiert, ist die Permeabilität. Die Selektivität wiederum, beschreibt die Verhältnisse der Permeabilität der einzelnen, zu trennenden Gase. Da Sauerstoffmoleküle um ein Vielfaches kleiner sind als Stickstoffmoleküle, sind die meisten Membranmaterialien für Sauerstoff durchlässiger als für Stickstoff.

Tab. 2.2: Auswahl der für die Luftzerlegung relevanten Elemente mit den dazugehörigen Molekülradien nach [25]

Element	Molekülradius r_{∞} / nm
Stickstoff	16
Sauerstoff	14,8
Argon	14,3

Nachdem grob die Wirkweise der Membran erläutert wurden soll nun auf die Funktion einer kompletten Membranverfahrens-LZA eingegangen werden.

Wie bereits erwähnt, wird das Membranverfahren als Schlüsseltechnologie für nachhaltige Luftzerlegungsprozesse gesehen. Ein Grund hierfür kann sein, dass nicht, wie in der kryogenen Luftzerlegung oder dem MOLTOX-Verfahren, die Luft enorm komprimiert werden muss. Es wird lediglich ein Luftgebläse benötigt, welches genug Druck bereitstellt, um Druckverluste über die Verrohrung, Filtereinheiten und Membranreaktoren zu kompensieren. Um genügend hohe Produktströme realisieren zu können, werden die Membranen meist in vielschichtigen, zylindrischen Modulen zusammengesetzt. Der Sauerstoff permeiert dann durch Hohlfasern oder durch spiralförmige Wicklung und wird als Produkt abgezogen. Im Gegensatz zum Adsorptions- oder MOLTOX-Verfahren ist hier der Sauerstoff noch durch Fremdstoffe (Wasser und CO₂) kontaminiert. Nach [14] sind heute Membran-LZA in der Lage, einen Produktstrom von bis zu 20t/ Tag zu realisieren. Dies allerdings nur, wenn das Produkt nicht hochrein sein muss.

2.3.5 Das Ionen-Transportmembran-Verfahren

Eine aus dem „konventionellen“ Membranverfahren abgeleitete Technik der Luftzerlegung, stellt der Einsatz sogenannter Ion-Transportmembranen (ITM) dar. Diese ITMs werden aus ionisch und halbleitenden (MIEC) Keramikoxiden hergestellt, welche bei hohen Temperaturen (800 °C – 900°C) den Sauerstoff leiten.

Aufgrund der thermischen Aktivierung der ITM muss der Feed ebenfalls erwärmt werden. Dies kann entweder durch einen Wärmeübertrager, das Befeuern mit günstigen Brennstoffen oder einer Mischung aus Beidem, realisiert werden [26]. Bei den für den Prozess benötigten $800^{\circ}\text{C} - 900^{\circ}\text{C}$ werden die Sauerstoffmoleküle auf der ITM-Oberfläche ionisiert. Als Triebkraft für den Transport durch die Membran wird entweder ein elektrisches Feld oder die Differenz der Sauerstoff-Partialdrücke auf der Hoch- und Niederdruckseite genutzt [14], [27].

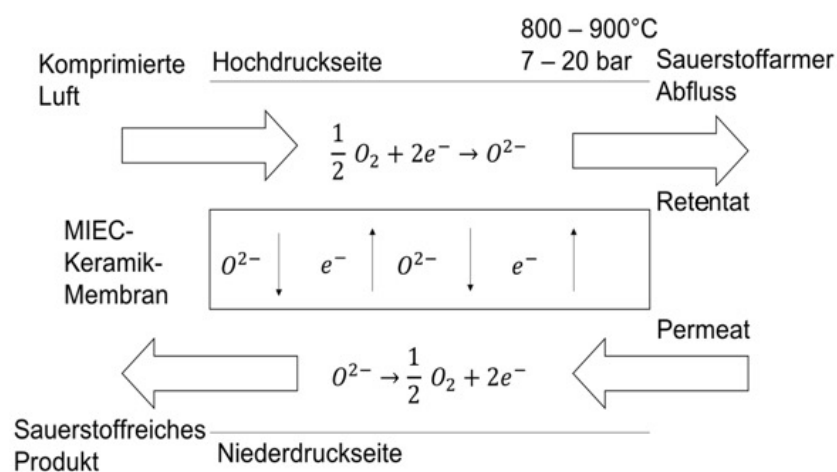


Abb. 2.6: Eigenerstellte Darstellung der prinzipiellen Funktionsweise einer Ionen-Transportmembran nach [27]

Ein weiterer Vorteil des ITM-Verfahrens ist es, dass die heiße Luft genutzt werden kann um damit eine Turbine respektive einen Generator anzutreiben, welcher letztendlich elektrische Energie erzeugen kann. In Dyer et al. wird diese Ergänzung sinngemäß wie folgt beschrieben [26]:

Um eine akzeptable Kreislaufeffizienz bzw. einen hohen Wirkungsgrad zu erreichen, kann die mit dem heißen, unter Druck stehenden Nichtpermeatstrom verbundene Energie durch die Integration der ITM-Sauerstoffmembran mit einem Gasturbinen-Leistungsgeneratorsystem in verschiedenen Zykluskonfigurationen zurückgewonnen werden.

Dafür werden ein Permeat- und ein Nichtpermeatstrom in eine Turbine geleitet. Da die Betriebstemperatur der ITM höher ist als der Abwärmestrom der Kompressoren, wird

ein zusätzlicher Verbrenner im Nichtpermeatstrom benötigt. Die beiden Ströme werden dann in eine Turbine geleitet, welche wiederum einen Generator antreibt und/oder in einem Abhitzedampferzeuger (ADE) Dampf erzeugt. So kann zusammengefasst gesagt werden, dass das ITM-Verfahren ein kapitalintensiverer Prozess ist als die kryogene Luftzerlegung, jedoch die Vorteile darin liegen, dass neben reinem Sauerstoff auch elektrische Energie und Dampf produziert werden kann.

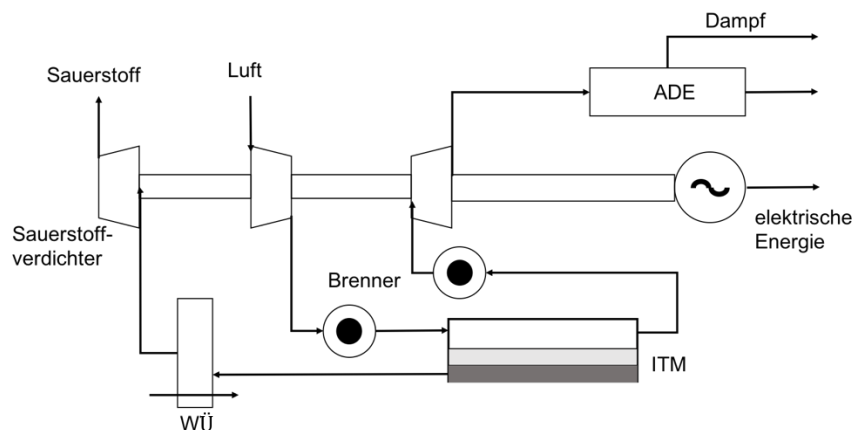


Abb. 2.7: Eigenerstellte Prinzipskizze des ITM-Verfahrens mit integrierter Dampf- und Elektroenergieerzeugung nach [26]

2.4 Zusammenfassung der alternativen Luftzerlegungsmethoden

Obwohl die kryogene Luftzerlegung als etabliert und weitestgehend ausgereift angesehen wird, werden stets Forschungen an alternativen Luftzerlegungsmethoden betrieben. Da die kryogene Luftzerlegung ein sehr energieintensiver Prozess ist, werden gerade im Hinblick auf den effizienteren Einsatz der Elektroenergie Bemühungen angestellt. So wird gesagt, dass energieintensive Prozesse wie die Destillation oder die Verdampfung durch energiesparendere Methoden wie Membran- oder Adsorptionsverfahren ersetzt werden müssen. Jedoch besteht der Nachteil noch darin, dass existierende Materialien bzw. Verfahren noch Barrieren überwinden müssen, um sich etablieren zu können. Diese Barrieren sind beispielsweise:

- Die genutzten Materialien besitzen nicht die benötigte Selektivität, um eine angestrebte Separation zu realisieren
- Die genutzten Materialien bieten keinen genügend hohen Durchsatz, um wirtschaftlich gut arbeiten zu können
- Materialien können unter groben industriellen Bedingungen nicht lange im optimalen Bereich arbeiten [22]

Ebenso werden Methoden erforscht und getestet, welche den Kaptialeinsatz für LZA mindern sollen. So werden neue Einhausungsmethoden (Drei-Säulen-Kolonnen) erprobt. Dabei sollen die Wärme- bzw. Kälteverluste weiter minimiert werden.

Tab. 2.3: Vergleich der Luftzerlegungsmethoden nach [14], [27]

Prozess	Entwicklungsstatus	Durchsatz t/ d	Nebenproduktkapazität	Produktreinheit Vol.-%	Anfahrzeit
Kryogene Luftzerlegung	Ausgereift	> 18	Gut	> 99	Stunden
Adsorption	Halb-Ausgereift	< 136	Schlecht	95	Minuten
Polymer- Membran	Halb-Ausgereift	< 18	Schlecht	~40	Minuten
Chemische Luftzerlegung	Forschungsstadium	Unbestimmt	Schlecht	> 99	Stunden
ITM- Verfahren	Forschungsstadium	Unbestimmt	Schlecht ⁷	> 99	Stunden

⁷ In Tab. 2.3 wird die Nebenproduktkapazität als Maß verwendet, relativ reinen Stickstoff oder Argon zu produzieren, ohne zusätzliche Kolonnen o.ä. installieren zu müssen

3 Wärmeübertrager innerhalb einer Luftzerlegungsanlage

Dieses Kapitel soll einen Einblick in das Thema der Wärmeübertrager geben. Zu Beginn sollen Grundlagen und wichtige Begriffe der Wärmeübertragung angesprochen werden. Danach wird eine Einteilung der verschiedenen Wärmeübertrager hinsichtlich ihrer Wärmeübertragung und der geometrischen Führung der Stoffströme getroffen.

3.1 Grundlagen der Wärmeübertragung

In der Thermodynamik wird Energie, welche die Grenzen eines Systems überschreitet, Wärme (Formelzeichen Q) genannt. Voraussetzung dafür ist es, dass der Energietransport lediglich durch einen Temperaturunterschied erfolgt [28]. Die Wärmeübertragung kann dabei durch Wärmeleitung, Strahlung oder Konvektion erfolgen. Der entsprechende Vorgang wird als Wärmetransport bezeichnet.

Voraussetzung für die Wärmeleitung ist es, dass in den Stoffen ein Temperaturgradient (gerichtetes Vektorfeld) vorhanden ist. Sinngemäß bedeutet dies nach Clausius: „Wärme fließt niemals selbstständig von einem kälteren zu einem wärmeren Körper“ [29]. Befindet sich ein Medium (ungeachtet, ob es fließt oder ruht) mit einer Temperatur $\vartheta_{\text{Medium}}$ beispielsweise in einem Rohr mit der Temperatur $\vartheta_{\text{Rohr}} \neq \vartheta_{\text{Medium}}$, so erfolgt Wärmeleitung zwischen dem Medium und dem Rohr. Dies gilt ebenso für zwei Stoffströme. Im Gegensatz dazu steht die Wärmestrahlung. Bei dieser wird kein Wärmeträger benötigt. Mit Hilfe elektromagnetischer Wellen wird Wärme von einer Oberfläche zu einer anderen transportiert [30]. Da im Kontext dieser Arbeit jedoch die Strahlung bzw. Wärmestrahlung nicht behandelt wird, beziehen sich die kommenden Ausführungen nur auf den Effekt der Wärmeleitung.

Die Wärmeübertragung kann in drei Klassen eingeordnet werden. Bei der direkten Wärmeübertragung findet die Wärmeübertragung durch ein direktes Mischen beider Stoffe statt. Die indirekte Wärmeübertragung zeichnet sich durch die räumliche Trennung der Stoffe aus. Ein bekanntes Beispiel für eine solche Wärmeübertragung ist

der Autokühler oder der heimische Heizkörper [31], [32]. Eine Sonderform stellt die halbindirekte Wärmeübertragung dar. Die Wärmeübertragung ist hier durch einen zeitlichen Versatz gekennzeichnet. So kann nach [31] ein Wärmespeicher zu einem bestimmten Zeitpunkt aufgewärmt werden und zu einem späteren Zeitpunkt wieder abgekühlt werden. Anwendung findet dieses Prinzip im Bereich der Wärmespeicher.

Weiterhin können Wärmeübertrager nach der unterschiedlichen geometrischen Führung der Ströme klassifiziert werden.

Bei dem Gleichstrom-Prinzip fließen die beiden Medien, welche durch ein wärmeleitendes Medium, beispielsweise eine Platte oder Rohrwand, getrennt sind, in die gleiche Richtung. Im Falle, es liegt eine unendlich lange Wärmeübertragungsfläche vor, erfolgt ein vollständiger Ausgleich der Temperaturen. Dem entgegen steht das Gegenstrom-Prinzip. Hierbei fließen die Medien, ebenfalls getrennt voneinander, in gegensätzliche Richtung. Dies bewirkt eine bessere Wärmeübertragung. Auch hier kann ein völliger Ausgleich der Temperaturen hergestellt werden. Weitere Prinzipien werden in [32] genannt.

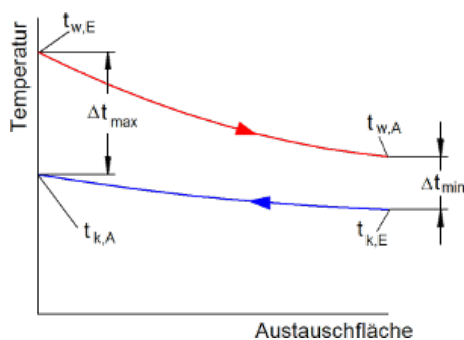


Abb. 3.1: Prinzipielles Temperaturprofil einer gegenstromgeführten Wärmeübertragung [33]

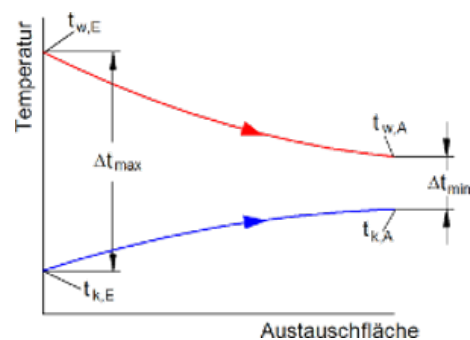


Abb. 3.2: Prinzipielles Temperaturprofil einer gleichstromgeführten Wärmeübertragung [33]

mit:

$t_{w,E}$

Eintrittstemperatur warmes Fluid

$t_{w,A}$

Austrittstemperatur warmes Fluid

$t_{k,E}$

Eintrittstemperatur kaltes Fluid

$t_{k,A}$	Austrittstemperatur kaltes Fluid
Δt_{\min}	Kleinster Temperaturunterschied
Δt_{\max}	Größter Temperaturunterschied

Wärmeübertrager sind thermodynamische Apparate, welche im Sinne des zweiten thermodynamischen Hauptsatzes, die Wärme zwischen zwei Stoffströmen übertragen. Basierend auf dem Wirkprinzip (zwei Wärmeübergänge und eine Wärmeleitung) der Wärmeübertrager können sie eingesetzt werden, um Zustandsänderungen und/ oder Temperaturänderungen von Fluiden zu bewirken. Dabei geht die Wärme vom fluiden Medium auf die Trennwand über und wird von dort aus auf das zweite Medium übertragen. Die Temperaturen fallen dabei an den Wänden steil ab. Wobei hingegen in einiger Entfernung die Temperaturunterschiede nur noch unwesentlich sind. Da der Prozess der Wärmeübertragung ein sehr komplexer Prozess ist, werden in der Praxis viele Vereinfachungen in Bezug auf die Berechnung der Wärmeübertrager getroffen. Diese können nach Franke [34] und dem VDI Wärmeatlas [35] wie folgt definiert werden:

- 1) Wärmeleitung und Vermischung sind in Flussrichtung zu vernachlässigen.
- 2) Der stationäre Betrieb des Wärmeübertragers ist anzunehmen.
- 3) Es findet keine Wärmeübertragung mit der Umgebung statt.
- 4) Kinetische und potentielle Energie des Fluides sind zu vernachlässigen.
- 5) Bei einer Phasenänderung bleibt entweder die Temperatur konstant oder ein linearer Zusammenhang zwischen Enthalpie und Temperatur kann definiert werden.

In den nun folgenden Abschnitten sollen Grundlagen für die Berechnung von Wärmeübertragern erläutert werden.

Da in der Thermodynamik keine Aussagen über die Wärme Q , welche über einen Zeitraum t in Abhängigkeit des Temperaturunterschiedes bzw. des Temperaturgradienten gemacht wird, soll an dieser Stelle der Begriff des Wärmestromes \dot{Q} eingeführt werden.

$$\dot{Q} = \frac{dQ}{dt} \quad (3.1)$$

Weiterhin wird die Wärmestromdichte \dot{q} als Ausdruck, welcher Wärmestrom pro Fläche übertragen wird, eingeführt.

$$\dot{q} = \frac{d\dot{Q}}{dA} \quad (3.2)$$

Aufgrund der Vereinfachungen (spez. siehe Punkt 4) und der Tatsache, dass ein lokaler Temperaturgradient $\partial T/\partial x$ entlang der Ortskoordinate x vorliegt, hängt die Wärmestromdichte ausschließlich von der Wärmeleitfähigkeit λ ab [35].

$$\dot{q} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (3.3)$$

Bzw. in vektorieller Form:

$$\vec{\dot{q}} = -\lambda \text{ grad } T \quad (3.4)$$

Diese Beziehung wird auch als das *Fouriersches Gesetz* bezeichnet und stellt die Grundlage aller Berechnungen für Wärmeleitungsvorgänge dar. Das negative Vorzeichen gibt hierbei an, dass die Temperatur von dem höheren Temperaturniveau zum niederen transportiert wird (gemäß dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik).

Stationäre und instationäre Wärmeleitung durch eine ebene Wand

Bei der stationären Wärmeleitung, wird angenommen, dass $\dot{q} = \dot{Q}/A = \text{konst.}$ senkrecht der Wandoberfläche ist. Von stationärer Wärmeleitung wird gesprochen, wenn die Temperaturen Orts- jedoch nicht Zeitabhängig sind. Weiterhin wird die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Temperatur vernachlässigt. Hierfür wird ein konstanter mittlerer Wärmeleitwert eingesetzt. Integriert man nun entlang der x -Koordinate, so ergibt sich aus Gl. (3.3) folgender Ausdruck:

$$\dot{q} = \lambda \cdot \frac{T_1 - T_2}{s} \quad (3.5)$$

Somit ergibt sich der Wärmestrom durch eine solche Wand aus:

$$\dot{Q} = \lambda \cdot A \cdot \frac{T_1 - T_2}{s} \quad (3.6)$$

Da in der Praxis häufig Konvektion und Wärmeleitung gemeinsam auftreten, wurde Wärmedurchgangskoeffizient k (auch Wärmedurchgangszahl) eingeführt. Mit diesem Koeffizienten kann der Wärmestrom von Fluid 1 zum Fluid 2 direkt bestimmt werden.

$$\dot{Q} = k \cdot A \cdot \Delta T_m \quad (3.7)$$

$$\Delta T_m = \frac{\Delta T_{gr} - \Delta T_{kl}}{\ln\left(\frac{\Delta T_{gr}}{\Delta T_{kl}}\right)} \quad \text{für } \Delta T_{gr} > \Delta T_{kl} \quad (3.8)$$

Wie in Formel (3.8) zu sehen ist, kann der Wärmestrom nicht als linear bezogen auf die mittlere logarithmische Temperaturdifferenz angesehen werden. Dies spiegelt sich vor allem bei der Auslegung (Design) von Wärmeübertragern wieder. So bedingt eine Vergrößerung der Fläche, an der Wärme übertragen werden soll, keine direkt proportionale Erhöhung des Wärmestroms.

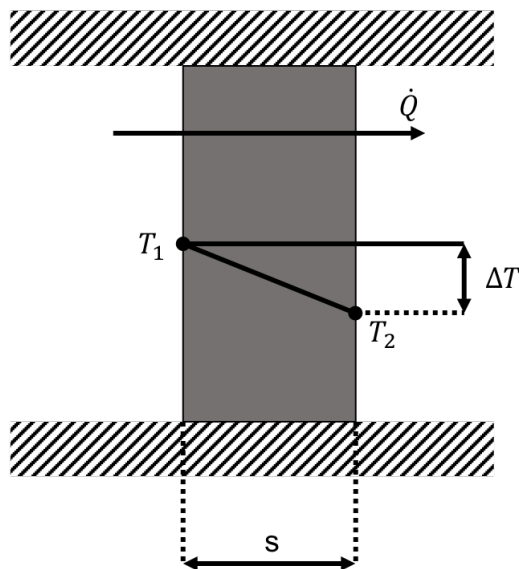


Abb. 3.3: Prinzipieller stationärer Temperaturverlauf in einer ebenen Wand nach [30], [34]



Abb. 3.4: Prinzipieller instationärer Temperaturverlauf in einer ebenen Wand nach [30], [35]

3.2 Bauarten verschiedener Wärmeübertrager

Im Allgemeinen können Wärmeübertrager unter anderem in folgende Bauarten bzw. -formen eingeteilt werden:

- Rohrbündel-Wärmeübertrager
- Platten-Wärmeübertrager
- Spiral-Wärmeübertrager
- Rotations-Wärmeübertrager
- Schlangen-Wärmeübertrager

Eine Klassifizierung der einzelnen Wärmeübertragung ist in [37] zu sehen. Der VDI-Wärmeatlas zeigt eine Auflistung verschiedener Wärmeübertrager mit den dazugehörigen, überschlägigen k -Werten auf. In Tab. 8.1 sind exemplarisch die überschlägigen k -Werte für den Rohrbündel-, Doppelrohr- und Platten-Wärmeübertrager mit ausgewählten Übertragungsbedingungen zu sehen. Als Bauart der Wahl, wird jedoch der Plattenwärmeübertrager, genauer Aluminium-Plattenwärmeübertrager genutzt. Die Literatur bezüglich kryogener LZA besagt immer wieder, dass diese Bauform präferiert wird [38]–[40].

3.2.1 Aufbau und Wirkungsweise eines Platten-Wärmeübertrager

Aufgrund ihrer kompakten Bauweise und der hohen Leistungsdichte, sind Platten-Wärmeübertrager in industriellen Anwendungen weit verbreitet. Diese Wärmeübertragerbauart besteht aus zusammengesetzten Platten mit Zwischenräumen, in denen abwechselnd abzukühlendes und aufzuwärmendes Fluid entlangströmt.

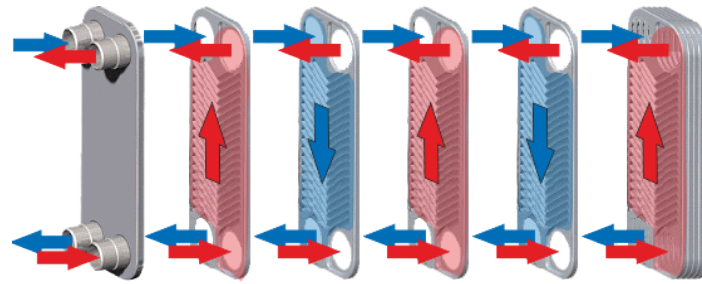


Abb. 3.5: Prinzipieller Fluidfluss innerhalb eines Platten-Wärmeübertragers [41]

Verglichen mit Rohrbündel-Wärmeübertragern besitzen Platten-Wärmeübertrager nach Kananeh und Peschel [42] unter anderem folgende Vorteile:

- Größere Wärmeübertragungskoeffizienten
- Kleinere benötigte Wärmeübertragungsfläche
- Geringe Verschmutzung durch hohe Fluidturbulenzen
- Deutlich geringerer Platzbedarf für Installation und Wartung

Platten-Wärmeübertrager sind in der Lage, sowohl eine Gleichstrom- als auch Gegenstromführung zu realisieren. Dies kann erreicht werden, indem gezielte Durchgänge innerhalb des Wärmeübertragers versperrt werden. Häufig werden die Platten in einem Winkel-Wellen-Muster gefertigt. Dies erhöht zum einen die Wärmeübergangsfläche und steigert zum anderen die Turbulenzen, mit denen das Fluid sich durch den Wärmeübertrager bewegt [43].



Abb. 3.6: Platte eines Platten-Wärmeübertragers im gebräuchlichsten Oberflächenmuster, dem Chevron-Design [44]

Die Erhöhung der Turbulenzen hat weiterhin den Vorteil, dass Wärme schneller übertragen werden kann und dass das Fouling vermindert wird.

Als Fouling bezeichnet man das Verschmutzen der Wärmeübertragungsfläche durch Ablagerungen. Diese Ablagerungen bilden dann eine Isolierschicht auf der Wärmeübertragungsfläche. Dadurch sinkt zum einen der Wärmeübergang zwischen den Fluiden und zum anderen wird die Strömungs- bzw. Spaltgeschwindigkeit erhöht [45]. Um diesem Effekt vorzubeugen, werden Wärmeübertrager meist zu 70 bis 80% überdimensioniert, wovon 30 bis 50% dem Fouling zugeschrieben werden [46].

3.3 Bilanzierung in ASPEN PLUS

ASPEN PLUS bietet die Möglichkeit, die Bilanzen für jedes Bauteil innerhalb der LZA einzusehen. Dabei werden der Molstrom, der Massenstrom und die Enthalpie des durch das Bauteil fließende Fluides dargestellt. Weiterhin wird die relative Differenz der ein- und austretenden Strömen sowie der Enthalpie dargestellt. Somit ist es nicht von Nöten, diese Werte manuell zu berechnen.

Tab. 3.1: Beispiel für die Zusammenfassung der Bilanzierung eines MHeatX-Simulationsblockes in ASPEN PLUS.

Total	Units	In	Out	Rel. diff
Mole-flow	kmol/hr	24833,7177	24833,7177	0
Mass-flow	kg/hr	718884,018	718884,018	-1,62E-16
Enthalpy	Watt	-25097065	-25095964	-4,39E-05

Es besteht ebenfalls die Möglichkeit, eine so genannte Zonenanalyse innerhalb eines Wärmeübertragers durchführen zu lassen. Dabei wird der eigentliche Wärmeübertrager in eine Anzahl kleiner, durch Wärmeströme gekoppelte, Segmente unterteilt. Für jedes Segment wird durch ASPEN PLUS eine Energiebilanz erstellt, um die entsprechenden Stromeintritts- und austrittstemperaturen für das Segment, unter Berücksichtigung einer eventuellen Phasenänderung zu ermitteln.

Tab. 3.2 zeigt Auszugsweise die Auswertung der Zonen-Analyse in ASPEN PLUS. Es ist zu erkennen, dass der Feed-Strom gegen den Produkt-Strom gekühlt wird. Ebenso ist zu sehen, dass die thermische Leistung entlang der Segmente steigt, was auf eine Wärmeübertragung hinweist (Spalte „cumulative Duty“; in dieser Spalte wird die aufsummierte thermische Leistung dargestellt).

Tab. 3.2: Auswertung der Zonen-Analyse in ASPEN PLUS mit der Unterteilung in 15 Segmente (Zonen).

Point	Cumulative Duty [MW]	T-Hot [°C]	T-Cold [°C]	Delta T [°C]	LMTD [°C]
1	0	30,7713043	25,000072	5,7712323	
2	2,54828406	5,70449784	-0,3598764	6,06437419	5,91659297
3	5,09656812	-19,313586	-25,725404	6,41181853	6,23648339
...
15	25,4828406	-172,71632	-194,20222	21,4858985	20,5235673

4 Simulation in ASPEN PLUS

In diesem Kapitel wird die Simulation einer Luftzerlegungsanlage in ASPEN PLUS V8.8 gezeigt. Es wird beschrieben, wie das idealisierte Modell nach Kooijman dahingehend abgewandelt wird, dass anstelle mehrerer einzelner Wärmeübertrager und ungekoppelten Wärmeströmen, ein Hauptwärmeübertrager mit gekoppelten Wärmeströmen vorzufinden ist. Anschließend werden dann Parametervariationen verschiedener Prozessparameter vorgenommen um Reaktionen des Wärmeübertragers respektive der Luftzerlegungsanlage sehen zu können. Abschließend sollen die Ergebnisse der Variationen dazu dienen, im 5. Kapitel Ableitungen bezüglich der Flexibilisierungspotentiale treffen zu können.

4.1 Herleitung der modellierten Anlage

Für die Simulation in ASPEN PLUS wurde das Modell der Luftzerlegungsanlage nach Kooijman genutzt (siehe Kap. 1.2.1 und Abb. 1.2). Obwohl die Literatur auch andere Modellansätze bietet, wäre die Realisierung dieser im Kontext dieser Abschlussarbeit zu komplex, um sie umzusetzen. So müssten beispielsweise die HPC und LPC dahingehend neu modelliert werden, dass sie zu einem zwei-Säulen-Apparat zusammengefasst werden können.

Somit wurden die Kolonnen (HPC, LPC und ARC) nebst der benötigten Peripherie (wie zum Beispiel den Expansionsventilen und dem Separator) als gegeben angesehen und in das ASPEN-Modell implementiert. Die Parameter dieser Anlagenteile wurden aus dem Modell nach Kooijman übernommen. Dies hat den Vorteil, dass keine Neuberechnungen der Anlagenteile vorgenommen werden musste und die Vergleichbarkeit der Ergebnisse des ASPEN-Modells mit dem Modell nach Kooijman vereinfacht wurde.

Da der Fokus dieser Arbeit auf der Bilanzierung des Hauptwärmeübertragers und nicht auf dessen Auslegung liegt, wurden parasitäre Effekte, welche in der Realität auftreten könnten, ebenfalls nicht betrachtet. Ein Beispiel für solche Effekte wäre beispielsweise das so genannte Fouling, welcher in Kapitel 3.2.1 besprochen wurde. Der in ASPEN PLUS verwendete MHeatX-Block lässt sich nicht in eine der im Kapitel 3.2 erwähnten

Bauarten einteilen. Welche Berechnungsalgorithmen diesem Simulationsblock zugrunde liegen, kann ebenfalls nicht gesagt werden. Da im Kontext dieser Arbeit kein Design eines Wärmeübertragers durchgeführt werden soll, wird der Simulationsblock als gegeben hingenommen.

In realen LZA werden gebündelte Plattenwärmeübertrager eingesetzt. Vor- und Nachteile verschiedener Wärmeübertrager wurden im Kapitel 3.2 erläutert.

4.2 Umsetzung eines Hauptwärmeübertragers in ASPEN PLUS

Um von der vollständigen Idealisierung des LZA-Modells nach Kooijman hin zu einem realitätsnäheren LZA-Modell zu gehen, wurden die Wärmeübertrager der ungekoppelten Wärmeströme entfernt. Der Rest des Modells (bspw. die Drücke in der HPC und LPC) blieb weitestgehend unverändert. ASPEN PLUS bietet die Möglichkeit, einen so genannten MHeatX-Block einzusetzen. Dieser Block ist in der Lage, mehrere heiße und kalte Ströme zu verarbeiten ohne Berücksichtigung einer Wärmeübertrager-Geometrie. Eine Abbildung des Fließbildes ist im Anhang auf Seite 74 zu sehen.

An diesen MHeatX-Block, im folgenden MHEX (engl.: Main Heat Exchanger, Hauptwärmeübertrager) genannt, wurden dann die Feed-Ströme mit den HOT-Feed-Inlets und die Produktströme mit den COLD-Feed-Inlets verbunden. Die Parametrierung des MHEX erfolgte, indem diesem vorgegeben wurde, welche beispielsweise Austrittstemperatur die abzukühlenden Fluide haben sollen. Weiterhin mussten, wenn die Temperatur als Sollwert vorgegeben wird, noch der Austrittsdruck und die zu erwartende Fluid-Phase parametrieren werden. Die Sollwerte, wie eben Temperatur und Druck, wurden aus dem Originalmodell nach Kooijman übernommen. Da im HPC-Feed eine partielle Verflüssigung zu erwarten war und alle Produktströme definitiv einen Phasenwechsel (Übergang des Fluides vom gasförmigen in den flüssigen Aggregatzustand und umgekehrt) vollziehen, wurden hier als zu erwartende Phasen eine Gas- oder Flüssigphase ausgewählt. Eine Übersicht der Spezifikationen bzw. Parameter kann Tab. 8.2 entnommen werden. Punkte wie die maximale Anzahl der Iterationen und die Berechnungstoleranz wurden durch ASPEN PLUS vorgegeben

und nicht verändert. Ein Vergleich der thermischen Leistung pro Strom des MHEX mit den äquivalenten thermischen Leistungen entsprechender Ströme des Kooijman-Modells zeigt, dass die Werte bis auf minimale Differenzen übereinstimmen. Die Differenzen könnten auf Unterschiede in den Berechnungsalgorithmen beider Simulationsprogramme zurückzuführen sein.

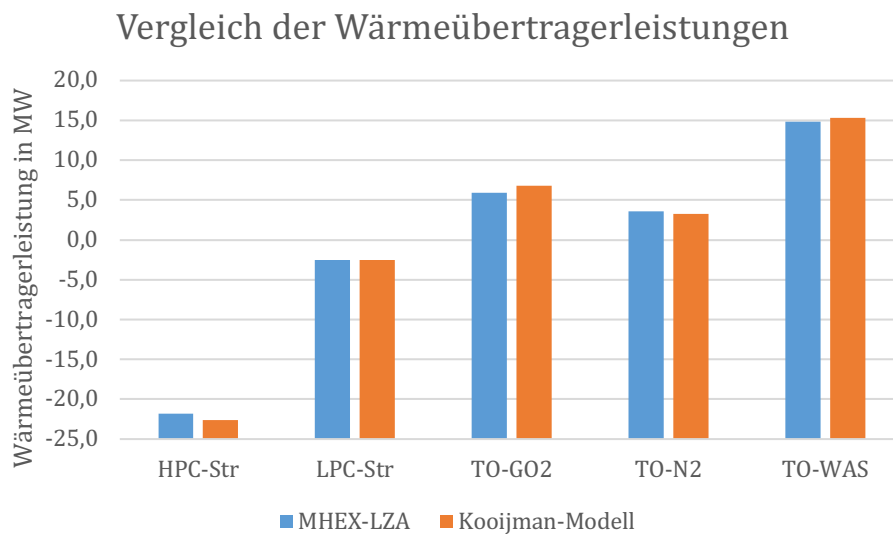


Abb. 4.1: Vergleich der Wärmeübertragerleistungen der MHEX-LZA und des originalen Kooijman-Modells

Bei der Simulation der MHEX-LZA fiel auf, dass die produzierte Menge von Sauerstoff und dessen Reinheit deutlich von den Werten des Original-Modells abwichen. Während das Modell nach Kooijman in der Simulationssoftware ChemSep auf rund 60 t/h produzierten Sauerstoff kommt, produziert sowohl das Modell, welches als Ausgangsbasis für die Modellierung des MHEX genutzt wurde, als auch das MHEX-LZA-Modell, mit rund 54 t/h, nur ca. 90% dieses Massenstromes. Die Parameter aller Prozesskomponenten wurden, wie bereits erwähnt, direkt aus dem Originalmodell entnommen. Weiterhin ist anzumerken, dass die Reinheit des Sauerstoffs ebenfalls differiert. So ist der Reinheitsgrad im Kooijman-Modell bei 98,1% und im MHEX-LZA bei 99,5%.

Bei der Untersuchung der Parameter aller Fluidströme und Bauteilen ist aufgefallen, dass der Fluidmassenstrom von Strom 12 (S12, siehe Kap. 8.1) deutlich unter dem des

im Kooijman-Modell zu findendem lag. Dieser wurde gemäß den Werten aus dem Kooijman-Modell von 10,8 t/h auf 82,9 t/h angehoben.

4.3 Parametervariationen in den Hauptwärmeübertrager-Modellvariationen

Um Parametervariationen durchführen zu können, müssen in ASPEN PLUS so genannte „Sensitivity Lists“ angelegt werden. Innerhalb solcher Listen können dann Variablen editiert werden, welche variiert bzw. manipuliert werden sollen. Wichtig ist es, dass nur Variablen manipuliert werden können, die auch in den Anlagenteilen parametrisiert sind. So kann beispielsweise keine Leistungsaufnahme eines Kompressors variiert werden, wenn er ein Druckverhältnis als Parameter bekommen hat.

Weiterhin wurde der MHEX in zweierlei Hinsicht parametrisiert. Zum einen so, dass die Feed-Parameter „FP“ (HPC-Feed, LPC-Feed) und zum anderen die Produkt-Parameter „PP“ (G-O₂ (gasförmiger Sauerstoff), G-N₂ (gasförmiger Stickstoff), WAS-OUT (Abfallstrom)) vorgegeben wurden. Diese Unterscheidung soll bewirken, dass Sensibilitäten bei der Variation der Parameter besser dargestellt werden können, da je nach Vorgabenvariante verschiedene Ausgangsparameter relevant werden. So kann beispielsweise bei der PP-Variante der O₂-Massenstrom in Abhängigkeit des Druckes der Feed-Ströme dargestellt werden. Dies kann in der FP-Variante nicht, da dort der Massenstrom des Sauerstoff-Produktstromes fest parametrisiert ist.

Als Ausgabewerte werden stets die Reinheit (Mass-Frac oder Massenanteile), der Massenstrom und die Temperatur des gasförmigen Sauerstoff-Produktstromes betrachtet. Wie bereits in Kap. 4.2 angesprochen, kann das MHEX-Modell in der FP-Variante nur ungefähr 90% des im Kooijman-Modell realisierten Sauerstoffmassenstrom produzieren. Bei der Erprobung der PP-Variante ist aufgefallen, dass der Massenstrom bei gegebenen Parametern bei ca. 110% des Original-Modells liegt. Gravierende Unterschiede wurden dabei bei den Kopf-Strömen der HPC festgestellt. Hierbei wurden die Parameter der MHEX-Modellvariationen nochmals gegen die des Original-Modells geprüft und entsprechend geändert. Während sich in der FP-Variante des MHEX-Modells eine gute Näherung des Massenstromes und der Reinheit an das Kooijman-Modell einstellte, driftete die PP-

Variante immer weiter ab. Um jedoch beide Varianten vergleichbar zu machen, wurde die Verdampferleistung am LPC-Verdampfer erhöht (von 10,1 MW auf 10,8 MW), um weitestgehend identische Ausgangswerte bezüglich der Parametervariationen zu realisieren. Final besitzen beide MHEX-Modell-Varianten eine Abweichung vom Kooijman-Modell von rund +5% bezogen auf den Massenstrom des produzierten Sauerstoffs. Somit werden die MHEX-Modellvariationen, in denen die aus dem Original-Modell auftretenden ungekoppelten Wärmeströme¹ zu gekoppelten Wärmeströmen zusammengefasst wurden, als fertiggestellt angesehen.

4.3.1 Festlegungen für die Parametervariationen

Wie bereits angesprochen, sind die Verschiedenen MHEX-Modell-Varianten sensibel gegenüber unterschiedlichen Ausgangsparametern. So kann beispielsweise die Produkttemperatur des O₂-Stromes ausschließlich innerhalb der FP-Variante variiert werden, da sie in der PP-Variante fest vorgegeben ist. Folgende Tabelle zeigt die Sensibilitäten der einzelnen MHEX-Varianten.

Tab. 4.1: Sensibilitäten der einzelnen MHEX-Varianten auf relevante Ausgangsparameter

MHEX-Variante	Sensibel gegenüber
FP	Produkttemperatur
PP	Produktreinheit, Produktmassenstrom

Weiterhin sollen als Produktparameter und Gesamtleistungsaufnahme der Verdichterstufe folgende Erwartungswerte eingehalten werden:

Tab. 4.2: Erwartungswerte der Produktparameter des Sauerstoff-Produktstromes und der Gesamtleistungsaufnahme der Verdichterstufe

Parameter	Formelzeichen	Min. Wert	Max. Wert	Normwert	Einheit
Temperatur	T	0	35	25 (PP) 14,8 (FP)	°C
Produkt- Massenstrom	\dot{m}	57	65	~63 ⁸	$\frac{t}{h}$
Reinheit	-	0,98	1	0,98	-
Gesamt- Leistungsaufnahme				24,5	MW

4.3.2 Vorbereitungen für die Parametervariationen

Verdichterstufe

Für die Parametervariation, welche in Kapitel 4.6 und Kapitel 4.7 durchgeführt werden sollen, wurden die Ausgangsspezifikation der Verdichter C1 – C3 geändert. Nach dem Kooijman-Modell besitzen die drei Verdichter jeweils eine Leistungsaufnahme von rund 8 MW. Nach den Änderungen wurde keine Leistung mehr, sondern ein Druckverhältnis Π zwischen Saug (p_1) - und Druckseite (p_2) von 1,95 vorgegeben.

$$\Pi = \frac{p_2}{p_1} \quad (4.1)$$

Dieser Wert ist nicht empirisch innerhalb dieser Arbeit entwickelt wurden, sondern wurde aus dem LZA-Modell nach Kooijman entnommen. Dort wurde bei den Beschreibungen der Stoff- und Anlagenteilparameter das Druckverhältnis:

$$\frac{P_{out}}{P_{in}} = 1,95 \quad (4.2)$$

dargestellt. Mit dieser Ausgangsspezifikation soll die Leistungsaufnahme der Verdichter in Abhängigkeit des Druckverhältnisses dargestellt werden.

⁸ Je nach MHEX-Variante unterscheidet sich der Produkt-Massenstrom zwischen 63.169 kg/h bei der FP-Variante und 63.534 kg/h bei der PP-Variante

Expander in der PP-Variante

Da in der PP-Variante die Unterkühlung der Feed-Ströme gegen die Produktströme geschieht, können die Temperaturen der zur HPC und LPC gehenden Ströme nicht mehr parametrisiert werden. Dies hat zur Folge, dass der LPC-Strom kühler ist, als das in dem Original-Modell nach Kooijman vorgegeben wird. Während der LPC-Strom im Original-Modell mit einer Temperatur von $-133,2^{\circ}\text{C}$ in einen Expander geleitet wird, welcher den Fluidstrom entspannt und ihn mit Hilfe des Joule-Thomson-Effektes auf $-174,3^{\circ}\text{C}$ unterkühlt, verlässt er im MHEX-LZA-Modell den Hauptwärmeübertrager bereits mit $-172,8^{\circ}\text{C}$. Der Betrieb mit dem Expander war unter diesen Bedingungen nur noch mit Warnungen verbunden. Es wurde darauf hingewiesen, dass der Fluidstrom die Taupunkttemperatur unterschritten hat. Somit wurde anstatt des Expanders ein Drosselventil eingesetzt, welches lediglich den Druck des Fluidstromes mindern soll.

Parametrierung der Schrittweiten innerhalb der Sensitivity Lists

Der Standardwert, um welchen eine zu manipulierende Variable inkrementiert wird, ist bei ASPEN PLUS zehn. Da jedoch bei komplexeren Variationen (sechs manipulierte Variablen) die Anzahl der Simulationswerte schnell steigt, was in vielen Fällen zu einem Absturz von ASPEN und dem damit verbundenen Löschen der Simulationswerte führt, wurde die Schrittweite abgesenkt. Sie wurde von zehn auf vier Schritte vermindert. Dies hat zwar zur Folge, dass die Auflösung der Simulationsergebnisse sinkt, jedoch die Variationen erfolgreich durchgeführt bzw. beendet werden.

Grenzen und Arbeitsbereich des LZA-Modells

Um zu prüfen in welchem Parameterbereich das Modell plausible und belastbare Werte produziert, wurde eine Sensitivity List erzeugt, in welcher das LZA-Modell über einen großen Leistungsbereich geprüft wurde. Hierbei ist das Druckverhältnis der Verdichterstufe in einem Bereich $1 < \Pi \leq 3$ und der isentrope Wirkungsgrad der einzelnen Verdichter $0,7 < \eta_v \leq 0,9$ variiert wurden. Dabei lag der Fokus der resultierenden Werte bei der Produkttemperatur, dem Produktmassenstrom und der Produktreinheit. Weiterhin wurde zu jeder Parameterkonstellation die äquivalente Leistungsaufnahme der Verdichter überprüft.

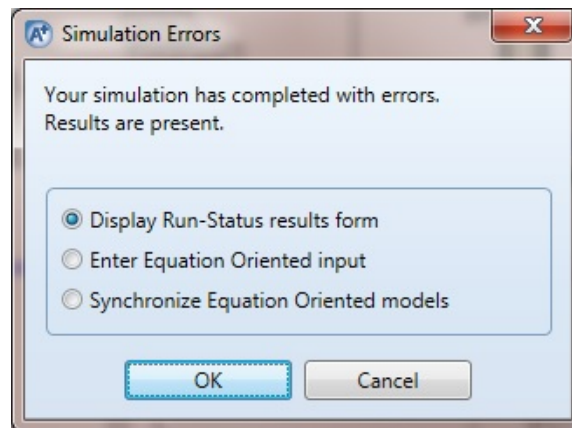


Abb. 4.2: Prompt einer fehlerhaft beendeten Simulation in ASPEN PLUS

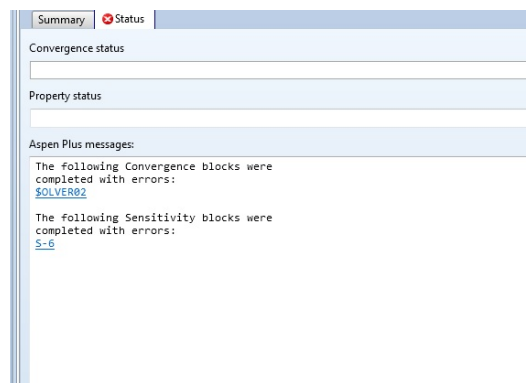


Abb. 4.3: Fehlertext einer fehlerhaft beendeten Simulation in ASPEN PLUS

Die Parametervariation wurde mit Fehlern und Warnungen beendet. Welche Fehler und Warnungen dabei auftraten, wird in folgender Tabelle gezeigt. Exemplarisch wurden Parameterkonstellationen geprüft, welche eine Fehler- oder Warnmeldung hervorriefen. Es sollte überprüft werden, welche Fehler- oder Warnmeldungen die LZA produziert. Hierbei muss gesagt werden, dass bei Fehlermeldungen ein Weiterbetrieb der LZA nicht möglich ist. Warnungen hingegen haben hierbei einen informativen Charakter. Eine Weiterführung des Produktionsbetriebes ist somit möglich. Weiterhin ist anzumerken, dass lediglich die PP-Variante des LZA-Modells Fehler- bzw. Warnmeldungen erzeugte.

Erläuterung der aufgetretenen Fehler- und Warnmeldungen:

Tab. 4.3: Erläuterungen der am häufigsten aufgetretenen Fehler- und Warnmeldungen

Fehler-/ Warnmeldung	Erläuterung
HPC Feed pressure lower than Stage Pressure	Der Druck des Zuflusstromes in die HPC ist kleiner als der Druck innerhalb der HPC (5,6 bar)
MHEX Crossover Found at the beginning of the Hot Side	Die Temperatur des in den Hauptwärmeübertrager einfließenden Mediums ist kälter, als das austretende. Diese Warnmeldung stellt eine Verletzung des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik dar. Grund für diese Warnung ist, dass das Fluid durch den letzten Wärmeübertrager in der Verdichterstufe zu stark abgekühlt wird.

Tab. 4.4: Auszug der exemplarisch geprüften Parameterkonstellationen und der entsprechenden Fehler- bzw. Warnmeldungen

C1	C2	C3	η_{c1}	η_{c2}	η_{c3}	Fehler- bzw. Warnmeldung
1,5	1,5	1,5	0,7	0,7	0,7	- HPC Feed pressure lower than Stage Pressure - MHEX Temp below Lower Bound
1,8	1,8	1,8	0,7	0,7	0,7	- HPC Feed Pressure lower than Stage Pressure
1,8	1,95	1,95	0,7	0,7	0,7	- HPC Feed Pressure lower than Stage Pressure
1,95	1,95	1,95	0,76667	0,9	0,9	- MHEX Crossover Found at the beginning of the Hot Side
1,95	1,95	1,95	0,9	0,8333	0,9	- MHEX Crossover Found at the beginning of the Hot Side

Die Fehler- bzw. Warnmeldung "MHEX below Lower Bound" kann nicht Erklärt werden, da keine obere und untere Grenze bezogen auf die Wärmeübertragung parametrisiert wurden.

Für Parameterkonstellationen größer dem Standard-Druckverhältnis von 1,95 brachten ebenfalls Fehler- und Warnmeldungen hervor. Diese waren jedoch identisch den in Tab. 4.4 aufgeführten. Zusätzlich wurde hier in einigen Parameterkonstellationen noch der Fehler erzeugt, welcher besagt, dass innerhalb der LPC Böden austrockneten, da der Gas- bzw. Fluidstrom gegen null ging. Eine weitere Produktion von fraktionierten Gasen ist bei diesem Fehler nicht möglich. Die folgenden Abbildungen zeigen die Arbeitsbereiche der verschiedenen LZA-Modell-Varianten mit separatem Fokus auf Produkttemperatur, Produktmassenstrom und der Reinheit des produzierten Sauerstoffs.

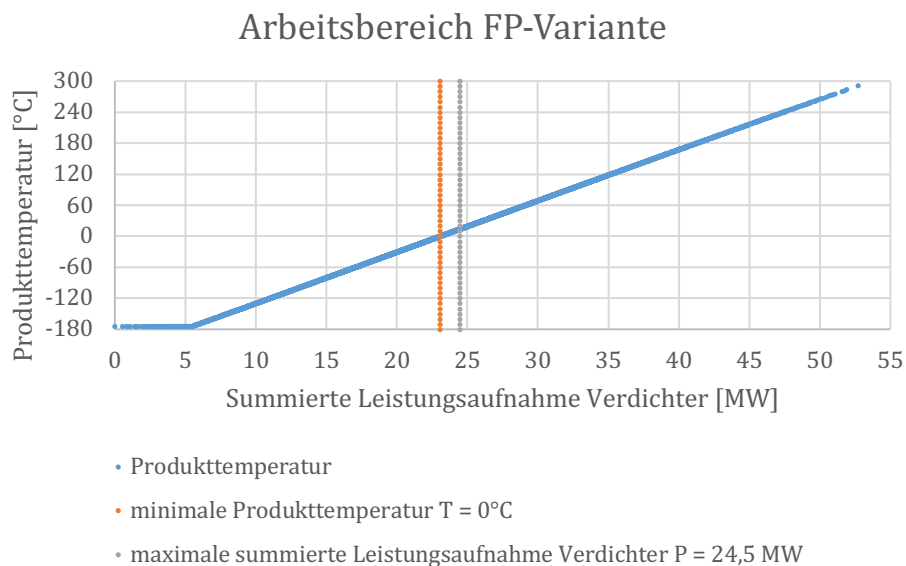


Abb. 4.4: Darstellung des Arbeitsbereiches in der FP-Variante des LZA-Modells

In Abb. 4.4 ist zu sehen, dass der Bereich in welchem die simulierten Werte innerhalb der Erwartungswerte liegen, sehr klein ist. Lediglich in einem Bereich von ca. 1,3 MW wird eine Produkttemperatur erreicht, welche innerhalb der Erwartungswerte liegt. Weiterhin ist zu sehen, dass der Graph monoton steigt und innerhalb der Abbildung einen maximalen Wert von 291,27 °C bei einer summierten Leistungsaufnahme von 52,7 MW hat. Im unteren Leistungsbereich ($P < 5,7 \text{ MW}$) zeigt das Modell der LZA keine bzw. nur eine geringe Reaktion.

Somit kann als untere des LZA-Modells in der FP-Variante eine Leistungsaufnahme von 5,7 MW festgelegt werden. Eine obere Grenze kann aufgrund des monoton steigenden

Graphs nicht festgelegt werden. Jedoch wird im Kontext dieser Abschlussarbeit sinniger Weise die obere Grenze der Leistungsaufnahme von 24,5 MW gesetzt.

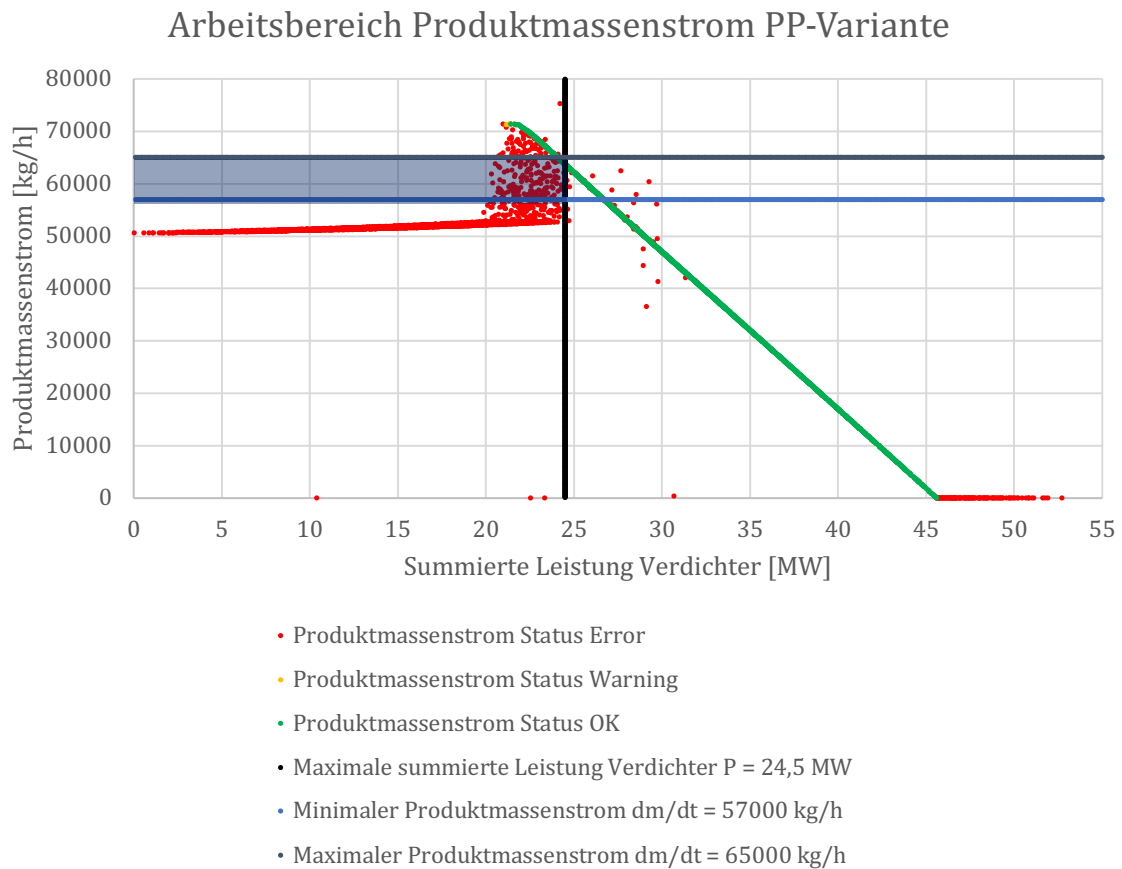


Abb. 4.5: Darstellung des Arbeitsbereiches in der PP-Variante des LZA-Modells bezogen auf den Produktmassenstrom

Die in Abb. 4.5 dargestellten Simulationsergebnisse sind nach ihrem Simulationsstatus farblich differenziert worden. So werden Werte, welche fehlerhaft waren Rot, Werte, welche Warnungen darstellten Gelb und fehlerfreie Werte, Grün dargestellt. Es ist deutlich zu sehen, dass im Bereich bis ca. 20 MW summierter Leistungsaufnahme der Verdichterstufe, nur eine geringe Reaktion der LZA auftritt. Der Grund hierfür ist meist, dass der Druck des Fluidstromes innerhalb der LZA zu gering ist (siehe Tab. 4.3, erste Fehler-/ Warnmeldung). Weiterhin ist deutlich zu erkennen, dass eine Erhöhung der summierten Leistung keine direkt proportionale Zunahme des Produktmassenstromes zur Folge hat. Ebenso wie in Abb. 4.4 sind die Grenzen der Erwartungswerte wieder in die Abbildung eingezeichnet. Die Anzahl der in diesem Bereich liegenden Simulationsergebnisse ist, verglichen mit den fehlerhaften Simulationsergebnissen, sehr gering.

Im Arbeitsbereich, gemäß den Erwartungswerten (dunkelblau hinterlegt), liegen nur sehr wenige Simulationswerte.

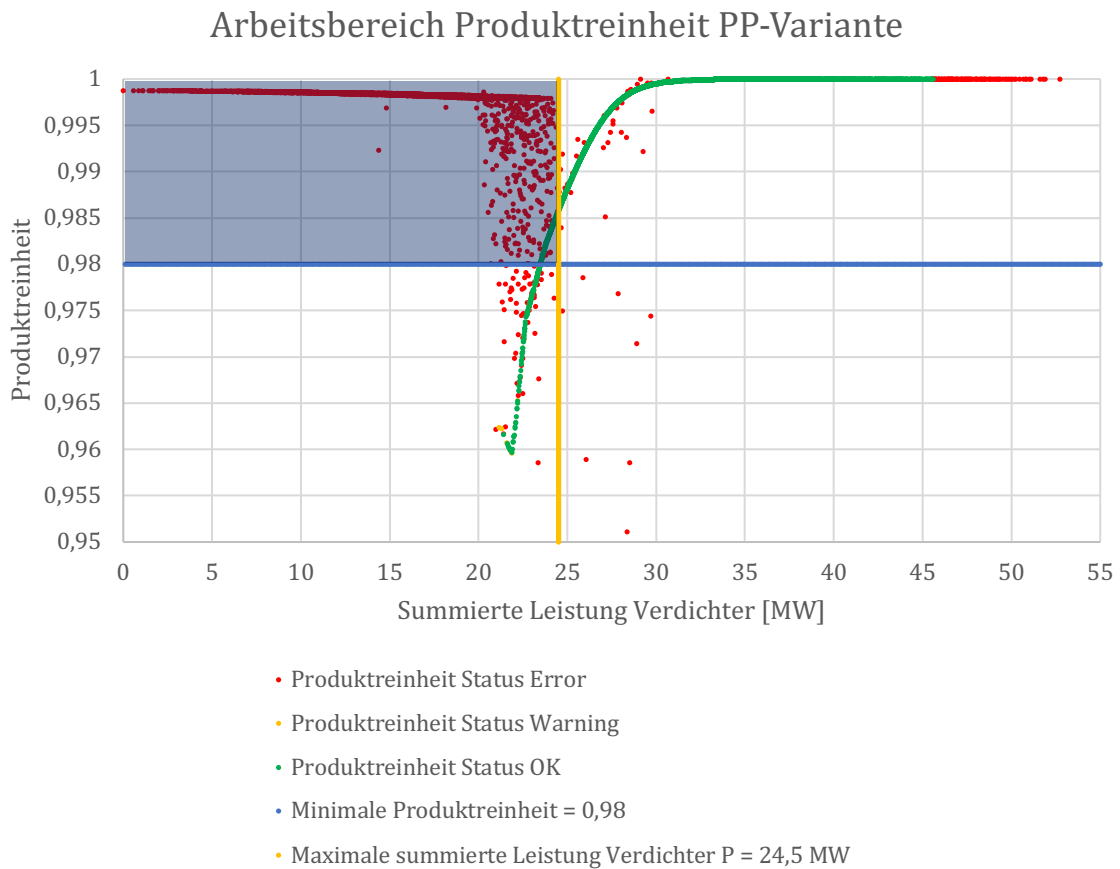


Abb. 4.6: Darstellung des Arbeitsbereiches in der PP-Variante des LZA-Modells bezogen auf die Produktreinheit

Ebenso wie in Abb. 4.6 sind hier die Simulationswerte farblich differenziert wurden. Auch hier liegen viele fehlerhafte Simulationswerte innerhalb des Bereiches der Erwartungswerte (dunkelblau hinterlegt). Der Arbeitsbereich kann, bezogen auf die Produktreinheit, auf einen Bereich zwischen 23,4 und 24,5 MW festgelegt werden.

Deutlich zu erkennen ist, dass der grüne Graph bis ca. 30 MW einen starken Anstieg hat, bis er sich letztendlich einer Produktreinheit von 1 annähert. Dies zeigt eine Zunahme der Reinheit mit steigender Leistungsaufnahme. Jedoch besteht ein Zusammenhang zwischen dem Produktmassenstrom und der Produktreinheit, welcher an späterer Stelle diskutiert werden soll.

4.4 Variation der elektrischen Leistungsaufnahmen der Verdichter C1 – C3

Für die erste Parametervariation wurden die Leistungsaufnahmen der Verdichter variiert. Hierfür wurden die Leistungen in einem Band von 6 MW_{el} bis 8,5 MW_{el} simuliert. Es sollte geprüft werden, wie die relevanten Produktparameter (siehe Tab. 4.2) auf eine Änderung reagieren und ob sie noch in den Grenzen der Erwartungswerte liegen.

4.4.1 MHEX-LZA in der FP-Variante

Die in dieser Variante durchgeführte Parametervariation, lieferte 1001 (1000 simulierte und ein Initialwert) Simulationen. Innerhalb der Variation kam es zu keinem Fehler und zu keiner Warnung. Diese Simulationen wurden anschließend nach den Erwartungswerten (siehe Tab. 4.2) gefiltert. Da das Produktgas eine Temperatur von > 0°C besitzen sollte, wurde der Datensatz auf 146 Wertepaare reduziert. Diese haben im Mittelwert eine Produkttemperatur von 6,34 °C. Damit also nur rund 42% des vorgegebenen Normwertes.

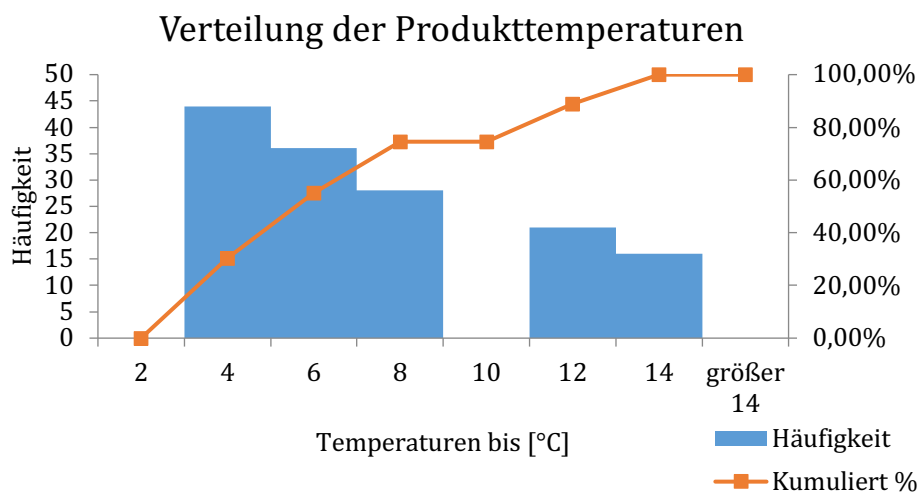


Abb. 4.7: Histogramm der Produkttemperaturen bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme

4.4.2 MHEX-LZA in der PP-Variante

Auch diese Variation lieferte 1001 Simulationsergebnisse. Im Gegensatz, zur im voranstehenden Kapitel durchgeführten Variation, verlief diese nicht ohne Fehler. Die Prozesssimulationssoftware ASPEN PLUS gibt dabei nicht an, worin die Fehler liegen. Es wird bei der tabellarischen Ansicht der Simulationsergebnisse lediglich der Status Error wiedergegeben. Somit lässt sich nicht sagen, ob es ein Fehler ist, welcher eine Berechnung nicht konvergieren lässt oder ob es sich um einen Fehler handelt, welcher einen Weiterbetrieb der Anlage verhindert.

964 der produzierten Simulationsergebnisse waren fehlerhaft. Nachdem verschiedene Wertepaare der Parametervariation als Vorgabewerte in die Parameterliste der Verdichter eingetragen wurden, stellte sich heraus, dass die Fehler oftmals darin lagen, dass der Druck des Fluides innerhalb der LZA zu gering war und somit eine Weiterführung des Anlagenbetriebes nicht möglich gewesen ist. Somit waren lediglich 37 Variationsergebnisse auswertbar.

Die Simulationsergebnisse wurden dann mit Hilfe des Tabellenkalkulationsprogrammes Microsoft Excel gemäß den Erwartungswerten gefiltert. Nach der Filterung dieser Ergebnisse, gestaltet sich die Verteilung der Variationsergebnisse wie in den folgenden Abbildungen Abb. 4.8 und Abb. 4.9 zu sehen.

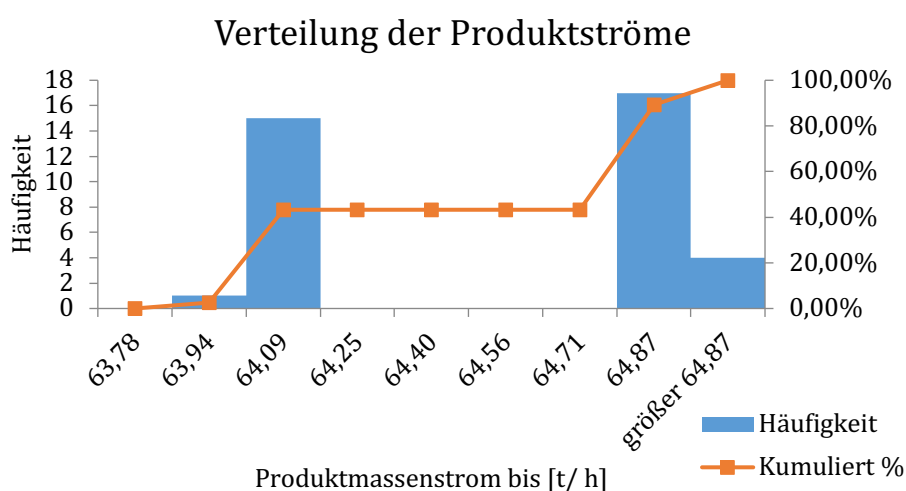


Abb. 4.8: Histogramm der Produktmassenströme bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme

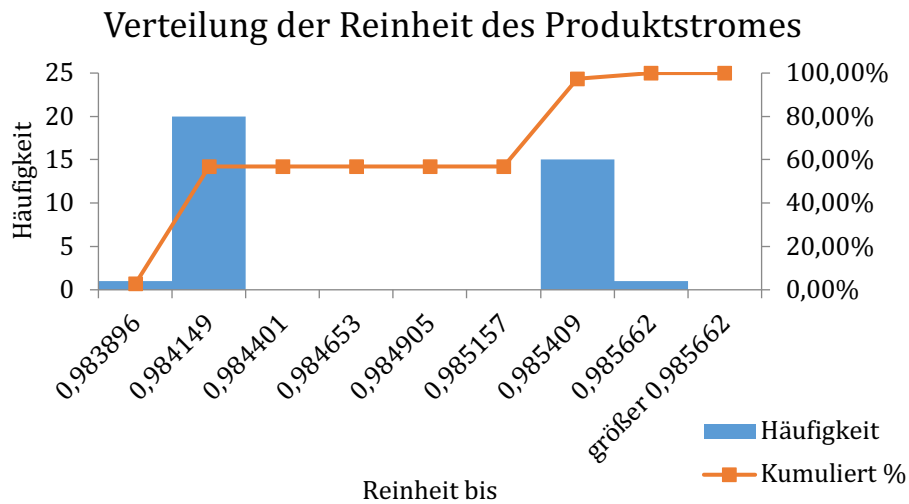


Abb. 4.9: Histogramm der Reinheit der Produktströme bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme

4.5 Variation der Leistungsaufnahmen der Verdichter C1 – C3 mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter

Basierend auf den Simulationsergebnissen aus Kapitel 4.4 wurde untersucht, wie stark der Einfluss des isentropen Wirkungsgrades, neben der Variation der Leistungsaufnahmen, auf die Vorgabeparameter ist. Weiterhin sollte geprüft werden, ob es möglich ist, Verdichter mit einer niedrigeren Leistungsaufnahme, jedoch einem größeren bzw. besseren isentropen Wirkungsgrad anstelle der gegebenen Verdichter zu nutzen.

Für die Verdichter der LZA lassen sich die Wirkungsgrade im herkömmlichen Sinne, also dem Verhältnis aus abgegebener und zugeführter Leistung, nicht bestimmen, da kein Energieverlust auftritt. Für die Beurteilung der Verdichter kann jedoch das Verhältnis aus der realen irreversiblen (bspw. elektrische Leistung welche in Wärme Leistung umgewandelt wird) und der idealen reversiblen Zustandsänderung genutzt werden. Dieser Vergleich beschreibt dann den isentropen Wirkungsgrad. Der isentrope Wirkungsgrad kann jedoch nur bei Komponenten bestimmt werden, an denen keine Wärmeübertragung, Stoffmischung oder chemische Reaktion geschieht [47]. Weiterhin ist der isentrope Wirkungsgrad eine idealisierte Größe. Die Entropie

wird bei der Änderung der Temperatur als konstant angenommen, was im Normalfall nicht der Fall ist.

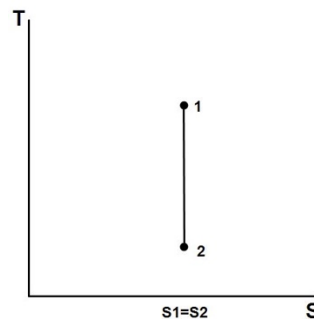


Abb. 4.10: Sinnbildliche Darstellung eines isentropen Prozesses [48]

$$\eta_v = \frac{\text{isentropie Verdichterarbeit}}{\text{eigentliche Verdichterarbeit}} = \frac{W_s}{W} \cong \frac{h_{2s} - h_1}{h_2 - h_1} \quad (4.3)$$

4.5.1 MHEX-LZA in der FP-Variante

Aus dieser Variation entstanden 4097 Simulationsergebnisse. Diese Simulation erfolgte ohne Fehler- oder Warnmeldungen. Da jedoch untersucht werden sollte, ob die modellierte LZA auch mit geänderten Parametern, in dem Falle die elektrische Leistungsaufnahme der Verdichter, arbeiten kann, wurden die Werte mit einem anderen Fokus gefiltert. Diesmal wurden neben Produkttemperatur auch die relative Leistungsaufnahme bezogen auf die Standard-Leistungsaufnahme (siehe letzten Punkt Tab.4.2.) betrachtet. Signifikant bei dieser Variation fiel auf, dass sich die Produkttemperaturen nicht wie in Kap. 4.4.1 über den gegebenen Bereich verteilen.

Auch hier wurden die Simulationsergebnisse mittels Excel entsprechend den Erwartungswerten gefiltert. Demnach reduzierte sich der Datensatz der Simulationsergebnisse auf 385 Werte, also weniger als 10%.

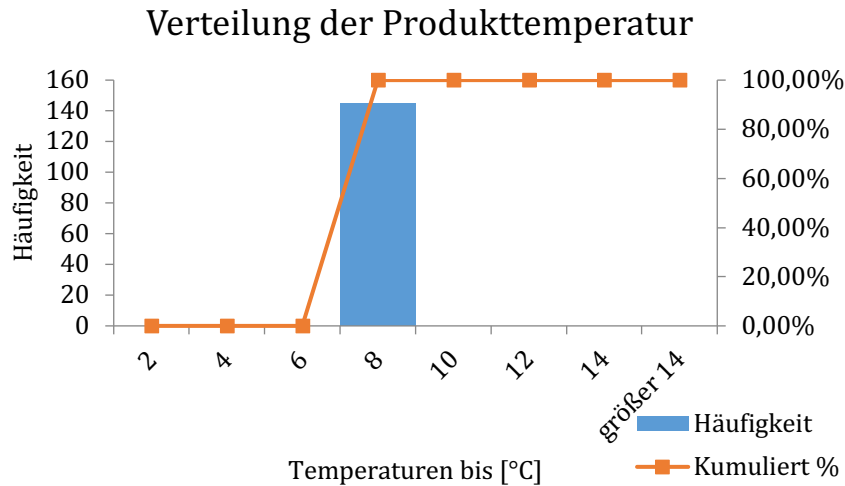


Abb. 4.11: Histogramm der Produkttemperatur bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter

4.5.2 MHEX-LZA in der PP Variante

Diese Parametervariation lieferte aus 4097 produzierten, 240 auswertbare Werte. Wie bereits in Kapitel 4.4.2 war auch diese Simulation sehr fehlerbehaftet. Die Fehler basieren auf dem Error-Status der Simulationsergebnisse, welcher durch ASPEN PLUS ausgegeben wird. Nach Anwendung der Filterregeln in Excel stellen sich die Verteilungen des Produktmassenstromes und der Reinheit des Produktes wie folgt dar.

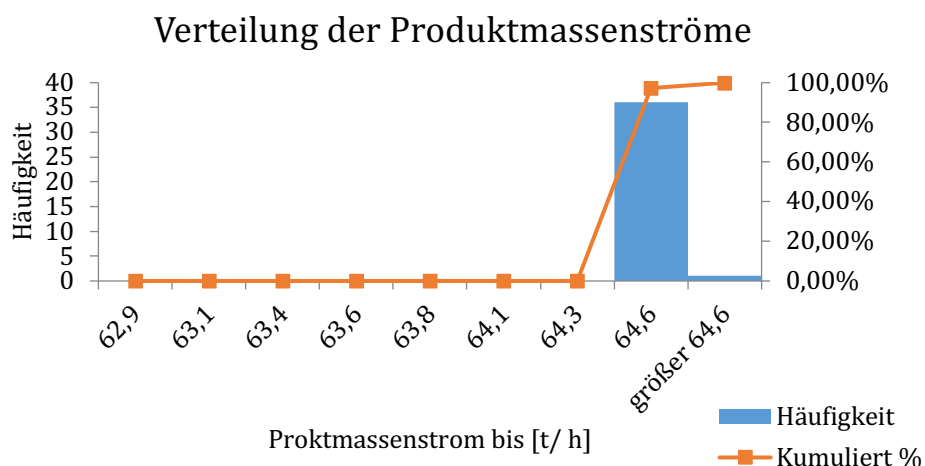


Abb. 4.12: Histogramm des Produktmassenstromes bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter

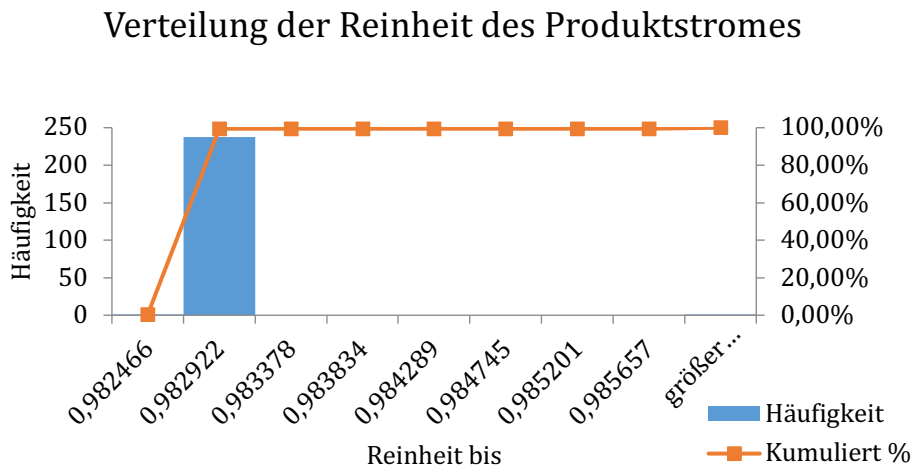


Abb. 4.13: Histogramm der Reinheit des Produktstromes bei der Variation der elektrischen Leistungsaufnahme isentropen Wirkungsgrad als Parameter

Es ist deutlich zu erkennen, dass die produzierten Werte sowohl des Produktmassenstromes als auch die der Produktreinheit nur eine sehr kleine bis gar keine Streuung besitzen. Dies deutet darauf hin, dass die Parametervariation der Leistungsaufnahmen der Verdichterstufe mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter, keine Auswirkungen auf den Anlagenbetrieb haben. Weder der Produktmassenstrom noch die Produktreinheit wird durch die Variation beeinflusst.

4.6 Variation der Druckverhältnisse der Verdichter C1 – C3

Wie bereits beschrieben, wird bei der Variation der Druckverhältnisse keine elektrische Leistungsaufnahme vorgegeben, sondern das Verhältnis zwischen Saug- und Druckseite der Verdichter.

4.6.1 MHEX-LZA in der FP-Variante

Wie in allen Parametervariationen, in denen nur eine Variable geändert wird, wurden bei dieser Simulation 1001 Werte produziert. Diese Simulation lieferte ebenfalls weder Fehler noch Warnungen. Nach der Auswertung dieser Werte in Excel, wurde der Datensatz auf 19 Werte dezimiert. Weiterhin ist anzumerken, dass die relativen

Leistungsaufnahmen der gefilterten Werte alle größer als 100%, bezogen auf die normale Leistungsaufnahme sind.

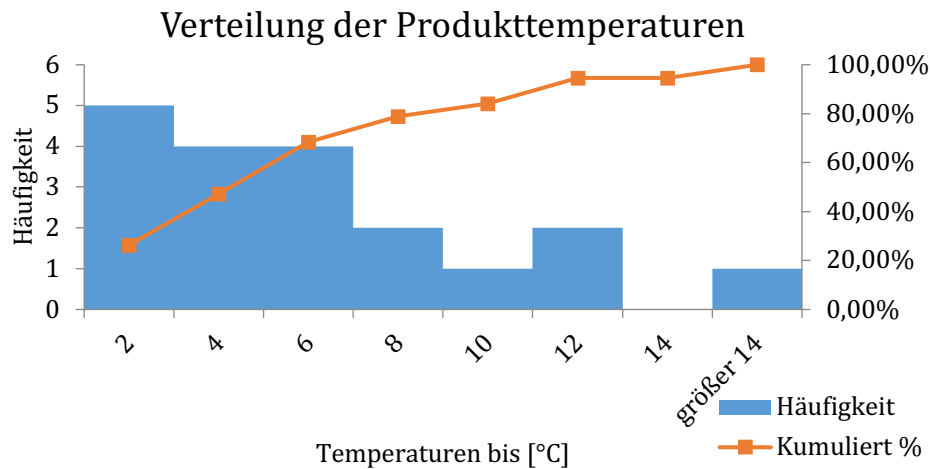


Abb. 4.14: Histogramm der Produkttemperaturen bei der Variation der Druckverhältnisse

Demnach ist eine Parametervariation der Druckverhältnisse ohne Betrachtung der isentropen Wirkungsgrade keine relevante Option im Kontext dieser Abschlussarbeit. Jedoch sollte hiermit geprüft werden, ob diese Parametervariation eine Reaktion der LZA zeigt.

4.6.2 MHEX-LZA in der PP-Variante

Diese Parametervariation erzeugte viele Fehler. ASPEN PLUS lieferte bei der tabellarischen Übersicht der Simulationsergebnisse eine große Anzahl von Error-Status. Lediglich 13 der 1001 produzierten Werte waren auswertbar. Nach Anwendung der Filterregeln bezüglich des maximalen Produktmassenstromes in Excel, wäre dieser Datensatz auf 3 Werte reduziert wurden. Um jedoch einen auswertbaren Datensatz beibehalten zu können, wurden die Simulationsergebnisse lediglich nach dem Status gefiltert, ob die Simulation fehlerhaft verlaufen ist oder nicht.

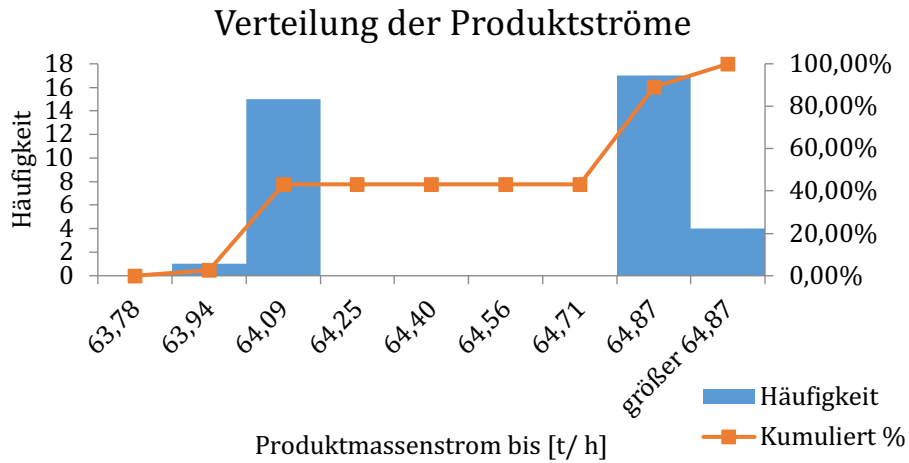


Abb. 4.15: Histogramm des Produktmassenstromes bei der Variation der Druckverhältnisse

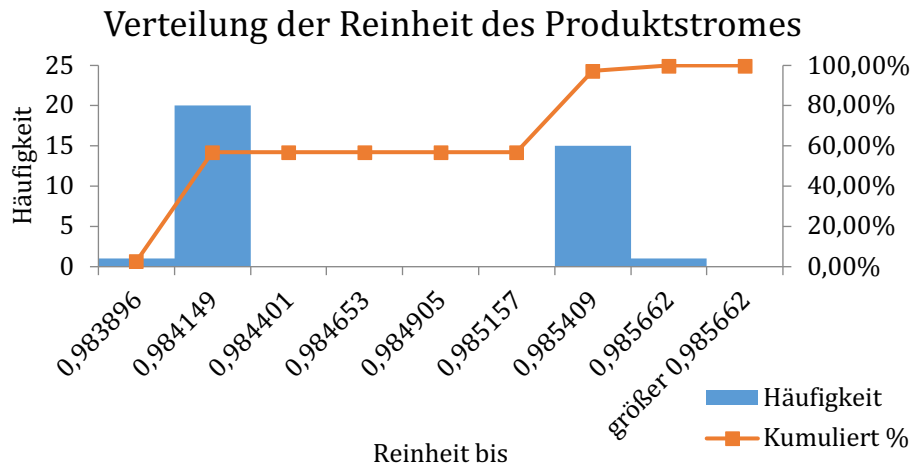


Abb. 4.16: Histogramm der Reinheit des Produktstromes bei der Variation der Druckverhältnisse

Diese sehr geringe Anzahl an auswertbaren Datensätzen lässt ebenfalls darauf schließen, dass eine Parametervariation der Druckverhältnisse der Verdichterstufe ohne Betrachtung des isentropen Wirkungsgrades keine Option der Flexibilisierung einer LZA darstellt.

4.7 Variation der Druckverhältnisse der Verdichter C1 – C3 mit jeweiligem Isentropen Wirkungsgrad als Parameter

Äquivalent Kapitel 4.4 soll bei dieser Parametervariation die Auswirkungen auf Produkttemperatur, -massenstrom und -reinheit, in Abhängigkeit der Druckverhältnisse und des isentropen Wirkungsgrades untersucht werden.

4.7.1 MHEX-LZA in der FP-Variante

Diese Parametervariation verlief, so wie die vorangehenden FP-Varianten-Simulationen ohne Fehler oder Warnungen. Nach Anwendung der Filterregeln für die Produkttemperatur und die relative Leistungsaufnahme, wurde der Datensatz auf 197 Werte reduziert. In der Auswertung dieser gefilterten Werte fiel auf, dass rund 6% der Werte über der vorgegebenen Normtemperatur liegen. Dies ist in keiner Weise ein negativer Aspekt, da die Produkttemperaturen ohne Konsequenzen für eine LZA 30 °C und mehr haben können.

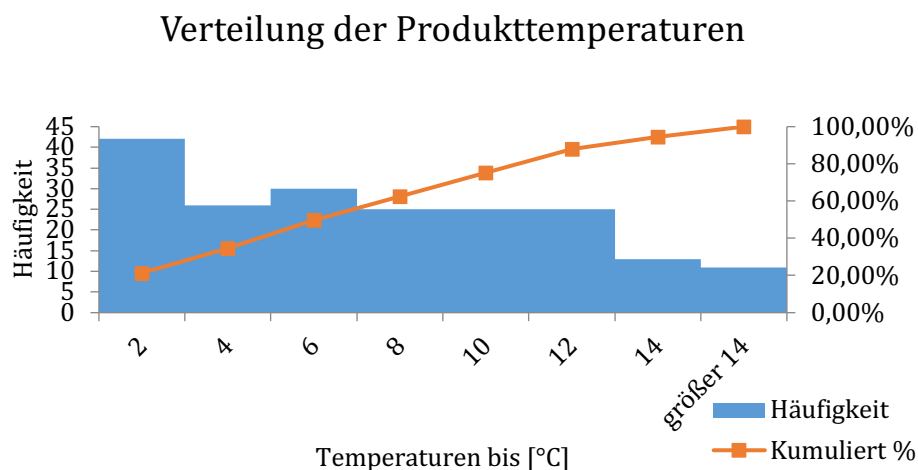


Abb. 4.17: Histogramm der Produkttemperatur bei der Variation der Druckverhältnisse mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter

Es ist zu sehen, dass die Verteilung der Simulationsergebnisse über das gesamte Spektrum der Erwartungswerte reicht. Dies zeigt, dass eine Variation der

Druckverhältnisse der Verdichterstufe mit betrachtetem isentropen Wirkungsgrad eine Flexibilisierungsoption darstellt.

4.7.2 MHEX-LZA in der PP-Variante

Ebenso wie bei der Variation der Druckverhältnisse ohne Betrachtung des isentropen Wirkungsgrades, war diese Simulation stark fehlerbehaftet. Von den 4097 produzierten Werten, waren lediglich 71 ohne Fehler. 20 dieser Werte lagen, nach Anwendung der Filterregeln in Excel, innerhalb der vorgegebenen Erwartungswerten. Die Verteilung der ausgewerteten Daten stellt sich wie in Abb. 4.18 zu sehen, dar.

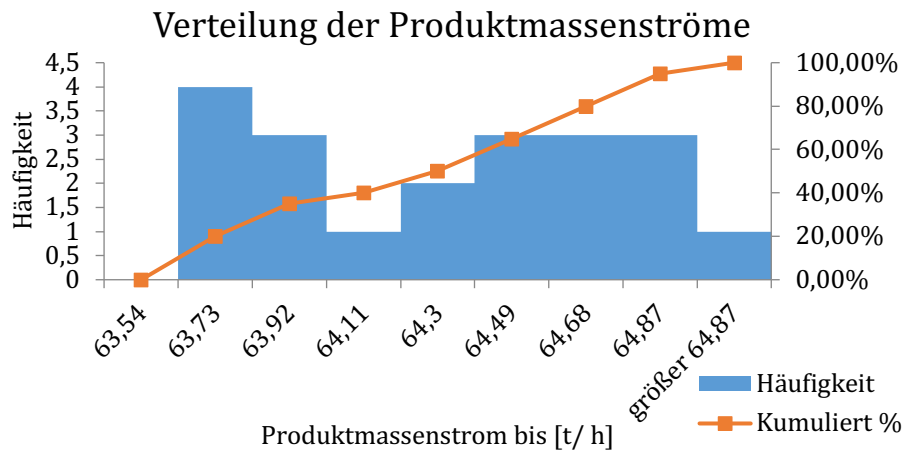


Abb. 4.18: Histogramm des Produktmassenstromes bei der Variation der Druckverhältnisse mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter

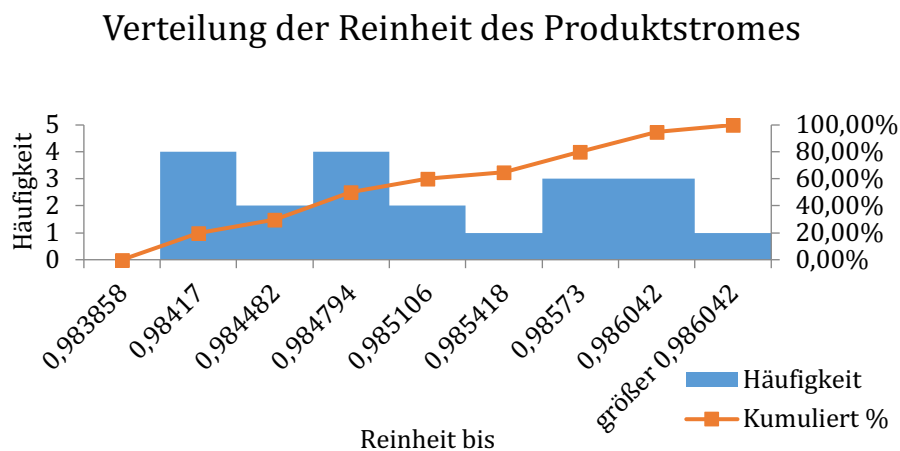


Abb. 4.19: Histogramm der Reinheit des Produktstromes bei der Variation der Druckverhältnisse mit isentropen Wirkungsgrad als Parameter

5 Diskussion der Simulationsergebnisse

In diesem Kapitel sollen die Simulationsergebnisse aus dem vorherigen Kapitel zusammengefasst, vergleichend grafisch dargestellt und diskutiert werden. Die MHEX-LZA-Varianten werden dabei separat diskutiert. Am Ende des Kapitels sollen dann Ableitungen bezüglich des Flexibilisierungspotentials einer LZA getroffen werden.

Zum besseren Verständnis der in den folgenden Diagrammen und Tabellen auftretenden Abkürzungen, soll folgende Tabelle die Abkürzungen als Klartext darstellen.

Tab. 5.1: Übersicht der Abkürzungen innerhalb der Box-Whisker-Plots und der zugehörigen Klartexte

Abkürzung	Simulationsnummer	Anlagenvariante	Variierter Parameter
MHEX_FP_Var_Leistung	1	FP	Leistungsaufnahme C1 – C3
MHEX_FP_Var_Leistung_Var_Isen	2	FP	Leistungsaufnahme C1 – C3 + isentroper Wirkungsgrad
MHEX_FP_Var_PRatio	3	FP	Druckverhältnisse C1 – C3
MHEX_FP_Var_PRatio_Var_Isen	4	FP	Druckverhältnisse C1 – C3 + isentroper Wirkungsgrad
MHEX_PP_Var_Leistung	5	PP	Leistungsaufnahme C1 – C3
MHEX_PP_Var_Leistung_Var_Isen	6	PP	Leistungsaufnahme C1 – C3 + isentroper Wirkungsgrad
MHEX_PP_Var_PRatio	7	PP	Druckverhältnisse C1 – C3
MHEX_PP_Var_PRatio_Var_Isen	8	PP	Druckverhältnisse C1 – C3 + isentroper Wirkungsgrad

5.1 Der Box-Whisker-Plot

Für die grafische Darstellung werden Box-Whisker-Plots verwendet. Diese Plots sind aus der Statistik bekannt und stellen eine Möglichkeit dar, die Simulationsergebnisse übersichtlich und vergleichbar darzustellen. Quantile und die daraus abgeleiteten Box-Whisker-Plots als grafische Zusammenfassung sind geeignete Mittel, um die Streuung von Daten darzustellen [49].

Um den Box-Whisker-Plot zu erstellen, wurden folgende Kennwerte aus den Simulationsergebnissen bestimmt. Die Bestimmung erfolgte ebenfalls mit Hilfe des Tabellenkalkulationsprogrammes Microsoft Excel.

Tab. 5.2: Die fünf benötigten Kennwerte einer Verteilung für die Erstellung des Box-Whisker-Plots

	Bedeutung
Minimum	Stellt den kleinsten Wert innerhalb eines Datensatzes dar
1. Quartil (Q1)	Mindestens 25% der Werte des Datensatzes sind kleiner als dieser Wert (im Box-Whisker-Plot Grau dargestellt)
Median	Der Median teilt eine geordnete Datenliste in zwei Teile mit gleich vielen Werten (im Box-Whisker-Plot Trennlinie zwischen Q1 und Q3)
3. Quartil (Q3)	Mindestens 75% der Werte des Datensatzes sind kleiner als dieser Wert (im Box-Whisker-Plot Orange dargestellt)
Maximum	Stellt den größten Wert innerhalb eines Datensatzes dar

Um die Simulationsergebnisse der verschiedenen Simulationsvarianten vergleichbar darzustellen, werden alle Sensibilitäten der einzelnen Varianten in einem Diagramm vergleichend dargestellt. Dies soll eine direkte Vergleichbarkeit aller produzierten Werte ermöglichen.

5.2 Auswertungen der MHEX-LZA in der FP-Variante

Die MHEX-LZA in der FP-Variante zeigte eine Sensibilität gegenüber der Produkttemperatur (siehe Tab. 4.1). Basierend auf den Erwartungswerten (Tab. 4.2) wurden Variationen der Leistungsaufnahme und des Druckverhältnisses (mit und ohne dem isentropen Wirkungsgrad als Parameter) durchgeführt.

Keine überprüfte Variation kam dabei an den Norm-Erwartungswert von 14,8 °C. Die Streuungen der resultierenden Produkttemperaturen der verschiedenen Variationen lagen stets unter dem Median der Erwartungswerten. Dies deutet darauf hin, dass trotz zahlreicher produzierter Simulationsergebnisse die Reaktion des Systems in einem verhältnismäßig kleinen Band stattfindet. Besonders ist dabei die im Kapitel 4.5.1 durchgeführte Variation hervorzuheben. Diese produzierte, bis auf einen Ausreißer von 14,0°C, konstant eine Produkttemperatur von 7,7°C. Da die Anlagenparameter - zum Beispiel der Druck in der HPC oder LPC - bei jeder Variation konstant waren, kann ein Fehler innerhalb der Simulation ausgeschlossen werden. Ein derartiges Simulationsergebnis trat bei keiner weiteren Variation auf.

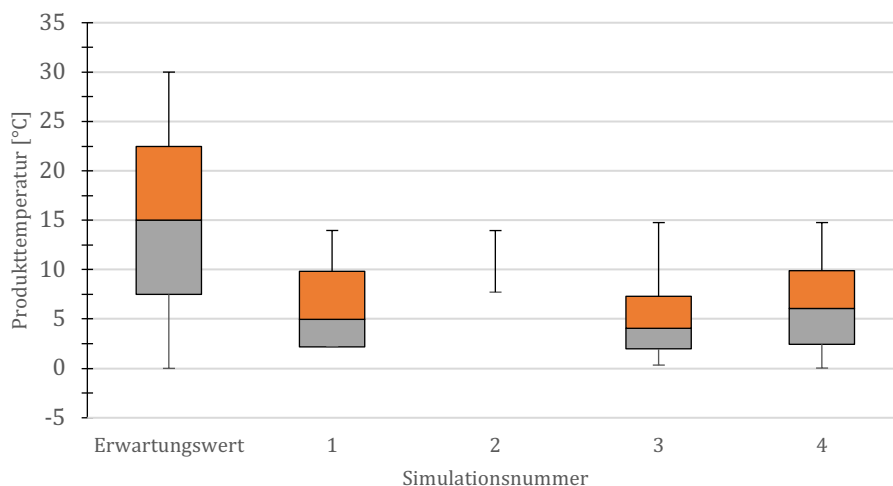


Abb. 5.1: Box-Whisker-Plots der Verteilung der Simulationsergebnisse der MHEX-LZA in der FP-Variante

Die Abbildung zeigt deutlich, dass keine Parametervariation der MHEX-LZA in der FP-Variante die erwartete mittlere Temperatur von 14,8 °C erreicht. Jedoch liegen

Mediane der Simulationen 1 – 4 in einem einstelligen positiven Wert. Da die Temperaturen größer als 0°C sind, können die Simulationsergebnisse als belastbar angesehen werden.

Tabelle **Tab. 5.3** zeigt die Übersicht der Kennwerte zur Erstellung des Box-Whisker-Plots. Hier zu sehen ist, dass das Modell trotz der Parametervariation bis auf den Max-Wert nur bedingt die Mediantemperatur bzw. die erwartete Produkttemperatur erreicht.

Tab. 5.3: Tabellarische Übersicht der Kennwerte für die Simulationen 1 – 4.

Produkttemperatur [°C]	Norm	1	2	3	4
min	0	2,2	7,7	0,3	0,0
Q1	7,5	2,2	7,7	2,0	2,5
Median	15	5,0	7,7	4,0	6,1
Q3	22,5	9,8	7,7	7,3	9,9
max	30	14,0	14,0	14,8	14,8

Auch hier kann gesehen werden, dass die Produkttemperatur der Simulationsnummer 2, ausgenommen dem Maximalwert von 14,0°C, bei konstant 7,7°C liegt, was nicht plausibel ist jedoch innerhalb dieser Abschlussarbeit als gegeben angenommen werden muss.

5.3 Auswertung der MHEX-LZA in der PP-Variante

Dieses Unterkapitel wird aufgrund der Sensibilität der PP-Variante gegenüber dem Produktmassenstrom und der Produktreinheit separiert ausgewertet. Zuerst soll eine Diskussion der Simulationsergebnisse für den Produktmassenstrom geführt werden. Danach werden Ergebnisse für die Produktreinheit diskutiert.

5.3.1 Diskussion der Simulationsergebnisse des Produktmassenstromes

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Produktmassenströme aller Parametervariationen der PP-Variante oberhalb der Erwartungswerte lagen. Dies bedeutet, dass die Überschreitung der produzierten Sauerstoffmenge von rund zwei Tonnen pro Stunde kein Risiko der Überlastung der Anlage ist. Jedoch zeigt Simulation 7 eine starke Abweichung des Produktmassenstromes (vgl. Kap. 4.6.2). Um eine solche Überproduktion kompensieren zu können, wären größere Speicherbehälter oder Tanks von Nöten. Ein ausschließliches variieren der Druckverhältnisse zwischen Saug- und Druckseite der Verdichter, resultiert innerhalb der Simulation in vielen Fehlern. Bei der Simulation mit Parameterkonstellationen, welche innerhalb der Simulationsergebnisse mit dem Error-Status gekennzeichnet wurden, brach ASPEN PLUS die Simulation ab (vgl. Abb. 4.2). Die daraus resultierende Fehlermeldung besagte, dass die Stages oder auch Böden der Kolonnen mit derart wenig Edukt versorgt werden, dass diese austrocknen bzw. leerlaufen. Eine Weiterführung des Produktionsbetriebes der LZA war somit nicht möglich.

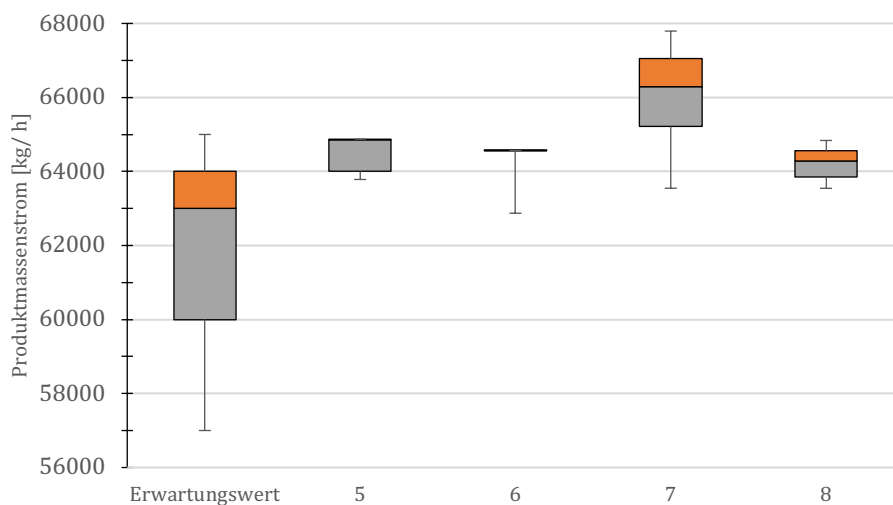


Abb. 5.2: Box-Whisker-Plots der Verteilung der Simulationsergebnisse der Produktmassenströme der MHEX-LZA in der PP-Variante

Auch ist in dieser Abbildung zu erkennen, dass die Streuungen der Simulationsergebnisse bedeutend geringer sind, als die der Vorgabewerte. Die Reaktion des LZA-Modells ist also, ebenso wie in der FP-Variante, innerhalb eines kleinen Bereiches. Weiterhin ist anzumerken, dass die Änderung des

Produktmassenstroms mit einer Änderung der Reinheit des Produktes einhergeht. So konnte beobachtet werden, dass sich mit steigendem Produktmassenstrom eine Minderung der Produktreinheit einstellt. Man kann hierbei nahezu von einer indirekten Proportionalität sprechen. Eine Prüfung des Zusammenhanges zwischen Produktmassenstrom und Produktreinheit bei der Simulationsnummer sieben in Excel zeigte, dass zusammenhängende Werte mit dem Faktor -0,9955 korrelieren.

Tab. 5.4: Tabellarische Übersicht der Kennwerte des Produktmassenstromes für die Simulationen 5 – 8.

Massenstrom [kg/ h]	Vorgabe	5	6	7	8
min	57000	63783,5	62871,2	63547,0	63544,5
Q1	60000	64001,8	64559,1	65213,1	63846,9
Median	63000	64854,6	64561,0	66297,5	64282,8
Q3	64000	64864,0	64562,1	67045,5	64560,1
max	65000	64866,4	64567,7	67699,8	64890,0

Tab. 5.4 zeigt die Kennwerte für den Box-Whisker-Plot. Im Gegensatz zu den Histogrammen (Abb. 4.8, Abb. 4.12, Abb. 4.15 und Abb. 4.18), wurden die Kennwerte wieder in der Einheit kg/ h dargestellt, da die Auflösung bei t/ h zu gering war, um Unterschiede darstellen zu können.

5.3.2 Diskussion der Simulationsergebnisse der Produktreinheit

Wie innerhalb der Simulationen festzustellen war, geht die Produktreinheit stets indirekt proportional mit dem Produktmassenstrom einher. Analog zu Abb. 5.2 befinden sich die Simulationsergebnisse am Rand der in Tab. 4.2 definierten Erwartungswerten. Diesmal befinden sich die Simulationsergebnisse jedoch an der unteren Grenze. Dies hat zu Folge, dass die Reinheit bzw. die Massenanteile des Sauerstoffes nicht mehr in ausreichender Höhe gegeben sind. Der Sauerstoff ist durch nicht erwünschte Nebenprodukte wie Stickstoff oder Argon kontaminiert.

Als kleinster Erwartungswert wurde eine Reinheit des Sauerstoffs von 98% (entspricht einem Massenanteil von 0,98) definiert. Dieser wird bei der Simulationsnummer 7 teilweise deutlich unterschritten.

Ebenso wie bei den Simulationsergebnissen des Produktmassenstromes, besitzen die Simulationsnummern 5 – 8 eine sehr kleine Streuung, was auf eine fehlende Flexibilisierungsoption hindeutet.

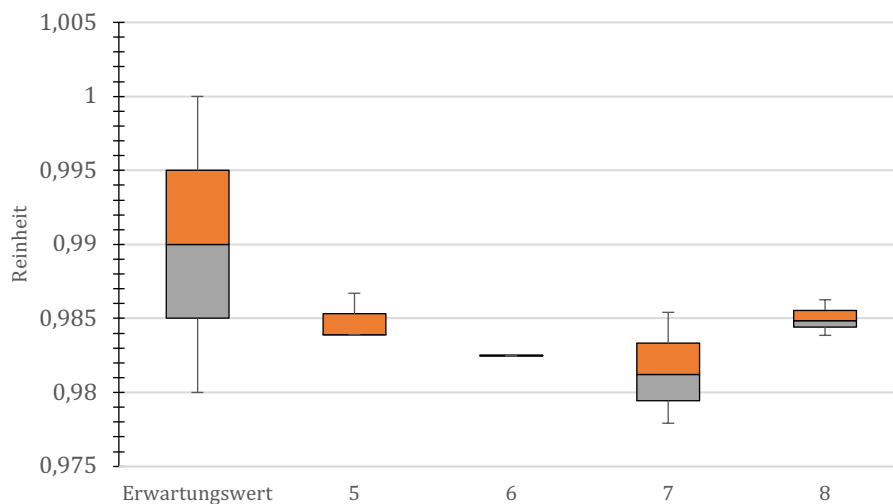


Abb. 5.3: Box-Whisker-Plots der Verteilung der Simulationsergebnisse der Produktreinheit der MHEX-LZA in der PP-Variante

Tab. 5.5: Tabellarische Übersicht der Kennwerte der Reinheit des Produktmassenstromes für die Simulationen 5 – 8.

Reinheit	Vorgabe	5	6	7	8
min	0,98	0,983896	0,982466	0,977921	0,983858
Q1	0,985	0,983900	0,982477	0,979454	0,984401
Median	0,99	0,983918	0,982480	0,981227	0,984854
Q3	0,995	0,985310	0,982484	0,983321	0,985559
max	1	0,985662	0,985657	0,986036	0,986042

Zusammengefasst kann gesagt werden, dass weder der Produktmassenstrom noch die damit einhergehende Produktreinheit innerhalb der Erwartungswerten lag. Zwar wurde ein größerer Produktmassenstrom erreicht, jedoch geschah dies zu Ungunsten der Produktreinheit. Damit wird gezeigt, dass eine Flexibilisierungsoption bzw. das Potential, die Fahrweise von LZA an das Energieangebot des Energieversorgungsnetzes anzupassen, nicht gegeben ist. Zwar kann die Verdichterstufe, welche den Hauptelektroenergieverbraucher innerhalb einer LZA darstellt, in seiner Fahrweise variiert werden, jedoch sind dadurch Einbußen bei der Produktreinheit und dem Produktmassenstrom, also der Menge, in welcher Sauerstoff produziert werden kann, zu erwarten.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Dieses Kapitel soll die Ergebnisse dieser Abschlussarbeit zusammenfassen und einen Ausblick darüber geben, wie Flexibilisierungspotentiale einer LZA aussehen könnten. Weiterhin soll die Möglichkeit der Erstellung einer dynamischen Simulation einer LZA angesprochen werden. Zum Abschluss soll noch ein Fazit gezogen werden.

6.1 Zusammenfassung der Ergebnisse der Parametervariationen

Bereits bei dem Transfer des LZA-Modells nach Kooijman von ChemSep zu ASPEN PLUS fiel auf, dass trotz identischer Anlagenparameter (Drücke innerhalb der Kolonnen, Massenströme innerhalb der LZA etc.) die Simulationsergebnisse differierten. Das Original-Modell war für einen Produktmassenstrom von 60 t/h, mit einem Massenanteil (Reinheit) von 0,981 ausgelegt. Das Modell in ASPEN PLUS lieferte zunächst nur einen Produktmassenstrom von 54 t/h bei einer Reinheit von ebenfalls 0,981.

Eine Überprüfung aller in der LZA vorzufindenden Parameter (Massenströme, Temperaturen, Drücke, Reinheit bzw. Massenteile), der Ströme sowie der Kolonnen zeigte, dass die eigentlich gekoppelten Wärmeströme des HPC-Verdampfers und des LPC-Kondensators, starke Abweichungen bezüglich der thermischen Leistungen ($|\Delta P_{th}| = 0,102 \text{ MW}$) aufwiesen. Bei einer Einstellung identischer thermischer Leistungen des HPC-Verdampfers und LPC-Kondensators fiel auf, dass der Produktmassenstrom zu stark anstieg ($\dot{m}_{O_2} > 75 \text{ t/h}$) und die Produktreinheit auf ein inakzeptables Maß herabfiel (Reinheit $< 0,8$). Somit wurde eine empirische Näherung der thermischen Leistungen parametrisiert.

Ein weiterer Grund für die geringere Menge produzierten Sauerstoffs des LZA-Modells in ASPEN PLUS, wurde im Massenstrom des Stromes 12 (S12, siehe Kap. 8.1) gefunden.

Mit diesen Anpassungen stellte sich ein Betriebszustand der MHEX-LZA ein, welcher weitestgehend gleiche Produktparameter lieferte und somit die Ausgangsbasis für die Parametervariationen darstellt.

Als zu parametrierende Variablen wurden zunächst die elektrischen Leistungsaufnahmen der Verdichter C1 – C3 ausgewählt, da diese im Kontext dieser Abschlussarbeit die relevantesten Größen darstellen. Später wurde dann von der Vorgabe bzw. der Parametrierung der elektrischen Leistungsaufnahmen abgegangen. Als zu parametrierende Variablen wurde dann nur noch Druckverhältnisse vorgegeben. Resultierend wurde dann geprüft, welche Leistungsaufnahmen äquivalent zu welchen Druckverhältnissen waren. Zum Schluss wurden neben den Leistungsaufnahmen und den Druckverhältnissen der Verdichter C1 – C3 noch der isentrope Wirkungsgrad als Parameter für die einzelnen Parametervariationen eingeführt. Es sollte festgestellt werden, ob beispielsweise die Verdichterstufe bei einer geringeren summierten Leistungsaufnahme und besserem isentropen Wirkungsgrad, ähnliche oder gar bessere Simulationsergebnisse, als es die Original-LZA, liefert. Als Simulationsergebnisse wurden stets Produkttemperatur, Produktmassenstrom und -reinheit betrachtet. Diese Parameter sind wiederum die relevanten Kenngrößen für LZA.

6.1.1 MHEX-LZA in der FP-Variante

Die Ergebnisse der Parametervariationen der MHEX-LZA in der FP-Variante waren durchgängig fehlerfrei. Die Bedeutung von Fehlern oder Warnungen kann dabei in Kapitel 4.4.2 erlesen werden. Ferner wurden keine, von der Anlage erwarteten, Aggregatzustände der Ströme verletzt. Bei der Erstellung von Prozessanlagen in ASPEN PLUS müssen den verschiedenen Bauteilen so genannte „initial guess“ vorgegeben werden. Bei diesen müssen dann, neben den entsprechenden Feed- und Produktströmen auch Angaben darüber gemacht werden, in welchen zu erwartendem Aggregatzustand das Fluid in dieses Bauteil ein- bzw. austritt.

Jedoch waren die Produkttemperaturen nach dem MHEX in einem sehr großen Bereich ($-102^{\circ}\text{C} < T_{\text{Prod}} < 14,8^{\circ}\text{C}$). Das Produkt bei einer Temperatur kleiner Null zu entnehmen birgt die Gefahr, dass die Leitungen, welche die LZA verlassen, einfrieren. Aus diesem Grund wurden die Erwartungswerte für den Produktstrom generiert. Diese wurden, basierend auf einem Gespräch mit einem ehemaligen Techniker der LINDE AG, erstellt.

Die möglichen Parameterkombinationen der Verdichterstufe, in denen die Produkttemperatur innerhalb der Vorgabewerte liegt ist, verglichen mit der Anzahl der produzierten Werte, sehr gering. Von den 10.196 produzierten Werten innerhalb der Parametervariation in der FP-Variante, konnten lediglich 742 zur Auswertung herangezogen werden. Dies ist ein Hinweis dafür, dass das Flexibilisierungspotential einer LZA sehr gering ist. Zwar kann die Leistung respektive das Druckverhältnis eines jeden Verdichters variiert werden, jedoch wirkt sich dies auf die gesamte Anlage aus. Es besteht die Möglichkeit, der Anlage einen Produktstrom mit einer Temperatur kleiner 0°C zu entnehmen und in einer separaten Verflüssigereinheit wieder zu verflüssigen, jedoch verfügt nicht jede LZA über eine solche Einheit, sodass dies nicht als normaler Betriebsfall angesehen werden kann.

Weiterhin wurde diese Verflüssigereinheit innerhalb dieser Abschlussarbeit weder theoretisch noch im Simulationsmodell betrachtet. Weiterhin würde bei der Entnahme eines kalten Produktstromes unnötig viel thermische Energie vergeudet werden, was im Umkehrschluss bedeuten würde, dass mehr elektrische Leistung eingesetzt werden muss um die Feed-Ströme auf Betriebstemperatur zu unterkühlen.

6.1.2 MHEX-LZA in der PP-Variante

Die Parametervariationen innerhalb dieser LZA-Variante waren stark fehlerbehaftet. Weiterhin musste der Expander vor der LPC durch ein Drosselventil ersetzt werden, da durch die enorm kalte Temperatur des LPC-Feeds eine partielle Verflüssigung des Stromes eintrat. Der Expander konnte dieses Gas-Flüssigkeitsgemisch dann nicht mehr ordnungsgemäß entspannen. Das Drosselventil ist jetzt an dieser Stelle dafür zuständig, den Druck des Feed-Stromes herabzusetzen.

Die Sensibilitäten dieser Anlagen-Variante zeigten, dass ein indirekt proportionaler, nahezu inverser, Zusammenhang zwischen dem Produktmassenstrom und der Reinheit des Produktstromes besteht. Ebenfalls wurde festgestellt, dass die Verdichterstufe bei einem besseren isentropen Wirkungsgrad und einer geringeren Leistungsaufnahme nicht zwangsläufig äquivalent oder besser als das Original-Modell arbeitet. Weiterhin ist der Bereich, in dem die Simulationsergebnisse des

Produktmassenstromes und die Produktreinheit auftraten, sehr groß. So bewegte sich der Produktmassenstrom zwischen rund 45 t/h und 95 t/h. Die Produktreinheit befand sich in einem Band zwischen 0,02 und 0,998.

Bei der Parametervariation dieser LZA-Variante wurden jeweils 10.196 Werte für den Produktmassenstrom und die Produktreinheit produziert. Nach Filterung dieser produzierten Werte gemäß den Erwartungswerten in Microsoft Excel konnten lediglich 310 Werte für den Produktmassenstrom und 310 Werte für die Produktreinheit für die Auswertung herangezogen werden. Dies ist ebenso wie in der FP-Variante ein deutlicher Hinweis dafür, dass das Potential einer LZA flexibel, an das Energieangebot im Energienetz angepasst betrieben zu werden, sehr gering ist.

6.2 Zusammenfassung der Parametervariationen der MHEX-LZA

Basierend auf den Simulationsergebnissen und dem Ausschuss fehlerhafter Datensätze kann gesagt werden, dass eine LZA, wie sie innerhalb dieser Arbeit genutzt und simuliert wurde, nicht an das Energieangebot im Energieversorgungsnetz angepasst betrieben werden kann.

Die Produktparameter realer Anlagen bewegen sich in einem relativ kleinem Raum, bezogen auf Temperatur, Produktmassenstrom und Produktreinheit. Die Streuung der Simulationsergebnisse über-/ unterschreitet diesen Raum teilweise um ein Vielfaches. Ferner sind reale Anlagen bedeutend komplexer, was eine Untersuchung des Flexibilisierungspotentials enorm erschwert. Eine kleine Flexibilisierungsoption wird aktuell angewendet, in dem die Fahrweise der Anlage dahingehend geändert wird, dass das Produkt flüssig oder gasförmig abgenommen werden kann. Dies wird, wie bereits angesprochen, durch eine separate Verflüssigereinheit erreicht.

Weiterhin ist ein sich ändernder Betriebspunkt einer LZA potentiell schädlich für die Anlagenkomponenten. Durch die tiefkalten Arbeitstemperaturen kann es zu thermischen Spannungen kommen, welche im ungünstigsten Fall eine Beschädigung der Anlagenteile zur Folge haben könnte. Ferner können ca. sechs bis acht Stunden, bis sich eine LZA auf einen Betriebspunkt „eingeschwungen“ hat, vergehen. Dies ist jedoch mit einem hohen Ressourceneinsatz verbunden da die Luft, welche fraktioniert werden soll, auf Betriebstemperatur und- druck gebracht werden muss.

Soll in der LZA neben hochreinem Sauerstoff noch Argon produziert werden, kann es bis zu drei Tage dauern, bis dieser in einem hinreichenden Produktmassenstrom und in hinreichender Reinheit produziert werden kann.

Es existieren LZA in England, mit welchen das so genannte „Power Peak Shaving“ (Leistungsspitzen glättung) betrieben wird. Dabei wird bei einer anbahnenden Leistungsspitze im Energieversorgungsnetz eine Verflüssigereinheit zugeschaltet, welche dann, wie beschrieben, gasförmigen Sauerstoff aus der LZA entnimmt und wiederum verflüssigt.

Eine derartige LZA mit zuschaltbarer Verflüssigereinheit in Deutschland, ist zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Arbeit nicht bekannt. Jedoch könnte nach dem englischen Vorbild in den Nachtstunden diese Verflüssigereinheit eingesetzt werden, um das Energieversorgungsnetz stabil zu halten. Weiterhin könnte durch diese Einheit die Bereitstellung von negativer Regelenergie realisiert werden.

6.3 Dynamisches Modell einer LZA

Dynamische Modelle zeigen neben der Abhängigkeit der Ausgangsparameter von den Eingangsparametern, auch eine Abhängigkeit der Zeit. So kann beispielsweise ein Betriebspunktwechsel einer LZA innerhalb zu definierender Grenzen durchgeführt werden. Neben den Produktparametern kann dann gezeigt werden, wie viel Zeit dieser Wechsel in Anspruch nehmen würde.

Für eine dynamische Simulation in ASPEN PLUS sind dann jedoch noch weitere Parameter von Nöten, welche im Kontext dieser Abschlussarbeit weder theoretisch betrachtet noch erarbeitet wurden. Zu diesen Parametern zählen dann beispielsweise geometrische Abmessung des Verdampfers und des Kondensators oder auch die Ausrichtung dieser Bauteile (horizontal oder vertikal). Da innerhalb dieser Arbeit festgestellt wurde, dass eine LZA kein Flexibilisierungspotential hat, wurde von einem derartigen Modell bzw. einer derartigen Simulation abgesehen.

Die Erstellung einer dynamischen Simulation birgt jedoch das Potential, weitere Abschlussarbeiten zu verfassen und die Ergebnisse dieser Abschlussarbeit zu bestätigen oder gegebenenfalls zu widerlegen.

6.4 Fazit

Die 1903 von Carl von Linde erstmals erbaute LZA und seitdem stets weiterentwickelte Prinzip der Luftzerlegung gilt heute als technologisch ausgereift. Dennoch wird stets an weiteren Optimierungspotentialen geforscht. Sei es indem alternative Methoden der Luftzerlegung erprobt werden (siehe ab Kapitel 2.3) oder energetische Optimierungen an bestehenden Anlagen durchgeführt werden. So ist bei letzterem besonders der Zwei-Säulen-Apparat und der daraus entstandene Drei-Säulen-Apparat hervorzuheben. Diese Apparate haben die HPC und LPC in einer Einhausung, was thermische Verluste und damit verbundene Ressourceneinsätze minimieren soll.

Im Forschungsvorhaben „FlexChem“ werden Möglichkeiten erforscht, den Ausbau erneuerbarer Energien und dem damit verbundenem volatilen Energieangebot im Energieversorgungsnetz in Einklang mit einer potentiell flexiblen Fahrweise von energieintensiven verfahrenstechnischen Prozessen zu bringen. Als Beispiel für einen solchen energieintensiven Prozess stellt die kryogene Luftzerlegung dar.

Im Rahmen dieser Abschlussarbeit sollte geprüft werden, inwiefern eine kryogene Luftzerlegungsanlage an das in Zukunft immer volatiler werdende Energieangebot angepasst werden kann.

Im ersten Schritt wurde durch das Fraunhofer IFF, das Modell von Harry Kooijman einer idealisierten LZA in die Prozesssimulationssoftware ASPEN PLUS übertragen. Bereits am Anfang wurden starke Sensibilitäten bei Parameteränderungen festgestellt (siehe Kapitel 1.2.2). Weiterhin wurden die ungekoppelten Wärmeströme des Feed- und Produktstroms mit Hilfe eines Hauptwärmeübertrager (MHEX; Main Heat Exchanger) zu gekoppelten Wärmeströmen zusammengefasst. ASPEN PLUS benötigt, um mit diesem Simulationsblock arbeiten zu können, entweder die Parameter der eingehenden oder ausgehenden Ströme. Somit wurden zwei verschiedene LZA-Modell-

Varianten entwickelt, welche verschiedene Sensibilitäten aufwiesen (MHEX-LZA in PP-Variante und MHEX-LZA in FP-Variante; siehe Tab. 4.1).

Mit diesen Varianten wurden dann die Parametervariationen durchgeführt. Zunächst wurde die Leistungsaufnahme der Verdichterstufe (C1 – C3) variiert. Signifikant fiel bei diesen Variationen auf, dass die betrachteten Parameter (Produkttemperatur, -reinheit und -massenstrom) sich nicht über das gesamte Spektrum der Erwartungswerte verteilten (siehe Kapitel 4.4. ff.). Weiterhin zeigte sich bei der Variation der Leistung mit betrachtetem isentropen Wirkungsgrad, dass dieser keinen Einfluss auf die betrachteten Parameter hat. So verteilten sich die Simulationsergebnisse nur noch auf einen kleinen Bereich der Erwartungswerte.

Bei der Variation der Druckverhältnisse sollte überprüft werden, ob die Vorgabe eines Verhältnisses zwischen Saug- und Druckseite der Kompressoren, innerhalb der Verdichterstufe, eine Flexibilisierungsoption darstellt. Bei der Variation innerhalb von ASPEN PLUS wurde hierbei dann neben dem eigentlichen Druckverhältnis die äquivalente elektrische Leistungsaufnahme betrachtet. Bei der FP-Variante des LZA-Modells konnte festgestellt werden, dass der größte Teil der Simulationsergebnisse eine relative Leistungsaufnahme von $> 100\%$ aufwies. Ein Großteil der Simulationsergebnisse der PP-Variante des LZA-Modells innerhalb dieser Variation waren ebenfalls außerhalb der Erwartungswerte. So konnte nur ein kleiner Teil zur eigentlichen Auswertung herangezogen werden.

Nun wurde neben dem Druckverhältnis, ebenso wie bei der Leistungsaufnahme, der isentrope Wirkungsgrad mit betrachtet. Hierbei stellte sich sowohl in der FP- als auch in der PP-Variante des LZA-Modells, eine gute Verteilung der heranziehbaren Daten über den Bereich der Erwartungswerte ein. Jedoch wurden die von ASPEN PLUS generierten Daten durch die Anwendung der Filter gemäß den Erwartungswerten in Excel stark dezimiert.

Weiterhin zeigen die Abbildungen Abb. 4.4, Abb. 4.5 und Abb. 4.6 deutlich, wie wenige Simulationsergebnisse innerhalb des Arbeitsbereiches liegen. Trotz einer Vielzahl produzierter Simulationsergebnisse und einem großen Bereich, in dem die

Parametervariationen vorgenommen wurden, entstanden viele fehlerhafte Werte, welche ungeeignet für den Produktionsbetrieb einer LZA sind.

Daraus kann geschlossen werden, dass eine LZA keine Flexibilisierungsoption bzw. kein Flexibilisierungspotential besitzt. Ein beispielsweise herabsenken der Druckverhältnisse innerhalb der Verdichterstufe hat einen zu geringen Produktmassenstrom zur Folge, was einer Minderung der produzierten Menge von Sauerstoff und damit einhergehend monetären Verlusten verbunden ist.

7 Literaturverzeichnis

- [1] M. Schrader, *Prinzipien und Anwendungen der Physikalischen Chemie*. Freising: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2016.
- [2] Lenntech BV, „Chemische Elemente geordnet nach Siedepunkt“, *Lenntech Water Treatment Solutions*, 24-Apr-2018. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.lenntech.de/data-pse/siedepunkt.htm>.
- [3] H. Kooijman und R. Taylor, *The ChemSep Book*. Norderstedt: Books on Demand GmbH, 2001.
- [4] H. Kooijman, „Vereinfachtes ASU-Modell“. 24-Apr-2018.
- [5] Linde AG, „125 Jahre Linde - Eine Chronik“. 2004.
- [6] Linde AG, „Air Separation Plants - History and technological progress in the course of time“, *Air separation plants*, 2018. [Online]. Verfügbar unter: www.linde-engineering.com/air_separation_Plants.
- [7] H. Chen, T. N. Cong, W. Yang, C. Tan, Y. Li, und Y. Ding, „Progress in electrical energy storage system: A critical review“, 2009.
- [8] Y. Li, H. Chen, X. Zhang, C. Tan, und Y. Ding, „Renewable energy carriers: Hydrogen or liquid air/nitrogen?“, 2010.
- [9] W. F. Castle, „Air separation and liquefaction: recent developments and prospects for the beginning of the new millennium“, 2002.
- [10] M. Kellner, „Entwicklung eines mobilen Sauerstoffgenerators zur Verbesserung des Verbrennungsvorgangs im Fahrzeugmotor“, Universität Essen, Essen, 2002.
- [11] Donau Carbon GmbH, „aktivkohle.pdf“. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.donau-carbon.com/Downloads/aktivkohle.aspx>. [Zugegriffen: 14-Mai-2018].
- [12] „Aktivierung (Chemie)“, *Wikipedia*. 28-Apr-2013.
- [13] B. Lohrengel, *Thermische Trennverfahren*, 3. Auflage. Berlin; Boston: De Gruyter.

- [14] A. . Smith und J. Klosek, „A review of air separation technologies and their integration with energy conversion processes“, *Fuel Process. Technol.*, Bd. 70, Nr. 2, S. 115–134, Mai 2001.
- [15] „Delokalisierte Systeme - Chemgapedia“. [Online]. Verfügbar unter: http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/11/aac/vorlesung/kap_4/vlu/delokalisiert.vlu/Page/vsc/de/ch/11/aac/vorlesung/kap_4/kap4_3/kap43_10/kap4310_5a.vscml.html. [Zugegriffen: 14-Mai-2018].
- [16] D. G. Pahinkar und S. Garimella, „A novel temperature swing adsorption process for natural gas purification, Part II: Performance assessment“, *Sep. Purif. Technol.*, Bd. 204, S. 81–89, Okt. 2018.
- [17] P. Hao, Y. Shi, S. Li, X. Zhu, und N. Cai, „Correlations between adsorbent characteristics and the performance of pressure swing adsorption separation process“, *Fuel*, Bd. 230, S. 9–17, Okt. 2018.
- [18] M. Whysall und L. J. M. Wagemans, „Very large-scale pressure swing adsorption processes“, US6210466B1, 03-Apr-2001.
- [19] M. Fakhroleslam, S. Fatemi, R. Bozorgmehry Boozarjomehry, E. De Santis, M. D. Di Benedetto, und G. Pola, „Maximal safe set computation for pressure swing adsorption processes“, *Comput. Chem. Eng.*, Bd. 109, S. 179–190, Jan. 2018.
- [20] D. C. Erickson, W. R. Brown, B. R. Dunbobbin, und R. G. Massey, „MOLTOX Chemical Air Separation System - A Progress Report“, Houston, Juni 1986.
- [21] S. Shimizu, Y. Saito, S. Asakawa, und Y. Ito, „Hochtemperatur mit selectiven durchlässigen Membranen zur Anreicherung von Luft mit Sauerstoff“, EP0108843B1, 01-Okt-1986.
- [22] none, und BCS Inc., Laurel, MD (United States), „Materials for Separation Technologies. Energy and Emission Reduction Opportunities“, 1218755, Mai 2005.
- [23] C. Castel und E. Favre, „Membrane separations and energy efficiency“, *J. Membr. Sci.*, Bd. 548, S. 345–357, Feb. 2018.
- [24] B. Lohrengel, *Einführung in die thermischen Trennverfahren: Trennung von Gas-, Dampf- und Flüssigkeitsgemischen*, 2., überarb. Aufl. München: Oldenbourg, 2012.

- [25] G. Wiegleb, „Physikalische Eigenschaften von Gasen“, in *Gasmesstechnik in Theorie und Praxis*, Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2016, S. 7–118.
- [26] P. Dyer, R. E. Richards, S. R. Russek, und T. Dale, „Ion transport membrane technology for oxygen separation and syngas production“, *Solid State Ion.*, Bd. 134, Nr. 1–2, S. 21–33, Okt. 2000.
- [27] S. S. Hashim, A. R. Mohamed, und S. Bhatia, „Oxygen separation from air using ceramic-based membrane technology for sustainable fuel production and power generation“, *Renew. Sustain. Energy Rev.*, Bd. 15, Nr. 2, S. 1284–1293, Feb. 2011.
- [28] H. D. Baehr und K. Stephan, *Wärme- und Stoffübertragung*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [29] „2. Hauptsatz der Thermodynamik - Chemgapedia“. [Online]. Verfügbar unter: http://www.chemgapedia.de/vsengine/glossary/de/2_00046_00032hauptsatz_00032der_00032thermodynamik.glos.html. [Zugegriffen: 25-Mai-2018].
- [30] P. Böckh und T. Wetzel, *Wärmeübertragung*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2017.
- [31] „Basiswissen-Wrmebertrager_german.pdf“.
- [32] „Wärmeübertrager“. [Online]. Verfügbar unter: <http://www.chemie.de/lexikon/W%C3%A4rme%C3%BCbertrager.html>. [Zugegriffen: 25-Mai-2018].
- [33] „Berechnungsformeln für einen Wärmetauschers“. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.schweizer-fn.de/waerme/waermetauscher/waermetauscher.php>. [Zugegriffen: 14-Juni-2018].
- [34] S. A. Franke, „Produktionsbasierte Energiemodellierung lebensmittelprozesstechnischer Anlagen“, Technische Universität, München, 2015.
- [35] VDI e. V., Hrsg., *VDI-Wärmeatlas*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [36] S. Rönsch, *Anlagenbilanzierung in der Energietechnik*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2015.
- [37] R. Stieglitz und V. Heinzl, *Thermische Solarenergie: Grundlagen, Technologie,*

Anwendungen. Berlin: Springer Vieweg, 2012.

[38] C. Us u. a., „Multistream heat exchangers: Equation-oriented modeling and flowsheet optimization“, *McKetta Department of Chemical Engineering*. .

[39] „Plattenwärmeaustauscher“, *Linde Engineering*. [Online]. Verfügbar unter: http://www.linde-engineering.de/de/plant_components/plate_fin_heat_exchangers/index.html. [Zugegriffen: 19-Juni-2018].

[40] „Richtlinie für sichere Praxis in kryogenen Luftzerlegungsanlagen“..

[41] „Wärmeübertrager-Prinzipdarstellung“. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.acin.tuwien.ac.at/file/project/cds/Compact-plate-heat-exchangers/pheexplosionlarge.png>. [Zugegriffen: 20-Juni-2018].

[42] A. Bani und J. Peschel, „Fouling in Plate Heat Exchangers: Some Practical Experience“, in *Heat Exchangers - Basics Design Applications*, J. Mitrovic, Hrsg. InTech, 2012.

[43] M. Reich, „Bachelor-Thesis im Studiengang Prozess-, Energie-, und Umwelttechnik“, S. 84.

[44] T. M. Abou Elmaaty, A. E. Kabeel, und M. Mahgoub, „Corrugated plate heat exchanger review“, *Renew. Sustain. Energy Rev.*, Bd. 70, S. 852–860, Apr. 2017.

[45] L. Wang, B. Sundén, und R. M. Manglik, Hrsg., *Plate heat exchangers: design, applications and performance*. Southampton ; Boston: WIT Press, 2007.

[46] H. Müller-Steinhagen, „Cooling-Water Fouling in Heat Exchangers“, in *Advances in Heat Transfer*, Bd. 33, Elsevier, 1999, S. 415–496.

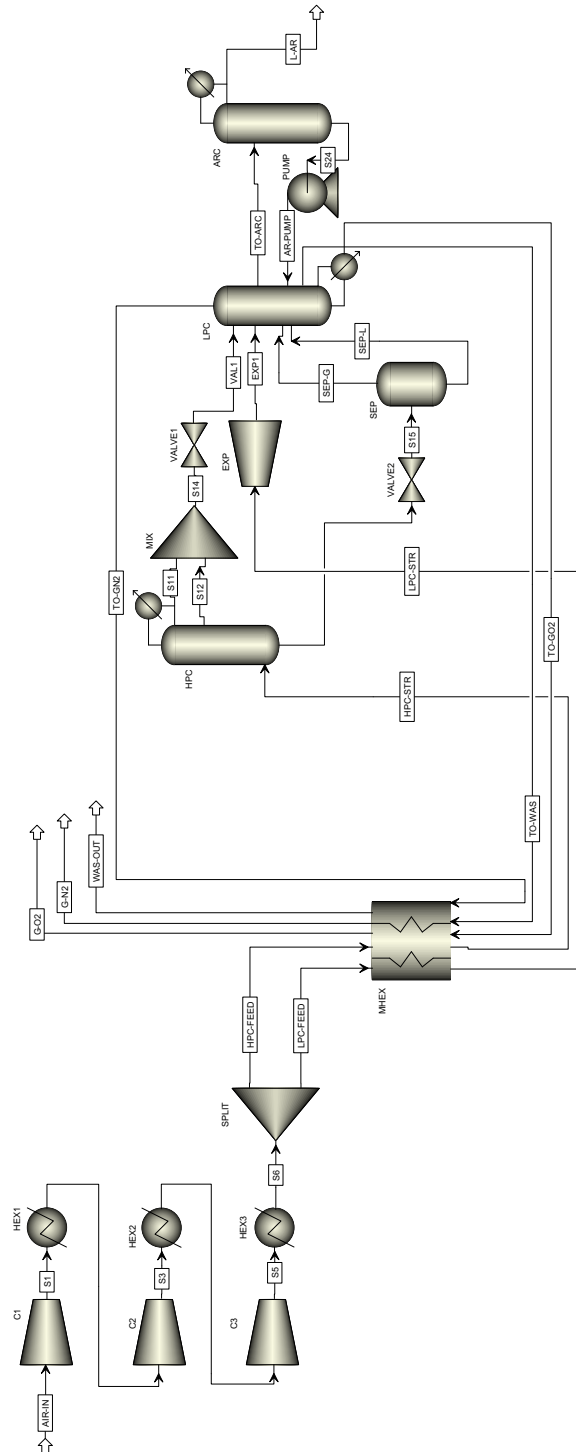
[47] C. Kail, „Analyse von Kraftwerksprozessen mit Gasturbinen unter energetischen, exergetischen und ökonomischen Aspekten“, S. 170.

[48] „Isentropic process“, *Wikipedia*. 01-Juli-2018.

[49] L. Fahrmeir, C. Heumann, R. Künstler, I. Pigeot, und G. Tutz, *Statistik: der Weg zur Datenanalyse*, 8., überarbeitete und ergänzte Auflage. Berlin Heidelberg: Springer Spektrum, 2016.

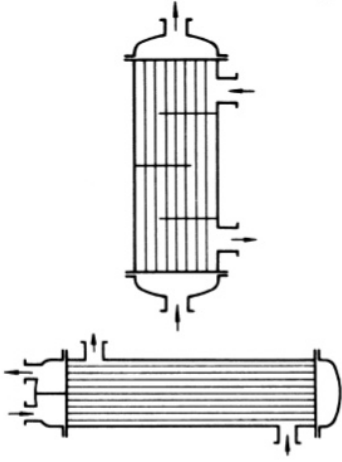
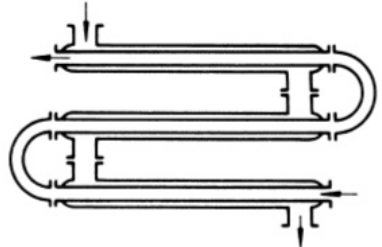
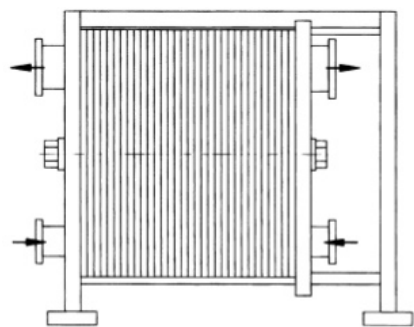
8 Anhang

8.1 Flowsheet mit MHEX



8.2 Übersicht über ausgewählte Bauarten von Wärmeübertragern

Tab. 8.1: Ausgewählte Bauarten von Wärmeübertragern nebst relevanter Übertragungsbedingungen und überschlägigen k -Werten [35].

Bauart	Übertragungsbedingungen	Überschlägiger k -Wert $W/m^2 \cdot K$
Rohrbündel-Wärmeübertrager 	Gas (1 bar) innerhalb und Gas (1 bar) außerhalb der Rohre	5 bis 35
	Flüssigkeit außerhalb (innerhalb) und Gas (1 bar) innerhalb (außerhalb) der Rohre	15 bis 70
Doppelrohr-Wärmeübertrager 	Gas (1 bar) innerhalb und Gas (1 bar) außerhalb der Rohre	10 bis 35
	Flüssigkeiten innerhalb und außerhalb der Rohre	300 bis 1400
Platten-Wärmeübertrager 	Ebene Kanäle, Gas an Wasser	20 bis 60
	Ebene Kanäle, Flüssigkeit an Wasser	350 bis 1200
	Profilplatten, Flüssigkeit an Flüssigkeit	1000 bis 4000

8.3 Spezifikation und Ergebnisse einer frühen Simulation des MHEX

Tab. 8.2: Übersicht der Spezifikationen/ Parametrierungen des MHEX in ASPEN PLUS

Inlet stream	HPC-FEED	LPC-FEED	TO-GO2	TO-GN2	TO-WAS
Exchanger side	HOT	HOT	COLD	COLD	COLD
Outlet stream	HPC-STR	LPC-STR	G-O2	G-N2	WAS-OUT
Decant stream					
Valid phases	Vapor-Liquid	Vapor-Liquid	Vapor-Liquid	Vapor-Liquid	Vapor-Liquid
Specification	Temperature	Temperature			
Value	-173,8	-133,2			
Units	C	C			
Pressure	5,7	5,9	0	0	0
Units	bar	bar	bar	bar	bar
Duty estimate					
Units	MW	MW	MW	MW	MW
Max. iterations	30	30	30	30	30
Tolerance	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001

Tab. 8.3: Simulationsergebnisse der MHEX-LZA in ASPEN PLUS.

Inlet stream		HPC-FEED	LPC-FEED	TO-GO2	TO-GN2	TO-WAS
Exchanger side		HOT	HOT	COLD	COLD	COLD
Outlet stream		HPC-STR	LPC-STR	G-O2	G-N2	WAS-OUT
Inlet temperature	C	29,96	29,96	-180,35	-194,20	-191,66
Inlet pressure	bar	6,12	6,12	1,35	1,2	1,21
Inlet vapor fraction		1	1	0	1	1
Outlet temperature	C	-173,8	-133,2	19,17	19,17	19,17
Outlet pressure	bar	5,7	5,9	1,35	1,2	1,21
Outlet vapor fraction		0,756	1	1	1	1
Duty	MW	-21,82	-2,52	5,90	3,60	14,84