


Flexibler Betrieb von Luftzerlegungsanlagen

Harald Klein^{1,*}, Philipp Fritsch¹, Patrick Haider¹, Robert Kender¹, Felix Rößler^{1,2}, Sebastian Rehfeldt¹, Pascal Freko², Rainer Hoffmann², Ingo Thomas² und Bernd Wunderlich²

DOI: 10.1002/cite.202000054

 This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution License, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Vor dem Hintergrund der Energiewende wird die aktuelle Forschung zum energieoptimalen, lastflexiblen Betrieb von Luftzerlegungsanlagen beschrieben. Zum einen wird ein realitätsgetreuer, druckgetriebener Ansatz zur dynamischen Simulation vorgestellt. Auf dessen Basis wird ein detailliertes, transientes Simulationsmodell einer realen Luftzerlegungsanlage, ein digitaler Zwilling, erstellt. Exemplarisch werden Simulationen extremer Betriebsszenarien, wie das Anfahren oder Abschalten des Hauptwärmeübertragers, der Trennkolonnen und der gesamten Luftzerlegungsanlage, beschrieben. Zum anderen wird die Lebensdauer des Hauptwärmeübertragers aufgrund der hohen thermischen Wechselbelastung mithilfe eines Prüfstands untersucht. Die aufgenommenen Daten dienen zur Ableitung und Validierung dreidimensionaler Simulationsmodelle.

Schlüsselwörter: Digitaler Zwilling, Dynamische Simulation, Flexibler Betrieb, Kryogene Rektifikation, Luftzerlegung, Plattenwärmeübertrager

Eingegangen: 31. März 2020; *revidiert:* 10. Juli 2020; *akzeptiert:* 14. September 2020

Flexible Operation of Air Separation Units

As part of the Energiewende, the current research on energy-optimized, flexible operation of air separation units is described. A realistic, pressure-driven approach for dynamic simulation is presented, which is used to provide a detailed, transient simulation model, a digital twin, of an air separation unit. Extreme operation scenarios, such as start-up and shutdown of the main heat exchanger, the distillation columns or the entire air separation unit, are described. Since the main heat exchanger experiences repeated temperature changes, its lifetime is investigated in a test rig. The gathered data is used to derive and validate three dimensional simulation models.

Keywords: Air separation unit, Cryogenic distillation, Digital twin, Dynamic simulation, Flexible operation, Plate-fin heat exchanger

1 Einleitung

Im Rahmen der BMBF-geförderten Kopernikus-Projekte wird im Teilprojekt „SynErgie“ die Lastflexibilisierung von industriellen Produktionsprozessen untersucht. Dabei liegt ein besonderer Fokus auf energieintensiven, verfahrenstechnischen Prozessen. Luftzerlegungsanlagen (LZA) weisen einen hohen Bedarf an elektrischer Energie auf. Die flüssigen Produkte einer LZA, Sauerstoff und Stickstoff, lassen sich vergleichsweise einfach mit hoher Energiedichte speichern. Die geschätzte Anschlussleistung von 930 MW liegt im einstelligen Prozentbereich des gesamten industriellen Stromverbrauchs in Deutschland. LZA stellen daher einen wesentlichen Flexibilisierungshebel innerhalb der großindustriellen Produktionsprozesse dar [1]. Im Zuge der Energiewende gewinnt die Lastflexibilisierung zunehmend an Bedeutung, da verstärkt Energie aus regenerativen Quellen genutzt wird, die in ihrer Verfügbarkeit eine hohe Volatilität

aufweisen. Der Einfluss einer volatilen Energieverfügbarkeit wird im SynErgie-Teilprojekt „FlexASU“ ganzheitlich betrachtet, so dass das Flexibilisierungspotenzial zunächst identifiziert und in einem zweiten Schritt gesteigert werden kann. FlexASU-Projektpartner sind die Linde GmbH, MAN Energy Solutions, die Technische Universität München, die

¹Prof. Dr.-Ing. Harald Klein, Philipp Fritsch, Patrick Haider, Robert Kender, Felix Rößler, Dr.-Ing. Sebastian Rehfeldt
harald.klein@tum.de

Technische Universität München, Lehrstuhl für Anlagen- und Prozesstechnik, Boltzmannstraße 15, 85748 Garching bei München, Deutschland.

²Felix Rößler, Pascal Freko, Dr.-Ing. Rainer Hoffmann, Dr. Ingo Thomas, Dr.-Ing. Bernd Wunderlich
Linde GmbH, Linde Engineering, Dr.-Carl-von-Linde-Straße 6–14, 82049 Pullach, Deutschland.

RWTH Aachen, die Universität der Bundeswehr München und die Technische Universität Berlin.

Für einen energieoptimalen, flexiblen Betrieb einer LZA ist die Entwicklung von neuartigen Prozessregelungsstrategien notwendig, die den gesamten Lastbereich der Anlage berücksichtigen. Für die Entwicklung dieser Prozessregelungsstrategien sind detaillierte dynamische Simulationsmodelle von LZA, digitale Zwillinge, erforderlich, die als Regelstrecke eingesetzt werden. Hinsichtlich des dynamischen Verhaltens sind der Hauptwärmeübertrager (HWÜ) sowie die beiden Trennkolonnen, die auf unterschiedlichen Druckniveaus betrieben werden, von besonderer Bedeutung. Der HWÜ ist meist als gelöteter Plattenwärmeübertrager (PFHE, engl.: *plate-fin heat exchanger*), aus Aluminium ausgeführt. Bei den Trennkolonnen kommen sowohl Packungs- als auch Bodenkolonnen zum Einsatz. Es wird ein physikalischer Modellierungsansatz beschrieben, bei dem die Prozessströme in der modellierten LZA und insbesondere in den genannten Apparaten aus Druckunterschieden und Strömungswiderständen resultieren. Dieser realitätsnahe Modellierungsansatz ist die Grundlage der in dieser Arbeit beschriebenen dynamischen Simulationsmodelle zur Entwicklung eines digitalen Zwillings einer kompletten, lastflexiblen LZA.

Der adaptive Betrieb einer LZA hat zur Folge, dass der HWÜ großen zeitlichen und örtlichen Temperaturunterschieden ausgesetzt wird, die zu hohen thermischen Belastungen führen können. Diese resultieren im schlimmsten Fall in einer mechanischen Schädigung des HWÜ. Um die Schadensmechanismen detailliert zu untersuchen, wurde ein Prüfstand für PFHE thermisch, fluiddynamisch und mechanisch ausgelegt, gefertigt, montiert und in Betrieb genommen [2]. Der Prüfstand ist mit umfangreicher Mesinstrumentierung ausgerüstet, wodurch dreidimensional aufgelöste Temperatur- und Dehnungsfelder im dynamischen Betrieb gewonnen werden. Diese Daten dienen unter anderem zur Validierung eines dreidimensionalen CFD-Modells für PFHE, das ebenfalls im Projekt entwickelt wurde. Mit diesem Modell ist es möglich, dreidimensionale Temperaturfelder dynamischer Betriebsszenarien zu berechnen. Als Eingangsparameter für weiterführende strukturelle Simulationen tragen diese Temperaturfelder zur Vorhersage der Lebensdauer von PFHE bei. In dieser Arbeit werden Messergebnisse, die mithilfe des Prüfstands ermittelt wurden, mit korrespondierenden Simulationsergebnissen des CFD-Modells verglichen.

2 Betrieb und Simulation von Luftzerlegungsanlagen

Im Folgenden werden die Grundlagen der Luftzerlegung beschrieben. In Abschn. 2.1 wird der Prozess der Luftzerlegung anhand einer beispielhaften, dem Stand der Technik entsprechenden LZA ohne Argonproduktion erläutert. In Abschn. 2.2 wird auf den flexiblen Betrieb von LZA einge-

gangen. Diese der volatilen Energieverfügbarkeit geschuldete Betriebsweise formuliert neue Ansprüche an die Simulation von LZA. Zunächst wird daher die Notwendigkeit der dynamischen Simulation von LZA begründet. Anschließend wird eine Übersicht über bisherige Anwendungen von dynamischen Simulationen von LZA gegeben.

2.1 Prozessbeschreibung

In Abb. 1 ist ein vereinfachtes Prozessflussbild einer LZA mit den wichtigsten Komponenten dargestellt. Der Hauptluftverdichter saugt Umgebungsluft durch einen Filter an und komprimiert diese auf ein Druckniveau von etwa 6 bar. Anschließend wird der Luftstrom in einer auf Kühlwasser basierenden Vorkühlung wieder auf Umgebungstemperatur abgekühlt. Im nächsten Schritt wird der Luftstrom in einem Adsorber gereinigt. Insbesondere Wasser, Kohlenstoffdioxid und andere Spurenkomponenten, die im kryogenen Teil der Anlage ausfrieren würden, werden entfernt. Der Luftstrom wird anschließend in zwei Ströme aufgeteilt. Die Hauptmenge wird direkt durch den als PFHE ausgeführten HWÜ geleitet, darin abgekühlt und teilweise verflüssigt. Ein kleinerer Stoffmengenstrom wird durch den Booster, einen weiteren Luftverdichter, geführt und auf ein höheres Druckniveau komprimiert. Im HWÜ wird dieser Strom abgekühlt und anschließend in einem Turboexpander entspannt. Die aus der Entspannung resultierende Abkühlung dieses Hochdruckluftstroms entspricht der für den kryogenen Prozess der Luftzerlegung erforderlichen Kälteleistung. Beide Teilströme werden nach dem HWÜ vereint und in den Rektifikationsteil der LZA eingespeist.

In diesem Teil der exemplarischen LZA werden die beiden Hauptbestandteile der Luft, Stickstoff und Sauerstoff, durch kryogene Rektifikation voneinander getrennt. Das Trennverfahren basiert auf den unterschiedlichen Siedetemperaturen von Stickstoff (ca. 80 K bei 1,013 bar) und Sauerstoff (ca. 90 K bei 1,013 bar). In einer LZA wird dieser Vorgang üblicherweise in zwei Kolonnen, einer Hoch- und einer Niederdruckkolonne, durchgeführt. Die unterschiedlichen Druckniveaus ermöglichen eine energetisch vorteilhafte, thermische Kopplung zwischen dem Verdampfer der Niederdruckkolonne und dem Kondensator der Hochdruckkolonne [3].

Der Leichtsieder, Stickstoff, reichert sich am Kopf der Niederdruckkolonne an und kann dort in reiner Form gewonnen werden. Der Schwertsieder, Sauerstoff, reichert sich am Sumpf der Niederdruckkolonne an und kann dort ebenfalls hochrein abgezogen werden. Stickstoff und Sauerstoff können je nach Betriebsmodus entweder in flüssiger Form als LIN (engl.: *liquid nitrogen*) und LOX (engl.: *liquid oxygen*) gewonnen werden oder zurück durch den HWÜ geleitet, darin verdampft und als gasförmige Produkte GAN (engl.: *gaseous nitrogen*) und GOX (engl.: *gaseous oxygen*) gewonnen werden.

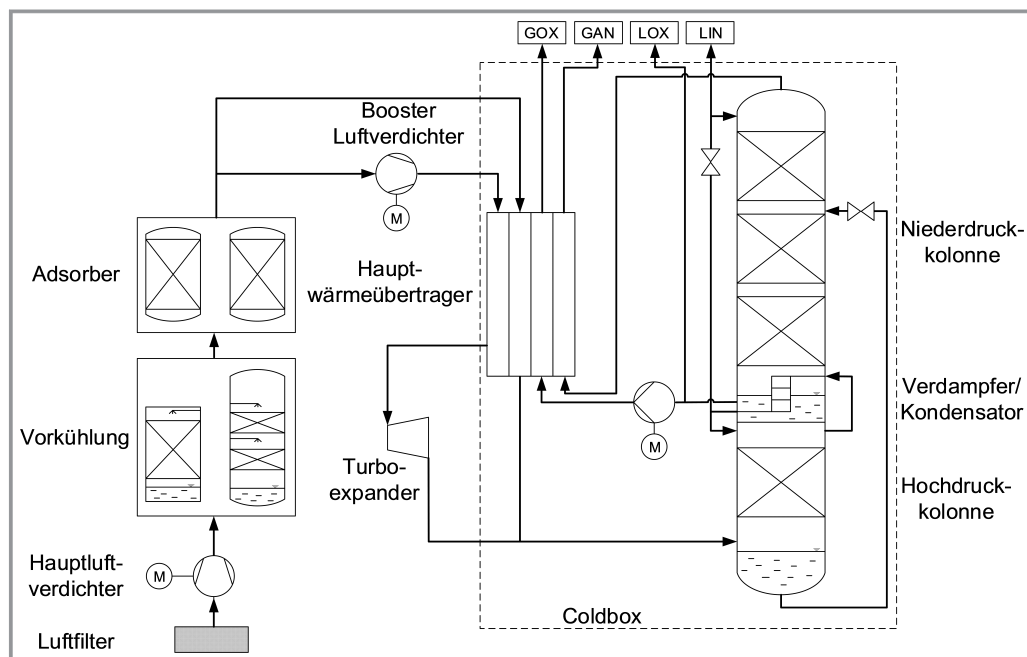


Abbildung 1. Beispielhaftes Prozessfließbild einer LZA [2].

Das dargestellte Fließbild zeigt eine beispielhafte Prozessvariante der Luftzerlegung. Je nach erforderlichem Verhältnis von gasförmigen und flüssigen Produkten können alternative Konzepte für die Bereitstellung der Kälteleistung eingesetzt werden. Zudem ist es insbesondere in größeren Anlagen üblich, den Rektifikationsteil mit zusätzlichen Kolonnen zu erweitern, welche die Abtrennung von Argon als Mittelsieder zwischen Stickstoff und Sauerstoff ermöglichen. Weitere Details zum Prozess der Luftzerlegung sind in der weiterführenden Literatur beschrieben [4, 5].

2.2 Simulation und Optimierung des flexiblen Betriebs von Luftzerlegungsanlagen

Um eine LZA lastflexibel und effizient zu betreiben, ist deren Betriebsmodus an die volatile Verfügbarkeit regenerativer Energien anzupassen. Der energieoptimale Betrieb der LZA stellt dabei die primäre Zielsetzung dar. Einerseits kann die längerfristige Betriebsplanung (engl.: *scheduling*) an die erwartete Verfügbarkeit erneuerbarer Energiequellen angepasst werden. Andererseits kann kurzfristig auf Schwankungen der Energieverfügbarkeit reagiert werden, indem der Anlagenbetrieb unmittelbar reguliert wird.

Für die längerfristige Betriebsplanung einer LZA wird das sogenannte *Demand Side Management* (DSM) angewendet, bei dem die Fahrweise der LZA an die Verfügbarkeit erneuerbarer Energien und damit den Energiepreis angepasst wird [6, 7]. Dazu wird ein dynamisches Optimierungsproblem definiert, dem die Minimierung der Betriebskosten als Zielfunktion zugrunde liegt [8]. Diese Problemstellung

entspricht der Optimierung eines gemischt-ganzzahligen, linearen Problems (engl.: *mixed-integer linear programming*, MILP). Die Optimierung nutzt sogenannte Surrogatmodelle der zu optimierenden LZA, um die Komplexität der Problemstellung zu reduzieren [7]. Dabei handelt es sich um Ersatzmodelle, die entweder auf historischen Anlagendaten [8–10] oder auf stationären Simulationen verschiedener Betriebspunkte [6, 9–15] basieren. Das dynamische Verhalten von Lastwechselvorgängen wird durch die Formulierung von Nebenbedingungen abgebildet. Es wird insbesondere die maximal mögliche Lastwechselgeschwindigkeit nach oben begrenzt [6, 8–10, 12–14, 16, 17]. Zudem werden Anfahrvorgänge und Anlagenstopps berücksichtigt [9, 14]. Des Weiteren betrachten Obermeier et al. den Aspekt der Lebensdauer kritischer Anlagenkomponenten [6, 18]. Ein aktuelles Beispiel für DSM bei fluktuierender Energieverfügbarkeit am Beispiel einer LZA findet sich in Kelley et al. [19].

Die Genauigkeit der Vorhersage der dominierenden Zeitkonstanten von Lastwechselvorgängen der betrachteten LZA hat großen Einfluss auf das Optimierungsergebnis. Unter dem Begriff Zeitkonstante wird im Allgemeinen die charakteristische Dauer eines physikalischen Vorgangs verstanden. Die Zeitkonstanten können entweder durch eine Betrachtung von Betriebsdaten realer Anlagen oder mithilfe dynamischer Anlagenmodelle bestimmt werden. Betriebsdaten sind oftmals nur in begrenztem Umfang zugänglich oder liegen nicht in hinreichender Datenqualität vor. Zudem sind Messdaten, insbesondere im hochgradig dynamischen Betrieb einer LZA, häufig fehlerbehaftet. Darüber hinaus können Betriebsdaten bestehender LZA für die Vorhersage von Zeitkonstanten neuer LZA lediglich als

Richtwerte verwendet werden, da jede LZA ein individuelles Betriebsverhalten aufweist. Dies unterstreicht die Notwendigkeit detaillierter, dynamischer Simulationsmodelle für LZA als Ersatz für Betriebsdaten, um auch für neue LZA Zeitkonstanten mit hoher Genauigkeit zu präzisieren. Außerdem sind detaillierte, dynamische Simulationen nicht auf eine bestimmte Anzahl an Messstellen limitiert. So liegen in einer dynamischen Simulation zu allen Zeitpunkten Informationen wie beispielsweise Druck, Temperatur und Zusammensetzung der Prozessfluide in sämtlichen berechneten verfahrenstechnischen Apparaten vor.

Um auf kurzfristige Schwankungen der Energieverfügbarkeit zu reagieren, werden neuartige Regelungskonzepte, basierend auf nichtlinearer, modellprädiktiver Regelung (engl.: *nonlinear model predictive control*, NMPC), eingesetzt. Pattison et al. [20] stellen die These auf, dass die Anzahl an Lastwechselfvorgängen von LZA aufgrund der steigenden Volatilität der Energieverfügbarkeit und eines stark schwankenden Energiemarktes deutlich zunehmen wird. Die Autoren gehen davon aus, dass eine LZA in diesem dynamischen Umfeld nie einen stationären Zustand erreichen wird [20]. Es ist daher erforderlich, den flexiblen Betrieb einer LZA und die Betriebsplanung direkt miteinander zu koppeln. Für diese Kopplung stehen zwei unterschiedliche Paradigmen zur Auswahl, Bottom-up- und Top-down-Ansätze. Beim Top-down-Ansatz wird ein hierarchischer Ansatz verfolgt, bei dem DSM-Probleme offline gelöst werden, um ökonomisch optimale Sollwerte für die Anlagenregelung zu berechnen. Weitere Informationen zum Top-down Ansatz können Caspari et al. entnommen werden [21]. Ein Beispiel für den Bottom-up-Ansatz ist das sogenannte *economic* NMPC (eNMPC). Dabei wird parallel zum Betrieb eine dynamische Optimierung eines rigorosen Modells der realen Anlage (Regelmodell) mit einer hinterlegten ökonomischen Zielfunktion durchgeführt [21]. Gemäß des Optimierungsergebnisses werden einerseits die Betriebsplanung und andererseits die Eingangsgrößen der Basisregelung hinsichtlich eines energieoptimalen Betriebs angepasst [22–25]. Caspari et al. [22] wenden eNMPC auf ein dynamisches Modell einer Stickstoffanlage an. Die betrachtete Stickstoffanlage umfasst, verglichen mit der LZA in Abb. 1, lediglich die untere der beiden Trennkolonnen, die Druckkolonne. In Caspari et al. [26] wird dieser Ansatz auf eine LZA zur Stickstoff- und Sauerstoffproduktion analog zu Abb. 1 erweitert. In beiden Fällen werden rigorose, dynamische Anlagenmodelle optimiert, die durch vereinfachende Annahmen, wie lineare Druckverlustkorrelationen in den Trennkolonnen, in ihrer Komplexität reduziert sind [22, 26]. Darüber hinaus, wird in Caspari et al. [27] ein eNMPC-Problem einer Stickstoffanlage gelöst, bei dem zwei klassische Modellreduktionsansätze für Trennkolonnen, die Zusammenfassung mehrerer theoretischer Trennstufen in Kompartments [28] und das nichtlineare Wellenmodell [29], kombiniert werden.

Eine weitere Anwendung der dynamischen Simulation von LZA ist die Optimierung von Lastwechselfvorgängen.

Bereits Engl et al. [30] und Kröner et al. [31] stellen Simulationsstudien zur Optimierung von Lastwechselgeschwindigkeiten in einem Lastbereich von 60–100 % vor. Cao et al. unterstreichen die Bedeutung von schnellen Lastwechseln im Hinblick auf einen effizienten, flexiblen Betrieb von LZA. Der Fokus in diesen Arbeiten liegt auf der Identifikation von Engpässen und Limitierungen (engl.: *debottlenecking*), die schnelle Lastwechsel verhindern [12, 32]. Ein aktuelles Beispiel für die Optimierung von Lastwechselfvorgängen kann Schäfer et al. entnommen werden [33].

Die steigende Volatilität erneuerbarer Energiequellen resultiert in einer Erweiterung des Lastbereichs, in dem LZA betrieben werden. Dadurch gewinnen extreme Lastwechselszenarien, wie das Anfahren oder Abschalten von LZA, an Bedeutung. Diese neuen Betriebsszenarien sind simulativ abzubilden. Mit einer zunehmenden Anzahl an lastflexibel betriebenen LZA kommt somit auch der dynamischen Simulation dieser Anlagen eine zunehmende Bedeutung zu. Wunderlich [34] entwickelte daher ein druckgetriebenes, dynamisches Modell der thermisch gekoppelten Trennkolonnen einer LZA ohne Argonproduktion. Im Gegensatz zur Modellierung nach Kröner et al. [31] ist der Lastbereich des Modells nicht auf 60–100 % beschränkt, sondern deckt den kompletten Lastbereich ab. Das Kolonnenmodell nach Wunderlich [34] wird im Rahmen des Projekts „FlexASU“ weiterentwickelt. Darüber hinaus werden weitere druckgetriebene, dynamische Modelle von verfahrenstechnischen Grundoperationen entwickelt, um die Bereitstellung eines Gesamtanlagenmodells, eines digitalen Zwillinges, zu ermöglichen. Dieses Modell bildet das Verhalten einer LZA im gesamten Lastbereich realitätsgetreu ab. Neben den Trennkolonnen beeinflusst der HWÜ das dynamische Verhalten einer LZA maßgeblich. Bei Anfahr- oder Abschaltprozessen einer LZA ist die adäquate, detaillierte Modellierung der thermischen Trägheit des HWÜ entscheidend, um die dominierenden Zeitkonstanten dieser Vorgänge akkurat vorherzusagen. Zudem ist, aufgrund der ausgeprägten Wärmeintegration einer LZA, eine hohe Simulationsgenauigkeit des HWÜ unabdingbar, um physikalische Vorgänge in einer LZA akkurat darzustellen. In Abschn. 3 werden druckgetriebene, dynamische Modelle des HWÜ, der Trennkolonnen und einer Gesamtanlage, entwickelt von Kender et al. vorgestellt [35–38].

Die Anpassung der Betriebsplanung ist eine Möglichkeit, den veränderten Anforderungen an eine flexibel betriebene LZA Rechnung zu tragen. Alternativ kann eine LZA apparatentechnisch angepasst werden. Miller et al. befassen sich beispielsweise mit konstruktiven Modifikationen des kryogenen Rektifikationssystems, um Wiederanfahrvorgänge zu beschleunigen [39]. Dieser Ansatz soll im Rahmen dieser Arbeit nicht weiterverfolgt werden.

Neben der dynamischen Simulation von LZA wird in dieser Arbeit besonderes Augenmerk auf eine detaillierte Betrachtung von PFHE unter thermischer Wechselbelastung gelegt. Ein Prüfstand zur experimentellen Analyse von thermischen Belastungen wird in Abschn. 4.1 beschrieben. Die-

ser wird unter anderem zur Validierung des in Abschn. 4.2 vorgestellten, dreidimensionalen CFD-Modells für PFHE eingesetzt. Auch andere Gruppen haben sich bereits mit thermischen Belastungen von PFHE auseinandergesetzt. Carter et al. stellen beispielsweise eine Methodik zur Schadensanalyse und Lebensdauerabschätzung von PFHE vor [40]. Li et al. optimieren die Struktur von PFHE hinsichtlich der mechanischen Belastung im kryogenen Betrieb [41].

3 Druckgetriebener Ansatz zur dynamischen Simulation von flexiblen Prozessen

Die Simulation flexibel betriebener Anlagen formuliert neue Anforderungen an die eingesetzten Modelle, die diesen hochgradig transienten Betriebsmodus beschreiben. Es sind dynamische Modelle erforderlich, die den kompletten Lastbereich solcher Anlagen akkurat beschreiben und Extrem-szenarien wie Anfahrvorgänge oder einen plötzlichen Anlagenstopp simulieren können. Dadurch wird inhärent sichergestellt, dass alle Lastzustände zwischen diesen beiden Extremzuständen ebenfalls abgebildet werden können [34, 36–38]. Daher ist der Fokus der Simulationen nicht, wie z. B. bei der Prozessauslegung, ausschließlich darauf gerichtet, einzelne Betriebspunkte mit hoher Genauigkeit abzubilden, sondern auch das transiente Anlagenverhalten bei Lastwechselfvorgängen. In dieser Arbeit wird zur dynamischen Simulation flexibel betriebener LZA ein physikalisch motivierter, druckgetriebener Simulationsansatz nach Thomas et al. eingesetzt [42]. Ein weiteres Beispiel für die Anwendung eines druckgetriebenen Simulationsansatzes für den flexiblen Betrieb der 1,2-Dichloroethansynthese wird von Hoffmann et al. [43] erläutert.

3.1 Grundlagen des druckgetriebenen Ansatzes

Um die in Abb. 1 dargestellte LZA mit dem druckgetriebenen Ansatz nach Thomas et al. [42] zu modellieren, wird diese als Druck-Netzwerk interpretiert. Die Randbedingungen dieses Druck-Netzwerks sind die ein- und austretenden Prozessströme. Diese entspringen oder münden in sog. Battery Limits, die den Druck der ein- oder austretenden Prozessströme festlegen. Entsprechend des festgelegten Druckniveaus und des Strömungswiderstands im Druck-Netzwerk ergibt sich der Stoffmengenstrom, der in das Druck-Netzwerk einströmt oder aus diesem austritt [35, 42].

Die Battery Limits stellen somit zum einen Quellen für Prozessströme dar, die in das Druck-Netzwerk eintreten. Dabei definieren die Quellen die Zusammensetzung und den thermodynamischen Zustand des eintretenden Prozessstroms. Bei der Modellierung der LZA aus Abb. 1 wird beispielsweise der Austrittszustand des Hauptluftverdichters als Quelle eines Prozessstroms bei vorgegebenem Prozessdruck modelliert.

Zum anderen fungieren Battery Limits als Senken für die aus dem Druck-Netzwerk austretenden Prozessströme. Die Zusammensetzung und der thermodynamische Zustand werden in diesem Fall durch den Prozessstrom, der in die Senke eintritt, festgelegt. Beispielsweise münden die Produktströme der LZA (Abb. 1) in Senken, die das gewünschte Druckniveau der Produkte festlegen.

In Abhängigkeit der Strömungsrichtung, die sich gemäß dem druckgetriebenen Modellierungsansatz im Strömungsweg, der an das jeweilige Battery Limit angrenzt, einstellt, kann dieses entweder als Quelle oder als Senke für Prozessströme fungieren. Der Begriff des Strömungswegs wird im Folgenden genauer erläutert [35, 42].

Innerhalb des Druck-Netzwerks wird zwischen Druckknoten und Druck-Strom-Units unterschieden. Druckknoten sind finite Volumina, die je nach thermodynamischem Zustand eine bestimmte Menge eines Prozessfluids speichern. In den jeweiligen Druckknoten wird über die Bedingung, dass das thermodynamische Volumen des Prozessfluids V_{TD} das spezifizierte geometrische Volumen des Druckknotens V_{geo} einnimmt, implizit der Druck berechnet [34]. Folglich sind sowohl in einem Druckknoten als auch in einem Battery Limit alle Informationen über die Zusammensetzung und den thermodynamischen Zustand des Fluids bekannt. Apparate technisch repräsentieren Druckknoten z. B. Flash-Behälter, Kolonnenböden, Kondensatoren, Verdampfer oder Vorlagebehälter.

Eine Druck-Strom-Unit ist hingegen ein Holdup-freies Modell, das keine Speicherkapazität für ein Prozessfluid aufweist und zwei Druckknoten oder Battery Limits miteinander verbindet. Gemäß der Druckdifferenz zwischen den beiden anliegenden Druckknoten oder Battery Limits wird in einer Druck-Strom-Unit der entsprechende Stoffmengenstrom des Prozessfluids berechnet. Dieses strömt vom Druckknoten höheren Drucks zum Druckknoten niedrigeren Drucks. Die Bestimmung des Stoffmengenstroms innerhalb des Strömungswegs einer Druck-Strom-Unit erfolgt gemäß dem generischen, quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhang nach Thomas et al. [42]. Ein Strömungsweg ist somit als Kombination von zwei Druckknoten oder Battery Limits definiert, die durch eine oder mehrere Druck-Strom-Units verknüpft sind. In Abb. 2 ist ein generisches Beispiel eines Strömungswegs mit zwei Druckknoten, die durch eine Druck-Strom-Unit verknüpft sind, dargestellt. Somit können Einbauten oder Apparate, die eine Druckdifferenz zwischen zwei benachbarten Druckknoten hervorrufen, durch Druck-Strom-Units repräsentiert werden. Beispielsweise können Druckverlustkorrelationen in Kolon-

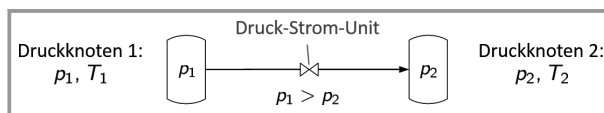


Abbildung 2. Generische Darstellung eines Strömungswegs [35].

nen und Wärmeübertragern, Pumpen, Expander, Ventile o. Ä. durch Druck-Strom-Units modelliert werden [35, 36].

In jeder Druck-Strom-Unit wird der generische, quasi-lineare Druck-Strom-Zusammenhang

$$C\Delta p = R\dot{N} \quad (1)$$

berechnet. Dabei wird die Druckdifferenz Δp über die Widerstandsbeiwerte C und R mit dem Stoffmengenstrom \dot{N} ins Verhältnis gesetzt. Eine Besonderheit dieses Ansatzes ist, dass die Strömungsrichtung des Fluids nicht vorgegeben, sondern durch die Druckdifferenz $\Delta p = p_1 - p_2$ bestimmt wird. Somit können Strömungsszenarien wie Vorwärts- ($p_1 > p_2$, s. Abb. 2), Rückwärts- ($p_1 < p_2$), sowie Nullströmung ($p_1 = p_2$) simuliert werden. Die Widerstandsbeiwerte C und R können durch beliebige Funktionen bestimmt werden, wobei sowohl lineare als auch nichtlineare Druck-Strom-Zusammenhänge abgebildet werden können. Um numerische Singularitäten zu vermeiden, ist durch adäquate Modellierung lediglich sicherzustellen, dass der Widerstandsbeiwert C nicht gegen unendlich geht und der Widerstandsbeiwert R ungleich null bleibt. [34–38, 42]

3.2 Ergebnisse der Simulationsstudien

Im Folgenden werden Ergebnisse von Simulationsstudien detaillierter dynamischer Modelle der wichtigsten Bestandteile der in Abb. 1 dargestellten LZA vorgestellt. Die Modelle des HWÜ und der Trennkolonnen basieren auf dem druckgetriebenen Modellierungsansatz nach Thomas et al. [42]. Darüber hinaus werden Fallstudien von extremen Lastwechselszenarien, wie dem Anfahren oder dem plötzlichen Abschalten einer LZA, präsentiert. Abschließend wird das dynamische Modell einer gesamten LZA am Beispiel eines warmen Anfahrvorgangs vorgestellt, das unter anderem die Teilmodelle des HWÜ und der Trennkolonnen beinhaltet.

3.2.1 Hauptwärmeübertrager

Wie Abb. 1 zeigt, ist der HWÜ ein zentraler Bestandteil jeder LZA. Der HWÜ dient der Wärmeübertragung zwischen warmen und kalten Prozessfluiden und der Wärmeintegration des Gesamtprozesses. Einerseits weist der HWÜ

bei Anfahr- und Lastwechselfvorgängen sowie bei Anlagenstopps eine hohe thermische Trägheit auf, die in einer dynamischen Simulation zu berücksichtigen ist, um die transienten Zeitskalen mit hoher Genauigkeit wiederzugeben. Andererseits ist das hohe Maß an Wärmeintegration im HWÜ mit hinreichender Genauigkeit abzubilden, um reale Betriebsszenarien akkurat zu beschreiben. Der HWÜ einer LZA ist meist als gelöteter PFHE aus Aluminium ausgeführt (s. Abb. 3a) und setzt sich aus einem oder mehreren Modulen zusammen, die eine hohe spezifische Wärmeübertragungsfläche zur Verfügung stellen. Die Prozessfluide werden dem Apparat über je einen Header zugeführt. Innerhalb eines Moduls durchströmt je ein Prozessfluid eine Finstruktur (s. Abb. 3b). Die Finstruktur setzt sich aus dem eintrittsnahen Verteiler, dem Kernbereich und dem austrittsnahen Sammler zusammen. Die Finstruktur ist durch Seitenleisten und Trennbleche von der Umgebung und benachbarten Finstrukturen abgegrenzt und stellt einen abgeschlossenen Strömungsraum, eine Passage, dar. Durch ein Trennblech wird Wärme indirekt von einem warmen auf ein kaltes Prozessfluid übertragen [35].

Die Modellierung des HWÜ im Rahmen einer Prozesssimulation erfolgt mit eindimensionalen, entlang der Hauptströmungsrichtung der Prozessfluide im PFHE diskretisierten Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Bei der Modellierung der Energiebilanz ist der konvektive Wärmeübergang

$$\dot{Q}_\alpha = \alpha A_{\text{eff}}(T_{\text{Metall}} - T_{\text{Fluid}}) \quad (2)$$

zwischen der Metallmasse des HWÜ und den Prozessfluiden entscheidend. Die Triebkraft für den konvektiven Wärmeübergang ist die Differenz zwischen der Metalltemperatur T_{Metall} und der Temperatur des Prozessfluids T_{Fluid} . Der Wärmeübergangskoeffizient α und die effektive Wärmeübertragungsfläche A_{eff} stellen die Schnittstelle für die Einbindung von Auslegungskorrelationen für den Wärmeübergang in die Prozesssimulation dar. Für die Anwendung des Wärmeübertragermodells im Rahmen eines digitalen Zwillinges einer LZA ist entscheidend, dass Prozesssimulationen bezüglich des konvektiven Wärmeübergangs in Auslegungsgenauigkeit durchgeführt werden können [35].

Im Hinblick auf die Einbindung eines Wärmeübertragers in das Druck-Netzwerk nach Thomas et al. [42] wird die

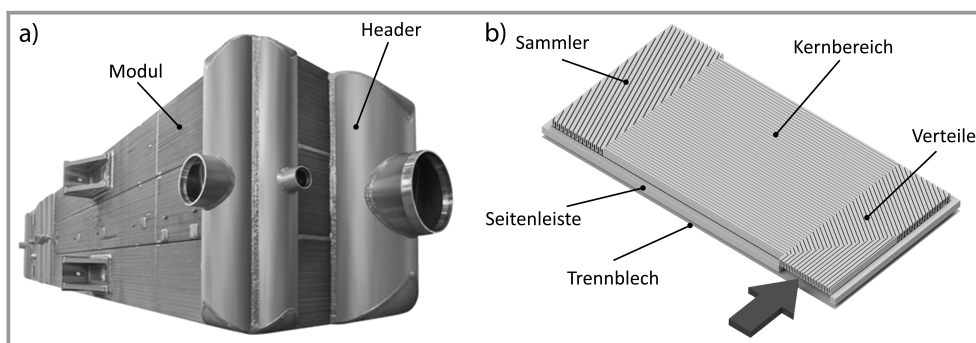


Abbildung 3. a) Konstruktive Ausführung eines PFHE und b) Details der Geometrie im Inneren eines PFHE [2, 35].

Impulsbilanz der Prozessfluide näher betrachtet. Wird angenommen, dass die Impulsdynamik deutlich schneller abläuft als Massen- sowie Energiedynamik und Einflüsse von Potenzialen, wie der Gravitation, vernachlässigbar sind, resultiert eine quasi-stationäre, eindimensionale Impulsbilanz eines Prozessfluids. Üblicherweise wird diese in der Verfahrenstechnik als Druckverlustkorrelation formuliert:

$$\Delta p = \Delta p_B + \Delta p_R = f(\dot{N})\dot{N} \quad (3)$$

Der Gesamtdruckverlust Δp setzt sich aus einem Druckverlust infolge der Änderung des Strömungsimpulses Δp_B (Beschleunigungsdruckverlust) und Reibungsdruckverlusten Δp_R zusammen. Für einen PFHE kann der Gesamtdruckverlust Δp als Produkt einer vom Stoffmengenstrom \dot{N} abhängigen Funktion $f(\dot{N})$ und des Stoffmengenstroms \dot{N} formuliert werden. Gl. (3) stellt eine Analogie zum generischen, quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhang der druckgetriebenen Prozesssimulation (s. Gl. (1)) nach Thomas et al. [42] dar. Der Widerstandsbeiwert C nimmt für den Anwendungsfall eines PFHE konstant den Wert 1 an. Der Widerstandsbeiwert R wird durch die Funktion $f(\dot{N})$ ausgedrückt. Diese Funktion beinhaltet die Auslegungskorrelationen für den Druckverlust in einem PFHE [35, 42].

Im Folgenden wird das Verhalten des HWÜ einer LZA während eines warmen Anfahrvorgangs nach Kender et al. anhand einer druckgetriebenen, dynamischen Simulation beschrieben [35]. Zu Beginn eines warmen Anfahrvorgangs liegt die gesamte LZA bei Umgebungsbedingungen vor. Die betrachtete LZA ist mit der in Abb. 1 dargestellten Anlage vergleichbar, erzeugt jedoch ausschließlich gasförmige Produkte. Aufgrund des druckgetriebenen Ansatzes ist es möglich, die LZA in der Simulation aus dem Zustand der Nullströmung anzufahren. Der betrachtete HWÜ verfügt über sechs Passagen für die verschiedenen Prozessfluide. Ein Prozessstrom vorgereinigter Umgebungsluft wird auf einen Betriebsdruck von etwa 6,7 bar verdichtet und auf zwei Passagen aufgeteilt. Der kleinere der beiden Luftströme, der sogenannte Turbinenstrom (Luft 1), durchströmt den HWÜ nur auf einem Teil der Gesamtlänge und wird anschließend in einer Expansionsturbine entspannt. Im Gegensatz zu der in Abb. 1 dargestellten LZA entfällt im hier betrachteten Szenario die Nachverdichtung des Turbinenstroms. Der andere Luftstrom (Luft 2), der dem Hauptluftstrom in Abb. 1 entspricht, durchströmt hingegen die gesamte Länge des HWÜ. Beide Luftströme Luft 1 und Luft 2 werden im HWÜ auf ein kryogenes Temperaturniveau abgekühlt und den Trennkolonnen der LZA zugeführt. Die beiden stickstoffreichen Produktströme GAN und UN2 sind Produkte der Niederdruckkolonne. GAN und UN2 liegen daher bei einem niedrigen Prozessdruck von etwa 1,3 bar vor und durchströmen den HWÜ auf ganzer Länge. Der stickstoffreiche Produktstrom PGAN (engl.: *pressurized GAN*) ist ein Produktstrom der Hochdruckkolonne und liegt im stationären Betrieb bei einem Druck von etwa 6,3 bar vor. Der sauerstoffreiche Produktstrom GOX wird durch das Ver-

dampfen von flüssigem Sauerstoff, einem Produkt der Niederdruckkolonne, gewonnen und liegt auf einem Druckniveau von 2,3 bar vor. GOX und PGAN durchströmen den HWÜ nicht auf ganzer Länge. Alle Produktströme werden im HWÜ von kryogenen Temperaturen auf Umgebungsbedingungen angewärmt.

Der Anfahrvorgang der LZA nach Kender et al. [35] gliedert sich in vier Abschnitte: Druckaufbau, Abkühlvorgang, Annäherung an den Betriebszustand und GOX-Gewinnung. Die zeitlichen Verläufe der Prozessdrücke p und der Stoffmengenströme \dot{N} in den Passagen des HWÜ sind Abb. 4 zu entnehmen. Die Stoffmengenströme sind auf den Stoffmengenstrom \dot{N}_{stat} im stationären Betrieb der LZA normiert.

Während des Druckaufbaus wird der Hauptluftverdichter der LZA in Betrieb genommen. Daher steigt der Prozessdruck in den beiden Luftpassagen Luft 1 und Luft 2 bis zu einer Simulationszeit von 0,7 h sukzessive bis auf den gewünschten Druck von 6,7 bar an. Die beiden Luftströme werden als Feed in die Trennkolonnen der LZA eingespeist. In der Folge nimmt auch der Druck in den Trennkolonnen zu. Somit steigen die Drücke in den Passagen der Produktströme GAN, UN2 und PGAN bis auf das gewünschte Druckniveau. Nach einer Simulationszeit von etwa 1,3 h ist der Druckaufbau abgeschlossen. Während des Druckaufbaus steigen die Stoffmengenströme, die durch die Passagen Luft 1, Luft 2, GAN, UN2 und PGAN des HWÜ strömen, kontinuierlich an. Am Ende des Druckaufbaus erreichen diese jeweils einen konstanten Wert, der über den restlichen Abkühlvorgang gehalten wird. Der Abkühlvorgang ist nach einer Simulationszeit von 4,2 h abgeschlossen. Durch eine Anpassung der Strömungswiderstände der LZA, u. a. durch veränderte Ventilstellungen, werden die Stoffmengenströme anschließend bis zu einer Simulationszeit von 5,5 h an die gewünschten Werte im stationären Betrieb angepasst. Bis zu diesem Zeitpunkt ist die GOX-Passage nicht durchströmt, da noch kein Sauerstoffprodukt erzeugt wird. Zwischen 5,5 und 5,7 h Simulationszeit wird die GOX-Passage in Betrieb genommen. Anschließend weisen sowohl die Drücke als auch die Stoffmengenströme in den Passagen stationäre Werte auf.

Die Randbedingungen der Prozessdrücke und Stoffmengenströme in den Passagen resultieren in einem charakteristischen Temperaturprofil über der Länge des HWÜ in Hauptströmungsrichtung [35]. Diese Temperaturprofile sind in Abb. 5 zu ausgewählten Zeitpunkten während des vereinfachten Anfahrvorgangs dargestellt.

Zu Beginn des warmen Anfahrvorgangs liegen die Passagen- und Metalltemperaturen des HWÜ konstant bei Umgebungstemperatur vor. Nach einer Simulationszeit von 1,5 h beginnt der Abkühlvorgang. Durch die Entspannung des Luftstroms Luft 1 in der Expansionsturbine kühlt sich der Tieftemperaturteil der LZA mit den Trennkolonnen sukzessive ab. Daher nimmt auch die Temperatur der Produktströme GAN, PGAN und UN2 am Eintritt in den HWÜ ab. Dies führt zu einer Abkühlung des HWÜ ausgehend vom kalten Ende bei einer Länge von 4,35 m. Nach

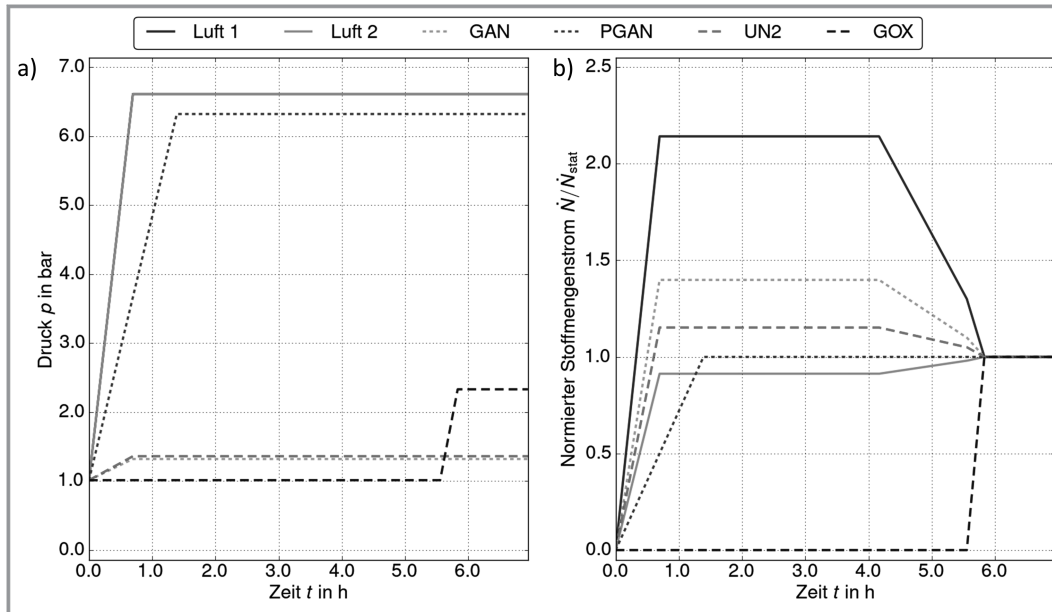


Abbildung 4. Zeitlicher Verlauf a) des Drucks und b) des normierten Stoffmengenstroms in den Passagen des HWÜ einer LZA während eines warmen Anfahrvorgangs [35].

einer Simulationszeit von 2,8 h (Abb. 5a) beträgt die Metalltemperatur am kalten Ende des HWÜ etwa 185 K. Die Auswirkungen des Abkühlvorgangs sind auf ganzer Länge des HWÜ bis zum warmen Ende zu beobachten. Nach einer Simulationszeit von 4,1 h ist der Abkühlvorgang abgeschlossen und das kalte Ende erreicht ein kryogenes Temperaturniveau von etwa 135 K. Es stellt sich ein nahezu lineares Temperaturprofil über die Länge des HWÜ ein. Die Anpassung der Stoffmengenströme während der Annäherung an den stationären Betrieb resultiert in einer Veränderung des Verhältnisses von warmen und kalten Wärmekapazitätsströmen. Ein Wärmekapazitätsstrom ist als Produkt aus Massenstrom und spezifischer Wärmekapazität des jeweiligen Prozessfluids definiert. Es liegt kurzzeitig ein Überschuss warmer Wärmekapazitätsströme vor, da der HWÜ noch nicht im Auslegungsfall betrieben wird. Das Temperaturprofil verschiebt sich zu wärmeren Temperaturen und weist einen gekrümmten Verlauf auf (Abb. 5b). Zudem weist der HWÜ am warmen Ende einen Pinch auf, was sich in einer sehr geringen Temperaturdifferenz zwischen warmen und kalten Strömen äußert. Durch die Inbetriebnahme der GOX-Passage wird der Überschuss warmer Wärmekapazitätsströme ausgeglichen. Das Temperaturprofil wird zu kälteren Temperaturen verschoben und nimmt am Ende des Anfahrvorgangs wieder ein nahezu lineares Temperaturprofil an (Abb. 5c). Dies entspricht dem gewünschten stationären Betriebszustand des HWÜ.

Mithilfe des druckgetriebenen Ansatzes zur Prozesssimulation können Wärmeübertrager mit hoher Genauigkeit, beispielsweise für die Entwicklung neuartiger Regelungskonzepte, modelliert werden. Insbesondere können die Wärmeübergangs- und Druckverlustbeziehungen in Auslegungsgenauigkeit berücksichtigt werden. Dies ermöglicht

die akkurate Simulation der Wärmeintegration einer LZA. Druckgetriebene Modelle von Wärmeübertragern sind zudem in der Lage, extreme Betriebsbedingungen abzubilden und lassen Rückschlüsse auf das Verhalten der Apparate in diesen Betriebsszenarien zu [35, 42]. Insbesondere bei schnellen Anfahrscenarien treten jedoch zwei- und dreidimensionale Effekte, wie Temperaturfehlverteilungen, auf, die mit eindimensionalen Modellen nicht aufgelöst werden können. Für die Prozesssimulation spielen diese Phänomene eine untergeordnete Rolle, für die Auslegung der Wärmeübertrager ist allerdings eine weiterführende detaillierte, dreidimensionale Betrachtung erforderlich. Diese wird in Abschn. 4.2 beschrieben.

3.2.2 Trennkolonnen

Ausschlaggebend für das dynamische Verhalten einer LZA ist neben dem HWÜ die sog. Linde-Doppelkolonne, die aus zwei thermisch gekoppelten Trennkolonnen besteht. Die durch Bilanzgleichungen beschriebenen Konzentrationsänderungen in den Trennkolonnen stellen die größten Zeitkonstanten im System dar. Bei deren Modellierung liegt ein besonderer Fokus auf der Simulationsgenauigkeit, sowohl bei der stationären Auslegung als auch in Bezug auf das transiente Verhalten. Beispielhaft wird das Szenario von Kender et al. [38] präsentiert, das auf den Modellen von Wunderlich [34] und Kender et al. [37] basiert. In Abb. 6 ist die Topologie der betrachteten Doppelkolonne dargestellt.

Der teilverflüssigte Hauptluftstrom wird oberhalb des Sumpfs der Druckkolonne eingespeist. Die Druckkolonne, die im Auslegungsfall bei 5 bis 6 bar betrieben wird, ist als Packungskolonne mit zwei Packungsbetten mit jeweils 20 theoretischen Böden und dem darüber angebrachten Flüs-

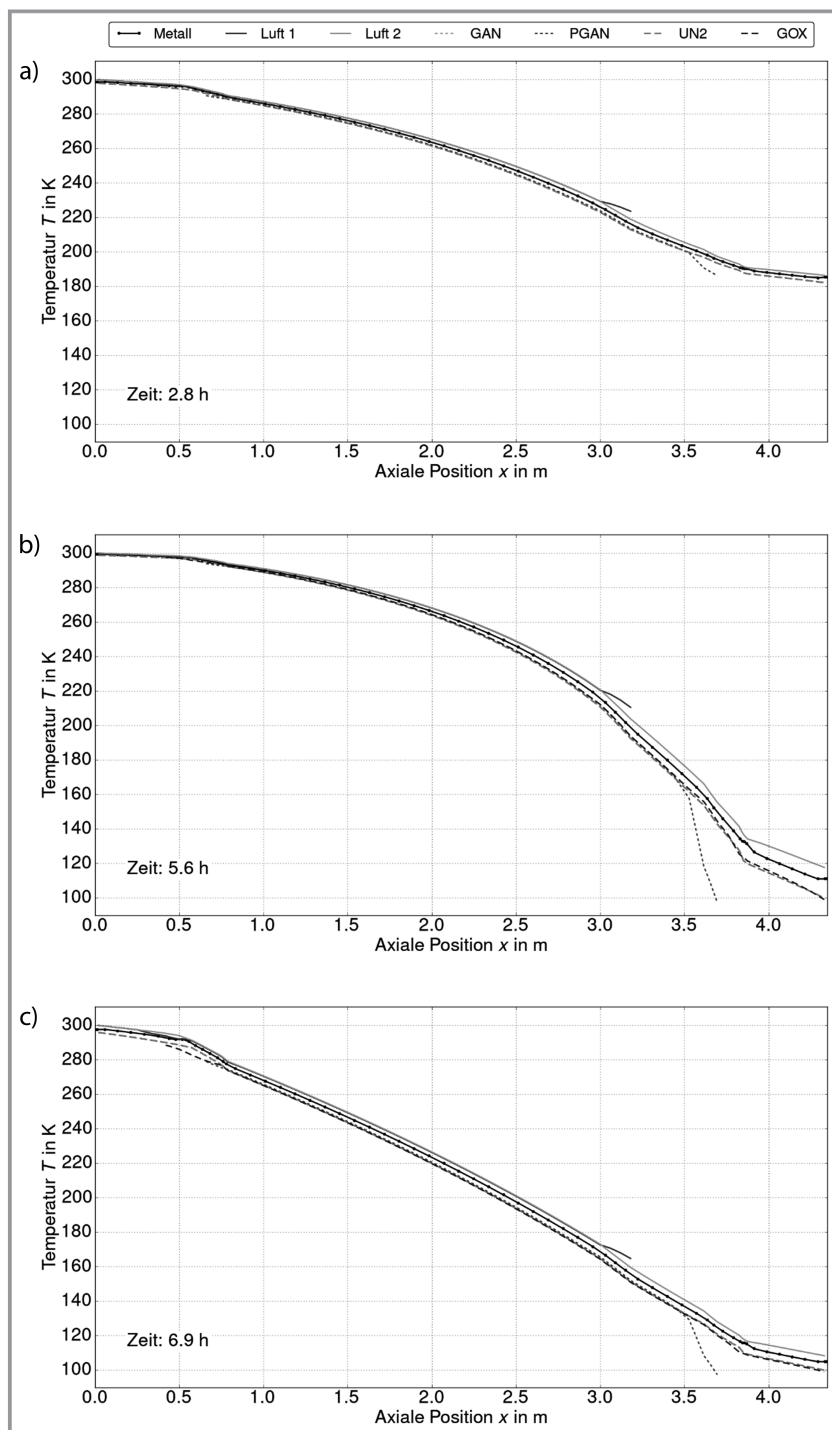


Abbildung 5. Temperaturprofile im HWÜ zu ausgewählten Zeitpunkten während des vereinfachten Anfahrvorgangs: a) Mitte des Abkühlvorgangs; b) Beginn der Inbetriebnahme GOX; c) Ende des Anfahrvorgangs [35].

sigkeitsverteiler ausgeführt. Die Niederdruckkolonne, die im Auslegungsfall bei 1,3 bis 1,6 bar betrieben wird, besteht aus vier Packungsbetten und den jeweils darüber angebrachten Verteilern. Insgesamt beinhaltet die Niederdruckkolonne 66 theoretische Böden, die sich aus zwei Packungs-

betten mit jeweils 18 und zwei Packungsbetten mit jeweils 15 theoretischen Böden ergeben. Zwischen dem zweiten und dritten Packungsbett der Niederdruckkolonne wird ein zusätzlicher Luftstrom, der Turbinenluftstrom aus Abb. 1, eingespeist. Die beiden Kolonnen sind über ein Bypass-Ventil, das für schnelle Anfahrvorgänge erforderlich ist, miteinander verbunden. Die Kolonnen sind über den Verdampfer/Kondensator thermisch gekoppelt. Bei der Kondensation des Kopfprodukts der Druckkolonne wird latente Wärme freigesetzt, die zum Verdampfen des Sumpfprodukts der Niederdruckkolonne eingesetzt wird. Der hochreine flüssige Stickstoff am Kopf der Druckkolonne (LIN) wird als Rücklauf in beiden Kolonnen verwendet. Das Sumpfprodukt der Druckkolonne, ein mit Sauerstoff angereicherter Luftstrom (engl.: *crude liquid oxygen pressurized*, CLOP), wird zwischen dem zweiten und dem dritten Packungsbett mithilfe eines Flüssigkeitsverteilers als Feed in die Niederdruckkolonne eingespeist. Die Produktströme in diesem Szenario sind hochreiner, gasförmiger Stickstoff (GAN), unreiner Stickstoff (UN2) sowie hochreiner Sauerstoff in flüssiger (LOX) und gasförmiger (GOX) Form. Alle Produktströme werden der Niederdruckkolonne entnommen. Die Stickstoffprodukte werden in einem weiteren Wärmeübertrager, dem sog. Unterkühlerkreuzgegenströmer (UKG), dazu eingesetzt, den Feedstrom und den Rücklauf der Niederdruckkolonne zu kühlen. Die Modellierung des UKG erfolgt mit dem in Abschn. 3.2.1 vorgestellten Modellierungsansatz. Die Füllstände beider Kolonnensümpfe werden jeweils über die Menge an Flüssigkeit geregelt, die abgezogen wird. Zusätzlich wird über einen Temperaturregler, der etwa auf halber Höhe der Drucksäule angebracht ist, der LIN-Rücklauf der Niederdrucksäule geregelt. Die verschiedenen Druckniveaus des Kolonnensystems werden zudem über einen Druckregler am Kopf der Niederdruckkolonne eingestellt.

Bei dem in dieser Arbeit vorgestellten Kolonnenmodell handelt es sich um ein Gleichgewichtsstufenmodell. Eine Besonderheit des Modells ist, dass sowohl gasförmiger als auch flüssiger Holdup berücksichtigt werden. Die Fluid-dynamik in der Kolonne wird gemäß der Korrelations-

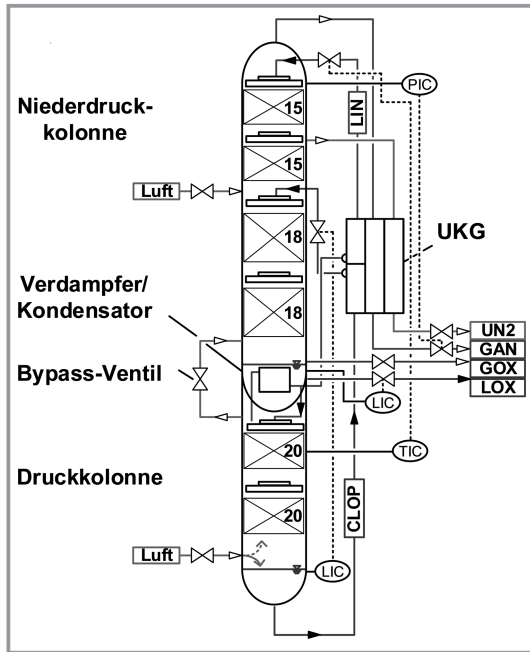


Abbildung 6. Topologie der Doppelkolonne im betrachteten dynamischen Szenario [34, 37, 38].

gleichungen von Kooijman et al. [44] berechnet. Die Menge des in den Kolonnen nach oben strömenden Gases zwischen zwei Kolonnenstufen (Druckknoten) wird dabei implizit bestimmt, indem die Differenz der Druckniveaus der Kolonnenstufen mit der Druckdifferenz abgeglichen wird, die sich gemäß der Korrelationsgleichungen ergibt. Für die Berechnung des in den Kolonnen nach unten strömenden Flüssigkeitsstroms wird der Flüssigkeitsinhalt einer Gleichgewichtsstufe mit dem Flüssigkeitsinhalt, der

sich nach den Korrelationen einzustellen hat, abgeglichen [44]. Zudem wird zur Bestimmung der Menge des austretenden Flüssigkeitsstroms eine physikalische Ausflussbeziehung herangezogen. Ist die Gewichtskraft des Flüssigkeitsinhalts eines theoretischen Bodens, der mit dem Volumen des Flüssigkeitsfilms eines Packungselements korreliert, größer als die Summe aller entgegenwirkenden Kräfte, strömt aus der betrachteten Gleichgewichtsstufe Flüssigkeit nach unten aus. Die entgegenwirkenden Kräfte setzen sich aus dem anliegenden Druckgradienten, der Triebkraft der Gasströmung ist, und den Reibungskräften infolge des Gas-Flüssig-Gegenstroms zusammen. Die Flüssigkeit strömt somit schwerkraftgetrieben entgegen dem Druckgradienten in Richtung des Kolonnensumpfs, wohingegen die Gasströmung druckgetrieben nach oben zum Kopf der Kolonne aufsteigt. Detaillierte Beschreibungen des Kolonnenmodells sind Kender et al. [38] und Wunderlich [35] zu entnehmen.

Im Folgenden werden zwei extreme Lastwechselszenarien, ein vereinfachter warmer Anfahrvorgang und ein Anlagenstopp nach Kender et al. [38] beschrieben, die mithilfe des präsentierten Kolonnenmodells simuliert wurden.

Vereinfachter warmer Anfahrvorgang

Zu Beginn des vereinfachten warmen Anfahrvorgangs liegt in allen Anlagenteilen Gas mit der Zusammensetzung von Umgebungsluft bei Umgebungstemperatur und -druck vor. Daraufhin werden Feeddruck und -temperatur in einem vorgegebenen Zeitintervall erhöht respektive reduziert. In Abb. 7 sind repräsentative Flüssigkeits- und Gasströme im Inneren der vier Packungsbetten der Niederdruckkolonne abgebildet. Die theoretischen Böden sind dabei aufsteigend von unten nach oben nummeriert.

Wie in Abb. 7 zu erkennen ist, liegen sowohl für die Flüssigkeits- als auch für die Gasströmung zu Beginn der Simu-

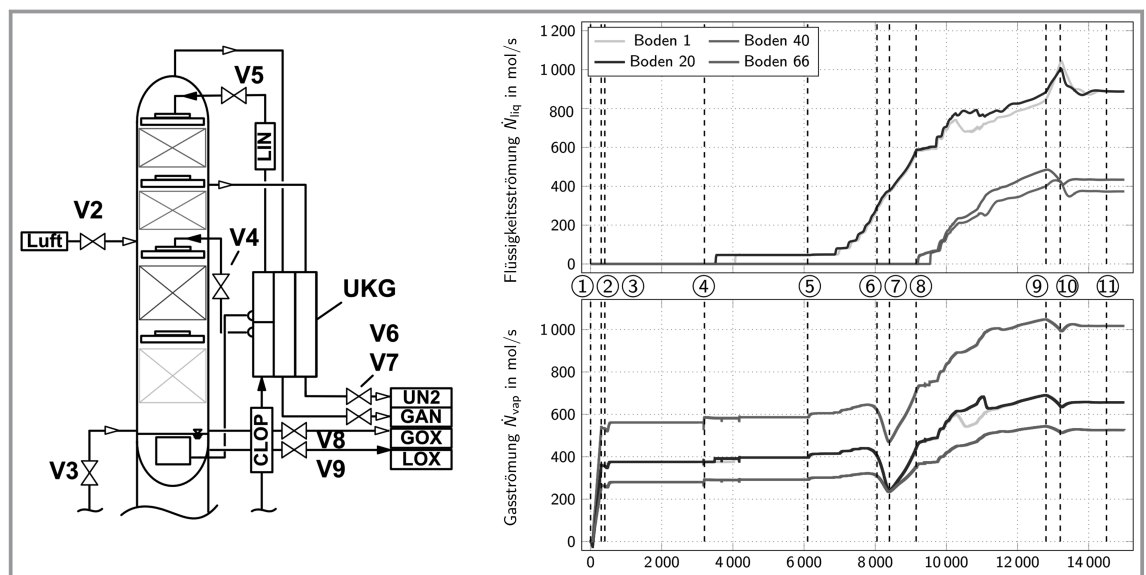


Abbildung 7. Interne Flüssigkeits- und Gasströmungen der Niederdruckkolonne während eines warmen Anfahr Szenarios [38].

lation Nullströmungsszenarien vor. In den ersten beiden Schritten ② und ③ wird das in die Druckkolonne eintretende Feed auf Prozessbedingungen gebracht. Der Feedstrom wird anschließend solange konstant gehalten, bis am Zeitpunkt ④ der Soll-Füllstand der Druckkolonne überschritten wird. Ab diesem Zeitpunkt wird flüssiges Sumpfprodukt der Druckkolonne (CLOP) in die Niederdruckkolonne eingespeist. Ausgehend vom Verteiler, der oberhalb des zweiten Packungsbetts angebracht ist, rieselt die Flüssigkeit durch die Packungsstruktur bis zum Sumpf der Niederdruckkolonne. Sobald im Sumpf der Niederdruckkolonne ein ausreichender Füllstand erreicht ist, wird am Zeitpunkt ⑤ der Verdampfer/Kondensator aktiviert. Der Verdampfer/Kondensator ist ausschlaggebend für die Rektifikationswirkung der beiden Trennkolonnen. Daher steigt mit der Aktivierung des Verdampfer/Kondensators der Flüssigkeitsrücklauf in der Druckkolonne und mit Verzögerung auch in der Niederdruckkolonne. Zwischen den beiden nächsten Zeitpunkten ⑥ und ⑦ wird das Bypass-Ventil (V3) zwischen beiden Trennkolonnen geschlossen, was einen kurzzeitigen Rückgang der Gasströmung zur Folge hat. Im nächsten Schritt ⑧ wird das LIN-Rücklaufventil (V5) geöffnet. Ab diesem Zeitpunkt fließt Flüssigkeit durch die oberen beiden Packungsbetten. Bis am Zeitpunkt ⑨ die maximale Leistung des Verdampfer/Kondensators erreicht ist, werden sowohl die Verläufe der Flüssigkeits- sowie der Gasströmung maßgeblich durch zwei Effekte beeinflusst. Zum einen steigt mit zunehmender Benetzung des Verdampfer/Kondensators dessen Leistung. Zum anderen kommt es zu Konzentrationsverschiebungen, insbesondere des Sumpfprodukts der Niederdruckkolonne, die Auswirkungen auf die treibende Temperaturdifferenz haben. Nach dem Erreichen des Soll-Füllstands der Niederdruckkolonne am Zeitpunkt ⑩ stellt sich schließlich bei Zeitpunkt ⑪ eine stationäre Fluidynamik in der Niederdruckkolonne ein. Ein finaler stationärer

Zustand wird nach weiteren 21 000 s erreicht, nachdem sich auch die Konzentrationsprofile in den Trennkolonnen eingestellt haben. [38]

Anlagenstopp

In Abb. 8 ist die zeitliche Entwicklung der internen Flüssigkeits- und Gasströme in der Niederdruckkolonne während eines Anlagenstopps dargestellt. Verglichen mit dem vereinfachten, warmen Anfahrvorgang sind die Zeitskalen des Anlagenstopps wesentlich kürzer. Ausgehend von einem stationären Betriebszustand der LZA wird zwischen den Zeitpunkten ② und ③ der Anlagenstopp eingeleitet. Dabei werden alle Strömungswege, bis auf das GAN-Produkt am Kopf der Niederdruckkolonne, durch Schließen der entsprechenden Ventile unterbrochen. Das GAN-Ventil (V7) hingegen wird vollständig geöffnet. Dadurch kommt es zu einer kurzzeitigen Erhöhung der internen Gasströmung der Niederdruckkolonne, was ein Absinken der Flüssigkeitsströmung in diesem Zeitraum zur Folge hat. Anschließend beginnt der Gasstrom in der Niederdruckkolonne einzubrechen und die Flüssigkeit regnet in den Kolonnensumpf. Am Zeitpunkt ④ wird der Verdampfer/Kondensator deaktiviert. Der Grund dafür ist die Reduktion des Drucks auf der Kondensatorseite, die zu einer Abnahme der Tautemperatur führt. Fällt die Tautemperatur auf der Kondensatorseite unter die Siedetemperatur auf der Verdampferseite, kann kein Gas mehr kondensiert werden. Zwischen den Zeitpunkten ⑤ und ⑥ wird die Druckkolonne durch Öffnen des Bypass-Ventils (V3) über den GAN-Strömungsweg am Kopf der Niederdruckkolonne entspannt. Am Zeitpunkt ⑦ wird der sogenannte kalte Stand-by-Zustand erreicht. [39]

Anhand der beiden beschriebenen extremen Lastwechselszenarien wurde somit exemplarisch gezeigt, dass der komplette Lastbereich der Trennkolonnen einer LZA mithilfe des druckgetriebenen Simulationsansatzes nach

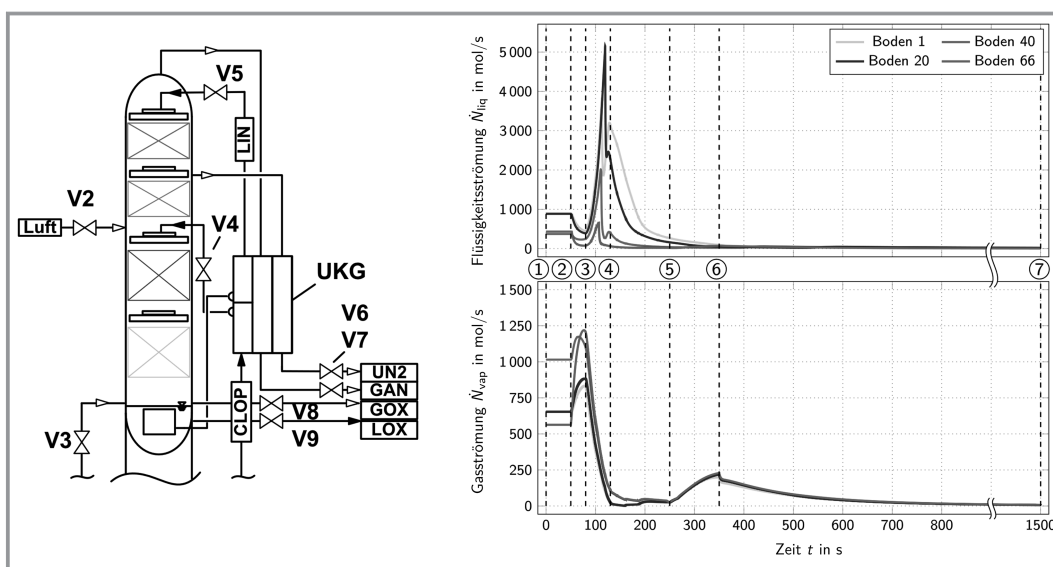


Abbildung 8. Interne Flüssigkeits- und Gasströmungen der Niederdruckkolonne während eines Anlagenstopps [38].

Thomas et al. abgebildet werden kann. Die Plausibilität der Ergebnisse wurde basierend auf Erfahrungswerten der Linde GmbH, Linde Engineering, Kooperationspartner im Projekt „FlexASU“, bestätigt.

3.2.3 Gesamtanlage – digitaler Zwilling

Basierend auf den druckgetriebenen, dynamischen Detailmodellen der Hauptbestandteile einer LZA, dem HWÜ (s. Abschn. 3.2.1) und den Trennkolonnen (s. Abschn. 3.2.2), wird ein druckgetriebenes, dynamisches Gesamtanlagenmodell einer LZA ohne Argonproduktion, ein sog. digitaler Zwilling, entwickelt. In Abb. 9 ist ein Fließbild des von Kender et al. [36] entwickelten digitalen Zwillings inklusive Basisregelung dargestellt.

Neben den Hauptbestandteilen sind druckgetriebene Modelle weiterer verfahrenstechnischer Anlagenkomponenten, wie Expander, Pumpen und Ventile, Bestandteil des Gesamtanlagenmodells. Der Hauptluftverdichter wird durch eine Erhöhung des Drucks der Quelle des Hauptluftstroms vereinfacht dargestellt, da die Dynamik des Verdichters gegenüber der Dynamik der Trennkolonnen auf deutlich kleineren Zeitskalen abläuft und damit als annähernd stationär angesehen werden kann. Aus diesem Grund handelt es sich auch bei den druckgetriebenen Modellen von Expander und Pumpen um quasi-stationäre Modelle. Gegenüber dem in Abb. 1 dargestellten, exemplarischen

Fließbild einer LZA sind bei Kender et al. der Luftfilter, die Vorkühlung und die Adsorber nicht modelliert. Darüber hinaus gibt es keinen Booster zur Nachverdichtung des Feedgases. Dafür kommen sowohl ein Nebenkondensator als auch ein Bypass-Ventil analog zu Abschn. 3.2.2 hinzu. Der Nebenkondensator verdampft das aus der Niederdruckkolonne abgezogene, flüssige Sauerstoffprodukt beim gewünschten Produktdruck, bevor es im HWÜ angewärmt wird. Das Produktspektrum in Abb. 9 unterscheidet sich von dem in Abb. 1. In dem von Kender et al. erstellten digitalen Zwilling fällt ein stickstoffreicher Abgasstrom an, der sich aus den Strömen GAN und UN₂ zusammensetzt und zur Atmosphäre abgeblasen wird (ATM). Das Hauptprodukt der modellierten LZA ist GOX. Zudem wird ein LOX-Spülstrom und Druckstickstoff (PGAN) produziert. [36]

Warmer Anfahrvorgang

Im Folgenden wird mithilfe des digitalen Zwillings ein warmer Anfahrvorgang einer LZA nach Kender et al. [36] vorgestellt. Im Gegensatz zu dem in Abschn. 3.2.2 isoliert an der Doppelkolonne erläuterten warmen Anfahrvorgang wird nun der reale Anfahrvorgang einer gesamten LZA simuliert. Dabei wird ausschließlich der Druck der Quelle des Hauptluftstroms sukzessive erhöht, was dem Anfahren des Hauptluftverdichters entspricht.

Zu Beginn sind alle Ventile bis auf das LIN-Ventil zwischen Druck- und Niederdruckkolonne und das LOX-Pro-

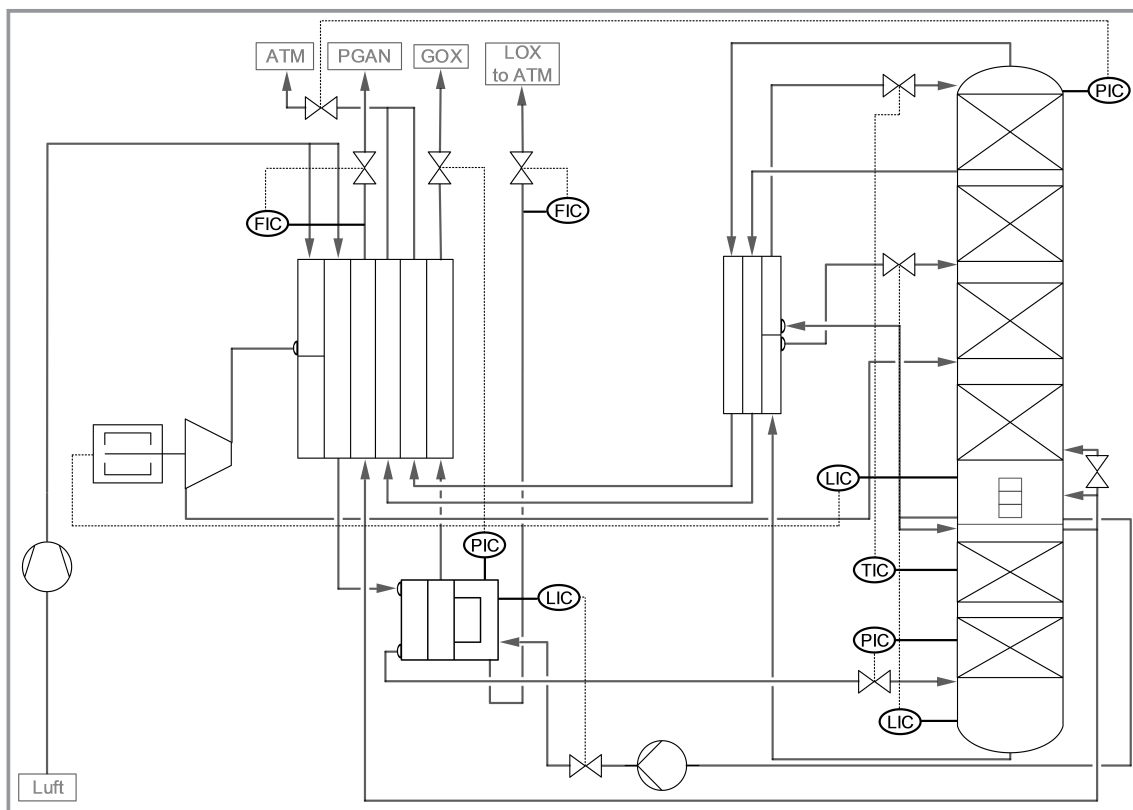


Abbildung 9. Prozessfließbild eines digitalen Zwillings einer LZA ohne Argonproduktion [36].

duktventil mit einem vorgegebenen Ventilhub geöffnet. Die Anlage wird initial mit gasförmiger Luft bei Umgebungsbedingungen durchströmt. Anschließend wird das hohe Maß an Wärmeintegration innerhalb einer LZA sichtbar. Die Abkühlung der LZA auf kryogene Temperaturen erfolgt durch die Entspannung eines Teilstroms der Umgebungsluft im Expander. Dieser wird direkt in die Niederdruckkolonne eingespeist. Die Einspeisung der kalten Turbinenluft führt zu einer Abkühlung der gasförmigen Produktströme der Niederdruckkolonne (GAN und UN₂). Diese kühlen anschließend einerseits im UKG den anfangs gasförmigen CLOP-Strom, einen Feedstrom der Niederdruckkolonne, und andererseits die eintretenden Luftströme im HWÜ ab. Dabei wird der CLOP-Strom so lange abgekühlt, bis bei dessen Entspannung auf den Druck der Niederdruckkolonne Flüssigkeit entsteht. Analog könnte Flüssigkeit auch über die LIN-Einspeisung erzeugt werden. Da diese Leitung eine geringere Kapazität aufweist und der Anfahrvorgang dadurch verzögert würde, ist diese im simulierten Anfahrvorgang nach Kender et al. anfangs geschlossen. [34, 36]

Bei der Simulation der Gesamtanlage wird die Notwendigkeit der in Abschn. 3.2.1 vorgestellten Wärmeübertragermodelle in Auslegungsgenauigkeit deutlich. Aufgrund des hohen Grads an Wärmeintegration innerhalb einer LZA ist die dynamische Simulation in Auslegungsgenauigkeit unverzichtbar, um das Abkühlen der Prozessströme und das Erzeugen von Flüssigkeit im System akkurat darzustellen.

In Abb. 10a ist das Konzentrationsprofil der Gasphase der Niederdruckkolonne auf der rechten Seite und die interne Flüssigkeitsströmung auf der linken Seite vor der Entstehung der ersten Flüssigkeitströpfchen dargestellt. Zusätzlich ist auf der linken Seite die Lage der verschiedenen Einspeisungen visualisiert. In Abb. 10b sind die Verläufe der gleichen Prozessgrößen nach der ersten Flüssigkeitsbildung gezeigt.

Im Gegensatz zum vereinfachten, warmen Anfahrvorgang in Abschn. 3.2.2 wird der Druckkolonne kein teilver-

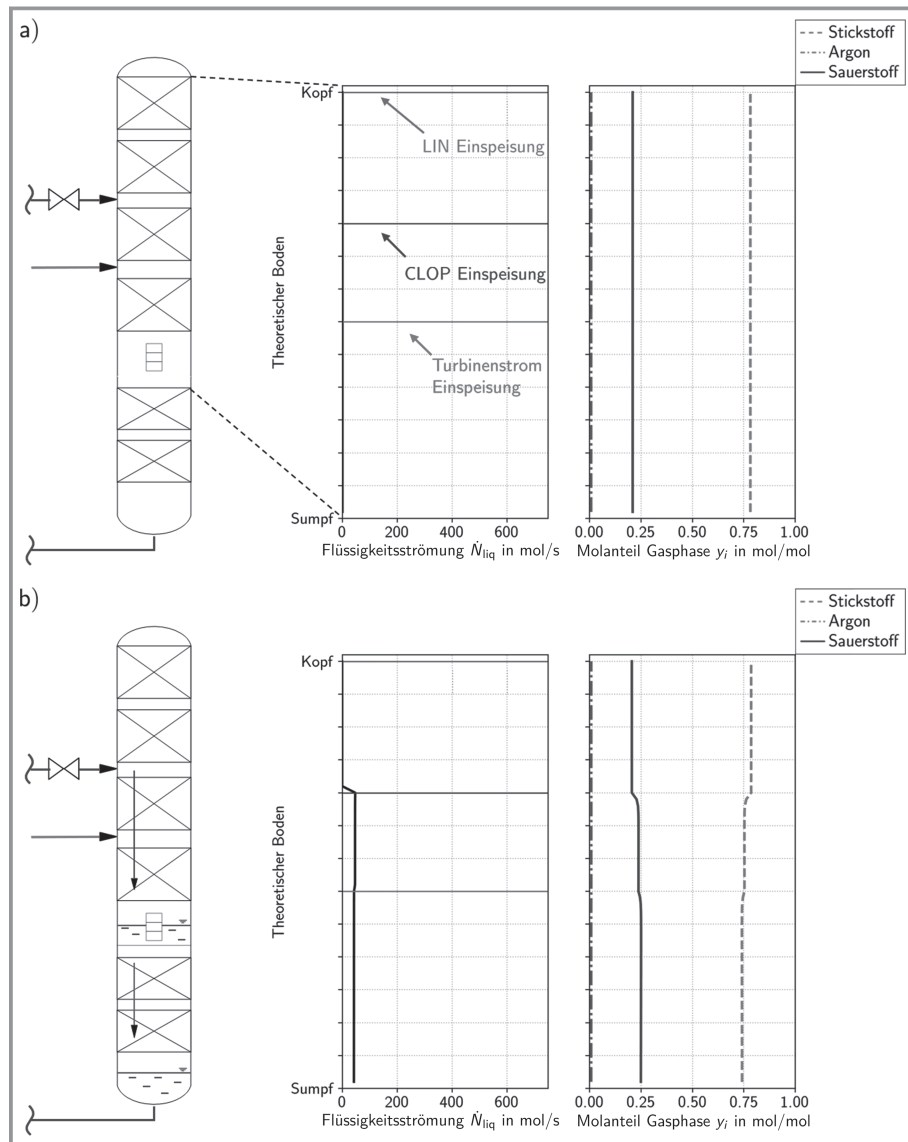


Abbildung 10. Konzentrationsprofil der Gasphase (rechts) und kolonneninterne Flüssigkeitsströmung (links) der Niederdruckkolonne a) vor dem Entstehen von Flüssigkeit; b) nach dem Entstehen von Flüssigkeit [36].

flüssiger Luftstrom zugeführt. In der in Abb. 9 dargestellten LZA kann erst Flüssigkeit in der Druckkolonne entstehen, sobald der Füllstand im Sumpf der Niederdrucksäule so hoch ist, dass der Verdampfer/Kondensator hinreichend benetzt ist und somit die Rektifikation in beiden Trennkolonnen gestartet ist. Der Beginn der thermischen Trennung durch Rektifikation ist bereits an der minimalen Anreicherung von Sauerstoff im Sumpf und von Stickstoff am Kopf der Niederdruckkolonne in Abb. 10b zu erkennen.

Mit steigendem Füllstand im Sumpf der Niederdruckkolonne steigt die Leistung des Verdampfer/Kondensators und das Verhältnis von Flüssig- zu Gasbelastung in den Trennkolonnen verschiebt sich. Sobald ausreichend Rücklauf für die Druckkolonne vorhanden ist, wird das LIN-Ventil öff-

net und es wird ein konstanter LIN-Rücklauf in die Niederdruckkolonne eingespeist bis die Soll-Füllstände in beiden Kolonnen erreicht sind. Anschließend wird begonnen, flüssiges Sauerstoffprodukt aus dem Sumpf der Niederdruckkolonne abzuführen. Diese Betriebszustände sind in Abb. 11 dargestellt. Erneut sind kolonneninterne Flüssigkeitsströmungen links und das Konzentrationsprofil der Gasphase rechts abgebildet.

Werden beide Konzentrationsprofile miteinander verglichen, sind signifikante Unterschiede zu erkennen. Bevor flüssiges Sauerstoffprodukt abgezogen wird, reichert sich der Schwersieder Sauerstoff im unteren Teil der Niederdruckkolonne an. Dies führt zu einer hohen Sauerstoffreinheit bis zur Einspeisestelle des Turbinenstroms und zum anderen wird der sog. Mittelsiederbauch, der nur minimal ausgeprägt ist, in Richtung Kolonnenkopf verschoben. Beim Mittelsiederbauch handelt es sich um eine Anreicherung des Mittelsieders zwischen Kolonnenkopf (hohe Konzentration des Leichtsieders) und Kolonnensumpf (hohe Konzentration des Schwersieders). Im ternären Stoffgemisch Luft stellt Argon den Mittelsieder dar. Die in Abb. 9 gezeigte Konfiguration einer LZA erzeugt kein Argon als Produktstrom. Dennoch ist Argon als Bestandteil der Umgebungsluft während der gesamten Simulation zu berücksichtigen, um Effekte wie den Mittelsiederbauch akkurat wiederzugeben.

Nach Beginn des Abzugs des Sauerstoffproduktstroms ist in Abb. 11b ein gänzlich anderes Verhalten zu erkennen. Ohne eine Anpassung des Rücklaufs der Niederdruckkolonne kann die Sauerstoffreinheit bei konstanter Sauerstoffproduktmenge nicht gehalten werden. Der Leichtsieder Stickstoff bricht folglich in den unteren Teil der Niederdruckkolonne durch. Dieser Effekt wird durch die bei einer LZA übliche Füllstandsregelung im Verdampfer/Kondensator verstärkt. Der Füllstand wird im Gegensatz zum in Abschn. 3.2.2 vorgestellten Szenario nicht über den Abzug von flüssigem Sumpfprodukt, sondern über die Menge des Turbinenstroms, der direkt in die Niederdruckkolonne eingespeist

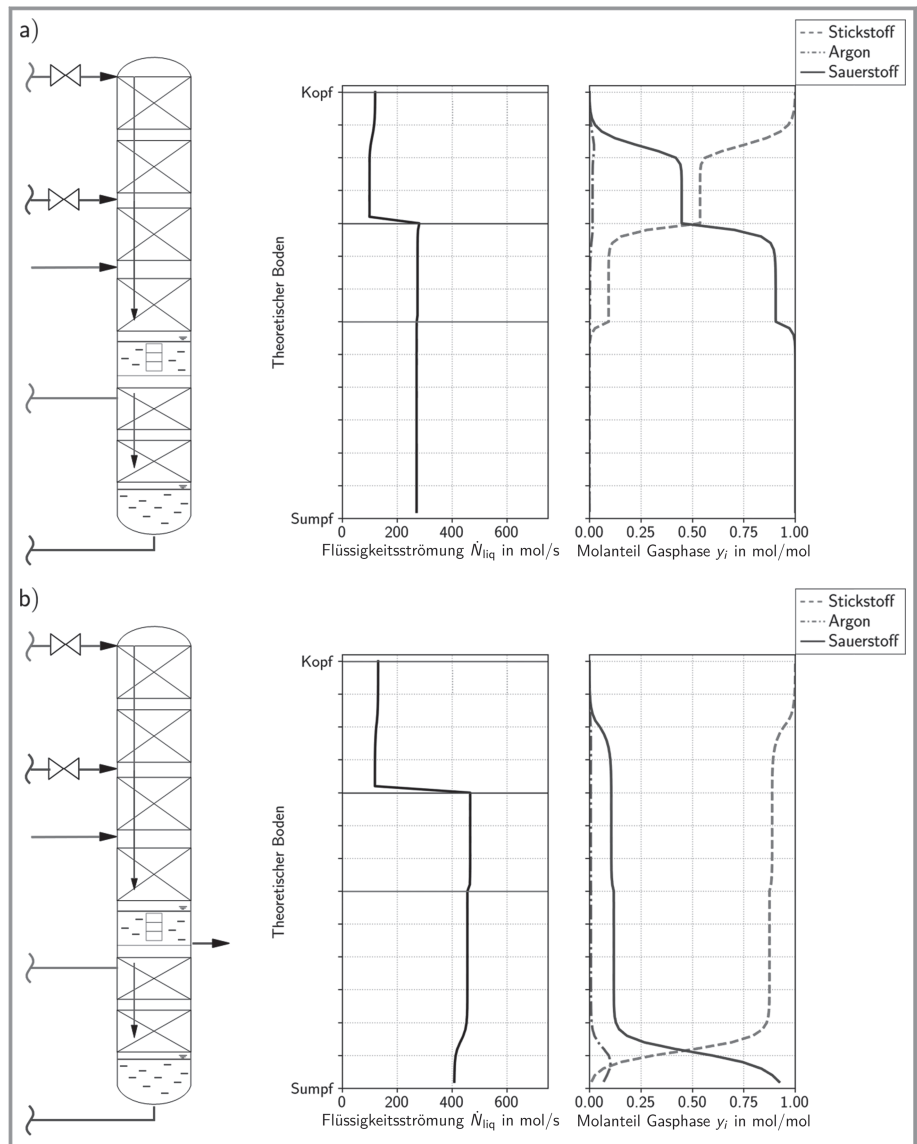


Abbildung 11. Konzentrationsprofil der Gasphase (rechts) und kolonneninterne Flüssigkeitsströmung (links) der Niederdruckkolonne a) vor dem Beginn des Abzugs von flüssigem Sauerstoffprodukt; b) nach dem Beginn des Abzugs von flüssigem Sauerstoffprodukt [36].

wird, geregelt. Um den Abzug von flüssigem Sauerstoffprodukt zu kompensieren, ist der relative Anteil des Luftstroms, der über die Turbine entspannt wird, zu erhöhen. Dies bewirkt eine Abkühlung der Niederdruckkolonne, was zu einer höheren Konzentration an Leichtsieder über die gesamte Höhe der Kolonne führt. Weiter ist zu erkennen, dass der Mittelsiederbauch durch diese Konzentrationsverschiebung in Richtung des Kolonnensumpfs verschoben wird. Die kolonneninternen Flüssigkeitsströmungen sind, abgesehen vom nicht veränderten LIN-Rücklauf, in Abb. 11b größer als in Abb. 11a, um den Abzug von flüssigem Sauerstoffprodukt im Sumpf zu kompensieren. Zusätzlich ist in Abb. 11b nahe des Kolonnensumpfs der Einfluss der starken Konzentrationsänderung auf die interne Flüssigkeitsströmung zu erkennen.

Im nächsten Schritt wird der LIN-Rücklauf der Niederdruckkolonne angepasst, indem der Temperaturregler, der die Temperatur einer Gleichgewichtsstufe etwa auf halber Höhe der Drucksäule regelt, aktiviert wird. In Abb. 12a sind die Profile der kolonneninternen Flüssigkeitsströmung links und das Konzentrationsprofil der Gasphase der Niederdruckkolonne nach dem Erreichen einer stationären Fluid-dynamik abgebildet. Abb. 12b zeigt den finalen und bezüglich der Fluidodynamik und der Konzentrationsprofile stationären Zustand.

Die Anpassung des LIN-Rücklaufs führt dazu, dass die gewünschte Sauerstoffreinheit im Sumpf erreicht wird. Es stellt sich sowohl in Abb. 12a als auch in Abb. 12b das gewünschte Konzentrationsprofil einer Niederdruckkolonne einer LZA ein. Analog zu Abschn. 3.2.2 ist mit dem Er-

reichen einer stationären Fluidodynamik nicht der endgültig stationäre Zustand verbunden, da die Zeitskalen der Konzentrationsänderungen signifikant größer sind als die der Fluidodynamik. Analog zu Abschn. 3.2.2 wurde die Plausibilität der Ergebnisse basierend auf Erfahrungswerten der Linde GmbH, Linde Engineering bestätigt. [36]

Es wurden die wichtigsten Aspekte und Teilmodelle erläutert, die für die transiente, realitätsgetreue Simulation einer LZA erforderlich sind. Die korrekte Vorhersage der Zeitskalen der Wärmeintegration in Wärmeübertragern oder einer Veränderung im kryogenen Rektifikationssystem sind entscheidend für eine adäquate Modellierung des realen Anlagenbetriebs einer LZA. Damit bildet die Simulation des gesamten Betriebsbereichs einer LZA vom Anlagenstillstand bis zum stationären Betrieb die Grundlage, um eine reale LZA flexibel zu betreiben.

Der vorgestellte digitale Zwilling kann beispielsweise eingesetzt werden, um warme und kalte Anfahrvorgänge sowie schnelle Abschaltvorgänge virtuell zu betrachten, und als Regelstrecke dienen, um neuartige Regelungskonzepte zu entwickeln. Erfahrungen von Ingenieuren aus Inbetriebnahmen von LZA können mithilfe des digitalen Zwillings rekonstruiert, visualisiert und detailliert analysiert werden. Zudem können Veränderungen am Betriebszustand der Anlage und deren Auswirkungen erprobt werden, ehe diese an der realen Anlage vorgenommen werden.

4 Detailbetrachtung: Dynamischer Betrieb eines Plattenwärmeübertragers

Der lastflexible Betrieb einer LZA führt zu großen örtlichen und zeitlichen Temperaturunterschieden im HWÜ, die in höheren thermischen Belastungen im Vergleich zum stationären Betrieb resultieren können. Daher wird diese Anlagenkomponente experimentell mithilfe eines Prüfstands untersucht. Der Versuchsbetrieb dient dabei der detaillierten Analyse von Schadensmechanismen eines PFHE unter thermischer Belastung sowie der Bestimmung von drei-

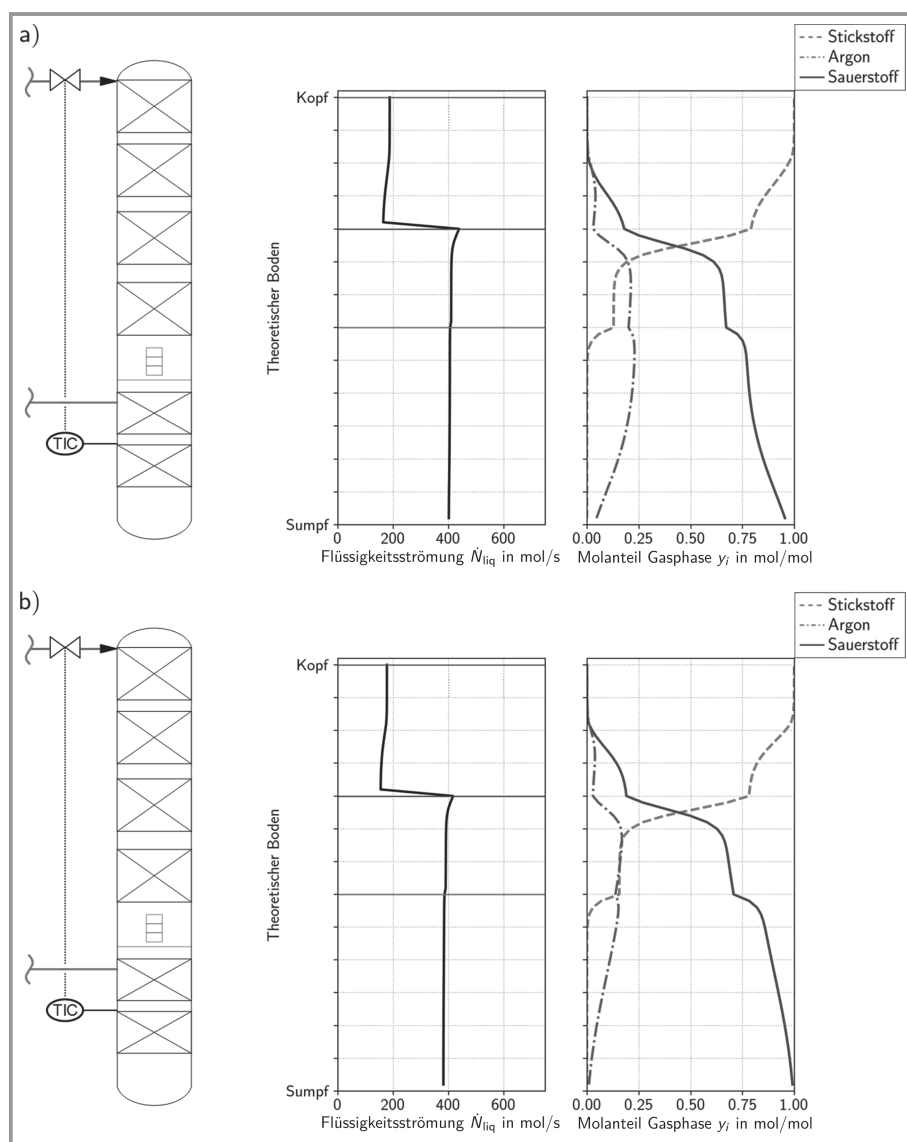


Abbildung 12. Konzentrationsprofil der Gasphase (rechts) und kolonneninterne Flüssigkeitsströmung (links) der Niederdruckkolonne a) nach Erreichen einer stationären Hydrodynamik; b) nach Erreichen des stationären Zustands [36].

dimensional aufgelösten Messdaten von Temperaturverteilung und thermischer Dehnung des PFHE während des dynamischen Betriebs. Diese Daten werden unter anderem zur Validierung von Modellen für die Vorhersage der Lebensdauer eines PFHE eingesetzt. In diesem Abschnitt werden der im Rahmen des Projektes „FlexASU“ entstandene Prüfstand sowie ein neu entwickeltes CFD-Modell vorgestellt. Zudem werden die Ergebnisse von Experiment und Simulation gegenübergestellt.

4.1 Prüfstand für den dynamischen Betrieb von Plattenwärmeübertragern

Der im Rahmen des Projektes „FlexASU“ entworfene Prüfstand beinhaltet zwei gelötete PFHE aus Aluminium, die mit einer Masse von etwa 1,5 t hinreichend groß sind, um einen HWÜ einer realen LZA zu repräsentieren [2]. Ein vereinfachtes Fließbild des Prüfstands ist in Abb. 13a dargestellt.

An- und Abfahrvorgänge sowie Lastwechsel einer LZA können zu erhöhten thermischen Belastungen führen. Um diese Belastungen zu simulieren, werden die PFHE im Versuchstand abwechselnd erwärmt und wieder abgekühlt. Dazu werden sie alternierend von einem warmen und einem kalten gasförmigen Stickstoffstrom durchströmt, die mithilfe eines Heizers und eines Kühlers bereitgestellt werden. Durch das Testscenario werden die PFHE im Prüfstand bewusst stärker belastet als der HWÜ einer realen LZA, um in absehbarer Zeit den Schadensmechanismus eines PFHE hervorzurufen. Durch die Verwendung von zwei PFHE kann der Versuchsaufbau mit einem Gebläse im Kreislauf betrieben werden, wobei im Dauerbetrieb jeweils ein PFHE erwärmt und der andere abgekühlt wird. Insgesamt werden etwa 10 t h^{-1} gasförmiger Stickstoff im Kreislauf gefördert. Als Kühlmittel werden im Kühler im Kreislaufbetrieb etwa 400 kg h^{-1} flüssiger Stickstoff verdampft, um das kryogene Temperaturniveau einer LZA zu erreichen. Aufgrund der

niedrigen Temperaturen ist es erforderlich, den kryogenen Teil des Prüfstands in einer sogenannten Coldbox zu verbauen, die mit isolierendem Perlit gefüllt ist. Dieses Isolationskonzept wird auch bei realen LZA eingesetzt.

In Abb. 13b ist ein CAD-Modell des Prüfstands dargestellt. Zusätzlich zu den im vereinfachten Fließbild dargestellten Hauptkomponenten sind weitere Komponenten für den Betrieb des Prüfstands erforderlich. An der Armaturentafel wird der Prozesskreislauf mit Stickstoff befüllt und entleert. Der Equalizer dient als definierte thermische Masse, die sicherstellt, dass der Prozesskreislauf keinen zeitlichen Temperaturschwankungen unterliegt. Der LIN-Tank dient zur Versorgung des Kühlers mit flüssigem Stickstoff. Nicht dargestellt ist die Prozesswarte zur Steuerung und Überwachung des Prozesses.

Die PFHE im Prüfstand werden optisch hinsichtlich des Auftretens von Rissen und gasbasiert bezüglich möglicher Leckagen überwacht. Sollte einer dieser Schadensfälle auftreten, sind sowohl Ort und Zeitpunkt des Schadens mithilfe der Messtechnik exakt zu bestimmen. Die Messdaten des Schadensfalls können zudem mit Modellen zur Vorhersage der Lebensdauer von PFHE verglichen werden. Darüber hinaus werden am Versuchstand lokale und globale Dehnungen und Temperaturen auf der Oberfläche und im Inneren der Wärmeübertrager im dynamischen Betrieb gemessen. Dadurch kann eine dreidimensionale Visualisierung von Temperaturen, thermischen Dehnungen und den resultierenden Spannungen im Inneren der Wärmeübertrager gewonnen werden. Diese Daten können u. a. zur Validierung eines dreidimensionalen CFD-Modells zur thermofluidynamischen Simulation von PFHE eingesetzt werden. Dieses liefert beispielsweise Eingangsdaten für eine strukturelle Analyse zur Lebensdauerabschätzung eines PFHE (s. Abschn. 4.2).

Der Prüfstand generiert einen erheblichen Mehrwert, da er Messdaten und Erkenntnisse bezüglich hochgradig dynamischer Vorgänge liefert, die in kommerziellen LZA aktuell nicht gewonnen werden können. Dies ist einerseits darauf

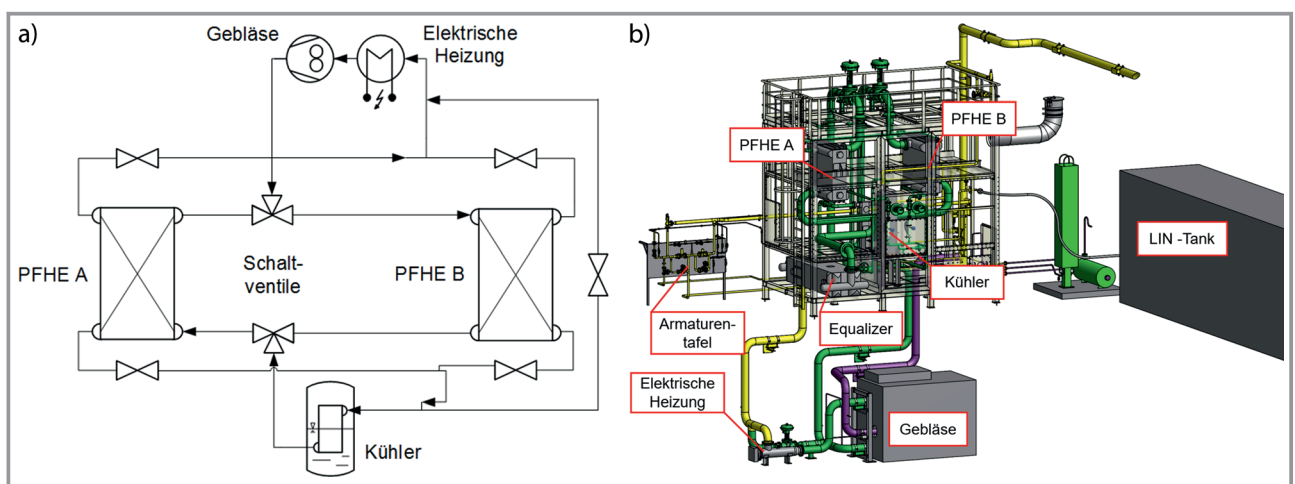


Abbildung 13. a) Vereinfachtes Fließbild [2] und b) CAD-Modell des Prüfstands.

zurückzuführen, dass reale LZA derzeit selten hochgradig dynamisch betrieben werden. Andererseits sind die HWÜ realer LZA aus Kostengründen nicht mit der erforderlichen Messtechnik ausgestattet.

4.2 Detailsimulation von Plattenwärmeübertragern mit CFD und FEM

Um den Einfluss einer hochgradig dynamischen Betriebsweise auf die Lebensdauer eines PFHE zu untersuchen, ist eine rein eindimensionale Betrachtung, wie sie für die Prozesssimulation üblich und in Abschn. 3.2.1 erläutert ist, nicht hinreichend. Während An- und Abfahrvorgängen wird die Temperaturverteilung im PFHE neben den Prozessströmen zunehmend durch die thermische Trägheit der dreidimensionalen metallischen Struktur des PFHE und deren hohe Temperaturleitfähigkeit bestimmt. Folglich wird für die detaillierte Bewertung solcher Betriebsszenarien auf dreidimensionale Simulationsmodelle zurückgegriffen, welche die tatsächliche Geometrie des PFHE vollständig auflösen. [45]

Die Untersuchung der Lebensdauer stützt sich dabei auf eine strukturmechanische Analyse auf Basis der Finite-Elemente-Methode (FEM), welche die Verformung eines PFHE unter Berücksichtigung anliegender Lasten berechnet und einen eventuellen Schadenseintritt vorhersagen kann. Hierfür ist die dreidimensionale Temperaturverteilung im PFHE als Eingangsgröße erforderlich, die mit einem im Rahmen des Projektes „FlexASU“ entwickelten CFD-Modell auch für dynamische Betriebsszenarien berechnet werden kann. Ziel des Modellansatzes ist es, die relevanten Teile der Geometrie eines PFHE räumlich aufzulösen und zugleich den Rechenaufwand so gering zu halten, dass auch transiente Simulationen möglich sind.

Dafür wird ein Rechengitter generiert, das die in Abb. 3b dargestellten Bestandteile wie Seitenleisten und Trennbleche in jeder einzelnen Lage des PFHE exakt berücksichtigt. Die exakte Geometrie der Finstruktur wird vom Rechengitter jedoch nicht aufgelöst, sondern durch ein poröses Medium modelliert. Dieses Vorgehen ist naheliegend, da die räumlichen Abmessungen der Finstrukturen mehrere Größenordnungen kleiner sind als die des gesamten PFHE. Das für eine vollständige Auflösung erforderliche, sehr feine Rechengitter ist mit dem Anspruch einer transienten Simulation großer PFHE nicht vereinbar. Auch Niroomand et al. teilen die Einschätzung, dass eine poröse Modellierung der Finstrukturen erforderlich ist, um transiente Simulationen eines PFHE mit vertretbarem Rechenaufwand zu ermöglichen [46].

In den porösen Teilen des Gitters koexistieren Finstrukturen und Prozessfluide. Die unterschiedliche Ausrichtung der Finstrukturen, beispielsweise in den Verteiler- und Sammlerzonen, wird über anisotrope Eigenschaften des porösen Mediums berücksichtigt, wodurch die strömunglenkende Wirkung realitätsnah wiedergegeben wird. Damit wird die Strömungsführung der Prozessfluide innerhalb des Apparats realitätsnah nachgebildet und der Einfluss von

örtlichen Fehlverteilungen und Totzonen auf die Temperaturverteilung im Apparat berücksichtigt. Eine experimentelle Visualisierung der Strömungsverhältnisse und Totzonen in den Verteilern eines PFHE wird z. B. von Jeong et al. thematisiert [47]. Die festen Bestandteile der Seitenleisten, Trennbleche und Finstrukturen eines PFHE werden ausschließlich durch eine Energiebilanz beschrieben und sind thermisch an den jeweiligen Kontaktflächen miteinander gekoppelt. Für die Berechnung der Prozessfluide werden zusätzlich Erhaltungsgleichungen für Impuls und Masse gelöst. Der Modellansatz des porösen Mediums ermöglicht die Einbindung von Korrelationsgleichungen für Wärmeübergang und Druckverlust in Auslegungsqualität, um die Interaktion zwischen Prozessfluid und Finstruktur zu modellieren.

Die in der Prozesssimulation eingesetzte, numerisch effiziente und eindimensionale Modellierung, wie sie in Abschn. 3.2.1 beschrieben ist, ist nicht in der Lage, dreidimensionale Temperaturverteilungen in einem PFHE unter hochgradig dynamischen Betriebsszenarien vorherzusagen. Mithilfe der hier beschriebenen, dreidimensionalen CFD-Modellierung können auch diese für die Lebensdauerbetrachtung des PFHE wichtigen Effekte beschrieben werden, da eine detaillierte Auflösung der Geometrie und der Strömungsführung möglich ist.

4.3 Ergebnisse

Für das in Abschn. 4.1 beschriebene Betriebsszenario des Prüfstands stehen erstmals dreidimensionale Messdaten aus dem dynamischen Betrieb eines PFHE zur Verfügung. Diese können zur Validierung der Lebensdauerberechnung und des in Abschn. 4.2 beschriebenen CFD-Modells herangezogen werden. Hierfür ist in Abb. 14b beispielhaft die mit dem CFD-Modell berechnete Temperaturverteilung während des Abkühlvorgangs eines PFHE des Prüfstands gezeigt. Es ist zu erkennen, dass die gewählten Betriebsbedingungen zu einer komplexen Temperaturverteilung in allen Raumrichtungen führen. Neben den auch in eindimensionalen Modellen berücksichtigten Temperaturgradienten in Hauptströmungsrichtung kommt es zu signifikanten Temperaturdifferenzen über die Breite und die Stapelhöhe des PFHE. Da der dynamische Abkühlvorgang zu dem gezeigten Zeitpunkt erst wenige Minuten andauert, weist ein Großteil des PFHE noch die warme Ausgangstemperatur auf. Die seitliche Einspeisung des kalten Stickstoffs führt unter den gewählten Betriebsbedingungen zu einer deutlichen Ungleichverteilung der Temperatur im Einlassbereich. Der PFHE stellt eine hohe spezifische Oberfläche für den Wärmeübergang bereit, so dass der Stickstoff sich bereits im Einlassbereich nahezu vollständig auf die Temperatur des Metalls anwärmt und dabei lokal einen großen Wärmestrom aufnimmt. Die Wärmeleitung in den Seitenleisten, Trennblechen und Finstrukturen ist dagegen nicht ausreichend, um die resultierenden Temperaturunterschiede im Querschnitt

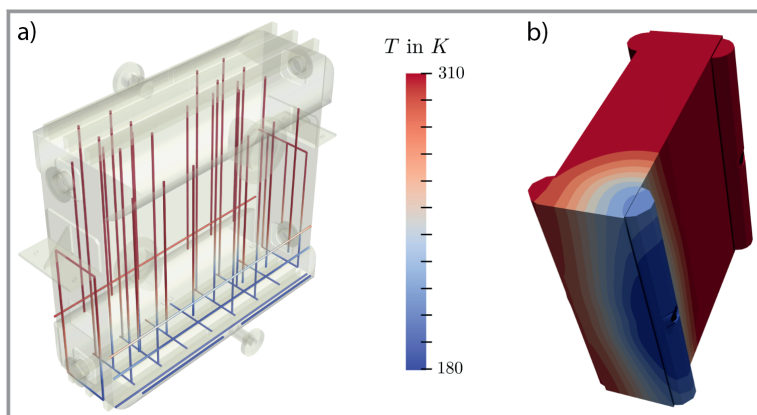


Abbildung 14. Vergleich von a) den Ergebnissen der Temperaturmessungen im Prüfstand und b) den Ergebnissen der dreidimensionalen CFD-Simulation.

des Apparats vollständig auszugleichen. Vereinfachende Annahmen, die zu einer ein- oder zweidimensionalen Betrachtung des PFHE führen würden, sind dementsprechend für den hochgradig dynamischen Betrieb des Prüfstands nicht zulässig, weshalb die hier gezeigte, dreidimensionale Simulation zur Bewertung herangezogen werden muss.

Im Vergleich zur Simulation sind in Abb. 14a die im Experiment mithilfe von Glasfasern gemessenen Temperaturen zu einem Zeitpunkt am Ende des Abkühlvorgangs dargestellt. Die durch Simulation und Experiment ermittelten Temperaturen stimmen sehr gut überein. Die dreidimensionale Temperaturverteilung über Länge, Breite und Stapelhöhe des PFHE infolge der beschriebenen dynamischen Effekte ist sowohl anhand der experimentellen Daten als auch anhand der Ergebnisse des CFD-Modells deutlich zu erkennen.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden verschiedene Aspekte beschrieben, die beim dynamischen Betrieb einer LZA zu berücksichtigen sind. Bereits während der Auslegung einer lastflexibel betriebenen LZA werden detaillierte, dynamische Modelle zur Prozesssimulation benötigt, die numerisch anspruchsvolle Betriebszenarien mit Strömungsumkehr und Nullströmungen mit hoher Genauigkeit abbilden können. Hierfür wurde ein druckgetriebener Ansatz zur dynamischen Simulation und dessen Anwendung auf Modelle zur realitätsnahen Simulation von Rektifikationskolonnen und Wärmeübertragern vorgestellt. Die Modelle der Wärmeübertrager und der Trennkolonnen basieren auf detaillierten Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust. Die druckgetriebene Modellierung lässt sich auf die übrigen Anlagenkomponenten einer LZA wie Verdichter und Turbinen erweitern. Ein detailliertes Anlagenmodell zur dynamischen Simulation einer gesamten, lastflexibel betriebenen LZA, ein digitaler Zwilling, wurde vorgestellt. Der digitale Zwilling deckt den gesamten Betriebsbereich einer realen LZA ab und soll zukünftig zur Entwicklung und Erprobung innovativer

Regelungskonzepte sowie zur Optimierung des lastflexiblen Betriebs eingesetzt werden. Die Entwicklung innovativer Regelungskonzepte wird dabei maßgeblich durch den Projektpartner AVT.SVT der RWTH Aachen durchgeführt.

Der hochgradig dynamische, lastflexible Betrieb einer LZA stellt hohe Anforderungen an die mechanische Belastbarkeit der eingesetzten Anlagenkomponenten, die bisher ausschließlich für den stationären Betriebspunkt einer Anlage ausgelegt und optimiert wurden. Es wurde daher eine detaillierte experimentelle und numerische Betrachtung eines PFHE vorgestellt, der einen HWÜ einer LZA repräsentiert und durch Temperaturschwankungen infolge von An- und Abfahrvorgängen thermisch belastet wird. Die Untersuchung der Lebensdauer einer derart

komplexen Anlagenkomponente unter hochgradig transienten Betriebsbedingungen ist ausschließlich auf Basis eines dreidimensionalen thermofluidodynamischen CFD-Modells möglich, das Daten der dreidimensionalen Temperaturverteilung in einem PFHE liefert. Die Temperaturprofile dienen als Eingangsdaten für eine nachgeschaltete strukturmechanische Analyse mittels FEM. Die Validierung der beiden Modelle erfolgt mithilfe einer aufwendig mit Messtechnik ausgestatteten und im kryogenen Bereich betriebenen Versuchsanlage im Technikumsmaßstab. Diese liefert dreidimensional aufgelöste Messdaten von Temperatur und thermischer Dehnung eines PFHE im dynamischen Betrieb. Durch eine Kombination der Erkenntnisse aus Experiment und Simulation können in Zukunft nicht nur schonende Betriebskonzepte erarbeitet, sondern auch konstruktive Verbesserungen des HWÜ hinsichtlich der mechanischen Belastbarkeit realisiert werden. Ähnliche Untersuchungen werden derzeit für andere Anlagenkomponenten, beispielsweise die eingesetzten Verdichter, durchgeführt. Die Untersuchungen und der Betrieb der Verdichter wird dabei maßgeblich durch die Projektpartner MAN Energy Solutions und die Universität der Bundeswehr München durchgeführt.

Die Zielsetzung des Teilprojekts „FlexASU“ des Kopernikus-Projekts „SynErgie“, die Umsetzung einer lastflexibel betriebenen LZA, die optimal an eine Versorgung mit volatil zur Verfügung stehenden erneuerbaren Energien angepasst ist, wird somit auf Basis einer Kombination verbesserter Anlagenkomponenten, detaillierter, dynamischer Prozessmodelle und innovativer Betriebs- und Regelungsstrategien realisiert werden.

Die Autoren bedanken sich herzlich beim Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) für die finanzielle Unterstützung und beim Projektträger Jülich (PTJ) für die Betreuung des Kopernikus-Projekts „SynErgie“ (FKZ 03SFK3E1) und „SynErgie2“ (FKZ 03SFK3E1-2). Open Access Veröffentlichung ermöglicht und organisiert durch Projekt DEAL.



Harald Klein studierte Verfahrenstechnik an der Universität Stuttgart und verbrachte eineinhalb Jahre als Masterstudent am Chemical Engineering Department an der University of Wisconsin in Madison, USA. Nach der Promotion an der Universität Stuttgart war Prof. Klein zunächst bei Linde Engineering im Bereich Wasser-

stoff- und Synthesegasanlagen tätig. Im Jahr 2008 erfolgte der Ruf an die Technische Universität München als verantwortlicher Professor und Leiter des Lehrstuhls für Anlagen- und Prozesstechnik. Sein Forschungsschwerpunkt ist die Analyse und Synthese von verfahrenstechnischen Prozessen. Dabei wird ein besonderer Fokus auf die Anwendung von thermischen und chemischen Grundoperationen der klassischen Verfahrenstechnik auch in der Energietechnik gelegt. Die dafür notwendigen thermodynamischen Stoffdatenmodelle, die Auslegungsmethoden von thermischen Apparaten sowie die Modellbildung und Simulation stehen dabei im Vordergrund.

Formelzeichen

A	$[m^2]$	Fläche
C	$[-]$	Widerstandsbeiwert
\dot{N}	$[mol\ s^{-1}]$	Stoffmengenstrom
p	$[bar]$	Druck
Δp	$[bar]$	Druckdifferenz/Druckverlust
\dot{Q}	$[kW]$	Wärmestrom
R	$[-]$	Widerstandsbeiwert
t	$[s]$	Zeit
T	$[K]$	Temperatur
V	$[m^3]$	Volumen
x	$[m]$	axiale Position
y_i	$[mol\ mol^{-1}]$	Molanteil Gasphase der Komponente i
α	$[W\ m^{-2}K^{-1}]$	Wärmeübergangskoeffizient

Indizes

A	außen
B	Beschleunigung
eff	effektiv
geo	geometrisch
liq	flüssig
R	Reibung
stat	stationär
TD	thermodynamisch
vap	gasförmig

Abkürzungen

ASU	air separation unit
ATM	Atmosphäre
CAD	computer-aided design
CFD	computational fluid dynamics
DSM	demand side management
eNMPC	economical nonlinear model predictive control
FEM	Finite-Elemente-Methode
GAN	gaseous nitrogen
GOX	gaseous oxygen
HWÜ	Hauptwärmeübertrager
LIN	liquid nitrogen
LOX	liquid oxygen
LZA	Luftzerlegungsanlage
MILP	mixed-integer linear programming
NMPC	nonlinear model predictive control
PFHE	plate-fin heat exchanger
PGAN	pressurized gaseous nitrogen
UKG	Unterkühlerkreuzgegenströmer

Literatur

- [1] *Energieflexibilität in der deutschen Industrie: Ergebnisse aus dem Kopernikus-Projekt – Synchronisierte und energieadaptive Produktionstechnik zur flexiblen Ausrichtung von Industrieprozessen auf eine fluktuierende Energieversorgung (SynErgie): Flexibilitätspotenziale in der Luftzerlegung* (Eds: A. Sauer, E. Abele, H. U. Buhl), Fraunhofer Verlag, Stuttgart **2019**.
- [2] P. Haider, P. Freko, S. Lochner, T. Reiter, S. Rehfeldt, H. Klein, *Chem. Eng. Res. Des.* **2019**, *147*, 90–97. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.04.025>
- [3] J. G. Stichlmair, J. R. Fair, *Distillation: Principles and practices*, Wiley-VCH, Weinheim **1998**.
- [4] H.-W. Häring, in *Industrial gases processing* (Ed: H.-W. Häring), Wiley-VCH, Weinheim **2008**.
- [5] H. Hausen, H. Linde, *Tiefemperaturtechnik: Erzeugung sehr tiefer Temperaturen, Gasverflüssigung und Zerlegung von Gasgemischen*, Springer, Berlin **1985**.
- [6] A. Obermeier, C. Windmeier, E. Esche, J.-U. Repke, A Discrete-time Scheduling Model for Continuous Power-intensive Processes Considering Fatigue of Equipment, in: *28th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*, Vol. 43, Elsevier, Amsterdam **2018**, 955–960. DOI: <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-64235-6.50168-6>
- [7] Q. Zhang, I. E. Grossmann, in *Alternative Energy Sources and Technologies* (Ed: M. Martin), Springer International Publishing, Cham **2016**.
- [8] R. C. Pattison, C. R. Touretzky, T. Johansson, I. Harjunkoski, M. Baldea, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2016**, *55* (16), 4562–4584. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5b03499>
- [9] S. Mitra, I. E. Grossmann, J. M. Pinto, N. Arora, *Comput. Chem. Eng.* **2012**, *38*, 171–184. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2011.09.019>
- [10] Q. Zhang, A. Sundaramoorthy, I. E. Grossmann, J. M. Pinto, *Comput. Chem. Eng.* **2016** (84), 382–393.
- [11] Q. Zhang, I. E. Grossmann, C. F. Heuberger, A. Sundaramoorthy, J. M. Pinto, *AIChE J.* **2015**, *61* (5), 1547–1558. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.14730>

- [12] Y. Cao, C. L. E. Swartz, M. Baldea, S. Blouin, *J. Process Control* **2015**, 33, 37–48. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2015.05.002>
- [13] S. Mitra, J. M. Pinto, I. E. Grossmann, *Comput. Chem. Eng.* **2014**, 65, 89–101. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2014.01.016>
- [14] S. Mitra, L. Sun, I. E. Grossmann, *Energy* **2013**, 54, 194–211. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2013.02.030>
- [15] M. H. Karwan, M. F. Kebli, *Comput. Oper. Res.* **2007**, 34 (3), 848–867. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cor.2005.05.014>
- [16] Q. Zhang, J. L. Cremer, I. E. Grossmann, A. Sundaramoorthy, J. M. Pinto, *Comput. Chem. Eng.* **2016**, 86, 90–105. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2015.12.015>
- [17] D. Zhou, K. Zhou, L. Zhu, J. Zhao, Z. Xu, Z. Shao, X. Chen, *Sep. Purif. Technol.* **2017**, 172, 178–191. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2016.08.009>
- [18] A. Obermeier, C. Windmeier, E. Esche, J.-U. Repke, *Chem. Eng. Sci.* **2019**, 195, 904–920. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.10.036>
- [19] M. T. Kelley, R. Baldick, M. Baldea, *AIChE J.* **2020**, 66 (9), e16273. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.16273>
- [20] R. C. Pattison, C. R. Touretzky, I. Harjunkoski, M. Baldea, *AIChE J.* **2017**, 63 (2), 639–651. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.15408>
- [21] A. Caspari, C. Tsay, A. Mhamdi, M. Baldea, A. Mitsos, *J. Process Control* **2020**, 91, 50–62. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2020.05.008>
- [22] A. Caspari, J. M. M. Faust, P. Schäfer, A. Mhamdi, A. Mitsos, *IFAC-PapersOnLine* **2018**, 51 (20), 295–300. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2018.11.028>
- [23] R. Amrit, J. B. Rawlings, D. Angeli, *Ann. Rev. Control* **2011**, 35 (2), 178–186. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.arcontrol.2011.10.011>
- [24] M. Ellis, H. Durand, P. D. Christofides, *J. Process Control* **2014**, 24 (8), 1156–1178. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2014.03.010>
- [25] E. N. Pistikopoulos, N. A. Diangelakis, *Comput. Chem. Eng.* **2016**, 91, 85–92. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2015.11.002>
- [26] A. Caspari, C. Offermanns, P. Schäfer, A. Mhamdi, A. Mitsos, *AIChE J.* **2019**, 65 (11), 45–4393. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.16721>
- [27] A. Caspari, C. Offermanns, A.-M. Ecker, M. Pottmann, G. Zapp, A. Mhamdi, A. Mitsos, *J. Process Control* **2020**, 91, 12–24. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2020.05.004>
- [28] A. Benallou, D. E. Seborg, D. A. Mellichamp, *AIChE J.* **1986**, 32 (7), 1067–1078. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.690320703>
- [29] A. Kienle, *Chem. Eng. Sci.* **2000**, 55 (10), 1817–1828. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(99\)00463-7](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(99)00463-7)
- [30] G. Engl, A. Kröner, T. Kronseder, O. von Stryk, in *High Performance Scientific and Engineering Computing: Proceedings of the International FORTWIHR Conference on HPSEC* (Eds: H.-J. Bungartz, F. Durst, C. Zenger), Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 8, Springer, Berlin **1999**.
- [31] A. Kröner, T. Kronseder, G. Engl, O. V. Stryk, in *European Symposium on Computer Aided Process Engineering: 11* (Eds: R. Gani, S. B. Jørgensen), Computer-aided chemical engineering, Vol. 9, Elsevier, Amsterdam **2001**.
- [32] Y. Cao, C. L. E. Swartz, M. Baldea, Design for Dynamic Performance: Application to an Air Separation Unit, in *Proc. of the 2011 American Control Conference*, IEEE, Piscataway, NJ **2011**. DOI: <https://doi.org/10.1109/ACC.2011.5990942>
- [33] P. Schäfer, L. F. Bering, A. Caspari, A. Mhamdi, A. Mitsos, in *13th International Symposium on Process Systems Engineering* (Eds: M. R. Eden, M. G. Ierapetritou, G. P. Towler), Computer-aided chemical engineering, Vol. 44, Elsevier, Amsterdam **2018**.
- [34] B. Wunderlich, Entwicklung eines druckgetriebenen dynamischen Kolonnenmodells zur Erhöhung der Flexibilität von kryogenen Luftzerlegungsanlagen, *Dissertation*, Karlsruhe Institut für Technologie (KIT) **2018**.
- [35] R. Kender, F. Rößler, B. Wunderlich, I. Thomas, P. Freko, A. Peschel, A. Ecker, S. Rehfeldt, H. Klein, *Vorteile eines druckgetriebenen Modellierungsansatzes bei der dynamischen Simulation eines Wärmeübertragers*, Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Prozess-, Apparate- und Anlagentechnik, Dortmund **2019**.
- [36] R. Kender, B. Wunderlich, I. Thomas, A. Peschel, S. Rehfeldt, H. Klein, *Druckgetriebene dynamische Simulation einer gesamten Luftzerlegungsanlage*, Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Fluidverfahrenstechnik, Potsdam **2019**.
- [37] R. Kender, B. Wunderlich, I. Thomas, A. Peschel, S. Rehfeldt, H. Klein, *Chem. Eng. Trans.* **2018** (69), 271–276. DOI: <https://doi.org/10.3303/CET1869046>
- [38] R. Kender, B. Wunderlich, I. Thomas, A. Peschel, S. Rehfeldt, H. Klein, *Chem. Eng. Res. Des.* **2019**, 147, 98–112. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.04.031>
- [39] J. Müller, W. L. Luyben, P. Belanger, S. Blouin, L. Megan, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2008**, 47 (2), 394–404. DOI: <https://doi.org/10.1021/ie070975t>
- [40] P. Carter, T. J. Carter, A. Viljoen, *Eng. Failure Anal.* **1996**, 3 (1), 29–43. DOI: [https://doi.org/10.1016/1350-6307\(95\)00031-3](https://doi.org/10.1016/1350-6307(95)00031-3)
- [41] K. Li, J. Wen, H. Yang, S. Wang, Y. Li, *Int. J. Therm. Sci.* **2019**, 145, 106013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2019.106013>
- [42] I. Thomas, B. Wunderlich, S. Grohmann, *Chem. Eng. Sci.* **2020**, 215, 115171. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.115171>
- [43] C. Hoffmann, J. Weigert, E. Esche, J.-U. Repke, *Chem. Eng. Sci.* **2020**, 214, 115358. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.115358>
- [44] H. A. Kooijman, K. R. Krishnamurthy, M. W. Biddulph, A new pressure drop model for structured packing, *ICHEME Symp. Ser.* **2002**, 104, A109–A123.
- [45] P. Haider, P. Freko, T. Acher, S. Rehfeldt, H. Klein, *Appl. Therm. Eng.* **2020**, 180, 115791. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2020.115791>
- [46] R. Niroomand, M. H. Saidi, S. K. Hannani, *Appl. Therm. Eng.* **2019**, 157, 113730. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2019.113730>
- [47] T.-S. Jeong, J.-h. Yu, D.-I. Lim, H.-B. Kim, *J. Visualization* **2018**, 21 (6), 1031–1041. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12650-018-0505-3>