

Technische Universität München
TUM School of Engineering and Design

Entwicklung eines modular-hierarchischen und druckgetriebenen Modells zur stationären und dynamischen Simulation von Wärmeübertragern

Felix Julian Rößler

Vollständiger Abdruck der von der TUM School of Engineering and Design der Technischen Universität München zur Erlangung eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)
genehmigten Dissertation.

Vorsitz: Prof. Dr.-Ing. Dirk Weuster-Botz

Prüfende der Dissertation:

1. Prof. Dr.-Ing. Harald Klein
2. Prof. Wolfgang Polifke, Ph.D.

Die Dissertation wurde am 03.08.2023 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die TUM School of Engineering and Design am 04.12.2023 angenommen.

„Lebe als würdest du morgen sterben. Lerne als würdest du für immer leben.“

Mahatma Gandhi

FÜR MEINE FAMILIE

Ich hoffe, Ihr findet immer das richtige Maß zwischen Lernen und Leben.

Das Eine schließt das Andere nicht aus!

Teile der vorgelegten Dissertation sind in folgenden Publikationen erschienen:

Rößler, F.; Thomas, I.; Freko, P.; Zander, H.-J.; Rehfeldt, S.; Klein, H.: *Dynamic simulation with digital twins of heat exchangers*. AIChE Annual Meeting, Conference Proceedings, 2020-November. (2020).

Rößler, F.; Freko, P.; Thomas, I.; Kender, R.; Rehfeldt, S.; Klein, H.: *A modular-hierarchical framework for the pressure-driven simulation of heat exchanger dynamics*. Computers & Chemical Engineering 163 (2022), S. 107821. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2022.107821.

Rößler, F.; Krumova, V.; Gewalt, S.; Bauernfeind, A.; Freko, P.; Thomas, I.; Zander, H.-J.; Rehfeldt, S.; Klein, H.: *Hazard Analysis of Fixed-Tube-Sheet Shell-and-Tube Heat Exchangers*. Chemie Ingenieur Technik 94.5 (2022), S. 727–737. ISSN: 0009-286X. DOI: 10.1002/cite.202100186.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Doktorand bei der Linde GmbH (Linde Engineering) und während des damit verbundenen Aufenthalts als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Anlagen- und Prozesstechnik der TU München. In diesem Umfeld haben zahlreiche Personen zum Gelingen der Arbeit beigetragen. Euch allen sage ich hiermit von ganzem Herzen: Danke!

Besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Prof. Dr.-Ing. Harald Klein, der es mir ermöglicht hat, das Thema der dynamischen Simulation von Wärmeübertragern im spannenden und zugleich herausfordernden Umfeld einer Industriekooperation zu bearbeiten, und mich dabei hervorragend betreut hat. In diesem Zuge bedanke ich mich auch bei Dr.-Ing. Sebastian Rehfeldt, der durch konstruktive Ratschläge maßgeblich zum Erfolg meiner Arbeit beigetragen hat. Für die Übernahme des Zweitgutachtens bedanke ich mich bei Prof. Wolfgang Polifke, Ph.D., und für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes bei Prof. Dr.-Ing. Dirk Weuster-Botz.

Während meiner Zeit bei Linde Engineering durfte ich mehrere Abteilungen mit hervorragendem Arbeitsklima kennenlernen. Insbesondere möchte ich meinen beiden Linde-Betreuern Pascal Freko (ENCP) und Dr. Ingo Thomas (ITP) für die unzähligen fachlichen Diskussionen über Wärmeübertrager und numerische Problemstellungen danken. Ingo, ohne SMI@LE gäbe es auch den jetzigen Stand von Wärmeübertragermodellen oder digitalen Zwillingen nicht, vielen Dank für Deine progressive Einstellung! Pascal, ohne Deinen fachlichen Input als Wärmeübertrager-Experte hätte die Simulationsumgebung nicht den derzeitigen Reifegrad erreicht, vielen Dank für Deinen Beitrag!

Ein Dankeschön für die Möglichkeit, im Umfeld des Kopernikus-Förderprojekts FlexASU zu arbeiten, geht an das Team der Produktlinie AS um Stefan Lochner. Die PFHE-Experten Paul Heinz und Axel Lehmacher hatten jederzeit ein offenes Ohr für meine Fragen. Selbiges gilt für die CWHE- und STHE-Experten Florian Deichsel, Stefan Gewalt und Dr.-Ing. Luis Matamoros. Bei den Simulationsexperten um Dr.-Ing. Hans-Jörg Zander, Dr.-Ing. Thomas Acher und Manuel Knaup bedanke ich mich für den regen fachlichen Austausch, der die Arbeit maßgeblich voran gebracht hat. Für Fragen zu Stoffdaten oder OPTISIM waren Dr.-Ing. Andreas Grenner und Dr.-Ing. Bernd Wunderlich jederzeit erreichbar, vielen Dank für Euren wertvollen Input!

Ich freue mich, dass die Simulationsumgebung auch nach dem Abschluss des Promotionsprojektes bei Linde weiterlebt, wofür die „SMI@LE-Taskforce“ um Veronika Krumova und Dr.-Ing. Magnus Winter Sorge tragen wird. An der Bereitstellung der erforderlichen Rahmenbedingungen haben die Abteilungsleiter Dr.-Ing. Christiane Kerber, Thomas Walter und Dr.-Ing. Maria-Magdalena Jarczyk bei ENCP sowie Dr.-Ing. Andreas

Kröner bei ITP maßgeblich mitgewirkt, vielen Dank für Euren Einsatz und die allzeit offenstehenden Türen!

Während meiner Zeit am Lehrstuhl herrschte durchweg ein tolles Arbeitsklima mit fachlichen und weniger fachlichen Diskussionen. Hierfür möchte ich allen Kolleg*innen gleichermaßen danken. Bei Nadin Rausch, Dr.-Ing. Patrick Haider, Dr.-Ing. Philipp Fritsch und Dr.-Ing. Robert Kender bedanke ich mich für den regen fachlichen Austausch. Nadin, danke, dass Du mit Deiner Master's Thesis die ein oder andere wertvolle Grundlage gelegt hast. Patrick, sowohl an das Benchmarking als auch an die Symbiose zwischen 1D- und 3D-Modellierung werde ich immer gerne zurückdenken. Philipp, danke, dass Du mich ohne Vorbehalte in unser Büro am Lehrstuhl aufgenommen hast. Robert, die ITP-Zeit im gemeinsamen Büro mit der hervorragenden Zusammenarbeit bei den unzähligen fachlichen Aspekten und den kurzweiligen Momenten bei weniger fachlichen Themen hat mir sehr viel Spaß gemacht. Auch die zahlreichen gemeinsamen Veröffentlichungen werde ich positiv in Erinnerung behalten.

Zum Erfolg der Arbeit haben im Rahmen von Studien- und Abschlussarbeiten auch Lola Mercier, Franziska Engel, Veronika Krumova, Maximilian Eisner und Alexander Bauernfeind beigetragen. Auch Euch ein herzliches Dankeschön!

Last but not least: Bei meinen Eltern bedanke ich mich für die bedingungslose Unterstützung auf meinem gesamten Bildungsweg. Angela und Karl-Heinz, ohne Euren Rückhalt wäre der erfolgreiche Abschluss dieser Arbeit ungleich schwerer geworden. Ein großes Dankeschön geht auch an meine kleine Schwester: Alisa, danke für Deine allzeit offenen Ohren.

Marktredwitz, Mai 2024

Felix Julian Rößler

Kurzfassung

In dieser Arbeit wird eine modular-hierarchische Simulationsumgebung für die druckgetriebene, dynamische und stationäre Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern vorgestellt. Eine Kernkomponente der Simulationsumgebung sind Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust nach aktuellem Stand der Technik, die eine realitätsgetreue Repräsentation der Wärmeübertrager sicherstellen. Die druckgetriebene Modellierung ermöglicht eine robuste Simulation von Vorwärts-, Rückwärts- und Nullströmung, was für eine akkurate Vorhersage der Wärmeübertragerdynamik entscheidend ist. Die Simulationsumgebung nutzt eine innovative Softwareinfrastruktur und kann die für verfahrenstechnische Anlagen relevanten Platten-, Rohrbündel- und spiralgewickelten Wärmeübertrager abbilden. Die Simulationsumgebung umfasst verschiedene Modelltiefen für Anwendungen mit unterschiedlichen Anforderungen.

Die Notwendigkeit der realitätsgetreuen, stationären und dynamischen Simulation von Wärmeübertragern wird zunächst anhand ausgewählter, energieintensiver Produktionsprozesse begründet. Anschließend werden die industriell relevanten Bauformen von Wärmeübertragern und die korrespondierenden Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust vorgestellt. Auf Basis mathematischer und numerischer Grundlagen werden daraufhin Simulationsverfahren verschiedener Modelltiefe für die stationäre und dynamische Simulation von Wärmeübertragern entwickelt, gegen alternative Simulationsverfahren aus der Literatur abgegrenzt und zu einer modular-hierarchischen Simulationsumgebung zusammengefasst. Dabei werden die numerischen Eigenschaften der verschiedenen Modelltiefen analysiert und Limitierungen des Anwendungsbereichs herausgearbeitet. Die grundlegenden Module der Simulationsumgebung werden mit analytischen Referenzlösungen und kommerziellen Simulationsprogrammen validiert.

Ausgewählte Betriebsszenarien mit und ohne Phasenwechsel werden herangezogen, um die Verfahren der Simulationsumgebung für die stationäre Nachrechnung von Wärmeübertragern zu vergleichen. Für einphasige Anwendungen bieten gleichungsbasierte Verfahren einen Rechenzeitvorteil, für Applikationen mit Phasenwechsel erlauben speziell angepasste Verfahren numerisch robuste Simulationen. Abschließend werden industriell relevante Szenarien, welche die dynamische Simulation von Wärmeübertragern erfordern, betrachtet. Bei der Risikoanalyse von Rohrbündel- und spiralgewickelten Wärmeübertragern können durch transiente Simulation kostenintensive Designanpassungen vermieden werden. Die Abschätzung der Lebensdauer von Plattenwärmeübertragern unter dynamischer Wechselbelastung ist eine weitere Anwendung. Zudem können dynamische Wärmeübertragermodelle zur Entwicklung schonender Anfahrkonzepte für flexibel betriebene verfahrenstechnische Anlagen eingesetzt werden oder als Kernkomponente detaillierter, druckgetriebener Gesamtanlagenmodelle – digitaler Zwillinge – dienen.

Abstract

In this work a modular-hierarchical framework for the pressure-driven, dynamic simulation and the steady-state rating of multi-stream heat exchangers is presented. A core component of the simulation framework are state-of-the-art design correlations for heat transfer and pressure drop, which ensure a realistic representation of the heat exchangers. The pressure-driven approach enables the numerically robust simulation of forward, reverse and zero flow scenarios, which is critical for an accurate prediction of heat exchanger dynamics. The simulation framework uses an innovative software infrastructure and can represent plate-fin, shell-and-tube and coil-wound heat exchangers, which are relevant for the modeling of large-scale process plants. The simulation framework includes multiple modeling approaches for applications with different requirements.

First, the necessity of realistic steady-state and dynamic simulation models for heat exchangers is justified by focusing on selected energy-intensive production processes. Subsequently, industrially relevant heat exchanger types and the corresponding correlations for heat transfer and pressure drop are presented. Based on mathematical and numerical fundamentals, modeling approaches with different degrees of detail for the steady-state and dynamic simulation of heat exchangers are developed. Thereafter, these modeling approaches are compared with alternative simulation methods published in literature and combined to a modular-hierarchical simulation framework. The numerical characteristics of the different modeling approaches are analyzed and the limits of the respective application ranges are highlighted. The basic modules of the simulation framework are validated by analytical reference solutions and commercial simulation packages.

Selected operating scenarios with and without phase change are applied to compare the steady-state rating methods provided by the simulation framework. For single-phase applications, equation-based methods offer an advantage in terms of computational speed. For applications with phase change, tailored methods allow numerically robust simulations. Furthermore, industrially relevant scenarios requiring dynamic simulations of heat exchangers are examined. Considering the risk analysis of shell-and-tube as well as coil-wound heat exchangers, cost-intensive design adaptations can be avoided by transient simulation. Lifetime estimation of plate-fin heat exchangers under cyclic thermal load is another application of dynamic heat exchanger simulations. In addition, transient heat exchanger models can be used to develop smart start-up concepts for flexibly operated process plants. Alternatively, they can serve as a core component of detailed, pressure-driven models of complete process plants, so-called digital twins.

Inhaltsverzeichnis

Formelzeichen und Abkürzungen	XV
1 Flexibler Betrieb von energieintensiven Produktionsprozessen	1
2 Bauformen von Wärmeübertragern	9
2.1 Plattenwärmeübertrager	9
2.2 Spiralgewickelte Wärmeübertrager	10
2.3 Rohrbündelwärmeübertrager	11
3 Korrelationsgleichungen zur Auslegung von Wärmeübertragern	13
3.1 Konvektiver Wärmeübergang	13
3.1.1 Wärmeübergangskorrelationen für einphasige Fluide	16
3.1.2 Wärmeübergangskorrelationen bei Verdampfung	19
3.1.3 Wärmeübergangskorrelationen bei Kondensation	22
3.2 Druckverlust	24
3.2.1 Einphasige Fluide in Geradrohren	25
3.2.2 Einphasige Fluide in gekrümmten Rohren	25
3.2.3 Einphasige Queranströmung eines Rohrbündels	26
3.2.4 Einphasige Fluide in Plattenwärmeübertragern	27
4 Mathematische Grundlagen	29
4.1 Reynolds-Transport-Theorem	29
4.2 Allgemeine Bilanzgleichung	30
4.3 Örtliche Diskretisierung mit finiten Volumen	31
4.4 Randbedingungen	33
4.5 Differentiell-algebraische Gleichungssysteme	34
4.6 Zeitliche Diskretisierung und Integrationsverfahren	35
4.7 Lösungsverfahren algebraischer Gleichungssysteme	36
4.7.1 Fixpunktiteration	37
4.7.2 Thomas-Algorithmus	38
4.7.3 Sekantenverfahren	38
4.7.4 Bisektionsverfahren	39
4.7.5 Regula-Falsi-Verfahren	40
4.7.6 Newton-Verfahren	40
4.8 Stabilität von Gleichungssystemen	41
4.9 Maßgeschneiderte numerische Verfahren	43
4.10 Implizite Differentiation	44

5	Grundlagen der Simulation von Wärmeübertragern	47
5.1	Grundlegende Bilanzgleichungen	47
5.1.1	Massenerhaltung eines Prozessstroms	47
5.1.2	Impulserhaltung eines Prozessstroms	48
5.1.3	Energieerhaltung eines Prozessstroms	48
5.1.4	Energieerhaltung einer Metallwärmekapazität	50
5.2	Methoden zur Simulation von Wärmeübertragern	51
5.2.1	Stationäre Simulation	51
5.2.2	Dynamische Simulation	55
5.2.3	Abgrenzung zum Stand der Technik	57
5.3	Druckgetriebene Simulation	58
5.4	Stoffdatenberechnung	59
5.5	Modellierungsumgebung SMI@LE	60
6	Simulationsverfahren für Wärmeübertrager	63
6.1	Eindimensionale Bilanzgleichungen	64
6.2	Dynamik mit Fluid-Massen- und -Energie-Holdup	65
6.2.1	Integration als System differentiell-algebraischer Gleichungen	67
6.2.2	Integration als System gewöhnlicher Differentialgleichungen	69
6.3	Dynamik mit quasi-stationären Prozessströmen	72
6.3.1	Integration als System differentiell-algebraischer Gleichungen	73
6.3.2	Betrachtung eines finiten Volumens eines Prozessstroms	75
6.3.3	Integration als System gewöhnlicher Differentialgleichungen	80
6.4	Stationäre Simulation	86
6.4.1	Pseudo-transientes Simulationsverfahren	86
6.4.2	Gleichungsbasiertes Simulationsverfahren	87
6.4.3	Maßgeschneidertes Simulationsverfahren	87
6.4.4	Konvergenzbetrachtung eines Wärmeübertragerabschnitts	88
6.4.5	Simultane axiale Integration aller Prozessströme	90
6.5	Modular-hierarchische Simulationsumgebung	93
7	Validierung der Basismodule	97
7.1	Metallwärmekapazitäten	97
7.1.1	Stationäre Wärmeleitung	97
7.1.2	Instationärer konvektiver Wärmeübergang	98
7.1.3	Instationäre Wärmeleitung	101
7.2	Prozessstrommodelle	104
7.2.1	Analytische Referenzlösung	105
7.2.2	Vergleich mit stationären Auslegungsprogrammen	107
8	Validierung und Nachrechnung von Wärmeübertragern	113
8.1	Validierung eines Hauptwärmeübertragers	113
8.2	Stationäre Nachrechnung von Wärmeübertragern	119
8.2.1	Vergleich verschiedener Verfahren zur Nachrechnung	119

8.2.2	Nachrechnung eines Wärmeübertragers mit Phasenwechseln . . .	121
9	Dynamische Simulation von Wärmeübertragern	125
9.1	Dynamik verschiedener Prozessstrommodelle	125
9.1.1	Überhitzung von Prozessdampf	125
9.1.2	Kondensation eines Luft-Stroms	129
9.2	Risikoanalyse von Wärmeübertragern	132
9.2.1	Ausfall der Rohrseite eines Rohrbündelwärmeübertragers	133
9.2.2	Reinigung des Mantels eines Rohrbündelwärmeübertragers	134
9.2.3	Vereinfachte Betrachtung eines Reaktorausfalls	135
9.2.4	Anfahrvorgang eines spiralgewickelten Wärmeübertragers	137
9.3	Lebensdauerabschätzung von Wärmeübertragern	140
9.3.1	Subcooler einer Luftzerlegungsanlage	140
9.3.2	Plattenwärmeübertrager einer Erdgasanlage	145
9.4	Entwicklung von schonenden Anfahrkonzepten	150
9.5	Druckgetriebene Gesamtanlagensimulation	153
9.5.1	Anfahrvorgang	153
9.5.2	Anlagenstopp	155
9.5.3	Wiederanfahren	159
10	Zusammenfassung und Ausblick	163
	Tabellenverzeichnis	169
	Abbildungsverzeichnis	170
	Literatur	173

Formelzeichen und Abkürzungen

Lateinische Formelzeichen

A	Fläche	m^2
\mathbf{A}	Koeffizientenmatrix	
a	Querteilungsverhältnis eines Rohrbündels	
a	linke Intervallgrenze	
$a_1 \dots a_n$	Koeffizienten auf der linken Nebendiagonale	
a_x	längenspezifische Fläche	$\frac{\text{m}^2}{\text{m}}$
b	Längsteilungsverhältnis eines Rohrbündels	
b	rechte Intervallgrenze	
\mathbf{b}	Randbedingungsvektor	
$b_1 \dots b_n$	Koeffizienten auf der Hauptdiagonale	
C	Anzahl an thermischen Kontakten	
C	Widerstandsbeiwert	
C_k	Koeffizient der Reihenlösung	
C_{wl}	Strahlungskoeffizient	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}^4}$
c	spezifische Wärmekapazität (Festkörper)	$\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$
$c_1 \dots c_n$	Koeffizienten auf der rechten Nebendiagonale	
$c'_1 \dots c'_n$	Modifizierte Koeffizienten der rechten Nebendiagonale	
c_p	spezifische Wärmekapazität (Fluid)	$\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$
\bar{c}_p	molare Wärmekapazität (Fluid)	$\frac{\text{J}}{\text{mol K}}$
D	Krümmungsdurchmesser	m
d	Durchmesser	m
$d_1 \dots d_n$	Koeffizienten der Randbedingungsmatrix	
$d'_1 \dots d'_n$	Modifizierte Koeffizienten der Randbedingungsmatrix	
dx	Länge eines Volumenelements	m
F	Korrekturfaktor	
F	Wärmeübertragungsfähigkeit	$\frac{\text{W}}{\text{K}}$
f	funktionaler Zusammenhang	

f'	funktionaler Zusammenhang	
\mathbf{f}	vektorielle Funktion/rechte Seite	
f_A	Rohranordnungsfaktor	
f_B	Bypassströmungsfaktor	
f_G	Geometriefaktor	
f_L	Leckströmungsfaktor	
G	Korrekturfaktor	
g	Gravitationskonstante	$\frac{\text{m}}{\text{s}^2}$
g	funktionaler Zusammenhang	
g'	funktionaler Zusammenhang	
g''	funktionaler Zusammenhang	
g'''	funktionaler Zusammenhang	
\mathbf{g}	vektorielle Funktion	
\mathbf{g}	vektorielle Darstellung der Gravitationskonstante	$\frac{\text{m}}{\text{s}^2}$
h	Diskretisierungsweite	m
h	spezifische Enthalpie	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$
h'	spezifische Enthalpie am Siedepunkt	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$
h''	spezifische Enthalpie am Taupunkt	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$
h_{Fin}	Fin-Höhe (Plattenwärmeübertrager)	m
\dot{H}	Enthalpiestrom	W
I	Anzahl an Prozessströmen in thermischem Kontakt	
J	Anzahl an Volumenelementen	
\mathbf{J}	Jacobi-Matrix	
J_G	dimensionslose Gasgeschwindigkeit	
K	Anzahl an Seitenflächen	
K	mittlere Rauheit	m
\mathbf{k}	Vektor der Modellkonstanten	
L	Länge	m
L	funktionaler Zusammenhang	
L^*	charakteristische Länge	m
\dot{M}	Massenstrom	$\frac{\text{kg}}{\text{s}}$
\bar{M}	molare Masse	$\frac{\text{kg}}{\text{mol}}$
m	Parameter	

N	Stoffmenge	mol
\dot{N}	Stoffmengenstrom	$\frac{\text{mol}}{\text{s}}$
\dot{N}^*	numerisch verzögerter Stoffmengenstrom	$\frac{\text{mol}}{\text{s}}$
n	Parameter	
\mathbf{n}	Oberflächennormalenvektor	
N_{SF}	Anzahl an Seitenflächen	
N_{I}	Anzahl an Stützstellen	
n_{r}	Anzahl an Rohrreihen	
P_1	Parameter für Wärmeübergangskorrelation	
P_2	Parameter für Wärmeübergangskorrelation	
p	Ordnung eines Diskretisierungsverfahrens	
p	Druck	bar
p_{sat}	Sättigungsdampfdruck	bar
\dot{Q}	Wärmestrom	W
Q^ϕ	Quelle/Senke	
\dot{q}	Wärmequellterm	$\frac{\text{W}}{\text{m}^3}$
\dot{q}_x	Wärmestromdichte	$\frac{\text{W}}{\text{m}}$
R	Widerstandsbeiwert	
\mathbf{r}	Vektor der Modellparameter	
S	Oberfläche	m^2
S	Anzahl an Metallwärmekapazitäten in therm. Kontakt	
T	Temperatur	K
T'	Temperatur am Siedepunkt	K
T''	Temperatur am Taupunkt	K
T_{sat}	Siedetemperatur	K
t	Zeit	s
t^*	aktueller Zeitpunkt	s
t_{Fin}	Dicke der Fin-Struktur	m
u	spezifische innere Energie	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$
U	Innere Energie	J
\dot{V}	Volumenstrom	$\frac{\text{m}^3}{\text{s}}$
V	Volumen	m^3
v	Geschwindigkeit	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$

\mathbf{v}	Geschwindigkeitsvektor	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$
vf_{gen}	generalisierter Dampfanteil	
\mathbf{w}	Vektorfeld	
x	Massenanteil	
x	Ortskoordinate	m
\mathbf{x}	Variablenvektor	
$\dot{\mathbf{x}}$	Zeitableitung des Variablenvektors	
x'	Unstetigkeitsstelle	
$x_1 \dots x_n$	Variablenvektoreinträge	
\mathbf{y}	Lösungsvektor	
z	Komponentenzusammensetzung eines Prozessfluids	
z'	Zusammensetzung eines Prozessfluids am Siedepunkt	
z''	Zusammensetzung eines Prozessfluids am Taupunkt	

Griechische Formelzeichen

α	Wärmeübergangskoeffizient	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$
α	Polynomkoeffizient	
α_0	Referenzwärmeübergangskoeffizient	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$
β	isobarer therm. Ausdehnungskoeffizient	$\frac{1}{\text{K}}$
β	Polynomkoeffizient	
β_{Fin}	Parameter (Bestimmung des Fin-Wirkungsgrads)	
δ	Referenzgrenzschichtdicke	m
δ_k	Parameter der Reihenlösung	
Δp	Druckdifferenz	bar
Δp_{B}	Beschleunigungsdruckverlust	bar
Δp_{G}	Gravitationsdruckverlust	bar
Δp_{R}	Reibungsdruckverlust	bar
Δh_{v}	latente Wärme	$\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$
Δh_{v}^*	korrigierte latente Wärme	$\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$
ΔT	Temperaturdifferenz	K
ϵ	halbe Intervallbreite	
ε	Emissionsgrad	
ζ	Reibungsbeiwert	
η	dynamische Viskosität	Pa s
η_{Fin}	Fin-Wirkungsgrad	

θ	dimensionslose Temperatur	
γ	Homotopieparameter	
γ_{dir}	Vorzeichenoperator	
Γ^ϕ	Diffusionskoeffizient	
λ	Wärmeleitfähigkeit	$\frac{\text{W}}{\text{m K}}$
ξ	dimensionslose Ortskoordinate	
π	Kreiszahl	
ϱ	Dichte	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
σ	Oberflächenspannung	$\frac{\text{N}}{\text{m}}$
σ_{SB}	Stefan-Boltzmann-Konstante	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}^4}$
τ	dimensionslose Zeit	
τ	Zeitkonstante eines PT1-Glieds	s
τ	Eintrag des Spannungstensors	$\frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}$
$\boldsymbol{\tau}$	Spannungstensor	$\frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}$
Φ	integrale Erhaltungsgröße	
$\boldsymbol{\Phi}$	vektorielle Verfahrensfunktion	
ϕ	spezifische Erhaltungsgröße	
$\boldsymbol{\varphi}$	vektorielle Verfahrensfunktion der Fixpunktgleichung	
ψ	Hohlraumanteil (Rohrbündel)	
ω	Gewichtungsfaktor	

Hochgestellte Indizes

*	tatsächliche Lösung
m	Iteration m
t	Zeitpunkt t
$t + \Delta t$	Zeitpunkt $t + \Delta t$
l	Eintritt eines Volumenelements
ll	Austritt eines Volumenelements

Tiefgestellte Indizes

α	durch konvektiven Wärmeübergang
λ	durch Wärmeleitung
Δp	für den Druckverlust
0	initialer Zeitpunkt
1	bezogen auf Druckknoten 1
1	bezogen auf Prozessstrom 1

2	bezogen auf Druckknoten 2
2	bezogen auf Prozessstrom 2
2P	Zweiphasengebiet
a	Außenseite
a	algebraisch
aus	am Austritt eines Volumenelements
Bündel	Rohrbündel
C	betrachtetes finites Volumen
c	thermischer Kontakt c
char	charakteristisch
d	differentiell
E	rechts angrenzendes finites Volumen
e	rechts angrenzende Seitenfläche
eff	effektiv
ein	am Eintritt eines Volumenelements
F	Flüssigphase
Film	Filmströmung
final	finaler Zeitpunkt
fl	Flüssigphase
Fl	Fluid
FT	gesamter Massenstrom in der Flüssigphase
FV	finites Volumen
G	Gasphase
ga	Gasphase
geo	geometrisch
h	hydraulisch
\dot{H}	für den Enthalpiestrom
i	auf der Innenseite
i	Prozessstrom i
int	integral
ist	Istwert
j	Volumenelement j
$j-$	linke Seitenfläche des Volumenelements j

$j+$	rechte Seitenfläche des Volumenelements j
k	konvektiver Wärmeübergang
k	Anzahl berücksichtigter Zeitschritte
k	Zellseitenfläche k
$k-$	links an die Zellseitenfläche k angrenzendes Volumen
$k+$	rechts an die Zellseitenfläche k angrenzendes Volumen
konv	durch konvektiven Transport
krit	kritisch
L	linkes Ende
lam	laminar
mak	makroskopisch
max	maximal
Me	Metall
Metall	Metall
mik	mikroskopisch
min	minimal
n	zum Zeitpunkt t_n
N	für die Stoffmenge
\dot{N}	für den Stoffmengenstrom
\dot{N}^*	für den numerisch verzögerten Stoffmengenstrom
p	für den Druck
pri	primär
\dot{Q}	für den übertragenen Wärmestrom
Quer	freier Strömungsquerschnitt
r	reduziert
R	rechtes Ende
R	für den Widerstandsbeiwert
Reihe	Rohrreihe
S	Wärmestrahlung
s	Metallwärmekapazität s
sat	am Siedepunkt
Scher	Scherströmung
sek	sekundär

Sie	am Siedepunkt
soll	Sollwert
T	für die Temperatur
td	thermodynamisch
trans	Übergangsbereich
turb	turbulent
U	überströmt
U	für die innere Energie
V	volumetrisch
W	Wand
W	links angrenzendes finites Volumen
w	links angrenzende Seitenfläche
I	Regime I nach SHAH (2009)
II	Regime II nach SHAH (2009)
III	Regime III nach SHAH (2009)
∞	Umgebung

Dimensionslose Kennzahlen

Bi	Biot-Zahl
Fo	Fourier-Zahl
Gr	Grashof-Zahl
J	Colburn-Faktor
Nu	Nusselt-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
X_M	Martinelli-Parameter

Abkürzungen

AE	algebraische Gleichung (engl.: algebraic equation)
ASU	Luftzerlegungsanlage (engl.: air separation unit)
BDF	Rückwärtsdifferenzen (engl.: backward differentiation formulas)
CAPEX	Investitionskosten (engl.: capital expenditure)
CFD	numerische Strömungsmechanik (engl.: computational fluid dynamics)
CGN	unreiner gasförmiger Stickstoff (engl.: crude gaseous nitrogen)
CLOP	unreiner, flüssiger Drucksauerstoff (engl.: crude liquid oxygen pressurized)

CWHE	spiralgewickelter Wärmeübertrager (engl.: coil-wound heat exchanger)
DAE	differentiell-algebraische Gleichung (engl.: differential algebraic equation)
DLL	Dynamic Link Library
DPM	Distributed-Parameter-Modell
ET	Expansionsturbine
FV	finites Volumen
GAN	gasförmiger Stickstoff (engl.: gaseous nitrogen)
GMPS	General Multiphase Property System
GOX	gasförmiger Sauerstoff (engl.: gaseous oxygen)
HAZAN	Risikoanalyse (engl.: hazard analysis)
H ₂	Wasserstoff
HTFS	Aspen HTFS Research Network
HTRI	Heat Transfer Research, Inc.
KV	Kontrollvolumen
LAES	kryogene Energiespeicherung (engl.: liquid air energy storage)
LH ₂	flüssiger Wasserstoff
LIN	flüssiger Stickstoff (engl.: liquid nitrogen)
LNG	Flüssigerdgas (engl.: liquefied natural gas)
LOX	flüssiger Sauerstoff (engl.: liquid oxygen)
MBM	Moving-Boundary-Modell
MHEX	Hauptwärmeübertrager (engl.: main heat exchanger)
MOL	vertikale Linienmethode (engl.: method of lines)
MV	materielles Volumen
NG	Erdgas (engl.: natural gas)
NK	Nebenkondensator
NLU	Anlage zur Stickstoffverflüssigung (engl.: nitrogen liquefaction unit)
ODE	gewöhnliche Differentialgleichung (engl.: ordinary differential equation)
OPEX	Betriebskosten (engl.: operational expenditure)
PDE	partielle Differentialgleichung (engl.: partial differential equation)
PFHE	Plattenwärmeübertrager (engl.: plate-fin heat exchanger)
PGAN	gasförmiger Druckstickstoff (engl.: pressurized gaseous nitrogen)
RTT	Reynolds-Transport-Theorem

SC	Subcooler
SEWTLE	semi-explizite Methode für durch eine Wandtemperatur gekoppelte Gleichungen (engl.: semi-explicit method for wall temperature linked equations)
SIMPLE	semi-implizite Methode für durch den Druck gekoppelte Gleichungen (engl.: semi-implicit method for pressure linked equations)
SMI@LE	Simulation Model Infrastructure at Linde Engineering
STHE	Rohrbündelwärmeübertrager (engl.: shell-and-tube heat exchanger)

1 Flexibler Betrieb von energieintensiven Produktionsprozessen

In dieser Arbeit werden Simulationsverfahren zur stationären und dynamischen Simulation von Wärmeübertragern vorgestellt, die auf Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust basieren. Die Wärmeübertragermodelle werden als integraler Bestandteil von detaillierten Simulationsmodellen verfahrenstechnischer Anlagen eingesetzt. Zudem werden für ausgewählte Anwendungsfälle numerisch robuste Simulationsverfahren identifiziert, die bei vertretbarem Simulationsaufwand bestmögliche Simulationsergebnisse liefern. Zunächst stellt sich jedoch die folgende Frage: Warum ist die dynamische Simulation von Wärmeübertragern mit Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust erforderlich?

Infolge der weltweiten Energiewende nimmt der Anteil erneuerbarer Energiequellen am Energieangebot zu. Die volatile Verfügbarkeit der erneuerbaren Energiequellen erfordert eine flexible Anpassung des Energieverbrauchs an das Energieangebot, um die Stromnetze zu stabilisieren. Ein Großteil des Energiebedarfs entfällt auf großindustrielle Produktionsprozesse, z.B. verfahrenstechnische Anlagen. Die Anpassung des Energiebedarfs dieser Produktionsprozesse durch einen flexiblen Betrieb bei gleichbleibender Produktqualität (Laststeuerung) ist daher entscheidend für eine erfolgreiche Umsetzung der Energiewende. [SAUER ET AL. 2019, KLEIN ET AL. 2020, KLEIN ET AL. 2021, KENDER ET AL. 2021]

Ein flexibler Betrieb von verfahrenstechnischen Anlagen erfordert zahlreiche Lastwechsel sowie Anfahr- und Abschaltvorgänge. Die Steuerung dieser transienten Betriebsszenarien erfolgt durch echtzeitfähige Regelungskonzepte, die beispielsweise auf Basis von detaillierten, dynamischen Anlagenmodellen entwickelt werden. Die Anlagenmodelle werden zudem zur Optimierung des Anlagenbetriebs und zur Analyse von Störfällen eingesetzt. Darüber hinaus kann ein detailliertes Anlagenmodell als Kernkomponente eines digitalen Zwillings eines verfahrenstechnischen Prozesses eingesetzt werden. Der digitale Zwilling deckt verschiedene Anwendungsfälle im Lebenszyklus einer verfahrenstechnischen Anlage von der Auslegung über die Inbetriebnahme bis zur Optimierung des Betriebs ab. Somit ist der Detailgrad des zugrundeliegenden Anlagenmodells so anzupassen, dass für einen bestimmten Anwendungsfall die bestmögliche Repräsentation der realen Anlage bei vertretbarem Simulationsaufwand gegeben ist. [LUO ET AL. 2003, KENDER ET AL. 2021, KENDER ET AL. 2022a, KENDER ET AL. 2022b]

Kryogene Verfahren sowie Kühl- und Heizsysteme sind durch eine hohe Energieeffizienz infolge von thermischer Integration gekennzeichnet. Um die Energieeffizienz dieser Prozesse zu maximieren, kommen möglichst effiziente Wärmeübertrager zum Einsatz. Somit sind Wärmeübertrager ein integraler Bestandteil der korrespondierenden Anlagen. Im Folgenden werden energieintensive kryogene Prozesse vorgestellt, die thermisch integriert sind und Potential zur Lastflexibilisierung aufweisen. Somit wird die Notwendigkeit von Wärmeübertragermodellen in Auslegungsgenauigkeit hinsichtlich Wärmeübergang und Druckverlust, die in dynamische Anlagenmodelle eingebunden werden können, unterstrichen. Ausgewählte Wärmeübertrager der beschriebenen Prozesse werden im weiteren Verlauf dieser Arbeit wieder aufgegriffen. [RÖSSLER ET AL. 2020, RÖSSLER ET AL. 2022a, RÖSSLER ET AL. 2022b]

In Luftzerlegungsanlagen (engl. air separation unit, ASU) werden durch kryogene Rektifikation von Umgebungsluft die Reinstoffe Stickstoff und Sauerstoff sowie optional die Edelgase Argon, Krypton und/oder Xenon gewonnen. Abb. 1.1 zeigt exemplarisch das Prozessfließbild einer typischen ASU ohne Edelgasproduktion. Der Feedstrom LUFT wird in gasförmigen Sauerstoff (engl. gaseous oxygen, GOX), flüssigen Sauerstoff (engl. liquid oxygen, LOX), unreinen gasförmigen Stickstoff (engl. crude gaseous nitrogen, CGN), gasförmigen Stickstoff (engl. gaseous nitrogen, GAN) und gasförmigen Druckstickstoff (engl. pressurized gaseous nitrogen, PGAN) aufgetrennt. Eine Kernkomponente der ASU ist die aus zwei Rektifikationskolonnen bestehende Doppelkolonne. Die unterschiedlichen Druckniveaus von Hoch- und Niederdruckkolonne ermöglichen eine energetisch vorteilhafte Kopplung durch den Verdampfer/Kondensator, der zwischen den beiden Kolonnen angebracht ist. Die zur Verdampfung des Sumpfprodukts der Niederdruckkolonne erforderliche Energie wird durch Kondensation des Kopfprodukts der Hochdruckkolonne bereitgestellt. Durch den Verdampfer/Kondensator ist eine hohe Wärmeintegration gegeben und die Notwendigkeit von zusätzlichem Equipment (z.B. Pumpen) entfällt. Mit dem Hauptwärmeübertrager (engl. main heat exchanger, MHEX), dem Subcooler (SC) und dem Nebenkondensator (NK), die als Plattenwärmeübertrager (engl. plate-fin heat exchanger, PFHE) ausgeführt sind, stellen Wärmeübertrager weitere Kernkomponenten der ASU dar. [HAUSEN & LINDE 1985, HÄRING 2008, KENDER ET AL. 2019, KLEIN ET AL. 2020, KLEIN ET AL. 2021, KENDER ET AL. 2021, RÖSSLER ET AL. 2022a]

Der Feedstrom LUFT wird im Hauptluftverdichter komprimiert und anschließend in zwei Prozessströme aufgeteilt. Der Teilstrom LUFT1 durchströmt die gesamte Länge des MHEX und wird auf ein kryogenes Temperaturniveau abgekühlt. Anschließend wird der Prozessstrom LUFT1 im NK partiell kondensiert und in die Hochdruckkolonne eingespeist. Der Teilstrom LUFT2 wird im MHEX abgekühlt, in einer Expansionsturbine entspannt und der Niederdruckkolonne zugeführt. Dabei stellt die Expansion die Kälteleistung für die kryogene Rektifikation in der Hoch- und der Niederdruckkolonne bereit. Durch die Rektifikation wird der Feedstrom in die Reinstoffe Stickstoff und Sauerstoff zerlegt. Der Leichtsieder Stickstoff wird am Kopf und der Schwertsieder Sauerstoff im Sumpf der Niederdruckkolonne gewonnen. Im SC werden die gasförmigen Produktströme GAN und CGN überhitzt, um die flüssigen Prozessströme CLOP (unreiner flüssiger Drucksauerstoff, engl. crude liquid oxygen pressurized) und LIN (flüssiger Druckstickstoff,

des Speichers). Effiziente, kryogene Mehrstromwärmeübertrager werden sowohl für die Verflüssigung (Hauptwärmeübertrager) als auch für das Verdampfen (Verdampfer) des Arbeitsmediums eingesetzt. Eine Effizienzsteigerung des Prozesses erfordert detaillierte Studien der Wärmeintegration von Lade- und Entladevorgängen durch einen regenerativen Energiespeicher. Dieser interagiert mit dem Hauptwärmeübertrager und mit dem Verdampfer, sodass die Komplexität des dynamischen Anlagenverhaltens zunimmt. Für detaillierte Analysen der Anlagendynamik sind daher transiente Anlagenmodelle mit Wärmeübertragermodellen auf Basis von Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust erforderlich. [MORGAN ET AL. 2015, SCIACOVELLI ET AL. 2017, FIKIIN ET AL. 2017, POPOV ET AL. 2019]

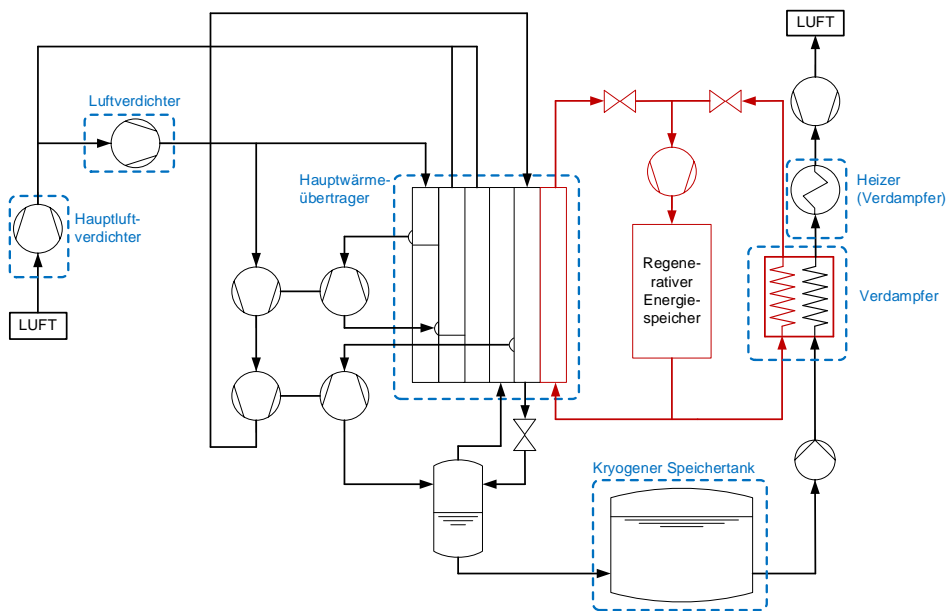


Abbildung 1.2: Prozessflussbild eines kryogenen Energiespeichers [MORGAN ET AL. 2015]

Anlagen zur Verflüssigung von Stickstoff (engl. nitrogen liquefaction unit, NLU) sind vergleichbar mit dem Verflüssigungsteil einer LAES-Anlage (vgl. Abb. 1.3). Die Kernkomponenten der dargestellten NLU sind zwei gekoppelte Plattenwärmeübertrager (PFHE 1, PFHE 2), zwei Expansionsturbinen (ET 1, ET 2), ein Flashbehälter und ein Zweistromwärmeübertrager. Die beiden gasförmigen Stickstoffströme N₂ (unterkritisch) und HPN₂ (überkritisch) sind die Feedströme der NLU. N₂ strömt teilweise durch PFHE 1, wird dabei abgekühlt und anschließend in ET 1 entspannt. Nach der Entspannung wird der Prozessstrom in PFHE 1 erwärmt und als Teil des rezirkulierten Prozessstroms RECYCLE abgezogen. Der Prozessstrom HPN₂ wird auf der ganzen Länge von PFHE 1 abgekühlt und tritt als gasförmiger Strom aus. Ein Teil des Prozessstroms wird anschließend in ET 2 entspannt und dem Flashbehälter zugeführt. Der verbleibende Teil wird in PFHE 2 weiter abgekühlt. Nach einer Entspannung wird dieser Prozessstrom ebenfalls in den Flashbehälter eingespeist. Aufgrund der Abkühlung des überkritischen Prozessstroms HPN₂ in PFHE 2 und der anschließenden Entspannung, liegt ein Zweiphasengemisch im Flashbehälter vor. Die Gasphase wird abgezogen und

zunächst in PFHE 2, dann in PFHE 1 angewärmt. Anschließend wird der Prozessstrom in PFHE 1 vorzeitig abgezogen und dem Austrittsstrom von ET 1 zugemischt. Die Flüssigphase des Flashbehälters entspricht dem flüssigen Stickstoffprodukt (LIN) und wird im Zweistromwärmeübertrager unterkühlt. Ein LIN-Teilstrom wird weiter entspannt und stellt im Zweistromwärmeübertrager die Kälteleistung zur Unterkühlung des Produktstroms bereit. Anschließend wird dieser Teilstrom in PFHE 1 und PFHE 2 angewärmt und dem Prozessstrom RECYCLE zugeführt. Für einen energieeffizienten stationären und dynamischen Betrieb einer NLU ist ein optimales Zusammenspiel von Expansionsturbinen und PFHEs entscheidend. Daher sind Simulationsmodelle für PFHEs in Auslegungsgenauigkeit hinsichtlich Wärmeübergang und Druckverlust unabdingbar, um das Anlagenverhalten einer NLU adäquat abzubilden.

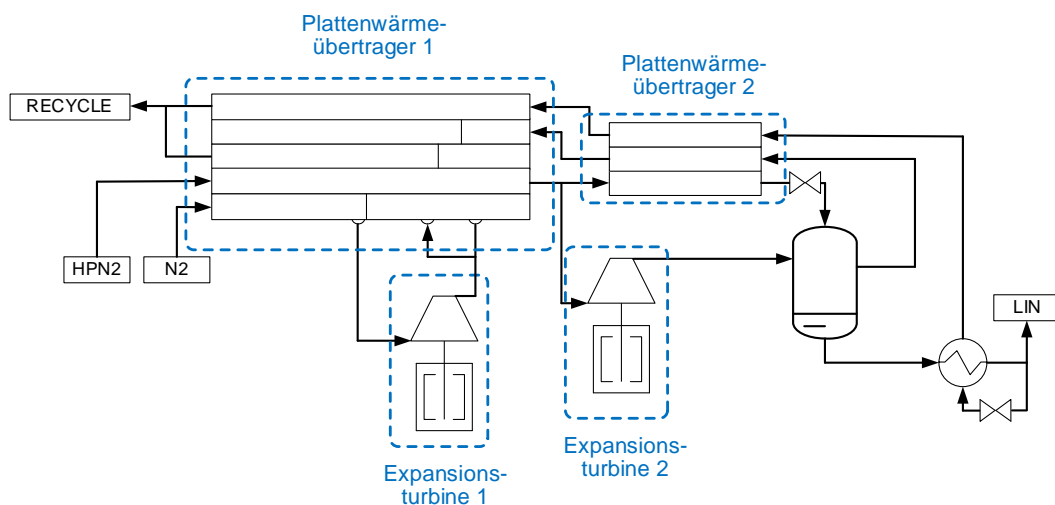


Abbildung 1.3: Prozessflussbild einer Stickstoffverflüssigungsanlage

Thermisch integrierte, kryogene Verfahren sind nicht auf das Stoffsystem Luft beschränkt. Derzeit gelten Erdgas und blauer Wasserstoff als Brückentechnologien der Energiewende und grüner Wasserstoff wird als Energieträger der Zukunft gehandelt [NEWBOROUGH & COOLEY 2020, NOUSSAN ET AL. 2021]. Für diese Energieträger sind jedoch energie- und kosteneffiziente Speicher- und Verteilungskonzepte erforderlich, um den Zeitraum zwischen Erzeugung und Verbrauch zu überbrücken [SKAUGEN ET AL. 2020]. Daher dient die Verflüssigung von Erdgas und Wasserstoff der Speicherung und dem effizienten Transport als kryogene Flüssigkeit mit hoher Dichte über große Distanzen [BERSTAD ET AL. 2010, ULVESTAD & OVERLAND 2012, POPOV ET AL. 2019, YANXING ET AL. 2019]. Die kryogenen Prozesse zur Verflüssigung von Erdgas oder Wasserstoff sind thermisch integrierte Verfahren mit einem hohen Potential zur Lastflexibilisierung, die auf dem Einsatz effizienter Mehrstromwärmeübertrager basieren. Auch in Wiederverdampfungsanlagen am Einsatzort der Energieträger sind Mehrstromwärmeübertrager verbaut [POPOV ET AL. 2019]. Abb. 1.4a visualisiert ein Beispiel für den Prozess der Erdgasverflüssigung und Abb. 1.4b zeigt ein exemplarisches Prozessflussbild der Wasserstoffverflüssigung.

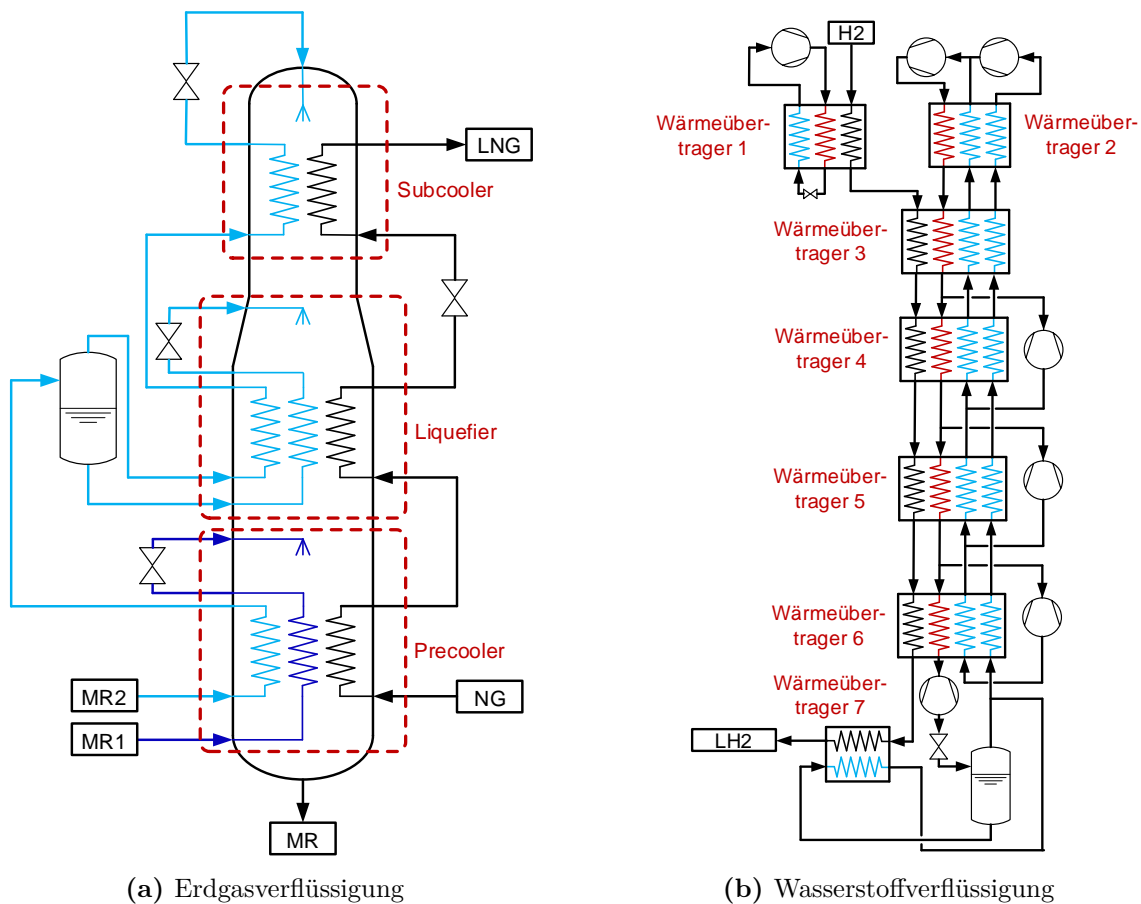


Abbildung 1.4: Prozessfließbilder von kryogenen Verflüssigungsprozessen

Bei der Gewinnung von Flüssigerdgas (engl. liquefied natural gas, LNG) werden spiralgewickelte Wärmeübertrager (engl. coil-wound heat exchanger, CWHE) eingesetzt, um den Erdgasstrom (engl. natural gas, NG) zu kühlen (Precooler), zu verflüssigen (Liquefier) und zu unterkühlen (Subcooler) [DING ET AL. 2017]. Die Kälteleistung wird durch die Kältemittelgemische MR1 und MR2 bereitgestellt, die einer Fallfilmverdampfung auf der Mantelseite des jeweiligen CWHE unterliegen [POPOV ET AL. 2019]. Die CWHEs entsprechen bis zu 30 % der Investitionskosten (engl. capital expenditure, CAPEX) einer Anlage zur Erdgasverflüssigung [PACIO & DORAO 2011]. Etwa 25 % der Betriebskosten (engl. operational expenditure, OPEX) sind auf Nicht-Idealitäten der CWHEs, wie den Wärmeeinfall aus der Umgebung, die Wärmeleitungseffekte in den Metallkomponenten und die Wärmeübergangswiderstände, zurückzuführen [FREDHEIM 1994, GUPTA & ATREY 2000]. Um CAPEX und OPEX der Anlagen zur Verflüssigung von Erdgas zu minimieren, ist daher eine optimale Auslegung der CWHEs und des Gesamtprozesses für stationäre und dynamische Betriebszustände entscheidend [FREDHEIM 1994]. Somit sind CWHE-Modelle mit Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust erforderlich, um den stationären und transienten Betrieb realistisch vorherzusagen [FREDHEIM ET AL. 2000, NEERAAS ET AL. 2004].

Bei der Erzeugung von flüssigem Wasserstoff (LH₂) wird gasförmiger Wasserstoff (H₂) in einem mehrstufigen Prozess abgekühlt und verflüssigt. Da PFHEs eine hinreichend große volumenspezifische Wärmeübertragungsfläche für eine effiziente Verflüssigung des Wasserstoffs bereitstellen können, stellen diese Apparate eine Kernkomponente des Prozesses dar [CARDELLA ET AL. 2017]. Die PFHEs sind partiell mit einem Katalysator für die Umwandlung von Ortho- zu Parawasserstoff beschichtet. Parawasserstoff stellt einen energetisch günstigeren Zustand dar als Orthowasserstoff. Daher läuft die exotherme Umwandlung von Ortho- zu Parawasserstoff von Natur aus ab, wenn auch sehr langsam. Die dabei freiwerdende Reaktionswärme übersteigt die Verdampfungsenthalpie von Wasserstoff. Daher ist die Reaktion in einem Speicher für flüssigen Wasserstoff unbedingt zu vermeiden, um Wasserstoffverluste durch Verdampfung zu minimieren. Aus diesem Grund wird die Umwandlung von Ortho- zu Parawasserstoff bereits während der Verflüssigung katalytisch herbeigeführt. Die Kälteleistung für die Wasserstoff-Verflüssigung wird durch mehrere Kältemittelkreisläufe bereitgestellt. Aufgrund der vergleichsweise neuen Technologie bietet die Verflüssigung von Wasserstoff Optimierungspotential hinsichtlich des stationären und des dynamischen Betriebs [SKAUGEN ET AL. 2020]. Dabei sind hinreichend akkurate Modelle für die PFHEs erforderlich, sodass Ansätze zur integralen Bilanzierung eines Wärmeübertragers nicht ausreichen [DONAUBAUER ET AL. 2019]. Auch Methoden der CFD (engl. computational fluid dynamics) sind aufgrund des hohen Rechenaufwands nicht anwendbar [SKAUGEN ET AL. 2020, HAIDER ET AL. 2020, HAIDER ET AL. 2021a, HAIDER ET AL. 2021b]. Stationäre und dynamische Wärmeübertragermodelle auf Basis von Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust verfügen hingegen über einen hinreichenden Detailgrad und einen vertretbaren Rechenaufwand für die Optimierung von Prozessen zur Verflüssigung von Wasserstoff.

Abb. 1.1 bis 1.4 veranschaulichen die ausgeprägte thermische Integration von kryogenen Prozessen, die durch Wärmeübertrager erreicht wird. Bei der stationären Prozesssimulation und -optimierung werden meist integrale Wärmeübertragermodelle eingesetzt, um die Prozessrandbedingungen der Wärmeübertrager zu ermitteln. Mit detaillierten Auslegungsprogrammen werden die Wärmeübertrager anschließend thermisch und hydraulisch adäquat ausgelegt. Häufig ist dabei ein iteratives Vorgehen zwischen Prozesssimulation und detaillierter Auslegung der Wärmeübertrager erforderlich. Für die stationäre Nachrechnung von verfahrenstechnischen Prozessen bei gegebener Topologie der Anlage und Geometrie des Equipments können ebenfalls integrale Wärmeübertragermodelle herangezogen werden, da gemäß der Auslegung Wärmeübergangskoeffizienten, effektive Wärmeübertragungsflächen und Druckverlustbeiwerte für den Betriebspunkt des Wärmeübertragers bekannt sind.

Während einer dynamischen Prozesssimulation soll das eingesetzte Wärmeübertragermodell hingegen den gesamten Betriebsbereich der Prozessanlage akkurat abbilden. Daher ist eine Anpassung von Modellparametern an eine stationäre Auslegung nicht möglich. Somit sind dynamische Wärmeübertragermodelle mit Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust erforderlich, welche zudem die Topologie des Wärmeübertragers hinreichend genau auflösen. Ausschließlich auf Basis von akkuraten

Wärmeübergangskorrelationen können der Wärmedurchgang und damit die Effizienz eines Wärmeübertragers realitätsgetreu abgebildet werden. Die Qualität der dynamischen Simulationsergebnisse hängt zudem entscheidend von der Berücksichtigung weiterer Einflussparameter ab. Wärmeleitungseffekte in den Metallkomponenten sowie ein Wärmeeinfall aus der Umgebung reduzieren die Effizienz eines Wärmeübertragers und sind daher zu berücksichtigen. Darüber hinaus ist insbesondere bei Wärmeübertragern mit einem hohen Temperaturgang oder mit Phasenwechseln die Variation der Stoffeigenschaften der Prozessströme mit Temperatur und Druck von Bedeutung. [NELLIS 2003, ZHANG ET AL. 2010, KOHIL ET AL. 2010, JAIN ET AL. 2017, ZHANG ET AL. 2017]

Ausschließlich eine realitätsgetreue Modellierung von Wärmeübertragern ermöglicht ein optimales Design einer verfahrenstechnischen Anlage für den stationären und dynamischen Betrieb sowie eine akkurate Vorhersage der Anlagendynamik. Im Rahmen dieser Arbeit werden daher adäquate Simulationsverfahren für Wärmeübertrager vorgestellt. Zunächst wird in Kapitel 2 auf die in der Prozessindustrie relevanten Bauformen von Wärmeübertragern eingegangen. In Kapitel 3 werden anschließend relevante Korrelationen für Druckverlust und Wärmeübergang zur thermo-fluiddynamischen Auslegung dieser Bauformen vorgestellt. Die Kapitel 4 und 5 thematisieren daraufhin mathematische und allgemeine Grundlagen im Hinblick auf die numerische Simulation von Wärmeübertragern. Die in dieser Arbeit auf Basis dieser Grundlagen entwickelten stationären und dynamischen Simulationsverfahren für Mehrstromwärmeübertrager werden in Kapitel 6 präsentiert und zu einer modular-hierarchischen Simulationsumgebung zusammengefasst. Diese basiert auf grundlegenden Modulen für Prozessströme und Metallwärmekapazitäten, die in Kapitel 7 unter anderem mit analytischen Referenzlösungen validiert werden. In den Kapiteln 8 und 9 werden daraufhin Simulationsergebnisse für ausgewählte stationäre und dynamische Anwendungsfälle der Simulationsverfahren präsentiert. Kapitel 10 fasst abschließend die wichtigsten Erkenntnisse dieser Arbeit zusammen und gibt einen Überblick über mögliche Weiterentwicklungen der modular-hierarchischen Simulationsumgebung für Mehrstromwärmeübertrager.

2 Bauformen von Wärmeübertragern

Im industriellen Maßstab werden insbesondere PFHEs, CWHEs und Rohrbündelwärmeübertrager (engl. shell-and-tube heat exchanger, STHE) eingesetzt. Grundlagen zu diesen Bauformen sind den Abschnitten 2.1 bis 2.3 zu entnehmen.

2.1 Plattenwärmeübertrager

PFHEs verfügen über eine hohe topologische Flexibilität, da Zwischeneinspeisungen und Zwischenausspeisungen sowie die thermische Integration von mehr als zehn Prozessströmen in einem Apparat mit geringem Volumen und geringer Masse möglich sind. PFHEs weisen eine hohe spezifische Wärmeübertragungsfläche auf und erlauben einen Betrieb mit geringen Temperaturdifferenzen zwischen warmen und kalten Prozessströmen. Ein PFHE besteht aus einem oder mehreren Modulen. Das in Abb. 2.1a dargestellte Beispiel verfügt über drei übereinander liegende und verschweißte Module. Jeder Prozessstrom wird durch eine einzelne Verteilerschale zugeführt und auf die verschiedenen Module sowie die einzelnen Lagen der Module verteilt. Ein Prozessstrom nimmt somit mehrere Lagen einer meist gleichen geometrischen Struktur ein. Abb. 2.1b zeigt eine exemplarische Geometrie einer Lage. Die Fin-Struktur der Lage bildet einen Strömungsraum, welcher durch Trennbleche von anderen Lagen und durch Seitenleisten von der Umgebung abgetrennt ist. Eine Fin-Struktur ist meist durch Verteilerfins nahe der Einspeisung, Hauptfins und Sammlerfins nahe der Ausspeisung des Prozessstroms zusammengesetzt. [ROHSENOW ET AL. 1998, WANG & SUNDÉN 2001, HESSELGREAVES ET AL. 2016, KLEIN ET AL. 2020, KLEIN ET AL. 2021, RÖSSLER ET AL. 2022a]

Die Hauptfins dienen einem optimalen Wärmeübergang, Verteiler- und Sammlerfins hingegen werden für eine optimale Verteilung der Strömung über die Breite des PFHE ausgelegt. Fin-Struktur, Seitenleisten und Trennbleche werden aus Aluminium gefertigt und durch ein Lötverfahren stoffschlüssig verbunden. Der Wärmeübergang von einem warmen auf ein kaltes Prozessfluid erfolgt indirekt durch das gemeinsame Trennblech und stellt somit eine Reihenschaltung zweier konvektiver Wärmeübergänge und der Wärmeleitung durch das Trennblech dar. [ROHSENOW ET AL. 1998, WANG & SUNDÉN 2001, HESSELGREAVES ET AL. 2016, KLEIN ET AL. 2020, KLEIN ET AL. 2021, RÖSSLER ET AL. 2022a]

Aufgrund der komplexen Stapelfolge der verschiedenen Lagen und der Lötverbindungen können transiente Betriebsszenarien zu hohen Temperaturdifferenzen, thermischen Spannungen, Materialermüdung und Schäden eines PFHE führen [MA ET AL. 2015, MA ET AL. 2016, LI ET AL. 2019, FRITSCH ET AL. 2021a, FRITSCH ET AL. 2021b]. Aus

diesem Grund sind dynamische Simulationsmodelle für eine detaillierte Analyse der Lebensdauer von PFHEs unter dynamischen Betriebsbedingungen erforderlich, um deren Einsatz in flexibel betriebenen verfahrenstechnischen Anlagen zu ermöglichen [HAIDER ET AL. 2019, NIROOMAND ET AL. 2019, NIROOMAND ET AL. 2020, HAIDER ET AL. 2020, HAIDER ET AL. 2021a, HAIDER ET AL. 2021b].

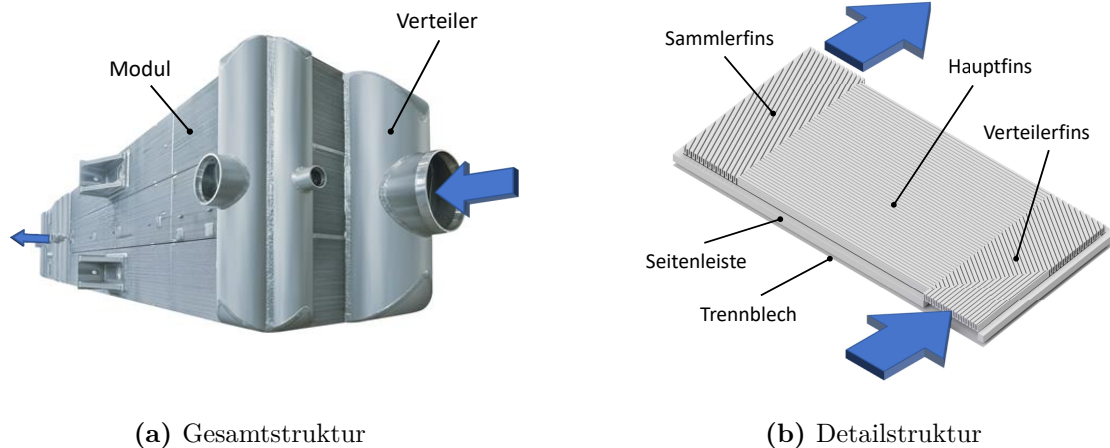


Abbildung 2.1: Visualisierung eines Plattenwärmeübertragers [KLEIN ET AL. 2020, KLEIN ET AL. 2021, RÖSSLER ET AL. 2022a]

2.2 Spiralgewickelte Wärmeübertrager

Ein CWHE (vgl. Abb. 2.2a) wird aus Aluminium- oder Edelstahlrohren gefertigt. Der Strömungsraum eines CWHE wird von einem zylindrischen Mantel und einem zylindrischen Kernrohr begrenzt. Mehrere Lagen von Rohren, das Rohrbündel, sind mit verschiedenen Steigungswinkeln um das Kernrohr gewickelt. Das Rohrbündel beinhaltet eine oder mehrere Rohrfraktionen für verschiedene Prozessströme. Im Allgemeinen sind unterschiedliche Strömungsführungen möglich. Im konkreten Beispiel in Abb. 2.2a strömt der rohrseitige Prozessstrom entgegen der Schwerkraft nach oben. Das mantelseitige Prozessfluid wird im Gegenstrom durch die Mantelseite des CWHE geführt. Diese wird vom Rohrbündel, dem Kernrohr und dem Mantel begrenzt. Wärme wird durch die Rohre indirekt von einem warmen auf einen kalten Prozessstrom übertragen. Da ein CWHE nicht für verunreinigte Prozessströme oder Fluide mit einer Tendenz zum Fouling eingesetzt werden kann, stellen thermisch integrierte kryogene Prozesse, wie die Erdgasverflüssigung, die Hauptanwendung dar. Die Konstruktion des Rohrbündels bedingt eine hohe Robustheit eines CWHE gegenüber Temperaturgradienten während transientscher Betriebsszenarien und den resultierenden thermischen Spannungen. Daher sind CWHE robust gegenüber Lastwechseln, Anfahr- und Abschaltvorgängen. [STEINBAUER & HECHT 1996, KUPPAN 2013, WEIKL ET AL. 2014, POPOV ET AL. 2019, RÖSSLER ET AL. 2022a]

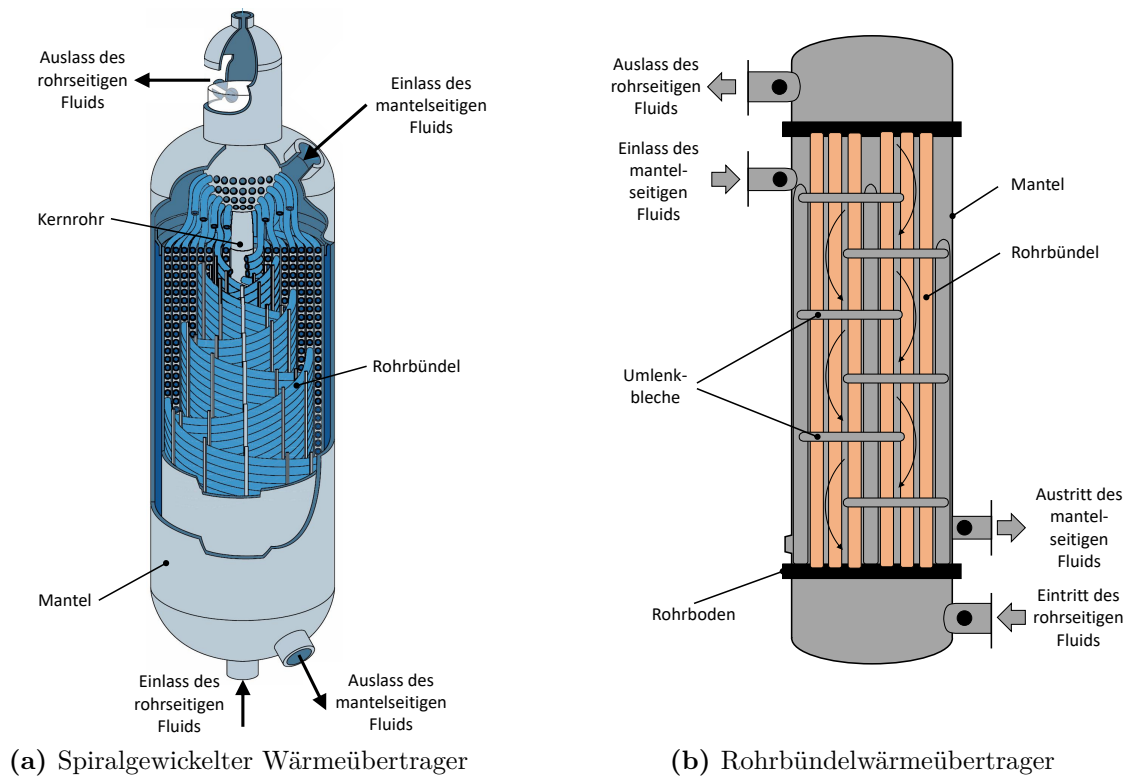


Abbildung 2.2: Visualisierung verschiedener Wärmeübertrager [RÖSSLER ET AL. 2022a, RÖSSLER ET AL. 2022b]

2.3 Rohrbündelwärmeübertrager

STHEs haben aufgrund des großen tolerierbaren Druck- und Temperaturbereichs ein weites Anwendungsspektrum. Die Apparate werden z.B. als Verdampfer und Kondensatoren in Kühl- und Heizsystemen oder in Kraftwerken eingesetzt. Zudem erfolgen Anwärm- oder Abkühlvorgänge bei der Raffination von Erdöl häufig mit Hilfe von STHEs. Der Betrieb ist bei hohen Temperaturen und Drücken möglich. Aufgrund des großen freien Strömungsquerschnitts können hochviskose Prozessströme thermisch integriert werden. Fluide, die Verunreinigungen oder eine Tendenz zum Fouling aufweisen, werden aufgrund der guten Reinigungseigenschaften unterstützt. Abb. 2.2b visualisiert die grundlegende Geometrie eines STHE mit fest verschweißten Rohrböden. Ein Bündel paralleler Rohre ist im Inneren eines zylindrischen Mantels installiert. Um das Rohrband zu fixieren, ist dieses mit den Rohrböden verschweißt. Die Rohrböden sind zudem durch eine Schweißnaht mit dem Mantel verbunden. Somit bilden der Mantelraum und der Innenraum der Rohre zwei durch die Rohre und die Rohrböden getrennte Strömungsräume. Das rohrseitige Fluid strömt durch die Rohre, der mantelseitige Prozessstrom fließt, geführt durch Umlenkleche, im Kreuzgegenstrom durch den Mantel. Einerseits erzeugen die Umlenkleche Turbulenz, um den Wärmeübergang zu erhöhen, andererseits wird das Rohrband mechanisch unterstützt, um Rohrschwingungen zu unterdrücken. Der STHE in Abb. 2.2b verfügt über einen Rohrweg, eine einmalige Passage des rohrseitigen

Prozessstroms. Wird der rohrseitige Prozessstrom an den Enden des STHE einmal oder mehrfach umgelenkt, wird von zwei oder mehr Rohrwegen gesprochen. Die Rohre eines Rohrwegs bilden eine Rohrfraktion. [TABOREK ET AL. 1983, ROHSENOW ET AL. 1998, MUKHERJEE 2004, IGNATOWITZ & FASTERT 2013, RÖSSLER ET AL. 2022a, RÖSSLER ET AL. 2022b]

3 Korrelationsgleichungen zur Auslegung von Wärmeübertragern

Wärmeübertrager werden mit Wärmeübergangs- und Druckverlustkorrelationen hinsichtlich Energietransport und Fluidodynamik dimensioniert. Im Folgenden werden ausgewählte Wärmeübergangs- (vgl. Abschnitt 3.1) und Druckverlustkorrelationen (vgl. Abschnitt 3.2) zusammengefasst. Die Übersicht basiert unter anderem auf den studentischen Arbeiten von MERCIER (2019) (CWHE) sowie KRUMOVA (2020) (STHE) und umfasst allgemein anerkannte und in der Literatur veröffentlichte Korrelationen. Demgegenüber werden in der Industrie differenziertere, jedoch nicht öffentlich zugängliche Korrelationen kommerzieller Organisationen, wie z.B. HTFS oder HTRI, herangezogen. Diese Korrelationen stellen den aktuellen Stand der Technik dar und sind Bestandteil der in dieser Arbeit vorgestellten Simulationsumgebung. Es ist darauf hinzuweisen, dass die in dieser Arbeit eingesetzten Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust sowohl auf Experimenten mit ausgewählten Stoffsystemen als auch auf theoretischen Betrachtungen basieren. Daher sind die Korrelationen, insbesondere im Zweiphasengebiet, mit Unsicherheiten behaftet, welche im Rahmen dieser Arbeit aber nicht im Detail diskutiert werden sollen. Für eine Quantifizierung der Unsicherheiten wird der interessierte Leser auf die referenzierte Fachliteratur verwiesen.

3.1 Konvektiver Wärmeübergang

Maßgeblich für die Dimensionierung eines Wärmeübertragers hinsichtlich des Energietransports ist der konvektive Wärmeübergang

$$\dot{Q}_\alpha = \alpha \cdot A_{\text{eff}} \cdot (T_{\text{Me}} - T_{\text{Fl}}) \quad (3.1)$$

zwischen den Metallkomponenten und den Prozessströmen. \dot{Q}_α bezeichnet den aufgrund der treibenden Temperaturdifferenz zwischen der Metall- T_{Me} und der Fluidtemperatur T_{Fl} übertragenen Wärmestrom. Entscheidend für die realitätsgetreue Auslegung eines Wärmeübertragers sind adäquate Korrelationen für den Wärmeübergangskoeffizienten α und die effektive Wärmeübertragungsfläche A_{eff} .

Die Wärmeübertragungsfläche zwischen einem rohrseitigen Prozessstrom eines STHE oder CWHE und der korrespondierenden Rohrfraktion ist die Innenfläche der Rohre. Für die Interaktion des mantelseitigen Prozessstroms eines STHE oder CWHE mit einer Rohrfraktion bildet die Außenfläche der Rohre die Wärmeübertragungsfläche. Die Innenfläche des Mantels bzw. die Außenfläche des Kernrohrs stellen die Wärmeübergangsfläche

zwischen dem mantelseitigen Strom eines STHE oder CWHE und dem Mantel bzw. dem Kernrohr dar. In einem PFHE ergibt sich die Wärmeübertragungsfläche

$$A_{\text{eff}} = A_{\text{pri}} + \eta_{\text{Fin}} \cdot A_{\text{sek}} \quad (3.2)$$

als Summe der primären A_{pri} und der sekundären Wärmeübertragungsfläche A_{sek} , welche mit dem Fin-Wirkungsgrad η_{Fin} gewichtet wird. A_{pri} beschreibt die Kontaktfläche zwischen dem Fluid und den Trennblechen. A_{sek} ist die Oberfläche der Fin-Struktur, die mit dem Fluid in Kontakt steht [KAYS & LONDON 1997, ROHSENOW ET AL. 1998, HESSELGREAVES ET AL. 2016, RÖSSLER ET AL. 2022a].

Für eine typische Finstruktur eines Plattenwärmeübertragers (vgl. Abb. 3.1) kann der Fin-Wirkungsgrad entsprechend der Beziehung

$$\eta_{\text{Fin}} = \frac{\tanh(\beta_{\text{Fin}})}{\beta_{\text{Fin}}} \quad (3.3)$$

ermittelt werden, wobei der Parameter

$$\beta_{\text{Fin}} = \frac{h_{\text{Fin}}}{2} \cdot \left(\frac{2 \cdot \alpha}{\lambda_{\text{Me}} \cdot t_{\text{Fin}}} \right)^{0.5} \quad (3.4)$$

mit der Höhe h_{Fin} und der Dicke t_{Fin} der Fin-Struktur bestimmt wird. λ_{Me} repräsentiert die Wärmeleitfähigkeit des Fin-Materials. Dabei werden die Annahmen

- 1.) einer Quasi-1D-Betrachtung der Fin-Struktur,
- 2.) eines konstanten Wärmeübergangskoeffizienten α entlang der Finstruktur,
- 3.) einer konstanten Wärmeleitfähigkeit λ_{Me} der Finstruktur,
- 4.) eines konstanten Querschnitts der Finstruktur,
- 5.) eines idealen Wärmeübergangs zwischen Finstruktur und Trennblech,
- 6.) einer dünnen Finstruktur mit $t_{\text{Fin}} \ll h_{\text{Fin}}$ und
- 7.) einer symmetrischen Betrachtung der Finstruktur zwischen den Trennblechen

angewendet [KAYS & LONDON 1997, ROHSENOW ET AL. 1998, HESSELGREAVES ET AL. 2016].

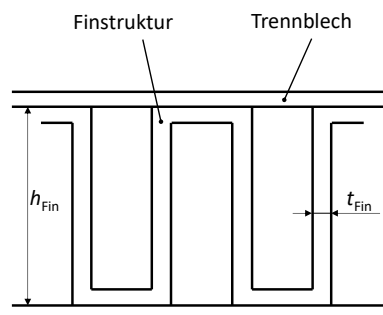


Abbildung 3.1: Finstruktur eines Plattenwärmeübertragers

Die Nusselt-Zahl

$$Nu = \frac{\alpha \cdot L_{\text{char}}}{\lambda_{\text{Fl}}} \quad (3.5)$$

ist eine dimensionslose Darstellung eines Wärmeübergangskoeffizienten, wobei L_{char} eine charakteristische Länge und λ_{Fl} die Wärmeleitfähigkeit des Fluids darstellen. Es werden sowohl Korrelationen für den Wärmeübergangskoeffizienten α als auch für die Nusselt-Zahl eingesetzt. Beide Ansätze können durch Gleichung (3.5) unter Einbeziehung einer charakteristischen Länge, z.B. einem Rohrdurchmesser, ineinander überführt werden.

Bei den Berechnungsmethoden wird zwischen erzwungener und natürlicher Konvektion unterschieden. Bei erzwungener Konvektion wird die Strömung durch äußere Kräfte aufgeprägt und kann durch die Reynolds-Zahl

$$Re = \frac{\dot{M} \cdot L_{\text{char}}}{A_{\text{Quer}} \cdot \eta} \quad (3.6)$$

charakterisiert werden, wobei \dot{M} den Massenstrom und η die dynamische Viskosität des Fluids beschreiben. A_{Quer} bezeichnet den freien Strömungsquerschnitt. Bei natürlicher Konvektion resultiert die Strömung aus Auftriebskräften infolge von Dichteunterschieden im Fluid. Die Strömung wird durch die Grashof-Zahl

$$Gr = \frac{L_{\text{char}}^3 \cdot \varrho^2 \cdot g \cdot \beta \cdot |T_{\text{Fl}} - T_{\text{Me}}|}{\eta^2} \quad (3.7)$$

charakterisiert. Dabei sind g die Gravitationskonstante, ϱ die Dichte und β der isobare thermische Ausdehnungskoeffizient des Fluids. Die Prandtl-Zahl

$$Pr = \frac{\eta \cdot c_p}{\lambda_{\text{Fl}}} \quad (3.8)$$

setzt den diffusiven Impulstransport im Fluid ins Verhältnis mit dem diffusiven Energietransport im Fluid. Die Prandtl-Zahl hängt ausschließlich von Stoffeigenschaften des Fluids ab. c_p ist die spezifische Wärmekapazität des Fluids bei konstantem Druck.

Im Allgemeinen kann die Nusselt-Zahl für die natürliche Konvektion durch

$$Nu = f(Gr, Pr) \quad (3.9)$$

und für die erzwungene Konvektion durch

$$Nu = f(Re, Pr) \quad (3.10)$$

dargestellt werden. Die Gleichungen (3.9) sowie (3.10) sind streng thermo-fluiddynamisch motiviert. Aus einer Dimensionsanalyse der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie resultieren Re und Pr bzw. Gr und Pr als Paare dimensionsloser Kennzahlen, welche die Strömungsverhältnisse für die erzwungene bzw. natürliche Konvektion beschreiben [POLIFKE & KOPITZ 2009]. Die für diese Arbeit relevanten

Wärmeübertrager werden unter erzwungener Konvektion betrieben, sodass im Folgenden ausschließlich Korrelationen gemäß Gleichung (3.10) betrachtet werden.

Für verschiedene Wärmeübergangsregime und Strömungsräume von Wärmeübertragern werden unterschiedliche Korrelationen eingesetzt. Es wird zwischen Abkühlen und Anwärmen in einphasigen Regimen unterschieden. Zudem werden Kondensation und Verdampfung im Zweiphasengebiet betrachtet. Für Abkühlung oder Kondensation gilt $T_{\text{Me}} < T_{\text{Fl}}$, für Anwärmen oder Verdampfen $T_{\text{Me}} > T_{\text{Fl}}$. Abschnitt 3.1.1 thematisiert Wärmeübergangskorrelationen für einphasige Prozessfluide. In Abschnitt 3.1.2 werden verdampfende und in Abschnitt 3.1.3 kondensierende Fluide betrachtet.

3.1.1 Wärmeübergangskorrelationen für einphasige Fluide

Einphasige Fluide in geraden Rohren Für die Berechnung der Reynolds-Zahl Re eines Geradrohrs, z.B. im Rohrbündel eines STHE, gemäß Gleichung 3.6 wird als charakteristisches Längenmaß der Rohrrinnendurchmesser d_i eingesetzt. Unterhalb der kritischen Reynolds-Zahl $Re_{\text{krit}} = 2300$ liegt eine laminare Strömung mit der über die Rohrlänge L gemittelten Nusselt-Zahl

$$Nu_{\text{lam}} = \sqrt[3]{3.66^3 + 0.7^3 + (1.615 \cdot (Re \cdot Pr \cdot d_i/L)^{1/3} - 0.7)^3} \quad (3.11)$$

vor. Bei Reynolds-Zahlen $Re \geq 10^4$ stellt sich eine turbulente Rohrströmung mit der mittleren Nusselt-Zahl

$$Nu_{\text{turb}} = \frac{(\zeta/8) \cdot Re \cdot Pr}{1 + 12.7 \cdot \sqrt{\zeta/8} \cdot (Pr^{2/3} - 1)} \left(1 + \left(\frac{d_i}{L} \right)^{2/3} \right) \quad (3.12)$$

ein, wobei

$$\zeta = (1.8 \log_{10}(Re) - 1.5)^{-2} \quad (3.13)$$

einen Reibungsbeiwert repräsentiert. Im Übergangsbereich zwischen laminarer und turbulenter Strömung ($2300 < Re < 10^4$) resultiert die mittlere Nusselt-Zahl

$$Nu_{\text{trans}} = (1 - \gamma) \cdot Nu_{\text{lam}}(Re = 2300) + \gamma \cdot Nu_{\text{turb}}(Re = 10^4) \quad (3.14)$$

aus einer Überblendung mit Hilfe des Homotopieparameters

$$\gamma = \frac{Re - 2300}{10^4 - 2300} \quad \text{mit} \quad 0 \leq \gamma \leq 1. \quad (3.15)$$

$Nu_{\text{lam}}(Re = 2300)$ beschreibt die laminare Nusselt-Zahl bei $Re = 2300$ und $Nu_{\text{turb}}(Re = 10^4)$ bezeichnet die turbulente Nusselt-Zahl bei $Re = 10^4$. [VDI 2013]

Einphasige Fluide in gekrümmten Rohren Auf eine Fluidströmung in einem gekrümmten Rohr, z.B. im Rohrbündel eines CWHE, wirkt eine Zentrifugalkraft, die Sekundärströmungen erzeugt und den Wärmeübergang im Vergleich zu einem Geradrohr erhöht. Der Krümmungseffekt wird durch das Verhältnis von Rohrrinnendurchmesser d_i und Durchmesser D der Rohrkrümmung charakterisiert. Die Nusselt-Zahl

$$Nu_{\text{lam}} = \left(3.65 + 0.08 \cdot \left(1 + 0.8 \cdot \left(\frac{d_i}{D} \right)^{0.9} \right) \cdot Re^m \cdot Pr^{1/3} \right) \cdot \left(\frac{Pr}{Pr_W} \right)^{0.14} \quad (3.16)$$

mit

$$m = 0.5 + 0.2903 \cdot \left(\frac{d_i}{D} \right)^{0.194} \quad (3.17)$$

beschreibt den Wärmeübergang im laminaren Bereich. Pr bzw. Pr_W entsprechen den Prandtl-Zahlen des Fluids bei Fluid- bzw. Wandtemperatur. Im turbulenten Bereich ($Re \geq 2.2 \cdot 10^4$) wird die Nusselt-Zahl durch

$$Nu_{\text{turb}} = \frac{0.125 \cdot \zeta_{\text{turb}} \cdot Re \cdot Pr}{1 + 12.7 \cdot \sqrt{\zeta_{\text{turb}}/8} \cdot (Pr^{2/3} - 1)} \quad (3.18)$$

berechnet. Dabei fließt der turbulente Reibungsbeiwert

$$\zeta_{\text{turb}} = \left(\frac{0.3164}{Re^{0.25}} + 0.03 \cdot \left(\frac{d_i}{D} \right)^{1/2} \right) \cdot \left(\frac{\eta_W}{\eta} \right)^{0.27} \quad (3.19)$$

ein. Dieser wird mit Hilfe der dynamischen Viskositäten η bzw. η_W des Fluids bei Fluid- bzw. Wandtemperatur bestimmt. Die kritische Reynolds-Zahl

$$Re_{\text{krit}} = 2300 \cdot \left(1 + 8.6 \cdot \left(\frac{d_i}{D} \right)^{0.45} \right) \quad (3.20)$$

beschreibt den laminar-turbulenten Übergang. Die Nusselt-Zahl

$$Nu = \gamma \cdot Nu_{\text{lam}}(Re = Re_{\text{krit}}) + (1 - \gamma) \cdot Nu_{\text{turb}}(Re = 2.2 \cdot 10^4) \quad (3.21)$$

gilt im Übergangsbereich ($Re_{\text{krit}} < Re < 2.2 \cdot 10^4$) und setzt sich aus einem laminaren (vgl. Gleichung (3.16)) sowie einem turbulenten (vgl. Gleichung (3.18)) Beitrag zusammen, welche mit dem Homotopieparameter

$$\gamma = \frac{2.2 \cdot 10^4 - Re}{2.2 \cdot 10^4 - Re_{\text{krit}}} \quad \text{mit} \quad 0 \leq \gamma \leq 1 \quad (3.22)$$

gewichtet werden. [SCHMIDT 1967, GNIELINSKI 1986]

Einphasige Fluide auf der Mantelseite eines STHE Die Reynolds-Zahl

$$Re = \frac{\dot{M} \cdot L_U}{\psi \cdot A_{\text{Quer}} \cdot \eta} \quad (3.23)$$

im Mantelraum eines STHE wird mit dem Hohlraumanteil ψ des Rohrbündels korrigiert. Die charakteristische Länge entspricht der überströmten Länge eines Rohres

$$L_U = \frac{\pi}{2} \cdot d_a, \quad (3.24)$$

die sich aus dem Rohraußendurchmesser d_a ergibt. Die mittlere Nusselt-Zahl

$$Nu_{\text{Reihe}} = 0.3 + \sqrt{Nu_{\text{lam}}^2 + Nu_{\text{turb}}^2} \quad (3.25)$$

einer querangeströmten Reihe glatter Rohre setzt sich aus dem laminaren Beitrag

$$Nu_{\text{lam}} = 0.664 \cdot \sqrt{Re} \cdot \sqrt[3]{Pr} \quad (3.26)$$

und dem turbulenten Anteil

$$Nu_{\text{turb}} = \frac{0.037 \cdot Re^{0.8} \cdot Pr}{1 + 2.443 \cdot Re^{-0.1} \cdot (Pr^{2/3} - 1)} \quad (3.27)$$

zusammen. Die mittlere Nusselt-Zahl

$$Nu_{\text{Bündel}} = Nu_{\text{Reihe}} \cdot f_A \quad (3.28)$$

eines querangeströmten, glatten Rohrbündels folgt aus der mittleren Nusselt-Zahl Nu_{Reihe} einer querangeströmten Rohrreihe und dem Rohranordnungsfaktor f_A .

Die mittlere Nusselt-Zahl

$$Nu = f_G \cdot f_L \cdot f_B \cdot Nu_{\text{Bündel}} \quad (3.29)$$

im Mantelraum eines STHE mit Umlenkblechen ist geringer als die Nusselt-Zahl $Nu_{\text{Bündel}}$ eines querangeströmten Bündels. Die Reduktion des Wärmeübergangs wird durch Korrekturfaktoren berücksichtigt. Der Geometriefaktor f_G beschreibt den Einfluss der Kreuzgegenstromführung. Der Leck- f_L und der Bypassströmungsfaktor f_B repräsentieren den Einfluss von Leck- und Bypassströmungen. [VDI 2013]

Einphasige Fluide auf der Mantelseite eines CWHE Die Nusselt-Zahl

$$Nu = P_1 \cdot Re^{P_2} \cdot Pr^{0.36} \quad (3.30)$$

für eine einphasige Umströmung des Rohrbündels eines CWHE wird durch eine Polynomfunktion beschrieben. Die Parameter P_1 und P_2 variieren für bestimmte Bereiche der Reynolds-Zahl. [ABADZIC & SCHOLZ 1973]

Einphasige Fluide in Plattenwärmeübertragern Der Wärmeübergangskoeffizient

$$\alpha = \frac{J(Re, Pr) \cdot c_p \cdot \bar{M} \cdot \dot{N}}{Pr^{2/3} \cdot A_{\text{Quer}}} \quad (3.31)$$

beschreibt den einphasigen Wärmeübergang in einem PFHE. Der Colburn-Faktor J ist eine Funktion der Geometrie der betrachteten Fin-Struktur sowie der Reynolds-Zahl Re und der Prandtl-Zahl Pr des Fluids. Zudem fließen der Stoffmengenstrom \dot{N} , die spezifische Wärmekapazität c_p und die molare Masse \bar{M} ein. A_{Quer} beschreibt den freien Strömungsquerschnitt der betrachteten Fin-Struktur. [KAYS & LONDON 1997, HESSELGREAVES ET AL. 2016, RÖSSLER ET AL. 2022a]

3.1.2 Wärmeübergangskorrelationen bei Verdampfung

Bei der Verdampfung treten in Abhängigkeit der Überhitzung der Metallwand mehrere Regime mit stark unterschiedlichen Wärmeübergangskoeffizienten auf. Abb. 3.2 visualisiert diese Regime exemplarisch für gesättigtes Wasser bei atmosphärischem Druck. Dabei ist die Wärmestromdichte über der Überhitzung aufgetragen, wobei Konvektionssieden (I), Blasensieden (II), Übergangssieden (III) und Filmsieden (IV) auftreten. Beim Konvektionssieden (I) werden keine Gasblasen gebildet und die Wärme wird durch Konvektion von der Wand an die Kernströmung übertragen. Beim Blasensieden (II) entstehen an Keimstellen zunächst einzelne und nicht interagierende Gasblasen, sodass Konvektion den dominierenden Einfluss auf den Wärmeübergang darstellt. Mit steigender Überhitzung nimmt die Anzahl und Interaktion der Gasblasen zu, sodass sich Blasensäulen bilden. Gasblasen in Wandnähe reduzieren die Wärmeübertragungsfläche zwischen Wand und Fluid, sodass die Wärmestromdichte mit steigender Überhitzung weniger stark zunimmt und ein lokales Maximum erreicht wird. An diesem Punkt wird von kritischer Temperaturdifferenz und kritischem Wärmestrom gesprochen. Mit weiter zunehmender Überhitzung sinkt der übertragene Wärmestrom, bis bei der Leidenfrost-Temperaturdifferenz ein lokales Minimum vorliegt. Der Bereich zwischen kritischer und Leidenfrost-Temperaturdifferenz wird als Übergangssieden (III) bezeichnet. In diesem Regime treten an der Wand alternierend Blasensieden (II) und Filmsieden (IV) auf. Im Bereich des Filmsiedens (IV) bildet sich zwischen flüssiger Kernströmung und Metallwand ein stabiler Gasfilm aus. Die eigentliche Verdampfung erfolgt an der Grenzfläche zwischen Gas- und Flüssigphase. Die Wärme wird im Gasfilm durch Konvektion und Wärmestrahlung übertragen. Mit steigender Überhitzung nimmt die Wärmestrahlung und dadurch die übertragene Wärme zu. In industriellen Anwendungen wird meist das Regime des Blasensiedens (II) angestrebt, da ein reproduzierbarer und vergleichsweise hoher Wärmeübergang bei einer geringen Überhitzung vorliegt. [FAGHRI & ZHANG 2006]

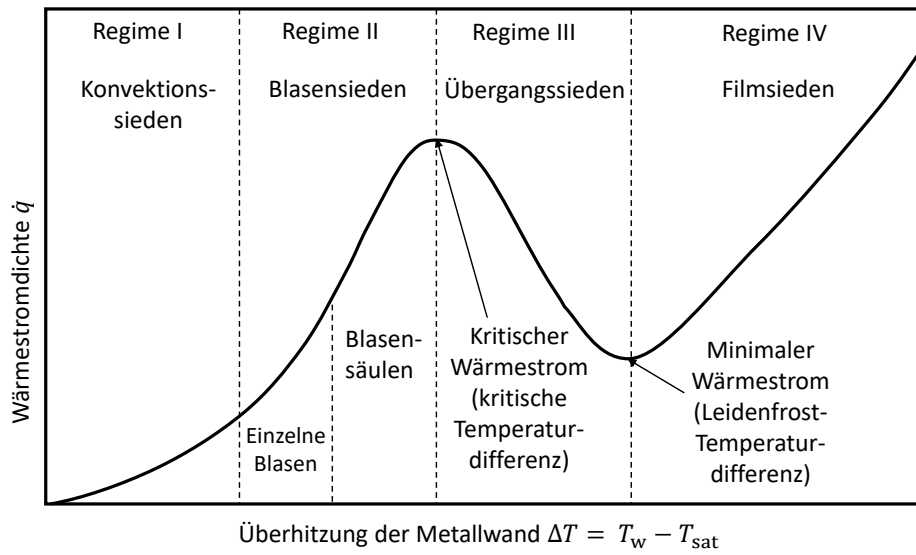


Abbildung 3.2: Übertragener Wärmestrom in Abhängigkeit von der Überhitzung [FAGHRI & ZHANG 2006]

Für die Verdampfung in verschiedenen Strömungsräumen von Wärmeübertragern werden unterschiedliche Korrelationsgleichungen eingesetzt, wobei für bestimmte Wärmeübertrager nicht alle Verdampfungsregime berücksichtigt werden oder von einer Überlagerung von Regimen ausgegangen wird.

Blasensieden in Rohren Das Blasensieden in vertikalen Geradrohren kann mit einer von CHEN (1966) für Wasser und organische Stoffsysteme entwickelten Korrelation beschrieben werden. Der Wärmeübergangskoeffizient

$$\alpha = \alpha_{\text{mak}} + \alpha_{\text{mik}} \quad (3.32)$$

setzt sich aus dem Beitrag

$$\alpha_{\text{mak}} = 0.023 \cdot Re_F^{0.8} \cdot Pr_F^{0.4} \cdot \frac{\lambda_F}{d_i} \cdot F(Re_F, Re) \quad (3.33)$$

infolge des makroskopischen Effekts der Fluidströmung (Konvektionssieden) und dem mikroskopischen Einfluss

$$\alpha_{\text{mik}} = 0.00122 \cdot \left(\frac{\lambda_F^{0.79} \cdot c_{p,F}^{0.45} \cdot \rho_F^{0.49} \cdot g^{0.25}}{\sigma^{0.5} \cdot \eta_F^{0.29} \cdot \Delta h_v^{0.24} \cdot \rho_G^{0.24}} \right) \cdot \Delta T^{0.24} \cdot \Delta p_{\text{sat}}^{0.75} \cdot G(Re) \quad (3.34)$$

infolge der Blasenbildung durch Verdampfung (Blasensieden) zusammen. Dabei steht der Index F für die Flüssigphase und der Index G für die Gasphase. Der Faktor F repräsentiert eine Funktion der Reynolds-Zahl Re_F der Flüssigphase sowie der Reynolds-Zahl Re der Zweiphasenströmung und der Faktor G eine Funktion der Reynolds-Zahl Re der Zweiphasenströmung. Die latente Wärme wird durch Δh_v ausgedrückt. Δp_{sat} entspricht

der Differenz der Sättigungsdampfdrücke die sich gemäß der Temperaturdifferenz ΔT zwischen Wand und Fluid ergibt.

Filmsieden in Rohren oder auf der Mantelseite eines STHE Für Filmsieden in vertikalen Rohren oder bei der Überströmung von horizontalen Rohren, z.B. im Mantelraum eines STHE, werden die folgenden Korrelationen genutzt:

$$\alpha = \alpha_k + \frac{3}{4} \cdot \alpha_S, \quad (3.35)$$

$$\alpha_k = F \cdot \left(\frac{\lambda_G^3 \cdot g \cdot \varrho_G \cdot (\varrho_F - \varrho_G) \cdot \Delta h_v^*}{\eta_G \cdot d_i \cdot \Delta T} \right)^{1/4}, \quad (3.36)$$

$$\alpha_S = C_{wl} \cdot \frac{(T_W^4 - T_F^4)}{\Delta T}, \quad (3.37)$$

$$C_{wl} = \frac{\sigma_{SB}}{1/\epsilon_W + 1/\epsilon_F - 1}, \quad (3.38)$$

$$\Delta h_v^* = \Delta h_v \cdot \left(1 + \frac{0.4 \cdot c_{p,G} \cdot \Delta T}{\Delta h_v} \right)^2. \quad (3.39)$$

Der Wärmeübergangskoeffizient α setzt sich aus einem konvektiven Anteil α_k , der mit der korrigierten latenten Wärme Δh_v^* ermittelt wird, und einem Strahlungsanteil α_S zusammen. C_{wl} steht für den Strahlungskoeffizienten und σ_{SB} für die Stefan-Boltzmann-Konstante. Die Parameter ϵ_W und ϵ_F repräsentieren den Emissionsgrad der Wand und der Flüssigkeit. Die Temperaturdifferenz zwischen Rohrwand und Flüssigkeit wird durch ΔT ausgedrückt. Der Faktor F ist für eine Strömung in vertikalen Rohren mit 0.62 zu wählen. Für die Überströmung eines horizontalen Rohrs gilt $F = 0.80$. [VDI 2013]

Übergangssieden in Rohren Beim Übergangssieden von Rohrströmungen verlaufen die Siedekennlinien im doppelt logarithmischen Koordinatensystem näherungsweise linear, sodass der Wärmeübergangskoeffizient durch eine Interpolation zwischen den Wärmeübergangskoeffizienten für Blasensieden und Filmsieden in Rohren berechnet werden kann. [VDI 2013]

Fallfilmverdampfung auf der Mantelseite eines CWHE Auf der Mantelseite eines CWHE liegt in vielen industriell relevanten Anwendungsfällen, z.B. bei der Erdgasverflüssigung, eine Fallfilmverdampfung vor. Die Strömung setzt sich aus einer schwerkraftgetriebenen Filmströmung und einer Scherströmung zusammen. Bei kleinen Dampfgehalten liegt ausschließlich Filmströmung vor, bei größeren Dampfgehalten zusätzlich Scherströmung. Nach FREDHEIM (1994) ergibt sich der Wärmeübergangskoeffizient

$$\alpha_{\text{Film}} = \frac{Nu_{\text{Film}} \cdot \lambda_F}{\delta} \quad (3.40)$$

der Filmströmung aus der Referenzgrenzschichtdicke

$$\delta = \left(\frac{\eta_{\text{F}}^2}{\varrho_{\text{F}}^2 \cdot g} \right)^{1/3} \quad (3.41)$$

des Flüssigkeitsfilm an den Rohren und der Nusselt-Zahl Nu_{Film} der Filmströmung. Diese ergibt sich aus einem Zusammenhang der Form

$$Nu_{\text{Film}} = f(\delta, Re_{\text{Film}}, Pr), \quad (3.42)$$

welcher neben der Geometrie des Mantelraums und der Referenzgrenzschichtdicke δ die Film-Reynolds-Zahl Re_{Film} und die Prandtl-Zahl Pr berücksichtigt. Der Wärmeübergangskoeffizient

$$\alpha_{\text{Scher}} = 1.32 \cdot \left(\frac{1}{X_{\text{M}}} \right)^{0.78} \cdot \alpha_{\text{F}} \quad (3.43)$$

der Scherströmung ergibt sich aus dem Martinelli-Parameter X_{M} und dem Wärmeübergangskoeffizienten α_{F} der Flüssigphase, wenn diese ohne Anwesenheit der Gasphase durch den Mantelraum strömt (vgl. Abschnitt 3.1.1). Der Wärmeübergangskoeffizient

$$\alpha = \left(\alpha_{\text{Film}}^2 + \alpha_{\text{Scher}}^2 \right)^{1/2} \quad (3.44)$$

der Fallfilmverdampfung resultiert aus einer Gewichtung der Wärmeübergangskoeffizienten beider Strömungseinflüsse.

Verdampfung in einem PFHE In einem PFHE wird bei der Verdampfung eines Prozessstroms aufgrund der im stationären Betrieb geringen Temperaturdifferenzen zwischen Metall und Fluid von einer Überlagerung von Konvektions- und Blasensieden ausgegangen. Dieses Regime kann mit den Korrelationen (3.33) und (3.34) nach CHEN (1966), die auf den Analysen von FORSTER & ZUBER (1955) basieren, beschrieben werden.

3.1.3 Wärmeübergangskorrelationen bei Kondensation

Es gibt in der Literatur zahlreiche Ansätze zur Modellierung des Wärmeübergangs bei Kondensation, sodass im Folgenden lediglich ausgewählte Korrelationen für verschiedene Strömungsräume von Wärmeübertragern vorgestellt werden.

Kondensation in Rohren SHAH (2009) präsentiert Wärmeübergangskorrelationen für die Kondensation in vertikalen Rohren. Anhand der Gasgeschwindigkeit

$$J_{\text{G}} = \frac{x_{\text{G}} \cdot \dot{M}}{A_{\text{Quer}} \cdot (g \cdot d_{\text{i}} \cdot \varrho_{\text{G}} \cdot (\varrho_{\text{F}} - \varrho_{\text{G}}))^{0.5}} \quad (3.45)$$

werden drei Regime unterschieden, wobei x_G für den Massenanteil der Gasphase steht und \dot{M} den Massenstrom der Zweiphasenströmung repräsentiert. Die Grenze zwischen den Regimen I und II liegt bei

$$J_G = \frac{1}{2.4 \cdot F + 0.73} \quad (3.46)$$

und der Übergang zwischen den Regimen II und III bei

$$J_G = 0.89 - 0.93 \cdot \exp(-0.087 \cdot F^{-1.17}). \quad (3.47)$$

Dabei fließen nach SHAH (1979) der Faktor

$$F = \left(\frac{1}{x_G} - 1 \right)^{0.8} \cdot p_r^{0.4} \quad (3.48)$$

und damit der reduzierte Druck p_r ein. Der Wärmeübergangskoeffizient

$$\alpha_I = \alpha_{FT} \cdot \left(\frac{\eta_F}{14 \cdot \eta_G} \right)^n \cdot \left((1 - x_G)^{0.8} + \frac{3.8 \cdot x_G^{0.76} \cdot (1 - x_G)^{0.04}}{p_r^{0.38}} \right) \quad (3.49)$$

mit

$$n = 0.0058 + 0.0057 \cdot p_r \quad (3.50)$$

beschreibt die Verhältnisse in Regime I. Dabei steht

$$\alpha_{FT} = 0.023 \cdot Re_{FT}^{0.8} \cdot Pr_F^{0.4} \quad (3.51)$$

für einen Wärmeübergangskoeffizienten unter der Annahme, dass der gesamte Massenstrom in der Flüssigphase vorliegt. Die Reynolds-Zahl

$$Re_{FT} = \frac{Re_F}{1 - x_G} \quad (3.52)$$

charakterisiert die Strömungsverhältnisse unter dieser Annahme. In Regime III wird zur Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten die folgende Gleichung eingesetzt:

$$\alpha_{III} = 1.23 \cdot Re_F^{-1/3} \cdot \left(\frac{\rho_F \cdot (\rho_F - \rho_G) \cdot g \cdot \lambda_F^3}{\eta_F^2} \right)^{-1/3}. \quad (3.53)$$

Der Übergangsbereich (Regime II) wird durch den Wärmeübergangskoeffizienten

$$\alpha_{II} = \alpha_I + \alpha_{III} \quad (3.54)$$

beschrieben, der Summe der Wärmeübergangskoeffizienten der Regime I und III.

Filmkondensation an einzelnen Rohren Der Wärmeübergangskoeffizient

$$\alpha = 0.728 \cdot \left(\frac{\rho_F \cdot (\rho_F - \rho_G) \cdot g \cdot \Delta h_v \cdot \lambda_F^3}{\eta_F \cdot (T_{\text{sat}} - T_W)} \cdot \frac{L}{d_a} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (3.55)$$

wird für die Beschreibung der Filmkondensation an einzelnen horizontalen Rohren eingesetzt. Dabei steht L für die Rohrlänge, d_a für den Rohraußendurchmesser und T_{sat} für die Sättigungstemperatur des Fluids. [VDI 2013]

Kondensation in einem PFHE Der Wärmeübergangskoeffizient

$$\alpha = \alpha_{\text{FT}} \cdot \sqrt{\frac{\rho_F}{\rho_G} \cdot x_G + (1 - x_G)} \quad (3.56)$$

nach BOYKO & KRUSHILIN (1967) kann zur Beschreibung der Kondensation eines Prozessstroms in einem PFHE angewendet werden. Dabei wird der Wärmeübergangskoeffizient α_{FT} gemäß der Korrelationsgleichungen für einphasige Fluide berechnet (vgl. Abschnitt 3.1.1), wobei der gesamte Massenstrom als flüssig angenommen wird. Der Einfluss der Zweiphasenströmung wird durch den Korrekturfaktor $\frac{\rho_F}{\rho_G} \cdot x_G + (1 - x_G)$ berücksichtigt.

3.2 Druckverlust

Wärmeübertrager werden hydraulisch mit empirischen Druckverlustkorrelationen ausgelegt. Der Gesamtdruckverlust

$$\Delta p = \Delta p_R + \Delta p_B + \Delta p_G \quad (3.57)$$

setzt sich aus dem Druckverlust infolge der Änderung des Strömungsimpulses Δp_B (Beschleunigungsdruckverlust), dem Reibungsdruckverlust Δp_R und dem Gravitationsdruckverlust Δp_G zusammen. Der Gravitationsdruckverlust entspricht der durch einen Prozessstrom zu überwindenden statischen Höhe, wobei im Allgemeinen die Zweiphasendichte und der Schlupf zwischen den Phasen in der Berechnung zu berücksichtigen sind. Zudem kann für die meisten Anwendungen von Wärmeübertragern der Beschleunigungsdruckverlust vernachlässigt werden. Der Reibungsdruckverlust im Zweiphasengebiet ergibt sich meist aus einer Überlagerung mehrerer Beiträge einphasiger Druckverlustkorrelationen. Daher werden hier ausschließlich Korrelationsgleichungen für den Reibungsdruckverlust einphasiger Fluide in den unterschiedlichen Strömungsräumen von Wärmeübertragern thematisiert. [NIROOMAND ET AL. 2019, NIROOMAND ET AL. 2020, KLEIN ET AL. 2020, KLEIN ET AL. 2021, RÖSSLER ET AL. 2020, RÖSSLER ET AL. 2022a, RÖSSLER ET AL. 2022b]

3.2.1 Einphasige Fluide in Geradrohren

Der Reibungsdruckverlust in Geradrohren, z.B. auf der Rohrseite eines STHE, wird durch den Zusammenhang

$$\Delta p_R = \zeta \cdot \frac{\rho \cdot v^2}{2} \cdot \frac{L}{d_i} \quad (3.58)$$

beschrieben, wobei v für die Geschwindigkeit des Fluids, L für die Rohrlänge und d_i für den Rohrrinnendurchmesser stehen. Der Reibungsbeiwert ζ ergibt sich für den laminaren Bereich ($Re \leq 2300$) gemäß der Beziehung

$$\zeta_{\text{lam}} = \frac{64}{Re}. \quad (3.59)$$

Für turbulente Rohrströmungen ($Re > 2300$) kann der Reibungsbeiwert ζ für hydraulisch glatte Rohre gemäß

$$\zeta_{\text{turb}} = \frac{0.3164}{Re^{0.25}} \quad (3.60)$$

oder für hydraulisch raue Rohre gemäß

$$\frac{1}{\zeta_{\text{turb}}} = 2 \cdot \log_{10} \left(\frac{d_i}{K} \right) + 1.14 \quad (3.61)$$

bestimmt werden. K repräsentiert die mittlere Rauheit der Rohrrinnenfläche. Für den Übergang zwischen hydraulisch glatten und rauen Rohren gilt die implizite Colebrook-White-Gleichung

$$\frac{1}{\sqrt{\zeta_{\text{turb}}}} = -2 \cdot \log_{10} \left(\frac{2.51}{Re \cdot \sqrt{\zeta_{\text{turb}}}} + \frac{K}{3.71 \cdot d_i} \right) \quad (3.62)$$

für den turbulenten Reibungsbeiwert. [VDI 2013]

3.2.2 Einphasige Fluide in gekrümmten Rohren

Der Druckverlust in gekrümmten Rohren, z.B. auf der Rohrseite eines CWHE, ergibt sich gemäß Gleichung (3.58). Jedoch erhöhen die Sekundärströmungen infolge der in einem gekrümmten Rohr wirkenden Zentrifugalkraft neben dem Wärmeübergang (vgl. Abschnitt 3.1.1) auch den Druckverlust gegenüber einem Geradrohr. Daher wird der Reibungsbeiwert ζ für gekrümmte Rohre abweichend bestimmt. Im laminaren Bereich gilt

$$\zeta_{\text{lam}} = \frac{64}{Re} \left(1 + 0.033 \cdot \left(\log_{10} \left(Re \sqrt{\frac{d_i}{D}} \right) \right)^4 \right) \quad (3.63)$$

und im turbulenten Bereich folgt der Reibungsbeiwert aus dem Zusammenhang

$$\zeta_{\text{turb}} = \frac{0.3164}{Re^{0.25}} + 0.03 \left(\frac{d_i}{D} \right)^{1/2}. \quad (3.64)$$

Die kritische Reynolds-Zahl am Übergang zwischen laminarer und turbulenter Strömung in einem gekrümmten Rohr wird durch Gleichung (3.20) beschrieben. Eine Temperaturdifferenz zwischen Rohrwand und Fluid führt zu einem reduzierten Druckverlust, sodass der Reibungsbeiwert ζ in diesem Fall mit dem Faktor

$$F = \left(\frac{\eta_W}{\eta} \right)^{0.27} \quad (3.65)$$

korrigiert wird. [SCHMIDT 1967, GNIELINSKI 1983, GNIELINSKI 1986, VDI 2013]

3.2.3 Einphasige Queranströmung eines Rohrbündels

Die Druckverlustberechnung auf der Mantelseite eines STHE oder eines CWHE basiert auf Korrelationen für querangeströmte Rohrbündel. Der Zusammenhang

$$\Delta p_R = \zeta \cdot n_r \cdot \frac{\rho \cdot v^2}{2} \quad (3.66)$$

beschreibt den Druckverlust in einem querangeströmten Rohrbündel mit fluchtender Rohranordnung und n_r Rohrreihen. Die Geschwindigkeit im engsten Querschnitt wird durch v repräsentiert. Der Reibungsbeiwert

$$\zeta = \zeta_{\text{lam}} \cdot F_{\text{lam}} + \zeta_{\text{turb}} \cdot F_{\text{turb}} \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{Re + 1000}{2000}\right) \right) \quad (3.67)$$

setzt sich für ein ideales Rohrbündel aus einem laminaren Anteil

$$\zeta_{\text{lam}} = \frac{280 \cdot \pi \cdot \left((b^{0.5} - 0.6)^2 + 0.75 \right)}{Re \cdot (4 \cdot a \cdot b - \pi) \cdot a^{1.6}} \quad (3.68)$$

und einem turbulenten Beitrag

$$\zeta_{\text{turb}} = \frac{\left(0.22 + \frac{1.2 \cdot \left(1 - \frac{0.94}{b} \right)^{0.6}}{(a - 0.85)^{1.3}} \right) \cdot \left(10^{0.47 \cdot \left(\frac{b}{a} - 1.5 \right)} \right) + (0.03 \cdot (a - 1) \cdot (b - 1))}{Re^{\frac{0.1 \cdot b}{a}}} \quad (3.69)$$

zusammen. Die maßgeblichen Einflussparameter sind das Querteilungsverhältnis a und das Längsteilungsverhältnis b . Die Korrekturfaktoren

$$F_{\text{lam}} = \left(\frac{\eta_W}{\eta} \right) \frac{0.57}{\left(\left(\frac{4ab}{\pi} - 1 \right) \cdot Re \right)^{0.25}} \quad (3.70)$$

und

$$F_{\text{turb}} = \left(\frac{\eta_W}{\eta} \right)^{0.14} \quad (3.71)$$

berücksichtigen den Einfluss variabler Stoffeigenschaften des Fluids infolge einer nicht-isothermen Strömung. [SIEDER & TATE 1936, VDI 2013]

3.2.4 Einphasige Fluide in Plattenwärmeübertragern

In einem PFHE kann der Reibungsdruckverlust durch die Beziehung

$$\Delta p_R = \frac{2 \cdot \zeta(Re) \cdot L \cdot \bar{M}^2 \cdot \dot{N}^2}{\varrho \cdot d_h \cdot A_{\text{Quer}}^2} \quad (3.72)$$

beschrieben werden, wobei eine nicht-lineare Abhängigkeit vom Stoffmengenstrom \dot{N} vorliegt. Der Reibungsbeiwert ζ hängt sowohl von der Reynolds-Zahl Re als auch von der Geometrie der betrachteten Fin-Struktur ab. L beschreibt die Länge der durchströmten Fin-Struktur, d_h den hydraulischen Durchmesser und A_{Quer} den freien Strömungsquerschnitt. [KAYS & LONDON 1997, HESSELGREAVES ET AL. 2016, RÖSSLER ET AL. 2020, RÖSSLER ET AL. 2022a, RÖSSLER ET AL. 2022b]

4 Mathematische Grundlagen

Im Folgenden werden die mathematischen Grundlagen erläutert, welche die Basis der in dieser Arbeit vorgestellten Simulationsverfahren für Wärmeübertrager bilden. In Abschnitt 4.1 wird auf das Reynolds-Transport-Theorem eingegangen. Anschließend wird die differentielle Form einer allgemeinen Bilanzgleichung abgeleitet (vgl. Abschnitt 4.2) und mit der Methode der finiten Volumen örtlich diskretisiert (vgl. Abschnitt 4.3). In Abschnitt 4.4 werden relevante Randbedingungen für die diskretisierte Bilanzgleichung zusammengefasst. Daraufhin wird die Struktur des örtlich diskretisierten Gleichungssystems erläutert (vgl. Abschnitt 4.5), ehe Abschnitt 4.6 die zeitliche Diskretisierung durch Integrationsverfahren thematisiert. Die örtliche und zeitliche Diskretisierung resultiert in einem algebraischen Gleichungssystem, welches durch adäquate Algorithmen gelöst werden kann (vgl. Abschnitt 4.7). Auf die Stabilitätseigenschaften derartiger gleichungsbasierter Lösungsansätze wird in Abschnitt 4.8 eingegangen. Zudem wird der alternative Ansatz maßgeschneiderter iterativer Lösungsansätze vorgestellt (vgl. Abschnitt 4.9). Abschließend wird in Abschnitt 4.10 das Konzept der impliziten Differentiation erläutert.

4.1 Reynolds-Transport-Theorem

Bilanzgleichungen können für ein materielles Volumen (MV) eines Fluids – ein Volumenelement, das sich mit der Strömung bewegt und durch einwirkende Kräfte deformiert wird – formuliert werden. Für die Simulation physikalischer Systeme mit definierter Geometrie sind ortsfeste Kontrollvolumen (KV) mit konstanter Geometrie relevant. Das Reynolds-Transport-Theorem (RTT) ermöglicht die Übertragung einer Bilanzgleichung von einem MV auf ein KV: Die zeitliche Änderung der Erhaltungsgröße in einem MV entspricht der Summe der zeitlichen Änderung der Erhaltungsgröße im KV und den Flüssen der Erhaltungsgröße über die Seitenflächen des KV. Der Zusammenhang

$$\left(\frac{d\Phi}{dt}\right)_{\text{MV}} = \frac{d}{dt} \left(\int_{\text{MV}} (\rho \phi) dV \right) = \int_{\text{KV}} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV + \oint_{\text{KV}} \rho \mathbf{v} \phi \cdot \mathbf{n} dS \quad (4.1)$$

beschreibt das RTT für ein KV mit konstanter Geometrie. Φ bzw. ϕ bezeichnen die integrale bzw. die spezifische Erhaltungsgröße. ρ steht für die Dichte und \mathbf{v} für den Vektor der Geschwindigkeit des Fluids. S bzw. V beschreiben die Oberfläche bzw. das Volumen. \mathbf{n} symbolisiert den Oberflächennormalenvektor. Der Gauss'sche Satz

$$\oint_{\text{KV}} (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}) dS = \int_{\text{KV}} (\nabla \cdot \mathbf{w}) dV \quad (4.2)$$

erlaubt es, ein Oberflächenintegral in ein Volumenintegral umzuformen: Der Fluss eines Vektorfelds \mathbf{w} durch eine Oberfläche, welche ein Volumen einschließt, entspricht dem Volumenintegral aller Quellen und Senken des Vektorfeldes im eingeschlossenen Volumen und damit dem Volumenintegral der Divergenz des Vektorfelds \mathbf{w} . Daraus resultiert

$$\left(\frac{d\Phi}{dt}\right)_{\text{MV}} = \frac{d}{dt} \left(\int_{\text{MV}} (\varrho \phi) dV \right) = \int_{\text{KV}} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\varrho \phi) + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v} \phi) \right) dV \quad (4.3)$$

für das RTT. [PATANKAR 1980, FERZIGER & PERIĆ 2002, MOUKALLED ET AL. 2016]

4.2 Allgemeine Bilanzgleichung

Ausgehend von einem MV, das den Raum eines korrespondierenden KV einnimmt, kann eine Bilanzgleichung für die spezifische Erhaltungsgröße ϕ in diesem KV abgeleitet werden, die das Gleichgewicht von drei Beiträgen beschreibt. Der Beitrag

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\text{MV}} (\varrho \phi) dV \right) = \int_{\text{KV}} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\varrho \phi) + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v} \phi) \right) dV \quad (4.4)$$

entspricht der zeitlichen Änderung der Erhaltungsgröße im MV und gemäß RTT in Gleichung (4.3) im KV. Das Produkt $\varrho \mathbf{v} \phi$ ist der konvektive Fluss. Der Beitrag

$$\oint_{\text{MV}} (\Gamma^\phi \nabla \phi) \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\text{KV}} \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) dV \quad (4.5)$$

fasst die diffusiven Flüsse $\Gamma^\phi \nabla \phi$ der Erhaltungsgröße über die Seitenflächen der Volumen MV und KV zusammen. Γ^ϕ beschreibt den Diffusionskoeffizienten. Der Gradient $\nabla \phi$ entspricht der treibenden Kraft des Diffusionsvorgangs. Der Beitrag

$$\int_{\text{MV}} Q^\phi dV = \int_{\text{KV}} Q^\phi dV \quad (4.6)$$

repräsentiert die Quellen und Senken Q^ϕ der Erhaltungsgröße. Das Gleichgewicht

$$\int_{\text{KV}} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\varrho \phi) + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v} \phi) - \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) - Q^\phi \right) dV = 0 \quad (4.7)$$

der drei Beiträge der Gleichungen (4.4) bis (4.6) entspricht der integralen Form der allgemeinen Bilanzgleichung. Da diese für ein beliebiges KV gilt, ist das Gleichgewicht für Integral und Integrand gleichermaßen gültig. Es resultiert die differentielle Form

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varrho \phi) + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) + Q^\phi \quad (4.8)$$

der allgemeinen Bilanzgleichung. Der erste Term beschreibt die zeitliche Änderung der Erhaltungsgröße im KV. Die weiteren Terme werden als Konvektions-, Diffusions- und Quellterme bezeichnet. Die allgemeine Bilanzgleichung wird in dieser Arbeit zur

Bilanzierung der Erhaltungsgrößen Masse, Impuls und Energie in Wärmeübertragern eingesetzt. [PATANKAR 1980, FERZIGER & PERIĆ 2002, MOUKALLED ET AL. 2016]

4.3 Örtliche Diskretisierung mit finiten Volumen

Die allgemeine Bilanz in Gleichung (4.8) entspricht einer partiellen Differentialgleichung (engl. partial differential equation, PDE) mit den unabhängigen Variablen Zeit und Ortskoordinaten. Eine PDE kann auf einem definierten Berechnungsgebiet mit der vertikalen Linienmethode (engl. method of lines, MOL) numerisch gelöst werden. Dabei wird die PDE durch eine Diskretisierung bezüglich aller außer einer unabhängigen Variablen in eine semi-diskrete, gewöhnliche Differentialgleichung (engl. ordinary differential equation, ODE) überführt.

In dieser Arbeit wird eine Diskretisierung mit finiten Volumen (FV) herangezogen. Zunächst wird das Berechnungsgebiet in KV unterteilt. Anschließend erfolgt die numerische Diskretisierung, wobei die allgemeine Bilanz in Gleichung (4.8) in jedem KV über dessen Volumen, das FV, integriert wird:

$$\int_{\text{FV}} \frac{\partial(\varrho\phi)}{\partial t} dV + \int_{\text{FV}} \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v} \phi) dV = \int_{\text{FV}} \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) dV + \int_{\text{FV}} Q^\phi dV. \quad (4.9)$$

Für ein FV mit konstanter Geometrie, wie in dieser Arbeit angenommen, gilt

$$\int_{\text{FV}} \frac{\partial(\varrho\phi)}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\text{FV}} \varrho\phi dV \right). \quad (4.10)$$

Zudem wird der Gauss'sche Satz angewendet, um die Volumenintegrale der Konvektions- und Diffusionsterme in Oberflächenintegrale umzuformen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\text{FV}} \varrho\phi dV \right) + \oint_{\partial\text{FV}} (\varrho \mathbf{v} \phi) \cdot d\mathbf{S} = \oint_{\partial\text{FV}} (\Gamma^\phi \nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} + \int_{\text{FV}} Q^\phi dV. \quad (4.11)$$

Dabei bezeichnet ∂FV den Rand, d.h. die Seitenflächen, des FV. Die Oberflächenintegrale werden als Summen der Teilintegrale aller N_{SF} Seitenflächen formuliert:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\text{FV}} \varrho\phi dV \right) + \sum_{f=1}^{N_{\text{SF}}} \left(\oint_f (\varrho \mathbf{v} \phi)_f \cdot d\mathbf{S}_f \right) \\ &= \sum_{f=1}^{N_{\text{SF}}} \left(\oint_f (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f \cdot d\mathbf{S}_f \right) + \int_{\text{FV}} Q^\phi dV. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Eine Gauss-Quadratur der Oberflächen- und Volumenintegrale liefert die Gleichung

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{i=1}^{N_I} \omega_i (\varrho\phi)_i V_{\text{FV}} \right) + \sum_{f=1}^{N_{\text{SF}}} \sum_{i=1}^{N_I} \left(\omega_{i,f} (\varrho \mathbf{v} \phi)_{i,f} \cdot \mathbf{S}_f \right) \\ &= \sum_{f=1}^{N_{\text{SF}}} \sum_{i=1}^{N_I} \left(\omega_{i,f} (\Gamma^\phi \nabla \phi)_{i,f} \cdot \mathbf{S}_f \right) + \sum_{i=1}^{N_I} (Q_i^\phi \omega_i V_{\text{FV}}), \end{aligned} \quad (4.13)$$

wobei der Index i für eine der N_I Stützstellen der Gauss-Quadratur steht. ω_i ist der Gewichtungsfaktor der Stützstelle i bei der Auswertung der Gauss-Quadratur. Wird genau eine Stützstelle für die Oberflächen- und Volumenintegrale herangezogen, was einer Approximationsgenauigkeit zweiter Ordnung entspricht, folgt die Beziehung

$$\frac{\partial(\varrho\phi)}{\partial t} V_{\text{FV}} + \sum_{f=1}^{N_{\text{SF}}} \left(\varrho \mathbf{v} \phi - \Gamma^\phi \nabla \phi \right)_f \cdot \mathbf{S}_f = Q^\phi V_{\text{FV}}, \quad (4.14)$$

die als semi-diskrete allgemeine Bilanzgleichung bezeichnet wird. Die Diskretisierung mit FV stellt sicher, dass diese Gleichung konservativ gegenüber der Erhaltungsgröße ϕ ist. [PATANKAR 1980, FERZIGER & PERIĆ 2002, MOUKALLED ET AL. 2016]

Der finale Schritt der Diskretisierung mit FV ist die Approximation der konvektiven und diffusiven Flüsse $\varrho \mathbf{v} \phi$ und $\Gamma^\phi \nabla \phi$ auf den Seitenflächen mit Hilfe der Werte der Erhaltungsgröße in den benachbarten FV. Diese Linearisierung der Flüsse wird für die allgemeine Bilanzgleichung anhand des eindimensionalen FV in Abb. 4.1 demonstriert.

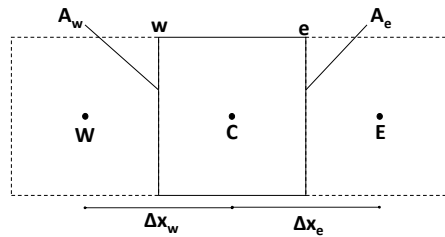


Abbildung 4.1: Visualisierung der Indexnotation bei der Linearisierung der Flüsse

Die diffusiven Flüsse über die linke bzw. rechte Seitenfläche w bzw. e mit den Flächeninhalten A_w bzw. A_e können als

$$\Gamma_w^\phi A_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \quad \text{bzw.} \quad \Gamma_e^\phi A_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \quad (4.15)$$

dargestellt werden. Die lineare Approximation der Gradienten

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = \frac{\phi_C - \phi_W}{\Delta x_w} \quad \text{bzw.} \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \frac{\phi_E - \phi_C}{\Delta x_e} \quad (4.16)$$

bietet im Vergleich zu Approximationsschemata höherer Ordnung einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Erhaltung der physikalischen Eigenschaften der Bilanzgleichung. Es resultiert die linearisierte Darstellung der diffusiven Flüsse:

$$\Gamma_w^\phi \frac{A_w}{\Delta x_w} (\phi_C - \phi_W) \quad \text{bzw.} \quad \Gamma_e^\phi \frac{A_e}{\Delta x_e} (\phi_E - \phi_C). \quad (4.17)$$

Inhomogene Stoffeigenschaften bedingen einen variablen Diffusionsbeiwert, der auf den Seitenflächen zu approximieren ist. In dieser Arbeit wird die lineare Interpolation

$$\Gamma_w^\phi = \frac{\Gamma_W^\phi + \Gamma_C^\phi}{2} \quad \text{bzw.} \quad \Gamma_e^\phi = \frac{\Gamma_C^\phi + \Gamma_E^\phi}{2} \quad (4.18)$$

herangezogen, da keine sprunghaften Änderungen des Diffusionskoeffizienten zu erwarten sind. [PATANKAR 1980, FERZIGER & PERIĆ 2002, MOUKALLED ET AL. 2016]

Die Linearisierung des konvektiven Flusses $\rho \mathbf{v} \phi$ erfordert eine Approximation der Erhaltungsgröße ϕ auf den Seitenflächen. Die lineare Interpolation

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_C}{2} \quad \text{bzw.} \quad \phi_e = \frac{\phi_C + \phi_E}{2} \quad (4.19)$$

resultiert für große Peclet-Zahlen (konvektiver Transport dominiert gegenüber dem diffusiven Transport) in einem nicht physikalischen Lösungsverhalten, da der konvektive Transport maßgeblich von der Strömungsrichtung des Massenstroms \dot{M} abhängt. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit das Upwind-Schema

$$\phi_w = \begin{cases} \phi_C & \text{für } \dot{M}_w \geq 0 \\ \phi_W & \text{für } \dot{M}_w < 0 \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad \phi_e = \begin{cases} \phi_C & \text{für } \dot{M}_e \geq 0 \\ \phi_E & \text{für } \dot{M}_e < 0 \end{cases} \quad (4.20)$$

eingesetzt, welches im Gegensatz zur linearen Interpolation lediglich erster Ordnung genau ist. Nichtsdestotrotz erzielt das Upwind-Schema für große Peclet-Zahlen eine physikalisch plausible Lösung, was für diese Arbeit aufgrund der limitierten Genauigkeit empirischer Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust sowie dem primären Ziel einer möglichst robusten Simulationsumgebung für Wärmeübertrager hinreichend ist. [PATANKAR 1980, FERZIGER & PERIĆ 2002, MOUKALLED ET AL. 2016]

4.4 Randbedingungen

Zur Lösung der semi-diskreten Bilanz in Gleichung (4.14) sind Randbedingungen für die konvektiven und diffusiven Flüsse auf dem Rand des Berechnungsgebiets erforderlich. Bei einer Eintrittsrandbedingung des Konvektionsterms werden sowohl der eintretende Massenstrom als auch die Erhaltungsgröße spezifiziert, sodass die Eintrittsrandbedingung einem Quellterm der allgemeinen Bilanzgleichung entspricht. Bei einer Austrittsrandbedingung wird ein verschwindender Gradient der Erhaltungsgröße in Richtung des Normalenvektors der Seitenfläche modelliert, indem der Wert der Erhaltungsgröße auf der Seitenfläche gleich dem Wert der Erhaltungsgröße im FV gesetzt wird. Nicht durchströmte Seitenflächen werden abgebildet, indem die Fluidgeschwindigkeit orthogonal zur Seitenfläche und damit der konvektive Fluss zu Null gesetzt werden. [PATANKAR 1980, FERZIGER & PERIĆ 2002, MOUKALLED ET AL. 2016]

Auch für den Diffusionsterm werden verschiedene Randbedingungen unterschieden. Bei einer Randbedingung erster Ordnung (Dirichlet-Randbedingung) wird der Wert der Erhaltungsgröße auf der Seitenfläche vorgegeben. Wird hingegen der Gradient einer Erhaltungsgröße orthogonal zur betrachteten Seitenfläche und damit der diffusive Fluss spezifiziert, liegt eine Neumann-Randbedingung (Randbedingung zweiter Ordnung) vor. Der Spezialfall mit einem diffusiven Fluss gleich Null wird als Symmetrie- oder Adiabasis-Randbedingung bezeichnet. Bei einer Randbedingung der dritten Art (Robin-Randbedingung) wird der diffusive Fluss aus einer Beziehung zwischen dem Gradienten der Erhaltungsgröße in Richtung des Normalenvektors der Seitenfläche und einer Funktion für den Wert der Erhaltungsgröße auf der Seitenfläche ermittelt. [PATANKAR 1980, FERZIGER & PERIĆ 2002, MOUKALLED ET AL. 2016]

4.5 Differentiell-algebraische Gleichungssysteme

Die semi-diskrete Bilanz in Gleichung (4.14) entspricht einer ODE mit der Zeit als unabhängiger Variable. Neben als ODE darstellbaren Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie verfügen technische Systeme über algebraische Gleichungen (engl. algebraic equation, AE), wie z.B. Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust (vgl. Kapitel 3) oder Randbedingungen (vgl. Abschnitt 4.4). Ein technisches System wird somit durch ein System differentiell-algebraischer Gleichungen (engl.: differential algebraic equation, DAE) beschrieben. Ein DAE-System kann in der Form

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}}_d &= \mathbf{f}(\mathbf{x}_d, \mathbf{x}_a, \mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \\ 0 &= \mathbf{g}(\mathbf{x}_d, \mathbf{x}_a, \mathbf{r}, \mathbf{k}, t)\end{aligned}\tag{4.21}$$

dargestellt werden, wobei \mathbf{x}_d den Vektor der differentiellen Variablen und $\dot{\mathbf{x}}_d$ dessen Zeitableitung repräsentieren. \mathbf{x}_a steht für den Vektor der algebraischen Variablen und t für die Zeit. Die Modellparameter werden als Vektor \mathbf{r} dargestellt. \mathbf{k} beschreibt den Vektor der Modellkonstanten. Die Funktionen \mathbf{f} und \mathbf{g} der jeweiligen ODE oder AE werden als rechte Seiten bezeichnet. Ein ODE-System

$$\dot{\mathbf{x}}_d = \mathbf{f}(\mathbf{x}_d, \mathbf{r}, \mathbf{k}, t),\tag{4.22}$$

welches ausschließlich über differentielle Variablen \mathbf{x}_d verfügt, stellt einen Spezialfall eines DAE-Systems dar. Der Vektor \mathbf{x}_a der algebraischen Variablen entfällt. Ein DAE-System kann in ein ODE-System umgewandelt werden, wenn das Teilsystem

$$0 = \mathbf{g}(\mathbf{x}_d, \mathbf{x}_a, \mathbf{r}, \mathbf{k}, t)\tag{4.23}$$

explizit nach den algebraischen Variablen \mathbf{x}_a aufgelöst und das Ergebnis in die differentiellen rechten Seiten \mathbf{f} eingesetzt wird. [ASCHER & PETZOLD 1998, KRONSEDER 2003, KUNKEL & MEHRMANN 2006, HAIRER ET AL. 2008, HAIRER & WANNER 2009, BIEGLER 2014, WUNDERLICH 2018]

4.6 Zeitliche Diskretisierung und Integrationsverfahren

ODE- oder DAE-Systeme können mit gleichungsbasierten Ansätzen gelöst werden, wobei die Lösung des gesamten Gleichungssystems simultan bestimmt wird. Die Basis eines gleichungsbasierten Lösungsverfahrens bildet ein Integrationsverfahren, welches ausgehend von einer zum Zeitpunkt t bekannten Lösung das Systemverhalten nach einem weiteren diskreten Zeitintervall Δt bestimmt. Ausgehend vom Startzeitpunkt t_0 wird die Integration solange fortgesetzt, bis der finale Zeitpunkt t_{final} erreicht ist. Um Konvergenz sicherzustellen, ist eine konsistente Startwertbelegung zum Startzeitpunkt t_0 erforderlich. Dem Integrationsverfahren obliegt die zeitliche Diskretisierung der semi-diskreten Bilanz in Gleichung (4.14), die durch den Zusammenhang

$$\frac{\partial (\varrho_C \phi_C)}{\partial t} V_C + L(\phi_C) = 0 \quad (4.24)$$

kompakt darstellbar ist. $L(\phi_C)$ fasst die örtlich diskretisierten Konvektions-, Diffusions- und Quellterme für das betrachtete FV C mit dem Volumen V_C zusammen. Für die zeitliche Diskretisierung können explizite oder implizite Verfahren eingesetzt werden. Das einfachste explizite Verfahren ist das Vorwärts-Euler-Verfahren

$$\frac{(\varrho_C \phi_C)^{t+\Delta t} - (\varrho_C \phi_C)^t}{\Delta t} V_C + L(\phi_C^t) = 0, \quad (4.25)$$

welches die örtlich diskretisierten Terme $L(\phi_C^t)$ ausschließlich zum bereits berechneten Zeitpunkt t evaluiert, um die Lösung zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ zu ermitteln. Somit bestimmt ein explizites Schema die Lösung zum nächsten Zeitpunkt, ohne dass ein implizites Gleichungssystem zu lösen ist. Allerdings ist der Zeitschritt aus Stabilitätsgründen limitiert. Unter praktischen Gesichtspunkten überwiegt der Nachteil eines limitierten Zeitschritts den Vorteil einer rein expliziten Berechnungsvorschrift. Daher werden implizite Verfahren eingesetzt, welche keiner Limitierung des Zeitschritts aus Stabilitätsgründen unterliegen. Ein einfaches implizites Verfahren ist das Rückwärts-Euler-Verfahren

$$\frac{(\varrho_C \phi_C)^{t+\Delta t} - (\varrho_C \phi_C)^t}{\Delta t} V_C + L(\phi_C^{t+\Delta t}) = 0, \quad (4.26)$$

welches die örtlich diskretisierten Terme $L(\phi_C^{t+\Delta t})$ ausschließlich zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ auswertet. Somit ist ein implizites Gleichungssystem zu lösen, um die Lösung in der Zeit zu integrieren. Der Zeitschritt des Rückwärts-Euler-Verfahrens ist nicht aus Stabilitätsgründen, jedoch aufgrund von Genauigkeitsanforderungen limitiert, da beide Euler-Verfahren Einschrittverfahren mit einem Diskretisierungsfehler zweiter Ordnung darstellen. Daher kommen in der Praxis Integrationsverfahren höherer Ordnung zum Einsatz, wobei Mehrschritt- und Einschrittverfahren unterschieden werden. Die allgemeine Integrationsvorschrift eines Mehrschrittverfahrens ist durch

$$\alpha_0 \cdot \mathbf{y}_n = \beta_0 \cdot \mathbf{f}_n + \sum_{j=1}^k (\alpha_j \cdot \mathbf{y}_{n-j} + \Delta t \cdot \beta_j \cdot \mathbf{f}_{n-j}) \quad (4.27)$$

darstellbar. Die Lösung \mathbf{y}_n zum Zeitpunkt t_n wird dabei einerseits auf Basis der Werte \mathbf{f}_n der rechten Seiten zum gesuchten Zeitpunkt t_n bestimmt. Andererseits fließen Informationen der Lösungswerte \mathbf{y}_{n-j} und der Werte der rechten Seiten \mathbf{f}_{n-j} von k zurückliegenden Zeitschritten ein. Die Polynomkoeffizienten α_j und β_j grenzen die jeweiligen Mehrschrittverfahren gegeneinander ab. Meist gilt $\alpha_0 = 1$. Gilt $\beta_0 = 0$, liegt ein explizites Verfahren vor. Im Fall $\beta_0 \neq 0$ ist das Verfahren implizit. Die allgemeine Integrationsvorschrift eines Einschrittverfahrens höherer Ordnung

$$\mathbf{y}_n = \mathbf{y}_{n-1} + \Delta t \cdot \Phi(t_{n-1}, \mathbf{y}_{n-1}, \mathbf{y}_n, \Delta t) \quad (4.28)$$

setzt hingegen ausschließlich die Lösung \mathbf{y}_{n-1} zum vorangegangenen Zeitpunkt t_{n-1} ein, um die gesuchte Lösung \mathbf{y}_n zum Zeitpunkt t_n zu bestimmen. Weiter zurückliegende Zeitschritte fließen nicht in die Berechnung ein. Dabei beschreibt Φ die Verfahrensfunktion. Die bekanntesten Vertreter von Einschrittverfahren höherer Ordnung sind Runge-Kutta-Verfahren und Extrapolationsverfahren. Bei den Mehrschrittverfahren werden die expliziten Adams-Bashforth-Verfahren sowie die impliziten Adams-Moulton-Verfahren unterschieden. Daneben existieren Rückwärtsdifferenzenverfahren oder BDF-Verfahren (engl.: backward differentiation formulas). Letztere weisen gute Stabilitätseigenschaften im Hinblick auf die Lösung steifer DAE-Systeme auf und werden daher in dieser Arbeit herangezogen. Die Berechnungsvorschrift

$$\mathbf{y}_n = \Delta t \cdot \beta_0 \cdot \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n) + \sum_{j=1}^k (\alpha_j \cdot \mathbf{y}_{n-j}) \quad (4.29)$$

beschreibt ein BDF-Verfahren der Ordnung k und entspricht einem nicht-linearen Gleichungssystem für \mathbf{y}_n . Die Koeffizienten β_0 und α_j ergeben sich aus Rückwärtsdifferenzen, welche die Lösungswerte $\mathbf{y}_{n-1}, \dots, \mathbf{y}_{n-k}$ berücksichtigen. Zur Lösung der nicht-linearen Gleichung (4.29) wird eine Prädiktor-Korrektor-Methode eingesetzt. In einem ersten Schritt wird die Lösung \mathbf{y}_n für den Zeitpunkt t_n mit Hilfe einer expliziten Polynomfunktion näherungsweise bestimmt. Die Polynomfunktion wird analog zu Gleichung (4.27) durch Koeffizienten, Lösungswerte und Werte der rechten Seiten zu den zurückliegenden Zeitpunkten t_{n-1}, \dots, t_{n-k} beschrieben. In einem zweiten Schritt kommt ein Lösungsverfahren für Gleichungssysteme, z.B. das Newton-Verfahren, zum Einsatz. Dieses bestimmt, ausgehend vom prädizierten Schätzwert, iterativ die Approximation der Lösung \mathbf{y}_n des nicht-linearen, algebraischen Gleichungssystems, welches aus der örtlichen und zeitlichen Diskretisierung resultiert. [ASCHER & PETZOLD 1998, HAIRER ET AL. 2008, HAIRER & WANNER 2009, SCHERER 2010, DEUFLHARD 2013, DEUFLHARD 2019, DEUFLHARD 2020]

4.7 Lösungsverfahren algebraischer Gleichungssysteme

Implizite Integrationsverfahren, z.B. die Berechnungsvorschrift eines BDF-Verfahrens in Gleichung (4.29), erfordern das Lösen eines algebraischen Gleichungssystems, um die

Lösung um einen Zeitschritt Δt fortzuschreiben. Es werden lineare und nicht-lineare algebraische Gleichungssysteme unterschieden. Diese können allgemein in der Form

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (4.30)$$

dargestellt werden. Dabei ergibt sich die Koeffizientenmatrix \mathbf{A} infolge der Diskretisierung (vgl. Abschnitt 4.3). Der Vektor \mathbf{b} enthält die Randbedingungen (vgl. Abschnitt 4.4), Modellparameter und -konstanten. Bei einem linearen Gleichungssystem ist \mathbf{b} unabhängig von \mathbf{x} und $\mathbf{A} \mathbf{x}$ stellt eine lineare Funktion in \mathbf{x} dar. Im nicht-linearen Fall hängen \mathbf{A} und/oder \mathbf{b} nicht-linear von \mathbf{x} ab. Gleichungssysteme, welche aus der Diskretisierung technischer Systeme resultieren, sind im Allgemeinen nicht-linear. Im Folgenden werden adäquate Verfahren zur Bestimmung der Nullstelle

$$\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0 \quad (4.31)$$

und damit zur Lösung eines algebraischen Gleichungssystems thematisiert. Dabei wird zwischen direkten und iterativen Lösungsverfahren unterschieden. Direkte Verfahren ermitteln die Lösung in einem einzigen Berechnungsschritt. Bei einem iterativen Verfahren wird hingegen ausgehend von einem ersten Schätzwert der Lösung, dem Startwert $\mathbf{x}^{(0)}$, wiederholt eine Berechnungsvorschrift ausgeführt. Diese liefert in jeder Iteration m einen neuen Schätzwert $\mathbf{x}^{(m)}$. Ein iteratives Lösungsverfahren konvergiert, wenn sich die Schätzwerte sukzessive der Lösung \mathbf{x}^* annähern:

$$\|\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{x}^*\| > \|\mathbf{x}^{(m+1)} - \mathbf{x}^*\|. \quad (4.32)$$

Wenn die Änderung der Schätzwerte zwischen zwei Iterationen m und $m + 1$ eine spezifizierte Toleranz unterschreitet, ist Konvergenz erreicht und die iterative Berechnung wird abgebrochen. [MOUKALLED ET AL. 2016, FRIEDRICH & PIETSCHMANN 2020]

4.7.1 Fixpunktiteration

Ein iteratives Verfahren zur Lösung von nicht-linearen algebraischen Gleichungssystemen ist die Fixpunktiteration. Diese kann sowohl für eindimensionale Funktionen als auch für mehrdimensionale Gleichungssysteme eingesetzt werden. Gleichung (4.31), welche die Nullstelle beschreibt, wird in einem ersten Schritt in die Fixpunktgleichung

$$\varphi(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \quad (4.33)$$

umgeformt. Aus der Fixpunktgleichung folgt direkt die Berechnungsvorschrift

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \varphi(\mathbf{x}^{(m)}) \quad (4.34)$$

des Verfahrens. Der Schätzwert $\mathbf{x}^{(m+1)}$ der exakten Lösung \mathbf{x}^* in der Iteration $m + 1$ ergibt sich aus dem Schätzwert $\mathbf{x}^{(m)}$ der vorhergehenden Iteration m . Somit ist lediglich ein Startwert $\mathbf{x}^{(0)}$ zu wählen, um die Nullstelle mit Hilfe der Fixpunktgleichung zu

ermitteln. Die Konvergenzbedingung der Fixpunktiteration ist die Kontraktivität der Verfahrensfunktion. [DAHMEN & REUSKEN 2008, HERMANN 2020]

4.7.2 Thomas-Algorithmus

Der Thomas-Algorithmus ist ein direktes Verfahren zur Lösung tridiagonaler linearer Gleichungssysteme der Form

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & 0 \\ a_2 & b_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

In einem ersten Schritt werden die Vorschriften

$$c'_i = \begin{cases} \frac{c_1}{b_1} & \text{für } i = 1 \\ \frac{c_i}{b_i - c'_{i-1} a_i} & \text{für } i = 2, \dots, n-1 \end{cases} \quad (4.36)$$

und

$$d'_i = \begin{cases} \frac{d_1}{b_1} & \text{für } i = 1 \\ \frac{d_i - d'_{i-1} a_i}{b_i - c'_{i-1} a_i} & \text{für } i = 2, \dots, n \end{cases} \quad (4.37)$$

angewendet, um die Koeffizienten a_i der linken Nebendiagonale zu eliminieren. Es resultiert das modifizierte lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} b_1 & c'_1 & & 0 \\ 0 & b_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & c'_{n-1} \\ 0 & & 0 & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d'_1 \\ d'_2 \\ \vdots \\ d'_n \end{pmatrix}, \quad (4.38)$$

welches in einem zweiten Schritt explizit durch Rückwärtseinsetzen gelöst wird.

4.7.3 Sekantenverfahren

Das Sekanten-Verfahren ist ein iteratives Verfahren zur Lösung eines nicht-linearen algebraischen Gleichungssystems. Im eindimensionalen Fall werden zunächst zwei Schätzwerte $x^{(0)}$ und $x^{(1)}$ für die Nullstelle gewählt. Daraus ergeben sich die zugehörigen Funktionswerte $f(x^{(0)})$ und $f(x^{(1)})$. Der Zusammenhang

$$\frac{f(x^{(1)}) - f(x^{(0)})}{x^{(1)} - x^{(0)}} \quad (4.39)$$

beschreibt die Steigung der durch die Schätzwerte $x^{(0)}$ und $x^{(1)}$ beschriebenen Sekante des Funktionsverlaufs. Daraus folgt direkt die Berechnungsvorschrift

$$x^{(m+1)} = x^{(m)} - \frac{x^{(m)} - x^{(m-1)}}{f(x^{(m)}) - f(x^{(m-1)})} \cdot f(x^{(m)}) \quad (4.40)$$

des Sekantenverfahrens. Falls die Funktion $f(x)$ stetig im Definitionsbereich ist und genau eine Nullstelle x^* besitzt, konvergiert das Sekantenverfahren superlinear gegen die Nullstelle. Der Zusammenhang in Gleichung (4.39) kann als Approximation der Ableitung $\frac{df}{dx}$ des Funktionsverlaufs interpretiert werden. Daher kann das Sekantenverfahren auch auf nicht-lineare Gleichungssysteme erweitert werden, wobei die Ableitungs- oder Jacobi-Matrix durch infinitesimale Auslenkungen des aktuellen Schätzwertes $\mathbf{x}^{(m)}$ des Lösungsvektors approximiert wird. [HANKE-BOURGEOIS 2009, HERMANN 2020]

4.7.4 Bisektionsverfahren

Das Bisektionsverfahren kann zum Lösen einer nicht-linearen algebraischen Gleichung eingesetzt werden. Dabei wird im Intervall $[a_0, b_0]$ die Nullstelle einer stetigen Funktion gesucht. Das Verfahren basiert auf dem Zwischenwertsatz, der besagt, dass für eine stetige Funktion eine Nullstelle im Intervall $[a, b]$ vorliegt, wenn

$$f(a) \cdot f(b) < 0 \quad (4.41)$$

gilt (Monotonie). Somit kann das Startintervall $[a_0, b_0]$ sukzessive halbiert werden, bis die Nullstelle eingegrenzt ist. Die Berechnungsvorschrift des Bisektionsverfahrens

$$x^{(m+1)} = b^{(m)} - \frac{a^{(m)} + b^{(m)}}{2}. \quad (4.42)$$

liefert eine neue Intervallgrenze $x^{(m+1)}$. Diese wird eingesetzt, um gemäß

$$a^{(m+1)} = \begin{cases} b^{(m)}, & \text{wenn } f(b^{(m)}) \cdot f(x^{(m+1)}) \leq 0 \\ a^{(m)}, & \text{wenn } f(b^{(m)}) \cdot f(x^{(m+1)}) > 0 \end{cases} \quad (4.43)$$

$$b^{(m+1)} = x^{(m+1)}$$

eine der ursprünglichen Intervallgrenzen $a^{(m)}$ und $b^{(m)}$ zu ersetzen. Wenn die modifizierten Intervallgrenzen $a^{(m+1)}$ und $b^{(m+1)}$ die Nullstelle mit hinreichender Genauigkeit eingrenzen, liegt Konvergenz vor und die iterative Berechnung wird abgebrochen.

4.7.5 Regula-Falsi-Verfahren

Ein weiteres iteratives Verfahren zur Nullstellensuche für eine eindimensionale Funktion ist das Regula-Falsi-Verfahren, welches Elemente von Sekanten- und Bisektionsverfahren kombiniert. Mit der Berechnungsvorschrift

$$x^{(m+1)} = b^{(m)} - \frac{b^{(m)} - a^{(m)}}{f(b^{(m)}) - f(a^{(m)})} \cdot f(b^{(m)}) \quad (4.44)$$

wird auf Basis der zu den Intervallgrenzen $a^{(m)}$ und $b^{(m)}$ gehörenden Funktionswerte $f(a^{(m)})$ und $f(b^{(m)})$ ein neuer Schätzwert $x^{(m+1)}$ der Nullstelle ermittelt. Dieser Schritt entspricht der Berechnungsvorschrift des Sekantenverfahrens. Der Schätzwert $x^{(m+1)}$ wird herangezogen, um die Intervallgrenzen der Nullstellensuche zu modifizieren. Im Gegensatz zum Bisektionsverfahren wird das Intervall somit nicht halbiert. Stattdessen werden mit dem Zwischenwertsatz die modifizierten Intervallgrenzen

$$\begin{aligned} a^{(m+1)} &= \begin{cases} b^{(m)}, & \text{wenn } f(b^{(m)}) \cdot f(x^{(m+1)}) \leq 0 \\ a^{(m)}, & \text{wenn } f(b^{(m)}) \cdot f(x^{(m+1)}) > 0 \end{cases} \\ b^{(m+1)} &= x^{(m+1)} \end{aligned} \quad (4.45)$$

definiert, welche die Nullstelle eingrenzen. Analog zum Bisektionsverfahren liegt Konvergenz vor und die iterative Berechnung wird abgebrochen, wenn die modifizierten Intervallgrenzen $a^{(m+1)}$ und $b^{(m+1)}$ die Nullstelle mit hinreichender Genauigkeit eingrenzen. [DOWELL & JARRATT 1971]

4.7.6 Newton-Verfahren

Ein Verfahren, um die Nullstelle \mathbf{x}^* nicht-linearer algebraischer Gleichungssysteme zu bestimmen, ist das Newton-Verfahren. Im eindimensionalen Fall kann die Berechnungsvorschrift anschaulich interpretiert werden. Für einen Schätzwert $x^{(m)}$ der Lösung wird die Tangente an die Funktion $f(x)$ bestimmt. Der Schnittpunkt der Tangente mit der Ordinate dient als Näherungslösung $x^{(m+1)}$ der Nullstelle. Im mehrdimensionalen Fall wird die Lösung des Gleichungssystems mit Hilfe der Jacobi-Matrix

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad (4.46)$$

iterativ bestimmt. Die Jacobi-Matrix beschreibt die partiellen Ableitungen aller rechten Seiten f_i des Gleichungssystems bezüglich der Variablen x_j . Die Approximation $\mathbf{x}^{(m+1)}$ der Lösung für Iteration $m + 1$ ergibt sich gemäß der Berechnungsvorschrift

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{J}(\mathbf{x}^{(m)})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(m)}) \quad (4.47)$$

aus der Jacobi-Matrix $\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(m)})$, der Approximation $\mathbf{x}^{(m)}$ der Nullstelle und den Werten der rechten Seiten $\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(m)})$ der vorangegangenen Iteration m . Gleichung (4.47) erfordert die Matrix-Vektor-Multiplikation $\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(m)})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(m)})$ und das aufwendige Invertieren der Jacobi-Matrix. Meist wird daher das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(m)}) \Delta \mathbf{x}^{(m)} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(m)}) \quad (4.48)$$

nach $\Delta \mathbf{x}^{(m)}$ gelöst, um das Invertieren der Jacobi-Matrix zu vermeiden. Basierend auf einer effizienten Vektoraddition liefert die modifizierte Berechnungsvorschrift

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} + \Delta \mathbf{x}^{(m)} \quad (4.49)$$

den Schätzwert $\mathbf{x}^{(m+1)}$. Als Lösungsverfahren für das lineare Gleichungssystem (4.48) werden lineare Gleichungslöser, wie das Jacobi-Verfahren oder das Gauss-Seidel-Verfahren, eingesetzt. Insbesondere dünn besetzte Gleichungssysteme können mit dem quadratisch konvergenten Newton-Verfahren effizient gelöst werden, falls die Funktion $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ im Definitionsbereich stetig ist und genau eine Nullstelle \mathbf{x}^* besitzt. Allerdings ist ein Startwert $\mathbf{x}^{(0)}$ zu wählen, der hinreichend nahe an der gesuchten Nullstelle \mathbf{x}^* liegt, um die Konvergenz des lokal konvergenten Verfahrens sicherzustellen. Andernfalls können Divergenz, oszillierendes Verhalten oder Konvergenz gegen eine nicht gesuchte Nullstelle auftreten. [HANKE-BOURGEOIS 2009, FERZIGER & PERIĆ 2002, DEUFLHARD 2013, MOUKALLED ET AL. 2016, WUNDERLICH 2018, DEUFLHARD 2019, DEUFLHARD 2020, HERMANN 2020]

4.8 Stabilität von Gleichungssystemen

Die Bilanzgleichungen eines technischen Systems können durch FV räumlich und durch Integrationsverfahren zeitlich diskretisiert werden, woraus ein nicht-lineares algebraisches Gleichungssystem resultiert (vgl. Abschnitt 4.2 bis 4.7). Zur simultanen gleichungsbasierten Lösung dieses Gesamtgleichungssystems werden numerische Lösungsverfahren eingesetzt (vgl. Abschnitt 4.7). Um eine Lösung zu erzielen, ist numerische Stabilität des zu lösenden Gleichungssystems zwingend erforderlich. Unter Stabilität wird verstanden, dass ein Lösungsverfahren für verschiedene Kombinationen von Startwerten und Randbedingungen eine Lösung des Gleichungssystems liefert. Die Stabilität wird maßgeblich durch die zur räumlichen Diskretisierung eingesetzten Schemata beeinflusst. Zudem sind die Art und der Zeitschritt des Integrationsverfahrens entscheidende Einflussparameter auf die Stabilität. [MOUKALLED ET AL. 2016]

Konvergenz- bzw. Stabilitätsprobleme eines numerischen Lösungsverfahrens können auf Unstetigkeiten in Form von Knicken oder Sprüngen zurückzuführen sein. Aus mathematischer Sicht wird unter einem Knick oder einem Sprung der Übergang von einem funktionalen Zusammenhang $f(x)_{x < x'}$ auf eine zweite Funktion $f(x)_{x \geq x'}$ an der Stelle $x = x'$ verstanden. Bei einem Knick liegt an der Stelle $x = x'$ ein gemeinsamer

Schnittpunkt der beiden Funktionen vor, bei einem Sprung nicht. Knicke oder Sprünge treten z.B. in empirischen Korrelationen für Wärmeübergang (vgl. Abschnitt 3.1) und Druckverlust (vgl. Abschnitt 3.2) auf. Eine Unstetigkeit in Form eines Knicks liegt z.B. am Übergang der Wärmeübergangskorrelation in Gleichung (3.30) zwischen verschiedenen Bereichen der Reynolds-Zahl vor. Der Einfluss eines Phasenwechsels auf den Wärmeübergang in einem Wärmeübertrager stellt eine Unstetigkeit in Form eines Sprungs dar, da abrupt zwischen verschiedenen Wärmeübergangskorrelationen umgeschaltet wird.

BDF-Integratoren für DAE-Systeme beschreiben die Lösung für den nächsten Zeitpunkt durch das implizite BDF-Polynom in Gleichung (4.29) und ermitteln diese durch ein Prädiktor-Korrektor-Verfahren. Der prädizierte Wert entspricht einer expliziten Abschätzung. Der Korrektor-Schritt wird mit dem gradientenbasierten Newton-Verfahren ausgeführt, was stetige Ableitungszusammenhänge erfordert. Unstetigkeiten in Form von Knicken und Sprüngen sind jedoch nicht stetig differenzierbar, sodass die Konvergenz des Verfahrens bzw. die Stabilität des Gleichungssystems nicht garantiert werden können. Abb. 4.2 veranschaulicht das Verhalten der Prädiktor-Korrektor-Methode an Unstetigkeitsstellen in Form von Knicken und Sprüngen. Die explizite Prädiktion wird mit den vor der Unstetigkeitsstelle ($x < x'$) gültigen Ableitungszusammenhängen ausgeführt. Die Approximation der tatsächlichen Lösung wird durch das BDF-Polynom in Gleichung (4.29) beschrieben und berücksichtigt die nach der Unstetigkeitsstelle ($x \geq x'$) gültigen Ableitungszusammenhänge. Liegt der prädizierte Schätzwert der Lösung außerhalb des Konvergenzradius des gradientenbasierten Newton-Verfahrens, so schlägt der iterative Korrektor-Schritt fehl und es kommt zur Reduktion des Zeitschritts des Integrationsverfahrens oder zum Abbruch des numerischen Lösungsverfahrens.

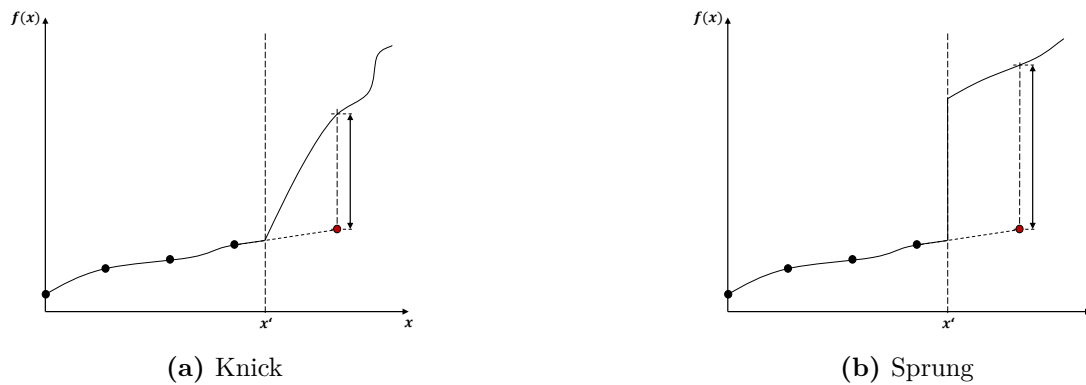


Abbildung 4.2: Prädiktor-Korrektor-Verfahren an Unstetigkeiten

Um einen Simulationsabbruch zu verhindern, können Regularisierungen eingesetzt werden, welche die Unstetigkeiten durch stetig differenzierbare Funktionsverläufe ersetzen. In einem Intervall $[x' - \epsilon, x' + \epsilon]$ um die Unstetigkeitsstelle x' wird der ursprüngliche Funktionsverlauf modifiziert. Eine Regularisierung zur stetigen Überblendung von $f(x)_{x < x'}$ auf $f(x)_{x \geq x'}$ lässt sich mit dem Homotopieparameter γ wie folgt darstellen:

$$f(x) = (1 - \gamma(x)) \cdot f(x)_{x < x'} + \gamma(x) \cdot f(x)_{x \geq x'}. \quad (4.50)$$

γ entspricht einer monotonen, stetig differenzierbaren Funktion in der Schaltgröße x , die an der unteren Intervallgrenze $x' - \epsilon$ den Wert Null und an der oberen Intervallgrenze $x' + \epsilon$ den Wert Eins annimmt. Abb. 4.3 visualisiert das Verhalten des BDF-Lösers an den durch Regularisierungen ersetzten Unstetigkeiten aus Abb. 4.2.

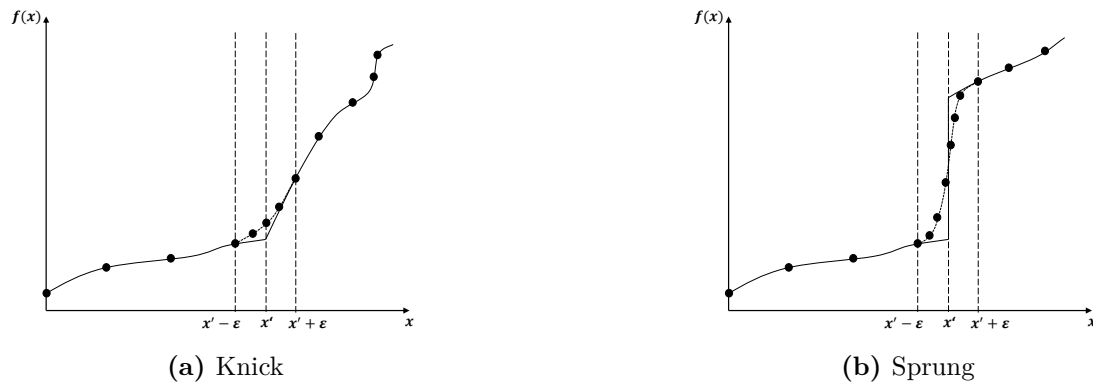


Abbildung 4.3: Regularisierung von Unstetigkeiten

Die Prädiktion der Lösung liegt durch den Einsatz der Regularisierung näher an der tatsächlichen Lösung. Damit steigt die Wahrscheinlichkeit, dass das gradientenbasierte Newton-Verfahren gegen die tatsächliche Lösung konvergiert. Die ursprüngliche Unstetigkeit wird bereits ab $x' - \epsilon$ detektiert, sodass eine frühzeitige Anpassung des Zeitschritts erfolgt. Die Wahl der Grenzen des Intervalls $[x' - \epsilon, x' + \epsilon]$ stellt einen Kompromiss aus Genauigkeit, Stabilität und Rechenzeit dar. [DURAN & GROSSMANN 1986, WAYBURN & SEADER 1987, WUNDERLICH 2018]

4.9 Maßgeschneiderte numerische Verfahren

Maßgeschneiderte Lösungsverfahren stellen eine Alternative dar, falls die Stabilität eines gleichungsbasierten Lösungsverfahrens trotz numerischer Maßnahmen wie Regularisierung nicht gewährleistet werden kann. Dabei wird die Lösung eines nicht-linearen algebraischen Gesamtgleichungssystems durch die sequentielle, iterative Lösung von Teilgleichungssystemen ersetzt. Im Gegensatz zum generischen Ansatz der gleichungsbasierten Simulation sind maßgeschneiderte Lösungsverfahren daher problemspezifisch. In der CFD ist die gleichungsbasierte Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Strömungen aufgrund der impliziten Kopplung von Druck- und Geschwindigkeitsfeld sowie der Tatsache, dass der Druck keine Erhaltungsgröße der Bilanzgleichungen darstellt, nicht trivial. Daher werden die Navier-Stokes-Gleichungen zu einer skalaren Druck- und einer vektoriellen Impulsgleichung umgeformt und mit dem maßgeschneiderten SIMPLE-Algorithmus (engl.: semi-implicit method for pressure linked equations) gelöst (vgl. Abb. 4.4). Zuerst werden die bereits berechneten Lösungsfelder für Massenstrom \dot{M} , Geschwindigkeit v , Dichte ρ und Druck p zum Zeitpunkt t_n als initiale Schätzung für die entsprechenden Lösungsfelder zum Zeitpunkt t_{n+1} angenommen. Anschließend wird die vektorielle Impulsbilanz eingesetzt, um einen neuen Schätzwert des

Geschwindigkeitsfelds v^* zum Zeitpunkt t_{n+1} zu generieren. Mit v^* wird ein Lösungsfeld für den Massenstrom \dot{M}^* berechnet, welches die Impulserhaltung, nicht aber die Massenerhaltung erfüllt. Im nächsten Schritt wird die Druckkorrektur p' ermittelt, mit der Massenstrom, Geschwindigkeit, Dichte und Druck so modifiziert werden, dass die Massenerhaltung erfüllt ist. Die mit der Druckkorrektur bestimmten Lösungsfelder werden als neuer Schätzwert für die Lösung zum Zeitpunkt t_{n+1} betrachtet. Das iterative Verfahren wird fortgesetzt, bis die Lösung zum Zeitpunkt t_{n+1} im Rahmen der spezifizierten Toleranzen konvergiert ist. Anschließend wird auf den nächsten Zeitschritt übergegangen. [PATANKAR 1980, VAN DOORMAAL & RAITHBY 1984, FERZIGER & PERIĆ 2002, MOUKALLED ET AL. 2016]

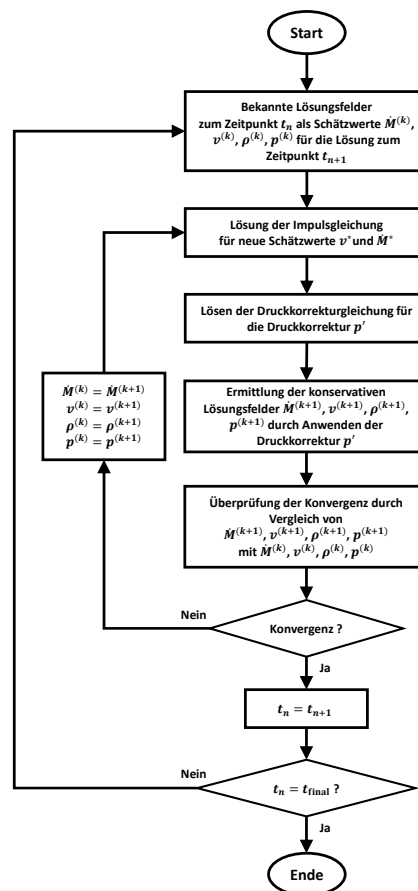


Abbildung 4.4: Schematische Darstellung des SIMPLE-Algorithmus

4.10 Implizite Differentiation

Simultane, gleichungsbasierte Simulationsansätze (vgl. Abschnitt 4.7) nutzen häufig gradientenbasierte Lösungsverfahren, wie das Newton-Verfahren (vgl. Abschnitt 4.7.6), zur Lösung eines Gesamtgleichungssystems. Diese Verfahren garantieren eine schnelle Konvergenz, falls eine eindeutige Lösung vorliegt und die geschätzten Initialwerte im Konvergenzradius des numerischen Verfahrens liegen. Ist das Bestimmen von hinreichend

guten Initialwerten nicht trivial, werden häufig maßgeschneiderte Lösungsansätze (vgl. Abschnitt 4.9) eingesetzt. Diese ermitteln die Lösung durch ein meist ableitungsfreies, iteratives Auswerten von Teilgleichungssystemen.

Eine weitere Möglichkeit ist die Kombination von gleichungsbasierten und maßgeschneiderten Lösungsansätzen. Dabei wird ein kritisches Teilgleichungssystem $\mathbf{f}(\mathbf{x}(\mathbf{r}), \mathbf{r}) = 0$, das von einem Parametervektor \mathbf{r} abhängt und einen Vektor von Lösungsvariablen $\mathbf{x}(\mathbf{r})$ beschreibt, identifiziert und durch ein maßgeschneidertes Verfahren gelöst. Die Lösung wird anschließend explizit zurückgegeben und in die rechte Seite des um das kritische Teilgleichungssystem reduzierten Gesamtgleichungssystems eingesetzt. Das modifizierte Gesamtgleichungssystem kann daraufhin mit gradientenbasierten Verfahren gelöst werden. Ein Beispiel für dieses numerische Vorgehen ist die Umformung eines DAE- in ein ODE-System (vgl. Abschnitt 4.5).

Um bei diesem numerischen Ansatz ein gradientenbasiertes Lösungsverfahren auf das reduzierte Gesamtgleichungssystem anwenden zu können, ist die Ableitungsmatrix $\frac{d\mathbf{x}(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}}$ der Lösungsvariablen nach den Modellparametern zu bestimmen, wobei die Lösung \mathbf{x} des kritischen Teilgleichungssystems $\mathbf{f}(\mathbf{x}(\mathbf{r}), \mathbf{r}) = 0$ bereits bekannt ist. Zu diesem Zweck wird die implizite Differentiation auf Basis der mehrdimensionalen Kettenregel

$$0 = \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{r}} + \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}(\mathbf{r})} \cdot \frac{d\mathbf{x}(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}} \quad (4.51)$$

eingesetzt. Die gesuchte Ableitungsmatrix $\frac{d\mathbf{x}(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}}$ ergibt sich durch das Lösen des linearen Gleichungssystems

$$\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}(\mathbf{r})} \cdot \frac{d\mathbf{x}(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}} = -\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{r}}, \quad (4.52)$$

das von der Jacobi-Matrix $\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}(\mathbf{r})}$ sowie der Matrix der Parameterableitungen $\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{r}}$ des Teilgleichungssystems abhängt. Gleichung (4.52) wird auch als Implicit-Function-Theorem bezeichnet.

5 Grundlagen der Simulation von Wärmeübertragern

Für das Verständnis der in dieser Arbeit beschriebenen Simulationsverfahren für Wärmeübertrager sind neben den mathematischen Zusammenhängen in Kapitel 4 weitere Grundlagen erforderlich. In Abschnitt 5.1 wird auf die grundlegenden Bilanzgleichungen in Wärmeübertragern eingegangen. Abschnitt 5.2 fasst verschiedene Methoden aus der Literatur zur stationären und dynamischen Simulation von Wärmeübertragern zusammen. Die in dieser Arbeit entwickelten Simulationsverfahren sind kompatibel mit dem druckgetriebenen Simulationsansatz nach THOMAS ET AL. (2020) (vgl. Abschnitt 5.3). In Abschnitt 5.4 werden für diese Arbeit relevante Methoden zur Stoffdatenberechnung präsentiert, ehe die Modellierungsumgebung SMI@LE beschrieben wird, die der Implementierung der Simulationsverfahren dient (vgl. Abschnitt 5.5).

5.1 Grundlegende Bilanzgleichungen

Die allgemeine, differentielle Bilanz in Gleichung (4.8) kann auf verschiedene Erhaltungsgrößen angewendet werden. Bei der Simulation von Wärmeübertragern sind die Massen-, die Impuls- und die Energieerhaltung der Prozessströme sowie die Energieerhaltung der Metallwärmekapazitäten von Relevanz.

5.1.1 Massenerhaltung eines Prozessstroms

Die differentielle Form der Massenerhaltung eines Prozessstroms i lässt sich im dreidimensionalen Raum als skalare Gleichung darstellen:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i). \quad (5.1)$$

Die linke Seite entspricht der zeitlichen Änderung der Masse, repräsentiert durch die Dichte ρ_i . Die rechte Seite beschreibt den konvektiven Massentransport mit der vektoriellen Fluidgeschwindigkeit \mathbf{v}_i . Im Vergleich zur allgemeinen Bilanz in Gleichung (4.8) weist die Massenerhaltung keinen Diffusionsterm auf. Zudem werden Massenquellterme, z.B. infolge von chemischen Reaktionen, nicht berücksichtigt.

5.1.2 Impulserhaltung eines Prozessstroms

Die vektorielle Gleichung

$$\frac{\partial \varrho_i \mathbf{v}_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (\varrho_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i) - \nabla \cdot p_i + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_i + \varrho_i \mathbf{g} \quad (5.2)$$

repräsentiert die konservative, differentielle Form der Impulserhaltung eines Prozessstroms i im dreidimensionalen Raum. Die linke Seite entspricht der zeitlichen Änderung des Impulses $\varrho_i \mathbf{v}_i$. Der erste Term auf der rechten Seite beschreibt den konvektiven Impulstransport. Der Gradient des Drucks p_i ist der zweite Term auf der rechten Seite. Der dritte Term auf der rechten Seite repräsentiert den Gradienten des Spannungstensors $\boldsymbol{\tau}_i$, der z.B. Reibungseffekte beinhaltet. Der verbleibende Term beschreibt den Einfluss der vektoriellen Gravitationskonstante \mathbf{g} . Die Gradienten von Druck und Spannungstensor sowie der Gravitationseinfluss sind externe Krafteinflüsse und können somit als Quellterme interpretiert werden.

5.1.3 Energieerhaltung eines Prozessstroms

Die dreidimensionale Erhaltungsgleichung der inneren Energie

$$\frac{\partial \varrho_i u_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (\varrho_i h_i \mathbf{v}_i) + \nabla \cdot (\lambda_i \nabla T_i) + \dot{q}_V \quad (5.3)$$

beschreibt den Prozessstrom i eines Wärmeübertragers. Die linke Seite entspricht der zeitlichen Änderung der volumenspezifischen inneren Energie $\varrho_i u_i$, wobei u_i die massenspezifische innere Energie repräsentiert. Gleichung (5.3) geht somit im Hinblick auf die Anwendung in Wärmeübertragern davon aus, dass Änderungen der kinetischen und potentiellen Energie im Vergleich zur zeitlichen Variation der inneren Energie eine untergeordnete Rolle spielen. Der erste Term auf der rechten Seite steht für den konvektiven Transport der massenspezifischen Enthalpie h_i . Der zweite Term auf der rechten Seite entspricht dem diffusiven Energietransport im Fluid durch Wärmeleitung, wobei λ_i für die Wärmeleitfähigkeit und T_i für die Temperatur des Prozessfluids stehen. Der volumenspezifische Quellterm \dot{q}_V repräsentiert im Allgemeinen Energiequellen und -senken (beispielsweise durch chemische Reaktionen) und ist für Wärmeübertrager meist nicht zu berücksichtigen. Energiequellen bzw. -senken infolge von Reibung sind bei der Simulation von Wärmeübertragern gegenüber dem konvektiven Wärmetransport sowie dem konvektiven Wärmeübergang vernachlässigbar und gehen daher nicht in Gleichung (5.3) ein.

Der thermische Kontakt eines Prozessstroms i mit einem Festkörper s abweichender Temperatur kann sowohl mikroskopisch als auch makroskopisch betrachtet werden, was in Abb. 5.1 visualisiert ist. Bei der mikroskopischen Betrachtung (vgl. Abb. (5.1a)), die beispielsweise in CFD-Ansätzen zum Einsatz kommt, wird das Verhalten des Prozessstroms in Wandnähe detailliert aufgelöst. Für Fluidelemente, die in direktem Kontakt mit dem Festkörper stehen, gilt die Haftbedingung, d.h. alle Einträge

des Geschwindigkeitsvektors \mathbf{v}_i sind gleich Null. In unmittelbarer Umgebung des Festkörpers sind somit ausschließlich diffusive Wärmetransportvorgänge relevant, da kein konvektiver Energietransport mit der Strömung möglich ist. Somit ist in der unmittelbaren Umgebung der Oberfläche W des Festkörpers (innerhalb der sogenannten thermischen Grenzschicht) der diffusive Term gemäß Gleichung (5.3) maßgeblich. Für den übertragenen Wärmestrom \dot{q}_W und die Oberflächentemperatur T_W gelten

$$-\lambda_s \nabla T_s \Big|_W = \dot{q}_W = -\lambda_i \nabla T_i \Big|_W \quad (5.4)$$

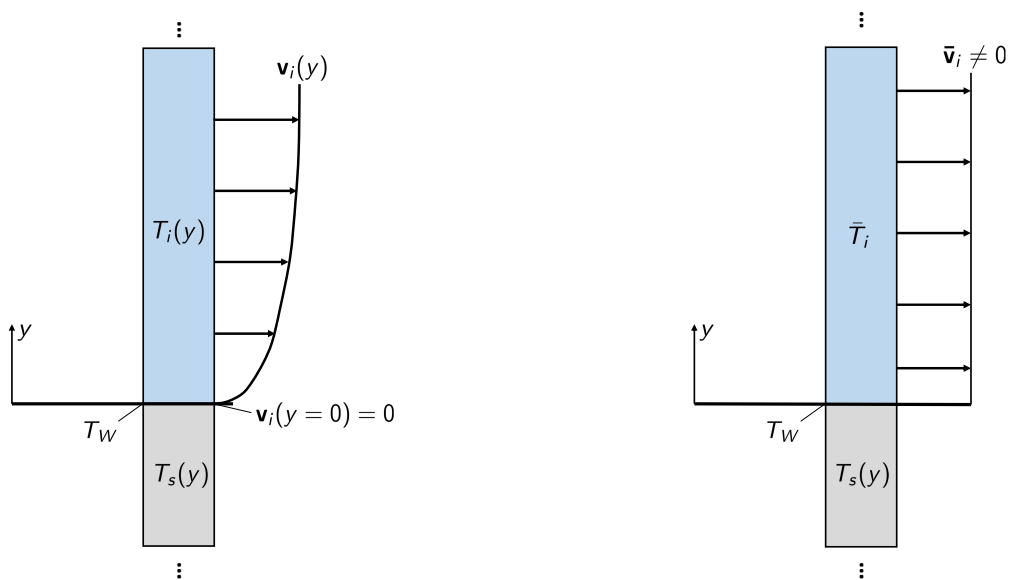
sowie

$$T_{s,W} = T_W = T_{i,W} \quad (5.5)$$

als Kopplungsbedingungen. Dabei steht λ_s für die Wärmeleitfähigkeit im Festkörper und T_s für die lokale Temperatur im Festkörper. Mit zunehmendem Abstand von der Oberfläche des Festkörpers nehmen die Strömungsgeschwindigkeiten zu. Außerhalb der thermischen Grenzschicht dominiert der konvektive den diffusiven Energietransport im Fluid, sodass der Diffusionsterm in Gleichung (5.3) vernachlässigbar ist und die Erhaltungsgleichung der inneren Energie für einen Prozessstrom i vereinfacht in der Form

$$\frac{\partial \rho_i u_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_i h_i \mathbf{v}_i) + \dot{q}_V \quad (5.6)$$

dargestellt werden kann.



(a) Mikroskopische Betrachtung

(b) Makroskopische Betrachtung

Abbildung 5.1: Konvektiver Wärmeübergang: Prozessstrom i und Festkörper s

Bei einer makroskopischen Betrachtung des thermischen Kontakts eines Prozessstroms i mit einem Festkörper s werden die einzelnen Fluidelemente in unmittelbarer Umgebung der Wand nicht aufgelöst. Stattdessen wird eine makroskopische Strömung mit dem Vektor der mittleren Geschwindigkeiten $\bar{\mathbf{v}}_i$ und der mittleren Temperatur \bar{T}_i betrachtet (vgl. Abb. (5.1b)). Somit wird auch die Überlagerung von diffusiven und konvektiven Wärmetransportvorgängen in der thermischen Grenzschicht nicht aufgelöst. Diese wird stattdessen durch eine konvektive Wärmeübergangsbeziehung (vgl. Abschnitt 3.1) modelliert. Für die makroskopische Betrachtung lässt sich die Kopplungsbedingung für den übertragenen Wärmestrom durch den Zusammenhang

$$-\lambda_s \nabla T_s \Big|_{\text{W}} = \dot{q}_{\text{W}} = \alpha \cdot (T_{\text{W}} - \bar{T}_i) \quad (5.7)$$

darstellen. Da bei einer makroskopischen Betrachtung des konvektiven Wärmeübergangs zwischen einem Festkörper und einem Prozessstrom die diffusiven Beiträge in der thermischen Grenzschicht mit einer konvektiven Wärmeübergangsbeziehung (vgl. Abschnitt 3.1) modelliert werden, sind keine diffusiven Terme in der Erhaltungsgleichung für die innere Energie des Prozessstroms i zu berücksichtigen. Daher wird für die Modellierung von Wärmeübertragern in dieser Arbeit auf Gleichung (5.6) zurückgegriffen.

Der übertragene Wärmestrom \dot{q}_{W} gemäß der Kopplungsbedingung für den konvektiven Wärmeübergang in Gleichung (5.7) stellt eine Randbedingung für die dreidimensionale Erhaltungsgleichung der inneren Energie eines Prozessstroms in Gleichung (5.6) dar. Die Anwendung einer Randbedingung auf eine Erhaltungsgleichung erfordert die Kenntnis der spezifischen Geometrie des Berechnungsgebiets. Daher wird an dieser Stelle auf Abschnitt 6.1 verwiesen, in dem die Kopplungsbedingung exemplarisch auf die Energiebilanz eines eindimensionalen Prozessstroms angewendet wird (vgl. Gleichung (6.6)).

5.1.4 Energieerhaltung einer Metallwärmekapazität

Die differentielle Form der Energieerhaltung eines Festkörpers s ist für den dreidimensionalen Raum durch die folgende Beziehung gegeben:

$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_s \nabla T_s) + \dot{q}_V. \quad (5.8)$$

Die linke Seite beschreibt die zeitliche Änderung der volumenspezifischen Energie, ausgedrückt durch die Festkörpertemperatur T_s . ρ_s und c_s stehen für die Dichte und die spezifische Wärmekapazität des Festkörpers. Die Wärmeleitung wird durch den Diffusionsterm $\nabla \cdot (\lambda_s \nabla T_s)$ auf der rechten Seite beschrieben und maßgeblich durch die Wärmeleitfähigkeit λ_s des Festkörpers bestimmt. Der volumenspezifische Quellterm \dot{q}_V repräsentiert im Allgemeinen Energiequellen und -senken (beispielsweise durch elektrische Beheizung) und ist für Wärmeübertrager meist nicht zu berücksichtigen.

Steht der Festkörper s mit einem Prozessstrom i in thermischem Kontakt, so wird im Rahmen dieser Arbeit eine makroskopische Betrachtung des konvektiven Wärmeübergangs mit einer Kopplungsbedingung gemäß Gleichung (5.7) herangezogen. Auch für eine Metallwärmekapazität stellt der übertragene Wärmestrom \dot{q}_W eine Randbedingung für die dreidimensionale Energieerhaltung in Gleichung (5.8) dar, deren Anwendung die Kenntnis der spezifischen Geometrie erfordert. An dieser Stelle wird exemplarisch auf Abschnitt 6.1 verwiesen, in dem die Kopplungsbedingung auf die Energiebilanz einer eindimensionalen Metallwärmekapazität angewendet wird (vgl. Gleichung (6.7)).

5.2 Methoden zur Simulation von Wärmeübertragern

Der Betrieb von Mehrstromwärmeübertragern wird in der Literatur numerisch mit verschiedenen Ausprägungen der Erhaltungsgleichungen in Gleichungen (5.1), (5.2), (5.6) und (5.8) analysiert. Dabei werden stationäre Simulationen häufig mit detaillierten Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang (vgl. Abschnitt 3.1) und Druckverlust (vgl. Abschnitt 3.2) durchgeführt. Dynamische Studien basieren hingegen meist auf vereinfachten Modellannahmen.

5.2.1 Stationäre Simulation

Stationäre Auslegungsmethoden ermitteln für vorgegebene Prozessrandbedingungen die optimale Geometrie eines Wärmeübertragers [PRASAD 1996, PICÓN-NÚÑEZ ET AL. 2002, GHOSH ET AL. 2011, ZHAO & LI 2013, XU ET AL. 2017, CHO ET AL. 2017]. Dabei stellt ein robustes und akkurates Modell zur Nachrechnung eines Wärmeübertragers, das für eine bekannte Geometrie und gegebene Eintrittsbedingungen der Prozessströme deren stationäre Austrittsbedingungen berechnet, einen essentiellen Bestandteil dar. Die Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern kann mit Distributed-Parameter-Modellen (DPM) ausgeführt werden. Im Gegensatz zu klassischen, integralen Simulationsansätzen löst ein DPM die Geometrie des Wärmeübertragers in mindestens einer Raumrichtung detailliert auf. Dies ermöglicht die Berücksichtigung lokal berechneter Stoffdaten und lokal ausgewerteter Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust [PACIO & DORAO 2011, DAS & GHOSH 2012, POPOV ET AL. 2019]. Ein DPM basiert auf einer Diskretisierung des Wärmeübertragers und der grundlegenden Bilanzgleichungen (vgl. Abschnitt 4.3). Das resultierende DAE-System wird gleichungsbasiert (vgl. Abschnitt 4.7) oder durch maßgeschneiderte Algorithmen (vgl. Abschnitt 4.9) gelöst [CHATO ET AL. 1971, HASELER 1981].

Gleichungsbasierte Simulationsverfahren

CHATO ET AL. (1971) präsentieren ein eindimensionales DPM für Gleich- und Gegenstromwärmeübertrager, das auf einer FV-Diskretisierung basiert. Dabei werden konstante Wärmeübergangskoeffizienten sowie Stoffdaten verwendet und die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten wird vernachlässigt. Mit einem durch finite Elemente diskretisierten DPM untersuchen RANGANAYAKULU ET AL. (1996), RANGANAYAKULU &

SEETHARAMU (1997), RANGANAYAKULU & SEETHARAMU (1999) und RANGANAYAKULU & SEETHARAMU (2000) den Einfluss von Strömungs- und Temperaturfehlverteilungen sowie die Auswirkungen der Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten auf den Betrieb eines Kreuzstrom-PFHE mit einphasigen Prozessströmen. FREDHEIM ET AL. (2000) stellen das proprietäre Programm *Coil* für die Nachrechnung eines CWHE vor, welches Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust berücksichtigt. GUT & PINTO (2003) setzen ein DPM ein, um den Einfluss verschiedener Topologien auf den Betrieb eines einphasigen Plattenwärmeübertragers zu analysieren. NELLIS (2003) präsentiert ein eindimensionales DPM für einphasige kryogene Mehrstromwärmeübertrager. Die Diskretisierung mit finiten Differenzen ist so gewählt, dass Ein- und Ausspeisungen von Prozessströmen mit einer exponentiellen Gitterverfeinerung aufgelöst werden. Variable Stoffdaten und die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten werden berücksichtigt. PICARD ET AL. (2009) stellen ein dreidimensionales DPM für einen PFHE vor und berichten, dass Konvergenz der gleichungsbasierten Simulation nicht garantiert werden kann, wenn Diskontinuitäten an Phasenwechseln auftreten. Die Strömungsfehlverteilung in einem PFHE mit einphasigen Prozessströmen wird von JAIN ET AL. (2017) mit Hilfe eines zweidimensionalen DPM analysiert. Dabei wird die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten vernachlässigt.

Maßgeschneiderte Simulationsverfahren

HASELER (1981) nutzt einen Common-Wall-Ansatz für die Nachrechnung eines PFHE. Darunter wird verstanden, dass alle metallischen Bestandteile des PFHE als eine eindimensionale Metallwärmekapazität modelliert werden, welche die Hauptströmungsrichtung der Prozessströme auflöst. Die Prozessströme interagieren simultan durch konvektiven Wärmeübergang mit der Common Wall. Zudem stellt HASELER (1981) zwei Ansätze zur Nachrechnung eines PFHE vor, welche variable Stoffdaten sowie die lokale Auswertung von Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust erlauben. Eine kombinierte axiale Integration aller Prozessströme bietet Vorteile bei der Analyse von Gleichstromwärmeübertragern. Ein maßgeschneidertes, alternierendes Schema, welches auf einer FV-Diskretisierung basiert, wird für Gegenstromwärmeübertrager herangezogen. Dieses Verfahren ist die Basis des kommerziellen Programms UniSim[®] PFE zur PFHE-Auslegung. Zuerst werden die Erhaltungsgleichungen der Prozessströme ausgewertet, während die Metalltemperaturen konstant gehalten werden. Anschließend werden die Bilanzgleichungen der Metallwärmekapazitäten evaluiert, wobei die aktuelle Abschätzung der Prozessströme eine konstante Randbedingung darstellt.

PRASAD & GURUKUL (1987) entwickeln ein zweidimensionales DPM für einen einphasigen PFHE, um den Einfluss der Stapelfolge auf den Betrieb zu analysieren [PRASAD 1991]. PRASAD & GURUKUL (1992) erweitern dieses Modell für Kreuzstromführungen und evaluieren verschiedene Ansätze zur Berücksichtigung des Fin-Wirkungsgrads (vgl. Gleichung (3.3)) [PRASAD 1996, PRASAD 1997].

CORBERÁN ET AL. (2001) präsentieren den Simulationsansatz *SEWTLE* (engl.: semi-explicit method for wall temperature linked equations), welcher alternierend die Bilanzgleichungen von Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen evaluiert. Somit wird der

alternierende Lösungsansatz nach HASELER (1981) adaptiert. Ein FV-diskretisiertes, dreidimensionales DPM für Rippen-Rohr-Wärmeübertrager wird von LIU ET AL. (2004) vorgestellt. Durch Anwenden der Graphentheorie können komplexe Topologien von miteinander verschalteten Rohren berücksichtigt werden. Ein effizienter, maßgeschneiderter Algorithmus entkoppelt die Lösung von Energie- und Impulserhaltung, wobei Wärmeleitungseffekte in den Metallwärmekapazitäten vernachlässigt werden. Phasenwechsel im Inneren der Rohre werden hingegen berücksichtigt.

JIANG ET AL. (2006) stellen ein weiteres Modell zur Nachrechnung von Rippen-Rohr-Wärmeübertragern vor, das beliebige Verschaltungen von Rohren durch eine Konnektivitätsmatrix beschreibt. Im Gegensatz zu LIU ET AL. (2004) wird ein FV, das einem Phasenwechsel unterliegt, zur Stabilisierung der Berechnung sukzessive verfeinert. DING ET AL. (2011) führen ein explizites, alternierendes Berechnungsschema für Rippen-Rohr-Wärmeübertrager ein, das die sukzessive Verfeinerung eines FV mit Phasenwechsel nach JIANG ET AL. (2006) nutzt. SKAUGEN ET AL. (2010), SKAUGEN ET AL. (2013), SKAUGEN ET AL. (2015) und LØVSETH ET AL. (2015) entwickeln ein umfassendes Modell für die Nachrechnung von kryogenen Mehrstromwärmeübertragern. Die Autoren betonen, dass lokal aufgelöste Stoffdaten sowie Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust entscheidend für die akkurate Vorhersage des Betriebs sind. Zudem sind adäquate Regularisierungen (vgl. Abschnitt 4.8) von Wärmeübergangs- und Druckverlustkorrelationen an Phasenwechseln für robuste Berechnungen erforderlich.

QIAO ET AL. (2013) stellen ein zweidimensionales, FV-diskretisiertes DPM für Plattenwärmeübertrager vor, welches auf einem maßgeschneiderten und zur Verkürzung der Rechenzeiten parallelisierbaren Algorithmus basiert. Ein weiteres zweidimensionales DPM, das die Stapelfolge eines kryogenen PFHE mit einphasigen Prozessströmen auflöst und die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten berücksichtigt, wird von GOYAL ET AL. (2014) präsentiert. WANG ET AL. (2015) stellen ein eindimensionales DPM für einen CWHE vor, das komplexe Verschaltungen von Prozessströmen durch die Graphentheorie modelliert. Ein maßgeschneidertes Verfahren mit drei Berechnungsschleifen für Wärmeübergang, Druckverlust und Auswertung der Metallwärmekapazitäten wird eingesetzt. Mit einem zweidimensionalen DPM, das die Stapelfolge eines PFHE auflöst, analysieren SUN ET AL. (2019) eine industrielle Coldbox mit mehreren Wärmeübertragern unter dem Einfluss von Phasenwechseln. Ein alternierender Algorithmus berechnet zunächst die Strömungsverteilung zwischen den Wärmeübertragern und anschließend jeden PFHE selbst, indem abwechselnd die Grundgleichungen von Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen ausgewertet werden.

NIROOMAND ET AL. (2019) analysieren mit einem dreidimensionalen DPM die Auswirkungen von Fehlverteilungen und der Stapelfolge auf den Betrieb eines PFHE mit einphasigen Reinstoffen als Prozessströme. Die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten wird dabei berücksichtigt. Zudem evaluiert das Modell lokal Stoffdaten und Korrelationen für Wärmeübergang sowie Druckverlust. Zur Lösung wird ein maßgeschneidertes Verfahren eingesetzt, welches die Auswertung von Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen iteriert. NIROOMAND ET AL. (2020) erweitern dieses Modell auf Mehrkomponentengemische mit Phasenwechseln.

Alternative Simulationsverfahren

Da proprietäre Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust sowie robuste Simulationsmodelle häufig nicht verfügbar sind, wenden HASAN ET AL. (2007) und HASAN ET AL. (2009) einen Optimierer an, um ein Wärmeübertragernetzwerk an Betriebsdaten von realen Mehrstromwärmeübertragern anzupassen. KAMATH ET AL. (2012) stellen ein stationäres Modell für Mehrstromwärmeübertrager zur Prozesssimulation und -optimierung vor, bei dem der Apparat als Wärmeübertragernetzwerk interpretiert wird. Somit kann nach DURAN & GROSSMANN (1986) die Methode der simultanen Wärmeintegration und Prozessoptimierung genutzt werden. Diese berücksichtigt die Wärmeintegration als zusätzliche Nebenbedingungen in der Optimierungsaufgabe.

WATSON ET AL. (2015) und WATSON & BARTON (2017) modifizieren diesen Ansatz zu einem gleichungsbasierten Wärmeübertragermodell für die Prozesssimulation [VIKSE ET AL. 2018] und Optimierung [WATSON ET AL. 2018] von Verflüssigungsprozessen. Da dieser Ansatz auf den Summenkurven der Pinch-Analyse basiert, können weder die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten noch lokale Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust berücksichtigt werden. PATTISON & BALDEA (2015) kombinieren dieses auf Summenkurven basierende stationäre Modell zur Verbesserung der Konvergenzeigenschaften mit dem Ansatz der pseudo-transienten Simulation [KELLEY & KEYES 1998, PATTISON & BALDEA 2014]. Dabei werden ausgewählte algebraische Gleichungen mit dem gleichen stationären Zustand ersetzt. TSAY ET AL. (2017) stellen ein Modell zur Nachrechnung eines CWHE vor, das auf pseudo-transienter Simulation basiert. Es werden Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust eingesetzt. Die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten wird jedoch nicht berücksichtigt.

Darüber hinaus werden vermehrt datengetriebene Ansätze auf Basis künstlicher neuronaler Netze publiziert, um Wärmeübertrager im stationären Betrieb zu beschreiben [AASI & MISHRA 2021]. Diese sind auf den Bereich der verfügbaren Betriebsdaten limitiert. Somit sind rigorose Modelle erforderlich, um die verfügbaren Betriebsdaten zu extrapolieren, sodass datengetriebene Ansätze in dieser Arbeit nicht behandelt werden. Auch die Simulation von Wärmeübertragern mit CFD-Methoden wird in dieser Arbeit nicht thematisiert, da die Lösung der gekoppelten, dreidimensionalen Erhaltungsgleichungen in Kombination mit einer aufwendigen Stoffdatenberechnung die effiziente Einbindung von CFD-Methoden in dynamische Gesamtanlagenmodelle erschwert [SUNDEN 2010, ZHANG ET AL. 2010, MARCHIONNI ET AL. 2019, ZARGOUSHI ET AL. 2020, HAIDER ET AL. 2020, HAIDER ET AL. 2021a, HAIDER ET AL. 2021b].

CFD-Methoden können auch eingesetzt werden, um Korrelationen für Wärmeübergang (vgl. Abschnitt 3.1) und Druckverlust (vgl. Abschnitt 3.2) zu bestimmen [FREUND & KABELAC 2010, GULLAPALLI & SUNDÉN 2014]. Vereinfachte analytische Ansätze, wie z.B. nach ZALESKI (1984) oder SEDDIQ & MAEREFAT (2020), sind zur Analyse von Wärmeübertragern nur begrenzt anwendbar, wenn Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust berücksichtigt werden sollen, und werden daher in dieser Arbeit nicht näher beschrieben.

5.2.2 Dynamische Simulation

Für die dynamische Simulation von Wärmeübertragern gibt es in der Literatur verschiedene Ansätze. Einerseits werden Moving-Boundary-Modelle (MBM) für Optimierungsaufgaben in Echtzeit eingesetzt. Andererseits findet, analog zur stationären Simulation, das auf einer Diskretisierung (vgl. Abschnitt 4.3) basierende DPM Anwendung. Dabei werden gleichungsbasierte und maßgeschneiderte Lösungsverfahren für das aus der Diskretisierung resultierende DAE-System (vgl. Abschnitt 4.5) des DPM unterschieden.

Moving-Boundary-Modelle

Ein MBM wird für Wärmeübertrager wie Kondensatoren oder Verdampfer eingesetzt, die genau einen Prozessstrom mit Phasenwechseln aufweisen. An den Siede- und Taupunkten dieses Prozessstroms wird der Apparat in eine minimale Anzahl an Segmenten unterteilt. In jedem Segment werden die Bilanzgleichungen für Masse und Energie formuliert, die den entsprechenden Phasenzustand beschreiben. Da die Segmente nicht weiter in diskrete Elemente unterteilt werden, sind in jedem Abschnitt Annahmen für die Profile der Enthalpie, des Dampfanteils und der übrigen Stoffdaten zu treffen. Somit wird für jedes Segment ein Modell mit integralen Parametern formuliert. [ZHANG & ZHANG 2006, MCKINLEY & ALLEYNE 2008, CECCHINATO & MANCINI 2012, BONILLA ET AL. 2015, VAUPEL ET AL. 2019]

Meist wird für jeden Prozessstrom ein konstanter Druck angenommen, d.h. die Impulsbilanz wird nicht aufgelöst. Aufgrund der fehlenden Diskretisierung kann keine Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten berücksichtigt werden. In der Dynamik verschieben sich die Positionen der Phasenwechsel und damit die Segmentgrenzen des MBM. Zudem können Segmente verschwinden oder neu auftreten, wenn Siede- oder Taupunkt die Bilanzierungsgrenze des MBM passieren. Um Singularitäten oder strukturelle Veränderungen des Gleichungssystems zu vermeiden, sind daher numerische Maßnahmen zu treffen. Häufig werden z.B. Pseudo-Zustandsgleichungen zur Beschreibung inaktiver Zustandsgrößen eingesetzt. [ZHANG & ZHANG 2006, MCKINLEY & ALLEYNE 2008, CECCHINATO & MANCINI 2012, BONILLA ET AL. 2015, VAUPEL ET AL. 2019]

Gleichungsbasierte Distributed-Parameter-Modelle

GEORGIADIS ET AL. (1998a), GEORGIADIS ET AL. (1998b) und GEORGIADIS & MACCHIETTO (2000) entwickeln ein eindimensionales DPM für einen Plattenwärmeübertrager und einen STHE mit einphasigen Prozessströmen. JUN & PURI (2006) modifizieren dieses Modell zu einem zweidimensionalen Ansatz, der die Stapelfolge des Plattenwärmeübertragers auflöst. AVEROUS ET AL. (1999) präsentieren ein DPM für einen PFHE mit quasi-stationären Energiebilanzen der Prozessströme. SKOGLUND ET AL. (2006) stellen ein objekt-orientiertes, eindimensionales DPM mit einer FV-Diskretisierung vor und betrachten die transiente Antwort von Zweistromwärmeübertragern auf Konzentrationsänderungen der einphasigen Prozessströme. Dabei wird die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten vernachlässigt.

ZAVERSKY ET AL. (2014) entwickeln ein weiteres eindimensionales DPM für einen STHE mit einphasigen Prozessströmen. BONILLA ET AL. (2017) nutzen ein eindimensionales DPM eines STHE mit mehreren Rohrwegen, um verschiedene Modellierungsansätze für die Energiespeicherkapazität des Rohrbündels zu vergleichen. Dabei werden die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten und die Energiespeicherkapazität des Mantels vernachlässigt. MARCHIONNI ET AL. (2019) stellen ein eindimensionales DPM zur Entwicklung von Regelungsstrategien für Wärmeübertrager mit einphasigen Prozessströmen vor.

HE ET AL. (2019) analysieren die Regelung von gekoppelten Plattenwärmeübertragern durch ein eindimensionales DPM mit quasi-stationären Energiebilanzen der einphasigen Prozessströme. Die Wärmeleitung der Metallwärmekapazitäten wird vernachlässigt, wohingegen deren Energiespeicherkapazität berücksichtigt wird. BOBIČ ET AL. (2020) entwickeln ein eindimensionales, FV-diskretisiertes DPM für einphasige Plattenwärmeübertrager mit zwei Prozessströmen, das die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten nicht berücksichtigt.

Maßgeschneiderte Distributed-Parameter-Modelle

PINGAUD ET AL. (1989) präsentieren ein zweidimensionales DPM, das die Stapelfolge eines PFHE auflöst und variable Stoffdaten sowie Auslegungskorrelationen für den Wärmeübergang beinhaltet. Dabei werden die Massen- und Energiespeicherkapazitäten der Prozessströme sowie die Energiespeicherkapazität der Metalle berücksichtigt. Die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten wird hingegen vernachlässigt. Die Autoren legen dar, dass die gleichungsbasierte Lösung des nicht-linearen DAE-Systems infolge einer Diskretisierung mit der MOL nicht trivial ist. Daher werden die Bilanzgleichungen zudem zeitlich diskretisiert. Das resultierende algebraische Gleichungssystem wird mit einem maßgeschneiderten Algorithmus gelöst, der alternierend die Teilgleichungssysteme von Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen evaluiert.

XUAN ET AL. (2006) entwickeln ein eindimensionales DPM für verschiedene Zwei-stromwärmeübertrager, das zwar Phasenwechsel der Prozessströme berücksichtigt, die Metallwärmekapazitäten jedoch nicht auflöst. Die Autoren sprechen von einem hybriden Ansatz mit Komponenten von DPM und MBM, da eine feste FV-Diskretisierung erfolgt und Phasenwechselzellen zur Stabilisierung der Simulation feiner aufgelöst werden. Die Zeitintegration erfolgt mit einem festen Zeitschritt. NIA ET AL. (2021) analysieren mit einem zweidimensionalen und mit finiten Differenzen diskretisierten DPM die Dynamik von Plattenwärmeübertragern mit einphasigen Prozessströmen, wobei konstante Stoffdaten eingesetzt werden. Die Lösung erfolgt mit einem voll-impliziten, maßgeschneiderten Ansatz, der die beiden Raumrichtungen entkoppelt und sequentiell löst. Die Integration wird mit einem festen Zeitschritt ausgeführt.

Vergleich von Moving-Boundary- und Distributed-Parameter-Modellen

Ein DPM ermöglicht eine detaillierte Analyse der Dynamik von Wärmeübertragern, da die Geometrie des Apparats akkurat aufgelöst wird. Dies erlaubt lokal die Berechnung von Stoffdaten und die Auswertung von Korrelationen für Wärmeübergang sowie Druckverlust. Allerdings weist ein DPM einen hohen Rechenaufwand auf, sodass

dynamische Simulationen in Echtzeit schwer zu realisieren sind. Demgegenüber ist ein MBM aufgrund der minimalen Anzahl an Segmenten echtzeitfähig. Allerdings ist ein MBM nicht für Simulationen in Auslegungsgenauigkeit hinsichtlich Wärmeübergang und Druckverlust geeignet und auf Wärmeübertrager mit genau einem Prozessstrom, der Phasenwechseln unterliegt, limitiert. [YEBRA ET AL. 2005, ZHANG & ZHANG 2006, MCKINLEY & ALLEYNE 2008, CECCHINATO & MANCINI 2012, BONILLA ET AL. 2015, DESIDERI ET AL. 2016, CAO ET AL. 2016, VAUPEL ET AL. 2019]

Ein DPM hat gegenüber einem MBM den Vorteil, dass die Modellformulierung nicht von der Art des Wärmeübertragers abhängt. Die Struktur des Gleichungssystems eines MBM unterscheidet sich hingegen z.B. für Kondensatoren und Verdampfer. Ein MBM vermeidet durch das akkurate Auflösen der Phasenwechsel numerische Effekte, die bei einem DPM zur Simulation von Wärmeübertragern mit Phasenwechseln auftreten [PINGAUD ET AL. 1989, SKAUGEN ET AL. 2010] und numerische Stabilisierung z.B. durch Regularisierungen (vgl. Abschnitt 4.8) erfordern. [YEBRA ET AL. 2005, ZHANG & ZHANG 2006, MCKINLEY & ALLEYNE 2008, CECCHINATO & MANCINI 2012, BONILLA ET AL. 2015, DESIDERI ET AL. 2016, CAO ET AL. 2016, VAUPEL ET AL. 2019]

5.2.3 Abgrenzung zum Stand der Technik

Die primäre Zielsetzung dieser Arbeit ist die robuste, stationäre und dynamische Simulation von Mehrstromwärmeübertragern in Auslegungsqualität, d.h. unter Berücksichtigung der differenzierten und industriell anerkannten Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust. Daher wird in Kapitel 6 eine modular-hierarchische Simulationsumgebung für Mehrstromwärmeübertrager auf Basis der grundlegenden Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie entwickelt. Die Implementierung erfolgt mit der innovativen Modellierungsumgebung SMI@LE, die in Abschnitt 5.5 vorgestellt wird. Die Kernkomponente der Simulationsumgebung ist ein eindimensionales, dynamisches Modell für Mehrstromwärmeübertrager mit größtmöglicher Modelltiefe, welches als integraler Bestandteil für realitätsgetreue digitale Zwillinge von Wärmeübertragern und verfahrenstechnischen Anlagen dienen soll. Die aufgelöste Dimension entspricht der Hauptströmungsrichtung der Prozessströme. Die räumliche Diskretisierung erfolgt mit der FV-Methode, die konservativ gegenüber den Erhaltungsgrößen ist.

Eine Kernkomponente der Simulationsumgebung ist der druckgetriebene Simulationsansatz nach THOMAS ET AL. (2020), der ohne Modellanpassungen die robuste Simulation von Vorwärts-, Rückwärts- und Nullströmung sowie transienter Wechsel der Strömungsrichtung erlaubt (vgl. Abschnitt 5.3). Eine Umkehr der Strömungsrichtung tritt bei Lastwechseln sowie Anfahr- und Abschaltvorgängen häufig auf, sodass der Einsatz von Modellen für Mehrstromwärmeübertrager als integraler Bestandteil von digitalen Zwillingen verfahrenstechnischer Anlagen ausschließlich durch einen druckgetriebenen Simulationsansatz ermöglicht wird. Die Simulationsumgebung verfügt zudem über Auslegungskorrelationen für den Wärmeübergang (vgl. Abschnitt 3.1) und den Druckverlust

(vgl. Abschnitt 3.2) sowie geeignete Methoden zur Berechnung variabler Stoffdaten (vgl. Abschnitt 5.4). Zudem wird die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten berücksichtigt, sodass der hohe Grad an Wärmeintegration von verfahrenstechnischen Anlagen akkurat repräsentiert wird.

Ausgehend von dieser Kernkomponente kann der Anwender die Modelltiefe der Simulationsumgebung sukzessive anpassen, um adäquate Wärmeübertragermodelle für verschiedene Anwendungen auszuwählen. Die Simulationsumgebung stellt für unterschiedliche Anwendungsfälle gleichungsbasierte oder maßgeschneiderte Lösungsverfahren bereit (vgl. Kapitel 6).

Wärmeübertragermodelle in der Literatur werden häufig nur für stationäre Simulationen, eine ausgewählte Anwendung oder eine bestimmte Art von Wärmeübertrager entwickelt (vgl. Abschnitt 5.2.1 und Abschnitt 5.2.2). In dieser Arbeit wird hingegen eine flexible und modular-hierarchische Simulationsumgebung für die robuste, dynamische und stationäre Betrachtung der industriell relevanten Wärmeübertrager PFHE, CWHE und STHE entwickelt. Die Simulationsumgebung erlaubt dem Nutzer eine Anpassung der Modelltiefe und kann aufgrund des modularen Aufbaus einfach erweitert werden.

Die Einbindung in Umgebungen zur (dynamischen) Prozesssimulation und -optimierung ist möglich. Die Wärmeübertragermodelle dieser Simulationsumgebung lösen die Geometrie entlang der Hauptströmungsrichtung der Prozessströme detailliert auf, sodass z.B. verschiedene Fin-Strukturen eines PFHE aufgelöst werden. Dies ermöglicht zudem die lokale Berechnung variabler Stoffdaten sowie die Auswertung von Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust. Außerdem kann somit die Wärmeleitung in den Metallwärmekapazitäten berücksichtigt werden. Im Gegensatz dazu vernachlässigen Wärmeübertragermodelle aus der Literatur mindestens eine dieser Modelleigenschaften. Darüber hinaus nehmen Wärmeübertragermodelle aus der Literatur meist a priori eine feste Strömungsrichtung der Prozessströme an. Demgegenüber basieren die in dieser Arbeit entwickelten Modelle auf einem druckgetriebenen Simulationsansatz, der die Simulation von Vorwärts-, Rückwärts- und Nullströmung erlaubt.

5.3 Druckgetriebene Simulation

Die in dieser Arbeit präsentierte modular-hierarchische Simulationsumgebung für Wärmeübertrager basiert auf dem Ansatz der druckgetriebenen Simulation nach THOMAS ET AL. (2020). Dieser wird in KLEIN ET AL. (2020), KLEIN ET AL. (2021), KENDER ET AL. (2021), KENDER ET AL. (2022a) und KENDER ET AL. (2022b) zur realitätsgetreuen dynamischen Simulation von verfahrenstechnischen Anlagen genutzt. Ein weiteres Beispiel für einen druckgetriebenen Simulationsansatz wird von HOFFMANN ET AL. (2020) vorgestellt. Eine verfahrenstechnische Anlage wird dabei als Netzwerk von Druckknoten interpretiert. Ein Druckknoten entspricht einem definierten und mit einem Prozessfluid gefüllten Volumen, in dem durch das Gleichgewicht

$$V_{td} = V_{geo} \tag{5.9}$$

zwischen dem thermodynamischen Volumen des Prozessfluids V_{td} und dem geometrischen Volumen V_{geo} der (Total-)Druck bestimmt werden kann. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die Bestimmung des (Total-)Drucks durch Gleichung (5.9) eine Abhängigkeit der Dichte entweder vom Druck oder von der Temperatur bzw. Enthalpie des Fluids voraussetzt. Insbesondere die geringe Druckabhängigkeit der Dichte in der Flüssigphase stellt dabei eine numerisch steife, aber nichtsdestotrotz lösbare mathematische Problemstellung dar. Ein Fluid mit konstanter Dichte, die weder temperatur- noch druckabhängig ist ($\rho \neq f(T) \neq f(p) = \text{const.}$), kann jedoch nicht mit dem Ansatz der druckgetriebenen Prozesssimulation abgebildet werden.

Die Druckknoten sind durch Druck-Strom-Units ohne Speicherfähigkeit für ein Prozessfluid verbunden. Diese berechnen mit dem generischen, quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhang

$$C \cdot \Delta p = R \cdot \dot{N} \quad (5.10)$$

den Stoffmengenstrom \dot{N} zwischen den Druckknoten. C und R sind Widerstandsbeiwerte. Die Strömungsrichtung wird gemäß der Druckdifferenz

$$\Delta p = p_1 - p_2 \quad (5.11)$$

zwischen den Druckknoten 1 und 2 bestimmt. In dem in Abb. 5.2 visualisierten Beispiel liegt eine Vorwärtsströmung vor, da $p_1 > p_2$. Zudem können Rückwärts- ($p_1 < p_2$) und Nullströmung ($p_1 = p_2$) abgebildet werden.

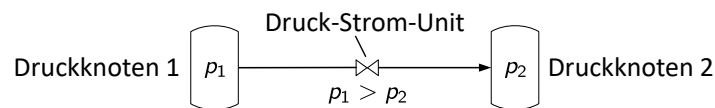


Abbildung 5.2: Einfaches Drucknetzwerk nach KLEIN ET AL. (2020)

5.4 Stoffdatenberechnung

Für eine realitätsgetreue Simulation von Wärmeübertragern ist die Berechnung von Stoffdaten wie Dichte, Viskosität, Wärmekapazität oder Gasphasenanteil bei bekanntem Druck, gegebener Enthalpie bzw. Temperatur und definierter Zusammensetzung eines Prozessfluids entscheidend. Zur Stoffdatenberechnung wird in dieser Arbeit das Linde-interne Stoffdatenprogramm GMPS herangezogen, welches den gesuchten Stoffwert als explizite Funktion eines konsistenten thermodynamischen Zustandsvektors (Zusammensetzung, Temperatur, Druck, Enthalpie) liefert. Zudem berechnet GMPS die Ableitungen des gesuchten Stoffwerts nach dem Zustandsvektor. Eine detaillierte Diskussion der GMPS-Methoden für verschiedene Stoffsysteme übersteigt den Umfang dieser Arbeit. Exemplarisch wird daher das Stoffsystem Luft – ein ternäres Gemisch von Stickstoff, Sauerstoff und Argon – betrachtet, das durch eine angepasste Zustandsgleichung nach Soave-Redlich-Kwong auf Basis von binären Wechselwirkungsparametern modelliert

wird [WUNDERLICH 2018]. Die Berechnung der Dichte erfolgt nach PÉNELOUX ET AL. (1982), die Viskosität wird nach DAUBERT & DANNER (1997) ermittelt und die Oberflächenspannung wird nach WEINAUG & KATZ (1943) bestimmt.

In Abschnitt 4.8 wird erläutert, dass die Stabilität von gleichungsbasierten Lösungsverfahren durch die Regularisierung von Unstetigkeiten am Übergang zwischen abschnittsweise definierten Funktionen erhöht werden kann. Die Berechnung von Stoffdaten basiert auf abschnittsweise definierten Funktionen für bestimmte Bereiche des thermodynamischen Zustandsvektors (Zusammensetzung, Temperatur, Druck, Enthalpie). Insbesondere an Phasenwechseln treten daher Unstetigkeiten auf, welche in dieser Arbeit durch stetig differenzierbare Regularisierungen ersetzt werden. Als Schaltgröße der Regularisierungen wird unter anderem der generalisierte Dampfanteil

$$v_{\text{gen}} = \frac{h(z, p, T) - h'(z', p, T')}{h''(z'', p, T'') - h'(z', p, T')} \quad (5.12)$$

nach WUNDERLICH (2018) eingesetzt. h , T , p und z bezeichnen die spezifische Enthalpie, die Temperatur, den Druck sowie die Zusammensetzung des Prozessfluids. Die spezifische Enthalpie am Siede- bzw. Taupunkt wird durch h' bzw. h'' beschrieben. z' und z'' stehen für die Zusammensetzungen der gesättigten Flüssigkeit am Siedepunkt und des gesättigten Gases am Taupunkt. T'' steht für die Tautemperatur und T' repräsentiert die Siedetemperatur. Der generalisierte Dampfanteil nimmt für ein überhitztes Gas Werte größer Eins und für eine unterkühlte Flüssigkeit Werte kleiner Null an. Somit stellt der generalisierte im Gegensatz zum konventionellen Dampfanteil einen stetig differenzierbaren Funktionsverlauf über Tau- und Siedepunkt hinweg dar. Die Verwendung des generischen Dampfanteils unterliegt der Annahme, dass Tau- und Siedepunkte für einen thermodynamischen Zustandsvektor robust und physikalisch sinnvoll berechnet werden können. Diese Annahme ist nicht für alle thermodynamischen Zustände, z.B. überkritische Fluide, zulässig.

5.5 Modellierungsumgebung SMI@LE

Zukunftsfähige (dynamische) Simulationsmodelle zeichnen sich durch numerische Robustheit, effiziente Auswertbarkeit, gute Wartbarkeit, einfache Wiederverwendbarkeit und eine minimale Abhängigkeit von Fremdsoftware aus [KENDER ET AL. 2019]. Im Hinblick auf die Integration in digitale Zwillinge verfahrenstechnischer Anlagen sind Simulationsmodelle zudem in einer modernen Simulationsumgebung zu implementieren, die echtzeitfähige Schnittstellen für den bidirektionalen Datentransfer zwischen Modellen und Betriebsdatenbanken bereitstellt [KENDER ET AL. 2021]. Die auf C++ basierte, Linde-interne Modellierungsumgebung SMI@LE (Simulation Model Infrastructure at Linde Engineering) wurde unter diesen Gesichtspunkten entwickelt. Die rein objektorientierte Programmierung ermöglicht dabei die Entwicklung von modular-hierarchischen Simulationsmodellen, SMI@LE-Modellen. Mehrere SMI@LE-Modelle können zu Modulen, SMI@LE-Flowsheets, zusammengesetzt werden. Diese dienen zur

Modellierung komplexer Apparate oder ganzer Prozessanlagen. Auch die in dieser Arbeit vorgestellten Wärmeübertragermodelle sind als SMI@LE-Flowsheets implementiert, um die Charakteristika der Simulationsumgebung zu nutzen.

Das in Abb. 5.3 visualisierte SMI@LE-Konzept grenzt die Rollen von Modellierer, Softwareingenieur und Anwender gegeneinander ab. Der eigentliche SMI@LE-Kern wird von geschulten Softwareingenieuren verwaltet und enthält numerische Methoden wie Integrationsverfahren (vgl. Abschnitt 4.6), Gleichungslöser (vgl. Abschnitt 4.7) oder Optimierer. Beispiele dafür sind die parallelisierbaren Integrationsverfahren und Gleichungslöser der Programmbibliothek SUNDIALS [HINDMARSH ET AL. 2005]. Zudem sind der proprietäre BDF-Integrator OPTISIM[®] SOLVE2 und das Linde-interne angepasste Newton-Verfahren OPTISIM[®] SOLVE1 verfügbar [KRONSEDER 2003, WUNDERLICH 2018]. Auch die Programmbibliotheken ADOL-C [GRIEWANK ET AL. 1996], ADEPT [HOGAN 2014] und CppAD [BELL 2007] zur automatischen Differentiation mathematischer Zusammenhänge sind ein integraler Bestandteil, da eine akkurate, analytische Bestimmung der Jacobi-Matrix entscheidend für den Einsatz effizienter Lösungsverfahren ist. Matrixoperationen, z.B. für den in Abschnitt 4.10 beschriebenen Satz von der impliziten Funktion, werden durch die Programmbibliothek Eigen [JACOB & GUENNEBAUD o.D.] unterstützt. Der SMI@LE-Kern ermöglicht sowohl die konventionelle Prozesssimulation mit gerichteten Stromvektoren als auch die druckgetriebene Prozesssimulation nach THOMAS ET AL. (2020) (vgl. Abschnitt 5.3). Zudem ist eine Schnittstelle zum Linde-internen Stoffdatenpaket GMPS (vgl. Abschnitt 5.4) vorgesehen.

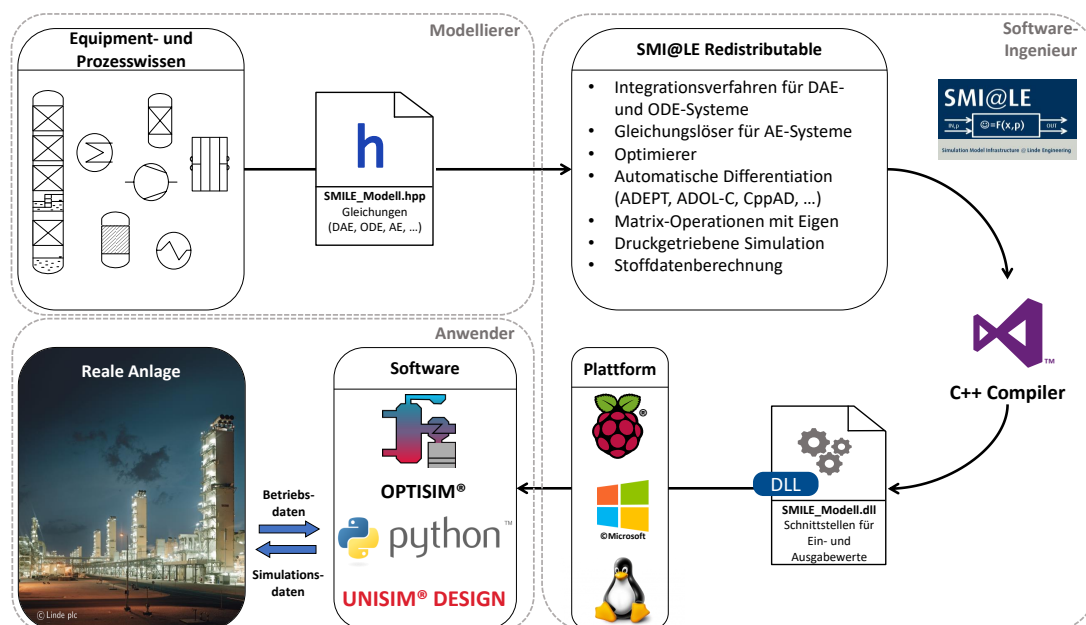


Abbildung 5.3: Modellierungsumgebung SMI@LE [KENDER ET AL. 2019]

Der Modellierer überführt das Expertenwissen über Apparate und verfahrenstechnische Prozesse in ein DAE-, ODE- oder AE-System (vgl. Abschnitt 4.5 bzw. Abschnitt 4.7)

in Form einer C++ Header-Datei (SMI@LE-Modell bzw. -Flowsheet). Um die Modellgleichungen in eine Programmbibliothek, z.B. eine Dynamic Link Library (DLL) auf einem Windows-Betriebssystem, zu konvertieren, wird den Modellierern und Anwendern sowohl ein C++ Compiler als auch eine Redistributable des SMI@LE-Kerns, welche ausschließlich relevante Schnittstellen exponiert, zur Verfügung gestellt. Die Redistributable unterstützt die Zielplattformen Windows und Linux für konventionelle Anwendungen sowie Einplatinencomputer, wie das Raspberry Pi, für Online-Applikationen.

Die Programmbibliothek eines SMI@LE-Modells oder -Flowsheets kann vom Anwender in verschiedenen Simulationsprogrammen eingesetzt werden. Der Linde-interne Prozesssimulator OPTISIM[®] nutzt simultane, gleichungsbasierte Lösungsverfahren (vgl. Abschnitt 4.7) zur stationären Auslegung und Optimierung sowie zur dynamischen Analyse von Lastwechseln oder Störfällen verfahrenstechnischer Prozesse [KRONSEDER 2003, WUNDERLICH 2018]. Zudem können SMI@LE-Modelle im kommerziellen Prozesssimulator UniSim[®] Design, der einen ableitungsfreien und sequentiellen Lösungsansatz verfolgt, eingebunden werden. Für Online-Anwendungen, wie die Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse in Echtzeit, steht eine innovative, Python[™]-basierte Simulationsinfrastruktur zur Verfügung, in welcher sowohl gleichungsbasierte als auch sequentielle Lösungsverfahren genutzt werden können. SMI@LE bietet dem Anwender zudem die Perspektive, echtzeitfähige Schnittstellen für den bidirektionalen Datentransfer zwischen diesen Simulationsprogrammen und Betriebsdatenbanken realer Anlagen zu nutzen.

6 Simulationsverfahren für Wärmeübertrager

In diesem Kapitel werden die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Simulationsverfahren zur stationären und dynamischen Simulation von Wärmeübertragern präsentiert. Dabei wird der Apparat eindimensional modelliert, indem die Hauptströmungsrichtung der Prozessströme aufgelöst wird. Dieser Ansatz erlaubt einerseits geringe Rechenzeiten und andererseits die Simulation in Auslegungsgenauigkeit, da die Geometrie akkurat abgebildet wird. Die grundlegenden Gleichungen resultieren aus den Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust (vgl. Abschnitt 3.1 und Abschnitt 3.2), der impliziten Druckbestimmung in Gleichung (5.9) und der Berechnung der Stoffmengenströme für den druckgetriebenen Simulationsansatz (vgl. Abschnitt 5.3) gemäß Gleichung (5.10). Zudem sind eindimensionale Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie Teil des Gleichungssystems. Diese werden in Abschnitt 6.1 aus den dreidimensionalen Bilanzgleichungen von Prozessströmen und Metallwärmekapazitäten (vgl. Abschnitt 5.1) abgeleitet.

Basierend auf den eindimensionalen Erhaltungsgleichungen werden im Folgenden Simulationsverfahren für Wärmeübertrager präsentiert. Dabei werden für verschiedene Anwendungsfälle gleichungsbasierte oder maßgeschneiderte Lösungsalgorithmen eingesetzt. Zunächst wird in Abschnitt 6.2 ein voll-dynamisches Modell mit größtmöglicher Modelltiefe hinsichtlich der in Form von ODEs dynamisch aufgelösten Teilgleichungen thematisiert, welches das gesamte Anwendungsspektrum eines Wärmeübertragers abdeckt und als integraler Bestandteil eines detaillierten dynamischen Anlagenmodells für die Anwendung in einem digitalen Zwilling einer verfahrenstechnischen Anlage dienen soll [KENDER ET AL. 2021]. Davon ausgehend wird die Modelltiefe durch vereinfachende Annahmen sukzessive reduziert, um adäquate Wärmeübertragermodelle für verschiedene Anwendungsfälle abzuleiten. In Abschnitt 6.3 wird ein dynamisches Modell mit quasi-stationär modellierten Prozessströmen vorgestellt, welches insbesondere für langsame Lastwechsel oder zur Simulation von Störfallszenarien in der Gasphase geeignet ist. Daraufhin wird die Modelltiefe weiter reduziert, um stationäre Simulationsmodelle für Wärmeübertrager bereitzustellen (vgl. Abschnitt 6.4). Abschließend wird in Abschnitt 6.5 beschrieben, wie die Simulationsverfahren zu einer modular-hierarchischen Simulationsumgebung für verschiedene Arten von Mehrstromwärmeübertragern zusammengefasst werden.

6.1 Eindimensionale Bilanzgleichungen

Die eindimensionale, differentielle Form der Massenerhaltung eines Prozessstroms i

$$\frac{\partial \varrho_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (\varrho_i v_i) \quad (6.1)$$

wird mit der skalaren Geschwindigkeit v_i des Fluids formuliert. Die partielle Ableitung $\frac{\partial}{\partial x}$ repräsentiert den Gradienten des Konvektionsterms, wobei x für die Koordinate der aufgelösten Raumrichtung steht.

Für einen eindimensionalen Prozessstroms i entspricht die skalare Gleichung

$$\frac{\partial \varrho_i v_i}{\partial t} = -\frac{\partial p_i}{\partial x} - \frac{\partial (\varrho_i v_i^2)}{\partial x} + \frac{\partial \tau_i}{\partial x} + \varrho_i g \quad (6.2)$$

der konservativen Form der differentiellen Impulserhaltung. Die skalare Gravitationskonstante g ist nur bei vertikaler Ausrichtung eines Wärmeübertragers relevant. Der Gradient des relevanten Beitrags τ_i des Spannungstensors beschreibt die Reibungseinflüsse. Wird die Annahme getroffen, dass die Impulsdynamik in einem Wärmeübertrager deutlich schneller abläuft als die Massen- und Energiedynamik, kann die linke Seite der Gleichung (6.2) gleich Null gesetzt werden [SASS & MITSOS 2019]. Es resultiert

$$\frac{\partial p_i}{\partial x} = -\frac{\partial (\rho_i v_i^2)}{\partial x} + \frac{\partial \tau_i}{\partial x} + \rho_i g \quad (6.3)$$

als quasi-stationäre Impulsbilanz. Gleichung (6.3) kann als Druckverlustbeziehung

$$\Delta p = \Delta p_B + \Delta p_R + \Delta p_G \quad (6.4)$$

formuliert werden. Der Gesamtdruckverlust Δp setzt sich aus den Anteilen von Beschleunigungsdruckverlust Δp_B , Reibungsdruckverlust Δp_R und Gravitationsdruckverlust Δp_G zusammen. Für Wärmeübertrager ist der Beschleunigungsdruckverlust im Vergleich zu den anderen Beiträgen vernachlässigbar [NIROOMAND ET AL. 2019]. Der Reibungsdruckverlust kann als Produkt einer Funktion $f(\dot{N})$, die vom Stoffmengenstrom \dot{N} abhängt, und dem Stoffmengenstrom formuliert werden. Die resultierende Beziehung

$$\Delta p = \Delta p_R + \Delta p_G = f(\dot{N}) \cdot \dot{N} + \Delta p_G \quad (6.5)$$

stellt eine Analogie zum quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhang (5.10) des druckgetriebenen Simulationsansatzes nach THOMAS ET AL. (2020) dar. Der Widerstandsbeiwert C nimmt für den Anwendungsfall eines Wärmeübertragers den Wert Eins an, der Widerstandsbeiwert R wird durch die Funktion $f(\dot{N})$ wiedergegeben. Der Gravitationsdruckverlust Δp_G wird als Beitrag zur treibenden Druckdifferenz interpretiert.

Der eindimensionale Zusammenhang

$$\frac{\partial \rho_i u_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (\rho_i h_i v_i) + \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{q}_{\alpha,i,s}) \quad (6.6)$$

repräsentiert die differentielle Form der Energieerhaltung des Prozessstroms i . Die Summe $\sum_{s=1}^{S_i} (\dot{q}_{\alpha,i,s})$ entspricht allen Beiträgen des konvektiven Wärmeübergangs zwischen dem Prozessstrom i und allen mit diesem in Kontakt stehenden Metallwärmekapazitäten S_i . $\dot{q}_{\alpha,i,s}$ steht für die übertragene Wärmemenge.

Für eine eindimensionale Metallwärmekapazität s entspricht der Zusammenhang

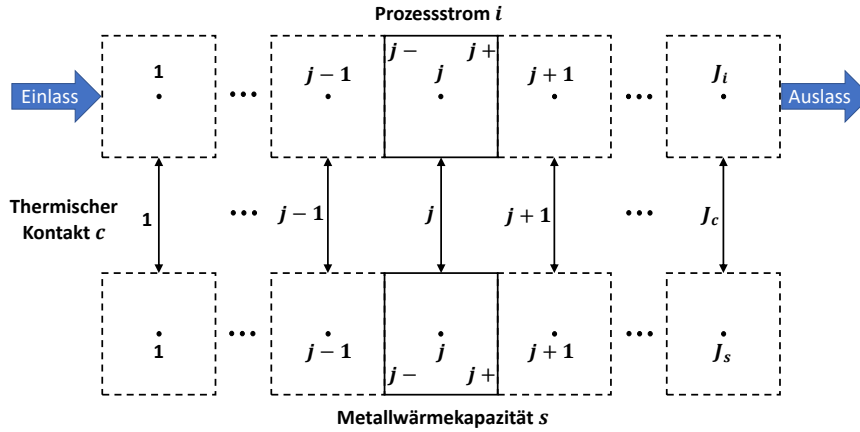
$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) - \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{q}_{\alpha,i,s}) \quad (6.7)$$

der differentiiellen Form der Energiebilanz. Die Summe $\sum_{i=1}^{I_s} (\dot{q}_{\alpha,i,s})$ ergibt sich aus allen Beiträgen des konvektiven Wärmeübergangs zwischen der Metallwärmekapazität s und allen mit dieser in Kontakt stehenden Prozessströmen I_s .

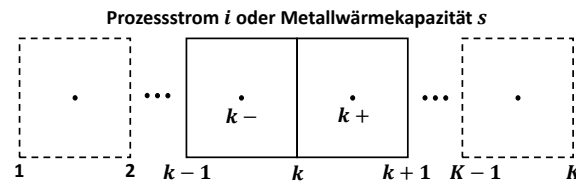
6.2 Dynamik mit Fluid-Massen- und -Energie-Holdup

Die größte Modelltiefe der Simulationsverfahren wird erreicht, indem alle Zeitkonstanten der Erhaltungsgleichungen in Gleichungen (6.1), (6.6) und (6.7) für Masse und Energie aufgelöst werden. Die Impulserhaltung der Prozessströme wird hingegen als quasi-stationär angenommen (vgl. Gleichung (6.3)), um Kompatibilität mit dem druckgetriebenen Simulationsansatz nach THOMAS ET AL. (2020) sicherzustellen. Die Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen auf dem eindimensionalen Berechnungsgebiet erfolgt mit der FV-Methode. Abb. 6.1 visualisiert exemplarisch die Diskretisierung eines Prozessstroms i , der mit einer Metallwärmekapazität s in thermischem Kontakt (Index c) steht.

Abb. 6.1a veranschaulicht die Indexnotation zur Beschreibung von Gleichungen, die am Mittelpunkt eines FV j mit den Seitenflächen $j-$ und $j+$ ausgewertet werden. Die benachbarten FV werden mit den Indizes $j-1$ und $j+1$ beschrieben. Der Prozessstrom i verfügt über J_i und die Metallwärmekapazität s über J_s FV. Der thermische Kontakt c ist in J_c FV aktiv. Im Allgemeinen stehen nicht alle Prozessströme und Metallwärmekapazitäten auf dem gesamten Berechnungsgebiet miteinander in thermischem Kontakt, sodass $J_i \neq J_s \neq J_c$ gelten kann. Abb. 6.1b visualisiert die Indexnotation zur Beschreibung von Gleichungen, die auf einer Seitenfläche k eines FV ausgewertet werden. Die benachbarten FV werden mit den Indizes $k-$ und $k+$ referenziert, die benachbarten Seitenflächen mit $k-1$ und $k+1$. Für die Anzahl an Seitenflächen gilt $K = J + 1$.



(a) Indexnotation für die Mittelpunkte der finiten Volumes



(b) Indexnotation für die Seitenflächen der finiten Volumes

Abbildung 6.1: Diskretisierung des Berechnungsgebiets eines Wärmeübertragers

Die FV-Diskretisierung resultiert in der integralen Form

$$\frac{\partial N_{i,j}}{\partial t} = \dot{N}_{i,j-} - \dot{N}_{i,j+} \quad (6.8)$$

der Massenerhaltung für ein FV j eines Prozessstroms i . Die Stoffmenge $N_{i,j}$ ist die Erhaltungsgröße. Die Stoffmengenströme $\dot{N}_{i,j-}$ und $\dot{N}_{i,j+}$ stellen die konvektiven Flüsse dar. Diese werden mit dem generischen, quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhang in Gleichung (5.10) bestimmt, welcher der integralen, diskretisierten Impulsbilanz in Gleichung (6.5) entspricht.

Die Diskretisierung liefert zudem die integrale Form

$$\frac{\partial U_{i,j}}{\partial t} = \dot{H}_{i,j-} - \dot{H}_{i,j+} + \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \quad (6.9)$$

der Energiebilanz für ein FV j eines Prozessstroms i . Die zeitliche Änderung der inneren Energie $U_{i,j}$ entspricht den konvektiven Enthalpieströmen $\dot{H}_{i,j-}$ und $\dot{H}_{i,j+}$ über die Seitenflächen sowie der Summe aller Beiträge $\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}$ infolge des konvektiven Wärmeübergangs zwischen dem Prozessstrom i und allen in thermischem Kontakt stehenden Metallwärmekapazitäten S_i .

Die FV-diskretisierte Form der Energieerhaltung einer Metallwärmekapazität s

$$\frac{\partial T_{s,j}}{\partial t} = \frac{1}{\rho_{s,j} c_{s,j}} \cdot \left(\dot{Q}_{\lambda,s,j-} - \dot{Q}_{\lambda,s,j+} - \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad (6.10)$$

berücksichtigt im FV j den Wärmestrom $\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}$. Dieser Wärmestrom wird dem angrenzenden FV des Prozessstroms i aufgrund des konvektiven Wärmeübergangs entzogen. $\dot{Q}_{\lambda,s,j-}$ und $\dot{Q}_{\lambda,s,j+}$ entsprechen den diffusiven Flüssen über die Seitenflächen infolge der Wärmeleitung. Die Linearisierung der diffusiven Flüsse liefert

$$\dot{Q}_{\lambda,s,k} = A_{\lambda,k} (\lambda_{s,k+} + \lambda_{s,k-}) \frac{T_{s,k+} - T_{s,k-}}{dx_{k+} + dx_{k-}} \quad (6.11)$$

für die Seitenfläche k . Dabei entspricht A_{λ} dem wärmeleitenden Querschnitt und dx der Länge eines eindimensionalen FV.

6.2.1 Integration als System differentiell-algebraischer Gleichungen

Aus der FV-Diskretisierung der Grundgleichungen für die Dynamik von Wärmeübertragern unter Berücksichtigung von Fluid-Massen- und -Energie-Holdup resultiert ein DAE-System, das gleichungsbasiert mit einem Integrationsverfahren (vgl. Abschnitt 4.6) gelöst werden kann. Eine kompakte Darstellung des DAE-Systems ist durch die Gleichungen (6.12) bis (6.20) gegeben. Die kompakte Notation wird im verbleibenden Teil dieser Arbeit wiederholt herangezogen, um Vereinfachungen des Gleichungssystems zur Reduktion der Modelltiefe abzuleiten.

$$\frac{\partial T_{s,j}}{\partial t} = f_T \left(T_{s,j-1}, T_{s,j}, T_{s,j+1}, \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall s \in S, \quad \forall j \in J_s \quad (6.12)$$

$$\frac{\partial N_{i,j}}{\partial t} = f_{N,i} (\dot{N}_{j-}, \dot{N}_{j+}) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.13)$$

$$\frac{\partial U_{i,j}}{\partial t} = f_U \left(\dot{H}_{i,j-}, \dot{H}_{i,j+}, \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.14)$$

$$0 = f_{p,i} (p_j, U_j, N_j) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.15)$$

$$0 = f_{\dot{Q}} (\dot{Q}_{\alpha,c,j}, T_{s,j}, N_{i,j}, U_{i,j}, p_{i,j}) \quad \forall c \in C, \quad \forall j \in J_c \quad (6.16)$$

$$0 = f_{R,i} (R_k, p_{k-}, p_{k+}, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}, \dot{N}_k) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.17)$$

$$0 = f_{\Delta p,i} (\Delta p_{G,k}, p_{k-}, p_{k+}, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.18)$$

$$0 = f_{\dot{N},i} (\dot{N}_k, p_{k-}, p_{k+}, R_k, \Delta p_{G,k}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.19)$$

$$0 = f_{\dot{H},i} (\dot{H}_k, p_{k-}, p_{k+}, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}, \dot{N}_k) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.20)$$

Die differentielle Gleichung (6.12) repräsentiert die Energiebilanz der Metallwärmekapazitäten. Die zeitliche Änderung der Metalltemperatur $T_{s,j}$ entspricht der rechten Seite f_T , welche die Metalltemperaturen der FV $j - 1$, j und $j + 1$ berücksichtigt. Zudem geht die Summe aller Wärmeströme $\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}$ aufgrund des konvektiven Wärmeübergangs zwischen der Metallwärmekapazität s und allen I_s in thermischem Kontakt stehenden Prozessströmen in die Berechnung ein. Die Gleichung ist für alle J_s FV der S Metallwärmekapazitäten auszuwerten.

Gleichung (6.13) beschreibt die Massenerhaltung der Prozessströme. Die differentielle rechte Seite $f_{N,i}$ entspricht der zeitlichen Änderung der gespeicherten Stoffmenge $N_{i,j}$. Die Funktion hängt von den Stoffmengenströmen $\dot{N}_{i,j-}$ und $\dot{N}_{i,j+}$ über die Seitenflächen des FV j ab. Die Massenerhaltung ist für alle J_i FV aller I Prozessströme auszuwerten.

Die zeitliche Änderung der inneren Energie $U_{i,j}$ wird durch die differentielle Gleichung (6.14) beschrieben und entspricht der rechten Seite f_U , die von den Enthalpieströmen $\dot{H}_{i,j-}$ und $\dot{H}_{i,j+}$ abhängt. Zudem geht die Summe aller Wärmeströme $\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}$ infolge des konvektiven Wärmeübergangs in die Berechnung ein. Die Energiebilanz ist für alle J_i FV aller I Prozessströme zu berücksichtigen.

Die algebraische Gleichung (6.15) beschreibt die implizite Druckbestimmung nach Gleichung (5.9) im FV j des Prozessstroms i . Der Druck $p_{i,j}$ wird mit der rechten Seite $f_{p,i}$ ermittelt, die von der inneren Energie $U_{i,j}$ und der Stoffmenge $N_{i,j}$ abhängt. Die implizite Druckbestimmung wird für alle J_i FV aller I Prozessströme durchgeführt und basiert auf einem Abgleich der thermodynamischen und geometrischen Volumen mit Hilfe des Stoffdatenprogramms GMPS. An Phasenwechseln treten Knickunstetigkeiten auf, da zwischen verschiedenen Berechnungsmethoden für das thermodynamische Volumen umgeschaltet wird. Daher werden Regularisierungen (vgl. Abschnitt 4.8) mit dem generalisierten Dampfanteil (vgl. Abschnitt 5.4) als Schaltgröße eingesetzt.

Der übertragene Wärmestrom $\dot{Q}_{\alpha,c,j}$ im FV j des thermischen Kontakts c ergibt sich gemäß der algebraischen Gleichung (6.16) aus der rechten Seite $f_{\dot{Q}}$, welche die Metalltemperatur $T_{s,j}$ mit der inneren Energie $U_{i,j}$, der Stoffmenge $N_{i,j}$ und dem Druck $p_{i,j}$ des Prozessstroms i korreliert. Die Gleichung wird für alle J_c FV aller C thermischen Kontakte formuliert. $f_{\dot{Q}}$ beinhaltet die Auslegungskorrelationen für den Wärmeübergang (vgl. Abschnitt 3.1). Mit adäquaten Regularisierungen (vgl. Abschnitt 4.8) an Phasenwechseln und am Übergang zwischen verschiedenen Korrelationsmethoden wird das Gleichungssystem stabilisiert.

Die algebraische rechte Seite $f_{R,i}$ in Gleichung (6.17) ermöglicht die Bestimmung des Widerstandsbeiwerts $R_{i,k}$ für den Druck-Strom-Zusammenhang in Gleichung (5.10) an der Seitenfläche k des Prozessstroms i . Dabei fließen die Drücke $p_{i,k-}$ und $p_{i,k+}$, die gespeicherten Stoffmengen $N_{i,k-}$ und $N_{i,k+}$ sowie die inneren Energien $U_{i,k-}$ und $U_{i,k+}$ der benachbarten FV in die Berechnung ein. Zudem hängt die rechte Seite vom Stoffmengenstrom $\dot{N}_{i,k}$ über die Seitenfläche ab und berücksichtigt die Auslegungskorrelationen für den Druckverlust (vgl. Abschnitt 3.2). Erneut kommen Regularisierungen (vgl. Abschnitt 4.8) an Phasenwechseln und am Übergang zwischen verschiedenen Korrelationsmethoden zur Stabilisierung des Gleichungssystems zum Einsatz.

Der Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,k}$ wird aus der rechten Seite $f_{\Delta p,i}$ der algebraischen Gleichung (6.18) bestimmt, welche über die Berechnung der Dichte von den Drücken $p_{i,k-}$ und $p_{i,k+}$, Stoffmengen $N_{i,k-}$ und $N_{i,k+}$ sowie inneren Energien $U_{i,k-}$ und $U_{i,k+}$ der benachbarten FV abhängt. Die Methoden zur Dichteberechnung erfordern adäquate Regularisierungen (vgl. Abschnitt 4.8) an Phasenwechseln.

Die algebraische Gleichung (6.19) mit der rechten Seite $f_{\dot{N},i}$ beschreibt die Bestimmung des Stoffmengenstroms $\dot{N}_{i,k}$ über die Seitenfläche k des Prozessstroms i gemäß des

quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhangs in Gleichung (5.10). Einflussgrößen sind die Drücke $p_{i,k-}$ und $p_{i,k+}$ der angrenzenden FV und der Widerstandsbeiwert $R_{i,k}$ sowie der Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i,k}$. Somit sind die algebraischen Gleichungen (6.17) bis (6.19) gekoppelt und werden für alle K_i Seitenflächen aller I Prozessströme ausgewertet.

Der Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,k}$ über die Seitenfläche k des Prozessstroms i wird in Gleichung (6.20) durch die rechte Seite $f_{\dot{H},i}$ ausgedrückt. Die Gleichung ist für alle K_i Seitenflächen aller I Prozessströme auszuwerten. Einflussgrößen sind die Stoffmengen $N_{i,k-}$ und $N_{i,k+}$, die Drücke $p_{i,k-}$ und $p_{i,k+}$, die inneren Energien $U_{i,k-}$ und $U_{i,k+}$ sowie der Stoffmengenstrom $\dot{N}_{i,k}$.

6.2.2 Integration als System gewöhnlicher Differentialgleichungen

Ein DAE-System kann in ein ODE-System umgeformt werden, indem alle algebraischen Gleichungen gelöst und die resultierenden expliziten Ausdrücke für die algebraischen Variablen in die differentielle rechte Seite eingesetzt werden (vgl. Abschnitt 4.5). In diesem Abschnitt wird das DAE-System aus Abschnitt 6.2.1 in ein ODE-System überführt.

Die implizite Druckbestimmung in Gleichung (6.15) basiert auf dem Abgleich von thermodynamischem und geometrischem Volumen des Prozessfluids. Das thermodynamische Volumen wird mit GMPS als Funktion von Druck $p_{i,j}$, Stoffmenge $N_{i,j}$ und innerer Energie $U_{i,j}$ bestimmt. Zu jedem Zeitpunkt einer dynamischen Simulation liefert das Integrationsverfahren die differentiellen Variablen $N_{i,j}$ und $U_{i,j}$. Somit ist der Druck $p_{i,j}$ die einzige algebraische Variable. Allerdings liegt eine hinsichtlich des Drucks implizite, algebraische Gleichung vor, sodass der Druck ausschließlich durch einen Gleichungslöser bestimmt werden kann. In dieser Arbeit wird das Regula-Falsi-Verfahren (vgl. Abschnitt 4.7.5) eingesetzt, das für den Druck den expliziten Zusammenhang

$$p_{i,j} \leftarrow f'_{p,i}(U_j, N_j) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.21)$$

liefert. Die relevanten Ableitungszusammenhänge zwischen Druck, innerer Energie und Stoffmenge werden durch implizite Differentiation ermittelt (vgl. Abschnitt 4.10).

Die algebraische Gleichung (6.16) für den konvektiven Wärmeübergang kann bei bekanntem Druck $p_{i,j}$ als explizite Funktionsauswertung

$$\dot{Q}_{\alpha,c,j} \leftarrow f'_{\dot{Q}}(T_{s,j}, N_{i,j}, U_{i,j}, p_{i,j}) \quad \forall c \in C, \quad \forall j \in J_c \quad (6.22)$$

interpretiert werden. Falls die Wärmeübergangskorrelationen eine implizite Kopplung von Metalltemperatur, thermodynamischem Zustand des Fluids und Wärmestrom beinhalten, sind ein Gleichungslöser (vgl. Abschnitt 4.7) sowie die implizite Differentiation zur Bestimmung der relevanten Ableitungen (vgl. Abschnitt 4.10) anzuwenden.

Die algebraischen Variablen Stoffmengenstrom $\dot{N}_{i,k}$, Widerstandsbeiwert $R_{i,k}$ und Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i,k}$ an der Seitenfläche k des Prozessstroms i sind durch die

impliziten und gekoppelten Gleichungen (6.17), (6.18) und (6.19) definiert. Zur Lösung und expliziten Darstellung dieses Teilgleichungssystems kann z.B. eine Fixpunktiteration (vgl. Abschnitt 4.7.1) als Gleichungslöser eingesetzt werden. Die relevanten Ableitungszusammenhänge sind mit impliziter Differentiation zu bestimmen (vgl. Abschnitt 4.10). Die folgenden expliziten Zusammenhänge entsprechen der Lösung des Teilgleichungssystems in Abhängigkeit von Druck, Stoffmenge und innerer Energie der FV $k-$ und $k+$:

$$R_{i,k} \leftarrow f'_{R,i}(p_{k-}, p_{k+}, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.23)$$

$$\Delta p_{G,i,k} \leftarrow f'_{\Delta p,i}(p_{k-}, p_{k+}, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.24)$$

$$\dot{N}_{i,k} \leftarrow f'_{\dot{N},i}(p_{k-}, p_{k+}, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.25)$$

Um die numerische Komplexität zu reduzieren und einen unterlagerten Gleichungslöser zu vermeiden, können $R_{i,k}$ und $\Delta p_{G,i,k}$ alternativ mit einem durch ein PT1-Glied verzögerten Stoffmengenstrom $\dot{N}_{i,k}^*$ bestimmt werden:

$$\frac{\partial \dot{N}_{i,k}^*}{\partial t} = \frac{1}{\tau_{\dot{N}}} (\dot{N}_{i,k} - \dot{N}_{i,k}^*) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.26)$$

$$R_{i,k} \leftarrow f'_{R,i}(p_{k-}, p_{k+}, \dot{N}_{i,k}^*, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.27)$$

$$\Delta p_{G,i,k} \leftarrow f'_{\Delta p,i}(p_{k-}, p_{k+}, \dot{N}_{i,k}^*, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.28)$$

Diese Alternative wird für die Berechnungen in dieser Arbeit genutzt. Dabei gehen neben den bereits iterativ bestimmten Drücken p_{k-} und p_{k+} ausschließlich die differentiellen Variablen $\dot{N}_{i,k}^*$, N_{k-} , N_{k+} , U_{k-} sowie U_{k+} in die Berechnung ein. Mit Hilfe des Gravitationsdruckverlusts $\Delta p_{G,i,k}$ und des Widerstandsbeiwerts $R_{i,k}$ folgt in diesem Fall explizit der Stoffmengenstrom aus dem quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhang:

$$\dot{N}_{i,k} \leftarrow f'_{\dot{N},i}(p_{k-}, p_{k+}, R_{i,k}, \Delta p_{G,i,k}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.29)$$

Aus dem expliziten Zusammenhang für den Stoffmengenstrom $\dot{N}_{i,k}$ in Gleichung (6.29) resultiert

$$\dot{H}_{i,k} \leftarrow f'_{\dot{H},i}(p_{k-}, p_{k+}, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}, \dot{N}_{i,k}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.30)$$

als explizite Berechnungsvorschrift für den Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,k}$. Somit können die algebraischen Gleichungen (6.15) bis (6.20) durch die expliziten Berechnungsvorschriften in Gleichungen (6.21) und (6.22) sowie (6.27) bis (6.30) sowie die differentielle Gleichung (6.26) ersetzt werden.

Das resultierende ODE-System lautet kompakt:

$$\frac{\partial T_{s,j}}{\partial t} = f_T \left(T_{s,j-1}, T_{s,j}, T_{s,j+1}, \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall s \in S, \quad \forall j \in J_s \quad (6.31)$$

$$\frac{\partial N_{i,j}}{\partial t} = f_{N,i} (\dot{N}_{j-}, \dot{N}_{j+}) \quad \forall i \in I, \forall j \in J_i \quad (6.32)$$

$$\frac{\partial U_{i,j}}{\partial t} = f_U \left(\dot{H}_{i,j-}, \dot{H}_{i,j+}, \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.33)$$

$$\frac{\partial \dot{N}_{i,k}^*}{\partial t} = f_{\dot{N}^*} = \frac{1}{\tau_{\dot{N}}} (\dot{N}_{i,k} - \dot{N}_{i,k}^*) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.34)$$

$$p_{i,j} \leftarrow f'_{p,i} (U_j, N_j) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.35)$$

$$\dot{Q}_{\alpha,c,j} \leftarrow f'_{\dot{Q}} (T_{s,j}, N_{i,j}, U_{i,j}, p_{i,j}) \quad \forall c \in C, \quad \forall j \in J_c \quad (6.36)$$

$$R_{i,k} \leftarrow f'_{R,i} (p_{k-}, p_{k+}, \dot{N}_k^*, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.37)$$

$$\Delta p_{G,i,k} \leftarrow f'_{\Delta p,i} (p_{k-}, p_{k+}, \dot{N}_k^*, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.38)$$

$$\dot{N}_{i,k} \leftarrow f'_{\dot{N},i} (p_{k-}, p_{k+}, R_k, \Delta p_{G,i,k}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.39)$$

$$\dot{H}_{i,k} \leftarrow f'_{\dot{H},i} (p_{k-}, p_{k+}, N_{k-}, N_{k+}, U_{k-}, U_{k+}, \dot{N}_k) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.40)$$

Die Integration des ODE-Systems in den Gleichungen (6.31) bis (6.40) entspricht einem maßgeschneiderten Lösungsalgorithmus (vgl. Abschnitt 4.9), da implizite, algebraische Teilgleichungssysteme durch Gleichungslöser gelöst, explizit formuliert und als Bestandteil der differentiellen rechten Seiten eines übergeordneten Integrationsverfahrens genutzt werden. In Abb. 6.2 ist dieser maßgeschneiderte Algorithmus visualisiert.

Mit einem Integrationsverfahren (vgl. Abschnitt 4.6) wird das ODE-System von $t = t_0$ bis $t = t_{\text{final}}$ integriert. Bei $t = t_0$ sind konsistente Initialwerte für die differentiellen Variablen $T_{s,j}$, $N_{i,j}$, $U_{i,j}$ und $\dot{N}_{i,k}^*$ vorzugeben. Das Integrationsverfahren erfordert zu ausgewählten Zeitpunkten $t = t^*$ die Auswertung der differentiellen rechten Seiten f_T , $f_{N,i}$, f_U und $f_{\dot{N}^*}$ für den aktuellen Wert der differentiellen Variablen. In einem ersten Schritt wird eine Schleife über alle J_i FV aller I Prozessströme durchlaufen, um mit einem unterlagerten Gleichungslöser den Druck $p_{i,j}$ zu bestimmen. Anschließend werden für alle K_i Seitenflächen der I Prozessströme Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i,k}$, Widerstandsbeiwert $R_{i,k}$, Stoffmengenstrom $\dot{N}_{i,k}$ und Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,k}$ mit Hilfe des PT1-verzögerten Stoffmengenstroms $\dot{N}_{i,k}^*$ und des quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhangs in Gleichung (5.10) bestimmt. In einer weiteren Schleife über alle J_c FV aller C thermischen Kontakte wird der infolge des konvektiven Wärmeübergangs übertragene Wärmestrom $\dot{Q}_{\alpha,c,j}$ explizit ausgewertet. Es folgen zwei zusätzliche Schleifen über alle J_s FV aller S Metallwärmekapazitäten und alle J_i FV aller I Prozessströme. Dabei werden die differentiellen rechten Seiten f_T , $f_{N,i}$, f_U und $f_{\dot{N}^*}$ ausgewertet.

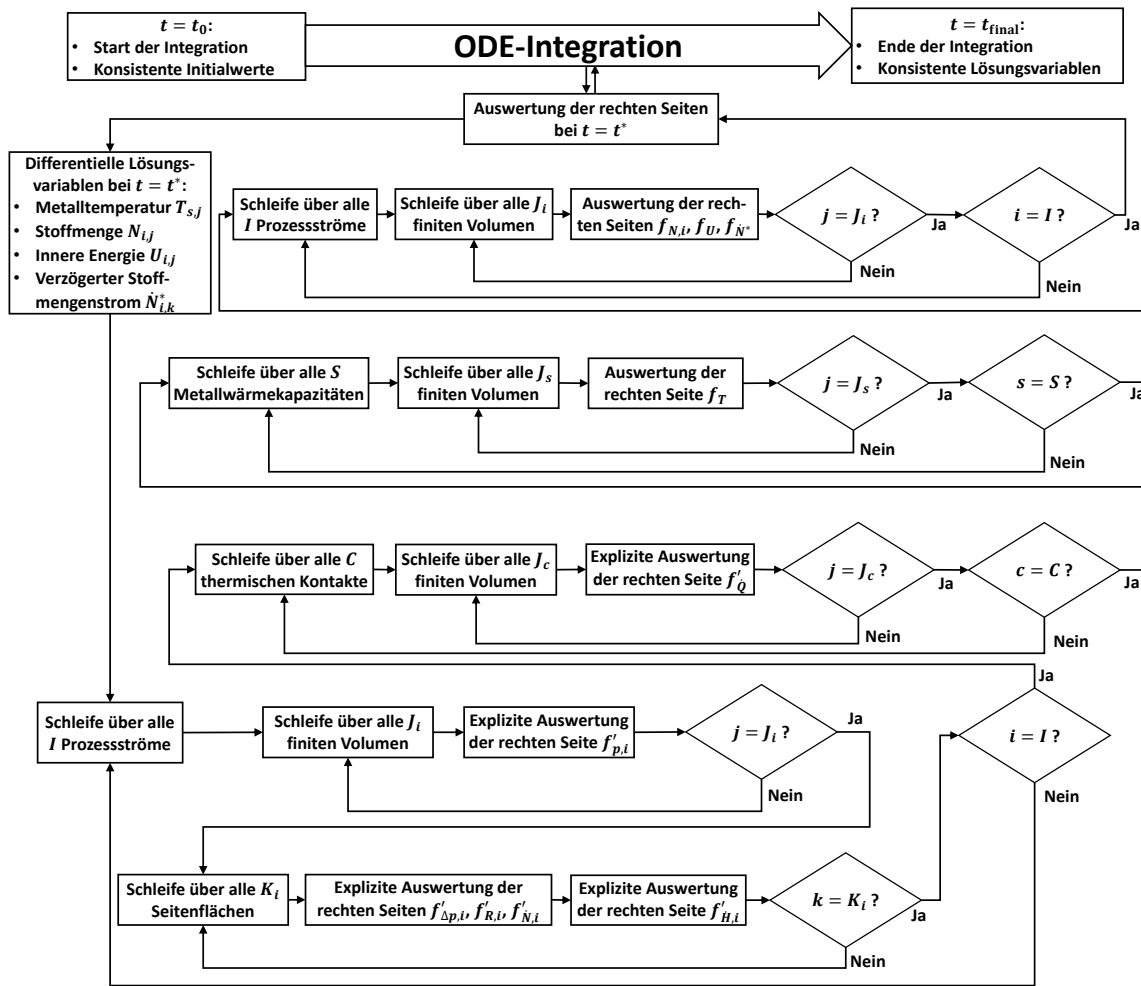


Abbildung 6.2: Integration eines Wärmeübertragers mit Fluid-Massen- und -Energie-Holdup als System gewöhnlicher Differentialgleichungen

6.3 Dynamik mit quasi-stationären Prozessströmen

Die in Abschnitt 6.2 vorgestellten dynamischen Simulationsverfahren verfügen über die größtmögliche Modelltiefe für die eindimensionale Betrachtung von Wärmeüberträgern und sind im Hinblick auf die Anwendung in digitalen Zwillingen verfahrenstechnischer Anlagen entwickelt. Alle Massen- und Energiebilanzen werden dynamisch in Form von ODEs aufgelöst. Lediglich die Impulsbilanz der Prozessströme wird quasi-stationär angenommen. In diesem Abschnitt wird eine Reduktion der Modelltiefe vorgenommen. Die Massen- und Energiebilanzen der Prozessströme werden quasi-stationär betrachtet, sodass die transiente Antwort des Wärmeübertragers ausschließlich durch die dynamisch aufgelösten Energiebilanzen der Metallwärmekapazitäten beschrieben wird. Es wird somit davon ausgegangen, dass die Massen- und Energiedynamik der Prozessströme deutlich schneller abläuft als die Energiedynamik der Metallwärmekapazitäten. Diese Annahme ist insbesondere für langsame Lastwechsel von Wärmeüberträgern gerechtfertigt, da der Energietransport mit der Strömung und der konvektive Wärmeübergang die Energiebilanz der Prozessströme dominieren. Auch für Anwendungen mit ausschließlich

gasförmigen Fluiden ist diese Modelltiefe hinreichend, da die Energiespeicherkapazität der Prozessströme gegenüber den Metallwärmekapazitäten vernachlässigbar ist.

6.3.1 Integration als System differentiell-algebraischer Gleichungen

Zunächst wird der gleichungsbasierte Ansatz der Integration eines DAE-Systems verfolgt, der von den Gleichungen (6.12) bis (6.20) abgeleitet wird. Der Zusammenhang

$$0 = \dot{N}_{i,j-} - \dot{N}_{i,j+} \quad (6.41)$$

entspricht der quasi-stationären, integralen Form der Massenerhaltung für ein FV j eines Prozessstroms i . Die Summe der Stoffmengenströme $\dot{N}_{i,j-}$ und $\dot{N}_{i,j+}$ nimmt den Nullwert an. Somit ist der Stoffmengenstrom \dot{N}_i an jeder Position entlang des Prozessstroms gleich und die differentielle Gleichung (6.13) entfällt.

Die quasi-stationäre Energiebilanz für ein FV j eines Prozessstroms i lautet:

$$0 = \dot{H}_{i,j-} - \dot{H}_{i,j+} + \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}). \quad (6.42)$$

Die Differenz der Enthalpieströme $\dot{H}_{i,j-}$ und $\dot{H}_{i,j+}$ entspricht der Summe aller Beiträge $\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}$ infolge des konvektiven Wärmeübergangs. Die quasi-stationäre Energiebilanz ersetzt die differentielle Gleichung (6.14).

Die Druckbestimmung nach Gleichung (6.15) auf Basis des Massen- und Energie-Holdups eines Prozessstroms entfällt aufgrund der quasi-stationären Massen- und Energiebilanzen. Der Druck $p_{i,k}$ wird alternativ mit der quasi-stationären Impulsbilanz

$$0 = p_{i,k-1} - p_{i,k} + \Delta p_{G,i,k-} + R_{i,k-} \dot{N}_i \quad (6.43)$$

auf allen Seitenflächen k berechnet. Dabei gehen das Druckniveau $p_{i,k-1}$ an der stromauf gelegenen Seitenfläche $k-1$ sowie der Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i,k-}$ und das Produkt $R_{i,k-} \dot{N}_i$ aus Widerstandsbeiwert und Stoffmengenstrom im stromauf gelegenen FV $k-$ in die Berechnung ein.

Auch die Berechnung des konvektiven Wärmeübergangs in einem FV j nach der algebraischen Gleichung (6.16) ist infolge der quasi-stationär angenommenen Massen- und Energiebilanzen der Prozessströme zu modifizieren. Die im FV gespeicherte innere Energie und Stoffmenge sowie der im FV herrschende Druck können nicht mehr als Berechnungsgrundlage herangezogen werden. Stattdessen stehen die Drücke $p_{i,j-}$ und $p_{i,j+}$ sowie die Enthalpieströme $\dot{H}_{i,j-}$ und $\dot{H}_{i,j+}$ an den Seitenflächen $j-$ und $j+$ zur Verfügung. Zudem fließt der für alle Positionen entlang eines Prozessstroms gleiche Stoffmengenstrom \dot{N}_i ein. Der übertragene Wärmestrom $\dot{Q}_{\alpha,c,j}$ folgt somit aus einer algebraischen Gleichung der Form

$$0 = g_{\dot{Q}}(\dot{Q}_{\alpha,c,j}, T_{s,j}, \dot{N}_i, \dot{H}_{i,j-}, \dot{H}_{i,j+}, p_{i,j-}, p_{i,j+}). \quad (6.44)$$

Werden nur Druck und Enthalpiestrom der stromauf gelegenen Seitenfläche $j-$ herangezogen, liegt eine explizite räumliche Diskretisierung vor, welche – wie auch eine zentrale Differenz – zu unphysikalischen Temperaturüberschwingern (dispersiver Fehler) führen kann. Daher wird in dieser Arbeit bevorzugt eine implizite örtliche Diskretisierung eingesetzt, die auf Druck und Enthalpiestrom der stromab gelegenen Seitenfläche $j+$ basiert und ein physikalisches Lösungsverhalten aufweist (dissipativer Fehler).

Der Stoffmengenstrom \dot{N}_i kann als Randbedingung vorgegeben werden, was konventionellen Ansätzen der Prozesssimulation entspricht. Somit entfällt die algebraische Gleichung (6.19) zur Bestimmung des Stoffmengenstroms. Durch die algebraischen Gleichungen (6.17) und (6.18) werden die für eine Seitenfläche k relevanten Größen des Widerstandsbeiwerts und des Gravitationsdruckverlusts auf Basis von Druck, innerer Energie und Stoffmengeninhalt der benachbarten FV $k-$ und $k+$ bestimmt. Für eine quasi-stationäre Betrachtung der Prozessströme werden Widerstandsbeiwert $R_{i,j}$ und Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i,j}$ hingegen wie folgt für jedes FV j ausgewertet:

$$0 = g_{R,i} \left(R_j, p_{j-}, p_{j+}, \dot{H}_{j-}, \dot{H}_{j+}, \dot{N} \right), \quad (6.45)$$

$$0 = g_{\Delta p,i} \left(\Delta p_{G,j}, p_{j-}, p_{j+}, \dot{H}_{j-}, \dot{H}_{j+}, \dot{N} \right). \quad (6.46)$$

Alternativ wird der Stoffmengenstrom \dot{N}_i bei der druckgetriebenen Simulation durch den quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhang in Gleichung (5.10) bestimmt. In diesem Fall ist die algebraische Gleichung (6.19) integral für einen Prozessstrom zu lösen:

$$0 = g_{\dot{N},i} \left(\dot{N}, p_L, p_R, R_1 \dots R_{J_i}, \Delta p_{G,1} \dots \Delta p_{G,J_i} \right). \quad (6.47)$$

Dabei ist die Differenz zwischen dem angenommenen Eintrittsdruck $p_{i,L}$ und dem nominalen Austrittsdruck $p_{i,R}$ des Prozessstroms die Triebkraft der Strömung. Zudem gehen die Widerstandsbeiwerte $R_{i,1} \dots R_{i,J_i}$ und Gravitationsdruckverluste $\Delta p_{G,i,1} \dots \Delta p_{G,i,J_i}$ in die Berechnung ein. Das DAE-System mit reduzierter Modelltiefe kann somit wie folgt dargestellt werden:

$$\frac{\partial T_{s,j}}{\partial t} = g_T \left(T_{s,j-}, T_{s,j}, T_{s,j+}, \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall s \in S, \quad \forall j \in J_s \quad (6.48)$$

$$0 = g_U \left(\dot{H}_{i,j-}, \dot{H}_{i,j+}, \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.49)$$

$$0 = g_{p,i} \left(p_{k-1}, p_k, \Delta p_{G,k-}, R_{k-}, \dot{N} \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.50)$$

$$0 = g_{\dot{Q}} \left(\dot{Q}_{\alpha,c,j}, T_{s,j}, \dot{N}_i, \dot{H}_{i,j-}, \dot{H}_{i,j+}, p_{i,j-}, p_{i,j+} \right) \quad \forall c \in C, \quad \forall j \in J_c \quad (6.51)$$

$$0 = g_{R,i} \left(R_j, p_{j-}, p_{j+}, \dot{H}_{j-}, \dot{H}_{j+}, \dot{N} \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.52)$$

$$0 = g_{\Delta p,i} \left(\Delta p_{G,j}, p_{j-}, p_{j+}, \dot{H}_{j-}, \dot{H}_{j+}, \dot{N} \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.53)$$

$$0 = g_{\dot{N},i} \left(\dot{N}, p_L, p_R, R_1 \dots R_{J_i}, \Delta p_{G,1} \dots \Delta p_{G,J_i} \right) \quad \forall i \in I \quad (6.54)$$

6.3.2 Betrachtung eines finiten Volumens eines Prozessstroms

Um Limitierungen der DAE-Integration der Gleichungen (6.48) bis (6.54) zu identifizieren, erfolgt in diesem Abschnitt eine Analyse des Wärmeübergangsproblems

$$\dot{Q}_{\text{konv}} = \dot{Q}_{\alpha} \quad (6.55)$$

für ein FV eines Prozessstroms mit quasi-stationären Bilanzgleichungen.

$$\dot{Q}_{\text{konv}} = \left| \dot{H}_{\text{aus}} - \dot{H}_{\text{ein}} \right| \quad (6.56)$$

bezeichnet den übertragenen Wärmestrom gemäß der quasi-stationären Energiebilanz, wobei \dot{H}_{ein} bzw. \dot{H}_{aus} die in das FV ein- bzw. austretenden Enthalpieströme darstellen. Aufgrund unterschiedlicher empirischer Korrelationen wird der gemäß des konvektiven Wärmeübergangs berechnete Wärmestrom \dot{Q}_{α} für verschiedene Phasenzustände des Prozessfluids durch unterschiedliche Lösungskurven beschrieben. Der Wärmeübergangskoeffizient α unterliegt am Phasenwechsel einer Unstetigkeit in Form eines Sprungs, wobei die Werte im Zweiphasengebiet größer sind als in einphasigen Regimen.

In der Flüssigphase gilt die Beziehung

$$\dot{Q}_{\alpha,\text{fl}} = \left| \alpha_{\text{fl}} \cdot A_{\text{eff,fl}} \cdot \left(T_{\text{Metall}} - T(\dot{H}_{\text{aus}}) \right) \right|, \quad (6.57)$$

wohingegen in der Gasphase der Zusammenhang

$$\dot{Q}_{\alpha,\text{ga}} = \left| \alpha_{\text{ga}} \cdot A_{\text{eff,ga}} \cdot \left(T_{\text{Metall}} - T(\dot{H}_{\text{aus}}) \right) \right| \quad (6.58)$$

gilt und im Zweiphasengebiet die Korrelation

$$\dot{Q}_{\alpha,2\text{P}} = \left| \alpha_{2\text{P}} \cdot A_{\text{eff,2P}} \cdot \left(T_{\text{Metall}} - T(\dot{H}_{\text{aus}}) \right) \right| \quad (6.59)$$

anzuwenden ist. α_{fl} , α_{ga} und $\alpha_{2\text{P}}$ bzw. $A_{\text{eff,fl}}$, $A_{\text{eff,ga}}$ und $A_{\text{eff,2P}}$ beschreiben den Wärmeübergangskoeffizienten bzw. die effektive Wärmeübertragungsfläche in der Flüssigphase, in der Gasphase und im Zweiphasengebiet. Das Produkt aus dem Wärmeübergangskoeffizienten und der effektiven Wärmeübertragungsfläche wird im Folgenden als Wärmeübertragungsfähigkeit bezeichnet. Meist ist diese im Zweiphasengebiet höher als für einphasige Zustände. Diese Annahme liegt der Betrachtung in diesem Abschnitt zugrunde. Es wird zudem angenommen, dass der Prozessstrom mit genau einer Metallwärmekapazität der Temperatur T_{Metall} in thermischem Kontakt steht. $T(\dot{H}_{\text{aus}})$ beschreibt die Temperatur des Prozessstroms, die sich aus dem Enthalpiestrom am Austritt aus dem FV ergibt. Dies entspricht einer impliziten räumlichen Diskretisierung für die Berechnung der Temperatur des Prozessstroms, welche für die folgende Betrachtung gewählt wird. Alternativ kann die Temperatur durch eine zentrale Differenz $T\left(\frac{\dot{H}_{\text{ein}} + \dot{H}_{\text{aus}}}{2}\right)$ oder durch ein explizites Schema $T(\dot{H}_{\text{ein}})$ approximiert werden.

Die Lösungskurven für $\dot{Q}_{\alpha,\text{fl}}$, $\dot{Q}_{\alpha,\text{ga}}$, $\dot{Q}_{\alpha,2\text{P}}$ und \dot{Q}_{konv} können in einem zweidimensionalen Raum, der vom übertragenen Wärmestrom \dot{Q} und der Temperatur $T(\dot{H}_{\text{aus}})$ aufgespannt wird, visualisiert werden. Ein Schnittpunkt der Lösungskurven für $\dot{Q}_{\alpha,\text{fl}}$, $\dot{Q}_{\alpha,\text{ga}}$, $\dot{Q}_{\alpha,2\text{P}}$ mit der Lösungskurve für \dot{Q}_{konv} stellt eine mögliche Lösung des Wärmeübergangsproblems in Gleichung (6.55) dar. Dabei sind die Lösungskurven für $\dot{Q}_{\alpha,\text{fl}}$, $\dot{Q}_{\alpha,\text{ga}}$ bzw. $\dot{Q}_{\alpha,2\text{P}}$ ausschließlich in der Flüssigphase, in der Gasphase bzw. im Zweiphasengebiet gültig. Die Lösungskurve für \dot{Q}_{konv} entspricht dem Temperatur-Enthalpie-Verlauf des Prozessfluids, der an den Siede- und Taupunkten charakteristische und je nach Stoffsystem unterschiedlich ausgeprägte Knicke aufweist. Für diese Betrachtung wird Reinstoffverhalten angenommen, sodass die Sättigungstemperatur im Zweiphasengebiet unabhängig von der Enthalpie und damit von der übertragenen Wärme \dot{Q} ist. Abb. 6.3 bis 6.5 visualisieren die Lösung des Wärmeübergangsproblems in Gleichung (6.55) für verschiedene thermodynamische Zustände.

In Abb. 6.3 wird ein FV eines quasi-stationär modellierten Prozessstroms ohne Phasenwechsel betrachtet. Für ein flüssiges Prozessfluid liegt sowohl bei Wärmezufuhr als auch bei Wärmeabfuhr durch den konvektiven Wärmeübergang ein eindeutiger Schnittpunkt der Lösungskurven $\dot{Q}_{\alpha,\text{fl}}$ und \dot{Q}_{konv} vor (vgl. Abb. 6.3(a) und (b)). Somit ist eine eindeutige Lösung des Wärmeübergangsproblems in Gleichung (6.55) gegeben. Eine eindeutige Lösung wird auch für einen gasförmigen Prozessstrom bei Abkühlung (vgl. Abb. 6.3(c)) bzw. Erwärmung (vgl. Abb. 6.3(d)) gefunden. Für einen Prozessstrom im Zweiphasengebiet unter Wärmeabfuhr bzw. Wärmezufuhr liegen ebenfalls eindeutige Lösungen vor, wie Abb. 6.3(e) bzw. 6.3(f) zu entnehmen ist. Somit kann festgehalten werden, dass in einem FV eines quasi-stationär modellierten Prozessstroms ohne Phasenwechsel eine eindeutige Lösung des Wärmeübergangsproblems in Gleichung (6.55) garantiert ist. Wärmeübertrager ohne Phasenwechsel können daher mit einer gleichungsbasierten DAE-Integration (vgl. Abschnitt 6.3.1) numerisch robust analysiert werden.

Abb. 6.4 behandelt das Wärmeübergangsproblem in Gleichung (6.55) für ein FV in der Umgebung des Siedepunkts. In Abb. 6.4(a) wird angenommen, dass einem im Zweiphasengebiet in das FV eintretenden Prozessstrom durch konvektiven Wärmeübergang Wärme entzogen wird. Da der thermodynamische Zustand am Eintritt nahe am Siedepunkt liegt, kann der Prozessstrom entweder im Zweiphasengebiet oder in der Flüssigphase aus dem FV austreten, sodass die Lösungskurven $\dot{Q}_{\alpha,2\text{P}}$ und $\dot{Q}_{\alpha,\text{fl}}$ zu berücksichtigen sind. Die Steigungen der Lösungskurven entsprechen der Wärmeübertragungsfähigkeit in der korrespondierenden Phase. Infolge der ungünstigen Steigungen der Lösungskurven $\dot{Q}_{\alpha,2\text{P}}$ und $\dot{Q}_{\alpha,\text{fl}}$ liegt in den jeweiligen Gültigkeitsbereichen kein Schnittpunkt mit der Lösungskurve \dot{Q}_{konv} vor. Somit ist das Wärmeübergangsproblem in Gleichung (6.55) unter den betrachteten Randbedingungen nicht lösbar. Durch eine Erhöhung der Wärmeübertragungsfähigkeit in der Flüssigphase kann die Lösungskurve $\dot{Q}_{\alpha,\text{fl}}$ modifiziert werden (vgl. Abb. 6.4(c)), sodass eine eindeutige Lösung für den Austrittszustand in der Flüssigphase vorliegt. Analog stellt sich eine eindeutige Lösung mit einem Austrittszustand im Zweiphasengebiet ein, falls die Steigung der Lösungskurve $\dot{Q}_{\alpha,2\text{P}}$ aufgrund einer höheren Wärmeübertragungsfähigkeit im Zweiphasengebiet zunimmt (vgl. Abb. 6.4(e)).

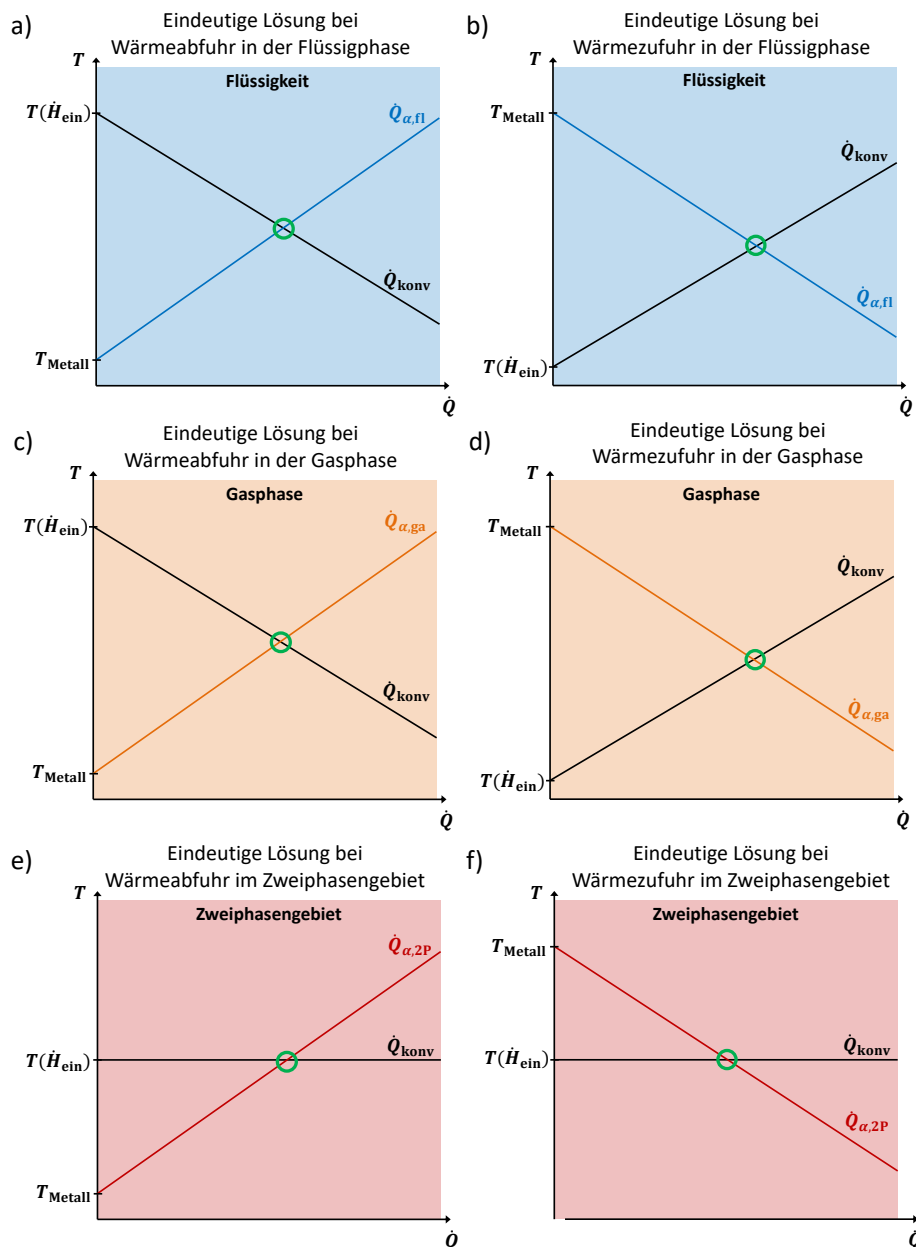


Abbildung 6.3: Visualisierung des Wärmeübergangsproblems ohne Phasenwechsel

In Abb. 6.4(b) wird das Wärmeübergangsproblem in Gleichung (6.55) für den Wärmeeintrag in einen flüssigen Prozessstrom analysiert, der nahe dem Siedepunkt in das FV eintritt. Der Austrittszustand dieses Prozessstroms kann in Abhängigkeit von der übertragenen Wärmemenge in der Flüssigphase oder im Zweiphasengebiet liegen. Für die angenommenen Wärmeübertragungsfähigkeiten in der Flüssigphase und im Zweiphasengebiet resultieren zwei Schnittpunkte der Lösungskurven $\dot{Q}_{\alpha, 2P}$ bzw. $\dot{Q}_{\alpha, \text{fl}}$ mit der Lösungskurve \dot{Q}_{konv} . Somit liegen zwei valide Lösungen vor. Eine Reduktion der Wärmeübertragungsfähigkeit im Zweiphasengebiet und damit der Steigung der Lösungskurve $\dot{Q}_{\alpha, 2P}$ führt zu genau einer Lösung in der Flüssigphase (vgl. Abb. 6.4(d)). Wird alternativ die Wärmeübertragungsfähigkeit in der Flüssigphase erhöht, resultiert eine eindeutige Lösung im Zweiphasengebiet (vgl. Abb. 6.4(f)).

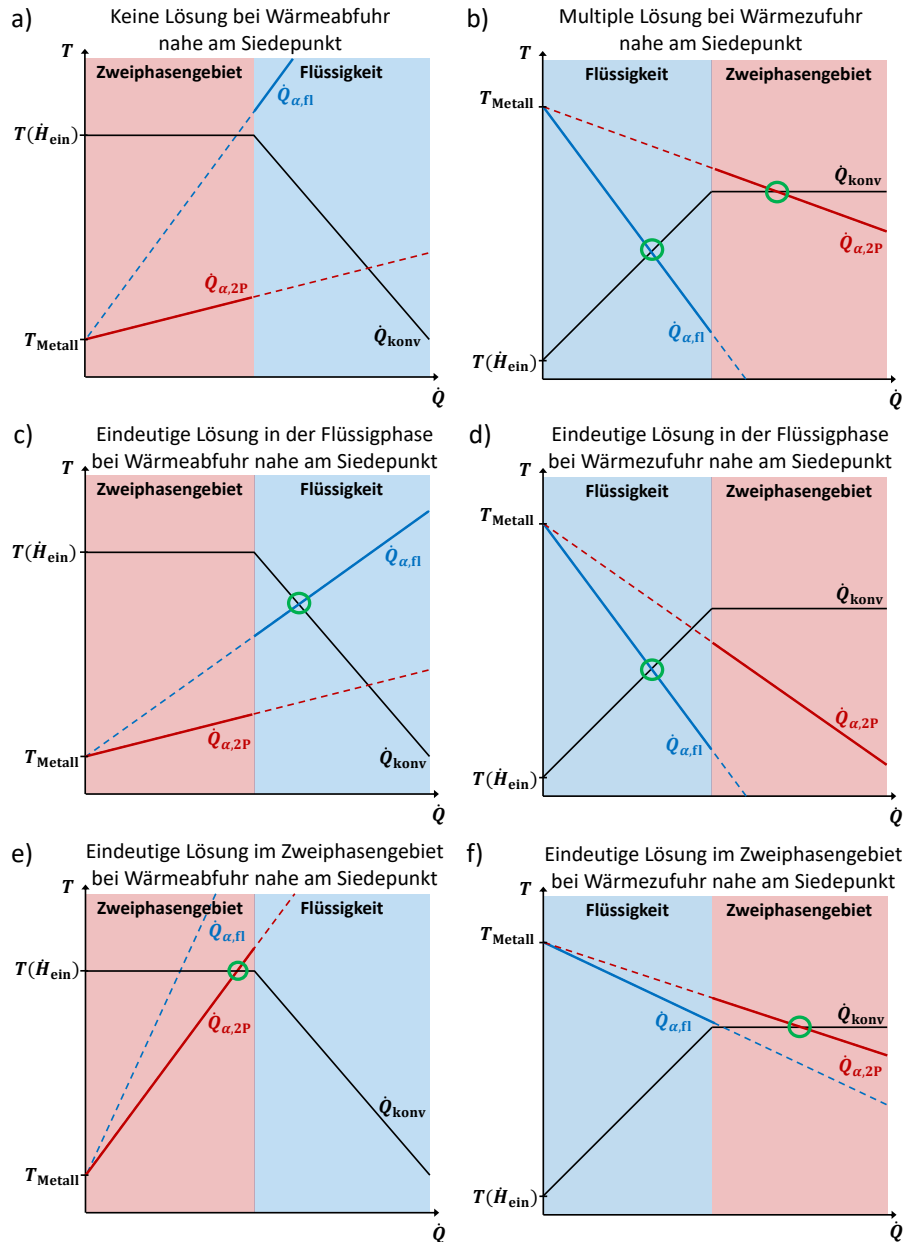


Abbildung 6.4: Visualisierung des Wärmeübergangsproblems nahe am Siedepunkt

Abb. 6.5 visualisiert das Wärmeübergangsproblem in Gleichung (6.55) in der Umgebung des Taupunkts. Wird einem zweiphasigen Prozessstrom, der nahe am Taupunkt in das FV eintritt, Wärme zugeführt, so resultiert für ungünstige Steigungen der Lösungskurven $\dot{Q}_{\alpha,ga}$ und $\dot{Q}_{\alpha,2P}$ ein Zustand ohne valide Lösung (vgl. Abb. 6.5(a)). Durch eine Anpassung der Wärmeübertragungsfähigkeiten im Zweiphasengebiet oder in der Gasphase kann eine eindeutige Lösung in der Gasphase (vgl. Abb. 6.5(c)) oder im Zweiphasengebiet (vgl. Abb. 6.5(e)) eingestellt werden. In Abb. 6.5(b) wird einem gasförmigen Prozessstrom, der nahe dem Taupunkt in das FV eintritt, Wärme entzogen. In Abhängigkeit von der übertragenen Wärmemenge resultieren für die angenommenen Wärmeübertragungsfähigkeiten zwei valide Lösungen des Wärmeübergangsproblems in

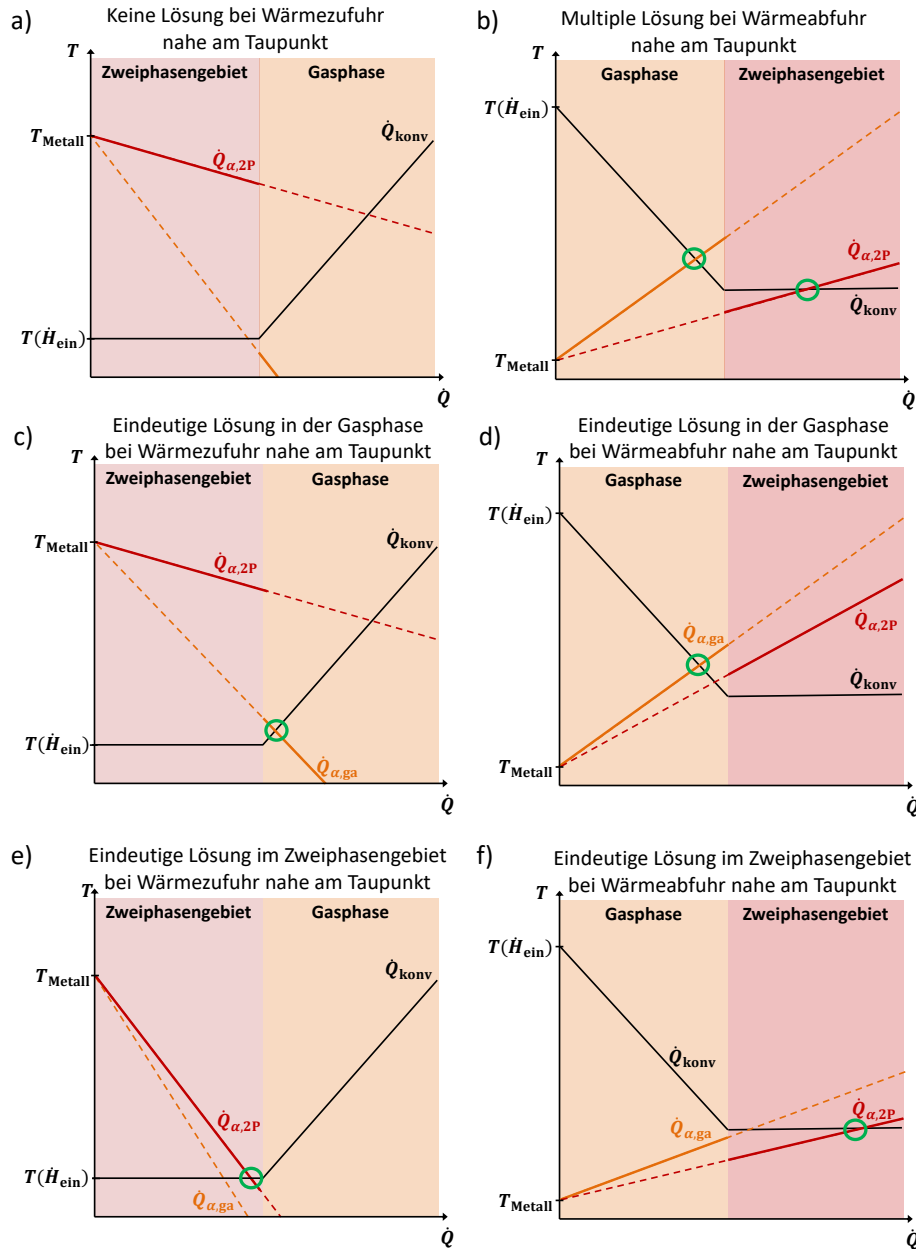


Abbildung 6.5: Visualisierung des Wärmeübergangsproblems nahe am Taupunkt

Gleichung (6.55) in der Gasphase sowie im Zweiphasengebiet. Erneut können für veränderte Wärmeübertragungsfähigkeiten Zustände mit genau einer validen Lösung auftreten. Diese kann entweder in der Gasphase (vgl. Abb. 6.5(d)) oder im Zweiphasengebiet (vgl. Abb. 6.5(f)) liegen.

Das Wärmeübergangsproblem in Gleichung (6.55) ist ein integraler Bestandteil des Gesamtgleichungssystems zur DAE-Integration von Wärmeübertragern mit quasi-stationär modellierten Prozessströmen (vgl. Abschnitt 6.3.1). Ist das Wärmeübergangsproblem in Gleichung (6.55) nicht eindeutig lösbar, können daher Konvergenzprobleme der Gleichungslöser dieses gleichungsbasierten Lösungsverfahrens resultieren. Treten multiple Lösungen auf, kann der Gleichungslöser in verschiedenen Iterationen des Lösungsverfahrens unterschiedliche valide Lösungen annehmen. Ist das Wärmeübergangsproblem in

einem FV hingegen nicht lösbar, kann auch keine Lösung des Gesamtgleichungssystems ermittelt werden. Somit ist eine numerisch robuste, dynamische Simulation eines Wärmeübertragers mit Phasenwechseln und quasi-stationär modellierten Prozessströmen nicht durch eine gleichungsbasierte DAE-Integration zu erreichen.

6.3.3 Integration als System gewöhnlicher Differentialgleichungen

Bei der Lösung des Wärmeübergangsproblems in Gleichung (6.55) in der Umgebung von Phasenwechseln können multiple valide Lösungen auftreten oder keine Lösung vorliegen. Daher ist die gleichungsbasierte DAE-Integration des Gesamtgleichungssystems eines Wärmeübertragers mit quasi-stationär modellierten Prozessströmen bei Anwesenheit von Phasenwechseln kein numerisch robustes Simulationsverfahren. Ein alternatives Simulationsverfahren, das inhärent eine eindeutige und reproduzierbare Lösung des Wärmeübergangsproblems in jedem FV und damit eines gesamten Prozessstroms sicherstellt, ist einzusetzen. Im Folgenden wird ein maßgeschneidertes Simulationsverfahren präsentiert, das diese Anforderungen erfüllt und vom DAE-System in den Gleichungen (6.48) bis (6.54) abgeleitet wird. In einem ersten Schritt werden die algebraischen Gleichungen (6.49) bis (6.54), welche die quasi-stationären Prozessströme beschreiben, mit einem adäquaten Algorithmus gelöst. Das Ergebnis wird zusammen mit den relevanten Ableitungszusammenhängen explizit zurückgegeben. In einem zweiten Schritt wird die explizite Lösung der Prozessströme in die differentielle Gleichung (6.48) eingesetzt, die mit einem Integrationsverfahren integriert wird. Somit wird das ursprüngliche DAE-System in ein ODE-System überführt.

Bei der konventionellen Prozesssimulation sind die Strömungsrichtung und der Stoffmen- genstrom \dot{N}_i des Prozessstroms vorgegeben. Somit sind auch der Druck $p_{i,\text{ein}}$ und der Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,\text{ein}}$ am Eintritt des Prozessstroms bekannt. Unter diesen Annahmen kann das ODE-System wie folgt dargestellt werden:

$$\frac{\partial T_{s,j}}{\partial t} = g_T \left(T_{s,j-}, T_{s,j}, T_{s,j+}, \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall s \in S, \quad \forall j \in J_s \quad (6.60)$$

$$\dot{H}_{i,k} \leftarrow g'_U \left(p_{i,\text{ein}}, \dot{H}_{i,\text{ein}}, \dot{N}_i, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c} \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.61)$$

$$p_{i,k} \leftarrow g'_p \left(p_{i,\text{ein}}, \dot{H}_{i,\text{ein}}, \dot{N}_i, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c} \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.62)$$

$$\dot{Q}_{\alpha,c,j} \leftarrow g'_Q \left(p_{i,\text{ein}}, \dot{H}_{i,\text{ein}}, \dot{N}_i, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c} \right) \quad \forall c \in C, \quad \forall j \in J_c \quad (6.63)$$

$$R_{i,j} \leftarrow g'_R \left(p_{i,\text{ein}}, \dot{H}_{i,\text{ein}}, \dot{N}_i, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c} \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.64)$$

$$\Delta p_{G,i,j} \leftarrow g'_{\Delta p} \left(p_{i,\text{ein}}, \dot{H}_{i,\text{ein}}, \dot{N}_i, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c} \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.65)$$

Die differentielle Gleichung (6.60) beschreibt die Dynamik der Metallwärmekapazitäten. Die expliziten Zuweisungen in den Gleichungen (6.61) bis (6.65) repräsentieren das Ergebnis der isolierten Berechnung der Prozessströme mit einem unterlagerten Lösungs- verfahren. Neben den Randbedingungen für den Stoffmengenstrom \dot{N}_i , den Druck $p_{i,\text{ein}}$

und den Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,\text{ein}}$ gehen die vom Integrationsverfahren bestimmten differentiellen Variablen der Metalltemperaturen $T_{1,1}$ bis T_{S_c, J_c} aller S_c mit dem Prozessstrom in thermischem Kontakt stehenden Metallwärmekapazitäten in diese Berechnung ein. Die Enthalpieströme $\dot{H}_{i,k}$ und die Drücke $p_{i,k}$ auf allen K_i Seitenflächen sowie die infolge des konvektiven Wärmeübergangs übertragenen Wärmeströme $\dot{Q}_{\alpha,c,j}$ in allen J_c FV sind Ergebnisse der isolierten Berechnung der Prozessströme. Zudem ergeben sich die Widerstandsbeiwerte $R_{i,j}$ und die Gravitationsdruckverluste $\Delta p_{G,i,j}$ in allen J_i FV.

Wird ein druckgetriebener Simulationsansatz gewählt, sind die Strömungsrichtung und der Stoffmengenstrom \dot{N}_i des Prozessstroms nicht a priori bekannt. Daher sind auch der Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,\text{ein}}$ und der Druck $p_{i,\text{ein}}$ am Eintritt des Prozessstroms Variablen der Berechnung und im Gegensatz zur konventionellen Prozesssimulation keine Randbedingungen. Bei bekannter Strömungsrichtung und bekanntem Stoffmengenstrom \dot{N}_i ergeben sich der Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,\text{ein}}$ und der Druck $p_{i,\text{ein}}$ aus den Drücken $p_{i,L}$ bzw. $p_{i,R}$ und den spezifischen Enthalpien $h_{i,L}$ bzw. $h_{i,R}$ an den Enden L bzw. R des Prozessstroms. Strömungsrichtung und Stoffmengenstrom \dot{N}_i hängen über den quasi-linearen Druck-Strom-Zusammenhang in Gleichung (5.10) direkt von der Differenz der Drücke $p_{i,L}$ bzw. $p_{i,R}$ ab. Der Druck-Strom-Zusammenhang beinhaltet zudem eine implizite Kopplung des Stoffmengenstroms \dot{N}_i mit dem integralen Widerstandsbeiwert R_i und dem integralen Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i}$. Diese integralen Größen entsprechen der Summe aller Widerstandsbeiwerte $R_{i,j}$ und Gravitationsdruckverluste $\Delta p_{G,i,j}$ des Prozessstroms. Diese wiederum resultieren, analog zur konventionellen Prozesssimulation, aus der Auswertung des Prozessstroms für bekannte Randbedingungen \dot{N}_i , $\dot{H}_{i,\text{ein}}$ und $p_{i,\text{ein}}$.

Somit ist für die Einbindung des druckgetriebenen Simulationsansatzes in das ODE-System in den Gleichungen (6.60) bis (6.65) ein alternierender Algorithmus erforderlich. Zunächst werden die Randbedingungen des Stoffmengenstroms \dot{N}_i , des Eintrittsdrucks $p_{i,\text{ein}}$ und des einströmenden Enthalpiestroms $\dot{H}_{i,\text{ein}}$ geschätzt. Anschließend wird der Prozessstrom für die gegebenen Randbedingungen unterlagert gelöst, um den integralen Widerstandsbeiwert R_i und den integralen Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i}$ zu ermitteln. Daraufhin werden auf Basis der integralen Größen die Randbedingungen angepasst. Dieses iterative Vorgehen wird so lange wiederholt, bis sich der Stoffmengenstrom \dot{N}_i nicht mehr ändert. Das aus der iterativen Berechnung eines Prozessstroms unter Berücksichtigung des druckgetriebenen Simulationsansatzes resultierende ODE-System kann wie folgt dargestellt werden:

$$\frac{\partial T_{s,j}}{\partial t} = g_T \left(T_{s,j-}, T_{s,j}, T_{s,j+}, \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall s \in S, \quad \forall j \in J_s \quad (6.66)$$

$$\dot{H}_{i,k} \leftarrow g_U''(p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.67)$$

$$p_{i,k} \leftarrow g_p''(p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.68)$$

$$\dot{Q}_{\alpha,c,j} \leftarrow g_Q''(p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall c \in C, \quad \forall j \in J_c \quad (6.69)$$

$$R_{i,j} \leftarrow g_R''(p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.70)$$

$$\Delta p_{G,i,j} \leftarrow g_{\Delta p}''(p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.71)$$

$$R_i \leftarrow g''_{R,\text{int}}(p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I \quad (6.72)$$

$$\Delta p_{G,i} \leftarrow g''_{\Delta p,\text{int}}(p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I \quad (6.73)$$

$$\dot{N}_i \leftarrow g''_{\dot{N}}(p_{i,L}, p_{i,R}, R_i, p_{G,i}) \quad \forall i \in I \quad (6.74)$$

Die Zuweisungen in den Gleichungen (6.67) bis (6.73) entsprechen dabei der Auswertung des Prozessstroms für bekannte Randbedingungen, wohingegen der Zusammenhang in Gleichung (6.74) der Anpassung der Randbedingungen entspricht.

Das wiederholte Auswerten eines Prozessstroms für die aktuellen Randbedingungen des Stoffmengenstroms \dot{N}_i , des Eintrittsdrucks $p_{i,\text{ein}}$ und des Enthalpiestroms $\dot{H}_{i,\text{ein}}$ während des iterativen Lösungsprozesses für den Stoffmengenstrom \dot{N}_i entspricht einem rechenintensiven Vorgehen. Daher wird in dieser Arbeit ein alternativer Ansatz eingesetzt, bei dem der differentielle Zusammenhang eines PT1-Glieds auf den integralen Widerstandsbeiwert R_i und den integralen Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i}$ angewendet wird. Dadurch werden der tatsächliche Widerstandsbeiwert $R_{i,\text{ist}}$ bzw. der tatsächliche Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i,\text{ist}}$ im Vergleich zu den Sollwerten $R_{i,\text{soll}}$ bzw. $\Delta p_{G,i,\text{soll}}$, die aus der Berechnung des Prozessstroms für gegebene Randbedingungen resultieren, zeitlich verzögert. Diese Maßnahme entkoppelt die Ermittlung dieser integralen Größen von der Bestimmung des Stoffmengenstroms \dot{N}_i mit dem quasi-stationären Druck-Strom-Zusammenhang. Der stationäre Endzustand der Wärmeübertragerdynamik wird durch diese Maßnahme nicht verändert, weshalb die Modellanpassung insbesondere für langsame Lastwechsel von Wärmeübertragern anwendbar ist. Das resultierende ODE-System kann wie folgt dargestellt werden:

$$\frac{\partial T_{s,j}}{\partial t} = g_T \left(T_{s,j-}, T_{s,j}, T_{s,j+}, \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall s \in S, \quad \forall j \in J_s \quad (6.75)$$

$$\frac{(\partial R_{i,\text{ist}})}{\partial t} = \frac{1}{\tau_R} (R_{i,\text{soll}} - R_{i,\text{ist}}) \quad \forall i \in I \quad (6.76)$$

$$\frac{(\partial \Delta p_{G,i,\text{ist}})}{\partial t} = \frac{1}{\tau_{\Delta p}} (\Delta p_{G,i,\text{soll}} - \Delta p_{G,i,\text{ist}}) \quad \forall i \in I \quad (6.77)$$

$$\dot{N}_i \leftarrow g'''_{\dot{N}}(p_{i,L}, p_{i,R}, R_{i,\text{ist}}, \Delta p_{G,i,\text{ist}}) \quad \forall i \in I \quad (6.78)$$

$$\dot{H}_{i,k} \leftarrow g'''_{\dot{H}}(\dot{N}_i, p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.79)$$

$$p_{i,k} \leftarrow g'''_p(\dot{N}_i, p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.80)$$

$$\dot{Q}_{\alpha,c,j} \leftarrow g'''_{\dot{Q}}(\dot{N}_i, p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall c \in C, \quad \forall j \in J_c \quad (6.81)$$

$$R_{i,j} \leftarrow g'''_R(\dot{N}_i, p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.82)$$

$$\Delta p_{G,i,j} \leftarrow g'''_{\Delta p}(\dot{N}_i, p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.83)$$

$$R_{i,\text{soll}} \leftarrow g'''_{R,\text{int}}(\dot{N}_i, p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I \quad (6.84)$$

$$\Delta p_{G,i,\text{soll}} \leftarrow g'''_{\Delta p,\text{int}}(\dot{N}_i, p_{i,L}, p_{i,R}, h_{i,L}, h_{i,R}, T_{1,1} \dots T_{S_c, J_c}) \quad \forall i \in I \quad (6.85)$$

Die Sollwerte $R_{i,\text{soll}}$ und $\Delta p_{G,i,\text{soll}}$ des Widerstandsbeiwerts und des Gravitationsdruckverlusts (vgl. Gleichungen (6.84) und (6.85)) resultieren aus der unterlagerten Lösung

der Prozessströme für bekannte Randbedingungen. Die tatsächlich zur Berechnung des Stoffmengenstroms \dot{N}_i eingesetzten Werte $R_{i,\text{ist}}$ bzw. $\Delta p_{G,i,\text{ist}}$ folgen aus den differentiellen Gleichungen (6.76) bzw. (6.77), die PT1-Gliedern mit den Zeitkonstanten τ_R bzw. $\tau_{\Delta p}$ entsprechen. Der Stoffmengenstrom \dot{N}_i ergibt sich explizit aus der Zuweisung in Gleichung (6.78), die keine vorherige unterlagerte Berechnung eines Prozessstroms erfordert. Mit dem nun a priori bekannten Stoffmengenstrom \dot{N}_i ist die unterlagerte Auswertung des Prozessstroms für jeden Zeitschritt nur einmal erforderlich.

Abb. 6.6 visualisiert das Simulationsverfahren zur Integration von Wärmeübertragern mit quasi-stationär modellierten Prozessströmen als ODE-System.

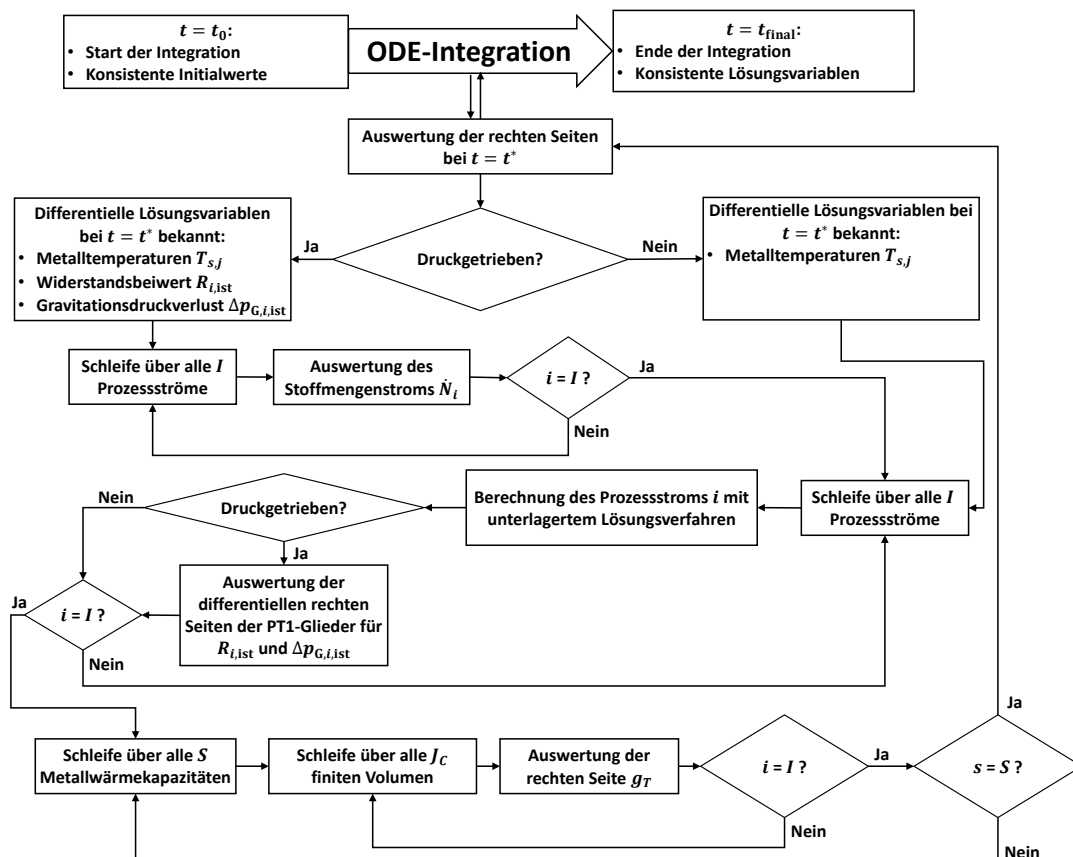


Abbildung 6.6: Integration eines Wärmeübertragers mit quasi-stationären Prozessströmen als System gewöhnlicher Differentialgleichungen

Die ODE-Integration beginnt mit konsistenten Initialwerten bei $t = t_0$. Zu verschiedenen Zeitpunkten $t = t^*$ erfordert der ODE-Integrator eine Auswertung der differentiellen rechten Seiten des ODE-Systems, was die unterlagerte Lösung des algebraischen Teilsystems der Prozessströme beinhaltet. Liegt ein druckgetriebener Simulationsansatz vor, so werden zunächst die Stoffmengenströme \dot{N}_i für alle I Prozessströme ermittelt. Bei der konventionellen Prozesssimulation sind diese als Randbedingungen vorgegeben. Anschließend wird das algebraische Teilsystem aller I quasi-stationären Prozessströme mit einem unterlagerten Lösungsverfahren gelöst. Dabei dienen die Eintrittsbedingungen der Prozessströme und die aktuellen Werte der differentiellen Metalltemperaturen als Randbedingungen. Das Ergebnis der Berechnung eines

Prozessstroms umfasst unter anderem das Profil des übertragenen Wärmestroms für jeden thermischen Kontakt mit einer Metallwärmekapazität und die Sollwerte für den Widerstandsbeiwert $R_{i,\text{soll}}$ und den Gravitationsdruckverlust $\Delta p_{G,i,\text{soll}}$. Somit können im druckgetriebenen Fall die differentiellen rechten Seiten der PT1-Glieder für $R_{i,\text{ist}}$ und $\Delta p_{G,i,\text{ist}}$ bestimmt werden. Abschließend wird mit den Profilen des durch konvektiven Wärmeübergang übertragenen Wärmestroms die differentielle rechte Seite g_T für alle J_s FV der S Metallwärmekapazitäten ausgewertet. Der ODE-Integrator schreitet daraufhin in der Zeit fort, um bei $t = t_{\text{final}}$ eine konsistente Lösung zu ermitteln.

Im Rahmen dieser Arbeit kommen zwei alternative, unterlagerte Lösungsverfahren zum Einsatz, um einen Prozessstrom für vorgegebene Eintrittsbedingungen und Metalltemperaturen auszuwerten. Unter Berücksichtigung dieser Randbedingungen beschreiben ausschließlich die quasi-stationären Bilanzgleichungen für Impuls und Energie sowie die algebraische Gleichung für den konvektiven Wärmeübergang einen Prozessstrom. Dabei sind der thermodynamische Zustand des Fluids und der übertragene Wärmestrom implizit gekoppelt (vgl. Gleichungen (6.55) bis (6.59)). Im Folgenden wird einerseits ein zellbasierter Algorithmus auf Basis des Regula-Falsi-Verfahrens (vgl. Abschnitt 4.7.5) vorgestellt. Andererseits kann ein Prozessstrom durch eine axiale Integration der quasi-stationären Bilanzgleichungen in Strömungsrichtung berechnet werden.

Zellbasiertes Verfahren Das Auswertungsschema des zellbasierten Verfahrens zur Berechnung eines Prozessstroms ist in Abb. 6.7 visualisiert.

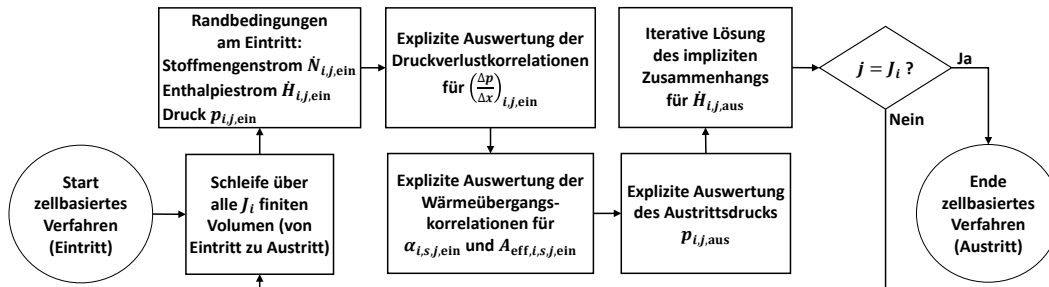


Abbildung 6.7: Zellbasiertes Verfahren zur Berechnung eines Prozessstroms

In Strömungsrichtung wird sukzessive ein FV des Prozessstroms nach dem anderen gelöst. Am Eintritt des Prozessstroms in das betrachtete FV j sind der Stoffmengenstrom $\dot{N}_{i,j,\text{ein}}$, der Druck $p_{i,j,\text{ein}}$ und der Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,j,\text{ein}}$ bekannt. Diese Größen definieren einen thermodynamisch konsistenten Zustand des Prozessfluids. Zudem sind die Metalltemperaturen $T_{s,j}$ aller S_i Metallwärmekapazitäten im betrachteten FV bekannt. Daher können die Korrelationen für den Druckverlust $\left(\frac{\Delta p}{\Delta x}\right)_{i,j,\text{ein}}$, den Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha_{i,s,j,\text{ein}}$ und die effektive Wärmeübertragungsfläche $A_{\text{eff},i,s,j,\text{ein}}$ am Eintritt des Fluids in das betrachtete FV explizit ausgewertet werden. Der Austrittsdruck $p_{i,j,\text{aus}}$ folgt anschließend aus der expliziten Funktionsauswertung

$$p_{i,j,\text{aus}} \leftarrow p_{i,j,\text{ein}} - \left(\frac{\Delta p}{\Delta x}\right)_{i,j,\text{ein}} \cdot \Delta x_{i,j}, \quad (6.86)$$

wobei $\Delta x_{i,j}$ die Länge des FV darstellt. Der austretende Enthalpiestrom

$$\dot{H}_{i,j,\text{aus}} = \dot{H}_{i,j,\text{ein}} + \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \quad (6.87)$$

hängt von der Summe aller Beiträge

$$\dot{Q}_{\alpha,i,s,j} = \alpha_{i,s,j,\text{ein}} \cdot A_{\text{eff},i,s,j,\text{ein}} \cdot (T_{s,j} - T(\dot{H}_{i,j,\text{aus}}, p_{i,j,\text{aus}})) \quad (6.88)$$

infolge des konvektiven Wärmeübergangs ab. Die Gleichungen (6.87) und (6.88) stellen somit einen impliziten, skalaren Zusammenhang für die Austrittsenthalpie $\dot{H}_{i,j,\text{aus}}$ dar, der mit einem Regula-Falsi-Verfahren (vgl. Abschnitt 4.7.5) gelöst wird.

Axiale Integration Bei der axialen Integration wird ein Integrationsverfahren (vgl. Abschnitt 4.6) eingesetzt, um ein ODE-System in Strömungsrichtung eines Prozessstroms zu integrieren. Die relevanten Ableitungszusammenhänge zwischen den Lösungsgrößen der Integration und den Modellparametern werden durch eine simultane Integration der Sensitivitätsgleichungen bestimmt. Das ODE-System setzt sich aus den differentiellen Bilanzgleichungen für Impuls (6.89) und Energie (6.90) sowie der expliziten Wärmeübergangsbeziehung (6.91) zusammen. Die ermittelte Lösung beschreibt die axialen Profile des Drucks und des Enthalpiestroms sowie für jeden thermischen Kontakt mit einer Metallwärmekapazität das axiale Profil des übertragenen Wärmestroms.

Der lokale Druckgradient entlang eines Prozessstroms

$$\frac{dp_i}{dx} = \left(\frac{dp_i}{dx} \right)_{\text{R}} + \left(\frac{dp_i}{dx} \right)_{\text{G}} = \left(\frac{\Delta p_i}{\Delta x} \right)_{\text{R}} + \left(\frac{\Delta p_i}{\Delta x} \right)_{\text{G}} \quad (6.89)$$

besteht aus Reibungsanteil $\left(\frac{dp_i}{dx} \right)_{\text{R}}$ und Gravitationsanteil $\left(\frac{dp_i}{dx} \right)_{\text{G}}$. Diese können mit den finiten Differenzen $\left(\frac{\Delta p_i}{\Delta x} \right)_{\text{R}}$ und $\left(\frac{\Delta p_i}{\Delta x} \right)_{\text{G}}$ approximiert werden, die den Korrelationen für Reibungs- und Gravitationsdruckverlust (vgl. Abschnitt 3.2) entsprechen.

Die lokale Änderung des Enthalpiestroms entlang eines Prozessstroms

$$\frac{d\dot{H}_i}{dx} = \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{q}_{x,\alpha,i,s}) \quad (6.90)$$

folgt direkt aus einer quasi-stationären Betrachtung der differentiellen Form der Energiebilanz (6.6). Der lokale Gradient des Enthalpiestroms $\frac{d\dot{H}_i}{dx}$ entspricht der Summe aller übertragenen Wärmestromdichten $\dot{q}_{x,\alpha,i,s}$ infolge des thermischen Kontakts des Prozessstroms i mit S_i Metallwärmekapazitäten. Die übertragenen Wärmestromdichten werden mit Hilfe der algebraischen Wärmeübergangsbeziehung (3.1) bestimmt. Diese kann unter Berücksichtigung der längenspezifischen effektiven Wärmeübertragungsfläche $a_{x,\text{eff},i,s}$ als explizite Funktionsauswertung

$$\dot{q}_{x,\alpha,i,s} \leftarrow \alpha_{i,s} \cdot a_{x,\text{eff},i,s} \cdot (T_s - T(\dot{H}_i, p_i)) \quad (6.91)$$

interpretiert werden, insofern die lokalen Werte der Metalltemperatur T_s , des Enthalpiestroms \dot{H}_i und des Drucks p_i bekannt sind. Druck und Enthalpiestrom sind als differentielle Lösungsvariablen der axialen Integration gegeben. Die Metalltemperaturen entsprechen den differentiellen Lösungsvariablen der übergeordneten Zeitintegration und können daher als konstante Randbedingungen der axialen Integration interpretiert werden. Die Metalltemperaturen liegen als Zellmittelwerte der FV der Metallwärmekapazitäten vor. Die lokale Metalltemperatur wird daher mit einer linearen Interpolation zwischen benachbarten Zellmittelwerten ermittelt.

6.4 Stationäre Simulation

Neben der Analyse der Dynamik von Wärmeübertragern ist die Beschreibung des stationären Betriebs der Apparate von Interesse. Daher werden im Folgenden stationäre Simulationsverfahren für Mehrstromwärmeübertrager präsentiert, wobei ausschließlich die Nachrechnung behandelt wird und Auslegungsverfahren nicht betrachtet werden. Abschnitt 6.4.1 thematisiert die pseudo-transiente Simulation, bei welcher der stationäre Zustand durch dynamische Modelle ermittelt wird. Zudem kann der stationäre Betrieb durch gleichungsbasierte (vgl. Abschnitt 6.4.2) oder maßgeschneiderte Ansätze (vgl. Abschnitt 6.4.3) beschrieben werden. In Abschnitt 6.4.4 wird ein diskretisierter Abschnitt eines Wärmeübertragers analysiert, um Limitierungen dieser stationären Simulationsverfahren darzulegen. Die Limitierungen können durch ein Simulationsverfahren umgangen werden, das auf einer simultanen axialen Integration aller Prozessströme basiert und in Abschnitt 6.4.5 vorgestellt wird.

6.4.1 Pseudo-transientes Simulationsverfahren

Um die stationäre Lösung eines algebraischen Gleichungssystems zu ermitteln, wird bei der pseudo-transienten Simulation ein DAE- oder ODE-System (mit der gleichen stationären Lösung wie das eigentliche algebraische Gleichungssystem) so lange in der Zeit integriert bis die zeitliche Änderung der differentiellen Variablen eine definierte Toleranz unterschreitet [KELLEY & KEYES 1998]. Für die Nachrechnung von Wärmeübertragern durch pseudo-transiente Simulation können einerseits die DAE-Systeme mit den Gleichungen (6.12) bis (6.20) (vgl. Abschnitt 6.2.1) und (6.48) bis (6.54) (vgl. Abschnitt 6.3.1) eingesetzt werden. Andererseits können die ODE-Systeme mit den Gleichungen (6.31) bis (6.40) (vgl. Abschnitt 6.2.2) und (6.60) bis (6.65) (vgl. Abschnitt 6.3.3) herangezogen werden. Aufgrund der unterschiedlichen Struktur und Modelltiefe dieser Gleichungssysteme sind bei der pseudo-transienten Simulation verschiedene Lösungsverhalten zu beobachten.

6.4.2 Gleichungsbasiertes Simulationsverfahren

Das DAE-System (6.48) bis (6.54) mit quasi-stationär modellierten Prozessströmen bildet den Ausgangspunkt für die Herleitung eines gleichungsbasierten Simulationsverfahrens zur stationären Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern. Lediglich die Metalltemperaturen, die durch die differentielle Gleichung (6.48) beschrieben werden, sind in diesem DAE-System differentielle Variablen. Wird auch diese Gleichung stationär formuliert, resultiert das algebraische Gleichungssystem (6.92) bis (6.98).

$$0 = g_T \left(T_{s,j-}, T_{s,j}, T_{s,j+}, \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall s \in S, \quad \forall j \in J_s \quad (6.92)$$

$$0 = g_U \left(\dot{H}_{i,j-}, \dot{H}_{i,j+}, \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{Q}_{\alpha,i,s,j}) \right) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.93)$$

$$0 = g_{p,i} (p_{k-1}, p_k, \Delta p_{G,k-}, R_{k-}, \dot{N}) \quad \forall i \in I, \quad \forall k \in K_i \quad (6.94)$$

$$0 = g_{\dot{Q}} (\dot{Q}_{\alpha,c,j}, T_{s,j}, \dot{N}_i, \dot{H}_{i,j-}, \dot{H}_{i,j+}, p_{i,j-}, p_{i,j+}) \quad \forall c \in C, \quad \forall j \in J_c \quad (6.95)$$

$$0 = g_{R,i} (R_j, p_{j-}, p_{j+}, \dot{H}_{j-}, \dot{H}_{j+}, \dot{N}) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.96)$$

$$0 = g_{\Delta p,i} (\Delta p_{G,j}, p_{j-}, p_{j+}, \dot{H}_{j-}, \dot{H}_{j+}, \dot{N}) \quad \forall i \in I, \quad \forall j \in J_i \quad (6.97)$$

$$0 = g_{\dot{N},i} (\dot{N}, p_L, p_R, R_1 \dots R_{J_i}, \Delta p_{G,1} \dots \Delta p_{G,J_i}) \quad \forall i \in I \quad (6.98)$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems kann mit adäquaten Gleichungslösern (vgl. Abschnitt 4.7), wie z.B. dem gradientenbasierten Newton-Verfahren (vgl. Abschnitt 4.7.6), berechnet werden. Um Konvergenz des Newton-Verfahrens sicherzustellen, müssen die gewählten Startwerte hinreichend nahe an der tatsächlichen Lösung liegen. Da die Auswahl geeigneter Startwerte nicht trivial ist, werden statt gleichungsbasierter häufig maßgeschneiderte Verfahren zur Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern angewendet, welche die Komplexität des algebraischen Gesamtgleichungssystems reduzieren, indem mehrere Teilgleichungssysteme iterativ gelöst werden.

6.4.3 Maßgeschneidertes Simulationsverfahren

Die Komplexität einer numerischen Problemstellung kann durch die Zerlegung eines algebraischen Gesamtgleichungssystems in Teilgleichungssysteme reduziert werden. Auch eine Zerlegung des Gleichungssystems (6.92) bis (6.98), das den stationären Betrieb eines Wärmeübertragers beschreibt, in gekoppelte Teilgleichungssysteme ist möglich. Das Teilgleichungssystem (6.93) bis (6.98) beschreibt die stationären Bilanzgleichungen und Wärmeübergangsbeziehungen aller Prozessströme und kann mit den in Abschnitt 6.3.3 vorgestellten Lösungsverfahren für Prozessströme gelöst werden (zellbasiertes Verfahren oder axiales Integrationsverfahren). Das verbleibende Teilgleichungssystem (6.92) beschreibt die stationären Energiebilanzen der Metallwärmekapazitäten. Werden die beiden Teilgleichungssysteme alternierend gelöst, kann eine Lösung des Gesamtgleichungssystems bestimmt werden. Abb. 6.8 visualisiert das resultierende und in dieser

Arbeit eingesetzte maßgeschneiderte Verfahren zur stationären Nachrechnung von Wärmeübertragern.

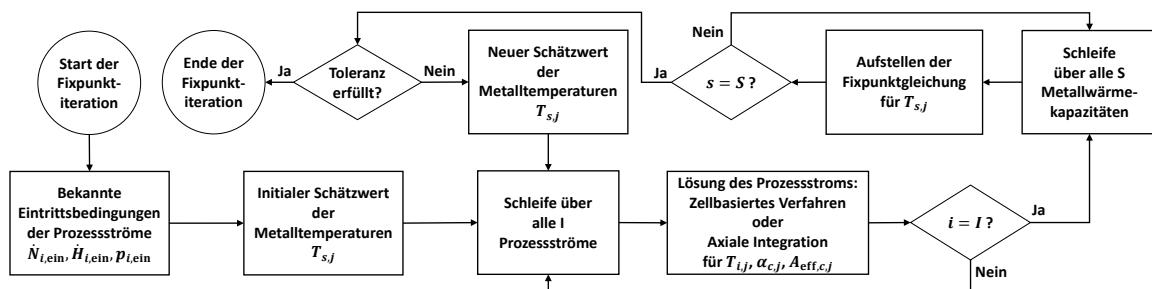


Abbildung 6.8: Maßgeschneidertes Verfahren zur Wärmeübertrager-Nachrechnung

Zu Beginn des Verfahrens werden Schätzwerte für die Metalltemperaturen $T_{s,j}$ gewählt. Zudem sind der Stoffmengenstrom $\dot{N}_{i,\text{ein}}$, der Druck $p_{i,\text{ein}}$ und der Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,\text{ein}}$ am Eintritt aller Prozessströme bekannt. Somit können isoliert alle Prozessströme mit dem zellbasierten Verfahren oder mit dem axialen Integrationsverfahren gelöst werden, wodurch für den aktuellen Schätzwert der Metalltemperaturen die Profile der Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha_{c,j}$ und der effektiven Wärmeübertragungsflächen $A_{\text{eff},c,j}$ für alle C thermischen Kontakte bekannt sind. Zudem sind die Temperaturprofile $T_{i,j}$ der Prozessströme Ergebnis der Berechnung. Die Temperaturprofile der Prozessströme sowie die Profile der Wärmeübergangskoeffizienten und effektiven Wärmeübertragungsflächen werden anschließend als konstante Randbedingungen für das Teilgleichungssystem der Metallwärmekapazitäten interpretiert. Mit dieser Annahme ergibt sich ein tridiagonales Gleichungssystem, welches einen verbesserten Schätzwert der Metalltemperaturen $T_{s,j}$ beschreibt und mit dem expliziten Thomas-Algorithmus (vgl. Abschnitt 4.7.2) effizient gelöst werden kann. Das grundlegende Konzept des alternierenden Lösungsverfahrens ist somit, eine verbesserte Approximation der Lösung für die Metalltemperaturen auf Basis des Schätzwerts der vorangegangenen Iteration zu bestimmen. Dies entspricht einer Fixpunktiteration (vgl. Abschnitt 4.7.1).

6.4.4 Konvergenzbetrachtung eines Wärmeübertragerabschnitts

Die in den Abschnitten 6.4.2 und 6.4.3 vorgestellten Verfahren zur Nachrechnung von Wärmeübertragern basieren auf einer räumlichen Diskretisierung mit finiten Volumina. In diesem Abschnitt wird auf Limitierungen dieser Algorithmen eingegangen, indem analog zu Abschnitt 6.3.2 ein ausgewählter Abschnitt eines Wärmeübertragers betrachtet wird. Bei der Nachrechnung von Wärmeübertragern werden die Metalltemperaturen durch algebraische Gleichungen beschrieben und können nicht mehr wie in der Dynamik als konstante Randbedingung einer isolierten Berechnung von Prozessströmen angenommen werden. Daher wird ein Zweistrom-Wärmeübertrager analysiert, der in Strömungsrichtung der Fluide mit einem finiten Volumen diskretisiert ist (vgl. Abb. 6.9).

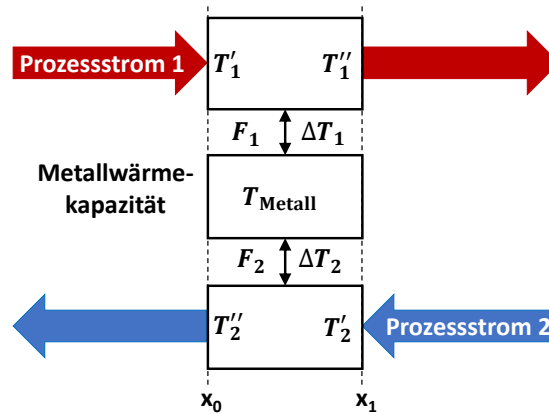


Abbildung 6.9: Abschnitt eines Wärmeübertragers mit einem finiten Volumen

Der Wärmeübertrager wird im Gegenstrom von zwei Prozessströmen durchströmt. Prozessstrom 1 tritt am linken Ende x_0 ein, Prozessstrom 2 am rechten Ende x_1 . Prozessstrom 1 liegt ausschließlich in der Gasphase vor. Für die Berechnung der Wärmeübertragungsfähigkeit F_1 auf Basis des thermodynamischen Zustands von Strom 1 am Austritt aus dem finiten Volumen werden daher einphasige Wärmeübergangskorrelationen eingesetzt. Die Eintrittstemperatur T'_2 von Strom 2 liegt in der Flüssigphase, nahe an der Siedetemperatur T_{Sie} . In Abhängigkeit von der Wärmeübertragungsfähigkeit F_2 und der treibenden Temperaturdifferenz ΔT_2 kann Strom 2 somit Austrittstemperaturen T''_2 in der Flüssigphase oder im Zweiphasengebiet erreichen. Sowohl die Wärmeübertragungsfähigkeit F_2 als auch die Temperaturdifferenz ΔT_2 werden am Austritt von Strom 2 aus dem finiten Volumen ausgewertet.

Das Gleichungssystem des Wärmeübertragers weist somit im Wesentlichen die folgenden Freiheitsgrade auf:

- Metalltemperatur T_{Metall}
- Austrittstemperaturen der Prozessströme T''_1 und T''_2
- Wärmeübertragungsfähigkeiten F_1 und F_2
- Übertragener Wärmestrom \dot{Q}

Falls genau eine Kombination an Werten für diese Freiheitsgrade existiert, die das Gleichungssystem erfüllt, ist dieses eindeutig lösbar. Erfüllen mehrere Kombinationen das Gleichungssystem, liegen multiple valide Lösungen vor.

Abb. 6.10(a) visualisiert eine valide Lösung des Gleichungssystems mit einer vergleichsweise hohen Metalltemperatur T_{Metall} . Infolge der daraus resultierenden, geringen Temperaturdifferenz $\Delta T_{1,\text{min}}$ in Kombination mit der Wärmeübertragungsfähigkeit F_{ga} wird dem gasförmigen Prozessstrom 1 lediglich ein geringer Wärmestrom \dot{Q}_{min} entzogen. Wird dieser dem flüssig in das finite Volumen eintretenden Strom 2 gemäß der Energiebilanz zugeführt, liegt dessen Austrittszustand in der Flüssigphase. Trotz der hohen treibenden Temperaturdifferenz $\Delta T_{2,\text{min}}$ kann aufgrund der geringen Wärmeübertragungsfähigkeit F_{fl} , die sich aus den Wärmeübergangskorrelationen für die Flüssigphase ergibt,

lediglich der geringe Wärmestrom \dot{Q}_{\min} aufgenommen werden, sodass die Energiebilanz des Wärmeübertragers erfüllt ist.

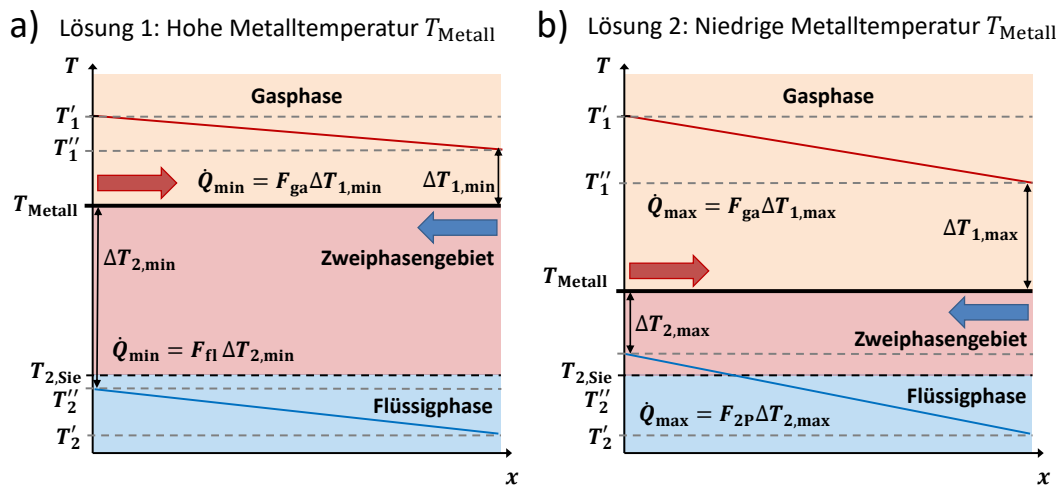


Abbildung 6.10: Multiple valide Lösungen eines Zweistrom-Wärmeübertragers

Eine alternative valide Lösung ist in Abb. 6.10(b) visualisiert. Die vergleichsweise niedrige Metalltemperatur T_{Metall} resultiert in einer höheren treibenden Temperaturdifferenz $\Delta T_{1,\max}$. Diese führt für die Wärmeübertragungsfähigkeit F_{ga} zu einem im Vergleich mit Abb. 6.10(a) hohen abgeführten Wärmestrom \dot{Q}_{\max} . Wird dieser dem kalten Prozessstrom 2 zugeführt, liegt dessen Austrittstemperatur T_2'' im Zweiphasengebiet. Die Wärmeübertragungsfähigkeit $F_{2\text{p}}$ ist daher mit den im Zweiphasengebiet gültigen Wärmeübergangskorrelationen zu berechnen und nimmt im Vergleich zu F_{fl} größere Werte an. Somit kann trotz der vergleichsweise geringen treibenden Temperaturdifferenz $\Delta T_{2,\max}$ der erhöhte Wärmestrom \dot{Q}_{\max} übertragen werden und die Energiebilanz des Wärmeübertragers ist erfüllt.

Für bekannte Eintrittsbedingungen der Prozessströme wird die Energiebilanz des Zweistrom-Wärmeübertragers somit durch zwei verschiedene Wertekombinationen der Freiheitsgrade erfüllt. Daher liegen multiple valide Lösungen des Gleichungssystems vor. Diese sind auf die räumliche Diskretisierung mit finiten Volumen in Kombination mit Phasenwechseln zurückzuführen, da ein Phasenübergang aufgrund unstetiger Wärmeübergangskorrelationen mit einer sprunghaften Änderung der Wärmeübertragungsfähigkeit einhergeht. Aus diesem Grund kann die Konvergenz von Algorithmen auf Basis einer ortsfesten Diskretisierung bei der stationären Nachrechnung von Wärmeübertrager mit Phasenwechseln nicht garantiert werden.

6.4.5 Simultane axiale Integration aller Prozessströme

Verfahren zur stationären Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern auf Basis einer räumlichen Diskretisierung mit finiten Volumen sind bei Anwesenheit von Phasenwechseln nicht hinreichend für numerisch robuste Betrachtungen (vgl. Abschnitt 6.4.4).

Daher wird im Folgenden ein alternativer Ansatz vorgestellt, der eine simultane axiale Integration aller Prozessströme mit festgelegter Integrationsrichtung nutzt. Bei der Herleitung wird von den differentiellen Zusammenhängen der lokalen Druckänderung (vgl. Gleichung (6.89)) und der lokalen Änderung des Enthalpiestroms (vgl. Gleichung (6.90)) sowie von der expliziten Auswertung der Wärmeübergangsbeziehung nach Gleichung (6.91) ausgegangen. Diese beschreiben das Gleichungssystem zur axialen Integration eines einzelnen Prozessstroms in Strömungsrichtung.

Bei der simultanen axialen Integration sind nun alle I Prozessströme und alle C thermischen Kontakte der Prozessströme mit Metallwärmekapazitäten zu berücksichtigen. Das zu integrierende Gleichungssystem kann wie folgt dargestellt werden:

$$\frac{\partial p_i}{\partial x} = \gamma_{\text{dir}} \cdot \left(\left(\frac{\Delta p_i}{\Delta x} \right)_{\text{R}} + \left(\frac{\Delta p_i}{\Delta x} \right)_{\text{G}} \right) \quad \forall i \in I \quad (6.99)$$

$$\frac{\partial \dot{H}_i}{\partial x} = \gamma_{\text{dir}} \cdot \sum_{s=1}^{S_i} (\dot{q}_{x,\alpha,i,s}) \quad \forall i \in I \quad (6.100)$$

$$\dot{q}_{x,\alpha,c} \leftarrow \alpha_{i,s} \cdot a_{x,\text{eff},i,s} \cdot (T_s - T(\dot{H}_i, p_i)) \quad \forall c \in C \quad (6.101)$$

Gleichung (6.99) beschreibt die lokale Änderung des Drucks, Gleichung (6.100) die lokale Änderung des Enthalpiestroms und Gleichung (6.101) die explizite Auswertung des Wärmeübergangs. Der Vorzeichenoperator γ_{dir} nimmt den Wert 1 an, wenn Integrationsrichtung und Strömungsrichtung eines Prozessstroms übereinstimmen. Fließt der Prozessstrom entgegen der Integrationsrichtung, so gilt $\gamma_{\text{dir}} = -1$.

Bei der axialen Integration eines einzelnen Prozessstroms wurde angenommen, dass die lokale Metalltemperatur T_s für alle S Metallwärmekapazitäten bekannt ist und daher als Randbedingung zu betrachten ist. Bei der simultanen axialen Integration aller Prozessströme hingegen ist die lokale Metalltemperatur T_s aller S Metallwärmekapazitäten zu bestimmen, um die explizite Funktionsauswertung (6.101) zu ermöglichen. Somit ist T_s lokal als algebraische Variable zu betrachten, die sich für jede Metallwärmekapazität aus der skalaren und im Allgemeinen impliziten Energiebilanz

$$0 = \sum_{i=1}^{I_s} (\dot{q}_{x,\alpha,i,s}) = \sum_{i=1}^{I_s} (\alpha_{i,s} \cdot a_{x,\text{eff},i,s} \cdot (T_s - T(\dot{H}_i, p_i))) \quad \forall s \in S \quad (6.102)$$

ergibt. Diese besagt, dass die Summe aller durch konvektiven Wärmeübergang übertragenen Wärmeströme den Nullwert annimmt. Im Gegensatz zu den bisher vorgestellten Ansätzen wird dabei die Wärmeleitung in der Metallwärmekapazität vernachlässigt.

Die Gleichungen (6.99) bis (6.102) bilden ein DAE-System. Einerseits kann dieses mit einem geeigneten Integrationsverfahren (vgl. Abschnitt 4.6) gelöst werden. Andererseits kann ein maßgeschneiderter Lösungsalgorithmus eingesetzt werden. Dabei wird Gleichung (6.102) lokal für alle S Metallwärmekapazitäten mit einem adäquaten Gleichungslöser (vgl. Abschnitt 4.7) nach der Metalltemperatur T_s gelöst. Das Ergebnis wird anschließend explizit zurückgegeben, was die Integration der Gleichungen (6.99) und (6.100) als ODE-System ermöglicht. In dieser Arbeit wird der maßgeschneiderte Ansatz

der ODE-Integration eingesetzt, da dieser die Möglichkeit bietet, je nach Anwendungsfall ausgewählte Verfahren zur Lösung der nicht-linearen Energiebilanz in Gleichung (6.102) anzuwenden.

Die stationäre Nachrechnung eines Gleichstromwärmeübertragers mit dem Ansatz der simultanen Integration aller Prozessströme ist trivial, da nach einmaliger Integration von Eintritt zu Austritt die Lösung des Wärmeübertragers bekannt ist. Für einen Gegenstromwärmeübertrager hingegen sind die Austrittsbedingungen der Prozessströme zu schätzen, welche entgegen der gewählten Integrationsrichtung strömen. Auf Basis dieser Schätzwerte wird anschließend die simultane axiale Integration aller Prozessströme durchgeführt. Diese liefert Ergebnisse für die Eintrittsbedingungen der Prozessströme, welche entgegen der gewählten Integrationsrichtung strömen. Ein Vergleich der berechneten mit den tatsächlichen Eintrittsbedingungen liefert rechte Seiten, die von einem Gleichungslöser (vgl. Abschnitt 4.7) genutzt werden können, um einen neuen Schätzwert der Austrittsbedingungen zu bestimmen. Der Gleichungslöser variiert die geschätzten Austrittsbedingungen so lange, bis die stationäre Lösung des Wärmeübertragers mit einer definierten Genauigkeit erreicht ist. Diese Methode wird auch als Schießverfahren bezeichnet [HERMANN 2020]. Abb. 6.11 visualisiert diesen Algorithmus zur stationären Nachrechnung von Gegenstromwärmeübertragern.

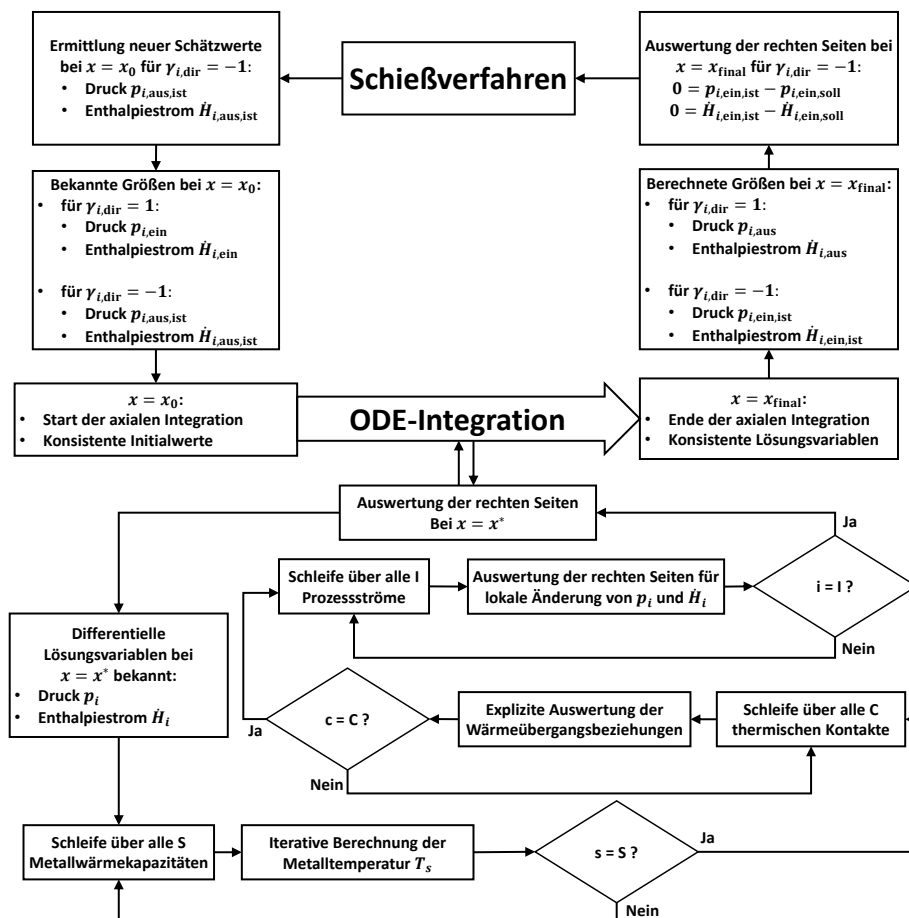


Abbildung 6.11: Schießverfahren zur Nachrechnung von Wärmeübertragern

6.5 Modular-hierarchische Simulationsumgebung

Die in Kapitel 2 vorgestellten Topologien von Wärmeübertragern können als Kombination von Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen modelliert werden, wenn die Interaktion dieser Bausteine durch adäquate Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust berücksichtigt wird. Die Korrelationen setzen eine akkurate Stoffdatenberechnung voraus. Somit bilden Metallwärmekapazitäten, Prozessströme, Wärmeübergangs- und Druckverlustkorrelationen sowie die Stoffdatenberechnung die grundlegenden Module einer modular-hierarchischen Simulationsumgebung für Wärmeübertrager. Die in dieser Arbeit entwickelte Simulationsumgebung ist in Abb. 6.12 visualisiert.

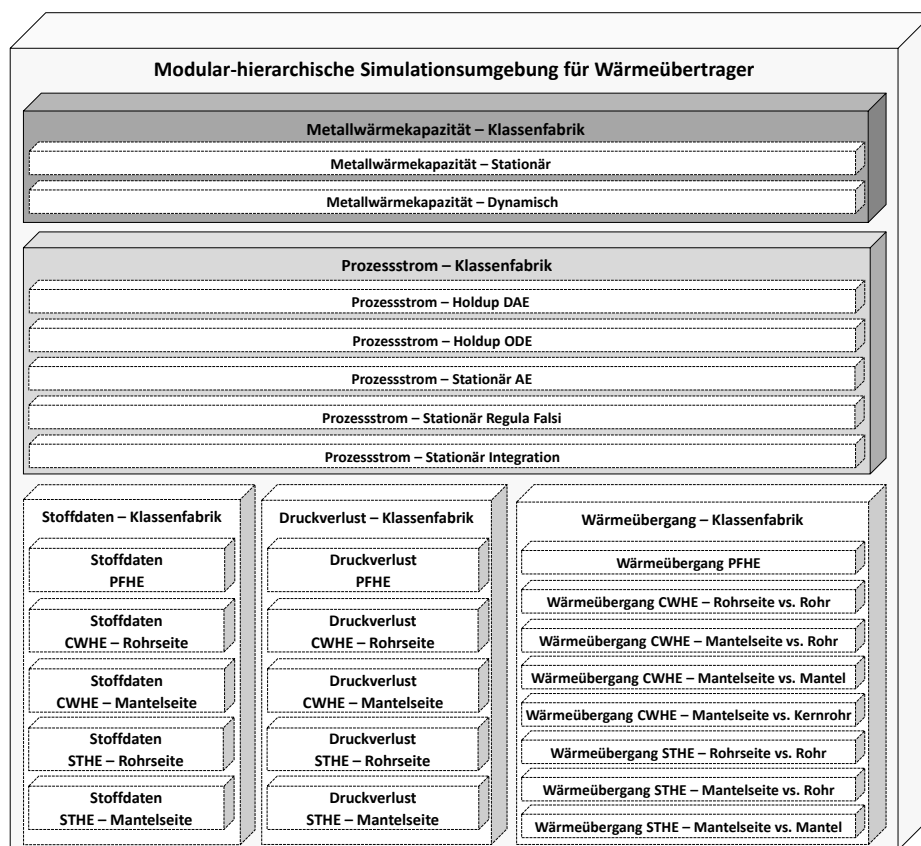


Abbildung 6.12: Modulare Simulationsumgebung für Wärmeübertrager

Die verschiedenen Modelltiefen der Simulationsansätze für Wärmeübertrager aus den Abschnitten 6.2 bis 6.4 erfordern verschiedene Ausprägungen der grundlegenden Bausteine von Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen. Daher wird mit dem Konzept der Class Factory (Klassenfabrik) ein Ansatz der objektorientierten Programmierung genutzt. Eine Class Factory ist eine Funktion, die während der Laufzeit eines Programms ein Objekt einer Klasse, die zunächst auf Basis von Eingangsparametern aus einer Auswahl an verfügbaren Klassen selektiert wird, erzeugt [GAMMA ET AL. 2009]. Im Rahmen der modularen Simulationsumgebung werden verschiedene Ausprägungen der Teilgleichungssysteme von Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen durch die Class Factories *Metallwärmekapazität* und *Prozessstrom* erzeugt. Verschiedene Arten von

Wärmeübertragern erfordern abweichende Korrelationsgleichungen für Druckverlust und Wärmeübergang sowie unterschiedliche Methoden zur Stoffdatenberechnung. Daher erzeugen die Class Factories *Druckverlust*, *Wärmeübergang* und *Stoffdaten* je nach Bauform des Wärmeübertragers verschiedene Module zur Auswertung von Wärmeübergang, Druckverlust und Stoffdaten.

Die Class Factory *Metallwärmekapazität* stellt für stationäre Simulationen (vgl. Abschnitt 6.4) die Instanz *Metallwärmekapazität – Stationär* und für dynamische Anwendungen (vgl. Abschnitte 6.2 und 6.3) die Instanz *Metallwärmekapazität – Dynamisch* bereit. Die Class Factory *Prozessstrom* erzeugt für den gleichungsbasierten Ansatz der DAE-Integration eines Wärmeübertragers unter Berücksichtigung von Fluid-Massen- und -Energie-Holdup (vgl. Abschnitt 6.2.1) die Instanz *Prozessstrom – Holdup DAE*. Für den maßgeschneiderten Ansatz der ODE-Integration eines Wärmeübertragers mit Fluid-Massen- und -Energie-Holdup (vgl. Abschnitt 6.2.2) wird die Instanz *Prozessstrom – Holdup ODE* ausgewählt. Die beiden gleichungsbasierten Ansätze zur dynamischen Simulation eines Wärmeübertragers mit quasi-stationären Prozessströmen durch Integration eines DAE-Systems (vgl. Abschnitt 6.3.1) und zur stationären Simulation eines Wärmeübertragers als System algebraischer Gleichungen (vgl. Abschnitt 6.4.2) basieren auf der Instanz *Prozessstrom – Stationär AE*. Für die maßgeschneiderten Ansätze der dynamischen Simulation eines Wärmeübertragers mit quasi-stationären Prozessströmen als ODE-System (vgl. Abschnitt 6.3.3) und für die stationäre Nachrechnung von Wärmeübertragern mit dem in Abschnitt 6.4.3 beschriebenen iterativen Verfahren werden die Instanzen *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* und *Prozessstrom – Stationär Integration* eingesetzt. Bei der pseudo-transienten Simulation zur stationären Nachrechnung von Wärmeübertragern (vgl. Abschnitt 6.4.1) können je nach Spezifikation durch den Anwender alle Instanzen der Class Factory *Prozessstrom* angewendet werden.

Die Class Factory *Stoffdaten* erzeugt für unterschiedliche Strömungsräume von Wärmeübertragern die Instanzen *Stoffdaten PFHE*, *Stoffdaten CWHE – Rohrseite*, *Stoffdaten CWHE – Mantelseite*, *Stoffdaten STHE – Rohrseite* und *Stoffdaten STHE – Mantelseite*. Die Class Factory *Druckverlust* stellt die eigenständigen Objekte *Druckverlust PFHE*, *Druckverlust CWHE – Rohrseite*, *Druckverlust CWHE – Mantelseite*, *Druckverlust STHE – Rohrseite* und *Druckverlust STHE – Mantelseite* zur Auswertung des Druckverlusts für verschiedene Prozessströme der unterschiedlichen Wärmeübertrager bereit. Die Wärmeübergangskorrelationen für verschiedene thermische Kontakte zwischen Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen können durch die Objekte *Wärmeübergang PFHE*, *Wärmeübergang CWHE – Rohrseite vs. Rohr*, *Wärmeübergang CWHE – Mantelseite vs. Rohr*, *Wärmeübergang CWHE – Mantelseite vs. Mantel*, *Wärmeübergang CWHE – Mantelseite vs. Kernrohr*, *Wärmeübergang STHE – Rohrseite vs. Rohr*, *Wärmeübergang STHE – Mantelseite vs. Rohr* und *Wärmeübergang STHE – Mantelseite vs. Mantel* repräsentiert werden, die von der Class Factory *Wärmeübergang* erzeugt werden.

Die modulare Simulationsumgebung (vgl. Abb. 6.12) ermöglicht die Darstellung verschiedener Arten von Wärmeübertragern, da ein Prozessstrom mit mehreren Metallwärmekapazitäten interagieren kann. Umgekehrt kann auch eine Metallwärmekapazität mit mehreren Prozessströmen in thermischem Kontakt stehen. Eine mögliche Repräsentation

eines PFHE ist in Abb. 6.13 dargestellt. Dabei wird ein Common-Wall-Ansatz nach HASELER (1981) angewendet. Alle metallischen Bestandteile des PFHE werden durch eine einzige *Metallwärmekapazität* abstrahiert, die simultan mit allen Modulen vom Typ *Prozessstrom* in thermischem Kontakt steht. Die Berechnung des Wärmeübergangs erfolgt im Modul *Wärmeübergang PFHE*. Für jeden *Prozessstrom* werden zudem die Stoffdaten des Fluids und die Druckverluste durch die Module *Stoffdaten PFHE* und *Druckverlust PFHE* evaluiert.

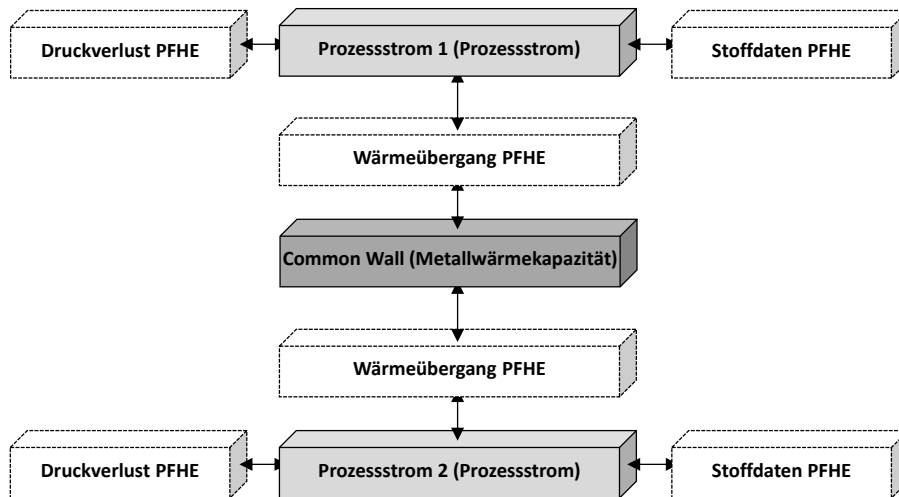


Abbildung 6.13: Repräsentation eines Plattenwärmeübertragers

Abb. 6.14 veranschaulicht eine mögliche Darstellung eines STHE mit N Rohrwegen durch die modulare Simulationsumgebung (vgl. Abb. 6.12). Die Rohre jedes Rohrwegs, eine Rohrfraktion, werden durch eine *Metallwärmekapazität* repräsentiert. Eine Rohrfraktion steht simultan mit dem mantelseitigen und dem korrespondierenden rohrseitigen Prozessstrom (Module vom Typ *Prozessstrom*) in thermischem Kontakt. Der Mantel des STHE wird durch eine weitere *Metallwärmekapazität* abgebildet. Der mantelseitige Prozessstrom interagiert mit den Metallwärmekapazitäten aller Rohrfraktionen und mit dem Mantel. Ein rohrseitiger Prozessstrom steht ausschließlich mit der korrespondierenden Rohrfraktion in thermischem Kontakt. Die Berechnung des Wärmeübergangs zwischen den Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen erfolgt durch die Module *Wärmeübergang STHE – Mantelseite vs. Mantel*, *Wärmeübergang STHE – Mantelseite vs. Rohr* und *Wärmeübergang STHE – Rohrseite vs. Rohr*. Für die Prozessströme werden die Stoffdaten durch die Module *Stoffdaten STHE – Rohrseite* bzw. *Stoffdaten STHE – Mantelseite* evaluiert und die Druckverluste mit den Modulen *Druckverlust STHE – Rohrseite* bzw. *Druckverlust STHE – Mantelseite* bestimmt.

Die Repräsentation eines CWHE durch die modulare Simulationsumgebung für Wärmeübertrager (vgl. Abb. 6.12) ist Abb. 6.15 zu entnehmen. Die Struktur ist vergleichbar mit der Modellierung eines STHE in Abb. 6.14. Das Kernrohr wird durch eine zusätzliche *Metallwärmekapazität* berücksichtigt. Diese steht mit dem mantelseitigen Prozessstrom in thermischem Kontakt.

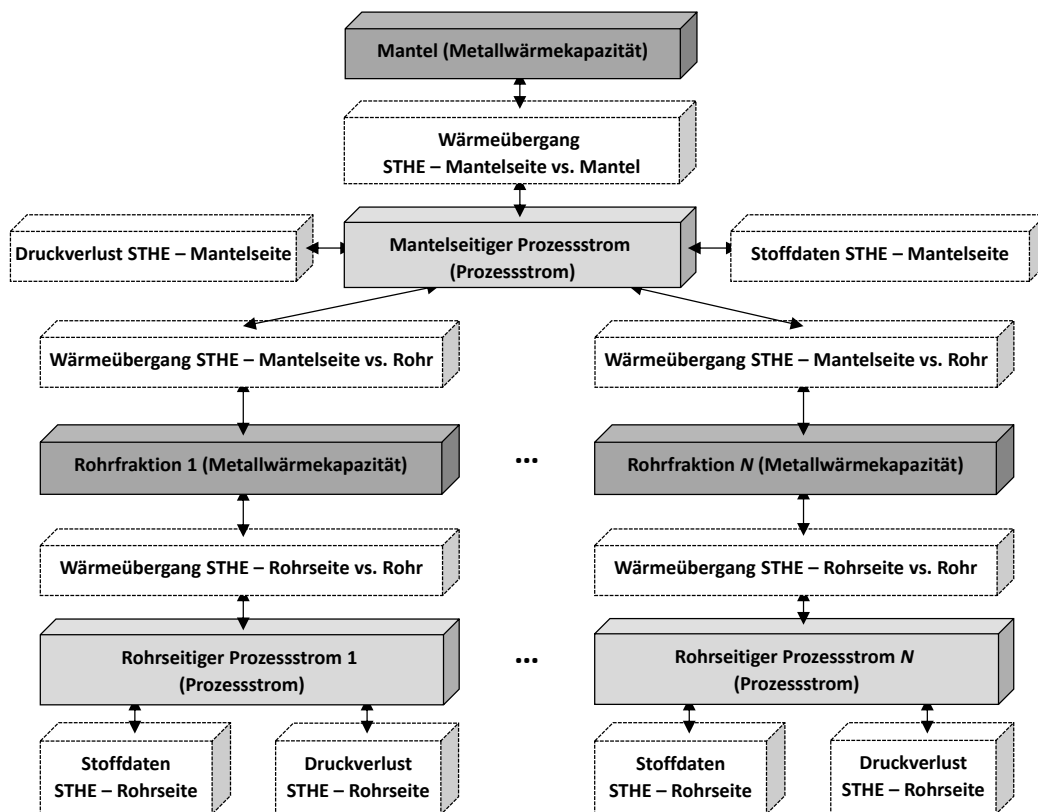


Abbildung 6.14: Repräsentation eines Rohrbündelwärmeübertragers

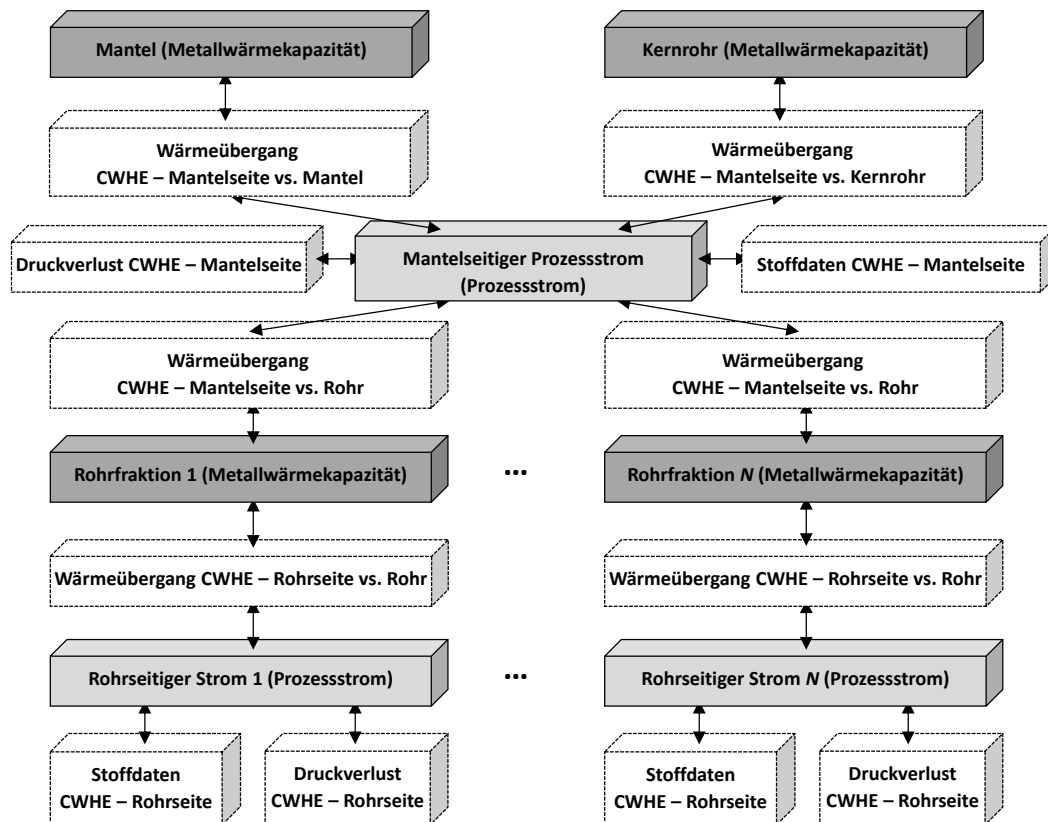


Abbildung 6.15: Repräsentation eines spiralgewickelten Wärmeübertragers

7 Validierung der Basismodule

Kapitel 6 beschreibt ausgewählte Simulationsverfahren für Wärmeübertrager, die in einer modular-hierarchischen Simulationsumgebung zusammengefasst sind. Diese beinhaltet Metallwärmekapazitäten und Prozessströme als Basismodule. Um verschiedene stationäre und dynamische Anwendungsfälle abzudecken, weisen die Simulationsverfahren unterschiedliche Ausprägungen der Teilegeichungssysteme von Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen auf, die im Folgenden validiert werden. Abschnitt 7.1 thematisiert die Metallwärmekapazitäten und Abschnitt 7.2 die Prozessströme.

7.1 Metallwärmekapazitäten

In diesem Abschnitt werden die verschiedenen Modelltiefen der Metallwärmekapazitäten mit analytischen Referenzlösungen validiert. Abschnitt 7.1.1 thematisiert die stationäre Wärmeleitung in einer eindimensionalen Metallwärmekapazität zur Validierung des Moduls *Metallwärmekapazität – Stationär*. In Abschnitt 7.1.2 wird durch die Anwendung der Methode der Blockkapazität auf das Modul *Metallwärmekapazität – Dynamisch* die Implementierung des konvektiven Wärmeübergangs validiert. Abschließend wird in Abschnitt 7.1.3 eine Referenzlösung für die eindimensionale, instationäre Wärmeleitung herangezogen, um deren Implementierung im Modul *Metallwärmekapazität – Dynamisch* zu validieren.

7.1.1 Stationäre Wärmeleitung

Das Modul *Metallwärmekapazität – Stationär* wird mit der analytischen Lösung für die stationäre Wärmeleitung in einer eindimensionalen, ebenen Platte (vgl. Abb. 7.1a) mit der charakteristischen Länge $L^* = 6.95 \text{ m}$ und der Wärmeleitfähigkeit $\lambda = 235 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$ validiert. Die Ortskoordinate der Platte wird mit x bezeichnet und durch

$$\xi = \frac{x}{L^*} \tag{7.1}$$

dimensionslos dargestellt. Die Randbedingungen des Wärmeleitungsproblems sind durch die Oberflächentemperaturen $T_1 = 303.15 \text{ K}$ bei $\xi = 0$ und $T_2 = 273.15 \text{ K}$ bei $\xi = 1$ gegeben. Die mit der dimensionslosen Temperatur

$$\theta = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1} \tag{7.2}$$

formulierte, entdimensionierte Laplace-Gleichung

$$\frac{d^2\theta}{d\xi^2} = 0 \quad (7.3)$$

beschreibt die Temperaturverteilung in der Platte. Die analytische Lösung

$$\theta(\xi) = \xi \quad (7.4)$$

entspricht einem linearen Verlauf zwischen den beiden Oberflächentemperaturen. Abb. 7.1b vergleicht die Referenzlösung mit den Simulationsergebnissen für eine Gitterauflösung von 200 finiten Volumen. Die Referenzlösung und die Simulation stimmen überein, sodass die im Modul *Metallwärmekapazität – Stationär* implementierten Zusammenhänge der stationären Wärmeleitung validiert sind.

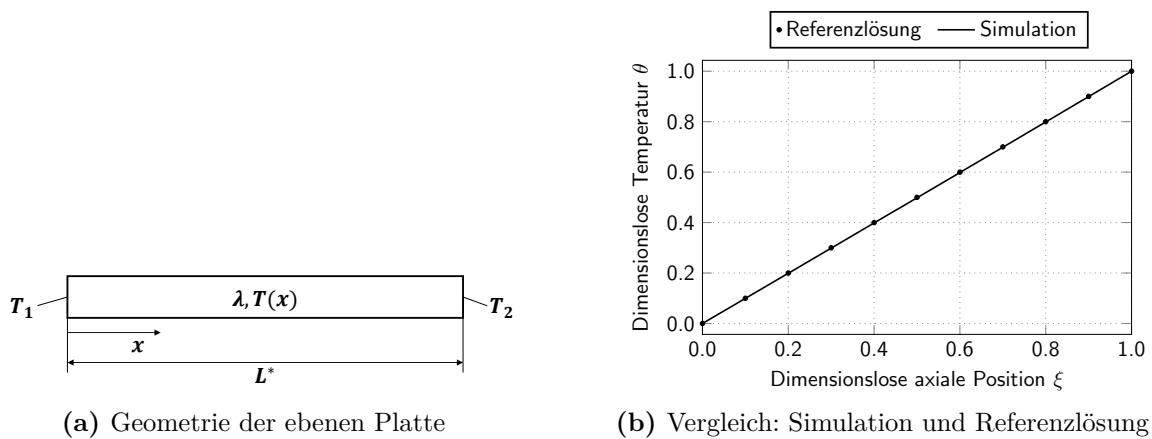


Abbildung 7.1: Validierung der stationären Wärmeleitung einer Metallwärmekapazität mit der analytischen Referenzlösung

7.1.2 Instationärer konvektiver Wärmeübergang

Die Methode der Blockkapazität ist eine Näherungslösung für den instationären, konvektiven Wärmeübergang von der Umgebung auf einen Festkörper. Dabei wird angenommen, dass der Wärmeleitwiderstand im Festkörper gegenüber dem konvektiven Wärmeübergangswiderstand vernachlässigbar ist. Im Folgenden wird die Methode der Blockkapazität auf eine Zylinderschale (vgl. Abb. 7.2) angewendet, um die Implementierung des konvektiven Wärmeübergangs in den Metallwärmekapazitätsmodellen der Simulationsumgebung für Wärmeübertrager zu überprüfen. Der konvektive Wärmeübergang findet ausschließlich auf der Innenseite der Zylinderschale mit der Fläche A statt und wird durch den Wärmeübergangskoeffizienten α sowie die Umgebungstemperatur T_∞ beeinflusst. Die Stirnflächen sowie die Außenfläche der Zylinderschale sind adiabat. Die Temperatur T wird bei der Methode der Blockkapazität als zeitlich veränderlich aber homogen im Festkörper angenommen. Die initiale Temperatur ist T_0 . Weitere charakteristische Parameter des Festkörpers sind Tab. 7.1 zu entnehmen.

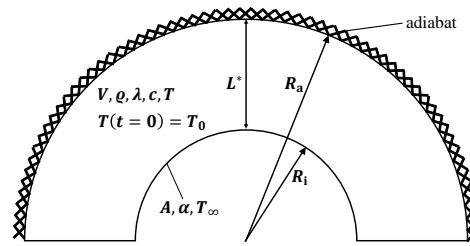


Abbildung 7.2: Geometrie der betrachteten Zylinderschale

Tabelle 7.1: Charakteristische Parameter der betrachteten Zylinderschale

Parameter	Wert
Dichte ρ	$2698.9 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Wärmeleitfähigkeit λ	$235.0 \frac{\text{W}}{\text{m K}}$
Wärmekapazität c	$897.0 \frac{\text{J}}{\text{kg K}}$
Innenradius R_i	1.0 m
Außenradius R_a	1.1 m
Charakteristische Länge L^*	0.1 m
Axiale Länge L	1.0 m
Wärmeübertragungsfläche A	3.242 m^2
Initiale Temperatur T_0	303.15 K
Umgebungstemperatur T_∞	273.15 K

Mit dem Wärmeübergangskoeffizient α wird die Biot-Zahl

$$\text{Bi} = \frac{\alpha L^*}{\lambda} \quad (7.5)$$

eingestellt. Diese beschreibt das Verhältnis von Wärmeleit- zu Wärmeübergangswiderstand. Die Methode der Blockkapazität gilt mit guter Näherung für $\text{Bi} < 0.10$ und damit für den Fall, dass der Wärmeübergangswiderstand den Wärmetransport zwischen Umgebung und Festkörper limitiert. [POLIFKE & KOPITZ 2009]

Eine integrale Energiebilanz des Festkörpers liefert die Differentialgleichung

$$\rho c V \frac{dT}{dt} = -\alpha A (T(t) - T_\infty), \quad (7.6)$$

welche die Festkörpertemperatur T in Abhängigkeit der folgenden Parameter beschreibt: initiale Temperatur T_0 und Umgebungstemperatur T_∞ in K, Zeit t in s, Wärmeübergangskoeffizient α in $\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$, Wärmeübertragungsfläche A in m^2 , Wärmekapazität c in $\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$, Dichte ρ in $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ und Volumen V in m^3 . Damit liegen acht unabhängige Größen bei sechs Einheiten (K, s, m, W, J, kg) vor. Nach dem II-Theorem von Buckingham

kann ein System mit n Parametern und m Einheiten durch $n - m$ linear unabhängige, dimensionslose Kennzahlen (Π -Gruppen) beschrieben werden. Die Methode der Blockkapazität kann somit mit den Π -Gruppen der dimensionslosen Temperatur

$$\theta = \frac{T - T_\infty}{T_0 - T_\infty} \quad (7.7)$$

und der dimensionslosen Zeit

$$\tau = \frac{t \alpha A}{\rho c V} \quad (7.8)$$

entdimensioniert werden. Die resultierende, dimensionslose Differentialgleichung

$$\frac{d\theta}{\theta} = -d\tau \quad (7.9)$$

hat die folgende analytische Lösung [POLIFKE & KOPITZ 2009]:

$$\theta = \exp(-\tau). \quad (7.10)$$

Wird die Zylinderschale durch ein Modul *Metallwärmekapazität - Dynamisch* mit genau einem finiten Volumen modelliert, entspricht dies der Methode der Blockkapazität. Dabei unterliegt eine Seitenfläche A dem konvektiven Wärmeübergang, alle anderen Seitenflächen sind adiabat. Abb. 7.3a vergleicht die Simulationsergebnisse für einen Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha = 23.5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$ ($Bi = 0.01$) mit der analytischen Lösung nach der Methode der Blockkapazität. Zudem visualisiert Abb. 7.3b die Simulationsergebnisse und die analytische Lösung für $\alpha = 2350.0 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$ ($Bi = 1.00$). Die Simulationsergebnisse und die analytische Lösung stimmen unabhängig von der Biot-Zahl überein, sodass die Implementierung des konvektiven Wärmeübergangs in den Modellen der Metallwärmekapazitäten als validiert betrachtet werden kann.

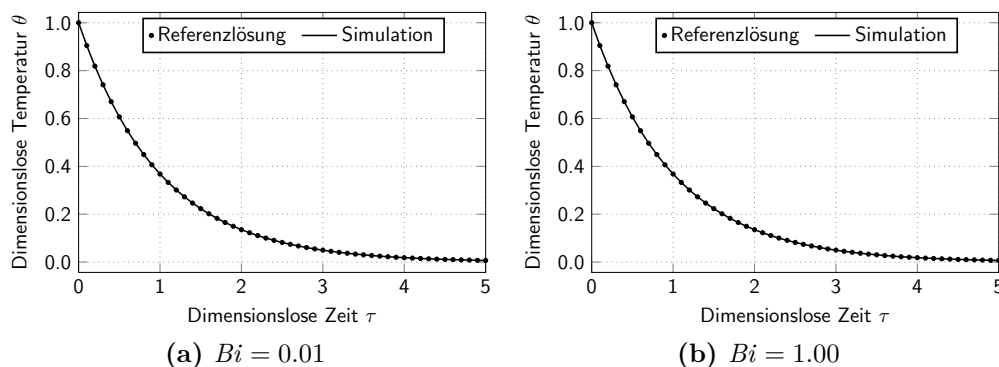


Abbildung 7.3: Vergleich der Methode der Blockkapazität mit Simulationsdaten

Da die Methode der Blockkapazität Wärmeleitwiderstände vernachlässigt, ist diese für $Bi < 0.10$ in guter Näherung gültig. Somit ist zu erwarten, dass die Entwicklung der mittleren Temperatur für $Bi = 0.01$ (vgl. Abb. 7.3a) dem realen Verhalten des Zylindermantels entspricht. Andererseits ist anzunehmen, dass das reale Verhalten

für $Bi = 1.00$ deutlich von Abb. 7.3b abweicht. Dies wird in Abb. 7.4 anhand von Simulationen veranschaulicht, welche den Zylindermantel radial mit 3, 10 bzw. 100 finiten Volumen diskretisieren. Mit steigender Anzahl an finiten Volumen wird der Einfluss der Wärmeleitung mit zunehmender Genauigkeit erfasst. Abb. 7.4a zeigt, dass die Anwendung der Methode der Blockkapazität für $Bi = 0.01$ zulässig ist. Die Änderung der mittleren Temperatur des Festkörpers hängt nicht von der radialen Auflösung mit finiten Volumen ab. Abb. 7.4b zeigt mit zunehmender radialer Auflösung hingegen eine Verschiebung des zeitlichen Verlaufs der mittleren Temperatur hin zu höheren Temperaturen.

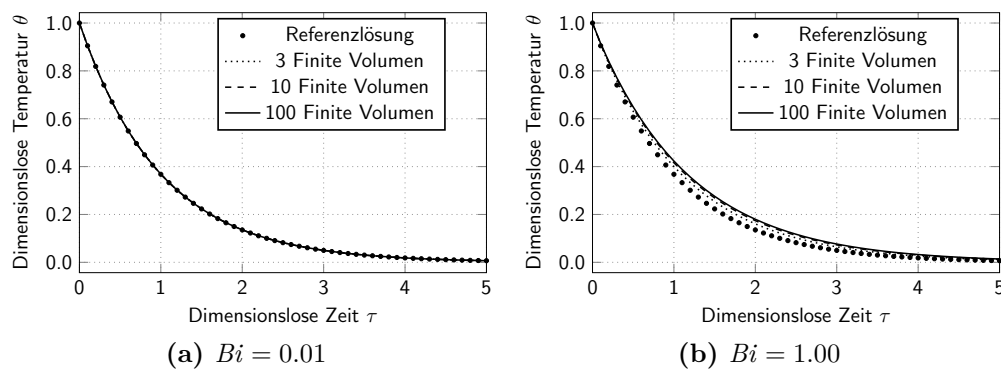


Abbildung 7.4: Vergleich der Methode der Blockkapazität mit Simulationsdaten für verschiedene radiale Auflösungen

Um Wärmetransportprobleme mit einem signifikantem Einfluss der Wärmeleitung zu validieren, ist die Methode der Blockkapazität somit nicht hinreichend. Daher wird im folgenden Abschnitt eine alternative Referenzlösung herangezogen, welche die instationäre Wärmeleitung in eindimensionalen Festkörpern beschreibt.

7.1.3 Instationäre Wärmeleitung

Um die Implementierung des Moduls *Metallwärmekapazität – Dynamisch* zu validieren, wird die analytische Lösung des instationären Wärmeleitungsproblems in einem eindimensionalen Festkörper herangezogen. Der betrachtete Festkörper (vgl. Abb. 7.5) mit der charakteristischen Länge L^* weist bei $x = 0$ eine adiabate Randbedingung auf. Bei $x = L^*$ liegt ein konvektiver Wärmeübergang mit dem Wärmeübergangskoeffizienten α zwischen dem Festkörper und der Umgebung mit der Temperatur T_∞ vor. Der Wärmeübergangskoeffizient α stellt den Freiheitsgrad dar, um verschiedene Biot-Zahlen Bi einzustellen. Weitere Kenngrößen des Festkörpers sind Tab. 7.2 zu entnehmen.

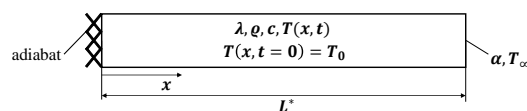


Abbildung 7.5: Wärmeleitung im eindimensionalen Festkörper

Tabelle 7.2: Charakteristische Parameter des eindimensionalen Festkörpers

Parameter	Wert
Dichte ρ	2698.9 $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Wärmeleitfähigkeit λ	235.0 $\frac{\text{W}}{\text{m K}}$
Wärmekapazität c	897.0 $\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$
Charakteristische Länge L^*	10.0 m
Querschnittsfläche A	1.0 m ²
Initiale Temperatur T_0	303.15 K
Umgebungstemperatur T_∞	273.15 K

Zu Beginn des instationären Wärmeleitvorgangs liegt eine homogene Temperatur T_0 im Festkörper vor. Die Fourier'sche Differentialgleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (7.11)$$

beschreibt die zeitliche Entwicklung der Temperatur $T(x, t)$ im Festkörper. Um eine analytische Referenzlösung abzuleiten, wird die Gleichung mit der Fourier-Zahl

$$Fo = \frac{\lambda t}{\rho c (L^*)^2}, \quad (7.12)$$

dem Verhältnis zwischen dem thermischen Diffusionslängenmaß und dem Längenmaß L^* , und der dimensionslosen Länge nach Gleichung (7.1) entdimensioniert:

$$\frac{\partial \theta(Fo, \xi)}{\partial Fo} = \frac{\partial^2 \theta(Fo, \xi)}{\partial \xi^2}. \quad (7.13)$$

Zudem fließen bei der Entdimensionierung die Biot-Zahl nach Gleichung (7.5) und die dimensionslose Temperatur τ (vgl. Gleichung (7.7)) ein. Wird ein Separationsansatz auf die entdimensionierte Fourier'sche Differentialgleichung (7.13) angewendet, ergibt sich eine Sturm-Liouville'sche Eigenwertaufgabe mit der Reihenlösung

$$\theta(Fo, \xi, Bi) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k \theta_k = \sum_{k=1}^{\infty} C_k \cos(\delta_k \xi) \exp(-\delta_k^2 Fo) \quad (7.14)$$

für die zeitabhängige Temperaturverteilung. Diese basiert auf den Koeffizienten

$$C_k = \frac{2 \sin(\delta_k)}{\delta_k + \sin(\delta_k) \cos(\delta_k)} \quad \text{mit} \quad k = 1, 2, \dots, \infty. \quad (7.15)$$

Die zeitliche Entwicklung der durch Integration von Gleichung (7.14) entlang der dimensionslosen Ortskoordinate ξ gemittelten Temperatur $\bar{\theta}$ des eindimensionalen Festkörpers wird durch

$$\bar{\theta}(Fo) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k \frac{\sin(\delta_k)}{\delta_k} \exp(-\delta_k^2 Fo) \quad (7.16)$$

beschrieben. Die Parameter δ_k und die Koeffizienten C_k hängen über die Beziehung

$$\frac{Bi}{\delta_k} = \tan(\delta_k) \quad (7.17)$$

implizit von der Biot-Zahl ab. In dieser Arbeit werden die ersten sechs Glieder der analytischen Reihenlösung zur Validierung herangezogen. Daher sind die Parameter δ_1 bis δ_6 und die Koeffizienten C_1 bis C_6 erforderlich (vgl. Tab. 7.3 und 7.4). [POLIFKE & KOPITZ 2009, CARSLAW & JAEGER 2011]

Tabelle 7.3: Parameter δ_k der Reihenlösung der instationären Wärmeleitung

Bi	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
0.01	0.0998	3.1448	6.2848	9.4258	12.5672	15.7086
0.10	0.3111	3.1731	6.2991	9.4354	12.5743	15.7143
1.00	0.8603	3.4256	6.4373	9.5293	12.6453	15.7713
10.00	1.4289	4.3058	7.2281	10.2003	13.2142	16.2594

Tabelle 7.4: Koeffizienten C_k der Reihenlösung der instationären Wärmeleitung

Bi	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6
0.01	1.001660	-0.002038	0.000514	-0.000217	0.000132	-0.000081
0.10	1.016099	-0.019661	0.005040	-0.002249	0.001260	-0.000806
1.00	1.119123	-0.151684	0.046595	-0.021661	0.012394	-0.007995
10.00	1.261967	-0.393432	0.210427	-0.130855	0.088126	-0.062723

In Abb. 7.6 wird die analytische Reihenlösung für verschiedene Biot-Zahlen mit Simulationsergebnissen verglichen, die mit dem Modul *Metallwärmekapazität – Dynamisch* und einer Diskretisierung mit 200 finiten Volumen ermittelt wurden. Je größer die Biot-Zahl, desto größer ist der Einfluss des konvektiven Wärmeübergangs auf den Wärmetransport. Für den Fall $Bi = 0.01$ stellt sich daher eine langsame Abkühlung der Metallwärmekapazität ein (vgl. Abb. 7.6a). Nach $Fo = 5.0$ nimmt die dimensionslose Temperatur $\bar{\theta}$ den Wert 0.95 an. Mit zunehmender Biot-Zahl nimmt die Geschwindigkeit der Abkühlung der Metallwärmekapazität zu. Nach $Fo = 5.0$ liegt für $Bi = 0.10$ eine dimensionslose Temperatur $\bar{\theta} = 0.61$ vor (vgl. Abb. 7.6b). Abb. 7.6c zeigt, dass sich für eine Biot-Zahl von 1.00 die Temperatur bei $Fo = 5.0$ der Umgebungstemperatur

annähert. Für $Bi = 10.00$ nimmt die Metallwärmekapazität bereits nach $Fo = 3.0$ die Umgebungstemperatur an (vgl. Abb. 7.6d). Unabhängig von der Biot-Zahl ist eine sehr gute Übereinstimmung von Referenzlösung und Simulation zu verzeichnen. Daher kann die Implementierung des Moduls *Metallwärmekapazität – Dynamisch* als validiert betrachtet werden.

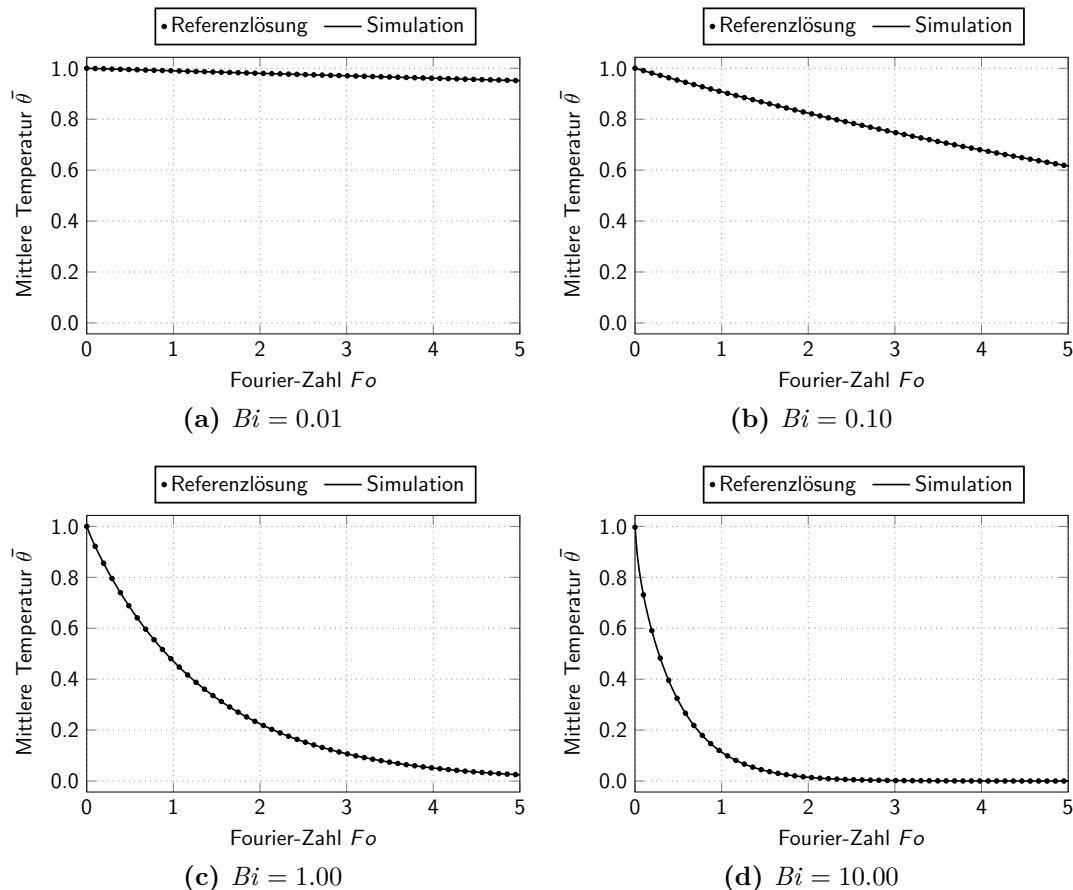


Abbildung 7.6: Vergleich von Simulationsergebnissen mit der analytischen Reihenlösung für die eindimensionale instationäre Wärmeleitung

7.2 Prozessstrommodelle

In diesem Abschnitt werden die Prozessstrommodelle unterschiedlicher Modelltiefe (vgl. Kapitel 6) validiert. In Abschnitt 7.2.1 wird die Implementierung der Energiebilanz durch eine analytische Referenzlösung überprüft. In Abschnitt 7.2.2 werden die Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust exemplarisch für Prozessströme ausgewählter PFHE mit dem kommerziellen Auslegungsprogramm UniSim[®] PFE validiert.

7.2.1 Analytische Referenzlösung

Die Gleichungen (6.90) und (6.91) beschreiben die Änderung des Enthalpiestroms an einem Punkt eines stationär betrachteten Prozessstroms vollständig, wenn die Temperaturen aller in thermischem Kontakt stehenden Metallwärmekapazitäten bekannt sind. Im Folgenden wird angenommen, dass der betrachtete Prozessstrom mit genau einer Metallwärmekapazität s in thermischem Kontakt steht, die eine in Strömungsrichtung konstante Temperatur T_s aufweist. Der Wärmeübergangskoeffizient $\alpha_{i,s}$ und die längenspezifische effektive Wärmeübertragungsfläche $a_{x,\text{eff},i,s}$ sind Konstanten. Daher vereinfachen sich die gekoppelten Gleichungen (6.90) und (6.91) zum skalaren Zusammenhang

$$\frac{\partial \dot{H}_i}{\partial x} = \dot{q}_{x,\alpha,i,s} = \alpha_{i,s} \cdot a_{x,\text{eff},i,s} \cdot (T_s - T(\dot{H}_i)), \quad (7.18)$$

der vom nicht-linearen Temperatur-Enthalpie-Zusammenhang $T(\dot{H}_i)$ des Prozessstroms abhängt. Für den Spezialfall eines linearen Temperatur-Enthalpie-Zusammenhangs kann eine analytische Lösung zur Validierung der verschiedenen Prozessstrommodelle abgeleitet werden. Daher wird ein konstanter Wärmekapazitätsstrom

$$\dot{N}_i \cdot \bar{c}_{p,i} = \left(\frac{\partial \dot{H}_i}{\partial T(\dot{H}_i)} \right)_p = \text{const.} \quad (7.19)$$

angenommen. Die Integration dieses Zusammenhangs liefert die lineare Beziehung

$$T(\dot{H}_i) = T(\dot{H}_{i,0}) + \frac{\dot{H}_i - \dot{H}_{i,0}}{\dot{N}_i \cdot \bar{c}_{p,i}} \quad (7.20)$$

zwischen Temperatur und Enthalpie. Der Referenz-Enthalpiestrom $\dot{H}_{i,0}$ wird für diese Betrachtung gleich dem Enthalpiestrom am Eintritt des Prozessstroms gesetzt. Wird Gleichung (7.20) in Gleichung (7.18) eingesetzt, resultiert eine inhomogene gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung mit der analytischen Lösung

$$\dot{H}_i = \dot{H}_{i,0} + \dot{N}_i \cdot \bar{c}_{p,i} \cdot (T_s - T(\dot{H}_{i,0})) \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{\alpha_{i,s} \cdot a_{x,\text{eff},i,s}}{\dot{N}_i \cdot \bar{c}_{p,i}} \cdot x\right) \right). \quad (7.21)$$

Im Folgenden werden Simulationsergebnisse der Prozessstrommodelle verschiedener Modelltiefe (vgl. Abschnitt 6.5) mit der analytischen Lösung in Gleichung (7.21) verglichen. Da die Annahme eines konstanten Wärmekapazitätsstroms in der Gasphase näherungsweise erfüllt ist, wird ein gasförmiger Stickstoffstrom, der durch eine Metallwärmekapazität der Länge $L = 5.0$ m abgekühlt wird, herangezogen. Die charakteristischen Parameter des Validierungsszenarios sind Tab. 7.5 zu entnehmen.

Tabelle 7.5: Charakteristische Parameter des Validierungsszenarios

Parameter	Wert
Wärmeübergangskoeffizient $\alpha_{i,s}$	$200.0 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$
Wärmeübertragungsfläche $a_{x,\text{eff},i,s}$	$63.4 \frac{\text{m}^2}{\text{m}}$
Metalltemperatur T_s	300.0 K
Eintrittstemperatur $T(\dot{H}_{i,0})$	400.0 K
Eintrittsenthalpie $\dot{H}_{i,0}$	$22\,961.4 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$
Molare Wärmekapazität $\bar{c}_{p,i}$	$29.2 \frac{\text{J}}{\text{molK}}$
Stoffmengenstrom \dot{N}_i	$500.0 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$

In Abb. 7.7 werden die Prozessstrommodelle verschiedener Modelltiefe (vgl. Abschnitt 6.5) anhand des Temperaturprofils des Prozessstroms mit der analytischen Lösung in Gleichung (7.21) verglichen. Es werden jeweils Diskretisierungen mit 50, 100 und 200 finiten Volumen betrachtet, um den Einfluss der Gitterauflösung zu analysieren. Für alle Modelltiefen stimmen die Simulationsergebnisse gut mit der analytischen Lösung überein, sodass die Implementierung der Energiebilanz als validiert zu betrachten ist.

Die Detailaufnahmen der Abb. 7.7a bis 7.7f verdeutlichen den Einfluss der gewählten Diskretisierung auf die Simulationsergebnisse. Die Modelle *Prozessstrom – Holdup DAE*, *Prozessstrom – Holdup ODE*, *Prozessstrom – Stationär AE* und *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* (vgl. Abb. 7.7a bis 7.7e) lösen die Geometrie des Prozessstroms mit finiten Volumen auf. Daher nähert sich die numerische Lösung der analytischen Referenzlösung mit zunehmender Gitterauflösung an. Dies ist darauf zurückzuführen, dass in dieser Arbeit eine erster Ordnung genaue implizite Diskretisierung der Temperaturdifferenz, die in den konvektiven Wärmeübergang eingeht, herangezogen wird, um eine numerisch robuste Berechnung von Wärmeübertragern sicherzustellen. Eine Ausnahme stellen die Simulationsergebnisse in Abb. 7.7d dar. Bereits für eine Gitterauflösung mit 50 finiten Volumen kann keine Abweichung von der analytischen Referenzlösung verzeichnet werden. Die Simulation nutzt eine zweiter Ordnung genaue Diskretisierung der Temperaturdifferenz, welche in die Berechnung des konvektiven Wärmeübergangs eingeht, mittels einer zentralen Differenz. Auch für das Modell *Prozessstrom – Stationär Integration* ist kein Einfluss der Gitterauflösung auf die Simulationsergebnisse festzustellen (vgl. Abb. 7.7f). Das eingesetzte axiale Integrationsverfahren integriert die differentielle Form der stationären Impuls- und Energiebilanzen des Prozessstroms von Eintritt zu Austritt. Die Schrittweite wird in Abhängigkeit einer lokalen Fehlerschätzung bestimmt und hängt nicht von der Gitterauflösung der in thermischem Kontakt stehenden Metallwärmekapazitäten ab. Die Gitterauflösung definiert lediglich die Positionen, an denen die Lösungsvariablen der Integration ausgegeben werden.

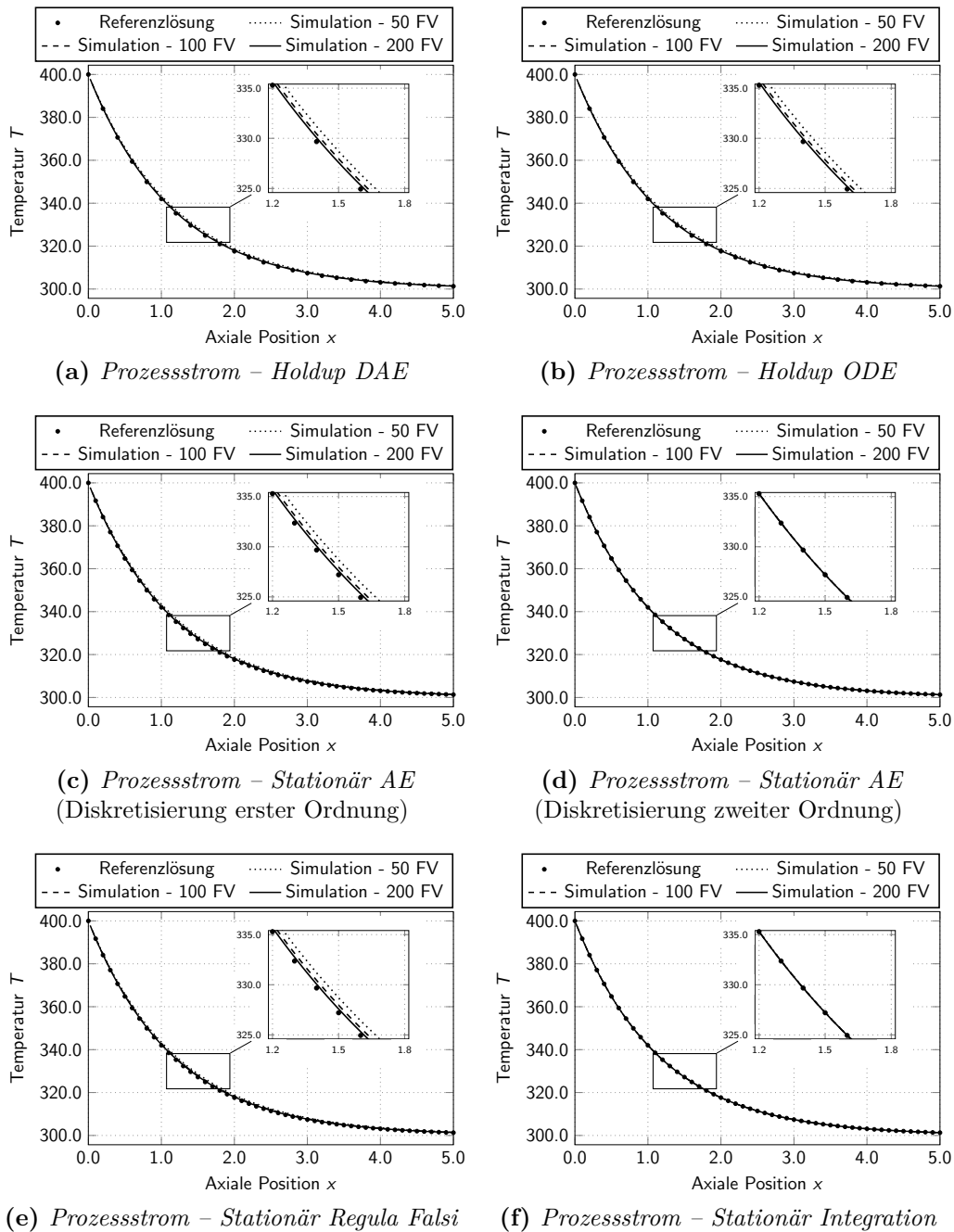


Abbildung 7.7: Vergleich von Simulationsergebnissen mit der analytischen Referenzlösung für das Temperaturprofil eines Prozessstroms

7.2.2 Vergleich mit stationären Auslegungsprogrammen

In Abschnitt 7.2.1 wurde die Energiebilanz für die verschiedenen Prozessstrommodelle validiert. Diese nutzen die gleiche Implementierung der Korrelationen für Druckverlust und Wärmeübergang, die daher im Folgenden exemplarisch anhand des Modells *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* für ausgewählte PFHE validiert werden. Dabei wird auf ein in dieser Arbeit entwickeltes, automatisiertes Vorgehen zur Validierung

von Prozessströmen mit dem kommerziellen Auslegungsprogramm UniSim[®] PFE als Referenz zurückgegriffen. Dieses umfasst die folgenden Schritte:

- 1.) Berechnung eines vollständigen PFHE mit UniSim[®] PFE,
- 2.) Extraktion des Metalltemperaturprofils als Randbedingung der Prozessströme,
- 3.) Extraktion der Eintrittsbedingungen für den zu validierenden Prozessstrom,
- 4.) Berechnung des zu validierenden Prozessstroms mit einem Prozessstrommodell,
- 5.) Vergleich der Ergebnisse.

An dieser Stelle wird die Berechnung je eines gasförmigen, flüssigen, überkritischen, kondensierenden und verdampfenden Prozessstroms mit der Randbedingung eines vorgegebenen Metalltemperaturprofils betrachtet. Der Vergleich erfolgt anhand der Profile von Temperatur bzw. Gasphasenanteil, Reibungsdruckverlust, Wärmeübergangskoeffizient und Fin-Wirkungsgrad.

Gasphase In Abb. 7.8 wird der Hauptluftstrom einer ASU (vgl. Abb. 1.1) betrachtet.

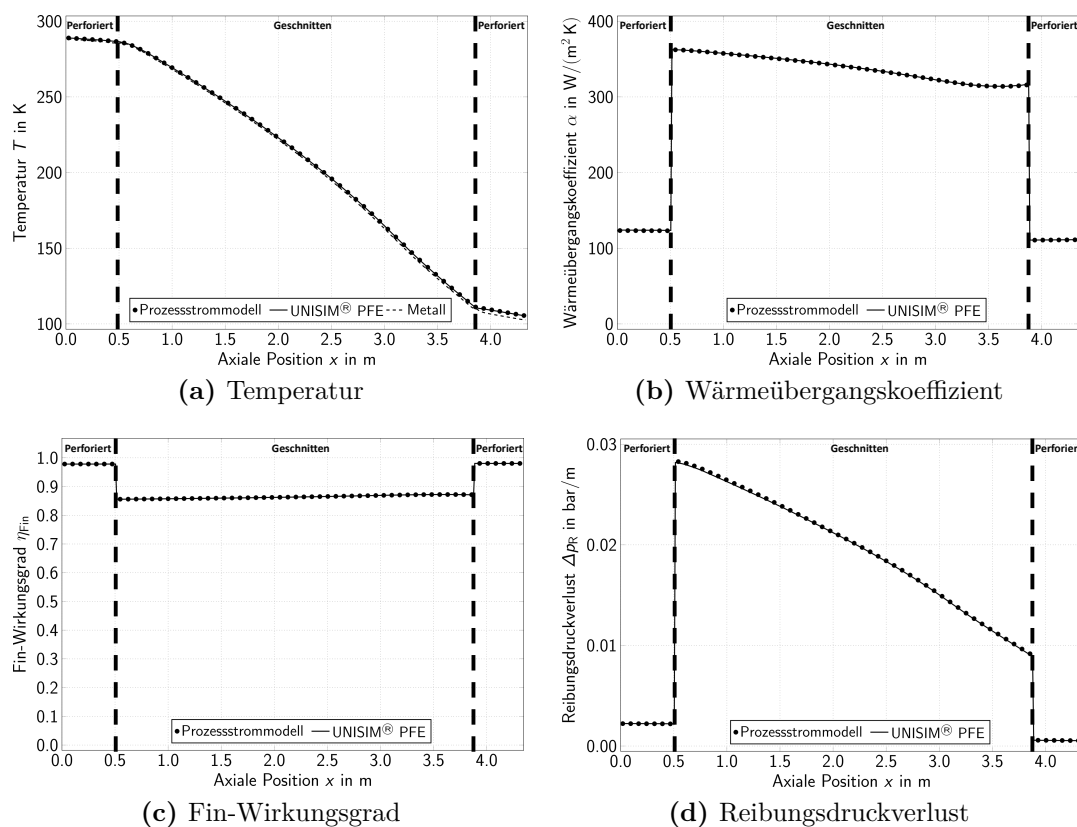


Abbildung 7.8: Validierung der Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust in der Gasphase mit UniSim[®] PFE

Der gasförmige Hauptluftstrom tritt bei $x = 0.0$ m in den Hauptwärmeübertrager ein und wird sukzessive abgekühlt. Die Abkühlung erfolgt in den perforierten Verteiler- und Sammlerfins aufgrund der geringeren Wärmeübergangskoeffizienten langsamer als in den

geschnittenen Hauptfins (vgl. Abb. 7.8a und 7.8b). Der Fin-Wirkungsgrad hängt indirekt proportional vom Wärmeübergangskoeffizienten ab, sodass dieser in den perforierten Verteiler- und Sammlerfins höher ist als in den geschnittenen Hauptfins (vgl. Abb. 7.8c). Die Fin-Geometrie hat einen signifikanten Einfluss auf den Reibungsdruckverlust (vgl. Abb. 7.8d), der in diesem Beispiel in den Hauptfins höher ist als in den Sammler- und Verteilerfins. Es kann von einer guten Übereinstimmung der betrachteten Profile gesprochen werden, sodass die Wärmeübergangs- und Druckverlustkorrelationen für gasförmige Prozessströme als validiert betrachtet werden können.

Flüssigphase In Abb. 7.9 werden die Korrelationen für die Flüssigphase anhand eines Kühlwasserstroms validiert.

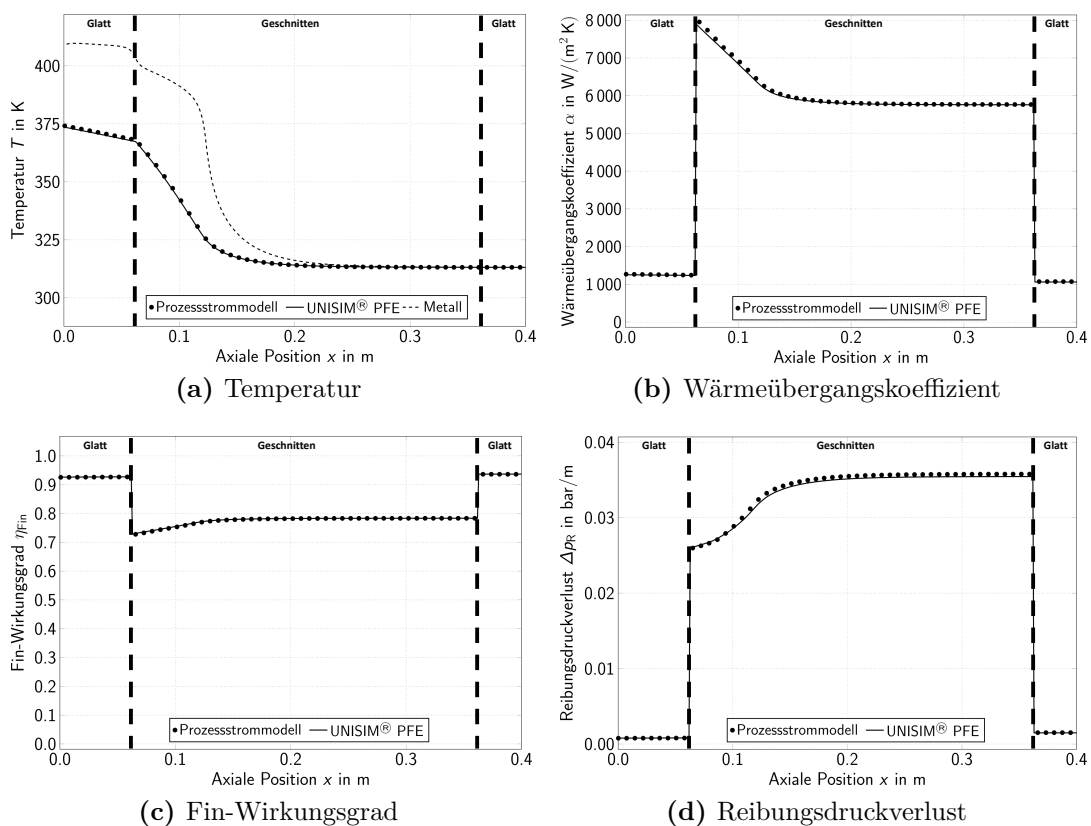


Abbildung 7.9: Validierung der Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust in der Flüssigphase mit UniSim® PFE

Der Kühlwasserstrom tritt bei $x = 0.4$ m in einen Kondensator ein. Da der Kondensator im Gegenstrom betrieben wird, ist die Erwärmung des Kühlwasserstroms von zwei Bereichen gekennzeichnet (vgl. Abb. 7.9a). Zwischen $x = 0.0$ m und $x = 0.2$ m kondensiert der warme Prozessstrom, sodass zwischen Metalltemperatur und Kühlwasserstrom eine große Temperaturdifferenz vorliegt. Zwischen $x = 0.2$ m und $x = 0.4$ m hingegen ist die Kondensation abgeschlossen und die Überhitzung des Metalls geht gegen Null. Der Temperatureinfluss auf die Stoffdaten und damit auf den Wärmeübergangskoeffizienten (vgl. Abb. 7.9b), den Fin-Wirkungsgrad (vgl. Abb. 7.9c) und den Reibungsdruckverlust

(vgl. Abb. 7.9d) ist insbesondere zwischen $x = 0.06$ m und $x = 0.2$ m zu beobachten. Insgesamt liegt eine gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit UniSim[®] PFE vor, sodass die Korrelationen für den Druckverlust und den Wärmeübergang in der Flüssigphase als validiert bezeichnet werden können.

Überkritischer Bereich Bei der Stickstoffverflüssigung werden häufig überkritische Prozessströme durch den Hauptwärmeübertrager der NLU (vgl. Abb. 1.3) geführt, sodass diese Anwendung zur Validierung der Wärmeübergangs- und Druckverlustkorrelationen im überkritischen Bereich herangezogen wird (vgl. Abb. 7.10). Der betrachtete Prozessstrom tritt bei $x = 0.0$ m in den Wärmeübertrager ein, unterliegt bei $x = 0.2$ m einem Wechsel von glatten auf geschnittene Fins und wird sukzessive abgekühlt. Aufgrund der guten Übereinstimmung der Berechnungsergebnisse mit UniSim[®] PFE werden die Korrelationen für den überkritischen Bereich als validiert betrachtet.

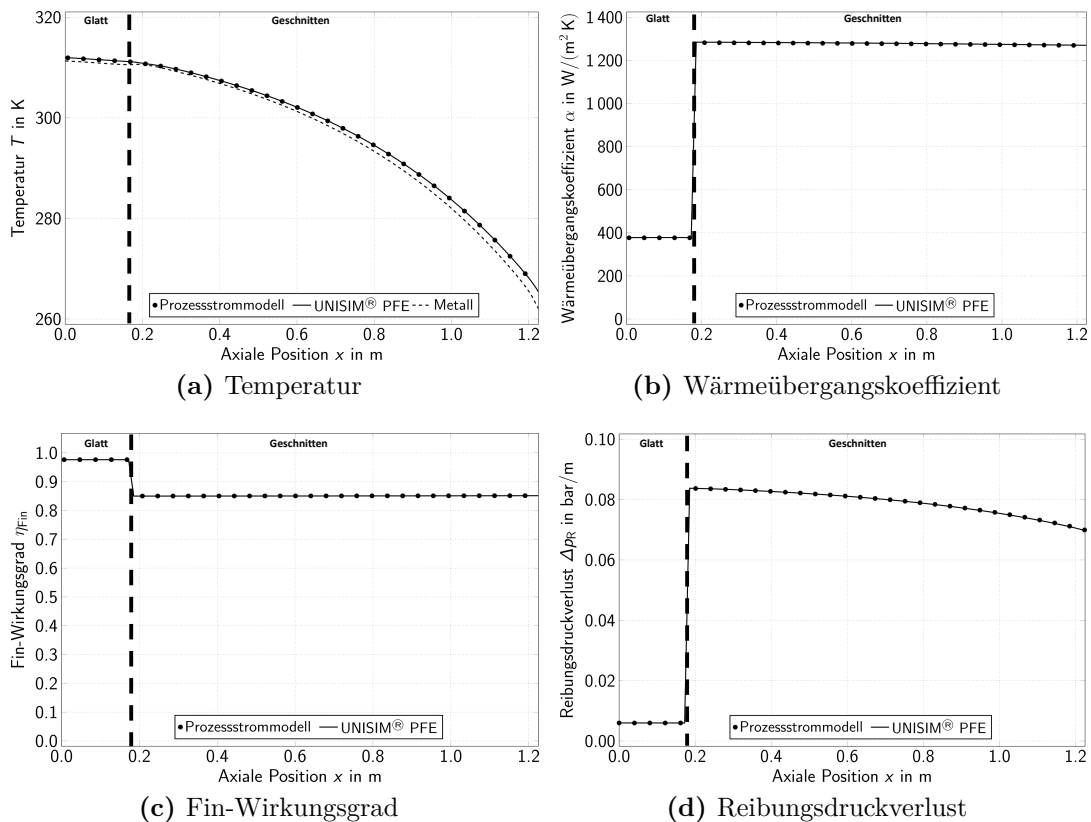


Abbildung 7.10: Validierung der Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust im überkritischen Bereich mit UniSim[®] PFE

Kondensation In Abb. 7.11 wird ein PFHE einer Erdgasanlage betrachtet. Ein Propan-reicher Prozessstrom tritt bei $x = 0.0$ m gasförmig ein und wird in den glatten Verteiler- und Sammlerfins sowie in den geschnittenen Hauptfins gegen einen kalten Gasstrom kondensiert. Die Kondensation setzt bei $x = 0.65$ m ein und ist bei $x = 3.4$ m abgeschlossen. Ab dieser axialen Position wird der nun flüssige Prozessstrom weiter unterkühlt. Während der Kondensation nimmt der Massenanteil der Gasphase mit

zunehmender Steigung ab (vgl. Abb. 7.11a). Dies ist auf das Zusammenspiel von Wärmeübergangskoeffizient (vgl. Abb. 7.11b), Fin-Wirkungsgrad (vgl. Abb. 7.11c) und treibender Temperaturdifferenz zurückzuführen. Der Reibungsdruckverlust im Zweiphasengebiet liegt gemäß Abb. 7.11d höher als in der Gas- oder Flüssigphase. Aufgrund der guten Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit UniSim[®] PFE können die Korrelationen für die Kondensation als validiert betrachtet werden.

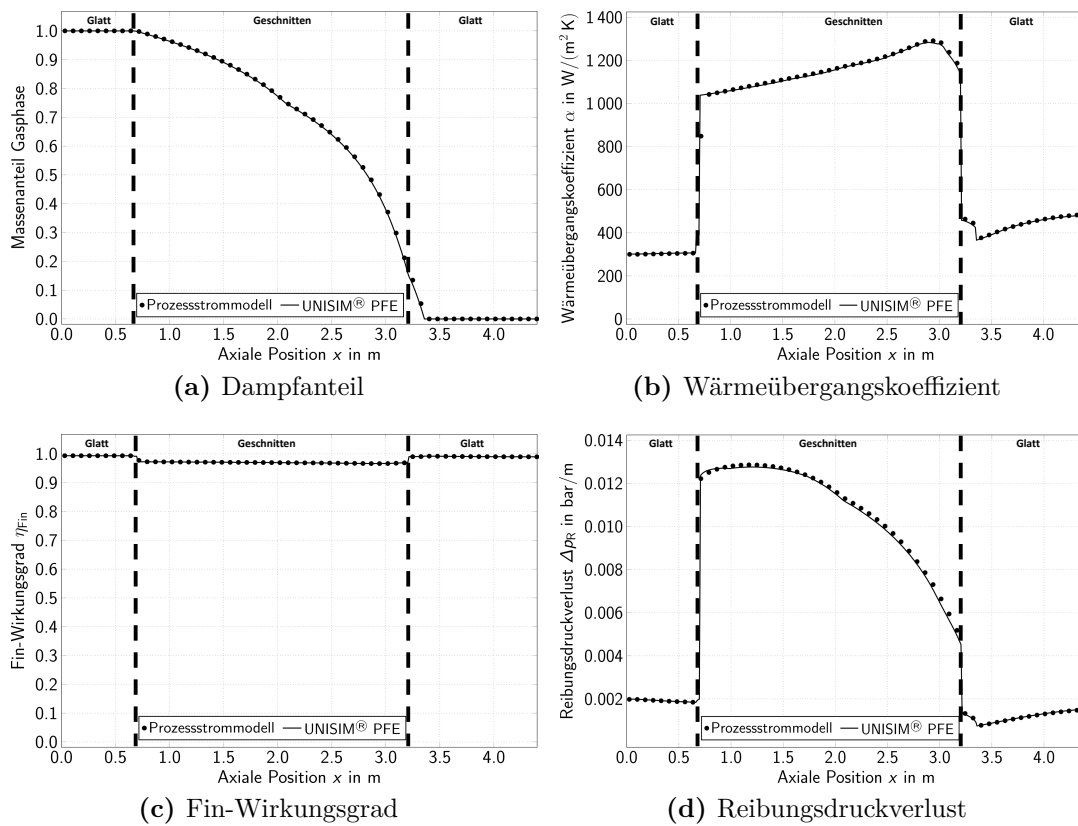


Abbildung 7.11: Validierung der Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust bei Kondensation mit UniSim[®] PFE

Verdampfung Zur Validierung der Korrelationen bei Verdampfung wird in Abb. 7.12 ein Prozessstrom herangezogen, der bei $x = 0,85$ m flüssig in einen Verdampfer mit ausschließlich glatten Fins eintritt. Bis zur Position $x = 0,42$ m wird der Prozessstrom vorgewärmt, ehe die Verdampfung einsetzt. Bei $x = 0,00$ m verlässt der Prozessstrom den Verdampfer vollständig gasförmig (vgl. Abb. 7.12a). Der Wärmeübergangskoeffizient liegt im Zweiphasengebiet deutlich höher als während der Vorwärmung in der Flüssigphase (vgl. Abb. 7.12b), was zu einer Reduktion des Fin-Wirkungsgrads führt (vgl. Abb. 7.12c). Verlauf und Wertebereich der mit dem Prozessstrommodell berechneten Wärmeübergangskoeffizienten und Fin-Wirkungsgrade stimmen mit UniSim[®] PFE überein. Für diese Arbeit ist somit davon auszugehen, dass die Implementierung der Wärmeübergangskorrelationen bei Verdampfung alle wesentlichen Einflussfaktoren auf den Wärmeübergang berücksichtigt. Der qualitative Verlauf der Profile von Wärmeübergangskoeffizient und Fin-Wirkungsgrad zeigt jedoch Abweichungen im Vergleich mit UniSim[®] PFE, welche

auf unterschiedliche Methoden zur Berechnung der relevanten Stoffdaten und die hohe Sensitivität der Verdampfungskorrelationen gegenüber bestimmten Stoffdaten zurückzuführen sind. UniSim[®] PFE basiert auf einer Stoffdateninterpolation, für die in dieser Arbeit entwickelte Simulationsumgebung wird eine lokale, akkurate Stoffdatenberechnung eingesetzt. Der Reibungsdruckverlust steigt mit dem Dampfanteil sukzessive an, was auf die Volumenzunahme der Zweiphasenströmung zurückzuführen ist (vgl. Abb. 7.12d). Die Druckverlustkorrelationen zeigen eine gute Übereinstimmung mit UniSim[®] PFE. Lediglich für Dampfanteile nahe 0.0 und 1.0 sind geringe Abweichungen zu verzeichnen. Diese sind auf unterschiedliche Maßnahmen zur numerischen Stabilisierung, z.B. Regularisierungen, im Bereich hoher und niedriger Dampfanteile zurückzuführen.

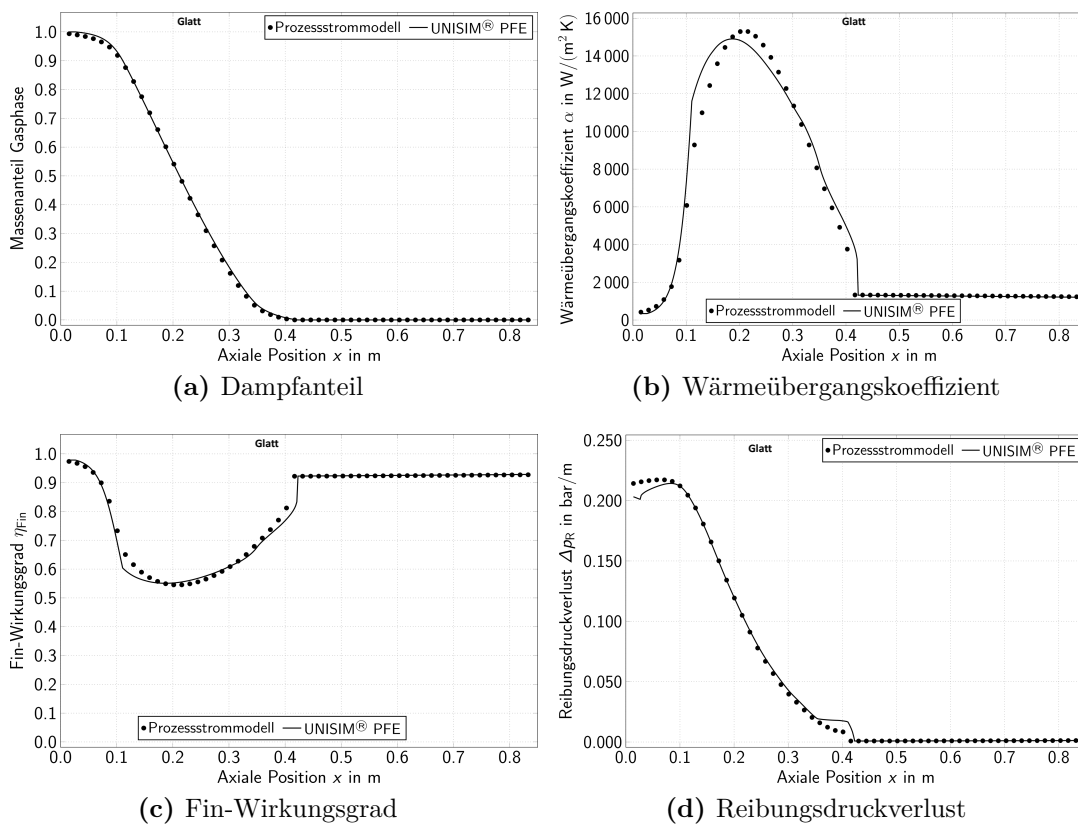


Abbildung 7.12: Validierung der Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust bei Verdampfung mit UniSim[®] PFE

8 Validierung und Nachrechnung von Wärmeübertragern

Nach der Validierung der Basismodule der Simulationsumgebung für Wärmeübertrager (Metallwärmekapazitäten und Prozessstrommodelle) in Kapitel 7 wird in Abschnitt 8.1 der stationäre Zustand des MHEX einer ASU (vgl. Abb. 1.1) mit der kommerziellen Auslegungssoftware UniSim[®] PFE validiert. Dabei werden die Auswirkungen der Diskretisierung des Wärmeübertragers auf die Simulationsergebnisse thematisiert. Zudem wird die Bedeutung einer akkuraten Auflösung der Geometrie entlang der Hauptströmungsrichtung der Prozessströme sowie adäquater Wärmeübergangskorrelationen herausgearbeitet. Anschließend wird analysiert, ob die Auflösung der Stapelfolge eines PFHE für dynamische Studien erforderlich ist. Abschließend werden in Abschnitt 8.2 die verschiedenen, in dieser Arbeit entwickelten Verfahren zur Nachrechnung von Wärmeübertragern gegenübergestellt. Alle Simulationen wurden auf einem Notebook mit Intel[®] Core[™] i5-6300U Prozessor (bei 2.4 GHz) und 8 GB Arbeitsspeicher durchgeführt.

8.1 Validierung eines Hauptwärmeübertragers

Abb. 8.1 visualisiert vereinfacht die Topologie des exemplarisch betrachteten MHEX. Die komprimierte Umgebungsluft, LUFT, wird in zwei Prozessströme, LUFT1 und LUFT2, aufgeteilt. Der größere der Teilströme, LUFT1, wird über die gesamte Länge des MHEX abgekühlt. LUFT2 durchströmt den MHEX teilweise und wird in der Expansionsturbine der ASU entspannt. Die warmen Prozessströme LUFT1 und LUFT2 werden im MHEX mit den kalten Produktströmen PGAN, GAN, CGN und GOX thermisch integriert. Dabei werden die warmen Ströme auf ein kryogenes Temperaturniveau abgekühlt und die Produktströme auf Umgebungsbedingungen angewärmt. GAN und CGN sind Produkte der Niederdruckkolonne und durchströmen den MHEX auf ganzer Länge. PGAN wird aus der Hochdruckkolonne abgezogen und durch einen Teil des MHEX geführt. Auch der Strom GOX ist lediglich in einem Teil des MHEX aktiv.

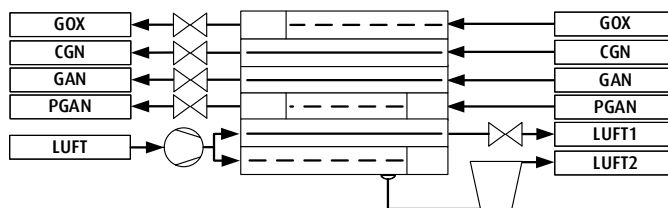


Abbildung 8.1: Topologie des Hauptwärmeübertragers

Die wichtigsten Geometriedaten des MHEX sind in Tab. 8.1 zusammengefasst.

Tabelle 8.1: Geometriedaten des Hauptwärmeübertragers

Größe	Wert
Länge	4.35 m
Breite	1.20 m
Gesamtmasse	12 000 kg
Lagenanzahl LUFT1	72
Lagenanzahl LUFT2	15
Lagenanzahl PGAN	3
Lagenanzahl GAN	57
Lagenanzahl CGN	60
Lagenanzahl GOX	24

Der stationäre Zustand des MHEX wurde durch pseudo-transiente Simulation (vgl. Abschnitt 6.4.1) mit dem Wärmeübertragermodell aus Abschnitt 6.3.1 bestimmt. Um eine hinreichende Auflösung des MHEX in Hauptströmungsrichtung der Prozessströme sicherzustellen, wird eine Netzkonvergenzstudie des stationären Zustands durchgeführt. Abb. 8.2 visualisiert das Temperaturprofil der Metallwärmekapazität des MHEX für verschiedene Gitterauflösungen (50, 100, 200 finite Volumen) und Diskretisierungsschemata für die treibende Temperaturdifferenz des konvektiven Wärmeübergangs (3.1) zwischen Metall und Prozessstrom (vgl. Abschnitt 7.2.1). Sind zwei Näherungslösungen x_1 und x_2 bekannt, die mit einem Diskretisierungsverfahren der Ordnung p und den Diskretisierungsweiten h_1 und h_2 erzielt wurden, so kann mit einer Richardson-Extrapolation die asymptotisch zu erwartende, netzkongvergente Lösung

$$x^* = \frac{x_2 - x_1 \cdot \left(\frac{h_2}{h_1}\right)^p}{1 - \left(\frac{h_2}{h_1}\right)^p} \quad (8.1)$$

abgeschätzt werden. Diese ist für die Diskretisierung zweiter Ordnung und die Näherungslösungen x_1 mit 100 bzw. x_2 mit 200 finiten Volumen ebenfalls in Abb. 8.2 visualisiert.

Für eine Diskretisierung erster Ordnung ist eine signifikante Abhängigkeit des Metalltemperaturprofils von der Gitterauflösung zu erkennen. Je geringer die Auflösung, desto niedriger ist die Metalltemperatur am warmen Ende des MHEX bei $x = 0.0$ m und desto höher ist die Metalltemperatur am kalten Ende bei $x = 4.35$ m. Dieses Verhalten wird als Diskretisierungsfehler erster Ordnung bezeichnet und führt zu einer numerisch bedingten Reduktion der Effizienz des MHEX. Für die Diskretisierung zweiter Ordnung sind die mit 50, 100 und 200 finiten Volumen berechneten Metalltemperaturprofile nahezu identisch (vgl. rechte Detailansicht). Somit sind bei einer Diskretisierung zweiter Ordnung bereits 50 finite Volumen ausreichend für eine netzunabhängige Lösung. Mit zunehmender Anzahl finiter Volumen nähern sich die Temperaturprofile für eine Diskretisierung erster

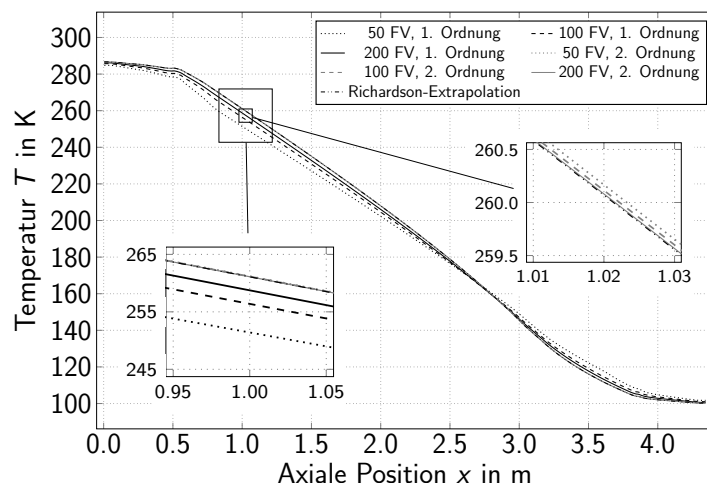


Abbildung 8.2: Metalltemperatur für verschiedene Diskretisierungsverfahren

Ordnung an die Simulationsergebnisse, die mit einer Diskretisierung zweiter Ordnung erzielt wurden, an (vgl. linke Detailansicht).

Tab. 8.2 fasst die maximale absolute Abweichung der mit den verschiedenen Diskretisierungsverfahren ermittelten Metalltemperaturprofile von der Referenzlösung mit einer Diskretisierung zweiter Ordnung und 200 finiten Volumina zusammen. Die Wahl dieser Referenzlösung ist aufgrund der guten Übereinstimmung mit der gemäß der Richardson-Extrapolation asymptotisch zu erwartenden Lösung gerechtfertigt. Die Abweichung der Diskretisierungen zweiter Ordnung von der Referenz sind vernachlässigbar. Demgegenüber resultiert eine Diskretisierung erster Ordnung mit 50 finiten Volumina in einer absoluten Abweichung von bis zu 10.1 K. Somit ist ein Diskretisierungsschema zweiter Ordnung ein geeigneter Ansatz für die akkurate Simulation von Mehrstromwärmeübertragern, da die Temperaturniveaus an den warmen und kalten Enden und damit die Effizienz des Wärmeübertragers korrekt vorhergesagt werden.

Tabelle 8.2: Maximale absolute Abweichung der Metalltemperaturen von einer Referenzlösung zweiter Ordnung mit 200 finiten Volumina

Diskretisierungsschema	Max. absolute Abweichung in K
50 finite Volumen, erste Ordnung	10.14
100 finite Volumen, erste Ordnung	4.82
200 finite Volumen, erste Ordnung	2.37
50 finite Volumen, zweite Ordnung	0.15
100 finite Volumen, zweite Ordnung	0.09
200 finite Volumen, zweite Ordnung	0.00

Eine genaue Bestimmung der Effizienz ist insbesondere erforderlich, wenn ein Wärmeübertragermodell als Bestandteil eines Gesamtanlagenmodells eingesetzt wird. Eine isolierte Simulation mit einem numerisch robusten Diskretisierungsschema erster Ordnung und geringer Auflösung ermöglicht hingegen die schnelle Abschätzung des Betriebs eines Mehrstromwärmeübertragers. Für die weiteren Analysen in diesem Abschnitt wird

eine Diskretisierung zweiter Ordnung mit 100 finiten Volumen als Kompromiss zwischen Rechenzeit und Ergebnisgenauigkeit eingesetzt.

In Abb. 8.3 wird das stationäre Metalltemperaturprofil des MHEX mit UniSim[®] PFE validiert, wobei eine gute Übereinstimmung zu verzeichnen ist. Die maximale absolute Abweichung der Metalltemperatur beträgt 1.01 K. Eine mögliche Erklärung für die geringen Abweichungen ist eine abweichende Auflösung der Geometrie des Wärmeübertragers, insbesondere der Fin-Wechsel, durch die verschiedenen Simulationsumgebungen. Zudem basieren UniSim[®] PFE und das in dieser Arbeit eingesetzte Simulationsverfahren auf unterschiedlichen Lösungsverfahren mit abweichenden Toleranzen. Ein maßgeschneiderter iterativer Algorithmus nach HASELER (1981) ist die Grundlage von UniSim[®] PFE, wohingegen die Vergleichslösung in dieser Betrachtung mit einem simultanen gleichungsbasierten Simulationsverfahren ermittelt wird.

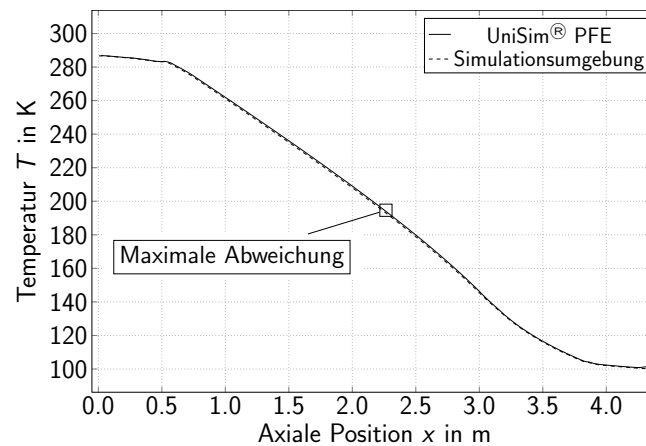


Abbildung 8.3: Validierung der stationären Metalltemperatur im Hauptwärmeübertrager mit UniSim[®] PFE

Ein weiterer wichtiger Aspekt bei der Modellierung von Wärmeübertragern ist eine akkurate Auflösung der Geometrie in Hauptströmungsrichtung der Prozessströme. Verteiler- bzw. Sammlerfins mit vergleichsweise geringer spezifischer Wärmeübertragungsfläche pro Lauflänge eines Prozessstroms werden am Eintritt bzw. Austritt von Prozessströmen eingesetzt, um die Strömungsführung zu optimieren (vgl. Abb. 2.1). Demgegenüber dienen Hauptfins mit höherer spezifischer Wärmeübertragungsfläche der Optimierung des Wärmeübergangs in den verbleibenden Bereichen. Die in dieser Arbeit entwickelte Simulationsumgebung für Wärmeübertrager löst die Übergänge zwischen Verteiler- bzw. Sammler- und Hauptfins exakt auf. Wärmeübertragermodelle aus der Literatur basieren hingegen häufig auf der unrealistischen Annahme einer gleichmäßig entlang der Hauptströmungsrichtung der Prozessströme verteilten Wärmeübertragungsfläche. Abb. 8.4 visualisiert den Einfluss verschiedener Auflösungen der Geometrie des MHEX auf das stationäre Metalltemperaturprofil. Wird für alle Prozessströme die Wärmeübertragungsfläche der Hauptfins entlang der gesamten Passage berücksichtigt, resultiert im Vergleich mit einer adäquat aufgelösten Geometrie eine maximale absolute Abweichung von etwa 10.1 K bei $x = 0.69$ m.

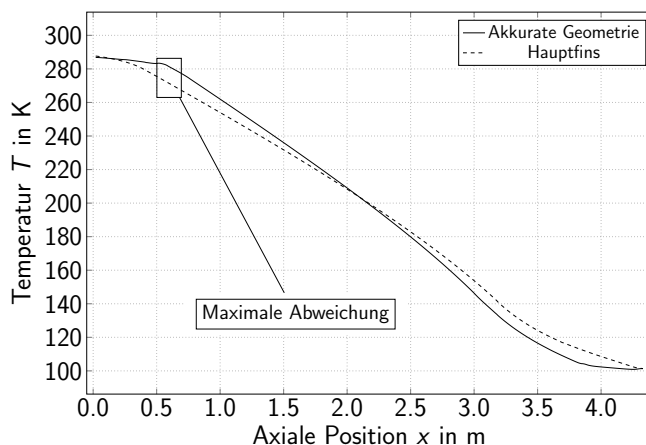


Abbildung 8.4: Stationäre Metalltemperatur im Hauptwärmeübertrager für verschiedene Geometrieauflösungen

Die Ergebnisqualität bei der numerischen Analyse von Wärmeübertragern hängt entscheidend von der Anwendung adäquater Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust ab. Die in dieser Arbeit vorgestellte Simulationsumgebung für Wärmeübertrager beinhaltet Korrelationen auf dem aktuellsten Stand der Technik, welche auch zur kommerziellen Auslegung von Wärmeübertragern genutzt werden, um qualitativ hochwertige Ergebnisse zu erzielen. In der Literatur werden Mehrstromwärmeübertrager hingegen häufig mit konstanten und an den stationären Betriebszustand angepassten Wärmeübergangs- und Druckverlustkoeffizienten beschrieben. Abb. 8.5 visualisiert den Einfluss der Anwendung konstanter Koeffizienten auf das stationäre Metalltemperaturprofil des Hauptwärmeübertragers. Im Vergleich zu einer Simulation mit akkuraten Korrelationen führt eine Simulation mit konstanten Koeffizienten zu einer maximalen absoluten Abweichung von 5.6 K bei $x = 0.65$ m.

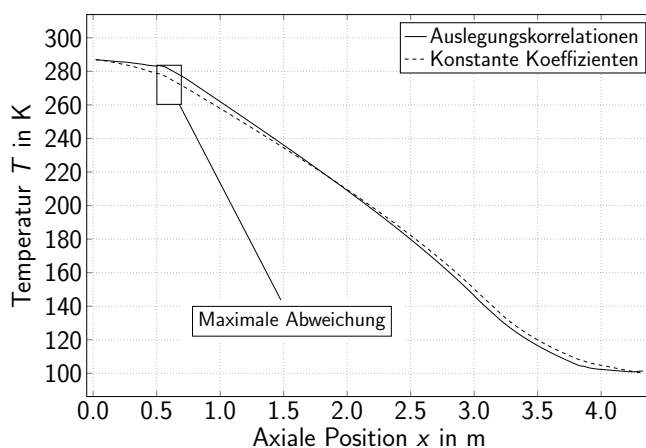


Abbildung 8.5: Stationäre Metalltemperatur im Hauptwärmeübertrager für konstante Wärmeübergangs- und Druckverlustkoeffizienten sowie akkurate Korrelationen

Zur Simulation von PFHE werden in der Literatur sowohl Layer-by-Layer-, welche die Stapelfolge auflösen, und Stream-by-Stream-Modelle, welche alle Lagen eines Fluids zu

einem integralen Prozessstrom zusammenfassen, eingesetzt. Für eine ideale Stapelfolge geht der Unterschied zwischen Layer-by-Layer- und Stream-by-Stream-Modellen gegen Null. Abb. 8.6 vergleicht das stationäre Metalltemperaturprofil für diese beiden Ansätze. Bei $x = 1.0$ m beträgt die maximale absolute Abweichung etwa 2.1 K. Es ist zudem zu erkennen, dass die Abweichung zwischen Layer-by-Layer- und Stream-by-Stream-Modellen im warmen Teil des MHEX größer als im kalten Teil ist. Dies ist auf den warmen Turbinenluftstrom mit verhältnismäßig kleinem Massenstrom zurückzuführen. Dieser wird mittig aus dem MHEX abgezogen und erschwert das Erreichen einer optimalen Lagenverteilung. Nichtsdestotrotz ist für den MHEX eine gute Übereinstimmung zwischen Layer-by-Layer- und Stream-by-Stream-Modellierung zu verzeichnen.

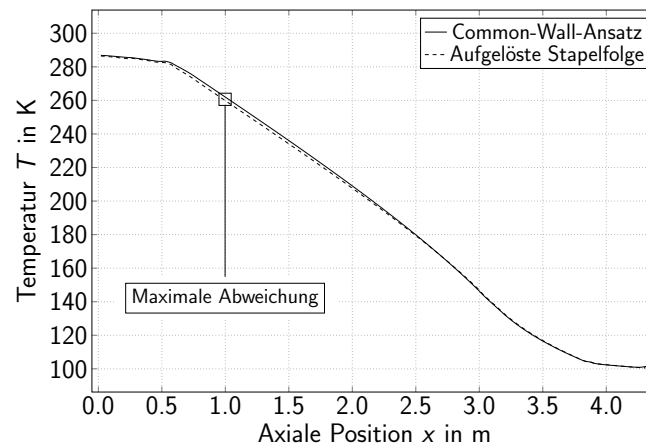


Abbildung 8.6: Stationäre Metalltemperatur im Hauptwärmeübertrager für Layer-by-Layer- und Stream-by-Stream-Modellierung

Ein Vergleich der Auswirkungen der in diesem Abschnitt thematisierten Modellannahmen lässt die folgenden Schlüsse zu: sowohl die Anwendung einer robusten Diskretisierung erster Ordnung mit einer geringen Anzahl an finiten Volumen als auch eine nicht adäquate Auflösung der Geometrie des MHEX haben einen maximalen absoluten Fehler von 10.1 K zur Folge. Der Einsatz von vereinfachten Wärmeübergangskorrelationen resultiert in einer Abweichung von 5.6 K. Da die akkurate Vorhersage des stationären und dynamischen Betriebs von Wärmeübertragern die primäre Zielsetzung dieser Arbeit ist, werden diese vereinfachenden Modellannahmen vermieden. Demgegenüber führt die Anwendung eines Stream-by-Stream- statt eines Layer-by-Layer-Modells lediglich zu einer Abweichung von 2.1 K, wohingegen durch ein Layer-by-Layer-Modell für industriell relevante PFHEs bis zu mehrere hundert Lagen an Prozessströmen aufzulösen sind. Daher ist ein Stream-by-Stream-Ansatz aufgrund der signifikanten Reduktion des Simulationsaufwands für die stationäre Nachrechnung und die dynamische Simulation von PFHEs im Rahmen dieser Arbeit gerechtfertigt.

8.2 Stationäre Nachrechnung von Wärmeübertragern

Abschnitt 6.4 thematisiert verschiedene Verfahren zur stationären Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern. Diese werden im Folgenden am Beispiel eines einphasigen Wärmeübertragers in einem Kühlwassersystem gegenübergestellt (vgl. Abschnitt 8.2.1). In Abschnitt 8.2.2 werden die explizit für die numerisch robuste Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern mit Phasenwechseln entwickelten Modelle auf einen PFHE einer Erdgasanlage angewendet.

8.2.1 Vergleich verschiedener Verfahren zur Nachrechnung

Im betrachteten Wärmeübertrager werden $3000 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ eines warmen Prozesswasserstroms, der bei einer Temperatur von 372.15 K und einem Druck von 3.6 bar vorliegt, durch $2500 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ Kühlwasser mit einer Temperatur von 303.15 K und einem Druck von 1.18 bar abgekühlt. Die wichtigsten Geometriedaten des Wärmeübertragers sind in Tab. 8.3 zusammengefasst.

Tabelle 8.3: Geometriedaten des Plattenwärmeübertragers

	Größe	Wert
	Länge	0.85 m
	Breite	0.12 m
	Gesamtmasse	100 kg
	Lagenanzahl Prozesswasser	100
	Lagenanzahl Kühlwasser	100

Mit den in dieser Arbeit entwickelten Verfahren für die stationäre Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern wird der stationäre Zustand sowohl für den Gleichstrom- als auch für den Gegenstrombetrieb berechnet. Als Startwert der Berechnung wird für alle Verfahren eine einheitliche Metalltemperatur von 350 K gewählt, an welche sich die Temperatur der Prozessströme annähert. Tab. 8.4 fasst die erforderlichen Rechenzeiten zusammen.

Tabelle 8.4: Rechenzeiten verschiedener Verfahren (einphasig)

Verfahren	Rechenzeit in s (Gleichstrom)	Rechenzeit in s (Gegenstrom)
Pseudo-transiente Simulation (DAE)	11.2	11.9
Pseudo-transiente Simulation (ODE)	21.1	23.1
Gleichungsbasierte Simulation (AE)	3.0	3.3
Maßgeschneidertes Verfahren	3.4	11.0
Integrationsverfahren	1.4	27.5

Wird das DAE-System aus Abschnitt 6.3.1 zur pseudo-transienten Simulation herangezogen, betragen die Rechenzeiten 11.2 s (Gleichstrom) bzw. 11.9 s (Gegenstrom). Für das ODE-System aus Abschnitt 6.3.3 ist etwa die doppelte Rechenzeit erforderlich. Dies ist auf die hinsichtlich Phasenwechseln numerisch robuste, explizite Auswertung der Prozessstrommodelle mit dem zellbasierten Verfahren (*Prozessstrom – Stationär Regula Falsi*) zurückzuführen. Somit bietet die pseudo-transiente Simulation mit dem DAE-System zwar Rechenzeitvorteile für einphasige Problemstellungen, gemäß Abschnitt 6.3.2 kann jedoch ausschließlich die pseudo-transiente Simulation auf Basis des ODE-Systems zur robusten Berechnung von Wärmeübertragern mit Phasenwechseln eingesetzt werden.

Wird der gleichungsbasierte Ansatz mit dem AE-System aus Abschnitt 6.4.2 herangezogen, resultieren für das einphasige Szenario deutlich geringere Rechenzeiten von etwa 3 s. Die Rechenzeiten für das maßgeschneiderte Verfahren (vgl. Abschnitt 6.4.3) hängen in hohem Maße vom gewählten Initialzustand ab. Für den Gleichstrombetrieb ist die initiale, gleichmäßige Metalltemperatur von 350 K eine gute Schätzung, sodass mit 3.4 s Rechenzeit eine mit dem gleichungsbasierten Ansatz vergleichbare Performanz resultiert. Für den Gegenstrombetrieb ist die Rechenzeit hingegen vergleichbar mit der DAE-basierten pseudo-transienten Simulation.

Das in Abschnitt 6.4.5 beschriebene Integrationsverfahren zur stationären Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern weist für den Gleichstrombetrieb die geringste Rechenzeit auf, da die Lösung bereits nach einmaliger expliziter Auswertung aller Prozessströme des Wärmeübertragers in Strömungsrichtung bekannt ist. Für den Gegenstrombetrieb resultiert hingegen die im Vergleich mit den anderen Verfahren größte Rechenzeit. Diese ist auf die akkurate Auflösung aller Prozessströme in Strömungsrichtung mit der Fehlertoleranz des Integrationsverfahrens zurückzuführen und ermöglicht im Gegensatz zu Verfahren für die stationäre Nachrechnung von Wärmeübertragern mit einer ortsfesten Diskretisierung eine numerisch robuste Berechnung von Mehrstromwärmeübertragern mit Phasenwechseln (vgl. Abschnitt 6.4.4).

Abb. 8.7 visualisiert die mit den verschiedenen Verfahren für die stationäre Nachrechnung ermittelte Metalltemperatur im Wärmeübertrager für den Gleichstrombetrieb. Beide Prozessströme werden bei $x = 0.7$ m eingespeist. Die Metalltemperatur an diesem Ende ist aufgrund des höheren Wärmekapazitätsstroms des warmen Prozesswasserstroms hin zu höheren Temperaturen verschoben. Bei $x = 0.0$ m stellt sich eine Temperatur von etwa 335 K ein. Die Detailausschnitte verdeutlichen die sehr gute Übereinstimmung aller Verfahren zur stationären Nachrechnung. Die pseudo-transiente, DAE-basierte Simulation hat den gleichen stationären Endzustand wie das gleichungsbasierte Verfahren zur Lösung eines AE-Systems, sodass die Ergebnisse deckungsgleich sind. Selbiges gilt für die pseudo-transiente Simulation mit dem ODE-System und das maßgeschneiderte Verfahren mit dem Modell *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi*. Für das Integrationsverfahren liegt die Metalltemperatur am linken Ende niedriger und am rechten Ende höher als für die anderen Methoden, da die Wärmeleitung im Metall bei der simultanen axialen Integration aller Prozessströme nicht aufgelöst werden kann. Somit bildet das Integrationsverfahren die verminderte Effizienz eines Wärmeübertragers

infolge der Wärmeleitung im Metall nicht ab. Die Visualisierung der Metalltemperatur des Wärmeübertragers im Gegenstrombetrieb (vgl. Abb. 8.8) lässt ebenfalls diese Rückschlüsse zu. Dabei tritt der warme Prozesswasserstrom bei $x = 0.0$ m in den Wärmeübertrager ein, der Kühlwasserstrom bei $x = 0.7$ m.

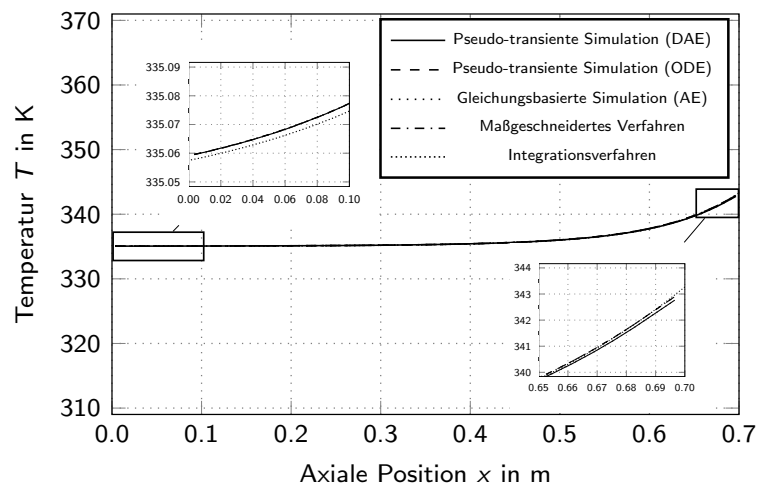


Abbildung 8.7: Metalltemperatur des Kühlwasserwärmeübertragers im Gleichstrombetrieb für verschiedene Verfahren

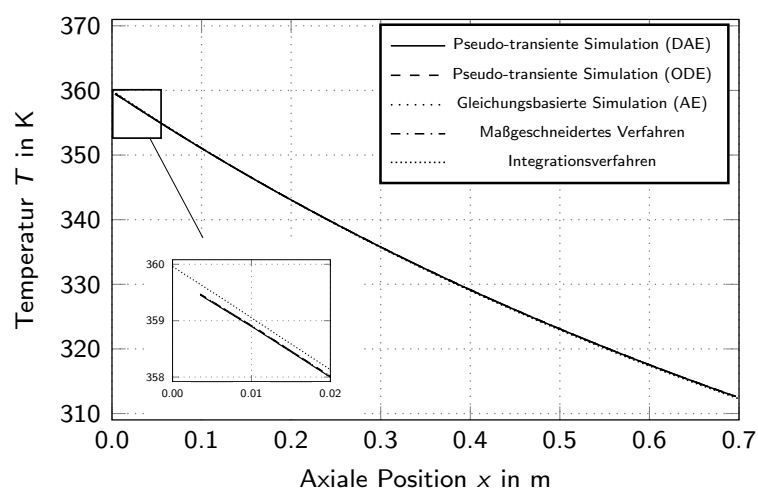


Abbildung 8.8: Metalltemperatur des Kühlwasserwärmeübertragers im Gegenstrombetrieb für verschiedene Verfahren

8.2.2 Nachrechnung eines Wärmeübertragers mit Phasenwechseln

Abb. 8.9 visualisiert die Topologie eines PFHE einer Erdgasanlage. Im stationären Betrieb werden zwei Methan-reiche Prozessströme (Strom 1 und 2) kondensiert und unterkühlt. Strom 3, ein gasförmiges Gemisch aus Stickstoff und Methan, wird im Gegenstrom angewärmt. Alle Ströme durchströmen den PFHE auf ganzer Länge.

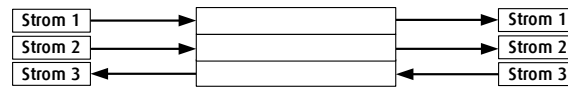


Abbildung 8.9: Topologie eines Plattenwärmeübertragers einer Erdgasanlage

Die wichtigsten Geometriedaten des PFHE sind in Tab. 8.5 zusammengefasst.

Tabelle 8.5: Geometriedaten des Plattenwärmeübertragers (Erdgasanlage)

Größe	Wert
Länge	4.33 m
Breite	1.20 m
Gesamtmasse	11 000 kg
Lagenanzahl Strom 1	40
Lagenanzahl Strom 2	24
Lagenanzahl Strom 3	128

Aufgrund der Anwesenheit von Phasenwechseln eignen sich gemäß Abschnitt 6.4.4 ausschließlich die pseudo-transiente Simulation auf Basis eines ODE-Systems (vgl. Abschnitt 6.3.3) und das stationäre Integrationsverfahren (vgl. Abschnitt 6.4.5) zur numerisch robusten Prädiktion des stationären Betriebs des PFHE. Tab. 8.6 stellt die erforderlichen Rechenzeiten dieser Verfahren gegenüber.

Tabelle 8.6: Rechenzeiten verschiedener Verfahren (Phasenwechsel)

Verfahren	Rechenzeit in min
Pseudo-transiente Simulation (ODE)	106.4
Integrationsverfahren	5.5

Aufgrund der ausgeprägten Nicht-Linearität des zu lösenden Gleichungssystems ist für die pseudo-transiente Simulation eine vergleichsweise lange Rechenzeit zu verzeichnen. Demgegenüber benötigt das Integrationsverfahren etwa 5.5 min bis zur Konvergenz. Dabei kommt derzeit lediglich ein Prototyp des Verfahrens zum Einsatz, sodass infolge zukünftiger Optimierungen von einer weiteren Verkürzung der Rechenzeiten auszugehen ist. Nichtsdestotrotz verdeutlichen die Ergebnisse das Potential des Integrationsverfahrens zum stationären Nachrechnen von Wärmeübertragern.

Abb. 8.10 visualisiert das Metalltemperaturprofil im stationären Betrieb des PFHE. Es ist eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse für die beiden Verfahren zu verzeichnen. Am warmen bzw. kalten Ende des Wärmeübertragers liefert das Integrationsverfahren höhere bzw. niedrigere Metalltemperaturen, da der diffusive Einfluss der Wärmeleitung im Metall nicht aufgelöst werden kann. Dies resultiert zudem in einem für das Integrationsverfahren steileren Gradienten der Metalltemperatur zwischen $x = 2.595$ m und

$x = 3.460$ m. Die Abweichungen in diesem Bereich sind zudem auf die rein implizite räumliche Diskretisierung (1. Ordnung) bei der pseudo-transienten Simulation zurückzuführen. Demgegenüber ist das fehlergesteuerte Integrationsverfahren als Diskretisierung höherer Ordnung zu interpretieren.

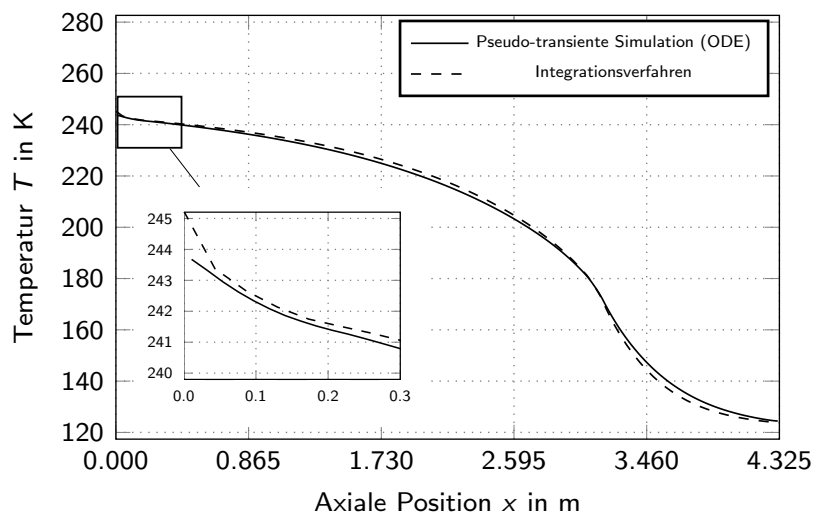


Abbildung 8.10: Metalltemperatur eines Plattenwärmeübertragers mit Phasenwechsel für verschiedene Verfahren

Abschließend kann somit festgehalten werden, dass das Integrationsverfahren (vgl. Abschnitt 6.4.5) eine aus mathematischer und numerischer Sicht robuste Methode für die stationäre Nachrechnung von Wärmeübertragern mit Phasenwechseln darstellt, welche die Geometrie des Apparats infolge der fehlergesteuerten Integration akkurat wiedergibt und im Vergleich mit anderen Simulationsansätzen kurze Rechenzeiten erlaubt. Als Bestandteil der in dieser Arbeit vorgestellten, flexiblen Simulationsumgebung für Wärmeübertrager bietet das Verfahren die Möglichkeit, eine robuste Berechnungsmethode für Mehrstromwärmeübertrager mit Phasenwechseln in Umgebungen zur stationären Prozesssimulation einzubinden. Dies bietet erheblichen Mehrwert, da Arbeitsabläufe bei der Auslegung verfahrenstechnischer Anlagen vereinfacht und damit Kosten eingespart werden können.

9 Dynamische Simulation von Wärmeübertragern

Im Folgenden werden die in dieser Arbeit entwickelten, dynamischen Simulationsmodelle für Wärmeübertrager auf transiente Betriebsszenarien angewendet, um das breite Anwendungsspektrum zu demonstrieren. In Abschnitt 9.1 werden die verschiedenen Prozessstrommodelle miteinander verglichen. Abschnitt 9.2 thematisiert anschließend die Risikoanalyse von STHE und CWHE durch dynamische Simulation. Transiente Simulationen können auch zur Lebensdauerabschätzung von PFHE unter thermischer Wechselbelastung (vgl. Abschnitt 9.3) oder zur Entwicklung von schonenden Anfahrstrategien für Prozessanlagen (vgl. Abschnitt 9.4) eingesetzt werden. Zudem dienen dynamische Wärmeübertragermodelle als Kernkomponente druckgetriebener Anlagenmodelle (vgl. Abschnitt 9.5). Alle Simulationen wurden auf einem Notebook mit Intel[®] Core[™] i5-6300U Prozessor (bei 2.4 GHz) und 8 GB Arbeitsspeicher durchgeführt.

9.1 Dynamik verschiedener Prozessstrommodelle

In diesem Abschnitt werden die in Kapitel 6 vorgestellten Prozessstrommodelle zur Simulation zweier Betriebsszenarien von Wärmeübertragerpassagen eingesetzt. Zunächst werden alle Modelltiefen anhand einer druckgetriebenen Simulation der Überhitzung von Wasserdampf miteinander verglichen. Anschließend wird die Kondensation eines Luftstroms herangezogen, um die Prozessstrommodelle *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* und *Prozessstrom – Stationär Integration*, die explizit zur numerisch robusten Simulation von Anwendungen mit Phasenwechseln entwickelt wurden, gegenüberzustellen.

9.1.1 Überhitzung von Prozessdampf

Es wird eine Wärmeübertragerpassage betrachtet, in der Wasserdampf gegen eine konstante Wandtemperatur von 550 K angewärmt wird. Initial ist die Passage mit Wasserdampf bei 550 K und 3.6 bar gefüllt. Es liegt eine Nullströmung vor. Durch Anpassung der Druckniveaus an den beiden Enden $x = 0.2\text{ m}$ und $x = 0.0\text{ m}$ der Passage (z.B. durch die Regelung des Gesamtprozesses) wird die Strömungsrichtung in der Wärmeübertragerpassage eingestellt (Vorwärtsströmung von $x = 0.2\text{ m}$ zu $x = 0.0\text{ m}$ oder Rückwärtsströmung von $x = 0.0\text{ m}$ zu $x = 0.2\text{ m}$). In beiden Fällen tritt Wasserdampf mit einer Temperatur von 500 K in die Passage ein. Abb. 9.1 visualisiert die zeitliche Entwicklung der Druckniveaus an den beiden Enden der Wärmeübertragerpassage während des 3200 s andauernden Szenarios. Der Druck bei

$x = 0.0\text{ m}$ wird konstant bei 3.6 bar gehalten. Bei $x = 0.2\text{ m}$ wird der Druck im Vergleich zum Ausgangsniveau zunächst um 0.01 bar angehoben bzw. abgesenkt. Die Druckänderungen erfolgen dabei über jeweils 100 s linear in der Zeit. Die Druckvariation wird anschließend mit den Amplituden 0.1 bar, 0.5 bar und 1.0 bar wiederholt.

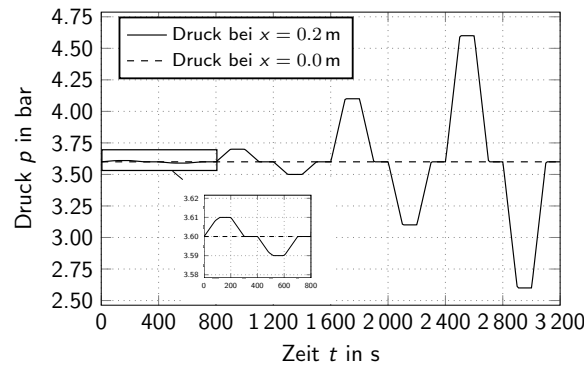


Abbildung 9.1: Druckrandbedingungen der Wärmeübertragerpassage

Gemäß der Druckverlustkorrelationen resultiert in Abhängigkeit von der integralen Druckdifferenz, vom lokalen thermodynamischen Zustand des Fluids und der Modelltiefe ein Stoffmengenstrom an Wasserdampf. Dessen zeitlicher Verlauf ist in Abb. 9.2 für die verschiedenen Prozessstrommodelle dargestellt. Aufgrund der nichtlinearen Druckverlustbeziehungen führt eine lineare Veränderung des Drucks zu einer nichtlinearen Änderung des Stoffmengenstroms. Die für die verschiedenen Druckauslenkungen erreichten Plateauwerte des Stoffmengenstroms sind für alle Prozessstrommodelle, welche die gleiche Implementierung von Druckverlust- und Wärmeübergangskorrelationen nutzen, identisch. Auch der qualitative zeitliche Verlauf des Stoffmengenstroms ist für die verschiedenen Prozessstrommodelle vergleichbar. Zur Reduktion der numerischen Komplexität wird bei den Modellen *Prozessstrom – Holdup ODE*, *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* und *Prozessstrom – Stationär Integration* auf eine Verzögerung der lokalen bzw. integralen Widerstandsbeiwerte mit einem PT1-Glied zurückgegriffen (vgl. Kapitel 6). Diese führt zu leichten Überschwingern kurz vor dem Erreichen der Plateauwerte (vgl. Abb. 9.2b), 9.2e und 9.2f). Die Simulationen mit den impliziten Prozessstrommodellen (vgl. Abb. 9.2a, 9.2c und 9.2d) weisen hingegen keine Überschwinger auf, da sich die lokalen bzw. integralen Druckverlustbeiwerte aus einer algebraischen Gleichung ergeben (vgl. Kapitel 6). Der Einfluss des Prozessdrucks auf die Druckverlustkorrelationen kann anhand der Plateauwerte des Stoffmengenstroms analysiert werden. Für eine Vorwärtsströmung wird der Eintrittsdruck angehoben, für eine Rückwärtsströmung wird dieser hingegen abgesenkt, sodass sich trotz gleicher integraler Druckdifferenz abweichende Plateauwerte des Stoffmengenstroms einstellen.

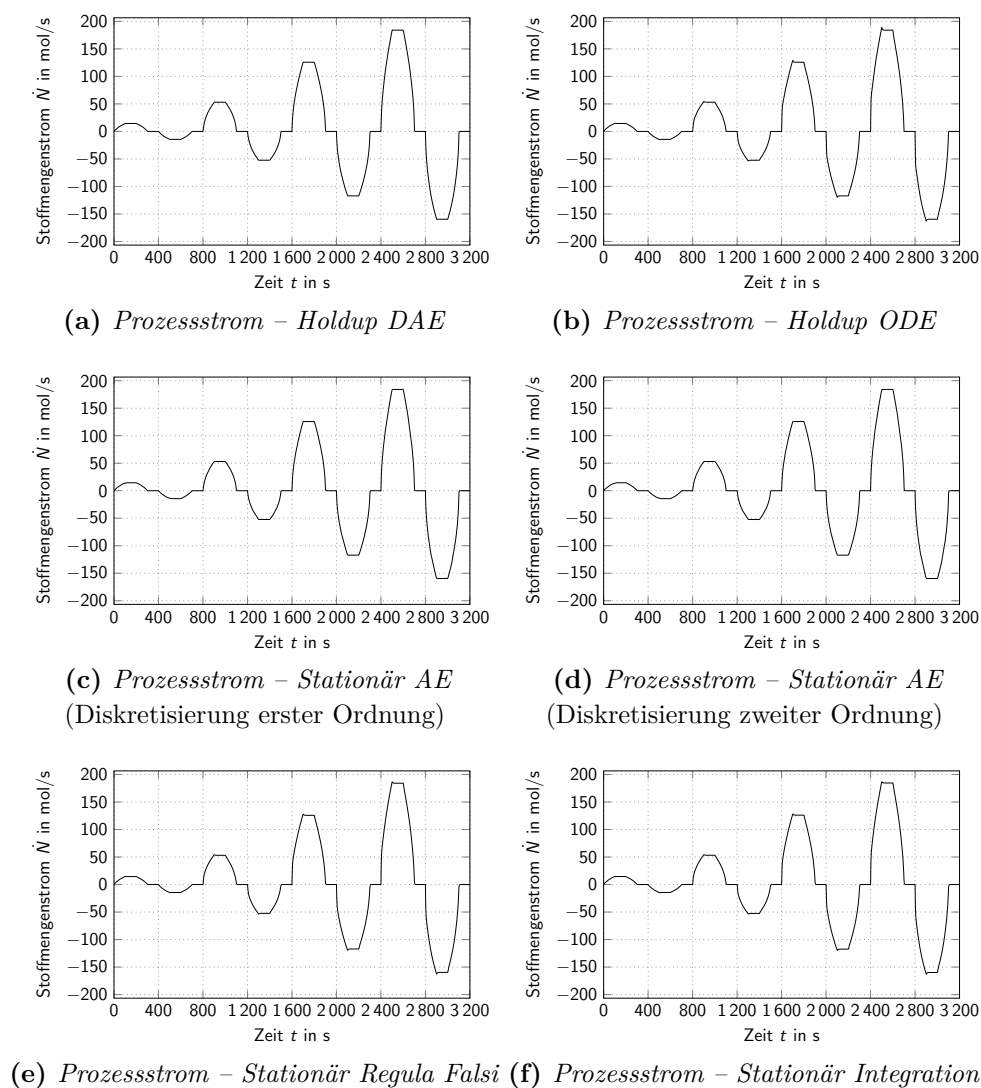


Abbildung 9.2: Stoffmengenstrom für verschiedene Prozessstrommodelle

Durch das Zusammenspiel aus konvektivem Energietransport und Wärmeübergang ergibt sich ein charakteristisches Temperaturprofil entlang der Wärmeübertragerpassage. In Abb. 9.3 werden das Temperaturprofil nach $t = 2450$ s und die zeitliche Entwicklung der lokalen Temperatur bei $x = 0.1$ m für die verschiedenen Prozessstrommodelle verglichen, um den Einfluss der Modelltiefe auf das Temperaturprofil zu bewerten. Im betrachteten Zeitintervall strömt Wasserdampf mit 500 K bei $x = 0.2$ m in die Passage ein. Die Temperatur des Prozessstroms nähert sich daher sukzessive an die konstante Wandtemperatur von 550 K an. Da der Stoffmengenstrom mit der Zeit ansteigt, ist eine zunehmende Länge erforderlich, bis die Stromtemperatur die Wandtemperatur annimmt. Wie Abb. 9.3a entnommen werden kann, ist die Vorhersage des Temperaturprofils für alle Prozessstrommodelle vergleichbar.

Die geringen Diskrepanzen sind durch abweichende Stoffmengenströme zu erklären, die bei $t = 2450$ s durch die Passage strömen. Die Modelle *Prozessstrom – Stationär AE* (1. und 2. Ordnung) weisen zu diesem Zeitpunkt den geringsten Stoffmengenstrom auf.

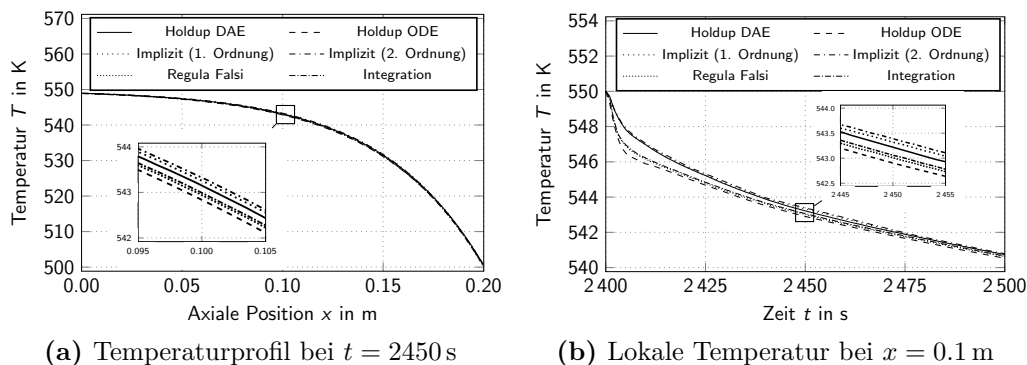


Abbildung 9.3: Temperaturverläufe für verschiedene Prozessstrommodelle

Dieser folgt aus einer algebraischen Gleichung, in die der integrale Widerstandsbeiwert der Passage eingeht. Somit nähert sich das Stromtemperaturprofil vergleichsweise schnell an die Metalltemperatur an. Für das Modell *Prozessstrom – Holdup DAE* wird der Stoffmengenstrom durch algebraische Gleichungen unter Berücksichtigung lokaler Widerstandsbeiwerte bestimmt, sodass sich ein höherer Stoffmengenstrom einstellt. Die Prozessstrommodelle *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* und *Prozessstrom – Stationär Integration* nutzen einen mit einem PT1-Glied verzögerten integralen Widerstandsbeiwert, sodass der Widerstandsbeiwert bei zunehmendem Stoffmengenstrom unterschätzt wird.

Im Vergleich mit den Modellen *Prozessstrom – Stationär AE* (1. und 2. Ordnung) stellt sich somit ein höherer Stoffmengenstrom ein. Die höhere Diskretisierungsordnung des Modells *Prozessstrom – Stationär AE* (2. Ordnung) im Gegensatz zum Modell *Prozessstrom – Stationär AE* (1. Ordnung) führt dazu, dass sich die Stromtemperatur schneller an die Metalltemperatur annähert. Analog kann auch das Modell *Prozessstrom – Stationär Integration* im Vergleich zum Modell *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* als eine Diskretisierung höherer Ordnung gesehen werden. Der höchste Stoffmengenstrom stellt sich für das Modell *Prozessstrom – Holdup ODE* ein, da zur Berechnung der lokalen Widerstandsbeiwerte ein durch ein PT1-Glied verzögerter Stoffmengenstrom eingesetzt wird. Abb. 9.3b visualisiert den beschriebenen Sachverhalt anhand der zeitlichen Entwicklung der lokalen Stromtemperatur bei $x = 0.1$ m.

Tab. 9.1 stellt die Prozessstrommodelle anhand der Rechenzeiten für das druckgetriebene Betriebsszenario gegenüber. Das Modell *Prozessstrom – Holdup DAE* berücksichtigt Fluid-Massen- und -Energie-Holdup und weist daher im Vergleich zu den quasi-stationären Modellen *Prozessstrom – Stationär AE* (1. und 2. Ordnung) eine höhere Rechenzeit auf. Durch das Umformen der DAE in eine ODE (*Prozessstrom – Holdup ODE*) nimmt die Rechenzeit deutlich zu. Dieser Rechenzeitzuwachs ist insbesondere auf die numerisch anspruchsvolle Simulation der Nullströmungsbereiche zurückzuführen. Die Modelle *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* und *Prozessstrom – Stationär Integration* resultieren aus der Formulierung des Modells *Prozessstrom – Stationär AE* als ODE und sind speziell für die robuste dynamische Simulation von Wärmeübertragern mit Phasenwechseln entwickelt. Durch die Formulierung als ODE kann einerseits die

Rechenzeit erheblich verkürzt werden (vgl. *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi*). Andererseits (vgl. *Prozessstrom – Stationär Integration*) können die axialen Profile des Prozessstroms bei einer vertretbaren Zunahme der Rechenzeit fehlergesteuert mit einem Integrator aufgelöst werden.

Tabelle 9.1: Rechenzeit der Prozessstrommodelle (einphasiges Betriebsszenario)

Modelltiefe	Rechenzeit in h
<i>Prozessstrom – Holdup DAE</i>	3.8
<i>Prozessstrom – Holdup ODE</i>	> 12.0
<i>Prozessstrom – Stationär AE (1. Ordnung)</i>	1.1
<i>Prozessstrom – Stationär AE (2. Ordnung)</i>	1.1
<i>Prozessstrom – Stationär Regula Falsi</i>	0.5
<i>Prozessstrom – Stationär Integration</i>	6.0

9.1.2 Kondensation eines Luft-Stroms

Es wird eine Wärmeübertragerpassage betrachtet, in die ein überhitzter Luftstrom mit einer Temperatur von 300 K und einem Druck von 1 bar eintritt. Der Prozessstrom wird gegen eine konstante Metalltemperatur von 60 K abgekühlt und, falls eine hinreichend große Wärmemenge entzogen wird, kondensiert oder unterkühlt. Abhängig vom Stoffmengenstrom, dessen zeitlicher Verlauf in Abb. 9.4a dargestellt ist, variiert die entzogene Wärmemenge und damit die Austrittstemperatur des Prozessstroms während des 900 s andauernden Szenarios. Die Prozessstrommodelle *Prozessstrom – Stationär Integration* und *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* werden anhand der Austrittstemperatur verglichen (vgl. Abb. 9.4b).

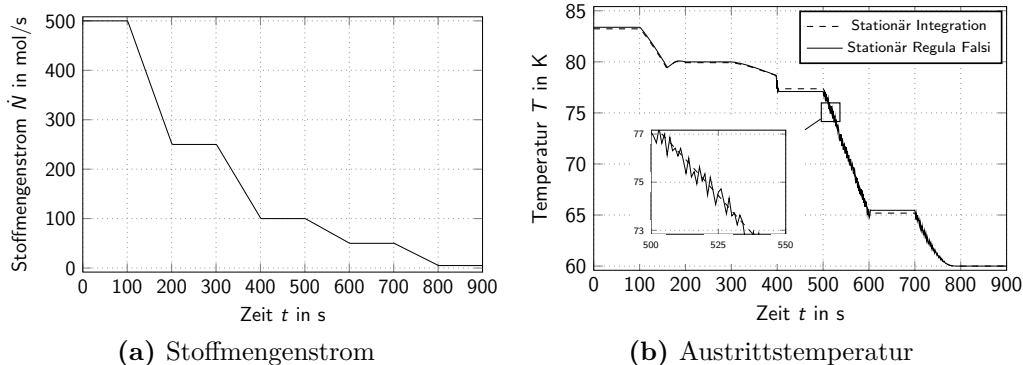


Abbildung 9.4: Skalare Größen während der Kondensation eines Luftstroms

Initial strömen $500 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ durch die Wärmeübertragerpassage. Die korrespondierende Austrittstemperatur beträgt etwa 83 K, was einem Austrittszustand in der Gasphase entspricht. Der Stoffmengenstrom wird anschließend sukzessive reduziert, sodass auch der eintretende Wärmekapazitätsstrom abnimmt. Die Austrittstemperatur fällt solange, bis

nach etwa 160 s der Taupunkt erreicht wird (lokales Minimum der Austrittstemperatur). Zwischen $t = 160$ s und $t = 190$ s steigt die Austrittstemperatur trotz des weiter abnehmenden Stoffmengenstroms zunächst wieder an, bis ein lokales Maximum von etwa 80.1 K erreicht wird. Dies ist auf den abnehmenden integralen Druckverlust entlang der Wärmeübertragerpassage zurückzuführen, der in einem ansteigenden Austrittsdruck und damit in einer zunehmenden Tautemperatur am Austritt resultiert.

Ab $t = 190$ s überwiegt der zunehmende Wärmeübergang aufgrund erhöhter Wärmeübergangskoeffizienten im Zweiphasengebiet den Einfluss des abnehmenden integralen Druckverlusts und die Austrittstemperatur sinkt wieder ab. Nach $t = 200$ s wird mit etwa 80 K die Austrittstemperatur erreicht, die sich für einen Stoffmengenstrom von $250 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ einstellt. Zwischen $t = 300$ s und $t = 400$ s wird der Stoffmengenstrom bis auf $100 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ reduziert, was zu einer weiter fallenden Austrittstemperatur führt. Bei $t \approx 397$ s erreicht die Austrittstemperatur den Siedepunkt. Da nun keine latente Wärme mehr abzuführen ist, fällt die Austrittstemperatur ab diesem Zeitpunkt deutlich schneller. Bis zum Ende des Szenarios wird der eintretende Wärmekapazitätsstrom so weit reduziert, dass die Austrittstemperatur die Metalltemperatur von 60 K annimmt.

Abb. 9.4b verdeutlicht insbesondere zwischen $t = 500$ s und $t = 800$ s das unterschiedliche, charakteristische Lösungsverhalten der Modelle *Prozessstrom – Stationär Integration* und *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* für eine fallende Austrittstemperatur unter Anwesenheit von Kondensation. Während das Modell *Prozessstrom – Stationär Integration* einen kontinuierlichen Verlauf der Austrittstemperatur vorhersagt, weist das Modell *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* Oszillationen der Austrittstemperatur entlang dieses kontinuierlichen Verlaufs auf (vgl. Detailansicht in Abb. 9.4b).

Während der axialen Integration der Energie- und Impulsbilanzen des Prozessstroms entlang der Strömungsrichtung (vgl. Kapitel 6) löst das Modell *Prozessstrom – Stationär Integration* die lokalen Wärmeübergangs- und Druckverlustzusammenhänge im Rahmen der spezifizierten Toleranz des Integrationsverfahrens auf. Somit werden auch die Phasenwechsel an Tau- und Siedepunkt fehlergesteuert aufgelöst, was eine kontinuierliche Lösung für die Austrittstemperatur ermöglicht.

Demgegenüber basiert das Modell *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* auf einer FV-Diskretisierung der Wärmeübertragerpassage, sodass ausschließlich komplette Volumen in der Gasphase, der Flüssigphase oder im Zweiphasengebiet vorliegen können. Jede Oszillation der Austrittstemperatur im Zweiphasengebiet um den zu erwartenden kontinuierlichen Verlauf ist somit auf den Phasenwechsel eines Volumens am Tau- oder Siedepunkt zurückzuführen. Dieser Phasenwechsel führt zu einer sprunghaften Änderung des Wärmeübergangskoeffizienten des finiten Volumens, sodass sich die übertragene Wärmemenge und damit die Austrittstemperatur sprunghaft ändern.

Die Modelle *Prozessstrom – Stationär Integration* und *Prozessstrom – Stationär Regula Falsi* zeigen zwar ein unterschiedliches Lösungsverhalten hinsichtlich der integralen Austrittstemperatur des Prozessstroms, liefern jedoch für jeden Zeitpunkt des dynamischen Kondensationsszenarios eine eindeutige Lösung für den Prozessstrom und ermöglichen daher eine numerisch robuste Simulation von Wärmeübertragern mit Phasenwechseln.

Abb. 9.5 visualisiert die eindeutige Lösung beider Modelle exemplarisch für den Zeitpunkt $t = 580$ s des Kondensationsszenarios. Die Temperatur des Prozessstroms nähert sich ausgehend vom Eintritt bei $x = 0.0$ m sukzessive der Metalltemperatur von 60 K an (vgl. Abb. 9.5a). Das korrespondierende Profil des Wärmeübergangskoeffizienten ist in Abb. 9.5b zu entnehmen. Bei $x = 0.3$ m und $x = 0.6$ m liegen Übergänge zwischen unterschiedlichen Fin-Geometrien vor, die einen vernachlässigbaren Einfluss auf das Temperaturprofil des Luftstroms aufweisen, jedoch den Wärmeübergangskoeffizienten maßgeblich beeinflussen.

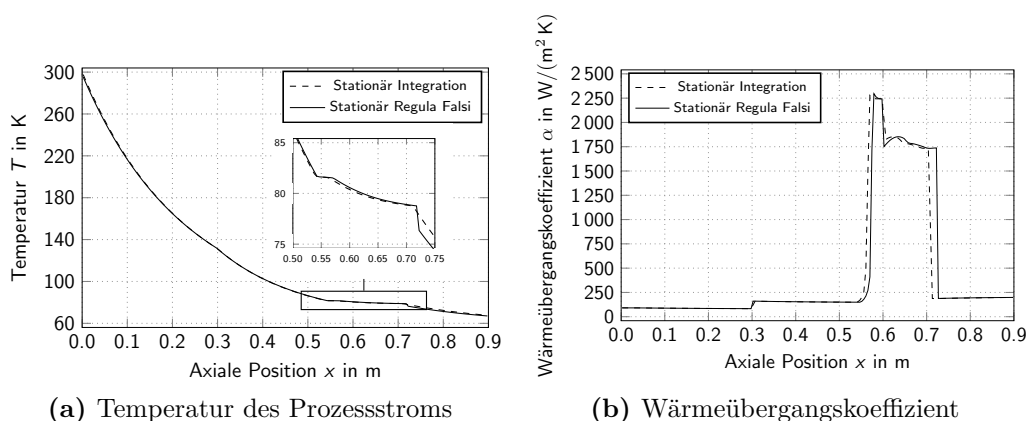


Abbildung 9.5: Axiale Profile nach $t = 580$ s des Kondensationsszenarios

Bei $x \approx 0.53$ m wird der Taupunkt erreicht, was zu einem sprunghaften Anstieg des Wärmeübergangskoeffizienten führt. Am Siedepunkt bei $x \approx 0.72$ m nimmt der Wärmeübergangskoeffizient hingegen abrupt ab. Das Modell *Prozessstrom - Stationär Integration* prädiziert Siede- und Taupunkt bei geringeren axialen Positionen x als das Modell *Prozessstrom - Stationär Regula Falsi*, da das Integrationsverfahren im Vergleich zum zellbasierten Verfahren als Verfahren höherer Ordnung zu interpretieren ist und einen höheren Wärmeübergang vorhersagt.

Auffällig ist zudem der für das Modell *Prozessstrom - Stationär Regula Falsi* größere Abfall der Temperatur direkt nach dem Siedepunkt. Dieser ist darauf zurückzuführen, dass das letzte finite Volumen mit zweiphasigem Eintrittszustand hinsichtlich des Wärmeübergangs als vollständig zweiphasig interpretiert wird. Der Phasenwechsel fällt jedoch nicht zwangsläufig mit der Austrittsseitenfläche zusammen, sodass der Prozessstrom anteilig mit dem hohen Wärmeübergangskoeffizienten des Zweiphasengebiets unterkühlt wird. Dies resultiert in einer überschätzten Temperaturreduktion direkt nach dem Phasenwechsel am Siedepunkt.

Tab. 9.2 fasst die Rechenzeiten der Modelle *Prozessstrom - Stationär Regula Falsi* und *Prozessstrom - Stationär Integration* für das Kondensationsszenario zusammen. Das zellbasierte Verfahren ist mit einer Rechenzeit von 0.1 h echtzeitfähig, wohingegen das Integrationsverfahren bei einer vertretbaren Zunahme der Rechenzeit eine kontinuierliche

Lösung hinsichtlich der Austrittstemperatur ermöglicht. Auf Basis der damit einhergehenden kontinuierlichen Ableitungszusammenhänge ist eine stabile, gradientenbasierte Optimierung von Wärmeübertragern möglich.

Tabelle 9.2: Rechenzeit der Prozessstrommodelle (Kondensation)

Modelltiefe	Rechenzeit in h
Stationär Regula Falsi	0.1
Stationär Integration	0.6

9.2 Risikoanalyse von Wärmeübertragern

Das Verhalten von Wärmeübertragern während transienter Betriebsszenarien ist von Interesse, da Temperaturdifferenzen zwischen verschiedenen Metallkomponenten zu unterschiedlichen thermischen Dehnungen führen können, die in thermisch induzierten Spannungen resultieren. Ein Beispiel sind Temperaturdifferenzen zwischen Rohrbündel und Mantel eines STHE mit beidseitig verschweißten Rohrböden oder eines CWHE. Um ein durch die Spannungen induziertes Materialversagen während Störfällen, Lastwechseln, Anfahr- oder Abschaltvorgängen und Reinigungsprozeduren zu verhindern, sind Wärmeübertrager nach Auslegungsrichtlinien zu dimensionieren. Diese schreiben eine Risikoanalyse (engl. hazard analysis, HAZAN) während der Auslegung vor. Das Ergebnis einer HAZAN kann kostenintensive Designanpassungen erfordern, um die mechanische Stabilität eines Wärmeübertragers während der erforderlichen Lebensdauer sicherzustellen. Beispiele für Designanpassungen sind dickere Rohrböden, eine erhöhte Wandstärke von Mantel oder Rohren und der Einsatz von Expansionskompensatoren.

Bei einer HAZAN wird für ausgewählte transiente Szenarien die mittlere Temperaturdifferenz zwischen den relevanten Metallkomponenten bestimmt. Diese ist die Grundlage einer strukturmechanischen Berechnung bzw. Bewertung der korrespondierenden thermisch induzierten Spannungen. Um den Berechnungsaufwand zu minimieren, wird die mittlere Temperaturdifferenz häufig konservativ oder durch rein stationäre Berechnungen abgeschätzt, sodass die Ergebnisse gegebenenfalls deutlich von den real zu erwartenden Verhältnissen abweichen und zu nicht erforderlichen Designanpassungen führen können.

Ein Beispiel für eine konservative und potentiell zu stark vereinfachte Abschätzung der mittleren Temperaturdifferenz ist das folgende Vorgehen: Der Mantel eines STHE weist aufgrund der geringen volumenspezifischen Oberfläche und im Vergleich zum Rohrbündel großen Wandstärke eine hohe thermische Trägheit auf und behält während des transienten Szenarios die initiale, stationäre Temperatur bei. Das Rohrbündel verfügt aufgrund der großen volumenspezifischen Oberfläche sowie der vergleichsweise niedrigeren Wandstärke über eine geringere thermische Trägheit, sodass sich die Temperatur unmittelbar entsprechend des transienten Szenarios einstellt.

Dynamische Simulationen erlauben im Gegensatz zu konservativen Abschätzungen realitätsnähere Vorhersagen von Temperaturdifferenzen. Somit können ggfs. unnötige Designanpassungen infolge einer HAZAN und die damit verbundenen Mehrkosten verhindert werden. Im Folgenden wird exemplarisch das Simulationsverfahren aus Abschnitt 6.3.3 auf transiente Szenarien angewendet und mit typischen konservativen Annahmen verglichen. In Abschnitt 9.2.1 wird der Ausfall des rohrseitigen Stroms eines STHE thematisiert, ehe auf die Reinigung der Mantelseite eines STHE mit Wasserdampf eingegangen wird (vgl. Abschnitt 9.2.2). Abschnitt 9.2.3 betrachtet einen Störfall eines Rohrbündelreaktors. In Abschnitt 9.2.4 wird der Anfahrvorgang eines CWHE analysiert.

9.2.1 Ausfall der Rohrseite eines Rohrbündelwärmeübertragers

In diesem Abschnitt wird der Ausfall des rohrseitigen Stroms eines STHE betrachtet. Die wichtigsten Geometriedaten des STHE sind in Tab. 9.3 zusammengefasst.

Tabelle 9.3: Geometriedaten des Rohrbündelwärmeübertragers

	Größe	Wert
	Länge	6.86 m
	Außendurchmesser des Mantels	0.94 m
	Gesamtmasse des Mantels	2490 kg
	Anzahl an Rohren	954
	Außendurchmesser der Rohre	0.02 m
	Gesamtmasse der Rohre	5764 kg

Im stationären Zustand strömen $91 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ eines Methanol-reichen Prozessstroms mit 34°C durch die Rohrseite. Der mantelseitige Prozessstrom entspricht $88 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ eines warmen Methanol-reichen Prozessfluids mit einer Eintrittstemperatur von 110°C . Bei einer konservativen Abschätzung für den Ausfall des rohrseitigen Prozessstroms entsprechend obiger Beschreibung wird das Rohrbündel instantan auf 110°C aufgeheizt und der Mantel behält die stationäre mittlere Temperatur von 52°C bei. Daraus resultiert eine mittlere Temperaturdifferenz zwischen Mantel und Rohrbündel von -58 K , sodass ein Expansionskompensator einzusetzen ist, um mechanische Stabilität sicherzustellen.

Für eine realitätsnähere Abschätzung wird eine dynamische Simulation der initialen 200 s durchgeführt, wobei der rohrseitige Strom innerhalb der ersten 2 s des Szenarios ausfällt. Abb. 9.6a ist zu entnehmen, dass sich das Rohrbündel infolge des Ausfalls des kalten Prozessstroms schnell erwärmt. Nach 0.8 s beträgt sowohl die mittlere Mantel- als auch die mittlere Rohrbündeltemperatur 52.5°C . Das Rohrbündel nimmt nach etwa 15 s eine mittlere Temperatur von 100°C an und nähert sich nach 100 s der Eintrittstemperatur des mantelseitigen Prozessstroms von 110°C an. Der Anstieg der mittleren Temperatur des Mantels verläuft deutlich langsamer. Erst nach etwa 70 s erreicht der Mantel eine Temperatur von 100°C . Nach 200 s wird die Eintrittstemperatur des warmen

Prozessstroms erreicht. Abb. 9.6b stellt die Differenz der mittleren Temperaturen von Mantel und Rohrbündel über die Zeit dar. Die betragsmäßig maximale Temperaturdifferenz von -35 K wird nach etwa 16 s erreicht. Wird diese Temperaturdifferenz einer strukturmechanischen Analyse zugrunde gelegt, kann auf einen Expansionskompensator und die damit verbundenen Investitionskosten verzichtet werden.

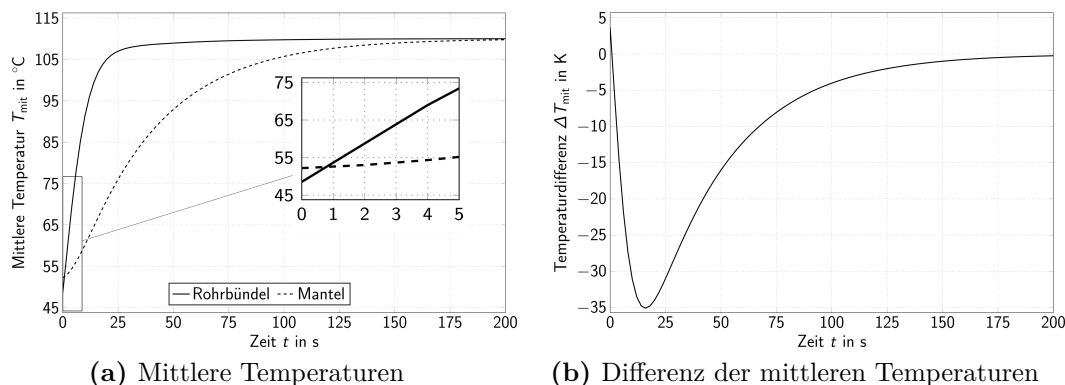


Abbildung 9.6: Ausfall der Rohrseite eines Rohrbündelwärmeübertragers

9.2.2 Reinigung des Mantels eines Rohrbündelwärmeübertragers

Einen Prozessraum mit Wasserdampf zu durchströmen, ist ein in der Prozessindustrie weit verbreitetes Vorgehen, um Rückstände von Kohlenwasserstoffen zu entfernen. In diesem Abschnitt wird die Reinigung des Mantelraums eines STHE betrachtet. Die wichtigsten Geometriedaten des STHE sind in Tab. 9.4 zusammengefasst.

Tabelle 9.4: Geometriedaten des Rohrbündelwärmeübertragers

Größe	Wert
Länge	8.35 m
Außendurchmesser des Mantels	1.34 m
Gesamtmasse des Mantels	5041 kg
Anzahl an Rohren	1813
Außendurchmesser der Rohre	0.02 m
Gesamtmasse der Rohre	16 819 kg

Zu Beginn des Szenarios ist der STHE nicht in Betrieb und Rohr- sowie Mantelseite sind entleert. Rohrbündel und Mantel liegen bei Umgebungstemperatur (7.5°C) vor. Der Mantelraum wird anschließend mit $8 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ überhitztem Wasserdampf durchströmt. Die Eintrittsbedingungen betragen 1.2 bar und 120°C . Bei einem konservativen Ansatz zur HAZAN wird davon ausgegangen, dass das Rohrbündel instantan die Eintrittstemperatur des Wasserdampfs annimmt und der Mantel die Ausgangstemperatur beibehält. Im betrachteten Szenario resultiert daraus eine Differenz der mittleren Temperaturen von Mantel und Rohrbündel von -112.5 K , sodass Anpassungen der Auslegung und

damit zusätzliche Investitionskosten erforderlich sind, um mechanische Stabilität zu garantieren.

Mit Hilfe einer dynamischen Simulation der ersten 200 s wird das Verhalten des STHE während des Reinigungsprozesses analysiert. Die Eintrittsbedingungen des Wasserdampfs werden über das Szenario als konstant angenommen. In Abb. 9.7a ist die zeitliche Entwicklung der mittleren Temperaturen von Mantel und Rohrbündel dargestellt. Beide Metallinstanzen werden sukzessive erwärmt, wobei sich das Rohrbündel schneller der Eintrittstemperatur des Wasserdampfs annähert als der Mantel. Die Differenz der mittleren Temperaturen von Mantel und Rohrbündel während der Reinigung ist Abb. 9.7b zu entnehmen. Die betragsmäßig maximale Temperaturdifferenz von -47 K wird nach 40 s erreicht. Wird dieser Wert als Grundlage einer strukturmechanischen Analyse eingesetzt, können Anpassungen der Auslegung und damit Mehrkosten vermieden werden.

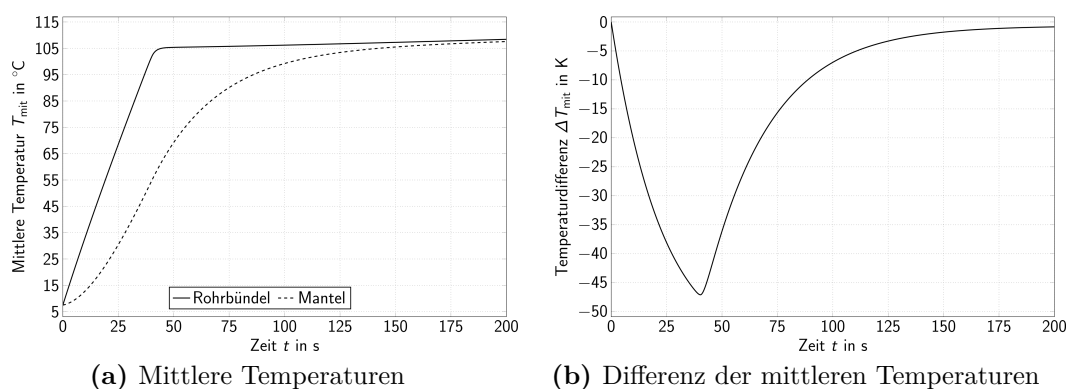


Abbildung 9.7: Reinigung des Mantelraums eines Rohrbündelwärmeübertragers

9.2.3 Vereinfachte Betrachtung eines Reaktorausfalls

In diesem Abschnitt wird der Ausfall eines Rohrbündelreaktors betrachtet. Abb. 9.8 veranschaulicht den Reaktor und das angeschlossene Kühlsystem. Eine exotherme Reaktion findet in den mit Katalysator gefüllten Rohren statt. Die Kühlung erfolgt auf der Mantelseite durch ein Kältemittel mit einer Eintrittstemperatur von 90 °C . Dabei werden im stationären Betrieb $248\frac{\text{kg}}{\text{s}}$ des Kältemittels bei 5 bar zirkuliert und in einem Kühler abgekühlt. Die Eintrittstemperatur des kalten Prozessstroms des Kühlers beträgt 15 °C . Im stationären Betrieb beträgt die mittlere Temperatur der Rohre 92 °C und die mittlere Temperatur des Mantels entspricht 90 °C . Die wichtigsten Geometriedaten des Reaktors sind in Tab. 9.5 zusammengefasst.

Es wird angenommen, dass die exotherme Reaktion ausfällt während der Kühler und die Pumpe kontinuierlich weiter betrieben werden. Daher nimmt die Eintrittstemperatur T_{ein} des Kältemittels in den Mantelraum kontinuierlich ab, während der Eintrittsdruck p_{ein} und der zirkulierende Stoffmengenstrom \dot{N}_{ein} konstant bleiben. Infolgedessen werden Mantel und Rohrbündel des Reaktors ungleichmäßig abgekühlt, was zu kritischen Temperaturdifferenzen und zu spannungsinduziertem Materialversagen führen kann.

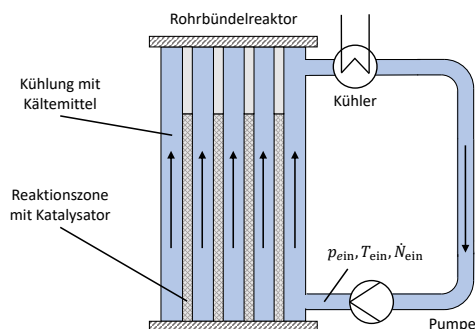


Abbildung 9.8: Rohrbandelreaktor mit K&uumuhlkreislauf

Tabelle 9.5: Geometriedaten des Reaktors

GröBe	Wert
Länge	6.30 m
AuBendurchmesser des Mantels	5.68 m
Gesamtmasse des Mantels	78 140 kg
Anzahl an Rohren	5350
AuBendurchmesser der Rohre	0.06 m
Gesamtmasse der Rohre	130 410 kg

Während einer HAZAN wird konservativ angenommen, dass das Rohrbandel instantan die Temperatur der kalten Seite des K&uumuhlers von 15 °C annimmt und der Mantel die initiale Temperatur von 90 °C beibehält. Diese Annahmen resultieren in einer mittleren Temperaturdifferenz von 75 K und erfordern eine Modifikation der Auslegung.

Im Hinblick auf eine realistischere Abschätzung wird eine dynamische Simulation der ersten 180 min des Szenarios durchgef&uumuhrt. Die Entwicklung der Eintrittstemperatur T_{ein} des K&uumulmittels sowie der mittleren Temperaturen von Mantel- und Rohrbandel &uumuber die Zeit sind Abb. 9.9a zu entnehmen. Die mittlere Temperatur des Rohrbandels folgt dem zeitlichen Verlauf der Eintrittstemperatur des K&uumulmittels unmittelbar. Die Temperaturänderung im Mantel tritt hingegen erst mit deutlicher Verzögerung ein. Nach etwa 20 min beträgt die Eintrittstemperatur des K&uumulmittels 53 °C und die Temperatur des Rohrbandels nimmt 55 °C an. Der Mantel hingegen weist zu diesem Zeitpunkt eine mittlere Temperatur von 71 °C auf. Nach etwa 160 min haben sich sowohl die Eintrittstemperatur des K&uumulmittels als auch die mittleren Mantel- und Rohrbandeltemperaturen der Temperatur der kalten Seite des K&uumuhlers von 15 °C angenähert. Abb. 9.9b stellt die Differenz der mittleren Metalltemperaturen von Rohrbandel und Mantel während des Störfalls dar. Die maximale Temperaturdifferenz von 16 K tritt nach etwa 20 min auf. Wird dieser Wert f&uumur eine strukturmechanische Analyse herangezogen, so sind keine Änderungen an der Auslegung des Reaktors erforderlich, um die mechanische Stabilität zu gewährleisten.

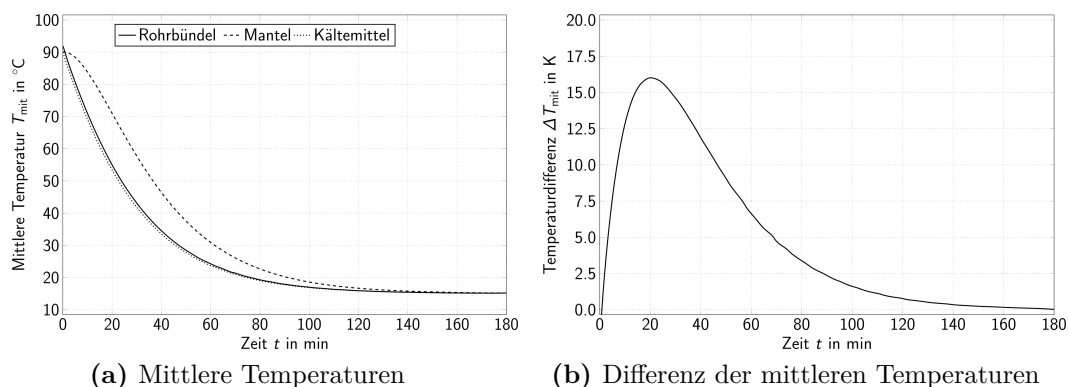


Abbildung 9.9: Ausfall eines Rohrbündelreaktors

9.2.4 Anfahrvorgang eines spiralgewickelten Wärmeübertragers

Während eines Anfahrvorgangs des als CWHE ausgeführten Subcoolers einer Erdgasverflüssigungsanlage (vgl. Abb. 1.4a) ist es entscheidend, die Differenz der mittleren Temperaturen von Kernrohr, Rohrbündel und Mantel zu kontrollieren, um durch thermische Spannungen induzierte Schäden zu vermeiden. Daher wird in diesem Abschnitt die zeitliche Entwicklung der Metalltemperaturen durch eine transiente Berechnung des Anfahrvorgangs ermittelt. Dabei wird das in Abschnitt 6.3.3 vorgestellte Berechnungsverfahren eingesetzt. Der Subcooler verfügt über zwei rohrseitige Prozessströme (Erdgas und Kältemittel), die im stationären Betrieb unterkühlt werden. Der Kältemittelstrom wird anschließend durch Entspannung abgekühlt und in die Mantelseite des Subcoolers eingespeist, wo dieser einer Fallfilmverdampfung unterliegt. Die wichtigsten Geometriedaten des CWHE sind in Tab. 9.6 zusammengefasst.

Tabelle 9.6: Geometriedaten des Subcoolers

Größe	Wert
Länge	8.02 m
Außendurchmesser des Kernrohrs	0.80 m
Gesamtmasse des Kernrohrs	1100 kg
Außendurchmesser des Mantels	1.70 m
Gesamtmasse des Mantels	2200 kg
Anzahl an Rohren Erdgas	365
Gesamtmasse der Rohre Erdgas	3691 kg
Anzahl an Rohren Kältemittel	237
Gesamtmasse der Rohre Kältemittel	2395 kg
Außendurchmesser der Rohre	0.02 m

Während der im Folgenden analysierten initialen 18 h des Anfahrvorgangs wird der Subcooler durch Erdgas- und Kältemittelströme sukzessive abgekühlt. Abb. 9.10

visualisiert die zeitliche Entwicklung der Stoffmengenströme. Während der ersten 5 h des Anfahrvorgangs erfolgt die Abkühlung ausschließlich durch den Erdgasstrom, der sukzessive bis auf $780 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ nach 2.5 h erhöht wird. Anschließend wird der Stoffmengenstrom auf $460 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ nach 5 h reduziert. Im weiteren Verlauf des Anfahrvorgangs variiert der Erdgasstrom zwischen $350 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ und $590 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ (vgl. Abb. 9.10b). Nach 5 h wird auch der Kältemittelstrom in Betrieb genommen ($\approx 15 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$). Der Kältemittelstrom wird zunächst bis $t \approx 14$ h langsam, anschließend schneller bis auf $200 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ erhöht (vgl. Abb. 9.10a).

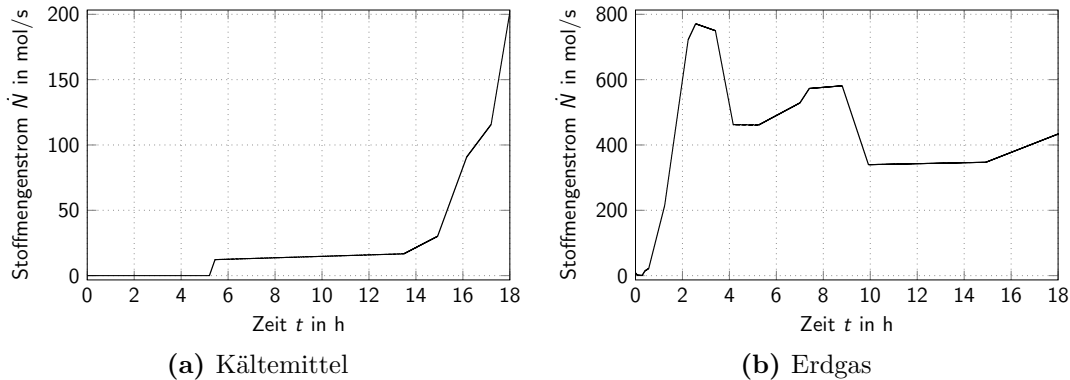


Abbildung 9.10: Stoffmengenströme beim Anfahren eines Subcoolers

Neben den Stoffmengenströmen sind die Eintrittstemperaturen der Prozessströme entscheidend für die Entwicklung der Metalltemperaturen während des Anfahrvorgangs (vgl. Abb. 9.11). Der Kältemittelstrom tritt bei der Inbetriebnahme nach 5 h mit etwa 265 K auf der Rohrseite in den CWHE ein. Während des Anfahrscenarios nimmt die Eintrittstemperatur sukzessive bis auf 200 K ab. Die Eintrittstemperatur des mantelseitigen Kältemittelstroms hängt vom Wärmeübergang des Kältemittels auf der Rohrseite und von der Entspannung bei der Umspeisung von Rohr- auf Mantelseite ab. Qualitativ folgt der Verlauf der mantelseitigen jedoch dem Verlauf der rohrseitigen Eintrittstemperatur. Nach 18 h beträgt die mantelseitige Eintrittstemperatur 140 K (vgl. Abb. 9.11a). Die Eintrittstemperatur des Erdgasstroms fällt während des Anfahrvorgangs von initial 270 K bis auf etwa 175 K ab (vgl. Abb. 9.11b).

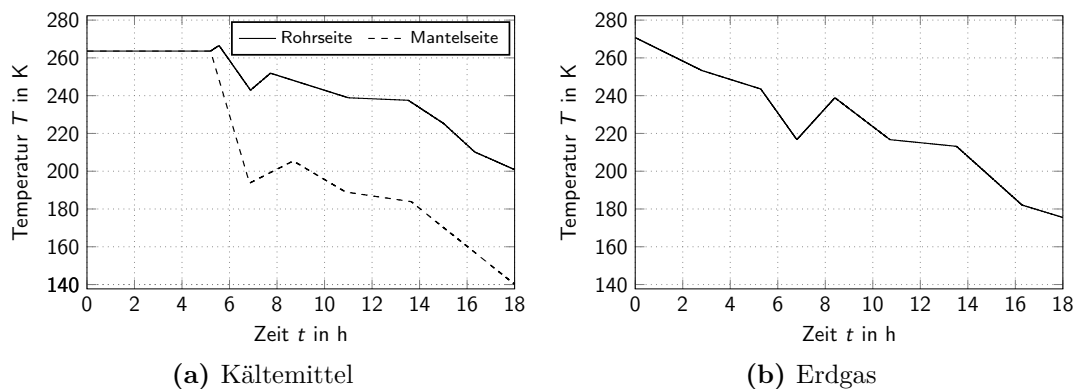


Abbildung 9.11: Eintrittstemperaturen beim Anfahren eines Subcoolers

Die Entwicklung der Metalltemperaturen des Subcoolers, die maßgeblich von den Eintrittstemperaturen und den Stoffmengenströmen beeinflusst wird, ist in Abb. 9.12a dargestellt. In den initialen 5 h erfolgt die Abkühlung des Subcoolers ausschließlich durch den Erdgasstrom. Daher folgt die mittlere Temperatur der Rohrfraktion des Erdgasstroms direkt dessen Eintrittstemperatur. Der nicht durchströmte und mit einem gasförmigen Medium gefüllte Mantelraum wird indirekt durch die Rohrfraktion des Erdgasstroms abgekühlt. Das mantelseitige Medium wiederum kühlt die nicht durchströmte Rohrfraktion des Kältemittelstroms sowie Mantel und Kernrohr. Aufgrund des hohen Oberflächen- zu Volumenverhältnisses sinkt dabei die mittlere Temperatur der nicht durchströmten Rohrfraktion schneller als die von Kernrohr oder Mantel.

Die mittleren Temperaturen von Mantel und Kernrohr entwickeln sich vergleichbar, da beide Metallkomponenten ähnliche Oberflächen- zu Volumenverhältnisse und Wärmeübergangsbedingungen zum Mantelraum aufweisen. Zum Zeitpunkt $t \approx 5$ h wird der Kältemittelstrom in Betrieb genommen, sodass die Entwicklung der mittleren Temperatur der korrespondierenden Rohrfraktion von der Eintrittstemperatur des Erdgasstroms entkoppelt. Im weiteren Verlauf des Anfahrvorgangs stellen sich die mittleren Metalltemperaturen entsprechend des komplexen Zusammenspiels der Wärmeübergänge zwischen dem mantelseitigen und den rohrseitigen Prozessströmen ein.

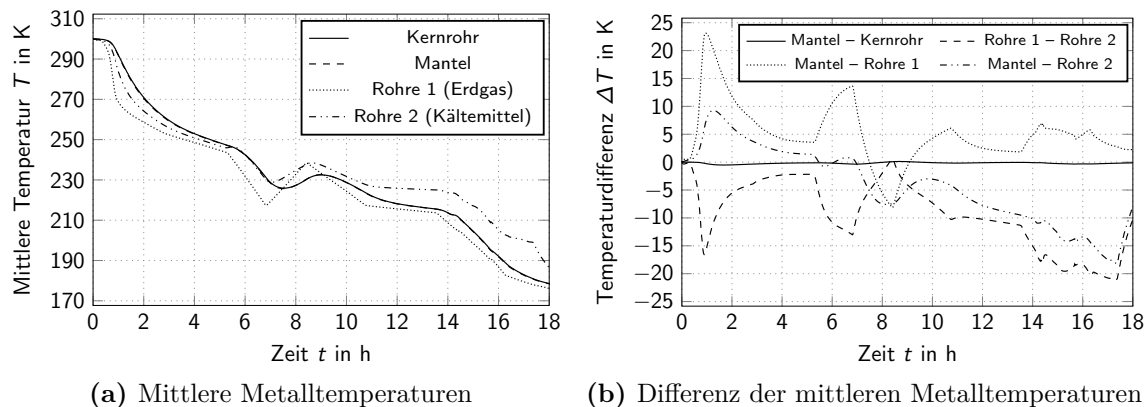


Abbildung 9.12: Metalltemperaturen beim Anfahren eines Subcoolers

Abb. 9.12b visualisiert die Differenzen der mittleren Temperaturen der Metallkomponenten des Subcoolers während des Anfahrvorgangs. Die Absolutwerte der Temperaturdifferenzen betragen weniger als 25 K. Daher ist davon auszugehen, dass durch den Anfahrvorgang keine durch Thermospannungen induzierte Schäden verursacht werden. Die Temperaturdifferenz zwischen Mantel und Kernrohr ist während des Anfahrvorgangs vernachlässigbar. Die maximale Temperaturdifferenz zwischen dem Mantel und der Rohrfraktion des Erdgasstroms tritt während der initialen Abkühlung durch den Erdgasstrom bei $t \approx 1$ h auf und ist auf die Zunahme des Stoffmengenstroms und die Abnahme der Eintrittstemperatur zurückzuführen.

Ein weiteres Maximum der Temperaturdifferenz zwischen dem Mantel und der Rohrfraktion des Erdgasstroms liegt bei $t \approx 7$ h. Hier nimmt die Eintrittstemperatur des Erdgasstroms weiter ab, während die Abkühlung des Mantels durch den Einfluss des

Kältemittels gedämpft wird. Das Maximum der absoluten Temperaturdifferenz zwischen dem Mantel und der Rohrfraktion des Kältemittelstroms liegt bei $t \approx 17$ h. Hier dämpft der warme rohrseitige Kältemittelstrom die Abkühlung der korrespondierenden Rohrfraktion durch das kalte mantelseitige Kältemittel, wohingegen der Mantel uneingeschränkt durch dieses abgekühlt werden kann. Nach $t \approx 17$ h liegt auch das Maximum der absoluten Temperaturdifferenz zwischen den beiden Rohrfraktionen vor. Einerseits dämpft der warme rohrseitige Kältemittelstrom die Abkühlung der korrespondierenden Rohrfraktion durch das mantelseitige Kältemittel. Zudem wird die Erdgas-Rohrfraktion zu diesem Zeitpunkt weiterhin durch den kalten Erdgasstrom abgekühlt.

9.3 Lebensdauerabschätzung von Wärmeübertragern

Die in dieser Arbeit entwickelten dynamischen Simulationsmodelle können zudem eingesetzt werden, um die Lebensdauer von Wärmeübertragern unter dem Einfluss transienter Betriebsszenarien abzuschätzen. Hierzu wird in einem ersten Schritt eine thermo-fluiddynamische Simulation der Betriebsszenarien durchgeführt, um die zeitliche Entwicklung der Metalltemperaturen zu ermitteln. Diese werden in einem zweiten Schritt als Randbedingungen einer struktur-mechanischen Analyse eingesetzt. Die dadurch quantifizierten Spannungen lassen Rückschlüsse auf die Dauerfestigkeit des Apparats zu. Im Folgenden wird das in Abschnitt 6.3.3 vorgestellte Simulationsmodell eingesetzt, um die zeitliche Entwicklung der Metalltemperaturen zu bestimmen. In Abschnitt 9.3.1 wird der Subcooler einer Luftzerlegungsanlage betrachtet und in Abschnitt 9.3.2 wird ein PFHE einer Erdgasanlage analysiert.

9.3.1 Subcooler einer Luftzerlegungsanlage

In diesem Abschnitt wird das Verhalten des Subcoolers der in Abb. 1.1 dargestellten Luftzerlegungsanlage während eines Anfahrvorgangs betrachtet. Initial liegt die Anlage bei Umgebungsdruck und -temperatur vor. Die Topologie des Subcoolers, welcher die Hoch- und die Niederdruckkolonne der Anlage thermisch integriert, ist Abb. 9.13 zu entnehmen. Die Prozessströme CGN und GAN werden im Gegenstrom zu den Prozessströmen CLOP und LIN geführt. Die gasförmigen, stickstoffreichen Prozessströme GAN und CGN werden aus der Niederdruckkolonne abgezogen. Die im stationären Betrieb flüssigen Prozessströme CLOP (sauerstoffreich) und LIN (stickstoffreich) sind Produkte der Hochdruckkolonne. GAN und CGN werden am rechten Ende eingespeist, durchströmen den Subcooler auf ganzer Länge und werden am linken Ende abgezogen. CLOP wird dem Apparat am linken Ende zugeführt und in der Mitte abgezogen. LIN wird mittig eingespeist und wird am rechten Ende des Apparats abgezogen. Da die warmen Prozessströme CLOP und LIN von links nach rechts strömen, wird das linke Ende als warmes, das rechte als kaltes Ende bezeichnet.

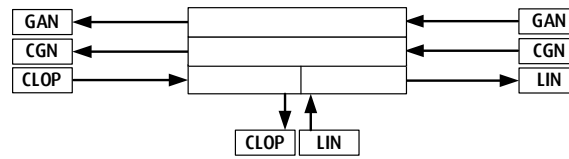


Abbildung 9.13: Topologie des Subcoolers einer Luftzerlegungsanlage

Die wichtigsten Geometriedaten des Subcoolers sind in Tab. 9.7 zusammengefasst.

Tabelle 9.7: Geometriedaten des Subcoolers

Größe	Wert
Länge	1.75 m
Breite	0.97 m
Gesamtmasse	1450 kg
Lagenanzahl GAN	24
Lagenanzahl CGN	30
Lagenanzahl CLOP	27
Lagenanzahl LIN	27

Der für den Subcooler relevante Teil des Anfahrvorgangs dauert 20 h. Die transiente Antwort des Subcoolers wird maßgeblich von der Entwicklung des Stoffmengenstroms (vgl. Abb. 9.14a) und des Drucks (vgl. Abb. 9.14b) der Prozessströme beeinflusst. Die Werte der Stoffmengenströme sind mit den Werten im stationären Betrieb normiert.

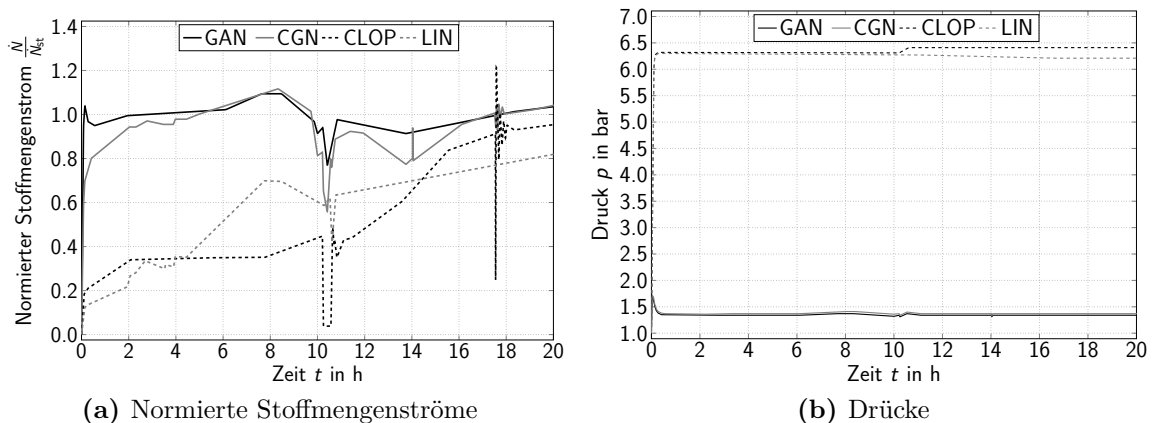


Abbildung 9.14: Prozessgrößen des Subcoolers während eines Anfahrvorgangs

Infolge der Drücke und Stoffmengenströme resultieren charakteristische Temperaturprofile entlang der Hauptströmungsrichtung der Prozessströme. Die eingesetzten Wärmeübergangskorrelationen liefern in Abhängigkeit vom thermodynamischen Zustand des Fluids den korrespondierenden Wärmeübergangskoeffizienten. Die Profile von Temperatur

und Wärmeübergangskoeffizient sind in Abb. 9.15 bis 9.18 für ausgewählte Zeitpunkte während des Anfahrvorgangs dargestellt.

Bis zum Zeitpunkt $t \approx 0.5$ h findet der Druckaufbau in der Luftzerlegungsanlage statt. Dies resultiert in ansteigenden Drücken und Stoffmengenströmen. Nach 2.1 h stabilisieren sich die Stoffmengenströme (vgl. Abb. 9.14). Wie Abb. 9.15a zu entnehmen ist, wurde der Subcooler bis zu diesem Zeitpunkt auf ein Temperaturniveau von etwa 100 K abgekühlt. Die Eintrittstemperatur des Prozessstroms GAN liegt mit etwa 85 K deutlich unterhalb der Metalltemperatur und bedingt in der Folge eine weitere Abkühlung der Metallmasse. Aufgrund des im Vergleich zum stationären Betrieb erhöhten Temperaturniveaus des Subcoolers treten CLOP und LIN gasförmig ein und werden im Subcooler bis zum Erreichen des Taupunkts abgekühlt. CLOP beginnt bei $x \approx 0.20$ m zu kondensieren, LIN bei $x \approx 1.25$ m. Der Taupunkt kann anhand des charakteristischen Knicks im Temperaturprofil der Prozessströme identifiziert werden. Die Wärmeübergangskoeffizienten ändern sich am Taupunkt signifikant (vgl. Abb. 9.15b). Entsprechend der eingesetzten Wärmeübergangskorrelationen (vgl. Abschnitt 3.1) für einen PFHE stellt sich ein Übergang von niedrigen Wärmeübergangskoeffizienten in der Gasphase zu hohen Wärmeübergangskoeffizienten im Zweiphasengebiet ein. In der Gasphase beträgt der Wärmeübergangskoeffizient für CLOP etwa $180 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$ und für LIN etwa $100 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$. Während der Kondensation im Zweiphasengebiet entsprechen die Wärmeübergangskoeffizienten für CLOP und LIN etwa $1550 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$ bzw. $1800 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$.

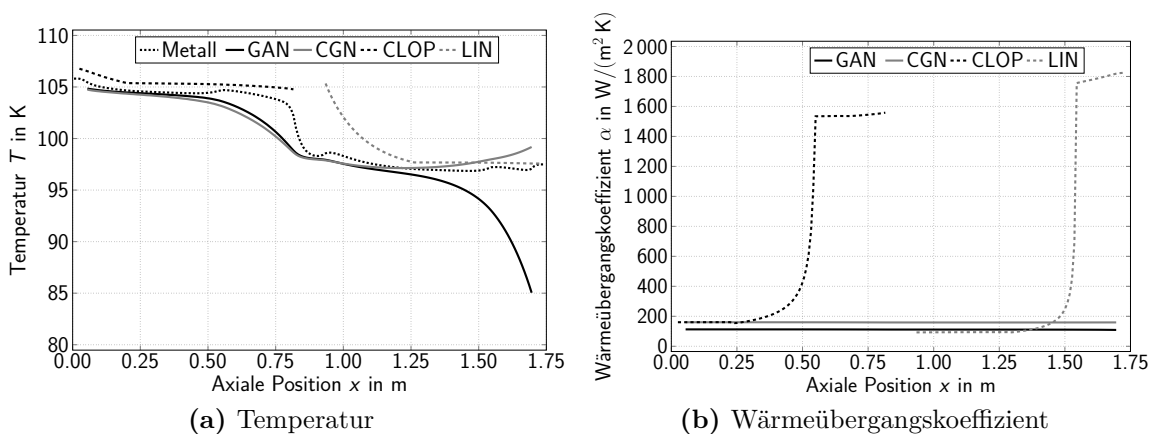


Abbildung 9.15: Prozessgrößen des Subcoolers nach 2.1 h des Anfahrvorgangs

Bis zum Zeitpunkt $t \approx 7.9$ h bleiben die Stoffmengenströme und die Drücke im Subcooler nahezu konstant. Lediglich der LIN-Stoffmengenstrom steigt kontinuierlich an (vgl. Abb. 9.14). Nach $t \approx 7.9$ h ist die Eintrittstemperatur des Prozessstroms CGN mit etwa 86 K deutlich geringer als die Metalltemperatur. Der Subcooler wird daher weiter abgekühlt und der Taupunkt der LIN-Passage verschiebt sich in Richtung des warmen Endes (vgl. Abb. 9.16a). Nach wie vor liegen stark unterschiedliche Wärmeübergangskoeffizienten für Gasphase und Zweiphasengebiet vor (vgl. Abb. 9.16b). Auch die CLOP-Eintrittstemperatur ist bis zu diesem Zeitpunkt abgesunken, sodass der Prozessstrom im Zweiphasengebiet eingespeist und entlang des Subcoolers vollständig kondensiert sowie unterkühlt wird. Der Siedepunkt, welcher am charakteristischen

Knick im Temperaturprofil zu identifizieren ist, liegt bei $x \approx 0.55$ m. Entsprechend der Auslegungskorrelationen für den konvektiven Wärmeübergang beträgt der Wärmeübergangskoeffizient im Zweiphasengebiet etwa $1750 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$ und in der unterkühlten Flüssigkeit etwa $300 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$.

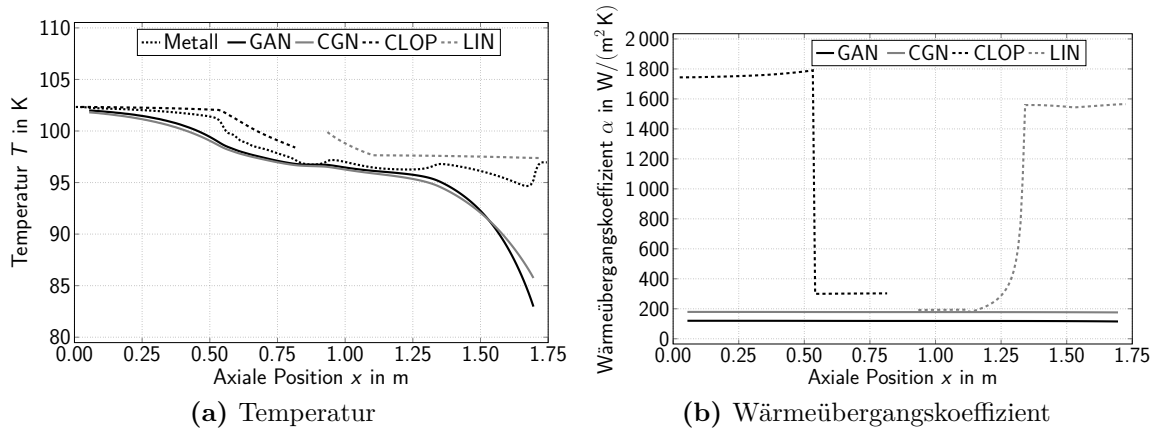


Abbildung 9.16: Prozessgrößen des Subcoolers nach 7.9 h des Anfahrvorgangs

Nach etwa 10.4 h ist aufgrund des Flüssigkeitsaufbaus im Rektifikationssystem der Luftzerlegungsanlage eine Störung der Stoffmengenströme und der Drücke im Subcooler zu beobachten. In der Folge nimmt der CLOP-Stoffmengenstrom nahezu den Nullwert an (vgl. Abb. 9.14). Aufgrund des geringen Stoffmengenstroms wird die Temperaturdifferenz zwischen dem warmen Prozessstrom CLOP und der Metalltemperatur auf ein Minimum reduziert. Somit wird die linke, warme Hälfte des Subcoolers ausschließlich von den kalten Prozessströmen GAN und CGN beeinflusst (vgl. Abb. 9.17).

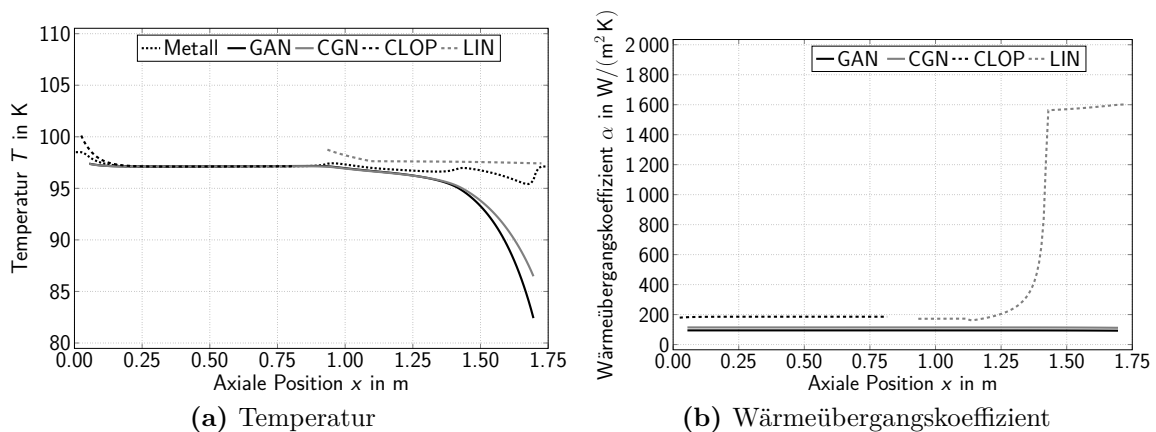


Abbildung 9.17: Prozessgrößen des Subcoolers nach 10.4 h des Anfahrvorgangs

Im weiteren Verlauf des Anfahrvorgangs stabilisieren sich die Drücke und die Stoffmengenströme nähern sich dem Zustand vor der Störung an. Zwischen $t \approx 17$ h und $t \approx 18$ h führt der Eingriff eines Füllstandsreglers im Rektifikationssystem der Luftzerlegungsanlage zu einem oszillierenden Verhalten des CLOP-Stoffmengenstroms (vgl. Abb. 9.14). Daraus resultiert ein oszillierendes Verhalten der Profile von Temperatur und

Wärmeübergangskoeffizienten in der linken, vom Stoffmengenstrom CLOP beeinflussten Hälfte des Subcoolers. Nach $t = 20$ h haben sich die Werte der Stoffmengenströme dem stationären Betrieb angenähert, sodass die Profile von Temperatur und Wärmeübergangskoeffizienten annähernd dem stationären Zustand entsprechen.

Abb. 9.18 zeigt, dass alle Prozessströme über die gesamte Länge des Subcoolers im einphasigen Zustand vorliegen. Dabei sind CLOP und LIN unterkühlte Flüssigkeiten sowie GAN und CGN überhitzte Gase. Die Wärmeübergangskoeffizienten in der Flüssigphase liegen höher als die Wärmeübergangskoeffizienten der gasförmigen Prozessströme. Das Metalltemperaturprofil ist nahezu linear und entspricht dem charakteristischen Temperaturprofil eines stationär betriebenen PFHE.

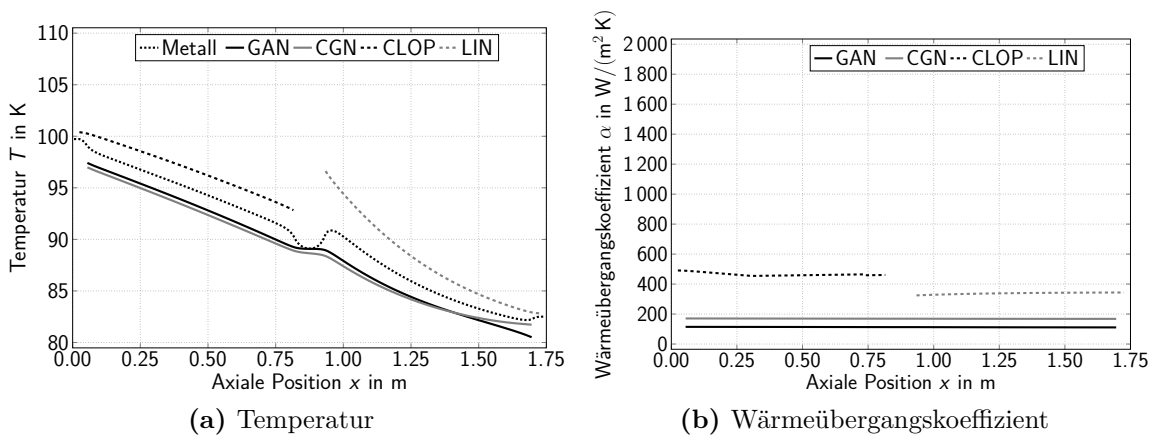


Abbildung 9.18: Prozessgrößen des Subcoolers nach 20.0 h des Anfahrvorgangs

Abb. 9.19 visualisiert die zeitliche Entwicklung der Metalltemperaturen während des Anfahrvorgangs, welche als Randbedingung einer nachfolgenden strukturmechanischen Analyse dienen. In den ersten 2 h des Anfahrvorgangs (vgl. Abb. 9.19a) erfolgt eine gleichmäßige Abkühlung der Metallmasse des Subcoolers von Umgebungstemperatur auf ein kryogenes Temperaturniveau von etwa 110 K, da ausschließlich gasförmige Prozessströme am Abkühlvorgang beteiligt sind. In diesem Teil des Anfahrvorgangs sind daher keine Temperaturgradienten zu beobachten, welche zu kritischen thermischen Spannungen führen können.

Abb. 9.19b visualisiert demgegenüber den zeitlichen Verlauf der Metalltemperaturen im Zeitraum $t = 2$ h bis $t = 20$ h des Anfahrvorgangs. Nach 16 h liegt, insbesondere am kalten Ende des Subcoolers, eine starke Änderung der Metalltemperatur mit der Zeit vor. Zudem sind zwischen $t = 2$ h und $t = 8$ h zwischen $x = 0.75$ m und $x = 1.00$ m ausgeprägte Temperaturgradienten zu verzeichnen. Die starken räumlichen und zeitlichen Temperaturunterschiede sind auf die Kondensationszonen der Prozessströme CLOP sowie LIN zurückzuführen.

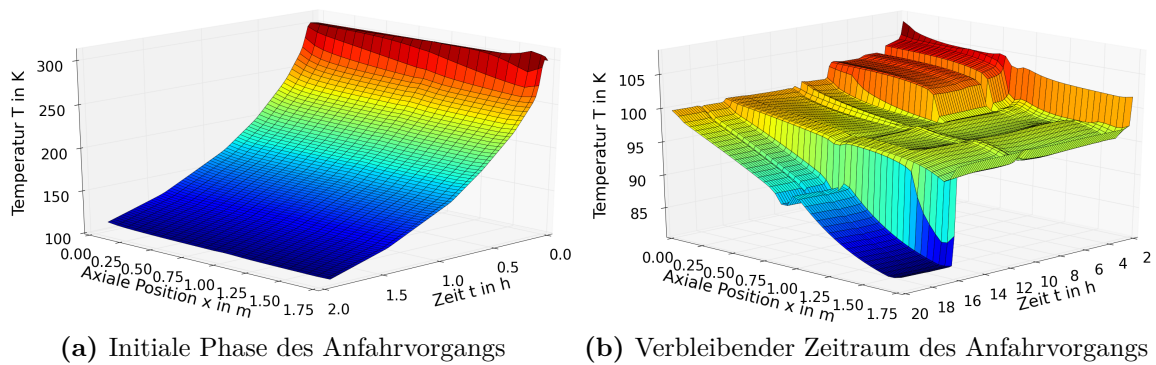


Abbildung 9.19: Metalltemperaturen des Subcoolers während des Anfahrvorgangs

9.3.2 Plattenwärmeübertrager einer Erdgasanlage

In diesem Abschnitt wird ein Lastwechsel des in Abschnitt 8.2.2 beschriebenen PFHE einer Erdgasanlage dynamisch simuliert, um die Entwicklung der Metalltemperaturen für eine strukturmechanische Analyse zur Abschätzung der Lebensdauer zu bestimmen. Während des Lastwechsels bleiben die Temperaturen und Drücke der Prozessströme am Eintritt in den PFHE konstant (vgl. Tab. 9.8).

Tabelle 9.8: Temperaturen und Drücke am Eintritt der Prozessströme

Prozessstrom	Temperatur in K	Druck in bar
Strom 1	273.15	55.7
Strom 2	245.15	33.2
Strom 3	112.00	1.3

Während des Lastwechsels vom initialen stationären Betriebszustand bei $t = 0.0$ h auf den finalen stationären Betriebszustand bei $t = 2.5$ h verändern sich die in den PFHE eintretenden Stoffmengenströme. Diese sind in Abb. 9.20 mit den Werten im finalen stationären Betriebszustand normiert dargestellt. Im initialen Betriebszustand betragen die normierten Stoffmengenströme 0.77 für Strom 1, 0.58 für Strom 2 sowie 0.72 für Strom 3. Der eigentliche Lastwechsel beginnt zum Zeitpunkt $t = 0.4$ h mit einem Abfall der Stoffmengenströme von Strom 1 und Strom 3. Der normierte Stoffmengenstrom von Strom 3 erreicht nach $t = 0.45$ h ein Minimum von 0.38. Der normierte Stoffmengenstrom von Strom 1 weist zum Zeitpunkt $t = 0.65$ h mit 0.22 ein Minimum auf. Anschließend steigen die Stoffmengenströme durch die beiden Passagen wieder und erreichen bei $t = 0.75$ h ein Plateau. Nach etwa $t = 0.85$ h ist eine weitere Veränderung der Stoffmengenströme zu beobachten. Für Strom 3 fällt der Stoffmengenstrom kurzzeitig auf nahezu Null. Anschließend stellt sich ein Plateau mit einem normierten Stoffmengenstrom von 0.49 ein. Der Stoffmengenstrom von Strom 2 fällt bis auf einen Wert von 0.30, welcher zunächst konstant gehalten wird. Auch der normierte Stoffmengenstrom von Strom 1 fällt kontinuierlich, bis bei einem Wert von

0.47 ein Plateau erreicht wird. Nach $t = 1.7$ h nehmen die Stoffmengenströme wieder zu und erreichen den finalen stationären Betriebszustand.

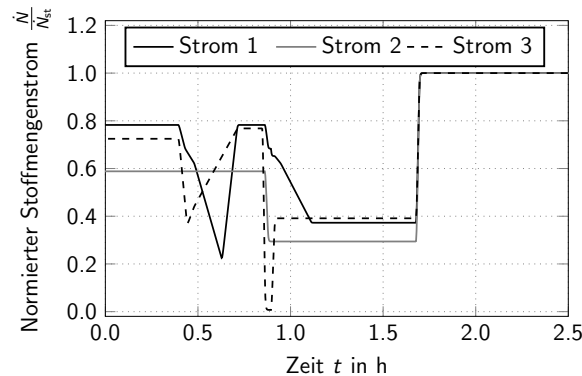


Abbildung 9.20: Stoffmengenströme im Plattenwärmeübertrager

Im Folgenden werden die Profile der Strom- und Metalltemperaturen sowie der Wärmeübergangskoeffizienten in Hauptströmungsrichtung der Prozessströme des PFHE zu ausgewählten Zeitpunkten während des Lastwechsels betrachtet. Abb. 9.21 visualisiert die Profile des initialen stationären Zustands. Im PFHE liegt ein Überschuss an warmen Wärmekapazitätsströmen vor, sodass die Temperaturprofile einen gekrümmten, zu höheren Temperaturen verschobenen Verlauf annehmen (vgl. Abb. 9.21a). Der PFHE ist von einer geringen Temperaturdifferenz zwischen warmen und kalten Prozessströmen am warmen Ende gekennzeichnet. Die Metalltemperatur am warmen Ende beträgt 237 K, am kalten Ende liegt eine Metalltemperatur von 119 K vor.

Anhand der Profile der Wärmeübergangskoeffizienten in Abb. 9.21b können lokal die Wärmeübergangsregime abgelesen werden. Strom 1 tritt bei $x = 0.025$ m geringfügig überhitzt in den PFHE ein und beginnt bei $x \approx 0.15$ m zu kondensieren, wodurch sich der Wärmeübergangskoeffizient erhöht. Bei $x = 0.625$ m tritt Strom 1 aus den Verteilerfins aus und durchströmt anschließend die Hauptfins. Aufgrund des Wechsels der Strömungsverhältnisse steigt der Wärmeübergangskoeffizient bis auf etwa $1500 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$ an. Der Wärmeübergangskoeffizient erreicht bei $x \approx 3.2$ m ein Maximum, welches dem Siedepunkt von Strom 1 entspricht. Im weiteren Verlauf wird Strom 1 unterkühlt. Dabei liegt bei $x = 3.75$ m der Wechsel von den Hauptfins auf die Sammlerfins der Passage vor. Prozessstrom 2 tritt bei $x = 0.025$ m überhitzt in den PFHE ein und wird abgekühlt. Bei $x = 0.6$ m tritt Strom 2 aus den Verteilerfins aus und in die Hauptfins ein. Erneut ist ein Anstieg des Wärmeübergangskoeffizienten zu beobachten. Der Prozessstrom erreicht nach $x \approx 1.7$ m den Taupunkt, der mit einem sprunghaften Anstieg des Wärmeübergangskoeffizienten auf etwa $900 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$ einhergeht.

Während der Kondensation nimmt der Wärmeübergangskoeffizient sukzessive zu und erreicht kurz vor dem Siedepunkt ein Maximum (vgl. $x \approx 3.3$ m). Am Taupunkt bei $x \approx 3.35$ m sinkt der Wärmeübergangskoeffizient abrupt auf etwa $720 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$. Strom 2 wird anschließend in der Flüssigphase unterkühlt und weist bei $x = 3.825$ m einen Wechsel von Haupt- zu Sammlerfins auf. Strom 3 tritt bei $x = 4.35$ m in den PFHE ein und liegt über die ganze Länge in der Gasphase vor. Dies führt zu einem geringen

Wärmeübergangskoeffizienten von etwa $150 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$. Bei $x = 4.175 \text{ m}$ bzw. $x = 0.225 \text{ m}$ liegt der Übergang von Verteiler- zu Haupt- bzw. von Haupt- zu Sammlerfins.

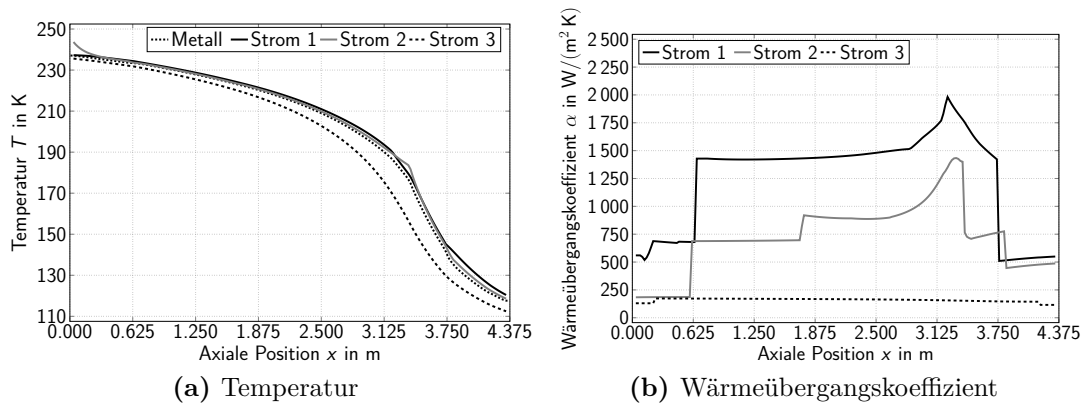


Abbildung 9.21: Prozessgrößen im PFHE nach 0.0 h des Lastwechsels

Abb. 9.22 visualisiert die Profile des PFHE nach $t = 0.8 \text{ h}$. Im Vergleich zum initialen stationären Zustand hat das Verhältnis von kalten zu warmen Wärmekapazitätsströmen zugenommen, sodass die Temperaturprofile zu kälteren Temperaturen verschoben sind. Der PFHE weist eine geringe Temperaturdifferenz zwischen warmen und kalten Prozessströmen am kalten Ende auf (vgl. Abb. 9.22a). Aufgrund des geringeren Temperaturniveaus des PFHE sind die Siede- und Taupunkte der kondensierenden Ströme 1 und 2 in Richtung des warmen Endes verschoben (vgl. Abb. 9.22b). Der Taupunkt von Strom 1 befindet sich nahe am Eintritt bei $x \approx 0.05 \text{ m}$, der Siedepunkt bei $x \approx 1.9 \text{ m}$. Tau- bzw. Siedepunkt von Strom 2 liegen bei $x \approx 0.8 \text{ m}$ bzw. $x \approx 2.15 \text{ m}$.

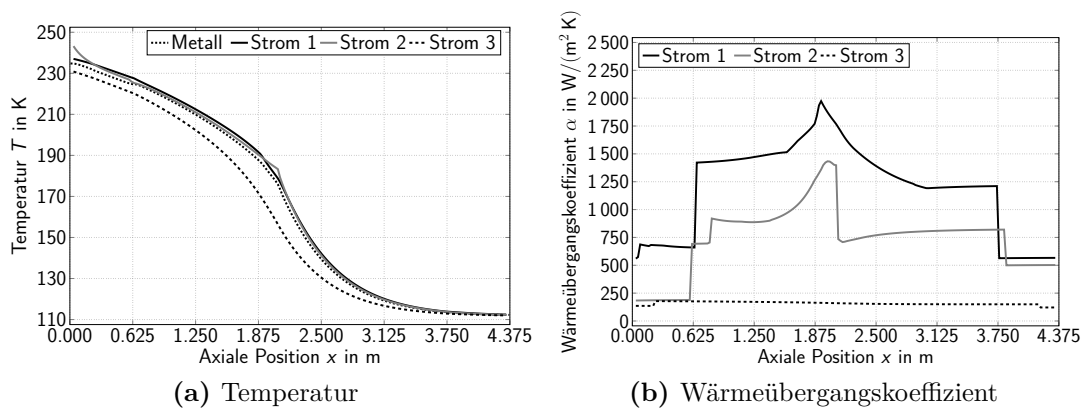


Abbildung 9.22: Prozessgrößen im PFHE nach 0.8 h des Lastwechsels

Zum Zeitpunkt $t = 0.87 \text{ h}$ geht der Stoffmengenstrom von Strom 3 gegen Null. Aufgrund des Überschusses warmer Wärmekapazitätsströme werden die Temperaturprofile hin zu höheren Temperaturen verschoben (vgl. Abb. 9.23a). Bei $x \approx 2.7 \text{ m}$ liegt ein ausgeprägter Gradient der Metalltemperatur vor. Der Wärmeübertrager wird auf der gesamten Länge durch die warmen Prozessströme dominiert, sodass geringe Temperaturdifferenzen

zwischen den warmen und den kalten Prozessströmen vorliegen. Aufgrund des höheren Temperaturniveaus sind die Siede- und Taupunkte von Strom 1 und Strom 2 zum kalten Ende des Wärmeübertragers hin verschoben (vgl. Abb. 9.23a).

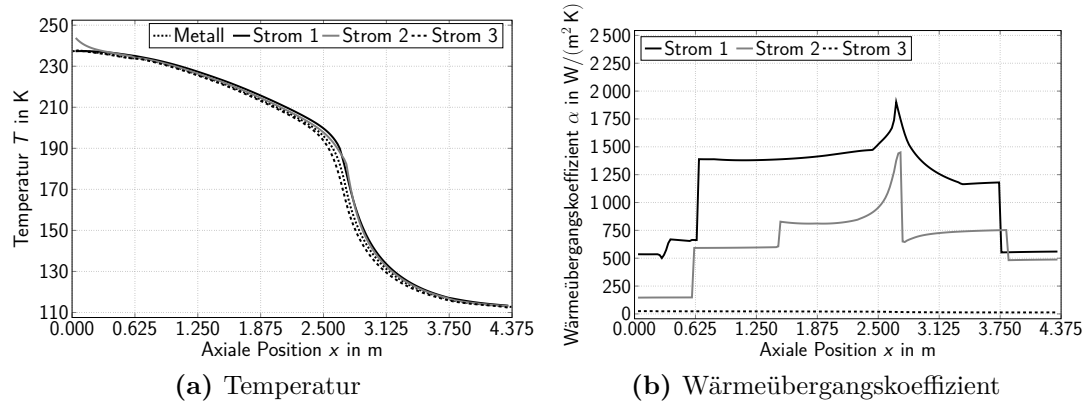


Abbildung 9.23: Prozessgrößen im PFHE nach 0.87 h des Lastwechsels

Auch nach $t = 0.9$ h des Lastwechsels dominiert ein Überschuss an warmen Wärmekapazitätsströmen das Verhalten des PFHE. Der ausgeprägte Gradient im Metalltemperaturprofil liegt nun bei $x \approx 3.8$ m vor (vgl. Abb. 9.24a). Da der kalte Prozessstrom (Strom 3) wieder aktiv ist, kann eine signifikante Temperaturdifferenz zwischen warmen und kalten Prozessströmen am kalten Ende beobachtet werden. Die Tau- und Siedepunkte von Strom 1 liegen nun bei $x \approx 1.15$ m und $x \approx 3.825$ m. Strom 2 beginnt nach $x \approx 2.85$ m zu kondensieren und ist nach $x \approx 3.825$ m vollständig verflüssigt (vgl. Abb. 9.24b).

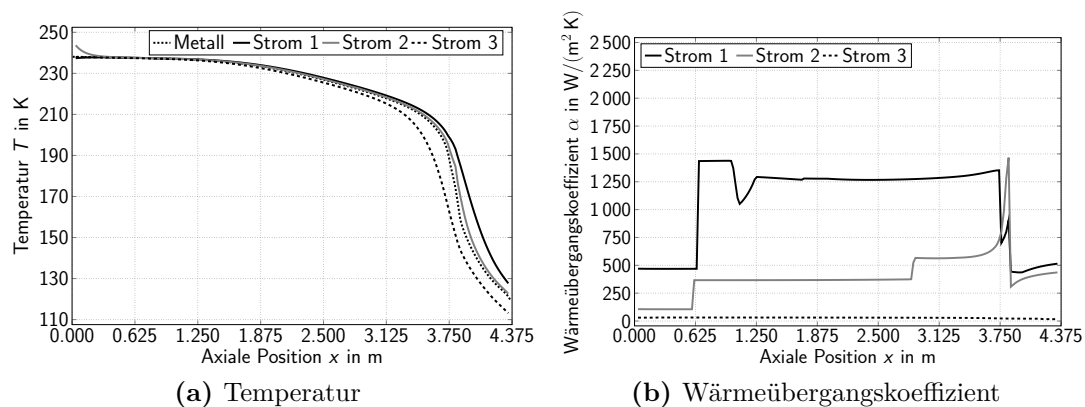


Abbildung 9.24: Prozessgrößen im PFHE nach 0.9 h des Lastwechsels

Bis zum finalen stationären Zustand nach $t = 2.5$ h werden die Stoffmengenströme des PFHE angepasst. Im Vergleich zum initialen stationären Zustand sind die resultierenden Temperaturprofile hin zu niedrigeren Temperaturen verschoben, da ein größeres Verhältnis von kalten zu warmen Wärmekapazitätsströmen vorliegt (vgl. Abb. 9.25a). Zudem sind die Stoffmengenströme im finalen stationären Zustand größer als im initialen, was

zu höheren Strömungsgeschwindigkeiten und gemäß der Wärmeübergangskorrelationen zu größeren Wärmeübergangskoeffizienten führt (vgl. Abb. 9.25b).

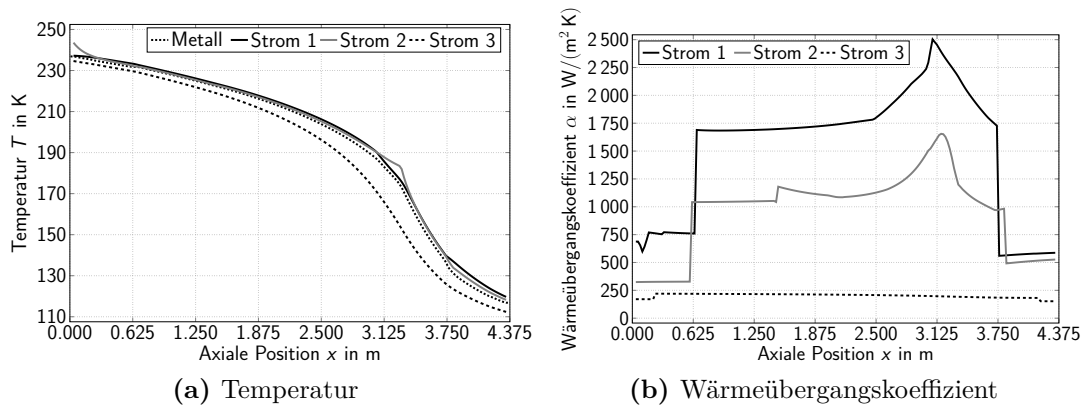


Abbildung 9.25: Prozessgrößen im PFHE nach 2.5 h des Lastwechsels

Die Entwicklung der Metalltemperaturen während des Lastwechsels ist Abb. 9.26 zu entnehmen. Infolge der rapiden Änderungen der Stoffmengenströme und damit des Verhältnisses von kalten und warmen Wärmekapazitätsströmen stellen sich schnelle Änderungen der Metalltemperatur ein. Die Reduktion des Stoffmengenstroms des kalten Stroms 3 führt bei $t \approx 0.45$ h zu einer kurzfristigen Erwärmung der Metallwärmekapazität. Diese kühlt anschließend wieder ab, da auch der Stoffmengenstrom des warmen Stroms 1 reduziert wird (vgl. $t \approx 0.7$ h). Bei $t \approx 1.0$ h liegt erneut ein lokales Maximum der Metalltemperaturen vor, da ein Überschuss warmer Wärmekapazitätsströme zu verzeichnen ist, ehe die Metallwärmekapazität bis zum finalen stationären Zustand sukzessive abkühlt. Aufgrund der schnellen Temperaturänderungen ist es für den betrachteten Lastwechsel unabdingbar, eine strukturmechanische Analyse durchzuführen, um die Kritikalität thermischer Spannungen beurteilen zu können.

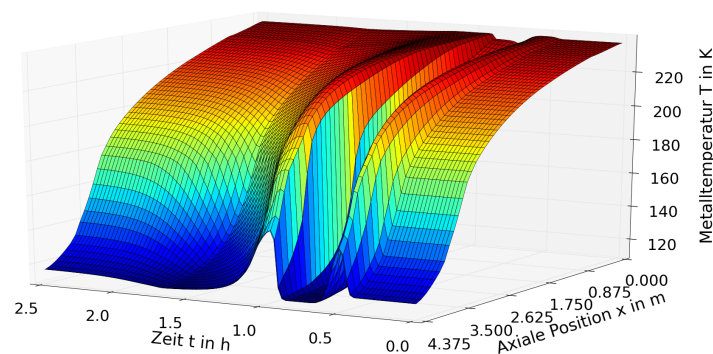


Abbildung 9.26: Metalltemperaturen des PFHE während des Lastwechsels

9.4 Entwicklung von schonenden Anfahrkonzepten

In den Abschnitten 9.2 und 9.3 wurden dynamische Simulationsmodelle zur Risikoanalyse und Lebensdauerabschätzung von Wärmeübertragern eingesetzt. Ist die für ein wiederkehrendes transientes Szenario mittels einer strukturmechanischen Analyse ermittelte Lebensdauer eines Apparats nicht ausreichend, so sind die Randbedingungen des Szenarios zu modifizieren. Es kann z.B. die Abkühlrate der Eintrittstemperatur eines Prozessstroms reduziert werden. Häufig ist eine Anpassung des Betriebskonzepts einer gesamten Prozessanlage notwendig. Dies erfordert die Einbindung von transienten Wärmeübertragermodellen in eine dynamische Prozesssimulation der Anlage. In diesem Abschnitt wird die Entwicklung eines Wiederanfahrkonzepts einer NLU (vgl. Abb. 1.3) nach zeitlich begrenztem Stillstand betrachtet. Die Integration der in dieser Arbeit entwickelten Wärmeübertragermodelle mit Auslegungskorrelationen für Druckverlust und Wärmeübergang in die Prozesssimulation ermöglicht die realitätsgetreue Simulation der Dynamik der NLU.

Die Eintrittsbedingungen der Feedströme N2 und HPN2, die bei einer Temperatur von 293 K vorliegen, stellen eine Randbedingung der Simulation dar. Abb. 9.27 visualisiert die mit dem Stoffmengenstrom im stationären Betrieb normierten Stoffmengenströme und die Drücke der Feedströme während des Anfahrvorgangs. In den ersten 2 h steigen die Stoffmengenströme sukzessive an, während eine erste Verdichterstufe stromauf des betrachteten Anlagenteils in Betrieb genommen wird. In diesem Zeitraum nimmt der Druck der Prozessströme von 16 bar auf 26 bar zu. Dieses Druckniveau entspricht dem stationären Betriebsdruck des Feedstroms N2.

Zwischen $t = 2$ h und $t = 4$ h wird eine zweite Verdichterstufe gestartet, sodass die Stoffmengenströme bis zum stationären Zustand $\frac{\dot{N}}{\dot{N}_{st}} = 1.0$ zunehmen. Parallel steigt der Druck des Prozessstroms HPN2 auf den stationären Betriebsdruck von 61 bar. Dabei wird bei $t \approx 2.4$ h der kritische Druck überschritten, der für Stickstoff bei etwa 34 bar liegt.

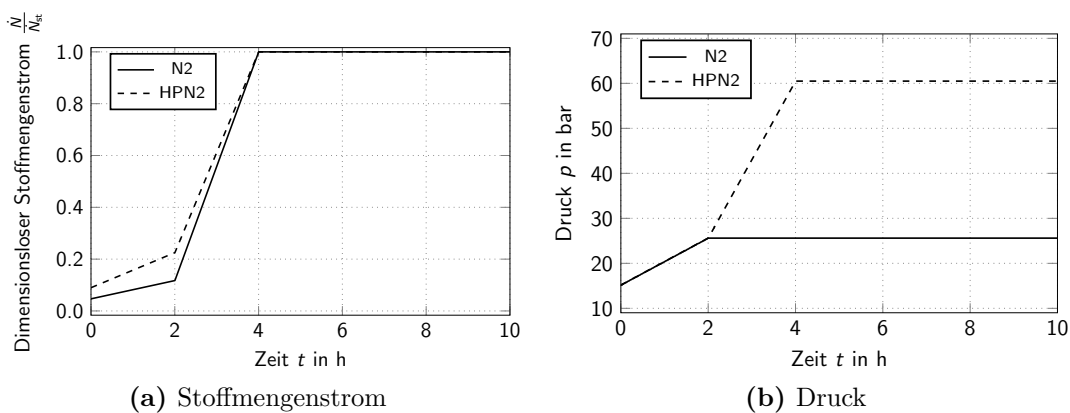


Abbildung 9.27: Prozessgrößen der Feedströme während des Anfahrvorgangs

Ein weiterer Einflussparameter der Simulation ist der Betriebszustand der Expansionsturbinen ET 1 und ET 2. In Abb. 9.28 ist die zeitliche Entwicklung der Austrittstemperaturen sowie der Kälteleistungen während des Anfahrvorgangs dargestellt. Die Austrittstemperatur der Turbine ET 1 beträgt initial 197 K und sinkt kontinuierlich. Nach etwa 2.7 h wird ein lokales Minimum erreicht, ehe die Austrittstemperatur bis auf 186 K im stationären Betrieb ansteigt. Die Austrittstemperatur der Turbine ET 2 sinkt ebenfalls kontinuierlich ab. Nach etwa 2.3 h liegt ein Plateau der Austrittstemperatur bei etwa 94 K vor, da infolge der Entspannung ein geringer Flüssigkeitsanteil anfällt. Die Kälteleistung, die von den Turbinen ET 1 und ET 2 durch Abfuhr mechanischer Arbeit bereitgestellt wird, hängt maßgeblich von den Stoffmengenströmen und den Druckniveaus der Feedströme ab und steigt daher während der initialen 4 h des Anfahrvorgangs sukzessive an, ehe sich der stationäre Betrieb der NLU einstellt. Der kontinuierliche Anstieg der Kälteleistung führt zu einer langsamen Abkühlung der NLU. Dieses Vorgehen vermeidet kritische Gradienten der Metalltemperatur der Plattenwärmeübertrager PFHE 1 und PFHE 2. Daher wird von einem schonenden Anfahrkonzept gesprochen.

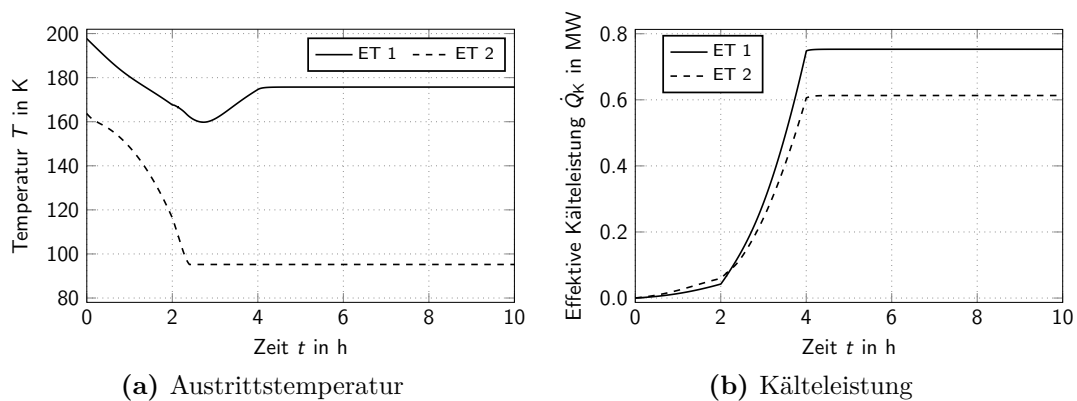


Abbildung 9.28: Parameter der Expansionsturbinen während des Anfahrvorgangs

Tab. 9.9 und 9.10 präsentieren die Geometriedaten von PFHE 1 und PFHE 2.

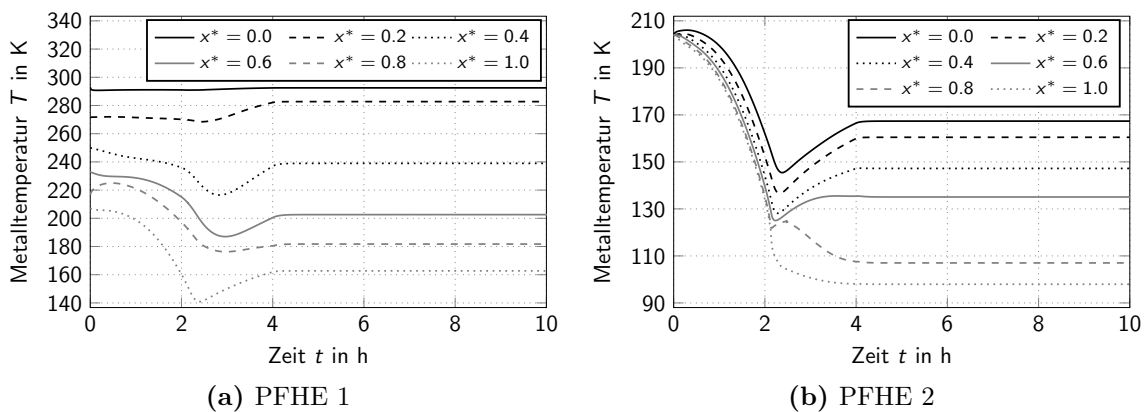
Tabelle 9.9: Geometriedaten von PFHE 1

Größe	Wert
Länge	5.73 m
Breite	1.20 m
Gesamtmasse	12 200 kg
Lagenanzahl N2	28
Lagenanzahl HPN2	56
Lagenanzahl RECYCLE	12
Lagenanzahl Flashgas	74
Lagenanzahl ET1 Austritt	74

Tabelle 9.10: Geometriedaten von PFHE 2

Größe	Wert
Länge	1.20 m
Breite	1.20 m
Gesamtmasse	2600 kg
Lagenanzahl HPN2	84
Lagenanzahl RECYCLE	12
Lagenanzahl Flashgas	74

Der Einsatz detaillierter Wärmeübertragermodelle ermöglicht eine akkurate Analyse der Entwicklung der Metalltemperaturen von PFHE 1 und PFHE 2 während des Anfahrvorgangs. Die Metalltemperaturen der beiden PFHE sind in Abb. 9.29 an ausgewählten Positionen entlang der Hauptströmungsrichtung der Prozessströme dargestellt. Die dimensionslose Position $x^* = \frac{x}{L} = 0$ bzw. $x^* = 1.0$ entspricht dem warmen bzw. kalten Ende des jeweiligen PFHE.

**Abbildung 9.29:** Metalltemperaturen der Wärmeübertrager beim Anfahren

Zu Beginn des Anfahrvorgangs beträgt die Temperatur am warmen Ende von PFHE 1 etwa 290 K und am kalten Ende etwa 205 K. PFHE 2 liegt bei einer ausgeglichenen Metalltemperatur von 205 K vor. Dies ist darauf zurückzuführen, dass sich die NLU zu Beginn des Anfahrvorgangs in einem kalten Standby-Zustand infolge eines vorangegangenen stationären Betriebszustands befindet. Während der initialen 2 h wird die NLU mit geringer Kälteleistung der Turbinen und geringen Stoffmengenströmen abgekühlt, bis am kalten Ende von PFHE 1 eine Metalltemperatur von etwa 160 K erreicht wird. PFHE 2 kühlt in diesem Zeitraum ebenfalls schonend und mit geringer Temperaturdifferenz zwischen dem warmen und dem kalten Ende ab. Nach 2 h beträgt die Metalltemperatur am warmen Ende etwa 160 K und am kalten Ende etwa 130 K. Bei $t \approx 2.2$ h fällt erstmals flüssiger Stickstoff am kalten Ende von PFHE 2 an. Dieser wird durch Entspannung partiell verdampft, dadurch abgekühlt und genutzt, um das kalte Ende von PFHE 2 weiter abzukühlen. Ab $t \approx 2.5$ h nimmt infolge der stark ansteigenden Feedströme

die Austrittstemperatur der Expansionsturbine ET1 zu. Infolgedessen verschiebt sich einerseits das Metalltemperaturprofil von PFHE 1 hin zu höheren Temperaturen und andererseits steigt die Metalltemperatur am warmen Ende von PFHE 2 an. Nach $t \approx 4$ h ist das finale stationäre Temperaturprofil in PFHE 1 und PFHE 2 erreicht.

9.5 Druckgetriebene Gesamtanlagensimulation

Ein detailliertes, dynamisches und druckgetriebenes Simulationsmodell, welches das Verhalten eines verfahrenstechnischen Prozesses realitätsgetreu abbildet, kann die Kernkomponente eines digitalen Zwillings einer Prozessanlage darstellen [KENDER ET AL. 2021]. Die in dieser Arbeit entwickelten, druckgetriebenen Wärmeübertragermodelle mit Auslegungskorrelationen für Druckverlust und Wärmeübergang stellen einen integralen Bestandteil derartiger Anlagenmodelle dar. In diesem Abschnitt wird durch druckgetriebene, dynamische Simulation das Verhalten der in Abb. 1.1 dargestellten ASU während transienter Betriebsszenarien analysiert. Dabei wird insbesondere der MHEX (vgl. Abb. 8.1) betrachtet, der durch das Wärmeübertragermodell aus Abschnitt 6.3.1 repräsentiert wird.

In Abschnitt 9.5.1 werden die Auswirkungen eines Anfahrvorgangs der ASU auf den MHEX betrachtet. Anschließend beschreibt Abschnitt 9.5.2 die transiente Antwort des MHEX auf einen Anlagenstopp. In Abschnitt 9.5.3 wird der Einfluss des Wiederanfahrens der ASU auf den MHEX analysiert. Die folgenden Ausführungen basieren auf den Publikationen von KLEIN ET AL. (2020), KLEIN ET AL. (2021), KENDER ET AL. (2021) und RÖSSLER ET AL. (2022a).

9.5.1 Anfahrvorgang

Zu Beginn des Anfahrvorgangs liegt die ASU bei Umgebungsbedingungen vor und in allen Strömungswegen herrscht Nullströmung. Der Anfahrvorgang gliedert sich in vier Abschnitte: Druckaufbau, Abkühlvorgang, Annäherung an den Betriebszustand und Gewinnung von Sauerstoffprodukt. Die zeitlichen Verläufe der Drücke und der Stoffmengenströme in den Passagen des MHEX sind Abb. 9.30 zu entnehmen, wobei die Stoffmengenströme mit dem Stoffmengenstrom im stationären Betrieb normiert sind.

Während des Druckaufbaus wird der Hauptluftverdichter der ASU in Betrieb genommen und der Druck der Prozessströme LUFT1 und LUFT2 nimmt bis $t = 0.7$ h auf 6.7 bar zu. Die beiden Luftströme werden in die Rektifikationskolonnen der ASU eingespeist, sodass die Druckniveaus der Produktströme GAN, CGN und PGAN ansteigen. Parallel zum Druckanstieg sind zunehmende Stoffmengenströme der Prozessströme LUFT1, LUFT2, GAN, CGN und PGAN zu beobachten. Nach etwa 1.3 h ist der Druckaufbau abgeschlossen und die Stoffmengen nehmen einen konstanten Wert an. Dieser wird über den Abkühlvorgang, der nach 4.2 h abgeschlossen ist, gehalten. Durch eine Anpassung der Ventilstellungen der ASU werden die Stoffmengenströme anschließend bis $t \approx 5.5$ h an die gewünschten Werte im stationären Betrieb angepasst. Bis zu diesem Zeitpunkt ist die

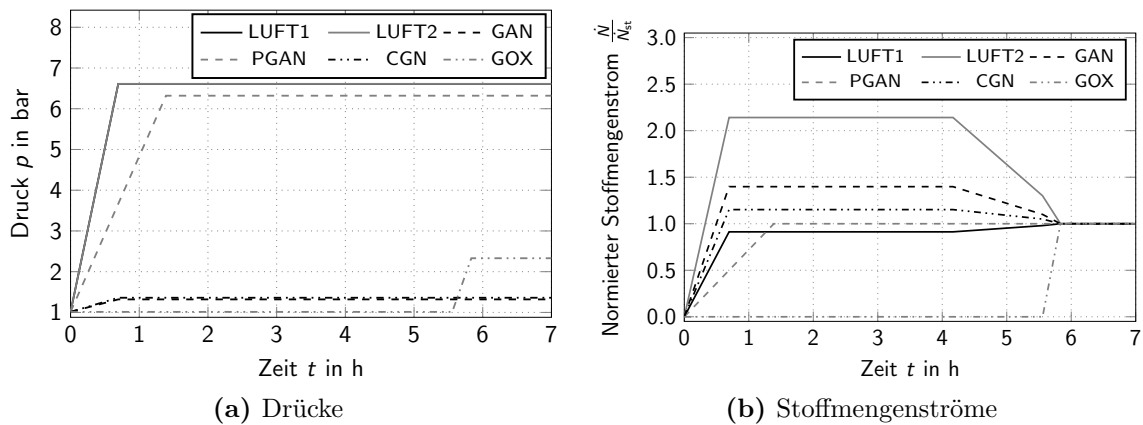


Abbildung 9.30: Prozessgrößen des Hauptwärmeübertragers (Anfahrvorgang)

GOX-Passage nicht durchströmt, da noch kein Sauerstoffprodukt erzeugt wird. Zwischen $t \approx 5.5$ h und $t \approx 5.7$ h wird die GOX-Passage in Betrieb genommen. Anschließend weisen die Drücke und die Stoffmengenströme stationäre Werte auf.

Die Randbedingungen der Drücke und der Stoffmengenströme in den Passagen resultieren in einem charakteristischen Temperaturprofil des MHEX entlang der Hauptströmungsrichtung der Prozessströme. Initial liegt der MHEX bei Umgebungstemperatur vor, ehe nach $t \approx 1.5$ h der Abkühlvorgang beginnt. Durch die Entspannung des Luftstroms LUFT2 in der Expansionsturbine kühlt die ASU sukzessive ab. Daher sinkt auch die Eintrittstemperatur der Produktströme GAN, CGN und PGAN in den MHEX, sodass sich dieser ausgehend vom kalten Ende bei $x = 4.45$ m abkühlt. Nach 2.8 h (vgl. Abb. 9.31) beträgt die Metalltemperatur am kalten Ende des MHEX etwa 185 K. Die Auswirkungen des Abkühlvorgangs sind bis zum warmen Ende sichtbar.

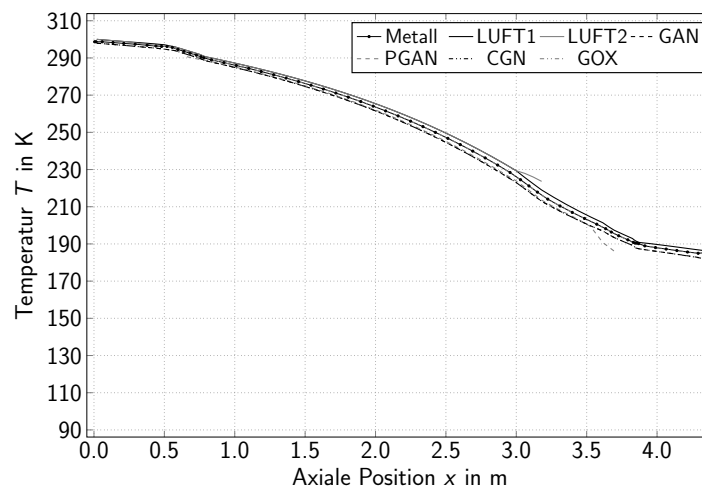


Abbildung 9.31: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (2.8 h Anfahren)

Nach $t \approx 4.1$ h ist der Abkühlvorgang abgeschlossen und das kalte Ende erreicht ein kryogenes Temperaturniveau von etwa 135 K. Es stellt sich ein annähernd lineares Metalltemperaturprofil über die Länge des MHEX ein. Die Anpassung der Stoffmengenströme während der Annäherung an den stationären Betrieb resultiert in einer Veränderung

des Verhältnisses von warmen zu kalten Wärmekapazitätsströmen. Kurzzeitig liegt ein Überschuss warmer Wärmekapazitätsströme vor, sodass sich das Temperaturprofil hin zu höheren Temperaturen verschiebt und einen gekrümmten Verlauf annimmt (vgl. Abb. 9.32). Zudem weist der MHEX am warmen Ende einen Pinch, eine geringe Temperaturdifferenz zwischen warmen und kalten Strömen, auf.

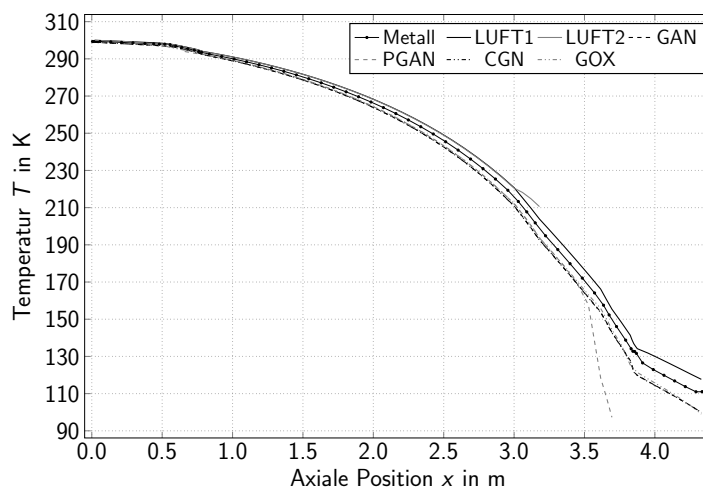


Abbildung 9.32: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (5.6 h Anfahren)

Durch die Inbetriebnahme der GOX-Passage wird der Überschuss warmer Wärmekapazitätsströme ausgeglichen. Das Temperaturprofil wird hin zu niedrigeren Temperaturen verschoben und nimmt im stationären Betrieb am Ende des Anfahrvorgangs ein annähernd lineares Temperaturprofil an (vgl. Abb. 9.33).

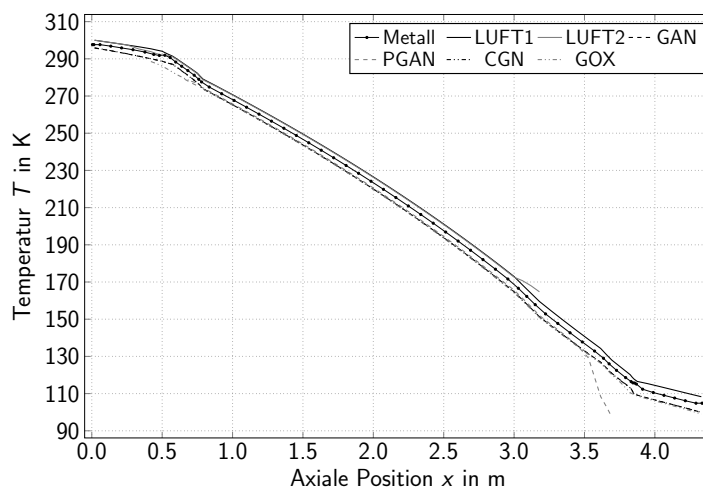


Abbildung 9.33: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (6.9 h Anfahren)

9.5.2 Anlagenstopp

Der Anlagenstopp nimmt 3680 s in Anspruch bis in allen Strömungswegen der ASU eine Nullströmung vorliegt. Da der Fokus auf dem MHEX liegt, werden die initialen 200 s im Detail betrachtet. Abb. 9.34a visualisiert die Drücke der Prozessströme während

des Anlagenstopps. Bis $t = 50$ s befindet sich der MHEX im stationären Betrieb. Die warmen Prozessströme LUFT1 und LUFT2 treten mit 6.59 bar ein. Das Druckniveau der Produktströme GAN und CGN beträgt 1.33 bar, der Druck des Produktstroms PGAN 6.29 bar. Der Prozessstrom GOX liegt bei 2.42 bar vor, was dem Druckniveau der LOX-Verdampfung im Nebenkondensator entspricht. Zwischen $t = 50$ s und $t = 80$ s wird der Hauptluftverdichter heruntergefahren, was zu einer linearen Abnahme des Druckniveaus der Prozessströme LUFT1 und LUFT2 auf Umgebungsdruck führt. Dadurch nimmt der Druck im Rektifikationssystem ab und die Drücke der Produktströme GAN, CGN und PGAN fallen. Der Druck des Prozessstroms GOX hängt direkt von der LOX-Verdampfung im Nebenkondensator ab und nimmt daher sukzessive ab, bis nach $t \approx 70$ s Umgebungsdruck erreicht wird. Anschließend sinkt das Druckniveau der GOX-Passage weiter, da im Nebenkondensator Vakuumbedingungen vorliegen.

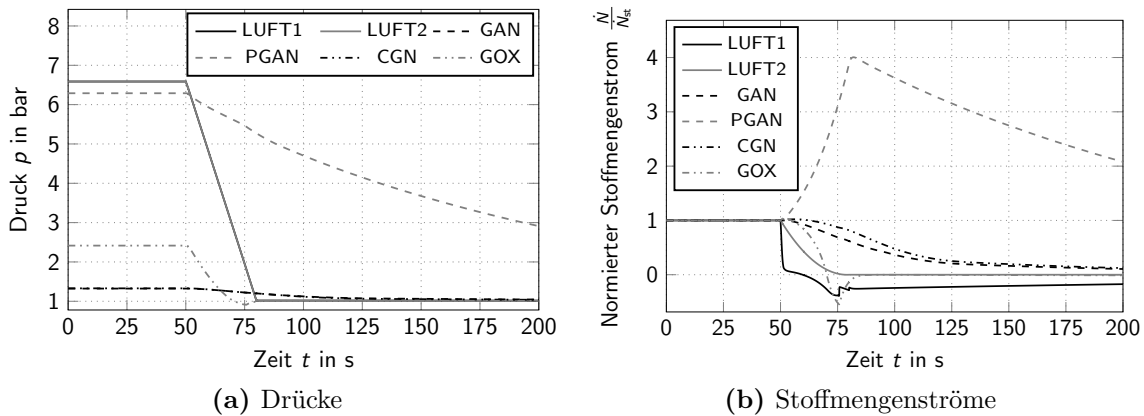


Abbildung 9.34: Prozessgrößen des Hauptwärmeübertragers (Anlagenstopp)

Die Entwicklung der Stoffmengenströme durch die Passagen des MHEX während des Abschaltvorgangs kann Abb. 9.34b entnommen werden. Dabei sind die Werte mit dem Stoffmengenstrom des jeweiligen Prozessstroms im stationären Betrieb normiert. Ab $t = 50$ s wird der Hauptluftverdichter heruntergefahren. Zudem werden die Produktventile V1 bis V4 (vgl. Abb. 1.1) bis zum Zeitpunkt $t = 80$ s vollständig geöffnet, sodass deutliche Änderungen der Stoffmengenströme resultieren. Nach $t \approx 60$ s entspricht der Druck am Eintritt der Passage LUFT1 dem Druckniveau an deren Austritt, sodass eine Nullströmung vorliegt. Im weiteren Verlauf tritt eine Rückwärtsströmung in der Passage LUFT1 auf, die maßgeblich für den Druckabfall in der ASU ist. Der Prozessstrom LUFT2 wird durch die Expansionsturbine geführt. Da sich in Turbomaschinen keine Rückwärtsströmung einstellen soll, wird eine solche durch ein Rückschlagventil verhindert. Daher herrscht in der Passage LUFT2 ab $t \approx 80$ s eine Nullströmung.

Ab $t = 50$ s nehmen die CGN- und GAN-Stoffmengenströme kontinuierlich ab. Zudem wird das PGAN-Produktventil V1 geöffnet, sodass der PGAN-Stoffmengenstrom durch den MHEX zunimmt, bis nach $t \approx 80$ s ein Maximum erreicht wird. Anschließend fällt der Stoffmengenstrom des Produkts PGAN sukzessive. Aufgrund des Druckabfalls im Nebenkondensator nimmt der Stoffmengenstrom durch die GOX-Passage ab, bis nach

$t \approx 70$ s eine Nullströmung vorliegt. Anschließend tritt eine Rückwärtsströmung mit einem betragsmäßigen Maximum nach $t \approx 77$ s auf, weil im Nebenkondensator Vakuum herrscht. Daraufhin nähert sich der GOX-Stoffmengenstrom dem Nullwert an, da die Vakuumbedingungen ausgeglichen werden.

Die Druckniveaus und die Stoffmengenströme beeinflussen das Verhalten des MHEX während des Anlagenstopps, sodass sich charakteristische Temperaturprofile entlang der Hauptströmungsrichtung einstellen. Nach 50 s befindet sich der MHEX im stationären Betrieb und ein nahezu lineares Metalltemperaturprofil liegt vor (vgl. Abb. 9.35). Zu diesem Zeitpunkt ist der MHEX zudem von geringen Temperaturdifferenzen zwischen den warmen und den kalten Prozessströmen gekennzeichnet. Die warmen Prozessströme LUFT1 und LUFT2 treten bei $x = 0.02$ m ein. Der Hauptluftstrom LUFT1 wird bei $x = 4.33$ m abgezogen, der Turbinenluftstrom LUFT2 bei $x = 3.18$ m. Die kalten Prozessströme GOX, GAN und CGN treten bei $x = 4.33$ m in den MHEX ein. Der Einlass des Prozessstroms PGAN befindet sich bei $x = 3.70$ m. GAN und CGN werden bei $x = 0.02$ m abgezogen. GOX und PGAN treten bei $x = 0.42$ m und $x = 0.66$ m aus. Am Austritt des Prozessstroms GOX ist der Einfluss des Sammlerfins zu beobachten, da die Temperaturdifferenz zwischen dem Prozessstrom und dem Metall zunimmt. Ein vergleichbares Verhalten kann für alle Prozessströme nahe der jeweiligen Ein- und Auspeisungen beobachtet werden (vgl. Detailaufnahmen) und ist darauf zurückzuführen, dass die Wärmeübertragungsfähigkeit von Verteiler- und Sammlerfins geringer ist als die von Hauptfins. Verteiler- und Sammlerfins werden für eine gute Verteilung der Strömung über die Breite eines PFHE ausgewählt, wohingegen Hauptfins für einen optimalen Wärmeübergang ausgelegt werden.

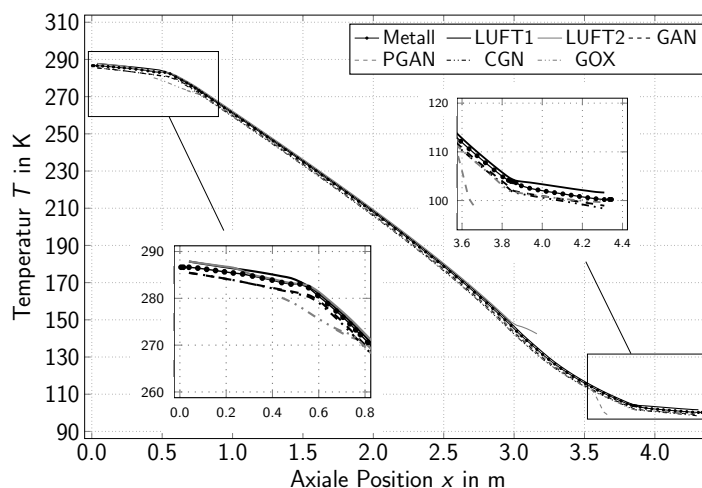


Abbildung 9.35: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (50 s Anlagenstopp)

Nach 75 s des Anlagenstopps (vgl. Abb. 9.36) liegt in den Passagen LUFT1 und GOX eine Rückwärtsströmung vor. Die GOX-Passage entspricht nun einem warmen Prozessstrom, der bei $x = 0.42$ m eingespeist wird. Die Eintrittstemperatur von 282 K liegt höher als die Metalltemperatur (vgl. linke Detailansicht). Der Prozessstrom LUFT1 tritt nun bei $x = 4.33$ m mit einer Temperatur von 89 K ein, die unterhalb der Metalltemperatur liegt (vgl. rechte Detailansicht). Das Temperaturprofil am kalten

Ende des MHEX flacht aufgrund einer Änderung des Verhältnisses von warmen zu kalten Wärmekapazitätsströmen ab. Im Metalltemperaturprofil können bei $x \approx 0.55$ m und $x \approx 3.85$ m charakteristische Knicke beobachtet werden, die aufgrund des Wechsels zwischen Verteiler- und Sammler- sowie Hauptfins auftreten.

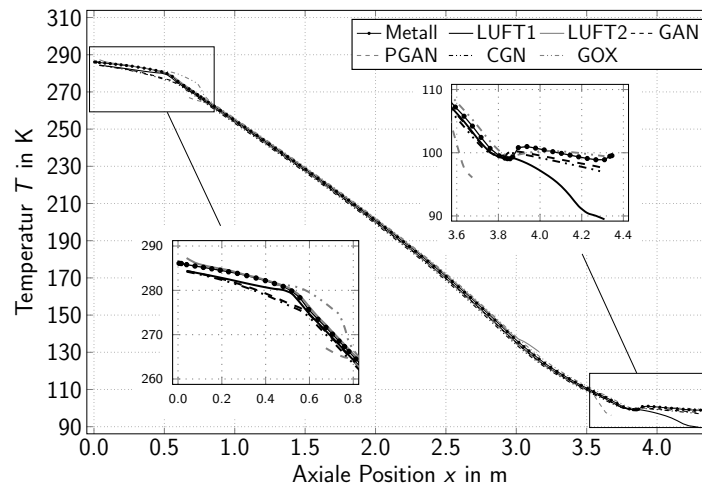


Abbildung 9.36: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (75 s Anlagenstopp)

Abb. 9.37 veranschaulicht die Temperaturprofile im MHEX nach 200 s des Anlagenstopps. Mit abnehmenden Stoffmengenströmen nimmt der Einfluss des konvektiven Wärmetransports und des Wärmeübergangs auf das Verhalten des MHEX ab. Stattdessen dominiert der Wärmetransport durch axiale Wärmeleitung im Metall. Die charakteristischen Knicke im Metalltemperaturprofil nach $t = 75$ s wurden durch die axiale Wärmeleitung geglättet. Zudem liegt nach 200 s ein Überschuss kalter Wärmekapazitätsströme vor, sodass die Metallmasse des MHEX abgekühlt wird. Die Metalltemperatur bei $x = 2.00$ m beträgt nach $t = 75$ s noch 201 K, nach $t = 200$ s bereits 185 K.

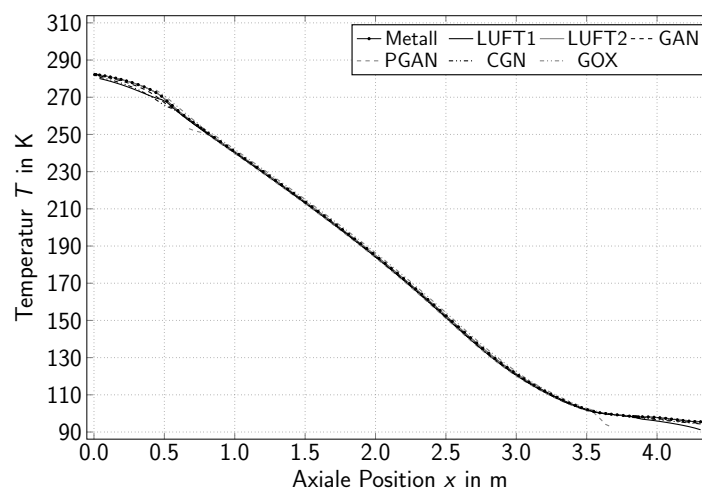


Abbildung 9.37: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (200 s Anlagenstopp)

Im weiteren Verlauf des Anlagenstopps nehmen alle Prozessströme eine Nullströmung an. Die Wärmeleitung im Metall des MHEX führt zu einem Temperaturengleich zwischen

dem warmen und dem kalten Ende. Abb. 9.38 visualisiert die Temperaturprofile am Ende des Anlagenstopps, die den Ausgangszustand eines anschließenden Wiederanfahrens der ASU (vgl. Abschnitt 9.5.3) darstellen. Die Metalltemperatur beträgt am warmen Ende 256 K, am kalten Ende 98 K.

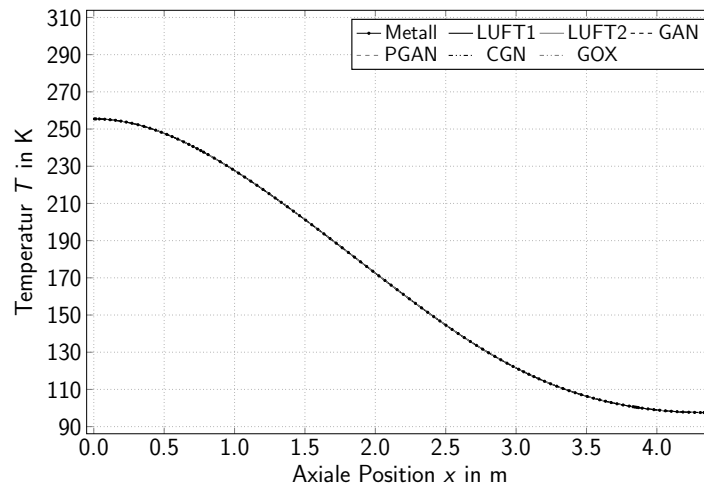


Abbildung 9.38: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (Ende Anlagenstopp)

9.5.3 Wiederanfahren

Im Folgenden wird das Wiederanfahren der ASU (vgl. Abb. 1.1) nach dem in Abschnitt 9.5.2 beschriebenen Anlagenstopp analysiert. Nach 5400 s wird das Sauerstoffprodukt GOX mit der erforderlichen Reinheit und Menge bereitgestellt. Die für den MHEX relevanten Änderungen treten jedoch in den ersten 500 s des Wiederanfahrens auf. Die Druckniveaus der Passagen in diesem Zeitraum sind in Abb. 9.39a dargestellt.

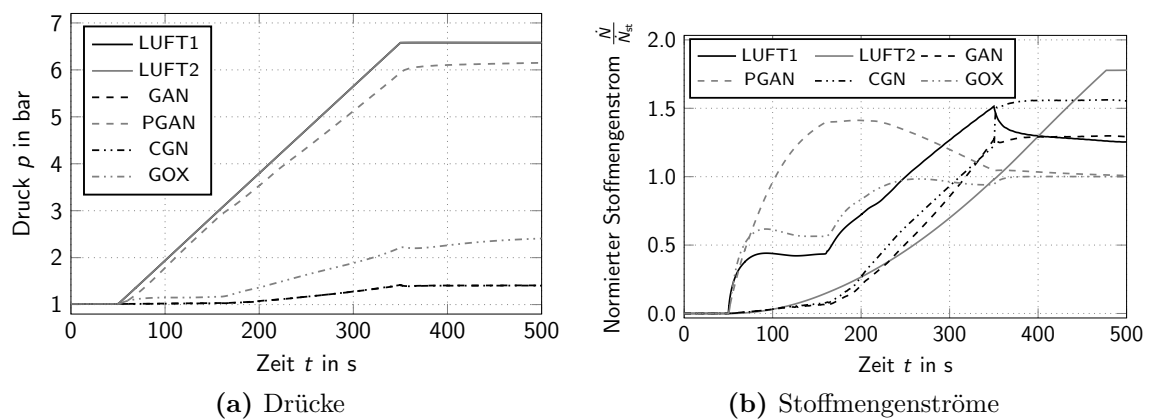


Abbildung 9.39: Prozessgrößen des Hauptwärmeübertragers (Wiederanfahren)

Bis zum Zeitpunkt $t = 50$ s ist die ASU abgeschaltet und in allen Passagen herrscht Umgebungsdruck. Zwischen $t = 50$ s und $t = 350$ s wird der Hauptluftverdichter in Betrieb genommen, sodass der Druck der Prozessströme LUFT1 und LUFT2 linear auf den im stationären Betrieb gewünschten Wert von 6.59 bar ansteigt. Somit

nehmen sowohl der Druck im Rektifikationssystem als auch die Druckniveaus der Produktströme zu. Nach $t = 500$ s tritt PGAN mit 6.15 bar in den MHEX ein, was nahezu dem gewünschten stationären Betriebszustand entspricht. Das Druckniveau des GOX-Produkts beträgt nach $t = 500$ s etwa 2.42 bar, da der Nebenkondensator einen stabilen Betriebszustand erreicht. Das Druckniveau der Produkte GAN und CGN liegt nach 500 s bei 1.40 bar und damit geringfügig höher als im stationären Betrieb.

Die Stoffmengenströme in den Passagen während des Wiederanfahrens sind Abb. 9.39b zu entnehmen. Bis zum Zeitpunkt $t = 50$ s liegt in allen Passagen eine Nullströmung vor. Während der Hauptluftverdichter zwischen $t = 50$ s und $t = 350$ s angefahren wird, nehmen die Werte der Stoffmengenströme zu. Zudem werden in diesem Zeitraum Ventilstellungen der ASU modifiziert, um die Stoffmengenströme anzupassen. Nach $t = 350$ s beeinflusst die Anlagenregelung die Stoffmengenströme.

Bis $t \approx 90$ s nimmt der Stoffmengenstrom durch die LUFT1-Passage zu, ehe ein Plateau erreicht wird. Nach $t \approx 160$ s geht der Verdampfer/Kondensator in Betrieb, was zu einem weiteren Anstieg des LUFT1-Stoffmengenstroms führt. Ab $t = 350$ s reduziert die Anlagenregelung den LUFT1-Stoffmengenstrom. Der Stoffmengenstrom durch die GOX-Passage wird durch Verdampfen von LOX im Nebenkondensator eingestellt. Dabei wird der Prozessstrom LUFT1 partiell kondensiert, sodass sich der GOX-Stoffmengenstrom vergleichbar mit dem LUFT1-Stoffmengenstrom entwickelt. Zwischen $t = 50$ s und $t \approx 160$ s steigt der Stoffmengenstrom durch die PGAN-Passage an bis nach der Inbetriebnahme des Verdampfer/Kondensators ein Plateau erreicht wird. Nach $t \approx 220$ s nimmt der PGAN-Stoffmengenstrom ab und nähert sich dem gewünschten Wert im stationären Betrieb an. Der LUFT2-Stoffmengenstrom nimmt während des Wiederanfahrens sukzessive zu, weil die Expansionsturbine in Betrieb genommen wird. Da LUFT2 in die Niederdruckkolonne der ASU eingespeist wird, entwickeln sich die Stoffmengenströme GAN und CGN ähnlich wie der Prozessstrom LUFT2. Nach $t = 350$ s werden die Stoffmengenströme durch die Passagen GAN und CGN durch den Eingriff der Anlagenregelung beeinflusst.

Nach $t = 500$ s übersteigen die Stoffmengenströme durch die Passagen LUFT1, LUFT2, GAN und CGN die im stationären Betrieb erwünschten Werte. Nichtsdestotrotz ist das Verhältnis von kalten zu warmen Wärmekapazitätsströmen im MHEX vergleichbar mit dem Verhältnis im stationären Betrieb. Daher entspricht das Temperaturprofil nach $t = 500$ s nahezu dem stationären Temperaturprofil am Ende des Wiederanfahrens. Im Folgenden werden die Temperaturprofile im MHEX zu ausgewählten Zeitpunkten während des Wiederanfahrens analysiert.

Abb. 9.38 zeigt die Temperaturprofile des MHEX zu Beginn des Wiederanfahrens (Nullströmung). Demgegenüber können Abb. 9.40 die Temperaturprofile nach $t = 90$ s entnommen werden. LUFT1 wird am warmen Ende mit einer Temperatur von 285 K eingespeist. Infolge der großen lokalen Temperaturdifferenz zwischen LUFT1 und dem Metall wird das warme Ende erwärmt. Diese Temperaturdifferenz hebt zudem den Übergang zwischen unterschiedlichen Fin-Strukturen bei $x = 0.5$ m hervor (vgl. Detailansicht). LUFT1 durchströmt zunächst die Verteilerfins mit einer moderaten

Wärmeübertragungsfläche und tritt anschließend in die Hauptfins mit einer größeren Wärmeübertragungsfläche ein. Dabei ist die Wärmeübertragungsfläche der Verteilerfins nicht hinreichend, damit sich der Prozessstrom der Metalltemperatur annähert. Die Eintrittstemperatur des Prozessstroms LUFT2 beträgt 279 K und trägt zur Erwärmung des warmen Endes bei. Im Gegensatz zum LUFT1-Stoffmengenstrom ist der LUFT2-Stoffmengenstrom gering, sodass sich die Temperatur von LUFT2 bereits in den Verteilerfins an die Metalltemperatur annähert.

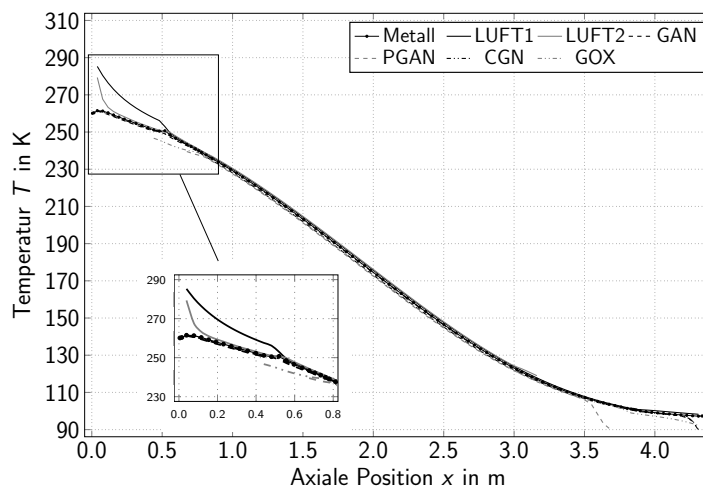


Abbildung 9.40: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (90 s Wiederanfahren)

Nach $t = 160$ s beträgt die Metalltemperatur am warmen Ende etwa 270 K (vgl. Abb. 9.41). Der Einfluss des Übergangs zwischen Verteiler- bzw. Sammler- und Hauptfins ist für alle Prozessströme zu beobachten (siehe Detailansichten). Das Anwärmen des MHEX durch die Prozessströme LUFT1 und LUFT2 beeinflusst zum betrachteten Zeitpunkt die Temperaturprofile auf der ganzen Länge. Die Metalltemperatur bei $x = 2.0$ m beträgt 179 K, nachdem zu Beginn des Wiederanfahrens 172 K zu verzeichnen waren. Zudem treten die charakteristischen Knicke im Metalltemperaturprofil bei $x \approx 0.55$ m und $x \approx 3.85$ m wieder auf, da der konvektive Energietransport und der Wärmeübergang den Einfluss der axialen Wärmeleitung im Metall dominieren.

Bis $t = 500$ s wird der MHEX durch die Prozessströme LUFT1 und LUFT2 aufgeheizt. Wie in Abb. 9.42 visualisiert ist, erreicht das warme Ende eine Temperatur von 285 K. Die Metalltemperatur bei $x = 2.0$ m beträgt 193 K. Zudem weist das Metalltemperaturprofil den für den stationären Betrieb charakteristischen linearen Verlauf auf.

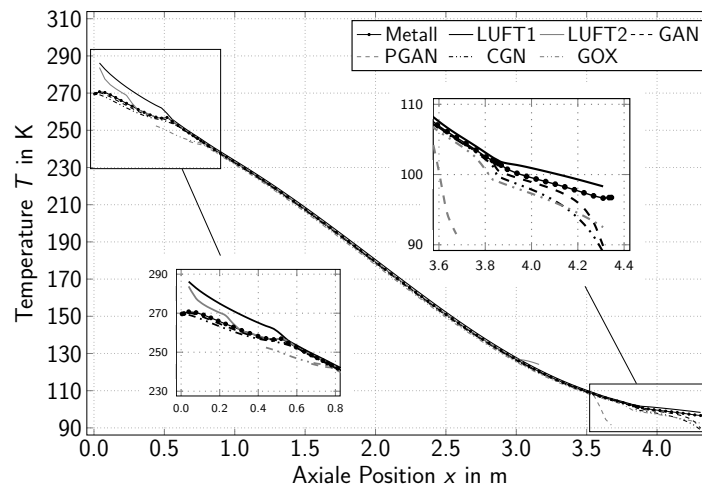


Abbildung 9.41: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (160s Wiederanfahren)

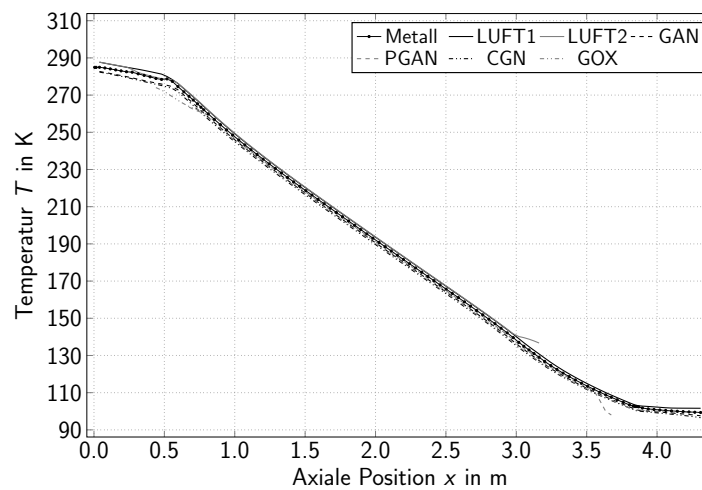


Abbildung 9.42: Temperatur im Hauptwärmeübertrager (500s Wiederanfahren)

Im verbleibenden Teil des Wiederanfahrens sind nur noch geringe Änderungen der Temperaturprofile zu verzeichnen, während sich die Stoffmengenströme den jeweiligen stationären Werten annähern. Die stationären Temperaturprofile am Ende des Wiederanfahrens entsprechen denen zu Beginn des Anlagenstopps (vgl. Abb. 9.35).

10 Zusammenfassung und Ausblick

Im Hinblick auf einen energieeffizienten Betrieb erfordern insbesondere kryogene Prozesse wie die Luftzerlegung einen hohen Grad an thermischer Integration. Die korrespondierenden verfahrenstechnischen Anlagen sind daher durch ausgeprägte Netzwerke von Wärmeübertragern gekennzeichnet. Um durch eine realitätsgetreue stationäre und dynamische Prozesssimulation den gesamten Betriebsbereich dieser Anlagen abzudecken, sind numerisch robuste stationäre und dynamische Modelle für Mehrstromwärmeübertrager mit Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust nach anerkanntem Stand der Technik erforderlich. Eine einfache Einbindung in Umgebungen zur Prozesssimulation, z.B. für die Entwicklung digitaler Zwillinge von verfahrenstechnischen Anlagen, ist entscheidend für die praktische Relevanz dieser Wärmeübertragermodelle.

Aufgrund dieser Notwendigkeiten wird in dieser Arbeit eine modular-hierarchische Simulationsumgebung für die druckgetriebene, dynamische Simulation und die stationäre Nachrechnung von Mehrstromwärmeübertragern entwickelt. Die Simulationsumgebung bildet die in der Prozessindustrie relevanten Platten-, Rohrbündel- und spiralgewickelten Wärmeübertrager als Kombination der Basismodule von Metallwärmekapazitäten und Prozessströmen ab. Die Interaktion dieser Basismodule wird durch Zusatzmodule zur Berechnung von Stoffdaten, Druckverlust und Wärmeübergang repräsentiert.

Eine Kernkomponente der Simulationsumgebung sind Auslegungskorrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust nach aktuellem Stand der Technik, die zur kommerziellen Auslegung von Wärmeübertragern eingesetzt werden. Die Simulationsumgebung ermöglicht daher, im Rahmen der Genauigkeit der eingesetzten Korrelationen, eine realitätsgetreue Repräsentation von Mehrstromwärmeübertragern. Die empirischen Auslegungskorrelationen bringen mit Unstetigkeiten in Form von Sprüngen und Knicken zusätzliche numerische Herausforderungen mit sich, die bei der Lösung des Gesamtgleichungssystems eines Wärmeübertragers zu berücksichtigen sind. Knicke treten beispielsweise am Übergang verschiedener Reynolds-Zahl-abhängiger Korrelationsregime für den Druckverlust auf. Sprünge liegen häufig an Siede- und Taupunkten vor, da die Wärmeübergangskoeffizienten im Zweiphasengebiet um ein vielfaches höher liegen als in Gas- oder Flüssigphase. Zudem weisen die grundlegenden Stoffeigenschaften an Phasenwechseln Unstetigkeiten auf. In dieser Arbeit werden einerseits konventionelle Regularisierungen zur numerischen Stabilisierung eingesetzt. Andererseits werden speziell angepasste Algorithmen zur Berechnung von Wärmeübertragern mit Phasenwechsel entwickelt.

Die druckgetriebene Modellierung nach THOMAS ET AL. (2020) ermöglicht eine robuste Simulation von Vorwärts-, Rückwärts- und Nullströmung sowie aller dazwischenliegenden Transitionen, was für eine akkurate Vorhersage der Wärmeübertragerdynamik

während Lastwechseln und Anfahr- oder Abschaltvorgängen von Prozessanlagen entscheidend ist. Die variable Strömungsrichtung erhöht die numerische Komplexität des Gesamtgleichungssystems eines Wärmeübertragers zusätzlich, da Mengenstrom und Strömungsrichtung keine festen Randbedingungen der Simulation darstellen.

Die Simulationsumgebung nutzt die Linde-interne, innovative Softwareinfrastruktur SMI@LE. Diese verfügt über Integrationsverfahren zur dynamischen sowie Gleichungslöser zur stationären Simulation. Die Gleichungslöser können in Kombination mit einer Implementierung der impliziten Differentiation auch zur unterlagerten Lösung und expliziten Formulierung von Teilgleichungssystemen eingesetzt werden. Zudem werden die automatische Differentiation durch die Bibliotheken ADOL-C, Adept oder CppAD und Matrixoperationen durch die Bibliothek Eigen unterstützt. SMI@LE verfügt zudem über eine Schnittstelle zur Linde-internen Stoffdatenumgebung GMPS und schafft die Voraussetzungen für einen bidirektionalen Datentransfer zwischen Simulationsmodellen und der realen Anlage im Hinblick auf die praktische Anwendung Digitaler Zwillinge.

Für die dynamische Simulation von Wärmeübertragern kommen in der Literatur hauptsächlich Moving-Boundary-Modelle (MBM) und Distributed-Parameter-Modelle (DPM) zum Einsatz. Ein MBM ermöglicht die Simulation von Wärmeübertragern mit genau einem Prozessstrom, der einem Phasenwechsel unterliegt, in Echtzeit. Allerdings wird die Geometrie des Wärmeübertragers nicht detailliert aufgelöst, sodass Simulationen in Auslegungsgenauigkeit nicht realisierbar sind. Demgegenüber löst ein DPM die Geometrie des betrachteten Wärmeübertragers in mindestens einer Raumrichtung detailliert auf und ermöglicht realitätsgetreue Simulationen auf Kosten einer höheren Rechenzeit. Für das stationäre Nachrechnen von Mehrstromwärmeübertragern wird in der Literatur zumeist auf ein DPM zurückgegriffen, um den erforderlichen Detailgrad zu erzielen. Dabei werden in der Dynamik und für das stationäre Nachrechnen sowohl gleichungsbasierte als auch maßgeschneiderte, iterative Lösungsverfahren für das DPM eingesetzt. Da robuste stationäre und dynamische Simulationen von Wärmeübertragern in Auslegungsgenauigkeit die Zielsetzung dieser Arbeit sind, umfasst die entwickelte Simulationsumgebung ausschließlich eindimensionale DPMs verschiedener Modelltiefen.

Die größtmögliche Modelltiefe für die dynamische Simulation diskretisiert einen Wärmeübertrager in Hauptströmungsrichtung der Prozessströme mit finiten Volumina. Dabei werden die Energiebilanzen von Metallkomponenten und Prozessströmen sowie die Massenbilanzen der Prozessströme in jedem finiten Volumen dynamisch aufgelöst. Lediglich die Impulsbilanzen der Prozessströme werden gemäß dem druckgetriebenen Ansatz nach THOMAS ET AL. (2020) quasi-stationär auf den einzelnen finiten Volumina betrachtet. Das resultierende DAE-System des Wärmeübertragers kann mit einem Integrationsverfahren gleichungsbasiert gelöst werden. Alternativ können algebraische Teilgleichungssysteme wie die implizite Druckbestimmung in jedem finiten Volumen unterlagert gelöst, explizit dargestellt und in die rechte Seite der differentiellen Residuen eingesetzt werden. Dieser maßgeschneiderte Lösungsansatz ermöglicht die Integration des Gesamtgleichungssystems als ODE. Die größtmögliche Modelltiefe mit Berücksichtigung von Fluid-Massen- und -Energie-Holdup wird in dieser Arbeit aufgrund der hohen Rechenzeiten, welche die effiziente Einbindung der Modelle in Gesamtanlagenmodelle

erschweren, ausschließlich prototypisch betrachtet. Aufgrund der hohen Ergebnisqualität wird allerdings eine Weiterentwicklung der Modelle in Folgearbeiten empfohlen. Durch Parallelisierung kann beispielsweise die hohe Rechenzeit adressiert werden.

Im Hinblick auf eine effiziente Einbindung von Wärmeübertragermodellen in dynamische Gesamtanlagenmodelle wird die Modelltiefe durch eine quasi-stationäre Modellierung der Massen- und Energiebilanzen der Prozessströme bei gleichzeitiger dynamischer Auflösung der Energiebilanzen der Metallkomponenten reduziert. Eine gleichungsbasierte Integration des resultierenden DAE-Systems stellt für einphasige Wärmeübertrager eine effiziente Berechnungsmethode dar. Treten jedoch Phasenwechsel mit unstetigen Wärmeübergangskorrelationen auf, kann im Rahmen der DAE-Integration keine eindeutige Lösung für ein ortsfestes finites Volumen garantiert werden. Aus diesem Grund werden zwei speziell angepasste Algorithmen zur isolierten Berechnung des Teilgleichungssystems eines Prozessstroms vorgestellt. Dies ermöglicht die Überführung des DAE-Systems in ein ODE-System. Ein zellbasiertes Verfahren, das mit der Regula-Falsi sequentiell alle finiten Volumen eines Prozessstroms von Einspeisung bis Auslass löst, ermöglicht eine Reduktion der Rechenzeiten im Vergleich zur DAE-Integration. Ein nicht an eine ortsfeste Diskretisierung gebundenes Integrationsverfahren, welches die Änderung von Druck und Enthalpiestrom entlang eines Prozessstroms fehlergesteuert auflöst, ermöglicht bei im Vergleich zum DAE-System vertretbarer Zunahme der Rechenzeit eine akkurate Auflösung der lokalen Wärmeübergangsverhältnisse inklusive Phasenwechseln. Beide Verfahren stellen eine numerisch robuste Simulation der Dynamik von Wärmeübertragern mit Phasenwechseln sicher. Das zellbasierte Verfahren hat Rechenzeitvorteile, das Integrationsverfahren liefert stetige Ableitungszusammenhänge der Austrittsströme und ist daher vielversprechend hinsichtlich zukünftiger Optimierungsanwendungen.

Werden neben den Prozessströmen auch die Energiebilanzen der Metallkomponenten stationär modelliert, resultiert ein auf einer Diskretisierung mit finiten Volumen basierendes AE-System zur stationären Nachrechnung eines Wärmeübertragers. Dessen Lösung kann einerseits simultan mit einem Gleichungslöser ermittelt werden. Andererseits können zur Reduktion der numerischen Komplexität im Wechsel die Teilgleichungssysteme für Prozessströme und Metallwärmekapazitäten gelöst werden, was einer Fixpunktiteration zur Bestimmung der diskreten Metalltemperaturen entspricht. Beide Verfahren stellen generische und effiziente Methoden zur stationären Nachrechnung von einphasigen Wärmeübertragern dar. Es kann jedoch gezeigt werden, dass die Anwesenheit von unstetigen Wärmeübergangskorrelationen an Phasenwechseln aufgrund der ortsfesten Diskretisierung mit finiten Volumen zu multiplen validen Lösungen eines Wärmeübertragers führen kann.

Ein Integrationsverfahren, das simultan alle Prozessströme des betrachteten Wärmeübertragers in deren Hauptströmungsrichtung integriert, ist unabhängig von einer ortsfesten Diskretisierung und ermöglicht daher das numerisch robuste stationäre Nachrechnen von Wärmeübertragern mit Phasenwechseln. In dieser Arbeit wird ein Prototyp dieses Verfahrens eingesetzt, der hinsichtlich Rechenzeit und Robustheit vielversprechende Ergebnisse liefert. Nichtsdestotrotz wird in Folgearbeiten eine Weiterentwicklung des Verfahrens empfohlen, um, z.B. durch Parallelisierung, softwaretechnisch effizientere

Implementierung, Anwendung einer effizienten Stoffdateninterpolation oder optimierte Automatisierung, die Rechenzeiten weiter zu reduzieren.

Das breite Anwendungsfeld detaillierter dynamischer Wärmeübertragermodelle wird anhand ausgewählter Applikationen demonstriert. So können bei der Risikoanalyse der mechanischen Integrität von Rohrbündel- und spiralgewickelten Wärmeübertragern konservative Abschätzungen durch realitätsnähere dynamische Berechnungen ersetzt werden. Dadurch können einerseits Ingenieursstunden und andererseits Investitionskosten für unnötige Designanpassungen eingespart werden. Eine weitere Anwendung für dynamische Wärmeübertragermodelle in Auslegungsqualität ist die Abschätzung der Lebensdauer von Plattenwärmeübertragern sowie die Entwicklung innovativer und schonender Anfahrkonzepte für flexibel betriebene Prozessanlagen, wie Luftzerleger oder Stickstoffverflüssiger. Dabei ist eine realitätsgetreue Vorhersage des Anlagenverhaltens, das maßgeblich von der transienten Antwort der verbauten Wärmeübertrager abhängt, erforderlich.

Die in dieser Arbeit entwickelten Wärmeübertragermodelle dienen zudem als Kernkomponente detaillierter, druckgetriebener Gesamtanlagenmodelle, welche einen integralen Bestandteil eines digitalen Zwillings einer Prozessanlage darstellen. Mit zunehmendem Fortschritt der Digitalisierung in der Prozessindustrie kommt dieser Anwendung eine immer größere Bedeutung zu.

Abschließend kann somit festgehalten werden, dass in dieser Arbeit erstmals eine modular-hierarchische und daher flexibel erweiterbare Simulationsumgebung für verschiedene industriell relevante Bauformen von Wärmeübertragern vorgestellt wird, die zugleich über verschiedene Modelltiefen zur stationären und dynamischen Simulation von Wärmeübertragern verfügt. Die verschiedenen Modelltiefen können dabei flexibel vom Anwender ausgewählt und miteinander kombiniert werden. Zudem wurde eine strukturierte Analyse der numerischen Eigenschaften der verschiedenen Modelltiefen durchgeführt, um die Limitierungen des jeweiligen Anwendungsbereichs darzulegen. Die Simulationsumgebung basiert auf der zukunftsfähigen Modellierungsumgebung SMI@LE und kann damit plattformübergreifend eingesetzt werden. Somit ist die Grundlage gelegt, um detaillierte Wärmeübertragermodelle für zukünftige Anwendungen infolge der fortschreitenden Digitalisierung der Prozessindustrie einfach verfügbar zu machen.

Mögliche zukünftige Anwendungen der Simulationsumgebung sind sowohl die Verbesserung bereits verfügbarer, stationärer Korrelationsgleichungen für Wärmeübergang und Druckverlust, um Unsicherheiten stationärer und dynamischer Simulationen von Wärmeübertragern zu reduzieren, als auch die Anpassung von Korrelationen für Wärmeübergang und Druckverlust an den dynamischen Betrieb von Wärmeübertragern. Auch die Entwicklung fortschrittlicher Regelungskonzepte für den dynamischen Betrieb von einzelnen Apparaten, Anlagenteilen oder ganzen Prozessen mit Hilfe detaillierter dynamischer Simulationsmodelle wird zunehmend an Bedeutung gewinnen. Durch Onlineüberwachung mittels Digitaler Zwillinge auf Basis detaillierter dynamischer Simulationsmodelle kann ein entscheidender Beitrag zur Verbesserung der Prozesssicherheit geleistet werden. Entscheidend für die Umsetzbarkeit dieser Applikationen ist

eine kontinuierliche Weiterentwicklung der zugrundeliegenden Simulationsumgebung für Wärmeübertrager in Folgearbeiten. Dabei steht insbesondere die Rechenzeit im Fokus. Durch Parallelisierung, effizientere softwaretechnische Implementierung, Minimierung von Stoffdatenaufrufen, effizientere Stoffdatenschnittstellen oder Ansätze zur Modellreduktion kann diese zukünftig weiter reduziert werden.

Tabellenverzeichnis

7.1	Charakteristische Parameter der betrachteten Zylinderschale	99
7.2	Charakteristische Parameter des eindimensionalen Festkörpers	102
7.3	Parameter δ_k der Reihenlösung der instationären Wärmeleitung	103
7.4	Koeffizienten C_k der Reihenlösung der instationären Wärmeleitung	103
7.5	Charakteristische Parameter des Validierungsszenarios	106
8.1	Geometriedaten des Hauptwärmeübertragers	114
8.2	Maximale absolute Abweichung der Metalltemperaturen	115
8.3	Geometriedaten des Plattenwärmeübertragers	119
8.4	Rechenzeiten verschiedener Verfahren (einphasig)	119
8.5	Geometriedaten des Plattenwärmeübertragers (Erdgasanlage)	122
8.6	Rechenzeiten verschiedener Verfahren (Phasenwechsel)	122
9.1	Rechenzeit der Prozessstrommodelle (einphasiges Betriebsszenario)	129
9.2	Rechenzeit der Prozessstrommodelle (Kondensation)	132
9.3	Geometriedaten des Rohrbündelwärmeübertragers	133
9.4	Geometriedaten des Rohrbündelwärmeübertragers	134
9.5	Geometriedaten des Reaktors	136
9.6	Geometriedaten des Subcoolers	137
9.7	Geometriedaten des Subcoolers	141
9.8	Temperaturen und Drücke am Eintritt der Prozessströme	145
9.9	Geometriedaten von PFHE 1	151
9.10	Geometriedaten von PFHE 2	152

Abbildungsverzeichnis

1.1	Prozessfließbild einer Luftzerlegungsanlage	3
1.2	Prozessfließbild eines kryogenen Energiespeichers	4
1.3	Prozessfließbild einer Stickstoffverflüssigungsanlage	5
1.4	Prozessfließbilder von kryogenen Verflüssigungsprozessen	6
2.1	Visualisierung eines Plattenwärmeübertragers	10
2.2	Visualisierung verschiedener Wärmeübertrager	11
3.1	Finstruktur eines Plattenwärmeübertragers	14
3.2	Übertragener Wärmestrom in Abhängigkeit von der Überhitzung	20
4.1	Visualisierung der Indexnotation bei der Linearisierung der Flüsse	32
4.2	Prädiktor-Korrektor-Verfahren an Unstetigkeiten	42
4.3	Regularisierung von Unstetigkeiten	43
4.4	Schematische Darstellung des SIMPLE-Algorithmus	44
5.1	Konvektiver Wärmeübergang: Prozessstrom i und Festkörper s	49
5.2	Einfaches Drucknetzwerk nach KLEIN ET AL. (2020)	59
5.3	Modellierungsumgebung SMI@LE [KENDER ET AL. 2019]	61
6.1	Diskretisierung des Berechnungsgebiets eines Wärmeübertragers	66
6.2	Integration mit Fluid-Massen- und -Energie-Holdup	72
6.3	Visualisierung des Wärmeübergangsproblems ohne Phasenwechsel	77
6.4	Visualisierung des Wärmeübergangsproblems nahe am Siedepunkt	78
6.5	Visualisierung des Wärmeübergangsproblems nahe am Taupunkt	79
6.6	Integration mit quasi-stationären Prozessströmen	83
6.7	Zellbasiertes Verfahren zur Berechnung eines Prozessstroms	84
6.8	Maßgeschneidertes Verfahren zur Wärmeübertrager-Nachrechnung	88
6.9	Abschnitt eines Wärmeübertragers mit einem finiten Volumen	89
6.10	Multiple valide Lösungen eines Zweistrom-Wärmeübertragers	90
6.11	Schießverfahren zur Nachrechnung von Wärmeübertragern	92
6.12	Modulare Simulationsumgebung für Wärmeübertrager	93
6.13	Repräsentation eines Plattenwärmeübertragers	95
6.14	Repräsentation eines Rohrbündelwärmeübertragers	96
6.15	Repräsentation eines spiralgewickelten Wärmeübertragers	96
7.1	Validierung der stationären Wärmeleitung einer Metallwärmekapazität	98
7.2	Geometrie der betrachteten Zylinderschale	99
7.3	Vergleich der Methode der Blockkapazität mit Simulationsdaten	100

7.4	Methode der Blockkapazität für verschiedene radiale Auflösungen	101
7.5	Wärmeleitung im eindimensionalen Festkörper	101
7.6	Vergleich mit der Reihenlösung für die instationäre Wärmeleitung	104
7.7	Vergleich mit der analytischen Referenzlösung für einen Prozessstrom	107
7.8	Validierung der Korrelationen in der Gasphase	108
7.9	Validierung der Korrelationen in der Flüssigphase	109
7.10	Validierung der Korrelationen im überkritischen Bereich	110
7.11	Validierung der Korrelationen bei Kondensation	111
7.12	Validierung der Korrelationen bei Verdampfung	112
8.1	Topologie des Hauptwärmeübertragers	113
8.2	Metalltemperatur für verschiedene Diskretisierungsverfahren	115
8.3	Validierung der stationären Metalltemperatur im Hauptwärmeübertrager	116
8.4	Metalltemperatur für verschiedene Geometrieauflösungen	117
8.5	Metalltemperatur für verschiedene Korrelationen	117
8.6	Metalltemperatur für Layer-by-Layer- und Stream-by-Stream-Modellierung	118
8.7	Metalltemperatur des Kühlwasserwärmeübertragers (Gleichstrom)	121
8.8	Metalltemperatur des Kühlwasserwärmeübertragers (Gegenstrom)	121
8.9	Topologie eines Plattenwärmeübertragers einer Erdgasanlage	122
8.10	Metalltemperatur für verschiedene Verfahren	123
9.1	Druckrandbedingungen der Wärmeübertragerpassage	126
9.2	Stoffmengenstrom für verschiedene Prozessstrommodelle	127
9.3	Temperaturverläufe für verschiedene Prozessstrommodelle	128
9.4	Skalare Größen während der Kondensation eines Luftstroms	129
9.5	Axiale Profile nach $t = 580$ s des Kondensationsszenarios	131
9.6	Ausfall der Rohrseite eines Rohrbündelwärmeübertragers	134
9.7	Reinigung des Mantelraums eines Rohrbündelwärmeübertragers	135
9.8	Rohrbündelreaktor mit Kühlsystem	136
9.9	Ausfall eines Rohrbündelreaktors	137
9.10	Stoffmengenströme beim Anfahren eines Subcoolers	138
9.11	Eintrittstemperaturen beim Anfahren eines Subcoolers	138
9.12	Metalltemperaturen beim Anfahren eines Subcoolers	139
9.13	Topologie des Subcoolers einer Luftzerlegungsanlage	141
9.14	Prozessgrößen des Subcoolers während eines Anfahrvorgangs	141
9.15	Prozessgrößen des Subcoolers nach 2.1 h des Anfahrvorgangs	142
9.16	Prozessgrößen des Subcoolers nach 7.9 h des Anfahrvorgangs	143
9.17	Prozessgrößen des Subcoolers nach 10.4 h des Anfahrvorgangs	143
9.18	Prozessgrößen des Subcoolers nach 20.0 h des Anfahrvorgangs	144
9.19	Metalltemperaturen des Subcoolers während des Anfahrvorgangs	145
9.20	Stoffmengenströme im Plattenwärmeübertrager	146
9.21	Prozessgrößen im PFHE nach 0.0 h des Lastwechsels	147
9.22	Prozessgrößen im PFHE nach 0.8 h des Lastwechsels	147
9.23	Prozessgrößen im PFHE nach 0.87 h des Lastwechsels	148

9.24	Prozessgrößen im PFHE nach 0.9 h des Lastwechsels	148
9.25	Prozessgrößen im PFHE nach 2.5 h des Lastwechsels	149
9.26	Metalltemperaturen des PFHE während des Lastwechsels	149
9.27	Prozessgrößen der Feedströme während des Anfahrvorgangs	150
9.28	Parameter der Expansionsturbinen während des Anfahrvorgangs	151
9.29	Metalltemperaturen der Wärmeübertrager beim Anfahren	152
9.30	Prozessgrößen des Hauptwärmeübertragers (Anfahrvorgang)	154
9.31	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (2.8 h Anfahren)	154
9.32	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (5.6 h Anfahren)	155
9.33	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (6.9 h Anfahren)	155
9.34	Prozessgrößen des Hauptwärmeübertragers (Anlagenstopp)	156
9.35	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (50 s Anlagenstopp)	157
9.36	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (75 s Anlagenstopp)	158
9.37	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (200 s Anlagenstopp)	158
9.38	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (Ende Anlagenstopp)	159
9.39	Prozessgrößen des Hauptwärmeübertragers (Wiederanfahren)	159
9.40	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (90 s Wiederanfahren)	161
9.41	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (160 s Wiederanfahren)	162
9.42	Temperatur im Hauptwärmeübertrager (500 s Wiederanfahren)	162

Literatur

AASI & MISHRA 2021

AASI, H. K.; MISHRA, M.: *Experimental investigation and ANN modelling on thermo-hydraulic efficacy of cross-flow three-fluid plate-fin heat exchanger*. International Journal of Thermal Sciences 164 (2021), S. 106870. ISSN: 12900729. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2021.106870.

ABADZIC & SCHOLZ 1973

ABADZIC, E. E.; SCHOLZ, H. W.: *Coiled Tubular Heat Exchangers. Advances in Cryogenic Engineering*. Hrsg. von K. D. TIMMERHAUS. Boston, MA: Springer US, 1973, S. 42–51. ISBN: 978-1-4684-3113-1. DOI: 10.1007/978-1-4684-3111-7.

ASCHER & PETZOLD 1998

ASCHER, U. M.; PETZOLD, L. R.: *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*. 3600 Market Street, 6th Floor Philadelphia, PA 19104-2688: SIAM, 1998. ISBN: 9780898714128. DOI: 10.1137/1.9781611971392.

AVEROUS ET AL. 1999

AVEROUS, D.; HAMMADI, K.; PINGAUD, H.; JOULIA, X.; GUITTARD, P.: *Dynamic simulation of Brazed Plate-Fin Heat Exchangers*. Computers & Chemical Engineering 23 (1999), S447–S450. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/S0098-1354(99)80110-0.

BELL 2007

BELL, B.: *CppAD: a package for C++ algorithmic differentiation*. 2007. URL: <https://coin-or.github.io/CppAD/doc/cppad.htm>.

BERSTAD ET AL. 2010

BERSTAD, D. O.; STANG, J. H.; NEKSÅ, P.: *Large-scale hydrogen liquefier utilising mixed-refrigerant pre-cooling*. International Journal of Hydrogen Energy 35.10 (2010), S. 4512–4523. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2010.02.001.

BIEGLER 2014

BIEGLER, L. T.: *Recent Advances in Chemical Process Optimization*. Chemie Ingenieur Technik 86.7 (2014), S. 943–952. ISSN: 0009-286X. DOI: 10.1002/cite.201400033.

BOBIČ ET AL. 2020

BOBIČ, M.; GJEREK, B.; GOLOBIČ, I.; BAJSIĆ, I.: *Dynamic behaviour of a plate heat exchanger: Influence of temperature disturbances and flow configurations*. International Journal of Heat and Mass Transfer 163 (2020), S. 120439. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120439.

BONILLA ET AL. 2017

BONILLA, J.; DE LA CALLE, A.; RODRÍGUEZ-GARCÍA, M. M.; ROCA, L.; VALENZUELA, L.: *Study on shell-and-tube heat exchanger models with different degree of complexity for process simulation and control design*. Applied Thermal Engineering 124 (2017), S. 1425–1440. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2017.06.129.

BONILLA ET AL. 2015

BONILLA, J.; DORMIDO, S.; CELLIER, F. E.: *Switching moving boundary models for two-phase flow evaporators and condensers*. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation 20.3 (2015), S. 743–768. ISSN: 10075704. DOI: 10.1016/j.cnsns.2014.06.035.

BOYKO & KRUSHILIN 1967

BOYKO, L. D.; KRUSHILIN, G. N.: *Heat transfer and hydraulic resistance during condensation of steam in a horizontal tube and in a bundle of tubes*. International Journal of Heat and Mass Transfer 10.3 (1967), S. 361–373. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/0017-9310(67)90152-4.

CAO ET AL. 2016

CAO, Y.; SWARTZ, C. L. E.; FLORES-CERRILLO, J.: *Optimal Dynamic Operation of a High-Purity Air Separation Plant under Varying Market Conditions*. Industrial & Engineering Chemistry Research 55.37 (2016), S. 9956–9970. ISSN: 0888-5885. DOI: 10.1021/acs.iecr.6b02090.

CARDELLA ET AL. 2017

CARDELLA, U.; DECKER, L.; KLEIN, H.: *Economically viable large-scale hydrogen liquefaction*. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering 171.1 (2017), S. 012013. ISSN: 1757-899X. DOI: 10.1088/1757-899X/171/1/012013.

CARSLAW & JAEGER 2011

CARSLAW, H. S.; JAEGER, J.: *Conduction of Heat in Solids*. Oxford, Clarendon Pr., 2011. ISBN: 9780198533689.

CECCHINATO & MANCINI 2012

CECCHINATO, L.; MANCINI, F.: *An intrinsically mass conservative switched evaporator model adopting the moving-boundary method*. International Journal of Refrigeration 35.2 (2012), S. 349–364. ISSN: 0140-7007. DOI: 10.1016/j.ijrefrig.2011.10.007.

CHATO ET AL. 1971

CHATO, J. C.; LAVERMAN, R. J.; SHAH, J. M.: *Analyses of parallel flow, multi-stream heat exchangers*. International Journal of Heat and Mass Transfer 14.10 (1971), S. 1691–1703. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/0017-9310(71)90077-9.

CHEN 1966

CHEN, J. C.: *Correlation for Boiling Heat Transfer to Saturated Fluids in Convective Flow*. Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development 5.3 (1966), S. 322–329. ISSN: 0196-4305. DOI: 10.1021/i260019a023.

CHO ET AL. 2017

CHO, D.-H.; SEO, S.-K.; LEE, C.-J.; LIM, Y.: *Optimization of layer patterning on a plate fin heat exchanger considering abnormal operating conditions*. Applied Thermal Engineering 127 (2017), S. 1036–1048. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2017.08.084.

CORBERÁN ET AL. 2001

CORBERÁN, J.; CÓRDOBA, P. F.; GONZALVEZ, J.; ALIAS, F.: *Semiexplicit method for wall temperature linked equations (SEWTLE) : A general finite-volume technique for the calculation of complex heat exchangers*. undefined (2001).

DAHMEN & REUSKEN 2008

DAHMEN, W.; REUSKEN, A.: *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Zweite, korrigierte Auflage. Springer-Lehrbuch. Berlin, Heidelberg: Springer, 2008. ISBN: 978-3-540-76493-9.

DAS & GHOSH 2012

DAS, P. K.; GHOSH, I.: *Thermal Design of Multistream Plate Fin Heat Exchangers—A State-of-the-Art Review*. Heat Transfer Engineering 33.4-5 (2012), S. 284–300. ISSN: 0145-7632. DOI: 10.1080/01457632.2012.611451.

DAUBERT & DANNER 1997

DAUBERT, T.; DANNER, R.: *API technical data book - petroleum refining*. 1997.

DESIDERI ET AL. 2016

DESIDERI, A.; DECHESNE, B.; WRONSKI, J.; VAN DEN BROEK, M.; GUSEV, S.; LEMORT, V.; QUOILIN, S.: *Comparison of Moving Boundary and Finite-Volume Heat Exchanger Models in the Modelica Language*. Energies 9.5 (2016), S. 339. DOI: 10.3390/en9050339.

DEUFLHARD 2013

DEUFLHARD, P.: *Numerische Mathematik 2: Gewöhnliche Differentialgleichungen*. 4. Auflage. De Gruyter Studium. Berlin und Boston: Walter de Gruyter, 2013. ISBN: 978-3-11-031636-0. DOI: 10.1515/9783110316360. URL: <https://www.degruyter.com/isbn/9783110316360>.

DEUFLHARD 2019

DEUFLHARD, P.: *Numerische Mathematik*. 5. Auflage. De-Gruyter-Lehrbuch. Berlin [u.a.]: de Gruyter, 2019. ISBN: 978-3-11-061421-3.

DEUFLHARD 2020

DEUFLHARD, P.: *Numerische Mathematik 3: Adaptive Lösung partieller Differentialgleichungen*. 2., erweiterte Auflage. De Gruyter Studium. Berlin/Boston: de Gruyter, 2020. ISBN: 978-3-11-068971-6.

DING ET AL. 2017

DING, C.; HU, H.; DING, G.; CHEN, J.; MI, X.; YU, S.; LI, J.: *Experimental investigation on downward flow boiling heat transfer characteristics of propane in shell side of LNG spiral wound heat exchanger*. International Journal of Refrigeration 84 (2017), S. 13–25. ISSN: 0140-7007. DOI: 10.1016/j.ijrefrig.2017.08.006.

DING ET AL. 2011

DING, W. K.; FAN, J. F.; HE, Y. L.; TAO, W. Q.; ZHENG, Y. X.; GAO, Y. F.; SONG, J.: *A general simulation model for performance prediction of plate fin-and-tube heat exchanger with complex circuit configuration*. Applied Thermal Engineering 31.16 (2011), S. 3106–3116. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2011.01.045.

DONAUBAUER ET AL. 2019

DONAUBAUER, P. J.; CARDELLA, U.; DECKER, L.; KLEIN, H.: *Kinetics and Heat Exchanger Design for Catalytic Ortho-Para Hydrogen Conversion during Liquefaction*. Chemical Engineering & Technology 42.3 (2019), S. 669–679. ISSN: 0930-7516. DOI: 10.1002/ceat.201800345.

DOWELL & JARRATT 1971

DOWELL, M.; JARRATT, P.: *A modified regula falsi method for computing the root of an equation*. BIT 11.2 (1971), S. 168–174. ISSN: 0006-3835. DOI: 10.1007/bf01934364.

DURAN & GROSSMANN 1986

DURAN, M. A.; GROSSMANN, I. E.: *Simultaneous optimization and heat integration of chemical processes*. AIChE Journal 32.1 (1986), S. 123–138. ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.690320114.

FAGHRI & ZHANG 2006

FAGHRI, A.; ZHANG, Y.: *Transport Phenomena in Multiphase Systems*. Burlington: Elsevier Science, 2006. ISBN: 0123706106. URL: <http://swb.ebib.com/patron/FullRecord.aspx?p=802570>.

FERZIGER & PERIĆ 2002

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Third, rev. edition. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2002. ISBN: 9783642560262. DOI: 10.1007/978-3-642-56026-2.

FIKIIN ET AL. 2017

FIKIIN, K.; STANKOV, B.; EVANS, J.; MAIDMENT, G.; FOSTER, A.; BROWN, T.; RADCLIFFE, J.; YOUNG-IDRISSI, M.; ALFORD, A.; VARGA, L.; ALVAREZ, G.; IVANOV, I. E.; BOND, C.; COLOMBO, I.; GARCIA-NAVEDA, G.; IVANOV, I.; HATTORI, K.; UMEKI, D.; BOJKOV, T.; KALOYANOV, N.: *Refrigerated warehouses as intelligent hubs to integrate renewable energy in industrial food refrigeration and to enhance power grid sustainability*. Trends in Food Science & Technology 60 (2017), S. 96–103. ISSN: 09242244. DOI: 10.1016/j.tifs.2016.11.011.

FORSTER & ZUBER 1955

FORSTER, H. K.; ZUBER, N.: *Dynamics of vapor bubbles and boiling heat transfer*. AIChE Journal 1.4 (1955), S. 531–535. ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.690010425.

FREDHEIM 1994

FREDHEIM, A. O.: *Thermal design of coil-wound LNG heat exchangers. Shell-side heat transfer and pressure drop*. 1994. URL: <https://www.osti.gov/etdeweb/biblio/51026>.

FREDHEIM ET AL. 2000

FREDHEIM, A.; JORSTAD, O.; OWREN, G.; VIST, S.; NEERAAS, B.: *Coil, a model for simulation of spiral wound LNG heat exchangers; Coil: modele de simulation de revaporiseurs de GNL a spires*. 2000. URL: <https://www.osti.gov/etdeweb/biblio/20168067>.

FREUND & KABELAC 2010

FREUND, S.; KABELAC, S.: *Investigation of local heat transfer coefficients in plate heat exchangers with temperature oscillation IR thermography and CFD*. International Journal of Heat and Mass Transfer 53.19-20 (2010), S. 3764–3781. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.04.027.

FRIEDRICH & PIETSCHMANN 2020

FRIEDRICH, H.; PIETSCHMANN, F.: *Numerische Methoden*. de Gruyter, 2020. ISBN: 9783110665604. DOI: 10.1515/9783110665604.

FRITSCH ET AL. 2021a

FRITSCH, P.; HOFFMANN, R.; FLÜGGEN, R.; HAIDER, P.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *A Cryogenic Test Rig for Dynamically Operated Plate–Fin Heat Exchangers*. Chemie Ingenieur Technik 93.8 (2021), S. 1230–1237. ISSN: 0009-286X. DOI: 10.1002/cite.202000253.

FRITSCH ET AL. 2021b

FRITSCH, P.; HOFFMANN, R.; FLÜGGEN, R.; WOITALKA, A.; HAIDER, P.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *Distributed Temperature and Strain Measurements at a Cryogenic Plate–Fin Heat Exchanger Test Rig*. Chemie Ingenieur Technik (2021). ISSN: 0009-286X. DOI: 10.1002/cite.202100070.

GAMMA ET AL. 2009

GAMMA, E.; HELM, R.; JOHNSON, R. E.; VLISSIDES, J.: *Design patterns: Elements of reusable object-oriented software*. Addison-Wesley professional computing series. Reading, MA: Addison-Wesley, 2009. ISBN: 9780321700698.

GEORGIADIS ET AL. 1998a

GEORGIADIS, M. C.; ROTSTEIN, G. E.; MACCHIETTO, S.: *Modelling and simulation of complex plate heat exchanger arrangements under milk fouling*. Computers & Chemical Engineering 22 (1998), S331–S338. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/S0098-1354(98)00072-6.

GEORGIADIS & MACCHIETTO 2000

GEORGIADIS, M. C.; MACCHIETTO, S.: *Dynamic modelling and simulation of plate heat exchangers under milk fouling*. Chemical Engineering Science 55.9 (2000), S. 1605–1619. ISSN: 0009-2509. DOI: 10.1016/S0009-2509(99)00429-7.

GEORGIADIS ET AL. 1998b

GEORGIADIS, M. C.; ROTSTEIN, G. E.; MACCHIETTO, S.: *Modeling and simulation of shell and tube heat exchangers under milk fouling*. AIChE Journal 44.4 (1998), S. 959–971. ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.690440422.

GHOSH ET AL. 2011

GHOSH, S.; GHOSH, I.; PRATI HAR, D. K.; MAITI, B.; DAS, P. K.: *Optimum stacking pattern for multi-stream plate-fin heat exchanger through a genetic algorithm*. International Journal of Thermal Sciences 50.2 (2011), S. 214–224. ISSN: 12900729. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2010.07.003.

GNIELINSKI 1983

GNIELINSKI, V.: *Zur Berechnung des Druckverlustes in Rohrwendeln*. VT. Verfahrenstechnik. 1983, S. 683–690. ISBN: 0341-2644. URL: <https://pascal-francis.inist.fr/vibad/index.php?action=getRecordDetail&idt=9037873>.

GNIELINSKI 1986

GNIELINSKI, V.: *HEAT TRANSFER AND PRESSURE DROP IN HELICALLY COILED TUBES*. Proceeding of International Heat Transfer Conference 8. Connecticut: Begellhouse, 1986, S. 2847–2854. ISBN: 0-89116-559-2. DOI: 10.1615/IHTC8.1360.

GOYAL ET AL. 2014

GOYAL, M.; CHAKRAVARTY, A.; ATREY, M. D.: *Two dimensional model for multistream plate fin heat exchangers*. Cryogenics 61 (2014), S. 70–78. ISSN: 0011-2275. DOI: 10.1016/j.cryogenics.2014.02.017.

GRIEWANK ET AL. 1996

GRIEWANK, A.; JUEDES, D.; UTKE, J.: *Algorithm 755: ADOL-C*. ACM Transactions on Mathematical Software 22.2 (1996), S. 131–167. ISSN: 0098-3500. DOI: 10.1145/229473.229474.

GULLAPALLI & SUNDÉN 2014

GULLAPALLI, V. S.; SUNDÉN, B.: *CFD Simulation of Heat Transfer and Pressure Drop in Compact Brazed Plate Heat Exchangers*. Heat Transfer Engineering 35.4 (2014), S. 358–366. ISSN: 0145-7632. DOI: 10.1080/01457632.2013.828557.

GUPTA & ATREY 2000

GUPTA, P.; ATREY, M.: *Performance evaluation of counter flow heat exchangers considering the effect of heat in leak and longitudinal conduction for low-temperature applications*. Cryogenics 40.7 (2000), S. 469–474. ISSN: 0011-2275. DOI: 10.1016/S0011-2275(00)00069-2.

GUT & PINTO 2003

GUT, J. A.; PINTO, J. M.: *Modeling of plate heat exchangers with generalized configurations*. International Journal of Heat and Mass Transfer 46.14 (2003), S. 2571–2585. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/S0017-9310(03)00040-1.

HAIDER ET AL. 2020

HAIDER, P.; FREKO, P.; ACHER, T.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *A transient three-dimensional model for thermo-fluid simulation of cryogenic plate-fin heat exchangers*. Applied Thermal Engineering 180 (2020), S. 115791. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2020.115791.

HAIDER ET AL. 2021a

HAIDER, P.; FREKO, P.; ACHER, T.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *Influence of inlet configuration and distributor geometry on the performance of cryogenic plate-fin heat exchangers*. Applied Thermal Engineering 195 (2021), S. 117197. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2021.117197.

HAIDER ET AL. 2019

HAIDER, P.; FREKO, P.; LOCHNER, S.; REITER, T.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *Design of a test rig for the simulation of startup procedures in main heat exchangers of air separation plants*. Chemical Engineering Research and Design 147 (2019), S. 90–97. ISSN: 02638762. DOI: 10.1016/j.cherd.2019.04.025.

HAIDER ET AL. 2021b

HAIDER, P.; HEINZ, P.; ACHER, T.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *A Framework for Multi-Objective Optimization of Plate-Fin Heat Exchangers Using a Detailed Three-Dimensional Simulation Model*. ChemEngineering 5.4 (2021), S. 82. DOI: 10.3390/chemengineering5040082.

HAIRER ET AL. 2008

HAIRER, E.; NØRSETT, S. P.; WANNER, G.: *Nonstiff problems*. 2., rev. ed., 3. printing. 8. Springer Series in Computational Mathematics. Berlin: Springer, 2008. ISBN: 978-3-540-78862-1.

HAIRER & WANNER 2009

HAIRER, E.; WANNER, G.: *Solving Ordinary Differential Equations II*. 2nd ed. v. 14. Springer Series in Computational Mathematics. Secaucus: Springer, 2009. ISBN: 978-3-642-05221-7.

HANKE-BOURGEOIS 2009

HANKE-BOURGEOIS, M.: *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*. 3., aktualisierte Auflage. Analysis und Numerik. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag / GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2009. ISBN: 978-3-8348-9309-3.

HÄRING 2008

HÄRING, H.-W.: *Industrial gases processing*. Weinheim: Wiley-VCH, 2008. ISBN: 9783527316854.

HASAN ET AL. 2009

HASAN, M. M. F.; KARIMI, I. A.; ALFADALA, H. E.; GROOTJANS, H.: *Operational modeling of multistream heat exchangers with phase changes*. AIChE Journal 55.1 (2009), S. 150–171. ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.11682.

HASAN ET AL. 2007

HASAN, M. M. F.; KARIMI, I. A.; ALFADALA, H.; GROOTJANS, H.: *Modeling and simulation of main cryogenic heat exchanger in a base-load liquefied natural gas plant*. 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering. Hrsg. von V. PLEȘU; P. Ș. AGACHI. 24. Computer-aided chemical engineering, 1570-7946. Amsterdam und London: Elsevier, 2007, S. 219–224. ISBN: 9780444531575. DOI: 10.1016/S1570-7946(07)80060-5.

HASELER 1981

HASELER, L. E.: *Performance Calculation Methods for Multi-stream Plate-Fin Heat Exchangers*. Begel House Inc, 1981. DOI: 10.1615/ICHMT.1981.AdvCourseHeatExch.320. URL: <http://www.dl.begellhouse.com/references/1bb331655c289a0a,15aac851609f970c,4f69349c23018210.html>.

HAUSEN & LINDE 1985

HAUSEN, H.; LINDE, H.: *TIEFTEMPERATURTECHNIK;ERZEUGUNG SEHR TIEFER TEMPERATUREN, GASVERFLUSSIGUNG UND ZERLEGUNG VON GASGEMISCHEN: Erzeugung sehr tiefer Temperaturen, Gasverflüssigung und Zerlegung von Gasgemischen*. Zweite, völlig neubearbeitete Auflage. CHAM: Springer, 1985. ISBN: 9783662105535. DOI: 10.1007/978-3-662-10553-5.

HE ET AL. 2019

HE, K.-L.; CHEN, Q.; LIU, Y.-T.; HAO, J.-H.; WANG, Y.-F.; YUAN, Y.: *A transient heat current model for dynamic performance analysis and optimal control of heat transfer system*. International Journal of Heat and Mass Transfer 145 (2019), S. 118767. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118767.

HERMANN 2020

HERMANN, M.: *Numerische Mathematik*. 4., überarbeitete und erweiterte Auflage. Band 2. De Gruyter Studium. München und Wien: De Gruyter Oldenbourg, 2020. ISBN: 9783110690378.

HESSELGREAVES ET AL. 2016

HESSELGREAVES, J. E.; LAW, R.; REAY, D. A.: *Compact heat exchangers: Selection, design and operation / J.E. Hesselgreaves, Richard Law, David Reay*. Second edition. Amsterdam: Butterworth-Heinemann, 2016. ISBN: 9780081003060.

HINDMARSH ET AL. 2005

HINDMARSH, A. C.; BROWN, P. N.; GRANT, K. E.; LEE, S. L.; SERBAN, R.; SHUMAKER, D. E.; WOODWARD, C. S.: *SUNDIALS: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers*. ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS) 31.3 (2005), S. 363–396.

HOFFMANN ET AL. 2020

HOFFMANN, C.; WEIGERT, J.; ESCHE, E.; REPKE, J.-U.: *A pressure-driven, dynamic model for distillation columns with smooth reformulations for flexible operation*. Computers & Chemical Engineering 142 (2020), S. 107062. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2020.107062.

HOGAN 2014

HOGAN, R. J.: *Fast Reverse-Mode Automatic Differentiation using Expression Templates in C++*. ACM Transactions on Mathematical Software 40.4 (2014), S. 1–16. ISSN: 0098-3500. DOI: 10.1145/2560359.

IGNATOWITZ & FASTERT 2013

IGNATOWITZ, E.; FASTERT, G.: *Chemietechnik*. 11. Aufl., 1. Dr. Europa-Lehrmittel. Haan-Gruiten: Verl. Europa-Lehrmittel, Nourney, Vollmer, 2013. ISBN: 9783808570579.

JACOB & GUENNEBAUD o.D.

JACOB, B.; GUENNEBAUD, G.: *Eigen*. URL: https://eigen.tuxfamily.org/index.php?title=Main_Page.

JAIN ET AL. 2017

JAIN, G.; CHAUDHARY, S.; GUPTA, P. K.; KUSH, P. K.: *Flow mal-distribution study in cryogenic counter-flow plate fin heat exchangers*. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering 171.1 (2017), S. 012014. ISSN: 1757-899X. DOI: 10.1088/1757-899X/171/1/012014.

JIANG ET AL. 2006

JIANG, H.; AUTE, V.; RADERMACHER, R.: *CoilDesigner: a general-purpose simulation and design tool for air-to-refrigerant heat exchangers*. International Journal of Refrigeration 29.4 (2006), S. 601–610. ISSN: 0140-7007. DOI: 10.1016/j.ijrefrig.2005.09.019.

JUN & PURI 2006

JUN, S.; PURI, V. M.: *A 2D dynamic model for fouling performance of plate heat exchangers*. Journal of Food Engineering 75.3 (2006), S. 364–374. ISSN: 02608774. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2005.03.064.

KAMATH ET AL. 2012

KAMATH, R. S.; BIEGLER, L. T.; GROSSMANN, I. E.: *Modeling multistream heat exchangers with and without phase changes for simultaneous optimization and heat integration*. AIChE Journal 58.1 (2012), S. 190–204. ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.12565.

KAYS & LONDON 1997

KAYS, W. M.; LONDON, A. L.: *Compact heat exchangers*. 3rd ed. Malabar, FL: Krieger Pub, 1997. ISBN: 1575240602.

KELLEY & KEYES 1998

KELLEY, C. T.; KEYES, D. E.: *Convergence Analysis of Pseudo-Transient Continuation*. SIAM Journal on Numerical Analysis 35.2 (1998), S. 508–523. ISSN: 0036-1429. DOI: 10.1137/S0036142996304796.

KENDER ET AL. 2021

KENDER, R.; KAUFMANN, F.; RÖSSLER, F.; WUNDERLICH, B.; GOLUBEV, D.; THOMAS, I.; ECKER, A.-M.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *Development of a digital twin for a flexible air separation unit using a pressure-driven simulation approach*. Computers & Chemical Engineering 151 (2021), S. 107349. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2021.107349.

KENDER ET AL. 2022a

KENDER, R.; RÖSSLER, F.; WUNDERLICH, B.; POTTMANN, M.; GOLUBEV, D.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *Development of control strategies for an air separation unit with a divided wall column using a pressure-driven digital twin*. Chemical Engineering and Processing - Process Intensification 176 (2022), S. 108893. ISSN: 02552701. DOI: 10.1016/j.cep.2022.108893.

KENDER ET AL. 2022b

KENDER, R.; RÖSSLER, F.; WUNDERLICH, B.; POTTMANN, M.; THOMAS, I.; ECKER, A.-M.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *Improving the load flexibility of industrial air separation units using a pressure-driven digital twin*. AIChE Journal (2022). ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.17692.

KENDER ET AL. 2019

KENDER, R.; WUNDERLICH, B.; THOMAS, I.; PESCHEL, A.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *Pressure-driven dynamic simulation of start up and shutdown procedures of distillation columns in air separation units*. Chemical Engineering Research and Design 147 (2019), S. 98–112. ISSN: 02638762. DOI: 10.1016/j.cherd.2019.04.031.

KLEIN ET AL. 2020

KLEIN, H.; FRITSCH, P.; HAIDER, P.; KENDER, R.; RÖSSLER, F.; REHFELDT, S.; FREKO, P.; HOFFMANN, R.; THOMAS, I.; WUNDERLICH, B.: *Flexibler Betrieb von Luftzerlegungsanlagen*. Chemie Ingenieur Technik 92.12 (2020), S. 1921–1940. ISSN: 0009-286X. DOI: 10.1002/cite.202000054.

KLEIN ET AL. 2021

KLEIN, H.; FRITSCH, P.; HAIDER, P.; KENDER, R.; RÖSSLER, F.; REHFELDT, S.; FREKO, P.; HOFFMANN, R.; THOMAS, I.; WUNDERLICH, B.: *Flexible Operation of Air Separation Units*. ChemBio Eng Reviews (2021).

KOHIL ET AL. 2010

KOHIL, A.; FARAG, H.; OSSMAN, M.: *Mathematical modeling of a multi-stream brazed aluminum plate fin heat exchanger*. Thermal Science 14.1 (2010), S. 103–114. ISSN: 0354-9836. DOI: 10.2298/TSCI1001103K.

KRONSEDER 2003

KRONSEDER, T.: *Towards nonlinear model-based online optimal control of chemical engineering plants: Parameterised controls and sensitivity functions for very large-scale index-2 DAE systems with state dependent discontinuities*. Nr. 977. Fortschritt-Berichte VDI. Reihe 8, Mess-, Steuerungs- und Regelungstechnik. Düsseldorf: VDI Verlag, 2003. ISBN: 978-3-18-397708-6.

KRUMOVA 2020

KRUMOVA, V.: *Entwicklung eines Modells zur dynamischen Simulation von Rohr-bündelwärmeübertragern: Development of a Dynamic Simulation Model for Shell and Tube Heat Exchangers*. Master's Thesis. München: Technische Universität München, 2020.

KUNKEL & MEHRMANN 2006

KUNKEL, P.; MEHRMANN, V.: *Differential-Algebraic Equations*. Zuerich, Switzerland: European Mathematical Society Publishing House, 2006. ISBN: 978-3-03719-017-3. DOI: 10.4171/017.

KUPPAN 2013

KUPPAN, T.: *Heat exchanger design handbook*. Second edition paperback. Mechanical engineering. Boca Raton: CRC Press, 2013. ISBN: 1138074667.

LI ET AL. 2019

LI, K.; WEN, J.; YANG, H.; WANG, S.; LI, Y.: *Sensitivity and stress analysis of serrated fin structure in plate-fin heat exchanger on cryogenic condition*. International Journal of Thermal Sciences 145 (2019), S. 106013. ISSN: 12900729. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2019.106013.

LIU ET AL. 2004

LIU, J.; WEI, W.; DING, G.; ZHANG, C.; FUKAYA, M.; WANG, K.; INAGAKI, T.: *A general steady state mathematical model for fin-and-tube heat exchanger based on graph theory*. International Journal of Refrigeration 27.8 (2004), S. 965–973. ISSN: 0140-7007. DOI: 10.1016/j.ijrefrig.2004.06.008.

LØVSETH ET AL. 2015

LØVSETH, S. W.; SNUSTAD, I.; BRUNSVOLD, A. L.; SKAUGEN, G.; WAHL, P. E.; LERVÅG, K. Y.: *From Droplets to Process: Multilevel Research Approach to Reduce Emissions from LNG Processes*. Energy Procedia 64 (2015), S. 3–12. ISSN: 18766102. DOI: 10.1016/j.egypro.2015.01.003.

LUO ET AL. 2003

LUO, X.; GUAN, X.; LI, M.; ROETZEL, W.: *Dynamic behaviour of one-dimensional flow multistream heat exchangers and their networks*. International Journal of Heat and Mass Transfer 46.4 (2003), S. 705–715. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/S0017-9310(02)00303-4.

MA ET AL. 2016

MA, H.; CAI, W.; YAO, Y.; JIANG, Y.: *Investigation on stress characteristics of plate-fin structures in the heat-up process of LNG heat exchanger*. Journal of Natural Gas Science and Engineering 30 (2016), S. 256–267. ISSN: 18755100. DOI: 10.1016/j.jngse.2016.02.029.

MA ET AL. 2015

MA, H.; CHEN, J.; CAI, W.; SHEN, C.; YAO, Y.; JIANG, Y.: *The influence of operation parameters on stress of plate-fin structures in LNG heat exchanger*. Journal of Natural Gas Science and Engineering 26 (2015), S. 216–228. ISSN: 18755100. DOI: 10.1016/j.jngse.2015.06.011.

MARCHIONNI ET AL. 2019

MARCHIONNI, M.; CHAI, L.; BIANCHI, G.; TASSOU, S. A.: *Numerical modelling and transient analysis of a printed circuit heat exchanger used as recuperator for supercritical CO₂ heat to power conversion systems*. Applied Thermal Engineering 161 (2019), S. 114190. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2019.114190.

MCKINLEY & ALLEYNE 2008

MCKINLEY, T. L.; ALLEYNE, A. G.: *An advanced nonlinear switched heat exchanger model for vapor compression cycles using the moving-boundary method*. International Journal of Refrigeration 31.7 (2008), S. 1253–1264. ISSN: 0140-7007. DOI: 10.1016/j.ijrefrig.2008.01.012.

MERCIER 2019

MERCIER, L.: *Entwicklung eines Simulationsmodells für spiralgewickelte Wärmeübertrager: Development of a Simulation Model for Coil-Wound Heat Exchangers*. Master's Thesis. München: Technische Universität München, 2019.

MORGAN ET AL. 2015

MORGAN, R.; NELMES, S.; GIBSON, E.; BRETT, G.: *Liquid air energy storage – Analysis and first results from a pilot scale demonstration plant*. Applied Energy 137 (2015), S. 845–853. ISSN: 03062619. DOI: 10.1016/j.apenergy.2014.07.109.

MOUKALLED ET AL. 2016

MOUKALLED, F. H.; DARWISH, M.; MANGANI, L.: *The finite volume method in computational fluid dynamics: An advanced introduction with OpenFOAM and Matlab*. 113. Cham [etc.]: Springer, 2016. ISBN: 978-3-319-16873-9. DOI: 10.1007/978-3-319-16874-6.

MUKHERJEE 2004

MUKHERJEE, R.: *Practical thermal design of shell-and-tube heat exchangers*. Series in thermal & fluid physics & engineering. New York: Begell House, 2004. ISBN: 1567002056.

NEERAAS ET AL. 2004

NEERAAS, B. O.; FREDHEIM, A. O.; AUNAN, B.: *Experimental data and model for heat transfer, in liquid falling film flow on shell-side, for spiral-wound LNG heat exchanger*. International Journal of Heat and Mass Transfer 47.14-16 (2004), S. 3565–3572. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2004.01.009.

NELLIS 2003

NELLIS, G. F.: *A heat exchanger model that includes axial conduction, parasitic heat loads, and property variations*. Cryogenics 43.9 (2003), S. 523–538. ISSN: 0011-2275. DOI: 10.1016/S0011-2275(03)00132-2.

NEWBOROUGH & COOLEY 2020

NEWBOROUGH, M.; COOLEY, G.: *Developments in the global hydrogen market: The spectrum of hydrogen colours*. Fuel Cells Bulletin 2020.11 (2020), S. 16–22. ISSN: 14642859. DOI: 10.1016/S1464-2859(20)30546-0.

NIA ET AL. 2021

NIA, M. F.; NASSAB, S. A. G.; ANSARI, A. B.: *Numerical simulation of air heating by the recovered waste heat from the radiating exhaust gas flows in a plate heat exchanger*. International Journal of Thermal Sciences 161 (2021), S. 106728. ISSN: 12900729. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2020.106728.

NIROOMAND ET AL. 2019

NIROOMAND, R.; SAIDI, M. H.; HANNANI, S. K.: *A quasi-three-dimensional thermal model for multi-stream plate fin heat exchangers*. Applied Thermal Engineering 157 (2019), S. 113730. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2019.113730.

NIROOMAND ET AL. 2020

NIROOMAND, R.; SAIDI, M. H.; HANNANI, S. K.: *A general multi-scale modeling framework for two-phase simulation of multi-stream plate-fin heat exchangers*. International Journal of Heat and Mass Transfer 156 (2020), S. 119730. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.119730.

NOUSSAN ET AL. 2021

NOUSSAN, M.; RAIMONDI, P. P.; SCITA, R.; HAFNER, M.: *The Role of Green and Blue Hydrogen in the Energy Transition—A Technological and Geopolitical Perspective*. Sustainability 13.1 (2021), S. 298. DOI: 10.3390/su13010298.

PACIO & DORAO 2011

PACIO, J. C.; DORAO, C. A.: *A review on heat exchanger thermal hydraulic models for cryogenic applications*. Cryogenics 51.7 (2011), S. 366–379. ISSN: 0011-2275. DOI: 10.1016/j.cryogenics.2011.04.005.

PATANKAR 1980

PATANKAR, S.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Series in computational methods in mechanics and thermal sciences. Boca Raton, FL: CRC Press, 1980. ISBN: 9781351991513.

PATTISON & BALDEA 2014

PATTISON, R. C.; BALDEA, M.: *Equation-oriented flowsheet simulation and optimization using pseudo-transient models*. AIChE Journal 60.12 (2014), S. 4104–4123. ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.14567.

PATTISON & BALDEA 2015

PATTISON, R. C.; BALDEA, M.: *Multistream heat exchangers: Equation-oriented modeling and flowsheet optimization*. AIChE Journal 61.6 (2015), S. 1856–1866. ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.14766.

PÉNELOUX ET AL. 1982

PÉNELOUX, A.; RAUZY, E.; FRÉZE, R.: *A consistent correction for Redlich-Kwong-Soave volumes*. Fluid Phase Equilibria 8.1 (1982), S. 7–23. ISSN: 03783812. DOI: 10.1016/0378-3812(82)80002-2.

PICARD ET AL. 2009

PICARD, F.; AVEROUS, D.; JOULIA, X.; BARRETEAU, D.: *ProSEC: Modelling and Simulation in 3D of Brazed Aluminium Core-in-Drum Plate-Fin Heat Exchangers*. *Computer Aided Chemical Engineering : 10th International Symposium on Process Systems Engineering: Part A*. Hrsg. von R. M. DE BRITO ALVES; DO NASCIMENTO, CALUDIO AUGUSTO OLLER; E. C. BISCAIA. 27. Elsevier, 2009, S. 261–266. ISBN: 1570-7946. DOI: 10.1016/S1570-7946(09)70264-0. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570794609702640>.

PICÓN-NÚÑEZ ET AL. 2002

PICÓN-NÚÑEZ, M.; POLLEY, G. T.; MEDINA-FLORES, M.: *Thermal design of multi-stream heat exchangers*. Applied Thermal Engineering 22.14 (2002), S. 1643–1660. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/S1359-4311(02)00074-1.

PINGAUD ET AL. 1989

PINGAUD, H.; LE LANN, J. M.; KOEHRET, B.; BARDIN, M. C.: *Steady-state and dynamic simulation of plate fin heat exchangers*. Computers & Chemical Engineering 13.4-5 (1989), S. 577–585. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/0098-1354(89)85041-0.

POLIFKE & KOPITZ 2009

POLIFKE, W.; KOPITZ, J.: *Wärmeübertragung: Grundlagen, analytische und numerische Methoden*. 2. aktual. Aufl. Always learning. München u.a: Pearson Studium, 2009. ISBN: 9783863266707.

POPOV ET AL. 2019

POPOV, D.; FIKIIN, K.; STANKOV, B.; ALVAREZ, G.; YOUNI-IDRISSI, M.; DAMAS, A.; EVANS, J.; BROWN, T.: *Cryogenic heat exchangers for process cooling and renewable energy storage: A review*. Applied Thermal Engineering 153 (2019), S. 275–290. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2019.02.106.

PRASAD 1991

PRASAD, B.: *The Performance Prediction of Multistream Plate-Fin Heat Exchangers Based on Stacking Pattern*. Heat Transfer Engineering 12.4 (1991), S. 58–70. ISSN: 0145-7632. DOI: 10.1080/01457639108939764.

PRASAD 1996

PRASAD, B.: *Fin efficiency and mechanisms of heat exchange through fins in multi-stream plate-fin heat exchangers: formulation*. International Journal of Heat and Mass Transfer 39.2 (1996), S. 419–428. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/0017-9310(95)00125-S.

PRASAD 1997

PRASAD, B.: *Fin efficiency and mechanisms of heat exchange through fins in multi-stream plate-fin heat exchangers: development and application of a rating algorithm*. International Journal of Heat and Mass Transfer 40.18 (1997), S. 4279–4288. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/S0017-9310(97)80962-3.

PRASAD & GURUKUL 1987

PRASAD, B.; GURUKUL, S.: *Differential method for sizing multistream plate fin heat exchangers*. Cryogenics 27.5 (1987), S. 257–262. ISSN: 0011-2275. DOI: 10.1016/0011-2275(87)90032-4.

PRASAD & GURUKUL 1992

PRASAD, B.; GURUKUL, S.: *Differential Methods for the Performance Prediction of Multistream Plate-Fin Heat Exchangers*. Journal of Heat Transfer 114.1 (1992), S. 41–49. ISSN: 0022-1481. DOI: 10.1115/1.2911265.

QIAO ET AL. 2013

QIAO, H.; AUTE, V.; LEE, H.; SALEH, K.; RADERMACHER, R.: *A new model for plate heat exchangers with generalized flow configurations and phase change*. International Journal of Refrigeration 36.2 (2013), S. 622–632. ISSN: 0140-7007. DOI: 10.1016/j.ijrefrig.2012.11.020.

RANGANAYAKULU & SEETHARAMU 1997

RANGANAYAKULU, C.; SEETHARAMU, K. N.: *The combined effects of inlet fluid flow and temperature nonuniformity in cross flow plate-fin compact heat exchanger using finite element method*. Heat and Mass Transfer 32.5 (1997), S. 375–383. ISSN: 1432-1181. DOI: 10.1007/s002310050134.

RANGANAYAKULU & SEETHARAMU 1999

RANGANAYAKULU, C.; SEETHARAMU, K. N.: *The combined effects of wall longitudinal heat conduction, inlet fluid flow nonuniformity and temperature nonuniformity in compact tube-fin heat exchangers: a finite element method*. International Journal of Heat and Mass Transfer 42.2 (1999), S. 263–273. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/S0017-9310(98)00156-2.

RANGANAYAKULU & SEETHARAMU 2000

RANGANAYAKULU, C.; SEETHARAMU, K. N.: *The combined effects of wall longitudinal heat conduction and inlet fluid flow maldistribution in crossflow plate-fin heat exchangers*. Heat and Mass Transfer 36.3 (2000), S. 247–256. ISSN: 1432-1181. DOI: 10.1007/s002310050392.

RANGANAYAKULU ET AL. 1996

RANGANAYAKULU, C.; SEETHARAMU, K. N.; SREEVATSAN, K. V.: *The effects of inlet fluid flow nonuniformity on thermal performance and pressure drops in crossflow plate-fin compact heat exchangers*. International Journal of Heat and Mass Transfer 40.1 (1996), S. 27–38. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/S0017-9310(96)00087-7.

ROHSENOW ET AL. 1998

ROHSENOW, W. M.; CHO, Y. I.; HARTNETT, J. P.: *Handbook of heat transfer*. 3rd ed. New York und London: McGraw-Hill, 1998. ISBN: 0070535558.

RÖSSLER ET AL. 2020

RÖSSLER, F.; THOMAS, I.; FREKO, P.; ZANDER, H.-J.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *Dynamic simulation with digital twins of heat exchangers*. AIChE Annual Meeting, Conference Proceedings, 2020-November. (2020).

RÖSSLER ET AL. 2022a

RÖSSLER, F.; FREKO, P.; THOMAS, I.; KENDER, R.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *A modular-hierarchical framework for the pressure-driven simulation of heat exchanger dynamics*. Computers & Chemical Engineering 163 (2022), S. 107821. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2022.107821.

RÖSSLER ET AL. 2022b

RÖSSLER, F.; KRUMOVA, V.; GEWALD, S.; BAUERNFEIND, A.; FREKO, P.; THOMAS, I.; ZANDER, H.-J.; REHFELDT, S.; KLEIN, H.: *Hazard Analysis of Fixed-Tube-Sheet Shell-and-Tube Heat Exchangers*. Chemie Ingenieur Technik 94.5 (2022), S. 727–737. ISSN: 0009-286X. DOI: 10.1002/cite.202100186.

SASS & MITSOS 2019

SASS, S.; MITSOS, A.: *Optimal operation of dynamic (energy) systems: When are quasi-steady models adequate?*: Computers & Chemical Engineering 124 (2019), S. 133–139. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2019.02.011.

SAUER ET AL. 2019

SAUER, A.; ABELE, E.; BUHL, H. U., Hrsg.: *Energieflexibilität in der deutschen Industrie: Ergebnisse aus dem Kopernikus-Projekt - Synchronisierte und energieadaptive Produktionstechnik zur flexiblen Ausrichtung von Industrieprozessen auf eine fluktuierende Energieversorgung - SynErgie*. Stuttgart: Fraunhofer Verlag, 2019. ISBN: 978-3-8396-1479-2.

SCHERER 2010

SCHERER, P. O. J.: *Computational Physics*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2010. ISBN: 978-3-642-13989-5. DOI: 10.1007/978-3-642-13990-1.

SCHMIDT 1967

SCHMIDT, E. F.: *Wärmeübergang und Druckverlust in Rohrschlangen*. Chemie Ingenieur Technik 39.13 (1967), S. 781–789. ISSN: 0009-286X. DOI: 10.1002/cite.330391302.

SCIACOVELLI ET AL. 2017

SCIACOVELLI, A.; VECCHI, A.; DING, Y.: *Liquid air energy storage (LAES) with packed bed cold thermal storage – From component to system level performance through dynamic modelling*. Applied Energy 190 (2017), S. 84–98. ISSN: 03062619. DOI: 10.1016/j.apenergy.2016.12.118.

SEDDIQ & MAEREFAT 2020

SEDDIQ, M.; MAEREFAT, M.: *Analytical solution for heat transfer problem in a cross-flow plate heat exchanger*. International Journal of Heat and Mass Transfer 163 (2020), S. 120410. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120410.

SHAH 1979

SHAH, M. M.: *A general correlation for heat transfer during film condensation inside pipes*. International Journal of Heat and Mass Transfer 22.4 (1979), S. 547–556. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/0017-9310(79)90058-9.

SHAH 2009

SHAH, M. M.: *An Improved and Extended General Correlation for Heat Transfer During Condensation in Plain Tubes*. HVAC&R Research 15.5 (2009), S. 889–913. ISSN: 1078-9669. DOI: 10.1080/10789669.2009.10390871.

SIEDER & TATE 1936

SIEDER, E. N.; TATE, G. E.: *Heat Transfer and Pressure Drop of Liquids in Tubes*. Industrial & Engineering Chemistry 28.12 (1936), S. 1429–1435. ISSN: 0019-7866. DOI: 10.1021/ie50324a027.

SKAUGEN ET AL. 2010

SKAUGEN, G.; GJØVÅG, G. A.; NEKSÅ, P.; WAHL, P. E.: *Use of sophisticated heat exchanger simulation models for investigation of possible design and operational pitfalls in LNG processes*. Journal of Natural Gas Science and Engineering 2.5 (2010), S. 235–243. ISSN: 18755100. DOI: 10.1016/j.jngse.2010.10.003.

SKAUGEN ET AL. 2015

SKAUGEN, G.; HAMMER, M.; GJENNESTAD, M. A.: *Investigation of Non-ideal Behavior of Plate-fin Heat Exchangers in LNG Services*. Energy Procedia 64 (2015), S. 13–22. ISSN: 18766102. DOI: 10.1016/j.egypro.2015.01.004.

SKAUGEN ET AL. 2020

SKAUGEN, G.; BERSTAD, D.; WILHELMSSEN, Ø.: *Comparing exergy losses and evaluating the potential of catalyst-filled plate-fin and spiral-wound heat exchangers in a large-scale Claude hydrogen liquefaction process*. International Journal of Hydrogen Energy 45.11 (2020), S. 6663–6679. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.12.076.

SKAUGEN ET AL. 2013

SKAUGEN, G.; KOLSAKER, K.; WALNUM, H. T.; WILHELMSSEN, Ø.: *A flexible and robust modelling framework for multi-stream heat exchangers*. Computers & Chemical Engineering 49 (2013), S. 95–104. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2012.10.006.

SKOGLUND ET AL. 2006

SKOGLUND, T.; ÅRZÉN, K.-E.; DEJMEK, P.: *Dynamic object-oriented heat exchanger models for simulation of fluid property transitions*. International Journal of Heat and Mass Transfer 49.13-14 (2006), S. 2291–2303. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.12.005.

STEINBAUER & HECHT 1996

STEINBAUER, M.; HECHT, T., Hrsg.: *Optimised Calculation of Helical-Coiled Heat Exchangers in LNG Plants*. 1996.

SUN ET AL. 2019

SUN, H.; HU, H.; DING, G.; CHEN, H.; ZHANG, Z.; WU, C.; WANG, L.: *A general distributed-parameter model for thermal performance of cold box with parallel plate-fin heat exchangers based on graph theory*. Applied Thermal Engineering 148 (2019), S. 478–490. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2018.11.054.

SUNDEN 2010

SUNDEN, B.: *Simulation of compact heat exchanger performance*. International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow 20.5 (2010), S. 551–569. ISSN: 0961-5539. DOI: 10.1108/09615531011048240.

TABOREK ET AL. 1983

TABOREK, J.; HEWITT, G. F.; AFGAN, N. H.: *Heat exchangers: Theory and practice / edited by J. Taborek, G.F. Hewitt, N. Afgan.* Washington und London: Hemisphere, New York und London : McGraw-Hill, 1983. ISBN: 0070628068.

THOMAS ET AL. 2020

THOMAS, I.; WUNDERLICH, B.; GROHMANN, S.: *Pressure-driven dynamic process simulation using a new generic stream object.* Chemical Engineering Science 215 (2020), S. 115171. ISSN: 0009-2509. DOI: 10.1016/j.ces.2019.115171.

TSAY ET AL. 2017

TSAY, C.; PATTISON, R. C.; BALDEA, M.: *Equation-oriented simulation and optimization of process flowsheets incorporating detailed spiral-wound multistream heat exchanger models.* AIChE Journal 63.9 (2017), S. 3778–3789. ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.15705.

ULVESTAD & OVERLAND 2012

ULVESTAD, M.; OVERLAND, I.: *Natural gas and CO2 price variation: impact on the relative cost-efficiency of LNG and pipelines.* The International journal of environmental studies 69.3 (2012), S. 407–426. ISSN: 0020-7233. DOI: 10.1080/00207233.2012.677581.

VAN DOORMAAL & RAITHBY 1984

VAN DOORMAAL, J. P.; RAITHBY, G. D.: *ENHANCEMENTS OF THE SIMPLE METHOD FOR PREDICTING INCOMPRESSIBLE FLUID FLOWS.* Numerical Heat Transfer 7.2 (1984), S. 147–163. ISSN: 0149-5720. DOI: 10.1080/01495728408961817.

VAUPEL ET AL. 2019

VAUPEL, Y.; HUSTER, W. R.; HOLTORF, F.; MHAMDI, A.; MITSOS, A.: *Analysis and improvement of dynamic heat exchanger models for nominal and start-up operation.* Energy 169 (2019), S. 1191–1201. ISSN: 03605442. DOI: 10.1016/j.energy.2018.12.048.

VDI 2013

VDI: *VDI-Wärmeatlas.* 11. bearb. und erw. Aufl. VDI-Buch. Berlin: Springer Vieweg, 2013. ISBN: 978-3-642-19980-6.

VIKSE ET AL. 2018

VIKSE, M.; WATSON, H. A. J.; GUNDERSEN, T.; BARTON, P. I.: *Versatile Simulation Method for Complex Single Mixed Refrigerant Natural Gas Liquefaction Processes.* Industrial & Engineering Chemistry Research 57.17 (2018), S. 5881–5894. ISSN: 0888-5885. DOI: 10.1021/acs.iecr.7b04131.

WANG & SUNDÉN 2001

WANG, L.; SUNDÉN, B.: *Design Methodology for Multistream Plate-Fin Heat Exchangers in Heat Exchanger Networks.* Heat Transfer Engineering 22.6 (2001), S. 3–11. ISSN: 0145-7632. DOI: 10.1080/014576301317048398.

WANG ET AL. 2015

WANG, T.; DING, G.; DUAN, Z.; REN, T.; CHEN, J.; PU, H.: *A distributed-parameter model for LNG spiral wound heat exchanger based on graph theory*. Applied Thermal Engineering 81 (2015), S. 102–113. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2015.02.020.

WATSON ET AL. 2015

WATSON, H. A. J.; KHAN, K. A.; BARTON, P. I.: *Multistream heat exchanger modeling and design*. AIChE Journal 61.10 (2015), S. 3390–3403. ISSN: 00011541. DOI: 10.1002/aic.14965.

WATSON & BARTON 2017

WATSON, H. A.; BARTON, P. I.: *Modeling phase changes in multistream heat exchangers*. International Journal of Heat and Mass Transfer 105 (2017), S. 207–219. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.09.081.

WATSON ET AL. 2018

WATSON, H. A.; VIKSE, M.; GUNDERSEN, T.; BARTON, P. I.: *Optimization of single mixed-refrigerant natural gas liquefaction processes described by nondifferentiable models*. Energy 150 (2018), S. 860–876. ISSN: 03605442. DOI: 10.1016/j.energy.2018.03.013.

WAYBURN & SEADER 1987

WAYBURN, T. L.; SEADER, J. D.: *Homotopy continuation methods for computer-aided process design*. Computers & Chemical Engineering 11.1 (1987), S. 7–25. ISSN: 00981354. DOI: 10.1016/0098-1354(87)80002-9.

WEIKL ET AL. 2014

WEIKL, M. C.; BRAUN, K.; WEISS, J.: *Coil-wound Heat Exchangers for Molten Salt Applications*. Energy Procedia 49 (2014), S. 1054–1060. ISSN: 18766102. DOI: 10.1016/j.egypro.2014.03.113.

WEINAUG & KATZ 1943

WEINAUG, C. F.; KATZ, D. L.: *Surface Tensions of Methane-Propane Mixtures*. Industrial & Engineering Chemistry 35.2 (1943), S. 239–246. ISSN: 0019-7866. DOI: 10.1021/ie50398a028.

WUNDERLICH 2018

WUNDERLICH, B.: *Entwicklung eines druckgetriebenen dynamischen Kolonnenmodells zur Erhöhung der Flexibilität von kryogenen Luftzerlegungsanlagen*. 2018. DOI: 10.5445/KSP/1000080378.

XU ET AL. 2017

XU, J.-h.; CHEN, X.-j.; ZHANG, S.-y.; CHEN, Q.-y.; GOU, H.-w.; TAN, J.-r.: *Thermal design of large plate-fin heat exchanger for cryogenic air separation unit based on multiple dynamic equilibriums*. Applied Thermal Engineering 113 (2017), S. 774–790. ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2016.10.177.

XUAN ET AL. 2006

XUAN, S.; AUTE, V.; RADERMACHER, R.: *Generic Dynamic Model for Heat Exchangers*. Computer Science (2006).

YANXING ET AL. 2019

YANXING, Z.; MAOQIONG, G.; YUAN, Z.; XUEQIANG, D.; JUN, S.: *Thermodynamics analysis of hydrogen storage based on compressed gaseous hydrogen, liquid hydrogen and cryo-compressed hydrogen*. International Journal of Hydrogen Energy 44.31 (2019), S. 16833–16840. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.04.207.

YEBRA ET AL. 2005

YEBRA, L. J.; BERENGUEL, M.; DORMIDO, S.: *EXTENDED MOVING BOUNDARY MODEL FOR TWO-PHASE FLOWS*. IFAC Proceedings Volumes 38.1 (2005), S. 368–373. ISSN: 14746670. DOI: 10.3182/20050703-6-CZ-1902.00062.

ZALESKI 1984

ZALESKI, T.: *A general mathematical model of parallel-flow, multichannel heat exchangers and analysis of its properties*. Chemical Engineering Science 39.7-8 (1984), S. 1251–1260. ISSN: 0009-2509. DOI: 10.1016/0009-2509(84)85086-1.

ZARGOUSHI ET AL. 2020

ZARGOUSHI, A.; TALEBI, F.; HOSSEINI, S. H.: *CFD modeling of industrial cold box with plate-fin heat exchanger: Focusing on phase change phenomenon*. International Journal of Heat and Mass Transfer 147 (2020), S. 118936. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118936.

ZAVERSKY ET AL. 2014

ZAVERSKY, F.; SÁNCHEZ, M.; ASTRAIN, D.: *Object-oriented modeling for the transient response simulation of multi-pass shell-and-tube heat exchangers as applied in active indirect thermal energy storage systems for concentrated solar power*. Energy 65 (2014), S. 647–664. ISSN: 03605442. DOI: 10.1016/j.energy.2013.11.070.

ZHANG ET AL. 2010

ZHANG, L.; YANG, C.; ZHOU, J.: *A distributed parameter model and its application in optimizing the plate-fin heat exchanger based on the minimum entropy generation*. International Journal of Thermal Sciences 49.8 (2010), S. 1427–1436. ISSN: 12900729. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2010.02.008.

ZHANG & ZHANG 2006

ZHANG, W.-J.; ZHANG, C.-L.: *A generalized moving-boundary model for transient simulation of dry-expansion evaporators under larger disturbances*. International Journal of Refrigeration 29.7 (2006), S. 1119–1127. ISSN: 0140-7007. DOI: 10.1016/j.ijrefrig.2006.03.002.

ZHANG ET AL. 2017

ZHANG, Z.; MEHENDALE, S.; TIAN, J.; LI, Y.: *Experimental investigation of two-phase flow distribution in plate-fin heat exchangers*. Chemical Engineering Research and Design 120 (2017), S. 34–46. ISSN: 02638762. DOI: 10.1016/j.cherd.2017.02.003.

ZHAO & LI 2013

ZHAO, M.; LI, Y.: *An effective layer pattern optimization model for multi-stream plate-fin heat exchanger using genetic algorithm*. International Journal of Heat and Mass Transfer 60 (2013), S. 480–489. ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.12.041.