

Simulation alternativer Verfahren zur Trennung leichter Spaltgase in der Ethylenerzeugung

Gerald Anton Ertl-Feyel, BSc

Graz, März 2014

Gerald Anton Ertl-Feyel, BSc

Simulation alternativer Verfahren zur Trennung leichter Spaltgase in der Ethylenherzeugung

Masterarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades eines

Diplom-Ingenieur

in

Verfahrenstechnik

eingereicht an der

Technischen Universität Graz

Betreuer:

Dipl.-Ing. Dr.techn. Thomas Wallek

Dipl.-Ing. Martin Schmid

Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik

Graz, März 2014

Masterarbeit
für
Herrn Gerald Anton Ertl-Feyel, BSc

Simulation alternativer Verfahren zur Trennung leichter Spaltgase in
der Ethylenherzeugung

Aufgabenstellung

Die Trennung leichter Spaltgase (Wasserstoff, Methan, Ethan, Ethen) im Tieftemperaturteil der Ethenanlage Schwechat ist aufgrund des Bedarfs an tiefen Temperaturen, die u.a. durch den Betrieb einer Ethenkälteanlage bereitgestellt werden, energieintensiv. Der hohe Leistungsbedarf des Turbokompressors der Kälteanlage wird durch Dampf aus der Hochdruckschiene gedeckt. Der in der Ethenanlage zur Verfügung stehende Hochdruckdampf (HD-Dampf) reicht dafür aber insgesamt nicht aus, somit muss HD-Dampf importiert werden.

Dieser Import soll durch Minimierung des Leistungsbedarfs im Tieftemperaturteil reduziert werden. Aus diesem Grund ist in dieser Arbeit das energetische Optimierungspotential des Tieftemperaturteils der Ethenanlage Schwechat zu erheben.

Dazu sind im Tieftemperaturteil Modifikationen vorzunehmen. In vorangegangenen Arbeiten wurden Membran- und Adsorptionstrennverfahren als alternative Trennverfahren zur Anwendung im Tieftemperaturteil untersucht. Die Aufgabe dieser Arbeit besteht darin, auf Basis der vorangegangenen Studien, die dort untersuchten Trennverfahren in die Anlagensimulation in KBC Petro-SIM[®] zu implementieren und zu analysieren. Optimierungsmöglichkeiten der vorhandenen Verfahrenskonfiguration sollen ebenso berücksichtigt werden.

Die Modellierung alternativer Trennverfahren erfolgt über vorhandene Programme in MATLAB[®], Angaben zu Prozessdaten aus KBC Petro-SIM[®] sind dafür notwendig. Daraus ergibt sich als weitere Aufgabe eine Kommunikation zwischen MATLAB[®] und KBC Petro-

SIM[®] durch Anwendung einer Schnittstelle herzustellen und den Datentransfer zu automatisieren.

Die vorgenommenen Modifikationen des Tieftemperaturteils sind in der Arbeit zu dokumentieren und zu beschreiben.

Die Ergebnisse aus den Modifikationen des Tieftemperaturteils sind so aufzubereiten und zu analysieren, dass eine Beurteilung des Optimierungspotentials möglich ist.

Deutsche Fassung:

Beschluss der Curricula-Kommission für Bachelor-, Master- und Diplomstudien vom 10.11.2008

Genehmigung des Senates am 1.12.2008

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Graz, am

.....

(Unterschrift)

Englische Fassung:

STATUTORY DECLARATION

I declare that I have authored this thesis independently, that I have not used other than the declared sources / resources, and that I have explicitly marked all material which has been quoted either literally or by content from the used sources.

Graz,

.....

date

(signature)

Kurzfassung

Im Tieftemperaturteil der Ethenanlage Schwechat werden die leichten Spaltgase Wasserstoff, Methan, Ethan und Ethen getrennt. Wasserstoff wird dabei gasförmig durch Kondensation der C-Fraktion (CH_4 , C_2H_4 , C_2H_6) gewonnen und die weitere Auftrennung der C-Fraktion erfolgt über Tieftemperaturrektifikation. Zur Bereitstellung tiefer Temperaturen werden zwei Kältekreisläufe betrieben. Ein Kältekreislauf führt dabei Propen und ein anderer Ethen auf verschiedenen Druckstufen als Kältemittel. Der Propenkältekreislauf ist über die Turbine eines dreistufigen Turbokompressors an den Dampf der Mitteldruckschiene (MD-Dampf) und der Ethenkältekreislauf über die Turbine eines vierstufigen Turbokompressors an den Dampf der Hochdruckschiene (HD-Dampf) gekoppelt. Die thermische Verdichtungsleistung im Ethenverdichter bestimmt die Menge an HD-Dampf, die der Turbine zuzuführen ist. Die Reduktion des Bedarfs an HD-Dampf im Tieftemperaturteil stellt die Motivation dieser Arbeit dar.

In dieser Arbeit wurde das energetische Optimierungspotential des Tieftemperaturteils durch den Einsatz zweier alternativer Trennverfahren und durch Modifikation der Prozessführung unter Beibehaltung des Trennprinzips erhoben. Dazu wurden verschiedene Modifikationen des Tieftemperaturteils in KBC Petro-SIM[®] simuliert. Der Hochdruckdampf stellte dabei das wichtigste Vergleichskriterium der betrachteten Prozessvarianten dar.

In einem ersten Ansatz zur Minimierung des Bedarfs an HD-Dampf wurden Zwischenkühlungen im Turbokompressor des Ethenkältekreislaufes installiert. Die Kälteleistung wurde dabei aus verschiedenen Druckstufen des Propenkältekreislaufes bezogen. Zur Optimierung des Energiebedarfs wurde ein zusätzlicher Kältekreislauf, in dem Isobutan als Kältemittel geführt wird, implementiert.

Auf Basis vorangegangener Arbeiten war zunächst als alternatives Trennverfahren die Implementierung einer Membran mit Wirkprinzip Gaspermeation zur Trennung von Ethan und Ethen vorgesehen. Aus ergänzenden Untersuchungen zu diesen Arbeiten ergab sich statt des Einsatzes dieser Membran die Verwendung eines Membrankontaktors mit und ohne nachgeschalteter Rektifikationskolonne. Weiterführend wurden diese Simulationen mit Zwischenkühlungen kombiniert.

Als zweites alternatives Trennverfahren wurde ein Adsorptionsprozess simuliert. In früheren Arbeiten wurden geeignete Spaltgaszusammensetzungen für die Simulation des

kontinuierlichen Adsorptionsprozesses ausgewählt. Der Tieftemperaturteil wurde basierend auf dieser Auswahl überarbeitet. Durch Nutzung einer ActiveX-Schnittstelle konnte die Simulation des Adsorptionsprozesses, der in MATLAB[®] mit einem bestehenden Algorithmus modelliert wurde, über MATLAB[®] in Kommunikation mit KBC Petro-SIM[®] realisiert werden.

Die Installation von Zwischenkühlungen und der Einsatz des Membrankontaktors ohne und mit nachgeschalteter Rektifikationskolonne führten zu vermindertem Bedarf an HD-Dampf. In den Simulationen, in denen eine Zwischenkühlung verwendet wurde, leistete diese mit einer Ausnahme den größten Beitrag an der Reduktion. Der Einsatz von Zwischenkühlungen sowie die Verwendung des Membrankontaktors mit nachgeschalteter Rektifikation führten zur Reduzierung des Exportes von MD-Dampf. Durch die Aufteilung der Kühllast auf den Isobutan- und Propenkältekreislauf konnte diese Reduktion verringert werden.

Die Implementierung des Adsorptionsprozesses zeigte, dass weitere Untersuchungen der Zyklusparameter und Modifikationen des Algorithmus zur Beurteilung notwendig sind. Die Verfahrenssimulationen können daher erst im Rahmen dieser Arbeit nachfolgender Untersuchungen abgeschlossen werden. Allein durch die zum Einsatz des Adsorptionsprozesses erforderlichen Modifikationen des Tieftemperaturteils in der Verfahrenssimulation ergaben sich in allen Fällen höhere aufzubringende Leistungen als im Referenzfall.

Abstract

The cold section separates the light cracked gases hydrogen, methane, ethane and ethene. To get hydrogen as a pure component in vapor state the C-fraction (CH_4 , C_2H_4 and C_2H_6) is condensed. In the following processes the C-fraction is separated by using low temperature rectification. There are two refrigeration circuits for the production of low temperatures. One circuit contains propene and the other ethene, both at different pressure levels. The turbine of the turbo compressor of the propene refrigeration circuit is connected to medium pressure steam and the turbine of the turbo compressor of the ethene refrigeration circuit is connected to high pressure steam. The import of high pressure steam is caused by the ethene compression in the ethene turbo compressor. The minimization of the high pressure steam demand is the motivation of this work.

The aim of this work was to discuss the energetic improvement of the cold section of the ethene plant by using two alternative separating processes and modifying the existing process. Therefore different modifications of the cold section were simulated in KBC Petro-SIM[®]. The most important criterion was the import of high pressure steam.

To minimize the high pressure steam demand of the cold section intermediate cooling systems were installed in the turbo compressor of the ethene refrigerant circuit. The provided temperatures of the propene refrigerant circuit were used to discharge the cooling load. For further optimization an additional refrigerant circuit processing isobutane as refrigerant medium was implemented.

Based on previous studies the implementation of a membrane to separate ethane and ethene using gas permeation was considered. After further investigations of these studies it was decided to use a membrane contactor instead of the gas permeation membrane. The membrane contactor was installed with and without a rectification column as a downstream unit. Furthermore the membrane contactor was combined with intercooling systems.

Another alternative separation method was the adsorption process. As a result of previous papers different cracked gas mixtures were chosen for the simulation of the continuous adsorption process. The cold section was revised based on this choice. The adsorption process simulated in MATLAB[®] was successfully linked to KBC Petro-SIM[®] using an ActiveX-Interface.

Both the intermediate cooling and the membrane contactor with and without a downstream rectification resulted in a reduced import of high pressure steam. In the simulations where intermediate cooling was applied, the cooling made the major contribution to the reduction of high pressure steam (with one exception). The use of the intermediate cooling as well as the membrane contactor with downstream rectification resulted in the reduction of the exported medium pressure steam. This reduction could be decreased by the distribution of the cooling load among the isobutane and propene refrigerant circuit.

The implementation of the adsorption process revealed the need of further investigations of the adsorption algorithm to come to conclusions. Therefore the process simulations are to be finished in studies subsequent to this work. However, the rearrangements required in the cold section to simulate the adsorption process resulted in a higher power demand compared to the reference case.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung.....	1
2	Ausgangssituation und Aufgabenstellung.....	2
2.1	Aufgabenstellung der Arbeit	8
3	Modifikation des Ethenverdichters durch Zwischenkühlung.....	9
3.1	Untersuchung von Zwischenkühlungen im Ethenverdichter.....	9
3.1.1	Möglichkeiten des Kältebezugs:	13
3.2	Zwischenkühlungen.....	14
3.2.1	Überblick.....	14
3.3	Simulation von Zwischenkühlungen	16
3.3.1	Zwischenkühlung 1 (Simulation 1).....	17
3.3.2	Zwischenkühlung 2 (Simulation 4).....	17
3.3.3	Zwischenkühlung 3 (Simulation 7).....	18
3.3.4	Diskussion und Schlussfolgerungen für die Zwischenkühlung mit Propen und Kühlwasser	19
3.3.5	Zwischenkühlungen 4 (Simulation 5) und 5 (Simulation 6).....	21
3.3.6	Zwischenkühlungen 6 (Simulation 2) und 7 (Simulation 3).....	22
3.3.7	Zwischenkühlungen 8 (Simulation 8) und 9 (Simulation 9).....	23
3.4	Auswertung und Beurteilung der Zwischenkühlungen	24
3.4.1	Beurteilung anhand der Produktströme.....	24
3.4.2	Beurteilung anhand der Recovery und der Reinheit	25
3.4.3	Beurteilung anhand des energetischen Optimierungspotentials.....	25
3.4.4	HD-Dampf Import im Detail.....	29
4	Membranverfahren	33
4.1	Diskussion der zur Simulation vorgelegten Membran	33
4.2	Verwendung eines alternativen Membranverfahrens	33
4.2.1	Spezifizierung des Splitters:.....	34

4.2.2	Implementierung in die Simulation.....	37
4.3	Variante 1: Membrankontaktor (Simulation 10).....	38
4.4	Variante 2: Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikation (Simulation 14).....	42
4.5	Weitere Untersuchungen der Membranverfahren	44
4.6	Auswertung und Beurteilung der Membrankontaktorvarianten	45
4.6.1	Beurteilung anhand der Produktströme.....	45
4.6.2	Beurteilung anhand von Recovery und Reinheit.....	46
4.6.3	Die Varianten im Vergleich	47
4.6.4	Beurteilung der Kontaktorvarianten anhand des energetischen Optimierungspotentials	48
4.6.5	Differenzierte Betrachtung des energetischen Optimierungspotentials des Kontaktors anhand HD-Dampf Import	50
4.6.6	Weiterführende Überlegungen	51
4.6.7	Schlussfolgerungen	54
5	Gegenüberstellung des Optimierungspotentials bisher untersuchter Modifikationen	57
6	Adsorptionsverfahren	61
6.1	Implementierung der Adsorption.....	64
6.2	Adsorptionssystem bei Anwendung auf Feed 6	67
6.2.1	Verfahrensführung bei Einbau eines Adsorbersystems für Feed 6	67
6.2.2	Erzeugte Verfahrensfließbilder in KBC Petro-SIM [®]	72
6.2.3	Vorläufige Schlussfolgerungen	73
6.3	Adsorptionssystem bei Anwendung auf Feed 3	73
6.3.1	Verfahrensführung bei Einbau eines Adsorbersystems für Feed 3	74
6.3.2	Vorläufige Schlussfolgerungen und Anmerkungen	79
6.4	Adsorptionssystem bei Anwendung auf Feed 1	80
6.4.1	Verfahrensführung bei Einbau eines Adsorbersystems für Feed 1	80
6.5	Schlussfolgerungen für die Adsorption	82
7	Zusammenfassung	84

8	Ausblick	87
9	Literaturverzeichnis.....	90
10	Symbolverzeichnis	91
11	Abbildungsverzeichnis	93
12	Tabellenverzeichnis.....	97
13	Anhang	100
13.1	Modelleinschränkungen bei Membrankontaktoren	100
13.2	Annahme von Wirkungsgraden und Wirkungsgradbereinigung	104
13.3	Berechnung der Sättigungsdampfdruckkurven.....	113
13.4	Thermodynamische Methode nach Peng-Robinson (PR).....	114
13.5	Einzelauswertungen und Darstellung des Einflusses der Wahl des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import.....	116
13.5.1	Zwischenkühlung 1 (Sim1)	116
13.5.2	Zwischenkühlung 2 (Sim4)	118
13.5.3	Zwischenkühlung 3 (Sim7)	121
13.5.4	Zwischenkühlung 4 (Sim5)	123
13.5.5	Zwischenkühlung 5 (Sim6)	126
13.5.6	Zwischenkühlung 6 (Sim2)	129
13.5.7	Zwischenkühlung 7 (Sim3)	131
13.5.8	Zwischenkühlung 8 (Sim8)	134
13.5.9	Zwischenkühlung 9 (Sim9)	137
13.5.10	Membrankontaktor, Variante 1 (Sim10)	139
13.5.11	Membrankontaktor, Variante 1 mit Zwischenkühlung (Sim11)	143
13.5.12	Membrankontaktor, Variante 1 mit Zwischenkühlung (Sim12)	147
13.5.13	Membrankontaktor, Variante 1 mit Zwischenkühlung (Sim13)	151
13.5.14	Membrankontaktor, Variante 2 (Sim14)	155
13.5.15	Membrankontaktor, Variante 2 mit Zwischenkühlung (Sim15)	159

13.5.16	Membrankontaktor, Variante 2 mit Zwischenkühlung (Sim16)	162
13.5.17	Membrankontaktor, Variante 2 mit Zwischenkühlung (Sim17)	166
13.6	Dokumentation der ActiveX-Schnittstelle	170
13.7	MATLAB [®] -Programm (exemplarisch für Feed 6, Kapitel 6.2)	175

1 Einführung

In Raffinerien wird neben Flüssiggas, Heizöl und Diesel auch Rohbenzin, sogenanntes Naphta, fraktioniert, das als Rohstoff zur Erzeugung von Ethen verwendet wird. [1]

In der chemischen Industrie ist Ethen mit einer weltweiten Produktion von 141 Millionen Tonnen im Jahr 2011 [2] eine wichtige Grundchemikalie. Zur Herstellung von Ethen aus dem Einsatz von Naphta werden in den Raffinerien Spaltöfen („Steamcracker“) betrieben. Aus den in den Spaltöfen erzeugten Spaltgasen werden in darauf folgenden unterschiedlichen Verfahrensstufen Produkte wie Propen, Propan, Pyrolysebenzin und Ethen gewonnen. Die Prozesse der jeweiligen Verfahrensstufe zur Gewinnung dieser Produkte können dabei in besonderem Maße energieintensiv sein. Das Produkt Ethen wird im Tieftemperaturteil der Ethenanlage aus den Spaltgasen gewonnen. Die in den Tieftemperaturteil eintretenden Spaltgase bestehen überwiegend aus den Komponenten Wasserstoff, Methan, Ethan und Ethen. Neben dem Exportprodukt Ethen (Mindestreinheit 98 vol% [2]) werden im Tieftemperaturteil auch Wasserstoff (Mindestreinheit 85 vol% [2]), Ethan und Methan gewonnen. Wasserstoff wird dabei für Hydrierungsprozesse in der Anlage und Methan als Energieträger zur Befeuerung der Spaltöfen verwendet. Ethan wird wiederum als Einsatzstoff in den Spaltöfen rückgeführt.

Die Trennung der leichten Spaltgase, die in den Tieftemperaturteil der Ethenanlage eintreten, erfolgt mittels Kondensation und Tieftemperaturrektifikation. Das erfordert eine hohe Energiebereitstellung und die Anlagenrentabilität wird dadurch belastet.

Daraus ergibt sich für den Tieftemperaturteil die Forderung nach Maximierung der Anlagenrentabilität durch Minimierung des Energieeinsatzes unter Einhaltung der geforderten Produktspezifikationen.

Die Untersuchung von Möglichkeiten zur Erfüllung dieser Forderung ist Motivation und Grundlage dieser Arbeit.

2 Ausgangssituation und Aufgabenstellung

Um zunächst einen Überblick der Ausgangslage zu erhalten, wird in diesem Kapitel der Verfahrensablauf vom Spaltprozess bis hin zur Gewinnung der Komponenten Wasserstoff, Methan, Ethen und Ethan aus den Spaltgasen, deren Verwendung und Spezifikationen skizziert. Der Einsatz von Tieftemperaturprozessen zur Gewinnung dieser Komponenten wird begründet und der Tieftemperaturteil der Ethenanlage als energieintensiver Teil der Anlage ausgewiesen. Die Forderung nach Maximierung der Anlagenrentabilität durch Minimierung des Energieeinsatzes im Tieftemperaturteil wird aufgestellt, eine Zieldefinition daraus abgeleitet und die bereits getätigten Schritte zur Erfüllung der Forderung dargelegt. Auf Basis der beschriebenen Ausgangssituation wird am Ende des Kapitels die Aufgabenstellung dieser Arbeit formuliert.

Das Verfahren

Das Naphta wird in die Spaltöfen geführt. Dort wird es vorgewärmt und mit heißem Wasserdampf vermischt. Das Gemisch wird anschließend auf eine Temperatur zwischen 800°C und 880°C [3] erwärmt. Dabei laufen Spaltprozesse („Cracken“) ab. Die Abwärme der Spaltöfen wird zur Erzeugung von Hochdruckdampf verwendet, der wiederum anlagenintern genutzt wird, z.B. zum Betreiben von Turbokompressoren. Nach dem Spaltprozess erfolgt das Quenchen. In diesem Prozess werden die heißen Spaltgase durch das Einspritzen von Ölen innerhalb kürzester Zeit abgekühlt (auf ca. 210°C). Dadurch wird eine Weiterreaktion der Moleküle verhindert, die Reaktion wird sozusagen eingefroren.

In diesem Zustand enthält das Gas hohe Anteile an Ethen, Ethan, Methan, Wasserstoff, Propen und viele weitere Kohlenwasserstoffe. Diese Komponenten werden in weiteren Schritten getrennt. Höhersiedende Pyrolyseöle, Prozesswasser und Teile des Pyrolysebenzins scheiden sich durch stufenweise Abkühlung in Waschkolonnen ab. Störende Verunreinigungen, insbesondere Kohlenstoffdioxid und Schwefelwasserstoff, werden durch eine Wäsche mit Natronlauge entfernt [1]. Im Anschluss werden die Spaltgase auf ca. 35 bar verdichtet (Spaltgaskompression). Nach der Spaltgaskompression wird das Gasgemisch durch aufeinanderfolgende Rektifikationen in die Einzelverbindungen getrennt. Zunächst findet eine Teilung in zwei Fraktionen statt, die C2-Fraktion, die größtenteils aus Ethen, und die C3(+)-Fraktion (enthält C3 und schwerer), die größtenteils aus Propen besteht. Aus der C3(+)-

Fraktion wird in einem weiteren Verfahrensschritt der C4-Schnitt gewonnen. Dieser besteht überwiegend aus ungesättigten Verbindungen mit vier C-Atomen [1].

Der nächste Verfahrensschritt besteht aus Tieftemperaturprozessen, die im Tieftemperaturteil der Anlage durchgeführt werden (in Abb. 2-1 grün markiert). Im Tieftemperaturteil der Anlage werden durch Abkühlung auf ca. -160°C alle C1- und C2-Verbindungen auskondensiert. Der Wasserstoff wird dabei gasförmig gewonnen und für Hydrierungsprozesse verwendet. Die Reinheit des Wasserstoffs ist mit mindestens 85 vol% vorgegeben. Das Methan wird von der C2-Fraktion mittels Tieftemperatur-Rektifikation getrennt und als Heizgas für die Spaltöfen verwendet. Reinheitsanforderungen an das Methan gibt es dabei nicht. Jedoch können Verunreinigungen den Heizwert senken sowie die Ausbeute an anderen Komponenten mindern.

Das nun vorhandene Gemisch aus Ethan und Ethen wird in einer weiteren Tieftemperatur-Rektifikation getrennt. Dem Ethen ist dabei eine Mindestreinheit von 98 vol% vorgegeben, Ethan hat keine Reinheitsvorgaben. Das Ethen wird einem offenen Ethenkältekreislauf übergeben. Nach Abzug des Ethenstroms, den der Kältekreislauf benötigt, wird das Ethen über Pipeline direkt an den Kunden abgegeben. Das Ethan wird wieder in den Spaltöfen rückgeführt. Ist der Ethanstrom mit Ethen verunreinigt, so wird dieses im Anlagenkreis geführt und mindert dadurch den Anlagenwirkungsgrad.

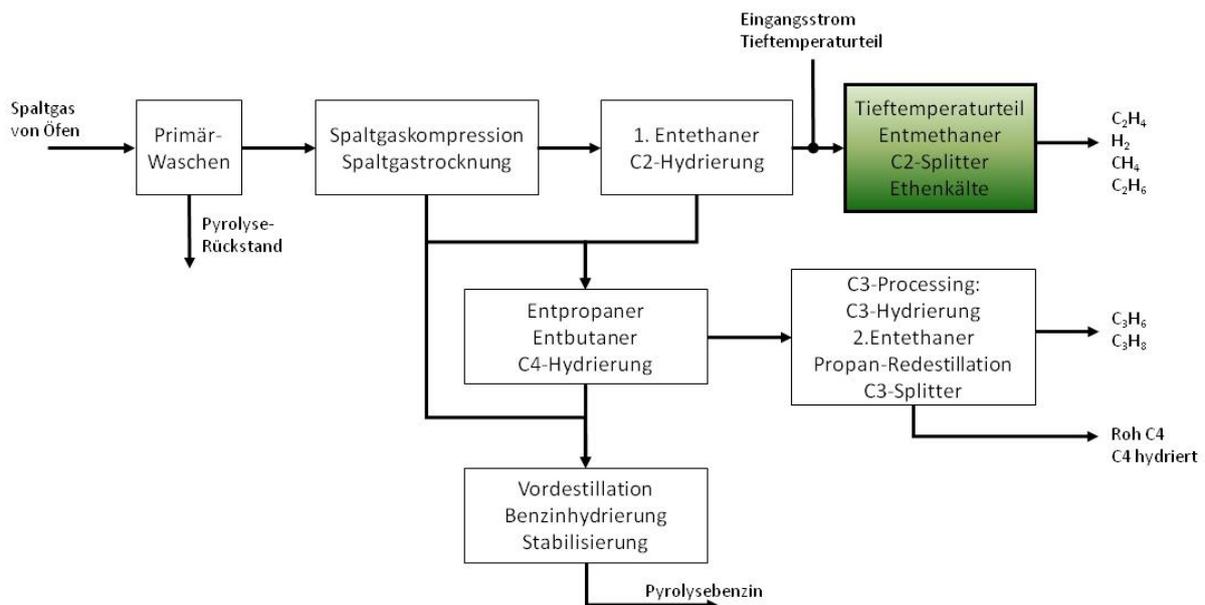


Abb. 2-1: Schema des Verfahrensablaufes der Behandlung der Spaltgase in der Ethenanlage

Die im Zuge vorangegangener Arbeiten erstellte Potentialanalyse weist den Tieftemperaturteil als wichtigen Untersuchungsgegenstand aus, dessen energetisches Optimierungspotential u.a. durch den Einsatz alternativer Trennverfahren in dieser Arbeit erhoben wird.

Begründung des hohen Energieeinsatzes im Tieftemperaturteil

Im Tieftemperaturteil der Ethenanlage werden die als Gasmisch eintretenden Spaltgase in die Komponenten Wasserstoff, Methan, Ethen und Ethan getrennt (die restlichen enthaltenen Spaltgaskomponenten haben einen Anteil von 0,33 mol% und werden in dieser Arbeit nicht berücksichtigt).

Die Trennung erfolgt zunächst durch schrittweises Auskondensieren der C1- und C2-Komponenten durch Kühlung auf ca. -160°C . Die Trennung von Methan von der C2-Fraktion sowie die weitere Trennung von Ethen und Ethan erfolgt mittels Tieftemperatur-Rektifikation.

Kondensation tritt ein, wenn bei vorhandenem Druck (bzw. Partialdruck) durch Abkühlung der Taupunkt erreicht wird. Die Spaltgaskomponenten beginnen, selbst bei höheren Partialdrücken, erst bei niedrigen Temperaturen zu kondensieren (siehe Abb. 2-2).

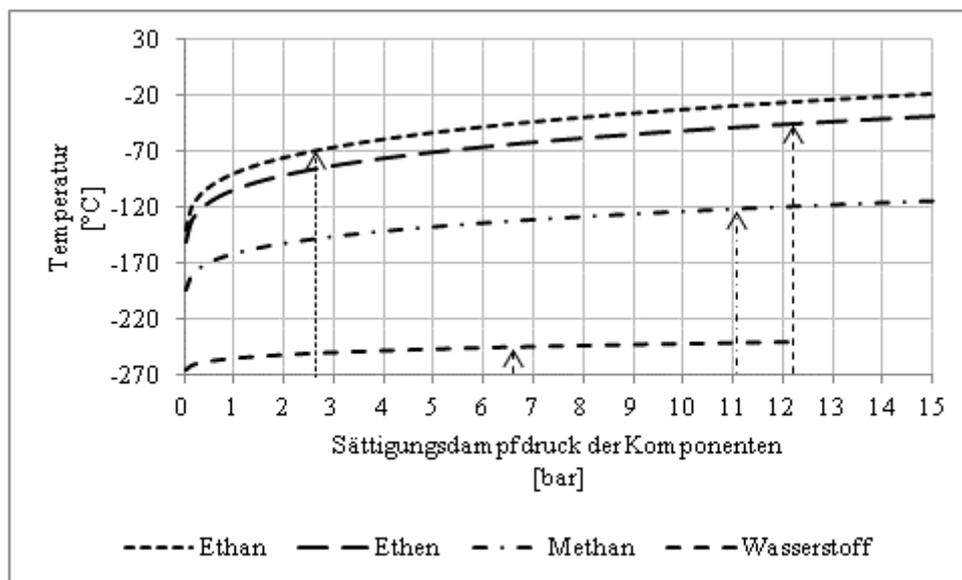


Abb. 2-2: Dampfdruckkurven der in den Tieftemperaturteil eintretenden Spaltgase mit ihren Partialdrücken (Berechnung über erweiterte Antoine-Gleichung, siehe 13.3)

Die Zusammensetzung des Eingangsstroms des Tieftemperaturteils der Anlage und den Systemdruck zu Grunde gelegt (siehe Tab. 2-1), ergeben sich bei idealer Betrachtung durch Anwendung des Gesetzes nach Dalton die Pfeildarstellungen in Abb. 2-2, die den jeweiligen Partialdruck der Spaltgaskomponente im Gemisch darstellen. Demnach ist Ethen mit einem

Partialdruck von ca. 12 bar jene Komponente, die ab einer Temperatur von ca. -70°C als erste zu kondensieren beginnt. Bei konstant bleibendem Systemdruck nehmen die Partialdrücke der übrigen Komponenten mit zunehmender Abscheidung der anderen zu. Mit zunehmendem Partialdruck steigt auch die Temperatur, bei der Kondensation eintritt.

Eingangsstrom	Temperatur	Systemdruck	Molenstrom
gasförmig	$[\text{C}^{\circ}]$	[bar]	[kmol/h]
	-39,05	32,53	5746
Molanteil			
[-]			
Wasserstoff	Methan	Ethen	Ethan
0,2017	0,3401	0,3741	0,0808

Tab. 2-1: Spezifikationen des Eingangsstroms in den Tieftemperaturteil der Ethenanlage

Im Tieftemperaturteil erfolgt die Gewinnung des Wasserstoffs durch Kühlung des Gasgemisches.

Die Spaltgase treten bei einem Systemdruck von 32,53 bar [4] in den Tieftemperaturteil ein. Die Kühlung bis zur Gewinnung des gasförmigen Wasserstoffs findet dabei in mehreren Stufen statt. Die Simulation in Abb. 2-3 wird bei 32,53 bar und in einem Temperaturbereich von -40°C bis -180°C durchgeführt, um die temperaturabhängige Abscheidung der einzelnen Komponenten darzustellen (Abb. 2-4)

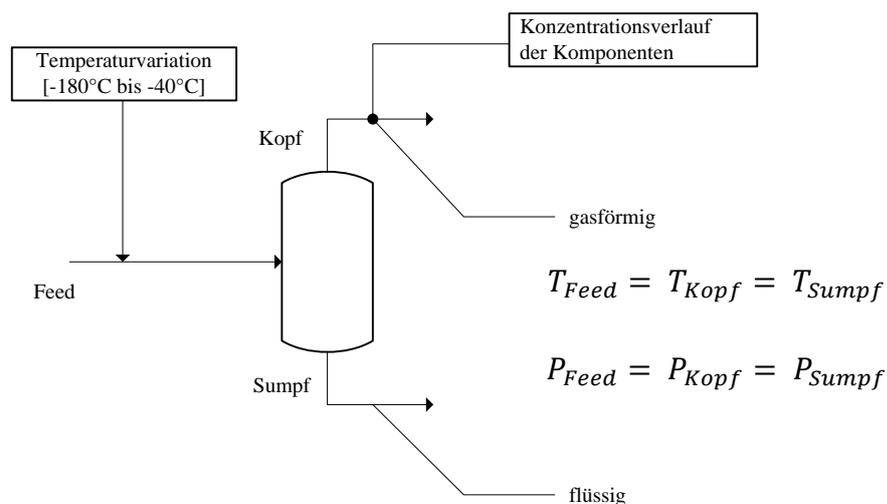


Abb. 2-3: Simulation des Kühlprozesses zur Abtrennung von Wasserstoff durch Auskondensieren der C1- und C2-Komponenten

Aus Abb. 2-4 ist zu erkennen, dass Ethan beim Erreichen einer Temperatur von ca. -100°C vollständig auskondensiert vorliegt. Ethen ist in der Gasphase ab einer Temperatur von ca. -130°C nicht mehr vorhanden und Methan scheidet ab einer Temperatur von ca. -170°C vollständig aus der Gasphase aus.

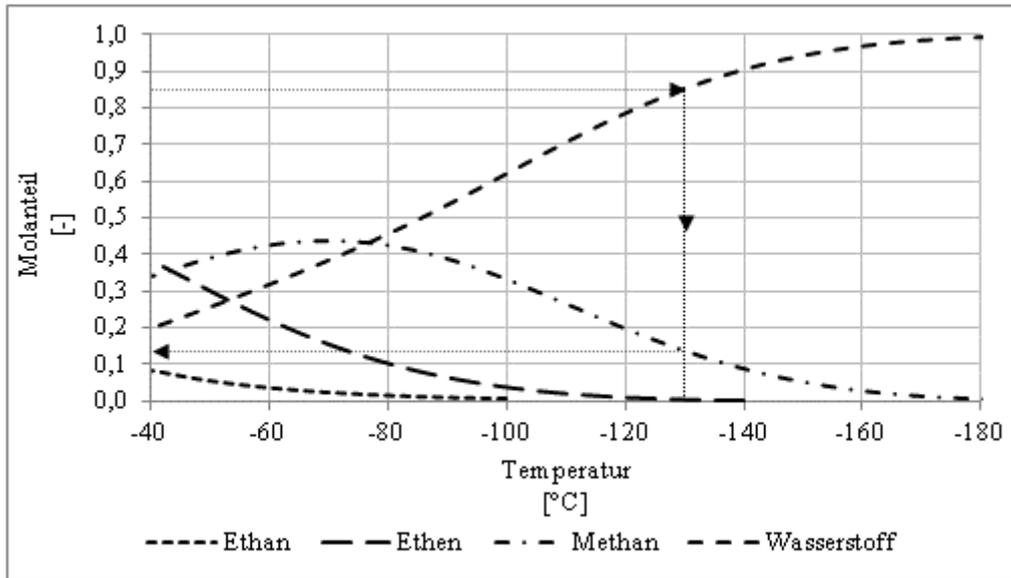


Abb. 2-4: Konzentrationsverlauf der Komponenten in der Gasphase über der Temperatur bei konstantem Systemdruck

Soll der Wasserstoff bei der geforderten Mindestreinheit (85 mol%, entspricht ideal betrachtet 85 vol%), in Abb. 2-4 durch den Pfeilverlauf gekennzeichnet, gewonnen werden, ist unter der Annahme eines konstanten Systemdrucks auf eine Temperatur von ca. -130°C zu kühlen. In diesem Zustand ergibt sich eine Zusammensetzung aus 85 mol% Wasserstoff und ca. 13 mol% Methan (die restlichen 2 mol% entfallen auf andere Komponenten).

In der Anlage findet die H_2 -Abscheidung bedingt durch leichten Druckverlust bei 30,57 bar [4] und $-162,4^{\circ}\text{C}$ [4] statt. Die Zusammensetzung der Gasphase beträgt dabei ca. 95 mol% Wasserstoff [4] und 5 mol% Methan [4]. Aus Abb. 2-2 kann geschlussfolgert werden, dass in der anschließenden Rektifikationskolonne zur Trennung von Methan und der C2-Fraktion eine Temperatur unter -90°C im Kopfkondensator benötigt wird (Kondensatordruck entspricht bei ca. 1,1% Druckverlust dem Eingangsdruck der Spaltgase in den Tieftemperaturteil).

Um die geforderten Temperaturen aufbringen zu können, wird u.a. ein Ethenkältekreislauf betrieben. Dieser stellt auf unterschiedlichem Druckniveau entsprechende Temperaturen für Kühlvorgänge zur Verfügung (siehe Kapitel 3).

Im Niederdruckbereich (ca. 1,3 bar [4]) wird durch den Ethenkältekreislauf eine Temperatur von $-99,42^{\circ}\text{C}$ [4] bereitgestellt, die zur Trennung der Spaltgase im Tieftemperaturteil eingesetzt wird.

Der Ethenkältekreislauf besteht aus Verdampfern (angeschlossene Verbraucher), einem vierstufigen Verdichter, Expansionsventilen (Joule-Thomson-Effekt) und einem Kondensatorsystem.

Der vierstufige Verdichter ist als Turbokompressor ausgeführt und wird mit einer Hochdruckdampfturbine betrieben. In der Einführung wird ausgeführt, dass die Abwärme der Spaltöfen zur Erzeugung von Dampf der Hochdruckstufe genutzt wird. Dieser wird für den Betrieb des Turbokompessors eingesetzt. Die Leistung, die durch den Einsatz dieses Dampfes eingebracht wird, reicht zum Betrieb des Turbokompessors (bzw. der Turbokompressoren, es werden mehrere Turbokompressoren mit HD-Dampf betrieben, diese befinden sich aber in anderen Anlagenteilen und sind daher nicht Gegenstand der Arbeit) nicht aus, daher wird zusätzlich Dampf der Hochdruckstufe importiert. Dieser Import vermindert die Anlagenrentabilität.

Daraus ergibt sich als Zieldefinition eine Erhebung des energetischen Optimierungspotentials des Tieftemperaturteils, um den Import von Dampf der Hochdruckstufe zur Maximierung der Anlagenrentabilität zu minimieren.

In den Arbeiten [2, 5] werden dazu Modelle zur Beschreibung der alternativen Trennverfahren (Membrantrennverfahren [5] und Adsorptionstrennverfahren [2]) untersucht, durch die eine Modellierung des jeweiligen Trennverfahrens in MATLAB[®] möglich ist. Die Modelle werden dabei auf verschiedene Membranen bzw. Adsorbentien angewendet. In [6] wird in weiterer Folge der in [2] erstellte Algorithmus zur Simulation eines Adsorptionsprozesses um die Kinetik erweitert. In [7] wird eine Parameterstudie zum Modell 3 in [5] durchgeführt. In [8] erfolgt eine weitere Modifizierung des Algorithmus aus [6] und eine Parameterstudie zu den Modellen in [2]. Die Parameterstudie zu den Modellen aus [2] erfolgt dabei mit dem in [8] modifizierten Algorithmus.

Als Ergebnis der Arbeiten [7, 8] liegen unter anderem Aussagen über die Leistungsfähigkeit der Trennverfahren hinsichtlich Reinheit und Recovery der Komponenten und ein modifizierter Algorithmus [8] vor.

Nach der Auswertung der Ergebnisse der Arbeiten [7, 8] wird ein Konzept erstellt, das unter Einbeziehung der alternativen Trennverfahren entsprechende alternative Betriebsmöglichkeiten des Tieftemperaturteils aufzeigt [9].

2.1 Aufgabenstellung der Arbeit

Gegenstand dieser Arbeit ist die Erhebung des energetischen Optimierungspotentials des Tieftemperaturteils der Anlage. Dies erfolgt durch Implementierung der in [9] aufgezeigten Betriebsmöglichkeiten des Tieftemperaturteils, die den Einsatz von Membran- und Adsorptionstrennverfahren vorsehen, in die Verfahrenssimulation der Ethenanlage in KBC Petro-SIM[®].

Besonders im Fokus steht dabei das Optimierungspotential des Importes von Dampf der Hochdruckstufe.

Die Möglichkeit einer Kommunikation zwischen MATLAB[®] und KBC Petro-SIM[®] zur Kombination aus Modellrechnung in MATLAB[®] und Verfahrenssimulation in KBC Petro-SIM[®] ist zu prüfen und durch Verwendung einer geeigneten Schnittstelle umzusetzen.

3 Modifikation des Ethenverdichters durch Zwischenkühlung

In diesem Teil der Arbeit werden aus dem Studium der Verfahrensbeschreibung [3] und der Verfahrenssimulation der aktuellen Anlagenkonfiguration des Tieftemperaturteils der Ethenanlage [4] thermodynamische Überlegungen dargelegt, aus denen sich ein Einsparungspotential für den Import von Dampf der Hochdruckstufe (HD-Dampf) durch einen modifizierten Betrieb des Turbokompressors zur Ethenverdichtung im Ethenkältekreislauf ergibt

3.1 Untersuchung von Zwischenkühlungen im Ethenverdichter

Zur Auftrennung der Spaltgase in die Komponenten Wasserstoff, Ethen, Ethan und Methan wird das bestehende Trennverfahren verwendet [3,4]. Der Turbokompressor der Ethenkälteanlage wird dabei mit verschiedenen von Zwischenkühlungen modifiziert, der Einfluss auf den Import von Dampf der Hochdruckstufe dabei untersucht und verglichen.

Der Turbokompressor besteht aus einer Turbine und vier Verdichterstufen. Turbine und Verdichter sind auf einer Welle angeordnet, der Verdichter wird von der Turbine angetrieben.

Zum Betrieb des Verdichters wird über die Turbine Hochdruckdampf (ca. 112 bar) auf Vakuum (0,06 bar) entspannt [4]. Der in der Anlage zur Verfügung stehende Hochdruckdampf reicht für den Betrieb des Verdichters nicht aus, HD-Dampf wird daher vom Heizkraftwerk II der Raffinerie Schwechat importiert. Der Import des Dampfes belastet die Anlagenrentabilität und stellt aus diesem Grund eine Größe dar, die es zu minimieren gilt.

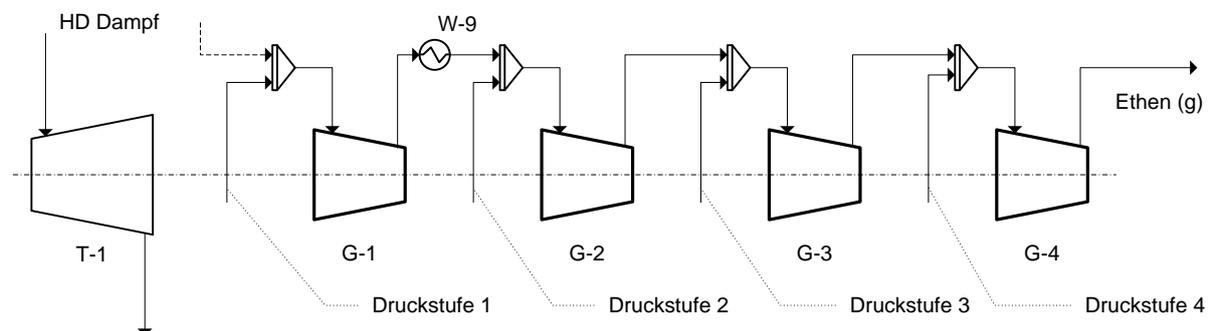


Abb. 3-1: Turbokompressor der Ethenkälteanlage

Im Kältebereitstellungsprozess werden die in Tab. 3-1 angegebenen Temperaturen bereitgestellt. Diese Temperaturen werden durch Ausnutzung des Joule-Thomson-Effektes, $(\partial T/\partial P)_H$, durch Druckänderung bei konstanter Enthalpie, erreicht. Aus Tab. 3-1 geht

hervor, dass, je tiefer die benötigte Temperatur ist, desto niedriger der dafür einzustellende Druck und desto höher die notwendige Druckänderung sein muss. Der geforderte Ausgangsdruck am Ethenverdichter beträgt 22,6 bar [3]. Dem Verdichter wird das sich auf unterschiedlichen Druckniveaus befindliche Ethen den entsprechenden Verdichterdruckstufen (G) zugeführt. Entsprechend den Druckniveaus der bereitgestellten Temperaturen ist der Verdichter dafür vierstufig ausgeführt. Bevor das Ethen in die jeweilige Verdichterstufe eintritt, wird es mit dem austretenden Ethen der vorangegangenen Verdichterstufe vermischt.

Folgende Drücke sind in der Referenzsimulation [4], auf Basis eines dreitägigen Testlaufs unter Vollast, zur Bereitstellung der geforderten Temperaturen im Ethenkältekreislauf eingestellt:

Druckstufe	Temperatur: [°C]	Druck [bar]
1	-99,42	1,32
2	-74,00	4,44
3	-54,59	9,11
4	-43,36	13,12

Tab. 3-1: eingestellte Temperaturen im Kältebereitstellungsprozess des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4]

Nach der ersten Verdichterstufe (G-1) ist ein Wärmeübertrager (W-9) angebracht, der das infolge der Verdichtung erwärmte Ethen von 130,6°C auf 28,24°C [4] kühlt. Als Kühlmedium wird dabei Kühlwasser verwendet.

Die beschriebene Situation zu Grunde gelegt, führt das zu folgender Überlegung:

Je höher die Leistung, die der Verdichter verbraucht, desto höher die benötigte Leistung an der Welle, die von der Turbine zu erbringen ist und desto höher ist der Import an Hochdruckdampf. Niedrigere Anlagenrentabilität ist die Folge.

Theorie:

Die thermische Leistung des Verdichters $\dot{W}_{Verdichter}$ errechnet sich aus der Summe der thermischen Leistungen der Verdichterstufen. Die thermische Leistung einer Verdichterstufe $\dot{W}_{Stufe,i}$ errechnet sich aus dem Produkt des in die Verdichterstufe eintretenden Massenstroms

$\dot{m}_{Stufe,i}$ und der Differenzen der Enthalpien $h_{Stufe,i}$ des eintretenden und austretenden Stroms:

$$\dot{W}_{Stufe,i} = \dot{m}_{Stufe,i} \cdot (h_{aus,Stufe,i} - h_{ein,Stufe,i}) \quad (3-1)$$

$$\dot{W}_{Verdichter} = \sum_{i=1}^4 \dot{W}_{Stufe,i} \quad (3-2)$$

Die thermische Leistung des Verdichters ergibt dann ein Minimum, wenn die thermischen Leistungen der Verdichterstufen minimal werden. Es ist die Frage zu klären, ob und wie ein Minimum in der jeweiligen, isoliert betrachteten Verdichterstufe unter gegebenen Bedingungen erreicht werden kann.

Auf die Menge an Ethen in der Zeiteinheit kann durch die Modifikation des Verdichters kein Einfluss genommen werden, diese wird durch die Kältebezieher (Verbraucher) bestimmt und ist dem Verdichter vorgegeben.

Ein Minimum der thermischen Leistung in einer Verdichterstufe kann sich daher nur durch Minimierung der jeweiligen Enthalpiedifferenz ergeben.

Die Enthalpie ist eine extensive Größe, d.h. eine Abhängigkeit vom Zustand und der Größe des Systems ist gegeben. Die Größe des Systems ist durch die von den Verbrauchern geforderten Ethenmengen definiert. Es bleibt daher noch die Möglichkeit zu prüfen, ob durch eine Veränderung des Systemzustandes auf die Leistung des Verdichters Einfluss genommen werden kann.

Betrachtung des Systemzustandes:

Der Verdichter überführt das Medium vom Eingangsdruck, auf einen höheren Ausgangsdruck. Das Druckverhältnis ist als Quotient von Ausgangsdruck zu Eingangsdruck definiert. Druck, Volumen und Temperatur sind voneinander abhängige Größen, ihr Zusammenhang wird durch Zustandsgleichungen mathematisch beschrieben. Für die Simulation wird die kubische Zustandsgleichung nach Peng-Robinson verwendet [siehe Kapitel 13.4].

Druck, Temperatur und Volumen ändern sich während des Prozesses. Die Art und Höhe der Änderung ist abhängig von der Art des Betriebs.

Der ideale Betrieb eines Kompressors wird durch eine isotherme Zustandsänderung beschrieben. Bei Turbokompressoren ist die Umsetzung eines isothermen Betriebs im Kompressionsteil aufgrund relativ hoher Massenströme und wenig Zeit für einen Wärmeaustausch nur schwer zu realisieren. Der Vergleichsprozess wird daher durch eine isentrope Zustandsänderung beschrieben und die reale Änderung durch eine Polytrope angenähert. Durch Anwendung der Polytropengleichung ergibt sich für den Zusammenhang von Druck P und Temperatur T , hier für das ideale Gas:

$$\frac{T_{aus}}{T_{ein}} = \left(\frac{P_{ein}}{P_{aus}} \right)^{\left(\frac{1-n}{n} \right)} \quad (3-3)$$

Die austretende Temperatur ist eine Funktion des Druckverhältnisses, des Polytropenexponenten n und der Eingangstemperatur. Die funktionalen Zusammenhänge zu (3-3) sind im Anhang dargelegt.

Der polytrope Wirkungsgrad (oder isentrope Wirkungsgrad) und das Druckverhältnis sind in der Simulation vorzugeben, das Druckverhältnis wird durch die Apparateauslegung vorgegeben (Ein- und Ausgangsdruck werden aus der Referenzsimulation [4] übernommen) und der Wirkungsgrad wird für die Simulation angenommen (siehe Kapitel 13.2 und Kapitel 13.5). Der Polytropenexponent ergibt sich aus den vorgegebenen Daten und die Ausgangstemperatur ist das Ergebnis der Polytropengleichung. Der Parameter, auf den noch Einfluss genommen werden kann, ist die Eingangstemperatur. Dieser Aspekt ist von Bedeutung, denn die Enthalpie ist eine Funktion von Druck, Temperatur und Volumen, also dem Zustand (3-4).

$$\frac{H - H^{id}}{R \cdot T} = Z - 1 + \frac{1}{R \cdot T} \cdot \int_{\infty}^V \left[T \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] \cdot dV \quad (3-4)$$

Die Eintrittstemperatur kann durch Zufuhr von Energie (z.B. Heizen) oder Abfuhr von Energie (z.B. Kühlen) verändert werden.

Durch Verringerung der Eingangstemperatur wird die Enthalpiedifferenz von Ein- und Ausgangsstrom reduziert, was eine Verringerung der vom Verdichter aufzubringenden Leistung bedeutet.

Für den Ethenverdichter bedeutet diese Schlussfolgerung, dass eine Zwischenkühlung des Mediums vor Eintritt in die nächste Verdichterstufe zur Verringerung der insgesamt

aufzubringenden Leistung führt. Um die Eingangstemperatur reduzieren zu können, ist es notwendig, Energie in Form von Kälte zur Verfügung zu stellen.

3.1.1 Möglichkeiten des Kältebezugs

In der Anlage wird ein Propenkältekreislauf (C3 Kälte) betrieben. Die Turbine zum Antrieb des dreistufigen Verdichters der Propenkälteanlage wird mit Mitteldruckdampf (13 bar) betrieben. In der Anlage liegt ein Überschuss an Mitteldruckdampf (MD-Dampf) vor, dieser wird exportiert.

Daher ist es naheliegend, zunächst Propenkälte auf den vorhandenen Druckniveaus zur Zwischenkühlung im Ethenverdichterstrang zu verwenden und den Einfluss auf den Import von Dampf der Hochdruckstufe (HDD) zu untersuchen. Der im Überschuss vorhandene Dampf der Mitteldruckstufe kann einerseits zur Deckung der zusätzlich von der Turbine des vorhandenen C3 Verdichters aufzubringenden Leistung (höherer Massenstrom) eingesetzt werden. Das ist aber nur dann möglich, wenn die zusätzliche C3 Menge den Betriebspunkt des Verdichters nicht unzulässig verschiebt. Andererseits besteht die Möglichkeit einen Parallelverdichterstrang auszulegen und den MD-Dampf dort einzusetzen.

Durch den Einsatz des Überschusses an MD-Dampf wird der Export in jedem Fall entsprechend reduziert.

Im Propenkältekreislauf werden in der Referenzsimulation [4] Temperaturen auf folgenden Druckniveaus zur Verfügung gestellt:

Druckstufe	Temperatur: [°C]	Druck [bar]
1	-40,78	1,36
2	-21,17	2,90
3	-10,55	4,16
4	6,39	6,98

Tab. 3-2: bereitgestellte Temperaturen der Propenkälteanlage in der Referenzsimulation [4]

Außerdem ist der vereinfachten Darstellung des Kühlwassersystems zu entnehmen, dass Kühlwasser bei 27°C und 2 bar zu Verfügung steht und im Schnitt bei 32°C abgeführt wird. [4]

Thermische Grenze der Kühlung

Eine wichtige thermische Grenze stellt der Taupunkt des Mediums beim entsprechenden Druck (bzw. Partialdruck) dar. Dieser darf nicht unterschritten werden. Das ist insbesondere bei Überlegungen zu einer möglichen Zwischenkühlung durch Ethen zu berücksichtigen.

Weitere Grenzen werden durch die Apparate definiert, Beispiele dafür sind die Betriebskennfelder des Verdichters und die Wärmeübertragerfläche.

Der Einsatzbereich ist im Zuge des Detail-Engineering mit dem Anlagenbauer abzuklären.

3.2 Zwischenkühlungen

3.2.1 Überblick

Aus der Analyse des Ethenkältekreislaufes des Tieftemperaturteils und den daraus abgeleiteten Überlegungen werden in diesem Kapitel unterschiedliche Möglichkeiten der Zwischenkühlung untersucht.

In den ersten Schritten wird die Kälte dem Propenkältekreislauf auf den Druckniveaus eins bis drei entnommen. Um in weiterer Folge für eine Entlastung der Propylenkältemaschine und somit für eine Entlastung der Mitteldruckdampfschiene zu sorgen, wird ein zusätzlicher Kältekreislauf, der mit Isobutan (i-Butan) betrieben wird, mit der Propenkälte der ersten und zweiten Druckstufe kombiniert (eine Kombination mit Propenkälte der dritten Druckstufe wird aufgrund der Ergebnisse, die die Zwischenkühlung mit dieser erbringen, nicht durchgeführt) und in der Anwendung auf Wirtschaftlichkeit im Sinne des Energieeinsatzes geprüft. In einem letzten Schritt wird die Zwischenkühlung durch alleinigen Einsatz von i-Butan Kälte geprüft. Zum Antrieb der Turbine des i-Butan Kältekreislaufes werden der Einsatz von Dampf der Mitteldruckstufe und Dampf der Niederdruckstufe untersucht.

Abhängig von der Temperatur bei Austritt aus der Verdichterstufe wird zusätzlich mit Kühlwasser vorgekühlt.

Zur Festlegung der Austrittstemperatur des Ethens aus dem Wärmeübertrager der Vor- und Zwischenkühlung werden folgende Überlegungen dargelegt.

Propen und Kühlwasser werden in der Anlage bereits zur Kühlung verwendet. Die Abnehmer der Kälte dieser Medien werden daher als Anhaltspunkt und Referenz verwendet. Die

üblichen Temperaturdifferenzen von Kühlmedium und abzukühlendem Medium jeweils am Wärmetauscher Ausgang betragen ca. 5°C bis 10°C.

Berechnung

Die Berechnung der Wärmeübertragung in den Vor- und Zwischenkühlern in der Simulation erfolgt über die Gleichungen (3-5) bis (3-8).

Im Tieftemperaturteil, in dem die Vor- und Zwischenkühler installiert sind, wird die abgeführte Wärmeleistung \dot{Q}_w aus Gl. (3-5) berechnet. Für die Berechnung werden der Ethenmassenstrom \dot{m}_w und dessen Enthalpien h_w am Ein- und Austritt des Wärmeübertragers benötigt. Keine Leistungsverluste ($\dot{Q}_{verluste}$) bei der Wärmeübertragung werden postuliert.

$$\dot{Q}_w = \dot{m}_w \cdot (h_{w,ein} - h_{w,aus}) - \dot{Q}_{w,verluste} \quad (3-5)$$

Die aus Gl. (3-5) berechnete Leistung wird in der Simulation in die Berechnung des Kältemittelbedarfs übernommen.

Die abgeführte Wärmeleistung im Ethenstrom entspricht der Kälteleistung \dot{Q}_k des Kältemittels (Gl. (3-6)).

$$|\dot{Q}_w| = |\dot{Q}_k| = |\dot{Q}| \quad (3-6)$$

Aus Gl. (3-7) wird in Folge die benötigte Masse an Kältemittel pro Zeiteinheit \dot{m}_k berechnet. Diese wird dann in weiteren Berechnungen verwendet (z.B. zur Berechnung der Verdichterleistung eines Kältekreislaufes). In Gl. (3-7) werden Ein- und Austrittsenthalpien h_k des Kältemittels im Wärmeübertrager benötigt. Für den Einsatz der Kältemittel Propen und i-Butan entspricht die Differenz der ein- und austretenden Enthalpie der Verdampfungsenthalpie.

$$\dot{Q}_k = \dot{m}_k \cdot (h_{k,aus} - h_{k,ein}) - \dot{Q}_{k,verluste} \quad (3-7)$$

$$\dot{Q}_{w,verluste} = \dot{Q}_{k,verluste} = 0 \quad (3-8)$$

Die Gleichungen (3-5) bis (3-8) gelten unabhängig vom Wärmeübertrager und der Strömungsführung.

Für einen Wärmeübertrager der Vor- und Zwischenkühlung gilt:

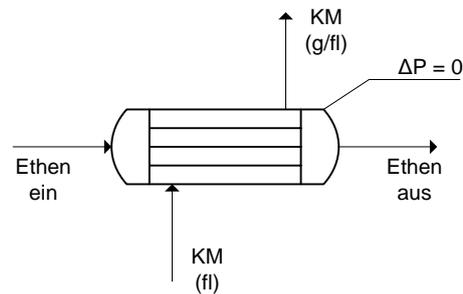


Abb. 3-2: Wärmeübertrager der Vor- und Zwischenkühlung

Das Kältemittel (KM) steht mit entsprechenden Temperaturen der Druckstufen aus dem C3 Kältekreislauf bzw. aus der Druckstufe des i-Butan Kältekreislaufes in kondensierter Form zur Verfügung und verdampft bei der Aufnahme der Wärmeleistung. Bei Verwendung von Kühlwasser zur Vorkühlung findet kein Phasenwechsel des Kühlwassers statt, der Austritt erfolgt im flüssigen Zustand. Die Eintrittstemperatur des Ethens in den Wärmeübertrager ergibt sich aus der Vermischung des aus der jeweiligen vorhergehenden Verdichterstufe austretenden Ethens und dem der jeweiligen Druckstufe zugeführten Ethen. Es wird angenommen, dass der Wärmeübertrager ohne Druckverlust arbeitet ($\Delta P = 0$). Das Kältemittel verdampft isotherm. Die Enthalpie des Kältemittels am Ein- und Ausgang sowie die Enthalpie des Ethens am Eingang und der Massenstrom von Ethen sind dem Wärmeübertrager der Vor- und Zwischenkühlung dadurch vorgegeben. Der Energiegleichung (3-6) fehlen daher noch der Massenstrom an Kältemittel und die Enthalpie des aus dem Wärmeübertrager austretenden Ethens. Es ergibt sich ein Freiheitsgrad. Dieser Freiheitsgrad wird zur Vorgabe der Enthalpie am Austritt, durch Angabe der Ziel-Temperatur, auf die Ethen im Wärmeübertrager gekühlt werden soll, verwendet. Die Menge an benötigtem Kühlmedium ergibt sich dann aus Gl. (3-6) bzw. Gl.(3-7).

3.3 Simulation von Zwischenkühlungen

In den Simulationen wird in den Verdichterstufen des Turbokompressors der Ethenkälteanlage ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen (siehe Kapitel 13.2 und Kapitel 13.5).

3.3.1 Zwischenkühlung 1 (Simulation 1)

Zur Zwischenkühlung wird Propenkälte der ersten Druckstufe des Propenkältekreislaufes verwendet. Das Ethen wird vor Eintritt in die Verdichterstufen auf -34°C zwischengekühlt.

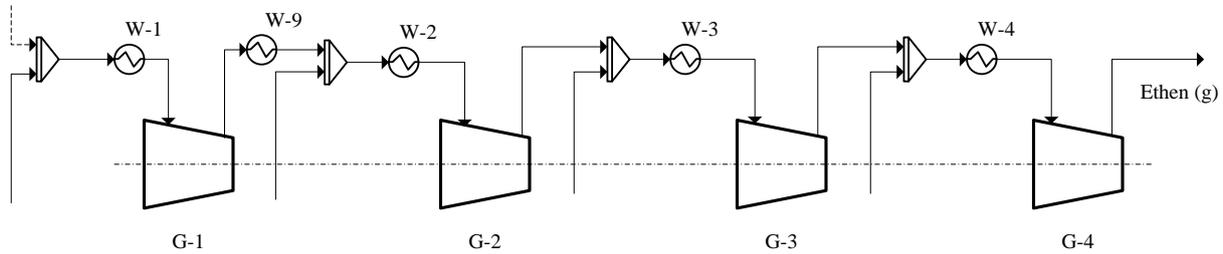


Abb. 3-3: Zwischenkühlung 1 (Simulation 1)

ZK 1 (Sim1)	Kälte bezogen aus:	Temperatur		\dot{Q} [kW]	$U \cdot A$ [kW/K]
		[$^{\circ}\text{C}$]			
		Ein	Aus		
W-1	C3, P = 1,43 bar (T = $-40,78^{\circ}\text{C}$)	-1,23	-34,00	514,32	28,68
W-9	Kühlwasser	59,48	28,24	551,64	-
W-2	C3, P = 1,43 bar (T = $-40,78^{\circ}\text{C}$)	9,29	-34,00	1411,61	67,37
W-3	C3, P = 1,43 bar (T = $-40,78^{\circ}\text{C}$)	1,84	-34,00	4305,30	228,61
W-4	C3, P = 1,43 bar (T = $-40,78^{\circ}\text{C}$)	-6,60	-34,00	4517,46	276,88

Tab. 3-3: Zwischenkühlung 1 (Simulation 1)

Das Ethen wird unmittelbar vor Eintritt in die nächste Verdichterstufe mit Propen der Druckstufe eins ($P = 1,43 \text{ bar}$, $T = -40,78^{\circ}\text{C}$) auf eine gewählte Temperatur von -34°C zwischengekühlt (Wärmetauscher Kennung "W"). Das Propen wird dabei verdampft. Der größte $U \cdot A$ -Wert wird in W-4 mit $276,88 \text{ kW/K}$ erreicht (Druck des eintretenden Ethens in W-4, 13 bar). Nach Austritt aus der ersten Verdichterstufe (G-1) wird das Ethen mit Kühlwasser auf $28,24^{\circ}\text{C}$ vorgekühlt. Diese Temperatur ist dem realisierten Prozess (Wärmeübertrager E-9901, „Cold Box“) entnommen. Die größte Kälteleistung wird in W-4 mit $4517,46 \text{ kW}$ erreicht.

3.3.2 Zwischenkühlung 2 (Simulation 4)

Für die Zwischenkühlung wird Propenkälte der zweiten Druckstufe des Propenkältekreislaufes verwendet. Das Ethen wird auf eine Temperatur von -15°C zwischengekühlt.

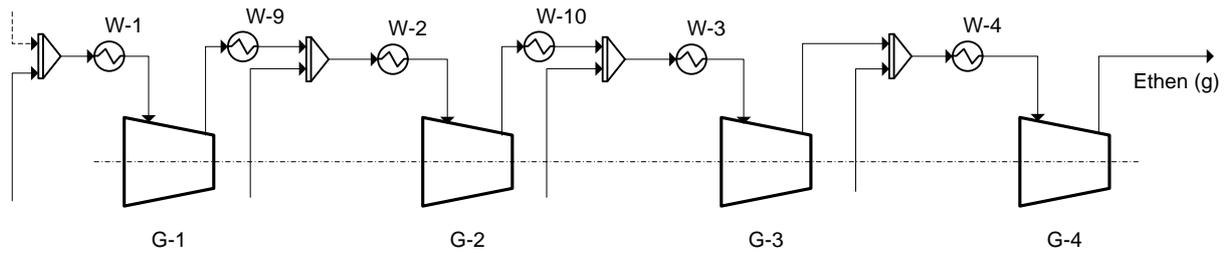


Abb. 3-4: Zwischenkühlung 2 (Simulation 4)

ZK 2 (Sim4)	Kälte bezogen aus:	Temperatur		\dot{Q} [kW]	$U \cdot A$ [kW/K]
		[°C]			
		Ein	Aus		
W-1	C3, P = 2,90 bar (T = -21,17°C)	18,30	-15,00	539,61	30,07
W-9	Kühlwasser	81,65	28,24	960,26	-
W-2	C3, P = 2,90 bar (T = -21,17°C)	19,19	-15,00	1137,51	62,48
W-10	Kühlwasser	37,16	28,24	318,62	-
W-3	C3, P = 2,90 bar (T = -21,17°C)	19,63	-15,00	4222,91	230,36
W-4	C3, P = 2,90 bar (T = -21,17°C)	13,42	-15,00	4680,42	284,75

Tab. 3-4: Zwischenkühlung 2 (Simulation 4)

In Zwischenkühlung 2 wird das Ethen mit Propen der Druckstufe zwei des Propenkältekreislaufes ($P = 2,09$ bar, $T = -21,17^\circ\text{C}$) auf eine gewählte Temperatur von -15°C zwischengekühlt. Nach Austritt aus der ersten und zweiten Verdichterstufe (G-1, G-2) wird zur Entlastung des Propeneinsatzes mit Kühlwasser (W-9, W-10) auf $28,24^\circ\text{C}$ vorgekühlt. Der größte $U \cdot A$ -Wert wird in W-4 mit $284,75$ kW/K erreicht (Druck des eintretenden Ethens in W-4: 13 bar). Die größte Kühlleistung wird in W-4 mit $4680,42$ kW geleistet.

3.3.3 Zwischenkühlung 3 (Simulation 7)

Eingesetzt wird Propenkälte der dritten Druckstufe des Propenkältekreislaufes. Das Ethen wird vor Eintritt in die Verdichterstufen auf -2°C zwischengekühlt.

ZK 3 (Sim7)	Kälte bezogen aus:	Temperatur		\dot{Q} [kW]	$U \cdot A$ [kW/K]
		[°C]			
		Ein	Aus		
W-1	C3, P = 4,16 bar (T = -10,55°C)	22,99	-2,00	410,91	22,48
W-9	Kühlwasser	96,62	28,24	1244,43	-
W-2	C3, P = 4,16 bar (T = -10,55°C)	21,59	-2,00	793,67	44,55
W-10	Kühlwasser	51,30	28,24	831,55	-
W-3	C3, P = 4,16 bar (T = -10,55°C)	23,08	-2,00	3084,47	168,41
W-4	C3, P = 4,16 bar (T = -10,55°C)	25,05	-2,00	4469,52	235,70

Tab. 3-5: Zwischenkühlung 3 (Simulation 7)

In Zwischenkühlung 3 wird das Ethen mit Propen der Druckstufe drei des Propenkältekreislaufes (P = 4,16 bar, T = -10,55°C) auf eine gewählte Temperatur von -2°C zwischengekühlt. Die Apparateanordnung ist dabei gleich wie für Zwischenkühlung 2. Die Vorkühlung mit Kühlwasser erfolgt wie in Zwischenkühlung 2. Der größte $U \cdot A$ -Wert wird in W-4 mit 235,70 kW/K erreicht (Druck des eintretenden Ethens in W-4, 13 bar). Die größte Wärmeleistung wird mit 4469,52 kW in W-4 abgeführt

3.3.4 Diskussion und Schlussfolgerungen für die Zwischenkühlung mit Propen und Kühlwasser

In den bisher diskutierten Varianten wird zur Zwischenkühlung Propen und zur Vorkühlung Kühlwasser verwendet. Der Einsatz von Propen-Kälte reduziert die Exportmenge an Dampf der Mitteldruckschiene. Die Arbeit an einer Lösung zur Senkung des Propeneinsatzes ist daher naheliegend. Eine Herausforderung beim Einsatz von Kältemitteln stellt die Kondensation des dampfförmigen Kältemittels dar. Das verdampfte Medium ist auf jenes Druckniveau zu verdichten, bei dem eine Kondensation unter Einsatz wirtschaftlich günstiger Mittel (Luft, Wasser, alternative Kältemittel, Joule-Thomson-Effekt, etc.) möglich ist. Diese Forderung zu Grunde gelegt führt zum Entschluss, einen Kältekreislauf, in dem i-Butan (Isobutan) als Kältemittel geführt wird, zu implementieren.

Begründung

Der Siedepunkt von Isobutan bei atmosphärischem Druck liegt bei -11,7°C [12], der Sättigungsdampfdruck bei einer Temperatur von 20°C liegt bei 3,019 bar [12]. Das heißt,

verdampftes i-Butan ist auf einen Druck von 3,02 bar zu verdichten, um mit einem Medium, das i-Butan auf eine Temperatur von 20°C zu kühlen imstande ist, kondensieren zu können.

Kühlwasser wird im Ethenverdichterstrang zur Vorkühlung des Ethens auf ca. 28°C eingesetzt. Es ist daher naheliegend, zu untersuchen, auf welchen Druck i-Butan verdichtet werden müsste, um mit Kühlwasser kondensiert werden zu können. Wird das Medium also auf einen Druck verdichtet, dessen Taupunkt bei 28°C oder darüber liegt, ist es möglich, Kühlwasser zur Kondensation zu verwenden. Ist die zur Verdichtung des i-Butans auf den Kondensationsdruck aufzuwendende Leistung geringer als jene Leistung, die bei voller Kühllast auf C3, also ohne Vorkühlung mit i-Butan, zu erbringen wäre, führt die Installation des i-Butan Kältekreislaufes zur Entlastung der MD Stufe.

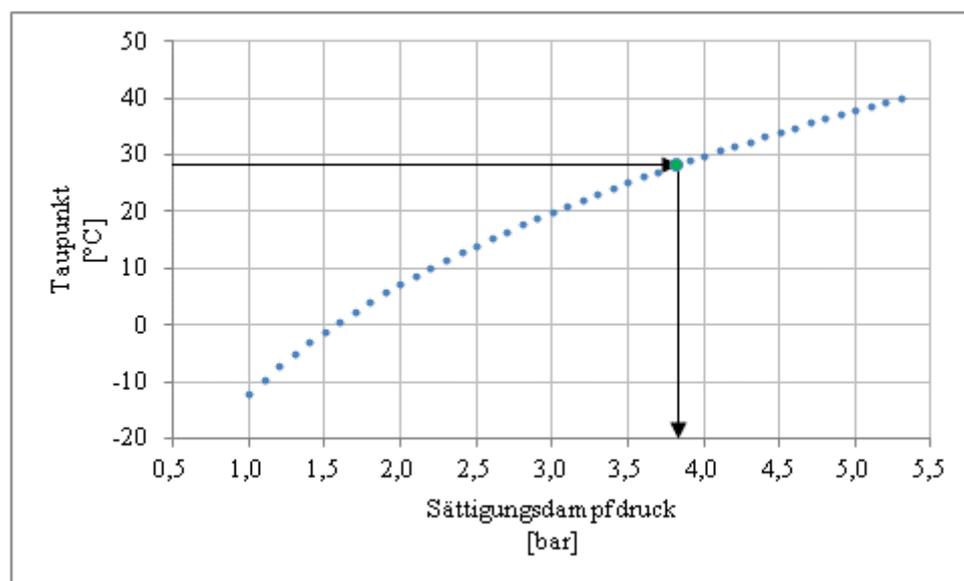


Abb. 3-5: Taupunkt, Sättigungsdampfdruck für i-Butan (Berechnung, siehe 13.3)

Um auf eine Temperatur von 28°C kühlen zu können, muss nach Abb. 3-5 auf ca. 4 bar verdichtet werden.

Der Verdichter zur i-Butanverdichtung wird als Turbokompressor ausgeführt. Ein Medium zum Antrieb der Turbine wird benötigt. Möglich wäre ein Import von HD-Dampf, Ziel ist aber, diesen zu minimieren. Dampf der Mitteldruckstufe liegt im Überschuss vor und bietet sich daher zum Einsatz an. Auch Niederdruckdampf ($P = 5$ bar) ist im Überschuss vorhanden. Ein Betrieb der Turbine mit ND-Dampf bedeutet keine Belastung der MDD Stufe durch den i-Butankreislauf, im Gegenteil, C3 wird maximal entlastet. Der Anschluss an die NDD Stufe stellt aufgrund der relativ geringen nutzbaren Druckdifferenz in Kombination mit den vorhandenen Dampfmenen einen Grenzfall dar (Schwankungen, Überlastungen etc. müssten

mit Sicherheit gedeckt sein), ist mit den gegebenen Daten aber thermodynamisch möglich, und wird daher untersucht. Das Verhältnis der Menge an HDD Einsparung zur Menge an MDD Einsatz wird durch diese Maßnahme vergrößert.

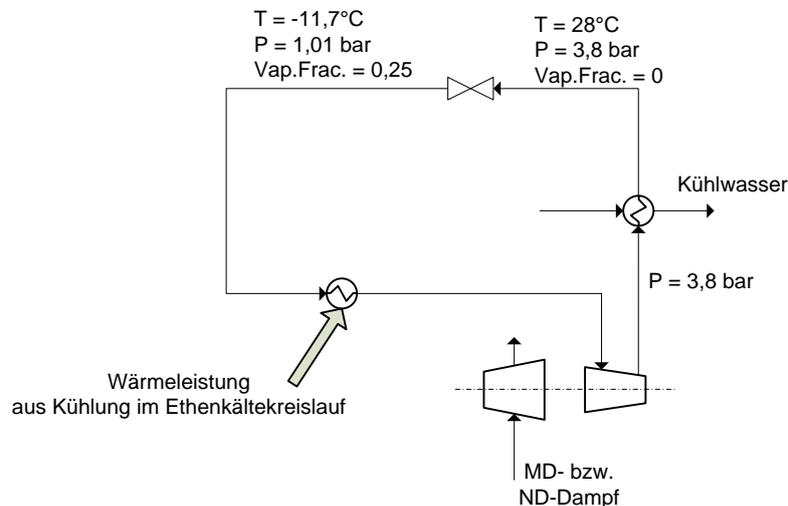


Abb. 3-6: Isobutankältekreislauf (vereinfachte Darstellung)

Wahl der Ethen-Zieltemperatur durch Kühlung mit Isobutan (i-Butan)

Isobutan steht bei atmosphärischem Druck mit $-11,7^{\circ}\text{C}$ zur Verfügung. Für den Aufbau des Kreislaufes ist eine Temperatur vorzugeben, auf die das Ethen durch das i-Butan gekühlt wird. Ein Anhaltspunkt für die Wahl dieser Temperatur stellen die in der Referenzanlage üblichen Differenzen der Temperaturen der austretenden Medien und den Austrittstemperaturen der jeweiligen Kühlmittel dar. Die Differenz beträgt im Mittel $6,49^{\circ}\text{C}$ (aus E-9805, E-9803 und E-9862 in [4]). Damit ergibt sich eine Ethen-Zieltemperatur von $-5,21^{\circ}\text{C}$. Aus Gründen zusätzlicher Sicherheit (z.B. eingestellter Druck nicht 1 atm, sondern darüber) wird für die Simulationen eine Vorgabetemperatur von -1°C gewählt.

3.3.5 Zwischenkühlungen 4 (Simulation 5) und 5 (Simulation 6)

In den Zwischenkühlungen 4 und 5 wird das Ethen vor Eintritt in die Verdichterstufen durch i-Butan auf -1°C vorgekühlt und durch Einsatz von Propenälte der zweiten Druckstufe des Propenältekreislaufes auf -15°C zwischengekühlt. Die Turbine des i-Butan Turbokompressors wird in Zwischenkühlung 4 mit Dampf der Mitteldruckstufe und in Zwischenkühlung 5 mit Dampf der Niederdruckstufe (NDD) angetrieben. Der Anschluss der Turbine an den ND-Dampf hat keinen Einfluss auf die thermodynamischen und technischen Daten der Ethenverdichtung. Die Daten aus beiden Zwischenkühlungen sind daher gleich.

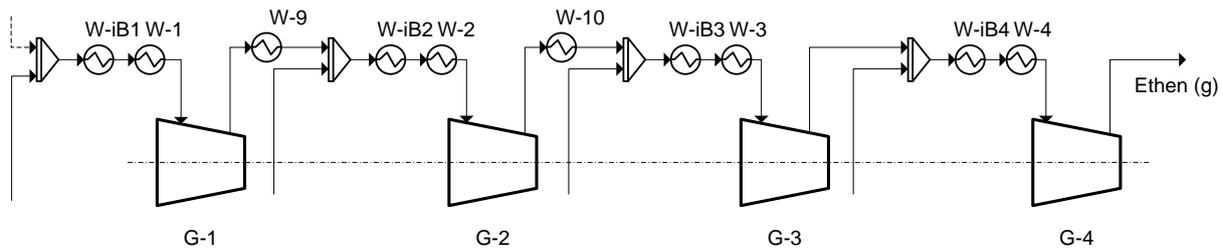


Abb. 3-7: Zwischenkühlung 4 (Simulation 5) und Zwischenkühlung 5 (Simulation 6)

ZK 4 (Sim5)	Kälte bezogen aus:	Temperatur		\dot{Q} [kW]	$U \cdot A$ [kW/K]
		[°C]			
		Ein	Aus		
W-iB1	i-B, P = 1,01 bar (T = -11,70°C)	18,30	-1,00	316,40	16,90
W-1	C3, P = 2,90 bar (T = -21,17°C)	-1,00	-15,00	223,21	18,88
W-9	Kühlwasser	81,65	28,24	960,24	-
W-iB2	i-B, P = 1,01 bar (T = -11,70°C)	19,19	-1,00	678,51	35,63
W-2	C3, P = 2,90 bar (T = -21,17°C)	-1,00	-15,00	458,98	38,83
W-10	Kühlwasser	37,16	28,24	318,59	-
W-iB3	i-B, P = 1,01 bar (T = -11,70°C)	19,63	-1,00	2532,56	131,90
W-3	C3, P = 2,90 bar (T = -21,17°C)	-1,00	-15,00	1690,34	143,01
W-iB4	i-B, P = 1,01 bar (T = -11,70°C)	13,42	-1,00	2374,71	140,55
W-4	C3, P = 2,90 bar (T = -21,17°C)	-1,00	-15,00	2297,47	194,38

Tab. 3-6: Zwischenkühlung 4 (Simulation 5) und Zwischenkühlung 5 (Simulation 6)

Das Ethen wird mit Propen der Druckstufe zwei ($P = 2,9$ bar, $T = -21,17^\circ\text{C}$) in den Zwischenkühlern (Kennzeichnung W) auf eine gewählte Temperatur von -15°C zwischengekühlt. Vor jedem C3 Zwischenkühler werden in dieser Simulation Isobutan-Vorkühler (Kennzeichnung W-iB), die auf -1°C vorkühlen, installiert. Die Apparateanordnung gleicht ansonsten jener in Zwischenkühlung 2. Den größten auftretenden $U \cdot A$ -Wert weist Wärmeübertrager W-4 mit 194,38 kW/K (Eingangsdruck des Ethens, 13 bar) auf. Die größte Wärmeleistung wird in W-iB3 mit 2532,56 kW abgeführt.

3.3.6 Zwischenkühlungen 6 (Simulation 2) und 7 (Simulation 3)

In den Zwischenkühlungen 6 und 7 wird Ethen mit i-Butan vor Eintritt in die Verdichterstufen auf -1°C vorgekühlt und durch den Einsatz von Propenkälte der ersten Druckstufe des Propenkältekreislaufes auf -34°C zwischengekühlt. Die Turbine des i-Butan

Turbokompressors wird in Zwischenkühlung 6 mit Dampf der Mitteldruckstufe und in Zwischenkühlung 7 mit Dampf der Niederdruckstufe (NDD) angetrieben.

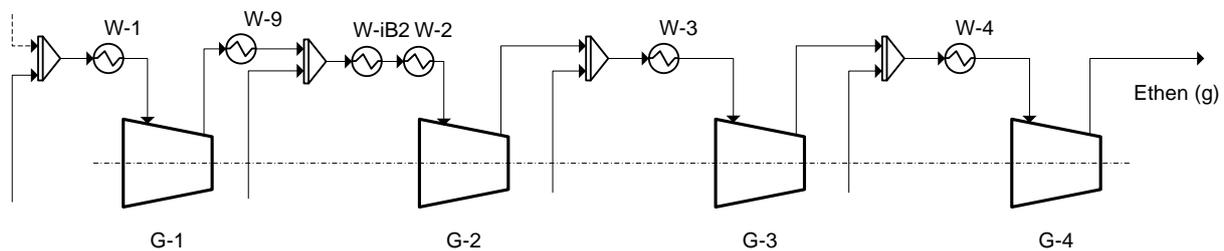


Abb. 3-8: Zwischenkühlung 6 (Simulation 2) und Zwischenkühlung 7 (Simulation 3)

ZK 6 (Sim3)	Kälte bezogen aus:	Temperatur		\dot{Q} [kW]	$U \cdot A$ [kW/K]
		[°C]			
		Ein	Aus		
W-1	C3, P = 1,36 bar (T = -40,78°C)	-1,23	-34,00	514,32	27,68
W-9	Kühlwasser	59,48	28,24	551,65	-
W-iB2	i-B, P = 1,01 bar (T = -11,70°C)	9,29	-1,00	343,30	10,20
W-2	C3, P = 1,36 bar (T = -40,78°C)	-1,00	-34,00	1068,31	57,28
W-3	C3, P = 1,36 bar (T = -40,78°C)	1,84	-34,00	4305,31	220,82
W-4	C3, P = 1,36 bar (T = -40,78°C)	-6,60	-34,00	4517,47	266,68

Tab. 3-7: Zwischenkühlung 6 (Simulation 2) und Zwischenkühlung 7 (Simulation 3)

In Zwischenkühlung 6 wird das Ethen mit Propan der Druckstufe eins ($P = 1,36$ bar, $T = -40,78^\circ\text{C}$) in den Zwischenkühlern (Kennzeichnung W) auf eine gewählte Temperatur von -34°C zwischengekühlt. Aufgrund der vorhandenen Temperaturen, wird ein i-Butan Vorkühler (Kennzeichnung W-iB) nur nach der ersten Verdichterstufe installiert. Die Apparateanordnung gleicht ansonsten jener in Zwischenkühlung 1. Den größten auftretenden $U \cdot A$ -Wert weist W-4 mit $266,68$ kW/K (Eingangsdruck des Ethens 13 bar) auf. Die größte Wärmeleistung wird in W-4 mit $4517,47$ kW abgeführt.

3.3.7 Zwischenkühlungen 8 (Simulation 8) und 9 (Simulation 9)

In den Zwischenkühlungen 8 und 9 wird das Ethen vor Eintritt in die Verdichterstufen durch i-Butan auf -1°C zwischengekühlt. Die Turbine des Turbokompressors des i-Butans wird in Zwischenkühlung 8 durch Dampf der Mitteldruckstufe und in Zwischenkühlung 9 mit Dampf der Niederdruckstufe (NDD) angetrieben.

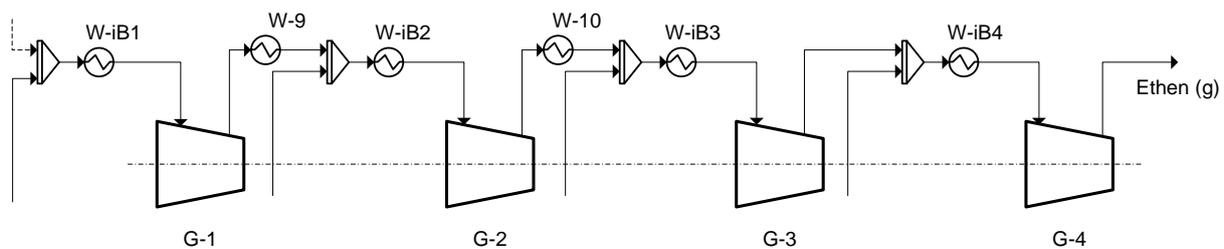


Abb. 3-9: Zwischenkühlung 8 (Simulation 8 und Simulation 9)

ZK 8 (Sim8)	Kälte bezogen aus:	Temperatur		\dot{Q} [kW]	$U \cdot A$ [kW/K]
		[°C]			
		Ein	Aus		
W-iB1	i-B, P = 1,013 bar (-11,7°C)	22,99	-1,00	394,79	19,36
W-9	Kühlwasser	97,77	28,24	1266,56	-
W-iB2	i-B, P = 1,013 bar (-11,7°C)	21,59	-1,00	760,57	38,21
W-10	Kühlwasser	52,38	28,24	871,26	-
W-iB3	i-B, P = 1,013 bar (-11,7°C)	23,08	-1,00	2963,01	145,04
W-iB4	i-B, P = 1,013 bar (-11,7°C)	25,86	-1,00	4440,26	207,59

Tab. 3-8: Zwischenkühlung 8 (Simulation 8) und Zwischenkühlung 9 (Simulation 9)

In Zwischenkühlung 8 wird Ethen mit i-Butan (P = 1,013, T = -11,7°C) auf -1°C in den Kühlern (W-iB) zwischengekühlt. Nach den Verdichterstufen eins und zwei wird das Ethen mit Kühlwasser auf 28,24°C vorgekühlt (W-9 und W-10). Die größte Kälteleistung wird mit 4440,26 kW in W-4 geleistet, dieser Kühler weist mit 207,59 kW/K auch den größten $U \cdot A$ -Wert auf.

3.4 Auswertung und Beurteilung der Zwischenkühlungen

In diesem Abschnitt werden die Zwischenkühlungen anhand ihrer Ergebnisse hinsichtlich des Einsparungspotentials bezüglich des Energieeinsatzes im Tieftemperaturteil der Anlage beurteilt. Detaillierte Auswertungen der einzelnen Zwischenkühlungen sind im Anhang zu finden.

3.4.1 Beurteilung anhand der Produktströme

Unter den Produktströmen werden die stündlich aus dem Tieftemperaturteil austretenden Massen an Wasserstoff für die Hydrierungsprozesse, Methan im Niederdruckstrom und im

Restgas, Ethan zur Rückführung in die Spaltöfen und Ethen zur Weiterverarbeitung verstanden.

Durch die Installation von Zwischenkühlungen wird auf die Produktströme kein Einfluss genommen. Die Produktmengen werden im kontinuierlichen Fall ausschließlich vom Trennverfahren bestimmt und dieses wird nicht verändert. Daher entsprechen die Produktströme jenen der Referenzsimulation [4].

3.4.2 Beurteilung anhand der Recovery und der Reinheit

Die Recovery und die Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt. Die Zwischenkühlungen haben auf ihre Werte keinen Einfluss. Recovery und Reinheit entsprechen in ihren Werten daher jenen der Referenzsimulation [4].

3.4.3 Beurteilung anhand des energetischen Optimierungspotentials

Die Ergebnisse setzen sich immer aus der Annahme eines polytropen Wirkungsgrades von 80% in den Verdichterstufen des Ethenverdichters (siehe Kapitel 13.2 und Kapitel 13.5) und den Zwischenkühlungen zusammen und werden jeweils mit den Werten aus der Referenzsimulation [4] verglichen.

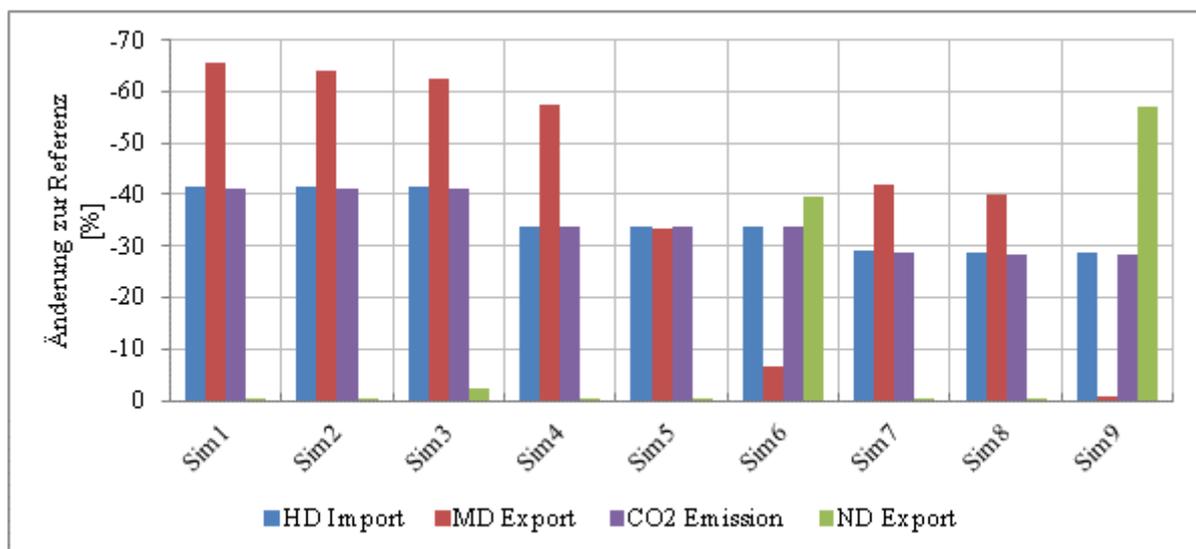


Abb. 3-10: Darstellung des energetischen Optimierungspotentials der Zwischenkühlungen

Analyse der Simulationen Sim1, Sim2 und Sim3

In den Simulationen Sim1, Sim2 und Sim3 wird zwischen den Verdichterstufen unter Einsatz von Propenkälte der ersten Druckstufe (siehe Tab. 3-2) auf -34°C zwischengekühlt.

HD-Dampf Import

Der Import von Dampf der Hochdruckstufe wird um ca. 41,4% reduziert. Ungefähr 14,3% der Reduktion ergeben sich durch den angenommenen Wirkungsgrad und 85,7% aus der Zwischenkühlung.

MD-Dampf Export

Durch den zusätzlichen Bedarf an Propenkälte ist im Propenkältekreislauf ein höherer Massenstrom zu verdichten, was zu einem höheren Einsatz von MD-Dampf zum Antrieb des Verdichters führt. In Sim1 wird der Export an MD-Dampf gegenüber der Referenzsimulation um ca. 65,6% reduziert.

Um den Einsatz von MD-Dampf in Sim1 verringern zu können, wird in Sim2 zusätzlich mit Isobutan auf -1°C vorgekühlt. Aufgrund der Temperaturen zwischen den Verdichterstufen ist eine Vorkühlung nur nach der ersten Verdichterstufe möglich (siehe Abb. 3-8) und die Entlastung des Einsatzes von MD-Dampf daher gering. Der Turbokompressor des Isobutankältekreislaufes wird durch MD-Dampf angetrieben. In Sim2 ergibt sich für den Export von MD-Dampf eine Reduktion gegenüber der Referenz von ca. 64,1%.

In Sim3 wird gegenüber Sim2 der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes mit Dampf der Niederdruckstufe (ND-Dampf) betrieben. Daraus ergibt sich eine Reduktion des MD-Dampf Exports gegenüber der Referenz von ca. 62,5%.

CO₂ Emissionen

Die Reduktion der CO₂ Emissionen in den Simulationen Sim1, Sim2 und Sim3 entspricht ungefähr der Reduktion des Importes an HD-Dampf (ca. 41%).

Die CO₂-Abschätzung bezieht sich auf den vom HKW II importierten HD-Dampf und HD-Sattdampf unter den folgenden Bedingungen: Vollkommene Verbrennung von n-C₁₉H₄₀ bei atmosphärischem Druck mit einer Luftüberschusszahl von 1,4 und einer Rauchgastemperatur von 120°C (Abgas), sowie Kesselspeisewasser für die Dampferzeugung bei 4,72 bara und 25°C. [4]

ND-Dampf Export

In Sim1 und Sim2 ergibt sich keine signifikante Veränderung des Exportes an ND-Dampf.

Um den MD-Dampf Einsatz durch die Vorkühlung maximal zu entlasten wird in Sim3 der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes mit ND-Dampf anstatt mit MD-Dampf betrieben. Daraus ergibt sich eine Reduktion des Exportes an ND-Dampf gegenüber der Referenz von ca. 2,3%.

Analyse der Simulationen Sim4, Sim5 und Sim6

In den Simulationen Sim4, Sim5 und Sim6 wird zwischen den Verdichterstufen unter Einsatz von Propenkälte der zweiten Druckstufe (siehe Tab. 3-2) auf -15°C zwischengekühlt.

HD-Dampf Import

Der Import von Dampf der Hochdruckstufe wird um ca. 33,9% reduziert. Ungefähr 14,3% der Reduktion ergeben sich durch den angenommenen Wirkungsgrad und 85,7% durch die Zwischenkühlung.

MD-Dampf Export

In Sim4 wird der Export von MD-Dampf gegenüber der Referenz um ca. 57,6% reduziert.

In Sim5 wird zwischen jeder Verdichterstufe zur Entlastung des Einsatzes an MD-Dampf mit Isobutan auf -1°C vorgekühlt. Im Gegensatz zu den Simulationen Sim1 bis Sim3 lassen die Temperaturen zwischen den Verdichterstufen eine Isobutan-Vorkühlung zu. Dadurch ergibt sich gegenüber der Referenz eine Reduktion des MD-Dampf Exportes um ca. 33,5%. Der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes wird durch MD-Dampf angetrieben. Im Vergleich zu Sim4 kann der Verlust an MD-Dampf Export durch die Installation der Vorkühlung um ca. 42% reduziert werden.

In Sim6 wird der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes durch den Dampf der Niederdruckstufe angetrieben. Gegenüber der Referenzsimulation ergibt sich eine Reduktion an MD-Dampf Export von ca. 6,5%.

Die Verringerung des Exportes an MD-Dampf kann in Sim6 durch die Vorkühlung und den Betrieb des zugehörigen Turbokompressors über ND-Dampf im Vergleich zu Sim4 um ca. 88,7% und im Vergleich zu Sim5 um 80,6% reduziert werden.

ND-Dampf Export

Dampf der Niederdruckstufe wird in Sim6 zum Betrieb des Turbokompressors des Isobutan-Kältekreislaufes verwendet. Dadurch wird der Export an ND-Dampf um ca. 40% reduziert.

CO₂ Emissionen

Die Reduktion der CO₂ Emissionen in den Simulationen Sim4 bis Sim6 entspricht ungefähr der Reduktion des Importes an HD-Dampf (ca. 34%).

Analyse der Simulation Sim7

In Simulation Sim7 wird zwischen den Verdichterstufen unter Einsatz von Propenkälte der dritten Druckstufe (siehe Tab. 3-2) auf -2°C zwischengekühlt.

HD-Dampf Import

Der Import von Dampf der Hochdruckstufe wird um ca. 28,9% reduziert. Ungefähr 14,4% der Reduktion ergeben sich durch den angenommenen Wirkungsgrad und 85,6% aus der Zwischenkühlung.

MD-Dampf Export

In Sim7 erfolgt eine Reduktion des MD-Dampf Exports gegenüber der Referenzsimulation um ca. 41,8%.

ND-Dampf Export

Auf den Export des Dampfes der Niederdruckstufe wird durch die Zwischenkühlung in Sim7 kein Einfluss genommen. Die in Abb. 3-10 dargestellte Reduktion des ND-Dampf Exportes für Sim7 um ca. 0,03% ist auf numerische Ursachen in der Berechnung zurückzuführen.

CO₂ Emissionen

Die Reduktion der CO₂ Emissionen in Sim7 entspricht ca. der Reduktion des HDD Importes.

Analyse der Simulationen Sim8 und Sim9

In den Simulationen Sim8 und Sim9 wird zwischen den Verdichterstufen unter Einsatz von Isobutankälte auf -1°C zwischengekühlt.

HD-Dampf Import

Der Import von Dampf der Hochdruckstufe wird gegenüber der Referenzsimulation um ca. 28,6% reduziert. Ungefähr 13,8% der Reduktion ergeben sich durch den angenommenen Wirkungsgrad und 86,2% durch die Zwischenkühlung.

MD-Dampf Export

In Sim8 wird der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes durch den Einsatz von MD-Dampf betrieben. Dadurch wird der Export von MD-Dampf gegenüber der Referenz um ca. 39,9% reduziert.

In Sim9 wird der Turbokompressor mit Dampf der Niederdruckstufe angetrieben, daher wird auf den Export von MD-Dampf kein Einfluss genommen. Die in Abb. 3-10 dargestellte Reduktion des MDD Exportes um ca. 0,7% ergibt sich aufgrund einer numerischen Einstellung, die sich auf den Propenkältekreislauf auswirkt.

ND-Dampf Export

In Sim8 wird auf den Export von ND-Dampf kein Einfluss genommen.

Durch den Antrieb des Turbokompressors des Isobutan-Kältekreislaufes mit ND-Dampf in Sim9 wird der NDD Export um ca. 57,3% reduziert.

CO₂ Emissionen

Die Reduktion der CO₂ Emissionen in Sim8 und Sim9 entspricht ungefähr der Reduktion des HDD Importes (ca. 29%).

3.4.4 HD-Dampf Import im Detail

In Abb. 3-10 ist die Einsparung an Dampf der Hochdruckstufe das Ergebnis aus Zwischenkühlung und dem gewählten polytropen Wirkungsgrad (80%, siehe Kapitel 13.2 und Kapitel 13.5) in den Verdichterstufen. Um die Einsparung unabhängig vom gewählten

Wirkungsgrad beurteilen zu können, sind in der nachfolgenden Darstellung (Abb. 3-11) die jeweiligen Einsparungen durch Zwischenkühlung und der Annahme des polytropen Wirkungsgrades abgebildet.

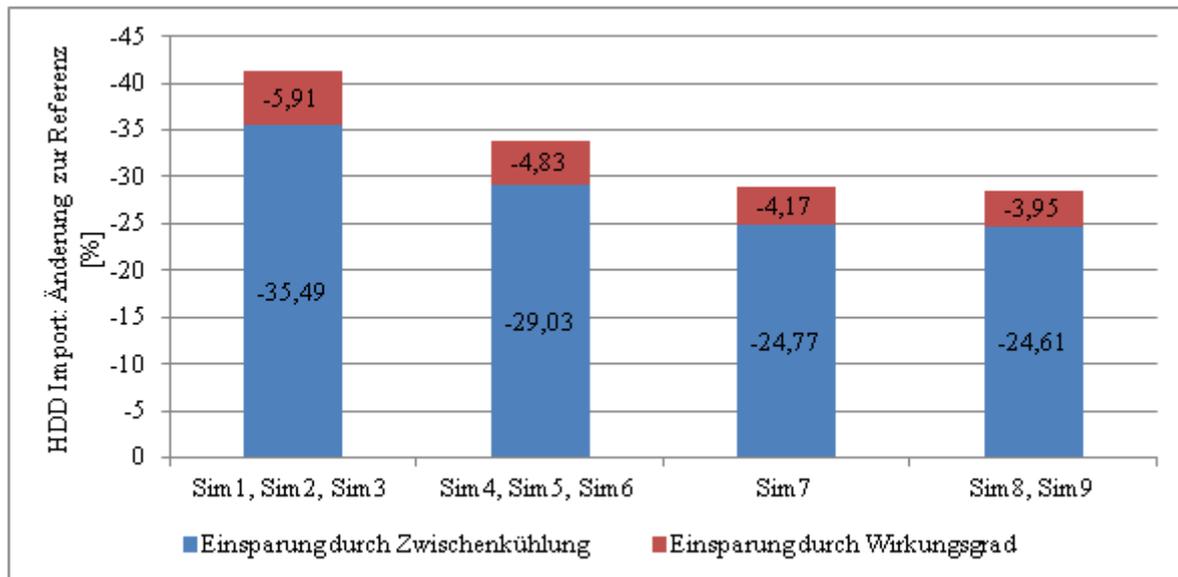


Abb. 3-11: Einsparung von Import an HD-Dampf durch die Zwischenkühlung und den gewählten polytropen Wirkungsgrad

Aus Abb. 3-11 ist zu lesen, dass die Zwischenkühlung auf -34°C in den Simulationen Sim1 bis Sim3 unabhängig vom gewählten Wirkungsgrad eine Einsparung gegenüber der Referenz von ca. 35,5% erbringt. Der gewählte polytrope Wirkungsgrad in den Verdichterstufen von 80% führt zu einer Einsparung von ca. 5,9%.

In den Simulationen Sim4 bis Sim6 werden durch die Zwischenkühlung auf -15°C ca. 29% an HD-Dampf eingespart und durch den gewählten polytropen Wirkungsgrad ca. 4,8%.

Durch die Zwischenkühlung auf -2°C in Simulation Sim7 werden ca. 24,8% HD-Dampf eingespart und durch den Wirkungsgrad ca. 4,2%.

Die Simulationen Sim8 und Sim9, in denen mit Isobutan auf -1°C zwischengekühlt wird, liefern durch die Zwischenkühlung ca. 24,6% und durch den Wirkungsgrad ca. 4% an Einsparung gegenüber der Referenz.

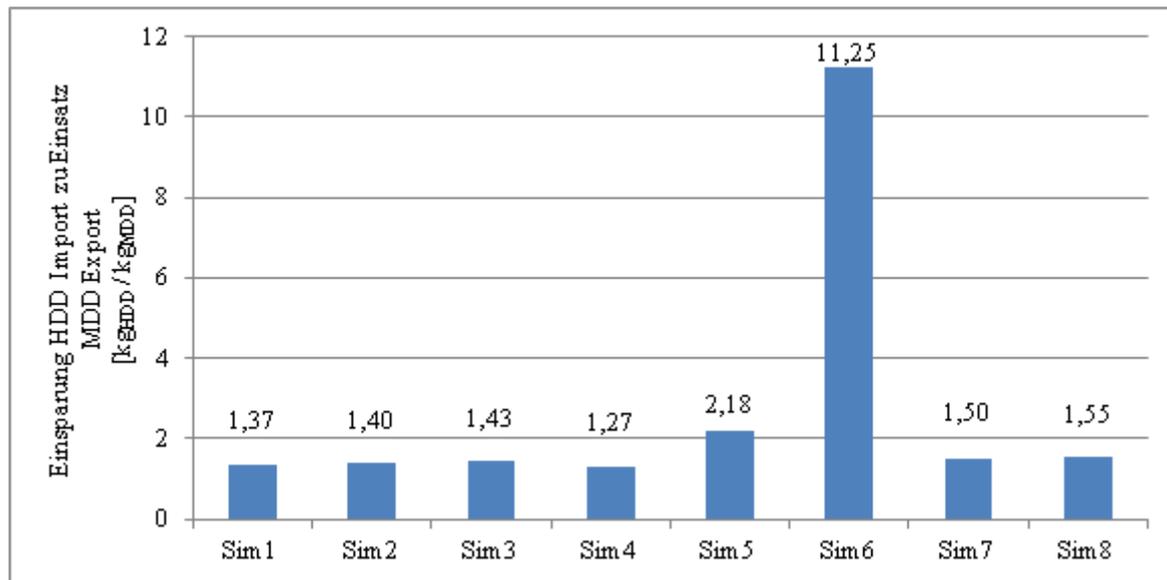
Verhältnis Nutzen (Einsparung HD-Dampf) zu Aufwand (Einsatz MD-Dampf)

Abb. 3-12: Verhältnis von der Einsparung an HDD Import zum Einsatz an MDD Export

In Abb. 3-12 ist für die Simulationen Sim1 bis Sim8 dargestellt, wie viel Kilogramm an Dampf der Hochdruckstufe durch den Einsatz von einem Kilogramm Dampf der Mitteldruckstufe eingespart werden kann. Sim9 ist in der Abbildung nicht enthalten, da dort kein MD-Dampf eingesetzt wird.

Zunächst ist in Abb. 3-12 zu sehen, dass das Verhältnis in allen Simulationen größer als eins ist, d.h. pro eingesetztem Kilogramm an Dampf der Mitteldruckstufe werden mehr als ein Kilogramm an HD-Dampf eingespart. Exergetisch ist Dampf der Hochdruckstufe höher zu bewerten als Mitteldruckdampf, eine monetäre Bewertung würde daher zu noch höheren Verhältnissen führen.

Weiters kann aus Abb. 3-12 der Einfluss der Vorkühlung abgelesen werden. In Sim1 wird keine Vorkühlung eingesetzt. In Sim2 und Sim3 kann nur nach der ersten Verdichterstufe vorgekühlt werden, dadurch ist der Nutzen aus der Vorkühlung gering. Die Einsparung von MD-Dampf durch Einsatz von ND-Dampf in Sim3 bringt nur ein geringfügig besseres Verhältnis gegenüber Sim2.

Deutliche Vorteile aus der Vorkühlung können in den Simulationen Sim5 und Sim6 gezogen werden. In diesen Simulationen kann nach jeder Verdichterstufe vorgekühlt werden. In Sim5 kann das Verhältnis gegenüber Sim4 (keine Vorkühlung) um ca. 72% angehoben werden. In Sim6 wird der Turbokompressor der Vorkühlung über ND-Dampf angetrieben, d.h. die

Mitteldruckstufe wird durch die Vorkühlung gegenüber Sim5, in der der Turbokompressor mit MD-Dampf angetrieben wird, maximal entlastet und führt so zu einem Verhältnis von 11,25.

In Sim7 sind keine Vorkühlungen installiert. Mitteldruckdampf wird zur Zwischenkühlung eingesetzt.

In Sim8 wird mit Isobutan zwischengekühlt, der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes wird durch MD-Dampf angetrieben.

Um aus den untersuchten Zwischenkühlungen die optimale zu finden, sollten alle Aspekte der Abbildungen Abb. 3-10, Abb. 3-11 und Abb. 3-12 herangezogen werden. Insbesondere eine weiterführende monetäre Untersuchung aus dem exergetischen Wert der Druckstufen wird empfohlen.

4 Membranverfahren

Die Aufgabenstellung umfasst u.a. die Implementierung einer Membran mit Wirkprinzip Gaspermeation zur Trennung von Ethen und Ethan in der Verfahrenssimulation.

4.1 Diskussion der zur Simulation vorgelegten Membran

In den vorangegangenen Arbeiten [5,7] wurden Untersuchungen zu verschiedenen Membranen durchgeführt. Die Auswahl einer Membran erfolgt nun auf Basis der Ergebnisse hinsichtlich Recovery und Reinheit von Ethen sowie der Membranfläche. Die ausgewählte Membran, in [5] mit „Membran 8“ bezeichnet, wird dieser Arbeit zur Implementierung in die Verfahrenssimulation vorgelegt.

Aufgrund des Inhalts von Publikation [10], aus der die gewählte Membran entnommen ist, wird hier davon ausgegangen, dass das in [5] ausgezeichnete Modell 3 für diese Membran nicht angewendet werden kann. In [7] wird ausschließlich Modell 3 auf die in [5] angegebenen Membranen in der Parameterstudie angewandt. Die Auswahl einer Membran basiert auf den Ergebnissen aus [7], diese gelten in dieser Arbeit bezüglich der ausgewählten Membran als nicht aussagekräftig (siehe Anhang, Kapitel 13.1).

Daraus ergibt sich eine abgeänderte Aufgabenstellung bezüglich der Simulation eines alternativen Trennverfahrens mittels Membranverfahren. Anstelle der Membran mit Wirkprinzip Gaspermeation wird ein Membrankontaktor, dessen Trennprinzip auf Absorption und Desorption beruht, in die Verfahrenssimulation implementiert [11].

4.2 Verwendung eines alternativen Membranverfahrens

Die abgeänderte Aufgabenstellung hinsichtlich der Simulation des Membranverfahrens beinhaltet die Implementierung des in [10] untersuchten Membranverfahrens bei Verwendung der in [10] maximal auftretenden Recovery bezüglich Ethen. Druck und Temperatur können im Prozess entsprechend den Systembedingungen in [10] eingestellt werden und die Zusammensetzung des Eingangstroms ist ähnlich der in [10]. Damit wird die Verwendung der maximalen Recovery begründet [11].

Das Wirkprinzip des Membranverfahrens nach [10] wird durch die Verwendung eines Bauteils zur Aufteilung eines Stromes nach bestimmten Kriterien (Splitter) simuliert.

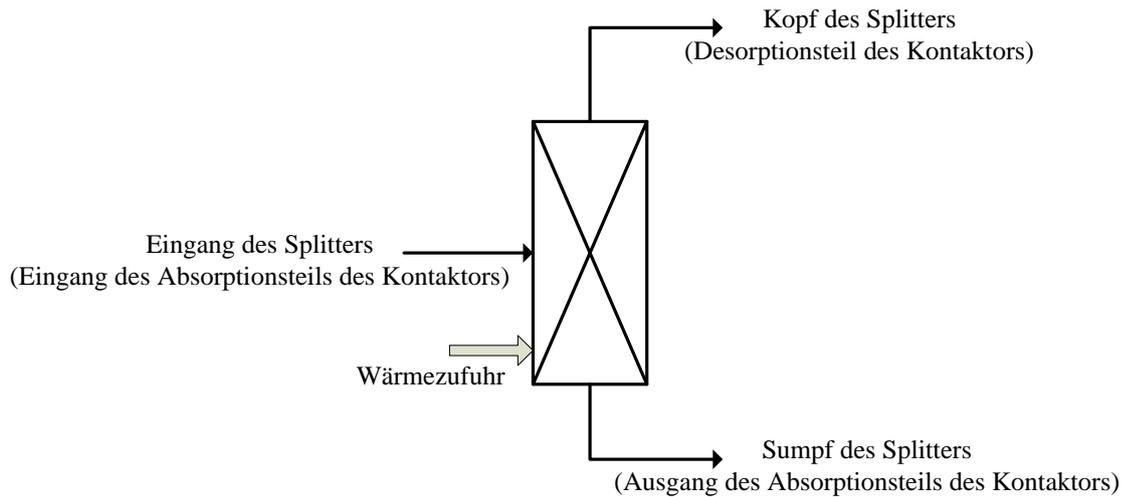


Abb. 4-1: Membrankontaktor, in die Simulation als Splitter implementiert

4.2.1 Spezifizierung des Splitters

Die notwendigen Spezifikationen, die am Splitter bei gegebenem Eingangsstrom einzustellen sind, umfassen:

- Eingangsdruck und -temperatur
- Druck und Temperatur am Kopf des Splitters
- Druck und Temperatur im Sumpf des Splitters
- Recoveries der im Strom enthaltenen Komponenten

Recovery:

Die am Splitter einzustellenden Komponentenrecoveries sind auf den Kopf des Splitters bezogen. Es wird angenommen, dass nur das Ethen vom Absorbens aufgenommen wird. Diese Annahme ist einer starken Vereinfachung geschuldet.

Ethen

Die Recovery von Ethen über Kopf wird mit 87% eingestellt. Das bedeutet, dass 87% des in den Splitter eintretenden Ethens über Kopf den Splitter verlassen. Die übrigen 13% werden über den Sumpf abgezogen.

Ethan

Die Recovery von Ethan über Kopf wird mit 0% eingestellt. Aufgrund der in [10] angegebenen Reinheiten von Ethen im Desorberteil des Kontaktors (über 99,4 mol%) wird der geringe Ethananteil im Permeat vernachlässigt.

Übrige Komponenten

Die übrigen Komponenten werden mit einer Recovery über Kopf von 0% eingestellt. Im Eingangsstrom ist eine Vielzahl an Komponenten enthalten. Der Verfahrenssimulation ist vorgegeben [11], die neben dem Ethen und Ethan im Eingangsstrom vorhandenen Komponenten über den Ausgang des Absorbers (Sumpf des Splitters) abzuziehen.

Temperatur am Kopf und Sumpf des Splitters

Die Temperaturen am Kopf und Sumpf werden auf 298 K (25°C) eingestellt.

In [10] wird der Apparat auf einer konstanten Temperatur von 298 K gehalten. Im Splitter wird diese Systemtemperatur über die Einstellung der Temperaturen des austretenden Stroms über Kopf (Desorberteil des Kontaktors) und Sumpf (Austritt am Absorber des Kontaktors) auf 298 K und durch die Implementierung einer Wärmezufuhr am Splitter, um die durch Druckänderung hervorgerufene Temperaturänderung ausgleichen zu können, erreicht.

Druck am Kopf des Splitters

Der Druck am Kopf des Splitters wird auf atmosphärischen Druck, also 1,013 bar eingestellt und entspricht dem in [10] vorhandenen Druck, bei dem das Ethen im Desorptionsteil des Kontaktors desorbiert.

Eingangsdruck und Druck am Sumpf des Splitters

Der Druck am Sumpf des Splitters und der Eingangsdruck werden auf 13 bar eingestellt [11]. Der Eingangsdruck entspricht dem Ausgangsdruck am Sumpf.

Im Membrankontaktor [10] wird der Druck am Austritt des Absorptionsteils eingestellt. Die hier verwendete Recovery entspricht mit 87% dem größten in [10] auftretenden Wert. Dieser Wert wird bei einem Druck von 5 bar am Ausgang des Absorberteils erreicht. Für die Simulation wird angenommen, dass der Systemdruck am Ausgang des Absorberteils, dem Systemdruck am Eingang des Kontaktors entspricht, also über die Länge des Absorberteils kein Druckverlust auftritt.

Es wird darauf hingewiesen, dass der gewählte Druck in der Simulation von dem im Experiment eingestellten Druck von 5 bar abweicht. Damit wird die Absicht bekundet, den Absorptionsvorgang bei höherem Systemdruck durchzuführen, da ein höherer Gesamtdruck (bzw. Partialdruck) üblicherweise das Gleichgewicht in Richtung gelöster Komponente verschiebt. Ob diese Änderung für den Membrankontaktor real umsetzbar ist und welche Folgen damit verbunden wären, ist an anderer Stelle zu untersuchen. Die Einstellung eines optimalen Systemdrucks bzw. Partialdrucks (optimal hinsichtlich des Betriebs des Kontaktors) wäre ein Ergebnis einer Untersuchung des Absorptionsprozesses.

Die Wahl von Eingangs- und Ausgangsdruck des Absorberteils (Sumpf des Splitters) hat für die Aussage, die durch die Simulation hinsichtlich Einsparung an Dampf der Hochdruckstufe durch Anwendung des Membranverfahrens zu erbringen ist, zunächst keine Bedeutung, da zusätzliche Energie für eine Verdichtung nur dann aufzubringen wäre, wenn der Eingangsdruck über dem Druck des der Membran vorgeschalteten Apparates liegen würde (ca. 30 bar).

Zustand des Eingangsstroms:

Der in den Kontaktor eintretende Strom ist nach Austritt aus der Rektifikationskolonne (D-9811), in der die Abtrennung des Methans von den C2-Komponenten erfolgt, und dem Passieren des Expansionsventils (FV8021) mit einem Dampfanteil von 40% teilverdampft. Bevor der Strom in den Splitter eintritt, erfolgt durch Installation eines Verdampfers zunächst vollständige Verdampfung und anschließend eine Erwärmung auf die Temperatur von 298 K durch Installation eines Erhitzers. Verdampfung und Erwärmung könnten auch durch die

Installation eines einzigen Erhitzers simuliert werden. Hier erfolgt eine differenzierte Ausführung, um die benötigten Wärmeleistungen für Verdampfung und Erhitzung separat zu erfassen.

Dem Kontaktormodul in [10] wird bei der maximalen Recovery ein Gasstrom aus Ethen und Ethan in der Höhe von 25 ml/min ($4,167 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$) zugeführt.

Aus der vorgeschalteten Rektifikationskolonne tritt ein Mengenstrom von 2904 kmol/h (806,67 mol/s) aus.

Unter Verwendung der idealen Gasgleichung ($R = 8,3144 \text{ J/mol K}$) und den in [10] eingestellten Zustandsgrößen, der Temperatur am Eingang bei 298 K und dem Druck am Eingang bei 5 bar, ergibt sich aus dem angegebenen Mengenstrom ein Volumenstrom von $3,997 \text{ m}^3/\text{s}$ pro Modul. Dieser Volumenstrom ist durch das Membranverfahren aufzunehmen und zu verarbeiten.

Wird also pro Modul (Außendurchmesser 12,7 mm, Länge 80 cm [10]) ein Volumenstrom von $3,997 \text{ m}^3/\text{s}$ verarbeitet, dann müssten zur Verarbeitung in der Anlage 9.592.033 Module verwendet werden. Bei dem gewählten Eingangsdruck von 13 bar wären es durch den geringeren Volumenstrom (ideale Gasgleichung) 3.688.505 Module (das entspricht ca. 374 m^3 wenn ausschließlich Labormodule zum Einsatz kommen).

4.2.2 Implementierung in die Simulation

Bevor der Splitter in die Simulation implementiert wird, ergeben sich hinsichtlich der Verfahrensführung folgende Überlegungen:

In der aktuellen Verfahrenskonfiguration werden Ethen und Ethan über Tieftemperaturrektifikation (D-9811) getrennt. Dabei treten ca. 60 t/h Ethen in die Kolonne ein und ca. 300 kg/h Ethen verlassen die Kolonne im Ethanstrom.

Wird die Rektifikationskolonne durch den Membrankontaktor ersetzt, bedeutet das zunächst, dass aufgrund der Recovery von 87% bezüglich Ethen, 7,8 Tonnen im Ethanstrom den Tieftemperaturteil verlassen. Unter der Annahme, dass sich Ethen im Spaltofen inert verhält, wird diese Menge im Anlagenkreis geführt und tritt wieder in den Tieftemperaturteil ein. Die in den Membrankontaktor eintretende Ethenmenge erhöht sich somit von ca. 60 t/h auf 68 t/h. Durch die Recovery (87%) sind es jetzt ca. 8,8 t/h an Ethen, die den Tieftemperaturteil über

den Ethanstrom verlassen und im Anlagenkreis geführt werden, der stationäre Zustand ist damit erreicht.

Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass sich eine im Anlagenkreis geführte zusätzliche Menge von ca. 8,8 t/h auf den Betrieb von Apparaten in anderen Anlagenteilen auswirkt. Insbesondere die Spaltgasverdichtung könnte dabei durch höhere Verdichtungsleistung betroffen sein.

Es werden daher zwei Möglichkeiten der Verfahrensführung entwickelt und simuliert:

- Variante 1: Das über Sumpf den Splitter verlassende Ethen wird im Kreislauf der Anlage geführt.
- Variante 2: Dem Membranverfahren wird eine Rektifikationskolonne zur Gewinnung des Ethens aus dem Abstrom des Absorberteils des Kontaktors nachgeschaltet.

4.3 Variante 1: Membrankontaktor (Simulation 10)

Variante 1 besteht im Grunde aus der Beibehaltung der vorhandenen Verfahrenskonfiguration was die Übergabe von Ethen an den Kältebereitstellungsprozess des Tieftemperaturteils und die Rückführung des Ethanstroms aus dem Tieftemperaturteil in die Spaltöfen betrifft. Die destillative Trennung von Ethan und Ethen wird durch den Membrankontaktor ersetzt. Bei der Rückführung des Ethans in die Spaltöfen wird das Ethen, das den Membrankontaktor am Ausgang des Absorbers (Sumpf des Splitters) verlässt, mitgeführt. In den Öfen wird angenommen, dass sich das Ethen im Gegensatz zu Ethan inert verhält, es reagiert also nicht, wird durch die Anlage geführt und tritt wieder in den Tieftemperaturteil der Anlage ein. Dabei erhöht sich der in den Kontaktor eintretende Ethenstrom um diesen Betrag. Durch die Recovery, die bei 87% liegt, erhöht sich dadurch aber auch die absolute Menge an im Kontaktor abgetrennten Ethen. Die Spaltöfen sind in der Simulation nicht implementiert, das rückgeführte Ethen wird daher den Spaltgasen aus den Spaltgasöfen bei Eintritt in die Primärwäsche zugeschaltet.

Weg des Ethens am Ausgang des Absorberteils des Kontaktors:

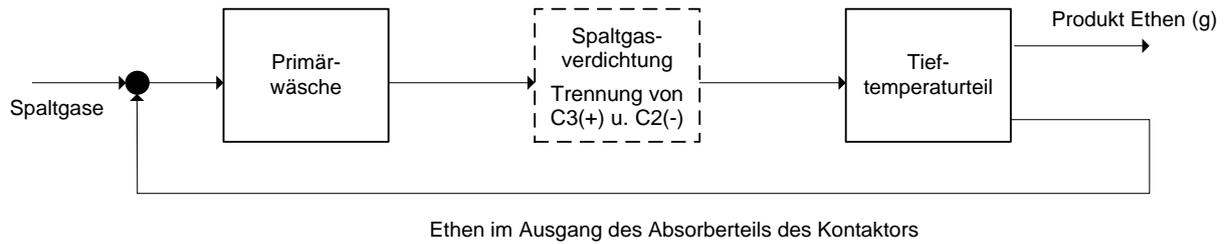


Abb. 4-2: Rückführung des Restethens

Die Implementierung des Kontaktors nach Variante 1 in die Simulation erfolgt wie in Abb. 4-3 dargestellt. Die zusätzlich installierten Bauteile sind dabei hervorgehoben gekennzeichnet.

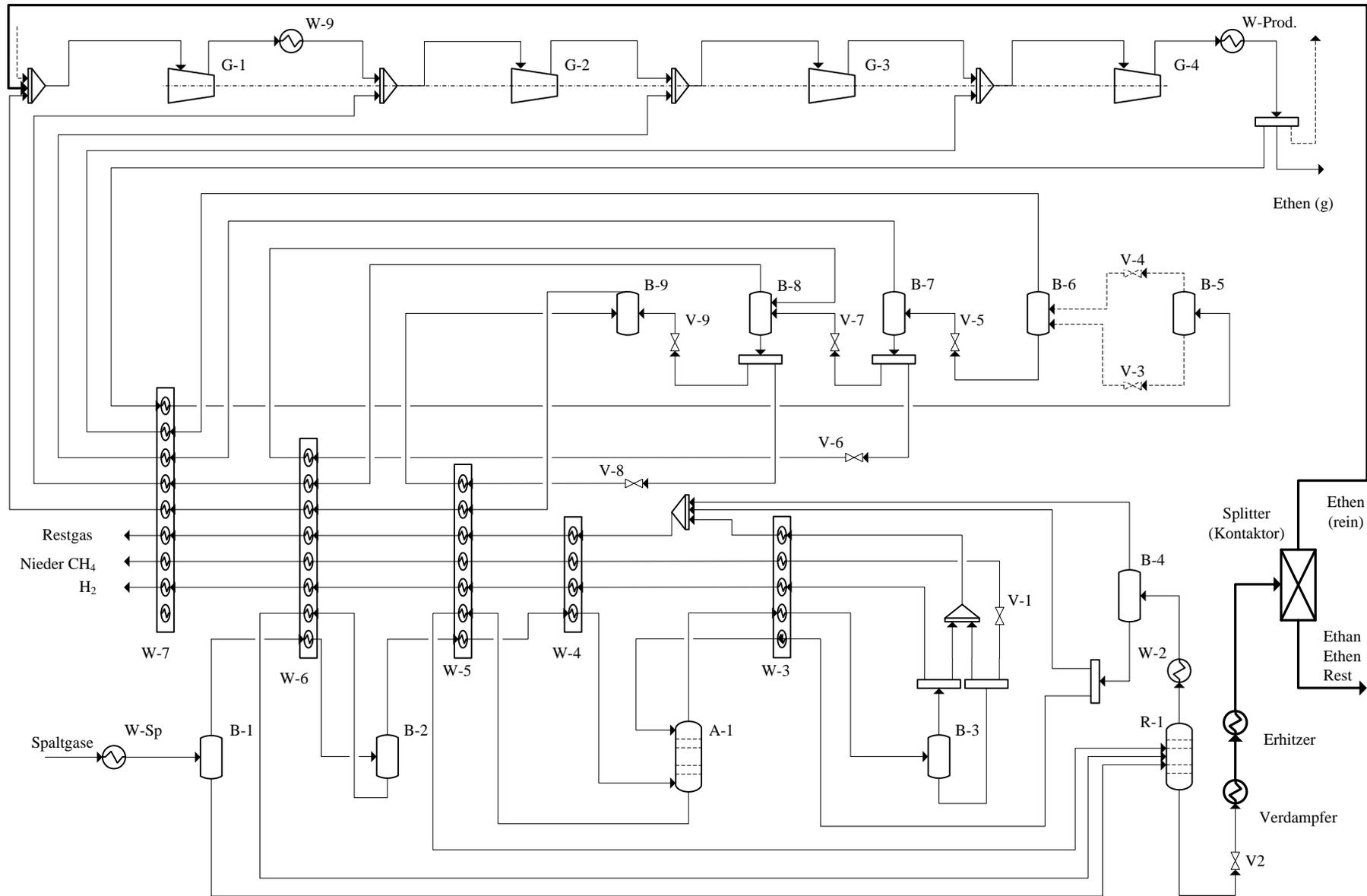


Abb. 4-3: Implementierung Membrankontaktor (vereinfachte Darstellung)

Nach Eintritt der Spaltgase in den Tieftemperaturteil der Anlage erfolgt die Prozessführung bis zur Rektifikationskolonne R-1 (D-9811) wie in der vorhandenen Verfahrenskonfiguration. Das Gasgemisch, das über den Sumpf aus der Rektifikationskolonne R-1 austritt, wird dem Splitter (Kontaktor) zugeführt. Bevor das aus R-1 austretende Gasgemisch in den Kontaktor eintritt, wird dieses auf 13 bar entspannt, im Verdampfer vollständig verdampft und im Erhitzer auf die Systemtemperatur (298 K) des Kontaktors isobar erwärmt. Verdampfung und Erhitzung werden hier separat abgebildet.

Das reine Ethen verlässt den Splitter über Kopf bei Desorptionsdruck (1 atm) und Systemtemperatur. Das Ethen wird der ersten Stufe des Ethenverdichters zugeführt (G-1). In den Verdichterstufen des Ethenverdichters (G-1, G-2, G-3, G-4) ist ein polytroper Wirkungsgrad von 80% eingestellt (siehe 13.2). Der Massenstrom des den Splitter über Kopf verlassenden Ethens beträgt 87% des eintretenden Ethens. Die restlichen 13% des in den Splitter eintretenden Ethens verlassen diesen mit den anderen Komponenten über den Sumpf bei Eingangsdruck (13 bar) und Systemtemperatur. Der den Splitter über Sumpf verlassende Strom wird in einen weiteren Splitter geführt, der kein reales Bauteil darstellt, sondern eine reine Simulationsmaßnahme ist, um die Rückführung über den Spaltofen darstellen zu können (Abb. 4-4). Dort wird das Ethen vom Gasstrom separiert und auf den Druck (2 bar) und die Temperatur (488,75 K) der Spaltgase aus den Öfen eingestellt. Nach Separation und Druck- und Temperatureinstellung wird das Ethen in die Simulation der Primärwäsche rückgeführt.

Das Gasgemisch aus Ethan und dem Rest wird, wie in der Referenzsimulation dargestellt, allerdings unter denselben Druck- und Temperatureinstellungen wie beim separierten Ethen, aus dem Tieftemperaturteil exportiert.

Zur Rückführung des Ethens wird, wie in Abb. 4-2 dargestellt, als Simulationsmaßnahme nach dem Kontaktor ein Splitter verwendet.

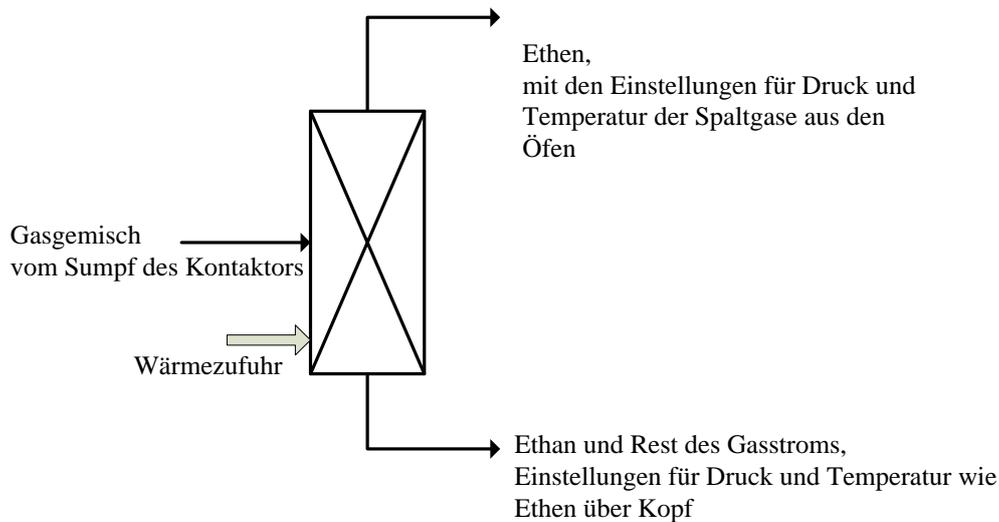


Abb. 4-4: Splitter zur Separierung des Ethens vom austretenden Gasstrom am Sumpf des Kontaktors

Über die Länge des Kontaktors bleibt der Gesamtdruck konstant. Der Kontaktor ist beheizt (25°C) und der Eingangsstrom wird dampfförmig zugeführt.

Diese Art der Implementierung kann prinzipiell zur Simulation von Membranverfahren unter Verwendung des Splitter-Bauteils verwendet werden. Die Art der Membran bzw. die Art des Membranverfahrens spielt dabei keine Rolle, da der Splitter in der Simulation über die o.a. Parameter grundsätzlich definiert ist.

4.4 Variante 2: Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikation (Simulation 14)

In Variante 2 wird dem Kontaktor eine Rektifikationskolonne nachgeschaltet. Die Aufgabe der Rektifikationskolonne ist es, das Ethen vom aus dem Absorptionsteil des Kontaktors austretenden Gasstrom mit hoher Reinheit zu separieren.

Im stationären Fall werden bei der Verfahrensführung mit Variante 1 $8,9 \text{ t/h}$ Ethen im Kreislauf geführt. Das entspricht ca. 15% der stündlich als Produkt abgeführten Masse. Die dem Kontaktor nachgeschaltete Rektifikationskolonne sollte die im Kreislauf geführte Menge an Ethen reduzieren und die Anlageneffizienz somit erhöhen.

Die Rektifikationskolonne ist thermodynamisch so auszugestalten, dass mit dem Einsatz günstigster Mittel ein Maximum an Ethen aus dem Gasstrom gewonnen wird. Unter dem

Einsatz günstigster Mittel wird hier beim Betrieb der Rektifikationskolonne die im Kondensator zur Bildung des Rücklaufverhältnisses benötigte Temperatur verstanden. Zur thermodynamischen Auslegung der Rektifikationskolonne werden daher ähnliche Überlegungen hinsichtlich des Kälteeinsatzes wie in Kapitel 3 angestellt. Eine Propenkälteanlage (C3 Kälteanlage) wird bereits betrieben und die in Tab. 3-2 angegebenen Temperaturen bereitgestellt. Dampf der Mitteldruckschiene (13 bar) ist im Überschuss vorhanden. Die Rektifikationskolonne wird daher so gestaltet, dass die Temperatur im Kondensator durch Einsatz von C3 Kälte der ersten Druckstufe betrieben werden kann.

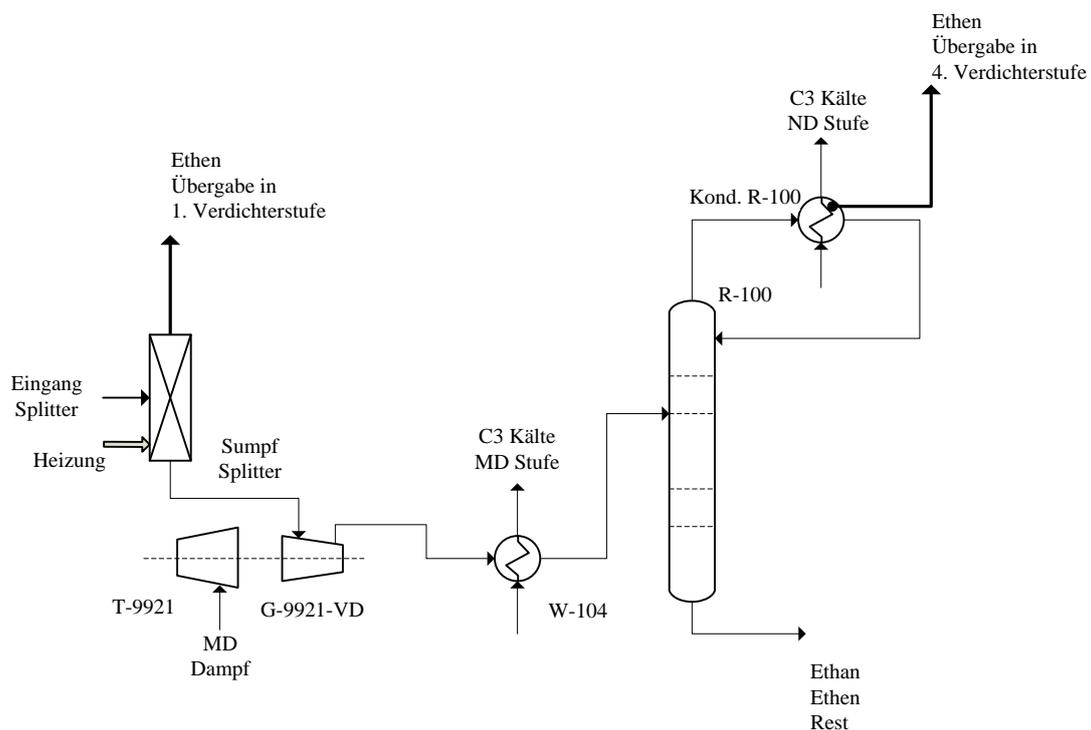


Abb. 4-5: Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikationskolonne

Gemäß Abb. 4-5, wird der den Splitter am Sumpf verlassende Gasstrom (25°C , 13 bar) in den Verdichter (G-9921-VD) eingeleitet. Dort erfolgt eine Verdichtung auf 20 bar. Die Verdichtung wird deshalb durchgeführt, damit im Kondensator der Rektifikationskolonne (Kond. R-100) mit C3 der Niederdruckstufe des C3 Kältekreislaufes kondensiert werden kann. Der Leistungseinsatz des Verdichters ist dabei abhängig vom Druck am Sumpf- bzw. vom Eingangsdruck des Kontaktors. Je kleiner die Druckdifferenz, desto weniger Leistung ist vom Verdichter bereitzustellen. Der Verdichter ist als Turbokompressor ausgeführt und wird durch den Dampf der Mitteldruckschiene betrieben. Im Wärmeübertrager (W-104) erfolgt durch Einsatz von C3 Kälte der Mitteldruckstufe eine Vorkühlung auf 0°C . Der Wärmeübertrager arbeitet isobar.

Das separierte (reine) Ethen aus dem Splitter wird der ersten Verdichterstufe des Ethenverdichters (G-1) übergeben und das rückgewonnene Ethen aus der nachgeschalteten Rektifikationskolonne (ca. 7,7 t/h, Reinheit 98 mol%, verunreinigt hauptsächlich durch Ethan mit 0,15 t/h) wird der vierten Verdichterstufe des Ethenverdichters (G-4) zugeführt.

Temperaturprofil der Rektifikationskolonne (R-100):

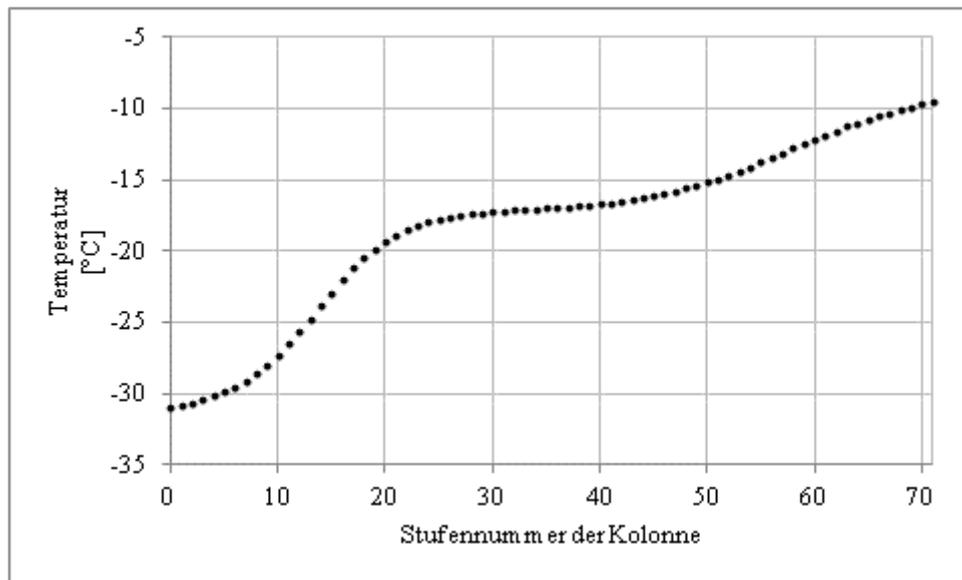


Abb. 4-6: Temperaturprofil der Rektifikationskolonne

Die Rektifikationskolonne zur Ethenseparierung wird mit insgesamt 72 Stufen ausgeführt. Um die numerische Abfolge der Stufen aus KBC Petro-Sim[®] beizubehalten, wird der Kondensator in Abb. 4-6 mit 0 und der Verdampfer mit der Nummer 71 belegt. Die Stufen werden vom Kopf der Kolonne abwärts gezählt. Die Kondensatortemperatur beträgt ca. -31°C. Der Einsatzstrom wird der Stufe 32 vollständig verdampft zugeführt. Der Druckverlust wird im Verdampfer mit 1 bar und im Kondensator mit 1,3 bar angegeben. Das Rücklaufverhältnis im Kondensator beträgt ca. 7,4 und im Verdampfer 2,9.

4.5 Weitere Untersuchungen der Membranverfahren

In weiteren Untersuchungen werden beide Varianten mit folgenden Zwischenkühlungen aus Kapitel 3 kombiniert: Variante 1 wird in den Simulationen 11 bis 13 und Variante 2 in den Simulationen 14 bis 17 jeweils mit den Zwischenkühlungen 1, 4 und 8 kombiniert.

4.6 Auswertung und Beurteilung der Membrankontaktorvarianten

In diesem Abschnitt werden die Membrankontaktorvarianten anhand ihrer Ergebnisse hinsichtlich des Einsparungspotentials bezüglich des Energieeinsatzes im Tieftemperaturteil der Anlage beurteilt. Die Ergebnisse setzen sich immer aus dem Trennverfahren und der Annahme eines polytropen Wirkungsgrades von 80% in den Verdichterstufen des Ethenverdichters (siehe Kapitel 13.2 und Kapitel 13.5) zusammen und werden jeweils mit den Werten aus der Referenzsimulation [4], wenn nicht anders angegeben, verglichen.

4.6.1 Beurteilung anhand der Produktströme

Aus Abb. 4-7 geht hervor, dass die insgesamt rückgewonnenen Mengen an Ethen in den untersuchten Verfahrenskonfigurationen ähnliche Werte aufweisen. In Variante 1 und Variante 2 fällt durch den geschlossenen Ethenkältekreislauf kein flüssiges Ethen an. Dadurch wird der Export von gasförmigem Ethen gegenüber der Referenz, in der ein offener Ethenkältekreislauf betrieben und zusätzlich zum gasförmigen flüssiges Ethen abgeführt wird, in Variante 1 um ca. 8,4% auf 59,6 Tonnen pro Stunde und in Variante 2 um ca. 9% auf 59,9 Tonnen pro Stunde erhöht. Auf die stündlich aus der Anlage abgeführten Massen an Wasserstoff, Methan und Ethan haben beide Varianten keinen Einfluss.

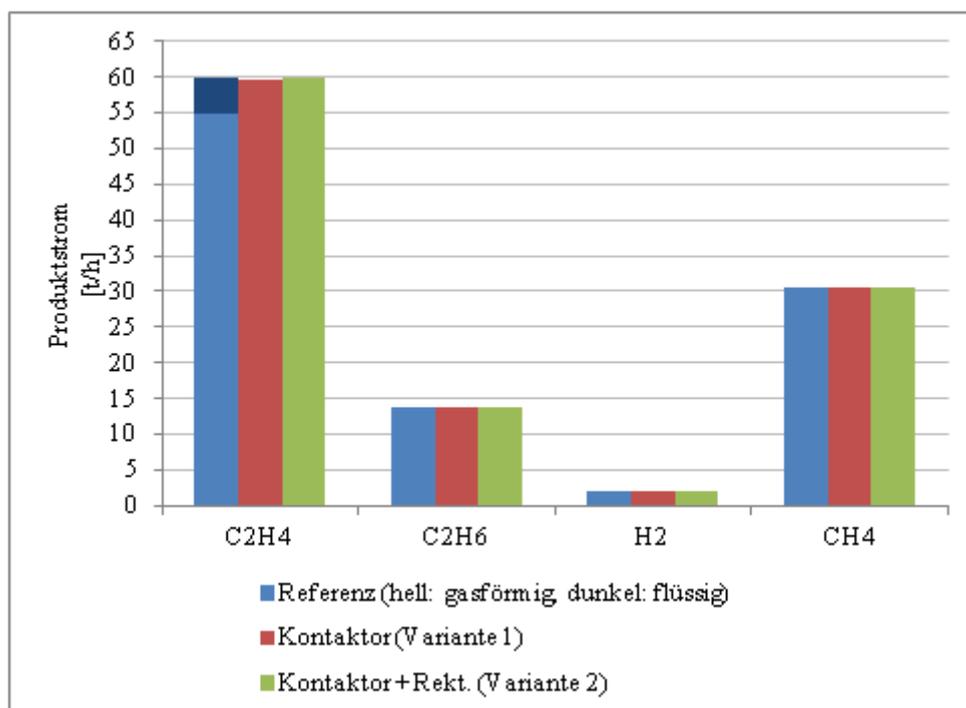


Abb. 4-7: Vergleich der Produktströme bei Einsatz der Membrankontaktorvarianten

4.6.2 Beurteilung anhand von Recovery und Reinheit

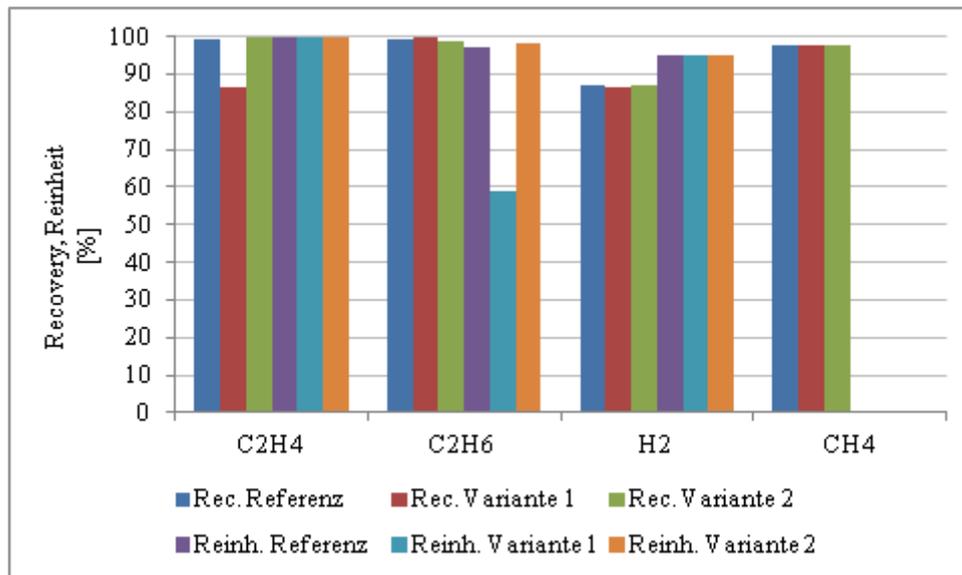


Abb. 4-8: Vergleich der Recoveries und Reinheit der Komponenten

Variante 1 (Membrankontaktor)

Durch Variante 1 wird die Recovery des Ethens gegenüber der Referenz um ca. 12% verringert. Gleichzeitig erhöht sich die Reinheit um 0,15 mol% auf 99,99 mol%, da die Recovery von Ethan gegenüber der Referenz um 0,57% zunimmt, und daher weniger dem Ethen nach der Trennung beigemischt ist. Umgekehrt ist der Ethanstrom durch das Ethen höher verunreinigt als in der Referenz, so dass sich nach dem Membrankontaktor eine Verringerung der Reinheit des Ethans um ca. 39 mol% ergibt. Auf die Reinheit des Wasserstoffs und die Recovery des Methans hat Variante 1 keinen Einfluss (Reinheit des Methans im Niederdruckstrom und im Restgas entspricht ungefähr den Werten der Referenz). Die Recovery des Wasserstoffs zeigt in Abb. 4-8 gegenüber Variante 2 und der Referenz einen geringfügig kleineren Wert an. Diese Abweichung beträgt ca. 11 kg/h (0,5%) und ergibt sich daraus, dass diese Menge an Wasserstoff mit der partiellen Kondensation der C-Fraktion aus der Dampfphase ausgeschieden wird. Diese Menge gelangt in den Entmethaner (Abb. 4-3, Kolonne R-1) und wird über den Kopf der Kolonne gemeinsam mit Methan von der C2-Fraktion abgetrennt.

Zunächst erscheint es unlogisch, dass die rückgewonnene Ethenmenge in Variante 1 einen ähnlichen Wert wie die Referenz aufweist (siehe 4.6.1), da die Recovery von Ethen um ca. 12% geringer ist. Die Begründung dafür liegt in der Masse an stündlich in den Tieftemperaturteil eintretendem Ethen. 87% dieses Ethens werden durch den

Membrankontaktor rückgewonnen, die restlichen 13% werden mit dem Ethan in die Spaltöfen rückgeführt. Dort wird das Ethan umgewandelt, das Ethen wird als inert angenommen, daher chemisch nicht verändert und dadurch im Kreislauf geführt. Dies führt zu einem entsprechend größeren Ethenstrom, der in den Tieftemperaturteil eintritt, was trotz geringerer Recovery gegenüber der Referenz absolut eine ähnliche rückgewonnene Ethenmenge ergibt.

Variante 2 (Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikation)

Dem Membrankontaktor ist eine Rektifikationskolonne zur Trennung des Gemisches aus Ethan und dem Rest an Ethen, der durch den Kontaktor nicht rückgewonnen werden konnte, nachgeschaltet. Durch diese Kombination ergibt sich eine Recovery bezüglich Ethen von ca. 99,4%, das entspricht in etwa der Recovery der Referenz. Einhergehend mit der Separierung des Ethens aus dem Ethanstrom ist eine Minderung der Reinheit des Ethens gegenüber der Referenz um ca. 0,10 mol% und beträgt ca. 99,7 mol%. Dies ist dadurch begründet, dass ein Anteil des Ethans das die Rektifikationskolonne über Kopf verlassende Ethen verunreinigt. Das wiederum führt zu einer Verminderung der Recovery des Ethans gegenüber der Referenz um 0,47%, auf ca. 98,95%. Die Reinheit des Ethanstroms wird durch die höhere Recovery des Ethens gegenüber der Referenz um ca. 1,1 mol%, auf ca. 98,17 mol% vergrößert. Auf die Recovery und die Reinheit von H₂ und CH₄, weist Variante 2 gegenüber der Referenz keine Unterschiede auf.

4.6.3 Die Varianten im Vergleich

		Variante 1	Variante 2
Exportmenge Ethen	[kg/h]	59585,62	59949,28
Produktreinheit Ethen	[mol%]	99,99	99,74
HDD Import	[kg/h]	51142,75	50017,28
MDD Export	[kg/h]	29828,25	14389,06

Tab. 4-1: Vergleich Kontaktor (Variante 1) mit Kontaktor und nachgeschalteter Rektifikationskolonne (Variante 2)

Mit Variante 2 (Kontaktor mit nachgeschalteter Rektifikation) werden stündlich ca. 364 kg mehr Ethen exportiert. Das entspricht einem Plus von ca. 0,6% bezogen auf Variante 1. Die geforderten Reinheiten werden in beiden Varianten erreicht. Variante 2 bezieht in der Stunde ca. 1,1 Tonnen weniger an Dampf der Hochdruckstufe in Bezug auf Variante 1, dies bedeutet

eine Einsparung von ca. 2,2%. Durch den Einsatz von C3 Kälte der Niederdruckstufe des C3 Kältekreislaufes im Kondensator der Rektifikationskolonne und den Betrieb des Turbokompressors zur Verdichtung auf den Kondensatordruck wird der Export des Dampfes der Mitteldruckstufe belastet. Daher ergibt sich für den MD-Dampf Export in Variante 2 gegenüber Variante 1 eine Verringerung von ca. 52%.

In Variante 1 hat der Eingangsdruck (entspricht dem Druck am Sumpf des Kontaktors) in der Simulation, sofern er nicht größer gewählt wird als die ca. 30 bar des vorgeschalteten Apparates keinen Einfluss auf die Import- und Exportgrößen der Anlage.

In Variante 2 nimmt der Eingangsdruck Einfluss auf die Leistung des der Rektifikationskolonne nachgeschalteten Turbokompressors, der mit MD-Dampf betrieben wird. Je kleiner die Differenz (20 bar am Ausgang des Verdichters) desto geringer die Belastung der MD Stufe. Ist es möglich, den Kontaktor bei einem Eingangsdruck von ca. 20 bar zu betreiben, kann, zumindest für die Kondensation mit C3 Kälte der ND Stufe, auf weitere Verdichtung verzichtet werden.

Abhängig von der vom Turbokompressor bereitzustellenden Leistung könnte dieser anstatt vom Dampf der Mitteldruckstufe, mit Dampf der Niederdruckstufe betrieben werden und so den Export von MD-Dampf nicht belasten.

4.6.4 Beurteilung der Kontaktorvarianten anhand des energetischen Optimierungspotentials

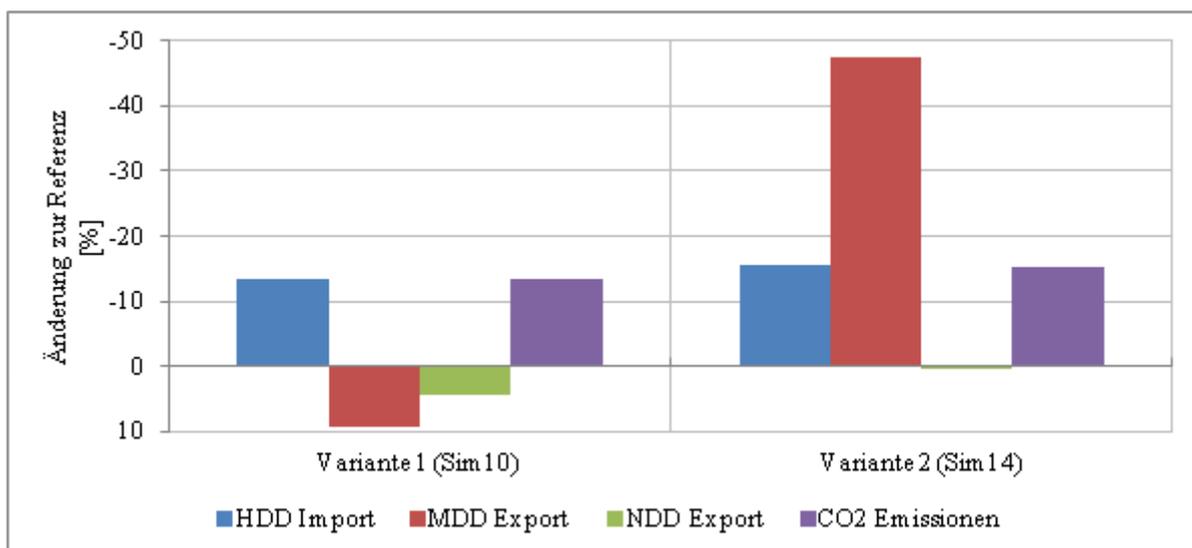


Abb. 4-9: Vergleich des energetischen Optimierungspotentials von Kontaktor (Variante 1) mit Kontaktor und nachgeschalteter Rektifikationskolonne (Variante 2)

Das energetische Optimierungspotential ergibt sich durch die Installation von Variante 1 bzw. Variante 2 und einem angenommenen polytropen Wirkungsgrad von 80% in den Verdichterstufen des Ethenverdichters.

Variante 1

Durch Variante 1 (Sim10) wird der Import von Dampf der Hochdruckstufe gegenüber der Referenz um ca. 13,6% reduziert. Dass die Reduktion des Importes von HD-Dampf nicht höher ist, liegt einerseits am geringen Desorptionsdruck des Membrankontaktors (die gesamte Ethenmenge, die durch den Membrankontaktor gewonnen wird, ist im Ethenverdichter auf 22,6 bar zu verdichten). Andererseits wird im Kopfkondensator der Rektifikationskolonne (D-9811) aufgrund der höheren Ethenmenge im Zufluss mehr Kälteleistung durch Ethen der Niederdruckstufe aus dem Ethenkältekreislauf benötigt. Durch die Ersetzung der Rektifikationskolonne (D-9851) in der Referenz durch den Membrankontaktor nach Variante 1, wird der Propenkältekreislauf durch den im Tieftemperaturteil installierten Kondensator E-9904 zusätzlich belastet. Der MDD Export allerdings wird um ca. 9% erhöht. Das liegt daran, dass eine höhere Ethenmenge in der Anlage geführt wird und dadurch mehr HD-Dampf für die Spaltgasverdichtung einzusetzen ist. Die Einsparung an CO₂-Emissionen gegenüber der Referenz entspricht in etwa der Einsparung an HDD Import. Der NDD Export wird gegenüber der Referenz um ca. 4,3% erhöht.

Variante 2

Durch Variante 2 (Sim14) wird der Import von Dampf der Hochdruckstufe um ca. 15,4% gegenüber der Referenz reduziert. Wie bei Variante 1 ist bei Variante 2 das durch den Kontaktor gewonnene Ethen bei einem Desorptionsdruck, der dem atmosphärischem Druck entspricht, für den Export auf 22,6 bar zu verdichten.

Das Ethen, das durch die dem Kontaktor nachgeschaltete Rektifikationskolonne gewonnen wird, kann aufgrund des in der Simulation (Sim14) vorhandenen Kondensatordrucks von 18,7 bar der vierten Verdichterstufe zugeführt werden.

Durch den Betrieb des Verdichters zur Verdichtung des Eingangsstroms der dem Kontaktor nachgeschalteten Rektifikationskolonne mit Dampf der Mitteldruckstufe, durch den Einsatz von Propenkälte der dritten Druckstufe des Propenkältekreislaufes zur Vorkühlung, sowie durch den Einsatz von Propenkälte der ersten Druckstufe des Propenkältekreislaufes (siehe

Tab. 3-2) im Kondensator der nachgeschalteten Kolonne, wird der Export von Dampf der Mitteldruckstufe um ca. 47,4% reduziert. Die Einsparung der CO₂-Emissionen entspricht ungefähr der Einsparung an HDD Import.

4.6.5 Differenzierte Betrachtung des energetischen Optimierungspotentials des Kontaktors anhand HD-Dampf Import

In Abschnitt 4.6.3 ergibt sich das energetische Optimierungspotential durch den angenommenen polytropen Wirkungsgrad in den Verdichterstufen des Ethenverdichters und den Einsatz des Membrankontaktors. Für eine objektive Bewertung des Trennverfahrens (Varianten 1 und 2) wird der Einfluss des angenommenen Wirkungsgrades herausgerechnet (siehe Kapitel 13.2 und Kapitel 13.5).

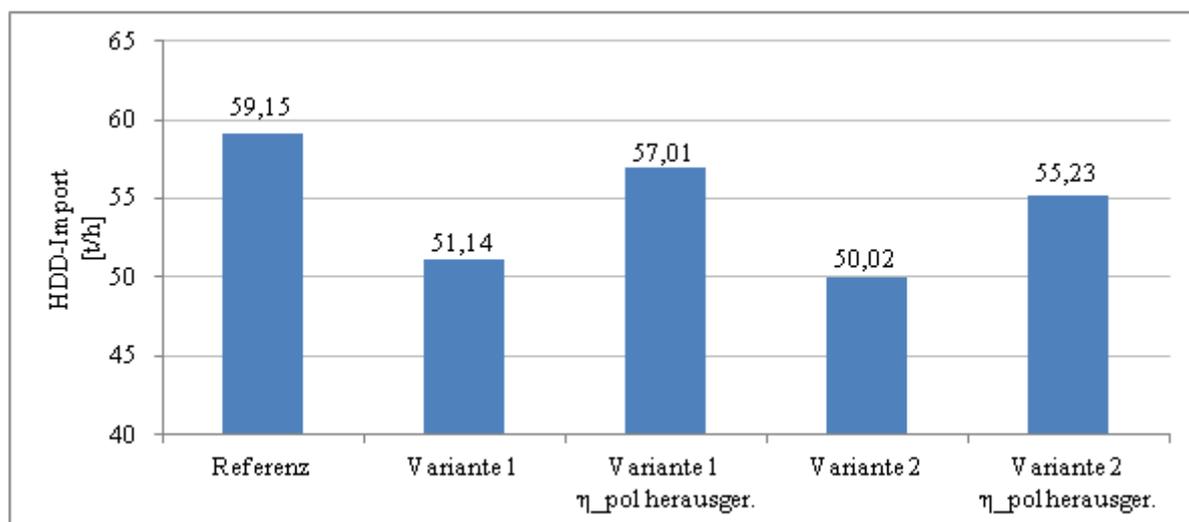


Abb. 4-10: Betrachtung des energetischen Optimierungspotentials des Membrankontaktors (Varianten 1 und 2) anhand HDD Import mit und ohne Einfluss der Wirkungsgradanpassung

In Abb. 4-10 ist der Einfluss des angenommenen polytropen Wirkungsgrades in den Verdichterstufen des Ethenverdichters aus dem Ergebnis herausgerechnet (Varianten 1 und 2, η_{pol} herausger.). Dadurch ist erkennbar, dass der Import von HD-Dampf in beiden Varianten im Vergleich zur Referenz abnimmt. In Variante 1 nimmt der Import um ca. 3,6 wt% und in Variante 2 um ca. 6,63 wt% ab.

Aus Abb. 4-10 ist abzulesen, dass bei polytropen Wirkungsgraden von 80% in den Verdichterstufen des Ethenverdichters bereits weitere Einsparungen im HD-Dampf Import stattfinden.

4.6.6 Weiterführende Überlegungen

In Kapitel 3 werden verschiedene Möglichkeiten von Zwischenkühlungen im Ethenverdichter untersucht. Aus den Ergebnissen geht hervor, dass durch den Einsatz von Zwischenkühlungen der Import von Dampf der Hochdruckstufe reduziert werden kann.

Durch Kombinationen aus in Kapitel 3 ausgewählten Zwischenkühlungen im Ethenverdichter und den Varianten 1 und 2 des Membrankontaktors könnte daher der HDD Import, im Vergleich mit den zuvor beschriebenen wirkungsgradbereinigten Kontaktorvarianten, vermindert werden. Die Varianten 1 und 2 werden daher mit den Zwischenkühlungen ZK1 (Sim1), ZK4 (Sim5) und ZK8 (Sim8) kombiniert.

Energetisches Optimierungspotential des Membrankontaktors aus den weiterführenden Überlegungen

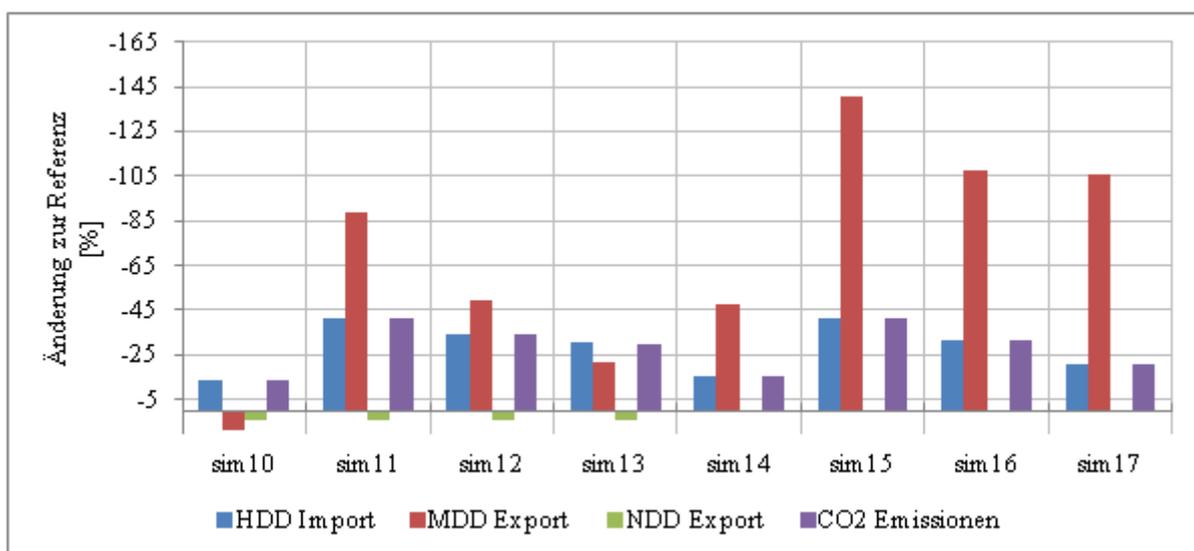


Abb. 4-11: energetisches Optimierungspotential des Membrankontaktors mit dem Einsatz von Zwischenkühlungen (Umsetzung der weiterführenden Überlegungen)

In Abb. 4-11 ist das energetische Optimierungspotential bei Kombination der Kontaktorvarianten 1 (Sim10) und 2 (Sim14) mit den Zwischenkühlungen ZK1, ZK4 und ZK8 unter Annahme eines polytropen Wirkungsgrades von 80% in den Ethenverdichterstufen abgebildet.

Die Kombinationen von Variante 1 mit den Zwischenkühlungen werden durch die Simulationen Sim11 bis Sim13 und jene von Variante 2 durch die Simulationen Sim15 bis Sim17 repräsentiert.

Aus Abb. 4-11 ist zu erkennen, dass die Einsparung an HDD Import bei Verwendung von Zwischenkühlungen gegenüber den Varianten 1 und 2 ohne Zwischenkühlung (Sim10, Sim14) zunimmt. Mit zunehmender Einsparung an HDD Import nimmt auch die Reduktion an MDD Export zu (siehe auch Kapitel 3.4.3 und 3.4.4).

In Simulation Sim11 wird die Zwischenkühlung ZK1 in Variante 1 eingesetzt. Gegenüber Sim10 (ohne Zwischenkühlung) kann die Einsparung an HDD Import um ca. 32,3% vergrößert werden. Gleichzeitig wird aber der Export an MD-Dampf um ca. 88,6% bezogen auf die Referenz reduziert.

In den Simulationen Sim12 (Variante 1 + ZK4) bzw. Sim13 (Variante 1 + ZK8) wird der HDD Import gegenüber Sim10 um ca. 24,34% bzw. ca. 19,36% erhöht. Der dafür benötigte MD-Dampf kann durch den vorhandenen Überschuss bzw. durch Reduktion des Exportes gedeckt werden, ein Import von MD-Dampf ist nicht notwendig.

In Simulation Sim15 wird Variante 2 mit Zwischenkühlung ZK1 kombiniert. Der HDD Import kann gegenüber Sim14 (ohne Zwischenkühlung) um ca. 30,64% reduziert werden. Durch den Einsatz von ZK4 (Sim16) kann die HDD Einsparung bezogen auf Sim14 um 19% und durch Einsatz von ZK8 (Sim17) um ca. 6,3% erhöht werden. Dem gegenüber steht in allen Kombinationen von Variante 2 mit den Zwischenkühlungen eine Reduktion des MDD Exportes von über 100% gegenüber der Referenz, d.h. Dampf der Mitteldruckstufe ist zu importieren.

Die Reduzierung der CO₂ Emissionen entspricht in allen in Abb. 4-11 abgebildeten Simulationen ungefähr der Einsparung an HDD Import.

In den nachfolgenden Diagrammen (Abb. 4-12 und Abb. 4-13) sind Vergleiche der absoluten Werte für den Import an HD-Dampf für die Kombinationen der Kontaktorvarianten mit den Zwischenkühlungen enthalten.

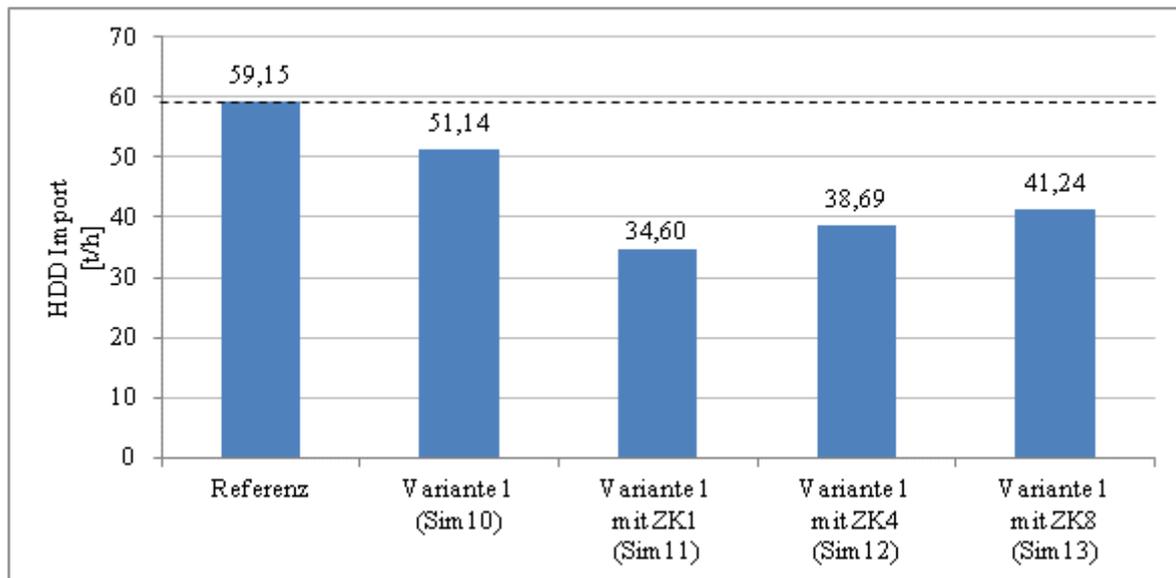


Abb. 4-12: importierte Mengen an HD-Dampf für Kontaktorvariante 1 mit und ohne Zwischenkühlungen

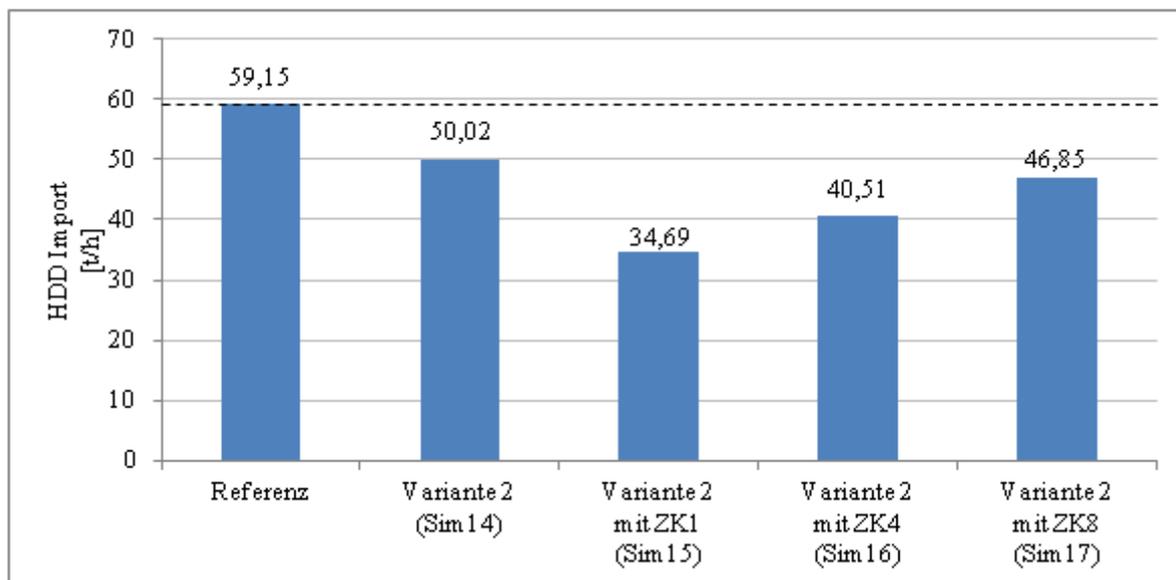


Abb. 4-13: importierte Mengen an HD-Dampf für Kontaktorvariante 2 mit und ohne Zwischenkühlungen

Verhältnis Nutzen (Einsparung HD-Dampf) zu Aufwand (Einsatz MD-Dampf)

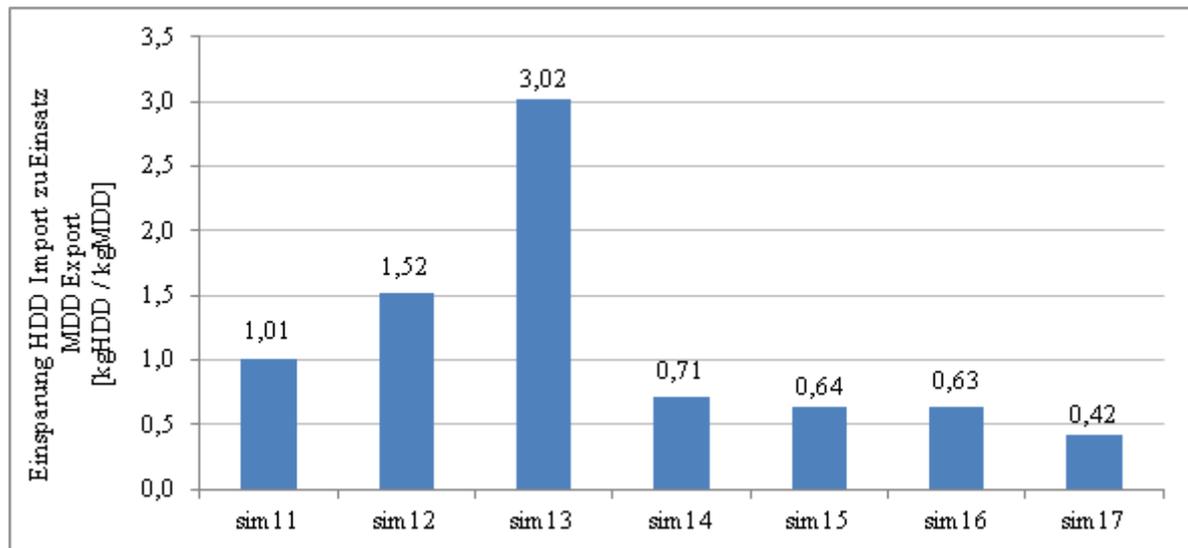


Abb. 4-14: Verhältnis von Einsparung an HDD Import zu Einsatz MDD Export für Kontaktorvarianten mit Zwischenkühlungen

Aus Abb. 4-14 geht hervor, dass in den Simulationen Sim11 bis Sim13 (Variante 1 mit Zwischenkühlungen) ein Verhältnis von Einsparung an HD-Dampf Import zu eingesetztem MD-Dampf Export über dem Wert Eins vorliegt. Pro eingesetztem Kilogramm MD-Dampf wird also mehr als ein Kilogramm HD-Dampf eingespart. In Sim10 (Variante 1 ohne Zwischenkühlung, in Abb. 4-14 nicht abgebildet) wird kein MD-Dampf eingesetzt, daher findet keine Reduktion des MD-Dampf Importes statt. In den Simulationen Sim14 bis Sim17 (Variante 2 mit und ohne Zwischenkühlungen) hingegen liegt das Verhältnis unter einem Wert von eins. Pro eingesetztem Kilogramm MD-Dampf wird weniger als ein Kilogramm HD-Dampf eingespart.

Aus Abb. 4-14 wird insbesondere eine weiterführende monetäre Untersuchung über den exergetischen Wert der Druckstufen empfohlen, da sich dadurch auch ein Verhältnis unter Eins ökonomisch positiv auswirken könnte.

4.6.7 Schlussfolgerungen

Bewertung der Technologie

Ethen wird durch Desorption aus dem Permeat des Membrankontaktors bei 1 atm gewonnen. Das Ethen soll für die weitere Verwendung auf ca. 22,6 bar verdichtet werden, d.h. dem Ethen ist die Druckdifferenz entsprechend aufzuprägen (der im Verhältnis zum vorgegebenen

Enddruck geringe Desorptionsdruck wirkt dabei wie ein optimierungslimitierender Wert). Dafür wird ein Turbokompressor verwendet. Wenn dieser, wie im hier betrachteten Fall, durch Dampf aus der Hochdruckstufe angetrieben wird, dann wirkt sich dies auf den Import von Dampf der Hochdruckstufe (HDD Import) aus.

Je höher also der Druck des Ethens bei Eintritt in den Ethenverdichterstrang, desto niedriger die Leistung, die der Turbokompressor aufzubringen hat und desto geringer der HDD Import. Die Desorption sollte daher bei größtmöglichem Druck stattfinden.

Eine andere Möglichkeit wäre der Einsatz einer Membran, die das Ethen retentatseitig rein abzieht. Der Druck des Ethens am Ausgang ist dabei nur abhängig vom Druckverlust über die Länge des Membrankontaktors.

Bewertung des Optimierungspotentials

Wird der Einfluss des angenommenen polytropen Wirkungsgrades der Verdichterstufen des Ethenverdichters aus den Ergebnissen von Variante 1 und 2 herausgerechnet und damit nur die Varianten des Membrankontaktors alleine beurteilt, ergibt sich in beiden Varianten ein positives Optimierungspotential hinsichtlich des Importes von Dampf der Hochdruckstufe, d.h. es wird weniger Dampf der Hochdruckstufe importiert als in der Referenz.

In den Varianten 1 (Membrankontaktor) und 2 (Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikation) erklärt sich das positive Optimierungspotential gegenüber der Referenz insbesondere durch die geringere Belastung der Verdichterstufen drei und vier des Ethenverdichters. In beiden Varianten werden in den Verdichterstufen eins und zwei höhere Leistungen gegenüber der Referenz aufgrund des höheren Bedarfs an Ethenkälte der Niederdruckstufe benötigt. Gleichzeitig werden aber die Verdichterstufen drei und vier, die insgesamt höhere Massenströme verarbeiten als die Stufen eins und zwei und dadurch die Gesamtleistung des Verdichters stärker beeinflussen, entlastet. Diese Entlastungen für die Verdichtungsleistung in den Verdichterstufen drei und vier betragen in beiden Varianten gegenüber der Referenz in etwa 67% in der dritten und 30% in der vierten Stufe.

Die Kombination der Varianten 1 und 2 mit den ausgewählten Zwischenkühlungen führt dann zu weiteren Einsparungen an HDD Import im Vergleich zur Referenz. Der verminderte Export an MD-Dampf bzw. die Notwendigkeit des Importes von MD-Dampf bei der Kombination von Variante 2 und den Zwischenkühlungen steht dem gegenüber.

Bewertung des Ethenexports

Die insgesamt rückgewonnene Menge an Ethen ist in den untersuchten Konfigurationen des Tieftemperaturteils ähnlich. Verglichen mit der Referenz (offener Ethenkältekreislauf, neben gasförmigem wird auch flüssiges Ethen abgeführt) wird bei geschlossenem Kältekreislauf (Ethen wird nur gasförmig abgeführt) in Variante 1 ca. 8,4% und in Variante 2 ca. 9% mehr an gasförmigem Ethen zur Weiterverwendung exportiert.

Bewertung der Anlagenrentabilität

Es wird hier angenommen, dass die Exportmenge von Ethen, der Import von HD-Dampf und der Export von MD-Dampf für die Erhebung der monetären Anlagenrentabilität von besonderer Bedeutung sind. Auch die Reinheit könnte ein Kriterium der Rentabilität darstellen.

Aus den Ergebnissen und der Auswertung von Kapitel 4.6 ergibt sich die Aussage, dass eine Beurteilung der Rentabilität ausschließlich anhand des energetischen Optimierungspotentials nicht vollständig sein kann. Maßnahmen im Tieftemperaturteil, die Auswirkungen auf die monetäre Rentabilität haben, sind in die Beurteilung mit einzubeziehen.

Wird der Einfluss der Annahme des polytropen Wirkungsgrades der Verdichterstufen des Ethenverdichters aus der Beurteilung gerechnet, verringert sich zwar die Einsparung an HDD Import, dieser ist aber immer noch geringer als jener der Referenz.

Werden die Varianten 1 und 2 mit Zwischenkühlungen kombiniert, ergeben sich weitere Einsparungen im HDD Import und den CO₂ Emissionen im Vergleich zur Referenz. Dem steht allerdings die Reduktion des Exportes von MD-Dampf gegenüber.

Um aus den Untersuchungen die optimale Variantenkombination zu finden, sollte daher eine monetäre Beurteilung der hier dargestellten Änderungen gegenüber der Referenz erfolgen.

5 Gegenüberstellung des Optimierungspotentials bisher untersuchter Modifikationen

Die Gegenüberstellung der bisher untersuchten alternativen Gestaltungen des Tieftemperaturteils erfolgt auf mehreren Ebenen. Dadurch wird eine differenzierte und objektivere Bewertung und Beurteilung der Ergebnisse aus den Simulationen ermöglicht.

Auf Ebene eins erfolgt zunächst in Abb. 5-1 die Gegenüberstellung des energetischen Optimierungspotentials hinsichtlich HDD Import, MDD- und NDD Export sowie der CO₂-Emissionen. Der Überblick wird dabei über die relativen Änderungen dieser Größen bezüglich der Referenz [4] gegeben. Ist der monetäre Wert der Import- Export- und Emissionsgrößen auf die Masse bezogen, dann entspricht die relative Änderung in Abb. 5-1 folglich der monetären Änderung.

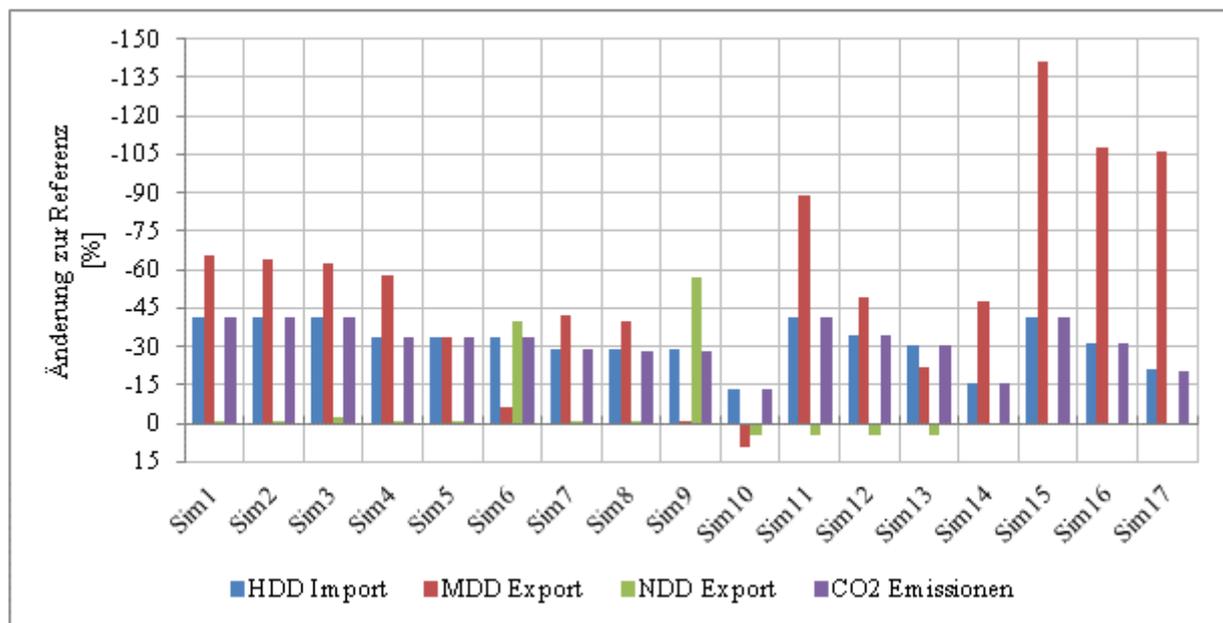


Abb. 5-1: Ebene 1: Gegenüberstellung des Optimierungspotentials der untersuchten Modifikationen des Tieftemperaturteils

In den Simulationen Sim1 bis Sim9 wird die Modifikation der aktuellen Verfahrenskonfiguration durch Einsatz von Zwischenkühlungen (siehe Kapitel 3), in Sim10 bis Sim13 der Einsatz eines Membrankontaktors (siehe Kapitel 4.3 und 4.5) und in Sim14 bis Sim17 der Einsatz des Membrankontaktors mit nachgeschalteter Rektifikation (siehe Kapitel 4.4 und 4.5) hinsichtlich des energetischen Optimierungspotentials untersucht.

In allen Simulationen wird Einsparung im Import von HD-Dampf und den CO₂ Emissionen, in etwa gleicher Größenordnung, erreicht. In allen Simulationen außer in Sim9 und Sim10

wird dafür MD-Dampf eingesetzt. Dadurch wird der Export von MD-Dampf reduziert. In den Simulationen Sim3, Sim6 und Sim9 wird der Turbokompressor des Isobutankältekreislaufes nicht durch MD- sondern durch ND-Dampf betrieben, daher wird der ND-Dampf in diesen Simulationen reduziert. Die Zunahme des Exportes von MD-Dampf in Simulation Sim10 bzw. die Zunahme des Exportes von ND-Dampf in den Simulationen Sim10 bis Sim13 ergibt sich durch die höhere Ethenmenge, die in diesen Simulationen durch die Anlage geführt wird. Dadurch wird nämlich der Bedarf an HD-Dampf in der Spaltgasverdichtung höher und somit auch die produzierte Menge an MD- und ND-Dampf. In Abb. 5-1 ist zu sehen, dass in den meisten Simulationen zur Einsparung von HD-Dampf MD-Dampf eingesetzt wird.

Auf Ebene zwei erfolgt daher eine Gegenüberstellung des Massenverhältnisses von Einsparung an HD-Dampf gegenüber dem dafür eingesetztem MD-Dampf. Aus diesem Verhältnis geht hervor, wieviel Kilogramm HD-Dampf pro eingesetztem Kilogramm MD-Dampf eingespart werden können.

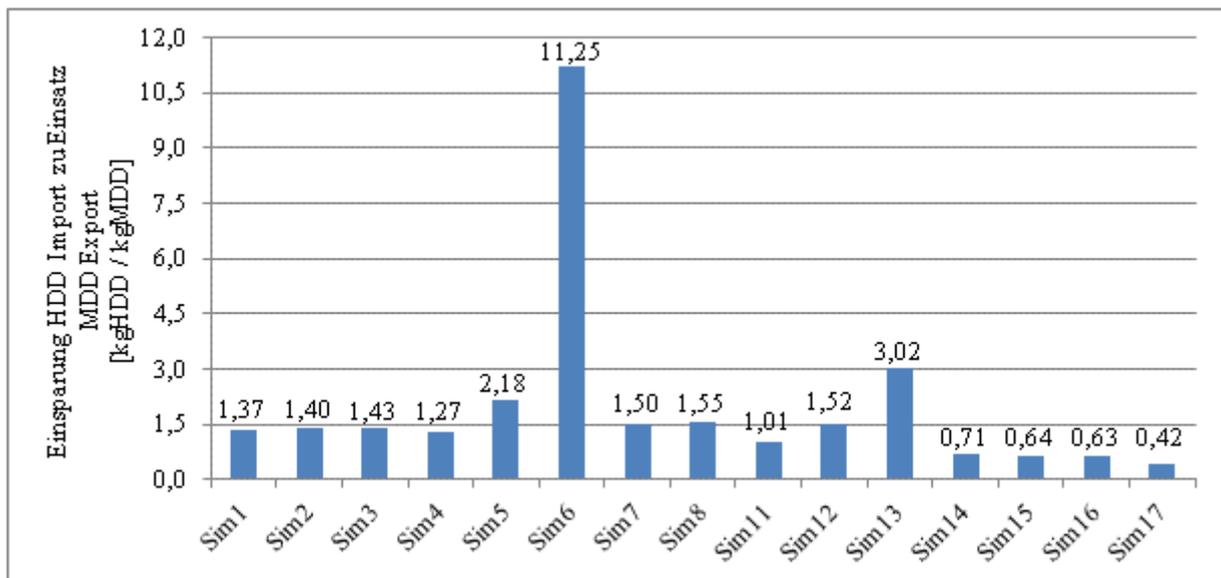


Abb. 5-2: Ebene 2: Gegenüberstellung des Optimierungspotentials der untersuchten Modifikationen des Tieftemperaturteils

In den Simulationen Sim1 bis Sim13 wird ein Massenverhältnis größer Eins erreicht, d.h. es werden pro eingesetztem Kilogramm MD-Dampf mehr als ein Kilogramm HD-Dampf eingespart. In den Simulationen Sim14 bis Sim17, also in jenen, wo dem Membrankontaktor eine Rektifikationskolonne nachgeschaltet ist, ergeben sich Verhältnisse unter Eins, d.h. es wird pro eingesetztem Kilogramm MD-Dampf weniger als ein Kilogramm HD-Dampf eingespart. Festzuhalten ist aber, dass es sich bei diesem Verhältnis ausschließlich um ein Massenverhältnis handelt. Unter Berücksichtigung der exergetischen Aspekte von HD- und

MD-Dampf kann sich auch ein Verhältnis unter Eins insgesamt positiv auf den ökonomischen Wert auswirken.

Die Simulation Sim6 überragt in Abb. 5-2 in ihrem Verhältnis das der anderen Simulationen deutlich. Dies ist darauf zurückzuführen, dass der Turbokompressor des Isobutankältekreislaufes über ND-Dampf und nicht über MD-Dampf angetrieben wird. Zwar wird ND-Dampf zum Antrieb des Turbokompressors auch in Simulation Sim3 verwendet, allerdings ist die Kälteleistung der Vorkühlung in Sim3 im Vergleich mit Sim6 gering. In den Simulationen Sim9 und Sim10 wird kein MD-Dampf eingesetzt, daher sind sie in Abb. 5-2 nicht berücksichtigt.

Auf der dritten Ebene wird die Einsparung des HD-Dampfes, als die im Fokus stehende Größe, differenziert betrachtet. Die Werte für den Import von HD-Dampf in den Simulationen Sim1 bis Sim14 ergeben sich aus den Modifikationen des Tieftemperaturteils. Insbesondere die Modifikation der Trennverfahren, des Ethenverdichters (Annahme eines polytropen Wirkungsgrades von 80% in den Verdichterstufen) und der Einsatz von Zwischenkühlungen bestimmen den veränderten HD-Dampf Bedarf des Tieftemperaturteils gegenüber der Referenz [4]. In den vorangegangenen Abbildungen dieses Kapitels ergibt sich der HD-Dampf Import in den Simulationen immer als Gesamtergebnis dieser Modifikationen. Die Modifikationen tragen aber in unterschiedlicher Höhe an der Einsparung bei. Vor allem die Annahme der Wirkungsgrade in den Verdichterstufen ist mit Unsicherheiten behaftet (siehe dazu Kapitel 13.2 und besonders 13.5). Um eine möglichst objektive Bewertung der HD-Dampf Einsparung zu ermöglichen, werden die Einsparungen, die durch die jeweiligen Modifikationen gegenüber der Referenz erreicht werden, in Abb. 5-3 für die Simulationen Sim1 bis Sim14 dargestellt.

In den Simulationen Sim1 bis Sim9 ergibt sich eine Änderung im HDD Import durch die Annahme von polytropen Wirkungsgraden (80%) in den Verdichterstufen des Ethenverdichters und durch Zwischenkühlungen. Wobei in den Simulationen Sim1 bis Sim3, Sim4 bis Sim6 und Sim8 bis Sim9 jeweils auf gleiche Temperatur zwischengekühlt wird. Daher sind die Änderungen in diesen Simulationen infolge der Zwischenkühlungen gleich. In den Simulationen Sim10 und Sim14 ergibt sich die Änderung des HD-Dampf Bedarfs durch das jeweilige Trennverfahren und der Annahme der Wirkungsgrade (polytrop, 80%). Die Simulationen Sim11 bis Sim13 sowie Sim15 und Sim16 ergeben einen veränderten HD-

Dampf Bedarf jeweils durch das verwendete Trennverfahren, die angenommenen polytropen Wirkungsgrade (80%) und durch die Installation von Zwischenkühlungen.

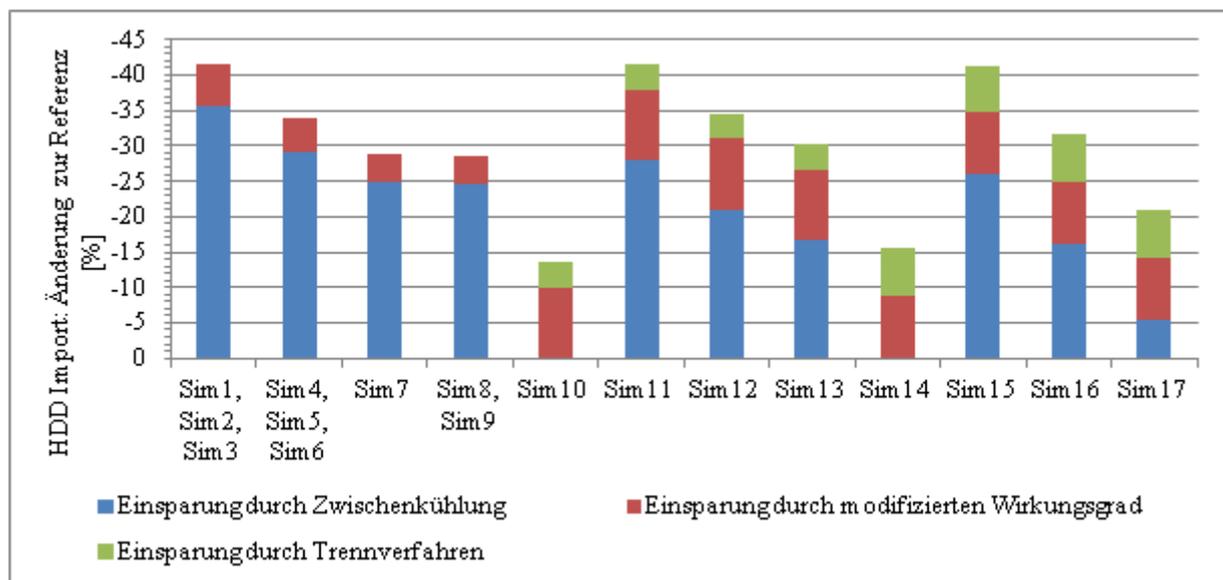


Abb. 5-3: Ebene 3: Änderung des HDD Imports gegenüber der Referenz [4] durch die jeweiligen Modifikation des Tieftemperaturteils in den Simulationen

Der Abb. 5-3 kann entnommen werden, dass die Zwischenkühlungen in allen Simulationen außer Sim17 die größte Einsparung an HDD Import bewirken. Werden die Verdichterstufen des Ethenverdichters mit polytropen Wirkungsgraden von ca. 80% betrieben, sind ebenfalls Einsparungen festzustellen, die aber in allen Simulationen außer Sim17 kleiner als die Einsparungen durch Zwischenkühlungen sind. Der Einsatz des Membrankontaktors mit und ohne nachgeschalteter Rektifikationskolonne ergibt den geringsten Minderbedarf an HD-Dampf.

Auswertungen und Detailanalysen zu den Modifikationen des Tieftemperaturteils sind den Kapiteln, in denen die jeweilige Methode behandelt wird, zu entnehmen. Detaillierte Auswertungen zu den durchgeführten Simulationen sind den Einzelauswertungen (Kapitel 13.5) des Anhangs zu entnehmen.

6 Adsorptionsverfahren

Neben dem Membranverfahren als Alternative zur aktuellen Verfahrenskonfiguration, ist die Untersuchung eines Adsorptionsverfahrens, genauer der Druckwechseladsorption (Pressure Swing Adsorption, PSA), hinsichtlich Einsparungspotential beim Import von Dampf der Hochdruckstufe (HD-Dampf) vorgesehen.

Dafür wurde in [2] u.a. ein Algorithmus in MATLAB[®] entwickelt, mit dem der Adsorptionsprozess eines PSA-Adsorbers simuliert wird. In [6, 8] wurde der Algorithmus um die Kinetik erweitert und modifiziert.

Unter Anwendung des Algorithmus aus [8] auf verschiedene Gaszusammensetzungen aus den Komponenten der Spaltgase, liegt in [8] eine Parameterstudie vor, in der die Parameter Temperatur und Druck variiert werden. Die Zielgrößen der Parameterstudie sind die Reinheiten und die Recoveries der Komponenten.

Auf Grundlage dieser Parameterstudie wird die Anwendung der Druckwechseladsorption, bei Verwendung von Aktivkohle als Adsorbens und dem Raffinat zum Druckaufbau, für folgende Komponentenmischungen gewählt und dieser Arbeit zur Implementierung zu Grunde gelegt [9] (Bezeichnungen aus [8] übernommen):

- Feed Nr. 1: Wasserstoff (H₂), Methan (CH₄), Ethan (C₂H₆), Ethen (C₂H₄)
- Feed Nr. 3: Wasserstoff (H₂), Methan (CH₄), Ethen (C₂H₄)
- Feed Nr. 6: Wasserstoff (H₂), Methan (CH₄)

Die Eingangsströme sind in [8] mit einer bestimmten Zusammensetzung definiert. Die tatsächliche Zusammensetzung des Eingangsstroms in den Adsorber ergibt sich aus vorgeschalteten Prozessen.

Aufgrund der ausgewählten Komponentenmischungen, für die eine Implementierung der Adsorption vorgesehen ist, ergeben sich die in [9] angegebenen Verfahrenskonfigurationen, die hier untersucht werden.

Die Recoveries aus [8] geben darüber Aufschluss, zu welchem Anteil der Eingangsmenge eine Komponente unmittelbar nach Austritt aus dem Adsorber vorliegt und ergeben sich aus dem unmittelbar aus dem Adsorber austretenden Raffinatstrom. Beim kontinuierlichen Adsorptionsprozess (siehe unten) wird ein Teil des Raffinatstroms für den Spülvorgang und

zum Druckaufbau (in [8] wird Raffinat zum Druckaufbau eingesetzt) verwendet. Dadurch verringert sich das Raffinat um jene Mengen, die für Spülung und Druckaufbau abgegeben werden und damit reduzieren sich auch die Komponentenmengen, die für eine weitere Verwendung in der Anlage gewonnen werden.

Im Zuge der Aufgabenumsetzung in dieser Arbeit wurde festgestellt, dass der, in [8] zur Berechnung der Recoveries gewählte Bilanzraum (siehe Abb. 6-1 links) während der Adsorption, die dem Raffinatstrom entnommenen Ströme für die Spülung und den Druckaufbau, nicht berücksichtigt. Die Entscheidung darüber, für welche Komponentenmischungen eine Adsorption in der Verfahrenssimulation implementiert werden sollte [8], basiert aber auf den berechneten Recoveries aus [8]. Für die Verfahrenssimulation allerdings bedeutender als diese systeminternen Recoveries (das System setzt sich aus mindestens zwei Adsorbern zusammen) sind jene Mengen, die zur weiteren Verwendung über dieses System hinaus abgegeben werden (definiert über „Raffinat real“ in Abb. 6-1). Daher sind die benötigten Mengen für Spülung und Druckaufbau für die Entscheidung über den Einsatz eines Adsorbersystems ebenso maßgebend. Die Recoveries aus [8] als Entscheidungsgrundlage sind dazu ungeeignet.

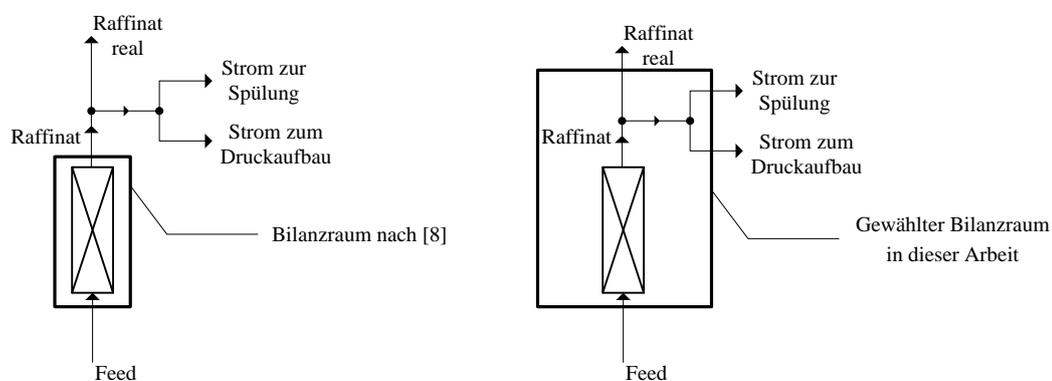


Abb. 6-1: gewählter Bilanzraum zur Berechnung der Recoveries der Komponenten während der Adsorption in [8] (links), gewählter Bilanzraum zur Berechnung der Recoveries der Komponenten während der Adsorption in dieser Arbeit (rechts)

In [2] wird angeführt, dass die Spülzeit im Adsorptionsprozess in jedem Fall kleiner sein muss als die Adsorptionszeit.

Aus einer Nachrechnung der in [8] ausgeführten Parameterstudie zu o.a. Komponentenmischungen unter Verwendung derselben MATLAB[®] Programme ergeben sich für alle Parametervariationen Ergebnisse, in denen die Spülzeit über der Adsorptionszeit liegt (Tab. 6-1).

Die in [2] zu Grunde gelegte Bedingung wird bei der Anwendung des Algorithmus aus [8] nicht erfüllt. Daher wird hier der Schluss gezogen, dass die vorliegenden Ergebnisse der Parameterstudie für die o.a. gewählten Komponentenmischungen für den zu simulierenden kontinuierlichen Adsorptionsprozess nicht aussagekräftig sind.

Feed 1	T = 234,1 K		T = 273 K		T = 300 K		T = 350 K	
Druck [bar]	t _{Ads} [s]	t _{Spül} [s]						
20,00	260,5	4688	238,7	4297	240,6	4331	217,2	3909
26,00	229,8	4137	231,5	4168	215,7	3882	200,0	3600
32,53	221,2	3981	223,7	4026	208,6	3755	197,4	3554
40,00	212,8	3831	215,4	3877	201,6	3629	193,2	3478
Feed 3	T = 234,1 K		T = 273 K		T = 300 K		T = 350 K	
20,00	0,542	9,76	58,14	1047	68,48	1233	77,65	1398
26,00	0,639	11,50	64,64	1164	67,62	1217	76,54	1378
32,53	0,722	12,99	71,99	1296	71,75	1292	80,18	1443
40,00	0,796	14,33	76,84	1383	77,54	1396	84,83	1527
Feed 6	T = 234,1 K		T = 273 K		T = 300 K		T = 350 K	
20,00	0,47	8,42	0,40	7,22	42,34	762	44,47	801
26,00	0,53	9,53	0,45	8,17	46,48	837	46,75	841
32,53	45,69	18002	48,28	869,07	48,59	875	48,29	869
40,00	0,60	10,77	0,60	10,84	49,87	898	56,66	1020

Tab. 6-1: Spül- und Adsorptionszeiten aus der Nachrechnung der Parameterstudie aus [8] für die o.a. ausgewählten Komponentenmischungen

Verwendbare Ergebnisse aus [8] und ein anwendbarer Algorithmus wären die Grundlage dieses Kapitels gewesen. Eine Modifizierung des Algorithmus hinsichtlich der in [2] angeführten Bedingung betreffend der Spülzeiten mit Wiederholung der Parameterstudien ist im Rahmen dieser Arbeit nicht vorgesehen.

Zwar kann der Algorithmus mit der derzeitigen Performance nicht zur konkreten Untersuchung des Einsparungspotentials verwendet werden, eine Implementierung des Adsorbersystems in die Verfahrenssimulation ist aber möglich. Dadurch können auch tendenzielle Aussagen über Energieaufwand und das Einsparungspotential getätigt werden.

Mit dem Einsatz einer ActiveX-Schnittstelle ist eine Automatisierung des gesamten Simulationsprozesses der Adsorption möglich und wird hier umgesetzt.

Zur Simulation des Adsorptionsprozesses in MATLAB[®] werden zurzeit die Prozessdaten aus der Verfahrenssimulation (KBC Petro-SIM[®]) manuell entnommen, im MATLAB[®] Programm eingegeben und nach Anwendung des Algorithmus zur Berechnung der Zielgrößen werden die berechneten Recoveries wiederum manuell dem Splitter in KBC Petro-SIM[®] (siehe Abb. 6-2) vorgegeben.



Abb. 6-2: derzeitiger Datenfluss zur Simulation des Adsorptionsprozesses

Durch die hier entwickelte Automatisierung werden die Prozessdaten automatisch an MATLAB[®] übergeben. Dort wird der Adsorptionsprozess durch Anwendung des Algorithmus simuliert, die Zielgrößen werden berechnet und die Recoveries der Komponenten automatisch von MATLAB[®] wieder in die Verfahrenssimulation übergeben (Abb. 6-3).

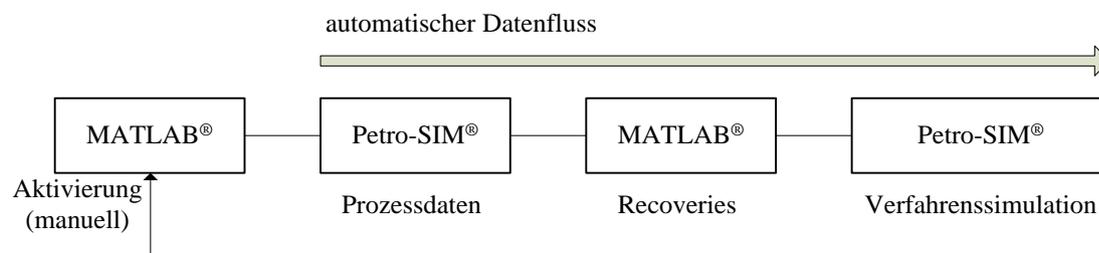


Abb. 6-3: in dieser Arbeit entwickelter Datenfluss zur Simulation des Adsorptionsprozesses

6.1 Implementierung der Adsorption

Die Adsorption (Adsorbersystem) wird in der Verfahrenssimulation durch die Verwendung des Bauteils „Splitter“ wie in Abb. 6-4 simuliert.

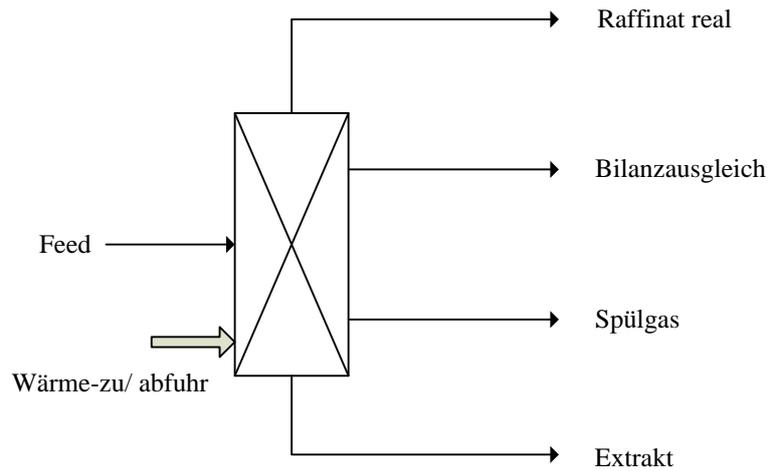


Abb. 6-4: Adsorbersystem in der Verfahrenssimulation

Die kontinuierliche Adsorption findet in der Realität nicht in einem einzigen Adsorber statt, sondern in mehreren Adsorbern, die auf verschiedenste Weise miteinander verschaltet sein können. Auch hinsichtlich der Anzahl an durchzuführenden Prozessschritten und deren Abfolge können sich kontinuierliche Adsorptionsprozesse unterscheiden.

Zwei oder mehr Adsorber werden bei kontinuierlichem Betrieb in einem Adsorbersystem zusammengefasst. Unabhängig von Verschaltung, stattfindenden Prozessen und deren Abfolge innerhalb dieses Systems, haben solche Systeme üblicherweise die nachfolgenden kontinuierlich austretenden Ströme gemeinsam:

- Raffinat („Raffinat real“, Abb. 6-4)
- Extrakt
- Spülgas

Das Raffinat (ff. wird mit Raffinat das über die Systemgrenzen austretende Raffinat bezeichnet) tritt während der Adsorptionsphase aus dem Adsorber aus. Es beinhaltet hauptsächlich die Komponenten, die vom Adsorbens nicht aufgenommen wurden.

Das Extrakt tritt während der Desorptionsphase aus dem Adsorber aus. Es beinhaltet hauptsächlich jene Komponenten, die vom Adsorbens während der Adsorptionsphase bevorzugt aufgenommen wurden.

Das Spülgas tritt während der Spülphase des Adsorbers aus. Wird mit dem Raffinat gespült, enthält es neben den Komponenten, die in der Desorptionsphase adsorbiert wurden, jene Komponenten, die vom Adsorbens nicht aufgenommen wurden. Die Spülung findet

üblicherweise bei Desorptionsdruck statt. Das Spülgas aus Abb. 6-4 ist vom Spülstrom aus Abb. 6-1 zu unterscheiden. Der Spülstrom tritt in den Adsorber zur Spülung ein. Der Adsorber agiert dabei als Quellterm, indem er die noch gebundenen Komponenten während der Spülung abgibt. Der eingetretene Spülstrom, angereichert mit den adsorbierten Komponenten, ergibt am Austritt des Adsorbers das Spülgas.

Für die Verfahrenssimulation ist noch ein weiterer austretender Strom zu definieren. Dieser ist eine reine mathematische Maßnahme um die Massenbilanz auszugleichen, wird mit Bilanzausgleich benannt und geht bei Konvergenz der Berechnung gegen Null.

Die im Splitter definierten Recoveries müssen für jede Komponente über alle austretenden Ströme in der Summe 1 ergeben, damit der Splitter bestimmt ist. Da die Recoveries in MATLAB[®] berechnet und numerische Lösungsverfahren im Algorithmus eingesetzt werden, ergeben sich Fehler in der Komponentenmengenbilanzierung. Die Bilanzfehler der Komponenten werden im Strom „Bilanzausgleich“ (Abb. 6-4) zusammengefasst. Dadurch ist der Splitter definiert.

Zum Ausgleich der Energiebilanz ist ein Energiestrom am Splitter zu installieren. Da Raffinatstrom, Extraktstrom und Spülgas Unterschiede in Druck und Zusammensetzung aufweisen, ist die Energiebilanz, um den in den Strömen eingestellten Zustand erhalten zu können, auszugleichen. Das wird über Wärmezu- oder -abfuhr erreicht.

Schritte der Automatisierung

Erweiterung des auf die o.a. Gasmischungen angewandten Algorithmus aus [8]

Der in der Verfahrenssimulation zur Simulation des Adsorbersystems eingesetzte Splitter benötigt zur Spezifikation die Recoveries der Komponenten für jeden aus dem Splitter austretenden Strom. Daher wird der Algorithmus, der in [8] eingesetzt wird, um die Recoveries der Komponenten, die für die Definition der Ströme in Abb. 6-4 benötigt werden, erweitert:

Recoveries des Raffinats

$$re_{\text{Raffinatreal},i} = \frac{n_{\text{Raffinatreal}} \cdot Y_{\text{Raffinat},i}}{n_{\text{Einsatz},i}} \quad (6-1)$$

Recoveries des Extrakts

$$\text{rec}_{\text{Extrakt},i} = \frac{n_{\text{Extraktges}} \cdot y_{\text{Extrakt},i}}{n_{\text{Einsatz},i}} \quad (6-2)$$

Recoveries des Spülgases

$$\text{rec}_{\text{Spuel},i} = \frac{n_{\text{Spuelges}} \cdot y_{\text{Spuel},i}}{n_{\text{Einsatz},i}} \quad (6-3)$$

Recoveries des Bilanzausgleichs

$$\text{verlust}_i = n_{\text{Raffinatreal}} \cdot y_{\text{Raffinat},i} + n_{\text{Extraktges}} \cdot y_{\text{Extrakt},i} + \quad (6-4)$$

$$+ n_{\text{Spuelges}} \cdot y_{\text{Spuel},i} - n_{\text{Einsatz},i}$$

$$\text{rec}_{\text{verlust},i} = \frac{\text{verlust}_i}{n_{\text{Einsatz},i}} \quad (6-5)$$

In den Gleichungen (6-1) bis (6-4) werden die Recoveries rec_i der Komponenten (Index i) der jeweiligen aus dem Splitter austretenden Ströme aus Abb. 6-4 aus dem Produkt des über die Systemgrenzen austretenden jeweiligen Molenstroms n und dem Molanteil der Komponenten y im Verhältnis zum Einsatzmolenstrom n_{Einsatz} der Komponenten berechnet.

Über Gl (6-5) wird der durch die numerischen Lösungsverfahren auftretende Bilanzfehler ausgeglichen.

6.2 Adsorptionssystem bei Anwendung auf Feed 6

Feed 6 [8] ist aus den Komponenten Wasserstoff (H_2) und Methan (CH_4) zusammengesetzt.

Vom Adsorbens wird bevorzugt Methan adsorbiert, Wasserstoff ist demnach mehrheitlich im Raffinat und Methan mehrheitlich im Extrakt vorhanden.

6.2.1 Verfahrensführung bei Einbau eines Adsorbersystems für Feed 6

Um die Komponentenmischung aus Feed 6 erzeugen zu können, wird der aktuelle Trennprozess auf die Verfahrensführung in Abb. 6-5 umgestellt. Abb. 6-5 ist ein vereinfacht dargestellter Ablauf. Die detaillierte Verfahrensführung ist der entsprechenden Simulation zu entnehmen.

Eine Änderung der Verfahrensführung des Trennprozesses betrifft die Rektifikationskolonne R-1 (D-9811). Im aktuellen Prozess wird in dieser Rektifikationskolonne das Methan von den C2-Komponenten abgetrennt. Das H_2 wird in einem vorgeschalteten Prozess aus dem Gemisch entfernt. Die Änderung enthält keinen vorgeschalteten Prozess, in dem H_2

abgetrennt wird. Alle Komponenten des in den Tieftemperaturteil eintretenden Gasstroms treten in die Rektifikationskolonne ein (eine neue thermische Auslegung war dafür notwendig). Dadurch wird am Kopf der Kolonne ein Gemisch aus Wasserstoff und Methan, und am Boden der Kolonne ein Gemisch aus den C₂-Komponenten gewonnen. Das Gemisch aus Methan und Wasserstoff ergibt den in [8] als Feed 6 bezeichneten Adsorbereingangsstrom.

Nach dem Austritt aus dem Kopf der Rektifikationskolonne R-1 strömt das Gemisch in ein Expansionsventil. Über dieses Expansionsventil wird der für die Simulation des Adsorptionsprozesses in MATLAB[®] benötigte Druck (Feed-Eingangsdruck) eingestellt. Nach Druckeinstellung strömt das Gasgemisch in einen Wärmeübertrager, über den die Adsorptionstemperatur eingestellt wird. Der Wärmeübertrager arbeitet ohne Druckverlust.

In MATLAB[®] wird die Schnittstelle so verwendet, dass die Zusammensetzung, der gewählte Druck und die gewählte Temperatur des Eingangsstroms automatisch aus KBC Petro-SIM[®] in MATLAB[®] eingelesen werden.

Über diese Daten werden die Reinheiten und die Recoveries der Komponenten der jeweiligen aus dem Splitter (Adsorbersystem in KBC Petro-SIM[®]) austretenden Ströme über den Algorithmus in MATLAB[®] berechnet.

Die berechneten Recoveries (siehe 6.1) werden automatisch von MATLAB[®] an KBC Petro-SIM[®] übergeben und vom Splitter übernommen.

Die Definition der Zustände der aus dem Splitter austretenden Ströme erfolgt über MATLAB[®].

Zur Übersicht werden die jeweils übergebenen und am Splitter eingestellten Daten automatisch im Tabellenkalkulationsprogramm von KBC Petro-SIM[®] angezeigt.

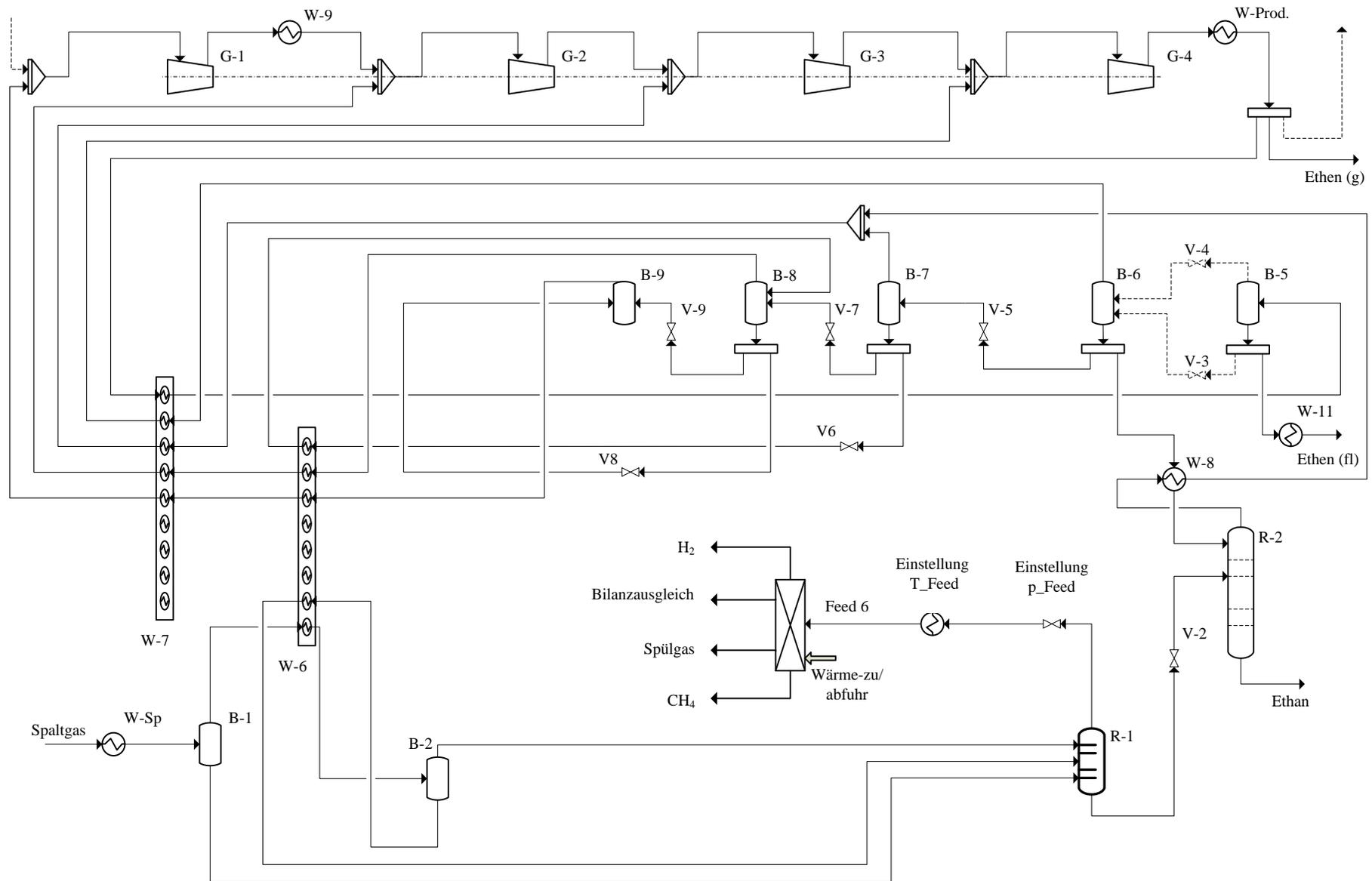


Abb. 6-5: Vorausgelegte Verfahrensführung zur Verarbeitung von Feed 6 [8] durch ein Adsorptionssystem (vereinfachte Darstellung)

Rektifikationskolonne R-1 (D-9811)

In der Simulation wird der Name der aktuellen Kolonne beibehalten.

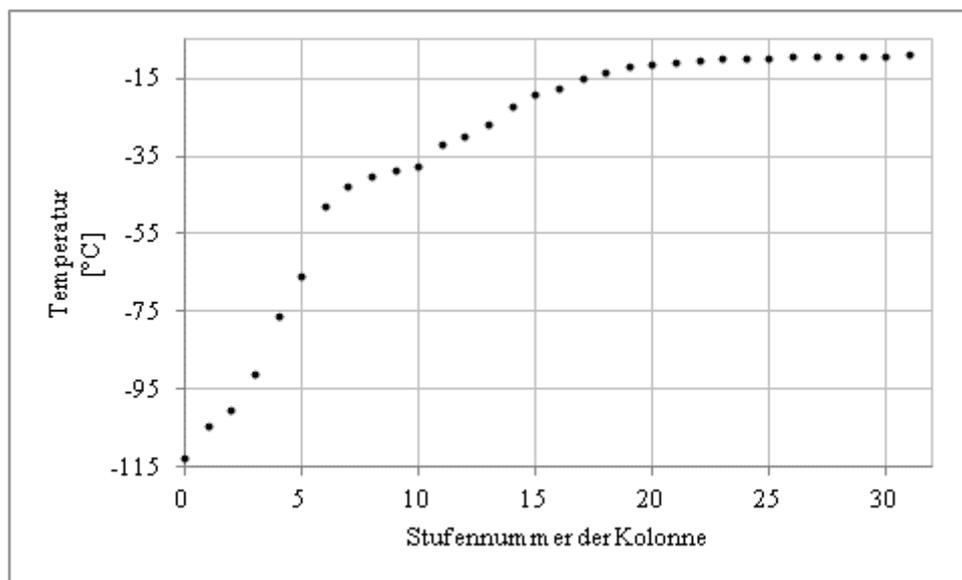


Abb. 6-6: Temperaturprofil der Rektifikationskolonne R-1 (D-9811) zur Trennung von Methan und Wasserstoff (Feed 6) von den C2-Komponenten

Die Kolonne besteht aus 31 Stufen (Verdampfer als Stufe eingerechnet, Kondensator nicht). Um die Benennung der Stufen aus KBC Petro-SIM[®] zu übernehmen, wird der Kondensator in Abb. 6-6 mit 0 bezeichnet. Die Zählung beginnt am Kopf der Kolonne.

In die Kolonne treten drei Ströme ein. Diese werden in den Stufen 5, 10 und 11 zugeführt.

Das Rücklaufverhältnis am Kopf und Boden beträgt 1,16. Der Kondensatordruck liegt bei 30,9 bar und der Druck im Verdampfer bei 31 bar.

Die Spezifikationen sind anhand der Schlüsselkomponenten Ethen und Methan gewählt. Für Ethen wird am Kopf ein maximaler Volumsanteil (Vapour) von 0,0015 und für Methan am Boden ein maximaler Volumsanteil (Liquid) von 0,0001 festgelegt. Die Spezifikation über Volumsanteile ist nach Vorbild der Referenz gewählt.

Beim vorhandenen Kondensatordruck wird eine Temperatur von ca. -115°C zum Einsetzen der Kondensation benötigt. Die benötigte tiefe Temperatur wird durch den Wasserstoff begründet.

Aus dem Ethenkältekreislauf steht die niedrigste Temperatur bei -99,42°C zur Verfügung. Benötigt wird aber eine Temperatur von ca. -115°C. Diese Temperatur ist mit den in der

Anlage vorhandenen Prozessen nicht zu erreichen. Aus diesem Grund wird ein zusätzlicher Methankältekreislauf in die Verfahrenssimulation implementiert.

Methankältekreislauf

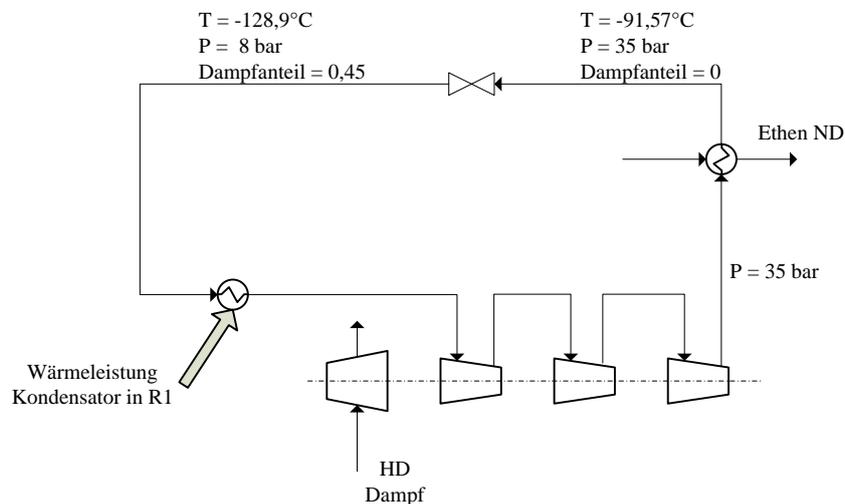


Abb. 6-7: einfacher Methankältekreislauf zur Bereitstellung der Kondensationstemperatur im Kopfkondensator der Rektifikationskolonne R-1 (D-9811)

Methan steht bei einem Druck von 8 bar mit $-128,9^{\circ}\text{C}$ in kondensierter Form zur Verfügung. Nach Zuführung der Wärmeleistung aus dem Kondensator der Rektifikationskolonne R-1 (D-9811) ist das Methan isobar verdampft. Hier wurde ein einfacher Methankältekreislauf erstellt, um den Kältebedarf im Kondensator von R-1 zu decken. Durch geeignete Verschaltungen, evtl. auch durch Ausnutzung des Joule-Thomson-Effektes könnten wie im Ethenkältekreislauf zusätzliche Verbraucher bedient werden. Hier erfolgt die Kondensation durch Einsatz von Ethenkälte der Niederdruckstufe. Dafür wird das verdampfte Methan vorher auf einen Druck von 35 bar verdichtet. Der Turbokompressor zur Verdichtung des Methandampfes wird mit Dampf der Hochdruckstufe betrieben.

Abfließende Ströme des Adsorbersystems (Splitter):

Das Raffinat tritt während der Adsorptionsphase eines Adsorbers mit Eingangsdruck aus dem System aus [2, 6, 8]. Das Extrakt tritt während der Desorptionsphase eines Adsorbers bei einem Desorptionsdruck von 0,1 bar [2, 6, 8] aus dem Splitter aus. Der Spülvorgang findet bei Desorptionsdruck statt, der Spülstrom tritt daher mit einem Druck von 0,1 bar aus. Der Bilanzverlust ist eine rein mathematische Maßnahme für den Bilanzausgleich. Der Zustand dieses Stroms ist für den Verfahrensablauf belanglos. Allen abfließenden Strömen ist ein Dampffanteil von 100% vorgegeben.

6.2.2 Erzeugte Verfahrensfliessbilder in KBC Petro-SIM[®]

Es werden zwei Typen von Verfahrensfliessbildern in KBC Petro-SIM[®] erstellt.

Verfahrensfliessbild Typ 1

Dieser Typ dient der Durchführung der Parameterstudie zur Ermittlung der optimalen Einstellungen hinsichtlich Druck und Temperatur für den Adsorptionsprozess in Kombination mit der Überprüfung und gegebenenfalls durchzuführenden Modifikation des Algorithmus. In diesem Verfahrensfliessbild wird nur im Subflowsheet ColdBox (CB) gearbeitet. Eine Kommunikation zu anderen Subflowsheets oder Verbindungen der Ströme über die Flowsheetgrenzen ist dabei nicht vorgesehen, damit nicht nach jeder Änderung der gesamte Anlagenprozess berechnet wird. Dieses Fließbild dient ausschließlich zum Einstellen von Druck und Temperatur und zur Erzeugung einzelner Kommunikationsstränge, um sich evtl. benötigte Informationen zusätzlich zur Verfügung stellen zu lassen, ohne dass dabei der gesamte Anlagenprozess berechnet wird.

Verfahrensfliessbild Typ 2

In diesem Verfahrensfliessbild können die gefundenen optimalen Parameter aus dem Verfahrensfliessbild nach Typ 1 eingesetzt und die gesamte Anlagensimulation durchgeführt werden. Die Kommunikation der Subflowsheets ist hergestellt, der Datentransfer aufrecht. Erste Optimierungsmaßnahmen, insbesondere in der Kälterückgewinnung sind bereits erstellt. Auch der Raffinatstrom ist bereits angeschlossen. Nicht angeschlossen sind der Extrakt- und der Spülstrom. Diese liegen beim Desorptionsdruck von 0,1 bar vor. Um überhaupt gefördert werden zu können, ist diesen ein entsprechender Druck aufzuprägen. Die Ausgestaltung der Anschlüsse dieser Ströme unter Berücksichtigung der Druckverhältnisse ist Gegenstand der nachfolgenden Arbeit, da auch der Desorptionsdruck möglicherweise zu verändern sein wird [11].

Nach Einstellung der gefundenen Parameter ist deren Auswirkung auf die weitere Verfahrensführung der Anlage zu prüfen. Eine für den Adsorptionsprozess günstige Kombination (hohe Recovery, hohe Reinheit) aus Druck und Temperatur kann sich auf nachfolgende Anlagenprozesse (z.B. C3 Processing, Subflowsheet „C3 Proc.“) auswirken. Evtl. sind dort Einstellungen anzupassen, oder einzelne Prozesse können aufgrund der

Einstellungen des Adsorberprozesses nicht berechnet werden (z.B. Wärmeübertrager, Komponenten im Flash mit Anschluss am Sumpf fließen über Kopf ab etc.).

6.2.3 Vorläufige Schlussfolgerungen

Durch die Änderung der Verfahrensführung dahingehend, dass der gesamte Wasserstoff in die Rektifikationskolonne R-1 eintritt, die Kondensationstemperatur dadurch auf einen Wert fällt, der durch Einsatz von Ethen der Niederdruckstufe nicht erreicht werden kann und dafür ein Methankältekreislauf betrieben wird, können unabhängig vom Adsorberprozess bereits Aussagen zum Energieeinsatz getätigt werden.

Im Methankältekreislauf werden unter den vorgenommenen Einstellungen zur Kondensation des Methans ca. 8,4 MW Ethenkälte der Niederdruckstufe benötigt. Aktuell werden für die Kondensationstemperatur der Rektifikationskolonne aus der Ethen ND Stufe ca. 3,3 MW bezogen. Der Mehrbedarf um das ca. 1,5 fache an Ethenkälte der ND Stufe bedeutet, dass dadurch auch ein größerer Massenstrom an Ethen im Ethenkältekreislauf verarbeitet werden muss, was, bei gleichbleibendem Kälteleistungsbezug der übrigen Ethenkälteverbraucher, zu höherem Leistungseinsatz des Verdichters und zu höherem HD-Dampf Import führt.

Der Turbokompressor zum Verdichten des Methans wird ebenso über den Dampf der Hochdruckstufe betrieben. In der gewählten Ausführung ist vom Verdichter eine Leistung von ca. 3 MW aufzubringen. Dies wirkt sich unmittelbar auf den HD-Dampf Import aus.

Aufgrund der Leistung, die der Ethenverdichter im Ethenkältekreislauf und der Methanverdichter im Methankältekreislauf zu erbringen haben, ergibt sich in Summe aus den beiden Leistungen ein Bedarf von ca. 20 MW für den Tieftemperaturteil, die durch den Einsatz von HD-Dampf aufzubringen sind. In der Referenz ist durch HD-Dampf eine Leistung im Tieftemperaturteil von ca. 16 MW zu decken.

Mit der geänderten Verfahrensführung wird ohne Berücksichtigung des Adsorptionsprozesses bereits mehr an Leistung aus der Dampf-Hochdruckstufe als gegenwärtig benötigt.

6.3 Adsorptionssystem bei Anwendung auf Feed 3

Feed 3 setzt sich aus den Komponenten Wasserstoff (H_2), Methan (CH_4) und Ethen (C_2H_4) zusammen.

6.3.1 Verfahrensführung bei Einbau eines Adsorbersystems für Feed 3

Vom Adsorbens werden bevorzugt Ethen und Methan adsorbiert. D.h. Wasserstoff ist mehrheitlich im Raffinat, Ethen und Methan sind mehrheitlich im Extrakt vorhanden. Um ein Gemisch wie in Feed 3 vorliegen zu haben, wird der Tieftemperaturteil neu gestaltet.

Konzept aus [9]

Die Spaltgase werden nach Eintreten in den Tieftemperaturteil in eine Rektifikationskolonne geführt. Dort wird Ethan über den Sumpf abgetrennt und ein Gemisch aus Wasserstoff, Ethen und Methan verlassen die Rektifikationskolonne über Kopf. Das die Rektifikationskolonne über Kopf verlassende Gemisch tritt in das Adsorbersystem ein. Wasserstoff wird als Raffinat, Methan und Ethen als Extrakt gewonnen. Wasserstoff kann weiterverwendet werden und das Gemisch aus Ethen und Methan wird in einer weiteren Rektifikationskolonne getrennt.

Umsetzung

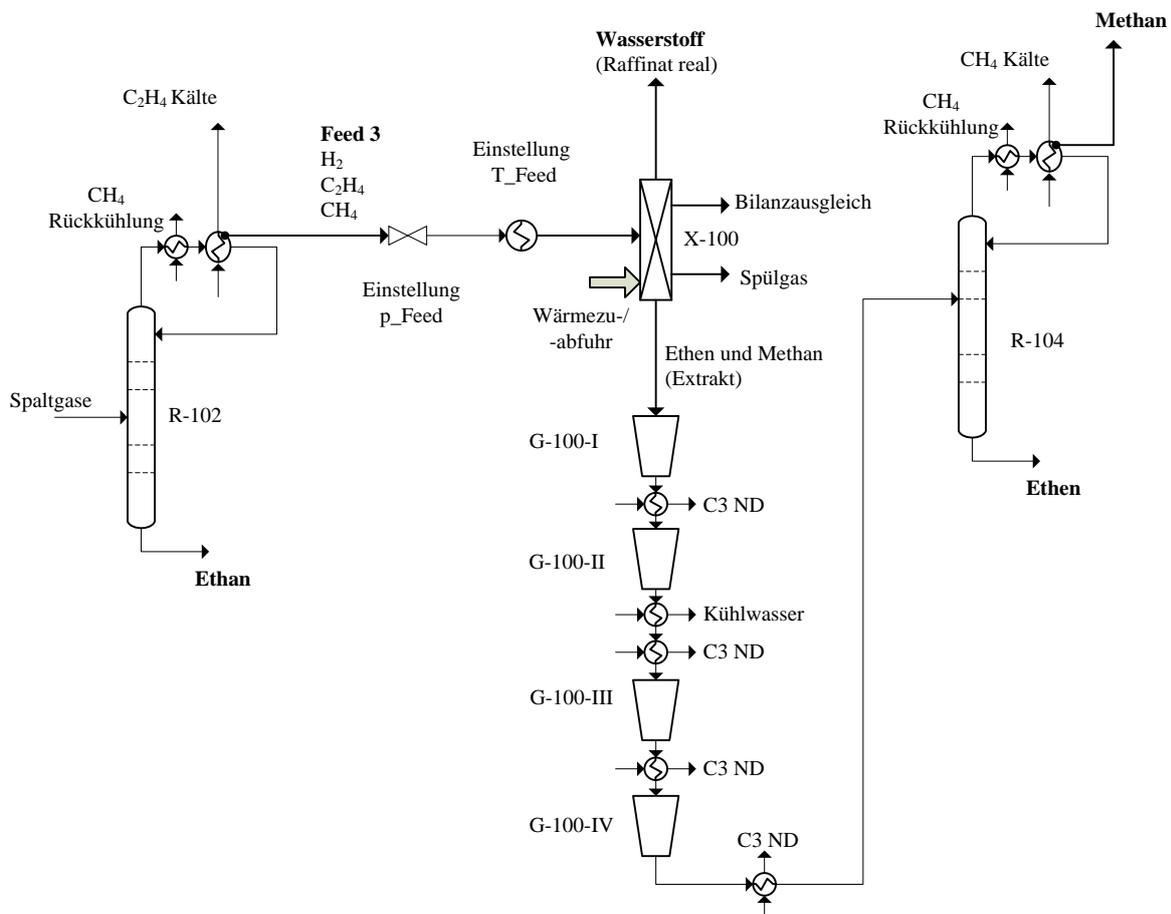


Abb. 6-8: Umsetzung des Tieftemperaturteils nach dem Konzept aus [8]

In Abb. 6-8 ist der neugestaltete Tieftemperaturteil in der Verfahrenssimulation im Konzept nach [9] vereinfacht abgebildet. Die Verfahrensführung ist dabei noch nicht optimiert. Die Ermittlung der optimalen Einstellungen von Druck und Temperatur des Adsorptionsprozesses sind Gegenstand weiterführender Arbeiten. Die Grundlage bildet jedoch Abb. 6-8.

Nach Eintritt in den Tieftemperaturteil werden die Spaltgase in die Rektifikationskolonne R-102 geführt. Ethan wird über Sumpf abgetrennt. Das über Kopf abgezogene Gemisch aus Wasserstoff, Methan und Ethen (Feed 3) wird vor Eintritt in den Kopfkondensator von R-102 durch Methan aus der Rektifikationskolonne R-104 vorgekühlt. Die Kondensatortemperatur in R-102 wird durch Einsatz von Ethenkälte erreicht. Feed 3 tritt in ein Expansionsventil und im Anschluss in einen Wärmeübertrager ein. Wie in Abschnitt 6.2.1 dienen das Expansionsventil und der Wärmeübertrager der Parameterstudie zur Ermittlung der optimalen Parameter für den Adsorptionsprozess- bzw. in weiterer Folge der Verfahrensführung (Kommunikation zwischen KBC Petro-SIM[®] und MATLAB[®] wie in 6.2.1). Im Adsorber X-100 wird der Wasserstoff als Hauptkomponente des Raffinats von Ethen und Methan, die die Hauptkomponenten des Extraktes sind, abgetrennt.

Das Raffinat tritt beim eingestellten Adsorbereingangsdruck und das Extrakt bei Desorptionsdruck (0,1 bar) aus dem Adsorber aus. Wasserstoff wird in der Anlage weiterverwendet. Ethen und Methan werden in der Rektifikationskolonne R-104 getrennt. Die Temperatur des Kopfkondensators hängt auch vom Kondensatordruck ab. Dieser setzt sich hier aus dem Druck des Eingangsstroms in die Kolonne abzüglich des Druckverlusts über die Verstärkersäule zusammen. Je höher der Druck, desto höher die erforderliche Kondensatortemperatur. Das bei einem Druck von 0,1 bar vorliegende Extrakt ist, unabhängig von den Kondensationsbedingungen, auf einen Druck zu verdichten mit dem überhaupt ein weiterer Transport möglich ist. Da 0,1 bar unter dem atmosphärischen Druck liegt, kann das Extrakt ohne Verdichtung nur durch Anlegen eines Vakuums transportiert werden, dies ist aber technisch aufwändig und zudem unwirtschaftlicher und im vorliegenden Fall für die weitere Verfahrensführung ohnehin nicht sinnvoll. Über den in Abb. 6-8 als vierstufigen Verdichter ausgeführten Turbokompressor erfolgt eine Verdichtung auf 32 bar. Der Turbokompressor wird durch Dampf der Hochdruckstufe (HD-Dampf) angetrieben. Zwischen den Verdichterstufen und vor Eintritt des Extrakts in die Rektifikationskolonne R-104 wird mit Propenkälte der Niederdruckstufe zwischen- bzw. vorgekühlt. Nach der zweiten Verdichterstufe wird zusätzlich mit Kühlwasser zwischengekühlt. Bei einer Verdichtung auf

32 bar und einem angenommenen Druck im Kondensator von R-104 von 31 bar, ergibt sich eine Kondensationstemperatur im Kopfkondensator von ca. -115°C . Das über Kopf in den Kondensator eintretende Gemisch wird durch das R-104 über Kopf verlassende Methan vorgekühlt. Die Kondensationstemperatur wird durch Einsatz von Methankälte (siehe Abb. 6-12) erreicht.

Zum Erreichen der jeweiligen Kopfkondensatortemperaturen der beiden Kolonnen werden ein Ethenkältekreislauf (für R-102) und ein Methankältekreislauf (für R-104) gestaltet.

Wie in Abschnitt 6.2.2 werden zwei Typen von Verfahrensbildern erstellt. Es gelten dieselben Aussagen.

Rektifikationskolonne R-102

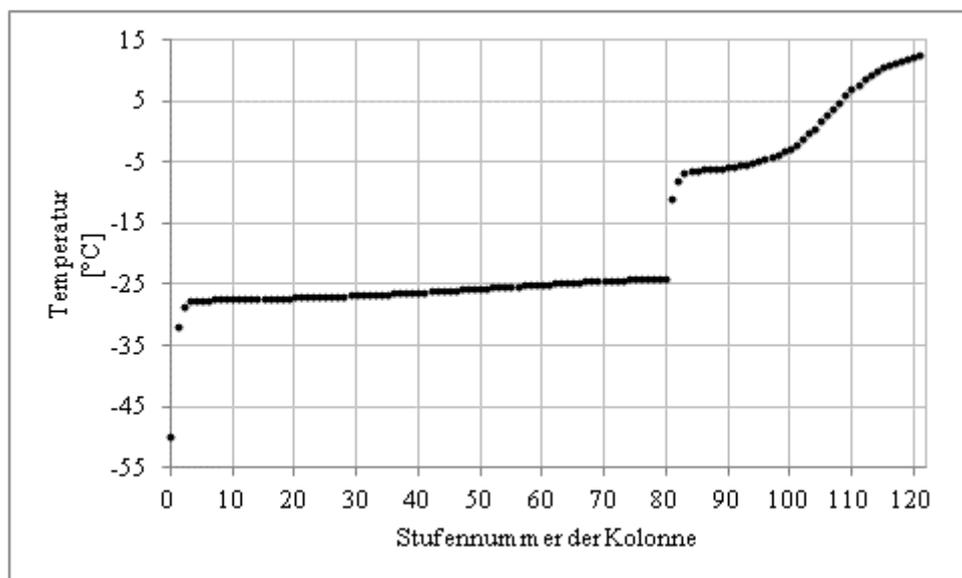


Abb. 6-9: Temperaturprofil der Rektifikationskolonne R-102

Die Kolonne besteht aus 120 Stufen (Verdampfer als Stufe eingerechnet, Kondensator nicht). Um die Benennung der Stufen aus KBC Petro-SIM[®] zu übernehmen, wird der Kondensator in Abb. Abb. 6-9 mit 0 bezeichnet. Die Zählung beginnt am Kopf der Kolonne.

Die Spaltgase werden der Kolonne in der Stufe Nummer 80 zugeführt.

Das Rücklaufverhältnis beträgt mit den gewählten Einstellungen am Kopf 1,32. Der Kondensatordruck liegt bei 32,17 bar und der Druck im Verdampfer bei 32,42 bar.

Beim eingestellten Kondensatordruck wird eine Temperatur von ca. -50°C zum Einsetzen der Kondensation benötigt.

Die Spezifikationen sind wie folgt gewählt: Für Ethan wird am Sumpf ein Molanteil von 0,974 in kondensierter Phase bei einer Recovery von 0,99 festgelegt.

Rektifikationskolonne R-104

Diese Rektifikationskolonne ist ein dem Adsorptionsprozess nachgeschalteter Trennprozess und ist bezüglich des Energieaufwandes von den dort eingestellten Prozessgrößen abhängig. Die Auslegung dieser Kolonne ist in der nachfolgenden Arbeit in Abhängigkeit der dort vorhandenen Prozessgrößen durchzuführen. Hier wird nur voruntersucht, mit welchen Kondensatortemperaturen ungefähr zu rechnen ist.

In Abb. 6-8 wird die Kolonne wie folgt vorausgelegt:

Durch den Verdichter wird das Gemisch aus Ethen und Methan auf 32 bar (gewählt) verdichtet und tritt nach Vorkühlung durch Propenkälte der ND Stufe auf -34°C in die Kolonne ein.

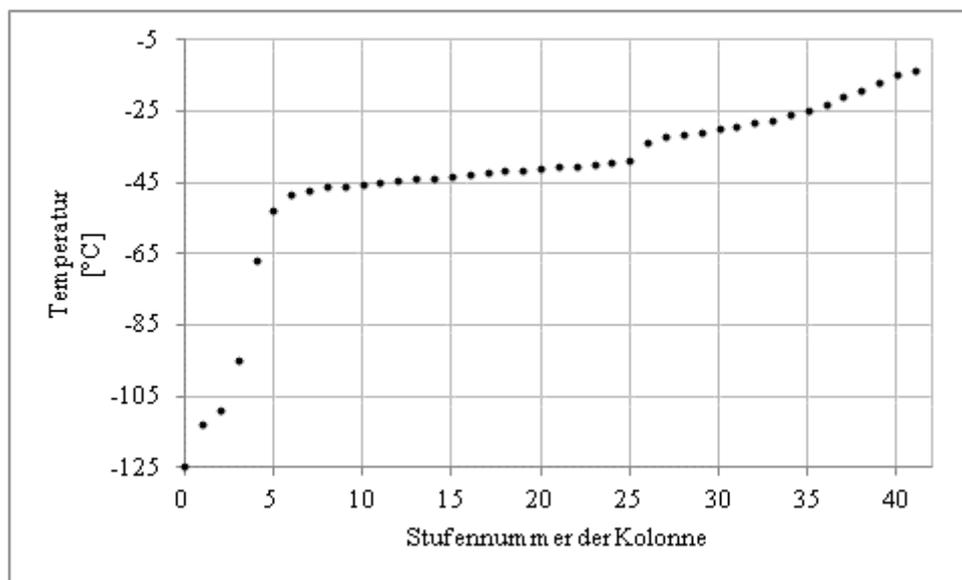


Abb. 6-10: Temperaturprofil der Rektifikationskolonne R-104

Die Kolonne besteht aus 41 Stufen (Verdampfer als Stufe eingerechnet, Kondensator nicht). Um die Benennung der Stufen aus KBC Petro-SIM[®] zu übernehmen, wird der Kondensator in Abb. 6-10 mit 0 bezeichnet. Die Zählung beginnt am Kopf der Kolonne.

Das Gemisch aus Methan und Ethen wird der Kolonne in der Stufe Nummer 25 zugeführt.

Das Rücklaufverhältnis beträgt mit den gewählten Einstellungen am Kopf 3,37. Der Kondensatordruck liegt bei 31 bar und der Druck im Verdampfer bei 31,8 bar.

Beim eingestellten Kondensatordruck wird eine Temperatur von ca. -115°C zum Einsetzen der Kondensation benötigt.

Die Spezifikationen sind wie folgt gewählt: Für Ethen wird am Kondensator ein Molanteil (Vapour) von 0,0001 und im Verdampfer eine Recovery von 0,98 festgelegt.

Die Kältekreisläufe:

Für den Kondensator der Rektifikationskolonne R-102 wird Ethenkälte und für den Kondensator der Rektifikationskolonne R-104 Methankälte benötigt.

Ethenkältekreislauf

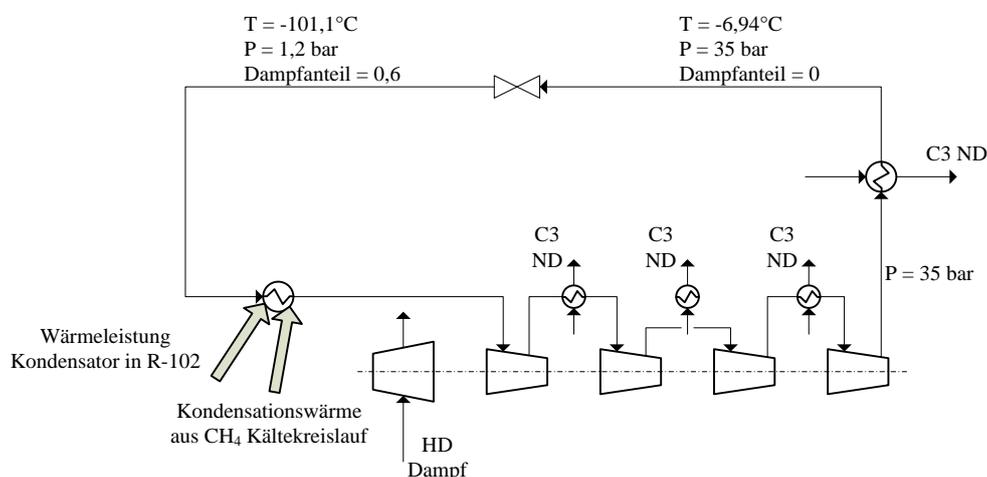


Abb. 6-11: Ethenkältekreislauf mit Zwischenkühlung

Ethenkälte steht bei einem Druck von 1,2 bar mit ca. $-101,1^{\circ}\text{C}$ zur Verfügung. Die Wärmeleistung aus dem Kopfkondensator von R-102 (ca. -50°C) und die Kondensationswärme des Methankältekreislaufes (ca. -92°C) werden aufgenommen. Im vierstufigen Verdichterstrang wird das Ethen auf 35 bar (gewählt) verdichtet. Wobei zwischen den Verdichterstufen I und II Zwischenkühlungen auf -34°C (ND Propenkälte) und in den Verdichterstufen II und III bzw. III und IV Zwischenkühlungen auf -10°C (ND Propenkälte) installiert sind. Propenkälte der ND Stufe wird auch zur Kondensation, bei einer Kondensationstemperatur von ca. -7°C , verwendet.

Ungünstig in dieser Ausführung ist, dass die Wärmeleistung von R-102 und die Kondensationsleistung vom Methankältekreislauf beim selben Druck aufgenommen werden, obwohl aus R-102 ca. -50°C und vom Methan-Kältekreislauf ca. -92°C zu verarbeiten sind. Hier ist eine Optimierungsmaßnahme hinsichtlich des Einbaus eines differenzierten

Druckniveaus angezeigt, sofern dadurch eine Verdichterstufe übersprungen werden kann (auch abhängig vom gewählten bzw. vorhandenen Verdichtungsverhältnis).

Methankältekreislauf

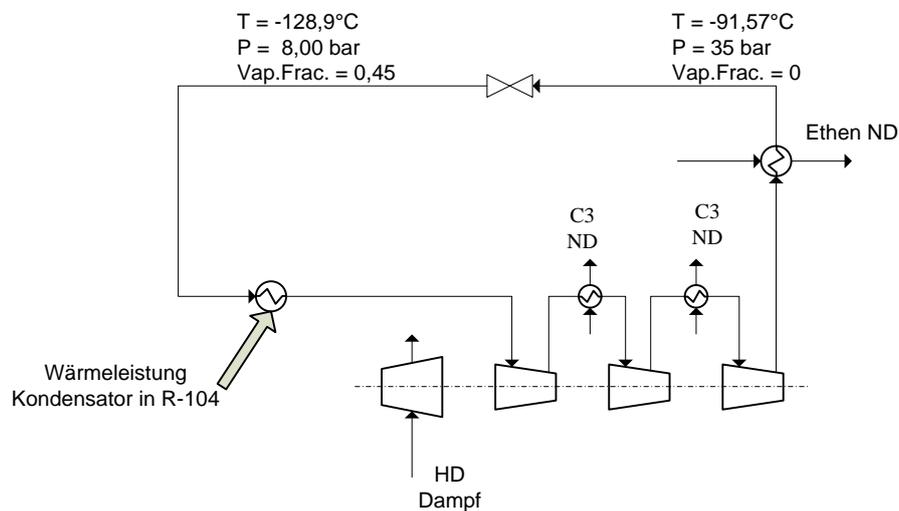


Abb. 6-12: Methankältekreislauf mit Zwischenkühlung

Methan steht bei einem Druck von 8 bar mit einer Temperatur von ca. -129°C zur Verfügung.

Nach Aufnahme der Wärmeleistung aus R-104 wird das Methan auf 35 bar im dreistufigen Verdichterstrang verdichtet. Zwischen den Stufen sind Zwischenkühlungen installiert. Dadurch wird das Methan auf -34°C mit ND Propenkälte zwischengekühlt. Kondensiert wird mit Ethenkälte bei einer Temperatur von ca. -92°C .

6.3.2 Vorläufige Schlussfolgerungen und Anmerkungen

Mit den gewählten Einstellungen ist im Ethenkältekreislauf eine Verdichterleistung von ca. 45,6 MW aufzubringen. Im Methankältekreislauf ist eine Verdichterleistung von ca. 3,3 MW zu erbringen und die Verdichtung des Adsorberextraktes erfordert einen Leistungsaufwand von ca. 10 MW. Alle Turbokompressoren werden durch Dampf der Hochdruckstufe betrieben. In Summe ist vom HD-Dampf daher eine Turbinen-Leistung für den Tieftemperaturteil von 58,9 MW zu decken. In der Referenz ist dagegen eine Turbinen-Leistung von 16 MW für den Tieftemperaturteil vom HD-Dampf aufzubringen.

Die Kondensatortemperaturen der beiden Rektifikationskolonnen, der Leistungsbedarf der beiden Kältekreisläufe und die, auch unabhängig vom Kondensatordruck in R-104, aufzubringende Leistung zur Verdichtung des Extraktes des Adsorbers auf Förderdruck

führen gegenüber der Referenz zu einem deutlich höherem Leistungsbedarf für den Tieftemperaturteil. Aufgrund der Ergebnisse dieser Voruntersuchung, unter Berücksichtigung des Desorptionsdruckes, kann davon ausgegangen werden, dass sich gegenüber der Referenz kein geringerer HDD Import einstellen wird, da selbst durch Optimierungsmaßnahmen in der Verfahrensführung und das Zuschalten des Adsorbers eine Reduktion von 58,9 MW auf unter 16 MW bezweifelt wird.

6.4 Adsorptionssystem bei Anwendung auf Feed 1

Feed 1 entspricht dem in den Tieftemperaturteil eintretenden Spaltgas mit den Komponenten Methan, Ethen, Ethan und Wasserstoff.

6.4.1 Verfahrensführung bei Einbau eines Adsorbersystems für Feed 1

Vom Adsorbens werden bevorzugt Ethen und Ethan adsorbiert [8]. D.h. Wasserstoff und Methan sind mehrheitlich im Raffinat, Ethen und Ethan sind mehrheitlich im Extrakt vorhanden.

Das Konzept aus [9] sieht allerdings eine Abtrennung des Wasserstoffs im ersten Prozessschritt mittels Adsorption vor. Diese Vorgabe kann mit dem in [8] untersuchten Adsorbens nicht erfüllt werden, da dort Wasserstoff und Methan über das Raffinat aus dem Gemisch abgetrennt werden. Zur weiteren Auftrennung in Methan und Wasserstoff wäre daher ein weiterer Prozess nachzuschalten, z.B. ein Adsorptionsprozess (vgl. Abschnitt 6.2: selbes Gemisch-Feed 6), oder ein Membranverfahren. In der vorliegenden Arbeit wird das Konzept nach [8] soweit umgesetzt, dass in nachfolgenden Arbeiten eine Parameterstudie aus Feed 1 mit MATLAB[®] unter Anwendung der Schnittstelle durchgeführt werden kann (Abb. 6-13).

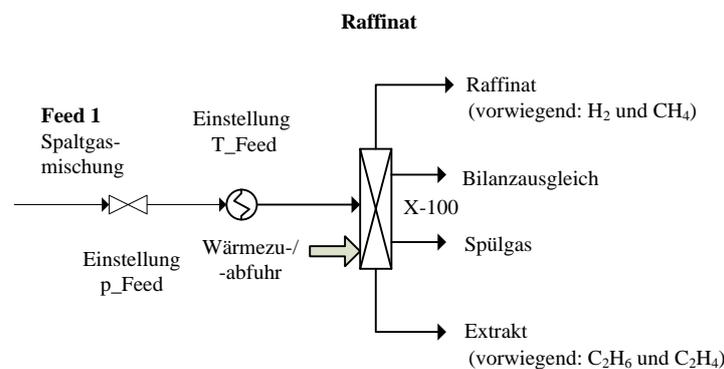


Abb. 6-13: Adsorptionssystem zur Parameterstudie bei Zuführung von Feed 1

Eine Voraussetzung des weiteren Trennvorgangs nach Konzept [9] wird unter der Annahme durchgeführt, dass eine Abtrennung von Wasserstoff im ersten Trennprozess stattfindet und die restlichen Spaltgase durch Rektifikation getrennt werden (Abb. 6-14).

Umsetzung von Konzept [8]

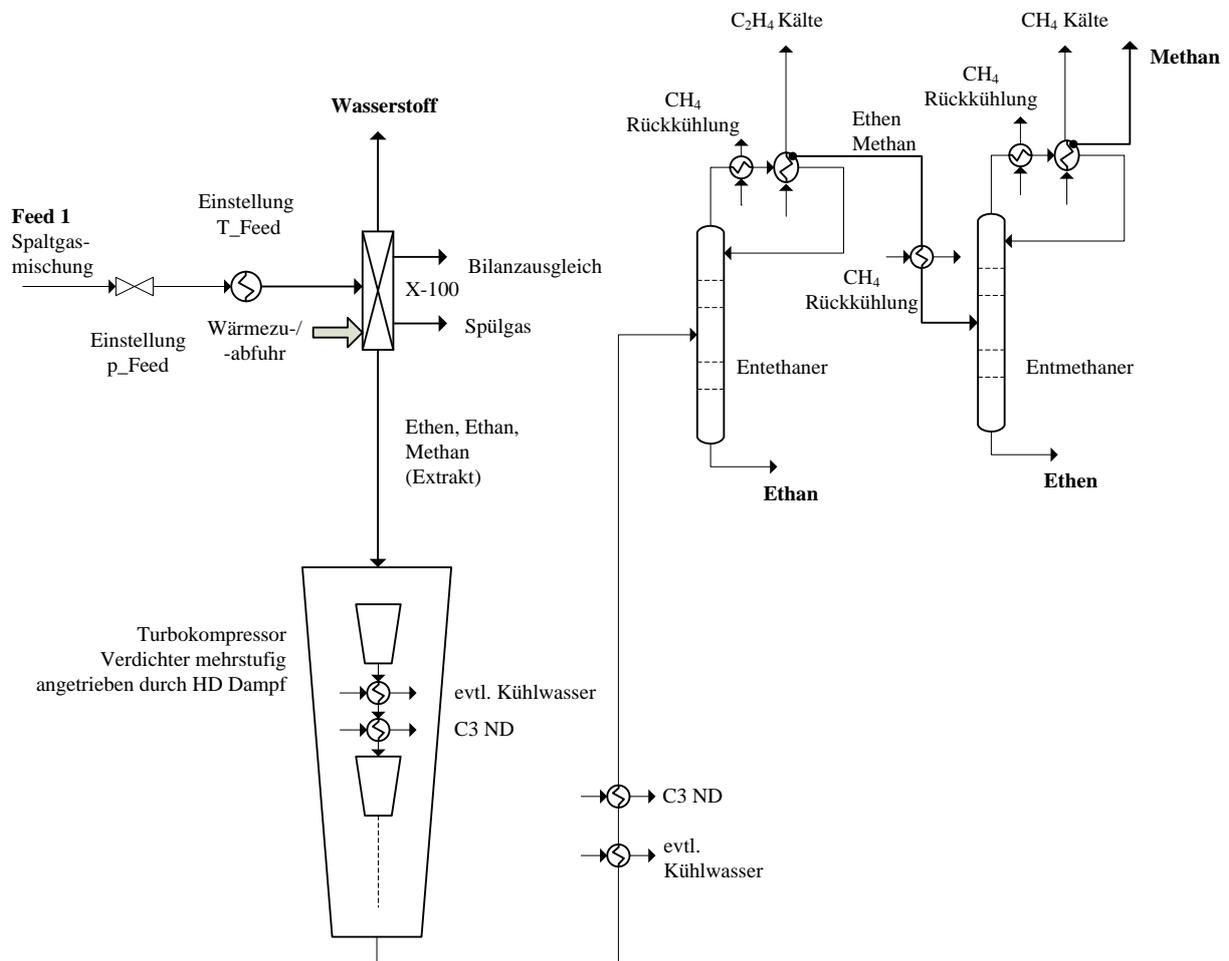


Abb. 6-14: Umsetzung des Tieftemperaturteils nach dem Konzept aus [8] unter Annahme der H_2 Abtrennung im ersten Prozessschritt

Die Spaltgase werden nach Eintritt in den Tieftemperaturteil in den Adsorber geführt. Über die dem Adsorber vorgeschalteten Bauteile Expansionsventil und Wärmeübertrager werden Druck und Temperatur für die Parameterstudie variiert. Das Extrakt, bestehend aus Ethen, Ethan und Methan wird über einen Turbokompressor, der durch Dampf der Hochdruckstufe angetrieben wird, verdichtet. Je nach gewähltem Druck, dessen Wert u.a. abhängig von der Kondensationstemperatur im Entethaner ist, muss in mehreren Stufen verdichtet werden. Zwischenkühlungen mit Propenälte der Niederdruckstufe sowie ggf. mit Kühlwasser werden vorgeschlagen. Aus der Voraussetzung wird geschlossen, dass auch im Auslegungsfall im Kopfkondensator des Entethaners Ethenkälte und im Kopfkondensator des Entmethaners

Methankälte benötigt wird. Beide Kältekreisläufe werden daher mit den gleichen Spezifikationen wie in Abschnitt 6.3 erstellt.

In der Voruntersuchung ist für den Ethenkältekreislauf eine Verdichterleistung von ca. 17 MW, für den Methankältekreislauf ca. 0,4 MW und für die Verdichtung des Extraktes ca. 12,7 MW aufzubringen. In Summe ergibt sich eine für den Tieftemperaturteil durch Einsatz von Dampf der Hochdruckstufe (alle Turbokompressoren werden in der Voruntersuchung mit Dampf der Hochdruckstufe angetrieben) abzudeckende Leistung von ca. 30,1 MW (vgl. Referenz ca. 16 MW).

Zusammenfassende Darstellung des Leistungsbedarfs des Tieftemperaturteils aus den Voruntersuchungen

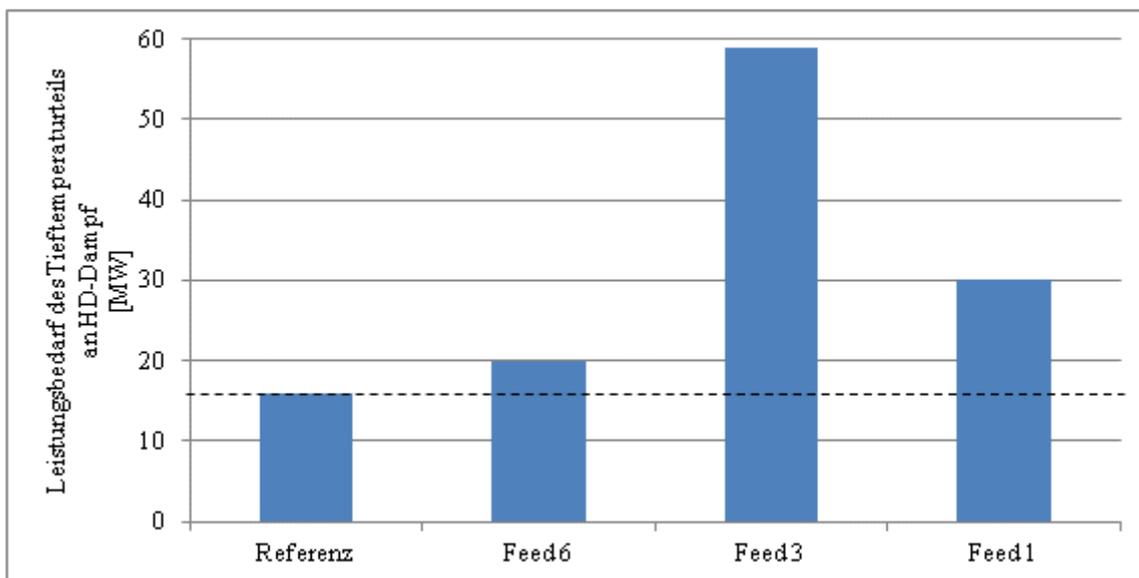


Abb. 6-15: Leistungsbedarf des Tieftemperaturteils aus den Voruntersuchungen zur Adsorption

6.5 Schlussfolgerungen für die Adsorption

Für das Adsorptionssystem kann geschlussfolgert werden, dass das Extrakt in jedem Fall mindestens auf Förderdruck-bzw. Lieferdruck zu verdichten ist. Das Extrakt wird bei Desorptionsdruck (0,1 bar) gewonnen. Unter Berücksichtigung anderer Druckverluste ist das Extrakt daher auf einen entsprechenden Druck zu verdichten, der einen weiteren Transport ermöglicht.

Werden zur weiteren Auftrennung Rektifikationskolonnen verwendet, ist die Kondensationstemperatur des Kopfkondensators von Bedeutung. Diese Temperatur ist u.a.

abhängig vom Kondensatordruck, der durch den Druck des Eingangsstroms (Ausgangsstrom des Adsorbens über Extrakt oder Raffinat) maßgeblich bestimmt ist. Wie die Voruntersuchungen gezeigt haben, können sich je nach Druck und vorhandenen Komponenten Temperaturen ergeben, die einen Einsatz von Ethenkälte oder Methankälte notwendig machen. Das führt zu entsprechenden Leistungsanforderungen, die, sofern nicht anders möglich (z.B. Dampf der Mitteldruckstufe), den Einsatz von Dampf der Hochdruckstufe erfordern.

Eine über den Förderdruck hinausgehende Verdichtung des Extraktes, sofern weiter aufzutrennende Komponenten im Extrakt vorhanden sind und nachgeschaltete Prozesse höhere Drücke benötigen, bedeutet weiteren Einsatz von Verdichterleistung und damit von Dampf der Hochdruckstufe, sofern die Turbokompressoren damit angetrieben werden.

Eine minimale Leistungsanforderung der Adsorbensysteme würde sich dann ergeben, wenn jene Komponente oder Komponenten über das Extrakt vom eintretenden Gasstrom getrennt werden, die keinen weiteren Trennprozess benötigen. In diesem Fall wäre dann nur auf Förderdruck bzw. Lieferdruck (Mindestdruck) zu verdichten. Jene Komponenten, die nach Austritt einem weiteren Trennprozess zuzuführen sind, sollten dabei nach Möglichkeit über das Raffinat abgeführt werden, da dieses gegenüber dem Extrakt bei höherem Druck gewonnen wird und dadurch eine geringere Druckdifferenz für den nachgeschalteten Prozess auszugleichen ist.

7 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das energetische Optimierungspotential des Tieftemperaturteils der Ethenanlage Schwechat untersucht. Die Untersuchung erfolgte insbesondere hinsichtlich des Imports von Dampf der Hochdruckstufe (HD-Dampf). Weitere Faktoren des Optimierungspotentials waren der Export von Dampf der Mittel- und Niederdruckstufe (MD-Dampf, ND-Dampf) und die CO₂-Emissionen.

Dazu wurde zunächst in Kapitel 3 der Turbokompressor zur Ethenverdichtung im Ethen-Kältekreislauf durch die Installation weiterer Zwischenkühlungen modifiziert. Für die Zwischenkühlung wurde zunächst Propen auf verschiedenen Druckstufen aus dem in der Anlage bereits vorhandenen Propen-Kältekreislauf eingesetzt. Daraus ergaben sich Einsparungen hinsichtlich des Importes von HD-Dampf von bis zu 36% (Kühlung mit ND-Propen). Der Einsatz von Propenkälte belastete den Turbokompressor des Propenkältekreislaufes, der mit MD-Dampf angetrieben wird, zusätzlich. Der Export von MD-Dampf wurde dadurch um bis zu 40% reduziert. Zur Verringerung der Reduktion des Exportes von MD-Dampf bei gleichzeitiger Aufrechterhaltung der HD-Dampf Einsparung wurde die Kühllast zwischen den Ethenverdichterstufen durch die Implementierung eines Isobutankältekreislaufes, sofern es die Systemtemperaturen ermöglichten, aufgeteilt. Der Turbokompressor des Isobutankältekreislaufes wurde in den Untersuchungen mit MD-Dampf einerseits und ND-Dampf (als Grenzfall) andererseits betrieben. Bei einer Zwischenkühlung auf -15°C (Propen, zweite Druckstufe) und Antrieb des Turbokompressors des Isobutankältekreislaufes mit MD-Dampf konnte durch die Aufteilung der Kühllast die Reduktion des Exportes von MD-Dampf gegenüber ohne Aufteilung um ca. 48% verringert werden. Bei Antrieb über ND-Dampf konnte die Reduktion um ca. 90% verringert werden. Der Export von ND-Dampf wurde durch den Einsatz zum Antrieb des Turbokompressors dabei um ca. 57% reduziert.

Für alle Varianten von Zwischenkühlungen ergab sich eine Einsparung im Import von HD-Dampf und es konnte ein Verhältnis von Einsparung an HD-Dampf zu Einsatz an MD-Dampf größer als eins erreicht werden, d.h. pro eingesetztem Kilogramm an MD-Dampf wird mehr als ein Kilogramm HD-Dampf eingespart. Auf die produzierten Mengen an Ethen, Wasserstoff, Ethan und Methan sowie auf deren Reinheiten hatten die Zwischenkühlungen keinen Einfluss.

In Kapitel 4 wurde das energetische Optimierungspotential des Tieftemperaturteils durch Einsatz eines Membrankontaktors zur Trennung von Ethen und Ethan untersucht.

Zunächst war für diese Trennung auf Grundlage der Arbeiten [5,7,9] eine Membran mit Wirkprinzip Gaspermeation zur Implementierung vorgesehen. In dieser Arbeit wurde aber festgestellt, dass die Membran, auf die in [5] Modelle für die Gaspermeation angewandt wurden, nicht auf diesem Wirkprinzip beruht. Es handelte sich dabei um einen Membrankontaktor (ausgeführt als Doppelmantelrohr), in dem das Ethen selektiv absorbiert, mit der flüssigen Lösung über eine Membran auf die Außenseite des Rohres transportiert und dort wieder desorbiert wurde. Daraus ergab sich für diese Arbeit ein geänderter Simulationsauftrag, der die Implementierung des Membrankontaktors vorsah.

Aufgrund der nicht ausreichenden Recovery des Membrankontaktors von 87% bezüglich Ethen wurden zwei Varianten für den Einsatz des Membrankontaktors erstellt. In Variante 1 wurde das durch den Membrankontaktor nicht abgetrennte Ethen (13%) mit dem Ethan in die Spaltöfen rückgeführt. Das Ethen wird dort im Gegensatz zum Ethan als inert angenommen, daher im Anlagenkreis geführt und tritt unverändert wieder in den Tieftemperaturteil ein. In Variante 2 wurde dem Membrankontaktor eine Rektifikationskolonne nachgeschaltet, was eine Erhöhung der Recovery von Ethen auf ca. 99,7% ergab. Gegenüber der Referenz (ca. 59,2 t/h) wurden durch Variante 1 mit ca. 57 t/h 3,6% und durch Variante 2 mit ca. 55,2 t/h 6,6% im HD-Dampf Import eingespart. Durch die höhere Ethenmenge im Anlagenkreis in Variante 1 wurde in der Spaltgasverdichtung mehr HD-Dampf benötigt als in der Referenz, dadurch erhöhte sich gleichzeitig der Export von MD- und ND-Dampf um ca. 9% und 4%. Durch die Rektifikation in Variante 2 wurde der MDD Export um ca. 48% reduziert.

Unter Annahme eines polytropen Wirkungsgrades in den Verdichterstufen des Ethenverdichters von 80% ergaben sich insgesamt Einsparungen im HD-Dampf Import von ca. 14% für Variante 1 und ca. 16% für Variante 2. In weiteren Überlegungen wurden beide Varianten mit ausgewählten Zwischenkühlungen aus der in dieser Arbeit durchgeführten Studie kombiniert. Dadurch ergab sich für beide Varianten insgesamt eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 41% (Propen, erste Druckstufe). Der Export von MD-Dampf wurde dabei in Variante 1 um ca. 90% verringert. In Variante 2 reichte der vorhandene MD-Dampf zum Betrieb der Zwischenkühlungen nicht mehr aus und MD-Dampf musste importiert werden. Bei annähernd gleichen rückgewonnenen Ethenmengen wie in der Referenz wurde in beiden Varianten aufgrund der geschlossenen Ausführung des Ethenkältekreislaufes (nur

gasförmiges Ethen wird abgeführt) eine stündlich höhere Menge an gasförmigem Ethen gegenüber der mit offenem Ethenkältekreislauf ausgeführten Referenz (gasförmiges und flüssiges Ethen werden abgeführt) exportiert. In Variante 1 waren es ca. 4,6 t/h (+8,4%) und in Variante 2 ca. 4,9 t/h (+9%) mehr, die aus der Anlage gasförmig exportiert wurden.

In Kapitel 6 wurde ein kontinuierlicher Adsorptionsprozess zur Trennung verschiedener Zusammensetzungen der Spaltgase implementiert. Dabei wurden für die Simulation des Adsorptionsprozesses benötigte Prozessdaten über eine ActiveX-Schnittstelle aus KBC Petro-SIM[®] in MATLAB[®] eingelesen. In MATLAB[®] wurde der Adsorptionsprozess simuliert und die dabei berechneten Daten über die Schnittstelle wieder an KBC Petro-SIM[®] übergeben.

Auf Grundlage der Ergebnisse aus der Parameterstudie [8] hinsichtlich Reinheit und Recovery wurden Zusammensetzungen ausgewählt, für die eine Verfahrenssimulation erstellt und ein Adsorptionssystem implementiert werden sollte [9].

In dieser Arbeit wurde festgestellt, dass die in der Parameterstudie [8] berechneten Recoveries zur Beurteilung über eine Verwendung in der Verfahrenssimulation ungeeignet waren. Weiters wurde festgestellt, dass eine in [2] (Basis für [8]) angeführte Bedingung für den kontinuierlichen Adsorptionsprozess (Spülzeit < Adsorptionszeit) durch den in [8] angewandten MATLAB[®]-Algorithmus nicht erfüllt wird.

Gemäß den Festlegungen in [9] wurden Verfahrenssimulationen unter Einsatz eines Adsorptionssystems für die Komponentenmischungen Feed 1 (Wasserstoff, Methan, Ethan, Ethen), Feed 3 (Wasserstoff, Methan, Ethen) und Feed 6 (Methan, Wasserstoff) erstellt. Jede Verfahrenssimulation wurde für weiterführende Untersuchungen in zwei Varianten erstellt. Eine Variante dient ausschließlich der Ermittlung der optimalen Parameter (Druck und Temperatur) für den Adsorptionsprozess. Mit der zweiten Variante kann die gesamte Anlage simuliert werden. Dazu sind die zuvor ermittelten, optimalen Parameter in die Simulation zu übertragen und auf Basis der Ergebnisse des Adsorptionsprozesses ist die Verfahrenssimulation entsprechend anzupassen. In den Simulationen wurden je nach Bedarf Methan- und Ethankältekreisläufe zur Bereitstellung der benötigten tiefen Temperaturen implementiert. Hauptsächlich durch die Turbokompressoren der Kältekreisläufe und die Verdichtung des Extraktes ergab sich in den Voruntersuchungen für den Tieftemperaturteil ein Leistungsbedarf von ca. 30 MW für Feed 1, 59 MW für Feed 3 und 20 MW für Feed 6. Im Referenzverfahren ist eine Leistung von ca. 16 MW aufzubringen.

8 Ausblick

Für den Einsatz von Vor- und Zwischenkühlungen

- Ein alternatives Kältemittel zu Isobutan, mit dem eine Kühlung auf tiefere Temperaturen einerseits und eine Kondensation mit Kühlwasser bei niedrigerem Druck andererseits möglich ist, würde das Optimierungspotential positiv beeinflussen.
- Eine in weiteren Arbeiten zu prüfende Möglichkeit wäre die Nutzung von Kälteleistung aus vorhandenen Strömen in der Anlage zur Vor- bzw. Zwischenkühlung.
- Die Untersuchung, ob der Antrieb der Turbine des Turbokompressors des Isobutan (oder alternativer Kältemittel)-Kältekreislaufes durch Dampf der Niederdruckstufe vom Grenzfall zum Betriebsfall werden könnte, ist zu empfehlen.
- Berechnungen der Wärmeübertragungsflächen der installierten Kühler über die Mittel der Strömungsmechanik (Nußelt, etc.) und Vergleich mit bereits installierten.
- Aus den Untersuchungen ist hervorgegangen, dass pro eingesetztem Kilogramm MD-Dampf mehr als ein Kilogramm HD-Dampf gegenüber der Referenz eingespart wird. Unter Berücksichtigung der Exergie der Druckstufen wären zur ökonomischen Beurteilung weiterführende, monetäre Berechnungen notwendig.

Für Membranverfahren

- Bei der Absicht, dieses spezielle Membranverfahren anzuwenden bzw. intensiveren Prüfungen zu unterziehen, ist aus thermodynamischen und reaktionstechnischen Aspekten eine Untersuchung des Absorptionsprozesses unter Berücksichtigung der Komponenten, die im Eingangsstrom enthalten sind, in Abhängigkeit der den Absorptionsprozess beeinflussenden Parameter unumgänglich.
- Die Technologie des Membrankontaktors ist gegenüber Membranen, deren Wirkprinzip die Gaspermeation ist, aufwändiger, der Prozess komplizierter, wartungsintensiver und teurer. In [5] bzw. [7] konnten keine Membranen mit Wirkprinzip Gaspermeation gefunden werden, die sowohl die geforderten Reinheiten als auch wirtschaftliche Recoveries erzielten. Weitere Literaturstudien und eigene oder in Kooperation durchgeführte Entwicklungen von Membranen (Gaspermeation) zur Trennung von Spaltgasmischungen wären daher anzuregen.
- Insbesondere die Forschung nach Membranen, durch die selektiv Wasserstoff und Methan aus den Spaltgasen mit jeweils hoher Recovery abgetrennt werden bzw. Wasserstoff von

Methan abgetrennt wird, würde zu deutlichen energetischen Einsparungen führen, da die Kondensation dieser Komponenten besonders energieintensiv ist.

- Beim Einsatz von Membranen zur Abtrennung einer Komponente sollte berücksichtigt werden, dass jene Komponenten die weiteren Trennprozessen zuzuführen sind, aufgrund der höheren Drücke, über die Retentatphase gewonnen werden. Insbesondere bei nachgeschalteten Kondensationsprozessen bringt das energetische Vorteile mit sich.
- Möglichkeiten der Desorption bei höheren Drücken und der Gewinnung von Ethen über die Retentatphase (höherer Druck zur weiteren Verwendung) durch Einsatz eines Adsorbens, das Ethan absorbiert und einer Membran die für Ethen undurchlässig ist, könnten geprüft werden.

Für Adsorptionssysteme

- In dieser Arbeit wurden Unstimmigkeiten im verwendeten Algorithmus in [8] festgestellt. Um eine vollständige Aussage über das energetische Optimierungspotential tätigen zu können, ist eine Überarbeitung des Algorithmus aus [8] durchzuführen.
- Die berechneten Recoveries in [8], aufgrund derer u.a. die Spaltgasmischungen zur Trennung mittels Adsorption ausgewählt wurden [9], waren ungeeignet. Eine Neuauswahl über eine Parameterstudie wie in [8] mit überarbeitetem Algorithmus und dem in dieser Arbeit vorgeschlagenen Bilanzraum zur Berechnung der Recoveries wird empfohlen.
- Zur Abtrennung einer Komponente ist es sinnvoll (nach Möglichkeit), Adsorber zu verwenden, die jene Komponenten, die weiteren Trennprozessen zugeführt werden, über die Raffinatphase gewinnen, weil dort die höheren Drücke vorhanden sind und dies insbesondere für nachgeschaltete Kondensationsprozesse energetisch von Vorteil ist.
- Derzeit wird das Extrakt bei 0,1 bar aus dem Adsorptionssystem gewonnen. Eine Verdichtung mindestens auf Förder- bzw. Lieferdruck ist notwendig und geht zu Lasten des Optimierungspotentials. Möglichkeiten zur Trennung des Adsorbates vom Adsorbens bei höheren Drücken sollten geprüft werden.
- Bei Verwendung eines Adsorptionssystems zur Abtrennung von Wasserstoff sollte darauf geachtet werden, dass die Recovery bezüglich Wasserstoff ausreichend hoch ist, damit Restmengen in nachgeschalteten Trennprozessen in denen Kondensation eingesetzt wird keine tieferen Kondensationstemperaturen verursachen und dadurch auf den Einsatz von Methan-Kälte verzichtet werden kann.

-
- Die zur Voruntersuchung erstellten Simulationen sind nach Überarbeitung des Algorithmus aus [8] und durchgeführter Parameterstudie anzupassen und zu optimieren.
 - Möglichkeiten zur Entlastung der Kolonnen durch Kombination mit Membranverfahren (Seitenabzug, Feedvorreinigung oder Membran im Kondensatorsystem) sollten untersucht werden.

9 Literaturverzeichnis

- [1] BASF SE, Online-Dokument, BASF_Steamcracker_max.pdf, Zugriff am 9.3.2014,
http://www.basf.com/group/corporate/site-ludwigshafen/de/function/conversions:/publish/content/about-basf/worldwide/europe/Ludwigshafen/Education/Lernen_mit_der_BASF/steamcracker/data/BASF_Steamcracker.pdf
- [2] Heimbürg, H.: *Untersuchung der adsorptiven Trennung der leichten Spaltgase aus der Ethylenherzeugung*. Masterarbeit, Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Technische Universität Graz, 2013.
- [3] Linde AG, *OMV AC REVAMP, Projekt Nr. 31240362, Verfahrensbeschreibung*. Ausgabe 01, 24.03.2005
- [4] Schmid, M.: *2013-04-03_PETROSIM4.1.ksc, KBC Petro-SIM[®], Simulationsdatei*. Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Technische Universität Graz, Stand 03.04.2013.
- [5] Macher, R.: *Untersuchung der Trennung von Wasserstoff und leichten Kohlenwasserstoffen mittels Membranverfahren*. Masterarbeit, Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Technische Universität Graz, 2013.
- [6] Steininger, J.: *Modifikation und Optimierung eines Algorithmus zur Berechnung einer Druckwechseladsorption*. Konstruktionsübung, Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Technische Universität Graz, 2013.
- [7] Pöcheim, T.: *Parameterstudie über die Trennung von Wasserstoff und leichten Kohlenwasserstoffen mittels Membranverfahren*. Masterarbeit, Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Technische Universität Graz, 2013.
- [8] Jöbstl, B.: *Parameterstudie über die Trennung von Wasserstoff und leichten Kohlenwasserstoffen mittels Druckwechseladsorption*. Konstruktionsübung, Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Technische Universität Graz, 2013.
- [9] Schmid, M.: *Präsentation: Prozesstechnische Optimierung der Ethylen-Anlage Schwechat*. Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Technische Universität Graz, 2013.
- [10] Teramoto, M., Shimizu, S.: *Ethylene/ethane separation and concentration by hollow fiber facilitated transport membrane module with permeation of silver nitrate solution*. Separation and Purification Technology **44** (2005) 19–29.
- [11] Schmid, M.: 2014, *Persönliche Mitteilung*. Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Technische Universität Graz.
- [12] GESTIS-Stoffdatenbank, Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung, Online-Ausgabe, Stand 22.3.2014,
<http://gestis.itrust.de/nxt/gateway.dll?f=templates&fn=default.htm&vid=gestisdeu:sdbdeu>

10 Symbolverzeichnis

Formelzeichen	Bezeichnung	Einheit
A	Wärmeübertragungsfläche	m ²
a	Parameter der erweiterten Antoine-Gleichung	-
a	Parameter der PR-Gleichung	J m ⁶ mol ⁻²
b	Parameter der erweiterten Antoine-Gleichung	K
b	Parameter der PR-Gleichung	m ³ mol ⁻¹
c	Parameter der erweiterten Antoine-Gleichung	K
d	Parameter der erweiterten Antoine-Gleichung	-
e	Parameter der erweiterten Antoine-Gleichung	K ⁻¹
f	Parameter der erweiterten Antoine-Gleichung	-
H	Spezifische molare Enthalpie	J mol ⁻¹
h	Massespezifische Enthalpie	J kg ⁻¹
k	Binärer Parameter	J m ⁶ mol ⁻¹
\dot{m}	Massenstrom	kg s ⁻¹
n	Polytrophenexponent	-
n	Stoffmenge	mol, kmol
P	Druck	Pa, bar
P _c	Kritischer Druck	Pa, bar
P _r	Reduzierter Druck	-
ΔP	Druckverlust	Pa, bar
\dot{Q}	Wärmeleistung	W, kW
R	Allgemeine Gaskonstante	J mol ⁻¹ K ⁻¹
T	Temperatur	K
T _c	Kritische Temperatur	K
Tr	Reduzierte Temperatur	-
U	Wärmedurchgangskoeffizient	W m ⁻² K ⁻¹
V	Molares Volumen	m ³ mol ⁻¹
\dot{W}	Thermische Leistung	W
y	Molanteil in der Gasphase	-
Z	Realgasfaktor (Kompressibilitätsfaktor)	-

Z^{an}	Term zur Berechnung des Realgasfaktors der anziehende Wechselwirkungen berücksichtigt	-
Z^{ab}	Term zur Berechnung des Realgasfaktors der abstoßende Wechselwirkungen berücksichtigt	-

Griechische Symbole

Formelzeichen	Bezeichnung	Einheit
α	Parameter zur Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit in der PR-Gleichung	-
ω	Azentrischer Faktor	-

Indizes

Formelzeichen	Beschreibung
ab	Aus dem System abführend
ein	Auf eintretende Größen bezogen
ges	gesamt
i	Bezug auf eine Komponente
j	Bezug auf eine Komponente
k	Kaltes Medium (Kältemittel)
spuel	Spülgas
stufe	Verdichterstufe
V	Verdichter
w	Warmes Medium (zu kühlendes Medium)
zu	Dem System zuführend

11 Abbildungsverzeichnis

Abb. 2-1: Schema des Verfahrensablaufes der Behandlung der Spaltgase in der Ethenanlage.	3
Abb. 2-2: Dampfdruckkurven der in den Tieftemperaturteil eintretenden Spaltgase mit ihren Partialdrücken (Berechnung über erweiterte Antoine-Gleichung, siehe 13.3)	4
Abb. 2-3: Simulation des Kühlprozesses zur Abtrennung von Wasserstoff durch Auskondensieren der C1- und C2-Komponenten	5
Abb. 2-4: Konzentrationsverlauf der Komponenten in der Gasphase über der Temperatur bei konstantem Systemdruck	6
Abb. 3-1: Turbokompressor der Ethenkälteanlage	9
Abb. 3-2: Wärmeübertrager der Vor- und Zwischenkühlung	16
Abb. 3-3: Zwischenkühlung 1 (Simulation 1)	17
Abb. 3-4: Zwischenkühlung 2 (Simulation 4)	18
Abb. 3-5: Taupunkt, Sättigungsdampfdruck für i-Butan (Berechnung, siehe 13.3)	20
Abb. 3-6: Isobutankältekreislauf (vereinfachte Darstellung)	21
Abb. 3-7: Zwischenkühlung 4 (Simulation 5) und Zwischenkühlung 5 (Simulation 6)	22
Abb. 3-8: Zwischenkühlung 6 (Simulation 2) und Zwischenkühlung 7 (Simulation 3)	23
Abb. 3-9: Zwischenkühlung 8 (Simulation 8 und Simulation 9)	24
Abb. 3-10: Darstellung des energetischen Optimierungspotentials der Zwischenkühlungen	25
Abb. 3-11: Einsparung von Import an HD-Dampf durch die Zwischenkühlung und den gewählten polytropen Wirkungsgrad	30
Abb. 3-12: Verhältnis von der Einsparung an HDD Import zum Einsatz an MDD Export	31
Abb. 4-1: Membrankontaktor, in die Simulation als Splitter implementiert	34
Abb. 4-2: Rückführung des Restethens	39
Abb. 4-3: Implementierung Membrankontaktor (vereinfachte Darstellung)	40
Abb. 4-4: Splitter zur Separierung des Ethens vom austretenden Gasstrom am Sumpf des Kontaktors	42
Abb. 4-5: Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikationskolonne	43
Abb. 4-6: Temperaturprofil der Rektifikationskolonne	44
Abb. 4-7: Vergleich der Produktströme bei Einsatz der Membrankontaktorvarianten	45
Abb. 4-8: Vergleich der Recoveries und Reinheit der Komponenten	46
Abb. 4-9: Vergleich des energetischen Optimierungspotentials von Kontaktor (Variante 1) mit Kontaktor und nachgeschalteter Rektifikationskolonne (Variante 2)	48

Abb. 4-10: Betrachtung des energetischen Optimierungspotentials des Membrankontaktors (Varianten 1 und 2) anhand HDD Import mit und ohne Einfluss der Wirkungsgradanpassung	50
Abb. 4-11: energetisches Optimierungspotential des Membrankontaktors mit dem Einsatz von Zwischenkühlungen (Umsetzung der weiterführenden Überlegungen).....	51
Abb. 4-12: importierte Mengen an HD-Dampf für Kontaktorvariante 1 mit und ohne Zwischenkühlungen	53
Abb. 4-13: importierte Mengen an HD-Dampf für Kontaktorvariante 2 mit und ohne Zwischenkühlungen	53
Abb. 4-14: Verhältnis von Einsparung an HDD Import zu Einsatz MDD Export für Kontaktorvarianten mit Zwischenkühlungen	54
Abb. 5-1: Ebene 1: Gegenüberstellung des Optimierungspotentials der untersuchten Modifikationen des Tieftemperaturteils	57
Abb. 5-2: Ebene 2: Gegenüberstellung des Optimierungspotentials der untersuchten Modifikationen des Tieftemperaturteils	58
Abb. 5-3: Ebene 3: Änderung des HDD Imports gegenüber der Referenz [4] durch die jeweiligen Modifikation des Tieftemperaturteils in den Simulationen	60
Abb. 6-1: gewählter Bilanzraum zur Berechnung der Recoveries der Komponenten während der Adsorption in [8] (links), gewählter Bilanzraum zur Berechnung der Recoveries der Komponenten während der Adsorption in dieser Arbeit (rechts)	62
Abb. 6-2: derzeitiger Datenfluss zur Simulation des Adsorptionsprozesses.....	64
Abb. 6-3: in dieser Arbeit entwickelter Datenfluss zur Simulation des Adsorptionsprozesses	64
Abb. 6-4: Adsorbersystem in der Verfahrenssimulation.....	65
Abb. 6-5: Vorausgelegte Verfahrensführung zur Verarbeitung von Feed 6 [8] durch ein Adsorptionssystem (vereinfachte Darstellung)	69
Abb. 6-6: Temperaturprofil der Rektifikationskolonne R-1 (D-9811) zur Trennung von Methan und Wasserstoff (Feed 6) von den C2-Komponenten.....	70
Abb. 6-7: einfacher Methankältekreislauf zur Bereitstellung der Kondensationstemperatur im Kopfkondensator der Rektifikationskolonne R-1 (D-9811).....	71
Abb. 6-8: Umsetzung des Tieftemperaturteils nach dem Konzept aus [8]	74
Abb. 6-9: Temperaturprofil der Rektifikationskolonne R-102	76
Abb. 6-10: Temperaturprofil der Rektifikationskolonne R-104	77
Abb. 6-11: Ethenkältekreislauf mit Zwischenkühlung	78
Abb. 6-12: Methankältekreislauf mit Zwischenkühlung.....	79

Abb. 6-13: Adsorptionssystem zur Parameterstudie bei Zuführung von Feed 1	80
Abb. 6-14: Umsetzung des Tieftemperaturteils nach dem Konzept aus [8] unter Annahme der H ₂ Abtrennung im ersten Prozessschritt	81
Abb. 6-15: Leistungsbedarf des Tieftemperaturteils aus den Voruntersuchungen zur Adsorption.....	82
Abb. 13-1: Funktionsprinzip Membran 8 (links) [10], Aufbau im Experiment (rechts) [10]	102
Abb. 13-2: Permeation der Module A, B und C [10].....	103
Abb. 13-3: Untersuchung der Verdichterleistung aus der Referenz [4] als Funktion des polytropen Wirkungsgrades	106
Abb. 13-4: Untersuchung der Verdichterleistung unter Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1(siehe Kapitel 4.3) als Funktion des polytropen Wirkungsgrades.....	106
Abb. 13-5: Untersuchung der Verdichterleistung unter Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2(siehe Kapitel 4.4) als Funktion des polytropen Wirkungsgrades.....	106
Abb. 13-6: Gesamtleistung des Verdichters über dem polytropen Wirkungsgrad der Verdichterstufen	107
Abb. 13-7: Gesamtleistung des Verdichters über dem polytropen Wirkungsgrad der Verdichterstufen im begrenzten Einsatzbereich.....	108
Abb. 13-8: HD-Dampf Import über dem polytropen Wirkungsgrad der Verdichterstufen ...	109
Abb. 13-9: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, hier am Bsp. ZK1 (Sim1)	110
Abb. 13-10: Beiträge von Zwischenkühlung, Membrankontaktor nach Variante 1 und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, hier am Bsp. Variante 1 + Zwischenkühlung (Sim11).....	111
Abb. 13-11: Beiträge von Zwischenkühlung, Membrankontaktor nach Variante 2 und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, hier am Bsp. Variante 2 + Zwischenkühlung (Sim15).....	112
Abb. 13-12: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 1 (Sim1)	118
Abb. 13-13: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 2 (Sim4)	120
Abb. 13-14: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 3 (Sim7)	123
Abb. 13-15: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 4 (Sim5)	125

Abb. 13-16: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 5 (Sim6)	128
Abb. 13-17: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 6 (Sim2)	131
Abb. 13-18: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 7 (Sim3)	134
Abb. 13-19: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 8 (Sim8)	136
Abb. 13-20: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 9 (Sim9)	139
Abb. 13-21: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 1 (Sim10).....	143
Abb. 13-22: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 1 (Sim11).....	147
Abb. 13-23: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 1 (Sim12).....	151
Abb. 13-24: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 1 (Sim13).....	155
Abb. 13-25: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 2 (Sim14).....	158
Abb. 13-26: Beiträge von Trennverfahren (Membrankontaktor nach Variante 2, Sim15), Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import.	162
Abb. 13-27: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 2 (Sim16).....	166
Abb. 13-28: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 2 (Sim17).....	170

12 Tabellenverzeichnis

Tab. 2-1: Spezifikationen des Eingangstroms in den Tieftemperaturteil der Ethenanlage	5
Tab. 3-1: eingestellte Temperaturen im Kältebereitstellungsprozess des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4]	10
Tab. 3-2: bereitgestellte Temperaturen der Propenkälteanlage in der Referenzsimulation [4]	13
Tab. 3-3: Zwischenkühlung 1 (Simulation 1)	17
Tab. 3-4: Zwischenkühlung 2 (Simulation 4)	18
Tab. 3-5: Zwischenkühlung 3 (Simulation 7)	19
Tab. 3-6: Zwischenkühlung 4 (Simulation 5) und Zwischenkühlung 5 (Simulation 6)	22
Tab. 3-7: Zwischenkühlung 6 (Simulation 2) und Zwischenkühlung 7 (Simulation 3)	23
Tab. 3-8: Zwischenkühlung 8 (Simulation 8) und Zwischenkühlung 9 (Simulation 9)	24
Tab. 4-1: Vergleich Kontaktor (Variante 1) mit Kontaktor und nachgeschalteter Rektifikationskolonne (Variante 2)	47
Tab. 6-1: Spül- und Adsorptionszeiten aus der Nachrechnung der Parameterstudie aus [8] für die o.a. ausgewählten Komponentenmischungen	63
Tab. 13-1: Parameter der erweiterten Antoine-Gleichung, Parameter aus KBC Petro-SIM [®]	113
Tab. 13-2: Gültigkeitsbereich der Parameter der Komponenten für die erweiterte Antoine-Gleichung, Gültigkeitsbereich aus KBC Petro-SIM [®]	113
Tab. 13-3: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 1 (Sim1), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	116
Tab. 13-4: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 1 (Sim1), Teil 2: Angaben absolut	116
Tab. 13-5: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 2 (Sim4), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	119
Tab. 13-6: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 2 (Sim4), Teil 2: Angaben absolut	119
Tab. 13-7: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 3 (Sim7), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	121
Tab. 13-8: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 3 (Sim7), Teil 2: Angaben absolut	121
Tab. 13-9: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 4 (Sim5), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	124
Tab. 13-10: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 4 (Sim5), Teil 2: Angaben absolut	124
Tab. 13-11: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 5 (Sim6), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	126
Tab. 13-12: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 5 (Sim6), Teil 2: Angaben absolut	127

Tab. 13-13: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 6 (Sim2), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	129
Tab. 13-14: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 6 (Sim2), Teil 2: Angaben absolut	129
Tab. 13-15: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 7 (Sim3), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	132
Tab. 13-16: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 7 (Sim3), Teil 2: Angaben absolut	132
Tab. 13-17: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 8 (Sim8), Teil 1:im Vergleich mit dem Basisfall [4]	135
Tab. 13-18: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 8 (Sim8), Teil 2: Angaben absolut	135
Tab. 13-19: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 9 (Sim9), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	137
Tab. 13-20: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 9 (Sim9), Teil 2: Angaben absolut	137
Tab. 13-21: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim10), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	140
Tab. 13-22: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim10), Teil 2: Angaben absolut	140
Tab. 13-23: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim11), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	144
Tab. 13-24: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim11), Teil 2: Angaben absolut	144
Tab. 13-25: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim12), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	148
Tab. 13-26: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim12), Teil 2: Angaben absolut	148
Tab. 13-27: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim13), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	152
Tab. 13-28: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim13), Teil 2: Angaben absolut	152
Tab. 13-29: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim14), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	156
Tab. 13-30: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim14), Teil 2: Angaben absolut	156
Tab. 13-31: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim15), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	159
Tab. 13-32: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim15), Teil 2: Angaben absolut	160
Tab. 13-33: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim16), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	163
Tab. 13-34: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim16), Teil 2: Angaben absolut	163

Tab. 13-35: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim17), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]	167
Tab. 13-36: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim17), Teil 2: Angaben absolut	167

13 Anhang

13.1 Modelleinschränkungen bei Membrankontaktoren

Aufgrund des Inhalts von Publikation [10], aus der die gewählte Membran entnommen ist, wird davon ausgegangen, dass das in [5] ausgezeichnete Modell 3 für diese Membran nicht angewendet werden kann. In [7] wird ausschließlich Modell 3 auf die in [5] angegebenen Membranen in der Parameterstudie angewandt. Die Auswahl einer Membran basiert auf den Ergebnissen aus [7].

Die Ergebnisse aus [7] werden hier für die gewählte Membran als gegenstandslos betrachtet. Das wird auf den folgenden Seiten argumentiert.

Aus den vorangegangenen Arbeiten [5,7]

[5] beinhaltet u.a.:

- Literaturstudie zur Findung von Membranen zur Trennung von Gemischen aus den Komponenten H_2 , CH_4 , C_2H_4 und C_2H_6 .
- Literaturstudie zur Findung von Modellen zur lokalen und globalen Berechnung von Recoveries, Reinheiten, Konzentrationsverläufen etc. zu den Membranen
- Anwendung der Modelle auf die gefundenen Membranen und Validierung
- Beschreibung des Einflusses der Variation der Parameter Eingangsdruck, Druckverhältnis Eingang zu Permeat und Trennfläche auf die Trenncharakteristik.

[7] beinhaltet:

Auf Basis von [5] wird in [7] eine Parameterstudie über die zehn Membranen mit Modell 3 durchgeführt.

Dabei werden die Parameter wie folgt variiert:

- Konstanter Eingangsdruck bei 32,53 bar und variables Druckverhältnis (Druck des Eingangs zum Permeat) zwischen 2,5 und 10
- Konstantes Druckverhältnis von Eingang zu Permeat bei 2,5 und variabler Eingangsdruck zwischen 1,013 und 32,52 bar

Ergebnis aus [5,7]

Im Ergebnis aus [5] werden zehn Membranen gefunden, auf die, neben anderen Modellen, Modell 3 angewandt wird. Aufgrund von anschließenden Validierungen wird dieses Modell als jenes identifiziert, das die Trennung am besten beschreibt. Die Auswirkungen der Variation der oben angeführten Prozessparameter auf die Trenncharakteristik werden dargestellt.

Im Ergebnis aus [5] werden die Recoveries und Reinheiten der Komponenten unter Anwendung von Modell 3 auf die in [5] beschriebenen Membranen bei Variation der zuvor beschriebenen Parameter berechnet und verglichen.

Die in [5,7] als Membran 8 ausgewiesene Membran wird aufgrund der berechneten Werte für Ethen aus der Parameterstudie (Recovery über 98%, Reinheit über 98 mol%, Fläche 5000m²) [7] für die Verfahrenssimulation ausgewählt und dieser Arbeit zur Implementierung in Auftrag gegeben.

In [5] (Seite 41) wird angeführt, dass die in die Arbeit aufgenommenen Membranen auf dem Trennprinzip der Gaspermeation beruhen.

Die Struktur von Modell 3 [5] (Verwendung der Partialdruckdifferenz als treibende Kraft, Komponentenbilanz unter Einbezug der Permeanz) lässt die Absicht auf Anwendung auf Membrane, deren Wirkprinzip auf Gaspermeation beruht, erkennen und logisch rechtfertigen.

Aufgrund der Ausführungen in [10] wird hier davon ausgegangen, dass es sich bei Membran 8 [5] um eine Membran handelt, deren Trennprinzip nicht die Gaspermeation ist. Vielmehr ist es eine spezielle Form eines Membrankontaktors, dessen Wirkprinzip auf Absorption und Desorption beruht.

Funktionsprinzip des in [5] als Membran 8 ausgewiesenen Membranverfahrens

Das in den Apparat eintretende Gasgemisch aus Ethan und Ethen wird mit wässriger Silbernitratlösung im Gleichstrom am Boden einer Hohlfaser-Ultrafiltrationsmembran im Lumen eingeführt. Das Silbernitrat absorbiert selektiv das Ethen. Es permeiert nicht das Gas, sondern die flüssige Silbernitratlösung in der das Ethen absorbiert wurde, durch die Membran. Nach Permeation auf die Außenseite, wird das Ethen desorbiert und die Lösung im Gegenstrom wieder zum Boden rückgeführt. Das eigentliche Trennprinzip ist dabei

Absorption/Desorption, nicht die in [5] zu Grunde gelegte Gaspermeation. Die Membran stellt eine konstruktive Möglichkeit dar, die Abmessungen von Absorber, Desorber und Gas-Flüssig-Abscheider kompakt zu halten. Die beste Performance (berechnet aus dem Verhältnis von vermessener Recovery zu berechneter Recovery bei idealen Bedingungen) des dargestellten Verfahrens wird erreicht, wenn die gesamte Lösung kurz vor Erreichen des Kopfes permeiert, da eine höhere Verweilzeit erreicht wird. Eigentlich handelt es sich bei der Erhöhung der Verweilzeit um eine Optimierungsmaßnahme der Absorption.

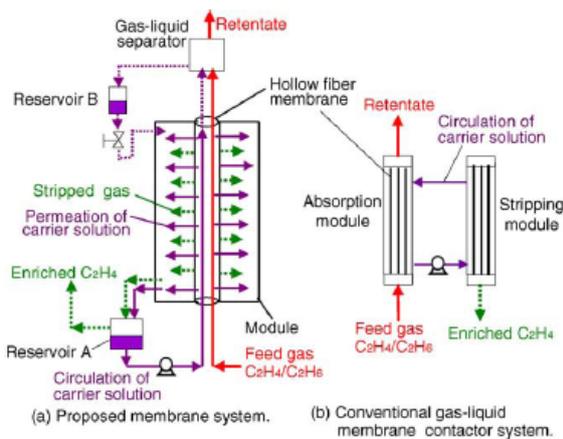


Fig. 1. Proposed membrane system and conventional gas-liquid membrane contactor system consisting of absorption and stripping modules.

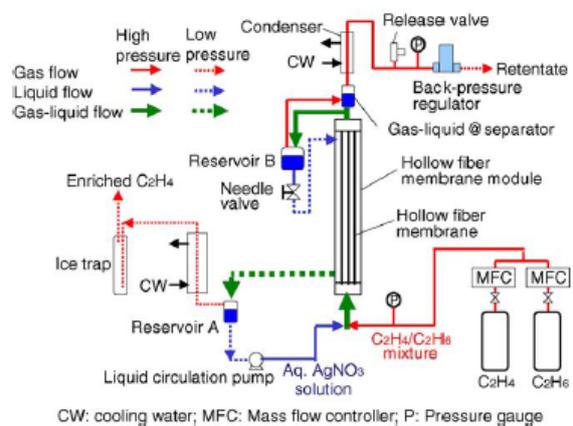


Fig. 2. Schematic of experimental apparatus.

Abb. 13-1: Funktionsprinzip Membran 8 (links) [10], Aufbau im Experiment (rechts) [10]

Im Versuch wurde die Membran unterschiedlich präpariert (Abb. 13-2). In Modul C beginnt die Silbernitratlösung kurz nach Einführung zu permeieren, in Modul B erst nach einem gewissen Abstand zum Einlass und in Modul A erst kurz vor Erreichen des Kopfes.

Bei sofortigem Einsetzen des Permeierens werden im Vergleich die schlechtesten Ergebnisse hinsichtlich Recovery erzielt. Dies ist auf eine geringe Verweilzeit und ungünstige Strömungsführung am Rohreinlass zurückzuführen. Modul A weist die höchste Recovery auf und Modul B liegt zwischen den Modulen A und C.

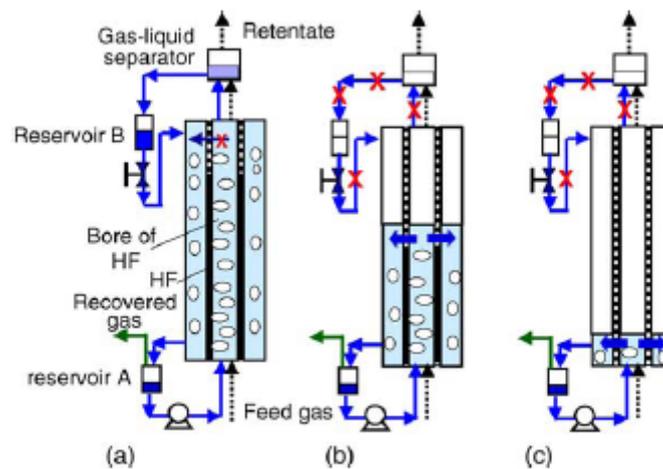


Fig. 4. Liquid permeation behavior of three modules. (a) Module A, (b) module B and (c) module C.

Abb. 13-2: Permeation der Module A, B und C [10]

Für die in [5] durchgeführten lokalen Modellierungen werden Permeanzen benötigt. Teramoto et al. [10] gibt zwar eine Permeanz an, bezeichnet diese aber selbst als „Scheinpermeanz“ und weist darauf hin, dass diese nicht jener Permeanz entspricht, die üblicherweise in der Gaspermeation verwendet wird.

Diese Art von Permeanz, wie sie in [10] angegeben ist, dient als Vergleichswert, um diese Technologie mit konventionellen Membranverfahren vergleichen zu können.

Teramoto et al. [10] berechnet die Permeanz über eine mittlere logarithmische Partialdruckdifferenz aus den Partialdrücken der in den Absorberteil des Kontaktors eintretenden und aus dem Kontaktor austretenden Spezies unter der Berücksichtigung der Anwesenheit von Dampf (Dampfdruck, Wasser bei 298K und 1 atm). Es handelt sich bei dieser Permeanz daher um einen globalen Wert, der nicht als Rechengröße zur Anwendung für eine lokale Modellierung geeignet ist.

Zusammenfassung und Fazit

In [5] wird davon ausgegangen, dass Membran 8 auf dem Wirkprinzip der Gaspermeation beruht. Modell 3, das aufgrund seiner Struktur zur Beschreibung von Gaspermeation geeignet ist, wird dort unter Verwendung der in [10] angegebenen Permeanz auf die Membran angewandt.

Aus Sicht der Verfahrenssimulation handelt es sich bei der in [5] ausgewiesenen Membran 8 nicht um die Technologie der Gaspermeation, sondern um eine spezielle Konstruktion eines Membrankontaktors, entsprechende Definitionen finden sich auch in [10]. Die eigentliche Trennung basiert auf Absorption und Desorption, nicht auf Gaspermeation, und die treibende Kraft für den Stoffübergang ist nicht die radiale Partialdruckdifferenz über die Membran.

Die Validierung des Modells 3 in [5] wurde mit Membranen durchgeführt, die tatsächlich durch Gaspermeation funktionieren [5]. Die Aussagen der Validierung können daher nicht auf Membrane anderen Wirkungsprinzips angewandt werden.

Bei der aus [10] entnommenen und in [5] zur Berechnung verwendeten Permeanz handelt es sich nicht um eine Permeanz, wie sie für Gaspermeation verwendet wird. Es handelt sich dabei um eine Scheinpermeanz [10] die einen Vergleich mit konventionellen Membranverfahren ermöglicht. Diese Permeanz wird daher zur Verwendung für eine lokale Modellierung als ungeeignet angesehen.

Aufgrund der angeführten Gründe werden die Ergebnisse aus [5,7] für die der Verfahrenssimulation zur Implementierung vorgegebene Membran 8 als gegenstandslos betrachtet.

13.2 Annahme von Wirkungsgraden und Wirkungsgradbereinigung

Die in der Referenz [4] vorgegebenen isentropen Wirkungsgrade der einzelnen Verdichterstufen wurden aus gemessenen Prozessdaten berechnet, dies beinhaltet Unsicherheiten [11].

Die in [4] vorgegebenen isentropen Wirkungsgrade betragen in der ersten Verdichterstufe 76%, der zweiten 78%, der dritten bei 48% und der vierten 95%.

Ob und in welcher Höhe ein geänderter Betrieb des Tieftemperaturteils (veränderter Massen- und Volumenstrom, andere Temperatur u.a.) Einfluss auf den Betriebspunkt des Kompressors nimmt, kann hier nicht beantwortet werden, weil dafür erforderliche Informationen wie Verdichterkennfelder und Datenblätter für den Turbokompressor nicht vorliegen.

Aus diesem Grund wird angenommen, dass der Turbokompressor für jede Konfiguration des Tieftemperaturteils der in dieser Arbeit simuliert wird, entsprechend optimal ausgelegt ist. Dabei wird in jeder durchgeführten Simulation in den Verdichterstufen ein polytroper

Wirkungsgrad von 80% angenommen. Dass dabei ein polytroper und kein isentroper Wirkungsgrad angenommen wird, begründet sich damit, dass der polytrope Wirkungsgrad, im Gegensatz zum isentropen, in den verwendeten Modellen unabhängig vom jeweiligen Druckverhältnis der Verdichterstufen ist. Die in der Simulation des realisierten Verfahrens [4] eingestellten Druckverhältnisse in den einzelnen Verdichterstufen sind unterschiedlich. Durch die Annahme eines polytropen Wirkungsgrades ist dieser Aspekt, aufgrund der Unabhängigkeit, nicht weiter zu berücksichtigen.

Die vorgegebenen Wirkungsgrade der Verdichterstufen nehmen Einfluss auf die von der Turbine zu erbringende Leistung und damit auch auf den HD-Dampf Import.

Wie sich die Werte angenommener polytroper Wirkungsgrade auf den Wert des HD-Dampf Importes bzw. auf die benötigte Leistung des Verdichters auswirken, ist zu untersuchen. Kann der Einfluss quantitativ festgestellt werden, ist es möglich, den Anteil des HDD Importes der durch Modifizierung des Wirkungsgrades verursacht wird, aus dem Ergebnis herauszurechnen, explizit darzustellen und Trennverfahren sowie Kühlsystem können unabhängig von der Wahl des polytropen Wirkungsgrades bewertet werden. Das Ergebnis ist somit wirkungsgradbereinigt.

Die polytropen Wirkungsgrade werden in allen Verdichterstufen (vier Stufen) variiert. Um ein vollständiges Bild über den Einfluss des polytropen Wirkungsgrades zeichnen zu können, ist ein möglichst breiter Bereich, innerhalb dessen der Wirkungsgrad variiert wird, zu wählen.

Die Untersuchung wird in zwei Hauptschritten durchgeführt:

- Untersuchung des Einflusses des polytropen Wirkungsgrades auf die Verdichterleistung

Diese Untersuchung grenzt im Ergebnis den polytropen Wirkungsgradbereich ein, in dem der Betrieb des Verdichters angenommen wird.

- Untersuchung des Einflusses des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import

Das Ergebnis dieser Untersuchung ist eine Darstellung des HDD Importes über den polytropen Wirkungsgrad im eingegrenzten Bereich, durch die der Wirkungsgradeinfluss erfasst wird.

Einfluss auf die Gesamtleistung des Ethenverdichters :

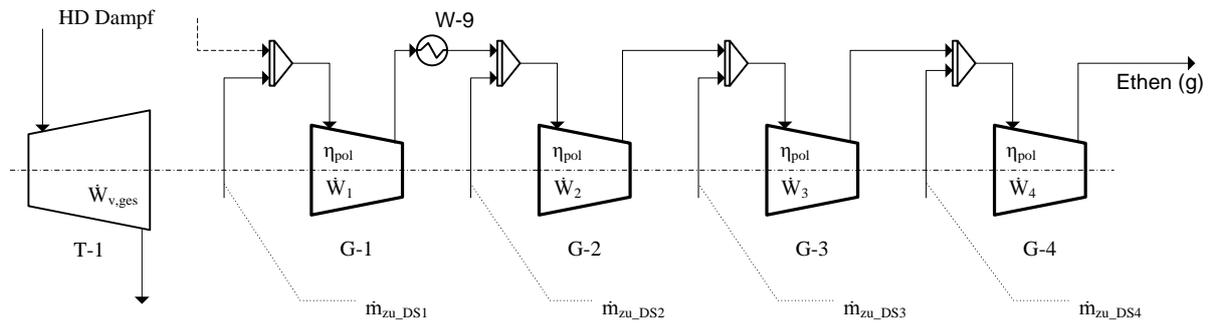


Abb. 13-3: Untersuchung der Verdichterleistung aus der Referenz [4] als Funktion des polytropen Wirkungsgrades

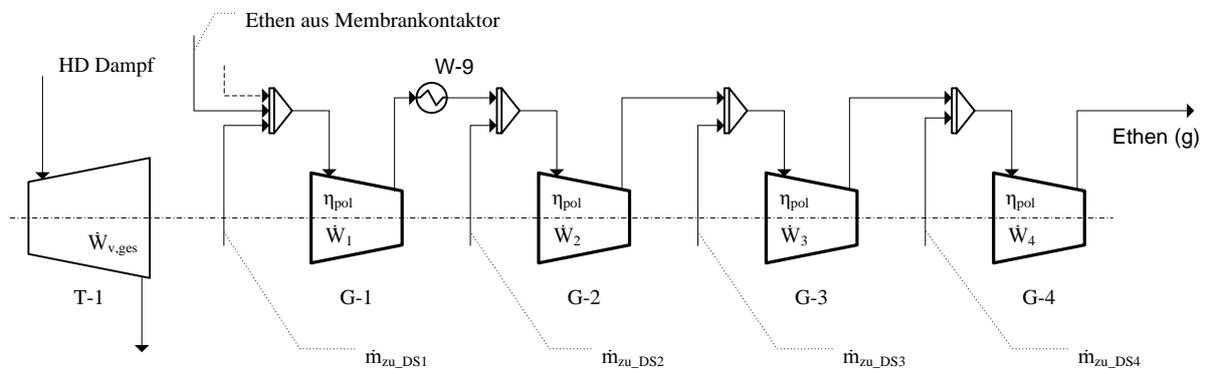


Abb. 13-4: Untersuchung der Verdichterleistung unter Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 (siehe Kapitel 4.3) als Funktion des polytropen Wirkungsgrades

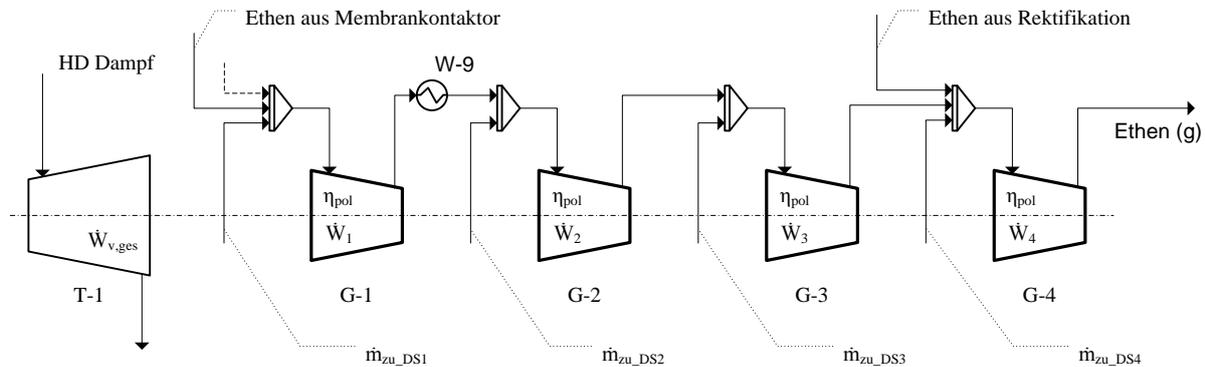


Abb. 13-5: Untersuchung der Verdichterleistung unter Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2 (siehe Kapitel 4.4) als Funktion des polytropen Wirkungsgrades

Die Summe der Leistungen der Verdichterstufen (\dot{W}_i) ergibt die Gesamtleistung des Verdichters ($\dot{W}_{v,ges}$), mechanische Verluste werden nicht berücksichtigt.

Jede Verdichterstufe wird zusätzlich zur austretenden Masse der Vorstufe mit der zugeführten Masse der jeweiligen Druckstufe der Ethenkälte des Ethenkältekreislaufes ($\dot{m}_{zu,i}$) belastet.

Untersucht wird die Gesamtleistung des Verdichters bei Variation der polytropen Wirkungsgrade in jeder Verdichterstufe in einem Bereich von 15% bis 99%. Die η_{pol} sind dabei aber in jedem Untersuchungsschritt in allen vier Verdichterstufen gleich.

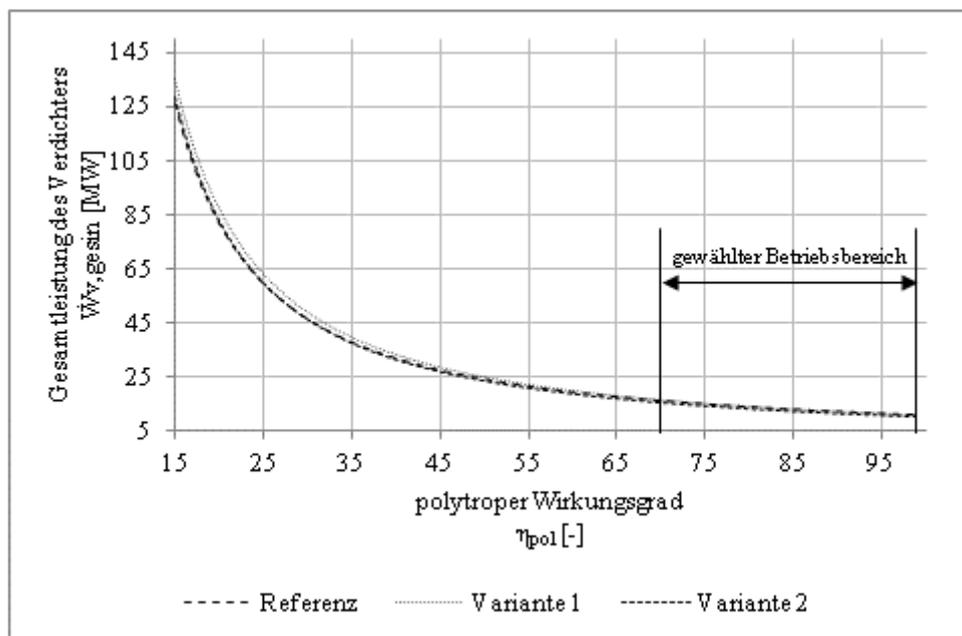


Abb. 13-6: Gesamtleistung des Verdichters über dem polytropen Wirkungsgrad der Verdichterstufen

Abb. 13-6 stellt die Gesamtleistung des Verdichters über den polytropen Wirkungsgrad der Verdichterstufen dar. Aufgrund des Anstieges der Verdichterleistung bei Wirkungsgraden unter 70% und die damit verbundene wirtschaftliche Mehrbelastung wird ein Betrieb unterhalb dieses Wertes ausgeschlossen. Es wird angenommen, dass jede Verdichterstufe in einem polytropen Wirkungsgradbereich zwischen 70% und 99% betrieben wird. Der Einfluss des Wirkungsgrades wird für diesen Bereich, im Detail, folgend betrachtet.

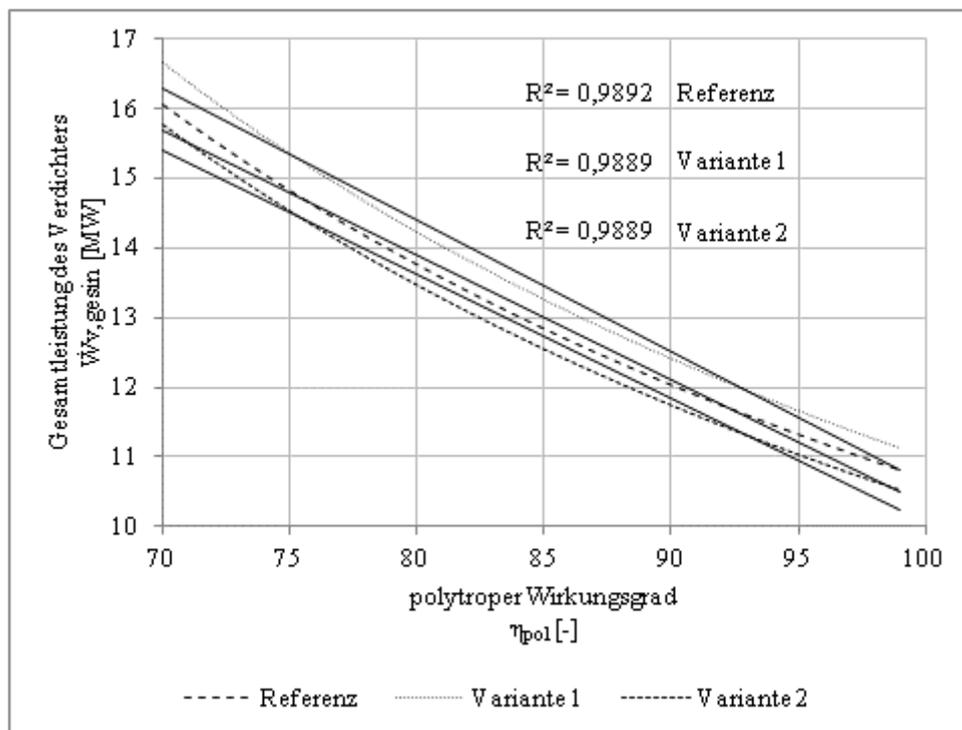


Abb. 13-7: Gesamtleistung des Verdichters über dem polytropen Wirkungsgrad der Verdichterstufen im begrenzten Einsatzbereich

Werden die Verdichterstufen bei polytropen Wirkungsgraden zwischen 70% und 99% betrieben, ergibt sich der in Abb. 13-7 dargestellte Verlauf. Zwischen den gewählten unteren (70%) und oberen (99%) Extremwerten des polytropen Wirkungsgrades ergibt sich, bezogen auf den unteren, ein Unterschied in der Leistung von ca. 33% (für den Referenzfall entspricht das ca. 5,3 MW, für Variante 1 ca. 5,5 MW und Variante 2 ca. 5,2 MW).

Fazit:

Aus der Untersuchung des Einflusses des polytropen Wirkungsgrades auf die Verdichterleistung, wird angenommen, dass die Verdichterstufen, aus Gründen der Wirtschaftlichkeit, bei polytropen Wirkungsgraden zwischen 70% und 99% betrieben werden.

Zwischen polytropen Wirkungsgraden von 70% und 90% in den Verdichterstufen liegt ein Unterschied in der Leistung von ca. 33%. Eine Berücksichtigung dieses Einflusses in der Beurteilung der alternativen Verfahren wird dadurch empfohlen.

Untersuchung des quantitativen Einflusses des polytropen Wirkungsgrades auf den HDD Import

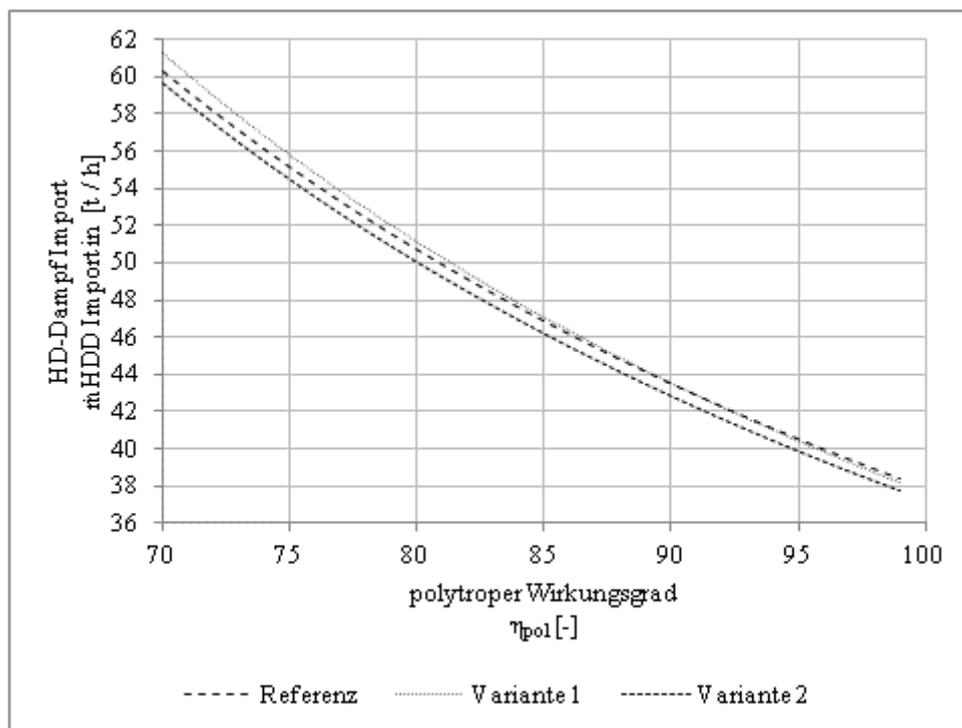


Abb. 13-8: HD-Dampf Import über dem polytropen Wirkungsgrad der Verdichterstufen

In Abb. 13-8 ist der HD-Dampf Import bei Variation des polytropen Wirkungsgrades, innerhalb des zuvor definierten Bereiches Abb. 13-7 dargestellt. Der quantitative Verlauf des HD-Dampf Imports als Funktion des polytropen Wirkungsgrades der Verdichterstufen des Ethenverdichters wird für die durchgeführten Simulationen dieser Arbeit explizit dargestellt. Nachfolgend sind dazu drei Beispiele angeführt.

Für die untersuchten Zwischenkühlungen aus Kapitel 3

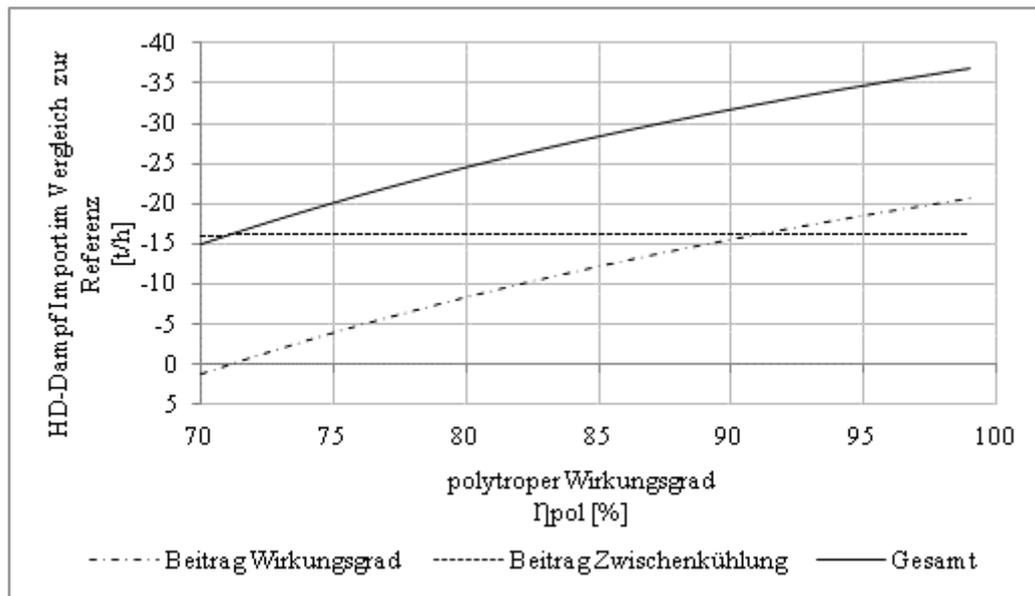


Abb. 13-9: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, hier am Bsp. ZK1 (Sim1)

Aus Abb. 13-9 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf die Einsparung des Importes von HD-Dampf auswirkt. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt bei über 100%. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 92% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

Für den Membrankontaktor nach Variante 1 (siehe Kapitel 4.3)

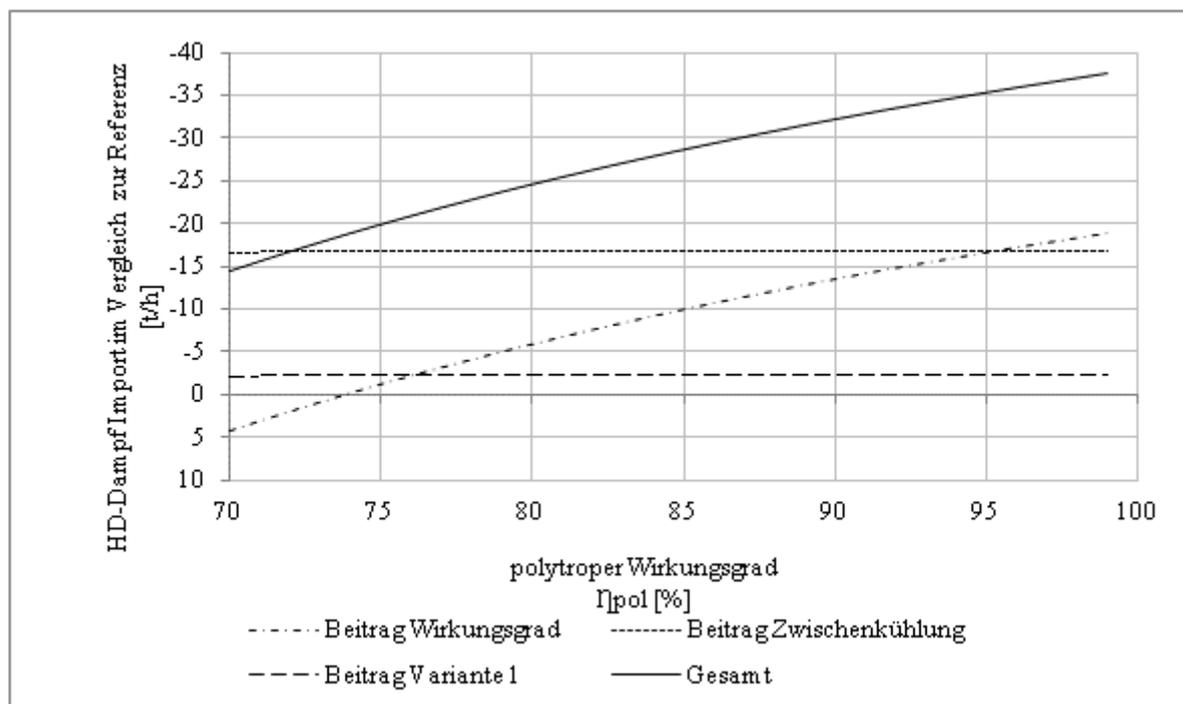


Abb. 13-10: Beiträge von Zwischenkühlung, Membrankontaktor nach Variante 1 und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, hier am Bsp. Variante 1 + Zwischenkühlung (Sim11)

In Abb. 13-10 ist zu erkennen, dass polytrope Wirkungsgrade in den Verdichterstufen unter ca. 74% nicht zur Einsparung von HD-Dampf Import beitragen. Die verwendete Zwischenkühlung leistet bis zu einem polytropen Wirkungsgrad von ca. 95% den größten Beitrag an der Einsparung von HD-Dampf Import gegenüber der Referenz. Das Trennverfahren hat bis zu ca. 76% den größeren Anteil an der Einsparung als die Wirkungsgrade. Zwischen 70% und 99% Wirkungsgrad in den Verdichterstufen besteht ein Unterschied von mehr als dem Doppelten in der Einsparung von HD-Dampf.

Für den Membrankontaktor nach Variante 2 (siehe Kapitel 4.4)

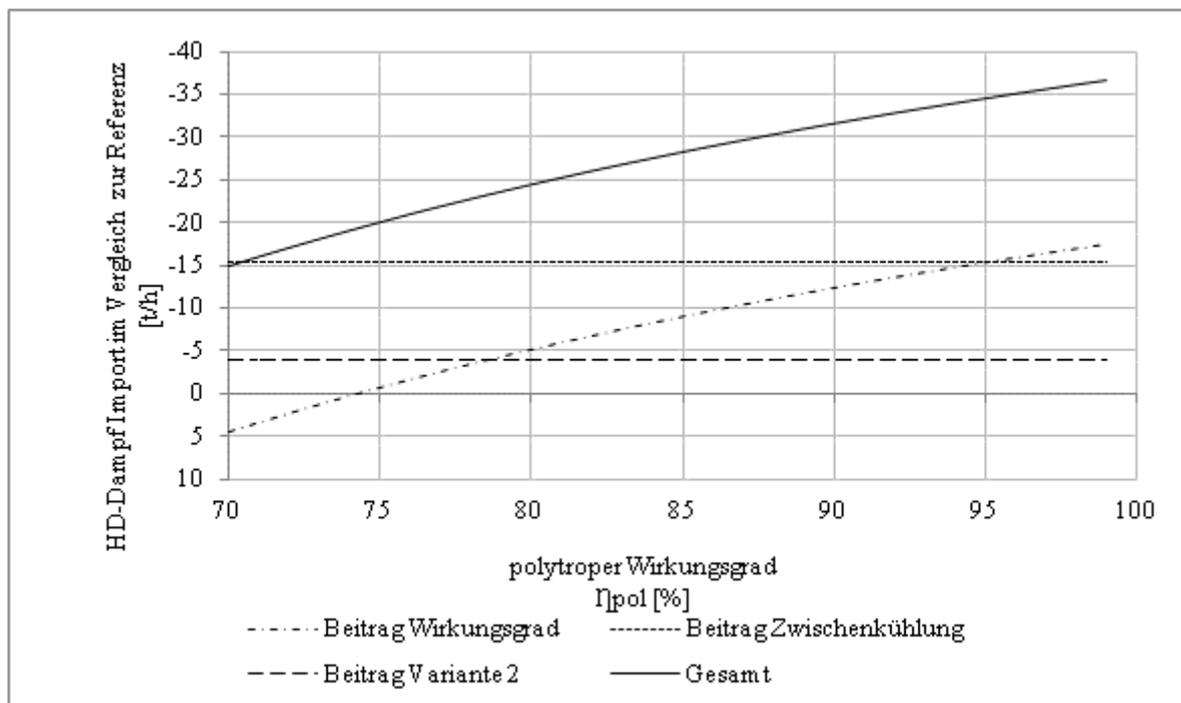


Abb. 13-11: Beiträge von Zwischenkühlung, Membrankontaktor nach Variante 2 und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, hier am Bsp. Variante 2 + Zwischenkühlung (Sim15)

In Abb. 13-11 ist zu erkennen, dass polytrope Wirkungsgrade unter 74% in den Verdichterstufen, keinen Beitrag zur Einsparung an HD-Dampf leisten. Bis zu Wirkungsgraden von 95% hat die Zwischenkühlung den größten Anteil an der Einsparung. Das Trennverfahren hat bis zu ca. 78% den größeren Anteil an der Einsparung als die Wirkungsgrade. Zwischen 70% und 99% Wirkungsgrad in den Verdichterstufen besteht auch hier ein Unterschied von mehr als dem Doppeltem in der Einsparung von HD-Dampf.

13.3 Berechnung der Sättigungsdampfdruckkurven

Die Berechnung der Sättigungsdampfdruckkurven in den Kapiteln 2 (Abb. 2-2) und 3 (Abb. 3-5) erfolgt über eine erweiterte Antoine-Gleichung die in KBC Petro-SIM[®] (Version 4.1) verwendet wird.

Erweiterte Antoine-Gleichung:

$$LN(P) = a + \frac{b}{(T + c)} + d \cdot LN(T) + e \cdot T^f \quad (13-1)$$

Der Druck P ist dabei in [kPa] einzusetzen und die Temperatur T in [K]. Die Temperatur kann dabei nicht explizit berechnet werden, ihr Wert ergibt sich durch Iteration.

In der folgenden Tabelle sind die Werte der Parameter der Antoine Gleichung angegeben:

Parameter	H ₂	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₂ H ₄	i-Butan
a	9,1827	31,35	44,0103	48,1101	58,7845
b	-107,93	-1307,52	-2568,82	-2473,65	-4136,68
c	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
d	0,1641	-3,2613	-4,9764	-5,7362	-7,0167
e*10 ⁵	60,22	2,942	1,464	1,937	1,037
f	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00

Tab. 13-1: Parameter der erweiterten Antoine-Gleichung, Parameter aus KBC Petro-SIM[®]

Gültigkeitsbereiche der Antoine-Gleichung

Parameter	T _{min}	T _{max}
von:	[°C]	[°C]
H ₂	-260,1	-241,1
CH ₄	-182,1	-82,75
C ₂ H ₆	-140,1	32,25
C ₂ H ₄	-168,1	9,209
i-Butan	-108,1	134,9

Tab. 13-2: Gültigkeitsbereich der Parameter der Komponenten für die erweiterte Antoine-Gleichung, Gültigkeitsbereich aus KBC Petro-SIM[®]

13.4 Thermodynamische Methode nach Peng-Robinson (PR)

Die kubische Zustandsgleichung nach Peng-Robinson ist eine Modifikation der van der Waals-Gleichung. Der Realgasfaktor (Kompressibilitätsfaktor) setzt sich dabei aus einem anziehenden und einem abstoßenden Term zusammen:

$$Z = Z^{ab} + Z^{an} \quad (13-2)$$

Über den abstoßenden Term Z^{ab} wird das Eigenvolumen der Moleküle berücksichtigt. Darunter sind abstoßende Kräfte zwischen den Molekülen zu verstehen.

$$Z^{ab} = \frac{V}{V - b} \quad (13-3)$$

Das Eigenvolumen wird über die Konstante b in Gl. (13-3) berücksichtigt. Dabei kann b für den Reinstoff über die kritischen Daten berechnet werden:

$$b = 0,0778 \cdot \frac{R \cdot T_c}{P_c} \quad (13-4)$$

Über den Term Z^{an} werden die anziehenden Wechselwirkungen zwischen den Molekülen berücksichtigt:

$$Z^{an} = - \frac{a(T) \cdot V}{R \cdot T \cdot [V(V + b) + b \cdot (V - b)]} \quad (13-5)$$

Die Wechselwirkungen werden über den temperaturabhängigen Parameter $a(T)$ berücksichtigt. Der Parameter kann für Reinstoffe, wie bereits zuvor die Konstante b , aus den kritischen Daten berechnet werden:

$$a(T) = a \cdot \alpha(T) \quad (13-6)$$

Der Parameter $a(T)$ ist eine empirische Funktion. Über den Faktor a werden die kritischen Daten miteinbezogen:

$$a = 0,45724 \cdot \frac{R^2 \cdot T_c^2}{P_c} \quad (13-7)$$

Und seine Temperaturabhängigkeit wird über den Faktor $\alpha(T)$ beschrieben:

$$\alpha(T) = [1 + (0,37464 + 1,54226 \cdot \omega - 0,26992 \cdot \omega^2) \cdot (1 - T_r^{0,5})]^2 \quad (13-8)$$

Im Faktor $\alpha(T)$ wird der azentrische Faktor ω und die reduzierte Temperatur T_r verwendet.

Der azentrische Faktor ω liegt meist in Tabellen vor. Die reduzierte Temperatur berechnet sich aus dem Verhältnis von Systemtemperatur zu kritischer Temperatur:

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (13-9)$$

Der Realgasfaktor selbst ist wie folgt definiert:

$$Z = \frac{P \cdot V}{R \cdot T} \quad (13-10)$$

Werden die Definitionen in Gl. (13-11) eingesetzt, ergibt sich als Gleichung:

$$\frac{P \cdot V}{R \cdot T} = \frac{V}{V - b} - \frac{a(T) \cdot V}{R \cdot T \cdot [V(V + b) + b \cdot (V - b)]} \quad (13-11)$$

Für Gemische

Zur Berechnung des thermodynamischen Zustandes von Gemischen mit der PR-Gleichung werden die Parameter b und $a(T)$ über Mischungsregeln berechnet.

Der Faktor b wird dabei über eine einfache Mischungsregel, als Summe der Produkte der Konzentrationen und Eigenvolumina der Reinstoffkomponenten, beschrieben:

$$b = \sum_i y_i \cdot b_i \quad (13-12)$$

Eine Möglichkeit den Faktor a zu beschreiben, besteht in der Annahme einer quadratischen Konzentrationsabhängigkeit:

$$a = \sum_i \sum_j y_i \cdot y_j \cdot a_{ij} \quad (13-13)$$

Der Kreuzkoeffizient- bzw. die Kreuzkoeffizienten a_{ij} werden dabei über das geometrische Mittel der Reinstoffparameter (a_{ii} und a_{jj}) berechnet. Wobei dieses durch einen binären Parameter k_{ij} korrigiert wird:

$$a_{ij} = \sqrt{(a_{ii} \cdot a_{jj})} \cdot (1 - k_{ij}) \quad (13-14)$$

Die PR-Gleichung eignet sich besonders für die Anwendung auf Kohlenwasserstoffe und wird in KBC Petro-SIM[®] zur Anwendung im Tieftemperaturbereich empfohlen.

13.5 Einzelauswertungen und Darstellung des Einflusses der Wahl des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import

13.5.1 Zwischenkühlung 1 (Sim1)

Der Ethenverdichter des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4] wird durch Installation von Zwischenkühlungen zwischen den Verdichterstufen modifiziert. Dabei wird mit Propen-Kälte auf -34°C gekühlt. In den Verdichterstufen wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen.

ZK1		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂
Sim1					Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-24484,62	-17922,84	-18,96	-5829,69
Änderung zu Referenz	[%]	-41,40	-65,57	-0,04	-41,22
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	1,37	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,33
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-8443,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-16041,54			

Tab. 13-3: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 1 (Sim1), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

ZK1 (Sim1)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	54959,10	13881,07	2032,36	30551,66
Recovery	[wt%]	99,14	99,42	86,99	97,46
Reinheit	[mol%]	99,84	97,07	99,84	k.A . erf.

Tab. 13-4: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 1 (Sim1), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Zwischenkühlung mit Propen-Kälte auf -34°C wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 24,5 t / h (41%) erreicht.

MD Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung, die dadurch im Propenkältekreislauf zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch wird der MD-Dampf Export um ca. 18 t/h (66%) reduziert. An CO₂ Emissionen werden ca. 5,8 t/h (41%) eingespart.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 1,37. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 1,37 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,33. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,33 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Durch die Zwischenkühlung werden ca. 16041,54 kg/h und. unabhängig davon, durch die Annahme des polytropen Wirkungsgrades ca. 8443,08 kg/h weniger an HD-Dampf bezogen.

Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die Zwischenkühlung hat keinen Einfluss auf Recovery und Reinheit. Recovery und Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt und nicht durch den Wirkungsgrad in den Verdichterstufen oder die Zwischenkühlung. Die Trennung der Spaltgase erfolgt in dieser Simulation gleich wie in der Referenz, daher ergibt sich kein Unterschied in diesen Größen.

Einfluss der Annahme des polytrophen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

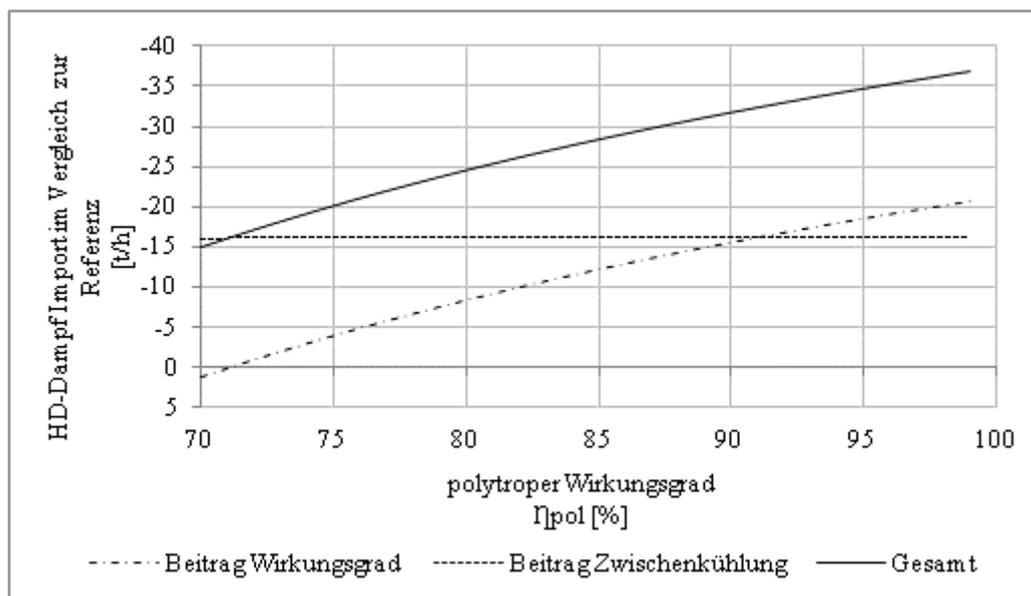


Abb. 13-12: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytrophen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 1 (Sim1)

Aus Abb. 13-12 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf den Import von HD-Dampf auswirkt. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt bei über 100%. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 92% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

13.5.2 Zwischenkühlung 2 (Sim4)

Der Ethenverdichter des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4] wird durch Installation von Zwischenkühlungen zwischen den Verdichterstufen modifiziert. Dabei wird mit Propen-Kälte auf -15°C gekühlt. In den Verdichterstufen wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen.

ZK2 Sim4		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-20030,91	-15731,57	-11,08	-4769,28
Änderung zu Referenz	[%]	-33,87	-57,55	-0,02	-33,72
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	1,27	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,30
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-8443,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-11587,83			

Tab. 13-5: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 2 (Sim4), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

ZK2 (Sim4)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	54959,10	13881,07	2032,36	30551,66
Recovery	[%]	99,14	99,42	86,99	97,46
Reinheit	[mol%]	99,84	97,07	99,84	k.A . erf.

Tab. 13-6: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 2 (Sim4), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Zwischenkühlung mit Propen auf -15°C wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 20 t / h (34%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung, die dadurch im Propenkältekreislauf zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch wird der MD-Dampf Export um ca. 15,7 t/h (58%) reduziert. An CO₂ Emissionen werden ca. 4,8 t/h (34%) eingespart.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 1,27. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 1,27 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,30. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,30 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Durch die Zwischenkühlung werden ca. 11587,83 kg/h und, unabhängig davon, durch die Annahme des polytropen Wirkungsgrades ca. 8443,08 kg/h weniger an HD-Dampf bezogen.

Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die Zwischenkühlung hat keinen Einfluss auf Recovery und Reinheit. Recovery und Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt und nicht durch den Wirkungsgrad in den Verdichterstufen oder die Zwischenkühlung. Die Trennung der Spaltgase erfolgt in dieser Simulation gleich wie in der Referenz, daher ergibt sich kein Unterschied in diesen Größen.

Einfluss der Annahme des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

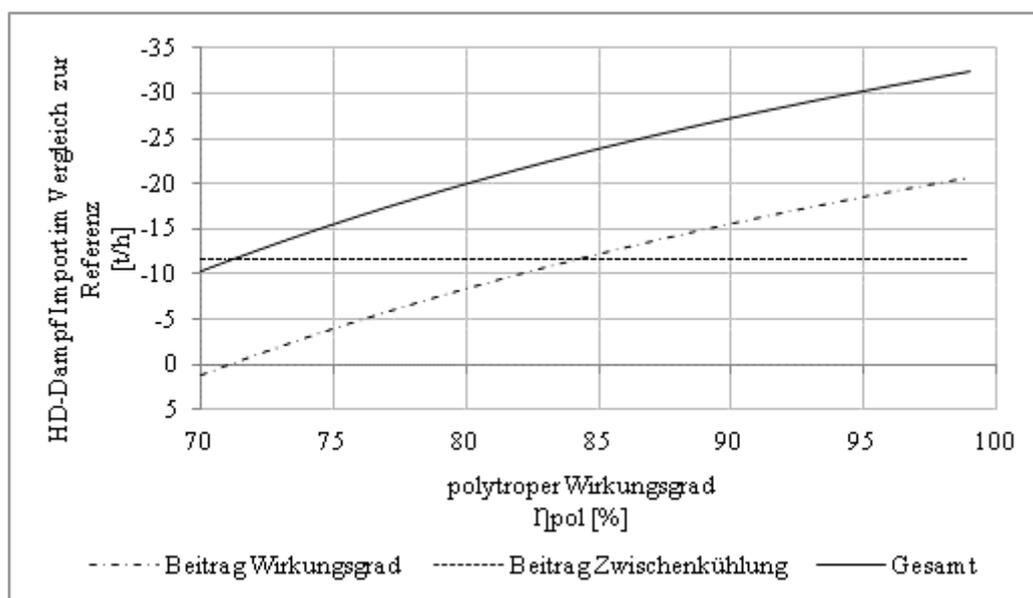


Abb. 13-13: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 2 (Sim4)

Aus Abb. 13-13 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf den Import von HD-Dampf auswirkt. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt bei über 200%. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 84% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

13.5.3 Zwischenkühlung 3 (Sim7)

Der Ethenverdichter des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4] wird durch Installation von Zwischenkühlungen zwischen den Verdichterstufen modifiziert. Dabei wird mit Propen-Kälte auf -2°C gekühlt. In den Verdichterstufen wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen.

ZK3 Sim7		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-17113,33	-11424,92	-17,57	-4074,61
Änderung zu Referenz	[%]	-28,93	-41,79	-0,03	-28,81
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	1,5			
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	0,36			
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-8443,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-8670,25			

Tab. 13-7: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 3 (Sim7), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

ZK3 (Sim7)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	54959,10	13881,07	2032,36	30551,66
Recovery	[%]	99,14	99,42	86,99	97,46
Reinheit	[mol%]	99,84	97,07	99,84	k.A . erf.

Tab. 13-8: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 3 (Sim7), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Zwischenkühlung mit Propen auf -2°C wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 17 t / h (29%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung, die dadurch im Propenkältekreislauf zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch wird der MD-Dampf Export um ca. 11,4 t/h (42%) reduziert. An CO₂ Emissionen werden ca. 4 t/h (29%) eingespart.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 1,5. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 1,5 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,36. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,36 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Durch die Zwischenkühlung werden ca. 8670,25 kg/h und, unabhängig davon, durch die Annahme des polytropen Wirkungsgrades ca. 8443,08 kg/h weniger an HD-Dampf bezogen.

Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die Zwischenkühlung hat keinen Einfluss auf Recovery und Reinheit. Recovery und Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt und nicht durch den Wirkungsgrad in den Verdichterstufen oder die Zwischenkühlung. Die Trennung der Spaltgase erfolgt in dieser Simulation gleich wie in der Referenz, daher ergibt sich kein Unterschied in diesen Größen.

Einfluss der Annahme des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

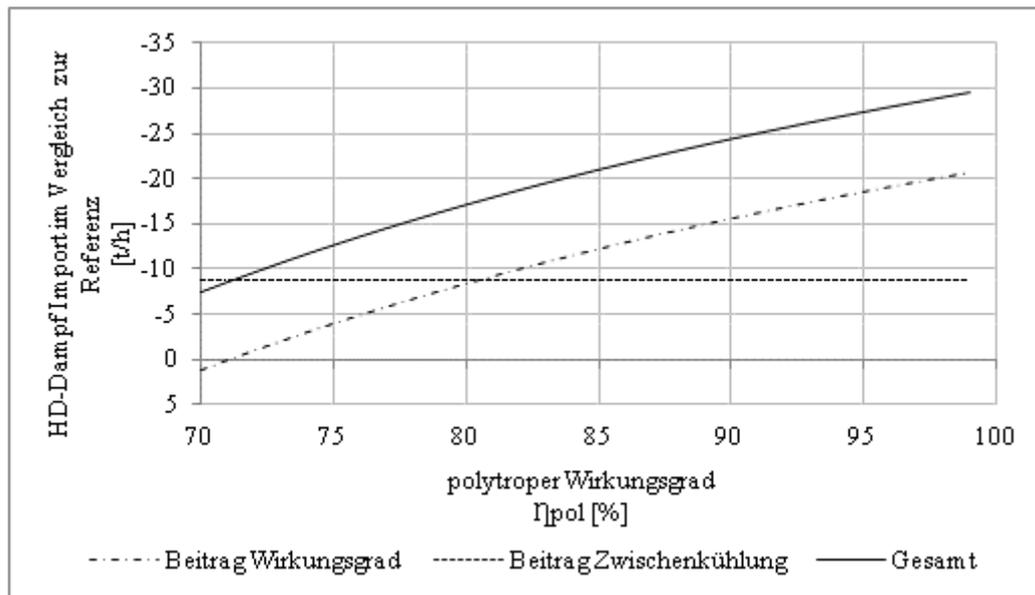


Abb. 13-14: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 3 (Sim7)

Aus Abb. 13-14 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf den Import von HD-Dampf auswirkt. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt bei über 300%. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 82% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

13.5.4 Zwischenkühlung 4 (Sim5)

Der Ethenverdichter des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4] wird durch Installation von Zwischenkühlungen zwischen den Verdichterstufen modifiziert. Dabei wird mit Propen auf -15°C gekühlt. In Sim2 wird die Kühllast zwischen den Verdichterstufen durch Vorkühlung auf -1°C , unter Einsatz von Isobutan, aufgeteilt. Der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes wird durch MD-Dampf angetrieben. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen.

ZK4 Sim5		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-20030,72	-9167,42	-37,63	-4769,23
Änderung zu Referenz	[%]	-33,87	-33,54	-0,07	-33,72
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	2,18	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,52
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-8443,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-11587,64			

Tab. 13-9: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 4 (Sim5), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

ZK4 (Sim5)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	54959,10	13881,07	2032,36	30551,66
Recovery	[%]	99,14	99,42	86,99	97,46
Reinheit	[mol%]	99,84	97,07	99,84	k.A . erf.

Tab. 13-10: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 4 (Sim5), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Zwischenkühlung mit Propen auf -15°C wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 20 t / h (34%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung, die dadurch im Propenkältekreislauf zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch wird der MD-Dampf Export um ca. 9,2 t/h (33,5%) reduziert. An CO₂ Emissionen werden ca. 4,8 t/h (34%) eingespart.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 2,18. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 2,18 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,52. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,52 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Durch die Zwischenkühlung werden ca. 11587,83 kg/h und, unabhängig davon, durch die Annahme des polytropen Wirkungsgrades ca. 8443,08 kg/h weniger an HD-Dampf bezogen.

Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die Zwischenkühlung hat keinen Einfluss auf Recovery und Reinheit. Recovery und Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt und nicht durch den Wirkungsgrad in den Verdichterstufen oder die Zwischenkühlung. Die Trennung der Spaltgase erfolgt in dieser Simulation gleich wie in der Referenz, daher ergibt sich kein Unterschied in diesen Größen.

Einfluss der Annahme des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

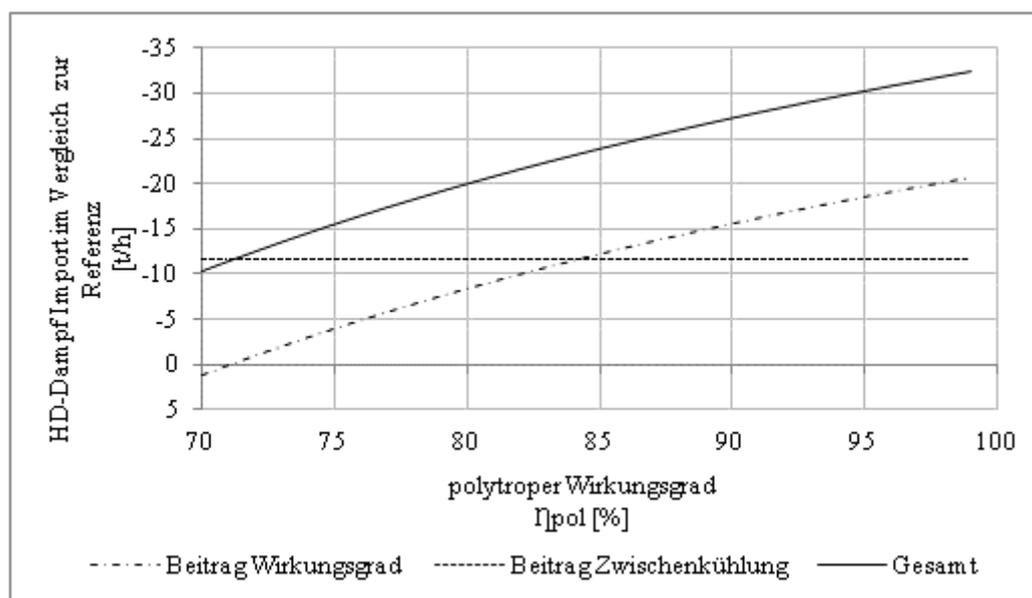


Abb. 13-15: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 4 (Sim5)

Aus Abb. 13-15 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf den Import von HD-Dampf auswirken. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt bei über 200%. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 84% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

13.5.5 Zwischenkühlung 5 (Sim6)

Der Ethenverdichter des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4] wird durch Installation von Zwischenkühlungen zwischen den Verdichterstufen modifiziert. Dabei wird mit Propen auf -15°C gekühlt. In Sim2 wird die Kühllast zwischen den Verdichterstufen durch Vorkühlung auf -1°C , unter Einsatz von Isobutan, aufgeteilt. Der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes wird durch ND-Dampf angetrieben. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen.

ZK5 Sim6		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-20030,72	-1780,90	-19855,14	-4769,23
Änderung zu Referenz	[%]	-33,87	-6,51	-39,55	-33,72
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	11,25	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	2,68
MDD zu NDD	[kg _{MDD} /kg _{NDD}]	-	0,7	-	-
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-8443,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-11587,64			

Tab. 13-11: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 5 (Sim6), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

ZK5 (Sim6)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	54959,10	13881,07	2032,36	30551,66
Recovery	[%]	99,14	99,42	86,99	97,46
Reinheit	[mol%]	99,84	97,07	99,84	k.A . erf.

Tab. 13-12: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 5 (Sim6), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Zwischenkühlung mit Propen auf -15°C wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 20 t / h (34%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung, die dadurch im Propenkältekreislauf zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch wird der MD-Dampf Export um ca. 1,8 t/h (6,5%) reduziert. An CO₂ Emissionen werden ca. 4,8 t/h (34%) eingespart.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 11,25. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 11,25 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 2,68. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 2,68 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Einsparung an Einsatz von MD-Dampf zu Einsatz ND-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung an Einsatz von MD-Dampf zu Einsatz ND-Dampf beträgt 0,7. Es werden pro Kilogramm eingesetztem ND-Dampf (Reduktion ND-Dampf Export), 0,7 Kilogramm an Reduktion von MD-Dampf Export gegenüber der Zwischenkühlung ohne Vorkühlung eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Durch die Zwischenkühlung werden ca. 11587,83 kg/h und. unabhängig davon, durch die Annahme des polytropen Wirkungsgrades ca. 8443,08 kg/h weniger an HD-Dampf bezogen.

Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die Zwischenkühlung hat keinen Einfluss auf Recovery und Reinheit. Recovery und Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt und nicht durch den Wirkungsgrad in den Verdichterstufen oder die Zwischenkühlung. Die Trennung der Spaltgase erfolgt in dieser Simulation gleich wie in der Referenz, daher ergibt sich kein Unterschied in diesen Größen.

Einfluss der Annahme des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

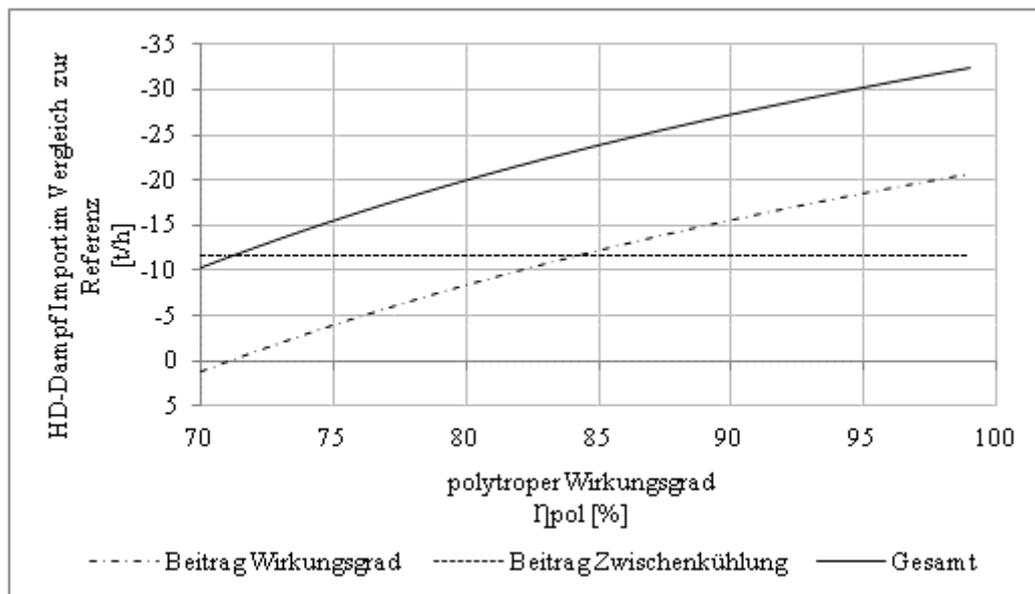


Abb. 13-16: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 5 (Sim6)

Aus Abb. 13-16 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf den Import von HD-Dampf auswirkt. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt bei über 200%. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 84% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

13.5.6 Zwischenkühlung 6 (Sim2)

Der Ethenverdichter des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4] wird durch Installation von Zwischenkühlungen zwischen den Verdichterstufen modifiziert. Dabei wird mit Propen auf -34°C gekühlt. In Sim2 wird die Kühllast nach der ersten Verdichterstufe durch Vorkühlung auf -1°C , unter Einsatz von Isobutan, aufgeteilt. Eine Vorkühlung nach den anderen Verdichterstufen ist aufgrund der dort vorliegenden Systemtemperaturen nicht möglich. Der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes wird durch MD-Dampf angetrieben. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen.

ZK6		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Sim2					
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-24484,54	-17521,48	-20,57	-5829,67
Änderung zu Referenz	[%]	-41,40	-64,10	-0,04	-41,22
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	1,4	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,33
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr.Wirkungsgrad	[kg/h]	-8443,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-16041,46			

Tab. 13-13: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 6 (Sim2), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

ZK6 (Sim2)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	54959,10	13881,07	2032,36	30551,66
Recovery	[%]	99,14	99,42	86,99	97,46
Reinheit	[mol%]	99,84	97,07	94,86	wie in [4].

Tab. 13-14: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 6 (Sim2), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Zwischenkühlung mit Propen auf -34°C wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 24,5 t / h (41%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung, die im Propenkältekreislauf zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch wird der MD-Dampf Export um ca. 17,5 t/h (64%) reduziert. An CO₂ Emissionen werden ca. 5,8 t/h (41%) eingespart.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 1,4. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 1,4 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,33. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,33 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Durch die Zwischenkühlung werden ca. 16041,54 kg/h und, unabhängig davon, durch die Annahme des polytropen Wirkungsgrades ca. 8443,08 kg/h weniger an HD-Dampf bezogen.

Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die Zwischenkühlung hat keinen Einfluss auf Recovery und Reinheit. Recovery und Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt und nicht durch den Wirkungsgrad in den Verdichterstufen oder die Zwischenkühlung. Die Trennung der Spaltgase erfolgt in dieser Simulation gleich wie in der Referenz, daher ergibt sich kein Unterschied in diesen Größen.

Einfluss der Annahme des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

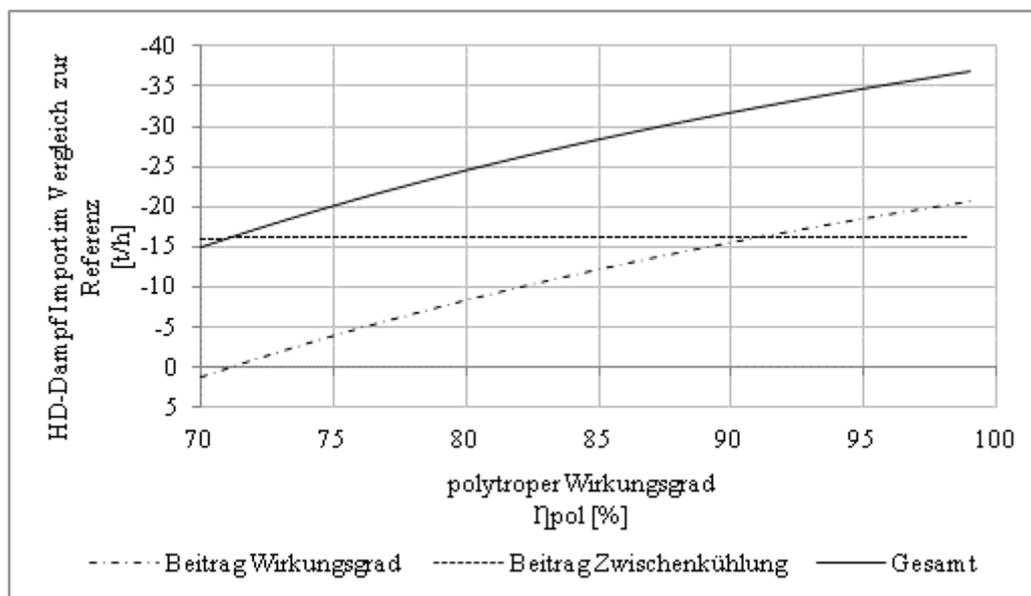


Abb. 13-17: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 6 (Sim2)

Aus Abb. 13-17 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf den Import von HD-Dampf auswirkt. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt bei über 100%. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 92% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

13.5.7 Zwischenkühlung 7 (Sim3)

Der Ethenverdichter des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4] wird durch Installation von Zwischenkühlungen zwischen den Verdichterstufen modifiziert. Dabei wird mit Propen auf -34°C gekühlt. In Sim3 wird nach der ersten Verdichterstufe die Kühllast durch Vorkühlung auf -1°C , unter Einsatz von Isobutan, aufgeteilt. Eine Vorkühlung nach den anderen Verdichterstufen ist aufgrund der Systemtemperaturen nicht möglich. Der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes wird durch ND-Dampf angetrieben. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen.

ZK7 Sim3		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-24484,54	-17091,82	-1173,30	-5829,67
Änderung zu Referenz	[%]	-41,40	-62,53	-2,34	-41,22
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	1,43	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,34
MDD zu NDD	[kg _{MDD} /kg _{NDD}]	-	0,72	-	-
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-8443,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-16041,46			

Tab. 13-15: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 7 (Sim3), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

ZK7 (Sim3)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	54959,10	13881,07	2032,36	30551,66
Recovery	[%]	99,14	99,42	86,99	97,46
Reinheit	[mol%]	99,84	97,07	94,86	wie in [4].

Tab. 13-16: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 7 (Sim3), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Zwischenkühlung mit Propen auf -34°C wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 24,5 t / h (41%) erreicht.

MD-Dampf Export, ND-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung, die im Propenkältekreislauf zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch wird der MD-Dampf Export um ca. 17,1 t/h (62,5%) reduziert. Durch den Antrieb der Turbine des Verdichters des Isobutan-Kältekreislaufes verringert sich der

ND-Dampf Export um ca. 1,2 t/h (2,3%). An CO₂ Emissionen werden ca. 5,8 t/h (41%) eingespart.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 1,43. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 1,43 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,34. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,34 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Einsparung an Einsatz von MD-Dampf zu Einsatz ND-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung an Einsatz von MD-Dampf zu Einsatz ND-Dampf beträgt 0,72. Es werden pro Kilogramm eingesetztem ND-Dampf (Reduktion ND-Dampf Export), 0,72 Kilogramm an Reduktion von MD-Dampf Export gegenüber der Zwischenkühlung ohne Vorkühlung eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Durch die Zwischenkühlung werden ca. 16041,46 kg/h und. unabhängig davon, durch die Annahme des polytropen Wirkungsgrades ca. 8443,08 kg/h weniger an HD-Dampf bezogen.

Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die Zwischenkühlung hat keinen Einfluss auf Recovery und Reinheit. Recovery und Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt und nicht durch den Wirkungsgrad in den Verdichterstufen oder die Zwischenkühlung. Die Trennung der Spaltgase erfolgt in dieser Simulation gleich wie in der Referenz, daher ergibt sich kein Unterschied in diesen Größen.

Einfluss der Annahme des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

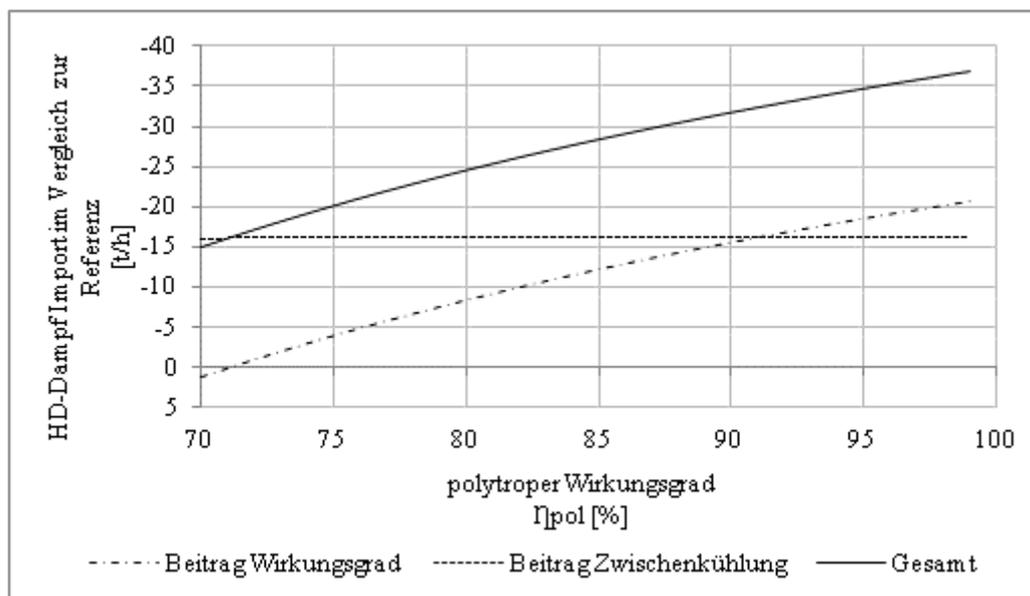


Abb. 13-18: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 7 (Sim3)

Aus Abb. 13-18 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf den Import von HD-Dampf auswirkt. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt bei über 100%. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 92% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

13.5.8 Zwischenkühlung 8 (Sim8)

Der Ethenverdichter des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4] wird durch Installation von Zwischenkühlungen zwischen den Verdichterstufen modifiziert. Dabei wird mit Isobutankälte auf -1°C gekühlt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen. Der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes wird durch MD-Dampf angetrieben.

ZK8 Sim8		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-16892,58	-10895,66	-18,86	-4022,05
Änderung zu Referenz	[%]	-28,56	-39,86	-0,04	-28,44
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	1,55	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]				0,37
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-8443,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-8449,50			

Tab. 13-17: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 8 (Sim8), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

ZK8 (Sim8)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	54959,10	13881,07	2032,36	30551,66
Recovery	[%]	99,14	99,42	86,99	97,46
Reinheit	[mol%]	99,84	97,07	99,84	k.A . erf.

Tab. 13-18: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 8 (Sim8), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Zwischenkühlung mit Propen auf -1°C wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 16,9 t / h (28,6%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung, die dadurch im Propenkältekreislauf zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch wird der MD-Dampf Export um ca. 11 t/h (40%) reduziert. An CO₂ Emissionen werden ca. 4 t/h (28%) eingespart.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 1,55. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 1,55 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,37. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,37 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Durch die Zwischenkühlung werden ca. -8443,08 kg/h und. unabhängig davon, durch die Annahme des polytropen Wirkungsgrades ca. 8449,50 kg/h weniger an HD-Dampf bezogen.

Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die Zwischenkühlung hat keinen Einfluss auf Recovery und Reinheit. Recovery und Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt und nicht durch den Wirkungsgrad in den Verdichterstufen oder die Zwischenkühlung. Die Trennung der Spaltgase erfolgt in dieser Simulation gleich wie in der Referenz, daher ergibt sich kein Unterschied in diesen Größen.

Einfluss der Annahme des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

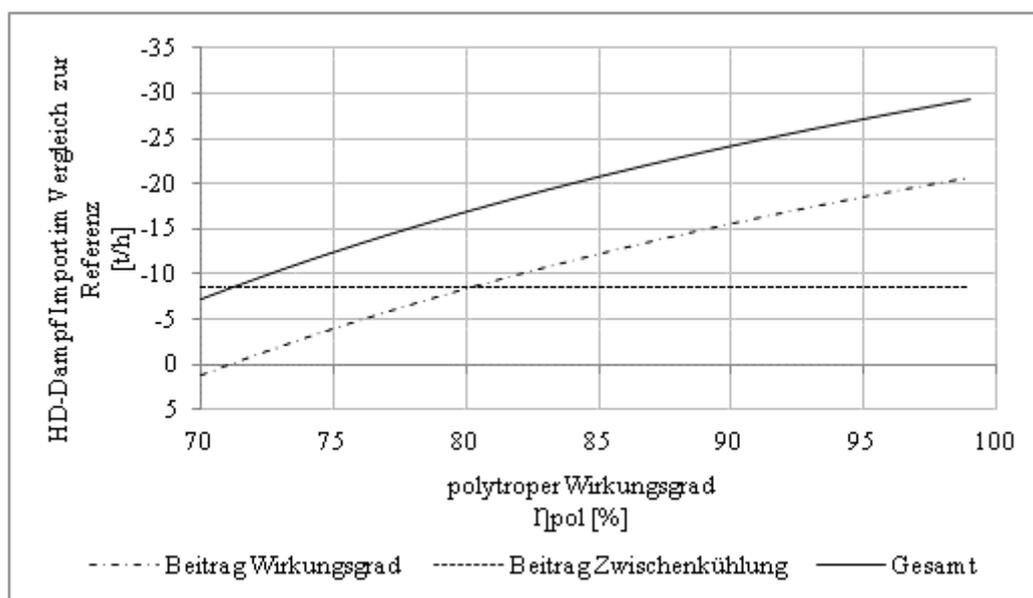


Abb. 13-19: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 8 (Sim8)

Aus Abb. 13-19 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf den Import von HD-Dampf auswirkt. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt über dem Dreifachen. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 81% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

13.5.9 Zwischenkühlung 9 (Sim9)

Der Ethenverdichter des Tieftemperaturteils in der Referenzsimulation [4] wird durch Installation von Zwischenkühlungen zwischen den Verdichterstufen modifiziert. Dabei wird mit Isobutankälte auf -1°C gekühlt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen. Der Turbokompressor des Isobutan-Kältekreislaufes wird durch ND-Dampf angetrieben.

ZK9		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂
Sim9					Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-16892,58	-179,81	-28747,37	-4022,11
Änderung zu Referenz	[%]	-28,56	-0,66	-57,26	-28,44
HDD zu NDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	0,59	-	-	-
CO ₂ zu NDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,14
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-8443,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-8449,50			

Tab. 13-19: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 9 (Sim9), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

ZK9 (Sim9)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	54959,10	13881,07	2032,36	30551,66
Recovery	[%]	99,14	99,42	86,99	97,46
Reinheit	[mol%]	99,84	97,07	99,84	k.A . erf.

Tab. 13-20: Einzelauswertung, Zwischenkühlung 9 (Sim9), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Zwischenkühlung mit Propen auf -1°C wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 16,9 t / h (28,6%) erreicht.

ND-Dampf Export, MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Durch den Antrieb der Turbine des Verdichters des Isobutan-Kältekreislaufes wird der ND-Dampf Export um ca. 28,7 t/h (57,3%) verringert. Einstellungen in der Simulation ergeben eine Reduktion des MD-Dampf Exportes von ca. 180 kg/h (0,7%). An CO₂ Emissionen werden ca. 4 t/h (28%) eingespart.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz ND-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu ND-Dampf beträgt 0,59. Es werden pro Kilogramm eingesetztem ND-Dampf (Reduktion ND-Dampf Export), 0,59 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz ND-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu ND-Dampf beträgt 0,14. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,14 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Durch die Zwischenkühlung werden ca. 8443,08 kg/h und, unabhängig davon, durch die Annahme des polytropen Wirkungsgrades ca. 8449,50 kg/h weniger an HD-Dampf bezogen.

Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die Zwischenkühlung hat keinen Einfluss auf Recovery und Reinheit. Recovery und Reinheit werden durch das Trennverfahren bestimmt und nicht durch den Wirkungsgrad in den Verdichterstufen oder die Zwischenkühlung. Die Trennung der Spaltgase erfolgt in dieser Simulation gleich wie in der Referenz, daher ergibt sich kein Unterschied in diesen Größen.

Einfluss der Annahme des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

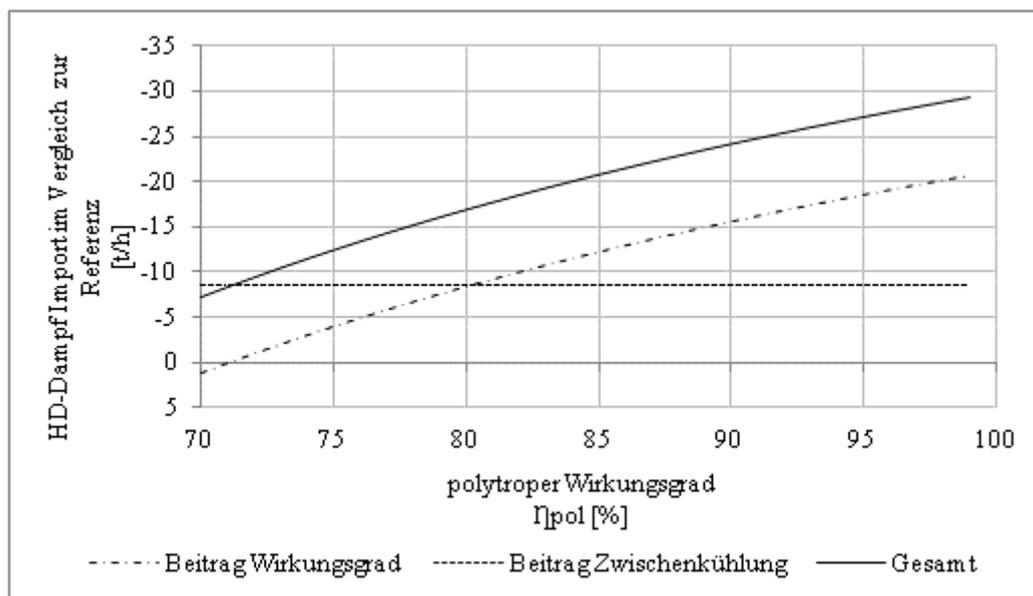


Abb. 13-20: Beiträge von Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Zwischenkühlung 9 (Sim9)

Aus Abb. 13-20 geht hervor, dass sich ein polytroper Wirkungsgrad in den Verdichterstufen unter ca. 72% negativ auf den Import von HD-Dampf auswirkt. Der Unterschied in der Einsparung von HD-Dampf zwischen 70% und 99% polytroper Wirkungsgrad liegt über dem Dreifachen. Bis zu Wirkungsgraden von ca. 81% leistet die Zwischenkühlung den höheren Beitrag an der Einsparung.

13.5.10 Membrankontaktor, Variante 1 (Sim10)

Zur Trennung von Ethan und Ethen wird ein Membrankontaktor im Tieftemperaturteil eingesetzt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters des Ethen-Kältekreislaufes wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen.

Variante 1 Sim10		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-8003,86	2492,49	2178,09	-1906,36
Änderung zu Referenz	[%]	-13,53	9,12	4,34	-13,48
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	-	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	-
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-5868,43			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-			
Trennverfahren	[kg/h]	-2135,43			

Tab. 13-21: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim10), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

Variante 1 (Sim10)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	59585,62	13815,96	2021,97	30502,21
Recovery	[%]	86,72	99,99	86,57	97,47
Reinheit	[mol%]	99,99	58,84	94,85	wie in [4]

Tab. 13-22: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim10), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Modifikation des Tieftemperaturteils wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 8 t / h (13,5%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Durch die höheren Mengen an Ethen die in der Anlage geführt werden, wird in der Spaltgasverdichtung mehr HD-Dampf benötigt. Dadurch wird der MD-Dampf Export um ca. 2,5 t/h (9%) erhöht. An CO₂ Emissionen werden ca. 1,9 t/h (13,5%) eingespart.

ND-Dampf Export

An Dampf der Niederdruckstufe werden um ca. 2,2 t/h (ca. 4%) gegenüber der Referenz mehr exportiert. Auch das ist eine Folge des höheren HD-Dampf Bezugs in der Spaltgasverdichtung.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wirkt sich positiv auf den HD-Dampf Import aus. Durch den Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wird HD-Dampf in der Höhe von ca. 2135,43 kg/h eingespart.

Durch den angenommenen polytropen Wirkungsgrad in den Verdichterstufen werden an HD-Dampf 5868,43 kg/h eingespart.

Produktströme, Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Ethen

Die rückgewonnene Menge an Ethen ist in etwa gleich (ca. -210kg/h, -0,35%). Die Exportmenge an gasförmigem Ethen beträgt durch den Betrieb des Tieftemperaturteils nach den in Sim10 durchgeführten Modifikationen 59585,62 kg/h. Das entspricht einer Zunahme um ca. 4,6 t/h (8%).

Die Recovery bezüglich Ethen (aus dem Tieftemperaturteil austretendes Ethen im Verhältnis zum eintretendem) beträgt ca. 87%, was einer Reduktion um ca. 12% entspricht. Die Reinheit des aus der Anlage austretenden Ethens beträgt auch aufgrund der Einstellungen in Sim10 ca. 100 mol% (+0,15 mol%).

Ethan

An Ethan werden ca. 13815,96 kg/h aus dem Tieftemperaturteil in die Spaltöfen zurückgeführt. Das entspricht zwar einer Reduktion von 65 kg/h (0,6%) ist aber für den Tieftemperaturteil auch darauf zurückzuführen, dass mit 13816,97 kg/h gegenüber 13961,61 kg/h in der Referenz, ca. 1% weniger Ethan in den Tieftemperaturteil eintritt. Die Abweichung der rückgeführten Menge an Ethan ist aber gering und wird in der Betrachtung vernachlässigt [11]. Der Membrankontaktor ist in der Simulation so eingestellt, dass kein Ethan im abgetrennten Ethen enthalten ist und die Verluste an Ethan in den übrigen

Trennstufen des Tieftemperaturprozesses sind vernachlässigbar, daher ergibt sich eine Recovery bezüglich Ethan von nahezu 100%.

Die Reinheit des Ethans beträgt 58.84 mol%, dies entspricht einer Verringerung um ca. 38 mol%. Das ist dadurch begründet, dass der Anteil an Ethen im Ethan durch die geringere Recovery bezüglich Ethen (87%) höher ist und die Reinheit des Ethans dadurch geringer.

Wasserstoff

Für die Hydrierungsprozesse werden stündlich ca. 2021,97 Kilogramm aus der Anlage zur Verfügung gestellt. Das entspricht in etwa einer Reduktion von ca. 11 kg/h (0,5%). Diese Abweichung ergibt sich daraus, dass diese Menge an Wasserstoff in den Kondensationsprozessen aus der Dampfphase ausgeschieden wird. Diese Menge gelangt in den Entmethaner (Abb. 4-3, Kolonne R-1) und wird über den Kopf der Kolonne gemeinsam mit Methan von der C2-Fraktion abgetrennt. Was die Reinheit betrifft, tritt keine Abweichung auf.

Methan

Mit 30502,21 kg/h treten zwar um ca. 0,16% weniger Methan aus der Anlage aus, um die gleiche Abweichung tritt aber auch eine geringere Menge ein. Daher ergibt sich keine Änderung bezüglich der Recovery, auch für die Reinheiten (ND-Methan und Restgas) werden keine Abweichungen festgestellt.

Einfluss der Wahl des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

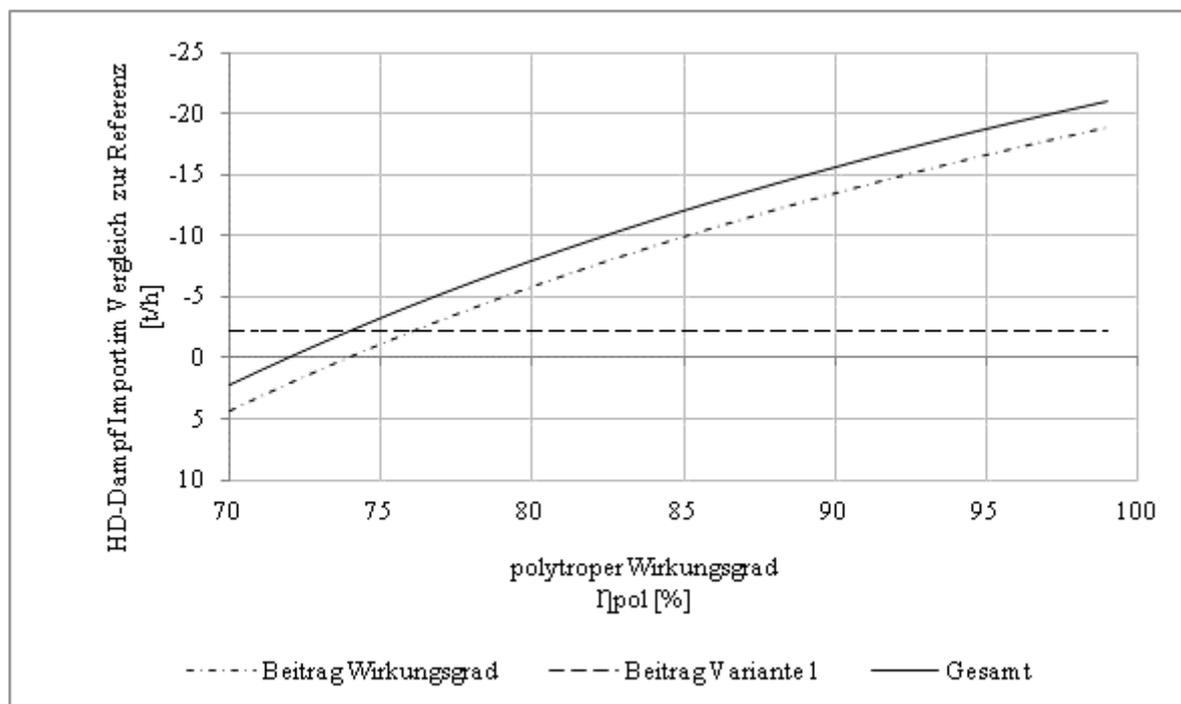


Abb. 13-21: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 1 (Sim10)

In Abb. 13-21 ist zu erkennen, dass der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1, gegenüber der Referenz, einen geringeren Bedarf an HD-Dampf für den Tieftemperaturteil mit sich bringt. Sind in den Verdichterstufen allerdings polytrope Wirkungsgrade unter ca. 74% vorhanden, ist der Bedarf an HD-Dampf gegenüber der Referenz höher. Bis zu Wirkungsgraden von 76% liefern die Zwischenkühlungen den höheren Beitrag an der Einsparung. Zwischen 76% und 99% Wirkungsgrad liegt ein Unterschied in der Einsparung von ca. neunfachem Wert.

13.5.11 Membrankontaktor, Variante 1 mit Zwischenkühlung (Sim11)

Zur Trennung von Ethan und Ethen wird ein Membrankontaktor im Tieftemperaturteil eingesetzt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters des Ethen-Kältekreislaufes wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen. Im Ethenverdichter erfolgen durch den Einsatz von Propen Zwischenkühlungen auf -34°C .

Variante 1 Sim11		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-24545,58	-24215,68	2223,46	-5844,69
Änderung zu Referenz	[%]	-41,50	-88,59	4,43	-41,33
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	1,01	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,24
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-5868,43			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-16541,72			
Trennverfahren	[kg/h]	-2135,43			

Tab. 13-23: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim11), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

Variante 1 (Sim11)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	59585,62	13815,96	2021,97	30502,21
Recovery	[%]	86,72	99,99	86,57	97,47
Reinheit	[mol%]	99,99	58,84	94,85	wie in [4]

Tab. 13-24: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim11), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Modifikation des Tieftemperaturteils wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 24,5 t / h (41,5%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung die im Propenkältekreislauf für die Zwischenkühlungen im Tieftemperaturteil zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch erfolgt eine Reduktion von MD-Dampf Export um ca. 24,2 t/h (88,6%). An CO₂ Emissionen werden ca. 5,8 t/h (41,3%) eingespart.

ND-Dampf Export

An Dampf der Niederdruckstufe werden um ca. 2,2 t/h (ca. 4,4%) mehr exportiert. Der zusätzliche Export ergibt sich aus dem Mehrbedarf an HD-Dampf der Spaltgasverdichter durch der höheren Menge an Ethen die in der Anlage geführt wird.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 1,01. Pro eingesetztem Kilogramm MD-Dampf wird ein Kilogramm HD-Dampf eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,24. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,24 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wirkt sich positiv auf den HD-Dampf Import aus. Durch den Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wird ein Minderbedarf an HD-Dampf in der Höhe von ca. 2135,43 kg/h verursacht.

Durch den angenommenen polytropen Wirkungsgrad in den Verdichterstufen werden an HD-Dampf 5868,43 kg/h und durch die Zwischenkühlung 16541,72 kg/h eingespart.

Produktströme, Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Ethen

Die rückgewonnene Menge an Ethen ist in etwa gleich (ca. -210kg/h, -0,35%). Die Exportmenge an gasförmigem Ethen beträgt durch den Betrieb des Tieftemperaturteils nach den in Sim10 durchgeführten Modifikationen 59585,62 kg/h. Das entspricht einer Zunahme um ca. 4,6 t/h (8%).

Die Recovery bezüglich Ethen (aus dem Tieftemperaturteil austretendes Ethen im Verhältnis zum eintretendem) beträgt ca. 87%, was einer Reduktion um ca. 12% entspricht. Die Reinheit des aus der Anlage austretenden Ethens beträgt auch aufgrund der Einstellungen in Sim10 ca. 100 mol% (+0,15 mol%).

Ethan

An Ethan werden ca. 13815,96 kg/h aus dem Tieftemperaturteil in die Spaltöfen zurückgeführt. Das entspricht zwar einer Reduktion von 65 kg/h (0,6%) ist aber für den Tieftemperaturteil auch darauf zurückzuführen, dass mit 13816,97 kg/h gegenüber 13961,61 kg/h in der Referenz, ca. 1% weniger Ethan in den Tieftemperaturteil eintritt. Die Abweichung der rückgeführten Menge an Ethan ist aber gering und wird in der Betrachtung vernachlässigt [11]. Der Membrankontaktor ist in der Simulation so eingestellt, dass kein Ethan im abgetrennten Ethen enthalten ist und die Verluste an Ethan in den übrigen Trennstufen des Tieftemperaturprozesses sind vernachlässigbar, daher ergibt sich eine Recovery bezüglich Ethan von nahezu 100%.

Die Reinheit des Ethans beträgt 58.84 mol%, dies entspricht einer Verringerung um ca. 38 mol%. Das ist dadurch begründet, dass der Anteil an Ethen im Ethan durch die geringere Recovery bezüglich Ethen (87%) höher ist und die Reinheit des Ethans dadurch geringer.

Wasserstoff

Für die Hydrierungsprozesse werden stündlich ca. 2021,97 Kilogramm aus der Anlage zur Verfügung gestellt. Das entspricht in etwa einer Reduktion von ca. 11 kg/h (0,5%). Diese Abweichung ergibt sich daraus, dass diese Menge an Wasserstoff in den Kondensationsprozessen aus der Dampfphase ausgeschieden wird. Diese Menge gelangt in den Entmethaner (Abb. 4-3, Kolonne R-1) und wird über den Kopf der Kolonne gemeinsam mit Methan von der C2-Fraktion abgetrennt. Was die Reinheit betrifft, tritt keine Abweichung auf.

Methan

Mit 30502,21 kg/h treten zwar um ca. 0,16% weniger Methan aus der Anlage aus, um die gleiche Abweichung tritt aber auch eine geringere Menge ein. Daher ergibt sich keine Änderung bezüglich der Recovery und auch für die Reinheiten (ND-Methan und Restgas) werden keine Abweichungen festgestellt.

Einfluss der Wahl des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

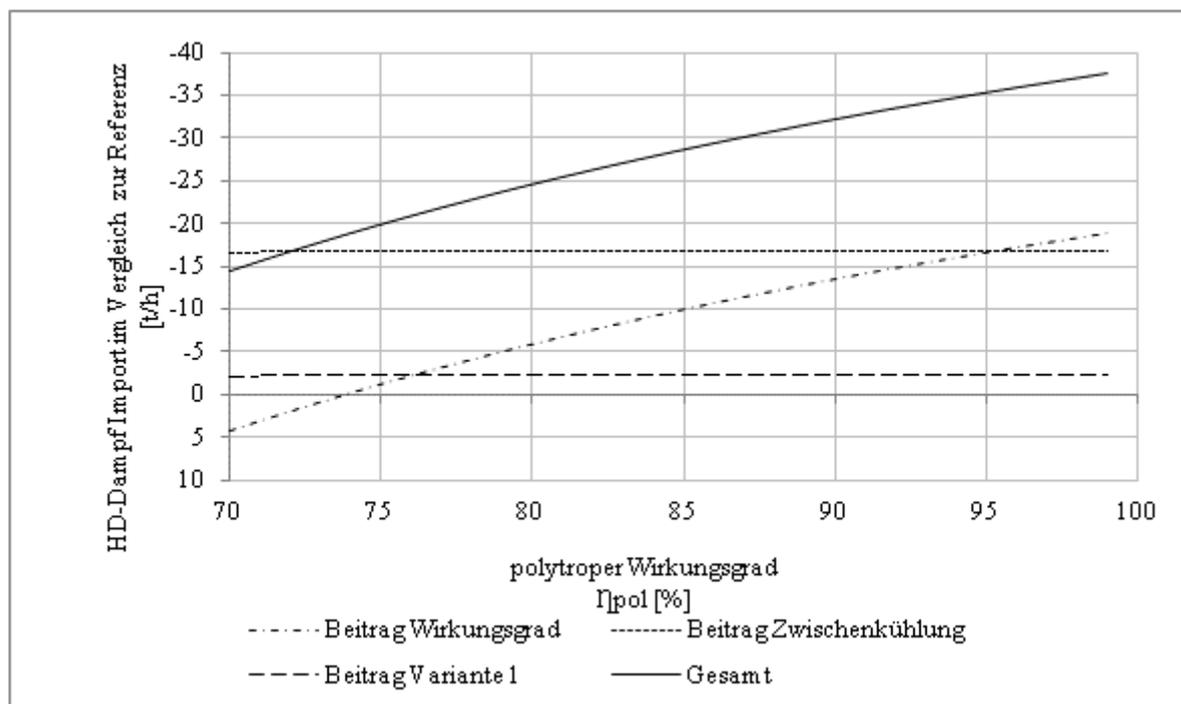


Abb. 13-22: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 1 (Sim11)

In Abb. 13-22 ist zu erkennen, dass der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1, gegenüber der Referenz, geringeren Bedarf an HD-Dampf für den Tieftemperaturteil mit sich bringt. Bis zu Wirkungsgraden von 95% leisten die Zwischenkühlungen den größten Beitrag an der Einsparung. Liegen die Wirkungsgrade in den Verdichterstufen unter ca. 74%, dann wird seitens des Verdichters kein Beitrag zur Einsparung geleistet, im Gegenteil, es ergibt sich ein negativer Einfluss auf die Einsparung.

13.5.12 Membrankontaktor, Variante 1 mit Zwischenkühlung (Sim12)

Zur Trennung von Ethan und Ethen wird ein Membrankontaktor im Tieftemperaturteil eingesetzt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters des Ethen-Kältekreislaufes wird ein polytropen Wirkungsgrad von 80% angenommen. Im Ethenverdichter wird zwischen den Verdichterstufen durch den Einsatz von Isobutan auf -1°C vorgekühlt und mit Propen auf -15°C zwischengekühlt.

Variante 1 Sim12		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-20453,77	-13478,68	2195,55	-4870,44
Änderung zu Referenz	[%]	-34,58	-49,31	4,37	-34,44
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	1,52	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,36
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-5868,43			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-12449,91			
Trennverfahren	[kg/h]	-2135,43			

Tab. 13-25: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim12), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

Variante 1 (Sim12)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	59585,62	13815,96	2021,97	30502,21
Recovery	[%]	86,72	99,99	86,57	97,47
Reinheit	[mol%]	99,99	58,84	94,85	wie in [4]

Tab. 13-26: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim12), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Modifikation des Tieftemperaturteils wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 20,5 t / h (34,6%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung die im Propenkältekreislauf für die Zwischenkühlungen im Tieftemperaturteil zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Das hat eine Reduktion von MD-Dampf Export um ca. 13,5 t/h (49,3%) zur Folge. An CO₂ Emissionen werden ca. 4,9 t/h (34,4%) eingespart.

ND-Dampf Export

An Dampf der Niederdruckstufe werden um ca. 2,2 t/h (ca. 4,4%) mehr exportiert. Der zusätzliche Export ergibt sich aus dem Mehrbedarf an HD-Dampf der Spaltgasverdichter durch der höheren Menge an Ethen die in der Anlage geführt wird.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 1,52. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 1,52 Kilogramm HD-Dampf eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,36. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,36 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wirkt sich positiv auf den HD-Dampf Import aus. Durch den Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wird ein Minderbedarf an HD-Dampf in der Höhe von ca. 2135,43 kg/h verursacht.

Durch den angenommenen polytropen Wirkungsgrad in den Verdichterstufen werden an HD-Dampf 5868,43 kg/h und durch die Zwischenkühlung 12449,91 kg/h eingespart.

Produktströme, Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die rückgewonnene Menge an Ethen ist in etwa gleich (ca. -210kg/h, -0,35%). Die Exportmenge an gasförmigem Ethen beträgt durch den Betrieb des Tieftemperaturteils nach den in Sim10 durchgeführten Modifikationen 59585,62 kg/h. Das entspricht einer Zunahme um ca. 4,6 t/h (8%).

Die Recovery bezüglich Ethen (aus dem Tieftemperaturteil austretendes Ethen im Verhältnis zum eintretendem) beträgt ca. 87%, was einer Reduktion um ca. 12% entspricht. Die Reinheit des aus der Anlage austretenden Ethens beträgt auch aufgrund der Einstellungen in Sim10 ca. 100 mol% (+0,15 mol%).

Ethan

An Ethan werden ca. 13815,96 kg/h aus dem Tieftemperaturteil in die Spaltöfen zurückgeführt. Das entspricht zwar einer Reduktion von 65 kg/h (0,6%) ist aber für den Tieftemperaturteil auch darauf zurückzuführen, dass mit 13816,97 kg/h gegenüber 13961,61 kg/h in der Referenz, ca. 1% weniger Ethan in den Tieftemperaturteil eintritt. Die Abweichung der rückgeführten Menge an Ethan ist aber gering und wird in der Betrachtung vernachlässigt [11]. Der Membrankontaktor ist in der Simulation so eingestellt, dass kein Ethan im abgetrennten Ethen enthalten ist und die Verluste an Ethan in den übrigen Trennstufen des Tieftemperaturprozesses sind vernachlässigbar, daher ergibt sich eine Recovery bezüglich Ethan von nahezu 100%.

Die Reinheit des Ethans beträgt 58.84 mol%, dies entspricht einer Verringerung um ca. 38 mol%. Das ist dadurch begründet, dass der Anteil an Ethen im Ethan durch die geringere Recovery bezüglich Ethen (87%) höher ist und die Reinheit des Ethans dadurch geringer.

Wasserstoff

Für die Hydrierungsprozesse werden stündlich ca. 2021,97 Kilogramm aus der Anlage zur Verfügung gestellt. Das entspricht in etwa einer Reduktion von ca. 11 kg/h (0,5%). Diese Abweichung ergibt sich daraus, dass diese Menge an Wasserstoff in den Kondensationsprozessen aus der Dampfphase ausgeschieden wird. Diese Menge gelangt in den Entmethaner (Abb. 4-3, Kolonne R-1) und wird über den Kopf der Kolonne gemeinsam mit Methan von der C2-Fraktion abgetrennt. Was die Reinheit betrifft, tritt keine Abweichung auf.

Methan

Mit 30501,87 kg/h treten zwar um ca. 0,16% weniger Methan aus der Anlage aus, um die gleiche Abweichung tritt aber auch eine geringere Menge ein. Daher ergibt sich keine Änderung bezüglich der Recovery und auch für die Reinheiten (ND-Methan und Restgas werden keine Abweichungen festgestellt).

Einfluss der Wahl des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

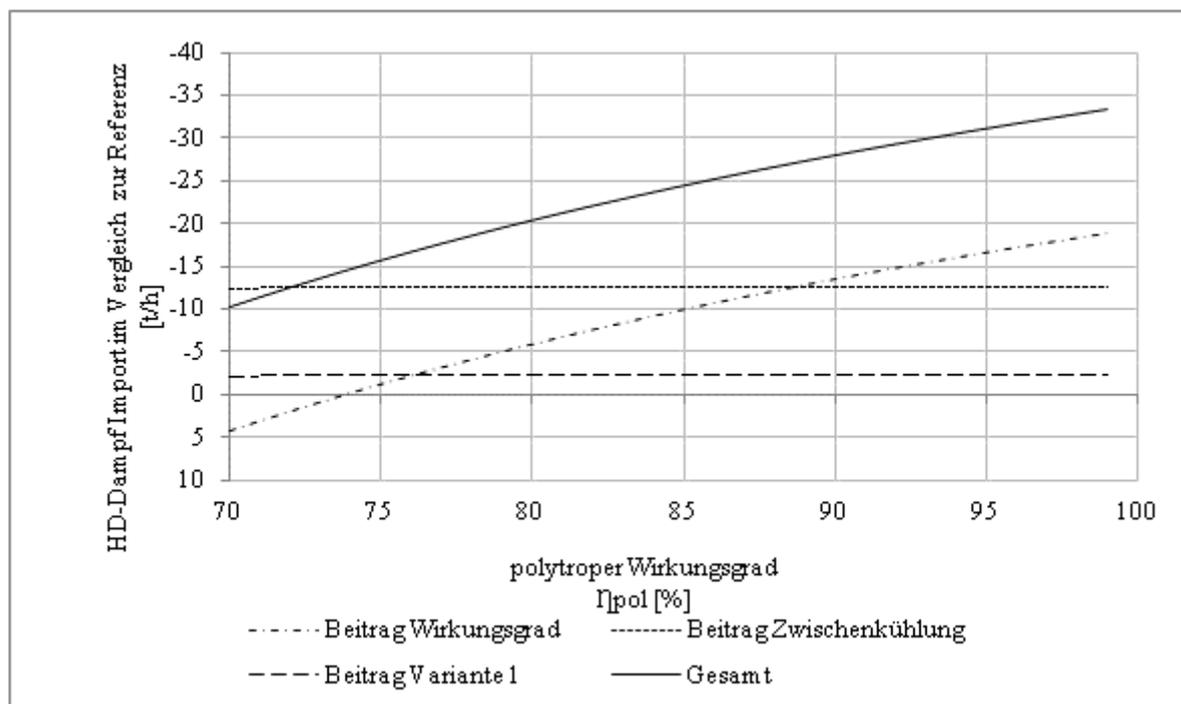


Abb. 13-23: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 1 (Sim12)

In Abb. 13-23 ist zu erkennen, dass der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1, gegenüber der Referenz, geringeren Bedarf an HD-Dampf für den Tieftemperaturteil mit sich bringt. Bis zu Wirkungsgraden von 88% leisten die Zwischenkühlungen den größten Beitrag an der Einsparung. Liegen die Wirkungsgrade in den Verdichterstufen unter ca. 74%, dann wird seitens des Verdichters kein Beitrag zur Einsparung geleistet, im Gegenteil, es ergibt sich ein negativer Einfluss auf die Einsparung.

13.5.13 Membrankontaktor, Variante 1 mit Zwischenkühlung (Sim13)

Zur Trennung von Ethan und Ethen wird ein Membrankontaktor im Tieftemperaturteil eingesetzt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters des Ethen-Kältekreislaufes wird ein polytropen Wirkungsgrad von 80% angenommen. Im Ethenverdichter erfolgen durch den Einsatz von Isobutan Zwischenkühlungen auf -1°C .

Variante 1 Sim13		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-17906,24	-5923,06	2175,73	-4263,89
Änderung zu Referenz	[%]	-30,27	-21,67	4,33	-30,15
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	3,02	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,72
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-5868,43			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-9902,38			
Trennverfahren	[kg/h]	-2135,43			

Tab. 13-27: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim13), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

Variante 1 (Sim13)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	59585,62	13815,96	2021,97	30502,21
Recovery	[%]	86,72	99,99	86,57	97,47
Reinheit	[mol%]	99,99	58,84	94,85	wie in [4]

Tab. 13-28: Einzelauswertung, Variante 1 (Sim13), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Modifikation des Tieftemperaturteils wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 17,9 t / h (30,3%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die zusätzliche Leistung die im Propenkältekreislauf für die Zwischenkühlungen im Tieftemperaturteil zu erbringen ist, wird über MD-Dampf eingebracht. Dadurch erfolgt eine Reduktion von MD-Dampf Export um ca. 59,23 t/h (21,7%). An CO₂ Emissionen werden ca. 4,3 t/h (30,2%) eingespart.

ND-Dampf Export

An Dampf der Niederdruckstufe werden um ca. 2,2 t/h (ca. 4,4%) mehr exportiert. Der zusätzliche Export ergibt sich aus dem Mehrbedarf an HD-Dampf der Spaltgasverdichter durch der höheren Menge an Ethen die in der Anlage geführt wird.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 3,02. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 3,02 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,72. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,72 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wirkt sich positiv auf den HD-Dampf Import aus. Durch den Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wird ein Minderbedarf an HD-Dampf in der Höhe von ca. 2135,43 kg/h verursacht.

Durch den angenommenen polytropen Wirkungsgrad in den Verdichterstufen werden an HD-Dampf 5868,43 kg/h und durch die Zwischenkühlung 9902,38 kg/h eingespart.

Produktströme, Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Die rückgewonnene Menge an Ethen ist in etwa gleich (ca. -210kg/h, -0,35%). Die Exportmenge an gasförmigem Ethen beträgt durch den Betrieb des Tieftemperaturteils nach den in Sim10 durchgeführten Modifikationen 59585,62 kg/h. Das entspricht einer Zunahme um ca. 4,6 t/h (8%).

Die Recovery bezüglich Ethen (aus dem Tieftemperaturteil austretendes Ethen im Verhältnis zum eintretendem) beträgt ca. 87%, was einer Reduktion um ca. 12% entspricht. Die Reinheit des aus der Anlage austretenden Ethens beträgt auch aufgrund der Einstellungen in Sim10 ca. 100 mol% (+0,15 mol%).

Ethan

An Ethan werden ca. 13815,96 kg/h aus dem Tieftemperaturteil in die Spaltöfen zurückgeführt. Das entspricht zwar einer Reduktion von 65 kg/h (0,6%) ist aber für den Tieftemperaturteil auch darauf zurückzuführen, dass mit 13816,97 kg/h gegenüber 13961,61 kg/h in der Referenz, ca. 1% weniger Ethan in den Tieftemperaturteil eintritt. Die Abweichung der rückgeführten Menge an Ethan ist aber gering und wird in der Betrachtung vernachlässigt [11]. Der Membrankontaktor ist in der Simulation so eingestellt, dass kein Ethan im abgetrennten Ethen enthalten ist und die Verluste an Ethan in den übrigen Trennstufen des Tieftemperaturprozesses sind vernachlässigbar, daher ergibt sich eine Recovery bezüglich Ethan von nahezu 100%.

Die Reinheit des Ethans beträgt 58.84 mol%, dies entspricht einer Verringerung um ca. 38 mol%. Das ist dadurch begründet, dass der Anteil an Ethen im Ethan durch die geringere Recovery bezüglich Ethen (87%) höher ist und die Reinheit des Ethans dadurch geringer.

Wasserstoff

Für die Hydrierungsprozesse werden stündlich ca. 2021,97 Kilogramm aus der Anlage zur Verfügung gestellt. Das entspricht in etwa einer Reduktion von ca. 11 kg/h (0,5%). Diese Abweichung ergibt sich daraus, dass diese Menge an Wasserstoff in den Kondensationsprozessen aus der Dampfphase ausgeschieden wird. Diese Menge gelangt in den Entmethaner (Abb. 4-3, Kolonne R-1) und wird über den Kopf der Kolonne gemeinsam mit Methan von der C2-Fraktion abgetrennt. Was die Reinheit betrifft, tritt keine Abweichung auf.

Methan

Mit 30501,87 kg/h treten zwar um ca. 0,16% weniger Methan aus der Anlage aus, um die gleiche Abweichung tritt aber auch eine geringere Menge ein. Daher ergibt sich keine Änderung bezüglich der Recovery und auch für die Reinheiten (ND-Methan und Restgas werden keine Abweichungen festgestellt).

Einfluss der Wahl des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

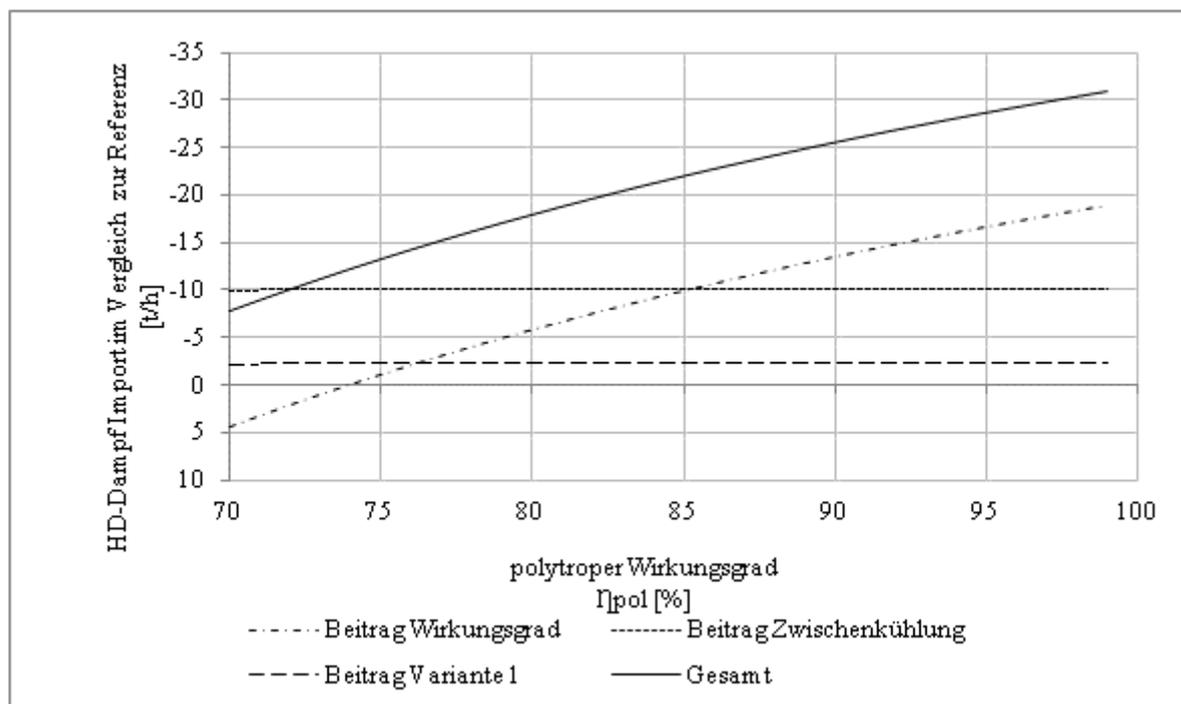


Abb. 13-24: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 1 (Sim13)

In Abb. 13-24 ist zu erkennen, dass der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1, gegenüber der Referenz, geringeren Bedarf an HD-Dampf für den Tieftemperaturteil mit sich bringt. Bis zu Wirkungsgraden von 85% leisten die Zwischenkühlungen den größten Beitrag an der Einsparung. Liegen die Wirkungsgrade in den Verdichterstufen unter ca. 74%, dann wird seitens des Verdichters kein Beitrag zur Einsparung geleistet, im Gegenteil, es ergibt sich ein negativer Einfluss auf die Einsparung.

13.5.14 Membrankontaktor, Variante 2 (Sim14)

Zur Trennung von Ethan und Ethen wird ein Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikationskolonne im Tieftemperaturteil eingesetzt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters des Ethen-Kältekreislaufes wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen.

Variante 2 Sim14		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-9129,32	-12946,70	17,88	-2173,84
Änderung zu Referenz	[%]	-15,44	-47,36	0,04	-15,37
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	0,71	-	-	-
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	-	-	-	0,17
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-5215,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-			
Trennverfahren	[kg/h]	-3914,24			

Tab. 13-29: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim14), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

Variante 2 (Sim14)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	59949,28	13815,06	2030,22	30551,91
Recovery	[%]	99,42	98,95	86,89	97,46
Reinheit	[mol%]	99,74	98,17	94,85	wie in [4]

Tab. 13-30: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim14), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Modifikation des Tieftemperaturteils wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 9,1 t / h (15,4%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Durch den Betrieb der nachgeschalteten Rektifikationskolonne (ND2-Propen als Kältemittel im Kondensator), die Verdichtung und die Vorkühlung (durch ND1-Propen) des Einsatzstromes wird der MD-Dampf Export um ca. 12,9 t/h (47,4%) reduziert. An CO₂ Emissionen werden ca. 2,2 t/h (15,4%) eingespart.

ND-Dampf Export

Auf den Export von ND-Dampf wird kein Einfluss genommen, er entspricht in etwa dem Wert der Referenz.

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 0,71. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 0,71 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,17. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,17 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wirkt sich positiv auf den HD-Dampf Import aus. Durch den Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 1 wird HD-Dampf in der Höhe von ca. 3914,24 kg/h eingespart.

Durch den angenommenen polytropen Wirkungsgrad in den Verdichterstufen werden an HD-Dampf 5215,08 kg/h eingespart.

Produktströme, Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Ethen

Die rückgewonnene Menge an Ethen ist in etwa gleich (ca. +150kg/h, +0,25%). Die Exportmenge an gasförmigem Ethen beträgt durch den Betrieb des Tieftemperaturteils nach den in Sim14 durchgeführten Modifikationen unter Einsatz des Membrankontaktors und nachgeschalteter Rektifikationskolonne 59949,28 kg/h. Das entspricht einer Zunahme um ca. 5 t/h (9%).

Die Recovery bezüglich Ethen (aus dem Tieftemperaturteil austretendes Ethen im Verhältnis zum eintretendem) beträgt ca. 99,42%, was in etwa dem Wert der Referenz (99,14%) entspricht. Die Reinheit des aus der Anlage austretenden Ethens beträgt in Sim14 ca. 99,74 mol% (+9,4 mol%).

Ethan

An Ethan werden ca. 13815,08 kg/h aus dem Tieftemperaturteil in die Spaltöfen zurückgeführt. Das entspricht einer Reduktion von ca. 66 kg/h (0,5%) und ist darauf zurückzuführen, dass ein Teil des in die Rektifikationskolonne eintretenden Ethans mit dem Ethen über Kopf die Kolonne verlässt. Die Recovery bezüglich Ethan entspricht in etwa 99% was einer geringfügigen Abweichung von ca. 0,5% entspricht. Die Reinheit des Ethans beträgt ca. 98,17 mol% (+1,1%).

Wasserstoff

Für die Hydrierungsprozesse steht Wasserstoff in gleichen Mengen und gleicher Reinheit zur Verfügung, auch die Recovery bezüglich Wasserstoff ist gleich, es wurden keine Abweichungen festgestellt.

Methan

Gleiche Menge, in gleicher Reinheit bei gleicher Recovery. Es wurden keine Abweichungen festgestellt.

Einfluss der Wahl des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

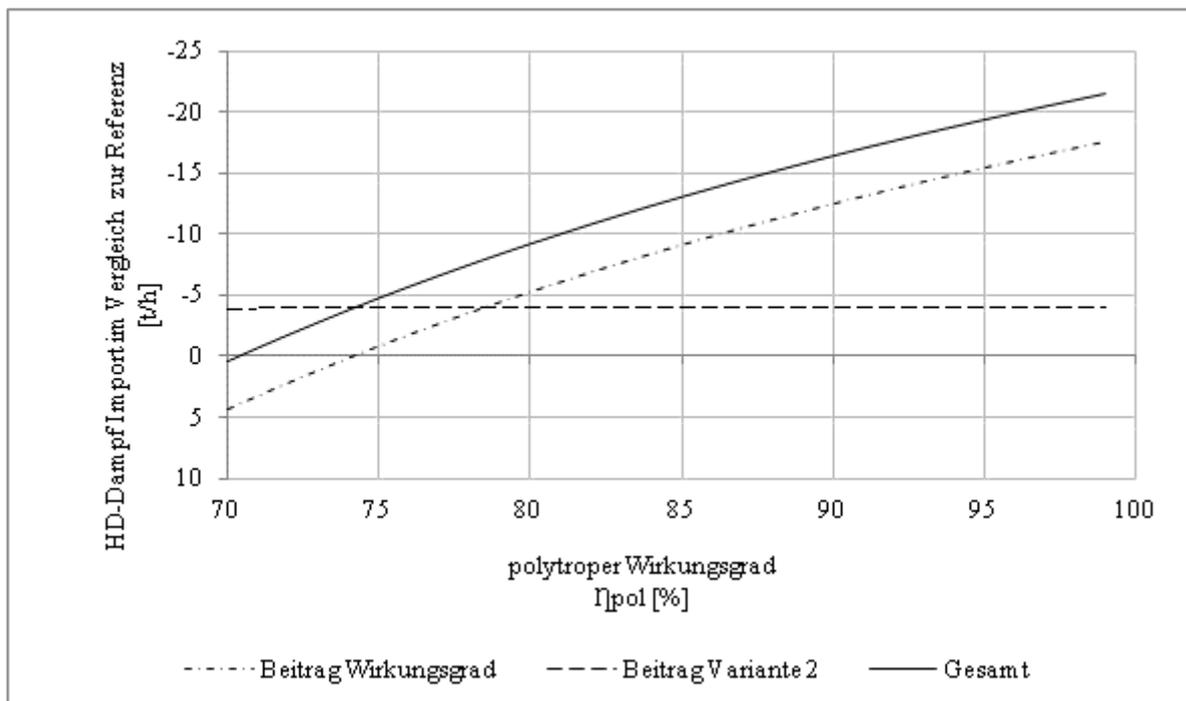


Abb. 13-25: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 2 (Sim14)

In Abb. 13-25 ist zu erkennen, dass der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2, gegenüber der Referenz, einen geringeren Bedarf an HD-Dampf für den Tieftemperaturteil mit sich bringt. Sind in den Verdichterstufen allerdings polytrope Wirkungsgrade unter ca. 71% vorhanden, ist der Bedarf an HD-Dampf gegenüber der Referenz höher. Bis zu Wirkungsgraden von 78% liefern die Zwischenkühlungen den höheren Beitrag an der Einsparung, danach ist die Höhe der Einsparung ausschließlich eine Funktion des polytropen Wirkungsgrades. Zwischen 76% und 95% Wirkungsgrad liegt ein Unterschied in der Einsparung über dreifachem Wert.

13.5.15 Membrankontaktor, Variante 2 mit Zwischenkühlung (Sim15)

Zur Trennung von Ethan und Ethen wird ein Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikationskolonne im Tieftemperaturteil eingesetzt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters des Ethen-Kältekreislaufes wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen. Im Ethenverdichter erfolgen durch den Einsatz von Propen Zwischenkühlungen auf -34°C .

Variante 2 (Sim15)		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO ₂ Emission
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg/h]	-24454,36	-38509,60	63,75	-5822,48
Änderung zu Referenz	[%]	-41,35	-140,88	0,13	-41,17
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	0,64			
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]				0,15
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-5215,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-15325,04			
Trennverfahren	[kg/h]	-3914,24			

Tab. 13-31: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim15), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

Variante 2 (Sim15)	Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme [kg/h]	59949,28	13815,06	2030,22	30551,91
Recovery [%]	99,42	98,95	86,89	97,46
Reinheit [mol%]	99,74	98,17	94,85	wie in [4]

Tab. 13-32: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim15), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Modifikation des Tieftemperaturteils wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 24,5 t / h (41,4%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die Zwischenkühlungen und der Betrieb der nachgeschalteten Rektifikationskolonne (ND2-Propen als Kältemittel im Kondensator) mit Verdichtung und Vorkühlung (durch ND1-Propen) des Einsatzstromes erfordern zusätzlichen Einsatz von MD-Dampf. Der zusätzliche Leistungsbedarf ist dabei so hoch, dass dieser mit dem Überschuss aus der [4] nicht gedeckt werden kann und ein Import von MD-Dampf notwendig ist. Der benötigte Import entspricht dabei in etwa 41% des Exportes aus [4]. An CO₂ Emissionen werden ca. 5,8 t/h (41,2%) eingespart.

ND-Dampf Export

An Export von ND-Dampf wird nur eine geringe Abweichung festgestellt (ca. +0,1%).

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 0,64. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 0,64 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,15. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,15 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2 wirkt sich positiv auf den HD-Dampf Import aus. Durch den Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2 wird ein Minderbedarf an HD-Dampf in der Höhe von ca. 3914,24 kg/h verursacht.

Durch den angenommenen polytropen Wirkungsgrad in den Verdichterstufen werden an HD-Dampf 5215,08 kg/h und durch die Zwischenkühlung 15325,04 kg/h eingespart.

Produktströme, Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Ethen

Die rückgewonnene Menge an Ethen ist in etwa gleich (ca. +150kg/h, +0,25%). Die Exportmenge an gasförmigem Ethen beträgt durch den Betrieb des Tieftemperaturteils nach den in Sim14 durchgeführten Modifikationen unter Einsatz des Membrankontaktors und nachgeschalteter Rektifikationskolonne 59949,28 kg/h. Das entspricht einer Zunahme um ca. 5 t/h (9%).

Die Recovery bezüglich Ethen (aus dem Tieftemperaturteil austretendes Ethen im Verhältnis zum eintretendem) beträgt ca. 99,42%, was in etwa dem Wert der Referenz (99,14%) entspricht. Die Reinheit des aus der Anlage austretenden Ethens beträgt in Sim14 ca. 99,74 mol% (+9,4 mol%).

Ethan

An Ethan werden ca. 13815,08 kg/h aus dem Tieftemperaturteil in die Spaltöfen zurückgeführt. Das entspricht einer Reduktion von ca. 66 kg/h (0,5%) und ist darauf zurückzuführen, dass ein Teil des in die Rektifikationskolonne eintretenden Ethans mit dem Ethen über Kopf die Kolonne verlässt. Die Recovery bezüglich Ethan entspricht in etwa 99% was einer geringfügigen Abweichung von ca. 0,5% entspricht. Die Reinheit des Ethans beträgt ca. 98,17 mol% (+1,1%).

Wasserstoff

Für die Hydrierungsprozesse steht Wasserstoff in gleichen Mengen und gleicher Reinheit zur Verfügung, auch die Recovery bezüglich Wasserstoff ist gleich, es wurden keine Abweichungen festgestellt.

Methan

Gleiche Menge, in gleicher Reinheit bei gleicher Recovery. Es wurden keine Abweichungen festgestellt.

Einfluss der Wahl des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

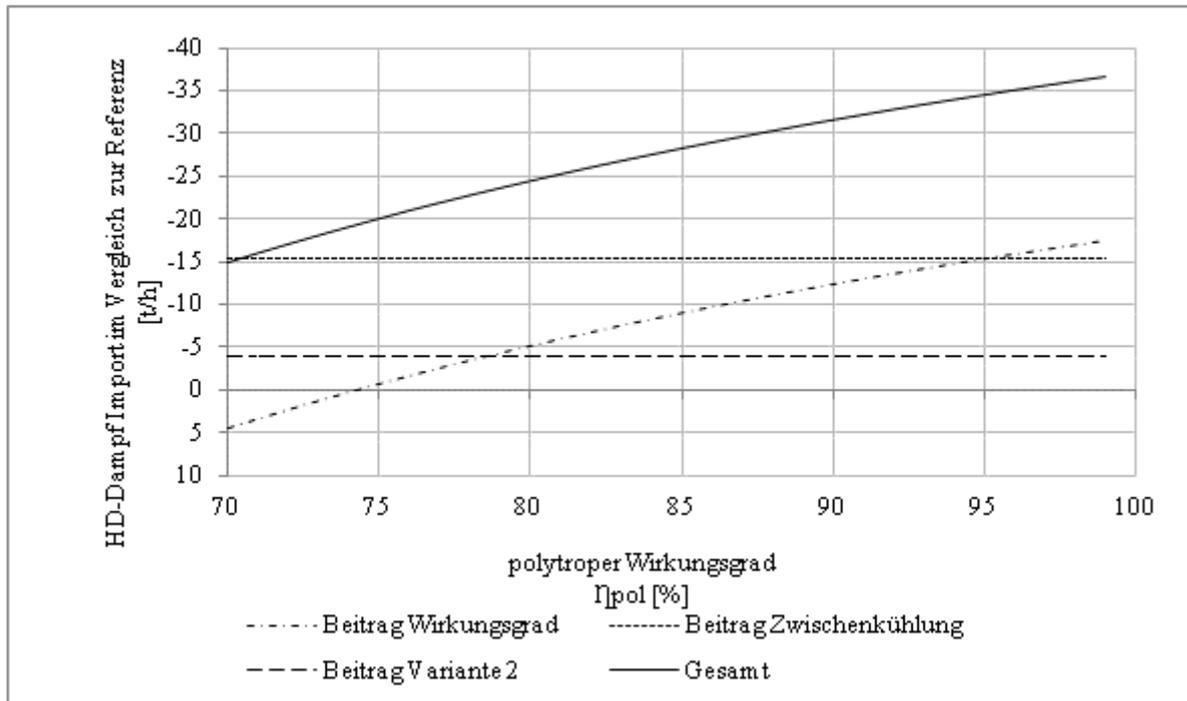


Abb. 13-26: Beiträge von Trennverfahren (Membrankontaktor nach Variante 2, Sim15), Zwischenkühlung und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import.

In Abb. 13-26 ist zu erkennen, dass der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2, gegenüber der Referenz, geringeren Bedarf an HD-Dampf für den Tieftemperaturteil mit sich bringt. Bis zu Wirkungsgraden von 95% leisten die Zwischenkühlungen den größten Beitrag an der Einsparung. Liegen die Wirkungsgrade in den Verdichterstufen unter ca. 74%, dann wird seitens des Verdichters kein Beitrag zur Einsparung geleistet, im Gegenteil, es ergibt sich ein negativer Einfluss auf die Einsparung.

13.5.16 Membrankontaktor, Variante 2 mit Zwischenkühlung (Sim16)

Zur Trennung von Ethan und Ethen wird ein Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikationskolonne im Tieftemperaturteil eingesetzt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters des Ethen-Kältekreislaufes wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80%

angenommen. Im Ethenverdichter wird zwischen den Verdichterstufen durch den Einsatz von Isobutan auf -1°C vorgekühlt und mit Propen auf -15°C zwischengekühlt.

Variante 2		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Sim16					
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-18636,40	-29440,97	48,89	-4437,25
Änderung zu Referenz	[%]	-31,51	-107,70	0,10	-31,37
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	0,63			
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]	0,15			
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-5215,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-9507,08			
Trennverfahren	[kg/h]	-3914,24			

Tab. 13-33: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim16), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

Variante 2 (Sim16)	Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme [kg/h]	59949,28	13815,06	2030,22	30551,91
Recovery [%]	99,42	98,95	86,89	97,46
Reinheit [mol%]	99,74	98,17	94,85	wie in [4]

Tab. 13-34: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim16), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Modifikation des Tieftemperaturteils wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 18,6 t / h (31,5%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die Zwischenkühlungen und der Betrieb der nachgeschalteten Rektifikationskolonne (ND2-Propen als Kältemittel im Kondensator) mit Verdichtung und Vorkühlung (durch ND1-

Propen) des Einsatzstromes erfordern zusätzlichen Einsatz von MD-Dampf. Der zusätzliche Leistungsbedarf ist dabei so hoch, dass dieser mit dem Überschuss aus der [4] nicht gedeckt werden kann und ein Import von MD-Dampf notwendig ist. Der benötigte Import entspricht dabei in etwa 8% des Exportes aus [4]. An CO₂ Emissionen werden ca. 4,4 t/h (31,4%) eingespart.

ND-Dampf Export

An Export von ND-Dampf wird nur eine geringe Abweichung festgestellt (ca. +0,1%).

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 0,63. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 0,63 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,15. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,15 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2 wirkt sich positiv auf den HD-Dampf Import aus. Durch den Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2 wird ein Minderbedarf an HD-Dampf in der Höhe von ca. 3914,24 kg/h verursacht.

Durch den angenommenen polytropen Wirkungsgrad in den Verdichterstufen werden an HD-Dampf 5215,08 kg/h und durch die Zwischenkühlung 9507,08 kg/h eingespart.

Produktströme, Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Ethen

Die rückgewonnene Menge an Ethen ist in etwa gleich (ca. +150kg/h, +0,25%). Die Exportmenge an gasförmigem Ethen beträgt durch den Betrieb des Tieftemperaturteils nach den in Sim14 durchgeführten Modifikationen unter Einsatz des Membrankontaktors und nachgeschalteter Rektifikationskolonne 59949,28 kg/h. Das entspricht einer Zunahme um ca. 5 t/h (9%).

Die Recovery bezüglich Ethen (aus dem Tieftemperaturteil austretendes Ethen im Verhältnis zum eintretendem) beträgt ca. 99,42%, was in etwa dem Wert der Referenz (99,14%) entspricht. Die Reinheit des aus der Anlage austretenden Ethens beträgt in Sim14 ca. 99,74 mol% (+9,4 mol%).

Ethan

An Ethan werden ca. 13815,08 kg/h aus dem Tieftemperaturteil in die Spaltöfen zurückgeführt. Das entspricht einer Reduktion von ca. 66 kg/h (0,5%) und ist darauf zurückzuführen, dass ein Teil des in die Rektifikationskolonne eintretenden Ethans mit dem Ethen über Kopf die Kolonne verlässt. Die Recovery bezüglich Ethan entspricht in etwa 99% was einer geringfügigen Abweichung von ca. 0,5% entspricht. Die Reinheit des Ethans beträgt ca. 98,17 mol% (+1,1%).

Wasserstoff

Für die Hydrierungsprozesse steht Wasserstoff in gleichen Mengen und gleicher Reinheit zur Verfügung, auch die Recovery bezüglich Wasserstoff ist gleich, es wurden keine Abweichungen festgestellt.

Methan

Gleiche Menge, in gleicher Reinheit bei gleicher Recovery. Es wurden keine Abweichungen festgestellt.

Einfluss der Wahl des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

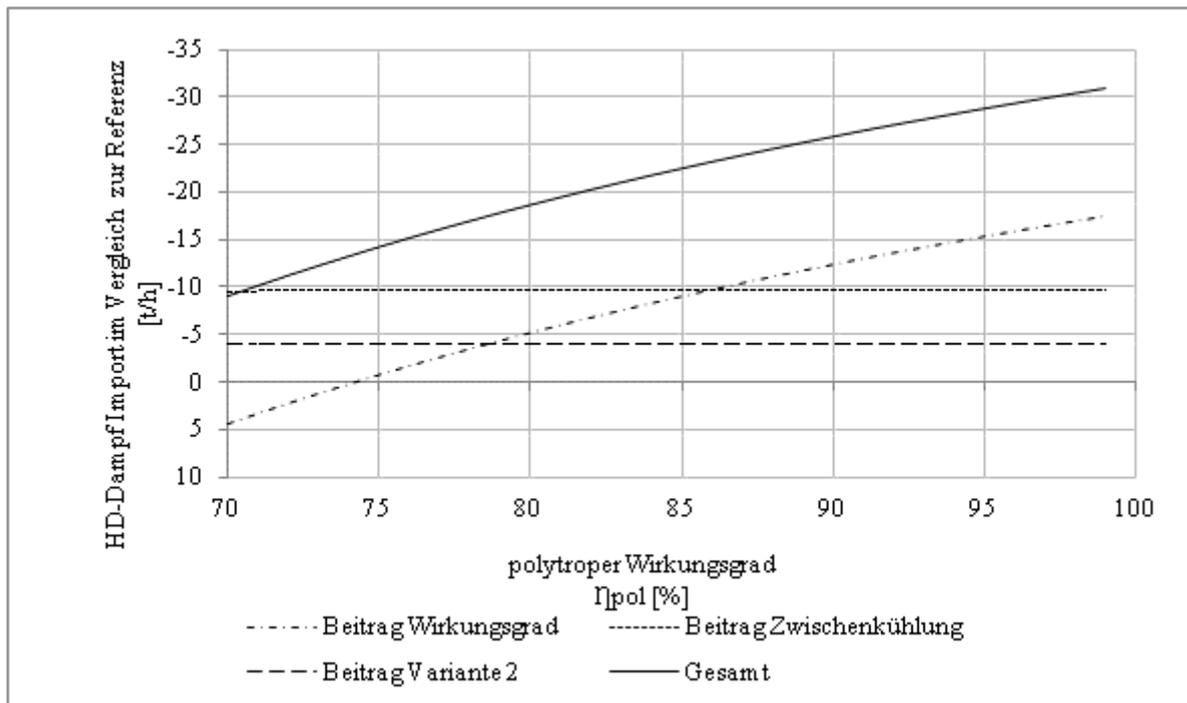


Abb. 13-27: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 2 (Sim16)

In Abb. 13-27 ist zu erkennen, dass der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2, gegenüber der Referenz, geringeren Bedarf an HD-Dampf für den Tieftemperaturteil mit sich bringt. Bis zu Wirkungsgraden von 86% leisten die Zwischenkühlungen den größten Beitrag an der Einsparung. Liegen die Wirkungsgrade in den Verdichterstufen unter ca. 74%, dann wird seitens des Verdichters kein Beitrag zur Einsparung geleistet, im Gegenteil, es ergibt sich ein negativer Einfluss auf die Einsparung.

13.5.17 Membrankontaktor, Variante 2 mit Zwischenkühlung (Sim17)

Zur Trennung von Ethan und Ethen wird ein Membrankontaktor mit nachgeschalteter Rektifikationskolonne im Tieftemperaturteil eingesetzt. In den Verdichterstufen des Ethenverdichters des Ethen-Kältekreislaufes wird ein polytroper Wirkungsgrad von 80% angenommen. Im Ethenverdichter erfolgen durch den Einsatz von Isobutan Zwischenkühlungen auf -1°C .

Variante 2		HDD Import	MDD Export	NDD Export	CO₂ Emission
Sim17					
Wirtschaftliche Kriterien					
Differenzen	[kg / h]	-12298,90	-28943,43	70,65	-2928,32
Änderung zu Referenz	[%]	-20,79	-105,88	0,14	-20,71
HDD zu MDD	[kg _{HDD} /kg _{MDD}]	0,42			
CO ₂ zu MDD	[kg _{CO2} /kg _{MDD}]				0,10
Beiträge am HD-Dampf Import					
Polytr. Wirkungsgrad	[kg/h]	-5215,08			
Zwischenkühlung	[kg/h]	-3914,25			
Trennverfahren	[kg/h]	-3169,57			

Tab. 13-35: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim17), Teil 1: im Vergleich mit dem Basisfall [4]

Variante 2 (Sim17)		Ethen	Ethan	Wasserstoff	Methan
Produktströme	[kg/h]	59949,28	13815,06	2030,22	30551,91
Recovery	[%]	99,42	98,95	86,89	97,46
Reinheit	[mol%]	99,74	98,17	94,85	wie in [4]

Tab. 13-36: Einzelauswertung, Variante 2 (Sim17), Teil 2: Angaben absolut

Wirtschaftliche Kriterien, mit Bezug auf den Basisfall [4]

HD-Dampf Import

Durch die Modifikation des Tieftemperaturteils wird eine Einsparung im HD-Dampf Import von ca. 12,3 t / h (20,8%) erreicht.

MD-Dampf Export und CO₂ Emissionen

Die Zwischenkühlungen und der Betrieb der nachgeschalteten Rektifikationskolonne (ND2-Propen als Kältemittel im Kondensator) mit Verdichtung und Vorkühlung (durch ND1-Propen) des Einsatzstromes erfordern zusätzlichen Einsatz von MD-Dampf. Der zusätzliche Leistungsbedarf ist dabei so hoch, dass dieser mit dem Überschuss aus der [4] nicht gedeckt werden kann und ein Import von MD-Dampf notwendig ist. Der benötigte Import entspricht

dabei in etwa 6% des Exportes aus [4]. An CO₂ Emissionen werden ca. 2,9 t/h (20,7%) eingespart.

ND-Dampf Export

An Export von ND-Dampf wird nur eine geringe Abweichung festgestellt (ca. +0,1%).

Einsparung HD-Dampf zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von Einsparung HD-Dampf zu MD-Dampf beträgt 0,42. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf (Reduktion MD-Dampf Export), 0,42 Kilogramm HD-Dampf im Import eingespart.

Reduzierung von CO₂ Emissionen zu Einsatz MD-Dampf

Das Verhältnis von CO₂ Emissionen zu MD-Dampf beträgt 0,10. Es werden pro Kilogramm eingesetztem MD-Dampf, 0,10 kg CO₂ Emissionen eingespart.

Beiträge an der Veränderung des HD-Dampf Imports gegenüber dem Basisfall [4]

Der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2 wirkt sich positiv auf den HD-Dampf Import aus. Durch den Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2 wird ein Minderbedarf an HD-Dampf in der Höhe von ca. 3169,57 kg/h verursacht.

Durch den angenommenen polytropen Wirkungsgrad in den Verdichterstufen werden an HD-Dampf 5215,08 kg/h und durch die Zwischenkühlung 3914,25 kg/h eingespart.

Produktströme, Recovery und Reinheit, bezogen auf den Basisfall [4]

Ethen

Die rückgewonnene Menge an Ethen ist in etwa gleich (ca. +150kg/h, +0,25%). Die Exportmenge an gasförmigem Ethen beträgt durch den Betrieb des Tieftemperaturteils nach den in Sim14 durchgeführten Modifikationen unter Einsatz des Membrankontaktors und nachgeschalteter Rektifikationskolonne 59949,28 kg/h. Das entspricht einer Zunahme um ca. 5 t/h (9%).

Die Recovery bezüglich Ethen (aus dem Tieftemperaturteil austretendes Ethen im Verhältnis zum eintretendem) beträgt ca. 99,42%, was in etwa dem Wert der Referenz (99,14%)

entspricht. Die Reinheit des aus der Anlage austretenden Ethens beträgt in Sim14 ca. 99,74 mol% (+9,4 mol%).

Ethan

An Ethan werden ca. 13815,08 kg/h aus dem Tieftemperaturteil in die Spaltöfen zurückgeführt. Das entspricht einer Reduktion von ca. 66 kg/h (0,5%) und ist darauf zurückzuführen, dass ein Teil des in die Rektifikationskolonne eintretenden Ethans mit dem Ethen über Kopf die Kolonne verlässt. Die Recovery bezüglich Ethan entspricht in etwa 99% was einer geringfügigen Abweichung von ca. 0,5% entspricht. Die Reinheit des Ethans beträgt ca. 98,17 mol% (+1,1%).

Wasserstoff

Für die Hydrierungsprozesse steht Wasserstoff in gleichen Mengen und gleicher Reinheit zur Verfügung, auch die Recovery bezüglich Wasserstoff ist gleich, es wurden keine Abweichungen festgestellt.

Methan

Gleiche Menge, in gleicher Reinheit bei gleicher Recovery. Es wurden keine Abweichungen festgestellt.

Einfluss der Wahl des polytropen Wirkungsgrades (siehe 13.2)

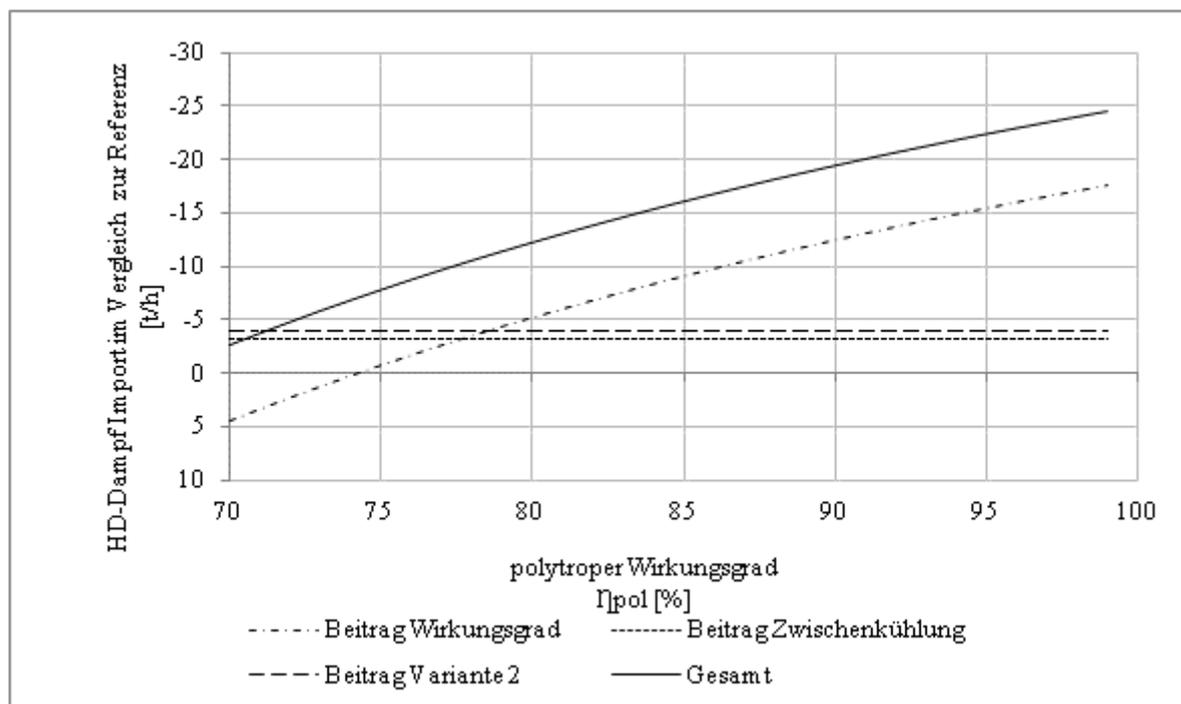


Abb. 13-28: Beiträge von Trennverfahren und Annahme des polytropen Wirkungsgrades auf den HD-Dampf Import, Trennverfahren: Membrankontaktor nach Variante 2 (Sim17)

In Abb. 13-28 ist zu erkennen, dass der Einsatz des Membrankontaktors nach Variante 2, gegenüber der Referenz, geringeren Bedarf an HD-Dampf für den Tieftemperaturteil mit sich bringt. Bis zu Wirkungsgraden von 77% leisten die Zwischenkühlungen den größten Beitrag an der Einsparung. Liegen die Wirkungsgrade in den Verdichterstufen unter ca. 74%, dann wird seitens des Verdichters kein Beitrag zur Einsparung geleistet, im Gegenteil, es ergibt sich ein negativer Einfluss auf die Einsparung.

13.6 Dokumentation der ActiveX-Schnittstelle

Zur Verfahrenssimulation unter Einsatz eines Adsorbersystems (siehe Kapitel 6) im Tieftemperaturteil und zu Zwecken der Auswertung von Simulationsergebnissen wird eine ActiveX-Schnittstelle verwendet. Durch den Einsatz der Schnittstelle können KBC Petro-SIM[®] und MATLAB[®] miteinander kommunizieren und Datentransfer wird ermöglicht. Es werden Prozessdaten aus der Anlagensimulation in KBC Petro-SIM[®] an MATLAB[®] und Ergebnisse aus Berechnungen in MATLAB[®] zurück an KBC Petro-SIM[®] übergeben.

Da die Befehlsreferenz zu der verwendeten ActiveX-Schnittstelle nicht verfügbar ist, wird im Folgenden eine Auswahl von Objekten und Funktionen vorgestellt, die durch die Schnittstelle

zur Verfügung stehen. Die Referenz soll nur eine Hilfestellung geben und ist keinesfalls als vollständig zu betrachten.

Auswahl von Objekten und Funktionen der ActiveX-Schnittstelle

Herstellung der Verbindung mit der ActiveX-Schnittstelle von KBC Petro-SIM[®]

```
PetroSIM = feval('actxserver', 'PetroSIM.Application');
```

Zugriff auf die KBC Petro-SIM[®] Simulationsdatei (ksc-Datei)

```
scase = invoke(PetroSIM.SimulationCases, 'Open', 'Dateipfad');
```

Der Dateipfad enthält den absoluten Pfad zur Simulationsdatei und den Dateinamen mit Dateierweiterung (zB C:\Simulationen\entmethaner.ksc).

Ist die Simulationsdatei zum Zeitpunkt des Zugriffs auf die ActiveX-Schnittstelle in KBC Petro-SIM[®] geöffnet, besitzt man von MATLAB[®] aus Lese- und Schreibzugriff auf die Datei, andernfalls hat man nur Lesezugriff und es können keine Werte in der Simulationsdatei verändert werden.

Freigabe der geöffneten Simulationsdatei

```
release(PetroSIM);
```

Ist das Programm abgeschlossen, muss die Simulationsdatei am Ende in jedem Fall wieder freigegeben werden.

Zugriff auf den KBC Petro-SIM[®] Solver

```
scase.Solver.CanSolve  
scase.Solver.IsSolving
```

Über diese Befehle kann beispielsweise überprüft werden, ob der KBC Petro-SIM[®] Solver noch läuft oder die Simulation abgeschlossen ist.

Zugriff auf das Flowsheet-Objekt

```
flowsheet = scase.FlowSheet;
```

Über das Flowsheet-Objekt kann unter anderem auf sämtliche im Flowsheet vorhandene Bauteile (Operations), Stoffströme und Spreadsheets zugegriffen werden.

Zugriff auf Subflowsheets

```
subflowsheet = flowsheet.Flowsheets.Item('CB');
```

Ist die Simulation in KBC Petro-SIM[®] auf mehrere Subflowsheets aufgeteilt, kann über das Flowsheet-Objekt auf die Subflowsheets zugegriffen werden. Als Parameter muss der Name des Subflowsheets in KBC Petro-SIM[®] übergeben werden.

Das Subflowsheet ist ebenfalls ein Flowsheet-Objekt und kann dementsprechend genauso für den Zugriff auf im Flowsheet vorhandene Bauteile, Stoffströme und Spreadsheets verwendet werden.

Zugriff auf Stoffstrom-Objekte

```
stream1 = flowsheet.MaterialStreams.Item('name');
```

Auf Stoffströme kann über das Flowsheet-Objekt zugegriffen werden. Als Parameter muss der Name des Stroms in KBC Petro-SIM[®] übergeben werden.

Das Stoffstrom-Objekt besitzt verschiedene Eigenschaften (Liste unvollständig):

```
stream1.Name  
stream1.Temperature  
stream1.Pressure  
stream1.MolarFlow  
stream1.MassFlow  
stream1.VolumeFlow  
stream1.VapourFraction  
stream1.ComponentMolarFraction  
stream1.ComponentMassFraction  
stream1.ComponentVolumeFraction
```

Der Name kann direkt verändert werden, auf die anderen Eigenschaften muss über das Value-Attribut zugegriffen werden:

```
stream1.Name = 'feed';  
druck = stream1.Pressure.Value;  
temp = stream1.Temperature.Value;
```

Zusätzlich stehen die Funktionen GetValue und SetValue zur Verfügung, mit deren Hilfe auch die Einheit angegeben werden kann, in der der Wert gesetzt oder gelesen wird. Die Einheit muss so angegeben werden, wie sie in KBC Petro-SIM[®] geschrieben ist.

```
stream1.Temperature.SetValue(298, 'K');  
stream1.Pressure.SetValue(5, 'bar');  
stream1.VapourFraction.SetValue(1);  
temp = stream1.Temperature.GetValue('K');  
druck = stream1.Pressure.GetValue('kPa');  
stream1.MolarFlow.GetValue('kgmole/h');
```

Die Zusammensetzung eines Stroms kann über das Values-Attribut gelesen und über SetValue unter Verwendung einer Zusatzfunktion verändert werden (Beispiel für 2 Komponenten und Molanteile):

```
molAnteile = stream1.ComponentMolarFraction.Values;  
feature('COM_SafeArraySingleDim', 1);  
stream1.ComponentMolarFraction.SetValue([0.5 0.5]);
```

Anhaltspunkte für weitere Attribute des Stoffstrom-Objekts liefert die Liste der Variablen, die man erhält, wenn man in KBC Petro-SIM[®] von einem Spreadsheet aus die Export Formula Result-Funktion nutzt und einen Stoffstrom auswählt.

Zugriff auf Bauteil-Objekte

```
splitter = flowsheet.Operations.Item('X-100');
```

Auf Bauteile (Column, Heater, Compressor, Splitter, ...) kann über das Flowsheet-Objekt zugegriffen werden. Als Parameter muss der Name des Bauteils in KBC Petro-SIM[®] übergeben werden.

Über das Bauteil-Objekt kann beispielsweise auf den Namen oder auf angeschlossene Einsatzströme (Feeds) zugegriffen werden:

```
splitter.Name  
splitter.AttachedFeeds
```

Je nach Bauteil-Typ unterscheiden sich die Eigenschaften des Bauteil-Objekts. Einen Anhaltspunkt liefert teilweise die Liste der Variablen, die man erhält, wenn man in KBC Petro-SIM[®] von einem Spreadsheet aus die Export Formula Result-Funktion nutzt und ein Bauteil auswählt.

Im Folgenden sind zu einigen Bauteilen Eigenschaften aufgelistet, die analog zu Druck und Temperatur eines Stoffstroms durch GetValue gelesen und durch SetValue verändert werden können.

Verdampfer und Kondensator (Heater, Cooler)

```
verdampfer.PressureDrop  
verdampfer.Duty
```

Verdichter (Compressor):

```
verdichter.PolytropicEfficiency  
verdichter.Energy
```

Zugriff auf Spreadsheet-Objekte

```
sheet = flowsheet.Operations.Item('SplitterSheet');
```

Auf KBC Petro-SIM[®]-Spreadsheets kann über das Flowsheet-Objekt zugegriffen werden. Als Parameter muss der Name des Spreadsheets in KBC Petro-SIM[®] übergeben werden.

Zellen in Spreadsheets können über die Attribute CellText und CellValue gelesen und verändert werden. Der Zugriff auf Zellen erfolgt über das Cell-Attribut unter Angabe der Zellenposition als Zeilen- und Spaltennummer (zB 1,1) oder Zellenbezeichnung (zB B1). Die Verwendung der Zellenbezeichnung ist zu empfehlen, da sie eindeutig und einfacher zu handhaben ist.

```
sheet.Cell('C5').CellValue = 0.25;  
sheet.Cell('A3').CellText = 'Beispiel';  
wert1 = sheet.Cell(1,1).CellValue;  
wert2 = sheet.Cell('A15').CellValue;  
text = sheet.Cell('B2').CellText;
```

13.7 MATLAB[®]-Programm (exemplarisch für Feed 6, Kapitel 6.2)

```

1  %%% Programm zur Simulation eines PSA-Prozesses für bis zu vier
2  %%% adsorbierbare Komponenten mittels LDF Algorithmus
3  %%%
4  %%%
5  %%% VERSION: 19.12.2013
6  %%% Programm: Implementierung einer ActiveX-Schnittstelle (Anwendung auf Petro-SIM(R)) in den Programmcode der
7  %%%           Parameterstudie aus [8]
8  %%% Änderungen gegenüber [8]: - Auslesen in EXCEL deaktiviert
9  %%%                           - Anwendung des Algorithmus nur auf Aktivkohle (nach Rücksprache mit DI Schmid)
10 %%%                          - Erweiterung um die Berechnung der notwendigen Recoveries
11 %%%                           für Petro-SIM(R)
12 %%%                          - Anwendung der ActiveX-Schnittstelle
13
14 clear all
15 clc
16
17 % ActiveX-Link aufbauen
18 PetroSIM      = feval('actxserver', 'PetroSIM.Application');
19 scase         = invoke(PetroSIM.SimulationCases, 'Open',...
20                     'N:\sim\Gesamt\Adsorption\Reparatur\dech4\entmethaner_neu_h2_ch4_sch.ksc');
21 flowsheet     = scase.Flowsheet;
22 coldbox       = flowsheet.Flowsheets.Item('CB');           %Zugriff auf Subflowsheet
23                                                       %"Coldbox Entmethaner C2 Splitter (CB)"
24 splits        = coldbox.Operations.Item('Adsorber');       %Zugriff auf das Spreadsheet "Adsorber"
25 adfeedv       = coldbox.MaterialStreams.Item('3');         %Einlesen des Materialstroms "3"
26 adfeed        = coldbox.MaterialStreams.Item('2');         %Einlesen des Materialstroms "2"
27 h2_hydr       = coldbox.MaterialStreams.Item('H2_Hydr');   %Einlesen des Materialstroms "H2_Hydr" (Raffinat)
28 %h2_hydr.VapourFraction.SetValue(1);
29 spuel         = coldbox.MaterialStreams.Item('Spülgas');   %Einlesen des Materialstroms "Spülgas" (Spülgas)
30 spuel.VapourFraction.SetValue(1);                          %Vapourfraction im "Spülgas" wird auf 100% eingestellt
31 ch4_ofen      = coldbox.MaterialStreams.Item('CH4_Ofen'); %Einlesen des Materialstroms "CH4_Ofen" (Extrakt)
32 ch4_ofen.VapourFraction.SetValue(1);                       %Vapourfraction im "CH4_Ofen" wird auf 100% eingestellt
33 verluste     = coldbox.MaterialStreams.Item('Verluste');  %Einlesen des Materialstroms "Verluste" (Bilanzausgleich)
34 verluste.VapourFraction.SetValue(1);                       %Vapourfraction im "Verluste" wird auf 100% eingestellt
35 adfeedvpr     = adfeedv.Pressure.GetValue('kPa');          %Zuweisung des Drucks in [kPa]
36 adfeedtemp    = adfeed.Temperature.GetValue('K');         %Zuweisung der Temperatur in [K]
37 adfeedmol     = adfeed.MolarFlow.GetValue('kgmole/h');    %Zuweisung des Stoffmengenstroms des Feed in [kmol/h]

```



```

78 nEinsatz = [comp_h2; comp_ch4; 0; 0];
79 nEinsatz = nEinsatz*1000/3600; % [mol/s]
80 nEinsatz = nEinsatz/nAdsorber; % [mol/s] Molenstrom der Komp. durch einen Adsorber
81
82 ngesamt = sum(nEinsatz); % [mol/s] Gesamtmolenstrom durch einen Adsorber
83 yEinsatz = nEinsatz/ngesamt; % Molanteil der Komponenten
84
85 % Variation von Druck und Temperatur
86
87 for pvar = 1:length(Pads)
88     for Tvar = 1:length(T)
89
90     Veinsatz = ngesamt*R*T(Tvar)/(Pads(pvar)*1000); % [m³/s] Volumenstrom Einsatz durch einen Adsorber
91     Veinsatznorm = Veinsatz*Pads(pvar)*Tnorm/(Pnorm*T(Tvar)); % [Nm³/s] Volumenstrom Einsatz durch einen Adsorber
92     % [kg/kmol]Molekulargewicht Gas am Eingang
93     MGgas = yEinsatz(1)*2.02 + yEinsatz(2)*16.04 + yEinsatz(3)*30.07 + yEinsatz(4)*28.05;
94
95     rhogas = Pads(pvar)*1000*MGgas/(8314.46*T(Tvar)); % [m³/kg] Gasdichte am Eingang
96
97     fFaktor = 0.3; % liegt zwischen 0.2 und 0.4; siehe DA Heimburg
98     vs = fFaktor/sqrt(rhogas); % [m/s] Leerrohrgeschwindigkeit (engl.: superficial velocity)
99
100    Aquerschnitt = Veinsatz/vs; % [m²] Querschnitt eines Adsorbers
101
102    dexakt = sqrt(4*Aquerschnitt/pi); % [m] Durchmesser eines Adsorbers
103    d = ceil(dexakt*10)/10; % Aufrunden von d auf nächste Dezimalstelle
104
105    V = d^2*pi*l/4; % [m³] Adsorbervolumen
106    msolid = V*(1-epsilon)*rhos; % [kg] gesamte Adsorbensmasse
107    vgas = Veinsatz/(d^2*pi/4*epsilon); % [m/s] Gasgeschwindigkeit (engl.: interstitial velocity)
108    vs = vgas*epsilon; % [m/s] Leerrohrgeschwindigkeit (engl.: superficial velocity)
109
110
111 % Eingabe der Isothermen-Parameter
112 % 1: H2 ; 2: CH4; 3: C2H6 ; 4: C2H4
113 nkomp = 4; % Anzahl der Komponenten
114
115     % [1/kPa] Langmuir-Parameter der Komponenten
116     b0 = [6.765600*10^-10; 1.054351*10^-5; 2.458400*10^-6; 3.516656*10^-6];
117     % [mol/(kg kPa)] Henry-Konstante der Komponenten

```

```

118     HenryK0 = [1.156827*10^-8; 2.564915*10^-5; 7.467129*10^-6; 9.540163*10^-6];
119     % Adsorptionseenthalpie [kJ/mol] aus Berechnung von Henry-Konstante K0
120     deltahadsK = [25.01; 13.59; 22.47; 20.84];
121     % Adsorptionseenthalpie [kJ/mol] aus Berechnung von Parameter b0
122     deltahadsb = [26.46; 11.64; 21.04; 19.06];
123
124
125
126
127     HenryK = HenryK0.*exp(deltahadsK/(R*10^-3*T(Tvar))); % [mol/(kg kPa)] Henry-Konstante der Komponenten
128     b = b0.*exp(deltahadsb/(R*10^-3*T(Tvar))); % [1/kPa] Langmuir-Parameter der Komponenten
129     qm = HenryK./b; % [mol/kg] monomolekulare Beladung
130
131 % Eingabe der Diskretisierungsparameter
132     tads = 1000; % [s] Beobachtungszeitraum für die Hochdruck-Adsorption
133     tspuel = tads; % [s] Beobachtungszeitraum für den Spülprozess
134     deltax = 0.05; % [m] Längeneinheit Diskretisierungslänge
135
136     ndeltax = round(1/deltax); % [-] Anzahl der Längeneinheiten
137     deltat = deltax/vgas; % [s] Zeiteinheit
138     ndeltatads = round(tads/deltat); % [-] Anzahl der Zeiteinheiten (Hochdruck-Adsorption)
139     ndeltatspuel = round(tspuel/deltat); % [-] Anzahl der Zeiteinheiten (Spülprozess)
140     tende = 1/vgas; % [s] Zeit bis das Gas das Ende des Adsorbers erreicht hat
141     ntende = round(tende/deltat); % [-] Anzahl der Zeiteinheiten bis das Gas das Ende des
142 % Adsorbens erreicht hat
143     Vkontroll = deltax*d^2*pi/4; % [m³] Volumen des Kontrollvolumen
144     cEinsatzges = ngesamt*deltat/(Vkontroll*epsilon); % [mol/m³ Gas] Gesamtkonzentration im Einsatz
145     cEinsatz = yEinsatz*cEinsatzges; % [mol/m³ Gas] Konzentration der Komponenten im Einsatz
146     pEinsatzges = cEinsatzges*R*T(Tvar)*10^-3; % [kPa] wahrer Gesamtdruck des Einsatz
147     pEinsatz = yEinsatz*pEinsatzges; % [kPa] Partialdrücke
148
149 % Wahl der Art des Druckaufbaus
150     druckaufbau = 2; %1=Druckaufbau mit Feed; 2=Druckaufbau mit Raffinat
151
152
153 % Berechnung des Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit der Temperatur
154 % Gleichgewichtsberechnung
155 % Berechnung des kinetischen Faktors aus den Diff.koeff.
156 % 1 = langsamer adsorbierende Komponenten
157 % 0.15 = schneller adsorbierende Komponenten

```

```
158 % siehe KÜ Steininger
159
160
161     DiffKoeff1 = [0.00038; 0.00135; 0.00082];           % [cm²/s] Messdaten aus Costa, Calleja
162     TDiffKoeff1 = 293.15;                               % [K] Messdaten aus Costa, Calleja
163     Aktenergie = [11.72; 9.5; 10];                     % [kJ/mol]
164
165     % [cm²/s] Christen, Praxiswissen der chemischen VT
166     DiffKoeff2 = DiffKoeff1.*exp(Aktenergie/(R*10^-3)*(1/TDiffKoeff1-1/T(Tvar)));
167     % [1/s] Berechnung von k aus Diff.koeff.
168     kin3 = 15*DiffKoeff2/((dp/2)*10^-1)^2;
169     % [1/s] hinzufügen von k-H2 aus Casas, Schell, Mazzotti: kH2=1
170     kin = [1; kin3];
171
172
173
174 % Initialisierung der Matrizten für den Druckaufbau
175
176 C1verd = zeros(ndeltax,1000);
177 C2verd = zeros(ndeltax,1000);
178 C3verd = zeros(ndeltax,1000);
179 C4verd = zeros(ndeltax,1000);
180
181 Q1verd = zeros(ndeltax,1000);
182 Q2verd = zeros(ndeltax,1000);
183 Q3verd = zeros(ndeltax,1000);
184 Q4verd = zeros(ndeltax,1000);
185
186
187 for durchlauf = 1:2
188
189     %Initialisierung einiger Matrizen und Vektoren
190
191     C1 = zeros(ndeltax,ndeltatads);
192     C2 = zeros(ndeltax,ndeltatads);
193     C3 = zeros(ndeltax,ndeltatads);
194     C4 = zeros(ndeltax,ndeltatads);
195
196     Q1 = zeros(ndeltax,ndeltatads);
197     Q2 = zeros(ndeltax,ndeltatads);
```

```
198     Q3 = zeros(ndeltax,ndeltatads);
199     Q4 = zeros(ndeltax,ndeltatads);
200
201     Q1des = zeros(ndeltax,1);
202     Q2des = zeros(ndeltax,1);
203     Q3des = zeros(ndeltax,1);
204     Q4des = zeros(ndeltax,1);
205
206     C1des = zeros(ndeltax,1);
207     C2des = zeros(ndeltax,1);
208     C3des = zeros(ndeltax,1);
209     C4des = zeros(ndeltax,1);
210
211     C1spuel = zeros(ndeltax,ndeltatspuel);
212     C2spuel = zeros(ndeltax,ndeltatspuel);
213     C3spuel = zeros(ndeltax,ndeltatspuel);
214     C4spuel = zeros(ndeltax,ndeltatspuel);
215
216     Q1spuel = zeros(ndeltax,ndeltatspuel);
217     Q2spuel = zeros(ndeltax,ndeltatspuel);
218     Q3spuel = zeros(ndeltax,ndeltatspuel);
219     Q4spuel = zeros(ndeltax,ndeltatspuel);
220
221     cneu = zeros(4,1);
222     calt = zeros(4,1);
223     qneu = zeros(4,1);
224     qalt = zeros(4,1);
225     q = zeros(4,1);
226     pkggw = zeros(4,1);
227     cggw = zeros(4,1);
228     deltac = zeros(4,1);
229     xweite = zeros(4,1);
230     niter=0;
231     fail=0;
232     mcount=0;
233     ortcount=0;
234
235
236     %% Berechnung des Hochdruck-Adsorptionsprozesses
237     disp('Berechnung des Hochdruck-Adsorptionsprozesses')
```

```
238
239     t = 0;
240
241     for j = 1:ndeltatads
242
243         % Zeitzähler
244         t(j) = deltat*j;
245
246
247
248         for m = 1:ndeltax
249
250
251             %Zeitschrittzähler
252             mcount=mcount+1;
253             if mcount == ndeltax
254                 ortcount=ortcount+1;
255                 fprintf('---- ZEITSCHRITTE ---- %d / %d ! \n', ortcount, ndeltatads)
256                 mcount=0;
257             end
258
259             % Bestimmung der Anfangskonzentration der Komponente k in [kPa].
260             if m == 1
261                 calt = cEinsatz;
262             elseif j == 1 && m~=1 && durchlauf == 1
263                 calt = [0;0;0;0];
264             elseif j == 1 && m~=1 && durchlauf == 2
265                 calt(1) = C1verd(m,length(tverd));
266                 calt(2) = C2verd(m,length(tverd));
267                 calt(3) = C3verd(m,length(tverd));
268                 calt(4) = C4verd(m,length(tverd));
269             else
270                 calt(1) = C1(m-1,j-1);
271                 calt(2) = C2(m-1,j-1);
272                 calt(3) = C3(m-1,j-1);
273                 calt(4) = C4(m-1,j-1);
274             end
275
276
277             if j == 1 && durchlauf == 1
```

```

278         qalt = [0;0;0;0];
279     elseif j == 1 && durchlauf == 2
280         qalt(1) = Q1verd(m,length(tverd));
281         qalt(2) = Q2verd(m,length(tverd));
282         qalt(3) = Q3verd(m,length(tverd));
283         qalt(4) = Q4verd(m,length(tverd));
284     else
285         qalt(1) = Q1(m,j-1);
286         qalt(2) = Q2(m,j-1);
287         qalt(3) = Q3(m,j-1);
288         qalt(4) = Q4(m,j-1);
289     end
290
291
292
293
294 %         Berechnung der Beladung qi in [mol m/kg solid]
295     for k = 1:nkomp
296         pkin(k) = calt(k)*R*T(Tvar)*10^-3;
297         q(k) = qm(k)*b(k)*pkin(k)/(1+sum(b.*pkin(k)));
298     end
299
300
301
302
303     % Berechnung der neuen Gaskonzentration und Beladung der
304     % Komponenten m in Abhängigkeit von der Zeit und der
305     % Position im Adsorber in [mol m/m^3 Gas]
306     for k = 1:nkomp
307         if k == 1
308
309             cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
310             qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
311
312             if cneu(k) < 0
313                 cneu(k)=0;
314                 qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
315             end
316
317

```

```
318         C1(m,j) = cneu(k);
319         Q1(m,j) = qneu(k);
320
321     elseif k == 2
322
323         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
324
325
326
327
328         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
329
330         if cneu(k) < 0
331             cneu(k)=0;
332             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
333         end
334
335         C2(m,j) = cneu(k);
336         Q2(m,j) = qneu(k);
337
338
339
340
341     elseif k == 3
342
343         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
344         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
345
346         if cneu(k) < 0
347
348             cneu(k)=0;
349             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
350         end
351
352         C3(m,j) = cneu(k);
353         Q3(m,j) = qneu(k);
354
355     else
356
357         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
```

```
358         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
359
360         if cneu(k) < 0
361             cneu(k)=0;
362             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
363         end
364         C4(m,j) = cneu(k);
365         Q4(m,j) = qneu(k);
366     end
367 end
368
369 end
370
371
372
373
374
375
376
377
378
379 end
380
381
382 % Berechnung der anfallenden Raffinatmenge in [mol gesamt]
383
384 n1Raffinat = sum(C1(ndeltax,:))*Vkontroll*epsilon*deltat;
385 n2Raffinat = sum(C2(ndeltax,:))*Vkontroll*epsilon*deltat;
386 n3Raffinat = sum(C3(ndeltax,:))*Vkontroll*epsilon*deltat;
387 n4Raffinat = sum(C4(ndeltax,:))*Vkontroll*epsilon*deltat;
388
389 nRaffinat = [n1Raffinat; n2Raffinat; n3Raffinat; n4Raffinat];
390 nRaffinatges = sum(nRaffinat);
391
392 % Abbruch des Adsorptionsprozesses wenn die schwere Komponente im
393 % Raffinatstrom einen gewissen Prozentsatz erreicht
394
395 if nRaffinatges > 1*10^-10 % um eine Division durch Null zu vermeiden
396     yRaffinat = nRaffinat/nRaffinatges;
397     unreinheit = yRaffinat(2); %Festlegen welche Komponenten als Verunreinigung gelten
```

```
398         if durchlauf == 1 && unreinheit > 0.01           % Festlegen der Toleranz im ersten Durchlauf
399             tads = j*deltat;                               % Zeit beim Abbruch = Adsorptionszeit
400             break
401         elseif durchlauf == 2 && unreinheit > 0.01       % Festlegen der Toleranz im zweiten Durchlauf
402             tads = j*deltat;
403             break
404         end
405     end
406 end
407
408     if j == ndeltatads
409         disp('Maximale Zeit bei der Adsorption überschritten')
410     end
411
412 end
413
414
415
416
417 % Berechnung der gesamten Einsatzmenge
418 nEinsatzges = ngesamt*tads;
419 nEinsatz = yEinsatz*nEinsatzges;
420
421 % Berechnung der Gaszusammensetzung im Adsorber nach der Adsorption
422 n1Gas = sum(C1(:,length(t))*Vkontroll*epsilon;
423 n2Gas = sum(C2(:,length(t))*Vkontroll*epsilon;
424 n3Gas = sum(C3(:,length(t))*Vkontroll*epsilon;
425 n4Gas = sum(C4(:,length(t))*Vkontroll*epsilon;
426
427 nGas = [n1Gas; n2Gas; n3Gas; n4Gas];
428 nGasges = sum(nGas);
429
430 yGas = nGas/nGasges;
431
432 % Berechnung der adsorbierten Mengen nach der Adsorption
433 n1Ads = sum(Q1(:,length(t))*msolid/ndeltax;
434 n2Ads = sum(Q2(:,length(t))*msolid/ndeltax;
435 n3Ads = sum(Q3(:,length(t))*msolid/ndeltax;
436 n4Ads = sum(Q4(:,length(t))*msolid/ndeltax;
437
```

```
438     nAds = [n1Ads; n2Ads; n3Ads; n4Ads];
439     nAdsGes = sum(nAds);
440
441     xAds = nAds/nAdsGes;
442
443     % Beladung
444     qAds = nAdsGes/msolid;
445
446     % Berechnung der anfallenden Raffinatmenge
447
448     if durchlauf == 1
449         nRaffinat = nEinsatz - nAds - nGas;
450     else
451         nRaffinat = nEinsatz + nGasdruck + nAdsdruck - nAds - nGas;
452     end
453
454     nRaffinatGes = sum(nRaffinat);
455
456     yRaffinat = nRaffinat/nRaffinatGes;
457
458 %     break
459
460
461     %% Berechnung des Entspannungsprozesses
462     disp('Berechnung des Entspannungsprozesses')
463
464     cneu = zeros(4,1);
465     calt = zeros(4,1);
466     qneu = zeros(4,1);
467     qalt = zeros(4,1);
468     q = zeros(4,1);
469
470     % Berechnung der neuen Gaskonzentration im Adsorber unter der Annahme,
471     % dass die Temperatur beim Entspannen konstant bleibt
472     CdesGes = Pdes*10^3/(R*T(Tvar));
473
474     for j = 1:ndeltax
475
476
477
```

```

478
479
480     %Initialisierung der Parameter calt und qalt
481
482 %     if n == 1
483         calt(1) = C1(j,length(t))*Pdes/Pads(pvar);
484         calt(2) = C2(j,length(t))*Pdes/Pads(pvar);
485         calt(3) = C3(j,length(t))*Pdes/Pads(pvar);
486         calt(4) = C4(j,length(t))*Pdes/Pads(pvar);
487
488         qalt(1) = Q1(j,length(t));
489         qalt(2) = Q2(j,length(t));
490         qalt(3) = Q3(j,length(t));
491         qalt(4) = Q4(j,length(t));
492 %     else
493 %
494 %         calt(1) = Cdesges*yn(1);
495 %         calt(2) = Cdesges*yn(2);
496 %         calt(3) = Cdesges*yn(3);
497 %         calt(4) = Cdesges*yn(4);
498 %
499 %         qalt(1) = Qldes(j);
500 %         qalt(2) = Q2des(j);
501 %         qalt(3) = Q3des(j);
502 %         qalt(4) = Q4des(j);
503 %     end
504
505 %     Berechnung der Beladung qi in [mol m/kg solid]
506     for k = 1:nkomp
507         pkin(k) = calt(k)*R*T(Tvar)*10^-3;
508         q(k) = qm(k)*b(k)*pkin(k)/(1+sum(b.*pkin(k)));
509     end
510
511 % Berechnung der neuen Gaskonzentration und Beladung der
512 % Komponenten m in Abhängigkeit von der Zeit und der
513 % Position im Adsorber in [mol m/m^3 Gas]
514     for k = 1:nkomp
515         if k == 1
516
517             cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;

```

```
518         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
519
520         if cneu(k) < 0
521             cneu(k)=0;
522             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
523         end
524
525
526         C1des(j) = cneu(k);
527         Q1des(j) = qneu(k);
528
529
530     elseif k == 2
531         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
532
533
534
535
536         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
537
538         if cneu(k) < 0
539             cneu(k)=0;
540             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
541         end
542
543         C2des(j) = cneu(k);
544         Q2des(j) = qneu(k);
545
546
547     elseif k == 3
548
549         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
550         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
551
552         if cneu(k) < 0
553
554             cneu(k)=0;
555             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
556         end
557
```

```
558             C3des(j) = cneu(k);
559             Q3des(j) = qneu(k);
560
561
562         else
563
564             cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
565             qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
566
567             if cneu(k) < 0
568
569                 cneu(k)=0;
570                 qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
571             end
572
573             C4des(j) = cneu(k);
574             Q34des(j) = qneu(k);
575
576         end
577     end
578
579
580
581     n1 = C1des(j)*Vkontroll*epsilon;
582     n2 = C2des(j)*Vkontroll*epsilon;
583     n3 = C3des(j)*Vkontroll*epsilon;
584     n4 = C4des(j)*Vkontroll*epsilon;
585
586     N = [n1; n2; n3; n4];
587     Nges = sum(N);
588
589     yn = N/Nges;
590
591
592
593
594
595 end
596
597
```

```
598 % Berechnung der Gaszusammensetzung im Adsorber nach dem Entspannen
599 n1Gasdes = sum(C1des)*Vkontroll*epsilon;
600 n2Gasdes = sum(C2des)*Vkontroll*epsilon;
601 n3Gasdes = sum(C3des)*Vkontroll*epsilon;
602 n4Gasdes = sum(C4des)*Vkontroll*epsilon;
603
604 nGasdes = [n1Gasdes; n2Gasdes; n3Gasdes; n4Gasdes];
605 nGasdesges = sum(nGasdes);
606
607 yGasdes = nGasdes/nGasdesges;
608
609 % Berechnung der adsorbierten Molmenge u Beladung nach dem Entspannen
610 n1Adsdes = sum(Q1des)*msolid/ndeltax;
611 n2Adsdes = sum(Q2des)*msolid/ndeltax;
612 n3Adsdes = sum(Q3des)*msolid/ndeltax;
613 n4Adsdes = sum(Q4des)*msolid/ndeltax;
614
615 nAdsdes = [n1Adsdes; n2Adsdes; n3Adsdes; n4Adsdes];
616 nAdsdesges = sum(nAdsdes);
617
618 xAdsentsp = nAdsdes/nAdsdesges;
619
620 qEntsp = nAdsdesges/msolid;
621
622 % Berechnung der Extraktmenge- und Zusammensetzung
623 n1Extrakt = (n1Gas + n1Ads) - (n1Gasdes + n1Adsdes);
624 n2Extrakt = (n2Gas + n2Ads) - (n2Gasdes + n2Adsdes);
625 n3Extrakt = (n3Gas + n3Ads) - (n3Gasdes + n3Adsdes);
626 n4Extrakt = (n4Gas + n4Ads) - (n4Gasdes + n4Adsdes);
627
628 nExtrakt = [n1Extrakt; n2Extrakt; n3Extrakt; n4Extrakt];
629 nExtraktges = sum(nExtrakt);
630
631 yExtrakt = nExtrakt/nExtraktges;
632
633
634
635 %% Berechnung des Spülvorgangs
636 disp('Berechnung des Spuelvorgangs')
637
```

```
638 % Es wurde Angenommen, dass die Spülgasgeschwindigkeit beliebig schnell
639 % sein kann und die Spülzeit so bestimmt nicht schneller ist als die
640 % Adsorptionszeit
641
642 cneu = zeros(4,1);
643 calt = zeros(4,1);
644 qneu = zeros(4,1);
645 qalt = zeros(4,1);
646 q = zeros(4,1);
647
648 % Als Spülgas wird entspannetes Raffinat verwendet
649 cSpuel = yRaffinat*Cdesges;
650 pSpuel = cSpuel*R*T(Tvar)*10^-3;
651
652 cRaffinatges = Pads(pvar)*10^3/(R*T(Tvar));
653 cRaffinat = cRaffinatges*yRaffinat;
654
655
656 % Initialisierung der Matrizen für die Konzentration und die Beladung für
657 % den Zeitpunkt 1
658 C1spuel(:,1) = C1des;
659 C2spuel(:,1) = C2des;
660 C3spuel(:,1) = C3des;
661 C4spuel(:,1) = C4des;
662
663 Q1spuel(:,1) = Q1des;
664 Q2spuel(:,1) = Q2des;
665 Q3spuel(:,1) = Q3des;
666 Q4spuel(:,1) = Q4des;
667
668 tspuel = 0;
669
670 if durchlauf == 1
671     zeit = round(length(t)*13);
672 else
673     zeit = round(length(t)*18);
674 end
675
676 zeitreal = zeit*deltat;
677
```

```
678     for j = 1:zeit
679
680         % Zeitzähler
681         tspuel(j) = deltat*j;
682
683         for m = 1:ndeltax
684
685             n = 1;
686
687
688
689             % Berechnung des Partialdrucks pki der Komponente m in [kPa]
690             % für das letzte Element des Adsorbers ist der Partialdruck immer
691             % gleich dem Partialdruck des Spuelgases
692
693             if m == 1
694                 calt = cSpuel;
695             else
696                 if j == 1
697                     calt(1) = C1spuel(ndeltax-m+1,j);
698                     calt(2) = C2spuel(ndeltax-m+1,j);
699                     calt(3) = C3spuel(ndeltax-m+1,j);
700                     calt(4) = C4spuel(ndeltax-m+1,j);
701                 else
702                     calt(1) = C1spuel(ndeltax-m+2,j-1);
703                     calt(2) = C2spuel(ndeltax-m+2,j-1);
704                     calt(3) = C3spuel(ndeltax-m+2,j-1);
705                     calt(4) = C4spuel(ndeltax-m+2,j-1);
706                 end
707             end
708
709             if j == 1
710                 qalt(1) = Q1spuel(ndeltax-m+1,j);
711                 qalt(2) = Q2spuel(ndeltax-m+1,j);
712                 qalt(3) = Q3spuel(ndeltax-m+1,j);
713                 qalt(4) = Q4spuel(ndeltax-m+1,j);
714             else
715                 qalt(1) = Q1spuel(ndeltax-m+1,j-1);
716                 qalt(2) = Q2spuel(ndeltax-m+1,j-1);
717                 qalt(3) = Q3spuel(ndeltax-m+1,j-1);
```

```

718             qalt(4) = Q4spuel(ndeltax-m+1,j-1);
719         end
720     %     else
721     %         calt(1) = C1spuel(ndeltax-m+1,j);
722     %         calt(2) = C2spuel(ndeltax-m+1,j);
723     %         calt(3) = C3spuel(ndeltax-m+1,j);
724     %         calt(4) = C4spuel(ndeltax-m+1,j);
725     %
726     %         qalt(1) = Q1spuel(ndeltax-m+1,j);
727     %         qalt(2) = Q2spuel(ndeltax-m+1,j);
728     %         qalt(3) = Q3spuel(ndeltax-m+1,j);
729     %         qalt(4) = Q4spuel(ndeltax-m+1,j);
730     %     end
731
732     %     Berechnung der Beladung qi in [mol m/kg solid]
733     for k = 1:nkomp
734         pkin(k) = calt(k)*R*T(Tvar)*10^-3;
735         q(k) = qm(k)*b(k)*pkin(k)/(1+sum(b.*pkin(k)));
736     end
737
738
739     % Berechnung der neuen Gaskonzentration der Komponenten m in
740     % Abhängigkeit von der Zeit und der Posititon im Adsorber in
741     % [mol m/m^3 Gas]
742     for k = 1:nkomp
743         if k == 1
744             cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
745             qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
746
747             if cneu(k) < 0
748                 cneu(k)=0;
749                 qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
750             end
751             C1spuel(ndeltax-m+1,j) = cneu(k);
752             Q1spuel(ndeltax-m+1,j) = qneu(k);
753
754         elseif k == 2
755             cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
756             qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
757

```

```
758         if cneu(k) < 0
759             cneu(k)=0;
760             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
761         end
762         C2spuel(ndeltax-m+1,j) = cneu(k);
763         Q2spuel(ndeltax-m+1,j) = qneu(k);
764
765     elseif k == 3
766         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
767         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
768
769         if cneu(k) < 0
770             cneu(k)=0;
771             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
772         end
773         C3spuel(ndeltax-m+1,j) = cneu(k);
774         Q3spuel(ndeltax-m+1,j) = qneu(k);
775
776     else
777         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
778         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
779
780         if cneu(k) < 0
781             cneu(k)=0;
782             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
783         end
784         C4spuel(ndeltax-m+1,j) = cneu(k);
785         Q4spuel(ndeltax-m+1,j) = qneu(k);
786     end
787 end
788
789
790
791     end
792
793
794 end
795
796
797
```

```
798 % Gesamte Spülgasmenge
799 nSpuelgas = cSpuel*Vkontroll*epsilon*length(tspuel)*deltat;
800 nSpuelgasges = sum(nSpuelgas);
801
802 % Berechnung der Gaszusammensetzung im Adsorber nach dem Spülen
803 n1Gasspuel = sum(C1spuel(:,length(tspuel)))*Vkontroll*epsilon;
804 n2Gasspuel = sum(C2spuel(:,length(tspuel)))*Vkontroll*epsilon;
805 n3Gasspuel = sum(C3spuel(:,length(tspuel)))*Vkontroll*epsilon;
806 n4Gasspuel = sum(C4spuel(:,length(tspuel)))*Vkontroll*epsilon;
807
808 nGasspuel = [n1Gasspuel; n2Gasspuel; n3Gasspuel; n4Gasspuel];
809 nGasspuelges = sum(nGasspuel);
810
811 yGasspuel = nGasspuel/nGasspuelges;
812
813
814
815 % Berechnung der adsorbierten Molmenge und Beladung nach dem Spülen
816 n1Adsspuel = sum(Q1spuel(:,length(tspuel)))*msolid/ndeltax;
817 n2Adsspuel = sum(Q2spuel(:,length(tspuel)))*msolid/ndeltax;
818 n3Adsspuel = sum(Q3spuel(:,length(tspuel)))*msolid/ndeltax;
819 n4Adsspuel = sum(Q4spuel(:,length(tspuel)))*msolid/ndeltax;
820
821 nAdsspuel = [n1Adsspuel; n2Adsspuel; n3Adsspuel; n4Adsspuel];
822 nAdsspuelges = sum(nAdsspuel);
823
824 xAdsspuel = nAdsspuel/nAdsspuelges;
825
826 qAdsspuel = nAdsspuelges/msolid;
827
828 % Berechnung der anfallenden Molmengen beim Spülen
829 n1Spuel = nSpuelgas(1) + n1Adsdes + n1Gasdes - (n1Gasspuel + n1Adsspuel);
830 n2Spuel = nSpuelgas(2) + n2Adsdes + n2Gasdes - (n2Gasspuel + n2Adsspuel);
831 n3Spuel = nSpuelgas(3) + n3Adsdes + n3Gasdes - (n3Gasspuel + n3Adsspuel);
832 n4Spuel = nSpuelgas(4) + n4Adsdes + n4Gasdes - (n4Gasspuel + n4Adsspuel);
833
834 nSpuel = [n1Spuel; n2Spuel; n3Spuel; n4Spuel];
835
836 % Gesamte anfallende Gasmenge
837 nSpuelges = sum(nSpuel);
```

```
838
839     ySpuel = nSpuel/nSpuelges;
840
841
842
843
844     %% Berechnung des Druckaufbaus
845     disp('Berechnung des Druckaufbaus');
846
847     C1verd(:,1) = C1spuel(:,length(tspuel));
848     C2verd(:,1) = C2spuel(:,length(tspuel));
849     C3verd(:,1) = C3spuel(:,length(tspuel));
850     C4verd(:,1) = C4spuel(:,length(tspuel));
851
852     Q1verd(:,1) = Q1spuel(:,length(tspuel));
853     Q2verd(:,1) = Q2spuel(:,length(tspuel));
854     Q3verd(:,1) = Q3spuel(:,length(tspuel));
855     Q4verd(:,1) = Q4spuel(:,length(tspuel));
856
857     zeit = 5000;                % maximale Zeit für den Druckaufbau
858     tverd = 0;
859     adsorberende = ndeltax;
860
861
862     if druckaufbau == 1          % Druckaufbau mittels Eisatzstrom
863
864         for j = 1:zeit %ndeltatspuel
865
866             % Zeitzähler
867             tverd(j) = deltat*j;
868
869             for m = 1:adsorberende
870
871
872
873
874
875                 % Berechnung des Partialdrucks pki der Komponente m in [kPa]
876                 % Im Fall für ein Verdichten mit Raffinat, ist der Partialdruck
877                 % für das letzte Element des Adsorbers immer gleich dem
```

```
878           % Partialdruck des Raffinats
879
880           if m == 1
881               calt = cEinsatz;
882           elseif m == adsorbierende
883               if j == 1
884                   calt(1) = C1verd(m,j);
885                   calt(2) = C2verd(m,j);
886                   calt(3) = C3verd(m,j);
887                   calt(4) = C4verd(m,j);
888               else
889                   calt(1) = C1verd(m-1,j-1) + C1verd(m,j-1);
890                   calt(2) = C2verd(m-1,j-1) + C2verd(m,j-1);
891                   calt(3) = C3verd(m-1,j-1) + C3verd(m,j-1);
892                   calt(4) = C4verd(m-1,j-1) + C4verd(m,j-1);
893               end
894           else
895               if j == 1
896                   calt(1) = C1verd(m,j);
897                   calt(2) = C2verd(m,j);
898                   calt(3) = C3verd(m,j);
899                   calt(4) = C4verd(m,j);
900               else
901                   calt(1) = C1verd(m-1,j-1);
902                   calt(2) = C2verd(m-1,j-1);
903                   calt(3) = C3verd(m-1,j-1);
904                   calt(4) = C4verd(m-1,j-1);
905               end
906           end
907
908           if j == 1
909               qalt(1) = Q1verd(m,j);
910               qalt(2) = Q2verd(m,j);
911               qalt(3) = Q3verd(m,j);
912               qalt(4) = Q4verd(m,j);
913           else
914               qalt(1) = Q1verd(m,j-1);
915               qalt(2) = Q2verd(m,j-1);
916               qalt(3) = Q3verd(m,j-1);
917               qalt(4) = Q4verd(m,j-1);
```

```

918         end
919 %     else
920 %         calt(1) = C1verd(m,j);
921 %         calt(2) = C2verd(m,j);
922 %         calt(3) = C3verd(m,j);
923 %         calt(4) = C4verd(m,j);
924 %
925 %         qalt(1) = Q1verd(m,j);
926 %         qalt(2) = Q2verd(m,j);
927 %         qalt(3) = Q3verd(m,j);
928 %         qalt(4) = Q4verd(m,j);
929 %     end
930
931 %     Berechnung der Beladung qi in [mol m/kg solid]
932 for k = 1:nkomp
933     pkin(k) = calt(k)*R*T(Tvar)*10^-3;
934     q(k) = qm(k)*b(k)*pkin(k)/(1+sum(b.*pkin(k)));
935 end
936
937
938 % Berechnung der neuen Gaskonzentration der Komponenten m in
939 % Abhängigkeit von der Zeit und der Posititon im Adsorber in
940 % [mol m/m^3 Gas]
941 for k = 1:nkomp
942     if k == 1
943         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
944         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
945
946         if cneu(k) < 0
947             cneu(k)=0;
948             qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
949         end
950         C1verd(m,j) = cneu(k);
951         Q1verd(m,j) = qneu(k);
952
953     elseif k == 2
954         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
955         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
956
957         if cneu(k) < 0

```

```
958         cneu(k)=0;
959         qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
960     end
961     C2verd(m,j) = cneu(k);
962     Q2verd(m,j) = qneu(k);
963
964     elseif k == 3
965     cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
966     qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
967
968     if cneu(k) < 0
969         cneu(k)=0;
970         qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
971     end
972     C3verd(m,j) = cneu(k);
973     Q3verd(m,j) = qneu(k);
974
975     else
976     cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
977     qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
978
979     if cneu(k) < 0
980         cneu(k)=0;
981         qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
982     end
983     C4verd(m,j) = cneu(k);
984     Q4verd(m,j) = qneu(k);
985     end
986 end
987
988
989
990
991 end
992
993 Cgesende = C1verd(adsorberende,length(tverd)) + C2verd(adsorberende,length(tverd))...
994           + C3verd(adsorberende,length(tverd)) + C4verd(adsorberende,length(tverd));
995
996 Pende = Cgesende*R*T(Tvar)*10^-3;
997
```

```
998         if Pende >= Pads(pvar)
999             adsorberende = adsorberende-1;
1000         end
1001
1002         for m = 1:ndeltax
1003             if C1verd(m,j) == 0 && j > 1
1004                 C1verd(m,j) = C1verd(m,j-1);
1005                 Q1verd(m,j) = Q1verd(m,j-1);
1006             end
1007             if C2verd(m,j) == 0 && j > 1
1008                 C2verd(m,j) = C2verd(m,j-1);
1009                 Q2verd(m,j) = Q2verd(m,j-1);
1010             end
1011             if C3verd(m,j) == 0 && j > 1
1012                 C3verd(m,j) = C3verd(m,j-1);
1013                 Q3verd(m,j) = Q3verd(m,j-1);
1014             end
1015             if C4verd(m,j) == 0 && j > 1
1016                 C4verd(m,j) = C4verd(m,j-1);
1017                 Q4verd(m,j) = Q4verd(m,j-1);
1018             end
1019
1020         end
1021
1022         Cverdges = mean(C1verd(:,j)) + mean(C2verd(:,j)) + mean(C3verd(:,j)) + mean(C4verd(:,j));
1023
1024         if Cverdges >= cRaffinatges
1025             Verdichterzeit = length(tverd);
1026             break
1027         end
1028
1029         if j == zeit
1030             disp('Maximale Zeit beim Verdichten überschritten')
1031         end
1032
1033     end
1034
1035
1036     % Berechnung der adsorbierten Molmenge nach dem Druckaufbau
1037     n1Adsdruck = sum(Q1verd(:,length(tverd)))*msolid/ndeltax;
```

```
1038     n2Adsdruck = sum(Q2verd(:,length(tverd)))*msolid/ndeltax;
1039     n3Adsdruck = sum(Q3verd(:,length(tverd)))*msolid/ndeltax;
1040     n4Adsdruck = sum(Q4verd(:,length(tverd)))*msolid/ndeltax;
1041
1042     nAdsdruck = [n1Adsdruck; n2Adsdruck; n3Adsdruck; n4Adsdruck];
1043     nAdsdruckges = sum(nAdsdruck);
1044
1045     % Berechnung der Gaszusammensetzung im Adsorber nach dem
1046     % Druckaufbau
1047     n1Gasdruck = sum(C1verd(:,length(tverd)))*Vkontroll*epsilon;
1048     n2Gasdruck = sum(C2verd(:,length(tverd)))*Vkontroll*epsilon;
1049     n3Gasdruck = sum(C3verd(:,length(tverd)))*Vkontroll*epsilon;
1050     n4Gasdruck = sum(C4verd(:,length(tverd)))*Vkontroll*epsilon;
1051
1052     nGasdruck = [n1Gasdruck; n2Gasdruck; n3Gasdruck; n4Gasdruck];
1053     nGasdruckges = sum(nGasdruck);
1054
1055     % Berechnung der Raffinatmenge für den Druckaufbau
1056     n1Verd = (n1Adsdruck + n1Gasdruck) - (n1Gasspuel + n1Adsspuel);
1057     n2Verd = (n2Adsdruck + n2Gasdruck) - (n2Gasspuel + n2Adsspuel);
1058     n3Verd = (n3Adsdruck + n3Gasdruck) - (n3Gasspuel + n3Adsspuel);
1059     n4Verd = (n4Adsdruck + n4Gasdruck) - (n4Gasspuel + n4Adsspuel);
1060
1061     nVerd = [n1Verd, n2Verd, n3Verd, n4Verd];
1062     nVerdges = sum(nVerd);
1063
1064     yVerd = nVerd/nVerdges;
1065
1066     % Prozentueller Anteil des Raffinats, der für Spülen und Verdichten
1067     % aufgebracht wird in [%]
1068
1069     nRaffinatverlust = (nSpuelgasges)/nRaffinatges*100;
1070
1071
1072
1073     elseif druckaufbau == 2           % Druckaufbau mittels Raffinat
1074
1075         for j = 1:zeit %ndeltatspuel
1076
1077             % Zeitzähler
```

```
1078         tverd(j) = deltat*j;
1079
1080         for m = 1:adsorberende
1081
1082
1083
1084             % Berechnung des Partialdrucks pki der Komponente m in
1085             % [kPa]
1086             % Im Fall für ein Verdichten mit Raffinat, ist der Partialdruck
1087             % für das letzte Element des Adsorbers immer gleich dem
1088             % Partialdruck des Raffinats
1089
1090             if m == 1
1091                 calt = cRaffinat;
1092             elseif m == adsorberende
1093                 if j == 1
1094                     calt(1) = C1verd(ndeltax-m+1,j);
1095                     calt(2) = C2verd(ndeltax-m+1,j);
1096                     calt(3) = C3verd(ndeltax-m+1,j);
1097                     calt(4) = C4verd(ndeltax-m+1,j);
1098                 else
1099                     calt(1) = C1verd(ndeltax-m+2,j-1) + C1verd(ndeltax-m+1,j-1);
1100                     calt(2) = C2verd(ndeltax-m+2,j-1) + C2verd(ndeltax-m+1,j-1);
1101                     calt(3) = C3verd(ndeltax-m+2,j-1) + C3verd(ndeltax-m+1,j-1);
1102                     calt(4) = C4verd(ndeltax-m+2,j-1) + C4verd(ndeltax-m+1,j-1);
1103                 end
1104             else
1105                 if j == 1
1106                     calt(1) = C1verd(ndeltax-m+1,j);
1107                     calt(2) = C2verd(ndeltax-m+1,j);
1108                     calt(3) = C3verd(ndeltax-m+1,j);
1109                     calt(4) = C4verd(ndeltax-m+1,j);
1110                 else
1111                     calt(1) = C1verd(ndeltax-m+2,j-1);
1112                     calt(2) = C2verd(ndeltax-m+2,j-1);
1113                     calt(3) = C3verd(ndeltax-m+2,j-1);
1114                     calt(4) = C4verd(ndeltax-m+2,j-1);
1115                 end
1116             end
1117         end
```

```

1118         if j == 1
1119             qalt(1) = Q1verd(ndeltax-m+1,j);
1120             qalt(2) = Q2verd(ndeltax-m+1,j);
1121             qalt(3) = Q3verd(ndeltax-m+1,j);
1122             qalt(4) = Q4verd(ndeltax-m+1,j);
1123         else
1124             qalt(1) = Q1verd(ndeltax-m+1,j-1);
1125             qalt(2) = Q2verd(ndeltax-m+1,j-1);
1126             qalt(3) = Q3verd(ndeltax-m+1,j-1);
1127             qalt(4) = Q4verd(ndeltax-m+1,j-1);
1128         end
1129     else
1130         calt(1) = C1verd(ndeltax-m+1,j);
1131         calt(2) = C2verd(ndeltax-m+1,j);
1132         calt(3) = C3verd(ndeltax-m+1,j);
1133         calt(4) = C4verd(ndeltax-m+1,j);
1134     %
1135     qalt(1) = Q1verd(ndeltax-m+1,j);
1136     qalt(2) = Q2verd(ndeltax-m+1,j);
1137     qalt(3) = Q3verd(ndeltax-m+1,j);
1138     qalt(4) = Q4verd(ndeltax-m+1,j);
1139 %
1140 %
1141 %     Berechnung der Beladung qi in [mol m/kg solid]
1142 for k = 1:nkomp
1143     pkin(k) = calt(k)*R*T(Tvar)*10^-3;
1144     q(k) = qm(k)*b(k)*pkin(k)/(1+sum(b.*pkin(k)));
1145 end
1146
1147
1148 % Berechnung der neuen Gaskonzentration der Komponenten m in
1149 % Abhängigkeit von der Zeit und der Posititon im Adsorber in
1150 % [mol m/m^3 Gas]
1151 for k = 1:nkomp
1152     if k == 1
1153         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
1154         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
1155     else
1156         if cneu(k) < 0
1157             cneu(k)=0;

```

```
1158         qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
1159     end
1160         C1verd(ndeltax-m+1,j) = cneu(k);
1161         Q1verd(ndeltax-m+1,j) = qneu(k);
1162
1163     elseif k == 2
1164         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
1165         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
1166
1167     if cneu(k) < 0
1168         cneu(k)=0;
1169         qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
1170     end
1171         C2verd(ndeltax-m+1,j) = cneu(k);
1172         Q2verd(ndeltax-m+1,j) = qneu(k);
1173
1174     elseif k == 3
1175         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
1176         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
1177
1178     if cneu(k) < 0
1179         cneu(k)=0;
1180         qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
1181     end
1182         C3verd(ndeltax-m+1,j) = cneu(k);
1183         Q3verd(ndeltax-m+1,j) = qneu(k);
1184
1185     else
1186         cneu(k) = calt(k) + (1-epsilon)/epsilon*rhos*kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
1187         qneu = qalt - kin(k)*(qalt(k)-q(k))*deltat;
1188
1189     if cneu(k) < 0
1190         cneu(k)=0;
1191         qneu= qalt + epsilon/(1-epsilon)*(1/rhos)*(calt-cneu);
1192     end
1193         C4verd(ndeltax-m+1,j) = cneu(k);
1194         Q4verd(ndeltax-m+1,j) = qneu(k);
1195     end
1196 end
1197
```

```
1198
1199
1200
1201     end
1202
1203     Cgesende = C1verd(ndeltax-adsorberende+1,length(tverd)) + ...
1204             C2verd(ndeltax-adsorberende+1,length(tverd)) + C3verd(ndeltax-adsorberende+1,length(tverd))...
1205             + C4verd(ndeltax-adsorberende+1,length(tverd));
1206
1207     Pende = Cgesende*R*T(Tvar)*10^-3;
1208
1209     if Pende >= Pads(pvar)
1210         adsorberende = adsorberende-1;
1211     end
1212
1213     for m = 1:ndeltax
1214         if C1verd(m,j) == 0 && j > 1
1215             C1verd(m,j) = C1verd(m,j-1);
1216             Q1verd(m,j) = Q1verd(m,j-1);
1217         end
1218         if C2verd(m,j) == 0 && j > 1
1219             C2verd(m,j) = C2verd(m,j-1);
1220             Q2verd(m,j) = Q2verd(m,j-1);
1221         end
1222         if C3verd(m,j) == 0 && j > 1
1223             C3verd(m,j) = C3verd(m,j-1);
1224             Q3verd(m,j) = Q3verd(m,j-1);
1225         end
1226         if C4verd(m,j) == 0 && j > 1
1227             C4verd(m,j) = C4verd(m,j-1);
1228             Q4verd(m,j) = Q4verd(m,j-1);
1229         end
1230     end
1231 end
1232
1233 Cverdges = mean(C1verd(:,j)) + mean(C2verd(:,j)) + mean(C3verd(:,j)) + mean(C4verd(:,j));
1234
1235 if Cverdges >= cRaffinatges
1236     Verdichterzeit = length(tverd);
1237     break
```

```
1238         end
1239
1240         if j == zeit
1241             disp('Maximale Zeit beim Verdichten überschritten')
1242         end
1243
1244     end
1245
1246
1247     % Berechnung der Beladung nach dem Druckaufbau
1248     n1Adsdruck = sum(Q1verd(:,length(tverd)))*msolid/ndeltax;
1249     n2Adsdruck = sum(Q2verd(:,length(tverd)))*msolid/ndeltax;
1250     n3Adsdruck = sum(Q3verd(:,length(tverd)))*msolid/ndeltax;
1251     n4Adsdruck = sum(Q4verd(:,length(tverd)))*msolid/ndeltax;
1252
1253     nAdsdruck = [n1Adsdruck; n2Adsdruck; n3Adsdruck; n4Adsdruck];
1254
1255     nAdsdruckges = sum(nAdsdruck);
1256
1257     % Berechnung der Gaszusammensetzung im Adsorber nach Druckaufbau
1258     n1Gasdruck = sum(C1verd(:,length(tverd)))*Vkontroll*epsilon;
1259     n2Gasdruck = sum(C2verd(:,length(tverd)))*Vkontroll*epsilon;
1260     n3Gasdruck = sum(C3verd(:,length(tverd)))*Vkontroll*epsilon;
1261     n4Gasdruck = sum(C4verd(:,length(tverd)))*Vkontroll*epsilon;
1262
1263     nGasdruck = [n1Gasdruck; n2Gasdruck; n3Gasdruck; n4Gasdruck];
1264     nGasdruckges = sum(nGasdruck);
1265
1266     % Berechnung der Raffinatmenge für den Druckaufbau
1267     n1Verd = (n1Adsdruck + n1Gasdruck) - (n1Gasspuel + n1Adsspuel);
1268     n2Verd = (n2Adsdruck + n2Gasdruck) - (n2Gasspuel + n2Adsspuel);
1269     n3Verd = (n3Adsdruck + n3Gasdruck) - (n3Gasspuel + n3Adsspuel);
1270     n4Verd = (n4Adsdruck + n4Gasdruck) - (n4Gasspuel + n4Adsspuel);
1271
1272     nVerd = [n1Verd, n2Verd, n3Verd, n4Verd];
1273     nVerdges = sum(nVerd);
1274
1275     yVerd = nVerd/nVerdges;
1276
1277     % Prozentueller Anteil des Raffinats, der für Spülen und Verdichten
```

```
1278         % aufgebracht wird in [%]
1279         nRaffinatverlust = (nSpuelgasges + nVerdges)/nRaffinatges*100;
1280
1281     end
1282
1283
1284
1285     %% Erstellen der Grafiken
1286
1287 % siehe Konstruktionsübung Jöbstl [8]
1288
1289
1290     %% Ausgabe einiger Prozessgrößen
1291
1292 % siehe Konstruktionsübung Jöbstl [8]
1293
1294
1295 %% Aufbereitung der Ergebnisse, um das Einlesen in ein Excelfile zu ermöglichen
1296
1297 Einsatzmol=nEinsatzges/tads;
1298 Raffinatmol=nRaffinatges/tads;
1299 Extraktmol=nExtraktges/tads;
1300 Raffinatreal=nRaffinatges-nSpuelgasges-nVerdges;
1301 %Raffinatreal=nEinsatzges-nSpuelgasges-nExtraktges;
1302 Raffinatrealmol=Raffinatreal/tads;
1303
1304 % ergEinsatz(pvar,Tvar) = nEinsatzges;
1305 % ergEinsatzmol(pvar,Tvar) = Einsatzmol;
1306 % ergRaffinat(pvar,Tvar) = nRaffinatges;
1307 % ergRaffinatmol(pvar,Tvar) = Raffinatmol;
1308 % ergRaffinatreal(pvar,Tvar) = Raffinatreal;
1309 % ergRaffinatrealmol(pvar,Tvar) = Raffinatrealmol;
1310 % ergExtrakt = nExtraktges;
1311 % ergExtraktmol(pvar,Tvar) = Extraktmol;
1312 % ergAdsges(pvar,Tvar)=nAdsges;
1313 % ergSpuelgasges(pvar,Tvar)=nSpuelgasges;
1314 % ergVerdges(pvar,Tvar)=nVerdges;
1315 %
1316 % ergGasgeschw(pvar,Tvar) = vgas;
1317 % ergLeergeschw(pvar,Tvar) = vs;
```

```
1318 % ergDurchmesser(pvar,Tvar) = d;
1319 % ergAdsmasse(pvar,Tvar) = msolid;
1320 % ergAdsdauer(pvar,Tvar) = tads;
1321 %
1322 % ergVeinsatz(pvar,Tvar)=Veinsatz;
1323 % ergVeinsatznorm(pvar,Tvar)=Veinsatznorm;
1324 %
1325 % ergyEinsatz=yEinsatz*100;
1326 %
1327 % ergyExtraktH2(pvar,Tvar) = yExtrakt(1)*100;
1328 % ergyExtraktCH4(pvar,Tvar) = yExtrakt(2)*100;
1329 % ergyExtraktC2H6(pvar,Tvar) = yExtrakt(3)*100;
1330 % ergyExtraktC2H4(pvar,Tvar) = yExtrakt(4)*100;
1331 %
1332 % ergyRaffinatH2(pvar,Tvar) = yRaffinat(1)*100;
1333 % ergyRaffinatCH4(pvar,Tvar) = yRaffinat(2)*100;
1334 % ergyRaffinatC2H6(pvar,Tvar) = yRaffinat(3)*100;
1335 % ergyRaffinatC2H4(pvar,Tvar) = yRaffinat(4)*100;
1336
1337
1338 end
1339 end
1340 end
1341
1342 %Berechnung der Recoveries
1343
1344 rec_h2_raff = Raffinatreal * yRaffinat(1) / nEinsatz(1); %Recovery H2 im Raffinatstrom
1345 rec_ch4_raff = Raffinatreal * yRaffinat(2) / nEinsatz(2); %Recovery CH4 im Raffinatstrom
1346 rec_h2_spuel = nSpuelges * ySpuel(1) / nEinsatz(1); %Recovery H2 im Spülstrom
1347 rec_ch4_spuel = nSpuelges * ySpuel(2) / nEinsatz(2); %Recovery CH4 im Spülstrom
1348 rec_h2_extrakt = nExtraktges * yExtrakt(1) / nEinsatz(1); %Recovery H2 im Extraktstrom
1349 rec_ch4_extrakt = nExtraktges * yExtrakt(2) / nEinsatz(2); %Recovery CH4 im Extraktstrom
1350
1351 %Berechnung des Bilanzfehlers
1352 verlust_h2 = Raffinatreal * yRaffinat(1)+ nSpuelges * ySpuel(1)+ nExtraktges...
1353 * yExtrakt(1) - nEinsatz(1);
1354 verlust_ch4 = Raffinatreal * yRaffinat(2)+ nSpuelges * ySpuel(2)+ nExtraktges * yExtrakt(2)...
1355 - nEinsatz(2);
1356
1357 %Recovery der Komponenten des Bilanzfehlers
```

```
1358 rec_verl_h2 = verlust_h2 / nEinsatz(1);
1359 rec_verl_ch4 = verlust_ch4 / nEinsatz(2);
1360
1361 %Übergabe der Recoveries an Petro-SIM(R)
1362 splits.Cell('B2').CellValue = rec_h2_raff;
1363 splits.Cell('B3').CellValue = rec_ch4_raff;
1364 splits.Cell('B5').CellValue = rec_h2_spuel;
1365 splits.Cell('B6').CellValue = rec_ch4_spuel;
1366 splits.Cell('B8').CellValue = rec_h2_extrakt;
1367 splits.Cell('B9').CellValue = rec_ch4_extrakt;
1368 splits.Cell('B11').CellValue = rec_verl_h2;
1369 splits.Cell('B12').CellValue = rec_verl_ch4;
1370
1371 release(PetroSIM);
```