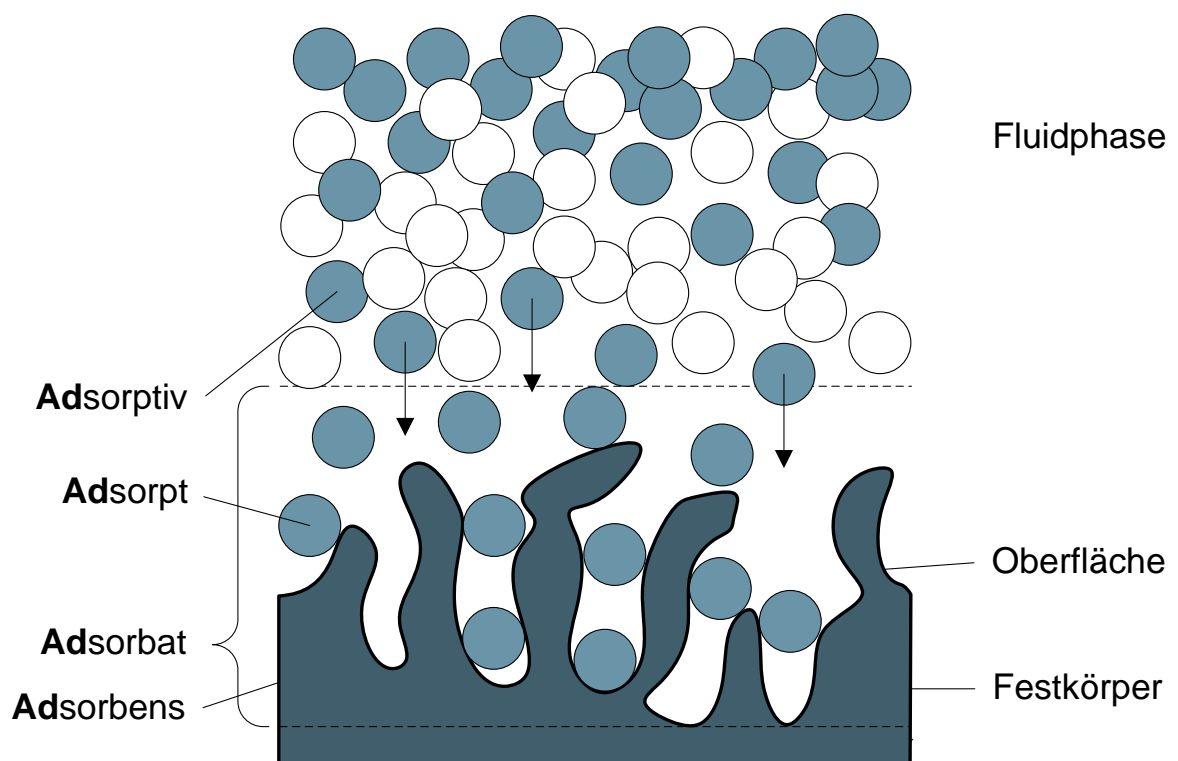




Leitfaden zur systematischen Auslegung technischer Adsorptionsprozesse aus der Gasphase





Datum: 31.03.2021

Ort: Bern

Subventionsgeberin:

Bundesamt für Energie BFE
Sektion Energieforschung und Cleantech
CH-3003 Bern
www.bfe.admin.ch

Subventionsempfängerin:

Hochschule Luzern
Technikumstrasse 21
6048 Horw
www.hslu.ch

Autor/in:

Reto Tamburini, HSLU, reto.tamburini@hslu.ch
Mirko Kleingries, HSLU, mirko.kleingries@hslu.ch
Ulf Christian Müller, HSLU, ulfchristian.mueller@hslu.ch

BFE-Projektbegleitung:

Carina Alles, carina.alles@bfe.admin.ch

Für den Inhalt und die Schlussfolgerungen sind ausschliesslich die Autoren dieses Berichts verantwortlich.



Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	3
Einleitung	4
Motivation des Leitfadens	4
Zielgruppe des Leitfadens	4
Allgemeine Informationen zum Leitfaden	4
Begleitender Anwendungsfall	6
Leitfaden	7
I. Aufgabenstellung	8
II. Ist-Analyse	9
III. Zielfunktionen	10
IV. Sorbensauswahl	12
V. Prozessdefinition	14
VI. Modellerstellung	15
VII. Modellvalidierung	16
VIII. Sensitivitätsanalyse	17
IX. Optimierung	19
X. Feinauslegung	21
Literaturverzeichnis	22



Einleitung

Motivation des Leitfadens

Sorptionsprozesse zeichnen sich, insbesondere wegen der simultanen Wärme- und Stoffübertragung, durch einen hohen Komplexitätsgrad aus. Dies hat zur Folge, dass bei der Auslegung von Sorptionsprozessen vielfach nicht das Optimum sämtlicher Parameter ermittelt werden kann, sondern nur Teilaspekte der Sorptionsprozesse optimiert werden. Im einfachsten Falle werden auf der Grundlage von Erfahrungen mit ähnlichen Prozessen anderen Massstabs, Scale up-/down bzw. Number up-/down Methoden angewendet. Diesem Umstand ist geschuldet, dass vielfach grosse Potenziale für Energieeinsparungen vorliegen, sie jedoch nicht bekannt sind und auch unklar wäre, wie diese Potenziale erschlossen werden könnten. Im BFE-Projekt «Empfehlungen zum Energieeffizienten Einsatz von Sorptionsprozessen – EESP» ist für zwei industrielle Sorptionsprozesse eine energetisch-ökonomische Untersuchung durchgeführt worden. Dabei kam ein von der Hochschule Luzern entwickeltes Softwaretool zum Einsatz. Dieses Tool ist innerhalb des umfangreichen BFE-Projektes SYSKON entwickelt worden. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse für die optimierte Auslegung von Sorptionsprozessen sind in diesem Leitfaden in verallgemeinerter Form abgefasst.

Zielgruppe des Leitfadens

Dieser Leitfaden richtet sich an Chemie- und Verfahreningenieure*innen aus der Praxis, welche sich mit der Auslegung und Integration von Gasphasen-Sorptionsprozessen befassen. Dabei sind keine besonderen Detailkenntnisse der einzelnen Teilprozesse nötig. Die Flughöhe des Leitfadens befindet sich ungefähr auf der Höhe von Energiebilanzierungen und Kostenberechnungen. Kenntnisse des Lösen von Differenzialgleichungen oder der Beschreibung/Anwendung komplexer thermodynamischer Vorgänge und Zusammenhänge wie Diffusionsmechanismen, simultane Wärme- und Stoffübertragung usw. sind nicht notwendig, können aber vorteilhaft sein. Der Leitfaden unterstützt Mitarbeiter*innen und Entscheidungsträger*innen von Industrieunternehmen und Ingenieurbüros in der systematischen Auslegung von Sorptionsprozessen.

Allgemeine Informationen zum Leitfaden

Für den Leitfaden wird das weite Feld industrieller Adsorptionsprozesse aus der Gasphase in zwei Grundtypen unterteilt:

- Grundtyp mit Ziel der **Gasreinigung**
- Grundtyp mit Ziel der **Produktgewinnung**

Diese Aufteilung erfolgt einerseits aufgrund der unterschiedlichen Zielfunktionen und andererseits, weil die Prozessparameter mit Spielraum stark vom Grundtyp der Sorptionsaufgabe abhängen. Kernkomponente des begleitenden Anwendungsfalls ist ein Rotoradsorber, der für die Reinigung eines mit Duftstoffen kontaminierten Abluftstromes zum Einsatz kommt (nähere Erläuterungen finden sich im nächsten Kapitel). Dieser wird folglich zum ersten Grundtyp der Gasreinigung gezählt. Hierfür wurden beispielhaft die folgenden drei Zielfunktionen definiert:

- energetischer Trennwirkungsgrad der Anlage für eine bestimmte Systemgrenze
- spezifischer Energiebedarf der Anlage für eine bestimmte Systemgrenze in kWh/t_{Produkt}
- spezifische Gestehungskosten für eine Betriebsdauer von 30 Jahren in CHF/t_{Produkt}



Das Produkt dieser Trennaufgabe besteht hierbei in der Masse der über eine bestimmte Betriebsdauer gereinigten Abluft.

Um die praktische Anwendbarkeit des Leitfadens sicherzustellen, ist das schrittweise Vorgehen an einem Anwendungsfall aus der Industrie beispielhaft dargestellt. Die mathematisch-physikalische Modellierung des Anwendungsfalls war Bestandteil des Projektes *SYSKON* [1]. Die energetische Optimierung wurde anschliessend im Projekt *EESP* [2] durchgeführt.

Für nähere Informationen zu den Modellierungsvorgängen wird auf den Schlussbericht [1] bzw. die Meilensteinberichte [3], [4] des Projektes *SYSKON* verwiesen. Für eine allfällige Implementierung eines industriellen Prozesses mithilfe der genannten Software können die Kompetenzzentren Thermische Energiesysteme und Verfahrenstechnik ([CC TEVT](#)) sowie Fluidmechanik und Hydromaschinen ([CC FMHM](#)) der Hochschule Luzern kontaktiert werden.



Begleitender Anwendungsfall

Der begleitende Anwendungsfall ist eine Anlage zur Reinigung der Abluft von Prozessen und Gebäuden in einer Industrieanlage, welche Duftstoffe herstellt. Dazu wird ein Sorptionsrotor, wie in Abbildung 1 dargestellt, verwendet. Der Sorptionsrotor enthält eine wabenförmige Struktur, auf der ein Adsorbens aufgetragen ist. Der Sorptionsrotor wird mit der beladenen Abluft (Punkt 1) des Industrieprozesses in seinem Adsorptionsteil durchströmt. Der Sorptionsrotor wird kontinuierlich von Desorptionsluft (Punkt 4) sowie Kühlluft (Punkt 5) durchströmt. Aus Geheimhaltungsgründen können an dieser Stelle keine vollständigen Angaben gemacht werden.

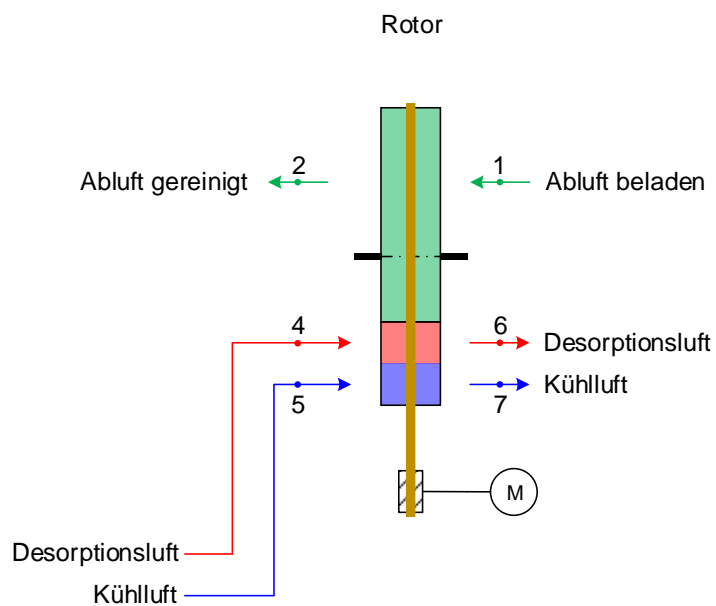


Abbildung 1: Übersicht der Abluftreinigungsanlage mit Sorptionsrotor



Leitfaden

Abbildung 2 zeigt vereinfacht das systematische Vorgehen zur Auslegung eines technischen Adsorptionsprozesses aus der Gasphase. Die einzelnen Teilschritte sind in den folgenden Kapiteln detailliert beschrieben. Es werden jeweils pro Teilschritt die Ziele und das Vorgehen erläutert. Anschliessend wird das Vorgehen innerhalb des Schrittes anhand des begleitenden Anwendungsfalles vorgeführt. Nummeriert in runden Klammern findet sich am Schluss jedes Kapitels eine Auflistung hilfreicher Literaturstellen zum entsprechenden Teilschritt. Allgemeine Literaturstellen sind mit eckigen Klammern gekennzeichnet und im Literaturverzeichnis am Ende des Dokuments aufgelistet.

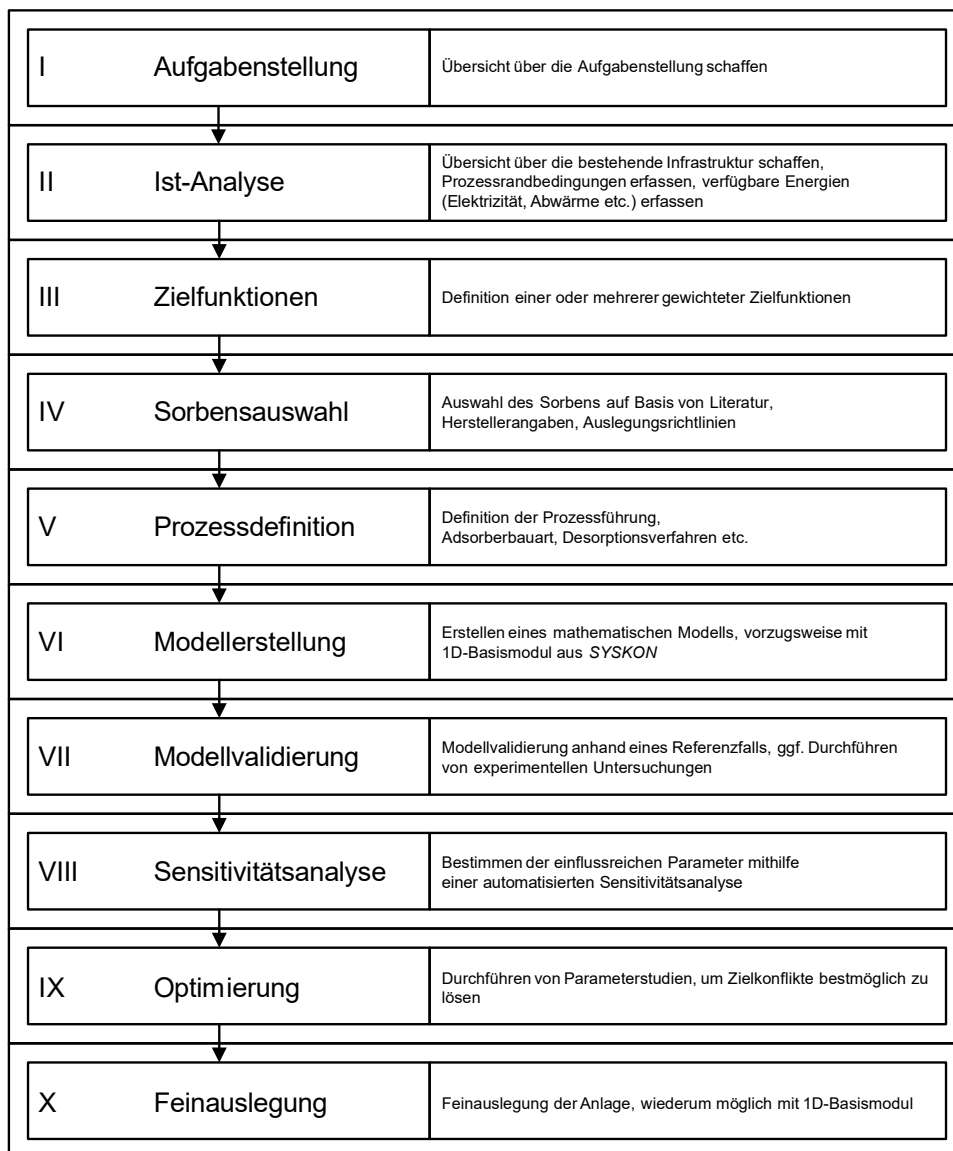


Abbildung 2: Systematisches Vorgehen zur Auslegung von technischen Adsorptionsprozessen aus der Gasphase



I. Aufgabenstellung

Ziele dieses Teilschritts:

- **Kenntnis der genauen Aufgabenstellung**

Vorgehen:

Der erste Schritt einer systematischen Auslegung technischer Adsorptionsprozesse aus der Gasphase besteht darin, die Aufgabenstellung zu erfassen. Dabei können beispielsweise folgende Fragen gestellt und beantwortet werden:

- Welchem **übergeordneten Grundtyp** wird der Prozess zugeordnet?
- Was ist die **Kernaufgabe des Prozesses**?

Vorgehen am begleitenden Anwendungsfall:

Der begleitende Anwendungsfall wird dem Grundtyp Gasreinigung zugeordnet. Die Kernaufgabe des Prozesses besteht darin, mit Duftstoffen kontaminierte Abluft zu reinigen.

Nützliche Literatur:

- (1) D. Bathen, M. Breitbach: *Adsorptionstechnik*, Springer Berlin Heidelberg, 2001
- (2) D. Bathen: *Gasphasen-Adsorption in der Umwelttechnik – Stand der Technik und Perspektiven*, Chemie Ingenieur Technik, 2002
- (3) A. Schönbacher: *Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstung und Prozesse*, Springer Berlin Heidelberg, 2002



II. Ist-Analyse

Ziele dieses Teilschritts:

- Übersicht der bestehenden Infrastruktur (Anlage, Komponenten etc.)
- Kenntnis sämtlicher relevanter Prozessparameter und Randbedingungen
- Auflistung der zur Verfügung stehenden Energien

Vorgehen:

In diesem Prozessschritt werden zunächst sämtliche verfügbaren Prozessdaten, Pläne, und Schemata der bestehenden Infrastruktur zusammengetragen. Ein besonderes Augenmerk sollte dabei auf **Temperaturniveaus, Gasvolumenströme, Drücke** und **Umgebungsbedingungen** geworfen werden. Ebenfalls werden die Zusammensetzungen der Gase erfasst. Dabei können eines oder mehrere Adsorptive unterschiedlicher Konzentrationen auftreten.

Als nächstes werden in diesem Schritt **wichtige Parameter der Prozessführung** erfasst. Dazu zählen beispielsweise zeitabhängige Veränderungen von Randbedingungen: z. B. wie konstant ist die Adsorptivkonzentration über eine bestimmte Zeitdauer, ist die zur Verfügung stehende Abwärme Schwankungen unterworfen etc. Weiter zählt dazu auch die **Geometrie** einer bestehenden Anlage mit dem für den Sorptionsprozess zur Verfügung stehenden Platz. Wird eine Anlage komplett neu gebaut, können die Geometrien später einer breiteren Parameterstudie zugeführt und so u. U. eine energetisch effizientere Anlage realisiert werden.

Weiter werden die **zur Verfügung stehenden Energien** aufgelistet. Dies können z. B. sein: **Wärmeenergie (in Form von Abwärme, Prozessdampf etc.), elektrische Energie usw.**

Vorgehen am begleitenden Anwendungsfall:

Für den Anwendungsfall wurden die folgenden Randbedingungen ermittelt (Diese sind hier vereinfacht, eine detaillierte Auflistung befindet sich im SYSKON-Schlussbericht [1]):

- Adsorptivkonzentration in Abluft: 5 vppm
- Ablufttemperatur: 25°C
- Abluftvolumenstrom: 50'000 m³/h
- Druck Abluft: 1 bar(a)
- Umgebungstemperatur/Umgebungsdruck: 1 bar / 20°C

Parameter der Prozessführung und Geometrie:

- Adsorptivkonzentration und Abluftvolumenstrom können als konstant angenommen werden
- Es steht keine Abwärme zur Verfügung
- Die Abluftreinigungsanlage soll auf dem Dach eines Industriegebäudes installiert werden

Nützliche Literatur:

- (4) D. Bathen, M. Breitbach: *Adsorptionstechnik*, Springer Berlin Heidelberg, 2001
- (5) D. Bathen: *Gasphasen-Adsorption in der Umwelttechnik – Stand der Technik und Perspektiven*, Chemie Ingenieur Technik, 2002
- (6) A. Schönbacher: *Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstung und Prozesse*, Springer Berlin Heidelberg, 2002
- (7) C. Thien: *Adsorption Calculations and Modeling*, Butterworth-Heinemann, 1994
- (8) US Army Corps of Engineers: *Adsorption Design Guide*, 2001
- (9) VDI – Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen: *VDI-Wärmeatlas*, Springer Vieweg, 2013



III. Zielfunktionen

Ziele dieses Teilschritts:

- Definition einer oder mehrerer gewichteter Zielfunktionen
- Kenntnis zur Bestimmung dieser Zielfunktionen anhand Systemgrenze

Vorgehen:

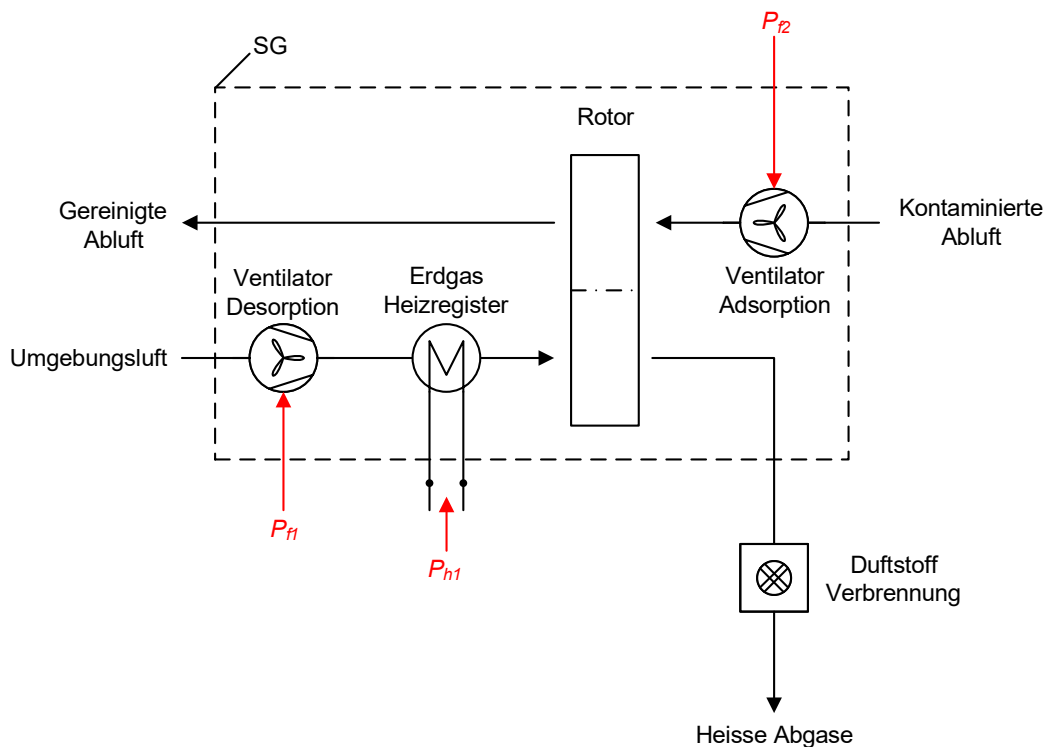
In diesem Prozessschritt werden **eine oder mehrere gewichtete Zielfunktionen** definiert. Gegenüber der Definition dieser Zielfunktionen sollte eine unvoreingenommene Haltung eingenommen werden. Es ist u. U. nicht sinnvoll, sich auf nur eine Zielfunktion festzulegen. **Nebst ökonomischen Betrachtungen sind unbedingt energetische Betrachtungen anzustellen.** Demnach sind auch energetische Zielfunktionen zu definieren. **Ein konkurrierender Zusammenhang zwischen ökonomischen und ökologischen Zielfunktionen ist nicht per se gegeben!** Die wirklichen Zusammenhänge zwischen ökonomischen und ökologischen Zielfunktionen unterliegen vielfach komplexen physikalischen Gegebenheiten und können nur durch eine systematische Auslegung mit einer Prozesssimulation mit anschliessender Sensitivitätsanalyse und Parameterstudie ermittelt werden.

Weiter werden in diesem Teilschritt die **Berechnungsgrundlagen der Zielfunktionen in Form von Gleichungen** zusammengetragen.

Vorgehen am begleitenden Anwendungsfall:

Für den begleitenden Anwendungsfall wurden die folgenden drei Zielfunktionen gemäss der Systemgrenze in der untenstehenden Abbildung definiert:

- energetischer Trennwirkungsgrad der Anlage
- spezifischer Energiebedarf der Anlage in kWh/t_{Produkt}
- spezifische Gestehungskosten für eine Betriebsdauer von 30 Jahren in CHF/t_{Produkt}





Eine Auflistung und Herleitung zur Berechnung dieser drei Zielfunktionen befindet sich im Schlussbericht des Projektes *EESP* [2].

Nützliche Literatur:

- (1) R. Smith: *Chemical Process Design and Integration*, Wiley, 2016
- (2) D. Bathen, M. Breitbach: *Adsorptionstechnik*, Springer Berlin Heidelberg, 2001
- (3) A. Schönbacher: *Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstung und Prozesse*, Springer Berlin Heidelberg, 2002



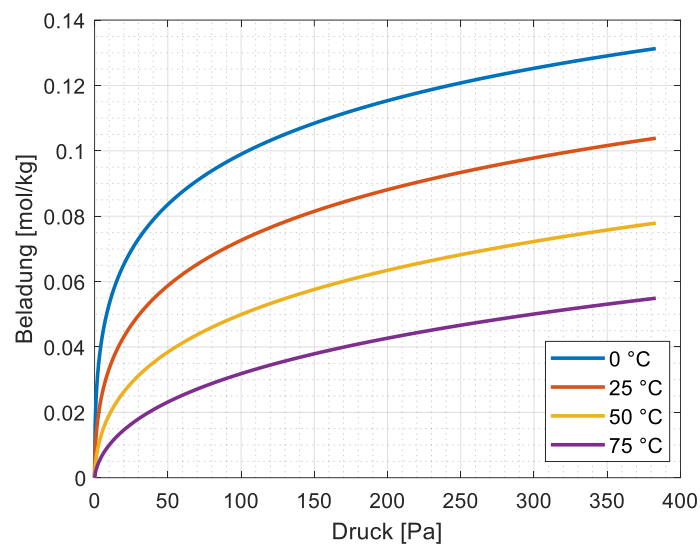
IV. Sorbensauswahl

Ziele dieses Teilschritts:	
<ul style="list-style-type: none"> ➤ Auswahl eines für die entsprechende Sorptionsaufgabe geeigneten Sorbens ➤ Vollständige Beschreibung der Gleichgewichts- und Kinetikdaten für sämtliche Adsorbens-Adsorptivpaarungen 	
Vorgehen:	
<p>In diesem Schritt erfolgt die Auswahl eines für die entsprechende Sorptionsaufgabe geeigneten Sorbens. Hierbei kann anhand der Publikation von K.S. Knaebel (1) vorgegangen werden. Die untenstehende Tabelle soll als Gedankenstütze für die Sorbensauswahl dienen. Es kann u. U. sein, dass dieser Prozessschritt im Laufe der Auslegung mehrere Iterationen durchlaufen muss. Erfüllt das ausgewählte Sorbens die Zielfunktion(en) nicht ausreichend gut, müssen ggf. ein alternatives Sorbens ausgewählt und die nachfolgenden Auslegungsschritte erneut durchgeführt werden.</p> <p>Zur Sorbensauswahl gehört ebenfalls das Zusammentragen von Daten zur Beschreibung der Gleichgewichtsbeladung der Sorbens-Sorptiv-Paarungen, sowie Daten zur Kinetik. Diese Daten entstammen vorzugsweise Herstellerangaben. Alternativ kann auch auf Literatur zurückgegriffen werden. Die Genauigkeit dieser Daten ist jedoch von elementarer Wichtigkeit! Sind diese Daten nicht bekannt, besitzen verschiedene Institutionen, mit dem dynamischen Sorptionsanalysator MixSorb® L auch die Hochschule Luzern, über die nötige Infrastruktur zur Bestimmung von Gleichgewichts- und Kinetikdaten. Als letzte alternative Möglichkeit wird hier die Isothermen-Extrapolation erwähnt. Auf der Basis von beispielsweise Gruppenbeitragsmethoden kann eine Isotherme für eine bestimmte Sorbens-Sorptiv-Paarung aus einer anderen Sorbens-Sorptiv-Paarung extrapoliert werden. Voraussetzung ist hierbei jedoch, dass sich das Sorbens der beiden Stoffpaarungen nicht unterscheidet. Aufgrund der eher geringen Vorhersagbarkeit wird von dieser Methode jedoch abgeraten. Anschliessend werden die Isothermen vorzugsweise mithilfe physikalischer Isothermenmodelle (Dubinin-Astakhov) modelliert.</p>	
Sorbens	Anwendungsfeld Gasphase
<i>Kohlenstoffhaltige Adsorbentien</i>	
Aktivkohle	Abluftreinigung Adsorption von VOCs
Aktivkoks	Dioxin- / Furan-Adsorption SO _x -NO _x -Abscheidung
Kohlenstoff-Molekularsiebe	Adsorption polarer Stoffe Luftzerlegung
<i>Oxidische Adsorbentien</i>	
Zeolithe	Gastrocknung Abluftreinigung Kohlenwasserstofftrennung Luftzerlegung Adsorption von VOCs
Kieselgel/Silicagel	Gastrocknung Geruchsminderung Adsorption von VOCs
Tonminerale	Autoabgasreinigung Gasentschwefelung
Aktivtonerde	Abluftreinigung Gastrocknung, -reinigung
<i>Polymeradsorbentien</i>	
Polysterole, Polyacrylester	Lösemittelrückgewinnung Abluftreinigung



Vorgehen am begleitenden Anwendungsfall:

Für den begleitenden Anwendungsfall eines Gasreinigungsprozesses wurde Aktivkohle als Sorbens ausgewählt. Das Adsorptiv ist hierbei Furfurylmercaptan mit der Summenformel C_5H_6OS . Vom Industriepartner wurden Isothermen von Dimethylsulfid C_2H_6S auf Aktivkohle zur Verfügung gestellt, diese dienen als Basis für eine Abschätzung der Isothermen von Furfurylmercaptan über eine Extrapolation. Anschließend wurde die zuvor genannte Isothermenextrapolation durchgeführt, um die Isothermen von Furfurylmercaptan zu erhalten. Danach erfolgte ein Fitting mit einem physikalischen Isothermenmodell nach Dubinin-Astakhov. In der untenstehenden Grafik sind die extrapolierten Isothermendaten für Dimethylsulfid auf der genannten Aktivkohle dargestellt.



Nützliche Literatur:

- (1) K.S. Knaebel: *Adsorbent Selection*, Adsorption Research Inc. Dublin Ohio, 2004
- (2) VDI – Verein Deutscher Ingenieure: *VDI 3674:2013-04, Abgasreinigung durch Adsorption - Prozessgas- und Abgasreinigung*, Beuth Verlag, 2016
- (3) T. Mayer: *Über die Aufbereitung biogener Gase mittels Adsorption*, TU Wien, 2012
- (4) A. Hauer: *Beurteilung fester Adsorbentien in offenen Sorptionssystemen für energetische Anwendungen*, TU Berlin, 2002



V. Prozessdefinition

Ziele dieses Teilschritts:

- Festlegung der Adsorptions-Prozessführung
- Festlegung der Desorptions-Prozessführung

Vorgehen:

Eng verknüpft mit der Sorbensauswahl sind Überlegungen zur Prozessführung und der Bauart der Sorptionseinrichtung. Prozessführung und Bauart sollten dabei kombiniert betrachtet werden, da in der Regel eine starke Wechselwirkung zwischen diesen beiden Aspekten vorliegt. Eine gute Beschreibung zur Vorgehensweise befindet sich im ersten Eintrag der Literaturempfehlungen unten. Für die Desorptions-Prozessführung stehen unterschiedliche Verfahren zur Verfügung, z. B. TSA oder PSA. Je nach Anwendungsfall und der zur Verfügung stehenden Energien wird dabei eine Auswahl getroffen. Dabei kann die folgende Tabelle als Entscheidungsgrundlage dienen:

Bedingungen	TSA	PSA
Der Feed ist eine Flüssigkeit, die bei weniger als 200°C verdampft werden kann.	Möglich	Möglich
Der Feed ist eine Flüssigkeit, die bei weniger als 200°C nicht vollständig verdampft werden kann.	Unwahrscheinlich	Nein
Die Adsorptivkonzentration im Feed beträgt weniger als 3 %.	Ja	Ja
Die Adsorptivkonzentration im Feed liegt zwischen 3 und 10 %.	Ja	Ja
Die Adsorptivkonzentration im Feed liegt über 10 %.	Möglich	Ja
Das Adsorptiv muss mit hoher Reinheit zurückgewonnen werden: mehr als 90 % Entfernung des Trägergasstroms.	Ja	Ja
Adsorptiv kann nur durch thermische Regenerierung desorbiert werden.	Ja	Nein
Praktische (günstige, nicht korrosive und ungiftige) Verdrängungs- oder Spülmittel lassen sich nicht leicht vom Adsorptiv trennen.	Möglich	Möglich

Vorgehen am begleitenden Anwendungsfall:

Für den begleitenden Anwendungsfall wurde ein Adsorber in Form eines Sorptionsrotors ausgewählt. Das Adsorptiv Dimethylsulfid hat einen Siedepunkt von 37°C, kann also unter 200°C vollständig verdampft werden. Zudem beträgt die Adsorptivkonzentration im Feed weniger als 3%. Zusammen mit der Bauart des Sorptionsrotors bietet sich eine Temperaturwechseldesorption (TSA) an.

Nützliche Literatur:

- (1) K.S. Knaebel: *A «How To» Guide for Adsorber Design*, Adsorption Research Inc. Dublin Ohio, 2002
- (2) United States environmental protection agency: *Choosing an Adsorption System for VOC: Carbon, Zeolite, or Polymers*, Triangle Park, 1999
- (3) D. Bathen, M. Breitbach: *Adsorptionstechnik*, Springer Berlin Heidelberg, 2001
- (4) A. Schönbücher: *Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstung und Prozesse*, Springer Berlin Heidelberg, 2002



VI. Modellerstellung

Ziele dieses Teilschritts:

- Mathematisch-physikalisches Modell des Adsorptionsprozesses, vorzugsweise auf Basis des SYSKON 1D-Basismoduls

Vorgehen:

Dieser Prozessschritt bildet den Kern für sämtliche nachfolgenden Untersuchungen. **Der Modellerstellung ist, aufgrund ihrer enormen Wichtigkeit, grösstmögliche Beachtung zu schenken.** Die Genauigkeit, Reproduzierbarkeit und Aussagekraft des Modells hängen dabei im Wesentlichen von den zuvor ermittelten Gleichgewichts- und Kinetikdaten ab! An dieser Stelle soll ebenfalls noch einmal auf die grosse Wichtigkeit von genauen und verlässlichen Gleichgewichts- und Kinetikdaten hingewiesen werden. **Ohne genaue Daten ist keine genaue Abbildung des realen Prozesses möglich!**

Für die Modellierung hat die Hochschule Luzern ein eindimensionales «Basismodul» mit der Modellierungssprache Modelica® entwickelt. Der grosse Vorteil dieses Ansatzes besteht darin, dass eine beliebige Verschaltung einer beliebigen Anzahl an Basismodulen möglich ist. Dadurch lassen sich eine Vielzahl an Adsorberbauarten modellieren. Die Software ist für Festbett- und Rotoradsorber getestet und validiert worden. Eine Adaption auf alternative Adsorbergeometrien ist möglich. Ein weiterer Vorteil dieser Software besteht darin, dass die Programmcodes der späteren Teilschritte Sensitivitätsanalyse und Parameterstudie mit der Modelica®-Software verknüpft sind und alle weiteren Schritte weitestgehend automatisiert durchgeführt werden können.

Vorgehen am begleitenden Anwendungsfall:

Für den begleitenden Anwendungsfall wurde der Sorptionsrotor in 1°-Kuchensegmente aufgeteilt. Innerhalb eines Kuchensegmentes wurden anschliessend 10 Basismodule in Serie geschaltet. Mit zeitlich verändernden Randbedingungen wird ein Umlaufen dieses Kuchensegmentes simuliert. Konzentrationsgradienten in Umfangsrichtung des Rotors werden dabei vernachlässigt.

Nützliche Literatur:

- (1) R. Tamburini, M. Kleingries, U.C. Müller: *SYSKON – Systematische Konzipierung Industrieller Ad- und Desorptionsprozesse – Schlussbericht*, Hochschule Luzern, 2020
- (2) S. Schneider: *Modellierung eines Ad- und Desorptionsprozesses für die Gasphasenadsorption*, Hochschule Luzern, 2019



VII. Modellvalidierung

Ziele dieses Teilschritts:

- Validiertes mathematisch-physikalisches Modell des Adsorptionsprozesses

Vorgehen:

Um die Korrektheit des Modells zu bestätigen, erfolgt in diesem Teilschritt eine Validierung. Die Validierung erfolgt vorzugsweise mit Referenzfällen aus der Literatur mit angepassten Modellrandbedingungen. Weiter kann die Validierung auch mit Messdaten aus der Praxis erfolgen. Wichtige Kenngrößen, welche die Korrektheit des Modells beschreiben sind:

- Gleichgewichtsbeladung in mol/kg_{sorbens} -> korrekte Gleichgewichtsbestimmung
- Austrittskonzentration in mol/m³ -> korrekte Kinetik
- Diffusionskoeffizienten -> korrekte Stoffübertragung
- Temperaturniveaus, bzw. Kenngrößen der Wärmeübertragung -> korrekte Wärmeübertragung

Vorgehen am begleitenden Anwendungsfall:

Für die Validierung des begleitenden Anwendungsfalls standen keine Referenzfälle zur Verfügung. Daher erfolgte ein Vergleich mit Messdaten und Erfahrungswerten des Anlagenbetreibers. Dabei konnten die modellierten Temperaturniveaus und Wärmeübertragungskenngrößen bestätigt werden. Für die Validierung der Gleichgewichtsbeladung und des Diffusionsverhaltens standen jedoch zu wenig Messwerte zur Verfügung. Ein Vergleich mit ähnlichen Anwendungsfällen zeigte jedoch, dass die Werte im zu erwarteten Bereich liegen.

Nützliche Literatur:

- (1) R. Tamburini, M. Kleingries, U.C. Müller: *SYSKON – Systematische Konzipierung Industrieller Ad- und Desorptionsprozesse – Schlussbericht*, Hochschule Luzern, 2020



VIII. Sensitivitätsanalyse

Ziele dieses Teilschritts:

- Auflistung der einflussreichsten Parameter bezüglich der Zielfunktion(en)

Vorgehen:

In diesem Teilschritt werden **sämtliche Parameter der Anlage mit Variationsspielraum** erfasst und aufgelistet. Mit diesen Parametern wird anschliessend ein statistischer Versuchsplan für eine Sensitivitätsanalyse mit einer vollfaktoriellen statistischen Versuchsplanung erstellt. In diesem Teilschritt genügt dabei ein mindestens dreistufiger Versuchsplan. Dabei gilt es unbedingt zu beachten, dass die Abhängigkeit der resultierenden Anzahl an zu berechnenden Betriebspunkten von den Parametern bei einem vollfaktoriellen Versuchsplan exponentiellen Ursprungs ist. Diese Abhängigkeit sieht wie folgt aus:

$$n_{\text{Betriebspunkte}} = n_{\text{Stufen}}^{n_{\text{Faktoren}}}$$

Für einen vollfaktoriellen Versuchsplan mit 3 Stufen (im Minimum empfohlen) und 5 Parametern mit Variationsspielraum resultieren so $3^5 = 243$ Betriebspunkte.

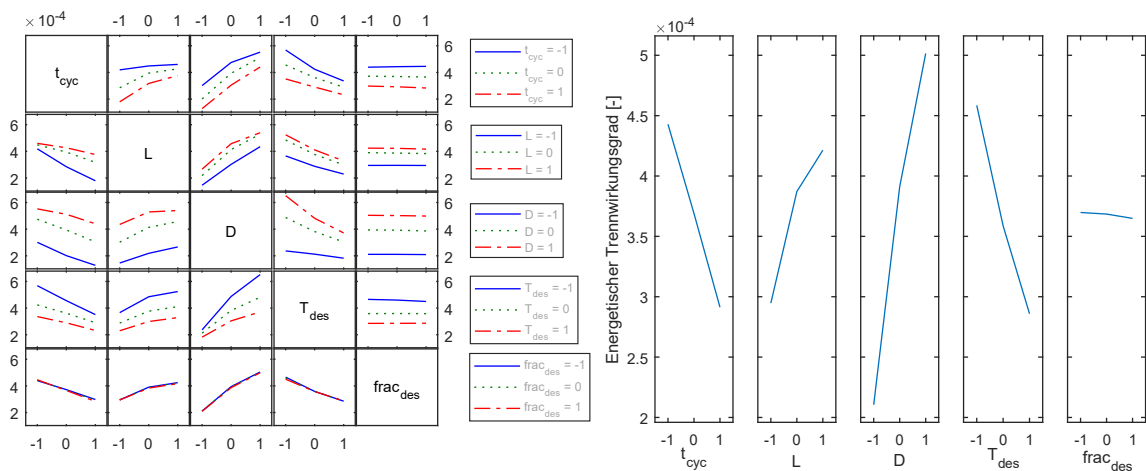
Die so berechneten Betriebspunkte werden anschliessend in zwei Grafiken, **dem Haupteffektdiagramm und dem Wechselwirkungdiagramm**, dargestellt. Anhand der Eigenheiten dieser Diagramme können anschliessend die Parameter mit dem grössten Einfluss auf die Zielfunktion(en) bestimmt werden.

Vorgehen am begleitenden Anwendungsfall:

Für den begleitenden Anwendungsfall wurden die folgenden 5 Parameter mit Variationsspielraum definiert:

- Zyklusdauer (Vollständige Umdrehung des Rotors) in s
- Desorptionstemperatur in °C
- Rotordurchmesser in m
- Rotortiefe in m
- Flächenanteil der Desorptionsluft in %

Anschliessend wurde mit diesen Parametern ein dreistufiger, vollfaktorieller Versuchsplan erstellt. Anschliessend wurden, mit einer von der Hochschule Luzern erstellten Software, alle 243 Betriebspunkte automatisiert berechnet. Die untenstehende Grafik zeigt nun im linken Diagramm die Wechselwirkungen und im rechten Diagramm die Haupteffekte.





Dabei können nun anhand der Eigenheiten dieser Diagramme die Parameter mit dem stärksten Einfluss auf die Zielfunktion bestimmt werden (Haupteinflüsse im rechten Diagramm). Weiter können mit dem linken Diagramm die Parameter, welche sich gegenseitig am stärksten beeinflussen, bestimmt werden. Diese Parameter werden anschliessend für die Parameterstudien vorgeschlagen. In der unten gelisteten nützlichen Literatur finden sich detaillierte Beschreibungen, wie diese Parameterbestimmung erfolgt. Eine gut verständliche Beschreibung befindet sich auch im Schlussbericht des BFE-Projektes *EESP* [2].

Für den begleitenden Anwendungsfall wurden auf der Basis dieser Beschreibungen die folgenden Parameterkombinationen bestimmt:

- Rotordurchmesser – Zykluszeit
- Rotordurchmesser – Desorptionstemperatur
- Rotortiefe – Zykluszeit
- Desorptionstemperatur – Zykluszeit

Nützliche Literatur:

- (1) K. Siebertz, D. van Bebber, T. Hochkirchen: *Statistische Versuchsplanung – Design of Experiments (DoE)*, Springer Vieweg, 2017
- (2) A. M. Law: *A Tutorial on Design of Experiments for Simulation Modeling*, Winter Simulation Conference, 2014
- (3) B. Giger: *Design of Experiments – Einführung in die Statistische Versuchsplanung*, TQU AG, 2016

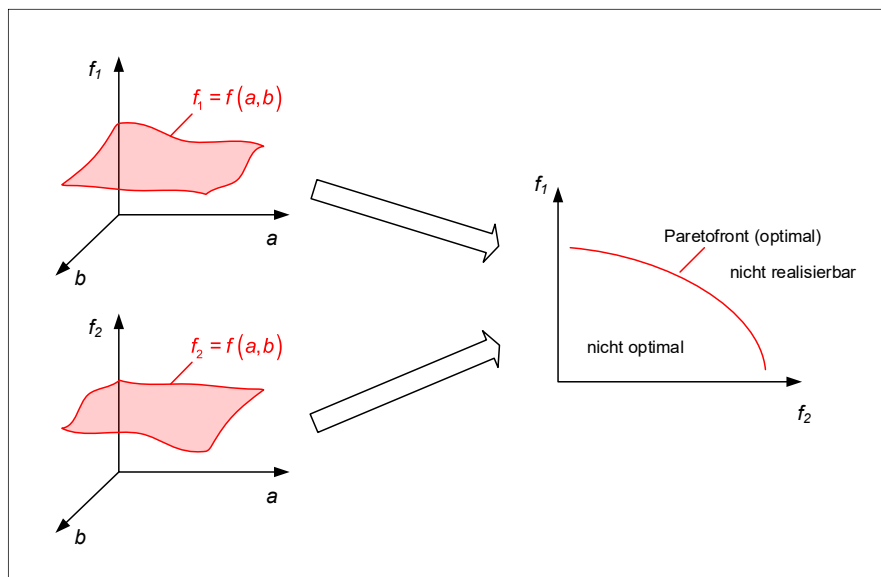
IX. Optimierung

Ziele dieses Teilschritts:

- Im Falle einer Zielfunktion: Parameterabstimmung für optimierte Zielfunktion
- Im Falle mehrerer gewichteter Zielfunktionen: Parameterabstimmung für eine Pareto-Lösungsmenge mehrerer gewichteter Zielfunktionen

Vorgehen:

In diesem Teilschritt werden, mit den im vorangegangenen Schritt bestimmten Parameterkombinationen, mit einer feineren Abstufung **weitere Betriebspunkte** berechnet. Die Ober- bzw. Untergrenzen bleiben dabei dieselben wie innerhalb der Sensitivitätsanalyse. Sind sämtliche Betriebspunkte bestimmt, wird mittels polynomischer Regression ein Metamodell erstellt. Werden nun die Betriebspunkte und das Metamodell in einer Grafik zusammen dargestellt, können für den Fall von nur einer Zielfunktion, aus dieser Darstellung die idealen Parameterwerte ausgelesen werden. Für gewichtete, multikriterielle Zielfunktionen, erfolgt, anschliessend an die Bestimmung des Metamodells, zusätzlich eine Pareto-Optimierung. Die Pareto-Optimierung erfolgt mithilfe eines genetischen Algorithmus. Dieser bestimmt aus zwei Metamodellen eine Paretofront wie in der folgenden Abbildung dargestellt.



Lösungen oberhalb der Paretofront sind nicht realisierbar und Lösungen unterhalb der Paretofront sind nicht optimal. Ausgehend von einer Pareto-Lösung kann eine Verbesserung einer Zielfunktion nur auf Kosten von mindestens einer anderen Zielfunktion erhalten werden. In **Fehler!**

Verweisquelle konnte nicht gefunden werden. rechts hat beispielsweise eine Erhöhung von f_2 unter Beibehaltung einer optimalen Lösung, also einer Verschiebung entlang der Paretofront, zwingend eine Absenkung bzw. Verschlechterung von f_1 zur Folge. Anschliessend können anhand der Gewichtung die Pareto-Lösungsmengen der Parameter für mehrere gewichtete Zielfunktionen bestimmt werden.

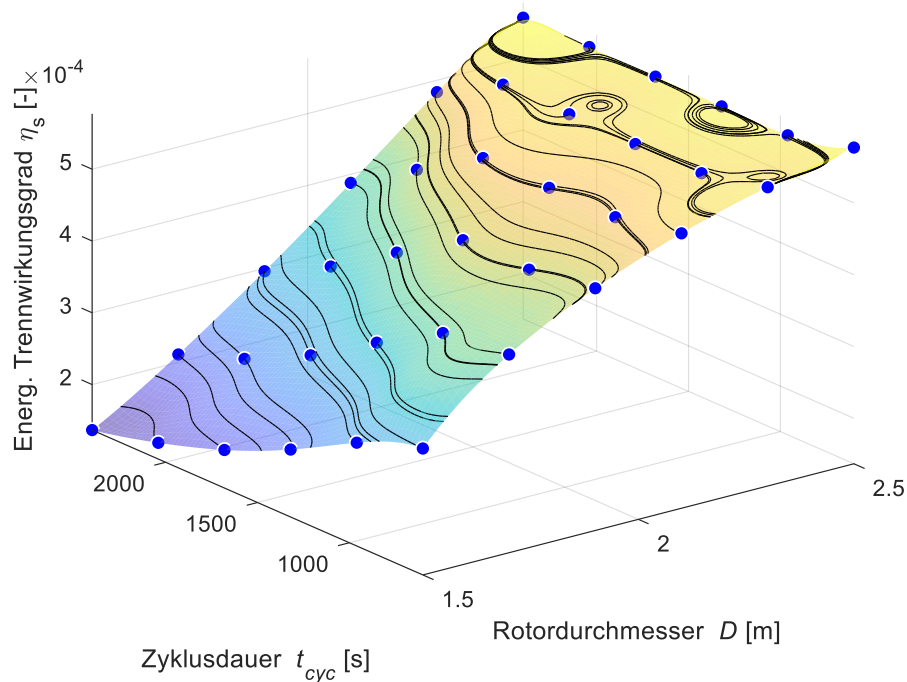
Vorgehen am begleitenden Anwendungsfall:

Für den begleitenden Anwendungsfall wird hier als Beispiel die Parameterstudie mit der Parameterkombination Rotordurchmesser – Zykluszeit erläutert. Diese Parameterstudie wurde mit einer Stufenanzahl von 6 mit einer Parameteranzahl von 2 durchgeführt. Daraus ergeben sich $6^2 = 36$ Betriebspunkte. In der untenstehenden Abbildung sind nun diese Betriebspunkte mit dem



polynomisch gefitteten Metamodell als Fläche zu sehen. Als zusätzliche Hilfe sind die Höhenlinien der Betriebspunkte auf dem Metamodell dargestellt. Für dieses gezeigte Beispiel lassen sich die folgenden Schlussfolgerungen ziehen:

- soll der energetische Trennwirkungsgrad für den betrachteten Parameterraum möglichst hoch sein, muss der Rotordurchmesser am oberen Ende des Parameterraums liegen.
- eine Erhöhung des Rotordurchmessers von 1.5 auf 2.5 m, bei Fixierung der Zyklusdauer, führt zu einer Erhöhung des energetischen Trennwirkungsgrades um nahezu 100%.
- eine Absenkung der Zykluszeit von 2500 auf 600 s, bei Fixierung des Rotordurchmessers, führt zu einer Erhöhung des energetischen Trennwirkungsgrades um ebenfalls ca. 100%. Dies gilt allerdings nur für den Fall eines Rotordurchmessers von 1.5 m.
- die Zyklusdauer sollte möglichst klein sein (600 s).
- ausgehend vom Referenzzustand des Prozesses bei 2 m Rotordurchmesser und einer Zykluszeit von 1200 s, resultiert ein Einsparpotenzial von ca. 30%.
- der Einfluss des Rotordurchmessers auf die Zielfunktion ist dominierend.
- für beide Abhängigkeiten lassen sich nur kleine Nichtlinearitäten feststellen.



Nützliche Literatur:

- (1) M. Altendorfer: *Pareto-Optimierung komplexer thermo-fluiddynamischer Systeme auf der Basis numerischer Berechnungen*, Universität Erlangen-Nürnberg, 2008
- (2) F. Bittner: *Modellgestützte multikriterielle Optimierung von permanenterregten Synchronmaschinen für Hybrid- und Elektrofahrzeuge*, Cuvillier Verlag, 2015



X. Feinauslegung

Mit diesem Leitfaden werden Mitarbeiter*innen und Entscheidungsträger*innen von Industrieunternehmen und Ingenieurbüros in die Lage versetzt, die Betriebsführung, die grobe Apparateauslegung, die Adsorbensauswahl sowie Wirtschaftlichkeitsberechnungen für einen, in Bezug auf vorgegebene Zielfunktionen, optimierten Adsorptionsprozess aus der Gasphase durchzuführen. Für eine vollständige Auslegung eines Adsorptionsprozesses aus der Gasphase ist eine Feinauslegung nötig. Die Feinauslegung ist als letzter Schritt des Leitfadens jedoch nur der Vollständigkeit halber aufgeführt. Es ist naheliegend, dass auch in diesem Schritt die Unterstützung von Simulationssoftware möglich bzw. nötig ist. Die in diesem Leitfaden vorgestellte Modelica®-Software des begleitenden Anwendungsfalles ist nicht für eine Feinauslegung konzipiert, kann aber auch hier als nützliches und unterstützendes Werkzeug dienen.



Literaturverzeichnis

- [1] R. Tamburini, M. Kleingries und U. C. Müller, «SYSKON - Systematische Konzipierung industrieller Ad- und Desorptionsprozesse - Schlussbericht,» BFE Bundesamt für Energie, Bern, 2020.
- [2] R. Tamburini, M. Kleingries und U. C. Müller, «Empfehlungen zum Energieeffizienten Einsatz von Sorptionsprozessen - Schlussbericht,» BFE Bundesamt für Energie, Bern, 2021.
- [3] R. Blättler, M. Fill, A. Rettig, S. Schneider, R. Tamburini, R. Waser, D. Widmer, M. Kleingries und U. C. Müller, «SYSKON - Zwischenbericht, Stand März 2019,» BFE Bundesamt für Energie, Bern, 2019.
- [4] S. Schneider, R. Tamburini, M. Kleingries und U. C. Müller, «SYSKON - Zwischenbericht, Stand Februar 2020,» BFE Bundesamt für Energie, Bern, 2020.