

Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg Hamburg University of Applied Sciences

Masterarbeit

Timo Möllmann

Simulative Betrachtung und Optimierung gekoppelter Prozesse unter Berücksichtigung des Physikalischen Optimums

Fakultät Technik und Informatik Department Maschinenbau und Produktion Faculty of Engineering and Computer Science Department of Mechanical Engineering and Production Management

Timo Möllmann

Simulative Betrachtung und Optimierung gekoppelter Prozesse unter Berücksichtigung des Physikalischen Optimums

Masterarbeit eingereicht im Rahmen der Masterprüfung

im Studiengang Maschinenbau Energie & Anlagensysteme am Department Maschinenbau und Produktion der Fakultät Technik und Informatik der Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg

in Zusammenarbeit mit: Projekt greoKEMS

Erstprüfer/in: Prof. Dr.-Ing. Bernd Sankol Zweitprüfer/in : Prof. Dr.-Ing. Achim Schmidt

Betreuer/In: M.Sc. Lukas Kerpen M.Eng. Natascha Eggers

Abgabedatum: 13.11.2020

Zusammenfassung

Timo Möllmann

Thema der Masterthesis

Simulative Betrachtung und Optimierung gekoppelter Prozesse unter Berücksichtigung des Physikalischen Optimums

Stichworte

Prozesskopplung, Physikalisches Optimum, Energieeffizienz, Optimierung, Ressourceneffizienz, Simulation, verfahrenstechnische Prozesse, Windenergie, Elektrolyse, Power-to-Gas, beheizter Rührbehälter, Betriebsoptimum, Dimensionierung

Kurzzusammenfassung

Diese Arbeit befasst sich mit der Untersuchung und energetischen Optimierung zweier beispielhafter Kopplungsprozesse unter Zuhilfenahme der Methode des Physikalischen Optimums. Anhand von Simulationen mit dem Programm MATLAB wird untersucht, inwieweit Betriebsoptima und physikalische optimale Dimensionierungen abgeleitet werden können.

Timo Möllmann

Title of the thesis

Simulative consideration and optimisation of coupled processes under consideration of the physical optimum

Keywords

process coupling, physical optimum, energy efficiency, optimisation, resource efficiency, simulation, procedural processes, wind energy, electrolysis, power-to-gas, heated stirring tank, optimum operation, dimensioning

Abstract

The following thesis deals with the investigation and energetic optimisation of two exemplary coupling processes with the help of the method of the physical optimum. On the basis of simulations with the software MATLAB it is investigated in which way an operating optimum and physical optimal dimensioning can be derived.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis III Tabellenverzeichnis IV Abkürzungsverzeichnis V Formelzeichen VI 1 Einleitung -1 - 2 Grundlagen -3 - 2.1 Wärmeübertragung -6 - 2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter -8 - 2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter -8 - 2.3 Elektrolyse -12 - 2.3.1 Alkalische Elektrolyse -12 - 2.3.2 PEM – Elektrolyse -12 - 2.3.2 PEM – Elektrolyse -14 - 2.5 Prozessbewertung -14 - 2.6 PhO – vermeidbare und unvermeidbare Verluste -17 - 2.7 Indirekte PhO-Faktoren -19 - 3 Anwendung der Methode des PhO auf einen beheizten Rührbehälter -20 - 3.1.1 Direkte PhO-Faktoren der Einzelprozesse -21 - 3.2.1 Lerausforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessen - -22 - 3.2.1 Linterusforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessee - -24 - 3.3.2 Unvermeidbare Vereinfac	Inha	ltsverzeichnis	I
Tabellenverzeichnis IV Abkürzungsverzeichnis V Formelzeichen VI 1 Einleitung -1 - 2 Grundlagen -3 - 2.1 Wärmeübertragung -3 - 2.1.1 Instationäre Wärmeübertragung -6 - 2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter -8 - 2.1.3 Rührerleistung -9 - 2.3 Elektrolyse -10 - 2.3.1 Alkalische Elektrolyse -10 - 2.3.1 Alkalische Elektrolyse -13 - 2.4 Windenergie -14 - 2.5 Prozessbewertung -15 - 2.6 PhO - vermeidbare und unvermeidbare Verluste -17 - 2.7 Indirekte PhO-Faktoren -19 - 3 Anwendung der Methode des PhO auf einen beheizten Rührbehälter -20 - 3.2 PhO des gekoppelten Prozesse -21 - 3.2.1 Lösungansatz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozessen -22 - 3.2.2 Lösungansatz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozesse - -24 - 3.3.1 Annahmen / Vereinfachungen <th>Abbi</th> <th>ldungsverzeichnis</th> <th>III</th>	Abbi	ldungsverzeichnis	III
Abkürzungsverzeichnis V Formelzeichen VI 1 Einleitung -1 - 2 Grundlagen -3 - 2.1 Wärmeübertragung -3 - 2.1.1 Instationäre Wärmeübertragung -6 - 2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter -8 - 2.8 Elektrolyse -10 - 2.3.1 Alkalische Elektrolyse -10 - 2.3.2 PEM – Elektrolyse -13 - 2.4 Windenergie -14 - 2.5 Prozessbewertung -15 - 2.6 PhO – vermeidbare und unvermeidbare Verluste -17 - 2.7 Indirekte PhO-Faktoren -19 - 3 Anwendung der Methode des PhO auf einen beheizten Rührbehälter -20 - 3.1 Direkte PhO-Faktoren der Einzelprozesse -21 - 3.2.1 Herausforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessen -21 - 3.2.1 Lösungsanstz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozessen -24 - 3.3 Ansätze zur Berechnung des drehzahlabhängigen Wärmebedarfs -28 - 3.3.4 Berechnung des Rührer-Energiebedarfes	Tabe	llenverzeichnis	IV
Formelzeichen VI 1 Einleitung -1 - 2 Grundlagen -3 - 2.1 Wärmeübertragung -6 - 2.1.1 Instationäre Wärmeübertragung -6 - 2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter -8 - 2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter -8 - 2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter -9 - 2.3 Elektrolyse -10 - 2.3.1 Alkalische Elektrolyse -12 - 2.3.2 PEM – Elektrolyse -14 - 2.5 Prozessbewertung -15 - 2.4 Windenergie -14 - 2.5 Prozessbewertung -15 - 2.6 PhO – vermeidbare und unvermeidbare Verluste -17 - 2.7 Indirekte PhO-Faktoren der Einzelprozesse -20 - 3.2 PhO des gekoppelten Prozesses -21 - 3.2.1 Herausforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessen -22 + 3.2.2 Lösungsansatz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozessen -22 + 3.2.1 Herausforderung des Bürber-Energiebedarfes -34 +	Abki	irzungsverzeichnis	v
1 Einleitung -1 - 2 Grundlagen -3 - 2.1 Wärmeübertragung -6 - 2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter -8 - 2.1.2 Rührerleistung -9 - 2.3 Elektrolyse -10 - 2.3.1 Alkalische Elektrolyse -12 - 2.3.2 PEM - Elektrolyse -13 - 2.4 Windenergie -13 - 2.4 Windenergie -14 - 2.5 Prozessbewertung -15 - 2.6 PhO - vermeidbare und unvermeidbare Verluste -17 - 2.7 Indirekte PhO-Faktoren -19 - 3 Anwendung der Methode des PhO auf einen beheizten Rührbehälter -20 - 3.1 Direkte PhO-Faktoren der Einzelprozesse -21 - 3.2.1 Herausforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessen - -22 - 3.2.2 Lösungsansatz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozessen - -24 - 3.3.1 Annahmen / Vereinfachungen - -24 - 3.3.2 Unvermeidbare Verluste kontinuierlicher und diskontinuierlicher Prozesse - -27 - 3.3.3	Form	nelzeichen	VI
2 Grundlagen -3 - 2.1 Wärmeübertragung -6 2.1.1 Instationäre Wärmeübertragung -6 2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter -8 2.2 Rührerleistung -9 2.3 Elektrolyse -10 2.3.1 Alkalische Elektrolyse -12 2.3.2 PEM – Elektrolyse -13 2.4 Windenergie -14 2.5 Prozessbewertung -15 2.6 PhO – vermeidbare und unvermeidbare Verluste -17 2.6 PhO – vermeidbare und unvermeidbare Verluste -17 2.7 Indirekte PhO-Faktoren -19 3 Anwendung der Methode des PhO auf einen beheizten Rührbehälter -20 3.1 Direkte PhO-Faktoren der Einzelprozesse -201 3.2 PhO des gekoppelten Prozessen -21 3.2.1 Herausforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessen -22 3.2.2 Lösungsansatz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozessen -24 3.3.2 Unvermeidbare Verluste kontinuierlicher und diskontinuierlicher Prozesse 27 3.3	1	Einleitung	- 1 -
3Anwendung der Methode des PhO auf einen beheizten Rührbehälter- 20 -3.1Direkte PhO-Faktoren der Einzelprozesse- 21 -3.2PhO des gekoppelten Prozesses- 21 -3.2.1Herausforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessen- 22 -3.2.2Lösungsansatz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozessen- 24 -3.3Simulative Betrachtung- 24 -3.3.1Annahmen / Vereinfachungen- 24 -3.3.2Unvermeidbare Verluste kontinuierlicher und diskontinuierlicher Prozesse - 27 -3.3.3Ansätze zur Berechnung des drehzahlabhängigen Wärmebedarfs- 28 -3.3.4Berechnung des Rührer-Energiebedarfes- 34 -3.3.5Simulationsergebnisse- 35 -3.3.6Indirekte PhO-Faktoren- 39 -3.4Interpretation- 42 -4Prozesskopplung: Windenergieanlage und Elektrolysezelle- 45 -4.1Windenergieanlage- 45 -4.1.1Windenergieanlage- 45 -4.1.2Wasserelektrolyse- 46 -4.2PhO des gekoppelten Prozesses- 49 -4.3Simulative Betrachtung des Power-to-Hydrogen-Prozesses- 51 -4.3.1Randbedingungen, Vereinfachungen und Annahmen- 52 -	2 2.1 2.1.1 2.2 2.3 2.3.1 2.3.2 2.4 2.5 2.6 2.7	Grundlagen Wärmeübertragung Instationäre Wärmeübertragung Wärmeübergang im Rührbehälter Rührerleistung Elektrolyse Alkalische Elektrolyse PEM – Elektrolyse Windenergie Prozessbewertung PhO – vermeidbare und unvermeidbare Verluste Indirekte PhO-Faktoren	- 3 - 3 - 6 - 8 - 9 - - 10 - - 12 - - 13 - - 13 - - 14 - - 15 - - 17 - - 19 -
3.1 Direkte PhO-Faktoren der Einzelprozesse - 20 - 3.2 PhO des gekoppelten Prozesses - 21 - 3.2.1 Herausforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessen - 22 - 3.2.2 Lösungsansatz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozessen - 24 - 3.3 Simulative Betrachtung - 24 - 3.3.1 Annahmen / Vereinfachungen - 24 - 3.3.2 Unvermeidbare Verluste kontinuierlicher und diskontinuierlicher Prozesse - 27 - 3.3.3 Ansätze zur Berechnung des drehzahlabhängigen Wärmebedarfs - 28 - 3.3.4 Berechnung des Rührer-Energiebedarfes - 34 - 3.3.5 Simulationsergebnisse. - 35 - 3.3.6 Indirekte PhO-Faktoren - 39 - 3.4 Berechnung: Windenergieanlage und Elektrolysezelle - 45 - 4.1 Windenergieanlage - 45 - 4.1.1 Windenergieanlage - 45 - 4.1.2 Wasserelektrolyse. - 46 - 4.2 PhO des gekoppelten Prozesses - 45 - 4.1.1 Windenergieanlage - 45 - 4.1.2 Wasserelektrolyse. - 46 - 4.2	3	Anwendung der Methode des PhO auf einen beheizten Rührbehälter	- 20 -
3.2.1Intertaustorderung der Derachnung des Filo ber geköpperten Frozessen	3.1 3.2 3.2 1	Direkte PhO-Faktoren der Einzelprozesse PhO des gekoppelten Prozesses Herausforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessen	- 20 - - 21 - - 22 -
3.3.1Annahmen / Vereinfachungen	3.2.1 3.2.2 3.3	Lösungsansatz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozessen Simulative Betrachtung	- 24 - - 24 -
3.3.5Simulationsergebnisse 35 -3.3.6Indirekte PhO-Faktoren 39 -3.4Interpretation 42 -4Prozesskopplung: Windenergieanlage und Elektrolysezelle- 45 -4.1PhO der Einzelprozesse- 45 -4.1.1Windenergieanlage- 45 -4.1.2Wasserelektrolyse 46 -4.2PhO des gekoppelten Prozesses- 49 -4.3Simulative Betrachtung des Power-to-Hydrogen-Prozesses- 51 -4.3.1Randbedingungen, Vereinfachungen und Annahmen 52 -	3.3.1 3.3.2 3.3.3 3.3.4	Annahmen / Vereinfachungen Unvermeidbare Verluste kontinuierlicher und diskontinuierlicher Prozesse Ansätze zur Berechnung des drehzahlabhängigen Wärmebedarfs Berechnung des Rührer-Energiebedarfes	- 24 - - 27 - - 28 - - 34 -
4Prozesskopplung: Windenergieanlage und Elektrolysezelle- 45 -4.1PhO der Einzelprozesse- 45 -4.1.1Windenergieanlage- 45 -4.1.2Wasserelektrolyse- 46 -4.2PhO des gekoppelten Prozesses- 49 -4.3Simulative Betrachtung des Power-to-Hydrogen-Prozesses- 51 -4.3.1Randbedingungen, Vereinfachungen und Annahmen- 52 -	3.3.5 3.3.6 3.4	Simulationsergebnisse Indirekte PhO-Faktoren Interpretation	- 35 - - 39 - - 42 -
4.1PhO der Einzelprozesse- 45 -4.1.1Windenergieanlage- 45 -4.1.2Wasserelektrolyse- 46 -4.2PhO des gekoppelten Prozesses- 49 -4.3Simulative Betrachtung des Power-to-Hydrogen-Prozesses- 51 -4.3.1Randbedingungen, Vereinfachungen und Annahmen- 52 -	4	Prozesskopplung: Windenergieanlage und Elektrolysezelle	- 45 -
 4.1.1 Windenergieanlage	4.1	PhO der Einzelprozesse	- 45 -
 4.1.2 Wasserelektrolyse	4.1.1	Windenergieanlage	- 45 -
 4.2 PhO des gekoppelten Prozesses	4.1.2	Wasserelektrolyse	- 46 -
 4.3 Simulative Betrachtung des Power-to-Hydrogen-Prozesses	4.2	PhO des gekoppelten Prozesses	- 49 -
4.3.1 Kandbedingungen, Vereinfachungen und Annahmen	4.3	Simulative Betrachtung des Power-to-Hydrogen-Prozesses	- 51 -
432 Mathematische Modellierung - 53 -	4.3.1 432	Kandbedingungen, Vereinfachungen und Annahmen	- 52 - - 53 -

4.3.3	Simulationsergebnisse	54 -
4.3.4	Validierung	60 -
4.4	Physikalisches Optimum vs. Betriebswirtschaftliches Optimum (Ausbli	ck) 61 -
4.5	Interpretation	63 -
5	Zusammenfassung	- 65 -
6	Literaturverzeichnis	- 67 -
Anha	ang	- 70 -
A: Q	uellcode – beheizter Rührbehälter	- 71 -
B: Q	B: Quellcode – Power-to-Hydrogen -	

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1:	Lösungsdiagramm zur Ermittlung der Temperatur in der Zylindermitte [3]	- 6 -
Abbildung 2.2:	Beispiel für die Herleitung des Temperaturverlaufes mit der "Methode der	-
	Blockkapazitat [3]	- / -
Abbildung 2.3:	Beispielhafte bildliche Darstellung eines Ankerrührers [6]	- 9 -
Abbildung 2.4:	Schematische Darstellung der Wasserelektrolyse (modifizierte Darstellung) [10]	11 -
Abbildung 2.5:	Schematischer Aufbau einer PEM-Elektrolysezelle [16]	13 -
Abbildung 2.6:	Schematische Darstellung einer WEA [19]	14 -
Abbildung 2.7:	Bilanzdarstellung zur Erläuterung vermeidbarer und unvermeidbarer Verluste in Bezug auf das PhO [24]	17 -
Abbildung 2.8:	Graphischer Verlauf des PhO-Leistungsfaktors bei verschiedenen Betriebszuständen [23]	18 -
Abbildung 3.1:	Anwendung der Energiebilanz auf das Modell des beheizten Rührbehälters (stationär)	22 -
Abbildung 3.2:	Schematische Darstellung des simulierten beheizten Rührbehälters (eigene Darstellung)	25 -
Abbildung 3.3:	Minimal benötigter Energiebedarf zur Aufheizung des Wassers in Abhängigkeit de Drehzahl bei Nichtberücksichtigung unvermeidbarer Verluste	r 30 -
Abbildung 3.4:	Leistung des Rührers in Abhängigkeit der Drehzahl	34 -
Abbildung 3.5:	Aufheizzeiten für verschiedene Heiztemperaturen in Abhängigkeit der Rührerdrehzahl	35 -
Abbildung 3.6:	Physikalisch optimaler Energiebedarf des Rührers für verschiedene Heiztemperaturen in Abhängigkeit der Drehzahl	36 -
Abbildung 3.7:	Physikalisch optimaler Energiebedarf zur Aufheizung des Wassers für versch. Heiztemperaturen in Abhängigkeit der Drehzahl unter Berücksichtigung drehzahlabhängiger unvermeidbarer Verluste	37 -
Abbildung 3.8:	Physikalisch optimale Gesamtenergiebedarf von Aufheizung und Rührer in Abhängigkeit der Drehzahl	38 -
Abbildung 3.9:	Physikalisches Optimum, vermeidbare und unvermeidbare Verluste für die Bedarfs- und Verbrauchsansicht (eigene Darstellung)	39 -
Abbildung 4.1:	Bilanzielle Darstellung des Aufwandes für den Gesamtprozess "Power-to- Hydrogen" (eigene Darstellung)	50 -
Abbildung 4.2:	H ₂ -Produktion in Abhängigkeit der AEL Dimensionierung	54 -
Abbildung 4.3:	H ₂ -Produktion in Abhängigkeit der PEM-EL Dimensionierung	55 -
Abbildung 4.4:	Spezifischer Energieaufwand der AEL (a) und PEM-EL (b) in Abhängigkeit der Dimensionierung	57 -
Abbildung 4.5:	Schematische U-I-Kennlinie und Einfluss der Stromdichte auf den Wirkungsgrad der Elektrolyse [32]	58 -
Abbildung 4.6:	Validierung der U-j Kennlinien; links eigene Darstellung, rechts [30]	60 -

Tabellenverzeichnis

Tabelle 3.1:	Geometrische- und Stoffdaten der Simulation des beheizten Rührbehälters [4] 26 -
Tabelle 3.2:	Übersicht möglicher Ansätze zur Berechnung der instationären Wärmeübertragung (eigene Darstellung) 28 -
Tabelle 3.3:	Gewichtung der unvermeidbaren Verluste des Aufheizprozesses bei n=3 s^-1; $$T_{heiz}\mbox{=}277^\circ\mbox{C}\mbox{-}41\mbox{-}$
Tabelle 4.1:	Randbedingungen und Parameter für die Simulation von WEA und Elektrolyse [30] 52 -
Tabelle 4.2:	Simulationsergebnisse für die Dimensionierung nach maximaler H2-Produktion 56 -
Tabelle 4.3:	Überschlägige Berechnung der für die Umsetzung der in dieser Arbeit bestimmten optimalen Dimensionierung notwendigen Einzelzellen unter der Annahme der derzeit technisch maximalen Elektrodenoberfläche
Tabelle 4.4:	Simulationsergebnisse für Dimensionierung der PEM-EL zur Erreichung der gleichen H2 Menge wie die AEL 59 -
Tabelle 4.5:	Validierung der in der Simulation des Power-to-Hydrogen Verfahrens berücksichtigten Zeitschritte
Tabelle 4.6:	Validierung der iterativen Simulation durch den Abgleich mit einer händischen Rechnung 61 -
Tabelle 4.7:	Vergleich der Investitionskosten für die AEL und die PEM-EL bei Auslegung auf eine maximale Wasserstoffproduktion unter Berücksichtigung der Simulationsergebnisse - 62 -
Tabelle 4.8:	Vergleich der Investitionskosten für die AEL und die PEM-EL bei Auslegung auf gleiche Wasserstoffproduktion unter Berücksichtigung der Simulationsergebnisse 62 -

Abkürzungsverzeichnis

AEL	Alkalische Elektrolyse
BwO	Betriebswirtschaftliches Optimum
DGL	Differentialgleichung
EL	
EU	Europäische Union
HAW	Hochschule für angewandte Wissenschaften
PEM	Proton Exchange Membrane
PhO	Physikalisches Optimum
WEA	

Formelzeichen

Symbol	Bedeutung	Einheit
A	Fläche	$[m^2]$
В	Bedarf	z.B. [<i>kWh</i>]
Bi	Biotzahl	[-]
С	Strahlungsaustauschzahl	[-]
D	Durchmesser	[m]
Ε	Energie	[/]
F	Faraday-Konstante	$\left[\frac{A \cdot s}{mol}\right]$
Fo	Fourierzahl	[-]
Ι	Strom	[A]
Κ	Verlustverhältnis	[-]
L	Charakteristische Länge	[m]
М	Molmasse	$\left[\frac{kg}{mol}\right]$
Ne	Newtonzahl	[-]
Р	Leistung	[W]
P_{el}	Elektrische Leistung	[W]
Pr	Prandtlzahl	[-]
Q	Wärmeenergie	[<i>V</i>]
Ż	Wärmestrom	[W]
$\dot{q}^{\prime\prime}{}_{s}$	Flächenspezifische Strahlungsleistung	$\left[\frac{W}{m^2}\right]$
R	Allgemeine Gaskonstante	$\left[\frac{kg \cdot m^2}{s^2 \cdot mol^{-1}K^{-1}}\right]$
Re	Reynoldszahl, ohm. Elektrodenwiderstand	$[-], [\Omega \cdot cm^2]$
ΔR_H	Reaktionsenthalpie	$\left[\frac{kJ}{mol}\right]$
Т	Temperatur	[K]
U	Innere Energie, Spannung	[J], [V]
Ū	Unvermeidbare Verluste	z.B. [<i>kWh</i>]
V	Volumen, Verbrauch	$[m^3]$, z.B. $[kWh]$
W_{el}	Elektrische Arbeit	[/]
а	Temperaturleitfähigkeit, Aktivität des Wassers	$\left[\frac{m^2}{s}\right],[-]$

b	Spezifischer Energieaufwand	$\left[\frac{J}{kg}\right]$
<i>c</i> _p	Spezifische Wärmekapazität	$\left[\frac{J}{kg \cdot K}\right]$
d	Durchmesser	[<i>m</i>]
j	Stromdichte	$\left[\frac{A}{cm^2}\right]$
j ₀	Austauschstromdichte	$\left[\frac{A}{cm^2}\right]$
k	Wärmedurchgangskoeffizient	$\left[\frac{W}{m^2 \cdot K}\right]$
т	Masse	[kg]
n	Drehzahl, Variable für Dimensionierung	$\left[\frac{1}{s}\right],[-]$
р	Druck	$\left[\frac{kg}{m\cdot s^2}\right]$
r	Radius	[m]
S	Dicke	[m]
t	Zeit	[<i>s</i>]
и	Strömungsgeschwindigkeit	$\left[\frac{m}{s}\right]$
x	Laufvariable (Ort)	[m]
Ζ	Ladungszahl	[-]
α	Wärmeübergangskoeffizient, Symmetriefaktor des Katalysators	$\left[\frac{W}{m^2 \cdot K}\right], [V]$
δ	Dicke	[m]
ε	Emissionsgrad	[-]
η	Dynamische Viskosität	$\left[\frac{kg}{m \cdot s}\right]$
θ	Temperatur	[° <i>C</i>]
λ	Wärmeleitfähigkeit	$\left[\frac{W}{m\cdot K}\right]$
υ	Kinematische Viskosität	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$
ρ	Dichte	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
$\Delta \Omega$	Vermeidbare Verluste	z.B. [<i>kWh</i>]
	Proportionalitätsfaktor zur Beschreibung der	[han2]
Υ	Abhängigkeit des Partialdruckes von der Stromdichte	$\left[\frac{bar \cdot cm}{A}\right]$

1 Einleitung

Das Thema Energie- und Ressourceneffizienz ist aktuell im Hinblick auf die Klimaschutzziele der Bundesregierung relevanter denn je. Der Klimaschutzplan 2050 [1] sieht eine Reduktion der Treibhausgasemissionen bis 2050 um 80 bis 95 Prozent im Vergleich zu 1990 vor. Damit soll Deutschland als führende Industrienation der EU als Vorbild dienen und eine weitgehende Treibhausgasneutralität bis 2050 erreichen. Zur Umsetzung dieses Ziels sind mitunter diverse Maßnahmen zur Vermeidung und Einsparung fossiler Energieträger notwendig. Eine wichtige Rolle spielen dabei effektive Methoden zur Bewertung der Energieeffizienz von Verfahren und Prozessen. Sie können dabei helfen Energieeinsparungspotential aufzudecken und damit die Verfahren und Prozesse energieeffizienter zu gestalten.

Eine Methode für die Bewertung und Steigerung der Energieeffizienz von Verfahren und Prozessen wurde 2014 von D. Volta [2] entwickelt. Sie betrachtet als ultimativen Referenzwert das sogenannte Physikalische Optimum (PhO). Dies ist ein physikalisch begründeter Grenzwert, der für den jeweiligen Prozess als maßgebend gilt und nicht zu überbieten ist. In dieser Arbeit geht es um die Betrachtung gekoppelter, also sich gegenseitig beeinflussender Prozesse und die Frage wie diese unter Berücksichtigung des Physikalischen Optimums optimiert werden können. Die Untersuchung erfolgt anhand zweier beispielhafter Prozesskopplungen. Im ersten Abschnitt werden die verfahrenstechnischen und thermodynamischen Grundlagen der jeweiligen Einzelprozesse behandelt, sowie eine detaillierte Einführung in die Methode des Physikalischen Optimums gegeben. Außerdem wird für jeden Einzelprozess das PhO definiert, um anschließend daraus auf ein PhO des Gesamtprozesses schließen zu können. Unterstützt werden die durchgeführten Untersuchungen mithilfe von MATLAB-Simulationen.

Das erste Beispiel einer Prozesskopplung ist ein beheizter Rührbehälter. Der Fokus liegt dabei auf der Ermittlung eines physikalisch optimalen Betriebspunktes, bei dem der Energieeinsatz zur Aufheizung von Wasser, um eine bestimmte Temperaturdifferenz, minimal ist. Der eingesetzte Rührer verbessert die Wärmeübertragung zwischen Heizquelle und dem im Behälter befindlichen Wasser, verbraucht dabei aber selbst eine gewisse Menge an Energie. Der physikalisch optimale Betriebspunkt wird simulativ ermittelt. Ob eine allgemeine Methodik für die Ermittlung von physikalisch optimalen Betriebspunkten bei gekoppelten Prozessen abgeleitet werden kann, wird im Anschluss diskutiert.

Das zweite Beispiel stellt die Kopplung einer Windenergieanlage (WEA) mit einem Wasser-Elektrolyseur dar, auch bekannt unter dem Begriff "Power-to-Hydrogen". Hierbei wird die durch die WEA erzeugte elektrische Energie zur Herstellung von Wasserstoff mittels des Elektrolyseverfahrens genutzt. Besonders im Hinblick auf die Einsparung fossiler Energieträger und die Flexibilisierung der Energiebereitstellung ist dies eine Variante der Prozesskopplung, bei der die energetische Optimierung eine entscheidende Rolle spielt. In den Untersuchungen erfolgt eine physikalisch optimale Dimensionierung der Elektrolysezellen für die dynamisch schwankende Leistung der WEA. Die Optimierungsmöglichkeiten, welche bei Windenergieanlagen bestehen, werden hierbei nicht näher behandelt. In der durchgeführten Simulation wird unter anderem untersucht, ob die größte zu erreichende Energieeffizienz zwangsläufig mit der ressourceneffizientesten Bauweise einhergeht und bei welcher Dimensionierung überhaupt von physikalisch optimal zu sprechen ist. Betrachtet werden dabei zwei unterschiedliche Elektrolyseverfahren, um etwaige Unterschiede im Hinblick auf die Dimensionierung zu untersuchen.

Die Arbeit beginnt mit der Behandlung relevanter thermodynamischer und verfahrenstechnischer Grundlagen. Anschließend werden verschiedene Methoden zur energetischen Bewertung von Verfahren und Prozessen vorgestellt, sowie Vor- und Nachteile dieser Methoden diskutiert. Anschließend wird die in dieser Arbeit verwendete Methode des Physikalischen Optimums näher betrachtet. Die darauffolgenden Kapitel beinhalten die simulative Betrachtung und Optimierung der ausgewählten Prozesskopplungen im Hinblick auf das Physikalische Optimum. Abschließend folgt eine Zusammenfassung der zentralen Ergebnisse und Erkenntnisse.

2 Grundlagen

In diesem Kapitel werden alle thermodynamischen und verfahrenstechnischen Grundlagen zu den Einzelprozessen der untersuchten Prozesskopplungen behandelt. Außerdem erfolgt neben der Vorstellung einiger Prozessbewertungsmethoden eine detaillierte Erläuterung zum Physikalischen Optimum.

2.1 Wärmeübertragung

Die Wärmeübertragung lässt sich in drei grundlegende Mechanismen aufteilen. Nachfolgend werden diese drei Wärmeübertragungsmechanismen Konvektion, Wärmeleitung und Strahlung erläutert. Treibende Kraft für die Übertragung von Wärme ist stets eine Temperaturdifferenz. Eine Wärmeübertragung ist immer mit einer Entropieänderung verbunden und daher ein irreversibler Prozess. Wärme wird in der Einheit Joule angegeben und stellt damit eine Energie dar. Sie fließt nach dem zweiten Satz der Thermodynamik selbstständig von höherer zu niedrigerer Temperatur. Von einem Wärmestrom spricht man, wenn Wärme in einem bestimmten Zeitintervall transportiert wird. [3]

Die erste Form in der Wärme übertragen werden kann ist die Wärmeleitung. Sie tritt in diffusive Festkörpern oder Fluiden durch Transportprozesse in Folge eines Temperaturunterschiedes auf. Die Wärmeleitung ist stoffgebunden und damit abhängig von den Materialeigenschaften des Stoffes, durch den die Wärme transportiert wird. Die Proportionalitätskonstante zwischen Temperaturdifferenz und Wärmestrom (Ursache und Wirkung) wird als Wärmeleitfähigkeit λ bezeichnet. Sie ist sowohl von der Temperatur als auch vom Druck abhängig, wobei die Druckabhängigkeit nur bei Flüssigkeiten und Gasen zu berücksichtigen ist. Die Temperaturabhängigkeit ist bei den meisten Materialien sehr gering, sodass sie ebenfalls häufig vernachlässigt werden kann. [4] Der Wärmestrom durch eine ebene Wand kann wie folgt beschrieben werden:

$$\dot{Q} = \lambda \cdot A \cdot \frac{\Delta T}{\delta} \tag{1}$$

λ	= Wärmeleitfähigkeit	[W/mŀ
А	= Wärmeübertragungsfläche	[m²]
Δ٦	$\Gamma = Temperaturdifferenz$	[K]
Δ	= Wanddicke	[m]

Die zweite Art der Wärmeübertragung stellt die Konvektion dar. Hier wird die Energie nicht nur durch reine Wärmeleitung, sondern auch durch die Bewegung des Fluids transportiert. Besonders relevant ist der Vorgang der Konvektion beispielsweise bei der Strömung von Fluiden an Wänden oder Rohrleitungen. Je nachdem wie die Strömungsverhältnisse des Fluides an der betrachteten Wandung sind, kann die Wärmeübertragung besser oder schlechter ablaufen. Grund hierfür ist die unterschiedliche Ausbildung der Grenzschicht. Die exakte Berechnung des Wärmestroms ist aufgrund der Abhängigkeit vom Temperatur- und

υ

a = Temperaturleitfähigkeit

Geschwindigkeitsfeld Fluid besonders aufwändig. im Daher wurde der Wärmeübergangskoeffizient α eingeführt, der ähnlich der Wärmeleitfähigkeit bei der Wärmeleitung eine Proportionalität zwischen Wärmestrom und Temperaturdifferenz herstellt. Doch auch die exakte Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten ist sehr aufwendig. Nur in sehr einfachen Fällen wie beispielsweise einer ausgebildeten laminaren Rohrströmung lassen sich mithilfe partiellen Differentialgleichungen Werte für von den Wärmeübergangskoeffizienten ermitteln. Es ist daher essenziell Experimente durchzuführen, um aus den ermittelten Wärmeströmen und Wand- sowie Fluidtemperaturen örtliche bzw. mittlere Wärmeübergangskoeffizienten abzuleiten. Da die konvektive Wärmeübertragung von vielen geometrischen, strömungstechnischen und materialspezifischen Einflussgrößen abhängig ist und die damit verbundenen notwendigen Versuche ein immenses Ausmaß annehmen würden, wird auf die sogenannte Ähnlichkeitstheorie zurückgegriffen. Die Bildung von dimensionslosen Kennzahlen verringert den Versuchsaufwand enorm. Vorteil ist, dass bei ähnlichen Kennzahlen auch von ähnlichen geometrischen, strömungstechnischen und materialtechnischen Verhältnissen ausgegangen werden kann. Statt alle Einflussgrößen in den Experimenten simulieren zu müssen, werden nur die dimensionslosen Kennzahlen variiert. Um den Wärmeübergang zu beschreiben wird die dimensionslose Nußelt-Zahl definiert:

$$Nu = \frac{\alpha \cdot L}{\lambda_F}$$
(2)
 $\alpha = W \ddot{a}rme \ddot{u} bergangskoeffizient [W/m^2K]$
 $L = charakteristische Länge [m]$
 $\lambda_F = W \ddot{a}rmele itf \ddot{a}higkeit des Fluids [W/mK]$

Die Nußelt-Zahl ist eine Funktion von der Reynolds- und der Prandtl-Zahl. Die Reynolds-Zahl beschreibt das Verhältnis von Trägheits- zu Zähigkeitskräften.

$$Re = \frac{u_{\infty} \cdot L}{v}$$
(3)
 $u_{\infty} = \text{Strömungsgeschwindigkeit} \qquad [m/s]$
 $v = \text{kinematische Viskosität} \qquad [m^2/s]$

Die Prandtl-Zahl beschreibt das Verhältnis von kinematischer Viskosität und Temperaturleitfähigkeit in reibungsbehafteten Strömungen:

$$Pr = \frac{v}{a} \tag{4}$$
[m²/s]

Die das Wärmeübergangsproblem beschreibenden Grenzschichtgleichungen werden durch die Reynolds- und Prandtl-Zahl beschrieben. Werden zwei geometrisch ähnliche Strömungen mit unterschiedlichen Abmessungen, Geschwindigkeiten, Temperaturen und Stoffwerten betrachtet und kommt es dabei zu gleichen Werten für Reynolds und Prandtl, dann sind die Temperatur- und Geschwindigkeitsfelder auch ähnlich. Es ergibt sich eine identische NußeltZahl, aus der sich wiederum der Wärmeübergangskoeffizient errechnen lässt. Für gewisse geometrische Anwendungsfälle gibt es zur Berechnung der Nußelt-Zahl analytische oder empirisch hergeleitete Lösungen, vgl. [4].

Die Konvektion lässt sich in zwei Kategorien einteilen. Zum einen gibt es die natürliche Konvektion, bei der Temperaturdifferenzen zu Dichteunterschieden führen und so eine natürliche Auftriebs- bzw. Abtriebsströmung zwischen Fluid und Festkörper entsteht. Die Wärmeübergangskoeffizienten sind bei der natürlichen Konvektion eher klein. Soll eine Wärmeübertragung zwischen Fluid und Festkörper begünstigt werden, so wird in der Praxis das Fluid oft durch bspw. Pumpen oder Ventilatoren in Bewegung gesetzt. In diesem Fall spricht man von erzwungener Konvektion. Die höheren Strömungsgeschwindigkeiten sorgen für größere Wärmeübergangskoeffizienten und damit für einen besseren Wärmestrom.

Die letzte Form der Wärmeübertragung ist die Strahlung. Sie ist im Gegensatz zu den bisher vorgestellten Wärmeübertragungsmechanismen nicht an Materie gebunden. Die Wärme wird in Form von elektromagnetischen Wellen übertragen. Die Energie kann so auch durch ein Vakuum transportiert werden. Zwar wird bei der Wärmestrahlung auch Wärme von einem warmen zu einem kalten Körper übertragen, jedoch ist hier nicht die Temperaturdifferenz maßgebend, sondern die Absolute Temperatur der beteiligten Körper. Die Intensität der Wärmestrahlung ist zudem temperaturabhängig. Jeder Körper mit einer Temperatur größer dem Absoluten Nullpunkt strahlt eine gewisse Wärmeenergie ab. Zwischen der insgesamt von einem Körper emittierten Strahlung und der absoluten Temperatur besteht folgender Zusammenhang:

$$\dot{q}_s^{\prime\prime} = \sigma \cdot T^4 \tag{5}$$

Wobei $\sigma = 5,67*10^{-8}$ W*m*⁻²K⁻⁴ die Boltzmann-Konstante ist. Dieser Zusammenhang gilt jedoch nur für einen "schwarzen" Körper, der dadurch gekennzeichnet ist, alle ankommende Strahlung zu absorbieren. [3] Die Wärmestrahlung wird in dieser Arbeit jedoch mithilfe eines äquivalenten Strahlungswärmeübergangskoeffizienten berechnet, weshalb für die weitere Theorie zur Wärmestrahlung auf [4] verwiesen wird.

Im Folgenden wird der Ansatz zur Bestimmung eines den Strahlungsverlusten äquivalenten Wärmeübergangskoeffizienten erläutert. Grundlage bildet die VDI Richtlinie 2055 (Wärmeund Kälteschutz von betriebstechnischen Anlagen) [5]. In dieser Richtlinie wird für die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Oberfläche und Umgebung durch Strahlung, bei Temperaturdifferenzen unter 150 K, folgender Zusammenhang verwendet:

$$\alpha_r = 4 \cdot C_{12} \cdot T_m^{3} \tag{6}$$

mit

$$C_{12} = \varepsilon_1 \cdot \sigma \tag{7}$$

und

$$T_m = \frac{1}{2} \cdot (\vartheta_0 + \vartheta_{air}) + 273,15K \tag{8}$$

ε_1 = Emissionsgrad der Behälteroberfläche	[-]
ϑ_0 = Temperatur der Behälterwand	[K]
$\vartheta_{air} = Umgebungstemperatur$	[K]

2.1.1 Instationäre Wärmeübertragung

Da es sich bei der Aufheizung des Rührbehälters um einen instationären Vorgang handelt, werden nachfolgend zwei Ansätze zur Berechnung von instationärer Wärmeübertragung vorgestellt. Von instationärer Wärmeübertragung spricht man, wenn es sowohl zu zeitlich als auch zu örtlich unterschiedlichen Zustandsgrößen, wie der Temperatur, kommt. Der erste Ansatz betrachtet dabei instationäre Wärmeleitung in geometrisch einfachen Körpern mit zusätzlichem konvektiven Wärmeübergang. Die Differentialgleichung (DGL) für ebene, eindimensionale Probleme lautet:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho \cdot c} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{9}$$

Die analytische Lösung dieser DGL für Körper mit endlicher Ausdehnung ist kompliziert, weshalb auf Lösungsdiagramme für bestimmte einfache geometrische Formen zurückgegriffen wird. Diese können dem VDI-Wärmeatlas [6] entnommen werden. Um dabei die Zahl der benötigten Diagramme klein zu halten, werden die Gleichungen und Parameter, die das Wärmeübertragungsproblem beschreiben dimensionslos angegeben. In Abbildung 2.1 ist ein solches Lösungsdiagramm beispielhaft für die Form eines Zylinders dargestellt. [3]



Abbildung 2.1: Lösungsdiagramm zur Ermittlung der Temperatur in der Zylindermitte [3]

Auf der Ordinate ist die dimensionslose Temperatur der Zylindermitte aufgetragen. Zur Ermittlung dieser wird neben der Fourier-Zahl auch die Biot-Zahl benötigt, welche auf der Abszisse aufgetragen ist. Beides sind dimensionslose Kennzahlen, die das Wärmeübertragungsproblem beschreiben. Wird ein zugehöriger Wert für die dimensionslose Temperatur abgelesen, kann mithilfe der bekannten Umgebungs- und Anfangstemperatur des Zylinders die Temperatur in der Zylindermitte berechnet werden.

Der zweite Ansatz zur Berechnung instationärer Wärmeübertragung nennt sich "Methode der Blockkapazität" bzw. "ideal gerührter Behälter". Die grundlegende Annahme bei diesem Ansatz ist, dass die Temperatur im betrachteten Körper oder Fluid überall gleich ist. Diese Annahme kann jedoch nur getroffen werden, wenn entweder der Wärmeleitwiderstand des Körpers kleiner ist als der Wärmeübergangswiderstand zwischen Körper und Fluid oder das Fluid "ideal gerührt" ist, sodass sich eine nahezu gleichmäßige Temperatur im Fluid einstellt. Die Wärmeleitung im Körper oder Fluid wird damit vernachlässigt und es ergibt sich eine Wärmeübertragung, welche nur von der Konvektion des umgebenen Fluids abhängig ist. Mithilfe der Energiebilanz lässt sich für konkrete Beispiele eine Gleichung zur Berechnung des zeitlichen Temperaturverlaufes ermitteln. Nachfolgend wird dies am Beispiel eines Körpers, welcher von einem Fluid höherer Temperatur umgeben ist, hergeleitet. Abbildung 2.2 zeigt dieses Beispiel mit den zugehörigen Parametern und Randbedingungen. [3]





Entsprechend der Energiebilanz ergibt sich nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik:

$$\frac{dU}{dt} = \dot{Q} = \alpha \cdot A \cdot (T_U - T) \tag{10}$$

Wobei die Änderung der inneren Energie durch folgenden Term ersetzt werden kann:

$$\frac{dU}{dt} = \rho \cdot c \cdot V \cdot \frac{dT}{dt} \tag{11}$$

Nach Umformung folgt damit:

$$\rho \cdot c \cdot V \cdot \frac{dT}{dt} = -\alpha \cdot A \cdot (T - T_U) \tag{12}$$

Nach Trennung der Variablen und Integration ergibt sich:

$$T - T_U = C_1 \cdot e^{\left(-\frac{\alpha \cdot A}{\rho \cdot c \cdot V} \cdot t\right)}$$
(13)

Für die Lösung der DGL wird folgende Anfangsbedingung angenommen:

$$t = 0: T = T_0 \tag{14}$$

Es ergibt sich nach Umformung folgende Gleichung zur Ermittlung des zeitlichen Temperaturverlaufs im Körper:

$$T(t) = T_U + (T_0 - T_U) \cdot e^{\left(-\frac{\alpha \cdot A}{\rho \cdot c \cdot V} \cdot t\right)}$$
(15)

2.1.2 Wärmeübergang im Rührbehälter

Für die Berechnung des Wärmestroms durch die Wand des Rührbehälters wird unter anderem der innere Wärmeübergangskoeffizient benötigt. Dieser lässt sich in Abhängigkeit des eingesetzten Rührers und seiner Drehgeschwindigkeit anhand folgender Gleichung berechnen. [6]

$$\alpha_i = \frac{Nu \cdot \lambda}{d_B} \tag{16}$$

Die Nußelt-Zahl beim Einsatz eines Ankerrührers, siehe Abbildung 2.3, lässt sich für den Heizfall nach Zlokarnik [7] mit folgender Gleichung berechnen.

$$Nu = 0.358 \cdot (Re \cdot Pr^{\frac{1}{2}} + 4000)^{\frac{2}{3}} \cdot (\frac{v}{v_W})^{-m}$$
(17)

mit

$$Re = \frac{n \cdot d_R^2 \cdot \rho}{\eta} \tag{18}$$

und

. .

$$Pr = \frac{v}{a} \tag{19}$$

n = Drehzahl	[1/s]
$d_R = R$ ührerdurchmesser	[m]
$d_{\rm B} = {\rm Beh\"alterdurchmesser}$	[m]
$\rho = \text{Dichte}$	[kg/m³]
$\eta = dynamische Viskosität$	[kg/m*s]
v_w = kinematische Viskosität bei Wandtemperatur	[m²/s]

Gültigkeitsbereiche:

$$1 < Re < 10^5$$

 $3 \le Pr \le 3,6 \cdot 10^4$

Die Gleichung (17) zur Berechnung der Nußelt-Zahl gilt nur für bestimmte geometrische Verhältnisse (vgl. [6], S. 1625) und die angegebenen Bereiche der Reynolds- und Prandtl-Zahl. Geringfügige Abweichung dieser Gültigkeitsbereiche lassen jedoch keine sprunghaften Änderungen zwischen Messungen und theoretischen Berechnungen erwarten. [6] Der Exponent *m* des Viskositätsterms wird mit einer separaten Formel berechnet, die hier nicht weiter erläutert wird, da die in dieser Arbeit untersuchten Temperaturdifferenzen keine merklichen Änderungen der kinematischen Viskosität hervorrufen und der gesamte Viskositätsterm daher \approx 1 ist. Für alle weiteren Stoffwerte, die in den Gleichungen (16) bis (19) Anwendung finden, gilt der Bezug zur mittleren Temperatur des Fluids.

2.2 Rührerleistung

Der Rührer erfüllt in Bezug auf das in dieser Arbeit untersuchte Beispiel zwei Aufgaben. Zum einen sorgt die durch den Rührer erzeugte Durchmischung im Fluid für eine gleichmäßige Temperaturverteilung, zum anderen wird der Wärmeübergang zwischen der Heizfläche und dem Fluid intensiviert. Der für die spätere Simulation gewählte Rührertyp wird Ankerrührer genannt und ist beispielhaft in Abbildung 2.3 dargestellt.



Abbildung 2.3: Beispielhafte bildliche Darstellung eines Ankerrührers [6]

Dieser Rührertyp ist besonders geeignet für die Intensivierung des Wärmeübergangs [7] und wurde auch, in geometrisch leicht abweichender Form, in den Versuchen im Rahmen einer Hausarbeit [8] an der HAW verwendet. Die Berechnung des Einflusses auf den Wärmeübergang wurde im vorherigen Kapitel erläutert. Nun wird die Ermittlung der minimal benötigten Leistung des Ankerrührers vorgestellt, welche sich einer dimensionslosen Kennzahl bedient. Diese Kennzahl wird Newton-Zahl genannt und ist durch Gleichung (20) definiert.

$$Ne = \frac{P_{R\ddot{u}hrer,PhO}}{\rho \cdot n^3 \cdot d_R^5} \tag{20}$$

Aus dieser Beziehung lässt sich die Rührerleistung $P_{Rührer,PhO}$ ermitteln. Die Newton-Zahl selbst ist für den Ankerrührer nur von der Reynolds-Zahl abhängig und gilt für newtonsche Flüssigkeiten und einphasige Flüssigkeiten. Wichtig ist, dass das geometrische Verhältnis zwischen dem betrachteten Rührer und Behälter, dem der empirischen Gleichung vorausgesetzten Verhältnis entspricht. Die für die Simulation verwendeten Gleichungen der Newton-Zahl werden nun in Bezug auf die Gültigkeitsbereiche vorgestellt. Leichte Abweichungen in den Gültigkeitsbereichen führen wie auch bei dem Wärmeübergang nicht automatisch zu sprunghaften Änderungen der berechneten Werte.

$$Ne = \frac{3}{Re^{0.2}} \quad \text{(für 167 < Re < 5 · 10^4) [6]}$$
(21)

$$Ne = 0.35$$
 (für Re = 10⁵) [7] (22)

Die berechneten Leistungen stellen nur die Leistung dar, welche zum Antrieb des Rührers notwendig ist, Verlustleistungen durch das Getriebe oder die Wellendichtung sind nicht inkludiert. [7]

2.3 Elektrolyse

Elektrolyse beschreibt im Allgemeinen die Zersetzung eines festen oder flüssigen Ionenleiters, auch Elektrolyt genannt, durch Anlegen eines Gleichstromes. Entdeckt wurde dieses Verfahren 1800 durch William Nicholson und Anthony Carlisle. Sie zersetzten Wasser mithilfe der Elektrolyse in die Grundbestandteile Wasserstoff und Sauerstoff. [9] In der heutigen Zeit wird die Wasserelektrolyse vornehmlich eingesetzt, um reinen Wasserstoff für industrielle Zwecke zu gewinnen oder zur Speicherung von Überschussenergie erneuerbarer Energiequellen. Die Funktionsweise der Wasserelektrolyse wird im Folgenden anhand von Abbildung 2.4 näher erläutert.



Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Wasserelektrolyse (modifizierte Darstellung) [10]

In den Elektrolyten (H₂O) werden 2 Elektroden eingetaucht und mit einer Gleichspannung versorgt. Die Anode und die Kathode sind dabei im Elektrolyten durch einen gasdichten aber für Ionen semipermeablen Separator voneinander getrennt. So wird verhindert, dass sich die entstehenden Reaktionsgase vermischen und gleichzeitig wird der für die Elektrolyse notwendige Ionenaustausch ermöglicht. Durch die angelegte elektrische Spannung entsteht ein Elektronenfluss von der Anode zur Kathode. An der Kathode herrscht ein Elektronenüberschuss und an der Anode ein Elektronenmangel. Positiv geladene Wasserstoffionen wandern von der Anode durch den semipermeablen Separator und reagieren an der Kathode mit zwei Elektronen zu molekularem Wasserstoff, der an der Kathode aufsteigt und gesammelt werden kann. Für die Anode und Kathode lassen sich entsprechende Teilreaktionen aufstellen.

(-) Kathode
$$2H_2O + 2e^- \rightleftharpoons H_2 + 2OH^-$$

(+) Anode
$$20H^- \rightleftharpoons \frac{1}{2}O_2 + 2e^- + H_2O$$

Als Gesamtreaktion ergibt sich:

Gesamt:
$$H_2 O \rightarrow \frac{1}{2}O_2 + H_2$$

Damit die Elektrolyse ablaufen kann wird eine minimale Spannung, die sogenannte reversible Zellspannung benötigt. Unter Standardbedingungen (25°C, 1 bar) beträgt diese für die Wasserelektrolyse 1,23 Volt. In der Realität müssen jedoch etwas höhere Spannungen angelegt

werden, damit die Reaktion stattfinden kann. Grund hierfür sind Überspannungen, welche sowohl durch den ohmschen Widerstand der Zelle (Elektroden, Leitungen, Separator und Elektrolyt), als auch durch kinetische Hemmungen beim Ladungsübergang zwischen Elektroden und dem Elektrolyten entstehen. Ist die notwendige Zersetzungsspannung erreicht, so lässt sich die Masse des elektrolytisch gebildeten Wasserstoffs nach dem Faraday'schen Gesetz nach Gleichung (23) berechnen.

$\dot{n}_{real,H2} = \frac{I}{z \cdot F}$	$\mathbf{r} = \frac{P_{el}}{z \cdot F \cdot U_{real}}$	(23)
$\dot{n}_{real,H2}$ = Realer Stoffmengenstrom des H ₂	[mol/h]	
<i>I</i> = Stromstärke	[A]	
z = Ladungszahl	[-]	
F = Faraday-Konstante	[(A*s)/mol]	
P_{el} = Elektrische Leistung	[W]	
U_{real} = Reale Zellspannung	[V]	

Der Stoffumsatz ist nach Faraday proportional zur aufgewendeten elektrischen Leistung. Die Dimension der elektrischen Leistung ist dabei von der Größe und Art des Elektrolyseurs sehr unterschiedlich. Deshalb wird der Stromfluss in einer Elektrolysezelle üblicherweise auf die Elektrodenoberfläche bezogen und über die Stromdichte, siehe Gleichung (24), ausgedrückt. [11]

$$j = \frac{I}{A} = \frac{P_{el}}{A \cdot U_{real}}$$
(24)
j = Stromdichte [A/cm²]
A = Elektrodenoberfläche [cm²]

Aus wirtschaftlicher Sicht sollte die Stromdichte so hoch wie möglich sein, um möglichst viel Wasserstoff zu produzieren. Je höher die Stromdichte jedoch ist, desto höher werden auch die Überspannungen und der Wirkungsgrad der Elektrolysezelle sinkt.

Ein großer Vorteil des Verfahrens der Elektrolyse ist die hohe Dynamik. Elektrochemische Vorgänge reagieren nahezu verzögerungsfrei auf Lastwechsel, sodass sie auch bei fluktuierenden elektrischen Leistungen eingesetzt werden können. [12]

2.3.1 Alkalische Elektrolyse

Die alkalische Elektrolyse (AEL) ist das am häufigsten verwendete Verfahren bei der Wasserelektrolyse. Sie ist seit vielen Jahrzehnten etabliert und wird in unterschiedlichen Größen und Leistungsklassen hergestellt. Die größten Anlagen erreichen bei 3,4 MW eine Wasserstoffproduktion von etwa 760 Nm³/h. Als Elektrolyt dient hier eine KOH-Lauge mit einer typischen Konzentration von 20-40%. [13] Sie erhöht die elektrische Leitfähigkeit des Wassers und begünstigt die Bildung von OH⁻-Ionen. Die Reaktion an den Elektroden findet

statt, wie in Kapitel 2.3 beschrieben. Die alkalische Elektrolyse zeichnet sich durch hohe Langlebigkeit und geringe Investitionskosten von ca. 1.500 €/kW aus. [14] Nachteile sind der geringe Teillastbereich, welcher nur bis ca. 40% der Nennlast reicht und die Komplexität und Baugröße der Anlagen. [13] [12] Die Stromdichte bei AEL Elektrolyseuren liegt zurzeit im Bereich von 0.2-0.5 A/cm² und ist damit im Vergleich zu PEM Elektrolyseuren recht niedrig. [15]

2.3.2 PEM – Elektrolyse

Die PEM (Proton Exchange Membrane) Elektrolyse gehört zu den neueren Verfahren, das erst vor ca. 25 Jahren entwickelt wurde und welches gewisse Vorteile gegenüber der alkalischen Elektrolyse aufweist, allerdings nur deutlich kleinere Leistungsklassen abdeckt. Der schematische Aufbau einer PEM-Elektrolysezelle ist in Abbildung 2.5 dargestellt.



Abbildung 2.5: Schematischer Aufbau einer PEM-Elektrolysezelle [16]

Der größte Unterschied zur AEL liegt bei der PEM-Elektrolysezelle darin, dass die Elektroden nicht in im Elektrolyten schwimmen. Es wird lediglich die Anode mit flüssigem Wasser (ohne Laugenbeimischung) über sogenannte Strömungsplatten versorgt. An der Anode entsteht Sauerstoff und die H⁺ Ionen wandern durch die semipermeable Membran auf die Kathodenseite. Hier bildet sich analog zu der elektrochemischen Reaktion der alkalischen Elektrolyse gasförmiger Wasserstoff und praktisch kein flüssiges Wasser. Der Transport der H⁺ Ionen erfolgt durch einen sauren Elektrolyten, der fester Bestandteil der PEM ist. Wie durch den Aufbau erkennbar ist, handelt es sich bei dieser Art der Elektrolyse um eine deutlich kompaktere Bauweise. Allerdings sind die Investitionskosten mit ca. 2300 €/kW deutlich höher. [14] Ein Vorteil gegenüber der AEL ist der deutlich größere Teillastbereich, er ermöglicht einen Betrieb bis zu 5% der Nennleistung. [12] Die Stromdichte bei der PEM-Elektrolyse liegt im Bereich von 1-2 A/cm² und ist damit etwa um den Faktor zehn größer als die der AEL-Elektrolyse. [15]

2.4 Windenergie

In Deutschland gab es 2019 insgesamt 29.456 Onshore-Windenergieanlagen (WEA) mit einer kumulierten installierten Leistung von ca. 54.000 Megawatt. [17] Dies entspricht ca. 33 Kohlekraftwerke von der Größe in Hamburg-Moorburg. [18] Windenergieanlagen nutzen zur Erzeugung elektrischen Stroms die kinetische Energie des Windes. Die Energiewandlung findet dabei in 2 Schritten statt. Zunächst wird die kinetische Energie des Windes mithilfe der Rotorblätter in Rotationsenergie einer Welle gewandelt, anschließend wandelt ein Generator diese Energie in elektrische Energie um. Der schematische Aufbau einer 3-Blatt WEA ist in Abbildung 2.6 dargestellt.



Abbildung 2.6: Schematische Darstellung einer WEA [19]

Die größten Anlagen haben aktuell eine elektrische Nennleistung von 12 Megawatt. [20] Typische Windgeschwindigkeiten, bei denen WEA arbeiten liegen zwischen 3 m/s und 25 m/s. Ein wichtiger Faktor im Zusammenhang mit WEA stellt der Betz-Faktor dar. Er gibt an wieviel der kinetischen Energie des Windes maximal durch die Rotorblätter in Rotationsenergie umgewandelt werden kann. Die Herleitung dieses Faktors ist in [19] genauer beschrieben. Der Wert beläuft sich auf 0,59, damit sind unter optimalen Bedingungen nur 59% der im Luftstrom enthaltenen mechanischen Leistung tatsächlich entnehmbar. Aerodynamisch optimierte Anlagen schaffen heute Werte von ca. 52%. [21]

2.5 **Prozessbewertung**

Zur Steigerung der Energie- und Ressourceneffizienz von technischen Prozessen und Verfahren gibt es heutzutage eine Reihe von systematischen Vorgehensweisen. Die Ableitung entsprechender Optimierungsmaßnahmen basiert dabei häufig auf einem Vergleich des realen Prozesses mit einem Referenzprozess, der beispielsweise den minimalen Aufwand oder theoretisch maximalen Nutzen festlegt. Wird zwischen diesen beiden Werten das Verhältnis gebildet, so kann die daraus resultierende Kennzahl ein Maß für die Effizienz des betrachteten Prozesses oder Verfahrens darstellen.

Die jeweiligen Bewertungsmethoden legen für die Bewertung der Energie- und Ressourceneffizienz dabei unterschiedliche Referenzprozesse fest.

Der Wirkungsgrad beispielsweise bildet das Verhältnis von realem Nutzen und realen Aufwand. Der reale Aufwand spiegelt dabei den maximalen Nutzen des Prozesses, entsprechend des Energieerhaltungssatzes, wider. Die gegenübergestellten Werte entsprechen jeweils den real messbaren Werten des Prozesses. Ein Wirkungsgrad von 100% entspricht daher dem reversiblen Grenzfall, der nie erreicht werden kann und damit einem Perpetuum Mobile 2. Art. Das tatsächliche durch Verbesserungsmaßnahmen erreichbare Effizienzsteigerungspotential lässt sich daher nicht mit dem Wirkungsgrad darstellen.

Andere Methoden bzw. Kennzahlsysteme ermöglichen es das Optimierungspotential darzustellen, indem sie als Referenzprozess das potenzielle Optimum des betrachteten Prozesses oder Verfahrens berücksichtigen. Ein Beispiel für solch ein Kennzahlensystem ist die EU-Energieverbrauchskennzeichnung. [22] Diese Kennzeichnung wurde zuletzt 2011 überarbeitet und ist für Geräte wie Waschmaschinen, Kühlschränke und Fernseher verpflichtend. Die Einteilung erfolgt dabei in sogenannte Energieeffizienzklassen, die Stand 2020 von der Klasse A+++ (Stromverbrauch niedrig) bis zur Klasse D (Stromverbrauch hoch) reichen. Dabei dient der Stromverbrauch eines Referenzgerätes als Bezug zur Bewertung der Energieeffizienz. Die Wahl des Referenzgerätes wurde jedoch über viele Jahre hin nicht aktualisiert, was dazu führte, dass immer mehr Geräte in die beste Energieeffizienzklasse fielen. Das Bestreben der Unternehmen ihre Geräte weiterhin energetisch zu optimieren wurde dadurch gebremst.

Die grundlegende Idee einen Prozess oder ein Verfahren anhand des derzeitigen Stands der Technik zu bewerten ist zwar praktikabel, ist jedoch häufig mit einem sehr großen Aufwand verbunden, da die Bewertung regelmäßig anhand eines neuen Referenzwertes durchgeführt werden muss. Somit geht eine einheitliche Basis als Grenzwert verloren. Für die Bewertung der Energie- und Ressourceneffizienz eignet sich daher die Methode des Physikalische Optimums, welche als Referenz einen ultimativen Referenzprozess definiert, der das maximal erreichbare Optimierungspotential im Hinblick auf die technischen und physikalischen Möglichkeiten berücksichtigt.

Die Methode des Physikalischen Optimums wurde 2014 von D. Volta erarbeitet und dient als Bewertungsmethode zur Ermittlung von Energie- und Ressourceneinsparungspotential von verschiedensten Prozessen und Verfahren. Die Bewertung von Prozessen mit dem PhO bietet hier einen großen Vorteil, da ein ultimativer, von Naturgesetzen festgelegter, Referenzwert definiert wird. Dieser Wert kann für den jeweilig untersuchten Prozess nicht überschritten bzw. unterschritten werden. Als Basis dienen hier die Grenzen der Physik, Chemie und Biologie. Vermeidbare Einflüsse wie Reibung, Wärmeverluste, Teillastverhalten etc. werden bei der Definition des Referenzwertes nicht berücksichtigt. [2]

In der Dissertation von C. Keichel zum Thema "Methode der grenzwertorientierten Bewertung" wurde die Methode des Physikalischen Optimums erweitert und zwei Perspektiven eingeführt, aus denen man die PhO-Faktoren betrachten kann. Der PhO-Faktor der Bedarfsperspektive wurde von C. Keichel als Verhältnis vom realen Aufwand an Energie oder Ressource eines Prozesses zu dem physikalisch optimalen Nutzen definiert. Als Beispiel kann hier die notwendige mechanische Energie eines Förderbandes erwähnt werden. Die tatsächlich benötige Energie dafür wird aufgrund von Verlusten immer größer sein. Je mehr Energie tatsächlich für das Förderband benötigt wird, desto größer wird der Faktor.

$$F_{PhO}^{B} = \frac{Aufwand}{Nutzen (PhO)} = \frac{B}{B_{PhO}} \ge 1$$
 (25)

Der Faktor gibt in diesem Fall den Mehrverbrauch des Prozesses an und kann im besten Falle den Wert Eins erreichen (Gleichung (25)). C. Keichel hat zusätzlich zu der gerade dargelegten Bedarfsperspektive, die Verbrauchsperspektive entwickelt (Gleichung (26)). Damit lassen sich PhO-Faktoren für Prozesse entwickeln, die aus Sicht der Bereitstellung von Energie oder Ressourcen betrachtet werden, also verbrauchende Prozesse sind. Als Beispiel soll hier die Bereitstellung von Wasserdampf dienen. Mit einer bestimmten Menge an Energie lässt sich bei optimalen Bedingungen eine gewisse Menge Wasserdampf erzeugen. Die tatsächlich erzeugte Menge an Wasserdampf wird in der Realität jedoch immer kleiner ausfallen. Der Faktor erreicht im Idealfall den Wert Eins und bleibt ansonsten kleiner als Eins.

$$F_{PhO}^{V} = \frac{Nutzen}{Aufwand (PhO)} = \frac{V}{V_{PhO}} \le 1$$
(26)

Die bisherige Betrachtung des PhO lässt eine Bewertung der Prozesse nur in einem bestimmten Zeitintervall zu. Es sind gemittelte Werte, die für die Bildung der Faktoren herangezogen werden. Die Effizienz des Prozesses bei der Inbetriebnahme oder im Teillastbetrieb lässt sich somit nicht direkt bewerten. Hierfür entwickelte C. Keichel den PhO-Leistungsfaktor, um eine kontinuierliche Bewertung der Prozesse zu ermöglichen. Der Faktor lässt sich analog zu den PhO-Faktoren aus Gleichung (25) und (26) bestimmen, setzt dabei aber die reale Leistung ins Verhältnis zur physikalisch optimalen Leistung. [23]

$$f_{PhO}^{B} = \frac{\dot{B}}{\dot{B}_{PhO}} \tag{27}$$

Ein Vorteil des PhO gegenüber des Wirkungsgrades ist, dass der definierte Grenzwert das tatsächlich physikalisch mögliche Optimierungspotential eines Prozesses oder Verfahrens aufzeigen kann. Der Wert 1 des PhO-Faktors ist physikalisch erreichbar und verletzt dabei keine Grundsätze der Thermodynamik. Einen Prozess auf den Wirkungsgrad von 1 hin zu optimieren ist hingegen nicht möglich, da sonst der zweite Hauptsatz der Thermodynamik verletzt wird.

Im Gegensatz zu den beschriebenen EU-Energieeffizienzklassen, muss der ideale Referenzprozess, also das PhO, für einen Prozess einmalig definiert werden und ändert sich nicht mit dem Stand der Technik.

2.6 PhO – vermeidbare und unvermeidbare Verluste

Die bisherige Definition des Physikalischen Optimums setzt weitestgehend stationäre Prozesse voraus und betrachtet auftretende Verluste nicht explizit. Generell können bei Prozessen vermeidbare Verluste auftreten, die es im Optimierungsprozess zu minimieren gilt und unvermeidbare Verluste auftreten, die trotz bestmöglicher Auslegung bzw. Konstruktion nicht abgeschaltet werden können. Besonders bei diskontinuierlich ablaufenden Prozessen, wie zum Beispiel dem Aufheizen und Abkühlen eines Rührbehälters kann es zu unvermeidbaren Verlusten kommen. Neben dem eigentlichen Nutzen, dem Aufheizen eines Fluides, müssen sowohl der Behälter als auch der Rührer mit aufgeheizt werden. Dies ist eine zusätzlich benötigte Energie, die nicht für den eigentlichen Nutzen verwendet werden kann. Dementsprechend größer wird die Abweichung der PhO-Faktoren vom Wert 1 bei solch einer Art von Prozessen ausfallen. Für die Betrachtung von kontinuierlichen und diskontinuierlichen Prozessen ist es daher sinnvoll vermeidbare und unvermeidbare Verluste systematisch im PhO zu berücksichtigen, um das tatsächlich mögliche Effizienzsteigerungspotential ermitteln zu können. Generell ist eine Effizienzsteigerung vorwiegend zu erreichen, wenn der Fokus auf die Verminderung der vermeidbaren Verluste gesetzt ist. Bisher wurden Verluste zwar in den Kennzahlen berücksichtigt, jedoch ohne dabei eine bestimmte Methodik zur bilanziellen Ermittlung des PhO zu nutzen. In der nachfolgenden Abbildung 2.7 wird die Idee der Berücksichtigung unvermeidbaren Verluste an einer einfachen Bilanz verdeutlicht. Das PhO eines Bedarfsprozesses wird demnach aus der Summe des minimalen physikalischen Bedarfs $B_{phys.min}$ und den unvermeidbaren Verlusten \dot{U} gebildet. Der tatsächlich benötigte Bedarf (Aufwand) wiederum setzt sich aus dem physikalisch optimalen Bedarf \dot{B}_{PhO} und den vermeidbaren Verlusten $\Delta \Omega$ zusammen. [24]



Abbildung 2.7: Bilanzdarstellung zur Erläuterung vermeidbarer und unvermeidbarer Verluste in Bezug auf das PhO [24]

$$\dot{B}_{PhO} = \dot{B}_{phys.min} + \dot{U} \tag{28}$$

Somit kann bewiesen werden, dass die unvermeidbaren Verluste bereits im physikalisch optimalen Nutzen mitberücksichtigt sind und, dass das PhO nicht immer gleichzusetzen ist mit dem physikalisch minimal notwendigen Bedarf. Darüber hinaus führen alle weiteren Verluste zu einem erhöhten Aufwand.

$$\dot{B} = \dot{B}_{PhO} + \Delta\Omega \tag{29}$$

In der Dissertation von C. Keichel wurde der PhO-Leistungsfaktor nach Gleichung (27) in Bezug auf unterschiedliche Betriebszustände, also Inbetriebnahme und Abschaltung sowie Teillastbetrieb betrachtet. In Abbildung 2.8 ist ein Diagramm dargestellt, aus dem beispielhaft für einen Prozess hervorgeht, wie sich das Verhältnis von realer und physikalisch optimaler Leistung mit der Zeit verändert. Die Betrachtung des Prozesses erfolgt aus der Bedarfsperspektive. Prozesszustand 1 und 2 stellen die Inbetriebnahme, Prozesszustand 5 und 6 das Abschalten des Prozesses dar. Typisch für diese Zustände ist, dass der Nutzen, also zum Beispiel die Erzeugung von Wasserdampf noch niedrig ist, die aufgewendete Energie jedoch hoch. Der Leistungsfaktor, gekennzeichnet durch den gestrichelten Graphen, ist dadurch in dieser Zeit besonders hoch. In der Volllast und Teillast, wie in Prozesszustand 3 und 4 zu erkennen, sind die PhO-Leistungsfaktoren deutlich niedriger.



Abbildung 2.8: Graphischer Verlauf des PhO-Leistungsfaktors bei verschiedenen Betriebszuständen [23]

Anhand des Leistungsfaktors lässt sich erkennen, dass insbesondere die Inbetriebnahme und die Abschaltung des Prozesses ineffizient sind. Diese Betriebszustände sind für diese Arbeit besonders interessant, da es sich bei dem Beispiel des beheizten Rührbehälters um genau solch einen instationären Prozess handelt.

Im Verlauf dieser Arbeit werden bei instationären Prozessen auch unvermeidbare Verluste im PhO explizit berücksichtigt. Dies führt dazu, dass durch die Anpassung des Referenzwertes das Optimierungspotential bei instationär ablaufenden Prozessen klarer definiert werden kann.

2.7 Indirekte PhO-Faktoren

Die indirekten PhO-Faktoren ergeben sich, wenn man den Aufwand und Nutzen eines Prozesses für die Bedarfs- und Verbrauchsansicht wie folgt definiert und anschließend in die Definition der direkten PhO-Faktoren ((25) und (26)) einsetzt.

Für die Bedarfsperspektive:

$$Aufwand = Nutzen + Verluste \tag{30}$$

Für die Verbrauchsperspektive:

$$Nutzen = Aufwand - Verluste$$
(31)

Für die indirekten PhO-Faktoren ergibt sich für die Bedarfs- und Verbrauchsperspektive:

$$F_{ind,PhO}^{B} = \frac{Nutzen (PhO) + Verluste}{Nutzen (PhO)} = 1 + \frac{Verluste}{Nutzen (PhO)} \ge 1$$
(32)

und

$$F_{ind,PhO}^{V} = \frac{Aufwand (PhO) - Verluste}{Aufwand (PhO)} = 1 - \frac{Verluste}{Aufwand (PhO)} \le 1$$
(33)

Diese andere Art der PhO-Faktor Definition kann zur Plausibilisierung der direkten PhO-Faktoren dienen. Dazu ist es notwendig alle Verluste des Prozesses aufzuführen. Sind die direkten und indirekten Faktoren gleich, so kann daraus geschlossen werden, dass alle negativen Einflüsse des Prozesses gefunden worden sind. Indirekte PhO-Faktoren können außerdem dazu verwendet werden, den Einfluss einzelner Verluste auf den Gesamtnutzen, bzw. Gesamtaufwand eines Prozesses zu bewerten. So wird eine gezielte Prozessoptimierung anhand des Physikalischen Optimums ermöglicht.

3 Anwendung der Methode des PhO auf einen beheizten Rührbehälter

Im Folgenden wird die Methode des PhO auf die Prozesskopplung des beheizten Rührbehälters angewendet. Die in einem beheizten Rührkessel kombinierten Prozesse sind die Erwärmung eines Fluids durch eine externe Heizquelle und die Durchmischung eines Fluids mithilfe eines Rührers. Die Kopplung dieser Einzelprozesse soll mithilfe des PhO im Hinblick auf die Energieeffizienz und ein mögliches Betriebsoptimum näher untersucht werden. Dazu werden Vereinfachungen und Annahmen in der Modellbetrachtung diskutiert und die Frage behandelt, ob bereits mit Hilfe der PhO-Faktoren der Einzelprozesse ein Betriebsoptimum ermittelt werden kann. Um diese Frage zu beantworten und um einen optimalen Betriebspunkt des Prozesses ermitteln zu können, wird eine simulative Betrachtung der Prozesskopplung durchgeführt.

Erste logische Überlegungen führen zu der Annahme, dass die Durchmischung des Fluides in dem Behälter einen positiven Einfluss auf den Wärmeübergang hat. Folglich ist anzunehmen, dass sich das Fluid schneller aufheizt und weniger Energie von der externen Heizquelle benötigt wird. Die Durchmischung des Fluides mithilfe des Rührers benötigt jedoch auch Energie, die wiederum abhängig von der Drehgeschwindigkeit ist. Bei der Kopplung der Prozesse sollte es demnach einen optimalen Betriebspunkt geben, welcher für eine definierte Aufheizung des Fluides ein energetisches Minimum aufweist. In von Studenten des Departments Maschinenbau und Produktion der HAW Hamburg durchgeführten Versuchen wurde dies untersucht. Bei diesen Messungen konnte jedoch kein Betriebsoptimum festgestellt werden. In dieser Arbeit soll daher simulativ untersucht werden, ob ein Betriebsoptimum ermittelt werden kann. Es folgt daher zunächst die Betrachtung der PhO-Faktoren der Einzelprozesse, die im Rahmen einer studentischen Arbeit an der HAW Hamburg bereits definiert wurden. [8]

3.1 Direkte PhO-Faktoren der Einzelprozesse

Für die Erwärmung des Fluides wird der PhO-Faktor in der Bedarfsperspektive nach D. Volta definiert:

$$F_{PhO}^{B} = \frac{W_{el}}{Q_{PhO}} = \frac{W_{el}}{m \cdot c \cdot \Delta T} \ge 1$$
(34)

 W_{el} = elektrische Energie der Heizquelle (Messwert) [J] Q_{PhO} = thermodyn. Mindestaufwand (Rechenwert) [J]

Der Zähler gibt den Aufwand in Form des tatsächlichen Energiebedarfs der externen Heizquelle an. Im Nenner steht, entsprechend der Grundgleichungen der Wärmelehre, die thermodynamische Mindestenergiemenge, welche zur Erwärmung des Fluides notwendig ist. Sie stellt den Nutzen des Prozesses dar. Hier lässt sich bereits erkennen, dass das physikalische Optimum nicht abhängig von der Qualität der Wärmeübertragung ist. Hierfür müsste eine Abhängigkeit der Drehzahl des Rührers gegeben sein. Vielmehr ist es ein konstanter Wert, der nur von der Stoffmenge, der Stoffeigenschaft und der Temperaturdifferenz abhängig ist. Das PhO beruht hier auf der Definition von D. Volta und berücksichtigt keine unvermeidbaren Verluste. Es wird von einem stationären Prozesse ausgegangen.

Der PhO- Faktor des Rührers lässt sich mithilfe der Gleichung für die Rührerleistung aus dem VDI-Wärmeatlas [6] berechnen. Hierbei handelt es sich aufgrund der Verhältnisbetrachtung von Leistungen, um den sogenannten PhO-Leistungsfaktor, wie er in Kapitel 2.6 beschrieben wurde:

$$f_{PhO}^{B} = \frac{P_{el}}{P_{R\ddot{u}hrer,PhO}} = \frac{P_{el}}{Ne \cdot n^{3} \cdot D_{R\ddot{u}hrer} \cdot \rho} \ge 1$$
(35)

Pel = elektrische Leistung des Rührers (Messwert)[W]PRührer,PhO = minimal benötigte Leistung des Rührers (Rechenwert)[W]

Der Zähler beinhaltet die tatsächlich aufgenommene elektrische Leistung des Rührers. Im Nenner steht die für eine bestimmte Drehzahl, Rührergeometrie und Fluiddichte benötigte minimale Leistung des Rührers. Diese optimale Leistung berücksichtigt keine Verluste durch das Getriebe oder Wellendichtungen, vgl. [6]. Die Berechnung der Newton-Zahl *Ne* ist in Kapitel 2.2 näher beschrieben.

3.2 PhO des gekoppelten Prozesses

Für die Kopplung der beiden Einzelprozesse wurden die vorgestellten PhO-Faktoren zu einem Gesamtfaktor zusammengeführt. Da der PhO-Faktor des Rührers nach Gleichung (35) auf der Betrachtung von Leistungen beruht, ist es notwendig die Leistungen mit einem Zeitintervall Δt zu multiplizieren, um eine Energie zu erlangen und den Gesamtfaktor wieder dimensionslos zu gestalten. Der PhO-Faktor für das gekoppelte System in der Bedarfsperspektive lautet:

$$F_{PhO,ges}^{B} = \frac{P_{el} \cdot \Delta t + W_{el}}{P_{R\ddot{u}hrer,PhO} \cdot \Delta t + Q_{PhO}}$$

$$= \frac{P_{el} \cdot \Delta t + W_{el}}{Ne \cdot n^{3} \cdot D_{R\ddot{u}hrer} \cdot \rho \cdot \Delta t + m \cdot c \cdot \Delta T} \ge 1$$
(36)

Soll dieser PhO-Faktor für die Optimierung und Ermittlung eines Betriebsoptimums genutzt werden, so stößt man auf einige Herausforderungen, die im nächsten Kapitel näher erläutert werden.

3.2.1 Herausforderung der Betrachtung des PhO bei gekoppelten Prozessen

Das PhO des betrachteten gekoppelten Prozesses welches im Nenner der Gleichung (36) definiert ist, stellt den physikalisch optimalen Gesamtenergiebedarf dar. Dabei werden der minimale Energiebedarf zur Aufheizung des Wassers $(m \cdot c \cdot \Delta T)$ und der Energiebedarf des Rührers addiert. Betrachtet man den Prozess des beheizten Rührbehälters rein aus thermodynamischer Sicht und wendet den Energieerhaltungssatz an, so lässt sich feststellen, dass hier ein Widerspruch entsteht. Zur Veranschaulichung dient Abbildung 3.1, die den beheizten Rührbehälter als thermodynamisches System mit einer Bilanzgrenze um das zu temperierende Fluid darstellt.



Abbildung 3.1: Anwendung der Energiebilanz auf das Modell des beheizten Rührbehälters (stationär)

Die Heizquelle am Behälterboden bringt die Wärmeenergie Q_{heiz} in das System. Außerdem wird dem System die Energie des Rührers $W_{Rührer}$ zugeführt. Die Änderung der inneren Energie ΔU bewirkt dabei die Temperaturänderung des Fluids und kann mit $m \cdot c \cdot \Delta T$ beschrieben werden. Nach dem Energieerhaltungssatz ergibt sich folgende Bilanzgleichung:

$$\Delta U = m \cdot c \cdot \Delta T = Q_{heiz} + W_{R\ddot{u}hrer} \tag{37}$$

Aus dieser Gleichung geht hervor, dass der Gesamtenergiebedarf zur Temperierung des Fluids immer konstant ist. Die für den Rührer aufgebrachte Energie wird nach dieser Ansicht zu 100% in Wärmeenergie umgewandelt und trägt damit zur Temperaturerhöhung des Fluides bei. Je intensiver der Einsatz des Rührers ist, desto weniger thermische Energie muss dem System über die Heizplatte zugeführt werden. Unter der Annahme, dass der Rührer seine Energie zu 100% in Wärme dissipiert kann entsprechend kein energetisches Minimum ermittelt werden. Letztendlich kann hier nur der Faktor Zeit beeinflusst werden. Denn durch den Einsatz des Rührers wird dem System einerseits Energie durch den Rührer selbst zugeführt, zusätzlich wird thermische Energie über die Heizplatte zugeführt. Je schneller der Rührer dreht, desto besser wird der Wärmeübergang zwischen Fluid und Heizplatte. Die noch benötigte thermische Energie, um das Fluid auf die gewünschte Temperatur zu erwärmen kann dem Fluid damit schneller zugeführt werden. Der Gesamtenergiebedarf ändert sich dadurch nicht. Je mehr Energie durch den Rührer in das System gebracht wird, desto weniger thermische Energie muss über die Heizplatte zugeführt werden. Eine Optimierung im Hinblick auf den geringsten Energiebedarf kann damit nicht stattfinden.

Die Definition des PhO laut Gleichung (36) trifft hingegen die Annahme, dass die Energie des Rührers nicht in die Temperierung des Fluides mit eingeht, sondern nur für die Bewegung des Fluides eingesetzt wird und damit zur Erhöhung der kinetischen Energie führt. Unter dieser Annahme ist die Addition des rein thermisch benötigten Energiebedarfs ($m \cdot c \cdot \Delta T$) und des Energiebedarfs des Rührers praktikabel. In den folgenden Betrachtungen wird daher von diesem vereinfachenden Ansatz ausgegangen. In der Realität wird ein gewisser Anteil der eingebrachten Rührerenergie mit Sicherheit in Wärme dissipiert. Dieser wird hier jedoch vernachlässigt.

Eine Herausforderung, die trotz der getroffenen Annahme bleibt, ist den thermischen Energiebedarf zur Aufheizung des Fluides in Abhängigkeit der Drehzahl darzustellen. Unter der vereinfachenden Annahme, dass nur die thermische Energie zur Erhöhung der Fluidtemperatur führt, ist der thermische Energiebedarf konstant und ändert sich nicht mit der Drehzahl des Rührers. Dementsprechend lässt sich anhand des gekoppelten PhO kein Betriebsoptimum ableiten. Die Gleichung (36) findet nur Anwendung, wenn eine bestimmte Drehzahl vorausgesetzt ist und ermittelt für diesen Betriebspunkt entsprechend das PhO. Da der Term für den physikalisch optimalen Energiebedarf der Heizquelle eine Konstante ist, wird das Minimum für das gesamte PhO (Temperierung und Durchmischung), also den Gesamtenergiebedarf, immer dann erreicht, wenn die Drehzahl des Rührers gleich null ist. Die Aussage würde damit lauten, dass der Prozess sein Betriebsoptimum genau dann erreicht, wenn der Rührer überhaupt nicht zum Einsatz kommt. Ob das tatsächlich einen optimalen Betriebspunkt darstellt soll deshalb weiter untersucht werden.

Eine weitere Herausforderung besteht in der Definition der Aufheizzeit Δt . Im Zähler, also den realen Messwerten, wird die Aufheizzeit eingesetzt, welche bei dem betrachteten Versuch tatsächlich zur Temperierung des Fluides benötigt wurde. Im Nenner wird die Aufheizzeit für die Berechnung der physikalisch optimalen Energie des Rührers benötigt. Im physikalisch optimalen Fall wird die Wärmeübertragung immer schneller ablaufen als im Realfall. Genaugenommen müssen an dieser Stelle also zwei unterschiedliche Aufheizzeiten betrachtet werden. Zum einen im Zähler die tatsächliche Aufheizzeit Δt_{real} und zum anderen im Nenner die optimale Aufheizzeit Δt_{PhO} . Die optimale Aufheizzeit ist abhängig von der Qualität der Wärmeübertragung von der Heizquelle zum Fluid. Es bedarf daher zur Berechnung dieses Wertes einen Ansatz, der die Wärmeübertragungsvorgänge berücksichtigt und einen Temperaturverlauf über die Zeit liefert.

Für die weitere Betrachtung der gekoppelten Prozesse, welche von einem gemeinsamen Parameter abhängig sind, wird das PhO als das Betriebsoptimum definiert. Denn in genau diesem Punkt ist der Energiebedarf minimal und der Betrieb des gekoppelten Prozesses befindet sich im Physikalischen Optimum. Bisher konnte lediglich für einen bestimmten Betriebspunkt der minimale Energiebedarf ermittelt werden. Ob weitere Energieeinsparungen mit der Wahl eines anderen Betriebspunktes möglich sind, konnte anhand des PhO bisher nicht bestimmt werden.

3.2.2 Lösungsansatz für die Verwendung des PhO bei gekoppelten Prozessen

Wie zur Ermittlung des optimalen Betriebspunktes des beheizten Rührbehälters vorgegangen werden muss, soll nun erläutert werden. Im vorangegangenen Kapitel wurde festgestellt, dass es zur Ermittlung des optimalen Betriebspunktes notwendig ist den thermischen Energiebedarf zur Temperierung des Fluids in Abhängigkeit der Rührerdrehzahl darzustellen. Dafür werden zunächst drei Ansätze untersucht und geprüft, ob sich der Energiebedarf in Abhängigkeit der Drehzahl verändert.

Bei den bisherigen Definitionen des PhO wurden Verluste nicht explizit berücksichtigt und der Prozess des beheizten Rührbehälters als stationär betrachtet. In den folgenden Untersuchungen werden daher die in Kapitel 2.6 beschriebenen unvermeidbaren Verluste, die bei instationären Prozessen auftreten, berücksichtigt und auf das PhO angewendet. Mit dem ermittelten geeigneten Ansatz findet im Anschluss die Simulation zur Ermittlung des Betriebsoptimums statt. An dieser Stelle wird darauf hingewiesen, dass das Betriebsoptimum auch analytisch bestimmt werden kann. Die analytische Lösung wird in dieser Arbeit jedoch nicht untersucht. Welcher Ansatz für die Simulation verwendet wird und welche Vereinfachung und Annahmen getroffen werden, um die Aufheizung des Fluids von der Drehzahl und damit der Qualität der Wärmeübertragung abhängig zu machen, wird in den folgenden Kapiteln beschrieben.

3.3 Simulative Betrachtung

Ziel der Simulation ist es, die Aufheizzeit, den Energiebedarf für die Aufheizung sowie den Energiebedarf für den Betrieb des Rührers in Abhängigkeit von der Drehzahl zu ermitteln. Das Minimum der Summe aus den Energien stellt das Betriebsoptimum dar. Hierzu müssen zunächst Berechnungsansätze, Annahmen und Vereinfachungen getroffen werden, um eine sinnvolle Simulation zu ermöglichen.

3.3.1 Annahmen / Vereinfachungen

In der Simulation wird von einem zylindrischen Behälter aus Glas ausgegangen, in dem sich ein halber Liter Wasser befindet, der von 20°C auf 60°C erhitzt werden soll. Bei dem eingesetzten Rührer handelt es sich um einen Ankerrührer, wie er in Kapitel 2.2 beschrieben ist. In Abbildung 3.2 ist das Gedankenmodell des gekoppelten Prozesses, so wie es simuliert wurde, dargestellt.



Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des simulierten beheizten Rührbehälters (eigene Darstellung)

Die externe Heizquelle überträgt die Wärme bei einer konstanten Oberflächentemperatur, wobei der Kontakt zum Behälterboden als ideal angesehen werden kann. Um direkte Verluste der Heizquelle an die Umgebung auszuschließen, wird zudem davon ausgegangen, dass die Fläche des Behälterbodens und die Heizfläche exakt gleich groß ist. Auf die sonst oft gebräuchliche Annahme eines konstanten Wärmestroms durch die Heizquelle wird verzichtet, da unter dieser Annahme die Qualität der Wärmeübertragung zwischen Heizplatte und Fluid außer Acht gelassen würde.

In Tabelle 3.1 sind alle geometrischen Daten und Stoffeigenschaften der verwendeten Materialien und Stoffe aufgeführt. Die geometrischen Daten orientieren sich hierbei an dem Versuchsaufbau der HAW Hamburg. Für das Material und die Masse des Rührers wurden Annahmen getroffen. Sie beeinflussen zwar in gewissem Maße die Werte der weiterführenden Berechnungen, aber nicht die grundlegenden Zusammenhänge.

Behälter (Glas)	
Wärmeleitfähigkeit	0,76
[W/(m*K)]	
Emissionsgrad[-]	0,92 (Mittelwert [4])
Wanddicke [m]	0,005
Füllhöhe [m]	0,064
Durchmesser [m]	0,1
Fluid (H ₂ O) bei 20°C	
Masse [kg]	0,5
spez. Wärmekapazität	4184
[J/kg*K]	
Dichte [kg/m ³]	1000
dyn. Viskosität	$1,005 \cdot 10^{-3}$
[kg/(m*s)]	
kin. Viskosität [m²/s]	$1 \cdot 10^{-6}$

Wärmeleitfähigkeit	0,6
[W/(m*K)]	
Temperaturleitfähigkeit	$0,14 \cdot 10^{-6}$
[m ² /s]	
Starttemperatur [°C]	20
Zieltemperatur [°C]	60
Rührer (Anker)	
Material	Polyethylen
Durchmesser [m]	0,089
Masse [kg]	0,03
spez. Wärmekapazität	2300
[J/Kg*K]	
Allgemein	
Umgebungstemperatur	20
[°C]	

Tabelle 3.1: Geometrische- und Stoffdaten der Simulation des beheizten Rührbehälters [4]

Der für die Simulation gewählte Drehzahlbereich wurde entsprechend der Gültigkeitsbereiche der Berechnungsansätze für den Wärmeübergang an der Innenfläche des Behälters, siehe Kapitel 2.1.2, festgelegt und geht von 0 s⁻¹ bis 12 s⁻¹. Eine höhere Drehgeschwindigkeit würde nicht sinnvoll sein, da das Wasser so stark durch den Rührer nach außen gedrängt wird, dass auf der eigentlichen Wärmeübertragungsfläche kein, oder nur wenig Wasser zurückbleiben würde. Dementsprechend würde die Wärmeübertragung negativ beeinflusst werden. Es wird zudem darauf hingewiesen, dass der Fall n=0 s⁻¹ nicht im Gültigkeitsbereich, der in Kapitel 2.1.2 zugrunde gelegten Berechnungsgleichungen für die Ermittlung des inneren Wärmeübergangskoeffizienten liegt. Demnach müsste strenggenommen für diesen Fall die Berechnung des inneren Wärmeübergangskoeffizienten mit einem anderen Ansatz durchgeführt werden. Nach Die Gleichung (16) ergibt für den Fall keiner Drehbewegung des Rührers, also Re=0, einen Wert von $\approx 540 \text{ W/m}^2\text{*K}$. Verglichen mit Anhaltswerten des Wärmeübergangskoeffizienten von ruhendem Wasser nach [25], ist dieser Wert zutreffend und liegt im Bereich des angegebenen Wertebereichs von 350-580 W/m²K. Es wird daher an dieser Stelle auf die Anwendung eines alternativen Ansatzes verzichtet.

Um den Einfluss der Drehzahl auf die Wärmeübertragung in mehreren Fällen zu prüfen, wurde die Simulation zudem bei unterschiedlichen konstanten Heiztemperaturen durchgeführt. Hier wurde als maximale Heiztemperatur 477 °C gewählt, da bei höheren Temperaturen Glas je nach Zusammensetzung bereits erweichen kann. [26] Aufgrund der geringen Wanddicke des Behälters und der somit geringen Flächenunterschiede zwischen Innen- und Außenwand, wird weiter angenommen, dass der Wärmedurchgang wie durch eine ebene Wand berechnet werden kann.
3.3.2 Unvermeidbare Verluste kontinuierlicher und diskontinuierlicher Prozesse

Das Aufheizen eines Fluides bei gleichzeitiger Durchmischung ist ein instationärer Vorgang. Bei solch diskontinuierlich ablaufenden Prozessen spielen andere Verluste eine Rolle als bei stationären, also eingeschwungenen Prozessen. In dem in dieser Arbeit betrachteten Beispiel muss neben dem Fluid zusätzlich der gesamte Behälter sowie der im Fluid befindliche Rührer mit aufgeheizt werden. Diese Energie muss zusätzlich aufgewendet werden, ist aber nicht abhängig von der Durchmischung und Qualität der Wärmeübertragung. Dies führt zu einem höheren Gesamtenergiebedarf, beeinflusst den optimalen Betriebspunkt jedoch nicht. In der Simulation werden daher nur die Verlustenergien berücksichtigt, die unvermeidbar über die Behälterwand an die Umgebung abgegeben werden und damit zeit- und drehzahlabhängig sind und damit einen Einfluss auf den Gesamtenergiebedarf haben. Diese Verluste entstehen sowohl bei kontinuierlichen als auch diskontinuierlichen Prozessen. Sie führen dazu, dass ein optimaler Betriebspunkt ermittelt werden kann.

Die Annahme eines adiabaten Rührbehälters ist in diesem Kontext nicht sinnvoll. C. Keichel führte dazu das Beispiel eines adiabaten Wärmeübertragungsapparates an. Wird die Wärme eines Fluids zu 100% auf das andere Fluid übertragen, so setzt dies optimale Wärmeübergangsverhältnisse voraus. Wärmedurchgangskoeffizient Der oder die Wärmeübertragungsfläche würden gegen unendlich streben. Folglich würde das wiederum zu PhO-Faktoren führen, die gegen null oder unendlich streben, je nachdem aus welcher Perspektive der Prozess betrachtet wird. Auch unter der Annahme physikalisch optimaler Bedingungen, ist eine Berücksichtigung von Wärmeverlusten an die Umgebung in der Simulation des beheizten Rührbehälters sinnvoll. Es wird jedoch darauf hingewiesen, dass es zur Steigerung der Energieeffizienz unbedingt erforderlich ist, den Behälter zu isolieren, um den Verlustwärmestrom an die Umgebung möglichst gering zu halten. Die Ermittlung von physikalisch optimalen Isolationsstärken wird in anderen Arbeiten aktuell untersucht und wird hier daher nicht näher behandelt. Für die Simulation werden vereinfachend die Wärmeverluste über die Behälterwand ohne Isolation betrachtet.

3.3.3 Ansätze zur Berechnung des drehzahlabhängigen Wärmebedarfs

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit verschiedenen Ansätzen zur Berechnung des drehzahlabhängigen Wärmebedarfs. Für die folgende Simulation des beheizten Rührbehälters wird ein solcher Ansatz benötigt, um ein Betriebsoptimum ableiten zu können.

Um eine bessere Vorstellung des zu simulierenden Sachverhaltes zu erlangen, ist es praktikabel das Modell in bilanzieller Form zu betrachten. Dazu verdeutlichen die in Tabelle 3.2 dargestellten Bilanzen verschiedene Ansätze zur thermodynamischen Betrachtung des gekoppelten Prozesses. Insgesamt werden drei Ansätze untersucht. Wie bereits in Kapitel 3.2.1 beschrieben, geht die Energie des Rührers zwar über die Bilanzgrenze in das System hinein, trägt aber nicht zur Erhöhung der Fluidtemperatur bei. Die aus den dargestellten Bilanzen abgeleiteten Bilanzgleichungen beschränken sich daher auf die ausgetauschten Wärmeenergien bzw. Wärmeströme. Der Gesamtenergiebedarf des gekoppelten Prozesses wiederum setzt sich aus dem Energiebedarf der Heizquelle und dem Energiebedarf des Rührers zusammen.

Der Ansatz "instationäre Wärmeleitung in geometrisch einfachen Körpern mit zusätzlichem konvektiven Wärmeübergang" aus Kapitel 2.1.1 kann aufgrund der eindimensionalen Betrachtung und der nicht vorhandenen Abhängigkeit von der Masse des aufzuheizenden Fluides für die Simulation nicht angewendet werden. Stattdessen findet zur Beschreibung der instationären Wärmeübertragung in Fall zwei und drei der Ansatz des ideal gerührten Behälters Anwendung.

Fall	1	2	3
Bilanzraum	Fluid	Behälter + Fluid	Behälter + Fluid und
		und Heizplatte	Heizplatte
	W _{Rührer} (n)	W _{Rührer} (n)	$W_{R\"uhrer}(n)$ $Q_{Verlust}(n)$ $Q_{heiz}(n)$
Ansatz zur Simulation von	- I nermodyn. Mindestaufwand	- Methode der Blockkapazität	- Methode der Blockkapazität
Temperatur	- stationär	- instationär	- Deruckstentigung
und	- stational		instationär
			- instationar
Wärmeenergie			

Tabelle 3.2: Übersicht möglicher Ansätze zur Berechnung der instationären Wärmeübertragung (eigene Darstellung)

Fall 1

Stationäre Betrachtung:

Die dargestellte Bilanz umfasst lediglich das im Behälter befindliche Fluid. Es werden keine Wärmeübertragungsphänomene am Behälterboden oder -wand betrachtet. Die Wärmeenergie Q_{heiz} führt zur Änderung der inneren Energie des Fluides. Nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik folgt für die reine Wärmebilanz:

$$\Delta U_{Fluid} = Q_{heiz} \tag{38}$$

mit

$$\Delta U_{Fluid} = m \cdot c \cdot \Delta T \tag{39}$$

Daraus folgt, dass die Wärmeenergie dem thermodynamischen Mindestaufwand, nach der kalorischen Zustandsgleichung, entspricht und jede zusätzliche Energie, die durch den Rührer verbraucht wird, den Gesamtaufwand steigert.

$$Gesamtenergiebedarf = m \cdot c \cdot \Delta T + W_{R\"uhrer}(n)$$
(40)

Es besteht damit keine optimale Drehzahl, bei der ein Energieminimum erreicht werden könnte. Das Physikalische Optimum wird immer ohne Durchmischung des Fluides erreicht.

Fall 2

Instationäre Betrachtung:

In diesem Modell findet die Methode der Blockkapazität aus Kapitel 2.1.1 Anwendung. Die Bilanzgrenze umfasst auch die Bereiche um die Heizplatte und den Rührbehälter und berücksichtigt damit auch Phänomene der instationären Wärmeübertragung. Hier folgt aus dem Ansatz der Blockkapazität, dass die Änderung der inneren Energie des Fluides gleich dem durch die Heizquelle hervorgerufenen Wärmestrom durch den Behälterboden ist:

$$\frac{dU_{Fluid}}{dt} = \dot{Q}_{heiz} = k(n) \cdot A \cdot (\vartheta_{Heiz} - \vartheta_{Fluid})$$
(41)

mit

$$k(n) = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_i(n)} + \frac{s}{\lambda_{Glas}}}$$
(42)

А	= Bodenfläche des Rührbehälters	[m²]
α_i	= Wärmeübergangskoeffizient an der Behälterinnenwand	$[W/m^2K]$
S	= Wanddicke des Rührbehälters	[m]
λ_{Glas}	= Wärmeleitfähigkeit des Rührbehälters	[W/mK]
ϑ_{Heiz}	= Temperatur der Heizquelle	[K]
ϑ_{Fluid}	= Temperatur des Fluides	[K]

Wie bereits in Kapitel 3.3.1 beschrieben wird der Wärmeübergang zwischen Heizquelle und Behälterboden als ideal angenommen. Daraus folgt, dass sich der Wärmedurchgangskoeffizient k für den Wärmestrom durch die Heizplatte lediglich aus dem Wärmeleitungswiderstand des Rührbehälters und dem, von der Drehzahl abhängigen inneren Wärmeübergangswiderstand zusammen setzt (vgl. Gleichung(16)).

Die Wärmebilanz entsprechend der dargestellten Bilanz für Fall 2 lautet:

$$\frac{dU_{Fluid}}{dt} = k(n) \cdot A \cdot (\vartheta_{Heiz} - \vartheta_{Fluid})$$
(43)

mit

$$\frac{dU_{Fluid}}{dt} = m \cdot c \cdot \frac{d\vartheta_{Fluid}}{dt} \tag{44}$$

Durch das Gleichsetzen des minimalen thermodynamischen Aufwandes nach der kalorischen Zustandsgleichung (Gleichung (44)) und dem Wärmestrom durch den Behälterboden (Gleichung (43)) kommt es dazu, dass der Energiebedarf zum Aufheizen des Fluides auch bei Änderung der Rührerdrehzahl konstant bleibt, siehe Abbildung 3.3. Die notwendige Energiemenge ist dabei auf der Ordinate und die Drehzahl des Rührers auf der Abszisse aufgetragen. Ist der Wärmeübergang schlecht und damit der Wärmedurchgangskoeffizient k klein, dann dauert es lediglich länger, bis die notwendige Wärmeenergie zur Temperierung des Fluides bereitgestellt ist. Eine Durchmischung durch den Rührer ist in diesem Fall kontraindiziert, da diese Energie zusätzlich aufgebracht werden muss, aber nicht dazu dient den notwendigen Gesamtenergiebedarf zu senken.



Abbildung 3.3: Minimal benötigter Energiebedarf zur Aufheizung des Wassers in Abhängigkeit der Drehzahl bei Nichtberücksichtigung unvermeidbarer Verluste

Die Schwankungen im Verlauf der Energie aus Abbildung 3.3 kommen simulationsbedingt, durch die endliche Größe der Zeitintervalle, zustande.

Fall 3

Instationäre Betrachtung:

Bei diesem Ansatz kommt wie in Fall zwei die Methode der Blockkapazität zum Einsatz, mit dem Zusatz, dass unvermeidbare Wärmeverluste durch die Behältermantelfläche berücksichtigt werden. Die Größe der Verluste hängt sowohl von dem inneren Wärmeübergangskoeffizienten und damit von der Durchmischung ab, sowie von der Aufheizzeit. Je länger die Temperierung des Wassers dauert, desto größer auch der Wärmeverlust an die Umgebung. Der Verlustwärmestrom berechnet sich nach dem Wärmedurchgang durch eine ebene Wand, berücksichtigt aber den inneren Wärmeübergangskoeffizienten, die Wärmeleitung durch den Glasbehälter und den äußeren Wärmeübergangskoeffizienten. Letzterer setzt sich aus einem konvektiven und einem durch Strahlung verursachten Teil zusammen (vgl. Gleichung (45)).

$$\alpha_a = \alpha_r + \alpha_{konv} \tag{45}$$

α_a	= Wärmeübergangskoeffizient der Behälteraußenwand	[W/m²K]
αr	= Wärmeübergangskoeffizient infolge von Strahlung	[W/m²K]
α_{kon}	v = Wärmeübergangskoeffizient infolge von Konvektion	[W/m ² K]

Der äquivalente Wärmeübergangskoeffizient α_r berechnet sich gemäß Gleichung (6), wobei sich die mittlere Temperatur T_m mit der Zieltemperatur 60°C und der Umgebungstemperatur 20°C errechnen lässt. In folgender Gleichung (46) wird der Zahlenwert für den Wärmeübergangskoeffizienten infolge von Strahlung ermittelt.

$$\alpha_r = 4 \cdot C_{12} \cdot T_m^{\ 3} = 4 \cdot 5,216 \cdot 10^{-8} \cdot 313,15^3 = 6,4 \frac{W}{m^2 \cdot K}$$
(46)

Für den konvektiven Anteil an der Außenwand des Rührbehälters wird eine Annahme von 5,1 W/m²K getroffen. [5] Dieser Wert ist ein Anhaltswert für eine nicht-metallene Oberfläche mit einem Emissionsgrad von 0,93 und entspricht damit in etwa dem angenommen Emissionsgrad des gläsernen Rührbehälters von 0,92. Aufgerundet ergibt sich für den gesamten äußeren Wärmeübergangskoeffizient ein Wert von $\alpha_a=12$ W/m²K. Der Verlustwärmestrom kann wie folgt berechnet werden.

$$\dot{Q}_{Verlust}(t) = k'(n) \cdot A' \cdot (\vartheta_{Fluid} - \vartheta_U)$$
(47)

mit

$$k'(n) = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_i(n)} + \frac{s}{\lambda_{Glas}} + \frac{1}{\alpha_a}}$$
(48)

A'= Mantelfläche des Rührbehälters

In Kapitel 2.1.1 wurde erläutert, wie sich aus dem Ansatz der Blockkapazität die Gleichung (15) zur Ermittlung des zeitlichen Temperaturverlaufes des Fluides ableiten lässt. Da in diesem Fall die Methode der Blockkapazität mit der Annahme eines Verlustwärmestroms erweitert wurde, muss auch die Gleichung für den zeitlichen Temperaturverlauf neu ermittelt werden. Für den ersten Schritt wird daher der Wärmestrom definiert, der zu einer Zustandsänderung des

 $[m^2]$

Fluides führt. Dieser setzt sich aus dem Wärmestrom der Heizquelle und aus dem abfließenden Wärmestrom zur Umgebung zusammen.

$$\dot{Q}(t) = \dot{Q}_{Heiz}(t) - \dot{Q}_{Verlust}(t)$$
(49)

mit

$$\dot{Q}_{Heiz}(t) = k(n) \cdot A \cdot (\vartheta_{Heiz} - \vartheta_{Fluid})$$
(50)

Der Gesamtwärmestrom, der auf das Fluid wirkt, führt zu einer Änderung der inneren Energie.

$$\dot{Q}(t) = \frac{dU_{Fluid}}{dt} = m \cdot c \frac{d\vartheta_{Fluid}}{dt}$$
(51)

Setzt man Gleichung (47), (50) in (49) ein und (49) in (51) folgt nach Umformung.

$$\frac{d\vartheta_{Fluid}}{dt} = \frac{k(n) \cdot A}{m \cdot c} \cdot \left(\vartheta_{Heiz} - \vartheta_{Fluid}\right) - \frac{k'(n) \cdot A'}{m \cdot c} \cdot \left(\vartheta_{Fluid} - \vartheta_{U}\right)$$
(52)

Als Vereinfachung werden die Vorfaktoren zusammengefasst.

$$a = \frac{k(n) \cdot A}{m \cdot c} \quad und \quad b = \frac{k'(n) \cdot A'}{m \cdot c} \tag{53}$$

Es folgt

$$\frac{d\vartheta_{Fluid}}{dt} = a \cdot (\vartheta_{Heiz} - \vartheta_{Fluid}) - b \cdot (\vartheta_{Fluid} - \vartheta_{U})$$
(54)

Die Lösung dieser Differentialgleichung mit der Anfangsbedingung $\vartheta_F(t = 0) = \vartheta_U$ liefert den zeitlichen Temperaturverlauf.

$$\vartheta_{Fluid}(t) = \vartheta_U - \left(\frac{a \cdot \vartheta_{Heiz} + b \cdot \vartheta_U}{(a+b)}\right) \cdot e^{(a+b) \cdot t} + \frac{a \cdot \vartheta_{Heiz} + b \cdot \vartheta_U}{(a+b)}$$
(55)

Diese Gleichung ist die Basis der Simulation und liefert, neben den Fluidtemperaturen für jeden Zeitschritt, bei Erreichung der Zieltemperatur von 60°C die benötigte Aufheizzeit. Diese Aufheizzeit entspricht der physikalisch optimalen Aufheizzeit Δt_{PhO} . Für die Berechnung der benötigten Wärmeenergie wird in der Simulation für jeden Zeitschritt der Wärmestrom nach (47) und (50) berechnet und anschließend, wie in Gleichung (56) dargestellt, über die Aufheizzeit integriert.

$$Q_{PhO} = \int_{0}^{\Delta t_{PhO}} \dot{Q}_{PhO}(t)$$

$$= \int_{0}^{\Delta t_{PhO}} k \cdot A \cdot (\vartheta_{Heiz} - \vartheta_{Fluid}) + k' \cdot A' \cdot (\vartheta_{Fluid} - \vartheta_{U})$$
(56)

Die gesamte in diesem Abschnitt dargestellte Berechnung erfolgt für die unterschiedlichen Drehzahlen des Rührers. Die Berechnung des drehzahlabhängigen inneren Wärmeübergangskoeffizienten α_i erfolgt dabei wie in Kapitel 2.1.2 beschrieben.

Mit dem beschriebenen Ansatz lassen sich Aufheizzeit und benötigte Wärmeenergie zur Temperierung des Fluids ermitteln. Zur vollständigen Betrachtung des gekoppelten Prozesses ist zusätzlich die minimal benötigte elektrische Energie des Rührers bei den verschiedenen Drehzahlen und Aufheizzeiten zu berechnen. Dies wird im nachfolgenden Kapitel erläutert. Die Addition der hier ermittelten Wärmeenergiebedarfs und des Energiebedarfes des Rührers ergibt in Summe den insgesamt aufzuwendenden Gesamtenergiebedarf.

Genau genommen gilt die Annahme des ideal gerührten Behälters nicht bei Stillstand (n=0 s⁻¹) des Rührers, da nicht von einer gleichmäßigen Temperaturverteilung bei ruhendem Fluid ausgegangen werden kann. Prinzipiell müsste in diesem Punkt ein anderer physikalischer Ansatz herangezogen werden. Die berechneten Werte des Wärmebedarfes sind unter der Annahme des ideal gerührten Behälters in diesem Punkt optimistischer als in der Realität. Wenn mit diesen Annahmen trotzdem ein Betriebsoptimum ermittelt werden kann, ist die Anwendung eines alternativen Berechnungsansatzes nicht indiziert. Zudem kann man in der Praxis davon ausgehen, dass bei einem Rührbehälter der Rührer auch stets eingesetzt wird.

3.3.4 Berechnung des Rührer-Energiebedarfes

Die Berechnung der minimal benötigten Rührerleistung für die entsprechende Drehzahl wurde in Kapitel 2.2 behandelt. Für die gesamtheitliche Betrachtung der insgesamt aufgewendeten Energie des gekoppelten Prozesses wird die Rührerenergie benötigt. Sie berechnet sich mit der für die Drehzahl entsprechenden Aufheizzeit und der Rührerleistung nach Gleichung (20).

$$W_{R\ddot{u}hrer,PhO} = P_{R\ddot{u}hrer,PhO} \cdot \Delta t_{PhO}$$
(57)

In Abbildung 3.4 ist die minimal benötigte Leistung des Rührers für verschiedene Drehzahlen abgebildet.



Abbildung 3.4: Leistung des Rührers in Abhängigkeit der Drehzahl

Es ist ein starker Anstieg der Rührerleistung mit zunehmender Drehzahl erkennbar. Grund hierfür ist, dass die Drehzahl mit dritter Potenz in die Leistung mit einfließt. Die Leistungswerte sind vergleichsweise gering, da wie in Kapitel 2.2 beschrieben, keinerlei Getriebe- oder Wellenringverluste mitberücksichtigt sind.

3.3.5 Simulationsergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Simulation des beheizten Rührbehälters vorgestellt. Die Aufheizzeiten des Wassers von 20°C bis 60°C sind in Abbildung 3.5 für verschiedene Heiztemperaturen dargestellt und wurden aus Gleichung (55) abgeleitet. Die Ordinate stellt die Aufheizzeit in Sekunden und die Abszisse die Drehzahl in Umdrehungen pro Sekunde dar.



Abbildung 3.5: Aufheizzeiten für verschiedene Heiztemperaturen in Abhängigkeit der Rührerdrehzahl

Es lässt sich erkennen, dass die Aufheizzeiten mit steigender Heiztemperatur abnehmen. Des Weiteren ist eine Abnahme der Aufheizzeit mit steigender Drehzahl erkennbar. Dabei ist ein deutlicher Sprung der Aufheizzeit zwischen dem Zustand n=0 s⁻¹, also keiner Durchmischung, und der ersten Drehzahlstufe n=1 s⁻¹ zu verzeichnen. Die Durchmischung führt also zu einer deutlich kürzeren Aufheizzeit, wobei diese bei zunehmender Drehzahl nur noch geringfügig sinkt. Das liegt daran, dass die Qualität der Wärmeübertragung bei höheren Drehzahlen nur geringfügig verbessert wird.

In Abbildung 3.6 ist auf der Ordinate die minimal aufzuwendende Energie des Rührers in Wattstunden für die unterschiedlichen Heiztemperaturen in Abhängigkeit der Drehzahl dargestellt. Je größer die Temperatur der Heizquelle ist, desto schneller kann die Aufheizung des Fluides stattfinden. Dies hat einen direkten Einfluss auf den Energiebedarf des Rührers, da



dieser eine geringere Zeit arbeiten muss und dementsprechend weniger Energie benötigt. Der Energiebedarf des Rührers steigt mit zunehmender Drehzahl mit dritter Potenz an, was aus dem Zusammenhang zwischen der Drehzahl und der Rührerleistung aus Gleichung (20) herrührt.

Abbildung 3.6: Physikalisch optimaler Energiebedarf des Rührers für verschiedene Heiztemperaturen in Abhängigkeit der Drehzahl

Der physikalisch optimale Energiebedarf für den Aufheizvorgang wurde in der Simulation durch Integration der Wärmeströme für jede Zeiteinheit nach Gleichung (56) ermittelt. In Abbildung 3.7 sind dazu die Energiebedarfswerte für die unterschiedlichen Heiztemperaturen in Abhängigkeit der Drehzahl dargestellt.



Abbildung 3.7: Physikalisch optimaler Energiebedarf zur Aufheizung des Wassers für versch. Heiztemperaturen in Abhängigkeit der Drehzahl unter Berücksichtigung drehzahlabhängiger unvermeidbarer Verluste

Als Grenzwert wird mit der roten Linie das thermodynamische Minimum für die Erwärmung des Wassers von 20°C auf 60°C dargestellt. Der Grenzwert entspricht dem minimalen Energieaufwand ohne Berücksichtigung vermeidbarer und unvermeidbarer Verluste. Bei der Simulation ergibt sich für alle Heiztemperaturen ein ähnlicher Verlauf des physikalisch optimalen Energiebedarfes für die Aufheizung des Fluides. Bei keinerlei Durchmischung ist dieser am größten und nimmt erst sprunghaft und nachfolgend langsam, aber stetig mit steigender Drehzahl ab. Der Sprung zwischen keinerlei Durchmischung und einer Durchmischung bei $n=1 \text{ s}^{-1}$ verdeutlicht, dass der Wärmeübergang an der Heizfläche in Folge der Durchmischung verbessert wird. Die geringere Aufheizzeit und damit auch geringeren unvermeidbaren Verluste an die Umgebung führen zu einem geringeren physikalisch optimalen Energiebedarf. Je höher die Heiztemperatur gewählt wird, desto weniger Energie wird insgesamt benötigt. Auch dieses Phänomen lässt sich mit den kleiner werdenden Aufheizzeiten und den damit geringeren Verlusten erklären.

Um aus den bisher dargelegten Ergebnissen ein Betriebsoptimum für den gekoppelten Prozess zu ermitteln, müssen die Energie für die Erwärmung des Wassers und die Energie für den Einsatz des Rührers addiert werden. Es folgt der für den gekoppelten Prozess benötigte Gesamtenergiebedarf in Abhängigkeit der Drehzahl (Abbildung 3.8).



Abbildung 3.8: Physikalisch optimale Gesamtenergiebedarf von Aufheizung und Rührer in Abhängigkeit der Drehzahl

Es zeigt sich für alle Heiztemperaturen eine ähnliche "Badewannenkurve", die jedoch auf der Y-Achse verschoben ist. Je niedriger die Heiztemperatur, desto höher das Gesamtniveau der benötigten Gesamtenergie. Für jede Heiztemperatur lässt sich ein Minimum bestimmen, welches in allen drei Fällen bei einer Drehzahl von n=3 s⁻¹ liegt. Dieser Punkt stellt die physikalisch optimale Drehzahl dar, bei der der Gesamtenergiebedarf minimal ist. Mit steigender Drehzahl nimmt die Rührerenergie Einfluss und lässt den Gesamtenergiebedarf wieder steigen. Die Fluidbewegung kann ab einer Drehzahl von n=3 s⁻¹ die Wärmeübertragung nicht in dem Maße verbessern, dass die höheren Rührerenergie kompensiert werden kann. Wie schon bei der Betrachtung des Energiebedarfes des reinen Aufheizvorgangs, vgl. Abbildung 3.7, ist auch hier zu erkennen, dass bei ruhendem Fluid und keinerlei Durchmischung durch den Rührer der Gesamtenergiebedarf deutlich höher ist. Durch die Simulation konnte verdeutlicht werden, dass es bei der betrachteten Prozesskopplung einen optimalen Betriebspunkt gibt und ein PhO ermittelt werden kann. Dass in allen drei untersuchten Fällen das energetische Optimum bei einer Drehzahl von n=3 s⁻¹ erreicht wird, liegt an den sehr ähnlichen Aufheizkurven, die alle ab einer Drehzahl von ca. n=2 s⁻¹ nur noch geringfügig sinken. In Kombination mit den steigenden Energieverbräuchen des Rührers ab einer Drehzahl von n=4 s⁻¹ führt dies in allen Fällen zu dem gleichen optimalen Betriebspunkt. Bei der Wahl einer anderen Rührergeometrie könnte sich jedoch ein anderer optimaler Betriebspunkt ergeben, da die benötigte Rührerleistung sich aufgrund anderer mathematischer Beschreibung verändert. Die Untersuchung weiterer Rührergeometrien wäre daher sinnvoll.

Nach den gewonnenen Erkenntnissen der vorangegangenen Betrachtungen und Simulation lässt sich der anfänglich definierte PhO-Faktor (Gleichung (36)) für den gekoppelten Prozess des beheizten Rührbehälters anpassen. Der PhO-Faktor dient, wie bereits festgestellt, dabei nicht dazu ein Betriebsoptimum zu ermitteln, sondern eignet sich für Betreiber solcher Prozesse als Überwachungsinstrument. Je größer die Abweichung des Faktors vom Wert 1, desto größer das Optimierungspotential. Der modifizierte PhO-Faktor nach Gleichung (58) differenziert zwischen der tatsächlich benötigten Aufheizzeit und der PhO-Aufheizzeit, welche sich aus der vorgestellten DGL (55) ableiten lässt. Des Weiteren berücksichtigt der PhO-Faktor die unvermeidbaren Verluste infolge der instationären Wärmeübertragung.

$$F_{PhO,ges}^{B} = \frac{P_{el} \cdot \Delta t_{real} + W_{el}}{P_{R\ddot{u}hrer,PhO} \cdot \Delta t_{PhO} + m \cdot c \cdot \Delta T + \sum unv. Verluste}$$
(58)

3.3.6 Indirekte PhO-Faktoren

Wendet man die Definition der indirekten PhO-Faktoren aus Kapitel 2.7 auf das Beispiel des Rührbehälters an, so ist es sinnvoll vorab die auftretenden Verluste näher zu betrachten. Wie bereits erläutert gibt es unvermeidbare Verluste, wie zum Beispiel die Aufheizung von Rührer und Behältermaterial und die Verluste über die Behälterwand an die Umgebung. Vermeidbare Verluste könnten beispielsweise Wärmeverluste infolge einer größer als der Behälterdurchmesser gewählten Heizplatte sein oder Wärmeverluste, die durch Verschmutzungen des Behälterbodens entstehen. Diese Art von Verlusten wurde jedoch nicht in der Simulation betrachtet, da sie nur sehr schwer zu quantifizieren sind. Anhand von Abbildung 3.9 soll nochmals näher erläutert werden, wie sich das PhO und die unvermeidbaren und vermeidbaren Verluste für die Bedarfs- und Verbrauchsperspektive zusammensetzen.



Abbildung 3.9: Physikalisches Optimum, vermeidbare und unvermeidbare Verluste für die Bedarfs- und Verbrauchsansicht (eigene Darstellung)

Der Balken auf der linken Seite des Diagramms stellt qualitativ die tatsächlich genutzte Energie zur Erreichung der gewünschten Nutzens dar (\dot{B}). Die rot schraffierten Bereiche kennzeichnen zum einen die vermeidbaren Verluste \dot{U} sowie die unvermeidbaren Verluste $\Delta\Omega$. Der verbleibende grüne Bereich des Balkens kennzeichnet den Energiebedarf, der aufgebracht werden müsste, wenn der Prozess ohne jegliche Verluste (reversibel) ablaufen würde ($\dot{B}_{phy,min}$).

Der rechte Balken stellt die nutzbare Energie dar, welche im reversiblen Fall zur Verfügung stehen würde ($\dot{V}_{phy,max}$). Sie wird gemindert durch die vermeidbaren und unvermeidbaren Verluste des betrachteten Prozesses. Der restliche grün gekennzeichnete Bereich beschreibt qualitativ jene Energie, die tatsächlich nutzbar ist (\dot{V}).

Bei Bedarfsprozessen gibt es einen physikalisch minimalen Bedarf $\dot{B}_{phys,min}$, der nicht unterschritten werden kann. Je nach betrachtetem Prozess können jedoch unvermeidbare Verluste \dot{U} auftreten, welche in den bisherigen Betrachtungen von D. Volta und C. Keichel zwar berücksichtigt, jedoch nicht methodisch erfasst wurden. Diese addiert stellen den bisher bekannten physikalisch optimalen Bedarf \dot{B}_{PhO} dar. Wie bereits in Kapitel 2.6 erläutert, sind die unvermeidbaren Verluste damit im Nutzen (Bedarfsperspektive) bzw. im Aufwand (Verbrauchsperspektive) enthalten. Darüber hinaus können vermeidbare Verluste $\Delta\Omega$ auftreten, welche in der Summe zu dem tatsächlichen notwendigen Bedarf \dot{B} führen. Für die Verbrauchsansicht gilt gleiches analog, wobei sowohl die unvermeidbaren als auch vermeidbaren Verluste von einem maximal möglichen Verbrauch subtrahiert werden.

Der indirekte Faktor für den gekoppelten Prozess des beheizten Rührbehälters lässt sich gemäß der allgemeinen Definition aus Gleichung (32) ableiten zu:

$$F_{ind,PhO,ges}^{B} = 1 + \frac{\sum verm. Verluste}{m \cdot c \cdot \Delta T + \sum unv. Verluste + P_{R\ddot{u}hrer,PhO} \cdot \Delta t_{PhO}}$$
(59)

Der Nutzen (Nenner) setzt sich aus der physikalisch minimal notwendigen Energie zur Aufheizung des Fluids, den unvermeidbaren Wärmeverlusten über die Behälterwand, sowie der physikalisch minimal notwendigen Energie des Rührers zusammen. Zudem müssten auch die Verluste durch die Aufheizung von Rührer und Behälter sowie unvermeidbare Verluste des Rührers (Getriebe- und Wellenringverluste) mitberücksichtigt werden. Letztere sind, wie bereits erwähnt, nur schwer zu quantifizieren. Im Zähler sind alle auftretenden vermeidbaren Verluste einzusetzen. Würde man diese Verluste berechnen oder messen können, so ließe sich dieser Faktor mit dem direkten Faktor aus Gleichung (25) vergleichen und plausibilisieren. Hierbei muss jedoch berücksichtigt werden, dass die Simulation in dieser Arbeit lediglich mit den Wärmeverlusten durch die Behälterwand durchgeführt wurde und die zusätzlichen unvermeidbaren Verluste des Rührers nicht im Faktor enthalten sind.

Generell ist bei der Verwendung des indirekten Faktors zu beachten, um was für einen Betriebszustand es sich handelt. Wird ein kontinuierlicher Prozess untersucht, entfallen die eben genannten Verluste für die Aufheizung bestimmter Bauteile oder Komponenten. Dies muss bei der Definition der unvermeidbaren Verluste berücksichtigt werden. Aufgrund fehlender Informationen zu realen Verbrauchswerten und vermeidbaren Verlusten lassen sich keine Zahlenwerte für die direkten und indirekten Faktoren aufstellen. Durch die Betrachtung der unvermeidbaren Verluste der Einzelprozesse lässt sich jedoch der prozentuale Anteil abschätzen und gewisse Optimierungsmaßnahmen ableiten. Dazu erfolgt zunächst eine Betrachtung des Verhältnisses der einzelnen unvermeidbaren Verluste zu der Summe aller unvermeidbaren Verluste für den Prozess der Fluidaufheizung. Das Verhältnis erhält die Bezeichnung K.

$$K_{Aufheizung} = \frac{unv.Verlust}{\sum unv.Verluste}$$
(60)

Wie bereits in Kapitel 2.6 beschrieben, bestehen die unvermeidbaren Verluste in unserem Beispiel aus drei Komponenten. Zum einen aus der Aufheizung des Rührbehälters und des Rührers selbst, sowie den Wärmeverlusten an die Umgebung. Betrachtet man diese Komponenten einzeln und setzt sie ins Verhältnis zu der Summe aller unvermeidbaren Verluste, so kann eine Gewichtung erzielt werden, aus der sich der prozentuale Anteil der Verluste am Gesamtverlust festmachen lässt.

$$K_{Aufheizung} = \left(\frac{\Delta E_{Behälter}}{\sum unv.Verluste}\right) + \left(\frac{\Delta E_{Rührer}}{\sum unv.Verluste}\right) + \left(\frac{\Delta E_{Umgebung}}{\sum unv.Verluste}\right) = 100\% \quad (61)$$

Mit

$\Delta E_{Behälter} = m_{Behälter} \cdot c_{Behälter} \cdot \Delta T$	[J]
$\Delta E_{R \ddot{\mathrm{u}} hrer} = m_{R \ddot{\mathrm{u}} hrer} \cdot c_{R \ddot{\mathrm{u}} hrer} \cdot \Delta T$	[J]
$\Delta E_{Umgebung} = \int k'(n) * A' * \Delta T dt$	[J]
$\sum unv. Verluste = \Delta E_{Behälter} + \Delta E_{Rührer} + \Delta E_{Umgebung}$	[J]

Für die Berechnung der benötigten Energie zur Aufheizung des Behälters und des Rührers wurden die geometrischen Daten und Stoffwerte aus Tabelle 3.1 verwendet. Die Verlustenergie an die Umgebung ist ein Ergebnis der durchgeführten Simulation. Nachfolgend sind die Anteile der einzelnen unvermeidbaren Verluste am Gesamtverlust für den optimalen Betriebspunkt (n=3 s⁻¹), bei einer Heiztemperatur von 277°C aufgeführt.

Unvermeidbarer Verlust	Anteil am Gesamtverlust
$\Delta E_{Behälter}$	46,02%
$\Delta E_{R\ddot{u}hrer}$	35,36%
$\Delta E_{Umgebung}$	18,62%
Summe	100%

Tabelle 3.3: Gewichtung der unvermeidbaren Verluste des Aufheizprozesses bei n=3 s⁻¹; T_{heiz} =277°C

Wie aus Tabelle 3.3 hervorgeht, hat der Energieverlust, welcher durch die Behälteraufheizung entsteht mit 46,02% den größten Anteil am Gesamtverlust der unvermeidbaren Verluste. Mit 35,36 % ist die Aufheizung des Rührers am Gesamtverlust beteiligt. Die Wärmeverluste, welche durch die Behältermantelfläche an die Umgebung abgegeben werden, sind mit 18,62 % am niedrigsten. Daraus lässt sich ableiten, dass bei den unvermeidbaren Verlusten als erstes auf

die Wahl des Behälters geachtet werden sollte. Dabei sollte ein Material gewählt werden, welches eine geringe spezifische Wärmekapazität aufweist, um den Energiebedarf zur Aufheizung des Behälters möglichst klein zu halten. Desweiten kann es sinnvoll sein die Wandstärke des Behälters nicht zu groß zu wählen, um das aufzuheizende Volumen gering zu halten. Die Wandstärke wirkt sich dementsprechend auch auf der Wärmeübergang zwischen Heizquelle und Fluid aus sowie auf die Verluste über die Behälterwand. Die genauen Auswirkungen müssten deshalb im Vorwege zielgerichtet untersucht werden.

Für den Rührer gilt es bei der Wahl des Materials auch auf eine geringe spezifische Wärmekapazität zu achten, um den Energiebedarf zur Aufheizung gering zu halten. Bei gleicher Durchmischungsqualität ist zudem der Rührer bevorzugt einzusetzen, der das geringe Volumen aufweist. Auch das führt zur Minderung des Energiebedarfes bei der Aufheizung des Rührers. Die Verluste an die Umgebung sind hingegen recht niedrig und können durch zusätzlich eingesetzte Isolation reduziert werden. Optimierungsbedarf besteht in erster Linie bei der Behälter- und Rührerauswahl.

3.4 Interpretation

Die Ergebnisse der Simulation verdeutlichen, dass es für die betrachtete Prozesskopplung von Erwärmung und Durchmischung eines Fluides mittels Rührer ein Betriebsoptimum gibt, in dem die notwendige Gesamtenergie minimal ist. Dieses Betriebsoptimum kann als PhO des gekoppelten Prozesses bezeichnet werden. Der optimale Betriebspunkt sollte im realen Prozesse eingestellt werden, um einen möglichst effizienten Betrieb zu ermöglichen.

Die bereits definierten PhO-Faktoren der Einzelprozesse konnten nur zum Teil für die Ermittlung des optimalen Betriebspunktes verwendet werden. Das Physikalische Optimum des Erwärmungsprozesses war bisher als Konstante definiert. Die Qualität der Wärmeübertragung, welche durch die erzwungene Strömung des Fluides im Behälter erhöht wird, wurde dabei vernachlässigt. Nur die Rührerenergie konnte bereits in Abhängigkeit der Drehzahl dargestellt werden. Um das Problem der instationären Wärmeübertragung in der Simulation umsetzen zu können, wurde der Ansatz des ideal gerührten Behälters (oder: Methode der Blockkapazität) verwendet. Mit diesem Ansatz lässt sich sowohl die Aufheizzeit als auch der notwendige Wärmeenergiebedarf in Abhängigkeit der Rührerdrehzahl darstellen. Hierzu werden zusätzliche unvermeidbare Verluste, in Form Wärmeverlusten von über die Behälteraußenwand, mitberücksichtigt. Würden diese Verluste nicht berücksichtigt werden, dann würde der notwendige Wärmeenergiebedarf konstant bleiben und die Drehzahl hätte lediglich einen Einfluss auf die Aufheizzeit. Ein optimaler Betriebspunkt wäre in diesem Fall immer der vollständige Verzicht auf einen Rührer, da für diesen nur zusätzlich Energie bereitgestellt werden müsste.

Die in dieser Arbeit getroffene Definition des PhO berücksichtigt explizit die unvermeidbaren Verluste des nicht kontinuierlichen Prozesses. Anhand einer bilanziellen Darstellung konnte der Zusammenhang zwischen dem physikalisch minimal notwendigen Energiebedarf, den vermeidbaren und unvermeidbaren Verlusten und dem PhO hergestellt werden. Für das konkrete Beispiel der Behälteraufheizung bei gleichzeitigem Rührereinsatz konnte bewiesen werden, dass nur mit Berücksichtigung drehzahlabhängiger unvermeidbarer Verluste ein Betriebsoptimum ermittelt werden kann. Unvermeidbare Verluste sind beispielsweise Energien, die bei instationären Prozessen zwangsläufig aufgewendet werden müssen, um den Nutzen zu generieren, aber nicht zum Nutzen beitragen. Eine relevante Vereinfachung bei der simulativen Ermittlung des Betriebsoptimums ist die Vernachlässigung der Rührerleistung bei der Energieerhaltungsgleichung. Theoretisch müsste die Energie des Rührers zu 100% mit zur Erwärmung des Fluids beitragen. In der Simulation wird lediglich der Energiebedarf berücksichtigt, der in Form von Wärme in das System geht. Die Leistung des Rührers wird ausschließlich für die Bewegung und Durchmischung des Fluids verwendet.

Neben der Ermittlung des Betriebsoptimums unter Zuhilfenahme der Methode des PhO konnte anschließend ein PhO-Faktor für den beheizten Rührbehälter ermittelt werden (Gleichung (58)), der die Überwachung der Effizienz im Betrieb ermöglicht. Dabei wird das PhO in Abhängigkeit der ausgewählten Drehzahl bestimmt und lässt so Optimierungspotential unabhängig von der Wahl des Betriebspunktes erkennbar werden.

Der indirekte Faktor für den instationären Gesamtprozess lässt sich bestimmen, wenn alle vermeidbaren und unvermeidbaren Verluste bestimmt werden können, sei es durch Messungen oder entsprechende Berechnungen. In dieser Arbeit konnten aufgrund fehlender Informationen zu vermeidbaren Verlusten dementsprechend keine Zahlenwerte ermittelt werden. Eine Plausibilisierung des direkten PhO Faktors hätte ohnehin nicht stattfinden können, da hierfür Messwerte zu den realen Energieverbräuchen der Aufheizung und des Rührers fehlen. Die alleinige Betrachtung des Aufheizungsprozesses hingegen konnte eine Gewichtung der einzelnen Komponenten der unvermeidbaren Verluste liefern. Es konnte gezeigt werden, dass der größte prozentuale Verlust durch die Aufheizung des Rührbehälters entsteht. Eine geeignete Optimierungsmaßnahme würde daher lauten, ein Material mit geringer spezifischer Wärmekapazität für den Behälter einzusetzen. Dies führt zu einem geringeren Energiebedarf bei der unvermeidlichen Aufheizung des Rührbehälters.

Als Ausblick zu weiterführenden Untersuchungen zum Thema Physikalisches Optimum bei gekoppelten Prozessen soll noch auf einen Aspekt eingegangen werden, der sich mit der analytischen Lösung der hier vorgestellten Simulation befasst. Die Betrachtung und Ermittlung des optimalen Betriebspunktes erfolgte in dieser Arbeit mithilfe des Simulationstools MATLAB. In diesem speziellen Beispiel ist es aufgrund der physikalischen Gesetzmäßigkeiten notwendig, vor der eigentlichen Berechnung der instationären Wärmeübertragung verschiedene Kennzahlen, wie bspw. die Reynoldszahl in Abhängigkeit der Drehzahl zu bestimmen und je nach Gültigkeitsbereich unterschiedliche mathematische Zusammenhänge zu verwenden. Die Verwendung von Schleifen und if-Bedingungen bietet bei der Simulation hierbei einen Vorteil. Letztendlich sollte es jedoch trotzdem möglich sein, für dieses oder auch andere Beispielprozesse analytische Lösungen für den optimalen Betriebspunkt zu finden.

Darauf aufbauend könnten weitere Arbeiten die Möglichkeit der Ableitung einer allgemeinen Methodik, zur Ermittlung des Physikalischen Optimums für gekoppelte Prozesse untersuchen. Das Ziel sollte es sein eine Systemvariable zu identifizieren, von welcher der Gesamtprozess abhängig ist. Im Falle des beheizten Rührbehälters wäre dies die Drehzahl des Rührers *n*. Leitet man die entsprechende mathematische Beziehung nach dieser Systemvariablen ab und setzt sie gleich Null, ergibt sich ein Minimum, welches dem PhO entspricht. Ein Vergleich zu der Methodik, die N. Beckmann in seiner Dissertation [27] zur Schnittpunktermittlung zwischen PhO und betriebswirtschaftlichem Optimum anwendet, sollte zudem angestellt werden.

4 Prozesskopplung: Windenergieanlage und Elektrolysezelle

Die Zusammenschaltung von Windenergieanlagen und Wasserelektrolyseuren wird auch als "Power-to-Hydrogen-Prozess" bezeichnet und ist im Hinblick auf die Einsparung fossiler Rohstoffe und der Sektorenkopplung ein wichtiger und sinnvoller Schritt in Richtung Dekarbonisierung. Der daraus gewonnene grüne Wasserstoff kann entweder direkt verwertet, gespeichert oder aber für die Einspeisung in das Erdgasnetz oder zur weiteren Verwendung bei der Methanisierung eingesetzt werden.

In diesem Kapitel wird untersucht, ob eine physikalisch optimale Dimensionierung von Elektrolysezellen bei fluktuierender elektrischer Energieversorgung mit Hilfe des PhO ermittelt werden kann. Dafür werden zwei Verfahren der Elektrolyse betrachtet, die Alkalische Elektrolyse sowie die Elektrolyse mit einer "Proton-Exchange-Membrane". Als Dimensionierungsgröße wird die aktive Elektrodenfläche gewählt.

Ein weiterer Punkt, der in diesem Zuge untersucht werden soll, ist, ob die beste zu erreichende Energieeffizienz der Elektrolysezelle auch mit der ressourceneffizientesten Bauweise bzw. mit dem maximalen Ertrag an produziertem Wasserstoff einhergeht. Durch die Betrachtung der zwei Elektrolyseverfahren können ggf. Unterschiede oder Gemeinsamkeiten zwischen den Verfahren festgestellt werden.

Um der Frage nachzugehen, was unter einer physikalisch optimalen Dimensionierung einer Elektrolysezelle zu verstehen ist, werden zunächst die Einzelprozesse im Hinblick auf ihr PhO betrachtet.

4.1 PhO der Einzelprozesse

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit dem PhO der Einzelprozesse. Die Wandlung von Windenergie in elektrische Energie ist der erste untersuchte Prozess und wird mithilfe einer Windenergieanlage realisiert. Bei dem Prozess der Wasserelektrolyse wird sowohl das verfahrensspezifische PhO vorgestellt als auch jenes, welches unabhängig des betrachteten Elektrolyseverfahrens verwendet werden kann.

4.1.1 Windenergieanlage

Ziel einer WEA ist es möglichst viel der kinetischen Energie des Windes in elektrische Energie umzuwandeln. Maßgebend ist hierbei, wie in Kapitel 2.4 beschrieben, der Betz-Faktor. Er gibt an, wieviel Prozent der Windenergie maximal durch die Rotorblätter in kinetische Rotationsenergie umgewandelt werden kann. Dieser Wert liegt bei 59%, gilt lediglich für Auftriebsläufer und geht von einer rein axialen Abströmung der Luft hinter der WEA aus. In der Realität gibt es jedoch durch die Rotation der Rotorblätter Drallverluste, welche abhängig von der Schnelllaufzahl sind. Außerdem kommen weitere Verluste durch den Profilwiderstand und die endliche Anzahl der Rotorblätter hinzu. [19] Sie alle zählen zu den prozessbedingten unvermeidbaren Verlusten, wie sie in Kapitel 2.6 bereits beschrieben wurden. Zur Berechnung

gibt es mehrere halbempirische Ansätze, auf die in dieser Arbeit nicht näher eingegangen wird. [19] Nicht betrachtet werden diejenigen unvermeidbaren Verluste, welche durch Energiewandlungsprozesse (Getriebe und Generator, etc.) innerhalb der Gondel verursacht werden. Sie sind selbstverständlich vorhanden, werden aber in dieser Arbeit nicht betrachtet, um die Komplexität zu verringern. Das Physikalische Optimum für Windenergieanlagen berechnet sich folglich aus der kinetischen Energie des Windes multipliziert mit dem Betz-Faktor und abzüglich der beschriebenen unvermeidbaren Verluste, welche ihre Ursache außerhalb der Gondel haben.

$$PhO_{WEA} = \left(\frac{1}{2} \cdot m \cdot u^2\right) \cdot 0,59 - \dot{U} \tag{62}$$

Das PhO einer WEA gemäß Gleichung (62) hat die Einheit [J].

4.1.2 Wasserelektrolyse

Das Verfahren der Elektrolyse lässt unterschiedliche Definitionen des Physikalischen Optimums zu. Zwei Definitionen wurden im Rahmen einer Hausarbeit von Studenten der HAW erarbeitet und werden im Folgenden vorgestellt. [28] Eine Definition ist verfahrensspezifisch und berücksichtigt unvermeidbare Verluste. Die andere hingegen betrachtet verfahrensunspezifisch nur, welche Energie aus thermodynamischer Sicht für die Spaltung des Wassers notwendig ist.

4.1.2.1 Der thermodynamische Grenzfall der Wasserelektrolyse

Die erste Definition bedient sich als physikalischen Grenzwert dem thermodynamisch idealen Grenzfall. Das PhO wird als die Summe aus der für die Spaltung des Wassers benötigten Reaktionsenthalpie und der notwendigen Wärmeenergie zur Aufheizung des Wassers gebildet. Die Reaktionsenthalpie unter Standardbedingungen ($t_0 = 25^{\circ}$ C, $p_0 = 1$ bar) hat folgenden Zahlenwert. [29]

$$\Delta_R H^0 = 285,84 \ \frac{kJ}{mol} = \ 39,39 \frac{kWh}{kg H_2} \tag{63}$$

Die Berechnung der notwendigen Wärmeenergie bei einer Abweichung zu den Standardbedingungen erfolgt anhand folgender Gleichung.

$$q_{H2O} = \bar{c_p}_{T_0}^T \cdot (T - T_0) \tag{64}$$

Weicht die Temperatur oder der Druck, bei der die Elektrolyse betrieben wird, von den Standardbedingungen ab, so ändert sich die Reaktionsenthalpie und die Wärmeenergie, die zum Aufheizen des Wassers benötigt wird. Das PhO ist damit temperatur- und druckabhängig und kann mit der folgenden Gleichung berechnet werden.

$$PhO_{EL,thermodyn.Grenzfall} = \Delta_R H(T,p) + q_{H20}(T)$$
(65)

Das dargestellte PhO besitzt die Einheit [kWh/kg H₂]. Wird dieses PhO zur Bildung eines PhO-Faktors (Gleichung(66)) herangezogen, lässt sich die Energieeffizienz unterschiedlicher Wasserelektrolyseverfahren miteinander vergleichen.

$$F_{PhO,EL,thermodyn.Grenzfall} = \frac{spez.Energiebedarf(Messwert)}{PhO_{EL,thermodyn.Grenzfall}} \ge 1 \quad (66)$$

Dabei arbeitet das Verfahren effizienter, dessen Faktor näher am Grenzwert 1 liegt.

4.1.2.2 Berücksichtigung unvermeidbarer Verluste

Um verfahrensspezifische Optimierungsmöglichkeiten besser aufdecken zu können eignet sich die zweite Definition des Physikalischen Optimums besser. Sie betrachtet die unvermeidbaren Verluste des jeweiligen Elektrolyseverfahrens in Form der vorhandenen Überspannungen. Die Überspannungen resultieren aus ohmschen Widerständen, elektrochemischen Transportprozessen und der Abweichung der Betriebsbedingungen von den sogenannten thermodynamischen Standardbedingungen. Für das jeweilige Elektrolyseverfahren lässt sich mit den Gleichungen (23) und (71) anschließend der Energiebedarf pro Kilogramm produziertem Wasserstoff einer optimal betriebenen Zelle, unter Berücksichtigung der unvermeidbaren Verluste, berechnen. Nachfolgend werden die mathematischen Beziehungen für die auftretenden Überspannungen näher erläutert.

Ohm´sche Überspannung

Ohm´sche Überspannungen beschreiben die Spannungsverluste infolge der elektrischen Widerstände der Elektroden, der Membran und elektrischen Leiter der Elektrolysezelle. Sie können mit folgender Gleichung (67) in Abhängigkeit der Stromdichte berechnet werden. [30]

$$U_{\Omega} = \left(R_e + \frac{d}{k_{sep}}\right) \cdot j \tag{67}$$

mit

$R_e = Widerstand der Elektrode$	$[\Omega^* \text{cm}^2]$
d = Dicke der Membran	$[\Omega^* cm^2]$
k _{sep} = Leitfähigkeit der Membran	$[S*cm^{-1}]$

Kinetische Überspannung

Kinetische Überspannung tritt durch kinetische Hemmungen beim Ladungsübergang zwischen den Elektroden und dem Elektrolyten auf. Beschreiben lässt sich die kinetische Überspannung mit Gleichung (68). [30]

$$U_{kin} \approx \frac{RT}{\alpha z F} \cdot \ln\left(\frac{j}{j_0}\right)$$
 (68)

mit

 α = Durchtritts- oder Symmetriefaktor des Katalysators [V]

R = allgemeine Gaskonstante

 $[\text{kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}]$

 j_0 = Austauschstromdichte

 $[A*cm^{-2}]$

Die Austauschstromdichte ist dabei abhängig von dem verwendeten Elektrolyten.

Nernst-Spannung

Die Nernst-Spannung beinhaltet die Erhöhung der Zellspannung, die sich einstellt, sobald die Betriebsbedingungen von den Standardbedingungen abweichen. Sie kann mit Gleichung (69) beschrieben werden.

$$U_{N} = U_{rev} + \frac{RT}{zF} \ln \left(\frac{p_{H2}^{c} \sqrt{p_{0_{2}}^{a}}}{p_{0}^{\frac{3}{2}} a_{H_{2}0}} \right)$$
(69)

mit

a_{H_2}	= Aktivität des Wassers	[-]
p_0	= Umgebungsdruck	[bar]
$p_{H_2}^c$	= Partialdruck H_2 an der Kathode	[bar]
$p_{O_2}^{c}$	= Partialdruck O ₂ an der Anode	[bar]

Die Partialdrücke an der Anode und Kathode werden mit einem Proportionalitätsfaktor berechnet, der die Abhängigkeit des Partialdruckes von der Stromdichte beschreibt. Dieser wurde in dem Artikel von Schalenbach und et al. [30] experimentell ermittelt. Beispielhaft ist in Gleichung (70) die Berechnung des Partialdruckes des Wasserstoffs an der Kathode dargestellt.

$$p_{H_2}^c = p^c + \Upsilon_{H_2} \cdot j - p_{sv}(T)$$
(70)

mit

Υ_{H_2} = Proportionalitätsfaktor zur Beschreibung der Abhängigkeit des	[bar*cm ² *A ⁻¹]
Partialdruckes von der Stromdichte	
p^c = Ausgangsdruck der Produktgase an der Kathode	[bar]
$p_{sv} = S$ ättigungsdampfdruck	[bar]

Sobald alle Überspannungen ermittelt sind, kann mit der Gleichung (23) der Stoffstrom des produzierten Wasserstoffs ermittelt werden. Anschließend lässt sich mit der nachfolgenden Gleichung (71) der Energieaufwand pro kg Wasserstoff berechnen. [28]

$$b_{H_2} = \frac{P_{el}}{\dot{n}_{H_2} \cdot M_{H_2}} \tag{71}$$

mit

 M_{H_2} = Molmasse Wasserstoff [kg/mol]

Dieser Wert entspricht dem physikalisch optimalen Energiebedarf pro kg Wasserstoff in dem jeweiligen Betriebspunkt des ausgewählten Elektrolyseverfahrens.

4.2 PhO des gekoppelten Prozesses

In diesem Kapitel wird untersucht, inwieweit sich aus dem PhO der Einzelprozesse ein PhO für den gekoppelten Prozess ableiten lässt. Zu Beginn muss dafür unterschieden werden, welchen Zweck das PhO haben soll. Es gibt zwei mögliche Anwendungsfälle, die nun näher beschrieben werden. Zum einen kann ein PhO des gekoppelten Prozesses gefordert sein, um für bestehende Anlagen mit bekannten Anlagenparametern und Betriebsdaten einen PhO-Leistungsfaktor abzuleiten. Dieser kann dem Betreiber der zusammengeschalteten Anlagen während des Betriebes Auskunft darüber geben, ob die Prozesse gut und effizient laufen. Bei Änderungen des entsprechenden PhO-Leistungsfaktors im negativen Sinne lassen sich dann entsprechende Gegenmaßnahmen einleiten. In welchem Bereich die Prozesse in diesem Fall nicht optimal arbeiten, lässt sich mit diesem Faktor jedoch nicht feststellen. Hierfür ist eine detaillierte Betrachtung der Einzelprozesse notwendig.

Den PhO-Leistungsfaktor des gekoppelten Prozesses für diesen Zweck zu definieren ist mithilfe der PhO-Definitionen der Einzelprozesse aus dem vorherigen Kapitel möglich. Der Gesamtprozess von WEA und Elektrolyse wird dafür aus der Verbrauchsperspektive betrachtet. Dies bedeutet, dass entsprechend Gleichung (72) die Energie, welche für die Produktion von Wasserstoff im optimalen Fall aufgewendet werden kann, als Aufwand, und der produzierte Wasserstoff als Nutzen betrachtet wird.

$$f_{ges,PhO}^{V} = \frac{Nutzen(Ges)}{Aufwand(PhO,Ges)} \le 1$$
(72)

Die Abbildung 4.1 stellt zur besseren Veranschaulichung des physikalisch optimalen Aufwandes den Gesamtprozess in bilanzieller Form dar.



Abbildung 4.1: Bilanzielle Darstellung des Aufwandes für den Gesamtprozess "Power-to-Hydrogen" (eigene Darstellung)

Die physikalisch optimal nutzbare Energie (*Aufwand*(*PhO*, *Ges*)) muss noch genauer definiert werden. Aufgrund prozessbedingter unvermeidbarer Verluste ist schließlich nicht die gesamte zur Verfügung stehende kinetische Energie des Windes nutzbar. An dieser Stelle werden die PhO der Einzelprozesse berücksichtigt. Als Maximalenergie steht die kinetische Energie des Windes zur Verfügung. Die unvermeidbaren Verluste der WEA (Betz- und Drallverluste) vermindern im ersten Prozess die verfügbare Gesamtenergie. Auch die nachgeschaltete Elektrolyse hat einen gewissen Teil an Energieverlusten (Überspannungen), die die verfügbare Energie weiter mindern. Tritt der Fall ein, dass mehr Energie zur Verfügung steht, als die Elektrolyse entsprechend des eigenen Leistungsbereiches aufnehmen kann, so wird der überschüssige Anteil der Energie auch als Verlustenergie gewertet. Im optimalen Fall bleibt die Energie nach Gleichung (73) für die tatsächliche Erzeugung von Wasserstoff übrig.

$$Aufwand(PhO,Ges) = \left(\frac{1}{2} \cdot m \cdot v^{2}\right) - \dot{U}_{WEA}(\lambda) - \dot{U}_{EL} - \dot{U}_{EL,kapa}$$
(73)

mit

m= Masse der Luft[kg]v= Windgeschwindigkeit[m/s]
$$\dot{U}_{WEA}(\lambda)$$
 = Betz-Faktor und Drallverluste (abhängig von der Schnelllaufzahl λ)[J] \dot{U}_{EL} = Energieverluste infolge von Überspannungen[J] $\dot{U}_{EL,kapa}$ = Energieverluste bei Überschreitung des EL-Leistungsbereiches[J]

Die Einheit des physikalisch optimalen Aufwandes ist entsprechend Joule. Der Nutzen in Form des produzierten Wasserstoffes muss daher mithilfe des Brennwertes von Wasserstoff ebenfalls in die Einheit Joule gebracht werden damit der PhO-Faktor dimensionslos bleibt. Wird der PhO-Leistungsfaktor (Gleichung (72)) für eine real existierende Anlagenkopplung angewendet, ergibt sich entsprechend ein Zahlenwert kleiner 1, aus dem sich ableiten lässt, wie groß die Verluste des Gesamtprozesses im Vergleich zum PhO sind. Leistungen unterhalb der Leistungsgrenze des Elektrolyseverfahrens führen zu keinem Nutzen, da kein Wasserstoff produziert wird. Dementsprechend geht der PhO-Faktor für diesen Fall gegen null.

Die zweite Möglichkeit ein PhO des Gesamtprozesses einzusetzen, ist das Ermitteln eines physikalisch optimalen Betriebspunktes, ähnlich dem Beispiel des beheizten Rührbehälters aus Kapitel 3. Im Fall der Kopplung von WEA und Elektrolyse ist dies jedoch nicht möglich, da sich die Prozesse nicht direkt in ihrer Qualität und Funktionsweise beeinflussen. Es gibt keinen gemeinsamen Parameter, von dem beide Prozesse abhängig sind. Vielmehr sind es Prozesse, welche in einer Art Reihenschaltung ablaufen und wo der Output der WEA, also die elektrische Energie, als Input der Elektrolyse dient. Selbst wenn es einen gemeinsamen Einflussparameter für beide Prozesse gäbe, würde die fluktuierende, nicht planbare elektrische Leistung der WEA keine analytische Lösung für die Ermittlung eines optimalen Betriebspunktes möglich machen. Trotz dieser Tatsache lässt sich durch eine simulative Betrachtung untersuchen, welche Dimensionierungsgröße für eine nachgeschaltete Elektrolysezelle möglichst optimal ist. Zwar gelten die daraus gewonnenen Ergebnisse nur für den tatsächlich untersuchten elektrischen Lastverlauf der WEA, es können aber Tendenzen für die optimale Dimensionierungsgröße ermittelt werden. Die simulative Betrachtung wird im nachfolgenden Kapitel ausführlich behandelt.

4.3 Simulative Betrachtung des Power-to-Hydrogen-Prozesses

Das Ziel der Simulation ist es herauszufinden, wie groß eine Elektrolysezelle dimensioniert werden muss, um die fluktuierende Leistung der vorgeschalteten WEA optimal zu nutzen. Was dabei optimal bedeutet, ist eine Frage der Zielsetzung, die hinter der Prozesskopplung steht. Zum einen kann "optimal" einen möglichst energieeffizienten Betrieb bedeuten, einen betriebswirtschaftlich günstigen Betrieb oder eine möglichst hohe Produktion von Wasserstoff. Spricht man von dem physikalisch optimalen Betrieb, so impliziert das meist, dass in diesem Punkt die Energie- und Ressourceneffizienz am größten ist. Ob dies auch für die Dimensionierung der Elektrolysezelle zutrifft soll näher untersucht werden. In der Simulation geht es daher auch um die Frage, ob die energieeffizienteste Dimensionierung im Betrieb mit der ressourcenschonendsten, also kompaktesten Bauweise übereinstimmt. Des Weiteren kann überprüft werden, ob bei der bestmöglichen Energieeffizienz auch die Wasserstoffproduktion maximal ist. Da zwei unterschiedliche Elektrolyseverfahren (PEM-EL und AEL) simuliert werden, können etwaige Unterschiede in den Dimensionierungsgrößen diskutiert werden.

4.3.1 Randbedingungen, Vereinfachungen und Annahmen

Bei den für die Simulation verwendeten Daten der elektrischen Leistungen handelt es sich um einen simulierten Jahresgang einer 3 MW Enercon WEA, welcher vom Fraunhofer IFF in Magdeburg zur Verfügung gestellt wurde. Die elektrischen Leistungen sind hierbei für jede Viertelstunde gegeben. Die Zellparameter der simulierten Elektrolysezellen stammen aus dem Artikel von Schalenbach und et al. [30] Simuliert wird eine alkalische Elektrolysezelle und eine PEM-Elektrolysezelle. Die Parameter und weiteren Annahmen, wie Auslegungs-Stromdichte, Temperatur, Druck etc. sind in nachfolgender Tabelle zusammengefasst.

Parameter	AEL	PEM-EL	Einheit
Leistungsbereich	40-150	5-200	%
[14] [31]			
d	463	210	μm
R _{sep}	0,281	0,126	Ωcm^2
R _e	0,081	0,029	Ωcm^2
a	0,0308	0,0133	V
j	0.5	2	Acm^{-2}
j ₀	5,633e-6	2,602e-10	Acm^{-2}
$\Upsilon_{H2}, \Upsilon_{O2}$	0	3	bar cm^2A^{-1}
Т	20	20	°C
p	1	1	bar
p_s	0,02338	0,02338	bar
F	96485,3365	96485,3365	$A \cdot s$
			mol
Z	2	2	-
R	8,314	8,314	J
			$mol \cdot K$
U _{rev0}	1,23	1,23	V

Tabelle 4.1: Randbedingungen und Parameter für die Simulation von WEA und Elektrolyse [30]

Eine zentrale Vereinfachung der Simulation ist, dass lediglich eine einzelne Zelle abgebildet wird. Normalerweise ist die Größe einer Einzelzelle im Hinblick auf die Elektrodenoberfläche verfahrensspezifisch begrenzt. In der Simulation werden Zellgrößen erreicht, die diese Grenzen übersteigen.

Würde man in der Simulation bereits eine Verschaltung von mehreren Einzelzellen zu einem Stack vornehmen, wäre die Berücksichtigung eines Regelkonzeptes aufgrund der schwankenden elektrischen Leistungen erforderlich. Dieses Regelkonzept ist nicht trivial, da berücksichtigt werden muss, ob bei kleineren elektrischen Leistungen alle Einzelzellen in Teillast, oder eine bestimmte Anzahl an Zellen unter voller Auslastung betrieben, dafür aber die restlichen Zellen abgeschaltet werden. Je nach Regelkonzept können ggf. auch hier unterschiedliche Dimensionierungen zu unterschiedlichen Ergebnissen führen.

Die Simulation dieser Arbeit beschränkt sich zudem nur auf eine Dimensionierung anhand der Elektrodenoberfläche und betrachtet keine weiteren möglichen Dimensionierungsparameter, wie z.B. eine veränderliche Nennstromdichte oder einen veränderlichen Elektrodenabstand.

4.3.2 Mathematische Modellierung

Für die Simulation der Elektrolysezellen werden mathematische Zusammenhänge benötigt, welche die entsprechenden verfahrenstypischen Verluste der AEL und PEM-EL beschreiben. Es liegt daher nahe die jeweiligen Überspannungen der Elektrolyseverfahren als Basis für die Simulation zu verwenden. Sie können im Vorwege in Abhängigkeit der Stromdichte und gewissen konstanten Parametern berechnet werden. Das Ziel der Simulation ist es, für verschiedene Zelldimensionierungen zu ermitteln, welche Menge an Wasserstoff produziert werden kann und wie groß der dazugehörige Energieaufwand ist. Die Dimensionierung der Elektrodenoberfläche richtet sich prozentual nach der Peak-Leistung der betrachteten WEA und der für das jeweilige Verfahren entsprechenden Auslegungs-Stromdichte. Im ersten Schritt wird daher die Dimensionierungsleistung nach Gleichung (74) festgelegt.

$$P_{el,dim} = n \cdot P_{el,max} \tag{74}$$

mit

n = Variable für Dimensionierung in %

Im nächsten Schritt wird mit der Auslegungsstromdichte für das jeweilige Verfahren und der dazugehörigen Zellspannung die Elektrodenoberfläche bestimmt.

$$A_{dim} = \frac{I_{dim}}{j_{PEM/AEL}} = \frac{\left(\frac{P_{el,dim}}{U(j_{PEM/AEL})}\right)}{j_{PEM/AEL}}$$
(75)

Mit

$U(j_{PEM/AEL}) =$ Zellspannung bei Auslegungsstromdichte	[V]
$j_{PEM/AEL}$ = Auslegungsstromdichte für PEM-EL und AEL	$[A \text{ cm}^{-2}]$
I_{dim} = Zellnennstrom für Dimensionierungsleistung	[A]

Aufgrund der fluktuierenden elektrischen Leistung ist eine statische Berechnung der Elektrolysezelle nicht möglich. Die Stromdichte ändert sich mit jeder Veränderung der verfügbaren elektrischen Leistung. Damit ändern sich auch die Überspannungen der Elektrolysezelle und die tatsächliche Zellspannung. Ein iteratives Vorgehen ist notwendig, um die Zellspannung, die elektrische Leistung und die Stromdichte aufeinander abzustimmen. Für jede errechnete elektrische Leistung folgt ein Wert für den Zellstrom und die Zellspannung. Mithilfe des Zellstroms und der Gleichung (23) kann im Anschluss für jeden Zeitschritt der Volumenstrom des produzierten Wasserstoffs berechnet werden. Die dafür benötigte Energie

ergibt sich aus der elektrischen Leistung und der Zeitschrittweite. Die elektrischen Leistungen, die den Leistungsbereich des Elektrolyseverfahrens unterschreiten, werden nicht berücksichtigt. Alle elektrischen Leistungen, die über den Leistungsbereich hinausgehen, werden bis zur jeweiligen Grenzleistung berücksichtigt. Die überschüssige Leistung geht verloren.

4.3.3 Simulationsergebnisse

Die Ergebnisse der durchgeführten Simulationen werden in diesem Kapitel vorgestellt. Dafür wird als erstes betrachtet, bei welcher Dimensionierungsleistung das Maximum an Wasserstoff produziert wird. Die Diagramme in Abbildung 4.2 und Abbildung 4.3 stellen den Verlauf der Wasserstoffproduktion in Abhängigkeit der Dimensionierungsleistung für die AEL Elektrolyseverfahren und PEM dar. Die Abszisse gibt hierbei die Dimensionierungsleistung der Elektrolysezelle in % der maximalen WEA-Leistung an. Auf der Ordinate ist die Masse des produzierten Wasserstoffes in kg abgebildet. Der Maximalwert ist jeweils durch die rot gestrichelte Linie dargestellt.



Abbildung 4.2: H₂-Produktion in Abhängigkeit der AEL Dimensionierung



Abbildung 4.3: H₂-Produktion in Abhängigkeit der PEM-EL Dimensionierung

Aus den Diagrammen geht hervor, dass der PEM-Elektrolyseur ca. 18% mehr Wasserstoff über das Jahr produziert als der alkalische Elektrolyseur. Die AEL erreicht ihre maximale Wasserstoffproduktion bei einer Dimensionierung von 62% der maximalen WEA-Leistung. Die PEM-EL muss deutlich größer dimensioniert werden und erreicht das Maximum an produziertem Wasserstoff bei einer Dimensionierung von 230%. In Tabelle 4.2 sind weitere Zahlenwerte für die hier gezeigte Dimensionierungsgröße zusammengefasst. Zudem wird ein Vergleich angestellt zwischen der durch die WEA zur Verfügung gestellten Jahresarbeit und der durch den Wasserstoff erzeugten, tatsächlich nutzbaren, Arbeit.

	AEL	PEM
Jahresarbeit WEA [MJ]	1,7193*10^7	1,7193*10^7
Nutzarbeit durch H2 [MJ]	1,2296*10^7	1.4521*10^7
(ermittelt mit Brennwert H2)		
Dimensionierungsleistung	62	230
[%]		
Dimensionierungsleistung	1.82	6.77
[MW]		
Elektrodenoberfläche [cm ²]	2.094.900	1.797.700
Wasserstoffproduktion [kg]	86.711	102.408
spez. Energiebedarf	47,59	43,87
[kWh/kg_H2]		

Tabelle 4.2: Simulationsergebnisse für die Dimensionierung nach maximaler H2-Produktion

Zu erkennen ist der deutliche Unterschied in den Dimensionierungsleistungen der Elektrolyseure. Die PEM-Elektrolyse muss für die maximale H2-Produktion auf eine Nennleistung von 6,77 MW ausgelegt sein, was 230% der Maximalleistung der WEA entspricht. Die AEL hingegen erreicht die maximale Wasserstoffproduktion bei einer Dimensionierungsleistung von 1,82 MW, was 62% der WEA-Maximalleistung entspricht. Betrachtet man die Elektrodenoberfläche, so sieht man, dass die PEM-EL trotz der deutlich größeren Dimensionierung eine kleinere Elektrodenfläche benötigt. Dies liegt an der höheren Stromdichte, welche durch das PEM-Verfahren erreicht wird. Auch der spezifische Energiebedarf der PEM-EL ist mit 43,87 kWh/kg_H2 niedriger als der der AEL mit 47,59 kWh/kg_H2. Da die PEM-EL bei gezeigter Dimensionierung mehr Wasserstoff produziert, ist auch die Nutzarbeit größer als bei der AEL.

Die folgenden beiden Diagramme in Abbildung 4.4 stellen dar, bei welcher Dimensionierungsgröße der spezifische Energiebedarf am niedrigsten, also die Energieeffizienz am besten ist. Die Abszisse stellt wieder die Dimensionierungsleistung der Elektrolysezelle dar. Die Ordinate bildet den spezifischen Energiebedarf, bzw. die Energieeffizienz in kWh/kg_H2 ab.



Abbildung 4.4: Spezifischer Energieaufwand der AEL (a) und PEM-EL (b) in Abhängigkeit der Dimensionierung

Bei beiden Elektrolyseverfahren wird die beste Energieeffizienz bei einer möglichst großen Dimensionierungsleistung erreicht. Die Tendenz der Graphen geht mit zunehmender Dimensionierungsgröße weiter in Richtung kleinerer Werte. Dieses Phänomen lässt sich mit dem Zusammenhang von Wirkungsgrad und Stromdichte beliebiger Elektrolysezellen, dargestellt in Abbildung 4.5, verdeutlichen.



Abbildung 4.5: Schematische U-I-Kennlinie und Einfluss der Stromdichte auf den Wirkungsgrad der Elektrolyse [32]

Die Stromdichte ist auf der Abszisse dargestellt. Als Ordinate sind auf der linken Seite die Zellspannung und auf der rechten Seite der Zellwirkungsgrad zu erkennen. Mit zunehmender Stromdichte nimmt der Zellwirkungsgrad ab. Je größer eine Elektrolysezelle dimensioniert ist, desto kleiner ist die Stromdichte und desto besser ist der Wirkungsgrad. Dies erklärt das Phänomen, dass sowohl bei der AEL als auch bei dem PEM-EL die beste Energieeffizienz bei möglichst großer Dimensionierung erreicht wird.

Um den anlagentechnischen Größenaufwand besser darstellen zu können, kann statt der reinen Elektrodenoberfläche die Anzahl der dafür notwendigen Einzelzellen berechnet werden. Als Grundlage dient hier die momentan technisch umsetzbare Zellgröße nach [16]. Die Dimensionierung entspricht jener in Tabelle 4.2.

	AEL	PEM-EL
max. Elektrodenoberfläche	30.000	1.000
pro Zelle [cm ²]		
Elektrodenoberfläche [cm ²]	2.094.900	1.797.700
benötigte Anzahl an Zellen	ca. 70 Zellen	ca. 1800 Zellen

Tabelle 4.3: Überschlägige Berechnung der für die Umsetzung der in dieser Arbeit bestimmten optimalen Dimensionierung notwendigen Einzelzellen unter der Annahme der derzeit technisch maximalen Elektrodenoberfläche Nachdem die optimalen Dimensionierungen der beiden Elektrolyseverfahren, zur Erreichung der maximalen Wasserstoffproduktion bzw. des kleinsten spezifischen Energiebedarfes vorgestellt wurden, folgt nun ein direkter Vergleich der Dimensionierungsgrößen unter der Annahme gleicher Wasserstoffproduktion. Es wird also die Dimensionierungsleistung gesucht, bei der die PEM-EL die gleiche Menge an Wasserstoff produziert, wie die AEL bei 62% Dimensionierungsleistung. Das Ergebnis ist in Tabelle 4.4 dargestellt.

	AEL	PEM-EL
Jahresarbeit WEA [MJ]	1,7193*10^7	1,7193*10^7
Nutzarbeit durch H2 [MJ]	1,2296*10^7	1,2321*10^7
(Brennwert H2: 141,8 MJ/kg)		
Dimensionierungsleistung	62	41
[%]		
Dimensionierungsleistung	1.82	1.21
[MW]		
Elektrodenoberfläche [cm ²]	2.094.900	320.460
Wasserstoffproduktion [kg]	86.711	86.896
spez. Energiebedarf	47,59	54.72
[kWh/kg_H2]		

Tabelle 4.4: Simulationsergebnisse für Dimensionierung der PEM-EL zur Erreichung der gleichen H2 Menge wie die AEL

Die Motivation dieser Untersuchung ist, den Unterschied der Dimensionierungen der Elektrolyseverfahren zu ermitteln, wenn die Menge des produzierten Wasserstoffs die gleiche ist. Die Simulation der PEM-EL hat ergeben, dass zur Erreichung dieser Wasserstoffmenge von ca. 87 Tonnen die Zelle um ein deutliches kleiner dimensioniert werden kann. Die Dimensionierungsleistung beträgt lediglich 41% der maximalen WEA-Leistung, also 1.21 MW. Auch die dafür notwendige Elektrodenoberfläche sinkt um ein Vielfaches. Dies bedeutet, dass die Elektrolysezelle deutlich kleiner und ressourcenschonender gebaut werden kann. Möglich wird das durch den großen Leistungsbereich von 5-200% der Nennleistung, wodurch auch bei einer kleinen Dimensionierung die großen elektrischen Leistungen durch die Elektrolysezelle verarbeitet werden können. Lediglich der spezifische Energiebedarf steigt auf 54,72 kWh/kg an, da die PEM-EL nun bei höheren Stromdichten und damit schlechterem Wirkungsgrad betrieben wird.

4.3.4 Validierung

Unter Validierung versteht man den Vergleich von Simulationsergebnissen mit empirischen Messdaten. So werden Fehler in der Programmierung erkennbar und zusätzlich kann überprüft werden, ob und wie genau das eigene Modell die Realität abbildet. Für die Simulation der Elektrolysezelle ist eine solche Validierung sinnvoll, da das Modell nicht ausschließlich bekannte Grundgleichungen verwendet, sondern zudem Iterationsschritte enthält. Die Simulation lässt sich mithilfe der nachfolgenden drei Schritte validieren.

- 1. U-j Kennlinie der Elektrolyseverfahren prüfen
- 2. Anzahl berücksichtigter elektrischer Leistungen abgleichen
- 3. Statisches Lastprofil berechnen; Abgleich mit Handrechnung

Schritt 1 dient dazu, die Überspannungen der gewählten Elektrolyseverfahren in Abhängigkeit der Stromdichte zu prüfen. Als Referenz dienen die Kennlinien aus Schalenbach et al. [30]. Abbildung 4.6 stellt die U-j Kennlinien der Simulation im Vergleich zu jenen aus der genannten Quelle dar. Die Randbedingungen wie Temperatur und Druck wurden für die Validierung angepasst und belaufen sich auf 80°C und einen Betriebsdruck von 1 bar.



Abbildung 4.6: Validierung der U-j Kennlinien; links eigene Darstellung, rechts [30]

Im rechten Diagramm entspricht der oberste schwarze Graph (alkaline, 463µm) der alkalischen Elektrolyse und der rote Graph darunter (acidic, 210µm) der PEM-EL. Im Vergleich zu den Graphen der Simulation im linken Diagramm ist eine sehr gute Übereinstimmung der Zahlenwerte und des Verlaufs zu erkennen. Dies lässt darauf schließen, dass die Zellspannungen der Simulation korrekt berechnet wurden.

Schritt 2 der Validierung hat das Ziel die Einhaltung der Leistungsbereiche der Elektrolyseverfahren zu prüfen. Somit wird sichergestellt, dass alle elektrischen Leistungen der WEA in der Simulation berücksichtigt werden. Die Tabelle 4.5 stellt hierfür die Anzahl der elektrischen Leistungswerte dar, die bei einer Dimensionierung von 100% berücksichtigt werden müssen und ermöglicht einen Vergleich dieses Wertes mit den tatsächlich in der Simulation berücksichtigten Zeitschritten.

	AEL	PEM-EL
Dimensionierung [%]	100	100
zu berücksichtigende	6366	14291
Zeitschritte [-]		
berücksichtige Zeitschritte [-]	6366	14291

Tabelle 4.5: Validierung der in der Simulation des Power-to-Hydrogen Verfahrens berücksichtigten Zeitschritte

Schritt 3 dient der Überprüfung der iterativen Vorgehensweise der Simulation. Dafür wird ein kurzes statisches Lastprofil simuliert und das Ergebnis mit einer Handrechnung verglichen. In beiden Fällen sollte zum einen die gleiche Elektrodenfläche, sowie die gleiche Menge an Wasserstoff berechnet werden. Als Beispiel soll die AEL dienen, die fünf Stunden mit einer elektrischen Leistung von 5kW versorgt wird.

AEL	Simulation	Handrechnung
Elektrodenoberfläche [cm ²]	5882,7	5882,7
Wasserstoffproduktion [kg]	0,5531	0,5531

Tabelle 4.6: Validierung der iterativen Simulation durch den Abgleich mit einer händischen Rechnung

Die Simulationsergebnisse stimmen exakt mit den Ergebnissen der Handrechnungen überein (vgl. Tabelle 4.6). Dies beweist, dass die iterative Methode der Simulation korrekt programmiert wurde.

4.4 Physikalisches Optimum vs. Betriebswirtschaftliches Optimum (Ausblick)

Bisher wurde die Dimensionierung der Elektrolysezelle rein nach dem PhO bestimmt. Das PhO kann je nach Zielsetzung jedoch unterschiedlich sein; zum einen die maximale Wasserstoffproduktion oder die größte erreichbare Energieeffizienz. Es konnte festgestellt werden, dass eine Dimensionierung nach der besten Energieeffizienz zu sehr großen Elektrodenoberflächen und damit zu großen Elektrolyseuren führt. Im Allgemeinen impliziert die Erreichung des Physikalischen Optimums eine größtmögliche Energie- und Ressourceneffizienz. In diesem konkreten Beispiel steigt jedoch der Ressourcenbedarf erheblich, wenn die Energieeffizienz erhöht werden soll. Neben dem notwendigen

Ressourceneinsatz müssen auch weitere Aspekte wie Investitionskosten und Lebensdauer berücksichtigt werden. Es muss daher ein Kompromiss zwischen der physikalisch optimalen Dimensionierung und der betriebswirtschaftlich optimalen Dimensionierung gefunden werden. Eine anwendbare Methode zur Ermittlung einer solchen Dimensionierung ist in der Dissertation von N. Beckmann zu finden. [27] Die Anwendung dieser Methode für das Beispiel der Kopplung von Windenergie und Elektrolyse findet in dieser Arbeit nicht statt. Es soll jedoch als Ausblick kurz auf das Thema Investitionskosten und Lebensdauer von Elektrolyseuren eingegangen werden.

Betrachtet man die Investitionskosten (nach Kapitel 2.3) für die simulierten Elektrolyseverfahren mit der Dimensionierung nach dem maximalen Wasserstoffertrag, so ergeben sich deutliche Unterschiede zwischen der AEL und PEM-EL, siehe Tabelle 4.7.

	AEL	PEM-EL
Dimensionierung [%]	62	230
Investitionskosten [€]	2,74 Mio.	15,52 Mio.
(Nennleistung)		

Tabelle 4.7: Vergleich der Investitionskosten für die AEL und die PEM-EL bei Auslegung auf eine maximale Wasserstoffproduktion unter Berücksichtigung der Simulationsergebnisse

Die PEM-EL würde in der Anschaffung mehr als das 5-fache der AEL kosten. Betrachtet man die Kosten, die sich ergeben, wenn die PEM-EL mit einer Dimensionierungsleistung von 41 % ausgelegt wird und damit die gleiche Menge an Wasserstoff produziert wie die AEL, so erkennt man, dass beide Verfahren etwa dieselben Investitionskosten aufweisen (vgl. Tabelle 4.8).

	AEL	PEM-EL
Dimensionierung [%]	62	41
Investitionskosten [€]	2,74 Mio.	2,78 Mio.
(Nennleistung)		

Tabelle 4.8: Vergleich der Investitionskosten für die AEL und die PEM-EL bei Auslegung auf gleiche Wasserstoffproduktion unter Berücksichtigung der Simulationsergebnisse

Wie bereits in Tabelle 4.4 ersichtlich wurde, ist die notwendige Elektrodenoberfläche der PEM-EL bei dieser Dimensionierungsgröße um ein Vielfaches kleiner und somit deutlich ressourcenschonender. Durch die schlechtere Energieeffizienz steigen im Umkehrschluss jedoch die Betriebskosten, da mehr Energie pro kg Wasserstoff benötigt wird. Es wird deutlich, dass bei dieser Prozesskopplung viele Einflussparameter zu berücksichtigen sind.

Ein weiterer Einflussparameter auf die Gesamt-Ressourceneffizienz ist die Lebensdauer einer Elektrolysezelle, die neben dem Elektrolyseverfahren selbst auch von der Größe und der dynamischen Belastung abhängig ist. Generell wird bei der Lebendsauer unterschieden zwischen Standzeit, Betriebsstunden und An- und Abfahrzyklen. Für die AEL wird eine Lebensdauer von ca. 50.000 Betriebsstunden angegeben. Die PEM-EL kann Lebensdauern von
über 80.000 Betriebsstunden erreichen. [14] Diese Werte sind jedoch stark von den Betriebsparametern und der Betriebsweise abhängig. Ein höherer Säuregehalt bei der AEL beispielsweise führt zu besserer Ionenleitfähigkeit, mindert aber aufgrund höherer Korrosionsanfälligkeit die Lebensdauer. Ähnliche Kompromisse gibt es auch bei der Größe der Anlagen und der damit größeren Elektrolytmenge. Je dynamischer die AEL betrieben wird, desto größer wirkt sich die Wärmekapazität auf den Betrieb aus. Häufige Inbetriebnahme und Abschaltung führen zudem zu Temperaturschwankungen, die die mechanische Beanspruchung bestimmter Bauteile erhöhen und zu einer geringeren Lebensdauer führen. [12]

4.5 Interpretation

Die Untersuchung der Prozesskopplung einer WEA und einer Elektrolyse hat gezeigt, dass die Bestimmung eines physikalisch optimalen Betriebspunktes nicht möglich ist. Das liegt unter anderem daran, dass es für die Prozesse keinen gemeinsamen Einflussparameter gibt. Es sind vielmehr in Reihe geschaltete Prozesse, also Prozesse, die nacheinander ablaufen. Die durchgeführte Simulation verfolgte daher das Ziel, herauszufinden inwieweit die Dimensionierung des Elektrolyseurs einen Einfluss auf die Wasserstoffproduktion und Energieeffizienz der Elektrolyse hat. Weiterhin sollte die Frage beantwortet werden, ob es eine physikalisch optimale Dimensionierung gibt, und wenn ja, wie diese aussieht.

Die Simulationsergebnisse verdeutlichen für beide untersuchten Elektrolyseverfahren, dass eine Dimensionierung nach der größtmöglichen Wasserstoffproduktion nicht mit der energieeffizientesten Dimensionierung übereinstimmt. Ist das Ziel bzw. die Anforderung an den Elektrolyseur möglichst viel Wasserstoff mit der gegebenen elektrischen Leistung der WEA zu erzeugen, so muss dieser eher kleiner dimensioniert werden. Die Elektrodenfläche ist demnach kleiner und damit die Stromdichte höher. Eine höhere Stromdichte ist jedoch auch immer mit einem kleineren Wirkungsgrad des Elektrolyseverfahrens verbunden, weshalb die Energieeffizienz bei dieser Dimensionierung nicht optimal ist. Ist hingegen eine hohe Energieeffizienz gewünscht, um bspw. die Betriebskosten kleiner zu halten, sollte der Elektrolyseur möglichst groß dimensioniert werden. Von einer physikalisch optimalen Dimensionierung zu sprechen setzt also eine bestimmte Zielsetzung voraus. Entweder eine möglichst hohe Wasserstoffproduktion oder ein möglichst energieeffizienter Betrieb.

Für die Dimensionierung nach der maximalen Wasserstoffproduktion ergibt sich für die AEL eine Dimensionierungsleistung von 62% der maximalen WEA-Leistung. Die PEM-EL erreicht ihre maximale Wasserstoffproduktion bei einer Dimensionierungsleistung von 230% und produziert dabei ca. 18% mehr Wasserstoff als die AEL. Interessant ist die Veränderung der notwendigen Dimensionierungsleistung der PEM-EL, wenn die gleiche Menge an Wasserstoff bei einer Dimensionierungsleistung von nur 41%. Das macht vor allem der große Leistungsbereich der PEM-EL von 5-200% der Nennleistung möglich. Durch die kleinere Dimensionierung sinkt jedoch auch die Energieeffizienz drastisch.

Insgesamt zeigt sich, dass die unterschiedlichen Elektrolyseverfahren in ihrer optimalen Dimensionierung deutlich voneinander abweichen. Ob bei der PEM-EL die Dimensionierung auf 230% betriebswirtschaftlich sinnvoll ist, um im Vergleich nur 18% mehr Wasserstoff über ein Jahr zu generieren, ist eine Frage, die nicht mit dem PhO beantwortet werden kann.

Spricht man vom PhO, so impliziert das immer einen Betriebszustand bei dem der betrachtete Prozess oder die betrachteten Prozesse energie- bzw. ressourcenschonend ablaufen. Durch die simulative Betrachtung konnte in diesem Beispiel verdeutlicht werden, dass ein energieschonender Betrieb nicht zeitgleich auch ressourcenschonend ist. Soll eine hohe Energieeffizienz erreicht werden, so müssten die Elektrolyseure unendlich groß gebaut werden. Denn nur bei einer möglichst großen Elektrodenoberfläche sinkt die Stromdichte und der Wirkungsgrad des Elektrolyseverfahrens steigt.

Auch in Anbetracht der Investitionskosten lässt ein sehr großer Elektrolyseur vermuten, dass ein betriebswirtschaftlicher Betrieb nicht möglich ist. Bei der Dimensionierung kann daher nicht nur auf das PhO gesetzt werden. Für eine genauere Aussage über eine optimale Dimensionierung, die sowohl die energetischen und die betriebswirtschaftlichen Aspekte, als auch den Einsatz notwendiger Ressourcen berücksichtigt, wird auf die Methode von N. Beckmann in seiner Dissertation "Wechselwirkungsanalyse zwischen dem Physikalischen Optimum, dem Betriebswirtschaftlichen Optimum und dem Carbon-Footprint-Optimum" verwiesen. Abschließend wird noch einmal darauf hingewiesen, dass in dieser Arbeit nur die Elektrodenoberfläche als Dimensionierungsgröße untersucht wurde. Bei der Dimensionierung von Elektrolysezellen können auch weitere Betriebs- und Anlagenparameter, wie Temperatur, Druck, Elektrodenabstand etc. eine Rolle spielen.

Für Betreiber von Power-to-Hydrogen Anlagen ist neben der Information, welche Dimensionierung für die jeweilige Anforderung optimal ist, besonders wichtig eine Kennzahl zur Überwachung des Prozesses zur Verfügung zu haben. Diese Kennzahl kann der PhO-Faktor darstellen, der in Kapitel 4.2 abgeleitet wurde. Er ermöglicht es die Qualität der Prozesskopplung darzustellen. Dabei berücksichtigt er sowohl das PhO der WEA als auch das PhO des Elektrolyseurs. Eine zunehmende Abweichung vom Grenzwert Eins, welcher bedeuten würde, dass die Prozesskopplung physikalisch optimal abläuft, gibt Hinweise auf mögliche Verschlechterungen im Prozessablauf. Dementsprechend können rechtzeitig Gegenmaßnahmen ergriffen werden. Eine Aussage darüber treffen was nicht korrekt und effizient abläuft kann der PhO-Faktor allerdings nicht.

5 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden zunächst die theoretischen Grundlagen der untersuchten Prozesskopplungen erläutert und verschiedene Methoden zur energetischen Bewertung von Prozessen und Verfahren vorgestellt. Anschließend wurden die ausgewählten Prozesskopplungen im Hinblick auf das PhO untersucht und simuliert. Die durchgeführten Simulationen sollten Aufschluss darüber geben, ob mithilfe der Methode des Physikalischen Optimums eine energetische Optimierung stattfinden kann.

Zunächst konnte festgestellt werden, dass die untersuchten Prozesskopplungen sehr unterschiedlich sind. Der beheizte Rührbehälter vereinigt zwei parallel ablaufende Prozesse (Temperierung und Durchmischung), die von einem gemeinsamen Parameter, der Drehzahl des Rührers, abhängig gemacht werden können. Dies ermöglicht die Ermittlung eines optimalen Betriebspunktes, bei dem der Gesamtenergiebedarf ein Minimum aufweist. Um diesen optimalen Betriebspunkt jedoch mithilfe des PhO ermitteln zu können, bedarf es gewisse Annahmen und Berechnungsmodelle, die in Kapitel 3 näher erläutert werden. Neben der Ermittlung eines energetisch optimalen Betriebspunktes kann auch ein PhO-Faktor für den Kopplungsprozess abgeleitet werden. Mit diesem ist es möglich eine Bewertung des Prozesses für jegliche Betriebspunkte durchzuführen. Sollte der PhO-Faktor sich im Laufe des Betriebes immer weiter vom Wert Eins entfernen, so ist dies ein Indiz für sich verschlechternde Prozess-Bedingungen.

Der Power-to-Hydrogen Prozess hingegen ist ein Prozess, bei dem die Einzelprozesse in Reihe geschaltet sind und nacheinander ablaufen. Zunächst findet die Energiewandlung von Windenergie zu elektrischer Energie statt, bevor die gewonnene elektrische Energie schließlich von der Elektrolyse zur Spaltung von Wasser in die Grundbestandteile Sauerstoff und Wasserstoff eingesetzt wird. Dementsprechend kann auch kein gemeinsamer Einflussparameter der Einzelprozesse gefunden werden, wie es bei dem beheizten Rührbehälter der Fall ist. Da die Windenergie zudem eine nicht zu beeinflussende und nicht planbare Energieform ist, lässt sich auch kein Betriebsoptimum der WEA und Elektrolyse bestimmen. Die Optimierung des Gesamtprozesses findet in diesem Fall durch die Dimensionierung des nachgeschalteten Elektrolyseverfahrens, des Elektrolyseurs, bzw. der Baugröße in Form der Elektrodenoberfläche, statt.

Das PhO wird bei einer größtmöglichen Energie- bzw. Ressourceneffizienz des Elektrolyseurs erreicht. Die durchgeführten Simulationen beweisen jedoch, dass die energieeffizienteste Dimensionierung nicht mit der ressourceneffizientesten Dimensionierung übereinstimmt. Ein energieeffizienter Elektrolyseur muss so groß gebaut werden wie möglich, da die zunehmende Elektrodenfläche zu kleinen Stromdichten und besseren Wirkungsgraden führt. Der Ressourcenaufwand und auch die damit verbundenen Investitionskosten steigen dabei jedoch rapide an.

Durch die Simulationen konnte auch verdeutlicht werden, dass der maximale Wasserstoffertrag bei deutlich kleineren Dimensionierungen erreicht wird (auch hier gibt es Unterschiede zwischen den untersuchten Elektrolyseverfahren AEL und PEM-EL). Der spezifische Energiebedarf ist bei dieser Dimensionierung jedoch größer. In einer kombinierten Betrachtung von PhO und BwO (Betriebswirtschaftliches Optimum) könnte die Dimensionierung nach dem maximalen Wasserstoffertrag jedoch eine Kompromisslösung darstellen. Für eine genauere Untersuchung dieses Kompromisses wird in Kapitel 4.5 auf die Dissertation von N. Beckmann verwiesen.

Die durchgeführten Simulationen können keine konkrete Dimensionierung als physikalisch optimal ermitteln, da dies abhängig von der Definition des PhO ist. Wird ein möglichst energieeffizienter Betrieb als physikalisch optimal betrachtet, müssten die Elektrolyseure möglichst groß dimensioniert werden. Wird hingegen der maximale Wasserstoffertrag als physikalisch optimal betrachtet, kann die Simulation eine konkrete Dimensionierung ermitteln, die in Kapitel 4.3.3 beschrieben ist.

Analog zur Prozesskopplung des beheizten Rührbehälters kann für den Power-to-Hydrogen Prozess ein PhO-Faktor abgeleitet werden, der Betreibern von solchen Anlagen einen Anhaltspunkt über die Qualität bzw. Effizienz ihrer Anlagen im Betrieb bietet. Dieser Faktor dient zur Überwachung des Gesamtprozesses und als Indikator für etwaige Störfälle oder Wartungsbedarfe.

Insgesamt konnten die Untersuchungen und Simulationen dieser Arbeit beweisen, dass die Methode des PhO sich für die Optimierung von Kopplungsprozessen eignet. Jedoch spielt die Art, wie die Prozesse miteinander kombiniert sind eine erhebliche Rolle bei der Vorgehensweise zur Ermittlung des PhO und dem dahinterstehenden Aufwand. Am praktikabelsten ist es, wenn die Einzelprozesse von einem gemeinsamen Parameter abhängig sind. Ist dies der Fall kann sowohl simulativ als auch analytisch ein Betriebsoptimum ermittelt werden, wobei die analytische Lösung lediglich als Ausblick in Kapitel 3.4 erwähnt wird. Bei nacheinander ablaufenden Prozessen lässt sich kein Betriebsoptimum ermitteln. Hier ist es vielmehr notwendig die Einzelprozesse energetisch sinnvoll aufeinander abzustimmen. Die Abstimmung erfolgt in dieser Arbeit bei der Prozesskopplung "Power-to-Hydrogen" simulativ in Form der Dimensionierungsgröße des Elektrolyseurs. Die Methode des PhO wird in diesem Fall nur für den Einzelprozess der Elektrolyse angewendet.

6 Literaturverzeichnis

- [1] BMU, "Klimaschutzplan 2050," Druck- und Verlagshaus Zarbock & Co. KG, Berlin, 2019.
- [2] D. Volta, Das Physikalische Optimum als Basis von Systematiken zur Steigerung der Energie- und Stoffeffizienz von Produktionsprozessen, Clausthal-Zellerfeld: Dissertation, 2014.
- [3] A. Schmidt, WSÜ Skript, Hamburg, 2015.
- [4] B. Hans Dieter und S. Karl, Wärme- und Stoffübertragung, Bochum, Stuttgart: Springer Vieweg, 2013.
- [5] VDI-Richtlinie, "Wärme- und Kälteschutz von betriebstechnischen Anlagen," Beuth Verlag GmbH, Düsseldorf, 2019.
- [6] V.-G. V. u. C. (GVC), VDI-Wärmeatlas, Düsseldorf: Springer Vieweg, 2006.
- [7] M. Zlokarnik, Rührtechnik, Graz: Springer, 1999.
- [8] F. Hahn, A. Muza und J. Schlimme, *Prozessoptimierung anhand des PhOs am Beispiel des Erhitzens von Wasser bei gleichzeitiger Umwälzung mit einem Rührer,* Hamburg: Projektarbeit, 2020.
- [9] P. Kurzweil und O. K. Dietlmeier, Elektrochemische Speicher, Wiesbaden: Springer Vieweg, 2018.
- [10] "StudyHelp," 2020. [Online]. Available: https://www.studyhelp.de/onlinelernen/chemie/elektrolyse/. [Zugriff am 5 August 2020].
- [11] N. Eggers, *Prozesssimulation eines flexiblen Elektrolysesystems mit Aspen,* Magdeburg: Bachelorarbeit, 2017.
- [12] T. Smolinka, M. Günther und J. Garche, "Stand und Entwicklungspotential der Wasserelektrolyse zur Herstellung von Wasserstoff aus regenerativen Energien," Fraunhofer ISE, unbekannt, 2011.
- [13] J. Töpler und J. Lehmann, Wasserstoff und Brennstoffzelle, Berlin: Springer Vieweg, 2017.
- [14] J. Meereis, T. Lutz-Kulawik und M. Rickert, "Potenzialstudie Wasserstoffwirtschaft," Kiel, 2019.

- [15] S. Pichlmaier, T. Hübner und S. Kigle, "FfE Forschungsstelle für Energiewirtschaft e.V.," 2020. [Online]. Available: https://www.ffe.de/publikationen/892-elektrolyse-die-schluesseltechnologie-fuerpower-to-x. [Zugriff am 14 August 2020].
- [16] A. Brinner, "Elektrolyse Basics IV," Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung, Baden-Württemberg, 2013.
- [17] B. W. e.V., "Bundesverband WindEnergie," 2020. [Online]. Available: https://www.wind-energie.de/themen/zahlen-und-fakten/deutschland/. [Zugriff am 4 August 2020].
- [18] V. H. M. GmbH, "Heizkraftwerk Moorburg," Vattenfall, [Online]. Available: https://kraftwerk-moorburg.hamburg/kraftwerk-moorburg/spitzentechnologie-imeinsatz/. [Zugriff am 09 10 2020].
- [19] E. Hau, Windkraftanlagen, Berlin : Springer Vieweg, 2014.
- [20] B. W. e.V., "Bundesverband Windenergie," 2020. [Online]. Available: https://www.wind-energie.de/themen/anlagentechnik/funktionsweise/. [Zugriff am 09 Oktober 2020].
- [21] B. W. e.V., "Bundesverband WindEnergie," 2020. [Online]. Available: https://www.windenergie.de/themen/anlagentechnik/funktionsweise/widerstandlaeuferauftriebslaeufer/. [Zugriff am 4 August 2020].
- [22] Umweltbundesamt, "Umweltbundesamt; Energieverbrauchskennzeichnung," [Online]. Available: https://www.umweltbundesamt.de/themen/klimaenergie/energiesparen/energieverbrauchskennzeichnung. [Zugriff am 26 Oktober 2020].
- [23] C. Keichel, Methode der grenzwertorientierten Bewertung, Clausthal-Zellerfeld: PAPIERFLIEGER VERLAG GmbH, 2017.
- [24] L. Kerpen, *Ausarbeitung zur Definition des indirekten PhO-Faktors,* Hamburg: HAW Hamburg, 2020.
- [25] J. Löser, M. Klemm und A. Hiller, Technische Thermodynamik in ausführlichen Beispielen, München: Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG, 2018.
- [26] DWK Life Sciences GmbH, "Home>Duran Eigenschaften," DWK Life Sciences GmbH, 6 Juli 2020. [Online]. Available: https://www.duran-group.com/de/ueberduran/duran-eigenschaften.html. [Zugriff am 6 Juli 2020].

- [27] N. Beckmann, Wechselwirkungsanalyse zwischen dem Physikalischen Optimum, dem Betriebswirtschaftlichen Optimum und dem Carbon-Footprint-Optimum, Clausthal-Zellerfeld: Papierflieger Verlag, 2018.
- [28] H. Haouani, H. Sahbudak, M. Meller und P. Heinrich, *Gegenüberstellung des PhO im thermodynamischen Grenzfall und der kapazitiven Betrachtung für die Wasserelektrolyse,* Hamburg.
- [29] H. Dieter Baehr und S. Kabelac, Thermodynamik, Berlin: Springer Vieweg, 2016.
- [30] "Acidic or Alkaline? Towards a New Perspective on the Efficiency of Water Electrolysis," *Journal of The Electrochemical Society*, 2016.
- [31] A. Regett und C. Pellinger, "Power2Gas Hype oder Schlüssel zur Energiewende?," Energieverlag GmbH, Essen, 2014.
- [32] P. Dr. Lettenmeier, "Wirkungsgrad Elektrolyse," Siemens AG, Erlangen, 2019.
- [33] T. Smolinka, N. Wiebe, P. Sterchele und u.v.m, "Studie IndWEDe -Industrialisierung der Wasserelektrolyse in Deutschland," BMVI, Berlin, 2018.
- [34] BWE, "Bundesverband WindEnergie," 2020. [Online]. Available: https://www.wind-energie.de/themen/anlagentechnik/funktionsweise/betz-undleistungsentnahme/. [Zugriff am 17 September 2020].

Anhang

A: Quellcode – beheizter Rührbehälter

```
1 %% Berechnung des notwendigen Heizwärmestroms in Abhängigkeit der Drehzahl bzw. 🗸
Durchmischung
  3 % Bestimmung der Konstanten und Parameter
  4
 5 % Rührbehälter
                                    Durchmesser Rührbehälter
                           % [m]
  6 d=0.1;
 7 d_r=0.089;
                           %[m]
                                     Durchmesser Rührer
 8 h-0.064;
                           %[m] Höhe Rührbehälter
  9 s=0.005;
                           % [m]
                                      Wanddicke
                          %[m^2] Fläche der Wärmeübertragung
%[m^2] Mantelfläche
 10 A_b-p1()*(d/2)^2;
 11 A_w=2*p1()*(d/2)*h;
 12 lam_g=0.76;
                           %[W/(m*K)] Wärmeleitfähigkeit Glas
13
 14 % Fluid
                           &[K]
 15 T_fluid=293;
                                      Starttemperatur des Fluids
                                  Zieltemperatur Wasser
Masse Wasser
 16 T_ziel=333;
                           &[K]
17 m-0.5;
                           %[kg]
 18 c_p=4184;
                           %[J/kg*K] spez. WK Wasser
 19 rho-1000;
                           %[kg/m^3] Dichte Wasser
 20 eta_dyn=1.005*10^-3; %[Pa*s]
                                      dyn. Viskosität Wasser
 21 teta_kin=1*10^-6;
                           %[m^2/s] kin. Viskosität
                           %[m^2/s] Temperaturleitfähigkeit W.
%W/(m*K) Wärmeleitfähigkeit Wasser
 22 a=0.14*10^-6;
                                       Temperaturleitfähigkeit Wasser
 23 lam w=0.6;
 24
 25 % Heizplatte (Variable)
 26 T_H-550;
                           %[K] Temperatur Heizplatte
27
 28 % weitere Parameter
 29 a_L=5;
                           %[W/(m2*K)]Wärmeübergangskoeffizienz Luft
 30
 31
 32 V_ende-[];
 33 T_heizzeit=[];
 34 Q_ende-[];
 35 for n=0:1:12
                                % Drehzahl Rührer
 36
 37 *Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten für Ankerrührer [VDI-Wärmeatlas]
 38
 39 Pr-teta_kin/a;
 40 Re=(n.*d_r.^2.*rho)./eta_dyn;
 41
 42 1f Re-0
 43
       alpha_1=540;
 44 else
       Nu=0.358.*(Re.*Pr.^0.5+4000).^(2/3);
 45
 46
 47
       alpha_i=(Nu.*lam_w)./d;
 48 end
 49 k=1./(1./alpha_1+s./lam_g);
                                            % Wärmedurchgangskoeffizient Behälterboden
 50 k_w=1./(1./alpha_1+s./lam_g+1./12);
                                            % Wärmedurchgangskoeffizient für 4
Behälterwand
 51
                                            % (Zahlenwert beinhaltet freie
                                            % Konvektion und Strahlung aus VDI 2055)
 52
 53
                % Umgebungstemperatur
 54 T U-293;
 55 T_wand-293; % Starttemperatur der Behälterwand
 56
 57
 58 T_verlauf=[];
```

```
59 O verlauf=[];
  60 V_verlauf=[];
  61
  62
  63 for t=0:0.01:10000 % Zeit
  64
  65
                 %Berechnung des Temperaturverlaufs mittels Ansatz: "Blockkapazität"
                T_fluid = (T_U-((((k_w.*A_w)./(m.*c_p)).*T_U)+(((k*A_b)./(m.*c_p)).*T_H))./
  66
((k_w,*A_w)./(m.*c_p)+(k.*A_b)./(m.*c_p)))*exp(-(((k_w,*A_w)./(m.*c_p))+((k.*A_b)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-(k_w,*A_w)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-(k_w,*A_w)))*exp(-((k_w,*A_w)./(m.*c_p)))*exp(-(k_w,*A_w)))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w)))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w)))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w)))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w)))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*exp(-(k_w,*A_w))*
*c_p))).*t)+(((((k_w*A_w)./(m.*c_p)).*T_U)+(((k.*A_b)./(m.*c_p)).*T_H))./((k_w*A_w)./
(m.*c_p)+(k.*A_b)./(m.*c_p)));
  67
                 % Berechnung des notwendigen Heizwärmestroms
  68
  69
                 Q=k.*A_b.*(T_H-T_fluid)+k_w.*A_w.*(T_fluid-T_U);
  70
                 % explizite Berechnung der Verluste über die Behälterwand
  71
  72
                V_ind=k_w.*A_w.*(T_fluid=T_U);
  73
  74
               T_verlauf=[T_verlauf, T_fluid];
  75
                 Q_verlauf=[0_verlauf,0];
  76
                 V_verlauf=[V_verlauf, V_ind];
  77
                 % wenn Zieltemperatur erreicht ist: Ermittlung der Aufheizzeit und Wärmestrom
  78
über die Zeit
  79
                 % integrieren
                if T_fluid >= T_ziel
  80
  81
                         t_end-t;
  82
                          T_heizzeit=[T_heizzeit,t_end];
  83
                x-0:0.01:t;
  84
                I-trapz(x, Q_verlauf);
                                                                % Umrechnung des Integrationswertes in Einheit "Wh"
  85
                 Q_gesamt=(I/3600);
  86
                 Q_ende-[Q_ende, Q_gesamt];
  87
  88
                % Berechnung der Verlustenergie
                 % Integration der Verluste
  89
  90
                V_ind_int=trapz(x,V_verlauf);
  91
                 % Umrechnung des Integrationswertes in Einheit "Wh"
               V_ges=(V_ind_int/3600);
  92
  93
                 % Vektor für Sammlung der Verlustenergiewerte für jede Drehzahl
  94
               V_ende=[V_ende, V_ges];
  95
  96
                break
  97
 98
                 end
 99 end
100 end
101
102 x-1:0.01:t_end+1;
103 figure(1)
104 plot (x, Q_verlauf);
105 xlabel('Zeit in [s]');
106 ylabel('Waermestrom in [W]');
107 figure(2)
108 plot (x, T_verlauf);
109 xlabel('Zeit in [s]');
110 ylabel('Temperatur in [K]');
111 I-trapz(x, Q_verlauf);
112 display (T_fluid);
113
                display (t);
              display (I/3600);
114
```

1 clear all

B: Quellcode – Power-to-Hydrogen

AEL:

```
3 %allgemeine Daten
 4 1_0=5.633*10^-6;
 5 Re-0.081;
 6 d-0.000463;
 7 R_sep=0.281;
 8 k_sep=0.164;
 9 a=0.0308;
10 T-20;
11 p_0-1;
12 p_c=1;
13 p_a-1;
14 Y_h2-0;
15 Y_02-0;
16 ps=0.02338;
17 z=2;
18 F-96485.3365;
19 R-8.314;
20
21 1 dim-0.5;
22 U_rev0-1.23;
23 U_rev=U_rev0-0.000846*(T+273.15-298.15);
24
25 % Leistungsdaten einlsen, Dimensionierungsleistung festlegen,
26 % Hilfsvariablen festlegen
27 Messreihe=xlsread('1_Jahr.xlsx');
28 Pel-Messreihe(:,2).*100000;
29 [numRows,numCols]= size(Messreihe);
30 Energieaufwand_verlauf=[];
31 n_kg_verlauf=[];
32 Y-[];
33 Anzahl=[];
34 A_verlauf=[];
35 j_verlauf=[];
36
37 % Berechnung der Überspannungen in Abhängigkeit der Stromdichte
38 % U-Ukin+U_r+U_N;
39 U_ges=[];
40
41
42 for j-0.0001:0.0001:5
43
44 % Überspannung durch ohmsche Verluste
45 U_Ohm=(Re+R_sep)*j;
46
47 % Überspannung kinetisch
48 U_kin=a*log(j/j_0);
49
50 % Nernst Spannung
51 U_N=U_rev+(R*(T+273.15)/(z*F))*log((p_c+Y_h2*j-ps)*((p_a*Y_02*j-ps)^0.5)/(p_0^
(3/2)));
52
53 U=real(U_N)+U_Ohm+U_kin;
54
55 U_ges=[U_ges, U];
56
57 end
58
59 % Schleife für unterschiedliche Dimensionierungsgrößen
```

```
60 for n=0.2:0.01:1
 61
 62 Pel_dim-max(Pel).*n;
 63 Pel_max=1.5*Pel_dim;
 64
 65 % für die Auslegungs-Stromdichte (j=0.5) nun die reale Spannung heraussuchen und
 66 % damit die Auslegungs-Stromstärke berechnen. Mit dieser dann die endgültige
 67 % Elektrodenfläche A bestimmen; Auslegung erfolgt somit nach Pmax bzw.
 68 % einer bestimmten Prozentzahl (n) dieser Leistung
 69
 70 U_dim=U_ges(5000);
 71 U_end=U_ges(end);
 72
 73 I_dim-Pel_dim/U_dim;
 74
 75 A= (I_dim/j_dim);
 76
 77 A_verlauf=[A_verlauf, A];
 78
 79 % Für jeden Leistungswert, der bereitgestellt wird folgt nun die Ermittlung
 80 % der jeweiligen U/I Kombination (Iterativer Prozess). Alle Leistung unter
 81 % 40% der Nennlast werden nicht verwendet. Überlast von 150% (P_dim*1.5) der
 82 % Nennleistung wird zugelassen. Überschüssiger Strom wird nicht verwendet.
 83
 84
 85 Pe1_ges=[];
 86 I_ges=[];
 87
 88 for x-1:1:numRows-1
 89
 90 for 1-1:1:50000
 91
 92
 93
       I-Pel(x)/U_ges(1);
 94
 95
 96
       j_neu=round((I/A)*10000);
 97
 98
       if j_neu--0
 99
100
           break
101
       end
102
103
        if Pel(x) > Pel_max
104
             I-Pel_max/U_ges(1);
105
         end
106
       Pel_neu=I*U_ges(j_neu);
107
108 % Der Grenzwert 100 für die Abweichung von Simulationsleistung zu
109 % tatsächlicher Leistung ist Simulationsbedingt gewählt
110 % worden. Damit Schrittweite von j nicht unendlich groß wird und
    % Rechenzeit gespart werden kann. 0,4 spiegelt den unteren
111
112
    % Leistungsbereich der AEL wieder.
113
114
       if abs(Pel(x)-Pel_neu)<100 && Pel_neu > 0.4*Pel_dim
115
116
           Pel_ges=[Pel_ges, Pel_neu];
117
118
           I_ges=[I_ges,I];
119
```

```
120
            1 verlauf=[1 verlauf, (I/A)];
121
122
           break
123
        end
124 end
125 end
126
      %Anzahl der berücksichtigten Zeitabschnitte (für Validierung)
127
128
           Anzahl=[Anzahl,length(Pel_ges)];
129
130 % Mithilfe der Stromwerte den H2-Stoffstrom ermitteln
131 % Einheit [mol/h]
132 n_h2=(I_ges./(z*F)).*3600;
133
134 % Gesamtmenge an produzierten H2
135 n_h2_ges=sum(n_h2.*0.25);
136
137 % Berechnung kWh/kg_H2:
138
139 E-(Pel_ges.*0.25)./1000; % kWh für jeden Zeitschritt
140
141 E_ges=sum(E);
142
143 Y=[Y,E_ges];
144
145 %Umrechnung mol/h in kg/h;
146
147 M-2.016*10^-3; %kg/mol
148
149 n_kg=n_h2_ges*M;
150
151 Energieaufwand-E_ges./n_kg;
152
153 Energieaufwand_verlauf-[Energieaufwand_verlauf, Energieaufwand];
154 n_kg_verlauf=[n_kg_verlauf,n_kg];
155
156
157 end
158
159 figure(1)
160 plot (0.2:0.01:1, n_kg_verlauf);
161 title('Masse_H_2 in Abhängigkeit der Dimensionierungsleistung')
162 xlabel('% der Maximalleistung')
163 ylabel('Masse_H_2 [kg]')
164
165
166 figure(2)
167 plot (0.2:0.01:1, Y);
168 title ('elektrische Energie in Abhängigkeit der Dimensionierungsleistung')
169 xlabel('% der Maximalleistung')
170 ylabel('elektrische Energie [kWh]')
171
172
173 figure(3)
174 plot (0.2:0.01:1, Energieaufwand_verlauf);
175 title('Energieaufwand pro kg_H_2 in Abhängigkeit der Dimensionierungsleistung')
176 xlabel('% der Maximalleistung')
177 ylabel('Energieaufwand pro kg_H_2 [kWh/kg_H_2]')
178
179 figure(4)
```

```
180 plot(0.2:0.01:1,Anzahl);
181 title('Anzahl berücksichtigter Zeitschritte')
182 xlabel('% der Maximalleistung')
183 ylabel('Anzahl [-]')
184
185
```

1 clear all

PEM-EL:

```
2
 3 %allgemeine Daten
 4 1_0-2.602*10^-10;
 5 Re=0.029;
 6 d-0.000210;
 7 R_sep=0.126;
 8 a=0.0133;
 9 T-20;
10 p_0-1;
11 p_c-1;
12 p_a=1;
13 Y_h2=3;
14 Y_02-3;
15 ps=0.02338;
16 z=2;
17 F-96485.3365;
18 R-8.314;
19
20 1_dim-2;
21 U_rev0-1.23;
22 U_rev=U_rev0-0.000846*(T+273.15-298.15);
23
24 % Leistungsdaten einlsen, Dimensionierungsleistung festlegen,
25 % Hilfsvariablen festlegen
26
27 Messreihe=xlsread('1_Jahr.xlsx');
28 Pel-Messreihe(:,2).*100000;
29 [numRows, numCols] = size(Messreihe);
30 Energieaufwand_verlauf-[];
31 n_kg_verlauf=[];
32 Y-[];
33 Anzahl=[];
34 A_verlauf=[];
35 j_verlauf=[];
36
37 % Berechnung der Überspannungen in Abhängigkeit der Stromdichte
38 % U=Ukin+U_r+U_N;
39
40 U_ges=[];
41 for j=0.0001:0.0001:9
42
43 % Überspannung durch ohmsche Verluste
44 U_Ohm=(Re+R_sep)*j;
45
46 % Überspannung kinetisch
47 U_kin=a*log(j/j_0);
48
49 % Nernst Spannung
50 U_N=U_rev+(R*(T+273.15)/(z*F))*log((p_c+Y_h2*j-ps)*((p_a*Y_o2*j-ps)^0.5)/(p_o^
(3/2)));
51
52 U=real(U_N)+U_Ohm+U_kin;
53
54 U_ges=[U_ges, U];
55
56 end
57
58 % Schleife für unterschiedliche Dimensionierungsgrößen
59 for n=1.8:0.01:3
```

```
60
 61 Pel_dim-max(Pel).*n;
 62 Pel_max=2*Pel_dim;
 63
 64 % für die Auslegungs-Stromdichte (j-2) nun die reale Spannung heraussuchen und
 65 % damit die Auslegungs-Stromstärke berechnen. Mit dieser dann die endgültige
 66 % Elektrodenfläche A bestimmen; Auslegung erfolgt somit nach Pmax bzw.
 67 % einer bestimmten Prozentzahl (n) dieser Leistung
 68
 69
 70 U_dim=U_ges(20000);
 71 U_end=U_ges (end);
 72
 73 I_dim-Pel_dim/U_dim;
 74
 75 A-I_dim/j_dim;
 76 A_verlauf=[A_verlauf, A];
 77
 78 % Für jeden Leistungswert, der bereitgestellt wird folgt nun die Ermittlung
 79 % der jeweiligen U/I Kombination (Iterativer Prozess). Alle Leistung unter
 80 % 5% der Nennlast werden nicht verwendet. Überlast von 200% (P_dim*2) der
 81 % Nennleistung wird zugelassen. Überschüssiger Strom wird nicht verwendet.
 82
 83
 84 Pel_ges=[];
 85 I_ges=[];
 86
 87 for x-1:1:numRows-1
 88
 89 for 1-1:1:90000
 90
 91
       I-Pel(x)/U_ges(1);
 92
 93
       j_neu=round((I/A)*10000);
 94
       if 1_neu--0
 95
 96
 97
           break
 98
        end
 99
        if Pel(x) > Pel_max
100
              I-Pel_max/U_ges(1);
101
         end
102
        Pel_neu=I*U_ges(j_neu);
103
104 % Der Grenzwert 100 für die Abweichung von Simulationsleistung zu
105 % tatsächlicher Leistung ist Simulationsbedingt gewählt
106 % worden. Damit Schrittweite von j nicht unendlich groß wird und
107 % Rechenzeit gespart werden kann. 0,05 spiegelt den unteren
108
    % Leistungsbereich der PEM-EL wieder.
109
        if abs(Pel(x)-Pel_neu)<100 && Pel_neu > 0.05*Pel_dim
110
111
112
           Pel_ges=[Pel_ges, Pel_neu];
113
114
           I des=[I des, I];
115
116
            1_verlauf=[1_verlauf, (1_neu/10000)];
117
118
           break
119
      end
```

```
120 end
121 end
     %Anzahl der berücksichtigten Zeitabschnitte (nur für Recherche)
122
123
124
           Anzahl=[Anzahl, length(Pel_ges)];
125
126 % Nun mithilfe der Stromwerte den H2-Stoffstrom ermitteln
127 % Einheit [mol/h]
128 n_h2=(I_ges./(z*F)).*3600;
129
130 % Gesamtmenge an produzierten H2
131 n_h2_ges=sum(n_h2.*0.25);
132
133 % Berechnung kWh/kg_H2:
134
135 E= (Pel_ges.*0.25)./1000; % kWh für jeden Zeitschritt
136
137 E_ges=sum(E);
138
139 Y-[Y,E_ges];
140
141 %Umrechnung mol/h in kg/h;
142
143 M-2.016*10^-3; %kg/mol
144
145 n_kg=n_h2_ges*M;
146
147 Energieaufwand-E_ges./n_kg;
148
149 Energieaufwand_verlauf-[Energieaufwand_verlauf, Energieaufwand];
150 n_kg_verlauf=[n_kg_verlauf,n_kg];
151
152
153 end
154
155 figure(1)
156 plot (1.8:0.01:3, n_kg_verlauf);
157 title('Masse_H_2 in Abhängigkeit der Dimensionierungsleistung')
158 xlabel('% der Maximalleistung')
159 ylabel('Masse_H_2 [kg]')
160
161
162 figure(2)
163 plot (1.8:0.01:3, Y);
164 title('elektrische Energie in Abhängigkeit der Dimensionierungsleistung')
165 xlabel('% der Maximalleistung')
166 ylabel('elektrische Energie [kWh]')
167
168
169 figure(3)
170 plot (1.8:0.01:3, Energieaufwand_verlauf);
171 title('Energieaufwand pro kg_H_2 in Abhängigkeit der Dimensionierungsleistung')
172 xlabel('% der Maximalleistung')
173 ylabel('Energieaufwand pro kg_H_2 [kWh/kg_H_2]')
174
175 figure(4)
176 plot (1.8:0.01:3, Anzahl);
177 title('Anzahl berücksichtigter Zeitschritte')
178 xlabel('% der Maximalleistung')
179 ylabel('Anzahl [-]')
```