



Schweizerische Eidgenossenschaft  
Confédération suisse  
Confederazione Svizzera  
Confederaziun svizra

Eidgenössisches Departement für  
Umwelt, Verkehr, Energie und Kommunikation UVEK  
**Bundesamt für Energie BFE**

# **Systematische Konzipierung industrieller Ad- und Desorptionsprozesse**

# **SYSKON**

---

**MS 3**

*Zwischenbericht, Stand März 2019*

---

**Auftraggeber:**

Bundesamt für Energie BFE  
Forschungsprogramm Industrielle Prozesse  
CH-3003 Bern  
[www.bfe.admin.ch](http://www.bfe.admin.ch)

**Auftragnehmer:**

Hochschule Luzern – Technik & Architektur (HSLU T&A)  
CC Thermische Energiesysteme & Verfahrenstechnik (CC TEVT)  
CC Fluidmechanik & Hydromaschinen (CC FMHM)  
Technikumstrasse 21  
CH-6048 Horw  
[www.hslu.ch/tevt](http://www.hslu.ch/tevt)

Climeworks AG  
z. Hd. Dr. Nathalie Casas  
Birchstrasse 155  
CH-8050 Zürich  
[www.climeworks.com](http://www.climeworks.com)

Givaudan International SA  
z. Hd. Dr. Gerald Jödicke  
Winterthurerstrasse  
8310 Kempthal  
[www.givaudan.com](http://www.givaudan.com)

**Autoren:**

Roman Blättler, Hochschule Luzern, [roman.blaettler@hslu.ch](mailto:roman.blaettler@hslu.ch)  
Marc Fill, Hochschule Luzern, [marc.fill@hslu.ch](mailto:marc.fill@hslu.ch)  
Adrian Rettig, Hochschule Luzern, [adrian.rettig@hslu.ch](mailto:adrian.rettig@hslu.ch)  
Silvan Schneider, Hochschule Luzern, [silvan.schneider@hslu.ch](mailto:silvan.schneider@hslu.ch)  
Reto Tamburini, Hochschule Luzern, [reto.tamburini@hslu.ch](mailto:reto.tamburini@hslu.ch)  
Roger Waser, Hochschule Luzern, [roger.waser@hslu.ch](mailto:roger.waser@hslu.ch)  
Dominik Widmer, Hochschule Luzern, [dominik.widmer@hslu.ch](mailto:dominik.widmer@hslu.ch)  
Prof. Dr. Mirko Kleingries, Hochschule Luzern, [mirko.kleingries@hslu.ch](mailto:mirko.kleingries@hslu.ch)  
Prof. Dr. Ulf Christian Müller, Hochschule Luzern, [ulfchristian.mueller@hslu.ch](mailto:ulfchristian.mueller@hslu.ch)

**BFE-Bereichsleiter:** Dr. Carina Alles  
**BFE-Programmleiter:** Dr. Carina Alles  
**BFE-Vertragsnummer:** SI/501624-01

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

## Zusammenfassung

Innerhalb des BFE-Projektes *SYSKON* sollen technische Ad- und Desorptionsprozesse systematisch konzipiert werden. Dieses Dokument beinhaltet eine Übersicht über die während der Projektlaufzeit vom 01.12.2018 bis zum 28.03.2019 durchgeführten Arbeiten und erreichten Zielen. Der durchlaufene Projektabschnitt beinhaltet Arbeiten zur Vervollständigung des Arbeitspaketes 3, sowie das Arbeitspaket 4 und beginnend das Arbeitspaket 5.

Im Rahmen der Vervollständigung des Arbeitspaketes 3 (Modellierung) sind die Gleichungen, von Dubinin und Astakhov für das Adsorptionsgleichgewicht, erweitert worden. Die Kinetik der Adsorption wird mit einem physikalisch abgestützten LDF-Koeffizienten abgebildet. Allfällig auftretende Temperaturgradienten in Umfangsrichtung eines Rotoradsorbers werden mittels einer Entdimensionalisierung der Transportgleichung und der Bestimmung von Fourier- bzw. Péclet-Zahlen in den verschiedenen Raumdimensionen auf ihren Einfluss bewertet. Da bei Rotoren monolithische Strömungskanäle vorliegen, sind entsprechende Gleichungen für die Erweiterung des 1D-Basismoduls auf Wabenkörper erarbeitet worden. Weiter ist eine Adsorbentiendatenbank aufgebaut worden, welche jeweils einige Vertreter der wichtigsten Adsorbentengruppen (Oxidische Adsorbentien, kohlenstoffhaltige Adsorbentien etc.) enthält. Die Datenbank enthält weiter Isothermendaten für drei verschiedene Adsorptive.

Im Rahmen des Arbeitspaketes 4 (Prozessmodell; Optimierung Thermo-Ökonomie) wurde eine Definition eines Gütegrades für adsorptive Trenn- und Abscheideprozesse erarbeitet. Ebenfalls ist eine Definition eines synthetischen Referenzprozesses aufgestellt worden. Für die spätere thermo-ökonomische Betrachtung ist dazu ein Modell eines Rotoradsorbers mit Modelica<sup>®</sup> aufgebaut worden. In dieses Modell fließen Berücksichtigungen der Kostenfunktionen und die späteren Zielfunktionen mit ein. Für die Erreichung der Zielfunktionen wurden Optimierungsmassnahmen erarbeitet. Um das Problem zu vereinfachen und Einflussparameter zu reduzieren wird das Verfahren Design of Experiments verwendet. Die Berechnungen zur Voruntersuchung erfolgen automatisiert mithilfe eines MATLAB<sup>®</sup>-Skriptes.

Vorgreifend auf das Arbeitspaket 5 (Beispielanwendungen Givaudan International AG und Climeworks AG) wurde bereits ein Entwurf der Lastenhefte von beiden Industriepartnern mit definierten Zielparametern erstellt. Die Lastenhefte bilden die Grundlage für gemeinsam abgestimmte Pflichtenhefte als Vorgabedokumente für die Arbeitspakete 5.1 und 5.2.

Aus Sicht des Projektteams besitzen nun die «must» Punkte des Pflichtenheftes (Anhang B) alle mindestens den Status Funktionalität aufgezeigt, beziehungsweise sind vollständig erfüllt. Auf einen Grossteil der «nice to have» Punkte trifft dies ebenfalls zu.

# Inhaltsverzeichnis

<b>ZUSAMMENFASSUNG</b> .....	<b>3</b>
<b>1 EINLEITUNG</b> .....	<b>5</b>
<b>2 ERWEITERUNG GLEICHGEWICHT SORBENS/SORPTIV</b> .....	<b>6</b>
2.1. DUBININ/ASTAKHOV .....	6
2.2. KINETIK.....	8
<b>3 ERWEITERUNGEN DES MODELICA®-MODELLS</b> .....	<b>9</b>
3.1. MODELLIERUNG ROTORADSORBER.....	9
3.2. TEMPERATURGRADIENT IN UMFANGSRICHTUNG.....	9
3.3. ERWEITERUNG DES BASISMODULS FÜR WABENKÖRPER .....	13
<b>4 ADSORBENTIENDATENBANK</b> .....	<b>16</b>
4.1. ÜBERSICHT .....	16
4.2. MODELICA® IMPLEMENTIERUNG .....	16
4.3. ISOTHERMEN UND STOFFPAARUNGEN.....	17
<b>5 EFFIZIENZBEWERTUNG</b> .....	<b>20</b>
5.1. REVERSIBLE MOLARE TRENNARBEIT .....	20
5.2. ADSORPTIONSENTHALPIEN .....	20
5.3. GÜTEGRAD.....	23
5.4. GANZHEITLICHE BETRACHTUNG .....	24
5.5. FAZIT.....	25
<b>6 PROZESSMODELL UND THERMO-ÖKONOMIE</b> .....	<b>26</b>
6.1. THERMO-ÖKONOMIE.....	26
6.2. REFERENZFALL ZUM FUNKTIONSTEST PROZESSMODELL UND THERMO-ÖKONOMIE .....	27
<b>7 ZIELFUNKTION</b> .....	<b>32</b>
<b>8 OPTIMIERUNG</b> .....	<b>33</b>
8.1. OPTIMIERUNGSPROZESS .....	33
8.2. DOE-ANSATZ ZUR OPTIMIERUNG.....	34
8.3. OPTIMIERUNG DES METAMODELLS .....	35
8.4. PARETOFRONT/DARSTELLUNG.....	35
8.5. MÖGLICHE REALISIERUNG IN MATLAB® UND DYMOLA® .....	36
<b>9 VERÖFFENTLICHUNGEN</b> .....	<b>37</b>
<b>10 AUSBLICK UND NÄCHSTE SCHRITTE</b> .....	<b>38</b>
<b>LITERATURVERZEICHNIS</b> .....	<b>39</b>
<b>SYMBOLVERZEICHNIS</b> .....	<b>41</b>
<b>ANHANG A</b> .....	<b>43</b>
<b>ANHANG B</b> .....	<b>44</b>
<b>ANHANG C</b> .....	<b>49</b>
<b>ANHANG D</b> .....	<b>51</b>

## 1 Einleitung

Während der Projektlaufzeit vom 01.12.2018 bis zum 28.03.2019 ist das Projekt SYSKON planmässig weitergeführt worden. Die abschliessenden Arbeiten des Arbeitspaketes 3 umfassten die Erarbeitung der für die Simulation nötigen Parameter der jeweiligen Isothermengleichungen. Dazu werden die Isothermen-Rohdaten mit einem MATLAB®-Code gefittet. Für letzteren erfolgte eine Erweiterung des Gleichgewichts Sorbens/Sorptiv nach Dubinin und Astakhov. Die so ermittelten Parameter können anschliessend in das Modelica®-Modell übernommen werden. Für die Kinetik der Adsorption werden die Stoffübergangs- und Stoffdurchgangskoeffizienten zu einem physikalisch abgestützten «lumped» LDF-Koeffizienten zusammengefasst. Um den Einfluss von tangentialen Temperaturgradienten auf das Modell beurteilen zu können, ist ein physikalisches Bewertungskriterium erarbeitet worden. Mithilfe einer Entdimensionalisierung der Transportgleichung werden Fourier- und Péclet-Zahlen in radialer, axialer und tangentialer Richtung berechnet. Aus den Verhältnissen dieser Zahlen kann auf die Auswirkungen von Wärmeleitung in Umfangsrichtung geschlossen werden. Der modellierte Rotoradsorber zeigt plausible Ergebnisse und kann für die anschliessende thermo-ökonomische Betrachtung verwendet werden. Für die monolithischen Strömungskanäle in Rotoradsorbern sind entsprechende Gleichungen für die Erweiterung des 1D-Basismoduls auf Wabenkörper für den Stoffübergang erarbeitet worden. Es ergeben sich unterschiedliche Sherwood-Korrelationen für Monolithen, laminare Rohrströmungen und laminare Plattenströmungen. Parallel dazu wurde die Adsorbentendatenbank (Siehe Kapitel 4, sowie Anhang A) ausgebaut. Darin sind einige gängige Adsorbentien, mit ihren für die Berechnungen nötigen Stoffwerten, hinterlegt. Die Datenbank beinhaltet ebenfalls die Rohdaten von Isothermen für die Adsorbentien mit jeweils drei verschiedenen Adsorptiven pro Adsorbens.

Im Zuge des Arbeitspakets 4 wurde eine Definition eines Gütegrades für Trennprozesse, in Analogie zum Carnot-Prozess für Wärmekraftmaschinen, hergeleitet. Hierbei wird der tatsächliche Energiebedarf der Gastrennung, eingeteilt in Adsorption/Desorption und Hilfsaggregate, mit dem Energieverbrauch einer reversiblen Gastrennung verglichen. Der so errechnete Gütegrad kann für eine objektive Betrachtung und Bewertung des Trenn- bzw. Abscheidevorgangs dienen. Für die thermo-ökonomischen Betrachtungen ist eine Definition eines synthetischen Referenzprozesses aufgestellt worden. Anschliessend sind Überlegungen für die Implementierung und Simulation eines Rotoradsorbers angestellt worden. In einem ersten Schritt wurde letzterer als ein axial durchströmtes Festbett mit sich ändernden Randbedingungen, in Anlehnung an den Fall von Konrad [1], modelliert. Dieser Rotoradsorber dient als Basis für die thermo-ökonomischen Betrachtungen. Das Modell wurde so erweitert, dass Zielfunktionen (z. B. Adsorptionszeit) und Kostenfunktionen (z. B. Sorbenskosten) miteinbezogen werden können. Eine optimale Erreichung dieser Zielfunktionen soll mithilfe des Optimierungswerkzeugs Design of Experiments realisiert werden. Dabei wird das komplex vorliegende Problem in ein einfacheres mit wenigen Einflussparametern reduziert. Die optimale Lösung kann anschliessend als Paretofront dargestellt werden. Die Berechnungen zur Voruntersuchung erfolgen automatisiert mithilfe eines MATLAB®-Skriptes.

Vorgreifend auf das Arbeitspaket 5 wurde bereits ein Entwurf der Lastenhefte von beiden Industriepartnern mit definierten Zielparametern erstellt. Die Lastenhefte bilden die Grundlage für gemeinsam abgestimmte Pflichtenhefte als Vorgabedokumente für die Arbeitspakete 5.1 und 5.2.

## 2 Erweiterung Gleichgewicht Sorbens/Sorptiv

In diesem Kapitel ist eine Beschreibung über die Implementierung des Verfahrens nach Dubinin/Astakhov zum Isothermenfitting enthalten.

### 2.1. Dubinin/Astakhov

Um das Adsorptionsgleichgewicht zu bestimmen, können die Isothermen mittels Ansatz von Dubinin und Astakhov nach Gleichung (2-1) gefittet werden (Nunez [2]).

$$W = \exp\left(-\left(\frac{A}{\beta \cdot E_0}\right)^n\right) \tag{2-1}$$

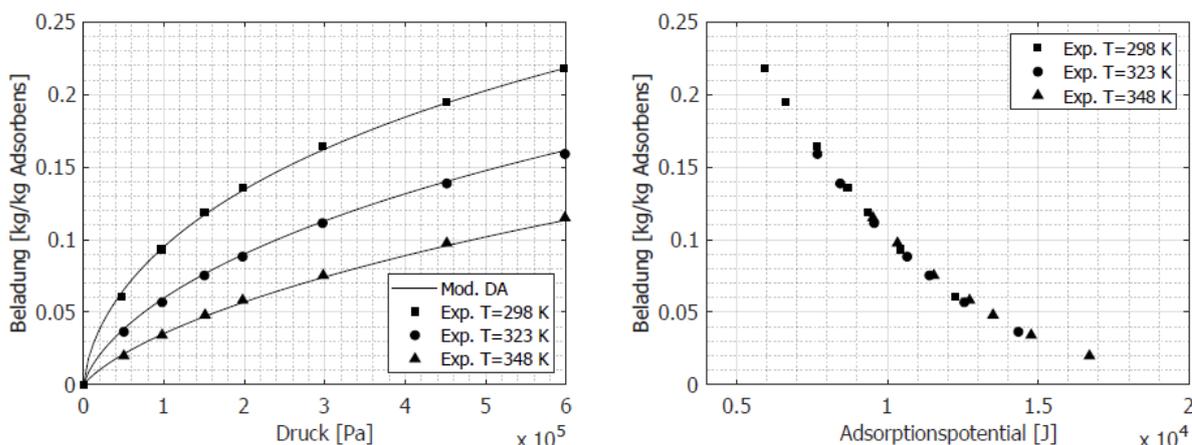
Das Adsorptionspotenzial A kann als Differenz der Gibbs-Energien zwischen adsorbierter und nicht adsorbierter Phase verstanden werden (Nunez [2]), wobei sich das spezifische adsorbierte Volumen W auf das adsorbierte Volumen beim Sättigungszustand bezieht.

$$A = RT \ln\left(\frac{f_{sat}}{f}\right) \approx RT \ln\left(\frac{p_{sat}}{p}\right) \tag{2-2}$$

$$W \approx \frac{q}{p_{sat}} \tag{2-3}$$

Da der Sättigungsdruck bei überkritischen Temperaturen nicht definiert ist, muss ein Pseudosättigungsdruck  $p_{sat} = p_c \left(\frac{T}{T_c}\right)^k$  definiert werden (Amankwah und Schwarz [3]). Es wird davon ausgegangen, dass sich die Sättigungsdichte aus dem molaren Kovolumen berechnen lässt zu  $\rho_{crit} \approx \frac{RT_c}{8p_c}$  (Schwamberger [4]).

Schneider [5] hat in seiner Masterthesis Isothermen für Kohlendioxid und Stickstoff mit dem Ansatz nach Dubinin gefittet. Die gefitteten Isothermen sind, zusammen mit den experimentellen Daten, in Abbildung 1 ersichtlich.



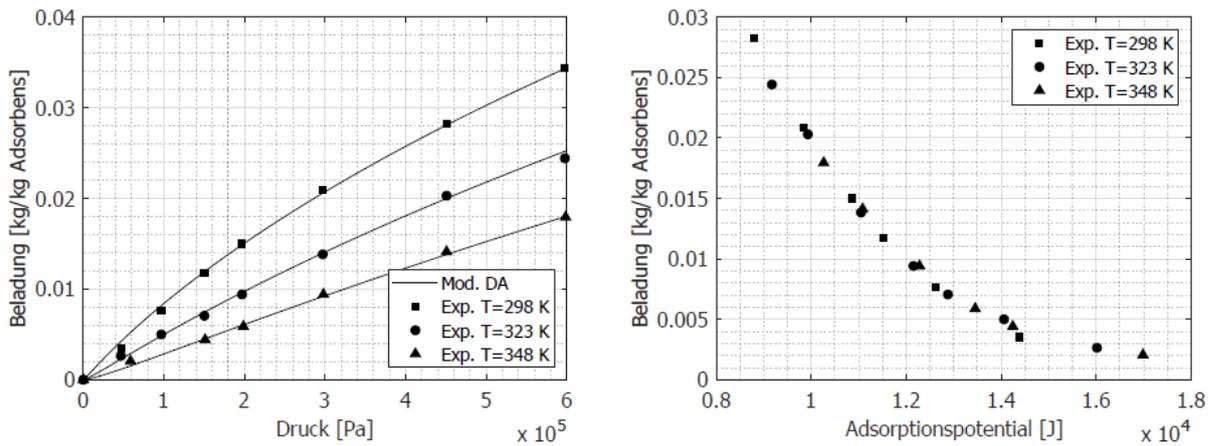


Abbildung 1: Isothermen für reines Kohlendioxid (oben) und Stickstoff (unten). Die Symbole bezeichnen Messwerte, durchgezogene Linien repräsentieren den Fit mit Dubinin-Astakhov (Schneider [5]).

Um auch das Gleichgewicht bei der Mehrkomponentenadsorption beschreiben zu können, kann der IE-Approach verwendet werden (Integral Equation) [6]. Die Beziehung von Wojciechowski beschreibt eine Mischisotherme mit:

$$\theta_{i,mix} = - \left( 1 - \sum_{j \neq i}^n \theta_{j,mix} \right) \theta_i \quad (2-4)$$

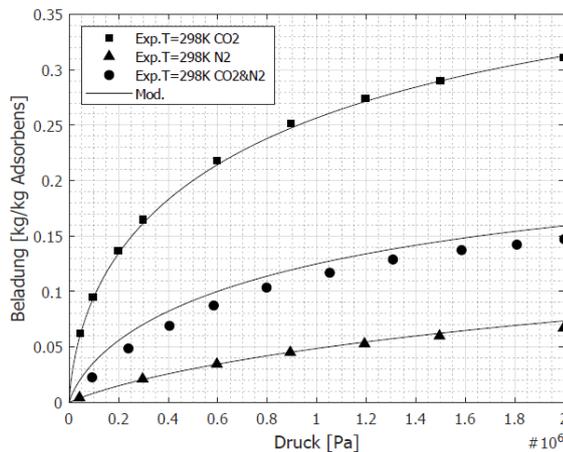


Abbildung 2: Mischisotherme für 15% CO<sub>2</sub> und 85% N<sub>2</sub>

Die spezifische Adsorptionenthalpie kann direkt aus der Gleichung von Dubinin und Astakhov berechnet werden (Beckner und Dailly [7]).

$$\Delta h_{ads} = \beta E_0 \left[ \ln \left( \frac{q_0}{q} \right) \right]^{1/n} + kRT \quad (2-5)$$

## 2.2. Kinetik

Auf Basis von physikalischen Grössen kann ein konsistenter LDF-Koeffizient berechnet werden. Dies erfolgt in vier Schritten:

- Berechnung eines materialspezifischen effektiven Diffusionskoeffizienten
- Geometriespezifische Berechnung des Stoffdurchgangskoeffizienten im Adsorbens Korn
- Definition eines strömungsabhängigen Stoffübergangskoeffizienten auf das Adsorbens Korn
- Kombination des Stoffdurchgangs- und Stoffübergangskoeffizienten in einem LDF-Koeffizienten

Der materialspezifische Diffusionskoeffizient wird durch die Effekte der Knudsen- und der molekularen Diffusion bestimmt. Über die Porosität und Tortuosität lässt sich ein effektiver Diffusionskoeffizient berechnen:

$$D_{eff,i} = \frac{\varepsilon}{\tau} \frac{D_{k,i} D_{m,i}}{D_{k,i} + D_{m,i}} \quad (2-6)$$

Die Bestimmung des molekularen Diffusionskoeffizienten ist über die Chapman-Enskog-Gleichung möglich. Bei mehr als zwei Komponenten müssen die Diffusionskoeffizienten über die Maxwell-Stefan-Theorie gemittelt werden (Tavlarides [8] und Sutton und Gnoffo [9]):

$$D_{m,i} = \frac{1 - y_i}{\sum_{j \neq i} \frac{y_j}{D_{m,ij}}} \quad (2-7)$$

Der rein materialabhängige Diffusionskoeffizient muss zur Berechnung des Stoffüberganges in einen Stoffübergangskoeffizienten umgerechnet werden, der sowohl von Strömungsgrössen, als auch der Geometrie des Adsorbens abhängig ist. Das Vorgehen wird im Folgenden beispielhaft für einen Festbettadsorber mit sphärischen Adsorbenspartikeln aufgezeigt. Für abweichende Adsorbensformen und Adsorbentbauarten sind lediglich die Korrelationen zu ersetzen. Der Stoffdurchgangskoeffizient lässt sich unter der Annahme eines parabolischen Konzentrationsprofils abschätzen (Li und Yang [10], Rezaei und Webley [11]).

$$k_d = \frac{5D_{eff}}{r} \quad (2-8)$$

Sherwood-, Reynolds- und Schmidt-Zahl erlauben eine Bestimmung des Stoffübergangskoeffizienten an der Oberfläche der Adsorbenspartikel. (Rezaei und Webley [11]). Die Korrelation stammt ursprünglich aus einer Veröffentlichung von Wakao und Funazkri [14] und gilt im für Festbettadsorber typischen Reynoldszahlbereich von 3 bis 10'000).

$$Sh = \frac{k_s \cdot d}{D_{eff}} = 2 + 1.1 Re^{0.6} Sc^{0.33} \quad (2-9)$$

Der Stoffdurchgangs- und Stoffübergangskoeffizient lassen sich schliesslich in einem physikalisch abgestützten LDF-Koeffizienten kombinieren (Rezaei und Webley [11]).

$$k_{LDF} = \frac{k_s k_d}{k_s + k_d} \quad (2-10)$$

### 3 Erweiterungen des Modelica®-Modells

Die folgenden Abschnitte beschreiben die Implementierten Erweiterungen des Modelica®-Modells. Es erfolgt zunächst eine Beschreibung der Modellierung des Rotoradsorbers und anschliessend der Erfassung des Temperaturgradienten in Umfangsrichtung.

#### 3.1. Modellierung Rotoradsorber

Ruvio et al. [12] haben zwei Modelle für Rotoradsorber erarbeitet, ein detailliertes zweidimensionales und ein vereinfachtes, welches den Adsorptivstrom als bulk-flow betrachtet. Innerhalb des detaillierten Modells werden die Massen-, Energie- und Stoffbilanzen zweidimensional gelöst, während das vereinfachte Modell die Gleichungen lediglich eindimensional löst. Die Resultate zeigen, dass das vereinfachte Modell für Strömungskanallängen  $> 0.1\text{m}$  und Verhältnissen von Strömungskanallänge zu Strömungskanalhöhe  $> 67$ , gute Resultate liefert. Konrad et al. [13] modellierten einen Rotoradsorber aus mehreren parallel geschalteten Festbettadsorbern. Hierbei wird jeweils ein Kuchensegment als Desorptionszone modelliert. Die Berechnungen erfolgen stationär, während die Zonen nach einer bestimmten Taktzeit «weitergeschoben» werden. Um das Basismodul auf Rotoradsorber adaptieren zu können, muss das Modelica®-Modell mit geänderten Randbedingungen erweitert werden. Es liegen nun Wabenkörper, anstelle von Schüttungen bei Festbettadsorbern, vor. Weiter erfolgt die Adsorption und die Desorption zur gleichen Zeit und es können Temperaturgradienten in Umfangsrichtung auftreten (Siehe Kapitel 3.2). Eine ausführliche Beschreibung des Rotoradsorber-Modells findet sich in Kapitel 6.2.1.

#### 3.2. Temperaturgradient in Umfangsrichtung

Der überwiegende Teil der Veröffentlichungen vernachlässigt den Temperaturgradienten in Umfangsrichtung. Eine klare Begründung, weshalb diese Vereinfachung gemacht wird, ist allerdings keinem der Paper zu entnehmen. Vereinzelt wird mit einem kleineren Rechenaufwand argumentiert, für SYSKON ist dies allerdings keine ausreichende Begründung. Im Folgenden findet sich eine Herleitung zur Entdimensionalisierung der Transportgleichung. Durch Einführen eines Zylinderkoordinatensystems können so Fourier- und Péclet-Zahlen in Umfangs- und Tangentialrichtung bestimmt werden. Mit dem Verhältnis dieser Zahlen kann anschliessend auf die Grösse und den Einfluss der auftretenden Temperaturgradienten geschlossen werden.

##### 3.2.1 Transportgleichung in alle Richtungen

Die Transportgleichung in ihrer allgemeinen Form für Radial ( $r$ ), Axial ( $x$ ) und Tangentialrichtung ( $\theta$ ) lautet:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} u) - v\nabla \vec{u} \quad (3-1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial (ru)}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) - v\nabla \vec{u}$$

##### 3.2.2 Dimensionslose Transportgleichung in x-Richtung

Um die Péclet- bzw. Fourier-Zahl zu bestimmen, können die Annahmen in Tabelle 1 in Gleichung (3-2) eingesetzt werden.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - v \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3-2)$$

Tabelle 1: Annahmen für die dimensionslose Transportgleichung in x-Richtung zur Bestimmung der Péclet-Zahl

Variable	Annahme
Temperatur	$u = u^* \cdot u_0$
Länge	$x = x^* \cdot x_0$
Zeit	$t = \frac{t^* \cdot x_0}{v_0}$
Geschwindigkeit	$v = v^* \cdot v_0$

Einsetzen liefert:

$$\frac{\partial(u)}{\partial\left(\frac{tv_0}{x_0}\right)} = \frac{a}{v_0 x_0} \frac{\partial^2(u)}{\partial\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} - \frac{\partial\left(\frac{uv}{v_0}\right)}{\partial\left(\frac{x}{x_0}\right)} \quad (3-3)$$

Zur Bestimmung der Fourier-Zahl kann analog vorgegangen werden:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - v \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3-4)$$

Tabelle 2: Annahmen für die dimensionslose Transportgleichung in z-Richtung zur Bestimmung der Fourier-Zahl

Variable	Annahme
Temperatur	$u = u^* \cdot u_0$
Länge	$x = x^* \cdot x_0$
Zeit	$t = \frac{t^* \cdot x_0}{v_0}$
Geschwindigkeit	$v = v^* \cdot v_0$

Einsetzen liefert:

$$\frac{\partial(u)}{\partial\left(\frac{ta}{x_0^2}\right)} = \frac{\partial^2(u)}{\partial\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} - \frac{\frac{x_0}{t} x_0}{1/Fo_x} \frac{\partial\left(\frac{uv}{v_0}\right)}{\partial\left(\frac{x}{x_0}\right)} \quad (3-5)$$

### 3.2.3 Dimensionslose Transportgleichung in radialer Richtung

Für die Bestimmung der Fourier-Zahl in radialer Richtung wird wiederum gleich vorgegangen.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial (ru)}{\partial r} \right) \tag{3-6}$$

Tabelle 3: Annahmen für die dimensionslose Transportgleichung in radialer Richtung zur Bestimmung der Fourier-Zahl

Variable	Annahme
Temperatur	$u = u^* \cdot u_0$
Länge	$x = x^* \cdot x_0$
Zeit	$t = \frac{t^* \cdot r_0^2}{a}$
Geschwindigkeit	$v = v^* \cdot v_0$

$$\frac{\partial(u)}{\partial\left(\frac{ta}{r_0^2}\right)} = \left( \frac{1}{\frac{1}{r_0}} \frac{\partial^2\left(\frac{r}{r_0} \frac{u}{u_0}\right)}{\partial\left(\frac{r}{r_0}\right)^2} \right) \tag{3-7}$$

$For$

### 3.2.4 Dimensionslose Transportgleichung in Umfangsrichtung

Schlussendlich kann auf dieselbe Weise auch die Fourier-Zahl in Umfangsrichtung bestimmt werden.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \right) \tag{3-8}$$

Tabelle 4: Annahmen für die dimensionslose Transportgleichung in Umfangsrichtung zur Bestimmung der Fourier-Zahl

Variable	Annahme
Temperatur	$u = u^* \cdot u_0$
Länge	$x = x^* \cdot x_0$
Zeit	$t = \frac{t^* \cdot (r_0 \theta_0)^2}{a}$
Geschwindigkeit	$v = v^* \cdot v_0$

$$\frac{\partial(u)}{\partial\left(\frac{ta}{(r_0 \theta_0)^2}\right)} = \left( \frac{1}{\left(\frac{r}{r_0}\right)^2} \frac{\partial^2\left(\frac{u}{u_0}\right)}{\partial\left(\frac{\theta}{\theta_0}\right)^2} \right) \tag{3-9}$$

$Fo_\theta$

Die aus den Gleichungen (3-1) bis (3-9) extrahierten Formeln zur Bestimmung der Kennzahlen sind in der Tabelle 5 zusammengefasst.

Tabelle 5: Zur Bestimmung der Fourier-Zahlen in axialer, radialer und tangentialer Richtung, sowie der Péclet-Zahl in axialer Richtung

Kennzahl	Formel
Axiale Fourier-Zahl	$ Fo_x = \frac{t \cdot a_x}{x_0^2} $
Radiale Fourier-Zahl	$ Fo_r = \frac{t \cdot a_r}{r_0^2} $
Tangentiale Fourier-Zahl	$ Fo_{\theta} = \frac{t \cdot a_{\theta}}{(r_0 \theta_0)^2} $
Axiale Péclet-Zahl	$ Pe_x = \frac{v_0 x_0}{a} $

Aus diesen Kennzahlen können nun die Verhältnisse gemäss den folgenden Formeln bestimmt werden.

$$R_{x\theta} = \frac{Fo_x}{Fo_{\theta}} = \frac{(r_0 \theta_0)^2 \cdot a_x}{x_0^2 \cdot a_{\theta}} \tag{3-10}$$

$$R_{xr} = \frac{Fo_x}{Fo_r} = \frac{r_0^2 \cdot a_x}{x_0^2 \cdot a_r} \tag{3-11}$$

$$Pe_x = \frac{v_0 x_0}{a} \tag{3-12}$$

Jetzt kann eine Fallunterscheidung für die Bewertung der Einflüsse in radialer, tangentialer und axialer Richtung erstellt werden:

Tabelle 6: Fallunterscheidung für die Bewertung der Einflüsse des Temperaturgradienten

Nr.	Fall	Bewertung der Einflüsse
1	$ Pe_x \gg 1 $	Leitung ist in Umfangs- und Radialrichtung nicht bedeutend
2	$ Pe_x \ll 1 \& R_{x\theta} \gg 1 \& R_{xr} \gg 1 $	Leitung ist in Umfangs- und Radialrichtung nicht bedeutend
3	$ Pe_x \ll 1 \& R_{x\theta} \ll 1 \& R_{xr} \gg 1 $	Leitung ist in Radialrichtung nicht bedeutend
4	$ Pe_x \ll 1 \& R_{x\theta} \gg 1 \& R_{xr} \ll 1 $	Leitung ist in Umfangsrichtung nicht bedeutend
5	$ Pe_x \ll 1 \& R_{x\theta} \ll 1 \& R_{xr} \ll 1 $	Leitung ist in Umfangs- und Radialrichtung bedeutend

Abschliessend kann nun gesagt werden, dass der Temperaturgradient in den Fällen 1 bis 4 vernachlässigt werden kann und im Fall 5 berücksichtigt werden muss.

Es zeigt sich, dass die Verhältnisse der Fourier-Zahlen und die Péclet-Zahl für unterschiedliche Geometrien andere Werte annehmen. Somit muss die Bewertung des Temperaturgradienten für jeden neuen Fall spezifisch erfolgen.

### 3.3. Erweiterung des Basismoduls für Wabenkörper

In diesem Kapitel erfolgt eine Beschreibung der Erweiterung des Basismoduls auf Wabenkörper. Die Berechnung des Stoffübergangs an der Adsorbensoberfläche ist für Monolithen über eigene Korrelationen möglich. Die Publikationen [11], [15] und [16] zeigen das Vorgehen dafür auf. Die Publikationen liefern alle notwendigen Korrelationen und Datenmaterial, welches als Vergleichsfall dienen könnte. Die einschlägigen Publikationen bedienen sich in der Regel bei den Korrelationen von Hawthorn [17] für den Stoffübergang.

#### 3.3.1 Monolith

Hawthorn gibt für Monolithen die folgenden Korrelationen zur Bestimmung von Sherwood-, Reynolds- und Schmidt-Zahl für den Stoffübergang an.

##### Monolith, wabenförmige hexzelle

$$Sh = 3.66 \cdot \left[ 1 + 0.095 \cdot Re \cdot Sc \cdot \frac{L}{x} \right]^{0.45} \quad (4-1)$$

$$Re = \frac{wL}{\nu}, Sc = \frac{k(x) \cdot L}{D_{AB}} \quad (4-2)$$

##### Monolith, wabenförmig

$$Sh = 2.35 \cdot \left[ 1 + 0.095 \cdot Re \cdot Sc \cdot \frac{L}{x} \right]^{0.45} \quad (4-3)$$

$$Re = \frac{wL}{\nu}, Sc = \frac{k(x) \cdot L}{D_{AB}} \quad (4-4)$$

#### 3.3.2 Erweiterung auf weitere Spezialgeometrien

Für runde Monolithkanäle können Korrelationen für Rohrströmungen verwendet werden. Diese sind besser ausgearbeitet und dokumentiert als die Angaben von Hawthorn. Als Quelle dient das Buch von M. Kraume [18]. Kraume unterscheidet die Fälle mit und ohne Anlauf des Geschwindigkeitsprofils.

##### Laminare Rohrströmung

Anlauf des Geschwindigkeits- und Konzentrationsprofils.

$$Sh = 0.664 \cdot \sqrt{Re \cdot \frac{d}{z}} \cdot Sc^{1/3}, z < z_{ein} \quad (4-5)$$

$$Re = \frac{wd}{\nu}, Sc = \frac{\nu}{D} \quad (4-6)$$

Ausgebildetes Geschwindigkeitsprofil, Anlauf des Konzentrationsprofils.

$$Sh = 1.615 \cdot \left( Re \cdot Sc \cdot \frac{d}{z} \right)^{1/3}, z < z_{ein} \quad (4-7)$$

$$Re = \frac{wd}{\nu}, Sc = \frac{\nu}{D} \quad (4-8)$$

### Laminare Plattenüberströmung

Für Fälle von plattenförmigen Strukturen gibt Kraume ebenfalls Korrelationen an.

$$Sh_x = \frac{k(x) \cdot L}{D_{AB}} = 0.664 \cdot \sqrt{Re_L} \cdot Sc^{1/3} \quad (4-9)$$

$$Re = \frac{wL}{\nu}, Sc = \frac{\nu}{D} \quad (4-10)$$

### 3.3.3 Randeffekte bei verschiedenen Querschnittsformen

Je spitzer die Winkel sind, die im Strömungskanalquerschnitt vorkommen, umso eher unterscheidet sich das Verhalten der Kernströmung vom Verhalten in den Ecken der Geometrie. Während die Strömung über einen kreisförmigen Querschnitt ortsunabhängig näherungsweise ein ähnliches Verhalten aufweist, verhält sich die Strömung bei einem Rechteckquerschnitt in den Ecken hinreichend anders als im Innern der Geometrie. Es kommt zu «Randeffekten»

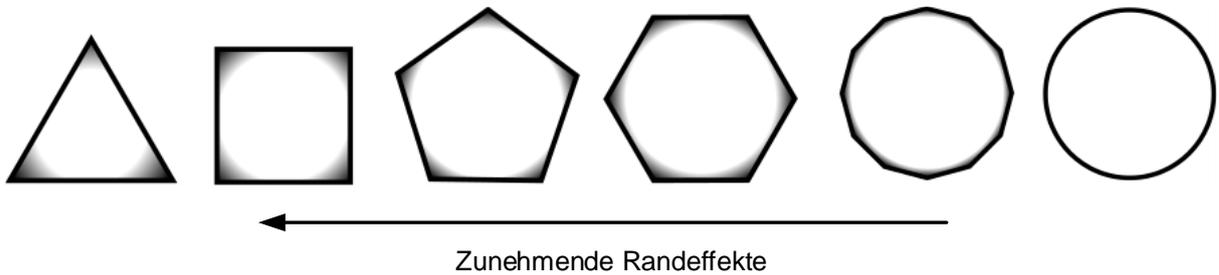


Abbildung 3: Rolle der Randeffekte bei verschiedenen Querschnittsformen des Strömungskanals

Je ausgeprägter solche Randeffekte sind, umso mehr wird die Durchbruchkurve von ihnen beeinflusst. In der Region mit den Randeffekten bildet sich eine Strömung aus, die ein unterschiedliches Adsorptionsverhalten im Vergleich zur Kernströmung aufweist. Durch Unterschiede in der Strömungsgeschwindigkeit, der Wirbelausbildung oder der Strömungsrichtung läuft in diesen Regionen die Adsorption mit unterschiedlicher Zeitkonstante ab. Faktisch ist dann ein Mehrspeichersystem vorhanden, dessen unterschiedliche Zeitkonstanten in der Durchbruchkurve sichtbar werden.

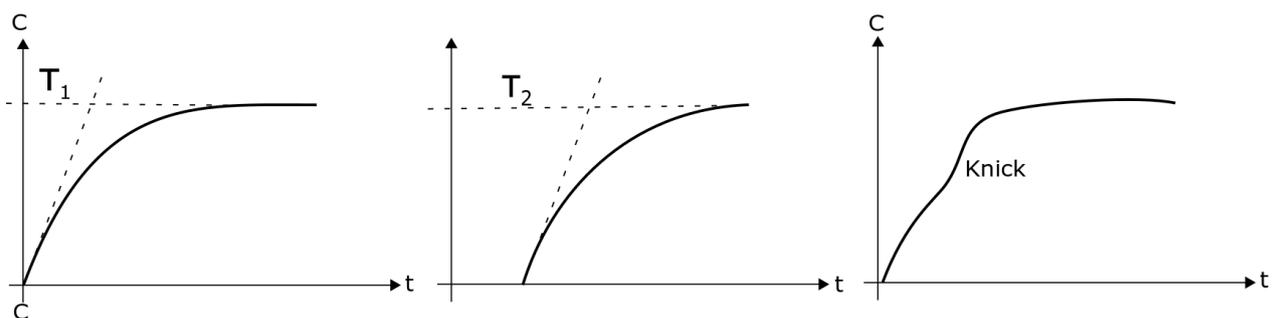


Abbildung 4: Beeinflussung der Durchbruchkurve bei einem System mit mehreren Zeitkonstanten

Das oben beschriebene Verhalten lässt sich durch lokale Anpassungen der Stoffübergangskorrelationen ebenfalls abbilden. Lokal kann im Querschnitt beispielsweise zwischen einer Korrelation «ebene Platte» und «Ecke» unterschieden werden.

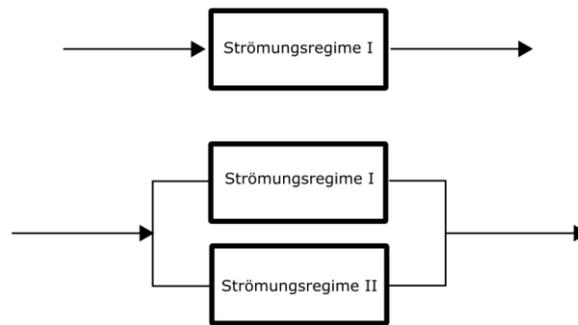


Abbildung 5: Modell mit Aufteilung in verschiedene Strömungsregime

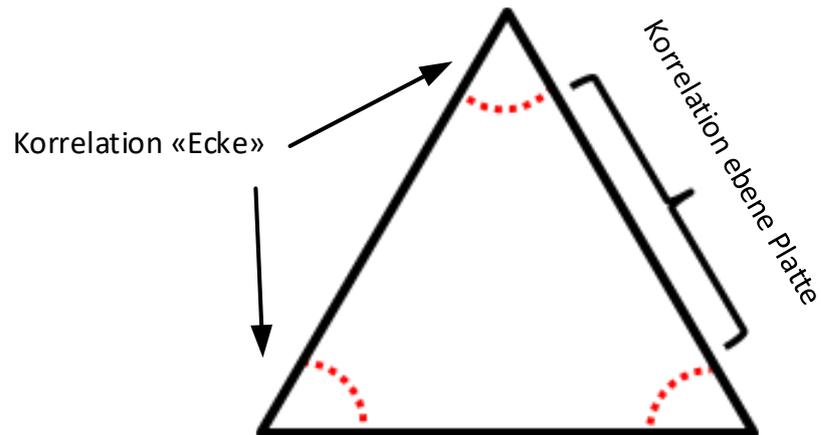


Abbildung 6: Beispiel für die lokale Unterscheidung der Strömungsphänomene in einem Dreieckquerschnitt

## 4 Adsorbentiendatenbank

Dieses Kapitel beinhaltet eine Beschreibung der Adsorbentiendatenbank von *SYSKON*. Es wird auf die verschiedenen, hinterlegten, Adsorbentien, Adsorptive, Stoffpaarungen und Isothermen eingegangen.

### 4.1. Übersicht

Im Anhang A ist die Adsorbentiendatenbank, welche für *SYSKON* erstellt wurde ersichtlich. Die Aufteilung der Adsorbentien erfolgte in die in Tabelle 7 gelisteten, gängigen Gruppen:

Tabelle 7: Auszug aus der Adsorbentiendatenbank von *SYSKON*

Gruppe	CAS-Nummer
<b>Kohlenstoffhaltige Adsorbentien</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aktivkohle Norit R2030</li> <li>• Aktivkohle Desorex K43/K47</li> <li>• Molekularsieb Linde 4A</li> <li>• Kohlenstoffmolekularsieb CMS</li> </ul>	7440-44-0 64365-11-3 70955-01-0 z.B. 1318-02-1
<b>Oxidische Adsorbentien</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zeolith 13X</li> <li>• Aktivtonerde Merck aktiv neutral</li> <li>• Silicagel</li> <li>• Aktiviertes Aluminiumoxid</li> </ul>	63231-69-6 1344-28-1 14808-60-7 1344-28-1
<b>Polymeradsorbentien</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Styrol/Divinylbenzol</li> </ul>	100-42-5
<b>Mischadsorbentien</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Kalk (Calciumkarbonat <math>\text{CaCO}_3</math>)</li> </ul>	471-34-1
<b>Metallorganische Gerüstverbindungen (MOF)</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Mg-MOF-74</li> <li>• HKUST-1</li> <li>• MOF-5</li> <li>• MIL-53 (Al)</li> </ul>	- 51937-85-0 255367-66-9 654061-20-8

Folgende, für die Modellierung notwendigen Parameter sind aus Literatur, Datenbanken, Veröffentlichungen etc. extrahiert worden:

- Schüttdichte
- Scheinbare Dichte
- Spezifisches Festkörpervolumen
- Spezifisches Porenvolumen
- Wahre Dichte
- Partikeldurchmesser
- Spezifische Wärmekapazität
- Kornporosität
- Tortuosität
- Porendurchmesser

Die Datenbank beinhaltet zurzeit ca. 35 Adsorbentien und deren Parameter. Eine laufende Ergänzung und Weiterführung dieser Datenbank ist Bestandteil von *SYSKON*.

### 4.2. Modelica® Implementierung

Um die Eigenschaften und Parameter der Adsorbentien in Modelica® verfügbar zu machen, wurde jedes einzelne Adsorbens innerhalb von Modelica® in einem «Record» hinterlegt. In Abbildung 7 ist ein «Record» am Beispiel der Aktivkohle Norit R2030 dargestellt.

```

record Activated_Carbon_NORIT_R2030
  "Data from paper: Tirzhá L.P. Dantas, 2011"
  parameter Modelica.SIunits.Density rho_bed_bulk = 546.24 "Bed bulk density (Schüttungsdichte) [kg/m3]";
  parameter Modelica.SIunits.Density rho_S_bulk = 1138 "Pellet bulk density (scheinbare Dichte) [kg/m3]";
  constant Modelica.SIunits.SpecificVolume v_pore = 4.1e-4 "specific pore volume (spezifisches Porenvolumen) [m3/kg]";
  constant Modelica.SIunits.SpecificVolume v_solid = 9999 "specific solid volume (spezifisches Festkörpervolumen) [m3/kg] Dummy-value, no data available";
  constant Modelica.SIunits.Diameter Dp = 3.8e-3 "Particle diameter [m]";
  constant Real coeff[2] = (0,880) "specific heat capacity [kJ/kgK]";

  constant Real eps_micro = 0.45 "Pellet porosity [-] Range: 0.45 - 0.77";
  constant Real tau_lam = 2.2 "Tortuosity [-]";
  constant Modelica.SIunits.Diameter d_pore = 1.5e-9 "Pore diameter [m] Range: 1.0e-9 - 1.0e-6";

  annotation (Icon(coordinateSystem(preserveAspectRatio=false)), Diagram(
    coordinateSystem(preserveAspectRatio=false)));
end Activated_Carbon_NORIT_R2030;
    
```

Abbildung 7: Modelica® "Record" von Aktivkohle Norit R2030, unbekannte Stoffdaten sind mit einem Dummy-Wert (9999) versehen, an diesem Beispiel ist es das specific solid volume, Die Daten stammen aus: «Carbon dioxide–nitrogen separation through adsorption on activated carbon in a fixed bed» [19].

Mit diesen Daten ist es nun möglich, die nötigen Berechnungen innerhalb der Modelica®-Software vorzunehmen.

### 4.3. Isothermen und Stoffpaarungen

Die Isothermendatenbank ist für drei verschiedene Sorptive aufgebaut worden (CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O). Die Isothermendaten stammen grösstenteils aus der NIST/ARPA-E Database of Novel and Emerging Adsorbent Materials [20]. In Abbildung 8 und folgenden sind repräsentative Isothermen für die Adsorption von CO<sub>2</sub> sowie N<sub>2</sub> an Zeolith 13X und Zeolith 5A dargestellt.

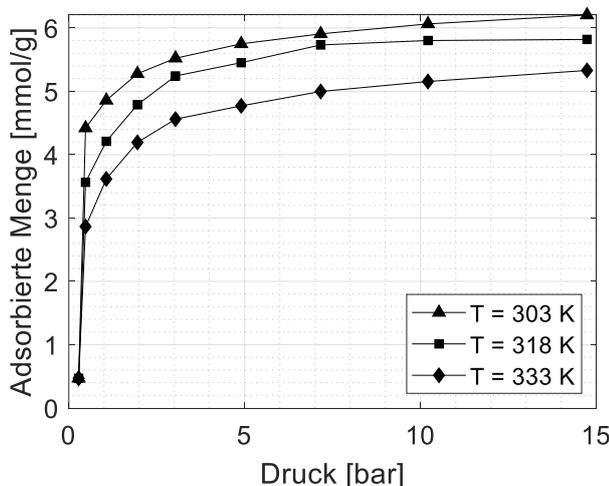


Abbildung 8: Isothermen-Rohdaten von Zeolith 13X mit CO<sub>2</sub>, linear interpoliert, aus «Dynamic desorption of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> from amino-MIL-53 (Al) adsorbent» [21]

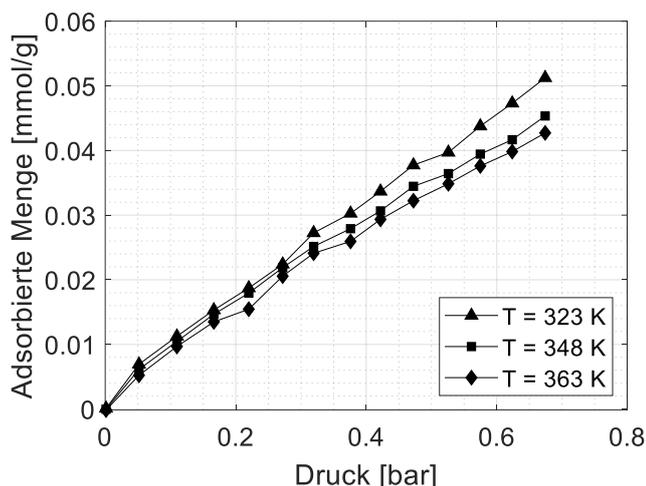


Abbildung 9: Isothermen-Rohdaten von Zeolith 13X mit N<sub>2</sub>, linear interpoliert, aus «Adsorption equilibrium for sulfur dioxide, nitric oxide, carbon dioxide, nitrogen on 13X and 5A zeolites» [22]

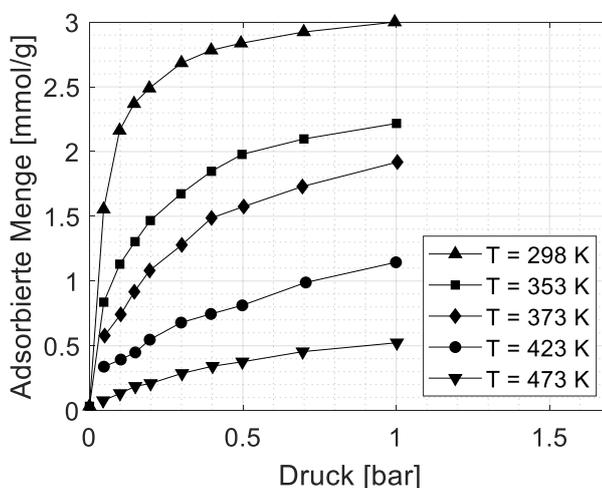


Abbildung 10: Isothermen-Rohdaten von Zeolith 5A mit CO<sub>2</sub>, linear interpoliert, aus «Carbon dioxide capture and recovery by means of TSA and/or VSA» [23]

Um die Isothermen mathematisch beschreiben zu können (Langmuir, Freundlich, Sips, Dubinin etc.), ist mit MATLAB® ein Programm geschrieben worden, welches das Fitten von mehreren Isothermen gleichzeitig ermöglicht. Hierbei werden die Isothermen-Rohdaten eingelesen und anschliessend schrittweise gefittet. Die so errechneten Langmuir-, Freundlich-, Sips- oder Dubinin Parameter können anschliessend in das Modelica®-Programm übernommen werden.

### 4.3.1 Langmuir Fitting

Es wird hier beispielhaft das Fitting für die Langmuir-Isotherme beschrieben. Das Fitting für die Langmuir-Isotherme erfolgt in zwei Schritten. Zunächst wird die Isotherme der grössten Temperatur und die Isotherme der kleinsten Temperatur angenähert d. h. es wird der Parameter  $q_0$  in Formel (5-1) bestimmt. Hierbei erfolgt das Fitting analytisch d. h. es werden nicht alle Punkte des Datensatzes verwendet, sondern nur so viele, dass das Fitting analytisch eindeutig lösbar wird.

$$q = q_0 \frac{K_l c_s}{1 + K_l c_s} \tag{5-1}$$

Die Lösung dieses Fittings wird anschliessend als Startlösung für das Fitting der ganzen Isothermenschar übernommen. In Abbildung 11 sind die gefitteten Isothermen zusammen mit den Rohdaten dargestellt. Die schwarzen Linien stellen die Langmuir-Isothermen mit den fertig gefitteten Parametern dar.

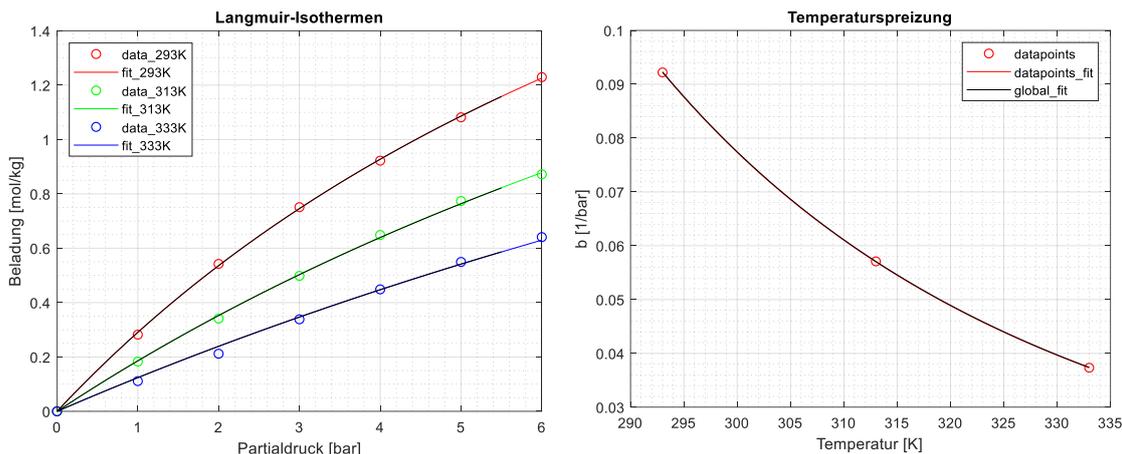


Abbildung 11: Links: Isothermen-Rohdaten (Kreise) mit den gefitteten Langmuir-Isothermen, rechts: Temperaturspreizung

### 4.3.2 Dubinin Fitting

Auf der linken Seite in Abbildung 12 sind die Isothermen aus «Dynamic and equilibrium-based investigations of CO<sub>2</sub>-removal from CH<sub>4</sub>-rich gas mixtures on microporous adsorbents» [24] dargestellt, die Kreise, Dreiecke und Vierecke repräsentieren jeweils die experimentell bestimmten Messdaten, die durchgezogene Linie entspricht der nach dem Dubinin-Verfahren gefitteten Isothermen.

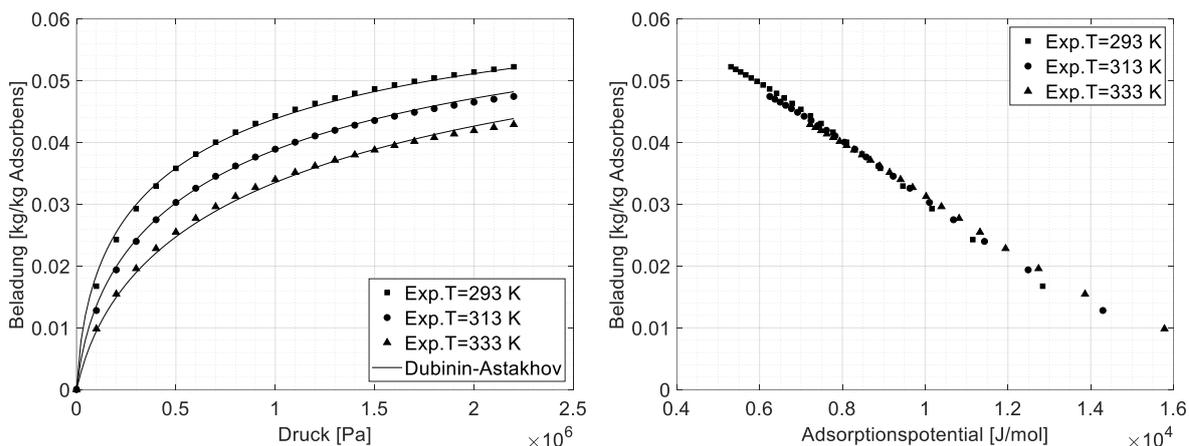


Abbildung 12: Links: Isothermen-Messdaten des Validierungsfalles «Dynamic and equilibrium-based investigations of CO<sub>2</sub>-removal from CH<sub>4</sub>-rich gas mixtures on microporous adsorbents» [24] für Temperaturen von 293 K (Quadrate), 313 K (Kreise) und 333 K (Dreiecke), mit gefitteten Dubinin-Astakhov-Isothermen (Durchgezogene Linien). Rechts: Generierte Dubinin-Kurve

Auf der rechten Seite sind für die drei verschiedenen Temperaturen die dazugehörigen Dubinin-Kurven geplottet. Auf der rechten Seite ist die charakteristische Dubinin-Kurve ersichtlich.

## 5 Effizienzbewertung

Die Effizienzbetrachtung innerhalb von SYSKON soll in Analogie zum Carnot-Prozess für Wärmekraftmaschinen über einen Vergleichsprozess erfolgen. In den folgenden Abschnitten wird die Erarbeitung eines Gütegrades für Trennprozesse erläutert.

### 5.1. Reversible molare Trennarbeit

Bei der Auftrennung eines Gasgemisches lässt sich, unter den Annahmen eines idealen Gasverhaltens und einer reversiblen Trennung, die reversible molare Trennarbeit für die Auftrennung des gesamten Gasgemisches berechnen [25] :

$$W_{rev} = -RT \sum_{i=1}^n y_i \ln y_i \quad (6-1)$$

Bzw. für die Volumenanteile:

$$W_{rev} = RT \left[ X_i \ln \left( \frac{1}{X_i} \right) + (1 - X_i) \ln \left( \frac{1}{1 - X_i} \right) \right] \quad (6-2)$$

Ist allerdings nur die Abtrennung von einer Gaskomponente wie z. B. CO<sub>2</sub> aus Umgebungsluft relevant, muss die reversible molare Trennarbeit durch den Volumenanteil der entsprechenden abzutrennenden Komponente dividiert werden:

$$W_{rev,i} = \frac{W_{rev}}{X_i} \quad (6-3)$$

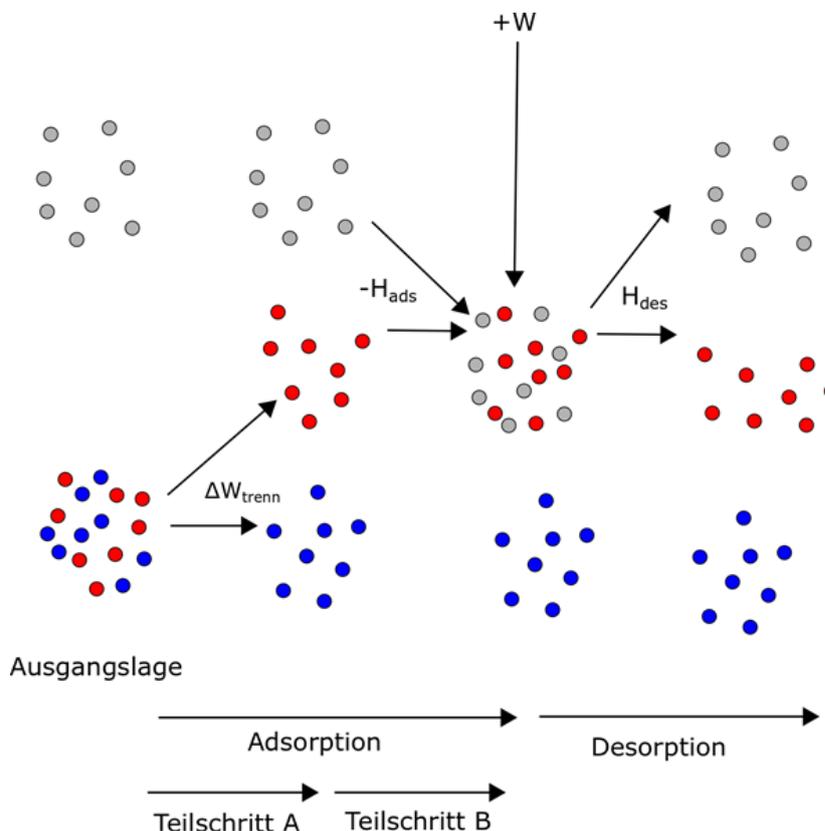
Die so errechnete Trennarbeit stellt nun einen Vergleichsprozess für die Auftrennung eines Gasgemisches unter idealisierten Bedingungen dar. Dieser Energiebedarf kann von einem realen Prozess nicht unterboten werden.

### 5.2. Adsorptionsenthalpien

Eine Effizienzbetrachtung ist ebenfalls über die Adsorptionsenthalpien möglich.

#### 5.2.1 Schritt 1: Adsorptionsprozess

Der Adsorptionsprozess lässt sich modellhaft gemäss Abbildung 13 in zwei Teilschritte aufteilen.



Dies ist zulässig, wenn die Adsorption analog zu einer chemischen Reaktion verstanden wird und somit der «Satz von Hess» anwendbar ist:

$$\Delta H_R^0 = \sum \Delta H_{f,produkte}^0 - \sum \Delta H_{f,edukte}^0 \quad (6-4)$$

Teilschritt A: Trennung des Gemisches in Einzelkomponenten. Dafür muss von aussen mindestens so viel Arbeit zugeführt werden wie benötigt wird um die reversible Trennentropie zu überwinden.

$$S_{trenn} = n \cdot (x_1 \cdot RT \cdot \ln(x_1) + x_2 \cdot RT \cdot \ln(x_2)) \quad (6-5)$$

Teilschritt B: Komponente 1 wird adsorbiert. Das entspricht dem Szenario bei der Messung einer Reinstoffisotherme, womit die freigesetzte Energie der Adsorptionsenthalpie entspricht.

$$H_{ads} = f(\text{Isosteren}) \quad (6-6)$$

Der Adsorptionsprozess läuft exotherm (freiwillig) ab. Daher muss der Umsatz an Gibbs-Energie über Teilschritt A und Teilschritt B negativ sein (Minimumprinzip der Gibbs-Energie).

$$\begin{aligned} \Delta G &= \Delta H_{ads} - T \cdot \Delta S_{trenn} < 0 \\ \Delta H_{ads} &< \underbrace{T \cdot \Delta S_{trenn}}_{W_{trenn}} \end{aligned} \quad (6-7)$$

Die Adsorption lässt sich somit als ein Mischvorgang, bei dem eine Mischung höherer Entropie entsteht verstehen:

$$S_{Adsorptive} < S_{Adsorbens+Adsorpt} \quad (6-8)$$

Damit der Prozess exotherm bleibt, muss der Gibbs-Energie-Umsatz negativ sein. Das deckt sich mit der Aussage, dass  $S_{Adsorptive} < S_{Adsorbens+Adsorpt}$ . Im Extremfall kann sogar  $S_{Adsorptive} \approx S_{Adsorbens+Adsorpt}$  angenommen werden (immer noch mit Nebenbedingung  $S_{Adsorptive} < S_{Adsorbens+Adsorpt}$ ). Der Wirkungsgrad eines Adsorbens für eine bestimmte Trennaufgabe lässt sich dann berechnen mit:

$$\eta_{Adsorbens} = \frac{\Delta W_{trenn}}{\Delta H_{ads}} = 1 - \left| \frac{\Delta W_{trenn}}{\Delta H_{ads}} \right| \quad (6-9)$$

Durch die Adsorption wird ein schlechter zu trennendes Gemisch Adsorbens+Adsorpt erzeugt. Wie viel schlechter sich dieses Gemisch trennen lässt, lässt sich beschreiben mit  $\eta_{Adsorbens}$ . Im Idealfall weist das Adsorbens-Adsorptivgemisch nur eine minimal höhere Entropie auf. Die Adsorption funktioniert dann immer noch exotherm und die Desorption ist energetisch effizient (siehe Abbildung 14).

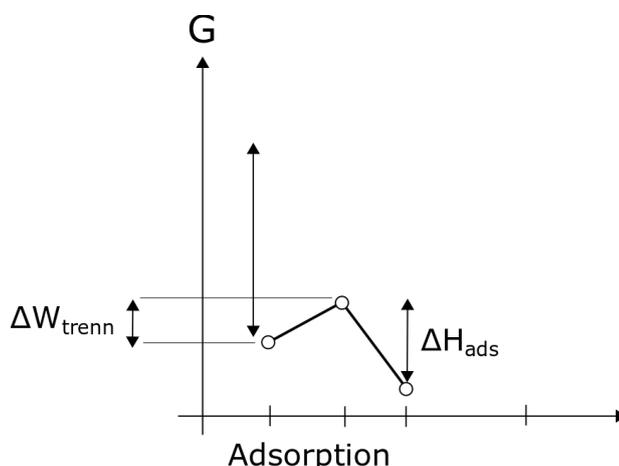


Abbildung 14: Gibbs\_Energie-Diagramm für die Adsorption

Der Adsorptionsprozess findet in erster Näherung bei konstantem Druck statt, da er gegen die Atmosphäre offen ist. Zusätzlich kann davon ausgegangen werden, dass die Atmosphäre die Eigenschaften eines Reservoirs hat. Das heisst die Konzentration an Adsorptiv kann als konstant vorausgesetzt werden. Im Isothermendiagramm in Abbildung 15 stellt sich bei konstantem Druck und konstanter Temperatur eine konstante Beladung ein. Dies ist der Sättigungszustand, der sich nach unendlich langer Zeit einstellt (bzw. näherungsweise einstellt in endlicher Zeit).

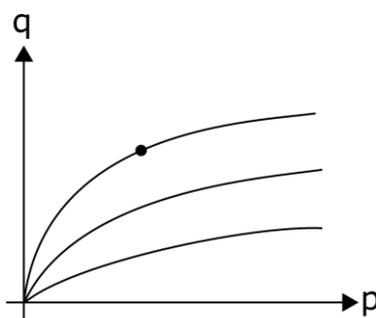


Abbildung 15: Isothermendiagramm bei konstantem Druck

### 5.2.2 Schritt 2: Desorptionsprozess

Im Desorptionsprozess muss eine Energiemenge, die der Adsorptionsenthalpie entspricht, von aussen zugeführt werden. Allerdings reicht diese Energiemenge nur aus, um den ursprünglichen Mischzustand zu erreichen (Gemisch aus Komponente 1 und Komponente 2). Soll Komponente 1 aber alleine in einen Behälter abgeschieden werden, muss zusätzlich eine Druck- bzw. Volumenänderungsarbeit zugeführt werden, um ein «leeres Volumen» zu schaffen, in das desorbiert werden kann. Der Unterschied kommt daher, dass die Adsorption

in einem offenen System gegen die Atmosphäre stattfindet, während die Desorption in einem geschlossenen System abläuft (es muss bei der Desorption die Rückmischung mit der Atmosphäre verhindert werden).

Der Desorptionsvorgang findet also in einem geschlossenen System statt (es soll ja die Rückmischung mit den Atmosphärgasen verhindert werden). Wenn das System geschlossen ist, tritt das Problem auf, dass der Druck bei der Desorption ansteigt, wenn das Systemvolumen konstant bleibt. In der Isotherme wandert der Sättigungszustand zu höherem Druck hin, wodurch die Desorption selbst wieder abbricht (höhere mögliche Beladung).

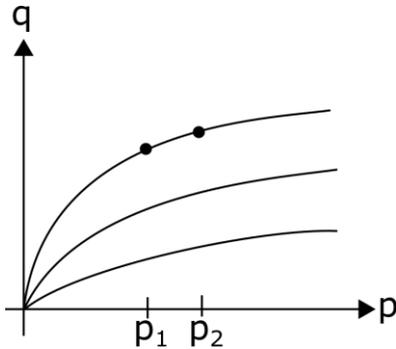


Abbildung 16: Isothermendiagramm bei konstantem Druck

Um die Desorption am Laufen zu halten muss z.B. der Druck abgesenkt und dann konstant gehalten werden. Zusätzlich zur Desorptionsenergie  $h_{ads}$  muss also zusätzlich noch Arbeit aufgewendet werden (siehe Abbildung 16). Welche Form diese Arbeit hat ist stark prozessabhängig (z.B. Druckänderungsarbeit beim Verpressen des adsorbierten Gases in Flaschen).

### 5.3. Gütegrad

Die Betrachtung in Abbildung 17 zeigt, dass eine Gütegraddefinition für den Fall abscheidender Adsorptionsprozesse, wie vorangehend beschrieben, auch die Volumenänderungsarbeit miteinbeziehen muss.

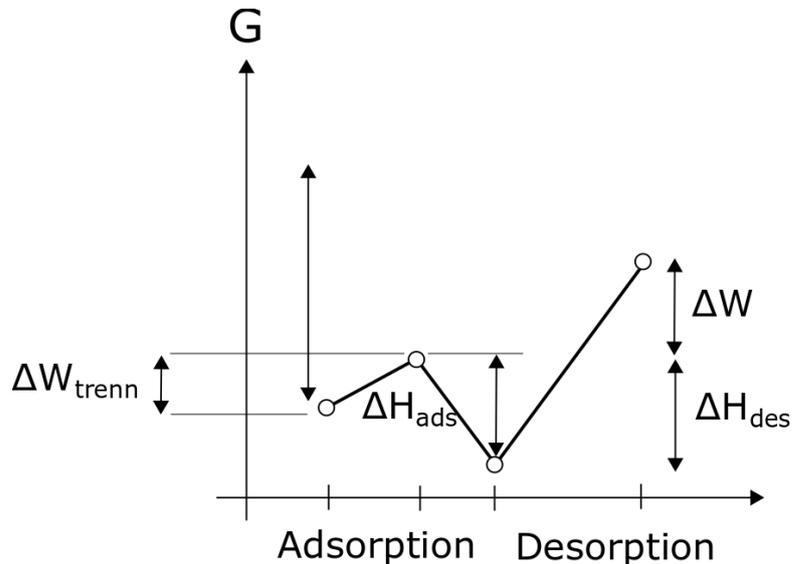


Abbildung 17: Gibbs-Energie-Diagramm für die Desorption

Technisch gesehen muss die aufzuwendende Volumenänderungsarbeit deshalb im Modell dem Adsorberwirkungsgrad in Formel (6-10) angelastet werden.

$$\zeta_{max} = \frac{\Delta W_{trenn} + \Delta W}{H_{des} + \Delta W} \quad (6-10)$$



Über die Adsorptionsenthalpie und die reversible molare Trennarbeit lässt sich der Wirkungsgrad auf molekularer Ebene definieren.

$$\eta_{mol} = \frac{\Delta w_{trenn}}{\Delta h_{ads}} \quad (6-13)$$

Dieser Wirkungsgrad ist nicht an einen Vergleichsprozess gebunden. Ausserdem bezieht er sich nur auf eine molekulare Ebene. Er ist für jede Konfiguration (Sorbens, Sorptiv etc.) unterschiedlich. Um nun die gesamte Kolonne mit der Peripherie betrachten zu können müssen, wie vorangehend beschrieben, auch der Energieaufwand für die Peripherie miteinbezogen werden (tatsächlicher Energiebedarf).

Mit diesem tatsächlichen Energiebedarf und der reversiblen molare Trennarbeit kann nun der Gütegrad der Gastrennung wie folgt definiert werden:

$$\zeta_t = \frac{W_{rev}}{W_{real}} \quad (6-14)$$

In Abbildung 19 sind exemplarisch die exergetischen Wirkungsgrade für die CO<sub>2</sub>-Abscheidung dargestellt [27]. In der Veröffentlichung «Entwicklungsmöglichkeiten der CO<sub>2</sub>-Rückhaltung in Kraftwerken aus thermodynamischer Sicht» [27] wird vom exergetischen Wirkungsgrad gesprochen, die Definition ist allerdings die gleiche wie in Formel (6-14). Die kleinen exergetischen Wirkungsgrade von ca. 2-8% bei der adsorptiven CO<sub>2</sub>-Abscheidung aus Rauchgasen deuten auf ein grosses Verbesserungspotenzial hin.

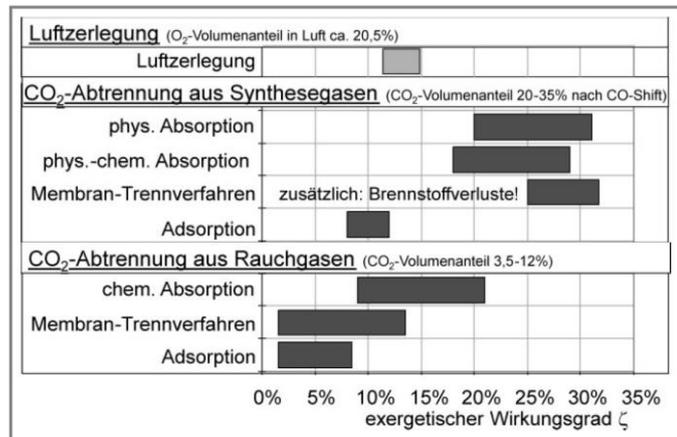


Abbildung 19: Exergetische Wirkungsgrade am Beispiel der CO<sub>2</sub>-Abscheidung [27]

## 5.5. Fazit

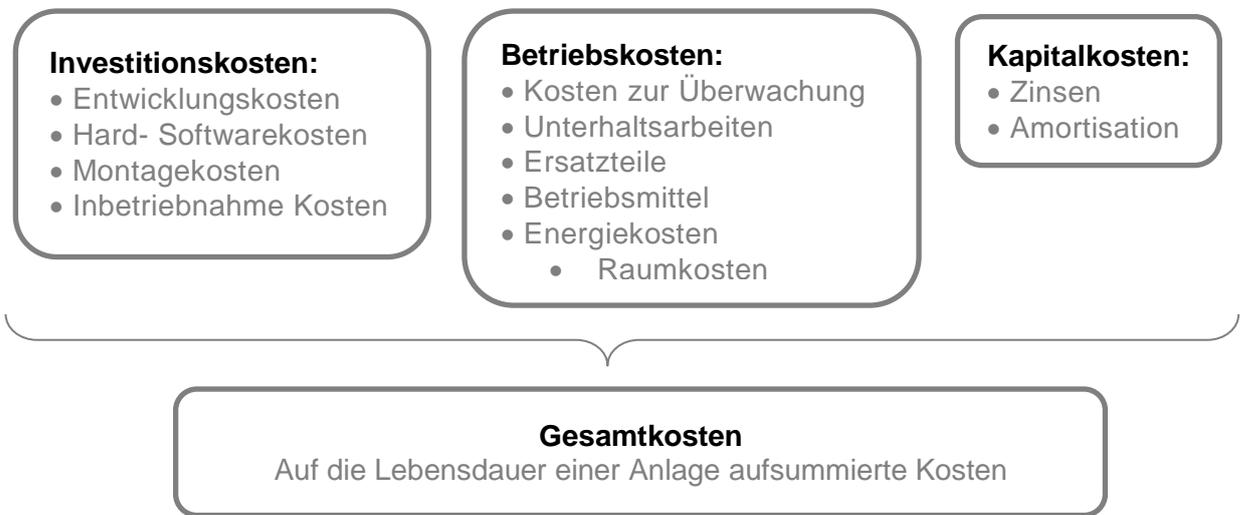
Mit diesem definierten Gütegrad können Ad- und Desorptionsprozesse nun sehr objektiv bewertet werden. Die Rechnungen sind denkbar einfach und können einfach in Modelica<sup>®</sup> implementiert werden. Die zur Bestimmung der Trennarbeit nötigen Grössen sind innerhalb Modelica<sup>®</sup> mit dem 1D-Basismodul bereits weitgehend berechnet worden und vorhanden. Eine Implementierung des Trenn-Gütegrades für ideale Gase wird an dieser Stelle als ausreichend angesehen, da im Rahmen von SYSKON nur ideale Gase modelliert werden.

## 6 Prozessmodell und Thermo-Ökonomie

In diesem Abschnitt erfolgt eine detaillierte Beschreibung des implementierten Prozessmodells. Das Prozessmodell ist nötig um den Prozess auf Basis von Kostenkorrelationen und Zielfunktionen bewertbar zu machen. Nachfolgend zuerst die Beschreibung der Thermo-Ökonomie und anschliessend die Implementierung des Rotoradsorbers, welche in Anlehnung an die Dissertation von Konrad [1] erfolgte.

### 6.1. Thermo-Ökonomie

Für die ökonomische Beurteilung werden alle relevanten Kosten in dem Modell mit entsprechenden Kostenkorrelationen definiert. Die gesamten Kosten setzen sich zusammen aus Investitions- Betriebs- und Kapitalkosten. Die Investitionskosten fallen bis zur Inbetriebnahme der Anlage an, die Betriebskosten anschliessend. Die Gesamtkosten zeigen die Kosten über die ganze Lebensdauer einer Anlage. Die Kostenberücksichtigung kann beliebig erweitert und präzisiert werden.



### Kostenkorrelationen

Kostenkomponenten welche sensitiv auf Auslegungsparameter reagieren, müssen variabel definiert werden. Dazu verwendet man Kostenkorrelationen die auf eine oder mehrere Grössen bezogen sind. Mit einer Exponentialfunktion kann eine solche Abhängigkeit in der Regel genügend genau abgebildet werden.

Mit der Wahl des Exponenten kann eine progressive, degressive oder lineare Abhängigkeit zur beeinflussenden Grösse beschrieben werden.

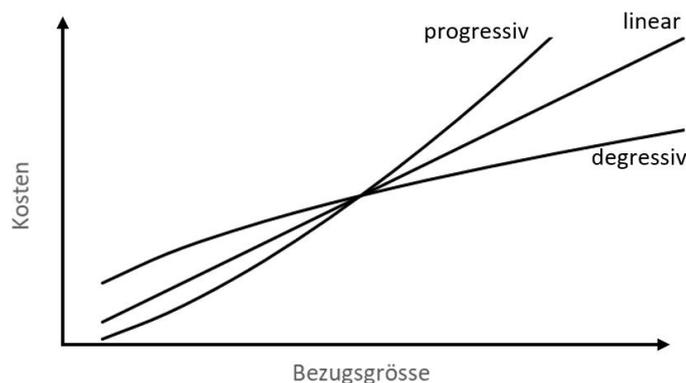


Abbildung 20: Darstellung der Kostenkorrelation mit einer Exponentialfunktion

In der Literatur finden sich diverse Kostenkorrelationen zu einzelnen Anlagenkomponenten. Diese müssen aber immer auf Plausibilität geprüft werden. Für die Bildung einer neuen Korrelation benötigt man die Kosten bei mehreren Bezugsgrößen.

Der Ansatz einer Kostenkorrelation mit einer Exponentialfunktion lautet:

$$CE = C_R \cdot \left( \frac{Q}{Q_R} \right)^M \cdot f_M \cdot f_P \cdot f_T \quad (7-1)$$

Als Beispiel wurde für den Referenzfall Ökonomie eine Kostenkorrelation für einen Radialventilator gemacht. Abbildung 21 zeigt die Abhängigkeit der Kosten zum Volumenstrom.

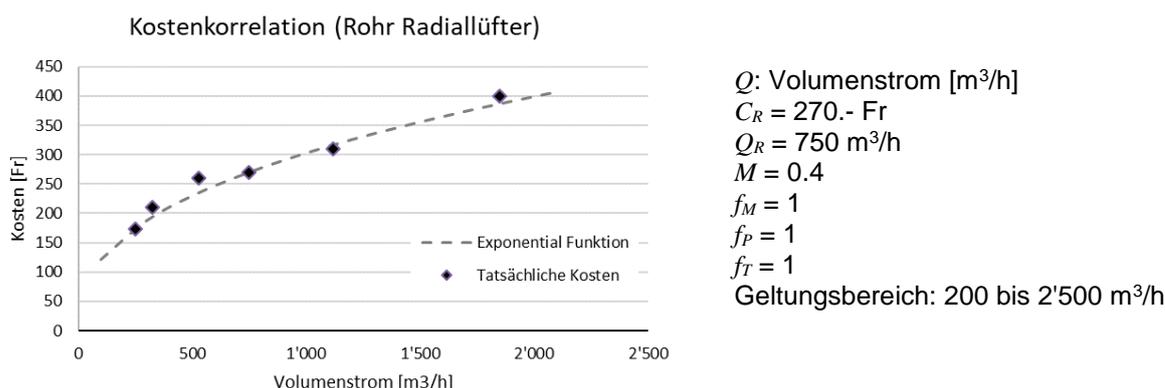


Abbildung 21: Kostenkorrelation eines Radiallüfters mit einer Exponentialfunktion

## 6.2. Referenzfall zum Funktionstest Prozessmodell und Thermo-Ökonomie

Die physikalisch-basierten Sorptionsmodelle werden mit ökonomischen Modellen verknüpft. Damit lassen sich die erstellten Simulationsmodelle für Wirtschaftlichkeitsberechnungen verwenden. Der Fokus liegt im Moment im Aufzeigen der grundsätzlichen Funktionalität und weniger in der Genauigkeit der Modelle. Als Testfall dient ein generischer Rotoradsorber, welcher Trichlorethen aus industrieller Prozessluft abscheiden soll. Die Spezifikationen des untersuchten Adsorbers sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

Tabelle 8: Apparatedaten und Randbedingungen des simulierten Rotoradsorbers

Apparatedaten		
Rotordurchmesser	0.8	m
Rotordicke	0.2	m
Flächenanteil Adsorption	0.8	-
Flächenanteil Desorption	0.1	-
Flächenanteil Kühlung	0.1	-
Zeit pro Umdrehung	5000	s
Betriebsdaten		
Volumenstrom Prozessluft	600	Nm <sup>3</sup> /h
Volumenstrom Desorption	60	Nm <sup>3</sup> /h
Volumenstrom Kühlung	60	Nm <sup>3</sup> /h
Konzentration Prozessluft	4	g/m <sup>3</sup>
Konzentration Kühlluft	0	g/m <sup>3</sup>
Temperatur Prozessluft	20	°C
Temperatur Desorption	145	°C
Temperatur Kühlung	20	°C

Stoffangaben		
Sorbens: Aktivkohle Degussa WS4		-
Sorptiv: Trichlorethen in Luft		-
Leerraumanteil	0.55	-

### 6.2.1 Rotoradsorber-Modell

Im vorliegenden Fall wird von einem Rotoradsorber ausgegangen, welcher eine Schüttung mit Aktivkohle beinhaltet. Um die tangentielle Beeinflussung gering zu halten, ist die Schüttung durch radiale Bleche in Segmente aufgeteilt. Die Abbildung 22 links zeigt schematisch den Rotoradsorber von vorne. Der Rotoradsorber ist in die Bereiche Adsorption, Desorption und Kühlung aufgeteilt. Der grüne Bereich wird mit der belasteten Prozessluft beaufschlagt. In diesem Bereich findet die Adsorption statt. Durch Rotation des Adsorbers gelangt nun ein Teil des beladenen Sorbens in den Desorptionsbereich (rot). Dort wird der Adsorber in Gegenrichtung mit heisser Luft durchströmt, siehe Abbildung 22 rechts. Durch die Temperaturerhöhung sowie den Konzentrationswechsel wird das Trichlorethen ausgetrieben. Ein weiterer Teil des Adsorbers wird mit Kühlluft aus der Umgebung durchströmt (blauer Bereich). Damit wird das Sorbensmaterial wieder auf ein für die Adsorption günstiges Temperaturniveau gebracht.

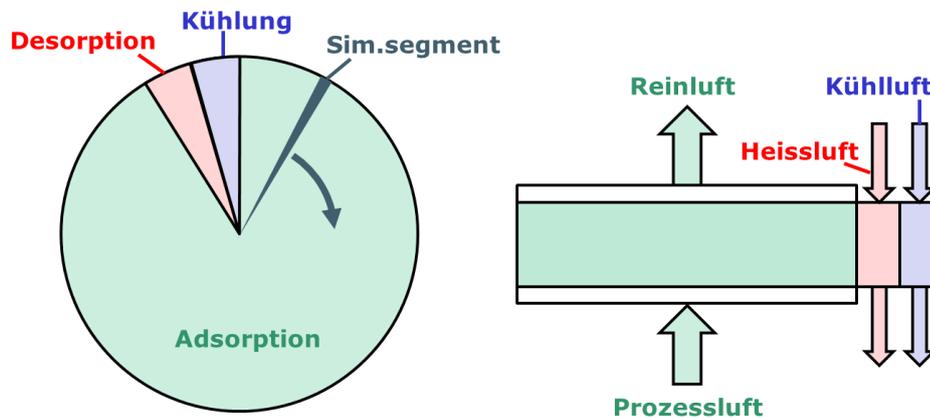


Abbildung 22: Links: Aufteilung des Rotoradsorbers in Bereiche mit Adsorption, Desorption und Kühlung; rechts: Abwicklung des Rotoradsorbers; für die Desorption und Kühlung wird der Adsorber in Gegenrichtung durchströmt

Für die Wirtschaftlichkeitsbeurteilung wird von einem kontinuierlichen Prozess mit konstanten Randbedingungen ausgegangen. Unter dieser Annahme lässt sich das Simulationsmodell stark vereinfachen. In diesem Fall reicht es, ein kleines, mitbewegtes Segment zu simulieren, wie in Abbildung 22 als graues Simulationssegment angedeutet. Dieses Segment lässt sich als einzelne Kolonne betrachten (analog zu Modell in AP3). In der Simulation ändern sich beim Durchlaufen eines Zyklus lediglich die Randbedingungen. Die Änderungen der Randbedingungen erfolgen im Simulationsmodell mit Hilfe einer sogenannten State Machine, siehe Abbildung 23.

Mittels dimensionslosen Transportgleichungen (vgl. Kapitel 3.2), kann die Vernachlässigung von radialen und tangentialen Gradienten begründet werden. Für den Referenzfall ist diese Vernachlässigung zulässig und die dimensionslosen Kennzahlen lassen sich berechnen zu (ausführliche Berechnung siehe Anhang C): Die Péclet-Zahl von 4448 führt auf Fall 1 in Tabelle 6, somit kann der Temperaturgradient vernachlässigt werden.

$$Fo_x = 2.25 \cdot 10^{-4}$$

$$Fo_r = 5.6 \cdot 10^{-5}$$

$$Fo_\theta = 1.35 \cdot 10^{-6}$$

$$Pe_x = 4448$$

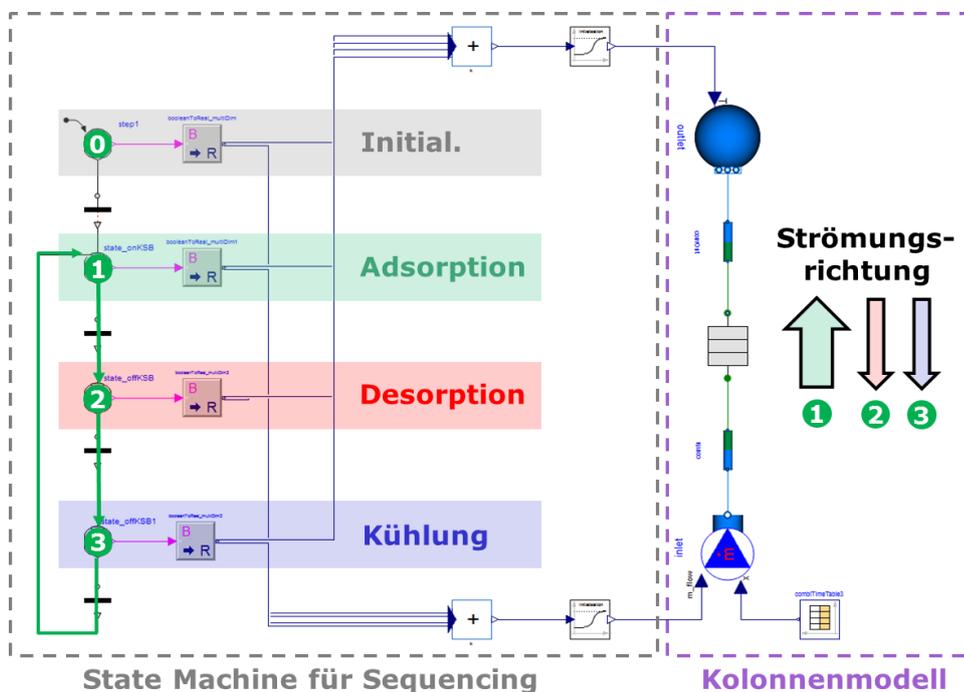


Abbildung 23: Simulationsmodell für den Rotoradsorber: Ein einzelnes Segment wird als Kolonne abgebildet, bei dem sich je nach Phase (Adsorption, Desorption, Kühlung) die Randbedingung geändert wird. Die Änderung der Randbedingung wird durch eine State Machine gesteuert

Die State Machine durchläuft folgende Schritte (Nummern entsprechend Abbildung 23):

### 0. Initialisierung

Während der Initialisierungsphase wird der Adsorber mit Reinluft (Konzentration Trichlorethen =  $0\text{g/m}^3$ ) und dem Nennvolumenstrom für die Prozessluft durchströmt.

### 1. Adsorption

Nach der Initialisierung wird am Kolonneneintritt die Konzentration des Trichlorethen auf den Wert der Prozessluft erhöht. In der Kolonne beginnt die Adsorption.

### 2. Desorption

Sobald das Simulationssegment den Desorptionsbereich erreicht, werden die Strömungsrichtungen gewechselt und der Volumenstrom sowie die Eintrittstemperatur angepasst. Dadurch wird in der Kolonne die Desorption eingeleitet.

### 3. Kühlung

Nach der Desorption erfolgt die Kühlung des Sorbensmaterials. Dazu werden die Temperaturen und gegebenenfalls der Volumenstrom am Eintritt geändert.

Nach dem Durchlaufen eines kompletten Zyklus springt die State Machine wieder an die Position 1 und startet somit erneut den Adsorptionsprozess.

## 6.2.2 Simulationsergebnis

Das Simulationssegment (Kolonne) hat zu Beginn Umgebungstemperatur und ist vollständig entladen. In den weiteren Zyklen wird sich die Kolonne im vorderen Bereich nicht mehr

vollumfänglich entladen können. Ausserdem wird auch die Sorbenstemperatur zu Beginn eines neuen Zyklus (je nach Kühlleistung) nicht mehr der Umgebungstemperatur entsprechen. Um einen eingeschwungenen Zustand zu erreichen, muss die Simulation mehrere Zyklen umfassen. Für die Beispielrechnung wurden 20 Zyklen berücksichtigt. Die Abbildung 24 zeigt den zeitlichen Verlauf der Beladung am Eintritt, in der Mitte sowie am Austritt der Kolonne.

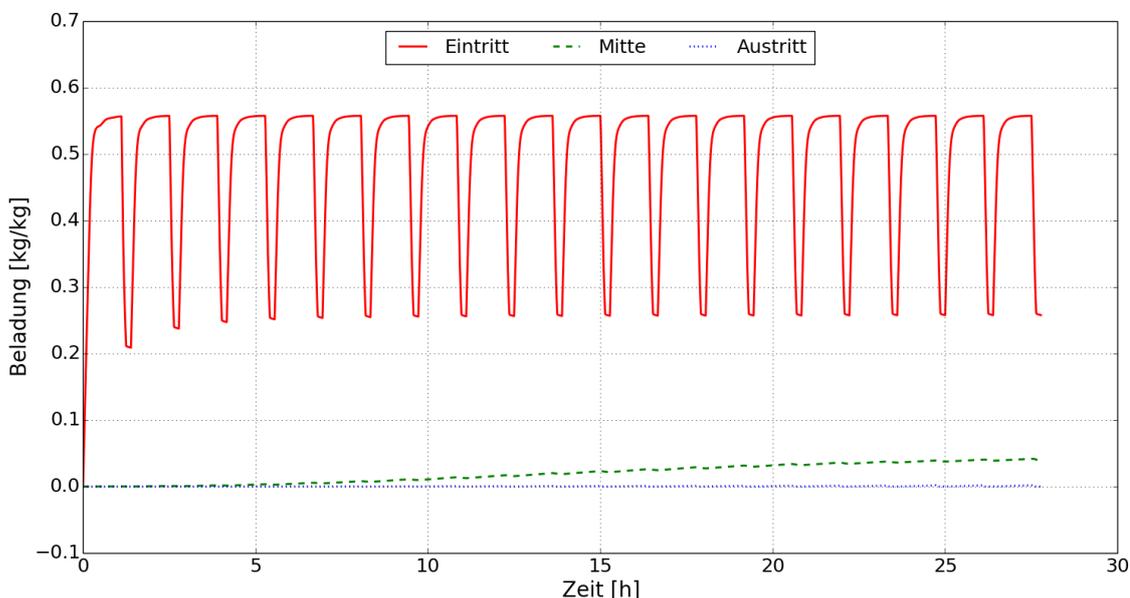


Abbildung 24: Momentane Beladung am Eintritt, in der Mitte sowie am Kolonnenaustritt zeigt Einschwingverhalten über mehrere Zyklen

Das Beladungsprofil im eingeschwungenen Zustand direkt vor bzw. nach dem Desorptionsprozess ist in Abbildung 25 dargestellt. Ein grosser Teil der Kolonttiefe scheint hier schlecht ausgenutzt zu sein (geringe Beladung). Es besteht hier entsprechendes Optimierungspotenzial, z.B. indem die Rotortiefe reduziert wird.

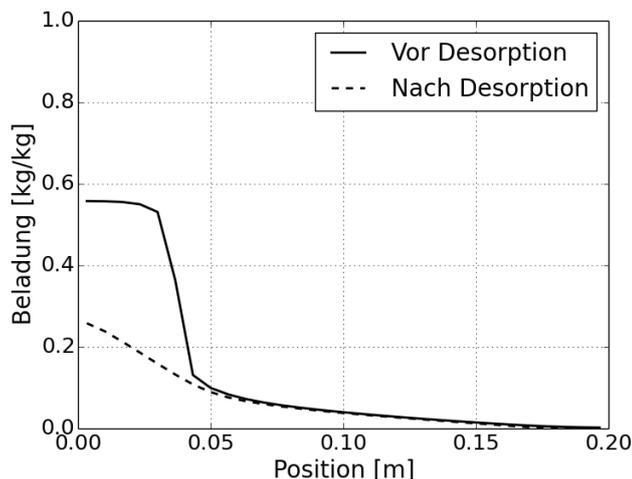


Abbildung 25: Beladungsprofil im eingeschwungenen Zustand direkt vor und nach dem Desorptionsprozess

Grundsätzlich zeigt das Simulationsmodell ein plausibles Verhalten und kann zum Aufzeigen der Funktionalität „Optimierung“ und „Wirtschaftlichkeitsberechnung“ verwendet werden. Das grobe Vorgehen ist im nächsten Abschnitt skizziert.

### 6.2.3 Optimierung und Wirtschaftlichkeitsberechnung

Basierend auf dem oben entwickelten Simulationsmodell lassen sich Optimierungen bzw. Wirtschaftlichkeitsberechnungen durchführen. Dazu werden neben den Kosten für den Adsorber weitere Kosten berücksichtigt. Diese müssen jedoch nicht zwingend als physikalisch-



## 7 Zielfunktion

Die Qualität einer Optimierung wird mittels Zielfunktion beschrieben, deren Maximum bzw. Minimum im Laufe des Optimierungsprozesses erreicht werden soll. Üblicherweise besteht eine Zielfunktion aus mehreren Einzelfunktionen, die mittels Vorfaktoren gewichtet werden. Ein einfaches Beispiel wäre die Kostenoptimierung einer Baugruppe, deren Preis (Zielfunktion), durch die Kosten der verbauten Komponenten beschrieben werden.

$$f_{Ziel}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_i^k C_i f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (8-1)$$

Je nach Gewichtung liegt das Optimum dann an einer anderen Stelle. Gilt es beispielsweise die Performance einer Anlage zu optimieren, kann dafür eine Zielfunktion definiert werden, die den einzelnen Aspekten, die den Performancebegriff beschreiben, eine unterschiedliche Priorität zuschreibt.

## 8 Optimierung

Dieses Kapitel beinhaltet eine Übersicht über die erarbeiteten Optimierungsmassnahmen zur Erreichung der definierten Zielfunktionen.

### 8.1. Optimierungsprozess

Der Optimierungsprozess erfolgt schrittweise. In einem ersten Schritt wird das komplexe Problem auf ein vereinfachtes Problem mit deutlich weniger Parameter reduziert. Dafür wird das Verfahren «Design of Experiments» verwendet (Siehe Kapitel 8.2). Es handelt sich hierbei um eine Art Sensitivitätsstudie, die anhand weniger Rechnungen durchgeführt wird und die einflussreichen Parameter identifiziert. In einer detaillierteren Hauptuntersuchung werden schliesslich nur die einflussreichsten Parameter variiert, dies allerdings recht engmaschig.

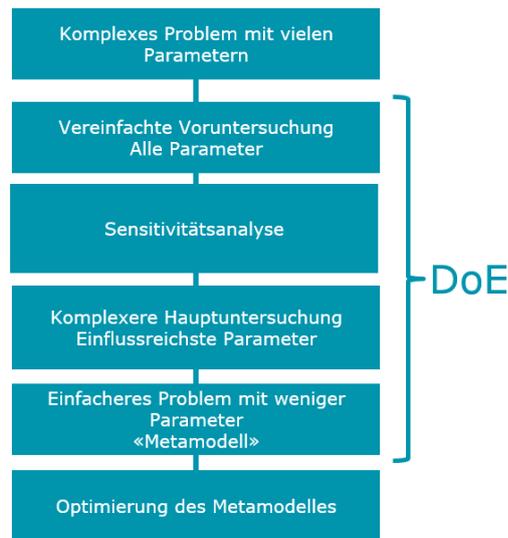


Abbildung 27: Ablaufdiagramm des Optimierungsprozesses

Nach Abschluss der Hauptuntersuchung in Abbildung 27 steht ein vereinfachtes Metamodell zur Verfügung, das im Idealfall, im Vergleich zum ursprünglichen Problem, nur einen Bruchteil an Optimierungsaufwand erfordert.

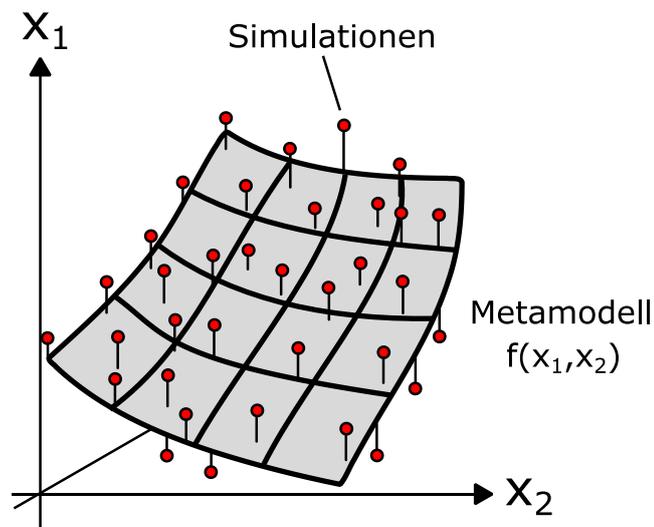


Abbildung 28: Vereinfachtes Metamodell

## 8.2. DoE-Ansatz zur Optimierung

Gemäss Pflichtenheft [28] muss die Designsoftware Sensitivitätsanalysen selbstständig durchführen und über eine Optimierungsfunktion verfügen, d. h. vom Nutzer vorgegebene Zielgrössen soll die Software automatisch optimieren können, so u. a. auch Energieeffizienz und Kosten. Schliesslich ermöglicht die Software einen Vergleich von verschiedenen Konfigurationsvarianten. Für die Umsetzung dieser Funktionen wird auf die Methode der statistischen Versuchsplanung oder Design of Experiments (DoE) zurückgegriffen. Im Folgenden wird der Nutzen von DoE mit spezieller Anwendung in Modellsimulationen näher erklärt.

Simulationsmodelle, und somit auch die Modellierung der Ad- und Desorptionsprozesse, haben mehrere Input-Faktoren. Die Bestimmung, welche dieser Einflussparameter einen signifikanten Einfluss auf interessierende Leistungskennzahlen oder Zielgrössen haben, kann besonders bei einer hohen Zahl von Einflussparametern eine schwierige Aufgabe sein. Die Anwendung und die Versuchsdurchführung mit Simulationsmodellen müssen in geeigneter Weise durchgeführt werden, damit korrekte, effiziente und effektive Erkenntnisse daraus gezogen werden können. Übliche und intuitive Vorgehensweisen bei Versuchen, wie u. a. das Ändern eines Faktors nach dem anderen (one-factor-at-a-time, OFAT), können nur durch Zufall zu einem optimalen Versuchsergebnis führen und sind daher meistens die falschen Ansätze [29], dies insbesondere auch wegen der Interaktion der Modellparameter und deren gemeinsamen Wirkung in den Modellen.

Im Gegensatz dazu ist das DoE eine Methodik zur systematischen Planung und statistischen Auswertung von Versuchen. Indem mehrere Faktoren nach definiertem Versuchsplan simultan verändert werden, werden Haupt- und Wechselwirkungen von Einflussparametern und somit der funktionale Zusammenhang zwischen den Parametern und den Zielgrössen im Simulationsmodell quantifizierbar. Bei vergleichsweise kleinerem Versuchsaufwand, hier die Simulationszeit, ist der Erkenntnisgewinn sehr hoch.

Ein weiterer starker Nutzen des DoE-Ansatzes ist die Entwicklung eines Metamodells, welches auf Basis der relevantesten Faktoren ein vereinfachtes mathematisches Modell des Simulationsmodells darstellt. Dadurch werden mathematische und statistische Methoden anwendbar und Modellantworten lassen sich auf Faktorlevel-Kombinationen innerhalb kürzester Zeitdauer vorhersagen [29, 30].

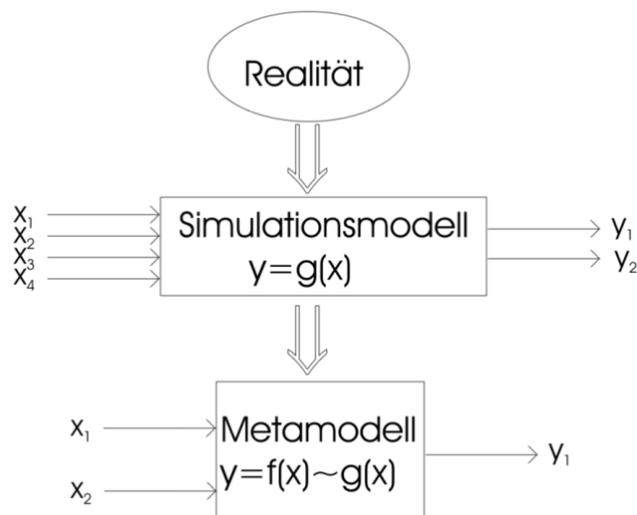


Abbildung 29: Hierarchie von Realität, Simulationsmodell und Metamodell [30]

Für Sensitivitätsanalysen ist es daher nicht mehr notwendig, die zum Teil sehr rechenintensiven Simulationsläufe durchzurechnen und führt zu Zeit- und Kostenersparnis. Natürlich gehen diese Vorteile auf Kosten der Genauigkeit, da das Metamodell schliesslich eine Approximation darstellt. Der Genauigkeitsgrad hängt aber von der Anwendung des Metamodells ab und wird im Metamodellierungsprozess festgelegt.

Der Metamodellierungsprozess teilt sich in folgende fünf Phasen auf [30]:

1. Vorüberlegungen über das Metamodell (Eingangs- und Zielgrößen, Wertebereich, Genauigkeit)
2. Spezifikation des Metamodells (mathematische Form)
3. Spezifikation des Versuchsentwurfs (statistische Versuchsplanung, Sammlung von Eingabe- und Ausgabedaten)
4. Parameterbestimmung und Parameterauswertung
5. Validierung mit Simulationsmodell

Das DoE mit dem Metamodell als Analysewerkzeug ist somit wesentlicher Bestandteil der Optimierungsfunktion der zu entwickelnden Software und wird in den nächsten Schritten der Softwareentwicklung weiter detailliert und umgesetzt.

Im Anhang D findet sich ein detailliertes Fallbeispiel zum Thema DoE, das an die Fragestellung aus dem Projekt *SYSKON* angelehnt ist.

### 8.3. Optimierung des Metamodells

Da es sich beim Metamodell um eine analytische Funktion handelt (Polynomfläche), ist eine analytische Optimierung möglich. Hierbei kann ein analoges Vorgehen wie bei der Kurvendiskussion benutzt werden.

Da die Funktion des Metamodells vergleichsweise glatt und stetig ist, sollte auch ein einfaches numerisch basiertes Gradientenabstiegsverfahren die Anforderungen an die Optimierung erfüllen.

### 8.4. Paretofront/Darstellung

In einer Zielfunktion, wie sie in Kapitel 8 beschrieben wird, lassen sich Einzeltermine durch Anpassung von Vorfaktoren anders gewichten. Durch Änderung der Gewichtung der Einzeltermine lassen sich somit neue Zielfunktionen definieren. Es versteht sich von selbst, dass sich mit dieser Änderung auch das Optimum im Zielraum verschiebt. Für jede abweichende Gewichtung muss somit eine neue Optimierung erfolgen.

Beim Vorhandensein von nur zwei Parametern lassen sich die Lösungen dieser Optimierung wiederum in einem zweidimensionalen Diagramm als Paretofront darstellen (Abbildung 30). Die Paretofront stellt dabei das Optimum dar, das bei einer bestimmten Gewichtung erreicht werden kann.

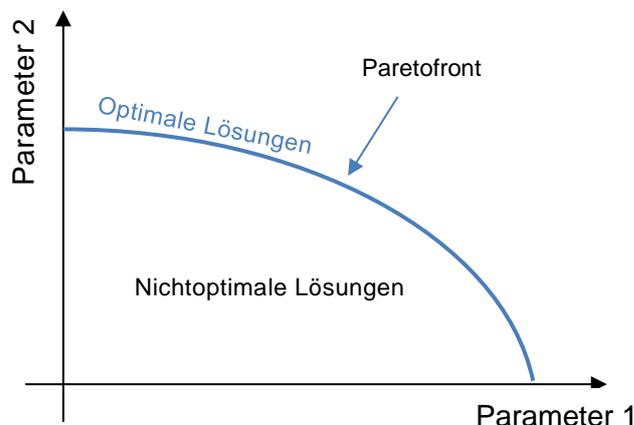


Abbildung 30: Darstellung der optimalen Lösung als Paretofront

Weitere Informationen zum Thema Paretofront finden sich beim Fallbeispiel im Anhang D.

## 8.5. Mögliche Realisierung in MATLAB® und Dymola®

Der Optimierungsprozess findet im Verbund mit MATLAB® statt, wie in Abbildung 31 dargestellt, stattfinden. Die Berechnungen für die Voruntersuchung wird mittels Skript von MATLAB® aus gesteuert und ausgewertet. Anhand der Resultate kann der Benutzer entscheiden, welche Parameter zu variieren sind und diese Variation von MATLAB® durchführen lassen.

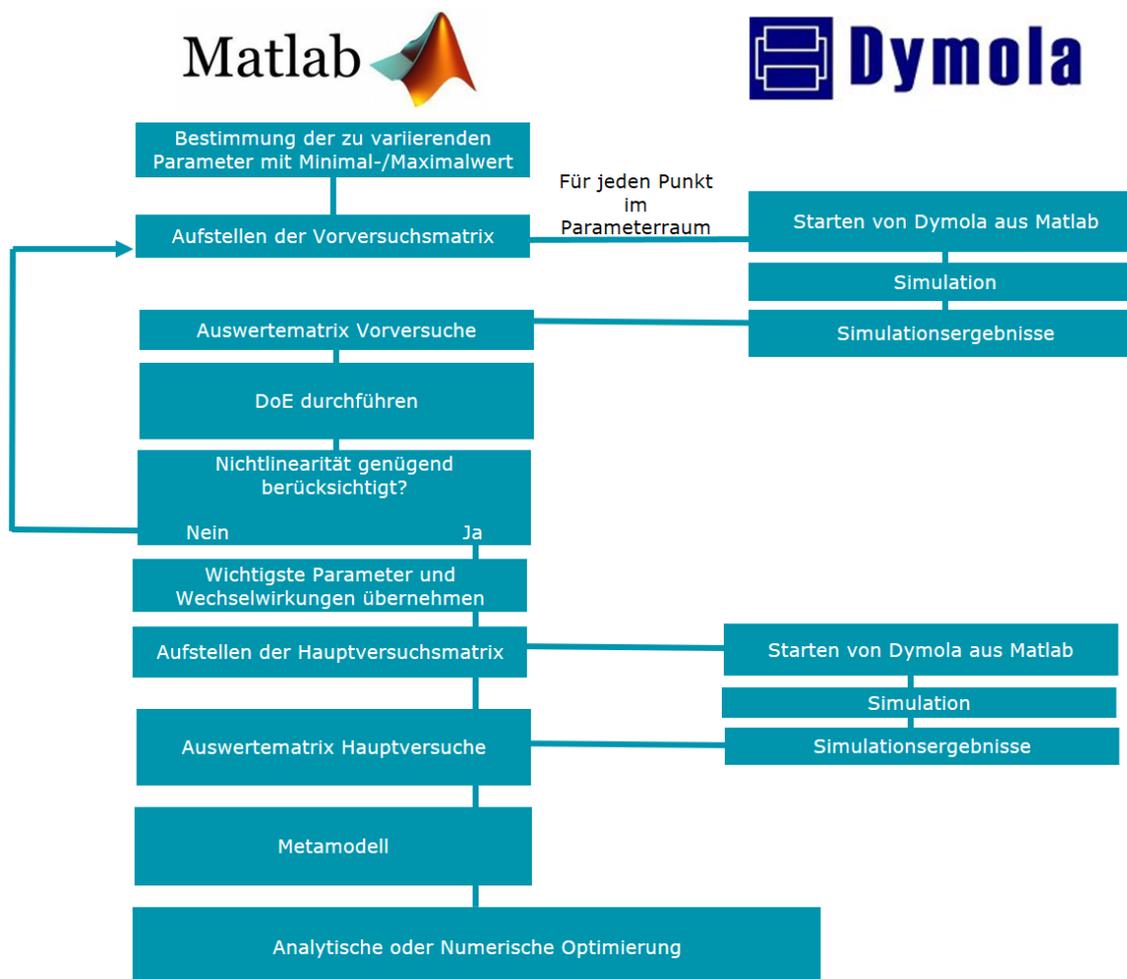


Abbildung 31: Realisierung des Optimierungsprozesses mit MATLAB® und Dymola®

## 9 Veröffentlichungen

Die Erkenntnisse aus dem Projekt *SYSKON* sollen in naher Zukunft in mehreren Papern der Öffentlichkeit zugänglich gemacht werden. Innerhalb der Projektgruppe *SYSKON* wurden hierzu erste Anstrengungen unternommen. Das erste Paper, mit dem Kernthema eindimensionales Basismodul (Basic One–Dimensional Modelica®-Model for Simulation of Gas-Phase Adsorber Dynamics), soll im zweiten Quartal 2019 erscheinen. Es soll als peer-reviewed Paper im Magazin *Chemical Engineering Science* des Verlags Elsevier veröffentlicht. Weitere Paper zu den nachfolgenden Forschungsschwerpunkten wie: Anwendung des Basismoduls auf Rotoradsorber etc. sollen folgen. Bis Projektende sollen fünf Veröffentlichungen erstellt werden.

## 10 Ausblick und nächste Schritte

Aufgrund der vollständigen Erfüllung sämtlicher «must» Punkte des Pflichtenheftes, soll der nächste Schritt darin bestehen, einen ersten realen Referenzfall zu rechnen. Die Design-Software wird als ausgereift genug angesehen um dieser Herausforderung gewachsen zu sein. Die beiden Lastenhefte für die Beispielanwendungen der Industriepartner liegen in einer ersten Version vor. In einem nächsten Schritt werden diese gemeinsam abgestimmt, so dass schlussendlich die Pflichtenhefte als Vorgabedokumente für die Arbeitspakete 5.1 und 5.2 daraus erstellt werden können.

Ende März 2019 wird das dritte Milestone-Treffen stattfinden (Meilenstein 3). Thema dieses Treffens wird die Modellierung des Rotoradsorbers, sowie die thermo-ökonomische Betrachtung mit Kostenkorrelationen und definierten Zielfunktionen sein. Die Begleitgruppe wird hier eingesetzt um den Status der Projektergebnisse, die Erfüllung des Pflichtenheftes und einen weiteren Projektablauf gemäss Planung zu beurteilen. Hierzu findet sich im Anhang B eine aktualisierte Version des Pflichtenheftes mit bewertetem Erfüllungsgrad als Diskussionsgrundlage.

## Literaturverzeichnis

1. Konrad, G., *Untersuchungen zum Betriebsverhalten und zur Optimierung rotierender Adsorptionssysteme*. Dissertation, Universität Stuttgart, Institut für Chemische Verfahrenstechnik, 1993.
2. Nunez, T., *Charakterisierung und Bewertung von Adsorbentien für Wärmetransformationsanwendungen*. 2001.
3. Amankwah, K.A.G., Schwarz, J.A., *A modified approach for estimating pseudo-vapor pressures in the application of the Dubinin-Astakhov equation*. Carbon, 33(9): pp. 1313-1319, 1995 DOI: [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(95\)00079-S](https://doi.org/10.1016/0008-6223(95)00079-S).
4. Schwamberger, V., *Thermodynamische und numerische Untersuchung eines neuartigen Sorptionszyklus zur Anwendung in Adsorptionswärmepumpen und -kältemaschinen = Thermodynamic and numerical investigation of a novel sorption cycle for application in adsorption heat pumps and chillers*. Ph.D. thesis, 2016.
5. Schneider, S., *Modellierung eines Adsorptionsprozesses aus der Gasphase*. Master-Thesis, 2019.
6. Nieszporek, K., *On the correct use of the Dubinin-Astakhov equation to study the mixed-gas adsorption equilibria*. Adsorption-Journal of the International Adsorption Society, 8(1): pp. 45-57, 2002 DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1015218507088>.
7. Beckner, M., Dailly, A., *Adsorption Enthalpy Calculations of Hydrogen Adsorption at Ambient Temperature and Pressures Exceeding 300 bar* %J American Journal of Analytical Chemistry. Vol.04No.10: pp. 9, 2013 DOI: 10.4236/ajac.2013.410A3002.
8. Tavlarides, L., *Sorption Modeling and Verification for Off-Gas Treatment*. 2016.
9. Sutton, K.G., Peter A., *Multi-Component Diffusion with Application To Computational Aerothermodynamics*. 1998.
10. Li, Z., Yang, R.T., *Concentration profile for linear driving force model for diffusion in a particle*. 45(1): pp. 196-200, 1999 DOI: doi:10.1002/aic.690450118.
11. Rezaei, F., Webley, P., *Optimum structured adsorbents for gas separation processes*. Chemical Engineering Science, 64(24): pp. 5182-5191, 2009 DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.08.029>.
12. C.R., R.J.J., Costa; A.R., Figueiredo, *On the behaviour of hygroscopic wheels: Part I – channel modelling*. 2007.
13. Konrad, G.E., Gerhart;, *Rotoradsorber zur Abluftreinigung und Lösungsmittelrückgewinnung*. 1994.
14. N., W.T., Funazkri, *Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid mass transfer coefficients in packed beds: Correlation of sherwood numbers*. 1978 DOI: [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(78\)85120-3](https://doi.org/10.1016/0009-2509(78)85120-3).
15. T., V.-S.M.J.G., Linders; F., Kapteijn; G., Marban; A.B., Fuertes; , *Adsorption and breakthrough performance of carbon-coated ceramic monoliths at low concentration of n-butane*. 2004.
16. Y. Y., L.S.P.P.B.D., CRITTENDEN;, *ZEOLITE MONOLITHS FOR AIR SEPARATION*. 1998.
17. Hawthorn, R.D., *Recent advances in air pollution control, vol. 70, AMER.INST.CHEM.ENGENS SYMP.SER. .* 1974.

18. Kraume, M., *Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik: Grundlagen und apparative Umsetzungen*. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
19. Tirzhá L.P., D.F.M.T., Luna; Ivanildo J., Silva Jr.; Diana C.S., de Azevedob;, Carlos A., G.A.E., Rodrigues; Regina F.P.M., Moreira;, *Carbon dioxide–nitrogen separation through adsorption on activated carbon in a fixed bed*. 2010 DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2010.08.026>.
20. *NIST/ARPA-E Database of Novel and Emerging Adsorbent Materials*. 2018.
21. Peter, S.A., Baron, G.V., Gascon, J., Kapteijn, F., Denayer, J.F.M.J.A., *Dynamic desorption of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> from amino-MIL-53(Al) adsorbent*. 19(6): pp. 1235-1244, 2013 DOI: 10.1007/s10450-013-9564-x.
22. Hua, D.H., Yi; Xiaolong, Tang; Qiongfeng, Yu; Ping, Ning; Liping, Yang;, *Adsorption equilibrium for sulfur dioxide, nitric oxide, carbon dioxide, nitrogen on 13X and 5A zeolites*. Chemical Engineering Journal, 2012 DOI: 10.1016/j.cej.2012.02.026.
23. Tlili, N., Grévilot, G., Vallières, C., *Carbon dioxide capture and recovery by means of TSA and/or VSA*. International Journal of Greenhouse Gas Control, 3(5): pp. 519-527, 2009 DOI: 10.1016/j.ijggc.2009.04.005.
24. Möller, A., Eschrich, R., Reichenbach, C., Guderian, J., Lange, M., Möllmer, J., *Dynamic and equilibrium-based investigations of CO<sub>2</sub>-removal from CH<sub>4</sub>-rich gas mixtures on microporous adsorbents*. Adsorption, 23(2): pp. 197-209, 2017 DOI: 10.1007/s10450-016-9821-x.
25. Schönbacher, A., *Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstungen und Prozesse ; mit 103 Tabellen*. Springer Berlin Heidelberg, 2002.
26. Ruikai, Z.S., Deng; Yinan, Liu; Qing, Zhao, Junnan, He; Li, Zhao;, *Carbon pump: Fundamental theory and applications*. 2016.
27. Göttlicher, G., *Entwicklungsmöglichkeiten der CO<sub>2</sub>-Rückhaltung in Kraftwerken aus thermodynamischer Sicht*. 2006.
28. Reich, M.R., Adrian; Sergi Yanez, Thomas; Tresch, Sergio; Waser, Roger; Widmer, Dominik; Müller, Ulf Christian; Kleingries, Mirko;, *Systematische Konzipierung industrieller Ad- und Desorptionsprozesse - AP2 Pflichtenheft*. 2018.
29. Law, A.M., *A tutorial on design of experiments for simulation modeling*. Proceedings of the Winter Simulation Conference 2014: pp. 66-80, 2014.
30. Berchtold, C., *Experimentieren mit Simulationsmodellen*. Institut für Technik Intelligenter Systeme, Universität der Bundeswehr München, 2000.

## Symbolverzeichnis

Bezeichnung	Bedeutung	Einheit
<b>Buchstaben</b>		
$A$	Adsorptionspotenzial	J/g
$A$	Temperaturleitfähigkeit	m <sup>2</sup> /s
$CE$	Kosten	CHF
$C_R$	Kosten Referenz	CHF
$c$	Stoffmengenkonzentration	mol/m <sup>3</sup>
$D$	Diffusionskoeffizient	m <sup>2</sup> /s
$D_{eff}$	Effektiver Diffusionskoeffizient	m <sup>2</sup> /s
$D_k$	Knudsen Diffusionskoeffizient	m <sup>2</sup> /s
$D_m$	Molekularer Diffusionskoeffizient	m <sup>2</sup> /s
$d$	Durchmesser	m
$E_0$	charakteristisches Adsorptionspotenzial für das Referenzgas Benzol (Dubinin)	J/g
$f$	Fugazität	Pa
$f_m$	Materialfaktor Kostenkorrelation	-
$f_p$	Druckfaktor Kostenkorrelation	-
$f_{sat}$	Pseudosättigungsfugazität	Pa
$f_t$	Temperaturfaktor Kostenkorrelation	-
$H_R^0$	Reaktionsenthalpie	J/mol
$h$	Spezifische Enthalpie	J/kg
$h_{ads}$	Spezifische Adsorptionsenthalpie	J/kg
$i$	Laufvariable	-
$j$	Laufvariable	-
$K_f$	Freundlich-Sorptionskoeffizient	Pa <sup>-1</sup>
$K_l$	Langmuir-Sorptionskoeffizient	Pa <sup>-1</sup>
$k_d$	Stoffdurchgangskoeffizient	m/s
$k_{LDF}$	LDF-Koeffizient	m/s
$k_s$	Stoffübergangskoeffizient	m/s
$k$	Exponent für den Pseudosättigungsdruck	-
$k$	Parameter für die Dubinin/Astakhov Gleichung	-
$L$	charakteristische Länge	m
$M$	Exponent Kostenkorrelation	-
$n$	Exponent der Dubinin/Astakhov Gleichung	-
$p$	Druck	Pa
$p_{crit}$	Kritischer Druck	Pa
$p_{sat}$	Pseudosättigungsdruck	Pa
$Q$	Wärme	kJ
$Q$	Bezugsgrösse Kostenkorrelation	-
$Q_H$	Wärmebedarf Desorption	kJ
$Q_L$	Wärmebedarf Adsorption	kJ
$Q_R$	Bezugsgrösse Referenz Kostenkorrelation	-
$q$	Adsorptionsenergie	J/g
$R$	Universelle Gaskonstante	kJ/mol K
$R$	Verhältnis der Fourier-Zahlen	-
$r$	Radius	m
$r$	Radiale Komponente für die Transportgleichung	-
$S_{trem}$	Trennentropie	J/K
$T$	Absoluttemperatur	K
$T_H$	Austrittstemperatur Desorber	K
$T_L$	Temperatur Adsorption	K
$T_0$	Umgebungstemperatur	K
$t$	Zeit	s
$u$	Temperatur der Transportgleichung	K

$v$	Strömungsgeschwindigkeit des Fluids	m/s
$W$	Adsorbiertes Volumen (Dubinin)	m <sup>3</sup> /kg
$w$	Arbeit	kJ/mol
$w_{real}$	Reale Trennarbeit	kJ/mol
$w_{rev/real}(CO_2-He)$	Energiebedarf für die reversible/reale Auffrennung des Desorptionsgases	kJ
$w_{RG}$	Energiebedarf für die Rohgasbehandlung	kJ
$w_{CO_2}$	Energiebedarf für die Gasabscheidung	kJ
$w_s$	Externer Energieeintrag	kJ
$w_{ventA}$	Energiebedarf Förderapparat Adsorption	kJ
$w_{ventD}$	Energiebedarf Förderapparat Desorption	kJ
$x$	Koordinate in x-Richtung	-
$X$	Volumenanteil der abzutrennenden Komponente	-
$y$	Molanteil	-

**Griechische Buchstaben**

$\beta$	Effektive Diffusionskonstante	kg/s Pa
$\varepsilon$	Kornporosität	-
$\zeta$	Gütegrad	-
$\eta$	Wirkungsgrad	-
$\theta$	Tangentiale Komponente der Transportgleichung	-
$\tau$	Tortuosität	-

**Indizes**

eff	effektiv
mol	molar
real	real
rev	reversibel
sat	Sättigung
t	trennen, die Trennung betreffend

**Kennzahlen**

$Fo$	Fourier-Zahl
$Pe$	Péclet-Zahl
$Re$	Reynolds-Zahl
$Sc$	Schmidt-Zahl
$Sh$	Sherwood-Zahl

**Abkürzungen**

IE	Integral Equation
OFAT	One Factor At a Time
MOF	Metallorganische Gerüstverbindung
SYSKON	Systematische Konzipierung industrieller Sorptionsprozesse

# Anhang A

Adsorbentien													CAS-Nummer
Genauere Bezeichnung	Schüttdichte [kg/m <sup>3</sup> ]	scheinbare Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]	specific solid volume [m <sup>3</sup> /kg]	specific pore volume [m <sup>3</sup> /kg]	wahre Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]	Partikeldurchmesser [µm]	spez. Wärmekapazität [J/(kg K)]	Komporosität [-] (Richtwert, Bathen)	Tortuosität [-] (Richtwert, Bathen)	Porendurchmesser [m] (Fittingparameter)	Quelle	CAS-Nummer	
<b>Adsorbentien der Physisorption</b>													
<b>Kohlenstoffhaltige Adsorbentien</b>													
Aktivkohle	engporig	400 - 500	800		4.5E-4 - 8E-4	2000	3.00E-3 - 10.00E-3	760 - 840	0.6	7 (mit Adsorptiv Wasser)	3E-10 - 1E-8	Axel Schönbacher, 2002	7440-44-0
Aktivkohle	weitporig	300 - 500	600 - 700		5E-4 - 8E-4	2200	3.00E-3 - 10.00E-3	760 - 840	0.73	7 (mit Adsorptiv Wasser)	3E-10 - 1E-8	Axel Schönbacher, 2002	7440-44-0
Aktivkohle	NORIT R2030	546.24	1138		4.10E-04	2070	3.80E-03	880	0.45 - 0.77	2.2	1.00E-9 - 1.00E-6, Bathen	Tirzhá L.P. Dantas, 2011	7440-44-0
Aktivkoks	%	500 - 600	900			1900		850	0.53	2.2	1.00E-6, Bathen	Heinz, Brauer XXXX	65996-77-2
Aktivkohle Donau Carbon	Desorex K43 / K47	470 - 570	600					760 - 840	0.45 - 0.77	2.2	3E-10 - 1E-8	Donau Carbon, 2018	64365-11-3
Molekularsieb	Linde 4 A	690	1100 - 1500		3.25E-4 - 7E-4	2600	0.0015 - 0.006	1040	0.5	2.2	3E-10 - 1E-8	Karl Kröll, XXXX Axel Schönbacher, 2002	70955-01-0
Kohlenstoff-Molekularsieb	CMS	650	960		3.25E-4 - 7E-4	2600	1.10E-03	880	0.315	2 (Carlos A. Grande, 2004)	0.5E-9, Yongha Park	Yongha Park, 2019	70955-01-0
<b>Oxidische Adsorbentien</b>													
Zeolithe/Molekularsiebe	Zeolith 13X	533.8	1230		3.35E-04	2460 - 3075	0.0015	900	0.5 - 0.6	8 - 10	1.00E-09	Rached Ben-Masour, 2018 H.Melissa Magee, XXXX	63231-69-6
Zeolithe/Molekularsiebe	Zeolith 10X	600 - 900	900 - 1290		2E-4 - 7E-4	1800 - 2100	0.0015 - 0.006	840 - 1000	0.37 - 0.57	8 - 10	8.00E-10	Wikipedia, 2019	63231-69-6
Zeolithe/Molekularsiebe	Zeolith 5A	600 - 900	900 - 1290		2E-4 - 7E-4	1800 - 2100	0.0015 - 0.006	840 - 1000	0.37 - 0.57	8 - 10	5.00E-10	Wikipedia, 2019	1318-02-1
Zeolithe/Molekularsiebe	Zeolith 4A	600 - 900	900 - 1290		2E-4 - 7E-4	1800 - 2100	0.0015 - 0.006	840 - 1000	0.37 - 0.57	8 - 10	4.00E-10	Wikipedia, 2019	1318-02-1
Zeolithe/Molekularsiebe	Zeolith 3A	600 - 900	900 - 1290		2E-4 - 7E-4	1800 - 2100	0.0015 - 0.006	840 - 1000	0.37 - 0.57	8 - 10	3.00E-10	Wikipedia, 2019	1318-02-1
Silicagel	engporig	700 - 800	1100		4.5E-4 - 5.5E-4	2200	1.00E-3 - 5.00E-3	920	0.5	3.6 - 6.4	8.00E-09	Axel Schönbacher, 2002	14808-60-7
Silicagel	weitporig	400 - 800	1100		3.23E-4 - 5.5E-4	2200	1.00E-3 - 5.00E-3	920	0.5	3.6 - 6.5	8.00E-09	Axel Schönbacher, 2002	14808-60-7
Kieselgel/Silicagel	SiO <sub>2</sub>	750	1100		3.5E-4 - 9.5E-4	2200	0.0005-0.004	920	0.45 - 0.65	3.5 - 6.5	0.000000006	Michael Schultes, 1996	14808-60-7
Aktivtonerde/Aluminate	Merck aktiv neutral	810	1200		5.00E-04	3000	2E-3 - 10E-3	1000	0.35 - 0.94	3.9 - 7.0	6.16E-08	Rolf Hahn, 1982	1344-28-1
Aktivtonerde/Aluminate	Merck 90 sauer	810	1200		5.00E-04	3000	2E-3 - 10E-3	1000	0.25 - 0.9	3.9 - 7.0	8.91E-08	Rolf Hahn, 1983	1344-28-1
Aktivtonerde/Aluminate	GX	810	1200		5.00E-04	3000	2E-3 - 10E-3	1000	0.25 - 0.88	3.9 - 7.0	6.76E-08	Rolf Hahn, 1984	1344-28-1
Aktivtonerde/Aluminate	Compalox	810	1200		5.00E-04	3000	2E-3 - 10E-3	1000	0.38 - 0.85	3.9 - 7.0	1.318E-07	Rolf Hahn, 1985	1344-28-1
Aktivtonerde/Aluminate	CTG 100	810	1200		5.00E-04	3000	2E-3 - 10E-3	1000	0.24 - 0.61	3.9 - 7.0	1.549E-07	Rolf Hahn, 1986	1344-28-1
Aktivtonerde/Aluminate	CTG 200	810	1200		5.00E-04	3000	2E-3 - 10E-3	1000	0.2 - 0.8	3.9 - 7.0	3.02E-08	Rolf Hahn, 1987	1344-28-1
Aktivtonerde/Aluminate	SES 300	810	1200		5.00E-04	3000	2E-3 - 10E-3	1000	0.3 - 0.64	3.9 - 7.0	1.096E-07	Rolf Hahn, 1988	1344-28-1
Aktiviertes Aluminiumoxid	γ-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	700 - 850	1200		5.00E-04	3000	2.00E-3 - 10.00E-3	880	0.6	3.9 - 7.0	1.25E-08	Shuang Chen, 2018	1344-28-1
<b>Polymeradsorbentien</b>													
Polystyrol/Polyacrylester	%	6.5			3.7E-4 - 1.43E-3		0.8E-3 - 5E-3	1500	0.35 - 0.65	1 - 10		Waermedaemmstoffe.de	9003-53-6
Phenolische Adsorbharze	%	800	1000		3.7E-4 - 1.43E-3	n.a.	0.5E-3 - 1.0E-3		0.35 - 0.65	1 - 10		Ralf Goedecke, XXXX	108-95-2
Styrol/Divinylbenzol	%	300 - 400	400		1.1E-3 - 1.25E-3	1000	0.50E-3 - 1.00E-3	350	0.6	1 - 10	1.00E-08	Axel Schönbacher, 2002 sigmaaldrich.com	100-42-5
<b>Mischadsorbentien</b>													
Kalk/AC oder AK										1 - 10			
Kalk	Calziumkarbonat CaCO <sub>3</sub>	960	1240			2700	2e-5 - 9e-5	822	0.540740741	1 - 10		korth.de, mollet.de	471-34-1
<b>Metallorganische Gerüstverbindungen (MOF)</b>													
Mg-MOF-74	%	230.1	911		7.93E-04		0.0002	900		1.86	1.20E-09	Rached Ben-Mansour, 2018 Maria C. Bernini, 2013	
HKUST-1	%	380	870		5.70E-04		0.00043	700	0.5	1.86	4.7E-9 - 1.21E-8	Alexander Münch, 2013 Markus Schindler, 2012 Sang Beom Choi, 2016 acsmaterial.com	51937-85-0
MOF-5	IRMOF-1	428.5	621		1.20E-03	2030	3.50E-05	750	0.69408867	1.86	5.1E-10 - 5.4E-10	Rached Ben-Mansour, 2017 Jinping Li, 2008 Yang Ming, 2013 helios.princeton.edu	255367-66-9
MIL-53 (Fe)	%									1.86	3.41E-09	Liangcheng Xie, 2018	654061-20-8
MIL-53 (Al)	%	826	1644		5.6E-4 - 7.2E-4		2.00E-03	500	0.36	1.86	8.50E-10	Alexandre F.P. Ferreira, 2014	654061-20-8

## Anhang B

### Pflichtenheft SYSKON

Software und Benutzeroberfläche:	must	nice to have	none	Ergänzung/Anmerkung	Projektstatus
Die fertige Design-Software soll öffentlich und unentgeltlich zugänglich sein (Open Source)		x		Open Source anzustreben	Pendent
Der Benutzer verfügt über eine abgeschlossene Design-Software mit Benutzeroberfläche (GUI)			x	Wird nicht weiter verfolgt	Pendent
Die Software ist ohne Modelica® Kenntnisse bedienbar			x	Wird nicht erfüllt werden	Pendent
Die Software funktioniert mit Linux Betriebssystem			x	Kann bei Bedarf umgesetzt werden	Pendent
Die Software funktioniert mit Windows Betriebssystem	x				Vollständig erfüllt
Benutzersprache Englisch	x				Vollständig erfüllt
Die Software kann einen vom Benutzer definierten Zielwert (Zielfunktion) berechnen	x			Individuell vom Benutzer definierbar	Funktionalität aufgezeigt
Die Software kann einen Zielwert automatisch optimieren	x			MATLAB®-gesteuerte Optimierung mithilfe des DoE-Ansatzes	Funktionalität aufgezeigt
Die Software kann eine möglichst energieeffiziente Lösung berechnen	x			Funktionalität über die Gewichtung einer Zielfunktion erreichbar	Funktionalität aufgezeigt
Die Software kann eine Sensitivitätsanalyse automatisch durchführen und die Ergebnisse darstellen	x			DoE-Ansatz beinhaltet Sensitivitätsanalyse, Parameterraum muss vom Benutzer individuell definiert werden	Funktionalität aufgezeigt
Die Software kann die Unterschiede von verschiedenen Konfigurationsvarianten eigenständig vergleichen			x	nur parametrisierbare Konfigurationen, über DoE unterstützt	Funktionalität aufgezeigt
<b>Output:</b>					
Protokoll mit allen berechneten und relevanten Eingabe-Berechnungsparametern sowie ein Vergleich mit einer Referenzkonfiguration	x			Referenzkonfiguration dient als Startkonfiguration für eine Analyse/Optimierung, eine vergleichende Bewertung kann individuell erstellt werden	Funktionalität aufgezeigt
Durchbruchskurve	x			Bei Festbett-Adsorber und teilweise Rotoradsorber (Schüttung)	Vollständig erfüllt
Adsorptionszeit	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Desorptionszeit	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Ad- und desorbierte Menge pro Zyklus (oder Zeiteinheit)	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Thermische Energie (detaillierte Informationen)	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Elektrische Energie (detaillierte Informationen)	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Investitionskosten (detaillierte Informationen)	x			individuell vom Benutzer zu hinterlegen	Funktionalität aufgezeigt

Betriebskosten (detaillierte Informationen)	x			individuell vom Benutzer zu hinterlegen	Funktionalität aufgezeigt
<b>Dokumentation:</b>					
Die in der Software implementierten Funktionalitäten und Formeln sind dokumentiert	x			Anhand dokumentierten Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Es gibt Best-Practice-Richtlinien zur Auslegung eines Sorptionsprozesses		x		Informationsgrundlage wächst mit Zahl der Anwendungen	Pendent
Es gibt Best-Practice-Richtlinien zur Anwendung der Software		x		Informationsgrundlage wächst mit Zahl der Anwendungen	Pendent
Es gibt eine Dokumentation bezüglich der Genauigkeit und Grenzen von Funktionalitäten		x		Informationsgrundlage wächst mit Zahl der Anwendungen	Pendent
<b>Sorbens/Sorptiv Datenbank:</b>	<b>must</b>	<b>nice to have</b>	<b>none</b>	<b>Ergänzung/Anmerkung</b>	
Automatisches Generieren von Isothermen			x	Isothermen basierend auf Messdaten standardisiert generiert	Funktionalität aufgezeigt
Isothermen für Sorbentien können in einer Datenbank als Funktion hinterlegt werden	x			Für Referenzanwendungen bereits im AP3 und AP4 hinterlegt	Vollständig erfüllt
Charakteristische Isothermen für Sorbentien sind in einer Bibliothek hinterlegt		x		Überprüfung der Anwendbarkeit liegt in der Verantwortung des Nutzers, Bibliothek wächst mit Zahl der Anwendungen	Funktionalität aufgezeigt
Isothermen für Sorbentien können in einer Datenbank als Kurvenschar hinterlegt werden			x	Die Isothermen werden in einer vorgelagerten Aufbereitung in eine Funktion überführt (Freundlich & Co.) -> Die Aufbereitung erfolgt durch den Benutzer, nicht in der zu entwickelnden Software	Funktionalität aufgezeigt
Durchmesser verteilung kann hinterlegt und daraus charakteristischer Durchmesser berechnet werden		x		Über gewichteten Mittelwert erreichbar	Funktionalität gegeben
Partikel-Durchmesser als freier Parameter wählbar	x				Vollständig erfüllt
Isothermen für Mehrstoffadsorption können hinterlegt werden	x			Zumindest Wasser + min. ein weiteres Sorptiv	Vollständig erfüllt
Zeitlich veränderliche Materialeigenschaften können berücksichtigt werden (Alterung; Verschmutzung, Aufquellen..)		x		Wünschenswerte Funktionalität, da hohe praktische Relevanz (Einfluss auf Gleichgewichtsbeladung und LDF-Koeffizient)	Funktionalität gegeben
Parametersatz zur Beschreibung der Kinetik (z. B. Diffusionskoeffizient) kann hinterlegt werden	x				Vollständig erfüllt
<b>Gas Datenbank:</b>					
Gasgemisch kann konfiguriert werden	x			Nutzung der NIST-Datenbank	Vollständig erfüllt
Gemisch-Dichte wird berechnet	x			Nutzung der NIST-Datenbank	Vollständig erfüllt
Gemisch-Viskosität wird berechnet	x			Nutzung der NIST-Datenbank	Vollständig erfüllt
Gemisch-Wärmekapazität wird berechnet	x			Nutzung der NIST-Datenbank	Vollständig erfüllt
Änderung der Gaseigenschaft aufgrund geänderter Zusammensetzung			x	Thermodynamische Größen wie Dichte, spez. Wärmekapazitäten etc. werden für eine fixe Gaszusammensetzung berechnet; Abhängigkeit von Druck und Temperatur wird für diese fixe Zusammensetzung berücksichtigt	Vollständig erfüllt

<b>1D-Basismodul (Ad- und Desorptionsprozess):</b>					
Ad-/Desorptionsprozess zwischen Gasphase und Feststoff kann simuliert werden	x			nur diese Kombination	Vollständig erfüllt
Wärmetransport Gas zu Sorbens wird berücksichtigt	x			vereinfachtes Modell	Vollständig erfüllt
Wärmetransport Sorbens zu Struktur wird berücksichtigt	x			vereinfachtes Modell Im Moment Annahme eines Temperaturgleichgewichtes zwischen Gas/Sorbens und Wärmetransport über $T_{gas} > T_{wand}$	Funktionalität aufgezeigt
Wärmestrahlung wird berücksichtigt			x	Kann bei Bedarf erweitert werden	Pendent
Das Beladungsgleichgewicht gemäss Isotherme wird berechnet	x				Vollständig erfüllt
Stofftransport in die Porenstruktur wird berücksichtigt	x			vereinfachtes Modell, LDF-Ansatz, dabei werden verschiedene Transporteffekte innerhalb des LDF-Koeffizienten berücksichtigt	Vollständig erfüllt
Die Sorptionsenthalpie wird berücksichtigt	x				Vollständig erfüllt
Zustandsgrössen X, T, $P_A$ werden berechnet	x				Vollständig erfüllt
Die Zustände im Sorbens werden als Funktion des Radius berechnet		x		Kann bei Bedarf erweitert werden	Pendent
Inhomogene Materialeigenschaften können berücksichtigt werden			x	Innerhalb eines 1D-Basismoduls nicht ohne weiteres möglich	Pendent
<b>Adsorber-Unit (Kolonne):</b>					
Der Adsorber wird in Strömungsrichtung räumlich diskretisiert	x				Vollständig erfüllt
Der Adsorber wird in einer weiteren Raumrichtung diskretisiert (z. B. in radialer Richtung)		x		Ist bei der Aufintegration des 1D-Basismoduls zu einem Prozessmodell zu berücksichtigen	Funktionalität gegeben
Wandeffekte werden berücksichtigt		x		Unter Berücksichtigung einer mittleren repräsentativen Durchströmungsgeschwindigkeit und Kolonnentemperatur	Funktionalität gegeben
Zeitlich veränderliche Randbedingungen können berücksichtigt werden		x			Vollständig erfüllt
<b>Bauarten:</b>	<b>must</b>	<b>nice to have</b>	<b>none</b>	<b>Ergänzung/Anmerkung</b>	
Festbett	x				Vollständig erfüllt
Rotor	x			Für Schüttung implementiert, für extrudierte Strukturen Funktionalität aufgezeigt	Funktionalität aufgezeigt
Wanderbett		x		Kann bei Bedarf umgesetzt werden	Pendent
Wirbelbett		x		Kann bei Bedarf umgesetzt werden	Pendent
Flugstrom		x		Kann bei Bedarf umgesetzt werden	Pendent
<b>Festbett-Adsorber:</b>					
Desorption mit Druckwechsel-Sorptionsverfahren (DWS)	x			Anhand Referenzfall aufgezeigt (Siqueira et al.)	Funktionalität aufgezeigt
Desorption mit Temperaturwechsel-Sorptionsverfahren (TWS)	x			Anhand Referenzfall aufgezeigt (Siqueira et al.)	Funktionalität aufgezeigt
Desorption mit Konzentrationswechsel-Sorptionsverfahren (KWS)	x				Vollständig erfüllt

<b>Rotor-Adsorber:</b>					
Sorbens als Film auf Trägerstruktur	x				Funktionalität aufgezeigt
Sorbens als Kugeln (rotierendes Festbett)			x	Rotierende Festbettschüttung	Vollständig erfüllt
Desorption mit Druckwechsel-Sorptionsverfahren (DWS)			x	Analog Festbettadsorber	Funktionalität aufgezeigt
Desorption mit Temperaturwechsel-Sorptionsverfahren (TWS)	x			Analog Festbettadsorber	Funktionalität aufgezeigt
Desorption mit Konzentrationswechsel-Sorptionsverfahren (KWS)	x			Analog Festbettadsorber	Funktionalität aufgezeigt
<b>Hilfskomponenten (Pumpen, Ventilatoren, Wärmeübertrager, Ventile etc.)</b>	<b>must</b>	<b>nice to have</b>	<b>none</b>	<b>Ergänzung/Anmerkung</b>	
Kennlinie kann hinterlegt werden	x			Standardbibliothek Modelica®	Funktionalität gegeben
Leistungsbedarf kann berechnet werden	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
<b>Druckverlust:</b>					
Druckverlust wird durch eine Verkettung von Verlustkoeffizienten berechnet	x			In Standardbibliothek hinterlegt	Funktionalität gegeben
Einfluss einer Wärmeübertragerstruktur wird beim Druckverlust berücksichtigt		x		Über Erweiterung der Ergun-Korrelation	Funktionalität gegeben
Einfluss des Partikeldurchmessers wird beim Druckverlust berücksichtigt	x			In Ergun berücksichtigt	Vollständig erfüllt
Einfluss Ungleichverteilung auf den Druckverlust wird berücksichtigt		x		Kann bei Bedarf umgesetzt werden	Pendent
Volumenstrom und Druckverlust kann über Ventilator Kennlinie gekoppelt sein	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
<b>Volumenstromverteilung:</b>					
Eine Ungleichverteilung des Volumenstroms kann abgebildet werden		x		Kann bei Bedarf umgesetzt werden	Pendent
<b>Investitionskosten:</b>					
Kosten für Apparatebau können berücksichtigt werden	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Kosten für Zusatzaggregate können berücksichtigt werden (Heizelemente; Ventilatoren; Pumpen..)	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Kosten für Sorbens kann berücksichtigt werden	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
<b>Betriebs- und Unterhaltskosten:</b>					
Elektrische Energie kann berücksichtigt werden	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Thermische Energie kann berücksichtigt werden	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Wartungskosten können berücksichtigt werden	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Ersatz & Fixkosten können berücksichtigt werden	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
<b>Zeiten:</b>					
Adsorptionszeit kann berechnet werden	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Desorptionszeit kann berechnet werden	x			Referenzprozess	Funktionalität aufgezeigt
Prozessfixzeiten können berücksichtigt werden	x			Kann bei Bedarf umgesetzt werden	Funktionalität gegeben

<b>Zielwert:</b>					
Ein Zielwert kann als Funktion mehrerer unterschiedlich gewichteter Parameter definiert werden	x			Darstellung als Paretofront	Funktionalität aufgezeigt

## Anhang C

### Detaillierte Berechnung der Dimensionslosen Kennzahlen.

$$V_m = \frac{RT}{p} = \frac{8.314 \frac{\text{kg m}^2}{\text{s}^2 \text{mol K}} 293.15 \text{ K}}{10^5 \text{ Pa}} = 0.024372 \frac{\text{m}^3}{\text{mol}}$$

$$\frac{1}{V_m} = \frac{1}{0.024372 \frac{\text{m}^3}{\text{mol}}} = 41.03 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

$$c_{\text{Zuluft}} = 4 \frac{\text{g}}{\text{m}^3} \cdot \frac{1}{131.39} \frac{\text{mol}}{\text{g}} = 0.030444 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

$$x_{\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3} = \frac{0.030444 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}}{41.03 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}} = 0.000742 \frac{\text{mol}_{\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3}}{\text{mol}}$$

$$x_{\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3} \cdot a_{\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3} + x_{\text{Luft}} \cdot a_{\text{Luft}} \approx x_{\text{Luft}} \cdot a_{\text{Luft}}$$

$$a_{\text{Luft}} = 20 \frac{\text{mm}^2}{\text{s}} = 2 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$Fo_x = \frac{t \cdot a_{\text{Luft}}}{L^2} = \frac{t \cdot 2 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}}{(0.2 \text{ m})^2} = 5 \cdot 10^{-4} \frac{1}{\text{s}} \cdot t$$

$$\frac{1}{a_{\text{tot}}} = \frac{1}{a_{\text{Luft}}} + \frac{1}{a_{\text{solid}}}$$

$$a_{\text{tot}} = \frac{1}{\frac{1}{a_{\text{Luft}}} + \frac{1}{a_{\text{solid}}}} \leq a_{\text{Luft}}, a_{\text{solid}}$$

$$a_{\text{tot}} = \frac{1}{\frac{1}{20 \frac{\text{mm}^2}{\text{s}}} + \frac{1}{98.8 \frac{\text{mm}^2}{\text{s}}}} = 16.6 \frac{\text{mm}^2}{\text{s}}$$

Worst case  $a_{\text{tot}} = a_{\text{Luft}}$

$$Fo_r = \frac{t \cdot a_{\text{Luft}}}{r_0^2} = \frac{t \cdot 2 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}}{(0.4 \text{ m})^2} = 1.25 \cdot 10^{-4} \frac{1}{\text{s}} \cdot t$$

$$Fo_{\Theta} = \frac{t \cdot a_{\text{Luft}}}{(r_0 \cdot \theta_0)^2} = \frac{t \cdot 2 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}}{(0.4 \text{ m} \cdot 2\pi)^2} = 3 \cdot 10^{-6} \frac{1}{\text{s}} \cdot t$$

$$Pe_x = \frac{v_0 \cdot L}{a_{\text{Luft}}} = 10^4 \frac{\text{s}}{\text{m}} \cdot v_0$$

$$\dot{V}_{Zuluft} = \frac{1e5 \text{ Pa} \cdot 600 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}}{273.15 \text{ K}} \cdot \frac{293.15 \text{ K}}{1e5 \text{ Pa}} = 643.9 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$$

$$v_{Zuluft} = \frac{\dot{V}_{Zuluft}}{A_{Adsorption}} = \frac{643.9 \frac{\text{m}^3}{3600 \text{ s}}}{0.8 \cdot (0.4 \text{ m})^2 \cdot \pi} = 0.445 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$Pe_x = \frac{v_0 \cdot L}{a_{Luft}} = \frac{0.445 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot 0.2 \text{ m}}{2 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}} = 4'448$$

$$t = \frac{L}{v_0} = \frac{0.2 \text{ m}}{0.445 \frac{\text{m}}{\text{s}}} = 0.45 \text{ s}$$

$$Fo_x = 2.25 \cdot 10^{-4}$$

$$Fo_r = 5.6 \cdot 10^{-5}$$

$$Fo_{\theta} = 1.35 \cdot 10^{-6}$$

$$Pe_x = 4'448$$

## Anhang D

# **Fallbeispiel DoE «Design of Experiments»**

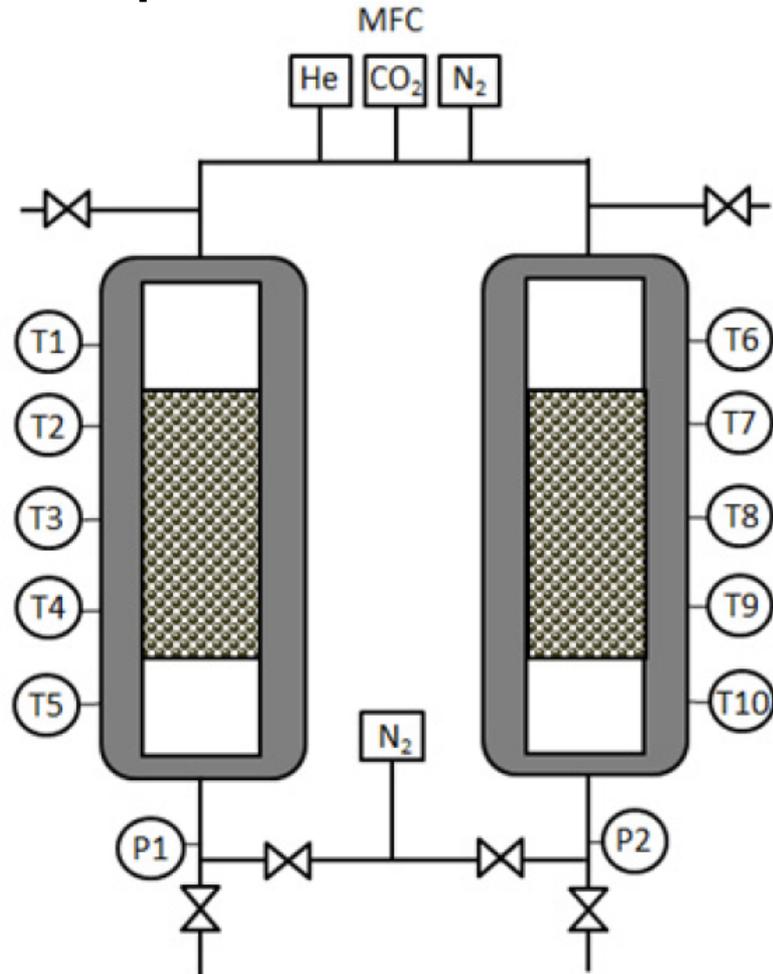
2019-03-06

Fallbeispiel in Anlehnung an

[https://www.tqu-group.com/we-dokumente/Downloads/design\\_of\\_experiments.pdf](https://www.tqu-group.com/we-dokumente/Downloads/design_of_experiments.pdf)

Silvan Schneider

## Fallbeispiel: Adsorberkolonne



Die Abscheiderate einer Adsorberkolonne ist aufgrund falscher Einstellungen zu klein.

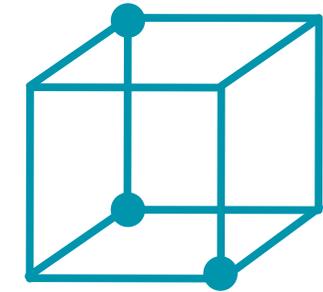
Es sind viele Einstellkombinationen möglich. Da nicht alle variiert werden können, sollen nur die Einstellungen mit dem grössten Einfluss variiert werden.

«Welche Parameter sind zu variieren?»

## Ausgangslage

- Problem: Abscheiderate einer Adsorptionskolonne ist zu tief
- Ziel: Abscheiderate soll durch Änderungen an den Einstellungen erhöht werden
- Einstellgrößen: Eingangskonzentration  $c$  erhöhen  
Strömungsgeschwindigkeit  $v$  erhöhen  
Adsorbenstyp  $t$  anpassen

## Aufstellen eines Versuchsplans

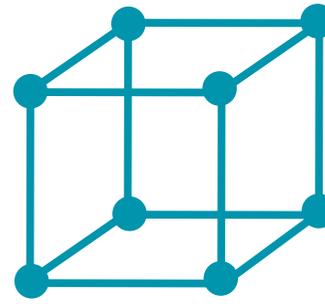


Teilfaktorieller Versuch

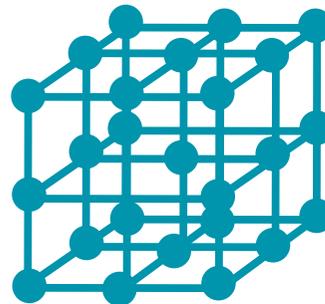
Zweistufig



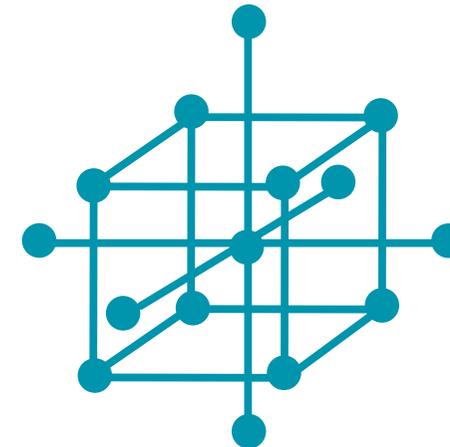
Mehrstufig



Vollfaktorieller Versuch



Vollfaktorieller Versuch



Response Surface Design

**Faktoren:** Anzahl der Parameter  
**Stufen:** Anzahl der Variationen je Parameter

## 2-stufiger vollfaktorieller Versuch

- Voruntersuchung
- Idee: Möglichst wenig Variationen (Stufen) der einzelnen Parameter
- Bestimmung der Sensitivität verschiedener Parameter

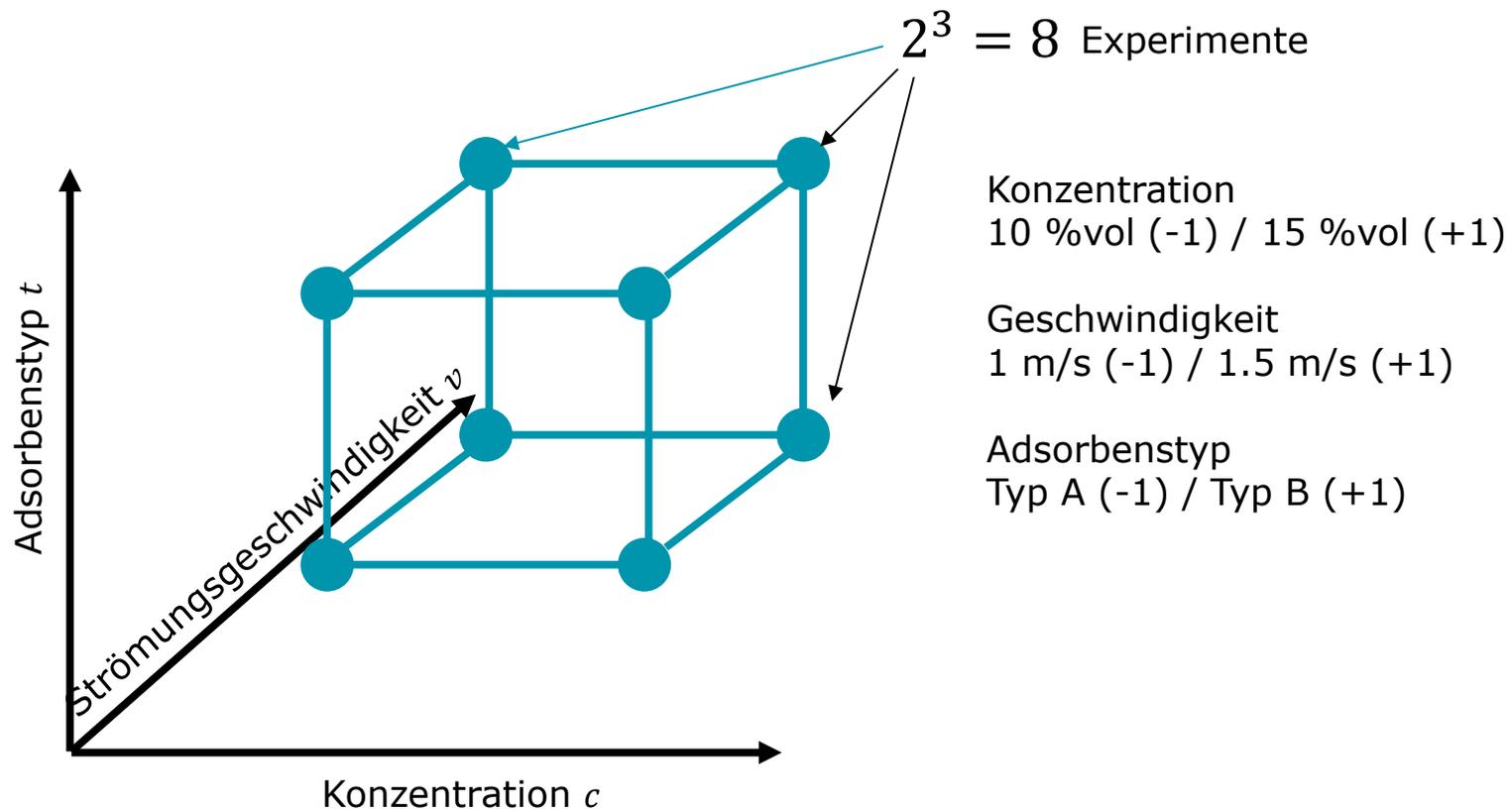
## Vertiefte Versuche

- Idee: Möglichst wenig Parameter mit möglichst vielen Stufen
- Erhöhung der Anzahl Variationen bei den Parametern mit den grössten Effekten
- Weglassen der weniger wirksamen Parameter

Ziel: Aus möglichst wenig Variationen möglichst viel Informationen erhalten

## 2-stufiger vollfaktorieller Versuch

- Zuordnung zweier Faktorstufen (-1, 1), 3 Faktoren (Variablen)



## Durchführung der Experimente

Zielgrösse:  
Abscheiderate in %

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95

Hauptwirkungen

Wechselwirkungen  
2. Ordnung

Wechselwirkungen  
3. Ordnung

Mittelwert:  
80.125 %

Wechselwirkungen bis und mit 2. Ordnung dominieren in der Regel

## Durchführung der Experimente

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A</i> %
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
<b>91.25</b>							+1
							-1
							E

Mittelwert

→ 91.25

## Haupteffekte & Wechselwirkungen

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A%</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25							+1
<b>69.00</b>							-1
							E

Mittelwert → 69.00

## Haupteffekte & Wechselwirkungen

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25							+1
69.00							-1
<b>22.25</b>							<b>E</b>

## Haupteffekte & Wechselwirkungen

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E

## Haupteffekte & Wechselwirkungen

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E

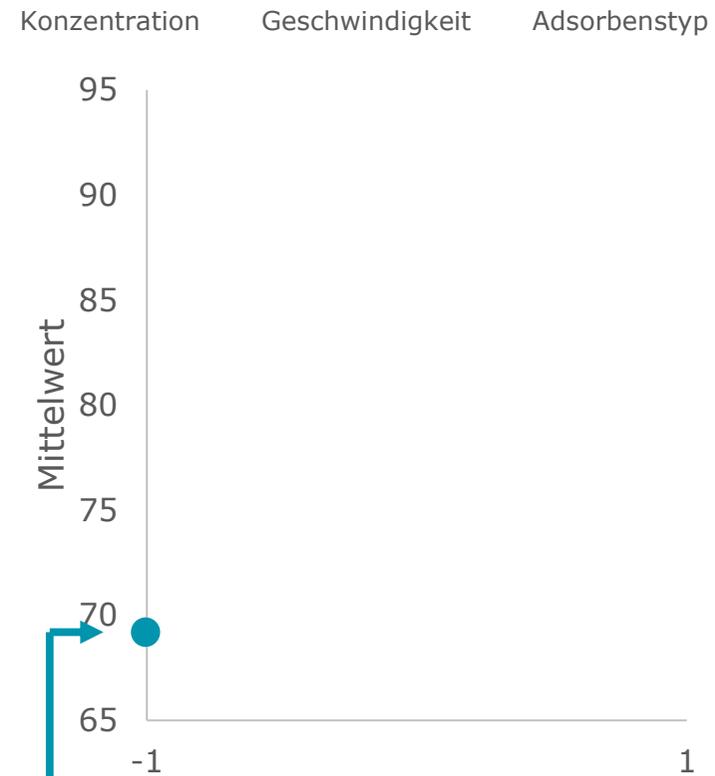
Haupteffekte

Wechselwirkung

→ Stärke der einzelnen Effekte wird sichtbar!

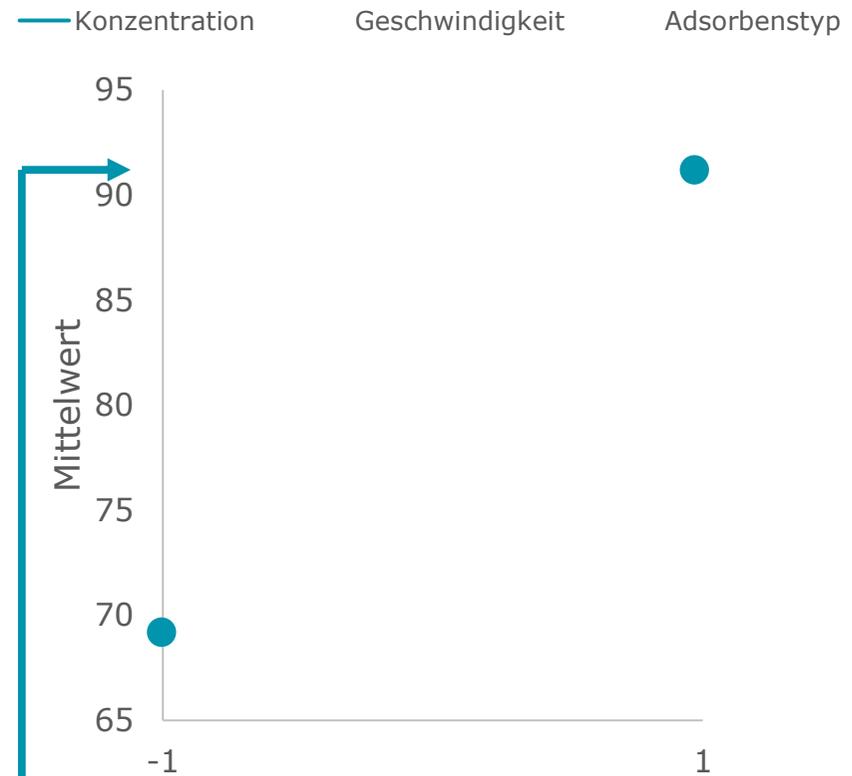
## Haupteffektdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A</i> %
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



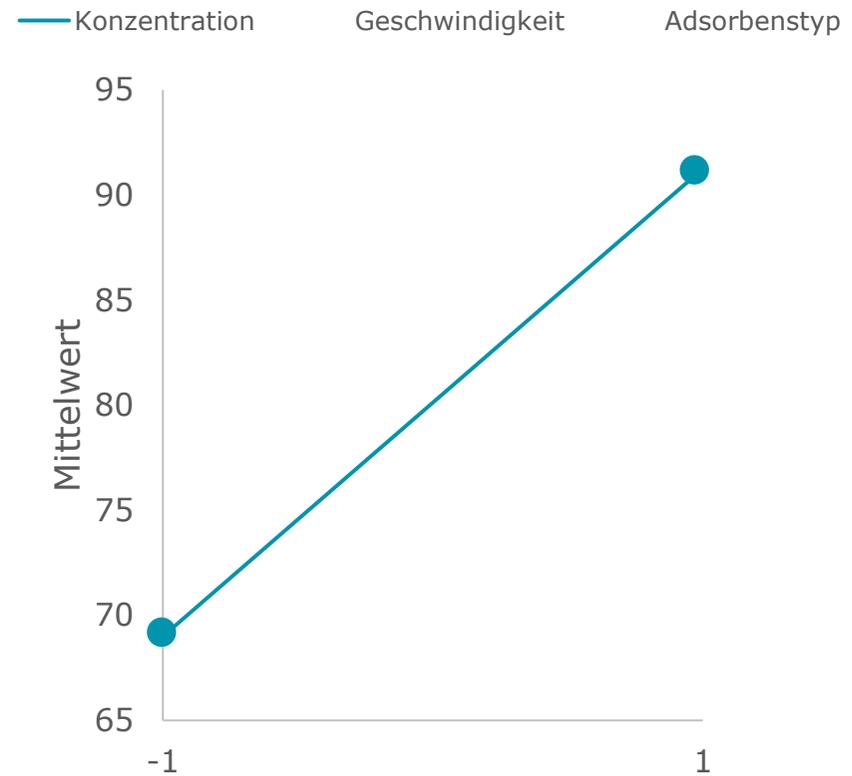
## Haupteffektdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A</i> %
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



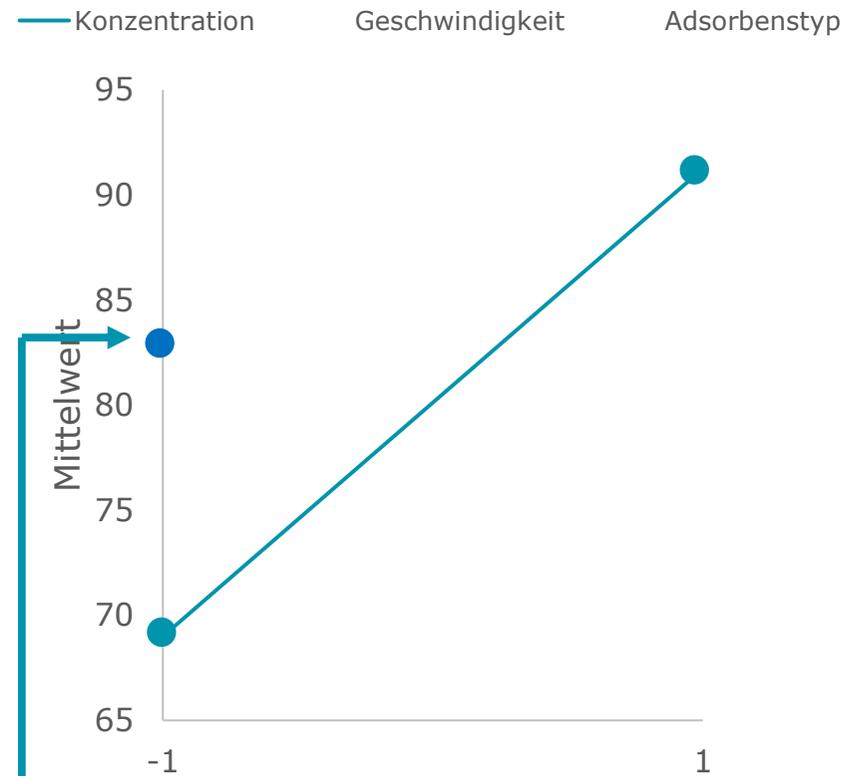
## Haupteffektdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



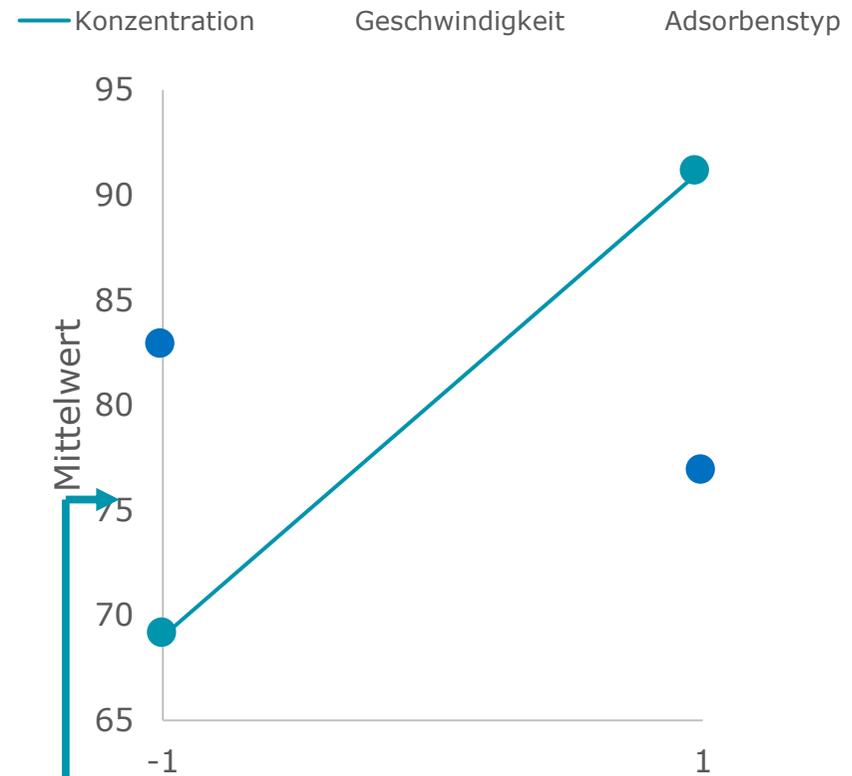
## Haupteffektdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	<b>83</b>	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



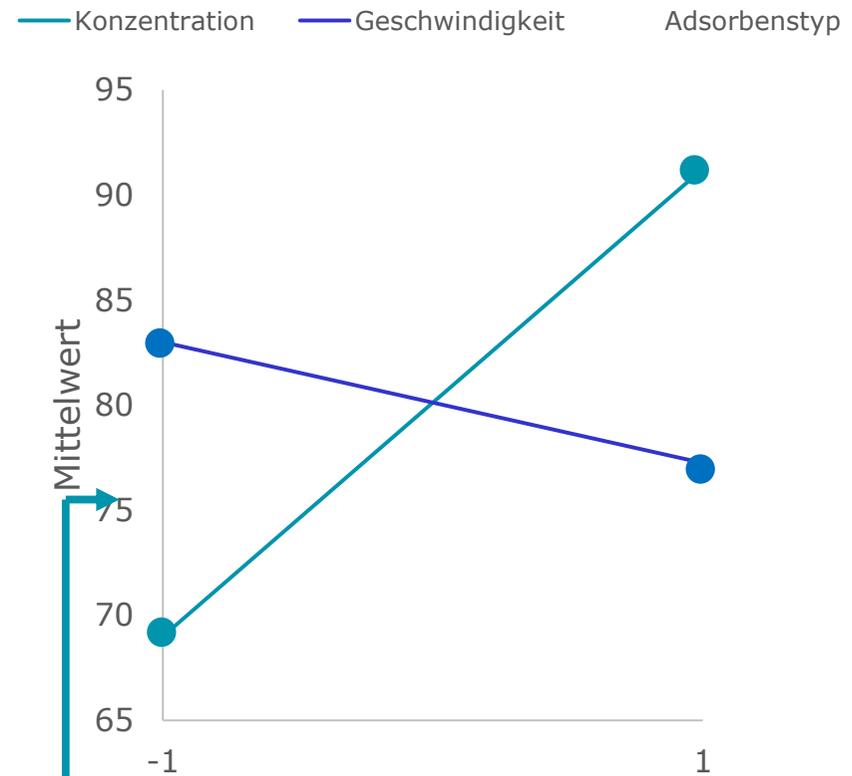
## Haupteffektdiagramm

c	v	t	c · v	c · t	v · t	c · v · t	A %
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



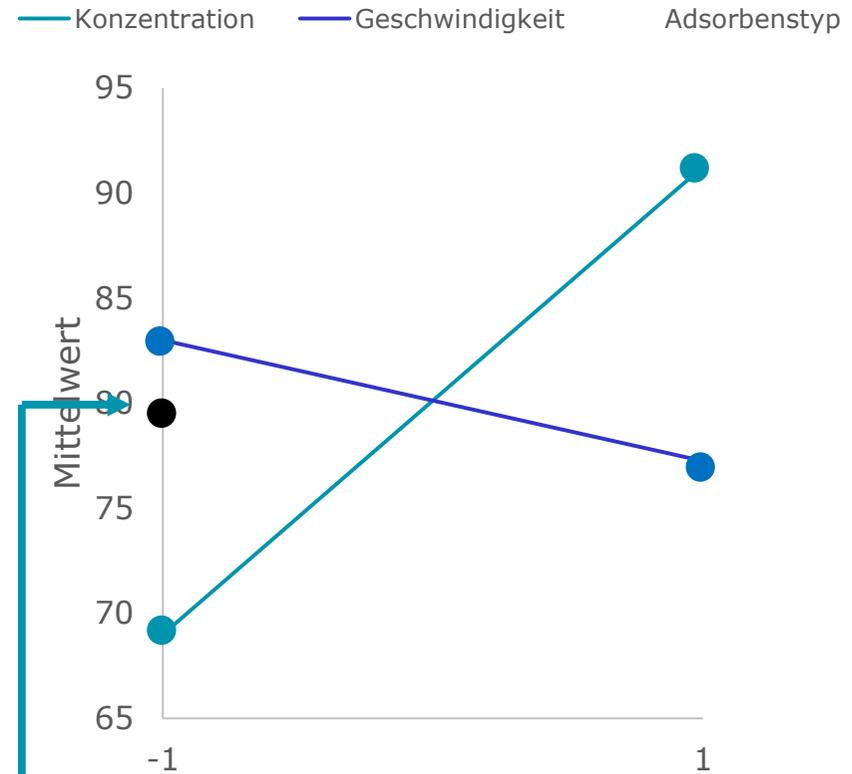
## Haupteffektdiagramm

c	v	t	c · v	c · t	v · t	c · v · t	A %
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



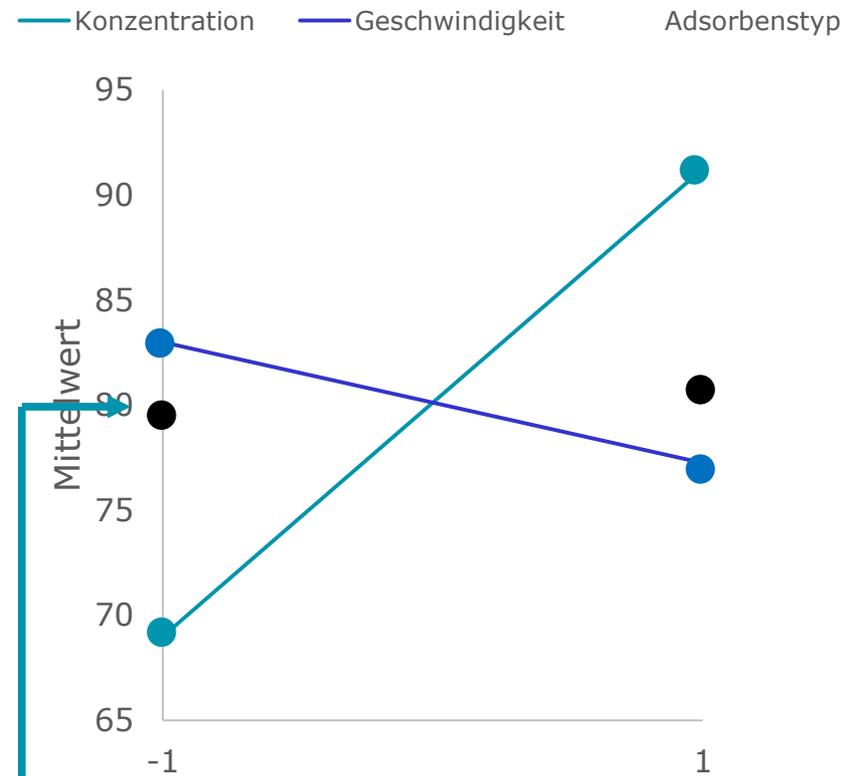
## Haupteffektdiagramm

c	v	t	c · v	c · t	v · t	c · v · t	A %
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



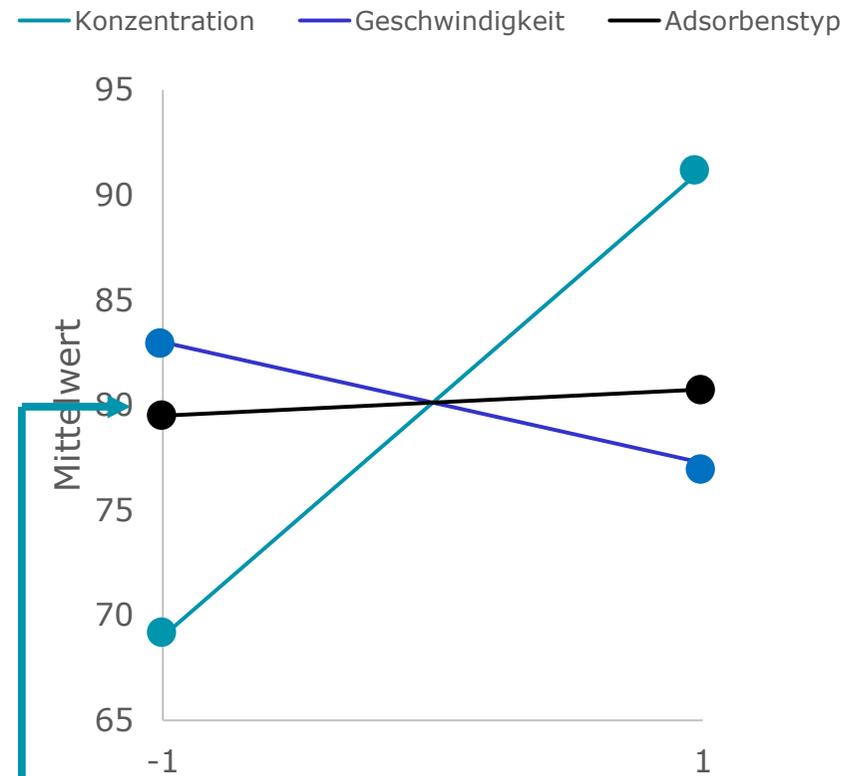
## Haupteffektdiagramm

c	v	t	c · v	c · t	v · t	c · v · t	A %
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



## Haupteffektdiagramm

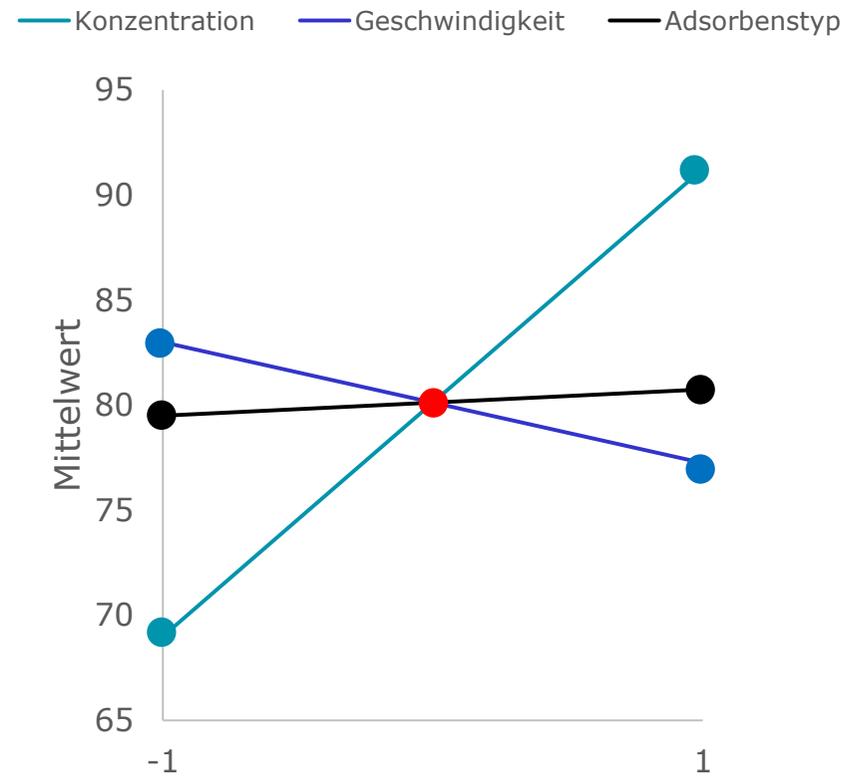
c	v	t	c · v	c · t	v · t	c · v · t	A %
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



## Haupteffektdiagramm

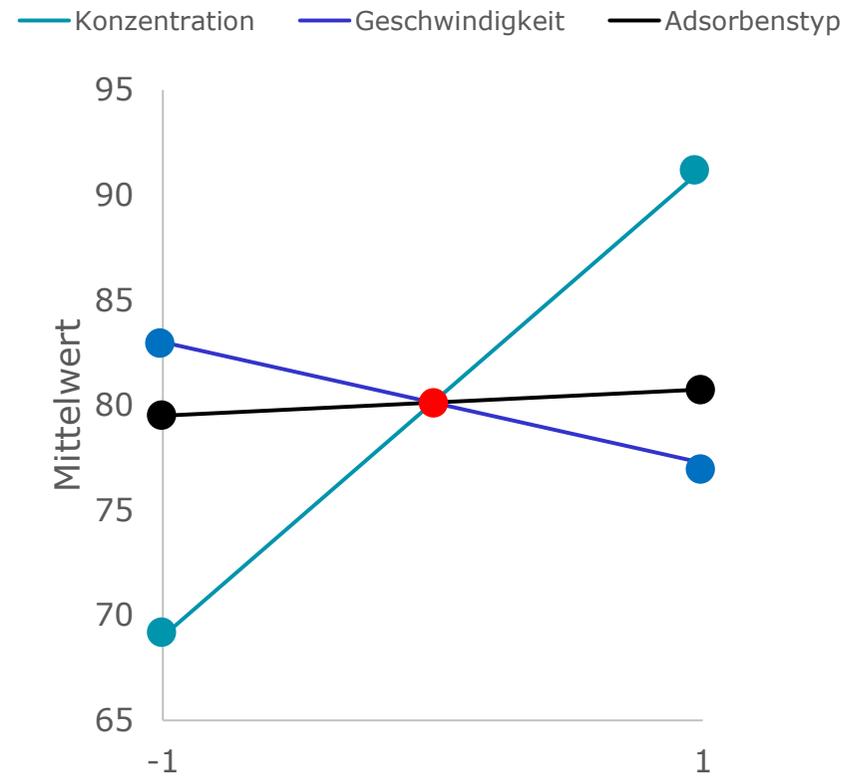
Mittelwert 80.125

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



## Haupteffektdiagramm

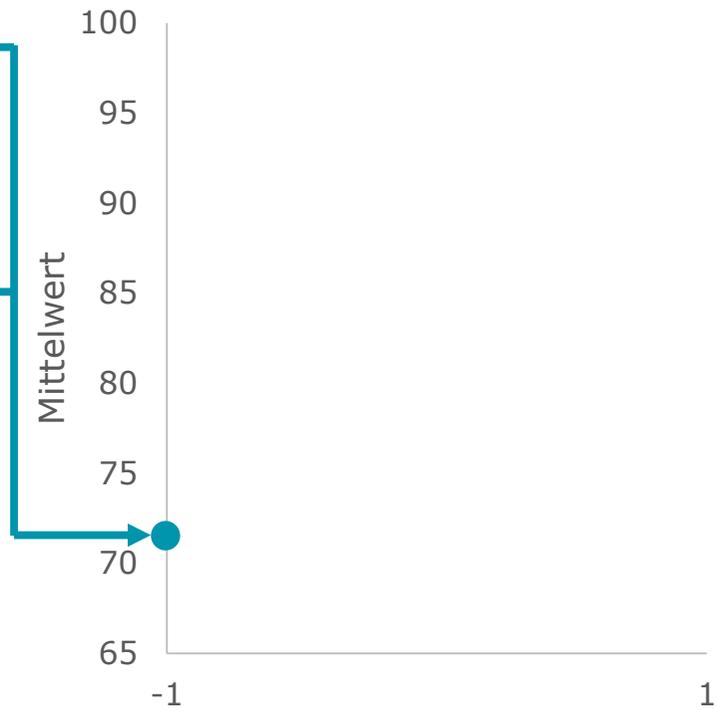
<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



Je grösser die Steigung, umso grösser der Einfluss einer Grösse

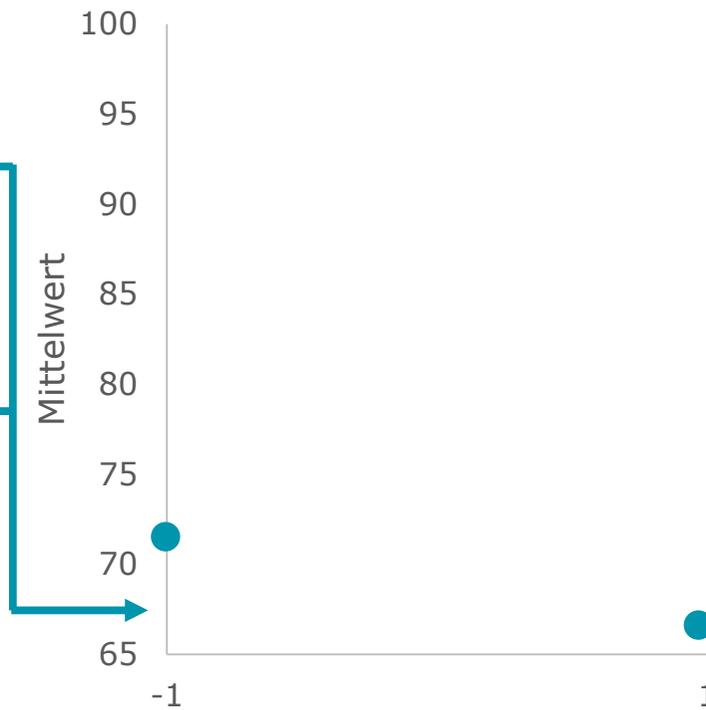
## Wechselwirkungsdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



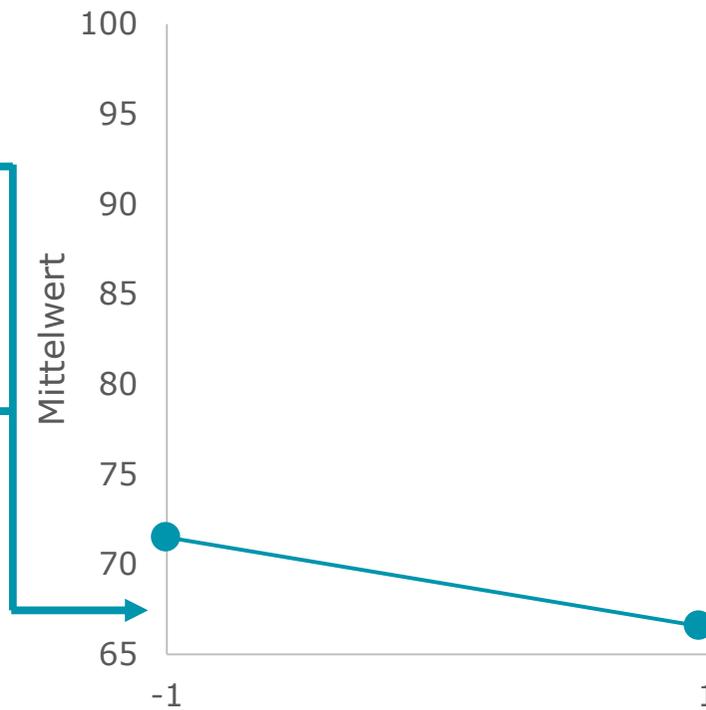
## Wechselwirkungsdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



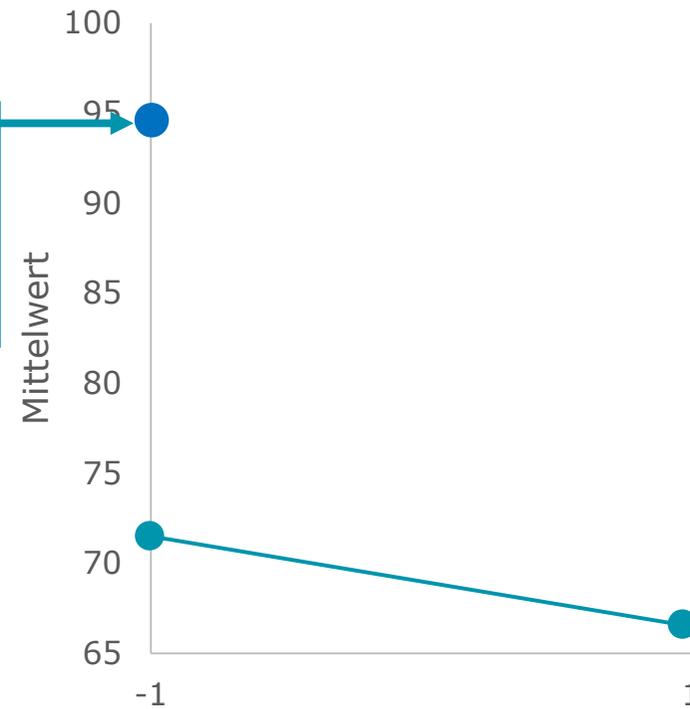
## Wechselwirkungsdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



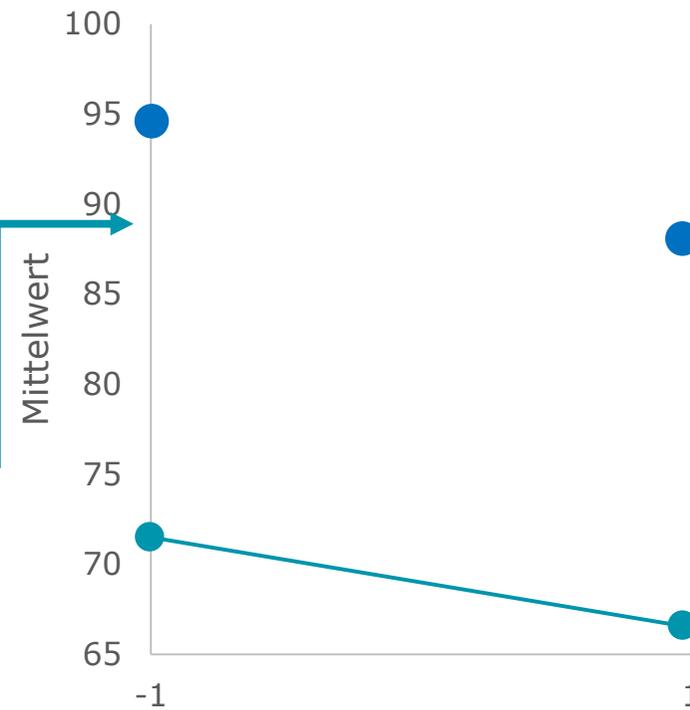
## Wechselwirkungsdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E



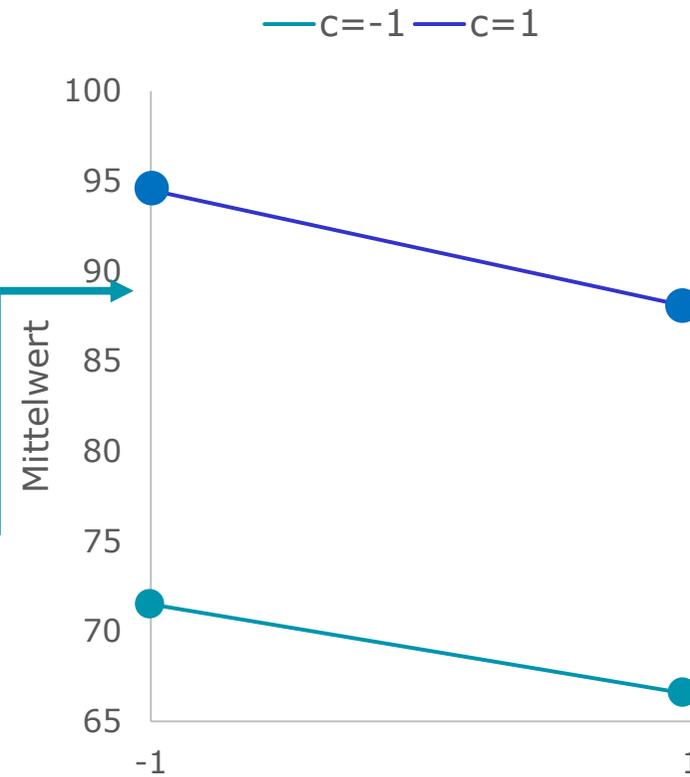
## Wechselwirkungsdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E

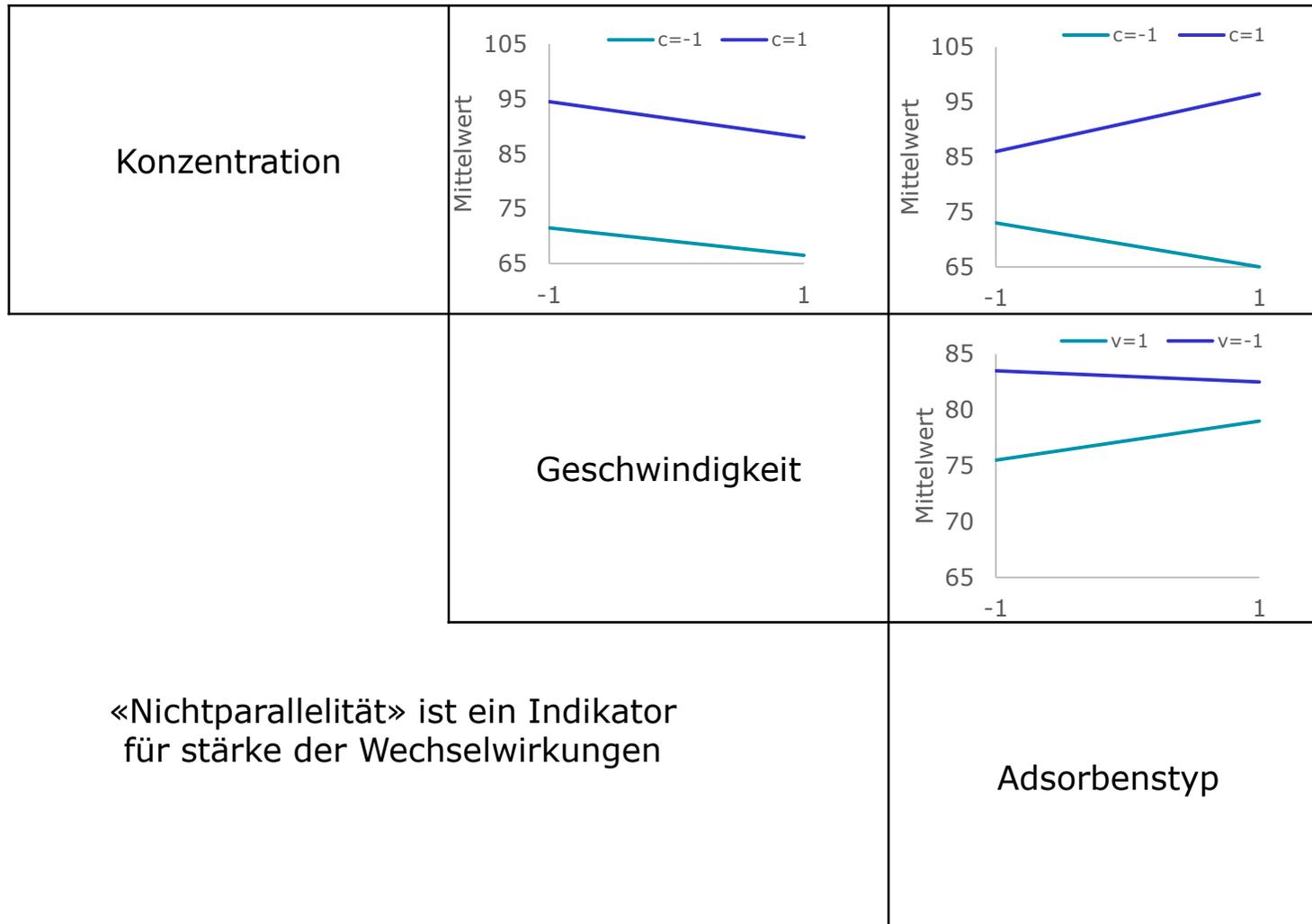


## Wechselwirkungsdiagramm

<i>c</i>	<i>v</i>	<i>t</i>	<i>c · v</i>	<i>c · t</i>	<i>v · t</i>	<i>c · v · t</i>	<i>A %</i>
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
1	1	1	1	1	1	1	95
91.25	77.25	80.75	79.75	84.75	81.25	80.75	+1
69.00	83	79.5	80.50	75.5	79.00	79.5	-1
22.25	-5.75	1.25	-0.75	9.25	2.25	1.25	E

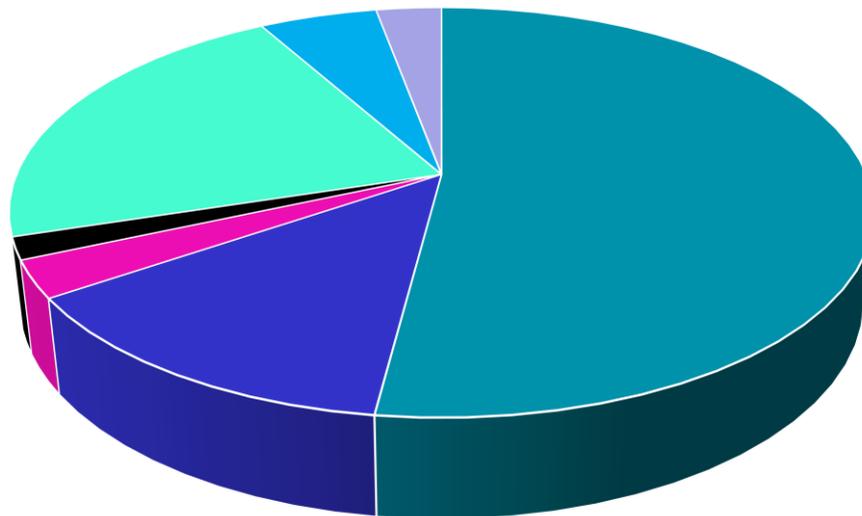


## Wechselwirkungsdiagramme für alle 3 Faktoren



## Anteil der Haupteffekte und Wechselwirkungen

Einflussfaktoren



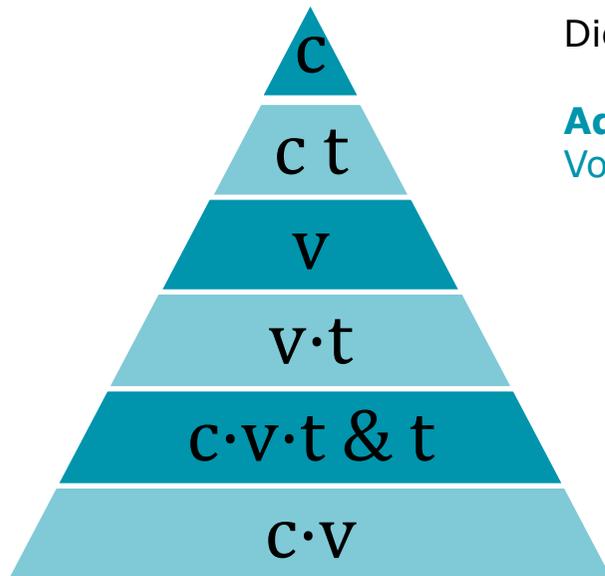
■ c ■ v ■ t ■ cv ■ ct ■ vt ■ cvt

Die Konzentrationseinstellung hat den grössten Einfluss auf die Adsorberkolonne (52%)

Der Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit ist ebenfalls gross (13.5 %)

Die grösste Wechselwirkung besteht zwischen der Konzentration und dem Adsorbententyp (22%)

## Anteil der Haupteffekte und Wechselwirkungen



Die Parameter lassen sich nun nach abnehmendem Effekt ordnen

### Adsorptionskolonne

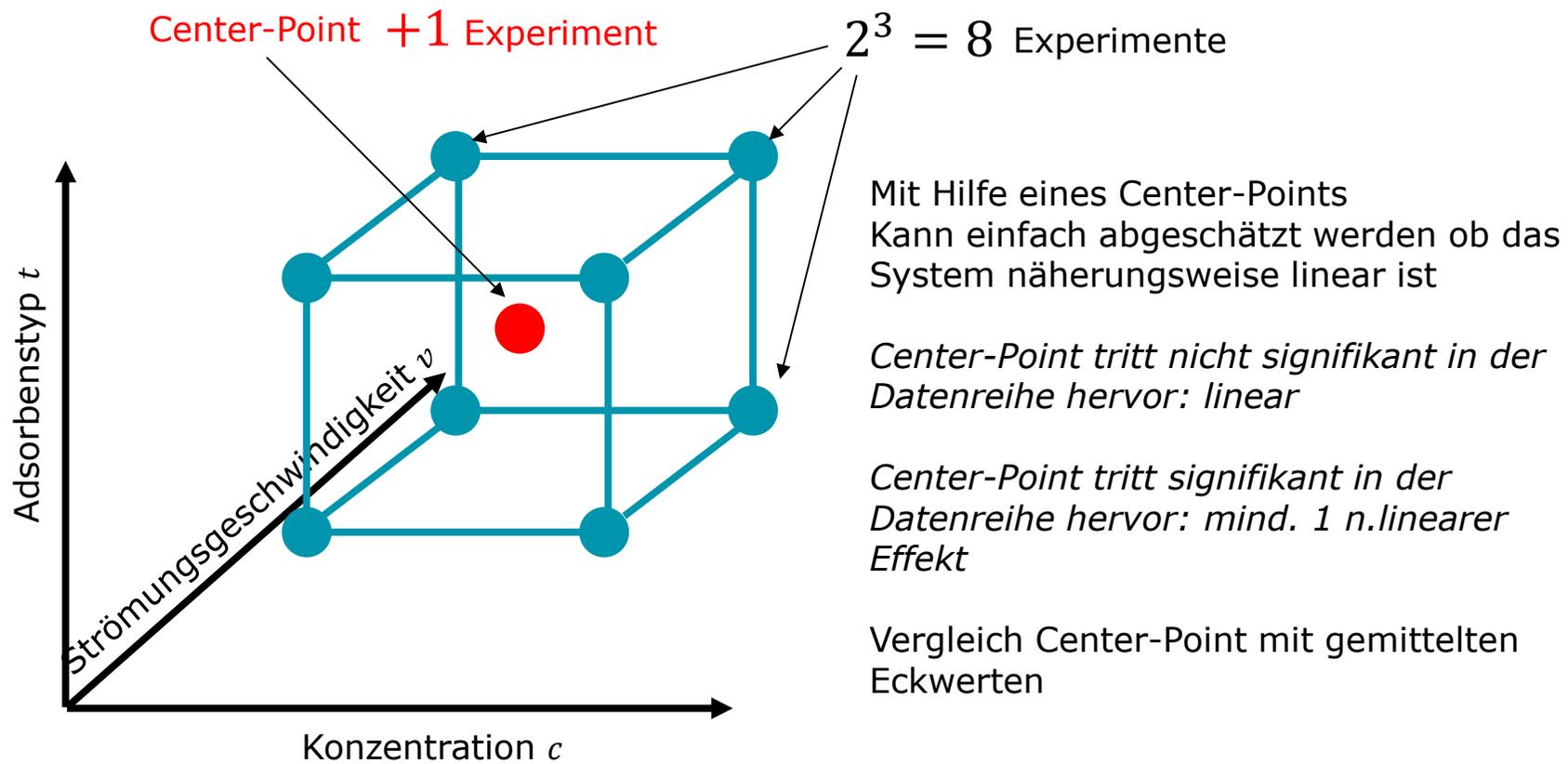
Vorgabe: Die Parameterstudie soll über drei Variationen erfolgen

Es ist die Konzentration  $c$  einzeln zu variieren

Es ist die Strömungsgeschwindigkeit  $v$  einzeln zu variieren

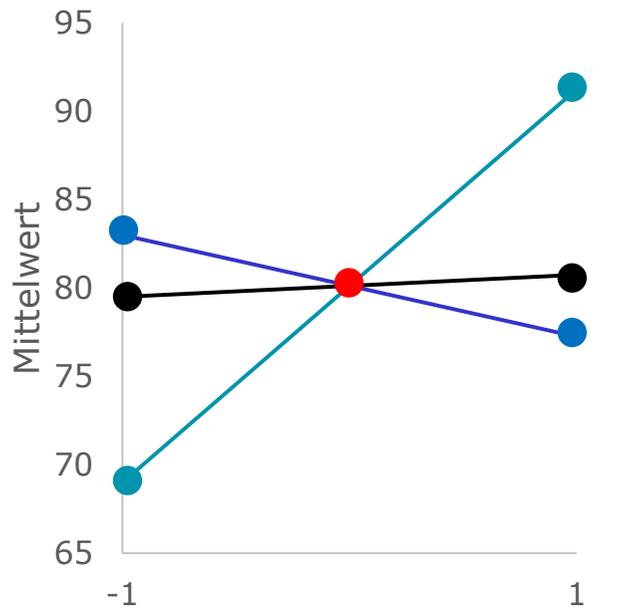
Es sind die Kombinationen zwischen der Konzentration  $c$  und dem Adsorbentstyp  $t$  zu variieren

## Überprüfung auf Nichtlinearität



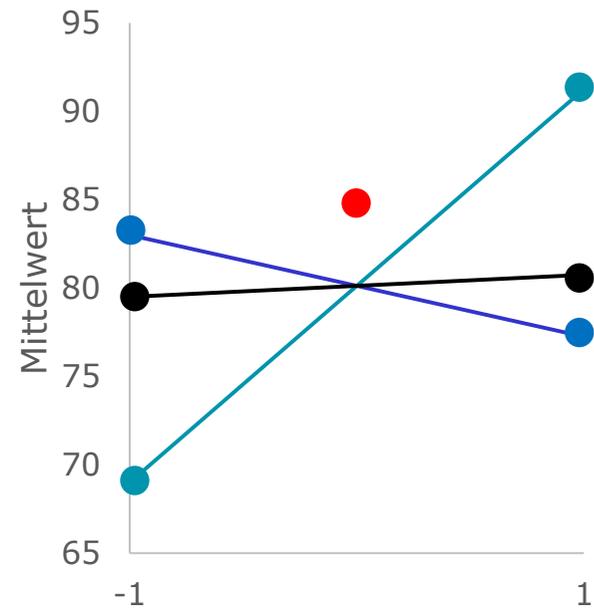
## Überprüfung auf Nichtlinearität

— Konzentration — Geschwindigkeit — Adsorbenstyp



Nicht-signifikanter Mittelwert

— Konzentration — Geschwindigkeit — Adsorbenstyp

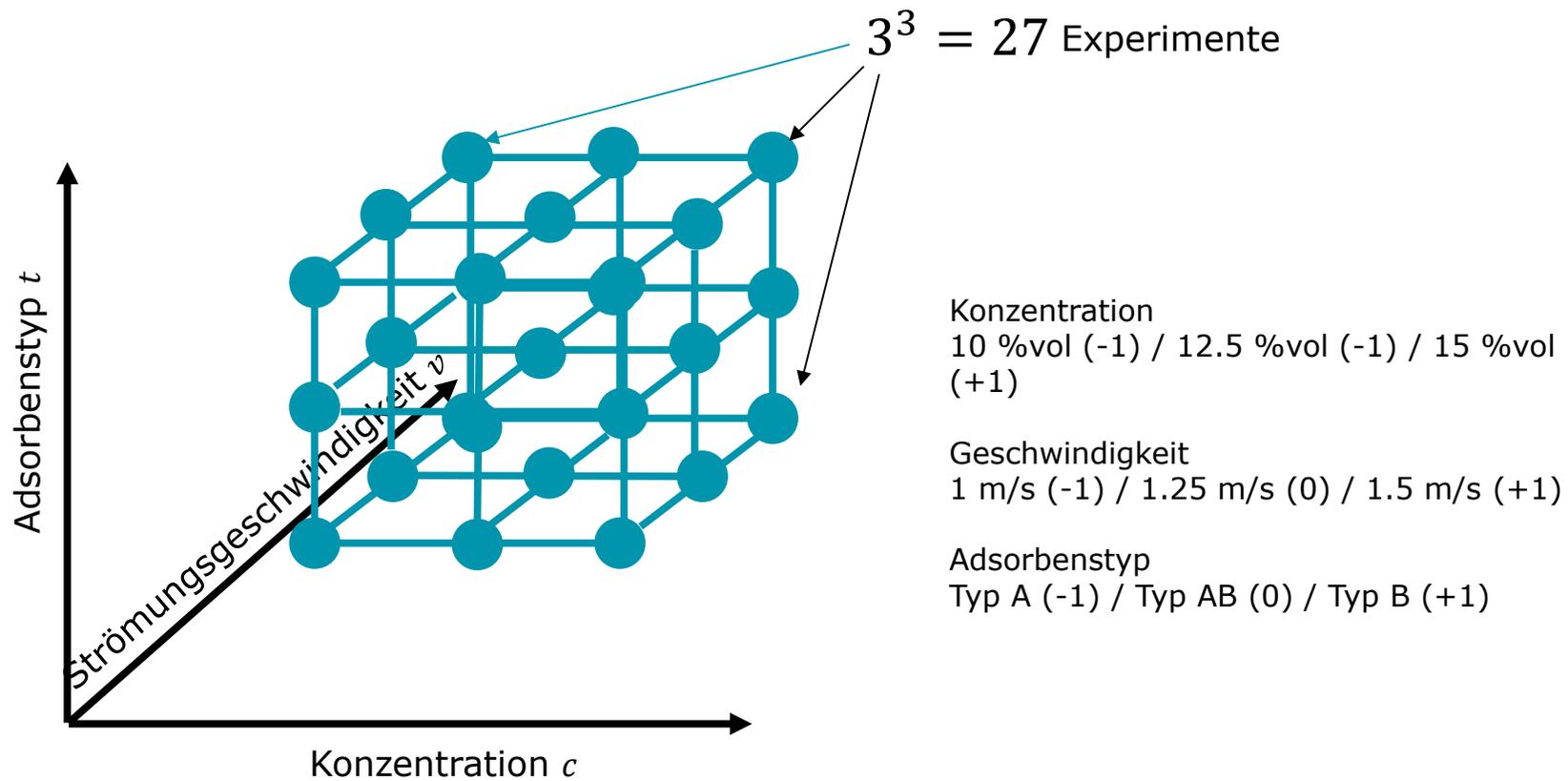


Signifikanter Mittelwert

**Bei Nichtlinearitäten muss die Anzahl der Stufen erhöht werden!**

### 3-stufiger vollfaktorieller Versuch

- Zuordnung dreier Faktorstufen (-1, 0, 1), 3 Faktoren (Variablen)



### 3-stufiger vollfaktorieller Versuch

c	v	t	c · v	c · t	v · t	c · v · t	A %
-1	-1	-1	1	1	1	-1	76
0	-1	-1	0	0	1	0	90
1	-1	-1	-1	-1	1	1	91
-1	0	-1	0	1	0	0	73
0	0	-1	0	0	0	0	79.5
1	0	-1	0	-1	0	0	90
-1	1	-1	-1	1	-1	1	70
0	1	-1	0	0	-1	0	85
1	1	-1	1	-1	-1	-1	81
-1	-1	0	1	0	0	0	70
0	-1	0	0	0	0	0	83
1	-1	0	-1	0	0	0	94.5
-1	0	0	0	0	0	0	75
0	0	0	0	0	0	0	80.125
1	0	0	0	0	0	0	95
-1	1	0	-1	0	0	0	66.5
0	1	0	0	0	0	0	77.25
1	1	0	1	0	0	0	88
-1	-1	1	1	-1	-1	1	67
0	-1	1	0	0	-1	0	82.5
1	-1	1	-1	1	-1	-1	98
-1	0	1	0	-1	0	0	65
0	0	1	0	0	0	0	80.75
1	0	1	0	1	0	0	96.5
-1	1	1	-1	-1	1	-1	63
0	1	1	0	0	1	0	79
1	1	1	1	1	1	1	95

## Anwendung: 2-stufiger vollvektorieller Versuch in Matlab

Abbildung in einem mathematischen Modell (Metamodell)

$$A = const + a_1c + a_2v + a_3t + a_4(c \cdot v) + a_5(c \cdot t) + a_6(v \cdot t) + a_7(c \cdot v \cdot t)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} const \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \\ a_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 76 \\ 91 \\ 70 \\ 81 \\ 67 \\ 98 \\ 63 \\ 95 \end{pmatrix}$$

$$const = 80.125, a_1 = 11.125, a_2 = -2.875, a_3 = 0.625, a_4 = -0.375, a_5 = 4.625, a_6 = 1.125, a_7 = 0.625$$

## Anwendung: 2-stufiger vollvektorieller Versuch in Matlab

Aufstellen der Experimentenmatrix

$$\text{group} = \begin{matrix} \left( \begin{array}{cccccccc} 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right) \end{matrix} \quad y = \begin{pmatrix} 76 \\ 91 \\ 70 \\ 81 \\ 67 \\ 98 \\ 63 \\ 95 \end{pmatrix}$$

const                      Experimente

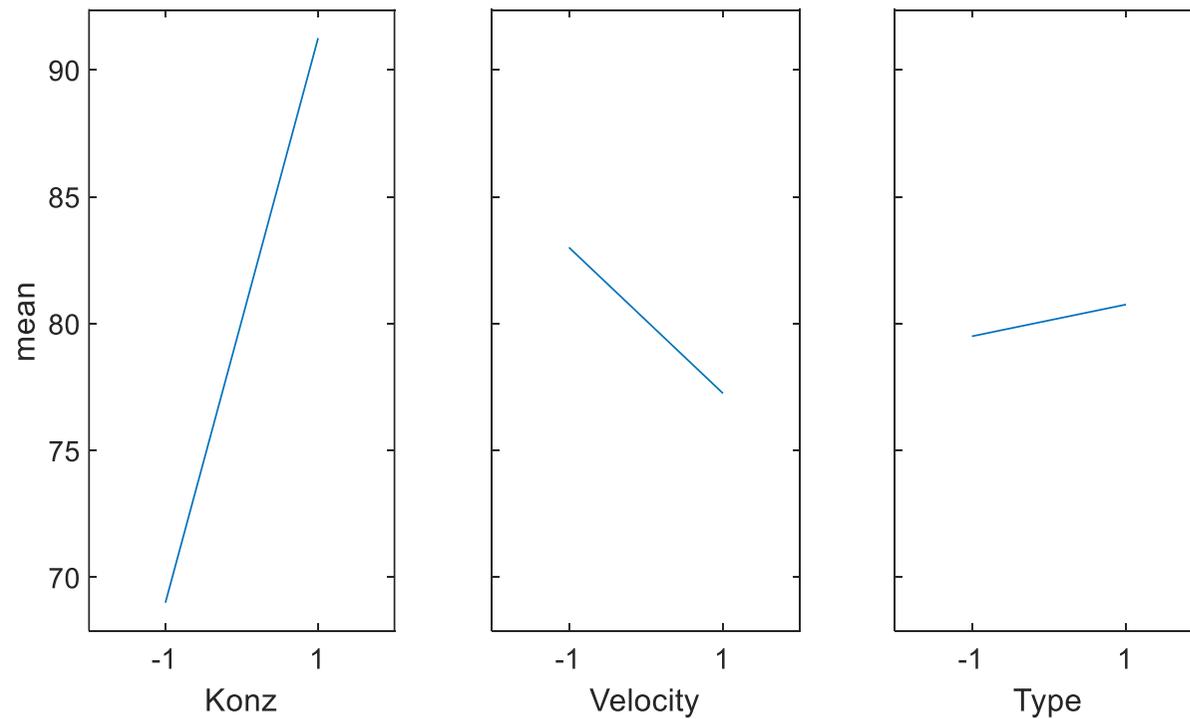
Darstellen der Haupteffektdiagramme

```
maineffectsplot(y,group)
```

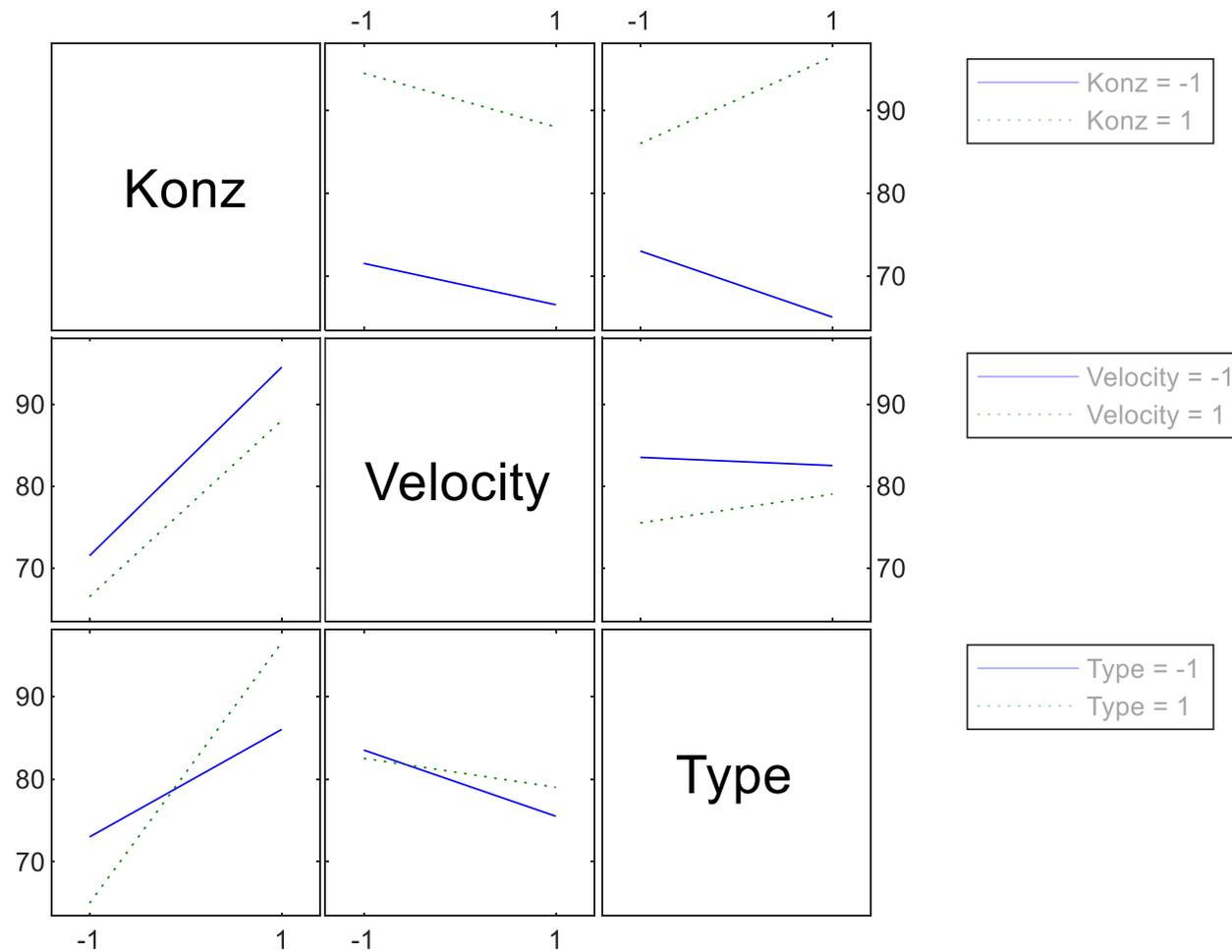
Darstellen der Wechselwirkungsdiagramme

```
interactionplot(y,group,'varnames',{ 'Konz', 'Velocity', 'Temp' })
```

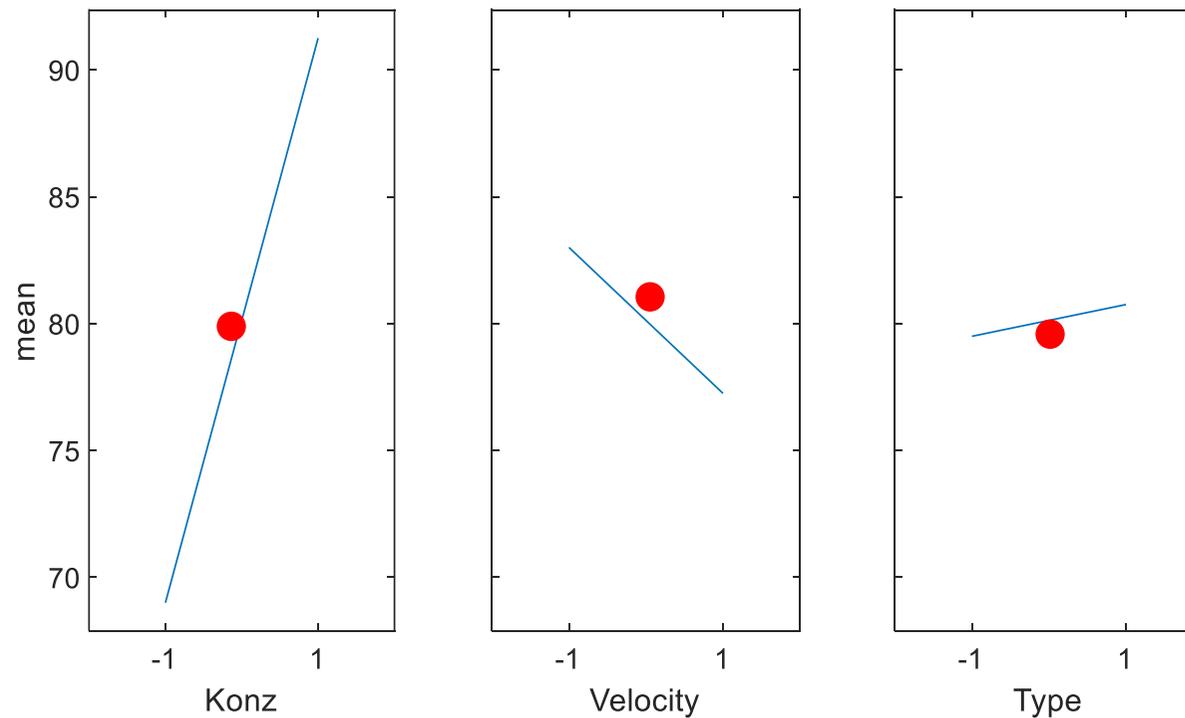
## Anwendung: 2-stufiger vollvektorieller Versuch in Matlab



## Anwendung: 2-stufiger vollvektorieller Versuch in Matlab



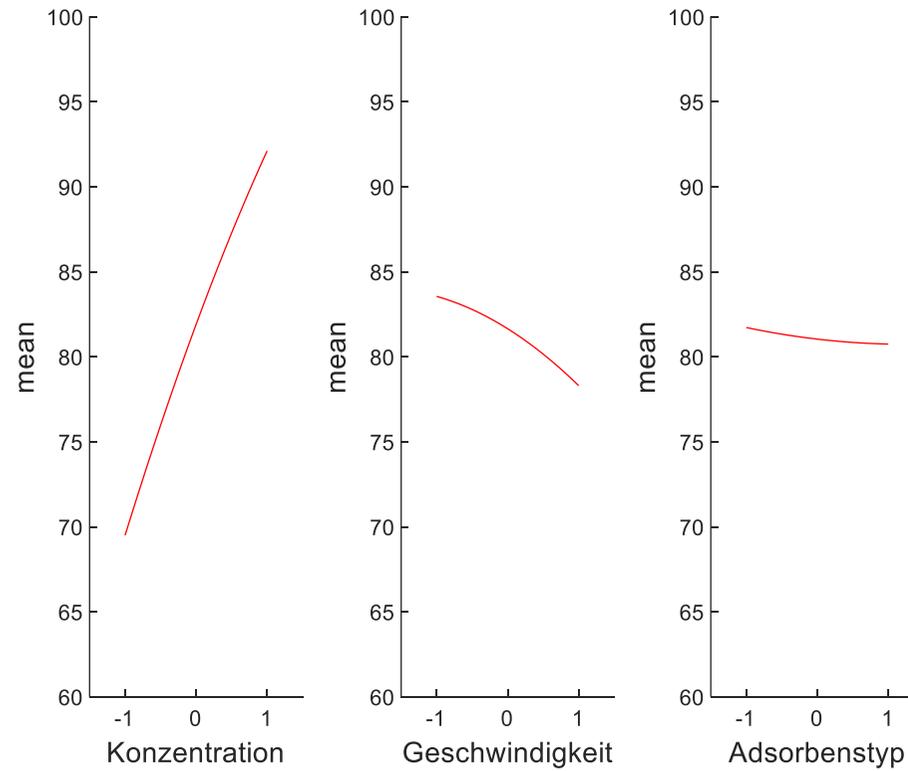
## Anwendung: 2-stufiger vollvektorieller Versuch in Matlab



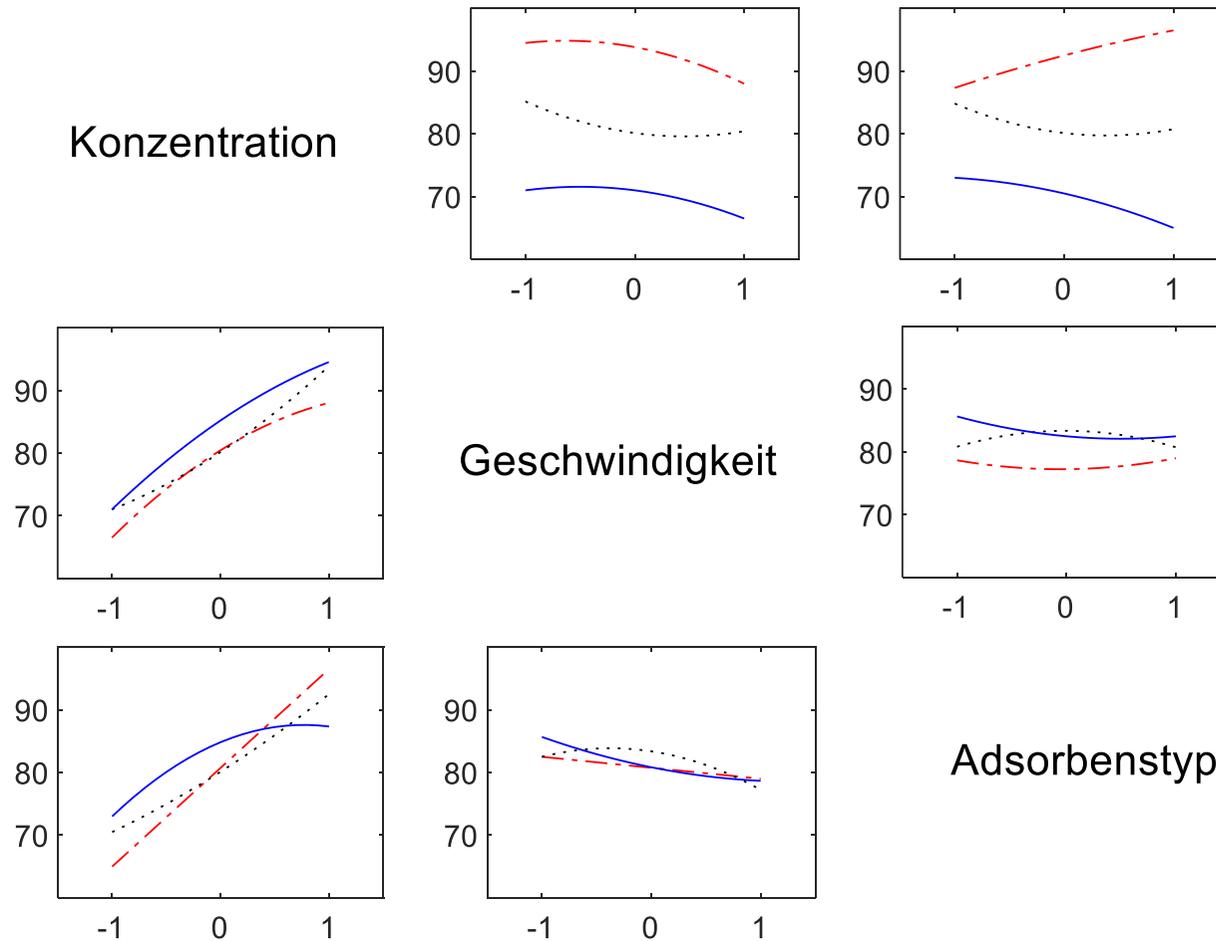
Mittels Center Point wird ersichtlich, dass mindestens 1 nichtlinearer Effekt vorhanden ist

→ Die Anzahl der Stufen muss erhöht werden

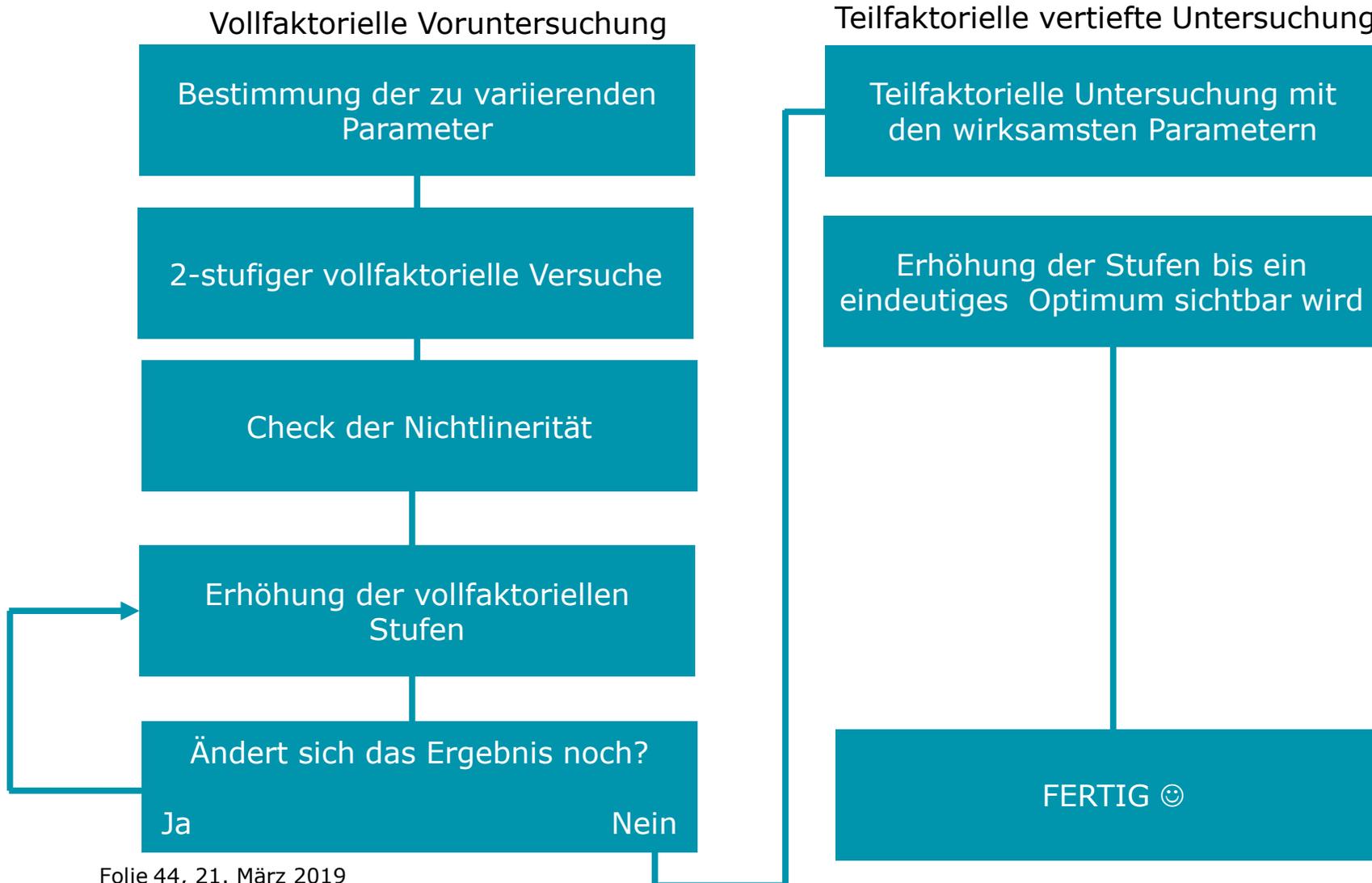
## Anwendung: 3-stufiger vollvektorieller Versuch in Matlab



## Anwendung: 3-stufiger vollvektorieller Versuch in Matlab



## Fazit: Mögliches Vorgehen bei Syskon



## Ergänzung: Variable Zielfunktion

Zielfunktion besteht aus mehreren Summanden

$$f_{Ziel}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_i^k C_i f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Beispiel: Neben dem Abscheidegrad  $A$  fließen noch die Anlagen- und Betriebskosten  $K$  in die Zielfunktion mit ein

$$f_{Ziel}(A, K) = \underbrace{C_A \cdot f_A(A, K)}_{\text{Anteil 1}} + \underbrace{C_K \cdot f_K(A, K)}_{\text{Anteil 2}}$$

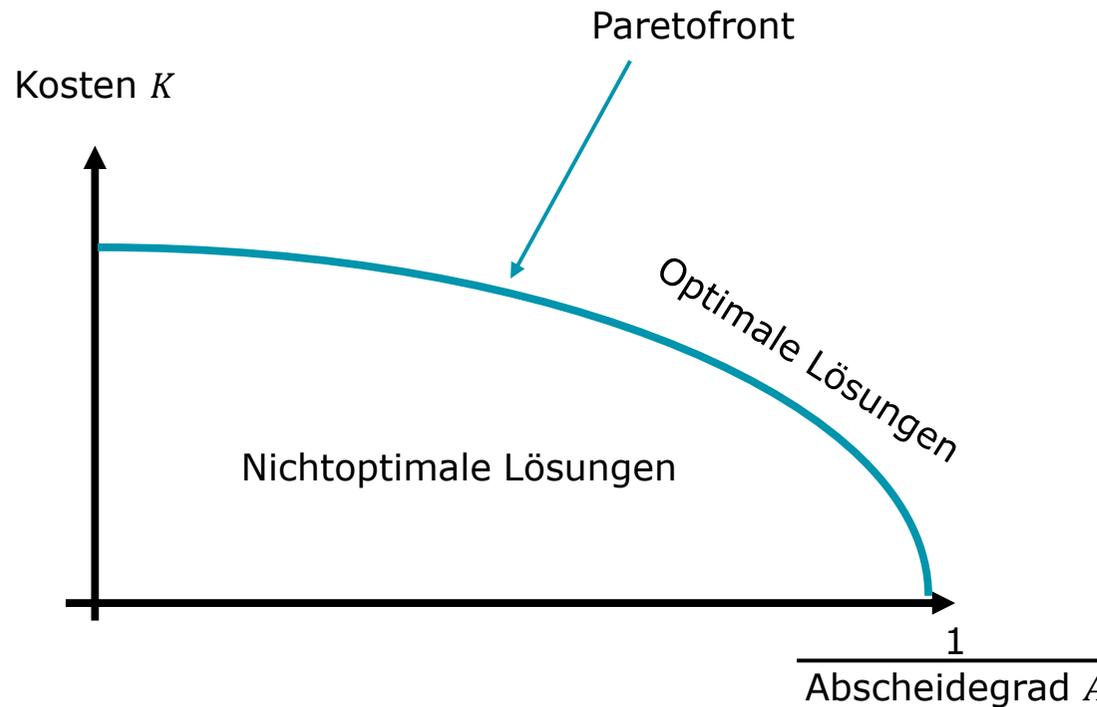
Eine optimale Lösung ist nicht mehr eindeutig bestimmbar

→ Je nach Gewichtung der einzelnen Anteile gibt es ein anderes Optimum

→ Für eine zweiteilige Zielfunktion lässt sich dies mittels Paretofront darstellen

## Ergänzung: Variable Zielfunktion

Paretofront: Ein Anteil der Zielfunktion lässt sich nicht mehr verbessern ohne einen anderen zu verschlechtern



Zusammenhang mit DoE: DoE dient der Findung der optimalen Lösungen auf der Paretofront

## Matlabgesteuerte Optimierung in Dymola

Statistics and Machine Learning Toolbox in Matlab erlaubt automatisierte DoEs

### Matlab (M) & Dymola (D)

M: Benutzereingabe, Liste aller für eine Variation in Frage kommender Parameter mit Minimal und Maximalwert

M: Aufstellen einer 2-stufigen vollfaktoriellen Vorversuchsmatrix

M+D: Für jeden Matrixeintrag: Starten von Dymola («system»-Befehl) mit entsprechendem Parameter

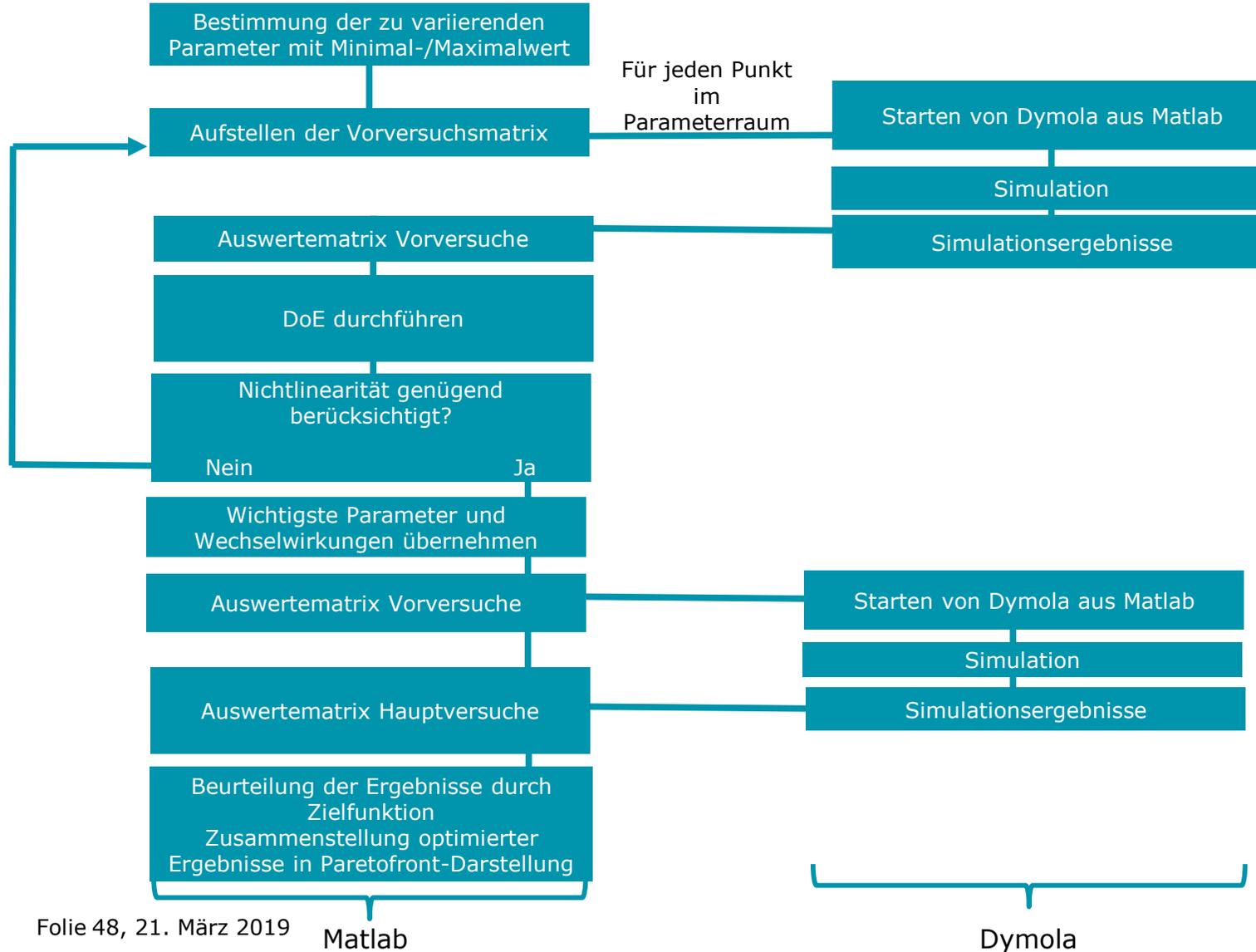
M: Nach jeder Simulation: Resultat in Vorversuchsmatrix eintragen

M: Nachdem die Vorversuchsmatrix komplett gefüllt wurde: DoE der Vorversuche auswerten, gegebenenfalls Anzahl Stufen erhöhen wenn die Auswertung zeigt, dass die Nichtlinearitäten ungenügend berücksichtigt wurden (automatisierte Prozedur möglich)

M: Aufstellen der teilfaktoriellen Hauptversuchsmatrix wo nur noch die wichtigsten Parameter und Wechselwirkungen drin sind

M+D: Für jeden Matrixeintrag: Starten von Dymola («system»-Befehl) mit entsprechendem Parameter

## Matlabgesteuerte Optimierung in Dymola



## Matlabgesteuerte Optimierung in Dymola

### ***Kurzfassung:***

Die Optimierung via DoE wertet nur bereits simulierte Rechnungen aus und entscheidet anhand der Auswertungen, welche weiteren Simulationen noch gemacht werden sollten. Das Vorgehen erfolgt schrittweise: Die Simulationen sind voneinander unabhängig, sodass diese maschinell einzeln hintereinander ausgeführt werden können. Dieser Punkt spricht dafür, das Vorgehen zu automatisieren (eventuell auch nur Schrittweise), damit der User nicht alle Simulationen von Hand starten muss.