FH MÜNSTER
University of Applied Sciences

Fraunhofer
UMSICHT

# Mathematische Optimierung von Superstrukturen zur modellbasierten Technologieauswahl von verfahrenstechnischen Prozessen

MASTERARBEIT

VON

JONAS PFERDEKEMPER

Mai 2020

Fachhochschule Münster
University of Applied Sciences
Fachbereich Chemieingenieurwesen

Fraunhofer-Institut für
Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik
UMSICHT

Die Abschlussarbeit wurde durchgeführt bei

Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik
UMSICHT
Osterfelder Straße 3
46047 Oberhausen

Firmenbetreuer: M.Sc. Matthias Sadlowski
Abteilung: Energiesysteme

Diese Abschlussarbeit wurde dem Prüfungsausschuss des Fachbereiches Chemieingenieurwesen vorlegt am:

_____

Hiermit versichere ich, dass ich diese Arbeit selbstständig angefertigt habe und die benutzten Hilfsmittel/Quellen angegeben worden sind.

_____

( Unterschrift ) Jonas Pferdekemper

# Sperrvermerk

Die vorliegende Masterarbeit mit dem Titel

**Mathematische Optimierung von Superstrukturen zur modellbasierten Technologieauswahl von verfahrenstechnischen Prozessen**

enthält vertrauliche Daten des Unternehmens

**Fraunhofer-Institut UMSICHT**

und ist bis zum **04.05.2025** gesperrt.

Die Arbeit darf nur dem Erst- und Zweitgutachter sowie befugten Mitgliedern des Prüfungsausschusses zugänglich gemacht werden. Eine Veröffentlichung und Vervielfältigung der Masterarbeit ist – auch in Auszügen – nicht gestattet.

Eine Einsichtnahme der Arbeit innerhalb der Sperrfrist durch Unbefugte bedarf einer ausdrücklichen Genehmigung des Verfassers und des oben genannten Unternehmens.

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei Matthias Sadlowski und Prof. Dr.-Ing. Andreas Wäsche für die ausgezeichnete Betreuung bedanken.
Für das Korrekturlesen danke ich Marc Berg, Frau Eggenkämper, Maximilian Korte und Lara Kubitzke.
Der Fraunhofer-Gesellschaft danke ich für das Bereitstellen der benötigten Mittel.

Vielen Dank!

# INHALT

**ABBILDUNGEN** ..... **III**
**TABELLEN** ..... **VI**
**ABKÜRZUNGEN** ..... **VII**
**SYMBOLE** ..... **IX**
**INDIZES** ..... **XI**
**1 EINLEITUNG** ..... **1**
1.1 Herausforderung Klimawandel ..... 1
1.2 Übereinkommen von Paris ..... 2
1.3 Stahlindustrie in der Kreislaufwirtschaft ..... 3
**2 AUSGANGSSITUATION & ZIELSETZUNG** ..... **5**
**3 GRUNDLAGEN** ..... **7**
3.1 Mathematische Optimierung ..... 7
3.1.1 Mathematische Grundlagen von Optimierungs-algorithmen ..... 7
3.1.2 Grafische Lösung anhand eines LP-Problems ..... 11
3.1.3 Bedeutung der gemischt-ganzzahligen linearen Optimierung ..... 12
3.1.4 Lineare gemischt-ganzzahlige Optimierung (MILP) ..... 13
3.1.5 LP-Relaxierung durch Simplex-Verfahren und Innere-Punkte-Methode ..... 14
3.1.6 Branch&Bound-Verfahren ..... 14
3.1.7 Schnittebenenverfahren ..... 16
3.1.8 Branch&Cut-Verfahren ..... 16
3.2 Optimierung von Energiesystemen in der Praxis ..... 17
3.3 Stand der Technik ..... 18
3.4 Stahlerzeugung ..... 20
3.4.1 Hochofen ..... 21
3.4.2 Koksofen ..... 22
3.4.3 Konverter ..... 22
3.4.4 Zusammensetzung der Prozessgase ..... 23
3.4.5 Weitere Technologien ..... 23
**4 METHODEN** ..... **25**
4.1 Modellierungsmethoden ..... 25
4.2 Modellierung der Teilprozesse ..... 26
4.3 Produkte aus binären und einer kontinuierlichen Variablen ..... 28
4.4 Verfahrenstechnische Einheiten ..... 29
4.4.1 Membrantrennverfahren ..... 29
4.4.2 Druckwechseladsorption ..... 30

4.4.3 Aminwäsche ..... 30
4.4.4 Physikalische Absorption ..... 31
4.4.5 Parametrierung der Trenneinheiten ..... 31
4.4.6 Kondensator ..... 32
4.4.7 Methanpyrolyse ..... 33
4.4.8 Wassergas-Shift-Reaktor ..... 34
4.4.9 Methanator ..... 34
4.4.10 Parametrierung der Konversionsprozesse ..... 35
4.5 Gaszeitreihe ..... 35
4.6 Energiebedingte Emissionen ..... 36
4.7 Modellierung Methanpyrolyse und Implementierung des Superstrukturfeatures ..... 39
4.8 Erstellen der Superstrukturmodelle ..... 45
4.9 Zielfunktion ..... 50
**5 ERGEBNISSE ..... 53**
5.1 Validierung ..... 53
5.1.1 Parallel ..... 53
5.1.2 Reihe ..... 54
5.1.3 Testcase ..... 55
5.2 Ergebnisse des Testcases ..... 55
5.3 Betriebsoptimierung des Testcases ..... 59
5.4 Einfluss der $CO_2$-Belastung der elektrischen Energie auf den Betrieb des Testcases ..... 61
5.5 Szenarien $CO_2$-Reduktion ..... 63
5.6 Einfluss der Speichergröße auf die Dynamik des Testcases ..... 64
5.7 Einfluss des Gradienten ..... 66
5.8 Betrieb des Testcases bei konstanter $CO_2$-Belastung der elektrischen Energie ..... 67
5.9 Zeitmessung ..... 69
**6 ZUSAMMENFASSUNG ..... 73**
**7 AUSBLICK ..... 75**
**LITERATUR ..... I**
**ANHANG ..... IV**

# ABBILDUNGEN

Abbildung 1: Korrelation zwischen kumulierten $CO_2$-Emissionen und Oberflächentemperatur seit 1850 und 1900. [1] ..... 1
Abbildung 2: Entwicklung des Reduktionsmittelverbrauchs bei der Stahlerzeugung. [3] ..... 3
Abbildung 3: Lösung einer einfachen LP-Problemstellung. Die optimale Lösung dieses Problems liegt auf der mit dem roten Kreis markierten Ecke des zweidimensionalen Polyeders. [5] ..... 12
Abbildung 4: Geometrische Interpretation des Simplex-Verfahrens (links) und der innere-Punkte-Methode (rechts). Bearbeitete Polyeder aus [7]. ..... 14
Abbildung 5: Schnittebenen werden zwischen konvexer Hülle und LP-Relaxierung gelegt. ..... 16
Abbildung 6: Übersicht verschiedener Stahlherstellungsrouten. Links: Koks-, Hochofen-, Konverterroute. Mitte: Schmelzreduktion. Rechts: Elektro-Lichtbogenofen. [18] ..... 21
Abbildung 7: Schematische Übersicht der Optimierungsmethoden. BO: Betriebsoptimierung. SO: Strukturoptimierung. SSO: Superstrukturoptimierung. ..... 26
Abbildung 8: Schematische Darstellung eines Membrantrennmoduls. [19] ..... 29
Abbildung 9: Temperaturabhängigkeit der Ausbeute eines Pyrolysereaktion bei einem Druck von einem bar. [27] ..... 33
Abbildung 10: Zeitlicher Verlauf eines Hochofen- und Koksofengasstroms. ..... 35
Abbildung 11: Zeitlicher Verlauf ausgewählter Energieträger und der $CO_2$-Emissionen je kWh für den Zeitraum Juni 2018. Eigene Abbildung aus Daten aus Agorameter. [30] ..... 37
Abbildung 12: Anteile verschiedener Energieträger an der gesamten deutschen Stromproduktion (2018). Eigene Abbildung aus Daten aus Agorameter. Legende gegen Uhrzeigersinn. [27] ..... 37
Abbildung 13: Scope 1, 2 und 3 -Emissionen gemäß Greenhouse Gas (GHG) Protocol. ..... 38
Abbildung 14: Schematische Darstellung des modellierten Pyrolyseprozesses. ..... 39
Abbildung 15: Schematische Darstellung des parallel geschalteten Optimierungsmodells. ..... 46
Abbildung 16: Schematische Darstellung des in Reihe geschalteten Optimierungsmodells. ..... 47
Abbildung 17: Schematische Darstellung des Testcases. ..... 48

Abbildung 18: Validierung des Superstrukturmodells für das Optimierungsmodell "parallel". Die Druckwechseladsorptionseinheit (PSA) wird ausgewählt. Massenstrom (MF) über Zeit. ..... 54
Abbildung 19: Validierung des Superstrukturmodells für das Optimierungsmodell "Reihe". Die Druckwechseladsorptionseinheiten (PSA 1 und 2) werden ausgewählt. ..... 54
Abbildung 20: Massenstrom Hochofengas (1), Massenstrom Fackel für Hochofengas (2), Speicherfüllstand Hochofengas (3), Massenstrom Bypass Speicher Hochofengas (4), Massenstrom Wassergas-Shift (5), Massenstrom Kondensator (6), Massenstrom Bypass WGS-Route (7), Massenstrom Druckwechseladsorption (8), Massenstrom physikalische Absorption (9), Massenstrom Aminwäsche (10), Massenstrom Membrantrennverfahren (11), Speicherfüllstand $CO_2$-Speicher (12). Größere Abbildung siehe Anhang C. ..... 56
Abbildung 21: Massenstrom Koksofengas (13), Massenstrom Fackel für Koksofengas (14), Speicherfüllstand Koksofengas (15), Massenstrom Bypass Speicher Koksofengas (16), Massenstrom Methanator (17), Massenstrom Kondensator (18), Massenstrom Pyrolyse (19), Speicherfüllstand Kohle (20), Massenstrom Druckwechseladsorption 2 (21), Massenstrom Membrantrennverfahren 2 (22), Speicherfüllstand Stickstoff (23), Speicherfüllstand Wasserstoff (24). Vergrößerte Abbildung in Anhang D. ..... 57
Abbildung 22: Diagramm 1 bis 12 - Ergebnisse der Betriebsoptimierung mit veränderten Parametern (Testcase). Vergrößerte Abbildung in Anhang E. ..... 60
Abbildung 23: Diagramm 13 bis 24 - Ergebnisse der Betriebsoptimierung mit veränderten Parametern (Testcase). Vergrößerte Abbildung in Anhang F..... 60
Abbildung 24: Massenstrom der Aminwäscheeinheit unter Einfluss der $CO_2$-Emissionen der elektrischen Energie..... 62
Abbildung 25: Massenstrom der Aminwäscheeinheit unter Einfluss der $CO_2$-Emissionen der elektrischen Energie (Tage 2 bis 6). ..... 62
Abbildung 26: Massenstrom der Membrantrenneinheit 2 und des Methanators unter Einfluss der $CO_2$-Emissionen der elektrischen Energie. ..... 63
Abbildung 27: Ergebnisse des Testcases mit größeren Speichern (1). Vergrößerte Abbildung in Anhang G. ..... 64

Abbildung 28: Ergebnisse des Testcases mit größeren Speichern (2). Vergrößerte Abbildung in Anhang H. ..... 65
Abbildung 29: Betrieb der Aminwäscheeinheit unter Einfluss der $CO_2$-Emissionen je kWh bei vergrößerten Speichergrößen. ..... 65
Abbildung 30: Vergleich der Massenströme der zweiten Membrantrenneinheit mit einem kleinen und großen Gradienten. ..... 66
Abbildung 31: Ergebnisse des Testcase unter konstanter $CO_2$-Belastung (1). Vergrößerte Abbildung in Anhang I. ..... 67
Abbildung 32: Ergebnisse des Testcase unter konstanter $CO_2$-Belastung (2). Vergrößerte Abbildung in Anhang J. ..... 68
Abbildung 33: Ergebnisse des Testcase unter konstanter $CO_2$-Belastung. Nähere Betrachtung der Dynamik des Koksofengases und des anschließenden Methanators. ..... 68
Abbildung 34: Abhängigkeit Rechenzeit vom betrachteten Berechnungszeitraum. ..... 69
Abbildung 35: Abhängigkeit der Rechenzeit von der Komplexität. ..... 70
Abbildung 36: Rechenzeit über Gap. ..... 71
Abbildung 37: Benötigte Laufzeit der Betriebs-, Struktur- und Superstrukturoptimierung. Weitere Parameter: 28 Tage Betrachtungszeitraum, Gap 2%, Testcase. ..... 72
Abbildung 38: Das Problem wird in zwei Unterproblem zerlegt [5]. ..... vi
Abbildung 39: Vergrößerte Abbildung 20 ..... viii
Abbildung 40: Vergrößerte Abbildung 21 ..... ix
Abbildung 41: Vergrößerte Abbildung 22 ..... x
Abbildung 42: Vergrößerte Abbildung 22 ..... x
Abbildung 43: Vergrößerte Abbildung 23 ..... xi
Abbildung 44: Vergrößerte Abbildung 27. ..... xii
Abbildung 45: Vergrößerte Abbildung 28. ..... xiii
Abbildung 46: Vergrößerte Abbildung 31 ..... xiv
Abbildung 47: Vergrößerte Abbildung 32 ..... xv

# TABELLEN

Tabelle 1: Menge an benötigtem Kohlendioxid und Wasserstoff pro kg Produkt. [3] .... 4
Tabelle 2: Zusammensetzung Prozessgase Stahlherstellung. [3] ..... 23
Tabelle 3: Parameter der Trenneinheiten. [23] ..... 32
Tabelle 4: Reaktionsenthalpien der Konversionsprozesse. ..... 35
Tabelle 5: Stöchiometrische Koeffizienten des Pyrolyseprozesses. ..... 39
Tabelle 6: Kontinuierliche Variablen des Pyrolyseprozesses. ..... 41
Tabelle 7: Binärvariablen für die Modellierung der Aminwäscheeinheit. ..... 44
Tabelle 8: Übersicht ausgewählter eingehender und ausgehender Teilströme. ..... 58
Tabelle 9: Parameter der betrachteten Trenneinheiten. ..... 58
Tabelle 10: Übersicht ausgewählter eingehender und ausgehender Teilströme und Abweichungen gegenüber Ergebnisse mit Einheiten, die durch die Superstruktur ausgewählt werden (vgl. Tabelle 8). ..... 59
Tabelle 11: Übersicht ausgewählter eingehender und ausgehender Teilströme der Betriebsoptimierung (Testcase). ..... 61
Tabelle 12: Auswirkungen der $CO_2$-Reduktionen auf die Optimierungsergebnisse. ..... 63
Tabelle 13: Auswirkungen des Gradienten auf die Scope-2-$CO_2$-Emissionen. ..... 67

# ABKÜRZUNGEN

| Abkürzung | Bedeutung |
|---|---|
| AGT | Aminwäsche |
| B&B | Branch&Bound |
| B&C | Branch&Cut |
| BFG | Hochofengas |
| BO | Betriebsoptimierung |
| BYP | Bypass |
| CF | Carbon Footprint |
| COG | Koksofengas |
| COND | Kondensator |
| E | Entscheidungspunkt |
| F | Umrechnungsfaktor |
| FCKW | Fluorchlorkohlenwasserstoffe |
| FL | Fackel |
| GF | Gradientenfaktor |
| GHG | Greenhouse Gas (deutsch: Treibhausgas) |
| HV | Hilfsvariable |
| LP | Lineare Optimierung |
| M | Molare Masse |
| max | Maximal |
| MEMB | Membrantrennverfahren |
| METH | Methanator |
| MF | Massenstrom |
| MILP | Gemischt-ganzzahlige lineare Optimierung |
| min | Minimal |
| NB | Nebenbedingung |
| NLP | Nichtlineare Optimierung |
| OUT | Ausgang |

| | |
|---|---|
| PHYS | Physikalische Absorption |
| PSA | Druckwechseladsorption |
| PYRO | Pyrolyse |
| SO | Strukturoptimierung |
| SOS | Strukturierte Variablenmengen |
| SSO | Superstrukturoptimierung |
| ST | Speicher |
| TF | Teillastfaktor |
| u.d.N. | Unter den Nebenbedingungen |
| WGS | Wassergas-Shift |

# SYMBOLE

| Symbol | Bedeutung | Einheit |
|---|---|---|
| $\mathbb{N}_0$ | Menge der natürlichen Zahlen inklusive Null | |
| $\mathbb{R}_0^+$ | Menge der nichtnegativen reellen Zahlen | |
| $LP_0$ | Lösung der LP-Relaxierung | |
| $\dot{Q}$ | Wärmestrom | $J \times h^{-1}$ |
| $\dot{m}$ | Massenstrom | $t \times h^{-1}$ |
| $y_j^*$ | Nicht ganzzahliger Wert | |
| $\oplus$ | Schrankenkennzeichnung | |
| $\Delta H_R^0$ | Reaktionsenthalpie | $kJ \times mol^{-1}$ |
| $\propto$ | Minimalverbesserung | |
| $\triangle$ | Differenz | |
| A | Matrix | |
| b | Vektor | |
| c | Vektor | |
| $c^T$ | Vektor c transponiert | |
| dt | Zeitintervall | h |
| F | Faktor | |
| J | Joule | |
| k | Kilo | |
| kg | Kilogramm | |
| kWh | Kilowattstunde | |
| m | Meter | |
| mol | Mol | |
| $\mathbb{R}$ | Menge der reellen Zahlen | |
| S | Bereich der Optimierungsaufgabe | |
| t | Formelzeichen für Zeit | |
| t | Tonne | |
| W | Element einer Menge aus diskreten Variablen | |

| | | |
|---|---|---|
| x | Variable | |
| $X^-$ | Untere Designgrenze | |
| $X^+$ | Obere Designgrenze | |
| y | Variable | |
| z | Zielfunktion | |
| E | Effizienzfaktor | |
| $\alpha$ | Ganzzahlige Variable | |
| $\beta$ | Ganzzahlige Variable | |
| $\delta$ | Binärvariable | |
| $\varepsilon$ | Toleranzschwelle | |
| $\kappa$ | Variable | |
| $\nu$ | Stöchiometrischer Faktor | |
| $\sigma$ | (Diskrete) Variable | |

## INDIZES

| Index | Bedeutung |
|---|---|
| aus | Ausgehender (Massen-)strom |
| ein | Eingehender (Massen-)strom |
| ges | Alle berücksichtigten Zeitschritte |
| i | Indexlaufnummer |
| IP | Untere Schranke |
| j | Indexlaufnummer |
| LP | Obere Schranke |
| m | Indexlaufnummer |
| n | Indexlaufnummer |
| n | Indexlaufnummer |
| onoff | Kennzeichnung Binärvariable für Ein- und Ausschalten |
| OUT | Ausgang |
| s | Indexlaufnummer Ort |
| Sc2 | $CO_2$-Emissionen durch Scope 2 |
| super | Kennzeichnung Binärvariable für Technologieauswahl |
| t | Indexlaufnummer Zeit |
| T | Laufnummer Gesamtzahl Zeitschritte |

# 1 EINLEITUNG

## 1.1 Herausforderung Klimawandel

Der gegenwärtige menschengemachte Klimawandel gilt als eine der größten Herausforderungen der Menschengemeinschaft. Verursacht durch ein Ungleichgewicht in der Strahlenbilanz, das durch eine erhöhte Konzentration an Treibhausgasen (wie Kohlendioxid, Methan, FCKW) in der Atmosphäre verursacht wird, kommt es zu einer Erhöhung der globalen Durchschnittstemperatur. Wie in Abbildung 1 zu sehen, korreliert der Anstieg der globalen durchschnittlichen Oberflächentemperatur mit der insgesamt ausgestoßenen Menge an Treibhausgasen ($CO_2$ und andere) seit dem Zeitraum 1850 – 1900. Der Anstieg der $CO_2$-Emissionen hängt unmittelbar mit dem Verbrennen fossiler Energieträger wie Kohle, Öl und Gas ab, dessen Nutzung sich mit dem Beginn der industriellen Revolution immer weiter beschleunigte. Die rote Linie in Abbildung 1 zeigt die Trendlinie des Anstiegs der globalen durchschnittlichen Oberflächentemperatur. Der hellrote bzw. violette Hintergrund zeigt mögliche Abweichungen auf. Unter dem pessimistischsten Szenario RCP8.5 erwärmt sich die Atmosphäre um 3 °C im Vergleich zum oben genannten Zeitraum.

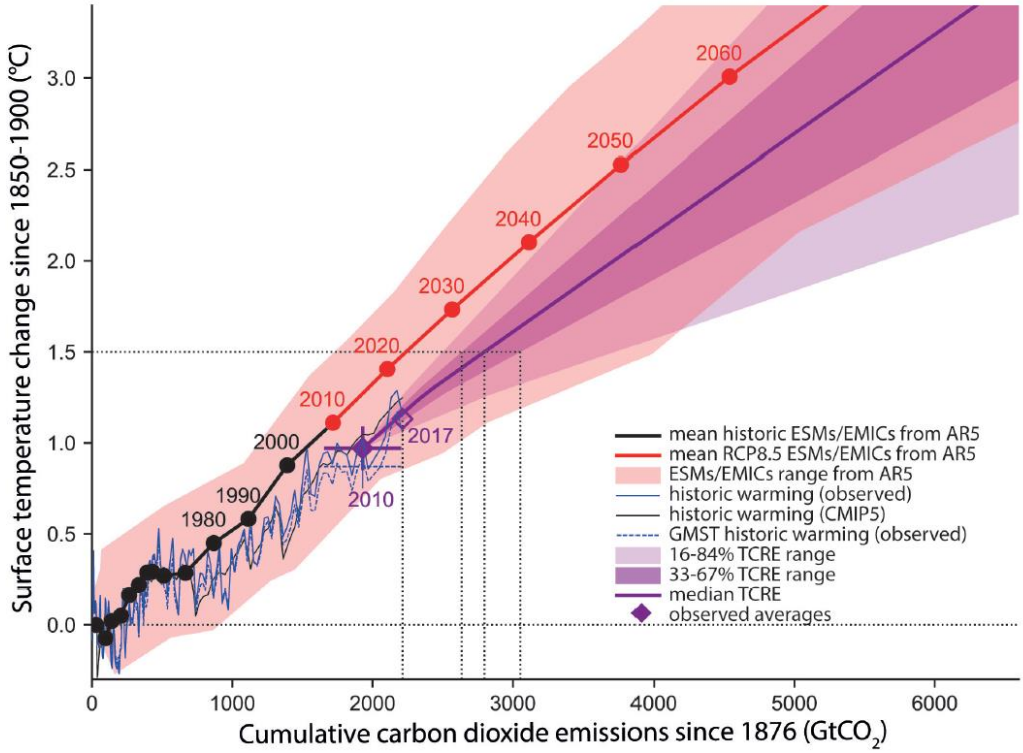


*Abbildung 1: Korrelation zwischen kumulierten $CO_2$-Emissionen und Oberflächentemperatur seit 1850 und 1900. [1]*

Rückkopplungseffekte können die globale Erwärmung weiter beschleunigen und die Dynamik vorantreiben. Die Folgen des Klimawandels sind weitreichend und hängen

maßgeblich vom Anstieg der globalen Durchschnittstemperatur ab. Zunehmen werden Extremwettereignisse wie Überschwemmungen, Sturmfluten und Dürren. Gletscher in Hochgebirgen und an den Polkappen werden schmelzen und dadurch den Meeresspiegel steigen lassen. Inselstaaten, Küstengebiete sowie Deltaregionen werden hiervon besonders betroffen sein. Jene Auswahl an Auswirkungen der globalen Erwärmung wird auch soziale und ökonomische Verwerfungen nach sich ziehen. Um die globale Erwärmung aufzuhalten, müssen in allen Gesellschaften Maßnahmen getroffen werden, damit die Treibhausgasemissionen in Zukunft sinken werden. Als vertragliche Basis für die Staaten der Weltgemeinschaft, dient das Übereinkommen von Paris. [1]

## 1.2 Übereinkommen von Paris

Mit der Ratifizierung des Übereinkommens von Paris aus dem Jahr 2015 verpflichteten sich alle unterzeichnenden Länder Maßnahmen zu treffen, um die Folgen der menschengemachten globalen Erwärmung auf ein bestimmtes Maß abzumildern. Gemäß Artikel 2 soll die weltweite Durchschnittstemperatur nicht über 2 °C gegenüber dem vorindustriellen Niveau liegen. Zudem sollen Anstrengungen unternommen werden, die Erwärmung auf 1,5 °C zu begrenzen, um den Planeten vor irreversiblen Schäden durch die globale Erwärmung zu schützen, da angenommen wird, dass eine Begrenzung von 2 °C nicht genügt. Um dieses Ziel zu erreichen, muss der Eintrag von Treibhausgasen in die Atmosphäre aufgehalten werden. Eine $CO_2$-Sequestierung ist dafür denkbar.

Aufgrund der verfügbaren Mittel sollen Industriestaaten wie Deutschland vorangehen und eine Reduzierung der Treibhausgasemissionen sofort einleiten. Eine Reduzierung der Treibhausgasemissionen wird von Entwicklungsländern unter Berücksichtigung der wirtschaftlichen Entwicklung erst zu einem späteren Zeitpunkt erwartet. Außerdem wird gemäß Artikel 4 eine gesamtwirtschaftliche Treibhausgasreduktion erwartet, die Industrien wie die Stahl- und Chemieindustrie miteinschließt. Finanzflüsse sollen zudem in Richtung einer treibhausgasarmen wirtschaftlichen Entwicklung gelenkt werden. Regulatorische Instrumente können Abgaben in Form vom $CO_2$-Zertifikatehandel, der bereits existiert, oder einer $CO_2$-Steuer, dessen Einführung in Deutschland für das Jahr 2021 geplant ist, sein. [2]

## 1.3 Stahlindustrie in der Kreislaufwirtschaft

Stahl ist der am meisten mit einer 2016 produzierten Menge von 1630 Mio. t verwendete Werkstoff der Welt. Zu 75% wird dieser in Hochofen-Konverterstahlwerken hergestellt. Eingesetzt wurden 1800 Mio. t metallische Einsatzstoffe, von denen ca. 64% Roheisen und ca. 32% recycelter Schrott waren. Rund 4% der metallischen Einsatzstoffe wurde direkt zu Eisen reduziert.

Der dominante Prozess zur Stahlherstellung ist der Hochofenprozess, mit dem in Deutschland im Jahr 2016 27,1 Mio. t Roheisen hergestellt wurden. Von großer wirtschaftlicher Bedeutung ist der Bereich Duisburg, wo in verschiedenen Hochofenwerken ca. 50% der oben genannten Roheisenmenge hergestellt werden. Als Reduktionsmittel werden v.a. Koks und Einblaskohle verwendet. Eine Reduzierung der eingesetzten Reduktionsmittelmenge ist praktisch nicht mehr möglich, da die Hochofenprozesse weitestgehend optimiert sind und knapp am thermodynamischen Optimum betrieben werden. Dies ist am asymptotischen Verlauf der eingesetzten Reduktionsmenge von 1948 bis 2008 in Abbildung 2 zu erkennen.

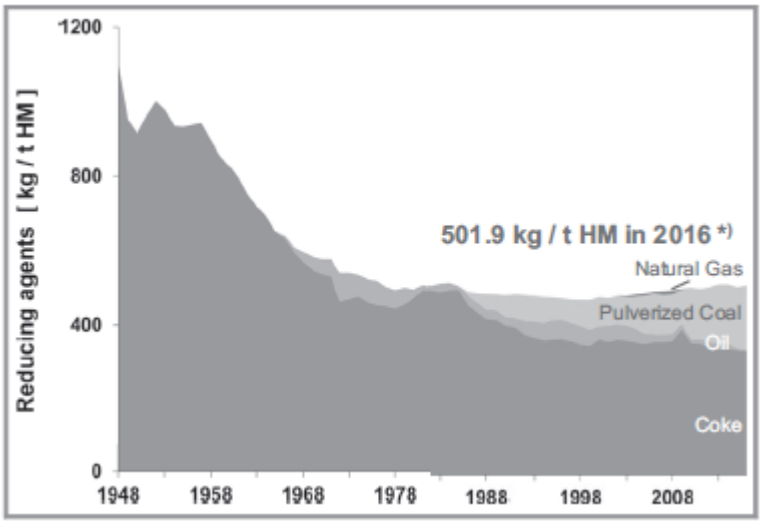


*Abbildung 2: Entwicklung des Reduktionsmittelverbrauchs bei der Stahlerzeugung. [3]*

Die Reduktionsmittelmenge konnte von 900 kg Reduktionsmittel pro t Roheisen im Jahr 1948 auf ca. 500 kg reduziert werden. Als theoretisches Minimum wurde ein Reduktionsmitteleinsatz von 386 kg pro Tonne Roheisen errechnet.

Da eine weitere Absenkung der $CO_2$-Emissionen nicht wirtschaftlich ist, wäre ein Zukauf von Emissionsrechten erforderlich. Dadurch steigen allerdings die Roheisenkosten. Für eine gleichzeitige Senkung der $CO_2$-Emissionen und Vermeidung des Zukaufs von Emissionsrechten bietet der Carbon2Chem®-Ansatz eine Möglichkeit, beide Ziele miteinander zu vereinen.

# EINLEITUNG

In der chemischen Industrie werden hohe Mengen an Synthesegasen für die Herstellung von verschiedenen organischen und anorganischen Substanzen benötigt. Da beim Hochofenprozess neben Roheisen auch Synthesegase als Nebenprodukt anfallen, die bisher thermisch genutzt werden, bietet sich hier eine Verknüpfung von Stahl- und Chemieindustrie an.

Je nach gewünschtem Produkt gilt es, die verschiedenen Teilströme zu kombinieren, denn die Synthesewege verschiedener chemische Produkte erfordern eine unterschiedliche Synthesegaszusammensetzung. Da die Menge an Wasserstoff aus den Hüttengasen einen limitierenden Faktor darstellt, werden Produkte bevorzugt, die vergleichsweise wenig Wasserstoff benötigen (vgl. Tabelle 1).

*Tabelle 1: Menge an benötigtem Kohlendioxid und Wasserstoff pro kg Produkt. [3]*

| Produkt | kg $CO_2$ pro kg Produkt | kg $H_2$ pro kg Produkt |
|---|---|---|
| Harnstoff | 0,73 | 0,1 |
| Methanol | 1,37 | 0,19 |
| Propen | 3,14 | 0,43 |

Ab einer gewissen Produktionsmenge reicht die in den Hüttengasen enthaltene Menge Wasserstoff nicht mehr aus und es muss Wasserstoff aus zusätzlichen Quellen bezogen werden. Eine Möglichkeit ist die Wasserelektrolyse unter Herbeiziehen elektrischer Energie aus erneuerbaren Quellen. Da der Anteil erneuerbarer Energien zeitlich fluktuiert und gleichzeitig ein konstanter Betrieb der verfahrenstechnischen Anlagen gewährleistet werden soll, ist ein Modell oder Konzept notwendig, das eine möglichst hohe Auslastung der Produktionsanlagen unter gleichzeitiger Berücksichtigung der fluktuierenden Einspeisung erneuerbarer Energien sicherstellt. [3] [4]

Um Entscheidungen zu treffen, welche verfahrenstechnische Einheiten für diese Problemstellung am geeignetsten sind, ist eine modellbasierte Technologieauswahl in Form einer Superstrukturoptimierung - wie in dieser Arbeit beschrieben - denkbar.

# 2 AUSGANGSSITUATION & ZIELSETZUNG

Das am Fraunhofer-Institut UMSICHT bestehende Optimierungsmodell beinhaltet die Möglichkeit zur Betriebsoptimierung und zur Strukturoptimierung eines Verbundes zur Verwertung von kohlenstoff- und wasserstoffhaltiger Prozessgase aus der Stahlindustrie. Bestehende Modelle zur modellbasierten Technologieauswahl zur Gasaufbereitung in der Stahlindustrie, die u.a. im Kapitel 3.3 beschrieben werden, können Hüttengase mit einem konstanten Volumenstrom verarbeiten. Die Möglichkeit dynamisches Verhalten auch in den anderen Prozessen für einen verfahrenstechnischen Verbund darzustellen sowie die Möglichkeit zur modellbasierten Technologieauswahl in Form einer Superstruktur ist weder in das bestehende Modell eingebunden noch in anderen Literaturquellen durchgeführt worden.

Das primäre Ziel dieser Arbeit soll es sein, das bestehende Optimierungsmodell durch die Superstrukturoptimierung zu erweitern. Praktisch bedeutet dies das nichtlineare Produkt von Binär- und kontinuierlichen Variablen in das Modell zu implementieren und diese mathematisch so umzuformen, dass gängige kommerzielle lineare Solver damit umgehen können.

Dafür soll eine Umgebung geschaffen werden, um die Methode zu testen und zu validieren. Zunächst erfolgt die Validierung mittels einfacher Testcases, die eine stoffliche Optimierung verschiedener Trenneinheiten durchführen sollen. Anschließend wird ein komplexerer Testcase vorgestellt, der mittels Trenn-, Speicher- und Konversionseinheiten Prozessgase der Stahlindustrie (konkret: Koks- und Hochofengase) aufarbeiten und anschließend auftrennen soll. Der Prozess soll mit möglichst niedrigen $CO_2$-Emissionen einhergehen. Dies soll unter Berücksichtigung einer $CO_2$-Zeitreihe, die die $CO_2$-Emissionen je kWh aus dem deutschen Stromnetz (2018) über die Zeit abbildet, untersucht werden. Die Ergebnisse des Testcases sollen unter Veränderung verschiedener Parameter wie Speichergröße oder dynamisches Verhalten diskutiert werden. Diese Berechnungen sollen zum Großteil das Superstrukturfeature berücksichtigen. Zum Vergleich soll ebenso eine Betriebsoptimierung des Testcases durchgeführt werden. Gegenstand der Untersuchung soll ebenso das Rechenzeitverhalten unter verschiedenen Bedingungen sein, da Kenntnisse über die Rechenzeiten insbesondere bei großskaligen Zeitreihen von großer Bedeutung sind.

# 3 GRUNDLAGEN

## 3.1 Mathematische Optimierung

Alle Teilgebiete der mathematischen Optimierung beschreiben im Wesentlichen die Bestimmung des Minimums bzw. Maximums einer Funktion auf einem definierten Bereich.

Ein Teilgebiet der mathematischen Optimierung ist die gemischt-ganzzahlige lineare Optimierung (englisch: mixed integer linear programming, MILP). Neben der in dieser Arbeit betrachteten Optimierungsmethode MILP gibt es noch eine Reihe weiterer Optimierungsmethoden. Beispielsweise findet die nichtlineare Optimierung Verwendung in der Petrochemie, um Netzwerkflussprobleme zu lösen [5]. Gängige kommerzielle MILP-Solver können nichtlineare Probleme jedoch nicht lösen und werden deshalb in dieser Arbeit nicht weiter betrachtet. Daneben ist die lineare Optimierung gebräuchlich, die anders als die Optimierung nach MILP keine Ganzzahligkeitsbedingung beinhaltet. [5]

### 3.1.1 Mathematische Grundlagen von Optimierungs-algorithmen

**Variablen**

**Kontinuierliche Variablen**

Kontinuierliche Variablen können jede nichtnegative reelle Zahl innerhalb eines bestimmten Bereiches $X^-$ bzw. $X^+$ annehmen. Für eine kontinuierliche Variable gilt:

$$0 \leq X^- \leq x \leq X^+, x: x \in \mathbb{R}_0^+ \quad (1)$$

In der Praxis stellen diese Variablen zum Beispiel Volumenströme dar. [5]

**Freie Variablen**

Freie Variablen werden auch unbeschränkte Variablen genannt und können jeden reellen Wert annehmen. Es gilt:

$$x: x \in \mathbb{R} \quad (2)$$

Sie können beispielsweise Wachstum oder Kontostände darstellen. [5]

**Ganzzahlige Variablen**

Ganzzahlige Variablen werden in der Literatur mit kleinen griechischen Buchstaben gekennzeichnet und sind in der Menge der natürlichen Zahlen zu finden.

$$\alpha, \beta: \alpha, \beta \in \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\}. \quad (3)$$

Auch hier können sich die ganzzahligen Variablen in einem beschränkten Bereich befinden (s. kontinuierliche Variablen). [5]

**Binäre Variablen**

Bei Ja-Nein-Entscheidungen eignen sich Binärvariablen, die ausschließlich die Werte 0 oder 1 annehmen können. Diese werden mit dem kleinen griechischen Buchstaben $\delta$ gekennzeichnet. [5]

$$\delta: \delta \in \{0, 1\}. \tag{4}$$

**Diskrete Variablen**

Diese Variablen können nur bestimmte Werte einer Menge annehmen. Diese können alle reelle Zahlen enthalten. Für eine diskrete Variable $\sigma$ gilt somit: [5]

$$\sigma: \sigma \in \{W_1, W_2, \dots, W_n\}. \tag{5}$$

**Strukturierte Variablenmengen**

Strukturierte Variablen vom Typ SOS-1 sind Variablenmengen, von denen höchstens eine Variable von Null abweichen darf. Beim Typ SOS-2 dürfen zwei Variablen von Null verschieden sein. Diese Arten von Variablen bieten in bestimmten Situationen gewisse Vorteile gegenüber Binärvariablen. Strukturierte Variablenmengen können dabei helfen, Sachzusammenhänge zu linearisieren. [5]

**Halbstetige bzw. semi-kontinuierliche Variablen**

Diese Variablen beschreiben zum Beispiel Mindestproduktionen oder Mindesttransportmengen. Mathematisch lässt sich dieser Sachverhalt so formulieren: [5]

$$x: x = 0 \ \vee \ X^- \leq x \ \leq \ X^+ \tag{6}$$

**Variablenmengen**

Variablen können als individuelle Objekte oder als Kollektive auftreten. Erstere sind jedoch bei großen Datenmengen unpraktisch, weshalb auf Indizes und Indexmengen zurückgegriffen wird.

Wenn zum Beispiel die generische Variable $x$ von einem Zeitabschnitt $t = 1, 2, \dots, 12$ und Ort $s = 1, 2, 3, 4, 5$ einem abhängt, lässt sich die Variable auch als $x_{ts}$ beschreiben. Die Indizes $s$ und $t$ werden dann den Indexmengen $T = \{1, 2, \dots, 12\}$ bzw. $S = \{1, 2, \dots, 5\}$ zugeordnet. Die im Zeitintervall 5 und am Standort 2 produzierte Menge hätte demnach die Variable $x_{52}$.

Allgemein bedeutet dies:

$$x_{ts}, t \in T, s \in S \tag{7}$$

Der Allquantor ∀ (für alle) beschreibt den Umstand, wenn alle Elemente einer Indexmenge gemeint sind. Mit der zusätzlichen Forderung wird beispielsweise geschrieben: [5]

$$x_{ts} \geq 20, \forall t, \forall s \text{ oder } x_{ts} \geq 20, \forall \{ts\} \tag{8}$$

**Nebenbedingungen**

Nebenbedingungen werden auch als Randbedingungen, Zulässigkeitsbedingungen, Beschränkungen, Restriktionen oder Constraints bezeichnet.
In der folgenden Form lassen sich Nebenbedingungen formulieren:

$$(linke\ Seite) \circ (rechte\ Seite)$$

∘ steht dabei für die Operatoren $\{\leq, =, \geq\}$. In der hier beschriebenen linearen Optimierung stehen auf der linken bzw. rechten Seite lineare Gleichungen. Von Schranken wird gesprochen, wenn die Variablen mit dem Koeffizienten 1 erscheinen, zum Beispiel $x \geq 7$. In der nichtlinearen Optimierung sind hingegen auch Potenzen, Produkte und Funktionen wie $e^x$ erlaubt. Die nichtlineare Optimierung erfordert jedoch einen erheblichen zeitlichen Mehraufwand, weshalb versucht wird, Sachzusammenhänge zu linearisieren. Konkret verkleinern und definieren Nebenbedingungen den Lösungsraum bei Optimierungsaufgaben und vereinfachen so das Finden einer optimalen Lösung. [5]

**Zielfunktion**

Häufig wird bei Optimierungen Kostenminimierung, $CO_2$-Minimierung oder Gewinnmaximierung angestrebt, die als Zielfunktionen in Form von mathematischen Funktionen beschrieben werden. Bei Optimierungsaufgaben, bei denen der Zielfunktionswert maximiert werden soll, wird die Zielfunktion mit einem negativen Vorzeichen versehen. Soll der Zielfunktionswert minimiert werden, wird ein positives Vorzeichen eingesetzt.
Bei linearen Optimierungsproblemen liegt die optimale Lösung am Rand des zulässigen Bereichs, der durch die oben genannten Nebenbedingungen definiert wird. [5]

**Mathematische Formulierung**

Lineare Optimierungsprobleme werden mit den Variablen $x_i$ und den Daten $A_{ij}, b_i$ und $c_i$ allgemein wie folgt ausgedrückt:

$$\max_{x_1,\dots,x_n} z \ , z = z(x_1, \dots, x_n) = c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n \tag{9}$$

unter den Nebenbedingungen (u.d.N.):

$$\begin{array}{ccccccccc} A_{11}x_1 & + & A_{12}x_2 & + & \dots & + & A_{1n}x_n & \leq & b_1 \\ A_{21}x_1 & + & A_{22}x_2 & + & \dots & + & A_{2n}x_n & \leq & b_2 \\ & & & & & & & \vdots & \\ A_{m1}x_1 & + & A_{m2}x_2 & + & \dots & + & A_{mn}x_n & \leq & b_m \\ & & & & & & x_1, \dots, x_n & \geq & 0 \end{array} \tag{10}$$

Kürzer lässt sich die Zielfunktion und die Nebenbedingung mit Hilfe der Matrix-Vektornotierung so formulieren:

$$\begin{aligned} &\max c^T x \\ &\text{u. d. N. } Ax \leq b \ , x \geq 0 \end{aligned} \tag{11}$$

A ist demnach als Matrix und b und c als Vektoren in den dazu passenden Dimensionen zu verstehen.

Die Matrix-Vektornotierung vereinfacht den Term der Zielfunktion zu:

$$c^T x \coloneqq \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \tag{12}$$

Zu sehen ist, dass der Spaltenvektor $c$ zu einem Zeilenvektor transponiert wird, während $x$ und $b$ Spaltenvektoren bleiben. Wird ein Zeilenvektor mit einem Spaltenvektor multipliziert, wird das Skalarprodukt erhalten. Dieses entspricht dann dem Zielfunktionswert von z.

Für die Nebenbedingungen gilt: [5]

$$A_i x \coloneqq \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j \tag{13}$$

**LP-Relaxierung**

Die LP-Relaxierung in der gemischt-ganzzahligen linearen Optimierung löst die Optimierungsaufgabe ohne Berücksichtigung der Ganzzahligkeitsbedingung und bietet eine Startlösung für diverse Lösungsalgorithmen (vgl. Kapitel 3.1.5). [5]

**Konvexe Hülle**

Die konvexe Hülle eines MILP-Problems beschreibt den kleinstmöglichen Bereich der gültigen Menge unter Berücksichtigung der Ganzzahligkeitsbedingung und beinhaltet die konvexe Menge, die alle Lösungen des MILP-Problems enthält. Die konvexe Hülle ist demnach eine Teilmenge der LP-Relaxierung, da dort die Ganzzahligkeitsbedingung nicht gilt. [5]

**Zulässige Lösung**

Als zulässige Lösung sind die Elemente aller gültigen Lösungen gemeint. Diese ist damit Teilmenge der konvexen Menge. [5]

**Gap**

Gap ist ein gängiger Begriff in der mathematischen Optimierung und beschreibt, wie weit die Lösung von der optimalen Lösung entfernt ist. Dieser wird üblicherweise in % angegeben. [5]

### 3.1.2 Grafische Lösung anhand eines LP-Problems

Die Lösungsmenge bei Optimierungsproblemen, die sich mit Linear Programming (LP) lösen lassen, befinden sich in einem (mehrdimensionalen) Polyeder S. Die optimale Lösung liegt dabei immer auf dem Eckpunkt dieses Polyeders. Bei einfachen Problemen mit einem Lösungsraum in einem zweidimensionalen Polyeder liegt die Lösung also auf einer der Ecken des Polyeders. Die Form des Polyeders hängt von den Nebenbedingungen des Optimierungsproblems ab. In Abbildung 3 ist die grafische Lösung eines Optimierungsproblems dargestellt. Die durchgezogenen schwarzen Linien repräsentieren dabei die Ungleichungen, die als Nebenbedingungen den blauen Lösungsraum definieren. Die zu maximierende Zielfunktion $\max 800p + 600s$ wird nach s umgestellt und es wird die gestrichelte Linie erhalten. Diese wird so lange parallel nach oben rechts verschoben, bis sie sich noch gerade im blauen Lösungsraum befindet. Diesen Schnittpunkt markiert der rote Punkt. An diesem können anschließend die optimalen p- und s-Werte abgelesen werden. Danach werden diese Werte in die Zielfunktion eingesetzt, sodass die optimale Lösung erhalten wird. [5]

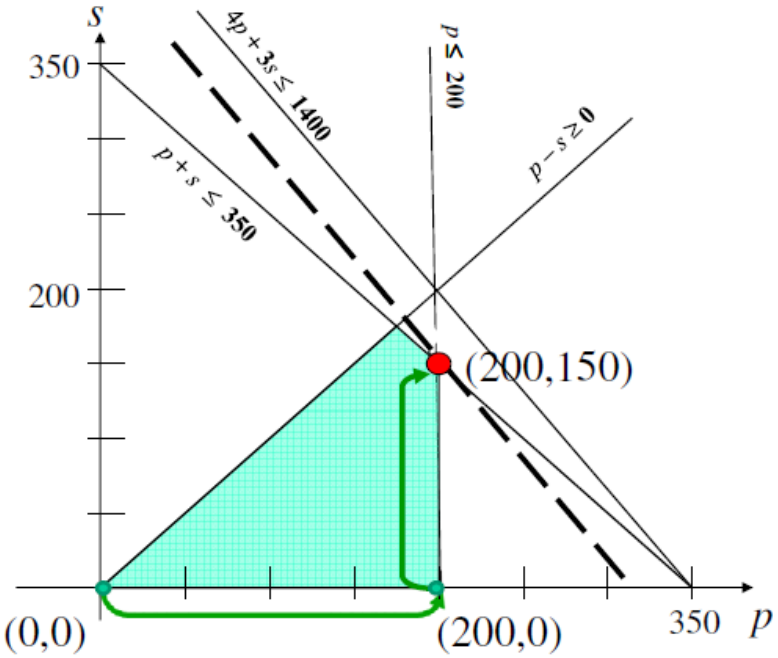


*Abbildung 3: Lösung einer einfachen LP-Problemstellung. Die optimale Lösung dieses Problems liegt auf der mit dem roten Kreis markierten Ecke des zweidimensionalen Polyeders. [5]*

### 3.1.3 Bedeutung der gemischt-ganzzahligen linearen Optimierung

Das Ziel der gemischt-ganzzahligen linearen Optimierung liegt im Finden optimaler Lösungen bei Minimierungs- und Maximierungsproblemstellungen. Typische zu optimierende Problemstellungen können Kosten- oder Zeitminimierungen oder Gewinnmaximierungen sein. In der chemischen Industrie lassen sich solche Problemstellungen im Prozessdesign, in Prozesssynthesen oder bei Mehr-Komponenten Strömungen finden. Andere Anwendungsgebiete finden sich in Produktionsbereichen, in der Logistik oder in der strategischen Planung. Das Einsparungspotential bei der kommerziellen Anwendung von Optimierungsmodellen wie MILP ist groß. Beispielsweise hat Delta Airlines innerhalb von drei Jahren 300 Mio. USD durch die Nutzung eines MILP-Modells eingespart. [6]

Notwendig zum Lösen dieser Problemstellungen ist ein mathematisches Modell, das Gleichungen, Ungleichungen und logische Operatoren enthält.

Ein mathematisches Modell besteht im Wesentlichen aus

- Daten
- Variablen
- Nebenbedingungen
- Zielfunktionen.

Die daraus resultierende MILP-Problemstellung ist für Software wie MATLAB nicht lösbar. Deshalb muss auf MILP-Solver wie Gurobi oder CPLEX zurückgegriffen werden.
Bei der gemischt-ganzzahligen linearen Optimierung handelt es sich um eine diskrete Optimierung, bei der die involvierten Variablen Zahlenwerte, Ja-Nein-Entscheidungen oder logische Bedingungen (zum Beispiel UND, ODER, GLEICH, …) annehmen können. Währenddessen nehmen die Variablen bei der klassischen Optimierung reelle Zahlen ($x: x \in \mathbb{R}$) an.
In der nichtlinearen Optimierung geht es um das Finden von globalen oder regionalen Optima. Diese Optima sind als Optima im mathematischen Sinne zu verstehen, d.h. als Maximal- oder Minimalstellen von mathematischen Funktionen. [5]

### 3.1.4 Lineare gemischt-ganzzahlige Optimierung (MILP)

Von großer praktischer Bedeutung ist das Lösen von Optimierungsproblemen mit der folgenden Form:

$$\max_{x \in S} c^T x, \mathrm{S} \coloneqq \{\mathrm{x} |\ \mathrm{Ax} = \mathrm{b}, \mathrm{x} \geq 0\} \tag{14}$$

Diese enthalten ganzzahlige Variablen $x_1, \dots, x_r \in \mathbb{N}_0$ und nichtnegative kontinuierliche Variablen $x_{r+1}, \dots, x_n \in \mathbb{R}_0^+$. Außerdem können Binärvariablen eingesetzt werden.
Um die exakte Lösung des Optimierungsproblems zu bestimmen, eignen sich Entscheidungsbaum- und Schnittebenenverfahren. Diese unterteilen sich in vollständige oder explizite und begrenzte oder implizite Enumerationsverfahren. Im Wesentlichen löst ein vollständiges Enumerationsverfahren das Optimierungsproblem, indem es die gesamte Lösungsmenge abbildet und zum Ende die optimale Lösung (zum Beispiel höchster Gewinn) auswählt, nachdem alle möglichen Kombinationen der eingesetzten Variablen abgeschlossen sind. Dieses banale Vorgehen funktioniert praktisch nur bei überschaubaren Problemen, da der Rechenaufwand exponentiell mit der Anzahl der Variablen steigt.
Implizite Enumerationsverfahren verkürzen den Rechenaufwand, indem sie zwar alle Kombinationen berücksichtigen jedoch nicht explizit. Zu diesen Verfahren gehören zum Beispiel Branch&Bound (B&B), das Schnittebenenverfahren und Branch&Cut (B&C), die in folgenden Kapiteln näher beschrieben werden. Aufgrund des verkürzten Rechenaufwands bieten diese Verfahren einen entscheidenden Vorteil gegenüber expliziten Enumerationsverfahren.

### 3.1.5 LP-Relaxierung durch Simplex-Verfahren und Innere-Punkte-Methode

Um eine Startlösung bei der linearen gemischt-ganzzahligen Optimierung zu erhalten, wird eine LP-Relaxierung durchgeführt. Die LP-Relaxierung beinhaltet die optimale Lösung einer MILP-Problemstellung nach Vernachlässigung der Ganzzahligkeitsbedingung. Das heißt, die Binärvariablen können im Anschluss der LP-Relaxierung Werte annehmen, die zwischen 0 und 1 liegen. Das Simplex-Verfahren und die Innere-Punkte-Methode sind zwei gängige Verfahren, um zur Lösung der LP-Relaxierung zu gelangen, die auch Einzug in kommerzielle Solver gefunden haben.
Geometrisch interpretiert befindet sich diese Lösung auf einer Ecke eines LP-Polyeders, der durch das Optimierungsproblem mit seinen Randbedingungen geformt wird. Um zu dieser Ecke zu gelangen, bewegt sich das Simplex-Verfahren entlang der Kanten hin zur optimalen Ecke (vgl. linkes Polyeder in Abbildung 4).

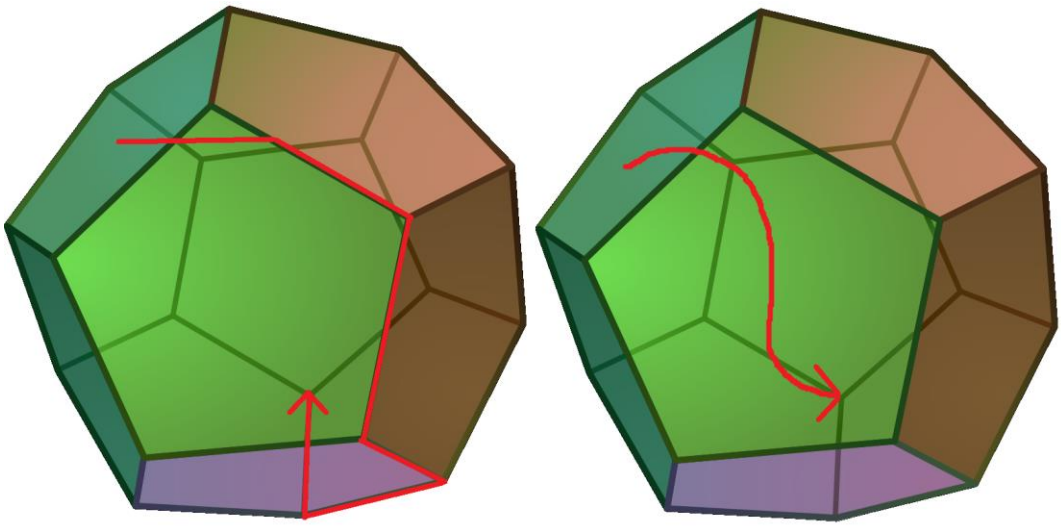

*Abbildung 4: Geometrische Interpretation des Simplex-Verfahrens (links) und der innere-Punkte-Methode (rechts). Bearbeitete Polyeder aus [7].*

Die innere-Punkte-Methode hingegen nähert sich der optimalen Lösung durch das Innere des Polyeders (vgl. rechtes Polyeder in Abbildung 4). [5]
Für eine kurze Beispielsrechnung des Simplex-Verfahrens wird an dieser Stelle auf den Anhang verwiesen.

### 3.1.6 Branch&Bound-Verfahren

Beim Branch&Bound-Verfahren (B&B-Verfahren) werden aus einem Problem weitere Unterprobleme mittels Verzweigungen *(engl. Branches)* erzeugt, die wiederum weitere Unterprobleme erzeugen können. Damit ein ineffizientes vollständiges Enumerationsverfahren vermieden wird, begrenzen *Schranken (engl. Bounds)* den zu

untersuchenden Lösungsraum. Deshalb ist das B&B-Verfahren ein implizites Enumerationsverfahren.

Der erste Knoten wird durch die LP-Relaxierung erzeugt. Für die (Nicht-)Betrachtung weiterer Knoten gibt es drei verschiedene Verwerfungskriterien:

- Unzulässigkeit
- Optimalität
- Dominanz

Bei einem Maximierungsproblem konvergieren die unteren Schranken $z^{IP}$ in einer monoton wachsenden Folge gegen die obere Schranke $z^{LP}$. Bei einem Minimierungsproblem fallen die oberen Schranken $z^{LP}$ gegen $z^{IP}$.

Ein Knoten wird verworfen, wenn der Zielfunktionswert der Lösung kleiner ist als die Minimalverbesserung $\propto$ (Dominanzkriterium). Wird der Knoten für das Optimierungsproblem weiterhin betrachtet, werden zwei weitere Unterprobleme kreiert. Dabei wird der nichtganzzahlige Wert $y_j^*$ betrachtet und in die Schranken $y_j \leq [\, y_j^* \,]$ und $y_j^* \geq \left[\, y_j^* \,\right] + 1$ zerlegt. Dieses Prozedere wird für die weiteren entstehenden LP-Probleme wiederholt.

Beendet ist das Verfahren, wenn die Knotenliste abgearbeitet wurde und in dieser sich entweder die zulässige und optimale Lösung befindet oder keine zulässige Lösung gefunden wird. Dieses Vorgehen ist jedoch ineffizient und wird in der Praxis nicht angewandt. Stattdessen wird die Differenz aus der oberen und der unteren Schranke betrachtet und beendet das B&B-Verfahren, sobald die Differenz eine vorher definierte Toleranzschwelle $\varepsilon$ unterschreitet.

$$\triangle := z^{LP} - z^{IP} \leq \varepsilon \tag{15}$$

Anstatt eines absoluten Schwellenwertes ist auch der Vergleich der beiden Schranken durch einen Quotienten möglich. Dieser wird in der gemischt-ganzzahligen linearen Optimierung Gap genannt und wird wie in der folgenden Formel berechnet. [5]

$$Gap = \left| 100 \times \frac{z^{LP} - z^{IP}}{z^{IP}} \right| \tag{16}$$

Ein anschauliches Rechenbeispiel des B&B-Verfahrens befindet sich im Anhang.

### 3.1.7 Schnittebenenverfahren

Wie im B&B-Verfahren wird auch im Schnittebenenverfahren (engl. cutting-plane methods) das Optimierungsproblem zunächst mit einer LP-Relaxierung gelöst. Anschließend reduzieren Schnittebenen, die als lineare Ungleichungen formuliert sind, die Lösungsmenge der LP-Relaxierung und nähern sich so der konvexen Hülle an, die die gesamte gültige Lösungsmenge (unter Berücksichtigung der Ganzzahligkeitsbedingung) des Optimierungsproblems enthält. Ein Abschneiden eines Teils der konvexen Menge wird durch den Einsatz neuer Ungleichungen außerdem vermieden (s. Abbildung 5). [5]

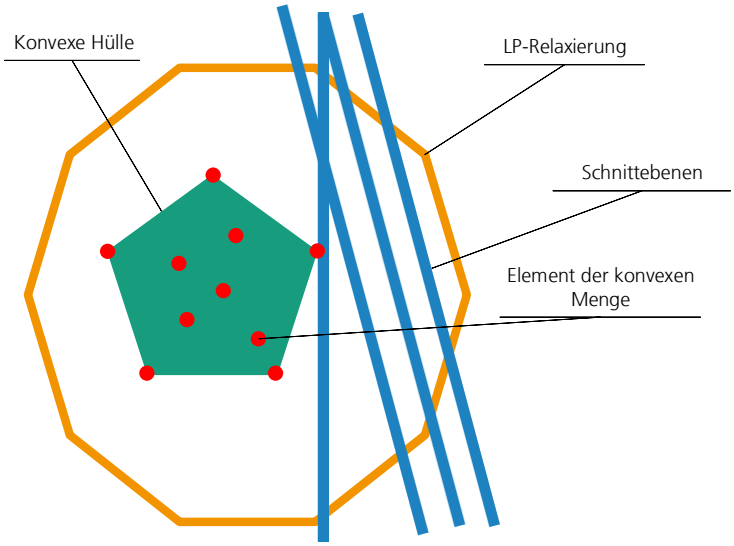


*Abbildung 5: Schnittebenen werden zwischen konvexer Hülle und LP-Relaxierung gelegt.*

### 3.1.8 Branch&Cut-Verfahren

Das Branch&Cut-Verfahren (B&C-Verfahren) verknüpft das B&B-Verfahren mit dem Schnittebenenverfahren und dient somit als Grundlage für kommerzielle Solver. Im B&B-Verfahren entstehen für jeden nicht-ganzzahligen Wert zwei neue Unterprobleme. Das B&C-Verfahren fügt jedem Knoten eine zulässige Ungleichung bzw. Schnitt (engl. cut) hinzu. Diese Schnitte schneiden wie im Schnittebenenverfahren Teile des Bereichs der LP-Relaxierung, ohne Teile der konvexen Hülle zu entfernen. Es gibt zwei Möglichkeiten Schnitte zu setzen:

1. Der Schnitt ist für das Gesamtproblem zulässig
2. Der Schnitt ist für bestimmte Knoten zulässig

Zu erkennen ist, dass in diesem Verfahren Schnitte mit Bedacht eingefügt werden, da sonst das zu lösende LP-Problem zu groß wird. Wichtig ist somit, möglichst effiziente Schnitte zu setzen. [5]

## 3.2 Optimierung von Energiesystemen in der Praxis

Bauer et al. beschreiben ein in der Praxis Anwendung gefundenes Optimierungsmodell von Energiesystemen (TOP-Energy®). In diesem sind verschiedene technische Anlagen, Tarife und externe Einflüsse miteinander verbunden und erlauben somit eine ganzheitliche Betrachtung des Energiesystems.

Der Betrachtungszeitraum wird dabei in Zeitintervalle unterteilt und in jedem Zeitintervall wird ein quasistationärer Zustand des Energiesystems berechnet. Die Zustände des Energiesystems werden hierbei in ein Gleichungssystem überführt und mit einer gemischt-ganzzahligen linearen Optimierung gelöst.

**Ablauf**

1. *Einlesen der Modellbeschreibungen*

   Die Modellbeschreibungen werden eingelesen und in ein Gleichungssystem befördert.

2. *Blockzerlegung*

   Das Gleichungssystem wird in viele kleinere Gleichungssysteme geteilt, die anschließend nach und nach gelöst werden. Diese kleinen Gleichungssysteme sind in der Regel wohlbestimmt, d.h. die Anzahl der beinhalteten Variablen stimmt mit der Anzahl der Gleichungen überein. Falls durch Eingabefehler o.ä. über- oder unterbestimmte Gleichungssysteme entstehen, können diese durch bestimmte mathematische Algorithmen in wohlbestimmte Gleichungssysteme zerlegt werden.

3. *Symbolisches Vereinfachen*

   Die Gleichungssysteme werden nicht numerisch gelöst, weil dies zu lange dauert und mit Fehlern behaftet ist. Die Ergebnisse des einen Gleichungssystems sind die Eingabeparameter des anderen Gleichungssystems und so häufen sich nach einer Vielzahl von Lösungen schnell hohe Fehlerwerte an. Stattdessen werden diese symbolisch gelöst.

4. *Lösen der Gleichungssysteme*

   Jeder Block berechnet zunächst alle Zeitschritte, bevor der nächste Block an der Reihe ist. Zum Schluss muss nur noch eine geringe Anzahl Gleichungssysteme gelöst werden. Auch hier gibt es verschiedene mathematische Algorithmen, die ein effizientes Lösen der Gleichungssysteme ohne große Qualitätsverluste gewährleisten.

In die Modellbeschreibungen fließen sowohl wirtschaftliche Faktoren als auch technische Parameter mit ein. Darunter fallen u.a. Strom- und Gaspreise, Wirkungsgrade, Mindestlaufzeit der Gasmotoren.

Die am Ende zu optimierende Zielfunktion lautet:

$$\min f(x,y) = \sum_{t=1}^{24} C(x_t, y_t) + \sum_{t=1}^{24} B(x_t, y_t) + \sum_{t=1}^{24} W(x_t, y_t) \qquad (17)$$

C sind hier die Energiekosten (Brennstoff, Einnahmen für die Stromeinspeisung, …), B die Betriebskosten (Schmierstoffe, Harnstoff, …) und W die Wartungskosten. In diesem Modell wird das Problem in einer Auflösung von 24 Zeitschritten (à 1 Stunde) berechnet. Am Ende hat das zu lösende Optimierungsproblem mehr als 5000 Variablen und ca. 8300 Randbedingungen in Form von Gleichungen und Ungleichungen. Die Ersteller des Optimierungsproblems berichten von einer Abweichung des berechneten Wärmebedarfs im Vergleich zum tatsächlichen Wärmebedarf von 2% und Kosteneinsparungen von 10% gegenüber der händischen Fahrweise. [8] [9]

## 3.3 Stand der Technik

Erste Literaturquellen aus den 1950er Jahren beschreiben den Einsatz mathematischer Optimierung in der Eisen- und Stahlindustrie. Bis zum Jahr 2000 wurden v.a. stochastische Modelle und Methoden zur Investitionsrechnung vorgestellt. Mit der Herausforderung der steigenden $CO_2$-Emissionen fand die mathematische Optimierung auch zur Reduzierung der $CO_2$-Emissionen Anwendung.

Zum einen gibt es Modelle zur mathematischen Optimierung, die eine globale Lösung in einem begrenzten Lösungsraum finden. Die meisten dieser Modelle sind im der Bereich linearen, nichtlinearen oder gemischt-ganzzahligen Optimierung zu finden. Für die Anwendung der oben genannten Optimierungsmodelle sind anwendungsbezogene Nebenbedingungen unabdingbar, um den Lösungsraum zu beschränken. Auch ist die Formulierung der Zielfunktion wichtig. Bei der linearen Optimierung dürfen beispielsweise nur lineare (Un-)Gleichungen und Zielfunktionen verwendet werden.

Zum anderen gibt es stochastische oder metaheuristische Optimierungsverfahren, die keine optimale Lösung garantieren. Jedoch finden diese Verfahren eine im Anwendungsfall ausreichend gute Lösung. Zugrunde liegt ein Verfahren, das die Parameter in einer bestimmten Weise variiert, um so zu einer ausreichend guten Lösung zu kommen. Beispiel dafür sind neuronale Netze.

Zudem gibt es maschinelles Lernen, dem Trainingsdaten zugrunde liegen, um Optimierungsmodelle oder andere Probleme zu lösen. Entscheidend für die Qualität des zu lösenden Problems ist die Qualität der vorliegenden Trainingsdaten.

Zum Schluss gibt es Optimierungsmethoden, die heuristische Methoden durch Expertenwissen anwenden. Die dadurch gefundene Lösung ist in den seltensten Fällen die optimale Lösung des zu lösenden Problems. Dennoch können heuristische Methoden Hilfestellungen bei anderen Optimierungsmethoden liefern. [10]

Liu et al. stellen seitens der Koksgewinnung ein NLP-Modell vor, welches die Exergieverluste einer Kokerei minimiert. Als Nebenbedingungen werden Massen- und Energiebilanzen ausgewählt. Zur Erreichung der Exergieverlustreduktion wird der Zufluss von Kohlegas erhöht und das Verhältnis von Hochofengas zu Koksofengas nah an 7:1 geführt. Nach der erfolgten Optimierung konnte der Exergieverlust um rund 7% verringert werden. [11]

Wu et al. beschreiben ein LP-Modell zur Kostenreduzierung von Hochofenprozessen. Dort werden die Eigenschaften von Stückerzen bei hohen Temperaturniveaus verbessert. Besonders hervorzuheben ist der Einfluss von heuristischen Methoden in Form von Expertenwissen, die erheblichen Einfluss auf die dort beschriebene Problemstellung haben. [12]

Ein weiterer Beitrag von Liu et al. stellt ein Vorhaben zur Ausbeuteoptimierung von Roheisen eines Hochofenprozesses vor, bei dem ebenfalls ein LP-Modell angewandt wird. Verschiedene Parameter des Hochofenprozesses, Rohstoffverhältnisse und Massenströme fließen ins Optimierungsmodell ein. Nach Abschluss des Optimierungsverfahrens kann eine Erhöhung der Ausbeute um ca. 2,6% verglichen mit dem Stand vor der Optimierung erzielt werden. [13]

Chen et al. präsentieren ein Paper zur Optimierung von Konverterprozessen, das LP für diese Zwecke verwendet. Auch hier werden Massen- und Energiebilanzen und andere einschränkende Nebenbedingungen gewählt, um den Prozess zu beschreiben. Eine Erhöhung der Stahlausbeute soll erzielt werden. Im Fokus der Betrachtung stehen die Stahlzusammensetzung, -temperatur, die Basizität der Schlacke und Stahl- bzw. Rohstoffpreise. Bis zu ca. 6,8% höhere Stahlausbeuten können durch die erfolgte Optimierung erzielt werden. [14]

Ein weiterer Ansatz ist, die einzelnen Verfahren nicht isoliert von den anderen Verfahrensschritten, sondern ganzheitlich im Verbund zu betrachten.

Ein von Larsson et al. veröffentlichtes Optimierungsmodell verwendet MILP, um den Energieeintrag des Verbundes zu minimieren. Massenbilanzen verbinden die jeweiligen Teilprozesse zu einem Verbund. Das entstandene Optimierungsmodell kann verschiedene Prozessfahrpläne berücksichtigen und Parameter entsprechend ändern. Ein weiterer Vorteil liegt in der Möglichkeit der Optimierung von Teilprozessen und des Gesamtprozesses. [15]

Superstrukturen in integrierten Hüttenwerken werden von Ghanbari et al. behandelt. Neben diversen Trenn- und Konversionsverfahren beinhaltet dieses vorgestellte Modell die Möglichkeit zur Methanolsynthetisierung aus dem Synthesegas, das sich in den Hüttengasen befindet. Die Hüttengase gehen als konstante Ströme in den Verbund ein. [16]

## 3.4 Stahlerzeugung

Der gegenwärtig bedeutendste Verfahrensverbund zur Stahlerzeugung ist das integrierte Hüttenwerk. Die Besonderheit hierbei liegt darin, dass sich die wichtigsten Teilprozesse an einem Standort befinden, um eine möglichst effiziente Produktion zum Beispiel durch die Minimierung von Transportwegen und die Vernetzung diverser Stoff- und Energieströme zu gewährleisten. Das integrierte Hüttenwerk besteht für gewöhnlich aus:

- Hochofen
- Koksofen
- Konverter
- Diversen nachgeschalteten Prozessen zur Fertigung von Zwischen- und Endprodukten (zum Beispiel Stahlträgern oder –platten).

In der Regel wird das Roheisen vorher mechanisch und metallurgisch in Sinter- und Pelletierungsprozessen aufbereitet, um vorteilhafte Eigenschaften wie Reduzierbarkeit für die nachgeschalteten Prozesse zu erreichen. Diese Prozesse befinden sich nicht zwangsläufig innerhalb der integrierten Hüttenwerke. [17]
Abbildung 6 zeigt eine Übersicht der oben genannten Prozesse.

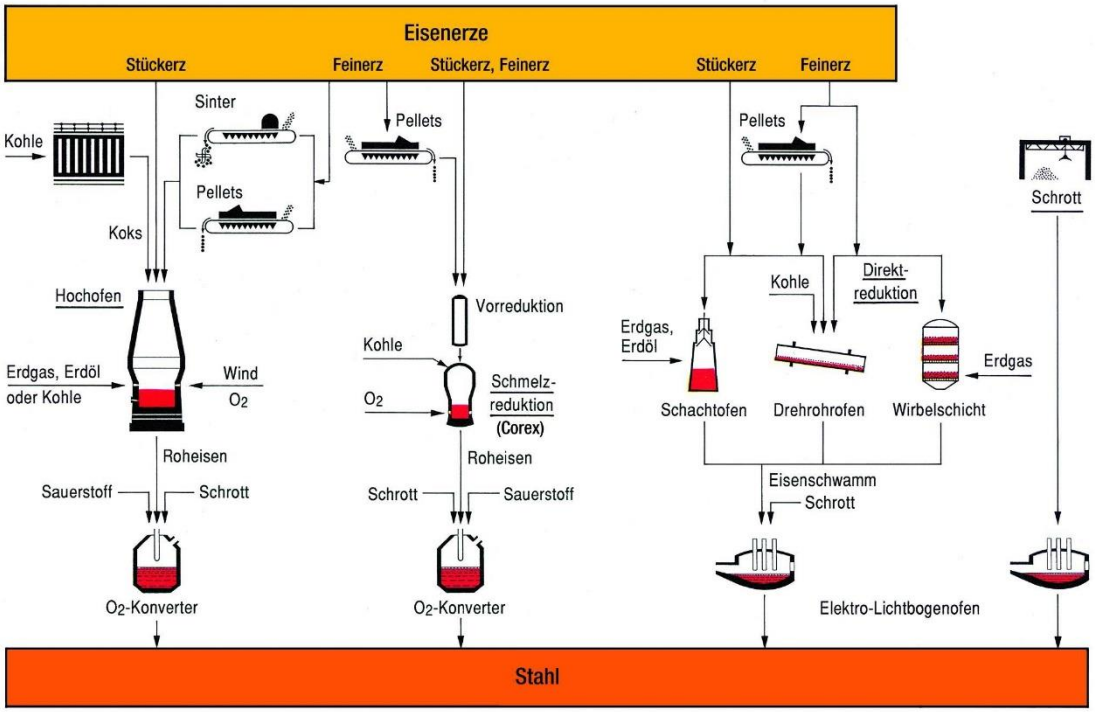


*Abbildung 6: Übersicht verschiedener Stahlherstellungsrouten. Links: Koks-, Hochofen-, Konverterroute. Mitte: Schmelzreduktion. Rechts: Elektro-Lichtbogenofen. [18]*

## 3.4.1 Hochofen

Im Hochofen werden die Rohstoffe am oberen Ende hineingegeben. Wie in den folgenden chemischen Reaktionen zu sehen, reagiert das Eisenerz zu Roheisen. Das Eisenerz liegt zum Großteil als Hematit ($Fe_2O_3$) vor mit einem kleineren Anteil an Magnetit ($Fe_3O_4$). Zuerst reagiert der in der erhitzten Luft enthaltene Sauerstoff mit dem im Koks enthaltenen Kohlenstoff zu Kohlenmonoxid.

$$2\,C + O_2 \rightarrow \; 2\,CO \tag{18}$$

Anschließend reagiert das Eisenerz in mehreren Schritten zu Roheisen, das im Groben wie in der folgenden Reaktionsgleichung abläuft.

$$Fe_2O_3 + 3\,CO \rightarrow \; 2\,Fe + 3\,CO_2 \tag{19}$$

Im Hochofen liegen verschiedene Temperaturbereiche vor, die dazu führen, dass das Eisenerz in mehreren Schritten zu Roheisen reduziert wird. Neben dem Roheisen fällt ebenfalls Schlacke als Nebenprodukt an, das ein komplexes Gemisch aus verschiedenen Silikaten und anderen Verbindungen ist. Das entstehende $CO_2$ wird bei konventionellen Stahlwerken vor allem thermisch genutzt. [17]

Teilprozesse des Hochofenprozesses sind

- Vorbehandlung des Eisenerzes
- Transport des Eisenerzes

- Betrieb des Hochofens
- Erzeugung des Heißgases
- Hinzugeben der Reduktionsmittel
- Gießen
- Weiterverarbeitung der Schlacke.

### 3.4.2 Koksofen

Im Wesentlichen wird im Koksofen Kohle zum porösen Brennstoff Koks verarbeitet. Die Verwendung von gewöhnlicher Kohle in den nachgelagerten Prozessen funktioniert nicht, weil die entstehenden Gase bei der Verbrennung von Kohle, das Eisen verunreinigen würden. Für die Koksherstellung wird die Kohle unter sauerstofffreier Atmosphäre auf 1000 °C – 1100 °C für 14 – 28 Stunden trockendestilliert, damit die flüchtigen Bestandteile der Kohle entfernt werden. Die Dauer hängt dabei von der Geometrie des Ofens, der Dichte und der gewünschten Qualität des Kokses ab. Neben dem Hauptprodukt Koks fallen Koksofengase an, die bisher v.a. thermisch genutzt werden. Als Ausgangsstoff kommen nur bestimmte Kohlearten in Frage, um den Prozess während der Koksherstellung oder im Hochofen zu optimieren. Zudem können Öle hinzugefügt werden, um das Koks im Anschluss kompakter zu machen.
Im Groben kann aus einer Tonne Kohle 700 kg – 800 kg Koks erzielt werden. Als Nebenprodukt fallen 140 kg – 200 kg Koksofengase an. Diese Zahlen hängen jedoch stark von der Kohlezusammensetzung und der Prozesszeit ab. [17]
Teilprozesse der Koksherstellung sind:

- Kohlevorbehandlung
- Betrieb der Koksofenbatterie (Kohlezufuhr, Erhitzen, Ausdrücken, Löschen)
- Kohlenachbehandlung (Entladen, Lagerung, Transport)
- Koksofengasbehandlung (konventionell: thermische Verwertung, aufkommend: stoffliche Verwertung).

### 3.4.3 Konverter

Der Konverter hat die Aufgabe Unreinheiten (Kohlenstoff, Silizium, Mangan, Phospor) in Oxide zu verwandeln und somit aus dem Roheisen zu entfernen, da diese ungünstige Eigenschaften des Stahls hervorrufen können. Der Kohlenstoffgehalt liegt vorher bei 4% – 5% und wird während des Prozesses auf 0,01% – 0,04% reduziert. [17]
Der Konverterprozess unterteilt sich in die folgenden Teilprozesse:

- Transport des Roheisens vom Hochofen zum Konverter

- Vorbehandlung des Roheisens (Entschwefelung, Schlackeentfernung)
- Umfüllen in den Konverter
- Oxidieren der Unreinheiten
- Zweite metallurgische Behandlung
- Gießen.

### 3.4.4 Zusammensetzung der Prozessgase

Wie in den vorangegangenen Kapiteln kurz erwähnt, werden die Prozessgase üblicherweise thermisch genutzt. Für eine stoffliche Nutzung sind Kenntnisse über die Zusammensetzung dieser erforderlich (vgl. Tabelle 2). [3] Sonstige Gase sind in der Regel Spurengase, die in geringen Mengen auftreten. Zu diesen gehören zum Beispiel Ammoniak, Benzol, Toluol und Xylole. [17] Für das weitere Vorgehen werden die Volumenanteile dieser Verbindungen nicht betrachtet. Der angegebene Anteil von 26% sonstiger Gase des Koksofengases wird für folgende Berechnungen als 26% Methananteil verwendet. Dies deckt sich auch in etwa mit Literaturquellen. [17]

*Tabelle 2: Zusammensetzung Prozessgase Stahlherstellung. [3]*

| | Koksofengas [mol%] | Hochofengas [mol%] | Konvertergas [mol%] |
|---|---|---|---|
| Stickstoff ($N_2$) | 5 | 49 | 14 |
| Wasserstoff ($H_2$) | 61 | 4 | 4 |
| Kohlenmonoxid (CO) | 6 | 25 | 65 |
| Kohlendioxid ($CO_2$) | 2 | 23 | 17 |
| Sonstige | 26 | > 0,1 | > 0,1 |
| Anteil am Volumenstrom [4] | 8 | 89 | 3 |

### 3.4.5 Weitere Technologien

Neben der in dieser Arbeit beschriebenen stofflichen Nutzung der Hüttengase gibt es weitere aufstrebende Technologien zur Stahlerzeugung. Diese produzieren jedoch im Vergleich zum integrierten Hüttenwerk geringere Mengen an Eisen und Stahl. Darunter fallen Technologien zur Direktreduktion, die Methan oder Wasserstoff als Reduktionsmittel verwenden. Dadurch fällt die Verwendung von Koks weg. Ein weiterer erwähnenswerter Prozess ist das Verfahren des zweistufigen Schmelzreduktionsverfahrens, bei dem nicht verkokte Kohle als Reduktionsmittel

verwendet wird. Vertreter dieser Verfahren sind Corex® oder Finex®. 2006 wurden mit dem Verfahren der Direktreduktion ca. 6,8% der Roheisenproduktion hergestellt. Ein sofortiges Umstellen der Hochofenroute hin zur Direktreduktion ist in Anbetracht hoher Investitionskosten in naher Zukunft nicht zu erwarten. [3]

Ein weiteres Verfahren zur Herstellung von Stahl auf Schrottbasis ist der Elektro-Lichtbogenofen. Bei diesem Stahlherstellungsverfahren wird die erforderliche Schmelzwärme aus elektrischer Energie gewonnen und durch einen Lichtbogen auf die zu schmelzenden Rohstoffe übertragen. Neben Stahlschrott können auch andere Roheisenchargen verarbeitet werden. [18]

# 4 METHODEN

## 4.1 Modellierungsmethoden

Prinzipiell werden hier drei verschiedene Modellierungsmethoden, die in der Literatur nicht einheitlich definiert sind, betrachtet.

1. Betriebsoptimierung
2. Strukturoptimierung
3. Superstrukturoptimierung

Die **Betriebsoptimierung** findet das Minimum bzw. Maximum einer Zielfunktion und berücksichtigt dabei alle Zeitschritte und erstellt einen optimalen Fahrplan für den betrachteten Prozess. Die oberen Designgrenzen der Teilprozesse bleiben dabei unangetastet und werden bei der Betriebsoptimierung als obere Designgrenzen der Teilprozesse ausgewählt. Die oberen Designgrenzen sind somit Konstanten. Der Betriebsoptimierung stehen zudem alle Prozesswege offen.

Die **Strukturoptimierung** geht einen Schritt weiter. Sowohl aus ökonomischen wie aus ökologischen Gründen macht es wenig Sinn, immer die obere Designgrenze der Teilprozesse als obere Designgrenze auszuwählen. Deshalb findet hier eine Optimierung hinsichtlich der maximalen Prozesskapazität statt. Die oberen Designgrenzen werden somit als kontinuierliche Variablen behandelt. Hier gilt es zu beachten, dass eine ökologische Optimierung (zum Beispiel $CO_2$-Minimierung) oft einer ökonomischen Optimierung (zum Beispiel Kostenminimierung) entgegenläuft. Wie bei der Betriebsoptimierung auch stehen der Strukturoptimierung alle möglichen Prozesspfade offen.

Durch den Einsatz von Binärvariablen kann bei der **Superstrukturoptimierung** eine Auswahl der Prozesspfade getroffen werden. Dies ist hilfreich, weil dadurch Technologien modellbasiert verglichen werden können. Um diesen Sachverhalt modellieren zu können, müssen hierfür kontinuierliche Variablen mit binären Variablen multipliziert werden. Daraus entstehen jedoch nichtlineare Terme, die entsprechend mathematisch umformuliert werden müssen, damit lineare Solver diesen neuen Sachverhalt lösen können (vgl. Kapitel 4.3).

Abbildung 7 zeigt eine schematische Übersicht der genannten Optimierungsmethoden. Die Komplexität der Optimierungsmethoden steigt von der Betriebsoptimierung, über die Strukturoptimierung hin zur Superstrukturoptimierung an.

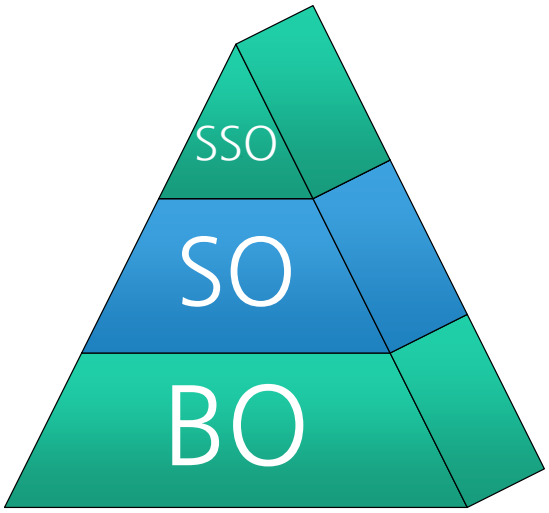


*Abbildung 7: Schematische Übersicht der Optimierungsmethoden. BO: Betriebsoptimierung. SO: Strukturoptimierung. SSO: Superstrukturoptimierung.*

## 4.2 Modellierung der Teilprozesse

Im Wesentlichen besteht die zu modellierende Superstruktur aus

1. Speichern
2. Trenneinheiten
3. Konversionseinheiten.

Diese werden anschließend in einem Netzwerk miteinander verbunden.

**Speicher**

Speicher werden durch folgende Parameter charakterisiert:

1. Maximal erlaubter Speicherfüllstand
2. Speicherfüllstand zu Anfang
3. Masseneingangsströme / Massenausgangsströme
4. Massenerhaltungsgleichungen

**Trenneinheiten**

Die hier modellierten Trenneinheiten sind die in Kapitel 4.4.1 bis 4.4.4 beschriebenen Trennverfahren des Membrantrennverfahrens, der Druckwechseladsorption, Aminwäsche und der physikalischen Adsorption. Obwohl diese Trenneinheiten technisch unterschiedlich konstruiert sind, können diese ähnlich modelliert werden. Wichtige Parameter sind hier:

1. Maximal erlaubter Massenstrom
2. Minimal erlaubter Massenstrom
3. Trennfaktoren für die verschiedenen Komponenten (zum Beispiel 95%ige Abtrennung von $CO_2$)

4. Teillastverhalten (zum Beispiel der Massenstrom muss mindestens 10% des maximal erlaubten Volumenstroms sein)
5. Gradientenverhalten (zum Beispiel der Massenstrom darf nicht mehr als 30% vom vorhergegangenen Zeitschritt abweichen - in beide Richtungen)
   Diese Information ist wichtig, damit hohe Lastsprünge vermieden werden. Real existierende Anlagen können unter Umständen damit nicht umgehen.
6. Verbrauch elektrischer Energie
7. Nichtnegativitätsbedingungen (Massenströme dürfen keine negativen Werte annehmen)

Die Gesamtmassen- und Teilströme fließen als kontinuierliche Variablen in das Modell ein, während die oben genannten Parameter als Nebenbedingungen in das Modell hineinfließen. Der Verbrauch elektrischer Energie ist proportional zum eingehenden Gasstrom und wird anschließend in $CO_2$-Emissionen umgerechnet. Der in der Modellierung beschriebene Kondensator ist ähnlich wie die anderen Trenneinheiten aufgebaut. Wichtig ist hier die Berücksichtigung des Wärmetransports innerhalb dieser Einheit.

**Konversionseinheiten**

Die in das Modell übersetzten Konversionseinheiten sind modellierte Reaktoren, die eingehende Stoffe mittels chemischer Reaktionen verfahrenstechnisch umwandeln. Darunter fallen die Methanpyrolyse, der Wassergas-Shift-Reaktor, der Methanator sowie die Fackel. Auch hier können diese Reaktoren ähnlich modelliert werden.

Folgende Parameter sind für die vollständige Modellierung notwendig:

1. Maximal erlaubter Massenstrom
2. Minimal erlaubter Massenstrom
3. Teillastverhalten
4. Gradientenverhalten
5. Nichtnegativitätsbedingungen
6. Stöchiometrische Faktoren der Reaktionsgleichungen
7. Reaktionsenthalpien
8. Umsatzgrade

Die Punkte 1. - 5. werden als Nebenbedingungen in das Modell eingepflegt. Mit den stöchiometrischen Faktoren und mit den Umsatzgraden werden die Komponentenmassenströme berechnet. Die Reaktionsenthalpien werden für die benötigte Wärme- bzw. Kühlleistung angesetzt. Es wird angenommen, dass die benötigte Wärme- bzw. Kühlleistung ohne Verluste abgeführt bzw. eingebracht wird, sodass die Energiemenge direkt in $CO_2$-Emissionen umgerechnet werden.

## 4.3 Produkte aus binären und einer kontinuierlichen Variablen

Superstrukturen verwenden Produkte aus binären und einer kontinuierlichen Variablen, um das (Nicht-)Berücksichtigen verschiedener Technologien zu formulieren. Diese haben die allgemeine Form

$$y = x \prod_{k=1}^{K} \delta_k \tag{20}$$

mit der kontinuierlichen Variablen $x$ und K binären Variablen $\delta_k$. Damit gängige MILP-Solver das Produkt aus Formel 20 lösen können, muss dieser mit den folgenden Ungleichungen linearisiert werden.

$$\forall k : y \leq X^+ \delta_k \quad , \quad y \leq x \quad , \quad y \geq x - X^+ \left( K - \sum_{k=1}^{K} \delta_k \right) \tag{21}$$

wobei $X^+$ die obere Schranke von $x$ repräsentiert. [5]

**Übersetzen von Produkten binärer und einer kontinuierlichen Variablen in einen MATLAB-Code**

Ein Produkt aus zwei Binär- und einer kontinuierlichen Variablen kommt bei Problemstellungen vor, bei denen durch die Superstruktur Technologien berücksichtigt oder verworfen werden und bei denen eine zweite Binärvariable das An- bzw. Abschalten von Technologien berücksichtigt. Die kontinuierliche Variable $x$ repräsentiert einen nichtnegativen Wert wie zum Beispiel einen Massen- oder Volumenstrom.

Wie zuvor beschrieben, kann dieses Problem in eine Reihe Ungleichungen übersetzt werden. In diesem konkreten Fall resultieren daraus vier Ungleichungen sowie die Nichtnegativitätsbedingung mit den Binärvariablen für die Technologieauswahl $\delta_{\mathrm{S}}$ (bleibt über gesamten Betrachtungszeitraum konstant) und denen für das Ein- und Abschalten der betrachteten Technologien $\delta_{\mathrm{onoff},t}$ (kann Wert über Zeitschritte ändern).

1. $y \leq X^+ \delta_{super}$
2. $y \leq X^+ \delta_{\mathrm{onoff},t}$
3. $y \leq x$
4. $y \geq x - X^+ \left( 2 - \delta_{super} - \delta_{\mathrm{onoff},t} \right)$
5. $y \geq 0$

(22)

Dabei stellt $X^+$ die obere Grenze der kontinuierlichen Variable $x$ dar. In diesem Fall kann das der maximal einstellbare Massen- oder Volumenstrom sein.

## 4.4 Verfahrenstechnische Einheiten

In den folgenden Kapiteln werden kurz die Trenn- und Konversionsverfahren vorgestellt, die im Testcase und den anderen Optimierungsmodellen eingesetzt werden.

### 4.4.1 Membrantrennverfahren

Membranen sind flächige und teildurchlässige Strukturen, die eine Komponente des eintretenden Gases oder Flüssigkeit zurückhält und für eine andere Komponente durchlässig ist.

Der Trenneffekt kann ähnlich wie ein Sieb auf der Porengröße der Membran (Porenmembran) beruhen, die die beiden austretenden Ströme voneinander trennt. Ein weiterer Trenneffekt basiert auf der unterschiedlichen Löslichkeit der zu trennenden Gase in der Membran (Diffusionsmembran). Da die Prozessgase in der Stahlherstellung nur kleine Molekülgrößenunterschiede aufweisen, sind in diesem Bereich nur Diffusionsmembranen von Bedeutung.

Treibende Kraft des Membrantrennverfahrens ist die Partialdruckdifferenz des zu trennenden Gases zwischen Permeat- und Retentatseite. Als zentrale Merkmale eines Membrantrennverfahrens sind in jedem Fall die Selektivität, also die Fähigkeit zwei Stoffe voneinander zu trennen, und die Leistungsfähigkeit, also der mögliche Permeatfluss, zu nennen.

Schematisch und stark vereinfacht wird ein Membrantrennverfahren wie in Abbildung 8 dargestellt. In der Anwendung werden zusätzlich noch Kompressoren oder Kaskaden eingesetzt. [19]

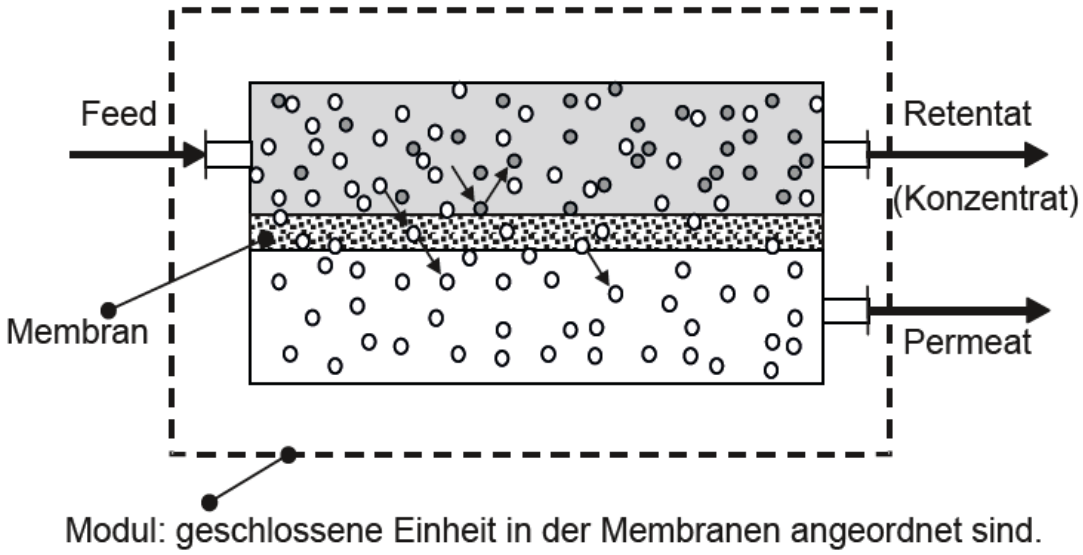


*Abbildung 8: Schematische Darstellung eines Membrantrennmoduls. [19]*

### 4.4.2 Druckwechseladsorption

Die Druckwechseladsorption (engl., pressure swing adsorption, PSA) basiert auf dem unterschiedlichen Adsorptionsverhalten verschiedener Gase. Als Adsorbens werden Aktivkohle, Molekularsiebe oder Kohlenstoffmolekularsiebe eingesetzt, die zum Beispiel Kohlendioxid leichter als Methan an sich binden und dieses somit aus dem Gasgemisch entfernen. Üblich ist feingemahlene, geformte und anschließend thermische behandelte Steinkohle. Das Gasgemisch wird vorher komprimiert, entschwefelt und von Wasser befreit. Von Vorteil sind zudem Temperaturen von ca. 5 °C und Drücke von 2 bis 7 bar. Nach vollständiger Beladung des Adsorbens, wird der Gasstrom auf einen anderen Adsorber umgeleitet, während der erste vollständig unter Vakuum evakuiert und für einen neuen Zyklus regeneriert wird. [20]

### 4.4.3 Aminwäsche

Das Verfahren der Aminwäsche ist ein Teilgebiet der chemischen Absorption, stammt aus der petrochemischen Industrie und wird in einer Vielzahl von Industriezweigen erfolgreich eingesetzt. Der zu trennende Gasstrom tritt im unteren Bereich der Kolonne ein, während die Aminlösung im oberen Bereich eingeleitet wird und das Kohlendioxid im Gegenstromprinzip chemisch absorbiert. Am Kolonnenkopf tritt der gereinigte Gasstrom aus und die mit $CO_2$ beladene Aminlösung wird in den Desorber geleitet. Dort wird das Kohlendioxid durch Erwärmen aus der Aminlösung entfernt. Um den Stoff- und Wärmeübergang zu erhöhen, können Böden, Füllkörper und Packungen in die Kolonne eingesetzt werden.

Die chemische Absorption erfolgt nach den folgenden beiden chemischen Reaktionen:

$$2\,\mathrm{RNH_2} + \mathrm{CO_2} \rightarrow \mathrm{RNH_3^+} + \mathrm{RNHCOO^-} \tag{23}$$

$$\mathrm{RNH_2} + \mathrm{CO_2} + \mathrm{H_2O} \rightarrow \mathrm{RNH_3^+} + \mathrm{HCO_3^-} \tag{24}$$

Das R steht für einen organischen Rest.

Anschließend wird im Desorber die $CO_2$-haltige Lösung erwärmt, sodass das gebundene $CO_2$ ausgetrieben wird. Das nun regenerierte Waschmittel kann für einen neuen Absorptionszyklus eingesetzt werden. [21]

### 4.4.4 Physikalische Absorption

Im Gegensatz zur chemischen Absorption wird das zu absorbierende Gas nicht chemisch umgewandelt, sondern durch zwischenmolekulare Wechselwirkungen in der Absorptionsflüssigkeit festgehalten. Vorteilhaft ist die physikalische Absorption bei hohem Partialdruck und großer vorliegender Menge der zu trennenden Komponente (oft $CO_2$). Die abzutrennende Komponente wird hier molekular am Waschmittel gebunden und im Anschluss im Desorber vom Waschmittel separiert. Das nun regenerierte Waschmittel kann für weitere Waschzyklen verwendet werden.

Von besonderer Bedeutung ist das Rectisolverfahren der Lizenzgeber Lurgi und Linde, bei dem Methanol als Waschmittel eingesetzt wird. Aufgrund der hohen Flüchtigkeit von Methanol bei Raumtemperatur wird der Prozess bei einer Temperatur zwischen -75 °C und -60 °C gefahren. Während der Absorption von $CO_2$ erwärmt sich das Waschmittel auf -20 °C. Die Beladungskapazität dieses Waschmittels bleibt bei diesem Verfahren im Vergleich zu anderen Waschmitteln auch bei niedrigen Temperaturen hoch. Ein weiterer Vorteil liegt in der Stabilität und in der relativ einfachen Handhabung des eingesetzten Waschmittels. Jedoch ist eine zusätzliche Kühleinheit erforderlich, um das niedrige Temperaturniveau zu erreichen. Diese macht das Verfahren oft unrentabel, weshalb dieses Verfahren nur bei schwierigen Anwendungen wie bei Kohlevergasungen Verwendung findet. [22]

### 4.4.5 Parametrierung der Trenneinheiten

Die folgenden Parameter entstammen einem Technologievergleich von Gastrenneinheiten zur Reinigung von Biomethan. Die dort enthaltenen Parameter werden entsprechend umgerechnet und vereinfachend für die Gasreinigung von Hüttengasen verwendet. Für die Modellparametrierung werden die jeweils höchsten angegebenen Werte) genutzt. [23] Für die Umrechnung der angegebenen Volumenströme wird die Dichte von Methan von 0,65941 $kg \times m^{-3}$ (20 °C, 1 bar) angenommen [24].

*Tabelle 3: Parameter der Trenneinheiten. [23]*

| Parameter | Physikalische Absorption | Aminwäsche | PSA | Membran-trennverfahren |
|---|---|---|---|---|
| Typische Anlagenkapazität in $m^3 \times h^{-1}$ | 300 – 1.500 | 400 – 2.000 | 300 - 800 | 50 - 500 |
| Elektrischer Energiebedarf in $kWh \times m^{-3}$ | 0,49 – 0,67 | 0,27 | 0,46 | 0,25 – 0,43 |
| Typische Anlagenkapazität in $t \times h^{-1}$ | 0,216 – 1,080 | 0,288 – 1,440 | 0,216 – 0,576 | 0,036 – 0,360 |
| Elektrischer Energiebedarf in $kWh \times t^{-1}$ | 747,0 – 1.016,7 | 409,7 | 698,0 | 381,1 – 652,5 |
| Abtrennrate in % | 96 | 99,96 | 98 | 80 – 99,8 |

### 4.4.6 Kondensator

In der Verfahrenstechnik dient ein Kondensator dient dazu, einen gasförmigen Stoff in die flüssige Phase zu überbringen. In dieser Arbeit wird ausschließlich Wasser kondensiert. Um dies zu ermöglichen, muss die im heißen Wasserdampf enthaltene Energie abgeführt werden. Dafür muss zunächst die Temperatur des Wasserdampfes auf die Kondensationstemperatur herabgesetzt werden, die latente Wärme abgegeben und anschließend das nun flüssige aber noch heiße Wasser auf die gewünschte Temperatur gebracht werden. Für den Wärmetransport des ersteren und letzteren Vorgangs kann die abgeführte Wärme über die Wärmekapazität von Wasserdampf bzw. flüssigen Wasser ermittelt werden. Wie die Wärmekapazität auch ist die Menge an abzugebender latenter Wärme temperatur- und druckabhängig. Für beide Vorgänge sind Funktionen im Modell hinterlegt, die diese druckabhängigen abzuführenden Wärmemengen berechnen können. [25] [26]

### 4.4.7 Methanpyrolyse

Die Methanpyrolyse ist ein Prozess zur Produktion von Wasserstoff und reinem Kohlenstoff. Wasserstoff ist ein wichtiges Industriegas und spielt in der Energiewende eine immer größer werdende Rolle. Der anfallende Kohlenstoff kann zum Beispiel in der metallurgischen Industrie eingesetzt werden. Die endotherme Pyrolysereaktion wird durch die untenstehende Reaktionsgleichung formuliert:

$$\mathrm{CH_4} \rightleftharpoons \mathrm{C} + 2\,\mathrm{H_2}\,, \Delta \mathrm{H_R^0} \;=\; +74{,}8\,\mathrm{kJ} \times \mathrm{mol^{-1}} \tag{25}$$

Die benötigte Energie kann elektrisch oder durch die Verbrennung von Methan und der Pyrolyseprodukte bereitgestellt werden. Es werden bereits viele verschiedene Prozesse zum Nutzbarmachen der oben genannten Reaktion beschrieben, die unter anderem Katalysatoren oder Plasmareaktionen verwenden. Für das weitere Vorgehen wird jedoch nur das thermische Cracken von Methan berücksichtigt. Bei diesem Prozess ist aufgrund der thermischen Stabilität eine 100%ige Umsetzung ab einer Temperatur von 1000 °C und einem Druck von einem bar zu beobachten. [27]

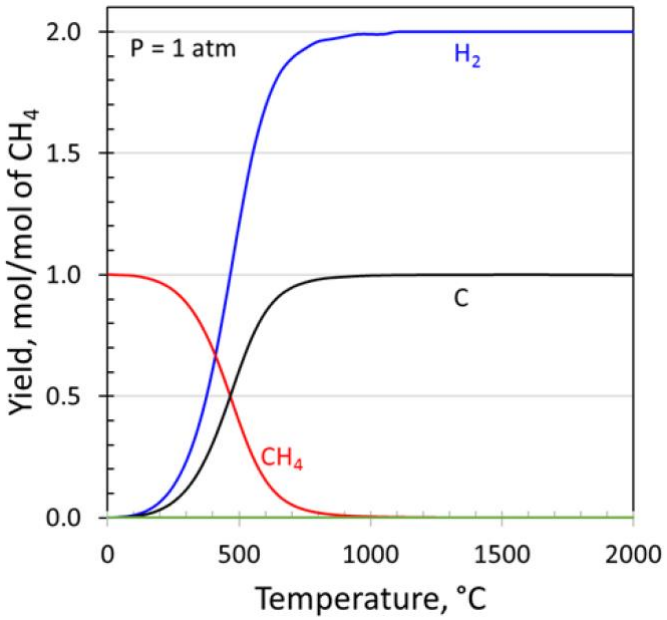


*Abbildung 9: Temperaturabhängigkeit der Ausbeute eines Pyrolysereaktion bei einem Druck von einem bar. [27]*

### 4.4.8 Wassergas-Shift-Reaktor

Im Wassergas-Shift-Reaktor wird Kohlenmonoxid und Wasser katalytisch zu Kohlendioxid und Wasserstoffgas umgesetzt. Die exotherme Reaktion läuft bevorzugt bei niedrigen Temperaturen ab. Um ein konstantes Temperaturniveau und somit hohe Umsatzraten zu gewährleisten, werden Wärmetauscher in den Prozess integriert. Als Katalysator wird mit Zink oder Chrom beschichtetes Eisen- oder Kupferoxid verwendet. Außerdem läuft der Prozess in einem Temperaturbereich zwischen 330 und 530 °C. Die Selektivität liegt bei 100%, während die Umsatzrate bei 99,8% liegt. [28]

$$\mathrm{CO} + \mathrm{H_2O} \rightleftharpoons \mathrm{CO_2} + \mathrm{H_2}\,, \Delta \mathrm{H_R^0} = -41{,}1\ \mathrm{kJ} \times \mathrm{mol^{-1}} \tag{26}$$

### 4.4.9 Methanator

Die Methanisierungsreaktionen von Kohlenmonoxid und Kohlendioxid wurden bereits im 20. Jahrhundert großtechnisch nutzbar gemacht. Dabei werden die Synthesegase CO und $CO_2$ katalytisch in den folgenden Methanisierungsreaktionen zu Methan umgesetzt.

$$\mathrm{CO} + 3\,\mathrm{H_2} \rightleftharpoons \mathrm{CH_4} + \mathrm{H_2O}\,,\ \Delta \mathrm{H_R^0} = -206{,}4\ \mathrm{kJ} \times \mathrm{mol^{-1}} \tag{27}$$

$$\mathrm{CO_2} + 4\,\mathrm{H_2} \rightleftharpoons \mathrm{CH_4} + 2\,\mathrm{H_2O}\,,\ \Delta \mathrm{H_R^0} = -164{,}9\ \mathrm{kJ} \times \mathrm{mol^{-1}} \tag{28}$$

Der Temperatur- und Druckbereich liegt zwischen 200 und 750 °C und 4 und 80 bar. Die Umsatzrate liegt zwischen 80 und 95%. Für eine wirtschaftliche Prozessführung werden in der Regel Nickel-Katalysatoren eingesetzt. Als Reaktoren kommen Festbett-, Wirbelschicht- und Drei-Phasen-Reaktoren infrage. [29]

### 4.4.10 Parametrierung der Konversionsprozesse

In Tabelle 4 ist eine Übersicht über die wichtigen Parameter der in Kapitel 4.4 vorgestellten Konversionsprozesse zu sehen. In dieser Arbeit sind nur die Reaktionsenthalpien von Bedeutung. Weitere Parameter wie Prozesstemperatur oder –drücke werden hier vernachlässigt. Die Umsatzraten werden für alle Prozesse auf 100% gesetzt.

*Tabelle 4: Reaktionsenthalpien der Konversionsprozesse.*

| Parameter | Methanpyrolyse | Wassergas-Shift-Reaktor | Methanator |
|---|---|---|---|
| Reaktionsenthalpie in $kJ \times mol^{-1}$ | + 74,8 | – 41,1 | 1. – 206,4<br>2. – 164,9 |

## 4.5 Gaszeitreihe

Als Berechnungsgrundlage der Optimierungsmodelle dient eine fiktive Gaszeitreihe, die einen Hüttengasmassenstrom über die Zeit abbildet. Die Gaszeitreihe soll möglichst dynamisch verlaufen. Zudem soll sie eine Auflösung von 15 Minuten aufweisen. Dafür dient ein entwickeltes Excel-basiertes Tool, das zwei verschiedene periodische Funktionen berechnet. Jeweils eine für den Gasstrom aus dem Hochofen und Koksofen. Die Amplitude, die Frequenz, ein Richtwert des Volumenstroms der periodischen Funktionen und die Anzahl der zu berechnenden Tage sind einstellbar. Zudem ist es möglich, die Zusammensetzung der Teilströme zu hinterlegen. Beispielhaft ergibt sich daraus der folgende Hochofen- bzw. Koksofengasstrom für zwei Tage (s. Abbildung 10).

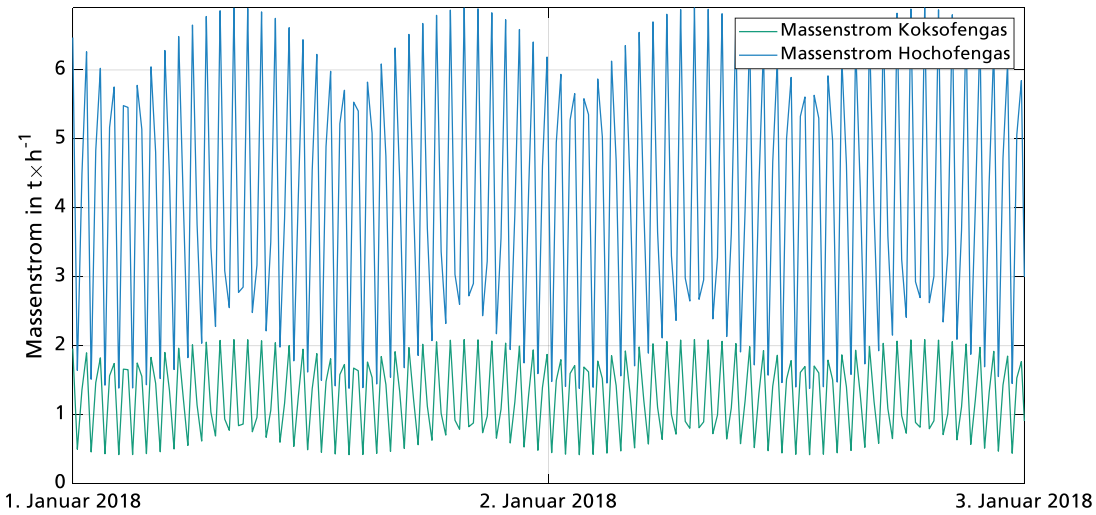


*Abbildung 10: Zeitlicher Verlauf eines Hochofen- und Koksofengasstroms.*

## 4.6 Energiebedingte Emissionen

Für eine Optimierung der Modelle hinsichtlich $CO_2$-Reduzierung sind Informationen der $CO_2$-Emissionen je produzierter kWh elektrischer Energie nötig. Eine bereitgestellte $CO_2$-Zeitreihe (Agorameter) von Agora-Energiewende [30] zeichnet die $CO_2$-Emissionen je produzierter kWh elektrischer Energie (in $g_{CO2} \times kWh^{-1}$) in stündlicher Auflösung auf. Dabei werden die bereitgestellten Werte auf eine viertelstündige Auflösung übertragen, um eine exakte Überlagerung der Werte der $CO_2$-Zeitreihe mit denen der Gaszeitreihe zu gewährleisten. In die $CO_2$-Belastung fließen die Mengen an stündlich produzierter Energie aus fossilen Energieträgern (Braunkohle, Steinkohle, Erdgas), regenerativ produzierter Energie (Biomasse, Solarenergie, Windkraft) und Kernenergie ein. Ebenfalls berücksichtigt werden die Mengen an importierter bzw. exportierter Energie. Berücksichtigt werden Werte aus dem Jahr 2018. Wie in Abbildung 11 zu erkennen, unterliegt der Verlauf der Stromerzeugung durch Solarenergie (dunkelgrüne Linie) großen periodischen Schwankungen, die durch den Tag-Nacht-Zyklus und anderen Wettereinflüssen begründet sind. Der Verlauf der erzeugten Energie durch (Onshore-) Windkraftanlagen (hellgrüne Linie) unterliegt ebenfalls aufgrund von Wettereinflüssen großen Schwankungen. Wegen technischer Limitierungen bewegt sich der Verlauf von durch Atomkraft bereitgestellte Energie (rot-gestrichelte Linie) auf einem relativ konstanten Grundlastniveau, der niedrige Gradienten aufweist. Etwas höhere Gradienten sind beim Verlauf der Braunkohleenergie (schwarz-gepunktete Linie) zu beobachten. Durch die Kombination dieser Energieträger entstehen jeweils unterschiedlich hohe $CO_2$-Emissionen, die summiert zu zeitlichen Schwankungen der $CO_2$-Emissionen (blaue Linie) in der Energieinfrastruktur führen. Dabei verantworten regenerative Energieträger geringere $CO_2$-Emissionen als fossile Energieträger wie Kohle, Erdöl und Erdgas. Zu erwähnen ist noch, dass der in Abbildung 11 abgebildete Verlauf sich in einem Sommermonat befindet. In Wintermonaten ändern sich die Verläufe wetterbedingt entsprechend. Ebenfalls ist auf die Reaktion der $CO_2$-Emissionen auf den Verlauf der Solarenergie hinzuweisen. Sobald Spitzen im Verlauf der Solarenergie zu

beobachten sind, sinken die $CO_2$-Emissionen je kWh gleich wieder. Der umgekehrte Effekt ist ebenfalls zu erkennen.

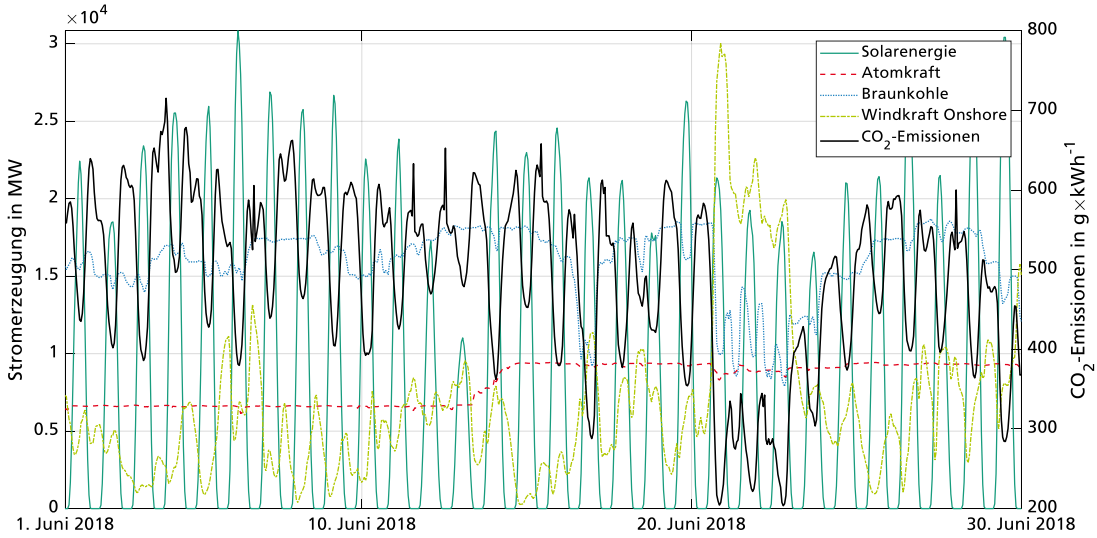


*Abbildung 11: Zeitlicher Verlauf ausgewählter Energieträger und der $CO_2$-Emissionen je kWh für den Zeitraum Juni 2018. Eigene Abbildung aus Daten aus Agorameter. [30]*

Im gesamten Jahr 2018 wurden ca. 39% der bereitgestellten Energie durch regenerative, ca. 47% durch fossile Energieträger und ca. 12% durch Atomkraft erzeugt. Abbildung 12 zeigt eine detaillierte Aufschlüsselung. [30]

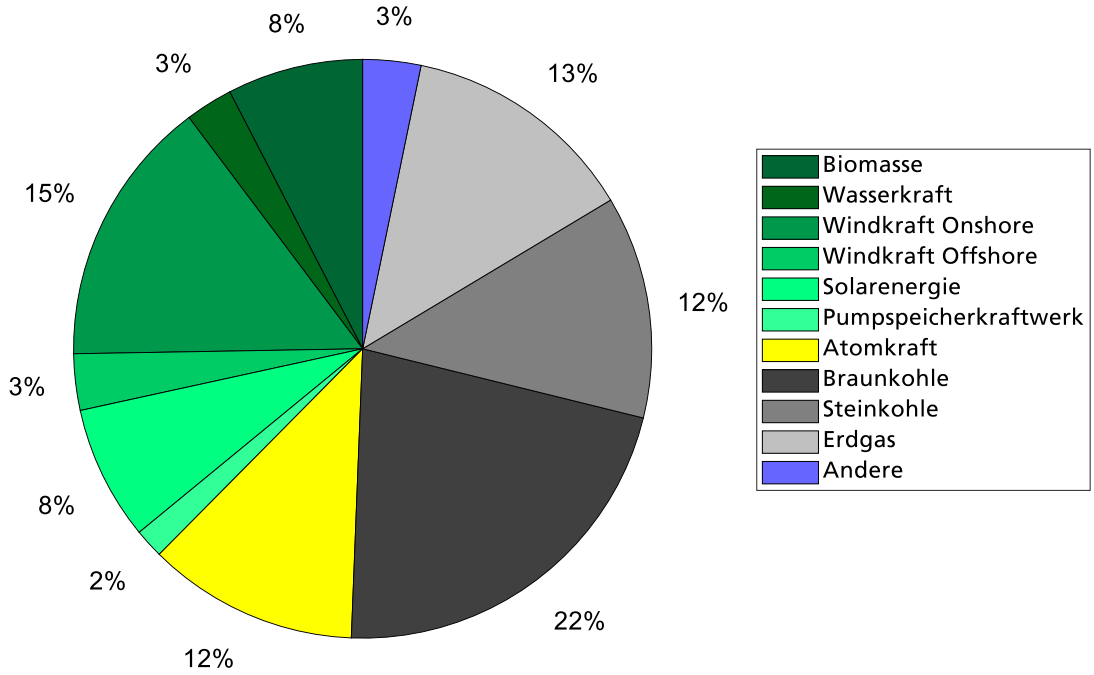


*Abbildung 12: Anteile verschiedener Energieträger an der gesamten deutschen Stromproduktion (2018). Eigene Abbildung aus Daten aus Agorameter. Legende gegen Uhrzeigersinn. [27]*

Die $CO_2$-Emissionen, die durch den Bezug elektrischer Energie entstehen, werden gemäß GHG (Greenhouse Gas) Protocol dem Scope 2 zugeordnet. Direkte $CO_2$-Emissionen, die zum Beispiel bei Verbrennungsprozessen entstehen, fallen unter Scope 1 und weitere

$CO_2$-Emissionen, die nicht Scope 2 zugeordnet werden, fallen unter Scope 3. Darunter sind $CO_2$-Emissionen zu verstehen, die in der vor- und nachgeschalteten Wertschöpfungskette entstehen wie zum Beispiel Hilfs- und Betriebsmittel [31]. Diese werden bei den in dieser Arbeit betrachteten Optimierungsmodellen jedoch nicht weiter verfolgt (vgl. Abbildung 13).

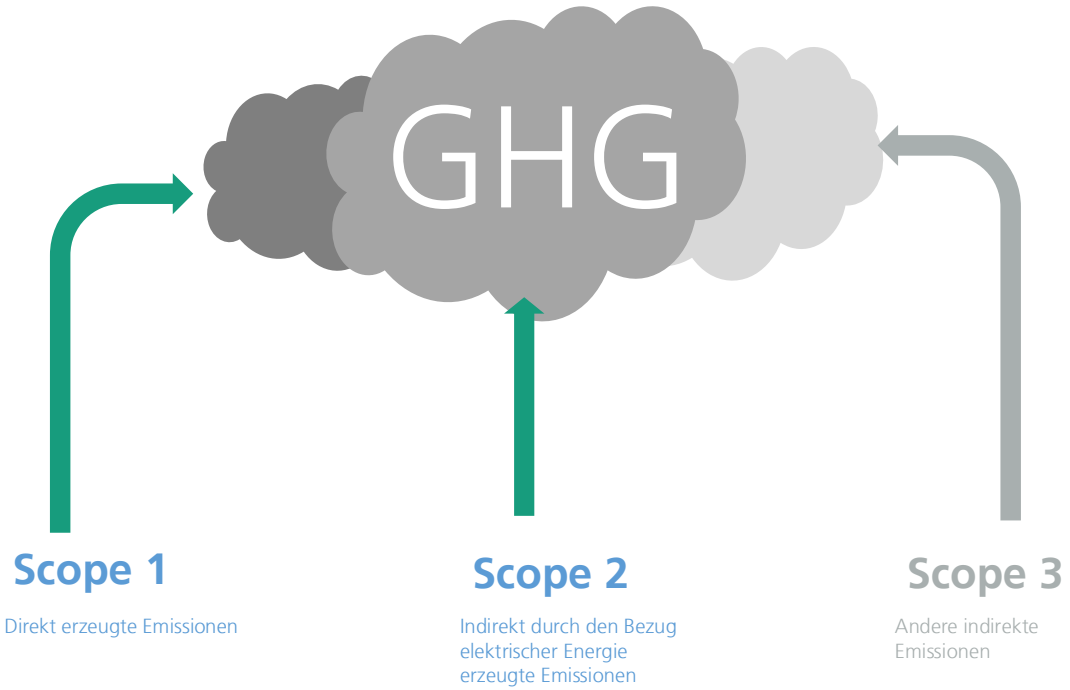


*Abbildung 13: Scope 1, 2 und 3 -Emissionen gemäß Greenhouse Gas (GHG) Protocol.*

## 4.7 Modellierung Methanpyrolyse und Implementierung des Superstrukturfeatures

Die Modellierung in eine MATLAB-Umgebung am Beispiel des Pyrolyseprozesses (vgl. Abbildung 14) erfolgt wie in den folgenden beschriebenen Schritten. Zum Schluss wird die Implementierung des Superstrukturfeatures am Beispiel einer Aminwäscheeinheit gezeigt.

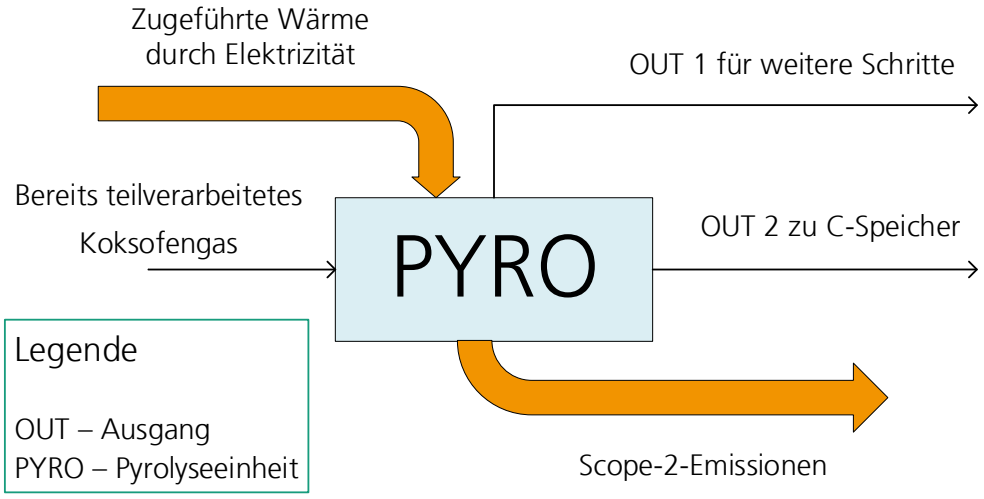


*Abbildung 14: Schematische Darstellung des modellierten Pyrolyseprozesses.*

Zuerst wird die obere und untere Designgrenze der Prozesseinheit definiert. Die obere Designgrenze ist der größte Wert, der in der Koksofengaszeitreihe auftritt.

$$\dot{m}_{design,max} = \max(\dot{m}_{COG}) \tag{29}$$

Die untere Designgrenze beträgt 10% von diesem Wert.

$$\dot{m}_{design,min} = 0{,}1 \times \max(\dot{m}_{COG}) \tag{30}$$

Danach werden die stöchiometrischen Faktoren als siebenteilige Zahlenfolge für die im Prozess wichtigen Substanzen niedergeschrieben. Wie üblich werden die in der Reaktion entstehenden Produkte mit einem positiven Vorzeichen gekennzeichnet, während die Edukte mit einem negativen Vorzeichen versehen werden.

*Tabelle 5: Stöchiometrische Koeffizienten des Pyrolyseprozesses.*

| | $CO_2$ | CO | $H_2$ | $CH_4$ | $N_2$ | $H_2O$ | C |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\nu_i$ | 0 | 0 | 2 | - 1 | 0 | 0 | 1 |

Die Zahlenfolge für die i Substanzen wird so in die Umgebung implementiert. Die Zahlenfolge wird mit einem Effizienzfaktor $\mathrm{E}$ versehen, um eine eventuell unvollständige Umsetzung zu berücksichtigen. Dieser Faktor hat hier den Wert 1 (entspricht also 100%iger Umsetzung).

$$\nu_i = \mathrm{E} \times [0\ 0\ 2\ -1\ 0\ 0\ 1] \tag{31}$$

Die Reaktionsenthalpie wird in kJ×mol$^{-1}$ in das Modell eingegeben.

$$\Delta \mathrm{H}_\mathrm{R}^0 = 74{,}9 \tag{32}$$

Je nach Einstellung im Konfigurationsskript wird das Teillastverhalten eingestellt. Dies wird durch einen Schalter zur Aktivierung und den Werten 0 und 1 (0 = nicht aktiv, 1 = aktiv) gesteuert. Bei Berücksichtigung wird der Teillastfaktor (TF) 0,1 (10%) und bei Vernachlässigung 0,0 (0%) gewählt.

```
Wenn Teillastverhalten aktiv, dann
```

$$TF_{min} = 0{,}1 \tag{33}$$

```
Wenn nicht, dann
```

$$TF_{min} = 0{,}0 \tag{34}$$

Die obere Teillastgrenze wird mit 1 angegeben.

$$TF_{max} = 1 \tag{35}$$

Ebenso wird eine einschränkende Option für die dynamische Fahrweise angegeben. Diese Option ist notwendig, da real existierende Anlagen hohe Lastsprünge oft nicht bewältigen können. Wie in Formel 36 beispielhaft zu sehen, darf dort durch den Gradientenfaktor (GF) der Massenstrom 10% vom vorausgegangenen Zeitschritt dt abweichen. Auch hier lässt sich die Aktivierung im Konfigurationsskript steuern.

```
Wenn Gradientenverhalten aktiv, dann
```

$$GF = 0{,}1 \times dt \tag{36}$$

```
Wenn nicht, dann
```

$$GF = 1 \tag{37}$$

Zudem müssen die Variablen definiert werden, die im Modell Verwendung finden. Die meisten der hier verwendeten Variablen sind kontinuierliche Variablen. Dabei sind die Dimensionen der Variablen unterschiedlich. Nach der Konvention des Modells beschreibt die erste Dimension die Zeitschritte, die zweite die verschiedenen Komponenten und die dritte Dimension einen von mehreren Strömen, falls ein Prozess zwei Ausgänge hat.

*Tabelle 6: Kontinuierliche Variablen des Pyrolyseprozesses.*

| Beschreibung | kontinuierliche Variablen | Dimensionen |
|---|---|---|
| Eingehender Massenstrom über Zeit | $\dot{m}_{t,ein}$ | $t_{ges}$,1,1 |
| Eingehender komponentenweiser Massenstrom über Zeit | $\dot{m}_{t,i,ein}$ | $t_{ges}$,7,1 |
| Ausgehende Massenströme über Zeit | $\dot{m}_{t,aus}$ | $t_{ges}$,1,2 |
| Ausgehender komponentenweiser Massenstrom über Zeit | $\dot{m}_{t,i,aus}$ | $t_{ges}$,7,2 |
| Obere Designgrenze | $\dot{m}_{max}$ | 1 |
| Ausgehender Wärmestrom | $\dot{Q}_t$ | $t_{ges}$,1,1 |
| Ausgehende $CO_2$-Emissionen | $\dot{m}_{t,CO_2}^{Sc2}$ | $t_{ges}$,1,1 |

Darauf folgen die grundlegenden Nebenbedingungen (kurz: NB), die auch verschiedene Nichtnegativitätsbedingungen beinhalten.

$$NB: \dot{m}_{t,ein} \leq \dot{m}_{max} \tag{38}$$

$$NB: \dot{m}_{t,ein} \geq 0 \tag{39}$$

$$NB: \dot{m}_{t,i,ein} \geq 0 \tag{40}$$

$$NB: \dot{m}_{t,aus} \geq 0 \tag{41}$$

$$NB: \dot{m}_{t,i,aus} \geq 0 \tag{42}$$

$$NB: \dot{m}_{max} \geq 0 \tag{43}$$

$$NB: \dot{m}_{design,min} \leq \dot{m}_{max} \leq \dot{m}_{design,max} \tag{44}$$

Für den Fall der Betriebsoptimierung und nicht der Strukturoptimierung wird die Nebenbedingung in das Modell eingesetzt, die besagt, dass die der maximal erlaubte Massenstrom der oberen Designgrenze entspricht.

```
Wenn Strukturoptimierung nicht aktiv, dann
```

$$NB: \dot{m}_{max} = \dot{m}_{design,max} \tag{45}$$

**Dynamische Grenzen**

Die erste dynamische Nebenbedingung beschreibt, dass der Betrag der Differenz zwischen des gesamten eingehenden Massenstroms zum Zeitpunkt t+1 und t nicht größer sein darf als durch das Produkt aus vorher definiertem Gradientenfaktor (GF) und der Variable des maximalen Massenstroms (vgl. Formel 46). Diese Einschränkung ist wichtig, da hohe Schwankungen im Fahrbetrieb für verfahrenstechnische Anlagen ungünstig sind.

$$NB: -GF \times \dot{m}_{max} \leq \dot{m}_{t+1,ein} - \dot{m}_{t,ein} \leq GF \times \dot{m}_{max} \tag{46}$$

Als zweite dynamische Nebenbedingung (vgl. Formel 47) wird das Teillastverhalten mit einbezogen, sodass sichergestellt wird, dass die Anlage mit einem Mindestmassenstrom betrieben wird.

$$NB: TF_{min} \times \dot{m}_{max} \leq \dot{m}_{t,ein} \leq TF_{max} \times \dot{m}_{max} \tag{47}$$

Die ausgehenden Massenströme werden in Form einer Massenbilanz berechnet. Dies geschieht unter Berücksichtigung der stöchiometrischen Faktoren der ablaufenden Reaktion, der entsprechenden molaren Massen und der eingehenden Komponentenströme. Die Komponenten des ersten Ausgangs werden wie in den Formeln 48 bis 54 berechnet. Diese Ströme werden dann für weitere Prozessschritte verwendet.

| | | |
|---|---|---|
| Ausgehender $CO_2$-Strom | $\dot{m}_{t,CO_2,aus1} = \dot{m}_{t,CO_2,ein}$ | (48) |
| Ausgehender CO-Strom | $\dot{m}_{t,CO,aus1} = \dot{m}_{t,CO,ein}$ | (49) |
| Ausgehender $H_2$-Strom | $\dot{m}_{t,H_2,aus1} = \dot{m}_{t,H_2,ein} + \nu_{H_2} \frac{M_{H_2}}{M_{CH_4}} \times \dot{m}_{t,CH_4,ein}$ | (50) |
| Ausgehender $CH_4$-Strom | $\dot{m}_{t,CH_4,aus1} = \dot{m}_{t,CH_4,ein} + \nu_{H_2} \times \dot{m}_{t,CH_4,ein}$ | (51) |
| Ausgehender $N_2$-Strom | $\dot{m}_{t,N_2,aus1} = \dot{m}_{t,N_2,ein}$ | (52) |

| | | |
|---|---|---|
| Ausgehender $H_2O$-Strom | $\dot{m}_{t,H_2O,aus1} = \dot{m}_{t,H_2O,ein}$ | (53) |
| Ausgehender C-Strom | $\dot{m}_{t,C,aus1} = 0$ | (54) |

Der zweite ausgehende Strom wird in einen Speicher geleitet, dessen Inhalt anschließend aus atomaren Kohlenstoff besteht.

| | | |
|---|---|---|
| Ausgehender $CO_2$-Strom | $\dot{m}_{t,CO_2,aus2} = 0$ | (55) |
| Ausgehender CO-Strom | $\dot{m}_{t,CO,aus2} = 0$ | (56) |
| Ausgehender $H_2$-Strom | $\dot{m}_{t,H_2,aus2} = 0$ | (57) |
| Ausgehender $CH_4$-Strom | $\dot{m}_{t,CH_4,aus2} = 0$ | (58) |
| Ausgehender $N_2$-Strom | $\dot{m}_{t,N_2,aus2} = 0$ | (59) |
| Ausgehender $H_2O$-Strom | $\dot{m}_{t,H_2O,aus2} = 0$ | (60) |
| Ausgehender C-Strom | $\dot{m}_{t,C,aus2} = \nu_C \times \frac{M_C}{M_{CH_4}} \times \dot{m}_{t,CH_4,ein}$ | (61) |

Anschließend wird der benötigte Wärmestrom aus dem Massenstrom, der Reaktionsenthalpie, der molaren Masse von Methan und einem Faktor zur Einheitenumrechnung berechnet. Die Einheit des Wärmestroms ist $J \times h^{-1}$.

$$\dot{Q}_t = \dot{m}_{t,CH_4,ein} \times \frac{\Delta H_R^0}{M_{CH_4}} \times 10^6 \quad (62)$$

Unter der Annahme, dass der benötigte Wärmestrom elektrisch erzeugt wird, wird der Wärmestromzeitreihe aus Formel 62 mit der $CO_2$-Zeitreihe (Carbon Footprint = $CF_t$) und einem Umrechnungsfaktor ($F_{J \rightarrow kWh}$) elementweise wie in Formel 63 multipliziert. Die daraus resultierende Einheit ist $t_{CO2} \times h^{-1}$.

$$\dot{m}_{t,CO_2}^{Sc2} = \dot{Q}_t \times CF_t \times F_{J \rightarrow kWh} \quad (63)$$

Die verwendete $CO_2$-Zeitreihe kann auch durch einen konstanten $CO_2$-Wert ersetzt werden, falls dies gewünscht ist.

Die Option zur Technologieauswahl gibt es für die Pyrolyseeinheit hier nicht. Deshalb werden die zusätzlichen benötigten Variablen und Nebenbedingungen für die Implementierung der Technologieauswahl am Beispiel der Aminwäscheeinheit (AGT) vorgestellt. Zusätzlich berücksichtigt der vorgestellte Pseudocode das Ein- und

Abschalten dieser Trenneinheit. Zunächst müssen jedoch die Binärvariablen definiert werden.

*Tabelle 7: Binärvariablen für die Modellierung der Aminwäscheeinheit.*

| Beschreibung | Binärvariablen | Dimensionen |
|---|---|---|
| Auswahl der Aminwäscheeinheit | $\delta_{super}$ | 1 |
| Ein- bzw. Ausschalten der Aminwäscheeinheit | $\delta_{t,onoff}$ | $t_{ges}$ |

```
Wenn Superstrukturoptimierung aktiv, dann
```

$$NB: \delta_{super} \times \dot{m}_{design,min} \leq \dot{m}_{max} \leq \delta_{super} \times \dot{m}_{design,max} \quad (64)$$

Die dynamischen Nebenbedingungen müssen hier umformuliert werden. Dies geschieht unter Hilfestellung von kontinuierlichen Hilfsvariablen (HV), die das Produkt von beliebig vielen Binärvariablen und einer kontinuierlichen Variablen abbilden (vgl. Kapitel 4.3). Hervorzuheben ist hier, dass die Binärvariable zum Ein- und Ausschalten der Aminwäscheeinheit jeden Zeitschritt einen anderen Wert annehmen kann, während die Binärvariable zur Technologieauswahl über den gesamten Betrachtungszeitraum entweder den Wert Null oder Eins annimmt.

$$NB: \delta_{super} \times \dot{m}_{design,min} \leq \dot{m}_{max} \leq \delta_{super} \times \dot{m}_{design,max} \quad (65)$$

Die dynamischen Nebenbedingungen für den Teillastbetrieb lauten demnach:

$$NB: TF_{min} \times HV \leq \dot{m}_{t,ein} \leq TF_{max} \times HV \quad (66)$$

$$NB: HV \leq \dot{m}_{design,max} \times \delta_{t,onoff} \quad (67)$$

$$NB: HV \leq \dot{m}_{design,max} \times \delta_{super,AGT} \quad (68)$$

$$NB: HV \leq \dot{m}_{max} \quad (69)$$

$$NB: HV \geq \dot{m}_{max} - \dot{m}_{design,max} \times (2 - \delta_{t,onoff} - \delta_{super}) \quad (70)$$

$$NB: HV \geq 0 \quad (71)$$

Die Gradientenbedingungen für den Fall der Superstrukturoptimierung sind ebenfalls in das Modell integriert. Auch diese beinhalten beide Binärvariablen wie die oben genannte Teillastbedingung, die das Ein- und Ausschalten sowie die Technologieauswahl berücksichtigen.

Durch eine weitere Nebenbedingung wird letztendlich bestimmt, welche der zur Verfügung stehenden Trenneinheiten genutzt wird. Die unten genannte Nebenbedingung zwingt dem Optimierungsmodell, eine der vier Trenneinheiten auszuwählen, da die Binärvariablen der jeweiligen Trenneinheiten entweder den Wert 0 oder 1 annehmen können und die Summe aus allen Binärvariablen kleiner oder gleich 1 sein muss.

$$NB: \delta_{super} + \delta_{super,MEMB1} + \delta_{super,PHYS1} + \delta_{super,PSA1} \leq 1 \qquad (72)$$

## 4.8 Erstellen der Superstrukturmodelle

Zur Validierung von Superstrukturen werden im Folgenden zunächst drei mittels MATLAB erstellte Superstrukturmodelle vorgestellt.

1. Parallele geschaltete Variante, *kurz: parallel*
2. In Reihe und parallel geschaltete Variante, *kurz: Reihe*
3. Großer Testcase in Anlehnung an Verwertungsprozessen von Hüttengasen, *kurz: Testcase*

In einem Konfigurationsoptionsfeld kann zwischen der Betriebs-, Struktur- und Superstrukturoptimierung gewählt werden.

**1. Parallel**

Die Aufgabe der parallel geschalteten Variante ist es, möglichst viel $CO_2$ aus einem $CO_2$-haltigen Gasstrom mit insgesamt sechs Komponenten zu entfernen. Dem Modell stehen drei verschiedene Trenneinheiten mit den in Kapitel 4.4.5 aufgeführten Parametern zur Verfügung.

1. Druckwechseladsorption
2. Aminwäsche
3. Membrantrennung

Schematisch wird die parallel geschaltete Variante wie in Abbildung 15 modelliert. Wie dort zu erkennen, wird in der Superstrukturoptimierung am Entscheidungspunkt (in der Abbildung: *E*) entschieden, welche Trenneinheit ausgewählt wird, um die maximale Menge an $CO_2$ abzutrennen. Die beiden Ausgänge sind mit OUT 1 bzw. OUT 2 gekennzeichnet.

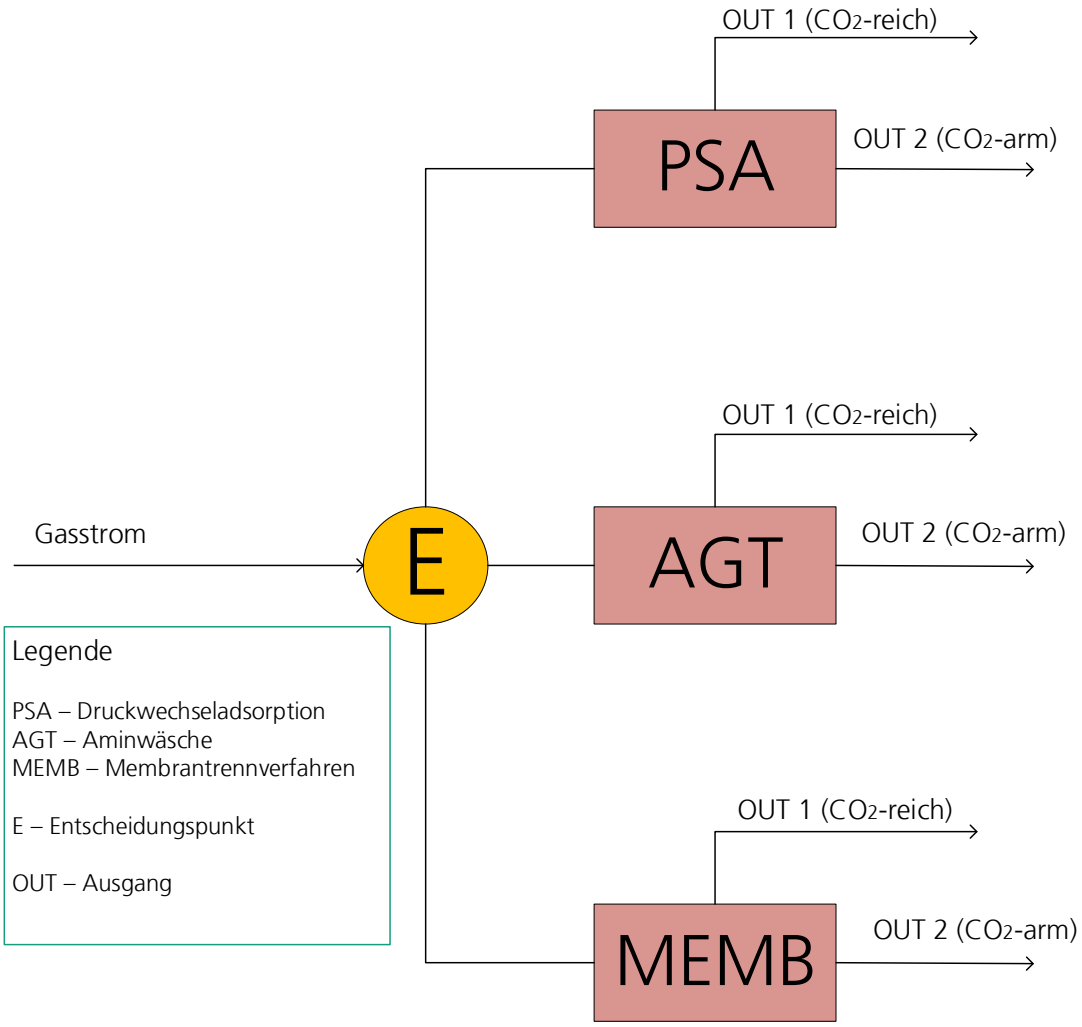


*Abbildung 15: Schematische Darstellung des parallel geschalteten Optimierungsmodells.*

**2. Reihe**

Die in Reihe geschaltete Variante funktioniert analog zur in parallel geschalteten Variante. Es wird hinter jeder ersten Trenneinheit eine weitere Trenneinheit gleicher Bauart geschaltet. Wie in 1. auch soll der $CO_2$-Strom möglichst gut aufgetrennt werden. Die Zielfunktion wird so formuliert, dass die Menge an abgetrennten $CO_2$ durch die hintereinander folgenden Trenneinheiten möglichst groß wird. Diese Variante wird in Abbildung 16 schematisch dargestellt.

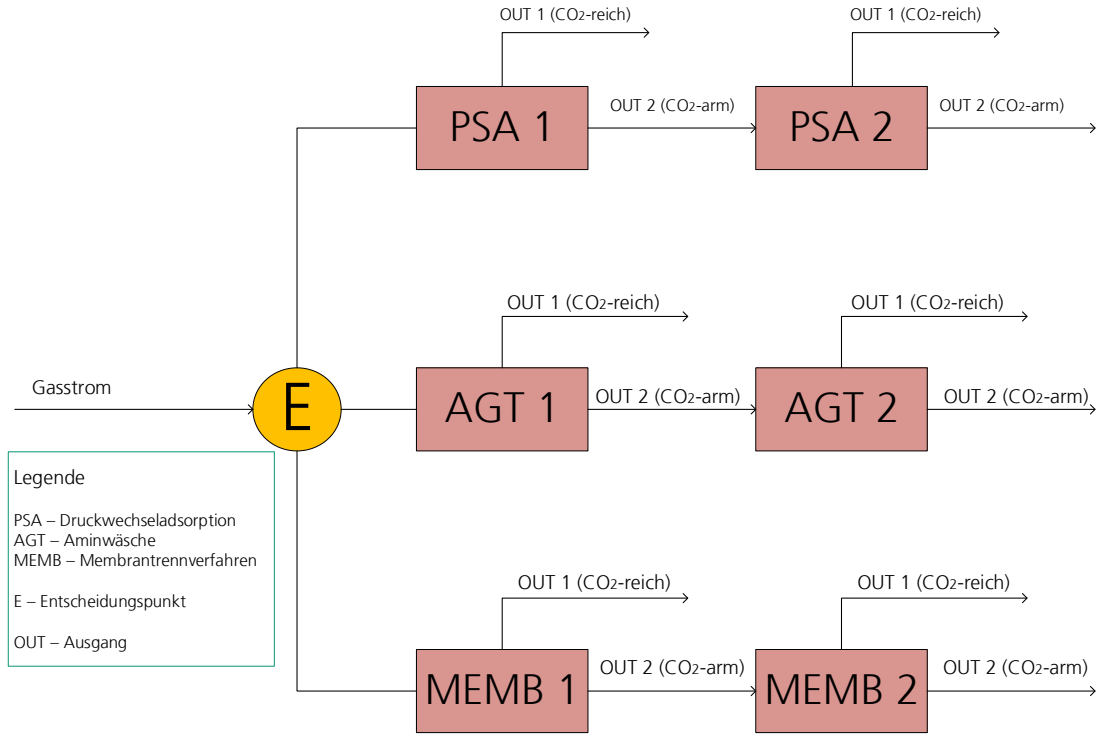


*Abbildung 16: Schematische Darstellung des in Reihe geschalteten Optimierungsmodells.*

## 3. Testcase

Der hier vorgestellte Testcase (s. Abbildung 17) ist angelehnt an die Gasaufbereitung von Hüttengasen. Genauer werden hier Prozessgase verarbeitet, die in der Kokerei (Koksofengas, engl.: coke oven gas, kurz: COG) und im Hochofen (Hochofengas, engl.: blast furnace gas, kurz: BFG) anfallen. Der Testcase enthält Trenneinheiten, Verfahren zur Stoffumwandlung und Speicher (vgl. Kapitel 4.4). Die Zielfunktion minimiert hier die $CO_2$-Emissionen des Gesamtverbundes. Berücksichtigt werden dabei die $CO_2$-Emissionen, die durch den Betrieb der verschiedenen Prozessschritte anfallen. Darunter fallen die Trenneinheiten, die Umwandlungsprozesse und die Fackeln. Berücksichtigt wird außerdem die ab- bzw. zuzuführende Wärme, verursacht durch die ablaufenden Reaktionen in den Konversionseinheiten. Ebenso wird das entfernte $CO_2$ im C- bzw. $CO_2$-Speicher berücksichtigt.

Der Testcase hat drei Entscheidungspunkte, bei der die Superstrukturoptimierung den optimalen Prozesspfad aussucht. Am ersten Entscheidungspunkt entscheidet sich, ob der Wassergas-Shift-Reaktor mit angeschlossenem Kondensator oder der Bypass ausgewählt wird, wodurch erstere Prozesse verworfen werden. Am zweiten Entscheidungspunkt wird eine von vier verschiedenen Trenneinheiten und am dritten eine von zwei Trenneinheiten ausgewählt.

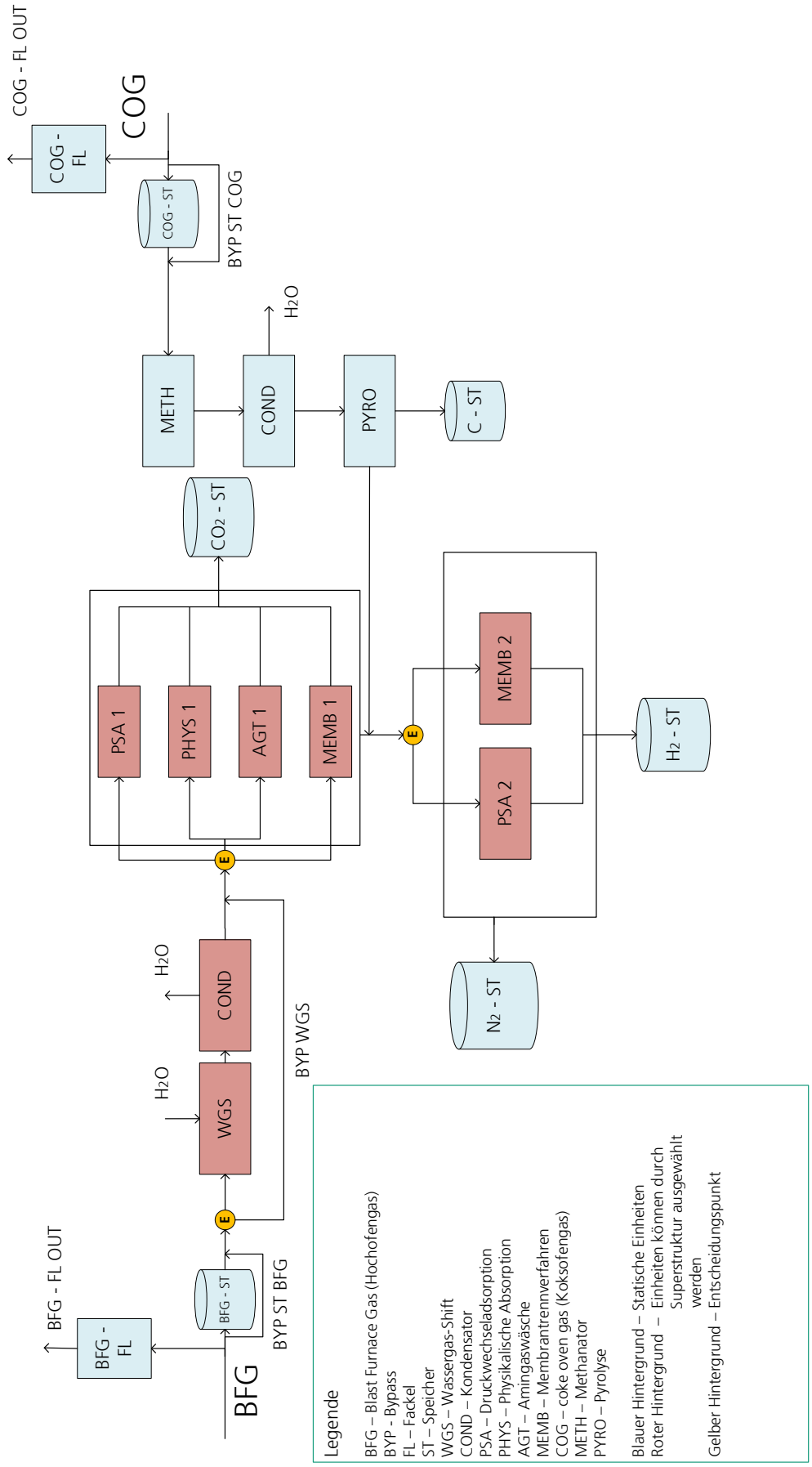


*Abbildung 17: Schematische Darstellung des Testcases.*

**BFG-Route**

Das eintretende CO-reiche Hochofengas wird zunächst in die Fackel, den Zwischenspeicher oder den Bypass, der den Zwischenspeicher umgeht, geleitet. Der Zwischenspeicher dient dazu, Spitzen im Hochofengasstrom abzufangen. Im Wassergas-Shift-Reaktor wird das dort enthaltende Kohlenmonoxid unter sechsfacher stöchiometrischer Wasserzugabe zu Kohlendioxid und molekularen Wasserstoff umgesetzt. Das Kohlendioxid wird anschließend in einem der vier Trenneinheiten abgetrennt.

**COG-Route**

Zuerst wird das Kohlenmonoxid und das Kohlendioxid des Koksofengasstroms im Methanator zu Methan umgesetzt, um den bereits hohen Methananteil zu erhöhen. Das dabei entstehende Wasser wird im Anschluss im Kondensator entfernt. Anschließend wird das Methan in einer Pyrolyseanlage zu atomaren Kohlenstoff, der abgetrennt wird, und molekularen Wasserstoff umgesetzt. Der nun stark wasserstoffhaltige Koksofengasstrom vereint sich mit dem verarbeiteten Hochofengasstrom. Beide Ströme enthalten zu diesem Zeitpunkt zum Großteil nur noch Stickstoff und Wasserstoff. Die beiden Komponenten werden zum Schluss entweder mit einer Druckwechseladsorption oder mit einem Membrantrennverfahren voneinander getrennt.

Dieser Testcase ist eine Modellrechnung und legt nur einen geringen Wert auf verfahrenstechnische Praktikabilität. Vielmehr soll das Superstrukturfeature erprobt und im Folgenden validiert werden. Deshalb werden einige vereinfachende Annahmen getroffen.

**Annahmen**

1. Der Wassergas-Shift-Reaktor und der nachgeschaltete Kondensator sind energetisch perfekt miteinander kombiniert.
2. Die Kühl- bzw. Wärmeleistung des Methanators, des Kondensators und des Pyrolyseprozesses der COG-Route muss elektrisch aufgebracht werden. Eine Verschaltung dieser Prozesse findet nicht statt.
3. Die Anlagengröße wird automatisch durch den höchsten Wert der Gaszeitzeitreihe übernommen, da in realen Verfahrenskonzepten ein Numbering-up möglich wäre.
4. Eine Komprimierung der eingehenden und zu verarbeitenden Gase findet nicht statt.

5. Der Betrachtungszeitraum beginnt stets am 01.01.2018. Dies betrifft demnach sowohl die $CO_2$-Zeitreihe als auch die Gaszeitreihe.
6. Eine stoffliche Verwertung der Konvertergase findet nicht statt.
7. Die Konversionseinheiten haben eine 100%ige Umsetzungsrate.
8. Die Speicher zu Anfang der BFG- und COG-Route können eine halbe Stunde lang bei maximalem Massenstrom des BFG- bzw. COG-Gases beladen werden.
9. $CO_2$ und Kohlenstoff wird im Anschluss stofflich verwertet.
10. Die Speicher am Ende des Verbundes sind virtuell und haben eine unendlich große Kapazität.
11. Die Dauer eines Zeitschrittes beträgt 15 Minuten.
12. Eingehende Gasströme mit einem negativen Massenstrom werden auf einen Wert von 0,01 $t \times h^{-1}$ überschrieben.
13. Der untere Teillastfaktor ($TF_{min}$) beträgt für alle Einheiten 10%.
14. Der Gradientenfaktor (GF) beträgt für alle Einheiten 30%.

## 4.9 Zielfunktion

Die Zielfunktion ist die treibende Kraft in der Optimierung und bestimmt weitestgehend den Verlauf der Optimierung. Bei der $CO_2$-Optimierung wird die Zielfunktion so formuliert, dass der gesamte Verbund die $CO_2$-Emissionen minimiert. Das bedeutet, dass Terme der Zielfunktion, die zu einer Reduktion der gesamten $CO_2$-Emissionen führen wie die $CO_2$- und C-Speicher maximiert werden sollen und Terme, die sich negativ auf die $CO_2$-Emissionen auswirken, gleichzeitig minimiert werden sollen. Darunter fallen $CO_2$-Emissionen wie direkte Emissionen, die durch die Fackeln an den Verbundeingängen entstehen, oder indirekte Emissionen wie der Verbrauch an elektrischer Energie (Scope 2) durch die Trenn- und Konversionsprozesse. Die für den Testcase eingesetzte Zielfunktion lautet demnach:

$$
\begin{aligned}
z = \; & dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,PSA1}^{Sc2} \; + \; dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,AGT1}^{Sc2} \; + \\
& dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,MEMB1}^{Sc2} \; + \; dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,PHYS1}^{Sc2} \; + \\
& dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,PSA2}^{Sc2} \; + \; dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,MEMB2}^{Sc2} \; + \\
& dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,METH}^{Sc2} \; + \; dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,COND\ COG}^{Sc2} \; + \\
& dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,PYRO}^{Sc2} \; + dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,BFG\ FL} \; + \\
& dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,COG\ FL} \; + \\
& m_{t=T,BFG\ ST} + m_{t=T,COG\ ST} - m_{t=T,CO_2\ ST} - m_{t=T,C\ ST}
\end{aligned}
\tag{73}
$$

Die ersten sechs Terme beinhalten die $CO_2$-Emissionen verursacht durch die Trenneinheiten. Konkret erfolgt die Berechnung über die Summe der Zeitschritte der ausgehenden indirekten $CO_2$-Emissionsströme multipliziert mit der Zeitschrittlänge dt (hier: 0,25 Stunden). Ähnlich verfahren wird mit dem Methanator, dem Kondensator und der Pyrolyse. Die direkten Emissionen der beiden Fackeln werden in den darauffolgenden Termen erfasst. Darauf folgen zwei Terme, die den Speicherfüllstand der Pufferspeicher berücksichtigen. Interessant ist der Speicherfüllstand am Ende des Berücksichtungszeitraum (t = T). Mit einem negativen Vorzeichen versehen sind die Speicherfüllstände zum Ende des Berücksichtigungszeitraumes, die die abzutrennenden kohlenstoffhaltigen Komponenten beinhalten, da diese maximiert werden sollen.
Allgemein lässt sich die in Formel 73 beschriebene Zielfunktion so formulieren:

$$
\begin{aligned}
z = \; & \mathrm{m}(\mathrm{CO_2\ durch\ Scope\ 1}) + \mathrm{m}(\mathrm{CO_2\ durch\ Scope\ 2}) \\
& + \mathrm{m}(\mathrm{CO_2\ im\ Verbund}) - \mathrm{m}(\mathrm{abgetrenntes\ CO_2})
\end{aligned}
\tag{74}
$$

Für das parallel und in Reihe geschaltete Optimierungsmodell wird eine stoffliche Optimierung vorgenommen. Das heißt, dass die austretende Menge an $CO_2$ über alle betrachteten Zeitschritte aus dem Ausgang 1 (OUT 1) der jeweiligen Trenneinheit maximiert werden soll.

Die Zielfunktion für die parallel geschaltete Variante lautet demnach:

$$z = (-1) \times dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,PSA,OUT1} - dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,AGT,OUT1} - dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,MEMB,OUT1} \quad (75)$$

Und für die in Reihe geschaltete Variante:

$$z = (-1) \times dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,PSA1,OUT1} - dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,AGT1,OUT1} - dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,MEMB1,OUT1} - dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,PSA2,OUT1} - dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,AGT2,OUT1} - dt \times \sum_{t=1}^{T} \dot{m}_{t,CO_2,MEMB2,OUT1} \quad (76)$$

# 5 ERGEBNISSE

## 5.1 Validierung

Zur Validierung der Superstrukturmodelle werden Parameter der Trenneinheiten so gewählt, dass vor der Superstrukturoptimierung das Ergebnis der Optimierung vorhergesagt werden kann.

### 5.1.1 Parallel

Zur Validierung des Superstrukturfeatures für das parallel geschaltete Superstrukturmodell werden die Abtrennraten der Trenneinheiten verändert. Für diesen Fall werden die oberen Designgrößen der Trenneinheiten mit der Spitze des eintretenden Gasstroms gleichgesetzt. Die drei Trenneinheiten sind also gleich groß. Der Energieverbrauch spielt in dieser Optimierung keine Rolle, da eine stoffliche Optimierung vorgenommen wird. Konkret bedeutet das, dass die Trenneinheit ausgewählt werden soll, die am meisten Kohlendioxid aus dem Gasstrom abtrennt. Für die Parametrierung dieser Superstrukturoptimierung wird ein Zeitraum von 1344 Zeitschritten (entspricht 14 Tagen) und ein Gap von 2% angesetzt. Die Abtrennrate der Druckwechseladsorption beträgt hier 90%, während die Abtrennraten der Aminwäsche und des Membrantrennverfahrens 60% beträgt. Nach fünf Wiederholungen wird stets wie erwartet das Druckwechseladsorptionsverfahren ausgewählt. Abbildung 18 stellt die Technologieauswahl in diesem Superstrukturmodell dar. Wie in Diagramm 2 zu erkennen, wird die Druckwechseladsorptionseinheit ausgewählt und die anderen beiden Trenneinheiten werden verworfen (Diagramm 3 und 4).

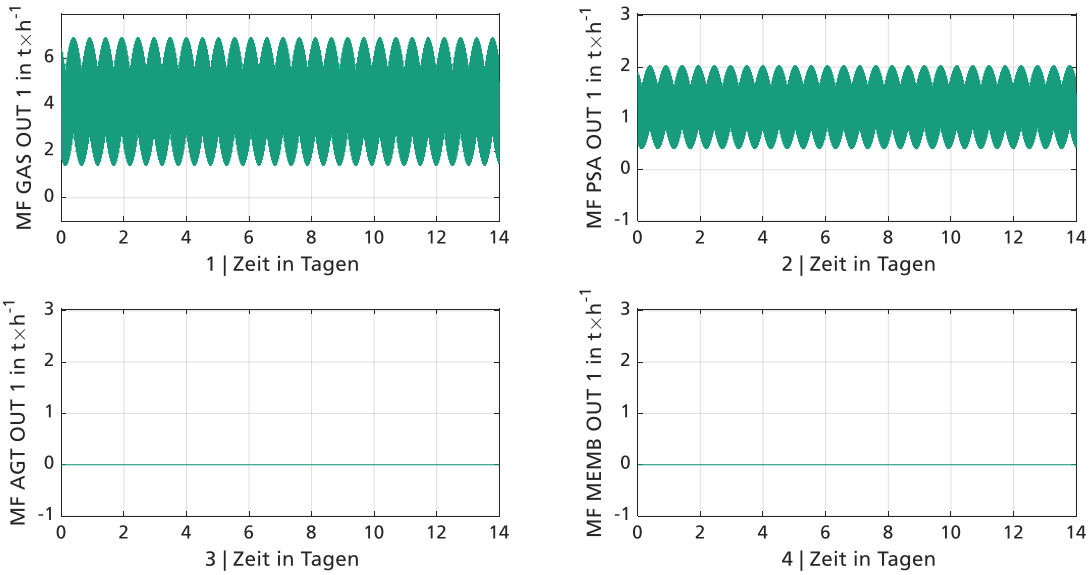


*Abbildung 18: Validierung des Superstrukturmodells für das Optimierungsmodell "parallel". Die Druckwechseladsorptionseinheit (PSA) wird ausgewählt. Massenstrom (MF) über Zeit.*

## 5.1.2 Reihe

Die Validierung der in Reihe geschalteten Variante verläuft wie die Validierung der parallel geschalteten Variante. Die Parameter sind mit dieser identisch. Auch hier werden nach fünfmaligen Wiederholen stets wie erwartet die in Reihe geschalteten Druckwechseladsorptionsverfahren, wie in Abbildung 19 zu erkennen (s. Diagramm 2 und 5), ausgewählt.

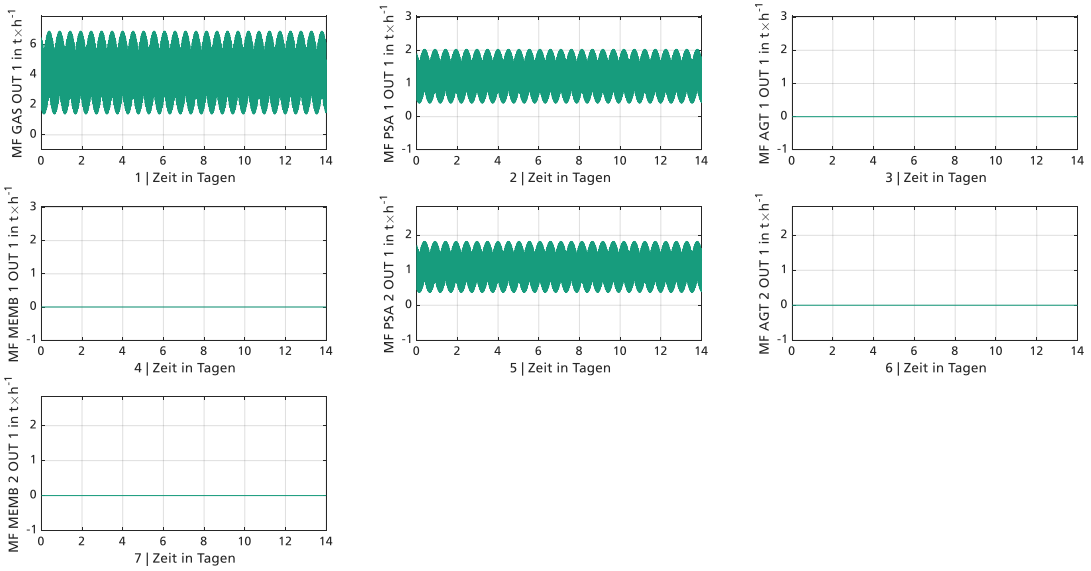


*Abbildung 19: Validierung des Superstrukturmodells für das Optimierungsmodell "Reihe". Die Druckwechseladsorptionseinheiten (PSA 1 und 2) werden ausgewählt.*

### 5.1.3 Testcase

Zur Validierung der $CO_2$-Optimierung des Superstrukturfeatures im Testcase wird der Energieverbrauch aller Trenneinheiten außer dem Membrantrennverfahren mit 5 $kWh \times m^{-3}$ belegt. Das Membrantrennverfahren hat zur Validierung einen Energieverbrauch von 0 $kWh \times m^{-3}$. Es wird über 96 Zeitschritte (entspricht einem Tag), einem Gap von 2% und einer $CO_2$-Zeitreihe optimiert. Das Ergebnis ist nach fünfmaligen Wiederholen eindeutig. Wie erwartet wird jedes Mal das Membrantrennverfahren als optimale Trenneinheit ausgewählt.

## 5.2 Ergebnisse des Testcases

Die Ergebnisse des Testcases sind in den folgenden Abbildungen zu sehen. Folgende Parameter werden angesetzt.

1. Zeitraum: 1344 Zeitschritte (entspricht 14 Tagen)
2. Superstrukturoptimierung
3. Gap: 2%
4. $CO_2$-Optimierung unter Berücksichtigung der $CO_2$-Zeitreihe
5. Minimaler und maximaler Hochofengasstrom in $t \times h^{-1}$: 1,4 bzw. 6,9
6. Minimaler und maximaler Koksofengasstrom in $t \times h^{-1}$: 0,4 bzw. 2,1

Die folgenden zwei Abbildungen (Abbildung 20 und Abbildung 21) zeigen in 24 verschiedenen Diagrammen die Massenströme bzw. Speicherfüllstände des Verbundes. Die Auswahl der Technologien durch die Superstruktur ist in den Diagrammen 8 – 11 zu sehen. Dort zeigen die Massenströme der Druckwechseladsorptions-, physikalischen Absorptions- und Membrantrenneinheit einen durchgängigen Zeitverlauf von 0 $t \times h^{-1}$ an. Wie in Diagramm 10 zu erkennen, wird stattdessen die Aminwäscheeinheit für die $CO_2$-Abtrennung verwendet. Diese Beobachtung deckt sich auch mit den Werten der Binärvariablen, die diesen Sachverhalt beschreiben. Ebenso hervorzuheben ist das dynamische Ein- und Ausspeichern des BFG-Speichers (vgl. Diagramm 3 in Abbildung 20) unter gleichzeitiger dynamischer Nutzung des Bypasses (vgl. Diagramm 4 in Abbildung 20). Zu beobachten ist außerdem, dass in der Superstrukturoptimierung die Wassergas-

Shift-Route mit nachgeschaltetem Kondensator anstelle des alternativen Bypasses ausgewählt wird.

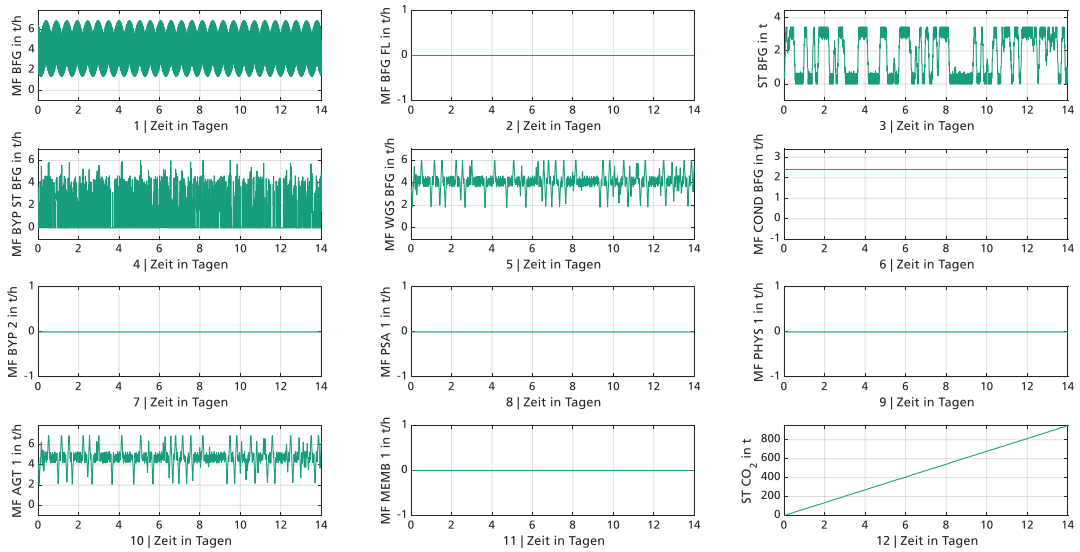


*Abbildung 20: Massenstrom Hochofengas (1), Massenstrom Fackel für Hochofengas (2), Speicherfüllstand Hochofengas (3), Massenstrom Bypass Speicher Hochofengas (4), Massenstrom Wassergas-Shift (5), Massenstrom Kondensator (6), Massenstrom Bypass WGS-Route (7), Massenstrom Druckwechseladsorption (8), Massenstrom physikalische Absorption (9), Massenstrom Aminwäsche (10), Massenstrom Membrantrennverfahren (11), Speicherfüllstand $CO_2$-Speicher (12). Größere Abbildung siehe Anhang C.*

Ein ähnliches Verhalten lässt sich auch bei der COG-Route beobachten. Das Koksofengas wird auch hier in dynamischer Weise vom COG-Speicher aufgenommen und wieder in den Verbund entlassen (vgl. Diagramm 15 in Abbildung 21). Der Bypass kommt hier nicht zur Verwendung. Die dynamische Fahrweise überträgt sich auf die weiteren Prozesseinheiten. Nach der Vereinigung der BFG- und COG-Route wird durch die Superstruktur das Membrantrennverfahren zur Trennung von Wasserstoff und Stickstoff ausgewählt (vgl. Diagramm 22 in Abbildung 21).

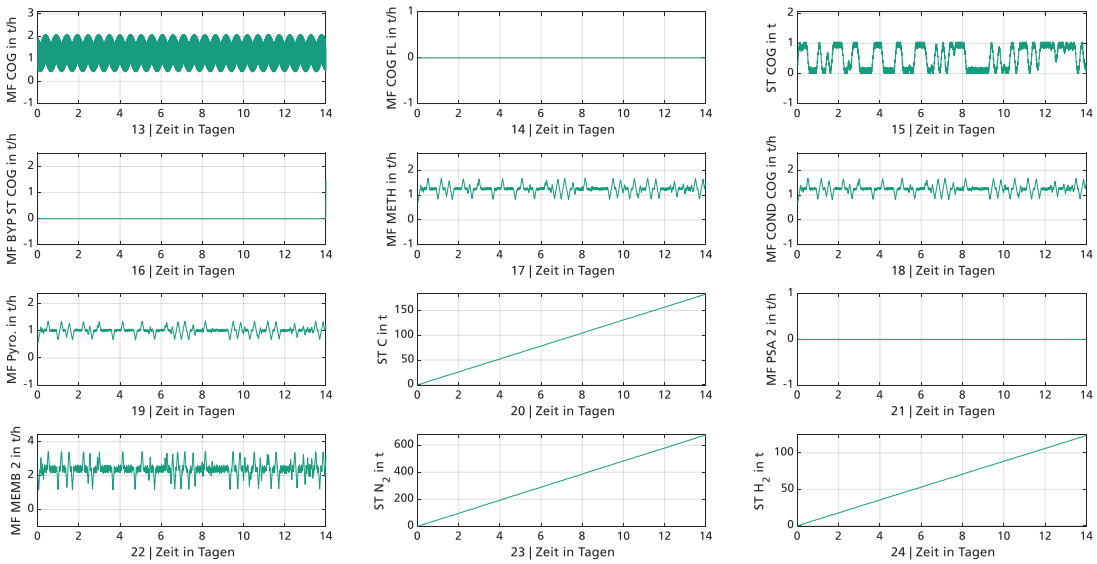


*Abbildung 21: Massenstrom Koksofengas (13), Massenstrom Fackel für Koksofengas (14), Speicherfüllstand Koksofengas (15), Massenstrom Bypass Speicher Koksofengas (16), Massenstrom Methanator (17), Massenstrom Kondensator (18), Massenstrom Pyrolyse (19), Speicherfüllstand Kohle (20), Massenstrom Druckwechseladsorption 2 (21), Massenstrom Membrantrennverfahren 2 (22), Speicherfüllstand Stickstoff (23), Speicherfüllstand Wasserstoff (24). Vergrößerte Abbildung in Anhang D.*

Letztendlich werden dem Verbund innerhalb von 14 Tagen ca. 1.623 t $CO_2$ zugeführt. In diese Menge fließt sowohl der $CO_2$- als auch der CO- und $CH_4$-Anteil mit ein. Der CO-, der $CH_4$-Anteil und der im C-Speicher enthaltene Kohlenstoff fließen nicht als Treibhausgasäquivalente an. Sondern werden betrachtet, als würden sie stöchiometrisch zu $CO_2$ verbrennen. In Summe werden insgesamt ca. 949 t $CO_2$ (C- und $CO_2$-Speicher) gespeichert und ca. 690 t $CO_2$ treten aus dem Verbund hinaus. Davon ist mehr als 99% $CO_2$, das an anderer Stelle durch die Erzeugung von elektrischer Energie (Scope 2) entsteht. Das gespeicherte $CO_2$ kann endgelagert werden oder als Rohstoff dienen. Zudem werden große Mengen an Stickstoff und Wasserstoff gewonnen, für die diverse Zwecke Verwendung gefunden werden kann. Letzteres ist für die Energiewende von besonderer Bedeutung [32]. Tabelle 8 liefert eine Übersicht der oben genannten Ergebnisse.

*Tabelle 8: Übersicht ausgewählter eingehender und ausgehender Teilströme.*

| Größen | Werte in t |
|---|---|
| Eingehendes $CO_2$ | 1.623 |
| Gespeichertes $CO_2$ | 949 |
| Ausgehendes $CO_2$ | 690 |
| Davon Scope 2 | 689 |
| Davon Verbrennung über Fackel | < 1 |
| Gespeicherter $N_2$ | 677 |
| Gespeicherter $H_2$ | 120 |

Um die Auswirkungen der Technologieauswahl mittels Superstruktur aufzuzeigen, werden in Tabelle 10 die Ergebnisse der Superstrukturoptimierung aufgezeigt, wenn erzwungen wird, dass zunächst das Trennverfahren der physikalischen Absorption und anschließend das Trennverfahren der Druckwechseladsorption ausgewählt wird. Beide haben gegenüber der Trennverfahren, die durch die Superstrukturoptimierung ausgewählt werden, nachteiligere Parameter. Andere Parameter bleiben bei dieser Optimierung gleich. Die Auswahl wurde durch das Definieren der entsprechenden Binärvariabeln auf einen Wert von 1 erzwungen.

$$\delta_{super,PHYS1} = 1 \tag{77}$$

$$\delta_{super,PSA2} = 1 \tag{78}$$

Zur Erinnerung sind in Tabelle 9 die Trennfaktoren und der Bedarf elektrischer Energie der betrachteten Trenneinheiten beschrieben.

*Tabelle 9: Parameter der betrachteten Trenneinheiten.*

| Parameter | Physikalische Absorption | Aminwäsche | Druckwechsel-adsorption | Membran-trennverfahren |
|---|---|---|---|---|
| Elektrischer Energiebedarf in $kWh \times t^{-1}$ | 1.016,7 | 409,7 | 698,0 | 652,5 |
| Abtrennrate in % | 96 | 99,96 | 98 | 99,8 |

*Tabelle 10: Übersicht ausgewählter eingehender und ausgehender Teilströme und Abweichungen gegenüber Ergebnisse mit Einheiten, die durch die Superstruktur ausgewählt werden (vgl. Tabelle 8).*

| Größen | Werte | Abweichung absolut in t | Abweichung in % |
|---|---|---|---|
| Eingehendes $CO_2$ | 1.623 | 0 | 0 |
| Gespeichertes $CO_2$ | 927 | - 22 | - 2,3 |
| Ausgehendes $CO_2$ | 732 | + 42 | + 6,1 |
| Davon Scope 2 | 708 | + 19 | + 2,8 |
| Davon Verbrennung über Fackel | 4 | 4 | / |
| Gespeicherter $N_2$ | 664 | -13 | - 1,9 |
| Gespeicherter $H_2$ | 120 | 0 | 0 |

Wie oben zu sehen, wird bei dieser Berechnung weniger $CO_2$ als im Referenzfall gespeichert wird und gleichzeitig entstehen mehr Scope-2-$CO_2$-Emissionen. Hochgerechnet auf einen Zeitraum von 52 Wochen (ca. 1 Jahr) könnten für diesen Fall 572 t $CO_2$ weniger gespeichert werden und 494 t $CO_2$ durch Scope 2 zusätzlich erzeugt werden.

Hier ist eine Bewertung der Ergebnisse einfach, da sowohl die $CO_2$-Emissionen erhöht werden und die $CO_2$-Abtrennung reduziert wird. Bei einem Szenario, bei dem sich beispielsweise die $CO_2$-Abtrennung verschlechtert, aber die $CO_2$-Emissionen durch Scope 2 reduziert werden, ist eine Bewertung schwieriger. Denn dies würde bedeuten, dass der zum Schluss abgetrennte Stickstoff eine Verunreinigung mit $CO_2$ erfahren würde. Hier müsste also entschieden werden, welcher der beiden Effekte höher gewichtet wird.

## 5.3 Betriebsoptimierung des Testcases

Als nächstes sollen die Ergebnisse der Betriebsoptimierung des Konzeptverbundes vorgestellt werden. Um dynamisches Verhalten in allen Trenneinheiten aufzuzeigen, das sonst bei der Superstrukturoptimierung nur bei einer Trenneinheit zu beobachten ist, werden die oberen Designgrenzen aller Trenneinheiten um 70% reduziert.

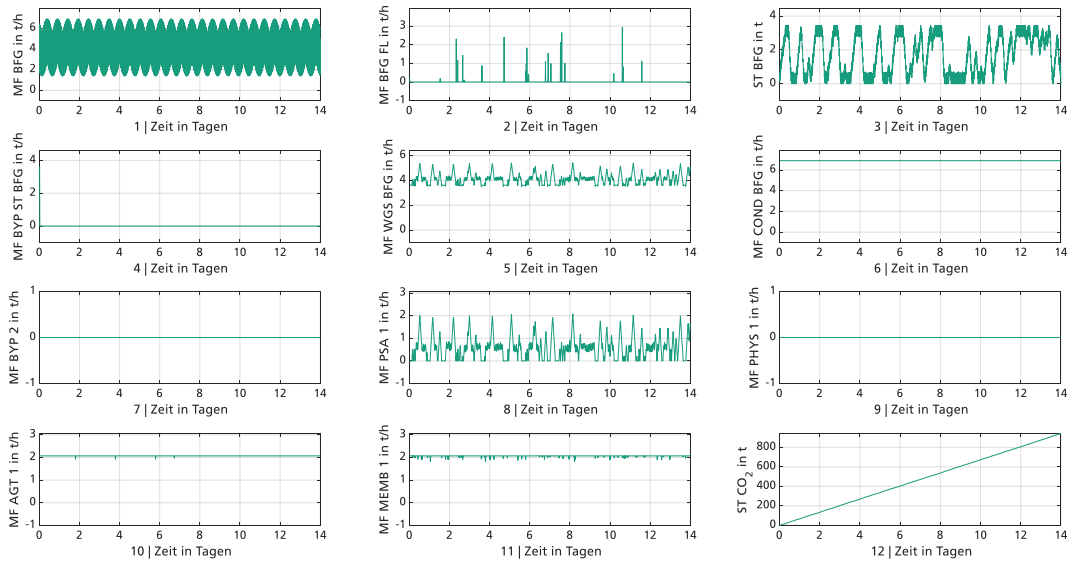


*Abbildung 22: Diagramm 1 bis 12 - Ergebnisse der Betriebsoptimierung mit veränderten Parametern (Testcase). Vergrößerte Abbildung in Anhang E.*

Wie in den Diagrammen 8 – 11 in Abbildung 22 zu sehen ist, werden drei von vier Einheiten zur Gastrennung genutzt. Weitestgehend sind sowohl die Aminwäscheeinheit als auch das Membranverfahren über den gesamten betrachteten Zeitraum bis auf kleine Ausschläge nach unten ausgelastet (vgl. Diagramm 10 und 11 in Abbildung 22). Restliche ausgespeicherte Gasspitzen werden durch die Druckwechseladsorptionseinheit aufgefangen (vgl. Diagramm 8). Aufgrund ihrer nachteiligen Parametrierung kommt das Verfahren der physikalischen Absorption nicht zur Verwendung (vgl. Diagramm 9).

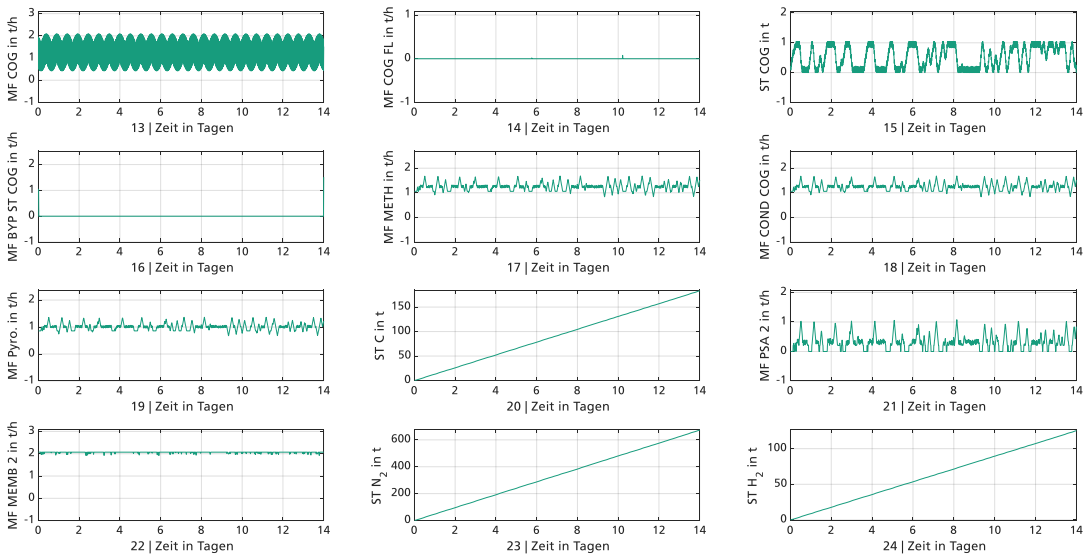


*Abbildung 23: Diagramm 13 bis 24 - Ergebnisse der Betriebsoptimierung mit veränderten Parametern (Testcase). Vergrößerte Abbildung in Anhang F.*

Wie in Diagramm 21 und 22 in Abbildung 23 zu sehen, wird das Membranverfahren der Druckwechseladsorptionseinheit vorgezogen. In Tabelle 11 sind die Ergebnisse der durchgeführten Betriebsoptimierung aufgeführt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen aus der Superstrukturoptimierung ist nicht sinnvoll, da wie oben beschrieben die Kapazitäten der Trenneinheiten reduziert werden.

*Tabelle 11: Übersicht ausgewählter eingehender und ausgehender Teilströme der Betriebsoptimierung (Testcase).*

| Größen | Werte in t |
|---|---|
| Eingehendes $CO_2$ | 1.623 |
| Gespeichertes $CO_2$ | 943 |
| Ausgehendes $CO_2$ | 795 |
| Davon Scope 2 | 789 |
| Davon Verbrennung über Fackel | 5 |
| Gespeicherter $N_2$ | 674 |
| Gespeicherter $H_2$ | 120 |

## 5.4 Einfluss der $CO_2$-Belastung der elektrischen Energie auf den Betrieb des Testcases

Folgend soll der Einfluss der $CO_2$-Emissionen mit dem Betrieb einer ausgewählten Trenneinheit verdeutlicht werden. Dazu werden die $CO_2$-Emissionen je kWh elektrischer Energie von 01. Januar 2018 bis zum einschließlich 14. Januar 2018 mit dem Massenstrom der Aminwäscheeinheit, die in der Superstrukturoptimierung ausgewählt wird, übereinandergelegt (s. Abbildung 24).

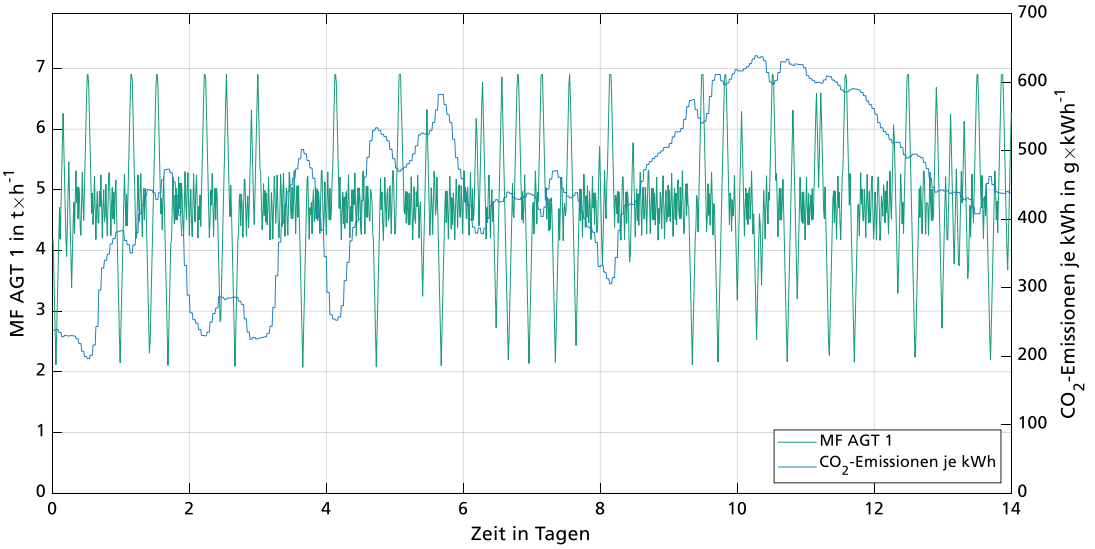


*Abbildung 24: Massenstrom der Aminwäscheeinheit unter Einfluss der $CO_2$-Emissionen der elektrischen Energie.*

Diese Abbildung zeigt eindrucksvoll, dass die Aminwäscheeinheit bevorzugt dann betrieben wird, sobald die $CO_2$-Emissionen je kWh elektrischer Energie ein lokales Minimum aufweisen. Respektive wird der Betrieb heruntergefahren, sobald die $CO_2$-Emissionen ein lokales Maximum aufweisen.

In der folgenden Abbildung soll der Zeitraum zwischen 2 und 6 Tagen näher untersucht werden.

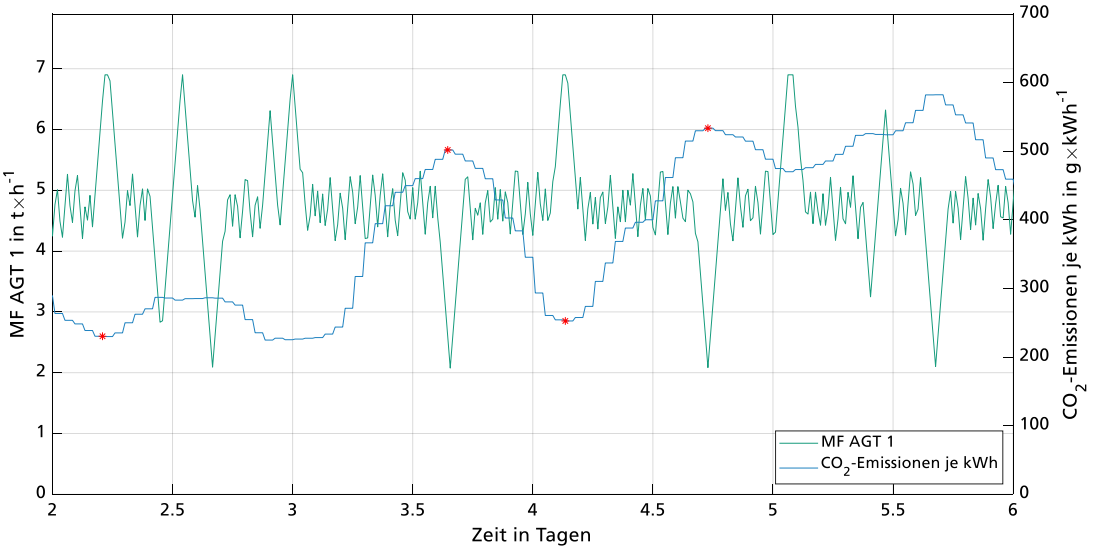


*Abbildung 25: Massenstrom der Aminwäscheeinheit unter Einfluss der $CO_2$-Emissionen der elektrischen Energie (Tage 2 bis 6).*

An den mit dem roten Stern in Abbildung 25 gekennzeichneten lokalen Minima und Maxima der $CO_2$-Zeitreihe weist der Betrieb der Aminwäscheeinheit hohe Lastsprünge auf. Kleinere Lastsprünge können zwischen den Extremstellen der $CO_2$-Zeitreihe beobachtet werden. Dieses Verhalten lässt sich zum Beispiel zwischen dem 3. und 4. roten Stern beobachten. Dieses Verhalten ist wünschenswert, weil dadurch die $CO_2$-

Emissionen des gesamten Verbundes minimiert und das Ergebnis der Zielfunktion ($CO_2$-Minimierung) optimiert wird. Ein ähnliches Verhalten lässt sich auch beim Betrieb des Methanators und der zweiten Membrantrenneinheit beobachten (vgl. Abbildung 26).

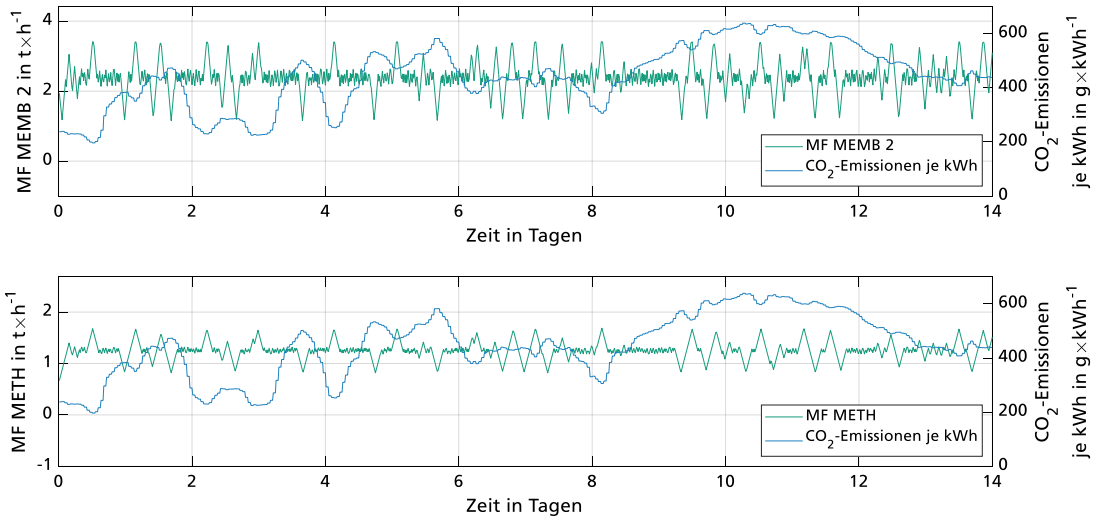


*Abbildung 26: Massenstrom der Membrantrenneinheit 2 und des Methanators unter Einfluss der $CO_2$-Emissionen der elektrischen Energie.*

## 5.5 Szenarien $CO_2$-Reduktion

Die folgenden Ergebnisse in Tabelle 12 zeigen die $CO_2$-Emissionen des Testcases für verschiedene $CO_2$-Reduktionsszenarien bei sonst gleichbleibender Eingangsgrößen. Erstens sollen die $CO_2$-Emissionen je kWh um 30% und zweitens um 50% im Vergleich zum Referenzeitraum gesenkt werden. Diese Szenarien sind durch einen weiteren Ausbau der regenerativen Energien denkbar.

*Tabelle 12: Auswirkungen der $CO_2$-Reduktionen auf die Optimierungsergebnisse.*

| Größen | Referenz 2018 | Szenario 30% | Szenario 50% |
|---|---|---|---|
| Eingehendes $CO_2$ | 1.623 | 1.623 | 1.623 |
| Gespeichertes $CO_2$ | 949 | 942 | 942 |
| Ausgehendes $CO_2$ | 690 | 488 | 351 |
| Davon Scope 2 | 689 | 479 | 342 |
| Davon Verbrennung über Fackel | < 1 | 8 | 8 |
| Gespeicherter $N_2$ | 677 | 672 | 672 |
| Gespeicherter $H_2$ | 120 | 120 | 120 |

Es wird deutlich, dass die $CO_2$-Emissionen maßgeblich von der $CO_2$-Belastung der zur Verfügung stehenden elektrischen Energie abhängen, da die Scope-2-Emissionen bei einer Reduktion der $CO_2$-Emissionen je kWh sinken.

## 5.6 Einfluss der Speichergröße auf die Dynamik des Testcases

In den nachfolgenden Rechnungen soll untersucht werden, wie sich eine Vergrößerung der Speicher, die sich am Anfang des Testcasemodells befinden, auf die Dynamik auswirkt. Dazu werden die Speichergrößen verfünfzigfacht.

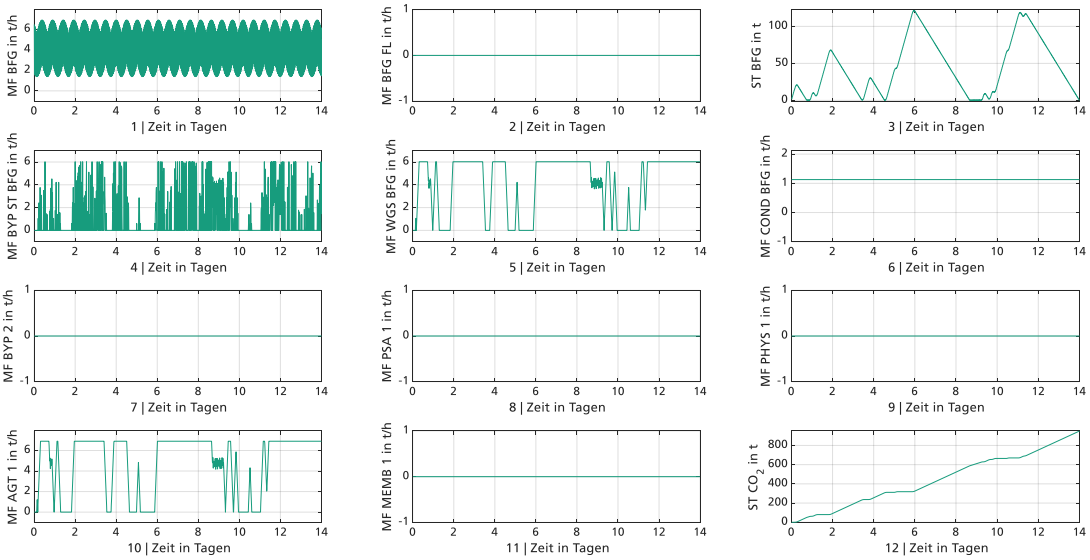


*Abbildung 27: Ergebnisse des Testcases mit größeren Speichern (1). Vergrößerte Abbildung in Anhang G.*

Wie in Diagramm 3 in Abbildung 27 zu erkennen, wird der Hochofengasspeicher ca. am zweiten Tag zur Hälfte gefüllt, am sechsten und elften Tag vollständig gefüllt und anschließend leergefahren. Der Inhalt wird dann den nachgeschalteten Prozessen zur Verfügung gestellt. Wie in Diagramm 5 und Diagramm 10 in Abbildung 27 zu sehen, wird der Wassergas-Shift-Reaktor u.a. zwischen dem zweiten und vierten Tag und zwischen sechsten und neunten Tag ohne Gradient auf einem Plateau mit maximaler Kapazitätsausschöpfung betrieben. Eine fast identische Dynamik lässt sich auch bei der Aminwäscheeinheit in Diagramm 10 beobachten. Der Kondensator (vgl. Diagramm 6) wird über den gesamten Zeitraum auf einem konstanten Plateau betrieben.

Auch bei den übrigen Verfahrensschritten lässt sich eine Reduzierung der Dynamik feststellen (s. Abbildung 28).

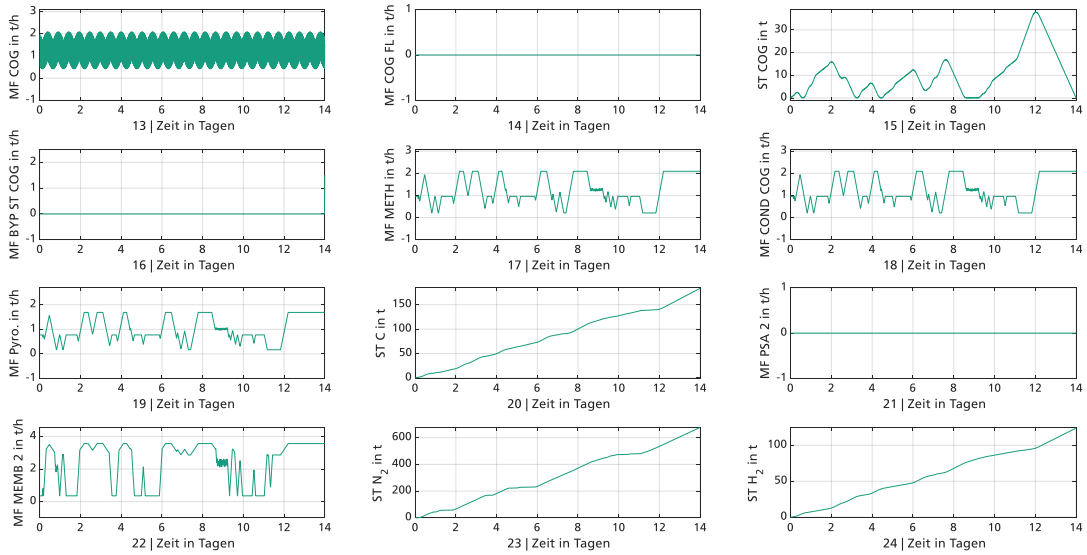


*Abbildung 28: Ergebnisse des Testcases mit größeren Speichern (2). Vergrößerte Abbildung in Anhang H.*

Als Ursache für dieses Verhalten ist erneut die $CO_2$-Belastung der elektrischen Energie. Wie in Abbildung 29 zu sehen, wird die Aminwäscheeinheit vor allem in den Bereichen betrieben, an denen $CO_2$-Emissionen vergleichsweise niedrig sind. Beobachten lässt sich das im Intervall zwischen Tag sechs und Tag neun oder von Tag elf bis 14. An Bereichen mit hohen Emissionen wie zwischen Tag fünf und sechs wird die Anlage größtenteils nicht betrieben.

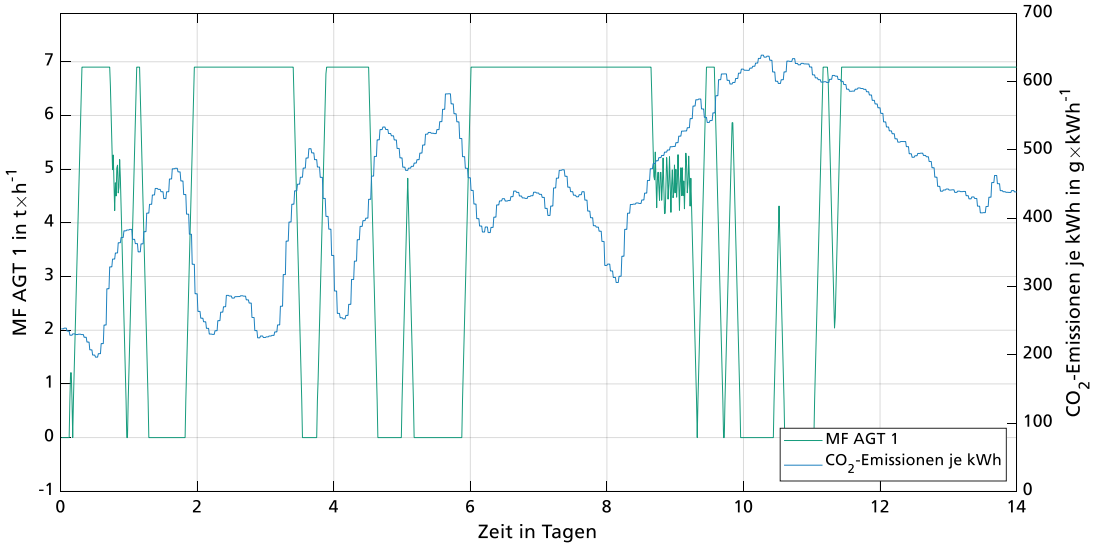


*Abbildung 29: Betrieb der Aminwäscheeinheit unter Einfluss der $CO_2$-Emissionen je kWh bei vergrößerten Speichergrößen.*

## 5.7 Einfluss des Gradienten

Als nächstes soll der Einfluss des Gradienten auf die Fahrweise untersucht werden. Um zu hohe Lastsprünge zu vermeiden und um somit ein möglichst realitätsnahes Verhalten abzubilden, soll der Massenstrom des nächsten Zeitschrittes in dieser Optimierung in den Fällen nicht um 30% abweichen.

In Abbildung 30 soll aufgezeigt werden, wie sehr sich eine Veränderung des Gradientenfaktors auf die Fahrweise der zweiten Membrantrenneinheit auswirkt. Dazu wird der Gradientenfaktor von 30% auf 0,5% verringert. Die übrigen Parameter sind gleich. Zu beobachten ist, dass der Verlauf der Fahrweise mit einem kleinen Gradienten (grüne Linie) sich eher in einem mittleren Bereich aufhält und vergleichsweise hohe bzw. niedrige Massenströme vermieden werden. Beim Betrieb der Trenneinheit mit einem hohen Gradienten sind wie erwartet hohe Lastsprünge zu beobachten, da diese zeitlich hohe $CO_2$-Emissionen vermeiden und zeitlich niedrige $CO_2$-Emissionen ausnutzen. In der Praxis resultiert aus einem höheren Gradienten hingegen ein höherer Energieverbrauch. Dieser Effekt kann jedoch vom Modell noch nicht berücksichtigt werden.

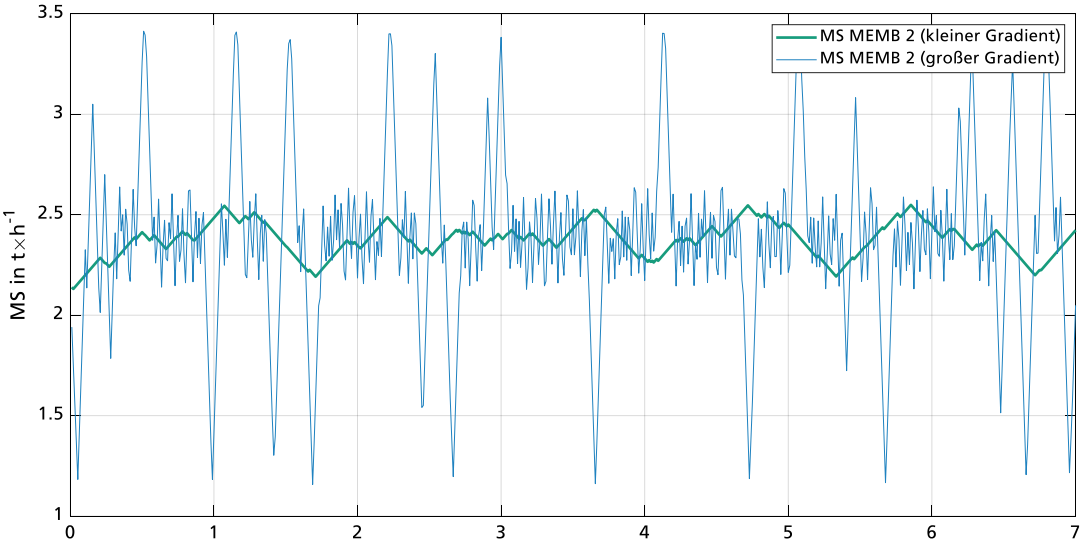


*Abbildung 30: Vergleich der Massenströme der zweiten Membrantrenneinheit mit einem kleinen und großen Gradienten.*

Die Fahrweise schlägt sich wie erwartet auf die Ergebnisse der Optimierung nieder. Auf einem Betrachtungszeitraum von zwei Wochen erhöhen sich die Scope-2-$CO_2$-Emissionen von 689 t auf 740 t durch die Verringerung des Gradientenverhaltens von 30% auf 0,5%. Diese Differenz kommt dadurch zustande, weil die größeren Gradienten niedrige $CO_2$-Emissionen der bezogenen elektrischen Energie besser ausnutzen können.

*Tabelle 13: Auswirkungen des Gradienten auf die Scope-2-$CO_2$-Emissionen.*

| Größen | großer Gradient (30%) | kleiner Gradient (0,5%) |
|---|---|---|
| Ausgehende $CO_2$-Emissionen (Scope 2) in t | 689 | 740 |

## 5.8 Betrieb des Testcases bei konstanter $CO_2$-Belastung der elektrischen Energie

Anders als in den obigen Durchläufen des Testcases wird in der folgenden Berechnung die $CO_2$-Belastung als zeitunabhängigen Wert von 474 g je kWh elektrischer Energie angenommen [33]. Dieser entspricht auch in etwa dem Jahresdurchschnitt der zur Verfügung gestellten $CO_2$-Zeitreihe. Für die weitere Betrachtung wird die Superstrukturoptimierung des Testcases bei einem Gap von 2% und einem Betrachtungszeitraum von zwei Wochen ausgewählt. Wie in Abbildung 31 und Abbildung 32 zu erkennen, ist die Dynamik im Testcase weiterhin vorhanden. In den Berechnungen bei denen die $CO_2$-Zeitreihe berücksichtigt wird, fungiert diese als Führungsgröße, weil - bestimmt durch die Zielfunktion - zu den Zeitpunkten die Anlagen bevorzugt betrieben werden, an denen die $CO_2$-Emissionen relativ niedrig sind. Da diese Führungsgröße hier fehlt, werden die Anlagen so betrieben wie es andere Randbedingungen wie Gradienten- und Teillastbedingung vorgeben. Der Betriebsverlauf hat somit einen hohen Zufallsanteil.

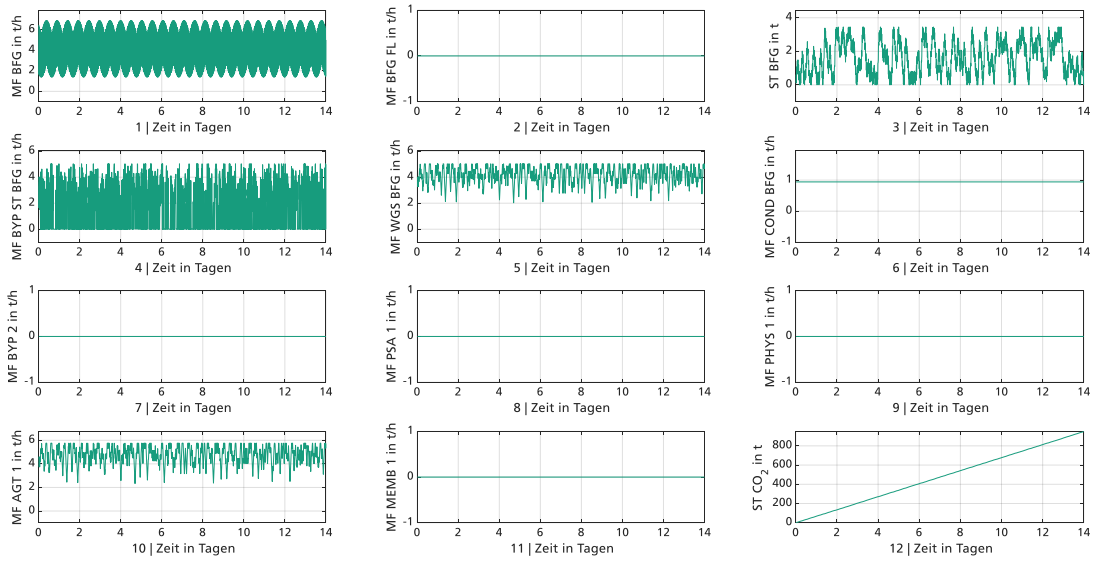


*Abbildung 31: Ergebnisse des Testcase unter konstanter $CO_2$-Belastung (1). Vergrößerte Abbildung in Anhang I.*

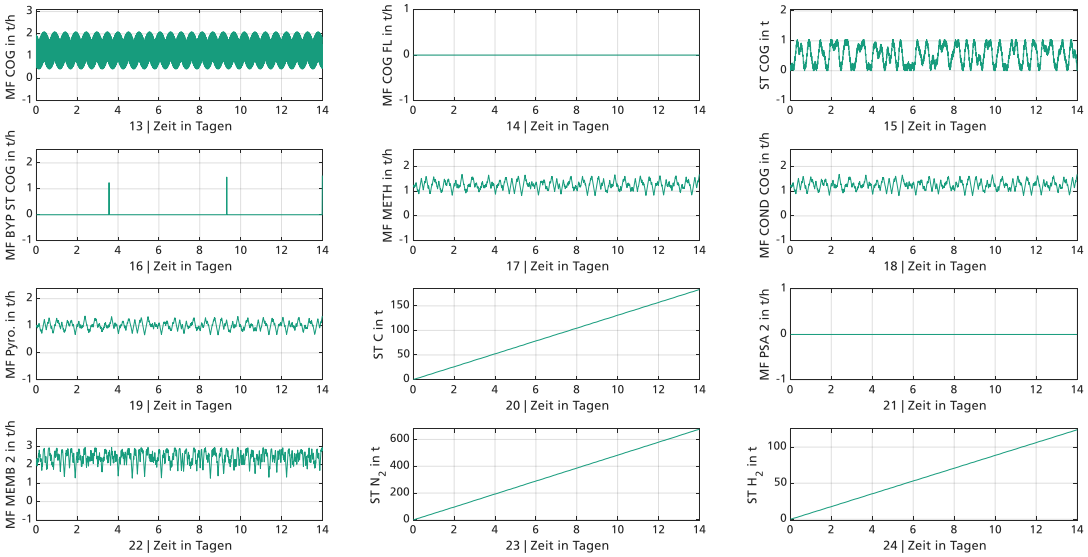


*Abbildung 32: Ergebnisse des Testcase unter konstanter $CO_2$-Belastung (2). Vergrößerte Abbildung in Anhang J.*

Wie in Abbildung 33 zu erkennen , ist die Dynamik des Methanators vom eingehenden Koksofengasstrom entkoppelt.

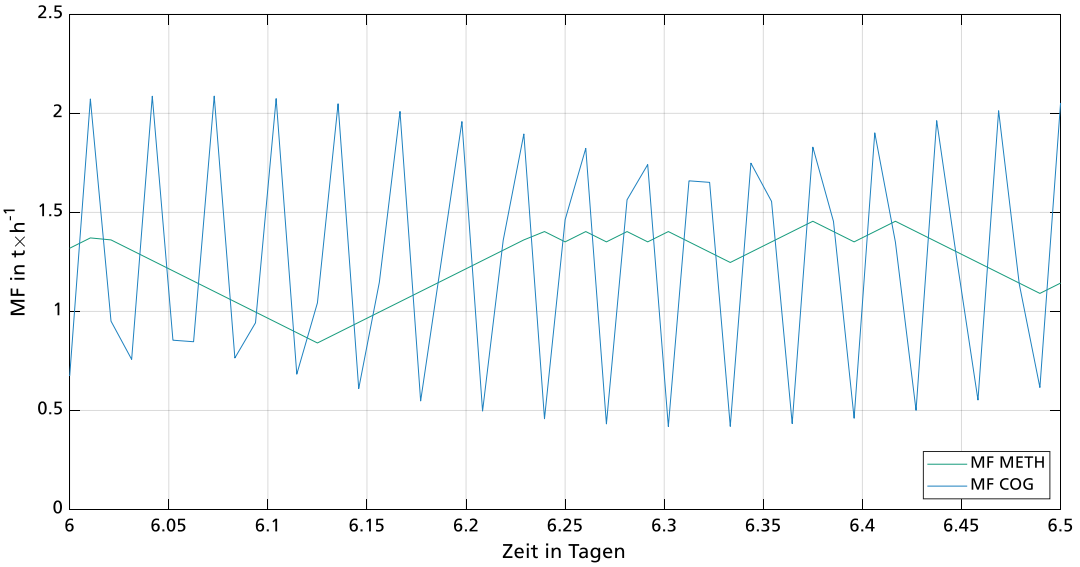


*Abbildung 33: Ergebnisse des Testcase unter konstanter $CO_2$-Belastung. Nähere Betrachtung der Dynamik des Koksofengases und des anschließenden Methanators.*

## 5.9 Zeitmessung

Theoretisch lassen sich beliebig große Zeiträume mit diesem Optimierungsmodell lösen. Aufgrund begrenzter Ressourcen wie Rechenleistung und verfügbarer Zeit lohnt es sich nicht, für komplexe Modelle Berechnungszeiträume von einem Jahr oder länger zu betrachten. In Abbildung 34 ist die benötigte Rechenzeit über verschiedene Optimierungszeiträume, die von einem Tag bis 28 Tagen reichen, aufgetragen. Betrachtet wird das Superstrukturmodell des Testcases unter einem Gap von 5%. Die mit dem roten Stern gekennzeichneten Punkte sind die arithmetischen Mittel von drei Messergebnissen. Deutlich wird, dass die benötigte Rechenzeit exponentiell vom betrachteten Optimierungszeitraum abhängt. Ein Versuch, einen Optimierungszeitraum von einem Jahr zu betrachten, scheiterte, weil das daraus resultierte Optimierungsmodell zu groß für die Optimierungsumgebung wird. Ein exponentielles Wachstum vorausgesetzt, würde die Berechnung hochgerechnet auf einen Betrachtungszeitraum von 365 Tagen unter gleichen Bedingungen mehr als $3 \times 10^{31}$ Jahre dauern. Bei einem quadratischen Wachstum, würde die Rechenzeit ca. 16 Tage betragen. Eine klare Vorhersage bzgl. des Wachstumsverhalten der Rechenzeit bei MILP gibt es nicht. Daher wird die Rechenzeit zwischen den beiden genannten hochgerechneten Werten liegen.

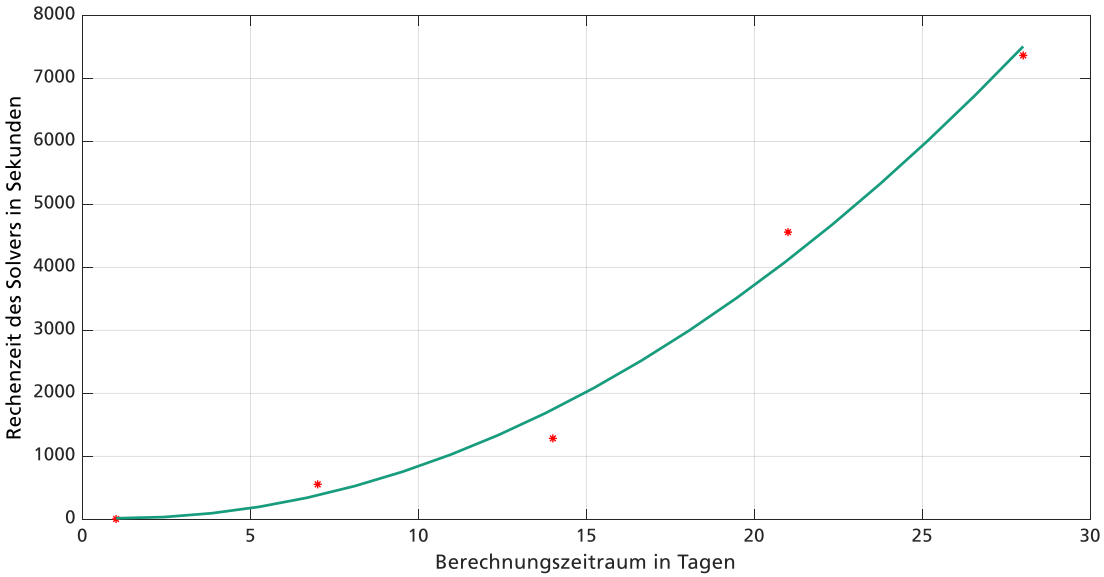


*Abbildung 34: Abhängigkeit Rechenzeit vom betrachteten Berechnungszeitraum.*

Einen weiteren Einfluss auf die Rechenzeit übt die Komplexität des betrachteten Optimierungsmodells aus. Abbildung 35 zeigt diesen Sachverhalt. Die Anzahl der betrachteten Variablen und Nebenbedingungen steigt vom parallelen hin zum in Reihe geschalteten Modell hin zum Testcase an. Die logarithmische Skalierung der y-Achse ist zu beachten. Der Testcase benötigt für den Fall der Superstrukturoptimierung, einem Betrachtungszeitraum von 28 Tagen und einem Gap von 2% im Mittel von drei Messwerten fast 7.000 Sekunden, während das parallel geschaltete und das in Reihe geschaltete Modell im Mittel 13 bzw. 53 Sekunden bei sonst gleichbleibenden Parametern benötigen. Konkret bedeutet dies, dass bei einer Vergrößerung des Optimierungsmodells um das Doppelte (wie bei „Parallel“ und „Reihe“), d.h. Verdopplung der Variablen- und Nebenbedingungenanzahl, eine überproportionale höhere Rechenzeit zu erwarten ist.

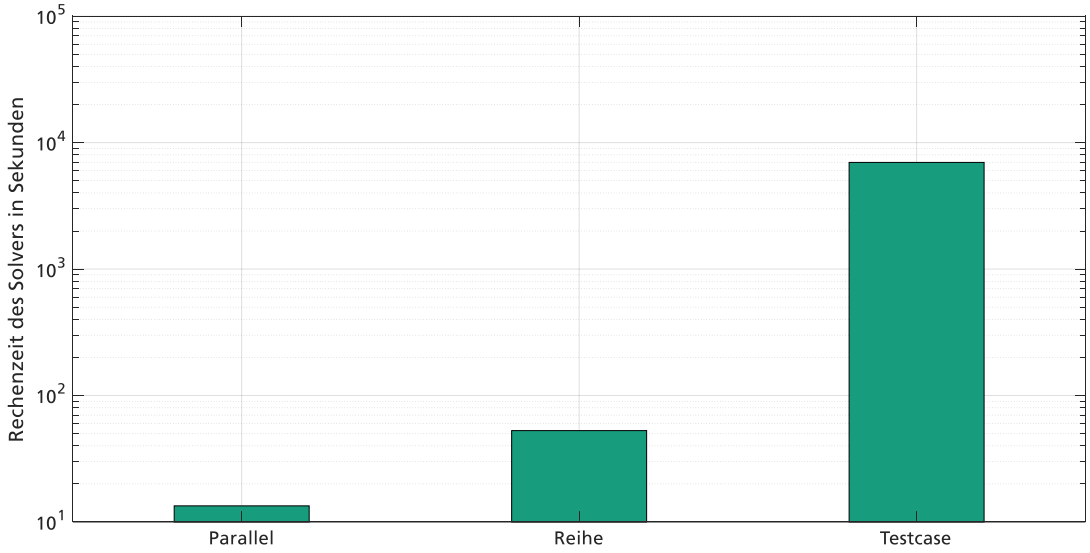


*Abbildung 35: Abhängigkeit der Rechenzeit von der Komplexität.*

Untersucht wird ebenfalls der Einfluss des Gaps auf die Rechenzeit des Solvers. In Abbildung 36 sind die Rechenzeiten des Solvers für die Gaps 0,002%, 0,02%, 0,2% und 2% auf einer logarithmischen x-Achse aufgetragen. Dafür wird als Grundlage das Superstrukturoptimierungsmodell des parallelen Builds bei einem Berechnungszeitraum von 21 Tagen genutzt. Zu sehen ist, dass die Rechenzeit bei einem kleinen Gap größer ist als bei einem größeren Gap. Dieser Effekt ist zu erwarten, weil es für den Solver schwieriger ist, die Lösungsmenge zu finden, die näher an der konvexen Menge ist. Dieser Effekt lässt sich jedoch nur bei äußerst kleinen Gaps wie in Abbildung 36 beobachten. Bei größeren Gaps wie bei 5% und 10% lässt sich eine Korrelation nicht

erkennen, da bei der Einsicht in das Optimierungsverhalten des Solvers ein direktes Springen von einem Gap von 100% auf ein Gap von 2% zu sehen ist.

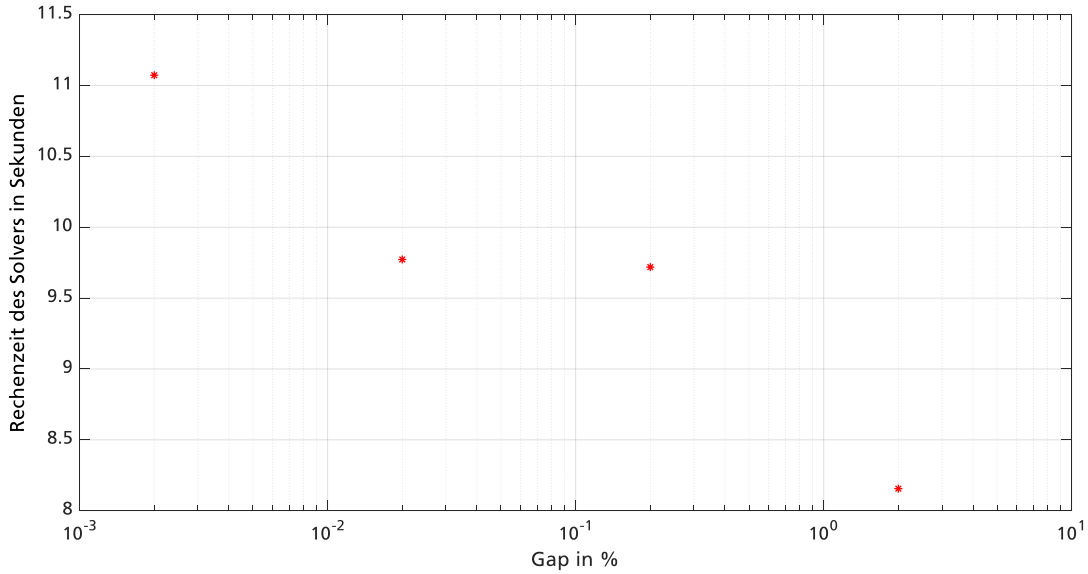


*Abbildung 36: Rechenzeit über Gap.*

Des Weiteren werden die benötigten Rechenzeiten der Betriebs-, Struktur- und Superstrukturoptimierung miteinander verglichen. Als Umgebung wird ein Betrachtungszeitraum von 28 Tagen, ein Gap von 2% und der Testcase ausgewählt. Wie in Abbildung 37 zu erkennen, ist die benötigte Rechenzeit mit ca. 440 Sekunden im Falle der Betriebsoptimierung am geringsten, während im Fall der Struktur- bzw. Superstrukturoptimierung ca. 7.400 bzw. 7.000 Sekunden benötigt werden. Der vergleichsweise niedrige Wert bei der Betriebsoptimierung kommt vermutlich durch das Hinzufügen von weiteren Variablen und Nebenbedingungen, die die Strukturoptimierung beschreiben zustande. Hingegen stellt sich die Frage, weshalb die Superstrukturoptimierung eine kürzere Rechenzeit aufweist, obwohl weitere Variablen und Nebenbedingungen hinzugefügt werden. Dies liegt vermutlich daran, dass die Algorithmen des Solvers während der Rechnung bestimmte Variablen und Nebenbedingungen verwerfen und für den weiteren Verlauf der Rechnung nicht mehr berücksichtigen.

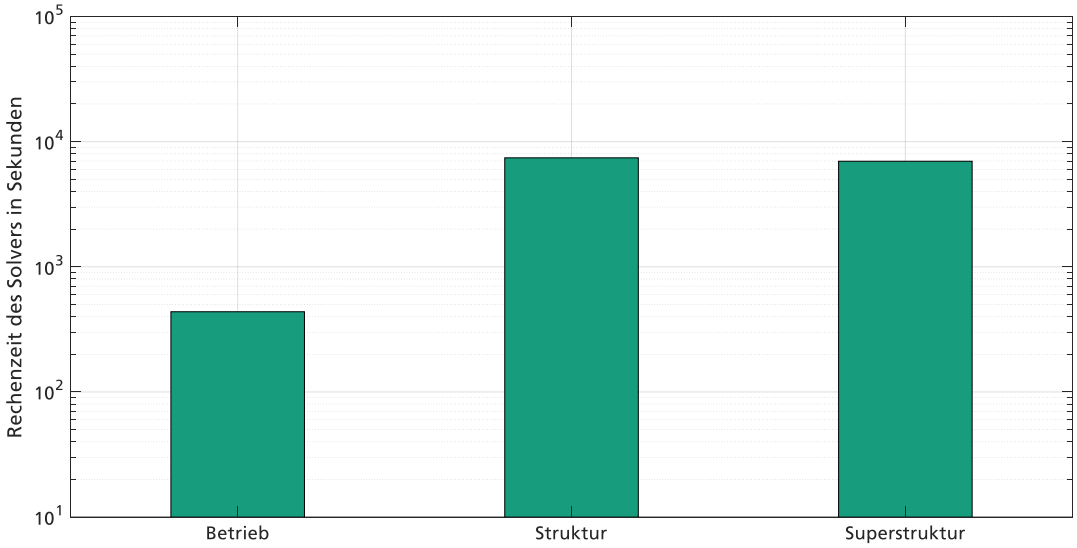


*Abbildung 37: Benötigte Laufzeit der Betriebs-, Struktur- und Superstrukturoptimierung. Weitere Parameter: 28 Tage Betrachtungszeitraum, Gap 2%, Testcase.*

Zusammenfassen lässt sich sagen, dass große Einflüsse auf die Rechenzeit durch die Komplexität des Optimierungsmodells und der Länge des Betrachtungszeitraum erkennbar sind. Ein Gap von 2% ist für die gängige Optimierungspraxis ausreichend und eine verkürzte Laufzeit bei einem höheren Gap lässt sich nicht beobachten. Ebenso spielt die Wahl der Betriebs-, Struktur- und Superstrukturoptimierung eine Rolle.

# 6 ZUSAMMENFASSUNG

Das Ziel dieser Arbeit ist es, das bestehende Modell durch die Möglichkeit einer modellbasierten Technologieauswahl in Form einer Superstrukturoptimierung zu erweitern. Zum Anfang dieser Arbeit werden die theoretischen Grundlagen beschrieben, die das Gerüst bilden, um die Zielsetzung dieser Arbeit zu erfüllen

Zu den theoretischen Grundlagen gehören sowohl Kenntnisse über die mathematische Optimierung (Kapitel 3.1) als auch das Einordnen anderer Studien zum Thema der mathemischen Optimierung in Stahlerzeugungsprozessen (Kapitel 3.3) als auch Kenntnisse über die Stahlerzeugung selbst (Kapitel 3.4).

Ein Teilbereich der mathematischen Optimierung, der in dieser Arbeit von besonderer Bedeutung ist, ist die gemischt-ganzzahlige lineare Optimierung (MILP). Neben Kenntnisse über diese Art der Optimierung an sich ist auch das Aneignen von Know-how über verschiedene Algorithmen wie das Branch&Bound- oder Simplex-Verfahren wichtig (Kapitel 3.1).

Das Teilgebiet der mathematischen Optimierung nach MILP wird anschließend als Methode für die Superstrukturoptimierung ausgewählt. Von besonderer Bedeutung ist dabei die Implementierung des Produktes von kontinuierlichen und binären Variablen, um eine modellbasierte Technologieauswahl treffen zu können. Daneben sind Kenntnisse über die verschiedenen verfahrenstechnischen Einheiten wichtig, um die technologische Basis einer möglichst realitätsnahen Modellierung zu schaffen (Kapitel 4.4). Um den Prozessen eine Führungsgröße zu geben, sodass der Betrieb möglichst emissionsarm einhergeht, geschieht die Modellierung unter Berücksichtigung einer $CO_2$-Zeitreihe der aus dem deutschen Strommix zur Verfügung gestellten elektrischen Energie (vgl. Kapitel 4.6). Zudem hat das Modell Zugriff auf eine fiktive aber real angelegte Gaszeitreihe, die einen fluktuierenden Hochofengas- bzw. Koksofengasstrom darstellt. Die Volumenstromverhältnisse der Teilströme, die Bestandteilzusammensetzung und das periodische Verhalten dieser Gaszeitreihe ist ebenfalls einstellbar.

Umgesetzt wird das Superstrukturoptimierungsmodell mit der Software MATLAB und der dort integrierten Toolbox YALMIP, die die Kommunikation zwischen MATLAB und eines kommerziellen MILP-Solvers wie Gurobi oder CPLEX ermöglicht. Am Beispiel des Pyrolyseprozesses wird in Kapitel 0 in Form eines Pseudo-Codes die Modellierung beschrieben. Dort fließen u.a. Massenbilanzen, die $CO_2$-Zeitreihe, der Einfluss des Teillastverhalten, die Reaktionsenthalpie mit ein. Die $CO_2$-Zeitreihe wird aus dem Agorameter importiert und bildet $CO_2$-Emissionen der bezogenen elektrischen Energie über Zeit ab.

Anschließend wird der Aufbau zweier einfacher modellierter Optimierungsmodelle beschrieben. Diese Modelle dienen der Validierung und bestätigen die Funktionsweise des neu implementierten Superstrukturfeatures. Im Anschluss daran folgt der Aufbau eines komplexeren Testcases, dessen Aufgabe es ist, zwei eingehende Gasströme unter ökologischen Gesichtspunkten aufzubereiten und anschließend in seine Bestandteile aufzutrennen.

Die anschließende Validierung des Superstrukturfeatures in Kapitel 5.1 wird anhand zweier einfacher Optimierungsmodelle mit Erfolg vorgenommen. Die erwarteten Ergebnisse werden durch die Optimierungsmodelle bestätigt.

Die Validierung des Testcases wird im Gegensatz zu den einfachen Modellen nicht stofflich, sondern in Form einer $CO_2$-Minimierung vorgenommen. Auch hier wird die Funktionsweise des Testcases bestätigt. Anschließend werden die Parameter und andere Eingangsgrößen des Testcases verändert und die daraus resultierenden Ergebnisse untersucht. Dazu werden die Massenströme der Teilprozesse visualisiert und dessen Verlauf diskutiert. Eine Erkenntnis daraus ist, dass der Verlauf der Massenströme auf den Verlauf $CO_2$-Zeitreihe antwortet. Das heißt, dass bei temporären Spitzen der $CO_2$-Zeitreihe eine Reduktion der Massenströme im Anlagenbetrieb zu verzeichnen ist. Die umgekehrte Fahrweise ist ebenfalls zu beobachten.

Darüber hinaus werden u.a. der Einfluss des Gradienten, der Speichergröße und die Fahrweise unter konstanten $CO_2$-Emissionen untersucht. Ebenfalls werden die Ergebnisse der Superstrukturoptimierung mit den Ergebnissen einer Betriebsoptimierung verglichen.

Neben den Verläufen der Massenströme liefert das Optimierungsmodell des Testcases auch Informationen zur Menge der entstandenen Endprodukte und zu den durch den Prozess entstandenen $CO_2$-Emissionen. Hochgerechnet für die in Kapitel 5.2 beschriebenen Ergebnisse auf 52 Wochen (entspricht ca. einem Jahr) gehen für die dort angegebenen Parameter und Eingangsgrößen ca. 42.200 t $CO_2$ in den Verbund des Testcases ein. Davon werden ca. 24.700 t gespeichert und ca. 17.900 t verlassen die Bilanzgrenzen (davon ca. 99,9% $CO_2$-Emissionen durch den Bezug elektrischer Energie). Zudem liefert der Verbund 17.600 t Stickstoff und 3.100 t Wasserstoff.

Anschließend werden Zeitmessungen der drei Optimierungsmodelle durchgeführt, bei dem der Betrachtungszeitraum, das Gap und die Optimierungsmethode verändert wird. Zu sehen ist eine klare überproportionale Erhöhung der Rechenzeit bei Vergrößerung des Betrachtungszeitraumes. Erhöht hat sich auch die Rechenzeit bei einer Verringerung des Gaps, entlang der Komplexität des Optimierungsmodells und von der Betriebsoptimierung auf die Struktur- bzw. Superstrukturoptimierung.

# 7 AUSBLICK

Das in dieser Arbeit vorgestellte Modell bietet diverse Erweiterungsmöglichkeiten. Erstens kann untersucht werden, wie sehr sich eine Integration eines Wind- oder eines Solarparks in das bestehende Modell zur Versorgung mit emissionsarmer Energie eignet. Von weiterem Interesse ist eine ökonomische Betrachtung des Verbundes. Für eine ökonomische Betrachtung muss die treibende Zielfunktion dafür umgeschrieben werden. In dieser Betrachtung würden Marktpreise für Energie und Endprodukte mit einfließen. Da diese ebenfalls Schwankungen unterworfen sind, ließe sich hier eine gewisse Ähnlichkeit zur Berechnung mit der $CO_2$-Zeitreihe bei der ökologischen Optimierung zu beobachten. In diese Betrachtung könnten ebenfalls Investitionskosten der Anlagen fallen. Diese steigen nicht linear mit der Kapazität einer Anlage an, sondern verhalten sich degressiv [34].

Das Testmodell könnte auch so erweitert werden, dass die Gase nicht nur getrennt, sondern im Sinne des Carbon2Chem-Ansatzes zu weiteren Endprodukten wie zum Beispiel Methanol oder Ameisensäure verarbeitet werden. Auch hier könnten im Zuge einer Superstrukturoptimierung Technologien zur Herstellung ökonomisch sowie ökologisch miteinander verglichen werden.

Zudem könnte der vorgestellte Testcase durch weitere technische Einheiten realistischer gemacht werden. Beispielsweise spielten hier die Betriebsdrücke der verschiedenen Anlagen eine untergeordnete bis keine Rolle. Beim Umgang mit Prozessgasen ist dies jedoch von großer Bedeutung, da eine optimale Fahrweise der jeweiligen Anlage bei unterschiedlichen Drücken ablaufen kann. Dafür muss jeder Teilprozess mit einem Kompressor ausgestattet werden, der die Gase auf den gewünschten Druck komprimiert.

Des Weiteren bietet die Integration der verschiedenen Teilprozesse Möglichkeiten für weitere Untersuchungen. Bisher wird der Wärme- bzw. Kältebedarf der Teilprozesse unabhängig voneinander betrachtet. Ein Netzwerk dieser verschiedenen Wärmeströme könnten in den Verbund eingebunden werden. Auch eine Anbindung an geothermische Wärmequellen oder an das Fernwärmenetz oder der Einsatz von Wärmepumpen könnte Ausgangspunkt weiterer Untersuchungen sein. Diese Integration würde das Problem jedoch noch großskaliger machen. Für eine Lösung dieses Problems müsste der Lösungsraum weiter eingegrenzt werden.

Weitere Untersuchungen könnten Szenarien des zukünftigen Energiemarktes betreffen. Der Ausbau der erneuerbaren Energien ist recht dynamisch. Deshalb können Ergebnisse der Superstrukturoptimierung, die auf Grundlage von aktuellen Zahlen entstehen, in einigen Jahren überholt sein. Vorstellbar wären Untersuchungen, die den Energiemarkt,

die dazugehörende Infrastruktur, technologische Trends, rechtliche Rahmenbedingungen und Preise für die hergestellten Endprodukte für die kommenden Jahrzehnte betreffen. Neben den wirtschaftlichen und ökologischen Untersuchungen sollten für eine nachhaltige Entwicklung auch die sozialen Folgen des Ausbaus erneuerbarer Energien ins Licht gerückt werden. In vielen Regionen Deutschlands häufen sich Initiativen gegen den Ausbau von Windkraftanlagen [35]. Dieser Umstand sollte in einer Szenarienanalyse berücksichtigt werden.

Aufgrund der hohen hochgerechneten Rechenzeiten bei langen Betrachtungszeiträumen macht es für zukünftige Betrachtungen ebenfalls Sinn, Datenmengen im Rahmen einer Clusteranalyse in Gruppen zusammenzufassen, um die Berechnungen zu optimieren. [36]

# LITERATUR


[1] V. Masson-Delmotte *et al.,* "Global Warming of 1.5°C: An IPCC Special Report on the impacts of global warming of 1.5°C above pre-industrial levels and related global greenhouse gas emission pathways, in the context of strengthening the global response to the threat of climate change, sustainable development, and efforts to eradicate poverty," ipcc, 2018.

[2] United Nations, "ADOPTION OF THE PARIS AGREEMENT," 2015.

[3] M. Oles *et al.,* "Carbon2Chem® - Ein cross-industrieller Ansatz zur Reduzierung der Treibhausgasemissionen," *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 90, 1-2, pp. 169–178, 2018, doi: 10.1002/cite.201700112.

[4] H. Ghanbari, M. Helle, F. Pettersson, and H. Saxén, "Optimization Study of Steelmaking under Novel Blast Furnace Operation Combined with Methanol Production," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 50, no. 21, pp. 12103–12112, 2011, doi: 10.1021/ie201198j.

[5] J. Kallrath, *Gemischt-ganzzahlige Optimierung: Modellierung in der Praxis*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2013. Accessed: Oct. 14 2019.

[6] Josef Kallrath, "MIXED INTEGER OPTIMIZATION IN THE CHEMICAL PROCESS INDUSTRY: Experience, Potential and Future Perspectives," pp. 809–813, 2011.

[7] Wikimedia Commons, *File:Dodecahedron.svg.* [Online]. Available: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Dodecahedron.jpg#/media/File:Dodecahedron.svg (accessed: Apr. 23 2020).

[8] David Bauer, Stefan Kirschbaum, Gregor Wrobel, Julian Agudelo, Philip Voll, "Modellbasierte Optimierung von Energiesystemen," *Lecture Notes in Informatics*, 141-144, 2015.

[9] TOP-Energy, *Software for Optimization of Energy Systems.* [Online]. Available: https://www.top-energy.de/en.html (accessed: Apr. 30 2020).

[10] M. van Beek, "A Review of Mathematical Programming in Integrated Iron- and Steelmaking," *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 90, no. 10, pp. 1568–1575, 2018, doi: 10.1002/cite.201800027.

[11] C. Liu, Z. Xie, F. Sun, and L. Chen, "Exergy analysis and optimization of coking process," *Energy*, vol. 139, pp. 694–705, 2017, doi: 10.1016/j.energy.2017.08.006.

[12] S. Wu, H. Han, and X. Liu, "Mathematical Model for Blast Furnace Burden Optimization Based on the High-temperature Reactivity," *ISIJ Int.*, vol. 50, no. 7, pp. 987–993, 2010, doi: 10.2355/isijinternational.50.987.

[13] X. Liu, H. Feng, L. Chen, X. Qin, and F. Sun, "Hot metal yield optimization of a blast furnace based on constructal theory," *Energy*, vol. 104, pp. 33–41, 2016, doi: 10.1016/j.energy.2016.03.113.

[14] L. Chen, X. Liu, H. Feng, Y. Ge, and Z. Xie, "Molten steel yield optimization of a converter based on constructal theory," *Sci. China Technol. Sci.*, vol. 61, no. 4, pp. 496–505, 2018, doi: 10.1007/s11431-017-9162-y.

[15] M. Larsson and J. Dahl, "Reduction of the Specific Energy Use in an Integrated Steel Plant-The Effect of an Optimisation Model," *ISIJ Int.*, vol. 43, no. 10, pp. 1664–1673, 2003, doi: 10.2355/isijinternational.43.1664.

[16] Hamid Ghanbari, Frank Pettersson, and Henrik Saxén, "Optimal operation strategy and gas utilization in a future integrated steel plant," *Chemical Engineering Research and Design*, pp. 322–336, 2015, doi: 10.1016/j.cherd.2015.06.038.

[17] European Integrated Pollution Prevention and Control Bureau, "Best Available Techniques (BAT) Reference Document for Iron and Steel Production: Industrial Emissions Directive 2010/75/EU (Integrated Pollution Prevention and Control)," 2012.

[18] Wirtschaftsvereinigung Stahl, *Roheisen- und Rohstahlerzeugung.* [Online]. Available: https://www.stahl-online.de/index.php/service/stahlerzeugung/ (accessed: 20.04.20202).

[19] T. Melin and R. Rautenbach, *Membranverfahren: Grundlagen der Modul- und Anlagenauslegung,* 3rd ed. Berlin, New York: Springer, 2007.

[20] O. Z. Peter Viebahn, "Technologien fuer die Energiewende Technologiebericht Band 2," 2018.

[21] R. Alexander, *CO2-Abscheidung aus Kraftwerksrauchgasen mit wässriger MEA-Lösung - Waschmitteldegradation und Aufbereitungsverfahren*, 2016.

[22] Andrea Ohle, *CO2-Abtrennung aus Gasströmen durch Absorption in Poly(methyldiglykol)amin*, 2009.

[23] Technische Universität Wien, "ÜBERBLICK ÜBER BIOGASAUFBEREITUNGSTECHNOLOGIEN ZUR PRODUKTION VON BIOMETHAN," May. 2012.

[24] NIST Chemistry WebBook, *Isothermal Properties for Methane.* [Online]. Available: https://webbook.nist.gov/ (accessed: Mar. 6 2020).

[25] Bundesverband Geothermie, *Kondensator (Thermodynamik).* [Online]. Available: https://www.geothermie.de/bibliothek/lexikon-der-geothermie/k/kondensator-thermodynamik.html (accessed: Apr. 14 2020).

[26] Thermopedia, *STEAM TABLES.* [Online]. Available: http://www.thermopedia.com/content/1150/ (accessed: Apr. 14 2020).

[27] R. Dagle, V. Dagle, M. Bearden, J. Holladay, T. Krause, and S. Ahmed, "R&D Opportunities for Development of Natural Gas Conversion Technologies: for Co-Production of Hydrogen and Value-Added Solid Carbon Products," Argonne National Laboratory, Nov. 2017.

[28] A.Y. Tonkovich*, J.L. Zilka, M.J. LaMont, Y. Wang, R.S. Wegeng, "Microchannel reactors for fuel processing applications. I. Water gas shift reactor," *Chemical Engineering Science*, no. 54, 1999.

[29] M. Schmidt, S. Schwarz, B. Stürmer, L. Wagener, and U. Zuberbühler, "Technologiebericht 4.2a Power-to-gas (Methanisierung chemisch-katalytisch) innerhalb des Forschungsprojekts TF_Energiewende," Wuppertal Institut, ISI, IZES (Hrsg.), 2018.

[30] Agora Energiewende, "Agorameter," 2019.

[31] Energieagentur NRW, *Emissions-Kategorien (Scopes) nach dem Greenhouse Gas Protocol.* [Online]. Available: http://www.ccf.nrw.de/navi/downloads/emissionsquellen/Emissions_Kategorien_Scopes.pdf (accessed: Apr. 14 2020).

[32] Bundesministerium für Wirtschaft und Energie, *Brennstoffzellen und Wasserstoff.* [Online]. Available: https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Artikel/Energie/Energieforschung/energieforschung-brennstoffzellen.html (accessed: Apr. 14 2020).

[33] Umweltbundesamt, *CO2-Emissionen pro Kilowattstunde Strom sinken weiter.* [Online]. Available: https://www.umweltbundesamt.de/themen/co2-emissionen-pro-kilowattstunde-strom-sinken (accessed: Apr. 8 2020).

[34] M. Perez-Fortes and E. Tzimas, "Techno-economic and environmental evaluation of CO2 utilisation for fuel production: Synthesis of methanol and formic acid," European Commission, 2016.

[35] P. H. Feindt and T. Saretzki, *Umwelt- und Technikkonflikte*. Wiesbaden: VS Verl. für Sozialwiss, 2010. [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-531-92354-3

[36] Sarah Wagner, *Clusteranalyse: Einführung.* [Online]. Available: https://www.inwt-statistics.de/blog-artikel-lesen/Clusteranalyse.html (accessed: Apr. 23 2020).

# ANHANG

Um die in Kapitel 3.1 abstrakten mathematischen Optimierungsmethoden zu erläutern, befinden sich in den folgenden zwei Unterkapiteln Rechenbeispiele zum Thema des Simplex-Algorithmus und des B&B-Verfahrens.

# ANHANG A: Simplex-Verfahren

Das Simplex-Verfahren soll anhand des folgenden Beispiels sehr oberflächlich erklärt werden. Für eine detaillierte und allgemeingültige Beschreibung wird auf die Literatur verwiesen.

Folgende Zielfunktion ist zu maximieren

$$\max_{(x_1,x_2)} z \ , z = z(x_1, x_2) = 800x_1 + 600x_2 \tag{79}$$

unter den Nebenbedingungen

$$\begin{array}{rcrcr} x_1 & + & x_2 & \leq & 350 \\ x_1 & & & \leq & 200 \\ x_1 & - & x_2 & \geq & 0 \\ 4x_1 & + & 3x_2 & \leq & 1400 \\ x_1 & , & x_2 & \geq & 0 \end{array} \tag{80}$$

Um das oben genannte Ungleichungssystem in ein Gleichungssystem umzuführen, werden die Schlupfvariablen $s_1, s_2, s_3, s_4$ für jede Ungleichung mit Ausnahme der Nichtnegativitätsbedingungen eingeführt.

$$\begin{array}{rcrcrcrcrcr} x_1 & + & x_2 & + & s_1 & & & & & = & 350 \\ x_1 & & & & & + & s_2 & & & = & 200 \\ -x_1 & + & x_2 & & & & & + & s_3 & = & 0 \\ 4x_1 & + & 3x_2 & & & & & & & + \ s_4 \ = & 1400 \end{array} \tag{81}$$

Anschließend wird mit Hilfe der Pivotspalte und –zeile das Pivotelement ermittelt. Das Pivotelement hilft die Lösung des linearen Gleichungssystems zu finden, indem es ähnlich wie beim Gauß-Algorithmus bei der Erstellung einer Einheitsmatrix behilflich ist, mit der die Lösung abgelesen werden kann.

Für ein detaillierteres Beispiel wird auf die Literaturquellen verwiesen. [5]

## ANHANG B: Branch&Bound-Verfahren Beispiel

Zur Verdeutlichung des Branch&Bound-Verfahrens (B&B) soll folgendes Optimierungsproblem gelöst werden

$$\max_{\kappa,\sigma} z \ , z = z(\kappa, \sigma) = 3\kappa + 2\sigma \tag{82}$$

Unter den Nebenbedingungen

$$\begin{aligned} 0 \leq \kappa \leq 2 \\ 0 \leq \sigma \leq 2 \\ \kappa + \sigma \leq 3{,}5 \end{aligned} \tag{83}$$

Als ersten Schritt wird die optimale Lösung unter Vernachlässigung der Ganzzahligkeitsbedingung gelöst. Dieser Schritt wird LP-Relaxierung genannt. Die Lösung wird zum Beispiel über das Simplex-Verfahren erhalten. Als Lösung ergibt sich

$$LP_0 : \kappa = 2 \ , \sigma = 1{,}5 \ , Z^0 = z = 9 \tag{84}$$

Wie oben zu sehen ist, ist der optimale Wert von $\kappa$ 2 und von $\sigma$ 1,5. Da für $\kappa$ und $\sigma$ ganzzahlige Werte gefordert werden, ist die oben genannte Lösung ungültig. Bekannt ist aber, dass z nicht den Wert 9 überschreiten kann. Dieser Wert wird als obere Schranke im weiteren Verlauf des Algorithmus berücksichtigt und wird als $z^{LP} = Z^0 = 9$ formuliert. Die untere Schranke wird formal als $z^{IP} = -\infty$ formuliert. Der optimale Zielfunktionswert $z^*$liegt also zwischen den oben genannten Schranken.

$$z^{LP} \geq z^* \geq z^{IP} \tag{85}$$

Um zu einer gültigen, ganzzahligen Lösung zu kommen, wird das oben beschriebene Problem in zwei Unterprobleme geteilt (vgl. Abbildung 1).

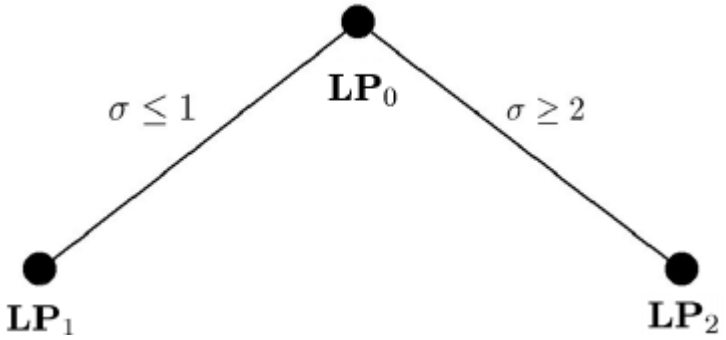


*Abbildung 38: Das Problem wird in zwei Unterproblem zerlegt [5].*

Die neuen Unterprobleme werden durch neue Schranken definiert. In diesem Fall sind es die beiden natürlichen Zahlen, die unmittelbar an $\sigma = 1{,}5$ grenzen. Also spart bei der weiteren Betrachtung das offene Intervall $\sigma = (1{,}2)$ aus.
Die zwei Unterprobleme, auch Zweige *(engl. Branches)* genannt, sind demnach

$$\begin{aligned} LP_1 &= LP_0 \ \oplus \sigma \leq 1 \\ LP_2 &= \ LP_0 \oplus \sigma \geq 2 \end{aligned} \tag{86}$$

Das Symbol $\oplus$ kennzeichnet die neuen Schrankenbedingungen.
Als nächstes werden beide Unterprobleme gelöst, vergleicht die Zielfunktionswerte und kontrolliert die geforderte Ganzzahligkeitsbedingung.

$$\begin{aligned} LP_1{:}\ \kappa = 2\ , \sigma = 1\ , Z^1 = z = 8 \\ LP_2{:}\ \kappa = 1{,}5\ , \sigma = 2\ , Z^2 = z = 8{,}5 \end{aligned} \tag{87}$$

Da $LP_1$ die Ganzzahligkeitsbedingung erfüllt, wird der untere Grenzwert der Zielfunktion mit $z^{IP} = 8$ aktualisiert. Das oben beschriebene Vorgehen wird mit $LP_2$ (auch Knoten genannt) wiederholt, um sicherzugehen, dass $LP_1$ die optimale Lösung ist.
Für die Unterprobleme von $LP_2$ gilt

$$\begin{aligned} LP_3{:}\ LP_2 \oplus \kappa \leq 1 \\ LP_4{:}\ LP_2 \oplus \kappa \geq 2 \end{aligned} \tag{88}$$

$LP_3$ hat folgende Lösung

$$LP_3{:}\ \kappa = 1\ , \sigma = 2\ , Z^3 = z = 7 \tag{89}$$

Der Zielfunktionswert ist mit $Z^3 = 7$ kleiner als $Z^1 = 8$ und fällt daher als optimale Lösung weg. $LP^4$ wird nicht weiter berücksichtigt, da es ein Unterproblem von $LP^2$ ist und mit der Bedingung $\kappa + \sigma \leq 3{,}5$ kollidiert, da $\kappa,\ \sigma\ \geq\ 2$.
Da $LP_3$ und $LP_4$ keine gültige oder optimale Lösung aufweisen, enthält $LP_1$die optimale Lösung. [5]

# ANHANG C

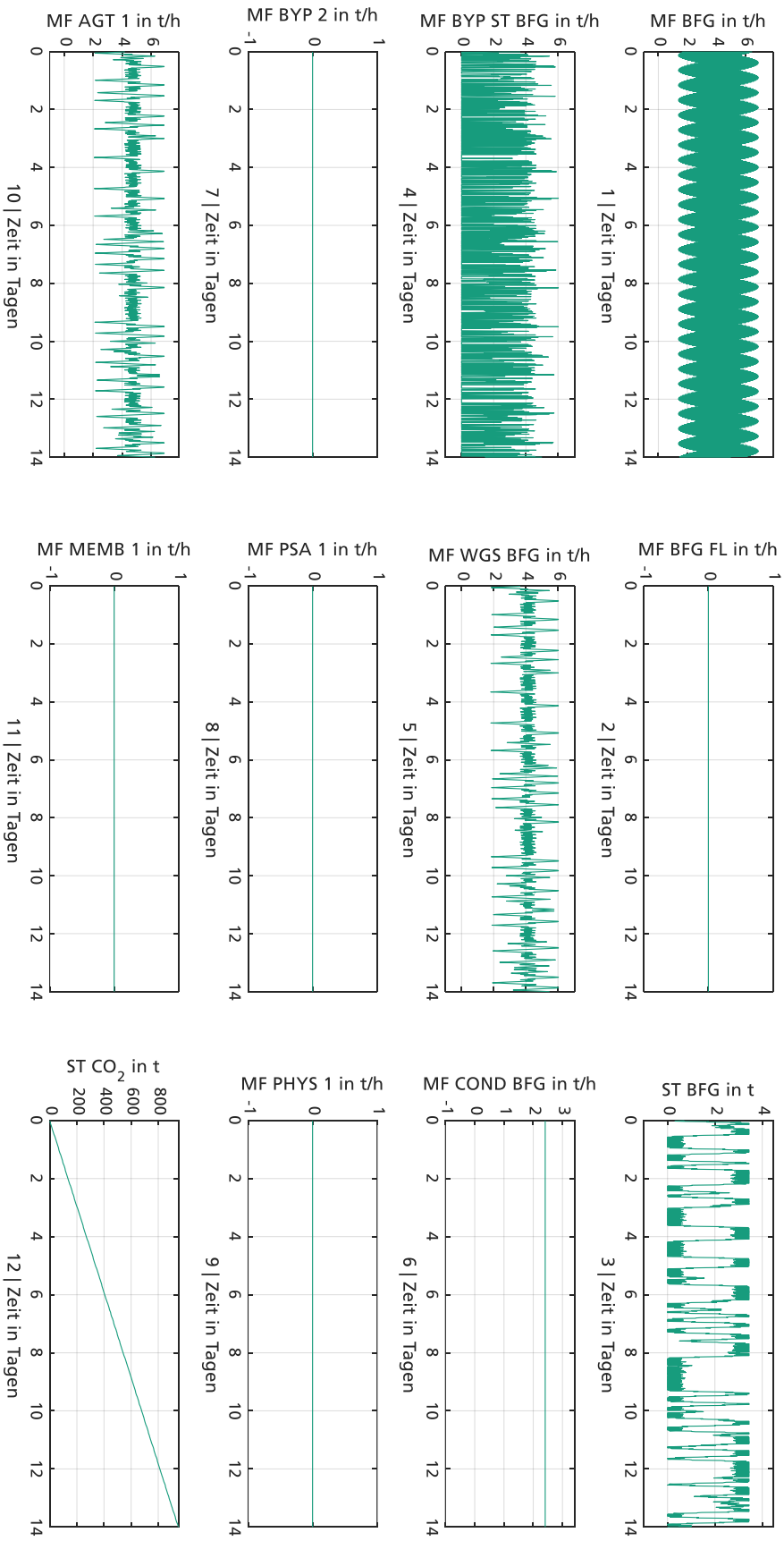


*Abbildung 39: Vergrößerte Abbildung 20*

# ANHANG D

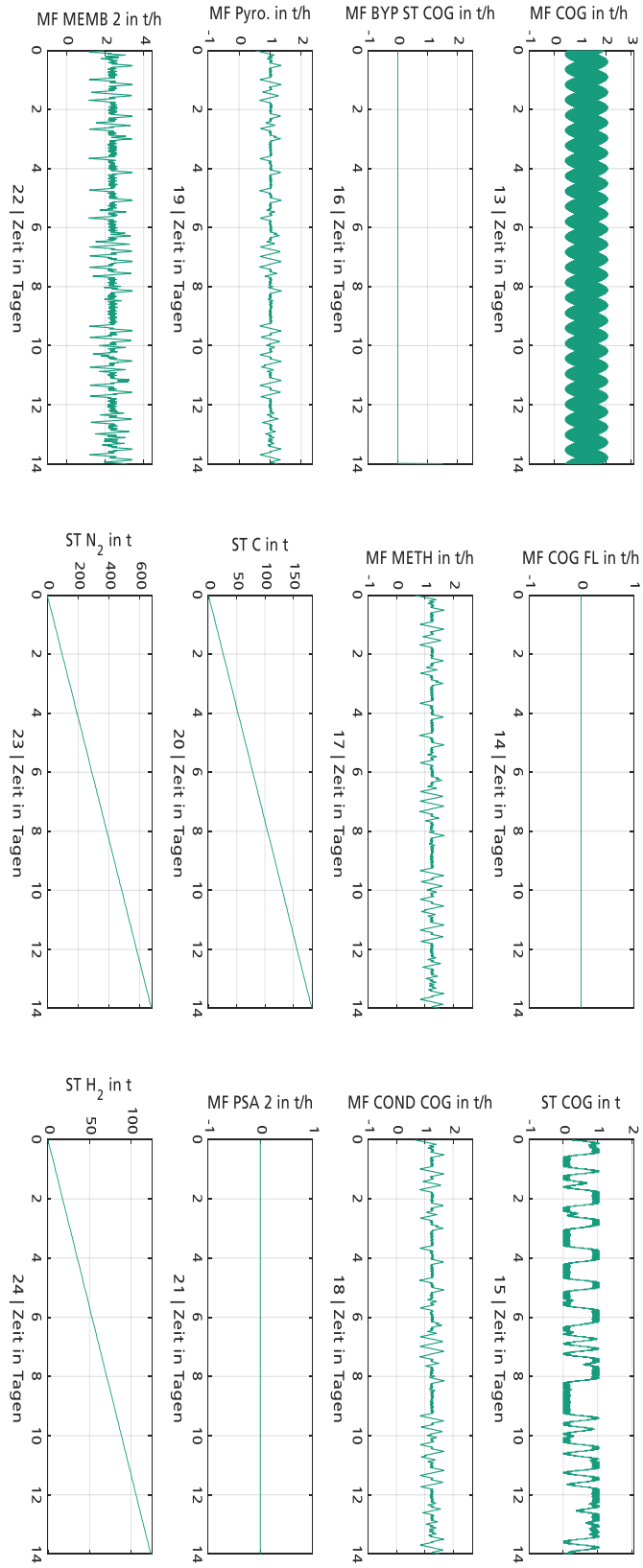


*Abbildung 40: Vergrößerte Abbildung 21*

# ANHANG E

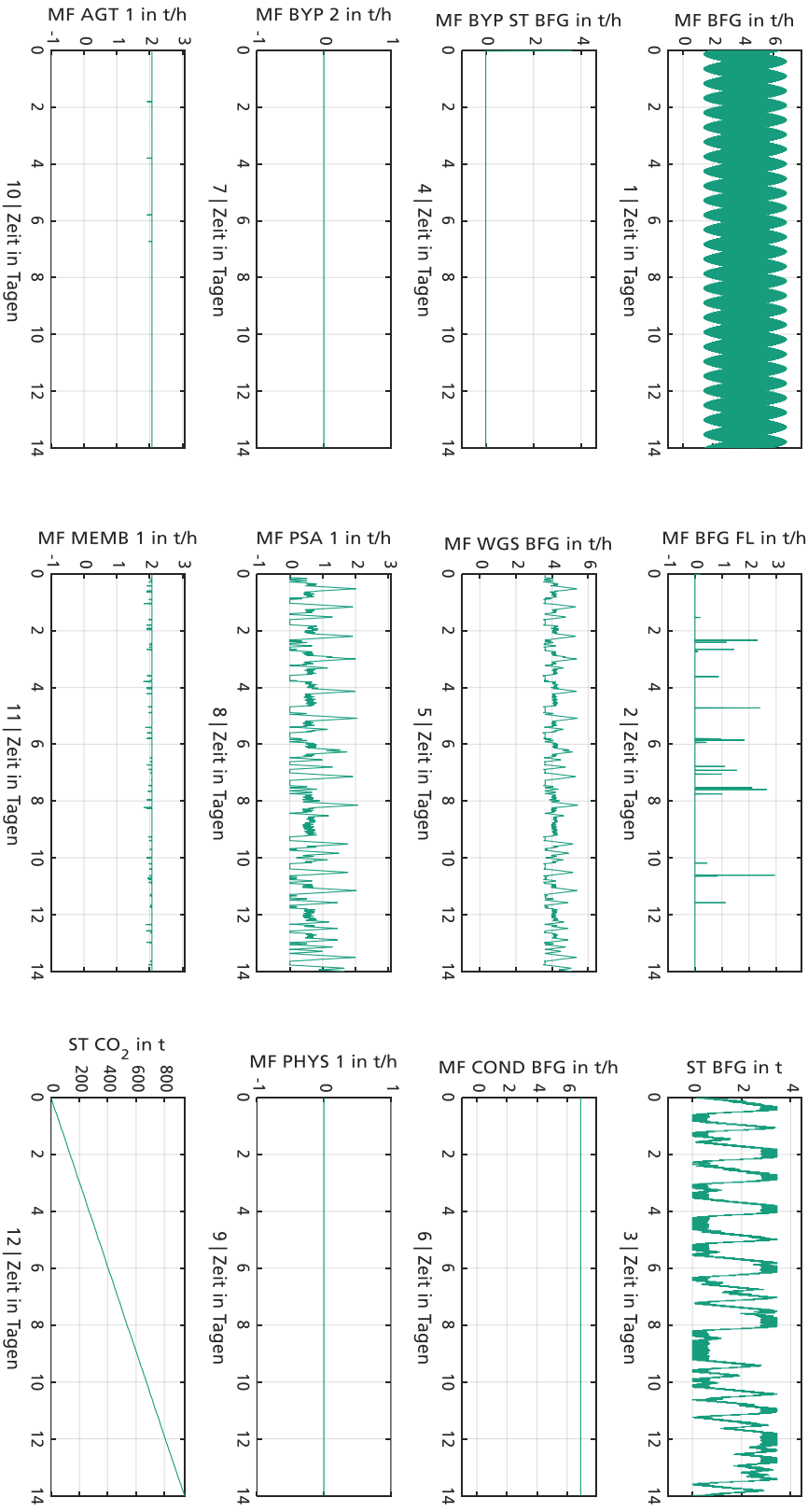


*Abbildung 41: Vergrößerte Abbildung 22*

# ANHANG F

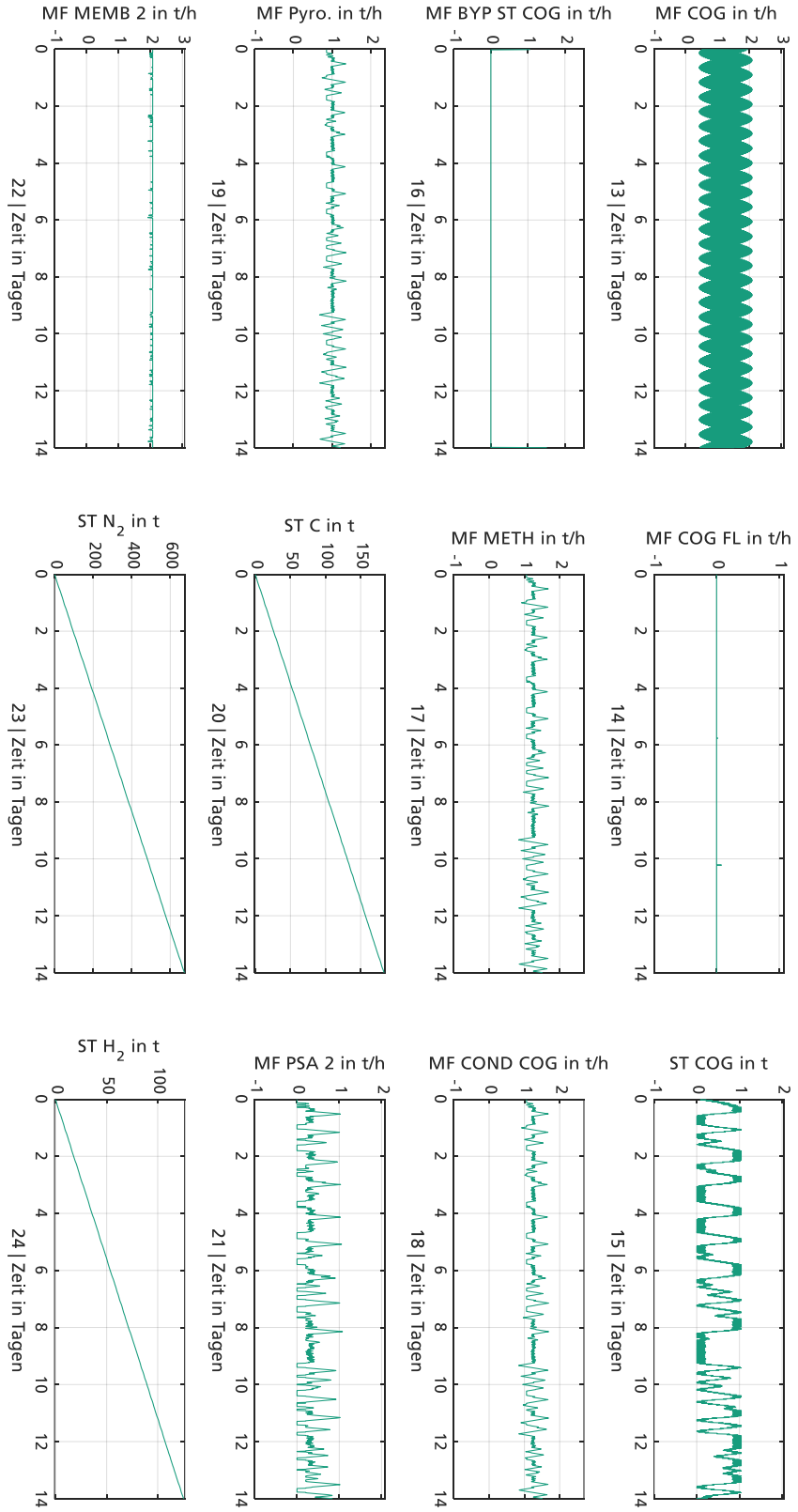


*Abbildung 43: Vergrößerte Abbildung 23*

# ANHANG G

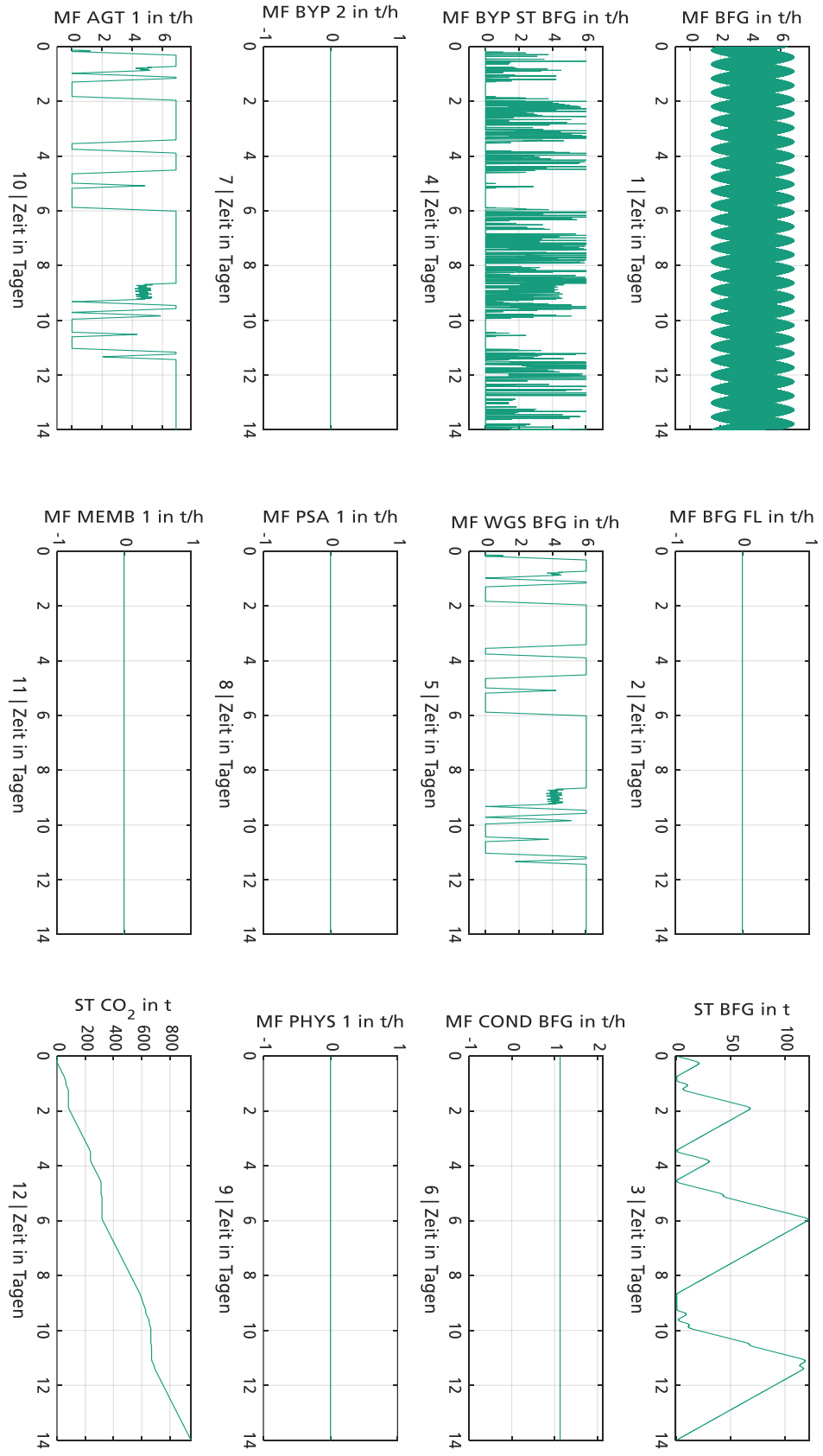


*Abbildung 44: Vergrößerte Abbildung 27.*

# ANHANG H

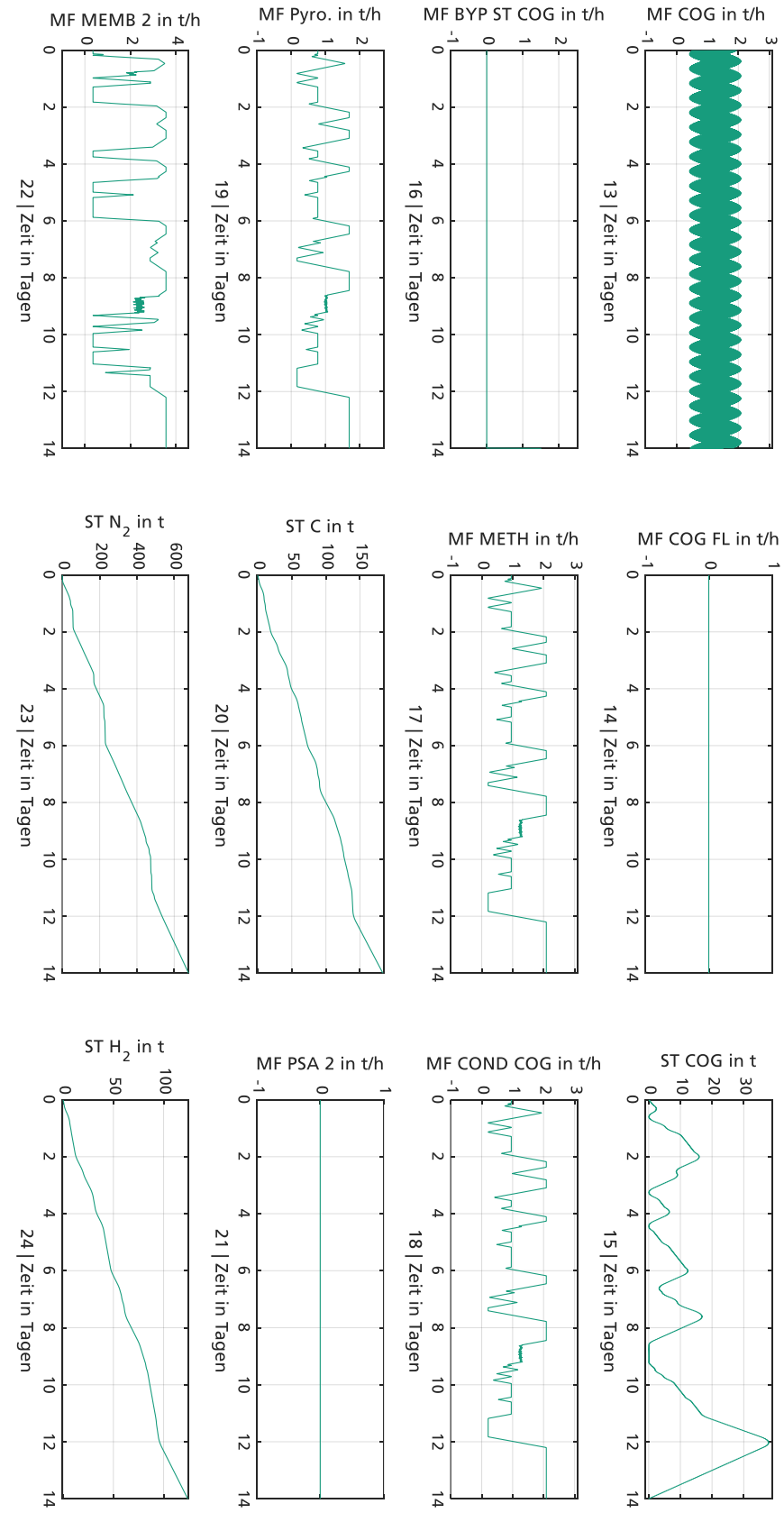


*Abbildung 45: Vergrößerte Abbildung 28.*

# ANHANG I

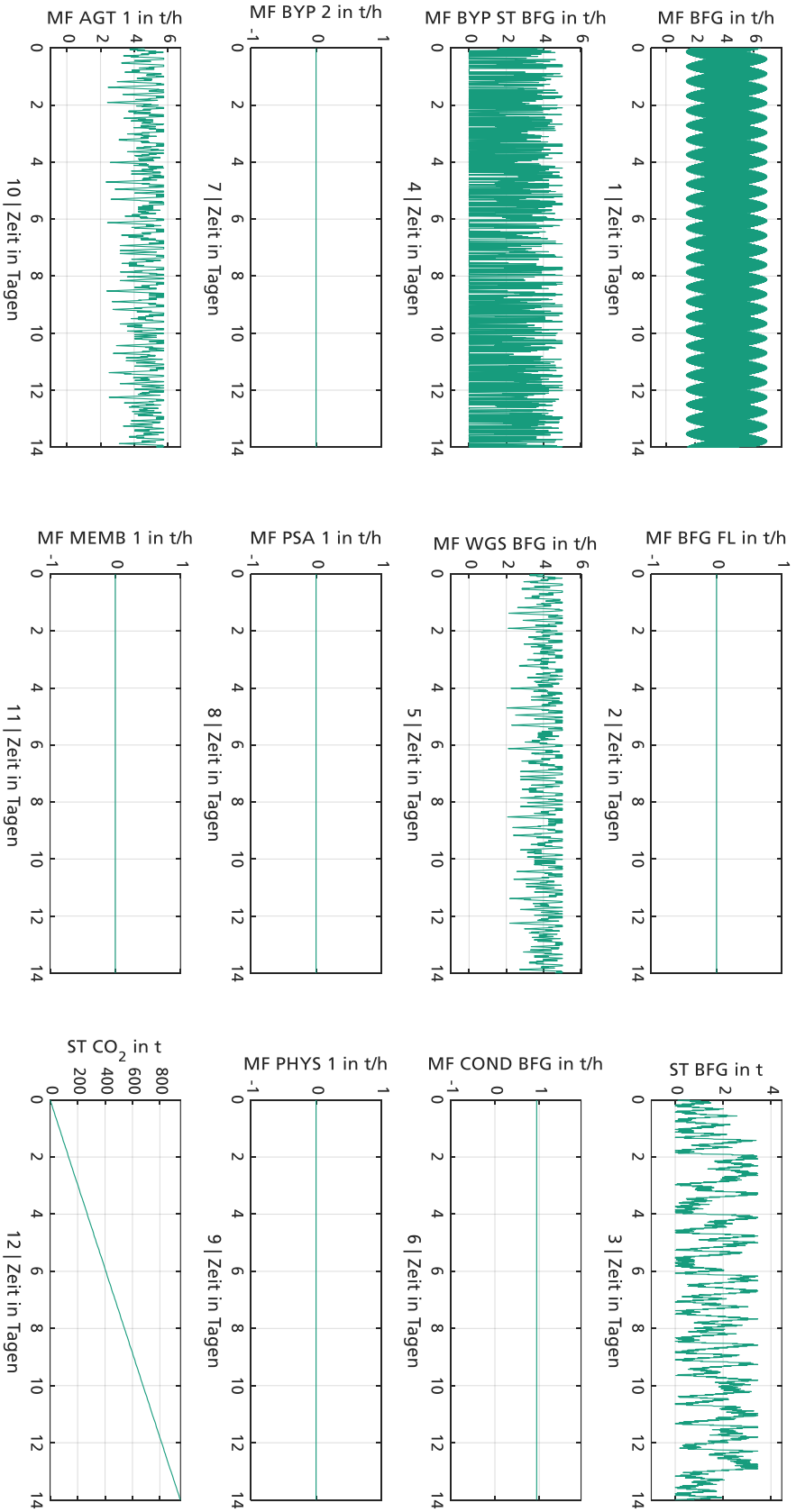


*Abbildung 46: Vergrößerte Abbildung 31*

# AHNHANG J

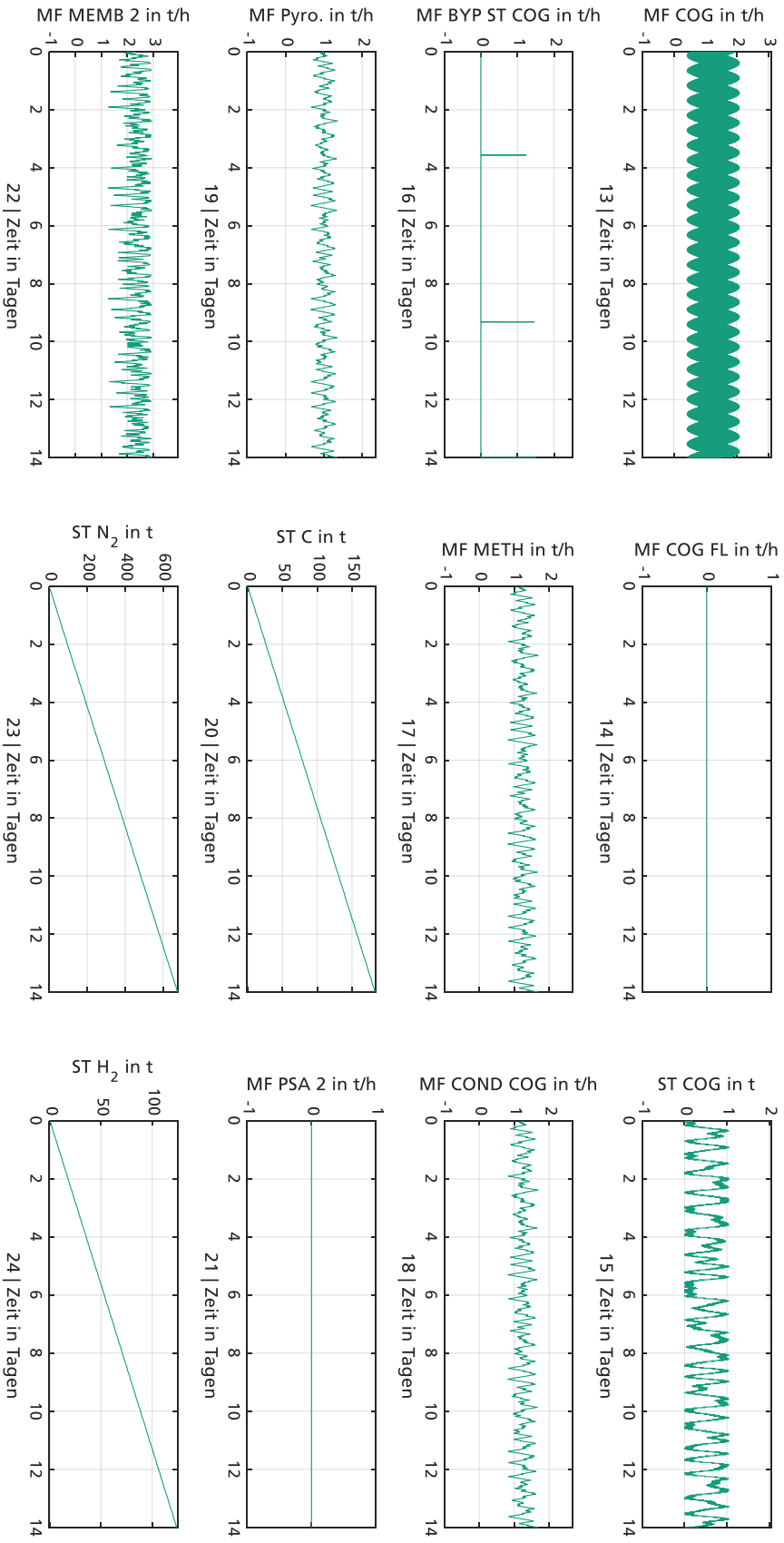


*Abbildung 47: Vergrößerte Abbildung 32*