

# **Model hierarchies for chemical process design**

## **Habilitationsschrift**

von Dr.-Ing. Peter Heidebrecht  
geboren am 5.5.1975 in Frunse

zur Verleihung des akademischen Grades

## **Doktor-Ingenieur habitatus (Dr.-Ing. habil.)**

genehmigt von der Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik  
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg am 1.11.2011.

Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher, Universität Magdeburg

Prof. Lorenz T. Biegler, Carnegie Mellon University, Pittsburgh

Prof. Dr. Dr. h.c. Frerich Keil, Universität Hamburg-Harburg



Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut  
für Dynamik komplexer technischer Systeme

Band 31

**Peter Heidebrecht**

**Model hierarchies for chemical process design**

Shaker Verlag  
Aachen 2011

**Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek**

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: Magdeburg, Univ., Habil.-Schr., 2011

Copyright Shaker Verlag 2011

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-0638-4

ISSN 1439-4804

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen

Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • e-mail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

## Danksagung

Diese Arbeit spiegelt den Kern meiner wissenschaftlichen Tätigkeit am Max-Planck-Institut und an der Otto-von-Guericke-Universität in Magdeburg während der letzten 6½ Jahre wider. Die Möglichkeit hierzu verdanke ich Prof. Kai Sundmacher, der mir nicht nur bestmögliche Arbeitsumstände geboten und meine Arbeit begleitet hat, sondern vor allem einige seiner Mitarbeiter meiner Obhut anvertraut hat.

Daß am Ende dieses Weges tatsächlich eine Habilitation stehen würde, haben manche immer für selbstverständlich gehalten. Ich nicht. Daß ich dieses Ziel erreicht habe, verdanke ich zu einem guten Teil anderen.

Mein zutiefst empfundener Dank hierfür gilt meiner Frau Alexandra, die immer um mich war und deren moralischer Beitrag für diese Arbeit absolut entscheidend war; und unserer Tochter Rebekka, die mit einer Geste jeden Schatten wegwischt. Die Kinder dieser Welt sind es, für die sich jeder Weg lohnt.

Herrn Prof. Frerich Keil und Herrn Prof. Lorenz T. Biegler danke ich nicht nur für die Übernahme der Gutachterrollen in meinem Verfahren, sondern vor allem für ihr stetes Interesse an meiner Arbeit, das mir immer Auftrieb war. Herrn Biegler und dem DAAD danke ich zudem für eine großartige Zeit an der Carnegie Mellon University, die noch lange nachwirken wird.

Ein großes Dankeschön geht an meine Habilitandenkollegen, insbesondere an Richard Hanke-Rauschenbach und Hannsjörg Freund, für viele fachliche Diskussionen. Und für ihre Offenheit in noch zahlreicheren persönlichen Gesprächen. Es gibt Dinge, die man nur mit solchen Weggefährten teilen kann.

Danke auch allen Mitgliedern meines Teams, Matthias Pfafferoth, Christoph Hertel, Benny Hartono, Silvia Piewek, André Sommer und Wenjing Wang. Die Worte „mein Team“ machen mich immer stolz – nicht wegen des ersten Wortes, sondern wegen des zweiten. Und weil es mir immer Freude und Ehre war, meine Doktoranden ein Stück auf ihrem Weg zu begleiten.

Schließlich möchte ich all jenen Kollegen in unserer Arbeitsgruppe danken, die eben nicht nur ihre Arbeit tun, sondern mit Hingabe dabei sind, zum Beispiel Nancy Jirsack, die selbst im Chaos noch den Überblick behält und weiterhilft; Bianka Stein, die stets mehr leistet, als nur Meßdaten aufzunehmen und weiterzugeben; Torsten Schröder, der auf vielen Baustellen Lösungen findet; Robert Rehner, der auch bei dummen User-Fragen gelassen bleibt ... die Liste ließe sich noch lange fortsetzen.

“Es braucht ein ganzes Dorf, um ein Kind großzuziehen” lautet ein afrikanisches Sprichwort. Das ist wahr, und es gilt nicht nur für Kinder. Auch ich hatte hier ein ganzes Dorf um mich. Danke dafür.



## Contents

<b>Zusammenfassung</b> .....	<b>3</b>
<b>1 Introduction</b> .....	<b>7</b>
1.1 Boundary conditions of process modelling.....	7
1.2 Requirements for models in process design.....	9
1.3 Model hierarchies.....	10
<b>2 Cyclic Water Gas Shift Reactor</b> .....	<b>12</b>
2.1 Working principle of the Cyclic Water Gas Shift Reactor (CWGSR).....	12
2.2 The Reference Model.....	14
2.3 The Single Reaction Model.....	20
2.4 The Front Model.....	21
2.5 Summary.....	24
<b>3 Structured reforming reactor</b> .....	<b>25</b>
3.1 The Indirect Internal Reforming Reactor (IIR).....	25
3.2 The Detailed Model.....	27
3.3 The Zone Model.....	31
3.4 The Phase Model.....	33
3.5 Summary.....	37
<b>4 Optimal design of TPR experiments</b> .....	<b>39</b>
4.1 The Temperature Programmed Reduction (TPR) method.....	39
4.2 The Complete Problem.....	40
4.3 The Reduced Problem.....	44
4.4 Summary.....	46
<b>5 Mass integration of high temperature fuel cell systems</b> .....	<b>47</b>
5.1 Introduction.....	47
5.2 Equilibrium Models.....	48
5.3 Stoichiometric Model.....	50
5.4 Summary.....	53
<b>6 Concluding remarks</b> .....	<b>54</b>
<b>References</b> .....	<b>57</b>
<b>Selected publications from the author</b> .....	<b>61</b>