**Modell für die Trennung und Verwertung von Hüttengasen**

Voraussetzung: Pakete „Pyomo“ und „Pyomo Solver“ müssen installiert sein (optional auch gurobi)

**Script** main\_overall

Führt das Modell mit Trennsystem aus (GDP). Speichern der Ergebnisse mit save\_results.

**Script** main\_tcm

Führt das Modell ohne Trennsystem aus (TCM). Speichern der Ergebnisse mit save\_results.

**Script** solve\_model

Löst das Optimierungsproblem. Hier können verschiedene Solver und Strategien ausgewählt werden.

Für das GDP wird bisher GDPopt mit der LOA-Strategie verwendet.

<https://pyomo.readthedocs.io/en/stable/contributed_packages/gdpopt.html>

Als Sub-Solver werden bisher glpk (alternativ gurobi) und IPOPT verwendet

**Script** save\_results

Speichert die Ergebnisse des gelösten Optimierungsproblems (TCM oder GDP), verschiedene Möglichkeiten können per Abfrage ausgewählt werden:

* Display results? Zeigt Ergebnisse an
* Save results as excel file? Speichert Ergebnisse als Excel-Datei
* Save superstructure object? Speichert das gesamte Modell als Datei

**Script** repeated\_solving\_el\_impact

Löst TCM und GDP für verschiedene Strom-Impacts. Die Ergebnisse werden **nicht** mit save\_results gespeichert, da die Datei zu groß wird. Stattdessen werden die Werte der interessanten Modellvariablen in ein Ergebnis-Dictionary gelegt und gespeichert, für den letzten Durchlauf z.B. in: 20200816\_v19\_pcest7\_100\_complete

**Script** plot

Plottet das Ergebnis-Dictionary

Die Ergebnisse werden dazu in Listen umgewandelt, unsinnige Ergebnisse werden dabei aussortiert (siehe Dokumentation im Code)

**Excel-Datei** Life Cycle Inventory

Muss Prozesse „Electricity, user-defined“ und „CO2 to atmosphere“ und Fluss „CO2 to atm [kg]“ enthalten, damit Interaktion mit Trennsystem funktioniert

Das ist für V15 – V19 der Fall, muss für V21 ggf. noch gemacht werden

**Klasse** Superstructure

Enthält Funktionen, um das Flowsheet zusammensetzen und das GDP-Optimierungsproblem aufstellen

**Klasse** LifeCycleInventory

* LCI aus Excel-Datei einlesen
* Lineares Optimierungsproblem aufstellen
* Prozesse deaktivieren

**Ordner** utils

Save\_results und solve\_model (weiter oben erklärt)

Utils: Stream-Klasse und Summen-Funktion

Properties: Stoffdaten

Reactions: Daten für chemische Reaktionen

**Ordner** samples

Enthält die Klassen für sämtliche Apparate des Trennsystems

**Zu erledigen (wurde nachträglich von Matthias ergänzt):**

1. Der bisherige cp-Wert für das CO-Adsorbens (aus Kakavandi2017) ist vermutlich deutlich (x2) zu hoch. Eine seriösere Abschätzung liefert das Sattler-Buch, Seite 407, Tab 4-10. Für Zeolithe wird etwa 1 kJ/(kg\*K) angegeben.
2. In der neuen LCI-Version (v21) ist ein genauerer O2-Prozess vorhanden, dadurch ändert sich evt. die SynGas-Herstellung. V21 muss vorher noch angepasst werden (siehe **Excel-Datei** Life Cycle Inventory)
3. (Bereits erledigt) Im SynGas-Produktstrom wurde der N2-Anteil bisher nicht rausgerechnet, im CH4-Produktstrom schon. Dadurch wurde evt. SynGas bevorzugt. In main\_overall, Zeile 117 bzw. 122, und repeated\_solving\_el\_impact wurde das bereits korrigiert