

1 Massenbilanz

1.1	Symbole	1
1.2	Einleitung	2
1.3	Die allgemeine Bilanzgleichung	2
1.3.1	Differentialbilanz	2
1.3.2	Integralbilanz	4
1.4	Membranverfahren	4
1.4.1	Batch	5
1.4.2	Semibatch	6
1.4.3	Konti-Prozess	8
1.5	Excel	9
1.5.1	Batch in Excel	9
1.5.2	Semibatch in Excel	11
1.5.3	Kontiprozess in Excel	13

1.1 Symbole

Symbol	Bedeutung	Einheit
A	Membranfläche	m^2
c_i	Konzentration der Komponente i im Tank	kg/m^3 oder g/L
$c_{i,\text{F}}$	Konzentration der Komponente i im Feed	wie c_i
$c_{i,\text{R}}$	Konzentration der Komponente i im Retentat	wie c_i
J_i	Flux der Komponente i durch die Membran	$\text{kg}/(\text{m}^2 \text{ h})$
J_V	Flux durch die Membran	$\text{m}^3/(\text{m}^2 \text{ h})$
M_i	Gesamtmasse der Komponente i im Bilanzraum	kg
t	Zeit	s oder h
t_0	Startzeitpunkt der Bilanz	
V	Flüssigkeitsvolumen im Tank bzw. Bilanzraum	m^3 oder L
$\dot{m}_{i,\text{F}}$	Massenstrom der Komponente i im Feed	kg/h
$\dot{m}_{i,\text{P}}$	Massenstrom der Komponente i im Permeat	kg/h
$\dot{m}_{i,\text{R}}$	Massenstrom der Komponente i im Retentat	kg/h
\dot{V}_{F}	Feedvolumenstrom	m^3/h oder L/h
\dot{V}_{P}	Permeatvolumenstrom	m^3/h
\dot{V}_{R}	Retentatvolumenstrom	m^3/h

Tabelle 1.1 Alphabetisch sortierte Übersicht der verwendeten Grössen und Einheiten

1.2 Einleitung

Die Erstellung einer Massenbilanz in der Verfahrenstechnik ist eine grundlegende Methode, um den Weg und die Veränderung von Substanzen in einem Prozess nachzuvollziehen. Was auf den ersten Blick wie eine nüchterne Rechenaufgabe wirkt, entpuppt sich in der Praxis rasch als eine Art Detektivarbeit: Man verfolgt Stoffströme, beobachtet ihre Veränderungen und versucht zu verstehen, wie der Prozess tatsächlich denkt.

Im Zentrum jeder Bilanzierung steht die Frage nach dem Bilanzraum. Er bestimmt, was überhaupt betrachtet wird. Bei Membransystemen kann dies der reale, physische Raum sein Tanks, Leitungen und Membranmodule, in denen sich zu Beginn eines Prozesses bestimmte Mengen an Stoffen befinden. Wählt man diesen umfassenden Bilanzraum, fasst man den gesamten Ablauf als Ganzes ins Auge.

Ebenso kann es sinnvoll sein, den Bilanzraum enger zu fassen, etwa nur auf eine einzelne Prozessstufe mit mehreren Membranmodulen. Eine solche Betrachtung wird besonders dann wichtig, wenn der Prozess nicht statisch ist, sondern sich laufend verändert, wie etwa während einer Reinigung. Dann kommt es darauf an, genau zu erfassen, wie sich Ströme und Konzentrationen über die Zeit entwickeln und welche Auswirkungen dies auf das Gesamtsystem hat.

Schnell zeigt sich, dass Membrananlagen alles andere als einfache Systeme sind. Ströme schwanken, Volumen ändern sich, Rückhaltungen sind nicht konstant und die Leistung der Membran reagiert empfindlich auf Druck, Fouling und Strömungsverhältnisse. Hinzu kommt, dass die Art des Betriebs ob Batch, Semibatch oder kontinuierlich das Verhalten des Systems grundlegend prägt. Während im Batchbetrieb das System weitgehend geschlossen erscheint, zwingt der Semibatchbetrieb dazu, Permeatabzug und Feedzufuhr gleichzeitig zu berücksichtigen. Im kontinuierlichen Betrieb wiederum muss man nicht nur die Ströme, sondern auch die Frage beachten, ob ein stationärer oder instationärer Zustand vorliegt.

Auch die Stoffströme selbst folgen selten einfachen Mustern. Konzentrationen steigen an, Retentionen verändern sich mit zunehmender Beladung oder Fouling, und der permeierende Stoffstrom ist nicht immer proportional zum Druck. All dies macht die Massenbilanz zu weit mehr als einer rechnerischen Pflichtübung. Sie ist ein Werkzeug, das tief in das Verhalten der Membran und des gesamten Prozesssystems blicken lässt.

Wer eine Massenbilanz erstellt, versucht letztlich, die Dynamik des Prozesses zu verstehen: seine Reaktionen, seine Grenzen, seine inneren Abläufe. Und genau darin liegt sowohl die Herausforderung als auch der besondere Reiz dieser Aufgabe.

1.3 Die allgemeine Bilanzgleichung

In der Verfahrenstechnik lassen sich zwei grundlegend unterschiedliche Arten von Bilanzen erstellen: Die **Differentialbilanz** und die **Integralbilanz**. Beide eröffnen einen eigenen Blick auf das Geschehen im Prozess.

1.3.1 Differentialbilanz

Die *Differentialbilanz* richtet den Fokus auf einen einzelnen, exakt definierten Zeitpunkt. Sie zeigt auf, welche Ströme *im Moment* durch den Bilanzraum fließen und wie sich das System in genau diesem Augenblick verändert. Jeder Term in einer solchen Gleichung ist ein Nennwert etwa eine Eingangsrate oder eine Permeatrate und trägt die Einheit einer ausgeglichenen Menge pro Zeit, also zum Beispiel m^3/h oder L/h . Differentialbilanzen sind damit das passende Werkzeug für kontinuierlich betriebene Prozesse, bei denen sich die

Dynamik laufend fortschreibt.

Die Herleitung der Bilanzgleichung beginnt immer mit der Wahl eines Bilanzraums. Innerhalb dieses Bilanzraums gilt für eine beliebige Komponente i allgemein das Prinzip der Stofferhaltung:

$$\frac{dM_i}{dt} = \sum_{\text{Ein}} \dot{m}_{i,\text{ein}} - \sum_{\text{Aus}} \dot{m}_{i,\text{aus}} + \dot{m}_{i,\text{Quelle}} - \dot{m}_{i,\text{Senke}}.$$

Dabei bedeuten:

- M_i : Masse der Komponente i im Bilanzraum,
- $\dot{m}_{i,\text{ein}}$: Massenströme der Komponente i , die in den Bilanzraum eintreten,
- $\dot{m}_{i,\text{aus}}$: Massenströme der Komponente i , die den Bilanzraum verlassen,
- $\dot{m}_{i,\text{Quelle}}, \dot{m}_{i,\text{Senke}}$: Quellen und Senken (z. B. chemische Reaktionen).

Für ein Membransystem ohne chemische Reaktion entfallen Quellen und Senken:

$$\dot{m}_{i,\text{Quelle}} = 0, \quad \dot{m}_{i,\text{Senke}} = 0,$$

also vereinfacht sich die Bilanz zu:

$$\frac{dM_i}{dt} = \sum_{\text{Ein}} \dot{m}_{i,\text{ein}} - \sum_{\text{Aus}} \dot{m}_{i,\text{aus}}.$$

Spezialisierung auf eine Membranstufe

Wählt man als Bilanzraum eine einzelne Membranstufe mit Feed, Retentat und Permeat, so gibt es typischerweise:

- einen Einstrom: Feed (Index F),
- zwei Ausströme: Retentat (Index R) und Permeat (Index P).

Die Bilanz wird damit zu:

$$\frac{dM_i}{dt} = \dot{m}_{i,\text{F}} - \dot{m}_{i,\text{R}} - \dot{m}_{i,\text{P}}.$$

Schreibt man die Massenströme über Konzentrationen und Volumenströme,

$$\dot{m}_{i,\text{F}} = c_{i,\text{F}} \dot{V}_{\text{F}}, \quad \dot{m}_{i,\text{R}} = c_{i,\text{R}} \dot{V}_{\text{R}}, \quad \dot{m}_{i,\text{P}} = c_{i,\text{P}} \dot{V}_{\text{P}},$$

und drückt die Masse im Bilanzraum durch $M_i = c_i V$ aus, so erhält man:

$$\frac{d}{dt}(c_i V) = c_{i,\text{F}} \dot{V}_{\text{F}} - c_{i,\text{R}} \dot{V}_{\text{R}} - c_{i,\text{P}} \dot{V}_{\text{P}}.$$

Dies ist die allgemeine Differentialbilanz für eine Komponente i über den gewählten Bilanzraum Membranstufe. Je nachdem, wie der Bilanzraum enger oder weiter gefasst wird (gesamte Anlage mit Tanks, nur Modulgruppe, nur Tank usw.), ändern sich die auftretenden Ein- und Ausströme – die Struktur der Bilanzgleichung bleibt jedoch gleich: zeitliche Änderung im Bilanzraum = Summe der Einstromterme minus Summe der Ausstromterme (plus Quellen/Senken, falls vorhanden).

1.3.2 Integralbilanz

Die *Integralbilanz* dagegen nimmt einen ganzen Zeitraum unter die Lupe. Sie beschreibt, was *zwischen* zwei Zeitpunkten geschieht, also wie viel Stoff insgesamt eintritt, austritt oder sich im System anreichert. Die Terme dieser Gleichung sind Mengen und besitzen dementsprechend Einheiten wie m^3 , L oder t. Diese Form der Bilanzierung wird typischerweise bei Chargenprozessen eingesetzt dort, wo ein Prozessabschnitt klar beginnt und endet, etwa unmittelbar nach der Zugabe von Einsatzstoffen und kurz bevor das Produkt entnommen wird.

Für eine Integralbilanz vergleicht man zwei Zeitpunkte, beispielsweise bei Prozessbeginn (10:30 Uhr) und Prozessende (18:30 Uhr). Die Differenz zwischen diesen beiden Zeitpunkten ergibt sich aus den genannten Zu- und Abgängen sowie den internen Veränderungen.

Als Analogie kann man sich eine Stadt vorstellen, die als Bilanzraum dient. Innerhalb eines Jahres ziehen Personen neu in die Stadt (Zuflüsse), während andere wegziehen (Abflüsse). Zusätzlich kommt es innerhalb des Bilanzraums zu Geburten (interne Zunahmen) und Sterbefällen (interne Abnahmen).

Die allgemeine Bilanzgleichung lautet:

Endbestand = Anfangsbestand + Zuflüsse – Abflüsse + interne Zunahmen – interne Abnahmen.

Setzt man die Werte ein:

$$\text{Endbestand} = \text{Anfangsbestand} + 23234 - 12987 + 908 - 7320.$$

Die daraus resultierende Veränderung beträgt:

$$23234 - 12987 + 908 - 7320 = -165.$$

Die Stadtbevölkerung nimmt in diesem Zeitraum also um 165 Personen ab.

1.4 Membranverfahren

Membranprozesse können als Batch-, Semibatch- oder kontinuierliche Prozesse betrieben werden und lassen sich zudem in stationäre und instationäre Prozesse einteilen. Bevor man für ein Prozesssystem Stoffbilanzen erstellt, muss man wissen, in welche dieser Kategorien der betreffende Prozess fällt.

Batch-Prozess	Die gesamte Flüssigkeit befindet sich zu Beginn im Behälter. Es wird weder Feed nachgeführt noch Permeat zurückgeführt. Das Volumen nimmt während der Filtration ab, die Konzentrationen ändern sich mit der Zeit.
Semibatch-Prozess	Kombination aus geschlossenem und offenem Betrieb. Während der Filtration wird frischer Feed zugeführt, während Permeat abgezogen wird. Das Volumen bleibt meist annähernd konstant, die Konzentrationen verändern sich jedoch.
Kontinuierlicher Prozess	Feed, Retentat und Permeat fließen gleichzeitig und dauerhaft. Die Volumenströme können sich zu einem stationären Zustand einstellen, in dem sich die Konzentrationen an den Ein- und Ausgängen nicht mehr verändern.

Tabelle 1.2 Vergleich von Batch-, Semibatch- und kontinuierlichen Prozessen in der Membrantechnik

1.4.1 Batch

Einen Batch-Membranprozess bilanziert man, indem man den gesamten Inhalt des Behälters (zusammen mit der Membrananlage) als Bilanzraum betrachtet und nur über die Zeit bilanzierte Größen betrachtet. Es gibt einen klaren Startzeitpunkt t_0 und ein Ende t .

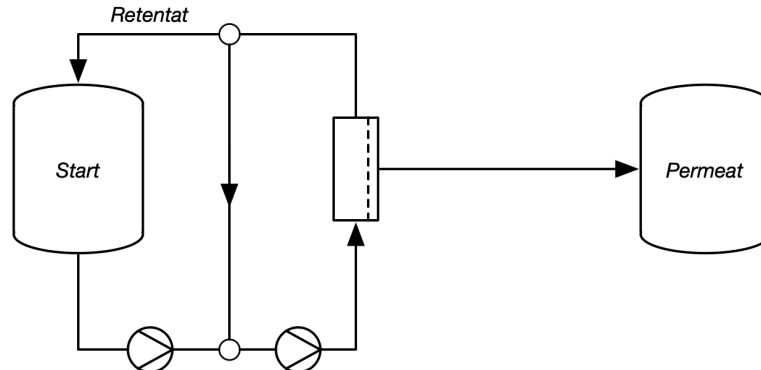


Abbildung 1.1 Schaltung für einen Batch Prozess

1. Bilanzraum festlegen

Beim Batch-Betrieb wird meist der Tank inklusive Umwälzleitung als Bilanzraum gewählt. Das Retentat wird in den Tank zurückgeführt, nur das Permeat verlässt den Bilanzraum. Von aussen gesehen gibt es also

- keine kontinuierliche Zufuhr von Feed,
- einen Abstrom: das Permeat.

2. Allgemeine Stoffbilanz (Komponentenbilanz)

Für eine beliebige Komponente i gilt in Integralform zwischen den Zeitpunkten t_0 (Start) und t :

$$M_i(t) = M_i(t_0) - \int_{t_0}^t \dot{m}_{i,P}(\tau) d\tau$$

wobei

- $M_i(t)$ die im Tank enthaltene Masse der Komponente i zum Zeitpunkt t ist,
- $\dot{m}_{i,P}$ der Massenstrom der Komponente i im Permeat ist.

Schreibt man $M_i = c_i V$ (mit c_i als Konzentration und V als Volumen im Tank), so folgt in Differentialform:

$$\frac{d}{dt}(c_i V) = -\dot{m}_{i,P} = -J_i A$$

mit

- J_i als Flux der Komponente i durch die Membran,
- A als Membranfläche.

3. Volumenbilanz

Für das Volumen (bzw. das Lösungsmittel) gilt analog:

$$\frac{dV}{dt} = -\dot{V}_P = -J_V A$$

wobei J_V der volumetrische Fluss durch die Membran ist.

4. Typische Annahmen im Batch-Membranprozess

In der Praxis werden häufig folgende Vereinfachungen getroffen:

- Der Tank ist ideal durchmischt, d. h. die Konzentration im Tank ist überall gleich.
- Die Dichte ist (annähernd) konstant.
- Es gibt keine chemischen Reaktionen, nur Trennung durch die Membran.

Unter diesen Annahmen genügen die Gleichungen

$$\frac{d}{dt}(c_i V) = -J_i A, \quad \frac{dV}{dt} = -J_V A,$$

um die Konzentrationsänderung im Batch-Membranprozess über die Zeit zu berechnen und damit eine vollständige Stoffbilanz für die Komponente i im Batch-Betrieb aufzustellen

1.4.2 Semibatch

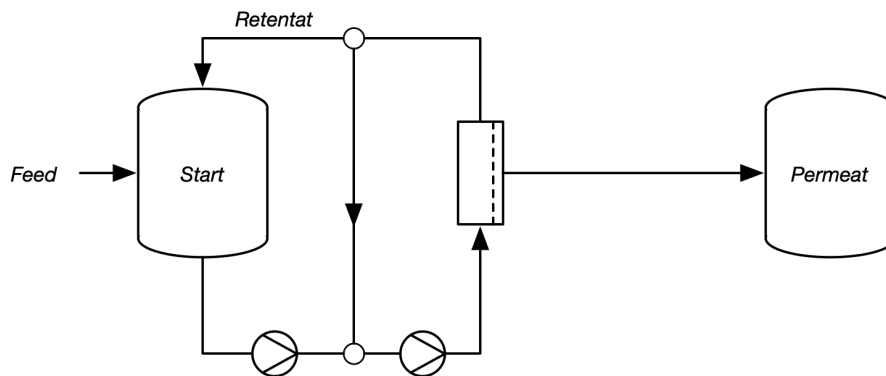


Abbildung 1.2 Schaltung für einen Semi-Batch Prozess

Einen Semibatch-Membranprozess bilanziert man, indem man den Behälter (mit Umwälzleitung und Membran) als Bilanzraum betrachtet, während während der Filtration zusätzlich frischer Feed zugeführt wird. Das Volumen im Tank bleibt dadurch meist ungefähr konstant, die Konzentrationen ändern sich jedoch mit der Zeit.

1. Bilanzraum festlegen

Der Bilanzraum umfasst den Tank, die Umwälzpumpe und die Membranmodule. Dabei gelten:

- Es gibt einen Einstrom: den Feedstrom \dot{V}_F (bzw. $\dot{m}_{i,F}$ für die Komponenten).
- Es gibt einen Ausstrom: das Permeat \dot{V}_P (bzw. $\dot{m}_{i,P}$).
- Das Retentat wird vollständig in den Tank zurückgeführt.

2. Allgemeine Komponentenbilanz

Für eine Komponente i zwischen den Zeitpunkten t_0 und t lautet die Integralbilanz:

$$M_i(t) = M_i(t_0) + \int_{t_0}^t \dot{m}_{i,F}(\tau) d\tau - \int_{t_0}^t \dot{m}_{i,P}(\tau) d\tau.$$

In Differentialform:

$$\frac{d}{dt}(c_i V) = \dot{m}_{i,F} - \dot{m}_{i,P}.$$

Schreibt man die Ströme aus:

$$\dot{m}_{i,F} = c_{i,F} \dot{V}_F, \quad \dot{m}_{i,P} = J_i A,$$

so ergibt sich:

$$\frac{d}{dt}(c_i V) = c_{i,F} \dot{V}_F - J_i A.$$

3. Volumenbilanz

Analog gilt für das Volumen im Tank:

$$\frac{dV}{dt} = \dot{V}_F - \dot{V}_P = \dot{V}_F - J_V A.$$

Im klassischen Semibatch-Betrieb wird oft angestrebt:

$$\frac{dV}{dt} \approx 0,$$

das heisst:

$$\dot{V}_F \approx \dot{V}_P.$$

Dann vereinfacht sich die Konzentrationsbilanz zu:

$$V \frac{dc_i}{dt} = \dot{V}_F (c_{i,F} - c_i) - J_i A.$$

4. Typische Annahmen im Semibatch-Betrieb

- Der Tank ist ideal durchmischt, die Konzentration im Behälter ist räumlich konstant.
- Die Dichte bleibt (annähernd) konstant.
- Keine chemischen Reaktionen, nur Trennvorgänge an der Membran.
- Das Arbeitsvolumen bleibt durch die Steuerung der Feedrate weitgehend konstant.

5. Interpretation

Ein Semibatch-Membranprozess verbindet die zeitliche Dynamik des Batch-Betriebs mit der kontrollierten Volumenhaltung eines kontinuierlichen Prozesses. Die Stoffbilanz zeigt, dass die Konzentrationsänderung im Tank durch zwei Effekte bestimmt wird:

1. den Eintrag frischer Komponenten mit dem Feed,
2. den Austrag gelöster Stoffe über die Permeation.

Damit lässt sich die zeitliche Entwicklung der Konzentrationen und des Volumens vollständig rechnerisch erfassen.

1.4.3 Konti-Prozess

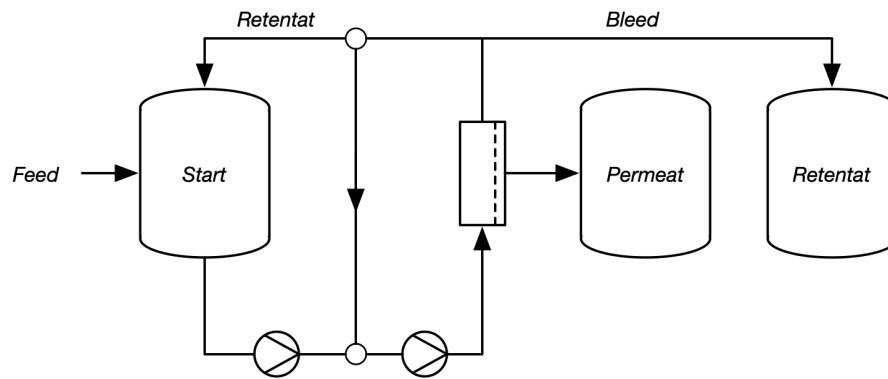


Abbildung 1.3 Schaltung für einen Konti-Prozess

Einen kontinuierlichen Membranprozess bilanziert man, indem man den stationären oder instationären Betrieb betrachtet, bei dem Feed, Retentat und Permeat gleichzeitig und dauerhaft fließen. Im Gegensatz zum Batch- oder Semibatch- Betrieb gibt es hier keine klaren Start- oder Endzeitpunkte; stattdessen wird stets über eine Zeiteinheit bilanziert.

1. Bilanzraum festlegen

Der Bilanzraum umfasst üblicherweise den Zulauf (Feed), die Membranstufe und die beiden Abströme (Retentat und Permeat). Es gibt also:

- einen Einstrom: Feed,
- zwei Ausströme: Retentat und Permeat.

2. Allgemeine Differentialbilanz

Für eine Komponente i gilt im instationären Fall:

$$\frac{dM_i}{dt} = \dot{m}_{i,F} - \dot{m}_{i,R} - \dot{m}_{i,P}.$$

Mit $M_i = c_i V$ folgt:

$$\frac{d}{dt}(c_i V) = c_{i,F} \dot{V}_F - c_{i,R} \dot{V}_R - J_i A.$$

3. Stationärer kontinuierlicher Betrieb

Im voll stationären Zustand gilt:

$$\frac{dM_i}{dt} = 0, \quad \frac{dV}{dt} = 0.$$

Damit ergeben sich die stationären Bilanzgleichungen:

$$c_{i,F} \dot{V}_F = c_{i,R} \dot{V}_R + J_i A,$$

und für das Volumen:

$$\dot{V}_F = \dot{V}_R + J_V A.$$

Diese beiden Gleichungen beschreiben vollständig den Fluss und die Aufteilung der Stoffe zwischen Feed, Retentat und Permeat.

4. Interpretation

Im stationären kontinuierlichen Prozess verändern sich die Konzentrationen und Volumenströme im Bilanzraum nicht mehr mit der Zeit. Die Stoffbilanz zeigt, dass der eintretende Stoffstrom aus dem Feed exakt durch die Summe der Austräge (Retentat plus Permeat) ausgeglichen wird.

5. Typische Annahmen im kontinuierlichen Betrieb

- Der Prozess hat einen stationären Zustand erreicht ($d/dt = 0$).
- Der Bilanzraum ist gut gemischt oder das Verhalten lässt sich mit mittleren Konzentrationen beschreiben.
- Die Membrantrennung ist zeitlich stabil (keine signifikante Änderung von Fouling oder Flux).
- Die Dichte und Viskosität der Lösung verändern sich nur gering.

Damit lässt sich ein kontinuierlicher Membranprozess sowohl im stationären als auch im instationären Betrieb vollständig stofflich bilanzieren.

1.5 Excel

1.5.1 Batch in Excel

Eine Massenbilanz für einen Batch-Ultrafiltrationsprozess lässt sich in Excel sehr einfach abbilden, wenn man die zeitliche Entwicklung von Volumen und Konzentration schrittweise berechnet. Da im Batchbetrieb kein Feed zugeführt wird, verlässt nur das Permeat den Bilanzraum. Das Retentat wird vollständig zurückgeführt. Der Bilanzraum ist somit der Tank mit der Membranstufe.

1. Grundidee

Die zugrunde liegenden Bilanzgleichungen lauten

$$\frac{dV}{dt} = -J_V A \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt}(c_i V) = -J_i A,$$

wobei V das Volumen im Tank, c_i die Konzentration einer Komponente, J_V der volumetrische Flux, J_i der Stoffflux und A die Membranfläche ist. In Excel werden diese Gleichungen mit kleinen Zeitintervallen Δt iterativ gelöst.

2. Tabellenstruktur in Excel

Eine geeignete Tabellenstruktur kann wie folgt aussehen:

Spalte	Inhalt	Beispiel
A	Zeit t	0, 1, 2, 3 min
B	Zeitintervall Δt	1 min
C	Volumen $V(t)$	100 L (Startwert)
D	Flux J_V	$45 \text{ L m}^{-2} \text{ h}^{-1}$
E	Membranfläche A	2 m^2
F	Permeatstrom \dot{V}_P	Formel
H	Konzentration $c_i(t)$	iterativ
I	Stoffflux J_i	Formel
J	Stoffstrom $\dot{m}_{i,P}$	Formel
K	Masse $M_i(t)$	$c_i \cdot V$

3. Formeln zur Berechnung

Um den Permeatstrom aus dem Flux in $\text{L m}^{-2} \text{ h}^{-1}$ auf L min^{-1} umzurechnen, verwendet man in Excel

$$\dot{V}_P = J_V A \cdot \frac{1}{60}.$$

Der Volumenverlauf ergibt sich dann iterativ:

$$V(t + \Delta t) = V(t) - \dot{V}_P \cdot \Delta t.$$

Falls eine Rückhaltung R vorliegt, lässt sich der Stoffflux schreiben als

$$J_i = J_V c_i (1 - R).$$

Der Stoffstrom in das Permeat wird zu

$$\dot{m}_{i,P} = J_i A.$$

Damit ergibt sich die zeitliche Änderung der Masse im Tank:

$$M_i(t + \Delta t) = M_i(t) - \dot{m}_{i,P} \cdot \Delta t.$$

Die Konzentration im Tank ergibt sich schliesslich aus

$$c_i(t + \Delta t) = \frac{M_i(t + \Delta t)}{V(t + \Delta t)}.$$

4. Iteration

Diese Formeln werden zeilenweise nach unten kopiert. Jede Zeile entspricht einem Zeitschritt. Daraus erhält man:

- das abnehmende Volumen,
- die zunehmende Konzentration,
- die entnommene Permeatmenge,
- die abgeführte Stoffmenge.

5. Darstellung

In Excel lassen sich anschliessend einfache Diagramme erstellen, etwa

- Volumen über der Zeit,
- Konzentration über der Zeit,
- optional Flux über der Zeit (falls Fouling modelliert wird).

Auf diese Weise lässt sich ein Batch-Ultrafiltrationsprozess vollständig und übersichtlich in Excel bilanzieren.

1.5.2 Semibatch in Excel

Ein Semibatch-Verfahren in der Ultrafiltration lässt sich in Excel abbilden, indem man neben dem Permeatabzug auch eine definierte Feedzufuhr berücksichtigt. Im Gegensatz zum reinen Batchbetrieb bleibt das Volumen im Tank oft annähernd konstant, während sich die Konzentration mit der Zeit verändert.

1. Grundidee

Im Semibatch-Betrieb gilt für das Volumen

$$\frac{dV}{dt} = \dot{V}_F - \dot{V}_P,$$

wobei \dot{V}_F der Feedvolumenstrom und \dot{V}_P der Permeatvolumenstrom ist. Für die Masse einer Komponente i im Tank gilt

$$\frac{dM_i}{dt} = \dot{m}_{i,F} - \dot{m}_{i,P},$$

mit

$$\dot{m}_{i,F} = c_{i,F} \dot{V}_F, \quad \dot{m}_{i,P} = J_i A.$$

In Excel werden diese Gleichungen wieder mit kleinen Zeitintervallen Δt iterativ gelöst.

2. Tabellenstruktur in Excel

Eine mögliche Tabellenstruktur für den Semibatch-Betrieb ist:

Spalte	Inhalt	Beispiel
A	Zeit t	0, 1, 2, 3 min
B	Zeitintervall Δt	1 min
C	Volumen $V(t)$	100 L (Startwert)
D	Feedvolumenstrom \dot{V}_F	z. B. 5 L h ⁻¹
E	Flux J_V	z. B. 45 L m ⁻² h ⁻¹
F	Membranfläche A	z. B. 2 m ²
G	Permeatstrom \dot{V}_P	Formel
H	Konzentration im Tank $c_i(t)$	iterativ
I	Feedkonzentration $c_{i,F}$	konstant oder vorgegeben
J	Stoffflux J_i	Formel
K	Stoffstrom im Permeat $\dot{m}_{i,P}$	Formel
L	Masse im Tank $M_i(t)$	$c_i \cdot V$

3. Volumenbilanz in Excel

Zuerst wird der Permeatstrom aus dem Flux berechnet, zum Beispiel in L min^{-1} :

$$\dot{V}_P = J_V A \cdot \frac{1}{60}.$$

Die Volumenbilanz lautet dann diskret:

$$V(t + \Delta t) = V(t) + (\dot{V}_F - \dot{V}_P) \Delta t.$$

In Excel bedeutet das:

- in einer Zeile steht $V(t)$,
- in der nächsten Zeile wird $V(t + \Delta t)$ aus $V(t)$, \dot{V}_F und \dot{V}_P berechnet.

Falls das Volumen im Semibatch-Verfahren bewusst annähernd konstant gehalten wird, kann man $\dot{V}_F \approx \dot{V}_P$ setzen und V als nahezu konstant behandeln.

4. Stoffbilanz in Excel

Für die Komponente i gilt diskret:

$$M_i(t + \Delta t) = M_i(t) + \dot{m}_{i,F} \Delta t - \dot{m}_{i,P} \Delta t.$$

Mit

$$\dot{m}_{i,F} = c_{i,F} \dot{V}_F,$$

und bei bekannter Rückhaltung R :

$$J_i = J_V c_i (1 - R), \quad \dot{m}_{i,P} = J_i A.$$

Damit ergibt sich die Masse im Tank in der nächsten Zeile

$$M_i(t + \Delta t) = M_i(t) + c_{i,F} \dot{V}_F \Delta t - J_V c_i (1 - R) A \Delta t.$$

Die Konzentration wird anschliessend aus Masse und Volumen berechnet:

$$c_i(t + \Delta t) = \frac{M_i(t + \Delta t)}{V(t + \Delta t)}.$$

5. Iteration und Auswertung

Wie beim Batchverfahren werden die Formeln für Volumen, Masse und Konzentration zeilenweise nach unten kopiert. Jede Zeile entspricht einem Zeitschritt $t, t + \Delta t, t + 2\Delta t, \dots$

Typische Auswertungen in Excel sind:

- Konzentration im Tank über der Zeit,
- Volumen im Tank über der Zeit,
- kumulativ entnommenes Permeatvolumen,
- abgeführte Stoffmenge im Permeat.

Auf diese Weise lässt sich der Semibatch-Ultrafiltrationsprozess mit Feedzufuhr und Permeatentnahme sauber und anschaulich in Excel bilanzieren.

1.5.3 Kontiprozess in Excel

Ein kontinuierlicher Ultrafiltrationsprozess lässt sich in Excel abbilden, indem man alle ein- und ausströmenden Grössen des Bilanzraums gleichzeitig berücksichtigt. Im Unterschied zu Batch- und Semibatch-Verfahren gibt es im Kontibetrieb sowohl einen kontinuierlichen Feedstrom als auch einen Retentat- und Permeatstrom. Je nach Fragestellung kann man instationär (zeitabhängig) oder stationär (rein algebraisch) bilanzieren.

1. Grundidee

Für eine Komponente i gilt im Kontibetrieb allgemein:

$$\frac{dM_i}{dt} = \dot{m}_{i,F} - \dot{m}_{i,R} - \dot{m}_{i,P},$$

wobei

$$M_i = c_i V, \quad \dot{m}_{i,F} = c_{i,F} \dot{V}_F, \quad \dot{m}_{i,R} = c_{i,R} \dot{V}_R, \quad \dot{m}_{i,P} = J_i A.$$

Für das Volumen gilt:

$$\frac{dV}{dt} = \dot{V}_F - \dot{V}_R - \dot{V}_P.$$

Im stationären Zustand gilt

$$\frac{dM_i}{dt} = 0, \quad \frac{dV}{dt} = 0,$$

und die Gleichungen werden rein algebraisch.

In Excel lassen sich beide Fälle abbilden.

2. Tabellenstruktur für den stationären Kontibetrieb

Dies ist der einfachste Fall, da keine Zeitintegration erforderlich ist.

Spalte	Inhalt	Beispiel
A	Feedvolumenstrom \dot{V}_F	100 L h ⁻¹
B	Feedkonzentration $c_{i,F}$	5 g L ⁻¹
C	Permeatfluss J_V	45 L m ⁻² h ⁻¹
D	Membranfläche A	2 m ²
E	Permeatstrom \dot{V}_P	Formel
F	Retentatstrom \dot{V}_R	Formel
G	Retentatkonzentration $c_{i,R}$	Ergebnis
H	Permeatkonzentration $c_{i,P}$	abhängig von Rückhaltung

3. Wichtige stationäre Gleichungen in Excel

Permeatstrom:

$$\dot{V}_P = J_V A.$$

Retentatstrom:

$$\dot{V}_R = \dot{V}_F - \dot{V}_P.$$

Falls eine Rückhaltung R vorliegt:

$$c_{i,P} = c_{i,F}(1 - R).$$

Stationäre Massenbilanz:

$$c_{i,F} \dot{V}_F = c_{i,R} \dot{V}_R + c_{i,P} \dot{V}_P.$$

Damit lässt sich $c_{i,R}$ algebraisch lösen und in Excel direkt aus den anderen Größen berechnen.

4. Tabellenstruktur für die instationäre Simulation

Wie beim Batch- oder Semibatch-Verfahren wird in Excel zeilenweise über die Zeit gerechnet:

Spalte	Inhalt	Beispiel
A	Zeit t	0, 1, 2, 3 min
B	Zeitintervall Δt	1 min
C	Volumen $V(t)$	Startwert
D	\dot{V}_F	konstant oder variabel
E	\dot{V}_R	Formel
F	\dot{V}_P	Formel
G	Konzentration $c_i(t)$	iterativ
H	$c_{i,F}$	vorgegeben
I	Flux J_i	Formel
J	Stoffstrom $\dot{m}_{i,P}$	Formel
K	Masse $M_i(t)$	$c_i \cdot V$

5. Zeitdiskrete Gleichungen

Volumen:

$$V(t + \Delta t) = V(t) + (\dot{V}_F - \dot{V}_R - \dot{V}_P) \Delta t.$$

Masse:

$$M_i(t + \Delta t) = M_i(t) + \dot{m}_{i,F} \Delta t - \dot{m}_{i,R} \Delta t - \dot{m}_{i,P} \Delta t.$$

Konzentration:

$$c_i(t + \Delta t) = \frac{M_i(t + \Delta t)}{V(t + \Delta t)}.$$

6. Auswertung

In Excel lassen sich verschiedene Darstellungen erzeugen:

- Konzentrationsverlauf bis zum stationären Zustand,
- Volumen- und Durchsatzentwicklung,
- Permeatproduktion,
- Stofftrennungseffizienz.

7. Zusammenfassung

Der stationäre Kontibetrieb wird in Excel meist über einfache algebraische Gleichungen abgebildet; der instationäre Kontibetrieb dagegen über eine iteration von Volumen-, Massen- und Konzentrationsbilanzen in Zeitschritten. Beide Varianten lassen sich mit denselben Grundformeln und denselben Tabellenstrukturen zuverlässig darstellen.