



Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	xiii
Tabellenverzeichnis	xix
Symbol- und Abkürzungsverzeichnis	xxv
1. Einleitung	1
2. Grundlagen und Stand des Wissens	3
2.1. Retrofit von chemischen Anlagen	3
2.1.1. Allgemeine Anmerkungen	3
2.1.2. Bekannte Systematiken für anlagenweite Retrofits	5
2.2. Optimierung	9
2.2.1. Gemischt ganzzahlige Optimierung	10
2.2.2. Lösungsalgorithmen	10
2.3. Thermodynamische Phasengleichgewichte	14
2.3.1. Theoretische Beschreibung	15
2.3.2. Bestimmung von Gleichgewichtsdaten	17
2.3.3. Multikomponentengemische	20
2.4. Reaktionstechnische Grundlagen	21
2.4.1. Grundbegriffe	21
2.4.2. Gleichgewichtsreaktionen	22
2.5. Einordnung der vorliegenden Arbeit	23
3. Hybride Systematik für einen anlagenweiten Retrofit	25
3.1. Allgemeine Anmerkungen	25
3.2. Phase I – Identifikation von Retrofit-Potenzial	28
3.2.1. Definition der Retrofit-Ziele (Schritt 1)	28
3.2.2. Prozessanalyse (Schritt 2)	31
3.2.3. Potenzialabschätzung (Schritt 3)	32
3.3. Phase II – Retrofit-Prozessentwicklung	33
3.3.1. Entwicklung von lokalen Prozessmodifikationen (Schritt 4)	33
3.3.2. Integration der Modifikationen (Schritt 5)	34
3.3.3. Evaluation der Prozessalternativen (Schritt 6)	34



3.4. Fazit und Auswahl der Fallbeispiele	35
4. Retrofit-Toolbox	37
4.1. Prinzipieller Aufbau	37
4.2. Parameterstudie	39
4.3. Implementierte Retrofit-Programme	41
4.3.1. Sensitivitätsanalyse	41
4.3.2. Optimierung	42
4.3.3. Synthese von destillativen Trennsequenzen	47
4.4. Fazit	51
5. Fallbeispiel I – Industrieller Zwischenprodukt-Prozess	53
5.1. Ausgangslage	53
5.2. Definition der Retrofit-Ziele (Schritt 1)	55
5.3. Prozessanalyse (Schritt 2)	55
5.4. Thermodynamische Charakterisierung	56
5.4.1. Analysemethoden	57
5.4.2. Stoffdatenmodell	58
5.4.3. Komplexes Flüssig-Flüssig-Gleichgewicht	65
5.4.4. Reaktionsnetzwerk	68
5.5. Schritt 3: Potenzialabschätzung	68
5.5.1. Reduktion der Herstellungskosten (Ziel I)	68
5.5.2. Verbesserte Abwasseraufbereitung (Ziel II)	71
5.6. Schritt 4: Prozessmodifikationen	72
5.6.1. Selektive Abtrennung von Seitenprodukten	74
5.6.2. Energetische Optimierung der Produktauftrennung	81
5.6.3. Energetische Optimierung der <i>Abwasseraufbereitung</i>	88
5.6.4. Reduktion der Abwasserbeladung	94
5.7. Schritt 5: Integration	94
5.7.1. Selektive Abtrennung von Seitenprodukten	95
5.7.2. Energetische Optimierung der <i>Produktauftrennung</i>	99
5.7.3. Energetische Optimierung der Abwasseraufbereitung	99
5.7.4. Reduktion der Abwasserbeladung	100
5.8. Schritt 6: Evaluation	103
5.8.1. Reduktion der Herstellungskosten (Ziel I)	103
5.8.2. Verbesserte Abwasseraufbereitung (Ziel II)	104
5.9. Fazit	104
6. Fallbeispiel II – Retrofit von Destillationssequenzen	107
6.1. Beschreibung der Ausgangslage	107
6.2. Stoffsystem	108
6.3. Generierung einer Referenzanlage	109
6.3.1. Grobauslegung	110



6.3.2. Detailauslegung	112
6.3.3. Dimensionierung der Anlagenkomponenten	119
6.4. Anwenden der Retrofit-Systematik	121
6.4.1. Retrofit-Systematik – Phase I	121
6.4.2. Retrofit-Systematik – Phase II	122
6.5. Fazit	129
7. Zusammenfassung und Ausblick	131
Literaturverzeichnis	133
A. Betreute studentische Arbeiten	145
A.1. Promotionsprojekt	145
A.2. Andere Projekte	146
B. Veröffentlichungen	147
B.1. Konferenzteilnahmen	147
B.1.1. Posterpräsentationen	147
B.1.2. Vorträge	147
B.2. Veröffentlichte Paper	148
C. Veröffentlichte Beispielprozesse	149
C.1. HDA-Prozess	149
C.2. Aromaten-Prozess	150
C.3. Prozess zur Rückgewinnung von Essigsäure	150
C.4. Methyl-Butynol-Prozess	151
C.5. Destillations-Prozess	152
C.6. Vinyl-Chlorid-Monomer-Prozess	152
C.7. NGL-Prozess	153
C.8. Methanol-Prozess	153
C.9. Ammoniak-Prozess	154
C.10. Feinchemikalien-Prozess	154
C.11. Blausäure-Prozess	154
D. Retrofit-Toolbox – Ergänzende Informationen	157
D.1. Verwendete Testfunktionen für eine globale Optimierung	157
D.1.1. Easom-Funktion	157
D.1.2. Hartmann-Funktion	158
D.1.3. Rosenbrock-Funktion	159
D.1.4. Schwefel-Funktion	160
D.1.5. Shekel-Funktion	160
D.1.6. Sphere-Funktion	161
D.1.7. Zakharov-Funktion	161
D.1.8. MINLP Funktion	162



D.2. Häufigkeitsverteilung der Moleküle	163
D.3. Kostenfaktoren für die Optimierung	164
D.3.1. Investitionskosten	165
D.3.2. Betriebsmittel	168
E. Fallbeispiel II – Ergänzende Informationen	169
E.1. Betrachtetes Stoffsystem	169
E.1.1. Reinstoffdaten	169
E.1.2. Gemischdaten	171
E.2. Referenzanlage	172
E.3. Retrofit-Anlage	176