



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 |