

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Problemstellung	1
1.2	Zielsetzung	2
1.3	Gliederung	4
2	Grundlagen: Optimierung	7
2.1	Allgemeine Problemstellung	8
2.2	Optimalitätskriterien	9
2.3	Optimierungsmethoden	11
2.3.1	Mathematische Programmierung	11
2.3.2	Heuristische Methoden	16
2.3.3	Hybride Methoden	26
3	Grundlagen: Designoptimierung chemischer Prozesse	29
3.1	Aufbau chemischer Prozesse	30
3.2	Entwicklung chemischer Prozesse	30
3.3	Designoptimierung	31
3.3.1	Systematische Lösungsansätze	32
3.3.2	Superstrukturoptimierung	33
4	Ein memetischer Algorithmus zur Designoptimierung	37
4.1	Das memetische Konzept	38
4.1.1	Struktur des memetischen Algorithmus	38
4.1.2	Polyolithische Modellierung	39
4.1.3	Restriktionsbehandlung	40
4.2	Stand der Forschung und Einordnung der vorliegenden Arbeit	41
4.3	Vorgehensweise	44
4.4	Varianten des MA	46

5 Referenzalgorithmen	47
5.1 CONOPT	47
5.2 OQNLP/CONOPT	47
5.3 SBB/CONOPT	48
5.4 SBB/OQNLP/CONOPT	49
6 Fallbeispiel	51
6.1 Designoptimierung reaktiver Rektifikationskolonnen	51
6.1.1 Reaktive Rektifikationskolonnen	51
6.1.2 Problemstellung	53
6.1.3 Modellierung	54
6.2 Fallbeispiel: MTBE-Kolonne mit optionalem Außenreaktor	61
6.2.1 Modellierung	61
6.2.2 Varianten der MTBE-Modelle	63
6.2.3 Größe der Modelle	64
7 Kontinuierliche Designoptimierung	65
7.1 Komponenten des MA	66
7.1.1 Repräsentation	66
7.1.2 Initialisierung	67
7.1.3 Mutation	67
7.1.4 Reparatur	68
7.1.5 Selektion	68
7.1.6 Tabuzonen	70
7.2 Evaluation	70
7.2.1 Testumgebung und Implementierung	71
7.2.2 Einstellung des MA	72
7.2.3 Vergleich mit dem Referenzalgorithmus	74
7.2.4 Analyse des MTBE-Problems	77
7.3 Zusammenfassung	78
8 Designoptimierung mit strukturellen Beschränkungen	81
8.1 Varianten des MA	81
8.1.1 MA_{NLP1}	81
8.1.2 $MA_{NLP-CF1}$	82
8.1.3 $MA_{NLP-CF2}$	82

8.2	Erweiterung des MA	83
8.2.1	Repräsentation	83
8.2.2	Initialisierung	84
8.2.3	Mutation	85
8.2.4	Selektion	85
8.2.5	Fitnessfunktion	86
8.2.6	Reparatur	86
8.3	Evaluation	87
8.3.1	Suchraumanalyse	87
8.3.2	Testumgebung	88
8.3.3	Numerische Ergebnisse	89
8.4	Zusammenfassung	90
9	Designoptimierung einer Operationseinheit	93
9.1	Erweiterung des MA	94
9.1.1	Repräsentation	94
9.1.2	Initialisierung	95
9.1.3	Rekombination	95
9.1.4	Mutation	99
9.1.5	Reparatur	101
9.2	Evaluation	102
9.2.1	Suchraumanalyse	102
9.2.2	Einstellung des MA	103
9.2.3	Vergleich mit den Referenzalgorithmen	107
9.3	Zusammenfassung	116
10	Designoptimierung mit optionalen Operationseinheiten	117
10.1	Erweiterung des MA	118
10.1.1	Repräsentation	118
10.1.2	Initialisierung	119
10.1.3	Rekombination	121
10.1.4	Behandlung optionaler Operationseinheiten bei der Mutation	123
10.1.5	Mutation	125
10.1.6	Reparatur	128
10.2	Initialisierung der Modellvariablen im Simulationsmodell	130
10.3	Evaluation	131

10.3.1	Suchraumanalyse	131
10.3.2	Einstellung des MA	133
10.3.3	Vergleich mit den Referenzalgorithmen	135
10.4	Zusammenfassung	147
11	Analyse und Bewertung	149
11.1	Analyse und Vergleich der Suchräume	150
11.1.1	Betrachtung der MTBE-Kolonne ohne Außenreaktor	150
11.1.2	Betrachtung des gesamten Fallbeispiels	152
11.2	Analyse des MA	155
11.2.1	Einfluss der Dimensionen des Suchraums und der Existenz diskreter Variablen	155
11.2.2	Einfluss der lokalen Suche	157
11.2.3	Einfluss der polyolithischen Modellierung	160
11.3	Bewertung des Konzeptes	162
11.3.1	Analyse der Ergebnisse von SBB/CONOPT	163
11.3.2	Analyse der Ergebnisse von SBB/OQNLP/CONOPT	164
11.3.3	Analyse der Ergebnisse des MA	166
11.3.4	Vergleich und Bewertung der Algorithmen	167
11.4	Zusammenfassung	167
12	Schlussfolgerungen	169
12.1	Zusammenfassung	169
12.2	Ausblick	172
A	Detaillierte Ergebnisse	175
A.1	Kontinuierliche Designoptimierung	175
A.2	Designoptimierung einer Operationseinheit	184
A.2.1	MTBE-Problem ohne strukturelle Beschränkungen ($MTBE_{MINLP}$)	184
A.2.2	MTBE-Problem mit strukturellen Beschränkungen ($MTBE_{MINLP-CF1}$)	185
A.3	Designoptimierung optionaler Operationseinheiten	187
A.3.1	MTBE-Problem ohne strukturelle Beschränkungen ($MTBE_CSTR_{MINLP}$)	187
A.3.2	MTBE-Problem mit strukturellen Beschränkungen ($MTBE_CSTR_{MINLP-CF1}$)	188

B Beschleunigung der Simulation	193
B.1 Lockerung der Zulässigkeitstoleranz	193
B.2 Initialisierung der Modellvariablen im Simulationsmodell	194
B.3 Zusammenfassung	196
C Modellierung der Stoffdaten und der kinetischen Parameter	197
D Varianten des memetischen Algorithmus	199
E Nomenklatur	201
Literaturverzeichnis	207