

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Konzeptionelles Design reaktiver Rektifikationsverfahren</b>	<b>5</b>
2.1	Entwicklung verfahrenstechnischer Prozesse	5
2.2	Optimierungsmethoden für das konzeptionelle Design	8
2.3	Design reaktiver Rektifikationsverfahren	15
2.4	Untersuchte Fragestellung dieser Arbeit	22
<b>3</b>	<b>Modellierungskonzept zur Optimierung reaktiver Rektifikationsverfahren</b>	<b>25</b>
3.1	Modellierungskonzept	26
3.2	Modellgleichungen der reaktiven Rektifikationskolonne	28
3.2.1	Modell eines Bausteins	28
3.2.2	Festlegung der Superstruktur	36
3.2.3	Arbeitsbereich und Katalysatormenge	37
3.2.4	Zielfunktion	39
3.3	Erweiterung um einen außenliegenden Reaktor	47
3.4	Vergleich mit Modellierungskonzepten aus der Literatur	51
<b>4</b>	<b>Fallbeispiele: Methyl-tert-Butylether und Methylethylester</b>	<b>53</b>
4.1	Herstellung von Methyl-tert-Butylether (MTBE)	53
4.2	Modellgleichungen für das Fallbeispiel MTBE	56
4.2.1	Reaktive Rektifikationskolonne	56
4.2.2	Reaktive Rektifikationskolonne mit Außenreaktor	62
4.2.3	Erweiterung um eine zweite Kolonne mit Rückführung	64
4.3	Heuristische Regeln und Startwerte für das Fallbeispiel MTBE	69
4.4	Herstellung von Methylethylester (Methylacetat)	72
4.5	Modellgleichungen für das Fallbeispiel Methylacetat	72
<b>5</b>	<b>Lösung der Optimierungsprobleme</b>	<b>79</b>
5.1	Implementierung der Modellgleichungen	79
5.2	Modelleigenschaften	85
5.3	Startwerte	89
5.4	Verwendete Solver	91
5.4.1	Lokale Solver CONOPT3, CONOPT4 und IPOPT	93
5.4.2	Multistart-Solver OQNLP	97
5.4.3	Branch-and-Bound-Solver SBB	99
5.4.4	Globale Solver ANTIGONE und BARON	100

<b>6</b>	<b>Ergebnisse numerischer Versuche</b>	<b>101</b>
6.1	Ergebnisse bei fester Anzahl aktiver Modellbausteine	101
6.1.1	Lokale Solver CONOPT3, CONOPT4 und IPOPT	102
6.1.2	Einfluss der Startwerte auf die Lösung	106
6.1.3	Multistart-Solver OQNLP	108
6.1.4	Globale Solver ANTIGONE und BARON	115
6.2	Ergebnisse bei variabler Anzahl aktiver Modellbausteine	120
6.2.1	Branch-and-Bound-Solver SBB	120
6.2.2	Globale Solver ANTIGONE und BARON	125
6.3	Zusammenfassung des Solver-Vergleichs	127
<b>7</b>	<b>Optimierung der ganzzahligen Entscheidungen</b>	<b>129</b>
7.1	Methoden zur Optimierung ganzzahliger Entscheidungen	131
7.2	Alternative Modellierungsansätze für die ganzzahligen Entscheidungen	132
7.2.1	Optimierung der Anzahl der Kolonnenstufen	132
7.2.2	Beschränkung der Anzahl der Zuläufe und Austauschströme	138
7.3	Vergleich der Modellierungsansätze für das Fallbeispiel MTBE	142
7.3.1	Optimierung der Anzahl der Kolonnenstufen	142
7.3.2	Beschränkung der Anzahl der Zuläufe und Austauschströme	145
7.3.3	Betrachtung des Gesamtproblems	152
7.4	Optimierungsansatz für das Verfahren zur Trennung von Isobuten und Butan	159
7.5	Zusammenfassung des Vergleichs der Modellierungsansätze	164
<b>8</b>	<b>Diskussion der optimalen konzeptionellen Designs der Fallbeispiele</b>	<b>167</b>
8.1	Optimale konzeptionelle Designs für das Fallbeispiel MTBE	167
8.1.1	Reaktive Rektifikationskolonne	167
8.1.2	Reaktive Rektifikationskolonne mit Außenreaktor	173
8.1.3	Verfahren zur Trennung von Isobuten und Butan	176
8.2	Optimales konzeptionelles Design für das Fallbeispiel Methylacetat	182
8.3	Lokale Optima für das Fallbeispiel MTBE	189
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>197</b>
<b>A</b>	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>201</b>
<b>B</b>	<b>Parameterwerte</b>	<b>207</b>
<b>C</b>	<b>GAMS Basismodell Methyl-tert-Butylether</b>	<b>217</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>225</b>