

Inhaltsverzeichnis

Formelzeichen und Abkürzungen	VIII
1 Einleitung	1
2 Aspekte der Verfahrensentwicklung	3
2.1 Überblick	3
2.2 Werkzeuge der Verfahrensentwicklung	4
2.2.1 Heuristische Methoden	5
2.2.2 Thermodynamische Bewertung	6
2.2.3 Mathematische Prozeßsynthese	7
2.3 Flowsheeting-Programme	7
2.3.1 Anwendungsbereiche	8
2.3.2 Aufbau	9
3 Der Exergiebegriff in der Verfahrenstechnik	10
3.1 Grundlagen	10
3.1.1 Definition der Exergie	10
3.1.2 Umgebungsmodell	12
3.1.3 Berechnung der Exergie eines Stoffstroms	15
3.2 Exergiebasierte Prozeßanalyse	17
3.2.1 Bewertungskriterien für chemische Anlagen	17
3.2.2 Anbindung an ein Flowsheeting-Programm	18
4 Exergetische Optimierung eines Prozesses	21
4.1 Ammoniaksynthese mit Steam-Reforming	21
4.2 Prozeßbeschreibung	21
4.2.1 Das Standardverfahren	22
4.3 Modellierung der Ammoniaksynthese	24

4.3.1	Synthesegaserzeugung	24
4.3.2	Synthesekreislauf	25
4.3.3	Tieftemperaturtrennung der Inerten	26
4.4	Kostenschätzung	27
4.5	Analyse des Standardverfahrens	29
4.5.1	Gesamtbewertung	29
4.5.2	Optimierung des Synthesedrucks	29
4.5.3	Ergebnis der Druckoptimierung	32
4.6	Analyse von Verfahrensvarianten	32
4.6.1	Das Braun-Purifier-Konzept	34
4.6.2	Das AMV Verfahren	34
4.7	Ergebnis der exergetischen Bewertung	35
5	MINLP-Algorithmen	39
5.1	Die Superstruktur	39
5.2	Mathematische Abbildung der Superstruktur	42
5.2.1	Modellierung	42
5.3	Übersicht zu MINLP-Algorithmen	44
5.3.1	Branch-and-Bound	45
5.3.2	MINLP-Optimierung auf Basis der Netzstruktur	46
5.4	Der Outer-Approximation Algorithmus	48
5.4.1	Übersicht	48
5.4.2	OAER-Algorithmus	50
5.4.3	Zerlegung des Netzwerks	54
5.4.4	Konvergenz	55
5.5	Die Generalized Benders Decomposition	57
5.6	Umsetzung der exergetischen Strukturoptimierung	60
5.6.1	Programmkonzept	60
5.6.2	Das Koordinierungsprogramm MIPS	61
6	Anwendungsbeispiele der MINLP-Optimierung	65
6.1	Illustration: Ein Literaturbeispiel	65
6.2	Zwischenkühlung eines Ammoniakkonverters	68
6.2.1	Modellierung	68
6.2.2	Ergebnis	71

6.2.3 Diskussion	72
7 Zusammenfassung	74
A Fließbilder	76
A.1 Synthesekreislauf	77
A.2 Standardverfahren	79
A.3 Braun-Purifier	81
A.4 AMV Verfahren	83
B Ergänzungen zum MINLP	84
B.1 Relaxation nichtlinearer Gleichungen	84
B.2 Modelle für MINLP-Optimierung	85
B.2.1 Reaktormodell REAKT	85
B.2.2 Modellierung der logischen Verbindungen	86