

Inhaltsverzeichnis

	Formelzeichen	VII
1	Einleitung	1
2	Stand des Wissens	4
2.1	Literaturübersicht	4
2.1.1	Diskontinuierliche Destillation	4
2.1.2	Diskontinuierliche Rektifikation	5
2.1.2.1	Short-cut-Methoden	6
2.1.2.2	Ausführliche Prozeßmodelle basierend auf Gleichgewichtstrennstufen	9
2.1.2.2.1	Einfluß des Hold-up	11
2.1.2.2.2	Start-up Phase	13
2.1.3	Chemische Reaktion	16
2.2	Einordnung der eigenen Arbeit	17
3	Physikalisches Modell	19
3.1	Kolonne	22
3.2	Reaktor	26
3.3	Kondensator	30
3.4	Regelkreise	33
3.5	Phasentrenner	36
4.	Numerische Verfahren	38
4.1	Übersicht	38
4.2	Newton-Raphson Verfahren	41
4.3	Relaxationsverfahren	46
4.4	Extrapolationsverfahren	49
4.5	Wahl der Variablen und der Berechnungsgleichungen	50

5.	BARESI Programmablauf und -struktur	54
5.1	Dateneingabe	55
5.2	Startwertberechnung	56
6.	Anwendungsfälle	58
6.1	Destillative Trennung eines Mehrkomponentengemisches	58
6.1.1	Prozeßbeschreibung	58
6.1.2	Simulationsergebnisse	62
6.2	Umesterung eines Carbonsäureester	68
6.2.1	Chemie der Umesterung	68
6.2.2	Ermittlung der Reaktionskinetik	70
6.2.2.1	Modellansatz	72
6.2.2.2	Versuchsanlage	77
6.2.2.3	Versuchsauswertung / Ergebnisse	79
6.2.2.4	Nachrechnen einer Pilotanlage	85
6.2.2.5	Scale-up der Versuchsergebnisse auf eine Produktionsanlage	88
6.3	Umesterung eines Carbonsäureester mit überlagerter Rektifikation	90
6.3.1	Beschreibung der Anlage und des Prozesses	90
6.3.2	Nachrechnen des Prozesses	93
6.3.3	Prozeßoptimierung	99
6.3.3.1	Optimierung der Batchdestillation	101
6.3.3.2	Optimierung der Umesterung	104
7	Zusammenfassung	110
A	Anhang	
	Anhang A1 Programmverzeichnis	112
	Anhang A1 Programmstruktur	119
	Literatur	130