

Inhalt

1.	Anliegen und Zielstellung	7
2.	Einführung – Überblick über die Gesamtproblematik	10
2.1.	Hierarchieebenen chemisch-technologischer Objekte	12
2.2.	Strategie von Systemuntersuchungen	14
2.3.	Synthese- und Analyseaufgaben	16
	<i>Literatur</i>	20
3.	Analyse und Modellierung stoffwirtschaftlicher Verfahren	21
3.1.	Ziel und Methoden der Analyse und Modellierung	21
3.2.	Prozeßmodelle	28
3.2.1.	Grundlagen	28
3.2.2.	Analytische Modellbildung	34
3.2.3.	Experimentelle Modellbildung	57
3.3.	Strukturanalyse und Berechnungsmethoden	69
3.3.1.	Grundlagen	69
3.3.2.	Methoden zur Strukturanalyse	74
3.3.3.	Berechnungsverfahren	83
3.4.	Modellanpassung und -überprüfung	86
3.4.1.	Vorbereitung des Datenmaterials	86
3.4.2.	Parameterbestimmung	88
3.4.3.	Überprüfung von Modellen	92
3.5.	Vereinfachung von Modellen	97
3.6.	Digitale Simulation	98
3.6.1.	Grundlagen	98
3.6.2.	Anwendung von Programmsystemen zur Simulation	101
3.7.	Beispiel 1: Kessel mit dampfbeheiztem Mantel	102
3.7.1.	Beschreibung des Objektes	102
3.7.2.	Dynamisches Modell	103
3.7.3.	Modell für den stationären Zustand	105
3.7.4.	Bestimmung der Modellparameter	105
3.7.5.	Anwendung des stationären Modells	106
3.7.6.	Anwendung des dynamischen Modells	107

3.8. Beispiel 2: Prozeßanalyse einer Reforminganlage	108
3.8.1. Beschreibung des Verfahrens	108
3.8.2. Ziel- und Einflußgrößen	110
3.8.3. Analytische Modellierung	111
3.8.4. Experimentell-statistische Modellierung	114
3.8.5. Vergleich der Ergebnisse mit der Praxis	118
3.8.6. Vergleich der Ergebnisse mit der Theorie	119
3.8.7. Optimierung	119
3.8.8. Nachführung des Modells	121
<i>Literatur</i>	124
4. Verfahrensentwurf (Verfahrenssynthese)	126
4.1. Problemstellung	126
4.2. Reaktionsweganalyse	141
4.2.1. Methodik der Reaktionsweganalyse	143
4.2.2. Auswahl günstiger Reaktionswege zur Herstellung von tert-Butyl-Oxianisol (BOA)	145
4.2.3. Auswahl günstiger Reaktionswege zur Herstellung von Acetaldehyd	147
4.3. Entwurf des Reaktors bzw. des Reaktorsystems	147
4.3.1. Struktursynthese auf der Grundlage von heuristischen Regeln	149
4.3.2. Struktursynthese von Reaktorsystemen mit der Strukturparametermethode	158
4.4. Entwurf von Stofftrennsystemen	167
4.4.1. Entwurf von Kolonnensystemen mit heuristischen Regeln	168
4.4.2. Beschreibung verbesserter heuristischer Regeln	172
4.4.3. Struktursynthese von Kolonnensystemen zur Trennung von Komponenten- gemischen	181
4.5. Struktursynthese von Wärmeübertragungssystemen	188
4.5.1. Formulierung der Aufgabenstellung	188
4.5.2. Struktursynthesealgorithmus auf der Grundlage heuristischer Regeln und unscharfer Methoden	196
4.6. Entwurf heterogener verfahrenstechnischer Systeme	212
4.6.1. Anwendung der Strukturparametermethode zum optimalen Entwurf hetero- gener verfahrenstechnischer Systeme	212
4.6.2. Optimale Strukturierung eines Reaktor-Stofftrennsystems zur Durchführung der Reaktion $A_1 \rightleftharpoons A_2 \rightleftharpoons A_3$ (A_2 – Zielprodukt)	215
4.6.3. Optimale Strukturierung eines Methylaminverfahrens	218
4.6.4. Optimale Strukturierung von gekoppelten Stofftrennungs- und Wärmeüber- tragungssystemen	222
<i>Literatur</i>	229
5. Sachwortverzeichnis	232