Software-Paket (DDBSP)

DDBSP_jumpstart_d.cdr; 12.10.2001

DDB - Gemischdatenbank

VLE	h^E	ACT	GLE	LLE	AZD	SLE	...

Vorhersage

UNIFAC	Mod. UNIFAC (Do)	ASOG	PSRK	...

Empfohlene Modell-Parameter

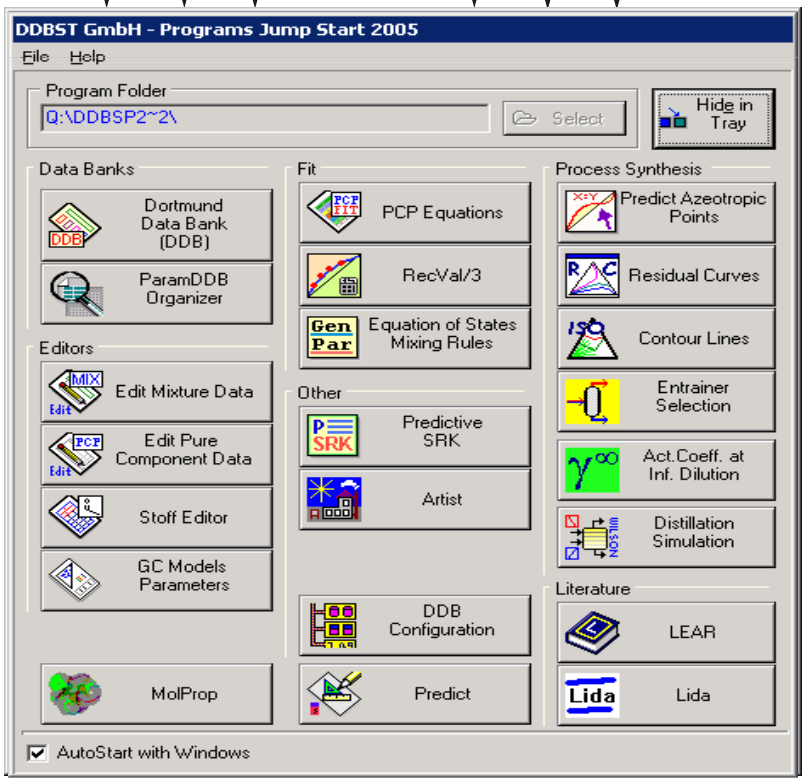
Wilson	NRTL	UNIQUAC	SRK	PR	...

DDB - Reinstoffdatenbank

P_i^s	c_P	crit.	η	T_m	Δh_{fus}	...

Vorhersage

Empfohlene Modell-Parameter



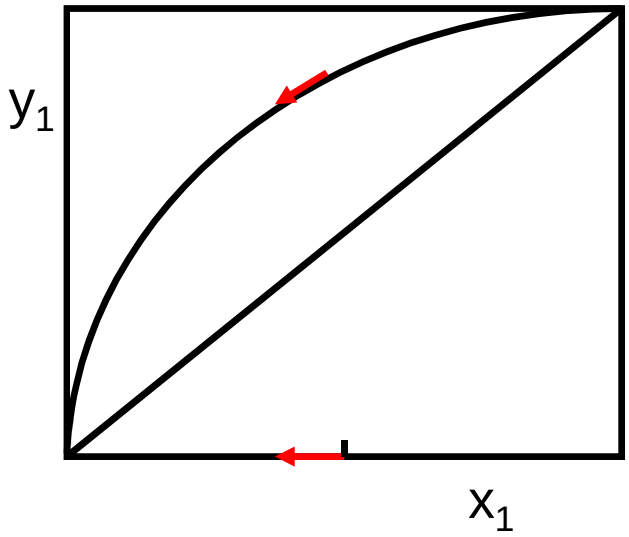
Berechnungs-Programme
- Phasengleichgewichte
- Simulationsprogramme
- Flash-Berechnungen
- Prozesssynthese

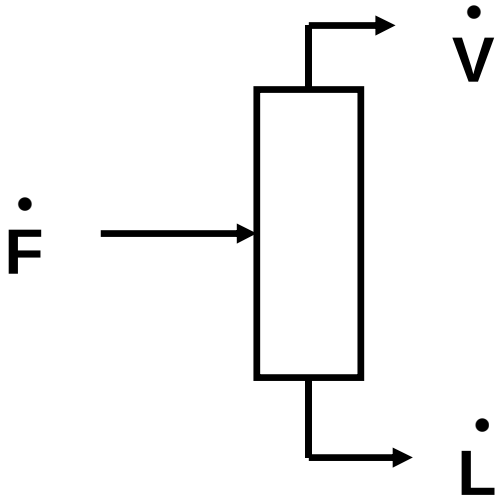
Präsentations-Programme
- Diagramme
- Tabellen

Parameter-Anpassung
- UNIFAC
- Mod. UNIFAC (Do)
- PSRK
- LIQUAC

Reinstoffdaten
- experimentell
- korreliert
- vorausberechnet

Erreichbare Anreicherung in einer theoretischen Trennstufe für ein System mit Trennfaktor $\alpha_{12} = 2.5$





Welche Konzentrationen ergeben sich bei einer Feedmenge von 1 kmol/h und einer Feedkonzentration von $x_1 = 0.5$ bei einem Dampfstrom von 0.5 kmol/h?

$$y_1 = \frac{\alpha_{12} x_1}{1 + (\alpha_{12} - 1) x_1}$$

$$y_1 = \frac{2.5 \cdot 0.5}{1 + (2.5 - 1) \cdot 0.5} = 0.714$$

$$\dot{F} \cdot z_1 = \dot{L} \cdot x_1 + \dot{V} y_1$$

$$0.5 = 0.5 x_1 + 0.5\, y_1$$

$$y_1 = \frac{2.5 \cdot x_1}{1 + (2.5 - 1) \cdot x_1}$$

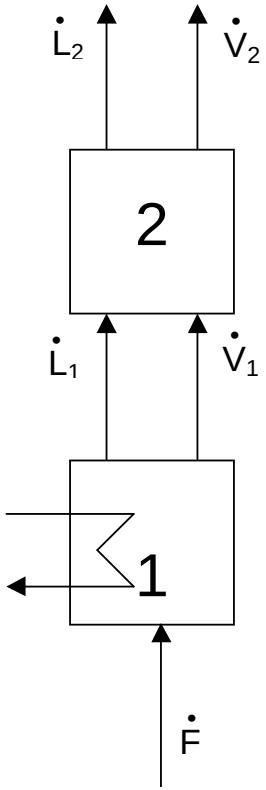
$$x_1 = 0.3874$$

$$y_1 = 0.6126$$

Realisierung mehrerer Stufen (Möglichkeiten der Stromführung)

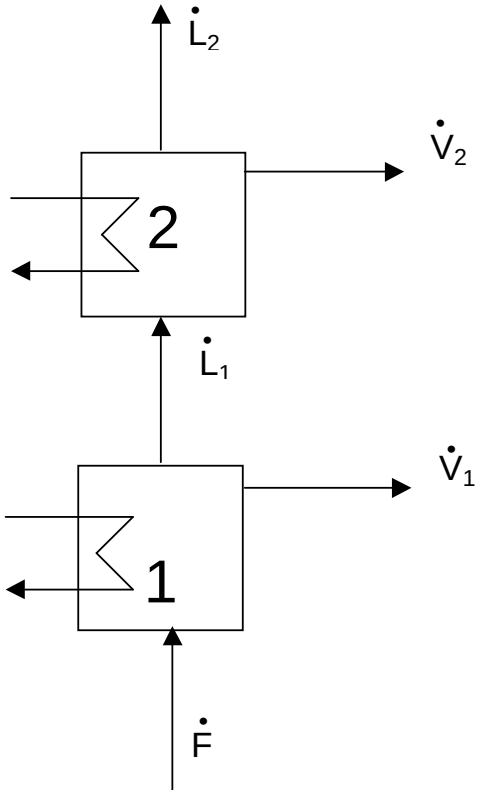
Gleichstrom

$y_1 = 0.6126$



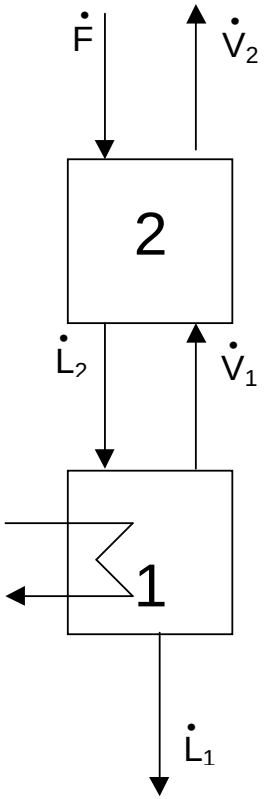
Kreuzstrom

$y_1 = 0.6305$



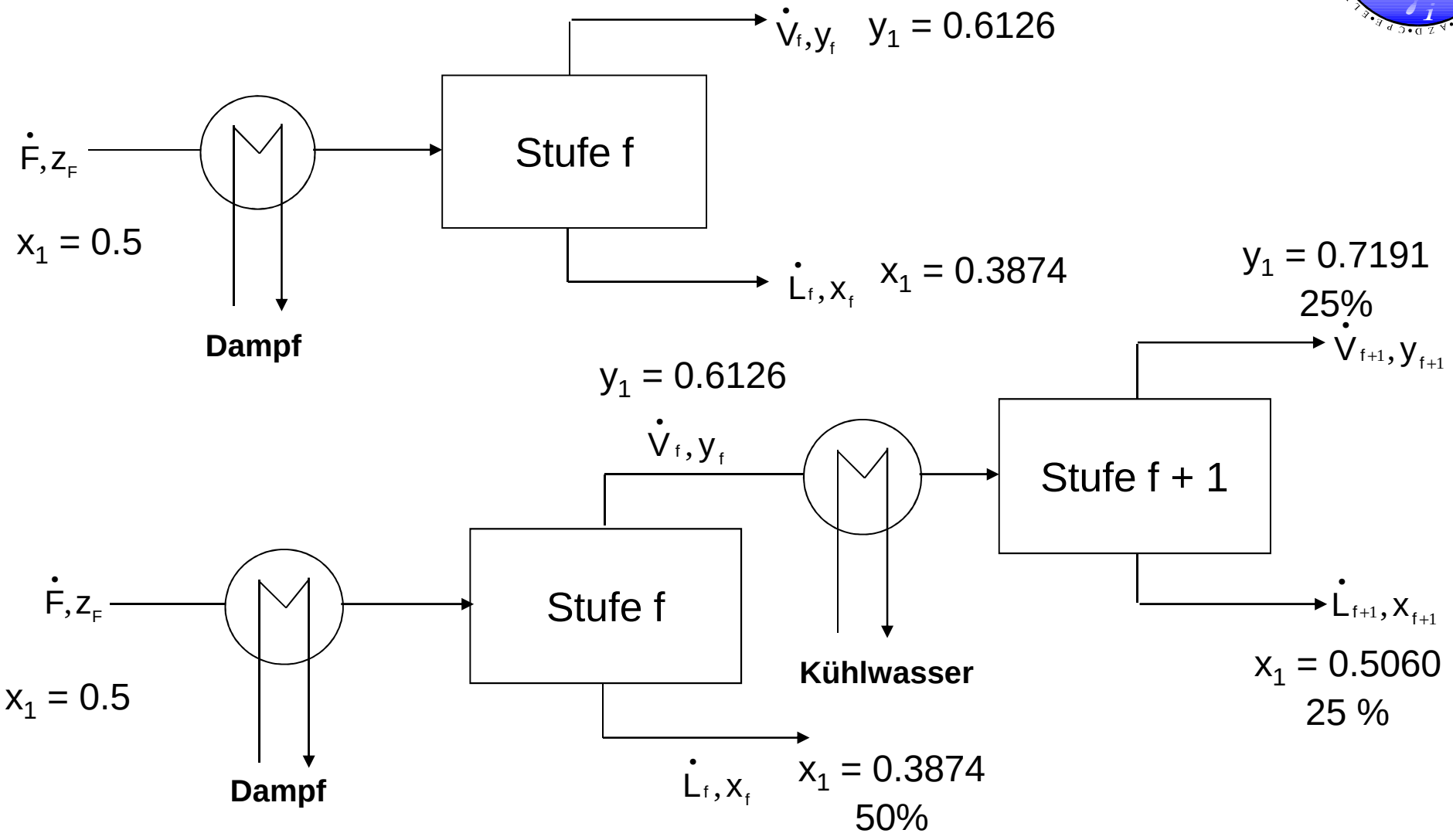
Gegenstrom

$y_1 = 0.6666$

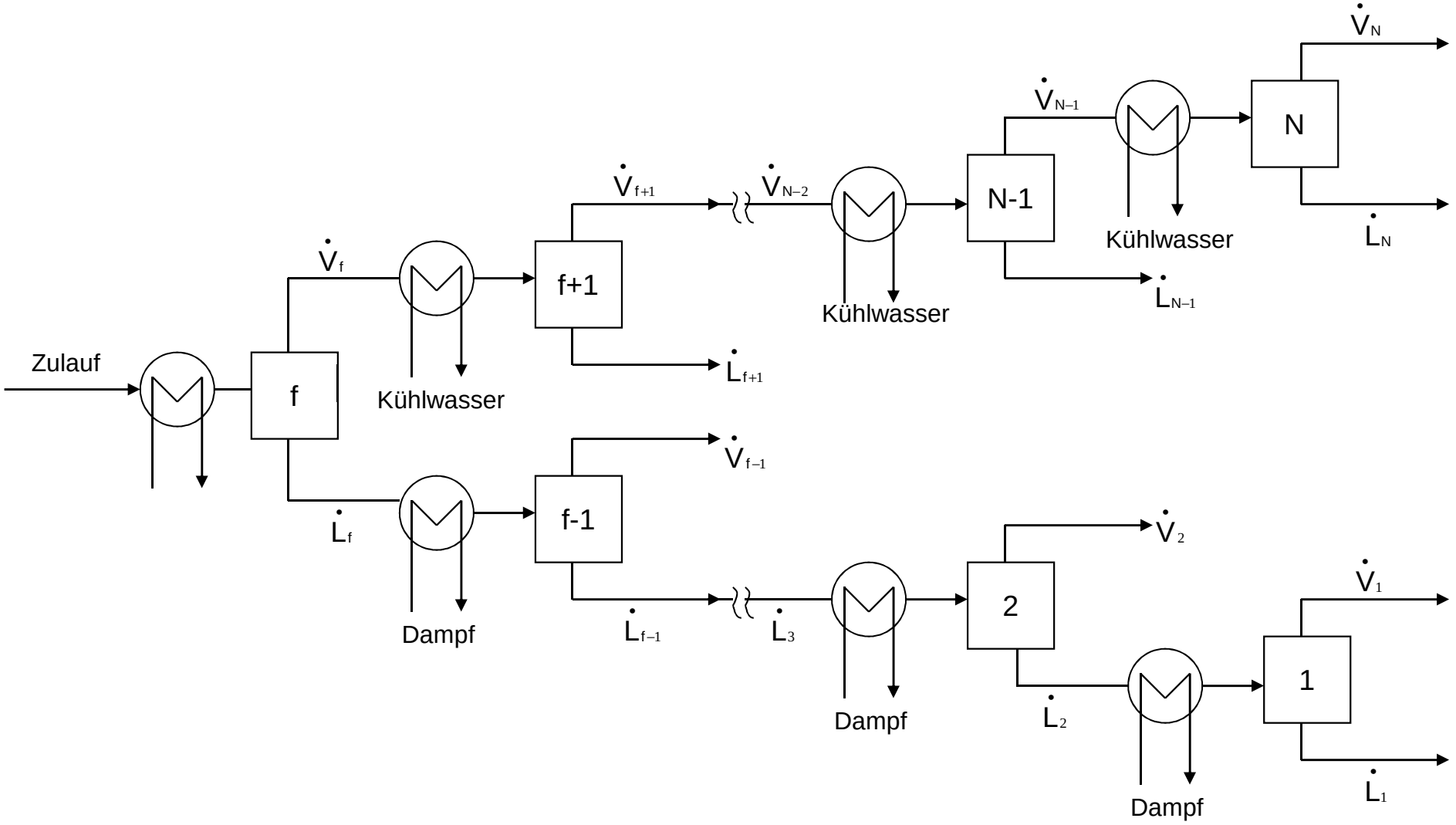


x_1 jeweils 0.5, F = 1, L = 0.5, $\Sigma V_i = 0.5$

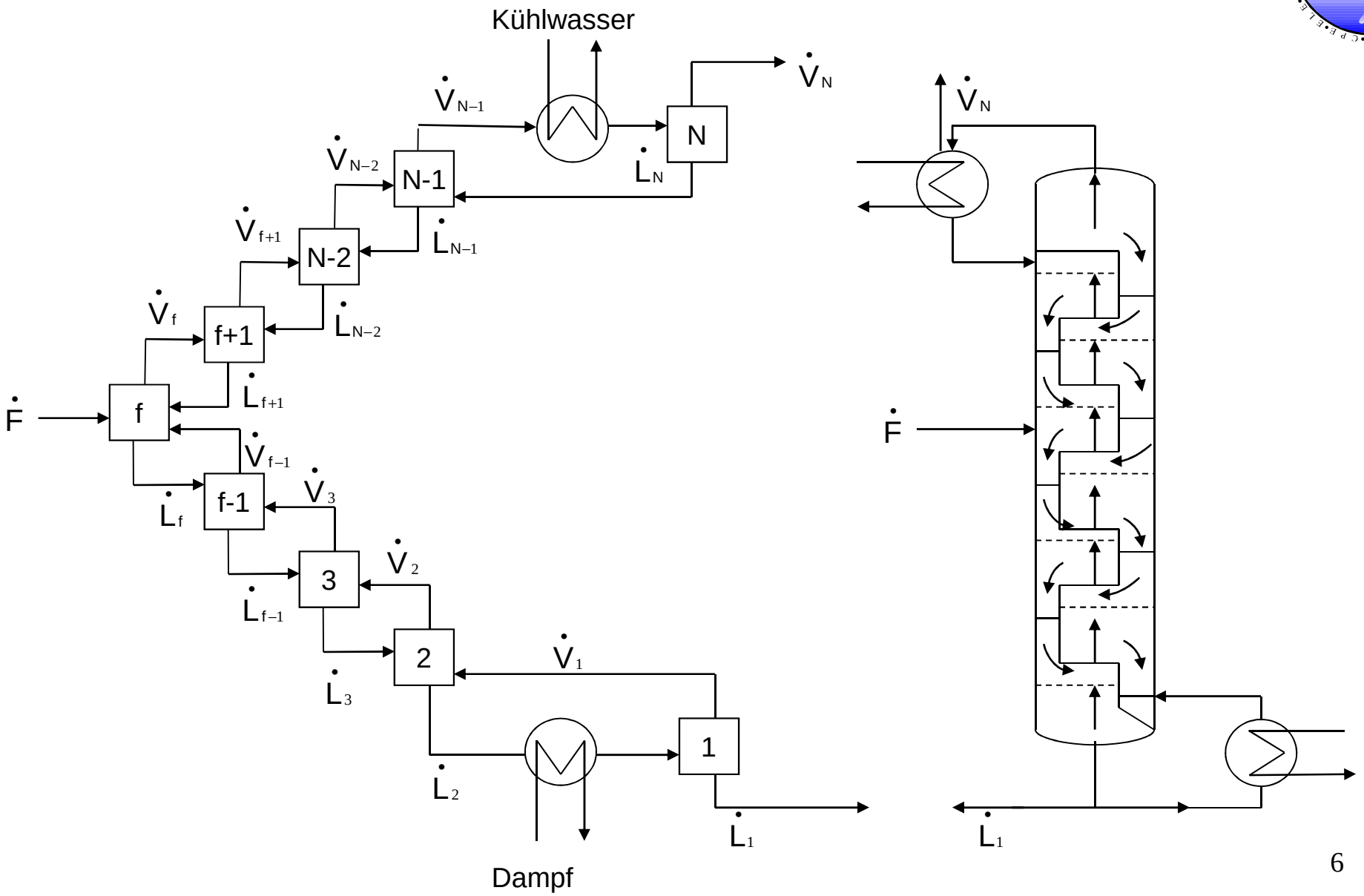
Zwei Gleichgewichtsstufen



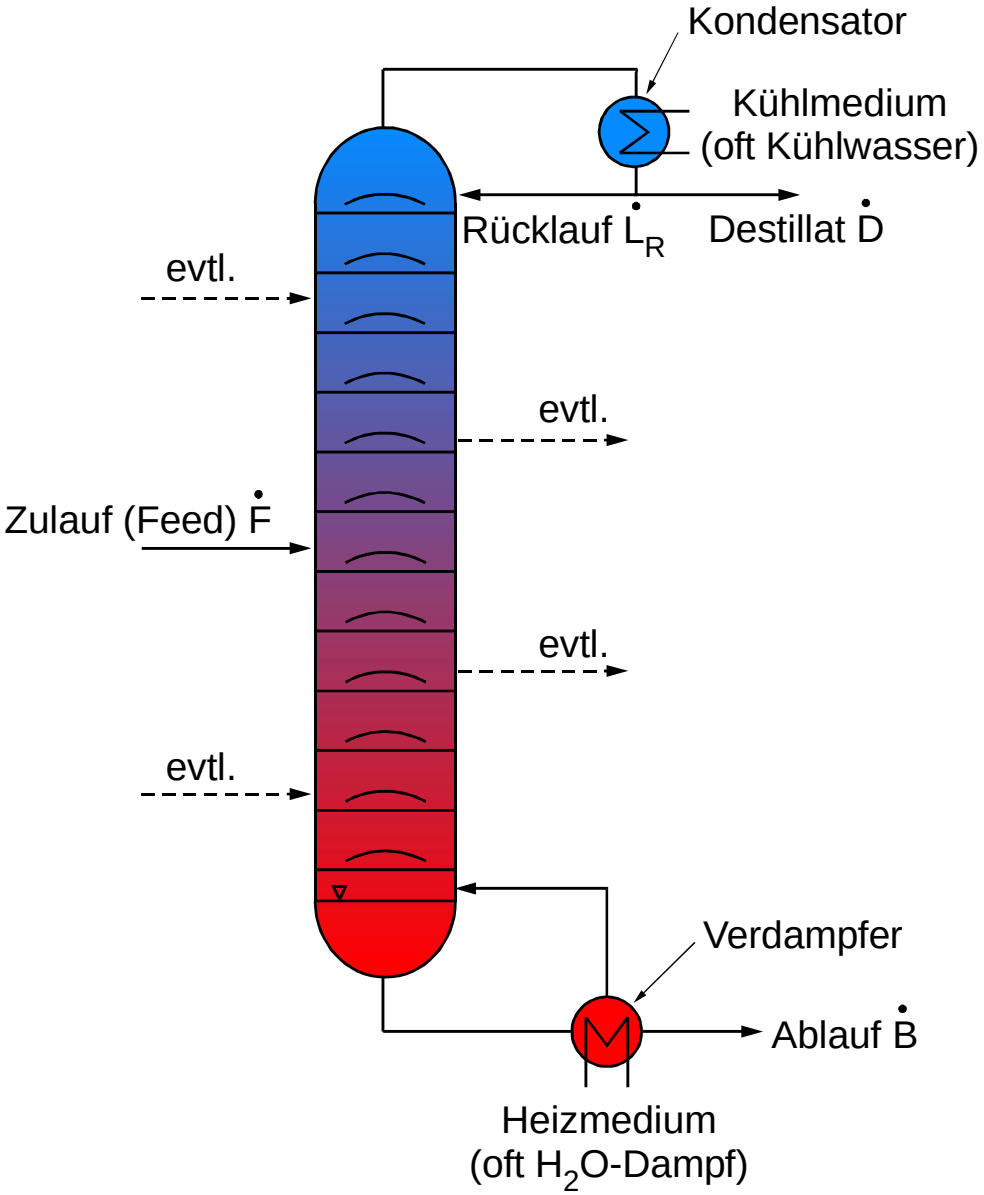
Vielzahl von Gleichgewichtsstufen



Rektifikationsanlage



Aufbau einer Rektifikationskolonne



d.h. typische Rektifikationskolonne besteht aus:

mehreren Stufen

Verdampfer

Kondensator

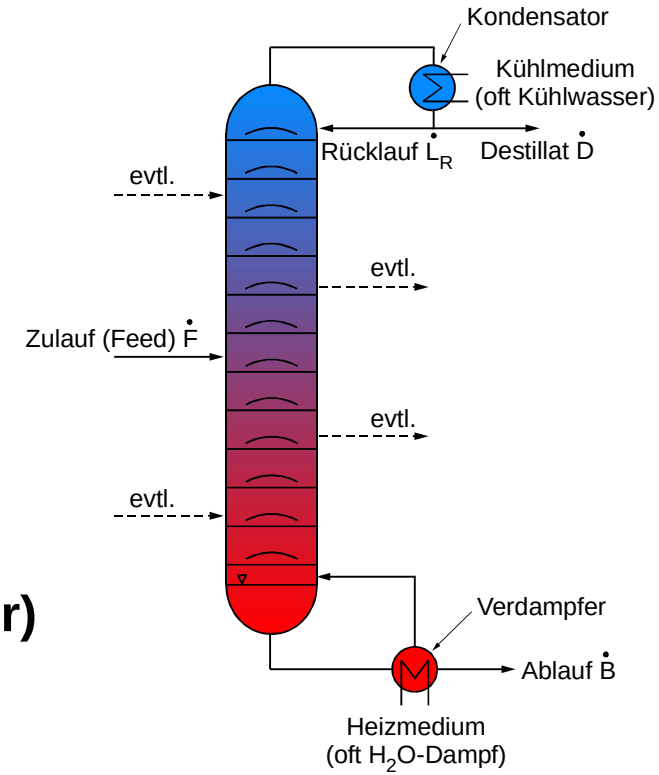
Stromführung:

Gegenstrom

Alte Rektifikationskolonne (Museum: Den Gamle By, Aarhus) (16. Jahrhundert)

Zu lösende Fragen bei der Auslegung kontinuierlicher Rektifikationskolonnen

- Art der Kolonne (Boden- bzw. Packungskolonne)
- bei welchem Druck soll die Kolonne arbeiten (üblicherweise: Atmosphärendruck)
- Anzahl der benötigten theoretischen (praktischen) Stufen (bzw. Höhe) der Packung
- Festlegung der Destillatmenge
- Rücklaufverhältnis
- Feedströme
  - wo
  - welche Mengen
  - thermischer Zustand
- flüssige (dampfförmige) Seitenströme?
  - wo
  - welche Mengen
- welche Energiemengen müssen zu- (Verdampfer) bzw. abgeführt (Kondensator) werden
- Durchmesser



Auslegung, d.h. Bestimmung der erforderlichen Trennstufen bzw. Höhe der Packung in Packungskolonnen

A) Konzept der idealen Trennstufe (Gleichgewichtsstufenkonzept)

bietet sich für Bodenkolonnen an
benötigt werden: K_i als f(x,T,P), h^L, h^V

B) Stoff- und Wärmeübergangsmodell (Konzept der Übertragungseinheit)

bietet sich für Packungskolonnen an

benötigt werden β_{Gi}, β_{Li}, a, α als f(x,T,P) und hydrodynamischen Bedingungen, f(Packung), h^L, h^V

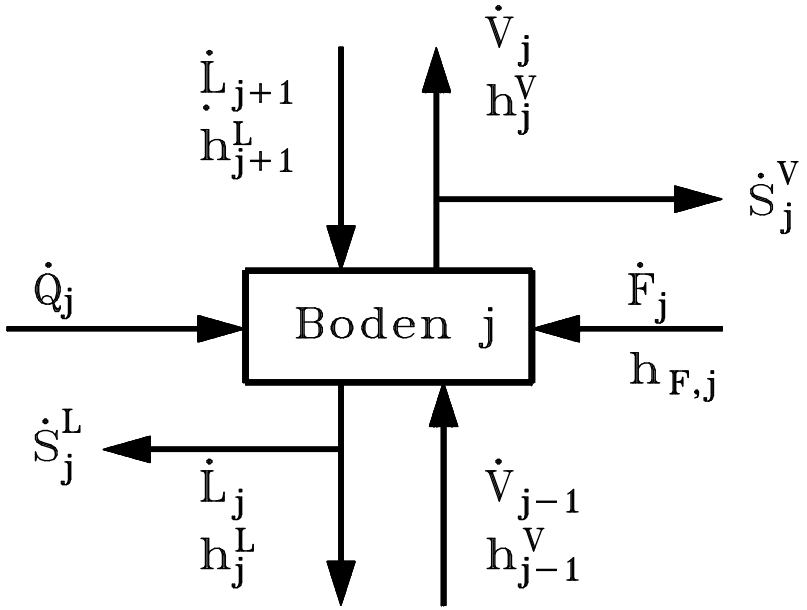
Material- und Enthalpiebilanzen (MESH-Gleichungen) für eine Gleichgewichtsstufe

$$M_{i,j} = \dot{L}_{j+1} x_{i,j+1} + \dot{V}_{j-1} y_{i,j-1} + \dot{F}_j z_{i,j} - (\dot{L}_j + \dot{S}_j^L) x_{i,j} - (\dot{V}_j + \dot{S}_j^V) y_{i,j} = 0$$

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j} x_{i,j} = 0 \qquad \left(K_{i,j} = \frac{y_{i,j}}{x_{i,j}} \right)$$

$$S_{x,j} = \sum x_{i,j} - 1.0 = 0$$

$$S_{y,j} = \sum y_{i,j} - 1.0 = 0$$



$$H_j = \dot{L}_{j+1} h_{j+1}^L + \dot{V}_{j-1} h_{j-1}^V + \dot{F}_j h_{F,j} - (\dot{L}_j + \dot{S}_j^L) h_j^L - (\dot{V}_j + \dot{S}_j^V) h_j^V + \dot{Q}_j = 0$$

N(2n+3) Gleichungen und Unbekannte

Für n = 4 Komponenten und N = 45 Böden ergeben sich 495 Gleichungen

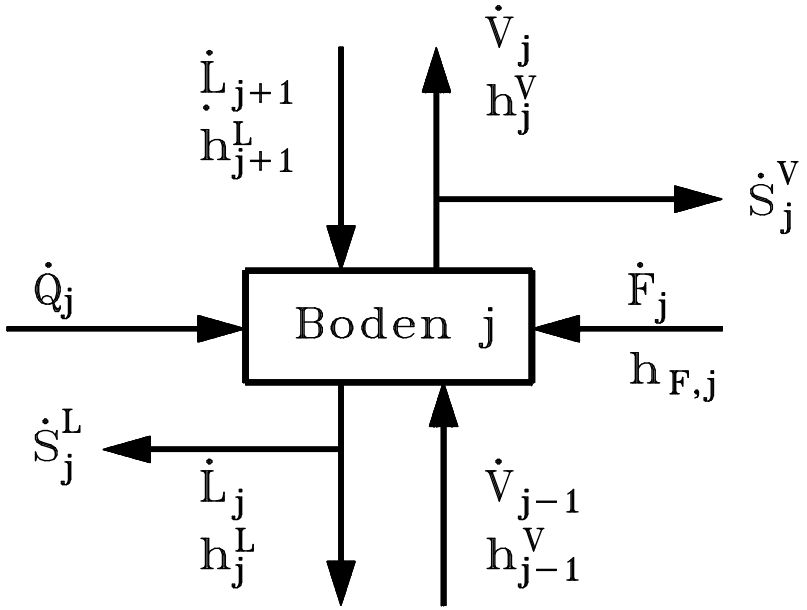
Material- und Enthalpiebilanz für eine Gleichgewichtsstufe (reaktive Rektifikation)

$$M_{i,j} = \dot{L}_{j+1} x_{i,j+1} + \dot{V}_{j-1} y_{i,j-1} + \dot{F}_j z_{i,j} - (\dot{L}_j + \dot{S}_j^{\,L}) x_{i,j}$$
$$- (\dot{V}_j + \dot{S}_j^{\,V}) y_{i,j} + r_{i,j} H_j^{\,L} = 0$$

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j} x_{i,j} = 0 \qquad \left(K_{i,j} = \frac{y_{i,j}}{x_{i,j}} \right)$$

$$S_{x,j} = \sum x_{i,j} - 1.0 = 0$$

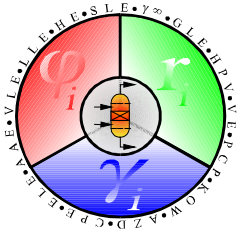
$$S_{y,j} = \sum y_{i,j} - 1.0 = 0$$



$$H_j = \dot{L}_{j+1} h_{j+1}^{\,L} + \dot{V}_{j-1} h_{j-1}^{V} + \dot{F}_j h_{F,j} - (\dot{L}_j + \dot{S}_j^{\,L}) h_j^{\,L}$$
$$- (\dot{V}_j + \dot{S}_j^{\,V}) h_j^{\,V} + \dot{Q}_j - r_j H_j^{\,L} \Delta h_{R,j} = 0$$

(MESH-Gleichungen)

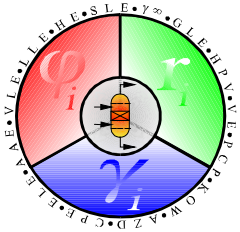
Vorwort im Lehrbuch von Henley und Seader



The availability of large electronic computers has made possible the rigorous solution of the equilibrium-stage model for multicomponent, multi-stage destillation column to an exactness limited only by the accuracy of the phase-equilibrium and enthalpy data utilized.

Buford D. Smith, 1973

Gleichgewichtsstufenkonzept



I Vereinfachte Verfahren für binäre Systeme

McCabe-Thiele-Verfahren

Ponchon-Savarit-Verfahren

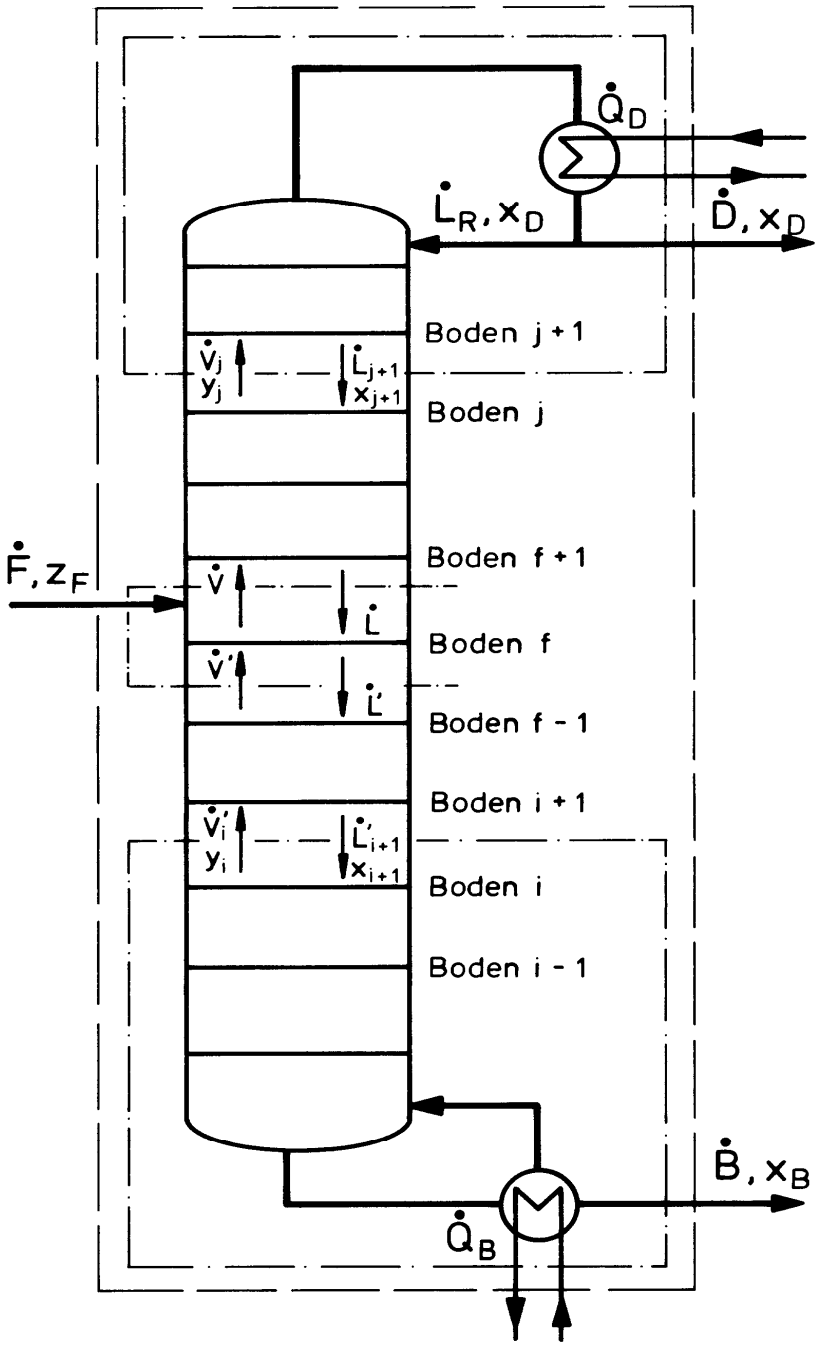
II Vereinfachte Verfahren für Mehrkomponentensysteme

short-Cut-Verfahren (Annahme α_{ij} = konstant)

III Rigorose Verfahren (Matrix-Verfahren)

Wang-Henke-Verfahren
Naphtali-Sandholm-Verfahren

Bodenkolonne



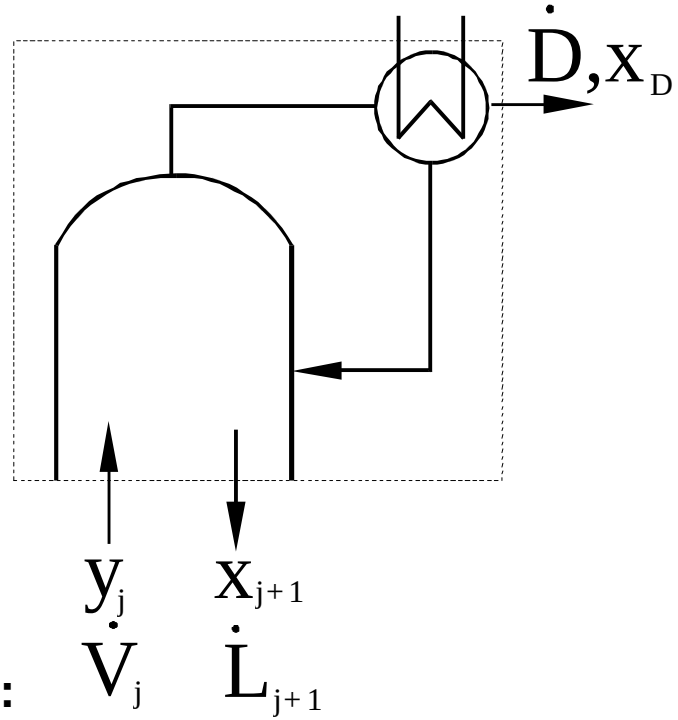
McCabe-Thiele-Verfahren (1925)

Vernachlässigung der Enthalpiebilanz, unter der Annahme dass:

1.) $\Delta h_{v1} = \Delta h_{v2}$ **(molar!)** **2.)** $h^E = 0$ **3.) Wärmeverlust = 0**

Mengenbilanz im Verstärkungsteil:

$$\dot{V}_j y_j = \dot{L}_{j+1} x_{j+1} + \dot{D} x_D$$



Nach Umstellung:

$$y_j = \frac{\dot{L}_{j+1}}{\dot{V}_j} x_{j+1} + \frac{\dot{D}}{\dot{V}_j} x_D$$

Bei Vernachlässigung der Enthalpieeffekte gilt:

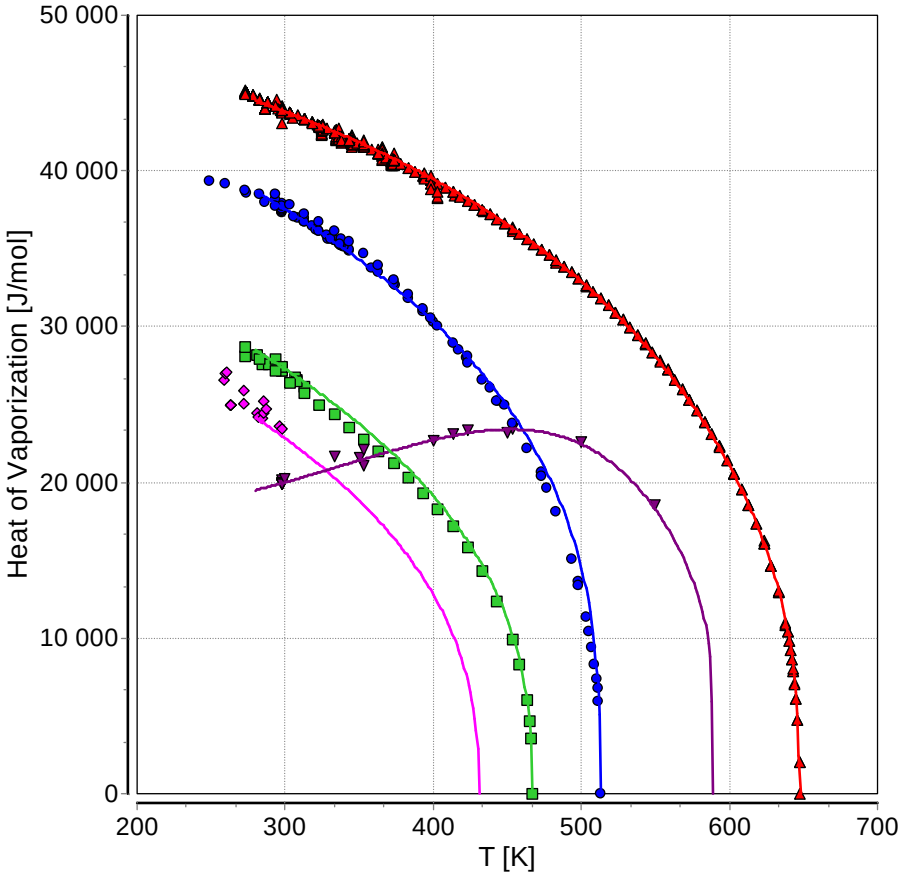
$\dot{L}_{j+1} = \dot{L}_j = \dot{L}_{j-1} = \dot{L}$ bzw. $\dot{V}_{j+1} = \dot{V}_j = \dot{V}_{j-1} = \dot{V}$

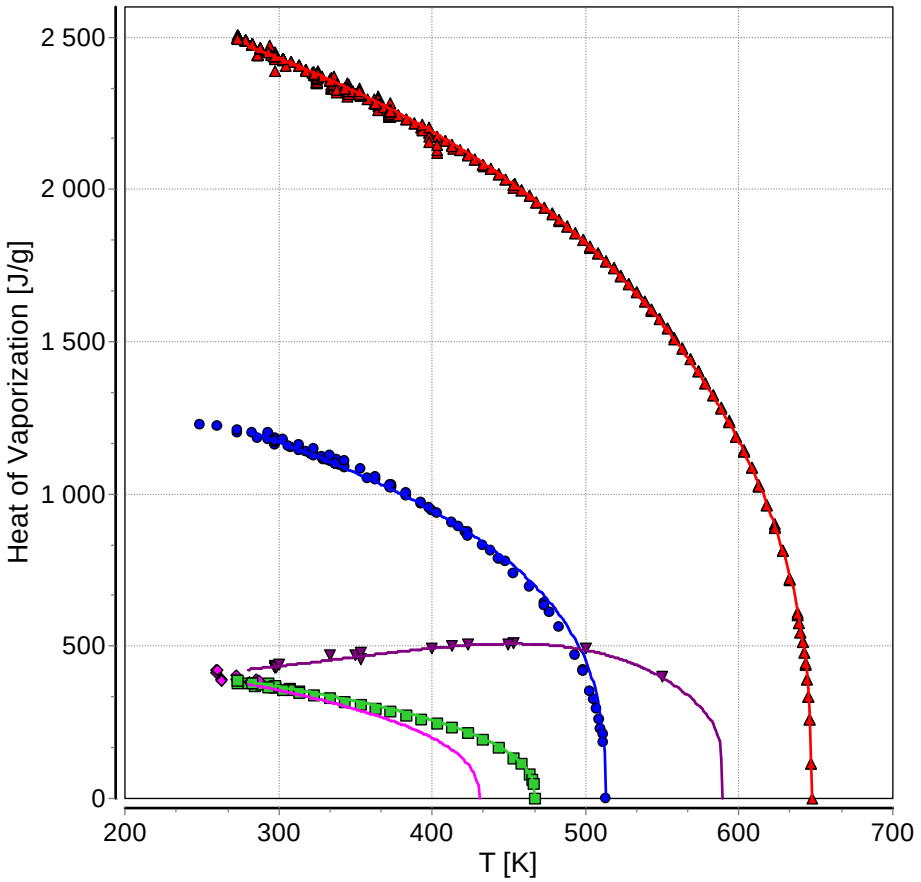
Nach Einführung des Rücklaufverhältnisses $v = \dot{L}/\dot{D}$

und Substitution des Dampfstroms $\dot{V} = \dot{L} + \dot{D}$ **erhält man:**

$$y_j = \frac{\dot{L}}{\dot{L} + \dot{D}} x_{j+1} + \frac{\dot{D}}{\dot{L} + \dot{D}} x_D$$

Verdampfungsenthalpie in J/mol und J/g





water methanol formic acid diethyl ether SO_2

McCabe-Thiele-Verfahren

Nach Division durch die Destillatmenge ergibt sich:

$$y_j = \frac{\dot{L}/\dot{D}}{\dot{L}/\dot{D}+\dot{D}/\dot{D}} x_{j+1} + \frac{\dot{D}/\dot{D}}{\dot{L}/\dot{D}+\dot{D}/\dot{D}} x_D$$

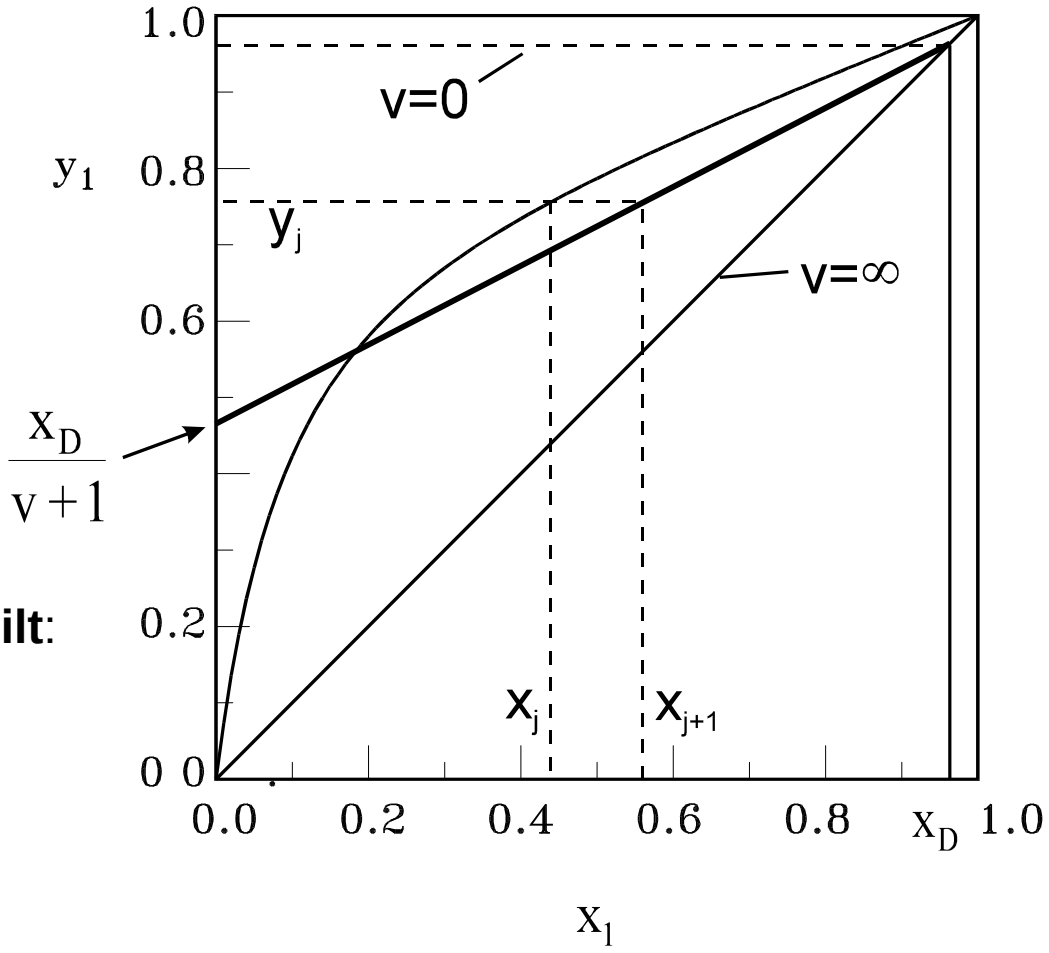
bzw.:

$$\boxed{y_j = \frac{v}{v+1} x_{j+1} + \frac{x_D}{v+1}}$$

Für die sogenannte Verstärkungsgerade gilt:

$$x = 0 \quad \rightarrow \quad y = \frac{x_D}{v+1}$$

$$x = x_D \quad \rightarrow \quad y = x_D$$



McCabe-Thiele-Verfahren

Mengenbilanz für den Abtriebsteil:

$$\dot{L}'_{i+1} = \dot{L}'_i = \dot{L}'_{i-1} = \dot{L}'$$

bzw.

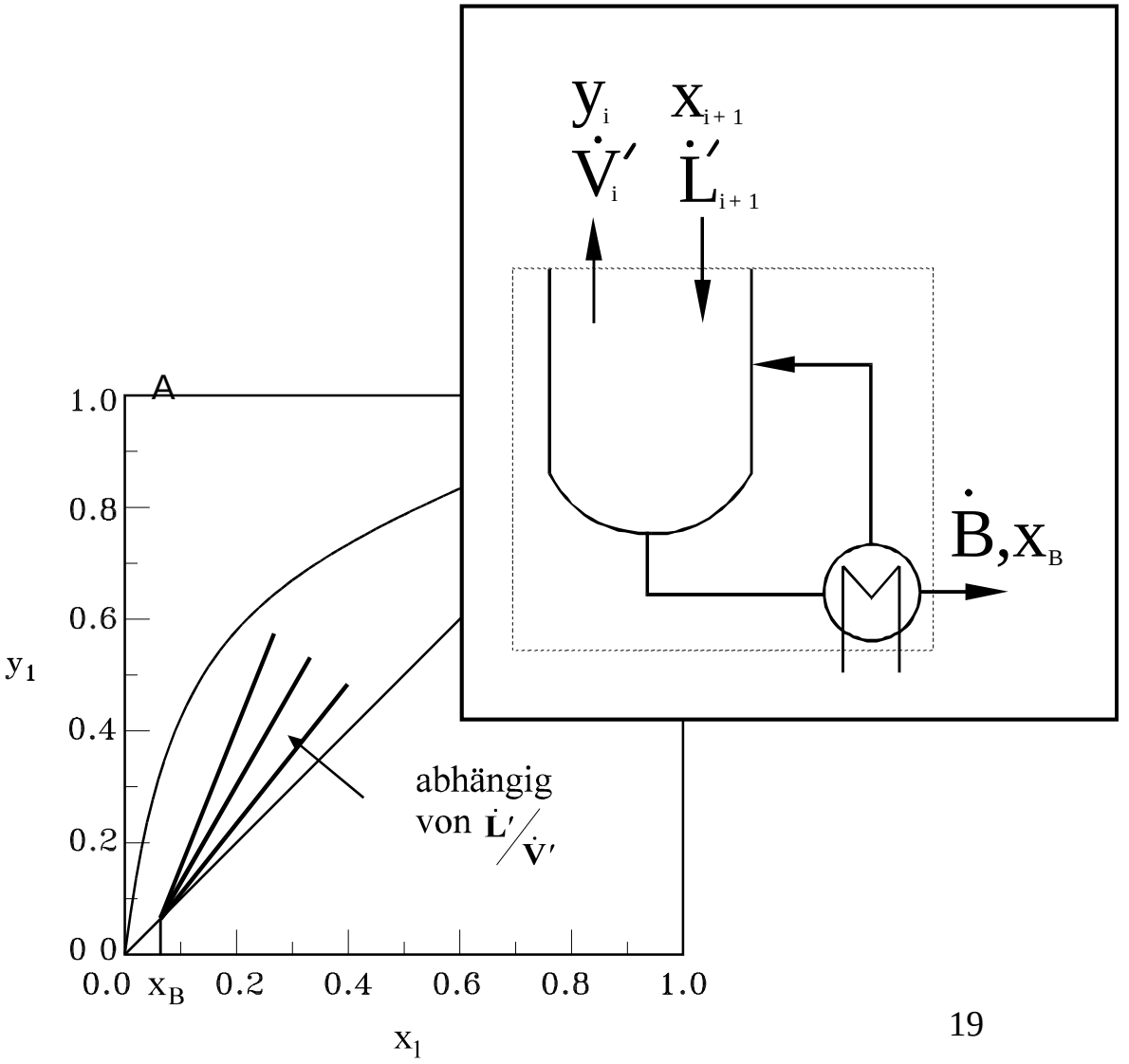
$$\dot{V}'_{i+1} = \dot{V}'_i = \dot{V}'_{i-1} = \dot{V}'$$

$$y_i = \frac{\dot{L}'}{\dot{V}'} x_{i+1} - \frac{\dot{B}}{\dot{V}'} x_B$$

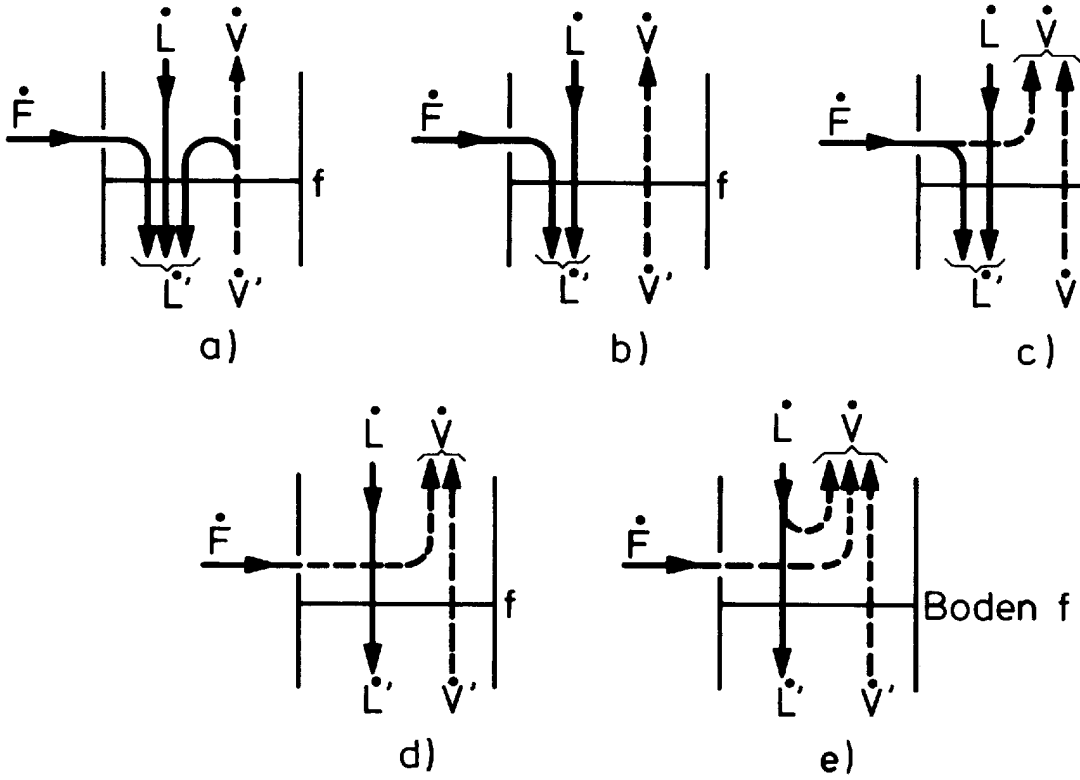
$\frac{\dot{L}'}{\dot{V}'}$ **wird durch den thermischen Zustand beeinflusst**

Mit $\dot{L}' = \dot{V}' + \dot{B}$ ergibt sich:

$$x = x_B \quad \rightarrow \quad y = x_B$$



Beeinflussung der Ströme auf dem Zulaufboden durch die Zulaufbedingungen



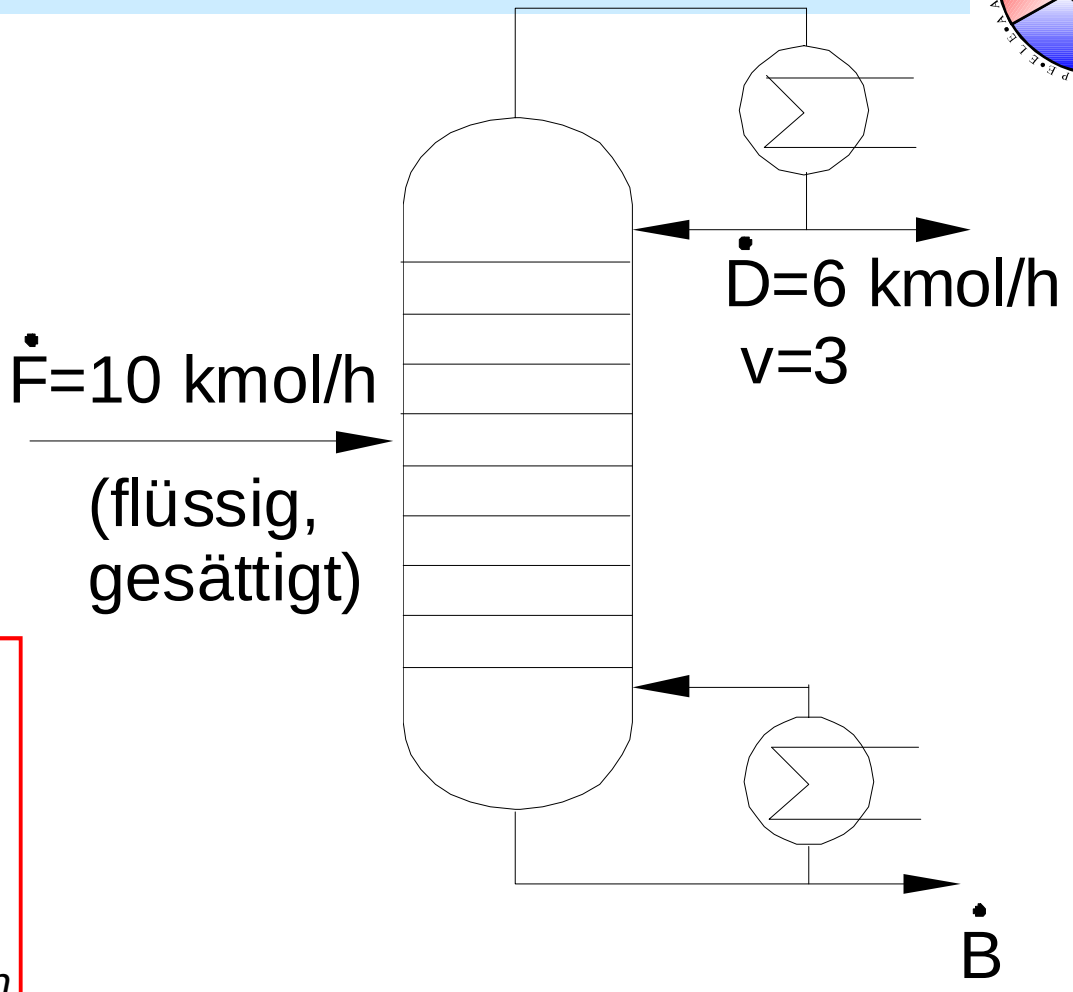
a) unterkühlt
b) flüssig im Sättigungszustand
c) teilweise verdampft
d) dampfförmig im Sättigungszustand
e) überhitzt

Typische Kolonne

Gesucht: $\dot{L}$, $\dot{V}$, $\dot{L}'$, $\dot{V}'$

$\dot{L}/\dot{V}$ $\dot{L}'/\dot{V}'$

Steigung der Arbeitsgeraden



$$\dot{B} = \dot{F} - \dot{D} = 10 - 6 = 4 kmol/h$$

$$\dot{L} = v \cdot \dot{D} = 3 \cdot 6 = 18 kmol/h$$

$$\dot{V} = \dot{L} + \dot{D} = 18 + 6 = 24 kmol/h$$

$$\dot{L}/\dot{V} = 18/24 = 0.75$$

$$\dot{L}' = \dot{L} + q \cdot \dot{F} = 18 + 10 = 28 kmol/h$$

$$\dot{V}' = \dot{V} = 24 kmol/h$$

$$\dot{L}'/\dot{V}' = 28/24 = 1.167$$

McCabe-Thiele-Verfahren

Der Schnittpunkt der Geraden ist auch durch Lösung der folgenden Gleichungen berechenbar:

Verstärkungsteil:

$$y_j = \frac{\dot{L}}{\dot{V}} x_{j+1} + \frac{\dot{D}}{\dot{V}} x_D$$

Abtriebsteil:

$$y_j = \frac{\dot{L}'}{\dot{V}'} x_{j+1} - \frac{\dot{B}}{\dot{V}'} x_B$$

$$y_j \dot{V} = x_{j+1} \dot{L} + \dot{D} x_D$$

$$y_j \dot{V}' = x_{j+1} \dot{L}' - \dot{B} x_B$$

Nach Subtraktion:

$$\mathbf{y_j (\dot{V} - \dot{V}') = x_{j+1} (\dot{L} - \dot{L}') + \dot{D} x_D + \dot{B} x_B}$$

Gesamtbilanz:

$$\dot{F} z_F = \dot{D} x_D + \dot{B} x_B$$

Definition:

$$q \dot{F} = \dot{L}' - \dot{L} \qquad (1-q) \dot{F} = \dot{V} - \dot{V}'$$

q: Anteil des flüssig gesättigten Feeds

$$y_j (1-q) \dot{F} = -q \dot{F} x_{j+1} + \dot{F} z_F$$

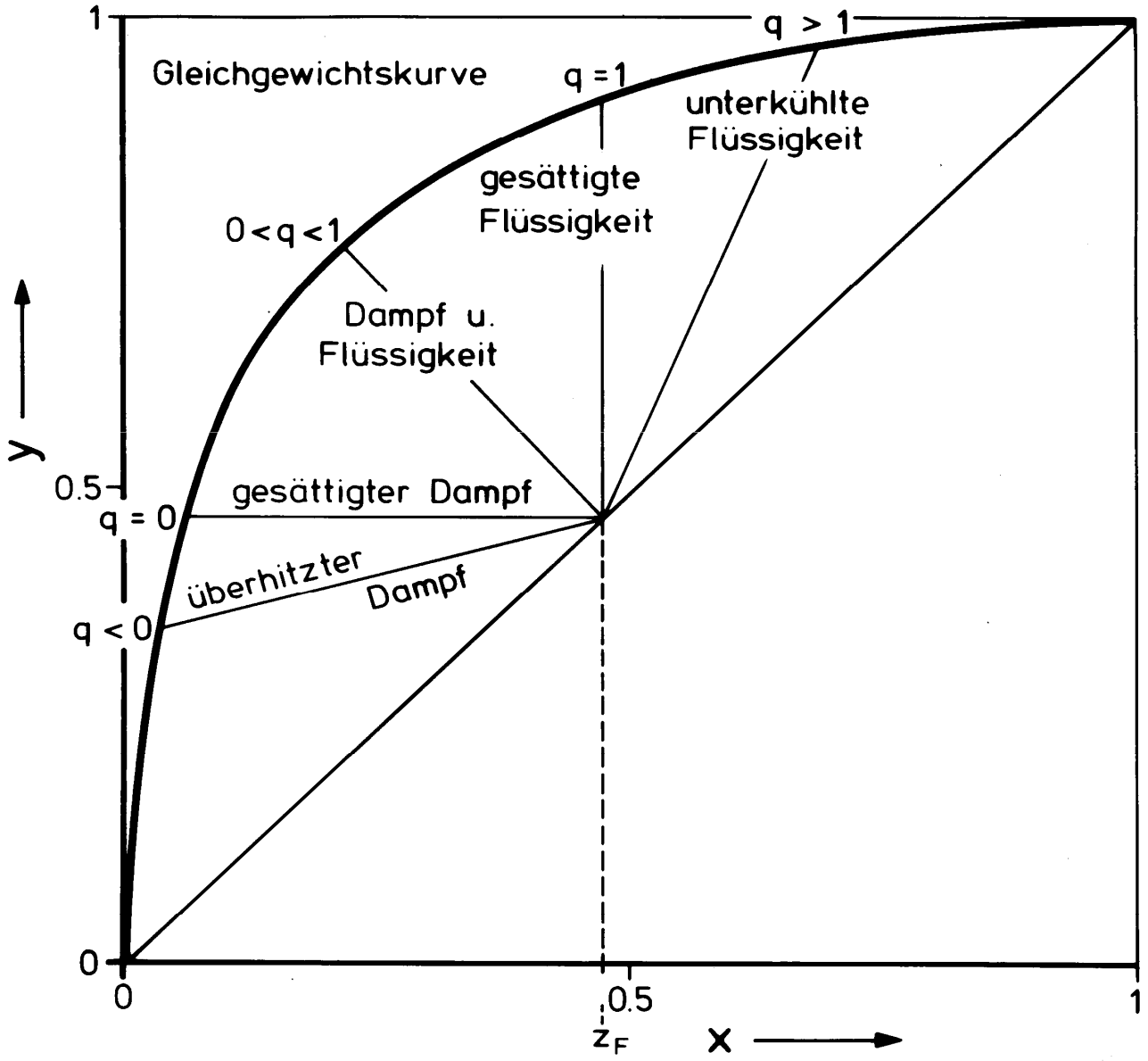
$$\mathbf{y_j = \frac{q}{q-1} x_{j+1} - \frac{z_F}{q-1}}$$

Schnittpunktsgerade: **für $x = z_F$** **$y = z_F$**

q = 1 Steigung = ∞

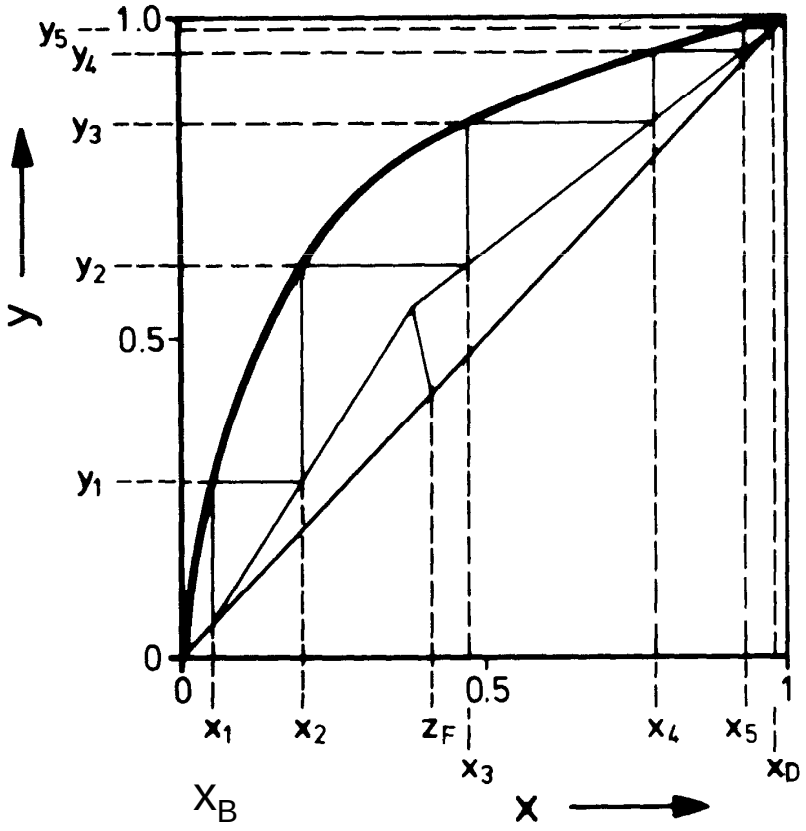
q = 0 Steigung = 0

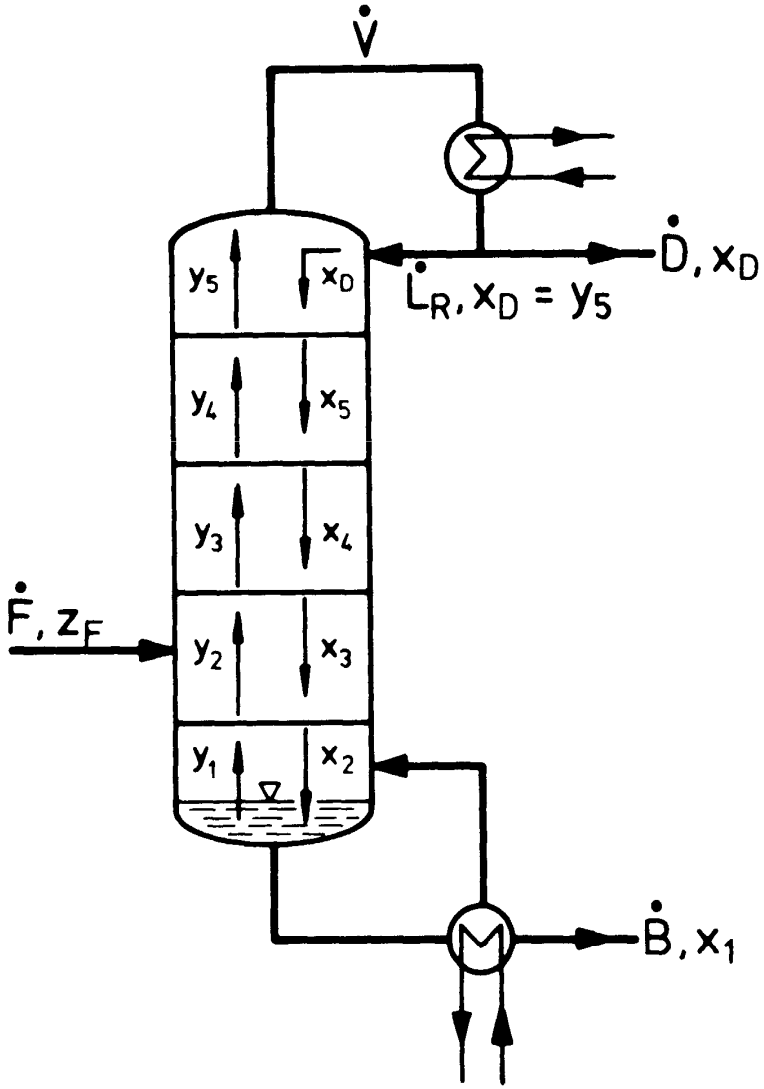
Schnittpunktslinie für verschiedene thermische Zustände



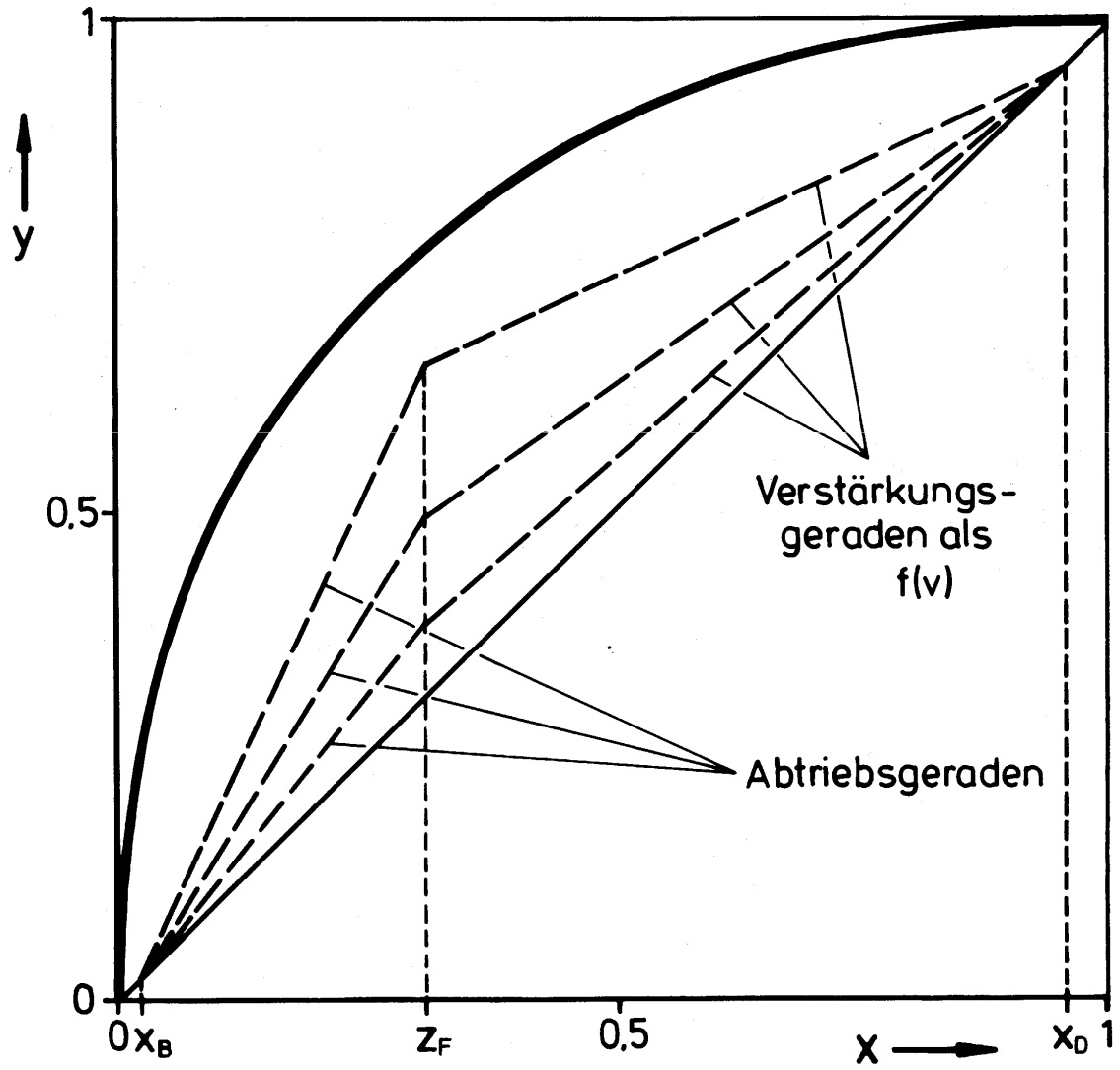
McCabe-Thiele-Verfahren

Bei Vorgabe von x_B, x_D, z_F, v und q alle Linien festgelegt



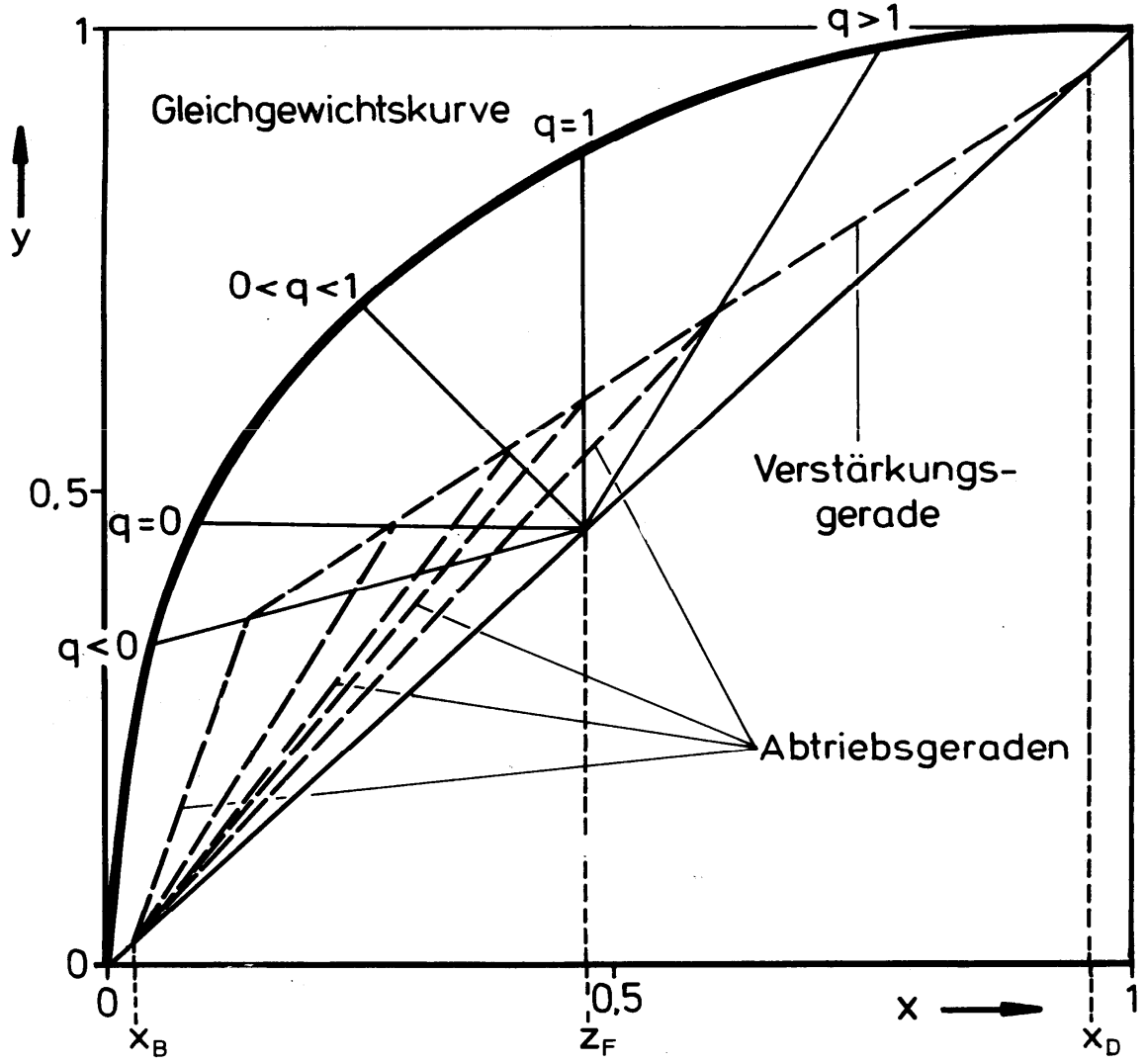


Arbeitsgeraden als Funktion des Rücklaufverhältnisses



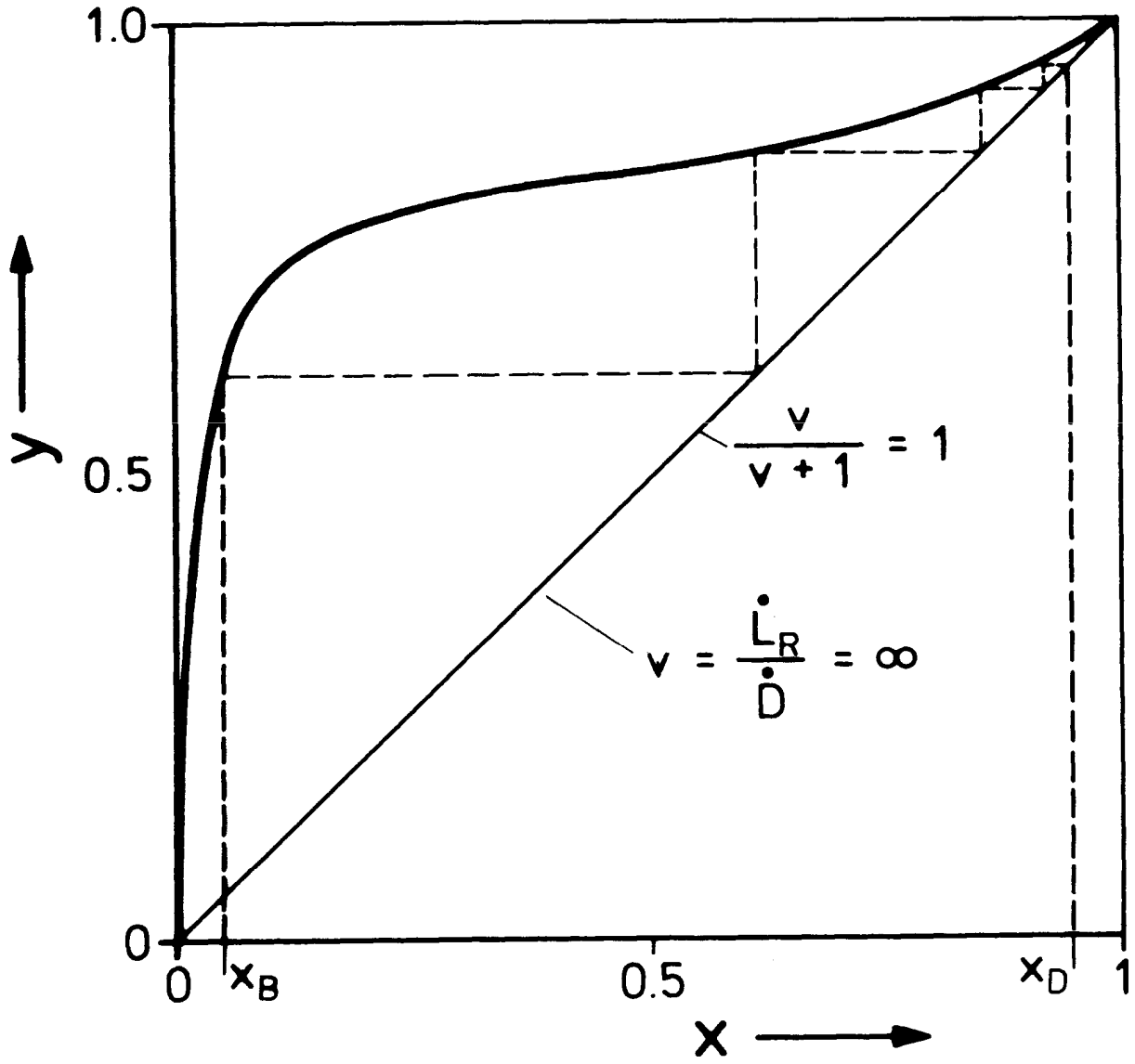
Anzahl der benötigten theoretischen Stufen wird von v und q beeinflusst

Arbeitsgeraden für unterschiedliche thermische Zustände des Zulaufs



Unterkühlung wie verstärktes Rücklaufverhältnis

Bestimmung der minimalen Bodenzahl



2 Grenzfälle denkbar:

$N_{min} \rightarrow v = \infty$

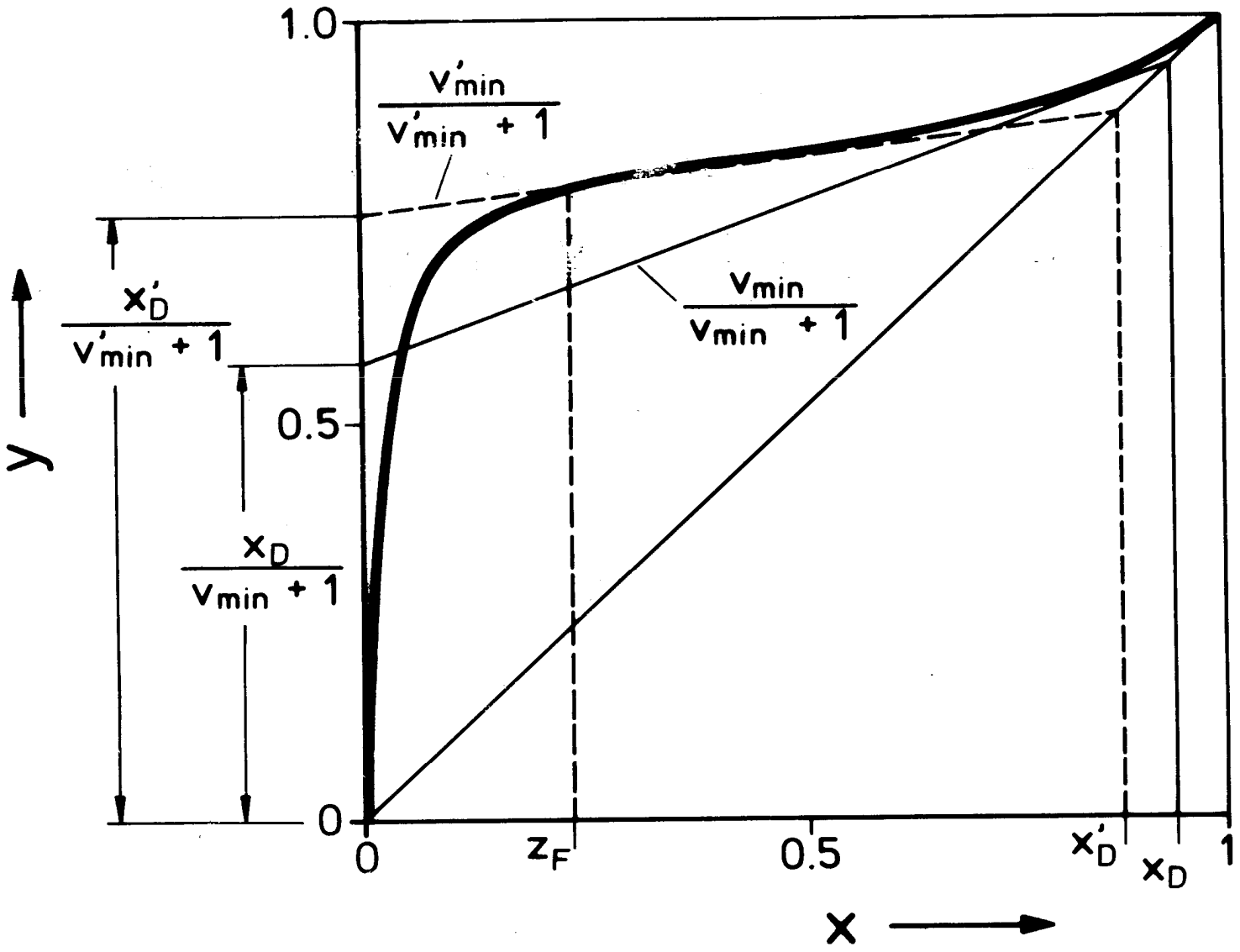
$V_{min} \rightarrow N_{th} = \infty$

v = ∞ *bedeutet* :

$\dot{D} = 0$

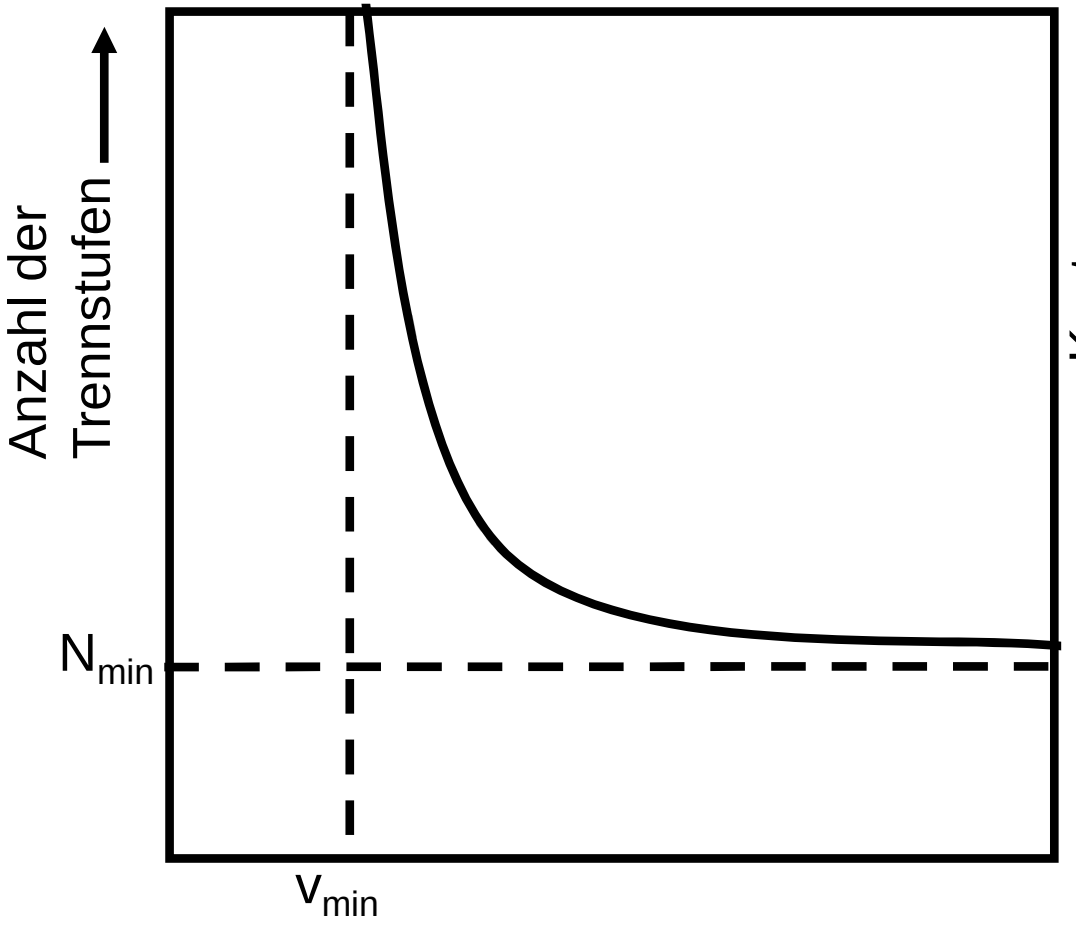
$\dot{B} = 0$

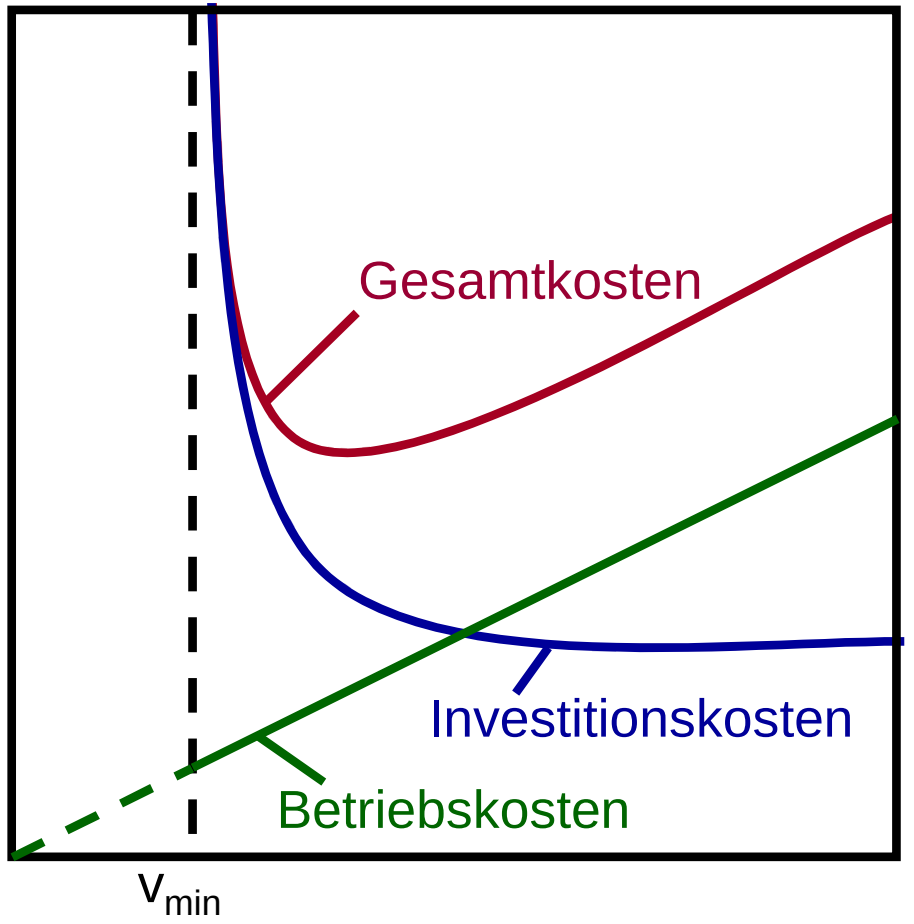
Bestimmung des minimalen Rücklaufverhältnisses



$$N_{th} \rightarrow \infty$$

Abhängigkeit der Stufenzahl und Kosten vom Rücklaufverhältnis



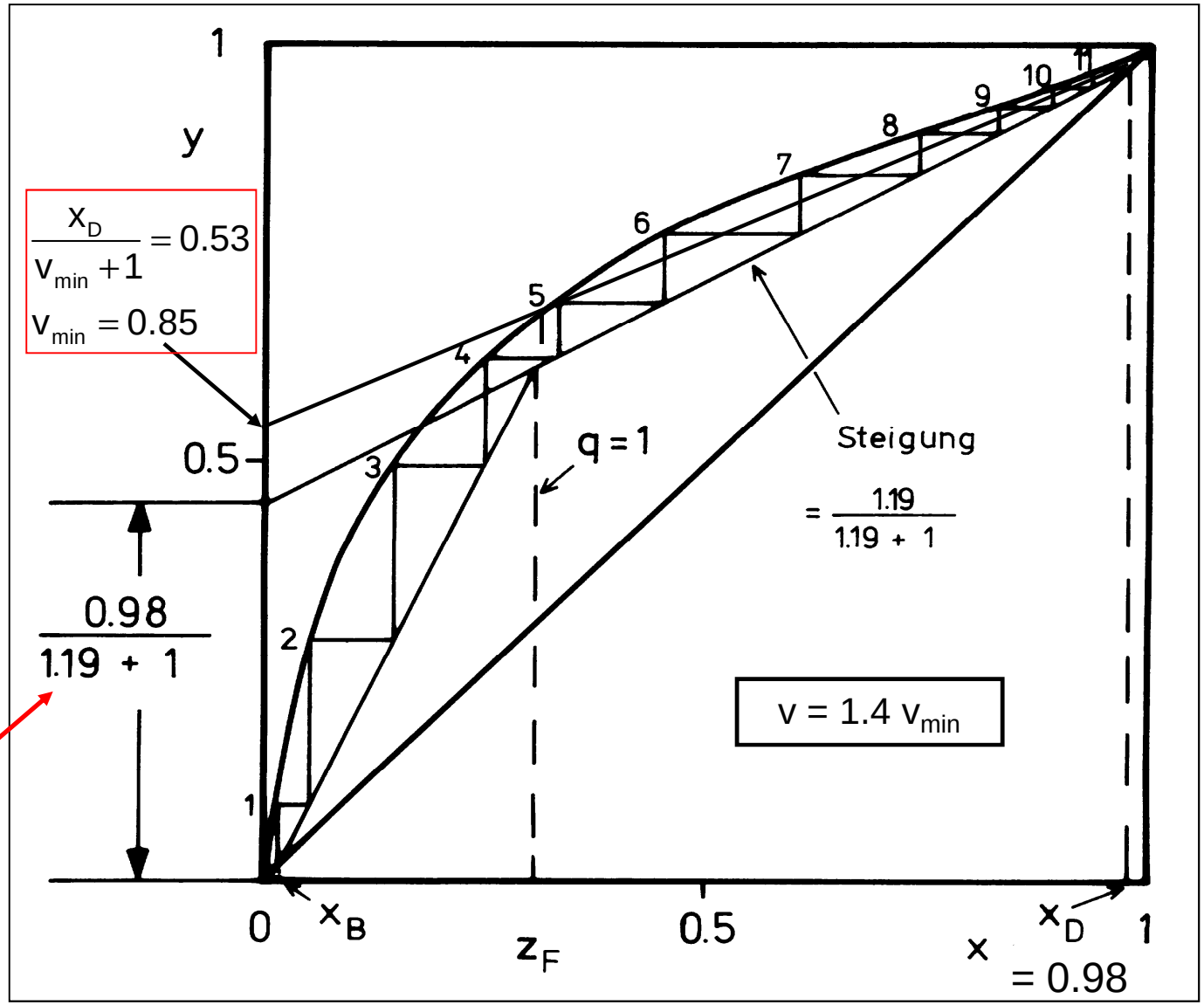


McCabe-Thiele-Verfahren für das System Methanol-Wasser

Auf dem 4. Boden sollte der Feed eingespeist werden.

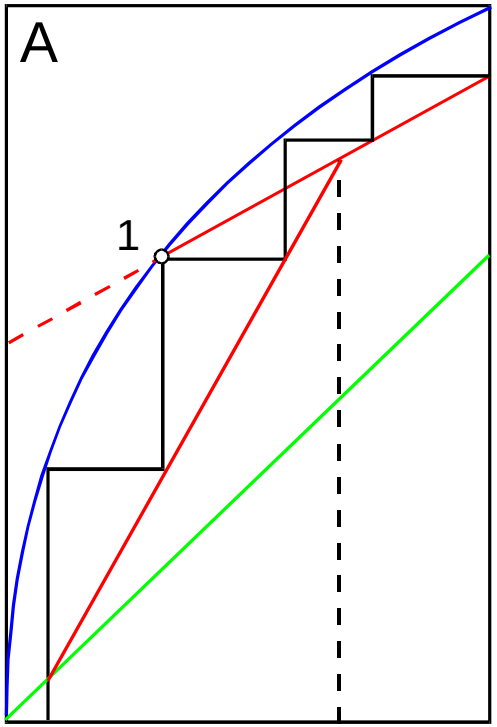
Was passiert wenn der Feed auf dem 8. Boden eingespeist wird?

$v = 1.4 v_{min}$

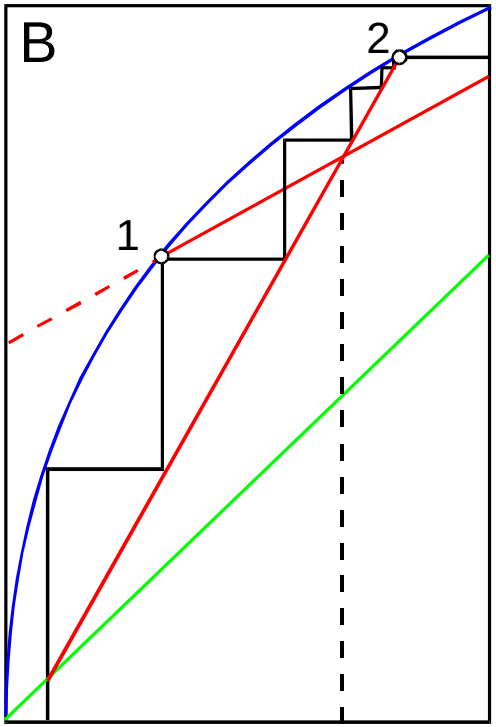


Wahl des optimalen Feedbodens wichtig!

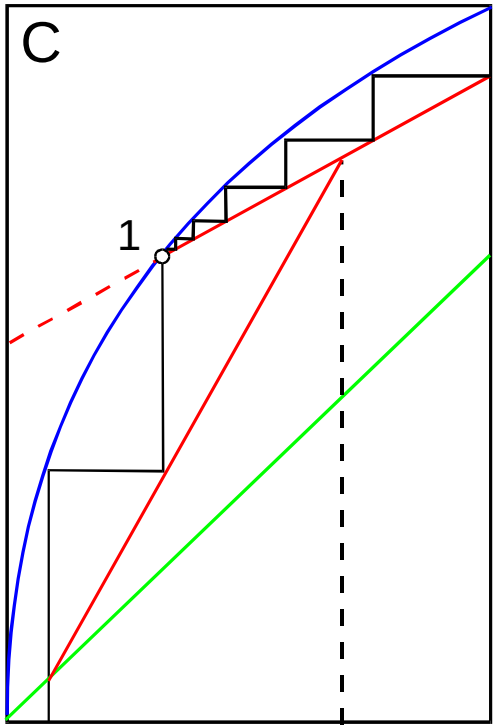
Gleichgewichtskurve
Diagonale im x-y-Diagramm
Arbeitsgeraden



optimale Wahl
des Feedbodens



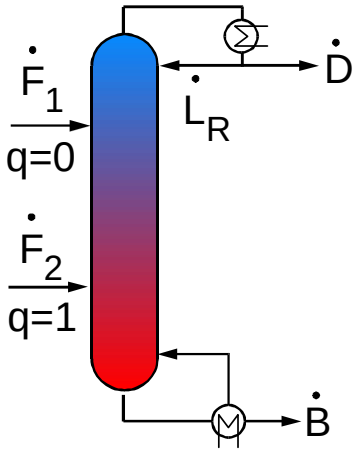
Wahl des Feedbodens
zu hoch

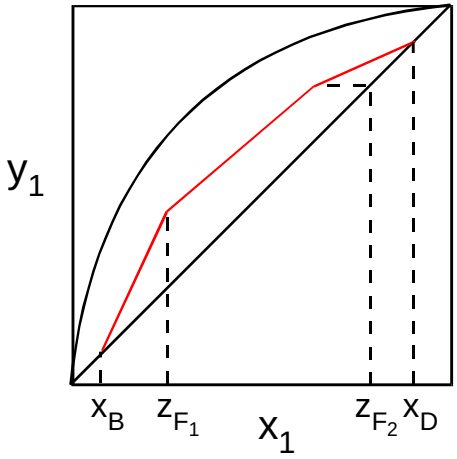


Wahl des Feedbodens
zu tief

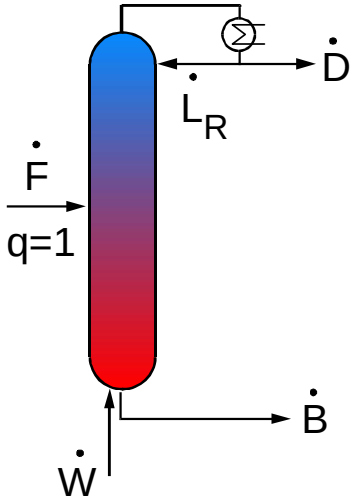
McCabe-Thiele-Verfahren für komplexere Trennaufgaben

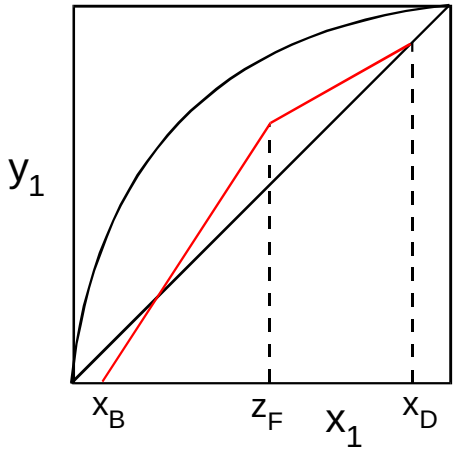
Mit zwei Zulaufströmen:



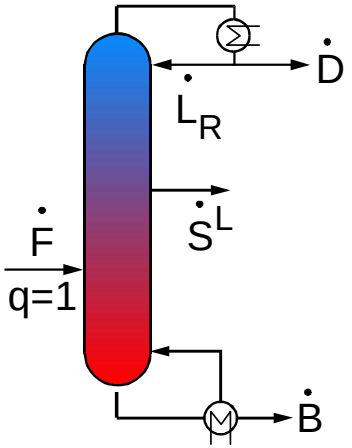


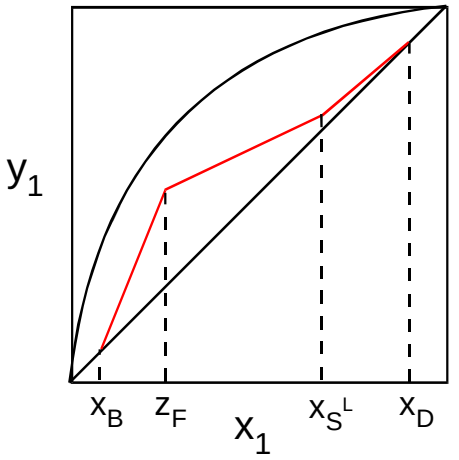
Mit direkter Heizung durch Wasserdampf:



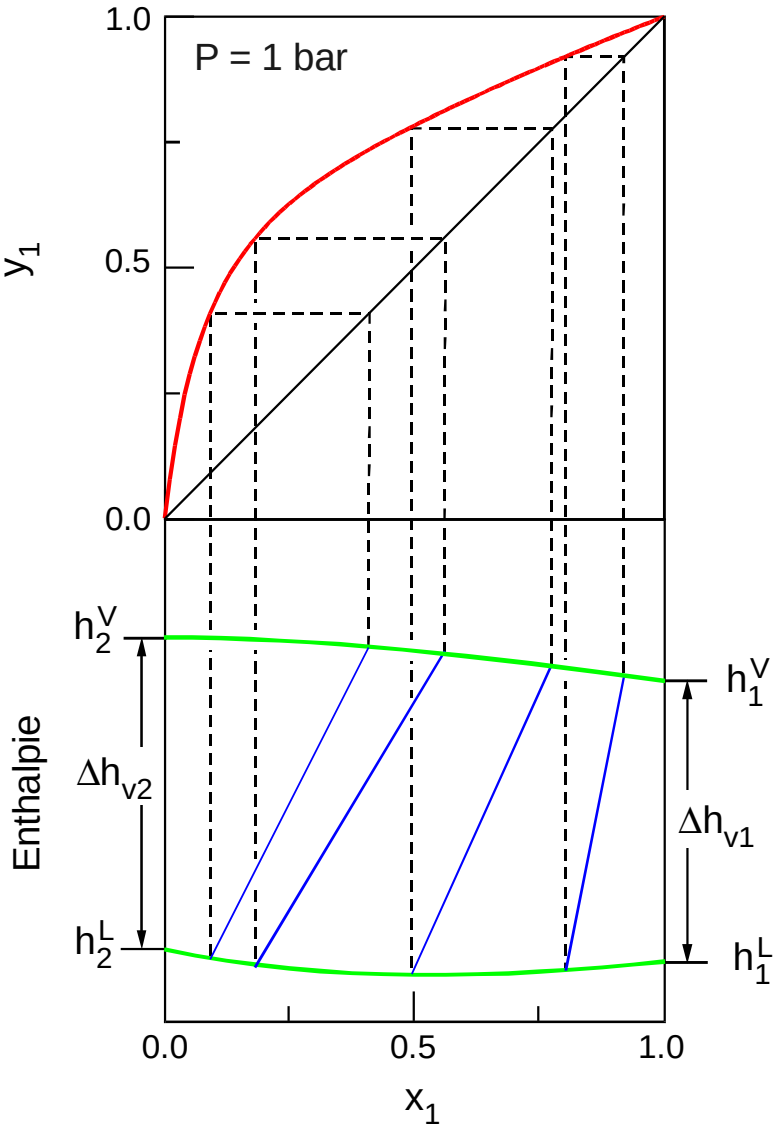


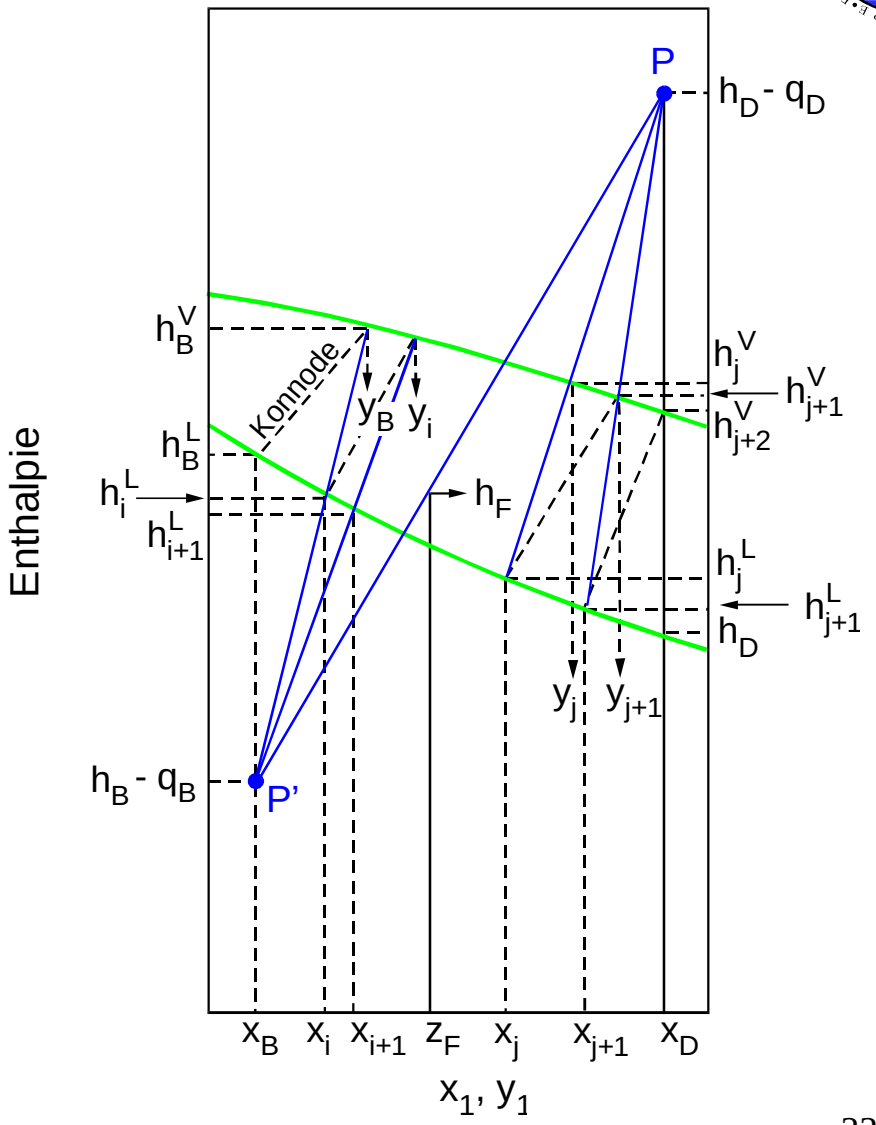
Mit flüssigem Seitenstrom:



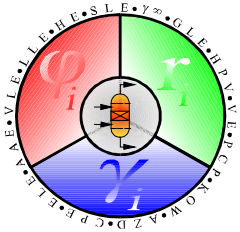


Ponchon-Savarit-Verfahren (Enthalpie-Konzentrations-Diagramm)





Fenske-Gleichung zur Ermittlung der minimalen Stufenzahl N_{min}



Annahme: $\alpha_{ij} =$ konstant $\qquad \alpha_{12} = \frac{y_1/x_1}{y_2/x_2} = \frac{y_1 x_2}{y_2 x_1} = \frac{\gamma_1 P_1^S}{\gamma_2 P_2^S}$

1. Stufe (Sumpf B): $\left(\frac{x_1}{x_2}\right)_2 = \left(\frac{y_1}{y_2}\right)_1 = \alpha_{12}\left(\frac{x_1}{x_2}\right)_1$

2. Stufe: $\left(\frac{x_1}{x_2}\right)_3 = \left(\frac{y_1}{y_2}\right)_2 = \alpha_{12}\left(\frac{x_1}{x_2}\right)_2 = \alpha_{12}^2\left(\frac{x_1}{x_2}\right)_1$

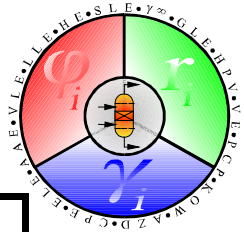
Für N_{min}Stufen gilt: $\left(\frac{x_1}{x_2}\right)_D = \alpha_{12}^{N_{min}}\left(\frac{x_1}{x_2}\right)_B$

Durch Umstellung erhält man die Fenske-Gleichung:

$$N_{min} = \frac{\log\left[\frac{(x_1/x_2)_D}{(x_1/x_2)_B}\right]}{\log\alpha_{12}}$$

$$N_{min} = \frac{\log\left(\frac{\dot{d}_1 \cdot \dot{b}_2}{\dot{b}_1 \cdot \dot{d}_2}\right)}{\log\alpha_{12}}$$

Trennfaktoren im Kopf und Sumpf der Kolonne für verschiedene Systeme



	Temperatur ℃	P_1^s kPa	P_2^s kPa	γ_1 $x_1 = 1$ $x_2 = 0$	γ_2 $x_1 = 0$ $x_2 = 1$	α_{12}^{∞}
Hexan(1)	68.74	101.3	38.75	1.000	0.999	2.617
Heptan(2						328
Benzol(1)						618
Toluol(2)						316
Methanol(						459
Wasser(2)	100.0	353.2	101.3	2,311	1.000	8.055
Aceton(1)	56.27	101.3	16.68	1.000	5.749	1.057
Wasser(2)	100.0	369.9	101.3	8.858	1.000	32.33

bei $\gamma_i > 1$

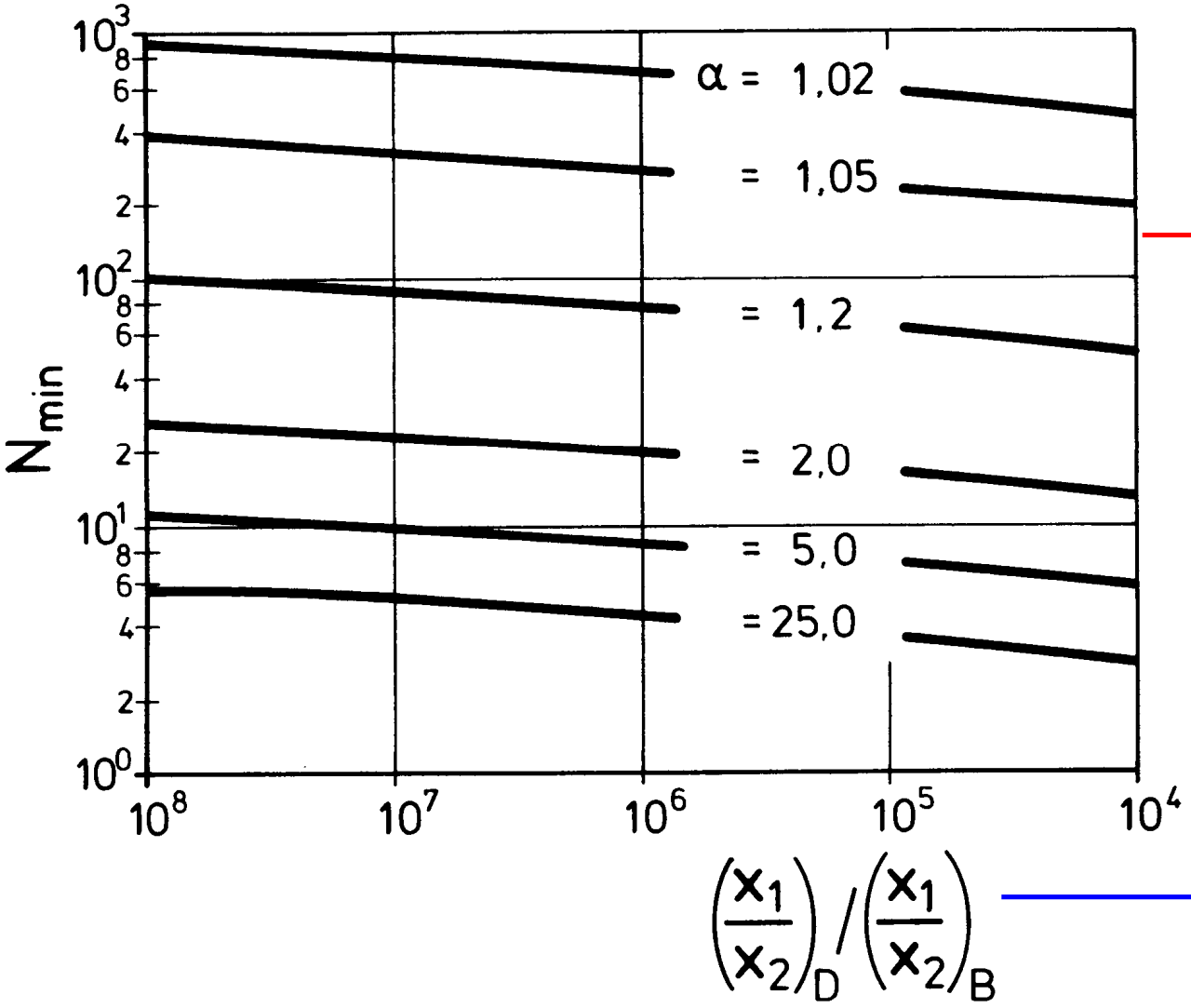
$(\alpha_{12})_D < (\alpha_{12})_B$

α_{12} in der Regel nicht konstant.

Deshalb Verwendung von $\bar{\alpha}_{12}$:

$$\bar{\alpha}_{12} = \sqrt{(\alpha_{12})_D (\alpha_{12})_B}$$

Anzahl theoretischer Stufenzahl als f(Trennfaktor, Produktreinheit)



normale Rektifikation
nicht mehr sinnvoll

$\alpha_{m/p\text{-Xylol}} = 1.02$

Propan-Propen-Splitter

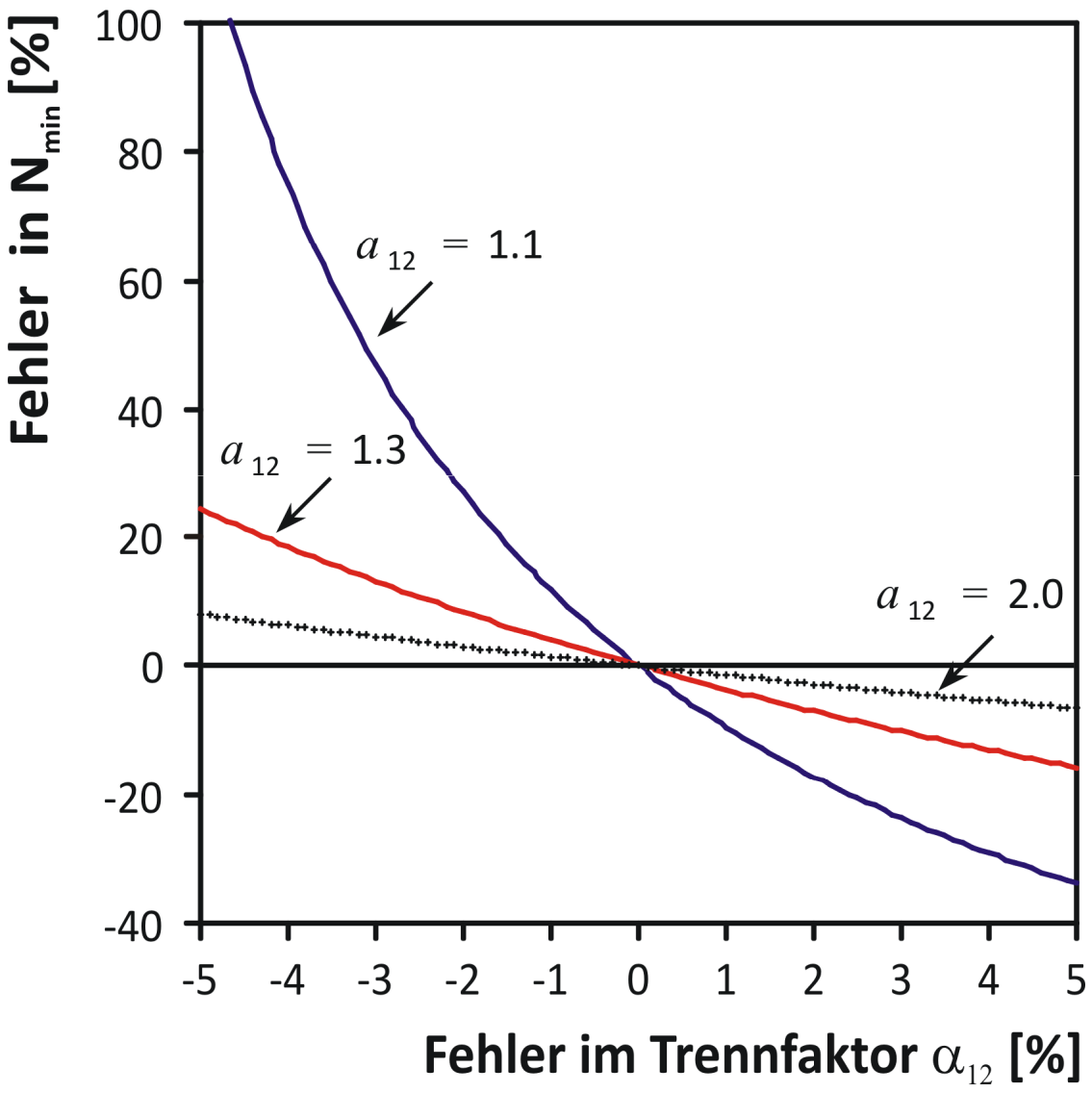
$\alpha \approx 1.22$ (1.15 .. 1.30)

ca. 10^4 bei 99 % Reinheit

ca. 10^8 bei 99.99 % Reinheit

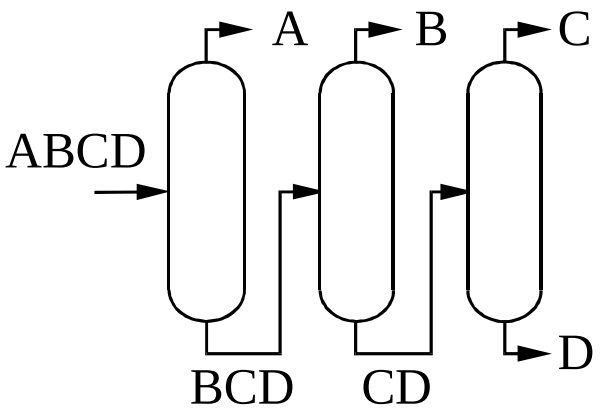
von Kopf- und Sumpfprodukt

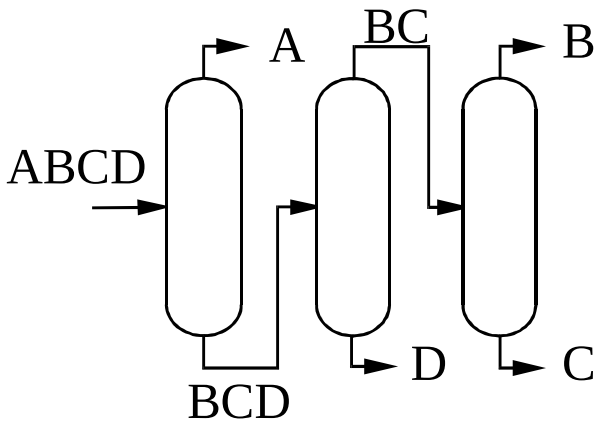
Einfluss des Fehlers im Trennfaktor auf die Anzahl minimaler Stufen

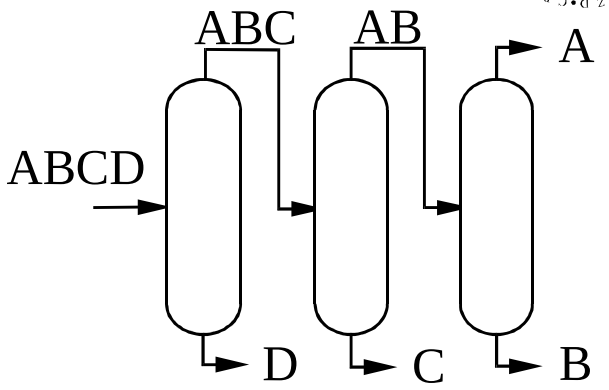


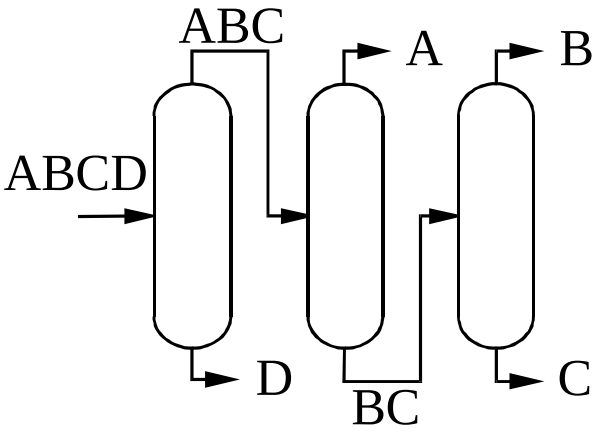
$$N_{min} = \frac{\log\left[\frac{(x_1/x_2)_D}{(x_1/x_2)_B}\right]}{\log \alpha_{12}}$$

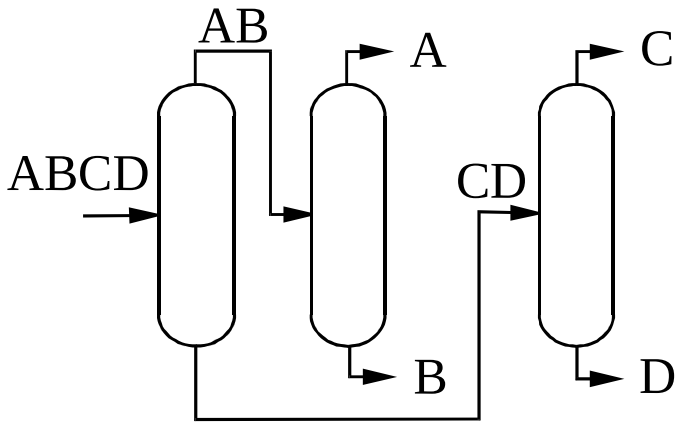
Mögliche Trennsequenzen und Auswahl der Schlüsselkomponenten für die Trennung von Pentan (A), Hexan (B), Heptan (C) und Octan (D)











Mittlere Werte für den Trennfaktor α_{ij} bei P = 1 bar:

$\alpha_{AC} = 6.52$

$\alpha_{BC} = 2.49$

$\alpha_{CC} = 1.00$

$\alpha_{DC} = 0.41$

Einführung einer leicht (1) und schwersiedenden Schlüsselkomponente (2) für das zu lösende Trennproblem

Berechnung der Konzentrationen aller anderen Komponenten mit der Fenske-Gleichung

$$N_{min} = \frac{\log \frac{\dot{d}_1 \cdot \dot{b}_2}{\dot{b}_1 \cdot \dot{d}_2}}{\log \bar{\alpha}_{12}}$$

$\dot{d}_i$ Destillatmenge der Komponente i (kmol/h)

$\dot{b}_i$ Sumpfmenge der Komponente i (kmol/h)

$$\bar{\alpha}_{12} = \sqrt{(\alpha_{12})_B (\alpha_{12})_D}$$

2 schwerer flüchtige Schlüsselkomponente

$$N_{min} = \frac{\log \frac{\dot{d}_i \cdot \dot{b}_2}{\dot{b}_i \cdot \dot{d}_2}}{\log \bar{\alpha}_{i2}}$$

$$\left(\frac{\dot{d}_i}{\dot{b}_i}\right) = \left(\frac{\dot{d}_2}{\dot{b}_2}\right) \bar{\alpha}_{i2}^{N_{min}}$$

durch Substitution $\dot{d}_i = \dot{f}_i - \dot{b}_i$ $\dot{f}_i$ Feed-Menge der Komponente i (kmol/h)

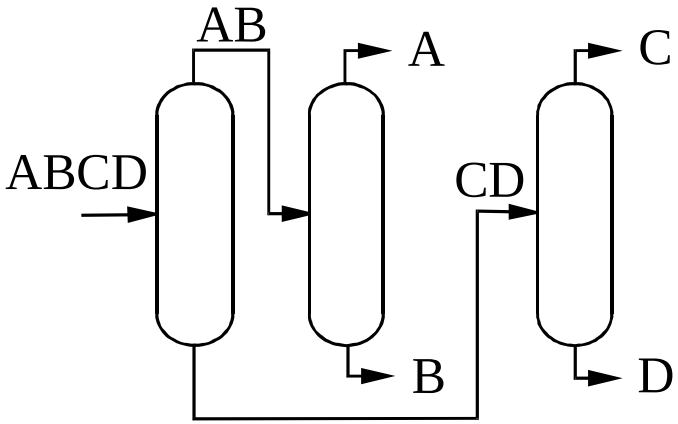
erhält man für $\dot{b}_i$:

$$\dot{b}_i = \frac{\dot{f}_i}{1 + \left(\frac{\dot{d}_2}{\dot{b}_2}\right) \bar{\alpha}_{i2}^{N_{min}}}$$

$$\dot{d}_i = \frac{\dot{f}_i \left(\frac{\dot{d}_2}{\dot{b}_2}\right) \bar{\alpha}_{i2}^{N_{min}}}{1 + \left(\frac{\dot{d}_2}{\dot{b}_2}\right) \bar{\alpha}_{i2}^{N_{min}}}$$

und für die Molmenge der Komponente i im Destillat

Bestimmung von N_{min} für die Trennung von Hexan (B) von Heptan (C) des quaternären Systems



$$\dot{F} = 100\,\text{kmol/h}$$

$z_{F,A} = 0.16 \quad \alpha_{AC} = 6.52$

$z_{F,B} = 0.44 \quad \alpha_{BC} = 2.49$

$z_{F,C} = 0.30 \quad \alpha_{CC} = 1.00$

$z_{F,D} = 0.10 \quad \alpha_{DC} = 0.41$

Destillat der 1. Kolonne soll 98 % des Hexans und 3 % des Heptans enthalten, d.h.:

$$\dot{d}_B = 44 \cdot 0.98 = 43.12\,\text{kmol/h}$$

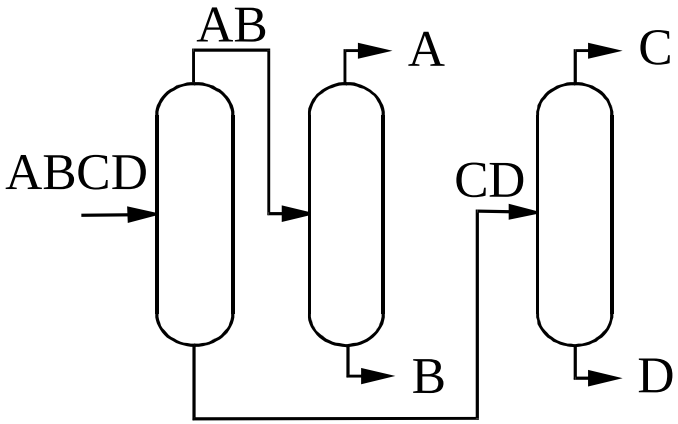
$$\dot{b}_B = \dot{f}_B - \dot{d}_B = 44 - 43.12 = 0.88\,\text{kmol/h}$$

$$\dot{d}_C = 30 \cdot 0.03 = 0.9\,\text{kmol/h}$$

$$\dot{b}_C = \dot{f}_C - \dot{d}_C = 30 - 0.90 = 29.1\,\text{kmol/h}$$

$$N_{min} = \frac{\log\left(\frac{43.12 \cdot 29.1}{0.88 \cdot 0.9}\right)}{\log 2.49} = 8.08$$

Ermittlung der Konzentrationen im Sumpf und Kopf der Kolonne bei der Trennung des quaternären Systems



$$\dot{F} = 100\,\text{kmol/h}$$

$z_{F,A} = 0.16 \quad \alpha_{AC} = 6.52$

$z_{F,B} = 0.44 \quad \alpha_{BC} = 2.49$

$z_{F,C} = 0.30 \quad \alpha_{CC} = 1.00$

$z_{F,D} = 0.10 \quad \alpha_{DC} = 0.41$

$$\dot{b}_A = \frac{16}{1+\left(\frac{0.9}{29.1}\right)6.52^{8.08}} = 1.36 \cdot 10^{-4}\,\text{kmol/h}$$

$$\dot{d}_A = 15.9999\ \text{kmol/h}$$

$$\dot{b}_D = \frac{10}{1+\left(\frac{0.9}{29.1}\right)0.41^{8.08}} = 9.9998\,\text{kmol/h}$$

$$\dot{d}_D = 2.17 \cdot 10^{-4}\,\text{kmol/h}$$

	n_D	n_B	x_D	x_B
A	**15.9999**	**$1.36\ 10^{-4}$**	**0.2666**	**$3.4\ 10^{-6}$**
B	**43.12**	**0.88**	**0.7184**	**0.0220**
C	**0.9**	**29.1**	**0.0150**	**0.7279**
D	**$2.17\ 10^{-4}$**	**9.9998**	**$3.6\ 10^{-6}$**	**0.2501**

Underwood-Beziehungen zur Ermittlung des minimalen Rücklaufverhältnisses

$$1 - \mathbf{q} = \sum \frac{\alpha_{i2} \mathbf{z}_{iF}}{\alpha_{i2} - \Theta}$$

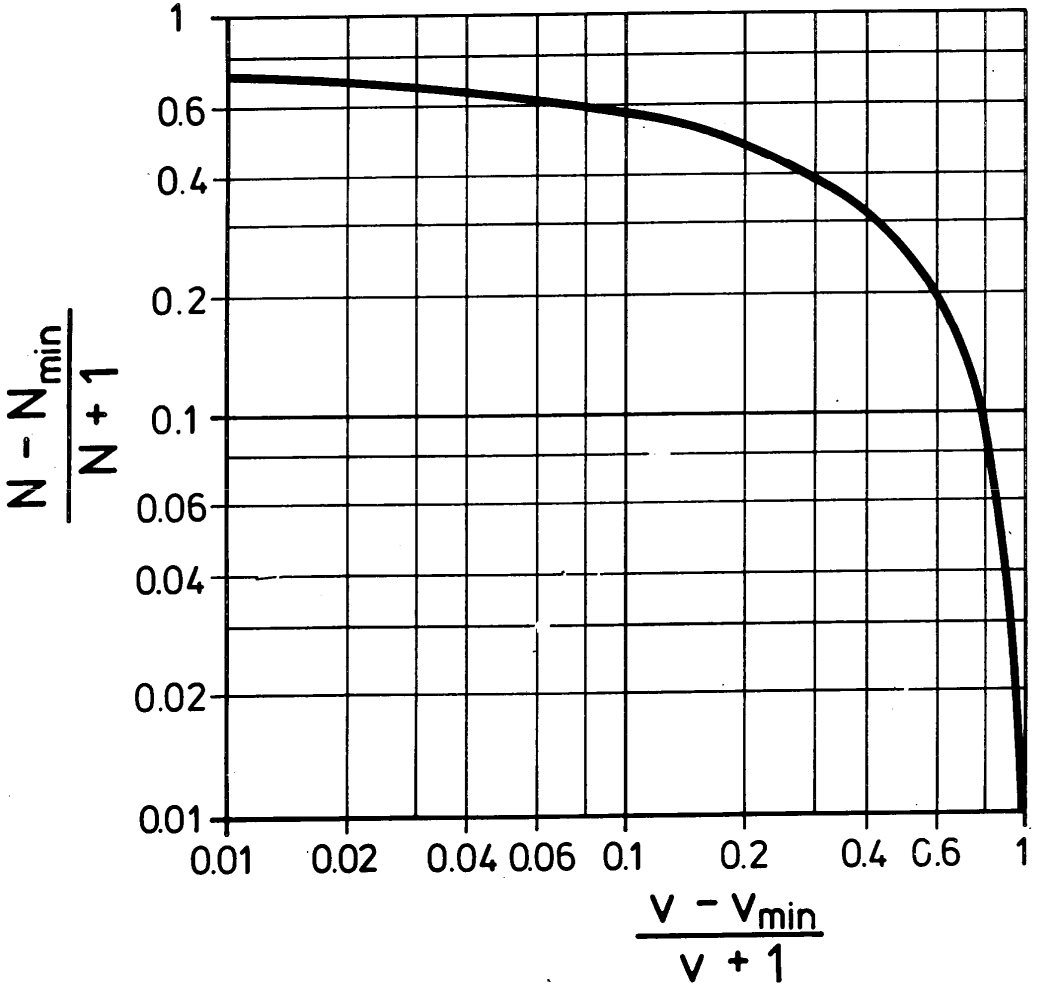
$$\mathbf{v}_{min} + 1 = \sum \frac{\alpha_{i2} \mathbf{x}_{iD}}{\alpha_{i2} - \Theta}$$

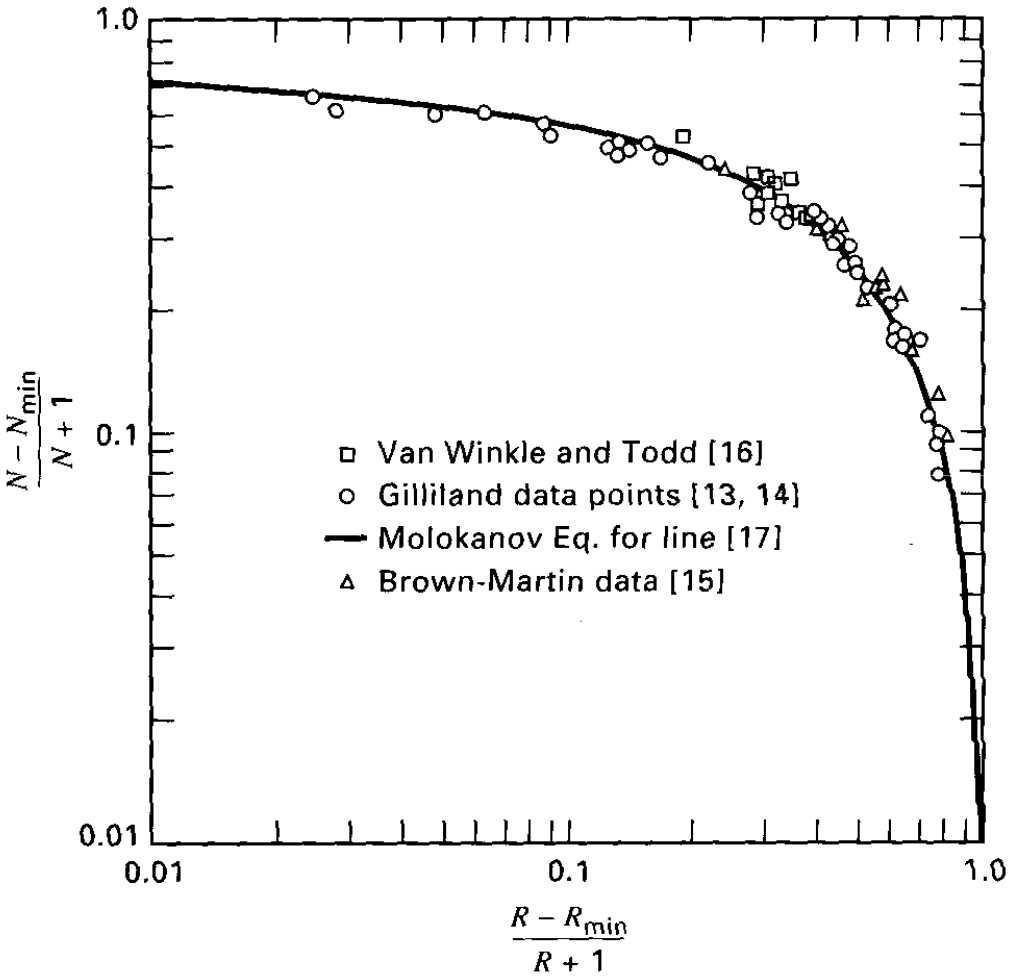
Θ Underwood-Faktor ($1 < \Theta < \alpha_{12}$)

q thermischer Zustand des Feeds

x_{iD} Molanteil der Komponente i im Kopf der Kolonne bei unendlichem Rücklauf (berechenbar mit Fenske-Gleichung)

Gilliland-Diagramm





Gleichung von Molokanov:

$$\frac{N-N_{min}}{N+1} = 1 - \exp\left[\left(\frac{1+54.4X}{11+117.2X}\right)\left(\frac{X-1}{X^{0.5}}\right)\right]$$

$$X = \frac{V-V_{min}}{V+1}$$

Short-cut-Methoden (Zusammenfassung)

Annahme: $\alpha_{i,j}$ = konstant

1) Fenske

$$N_{min} = \frac{\log\left(\frac{\dot{d}_1 \cdot \dot{b}_2}{\dot{b}_1 \cdot \dot{d}_2}\right)}{\log \alpha_{1,2}}$$

$$\dot{b}_i = \frac{\dot{f}_i}{1 + \left(\frac{\dot{d}_2}{\dot{b}_2}\right)\alpha_{1,2}^{N_{min}}}$$

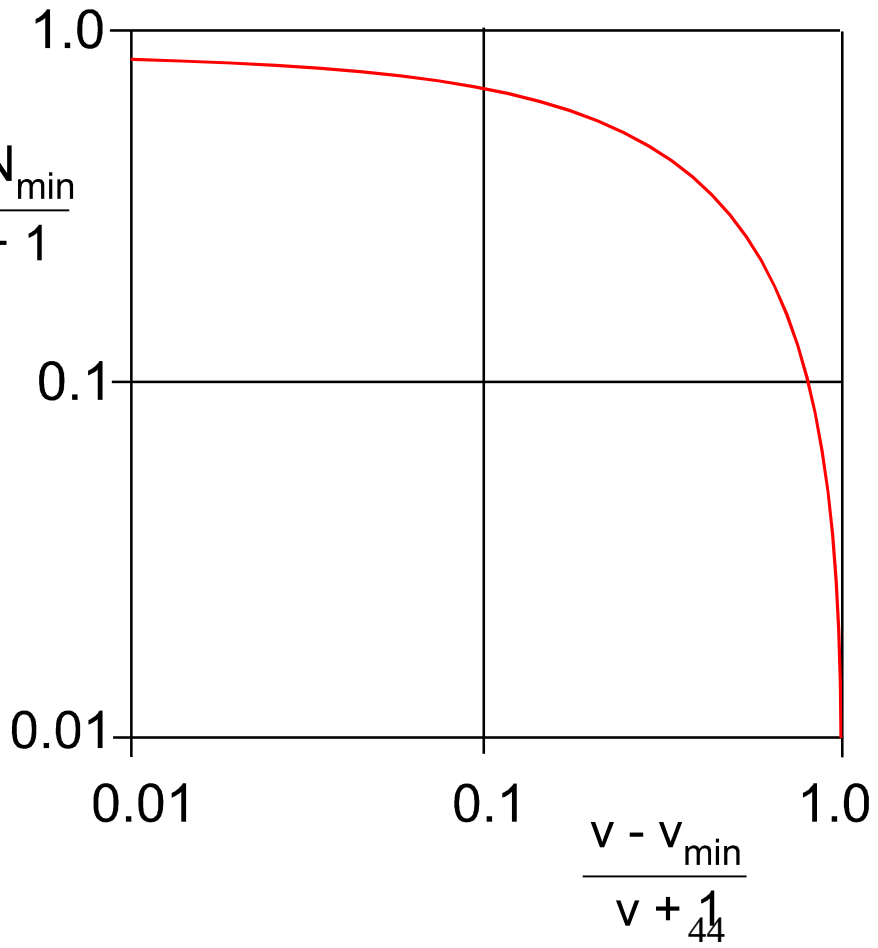
2) Underwood

$$1 - q = \sum \frac{\alpha_{i,2} z_{i,F}}{\alpha_{i,2} - \theta}$$

$$v_{min} + 1 = \sum \frac{\alpha_{i,2} x_{i,D}}{\alpha_{i,2} - \theta}$$

$$1 < \theta < \alpha_{1,2}$$

3) Gilliland



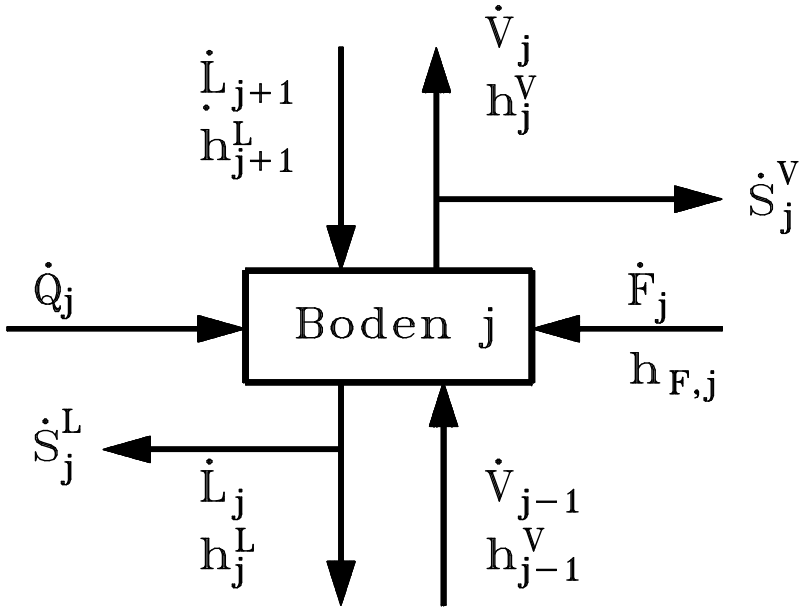
Material- und Enthalpiebilanzen (MESH-Gleichungen) für eine Gleichgewichtsstufe

$$M_{i,j} = \dot{L}_{j+1} x_{i,j+1} + \dot{V}_{j-1} y_{i,j-1} + \dot{F}_j z_{i,j} - (\dot{L}_j + \dot{S}_j^{\,L}) x_{i,j} - (\dot{V}_j + \dot{S}_j^{\,V}) y_{i,j} = 0$$

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j} x_{i,j} = 0 \qquad \left(K_{i,j} = \frac{y_{i,j}}{x_{i,j}} \right)$$

$$S_{x,j} = \sum x_{i,j} - 1.0 = 0$$

$$S_{y,j} = \sum y_{i,j} - 1.0 = 0$$



$$H_j = \dot{L}_{j+1} h_{j+1}^{\,L} + \dot{V}_{j-1} h^V_{j-1} + \dot{F}_j h_{F,j} - (\dot{L}_j + \dot{S}_j^{\,L}) h_j^{\,L} - (\dot{V}_j + \dot{S}_j^{\,V}) h_j^{\,V} + \dot{Q}_j = 0$$

N(2n+3) Gleichungen und Unbekannte

Für n = 4 Komponenten und N = 45 Böden ergeben sich 495 Gleichungen

Wang-Henke-Verfahren

Mengenbilanz für Komponente i:

$$M_{i,j} = \dot{L}_{j+1}\, x_{j+1} + \dot{V}_{j-1}\, y_{j-1} + \dot{F}_j\, z_j - (\dot{L}_j + \dot{S}_j^{L})x_j - (\dot{V}_j + \dot{S}_j^{V})y_j = 0$$

Durch Substitution erhält man:

$$y_j = K_j\, x_j$$

$$M_{i,j} = \dot{L}_{j+1}\, x_{j+1} + \dot{V}_{j-1}\, K_{j-1} x_{j-1} + \dot{F}_j\, z_j - (\dot{L}_j + \dot{S}_j^{L})x_j - (\dot{V}_j + \dot{S}_j^{V})K_j x_j = 0$$

Nach Umstellung:

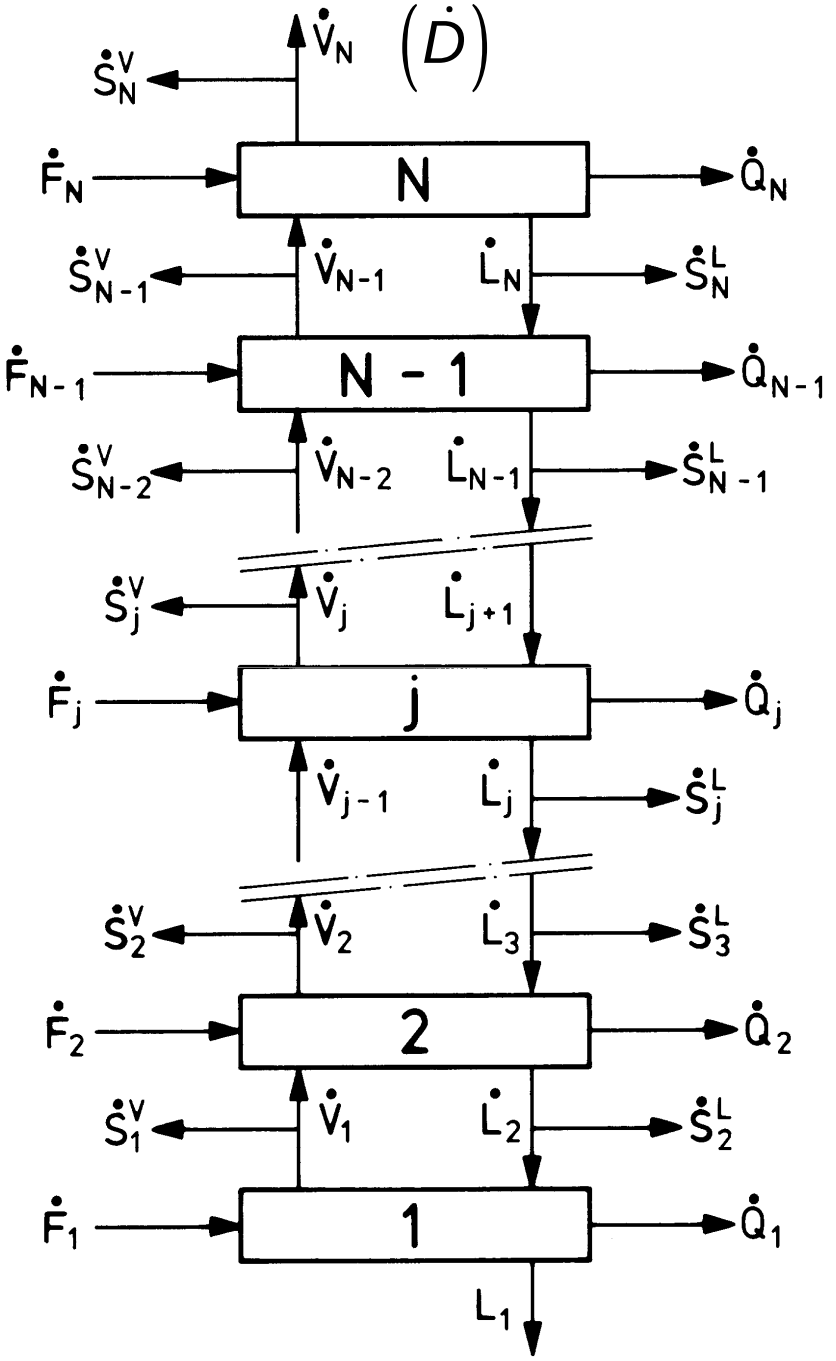
$$M_{i,j} = \dot{V}_{j-1}\, K_{j-1} x_{j-1} - (\dot{L}_j + \dot{S}_j^{L})x_j - (\dot{V}_j + \dot{S}_j^{V})K_j x_j + \dot{L}_{j+1}\, x_{j+1} = -\dot{F}_j\, z_j$$

ergibt sich eine sehr einfache Struktur:

$$\boxed{A_j x_{j-1} + B_j x_j + C_j x_{j+1} = D_j}$$

Kolonnenkonfiguration

$$\dot{L}_j = \dot{V}_{j-1} + \sum_{j}^{N}\left(\dot{F}_m - \dot{S}_m^L - \dot{S}_m^V\right) - \dot{V}_N$$



Wang- Henke-Verfahren

$$B_j = -\left[\dot{V}_{j-1} + \sum_{j}^{N} \left(\dot{F}_m - \dot{S}_m^{L} - \dot{S}_m^{V} \right) - \dot{V}_N + \dot{S}_j^{L} + \left(\dot{V}_j + \dot{S}_j^{V} \right) K_j \right]$$

$$A_j = \dot{V}_{j-1} K_{j-1}$$

$$\mathbf{A_j x_{j-1} + B_j x_j + C_j x_{j+1} = D_j}$$

$$C_j = \dot{V}_j + \sum_{j+1}^{N} \left(\dot{F}_m - \dot{S}_m^{L} - \dot{S}_m^{V} \right) - \dot{V}_N$$

$$D_j = -\dot{F}_j z_j$$

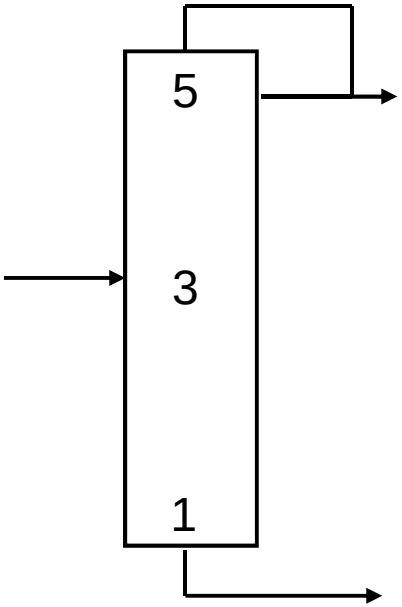
Wang- Henke-Verfahren

$$A_j = \dot{V}_{j-1} K_{j-1} \qquad B_j = -\left[\dot{V}_{j-1} + \sum_j^N \left(\dot{F}_m - \dot{S}_m^L - \dot{S}_m^V\right) - \dot{V}_N + \dot{S}_j^L + \left(\dot{V}_j + \dot{S}_j^V\right) K_j\right]$$

$$C_j = \dot{V}_j + \sum_{j+1}^N \left(\dot{F}_m - \dot{S}_m^L - \dot{S}_m^V\right) - \dot{V}_N \qquad D_j = -\dot{F}_j z_j$$

Beispiel: $\dot{F}_3$ = 10 kmol/h Methanol(1) – Wasser(2), q = 1, z_{1F} = 0.5, v = 1, **$\dot{D}=\dot{V}_N$=5kmol/h**

$\rightarrow$ **$\dot{V}$=10 kmol/h**



Für den 3. Boden (d.h. A_3, B_3, C_3, D_3) ergeben sich für Methanol (1):

Schätzwerte von $K_{1,3}$ = 1.57, $K_{1,2}$ = 1.83

(siehe Beispiel Mc-Cabe-Thiele-Verfahren):

$A_{1,3} = 10 \cdot 1.83 = 18.3$

$B_{1,3} = -(10 + 10 - 5 + 10 \cdot 1.57) = -30.7$

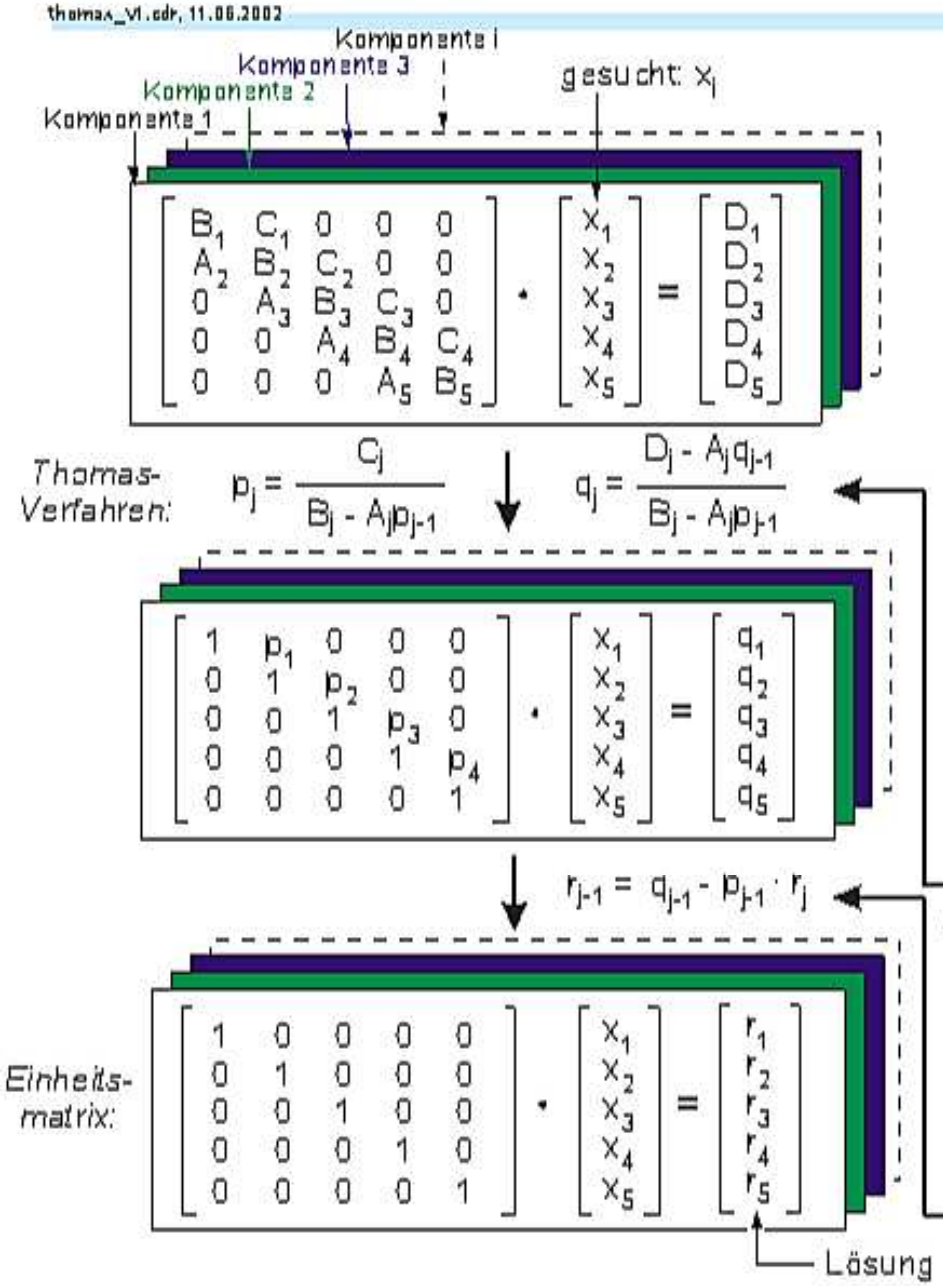
$C_{1,3} = 10 - 5 = 5$

$D_{1,3} = -10 \cdot 0.5 = -5$

Wang- Henke-Verfahren

$$\begin{bmatrix} -27.2 & 15 & 0 & 0 & 0 \\ 22.2 & -33.3 & 15 & 0 & 0 \\ 0 & 18.3 & -30.7 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 15.7 & -18.9 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 13.9 & -11.3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -5 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Thomas-Algorithmus zur Lösung der Materialbilanz des Wang-Henke-Verfahrens



1. Boden: $B_1 x_1 + C_1 x_2 = D_1$

nach Umstellung $x_1 + (C_1 / B_1)\, x_2 = (D_1 / B_1)$

mit $p_1 = C_1 / B_1$ und $q_1 = D_1 / B_1$

$\longrightarrow \quad x_1 + p_1 x_2 = q_1$

2. Boden: $A_2 x_1 + B_2 x_2 + C_2 x_3 = D_2$

nach Substitution $x_1 = q_1 - p_1 x_2$

$\longrightarrow \quad A_2(q_1 - p_1 x_2) + B_2 x_2 + C_2 x_3 = D_2$

$(B_2 - A_2 p_1)\, x_2 + C_2 x_3 = D_2 - A_2 q_1$

$x_2 + (C_2 / (B_2 - A_2 p_1))\, x_3 = (D_2 - A_2 q_1) / (B_2 - A_2 p_1)$

mit $p_2 = C_2 / (B_2 - A_2 p_1)$

$q_2 = (D_2 - A_2 q_1) / (B_2 - A_2 p_1)$

$\longrightarrow \quad x_2 + p_2 x_3 = q_2$

allgemein gilt für den Boden j

Boden N(5): $x_N = q_N$

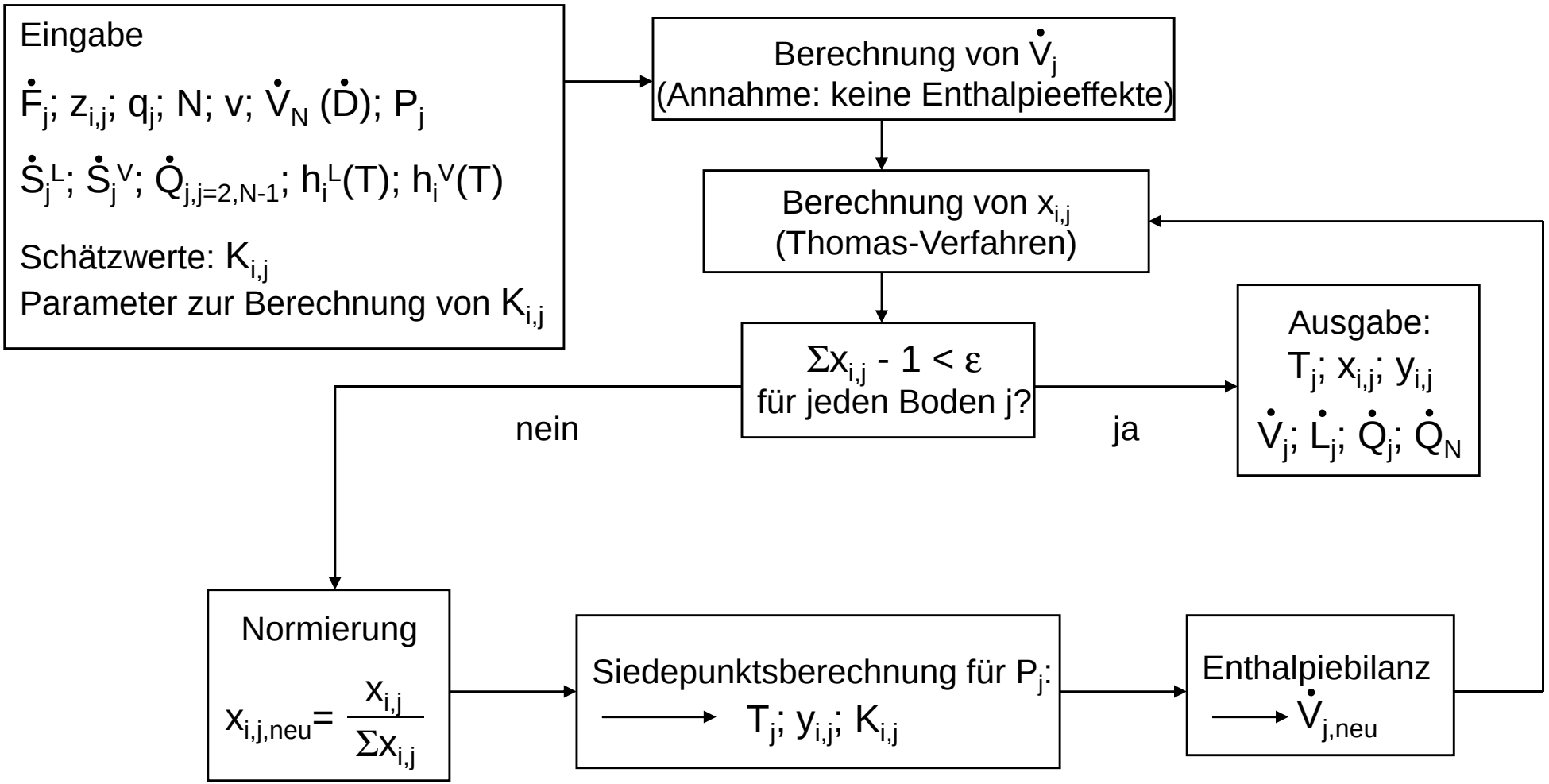
mit r_j $r_N = x_N = q_N$

Boden j-1: $x_{j-1} + p_{j-1} x_j = q_{j-1}$

mit $r_j = x_j$

$$r_{j-1} = x_{j-1} = q_{j-1} - p_{j-1} r_j$$

Flussdiagramm Wang-Henke-Verfahren



Naphtali-Sandholm-Verfahren

$$M_{i,j} = \dot{l}_{i,j+1} + \dot{v}_{i,j-1} + \dot{f}_{i,j} - \left(1 + s_j^L\right)\dot{l}_{i,j} - \left(1 + s_j^V\right)\dot{v}_{i,j} = 0$$

$$E_{i,j} = K_{i,j}\,\dot{l}_{i,j}\,\frac{\sum_{k=1}^{n}\dot{v}_{k,j}}{\sum_{k=1}^{n}\dot{l}_{k,j}} - \dot{v}_{i,j} = 0$$

$$H_j = h_{j+1}^L \sum_{i=1}^{n}\dot{l}_{i,j+1} + h_{j-1}^V \sum_{i=1}^{n}\dot{v}_{i,j} + h_{F,j}\sum_{i=1}^{n}\dot{f}_{i,j} - h_j^L\left(1 + s_j^L\right)\sum_{i=1}^{n}\dot{l}_{i,j} - h_j^V\left(1 + s_j^V\right)\sum_{i=1}^{n}\dot{v}_{i,j} + \dot{Q}_j = 0$$

$$\dot{V}_j = \sum_{i=1}^{n}\dot{v}_{i,j} \qquad \dot{L}_j = \sum_{i=1}^{n}\dot{l}_{i,j} \qquad \dot{F}_j = \sum_{i=1}^{n}\dot{f}_{i,j} \qquad s_j^V = \frac{\dot{S}_j^V}{\dot{V}_j} \qquad s_j^L = \frac{\dot{S}_j^L}{\dot{L}_j}$$

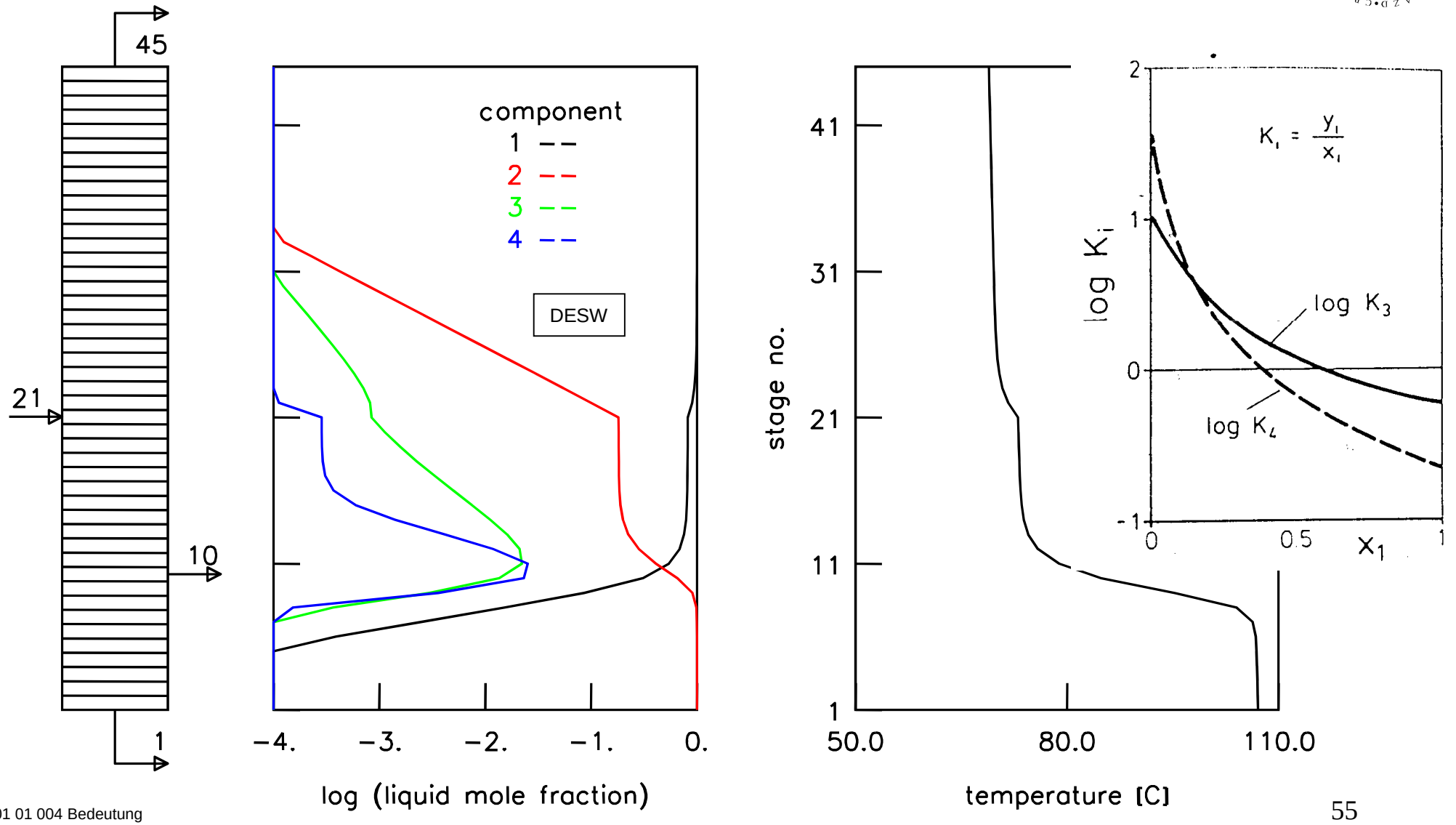
Newton-Raphson-Algorithmus

$$\overline{X} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ X_N \end{bmatrix} \qquad \overline{F} = \begin{bmatrix} \overline{F}_1 \\ \overline{F}_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \overline{F}_N \end{bmatrix} \qquad X_j = \begin{bmatrix} \dot{V}_{1,j} \\ \cdot \\ \cdot \\ \dot{V}_{n,j} \\ T_j \\ \dot{I}_{1,j} \\ \cdot \\ \cdot \\ \dot{I}_{n,j} \end{bmatrix} \qquad F_j = \begin{bmatrix} M_{1,j} \\ \cdot \\ \cdot \\ M_{n,j} \\ H_j \\ E_{1,j} \\ \cdot \\ \cdot \\ E_{n,j} \end{bmatrix}$$

$$\overline{X}^{(k+1)} = \overline{X}^{(k)} - \left[\left(\frac{d\overline{F}^{(k)}}{d\overline{X}^{(k)}} \right)^{-1} \right] \overline{F}^{(k)}$$

$$\overline{X}^{(k+1)} = \overline{X}^{(k)} + \Delta\overline{X}^{(k)}$$

Trennung des Systems Methanol (1) (z_F=0.6582) - Wasser (2) (z_F=0.3402)- Ethanol (z_F=0.0004) (3) - Isobutanol (z_F=0.0006) (4)



DESW-Eingabe 1 (Excel-Version)

Distillation (Naphthali-Sandholm) Using the Wilson-Model

based on code given in 'Grundoperationen' (Gmehling, Brehm)

General Information

Number of components:	4
Title	METHANOL(1)-WASSER(2)-ETHANOL(3)-ISOBUTANOL(4)

Pure Component Data

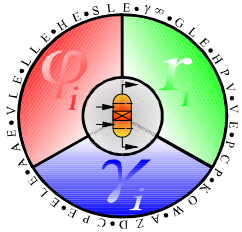
Molar volume, Antoine constants

	vL	A	B	C
1	40.73	7.20587	1582.271	239.73
2	18.07	7.19621	1730.63	233.43
3	58.69	7.2371	1592.864	226.184
4	92.91	7.66006	1950.94	237.147
5				

Interaction Parameters (Wilson, cal/mol)

	1	2	3	4	5
1	0.0000	54.04	-26.1400	298.0000	
2	236.3	0.0000	506.7000	987.2000	
3	62.4200	95.6800	0.0000	159.8000	
4	-215.5000	652.6000	-91.1200	0.0000	
5					0.0000

DESW-Eingabe 2 (Excel-Version)



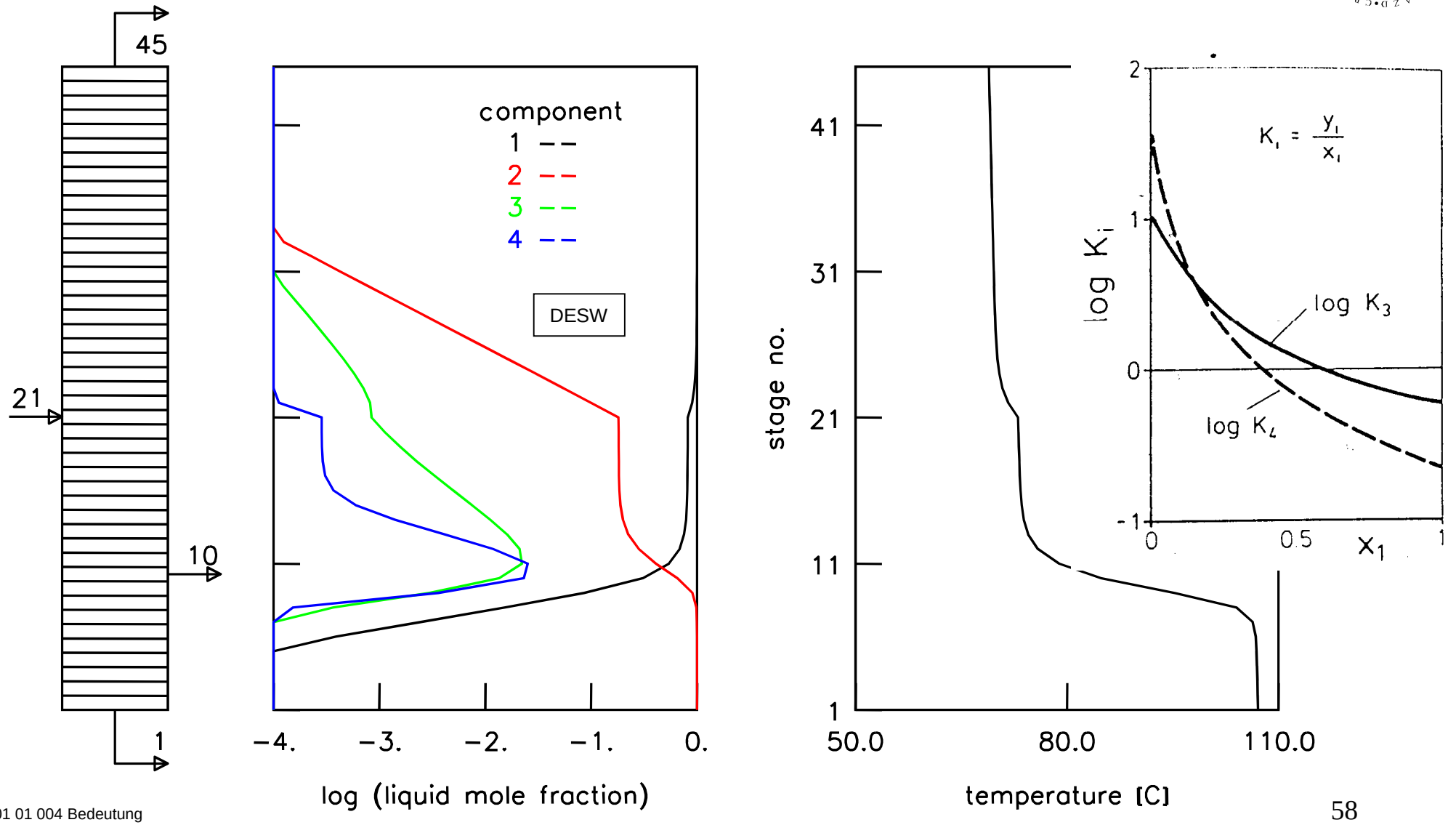
Column Configuration	
Number of stages (max. 50)	45
Number of feeds	1
Number of liquid side streams	1
Number of vapor side streams	0
Destillate flux	125.5
Reflux ratio	3
Top pressure (kPa)	120
Bottom pressure (kPa)	130
Top temperature estimate (°C)	70
Bottom temperature estimate (°C)	105
FLMAX	3
DTMAX	1.5
Exponent of convergence criterion	10

Feeds	stage	q	n1	n2	n3	n4	n5
1	21	0	127.1	65.8	0.07	0.12	

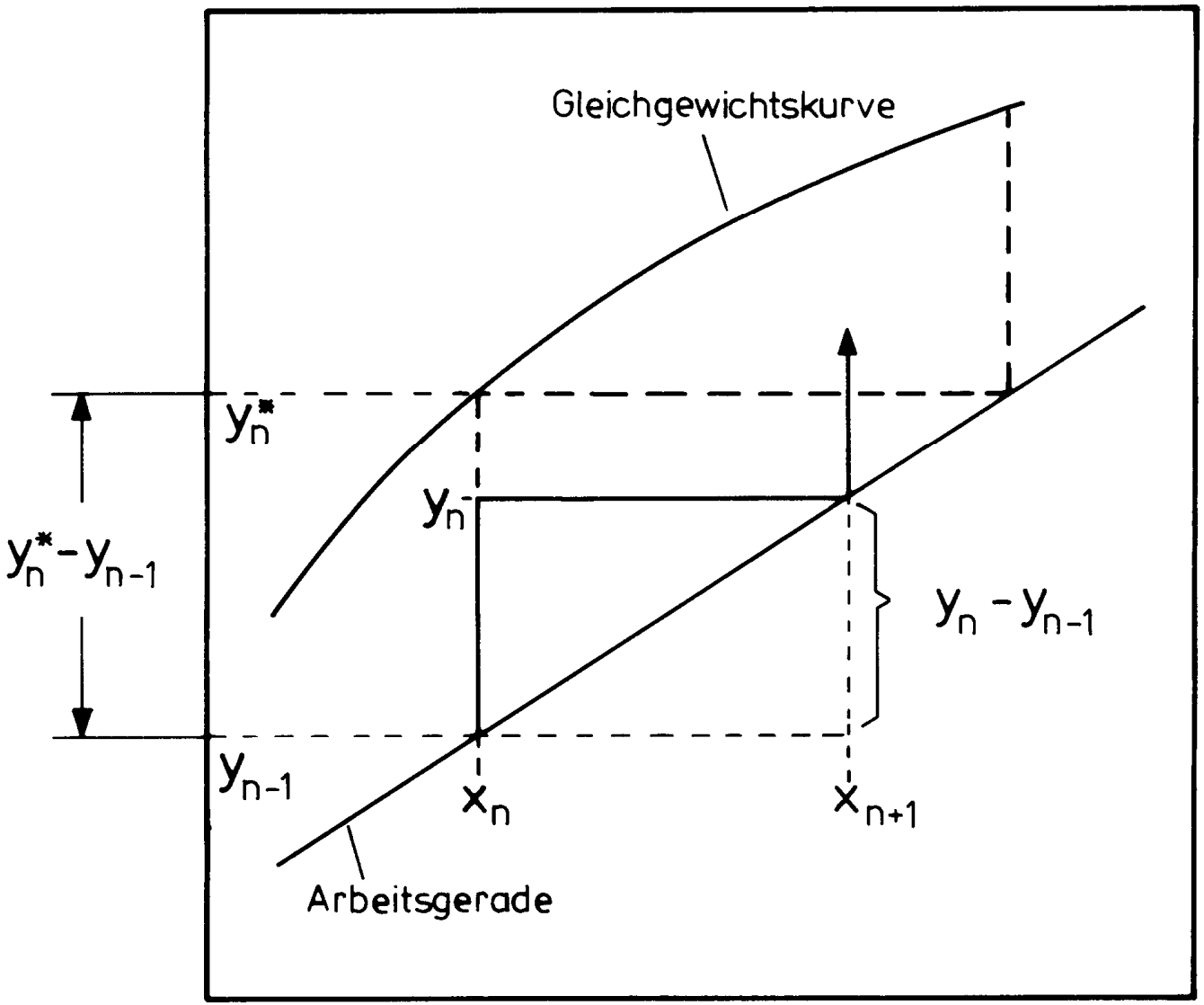
Liquid side streams	stage	n
1	10	5.2

Vapor side streams	stage	n

Trennung des Systems Methanol (1) (z_F=0.6582) - Wasser (2) (z_F=0.3402)- Ethanol (z_F=0.0004) (3) - Isobutanol (z_F=0.0006) (4)



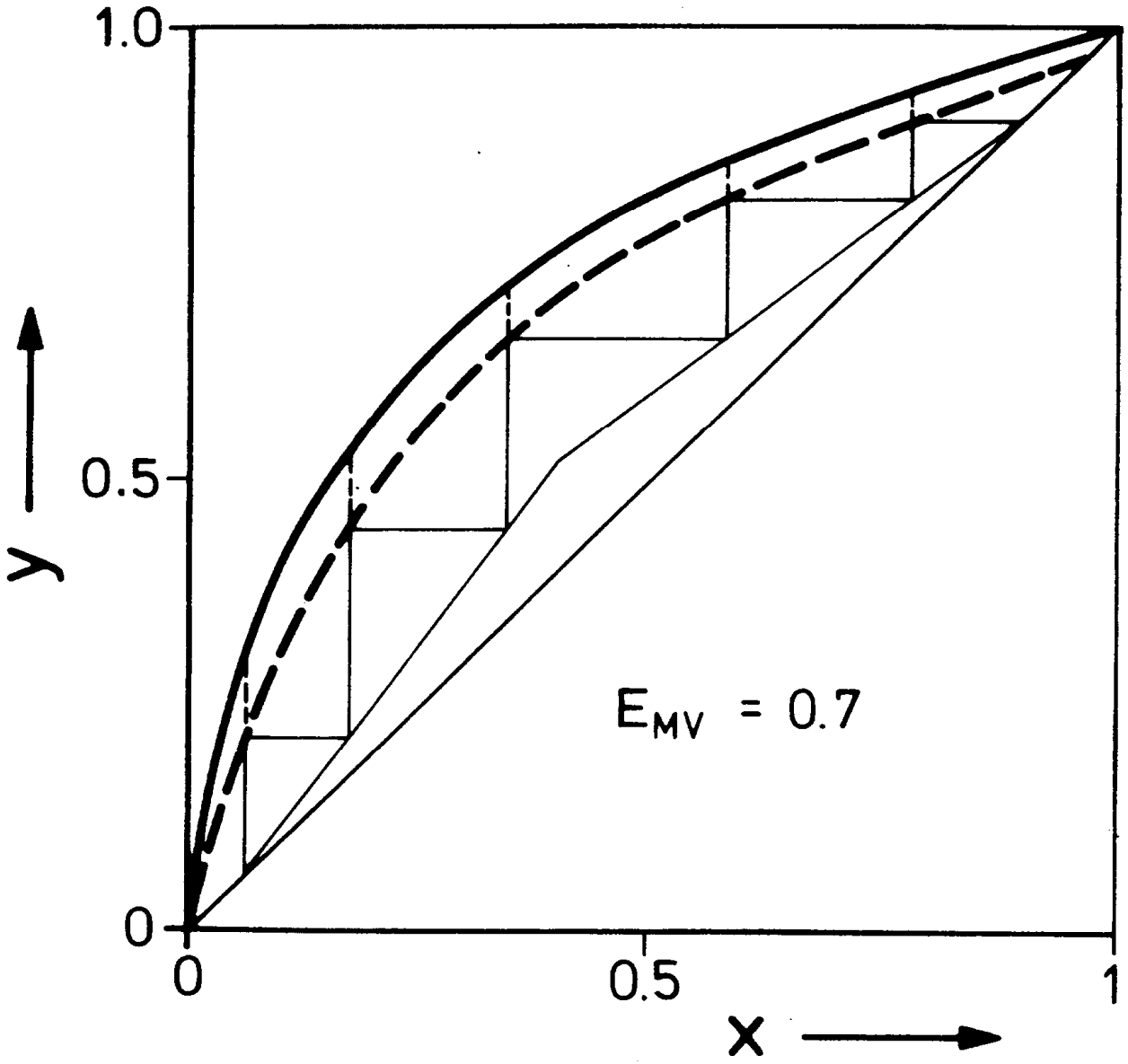
Berücksichtigung des Bodenwirkungsgrades beim McCabe-Thiele-Verfahren



Murphree-Bodenwirkungsgrad:

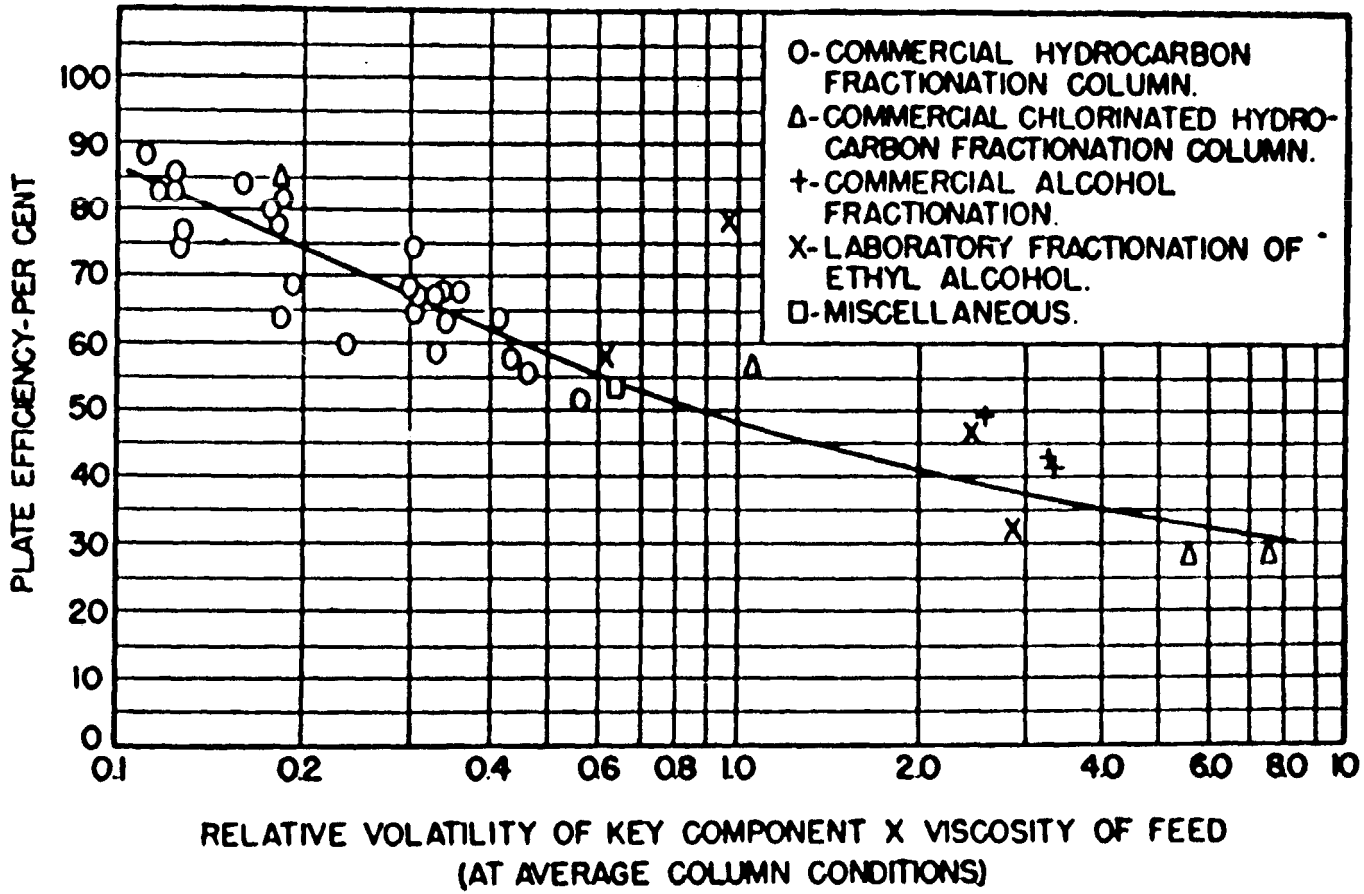
$$E_{MV} = \frac{y_n - y_{n-1}}{y_n^* - y_{n-1}}$$

McCabe-Thiele-Konstruktion bei einem Bodenwirkungsgrad von 0.7

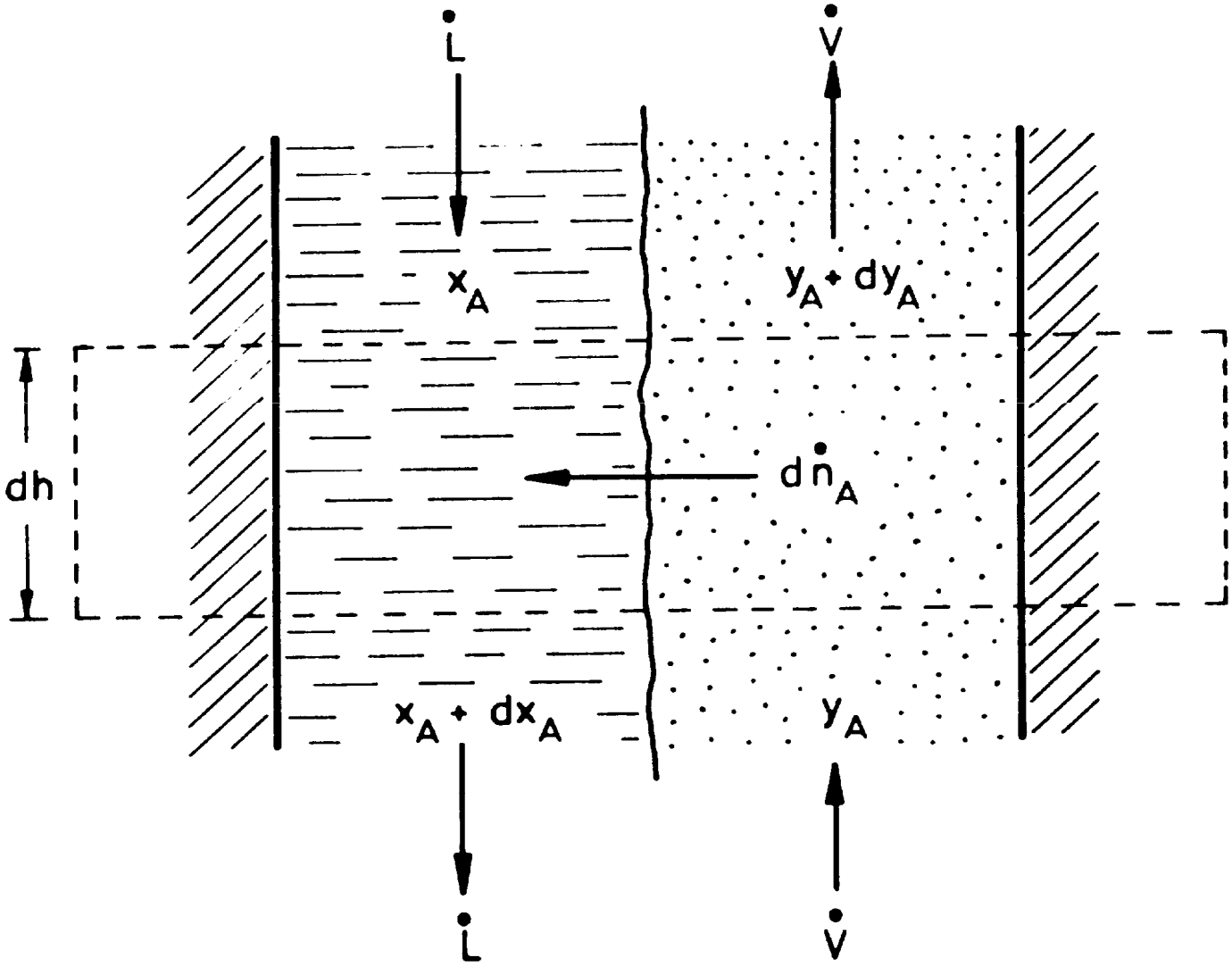


Bodenwirkungsgrad als f(Trennfaktor * Viskosität)

Figure 12-14. O'Connell correlation for overall efficiency of distillation columns. From O'Connell (1946). Reprinted from *Transactions Amer. Inst. Chem. Eng., 42,* 741 (1946). Copyright 1946, American Institute of Chemical Engineers.

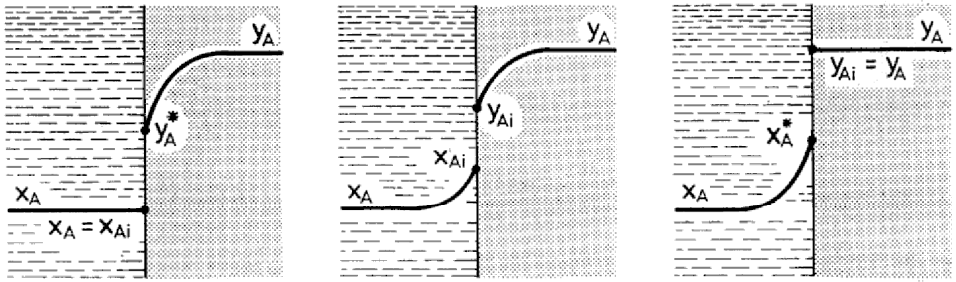


Ableitung der Mengenbilanz für das Konzept der Übertragungseinheit



Stoffübergangs-Modell (Bilanz für Volumenelement dV=Adh))

$$d\dot{n}_A = \beta_L a\left(x_{Ai} - x_A\right) A_F dh = \dot{L} dx_A = \beta_G a\left(y_A - y_{Ai}\right) A_F dh = \dot{V} dy_A$$



a spezifische Phasengrenzfläche (m^2/m^3)

β_L, β_G Stoffübergangskoeffizient ($kmol/m^2s$)

A_F Querschnittsfläche

$$H = \int_0^H dh = \frac{\dot{L}}{\beta_L a A_F} \int_{x_{AT}}^{x_{AB}} \frac{dx_A}{\left(x_{Ai} - x_A\right)}$$

$\frac{\dot{L}}{\beta_L a A_F}$ → HTU_L ; $\int \frac{dx_A}{(x_{Ai} - x_A)}$ → NTU_L

$$H = \int_0^H dh = \frac{\dot{V}}{\beta_G a A_F} \int_{y_{AB}}^{y_{AT}} \frac{dy_A}{\left(y_{Ai} - y_A\right)}$$

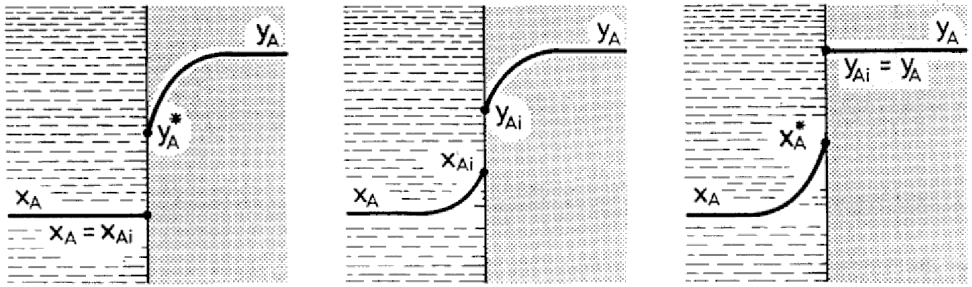
$\frac{\dot{V}}{\beta_G a A_F}$ → HTU_G ; $\int \frac{dy_A}{(y_{Ai} - y_A)}$ → NTU_G

B (bottom), T (top)

A = a dV = a A_F dh

Stoffübergangs-Modell

$$d\dot{n}_A = \beta_{OL} a \left(x_A^* - x_A \right) A_F dh = \dot{L} dx_A = \beta_{OG} a \left(y_A - y_A^* \right) A_F dh = \dot{V} dy_A$$



a	spezifische Phasengrenzfläche (m^2/m^3)
β_{OL}, β_{OG}	Overall-Stoffübergangskoeffizient (kmol/m^2s)
A_F	Querschnittsfläche (m^2)

$$H = \int_0^H dh = \frac{\dot{L}}{\beta_{OL} a A_F} \int_{x_{AT}}^{x_{AB}} \frac{dx_A}{\left(x_A^* - x_A \right)}$$

$\beta_{OL} a A_F$ → HTU_{OL}; $\int \frac{dx_A}{\left(x_A^* - x_A \right)}$ → NTU_{OL}

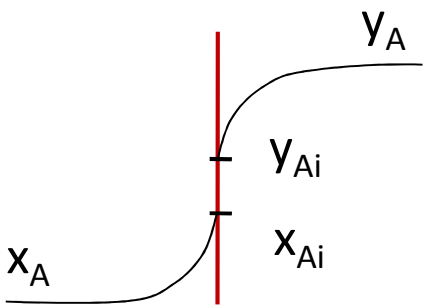
$$H = \int_0^H dh = \frac{\dot{V}}{\beta_{OG} a A_F} \int_{y_{AB}}^{y_{AT}} \frac{dy_A}{\left(y_A^* - y_A \right)}$$

$\beta_{OG} a A_F$ → HTU_{OG}; $\int \frac{dy_A}{\left(y_A^* - y_A \right)}$ → NTU_{OG}

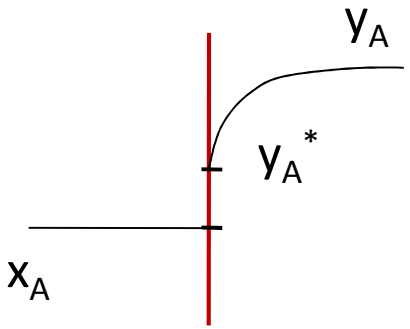
B (bottom), T (top)

A = a dV = a A_F dh

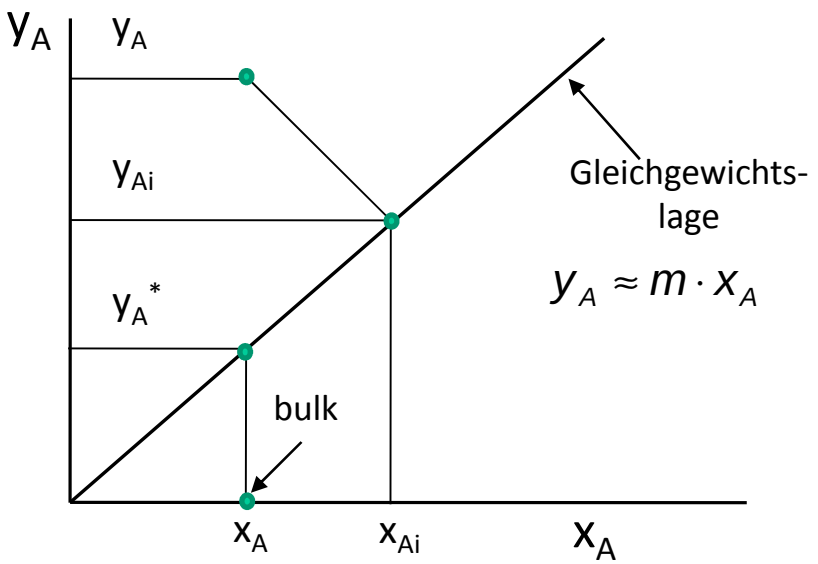
$$\dot{n}_A = \beta_G \, A \, (y_A - y_{Ai})$$



$$\dot{n}_A = \beta_{OG} \, A \, (y_A - y_A^*)$$



$$\dot{n}_A = \beta_L \, A \, (x_{Ai} - x_A)$$



$$y_A \approx m \cdot x_A$$

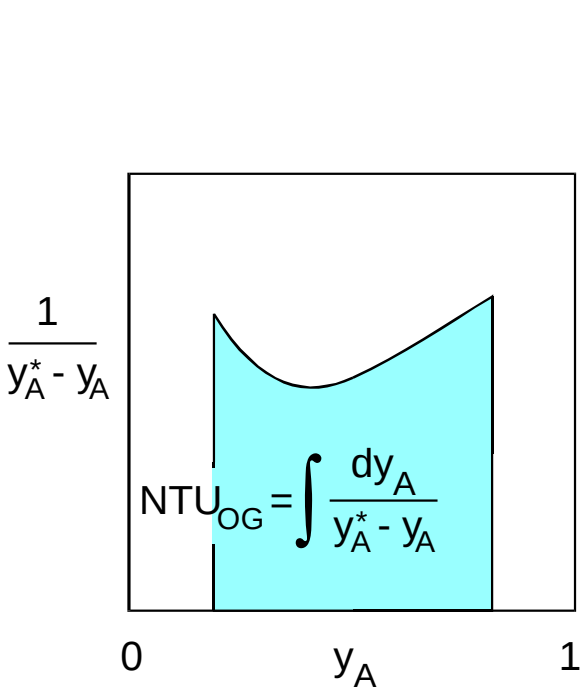
$$y_A - y_A^* = (y_A - y_{Ai}) + (y_{Ai} - y_A^*)$$

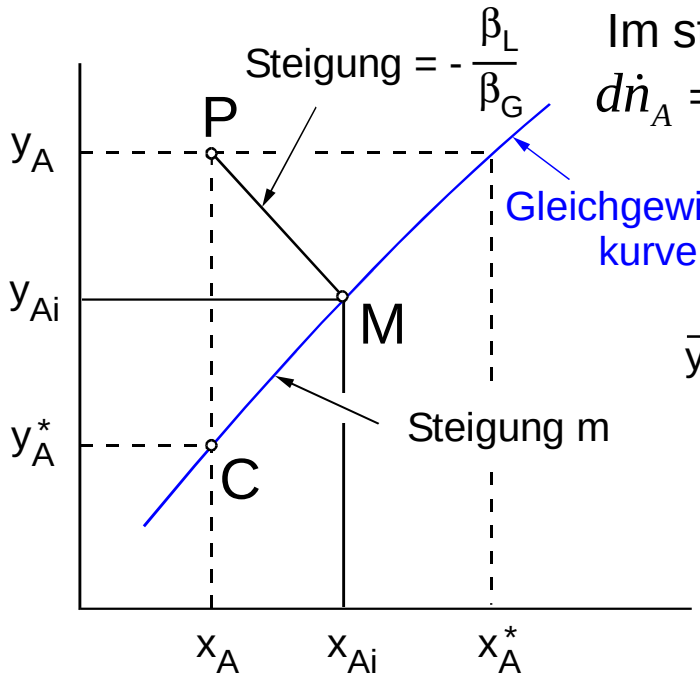
$$y_A - y_A^* = (y_A - y_{Ai}) + m(x_{Ai} - x_A)$$

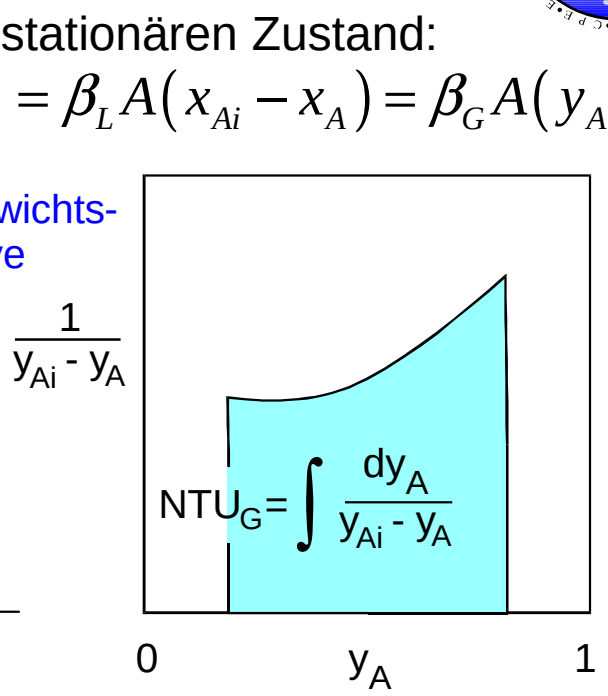
$$\frac{\dot{n}_A}{\beta_{OG} \cdot A} = \frac{\dot{n}_A}{\beta_G \cdot A} + m\left(\frac{\dot{n}_A}{\beta_L \cdot A}\right)$$

$$\boxed{\frac{1}{\beta_{OG}} = \frac{1}{\beta_G} + \frac{m}{\beta_L}}$$

Ermittlung der Zahl von Übertragungseinheiten (NTU) durch graphische Integration







Im stationären Zustand:

$$d\dot{n}_A = \beta_L A(x_{Ai} - x_A) = \beta_G A(y_A - y_{Ai})$$

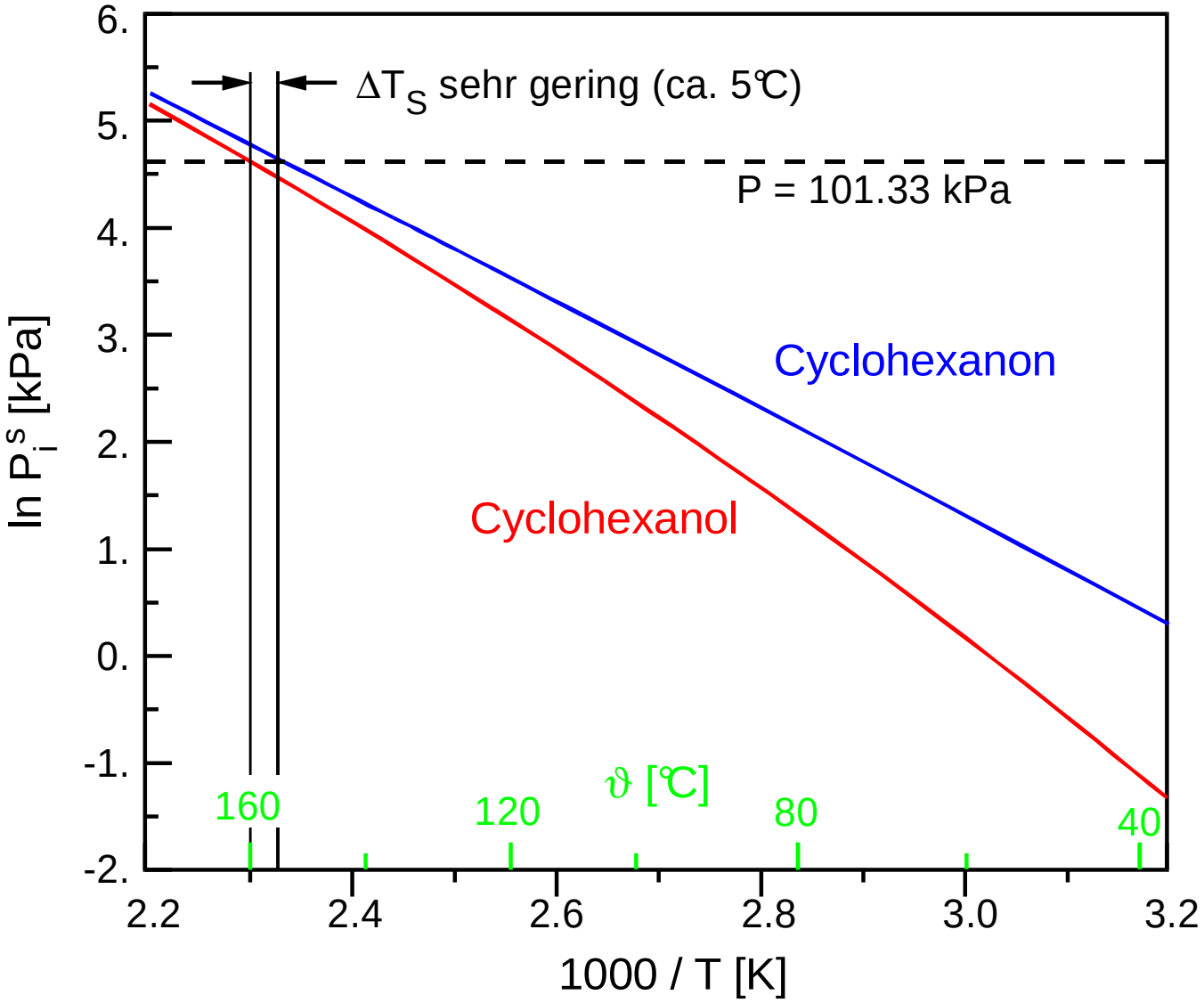
$$y_A - y_A^* = (y_A - y_{Ai}) + (y_{Ai} - y_A^*)$$

$$= (y_A - y_{Ai}) + m(x_{Ai} - x_A)$$

Annahme Gleichgewichtsgerade

$$\frac{\dot{n}_A}{\beta_{OG} A} = \frac{\dot{n}_A}{\beta_G A} + m\left(\frac{\dot{n}_A}{\beta_L A}\right) \Rightarrow \frac{1}{\beta_{OG}} = \frac{1}{\beta_G} + \frac{m}{\beta_L}$$

Sättigungsdampfdrücke als Funktion der reziproken Temperatur

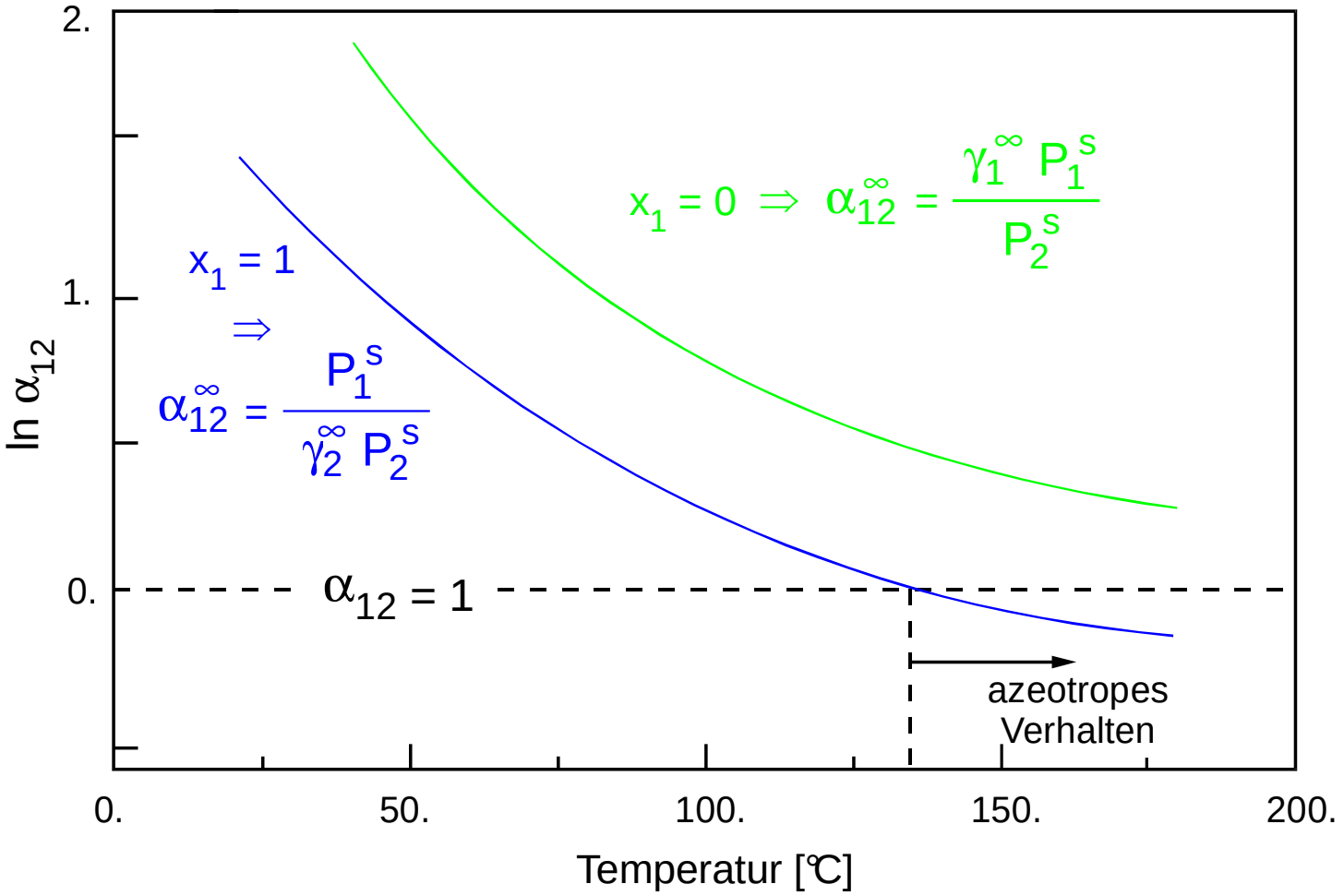


Normalsiedepunkte:

Cyclohexanon: 155 ℃

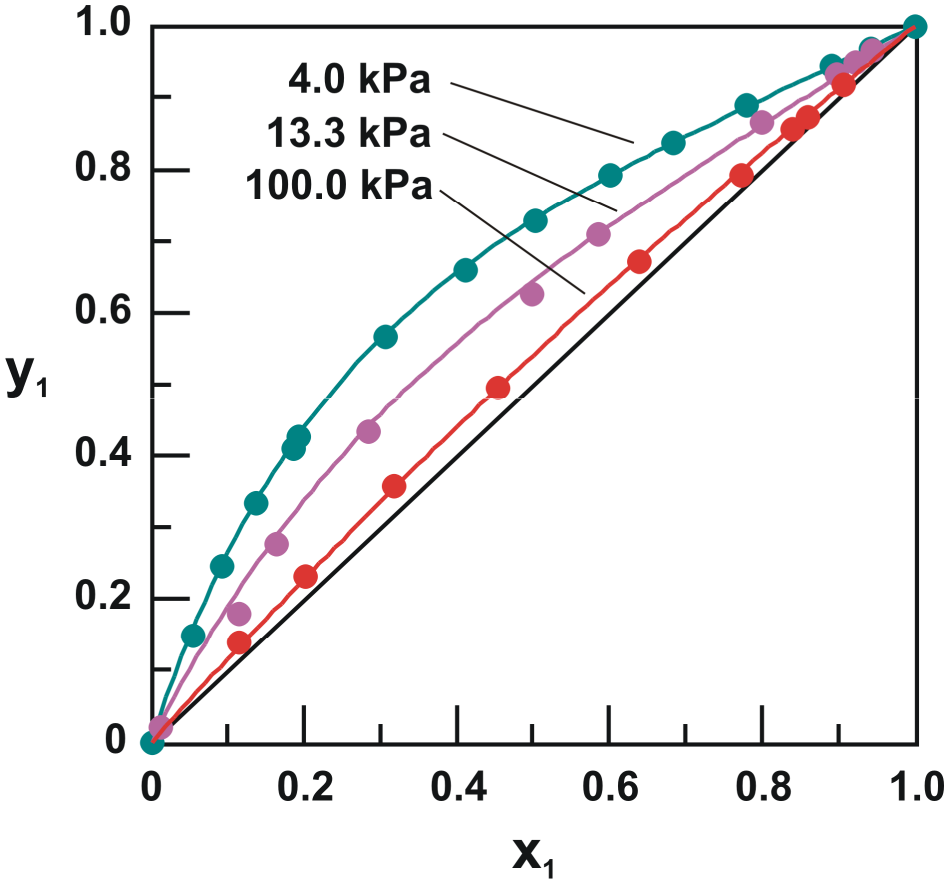
Cyclohexanol: 160.7 ℃

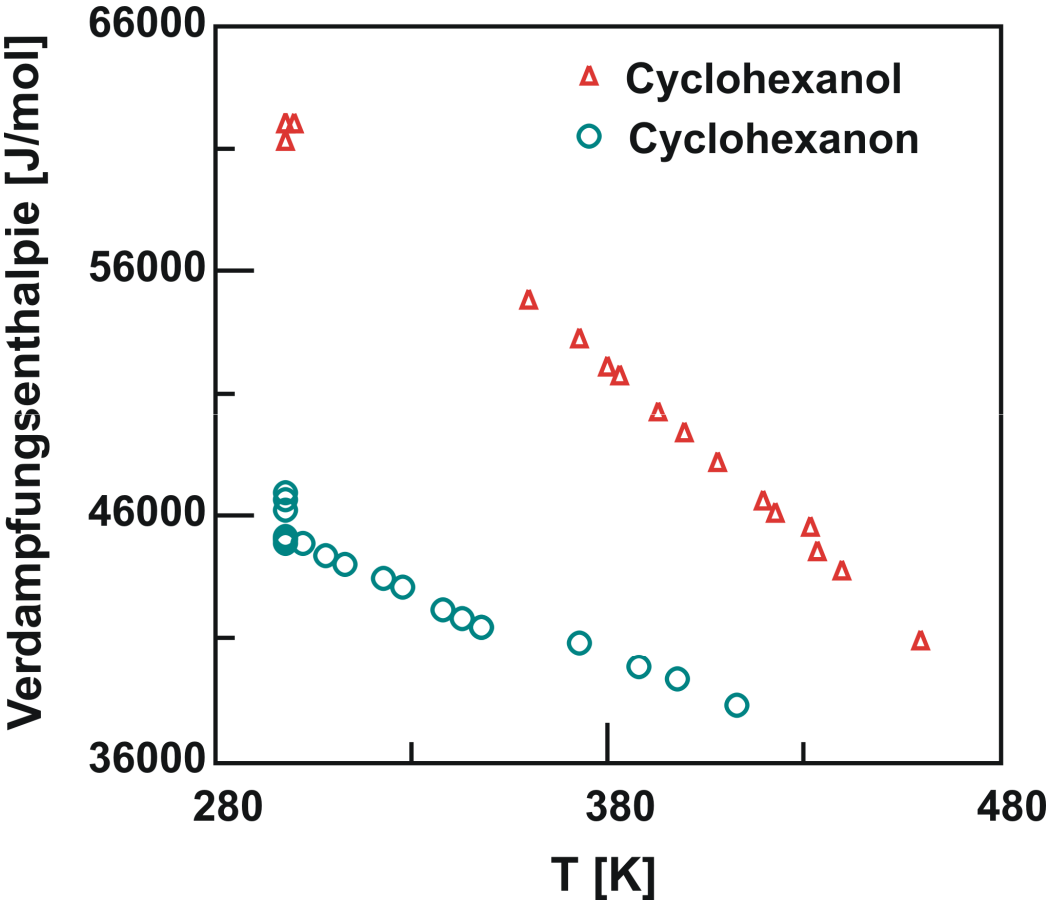
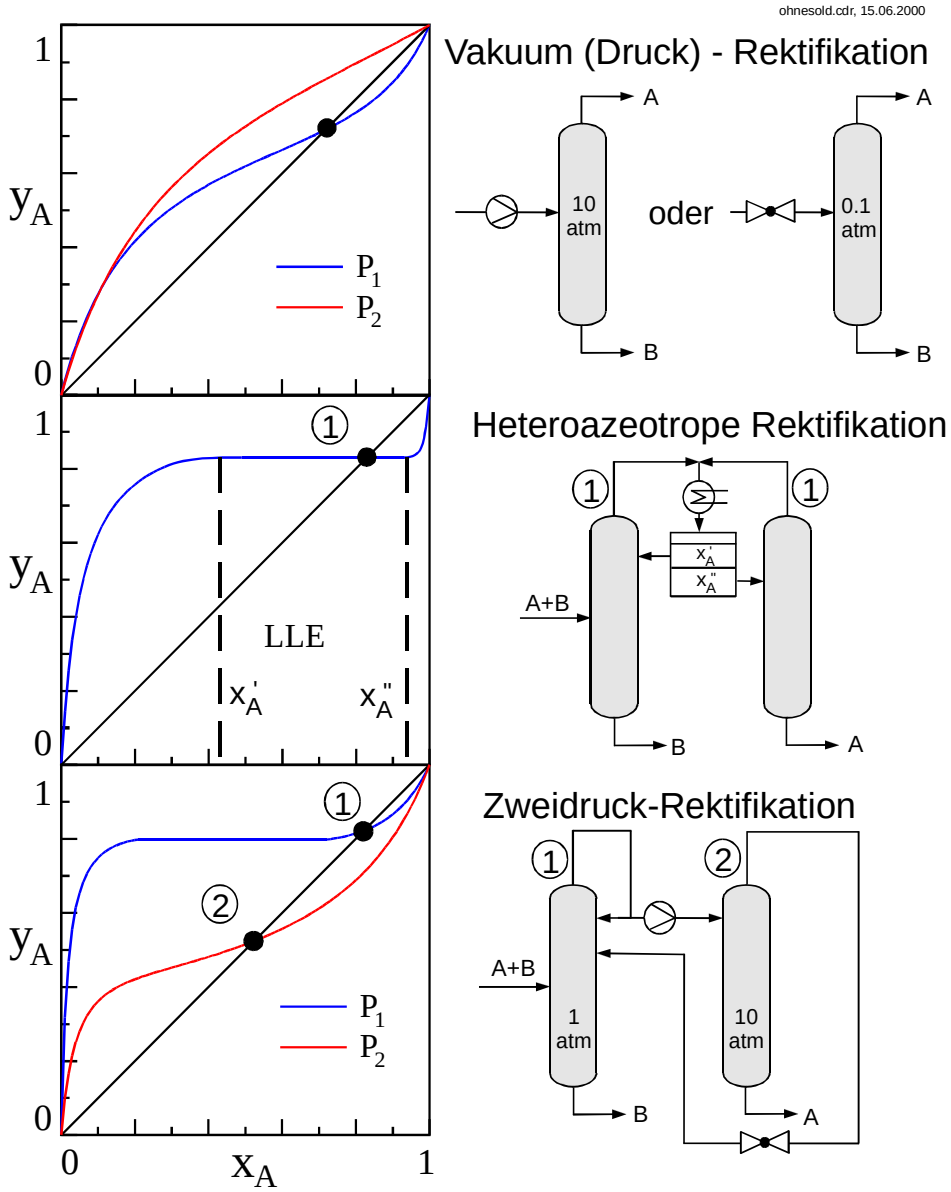
Trennfaktoren α_{12}^{∞} des Systems Cyclohexanon-Cyclohexanol



→ je niedriger die Temperatur, desto günstiger werden die Trennfaktoren
(und desto geringer wird die Anzahl der benötigten theoretischen Trennstufen N_{th})

VLE-Verhalten des Systems Cyclohexanon(1)-Cyclohexanol(2) bei verschiedenen Dücken und Verdampfungsenthalpien als f(T)





Trennung azeotroper Systeme ohne Zusatzstoff