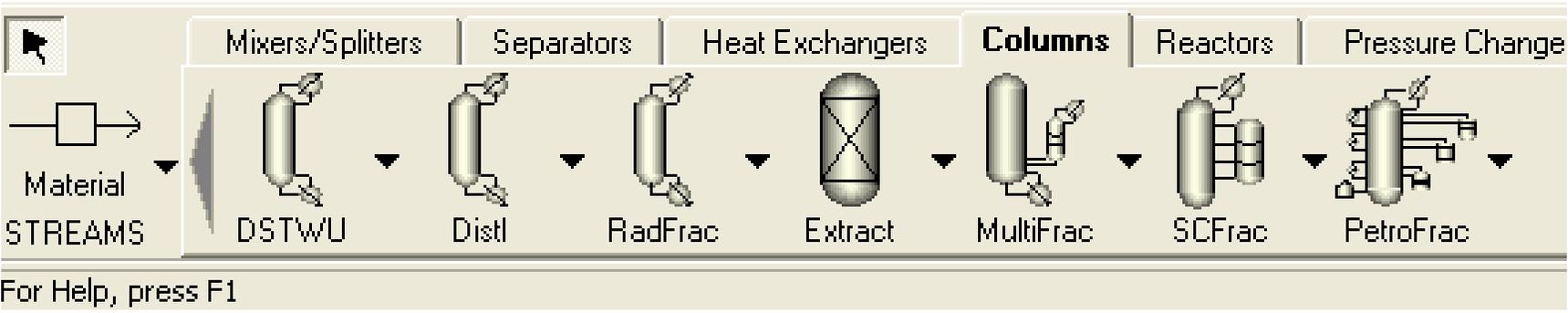




# Verfahrensentwicklung & Anlagenplanung

## Ergänzung zu Kapitel 3: Modellierung von Trennkolonnen

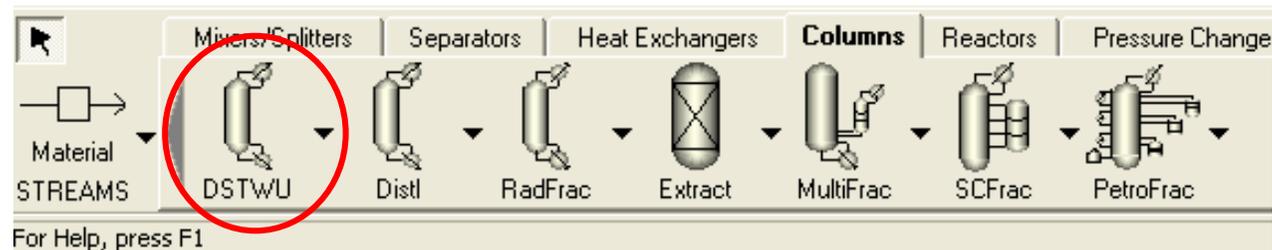
Vorlesung für Master-Studierende



## Shortcut-Modell

### DSTWU

- Modell nach Winn, Underwood und Gilliland
- Trennkolonnen mit einem Feed und zwei Produktströmen
- Bestimmung von  $rr_{\min}$  und  $n_{\min}$ , sowie aktuelles  $rr$  bei gegebenem  $n$  und umgekehrt
- Analog zum McCabe-Thiele-Verfahren
  - Auslegung des Apparates durch Bilanzierung des Kopfes
  - Verweilzeit im Apparat so groß, dass alle Komponenten ideal durchmischt sind (GGW-Modell)



## Rigoroses Modell

### RadFrac

- rigorose Auslegung und Design für Trennkolonnen
- für gewöhnliche, extraktive, reaktive oder azeotrope Rektifikation, Absorber und Stripper
- Bilanzierung jeder Stufe der Kolonne
- ideale Durchmischung der Komponenten auf jeder Stufe (GGW-Modell)

### RateBased

- Erweiterung zu RadFrac
- Berücksichtigung aller Wärme- und Stofftransportphänomene für die Bilanzierung einer Stufe (z.B. Kinetik von Reaktionen, Wärmetönung, Stofftransportlimitierung)



## SCFrac

- Shortcut-Destillationsmodell für komplexe petrochemische Trennoperationen
- Bestimmt Produktzusammensetzung und –flussrate, Stufenzahl und Wärmeleistung unter Einsatz von Trennfaktoren
- z.B. Rohölfractionierer oder Vakuumdestillation zur Benzingewinnung

## MultiFrac

- Rigorose Auslegung für eine Verschaltung von Trennkolonnen beliebiger Komplexität
- Wärmeintegrierte Kolonne, Absorber/Stripper-Verschaltung, Öltraffinerie

## PetroFrac

- Ölfractionierer

- **Graphische Verfahren:**
  - McCabe-Thiele Verfahren
  - Ponchon-Merkel-Diagramme
- **Short Cut Modelle (DSTWU Modelle)**
  - Fenske /Winn
  - Underwood
  - Gilliland
- **Rigorese Modelle (RadFrac Modelle)**
  - Gleichgewichtsstufenmodell
  - Rate-Based Modelle

## ■ Annahmen:

- Gilt ausschließlich für binäre Gemische
- Konstante Volumenströme im Auf- und Abtriebsteil der Kolonne
- Innerhalb des betrachteten Temperatur- und Druckbereichs haben die Verdampfungsenthalpien konstante Werte
- Mischungsenthalpien und Wärmeverluste werden vernachlässigt
- Energie zur Kondensation von 1 Mol Dampf = Energie zur Verdampfung von 1 Mol Flüssigkeit

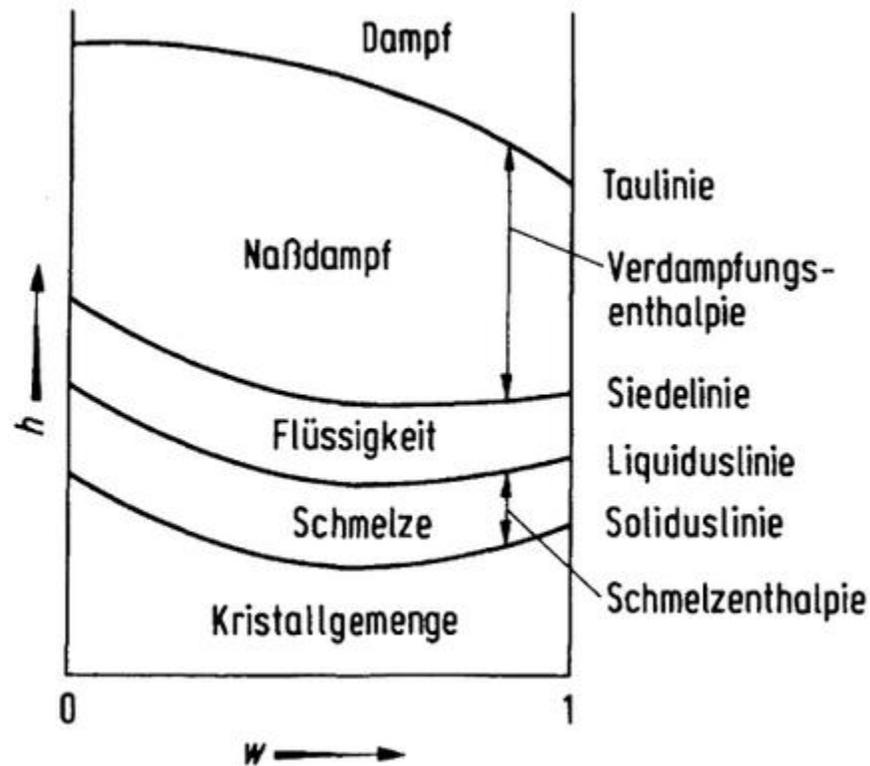
## ■ Berechnung der Arbeitsgerade für den Verstärkerteil aus einer Bilanz um den Kopf

## ■ Wichtige Grenzfälle:

- Rücklaufverhältnis  $\rightarrow \infty \rightarrow$  Arbeitsgerade liegt auf der 45°-Linie
- Stufenzahl  $\rightarrow \infty \rightarrow$  Arbeitsgerade schneidet y-Achse als Funktion des minimalen Rücklaufverhältnisses  $(1/v_{\min} + 1)$

# Ponchon-Merkel-Diagramme

- Voraussetzung: bekannte Reinstoff- und Mischungsenthalpien über den gesamten Konzentrationsbereich

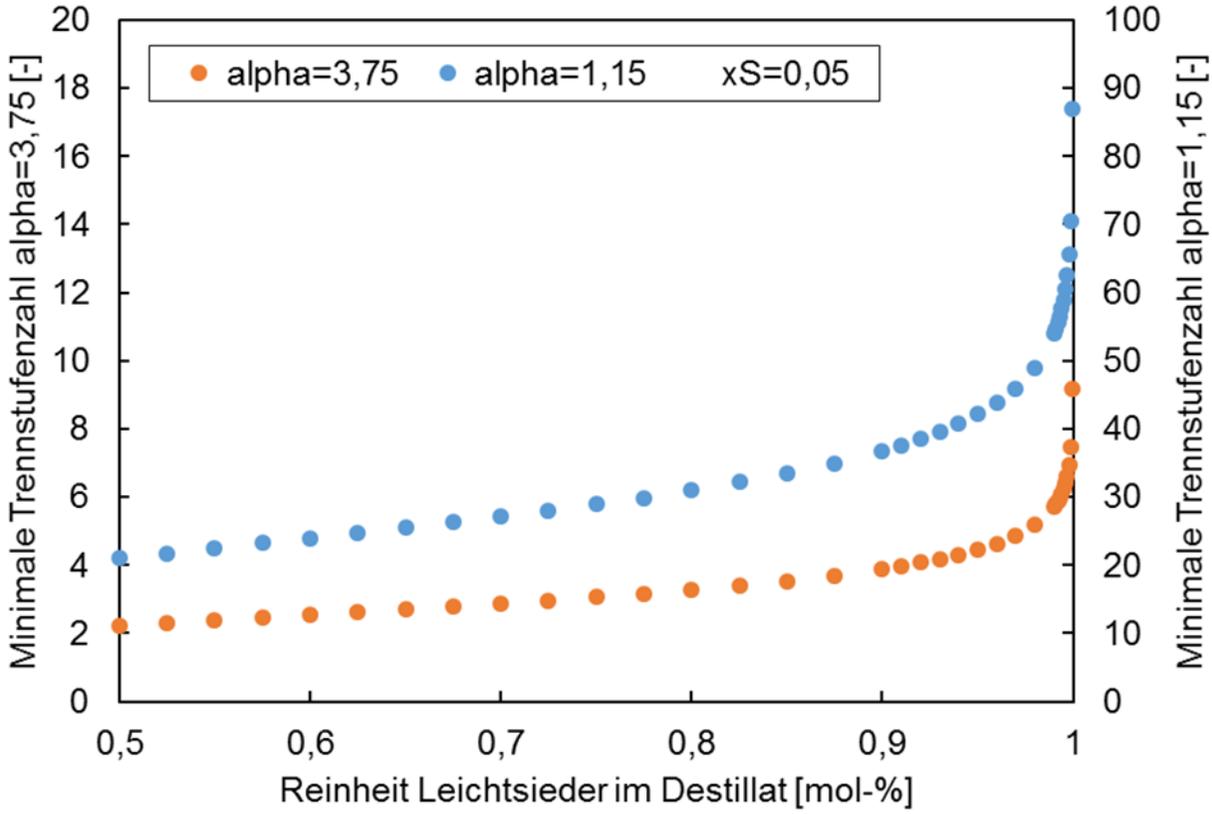


- **Annahmen:**
  - Mehrkomponentensysteme werden auf ein binäres Trennproblem reduziert.
  - Annahme konstanter Trennfaktoren auf jeder Stufe
  - Annahme konstanter Volumenströme im Auf- und Abtriebsteil
- **Ermöglicht die Bestimmung von:**
  - $N_{\min}, N, v_{\min}, v, \dot{V}_L, \dot{V}_D, \dot{Q}_{cond}, \dot{Q}_{reb}$
- **Minimale Trennstufenzahl** nach Fenske oder Winn
- **Minimales Rücklaufverhältnis** nach Underwood
- **Stufenzahl und Rücklaufverhältnis** nach Gilliland

# Minimale Trennstufenzahl nach Fenske oder Winn

- Für die minimale Stufenzahl geht das Rücklaufverhältnis  $\rightarrow \infty$

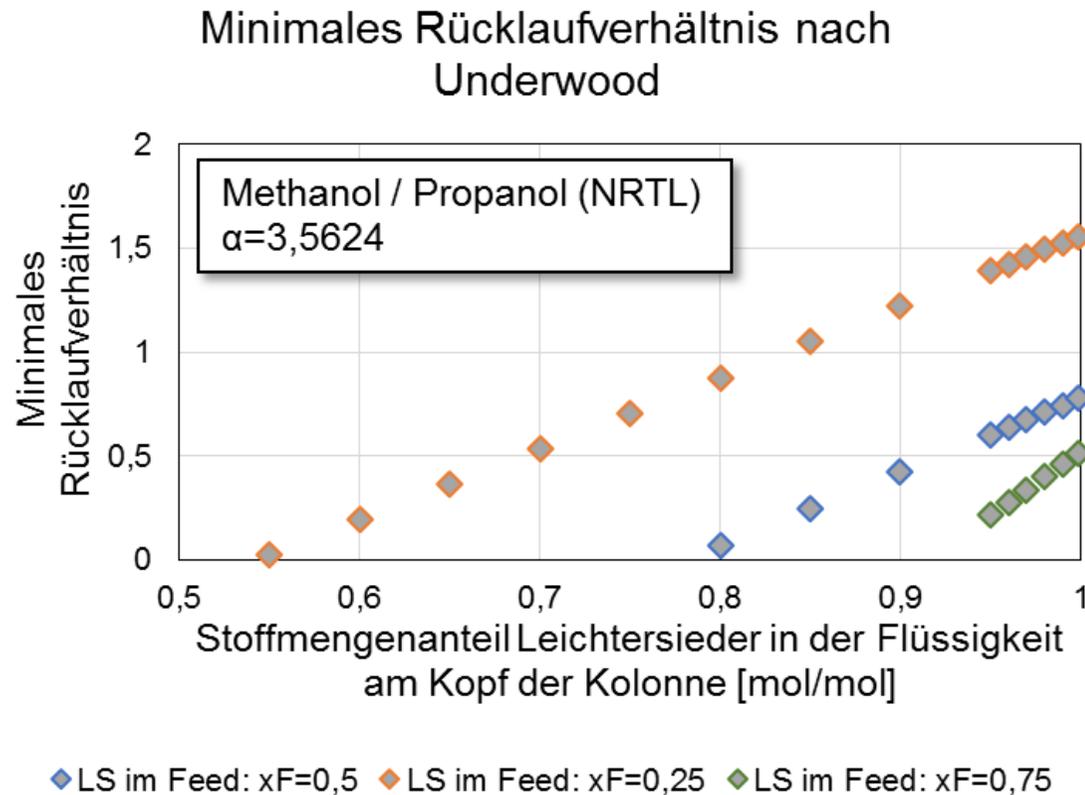
$$N_{t,min} = \frac{\lg \frac{x_S \cdot (1 - x_D)}{x_D \cdot (1 - x_S)}}{\lg \alpha_{12}}$$



# Minimales Rücklaufverhältnis nach Underwood

- Für das minimale Rücklaufverhältnis geht die Stufenzahl  $\rightarrow \infty$

- $$rr_{min} = \frac{1}{\alpha_{12}-1} \cdot \left( \frac{x_{Kopf,LS}}{x_{Feed,LS}} - \alpha_{12} \cdot \frac{1-x_{Kopf,LS}}{1-x_{Feed,LS}} \right)$$

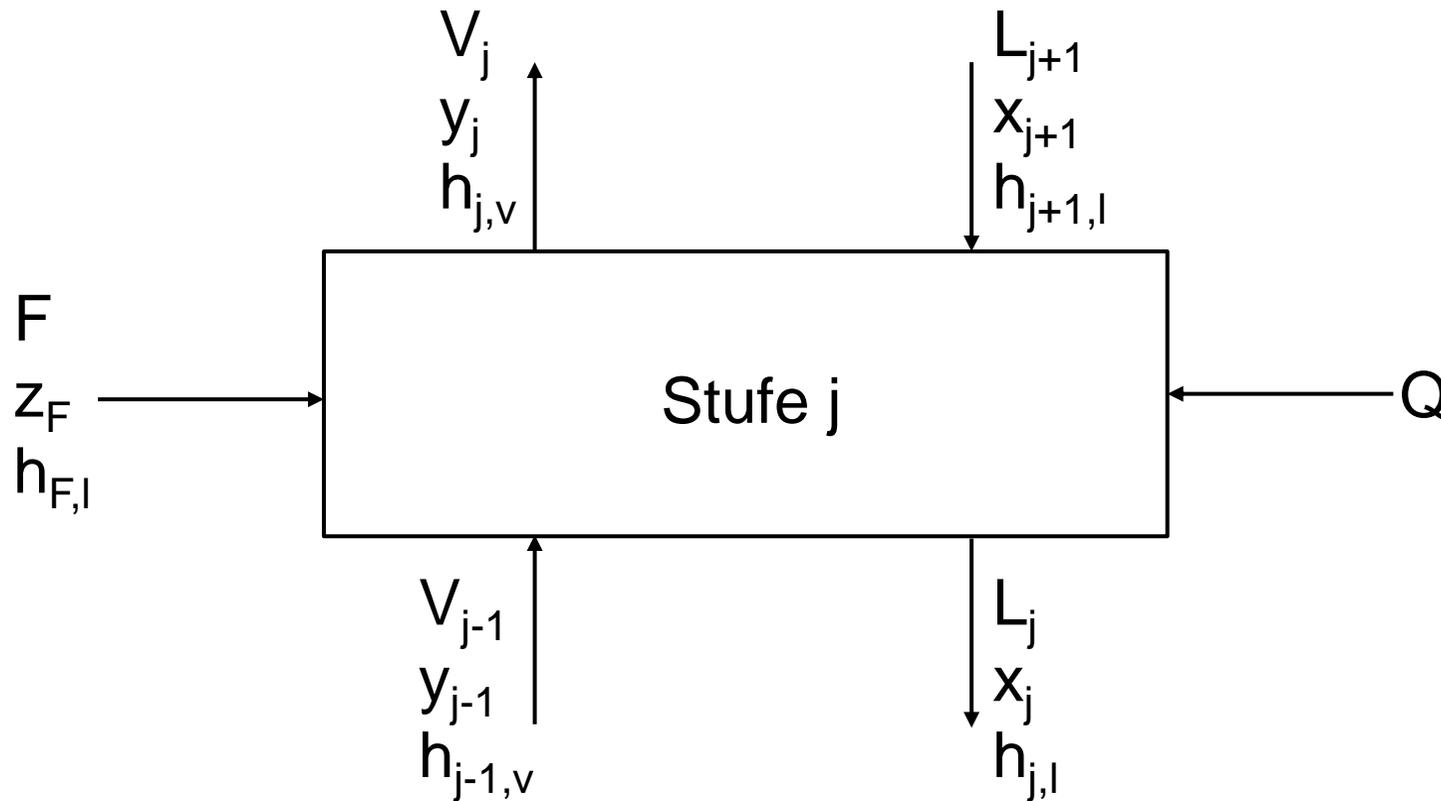


- Empirische Korrelationen
- Rücklaufverhältnis:  $v = 1,05 \dots 1,3 \cdot v_{min}$

- Stufenzahl:

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[ \frac{(1 + 54 \cdot X)(X - 1)}{(11 + 117 \cdot X) X^{0,5}} \right]$$

$$\text{Mit } X = \frac{v - v_{min}}{v + 1}$$



## Annahmen:

- Bilanzierung zweier getrennter Phasen
- Keine Reaktion
- Stationärer Betrieb

## ■ Material Balance

$$L_{j+1} \cdot x_{i,j+1} - L_j \cdot x_{i,j} + V_{j-1} \cdot y_{i,j-1} - V_{j+1} \cdot y_{i,j} + F_j \cdot z_{i,F} = 0$$

## ■ Equilibrium Balance

$$y_{i,j} - K_{i,j} \cdot x_{i,j} = 0 \quad \text{mit } K_i = y_i/x_i \quad K = f(T, p, x_i, y_i)$$

## ■ Summation Condition

$$\sum y_{i,j} - 1 = \sum x_{i,j} - 1 = 0$$

j: theoretische Trennstufe  
i: Komponente

## ■ Heat Balance

$$L_{j+1} \cdot h_{j+1,l} - L_j \cdot h_{j,l} + V_{j-1} \cdot y_{j-1,v} - V_{j+1} \cdot y_{j,v} + F_j \cdot h_{F,j} + Q = 0$$

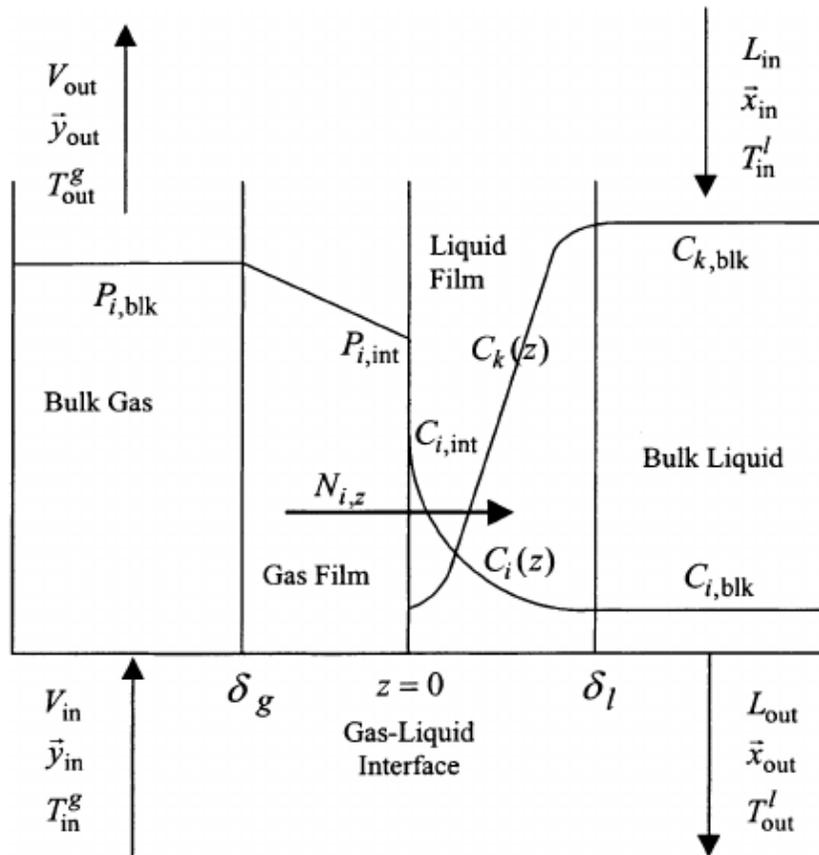
# Gleichgewichtsstufenmodell (III)

---

- **Material Balance:** pro theoretischer Trennstufe (N) und Komponente (n) eine Gleichung  $\rightarrow \sum N \cdot n$  Gleichungen
- **Equilibrium Condition:** muss ebenfalls auf jeder Stufe N und für jede Komponente n erfüllt werden  $\rightarrow \sum N \cdot n$  Gleichungen
- **Summation Condition:** gilt für Gasphase und Flüssigkeit auf jeder Stufe  $\sum 2 \cdot N$  Gleichungen
- **Heat Balance:** muss auf jeder Trennstufe N erfüllt sein  $\rightarrow N$  Gleichungen

In Summe ergeben sich pro Stufe  $(2n+3)$  Gleichungen und folglich pro Kolonne insgesamt  $N \cdot (2n+3)$  Gleichungen.

**Beispiel** binäres Stoffgemisch mit 10 theoretischen Stufen: 70 Gleichungen



## MERSHQ-Gleichungen:

Material Balance

Energy Balance

Mass- and Heat Transfer Rate Equations

Summation Equations

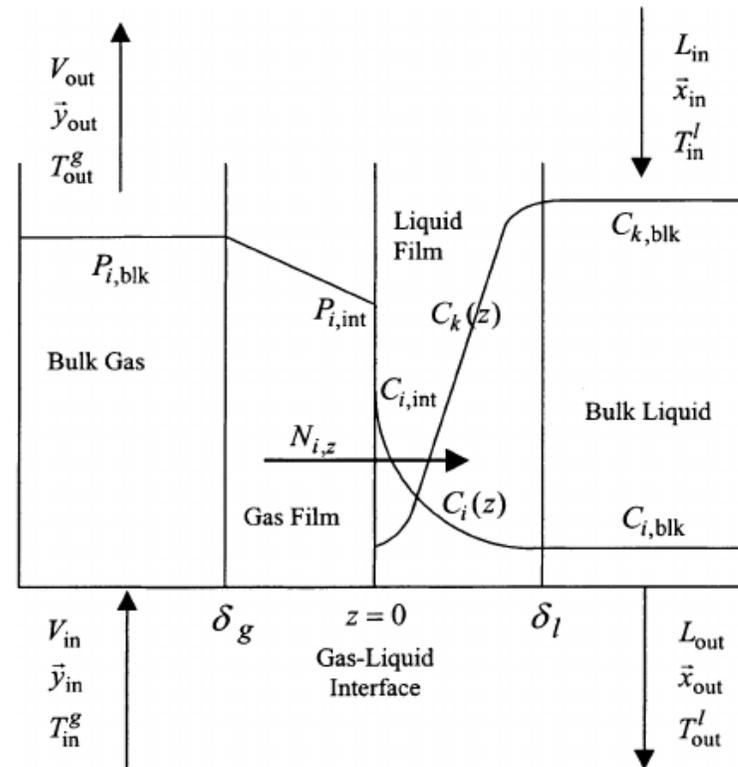
Hydraulic Equation for Pressure Drop

Equilibrium Equations

# Stoffübergangsmodelle: Zwei-Film Theorie

## ■ Annahmen:

- Stoffübergang von einer ruhenden, flüssigen Oberfläche an ein strömendes Fluid.
- Stoffübergang findet nur in der Grenzschicht statt.
- Die Filmdicke wird als bekannt und konstant vorausgesetzt.
- Stationärer Betrieb.



## ■ Vorstellung:

- Strömungsturbulenzen in der Bulkphase der Medien gelangen als sogenannte Turbulenzballen bis in die Phasengrenzfläche.
- Die zur Grenzschicht transportierten Fluidelemente verweilen dort für eine gewisse Zeit und werden anschließend durch nachströmende Elemente verdrängt → Annahme einer stationären Grenzschicht existiert hier nicht mehr.
- Grenzschicht erfährt eine ständige Verdrängung und Erneuerung.
- Während der mittleren Kontaktzeit der Fluidelemente an der Phasengrenzfläche kommt es zu Stofftransport durch instationäre Diffusion.

- **Erweiterung der Penetrationstheorie**
- **Annahmen:**
  - Keine konstante mittlere Kontaktzeit der Fluidelemente an der Phasengrenzfläche zwischen Gas und Flüssigkeit.
  - Verweilzeit der Elemente in der Grenzschicht wird in diesem Fall mit einer Verweilzeitdichtefunktion beschrieben.
  - Es kommt zu einer Erneuerung der Oberfläche mittels wiederkehrender nicht gleichmäßiger Strömungsfelder.

- **AIChE Correlation for Bubble Tray Design (1958)**
  - Basiert auf äquimolarer Gegenstromdiffusion binärer Gemische durch einen Film (Zweifilm-Theorie nach Danckwerts et. al)
  - 3 Randbedingungen
    - Massentransport einer Komponente in der Phase ist proportional zur Differenz der Konzentration oder des Partialdrucks an der Phasengrenze.
    - Gleichgewicht an der Phasengrenzschicht
    - Hold-Up der übertragenen Komponente in der Grenzschicht ist zu vernachlässigen
  - Berechnung des Stofftransports mittels geometrischer, fluiddynamischer und thermodynamischer Größen
- **Gerster et. al correlation (1958)**
  - Erweiterung der Fluiddynamik durch Wirbeldiffusionskoeffizienten
- **Hughmark correlation (1971)**
  - Erweiterung unter Anwendung der Oberflächenerneuerungstheorie und der Penetrationstheorie

## ■ Chilton und Colburn Analogie

- Wärmetransport ist analog zum Massentransport (Berechnung über die Prandtl-Zahl und die Schmidt-Zahl)
- Wird meistens im Prozessdesign verwendet und liefert selten große Abweichungen, da empirische Annäherung an turbulente, wirbelbedingte Diffusionsmodelle

## ■ Scheffe und Weiland

- Empirische Gleichung, die mittels Versuchen bei standardisierten Böden und Stoffgemischen durchgeführt wurden
- Phasengrenzfläche  $a = f(Re_L, Re_G, \text{Geometrie})$

$$a = 0,270 Re_G^{0,375} Re_L^{0,247} W'^{0,515}$$

$$Sh_G = 9,93 Re_G^{0,865} Re_L^{0,130} W'^{0,369} Sc_G^{0,5}$$

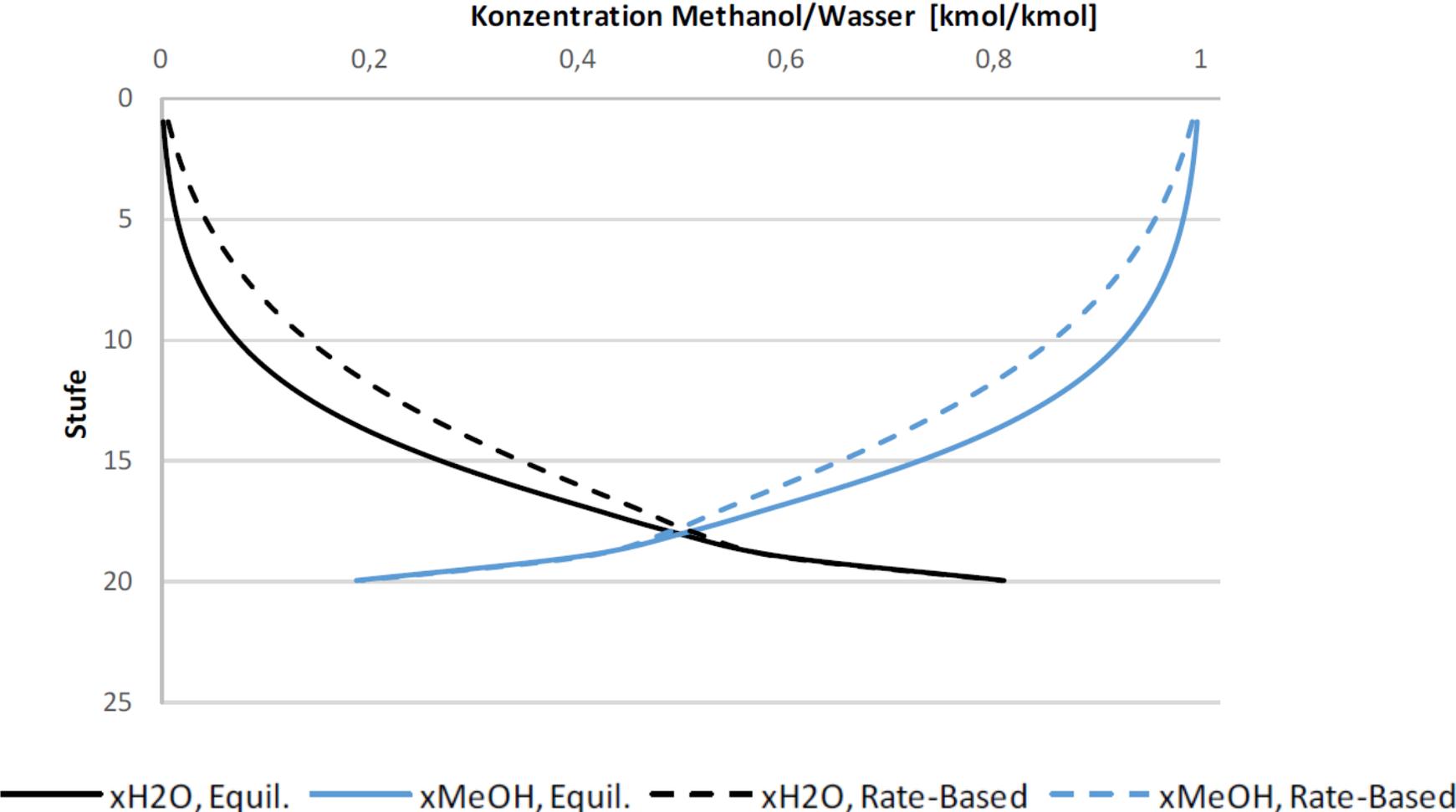
$$Sh_L = 125 Re_G^{0,684} Re_L^{0,087} W'^{0,051} Sc_L^{0,5}$$

# Benötigte thermodynamische Stoffeigenschaften

<b>Gleichgewichtsstufenmodelle</b>	<b>Rate-Based Modelle</b>
Aktivitätskoeffizienten	Aktivitätskoeffizienten
Dampfdrücke	Dampfdrücke
Fugazitätskoeffizienten	Fugazitätskoeffizienten
Dichten	Dichten
Enthalpien	Enthalpien
	Diffusionskoeffizienten
	Viskositäten
	Oberflächenspannungen
	Thermische Leitfähigkeiten
	Stofftransportkoeffizienten
	Wärmetransportkoeffizienten
	Phasengrenzflächen

# Unterschied zwischen Gleichgewichts- und NichtGGW-Modellen

- Stoffgemisch Methanol / Wasser ( $\alpha=3,75$ )



- **Für jede theoretische Trennstufe werden die folgenden Größen bestimmt:**

- Temperatur, Druck, Volumenstrom Dampf und Flüssigkeit, Konzentrationen der Komponenten in Dampf und Flüssigkeit

→ **Stark nicht-lineares Gleichungssysteme**

→ **Lösung mit entsprechenden mathematischen Methoden**

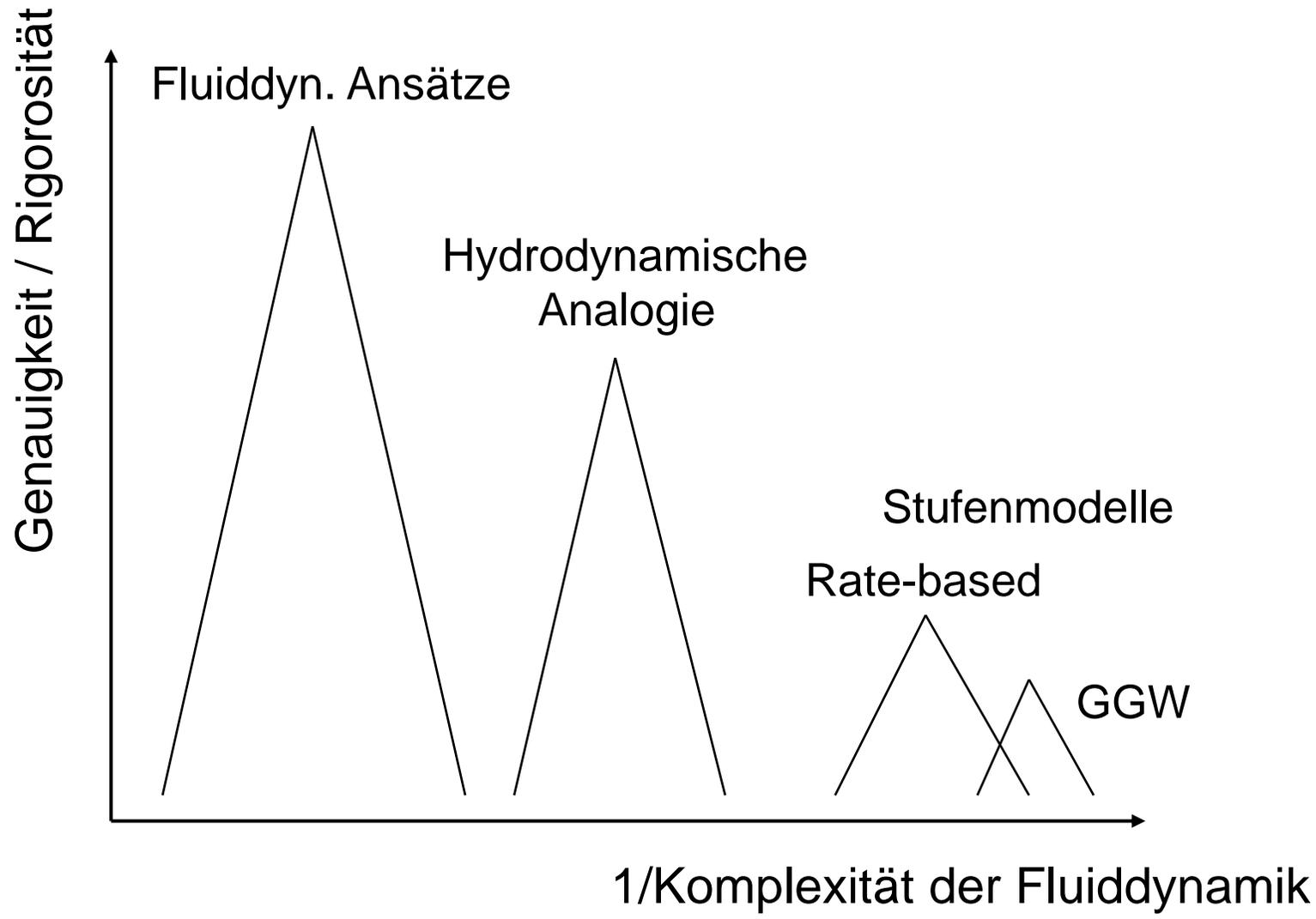
- **Beispiel 1: Wang-Henke-Verfahren**

- Zuerst Lösung der Stoffbilanz, anschließend Lösung der Energiebilanz
- Mittels Substitutionsmethoden

- **Beispiel 2: Naphtali-Sandholm-Verfahren**

- Simultane Lösung der MESH Gleichungen
- Mittels Einführung eines Variablen- und eines Funktionsvektors

# Einordnung der Komplexität der Methoden nach Kenig (I)



- **Stufenmodelle:**
  - Beschreibung der Fluidodynamik durch Annahmen und Vereinfachungen
  - GGW-Stufenmodell: pauschale Parameter für HTU und NTU
  - Rate-Based: Beschreibung des Stoffübergangs durch 2-Film-Modell
- **Hydrodynamische Analogie:**
  - Vereinfachung komplexer Strömungsmuster auf geometrisch einfache Strömungen
- **Fluiddynamische Ansätze:**
  - Beschreibung der Transportphänomene über partielle DGL's
  - Ergänzung durch Anfang- und Randbedingungen
  - Ergebnis: lokale Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsfelder
  - **ABER** Voraussetzung: bekannte Phasengrenzfläche zu jedem Zeitpunkt
- **Weitere Modelle, z.B. Zellenmodelle vorhanden**