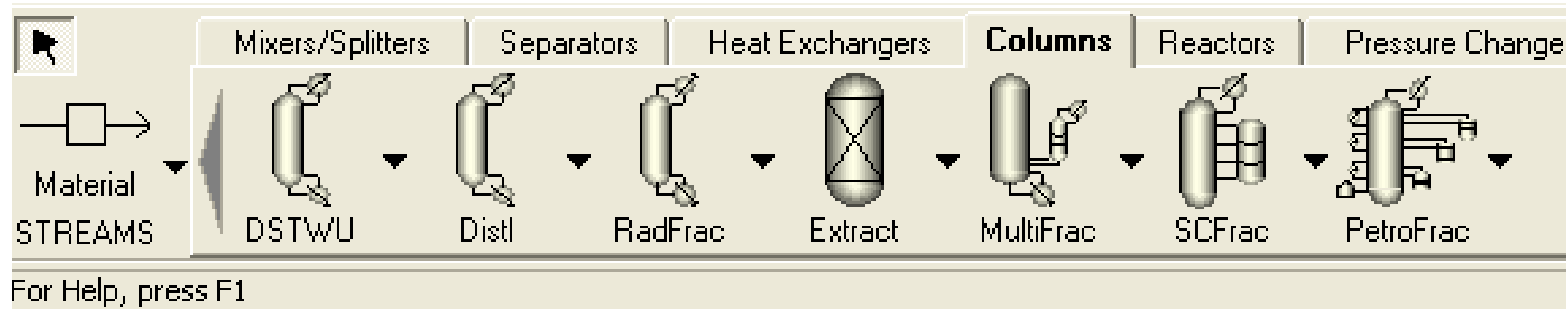
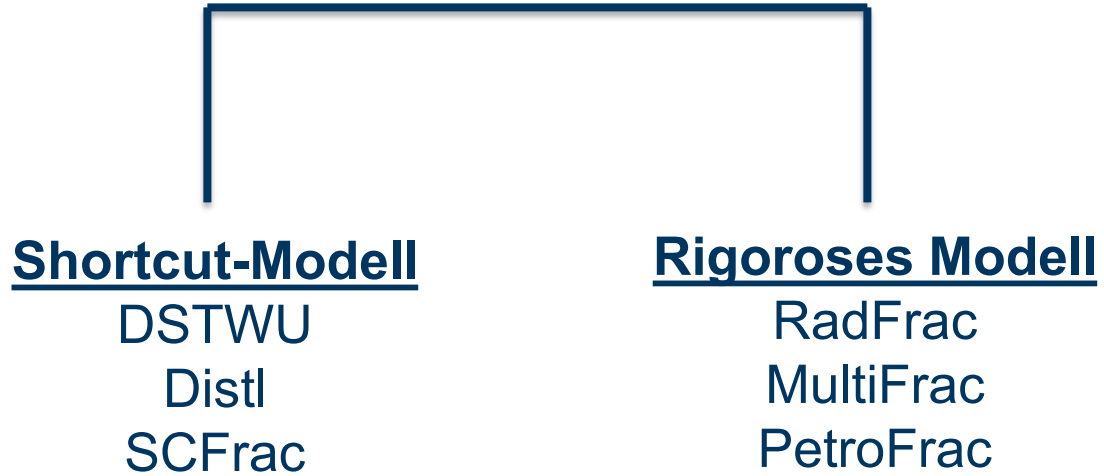




Prozesstechnik

Ergänzung zu Kapitel 3: Modellierung von Trennkolonnen

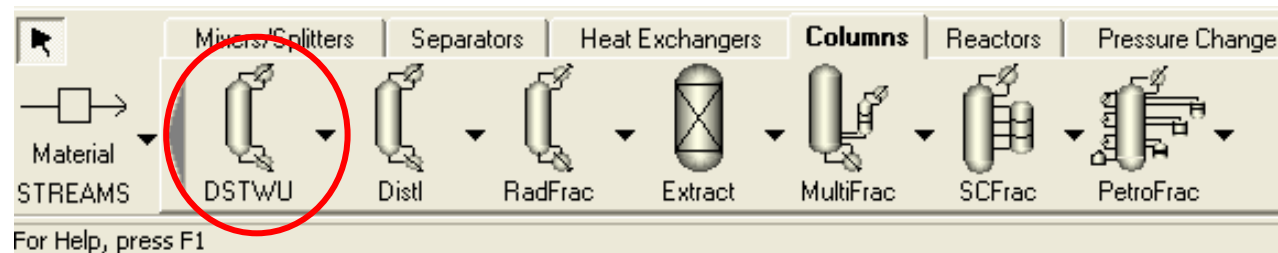
Vorlesung für Master-Studierende



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)



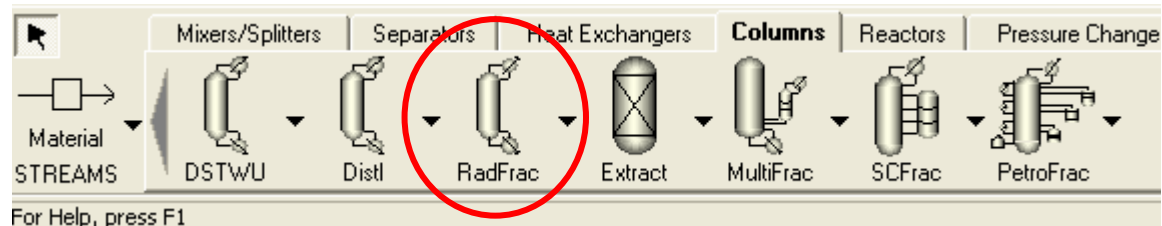
Rigoroses Modell

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:

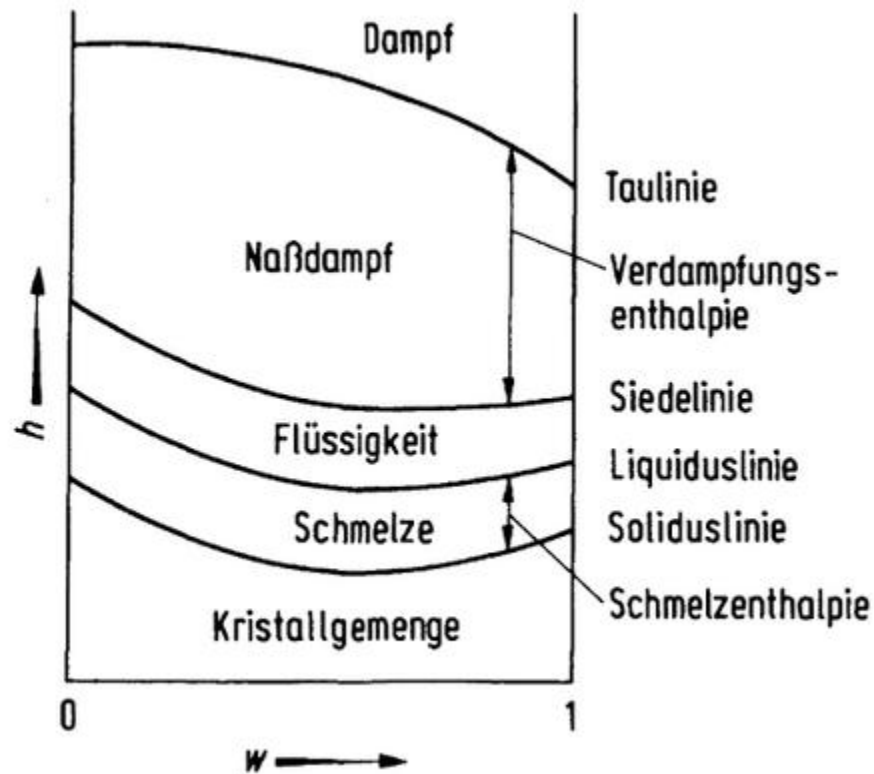
- Gilt ausschließlich für binäre Gemische
- Konstante Volumenströme im Auf- und Abtriebsteil der Kolonne
- Innerhalb des betrachteten Temperatur- und Druckbereichs haben die Verdampfungsenthalpien konstante Werte
- Mischungsenthalpien und Wärmeverluste werden vernachlässigt
- Energie zur Kondensation 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 $(1/v_{\min} + 1)$

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

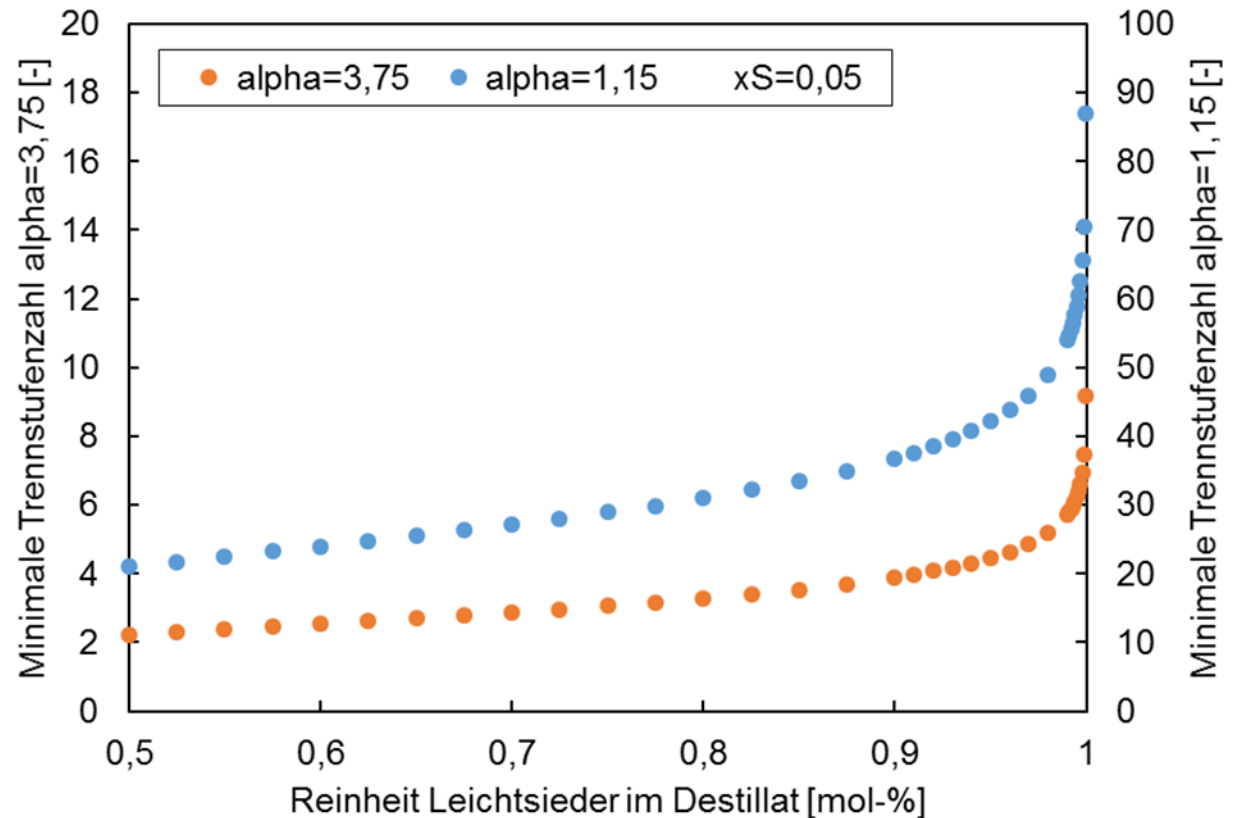


- **Annahmen:**
 - Mehrkomponentensysteme werden auf ein binäres Trennproblem reduziert.
 - Annahme konstanter Trennfaktoren auf jeder Stufe
 - Annahme konstanter Volumenströme im Auf- und Abtriebsteil
- **Ermöglicht die Bestimmung von:**
 - N_{\min} , N , v_{\min} , v , \dot{V}_L , \dot{V}_D , \dot{Q}_{cond} , \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 $\rightarrow \infty$

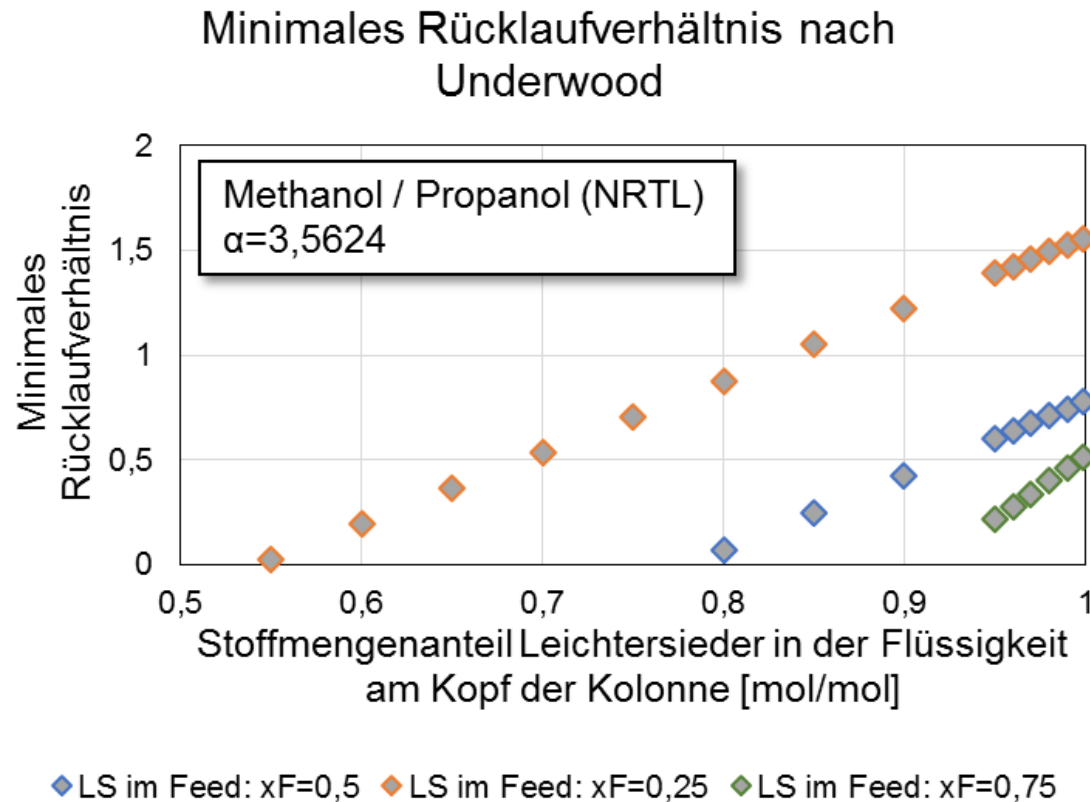
$$N_{t,min} = \frac{\lg \frac{x_S \cdot (1 - x_D)}{x_D \cdot (1 - x_S)}}{\lg \alpha_{12}}$$



Minimales Rücklaufverhältnis nach Underwood

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

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

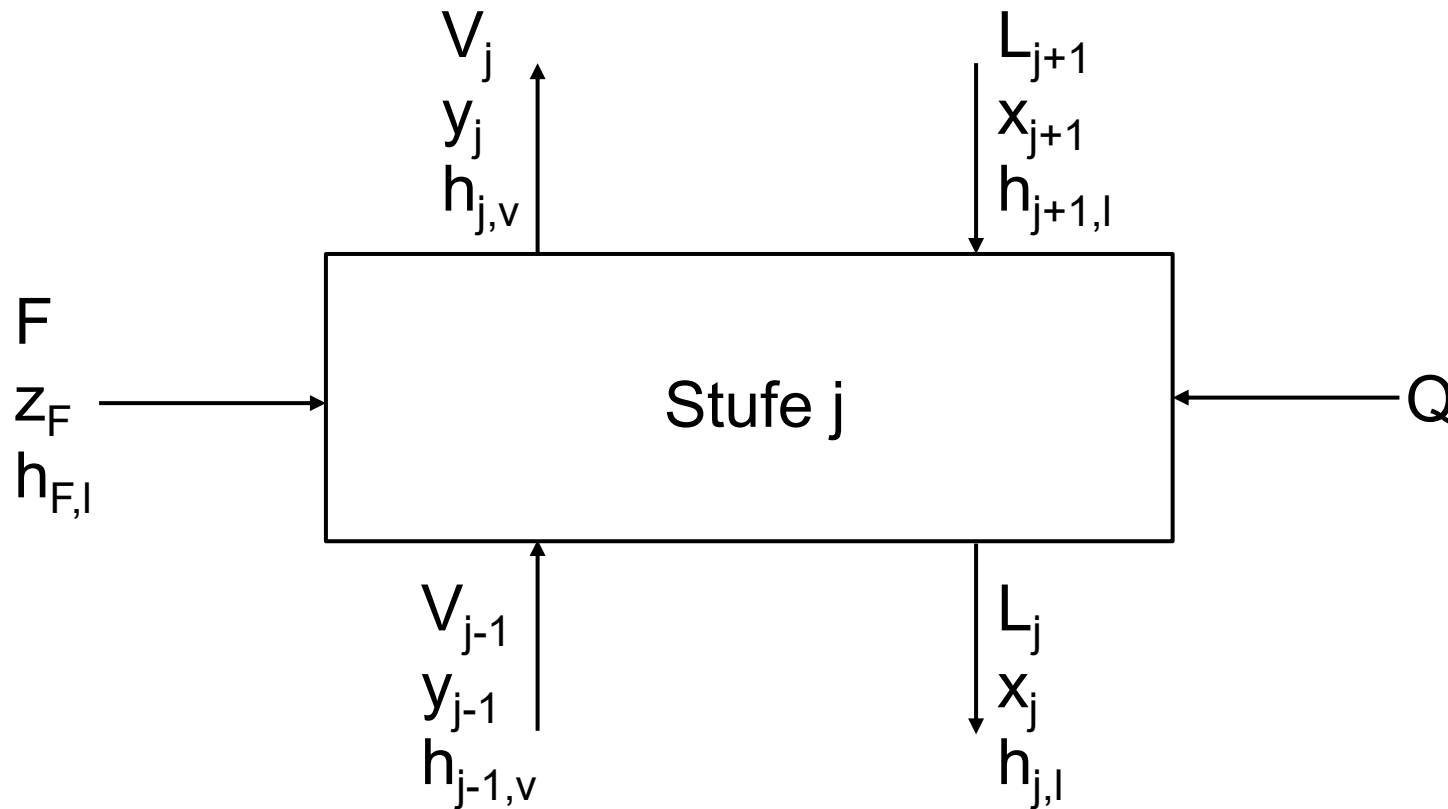


- Empirische Korrelationen
- Rücklaufverhältnis: $v = 1,05 \dots 1,3 \cdot v_{min}$

- 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

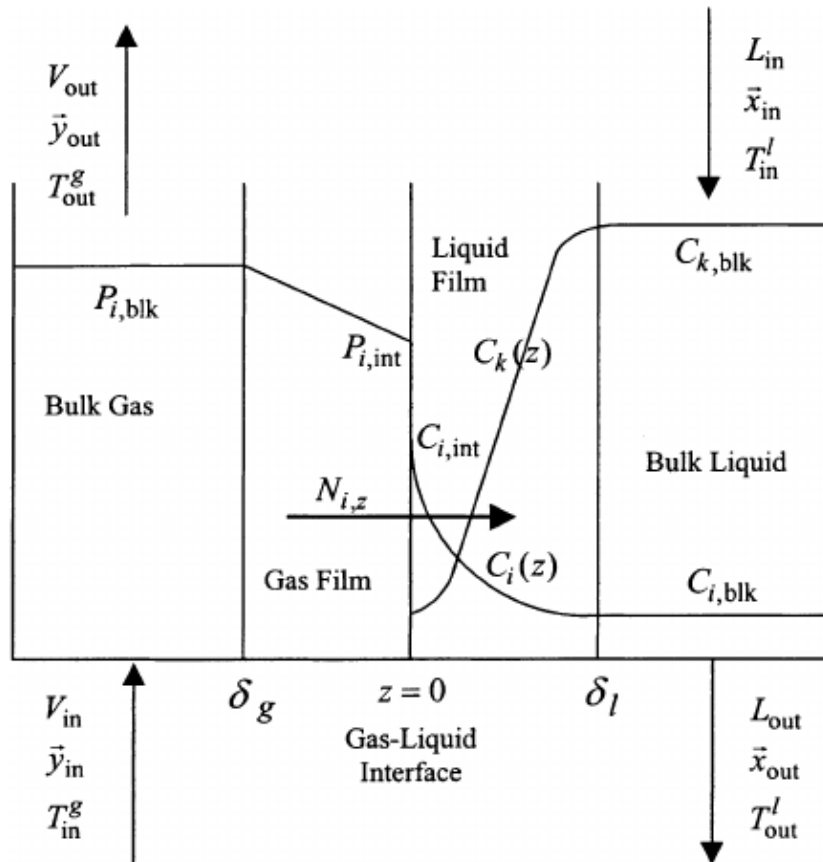
$$L_{j+1} \cdot h_{j+1,l} - L_j \cdot h_{j,l} + V_{j-1} \cdot y_{j-1,v} - V_{j+1} \cdot y_{j,v} + F_j \cdot h_{F,j} + Q = 0$$

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

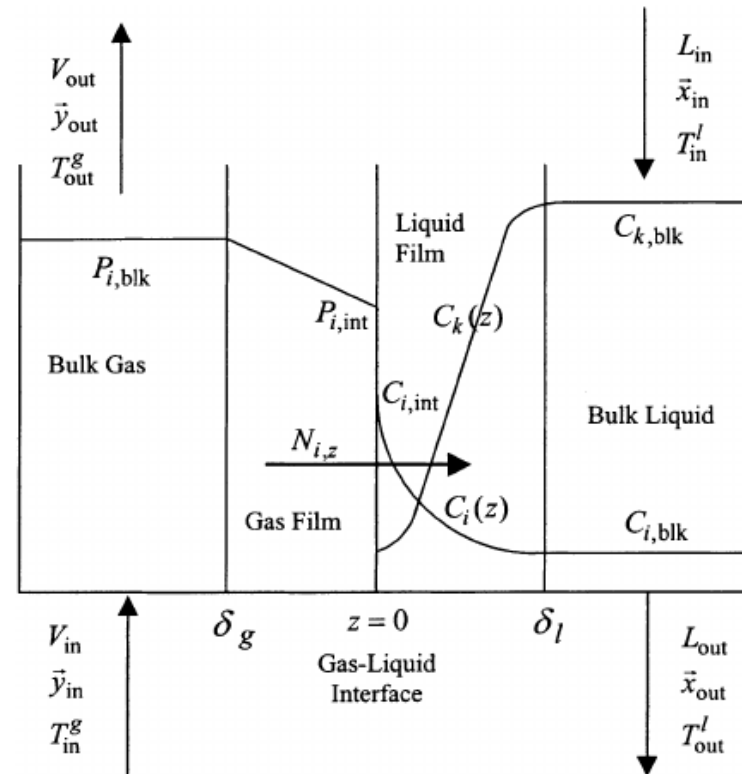
Hydraulic Equation for Pressure Drop

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 $a = f(Re_L, Re_G, \text{Geometrie})$

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

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

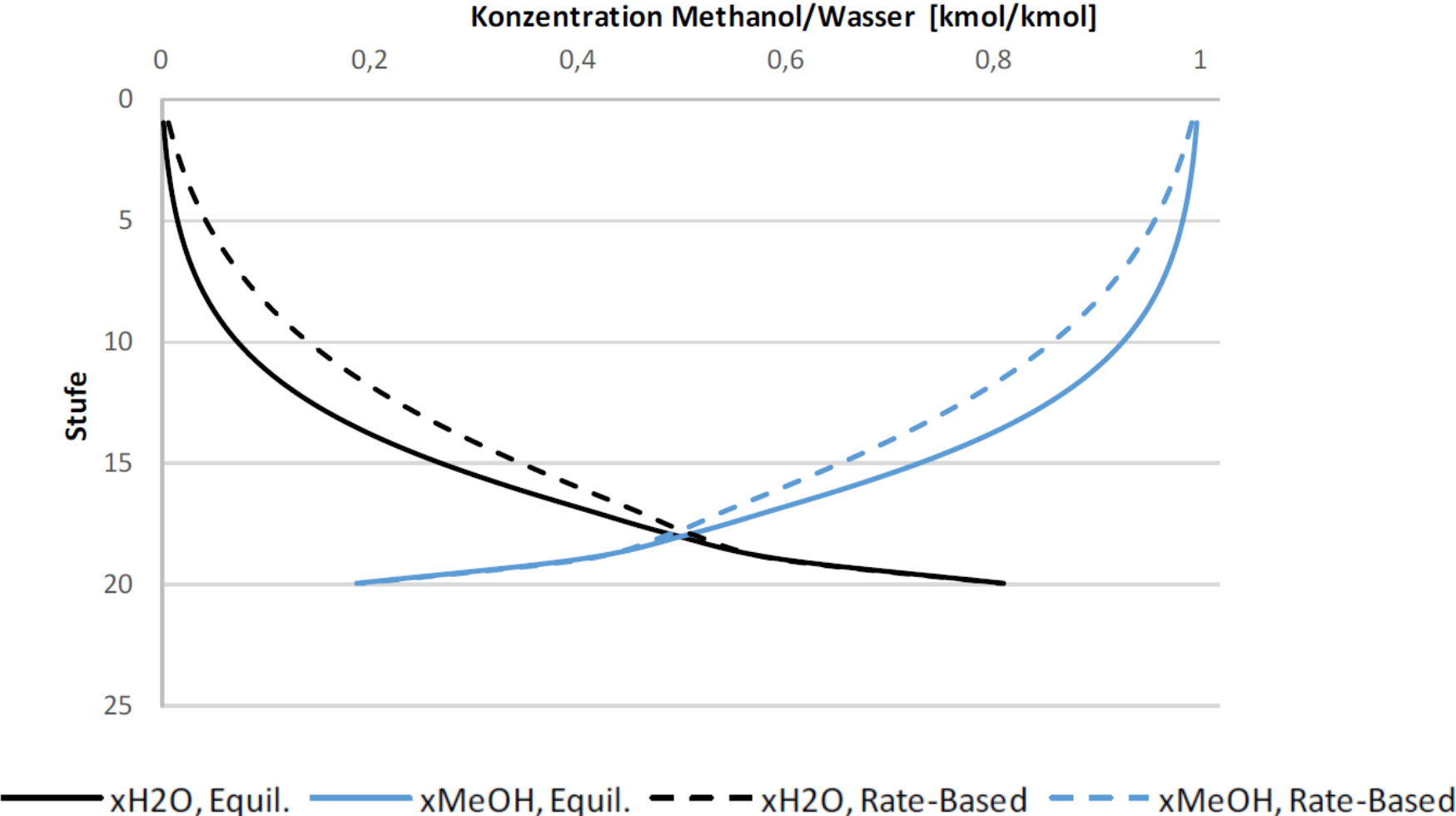
$$Sh_L = 125 Re_G^{0,684} Re_L^{0,087} W'^{0,051} Sc_L^{0,5}$$

Benötigte thermodynamische Stoffeigenschaften

Gleichgewichtsstufenmodelle	Rate-Based Modelle
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**

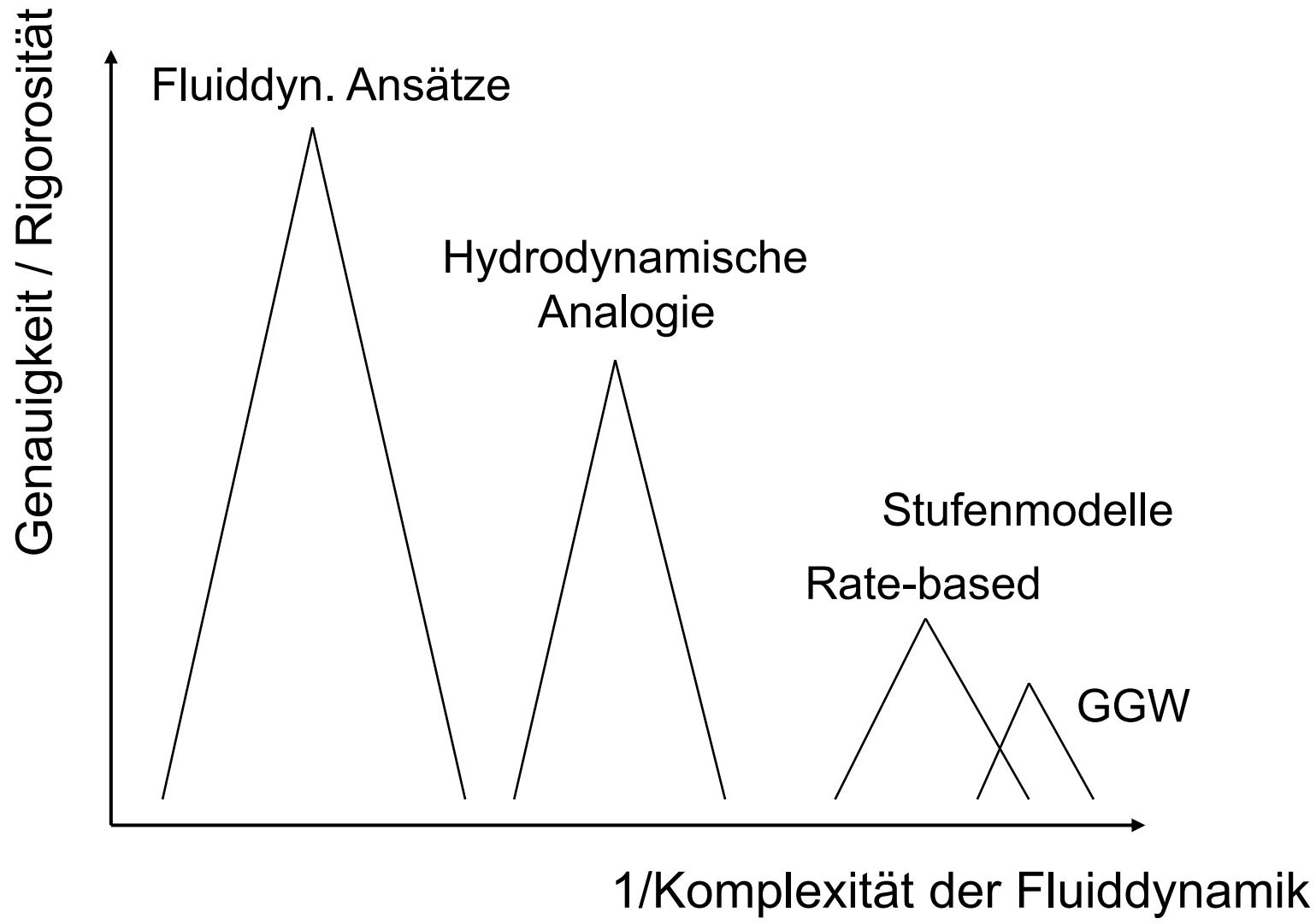
- **Beispiel 1: Wang-Henke-Verfahren**

- 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**