



Grundlagen der Prozess-Simulation für Rektifikation und Absorption

Trennung von Mehrkomponentengemischen in komplexen Bodenkolonnen

Die Kolonne besteht aus n Böden und wird kontinuierlich und stationär betrieben. Die Kolonne mit n Böden, Kopfkondensator und Verdampfer ist vorgegeben. Im Folgenden soll stets ein m -Komponenten-Gemisch vorliegen, das nur eine flüssige Phase auf den Böden hat (nur VLE-, kein LLVE-Gleichgewicht). Für eine gegebene Kolonne sind die Profile der Zusammensetzung und der Temperatur zu berechnen.

Kommt ein oder mehrere Seitenströme und/oder Zulaufströme vor, so spricht man von einer komplexen Kolonne. Die Mengenströme \dot{S}_j , flüssig, und \dot{W}_j , dampfförmig, sind bekannt. Auch die \dot{Q}_j sind vorgegeben! (siehe Abbildung):

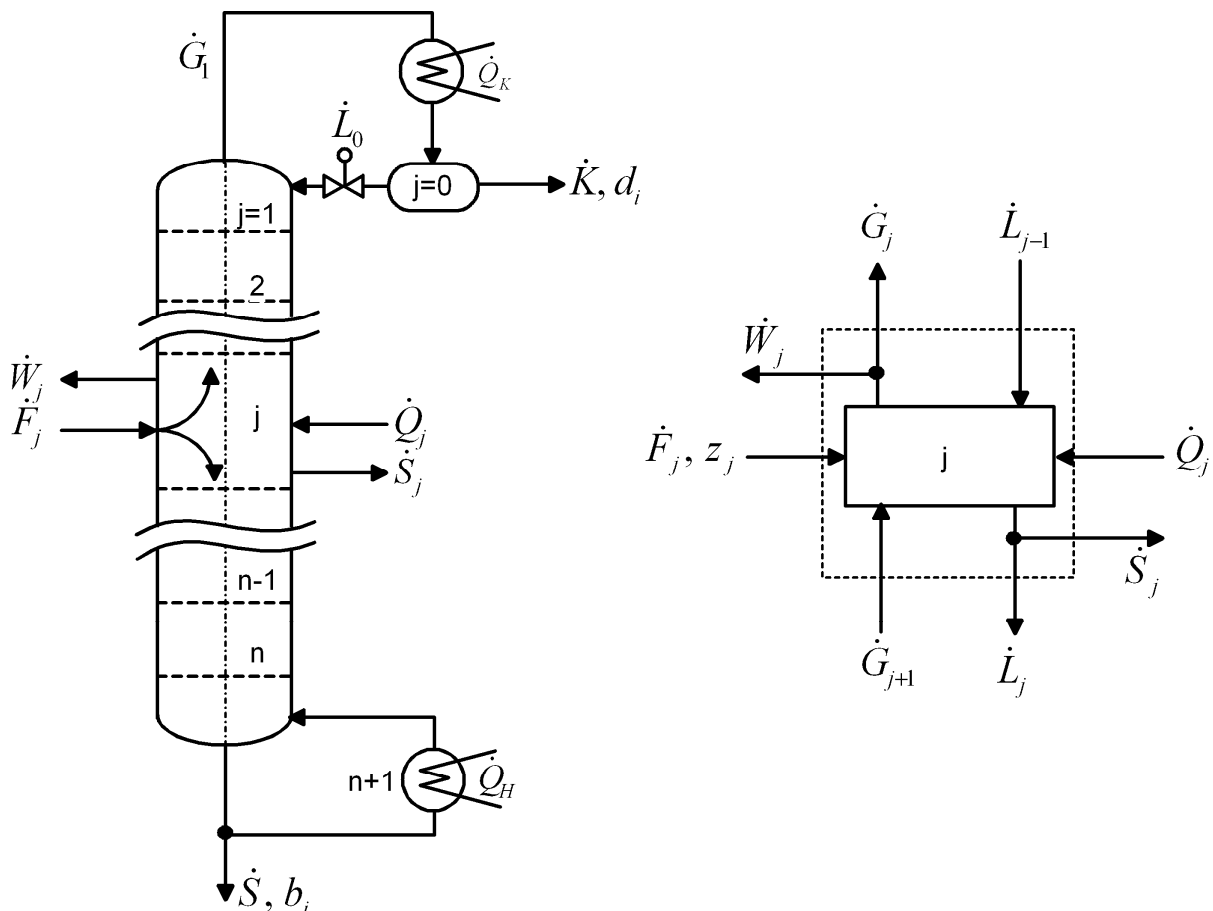


Abbildung 1: Schema einer komplexen Bodenkolonne, mit Teilkondensator und Teilverdampfer. Modell der beliebigen Trennstufe j .

1. MESH-Gleichungen: stationärer Betrieb

Definitionen: x_{ji}, y_{ji} = Molanteile der **Komponente i** in Flüssigkeit, Gasphase auf der **Stufe j**

$$r_j^G = \frac{\dot{W}_j}{\dot{G}_j}; r_j^L = \frac{\dot{S}_j}{\dot{L}_j}$$

M-Gleichungen

Mengenbilanz: (1 Gleichung)

$$M_j^t \equiv \dot{G}_{j+1} - (\dot{G}_j + \dot{W}_j) + \dot{L}_{j-1} - (\dot{L}_j + \dot{S}_j) + \dot{F}_j = 0 \quad (1)$$

Komponentenbilanzen: (m Gleichungen)

$$M_{ji} \equiv \dot{G}_{j+1}y_{j+1,i} - (\dot{G}_j + \dot{W}_j)y_{ji} + \dot{L}_{j-1}x_{j-1,i} - (\dot{L}_j + \dot{S}_j)x_{ji} + \dot{F}_jz_{ji} = 0 \quad (2)$$

E-Gleichungen („Equilibrium“) unter Beachtung des Murphree-Verstärkungsverhältnisses (jeder Komponente i im Gemisch ohne Mischungslücke) (s. später)

$$E_{ji} = E_{ji}^{MG}(x_j)K_{ji}(T_j, x_j)x_{ji} - y_{ji} + (1 - E_{ji}^{MG}(x_j))y_{j+1,i} = 0 \quad (\text{m Gl.}) \quad (3)$$

Oft wird die „theoretische“ Trennstufe angenommen, also alle $E_{ji}^{MG} = 1$ gesetzt.

Summations-Gleichungen m-Komponenten Gemisch

$$S_j^G \equiv \sum_{i=1}^m y_{ji} - 1 = 0 \quad (1 \text{ Gl.}) \quad (5)$$

$$S_j^L \equiv \sum_{i=1}^m x_{ji} - 1 = 0 \quad (1 \text{ Gl.}) \quad (6)$$

Gl. (5) und (6) werden meist zusammengefasst

$$S_j^{GL} \equiv \sum_{i=1}^m \left(y_{ji} - \frac{l_{ji}}{\dot{L}_j} \right) = 0 \quad (7)$$

$$x_{ji} = \frac{l_{ji}}{\dot{L}_j} \quad (8)$$

H-Gleichungen: Energie-Bilanz offenes System mit (**H**eat-balance) Ent-**H**alpie-Ströme

$$H_j \equiv \dot{G}_{j+1}\bar{h}_{j+1}^G - (\dot{G}_j + \dot{W}_j)\bar{h}_j^G + \dot{L}_{j-1}\bar{h}_{j-1}^L - (\dot{L}_j + \dot{S}_j)\bar{h}_j^L + \dot{F}_j\bar{h}_{Fj} + \dot{Q}_j = 0 \quad (1 \text{ Gl.}) \quad (9)$$

Das ist ein Satz von nichtlinearen algebraischen Gleichungen. Die Struktur der Variablen ist linear. Im instationären Fall ergeben die Gleichungen (1), (2) und (9) nicht Null. Stattdessen enthalten Sie den jeweiligen Akkumulationsterm.

Für jede Trennstufe j sind $(2m+4)$ Gleichungen vorhanden. Gesucht sind je Trennstufe die Unbekannten (Variablen) m -mal x_j , m -mal y_j , Temperatur T_j , und die Mengenströme \dot{G}_j , \dot{L}_j , d.h. das sind pro Trennstufe j $(2m+3)$ Unbekannte. Deshalb werden zur Lösung $(2m+3)$ Gleichungen ausgewählt, d.h. es werden Kolonnen- und Prozessvariablen vorgegeben.

Dies sind meistens folgende Größen:

1. Zulaufströme: Mengenstrom \dot{F}_j , Zusammensetzung z_j , und Zustand \bar{h}_{Fj}

2. Rücklaufverhältnis v

$$v \equiv \frac{\dot{L}_0}{\dot{K}} \text{ bzw. } \frac{\dot{L}_1}{\dot{K}} !$$

$$v^i \equiv \frac{\dot{L}_0^i}{\dot{K}^i}$$

(oder die Mengenströme \dot{L}_0, \dot{G}_1)

3. Druck in der Kolonne für alle Böden (Druckverluste!) oder p am Kopf (isobar)

4. Mindestens ein Produktstrom, z.B. \dot{K}

5. Betrieb des Kopfkondensators (Total- oder Teilkondensator)

6. Bodenzahl n , Lage der Zulauf- und Seitenstromböden (\dot{F}_j , \dot{S}_j , \dot{W}_j): Entwurfsmethode!

7. Mengenströme \dot{S}_j , \dot{W}_j der Seitenströme

2. Lösung der MESH-Gleichungen für einfache Kolonnen - Kurzmethode nach Thiele-Geddes

Es werden nur einfache Kolonnen betrachtet. Eine einfache Kolonne hat folgende Eigenschaften:

- a) 1 Zulauf (\dot{F}, x_F, \bar{h}_F)
- b) Kopf- und Sumpfproduktstrom \dot{K} und \dot{S} .
- c) Adiabate Trennsäule

(Ströme in mol/s, Zusammensetzung Molenbrüche)

2.1 Vereinbarungen, Definitionen

- Zulauf \dot{F}

Je nach Zulaufzustand (unterkühlte, siedende oder teilweise verdampfte Flüssigkeit; oder kondensierender oder überhitzter Dampf) wird der Zulauf in Komponentenströme aufgeteilt:

$$\dot{F} \equiv \dot{F}^L + \dot{F}^G \quad (10)$$

$$\dot{F}_{z_{Fi}} \equiv \dot{F}^L x_{Fi} + \dot{F}^G y_{Fi} \quad (11)$$

$$\dot{F} \bar{h}_F \equiv \dot{F}^L \bar{h}'_F + \dot{F}^G \bar{h}''_F \quad (15)$$

- Einführung von Komponentenströmen:

Allgemein	Kopf-/Sumpfprodukt	Zulaufstrom
$v_{ji} \equiv \dot{G}_j y_{ji} \quad (18)$	$d_i \equiv \dot{K} x_{Ki} \hat{=} v_{oi} \quad (20)$	$v_{Fi} \equiv \dot{F}^G y_{Fi} \quad (22)$
$l_{ji} \equiv \dot{L}_j x_{ji} \quad (19)$	$b_i \equiv \dot{S} x_{Si} \hat{=} l_{n+1,i} \quad (21)$	$l_{Fi} \equiv \dot{F}^L x_{Fi} \quad (23)$

somit schreibt sich Gl. (11) jetzt:

$$\dot{F}_{z_{Fi}} \equiv l_{Fi} + v_{Fi} \quad (24)$$

- Annahme: Theoretische Trennstufe

Auf jedem Boden sind Dampf und Flüssigkeit komplett quervermischt => Der aufsteigende Dampf ist jeweils im Gleichgewicht mit der ablaufenden Flüssigkeit!

Aus (18) folgt

$$v_{ji} \equiv \dot{G}_j y_{ji} = \frac{\dot{G}_j K_{ji}(T_j, \bar{x}_j)}{\dot{L}_j} \dot{L}_j x_{ji} \quad (25)$$

$$v_{ji} = S_{ji} l_{ji} \quad (26)$$

Abstreifkoeffizient (stripping coeff.; nicht Faktor λ_i !)

$$S_{ji} = \frac{K_{ji}(T, \bar{x})}{\left(\frac{\dot{L}}{\dot{G}}\right)_j} = \frac{K_{ji}}{\text{tg} \Theta_j} \quad \text{lokale Steigung der Betriebslinie} \quad (27)$$

Alternativ folgt aus (22)

$$l_{ji} = A_{ji} v_{ji} \quad (28)$$

mit Absorptionskoeffizient

$$A_{ji} = \frac{\left(\frac{\dot{L}}{\dot{G}}\right)_j}{K_{ji}} = \frac{1}{S_{ji}} \quad (29)$$

• Betrieb Kopfcondensator

Totalkondensator: alles wird kondensiert!

\dot{K} -Strom wird i.a. vom Sammler als Flüssigkeit im Siedezustand abgezogen

Teilkondensator:

Wirkt als Trennstufe! Betrieb nur bei kleinem $\Delta T = T_{\dot{G}_1} - T_{\text{Kühler}}$ möglich. \dot{K} -Strom wird i.a. als Sattedampf (aus Kondensator) abgezogen

$$y_{li} = x_{Ki} = x_{oi} \quad (30)$$

$$y_{oi} = K_{oi} x_{oi} \quad (36)$$

$$\bar{h}_K = \sum_{i=1}^m x_{Ki} h_i^L \quad h_i^L = h_{oi}^L + h_i^{LE} \quad (31)$$

$$\bar{h}_K = \sum_{i=1}^m y_{oi} h_i^G \quad (37)$$

h_i^L partielle molare Flüssigkeits-Enthalpie

meist $h_i^G \approx h_{oi}^G$ (Reinstoffwert)

$$d_i = \frac{1}{A_{oi}} l_{oi} \quad (32)$$

$$\dot{G}_1 - \dot{L}_o - \dot{K} = 0$$

$$\dot{G}_1 y_{li} - \dot{L}_o x_{oi} - \dot{K} y_{oi} = 0$$

$$d_i = \frac{\dot{K}}{\dot{L}_o} \dot{L}_o x_{oi} = \frac{\dot{K}}{\dot{L}_o} l_{oi} \quad (33)$$

$$y_{li} = \frac{\dot{L}_o}{\dot{G}_1} x_{oi} + y_{oi} \left(1 - \frac{\dot{L}_o}{\dot{G}_1}\right)$$

$$A_{oi} = \frac{\dot{L}_o}{\dot{K}} = v \text{ Rücklaufverhältnis} \quad (34)$$

$$d_i = \dot{K} y_{oi} = \left(\frac{\dot{K} K_{oi}}{\dot{L}_o}\right) \dot{L}_o x_{oi} \quad (39)$$

$$A_{oi} = \frac{\dot{L}_o}{K_{oi}} = \frac{v}{K_{oi}} \quad (40)$$

Trennstufe: Gleichgewichtsannahme am Ende des Kondensators. Dies bedeutet aber nicht, dass der Kondensator im Gleichgewicht arbeitet! Im Nachkondensator (Kühler genannt!) gilt:

$$y_{oi} = x_{Ki} \quad (38)$$

• Betrieb Verdampfer

Totalverdampfer: Gesamtstrom wird verdampft! (meist Durchlaufverdampfer)

Teilverdampfer (oft Umlaufverdampfer, z.B. kettle reboiler oder Sumpfordampfer)

Diese Bauart arbeitet als Trennstufe

$$y_{n+1,i} = x_{Si} \quad (41)$$

$$y_{n+1,i} = K_{n+1,i} x_{Si}$$

$$v_{n+1,i} \equiv \dot{G}_{n+1} y_{n+1,i} = \frac{\dot{G}_{n+1}}{\dot{S}} \dot{S} x_{Si} \quad (41)$$

$$v_{n+1,i} \equiv \dot{G}_{n+1} y_{n+1,i} = \frac{\dot{G}_{n+1} K_{n+1,i}}{\dot{S}} \dot{S} x_{Si} \quad (44)$$

$$b_i = A_{n+1,i} v_{n+1,i} \text{ (wg. } K_{n+1,i} = 1) \quad (42)$$

$$b_i = A_{n+1,i} v_{n+1,i} \quad (45)$$

$$A_{n+1,i} = \frac{\dot{S}}{\dot{G}_{n+1}} = \frac{1}{r_v} \quad (43)$$

$$A_{n+1,i} = \frac{\dot{S}}{\dot{G}_{n+1} K_{n+1,i}} \quad (46)$$

2.2 Komponenten-Bilanz (M-Bilanz) um jede Stufe j für jede Komponente i:

$$\begin{array}{rcll}
 -d_i & -l_{oi} & +v_{li} & = 0 & j = 0 & \text{(Kopf)} \\
 \vdots & & & & & \\
 l_{j-1,i} & -v_{ji} & -l_{ji} & +v_{j+1,i} & = 0 & 1 \leq j \leq f-2 \\
 \vdots & & & & & \\
 l_{f-2,i} & -v_{f-1,i} & -l_{f-1,i} & +v_{fi} & = -v_{Fi} & j = f-1 \\
 l_{f-1,i} & -v_{fi} & -l_{fi} & +v_{f+1,i} & = -l_{Fi} & j = f \\
 \vdots & & & & & \\
 l_{j-1,i} & -v_{ji} & -l_{ji} & +v_{j+1,i} & = 0 & f+1 \leq j \leq n \\
 \vdots & & & & & \\
 l_{ni} & -v_{n+1,i} & -b_i & & = 0 & j = n+1 & \text{(Sumpf)}
 \end{array} \tag{47}$$

Dieses Gleichung-System hat je 2 Unbekannte in den n+2 Zeilen!

- Substitution aller l_{ji} (Gl.(25)) und b_i (Gl.(38)) in Gleichungs-System (47) ergibt:

$$\begin{array}{rcll}
 -(A_{oi} + 1)d_i & +v_{li} & & = 0 & (0) \\
 \vdots & & & & \\
 +A_{j-1,i}v_{j-1,i} & -(A_{ji} + 1)v_{ji} & +v_{j+1,i} & = 0 & (1 \leq j \leq f-2) \\
 \vdots & & & & \\
 +A_{f-2,i}v_{f-2,i} & -(A_{f-1,i} + 1)v_{f-1,i} & +v_{fi} & = -v_{Fi} & (f-1) \\
 +A_{f-1,i}v_{f-1,i} & -(A_{fi} + 1)v_{fi} & +v_{f+1,i} & = -l_{Fi} & (f) \\
 \vdots & & & & \\
 +A_{j-1,i}v_{j-1,i} & -(A_{ji} + 1)v_{ji} & +v_{j+1,i} & = 0 & (f+1 \leq j \leq n) \\
 \vdots & & & & \\
 +A_{ni}v_{ni} & -(A_{n+1,i} + 1)v_{n+1,i} & & = 0 & (n+1)
 \end{array} \tag{48}$$

Lösung mit der Matrix-Methode

Für jede Komponente i gilt in Matrizenform

$$\boxed{A_i \vec{v}_i = -\vec{L}_i} \quad \text{Diese } i \text{ Matrizen beschreiben nur die } \mathbf{M}\text{-Gleichungen von MESH!} \tag{49}$$

Einzelmatrizen: $d_i \hat{=} v_{0i}$

$$\vec{v}_i^T = (d_i, v_{1i}, v_{2i}, \dots, v_{f-1,i}, v_{fi}, \dots, v_{ni}, v_{n+1,i}) \tag{50}$$

$$\vec{L}^T = (0,0,0, \dots, v_{Fi}, l_{Fi}, \dots, 0) \tag{51}$$

$$A_i = \begin{pmatrix} \rho_{oi} & 1 & 0 & 0 & & 0 \\ A_{oi} & \rho_{1i} & 1 & & & \\ & A_{1i} & \rho_{2i} & & & \\ & & \vdots & & & \\ 0 & & A_{f-1,i} & \rho_{fi} & 1 & 0 \\ & & & \vdots & & \\ 0 & & & A_{n-1,i} & \rho_{ni} & 1 \\ & & & 0 & A_{ni} & \rho_{n+1,i} \end{pmatrix} \quad (52)$$

mit $\rho_{ji} = -(A_{ji} + 1)$ (53)

A_i ist eine quadratische Matrix der Dimension $(n+2) \cdot (n+2)$. Für die Gesamtströme gilt:

$$\begin{aligned} \dot{F} - \dot{K} - \dot{S} &= 0 \\ \dot{G}_{j+1} - \dot{L}_j - \dot{K} &= 0 \quad (0 \leq j \leq f-2) \\ \dot{G}_f + \dot{F}_G - \dot{L}_{f-1} - \dot{K} &= 0 \quad (f-1) \\ \dot{L}_j - \dot{G}_{j+1} - \dot{S} &= 0 \quad (f \leq j \leq n) \end{aligned} \quad (54)$$

Lösungsweg:

Zunächst werden geschätzt:

- a) Temperaturen $\{T_j\}$ auf allen Stufen j . (z. B. lineare Temperaturverteilung)
- b) Gesamtströme $\{\dot{G}_j, \dot{L}_j\}$ unter der Annahme äquimolaren Stofftransportes (Gl. 42).

Da nun alle $\{T_j\}$, $\{\dot{G}_j\}$ und $\{\dot{L}_j\}$ vorgegeben sind, können die A_{ji} -Elemente der Matrix (47) berechnet werden. Das Gleichungssystem (49) wird nach den Unbekannten \bar{v}_i mit geeigneten Lösungsmethoden für Matrizen aufgelöst, z.B. durch Bildung der inversen Matrix

$$\underbrace{A_i^{-1} A_i}_{\text{Einheitsmatrix}} \bar{v}_i = -A_i^{-1} \bar{L}_i = \bar{v}_i \quad (55)$$

oder Gauß rekursiv für Bändermatrix, **oder EXCEL-Funktionen MINV und MMULT (s. Übung).**

• Zusammensetzungs-Profil

Mittels der Werte $\{v_{ji}\}$ und $\{A_{ji}\}$ folgt auch $\{l_{ji} = A_{ji} v_{ji}\}$. Damit werden die Zusammensetzungen der Dampf- bzw. der Flüssig-Phase berechnet.

$$y_{ji} = \frac{v_{ji}}{\dot{G}_j} \quad \text{und} \quad x_{ji} = \frac{l_{ji}}{\dot{L}_j} \quad (56), (57)$$

Das sind erste Näherungen, da die $\{T_j\}$ und $\{\dot{G}_j\}$ etc. geschätzt wurden. Im allgemeinen sind die Bedingungen

$$\sum_i^m x_{ji} = 1 \quad \text{und} \quad \sum_i^m y_{ji} = 1 \quad (5), (6)$$

nicht erfüllt!

2.3 Θ -Konvergenzmethode¹

Ziel der Θ -Konvergenzmethode ist es, verbesserte Molenbrüche, $(x_{ji}, y_{ji})_{Kor}$ zu erhalten, mit denen die obigen Bedingungen (5) und (6) erfüllt werden. Aus der Lösung der Matrixgleichung (49) sind die Werte $\{d_i\}_{ber}$ und $\{b_i\}_{ber}$ vorhanden.

Bilanz um Kolonne

$$\dot{F} = \dot{K} + \dot{S} \quad (58)$$

$$\dot{F}z_{Fi} \equiv l_{Fi} + v_{Fi} = (d_i)_{Kor} + (b_i)_{Kor} \quad (59)$$

Es soll ein Wichtungsfaktor Θ mit folgender Eigenschaft existieren:

$$\left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{Kor} = \Theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ber} \quad (60)$$

Mittels Gleichung (59) und (60) erhält man

$$(d_i)_{kor} = \frac{\dot{F}z_{Fi}}{1 + \Theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ber}} \quad (61)$$

Zur Ermittlung von Θ muss folgende Bedingung (s. Gleichung (6)) erfüllt sein

$$g(\Theta) = \sum_{i=1}^m (d_i)_{Kor} - \dot{K} = 0 \quad (62)$$

Gesucht ist die positive Wurzel der Funktion $g(\Theta)$. Es existieren folgende Grenzwerte:

- Für $\Theta = 0$ folgt unter Benutzung von Gleichung (55) in (56a):

$$g(\Theta) = \sum_{i=1}^m \frac{\dot{F}z_{Fi}}{1 + \Theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ber}} - \dot{K} = 0 \quad \text{oder} \quad g(\Theta) = \dot{F} \sum_{i=1}^m z_{Fi} - \dot{K} = \dot{S} = 0 \quad (63)$$

- Für $\Theta \rightarrow \infty$ folgt:

$$g(\Theta) = \sum_{i=1}^m \frac{\dot{F}z_{Fi}}{1 + \Theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ber}} - \dot{K} = 0 \quad \text{oder} \quad g(\Theta) = -\dot{K} = 0 \quad (\text{Asymptote})$$

- Iterative Lösung der Gl. (62) mit Newton-Verfahren

$$\Theta_{n+1} = \Theta_n - \frac{g(\Theta_n)}{g'(\Theta_n)} \quad (64)$$

Ableitung

$$g'(\Theta) = \sum_{i=1}^m \frac{d(d_i)_{Kor}}{d\Theta} = - \sum_{i=1}^m \frac{\dot{F}z_{Fi} \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ber}}{\left(1 + \Theta \left(\frac{b_i}{d_i}\right)_{ber}\right)^2} \quad (65)$$

Startwert: $\Theta_0 = 0!$, Ergebnis: Θ_{n+1} Abbruchschritt: ε

¹ Lyster, u.a.: „Figure Distillation This New Way: Part 1“, Petroleum Refiner 38 (1959), No. 6, S. 221 ff

Mit Hilfe von Gl. (61) und (60) können nun die Werte $\{b_i\}_{\text{Kor}}$ und $\{d_i\}_{\text{Kor}}$ berechnet werden. Dann werden die korrigierten Komponentenströme bestimmt:

$$(l_{ji})_{\text{Kor}} = (d_i)_{\text{Kor}} \left(\frac{l_{ji}}{d_i} \right)_{\text{ber}} \quad (66)$$

$$(v_{ji})_{\text{Kor}} = (d_i)_{\text{Kor}} \left(\frac{v_{ji}}{d_i} \right)_{\text{ber}} \quad (67)$$

Standardisierte Molenbrüche

$$x_{ji} = \frac{(l_{ji})_{\text{Kor}}}{\sum_{i=1}^m (l_{ji})_{\text{Kor}}} \quad (68)$$

$$y_{ji} = \frac{(v_{ji})_{\text{Kor}}}{\sum_{i=1}^m (v_{ji})_{\text{Kor}}} \quad (69)$$

2.4 Verbesserte Temperaturen der Trennstufen

a) Boiling-Point (BP) -Methode, siehe Übung 2:

$$\sum_{i=1}^m K_{ji}(T_j, \bar{x}_j) x_{ji} - 1 = 0 = f(T_j). \quad (70)$$

Oft ist die logarithmische Form besser geeignet, da fast eine lineare Funktion:

$$\log \left(\sum_i K_{ji}(T, \bar{x}_j) x_{ji} \right) = f \left(\frac{1}{T_j} \right) = 0 \quad (71)$$

b) K_b – Methode, siehe Übung:

2.5 Verbesserte Molenströme

In Praxis gern angewendete Methode „Konstanter Zusammensetzung“

Enthalpiestrom, z.B. G-Phase

$$\begin{aligned} \dot{G}_{j+1} \bar{h}_{j+1}^G &= \dot{G}_{j+1} \sum_i y_{j+1,i} h_{j+1,i}^G(T_{j+1}, y_{j+1}) \\ &= \sum_i v_{j+1,i} h_{j+1,i}^G \end{aligned} \quad (72)$$

Für Verstärkungsteil gilt (Komponenten-Ströme):

$$v_{j+1,i} = l_{ji} + d_i \quad (73)$$

Gl. (73) in (72) eingesetzt ergibt

$$\dot{G}_{j+1} \bar{h}_{j+1}^G = \dot{L}_j \sum_i h_{j+1,i}^G x_{ji} + \dot{K} \sum_i h_{j+1,i}^G x_{Ki} \quad (74)$$

Definition:

$$\bar{h}_{j+1}^G(\bar{x}_j) \equiv \sum_i h_{j+1,i}^G(T_{j+1}, \bar{y}_{j+1}) x_{ji} \quad (75)$$

$$\bar{h}_{j+1}^G(\bar{x}_K) \equiv \sum_i h_{j+1}^G(T_{j+1}, \bar{y}_{j+1}) x_{Ki} \quad (76)$$

Energiebilanz Verstärkungsteil ($A_t=0$) adiabate Kolonne

$$\dot{G}_{j+1} \bar{h}_{j+1}^G - \dot{L}_j \bar{h}_j^L - \dot{K} \bar{h}_K - \dot{Q}_K = 0 \quad (77)$$

Substitution der Gl. (74) in (77) ergibt:

$$\dot{L}_j = \frac{\dot{K} [\bar{h}_K - \bar{h}_{j+1}^G(\bar{x}_K)] + \dot{Q}_K}{\bar{h}_{j+1}^G(\bar{x}_j) - \bar{h}_j^L(\bar{x}_j)} \quad 1 \leq j \leq f-2 \quad (78)$$

Methode „konstanten Zusammensetzung“

Geht man von Gl. (77) aus und beachtet $\dot{G}_{j+1} = \dot{K} + \dot{L}_j$, so folgt

$$\begin{aligned} \dot{L}_j (\bar{h}_{j+1}^G - \bar{h}_j^L) + \dot{K} \bar{h}_{j+1}^G &= \dot{K} \bar{h}_K + \dot{Q}_K \\ \dot{L}_j &= \frac{\dot{K} [\bar{h}_K - \bar{h}_{j+1}^G] + \dot{Q}_K}{\bar{h}_{j+1}^G(\bar{y}_{j+1}) - \bar{h}_j^L(\bar{x}_j)} \end{aligned} \quad (79)$$

Vergleich mit den Gleichungen (78) und (79) zeigt den Unterschied. Statt mit molaren Enthalpien zu rechnen, die von den Näherungswerten T_{j+1} , y_{j+1} und T_j , x_j abhängen, wird mit der Enthalpiedifferenz $\bar{h}_{j+1}^G(\bar{x}_j) - \bar{h}_j^L(\bar{x}_j)$ gerechnet, die von Iterationsschritt zu Iterationsschritt nicht stark verschieden ist. Dies hat einen stabilisierenden Einfluss auf die Rechnung. Ferner gilt im Verstärkungsteil entsprechend Gl. (77)

$$\dot{L}_{f-1} = \frac{\dot{K} [\bar{h}_K - \bar{h}_f^G(\bar{x}_K)] + \dot{F}_G [\bar{h}_f^G(\bar{x}_f) - \bar{h}_f^G] + \dot{Q}_K}{\bar{h}_f^G(x_{f-1}) - \bar{h}_{f-1}^L} \quad (80)$$

Am Kopfkondensator ist folgender Wärmestrom abzuführen

$$\dot{Q}_K = \underbrace{\dot{L}_o}_{\dot{K}} [\bar{h}_1^G(x_o) - \bar{h}_o^L] + \dot{K} [\bar{h}_1^G(x_K) - \bar{h}_K] \quad (81)$$

Für den Abtriebsteil leitet man mit (Gl. (73) und mit der Energiebilanz folgende Beziehung ab:

$$\dot{G}_{j+1} = \frac{\dot{S} [\bar{h}_j^L(x_S) - \bar{h}_S^L] + \dot{Q}_S}{\bar{h}_{j+1}^G - \bar{h}_j^L(\bar{y}_{j+1})} \quad (82)$$

Per Definition bedeuten hierin:

$$\bar{h}_j^L(\bar{x}_S) \equiv \sum_i h_{ji}^L(T_j, \bar{x}_j) x_{Si} \quad (83)$$

$$\bar{h}_j^L(\bar{y}_{j+1}) \equiv \sum_i h_{ji}^L(T_j, \bar{x}_j) y_{j+1,i} \quad (84)$$

2.6 Ergebnis der gesamten Berechnung:

Nun sind auch verbesserte Molenströme $\{\dot{L}_j\}$, $\{\dot{G}_j\}$ bekannt, wobei für die anderen Ströme das System (49) zu verwenden ist. Mit dem jeweils letzten Satz der Werte $\{T_j\}_n$, $\{\dot{L}_j\}$, $\{\dot{G}_j\}$ wird das Gesamtverfahren so lange wiederholt bis für die Zusammensetzung gilt:

$$\boxed{|\bar{x}_{j,n+1} - \bar{x}_{j,n}| \leq \varepsilon_{j1} \quad \text{u.} \quad |\bar{y}_{j,n+1} - \bar{y}_{j,n}| \leq \varepsilon_{j2}} \quad (85)$$

2.7 Zusammenfassung (Thiele-Geddes)

1. Rektifikation

- a. Lösung der Komponentenbilanzen $\boxed{A_i \vec{v}_i = -\vec{L}_i}$ liefert: $v_{ji,ber}$ und $l_{ji,ber}$
- b. Θ -Konvergenz-Methode: $\bar{x}_{j,Kor}$ und $\bar{y}_{j,Kor}$
- c. verbesserte Temperaturen: $\bar{x}_{j,Kor}$ und $\bar{y}_{j,Kor}$
- d. T-Profil, \dot{L}, \dot{G} -Ströme aus Energie-Bilanzen und Methode der konstanten Zusammensetzung, $\bar{h}_j^G, \bar{h}_j^L = f(T_j)$

2. Absorption

- a. Lösung der Komponentenbilanzen $\boxed{A_i \vec{v}_i = -\vec{L}_i}$ liefert: $v_{ji,ber}$ und $l_{ji,ber}$

Evtl. Verwendung des Henry'schen Gesetzes $K_{ji} = \frac{H_{i,LM}(T,p)\gamma_i^*}{\varphi_i''(T,p,\bar{y}_j)p}$:

Achtung: Die verschiedenen Übergangskomponenten i im Lösungsmittel ergeben in der Regel $\gamma_i^* \neq 1$, oft wird allerdings $\gamma_i^* = 1$ angenommen. Dies muss überprüft werden

- b. Θ -Konvergenz-Methode: $\bar{x}_{j,Kor}$ und $\bar{y}_{j,Kor}$
- c. $\dot{L}_j = \sum_{i=1}^m l_{ji,Kor}, \dot{G}_j = \sum_{i=1}^m v_{ji,Kor}$
- d. T-Profil, \dot{L}, \dot{G} -Ströme aus Energie-Bilanzen und Methode der konstanten Zusammensetzung, $\bar{h}_j^G, \bar{h}_j^L = f(T_j)$

3. Lösung der MESH-Gleichungen für komplexe Kolonnen

Je Trennstufe j sind in den MESH-Gleichungen $(2m+3)$ Unbekannte (= Variable) vorhanden.

In Vektorschreibweise gilt:

$$\bar{x}_j^T = (\dot{G}_j, y_{j1}, y_{j2}, \dots, y_{jm}, T_j, x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{jm}, \dot{L}_j) \quad (j=2 \div n-1) \quad (86)$$

Alle Trennstufen zusammengefasst folgt:

$$\bar{X}^T = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n) \quad (87)$$

Der Vektor der Modell-Gleichung pro Stufe j lautet

$$\bar{F}_j^T = (M_j^t, M_{j1}, M_{j2}, \dots, M_{jm}, H_j, E_{j1}, E_{j2}, \dots, E_{jm}, S_j^{GL}) \quad (j=2 \div n-1) \quad (88)$$

Als allgemeine Funktion transponiert gilt:

$$F^T(\bar{X}) = (\bar{F}_1^T(\bar{x}_1), \bar{F}_2^T(\bar{x}_2), \dots, \bar{F}_n^T(\bar{x}_n)); j = 1 \div n \quad (89)$$

Aus dem MESH-Gleichungen folgt die Funktion F

$$F(\bar{X}) = (F^T(\bar{X}))^T = \bar{0} \quad (n \text{ Gln.}) \quad (90)$$

Auch der Kopfkondensator $j=1$ und der Sumpfvverdampfer $j=n$ müssen durch Aufstellen der Gleichungen für \bar{X} und \bar{F} modelliert werden, siehe Thiele-Geddes! Dies soll für den Kopfkondensator mit Dekanter (d.h. 2 flüssige Phasen) geschehen.

3.1 Kondensator mit Dekanter

„M-Bilanz“ um Kondensator

$$M_1^t \equiv \dot{G}_2 + \dot{G}_{K2} - (\dot{L}_1^\alpha + \dot{L}_2^\beta) - (\dot{K}^\alpha + \dot{K}^\beta) = 0 \quad (91)$$

$$M_{li} \equiv \dot{G}_2 y_2 + \dot{G}_{K2} y_{K2} - (\dot{L}_1^\alpha + \dot{K}^\alpha) x_{li}^\alpha - (\dot{L}_1^\beta + \dot{K}^\beta) x_{li}^\beta = 0 \quad (92)$$

„E- Gleichung“ 1. Phase

$$BP_1 \equiv \sum_i^m K_{li}^\alpha ((T_1 + \Delta T), \underline{x}_i^\alpha) x_{li}^\alpha - 1 = 0 \quad (93)$$

„S-Gl.“

$$S_{li}^\alpha \equiv \frac{l_{li}^\alpha}{\sum_k^m l_{lk}^\alpha} - \frac{d_{li}^\alpha}{\sum_k^m d_{lk}^\alpha} = 0 \quad (i=1 \dots m-1) \quad (94)$$

„H- Gleichung“ $\hat{=}$ Spezifikations-Gleichung, siehe unten!

$$SP_1 \equiv SPE_1 - \varphi(\bar{d}^\alpha, \bar{d}^\beta, T_1, \bar{l}_1^\alpha, \bar{l}_1^\beta) \quad (\text{z.B. } \sum l_{lk}^\alpha - v^\alpha \dot{K}^\alpha = 0) \quad (95)$$

Ist der Dekanter vorhanden, so gilt für die 2. Phase:

„E- Gleichung“

$$EA_{li} \equiv x_{li}^\alpha \gamma_{li}^\alpha - x_{li}^\beta \gamma_{li}^\beta = 0 \quad (i = 1 \dots m) \quad (96)$$

„S- Gleichung“

$$S_{li}^{\beta} \equiv \frac{l_{li}^{\beta}}{\sum_k l_{lk}^{\beta}} - \frac{d_{li}^{\beta}}{\sum_k d_{lk}^{\beta}} = 0 \quad (i=1\dots m-1) \quad (97)$$

„**H**- Gleichung“ $\hat{=}$ Spezifikations- Gleichung, (z.B. Strom \dot{K}^{β} , v^{β} etc.)

$$SP_2 \equiv SPE_2 - \varphi(\bar{d}^{\alpha}, \bar{d}^{\beta}, T_1, \bar{l}_1^{\alpha}, \bar{l}_1^{\beta}) \quad (98)$$

Ist keine 2. Flüssige Phase vorhanden, so sind die Gleichungen (96) bis (98) nicht zu verwenden. Die entsprechende Funktion lautet:

$$\bar{F}_1^T = (M_{11}, M_{12}, \dots, M_{1m}, BP_1, S_{11}^{\alpha}, \dots, S_{1,m-1}^{\alpha}, SP_1, EA_{11}, \dots, EA_{1m}, S_{11}^{\beta}, \dots, S_{1,m-1}^{\beta}, SP_2) \quad (99)$$

Dazu gehört die Unbekannte

$$\bar{x}_1^T = (d_{11}^{\alpha}, d_{12}^{\alpha}, \dots, d_{1m}^{\alpha}, T_1, l_{11}^{\alpha}, \dots, l_{1,m-1}^{\alpha}, l_{1m}^{\alpha}, l_{11}^{\beta}, \dots, l_{1m}^{\beta}, d_{11}^{\beta}, \dots, d_{1,m-1}^{\beta}, d_{1m}^{\beta}) \quad (100)$$

Für die Spezifikationen SP_1 und SP_2 werden häufig folgende Vorgaben gemacht:

- Die Rücklaufverhältnisse v^{α}, v^{β} ($v^i \equiv \dot{L}_1^i / \dot{K}^i$) bzw. v^{α} und das Verhältnis v^{α} / v^{β}
- Die Mengenströme $\dot{K}^{\alpha}, \dot{K}^{\beta}$
- Die Komponentenströme für die Komp. L in \dot{K} : $d_{11}^{\alpha}, d_{11}^{\beta} \#$

Entsprechende Gleichungen für den Verdampfer siehe Abschnitt 1.2 Gleichung (37) bis (41)!

3.2 Lösung Gl. (90)

3.2.1 Lösungsmethode: Einzelschrittverfahren (decomposition method)

$$\text{Umformung } F(\bar{X}) = 0 \text{ in } L\bar{X} = \bar{b} \quad (101)$$

$$\text{Zerlegung in } L = D + L_L + L_R \quad (102)$$

Ergibt iterative Lösung

$$(D + L_L)\bar{X}_{k+1} = -L_R \bar{X}_k + \bar{b} \quad (103)$$

bzw.

$$\bar{X}_{k+1} = -(D + L_L)^{-1} L_R \bar{X}_k + (D + L_L)^{-1} \bar{b} \quad (104)$$

Verfahren konvergiert, wenn entweder:

- $$\frac{\sum_{k \neq i} |\beta_{ik}|}{|\beta_{ii}|} < 1 \text{ für } i = 1 \dots n \quad (105)$$
- $(D + L_L)^{-1} L_R$ symmetrisch oder positiv definit ist.

3.2.2 Lösungsmethode: Gesamtschritt- oder Iterationsverfahren (repeated substitution)

$$\text{Gegeben } F(\bar{X}) = 0 \text{ in } L\bar{X} = \bar{b} \text{ umgeformt} \quad (106)$$

Zerlegung in

$$L = D + L_0 \quad (107)$$

Und iterative Lösung

$$\bar{X}_{k+1} = -D^{-1} L_0 \bar{X}_k + D^{-1} \bar{b} \quad (108)$$

Bem.: Es ist auch die Umformung möglich

$$\bar{X}_{k+1} = \bar{X}_k - D^{-1} [L\bar{X}_k - \bar{b}] \quad (109)$$

Verfahren 2 (Gl. (108)) ist konvergent, wenn

a. Max. Zeilensumme

$$\frac{\sum_{i \neq k} |\beta_{ik}|}{|\beta_{ii}|} = \|D^{-1}L_0\|_1 < 1 \quad (i=1\dots n) \quad (110)$$

b. Max. Spaltensumme

$$\frac{\sum_{i \neq k} |\beta_{ik}|}{|\beta_{kk}|} = \|D^{-1}L_0\|_2 < 1 \quad (k=1\dots n) \quad (111)$$

$$L\bar{X} = \bar{b}$$

$$\beta_{11}x_1 + \beta_{12}x_2 + \beta_{13}x_3 = b_1$$

$$\beta_{21}x_1 + \beta_{22}x_2 + \beta_{23}x_3 = b_2$$

$$\beta_{31}x_1 + \beta_{32}x_2 + \beta_{33}x_3 = b_3$$

$$\beta_{ik} = f(x)! \quad (B1)$$

$$D = \begin{bmatrix} \beta_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{33} \end{bmatrix}; L_L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \beta_{21} & 0 & 0 \\ \beta_{31} & \beta_{32} & 0 \end{bmatrix}; L_R = \begin{bmatrix} 0 & \beta_{12} & \beta_{13} \\ 0 & 0 & \beta_{23} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (B2)$$

Haben N.-Lösng. $\bar{x} = (x_1^0, x_2^0, x_3^0) \Rightarrow$ Einzelschrittverfahren

$$x_1^1 = \frac{1}{\beta_{11}} (0 - \beta_{12}x_2^0 - \beta_{13}x_3^0 + b_1)$$

$$x_2^1 = \frac{1}{\beta_{22}} (-\beta_{21}x_1^1 + 0 - \beta_{23}x_3^0 + b_2) \quad (B3)$$

$$x_3^1 = \frac{1}{\beta_{33}} (-\beta_{31}x_1^1 - \beta_{32}x_2^1 + 0 + b_3)$$

Zerlegung im Gesamtschrittverfahren

$$D + L_0 = \begin{bmatrix} \beta_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{33} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{21} & 0 & \beta_{23} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & 0 \end{bmatrix} \quad (B4)$$

folgt

$$D^{-1}L_0 = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\beta_{11}} (0 - \beta_{12} - \beta_{13}) \\ \frac{1}{\beta_{22}} (-\beta_{21} \quad 0 - \beta_{23}) \\ \frac{1}{\beta_{33}} (-\beta_{31} - \beta_{32} \quad 0) \end{array} \right\} \quad (B5)$$

Die Methoden 1 und 2 sind dann anwendbar, wenn Bändermatrizen vorliegen. Liegt eine Bändermatrix mit r-Bändern und n-Zeilen vor, so sind bei k-Iterationsschritten $\approx k \cdot r \cdot n$ Multiplikationen notwendig. Direkte Gaußsche Elimination $\approx n^3/3$ Multiplikationen (wenn alle $\beta_{ik} \neq 0$). Wichtig: Fehlerfortpflanzung mit jeder Multiplikation!

3.2.3 Lösungsmethode: Newton-Raphson-Verfahren

Da dieses Verfahren häufig angewendet wird, werden die Grundlagen zusammengefaßt.

Der Variablen-Vektor im Raum R^n ist gesucht

$$\bar{X}^T = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n) \quad (112)$$

Es darf auch im komplexen Raum C^n sein!

Der Einzelvektor folgt aus (76??)

$$\bar{x}_j^{-T} = (\xi_{j1}, \xi_{j2}, \dots, \xi_{j,2m+3}) \quad (\text{Dim. } 2m+3) \quad (113)$$

Im n-dim. Vektorraum R^n (Banach-Raum) gilt:

$$F(\bar{X}) = \begin{bmatrix} \bar{F}_1 (f_{11}(\bar{x}_1), f_{12}(\bar{x}_1), \dots, f_{1,2m+3}(\bar{x}_1)) \\ \bar{F}_2 (f_{21}(\bar{x}_2), f_{22}(\bar{x}_2), \dots, f_{2,2m+3}(\bar{x}_2)) \\ \vdots \\ \bar{F}_n (f_{n1}(\bar{x}_n), f_{n2}(\bar{x}_n), \dots, f_{n,2m+3}(\bar{x}_n)) \end{bmatrix} \quad (114)$$

Lösung von (114) ist nur im linearen V^n möglich. Daher wird F in einer Taylorreihe entwickelt und linearisiert!

Taylorreihe für jedes \bar{F}_j (Entwicklung um \bar{X}^0)

$$\bar{F}_j(\bar{X}) = \bar{F}_j(\bar{X}^0) + (\bar{X} - \bar{X}^0) \text{grad} \bar{F}_j(\bar{X}^0) = 0 \quad (115)$$

$$\bar{F}_j(\bar{X}) = \bar{F}_j(\bar{X}^0) + \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{\partial \bar{F}_j(\bar{X}^0)}{\partial \bar{x}_i} (\bar{x}_i - \bar{x}_i^0) \right\} = 0 \quad (116)$$

Umformung auf Funktionalmatrix (Jacobi-Matrix)

$$\frac{\partial F}{\partial X} = J(F) = \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial \bar{F}_1}{\partial \bar{x}_1} \right] & \left[\frac{\partial \bar{F}_1}{\partial \bar{x}_2} \right] & \dots & \left[\frac{\partial \bar{F}_1}{\partial \bar{x}_n} \right] \\ \left[\frac{\partial \bar{F}_2}{\partial \bar{x}_1} \right] & \left[\frac{\partial \bar{F}_2}{\partial \bar{x}_2} \right] & \dots & \left[\frac{\partial \bar{F}_2}{\partial \bar{x}_n} \right] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left[\frac{\partial \bar{F}_n}{\partial \bar{x}_1} \right] & \left[\frac{\partial \bar{F}_n}{\partial \bar{x}_2} \right] & \dots & \left[\frac{\partial \bar{F}_n}{\partial \bar{x}_n} \right] \end{bmatrix} \quad (\text{Dim. } n \times n) \quad (117)$$

In Abhängigkeit vom aktuellen Wert \bar{X}^k (k-te Iteration) schreibt man

$$J\left(F\left(\bar{X}^k\right)\right) \quad (118).$$

In Gl. (117) ist noch die partielle Differentiation nach den Variablen ξ_{ik} durchzuführen!

Für jedes Blockelement gilt (part. Diff. nach ξ_{ik})

$$\left[\frac{\partial \bar{F}_j}{\partial \bar{x}_i} \right] = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_{j1}}{\partial \xi_{i1}} & \frac{\partial f_{j1}}{\partial \xi_{i2}} & \dots & \frac{\partial f_{j1}}{\partial \xi_{i,2m+3}} \\ \frac{\partial f_{j2}}{\partial \xi_{i1}} & \frac{\partial f_{j2}}{\partial \xi_{i2}} & \dots & \frac{\partial f_{j2}}{\partial \xi_{i,2m+3}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{j,2m+3}}{\partial \xi_{i1}} & \frac{\partial f_{j,2m+3}}{\partial \xi_{i2}} & \dots & \frac{\partial f_{j,2m+3}}{\partial \xi_{i,2m+3}} \end{bmatrix} \quad (\text{Dim. } (2m+3) \times (2m+3) \text{ jedes Element}) \quad (119)$$

Wird eingeführt

$$\Delta\left(\bar{X}^k\right) \equiv \left(\bar{X}^{k+1}\right) - \left(\bar{X}^k\right) \text{ so folgt aus (115) und (116)} \quad (120)$$

$$J\left(F\left(\bar{X}^k\right)\right) \Delta\left(\bar{X}^k\right) = -F\left(\bar{X}^k\right) \quad (121)$$

Wird $\bar{g}(\bar{X}) = \bar{f}(\bar{X}) - \bar{f}(\bar{X}^0)$ (128)

und $\lambda=1-t$ gesetzt (129)

dann folgt z.B. die Newton Homotopie

$H(\bar{X}, \lambda) = \bar{f}(\bar{X}) - \lambda \bar{f}(\bar{X}^0) = 0$ Siehe oben! (130)

Eingesetzt in (127):

$\lambda=1: H(\bar{X}^0, 1) = \bar{g}(\bar{X}^0) = 0$

$\lambda=0: H(\bar{X}^*, 0) = \bar{f}(\bar{X}^*) = 0 \quad \bar{X}^* = \text{Lösung!}$

Durch Differenzieren von Gl. (130) nach p und Umformulierung in ein Anfangswertproblem er-

hält man mit $dp = \sqrt{d\bar{X}^2 + d\lambda^2} = s \hat{=} \text{Bogenlänge}$ (131)

Homotopy Continuation-Methode:

$$\frac{dH(\bar{X}(p), \lambda(p))}{dp} = \sum_i^n \frac{\partial \bar{f}(\bar{X})}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial x_i}{\partial p} - \bar{f}(\bar{X}^0) \underbrace{\frac{\partial \lambda}{\partial p}}_{\dot{\lambda}} = 0 \quad (132)$$

Das Ergebnis in Matrixform lautet

$$\begin{bmatrix} J & | & -\bar{f}(\bar{X}^0) \\ \dot{X}^T & | & \dot{\lambda} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{X} \\ \dot{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \bar{e}^{n+1} \quad (133)$$

worin der Einheitsvektor gegeben ist durch

$(\bar{e}^{n+1})^T = (0, 0, 0, \dots, 0, 1)$ (134)

Die Grenzbedingung des Anfangswertproblems lautet

$$\begin{bmatrix} \bar{X} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (135)$$

In Gl. (132) ist $\bar{u} = \begin{bmatrix} \dot{X}^T \\ \dot{\lambda} \end{bmatrix}$ der Tangenteneinheitsvektor.

4. Bestimmung der auszuführenden Kolonne:

Simulation: Bestimmung der Trennstufenzahl n der Kolonnen für gegebene Produktspezifikation, z.B. Sumpfungszusammensetzung einer Komponente i .

Wenn keine Einfachlösungen zu den gegebenen Parametersätzen vorhanden sind, dann:

1. Entwurfsmethode mit „Schlüsselkomponente“
2. Experiment: Mini-Plant (Problem: Scale-Up)
3. Festlegung der Lösung durch Regelung einer Trennstufen-Temperatur (Regelungs-Aufgabe)