

Technische Universität Berlin  
Fachgebiet Regelungssysteme (Control Systems Group)  
Fakultät IV

# Modellierung einer Destillationskolonne zur Auslegung von Regelungskonzepten

Studienarbeit  
Christian Klauer  
13.2.2009

Betreut durch: Stephanie Geist, Dmitry Gromov, Jörg Raisch

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2. Aufbau der Versuchsanlage</b>	<b>3</b>
<b>3. Modellbildung</b>	<b>6</b>
3.1. Bezeichnungen . . . . .	7
3.2. Grundlagen der verwendeten Bilanzierungsmethoden . . . . .	9
3.3. Abgrenzung und Bilanzierung einzelner Einheiten der Kolonne . . . . .	11
3.4. Statische Submodelle . . . . .	14
3.4.1. Phasengleichgewicht . . . . .	15
3.4.2. Enthalpien der Komponenten . . . . .	16
3.4.3. Temperatur . . . . .	18
3.4.4. Ablaufende Flüssigkeitsmenge . . . . .	18
3.4.5. Aufsteigender Dampf . . . . .	21
3.5. Modelle für Stoffeigenschaften . . . . .	26
3.6. Modell ohne Energiebilanz . . . . .	30
3.6.1. Anfangswerte . . . . .	36
3.6.2. Testfall und Simulation . . . . .	36
3.7. Modell mit Energiebilanz . . . . .	40
3.7.1. Anfangswerte . . . . .	45
3.7.2. Simulation . . . . .	46
<b>4. Ausblick</b>	<b>51</b>
<b>5. Zusammenfassung</b>	<b>53</b>
<b>A. Literatur</b>	<b>54</b>

# 1. Einleitung

Das in der Verfahrenstechnik häufig zur Trennung von Stoffgemischen eingesetzte Verfahren der Destillation zeigt, insbesondere bei Anlagen im Industriemaßstab, ein sehr komplexes systemdynamisches Verhalten. Um eine durchgehend hohe Qualität der Produkte zu erreichen, was sich in der Reinheit der Stoffe widerspiegelt, oder die Anlage anzufahren, ist aufgrund der Komplexität des Systems und wegen der starken Einflüsse der Umgebung eine Regelung verschiedener charakteristischer Größen notwendig. Die Voraussetzung für den Entwurf dieser Regler ist eine in einem bestimmten Arbeitsbereich hinreichend genaue und wenn möglich einfache Beschreibung des zu regelnden Systems.

In dieser Arbeit soll ein Modell einer Destillationskolonne aufgestellt werden, dessen Verhalten einer Referenzanlage der BASF-AG gleichen soll. Die Modellbildung stützt sich auf eine Mischung aus einer strukturellen Modellierung auf Basis physikalischer Verhaltensweisen und einer anschließenden Identifikation von Parametern, die nach dem Schritt der strukturellen Modellierung zunächst unbestimmt sind. Hierzu sind verschiedene zeitliche Verläufe von Messdaten vorhanden, aus denen einerseits auf den notwendigen Detaillierungsgrad der physikalischen Modellgleichungen geschlossen werden kann. Andererseits können mit Hilfe dieser Daten die fehlenden Parameter identifiziert werden. Nach der Modellierung dient ein zusätzlicher Datensatz schließlich als Referenz zur Validierung des aufgestellten Modells.

Aufbauend auf dieser Arbeit soll das entstandene Modell um eine Anlage zur Brüdenkompression (siehe [9]) erweitert werden, um dann auf dieser Basis eine Steuerung des Anfahrvorgangs der gesamten Anlage mit Hilfe einer hierarchischen Regelung zu entwerfen.

## 2. Aufbau der Versuchsanlage

Betrachtet wird hier (Abb 1) eine mehrstufige Bodendestillationskolonne mit 24 Böden, sowie Kondensator und Verdampfer. Jene wird mit einem Gemisch aus folgenden drei Komponenten betrieben:

1. Methanol
2. 1-Pentanol
3. Isobutanol

Anmerkung: Im Folgenden wird die jeweilige Komponente nur noch über die die Nummerierung referenziert. Die Anlage besitzt einen Zulauf (Feed  $F$ ), über den das zu trennende Gemisch eingeleitet wird. An den beiden Ausläufen  $B$  und  $D$  werden die Produkte der Destillation entnommen.

Ganz unten im Bild ist der Verdampfer dargestellt, welcher das vom ersten Boden herunterströmende Fluid teilweise mithilfe der zugeleiteten Energie  $Q$  verdampft und als Gaststrom wieder in die Kolonne einleitet. Auf den Böden findet eine Durchmischung dieses Dampfstroms mit dem herunterströmenden Fluid statt, wodurch der Separationseffekt erzielt wird: Es strömen die Komponenten bevorzugt nach oben, deren relative Flüchtigkeit (siehe 3.4.1) größer ist, also die Reinstoffe, die bei geringerer Temperatur sieden. Abb. 2 zeigt einen Ausschnitt aus der Kolonne, in dem der prinzipielle Aufbau eines Bodens zu erkennen ist: Der Dampfstrom  $V_j$ , welcher aus dem Flüssigholdup  $M_j$  aufsteigt, strömt durch das obere Sieb und verhindert so gleichzeitig das Abfließen der Flüssigkeit  $M_{j+1}$  durch die Löcher des Bodens. Weiterhin durchströmt der Dampf die Flüssigkeit über dem Sieb, wodurch die Durchmischung zustande kommt.

Ist der Dampf oben angelangt, ist in ihm nahezu kein Methanol mehr vorhanden, da dieser Stoff nur unter höheren Temperaturen (relativ zu den anderen Komponenten) seinen Siedepunkt erreicht und sich somit im Verdampfer anreichert.

Der im Kopf der Kolonne ankommende Dampfstrom strömt über ein Ventil  $S_{head}$  in den Kondensator und wird dort vollständig zu Flüssigkeit kondensiert. Zum Abtransport der Energie kann bspw. Kühlwasser verwendet werden. Dies ist an dieser Stelle jedoch nicht weiter spezifiziert. Lediglich wird durch eine Regelung die Temperatur des zusätzlich noch vorhandenen Flüssigholdups konstant gehalten. Als Stellgröße dient hierzu die abgeführte Wärmeenergie. Die aus dem Kondensator ablaufende Flüssigkeit teilt sich in Destillat-  $D$  sowie Rücklaufstrom  $R$  auf. Ein Teil des kondensierten Dampfes wird also wieder auf den obersten Boden zurückgeführt, wodurch eine stärkere Trennung des Gemisches erzielt werden kann. Der Nachteil eines größeren Rücklaufes ist jedoch der

erhöhte Energiebedarf der Anlage.

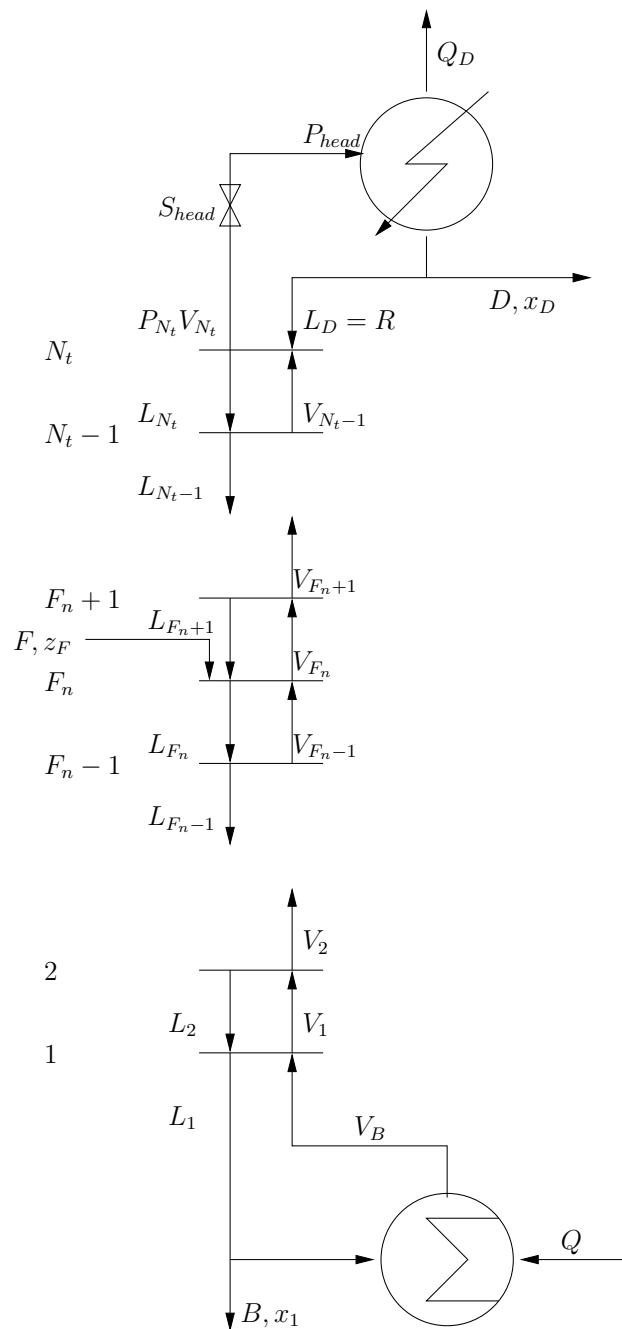


Abbildung 1: Schaltbild der Kolonne

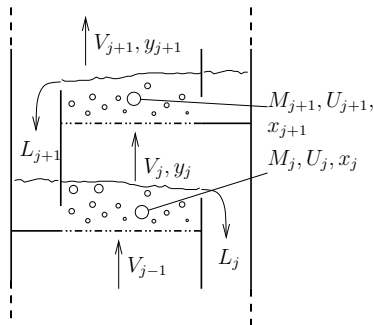


Abbildung 2: Ausschnitt aus der Kolonne

Das genaue Verhalten der Kolonne ist indirekt durch den zeitlichen Verlauf aller wichtigen Größen unter verschiedenen Eingangssignalen gegeben, wie beispielsweise eine Änderung der Heizleistung, welche durch ein detailliertes Simulationsprogramm (AspenDynamics) erzeugt wurden. Mit diesen Werten ist es möglich noch fehlende Parameter einiger Submodelle zu bestimmen. Zusätzlich werden diese Referenzdaten auch zur späteren Validierung des aufgestellten Modells verwendet.

### 3. Modellbildung

Ziel der Modellbildung soll es sein das wesentliche dynamische Verhalten der gegebenen Destillationskolonne nachzubilden. Da bei der Modellierung von Destillationskolonnen die Bandbreite der möglichen Detaillierungsstufen sehr groß ist und somit durchaus sehr komplexe, aber auch relativ einfache Modelle aufgestellt werden können, muss ein Kompromiss zwischen der Modellvereinfachung und Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit der Referenz getroffen werden. In dieser Arbeit wird zunächst mit einem einfachen Modell begonnen und dieses soweit ausgebaut, bis die Simulationsergebnisse vergleichbar sind. Die zahlreichen Schritte der Erweiterung können jedoch nicht alle wiedergegeben werden, sodass im wesentlichen nur auf zwei Schritte eingegangen wird: Ein Modell, bei dem Energieflüsse vernachlässigt werden, und eines, welches diese berücksichtigt.

Als Modellgrundlage dient ein Bödenmodell. Das bedeutet, dass das Gesamtsystem als

ein Zusammenschluss von Submodellen der verschiedenen Böden, sowie des Verdampfers und Kondensators darstellt. Für jeden Abschnitt der Anlage werden gesondert Gleichungen für die Dynamik aufgestellt. Diese Gleichungen erhält man im Wesentlichen über Bilanzen verschiedener Erhaltungsgrößen (siehe nachfolgenden Abschnitt). Zusätzlich werden noch einige statische Submodelle für verschiedene Verhaltensweisen der Kolonne, wie z.B. Fluidodynamik oder Dampfströme, sowie Modelle für Stoffdaten abgeleitet. Man erhält dadurch einen Satz von Bausteinen die später zu geschlossenen Modellen zusammengesetzt werden.

Eine Regelung soll im Wesentlichen die Konzentrationsprofile über den Böden einstellen. Da es aber in der Realität schwierig ist, die Konzentrationen mit genügend hohen Abstraten zu messen, schon gar nicht auf jedem Boden separat, müssen diese Profile über indirekte Indikatoren geregelt werden. Eine gängige Möglichkeit ist, das Temperaturprofil über den Böden zu betrachten, welches auch in der Realität einfach bestimmt werden kann. Aufgrund des Raoult'schen Gesetzes (siehe 3.5) sind die Konzentrationsprofile statisch mit den Temperaturprofilen korreliert, wobei der Druck nur einen sehr geringen Einfluss hat, da er sich nur geringfügig ändert. Ziel ist es also nun ein bestimmtes Temperaturprofil konstant einzustellen.

Eine Modellbildung des Kondensators, welche für eine Regelung des Holdup oder der Temperatur im Kondensator verwendet werden kann, ist nicht Ziel der Arbeit, da der Kondensator in weiterführenden Arbeiten nicht mehr benötigt wird. Jener soll durch eine Anlage zur Brüdenkompression ersetzt werden, wodurch das Augenmerk dieser Arbeit auf der Modellierung der Kolonne liegt und der Kondensator nur teilweise modelliert wird.

### 3.1. Bezeichnungen

Die wichtigsten Bezeichner, die in dieser Arbeit Verwendung finden, werden hier aufgeführt.

Bezeichner	Beschreibung
$F_n = 14$	# des Feedboden

Bezeichner	Beschreibung
$N_c = 3$	Anzahl der Komponenten
$N_t = 24$	Anzahl der Stufen
$L_j[\text{mol/s}]$	Flüssigkeitsstrom von Boden $j$ nach unten
$V_j[\text{mol/s}]$	Dampfstrom von Boden $j$ nach oben
$L_{vol,j}[\text{m}^3/\text{s}]$	Volumenstrom der Flüssigkeit nach unten
$V_{vol,j}[\text{m}^3/\text{s}]$	Volumenstrom des Dampfes nach oben
$F[\text{mol/s}]$	Feedstrom
$L_D = R[\text{mol/s}]$	Flüssigkeitsstrom aus dem Kondensator fließend in den obersten Boden (Reflux)
$D[\text{mol/s}]$	Ablaufstrom des Destillat aus Kondensator
$V_B[\text{mol/s}]$	Dampfstrom aus dem Verdampfer in die erste Stufe
$B[\text{mol/s}]$	Entnahmestrom des Produktes aus dem Verdampfer
$M_j[\text{mol}]$	Flüssigmolenholdup der Stufe $j$
$M_{V,j}[\text{mol}]$	Dampfmolenholdup der Stufe $j$
$M_{vol,j}[\text{m}^3]$	flüssiger Volumenholdup
$M_B[\text{mol}]$	Flüssigmolenholdup des Verdampfers
$M_{V,B}[\text{mol}]$	Dampfmolenholdup des Verdampfers
$M_D[\text{mol}]$	Flüssigmolenholdup des Kondensators
$M_{V,D}[\text{mol}]$	Dampfmolenholdup des Kondensators
$x_{i,j}$	Molarer Anteil der Komponente $i$ der Flüssigkeitsphase auf Boden $j$ (Molenbruch)
$\mathbf{x}_j$	Vektor $\mathbf{x}_j = [x_{1,j}, x_{2,j}, \dots, x_{N_c,j}]^T$
$y_{i,j}$	Molarer Anteil der Komponente $i$ der Dampfphase auf Boden $j$ (Molenbruch)
$\mathbf{y}_j$	Vektor $\mathbf{y}_j = [y_{1,j}, y_{2,j}, \dots, y_{N_c,j}]^T$
$\mathbf{z}_F = [z_{1,F}, z_{2,F}, \dots, z_{N_c,F}]$	Molare Zusammensetzung des Feed
$Q[\text{J}]$	Heizleistung
$T_j[\text{K}]$	Temperatur auf Boden $j$
$P_j[\text{N/m}^2]$	Druck auf der Stufe $j$
$T_0[\text{K}]$	Referenztemperatur



Bezeichner	Beschreibung
$U[\text{J}]$	innere Energie
$S_{head}$	Ventilkonstante für den Dampfstrom, der die Kolonne verlässt
$c_p[\text{J}/(\text{molK})]$	Molare Wärmekapazität der Flüssigkeit
$c_{p,V}[\text{J}/(\text{molK})]$	Molare Wärmekapazität des Dampfes
$h_v[\text{J}/\text{mol}]$	Molare Verdampfungsenthalpie
$\alpha_i$	relative Flüchtigkeit der Komponente $i$ zur ersten
$\rho[\text{m}^3/\text{mol}]$	Molares Volumen
$\hat{\Theta}_{vap,1,k}, \hat{\Theta}_{vap,2,k}, \hat{\Theta}_{liq,1,k}, \hat{\Theta}_{liq,2,k}$	Geschätzte Parameter für Enthalpien (siehe 3.4.2)
$\Theta_{L,1,j}, \Theta_{L,2,j}, \Theta_{L,3,j}$	Geschätzte Parameter für das Flüssigkeitsmodell für Boden $j$ (siehe 3.4.4)
$\Theta_{V,1,j}, \Theta_{V,2,j}$	Geschätzte Parameter für die Modellierung der Dampfströme von Boden $j$ (siehe 3.4.5)
$\omega_V$	Grenzfrequenz des Tiefpassfilters zur Filterung von $V'_j$
$\Theta_{md,i}$	Geschätzte Parameter für Stoffeigenschaft des molaren Volumens; $i$ - Reinstoff
$A_i, B_i$	Geschätzte Parameter der Antoine-Gleichung für jede Komponente $i$ (siehe 3.5)

Tabelle 1: Tabelle der verwendeten Bezeichnungen

### 3.2. Grundlagen der verwendeten Bilanzierungsmethoden

Zunächst wird eine allgemeine Übersicht über die verwendeten Bilanzierungsmethoden aufgezeigt, welche sich auf Erhaltungsgrößen stützen. Also jene Größen, für die keine Quell- oder Senkenterme auftreten. Insgesamt sind drei verschiedene Bilanzen zu unterscheiden: Erstens die Bilanzierung der Stoffmenge (Anzahl der Moleküle), zweitens die Bilanzierung der Stoffzusammensetzung. Als optionale Bilanz kann zusätzlich noch die innere Energie bilanziert werden. Allen gemeinsam ist, dass auf der Bilanzierung der einzelnen Abschnitte der Kolonne die zeitlichen Differentialgleichungen gewonnen werden.

**Bilanz der Gesamtmenge:** Hier wird ein Gebiet  $\Omega_j$  betrachtet, welches eine bestimmte Stoffmenge  $M_j$ , auch Holdup genannt, gemessen anhand einer Anzahl an Molekülen in der Einheit mol, beinhaltet. Über die Grenzen dieses Gebiets fließen Stoffströme ein und aus. Die Bilanzierungsgleichung wird als Änderung der im Gebiet enthaltenen Stoffmenge aufgeschrieben:

$$\frac{dM_j}{dt} = L_{Zulau\text{f}} - L_{Ablau\text{f}} \quad (1)$$

**Bilanz der Stoffzusammensetzung:** Da bei der Bilanz der Gesamtmenge noch keine Angaben über die Zusammensetzung der Stoffströme/Holdups getroffen werden, müssen bei einem System mit  $N_c$  verschiedenen Reinstoffen noch  $N_c - 1$  Bilanzgleichungen für die Zusammensetzung, gemessen in Molenbrüchen, angesetzt werden. Der Begriff "Molenbruch" beschreibt hierbei den relativen Anteil eines Reinstoffes  $i$  der Menge  $M_i$  [mol] an der Gesamtmenge eines Stoffgemisches (Summe aller Einzelmengen  $M_i$ ):

$$x_i = \frac{M_i}{\sum_{i=1}^{N_c} M_i} \quad (2)$$

Die Summation aller  $x_i$  ergibt:

$$\sum_{i=1}^{N_c} x_i = 1$$

woraus die grundlegende Beziehung (Schließbedingung)

$$x_{N_c}(x_1, x_2, \dots, x_{N_c-1}) = 1 - \sum_{i=1}^{N_c-1} x_i \quad (3)$$

folgt. Die Zusammensetzungen verschiedener Ströme oder Holdups werden in dieser Arbeit als Vektoren zusammengefasst:

$$\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_{N_c}]^T$$

Ein Parameter ist hierbei natürlich, wegen Gleichung (3) redundant vorhanden.

Zur Bilanzierung des Gebietes  $\Omega_j$  wird die Änderung der Anzahl der Moleküle jeweils jedes Reinstoffes  $M_j x_{i,j}$ , bis auf einen (Redundanz), gleich der Zu- und Anlaufströme der jeweiligen Teilchenmenge des Reinstoffes  $i$  angesetzt:

$$\frac{dMx_i}{dt} = L_{Zulau\text{f}} x'_{i,Zulau\text{f}} - L_{Ablau\text{f}} x'_{i,Ablau\text{f}}, \quad i = 1..N_c - 1 \quad (4)$$

Die Molenbrüche  $x_i$ ,  $x'_{i,Zulau\text{f}}$  und  $x'_{i,Ablau\text{f}}$  beschreiben die Zusammensetzungen des Holdup bzw. der beiden Stoffströme.

**Bilanz der inneren Energie:** Optional kann noch eine Bilanz der thermischen Energie angesetzt werden, wobei eine Änderung der inneren Energie  $\dot{U}$  gleich der Differenz zwischen Energie Zu- und Abläufen sein soll:

$$\frac{dU}{dt} = L_{Zulau\text{f}} h_{L,Zulau\text{f}}(T) - L_{Ablau\text{f}} h_{L,Ablau\text{f}}(T) + Q \quad (5)$$

Hierbei sind die Terme berücksichtigt, die einen Energiefluss aufgrund von Stoffströmen, sowie sonstigen Energieflüssen wie beispielsweise Wärmediffusion  $Q$ , modellieren. Die Größen  $h_{L,Zulau\text{f}}(T)$  und  $h_{L,Ablau\text{f}}(T)$  sind die sogenannten molaren Enthalpien der Materieströme [J/mol]. Sie hängen hauptsächlich von Temperatur und Zusammensetzung der Stoffe ab.

### 3.3. Abgrenzung und Bilanzierung einzelner Einheiten der Kolonne

Für jeden Boden der Kolonne, sowie für den Kondensator als auch den Verdampfer, werden getrennte Bilanzen angesetzt. Der Index  $j$  steht hierbei für die Bodenummer und  $B$  oder  $D$  für Verdampfer bzw. Kodensator. Die jeweilige Komponente, welcher verschiedene Eigenschaften zugeordnet werden können, wird über den Index  $i$  referenziert. Es gibt auch noch die Möglichkeit, weitere Bereiche zu unterscheiden. Beispielsweise kann die Dampf- bzw. Flüssigphase jeweils getrennt betrachtet werden, jedoch wird in dieser Arbeit von der vereinfachten Möglichkeit, beide Phasen gleichzeitig zu bilanzieren, Gebrauch gemacht. Hierzu muss jedoch die Annahme eines Phasengleichgewichts

zwischen beiden Phasen getroffen werden, was auch in der Literatur durchaus üblich ist. (Siehe [3, Seite 33], [8, Seite 50])

**Kondensator:** Für den Kondensator entfallen die dynamischen Bilanzgleichungen für die Stoffmenge, da hier eine konstante Stoffmenge angenommen wird, sowie auch die Gleichung für die Energie. Der Rücklauf in den obersten Boden wird als Modelleingang vorgegeben, wobei dessen Zusammensetzung sich aus der des konstanten Kondensatorholdups ergibt. Als Systemausgang ergibt sich der Destillatstrom  $D$ , welcher in der Realität so geregelt wird, dass der Kondensator Holdup gleich bleibt. Falls Energien berücksichtigt werden, wird eine konstante Rücklauftemperatur  $R_T$  als Modelleingang verwendet, da in der Realität im Kondensator ein Regler eingebaut ist, welcher dem Bilanzraum genau so viel Energie entzieht, dass die Temperatur konstant bleibt. Somit muss der real nicht ganz trivial zu modellierende Kondensator nicht in allen Feinheiten, die stark vom Aufbau abhängen, betrachtet werden.

$$\frac{d(M_D + M_{V,D})x_{i,D}}{dt} = -Dx_{i,D} - L_Dx_{i,D} + V_{N_i}y_{i,N_t}, \quad i = 1..N_c - 1 \quad (6)$$

In der späteren Implementierung ist es auch möglich die Zusammensetzung des Rücklaufstromes als Systemeingang einzustellen, wodurch eine detailliertere externe Modellierung eines Kondensators durchgeführt werden kann, und vor allem die Möglichkeit besteht eine komplexere verfahrenstechnische Anlage, wie etwa die der Brüdenkompression, anzuschließen. In diesem Fall würden die Gleichungen (6) entfallen und  $x_{D,i}$  durch Systemeingänge ersetzt werden.

**einfache Böden:** Jeder einzelne Boden wird als Bilanzraum betrachtet, für den die drei Bilanzierungen aufgestellt werden. Ein "einfacher" Boden  $j$  hat zwei Zuläufe, nämlich den Dampfstrom  $V_{j-1}$  vom unteren Boden  $j - 1$  in Boden  $j$  hinein und den vom oberen Boden  $j + 1$  herablaufenden Flüssigstrom  $L_{j+1}$ . Des weiteren hat jeder "einfache" Boden einen Flüssigkeitsablauf  $L_j$  und einen Verdampfungsstrom  $V_j$ . Es werden die Mengen bzw. Stoffbilanzen für jeden Boden  $j$ , außer für den Feedboden  $F_n$ , separat aufgestellt:

$$\frac{d(M_j + M_{V,j})x_{i,j}}{dt} = L_{j+1}x_{i,j+1} + V_{j-1}y_{i,j-1} - L_jx_{i,j} - V_jy_{i,j}, \quad i = 1..N_c - 1, \quad (7)$$

$$\frac{d(M_j + M_{V,j})}{dt} = L_{j+1} + V_{j-1} - L_j - V_j. \quad (8)$$

Die optionale Energiebilanz sieht folgendermaßen aus:

$$\frac{dU_j}{dt} = L_{j+1}h_{liq,j+1} + V_{j-1}h_{vap,j-1} - L_jh_{liq,j} - V_jh_{vap,j}. \quad (9)$$

Anzumerken ist eine Besonderheit der Indizierung: Der Dampfstrom in den ersten Boden hat zwei Bezeichnungen  $V_0 = V_B$ , wobei im folgenden immer  $V_B$  verwendet wird. Ebenso wird der Flüssigstrom  $L_{N_t+1}$  in den obersten Boden  $N_t$  als Rücklauf  $R$  bezeichnet. Äquivalent verhält es sich für die Enthalpien und Molenbrüche der Ströme:

- $h_{liq,N_t} = h_{liq,R}$
- $h_{vap,0} = h_{vap,B}$
- $y_0 = y_B$
- $x_{N_t} = x_R$

**Feedboden ( $j = F_n$ ):** Dieser Abschnitt unterscheidet sich von den anderen durch den zusätzlichen Zulauf  $F$ , welcher in seinen Eigenschaften wie Molenstrom  $F$ , Zusammensetzung  $z_F = [z_{1,F}, \dots, z_{N_c-1,F}]^T$  und Temperatur  $T_F$  weitere Systemeingänge beschreibt. Die Zusammensetzung  $z_F$  stellt hierbei nur  $N_c - 1$  skalare Eingänge dar, da sich der letzte Molenbruch durch die Schließbedingung (Gleichung (3)) ergibt.

$$\frac{d(M_j + M_{V,j})x_{i,j}}{dt} = L_{j+1}x_{i,j+1} + V_{j-1}y_{i,j-1} - L_jx_{i,j} - V_jy_{i,j} + Fz_{i,F}, \quad i = 1..N_c - 1 \quad (10)$$

$$\frac{d(M_j + M_{V,j})}{dt} = L_{j+1} + V_{j-1} - L_j - V_j + F \quad (11)$$

$$\frac{dU_j}{dt} = L_{j+1}h_{liq,j+1} + V_{j-1}h_{vap,j-1} - L_jh_{liq,j} - V_jh_{vap,j} + Fh_{liq,F} \quad (12)$$

**Verdampfer:** In den Verdampfer fließt ein Flüssigstrom  $L_1 - B$  ein. Durch die Verdampfung aufgrund der zugeführten Heizleistung entsteht ein Strom  $V_B$  aus dem Bilanzraum heraus. Zunächst werden wieder die Bilanzen der Stoffzusammensetzung aufgestellt:

$$\frac{d(M_B + M_{V,B})x_{i,B}}{dt} = (L_1 - B)x_{i,1} - V_B y_{i,D}, \quad i = 1..N_c - 1 \quad (13)$$

Die Gesamtmenge im Verdampfer ist als konstant angenommen, d.h. der Term, der die Änderung beschreibt, wird zu Null. Diese Annahme ist mit einem in der Realität eingebauten Füllstandsregler zu begründen, welcher den Auslass so einstellt, dass eine konstante Stoffmenge als Holdup enthalten ist. Der Einlass ist also gleich dem Auslass. Es ergibt sich eine statische Gleichung zur Berechnung des Ausflusses:

$$B = -V_B + L_1 \quad (14)$$

In der Energiebilanz muss nun zusätzlich zu den einfachen Böden ein Term für die Heizleistung  $Q$  modelliert werden.

$$\frac{dU_B}{dt} = Q + (L_1 - B)h_{liq,1} - V_B h_{vap,B} \quad (15)$$

### 3.4. Statische Submodelle

Zusätzliche Gleichungen ergeben sich durch algebraische Bedingungen, mit welchen die noch unbekannt Variablen berechnet werden können. Diese Gleichungen lassen sich aus physikalischen Überlegungen ableiten, bzw. der Literatur entnehmen. Durch Verwendung einiger Modelle, insbesondere denen aus dem thermodynamischem Bereich kann es durchaus vorkommen, dass die Möglichkeit diese algebraischen Gleichungen nach einer Variablen aufzulösen und in die Differentialgleichungen einzusetzen nicht gegeben ist. Es ergibt sich zwangsläufig ein Differentialgleichungssystem mit, numerisch zu lösenden, algebraischen Gleichungen, dessen numerische Lösung wesentlich höheren Rechen- und Implementationsaufwand bedeutet. Durch zielgerichtete Vereinfachungen soll jedoch versucht werden, einen alternativen Weg zu finden.

### 3.4.1. Phasengleichgewicht

Für jede Stufe  $j$ , also auch für den Kondensator und Verdampfer, wird die Zusammensetzung der Flüssig- und Gasphase über die relativen Flüchtigkeiten miteinander verknüpft [1, Seite 45]:

$$y'_{i,j} = \frac{\alpha_i x_{i,j}}{\sum_{k=1}^{N_c} \alpha_k x_{k,j}}, \quad i = 1..N_c \quad (16)$$

Die Parameter  $\alpha_i = \alpha_i(T, P)$  sind die relativen Flüchtigkeiten, welche durch

$$\alpha_{n,m} = \frac{y_n/x_n}{y_m/x_m} \quad (17)$$

definiert ist. Sie beschreiben das Flüchtigkeitsverhalten einer Komponente  $n$  relativ zu einer anderen  $m$  in einer Mischung beider, d.h. bspw., dass es bei  $\alpha_{n,m} > 1$  zu einer Anreicherung der Komponente  $n$  in der Gasphase kommt. Dies gilt allerdings nur für das stoffliche Gleichgewicht, welches erreicht ist, nachdem alle Ausgleichsvorgänge wie Diffusion, Verdampfung/Kondensation etc. abgeklungen sind und sich somit das Phasengleichgewicht eingestellt hat.

Die Parameter, welche stark von der Temperatur abhängen, wurden für das gegebene Stoffgemisch bereits erfasst und stehen als Tabelle (siehe Abschnitt 3.5) über der Temperatur zur Verfügung.

Da es in realen Kolonnen jedoch in den Austauschzonen der Böden aufgrund der ständigen Durchströmung niemals zu einem vollständigem Gleichgewicht kommen kann, müssen diese Abweichungen vom idealen Zustand gegebenenfalls berücksichtigt werden. Eine Möglichkeit hierzu besteht in der Einführung der sogenannten Bodenwirkungsgrade, mit welchen die Trennleistung der realen Stufe im Verhältnis zu der theoretisch maximal möglichen betrachtet wird, [5, S. 124]:

$$E_{OGM} = \frac{y_j - y_{j-1}}{y'_j - y_{j-1}} \quad (18)$$

Hierbei ist  $y'_j$  die theoretische Gaskonzentration, die sich im Phasengleichgewicht ein-

stellt. Für den gegebenen Wirkungsgrad  $E_{OGM}$  ergibt sich für die Zusammensetzung der Gasphase ein rekursiv zu lösendes Gleichungssystem:

$$y_j = E_{OGM}y'_j + (1 - E_{OGM})y_{j-1}, \quad j = 1..N_t \quad (19)$$

als Startwert  $y_0$  wird  $y_0 = y_B$ , die Gaszusammensetzung des Verdampfers angenommen.  $E_{OGM}$  ist hierbei bekannt und hängt vom Aufbau des Bodens, der Durchströmung, sowie von vielen weiteren Faktoren ab. Eine Vorhersage in Abhängigkeit aller Faktoren ist nur schwer möglich. Daher verwendet man meist konstante Erfahrungswerte, für Bodenkolonnen ca. 0.6 bis 0.7.

### 3.4.2. Enthalpien der Komponenten

Die Enthalpien der beteiligten Reinstoffe sind als Wertepaare abhängig von der Temperatur gegeben ( Abb. 3 und 4)

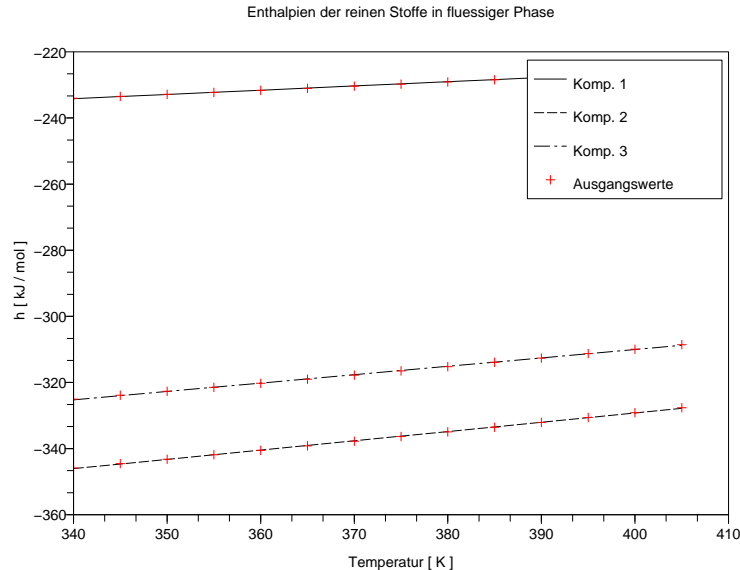


Abbildung 3: Enthalpie der reinen flüssigen Komponenten

Es wird eine Approximation der Enthalpien der Reinstoffe als Polynom 1. Ordnung,



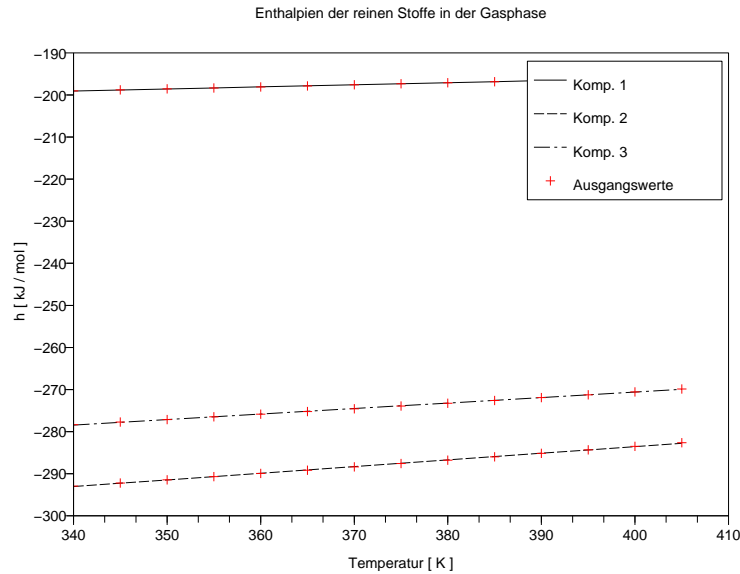


Abbildung 4: Enthalpie der reinen dampfförmigen Komponenten

wobei  $k = [1..N_c]$ , vorgenommen. Dies ermöglicht eine weitergehende analytische Behandlung.

$$h'_{vap,k}(T) = \hat{\Theta}_{vap,1,k}T + \hat{\Theta}_{vap,2,k}$$

Zur Bestimmung der Enthalpie einer Mischung dieser Komponenten wird ein lineares Mischungsgesetz verwendet:

$$h_{vap}(T, y) = \sum_{k=1}^{N_c} y_k h'_{vap,k}(T) \quad (20)$$

$$= T \sum_{k=1}^{N_c} y_k \hat{\Theta}_{vap,1,k} + \sum_{k=1}^{N_c} y_k \hat{\Theta}_{vap,2,k} \quad (21)$$

Analog gilt dies für die Flüssigphase:

$$h'_{liq,k}(T) = \hat{\Theta}_{liq,1,k}T + \hat{\Theta}_{liq,2,k}$$

$$h_{liq}(T, x) = \sum_{k=1}^{N_c} x_k h'_{liq,k}(T) \quad (22)$$

$$= T \sum_{k=1}^{N_c} x_k \hat{\Theta}_{liq,1,k} + \sum_{k=1}^{N_c} x_k \hat{\Theta}_{liq,2,k} \quad (23)$$

### 3.4.3. Temperatur

Zur Berechnung der Temperatur wird der Energieinhalt des Bilanzraums zu einem Zeitpunkt betrachtet. Es wird eine statische Bilanz aufgestellt in der der Energieinhalt  $U_j$  und Flüssig- ( $M_j$ ) sowie Dampfholdup  $M_{V,j}$  berücksichtigt werden:

$$\begin{aligned} U_j &= M_j h_{liq,j}(T_j, x_j) + M_{V,j} h_{vap,j}(T_j, x_j) \\ &= T_j \left[ M_{vap,j} \sum_{k=1}^{N_c} y_k \hat{\Theta}_{vap,1,k} + M_j \sum_{k=1}^{N_c} x_k \hat{\Theta}_{liq,1,k} \right] \\ &\quad + \left[ M_{vap,j} \sum_{k=1}^{N_c} y_k \hat{\Theta}_{vap,2,k} + M_j \sum_{k=1}^{N_c} x_k \hat{\Theta}_{liq,2,k} \right] \end{aligned}$$

Das Umstellen ergibt eine Gleichung zur Berechnung der Temperatur:

$$T_j = \frac{U_j - \left[ M_{vap,j} \sum_{k=1}^{N_c} y_k \hat{\Theta}_{vap,2,k} + M_j \sum_{k=1}^{N_c} x_k \hat{\Theta}_{liq,2,k} \right]}{\left[ M_{vap,j} \sum_{k=1}^{N_c} y_k \hat{\Theta}_{vap,1,k} + M_j \sum_{k=1}^{N_c} x_k \hat{\Theta}_{liq,1,k} \right]} \quad (24)$$

Die Approximation der Enthalpien durch lineare Funktionen hat somit den Vorteil, dass die Temperatur jeder Stufe analytisch bestimmt werden kann, und somit ein iteratives Lösungsverfahren für die Temperatur vermieden werden kann.

### 3.4.4. Ablaufende Flüssigkeitsmenge

Aufgrund des in jedem Boden verbauten Wehres (siehe Abb. 2), welches für ein Aufstauen der Flüssigkeit sorgt, ergibt sich eine Strömungsdynamik, welche ebenfalls bei

der Modellierung berücksichtigt wird. Hierzu wird betrachtet, wie sich der Flüssigvolumenstrom über das Wehr einstellt. Hierbei soll ein statisches Modell zugrunde gelegt werden, welches den Ablauf in Abhängigkeit der aufgestauten Flüssigkeitsvolumen, sowie des vom unteren Boden kommenden Dampfstroms beschreibt. Der Dampfstrom geht deshalb in diese Beziehung ein, da die nach oben strömenden Gasblasen das aufgestaute Fluid anheben. In [2] wird hierzu ein linearer Zusammenhang vorgeschlagen, welcher das Übertreten des Holdup über einen, vom jeweiligen Boden abhängenden, konstanten "Grundholdup"  $M_{vol0,j}$  beschreibt:

$$\begin{aligned} L_{vol,j} &= (M_{vol,j} - M_{vol0,j})k_j + \lambda V_{j-1}, \\ &= \Theta_{L,1,j}M_{vol,j} + \Theta_{L,2,j}V_{j-1} + \Theta_{L,3,j}. \end{aligned}$$

Hierbei gilt  $L_{vol,j} = \rho(x_j, T_j)L_j$  und  $M_{vol,j} = \rho_j(x_j, T_j)M_j$ . Die Bezeichnung  $\rho_j(x_j, T_j)[\frac{m^3}{mol}]$  ist das molare Volumen (siehe Abschnitt 3.5). Die Parameter  $\Theta_{L,n,j}$  können durch "Messungen" von  $M_{vol,j}$ ,  $L_{vol,j}$  und  $V_{j-1}$  aus den Referenzsimulationsdaten mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate für verschiedene Böden  $j$  geschätzt werden. Umgestellt ergibt sich eine Gleichung, mit welcher der molare Abfluss mit dem Molenholdup, Dampfstrom und Zusammensetzung verknüpft wird:

$$L_j = \Theta_{L,1,j}M_j + \frac{1}{\rho_j(x_j, T_j)} [\Theta_{L,2,j}V_{j-1} + \Theta_{L,3,j}] \quad (25)$$

Eine andere, genauere Beschreibung wäre die Verwendung der Francis-Wehrformel. [6]

Zusammen mit den Stoffmengenbilanzen ist mit diesem Ansatz auch berücksichtigt, dass der Molenholdup durchaus in der Realität aufgrund des vom Mischungsverhältnis abhängigen molarem Volumen, nicht konstant ist. Es ist also eine Dynamik im Molaren Holdup  $M_j$  zu erwarten, während der Volumenholdup weitgehend konstant bleibt.

Ursprünglich wurde angenommen, dass sich alle Böden, aufgrund des vermutlich gleichen Aufbaus, auch in gleicher Weise nach diesem Modell verhalten, sodass letztlich nur ein Parametersatz für alle Böden notwendig ist. Bei der Identifikation zeigten sich jedoch grundlegende Unterschiede zwischen dem oberen und unteren Teil der Kolonne,

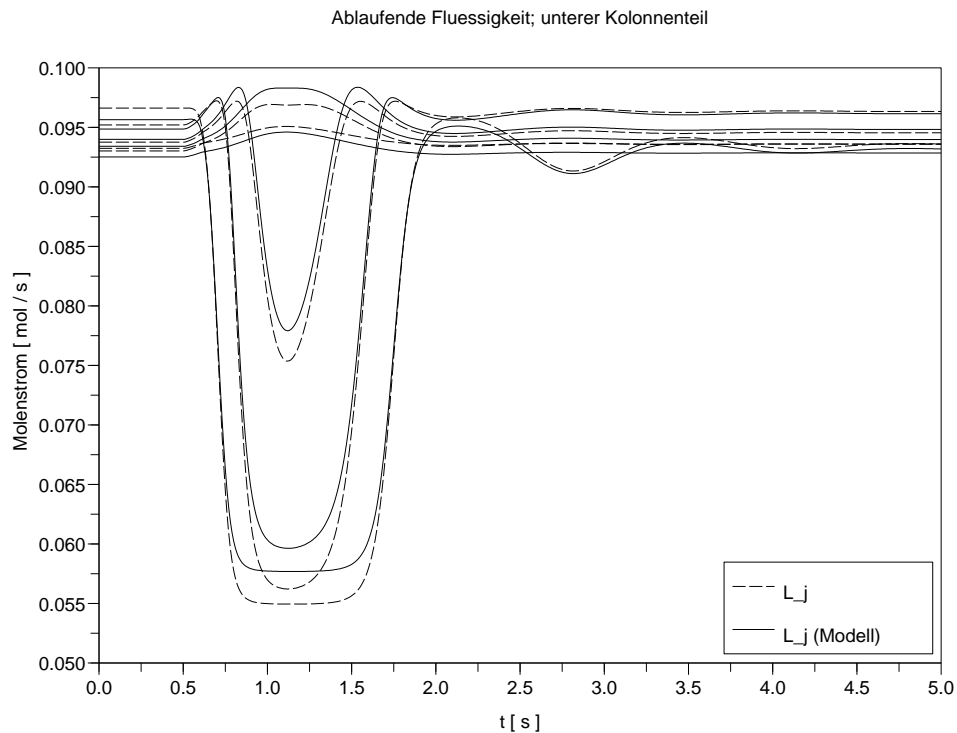


Abbildung 5: Verifikation des Strömungsmodells für den unteren Bereich der Kolonne

sodass diese Bereiche getrennt untersucht werden mussten. Es wird ein Parametersatz  $\Theta_{L,n,unten}$ ,  $n \in [1,2,3]$  für Boden  $j \in [1..12]$  und ein weiterer  $\Theta_{L,n,oben}$ ,  $n \in [1,2,3]$  für den oberen Teil  $j \in [13..23]$  identifiziert. Ein Grund für das widersprüchliche Verhalten konnte nicht ermittelt werden, da es sich bei den Referenzdaten um eine Simulation handelt und somit eine Untersuchung der Geometrie nicht möglich ist.

Die Abb. 5 und 6 zeigen einen Vergleich der durch das Modell bestimmten Flüssigkeitsmengenströme mit denen der Referenz, welche gestrichelt gezeichnet wurden. Man sieht, dass für den unteren Teil der Kolonne die Identifikation recht gut ist, für den oberen Teil einigermaßen in Ordnung. Möglicherweise ist die Annahme des gleichen Verhaltens aller oberen Böden nicht gegeben oder es haben hier noch weitere Größen Einfluss auf das Verhalten.

Ablaufende Flüssigkeit; oberer Kolonnenenteil

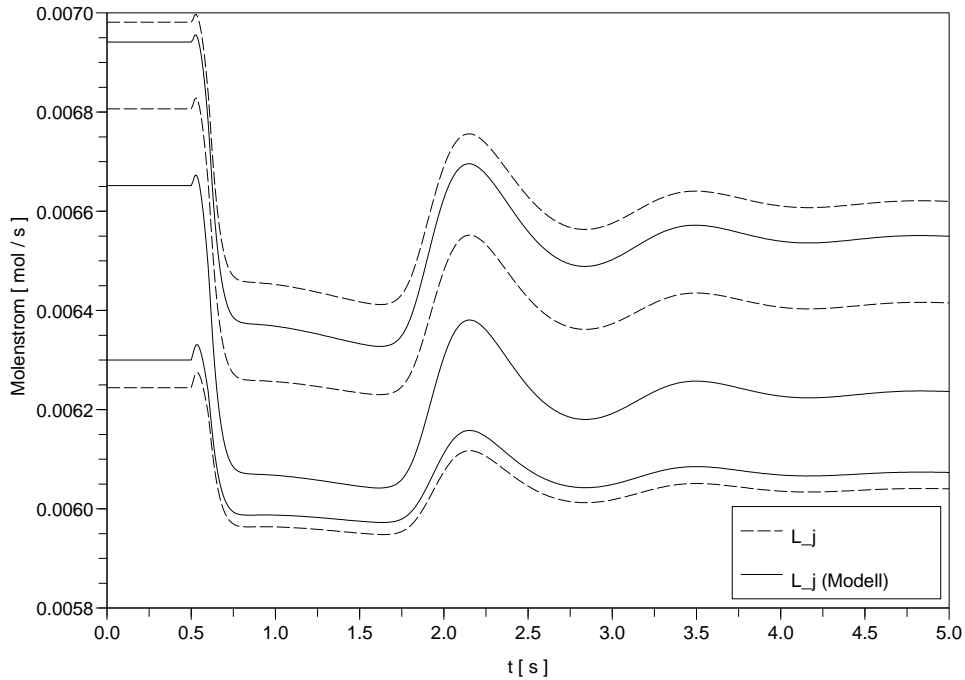


Abbildung 6: Verifikation des Strömungsmodells für den oberen Bereich der Kolonne

### 3.4.5. Aufsteigender Dampf

Zur Beschreibung des Dampfstroms, der aus jedem Boden aufsteigt wird angenommen, dass dieser sich im Wesentlichen aufgrund der Druckdifferenz zwischen den Böden einstellt. Jeder einzelne Boden, also die Platte auf der die Flüssigkeit lagert sowie auch die Flüssigkeit selbst, stellt dabei der Strömung einen Widerstand entgegen, sodass der Dampf nicht ungehindert strömen kann. Für das reale Verhalten spielen aber weitaus mehr Faktoren eine Rolle. Diese sind unter anderem die Massendichte und Menge der Flüssigkeit, d.h. je mehr Masse über dem Boden lagert, desto mehr Druck muss entgegengesetzt werden. Weitere Abhängigkeiten sind z.B. Massendichte und Molvolumen des aufströmenden Dampfes.

Es soll nun anhand der Referenzdaten ein Modell identifiziert werden, welches die Molenströme des Dampfes hinreichend genau beschreibt. Hierzu werden zunächst verschie-

dene statische Modellstrukturen anhand der physikalischen Zusammenhänge aufgestellt. Im zweiten Schritt werden die noch offenen Parameter bestimmt und die Modelle validiert.

**Modell 1)** Zur Beschreibung des Verhältnisses Dampfstrom zu Druckdifferenz wird zunächst eine einfache Konstante angenommen, welche sich relativ einfach aus den Referenzdaten ermitteln lässt. Es wird folgender Zusammenhang zwischen Dampfstrom und Druckdifferenz angenommen:

$$V'_j = \Theta_{V,j}(P_j - P_{j+1}) \quad (26)$$

**Modell 2)** Im ersten Modell wurde nur der Einfluss der Druckdifferenz berücksichtigt. Das zweite Modell soll auch die Abhängigkeit vom Flüssigholdup des oberen Bodens beschreiben. Hierzu wird ein zusätzlicher additiver Term  $\Theta_{V,2,j}$  hinzugefügt. Zusätzlich wird berücksichtigt, dass der Anteil, der aufgrund des Druckunterschieds zustande kommt, wegen des quadratischen mit der Strömungsgeschwindigkeit ansteigenden Strömungswiderstands nicht linear mit der Druckdifferenz eingeht, sondern über die Quadratwurzel [6] :

$$V'_j = \Theta_{V,1,j}\sqrt{P_j - P_{j+1}} + \Theta_{V,2,j}M_{j+1} \quad (27)$$

**Modell 3)** Im nächsten Schritt wird die molare Massendichte  $m_{mol}$  der Flüssigkeit einbezogen. Die Berechnung dieser Stoffeigenschaft in Abhängigkeit der Zusammensetzung  $x_j$  wird etwas später in Abschnitt 3.5 behandelt.

$$V'_j = \Theta_{V,1,j}\sqrt{P_j - P_{j+1}} + \Theta_{V,2,j}\frac{M_{j+1}}{m_{mol,j+1}(x_{j+1})} \quad (28)$$

Diese Strukturen wurden empirisch ermittelt.

Für diese drei Modelle werden die noch offenen Parameter  $\Theta_{V,1,j}$  und  $\Theta_{V,2,j}$  mithilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate [4, S. 13] aus gegebenen Messwerten für je-

weils jeden Boden getrennt ermittelt. Auf Basis dieser geschätzten Parameter werden die Dampfströme  $V_j$  nach dem jeweiligen Modell für die Messwertpaare  $P_{j-1} - P_j$ ,  $M_{j+1}$  und  $x_{j+1}$  berechnet und sind in Abb. 7 graphisch am Beispiel vom Feedboden ausgewertet. Zu sehen ist der mit jedem Modell berechnete Dampfstrom  $V_j$ , sowie der Fehler  $e = V_{modell} - V_{Referenz}$  als Abweichung von der Referenz. Die verschiedenen Messwerte wurden aufeinanderfolgenden äquidistanten Zeitpunkten entnommen, jedoch muss zwischen ihnen keine zeitliche Beziehung bestehen, da hier keine Dynamik betrachtet wird.

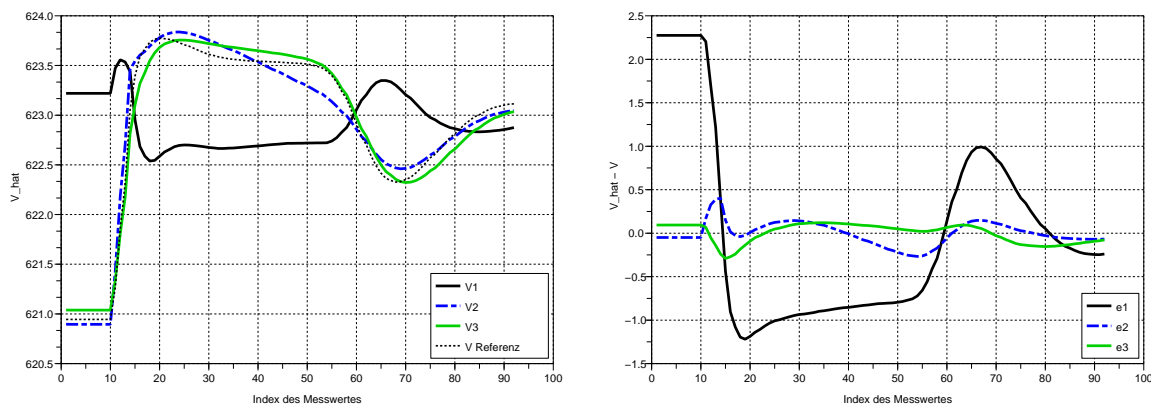


Abbildung 7: Verschiedene Modelle zur Berechnung des Dampfstroms  $V$

Es ist erkennbar, dass Modell 1) das Verhalten scheinbar nicht wiedergeben kann. Bessere Ergebnisse erzielt Modell 2), jedoch gibt es auch hier diverse Abweichungen. Modell 3) beschreibt den Messdatensatz am genauesten, der Fehler ist etwas geringer als der von Modell 2). Zur weiteren Verifikation der Modelle wurde in Abb. 8 ein weiterer Datensatz verwendet, welcher nicht zur Identifikation genutzt wurde, um die Fähigkeit der Vorhersage der Modelle für verschiedene Wertepaare überprüfen zu können. Hier spiegelt sich die gleiche Reihenfolge der Qualität der Modelle wieder: Modell 1) liefert eine sehr schlechte Vorhersage, während Modell 3) die beste Prädiktion liefert.

Die Wahl des Modells zur Berechnung der Dampfströme fällt folglich auf Modell 3). Abb. 9 zeigt die numerisch ermittelten Modellparameter für jeden Boden.

Die oberen Böden der Kolonne (Boden  $> 12$ ) zeigen geringe Schwankungen in den Pa-

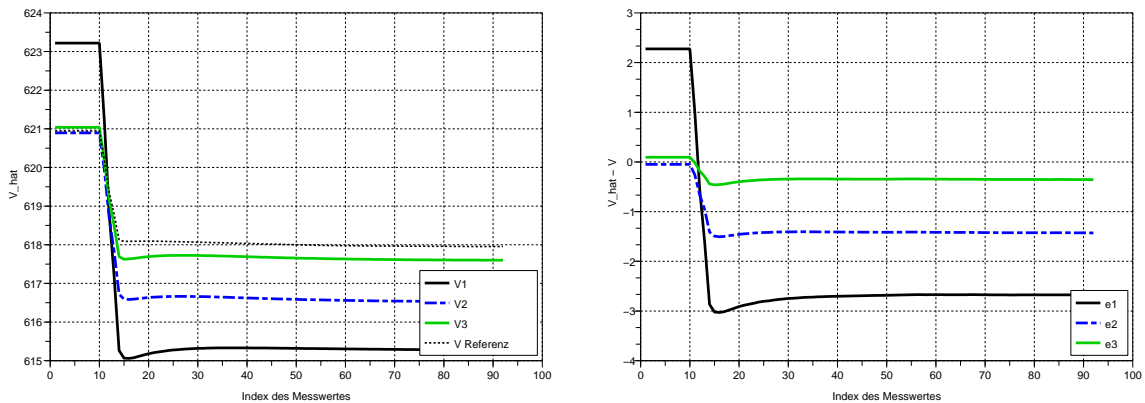


Abbildung 8: Verifizierung der Modelle durch Anwendung auf nicht zur Identifikation genutzte Datensätze

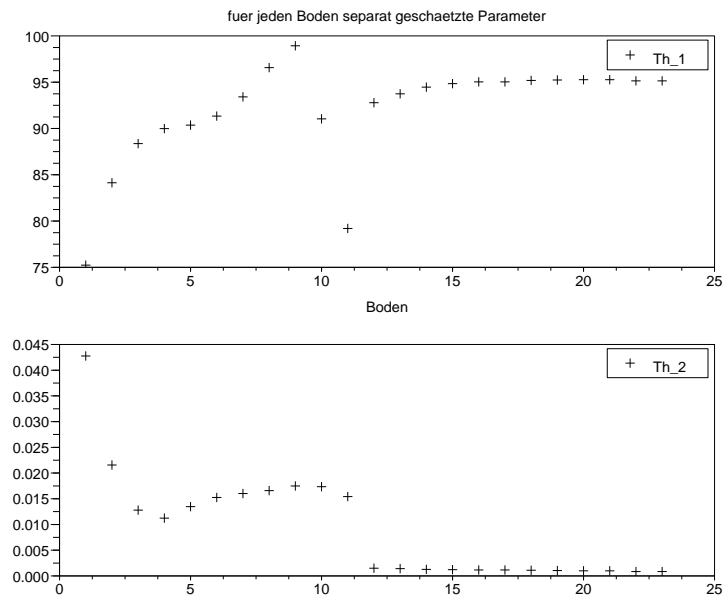


Abbildung 9: Identifizierte Parameter für Modell 3

parametern. Die Parameter der unteren Böden zeigen hingegen eine größere Streuung. Unter der Annahme, dass die unteren Böden gleich aufgebaut sind, ist zu vermuten, dass es noch weitere signifikante Einflussgrößen geben muss. So könnte, wenn sich auf



einem Boden Größen wie die Temperatur oder die Zusammensetzung rapide ändern, die Parameterschätzung für diesen Boden ungültig werden. Aufgründessen wurde bei der Verifizierung des Modells der Feedboden besonders in Betracht gezogen, da hier viele Größen starken Änderungen ausgesetzt sind. Solange das Kolonnenmodell jedoch nur um einen Arbeitspunkt ausgelenkt wird, müssten die Dampfströme relativ genau berechnet werden. Eine genauere Analyse hierzu war jedoch aufgrund fehlender Testdatensätze nicht möglich.

**Kopf der Kolonne** Die Gleichung (28) des ausgewählten Modells kann für alle Böden inklusive des Verdampfers allerdings nicht auf den obersten Boden  $N_t$  angewendet werden. Um auch die Strömung  $V_{N_t}$  berechnen zu können, wird im Kondensator ein bekannter Druck  $P_{head}$  angenommen. Dieser ist meist gleich dem Umgebungsdruck. Über das in Abb. 1 verbaute Ventil  $S_{head}$ , dessen Widerstandsparameter als Systemeingang ausgeführt wird, kann der aus der Kolonne herausströmende Dampf im Modell berechnet und auch geregelt werden, bzw. somit auch der Druck der Kolonne nach eventuellen Vorgaben durch eine Regelung eingestellt werden:

$$V'_{N_t} = S_{head} \sqrt{(P_{N_t} - P_{head})} \quad (29)$$

Das Ventil wird über ein quadratisches Widerstandsgesetz für den Molenstrom modelliert.

**Zusätzliches Tiefpassfilter** Bei der Implementierung wurde sehr schnell deutlich, dass durch die Berücksichtigung der Dynamik der Dampfströme sehr kleine Schrittweiten bei der numerischen Integration benötigt werden, da ein relativ zu den anderen Zeitkonstanten sehr hochfrequentes Verhalten bestimmter Systemteile auftritt. In der Simulation kommt es sonst zu numerischen Instabilitäten. Abhilfe verschafft eine zusätzliche Tiefpassfilterung der berechneten  $V'_j$ :

$$\dot{V}_j = \omega_V (-V_j + V'_j) \quad (30)$$

Die Konstante  $\omega_V$  wurde empirisch bestimmt, sodass nicht zu hohe Schrittweiten des

Lösungsalgorithmus notwendig sind, andererseits aber der Rest des Systems nicht durch ein träges Verhalten beeinflusst wird. Nebenbei existiert in der Realität tatsächlich, aufgrund der Massenträgheit, ein Widerstand des Dampfstromes gegenüber Änderungen der Strömungsgeschwindigkeit.

### 3.5. Modelle für Stoffeigenschaften

Die bisher aufgestellten Gleichungen zur Beschreibung verschiedener Eigenschaften der Böden, verwenden einige Stoffeigenschaften, wie bspw. Dichten, Massen oder Modelle zur Beschreibung des Phasengleichgewichts. Alle diese Eigenschaften hängen hauptsächlich von der Temperatur und der Zusammensetzung ab und sollen in diesem Abschnitt besprochen werden.

**molare Massendichte** Diese Stoffeigenschaft setzt sich linear anteilig bezüglich der Zusammensetzung des Gemisches aus den molaren Massen der reinen Komponenten zusammen:

$$m_{mol,j} = \sum_{i=1}^{N_c} x_{i,j} m_{mol,i, rein} = 32.042x_{1,j} + 88.149x_{2,j} + 74.122x_{3,j} \quad (31)$$

**molares Volumen** Für das Modell der ablaufenden Flüssigkeitsmenge wird die Stoffeigenschaft der Volumendichte benötigt. Die Werte der Volumendichte sind in Form eines Datensatzes über der Temperatur für die Reinstoffe (Abb. 10) gegeben. Der Verlauf wird wiederum mithilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate durch Polynome 2. Ordnung approximiert, was, wie im Bild zu erkennen ist, sehr gut funktioniert:

$$\rho_i(T) = \Theta_{md,i,1} + \Theta_{md,i,2}T + \Theta_{md,i,3}T^2$$

Um die Volumendichte einer Mischung bestimmen zu können, wird, wie schon bei den Enthalpien, wieder das lineare Mischungsgesetz angewendet:

$$\rho(x, T) = \sum_{k=i}^{N_c} x_i \rho_i(T) \quad (32)$$

$$= \sum_{k=i}^{N_c} x_i [\Theta_{md,i,1} + \Theta_{md,i,2} T + \Theta_{md,i,3} T^2] \quad (33)$$

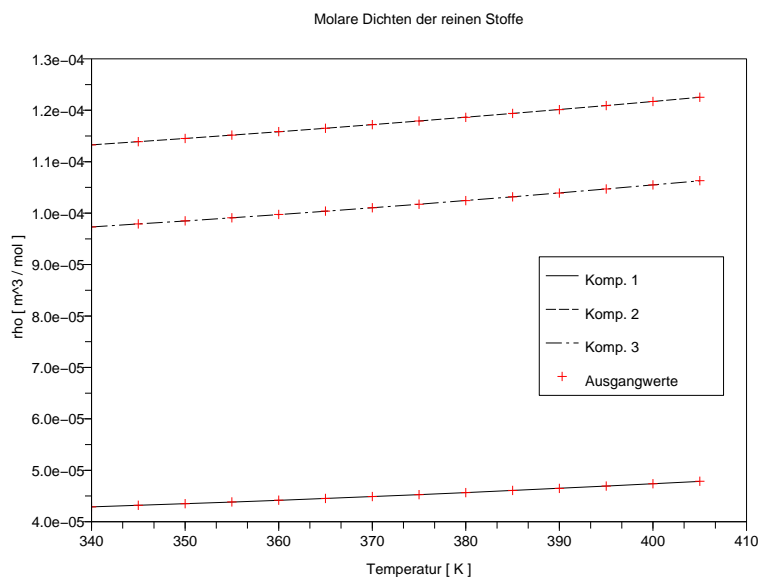


Abbildung 10: Molare Dichten der reinen Komponenten

**Raoult'sches Gesetz** Das Raoult'sche Gesetz beschreibt das Verhalten thermodynamisch abgeschlossener Systeme mit jeweils einer Gas- und Flüssigphase, wobei die beiden Phasen aus einem Stoffgemisch einer beliebigen Anzahl von beteiligten Stoffen besteht. Unter der Annahme, dass sich das System im Phasengleichgewicht befindet, setzt es vier thermodynamische Eigenschaften in Beziehung:

1. Konzentrationen der Gasphase
2. Konzentrationen der Flüssigphase
3. Temperatur
4. Druck

Folgende Gleichung beschreibt den genauen Zusammenhang:

$$x_i P_i(T) \gamma_i = P y_i, \quad \forall i \quad (34)$$

Die Bezeichnungen  $y_i$  und  $x_i$  sind hier wieder die Molenbrüche der anteiligen Mengen der  $i$ -ten Komponente in Gas bzw. Flüssigkeit.  $P$  ist der Gesamtdruck des Systems und  $P_i(T)$  ist der sog. Dampfdruck der jeweiligen Komponente, welcher stark abhängig von der Temperatur ist und als Stoffparameter gegeben ist. Diese Stoffeigenschaften, die von der Temperatur abhängig sind, können mit Polynomen oder besser der Antoine Gleichung (siehe nachfolgender Abschnitt) approximiert werden. Der Korrekturfaktor  $\gamma_i$  ist ein Parameter welcher Abweichungen des realen Verhaltens von diesem Modell beschreibt. Ist dieser gleich eins, so wird ein ideales Verhalten angenommen. Es kann aber bei bestimmten Mischungen zu Abweichungen kommen, sodass noch ein zusätzliches Modell, wie bspw. NRTL [7, S. 184] benutzt werden muss, mit welchem  $\gamma_i$  bestimmt werden kann. In dieser Arbeit wurde kein zusätzliches Modell für  $\gamma_i$  genutzt, sodass gilt  $\gamma_i = 1$ .

An dieser Stelle soll das Gesetz dazu genutzt werden, um mithilfe bekannter Zusammensetzungen und der Annahme, dass sich die Flüssigphase am Siedepunkt befindet, eine direkte statische Beziehung zwischen Druck und Temperatur in beiden Richtungen herzustellen.

Interessiert der Druck, welcher sich auf den Böden einstellt, kann die Beziehung 34 mit Gleichung (2) über alle  $i$  summiert und umgestellt werden:

$$P = \sum_{i=1}^{N_c} x_i P_i(T) \gamma_i \quad (35)$$

Etwas aufwendiger gestaltet sich jedoch die Berechnung der Temperatur, welche formal durch folgende Funktion beschrieben werden soll:

$$T = T_{Siede}(x, P) \quad (36)$$

Hier ist es allgemein nicht möglich die Gleichung nach  $T$  zu lösen. Stattdessen muss ein iteratives Verfahren verwendet werden. Es bietet sich das Newtonverfahren an, aller-

dings liefert auch ein sehr "rudimentäres" Suchverfahren eine durchaus zufriedenstellende Möglichkeit der Berechnung, welche vorerst Aufgrund des geringeren Aufwands implementiert wurde:

1. Festlegen einer Starttemperatur  $T$
2. Berechnen der Dampfdrücke  $P_i$  für jede Komponente
3. Berechnen von  $P_{iter} = \sum_{i=1}^{N_c} x_i P_i(T) \gamma_i$
4. Wenn der gegebene Druck  $P$  noch nicht genügend genau ist, dann suche ein neues  $T$  und wiederhole ab Schritt 2
  - Wenn  $P > P_{iter} \Rightarrow T$  verkleinern
  - Wenn  $P < P_{iter} \Rightarrow T$  vergrößern

Dieser Algorithmus findet die einzige existierende Lösung, wenn  $P_i(T)$  monoton wächst.

**relative Flüchtigkeiten** Für die relativen Flüchtigkeiten aus Abschnitt 3.4.1 können die Dampfdrücke verwendet werden. Die folgende Rechnung soll dies verdeutlichen:

$$P y_i = P_i x_i \gamma_i, \quad (37)$$

$$P = \sum_{i=1}^{N_c} P_i x_i \gamma_i = \frac{P_i x_i \gamma_i}{y_i}, \quad (38)$$

$$y_i = \frac{P_i x_i \gamma_i}{\sum_{i=1}^{N_c} P_i x_i \gamma_i} \quad (39)$$

Hier wurde Gleichung (2)

$$\sum_{i=1}^{N_c} x_i = 1$$

genutzt. Ein Vergleich mit Gleichung (16)

$$y'_{i,j} = \frac{\alpha_i x_{i,j}}{\sum_{k=1}^{N_c} \alpha_k x_{k,j}}, \quad i = 1..N_c,$$

zeigt die mögliche Verwendung der Dampfdrücke als Parameter der relativen Flüchtigkeit, da zusätzlich noch  $\gamma_i = 1$  gesetzt wurde.

**Antoine Gleichung** Zur Approximation der Dampfdrücke der verschiedenen Komponenten in Abhängigkeit der Temperatur, welche als Messwerte gegeben sind (Abb. 11), erweist es sich als sinnvoll, diese unter Verwendung der Antoine Gleichung (siehe [1, Seite 31]) zu approximieren, da diese im Gegensatz zu einfachen Polynomen die physikalische Struktur besser wiedergibt:

$$\ln P_i(T) = A_i + \frac{B_i}{T} \quad (40)$$

Die Parameter  $A_i$  und  $B_i$  können wieder durch die Methode der kleinsten Fehlerquadrate für jede Komponente geschätzt werden. Es ergibt sich eine gute Approximation der Messdaten, wie es in Abb. 11 zu sehen ist.

### 3.6. Modell ohne Energiebilanz

In den vorhergehenden Abschnitten wurden alle notwendigen Gleichungen abgeleitet, welche zum Zusammenfügen eines geschlossenen dynamischen Zustandsraummodells notwendig sind. Zunächst soll ein Modell der Kolonne ohne Energiebilanz und über den Böden konstanten Dampfströmen abgeleitet werden. Es wird von der Annahme ausgegangen, dass sich die Flüssigkeit auf den Böden am Siedepunkt befindet. Dann kann über die Zusammensetzung der Flüssigkeit und ein fest vorgegebenes Druckprofil auf das Temperaturprofil geschlossen werden.

Die Abbildungen 13 bis 16 zeigen zunächst die Schaltbilder einer Zusammenschaltung zusammengehöriger Gleichungen. Jedes Bild lässt sich einer Eigenschaft eines Bodens zuordnen. In der Zusammenschaltung entsteht ein komplettes Modell eines Bodens. Schaltung 13 enthält sämtliche Gleichungen zur Berechnung der Molenbrüche der Gas- als auch Flüssigphase. Es werden folgende Gleichungen verwendet:

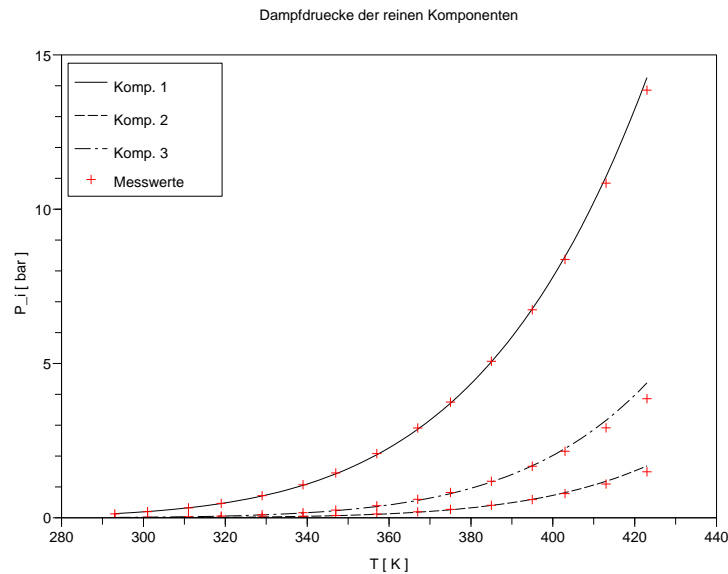


Abbildung 11: Dampfdrücke der Komponenten

- Zusammensetzungsbilanz:  $M_j \dot{x}_{i,j}$  für alle  $i \in [1, N_c - 1]$ ; Gleichung (7)
- Schließbedingung der Molenbrüche:  $x_{N_c,j} = x_{N_c}(x_{1,j}, x_{2,j})$  Gleichung (3)
- Phasengleichgewicht:  $\mathbf{y}'_j(\mathbf{x}_j)$  und  $\mathbf{y}_j(\mathbf{y}'_j, \mathbf{y}_{j-1})$ ; Gleichungen (16) und (19)

Das Signallaufdiagramm aus Abb. 14 zeigt die Bilanzierung des Gesamtholdup. Es dient der Berechnung von  $M_j$  und setzt Gleichung (8) um. Bild 15 zeigt das Diagramm zur Berechnung von  $T_j$  über den iterativen Algorithmus zu Gleichung (36). Hier wird der Druck  $P_j$  als konstant und bekannt vorausgesetzt. Schließlich wird noch die Modellierung der Flüssigströme benötigt. Das Modell ist in Abb. 16 als Signallaufplan dargestellt. Zur Modellierung der Flüssigströme gehören die folgenden Gleichungen:

- Molares Volumen der Flüssigkeit:  $\rho(\mathbf{x}_j, T_j)$ ; Gleichung (32)
- Ablaufende Flüssigkeit:  $L_j(\rho_j, V_{j-1}, M_j)$ ; Gleichung (25)

Abb. 12 zeigt den Zusammenschluss der hergeleiteten Beziehungen für einen einfachen Boden. Zur Implementation als Zustandsraummodell als MATLAB S-Funktion, aber auch der Übersichtlichkeit wegen sind alle Gleichungen für einen "einfachen" Boden

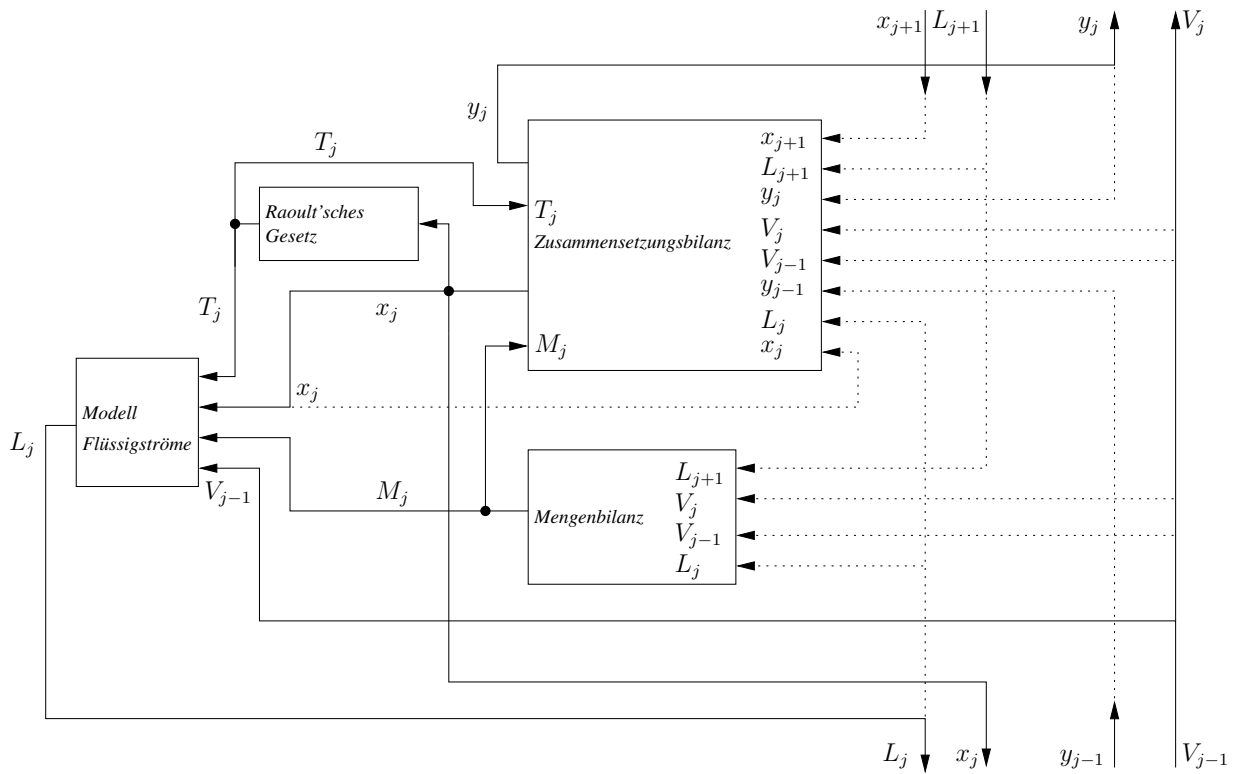


Abbildung 12: Schaltbild einfacher Boden

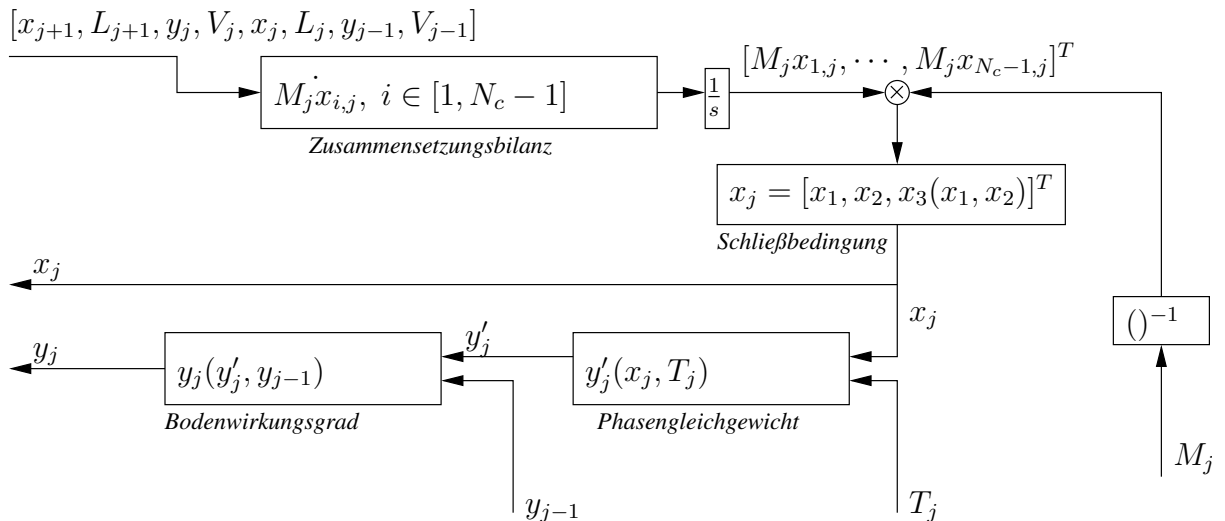


Abbildung 13: Modellierung der Zusammensetzungsbilanz



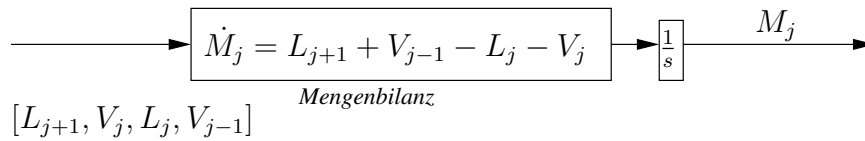


Abbildung 14: Modellierung der Mengenbilanz

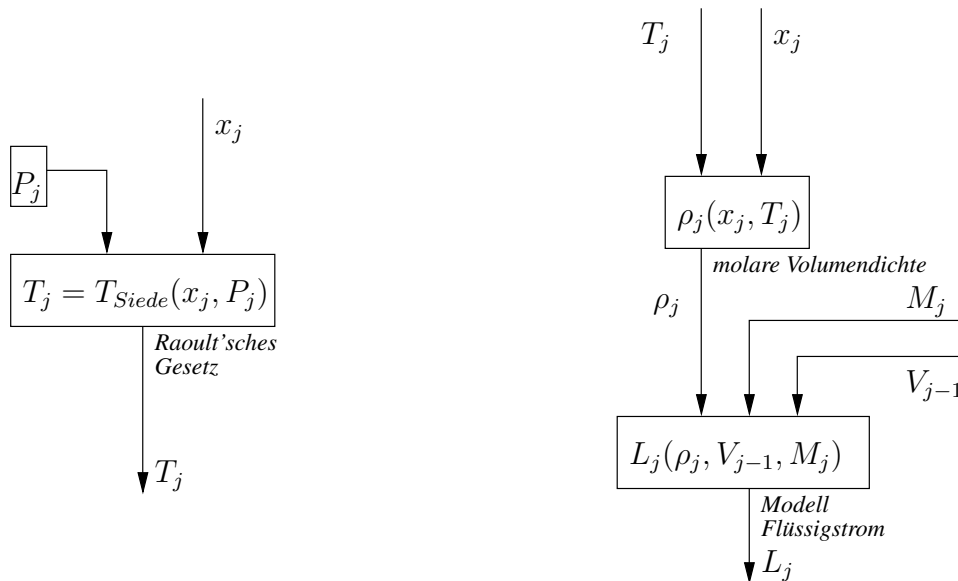


Abbildung 15: Iterative Routing zur Berechnung der Temperatur über das Raoult'sche Gesetz

Abbildung 16: Modell zur Berechnung der Flüssigströme

nochmals zusammengefasst aufgelistet:

1. Zusammensetzungsbilanz:  $M_j \dot{x}_{i,j}$  für alle  $i \in [1, N_c - 1]$ ; Gleichung (7)
2. Schließbedingung der Molenbrüche:  $x_{N_c,j} = x_{N_c}(x_{1,j}, x_{2,j})$  Gleichung (3)
3. Mengenbilanz:  $\dot{M}_j$  für alle  $i$ ; Gleichung (8)
4. Phasengleichgewicht:  $y'_j(x_j)$  und  $y_j(y'_j, y_{j-1})$ ; Gleichungen (16) und (19)
5. Siedepunkt:  $T_j = T_{Siede}(x_j, P_j)$ ; Verwendung des iterativen Algorithmus zu Gleichung (36)

6. Molares Volumen der Flüssigkeit:  $\rho(\mathbf{x}_j, T_j)$ ; Gleichung (32)
7. Ablaufende Flüssigkeit:  $L_j(\rho_j, V_{j-1}, M_j)$ ; Gleichung (25)
8. Aufsteigender Dampf:  $V_j = V_{j,1}$  (Dampfstrom konstant über alle Stufen)

Dieser Gleichungssatz wird auf die Böden  $j \in [1, 23] \setminus F_n$  angewendet. Der in Boden 24 einfließende Rücklauf  $L_{N_t+1}$  wird, wie bereits in Abschnitt 3.3 erwähnt wurde, auch als  $R$  bezeichnet. Weiterhin gilt  $V_B = V_0$ .

Für den Feedboden  $j = F_n$  müssen die Bilanzen um den Zulauf  $F$  der Zusammensetzung  $z_F$  erweitert werden:

1. Zusammensetzungsbilanz:  $M_j \dot{x}_{i,j}$  für alle  $i \in [1, N_c - 1]$ ; Gleichung (10)
2. Schließbedingung der Molenbrüche:  $x_{N_c,j} = x_{N_c}(x_{1,j}, x_{2,j})$  Gleichung (3)
3. Mengenzbilanz:  $\dot{M}_j$  für alle  $i$ ; Gleichung (11)
4. Phasengleichgewicht:  $\mathbf{y}'_j(\mathbf{x}_j)$  und  $\mathbf{y}_j(\mathbf{y}'_j, \mathbf{y}_{j-1})$ ; Gleichungen (16) und (19)
5. Siedepunkt:  $T_j = T_{Siede}(\mathbf{x}_j, P_j)$ ; Verwendung des iterativen Algorithmus zu Gleichung (36)
6. Molares Volumen der Flüssigkeit:  $\rho(\mathbf{x}_j, T_j)$ ; Gleichung (32)
7. Ablaufende Flüssigkeit:  $L_j(\rho_j, V_{j-1}, M_j)$ ; Gleichung (25)
8. Aufsteigender Dampf:  $V_j = V_{j,1}$  (Dampfstrom konstant über alle Stufen)

Der Feedstrom  $F$  und dessen Zusammensetzung  $z_F$  wird als Systemeingang ausgeführt.

Für den Verdampfer werden folgende Gleichungen angesetzt:

1. Zusammensetzungsbilanz: Gleichung (13)
2. Schließbedingung der Molenbrüche:  $x_{N_c,B} = x_{N_c}(x_{1,B}, x_{2,B})$  Gleichung (3)
3. Mengenzbilanz: Gleichung (14)
4. Phasengleichgewicht:  $\mathbf{y}_B = \mathbf{y}'_B(\mathbf{x}_B)$ ; Gleichung (16)
5.  $V_B = c_{dampf} Q$

6. Siedepunkt:  $T_B = T_{Siede}(x_B, P_B)$ ; Verwendung des iterativen Algorithmus zu Gleichung (36)

Die Modellierung der ablaufenden Flüssigströme entfällt, da hier kein Ablauf über ein Wehr vorhanden ist. Zusätzlich ist die Mengenbilanz nicht mehr dynamisch, da ein konstanter Holdup angenommen wurde.

Bei der Modellierung des Dampfstroms in Punkt 5 wird angenommen, dass näherungsweise ein proportionaler Zusammenhang zwischen Heizleistung (weiterer Systemeingang)  $Q$  und dem resultierenden Dampfstrom  $V_B$  besteht. Die Konstante  $c_{dampf}$  wurde durch Analyse der Referenzdaten zu  $c_{dampf} = 614/25000000$  bestimmt. Die Annahme der über den Böden konstanten Dampfströme stützt sich auf den näherungsweise gleichmäßigen thermischen Energiefluss in der Kolonne nach oben hin, wenn zusätzlich angenommen wird, dass die molare Verdampfungsenthalpie ebenfalls konstant bleibt.

Der Holdup des Verdampfers ist konstant  $M_B = 774\text{mol}$ .

Für den Kondensator wird schließlich noch angesetzt:

1. Zusammensetzungsbilanz: Gleichung (6)
2. Schließbedingung der Molenbrüche:  $x_{N_c,D} = x_{N_c}(x_{1,D}, x_{2,D})$  Gleichung (3)

Der Rücklauf  $R$  wird als Systemeingang ausgeführt, wobei dessen Molenbrüche  $R_x$  der Zusammensetzung des Flüssigholdup des Kondensators entspricht. Die Stoffmenge im Kondensator ist wie auch beim Verdampfer konstant auf  $M_D = 263\text{mol}$ . Der Kondensator ist also, wie bereits im Abschnitt 3.3 erwähnt, nicht vollständig detailliert modelliert.

Als Konstanten bzw. Parameter wurden zusätzlich angenommen:

- $P_j$ : Lineare Druckverlauf von  $P_1 = 100958 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$  bis  $P_{N_t} = 10^5 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$
- $P_B = 10100 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$
- $E_{OGM,j} = 1$  für alle  $j$  (Annahme: Böden befinden sich jederzeit im idealen Gleichgewicht)

Aus diesen Gleichungen ergibt sich ein geschlossenes Zustandsraummodell mit dem Zustandsvektor:

$$x = [M_j, M_j \mathbf{x}_{i,j}^T, M_B \mathbf{x}_{i,B}, M_D \mathbf{x}_{i,D}], \quad j \in [1, N_t], i \in [1, N_c - 1]$$

### 3.6.1. Anfangswerte

Es wird angenommen, dass am Anfang die Kolonne gleichmäßig bzgl. Volumen und Zusammensetzung gefüllt ist. Das Molvolumen ist über alle Böden konstant vorgegeben. Gleiches gilt für die Zusammensetzung, welche der des Feedstroms entspricht. In Tabelle 2 sind alle Anfangswerte zusammengefasst.

Zustand	Anfangswert	Beschreibung
$[x_{0,1,B}, x_{0,2,B}]^T$	$[0.6565, 0.2557]^T$	Zusammensetzung des Moleninhalts des Verdampfers
$[x_{0,1,j}, x_{0,2,j}]^T$	$[0.6565, 0.2557]^T, \forall j \in [1..N_t]$	Zusammensetzung des Moleninhalts der normalen Böden
$[x_{0,1,D}, x_{0,2,D}]^T$	$[0.6565, 0.2557]^T$	Zusammensetzung des Moleninhalts des Kondensators
$M_{0,j}$	160mol, $\forall j \in [1..N_t]$	Flüssigholdup der verschiedenen Stufen

Tabelle 2: Anfangswerte für das Modell ohne Energiebilanz

Diese Werte sind nur als grobe Grundlage zu sehen - der gewünschte, mit den jeweiligen Eingangsgrößen zusammenhängende stationäre Zustand, stellt sich in der Berechnung automatisch nach einer bestimmten Zeitdauer ein. Dieser Einschwingvorgang ist ein künstlicher Anfahrprozess und kann nicht ohne Weiteres auf die Realität angewendet werden.

### 3.6.2. Testfall und Simulation

Um das Modell zu testen, soll eine Simulation für einen festgelegten Eingangsgrößenverlauf durchgeführt werden. Das Modell wurde hierzu in MATLAB/Simulink als S-Function implementiert. Die berechneten Daten werden dann mit Referenzdaten verglichen, die unter den gleichen Eingangsverläufen entstanden sind. Zunächst jedoch muss

das Modell in einen stationären Grundzustand gebracht werden (siehe oben), welcher mit dem Anfangszustand der Referenzdaten übereinstimmt. Hierzu werden konstante Signale auf den Systemeingang gegeben (siehe Tabelle 3) und der Einschwingvorgang abgewartet.

Eingang	Wert	Beschreibung
$R$	92.6432[mol/s]	Rücklauf
$[z_{1,F}, z_{2,F}]^T$	$[0.6565, 0.2557]^T$	Feedzusammensetzung
$F$	754.723[mol/s]	Feedstrom
$Q$	$25 \cdot 10^6$ [W/s]	Heizleistung

Tabelle 3: Eingangsgrößen im stationären Zustand

Als Stellgrößenverlauf wird jetzt ein Änderung im Rücklauf betrachtet. Abb. 17 zeigt eine Erhöhung von  $R$ . Dieses Signal wird auf das System gegeben, alle anderen Eingänge werden konstant auf den Werten aus Tabelle 3 gehalten.

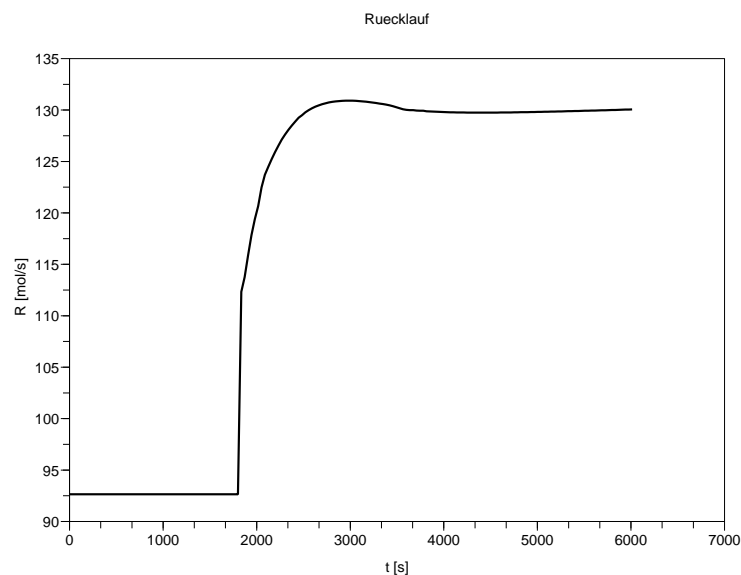


Abbildung 17: Rücklaufänderung  $R$

Die Simulationsergebnisse sind auszugsweise abgebildet. In den Abb. 18 finden sich die Verläufe für zwei charakteristische Zeitpunkte der Konzentrationen der Flüssigkeit und

des Dampfes über den Böden, sowie ein Temperaturprofil, welches ebenfalls über den verschiedenen Böden aufgetragen ist. Die schwarzen gestrichelten Linien zeigen zum Vergleich den Verlauf der Daten der Referenz.

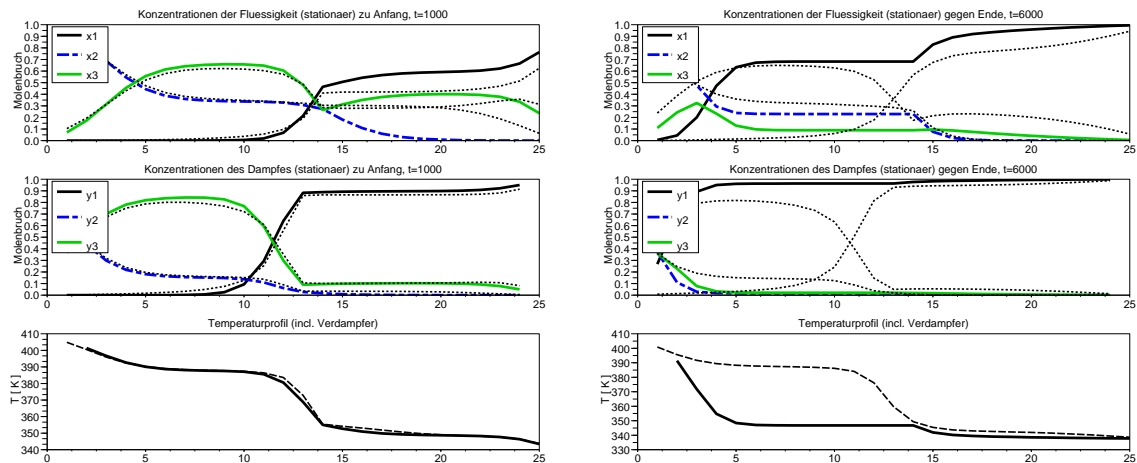


Abbildung 18: Simulation des Modells ohne Energiebilanz; Profile über den Böden aufgetragen

Abb. 19 zeigt links für die gleichen zwei verschiedenen Zeitpunkte die Verläufe des molaren Holdup, der Dampfströme und die ablaufende Flüssigmenge über den Böden. Rechts davon findet man die linear interpolierte Bodennummer bei der das Temperaturprofil die Temperatur  $T = 370[\text{K}]$  schneidet. Die Temperaturverläufe, die nur zu diskreten Bodennummern existieren, werden zwischen den einzelnen Stützpunkten linear interpoliert. Man erhält somit einen stetigen Verlauf für die Position des Temperaturwendepunktes, welcher die zu regelnde Größe darstellt.

Anhand der Verläufe für die abfließende Flüssigkeit, sowie den Molenholdup, welche nahezu direkt bis auf eine leichte Abhängigkeit von den Konzentrationsverläufen miteinander gekoppelt sind, lässt sich für diesen Fall eine brauchbare Vorhersagbarkeit des Modells für das abfließende Medium (Gleichung (25)) bestätigen. Da der Holdup  $M_j$  einen wesentlichen Einfluss auf die Zeitkonstanten der Dynamik des Systems hat ( $M_j$  steht neben der Ableitung in den Bilanzen der Stoffzusammensetzung; Gleichung (7)), bleibt kritisch anzumerken, dass die Molenholdups im Bereich des Feedbodens nicht das Referenzverhalten wiedergeben können. Unter einer Änderung der Heizleistung oder des Rücklaufs ergeben sich gerade in diesem Bereich starke Änderungen der Zu-

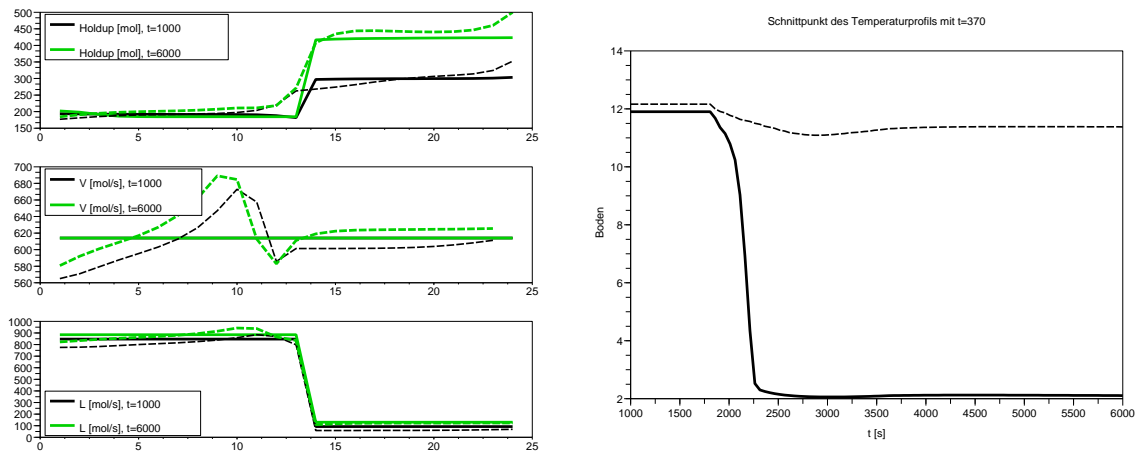


Abbildung 19: Simulation des Modells ohne Energiebilanz; Profile über den Böden aufgetragen

sammensetzungen, wodurch hier ein fehlerbehaftetes  $M_j$  einen besonders großen Fehler hervorruft. Der Verlauf des Dampfstroms ist, wie im Modell vorgegeben, über alle Stufen hinweg konstant. Das Referenzprofil besitzt besonders im unteren Kolonnenbereich starke Abweichungen.

Die Profile der Zusammensetzung zum Anfangszeitpunkt (stationärer Grundzustand s.o.) in Abb. 18 stimmen insbesondere für die Dampfkonzentrationen gut überein, somit liegt auch das davon abhängige Temperaturprofil im Toleranzbereich. Für den späteren Zeitpunkt mit erhöhtem Rücklauf trifft dies allerdings nicht zu. Hier ist die erste Komponente sehr weit in Richtung Verdampfer vorgedrungen, was man deutlich am Profil der Zusammensetzung der Flüssigkeit erkennen kann. Demzufolge stimmt auch das Temperaturprofil nicht mehr überein. Dieser Sachverhalt spiegelt sich auch im Verlauf des Schnittpunktes  $T = 370[\text{K}]$  mit dem Temperaturprofil wieder.

**Fazit** Die Konsequenz all dieser Missstände ist, dass dieses Modell für eine auf diesem Modell aufbauende Regelung unbrauchbar ist. Es müssen weitere Sachverhalte modelliert werden, welche dem Absinken des Temperaturwendepunktes entgegenstehen. Bei Betrachtung der Dampfströme unterhalb des Feedbodens zeigt sich in den Referenzdaten ein leicht erhöhter Wert. Dieser könnte dafür verantwortlich sein, dass die am

leichtesten siedende Komponente im Referenzfall wieder auf die oberen Böden gebracht wird, sodass ein "Absacken" verhindert wird. Der nächste Modellansatz wird somit primär um die Beschreibung der Dampfströme  $V_j$  erweitert werden.

### 3.7. Modell mit Energiebilanz

In der nächsten Modellvariante sollen die Dampfströme  $V_j$  dynamisch modelliert werden. Hierzu muss eine Energiebilanz der einzelnen Böden eingeführt werden, mit der die Temperatur auf jedem Boden anhand der Energiespeicherung berechnet werden kann. Mit der Temperatur gelingt es - wieder unter der Annahme, dass sich die gesamte Flüssigkeit am Siedepunkt befindet - über das Raoult'sche Gesetz den resultierenden Druck auf jedem Boden zu berechnen. Dann kann anhand der Druckdifferenz zwischen den einzelnen Böden der Strom des aufsteigenden Dampfes  $V_j$  für den Verdampfer und alle Böden außer dem obersten berechnet werden.

Zur Aufstellung der Energiebilanz muss, wenn das Gesamtsystem als Zustandsraummodell aufgeschrieben werden soll, der Gasholdup vernachlässigt werden, was bedeutet, dass in Gleichung (24)  $M_{vap,j} = 0, j \in [1..N_t, B, D]$  gesetzt wird. Andernfalls ergibt sich ein dynamisches System mit algebraischen Anteilen, welches aufwändiger zu implementieren und zu berechnen ist. Die Ursache liegt darin, dass für  $M_{vap,j} \neq 0$  in Gleichung (24)  $y_j$  bekannt sein muss, welches aber nur über das Phasengleichgewicht berechnet werden kann, wozu die Temperatur  $T_j$  notwendig ist. Ein analytisches Vorgehen wäre nicht möglich. Da die Dampfholdups im Vergleich zu den Flüssigholdups nur einen sehr geringen Energieinhalt besitzen, ist diese Annahme gerechtfertigt.

In den beiden Abbildungen 20 und 21 sind die zwei weiteren Modellbestandteile als Signalflussdiagramm gezeichnet. Die Energiebilanz 20 ersetzt die iterative Berechnung der Temperatur über das Raoult'sche Gesetz (Schaltbild 15). Es werden die folgenden Gleichungen verwendet:

- Energiebilanz:  $\dot{U}_j$ ; Gleichung (9)
- Berechnung der Temperatur:  $T_j = T_j(U_j, M_j, x_j)$  ; Gleichung (24)
- Enthalpie Flüssigphase:  $h_{liq,j}(T_j, x_j)$ ; Gleichung (22)



- Enthalpie Gasphase:  $h_{vap,i}(T_j, \mathbf{y}_j)$ ; Gleichung (20)

Die Berechnung der Enthalpien sind im Schaltbild mit der Energiebilanz in einem Block zusammengefasst.

Das Schaltbild zur Berechnung der Dampfströme (Abb 21) verwendet das Raout'sche Gesetz zur Berechnung des Drucks, mit welchem dann unter Zuhilfenahme des Drucks auf dem oberen Boden über die Druckdifferenz auf die Strömung geschlossen werden kann. Hierzu werden folgende Gleichungen verwendet:

- Siedepunkt:  $P_j = P_j(x_j, T_j)$ ; Gleichung (35)
- Aufsteigender Dampf:  $V'_j = V'_j(P_j, P_{j+1}, M_{j+1}, m_{mol,j+1})$  Gleichung (28)
- Tiefpassfilter für  $V'_j$ ; Gleichung (30)

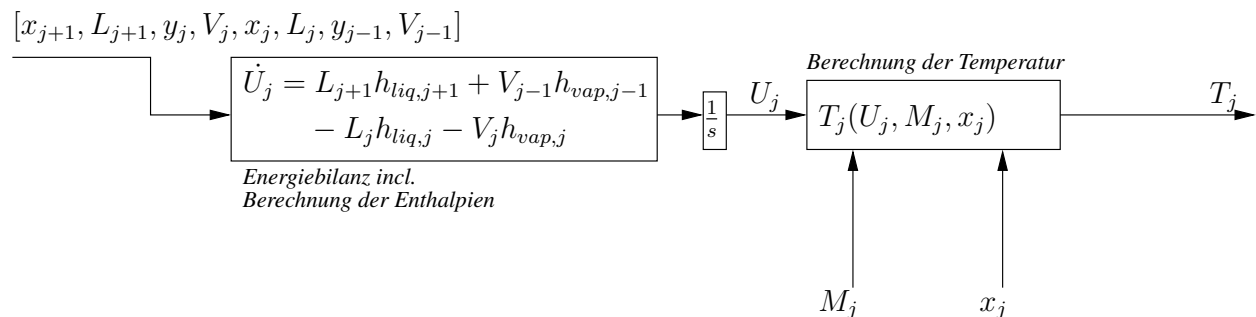


Abbildung 20: Modellierung der Energiebilanz und Berechnung der Temperatur

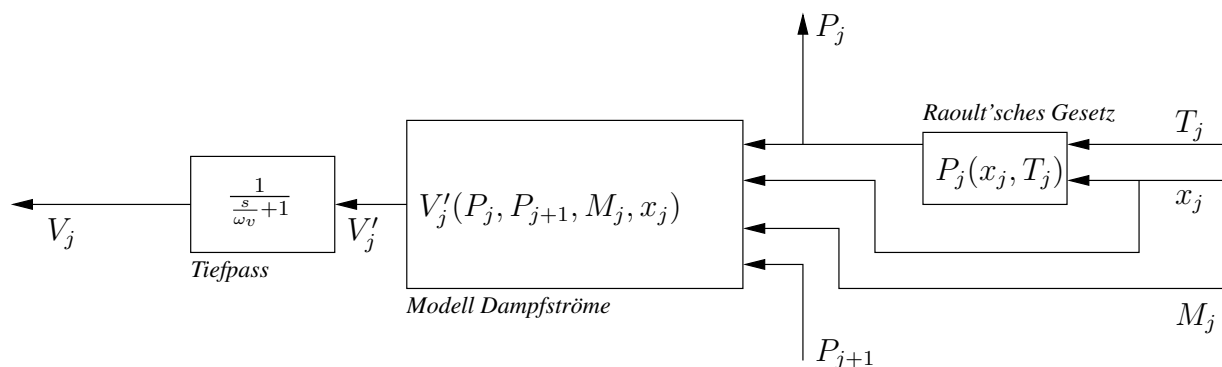


Abbildung 21: Modellierung der Dampfströme

Für die modellierung der "einfachen" Böden wird wieder ein Gleichungssatz zusammenfassend angegeben, diesmal mit einer Energiebilanz und den Gleichungen zur Modellierung von  $V_j$ , dessen Zusammenschaltung in Abb. 22 zu sehen ist.

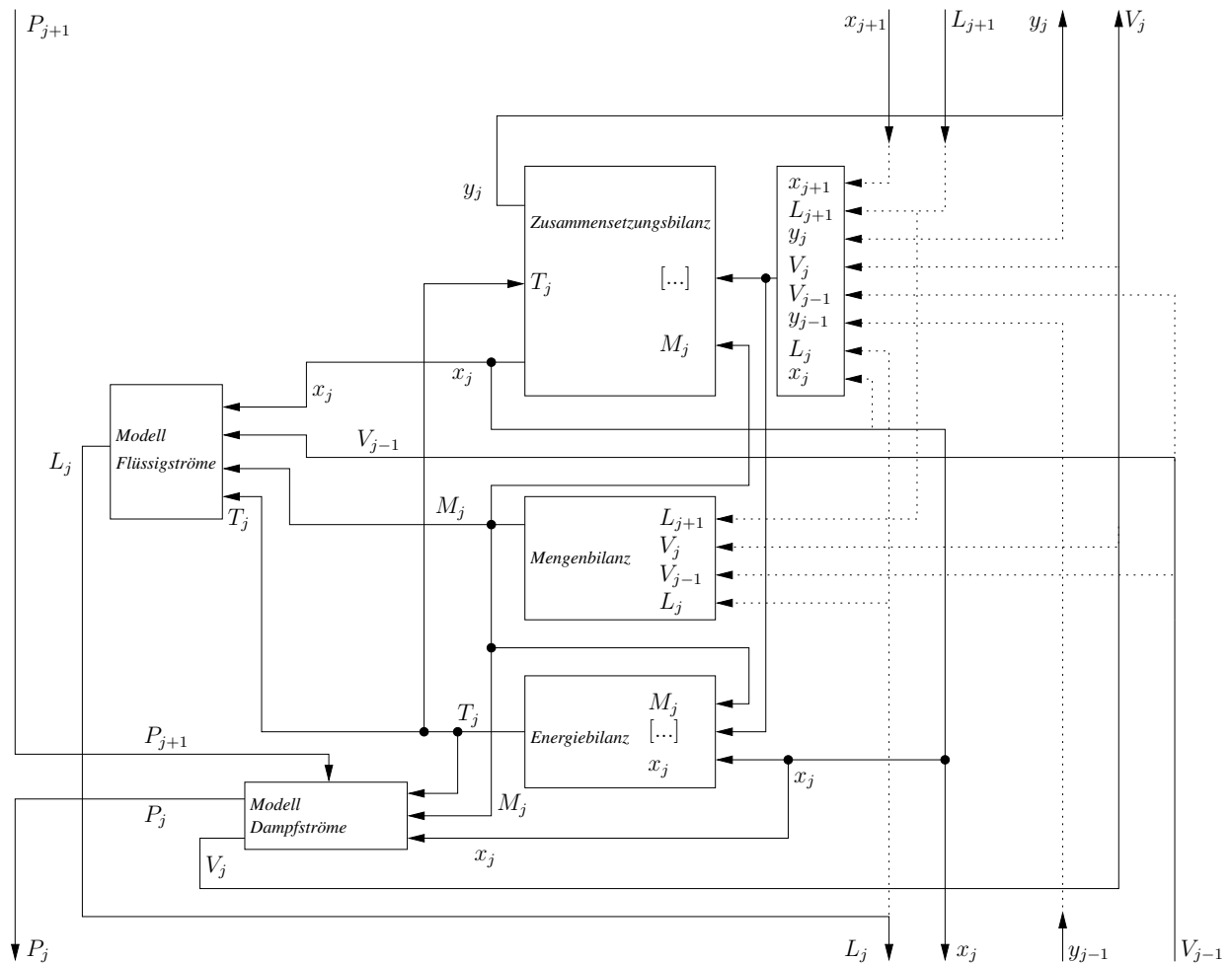


Abbildung 22: Schaltbild einfacher Böden mit Energiebilanz

1. Zusammensetzungsbilanz:  $M_j \dot{x}_{i,j}$  für alle  $i \in [1, N_c - 1]$ ; Gleichung (7)
2. Schließbedingung der Molenbrüche:  $x_{N_c,j} = x_{N_c}(x_{1,j}, x_{2,j})$  Gleichung (3)
3. Massenbilanz:  $\dot{M}_j$  für alle  $i$ ; Gleichung (8)
4. Energiebilanz:  $\dot{U}_j$ ; Gleichung (9)
5. Enthalpie Flüssigphase:  $h_{liq,j}(T_j, \mathbf{x}_j)$ ; Gleichung (22)

6. Enthalpie Gasphase:  $h_{vap,i}(T_j, \mathbf{y}_j)$ ; Gleichung (20)
7. Berechnung der Temperatur:  $T_j = T_j(U_j, M_j, \mathbf{x}_j)$  ; Gleichung (24)
8. Phasengleichgewicht:  $\mathbf{y}'_j(\mathbf{x}_j)$  und  $\mathbf{y}_j(\mathbf{y}'_j, \mathbf{y}_{j-1})$ ; Gleichungen (16) und (19)
9. Siedepunkt:  $P_j = P_j(\mathbf{x}_j, T_j)$ ; Gleichung (35)
10. Molares Volumen der Flüssigkeit:  $\rho(\mathbf{x}_j, T_j)$ ; Gleichung (32)
11. Ablaufende Flüssigkeit:  $L_j(\rho_j, V_{j-1}, M_j)$ ; Gleichung (25)
12. molare Masse der Flüssigkeit:  $m_{mol,j+1} = m_{mol,j+1}(\mathbf{x}_j)$ : Gleichung (31)
13. Aufsteigender Dampf:  $V'_j = V'_j(P_j, P_{j+1}, M_{j+1}, m_{mol,j+1})$  Gleichung (28)
14. Tiefpassfilter für  $V'_j$ ; Gleichung (30)

Dieser Gleichungssatz wird wiederum auf die Böden  $j \in [1, 23] \setminus F_n$  angewendet.

Für den Feedboden  $j = F_n$  werden wieder die Bilanzgleichungen angepasst:

1. Zusammensetzungsbilanz:  $\dot{M}_j x_{i,j}$  für alle  $i \in [1, N_c - 1]$ ; Gleichung (10)
2. Schließbedingung der Molenbrüche:  $x_{N_c,j} = x_{N_c}(x_{1,j}, x_{2,j})$  Gleichung (3)
3. Massenbilanz:  $\dot{M}_j$  für alle  $i$ ; Gleichung (11)
4. Energiebilanz:  $\dot{U}_j$ ; Gleichung (12)
5. Enthalpie Flüssigphase:  $h_{liq,j}(T_j, \mathbf{x}_j)$ ; Gleichung (22)
6. Enthalpie Gasphase:  $h_{vap,i}(T_j, \mathbf{y}_j)$ ; Gleichung (20)
7. Berechnung der Temperatur:  $T_j = T_j(U_j, M_j, \mathbf{x}_j)$  ; Gleichung (24)
8. Phasengleichgewicht:  $\mathbf{y}'_j(\mathbf{x}_j)$  und  $\mathbf{y}_j(\mathbf{y}'_j, \mathbf{y}_{j-1})$ ; Gleichungen (16) und (19)
9. Siedepunkt:  $P_j = P_j(\mathbf{x}_j, T_j)$ ; Gleichung (35)
10. Molares Volumen der Flüssigkeit:  $\rho(\mathbf{x}_j, T_j)$ ; Gleichung (32)
11. Ablaufende Flüssigkeit:  $L_j(\rho_j, V_{j-1}, M_j)$ ; Gleichung (25)
12. molare Masse der Flüssigkeit:  $m_{mol,j+1} = m_{mol,j+1}(\mathbf{x}_j)$ : Gleichung (31)

13. Aufsteigender Dampf:  $V_j' = V_j'(P_j, P_{j+1}, M_{j+1}, m_{mol,j+1})$  Gleichung (28)

14. Tiefpassfilter für  $V_j'$ ; Gleichung (30)

Der Feedstrom  $F$  und dessen Zusammensetzung  $z_F$  und diesmal auch Temperatur  $T_F$ , welche über die Beziehung (22) in eine Enthalpie  $h_{liq,F}(T_F, z_F) = h_{liq}(T_F, z_F)$  umgerechnet werden kann, wird als Systemeingang ausgeführt.

Der in Boden 24 einfließende Rücklauf  $L_{N_t+1}$  wird, wie bereits in Abschnitt 3.3 erwähnt wurde, auch als  $R$  bezeichnet.  $R$  ist hierbei wie die Temperatur  $T_R$  als Eingangsgröße des Systems ausgeführt.  $T_R$  wird wiederum in die Enthalpie  $h_{liq,R}(T_R, x_D) = h_{liq}(T_R, x_D)$  umgerechnet. Die Zusammensetzungen des Rücklaufs ergeben sich aus den Konzentrationen des Holdup im Kondensator. Des Weiteren sind die beiden Bezeichnungen  $V_B = V_0$  äquivalent.

Für den Verdampfer werden folgende Gleichungen angesetzt:

1. Zusammensetzungsbilanz: Gleichung (13)
2. Schließbedingung der Molenbrüche:  $x_{N_c,B} = x_{N_c}(x_{1,B}, x_{2,B})$  Gleichung (3)
3. Massenbilanz: Gleichung (14)
4. Energiebilanz: Gleichung (15)
5. Enthalpie Flüssigphase:  $h_{liq,B}(T_B, x_B)$ ; Gleichung (22)
6. Enthalpie Gasphase:  $h_{vap,B}(T_B, y_B)$ ; Gleichung (20)
7. Berechnung der Temperatur:  $T_B = T_B(U_B, M_B, x_B)$ ; Gleichung (24) für  $j = B$
8. Phasengleichgewicht:  $y_B = y_B'(x_B)$ ; Gleichung (16) für  $j = B$
9. Siedepunkt:  $P_B = P_B(x_B, T_B)$ ; Gleichung (35) für  $j = B$
10. molare Masse der Flüssigkeit:  $m_{mol,1} = m_{mol,1}(x_1)$ ; Gleichung (31) für  $j = B$
11.  $V_B = c_{dampf}Q$
12. Siedepunkt:  $T_B = T_{Siede}(x_B, P_B)$ ; Verwendung des iterativen Algorithmus zu Gleichung (36)
13. Aufsteigender Dampf:  $V_B' = V_B'(P_B, P_1, M_1, m_{mol,1})$  Gleichung (28) für  $j = B$

14. Tiefpassfilter für  $V'_B$ ; Gleichung (30) für  $j = B$

Der Holdup des Verdampfers ist konstant  $M_B = 774\text{mol}$ .

Für den Kondensator wird schließlich noch angesetzt:

1. Zusammensetzungsbilanz: Gleichung (6)
2. Schließbedingung der Molenbrüche:  $x_{N_c,D} = x_{N_c}(x_{1,D}, x_{2,D})$  Gleichung (3)

Der Rücklauf  $R$  sowie dessen Zusammensetzung  $R_x$  und Temperatur  $T_R$  wird als Systemeingang ausgeführt und der Holdup  $M_D = 263\text{mol}$  ist wie auch beim Verdampfer konstant.

Als Konstanten bzw. Parameter wurden zusätzlich angenommen:

- $E_{OGM,j} = 1$  für alle  $j$  (Annahme: Böden befinden sich jederzeit im idealen Gleichgewicht)
- $\omega_V = 2\frac{1}{5}$  Grenzfrequenz des Tiefpasses für  $V'_j$

Der Zustandsvektor für das System enthält nun auch die Energien:

$$x = [M_j, M_j x_{i,j}^T, M_B x_{i,B}, M_D x_{i,D}, U_j, U_B, V_j], \quad j \in [1, N_t], \quad i \in [1, N_c - 1]$$

### 3.7.1. Anfangswerte

In Tabelle 4 sind alle Anfangswerte aufgelistet. Zusätzlich sind nun auch Anfangswerte für die Energie erforderlich. Diese Anfangsenergien werden durch Vorgabe von Temperaturen und mit den Anfangswerten für die Molenholdups berechnet. Als Starttemperatur  $T_{0,j}$  wird die Temperatur des Feedstroms benutzt, gleiches gilt für  $T_{0,B}$ . Auch hinzugekommen sind die Zustände des Tiefpassfilters. Diese Zustände, welche direkt dem Ausgang  $V_j$  entsprechen, müssen auch initialisiert werden. Diese neuen Anfangswerte werden entsprechend denen sich aus Gleichung (28) und (29) ergebenden Werten (Berechnung von  $V_{0,j} = V'_{0,j}(P_{0,j}, x_j)$ ) gesetzt. Die Zustandsvariablen in diesen Gleichungen werden durch die jeweiligen Anfangswerte ersetzt. Hierzu ist unter anderem die Berechnung des Anfangsdrucks über allen Böden notwendig, was über Gleichung (35)

( $P_{0,j} = P_j(\mathbf{x}_{0,j}, T_{0,j})$ ) mit den Anfangswerten  $T_{0,j}$  realisiert wird. Tabelle 4 listet schließlich alle vorgegebenen Werte auf.

Zustand	Anfangswert	Beschreibung
$[x_{0,1,B}, x_{0,2,B}]^T$	$[0.6565, 0.2557]^T$	Zusammensetzung des Moleninhalts des Verdampfers
$[x_{0,1,j}, x_{0,2,j}]^T$	$[0.6565, 0.2557]^T,$ $\forall j \in [1..N_t]$	Zusammensetzung des Moleninhalts der normalen Böden
$[x_{0,1,D}, x_{0,2,D}]^T$	$[0.6565, 0.2557]^T$	Zusammensetzung des Moleninhalts des Kondensators
$M_{0,j}$	$160\text{mol}, \forall j \in [1..N_t]$	Flüssigholdup der verschiedenen Stufen
$U_{0,j}$	$U_j(T_{0,j}, M_{0,j}, \mathbf{x}_{0,j}),$ $T_{0,j} = 353[\text{K}]$	Energie so dass Temperatur von $T_{0,j}$
$U_{0,B}$	$U_B(T_{0,B}, M_{0,B}, \mathbf{x}_{0,B}),$ $T_{0,B} = 353[\text{K}]$	Energie so dass Temperatur von $T_{0,B}$
$V_{0,j}$	$V'_{0,j}(P_{0,j}, \mathbf{x}_j)$	Anfangswerte für $V_j$ Tiefpassfilter, ergeben sich aus anderen Startwerten über die Modellgleichungen

Tabelle 4: Anfangswerte für das Modell mit Energiebilanz

Um die Kolonne in den stationären Grundzustand (der Arbeitspunkt wie auch bei dem Modell ohne Energiebilanz) zu bringen, ist es nun zusätzlich noch notwendig, die ersten 150s nach dem Anfangszeitpunkt die sonst übliche Heizleistung von  $2.5 \cdot 10^7\text{W}$  auf  $3.5 \cdot 10^7\text{W}$  zu erhöhen (siehe auch Abb. 26), da sonst ein anderer Gleichgewichtspunkt des Systems angesteuert wird.

### 3.7.2. Simulation

Zur Validierung des Modells werden jetzt zwei unterschiedliche Simulationen verschiedener Testfälle durchgeführt. Begonnen wird wieder mit einer Rücklaufänderung. Als zweiter Testfall wird eine Änderung der Heizleistung  $Q$  vorgenommen. Die Systemeingänge werden, solange nicht einzelne Größen für Testfälle verändert werden, auf die

konstanten Signale aus Tabelle 5 gesetzt, wobei nun auch die Temperaturen der Zulaufströme berücksichtigt werden.

Eingang	Wert	Beschreibung
$R$	92.6432[mol/s]	Rücklauf
$[z_{1,F}, z_{2,F}]^T$	$[0.6565, 0.2557]^T$	Feedzusammensetzung
$F$	754.723[mol/s]	Feedstrom
$F_T$	353[K]	Feedtemperatur
$Q$	$25 \cdot 10^6$ [W/s]	Heizleistung
$R_T$	349.1[K]	Rücklauftemperatur

Tabelle 5: Eingangsgrößen im stationären Zustand

**Rückflussänderung** Nachdem die Kolonne ihren Arbeitspunkt erreicht hat, werden die Eingangssignale für den Rücklaufstrom  $R$  und die Rücklauftemperatur entsprechend den Verläufen der Referenzdaten geändert. Der genaue Verlauf ist Abb. 23 zu entnehmen. Die Temperatur wird aufgrund der gewünschten Übereinstimmung aller Eingangsgrößen mit den Referenzdaten und damit für die Vergleichbarkeit zusätzlich vorgegeben.

Die Reaktion der Kolonne bezüglich dieses Testsignals ist in den Abbildungen 24 und 25 zu sehen. Man erkennt, dass diesmal der Wendepunkt des Temperaturprofils im Vergleich zum vorherigen Modell sich nicht mehr auf die untersten Böden zubewegt. Hier wurde somit eine Verbesserung erzielt. Allerdings stimmt die Dynamik der Bewegung (Abb. 25 rechts) noch nicht ganz mit der Referenz überein.

Die Betrachtung der Molenholdups (Abb. 25 links) der oberen Stufen zeigt eine größere Abweichung als bei dem Modell ohne Energiebilanz. Der Unterschied zu der Berechnung ohne Energiebilanz (Bild 19 links) liegt in der unterschiedlichen Zusammensetzung auf den oberen Böden und somit einer anderen Volumendichte.

**Heizleistungsänderung** Zusätzlich wird noch das Verhalten unter einer Änderung der Heizleistung  $Q$  betrachtet. Hierzu wird wieder vom Grundzustand ausgegangen und  $Q$  langsam erhöht. (Abb. 26)

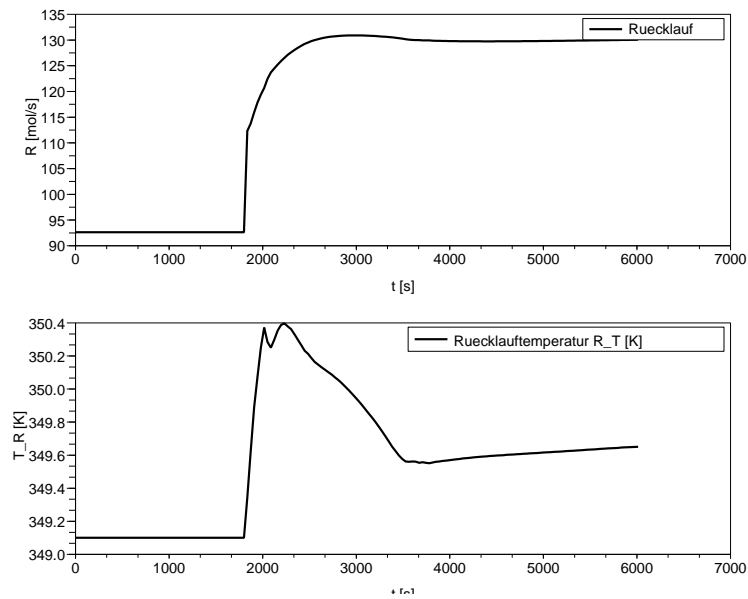


Abbildung 23: Rücklaufänderung  $R$

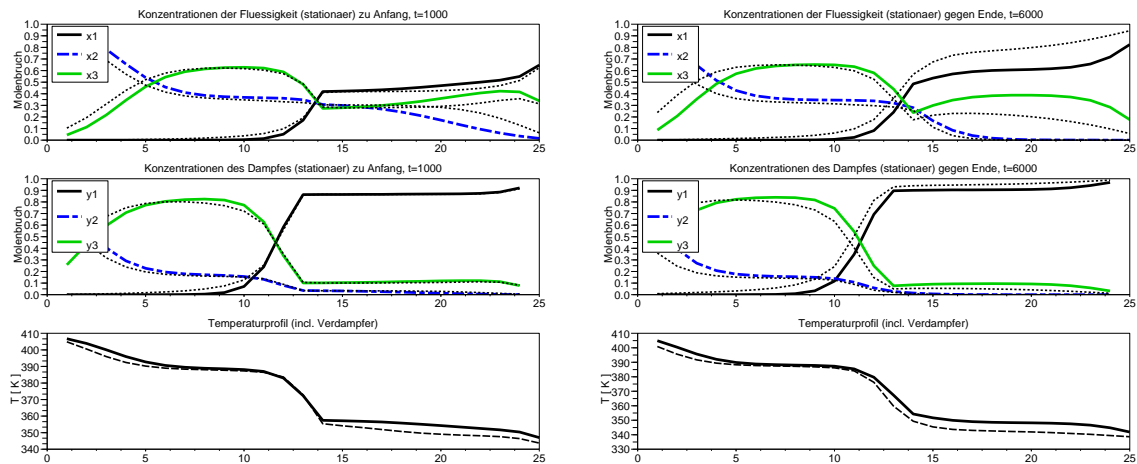


Abbildung 24: Simulation des Modells mit Energiebilanz; Profile über den Böden aufgetragen

Die Reaktion des Systems zeigt diesmal in der Dynamik (Abb 28) eine bessere Übereinstimmung. Das Überschwingen der Referenz ist jedoch nicht berücksichtigt, dafür ist der statische Fehler geringer.



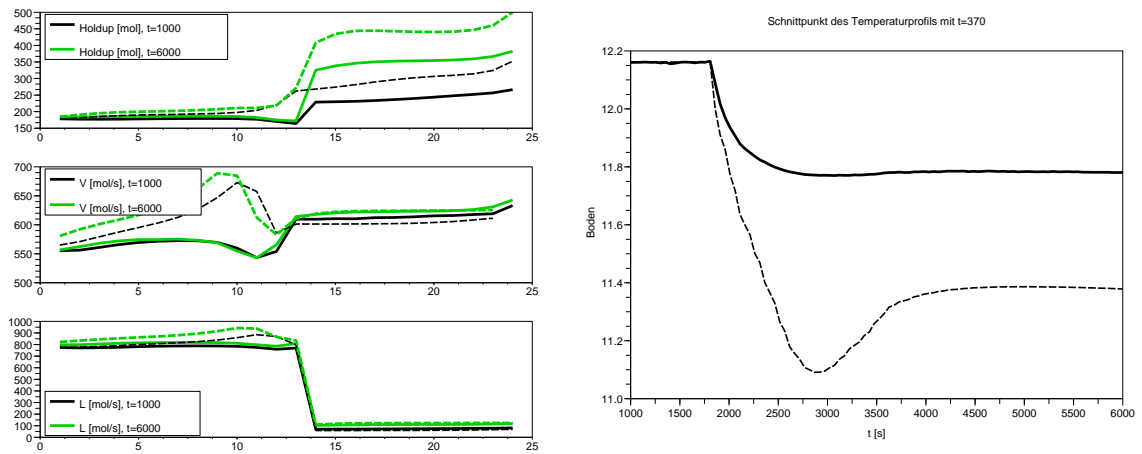


Abbildung 25: Simulation des Modells mit Energiebilanz; Profile über den Böden aufgetragen

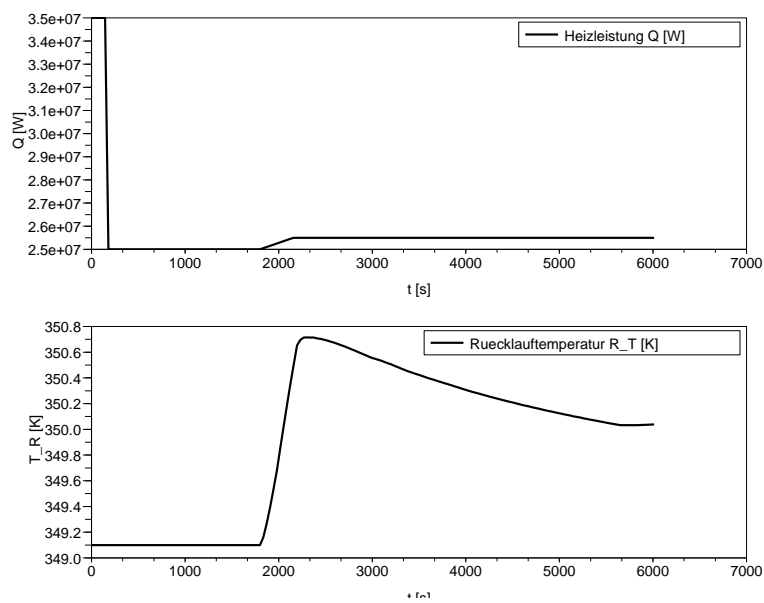


Abbildung 26: Heizleistungsänderung  $Q$

**Fazit** Die Ergebnisse des Modells mit Energiebilanz und dynamischen Dampfströmen zeigen ein wesentlich besseres Verhalten als das einfachere Modell. Jedoch sind auch diese Ergebnisse relativ ungenau. Das prinzipielle Verhalten einer Destillationskolonne

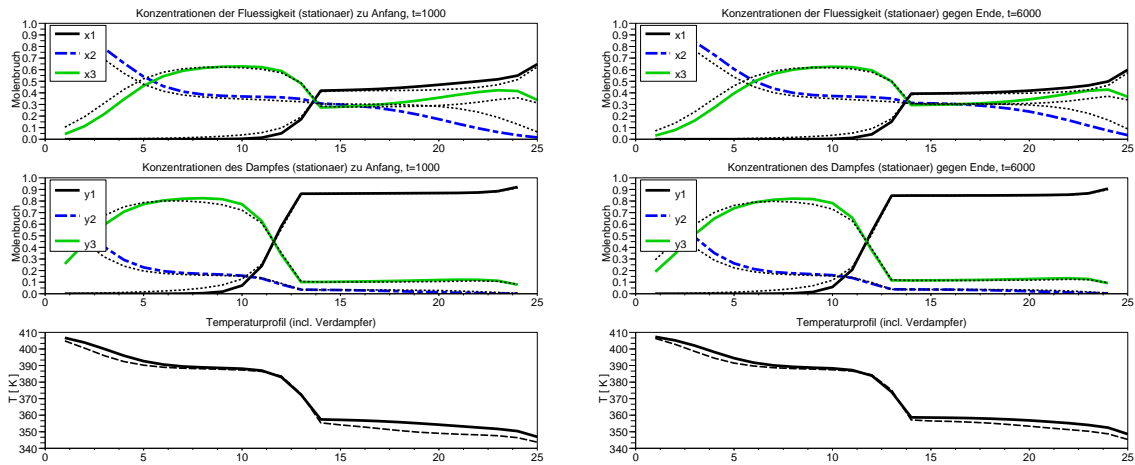


Abbildung 27: Simulation des Modells mit Energiebilanz; Konzentrationsprofile für Heizleistungsänderung

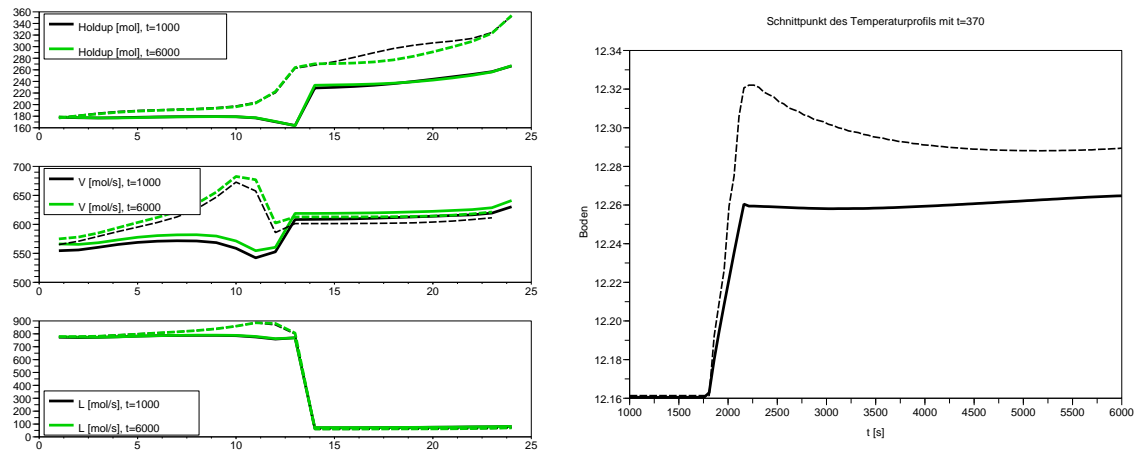


Abbildung 28: Simulation des Modells mit Energiebilanz; Strömungsprofile und Dynamik für Heizleistungsänderung

kann jedoch mit diesem Modell gut nachgebildet werden. Weitere Verbesserungen ergeben sich hauptsächlich durch Anpassung der Submodelle der Strömungseigenschaften, denn gerade hier mussten sehr viele Parameter aus den Referenzdaten geschätzt werden, wobei die Struktur der Modelle, insbesondere das Modell für die ablaufenden Flüssigkeiten der oberen Böden, ebenfalls angepasst werden muss. Hierzu wäre allerdings

vorerst eine genaue Kenntnis des Aufbaus erforderlich, die sich bisher nicht einholen ließ. Sehr großen Einfluss auf die Dynamik haben die Holdups der Stufen. Gerade im Bereich des Feedbodens sollten diese richtig berechnet werden. Dieses Problem hängt direkt mit den ungenauen Strömungsmodellen zusammen. Ein weiteres Problem stellt der nicht ganz korrekt berechnete Dampfstrom unterhalb des Feed dar. Er kann dem Hinunterfließen der ersten Komponente entgegenwirken, hat also auch großen Einfluss auf das Verhalten des Temperaturprofils, wie bereits durch den Unterschied zwischen beiden Modellen deutlich geworden ist. Da die Dampfströme im wesentlichen vom Energiestrom in der Kolonne abhängig sind ist es durchaus denkbar, dass hier ein weiterer Fehler liegt. Kritisch anzusehen ist diesbezüglich die Feedzulauftemperatur - ist diese zu niedrig, findet durch die zu kalte, ablaufende Flüssigkeit unterhalb des Feedbodens eine teilweise Neutralisation des aufsteigenden Energiestroms statt. Somit wird weniger Energie nach oben transportiert. Daraus folgt, dass auch weniger Dampf aufsteigen muss, der als Träger der thermischen Energie dient. Dieser Sachverhalt wird durch die Simulationsergebnisse plausibel.

## 4. Ausblick

Neben den noch möglichen Verbesserungen der Modellierung des Betriebszustands, die in dieser Arbeit durchgeführt wurde, besteht die Möglichkeit, das Modell um gewisse Eigenschaften, welche für das Anfahren der Kolonne relevant sind, zu modellieren. Hierzu gehört vor allem eine Modellierung der Hydrodynamik für den Fall, dass die Böden noch keinen, das Wehr übertretenden Holdup aufgestaut haben. Hier ist vor allem auch die Bauform des vom Dampf durchströmten Siebes von großer Bedeutung. Da die Kolonne zu Anfang noch kalt ist, muss weiterhin die Annahme, dass sich die gesamte Flüssigkeit am Siedepunkt befindet, verworfen werden. Das Tiefpassfilter, welches für die Dynamik der Dampfströme verantwortlich ist und die träge Masse des Dampfes modelliert, könnte durch Identifikation eines linearen Systems erster Ordnung mit den Messdaten besser an das Referenzsystem angepasst werden. Das hieraus resultierende Modell kann dazu verwendet werden, eine Druckregelung für die Kolonne zu entwerfen, welche von Bedeutung ist um zu starke Druckschwankungen, die spontanes Verdampfen der Flüssigkeit verursachen können, zu vermeiden. Die Stellgröße wäre in

einem solchen Fall das Ventil  $S_{head}$ . Abbildung 29 zeigt die Sprungantwort für den Druck im obersten Boden (links) sowie die Reaktion des Dampfstroms durch das Ventil. Eine vereinfachte Modellierung durch ein lineares dynamisches System sollte möglich sein.

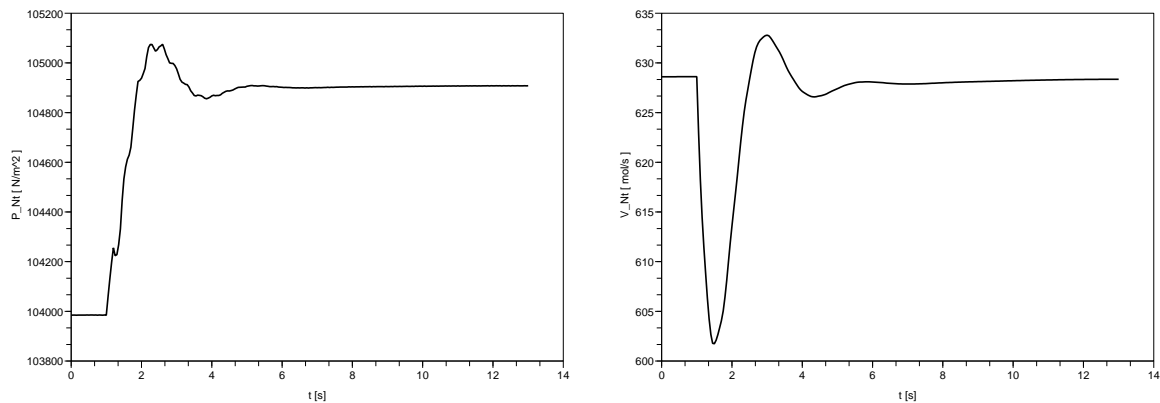


Abbildung 29: Simulation einer sprungförmigen Änderung der Ventilstellung  $S_{head}$

Eine weitere Regelaufgabe ist die Positionierung des Temperaturprofils und der damit verknüpften Konzentrationsprofile im stationären Zustand für den dieses Modell entwickelt worden ist. Als Stellgröße dient die zugeführte Heizleistung. Eine Änderung des Rücklaufs und auch des Feeds (dies folgt durch eine Änderung der Auslastung der Kolonne) kann als Störung angesehen werden, welche aber vom Betrag her bekannt ist und dem Regler als Information zur Verfügung steht. Eine entsprechend strukturierte Regelung könnte dadurch eine bessere Unterdrückung von Regelfehlern unter einem Lastwechsel erreichen.

Eine weitere Aufgabe ist der Entwurf eines Reglers zum Anfahren der Kolonne. Dieser müsste folgende Schritte, ausgehend von einer leeren, kalten Kolonne, ausführen:

1. Kolonne über Feed auffüllen; Heizung auf maximale Leistung einstellen; kompletter Rücklauf des kondensierten Dampfes
2. Feedzulauf ausschalten; Positionierung des Temperaturprofils durch Einstellen der Heizleistung
3. Feed und Produktabnahme einstellen; Übergang auf stationäre Regelung

In weiterführenden Untersuchungen soll der Anfahrvorgang einer Destillationskolonne mit angeschlossener Brüdenkompression [9] gesteuert werden. Hierzu kann das bestehende Modell durch Ersetzen des Kondensators erweitert werden.

## 5. Zusammenfassung

Ziel war es, ein Modell der durch die BASF-AG vorgegebene Destillationskolonne aufzustellen. Durch Ansatz verschiedener Bilanzräume und Verkopplung dieser unter Zuhilfenahme von verschiedenen Submodellen für die Strömungsdynamik und Stoffeigenschaften, sowie der Identifikation verbleibender Parameter, gelang es ein geschlossenes Modell im Softwaretool MATLAB zu implementieren. Das resultierende Modell konnte das prinzipielle Verhalten der Referenzkolonne nachbilden. Um eine genauere Modellierung zu erhalten, ist es notwendig, Fehler in den Modellen der Strömungsdynamik zu verbessern. Die Implementation in MATLAB besitzt die Möglichkeit des Austauschs des Kondensators und der Erweiterung um beliebige weitere modellierte Anlagen, wie dies für den Fall der Brüdenkompression durchgeführt werden soll.

## A. Literatur

- [1] Page S. Buckley, William L. Luyben, Joseph P. Shunta, *Design of distillation column control systems*, 1985.
- [2] S. Skogestad, *Dynamics and control of distillation columns: A Tutorial Introduction*, Chemical Engineering Department, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim.
- [3] Markus J. Groebel, *Asymptotisch exakte Ein- / Ausgangs-Linearisierung von Destillationskolonnen*, Institut für Systemdynamik und Regelungstechnik der Universität Stuttgart, 1996.
- [4] Uwe Kiencke, Ralf Eger *Messtechnik, Systemtheorie für Elektrotechniker* 2005.
- [5] Johann Stichlmair, *Grundlagen der Dimensionierung des Gas/ Flüssigkeit-Kontakapparates Bodenkolonne*, 1978.
- [6] Bernhard Retzbach, *Mathematische Modelle von Destillationskolonnen zur Synthese von Regelungskonzepten*, 1986.
- [7] Stephan Karl, Franz Mayinger *Mehrstoffsysteme und chemische Reaktionen*, 1999.
- [8] Tilman Barz, *Visualisierung modellbasierter Prozessdaten in der verfahrenstechnischen Leitwarte*, Fakultät III - Prozesswissenschaften, Technischen Universität Berlin, 2008
- [9] Austmeyer, Klaus E., *Mechanische Brüdenkompression* Informationsschrift der VDI-Gesellschaft Energie, 2008