

## Inhaltsverzeichnis

|          |  |     |
|----------|--|-----|
|          | <b>Formelzeichen</b> . . . . .                                       | VII |
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b> . . . . .  | 1   |
| <b>2</b> | <b>Stand des Wissens</b> . . . . .                                   | 3   |
| 2.1      | Beschreibung des Phasengleichgewichts . . . . .                      | 4   |
| 2.1.1    | Berechnung des Aktivitätskoeffizienten . . . . .                     | 5   |
| 2.1.2    | Modellierung eines idealen Stoffsystems . . . . .                    | 8   |
| 2.2      | Binäre Rektifikation mit minimalem Energiebedarf . . . . .           | 9   |
| 2.3      | Ternäre Rektifikation mit minimalem Energiebedarf . . . . .          | 14  |
| 2.4      | Verfahren zur Bestimmung des Mindestrückflußverhältnisses . . . . .  | 22  |
| <b>3</b> | <b>Eigener Berechnungsansatz für ternäre Stoffsysteme</b> . . . . .  | 29  |
| 3.1      | Berechnung der Pinchkonzentration . . . . .                          | 29  |
| 3.2      | Berechnung des Mindestrückflußverhältnisses ohne Iteration . . . . . | 37  |
| 3.3      | Gültigkeitsbereich . . . . .   | 39  |
| <b>4</b> | <b>Erweiterung auf Mehrstoffsysteme</b> . . . . .                    | 42  |
| 4.1      | Konzentrationsdarstellung quaternärer Stoffsysteme . . . . .         | 42  |
| 4.2      | Produktbereiche der quaternären Rektifikation . . . . .              | 44  |
| 4.3      | Berechnung des Mindestrückflußverhältnisses . . . . .                | 50  |
| <b>5</b> | <b>Vergleich mit rigorosen Simulationen</b> . . . . .                | 55  |
| 5.1      | Berechnungsprogramme . . . . .                                       | 55  |
| 5.1.1    | Programmierung der neuen Berechnungsmethode . . . . .                | 56  |
| 5.1.2    | Kolonnensimulationsprogramm . . . . .                                | 56  |
| 5.2      | Ideale Stoffsysteme . . . . .  | 58  |
| 5.2.1    | Berechnung ternärer und quaternärer Trennungen . . . . .             | 59  |
| 5.3      | Nichtideale Stoffsysteme . . . . .                                   | 60  |
| 5.3.1    | Ternäre zeotrope Trennungen . . . . .                                | 60  |
| 5.3.2    | Ternäre azeotrope Trennungen . . . . .                               | 64  |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 5.3.3    | Quaternäre zeotrope Trennungen . . . . .                     | 66        |
| 5.3.4    | Quaternäre azeotrope Trennungen . . . . .                    | 66        |
| 5.4      | Energiebedarf vollständiger Trennprozesse . . . . .          | 71        |
| 5.4.1    | Trennung ternärer zeotroper Gemische . . . . .               | 71        |
| 5.4.2    | Trennung ternärer azeotroper Gemische . . . . .              | 75        |
| 5.4.3    | Trennung quaternärer Gemische . . . . .                      | 85        |
| 5.5      | Vergleich und Diskussion . . . . .                           | 89        |
| <b>6</b> | <b>Zusammenfassung . . . . .</b>                             | <b>94</b> |
| <b>7</b> | <b>Anhang . . . . .</b>                                      | <b>95</b> |
| 7.1      | Berechnungsdaten . . . . .                                   | 95        |
| 7.2      | Destillationslinien eines quaternären Stoffsystems . . . . . | 97        |
| 7.3      | Phasengleichgewichtsdaten . . . . .                          | 98        |
| <b>8</b> | <b>Literaturverzeichnis . . . . .</b>                        | <b>99</b> |