

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	VII
1 Einleitung	1
1.1 Zielsetzung der Arbeit	1
1.2 Aufbau der Arbeit	4
2 Theoretische Grundlagen	5
2.1 Statistische Mechanik	5
2.1.1 Klassische Näherung	6
2.1.2 Makroskopische Größen	7
2.1.3 Ensembles	7
2.2 Molekulare Simulationen	10
2.2.1 Intermolekulare Wechselwirkungen	13
2.2.2 Algorithmus zur Lösung der Bewegungsgleichungen	15
2.2.3 Vereinfachungen	16
2.3 Auslegungsmethoden für Trennkolonnen	19
2.3.1 Stufenkonzept	19
2.3.2 Stoffaustausch-Verfahren	20
2.4 Dimensionsanalyse	22
2.4.1 Ähnlichkeitsprinzip	22
3 Methoden zur Simulation von Trennkolonnen	23
3.1 Konzept	23
3.2 Übergeordneter Simulationsalgorithmus	26
3.3 Definition der Basis-Eigenschaften	29
3.4 Algorithmen zur Abbildung der Anforderungen	33
3.5 Einfügen von Teilchen	44
3.5.1 Idee und Algorithmus der Geister-Teilchen	44
3.5.2 Energiebetrachtung des Einfügens	46

Inhaltsverzeichnis

3.6	Druckanpassung	49
3.7	Auswertung der Simulationen	50
3.7.1	Dichte-Profile	53
3.7.2	Zusammensetzungen in Auslegungsdiagrammen	54
3.7.3	Stoffdurchgangs- und Stoffübergangskoeffizienten	55
4	Dimensionsanalytische Betrachtung der Simulation	57
4.1	Bestimmung dimensionsloser Kennzahlen	58
4.2	Analytische Herleitung der Scale-up-Korrelation	62
4.3	Berücksichtigung des Wärmetransports	71
5	Simulationen von Trennapparaten mit molekulardynamischen Rechnungen	73
5.1	Verwendetes Stoffsystem	73
5.2	Energieanpassung	81
5.3	Anwendung der Dimensionsanalyse für eine Trennstufe	86
5.4	Simulation einer Extraktionskolonne	97
5.5	Simulation einer Mehrkomponenten-Destillation	102
6	Zusammenfassung	110
	Anhang	113
A	Anhang	114
A.1	Analytische Lösung des Stofftransports in der Filmphase	114
A.2	Molekulare Simulationen zur Ermittlung der Phasengleichgewichte	117
A.3	Molekulare Simulationen der übersättigten Phase	118
A.4	Energiebetrachtung	120
A.5	Molekulare Simulation einer Trennstufe	121
A.6	Molekulare Simulation einer Destillationskolonne	123
	Literaturverzeichnis	129
	Lebenslauf	135