

Table 1: Component and total flows for streams in Figure 3(a). (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	ethanol	benzene	water	total
1	0.2000	0.4000	0.4000	1.0000
2	0.0829	0.3947	0.0132	0.4908
3	0.1171	0.0053	0.3868	0.5092
4	0.0829	0.1108	0.0132	0.2069
5	0.0000	0.2839	0.0000	0.2839
6	0.1171	0.0053	0.0175	0.1399
7	0.0000	0.0000	0.3693	0.3693
8	0.2000	0.1161	0.0307	0.3468
9	0.1286	0.1161	0.0307	0.2754
10	0.0714	0.0000	0.0000	0.0714

Table 2: Component and total flows for streams in Figure 3(b). (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	ethanol	benzene	water	total
feed 1	0.2000	0.4000	0.4000	1.0000
1	0.7191	0.8690	0.5564	2.1445
2	0.2426	0.7884	0.0415	1.0725
3	0.4765	0.0806	0.5149	1.0720
4	0.2426	0.3884	0.0415	0.6725
5	0.0000	0.4000	0.0000	0.4000
6	0.4765	0.0806	0.1149	0.6720
7	0.0000	0.0000	0.4000	0.4000
8	0.7191	0.4690	0.1564	1.3445
9	0.5191	0.4690	0.1564	1.1445
10	0.2000	0.0000	0.0000	0.2000

Table 3: Component and total flows for streams in Figure 8(a). (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	ethanol	benzene	water	total
feed 2	0.4255	0.5000	0.0745	1.0000
1	0.4255	0.5000	0.0745	1.0000
2	0.3711	0.5000	0.0745	0.9456
3	0.0544	0.0000	0.0000	0.0544
4	0.3711	0.8000	0.3745	1.5456
5	0.1996	0.7867	0.0328	1.0191
6	0.1715	0.0133	0.3417	0.5265
7	0.1996	0.2640	0.0328	0.4964
8	0.0000	0.5227	0.0000	0.5227
9	0.1715	0.0133	0.0257	0.2105
10	0.0000	0.0000	0.3160	0.3160
11	0.0000	0.3000	0.0000	0.3000
12	0.0000	0.0000	0.3000	0.3000

Table 4: Component and total flows for streams in Figure 8(b), HYSYS simulation results without pure components' recycles. (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	ethanol	benzene	water	total
feed 2	0.4255	0.5000	0.0745	1.0000
1	1.1345	1.0383	0.2141	2.3869
2	0.7097	1.0323	0.2137	1.9557
3	0.4248	0.0060	0.0004	0.4312
4	0.7097	1.0323	0.2137	1.9557
5	0.1820	0.8335	0.0164	1.0319
6	0.5277	0.1988	0.1973	0.9238
7	0.1820	0.3395	0.0164	0.5379
8	0.0000	0.4940	0.0000	0.4940
9	0.5273	0.1988	0.1232	0.8493
10	0.0004	0.0000	0.0741	0.0745

Table 5: HYSYS simulation results for the column design.

Column	I	II	III
Bottom product	ethanol	benzene	water
Number of stages	40	10	10
feed tray	1 (top)	5	5
reflux ratio	0.3	0.1	2.0
reboil ratio	5.54	2.0	33.7

Table 6: Component and total flows for streams in Figure 8(b), using algorithms in the paper without pure components' recycles. (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	ethanol	benzene	water	total
feed 2	0.4255	0.5000	0.0745	1.0000
1	1.3454	1.1292	0.5225	2.9972
2	0.9199	1.1292	0.5225	2.5717
3	0.4255	0.0000	0.0000	0.4255
4	0.9199	1.1292	0.5225	2.5717
5	0.3347	0.9965	0.0582	1.3895
6	0.5852	0.1327	0.4643	1.1822
7	0.3347	0.4965	0.0582	0.8895
8	0.0000	0.5000	0.0000	0.5000
9	0.5852	0.1327	0.3898	1.1077
10	0.0000	0.0000	0.0745	0.0745

Table 7: Component and total flows for streams in Figure 8(c), using algorithms in the paper with some pure components' recycles. (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	ethanol	benzene	water	total
feed 2	0.4255	0.5000	0.0745	1.0000
1	1.5723	1.4072	0.3146	3.2941
2	1.1468	1.4072	0.3146	2.8686
3	0.4255	0.0000	0.0000	0.4255
4	1.1468	1.7072	0.6146	3.4686
5	0.5347	1.5599	0.0932	2.1878
6	0.6121	0.1473	0.5214	1.2808
7	0.5347	0.7599	0.0932	1.3878
8	0.0000	0.8000	0.0000	0.8000
9	0.6121	0.1473	0.1469	0.9063
10	0.0000	0.0000	0.0745	0.0745
11	0.0000	0.3000	0.0000	0.3000
12	0.0000	0.0000	0.3000	0.3000

Table 8: Component and total flows for streams in Figure 9. (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	water	butanol	acetic acid	butyl acetate	total
Feed	0.6000	0.1000	0.1000	0.2000	1.0000
1	0.6000	0.1000	0.1000	0.2000	1.0000
2	0.3946	0.0046	0.0239	0.0020	0.4251
3	0.2054	0.0954	0.0761	0.1980	0.5749
4	0.0068	0.0007	0.0000	0.0020	0.0095
5	0.3878	0.0039	0.0239	0.0000	0.4156
6	0.2054	0.0954	0.0761	0.0000	0.3769
7	0.0000	0.0000	0.0000	0.1980	0.1980
8	0.0000	0.0039	0.0044	0.0000	0.0083
9	0.3878	0.0000	0.0195	0.0000	0.4073
10	0.2054	0.0291	0.0000	0.0000	0.2345
11	0.0000	0.0663	0.0761	0.0000	0.1424
12	0.3878	0.0000	0.0000	0.0000	0.3878
13	0.0000	0.0000	0.0195	0.0000	0.0195
14	0.0000	0.0663	0.0000	0.0000	0.0663
15	0.0000	0.0000	0.0761	0.0000	0.0761
16	0.0915	0.0291	0.0000	0.0000	0.1206
17	0.1139	0.0000	0.0000	0.0000	0.1139

Table 9: Component and total flows for streams in Figure 10. (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	water	butanol	acetic acid	butyl acetate	total
Feed	0.6000	0.1000	0.1000	0.2000	1.0000
1	0.6056	0.1368	0.1268	0.2016	1.0708
2	0.3771	0.0046	0.0397	0.0016	0.4230
3	0.2285	0.1322	0.0871	0.2000	0.6478
4	0.0056	0.0006	0.0000	0.0016	0.0078
5	0.3715	0.0040	0.0397	0.0000	0.4152
6	0.2285	0.1322	0.0871	0.0000	0.4478
7	0.0000	0.0000	0.0000	0.2000	0.2000
8	0.0000	0.0362	0.0268	0.0000	0.0630
9	0.4730	0.0000	0.0129	0.0000	0.4859
10	0.2285	0.0322	0.0000	0.0000	0.2607
11	0.0000	0.1000	0.0871	0.0000	0.1871
12	0.4730	0.0000	0.0000	0.0000	0.4730
13	0.0000	0.0000	0.0129	0.0000	0.0129
14	0.0000	0.1000	0.0000	0.0000	0.1000
15	0.0000	0.0000	0.0871	0.0000	0.0871
16	0.1015	0.0322	0.0000	0.0000	0.1337
17	0.1270	0.0000	0.0000	0.0000	0.1270

Table 10: Component and total flows for streams in Figure 11. (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	water	butanol	acetic acid	butyl acetate	total
Feed	0.6000	0.1000	0.1000	0.2000	1.0000
1	0.6054	0.1006	0.1000	0.2016	1.0076
2	0.4288	0.0042	0.0260	0.0016	0.4606
3	0.1766	0.0964	0.0740	0.2000	0.5470
4	0.0054	0.0006	0.0000	0.0016	0.0076
5	0.4234	0.0036	0.0260	0.0000	0.4530
6	0.1766	0.1319	0.0871	0.0000	0.3956
7	0.0000	0.0000	0.0000	0.2000	0.2000
8	0.0000	0.0355	0.0131	0.0000	0.0486
9	0.5237	0.0000	0.0129	0.0000	0.5366
10	0.1766	0.0319	0.0000	0.0000	0.2085
11	0.0000	0.1000	0.0871	0.0000	0.1871
12	0.5237	0.0000	0.0000	0.0000	0.5237
13	0.0000	0.0000	0.0129	0.0000	0.0129
14	0.0000	0.1000	0.0000	0.0000	0.1000
15	0.0000	0.0000	0.0871	0.0000	0.0871
16	0.1003	0.0319	0.0000	0.0000	0.1322
17	0.0763	0.0000	0.0000	0.0000	0.0763

Table 11: Component and total flows for streams in Figure 12. (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	water	butanol	acetic acid	butyl acetate	total
Feed	0.6000	0.1000	0.1000	0.2000	1.0000
1	0.6000	0.1000	0.1000	0.2000	1.0000
2	0.3946	0.0046	0.0239	0.0020	0.4251
3	0.2054	0.0954	0.0761	0.1980	0.5749
4	0.0068	0.0007	0.0000	0.0020	0.0095
5	0.3878	0.0039	0.0239	0.0000	0.4156
6	0.2054	0.0954	0.0761	0.0000	0.3769
7	0.0000	0.0000	0.0000	0.1980	0.1980
8	0.0000	0.0039	0.0044	0.0000	0.0083
9	0.3878	0.0000	0.0195	0.0000	0.4073
10	0.2054	0.0000	0.0000	0.0000	0.2054
11	0.0000	0.0954	0.0761	0.0000	0.1715
12	0.3878	0.0000	0.0000	0.0000	0.3878
13	0.0000	0.0000	0.0195	0.0000	0.0195
14	0.0000	0.0954	0.0000	0.0000	0.0954
15	0.0000	0.0000	0.0401	0.0000	0.0401
16	0.0000	0.0000	0.0360	0.0000	0.0360

Table 12: Component and total flows for streams in Figure 13(a). (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	water	butanol	acetic acid	butyl acetate	total
Feed	0.6000	0.1000	0.1000	0.2000	1.0000
1	0.6056	0.1043	0.1043	0.2016	1.0158
2	0.4213	0.0043	0.0263	0.0016	0.4535
3	0.1843	0.1000	0.0780	0.2000	0.5623
4	0.0056	0.0006	0.0000	0.0016	0.0078
5	0.4157	0.0037	0.0263	0.0000	0.4457
6	0.1843	0.1000	0.0780	0.0000	0.3623
7	0.0000	0.0000	0.0000	0.2000	0.2000
8	0.0000	0.0037	0.0043	0.0000	0.0080
9	0.4157	0.0000	0.0220	0.0000	0.4377
10	0.1843	0.0000	0.0000	0.0000	0.1843
11	0.0000	0.1000	0.1148	0.0000	0.2148
12	0.4157	0.0000	0.0000	0.0000	0.4157
13	0.0000	0.0000	0.0220	0.0000	0.0220
14	0.0000	0.1000	0.0000	0.0000	0.1000
15	0.0000	0.0000	0.0780	0.0000	0.0780
16	0.0000	0.0000	0.0366	0.0000	0.0366

Table 13: Component and total flows for streams in Figure 13(b). (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	water	butanol	acetic acid	butyl acetate	total
Feed	0.6000	0.1000	0.1000	0.2000	1.0000
1	0.6054	0.1006	0.1000	0.2016	1.0076
2	0.4288	0.0078	0.0260	0.0016	0.4642
3	0.1766	0.0928	0.0740	0.2000	0.5434
4	0.0054	0.0006	0.0000	0.0016	0.0076
5	0.4234	0.0072	0.0260	0.0000	0.4566
6	0.1766	0.0928	0.0740	0.0000	0.3434
7	0.0000	0.0000	0.0000	0.2000	0.2000
8	0.0000	0.0072	0.0042	0.0000	0.0114
9	0.4234	0.0000	0.0218	0.0000	0.4452
10	0.1766	0.0000	0.0000	0.0000	0.1766
11	0.0000	0.1000	0.1148	0.0000	0.2148
12	0.4234	0.0000	0.0000	0.0000	0.4234
13	0.0000	0.0000	0.0218	0.0000	0.0218
14	0.0000	0.1000	0.0000	0.0000	0.1000
15	0.0000	0.0000	0.0782	0.0000	0.0782
16	0.0000	0.0000	0.0366	0.0000	0.0366

Table 14: Component and total flows for streams in Figure 13(c). (Normalized feed rate to 1 mole/time)

Stream No.	water	butanol	acetic acid	butyl acetate	total
Feed	0.6000	0.1000	0.1000	0.2000	1.0000
1	0.6054	0.1006	0.1000	0.2016	1.0076
2	0.4288	0.0078	0.0260	0.0016	0.4642
3	0.1766	0.0928	0.0740	0.2000	0.5434
4	0.0054	0.0006	0.0000	0.0016	0.0076
5	0.4234	0.0072	0.0260	0.0000	0.4566
6	0.1766	0.0928	0.0740	0.0000	0.3434
7	0.0000	0.0000	0.0000	0.2000	0.2000
8	0.0000	0.0072	0.0042	0.0000	0.0114
9	0.4234	0.0000	0.0218	0.0000	0.4452
10	0.1766	0.0000	0.0000	0.0000	0.1766
11	0.0000	0.0928	0.1106	0.0000	0.2034
12	0.4234	0.0000	0.0000	0.0000	0.4234
13	0.0000	0.0000	0.0218	0.0000	0.0218
14	0.0000	0.1000	0.0000	0.0000	0.1000
15	0.0000	0.0000	0.0782	0.0000	0.0782
16	0.0000	0.0000	0.0366	0.0000	0.0366