

Hausaufgaben Prozessdynamik
zur Übung 3

Alexander Reinhold
STK 03
168372

21. November 2004

Aufgabe 1

Partielle Stoffbilanz

- Bilanzgleichung

$$\frac{dn_\alpha}{dt} = V \sigma_\alpha$$

Mit $n_\alpha = V c_\alpha$ und $\sigma_\alpha = \sum_i v_{i,\alpha} r_i$ gilt:

$$\frac{dc_\alpha}{dt} = \sum_i v_{i,\alpha} r_i$$

- Matrix Stöchometrischer Koeffizienten

$$\underline{v} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- Gleichungen der Reaktionskinetik

$$r_1 = k_{1,0} e^{-\frac{E_{A,1}}{R T}} c_A c_B$$

$$r_{2+} = k_{2+,0} e^{-\frac{E_{A,2+}}{R T}} c_A c_C$$

$$r_{2-} = k_{2-,0} e^{-\frac{E_{A,2-}}{R T}} c_D$$

- Dynamische Gleichung des Konzentrationsverlaufes

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \\ c_C \\ c_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} r_1 \\ r_{2+} - r_{2-} \end{pmatrix} \quad (1)$$

Temperaturgleichung

- Enthalpiebilanz

$$\frac{dH}{dt} = F_{in} \varrho_{in} {}^m h_{in} - F_{out} \varrho {}^m h + Q + P_t + V \frac{dp}{dt}$$

– Betrachtung der linken Seite

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_\alpha n_\alpha h_\alpha = \sum_\alpha n_\alpha \frac{dh_\alpha}{dt} + \sum_\alpha h_\alpha \frac{dn_\alpha}{dt}$$

Weiterhin ist:

$$\sum_\alpha n_\alpha \frac{dh_\alpha}{dt} = \sum_\alpha n_\alpha \frac{\partial h_\alpha}{\partial T} \frac{dT}{dt} = \left(\sum_\alpha n_\alpha c_{p,\alpha} \right) \frac{dT}{dt}$$

– Betrachtung zur rechten Seite

$$F_{in} = 0 \quad F_{out} = 0 \quad Q = 0 \quad P_t \approx 0 \quad \frac{dp}{dt} = 0$$

- Dynamische Temperatugleichung (als Ergebnis der Enthalpiebilanz)

$$\begin{aligned}
 & \left(\sum_{\alpha} n_{\alpha} c_{p,\alpha} \right) \frac{dT}{dt} + \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{dn_{\alpha}}{dt} = 0 \\
 & \frac{dT}{dt} = - \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{dn_{\alpha}}{dt} / \sum_{\alpha} n_{\alpha} c_{p,\alpha} = - \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{dc_{\alpha}}{dt} / \sum_{\alpha} c_{\alpha} c_{p,\alpha} \\
 & \frac{dT}{dt} = - \sum_i \Delta_R h_i r_i / \sum_{\alpha} c_{\alpha} c_{p,\alpha} \\
 & \frac{dT}{dt} = \langle \begin{pmatrix} \Delta_R h_1 \\ \Delta_R h_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} r_1 \\ r_{2+} - r_{2-} \end{pmatrix} \rangle / \langle \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \\ c_C \\ c_D \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c_{p,A} \\ c_{p,B} \\ c_{p,C} \\ c_{p,D} \end{pmatrix} \rangle \quad (2)
 \end{aligned}$$

Auswertung mittels Matlab

- Quellcode - Funktion

```

function f=A1(t,X);
% X ist der Vektor der Simulationsvariablen [c_A;c_B;c_C;c_D;T]
% Einheiten sind hier genormt auf: K, mol, l, kJ, s
%%%%%
%% Variablen
%%%%%
%Reaktionsparameter
DRh=[26;26]; %[DRh]= kJ mol^-1
eps=[-1 -1; 0;1 -1;0 1]; %Matrix der Stöchiometrischen Faktoren
k0=[3E-11;5E-13;2E-16]/60; %[k0]= l^x mol^-x s^-1
EA=[-90;-106;80]; %[EA]= kJ mol^-1
cp=[121.3;112.4;218;373]/1000; %[cp]= kJ mol^-1 K^-1
R=8314*1E-6; %[R]= kJ mol^-1 K^-1
%Aufsplitten der Simulationsvariablen
C=[X(1);X(2);X(3);X(4)];
T=X(5);
%Gleichungen der Reaktionsgeschwindigkeiten
k=[k0(1)*exp(-EA(1)/R/T);k0(2)*exp(-EA(2)/R/T);k0(3)*exp(-EA(3)/R/T)];
r1=k0(1)*exp(-EA(1)/R/T)*C(1)*C(2);
r2h=k(2)*C(1)*C(3);
r2r=k(3)*C(4);
%%%%%
%% Funktion
%%%%%
c=eps*[r1;r2h-r2r];
t=-Dot(DRh,[r1;r2h-r2r])/Dot(C,cp);
f=[c(1);c(2);c(3);c(4);t];

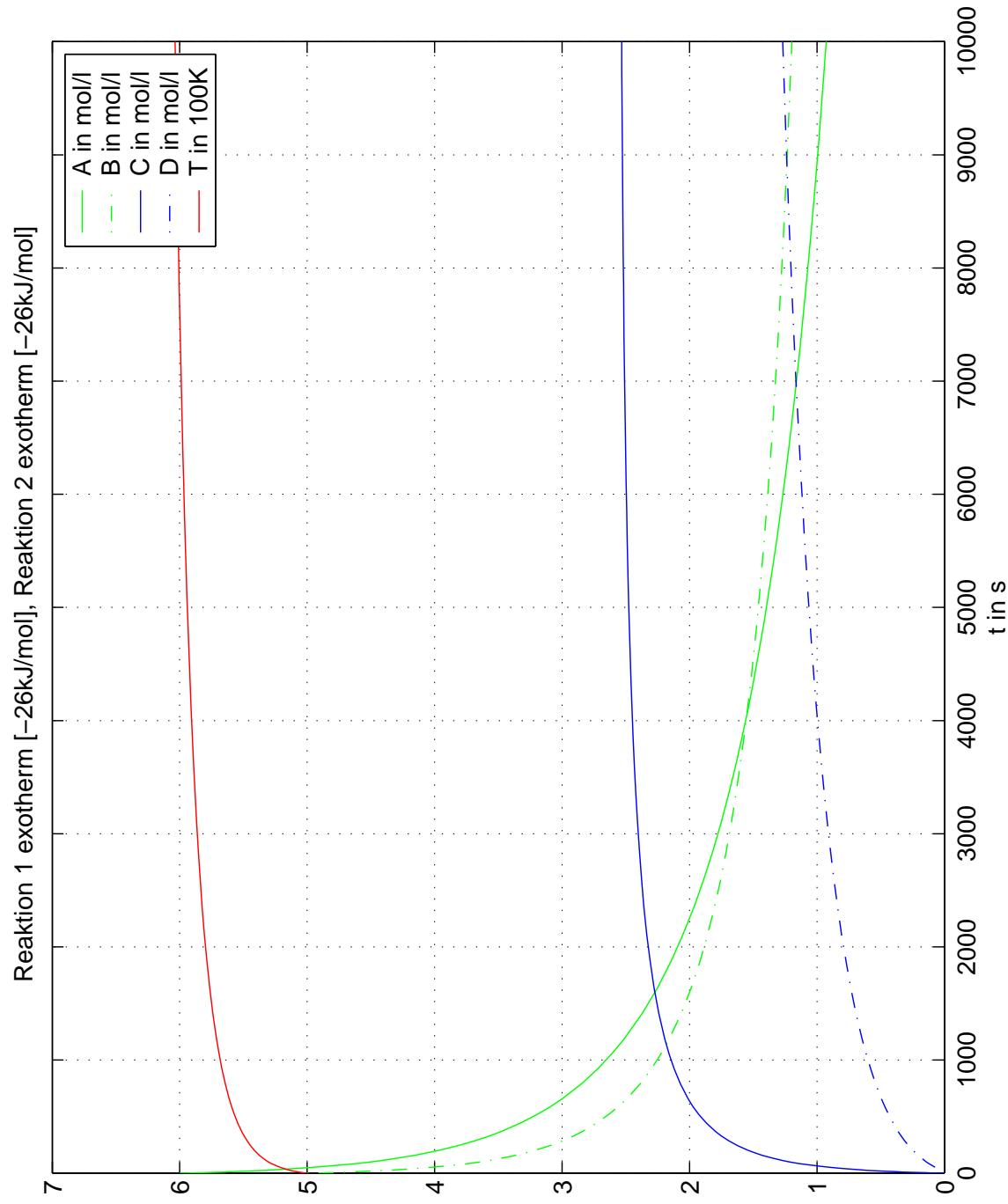
```

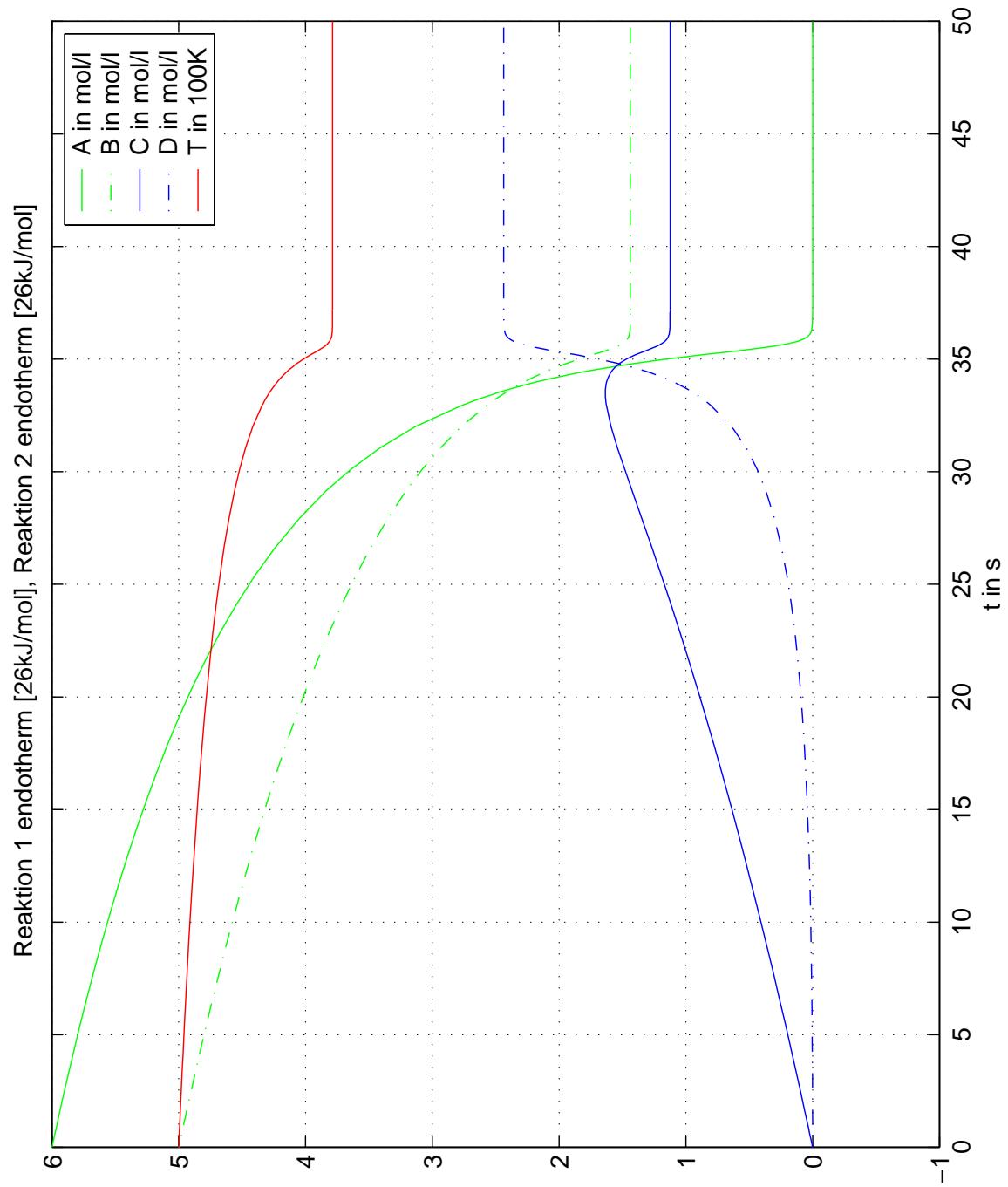
- Quellcode - Hauptprogramm

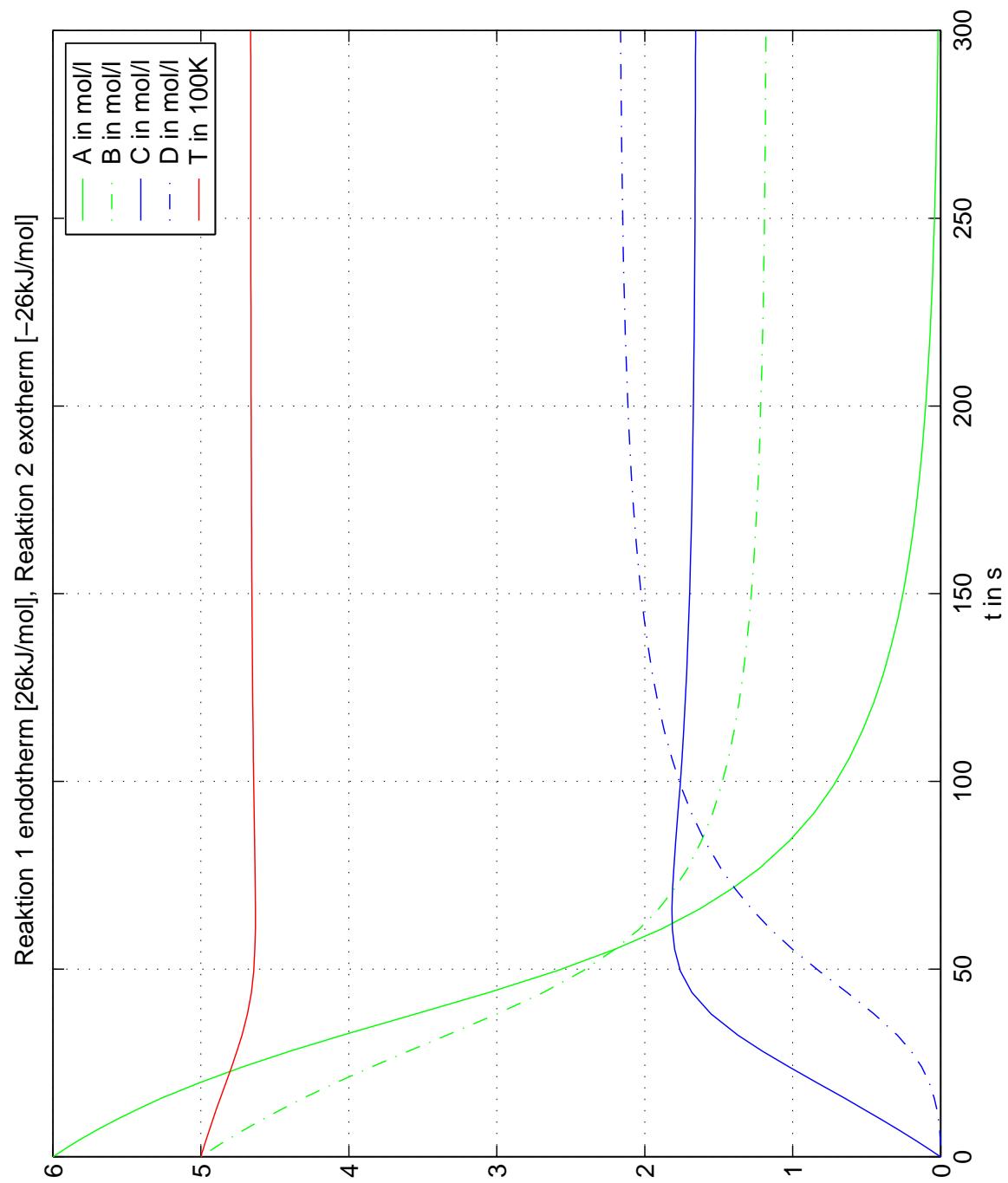
```

function A1_main;
clear all;
close all;
clc;
%%%%%
%% Variablen
%%%%%
%Anfangsbedingungen
T0=500; %[T0]= K
CO=[6;5;0;0]; %[CO]= mol l^-1
X0=[CO(1);CO(2);CO(3);CO(4);T0]; %[X0]= mol l^-1
t_end=50; %[t_end]=s
%%%%%
%% DGL lösen
%%%%%
[t,C]=ode45('A1',[0 t_end],X0);
%%%%%
%% Ausgabe
%%%%%
figure(1);
plot(t,C(:,1),'g-',t,C(:,2),'g-.',t,C(:,3),'b-',t,C(:,4),'b-.',t,C(:,5)/100,'r-');
legend('A in mol/l','B in mol/l','C in mol/l','D in mol/l','T in 100K');
title('Reaktion 1 endotherm [26kJ/mol], Reaktion 2 endotherm [26kJ/mol]');
xlabel('t in s');
ylabel('');
grid on;

```







Aufgabe 2

Änderung der Gesamt molmengen

$$\frac{dn^L}{dt} = -G^V \quad (1)$$

Dynamische Gleichung der Molenbrüche

- partielle Stoffbilanz

$$\begin{aligned} \frac{dn_\alpha^L}{dt} &= G_{in,\alpha}^L - G_{out,\alpha}^L + V \sigma_{alpha} \\ \frac{d(x_\alpha n^L)}{dt} &= -G_\alpha^V \\ x_\alpha \frac{dn^L}{dt} + n^L \frac{dx_\alpha}{dt} &= -k_\alpha x_\alpha G^V \\ \frac{dx_\alpha}{dt} &= \frac{1 - k_\alpha}{n^L} x_\alpha G^V \end{aligned} \quad (2)$$

Enthalpiebilanz und Dampfstrom G^V

- Enthalpiebilanz

$$\frac{dH^L}{dt} = G_{in} h_{in} - G^V h^V + Q + P_t + V \frac{dp}{dt}$$

– Betrachtung der linken Seite

$$\frac{dH^L}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_\alpha x_\alpha n^L h_\alpha^L = \sum_\alpha n_\alpha^L \frac{dh_\alpha^L}{dt} + \sum_\alpha h_\alpha^L n^L \frac{dx_\alpha}{dt} + \sum_\alpha h_\alpha^L x_\alpha \frac{dn^L}{dt}$$

Weiterhin ist mit $\frac{dT}{dt} = 0$:

$$\sum_\alpha n_\alpha^L \frac{dh_\alpha^L}{dt} = \sum_\alpha n_\alpha^L \frac{\partial h_\alpha^L}{\partial T} \frac{dT}{dt} = 0$$

– Betrachtung zur rechten Seite

$$G_{in} = 0 \quad \frac{dp}{dt} = 0 \quad G^V h^V = \sum_\alpha h_\alpha^V k_\alpha x_\alpha G^V$$

- Damit ergibt sich mit Einsetzen von Gleichung 1 und 2

$$\begin{aligned} \sum_\alpha h_\alpha^L n^L \frac{dx_\alpha}{dt} + \sum_\alpha h_\alpha^L x_\alpha \frac{dn^L}{dt} &= Q + P_t - \sum_\alpha h_\alpha^V k_\alpha x_\alpha G^V \\ \left(\sum_\alpha h_\alpha^L (1 - k_\alpha) x_\alpha - h_\alpha^L x_\alpha + h_\alpha^V k_\alpha x_\alpha \right) G^V &= Q + P_t \\ G^V &= \frac{Q + P_t}{\sum_\alpha (h_\alpha^V - h_\alpha^L) k_\alpha x_\alpha} \end{aligned} \quad (3)$$

Vollständiges Mathematisches Modell

Sowohl Q als auch P_t sind von den partiellen Stoffmengen in der Flüssigphase n_α^L abhängig, da der Kessel isotherm betrieben wird und die zugeführte Wärmemenge somit von der Wärmekapazität des Kesselinhaltes abhängt. Es gilt also $Q = Q(n^L, \underline{x}_\alpha)$ und $P_t = P_t(n^L, \underline{x}_\alpha)$.

- Differentielgleichungen

$$\frac{dn^L}{dt} = -\frac{Q(n^L, \underline{x}_\alpha) + P_t(n^L, \underline{x}_\alpha)}{\sum_\alpha (h_\alpha^V - h_\alpha^L) k_\alpha x_\alpha} \quad (4)$$

$$\frac{dx_\alpha}{dt} = \frac{1 - k_\alpha}{n^L} \frac{Q(n^L, \underline{x}_\alpha) + P_t(n^L, \underline{x}_\alpha)}{\sum_\alpha (h_\alpha^V - h_\alpha^L) k_\alpha} \quad (5)$$

- Algebraische Gleichungen

$$Q(n^L, \underline{x}_\alpha)$$

$$P_t(n^L, \underline{x}_\alpha)$$

- Parameter

$$\underline{h}_\alpha^L \quad \underline{h}_\alpha^V \quad k_\alpha$$

- Anfangsbedingungen

$$n_0^L (= 600 \text{ mol})$$

$$\underline{x}_{\alpha,0} = \frac{n_{\alpha,0}}{n_0^L} (= \begin{pmatrix} 0,25 \\ 0,2 \\ 0,55 \end{pmatrix})$$