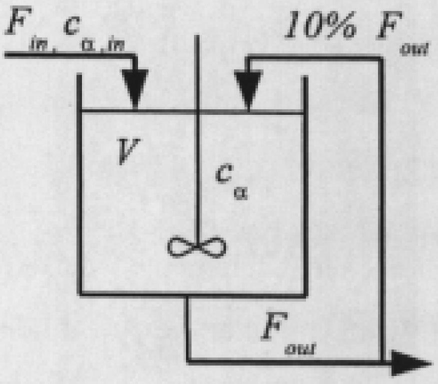
Übungsklausur Prozessdynamik I

WS 2005/2006

***Aufgabe 1:* Materialbilanz (20 P)**



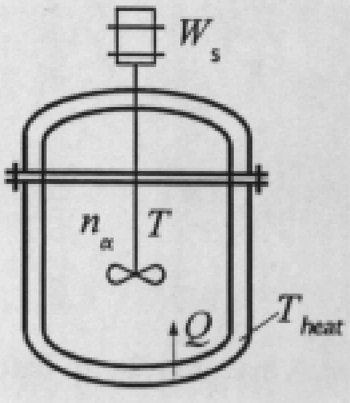
Gegeben sei ein isobarer (*p=const*) CSTR, der zum Zeitpunkt t=0 mit der reinen Komponente A gefüllt ist. F_{in} enthält nur die Komponente A. α soll allgemein die Komponenten bezeichnen. Im Reaktor laufen die folgenden chemischen Reaktionen ab:

$$A \underset{k_{1r}}{\overset{k_{1h}}{\Leftrightarrow}} B+C \;,\; A+2B \underset{k_{2r}}{\overset{k_{2h}}{\Leftrightarrow}} D \;,\; C+B \xrightarrow{k_3} D \;.$$

Die Reaktionsgeschwindigkeiten werden über Potenzansätze und die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten mittels Arrhenius-Ansätzen beschrieben. Die Reaktionsordnung der Komponenten in den Reaktionskinetiken entspricht deren stöchiometrischen Koeffizienten. Die Dichte ρ der Flüssigkeit darf als konstant angenommen werden.

1. Stellen Sie die Matrix der stöchiometrischen Koeffizienten, die Ansätze für die Reaktionsgeschwindigkeiten und für die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten auf.
2. Formulieren Sie die allgemeine Stoffbilanz für die Komponente α im Reaktor. Formen Sie diese zu einer dynamischen Gleichung für die Konzentration der Komponente α um und stellen Sie diese exemplarisch für die Komponenten A und C auf ($V \neq const$).
3. $F_{in}=50\, ml/min$. Wie groß muss der Zulauf F_{out} sein, um das Volumen im Reaktor konstant zu halten?

***Aufgabe 2:* Energiebilanz (15 P)**



Gegeben sei ein im Batch-Betrieb eingesetzter Rührkesselreaktor. Zum Zeitpunkt t=0 ist der Reaktor mit der reinen Komponente A gefüllt und auf eine bestimmte Temperatur T^z vorgeheizt, bei der die folgenden Reaktionen starten.

$$2A \xrightarrow{k_1} B \;\;,\;\; A+B \underset{k_{2r}}{\overset{k_{2h}}{\Leftrightarrow}} C \;.$$

Über die Reaktorwand wird dem Reaktor Wärme $Q=k\,A_W(T_{heat}-T)$ zugeführt. Das Reaktorvolumen, der Druck im Reaktor und die spezifischen Wärmekapazitäten der einzelnen Stoffe sind konstant . W_s ist vernachlässigbar klein. Die Arbeit der Volumenkräfte kann auch vernachlässigt werden.

1. Stellen Sie die Enthalpiebilanz auf und bringen Sie diese in die Temperaturform. Geben Sie jeden Herleitungsschritt an ($H=\sum_\alpha h_\alpha * n_\alpha$).

2. Wie hängt die Temperatur im Reaktor von der Reaktionswärme bei konstanter Wärmezufuhr und temperaturunabhängigen Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten ab:
    a) für den Fall zweier exothermer Reaktionen $\Delta_R h_j < 0, j = 1,2$,
    b) für den Fall zweier endothermer Reaktionen $\Delta_R h_j > 0, j = 1,2$,
    c) für den Fall einer exothermen und einer endothermen Reaktion $\Delta_R h_1 > 0, \Delta_R h_2 < 0$ (Diskutieren Sie die möglichen Kombinationen).

<u>Aufgabe 3:</u> Numerik (14 P)

1. Welches numerische Verfahren eignet sich zur Lösung von algebraischen Gleichungen der Art $f(x) = 0$? Wann arbeitet dieses Verfahren besonders zuverlässig? Was kann über die Anzahl der gefundenen Lösungen ausgesagt werden? Geben Sie die Berechnungsvorschrift des Verfahrens an.
2. Nennen Sie mindestens zwei Verfahren zur numerischen Integration. Welche Vor- und Nachteile haben diese Verfahren? Geben Sie die Berechnungsvorschrift der genannten Verfahren an.

<u>Aufgabe 4:</u> Linearisierung / Stabilität (18 P)

Gegeben sei ein einfaches Bilanzgleichungsmodell, mit dem eine Räuber-Beute-Population (Füchse und Hasen) zeitabhängig beschrieben werden kann. Die Anzahl der Hasen sei h und die Anzahl der Füchse sei f. Die Hasen können sich unabhängig von den Füchsen vermehren: $a \cdot h(t)$, werden aber von den Füchsen gefressen: $-b \cdot h(t) \cdot f(t)$, damit die Hasen-population nicht über alle Maßen wächst, gilt: $-k \cdot h^2(t)$. Die Füchse können sich nur vermehren, wenn Füchse existieren und genug Futter (Hasen) vorhanden ist: $d \cdot f(t) \cdot h(t)$; die Sterberate der Füchse ist $-c \cdot f(t)$. Die Modellgleichungen lauten also wie folgt:

$$\frac{dh}{dt} = a \cdot h(t) - b \cdot h(t) \cdot f(t) - k \cdot h^2(t)$$

$$\frac{df}{dt} = -c \cdot f(t) + d \cdot h(t) \cdot f(t)$$

Die Parameter seien: a = 1, b = 0.01, c = 1, d = 0.02, k = 0.005. $= 5 \cdot 10^{-3} \Rightarrow k^{-1} = \frac{1000}{5} = \underline{\underline{200}}$

$d^{-1} = \frac{100}{2} = 50$

1. Berechnen Sie die stationären Zustände dieses Modells!
2. Linearisieren Sie das Modell um die stationären Zustände! Welches Verfahren wird dafür verwendet?
3. Treffen Sie Aussagen über die Stabilität der stat. Zustände! Charakterisieren Sie die Art der stationären Zustände (z.B. Sattel, Knoten etc.)!
4. Berechnen Sie für einen der Zustände die Eigenvektoren und zeichnen Sie qualitativ das Phasenporträt!