

## Zusatzaufgaben zur Erlangung der Zulassung zur Prüfung PD I

### Aufgabe 1

In einem idealen CSTR soll eine einfache, irreversible, exotherme Reaktion 1. Ordnung der Form  $A \rightarrow B$  mit dem Reaktionsgeschwindigkeitsgesetz:

$$r = k_0 \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) c_A$$

ablaufen ( $k_0 = 9703 \text{ s}^{-1}$ ,  $E_A = 49.6 \text{ kJ/mol}$ ,  $\Delta_R H = -24.95 \text{ kJ/mol}$ ).

Zufluß- und Abflußmenge ( $F = 2.8 \text{ l/s}$ ), Reaktorvolumen ( $V = 10 \text{ m}^3$ ) sowie sämtliche Parameterwerte ( $c_p = 2093 \text{ kJ/(m}^3 \text{ K)}$ ,  $A_k = 19 \text{ m}^2$ ,  $k_w = 91.8 \text{ W/(m}^2 \text{ K)}$ ) seien temperaturunabhängig und zeitlich konstant. Der Reaktor ist von einem Kühlmantel umgeben, der als vollständig durchmischt angesehen werden kann, d.h.  $T_k$  ist über das Mantelvolumen konstant ( $T_k = 25^\circ \text{C}$ ). Außerdem sei vereinfachend angenommen, daß die Kühlmitteltemperatur während des Prozesses konstant gehalten werden kann (keine Energiebilanz des Mantels erforderlich).

Zuflußkonzentration:  $c_A^0 = 10 \text{ kmol/m}^3$ , Zuflußtemperatur:  $T^0 = 25^\circ \text{C}$ .

- Bilanzieren Sie alle notwendigen Größen, um folgende Systemgrößen in ihrer Dynamik untersuchen zu können: Konzentrationen von A und B im Reaktor sowie die Reaktortemperatur T.
- Bestimmen Sie den stationären Zustand des Systems.
- Stellen Sie die Zustands- und Eingangsgrößen als Abweichung vom stationären Zustand dar:

$$x = [c_A - c_{A_s}; T - T_s]$$

$$u = [c_A^0 - c_{A_s}^0; T^0 - T_s^0; T_k - T_{k_s}]$$

- Im folgenden soll die Stabilität des Reaktors in den Betriebspunkten untersucht werden. Linearisieren Sie hierzu das Differentialgleichungssystem in der Umgebung der stationären Betriebspunkte und bringen Sie es in die Standardform:

$$\frac{dx}{dt} = Ax + Bu$$

$$y = Cx + Du$$

Zeigen Sie die Berechnung der Matrizen A, B, C und D für alle stationären Punkte.

- Die Systemstabilität kann anhand der Eigenwerte der Matrix A bewertet werden. Berechnen Sie diese! Für welche Betriebspunkte ist das System stabil für welche nicht? Wieso?

**Aufgabe 2**

Die Konzentrationsänderung eines Stoffes A in einem chemischen Reaktor möge durch die folgende DGL beschrieben werden:

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{F}{V}(c_{A, \text{ein}} - c_A) - k * c_A^n, \quad c_A(t=0) = 1 \text{ mol/m}^3$$

$$F = 4.5 \text{ m}^3/\text{s}, \quad V = 1.5 \text{ m}^3, \quad k = 2 \text{ m}^3/(\text{mol} \cdot \text{s}), \quad c_{A, \text{ein}} = 2 \text{ mol/m}^3$$

a) Berechnen Sie die Konzentration  $c_{A, \text{SS}}$  im stationären Zustand für  $n=2$  :

- a.1 analytisch und
- a.2 numerisch.

Suchen Sie zuerst einen geeigneten Startwert aus. Begründen Sie Ihr Vorgehen.

- a.2.1 Newton-Verfahren (Iterationsvorschrift + 2 Iterationsschritte).
- a.2.2 Direkte Substitution (2 Iterationsschritte).

b) Ausgehend vom Zeitpunkt  $t_0=0$  sollen die Werte von  $c_A$  für  $n=2$  durch numerische Integration mittels Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung für einen Zeitschritt  $\Delta t=0.2 \text{ s}$  berechnet werden. Schreiben Sie zunächst die Iterationsvorschrift an.

c) Lösen Sie die DGL für  $n=1$  mittels Laplace-Transformation.

Geben Sie alle Zahlenwerte mit einer Genauigkeit von vier Nachkommastellen an.

Aufgaben erhalten: