OTTO-VON-GUERICKE-UNIVERSITÄT MAGDEBURG
Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik
Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik
Prof. Dr.-Ing. K. Sundmacher

WS 2011/12
Klausur im Fach Systemverfahrenstechnik
20. Februar 2012

Persönliche Angaben

Name, Vorname	
Matrikel-Nr.	

Hinweise zur Klausur

- Die Bearbeitungszeit beträgt 120 min. Es sind keine Hilfsmittel erlaubt.
- Verwenden Sie lediglich die ausgeteilten Blätter! Falls die vorhandenen Blätter nicht ausreichen: Fragen Sie bei der Klausuraufsicht nach, um neue Blätter zu erhalten.
- Bitte geben Sie alle ausgeteilten Blätter wieder ab!
- Bitte beschreiben Sie Ihren Lösungsweg durch kurze Kommentare, damit er nachvollziehbar ist!
- Bitte schreiben Sie deutlich und fassen Sie sich kurz!
- Lesen Sie sich die Aufgaben sorgfältig durch!

Bewertung

	Mögliche Punktzahl	Erreichte Punktzahl
1. Aufgabe	18.5 + 6	
2. Aufgabe	21,5 + 1	
3. Aufgabe	14,5 + 0,5	
4. Aufgabe	17.5	
5. Aufgabe	15 + 1	
Gesamt	**87 + 8,5**	

Note:

1. Aufgabe – Allgemeines (18.5 P + 6 ZP)

1.1. Tensornotation (5.5 P + 2 ZP)

1.1.1. Welche der folgenden Gleichungen enthalten Fehler, welche sind korrekt? Begründen Sie Ihre Antwort unter Angabe der Tensorordnung für jeden Term. (3 P)

$$A_{ij} b_i = C_{ij} \qquad \text{(i)}$$

$$a_j + B_{jk} c_k + D_{kk} = 0 \qquad \text{(ii)}$$

$$\frac{\partial}{\partial z_k}(a_k + b_j) + c_{jk} = d_{jk} \qquad \text{(iii)}$$

Antw:

(i) Linke Seite: Tensor erster Stufe (Index i gebunden), rechte Seite Tensor 2. Stufe. Es können nur Tensoren gleicher Stufe addiert werden. → falsch

(ii) Erste beiden Terme Tensoren erster Stufe (zweiter Term, index k gebunden). Dritter Term ist Tensor nullter Stufe (index k gebunden), kann nicht zu den andern beiden Termen addiert werden. → falsch

(iii) Differentialoperator wirkt auf *a_k* als Divergenz, auf *b_j* als Gradient. Es entstehen Tensoren nullter und zweiter Stufe. Diese können nicht miteinander addiert werden. Die anderen beiden Terme sind Tensoren zweiter Stufe, können also nur zum Gradienten von *b_j* addiert werden. → falsch

1.1.2. Die Bilanzgleichung der inneren Energie lautet in lokaler Formulierung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) = -\frac{\partial}{\partial z_k}(\rho u v_k + q_k') + \sum_\alpha f_{k,\alpha} j_{k,\alpha} - P_{jk}\frac{\partial v_j}{\partial z_k}$$

Schreiben Sie die rechte Seite der Gleichung unter Anwendung der Produktregel aus und kennzeichnen Sie im Ergebnis die Differentialoperatoren Divergenz und Gradient. (2,5 P)

Antw:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) = -u v_k \underbrace{\frac{\partial \rho}{\partial z_k}}_{\text{grad}} - \rho v_k \underbrace{\frac{\partial u}{\partial z_k}}_{\text{grad}} - \rho u \underbrace{\frac{\partial v_k}{\partial z_k}}_{\text{div}} - \underbrace{\frac{\partial q_k'}{\partial z_k}}_{\text{div}} + \sum_\alpha f_{k,\alpha} j_{k,\alpha} - P_{jk}\underbrace{\frac{\partial v_j}{\partial z_k}}_{\text{grad}}$$

→ 3x Gradient, 2x Divergenz

1.1.3. *Zusatzaufgabe:* Schreiben Sie die folgende Gleichung unter Ausnutzung der Tensornotation voll aus. (2 ZP)

$$\frac{\partial \phi_j}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_k}(\phi_j v_k + \gamma_{jk}) \quad , \qquad j,k \in \{1,2\}$$

Antw:

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_1}(\phi_1 v_1 + \gamma_{11}) - \frac{\partial}{\partial z_2}(\phi_1 v_2 + \gamma_{12})$$

$$\frac{\partial \phi_2}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_1}(\phi_2 v_1 + \gamma_{21}) - \frac{\partial}{\partial z_2}(\phi_2 v_2 + \gamma_{22})$$

1.2. Bilanzierung (8 P + 2 ZP)

1.2.1. Geben Sie die allgemeine Bilanzgleichung als Wortgleichung wieder! (1,5 P)

Antw:

Akkumulation = Transport ± Quelle/Senken

1.2.2. Nennen Sie drei Beispiele für Erhaltungsgrößen! (1,5 P)

Antw:

Masse, Energie, Impuls, Drehimpuls, Ladung.

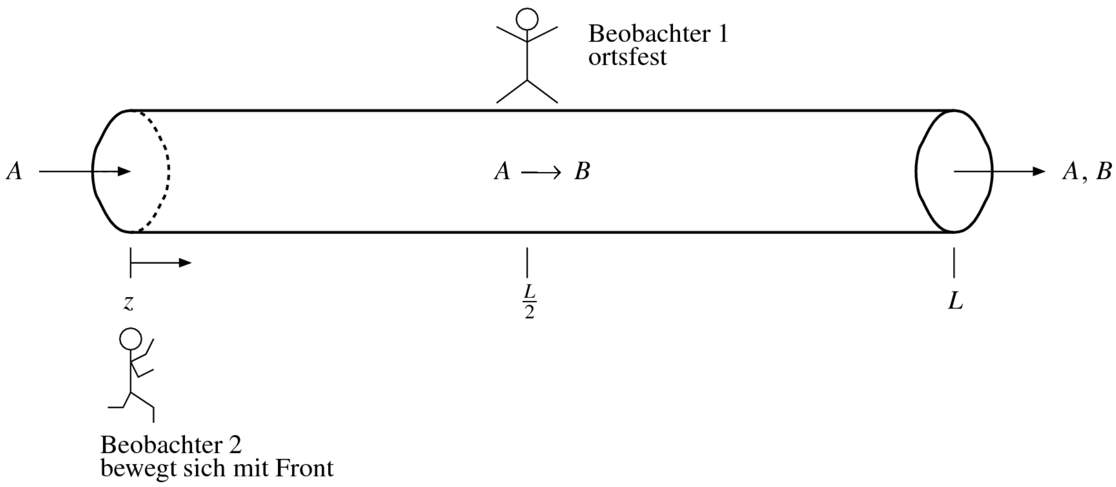
1.2.3. Worin besteht der Unterschied zwischen lokaler („Euler") und substantieller („Lagrange") Formulierung? Mit Hilfe welcher Gleichung können Bilanzen zwischen beiden Formulierungen transformiert werden? (2 P)

Antw:

lokale Form (Euler) → ortsfester Beobachter
substantielle Form (Lagrange) → mit Schwerpunktsgeschw. mitbewegter Beobachter (1 P)

Transformation mit Operatorgleichung $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v_k \frac{\partial}{\partial z_k}$ (1 P)

1.2.4. In einem gepackten eindimensionalen Rohrreaktor ohne Diffusion zerfällt Stoff A in Stoff B. Zu Beginn ist der Reaktor sauber (also: $c_A(t<t_0, z) = 0$). Zum Zeitpunkt t_0 wird ein Rechteckimpuls der Komponente A am Eingang aufgegeben. Skizzieren Sie den zu erwartenden qualitativen Verlauf der Konzentration A, $c_A(t)$, den Sie als Beobachter 1 und Beobachter 2 für $t > t_0$ erwarten. Zeichnen Sie zwei separate Diagramme. Beschriften Sie die Skizze ausreichend. Erläutern Sie Ihre Überlegungen! (3 P)



Antw:
● Der ortsfeste Beobachter sieht bis zu einem Zeitpunkt *T* keinen Anstieg in der Konzentration. Sie bleibt konstant Null. Zum Zeitpunkt *T* springt die Konzentration A auf einen Wert kleiner als die Eingangskonzentration wegen dem Zerfall A → B. Dieser Wert bleibt konstant für die Dauer des Rechteckimpulses Δt. (Skizze 1 P)
● Der mitbewegte Beobachter sieht den Zerfall von A an der Front. Da keine Kinetik vorgegeben ist, muss die Konzentration von A im zeitlichen Verlauf zwar stetig fallen, der Kurvenverlauf ist aber nicht eindeutig bestimmt. (Skizze 1 P)

● wenn richtig erklärt wurde (1 P)

1.2.5. *Zusatzaufgabe:* Die integrale Bilanz für eine Größe Φ sei gegeben durch

$$\int_V \frac{\partial \phi}{\partial t} \, \mathrm{d}V = -\int_A \phi v_k n_k \, \mathrm{d}A$$

Überführen sie diese Gleichung in die lokale, differentielle Form. (2 ZP)

Antw:

Mit dem Gaußschen Integralsatz (0.5P) kann das Oberflächenintegral in ein Berichsintegral überführt werden:

$$\int_V \frac{\partial \phi}{\partial t} \, \mathrm{d}V = -\int_V \frac{\partial}{\partial z_k} (\phi v_k) \, \mathrm{d}V \quad \text{(0.5P)}$$

Diese integrale Bilanz gilt für beliebige Kontrollvolumina V (0.5P). Damit folgt die lokale differentielle Bilanz

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_k} (\phi v_k) \quad . \qquad \text{(0.5P)}$$

1.3. Mehrphasensysteme (4 P)

1.3.1. Nennen Sie drei relevante Beispiele für Mehrphasensysteme in der Verfahrenstechnik. (1,5 P)

Antw:

Kristallisation, Wirbelschichtgranulation, Verdampfer (je 0.5P)

1.3.2. Wie viele intensive Zustandsgrößen muss man notwendigerweise kennen, damit ein einphasiges System (N Komponenten) thermodynamisch eindeutig bestimmt ist? (1 P)

Antw:

Gibbssche Phasenregel gibt Anzahl der intensiven thermodynamischen Freiheitsgrade F an:
$F = N + 2 - P = \underline{N + 1}$.

1.3.3. Geben Sie einen Satz von Größen an, der ein einphasiges Mehrkomponentensystem (N Komponenten) thermodynamisch eindeutig bestimmt. (1 P)

Antw:
* N Konzentrationen, Temperatur oder
* N Konzentrationen, Druck, oder
* $N - 1$ Konzentrationen, Druck und Temperatur

1.3.4. Wodurch wird der mechanische Zustand eines Systems festgelegt? (0.5P)

Antw:

Geschwindigkeitsvektor $v_{k,\alpha}$

1.4. Modellreduktion (1 P + 2 ZP)

1.4.1. Benennen Sie zwei Methoden zur Modellreduktion (1 P)

Antw:

(je 0.5P) Reduktion der Zahl der Ortskoorinaten, Nichtgleichgewichtsmodelle in Gleichgewichtsmodelle, Entdimensionierung, Quasistationarität, (Einführung von Annahmen)

1.4.2. *Zusatzaufgabe:* Gegeben ist ein Reaktionsschema für eine enzymatisch katalysierte Reaktion

(1) $\mathrm{A}+\mathrm{B} \xrightarrow{k_1} \mathrm{C}$ (2) $\mathrm{C} \xrightarrow{k_2} \mathrm{D}+\mathrm{B}$

Die Reaktionen können durch einen Potenzansatz beschrieben werden, die Temperatur kann als konstant angenommen werden. Das System wird folglich durch die Modellgleichungen 1-4 beschrieben.

(1) $\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{A}}{\mathrm{d}t}=-k_1 c_\mathrm{A} c_\mathrm{B}$ $\quad c_\mathrm{A}(0)=c_\mathrm{A}^0$

(2) $\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{B}}{\mathrm{d}t}=-k_1 c_\mathrm{A} c_\mathrm{B}+k_2 c_\mathrm{C}$ $\quad c_\mathrm{B}(0)=c_\mathrm{B}^0$

(3) $\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{C}}{\mathrm{d}t}=k_1 c_\mathrm{A} c_\mathrm{B}-k_2 c_\mathrm{C}$ $\quad c_\mathrm{C}(0)=0$

(4) $\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{D}}{\mathrm{d}t}=k_2 c_\mathrm{C}$ $\quad c_\mathrm{D}(0)=0$

Die enzymkatalysierte Reaktion lässt sich auch durch folgendes vereinfachtes Gleichungssystem veschreiben:

(1) $\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{A}}{\mathrm{d}t}=-k_1 c_\mathrm{A} c_\mathrm{B}$ $\quad c_\mathrm{A}(0)=c_\mathrm{A}^0$

(2') $\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{B}}{\mathrm{d}t}=-k_1 c_\mathrm{A} c_\mathrm{B}+k_2 (c_\mathrm{B}^0-c_\mathrm{B})$ $\quad c_\mathrm{B}(0)=c_\mathrm{B}^0$

Erläutern Sie, warum diese Vereinfachung der Gleichungsstruktur ohne Informationsverlust möglich ist. (2 ZP)

Antw:

Aus Gl. (2) und (3) folgt $\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{C}}{\mathrm{d}t}=-\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{B}}{\mathrm{d}t}$ (0.5P).

Integration liefert $c_\mathrm{C}(t)=c_\mathrm{C}(0)+c_\mathrm{B}(0)-c_\mathrm{B}(t)$ (0.5P).

Einsetzen der Anfangsbedingungen: $c_\mathrm{C}(t)=c_\mathrm{B}^0-c_\mathrm{B}(t)$ (0.5P).

Konzentration D ist entkoppelt vom Gleichungssystem bzw. $\frac{\partial c_\mathrm{D}}{\partial t}=\frac{\partial c_\mathrm{B}}{\partial t}-\frac{\partial c_\mathrm{A}}{\partial t}$ und Integration über t (0.5P).

2. Aufgabe – Bilanzierung (22 P + 1 ZP)

2.1. Massenbilanz (7 P + 1 ZP)

2.1.1. Geben Sie die Definitionsgleichung der Massenschwerpunktsgeschwindigkeit an. (1 P)

Antw.: L

$$\rho v_k = \sum_\alpha \rho_\alpha v_{k,\alpha}$$

2.1.2. Geben Sie die allgemeine Gesamtmassenbilanz in lokaler Formulierung an! (1 P)

Antw.: L

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_k}(v_k \rho)$$

2.1.3. Leiten Sie ausgehend von der Partialmassenbilanz in lokaler Formulierung (massenschwerpunktsbezogen) unter Zuhilfenahme der Gesamtmassenbilanz aus 2.1.2. die Differentialgleichung zur Bestimmung des Massenbruchs der Komponente α,

$$\rho \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} = -\rho v_k \frac{\partial w_\alpha}{\partial z_k} - \frac{\partial j_{k,\alpha}}{\partial z_k} + \sigma_\alpha$$

her. Kommentieren Sie die Umformungsschritte. (3 P)

Antw.: M

Partialmassenbilanz: $\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_k}(v_k \rho_\alpha + j_{k,\alpha}) + \sigma_\alpha$ (1 P)

und unter Verwendung von $\rho_\alpha = w_\alpha \rho$, folgt $\frac{\partial}{\partial t}(w_\alpha \rho) = -\frac{\partial}{\partial z_k}(w_\alpha \rho v_k + j_{k,\alpha}) + \sigma_\alpha$ (0,5 P)

Differenzieren (Produktregel): $\rho \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} + w_\alpha \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_k}(w_\alpha \rho v_k + j_{k,\alpha}) + \sigma_\alpha$ (0,5 P)

und Einsetzen der Gesamtmassenbilanz $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_k}(v_k \rho)$ führt auf

$$\rho \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} = w_\alpha \frac{\partial}{\partial z_k}(\rho v_k) - \frac{\partial}{\partial z_k}(w_\alpha \rho v_k + j_{k,\alpha}) + \sigma_\alpha$$ (0,5 P)

Schließlich folgt $\rho \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} = w_\alpha \frac{\partial}{\partial z_k}(\rho v_k) - w_\alpha \frac{\partial}{\partial z_k}(\rho v_k) - \rho v_k \frac{\partial w_\alpha}{\partial z_k} - \frac{\partial j_{k,\alpha}}{\partial z_k} + \sigma_\alpha$

und $\rho \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} = -\rho v_k \frac{\partial w_\alpha}{\partial z_k} - \frac{\partial j_{k,\alpha}}{\partial z_k} + \sigma_\alpha$ (0,5 P)

2.1.4. Nehmen Sie nun an, dass Diffusion und Konvektion entlang der z_3-Koordinate vernachlässigt werden können. Vereinfachen Sie die Gleichung entsprechend und schreiben Sie sie aus! (2 P)

Antw.:M

$$-\rho v_3 \frac{\partial w_\alpha}{\partial z_3} = 0 \quad \text{und} \quad -\frac{\partial j_{3,\alpha}}{\partial z_3} = 0$$

$$\rho \frac{\partial w_\alpha}{\partial t} = -\rho v_1 \frac{\partial w_\alpha}{\partial z_1} - \rho v_2 \frac{\partial w_\alpha}{\partial z_2} - \frac{\partial j_{1,\alpha}}{\partial z_1} - \frac{\partial j_{2,\alpha}}{\partial z_2} + \sigma_\alpha$$ (je 1P)

2.1.5. Zusatzaufgabe: Welche gängige Bezugsgeschwindigkeit kennen sie neben der Massenschwerpunktsgeschwindigkeit noch und wie ist diese definiert? (1 ZP)

Antw.: L

molare Schwerpunktsgeschwindigkeit: $c v_k^m = \sum_\alpha c_\alpha v_{k,\alpha}$

2.2. Impulsbilanz (7 P)

2.2.1. Die Impulsbilanz in lokaler Formulierung lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_j) = -\frac{\partial}{\partial z_k}(\rho v_k v_j + P_{jk}) + \sum_\alpha \rho_\alpha f_{j,\alpha} \quad .$$

Ordnen Sie jedem Term eine physikalische Bedeutung zu! (2 P)

Antw.:
Impulsänderung im Kontrollvolumen (0.5 P)
konvektiver Impulstransport ins Kontrollvolumen (0.5 P)
Impulsänderung durch Druckgradienten und innere Reibung (0.5 P)
Impulsänderung durch komponentenspezifische Volumenkräfte (0.5 P)

2.2.2. Wie vereinfacht sich die Besetzungsstruktur des Tensors P_{jk} für ein reibungsfreies Fluid? (1 P)

Antw.:

$$P_{jk} = p\,\delta_{jk}$$

2.2.3. Wie vereinfacht sich der Term $\sum_\alpha \rho_\alpha f_{j,\alpha}$ für den Fall, dass Gravitation die einzige angreifende Kraft ist? (*Anmerkung: Die Gravitationskraft kann hier als unabhängig vom Abstand zur Erdmitte behandelt werden. Die Gravitation wirkt hier entgegen der z_3-Koordinate*) (1 P)

Antw.:

$$\sum_\alpha \rho_\alpha f_{j,\alpha} = -\rho\, g\, \delta_{j3}$$

2.2.4. Aus der obigen Formulierung der Impulsbilanz (Aufg. 2.2.1.) ist die Druckverteilung in der Erdatmosphäre p(z) (barometrische Hoehenformel) herzuleiten.
Setzen Sie dafür zuerst die Ergebnisse aus 2.2.2. und 2.2.3. ein. Nutzen Sie anschließend das ideale Gasgesetz und die Annahme einer mittleren Molmasse M für die Luft um eine Differentialgleichung für

die Druckverteilung zu gewinnen. Integrieren Sie abschließend unter Einbezug einer sinnvoller Randbedingung. Die Temperatur kann in der gesamten Atmosphäre als konstant betrachtet werden. (3 P)

Antw.:

$\sum_\alpha \rho_\alpha f_{j,\alpha} = -\rho g \delta_{j3}$ und $P_{jk} = p\,\delta_{jk}$ in $0 = -\frac{\partial}{\partial z_k} P_{jk} + \sum_\alpha \rho_\alpha f_{j,\alpha}$ einsetzen

Dichte aus idealem Gas einsetzen: $\rho = \frac{n}{V} M = \frac{pM}{RT}$

integrieren und RB einsetzen → p unabh. von x,y; $p = p_0 e^{\left(\frac{-gM}{RT} z\right)}$

2.3. Energiebilanz (5,5 P)

2.3.1. Die Bilanz der Gesamtenergie lautet:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho e)}_{I} = -\frac{\partial}{\partial z_k}(\underbrace{\rho e v_k}_{II} + \underbrace{P_{jk} v_j}_{III} + \underbrace{q'_k}_{IV}) + \underbrace{\sum_\alpha \rho_\alpha f_{j,\alpha} v_{j,\alpha}}_{V} \quad .$$

Ordnen Sie jedem Term eine physikalische Bedeutung zu! (2,5 P)

Antw.: L

I Akkumulation
II Konvektiver Transport
III Arbeit der Oberflächenkräfte
IV Energiestrom
V Arbeit der Volumenkräfte (je 0,5 P)

2.3.2. Welche Arten der Energiebilanz (neben der Bilanz der Gesamtenergie) sind Ihnen noch bekannt? (1P)

Antw.: L

Innere Energie, Enthalpie

2.3.3. Welches Zustandsfeld wird aus der Energiebilanz gewonnen? (0,5 P)

Antw.: L

Temperaturfeld

2.3.4. Welche Einheit hat der Energiestrom q'$_k$ und welche Beiträge zur Energiebilanz werden damit berücksichtigt? (1,5 P)

Antw.: L

[q'k] = J/m2/s (0,5 P)

Der Energiestrom ($q'_k = q_k + \sum j_{k,\alpha} h_\alpha$) setzt sich zusammen aus Wärmeleitung (0,5 P) und Enthalpiediffusionsstrom (0,5 P).

3. Aufgabe – Konstitutive Gleichungen (14.5 P + 0.5 ZP)

3.1. Reaktionskinetiken (7 P)

Gegeben seien folgende Reaktionen:

$$\mathrm{A} \underset{k_{1-}}{\overset{k_{1+}}{\rightleftarrows}} \mathrm{C} \qquad \mathrm{B} \underset{k_{2-}}{\overset{k_{2+}}{\rightleftarrows}} 2\,\mathrm{D} \qquad \mathrm{C}+\mathrm{D} \underset{k_{3-}}{\overset{k_{3+}}{\rightleftarrows}} \mathrm{A}+\mathrm{B}$$

3.1.1. Geben Sie Potenzansätze für die Kinetik der beiden Reaktionsraten r_2 und r_3 [mol/m³/s] an! Unterstellen Sie dabei, dass es sich um Elementarreaktionen handelt! (1 P)

Antw.: L

$$r_2 = k_{2+}\, c_\mathrm{B} - k_{2-}\, c_\mathrm{D}^2$$
$$r_3 = k_{3+}\, c_\mathrm{C} c_\mathrm{D} - k_{3-}\, c_\mathrm{A} c_\mathrm{B}$$

3.1.2. Geben Sie die Matrix der stöchiometrischen Koeffizienten an. (2 P)

Antw.: L

$$\nu_{ij} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & +1 \\ 0 & -1 & +1 \\ +1 & 0 & -1 \\ 0 & +2 & -1 \end{bmatrix}$$ (je Zeile 0.5 P)

3.1.3. Geben Sie die lokalen, massebezogenen Quelldichten σ_α für die Spezies C und D an! (1 P)

Antw.: L

$$\sigma_\mathrm{C} = M_C (r_1 - r_3)$$
$$\sigma_\mathrm{D} = M_D (2\mathrm{r}_2 - r_3)$$

3.1.4. Durch welchen Ansatz lässt sich die Temperaturabhängigkeit der Reaktionskonstanten $k_{\alpha+}$ beschreiben? Geben Sie den Ansatz an! (1 P)

Antw.: L

$$k_{\alpha+}(T) = k_{\alpha+}^0 \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$$ (0.5 P)

Arrhenius Ansatz. (0.5 P)

3.1.5. Benennen Sie zwei weitere reaktionskinetische Ansätze neben dem Potenzansatz! Kommentieren Sie deren Bedeutung. (2 P)

Antw.: L

Die Michaelis-Menten Kinetik wird typischerweise bei enzymatisch katalysierten Reaktionen angewandt. Langmuir-Hinshelwood Ansätze verwendet man bei Reaktionen an Oberflächen (z.B. heterogene Katalyse).

3.2. Kinetik des Stofftransports (7.5P + 0,5 ZP)

3.2.1. Geben Sie den Fickschen Stofftransportansatz wieder. Kommentieren Sie wann dieser Ansatz generell gerechtfertigt ist? Erläutern Sie daran die typische Struktur einer empirischen Transport-Kinetik! (2P)

Antw.: L

$$J_k^\alpha = -D_\alpha \frac{\partial c_\alpha}{\partial z_k} \quad \text{(0,5 P)}$$

Der Ficksche Ansatz ist generell gerechtfertigt, wenn die Spezies α sehr stark verdünnt in einem Lösungsmittel vorliegt. (1 P)
Typische Transportkinetik als Wortgleichung (0,5 P): Fluss = (kinetischer Koeffizient) mal (Triebkraft)

3.2.2. Erläuteren Sie das Prinzip des Maxwell-Stefan-Ansatzes! (1 P)

Antw.: M
mikroskopisches Kräftegleichgewicht zwischen den verschiedenen Spezies

3.2.3. *Zusatzaufgabe:* Warum braucht man im Zusammenhang mit dem Maxwell-Stefan-Ansatz noch eine Schließbedingung? (0.5 ZP)

Antw.: S
weil die N Gleichungen für die N zu beschreibenden Massenströme linear abhängig sind (0.5 P)

3.2.4. Gehen Sie vom Maxwell-Stefan-Ansatz aus:

$$-\frac{x_\alpha}{RT}\left(\frac{\partial \mu_\alpha}{\partial z_k}\right)_T = \sum_{\substack{\beta=1 \\ \alpha\neq\beta}}^{N} \frac{x_\beta J_{k,\alpha} - x_\alpha J_{k,\beta}}{c_t Đ_{\alpha\beta}}$$

Stellen Sie den Maxwell-Sefan Ansatz für ein ideales (Aktivitätskoeffizient = 1) ternäres Gemisch auf. Als Schließbedingung gelte $0 = \sum_\alpha J_k^\alpha$. (2 P)

Antw.: M

Es gilt für das chemische Potential (weil ideales Gemisch) $\mu_j = \mu_j^0 + RT \ln x_j$ (0,5 P)

und damit für dessen örtliche Ableitung (0,5 P) $\frac{\partial \mu_j}{\partial z_k} = \frac{RT}{x_j}\frac{\partial x_j}{\partial z_k}$.

Dann erhalten wir:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial x_1}{\partial z_k} &= \frac{x_2 J_{k,1} - x_1 J_{k,2}}{c_t Đ_{12}} + \frac{x_3 J_{k,1} - x_1 J_{k,3}}{c_t Đ_{13}} \\ -\frac{\partial x_2}{\partial z_k} &= \frac{x_1 J_{k,2} - x_2 J_{k,1}}{c_t Đ_{12}} + \frac{x_3 J_{k,2} - x_2 J_{k,3}}{c_t Đ_{23}} \\ J_{k,3} &= 0 - J_{k,1} - J_{k,2} \end{aligned} \quad \text{(1 P)}$$

3.2.5. Vereinfachen sie das Gleichungssystem welches sich aus Aufgabe 3.2.4. ergibt unter der Annahme, dass die Komponenten 1 und 2 je einen stark verdünnten Gelöststoff und Komponente 3 das Lösungsmittel repräsentieren. Vergleichen sie das Ergebnis mit dem Fickschen Ansatz. (2.5 P)

Antw.: M
Es ist $x_1 \rightarrow 0$, $x_2 \rightarrow 0$ und $x_3 \rightarrow 1$. Setzen wir $x_1 = x_2 = 0$ und $x_3 = 1$, so bekommt man

$$J_{k,1} = -c_t Đ_{13} \frac{\partial x_1}{\partial z_k}$$
$$J_{k,2} = -c_t Đ_{23} \frac{\partial x_2}{\partial z_k} \quad \text{(2 P),}$$
$$J_{k,3} = 0 - J_{k,1} - J_{k,2}$$

Für die Komponenten 1 und 2 entsprechen die Ansätze für den molaren Diffusionsstrom dem Fickschen Ansatz. Kompontente 3 (das Lösungsmittel) muss die Ströme der beiden Gelöststoffe ausbalancieren um die Schließbedingung zu gewährleisten (welche beim Fickschen Ansatz üblicherweise verletzt wird). (0.5 P)

4. Aufgabe – Charakteristiken und Laplace (17.5 P)

4.1. Linearität, Randbedingungen, Lösungsmethoden (8.5 P)

4.1.1. Gegeben ist das folgende System partieller Differentialgleichungen:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho c_p v \frac{\partial T}{\partial z} + \lambda(T) \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$
$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -v \frac{\partial c_A}{\partial z} - k(T) c_A$$
$$\rho, c_p, v = \text{const.}, \quad 0 \leq z \leq L$$

Diskutieren Sie die Linearität des gegebenen Gleichungssystems termweise! Begründen Sie Ihre Aussagen! (3 P)

Antw.: jeweils 0,25 P für richtige Aussage und 0,25 P für richtige Begründung
- Linke Seite, erste Gl.: linear, da rho und cp konstant und Differentiation ein linearer Operator ist
- Erster Term der rechten Seite, erste Gl.: linear, da rho, cp und v konstant und Diff. Ein lin. Operator ist
- Zweiter Term der rechten Seite, erste Gl.: nichtlinear, da lambda eine i.A. nichtlineare Funktion der gesuchten Größe T ist
- Linke Seite, zweite Gl.: linear, da Diff. ein linearer Operator ist
- Erster Term der rechten Seite, zweite Gl.: linear, da v konstant und Diff. Ein lin. Operator ist
- Zweiter Term der rechten Seite, zweite Gl.: nichtlinear, da k eine i.A. nichtlineare Funktion der gesuchten Größe T ist

4.1.2. Welcher Ordnung (in Ort und Zeit!) sind die gegebenen Differentialgleichungen? Nennen Sie adäquate Randbedingungen. Nehmen Sie hierzu an, dass Temperatur und Konzentration bei z=0 gegeben sind und Wärmeleitung bei z=L nicht stattfindet. (3,5 P)

Antw.:
Gl. 1: 1. Ord. in der Zeit, 2. Ord. im Ort (1 P)
Gl. 2: 1. Ord. in der Zeit, 1. Ord. im Ort (1 P)

Gl. 1: zwei Rbn: $T(t, z=0) = T_0$, $\frac{\partial T}{\partial z}(t, z=L) = 0$ (1 P)

Gl. 2: eine RB: $c_A(t, z=0) = c_{A,ein}$ (0.5 P)

4.1.3. Können die genannten Gleichung mit Hilfe der Methode der Charakteristiken oder der Laplace-Transformation gelöst werden? (2 P)

Antw.:
Mit Charakteristiken kann das System nicht gelöst werden, da Gl. 1 zweiter Ordnung im Ort ist (Diffusion) (1 P)
Mit Laplace Trafo kann das System nicht gelöst werden, da es nichtlinear ist (1 P)

4.2. Laplace-Transformation (9 P)

4.2.1. Gegeben sei eine partielle Differentialgleichung, die die Dynamik der Anzahldichteverteilung f(t,x) einer Zellpopulation beschreibt (Populationsbilanz):

$$\frac{\partial f}{\partial t}+G\frac{\partial f}{\partial x}=-\frac{1}{\Theta}f$$

mit $f(t, x=0) = N(t)$
$f(t=0, x) = 0$
G, Θ = const.
wobei x die Masse einer Zelle ist und G die Wachstumsrate einer einzelnen Zelle, θ ist die mittlere Verweilzeit. Die Funktion $N(t)$ ist die Rate mit der neue Zelle gebildet werden. Lösen Sie die Gleichung analytisch mit Hilfe der Laplace-Transformation! (7 P)

Hinweis: Der Verschiebungssatz der Laplace-Transformation lautet $L\{f(t-a)\}(s)=\mathrm{e}^{-as}F(s)$ *bzw.* $L^{-1}\{\mathrm{e}^{-as}F(s)\}(t)=f(t-a)$.

Antw.: M

LT bezgl. T $L\left\{\frac{\partial f}{\partial t}\right\}+L\left\{G\frac{\partial f}{\partial x}\right\}=L\left\{-\frac{1}{\Theta}f\right\}$ (1 P)

ergibt $sF(s,x)-f(0,x)+G\frac{\partial F(s,x)}{\partial x}=-\frac{1}{\Theta}F(s,x)$ (1 P)

mit verschwindender Anfangsbedingung (1 P) ergibt sich die homogene ODE 1. Ordnung

$$\frac{\partial F(s,x)}{\partial x}=-(\frac{s}{G}+\frac{1}{G\Theta})F(s,x)$$

mit der allgemeinen Lösung $F(s,x)=C\exp\left[-\left(\frac{1}{G\Theta}+\frac{s}{G}\right)x\right]$ (1 P)

die Integrationskonstante ergibt sich nach einsetzen der transformierten Randbedingung $F(s,0)=\tilde{N}(s)$ zu $C=\tilde{N}(s)$ (1 P)

und damit folgt $F(s,x)=\tilde{N}(s)\exp\left[-\left(\frac{1}{G\Theta}+\frac{s}{G}\right)x\right]$

Umstellen in einen von s unabhängigen Anteil und einen von s abhängigen Anteil

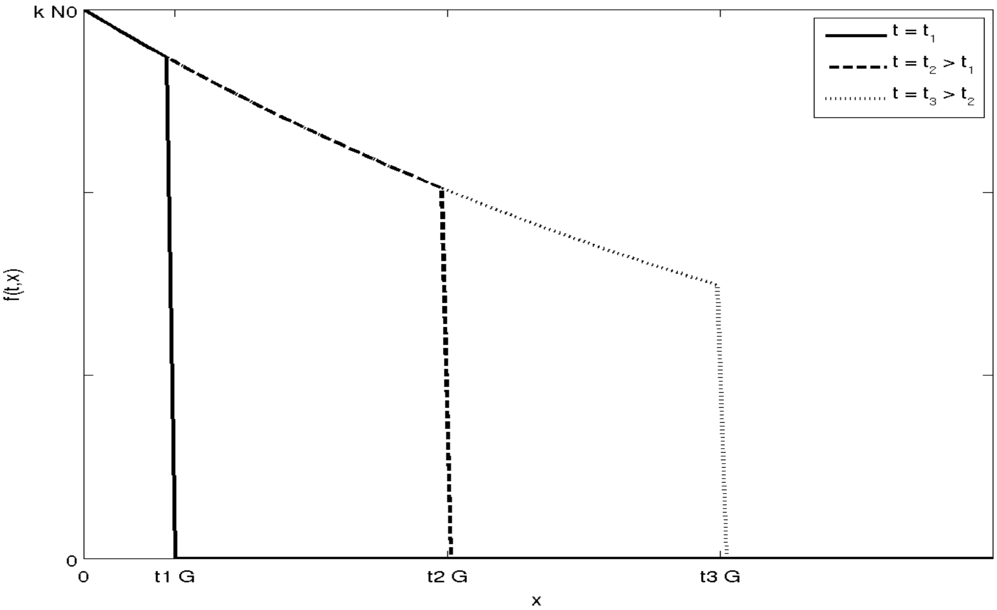
$F(s,x)=\exp\left[-\frac{x}{G\Theta}\right]\tilde{N}(s)\exp\left[-\frac{x}{G}s\right]$ (1 P) und Anwendung des Verschiebungssatzes erhält man nach Rücktransformation $f(t,x)=\exp\left[-\frac{x}{G\Theta}\right]N\left(t-\frac{x}{G}\right)$ (1 P)

4.2.2. Skizzieren Sie den Verlauf der Lösung $f(t,x)$ für $N(t)=N_0\cdot H(t)$ für 3 verschiedene Zeitpunkte, wobei H die (Heaviside-) Sprungfunktion ist. (2 P)

Antw.: M

Achsenbeschriftung (0.5 P), Lösungskurven (1 P), Randbedingung (0.5 P)

Lösung wie in Bild, aber alle Lösungen starten als fallende Exponentialfunktion, brechen jedoch bei tG ab.



5. Aufgabe – Finite-Volumen-Methode (15 P + 1 ZP)

5.1. Nennen Sie jeweils einen Vor- und Nachteil der Finite-Volumen-Methode. (1 P)

Antw:

Vorteil: konservative Methode (Erhaltungsgleichungen werden exakt erfüllt), Lösung nichtlinearer Probleme möglich.

Nachteil: nicht exakt, z.B. numerische Diffusion

5.2. Betrachtet wird die Wärmeleitung in einem Stab, der am linken Ende (z = 0) auf einer konstanten Temperatur von T_L gehalten wird. Der Stab wird an der Oberfläche durch Wärmeübergang auf Umgebungstemperatur gekühlt.
Das Temperaturprofil wird durch die partielle Differentialgleichung

$$\rho c_\mathrm{p} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{U\alpha}{A}(T_\mathrm{u} - T) \qquad \text{(I)}$$

mit der Anfangsbedingung $T(0,z) = T_0$ für alle $z \in [0, L]$

und den Randbedingungen $T(t,0) = T_\mathrm{L}$ und $\left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{z=L} = 0$ für alle $t \geqslant 0$

beschrieben.
Dabei ist ρ die Dichte, c_p die Wärmekapazität, λ die Wärmeleitfähigkeit, U der Umfang, A die Querschnittsfläche und L die Länge des Stabes. α ist der Wärmeübergangskoeffizient Stab ↔ Umgebung und T_u die Umgebungstemperatur. Die Parameter können alle als Konstanten aufgefasst werden.

5.2.1. Diskretisieren Sie Gleichung (I) termweise mit Hilfe der Finite-Volumen-Methode für ein inneres Kontrollvolumen. Gehen Sie von einem äquidistanten Gitter aus. Verwenden Sie eine vollständig beschriftete Skizze und benennen Sie die jeweils notwendigen Rechenregeln und Annahmen. (9.5 P)

Antw:

Skizze mit T_{i-1}, T_i, T_{i+1}, z_i, z_{i+1}, Δz (1.5P)
äquidistantes Gitter → $\Delta z_i = \Delta z$ (0.5P)

Akkumulation: $$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \rho c_\mathrm{p} \frac{\partial T}{\partial t} \mathrm{d}z \overset{\text{(a),(b)}}{=} \rho c_\mathrm{p} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{z_i}^{z_{i+1}} T \,\mathrm{d}z \overset{\text{(c)}}{=} \rho c_\mathrm{p} \frac{\mathrm{d}T_i}{\mathrm{d}t} \Delta z \qquad \text{(2.5P)}$$

Diffusion: $$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \mathrm{d}z \overset{\text{(d)}}{=} \lambda \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \mathrm{d}z \overset{\text{(e)}}{=} \lambda \left(\left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{z_{i+1}} - \left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{z_i} \right) \overset{\text{(f)}}{=} \lambda \left(\frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta z} - \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta z} \right) \qquad \text{(2.5P)}$$

Quelle/Senke: $$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{U\alpha}{A}(T_\mathrm{u} - T) \mathrm{d}z \overset{\text{(g),(c)}}{=} \frac{U\alpha}{A}(T_\mathrm{u} - T_i)\Delta z \qquad \text{(2P)}$$

Alles zusammengesetzt: $$\frac{\mathrm{d}T_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\rho c_\mathrm{p}} \left[\lambda \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta z^2} + \frac{U\alpha}{A}(T_\mathrm{u} - T_i) \right] \qquad \text{(0.5P)}$$

mit (a) ρ, c_p = const., (b) Leibniz-Regel, (c) T stückweise konstant, (d) λ =const., (e) HDI, (f) T stückweise linear, (g) U, α, A, T_u = const.

5.2.2. Welche Besetzungsstruktur hat die Jacobimatrix des resultierenden ODE-Systems? Wie viele Diagonalen sind besetzt? Welche? (1 P)

Antw:

3 besetzte Diagonalen: Hauptdiagonale und beide Nebendiagonalen.

$$J = \begin{bmatrix} * & * & & & \\ * & * & * & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & * & * & * \\ & & & * & * \end{bmatrix} .$$

5.2.3. *Zusatzaufgabe:* Wie viele Diagonalen sind in der strukturellen Jacobimatrix des ODE-Systems besetzt, wenn zur Berechnung des diffusiven Terms ein Polynom 3. Ordnung als Profilannahme verwendet wird? Begründen Sie! (1 ZP)

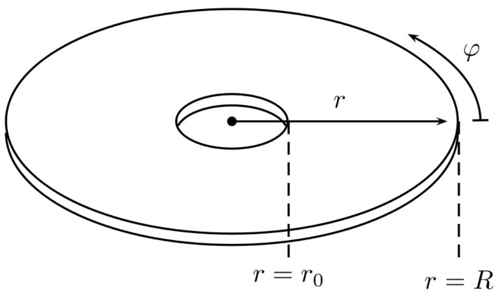
Antw:

5 besetzte Diagonalen.
Polynom 3. Ordnung → 4 Stützstellen je KV-Grenze → 5 Stützstellen je KV.

5.3. Betrachtet wird die Wärmeleitung auf einem platten Ring. Die zweidimensionale Wärmeleitungsgleichung in Polarkoordinaten lautet

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\lambda}{r^2}\frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} + Q(r, \varphi, T)$$

Dabei ist Q eine beliebige Wärmequelle bzw. -senke. Die radiale Koordinate r läuft vom inneren Rand ($r = r_0$) bis zum äußeren Rand ($r = R$). Die tangentiale Koordinate φ läuft einmal im Kreis, also von $\varphi = 0$ bis $\varphi = 2\pi$.



5.3.1. Formulieren Sie (physikalisch sinnvolle) Anfangs- und Randbedingungen! (2.5 P)

Antw:

Anfangsbedingung: $T(t=0, r, \varphi) = T^0$ (0.5P)

Kopplungsbedingungen der Winkelkoordinate $T(t, r, \varphi=0) = T(t, r, \varphi=2\pi)$ (0.5P)

und $\left.\frac{\partial T}{\partial \varphi}\right|_{\varphi=0} = \left.\frac{\partial T}{\partial \varphi}\right|_{\varphi=2\pi}$ (0.5P).

Randbedingungen am inneren Rand $T(t, r=r_{0,} \varphi) = T_{\text{innen}}$ (0.5P)

und am äußeren Rand der Platte $T(t, r=R, \varphi) = T_{\text{außen}}$ (0.5P).

5.3.2. Wie viele gekoppelte (gewöhnliche) Differentialgleichungen erhalten Sie, wenn Sie eine Diskretisierung von n_r = 20 Kontrollvolumina in radialer Reichtung und n_φ = 30 Kontrollvolumina in tangentialer Richtung unterstellen? (1 P)

Antw:

20 * 30 = 600 gekoppelte ODEs