



WS 2009/2010
Übung Systemverfahrenstechnik
2. Projektübung - Musterlösung

Ausgabetermin: 25. November 2009
Abgabetermin: 09. Dezember 2009

1. Aufgabe – Allgemeines

1.1 Finite-Volumen-Methode (FVM)

1.1.1 Bei welcher Art von Differentialgleichungen wird die Finite-Volumen-Methode (FVM) verwendet?

Antwort:

Die FVM überführt eine Partielle Differentialgleichung (PDE) in einen Satz von n gekoppelten gewöhnlichen Differentialgleichungen.

1.1.2 Nenne jeweils ein Vor- und Nachteil der FVM!

Antwort:

Die FVM ist eine Konservative Methode, d.h. Erhaltungssätze (Masse, Energie, Impuls) werden exakt erfüllt, unabhängig von der Größe der Kontrollvolumina.

numerische Diffusion

1.1.3 Nenne zwei weitere numerische Verfahren!

Antwort:

Finite-Differenzen-Methode, Finite-Elemente-Methode, etc

1.1.4 Schildere in wenigen Stichpunkten die Vorgehensweise bei der Anwendung der FVM!

Antwort:

- Aufstellen der Bilanzgleichungen und Kinetiken sowie der Formulierung von Anfangsbedingungen (AB) und Randbedingungen (RB)
- Unterteilung des Lösungsgebietes in finite Kontrollvolumen
- Formale Integration der PDE über die einzelnen Kontrollvolumen
- termweises Auswerten der Integrale durch Treffen von Profilannahmen; Annahmen zum örtlichen

Verlauf der gesuchten Größe innerhalb des betreffenden Volumens (z.B. stückweise konstant oder stückweise linear)

- Zusammenfassung der Terme und Behandlung der Randelemente unter Berücksichtigung der RB's

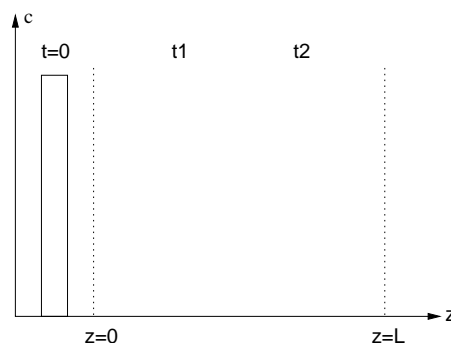
1.2 Gegeben ist folgende Gleichung zur Beschreibung der Konzentration eines Stoffes in der Flüssigphase während der chromatographischen Trennung in einem Rohr (siehe Übung 4):

Partielle Stoffmengenbilanz Flüssigphase:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial z} + D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - r_{AD/DE} \cdot a$$

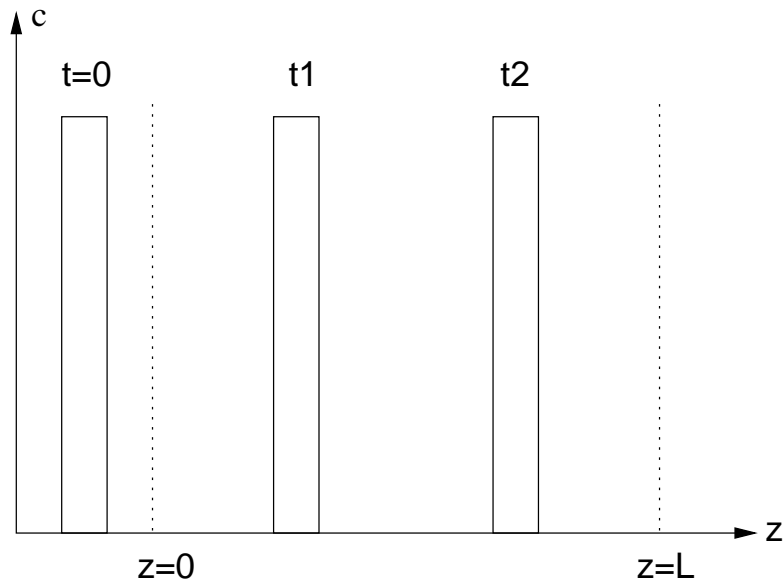
1.2.1 Angenommen, es wird ein rechteckiges Eingangssignal (siehe Skizze) auf dieses Rohr gegeben. Wie wird die Systemantwort für die unten beschriebenen Fälle (a)-(c) prinzipiell aussehen? Skizziere jeweils das Eingangssignal und Momentaufnahmen des Konzentrationsprofils zu zwei weiteren Zeitpunkten t_1 und t_2 für die folgenden Fälle (a)-(c). Fertige jeweils eine separate Skizze, wie beispielhaft in Abb.1 gezeigt, für die Fälle (a)-(c) an. Erläutere das Zustandekommen der gezeichneten Profile.

- (a) Adsorption tritt nicht auf und Diffusion ist vernachlässigbar.
- (b) Nur Diffusion spielt eine Rolle.
- (c) Sowohl Adsorption als auch Diffusion sind von Bedeutung.

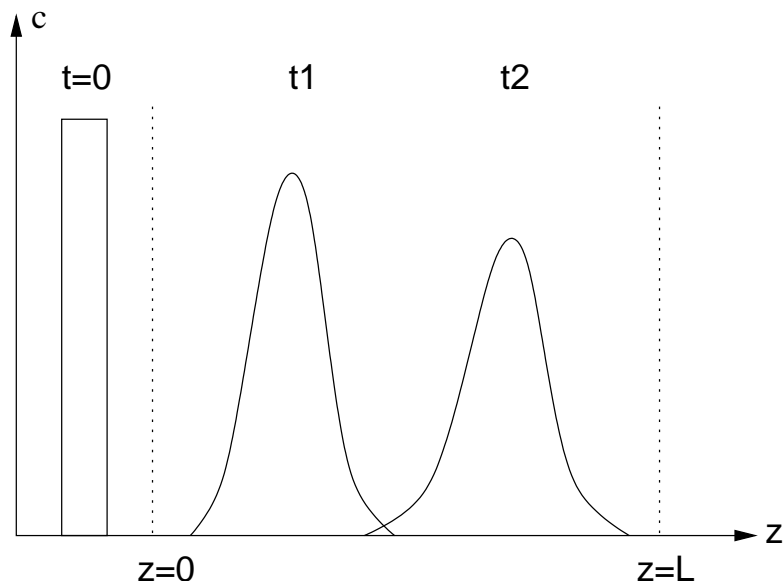


Antwort:

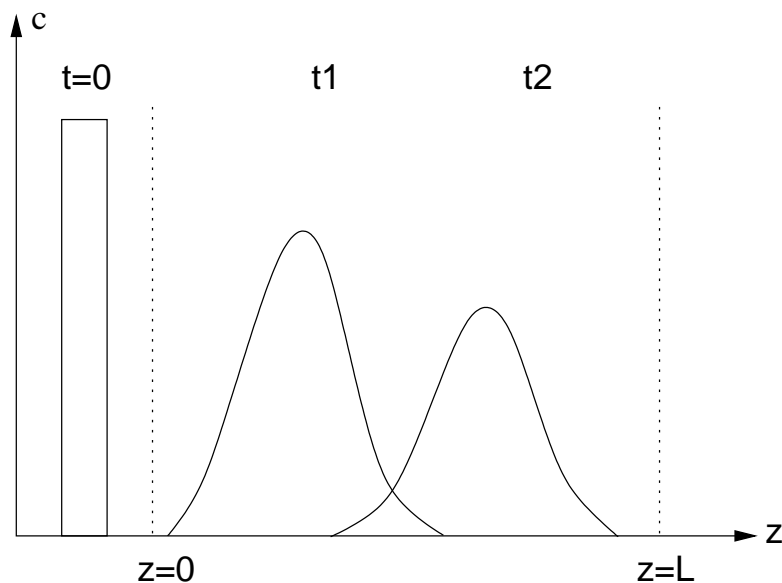
a) In einem Rohr, in welchem weder Adsorption noch Diffusion auftreten, wird der Stoff nur konvektiv durch das Rohr transportiert. Unter Annahme eines Kolbenströmungsprofils im Rohr (PFTR) wird das Eingangssignal nicht verändert, und der Stoß erreicht nach der Durchtrittszeit in unverfälschter Form das Ende des Rohres. Somit verhält sich dieses System als reines Totzeitglied. Die Totzeit gleicht dabei dem Quotienten aus Rohrlänge und Eluentengeschwindigkeit.



b) Diffusion bewirkt eine Veränderung des Stosssignals beim Durchlaufen des Rohres. Dieses wird in die Breite gezogen und nimmt bei einem idealen, also unendlich schmalen Stoß, die Form einer Normalverteilung an.



c) Das Hinzukommen von Adsorption bedeutet eine weitere Entfernung vom idealen Rohrreaktor, es bewirkt eine zusätzliche "Verschmierung" des Einsatzsignals. Somit wird das Antwortsignal noch breiter als bei Diffusion alleine. Hinzu kommt, dass die Adsorption eine Verlangsamung des Stofftransports bedeutet, wodurch das Ausgangssignal nochmals zusätzlich verzögert wird.



1.2.2 Angenommen, die partielle Stoffmengenbilanz der Flüssigphase wird für den Fall 1.2.1(a), Adsorption tritt nicht auf und Diffusion ist vernachlässigbar, numerisch mit Hilfe der Finite-Volumen-Methode gelöst. Vergleiche das zu erwartende Ergebnis mit dem aus 1.2.1(a).

Antwort:

In einem diskretisierten System tritt in Abhängigkeit von der Dichte des Diskretisierungsgitters sog. numerische Diffusion auf. In den Fällen (b) und (c) würde das Signal noch weiter in die Breite gezogen werden. Die numerische Diffusion und der „echte“ Diffusionsterm überlagern sich und bilden einen effektiven Diffusionskoeffizienten. Im Fall (a) würde das Eingangssignal nun auch in die Breite gezogen werden.

1.3 Maxwell-Stefan-Ansatz und Ficksche Diffusion

1.3.1 Was beschreibt der Maxwell-Stefan Ansatz (MS)?

Antwort:

Kräftegleichgewicht zwischen Triebkräften und Reibungskräften.

1.3.2 Warum beschreibt die MS Gleichung Diffusion im Allgemeinen besser als das Ficksche Gesetz?

Antwort:

- Berücksichtigung speziesspezifischer Wechselwirkungen in den Reibungskräften
- viel mehr Freiheitsgrade erlauben bessere Modellierung

1.3.3 Nenne zwei Nachteile einer Beschreibung mit Maxwell-Stefan!

Antwort:

- implizite Beschreibung der Partialmassenflüsse
- viel mehr Freiheitsgrade setzen viel mehr Wissen voraus

1.3.4 Gehe vom Maxwell-Stefan Ansatz aus. Es wird angenommen, dass ein Gradient des chemischen Potentials die einzige Triebkraft darstellt.

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

Zeige, dass für ein stark verdünntes binäres Gemisch der Maxwell-Stefan-Ansatz in den Fickschen Ansatz übergeht. Gehe davon aus, dass Komponente 1 ein Lösungsmittel und Komponente 2 einen stark verdünnten Gelöststoff repräsentieren.

Antwort:

Für ein stark verdünntes Gemisch sind die Aktivitätskoeffizienten eins. Damit ergibt sich für das chemische Potential

$$\mu_j = \mu_j^0 + RT \ln x_j$$

und damit für dessen örtliche Ableitung

$$\frac{\partial \mu_j}{\partial z_k} = \frac{RT}{x_j} \frac{\partial x_j}{\partial z_k}.$$

Dann erhalten wir:

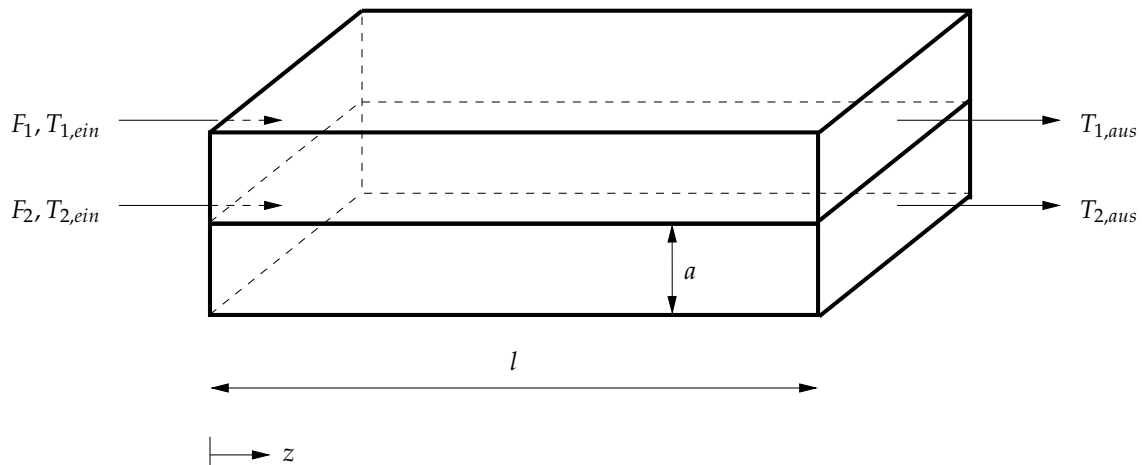
$$-\frac{\partial x_2}{\partial z_k} = \frac{x_1 J_{k,2} - x_2 J_{k,1}}{c_t \mathcal{D}_{21}}$$

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

$$J_{k,2} = -c_t \mathcal{D}_{21} \frac{\partial x_2}{\partial z_k},$$

was dem Diffusionsansatz nach Fick entspricht.

2. Aufgabe Diskretisierung und Implementierung in MatLab



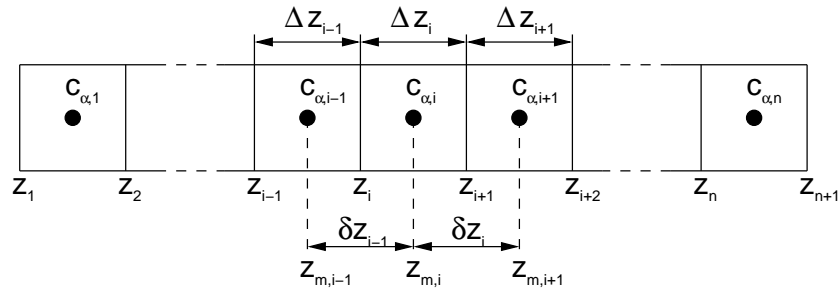
Der oben skizzierte Wärmeübertrager ist aus der ersten Projektübung (Aufgabe 3) bekannt. Vereinfachend wurde für die Modellierung angenommen, dass (a) die Strömungsgeschwindigkeiten, Dichten und Wärmekapazitäten der beiden Fluide konstant sind, (b) der Druck konstant ist, (c) Wärmeleitung in den Fluiden vernachlässigt werden kann, (d) die Wärmeübertragerwand sehr dünn ist (kann damit als speicherlos betrachtet werden) und (e) der Apparat keine Energie an die Umgebung verliert. Die resultierenden Gleichungen für die zeitliche und örtliche Änderung der Temperaturen (aus PÜ1 Aufgabe 3.3) für dieses Problem lauten:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial T_1}{\partial t} &= -v_1 \frac{\partial T_1}{\partial z} + \frac{1}{a} \frac{q_a}{(\rho c_p)_1} \\
 \frac{\partial T_2}{\partial t} &= -v_2 \frac{\partial T_2}{\partial z} - \frac{1}{a} \frac{q_a}{(\rho c_p)_2}
 \end{aligned}
 \quad
 \boxed{q_a = k(T_2 - T_1)}
 \quad
 (2.1)$$

$$\begin{aligned}
 \text{AB 1: } T_1(z, t=0) &= T_{1, \text{ein}} & \text{RB 1: } T_1(z=0, t) &= T_{1, \text{ein}} \\
 \text{AB 2: } T_2(z, t=0) &= T_{2, \text{ein}} & \text{RB 2: } T_2(z=0, t) &= T_{2, \text{ein}}
 \end{aligned}$$

2.1 Diskretisiere termweise die partielle Differentialgleichung zur Beschreibung von $T_1(z, t)$ für ein mittleres sowie für das erste und letzte Volumenelement. Benenne detailliert die für die Diskretisierung der einzelnen Terme notwendigen Annahmen und Rechenregeln. Verwende ein äquidistantes Gitter und fertige eine beschriftete Skizze an.

Hinweis: Die vollständig diskretisierten Gleichungen sind in Gleichung 2.2 angegeben. Die Punkte in Aufgabe 2.1 werden auf die Durchführung der einzelnen Teilschritte und die Verwendung der zugehörigen Annahmen vergeben. Für das Endergebnis gibt es keine Punkte. Eine ausführliche Dokumentation und vollständige Erläuterung der Schritte ist daher notwendig.



Antwort:

Ausgewertet werden nun die Integrale (Typ I-III) für ein inneres Kontrollvolumen aus. Es gelten folgende Abkürzungen:

1. Integration und Differentiation können vertauscht werden, da die Integration über ein ortsfestes Intervall $[z_i, z_{i+1}]$ ausgeführt wird (folgt aus Leibniz Regel).
2. Profilannahme: $T(z, t)$ ist konstant im Intervall $[z_i, z_{i+1}]$ und hat den Wert $T_i(t)$.
3. Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung.
4. Upwind Schema, d. h. $T(z_i, t) = T_{i-1}(t)$.
5. Im folgenden verwenden wir ein äquidistantes Gitter, d.h. $\Delta z_i = \delta z_i = \Delta z = \text{const}$.

$$\boxed{\frac{\partial T_1}{\partial t} = -v_1 \frac{\partial T_1}{\partial z} + \frac{1}{a(\rho c_p)_1} q_a}$$

Term: I II III

Auswertung Typ I, mittleres Element:

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial T_1}{\partial t} dz \stackrel{1.}{=} \frac{d}{dt} \int_{z_i}^{z_{i+1}} T_1 dz \stackrel{2.}{=} \frac{dT_{1,i}}{dt} \int_{z_i}^{z_{i+1}} dz = \frac{dT_{1,i}}{dt} \Delta z_i \stackrel{5.}{=} \frac{dT_{1,i}}{dt} \Delta z$$

Auswertung Typ II, mittleres Element:

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} -v_1 \frac{\partial T_1}{\partial z} dz \stackrel{v_1 = \text{const}}{=} -v_1 \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial T_1}{\partial z} dz \stackrel{3.}{=} -v_1 [T_1]_{z_i}^{z_{i+1}} \stackrel{2., 4.}{=} -v_1 (T_{1,i} - T_{1,i-1})$$

Auswertung Typ III, mittleres Element:

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{1}{a(\rho c_p)_1} q_a dz \stackrel{a, (\rho c_p)_1 = \text{const}}{=} \frac{1}{a(\rho c_p)_1} \int_{z_i}^{z_{i+1}} q_a dz$$

mit $q_a = f(T_1, T_2)$ und Annahme 2 folgt konstantes Profil für Wärmeaustauschterm

$$\frac{1}{a(\rho c_p)_1} \int_{z_i}^{z_{i+1}} q_a dz \stackrel{2.}{=} \frac{q_{a,i}}{a(\rho c_p)_1} \int_{z_i}^{z_{i+1}} dz \stackrel{5.}{=} \frac{q_{a,i}}{a(\rho c_p)_1} \Delta z$$

Dann erhält man die diskretisierten Gleichungen für ein mittleres Element

$$\boxed{\frac{dT_{1,i}}{dt} = -v_1 \left(\frac{T_{1,i} - T_{1,i-1}}{\Delta z} \right) + \frac{q_{a,i}}{a(\rho c_p)_1}}$$

Auswertung Typ I, erstes Element:

$$\int_{z_1}^{z_2} \frac{\partial T_1}{\partial t} dz \stackrel{1.}{=} \frac{d}{dt} \int_{z_1}^{z_2} T_1 dz \stackrel{2.}{=} \frac{dT_{1,1}}{dt} \int_{z_1}^{z_2} dz = \frac{dT_{1,1}}{dt} \Delta z_1 \stackrel{5.}{=} \frac{dT_{1,1}}{dt} \Delta z$$

Auswertung Typ II, erstes Element:

$$\int_{z_1}^{z_2} -v_1 \frac{\partial T_1}{\partial z} dz \stackrel{v_1=\text{const}}{=} -v_1 \int_{z_1}^{z_2} \frac{\partial T_1}{\partial z} dz \stackrel{3.}{=} -v_1 [T_1]_{z_1}^{z_2} \stackrel{2., 4., \text{RB1}}{=} -v_1 (T_{1,1} - T_{1,\text{ein}})$$

Auswertung Typ III, erstes Element:

$$\int_{z_1}^{z_2} \frac{1}{a(\rho c_p)_1} q_a dz \stackrel{a, (\rho c_p)_1=\text{const}}{=} \frac{1}{a(\rho c_p)_1} \int_{z_1}^{z_2} q_a dz \stackrel{2.}{=} \frac{q_{a,1}}{a(\rho c_p)_1} \int_{z_1}^{z_2} dz \stackrel{5.}{=} \frac{q_{a,1}}{a(\rho c_p)_1} \Delta z$$

Dann erhält man die diskretisierten Gleichungen für das erste Element

$$\boxed{\frac{dT_{1,1}}{dt} = -v_1 \left(\frac{T_{1,1} - T_{1,\text{ein}}}{\Delta z} \right) + \frac{q_{a,1}}{a(\rho c_p)_1}}$$

Auswertung Typ I, letztes Element:

$$\int_{z_1}^{z_2} \frac{\partial T_1}{\partial t} dz \stackrel{1.}{=} \frac{d}{dt} \int_{z_n}^{z_{n+1}} T_1 dz \stackrel{2.}{=} \frac{dT_{1,n}}{dt} \int_{z_n}^{z_{n+1}} dz = \frac{dT_{1,n}}{dt} \Delta z_n \stackrel{5.}{=} \frac{dT_{1,n}}{dt} \Delta z$$

Auswertung Typ II, letztes Element:

$$\int_{z_n}^{z_{n+1}} -v_1 \frac{\partial T_1}{\partial z} dz \stackrel{v_1=\text{const}}{=} -v_1 \int_{z_n}^{z_{n+1}} \frac{\partial T_1}{\partial z} dz \stackrel{3.}{=} -v_1 [T_1]_{z_n}^{z_{n+1}} \stackrel{2., 4.}{=} -v_1 (T_{1,n} - T_{1,n-1})$$

Auswertung Typ III, letztes Element:

$$\int_{z_n}^{z_{n+1}} \frac{1}{a(\rho c_p)_1} q_a dz \stackrel{a, (\rho c_p)_1=\text{const}}{=} \frac{1}{a(\rho c_p)_1} \int_{z_n}^{z_{n+1}} q_a dz \stackrel{2.}{=} \frac{q_{a,n}}{a(\rho c_p)_1} \int_{z_n}^{z_{n+1}} dz \stackrel{5.}{=} \frac{q_{a,n}}{a(\rho c_p)_1} \Delta z$$

Dann erhält man die diskretisierten Gleichungen für das erste Element

$$\boxed{\frac{dT_{1,n}}{dt} = -v_1 \left(\frac{T_{1,n} - T_{1,n-1}}{\Delta z} \right) + \frac{q_{a,n}}{a(\rho c_p)_1}}$$

2.2 Implementierung in MatLab

2.2.1 Implementiere das erhaltene System gewöhnlicher Differentialgleichungen in MatLab. Nutze aussagekräftige Variablenbezeichnungen und kommentiere hinreichend.

Antwort:

siehe MatLab-Code

2.2.2 Löse das Gleichungssystem unter Verwendung der gegebenen Größen auf einer geeigneten Zeitskala (Integrationszeit und Auflösung der Zeitachse).

Antwort:

Zeitskala etwa 10-100 Sekunden, logarithmische Achse für Kurzzeitverhalten

2.3 Auswertung und Analyse

2.3.1 Stelle das transiente Verhalten von $T_1(z,t)$ und $T_2(z,t)$ nahe des Eintritts (im ersten Volumenelement), in der Mitte (mittleres Volumenelement) und am Austritt (letztes Volumenelement) des Wärmeübertragers graphisch dar. Beschrifte die Achsen entsprechend.

Antwort:

MatLab: Bild 1-3

2.3.2 Stelle die stationären Temperaturprofile, $T_1(z, t \rightarrow \infty)$ und $T_2(z, t \rightarrow \infty)$, graphisch dar und bestimme die Austrittstemperaturen der beiden Fluide. Beschrifte die Achsen entsprechend.

Antwort:

MatLab: Bild 4

$$T_{2,L} = 320.9183 \text{ K}, \quad T_{1,L} = 324.3521 \text{ K}$$

2.3.3 Stelle das stationäre Ortsprofil der Wärmestromdichte $q_a(z, t \rightarrow \infty)$ graphisch dar.

Antwort:

MatLab: Bild 5

2.3.4 Betrachte den in Aufgabenteil 2.3.1 erhaltenen transienten Verlauf der Temperaturen am Austritt. Erläutere, warum die Temperatur T_2 über schwingt! Durch Anpassen welches Parameters lässt sich das Überspringen verhindern?

Antwort:

Unterschiedliche Geschwindigkeiten -> Geschwindigkeiten anpassen $v_1=v_2$;

2.4 Der Wärmeübertrager soll nun im Gegenstrom betrieben werden. Hierzu sei $v_2 = -0.4 \text{ m/s}$.

2.4.1 Warum kann das zuvor in Aufgabe 2.1 aufgestellte System aus Differentialgleichungen nicht zur Lösung des Problems verwendet werden (MatLab bricht die Berechnung ab)? Welche Änderungen müssen an dem diskretisierten Gleichungssystem und den Randbedingungen vorgenommen werden?

Antwort:

Upwind-Schema nur für $v>0$ und entsprechend andere Profilannahme notwendig.

Nun Berechnung von hinten nach vorne notwendig.

$$\frac{dT_{2,n}}{dt} = -v_2 \left(\frac{T_{2,\text{ein}} - T_{2,n}}{\Delta z} \right) - \frac{q_{a,n}}{a(\rho c_p)_2}$$

$$\frac{dT_{2,i}}{dt} = -v_2 \left(\frac{T_{2,i+1} - T_{2,i}}{\Delta z} \right) - \frac{q_{a,i}}{a(\rho c_p)_2}$$

$$\frac{dT_{2,1}}{dt} = -v_2 \left(\frac{T_{2,2} - T_{2,1}}{\Delta z} \right) - \frac{q_{a,1}}{a(\rho c_p)_2}$$

2.4.2 Implementiere die Änderungen, die am Gleichungssystem vorgenommen werden müssen, falls der Wärmeübertrager im Gegenstrom betrieben werden soll. Berechne die stationären Ortsprofile der Temperaturen, $T_1(z, t \rightarrow \infty)$ und $T_2(z, t \rightarrow \infty)$, sowie das stationäre Ortsprofil der Wärmestromdichte $q_a(z, t \rightarrow \infty)$ mit der neuen Geschwindigkeit $v_2 = -0,4$ m/s. Stelle die Ergebnisse graphisch dar.

Antwort:

MatLab-Code und Bilder 6 und 7

2.4.3 Bei welcher Betriebsweise wird mehr Wärme ausgetauscht? Nenne jeweils eine Anwendung oder ein Vorteil/Nachteil für die jeweilige Betriebsweise.

Antwort:

q_a betragsmässig größer für Gegenstrom.

Vorteil Gegenstrom:

Mehr Wärme wird übertragen. Die Temperatur des ursprünglich kälteren Mediums ist am Auslass ($z=0$) größer als Austrittstemperatur des ursprünglich wärmeren Mediums. Bei Gleichstrom ist dies nicht möglich

Vorteil Gleichstrom:

Schnellere Abkühlung des wärmeren Mediums

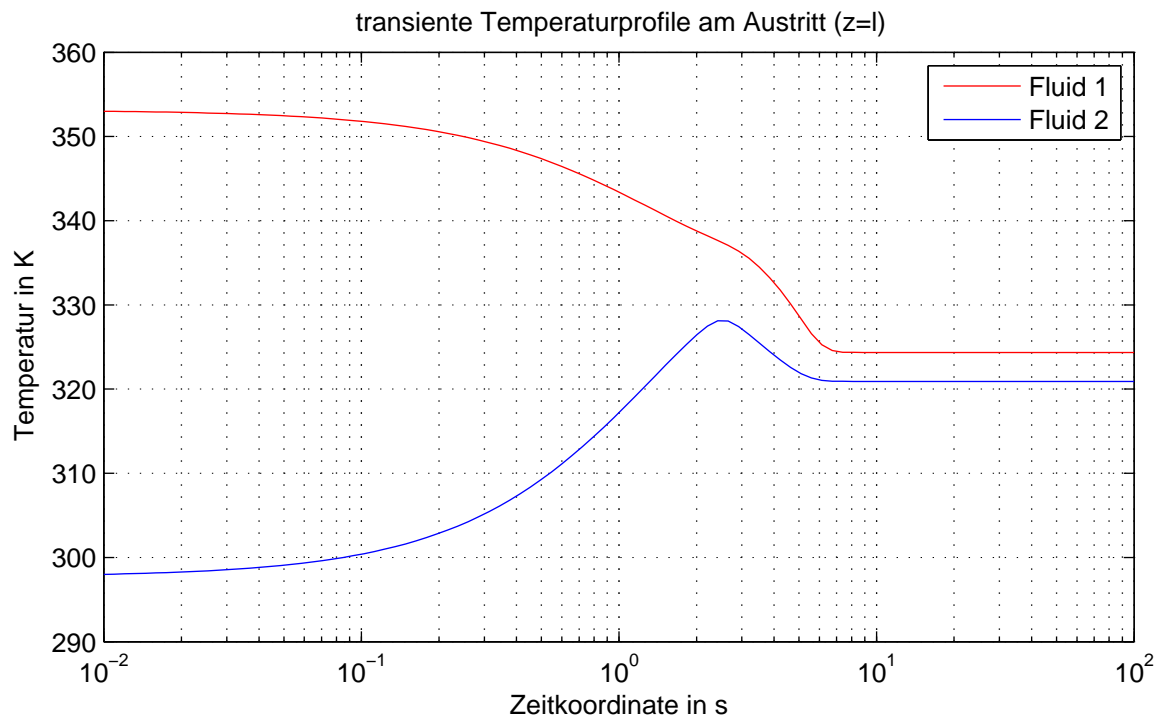


Figure1: zu Teil 2.3.1

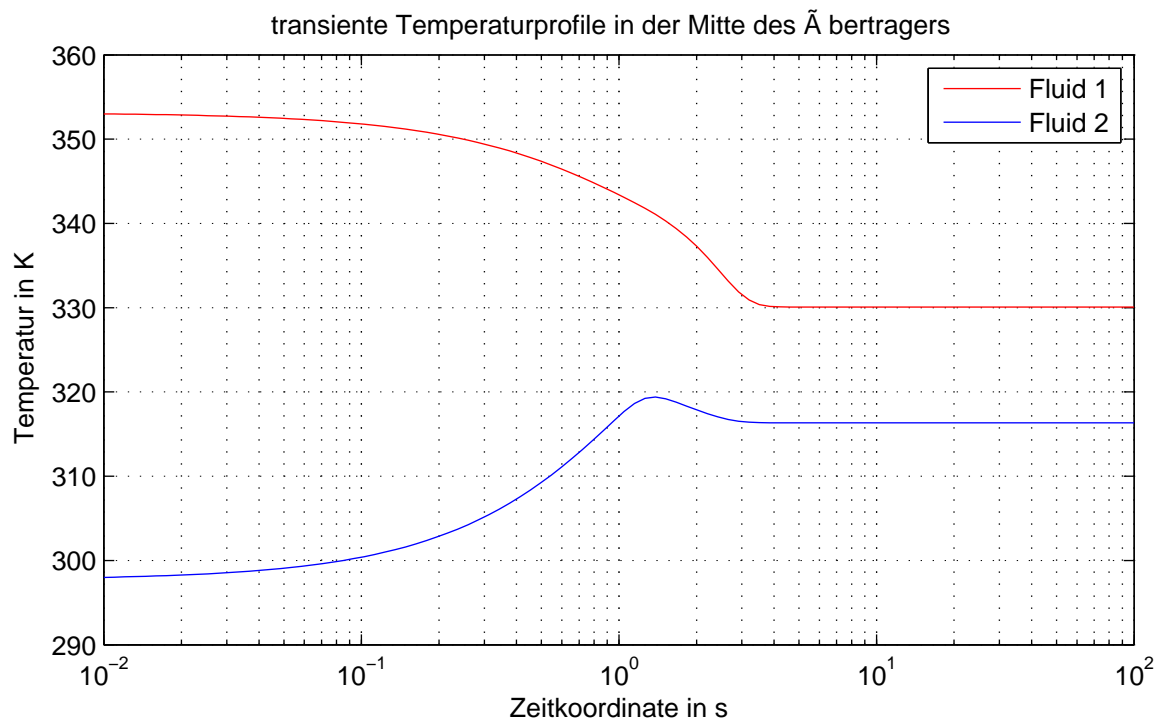


Figure2: zu Teil 2.3.1

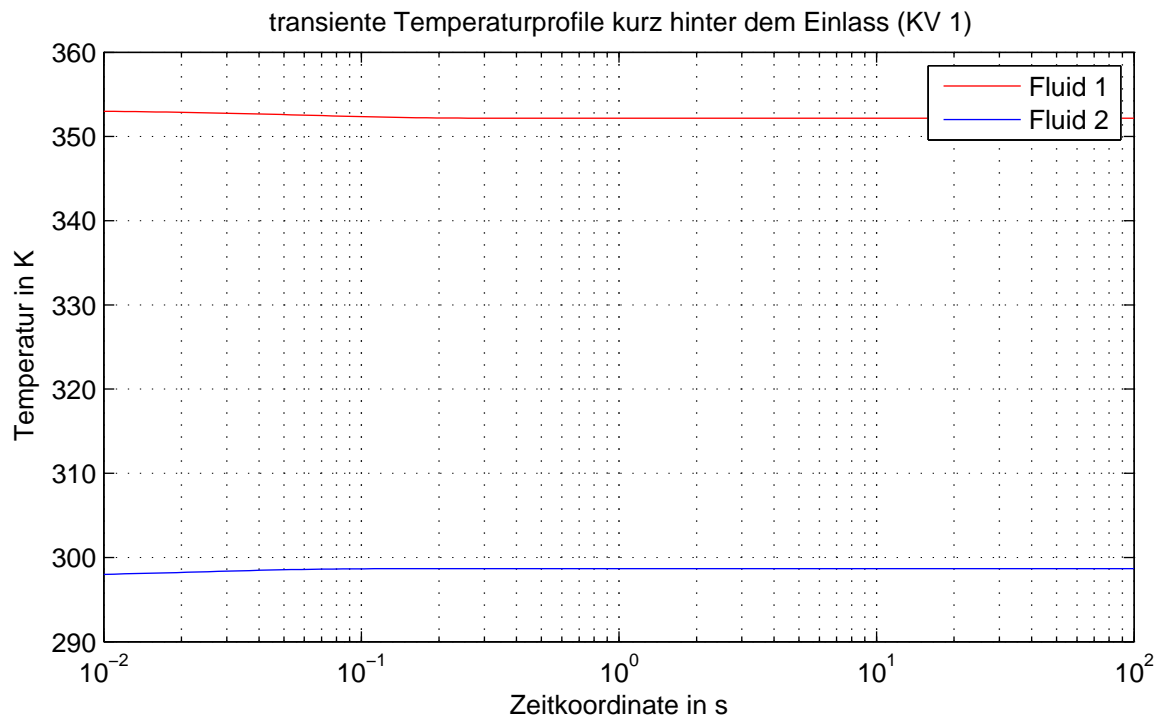


Figure3: zu Teil 2.3.1

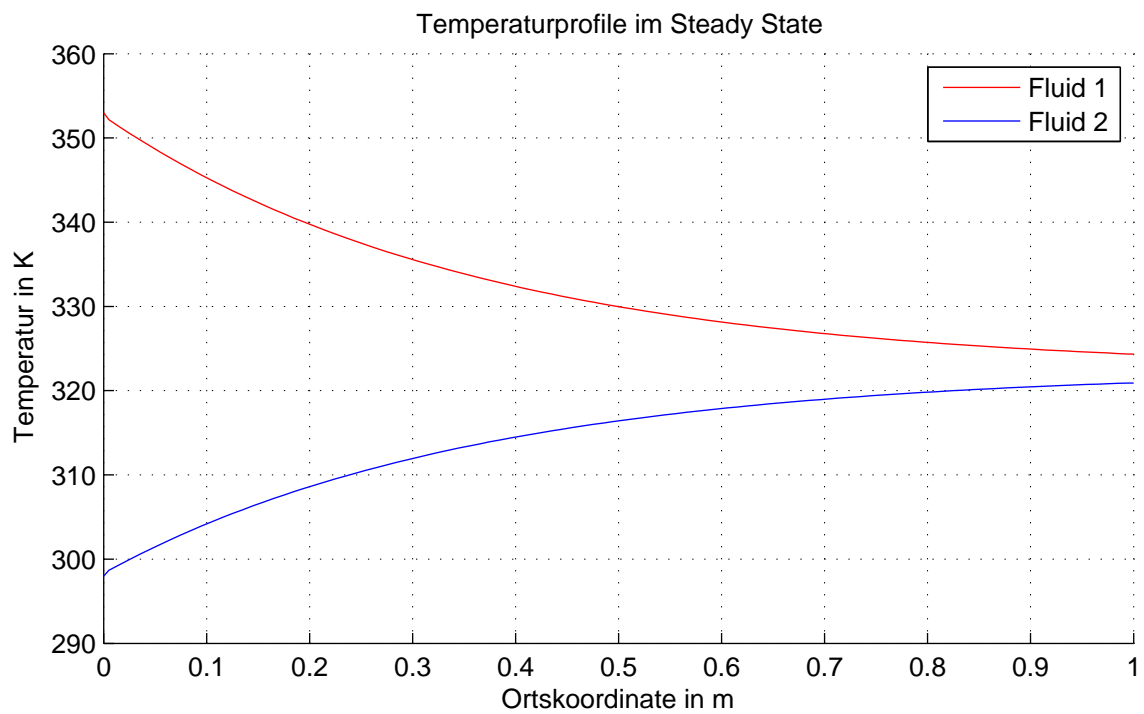


Figure4: zu Teil 2.3.2

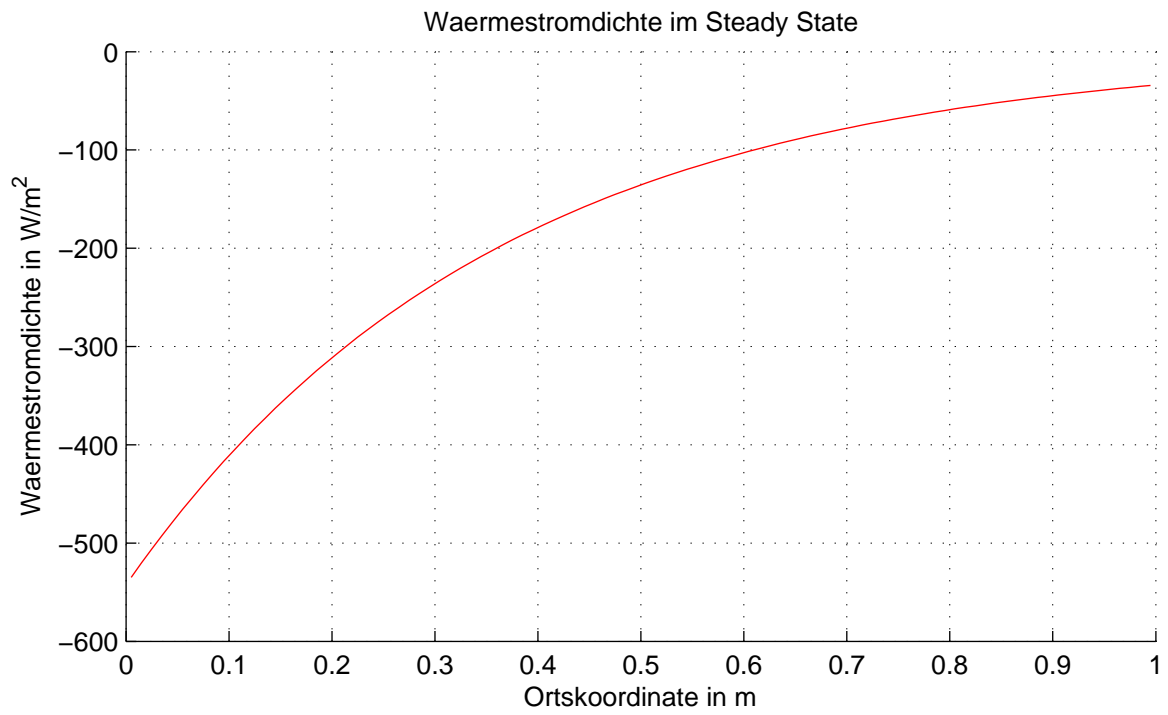


Figure5: zu Teil 2.3.3

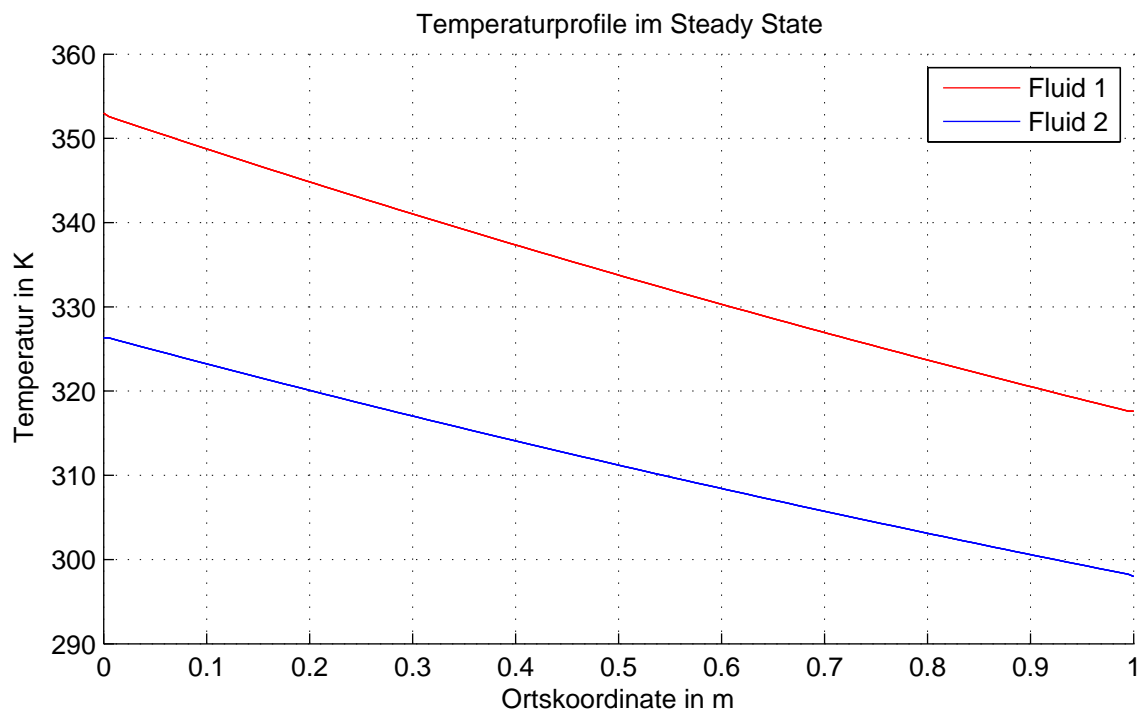


Figure6: zu Teil 2.4.2

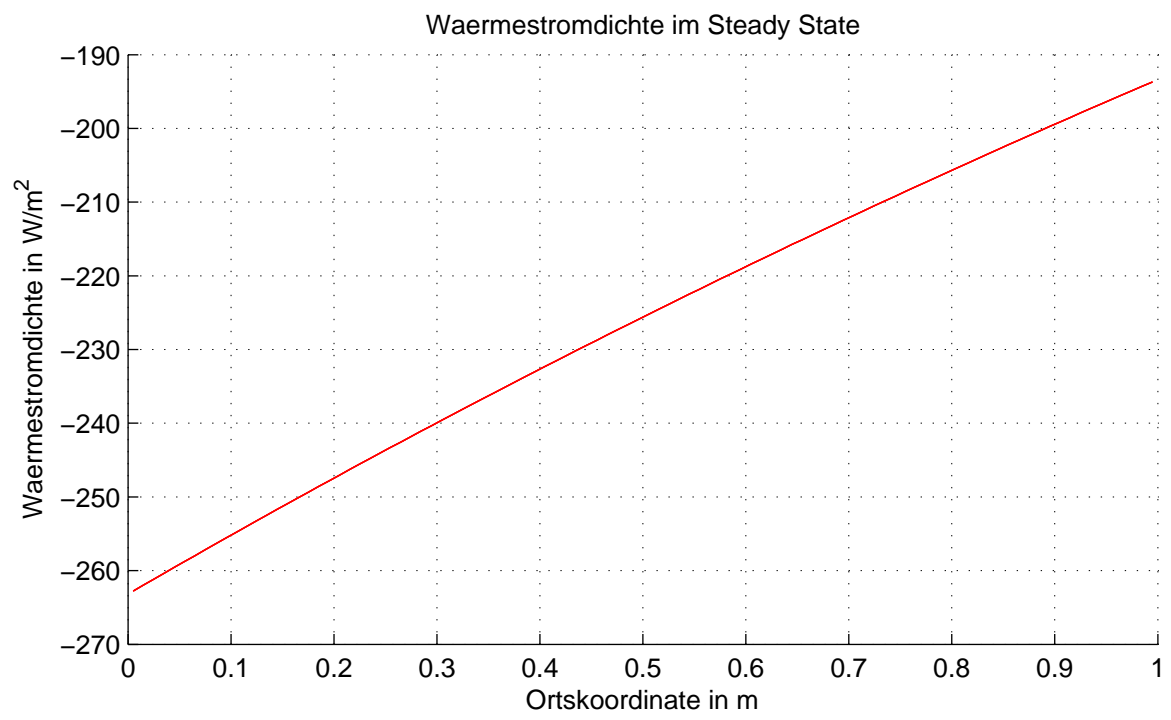


Figure7: zu Teil 2.4.2