

Systemverfahrenstechnik

2. Projektübung

Katharina Holstein,
STK 03

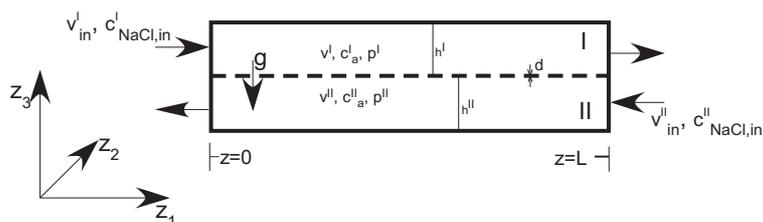
Vorüberlegung

In dieser Aufgabe wird eine Methode zur Meerwasserentsalzung vorgestellt. Mit diesem Verfahren wird, neben anderen auch, Trinkwasser mit Hilfe des osmotischen Effektes gewonnen. Hierzu kann man einige Vorüberlegungen zum besseren Verständnis der Aufgabe anstellen. Der allgemeine osmotische Effekt kann durch Vorwissen, aus der Schule zum Beispiel, erklärt werden. Die Osmose ist eine Spezialform der Diffusion. Sie beschreibt die einseitig gerichtete „Wanderung“ einer Lösung/eines Lösungsmittels durch eine semipermeable Membran. Die Membran ist im Idealfall nur für dieses Lösungsmittel (im Allgemeinen für Wasser und einige lösliche Substanzen (Salze)) durchlässig, andere gelöste Stoffe und Teilchen (Schmutzpartikel, usw.) können diese Membran nicht passieren. Das Lösungsmittel diffundiert vom Ort niedriger Konzentration zum Ort höherer Konzentration. Ein allgemeines Beispiel für dieses Prinzip wäre die Wasseraufnahme der Pflanze in die Wurzeln. Hier diffundiert Wasser aus dem „niedrigkonzentrierten“ Erdreich in die höher konzentrierten Zellen der Wurzeln. Durch das Einströmen eines Lösungsmittels gleichen sich die Konzentrationen der beiden getrennten Bereiche an, bis es nach endlicher Zeit zu einem Konzentrationsausgleich kommt. Während des Vorgangs der Osmose nimmt das Konzentrationsgefälle der beiden getrennten Bereiche ab. Die Intensität der Osmose ist nun abhängig vom Konzentrationsgefälle. Diese Intensität wird auch als osmotischer Druck beschrieben.

In dieser Aufgabe sind diese getrennten Bereiche zwei mit einer Membran verbundenen Rohre. Diese Rohre werden im Gegenstromprinzip von Meerwasser durchflossen. Somit herrscht in beiden Rohren die gleiche Konzentration und es würde an dieser Stelle kein Stoffaustausch stattfinden, oder nur in geringem Maße wobei die Konzentration konstant bleiben würde. Der osmotische Druck ist somit gleich. Damit es zu einem Stofftransport kommt, wird nun das obere Rohr unter höheren Druck gesetzt um den osmotischen Druck zu überwinden. Idealerweise würde nur Wasser durch die Membran gelangen, wir gehen aber in dieser Aufgabe davon aus, dass auch Salz mit durch die Membran wandern kann, wie es sicherlich auch im realen Prozess sein wird. Je weiter der Prozess fortgeschritten ist, desto höher steigt der osmotische Druck auf Grund des wachsenden Konzentrationsgefälles, bis irgendwann der auf das obere Rohr aufgeführte Druck nicht mehr ausreichen würde um diesen zu überwinden. Dies wird vermieden, indem beide Lösungen im Gegenstromprinzip in das Rohr hinein- und abgeführt werden. Gegenstromprinzip, da sonst der momentane Konzentrationsunterschied einfach durch das Rohr weiterwandern würde. Somit ist zu erwarten, dass im unteren Rohr am Ende Wasser mit einer sehr geringen Konzentration an Salz (evtl. sogar Trinkwasser) und im oberen Rohr Wasser mit einer höheren Konzentration an Salz als das zugeführte Meerwasser vorliegen bzw. ausströmen wird. Mittels dieser Vorüberlegungen wird nun an das eigentliche Aufgabensystem herangegangen.

Aufgabenteil

Zur Veranschaulichung des Sachverhaltes folgt an dieser Stelle die Skizze des Rohres.



Aufgabe 1

- 1.) Hergeleitet werden sollen die Bilanzen für die örtliche Verteilung der Konzentration in beiden Rohren. Hierzu wird zunächst nur vom Rohr I ausgegangen um dann zum Schluss diese Bilanz auch auf das Rohr II zu übertragen. Beide Rohre werden in die z_3 Richtung als ideal durchmischt angenommen. Dabei ist im oberen Rohr an der Membran $z_3 = 0$ und am oberen Rand $z_3 = h$. Im unteren Rohr ist am unteren Rand $z_3 = 0$ und an der Membran $z_3 = h$. Zur Bestimmung der Konzentrationsbilanz der Komponente α im Rohr I wird von der Massenänderung der Komponente im Volumen \mathcal{V} ausgegangen:

$$\frac{dm_\alpha}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\int_{\mathcal{V}} \rho_\alpha dV \right) = \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} dV \quad (1)$$

Aus der nun erhaltenen integralen Massenbilanz wird im Folgenden die partielle Massenbilanz gebildet:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} dV &= \underbrace{- \int_{\mathcal{A}} \rho_\alpha v_k n_k dA}_{\text{Zu-/Abfluss}} + \underbrace{\int_{\mathcal{V}} \sigma_\alpha dV}_{\text{Quellen/Senken}} \\ &= - \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial z_k} (\rho_\alpha v_k) dV + \int_{\mathcal{V}} \sigma_\alpha dV \end{aligned}$$

Umstellen liefert somit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} &= - \frac{\partial}{\partial z_k} (\rho_\alpha v_k) + \sigma_\alpha \\ &= - \frac{\partial}{\partial z_k} (\rho_\alpha v + \tilde{j}_{k,\alpha}) + \sigma_\alpha \end{aligned} \quad (2)$$

Hier beschreibt $\rho_\alpha v$ den konvektiven Massenstrom und $\tilde{j}_{k,\alpha}$ den diffusiven Massenstrom. Das σ_α wird im allgemeinen mittels Kinetiken beschrieben und wird an dieser Stelle Null gesetzt, da es weder Quellen noch Senken von Reaktionen in diesem Reaktor gibt. Die Gleichung (2) wird nun durch molarer Größen beschrieben:

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial z_k} (c_\alpha v + c_\alpha \tilde{j}_{k,\alpha}) \quad (3)$$

An dieser Stelle wurden folgende Umformungen vorgenommen:

$$\rho_\alpha = M_\alpha c_\alpha, \quad \tilde{j}_{k,\alpha} = M_\alpha J_{k,\alpha} = M_\alpha c_\alpha \dot{j}_{k,\alpha}$$

Das M_α ist die zeitlich und örtlich konstante Molmasse der Komponente α . Sie kann somit aus dem Differential rausgeschrieben und gekürzt werden.

Nun werden die für die Divergenz $\frac{\partial}{\partial z_k}$ relevanten Terme einzeln betrachtet:

- $\frac{\partial}{\partial z_1} (c_\alpha v)$ existiert nur in z_1 Richtung, da in den anderen Richtungen keine Konvektion vorliegt.
- $\frac{\partial}{\partial z_1} (c_\alpha \dot{j}_{k,\alpha})$ existiert auch nur in z_1 Richtung, ist aber nur $\neq 0$ an der Stelle $z_3 = 0$.
- $\frac{\partial}{\partial z_3} (c_\alpha \dot{j}_{k,\alpha})$ existiert nur in z_3 Richtung. Allerdings ist dieser Gradient nicht bestimmbar. Er wird daher $c_\alpha \dot{j}_{k,\alpha} = g$ gesetzt.

Auf die Integration über z_2 wird hier nicht eingegangen, da in diese Richtung nichts passiert.

Die Integration über z_3 von 0 bis h^I (vereinfacht als h ausgedrückt, da $h^I = h^{II}$) sieht nun für die molare Bilanz wie folgt aus:

$$\begin{aligned}
\int_0^h \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} dz_3 &= \int_0^h \left(-\frac{\partial}{\partial z_1} (c_\alpha^I v) - \frac{\partial}{\partial z_1} (c_\alpha^I j_{1,\alpha}) - \frac{\partial}{\partial z_3} (c_\alpha^I v) \right) dz_3 \\
\frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} h &= -\left(\frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^I v \cdot h - \frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^I v \cdot 0 \right) - \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^I j_\alpha \cdot h - \frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^I j_\alpha \cdot 0 \right)}_0 - \underbrace{\left(c_\alpha^I j_\alpha(h) - c_\alpha^I j_\alpha(0) \right)}_{0 - (-g_\alpha)} \\
\frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^I v - \frac{g_\alpha}{h}
\end{aligned} \tag{4}$$

Nun kann die Gleichung (4) für den Bilanzraum II betrachtet werden. Im zweiten Bilanzraum würde die Herleitung auf dem selben Wege erfolgen. Nur ist dieses Mal $c_\alpha^{II} j_\alpha(h) = -g_\alpha$ und $-c_\alpha^{II} j_\alpha(0) = 0$. Da die Geschwindigkeit des Fluides im Rohr II entgegengesetzt der Geschwindigkeit dessen im Rohr I ist, muss das Vorzeichen beim konvektiven Strom umgedreht werden. Somit ergibt sich für das Rohr II die Gleichung:

$$\frac{\partial c_\alpha^{II}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^{II} v + \frac{g_\alpha}{h} \tag{5}$$

- 2.) Schaut man sich diese Gleichung nun genauer an, so fällt auf, dass die Geschwindigkeit v bisher nicht weiter definiert wurde. Diese ist über das gesamte System nicht konstant und muss daher einzeln hergeleitet werden. Hierfür betrachten wir folgende Gleichung:

$$V = \sum_\alpha n_\alpha \nu_\alpha^m$$

An dieser Stelle ist ν_α^m das molare Volumen der Komponente α , welches über das gesamte System zeitlich und örtlich konstant ist. Dieses wird mit ν anstatt eines kleinen v 's bezeichnet, um in der weiteren Darstellung der Formeln diese beiden besser unterscheiden zu können. Durch Division durch V kann diese Schließbedingung in intensive Größen umgeformt werden:

$$1 = \sum_\alpha \frac{n_\alpha}{V} \nu_\alpha^m = \sum_\alpha c_\alpha \nu_\alpha^m \tag{6}$$

Diese Gleichung kann nun nach ∂t und ∂z differenziert werden:

(a)

$$0 = \frac{\partial \left(\sum_\alpha c_\alpha \nu_\alpha^m \right)}{\partial z} = \sum_\alpha \underbrace{\left(c_\alpha \frac{\partial \nu_\alpha^m}{\partial z} + \nu_\alpha^m \frac{\partial c_\alpha}{\partial z} \right)}_0 = \sum_\alpha \nu_\alpha^m \frac{\partial c_\alpha}{\partial z}$$

(b)

$$0 = \frac{\partial \left(\sum_\alpha c_\alpha \nu_\alpha^m \right)}{\partial t} = \sum_\alpha \underbrace{\left(c_\alpha \frac{\partial \nu_\alpha^m}{\partial t} + \nu_\alpha^m \frac{\partial c_\alpha}{\partial t} \right)}_0 = \sum_\alpha \nu_\alpha^m \frac{\partial c_\alpha}{\partial t}$$

Nun kann man für $\frac{\partial c_\alpha}{\partial t}$ die Gleichung (4) einsetzen (wiederrum wird vorerst nur der Bilanzraum I betrachtet):

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{\partial c_{\alpha}^I}{\partial t} = \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \left(-\frac{\partial}{\partial z_1} c_{\alpha}^I v - \frac{g_{\alpha}}{h} \right) \\
&= \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \left(-c_{\alpha}^I \frac{\partial v}{\partial z_1} - v \frac{\partial c_{\alpha}^I}{\partial z_1} - \frac{g_{\alpha}}{h} \right) = -\sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m c_{\alpha}^I \frac{\partial v}{\partial z_1} - \underbrace{\sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m v \frac{\partial c_{\alpha}^I}{\partial z_1}}_{0 \text{ wegen (a)}} - \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h} \\
\frac{\partial v}{\partial z_1} &= -\frac{\sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h}}{\sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m c_{\alpha}^I} = -\sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h} \quad \text{wegen Gleichung (6)} \tag{7}
\end{aligned}$$

Für den Bilanzraum II sieht die Umformung so ähnlich aus und liefert am Ende das gleiche Ergebnis:

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{\partial c_{\alpha}^{II}}{\partial t} = \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \left(\frac{\partial}{\partial z_1} c_{\alpha}^{II} v + \frac{g_{\alpha}}{h} \right) \\
&= \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m c_{\alpha}^{II} \frac{\partial v}{\partial z_1} + \underbrace{\sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m v \frac{\partial c_{\alpha}^{II}}{\partial z_1}}_{0 \text{ wegen (a)}} + \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h} \\
\frac{\partial v}{\partial z_1} &= -\sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h}
\end{aligned}$$

Durch diese Schließbedingung kann man, wenn eine Konzentration gegeben ist, die andere Konzentration berechnen. So ist in der vorliegenden Aufgabe die Eingangskonzentration des Salzes gegeben und man kann die Eingangskonzentration des Wassers berechnen:

$$c_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{1 - c_{\text{NaCl}} \nu_{\text{NaCl}}^m}{\nu_{\text{H}_2\text{O}}^m} = 5.5092 \cdot 10^4 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

- 3.) Weiterhin ist auch das g_{α} nicht explizit gegeben und muss noch berechnet werden. Dabei wird von folgendem Ansatz ausgegangen:

$$J_{\alpha} = c_{\alpha} j_{\alpha} = g_{\alpha}$$

Da das j_{α} die Massendiffusionsstromdichte darstellt und im Allgemeinen über den Fick'schen Ansatz oder mittels Maxwell-Stefan beschrieben wird, muss auch g_{α} damit zusammenhängen. Aus der Vorlesung ist der Zusammenhang $g_{\alpha} = u_{\alpha} \cdot c_{\alpha}$ bekannt. Da es sich hierbei um eine Membran handelt und die Fläche der Durchströmung von der Porosität abhängt, wird die Gleichung erweitert:

$$g_{\alpha} = u_{\alpha} \cdot \varepsilon \cdot c_{\alpha}$$

Für das c_{α} kann hier vereinfacht angenommen werden, dass:

$$c_{\alpha} = \frac{c_{\alpha}^{II} + c_{\alpha}^I}{2}$$

u ist die Geschwindigkeit der Teilchen und kann aus dem gegebenen Maxwell-Stefan-Ansatz berechnet werden.

$$u_{\alpha} = \frac{D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_{\alpha}^m \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)_{v,T} - \left(\frac{\partial \mu_{\alpha}}{\partial z} \right)_{p,T} \right)$$

Nachdem diese Gleichung nun umgestellt wurde, wird aus diesem kontinuierlichen Ansatz ein diskreter Ansatz formuliert. Es wird über die Dicke der Membran integriert, diese geht von 0 bis d :

$$\begin{aligned} \int_0^d u_\alpha dz_3 &= \int_0^d \frac{D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_\alpha^m \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)_{v,T} - \left(\frac{\partial \mu_\alpha}{\partial z} \right)_{p,T} \right) dz_3 \\ u_\alpha d &= \frac{D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_\alpha^m [p]_0^d - [\mu_\alpha]_0^d \right) \\ &= \frac{D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_\alpha^m (p^{\text{II}} - p^{\text{I}}) - (\mu_\alpha^{\text{II}} - \mu_\alpha^{\text{I}}) \right) \\ u_\alpha &= \frac{D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_\alpha^m \left(\frac{p^{\text{II}} - p^{\text{I}}}{d} \right) - \left(\frac{\mu_\alpha^{\text{II}} - \mu_\alpha^{\text{I}}}{d} \right) \right) \end{aligned}$$

Hierbei ist $\mu_\alpha = \mu_\alpha^\ominus + RT \ln x$ und $x = c_\alpha / \sum_\alpha c_\alpha$. Setzt man diese Gleichung nun in u_α ein, so heben sich die μ_α^\ominus auf und das RT wird ausgeklammert:

$$\mu_\alpha^{\text{II}} - \mu_\alpha^{\text{I}} = -RT \ln \left(\frac{c_\alpha^{\text{I}} c_t^{\text{II}}}{c_\alpha^{\text{II}} c_t^{\text{I}}} \right)$$

Hier wird vereinfacht $c_t = \sum_\alpha c_\alpha$ geschrieben. Somit kann folgendes formuliert werden:

$$u_\alpha = \frac{D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_\alpha^m \left(\frac{p^{\text{II}} - p^{\text{I}}}{d} \right) + \frac{RT}{d} \ln \left(\frac{c_\alpha^{\text{I}} c_t^{\text{II}}}{c_\alpha^{\text{II}} c_t^{\text{I}}} \right) \right) \quad (8)$$

Nach dieser Diskretisierung kann das u_α in das g_α eingesetzt werden:

$$g_\alpha = \frac{\varepsilon c_\alpha D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_\alpha^m \left(\frac{p^{\text{II}} - p^{\text{I}}}{d} \right) + \frac{RT}{d} \ln \left(\frac{c_\alpha^{\text{I}} c_t^{\text{II}}}{c_\alpha^{\text{II}} c_t^{\text{I}}} \right) \right) \quad (9)$$

4.) Zusammengefasst erhält man an dieser Stelle nun folgendes System von Gleichungen:

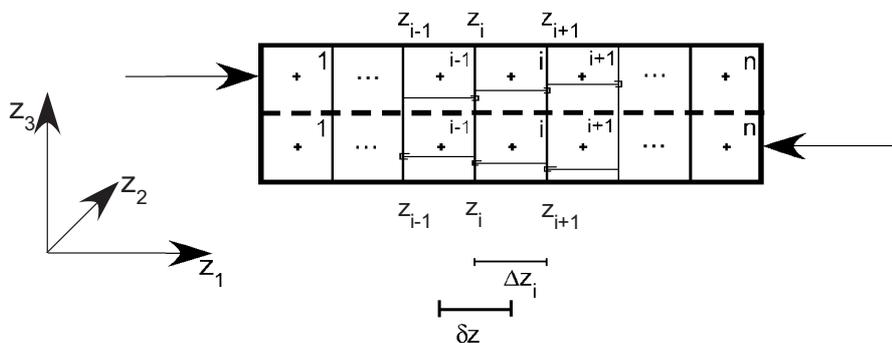
$$\begin{aligned} \frac{\partial c_\alpha^{\text{I}}}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^{\text{I}} v^{\text{I}} - \frac{g_\alpha}{h} & \frac{\partial c_\alpha^{\text{II}}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^{\text{II}} v^{\text{II}} + \frac{g_\alpha}{h} \\ \frac{\partial v}{\partial z_1} &= -\sum_\alpha \nu_\alpha^m \frac{g_\alpha}{h} \quad \text{mit} \quad g_\alpha = \frac{\varepsilon c_\alpha D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_\alpha^m \left(\frac{p^{\text{II}} - p^{\text{I}}}{d} \right) - \frac{RT}{d} \ln \left(\frac{c_\alpha^{\text{II}} c_t^{\text{I}}}{c_\alpha^{\text{I}} c_t^{\text{II}}} \right) \right) \end{aligned}$$

Somit liegen 2 gekoppelte Differentialgleichungen vor. Wobei die ersten beiden Gleichungen (Gleichungspaar) jeweils Differentialgleichungen 2. Art sind und die dritte Gleichung eine Differentialgleichung 1. Art ist. Es werden also für das erste Gleichungssystem zwei Anfangsbedingungen benötigt: diese stellen die Konzentration zum Zeitpunkt $t = 0$ in beiden Röhren dar. Für die zweite Gleichung wird eine Randbedingung benötigt, da ich durch die Ableitung nach dem Ort ein System von partiellen Differentialgleichungen erhalten habe. Diese Randbedingung sind meine jeweiligen Eingangskonzentrationen und -geschwindigkeiten. Allerdings werden die vorliegenden Gleichungen mittels der Finite-Volumen-Methode diskretisiert, sodass aus diesem gekoppelten System von 2 (die verschiedenen Richtungen werden an dieser Stelle nicht gezählt) partiellen Differentialgleichungen ein System von $2^*n^*\alpha$ (wobei α für die Anzahl an Komponenten im System steht) gewöhnlichen Differentialgleichungen vorliegt.

Das vorliegende System ist nichtlinear, da es nicht das Verstärkungsprinzip erfüllt. Dieses ist Voraussetzung für das Superpositionsprinzip, welches die Voraussetzung für die Linearität eines Systems ist. Man kann dies auch ganz einfach daran erkennen, dass in der Differentialgleichung für die Geschwindigkeit das c_α logarithmisch im μ_α auftaucht.

Aufgabe 2

Mit Hilfe der Skizze werden die Profilannahme für die Finite-Volumen-Methode getroffen. Für die Diskretisierung wurde davon ausgegangen, dass die Rohre äquidistant sind. Das heißt, die jeweiligen Volumenelemente besitzen alle die gleiche Größe. Und der Mittelpunkt eines jeden Volumenelementes ist gleich weit vom anderen entfernt:



$$\delta z_{i-1} = \delta z_i = \delta z_{i+1} = \delta z$$

In dieser Aufgabe wird von einem konstanten Profil ausgegangen. Dies bedeutet, dass für Konzentrationen am i ten Volumenelement die Konzentration des $i - 1$ ten Volumenelementes eingesetzt werden kann. Es wird also immer vom vorhergehenden Volumenelement auf das nächste geschlossen. Die Profilannahmen werden somit für beide Rohre von links nach rechts getroffen. Stellen an denen diese getroffen werden, sind mit Pa. gekennzeichnet. Denn es wird davon ausgegangen, dass sich die Konzentration z.B. von einem Moment zum nächsten im gegebenen Volumenelement nicht sprunghaft ändert. Bei vorgegebener Flussrichtung der Lösung im Rohr kann somit diese Aussage getroffen werden.

Das untere Rohr wird auf die gleiche Weise wie das obere Rohr diskretisiert. Die i 's laufen auch von links nach rechts, da ansonsten z.B. bei der Aufstellung der Gleichung für die Stoffstromdichte g_α Probleme entstanden wären, wenn man die Elemente im Rohr entgegengesetzt definiert hätte.

- 1.) Nun soll die partielle Differentialgleichung aus der Aufgabe (1.1) diskretisiert werden. Es wird wieder mit dem oberen Rohr begonnen und im Anschluss daran das untere Rohr betrachtet. Zur besseren Darstellung und Veranschaulichung wird diese für jeden Term einzeln vorgenommen:

Rohr I:

$$\frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^I v^I - \frac{g_\alpha}{h}$$

$$\begin{aligned} \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} dz_1 &= \int_{z_i}^{z_{i+1}} \left(-\frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^I v^I - \frac{g_\alpha}{h} \right) dz_1 \\ &= \int_{z_i}^{z_{i+1}} -\frac{\partial}{\partial z_1} c_\alpha^I v^I dz_1 + \int_{z_i}^{z_{i+1}} -\frac{g_\alpha}{h} dz_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_{\alpha}^I}{\partial t} dz_1 = \frac{dc_{\alpha,i}^I}{dt} \Delta z_i \\
& \cdot \int_{z_i}^{z_{i+1}} -\frac{g_{\alpha}}{h} dz_1 = -\frac{g_{\alpha,i}}{h} \Delta z_i \\
& \cdot \int_{z_i}^{z_{i+1}} -\frac{\partial(c_{\alpha}^I v^I)}{\partial z_1} dz_1 = \int_{z_i}^{z_{i+1}} [-c_{\alpha}^I v^I]_{z_i}^{z_{i+1}} \stackrel{Pa.}{=} -(c_{\alpha,i}^I v_i^I - c_{\alpha,i-1}^I v_{i-1}^I) = c_{\alpha,i-1}^I v_{i-1}^I - c_{\alpha,i}^I v_i^I \\
& \implies \frac{dc_{\alpha,i}^I}{dt} \Delta z_i = c_{\alpha,i-1}^I v_{i-1}^I - c_{\alpha,i}^I v_i^I - \frac{g_{\alpha,i}}{h} \Delta z_i \\
& \frac{dc_{\alpha,i}^I}{dt} = \frac{c_{\alpha,i-1}^I v_{i-1}^I - c_{\alpha,i}^I v_i^I}{\Delta z_i} - \frac{g_{\alpha,i}}{h} \tag{10}
\end{aligned}$$

An dieser Stelle ist es notwendig eine gesonderte Betrachtung für das erste ($i = 1$) Volumenelement vorzunehmen. Es muss darauf geachtet werden, dass $c_{i-1}^I = c_{in}^I$ und $v_{i-1}^I = v_{in}^I$ an dieser Stelle ist:

$$\frac{dc_{\alpha,1}^I}{dt} = \frac{c_{\alpha,in}^I v_{in}^I - c_{\alpha,1}^I v_1^I}{\Delta z_1} - \frac{g_{\alpha,1}}{h}$$

Rohr II:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial c_{\alpha}^{II}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z_1} c_{\alpha}^{II} v^{II} + \frac{g_{\alpha}}{h} \\
& \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_{\alpha}^{II}}{\partial t} dz_1 = \int_{z_i}^{z_{i+1}} \left(\frac{\partial}{\partial z_1} c_{\alpha}^{II} v^{II} + \frac{g_{\alpha}}{h} \right) dz_1 \\
& = \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial}{\partial z_1} c_{\alpha}^{II} v^{II} dz_1 + \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{g_{\alpha}}{h} dz_1 \\
& \cdot \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_{\alpha}^{II}}{\partial t} dz_1 = \frac{dc_{\alpha,i}^{II}}{dt} \Delta z_i \\
& \cdot \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{g_{\alpha}}{h} dz_1 = \frac{g_{\alpha,i}}{h} \Delta z_i \\
& \cdot \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial(c_{\alpha}^{II} v^{II})}{\partial z_1} dz_1 = \int_{z_i}^{z_{i+1}} [c_{\alpha}^{II} v^{II}]_{z_i}^{z_{i+1}} \stackrel{Pa.}{=} c_{\alpha,i+1}^{II} v_{i+1}^{II} - c_{\alpha,i}^{II} v_i^{II} \\
& \implies \frac{dc_{\alpha,i}^{II}}{dt} \Delta z_i = c_{\alpha,i+1}^{II} v_{i+1}^{II} - c_{\alpha,i}^{II} v_i^{II} + \frac{g_{\alpha,i}}{h} \Delta z_i \\
& \frac{dc_{\alpha,i}^{II}}{dt} = \frac{c_{\alpha,i+1}^{II} v_{i+1}^{II} - c_{\alpha,i}^{II} v_i^{II}}{\Delta z_i} + \frac{g_{\alpha,i}}{h} \tag{11}
\end{aligned}$$

Für das zweite Rohr muss auch wieder eine gesonderte Gleichung für das erste Volumenelement formuliert werden. Allerdings ist hier die Einströmrichtung eine andere und somit ist für $i + 1 = n$ der Wert $c_{\alpha, in}^{\text{II}}$ und der Wert v_{in}^{II} einzusetzen:

$$\frac{dc_{\alpha, n}^{\text{II}}}{dt} = \frac{c_{\alpha, in}^{\text{II}} v_{in}^{\text{II}} - c_{\alpha, n}^{\text{II}} v_n^{\text{II}}}{\Delta z_n/2} + \frac{g_{\alpha, n}}{h}$$

Nun muss natürlich die Bilanz für die Geschwindigkeit auch noch diskretisiert werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial z_1} &= - \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h} \\ \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial v}{\partial z_1} dz_1 &= [v^{\text{I}}]_{z_i}^{z_{i+1}} \stackrel{\text{Pa.}}{=} v_i^{\text{I}} - v_{i-1}^{\text{I}} \\ &= [v^{\text{II}}]_{z_i}^{z_{i+1}} \stackrel{\text{Pa.}}{=} v_{i+1}^{\text{II}} - v_i^{\text{II}} \\ \int_{z_i}^{z_{i+1}} - \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h} dz_1 &= - \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha, i}}{h} \Delta z_i \\ \text{mit } g_{\alpha, i} &= \frac{\varepsilon c_{\alpha, i} D_{\alpha, M}}{RT} \left(-\nu_{\alpha}^m \left(\frac{p^{\text{II}} - p^{\text{I}}}{d} \right) - \frac{RT}{d} \ln \left(\frac{c_{\alpha, i}^{\text{II}} c_{t, i}^{\text{I}}}{c_{\alpha, i}^{\text{I}} c_{t, i}^{\text{II}}} \right) \right) \\ \Rightarrow v_i^{\text{I}} &= v_{i-1}^{\text{I}} - \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha, i}}{h} \Delta z_i & (12) \\ v_i^{\text{II}} &= v_{i+1}^{\text{II}} + \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha, i}}{h} \Delta z_i & (13) \end{aligned}$$

- 2.) Eine andere Möglichkeit der Diskretisierung der Gleichungen (4) und (5) besteht darin, den konvektiven Term mit Hilfe der Kettenregel in zwei Terme aufzuspalten:

Rohr I:

$$\frac{\partial c_{\alpha}^{\text{I}}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial z_1} c_{\alpha}^{\text{I}} v^{\text{I}} - \frac{g_{\alpha}}{h} = -v^{\text{I}} \frac{\partial c_{\alpha}^{\text{I}}}{\partial z_1} - c_{\alpha}^{\text{I}} \frac{\partial v^{\text{I}}}{\partial z_1} - \frac{g_{\alpha}}{h}$$

An dieser Stelle kann für den Term $\partial v^{\text{I}}/\partial z_1$ die Gleichung (7) eingesetzt werden:

$$\frac{\partial c_{\alpha}^{\text{I}}}{\partial t} = -v^{\text{I}} \frac{\partial c_{\alpha}^{\text{I}}}{\partial z_1} + c_{\alpha}^{\text{I}} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h} - \frac{g_{\alpha}}{h}$$

Nun kann mit der Diskretisierung begonnen werden:

$$\begin{aligned} \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_{\alpha}^{\text{I}}}{\partial t} dz_1 &= \int_{z_i}^{z_{i+1}} \left(-v^{\text{I}} \frac{\partial c_{\alpha}^{\text{I}}}{\partial z_1} + c_{\alpha}^{\text{I}} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h} - \frac{g_{\alpha}}{h} \right) dz_1 \\ &= \int_{z_i}^{z_{i+1}} -v^{\text{I}} \frac{\partial c_{\alpha}^{\text{I}}}{\partial z_1} dz_1 + \int_{z_i}^{z_{i+1}} c_{\alpha}^{\text{I}} \sum_{\alpha} \nu_{\alpha}^m \frac{g_{\alpha}}{h} dz_1 - \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{g_{\alpha}}{h} dz_1 \end{aligned}$$

An dieser Stelle ergeben sich die ersten Probleme. Das c_{α} im zweiten Term der Gleichung darf nicht mit den α 's über denen die Summe gebildet wird, verwechselt werden. So wird an dieser Stelle für die Berechnung in Aufgabe 2.2 ein β für diese Summe verwendet:

- $\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} dz_1 = \frac{dc_{\alpha,i}^I}{dt} \Delta z_i$ wie bisher
- $\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{g_\alpha}{h} dz_1 = -\frac{g_{\alpha,i}}{h} \Delta z_i$ auch wie bisher
- $\int_{z_i}^{z_{i+1}} c_\alpha^I \sum_\beta \nu_\beta^m \frac{g_\beta}{h} dz_1 = c_{\alpha,i}^I \sum_\beta \nu_\beta^m \frac{g_{\beta,i}}{h} \Delta z_i$, da die jeweiligen Größen konstant sind
- aber für $\int_{z_i}^{z_{i+1}} -v^I \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial z_1} dz_1$ müssen entweder gesonderte Profilannahmen getroffen werden:

$$v^I = \text{const. über } \mathcal{V}^I = v_i^I \rightarrow \int_{z_i}^{z_{i+1}} -v^I \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial z_1} dz_1 = v_i^I \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial z_1} dz_1 = -v_i^I [c_\alpha^I]_{z_i}^{z_{i+1}} \stackrel{Pa.}{=} -v_i^I (c_{\alpha,i}^I - c_{\alpha,i-1}^I)$$

oder man integriert zweimal partiell. Dies führt jedoch nur dazu, dass man die Voraussetzung nachweist und zu einer wahren Aussage für diese Gleichung kommt.

Schreibt man diese Terme wieder zu einer Gleichung zusammen:

$$\begin{aligned} \frac{dc_{\alpha,i}^I}{dt} \Delta z_i &= c_{\alpha,i}^I \sum_\beta \nu_\beta^m \frac{g_{\beta,i}}{h} \Delta z_i - v_i^I (c_{\alpha,i}^I - c_{\alpha,i-1}^I) - \frac{g_{\alpha,i}}{h} \Delta z_i \\ \frac{dc_{\alpha,i}^I}{dt} &= c_{\alpha,i}^I \sum_\beta \nu_\beta^m \frac{g_{\beta,i}}{h} - \frac{v_i^I (c_{\alpha,i}^I - c_{\alpha,i-1}^I)}{\Delta z_i} - \frac{g_{\alpha,i}}{h} \end{aligned}$$

und vergleicht sie mit der Gleichung (11), so fällt sofort auf, dass mit der getroffenen Profilannahme von $v^I = \text{const.}$ eine Vereinfachung zuviel getroffen wurde und eine Fehlerquelle mehr in die Berechnung hineinfließt. Die Lösung ist somit um eine Fehlerordnung weniger genau. Daraus lässt sich schließen, dass solche verknüpften Terme für die Berechnung am Besten umgegangen werden. Dies kann erreicht werden, indem man die Gleichungen wie hier in der Aufgabe zusammenlässt oder in der Gesamtgleichung quasi eine Stufe weiter oben (Massenbilanz statt Stoffbilanz z.B.) diskretisiert. Das Ergebnis für das zweite Rohr wäre leider das gleiche, nur würden sich hier Vorzeichen auf Grund der anderen Einstromrichtung und eine andere Indizierung ergeben.

- 3.) Die Ergebnisse aus der Aufgabe (2.1.) wurden in Matlab implementiert und der Quelltext befindet sich als Anhang am Ende des Dokumentes.

Dabei wurde allerdings nur die Eingangskonzentration des Wassers durch die Schließbedingung berechnet. Die Änderung der Wasserkonzentration wurde wie auch die Änderung der Salzkonzentration über die diskretisierten Gleichungen (10),(11),(12) und (13) vorgenommen, obwohl auch hier die Schließbedingung genutzt hätte werden können.

Aus den beiden Abbildungen 3 und 4 lässt sich sehr schön der Verlauf der Salzkonzentration in beiden Rohren darstellen. Das Meerwasser strömt in das obere Rohr und Salz wandert aus diesem zu einem geringen Anteil in das zweite Rohr bis sich ein stabiler Wert der Salzkonzentration eingestellt hat. Dies geschieht, da die Membran für Salz und Wasser durchlässig ist und nicht nur für Wasser allein. Allerdings diffundiert zeitgleich auch Wasser aus dem oberen Rohr in das untere. Lässt man sich die Stofftransportdichte g_α von Matlab ausgeben, so sieht man auch, dass das Wasser besser diffundiert als das Salz. Somit steigt die Salzkonzentration im oberen Rohr nach einiger Zeit wieder an, da Wasser aus dem Rohr entweicht. Die Konzentration des Wassers fällt im oberen Rohr ab, da dieses aus diesem Rohr in das untere diffundiert.

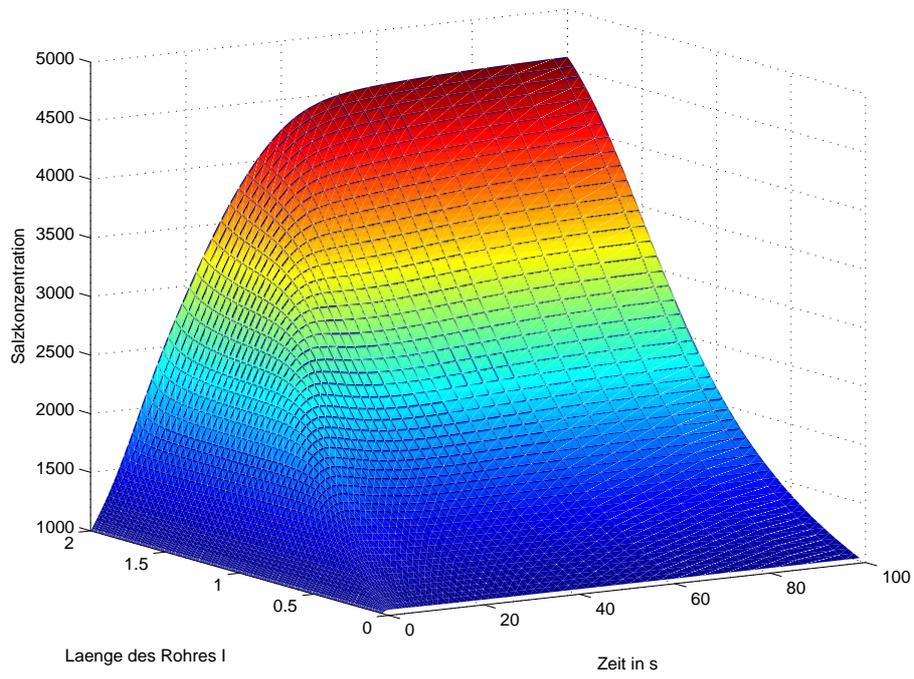


Abbildung 1: Änderung der Salzkonzentration im oberen Rohr

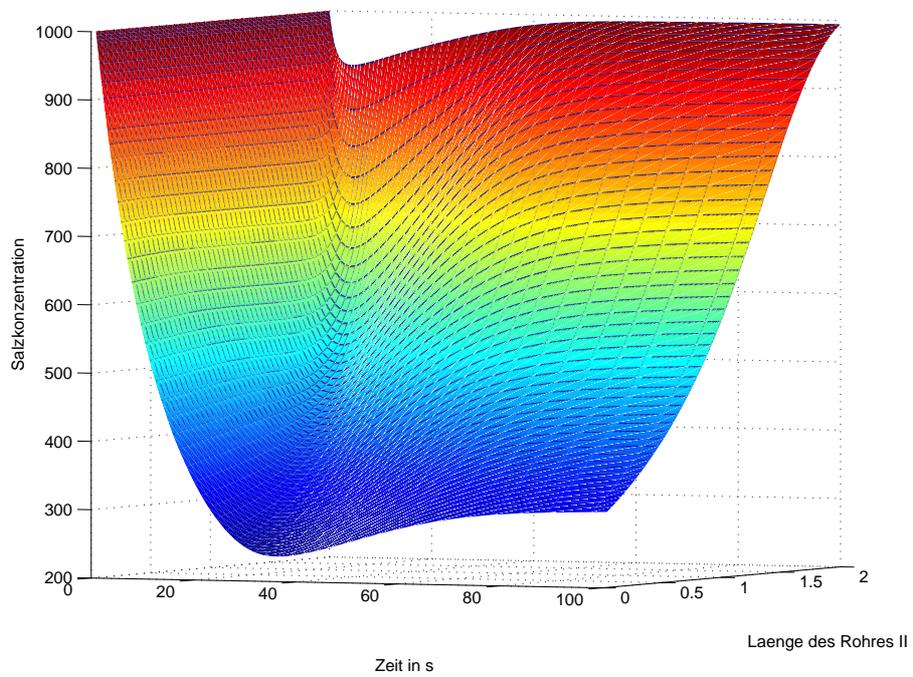


Abbildung 2: Änderung der Salzkonzentration im unteren Rohr

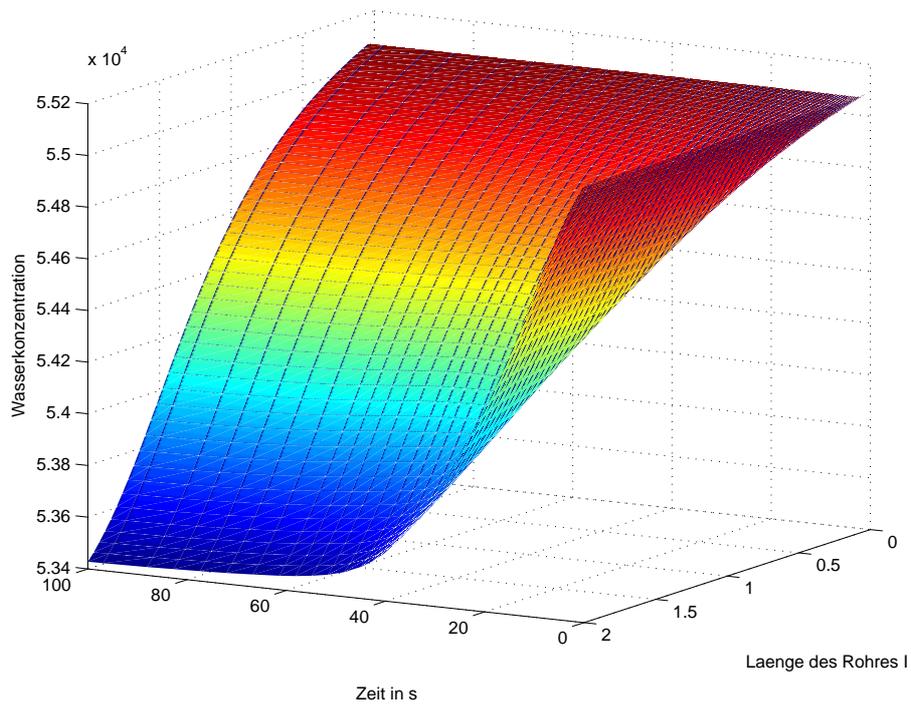


Abbildung 3: Änderung der Wasserkonzentration im oberen Rohr

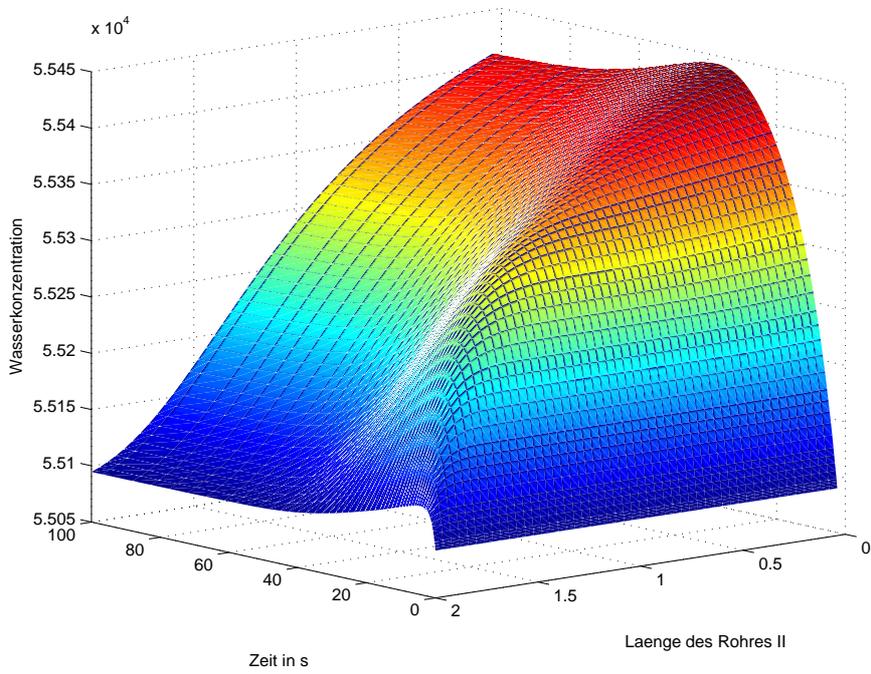


Abbildung 4: Änderung der Wasserkonzentration im unteren Rohr

Im zweiten Rohr strömt Wasser und Salz ein. Da viel mehr Wasser als Salz einströmt, nimmt die Konzentration des Salzes im unteren Rohr über die Länge und die Zeit ab. Bei beiden Graphen im unteren Rohr gibt es jeweils eine kleine Ausdellung zu Beginn, da ja wie bereits erklärt auch Salz in das untere Rohr strömt und dieses Einströmen die Konzentration mitändert. Da aber über die Zeit viel mehr Wasser einströmt als Salz laufen auch diese beiden auf konstante Werte.

- 4.) Die treibende Kraft für diesen ganzen Vorgang ist der Druckgradient in den beiden Rohren. Im oberen Rohr herrscht ein höherer Druck als im unteren Rohr und somit versucht das Fluid einen Druckausgleich durch Einströmen in das untere Rohr zu erreichen.

Leider kann man diesen Prozess nicht soweit treiben, dass sich in einem der beiden Rohre nur noch Wasser und in dem anderen nur noch Salz befindet. Da der Zweck des Systems in der Meerwasserentsalzung liegt, wird hier das Rohr II betrachtet. Denn im Rohr II sinkt die Konzentration des Salzes:

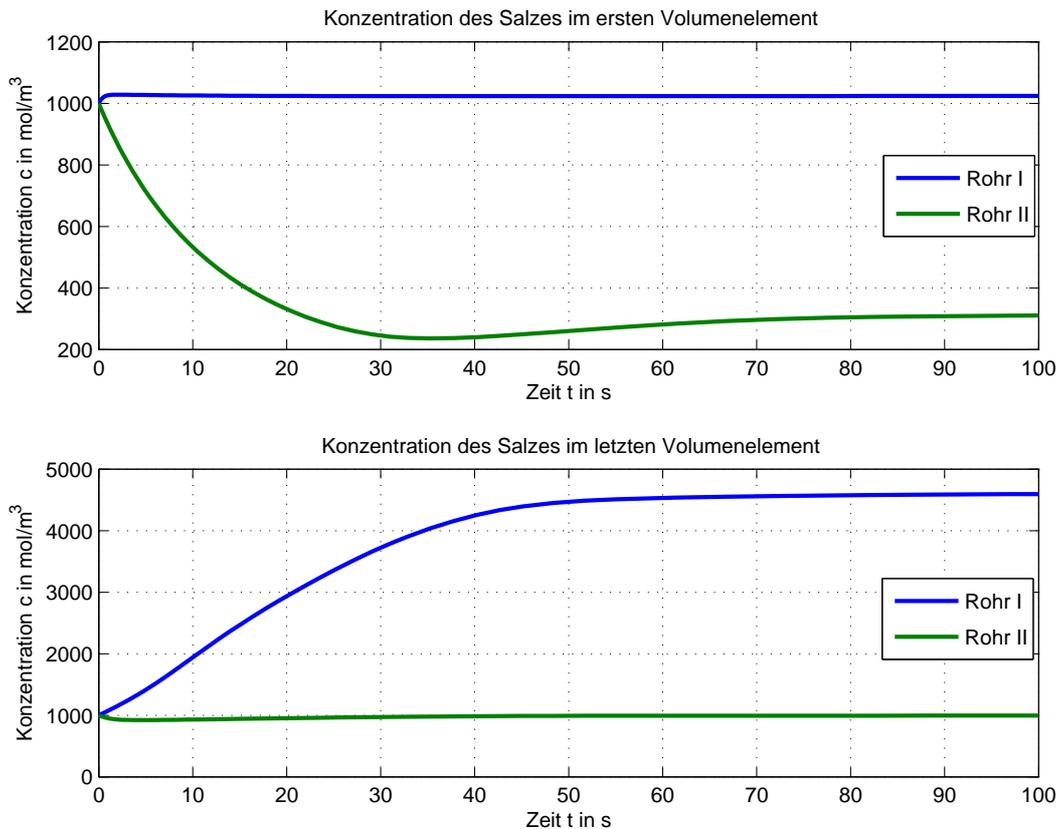


Abbildung 5: Verlauf der Salzkonzentration in zwei ausgewählten Volumenelementen

$$c_{\text{NaCl},in} = 1.0 \cdot 10^3 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

So fällt die Salzkonzentration von der Eingangskonzentration im unteren Rohr auf:

$$c_{\text{NaCl}} = 0.31 \cdot 10^3 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

Dies scheint ein konstanter Wert zu sein, da sich auch nach mehrmaligen Rumprobierens am Zeitintervall der ode nichts an diesem Wert änderte. Dies kann auch noch einmal mit Hilfe der Graphen für die Änderung der Wasserkonzentration verdeutlicht werden:

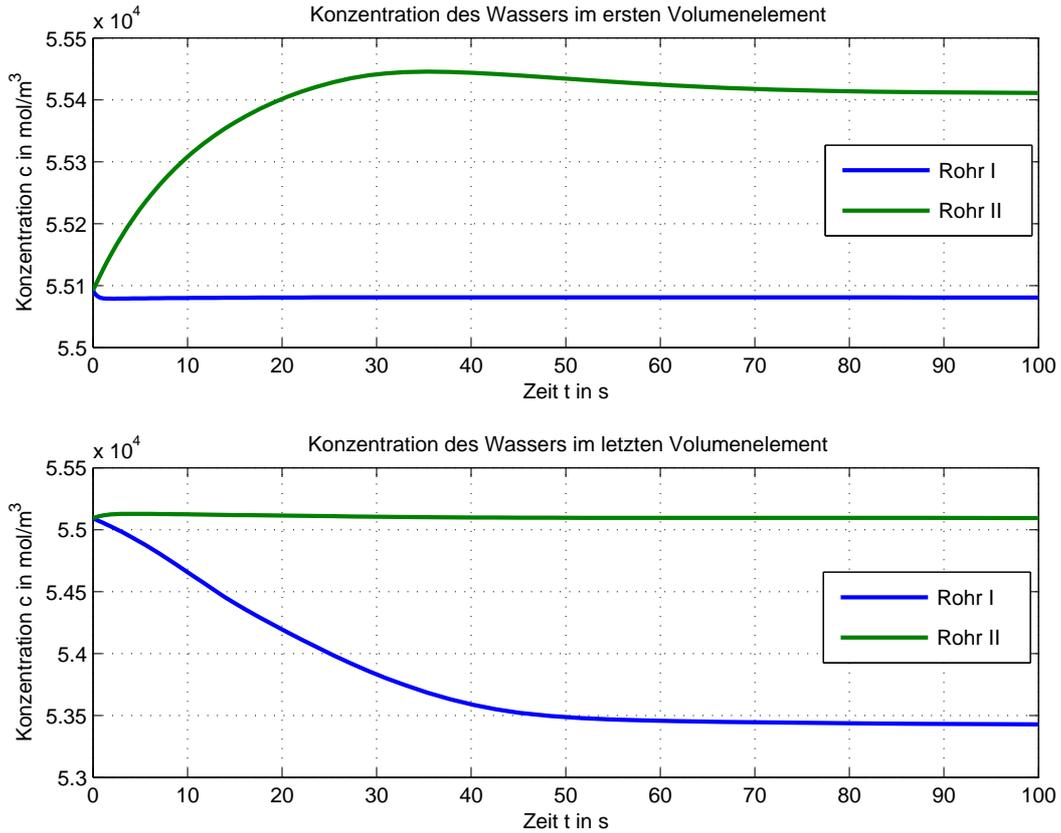


Abbildung 6: Verlauf der Wasserkonzentration in zwei ausgewählten Volumenelementen

$$c_{\text{H}_2\text{O},in} = 5.5092 \cdot 10^4 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

Im Rohr II steigt die Konzentration des Wassers von der Eingangskonzentration auf:

$$c_{\text{H}_2\text{O}} = 5.541 \cdot 10^4 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

Auch dieser Wert ist ein stabiler Grenzwert, den die Konzentrationsänderung des Wassers nach einem bestimmten Zeitintervall erreicht. Durch Optimierung des Prozesses kann sicherlich ein Maximum an Wasser mit einer minimalen Salzkonzentration erreicht werden. Jedoch ist es nicht möglich, das Fluid komplett zu entsalzen.

Weiterhin kann man diese Annahme mit dem gegebenen Stefan-Maxwell-ansatz überprüfen. Wenn nach unendlicher Zeit soviel Wasser eingeströmt ist (bei Annahme eines unendlich langen Rohres), reicht das Druckgefälle nicht mehr aus, um dem Konzentrationsgefälle entgegen zu wirken. Somit würde es rein aus der Überlegung heraus nicht mehr zu einer Stoffdiffusion durch die Membran kommen und der Stofftransportdichte wäre somit annähernd Null:

$$\begin{aligned} 0 = g_\alpha &= \frac{\varepsilon c_\alpha D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_\alpha^m \frac{p^{II} - p^I}{d} - \frac{RT}{d} \ln \frac{c_\alpha^{II} c_t^I}{c_\alpha^I c_t^{II}} \right) \\ 0 &= \frac{\varepsilon c_\alpha D_{\alpha,M}}{RT} \left(-\nu_\alpha^m \frac{p^{II} - p^I}{d} - \frac{RT}{d} \ln \frac{c_\alpha^{II} c_t^I}{c_\alpha^I c_t^{II}} \right) \\ &= -\nu_\alpha^m \frac{p^{II} - p^I}{d} - \frac{RT}{d} \ln \frac{c_\alpha^{II} c_t^I}{c_\alpha^I c_t^{II}} \end{aligned}$$

$$\nu_{\alpha}^m \frac{p^{II} - p^I}{d} = -\frac{RT}{d} \ln \frac{c_{\alpha}^{II} c_t^I}{c_{\alpha}^I c_t^{II}}$$

$$\exp\left(-\frac{\nu_{\alpha}^m}{RT}(p^{II} - p^I)\right) = \frac{c_{\alpha}^{II} c_t^I}{c_{\alpha}^I c_t^{II}}$$

$$\frac{c_{\alpha}^{II}}{c_t^{II}} = \frac{c_{\alpha}^I}{c_t^I} \exp\left(-\frac{\nu_{\alpha}^m}{RT}(p^{II} - p^I)\right)$$

Nun stelle man sich den Anfang des unendlichlangen Rohres vor ($i = 1$). An dieser Stelle wissen wir im oberen Rohr die Eingangskonzentration des Fluides. Um nun die Ausflusskonzentration des Wassers zu bestimmen, wird die Komponente α als Wasserkomponente angesehen und die benötigten Werte berechnet:

$$\frac{c_{\text{H}_2\text{O}}^{II}}{c_t^{II}} = \frac{c_{\text{H}_2\text{O},in}^I}{c_t^I} \exp\left(-\frac{\nu_{\text{H}_2\text{O}}^m}{RT}(p^{II} - p^I)\right)$$

mit: $c_t^I = c_{\text{H}_2\text{O}}^I + c_{\text{NaCl}}^I = c_{\text{H}_2\text{O},in} + c_{\text{NaCl},in}$

$$\frac{c_{\text{H}_2\text{O}}^{II}}{c_t^{II}} = 0.9129$$

Wenn dieses Verhältnis = 1 wäre, so wäre nur noch Wasser im Rohr enthalten. Dies ist jedoch gar nicht möglich, da ja das Salz nicht in das andere Rohr diffundieren kann und auch nicht einfach so verschwindet. Somit würde die maximale Wasserkonzentration am gesamten Rohranteil bei 91,29% liegen.

Im Anschluss befindet sich der Matlab-Quellcode. Bei der Implementierung in Matlab wurden neben der gegebenen Rohrlänge verschiedene Rohrlängen versucht um den Aufgabenteil 2.4 zu lösen. Weiterhin wurde eine zweite Höhe eingebaut, da es mir kurios erschien, dass beide Rohre genauso hoch sind, wie die Membran dick ist und ich mir nicht vorstellen konnte, dass dieser Prozess bei den gegebenen Drücken mit solch einem Rohrdurchmesser erfolgt. Jedoch liefert Matlab ein sehr ähnliches Ergebnis.

```

1
2 % Projektübung 2 Systemverfahrenstechni
3 % Katharina Holstein STK 03
4 % Hauptprogramm
5
6 function Prue2_haupt; close all; clear all; clc;
7
8 %Definition der globalen Variablen
9 p.h=0.1*1e-3; %Höhe der Rohre
10 %p.h=0.1; %Höhe zur Probe da kurios erschien
11 p.l=2; %Länge der Rohre
12 p.p1=1e7; %Druck im Rohr 1
13 p.p2=1e5; %Druck im Rohr 2
14 p.vin1=0.1; %Eintrittsgeschwindigkeit im Rohr 1
15 p.vin2=0.03; %Eintrittsgeschwindigkeit im Rohr 2
16 p.cin=[0 1e3]; %Konzentration des Meerwassers=Eingangskonzentration
17 p.nu=[1/55555 1/120000];%molares Volumen [H_2O NaCl]
18 p.D=[1e-7 1e-10]; %Diffusionskoeffizient durch die Membran [H_2O NaCl]
19 p.e=0.1; %Porosität der Membran
20 p.d=100e-6; %Dicke der Membran
21 p.T=293.15; %Temperatur in den Rohren
22 p.R=8.314; %molare Gaskonstante
23
24
25 %Deklaration der Volumenelemente und des Übergabevektors
26 p.n=50; %Anzahl der Volumenelemente
27 p.dz=p.l/p.n; %Aufteilen des Rohres in n gleichgroße Elemente

```

```

28 tspan=[0 100];           %Deklaration der Zeitspanne
29
30 p.cin(1)=(1-p.cin(2)*p.nu(2))/p.nu(1); %H_20-Konzentration
31
32 x0=[p.cin(1)*ones(p.n,1);p.cin(2)*ones(p.n,1);...
33     p.cin(1)*ones(p.n,1);p.cin(2)*ones(p.n,1)];
34
35
36 %Aufruf der ODE zur Lösung der diskretisierten Gleichungen
37 [t,x]=ode15s(@Prue2_neben, tspan, x0, [], p);
38
39 %graphische Darstellung:
40 %Verlauf der Salzkonzentration in zwei ausgewählten Volumenelementen
41 figure(1); subplot(211);
42 plot(t,x(:,p.n+1),t,x(:,3*p.n+1),'LineWidth',2); legend('Rohr
43 I','Rohr_II'); title('Konzentration_des_Salzes_im_ersten
44 Volumenelement'); xlabel('Zeit_t_in_s'); ylabel('Konzentration_c_in
45 mol/m^3'); grid on; subplot(212);
46 plot(t,x(:,2*p.n),t,x(:,4*p.n),'LineWidth',2); legend('Rohr_I','Rohr
47 II'); title('Konzentration_des_Salzes_im_letzten_Volumenelement');
48 xlabel('Zeit_t_in_s'); ylabel('Konzentration_c_in_mol/m^3'); grid
49 on;
50
51 %Verlauf der Wasserkonzentration in zwei ausgewählten Volumenelementen
52 figure(2); subplot(211);
53 plot(t,x(:,1),t,x(:,2*p.n+1),'LineWidth',2); legend('Rohr_I','Rohr
54 II'); title('Konzentration_des_Wassers_im_ersten_Volumenelement');
55 xlabel('Zeit_t_in_s'); ylabel('Konzentration_c_in_mol/m^3'); grid
56 on; subplot(212); plot(t,x(:,p.n),t,x(:,3*p.n),'LineWidth',2);
57 legend('Rohr_I','Rohr_II'); title('Konzentration_des_Wassers_im
58 letzten_Volumenelement'); xlabel('Zeit_t_in_s');
59 ylabel('Konzentration_c_in_mol/m^3'); grid on;
60
61 %Änderung der Salzkonzentration im oberen Rohr
62 figure(3);
63 surface(t,[1:p.n]*p.dz,x(:,p.n+1:2*p.n),'LineStyle','none',...
64 'FaceColor','interp')
65 %title('Salzkonzentration in allen Volumenelementen im ersten Rohr');
66 xlabel('Zeit_in_s'); ylabel('Laenge_des_Rohres_I');
67 zlabel('Salzkonzentration'); grid on;
68
69 %Änderung der Wasserkonzentration im oberen Rohr
70 figure(4);
71 surface(t,[1:p.n]*p.dz,x(:,1:p.n),'LineStyle','none',...
72 'FaceColor','interp')
73 %title('Wasserkonzentration in allen Volumenelementen im ersten Rohr');
74 xlabel('Zeit_in_s'); ylabel('Laenge_des_Rohres_I');
75 zlabel('Wasserkonzentration'); grid on;
76
77 %Änderung der Salzkonzentration im unteren Rohr
78 figure(5);
79 surface(t,[1:p.n]*p.dz,x(:,3*p.n+1:4*p.n),'LineStyle','none',...
80 'FaceColor','interp')
81 %title('Salzkonzentration in allen Volumenelementen im zweiten Rohr');
82 xlabel('Zeit_in_s'); ylabel('Laenge_des_Rohres_II');
83 zlabel('Salzkonzentration'); grid on;
84
85 %Änderung der Wasserkonzentration im unteren Rohr
86 figure(6);
87 surface(t,[1:p.n]*p.dz,x(:,2*p.n+1:3*p.n),'LineStyle','none',...
88 'FaceColor','interp')

```

```

89 %title('Wasserkonzentration in allen Volumenelementen im zweiten Rohr');
90 xlabel('Zeit_in_s'); ylabel('Laenge_des_Rohres_II');
91 zlabel('Wasserkonzentration'); grid on;
92
93 % Projektübung 2 Systemverfahrenstechnik
94 % Katharina Holstein STK 03
95 % Nebenprogramm
96
97 function f=Prue2_neben(t,x,p);
98
99 %Die Variablen werden in einer 3x3 Matrix gespeichert, dabei bildet die
100 %erste 'Richtung' die Komponente, die zweite 'Richtung' das Volumenelement
101 %und die dritte 'Richtung' den Ort (das Rohr)
102 c(1,:,1)=x(1:p.n); %H_2O im ersten Rohr
103 c(2,:,1)=x(p.n+1:2*p.n); %NaCl im ersten Rohr
104 c(1,:,2)=x(2*p.n+1:3*p.n); %H_2O im zweiten Rohr
105 c(2,:,2)=x(3*p.n+1:4*p.n); %NaCl im zweiten Rohr
106
107 %Berechnung der Stofftransportdichte g_\alpha
108 for a= 1:2, %Komponenten 1=H_2O, 2=NaCl
109     for i =1:p.n, %Volumenelemente
110         g(a,i)=p.e*(c(a,i,2)+c(a,i,1))/2*p.D(a)/p.R/p.T*(-p.nu(a)*...
111             ((p.p2-p.p1)/p.d)-p.R*p.T/p.d*log(c(a,i,2)*(c(1,i,1)+...
112             c(2,i,1))/(c(a,i,1)*(c(1,i,2)+c(2,i,2))));
113     end
114 end
115
116 %Berechnung der Geschwindigkeiten
117 for i=1:p.n %Volumenelement im oberen Rohr
118     if i==1
119         v(i,1)=-(p.nu(1)*g(1,i)+p.nu(2)*g(2,i))/p.h*p.dz+p.vin1;
120     else
121         v(i,1)=-(p.nu(1)*g(1,i)+p.nu(2)*g(2,i))/p.h*p.dz+v(i-1,1);
122     end
123 end
124 %die for-Schleife wurde hier Rückwärts laufen gelassen, da das Fluid
125 %entgegengesetzt der Definitionsrichtung der diskretisierten Elemente
126 %fließt
127 for i=1:p.n %Volumenelemente im unteren Rohr
128     v(p.n,2)=(p.nu(1)*g(1,p.n)+p.nu(2)*g(2,p.n))/p.h*p.dz+p.vin2;
129     if i==p.n
130         %nichts
131     else
132         v(p.n-i,2)=(p.nu(1)*g(1,p.n-i)+p.nu(2)*g(2,p.n-i))/p.h*p.dz+...
133         v(p.n+1-i,2);
134     end
135 end
136
137 % Berechnung der Konzentrationen
138 for a=1:2 %Komponenten 1=H_2O, 2=NaCl
139     for i=1:p.n %Volumenelemente im oberen Rohr
140         if i==1
141             dcdt(a,i,1)=(p.cin(a)*p.vin1-c(a,i,1)*v(i,1))/p.dz-...
142             g(a,i)/p.h;
143         else
144             dcdt(a,i,1)=(c(a,i-1,1)*v(i-1,1)-c(a,i,1)*v(i,1))/p.dz-...
145             g(a,i)/p.h;
146         end
147     end
148 end
149 %an dieser Stelle wird die for-Schleife wiederrum Rückwärts abgerufen

```

```

150 for a=1:2 %Komponenten 1=H_2O, 2=NaCl
151 for i=1:p.n %Volumenelemente im unteren Rohr
152 dcdt(a,p.n,2)=(p.cin(a)*p.vin2-c(a,p.n,2)*v(p.n,2))/p.dz+...
153 g(a,p.n)/p.h;
154 if i==p.n
155 % nichts
156 else
157 dcdt(a,p.n-i,2)=(c(a,p.n+1-i,2)*v(p.n+1-i,2)-c(a,p.n-i,2)*...
158 v(p.n-i,2))/p.dz+g(a,p.n-i)/p.h;
159 end
160 end
161 end
162
163 %Test zu Richtigkeit/Genauigkeit der Berechnungen
164 test=c(1, :, :)*p.nu(1)+c(2, :, :)*p.nu(2); %!=1
165
166 %Rückgabe der berechneten Werte an die Hauptfunktion
167 f=[dcdt(1, :, 1) dcdt(2, :, 1) dcdt(1, :, 2) dcdt(2, :, 2)]';

```