Systemverfahrenstechnik
2. Projektübung

Steffi Klinge*

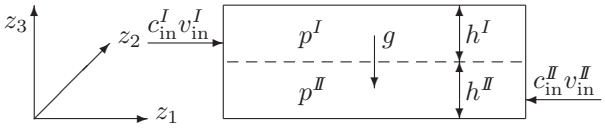
14. Dezember 2005

1. Aufgabe

1.1 Salzkonzentration

Zunächst sollen die Differentialgleichungen zur Berechnung der Salzkonzentration in beiden Rohren aufgestellt werden. Dazu gehe man von der allgemeinen Konzentrationsbilanz für den oberen Reaktor aus.

$$\frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_k}\left(c_\alpha^I v_k^I + j_{\alpha,k}^I\right) + \sigma_\alpha^I \tag{1}$$



Im vorliegenden Beispiel soll die Diffusion in Längs- und Tiefenrichtung der Rohre Null sein. Desweiteren gehe man davon aus, dass das Fluid nur in Längsrichtung ströme und keine Reaktion stattfinde.

$$\frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_1}\left(c_\alpha^I v_1^I + \cancelto{0}{j_{\alpha,1}^I}\right) - \frac{\partial}{\partial z_2}\left(\cancelto{0}{c_\alpha^I v_2^I} + \cancelto{0}{j_{\alpha,2}^I}\right) - \frac{\partial}{\partial z_3}\left(c_\alpha^I v_3^I + j_{\alpha,3}^I\right) + \cancelto{0}{\sigma_\alpha} \tag{2}$$

Nun integriere man (2) über z_3 im Interval $[0, h^I]$ um somit die Ortsableitung in vertikaler Richtung zu entfernen. Dabei ist zu beachten, dass bis auf $\frac{\partial}{\partial z_3}\left(c_\alpha^I v_3^I + j_{\alpha,3}^I\right)$ alle Terme von z_3 unabhängig und konstant über dem Intervall sind.

$$\int_0^{h^I} \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} \mathrm{d}z_3 = -\int_0^{h^I} \frac{\partial}{\partial z_1}\left(c_\alpha^I v_1^I\right) \mathrm{d}z_3 - \int_0^{h^I} \frac{\partial}{\partial z_3}\left(c_\alpha^I v_3^I + j_{\alpha,3}^I\right) \mathrm{d}z_3 \tag{3}$$

$$\frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} h^I = -\frac{\partial}{\partial z_1}\left(c_\alpha^I v_1^I\right) h^I - \left|\left(c_\alpha^I v_3^I + j_{\alpha,3}^I\right)\right|_0^{h^I} = -\frac{\partial}{\partial z_1}\left(c_\alpha^I v_1^I\right) h^I - \left(0 - \left(-g_\alpha^I\right)\right) \tag{4}$$

Da hier nur die Konvektionsgeschwindigkeit in Längsrichtung von Bedeutung ist, kann auf den Index 1 verzichtet werden. Außerdem muss die Stoffaustauschdichte in beiden Rohren betragsmäßig gleich groß sein, da die Membran Stoff weder produzieren noch speichern kann. Dementsprechend ist $g_\alpha^I = -g_\alpha^{II} = g_\alpha$ Schließlich ergibt sich für die Konzentration des Salzes im oberen Rohr aus (4).

$$\frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}\left(c_\alpha^I v^I\right) - \frac{g_\alpha}{h^I} \tag{5}$$

Für die Konzentration des unteren Rohres ergibt sich auf gleichem Wege die folgende Gleichung.

$$\frac{\partial c_\alpha^{II}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}\left(c_\alpha^{II} v^{II}\right) + \frac{g_\alpha}{h^{II}} \tag{6}$$

*Matrikel: STK03, Immatrikulationsnummer: xxxxxx

1.2 Geschwindigkeit

Für das Volumen gilt

$$V = \sum_\alpha n_\alpha v_\alpha^m \tag{7}$$

Teilt man (7) durch V erhält man

$$1 = \sum_\alpha \frac{n_\alpha}{V} v_\alpha^m = \sum_\alpha c_\alpha v_\alpha^m \tag{8}$$

Leitet man nun (8) nach Ort und Zeit ab, ergeben sich bei idealer Mischung ($v_\alpha^m = \text{const.}$) die folgenden Beziehungen

$$0 = \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial t}(c_\alpha v_\alpha^m) = \sum_\alpha v_\alpha^m \frac{\partial c_\alpha}{\partial t} \qquad \text{und} \qquad 0 = \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial z}(c_\alpha v_\alpha^m) = \sum_\alpha v_\alpha^m \frac{\partial c_\alpha}{\partial z} \tag{9}$$

Setzt man nun für das obere Rohr (5) ein, so erhält man schließlich mit (8) und (9)

$$0 = -\sum_\alpha v_\alpha^m \frac{\partial}{\partial z}\left(c_\alpha^I v^I\right) - \sum_\alpha \frac{g_\alpha}{h^I} = -\frac{\partial v^I}{\partial z} \underbrace{\sum_\alpha v_\alpha^m c_\alpha^I}_{=1} - \cancel{\sum_\alpha v_\alpha^m v^I \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial z}}^{\,0} - \sum_\alpha \frac{g_\alpha}{h^I}$$

$$\frac{\partial v^I}{\partial z} = -\sum_\alpha \frac{g_\alpha}{h^I} \tag{10}$$

Für das untere Rohr gehe man auf gleichem Wege vor. Dabei beachte man, dass das Fluid hier entgegen der Koordinatenrichtung fließt und somit die Geschwindigkeit ein negatives Vorzeichen besitzt ($v^{I\!I} = -|v^{I\!I}|$).

$$\frac{\partial v^{I\!I}}{\partial z} = +\sum_\alpha \frac{g_\alpha}{h^{I\!I}} \tag{11}$$

Aus der Schließbedingung (8) kann leicht über die Konzentration des Salzes die Wasserkonzentration errechnet werden.

$$1 = \sum_\alpha c_\alpha v_\alpha^m = c_{\mathrm{NaCl}} v_{\mathrm{NaCl}}^m + c_{\mathrm{H_2O}} v_{\mathrm{H_2O}}^m$$

$$c_{\mathrm{H_2O}} = \frac{1 - c_{\mathrm{NaCl}} v_{\mathrm{NaCl}}^m}{v_{\mathrm{H_2O}}^m} \tag{12}$$

1.3 Stoffaustauschdichte

Über den gegebenen Ansatz nach Maxwell–Stefan lässt sich die Stoffgeschwindigkeit u_α durch die Membran bestimmen.

$$-v_\alpha^m \left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)_{\mu,T} - \left(\frac{\partial \mu_\alpha}{\partial z}\right)_{p,T} = RT \frac{u_\alpha}{Đ_{\alpha,M}} \tag{13}$$

Diese wiederum ist mit der Stoffaustauschdichte g_α verknüpft. Da in der Membran weder Stoff erzeugt noch verbraucht wird, kann die Kontinuitätsgleichung des Stoffstromes G_α durch die Membran wie folgt beschrieben werden.

$$G_\alpha = F c_\alpha = A_{\mathrm{Durchfluss}} u_\alpha c_\alpha \tag{14}$$

Da nicht die gesamte Fläche der Membran durchflossen wird, muss hier die Durchflussfläche durch die Fläche der Membran und die Porösität ersetzt werden und es ergibt sich für g_α das folgende.

$$g_\alpha = \frac{G_\alpha}{A} = \varepsilon u_\alpha c_\alpha \tag{15}$$

Das chemische Potential μ kann ersetzt werden.

$$\mu_\alpha = \mu_\alpha^\ominus + RT \ln x_\alpha \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial \mu_\alpha}{\partial z} = RT \frac{\partial \ln x_\alpha}{\partial z} \tag{16}$$

Gleichung (15) nach u_α umgestellt und mit (16) in (13) eingesetzt ergibt die Bestimmungsgleichung der Stoffaustauschdichte.

$$g_\alpha = \varepsilon c_\alpha \mathit{Đ}_{\alpha,M} \left(-\frac{v_\alpha^m}{RT} \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)_{\mu,T} - \left(\frac{\partial \ln x_\alpha}{\partial z} \right)_{p,T} \right) \tag{17}$$

Dieser kontinuierliche Ansatz wird nun in einen diskreten umgeformt, in dem über z_3 im Interval $[0, d]$ in Richtung der Stoffaustauschdichte integriert wird.

$$\int_0^d g_\alpha \mathrm{d}z_3 = \varepsilon \mathit{Đ}_{\alpha,M} \int_0^d c_\alpha \left(-\frac{v_\alpha^m}{RT} \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)_{\mu,T} - \left(\frac{\partial \ln x_\alpha}{\partial z} \right)_{p,T} \right) \mathrm{d}z_3$$

$$g_\alpha d = \varepsilon \mathit{Đ}_{\alpha,M} \bar{c}_\alpha \left(-\frac{v_\alpha^m}{RT} \left(p^{I\!I} - p^I \right) - \left(\ln x_\alpha^{I\!I} - \ln x_\alpha^I \right) \right)$$

$$g_\alpha = \varepsilon \mathit{Đ}_{\alpha,M} \bar{c}_\alpha \left(\frac{v_\alpha^m}{RT} \frac{p^I - p^{I\!I}}{d} + \frac{\ln(x_\alpha^I / x_\alpha^{I\!I})}{d} \right) \qquad \text{mit} \qquad \bar{c}_\alpha = \frac{c_\alpha^I + c_\alpha^{I\!I}}{2} \tag{18}$$

Hier muss eine Profilannahme für c_α innerhalb der Membrankanäle getroffen werden. Da keine weiteren Daten vorleigen, verwende man hier den aus der Vorlesung bekannten Ansatz und wähle den Mittelwert der Konzentrationen auf beiden Seiten.

1.4 System

Nun liegt ein System von Gleichungen vor. Es besteht aus 2 partiellen Differentialgleichungen (PDE) 1. Ordnung in Ort und Zeit - den Konzentrationsbilanzen - (Nur die Konzentration einer Komponente (Salz) muss auf diese Weise ermittelt werden; die zweite ergibt sich aus der Schließbedingung (12).),

$$\frac{\partial c_{\mathrm{NaCl}}^I}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \left(c_{\mathrm{NaCl}}^I v^I \right) - \frac{g_{\mathrm{NaCl}}}{h^I}$$

$$\frac{\partial c_{\mathrm{NaCl}}^{I\!I}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \left(c_{\mathrm{NaCl}}^{I\!I} v^{I\!I} \right) + \frac{g_{\mathrm{NaCl}}}{h^{I\!I}}$$

2 gewöhnliche Differentialgleichungen (ODE) 1. Ordnung im Ort - den Geschwindigkeitsgradienten -

$$\frac{\partial v^I}{\partial z} = -\frac{g_{\mathrm{NaCl}} + g_{\mathrm{H_2O}}}{h^I}$$

$$\frac{\partial v^{I\!I}}{\partial z} = +\frac{g_{\mathrm{NaCl}} + g_{\mathrm{H_2O}}}{h^{I\!I}}$$

und der algebraischen Gleichungen - der Gleichungen der Stoffaustauschdichten.

$$g_{\mathrm{NaCl}} = \varepsilon \mathit{Đ}_{\mathrm{NaCl},M} \bar{c}_{\mathrm{NaCl}} \left(\frac{v_{\mathrm{NaCl}}^m}{RT} \frac{p^I - p^{I\!I}}{d} + \frac{\ln(x_{\mathrm{NaCl}}^I / x_{\mathrm{NaCl}}^{I\!I})}{d} \right)$$

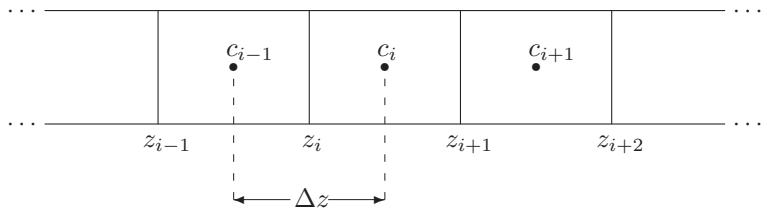
$$g_{\mathrm{H_2O}} = \varepsilon \mathit{Đ}_{\mathrm{H_2O},M} \bar{c}_{\mathrm{H_2O}} \left(\frac{v_{\mathrm{H_2O}}^m}{RT} \frac{p^I - p^{I\!I}}{d} + \frac{\ln(x_{\mathrm{H_2O}}^I / x_{\mathrm{H_2O}}^{I\!I})}{d} \right)$$

Zur Lösung der PDEs werden pro Gleichung eine Anfangs- und eine Randbedingung benötigt. Als Anfangsbedingung ist gegeben, dass die Rohre zu Beginn mit Meerwasser gefüllt sind ($c_0 = c_{MW}$). Als Randbedingungen dienen die Konzentrationen an den Zuläufen ($c_{in} = c_{MW}$). Um die Geschwindigkeiten in beiden Rohren ermitteln zu können, werden hier 2 weitere Randbedingungen benötigt. Wie bei den RB der PDE nutze man auch hier die Zuläufe (v_{in}). Es handelt sich um ein nichtlineares System, da in der Bestimmungsgleichung der Stoffaustauschdichte der natürliche Logarithmus von $x_\alpha = c_\alpha / c_t$ auftritt.

2. Aufgabe

2.1 Diskretisierung

Mittels der Finiten-Volumen-Methode sollen nun die partiellen Differentialgleichungen der Konzentrationen und die gewöhnlichen Differentialgleichungen der Geschwindigkeiten diskretisiert werden. Dadurch erhält man aus 2 PDEs und 2 ODEs ein System aus $N \cdot 2$ ODEs und $N \cdot 2$ algebraischen Gleichungen. Zunächst schneidet man das Rohr in äquidistanten Abständen und erhält N gleichgroße Volumenelemente.



Nun integriert man über ein solches beliebiges Volumenelement.

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} \mathrm{d}z = -\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial}{\partial z}\left(c_\alpha^I v^I\right) \mathrm{d}z - \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{g_\alpha}{h^I} \mathrm{d}z \tag{19}$$

Für die Konzentration c_α^I trifft man eine konstante Profilannahme. Sie soll im gesamten Volumenelement $c_{\alpha,i}^I$ sein.

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_\alpha^I}{\partial t} \mathrm{d}z = \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_{\alpha,i}^I}{\partial t} \mathrm{d}z = \frac{\mathrm{d}c_{\alpha,i}^I}{\mathrm{d}t} \int_{z_i}^{z_{i+1}} \mathrm{d}z = \frac{\mathrm{d}c_{\alpha,i}^I}{\mathrm{d}t}(z_{i+1} - z_i) = \frac{\mathrm{d}c_{\alpha,i}^I}{\mathrm{d}t}\Delta z \tag{20}$$

Für den Gradienten $\frac{\partial}{\partial z}\left(c_\alpha^I v^I\right)$ gestaltet sich die Profilannahme etwas schwieriger. Hier geht man vom ,,Upwind-Schema" aus und wählt gemäß der ,,Informationsflussrichtung" im Rohr

$$(cv)_{z_i} = \begin{cases} (cv)_{i-1} & \forall v > 0 \\ (cv)_i & \forall v < 0 \end{cases}$$

$$-\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial}{\partial z}\left(c_\alpha^I v^I\right) \mathrm{d}z = -\left(\left(c_\alpha^I v^I\right)_{z_{i+1}} - \left(c_\alpha^I v^I\right)_{z_i}\right) = -\left(\left(c_\alpha^I v^I\right)_i - \left(c_\alpha^I v^I\right)_{i-1}\right) \tag{21}$$

Wie schon bei der Konzentration geht man auch bei der Stofftromdichte von einem konstanten Profil aus.

$$-\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{g_\alpha}{h^I} \mathrm{d}z = -\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{g_{\alpha,i}}{h^I} \mathrm{d}z = -\frac{g_{\alpha,i}}{h^I} \int_{z_i}^{z_{i+1}} \mathrm{d}z = -\frac{g_{\alpha,i}}{h^I}(z_{i+1} - z_i) = -\frac{g_{\alpha,i}}{h^I}\Delta z \tag{22}$$

Fügt man nun (20), (21) und(22) zusammen und teilt durch Δz, folgt

$$\frac{\mathrm{d}c_{\alpha,i}^I}{\mathrm{d}t} = -\frac{(c_\alpha^I v^I)_i - (c_\alpha^I v^I)_{i-1}}{\Delta z} - \frac{g_{\alpha,i}}{h^I} \qquad \forall i \in [2,N] \tag{23}$$

Das erste Volumenelement besitzt keinen linken Nachbarn. Hier muss die Randbedingung genutzt werden.

$$\frac{\mathrm{d}c_{\alpha,1}^I}{\mathrm{d}t} = -\frac{(c_{\alpha,1}^I v_1^I) - (c_{\alpha,\mathrm{in}}^I v_{\mathrm{in}}^I)}{\Delta z} - \frac{g_{\alpha,1}}{h^I} \tag{24}$$

Auf gleichem Wege ergibt sich für das untere Rohr

$$\frac{\mathrm{d}c_{\alpha,i}^{II}}{\mathrm{d}t} = -\frac{(c_\alpha^{II} v^{II})_{i+1} - (c_\alpha^{II} v^{II})_i}{\Delta z} + \frac{g_{\alpha,i}}{h^{II}} \qquad \forall i \in [1,N-1] \tag{25}$$

$$\frac{\mathrm{d}c^{I\!I}_{\alpha,N}}{\mathrm{d}t} = -\frac{(c^{I\!I}_{\alpha,\mathrm{in}} v^{I\!I}_{\mathrm{in}}) - (c^{I\!I}_{\alpha,N} v^{I\!I}_{N})}{\Delta z} + \frac{g_{\alpha,N}}{h^{I\!I}} \tag{26}$$

Anschließend werden die Geschwindigkeitsgradienten mit Hilfe des ,,Upwind-Schemas" ebenfalls diskretisiert.

$$v^I_i = v^I_{i-1} - \sum_\alpha v^m_\alpha \frac{g_{\alpha,i}}{h^I}\Delta z \quad \forall i \in [2,N] \quad \text{und} \quad v^{I\!I}_i = v^{I\!I}_{i+1} - \sum_\alpha v^m_\alpha \frac{g_{\alpha,i}}{h^{I\!I}}\Delta z \quad \forall i \in [1,N-1] \tag{27}$$

mit den Randbedingungen

$$v^I_1 = v^I_{\mathrm{in}} - \sum_\alpha v^m_\alpha \frac{g_{\alpha,1}}{h^I}\Delta z \qquad \text{und} \qquad v^{I\!I}_N = v^{I\!I}_{\mathrm{in}} - \sum_\alpha v^m_\alpha \frac{g_{\alpha,N}}{h^{I\!I}}\Delta z \tag{28}$$

2.2 Gemischte Terme

Hier soll versucht werden die Konzentrationsbilanz aus Aufgabenteil 1.1 mittels der Ergebnisse aus Aufgabenteil 1.2 zu modifizieren. Setzt man (10) in (5) ein, so erhält man

$$\frac{\partial c^I_\alpha}{\partial t} = -c^I_\alpha \frac{\partial v^I}{\partial z} - v^I \frac{\partial c^I_\alpha}{\partial z} - \frac{g_\alpha}{h^I} = -c^I_\alpha \sum_\alpha \frac{g_\alpha}{h^I} - v^I \frac{\partial c^I_\alpha}{\partial z} - \frac{g_\alpha}{h^I} \tag{29}$$

Diskretisiert man nun (29), so ergibt sich

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c^I_\alpha}{\partial t}\mathrm{d}z = -\int_{z_i}^{z_{i+1}} c^I_\alpha \sum_\alpha \frac{g_\alpha}{h^I}\mathrm{d}z - \int_{z_i}^{z_{i+1}} v^I \frac{\partial c^I_\alpha}{\partial z}\mathrm{d}z - \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{g_\alpha}{h^I}\mathrm{d}z$$

$$\frac{\mathrm{d}c^I_{\alpha,i}}{\mathrm{d}t} = -c^I_{\alpha,i} \sum_\alpha \frac{g_{\alpha,i}}{h^I} - v^I_i \frac{c^I_{\alpha,i} - c^I_{\alpha,i-1}}{\Delta z} - \frac{g_{\alpha,i}}{h^I} \tag{30}$$

Zunächst erkennt man, dass der zweite Term der rechten Seite von (30) an die Bilanz eines Rührkessels erinnert. Die gleichbleibende Geschwindigkeit wird in solchen Fällen mit der Differenz von Eingangs- und Ausgangskonzentration multipliziert. Wenn angenommen wird, dass die Geschwindigkeiten im Ein- und Austritt im vorliegenden Beispiel gleich groß sind, wird eine weitere Vereinfachung getroffen, die eine weitere Ursache für fehlerhafte Berechnungen sein kann. Betrachtet man den ersten Term der linken Seite von (30) und setzt für ihn (27) ein, wird die Unsinnigkeit dieses Verfahrens weiter verdeutlicht.

$$\frac{\mathrm{d}c^I_{\alpha,i}}{\mathrm{d}t} = -c^I_{\alpha,i}\frac{v^I_i - v^I_{i-1}}{\Delta z} - v^I_i \frac{c^I_{\alpha,i} - c^I_{\alpha,i-1}}{\Delta z} - \frac{g_{\alpha,i}}{h^I} = -\frac{2c^I_{\alpha,i}v^I_i - c^I_{\alpha,i}v^I_{i-1} - c^I_{\alpha,i-1}v^I_i}{\Delta z} - \frac{g_{\alpha,i}}{h^I} \tag{31}$$

Das erhaltene Ergebnis ist offensichtlich falsch bzw sehr stark vereinfacht und somit fehlerbehafteter als die Diskretisierung in Aufgabenteil 2.1. Zusammenfassend soll hier davor gewarnt werden, Ableitungen von Produkten der Veränderlichen durch Anwendung der Produktregel aufzulösen.

2.3 Implementierung in `Matlab`

Die ermittelten Gleichungen für die Salzkonzentration in den beiden Rohren soll nun in `Matlab` implementiert werden.

```
1  %------------------------------------------------------------------%
2  %                                                                  %
3  %      Steffi Klinge, STK 03, Matrikelnummer 168209                %
4  %                                                                  %
5  %------------------------------------------------------------------%
6
7  %function pue2_main
8
9  %------------------------------------------------------------------
10 %Aufräumen
11 clear all;
```

```
close all;
clc;

%------------------------------------------------------------------------
%Parameter
% 1 und 2 beziehen sich auf das obere (1) oder das untere (2) Rohr
% w und s beziehen sich auf Stoffparameter von Salz oder Wasser
p.h_1 = 1e-4;           %m
p.h_2 = 1e-4;           %m
p.L = 2;                %m
p.p_1 = 1e7;            %Pa
p.p_2 = 1e5;            %Pa
p.v_w = 1/55555;        %m^3/mol
p.v_s = 1/120000;       %m^3/mol
p.D_w = 1e-7;           %m^2/s
p.D_s = 1e-10;          %m^2/s
p.e = 0.1;              %-
p.d = 1e-4;             %m
p.T = 293.15;           %K
p.R = 8.314;            %J/molK
p.n =50;                %-, Anzahl der finiten Volumen

%------------------------------------------------------------------------
%Anfangs- und Randwerte
p.v_in1 = 0.1;          %m/s
p.v_in2 = -0.03;        %m/s
p.c_mw = 1e3;           %mol/m^3
x_0 = [p.c_mw*ones(1,p.n) p.c_mw*ones(1,p.n)];

%------------------------------------------------------------------------
%Numerische Integration
p.t_end = 100;              %Endzeitpunkt

%Aufrufen des ODE-Solvers
options = odeset;
[t,x] = ode15s(@pue2_1, [0 p.t_end], x_0, options, p);

%------------------------------------------------------------------------
%Graphische Ausgabe
c_s1 = x(:,1:p.n);      %Aufspalten des Konzentrationsvektors
c_s2 = x(:,p.n+1:2*p.n);

zm = ((1:p.n)-0.5)*p.L/p.n; %mittlere Punkte der finiten Volumen

figure(1)               %Darstellung der Salzkonzentration im Rohr 1
mesh(t,zm,c_s1','Linestyle','none','FaceColor','interp');
xlabel('t in s');
ylabel('z in m');
zlabel('c_{NaCl}^I in mol/m^3');
title('Salzkonzentration im oberen Rohr');

figure(2)               %Darstellung der Salzkonzentration im Rohr 2
mesh(t,zm,c_s2','Linestyle','none','FaceColor','interp');
xlabel('t in s');
ylabel('z in m');
zlabel('c_{NaCl}^{II} in mol/m^3');
title('Salzkonzentration im unteren Rohr');

figure(3)               %Darstellung der Konzentrationen im stat. Zu.
plot(zm,c_s1(end,:),zm,c_s2(end,:));
grid on;
legend('c_{NaCl}^{I}','c_{NaCl}^{II}');
xlabel('z in m');
ylabel('c_{NaCl} in mol/m^3');
title('Salzkonzentration in beiden Rohren im stationären Zustand');

%------------------------------------------------------------------------
%Ausgabe im Command Window
disp('================================================================');
disp('Salzaustritskonzentraion aus dem oberen Rohr im stationären Zustand');
```

```
disp(sprintf(' c_NaCl^I = %g mol/m^3\n\n',c_s1(end,p.n)));
disp('========================================================================');
disp('Salzaustritskonzentraion aus dem unteren Rohr im stationären Zustand');
disp(sprintf(' c_NaCl^II = %g mol/m^3\n\n',c_s2(end,1)));
```

```
%------------------------------------------------------------------------%
%                                                                        %
%      Steffi Klinge, STK 03, Matrikelnummer 168209                      %
%                                                                        %
%------------------------------------------------------------------------%

function dx = pue2_1(t,x,p);

%------------------------------------------------------------------------
%Aufspalten des Zustandsvektors
c_s1 = x(1:p.n);
c_s2 = x(p.n+1:2*p.n);

%------------------------------------------------------------------------
%Berechnung der Wasser- und Gesamtkonzentration
c_w1 = (1-c_s1*p.v_s)/p.v_w;
c_w2 = (1-c_s2*p.v_s)/p.v_w;
c_t1 = c_s1 + c_w1;
c_t2 = c_s2 + c_w2;

%------------------------------------------------------------------------
%Berechnung der Stoffaustauschdichten
dz = p.L/p.n;           %Länge der finiten Volumenelemente
for i=1:p.n
    g_s(i) = (c_s1(i) + c_s2(i))/2 * p.e*p.D_s * (p.v_s/p.R/p.T * ...
        (p.p_1 - p.p_2)/p.d + log((c_s1(i)/c_t1(i))/(c_s2(i)/c_t2(i)))/p.d);
    g_w(i) = (c_w1(i) + c_w2(i))/2 * p.e*p.D_w * (p.v_w/p.R/p.T * ...
        (p.p_1 - p.p_2)/p.d + log((c_w1(i)/c_t1(i))/(c_w2(i)/c_t2(i)))/p.d);
end

%------------------------------------------------------------------------
%Berechnung der Konvektionsgeschwindigkeiten
v1(1) = p.v_in1 - (p.v_s*g_s(1)+p.v_w*g_w(1))/p.h_1*dz;
v2(p.n) = p.v_in2 - (p.v_s*g_s(p.n)+p.v_w*g_w(p.n))/p.h_2*dz;
for i=1:p.n-1
    v1(i+1) = v1(i) - (p.v_s*g_s(i+1)+p.v_w*g_w(i+1))/p.h_1*dz;
    v2(p.n-i) = v2(p.n-i+1) - (p.v_s*g_s(p.n-i)+p.v_w*g_w(p.n-i))/p.h_2*dz;
end

%------------------------------------------------------------------------
%Ausgabe im Command Window
if t==p.t_end
    disp('========================================================================');
    disp('Austritsgeschwindigkeit aus dem oberen Rohr im stationären Zustand');
    disp(sprintf('v_out^I = %g m/s\n\n',v1(p.n)));
    disp('========================================================================');
    disp('Austritsgeschwindigkeit aus dem unteren Rohr im stationären Zustand');
    disp(sprintf('v_out^II = %g m/s\n\n',v2(1)));
end

%------------------------------------------------------------------------
%Berechnung der Salzkonzentrationen
dc_s1(1) = - (c_s1(1)*v1(1) - p.c_mw*p.v_in1)/dz - g_s(1)/p.h_1;
dc_s2(p.n) = - (p.c_mw*p.v_in2 - c_s2(p.n)*v2(p.n))/dz + g_s(p.n)/p.h_2;
for i=1:p.n-1
    dc_s1(i+1) = - (c_s1(i+1)*v1(i+1) - c_s1(i)*v1(i))/dz - g_s(i+1)/p.h_1;
    dc_s2(p.n-i) = - (c_s2(p.n-i+1)*v2(p.n-i+1) - c_s2(p.n-i)*v2(p.n-i))/dz +...
        g_s(p.n-i)/p.h_2;
end

dx = [dc_s1 dc_s2]';   %Rückgabevektor
```

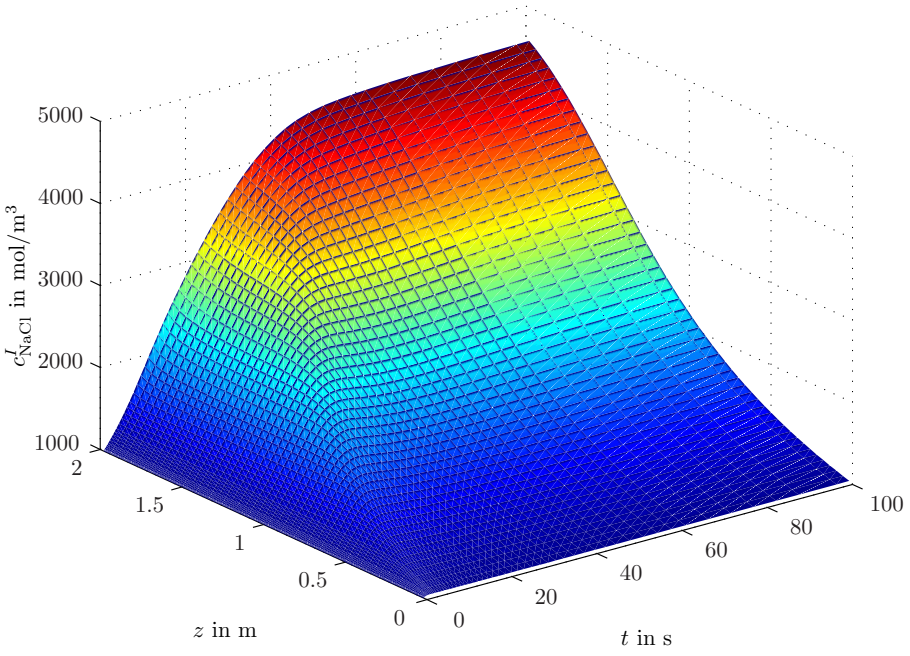


Abbildung 1: Salzkonzentration im oberen Reaktor

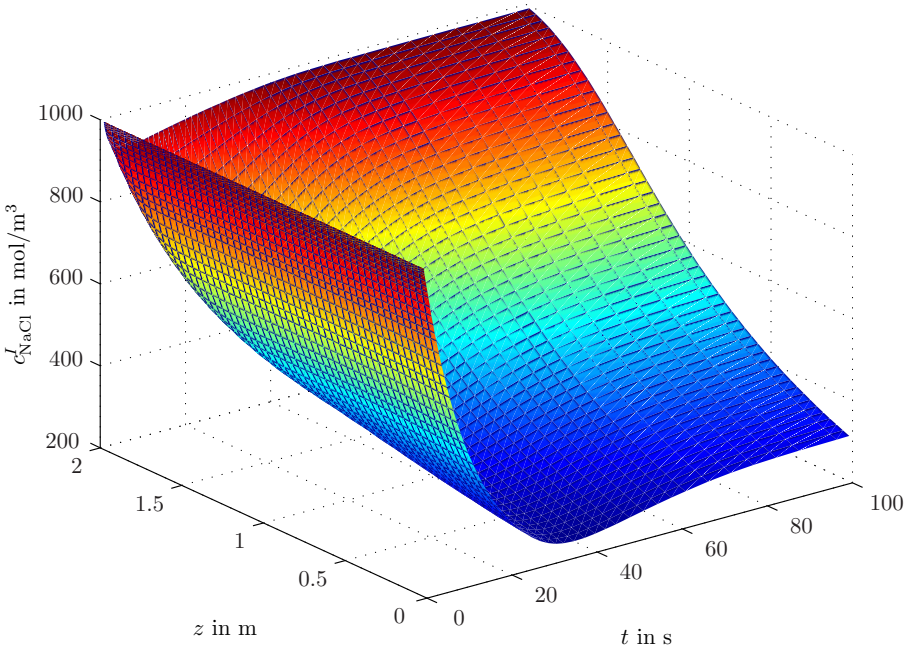


Abbildung 2: Salzkonzentration im unteren Reaktor

2.4 Grenzwertbetrachtung

Die in `Matlab` simulierten Konzentrationsverläufe zeigen, dass nach einiger Zeit (hier 100 s) sich zwar ein stationärer Wert einstellt, die Salzkonzentration am Ablauf des zweiten Reaktors jedoch nicht 0 ist, wie man in Abb. 2 sehen kann. Tatsächlich beträgt sie 310 mol/m^3. Es kann also mit diesem Reaktor in diesem Betriebszustand kein reines Wasser gewonnen werden. Betrachte man nun einen unendlich langen Rohrreaktor mit einer idealen Membran, die also kein Salz durchlässt. Um seinen stationären Zustand berechnen zu können muss die zeitliche Ableitung gleich 0 sein. Auch die Ableitung nach z wird hier zu

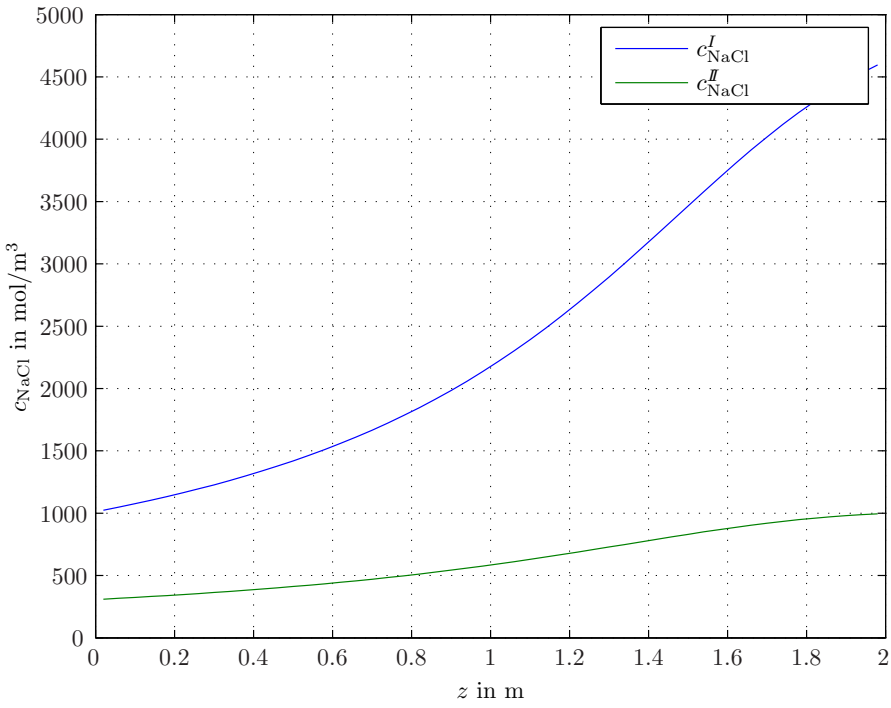


Abbildung 3: Salzkonzentration im stationären Zustand

0. Somit ergibt sich, dass der Stoffstrom durch die Membran ebenso gleich 0 sein muss.

$$0 = g_{\mathrm{H_2O}} = \varepsilon \bar{D}_{\mathrm{H_2O},M} \bar{c}_{\mathrm{H_2O}} \left(\frac{v^m_{\mathrm{H_2O}}}{RT} \frac{p^I - p^{II}}{d} + \frac{\ln(x^I_{\mathrm{H_2O}}/x^{II}_{\mathrm{H_2O}})}{d} \right)$$

Also ergibt sich für den maximalen Molenbruch von Wasser

$$x^{II}_{\mathrm{H_2O}} = x^I_{\mathrm{H_2O}} \mathrm{e}^{\frac{v^m_{\mathrm{H_2O}}}{RT}(p^I - p^{II})} = 1{,}057 \overset{!}{>} 1$$

Der Molenbruch kann nicht größer als 1 sein. Das Ergebnis ist dennoch nicht falsch. Es zeigt, dass der Druckgradient zu groß gewählt ist. Ein kleinerer Druckunterschied würde ausreichen, um reines Wasser am Ausfluss des unteren Rohres zu erhalten, bzw es könnte auch Flüssigkeit mit einer höheren Salzkonzentration eingeleitet werden.

$$\Delta p_{\min} = \frac{RT}{v^m_{\mathrm{H_2O}}} \ln(1/x^I_{\mathrm{H_2O}}) = 2{,}44 \text{ MPa}$$

$$x^I_{\mathrm{H_2O,\,min}} = \mathrm{e}^{-\frac{v^m_{\mathrm{H_2O}}}{RT}(p^I - p^{II})} = 0{,}93$$

$$x^I_{\mathrm{NaCl,\,max}} = 0{,}07 \qquad \Rightarrow \qquad c^I_{\mathrm{NaCl,\,max}} = 4071 \text{ mol/m}^3$$