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

SS 2013
Systemverfahrenstechnik
3. Projektübung

Ausgabetermin: 19. Juni 2013
Abgabetermin: 03. Juli 2013, 13:00 Uhr

1 Aufgabe: Konstitutive Gleichungen (21 P)

1.1 Benenne die drei Bausteine für ein Prozessmodell in der Verfahrenstechnik und gib jeweils ein Beispiel an. (3 P)

1.2 Gib je ein Beispiel für Größen an, die an Phasengrenzen springen können und für Größen, die an Phasengrenzen nicht springen können! (1 P)

1.3 Gib einen einfachen Ansatz für konduktiven Wärmetransport (Wärmeleitung) an. Wie ist die Einheit des kinetischen Koeffizienten? (1 P)

1.4 Erläutere daran die typische Struktur einer empirischen Transport-Kinetik! (1 P)

1.5 Wie nennt man den Effekt, bei dem Diffusion durch Temperaturgradienten hervorgerufen wird? Handelt es sich um einen Grund- oder Überlagerungseffekt? Wodurch wird Diffusion sonst getrieben? (2P)

1.6 Reaktionskinetik (3,5 P)

Gegeben seien folgende Gasphasenreaktionen:

$$\mathrm{A}+\mathrm{B} \underset{k_{1-}}{\overset{k_{1+}}{\rightleftarrows}} 2\mathrm{C}+\mathrm{D} \qquad \mathrm{B}+\mathrm{D} \overset{k_2}{\rightarrow} \mathrm{E} \quad .$$

1.6.1 Gib Potenzansätze für die Kinetik der beiden Reaktionsraten r_1 und r_2 [mol/m^3/s] an! Unterstelle dabei, dass es sich um Elementarreaktionen handelt! (1,5 P)

1.6.2 Gib die lokalen Quelldichten σ_α für die Spezies C und D an! (1 P)

1.6.3 Nenne zwei weitere reaktionskinetischen Ansätze neben dem Potenzansatz. (1 P)

1.7 Maxwell-Stefan-Ansatz und Ficksche Diffusion (5 P)

1.7.1 Was ist das Ziel des Maxwell-Stefan-Ansatzes! (1 P)

1.7.2 Erläutere das Prinzip des Maxwell-Stefan-Ansatzes! (1 P)

1.7.3 Gehe vom Maxwell-Stefan Ansatz aus:

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

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. (3 P)

1.8 Noch mal Maxwell-Stefan (4,5 P)

Abbildung 1 beschreibt schematisch den Ablauf an einer Brennstoffzellenelektrode an der folgende Reaktion abläuft:

$$O_2 + \; 4H^+ + \; 4e^- \;\rightarrow\; 2H_2O^{g.}$$

Das Edukt Sauerstoff (Index 1) wird aus dem Gasbulk an die Elektrodenoberfläche herantransportiert, das Produkt Wasserdampf (Index2) wird in den Bulk abtransportiert. Neben Sauerstoff und Wasserdampf enthält das Reaktionsgemisch keine weiteren Spezies. Von den Molenbrüchen x_1 und x_2 im Bulk und an der Elektrodenoberfläche wird angenommen, dass diese

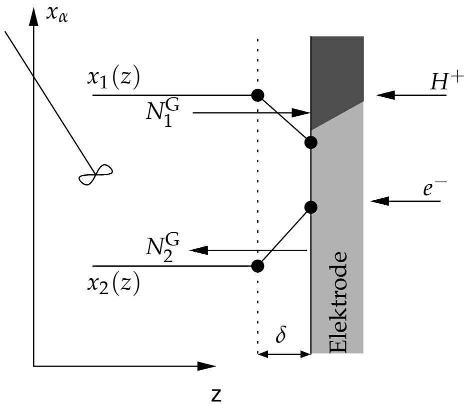

Abbildung 1: Elektrodenreaktion

aus Bilanzgleichungen bekannt sind.

Leite ausgehend von folgendem Maxwell-Stefan-Ansatz

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

eine kinetische Beziehung für die molare Stoffstromdichte von Sauerstoff N_{z,O_2} her! Gehe dabei von idealem Gasverhalten aus und berücksichtige den Stofftransportwiderstand mit Hilfe eines einfachen Filmmodells! Nutze außerdem die zusätzliche Information über den molaren Stofftransport aus der Reaktionsgleichung.

2. Aufgabe – Charakteristiken (10P)

In der chemischen Industrie werden für langsame Gas-Flüssig-Reaktionen oft Blasensäulen eingesetzt. Das Eduktgas wird am Boden der Blasensäule als Blasen eingeströmt. Durch den Dichteunterschied von Gas und Flüssigkeit steigen die Gasblasen nach oben und überschüssiges Gas wird am Kopf der Blasensäule aufgefangen. Während des Aufstiegs findet an der Gas-Flüssig-

Phasengrenze Stoffaustausch statt. Das Eduktgas geht dabei in die Flüssigphase über und reagiert dort mit den flüssigen Edukten. Wenn das Produkt leichter ist als die Flüssigphase, kann es direkt am Kopf der Blasensäule abgezogen werden. Wir betrachten nun die Bilanz der Konzentration einer Komponente alpha in der Gasphase:

$$\frac{\partial c_\alpha^G}{\partial t} = -v^G \frac{\partial c_\alpha^G}{\partial z} + \frac{1}{\epsilon^G} a J_\alpha^{GL}$$

2.1 Warum stellt die Charakteristikenmethode ein geeignetes Verfahren dar, um die obige Differentialgleichung analytisch zu lösen? (1 P)

2.2 Nehmen Sie an, die Gasphase kann vereinfachend mit der folgenden Formel beschrieben werden:

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} = -v \frac{\partial c_\alpha}{\partial z} - \frac{k c_\alpha}{1+z} \quad \text{mit} \quad \begin{array}{l} c_\alpha(t, z=0) = c_{\alpha,in}(t) \\ c_\alpha(t=0, z) = c_{\alpha,0}(z) \end{array}$$

wobei der Quellterm den mit der Aufstiegshöhe veränderlichen Stoffstrom zwischen den Phasen beschreibt, dessen Triebkraft nur von der Gasphasenkonzentration abhängig ist.
Lösen Sie die Gleichung analytisch mit Hilfe der Methode der Charakteristiken! (7 P)

2.3 Skizzieren Sie den Verlauf der Lösung $c_\alpha(z, t)$ für drei Zeitpunkte $0 = t_1 < t_2 < t_3$ unter Annahme folgender Parameterwerte und Randbedingungen:

$$\begin{array}{l} k, v = 1 \\ c_{\alpha,0}(z) = 0 \\ c_{\alpha,\mathrm{in}}(t) = \tilde{c}_{\alpha,\mathrm{in}} H(t) \end{array}$$

Dabei ist H die Heavisidesche Sprungfunktion. (2 P)

3 Aufgabe – Laplace Transformation (17 P)

3.1 Erläutere in wenigen Stichworten die Lösung von partiellen Differentiagleichungen mit Hilfe der Laplacetransformation! (2 P)

3.2 Laplace Transformation (15 P)

Gegeben ist das folgenden Konvektions-Diffusions-Problem

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v \frac{\partial c}{\partial z}$$

RB: $c(z=0, t) = c_{\mathrm{ein}}$, $c(z \to \infty, t) = 0$ für $t > 0$

AB: $c(z, t=0) = 0$ für $z > 0$.

3.2.1 Eliminiere den Konvektionsterm durch folgende Koordinatentransformation:

$$\begin{array}{l} x = z - v \cdot t \\ \tau = t \end{array} \quad \text{(4P)}$$

3.2.2 Löse das aus 3.2.1 resultierende Diffusionsproblem

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

RB: $c(x=0,\tau)=c_{\mathrm{ein}}$, $c(x\rightarrow\infty,\tau)=0$ für $\tau>0$

AB: $c(x,\tau=0)=0$ für $x>0$

mit Hilfe der Laplace-Transformation. Nutze zur Rücktransformation in den Zeitbereich folgende Beziehung (aus Laplace-Tabelle):

$$L^{-1}\left[\frac{e^{-a\sqrt{s}}}{s}\right]=\operatorname{erfc}\left(\frac{a}{\sqrt{4\cdot t}}\right)$$ (8P)

3.2.3 Transformiere die Lösung $c(x,\tau)$ in das ursprüngliche Koordinatensystem (z,t). (1P)

3.2.4 Skizziere die analytische Lösungen für den Fall D=0. Wie verändert sich das Lösungsprofil wenn man die Finite-Volumen-Methode anwendet? (2P)