

### Aufgabe 1

1.) Für die Modellierung örtlich verteilter Systeme stehen im Allgemeinen 3 Bilanzgleichungen zur Verfügung:

- Materialbilanz: diese kann in ihrer Form als Gesamtmassenbilanz und als partielle Massenbilanz verwendet werden. Dabei wird Erstere zur Bestimmung des Dichte- und Druckfeldes genutzt und die zweite zur Bestimmung des Konzentrationsfeldes.
- Energiebilanz: diese kann ebenfalls in verschiedene Bilanzgleichungen (Gesamtenergie, innere Energie und Enthalpie) geschrieben werden. Mit der Energiebilanz wird dabei das Temperaturfeld bestimmt.
- Impulsbilanz: diese tritt nur als Impulsbilanz auf und mit ihr wird das Geschwindigkeitsfeld bestimmt.

Dabei auftretende unabhängige Variablen sind die Zeit  $t$  und die drei Raumkoordinaten (für eine dreidimensionale Betrachtungsweise)  $z_1$ ,  $z_2$  und  $z_3$ .

2.) In der Verfahrenstechnik treten Zeitableitungen maximal bis zur zweiten Ableitung auf (zum Beispiel die Wellengleichung). Diese sind aber eher selten, häufiger sind Gleichungen mit einer Zeitableitung der ersten Ordnung, zum Beispiel die Wärmeleitungsgleichung.

In der Physik treten sehr häufig höhere Ableitungen auf, so zum Beispiel im Bereich der Mechanik:

Die Geschwindigkeit als erste Ableitung des Ortes nach der Zeit:

$$v(t) = \frac{ds}{dt}$$

Die Beschleunigung als zweite Ableitung des Ortes nach der Zeit, bzw. als erste Ableitung der Geschwindigkeit nach der Zeit:

$$a(t) = \frac{dv}{dt} = \frac{d^2s}{dt^2}$$

Der Ruck als dritte Ableitung des Ortes nach der Zeit, bzw. als erste Ableitung der Beschleunigung nach der Zeit. Das allgemeine angewandte - nicht offiziell anerkannte - Symbol ist das  $j$  für Englisch *jerk*:

$$j(t) = \frac{da}{dt} = \frac{d^2v}{dt^2} = \frac{d^3s}{dt^3}$$

Höhere Ableitung gibt es auch in der Physik bzw. Mechanik, so wurde beim Kontrollsystem des Hubble-Teleskopes eine vierte Ableitung des Ortes nach der Zeit gebraucht. Für diese gibt es aber keine offiziellen Namen, da sie so selten gebraucht werden. In eben genanntem Beispiel wurde die Einheit mit *jounce* bezeichnet. Da diese aber auch mit  $j$  beginnt, gibt es weitere verschiedene Namensvorschläge, so zum Beispiel *crack*. In diesem Zusammenhang wurden auch noch höhere Zeitableitungen mit Namensvorschlägen versehen, wobei darunter aber nichts wissenschaftlich Anerkanntes existiert.

3.) In dieser Aufgabe sind partielle Differentialgleichungen gegeben, die bestimmt werden sollen:

a)  $-\Delta u = f(z)$

Bei dieser elliptischen Differentialgleichung handelt es sich um die Poisson-Gleichung. Im eindimensionalen Fall benötigt man zwei Randbedingungen. Sie ist linear in  $u$ . Ein Beispiel dieser Gleichung wäre ein stationäres Temperaturfeld über einer Platte. Diese Gleichung kann man auch in der Tensornotation wiedergeben:

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial z_k^2} = f(z)$$

b)  $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \Delta u = f(z, t)$

Hier liegt eine hyperbolische Differentialgleichung vor. Ein Beispiel für diese ist das Schwingen einer eingespannten Saite und ihr Name ist im Allgemeinen Wellengleichung. Zur Lösung werden auf einem endlichen Definitionsbereich 2 Anfangsbedingungen und 2 Randbedingungen gebraucht. Die partielle Differentialgleichung ist linear in  $u$ . Die Tensornotation für diese Gleichung lautet:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial z_k^2} = f(z, t)$$

c)  $\frac{\partial u}{\partial t} - D \Delta u = f(z, t)$

Dies ist eine parabolische Differentialgleichung. Sie ist bekannt unter dem Namen instationäre Wärmeleitungsgleichung. Ein Beispiel ist die Diffusion mit Quellen oder Senken, je nach dem Vorzeichen von  $f$ . Sie ist linear in  $u$  und benötigt zur Lösung eine Anfangsbedingung und 2 Randbedingungen auf einem endlichen Gebiet.

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial z_k^2} = f(z, t)$$

d)  $\frac{\partial u}{\partial t} - D \Delta u = f(u, z, t)$

Diese parabolische Differentialgleichung ist die nichtlineare Form der Gleichung c), wenn  $f \neq u$ ; bei  $f = u$  ist sie linear in  $u$ . Somit ist dies auch die instationäre Wärmeleitungsgleichung. Ein Beispiel wäre die Anwendung der Fisher-Nagumo-Kolmogorov-Gleichungen zur Beschreibung der räumlichen Ausdehnung eines bestimmten Gens in einer Population. Somit braucht man auch zur Lösung dieser Gleichung eine Anfangsbedingung und 2 Randbedingungen.

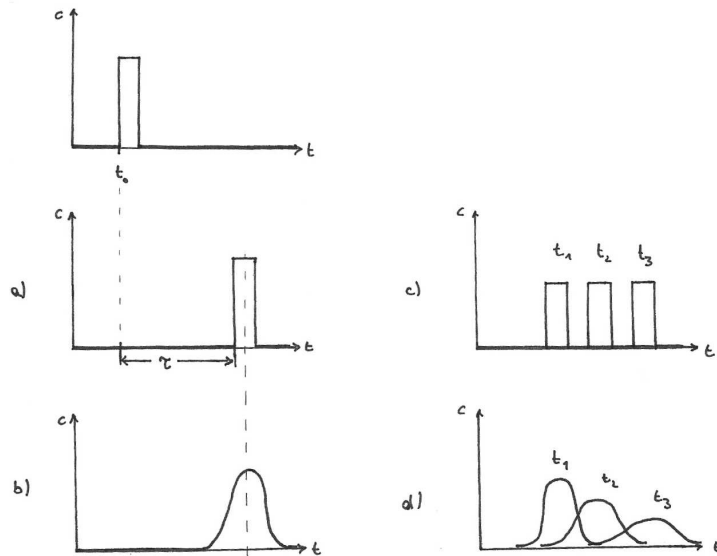
$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial z_k^2} = f(u, z, t)$$

4.) Aufgabe eines Konzentrationspuls als Eingangssignal:

Ohne Diffusion würde der Impuls zeitverzögert genauso austreten, wie er aufgegeben wurde (a). Mit Diffusion würde der Impuls „in die Breite gezogen“ werden und ebenfalls zeitverzögert austreten. Bei einem idealen Verhalten des Systems sähe der austretende Impuls wie die Gaußsche Glockenkurve aus, bei nicht idealem Verhalten ist das Ausgangssignal nur Gaußähnlich. Dieses Verhalten ist abhängig vom Diffusionskoeffizienten (b).

Je nach Strömungsgeschwindigkeit dauert es länger, bis der Impuls durch das Rohr gelangt ( $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_3$ )(c). Bei auftretender Diffusion (d) würde der Impuls bei längerer Zeitdauer noch mehr in die Breite gezogen werden und flacher werden, dies hängt natürlich von der Stärke der Diffusion ab, je stärker diese, desto breiter und flacher die Kurve.

In einem numerisch approximierten System würden die einzelnen Signale in Abhängigkeit von der Dichte jeweils (also a) und b)) in die Breite gezogen werden, da numerische Diffusion auftritt. Das System b) würde dabei noch breiter gezogen, als es bisher schon war, auf Grund von auftretenden Überlagerungen der numerischen Diffusion und dem „echten“ Diffusionsterm. Diese beiden bilden zusammen einen effektiven Diffusionskoeffizienten. Das System a) würde nur in die Breite gezogen werden, da es keinen Diffusionsterm im realen System gibt.



## Aufgabe 2

- 1.) In diesem System liegt ein Rohrreaktor vor. Das Edukt A reagiert in einer Reaktion 1. Ordnung zum Produkt B. Die allgemeine Formulierung des Quellen- und Senkenterms und der Reaktionsgeschwindigkeit lauten:

$$\sigma_\alpha = \sum_j \nu_{\alpha,j} r_j \quad r = k(T) \prod_{\text{Edukte}} c_\alpha^{|\nu|}$$

In diesem Ansatz kann die Reaktionsordnung in Abhängigkeit von  $\nu$  geschrieben werden.

Setzt man in die Reaktionsgeschwindigkeit nun den Arrhenius-Ansatz ein, so erhält man die für diese Aufgabenstellung gesuchte Reaktionsgeschwindigkeit und den Quellen- und Senkenterm für die Komponente A.

$$k(T) = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right)$$

$$r = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A^{|\nu|-1} = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A \quad (1)$$

$$\sigma_A = -k(T) c_A = -k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A \quad (2)$$

- 2.) Die lokale Gesamtmassenbilanz nach Gleichung (1.15) des Skriptes hat die Form:

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

Es existiert keine Konvektion in die Breite oder Tiefe des Rohrsystems. Somit entfallen die  $z_2$ - und  $z_3$ - Koordinaten. Die Anwendung der Produktregel liefert somit:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -v_1 \frac{\partial \rho}{\partial z_1} - \rho \frac{\partial v_1}{\partial z_1}$$

Aus der 3. Annahme kann nun geschlussfolgert werden, dass die Dichte konstant ist. Somit ist die zeitliche und örtliche Ableitung der Dichte gleich Null. Also kann die Gleichung wie folgt vereinfacht werden:

$$0 = -\rho \frac{\partial v_1}{\partial z_1} \implies 0 = \frac{\partial v_1}{\partial z_1}$$

Nun kann man aus dieser Aussage schlussfolgern, dass die Geschwindigkeit im gesamten Rohr konstant ist, da sie sich örtlich nicht ändert. Somit folgt:

$$v_1 = \text{const.} = v_{in} = \frac{F_{in}}{A} = \frac{F_{in}}{b \cdot d} \quad (3)$$

Wie sich aus dieser Rechnung ergeben hat, ist  $v = \text{const.}$  und kann somit nicht als  $v(z, t)$  dargestellt werden, sondern nur als  $v(F_{in}, A)$ . Sollte der Volumenstrom  $F_{in}$  konstant gehalten werden, so ist natürlich auch  $v_1$  konstant und bei variierendem  $F_{in}$  verändert sich  $v_1$  im selben Maße.

3.) Die lokale Komponentenmassenbilanz nach Gleichung (1.11):

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_1}(\rho_\alpha v_1 + \tilde{j}_{\alpha,k}) + \tilde{\sigma}_\alpha$$

Für das  $v_k$  wird schon ab hier  $v_1$  geschrieben, da ja bereits in der vorhergehenden Aufgabe hergeleitet wurde, dass alle anderen  $v$ 's Null sind, da Konvektion ja nur in  $z_1$ -Richtung auftritt. Mit  $\rho_\alpha = M_\alpha \cdot c_\alpha$  kann nun diese Gleichung vereinfacht werden. Dabei wird  $M_\alpha$  als konstant angesehen und kann somit aus den Differentialen geschrieben werden, weiterhin wird gleich durch  $M_\alpha$  geteilt, wobei gilt:

$$\frac{\tilde{j}_{\alpha,k}}{M_\alpha} = j_{\alpha,k} \quad \text{und} \quad \frac{\tilde{\sigma}_\alpha}{M_\alpha} = \sigma_\alpha$$

Somit ergibt sich die dynamische Gleichung für die Eduktkonzentration (Edukt=A) mit:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_1}(c_A v_1 + j_{A,k}) + \sigma_A$$

Diese in  $k$  dreidimensionale Form kann nun über die Breite ( $z_3$ -Richtung) und die Tiefe ( $z_2$ -Richtung) integriert werden, um die Gleichung zu vereinfachen.

Eine kleine Vorüberlegung vermindert hier den Rechenaufwand enorm: Konvektion findet wie bereits gesagt nur in  $z_1$ -Richtung statt, womit die Bezeichnung des  $v$ 's begründet ist. Diffusion kann nur vom Reservoir durch die Membran geschehen. Also diffundiert die Komponente A auch nur in die Tiefe des Rohres. Somit kann Diffusion in die Breite einfach ausgeschlossen werden. Also muss über die  $z_3$ -Richtung nicht integriert werden. Da die auftretenden Terme (Diffusionsterm) sich zu Null ergeben, oder jeweils nur ein  $b$  hinzukommt, welches durch Division gekürzt werden kann.

Die Integration über die  $z_2$ -Richtung folgt nun (wobei die Membran an  $d$  liegt):

$$\begin{aligned} \int_0^d \frac{\partial c_A}{\partial t} dz_2 &= \int_0^d -\frac{\partial}{\partial z_1}(c_A v_1 + j_{A,1}) dz_2 - \int_0^d \frac{\partial}{\partial z_1}(c_A v_2 + j_{A,2}) dz_2 + \int_0^d \sigma_A dz_2 \\ \frac{\partial c_A}{\partial t} d &= -\frac{\partial}{\partial z_1}(c_A v_1 + j_{A,1})d - (c_A v_2 + j_{A,2}) \Big|_0^d + \sigma_A d \end{aligned}$$

Dabei ist:  $(c_A v_2 + j_{A,2})|_0 = 0$  und  $(c_A v_2 + j_{A,2})|_d = (0 + j_{A,2}) = -g_M$ . Für das  $j_{A,1}$  wird der Fick'sche Diffusionssatz angenommen und umgeschrieben:

$$j_{A,1} = -D_A \frac{\partial c_A}{\partial z_1}$$

Dieser Term kann nun ausgeklammert werden und die einzelnen Differentiale zusammengefasst werden. In diesem Umformungsschritt wird auch das  $d$  von der linken Seite durch Division entfernt.

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_A}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial z_1} \left( c_A v_1 + D_A \frac{\partial c_A}{\partial z_1} \right) + \frac{g_M}{d} + \sigma_A \\ \frac{\partial c_A}{\partial t} &= -v_1 \frac{\partial c_A}{\partial z_1} + D_A \frac{\partial^2 c_A}{\partial z_1^2} + \frac{g_m}{d} + \sigma_A \end{aligned}$$

Nun kann hier die Gleichung (2) und  $g_m$  eingesetzt werden:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -v_1 \frac{\partial c_A}{\partial z_1} + D_A \frac{\partial^2 c_A}{\partial z_1^2} + \frac{\beta(c_R - c)}{d} - k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A \quad (4)$$

4.) Die lokale Form der Enthalpiebilanz (1.41) nach dem Skript lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) - \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z_k}(\rho h v_k + q'_k) + v_k \frac{\partial p}{\partial z_k} + \sum_{\alpha} f_{\alpha,k} j_{\alpha,k} - \pi_{j,k} \frac{\partial v_j}{\partial z_k}$$

Nun können hier ein paar Vereinfachungen auf Grund folgender Annahmen getroffen werden:

- Der Druck  $p$  ist im gesamten Rohrsystem laut Annahme 4 konstant. Somit sind alle Terme mit Differentiation von  $p$  über die Zeit  $t$  oder den Ort  $z_k$  gleich Null.
- Laut Annahme 10 leisten Volumenkräfte keine Arbeit und somit ergibt sich der vorletzte Term der Gleichung auch zu Null.
- Nach Annahme 4 kann auch die Reibung vernachlässigt werden. Also ist der letzte Term der Gleichung Null.

Die Gleichung kann somit in ihrer vereinfachten Form dargestellt werden. Im nachfolgenden Schritt wird die Produktregel auf den Konvektionsterm angewandt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) &= -\frac{\partial}{\partial z_k}(\rho h v_k + q'_k) \\ \rho \frac{\partial h}{\partial t} + h \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\rho v_k \frac{\partial h}{\partial z_k} - h v_k \frac{\partial \rho}{\partial z_k} - \rho h \frac{\partial v_k}{\partial z_k} - \frac{\partial q'_k}{\partial z_k} \end{aligned}$$

Die Differentiationen über die Dichte  $\rho$  nach  $t$  und  $z_k$  ergeben sich ebenfalls wieder zu Null. Da auch  $v_k = \text{const.}$ , wie bereits gezeigt, entfällt auch die Differentiation über  $v_k$  nach  $z_k$ , da diese ebenfalls Null ist. Nun kann noch das  $\rho$  durch Division von der linken Seite entfernt werden:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -v_k \frac{\partial h}{\partial z_k} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial q'_k}{\partial z_k}$$

Diese Gleichung kann ebenfalls über  $z_2$  und  $z_3$  integriert werden. Dabei geschieht hier aber ebenfalls über die  $z_3$ -Richtung nichts, da der Mantel als isoliert gilt und  $\frac{\partial q_3}{\partial z_3} dz_3 = 0$  und keine weiteren Abhängigkeiten über  $z_3$  existieren, ergäbe sich jeweils pro Integral nur ein  $b$ , welches wieder gekürzt werden könnte und ein „Nullterm“. Und somit muss diese Rechnung nicht durchgeführt werden.

Die Geschwindigkeit  $v_k$  existiert wie in Aufgabe 2.2 gezeigt) nur in die  $z_1$ -Richtung. Für die beiden anderen Richtungen sind  $v_2$  und  $v_3$  gleich Null, würde man nun die einzelnen Terme der Konvektion für diese beiden  $v$ 's aufschreiben, entfallen diese demnach. Also werden sie in der folgenden Berechnung weggelassen. Nun folgt die Integration über die  $z_2$ -Richtung.

$$\begin{aligned} \int_0^d \frac{\partial h}{\partial t} dz_2 &= \int_0^d -v_1 \frac{\partial h}{\partial z_1} dz_2 - \int_0^d \frac{1}{\rho} \frac{\partial q'_1}{\partial z_1} dz_2 - \int_0^d \frac{1}{\rho} \frac{\partial q'_2}{\partial z_2} dz_2 \\ \frac{\partial h}{\partial t} d &= -v_1 d \frac{\partial h}{\partial z_1} - \frac{d}{\rho} \frac{\partial q'_1}{\partial z_1} - \frac{1}{\rho} (q'_2) \Big|_0^d \end{aligned} \quad (5)$$

Laut Aufgabenstellung ist  $q'_k = q_k + \sum_{\alpha=1}^n j_{\alpha,k} h_{\alpha}(T)$ , dies in Gleichung (5) eingesetzt ergibt:

$$-\frac{d}{\rho} \frac{\partial q'_1}{\partial z_1} = -\frac{d}{\rho} \frac{\partial q_1}{\partial z_1} - \frac{d}{\rho} \frac{\partial}{\partial z_1} \left( \sum_{\alpha=1}^n \tilde{j}_{\alpha,1} h_{\alpha}(T) \right).$$

Da  $\frac{\partial q_1}{\partial z_1} = -\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2}$  und durch Vertauschen von Differentiation und Summation ergibt sich:

$$-\frac{d}{\rho} \frac{\partial q'_1}{\partial z_1} = d \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} - \frac{d}{\rho} \sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial z_1} \left( \tilde{j}_{\alpha,1} h_{\alpha}(T) \right)$$

Anwendung der Produktregel liefert

$$-\frac{d}{\rho} \frac{\partial q'_1}{\partial z_1} = d \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} - \frac{d}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \tilde{j}_{\alpha,1}}{\partial z_1} - \frac{d}{\rho} \sum_{\alpha} \tilde{j}_{\alpha,1} \frac{\partial h_{\alpha}}{\partial z_1}$$

Mit  $\frac{\partial h_{\alpha}}{\partial z_1} = c_{\alpha,p} \frac{\partial T}{\partial z_1}$  und Annahme 3

$$\begin{aligned} -\frac{d}{\rho} \frac{\partial q'_1}{\partial z_1} &= d \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} - \frac{d}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \tilde{j}_{\alpha,1}}{\partial z_1} - \frac{d}{\rho} \cdot 0 \cdot c_p \frac{\partial T}{\partial z_1} \\ -\frac{d}{\rho} \frac{\partial q'_1}{\partial z_1} &= d \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} - \sum_{\alpha} \frac{h_{\alpha} d}{\rho} \frac{\partial \tilde{j}_{\alpha,1}}{\partial z_1} \end{aligned}$$

Für den letzten Term in Gleichung (5) wurden folgende Umformungsschritte vorgenommen:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\rho} (q'_2) \Big|_0^d &= -\frac{1}{\rho} \left( q_2(d) + \sum_{\alpha} \tilde{j}_{\alpha,2}(d) h_{\alpha}(T) - q_2(0) - \tilde{j}_{\alpha,2}(0) h_{\alpha}(T) \right) \\ &= -\frac{1}{\rho} \left( -q_m + \sum_{\alpha} M_{\alpha} \tilde{j}_{\alpha,2}(d) h_{\alpha}(T) - 0 - 0 \right) \\ &= -\frac{1}{\rho} \left( -q_m - \sum_{\alpha} g_m M_{\alpha} h_{\alpha}(T) \right) \end{aligned}$$

Ab hier wird zur vereinfachten Schreibweise das  $T$  in  $h_{\alpha}(T)$  weggelassen, da es eindeutig von  $T$  abhängig ist. Zusammenschreiben dieser umgeformten Terme und einsetzen in die Gleichung (5) liefert:

$$\frac{\partial h}{\partial t} d = -v_1 d \frac{\partial h}{\partial z_1} + d \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} - \frac{d}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \tilde{j}_{\alpha,1}}{\partial z_1} - \frac{1}{\rho} \left( -q_m - \sum_{\alpha} \frac{g_m M_{\alpha} h_{\alpha}}{\rho} \right)$$

Weiteres Umformen liefert:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -v_1 \frac{\partial h}{\partial z_1} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} - \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \tilde{j}_{\alpha,1}}{\partial z_1} + \frac{q_m}{\rho d} + \sum_{\alpha} \frac{g_m M_{\alpha} h_{\alpha}}{\rho d} \quad (6)$$

Um nun eine Bestimmungsgleichung für das Temperaturfeld zu erhalten, fehlen an dieser Stelle noch Informationen über die Enthalpie. Durch Umformen und Einsetzen der totalen Zeitableitung der Enthalpie wird dieser Term in den nächsten Schritten berechnet:

$$\frac{dh}{dt} = c_p \frac{dT}{dt} + \left( \frac{\partial h}{\partial p} \right) \frac{dp}{dt} + \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{dw_{\alpha}}{dt} \quad .$$

Diese totale Form bringt man nun durch partielle Ableitung in eine lokale Form. Hierbei werden alle totalen Zeitableitungen durch folgenden Zusammenhang umgeschrieben:

$$\frac{d}{dt} \cdot = \frac{\partial}{\partial t} \cdot + v_k \frac{\partial}{\partial z_k} \cdot$$

Diese Gleichung kann auf Grund der bisherigen Berechnungen vereinfacht werden:

$$\frac{d}{dt} \cdot = \frac{\partial}{\partial t} \cdot + v_1 \frac{\partial}{\partial z_1} \cdot$$

Wendet man nun diesen Zusammenhang auf die totale Zeitableitung der Enthalpie an, ergibt sich:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + v_1 \frac{\partial h}{\partial z_1} = c_p \frac{\partial T}{\partial t} + v_1 c_p \frac{\partial T}{\partial z_1} + \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial w_{\alpha}}{\partial t} + \sum_{\alpha} v_1 h_{\alpha} \frac{\partial w_{\alpha}}{\partial z_1}$$

Diese Gleichung kann nun nach  $\partial h / \partial t$  umgestellt werden und  $w_{\alpha} = \rho_{\alpha} / \rho$  eingesetzt werden:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = c_p \frac{\partial T}{\partial t} + v_1 c_p \frac{\partial T}{\partial z_1} - v_1 \frac{\partial h}{\partial z_1} + \sum_{\alpha} \frac{h_{\alpha}}{\rho} \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial t} + \frac{v_1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial z_1} \quad (7)$$

Nun können Gleichung (6) und (7) gleichgesetzt werden:

$$\begin{aligned} & -v_1 \frac{\partial h}{\partial z_1} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} - \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \tilde{j}_{\alpha,1}}{\partial z_1} + \frac{q_m}{\rho d} + \sum_{\alpha} \frac{g_m M_{\alpha} h_{\alpha}}{\rho d} \\ & = c_p \frac{\partial T}{\partial t} + v_1 c_p \frac{\partial T}{\partial z_1} - v_1 \frac{\partial h}{\partial z_1} + \sum_{\alpha} \frac{h_{\alpha}}{\rho} \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial t} + \frac{v_1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial z_1} \end{aligned}$$

Durch geschicktes Umschreiben ist sofort ersichtlich, welche Terme entfallen:

$$\begin{aligned} & -v_1 \frac{\partial h}{\partial z_1} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} + \frac{q_m}{\rho d} + \sum_{\alpha} \frac{g_m M_{\alpha} h_{\alpha}}{\rho d} - \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \tilde{j}_{\alpha,1}}{\partial z_1} \\ & = -v_1 \frac{\partial h}{\partial z_1} + c_p \frac{\partial T}{\partial t} + v_1 c_p \frac{\partial T}{\partial z_1} + \sum_{\alpha} \frac{h_{\alpha}}{\rho} \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial t} + \frac{v_1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial z_1} \end{aligned}$$

Zur besseren Verdeutlichung, dass sich Terme wegekürzen, erfolgt nun die Umschreibung des letzten Terms des oberen Gleichungsteils:

$$-\frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \tilde{j}_{\alpha,1}}{\partial z_1} = -\frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} -h_{\alpha} D_{\alpha} M_{\alpha} \frac{\partial^2 c_{\alpha}}{\partial z_1^2}$$

An dieser Stelle kann durch weiteres Umformen eine bereits bekannte Gleichung in die letzten beiden Terme der unteren Gleichung eingesetzt werden:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \frac{h_{\alpha}}{\rho} \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial t} + \frac{v_1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial z_1} = \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha} h_{\alpha}}{\rho} \frac{\partial c_{\alpha}}{\partial t} + \frac{M_{\alpha} v_1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial c_{\alpha}}{\partial z_1} \\ & = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} h_{\alpha} M_{\alpha} \left( \frac{\partial c_{\alpha}}{\partial t} + v_1 \frac{\partial c_{\alpha}}{\partial z_1} \right) : \text{Gleichung (4) für den Klammerausdruck} \\ & = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} M_{\alpha} h_{\alpha} \left( D_{\alpha} \frac{\partial^2 c_{\alpha}}{\partial z_1^2} + \frac{g_m}{d} + \sigma_{\alpha} \right) = \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha}}{\rho} D_{\alpha} \frac{\partial^2 c_{\alpha}}{\partial z_1^2} + \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha} g_m}{\rho d} + \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha} \sigma_{\alpha}}{\rho} \end{aligned}$$

Die einzelnen umgeformten Terme werden nun in die jeweiligen Gleichungen eingefügt:

$$\begin{aligned} & \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} + \frac{q_m}{\rho d} + \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha}}{\rho} D_{\alpha} \frac{\partial^2 c_{\alpha}}{\partial z_1^2} + \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha} g_m}{\rho d} \\ & = c_p \frac{\partial T}{\partial t} + v_1 c_p \frac{\partial T}{\partial z_1} + \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha}}{\rho} D_{\alpha} \frac{\partial^2 c_{\alpha}}{\partial z_1^2} + \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha} g_m}{\rho d} + \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha} \sigma_{\alpha}}{\rho} \end{aligned}$$

Somit ergibt sich durch Kürzen:

$$\frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} + \frac{q_m}{\rho d} = c_p \frac{\partial T}{\partial t} + v_1 c_p \frac{\partial T}{\partial z_1} + \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha} \sigma_{\alpha}}{\rho}$$

Diese Gleichung kann nun nach  $\partial T / \partial t$  umgestellt werden:

$$\begin{aligned} c_p \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} + \frac{q_m}{\rho d} - v_1 c_p \frac{\partial T}{\partial z_1} - \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha} \sigma_{\alpha}}{\rho} \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} + \frac{q_m}{\rho c_p d} - v_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} - \sum_{\alpha} \frac{M_{\alpha} h_{\alpha} \sigma_{\alpha}}{\rho c_p} \end{aligned}$$

Ersetzen von  $-\sum_{\alpha} M_{\alpha} h_{\alpha} = \Delta_R h$  und Einsetzten von Gleichung (2) liefert:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} + \frac{q_m}{\rho c_p d} - v_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} r$$

Umordnen der einzelnen Terme und darauf folgendes Einsetzten von  $q_m$  und Gleichung (1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= -v_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} + \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} + \frac{q_m}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= -v_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} + \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2} + \frac{\alpha(T_R - T)}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A \end{aligned} \quad (8)$$

So hat man mit Gleichung (8) eine Bestimmungsgleichung für die Temperatur erhalten.

- 5.) Die erhaltene Differentialgleichung (4) aus Aufgabe (2.3) ist 1. Ordnung in der Zeit und 2. Ordnung im Ort. Somit benötigt man für diese eine Anfangsbedingung ( $c_0 = 0$ ) und zwei Randbedingungen ( $c_{in}, c_n = c_{out}$ ). Die soeben hergeleitete Differentialgleichung (8) aus der Aufgabe (2.4) ist ebenfalls 1. Ordnung in der Zeit und 2. Ordnung im Ort. Somit benötigt man auch für diese Gleichung eine Anfangsbedingung ( $T_0 = 300K$ ) und 2 Randbedingungen ( $T_{in}, T_n = T_{out}$ ).

Wenn Diffusion ( $D_A = 0$ ) und Wärmeleitung ( $\lambda = 0$ ) ausgeschlossen werden, vereinfachen sich die beiden Gleichungen wie folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_A}{\partial t} &= -v_1 \frac{\partial c_A}{\partial z_1} + \frac{\beta(c_R - c)}{d} - k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= -v_1 \frac{\partial T}{\partial z_1} + \frac{\alpha(T_R - T)}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A \end{aligned}$$

Somit liegen nur noch Differentialgleichungen erster Ordnung in Zeit und Ort vor. Dadurch verringert sich die Anzahl der benötigten Randbedingungen auf jeweils 1, es wird  $c_{in}$  und  $T_{in}$  angegeben.

- 6.) Beide Differentialgleichungen sind nichtlinear, da  $T$  in beiden Gleichungen im Term der Reaktionsgeschwindigkeit im Exponenten auftaucht.
- 7.) Die Voraussetzung für das Erreichen des stationären Zustandes eines Systems ist, dass die zeitliche Änderung aller gesuchten Größen verschwindet:

$$\frac{\partial c_{A,ss}}{\partial t} = 0 \quad \frac{\partial T_{ss}}{\partial t} = 0$$

Somit werden die Gleichungen (4) und (8) gleich Null gesetzt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_{A,ss}}{\partial t} &= 0 = -v_1 \frac{\partial c_{A,ss}}{\partial z_1} + D_A \frac{\partial^2 c_{A,ss}}{\partial z_1^2} + \frac{\beta(c_R - c_{ss})}{d} - k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_{ss}}\right) c_{A,ss} \\ \frac{\partial T_{ss}}{\partial t} &= 0 = -v_1 \frac{\partial T_{ss}}{\partial z_1} + \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T_{ss}}{\partial z_1^2} + \frac{\alpha(T_R - T_{ss})}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_{ss}}\right) c_{A,ss} \end{aligned}$$

Da in diesen Gleichungen nur noch Ableitungen nach einer Variablen ( $z_1$ ) auftauchen, können die  $\partial$  in  $d$  umgeschrieben werden:

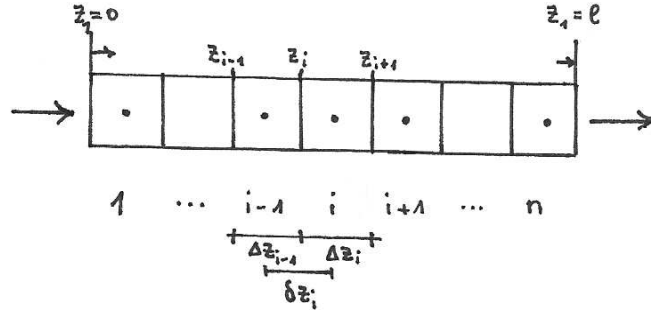
$$\begin{aligned} 0 &= -v_1 \frac{dc_{A,ss}}{dz_1} + D_A \frac{d^2 c_{A,ss}}{dz_1^2} + \frac{\beta(c_R - c_{ss})}{d} - k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_{ss}}\right) c_{A,ss} \\ 0 &= -v_1 \frac{dT_{ss}}{dz_1} + \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{d^2 T_{ss}}{dz_1^2} + \frac{\alpha(T_R - T_{ss})}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_{ss}}\right) c_{A,ss} \end{aligned}$$

Es liegt somit ein gekoppeltes Differentialgleichung 2. Ordnung in  $z_1$  für  $T_{ss}$  und  $c_{A,ss}$  vor. Somit werden für jede Gleichung jeweils 2 Randbedingungen und keine Anfangsbedingungen benötigt. Werden Diffusion ( $D_A = 0$ ) und Wärmeleitung ( $\lambda$ ) ausgeschlossen:

$$\begin{aligned} 0 &= -v_1 \frac{dc_{A,ss}}{dz_1} + \frac{\beta(c_R - c_{ss})}{d} - k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_{ss}}\right) c_{A,ss} \\ 0 &= -v_1 \frac{dT_{ss}}{dz_1} + \frac{\alpha(T_R - T_{ss})}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_{ss}}\right) c_{A,ss} \end{aligned}$$

erhält man ein gekoppeltes System Differentialgleichungen 1. Ordnung und benötigt nur noch jeweils pro Gleichung eine Randbedingung.

- 8.) Nun soll auf die erhaltenen Differentialgleichungen (4) und (8) die Finite-Volumen-Methode angewandt werden. Hierzu folgt zunächst eine Skizze zur Verdeutlichung des Sachverhaltes:



Das Kanalsystem wird in  $n$  gleichgroße Elemente unterteilt. Knicke im Rohr werden dabei für diese Berechnung vernachlässigt. Es erfolgt somit eine äquidistante Diskretisierung in gleichgroße Volumenelemente und  $\Delta z_i$  sowie  $\delta z_i$  sind alle gleich groß, sowie auch diese beiden einander gleich sind ( $\Delta z_i = \Delta z = \delta z_i = \delta z$ ). Dabei wird davon ausgegangen (Up-Wind-Schema), dass die Information von links nach rechts, also mit der Fließrichtung läuft.

Es wird die Gleichung (4) mittels der FVM in eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung umgewandelt indem über  $z_1$  integriert wird und beim Einsetzen der Grenzen über die finiten Volumen bestimmte Profilannahmen (Pa.) getroffen werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_A}{\partial t} &= -v_1 \frac{\partial c_A}{\partial z_1} + D_A \frac{\partial^2 c_A}{\partial z_1^2} + \frac{\beta(c_R - c)}{d} - k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A \\ \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_A}{\partial t} dz_1 &= \int_{z_i}^{z_{i+1}} -v_1 \frac{\partial c_A}{\partial z_1} dz_1 + \int_{z_i}^{z_{i+1}} D_A \frac{\partial^2 c_A}{\partial z_1^2} dz_1 + \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\beta(c_R - c)}{d} dz_1 - \int_{z_i}^{z_{i+1}} k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A dz_1 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

\* Pa.:  $c_A(t, z_1) = c_{A,i}(t)$  mit  $z_i \in (z_i, z_{i+1})$

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial c_A}{\partial t} dz_1 = \frac{dc_{A,i}}{dt} \Delta z_i$$

\* Pa.: Rückwärtsdifferenzieren  $c_A(t, z_i) = \begin{cases} c_{A,i}(t) & \text{für } z_i \in (z_i, z_{i+1}) \\ c_{A,i-1} & \text{für } z_i = z_1 \end{cases}$

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} -v_1 \frac{\partial c_A}{\partial z_1} dz_1 = -v[c_A]|_{z_i}^{z_{i+1}} = -v(c_{A,i} - c_{A,i-1}) = v c_{A,i-1} - v c_{A,i}$$

\* Pa.: Steigungen durch die Mittelpunkte der einzelnen Profile ergeben eine Gerade durch die jeweiligen Punkte und daraus kann das Profil bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \int_{z_i}^{z_{i+1}} D_A \frac{\partial^2 c_A}{\partial z_1^2} dz_1 &= D_A \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\partial^2 c_A}{\partial z_1^2} dz_1 = D_A \left[ \frac{\partial c_A}{\partial z_1} \right]_{z_i}^{z_{i+1}} \\ &= D_A \left( \frac{c_{A,i+1} - c_{A,i}}{\delta z_i} - \frac{c_{A,i} - c_{A,i-1}}{\delta z_{i-1}} \right) = D_A \left( \frac{c_{A,i+1} - 2c_{A,i} + c_{A,i-1}}{\Delta z_i} \right) \end{aligned}$$

\* Pa.: an dieser Stelle wird die gleiche Profilannahme wie in der Ersten getroffen

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{\beta(c_R - c)}{d} dz_1 = \frac{\beta}{d} (c_R - c_i) \Delta z_i$$

\* Pa.: für T gelten die gleichen Profilannahmen wie bereits für c getroffen

$$-\int_{z_i}^{z_{i+1}} k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) c_A dz_1 = -k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_i}\right) c_{A,i} \Delta z_i$$

Zusammenschreiben liefert die gewöhnliche Differentialgleichung, Division durch  $\Delta z_i$  das endgültige Ergebnis:

$$\begin{aligned} \frac{dc_{A,i}}{dt} \Delta z_i &= v c_{A,i-1} - v c_{A,i} + D_A \left( \frac{c_{A,i+1} - 2c_{A,i} + c_{A,i-1}}{\Delta z_i} \right) + \beta \frac{c_R - c_i}{d} \Delta z_i \\ &\quad - k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_i}\right) c_{A,i} \Delta z_i \\ \frac{dc_{A,i}}{dt} &= \frac{v c_{A,i-1} - v c_{A,i}}{\Delta z_i} + D_A \left( \frac{c_{A,i+1} - 2c_{A,i} + c_{A,i-1}}{\Delta z_i^2} \right) + \beta \frac{c_R - c_i}{d} \\ &\quad - k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_i}\right) c_{A,i} \end{aligned} \quad (9)$$

Genauso verfährt man nun mit der Differentialgleichung für T. Dies liefert nach Anwendung der FVM und den genauso getroffenen Profilannahmen:

$$\begin{aligned} \frac{dT_i}{dt} &= \frac{v T_{i-1} - v T_i}{\Delta z_i} + \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{T_{i+1} - 2 \cdot T_i + T_{i-1}}{\Delta z_i^2} + \alpha \frac{T_R - T_i}{\rho c_p d} \\ &\quad - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT_i}\right) c_{A,i} \end{aligned} \quad (10)$$

Allerdings müssen für beide Gleichungen die ersten und letzten Volumenelemente separat betrachtet werden. Dies liegt daran, dass die jeweiligen ersten Volumenelemente keinen Vorgänger haben und dass vom letzten Volumenelement in das Gebiet danach der Gradient Null ist und dadurch einige Vereinfachungen getroffen werden können. Außerdem existiert nur ein halbes Volumenelement von Ein nach 1:

Erstes Volumenelement für  $c_A$  mit  $i = 1$ :

$$\frac{dc_{A,1}}{dt} = \frac{vc_{A,in} - vc_{A,1}}{\Delta z_1} + D_A \left( \frac{c_{A,2} - c_{A,1}}{\Delta z_1^2} - \frac{c_{A,1} - c_{A,in}}{\Delta z_1^2 \cdot 0.5} \right) + \beta \frac{c_R - c_1}{d} - k_0 \cdot \exp \left( -\frac{E_A}{RT_1} \right) c_{A,1}$$

Letztes Volumenelement für  $c_A$  mit  $i = n$ :

$$\frac{dc_{A,n}}{dt} = \frac{vc_{A,n-1} - vc_{A,n}}{\Delta z_n} - D_A \left( \frac{c_{A,n} - c_{A,n-1}}{\Delta z_n^2} \right) + \beta \frac{c_R - c_n}{d} - k_0 \cdot \exp \left( -\frac{E_A}{RT_n} \right) c_{A,n}$$

Erstes Volumenlement für  $T$  mit  $i = 1$ :

$$\frac{dT_1}{dt} = \frac{vT_{in} - vT_1}{\Delta z_1} + \frac{\lambda}{\rho c_p} \left( \frac{T_2 - T_1}{\Delta z_1^2} - \frac{T_1 - T_{in}}{\Delta z_1^2 \cdot 0.5} \right) + \alpha \frac{T_R - T_1}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp \left( -\frac{E_A}{RT_1} \right) c_{A,1}$$

Letztes Volumenelement für  $T$  mit  $i = n$ :

$$\frac{dT_n}{dt} = \frac{vT_{n-1} - vT_n}{\Delta z_n} - \frac{\lambda}{\rho c_p} \left( \frac{T_n - T_{n-1}}{\Delta z_n^2} \right) + \alpha \frac{T_R - T_n}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp \left( -\frac{E_A}{RT_n} \right) c_{A,n}$$

- 9.) Für den Fall das Diffusion ( $D_A = 0$ ) und Wärmeleitung  $\lambda = 0$  wegfallen, muss keine erneute Diskretisierung vorgenommen werden, da diese beiden Koeffizienten nur als Vorfaktoren auftauchen und somit nur diese Gleichung durch Null-Multiplikation entfallen:

$$\begin{aligned} \frac{dc_{A,i}}{dt} &= \frac{vc_{A,i-1} - vc_{A,i}}{\Delta z_i} + \beta \frac{c_R - c_i}{d} - k_0 \cdot \exp \left( -\frac{E_A}{RT_i} \right) c_{A,i} \\ \frac{dT_i}{dt} &= \frac{vT_{i-1} - vT_i}{\Delta z_i} + \alpha \frac{T_R - T_i}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp \left( -\frac{E_A}{RT_i} \right) c_{A,i} \end{aligned}$$

Die Bestimmung der Gleichung für die Randbedingungen wird vereinfacht. Denn die letzten Randelemente ( $i = n$ ) der beiden Terme müssen gar nicht mehr betrachtet werden, denn es taucht nirgends ein Element über diesen hinaus in der Gleichung auf. Und die Gleichungen für die ersten Randelemente lautet:

$$\begin{aligned} \frac{dc_{A,1}}{dt} &= \frac{vc_{A,in} - vc_{A,1}}{\Delta z_1} + \beta \frac{c_R - c_1}{d} - k_0 \cdot \exp \left( -\frac{E_A}{RT_1} \right) c_{A,1} \\ \frac{dT_1}{dt} &= \frac{vT_{in} - vT_1}{\Delta z_1} + \alpha \frac{T_R - T_1}{\rho c_p d} - \frac{\Delta_R h}{\rho c_p} k_0 \cdot \exp \left( -\frac{E_A}{RT_1} \right) c_{A,1} \end{aligned}$$

### Aufgabe 3

- 1.) Der Quellcode des Matlab-Programmes befindet sich im Anhang. Leider konnte dabei nicht der Geschwindigkeitsterm ebenfalls mit in die Matrix-Schreibweise

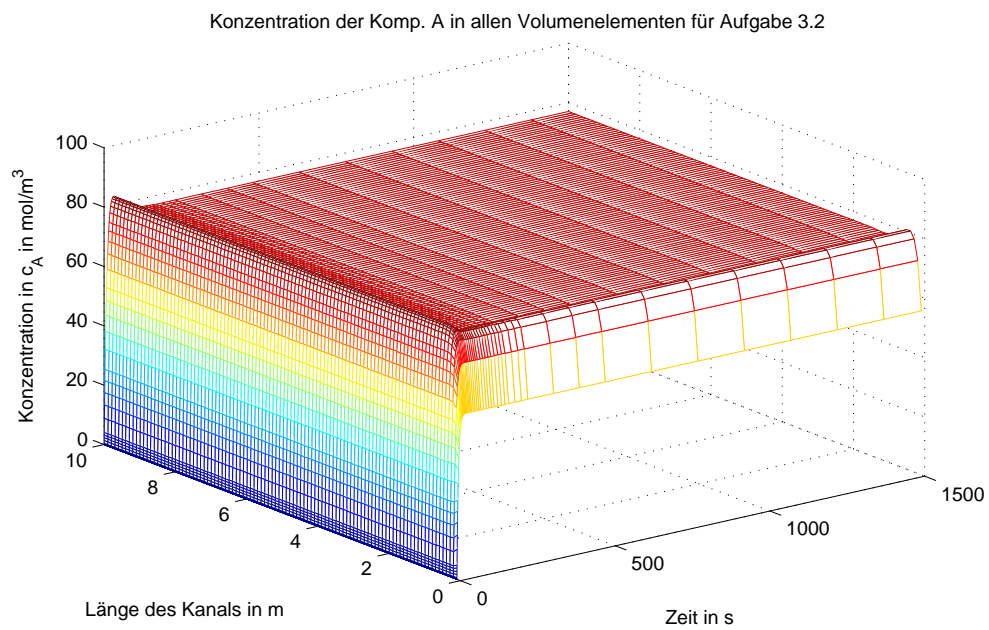
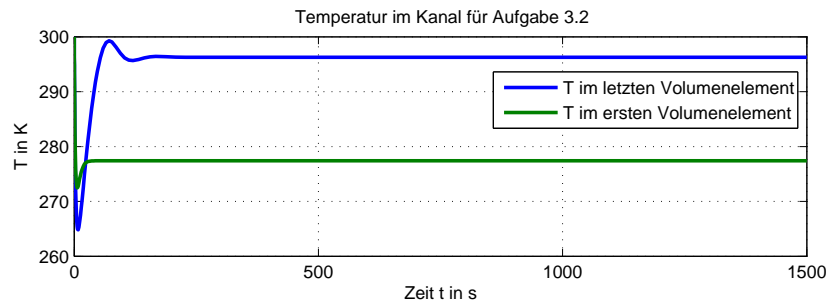
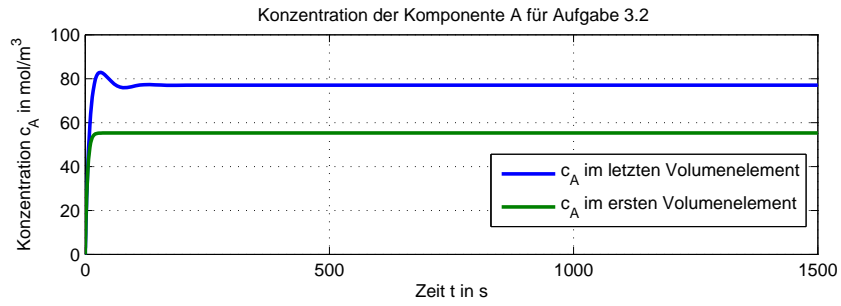
$$r = p.k0 * \exp(-p.EA./(p.R. * T(2 : p.n - 1))). * c(2 : p.n - 1)$$

genutzt werden, da interessanter Weise Matlab zu ungenau in der Berechnung wurde. Somit musste leider an dieser Stelle eine **for**-Schleife eingebaut werden.

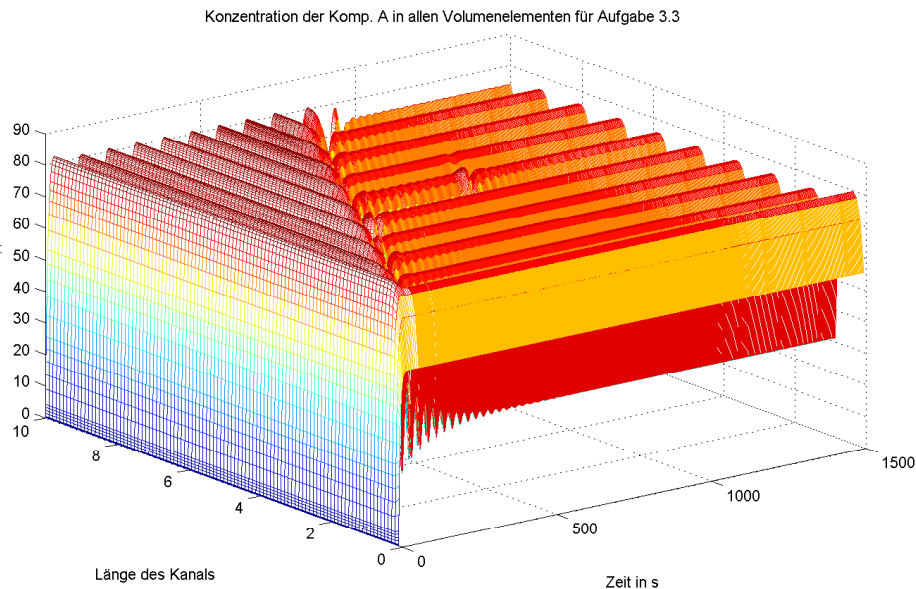
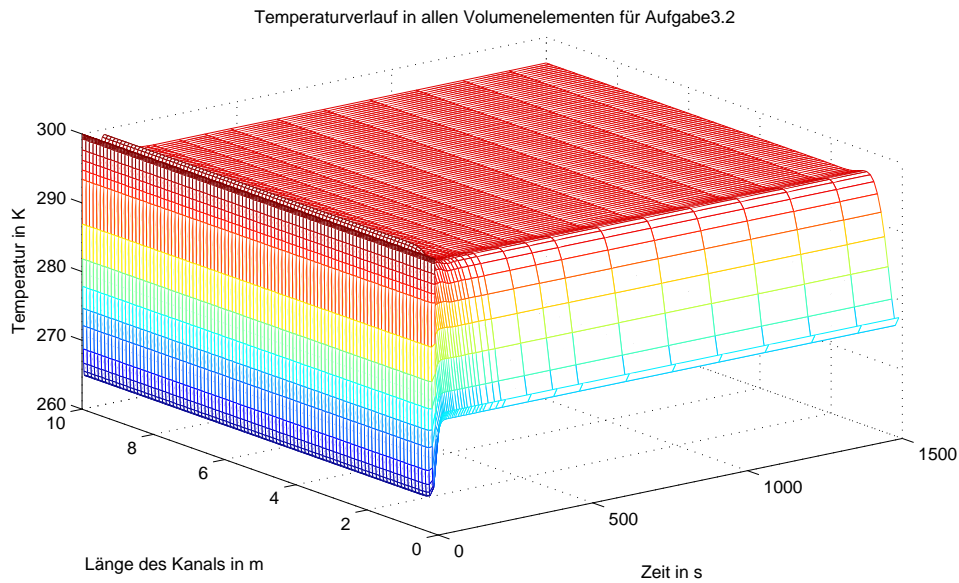
Alle Kanallängen sind dabei in  $m$  angegeben.

- 2.) Spezialfall:  $D_A = 0$  und  $\lambda = 0$

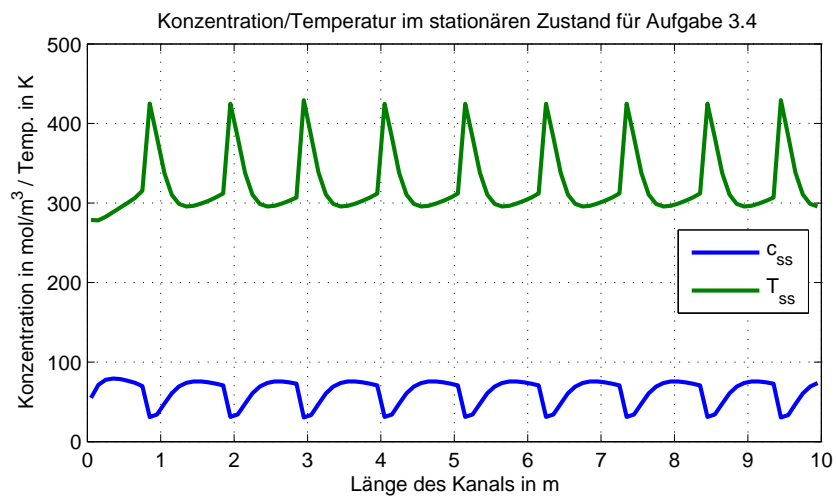
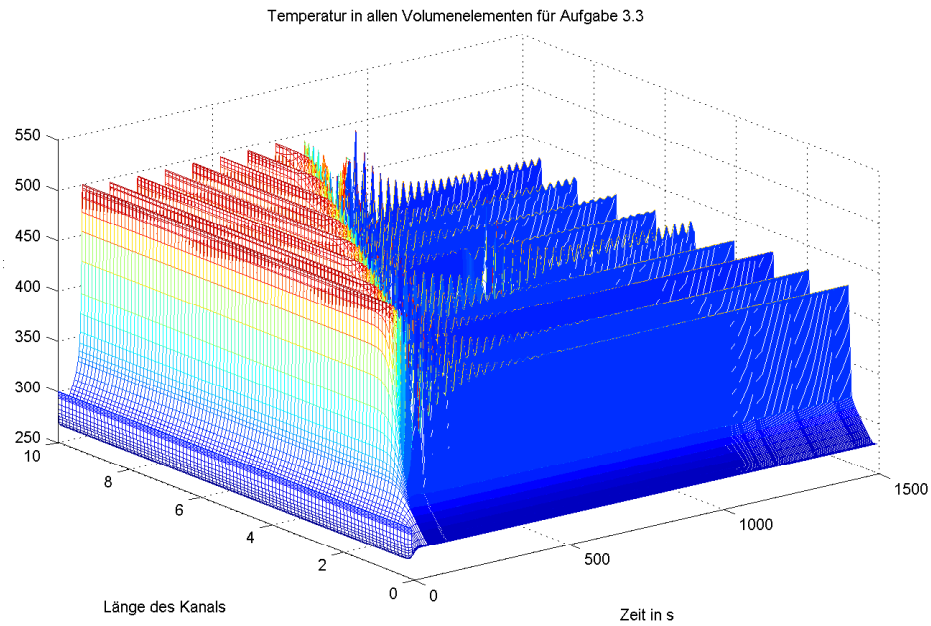
In diesen Abbildungen ist sehr gut zu erkennen, dass nach einer gewissen Anlaufzeit sich eine stabile Ruhelage einstellt.



- 3.) Bei höherer Reservoirtemperatur stellt sich kein stabiler Endzustand ein, vielmehr schwingt das System um einen bestimmten Wert. Dieses lässt auf einen Grenzzyklus schließen.



- 4.) Für  $T = 255K$  stellt sich ebenfalls bei der Lösung mittels `fsolve` ein schwingendes Verhalten ein.
- 5.) In der graphischen Ausgabe ist ersichtlich, dass die Lösung mittels FVM ungenauer ist, als das Verfahren, bei welchem über die stationären Lösungen und ein numerisches Verfahren (hier `ode15s`) die Lösungen berechnet wurden. Da die FVM durch die Unterteilung in Elemente zu ungenau wird und man zu viele vereinfachende Annahmen trifft, da die FVM immernoch eine Approximation des Systems ist. Bei einer höheren Wahl der Volumina wird das Verfahren zwar genauer, dies geht aber enorm auf die Rechenkosten und kann nicht ins unendliche hochgetrieben werden. Die stationäre Genauigkeit ist geringer als die der `ode` Berechnung, aber hinreichend genau für diese Aufgabe.
- 6.) Für einen unendlich langen Rohrreaktor und  $T = 254K$  würde sich nach einer gewissen Zeit ein stationärer für  $c$  und  $T$  Wert einstellen. Für  $T = 255K$  dagegen würde das System immer um



einen Wert oszillieren und es gäbe keinen festgelegten stabilen stationären Wert für  $c$  und  $T$ . Somit liegt ein Grenzzyklus irgendeiner Form vor. Auch in der ersten Projektübung lag ein Grenzzyklus des Systems für bestimmte Eingabewerte vor.

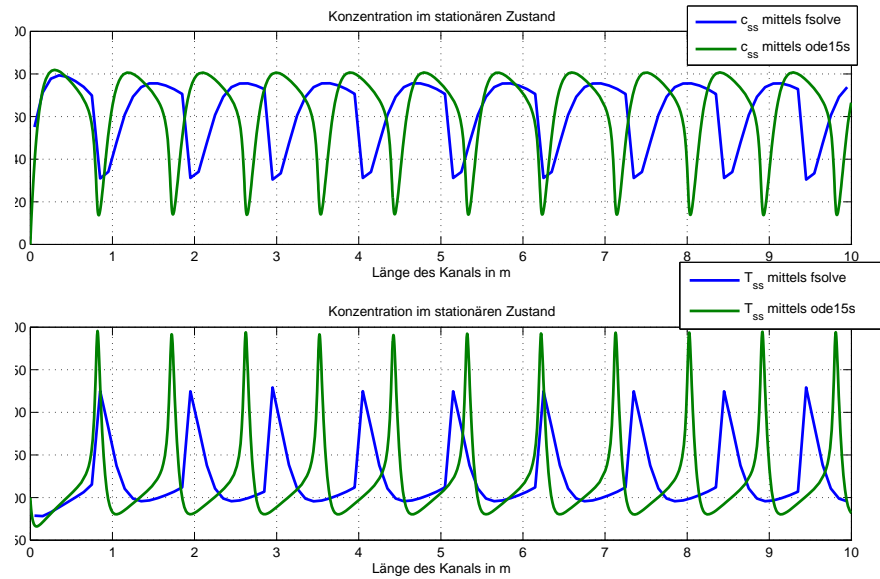
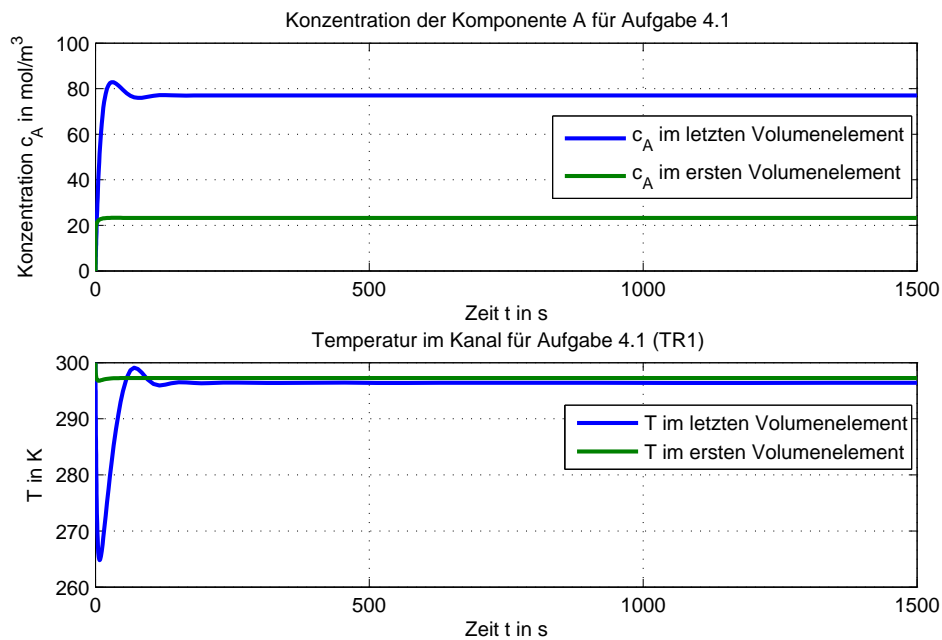


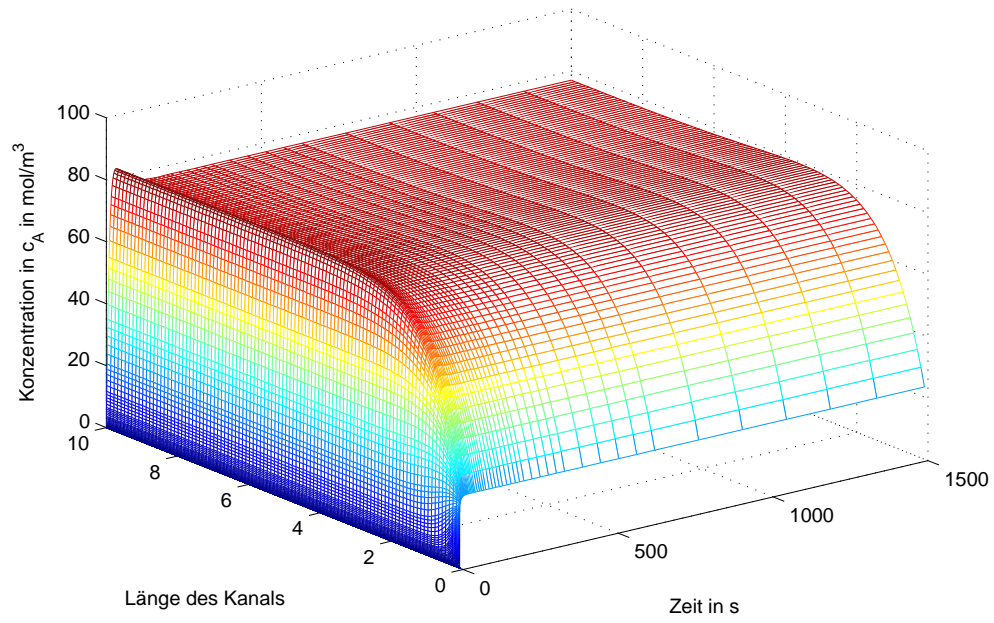
Abbildung 1: Darstellung der beiden Ergebnisse aus 3.4 und 3.5 in einem Diagramm

#### Zusatzaufgabe 4

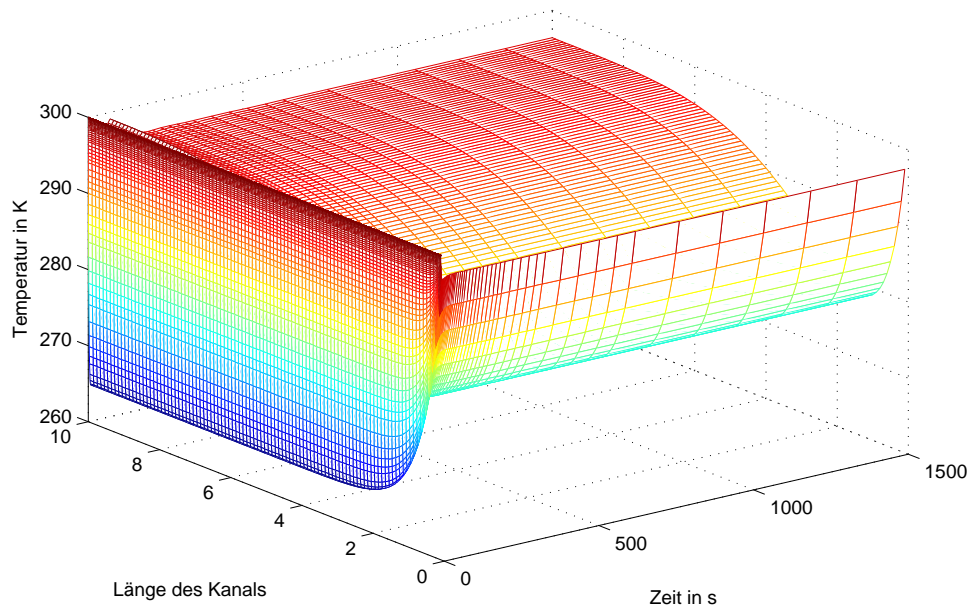
- 1.) Im ersten Temperaturfall spielt die Diffusion und die Wärmeleitung nur eine geringe Rolle. Es wird ebenfalls ein stationärer Wert erreicht, der sich durch diese beiden Größen natürlich verschiebt. Im Fall höherer Reservoirtemperatur stellt sich ebenfalls kein stabiler stationärer Wert ein. Die Oszillation ist im Vergleich zur Aufgabenstellung ohne Wärmeleitung und Diffusion auch deutlich stärker ausgeprägt.

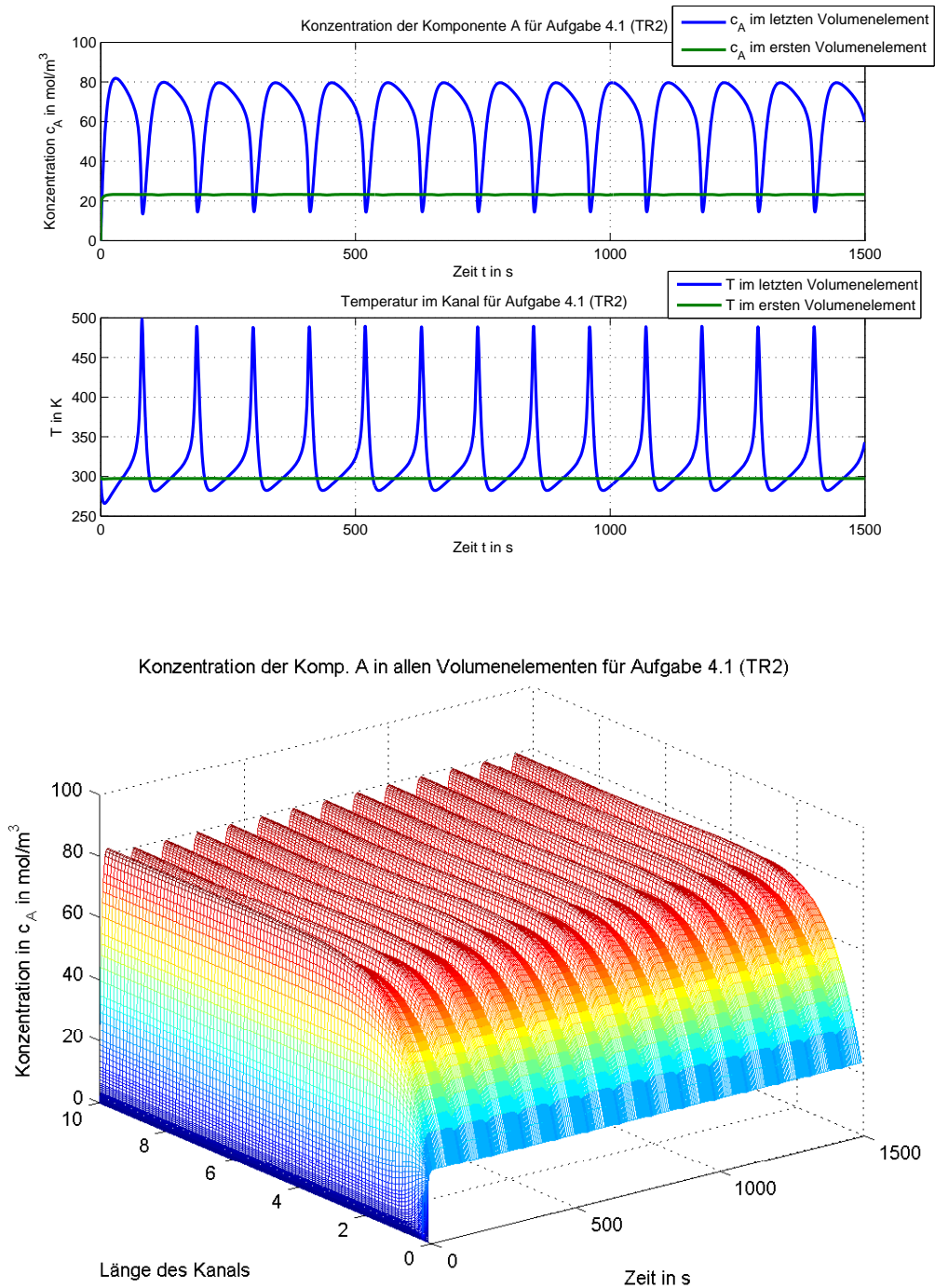


Konzentration der Komp. A in allen Volumenelementen für Aufgabe 4.1 (TR1)

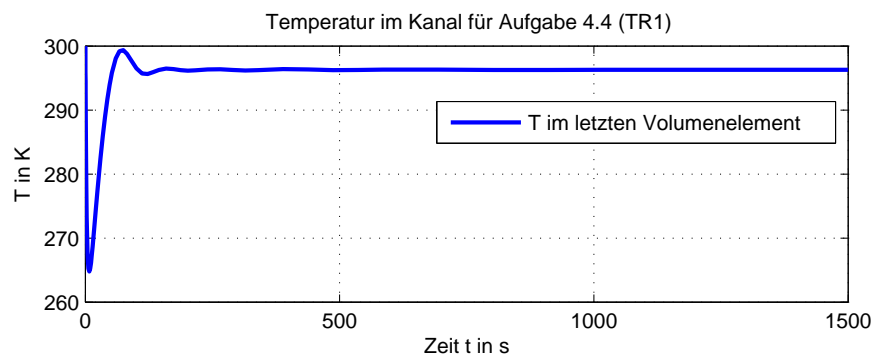
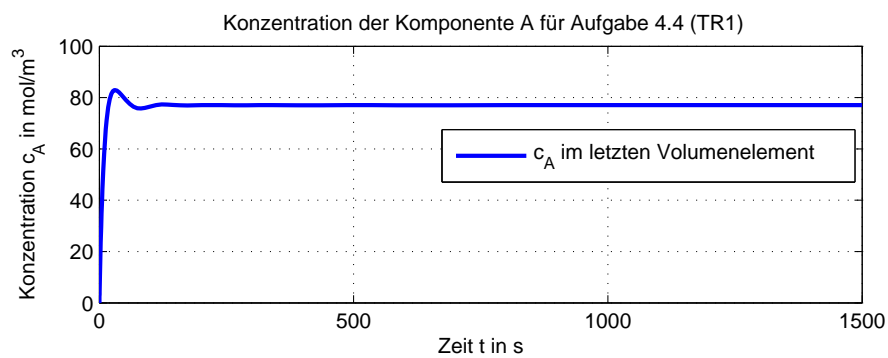
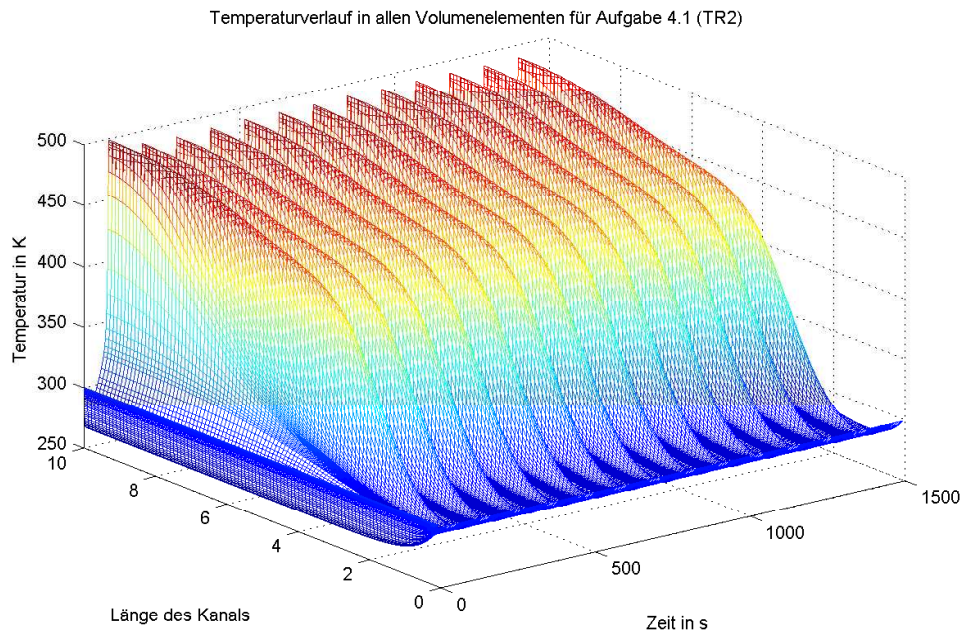


Temperaturverlauf in allen Volumenelementen für Aufgabe 4.1 (TR1)





- 4.) Für niedrigere Reservoirtemperatur stellt sich natürlich wieder ein stationärer Wert für  $c$  und  $T$  ein. Für die höhere Reservoirtemperatur schwingt das System auch um einen bestimmten Wert für  $c$  und  $T$ . Dieses System kann eigentlich gleich dem eines Rührkessels ohne Zu- und Abflüsse gesetzt werden, da keine Geschwindigkeit mehr auftritt und somit in der Gleichung nur noch die Reservoirtemperatur als quasi Manteltemperatur (einseitig) und ein Reaktionsterm vorliegen.

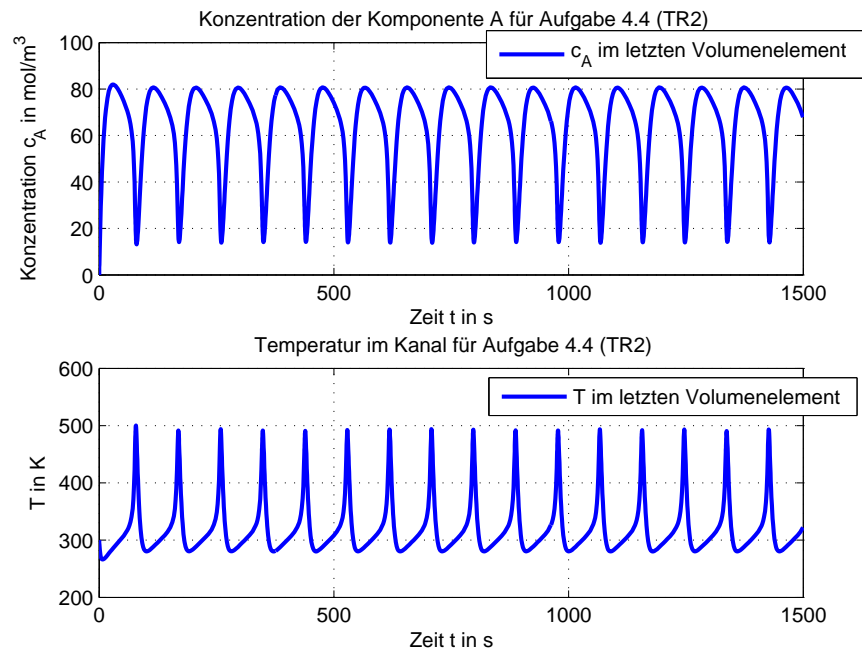


## Matlab-Quellcode

```

1
2 % Projektübung 3 Systemverfahrenstechnik
3 % Katharina Holstein STK 03

```



```

4 % Hauptprogramm
5
6 %function Prue3_haupt;
7 close all; clear all; clc;
8
9
10 % Definition benötigter Variablen und Größen
11 % Definition der globalen Variablen
12 p.l=10; % Länge des Kanalsystems in m
13 p.b=0.01; % Breite des Kanals in m
14 p.d=0.01; % Tiefe des Kanals in m
15 p.Fin=1e-6; % Zulauf in m³/s
16 p.cin=20; % Eingangskonzentration in die Kanäle mol/m³
17 p.Tin=300; % Zulauftemperatur in die Kanäle in K
18 p.cR=100; % Konzentration von A im Reservoir in mol/m³
19 p.beta=1e-3; % Stoffübergangskoeffizient über die Membran in m/s
20 p.alpha=1.52e4; % Wärmeübergangskoeffizient über die Membran in W/m²/K
21 p.k0=100; % Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizient in 1/s
22 p.EA=20000; % Aktivierungsenergie in J/mol
23 p.dRh=-28e6; % Reaktionsenthalpie in J/mol
24 p.R=8.3145; % molare Gaskonstante in J/mol/K
25 p.rhocp=4e6; % Volumenbezog. Wärmekapazität des Gemisches in J/m³/K
26
27 % Berechnung der Geschwindigkeit nach Aufgabe 2.2
28 p.v=p.Fin/p.b/p.d; % Geschwindigkeit im Kanal
29
30 % Definition allgemeiner veränderlicher Variablen
31 DA1=0.1; % Diffusionskoeffizient für A im Gemisch in m²/s
32 DA2=0;
33 lambda1=4e5; % Wärmeleitfähigkeit des Gemisches in W/m/K
34 lambda2=0;
35 TR1=254; % Temperatur des Reservoirs in K
36 TR2=255;
37 v1=p.v; % Konvektionsgeschwindigkeit im Reaktor in m/s²

```

```

38 v2=0;
39
40 % Deklaration der Anfangsvariablen
41 p.c0=0; % Anfangskonzentration von z
42 p.T0=300; % Anfangstemperatur in K von z
43
44 % Deklaration der Volumenelemente und des Übergabevektors
45 p.n=100; % Anzahl der Volumenelemente
46 p.dz=p.l/p.n; % Aufteilen des Rohres in n gleichgroße Elemente
47 tspan=[0 1500]; % Deklaration der Zeitspanne
48
49 % Deklaration von Anfangswerten
50 x0=[p.c0*ones(p.n,1) ; p.T0*ones(p.n,1)];
51 x01=[p.c0, p.T0];
52 x_1=[p.cin ];
53 x_2=[50*ones(p.n,1);395*ones(p.n,1)];
54
55
56
57 %Berechnung der gesuchten Werte gemäß der Aufgabenstellung
58
59 %Aufgabe 3.1 mit T=254K und Diffusion/Wärmeleitung gemäß Zusatzaufgabe 4.1
60 %Aufruf der ODE zur Lösung der diskretisierten Gleichungen
61 %Erzeugen einer Diagonalen mittels Einheitsmatrix
62 s11=eye(p.n);
63 %Erzeugen von Einsen über der Diagonalen
64 for i=1:p.n-1
65     if (i > 1)
66         s11(i, i-1) =1;
67     end
68     s11(i, i+1) = 1;
69 end
70 s11(p.n,p.n-1)=1;
71 %Erzeugen einer Einheitsmatrix
72 s12=eye(p.n);
73 s21=s12;
74 s22=s11;
75 %Zusammenschreiben der bisher erzeugten Matrizen zum Sparen von
76 %Rechenaufwand
77 S=[s11 s12; s21 s22];
78 options=odeset('JPattern',S);
79 [t,x]=ode15s(@Prue3_nebena, tspan, x0, options, p, TR1, DA1, lambda1, v1);
80
81
82 % Aufgabe 3.2 mit T_R=254K und ohne Diffusion/Wärmeleitung
83 % Erzeugen einer neuen S1 Matrix, da diese anders aussehen wird, durch
84 % geänderte Gleichungen
85 s111=eye(p.n);
86 % Erzeugen von Einsen über der Diagonalen
87 for i=1:p.n-1
88     if (i > 1)
89         s111(i, i-1) =1;
90     end
91 end
92 s111(p.n,p.n-1)=1;
93 % Erzeugen einer Einheitsmatrix
94 s112=eye(p.n);
95 s121=s112;
96 s122=s111;
97 % Zusammenschreiben in eine Matrix
98 S1=[s111 s112; s121 s122];

```

```

99 options1=odeset('JPattern',S1);
100 [t2,x2]=ode15s(@Prue3_nebena, tspan, x0, options1, p, TR1, DA2, lambda2, v1);
101
102 % Aufgabe 3.3 mit T_R=255K und mit Diffusion/Wärmeleitung
103 options=odeset('JPattern',S);
104 [t3,x3]=ode15s(@Prue3_nebena, tspan, x0, options, p, TR2, DA1, lambda1, v1);
105 % Aufgabe 3.3 mit T_R=255K und ohne Diffusion/Wärmeleitung
106 options1=odeset('JPattern',S1);
107 [t4,x4]=ode15s(@Prue3_nebena, tspan, x0, options1, p, TR2, DA2, lambda2, v1);
108
109 % Aufgabe 3.4 numerische Berechnung des stationären Zustandes
110 x_1=x4(end,:);
111 [x_s1]=fsolve(@Prue3_nebenb, x_1, [], p, TR2, DA2, lambda2, v1);
112 z1=[((1:p.n)-0.5)*p.Δz]';
113
114 % Aufgabe 3.5 (also ohne Diffusion/Wärmeleitung):
115 [z,x5]=ode15s(@Prue3_nebenc, [0 p.1], x01, [], p, TR2, DA2, lambda2, v1);
116
117 % Aufgabe 4.4 Konvektion ebenfalls Null (v=0)
118 [t6,x6]=ode15s(@Prue3_nebena, tspan, x0, options, p, TR1, DA2, lambda2, v2);
119 [t7,x7]=ode15s(@Prue3_nebena, tspan, x0, options1, p, TR2, DA2, lambda2, v2);
120
121
122
123 % graphische Auswertung aller bisherigen Ergebnisse
124
125 % graphische Darstellung der Ergebnisse aus Aufgabe 3.2:
126 figure(1);
127 subplot(211);
128 plot(t2,x2(:,p.n),t2,x2(:,1),'LineWidth',2);
129 legend('c_A_im_letzten_Volumenelement','c_A_im_ersten_Volumenelement');
130 title('Konzentration der Komponente A für Aufgabe 3.2');
131 xlabel('Zeit_t_in_s');
132 ylabel('Konzentration c_A in mol/m^3');
133 grid on;
134 subplot(212);
135 plot(t2,x2(:,2*p.n),t2,x2(:,p.n+1),'LineWidth',2);
136 legend('T_im_letzten_Volumenelement','T_im_ersten_Volumenelement');
137 title('Temperatur im Kanal für Aufgabe 3.2');
138 xlabel('Zeit_t_in_s');
139 ylabel('T_in_K');
140 grid on;
141 % Konzentration der Komponente A im gesamten Kanal
142 figure(2);
143 surf(t2,[1:p.n]*p.Δz,x2(:,1:p.n))
144 title('Konzentration der Komp. A in allen Volumenelementen für Aufgabe 3.2');
145 xlabel('Zeit_in_s');
146 ylabel('Länge des Kanals');
147 zlabel('Konzentration in c_A in mol/m^3');
148 grid on;
149 % Temperatur im gesamten Kanal
150 figure(3);
151 surf(t2,[1:p.n]*p.Δz,x2(:,p.n+1:2*p.n))
152 title('Temperaturverlauf in allen Volumenelementen für Aufgabe 3.2');
153 xlabel('Zeit_in_s');
154 ylabel('Länge des Kanals');
155 zlabel('Temperatur in K');
156 grid on;
157
158
159 % Graphische Darstellung der Ergebnisse aus Aufgabe 3.3

```

```

160 % Konzentration der Komponente A im gesamten Kanal für die Temperatur T=255K
161 figure(4);
162 subplot(211);
163 plot(t4,x4(:,p.n),t4,x4(:,1),'LineWidth',2);
164 legend('c_Aim_n.Volumenelement','c_Aim_1.Volumenelement');
165 title('Konzentration der Komponente A für Aufgabe 3.3');
166 xlabel('Zeit t in s');
167 ylabel('Konzentration c_A in mol/m^3');
168 grid on;
169 subplot(212);
170 plot(t4,x4(:,2*p.n),t4,x4(:,p.n+1),'LineWidth',2);
171 legend('T_im_n.Volumenelement','T_im_1.Volumenelement');
172 title('Temperatur im Kanal für Aufgabe 3.3');
173 xlabel('Zeit t in s');
174 ylabel('T in K');
175 grid on;
176 % Konzentration der Komponente A im gesamten Kanal
177 figure(5);
178 mesh(t4,[1:p.n]*p.dz,x4(:,1:p.n))
179 title('Konzentration der Komp. A in allen Volumenelementen für Aufgabe 3.3');
180 xlabel('Zeit in s');
181 ylabel('Länge des Kanals');
182 zlabel('Konzentration in c_A in mol/m^3');
183 grid on;
184 % Temperatur im gesamten Kanal
185 figure(6);
186 mesh(t4,[1:p.n]*p.dz,x4(:,p.n+1:2*p.n))
187 title('Temperatur in allen Volumenelementen für Aufgabe 3.3');
188 xlabel('Zeit in s');
189 ylabel('Länge des Kanals');
190 zlabel('Konzentration in c_A in mol/m^3');
191 grid on;
192
193 % Ausgabe der stationären Zustände mittels 3.4 und 3.5
194 figure(7);
195 subplot(211);
196 plot(z1,x_s1(1:p.n),z,x5(:,1),'LineWidth',2);
197 legend('c_{ss} mittels fsolve','c_{ss} mittels ode15s');
198 title('Konzentration im stationären Zustand');
199 xlabel('Länge des Kanals in m');
200 ylabel('Konzentration in mol/m^3');
201 grid on;
202 subplot(212);
203 plot(z1,x_s1(p.n+1:2*p.n),z,x5(:,2),'LineWidth',2);
204 legend('c_{ss} mittels fsolve','c_{ss} mittels ode15s');
205 title('Konzentration im stationären Zustand');
206 xlabel('Länge des Kanals in m');
207 ylabel('Temperatur in K');
208 grid on;
209
210 % Ausgabe der Ergebnisse aus Aufgabe 4.1
211 % Ausgabe der Ergebnisse für den Fall TR=254K
212 figure(8);
213 subplot(211);
214 plot(t,x(:,p.n),t,x(:,1),'LineWidth',2);
215 legend('c_A im letzten Volumenelement','c_A im ersten Volumenelement');
216 title('Konzentration der Komponente A für Aufgabe 4.1');
217 xlabel('Zeit t in s');
218 ylabel('Konzentration c_A in mol/m^3');
219 grid on;
220 subplot(212);

```

```

221 plot(t,x(:,2*p.n),t,x(:,p.n+1),'LineWidth',2);
222 legend('TimletztenVolumenelement','TimerstenVolumenelement');
223 title('TemperaturimKanal_für_Aufgabe_4.1(TR1)');
224 xlabel('Zeittins');
225 ylabel('TinK');
226 grid on;
227 % Konzentration der Komponente A im gesamten Kanal
228 figure(9);
229 mesh(t,[1:p.n]*p.Δz,x(:,1:p.n))
230 title('KonzentrationderKomp.AinallenVolumenelementen_für_Aufgabe_...
231 4.1(TR1)');
232 xlabel('Zeitins');
233 ylabel('LängedesKanals');
234 zlabel('KonzentrationincAinmol/m^3');
235 grid on;
236 % Temperatur im gesamten Kanal
237 figure(10);
238 mesh(t,[1:p.n]*p.Δz,x(:,p.n+1:2*p.n))
239 title('TemperaturverlaufinallenVolumenelementen_für_Aufgabe_4.1(TR1)');
240 xlabel('Zeitins');
241 ylabel('LängedesKanals');
242 zlabel('TemperaturinK');
243 grid on;
244 % Ausgabe der Ergebnisse für den Fall TR=255K
245 figure(11);
246 subplot(211);
247 plot(t3,x3(:,p.n),t3,x3(:,1),'LineWidth',2);
248 legend('cAimletztenVolumenelement','cAimerstenVolumenelement');
249 title('KonzentrationderKomponenteAfürAufgabe_4.1(TR2)');
250 xlabel('Zeittins');
251 ylabel('KonzentrationcAinmol/m^3');
252 grid on;
253 subplot(212);
254 plot(t3,x3(:,2*p.n),t3,x3(:,p.n+1),'LineWidth',2);
255 legend('TimletztenVolumenelement','TimerstenVolumenelement');
256 title('TemperaturimKanal_für_Aufgabe_4.1(TR2)');
257 xlabel('Zeittins');
258 ylabel('TinK');
259 grid on;
260 % Konzentration der Komponente A im gesamten Kanal
261 figure(12);
262 mesh(t3,[1:p.n]*p.Δz,x3(:,1:p.n))
263 title('KonzentrationderKomp.AinallenVolumenelementen_für_Aufgabe_...
264 4.1(TR2)');
265 xlabel('Zeitins');
266 ylabel('LängedesKanals');
267 zlabel('KonzentrationincAinmol/m^3');
268 grid on;
269 % Temperatur im gesamten Kanal
270 figure(13);
271 mesh(t3,[1:p.n]*p.Δz,x3(:,p.n+1:2*p.n))
272 title('TemperaturverlaufinallenVolumenelementen_für_Aufgabe_4.1(TR2)');
273 xlabel('Zeitins');
274 ylabel('LängedesKanals');
275 zlabel('TemperaturinK');
276 grid on;
277
278 % Ausgabe der Ergebnisse aus Aufgabe 4.4
279 % Auswertung der Ergebnisse für TR1
280 figure(14);
281 subplot(211);

```

```

282 plot(t6,x6(:,p.n), 'LineWidth',2);
283 legend('c_Aim_letzten_Volumenelement');
284 title('Konzentration der Komponente A für Aufgabe 4.4 (TR1)');
285 xlabel('Zeit t in s');
286 ylabel('Konzentration c_A in mol/m^3');
287 grid on;
288 subplot(212);
289 plot(t6,x6(:,2*p.n), 'LineWidth',2);
290 legend('T_im_letzten_Volumenelement');
291 title('Temperatur im Kanal für Aufgabe 4.4 (TR1)');
292 xlabel('Zeit t in s');
293 ylabel('T in K');
294 grid on;
295 % Auswertung der Ergebnisse für TR2
296 figure(15);
297 subplot(211);
298 plot(t7,x7(:,p.n), 'LineWidth',2);
299 legend('c_Aim_letzten_Volumenelement');
300 title('Konzentration der Komponente A für Aufgabe 4.4 (TR2)');
301 xlabel('Zeit t in s');
302 ylabel('Konzentration c_A in mol/m^3');
303 grid on;
304 subplot(212);
305 plot(t7,x7(:,2*p.n), 'LineWidth',2);
306 legend('T_im_letzten_Volumenelement');
307 title('Temperatur im Kanal für Aufgabe 4.4 (TR2)');
308 xlabel('Zeit t in s');
309 ylabel('T in K');
310 grid on;
311
312 % Ausgabe der stationären Zustände für 3.4
313 figure(16);
314 plot(z1,x_s1(1:p.n),z1,x_s1(p.n+1:2*p.n), 'LineWidth',2);
315 legend('c_{ss}', 'T_{ss}');
316 title('Konzentration/Temperatur im stationären Zustand für Aufgabe 3.4');
317 xlabel('Länge des Kanals in m');
318 ylabel('Konzentration in mol/m^3 / Temp. in K');
319 grid on;
320
321 % Projektübung 3 Systemverfahrenstechnik
322 % Katharina Holstein STK 03
323 % Nebenprogramm zu 3.1 und 3.2 sowie 3.3 sowie 4.1 und 4.4
324 function f=Prue3_nebena( t, x, p, TR, DA , lambda, v);
325 c=x(1:p.n); % Konzentration als ersten 1-n Zeilen des Spaltenvektors
326 T=x(p.n+1:2*p.n); % genauso mit Temperatur
327 for i=1:p.n
328     r(i,1)=p.k0*exp(-p.EA/(p.R*T(i)))*c(i);
329 end
330 % p.k0*exp(-p.EA/(p.R*T(1)))*c(1)
331 % p.k0*(exp(-p.EA/(p.R*T(2:p.n-1)))*c(2:p.n-1))'
332 % Aufteilen der einzelnen Elemente zur Berechnung von dcdt
333 % erstes Volumenelement
334 dcdt(1,1)=v*(p.cin-c(1))/p.dz...
335     +DA*(c(2)-c(1)-(c(1)-p.cin)/0.5)/(p.dz^2)...
336     +p.beta/p.d*(p.cR-c(1))...
337     -r(1);
338 % alle Volumenelemente von 2 bis n-1
339 dcdt(2:p.n-1,1)=v*(c(1:p.n-2)-c(2:p.n-1))/p.dz...
340     +DA*(c(3:p.n)-2*c(2:p.n-1)+c(1:p.n-2))/(p.dz^2)...
341     +p.beta/p.d*(p.cR-c(2:p.n-1))...
342     -r(2:p.n-1);

```

```

343 % letztes Volumenelement n
344 dcdt(p.n,1)=v*(c(p.n-1)-c(p.n))/p.dz...
345     -DA*(c(p.n)-c(p.n-1))/(p.dz^2)...
346     +p.beta/p.d*(p.cR-c(p.n))...
347     -r(p.n);
348 % Aufteilen der einzelnen Elemente zur Berechnung von dTdt
349 % erstes Volumenelement
350 dTdt(1,1)=v*(p.Tin-T(1))/p.dz...
351     +lambda/p.rhocp*(T(2)-T(1)-(T(1)-p.Tin)/0.5)/(p.dz^2)...
352     +p.alpha*(TR-T(1))/p.rhocp/p.d...
353     -p.dRh/p.rhocp*r(1);
354 % alle Volumenelemente von 2 bis n-1
355 dTdt(2:p.n-1,1)=v*(T(1:p.n-2)-T(2:p.n-1))/p.dz...
356     +lambda/p.rhocp*(T(3:p.n)-2*T(2:p.n-1)+T(1:p.n-2))/(p.dz^2)...
357     +p.alpha*(TR-T(2:p.n-1))/p.rhocp/p.d...
358     -p.dRh/p.rhocp*r(2:p.n-1);
359 % letztes Volumenelement
360 dTdt(p.n,1)=v*(T(p.n-1)-T(p.n))/p.dz...
361     -lambda/p.rhocp*(T(p.n)-T(p.n-1))/(p.dz^2)...
362     +p.alpha*(TR-T(p.n))/p.rhocp/p.d...
363     -p.dRh/p.rhocp*r(p.n);
364 f=[dcdt;dTdt];
365
366
367 % Projektkübung 3 Systemverfahrenstechnik Aufgabe 3
368 % Katharina Holstein STK 03
369 % Nebenprogramm 2
370 function f=Prue3_nebenb(x,p,TR, DA, lambda, v); f=Prue3_nebena(0, x,
371 p, TR, DA, lambda, v);
372
373
374 % Projektkübung 3 Systemverfahrenstechnik Aufgabe 3
375 % Katharina Holstein STK 03
376 % Nebenprogramm zur Aufgabe 3.5
377 function f=Prue3_nebenc(t, x, p, TR, DA, lambda, v); c=x(1); T=x(2);
378 dcdz=p.beta/p.d/p.v*(p.cR-c)...
379     -p.k0/v*exp(-p.EA/(p.R*T))*c;
380 dTdz=p.alpha*(TR-T)/p.rhocp/p.d/p.v...
381     -p.dRh/p.rhocp/v*p.k0*exp(-p.EA/(p.R*T))*c;
382 f=[dcdz; dTdz];

```