Wenn bei einem stationären CSTR die Konzentration eines Spurstoffs von c_0 auf c_1 geändert wird, wie lange muss man warten um $0{,}95c_1$ zu erhalten? Keine Reaktion!

$$\frac{dc}{dt}=\frac{c_1-c}{\tau}$$

$c(t=0)=c_0$ =der alte stationäre Wert

$$\frac{dc}{c_1-c}=\frac{dt}{\tau} \qquad \int\frac{dc}{c_1-c}=\int\frac{dt}{\tau} \qquad \int_{c_0}^{c(t')}\frac{dc}{c_1-c}=\int_0^{t'}\frac{dt}{\tau}=\frac{t'}{\tau}$$

$$\frac{t'}{\tau}=-\ln(c_1-c)\Big|_{c_0}^{c(t')}=-\ln\left(\frac{c_1-c(t')}{c_1-c_0}\right) \qquad \frac{c_1-c(t')}{c_1-c_0}=e^{-\frac{t'}{\tau}}$$

Wenn bei einem stationären CSTR die Konzentration eines Spurstoffs von c_0 auf c_1 geändert wird, wie lange muss man warten um $0{,}95c_1$ zu erhalten? Keine Reaktion!

$$\frac{c_1-c(t')}{c_1-c_0}=e^{-\frac{t'}{\tau}} \qquad c(t')=c_1+(c_0-c_1)e^{-\frac{t'}{\tau}}$$

$$\frac{t}{\tau}=-\ln\left(\frac{c_1-c(t)}{c_1-c_0}\right) \qquad t=-\tau\ln\left(\frac{c_1-0{,}95c_1}{c_1-c_0}\right) \qquad \boxed{t=-\tau\ln\left(\frac{0{,}05}{1-\frac{c_0}{c_1}}\right)}$$

Wenn bei einem stationären CSTR, in dem eine volumenbeständige irreversible Reaktion 1. Ordnung abläuft, die Verweilzeit geändert wird, wie lange muss man warten um $0{,}95\Delta c_{stat}$ zu erhalten?

$$\frac{dc}{dt}=\frac{c_0-c}{\tau}-kc$$

0,95(Delta c) !!!!!!

$$0=\frac{c_0-c_{sta,1}}{\tau_1}-kc_{sta,1} \qquad c_{sta}=\frac{c_0}{1+\tau k} \qquad c_{sta,1}=\frac{c_0}{1+\tau_1 k}$$

$$\frac{dc}{dt}=\frac{1}{\tau_2}(c_0-c-\tau_2 kc) \qquad \frac{dc}{c_0-c-\tau_2 kc}=\frac{1}{\tau_2}dt$$

$$\int\frac{dc}{c_0-c-\tau_2 kc}=\int\frac{1}{\tau_2}dt \qquad \int_{c_{sta,1}}^{0{,}95c_{sta,2}}\frac{dc}{c_0-c-\tau_2 kc}=\int_0^{t'}\frac{1}{\tau_2}dt=\frac{t'}{\tau_2}$$

$$\int_{c_{sta,1}}^{0{,}95c_{sta,2}}\frac{dc}{c_0-c-\tau_2 kc}=\frac{t'}{\tau_2} \qquad c_{sta,1}=\frac{c_0}{1+\tau_1 k}$$

$$\int_{c_{sta,1}}^{0{,}95c_{sta,2}}\frac{dc}{c_0-(1+\tau_2 k)c}=\frac{t'}{\tau_2} \qquad \frac{1}{1+\tau_2 k}\ln\big(c_0-(1+\tau_2 k)c\big)\Big|_{c_{sta,1}}^{c_{sta,2}}=\frac{t'}{\tau_2}$$

$$t'=\frac{\tau_2}{1+\tau_2 k}\ln\left(\frac{c_0-0{,}95(1+\tau_2 k)c_{sta,2}}{c_0-(1+\tau_2 k)c_{sta,1}}\right)$$

$$t'=\frac{\tau_2}{1+\tau_2 k}\ln\left(\frac{c_0-(1+\tau_2 k)\frac{0{,}95c_0}{1+\tau_2 k}}{c_0-(1+\tau_2 k)\frac{c_0}{1+\tau_1 k}}\right) \qquad t'=\frac{\tau_2}{1+\tau_2 k}\ln\left(\frac{0{,}05}{\frac{1+\tau_1 k-1-\tau_2 k}{1+\tau_1 k}}\right)$$

$$t'=\frac{\tau_2}{1+\tau_2 k}\ln\left(\frac{0{,}05}{\frac{1+\tau_1 k-1-\tau_2 k}{1+\tau_1 k}}\right)$$

$$t'=\frac{\tau_2}{1+\tau_2 k}\ln\left(\frac{0{,}05(1+\tau_1 k)}{k(\tau_1-\tau_2)}\right)$$

Dies ist die Zeit, die zu warten ist, bis nach einer Änderung von τ_1 auf τ_2 der Konzentrationswert von $0{,}95c_{sta}$ erreicht ist.

Umsatzverhalten von CSTR und PFR

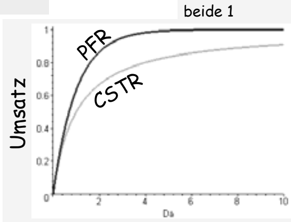
Umsatz $U=\frac{c_0-c}{c_0}$

Volumenbeständige, irreversible Reaktion 1. Ordnung

D_a Damköhlerzahl $D_a=\tau\, k$

im Unendlichen beide 1

D_a-Umsatz-Beziehungen

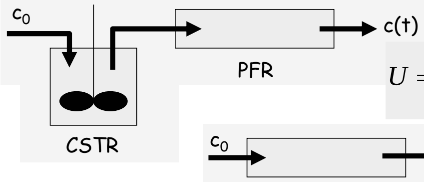


CSTR $U=\frac{D_a}{1+D_a}$

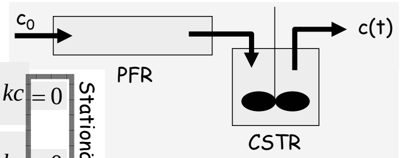
PFR $U=1-e^{-D_a}$

Aufgabe

Zwei Reaktor-Systeme sind gegeben, die jeweils aus einem idealen Durchflussrührkessel und einem idealen Strömungsrohr bestehen. Wenn eine irreversible Reaktion 1. Ordnung abläuft, welche Kombination ist vorteilhaft bezüglich des Umsatzes?



$$U = \frac{c_0 - c}{c_0} = 1 - \frac{c}{c_0}$$



CSTR $\frac{dc}{dt} = \frac{c_0 - c}{\tau} - kc \boxed{= 0}$

PFR $\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial z} - kc \boxed{= 0}$

Stationär

CSTR $\frac{dc}{dt} = \frac{c_0 - c}{\tau} - kc \boxed{= 0}$

PFR $\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial z} - kc \boxed{= 0}$

Stationär

$$U = 1 - \frac{c}{c_0}$$

CSTR

$$0 = \frac{c_0}{\tau} - \left(\frac{1}{\tau} + k\right)c_{st} \quad \left(\frac{1}{\tau} + k\right)c_{st} = \frac{c_0}{\tau} \quad c_{st} = \frac{c_0}{\tau\left(\frac{1}{\tau} + k\right)} \quad \boxed{c_{st} = \frac{c_0}{(1 + \tau k)}}$$

PFR

$$0 = -u\frac{\partial c}{\partial z} - kc \quad u\frac{dc}{dz} = -kc \quad u\frac{dc}{c} = -kdz \quad u\int_{c_0}^{c(L)}\frac{dc}{c} = -\int_0^L kdz$$

$$\int_{c_0}^{c(L)} u\frac{dc}{c} = -kL \quad \ln(c)\Big|_{c_0}^{c(L)} = -k\frac{L}{u} \quad \tau = \frac{L}{u} \quad c_{st} = c(L) \quad \ln\left(\frac{c_{st}}{c_0}\right) = -k\tau \quad \boxed{c_{st} = c_0 e^{-k\tau}}$$

CSTR $\frac{dc}{dt} = \frac{c_0 - c}{\tau} - kc \boxed{= 0}$

PFR $\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial z} - kc \boxed{= 0}$

Stationär

$\boxed{c_{CSTR} = \frac{c_0}{1 + \tau_{CSTR} k}}$ CSTR

$\boxed{c_{PFR} = c_0 e^{-k\tau_{PFR}}}$ PFR

CSTR-PFR

$$c_{C+P} = \boxed{c_{CSTR}}\, e^{-k\,\tau_{PFR}} \quad c_{C+P} = \frac{c_0}{1 + \tau_{CSTR} k} e^{-k\,\tau_{PFR}}$$

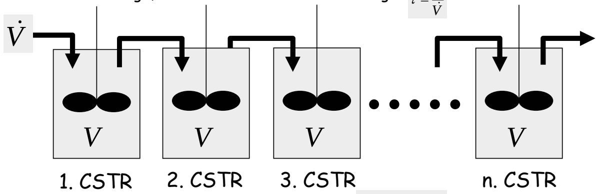
PFR-CSTR

$$c_{P+C} = \frac{\boxed{c_{PFR}}}{1 + \tau_{CSTR} k} \quad c_{P+C} = \frac{c_0 e^{-k\,\tau_{PFR}}}{1 + \tau_{CSTR} k}$$

Da die Konzentrationen identisch sind, $c_{P+C} = c_{C+P}$ ist es der Umsatz auch!!

Berechnung des Umsatzes einer Kaskade aus iCSTR!

Volumenbeständige, irreversible Reaktion 1. Ordnung $\tau = \frac{V}{\dot{V}}$ Volumen eines Reaktors



$$U = 1 - \frac{c}{c_0}$$

1. CSTR $c_{CSTR} = \frac{c_0}{1 + \tau k}$

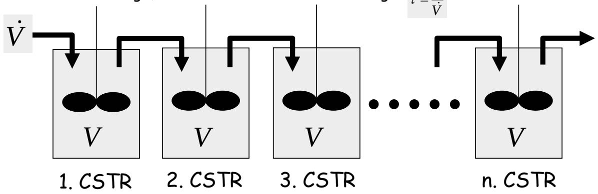
2. CSTR $c_{C+C} = \frac{c_{CSTR}}{1 + \tau k} = \frac{c_0 / (1 + \tau k)}{1 + \tau k} = \frac{c_0}{(1 + \tau k)^2}$

3. CSTR $c_{C+C+C} = \frac{c_{C+C}}{1 + \tau k} = \frac{c_0}{(1 + \tau k)^3}$

n. CSTR $c_{nC} = \frac{c_0}{(1 + \tau k)^n}$

Berechnung des Umsatzes einer Kaskade aus iCSTR!

Volumenbeständige, irreversible Reaktion 1. Ordnung $\tau = \frac{V}{\dot{V}}$ Volumen eines Reaktors



$$U = 1 - \frac{c}{c_0} \quad c_{nC} = \frac{c_0}{(1 + \tau k)^n}$$

Wie groß ist die hydrodynamische Verweilzeit von n Reaktoren? $\tau_{Kaskade} = n\tau$

D_a der Kaskade: $D_a = \tau_{Kaskade}\, k$

Damköhlerzahl

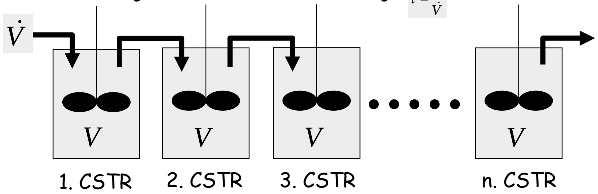
$$D_a = n\tau\, k$$

$$\frac{D_a}{n} = \tau\, k$$

$$c_{nC} = \frac{c_0}{\left(1 + \frac{D_a}{n}\right)^n}$$

Berechnung des Umsatzes einer Kaskade aus iCSTR!

Volumenbeständige, irreversible Reaktion 1. Ordnung $\tau = \frac{V}{\dot{V}}$ Volumen eines Reaktors



$$U = 1 - \frac{c}{c_0} \quad c_{nC} = \frac{c_0}{(1 + \tau k)^n} \quad D_a = n\tau\, k \quad c_{nC} = \frac{c_0}{\left(1 + \frac{D_a}{n}\right)^n}$$

Umsatz Kaskade

$$U_{nC} = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{D_a}{n}\right)^n}$$

Für n → ∞ $\lim_{n\to\infty}\left(1 + \frac{x}{n}\right)^n = ?$

$$\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{x}{n}\right)^n = ?$$

$$y=\left(1+\frac{x}{n}\right)^n$$

$$\frac{dy}{dx}=\frac{d}{dx}\left(1+\frac{x}{n}\right)^n=n\left(1+\frac{x}{n}\right)^{n-1}\frac{1}{n}=\left(1+\frac{x}{n}\right)^{n-1}$$

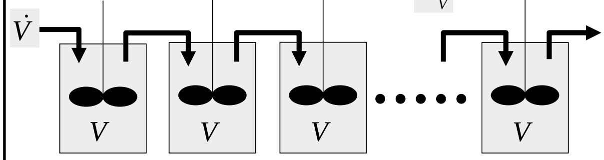
Wenn n unendlich ist, was ist n-1? $(\infty-1=\infty)$

Somit ist für $n\to\infty$ die Funktion y eine Funktion, die gleich ihrer Ableitung ist.

$$\Rightarrow \lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{x}{n}\right)^n = e^x$$

Berechnung des Umsatzes einer Kaskade aus iCSTR!

Volumenbeständige, irreversible Reaktion 1. Ordnung $\tau=\frac{V}{\dot V}$ Volumen eines Reaktors



1. CSTR 2. CSTR 3. CSTR n. CSTR

$$U=1-\frac{c}{c_0}\qquad c_{nC}=\frac{c_0}{(1+\tau\, k)^n}\qquad D_a=n\tau\, k\qquad c_{nC}=\frac{c_0}{\left(1+\frac{D_a}{n}\right)^n}$$

Umsatz Kaskade

$$U_{nC}=1-\frac{1}{\left(1+\frac{D_a}{n}\right)^n}$$

Für n → ∞ $\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{x}{n}\right)^n = e^x$

$$U_{\infty C}=U_{PFR}=1-e^{-D_a}$$ Umsatz PFR

Umsatzverhalten von CSTR bei einer Reaktion n. Ordnung

$$U=\frac{c_0-c}{c_0}\qquad U=1-\frac{c}{c_0}$$

CSTR: $\frac{dc}{dt}=\frac{c_0-c}{\tau}-kc^n=0$ ⟷ $0=c_0-c-k\tau c^n$

stationär

$c_0-c=k\tau c^n$ Division durch c_0^n

$$\Rightarrow \frac{c_0-c}{c_0}\frac{1}{c_0^{n-1}}=k\tau\left(\frac{c}{c_0}\right)^n\qquad \frac{c_0-c}{c_0}=k\tau c_0^{n-1}\left(\frac{c}{c_0}\right)^n$$

$$U=k\tau c_0^{n-1}(1-U)^n\qquad D_a=k\tau c_0^{n-1}\qquad \boxed{U=D_a(1-U)^n}$$

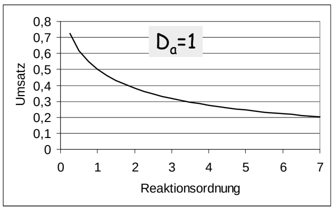
Kann nicht nach U aufgelöst werden

Umsatzverhalten von CSTR bei einer Reaktion n. Ordnung

$$\boxed{U=D_a(1-U)^n}$$

Berechnen mit dem Newton-Verfahren (Nullstellenberechnung) $x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$

$$f(U)=U-D_a(1-U)^n=0\qquad U_{i+1}=U_i-\frac{U_i-D_a(1-U_i)^n}{1+nD_a(1-U_i)^{n-1}}$$



Der Umsatz nimmt bei gleicher D_a-Zahl und steigender Ordnung der Reaktion ab!

Umsatzverhalten von PFR bei einer Reaktion n. Ordnung

$$U=\frac{c_0-c}{c_0}\qquad U=1-\frac{c}{c_0}$$

PFR: $\frac{\partial c}{\partial t}=-v\frac{\partial c}{\partial z}-kc^n=0$ ⟷ $\frac{dc}{dz}=-\frac{k}{v}c^n$

stationär

$$c^{-n}dc=-\frac{k}{v}dz\qquad \int c^{-n}dc=-\int\frac{k}{v}dz\qquad \int_{c_0}^{c(L)}c^{-n}dc=-\int_0^L\frac{k}{v}dz$$

$$\left.\frac{c^{-n+1}}{-n+1}\right|_{c_0}^{c(L)}=-\frac{k}{v}L=\frac{1}{-n+1}\left(c(L)^{-n+1}-c_0^{-n+1}\right)$$

$$\frac{k\tau}{c_0^{-n+1}}=\frac{1}{-n+1}\left(1-\left[\frac{c(L)}{c_0}\right]^{-n+1}\right)=Da$$

Umsatzverhalten von PFR bei einer Reaktion n. Ordnung

$$U=\frac{c_0-c}{c_0}\qquad U=1-\frac{c}{c_0}$$

PFR: $\frac{\partial c}{\partial t}=-v\frac{\partial c}{\partial z}-kc^n=0$ ⟷ $\frac{dc}{dz}=-\frac{k}{v}c^n$

stationär

$$Da=\frac{1}{-n+1}\left(1-\left[\frac{c(L)}{c_0}\right]^{-n+1}\right)\qquad Da=\frac{1}{-n+1}\left(1-[1-U]^{-n+1}\right)$$

für n=2 $U=\frac{Da}{1+Da}$

$$U=1-e^{\left(-\frac{\ln(1+nDa-Da)}{n-1}\right)}$$