

Stofftransport in der Fließstrecke

$\frac{\partial c}{\partial t} = -\text{div}(\vec{u}c) + \text{div}(D \nabla c)$ Hydrodynamik im PFR

Dispersionsmodell (z-Richtung)

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

Für die Dispersion beidseitig offenes System

Analytisch lösbar für δ -Signal

Für die Dispersion beidseitig geschlossenes System

Analytisch nicht lösbar

Leibniz Universität Hannover Bernd Hitzmann TCI Institut für Technische Chemie

Stofftransport in der Fließstrecke

Dispersionsmodell (z-Richtung)

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

Pulsförmige Eingangssignal (δ) beidseitig offen \longrightarrow

$$c(t, z) = \frac{n}{2A\sqrt{\pi D_{ax} t}} e^{-\left(\frac{z-u_z t}{4D_{ax} t}\right)^2} \quad \text{mit } \frac{n}{A} = \int_{-\infty}^{\infty} c(t, z) dz$$

für $A=1, D_{ax}=1, u_z=1, z=0..100, t=2..100$

Leibniz Universität Hannover Bernd Hitzmann TCI Institut für Technische Chemie

Stofftransport in der Fließstrecke

Dispersionsmodell

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

Einführung dimensionsloser Größen

$$x = \frac{z}{L} \quad \theta = \frac{t}{\tau} \quad \tau = \frac{L}{u_z}$$

Signal am Ausgang

$B_0 = \frac{u_z L}{D}$ Bodensteinzahl

Eingang δ ; Ausgang:

$$\frac{c(\theta, B_0)}{c_0} = \frac{1}{2\sqrt{\pi\theta}} e^{-\left(\frac{(1-\theta)^2 B_0}{4\theta}\right)}$$

Leibniz Universität Hannover Bernd Hitzmann TCI Institut für Technische Chemie

Bitte berechnen Sie die Halbwertsbreite der Gaußverteilung

$$G(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

$\mu = 5$

$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad \sigma = 0,399$

$$G(x_{0,5}) = \frac{1}{2\sigma\sqrt{2\pi}}$$

$$\frac{1}{2\sigma\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x_{0,5}-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Leibniz Universität Hannover Bernd Hitzmann TCI Institut für Technische Chemie

$$\frac{1}{2\sigma\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x_{0,5}-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad \frac{1}{2} = e^{-\frac{(x_{0,5}-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\ln\left(\frac{1}{2}\right) = -\frac{(x_{0,5}-\mu)^2}{2\sigma^2} \quad \ln(1) - \ln(2) = -\frac{(x_{0,5}-\mu)^2}{2\sigma^2}$$

$$\ln(2) = \frac{(x_{0,5}-\mu)^2}{2\sigma^2} \quad 2\sigma^2 \ln(2) = (x_{0,5}-\mu)^2$$

$$\sqrt{2\sigma^2 \ln(2)} = \pm(x_{0,5}-\mu) \quad x_{0,5} = \mu \pm \sqrt{2\sigma^2 \ln(2)}$$

$$x_{0,5} = \mu \pm \sigma\sqrt{2\ln(2)} \quad \sqrt{2\ln(2)} = 1,177$$

$$x_{0,5} = \mu \pm 1,177\sigma$$

Leibniz Universität Hannover Bernd Hitzmann TCI Institut für Technische Chemie

$$G(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

für $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ gilt

$$G(\mu \pm \sigma) = e^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{e}}$$

$$G(\mu \pm \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2,718}}$$

$$G(\mu \pm \sigma) = 0,6065$$

$x_{0,5} = \mu \pm \sigma\sqrt{2\ln(2)}$

$x_{0,5} = \mu \pm 1,177\sigma$

Leibniz Universität Hannover Bernd Hitzmann TCI Institut für Technische Chemie

$$G(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

$$x_{0,5} = \mu \pm \sigma\sqrt{2\ln(2)}$$

$$x_{0,5} = \mu \pm 1,177\sigma$$

Zweite Ableitung

Wendepunkt
 $G''(x_w) = 0$
 $\rightarrow x_w = \mu \pm \sigma$

$$\int_{\mu-\sigma}^{\mu+\sigma} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx = 0,683$$

TCI Institut für Technische Chemie
 Bernd Hitzmann

Gegeben ist folgende Verweilzeitverteilung. Bitte berechnen Sie die Varianz dieser Verteilung!

$$E(t) = \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\tau}$$
 Wahrscheinlichkeitsdichte-Verteilung eines idealen CSTR

$$\text{var}(t) = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^2 E(t) dt$$
 2. Moment der Verteilung

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} t E(t) dt$$
 1. Moment der Verteilung

TCI Institut für Technische Chemie
 Bernd Hitzmann

$$E(t) = \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\tau} \quad \bar{t} = \int_0^{\infty} t E(t) dt \quad \int_0^{\infty} t e^{-\frac{t}{\tau}} dt = \tau^2$$

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} t \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\tau} dt = -te^{-\frac{t}{\tau}} \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} e^{-\frac{t}{\tau}} dt = 0 - \tau e^{-\frac{t}{\tau}} \Big|_0^{\infty} = \tau$$

$$\int_a^b uv' dt = uv \Big|_a^b - \int_a^b u'v dt$$

$$u = t \quad u' = 1$$

$$v = -\tau e^{-\frac{t}{\tau}} \quad v' = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}$$

$$E(t) = \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\tau} \rightarrow \bar{t} = \tau$$

TCI Institut für Technische Chemie
 Bernd Hitzmann

$$E(t) = \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\tau} \quad \bar{t} = \tau \quad \text{var}(t) = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^2 E(t) dt \quad \int_0^{\infty} t^2 e^{-\frac{t}{\tau}} dt = \tau^3$$

$$\text{var}(t) = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\tau} dt = \int_0^{\infty} (t^2 - 2t\tau + \tau^2) \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\tau} dt$$

$$\text{var}(t) = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} t^2 e^{-\frac{t}{\tau}} dt - 2 \int_0^{\infty} t e^{-\frac{t}{\tau}} dt + \tau \int_0^{\infty} e^{-\frac{t}{\tau}} dt$$

$$\text{var}(t) = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} t^2 e^{-\frac{t}{\tau}} dt - 2\tau^2 + \tau(-\tau) e^{-\frac{t}{\tau}} \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} t^2 e^{-\frac{t}{\tau}} dt - 2\tau^2 - \tau^2(0-1)$$

$$\text{var}(t) = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} t^2 e^{-\frac{t}{\tau}} dt - \tau^2$$

TCI Institut für Technische Chemie
 Bernd Hitzmann

$$\text{var}(t) = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} t^2 e^{-\frac{t}{\tau}} dt - \tau^2$$

$$\int_a^b uv' dt = uv \Big|_a^b - \int_a^b u'v dt$$

$$u = t^2 \quad u' = 2t$$

$$v = -\tau e^{-\frac{t}{\tau}} \quad v' = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}$$

$$\int_0^{\infty} t^2 e^{-\frac{t}{\tau}} dt = -t^2 \tau e^{-\frac{t}{\tau}} \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} 2t \tau e^{-\frac{t}{\tau}} dt = 2\tau \int_0^{\infty} t e^{-\frac{t}{\tau}} dt = 2\tau^3$$

$$\text{var}(t) = \frac{1}{\tau} 2\tau^3 - \tau^2$$

$$\text{var}(t) = \tau^2$$

$$E(t) = \frac{e^{-\frac{t}{\tau}}}{\tau} \quad \bar{t} = \tau \quad \text{1. Moment}$$

$$\text{var}(t) = \tau^2 \quad \text{2. Moment}$$

TCI Institut für Technische Chemie
 Bernd Hitzmann

Bitte berechnen Sie die Varianz des Verweilzeitenspektrums beim Dispersionsmodell

$$E(\theta) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{B_0}{\pi\theta}} e^{-\frac{B_0(1-\theta)^2}{4\theta}}$$

$$B_0 = \frac{uL}{D_{ax}}$$

$$\bar{\theta} = \int_0^{\infty} \theta E(\theta) d\theta$$

$$\text{var}(\theta) = \int_0^{\infty} (\theta - \bar{\theta})^2 E(\theta) d\theta$$

TCI Institut für Technische Chemie
 Bernd Hitzmann

Dispersionsmodell

```

> restart;
> E(theta) := sqrt(B0/Pi/theta)/2*exp(-B0*(1-theta)^2/4/theta);

```

$$E(\theta) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{B_0}{\pi \theta}} e^{-\frac{B_0(1-\theta)^2}{4\theta}}$$

$$E(\theta) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{B_0}{\pi \theta}} e^{-\frac{B_0(1-\theta)^2}{4\theta}}$$


```

> assume(B0>0);
>
>
>
> |

```

$$\bar{\theta} = \int_0^{\infty} \theta E(\theta) d\theta = 1 + \frac{2}{B_0}$$

$$\text{var}(\theta) = \int_0^{\infty} (\theta - \bar{\theta})^2 E(\theta) d\theta = \frac{2}{B_0^2} (B_0 + 4)$$


 Bernd Hitzmann
 