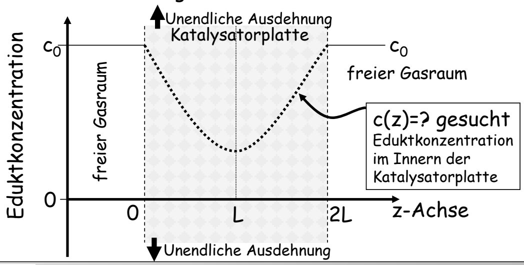
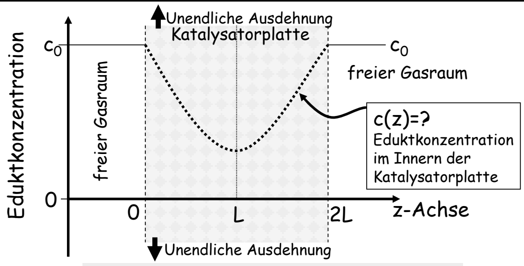
Aufgabe

Berechnen Sie den stationären Konzentrationsverlauf in einer unendlich ausgedehnten Katalysatorplatte unter der Annahme, dass ein effektiver Diffusionskoeffizient (Berücksichtigung von Gas-Porenwand-Stößen) gegeben ist sowie eine irreversiblen Reaktion 1. Ordnung.

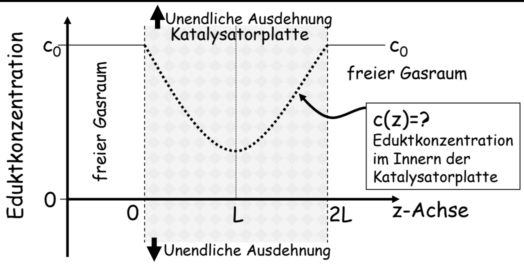




Allgemeine Stoffbilanz $\dfrac{\partial c_i}{\partial t} = -div(\vec{u}c_i) + div\left(D\ grad(c_i)\right) + \nu_i r_V$

Stationär Kat.Platte $\cancel{\dfrac{\partial c_i}{\partial t}} = -\cancel{div(\vec{u}c_i)} + div\left(D\ grad(c_i)\right) + \nu_i r_V$

z-Richtung irr. Reaktion 1. O $0 \quad = \quad 0 \quad + \quad D_{eff}\dfrac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad - \quad kc$

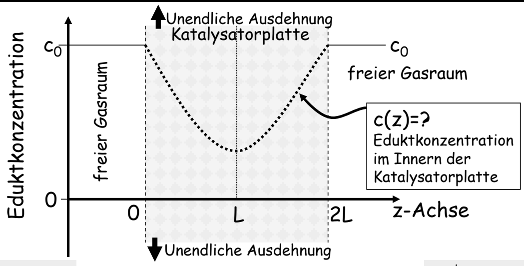


$D_{eff}\dfrac{\partial^2 c}{\partial z^2} = kc$ da nur Ableitung nach einer Variablen $D_{eff}\dfrac{d^2 c}{dz^2} = kc$

<u>Randbedingungen</u>

$c(z=0) = c_0$ $\quad \left.\dfrac{dc}{dz}\right|_{z=L} = 0$ Aufgrund der Symmetrie, c(L) ist minimal

$\left[\, c(z=2L) = c_0 \,\right]$ Nicht neu, da symmetrisch



$D_{eff}\dfrac{d^2 c}{dz^2} = kc$ <u>Randbedingungen</u> $c(z=0) = c_0$ $\quad \left.\dfrac{dc}{dz}\right|_{z=L} = 0$

Einführen von dimensionslosen Variablen für z und c

$\gamma = \dfrac{c(z)}{c_0}$ $\quad x = \dfrac{z}{L}$ $\quad \Rightarrow \quad \dfrac{c_0 D_{eff}}{L^2}\dfrac{d^2\gamma}{dx^2} = kc_0\gamma \quad \dfrac{d^2\gamma}{dx^2} = \dfrac{L^2 k}{D_{eff}}\gamma$

$\gamma(x=0) = 1$ $\quad \left.\dfrac{d\gamma}{dx}\right|_{x=1} = 0$

DGL 2. Ordnung

$\dfrac{d^2\gamma}{dx^2} = \dfrac{L^2 k}{D_{eff}}\gamma$

$\dfrac{d^2\gamma}{dx^2} = \varphi^2\gamma$

<u>Randbedingungen</u>

$\gamma(x=0) = 1$

$\left.\dfrac{d\gamma}{dx}\right|_{x=1} = 0$

$\varphi^2 = \dfrac{L^2 k}{D_{eff}}$ dimensionslos

$\varphi = L\sqrt{\dfrac{k}{D_{eff}}}$ Thiele Modul

Gesucht ist eine Funktion, deren zweite Ableitung die Funktion selber ist!

sin und cos gehen nicht, da gilt: $\dfrac{d^2\sin(x)}{dx^2} = -\sin(x)$

Das Minus-Zeichen kann in obiger DGL nicht berücksichtigt werden, da φ eine reelle Zahl ist!

Es bleibt nur die e-Funktion! $\xrightarrow{\text{Ansatz}}$ $\gamma = Ae^{ax}$

DGL 2. Ordnung

$\dfrac{d^2\gamma}{dx^2} = \varphi^2\gamma$

Ansatz

$\gamma = Ae^{ax}$

<u>Randbedingungen</u>

$\gamma(x=0) = 1$

$\left.\dfrac{d\gamma}{dx}\right|_{x=1} = 0$

Einsetzen:

$\dfrac{d^2\gamma}{dx^2} = Aa^2e^{ax} = \varphi^2\gamma \;\Rightarrow\; a^2 = \varphi^2,\; a = \pm\varphi \;\Rightarrow\; \gamma = Ae^{\varphi x} + Be^{-\varphi x}$

Nun Randbedingungen nutzen, um die freien Parameter A und B zu berechnen!

$\gamma(x=0) = 1 \quad 1 = Ae^0 + Be^0 \quad A = 1 - B$

$\left.\dfrac{d\gamma}{dx}\right|_{x=1} = 0 \quad A\varphi e^{\varphi} - B\varphi e^{-\varphi} = 0 \quad (1-B)\varphi e^{\varphi} - B\varphi e^{-\varphi} = 0$

$$\frac{d^2\gamma}{dx^2} = \varphi^2\gamma$$

Allgemeine Lösung

$$\gamma = Ae^{\varphi x} + Be^{-\varphi x}$$

1. Randbedingung

$$A = 1 - B$$

$$(1-B)\varphi e^{\varphi} - B\varphi e^{-\varphi} = 0$$

$$\varphi e^{\varphi} - B\varphi e^{\varphi} - B\varphi e^{-\varphi} = 0$$

$$B\left(\varphi e^{\varphi} + \varphi e^{-\varphi}\right) = \varphi e^{\varphi}$$

$$B = \frac{\varphi e^{\varphi}}{\varphi e^{\varphi} + \varphi e^{-\varphi}} = \frac{e^{\varphi}}{e^{\varphi} + e^{-\varphi}}$$

$$A = 1 - B = 1 - \frac{e^{\varphi}}{e^{\varphi} + e^{-\varphi}}$$

$$A = \frac{e^{-\varphi}}{e^{\varphi} + e^{-\varphi}}$$

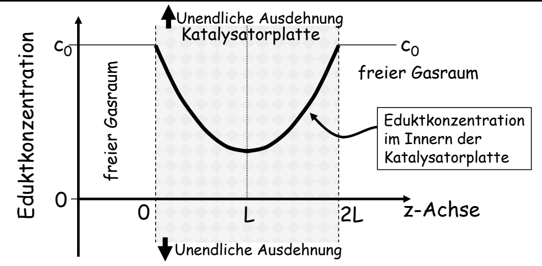
$$\gamma(x) = \frac{e^{\varphi(x-1)} + e^{-\varphi(x-1)}}{e^{\varphi} + e^{-\varphi}}$$

Definition: $\cosh x = \dfrac{e^{x} + e^{-x}}{2}$

$$\gamma(x) = \frac{\cosh(\varphi(x-1))}{\cosh(\varphi)}$$

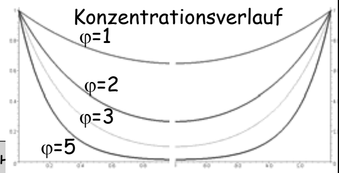
$$\gamma = \frac{c(z)}{c_0} \qquad x = \frac{z}{L}$$

$$c(z) = c_0 \frac{\cosh\left(\varphi\left[\frac{z}{L} - 1\right]\right)}{\cosh(\varphi)}$$



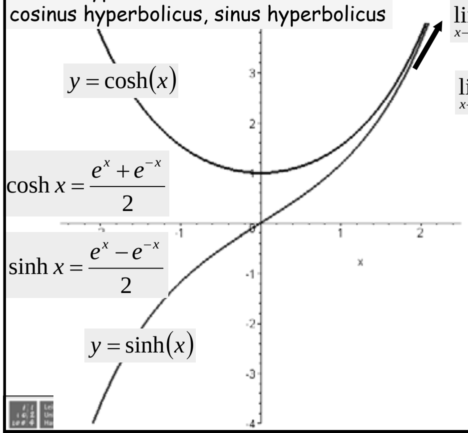
$$\varphi = L\sqrt{\frac{k}{D_{eff}}}$$

Thiele Modul



$$c(z) = c_0 \frac{\cosh\left(\varphi\left[\frac{z}{L} - 1\right]\right)}{\cosh(\varphi)}$$

Hyperbolische Funktionen
cosinus hyperbolicus, sinus hyperbolicus



$$y = \cosh(x)$$

$$\cosh x = \frac{e^{x} + e^{-x}}{2}$$

$$\sinh x = \frac{e^{x} - e^{-x}}{2}$$

$$y = \sinh(x)$$

$$\lim_{x\to\infty} \cosh(x) = \frac{e^{x}}{2}$$

$$\lim_{x\to\infty} \sinh(x) = \frac{e^{x}}{2}$$

Institut für Technische Chemie