



---

**Forschungszentrum Karlsruhe**  
in der Helmholtz-Gemeinschaft

---

**Wissenschaftliche Berichte**  
FZKA 7398

# **Auswertung von Verweilzeitmessungen in der Versuchsanlage THERESA**

**K. Nagel, B. Oser, M. Eberhard**

**Institut für Angewandte Informatik  
Institut für Technische Chemie**

**August 2008**



**Forschungszentrum Karlsruhe**

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 7398

# **Auswertung von Verweilzeitmessungen in der Versuchsanlage THERESA**

**K. Nagel, B. Oser, M. Eberhard**

Institut für Angewandte Informatik

Institut für Technische Chemie

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2008

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH  
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft  
Deutscher Forschungszentren (HGF)

ISSN 0947-8620

urn:nbn:de:0005-073986

## **Zusammenfassung**

Die experimentelle Bestimmung einer Verweilzeitverteilung erlaubt Rückschlüsse auf die Strömungsverhältnisse während der Messung. Die hier zur Verfügung stehenden Resultate beruhen auf zwei unterschiedlichen Messmethoden, Absorptions- bzw. Emissionsspektroskopie, die auch Messgenauigkeitsunterschiede zeigen. Die Ergebnisse der Absorptionsspektroskopie ergaben sich aus einer Zusammenarbeit mit dem Physikalisch-Chemischen Institut der Universität Heidelberg.

Zur Beschreibung der experimentellen Verteilungen wurden sowohl das Zellen- als auch das Dispersionsmodell herangezogen. Diese Modelle beinhalten sowohl Verdrängungs- als auch Vermischungseffekte.

Diese beiden Effekte können aber auch mit Hilfe der diskreten Faltung einer Rechteckfunktion und einer zeitlich abfallenden Exponentialfunktion interpretiert werden.

## **Abstract**

### **Evaluation of residence-time measurements in the pilot plant THERESA**

The experimental determination of dwell time distributions allows conclusions on the streaming relations while taking measurements within a reactor. The available results were obtained in a semi-technical rotary kiln (THERESA) using two different measuring methods, absorption resp. emission spectroscopy technique (the first carried out in co-operation with the Physical-Chemical Institute of the University of Heidelberg), which show differences in accuracy.

For the description of the experimental distributions, two different models (the so-called dispersion model and the cell model) have been used. Both models take into account the effects of displacement and mixture.

Both these effects, however, can also be expounded by the aid of the discrete convolution of a rectangle function and a negative exponential function.



# INHALTSVERZEICHNIS

<b>Einleitung</b>	3
<b>Experimente</b>	4
<b>Modelle und ihre Anwendung</b>	8
- <b>Dispersionsmodell</b>	9
- <b>Zellenmodell</b>	11
- <b>Diskrete Faltung</b>	14
<b>Schlussfolgerungen</b>	16
<b>Literatur</b>	17
<b>Anhang</b>	18





## Einleitung

Eine der wichtigen Größen für die Auslegung kontinuierlich arbeitender Reaktoren ist die Verweilzeit, d.h. die Zeit, während der sich das Stoffgemisch in dem betreffenden Reaktor befindet. Zusammen mit der Reaktionsgeschwindigkeit bestimmt sie den Grad des Umsatzes bzw. bei vorgegebenem Umsatz das Apparatvolumen. Verweilzeitverteilungsfunktionen geben außerdem Hinweise auf strömungstechnische Nichtidealitäten wie Strahlenbildung, partielle Rückvermischung oder Kurzschlussströmung.

Die gebräuchlichen Methoden zur Bestimmung der Verweilzeitverteilung basieren auf Tracerverfahren. Ein Teil der gängigen Tracer (z.B. Farbstoffe) eignen sich nicht für Hochtemperaturprozesse. Deshalb wurden bislang Verweilzeitbestimmungen in Hochtemperaturprozessen mit Hilfe von Radiotracern durchgeführt /1/, was mit einem erheblichen sicherheitstechnischen und genehmigungsrechtlichen Aufwand verbunden ist. Bei einem im FZK entwickelten Verfahren /2/ werden als Tracer Alkalisalze eingesetzt, die den Prozess nicht beeinflussen, deren Metallatome sich spektroskopisch leicht quantifizieren lassen und die im Brennstoff nicht oder nur in geringen Konzentrationen vorhanden sind, z.B. Alkalisalze wie KCl, LiCl, RbCl, oder CsCl. Die Alkalichloride werden in wässriger Lösung als feiner Nebel dosiert. Sie dissoziieren thermisch bei einer Temperatur über 900°C. Die Dissoziationsrate wird neben der Temperatur besonders vom Sauerstoffgehalt beeinflusst (Bildung stabiler Oxide). Analytisch erfasst wird nicht die eingesetzte Indikatorsubstanz (Alkalichloride), sondern erfasst werden die zu einem geringen Anteil thermisch freigesetzten Alkaliatome.

## Experimente

Die Versuche wurden an der 3 MWth -Drehrohrverbrennungsanlage THERESA des Forschungszentrums Karlsruhe durchgeführt (siehe Abb.1). Als Brennstoff dienen für Brenner D12 (Stirnseite Drehrohr) Erdgas und Heizöl. Die Brenner D4.1 und D4.2 in der Nachbrennkammer wurden nur mit Heizöl betrieben.

Es wurden folgende Parameter variiert:

- Brennstoffdurchsatz im Drehrohr (Heizöl)
- Brennstoffzusammensetzung im Drehrohr (Verhältnis Heizöl/Erdgas)
- Luftverteilung (Brennerluft D12, Hauptluft, Sekundärluft)

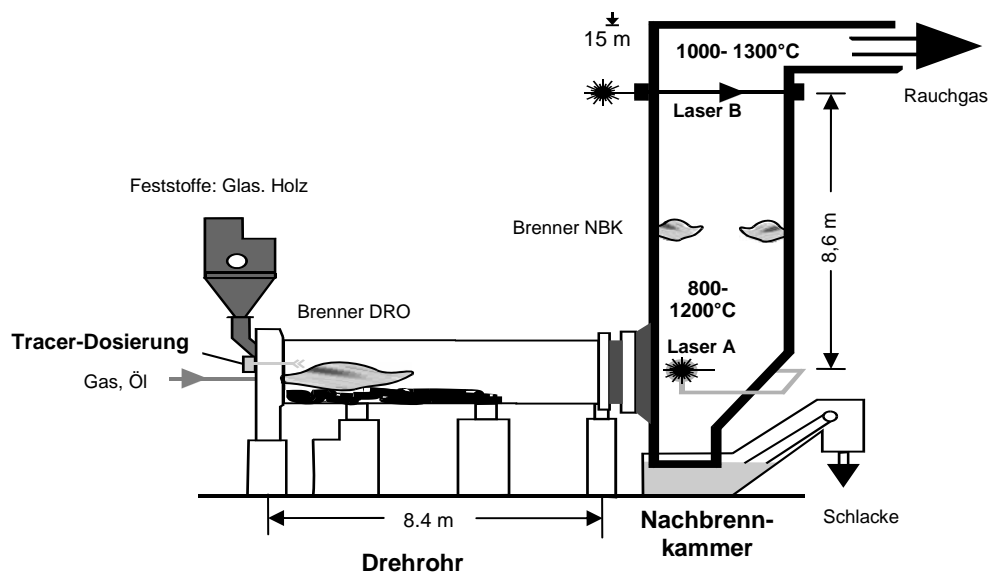


Abbildung 1: Drehrohr und Nachbrennkammer der Versuchsanlage THERESA mit Dosier- und Messstellen

Die Tracerdosierung erfolgt über eine gekühlte Dosierlanze an der Stirnseite des Drehrohrs als Dirac-Impuls mit einer Impulsbreite von ca. 500 bzw. 1000 ms (meist 500ms) in die Gasphase. Als Tracer dient eine wässrige LiCl-Lösung (10%ig). Der Verlauf der Li-Konzentration wird in-situ mittels Emissionsspektroskopie in der Flamme der Brenner der Nachbrennkammer (Brenner D4.1 und D4.2) bestimmt. Dosierung und Spektroskopie werden zeitgleich gestartet. Die Atomemissionen werden mittels Lichtleiter (Quarzfaser 7 x 200  $\mu\text{m}$ ) erfasst und über eine Gitterspektrographen auf einen CCD-Detektor überführt. Das opt. Gitter bildet eine Bandbreite von 240 nm bei einer spektralen Auflösung von  $< 2\text{nm}$  auf dem Sensorchip des CCD-Detektors ab. Die erfassten Emissionsspektren erstrecken sich von 500 bis 737 nm. Abbildung 2 zeigt eine Kurvenschar von Emissionsspektren. Deutlich zu sehen ist der Anstieg und Abfall des Lithiumpeaks. Natrium ist im Brennstoff bzw. im Schlackepelz enthalten und somit im Spektrum immer zu sehen. Der mit der Wellenlänge stetig ansteigende Untergrund ist auf die Planckstrahlung

zurückzuführen. Auf Grund der hohen Nachweisempfindlichkeit sind nur geringe Salzmengen erforderlich (ca. 100 mg pro Dosierstoß).

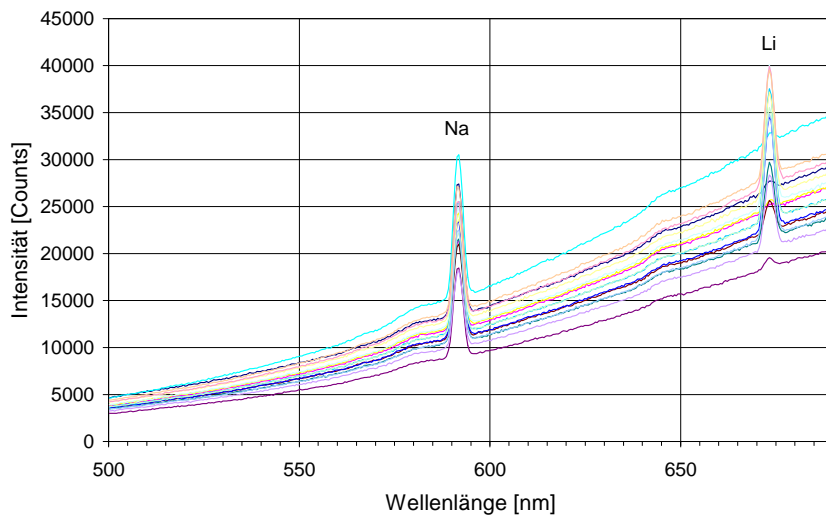


Abbildung 2: Emissionsspektren mit den Banden von Na (589 nm) und Li (671 nm)

Abbildung 3 zeigt als Ausschnitt der Gesamtspektren eine Kurvenschar von Li-Emissionsbanden ( $\lambda_{\max} = 671 \text{ nm}$ ). Deutlich zu sehen sind die Schwankungen des Untergrundes durch Temperatur- bzw. Intensitätsschwankungen.

Als konzentrationsproportionaler Wert wird mittels Simpsonregel die Fläche unter dem Li-Peak bestimmt (zwischen 669 und 679 nm), wobei der Untergrund nicht berücksichtigt wird. In Abbildung 5 ist in einem Spektrum die Grundlinie der Li-Bande markiert (Abb.5 unten, punktierte Linie).

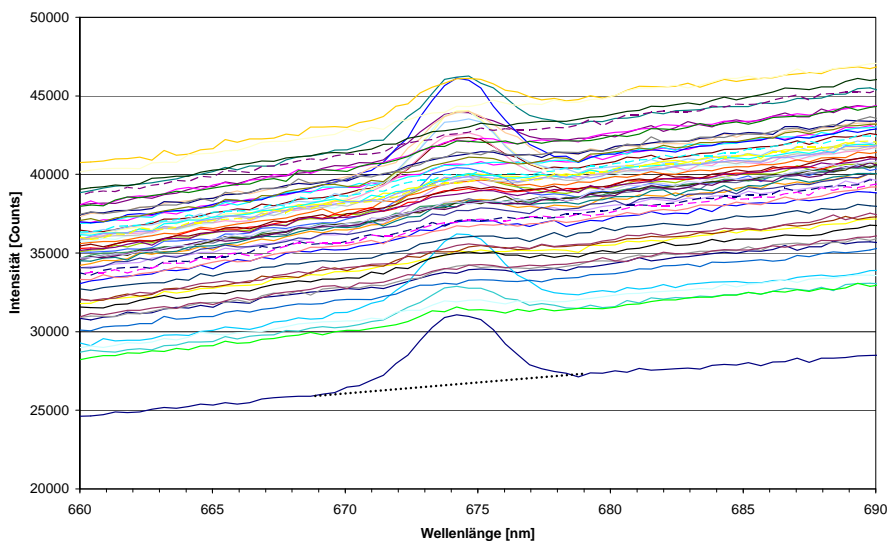


Abbildung 3: Kurvenschar von Li-Emissionsspektren

Bei Versuch TH76 wurde eine am Physikalisch-Chemischen Institut der Universität Heidelberg entwickelte Prozessanalysetechnik auf Basis der In-Situ-Laserabsorptionsspektroskopie im Rahmen einer Zusammenarbeit eingesetzt /3/. Als Tracer diente hierbei ein Gemisch aus KCl- und RbCl-Lösung. Es wurde simultan Rb ( $\lambda_{\max} = 780 \text{ nm}$ ) hinter dem Drehrohr (mit Laser A) und K ( $\lambda_{\max} = 770 \text{ nm}$ ) in der Nachbrennkammer (mit Laser B; siehe Abb. 1) bestimmt.

Abb. 4 und 5 zeigen die mit Gleichung 1 u. 2 /4,5/ aus den Messdaten errechnete dimensionslose differentielle und integrale Verweilzeitverteilungsfunktion für den Bereich zwischen Drehrohrstirnseite und Brenner in der Nachbrennkammer. Die mittlere Verweilzeit wird nach Gleichung 3 bestimmt /4,5/.

$$E(t) = \frac{c_{Ti}}{\sum_i c_{Ti} \Delta t_i} \quad \text{differentielle Verweilzeitverteilungsfunktion (1)}$$

$$I(t) = 1 - \sum_i \bar{E}_i(t) \Delta t \quad \text{integrale Verweilzeitverteilungsfunktion (2)}$$

$$\bar{t} = \frac{\sum_{i=1}^i t_i \cdot c_{Ti}}{\sum_{i=1}^i c_{Ti}} \quad \text{mittlere Verweilzeit (3)}$$

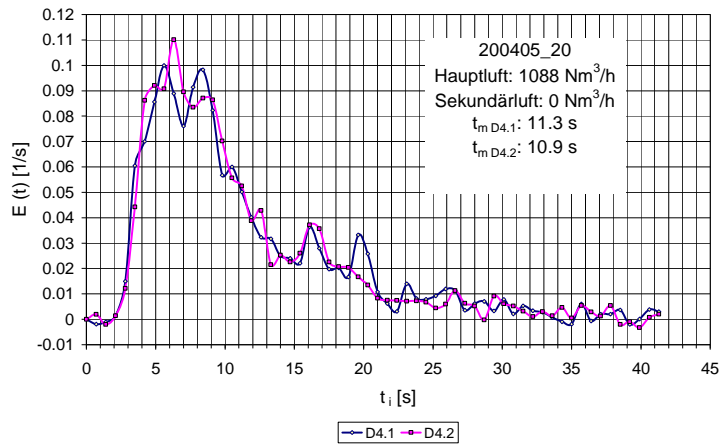


Abb. 4: Differentielle Verweilzeitverteilungsfunktion

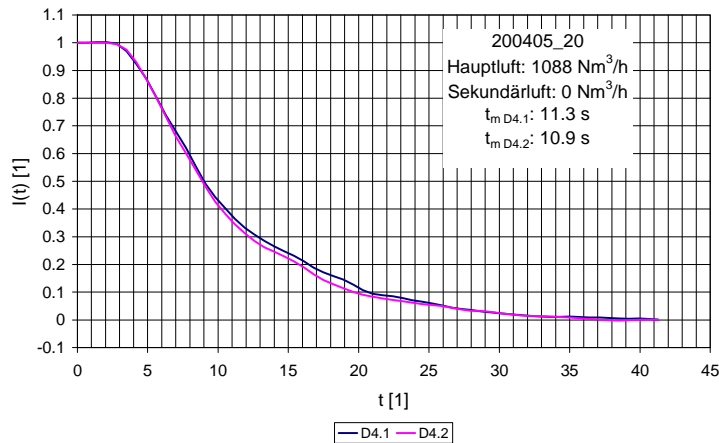


Abb5: Integrale Verweilzeitverteilungsfunktion

Die erhaltenen Verweilzeitverteilungsfunktionen zeigen wie erwartet einen Verlauf, der zwischen den Verteilungsfunktionen der beiden idealisierten Reaktormodelle Rührkessel und Strömungsrohr liegt.

## Modelle und ihre Anwendungen

Die zur Verfügung stehenden Messreihen, Konzentrationen als Funktion der Zeit, können prinzipiell auf zweierlei Weise betrachtet werden /6/:

1. als ein deterministisches Stofftransportsystem mit Eingang und Ausgang. Am Eingang dieses Systems wird im Idealfall eine Rechteckfunktion einer Indikatorlösung aufgegeben. Am Ausgang wird die Konzentration der Lösung in Abhängigkeit von der Zeit gemessen. Das dynamische Verhalten des Systems, d.h. die Transformation der Eingangsfunktion in die Ausgangsfunktion wird mit Hilfe von Strömungsmodellen beschrieben.
2. als ein stochastisches Transportsystem, in dem Mischvorgänge die Überführung von Eingangsimpuls in Ausgangsmessreihe bewirken. Mischvorgänge sind Zufallsereignisse und die aufgenommenen Messungen werden als Verteilungsfunktionen interpretiert. Diese Verteilungen lassen sich durch Zahlencharakteristika (Mittelwert, Streuung, Momente usw.) beschreiben.

Diese Arbeit beschäftigt sich ausschließlich mit Punkt 1.

## Dispersionsmodell

Im Gegensatz zur reinen Pfropfenströmung wird im Dispersionsmodell die Verweilzeitverteilung eines realen Strömungsrohres näherungsweise als eine Überlagerung von Pfropfenströmung und diffusionsartiger axialer Vermischung betrachtet. Diese axiale Vermischung wird durch einen Vermischungskoeffizienten  $D_{ax}$  beschrieben [7].

Zur axialen Vermischung tragen bei:

- konvektive Vermischung in Strömungsrichtung, verursacht durch Wirbelbildung und Turbulenz,
- ungleichförmige Verteilung der Strömungsgeschwindigkeit über den Rohrquerschnitt,
- molekulare Diffusion.

Es ist also eine Pfropfenströmung, an deren Front eine gewisse Durchmischung in axialer Richtung stattfindet, mit einem Vermischungskoeffizienten, der unabhängig ist von der Lage im Strömungsrohr. In radialer Richtung liegt ideale Vermischung vor.

Die Stoffbilanz umfasst eine von der Dispersionsströmung überlagerte Konvektionsströmung. Die differentielle zeitliche Änderung der Konzentration ergibt sich zu:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{ax} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \bar{w} \frac{\partial c}{\partial z}$$

mit der über den Querschnitt gemittelten Strömungsgeschwindigkeit  $\bar{w}$ .

Die Lösung der oberen Differentialgleichung ergibt sich zu:

$$F(t) = \frac{1}{2} \cdot \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{\bar{w} \cdot L}{D_{ax}}} \cdot \frac{1 - \frac{t}{\tau}}{\sqrt{\frac{t}{\tau}}} \right) \right)$$

dabei ist  $Bo$ , die Bodenstein-Zahl, das Verhältnis von konvektivem Stofftransport und axialer Vermischung:

$$Bo = \frac{\bar{w} \cdot L}{D_{ax}}$$

und erf die Fehlerfunktion mit:

$$\operatorname{erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^y e^{-x^2} dx$$

In den folgenden beiden Abbildungen sind die Summenkurven der experimentellen Messergebnisse (\*) und deren Anpassung mit Hilfe des Dispersionsmodells (—) als Funktion der auf die mittlere Verweilzeit ( $\tau$ ) normierten Zeit dargestellt. Weiterhin enthalten sie die Nummer des Experiments und in Klammer die zur Approximation verwendete Bodensteinzahl.

Abbildung 6 zeigt beispielhaft, dass Anfang und Ende der Summenkurve zufriedenstellend approximiert werden, der modellmäßige Anstieg der Kurve jedoch im allgemeinen flacher ausfällt als der experimentelle.

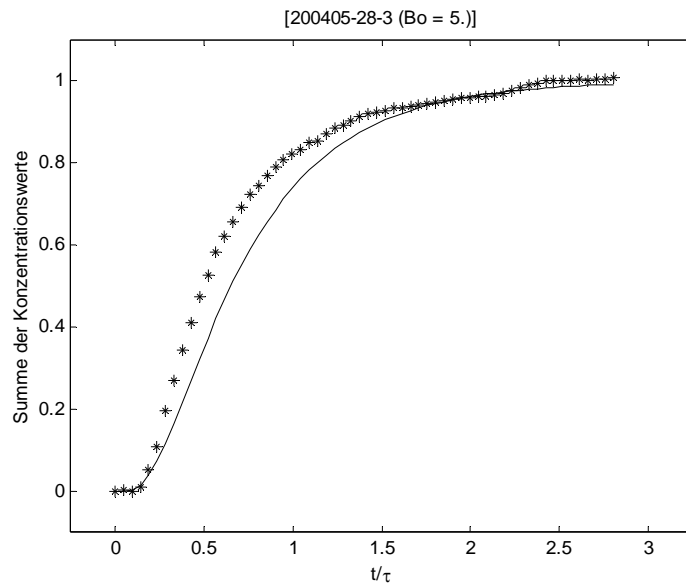


Abbildung 6: Experimentelle Summenkurve (\*) und deren Anpassung durch das Dispersionsmodell.

Abbildung 7 zeigt die einzige gute Approximation aller vorhandenen Experimente.

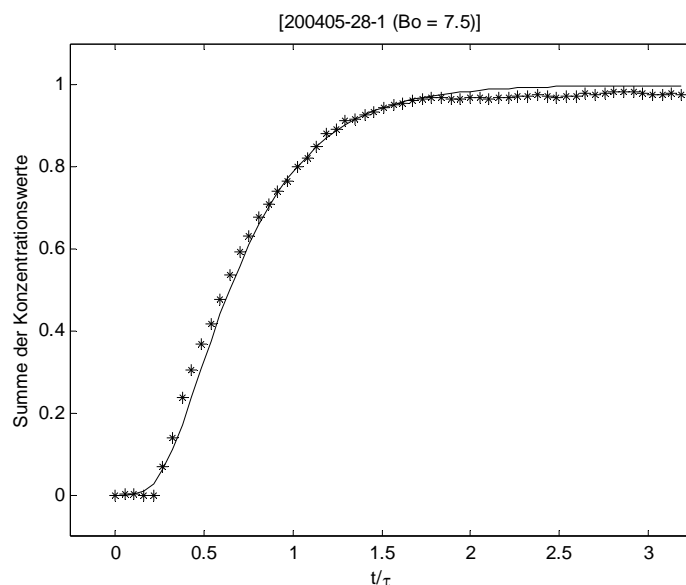


Abbildung 7: Siehe Abb.6.



## Zellenmodell

Eine weitere Möglichkeit Verweilzeitmessungen zu beschreiben, ist die in Reihenschaltung von  $n$  idealen Rührkesseln, sogenannte Rührkesselkaskade oder Mischreaktorbatterie. Der Vorteil dieses Modells ist, dass zwischen dem Modell der idealen Vermischung ( $n = 1$ ) und dem der idealen Verdrängung interpoliert ( $n = \infty$ ) werden kann. Voraussetzung für dieses Modell sind Pfropfenströmung und sofortige vollständige Vermischung der Markierungssubstanz mit dem Inhalt jedes Kessels. Das führt bei  $n$  Rührkesseln zu folgender Verweilzeitsummenfunktion /8/:

$$\frac{c_n^{\text{aus}}}{c_1^{\text{ein}}} = F(t) = 1 - e^{-n \cdot t / \tau} \cdot \left( 1 + \frac{n \cdot t}{\tau} + \frac{1}{2!} \cdot \left( \frac{n \cdot t}{\tau} \right)^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)!} \cdot \left( \frac{n \cdot t}{\tau} \right)^{n-1} \right)$$

bzw. zur Differentialgleichung für die Verweilzeitverteilungsfunktion:

$$E(t) = \frac{dF(t)}{dt} = \frac{n}{\tau \cdot (n-1)!} \cdot \left( \frac{n \cdot t}{\tau} \right)^{n-1} \cdot e^{-n \cdot t / \tau}$$

Die Koordinaten der folgenden Abbildungen entsprechen denen der vorausgehenden, in den Klammern hinter den Experimentnummern steht die Anzahl der Zellen, die zur jeweils besten Anpassung notwendig waren.

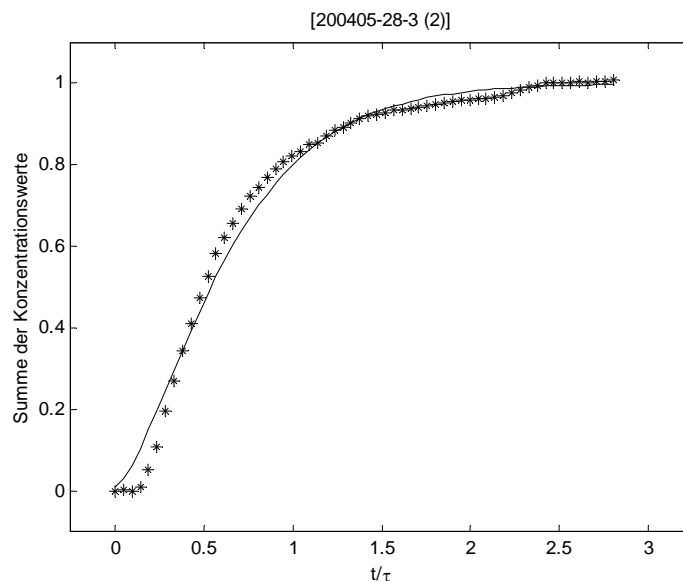


Abbildung 8: Experimentelle Summenkurve (\*) und deren Anpassung mit Hilfe des Zellenmodells.

Die Anpassung der experimentellen Werte durch das Modell des idealen Rührkessels ist gut, hat aber am Anfang der Summenkurve die größten Abweichungen. Das weist darauf hin, dass die Voraussetzung der sofortigen Vermischung noch nicht gegeben ist. Wurden Messungen an zwei verschiedenen Punkten des Brennofens aufgezeichnet (z.B. TH76\_K\_Rb), so ist die Anpassung am Anfang der zweiten Summenkurve deutlich besser. Dies demonstrieren die beiden folgenden Diagramme eindrucksvoll.

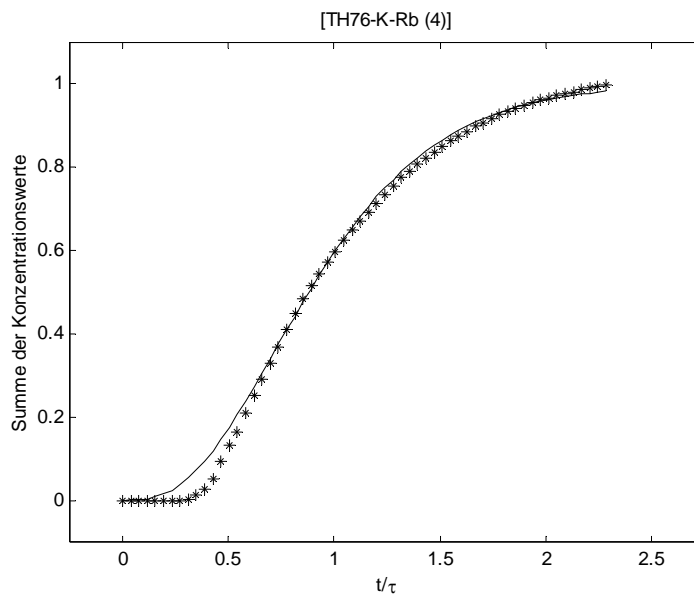


Abbildung 9: Siehe Abb. 8.

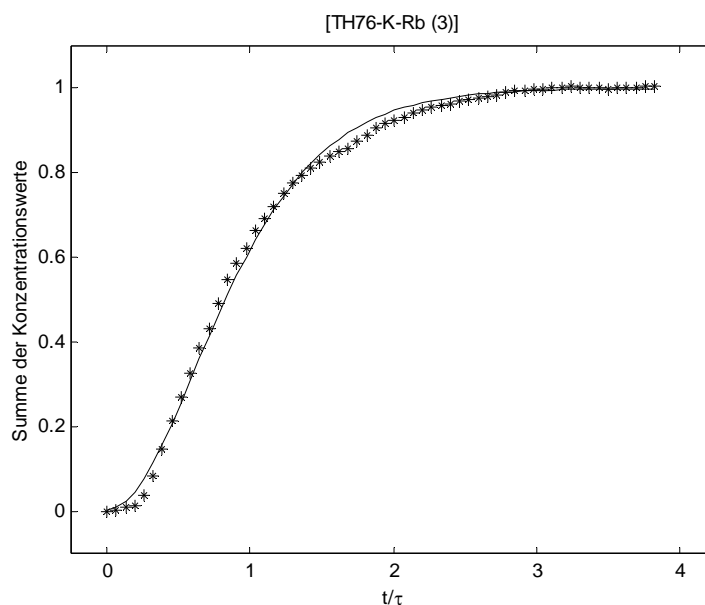


Abbildung 10: Siehe Abb. 8.

Ein Vergleich der beiden Modelle ergibt für das Zellenmodell insgesamt bessere Anpassungen als das Dispersionsmodell. Doch entsprechend der guten Anpassung mit Hilfe des Dispersionsmodells (s. Abb. 7), finden sich auch weniger gute Approximationen im Falle des Zellenmodells (s. Abb. 11).

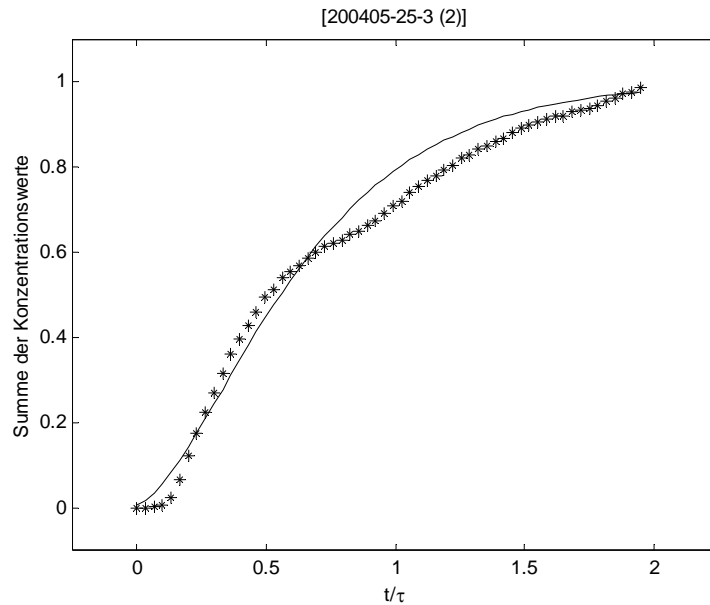


Abbildung 11: Siehe Abb. 8.

Welche Gründe dafür verantwortlich sind, komplexere Prozessabläufe oder größere Messungenauigkeiten, konnten bisher nicht geklärt werden.

## Diskrete Faltung

Ein der experimentellen Vorgehensweise entsprechende Modellierung der Verweilzeit ist die diskrete Faltung /7/.

Mathematisch ist die Faltung für zwei über dem reellen Intervall  $D$  definierte Funktionen  $f$  und  $g$  ( $f * g$ ) die Summe über das Produkt von  $f$  mit einer gespiegelten und verschobenen Version von  $g$ :

$$(f * g)(n) = \sum_{k \in D} f(k)g(n - k)$$

Anschaulich ist die Faltung die Gewichtung einer Funktion mit einer anderen. Der Funktionswert der Gewichtsfunktion  $f$  an der Stelle  $k$  gibt an, wie stark der um  $k$  zurückliegende Wert der gewichteten Funktion  $g(n - k)$ , den Wert der Ergebnisfunktion an der Stelle  $n$  beeinflusst.

Zur Beschreibung der Verweilzeitmessungen eignet sich die Gewichtung einer Rechteckfunktion (Markierungssubstanz) der Fläche eins mit einer Exponentialfunktion. Abbildung 12 gibt die beiden Funktionen als Voraussetzung der Faltung exemplarisch wieder. Die Faltung berechnet die Konzentrationswerte des Markierungsstoffes, die Aufzeichnungen sind also im Gegensatz zur bisherigen Darstellungsweise keine Summenkurven sondern spektrale Diagramme.

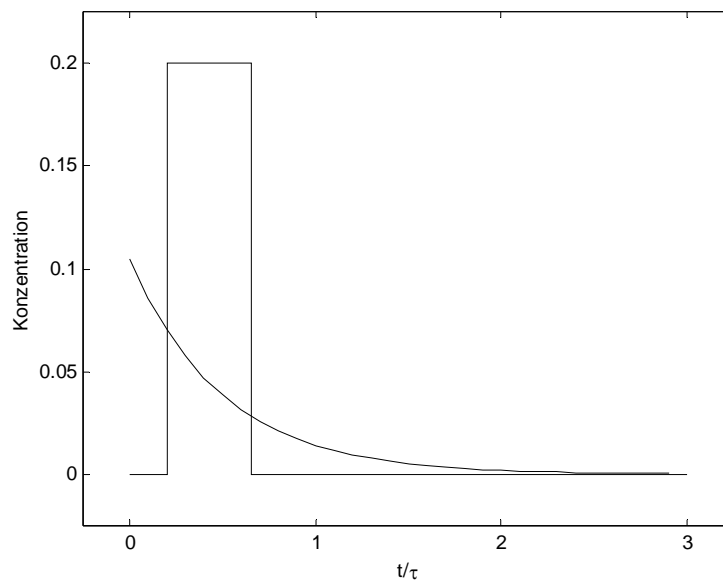


Abbildung 12: Die zur diskreten Faltung notwendigen Funktionen. Das auf die Fläche 1 normierte Eingangsrechteck und die exponentielle Gewichtsfunktion.

Bei der Anpassung durch diskrete Faltung wird der Anstieg der Messkurve wesentlich von der Lage und dem Maximum der Eingangs-Rechteckfunktion bestimmt, der Verlauf nach dem Konzentrationsmaximum ist abhängig von der Gewichtsfunktion.

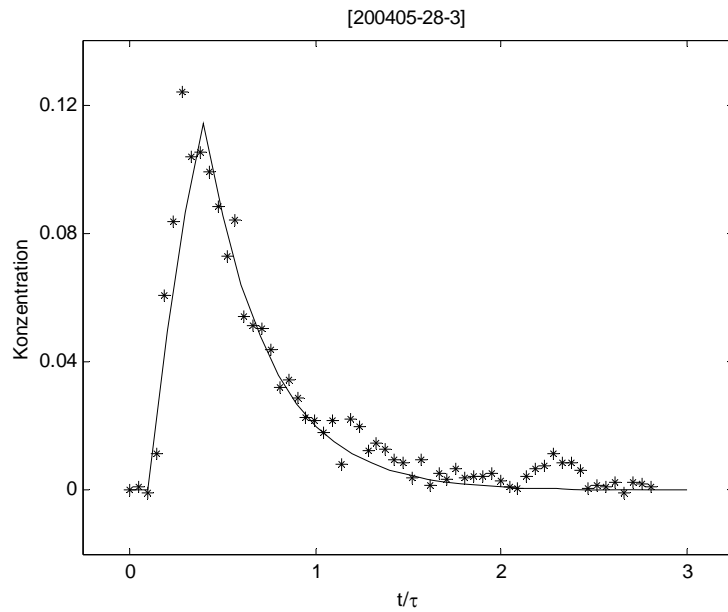


Abbildung 13: Messwerte (\*) und deren Anpassung durch diskrete Faltung.

Eine sehr gute Anpassung ergibt sich für das Experiment 200405–23–3 (s. Abb. 14), allerdings scheint hier zur Approximation, wie in wenigen anderen Fällen auch, ein kleiner konstanter additiver Term in der Gewichtsfunktion notwendig zu sein. Dieser Term könnte auf ein sogenanntes Totvolumen hindeuten, das mit dem übrigen Prozessvolumen einen verzögerten Austausch hat.

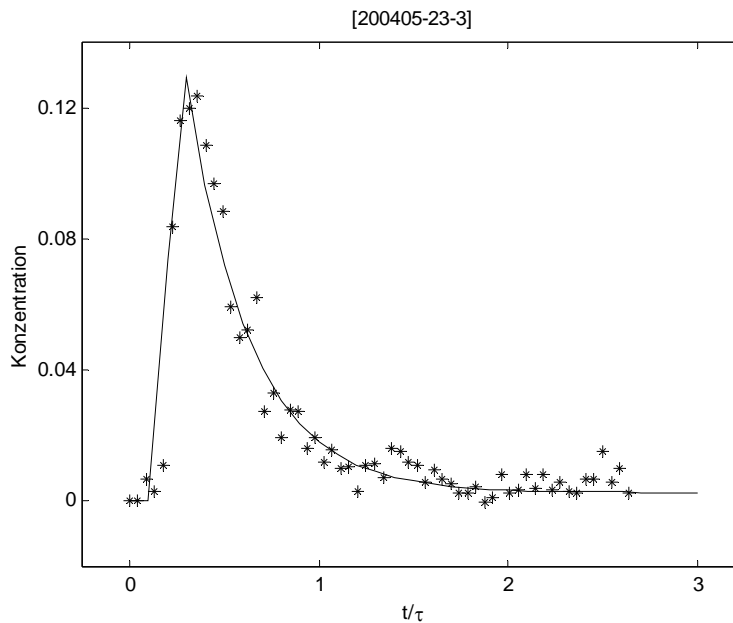


Abbildung 14: Siehe Abb. 13.

## Schlussfolgerungen

Die Interpretation der zugrunde gelegten Verweilzeitmessungen auf der Basis der verwendeten Modelle weist darauf hin, dass Mischungsvorgänge und Verdrängung von entscheidender Bedeutung sind.

Vergleicht man die Anpassungsergebnisse aufgrund der Diskreten Faltung mit Lösungen sogenannter Typenmodellen, so zeigt sich, dass der Typ 'Hintereinanderschaltung von Verdrängung und Vermischung' die gemessenen Verweilzeitkurven anschaulich repräsentiert. Ein Vergleich ist in der folgenden Tabelle wiedergegeben mit Nummer des Experiments, der Breite der Eingangsrechteckfunktion und der Exponentialfunktion für die Faltung, sowie die angepasste Lösung des Typenmodells.

<b>Experiment</b>	$x = \frac{t}{\tau}$	<b>Diskrete Faltung</b>	<b>Typenmodell Reihenschaltung</b>
200405-28-3	$0.15 \leq x \leq 0.45$	$0.15 \cdot e^{-2.9 \cdot x}$	$0.23 \cdot e^{-2.2 \cdot (x + 0.2)}$
190405-7-3	$0.2 \leq x \leq 0.45$	$0.005 + 0.08 \cdot e^{-3.0 \cdot x}$	$0.135 \cdot e^{-1.8 \cdot (x + 0.2)}$
210405-12-1	$0.2 \leq x \leq 0.4$	$0.105 \cdot e^{-2.0 \cdot x}$	$0.25 \cdot e^{-1.5 \cdot (x + 0.35)}$
200405-23-3	$0.2 \leq x \leq 0.35$	$0.002 + 0.11 \cdot e^{-3.0 \cdot x}$	$0.26 \cdot e^{-2.3 \cdot (x + 0.23)}$
200405-25-3	$0.15 \leq x \leq 0.25$	$0.078 \cdot e^{-1.4 \cdot x}$	$0.102 \cdot e^{-1.5 \cdot (x + 0.1)}$

Die zur Beschreibung der experimentellen Daten notwendigen Exponentialfunktionen für Faltung und Typenmodell unterscheiden sich, allerdings scheint der Unterschied für schlanker werdende Rechteckfunktionen geringer zu werden.

## Literatur

- /1/ Merz, A.; Vogg, H.: Fortschritte verfahrenstechnischer Forschung durch die Radionuklidtechnik, Chem.-Ing.-Tech 50 (1978) Nr. 2, S. 108-13.
- /2/ Merz, A.; Oser, B.; Seifert, H.; Siegel, R. ; Ebert, V.; Schlosser, H.E.; Wolfrum, J.: Verwendung von Tracer sowie Verfahren mit Verwendung der Tracer Offenlegungsschrift DE10218045A1.
- /3/ Ebert, V.; Schlosser, E.; Oser, B.; Kolb, T.; Wolfrum, J.: Neues diodenlasergestütztes Verfahren zur In-situ-Bestimmung der Verweilzeitverteilung von Produktgasen in Hochtemperaturprozessen, VDI-Berichte Nr. 1888 (2005) S. 291-301.
- /4/ Weiss, S. (Hrsg.); Adler, R.: Verfahrenstechnische Berechnungsmethoden, Teil 5: Reaktoren: Ausrüstungen und ihre Berechnungen, Verlag Chemie (Weinheim), 1987.
- /5/ Levenspiel, O.: Chemical Reaction Engineering, John Wiley and Sons (New York) , 1962.
- /6/ Pippel, W.; Runge, K.; Geyer, H.; Nieswand, R.; Naake, G. : Verweilzeitanalysen in technologischen Strömungssystemen, Akademieverlag (Berlin), 1978.
- /7/ Zeißler, R.,; Meyer, B.; Seifert, P.; Heinzl, A.: Jentsch, T. : Untersuchung des Verweilzeitverhaltens eines autothermen Vergasungsreaktors bei Drücken bis 70 bar(Ü), Chem.-Ing.-Tech 78 (2006) Nr. 1-2, S. 74-77.
- /8/ Emig,; Klemm, : Technische Chemie, Springer Verlag (Berlin), 2005.

## Anhang

Das ideale **Strömungsrohr** besitzt ein pfropfenartiges Strömungsprofil. In axialer Richtung tritt keine Vermischung auf und in radialer Richtung sind weder Temperatur- noch Konzentrationsgradienten vorhanden, d.h. es herrscht totale Durchmischung. Die Konzentration ist im idealen Strömungsrohr ortsabhängig. Die Stoffbilanz muss daher über ein differentielles Volumenelement durchgeführt werden. Der Transportterm besitzt nur einen konvektiven Anteil. Volumenbezogen lautet dann die Bilanzgleichung für einen Stoff der Konzentration  $c$ , der das Strömungsrohr in  $z$  – Richtung mit der Geschwindigkeit  $w$  durchströmt:

$$\begin{aligned}F \cdot \Delta z \cdot \Delta c &= (w \cdot F \cdot c - w \cdot F \cdot (c + \Delta c)) \cdot \Delta t \\F \cdot \Delta z \cdot \Delta c &= -w \cdot F \cdot \Delta c \cdot \Delta t \\ \Delta z \cdot \Delta c &= -w \cdot \Delta c \cdot \Delta t \\ \frac{\Delta c}{\Delta t} &= -w \cdot \frac{\Delta c}{\Delta z}\end{aligned}$$

Die modellmäßige Erweiterung der Pfropfenströmung durch axiale Vermischung bedeutet die Berücksichtigung eines **Dispersionsanteils**:

$$j_D = D_{ax} \cdot \frac{\Delta c}{\Delta z}$$

Damit folgt für die Stoffbilanz über eine Volumeneinheit:

$$\begin{aligned}\Delta z \cdot \Delta c &= -w \cdot \Delta c \cdot \Delta t + D_{ax} \cdot \frac{\Delta c}{\Delta z} \cdot \Delta t \\ \frac{\Delta c}{\Delta t} &= -w \cdot \frac{\Delta c}{\Delta z} + \frac{1}{\Delta z} \cdot \left( D_{ax} \cdot \frac{\Delta c}{\Delta z} \right)\end{aligned}$$

Die Stoffbilanz der **idealen Verdrängung und Vermischung** in Reihe setzt sich aus zwei Teilen zusammen. Aus der Vermischung eines idealen Rührkessels, dessen Bilanz über den gesamten Reaktor erstellt wird. Die Konzentration im Kessel ist, aufgrund der totalen Vermischung, gleich der Auslaufkonzentration:

$$\begin{aligned}v \cdot \Delta c &= \dot{v} \cdot (c_i - c_A) \cdot \Delta t \\ \frac{v}{\dot{v}} \cdot \frac{\Delta c}{\Delta t} + c_A &= c_i\end{aligned}$$

Und der Pfropfenströmung mit der daraus folgenden Gesamtbilanz:

$$c_i = c_E \cdot (t - t_v)$$



$$\frac{v}{\dot{v}} \cdot \frac{\Delta c}{\Delta t} + c_A = c_i = c_E \cdot (t - t_v)$$

Im **Zellenmodell** gilt für einen der N Idealkessel bei gleichem Reaktionsvolumen, gleichem Volumenstrom und gleicher mittlerer Verweilzeit  $\tau_n = \frac{\tau}{N} = \frac{v}{\dot{v}}$ :

$$\frac{dc_A^n}{dt} + \frac{N}{\tau} \cdot c_A^n = \frac{N}{\tau} \cdot c_A^{n-1}$$

mit der Lösung:

$$c_A^n = e^{-N \cdot t / \tau} \cdot \frac{N}{\tau} \int_0^t c_A^{n-1} \cdot e^{N \cdot t / \tau} \cdot dt$$

Für den ersten Rührkessel gilt also:

$$c_A^1 = c_E^1 \cdot \left( 1 - e^{-N \cdot t / \tau} \right)$$

Diese Lösung in die obere eingesetzt ergibt für den 2. Rührkessel:

$$c_A^2 = e^{-N \cdot t / \tau} \cdot \frac{N}{\tau} \cdot c_E^1 \int_0^t \left( 1 - e^{-N \cdot t / \tau} \right) \cdot e^{N \cdot t / \tau} \cdot dt$$

und damit:

$$c_A^2 = c_E^1 \cdot \left( 1 - e^{-N \cdot t / \tau} \cdot \left( 1 + \frac{N \cdot t}{\tau} \right) \right)$$

auf diese Art weiter fortgesetzt folgt daraus die im vorausgehenden Text genannte Formel für n Rührkessel.

Für die **diskrete Faltung** gilt:

$$(f * g)(n) = h(n) = \sum_{k \in D} f(k)g(n - k)$$

Ausgehend von einem Beispiel, in dem folgendes gegeben sei:

$$f(1), f(2), f(3) \text{ und } g(1), g(2), g(3)$$

Damit ergibt die vorausgehende Gleichung:

$$h(1) = f(1) \cdot g(0) + f(2) \cdot g(-1) + f(3) \cdot g(-2) = 0$$

$$h(2) = f(1) \cdot g(1) + f(2) \cdot g(0) + f(3) \cdot g(-1) = f(1) \cdot g(1)$$

$$h(3) = f(1) \cdot g(2) + f(2) \cdot g(1) + f(3) \cdot g(0) = f(1) \cdot g(2) + f(2) \cdot g(1)$$

$$h(4) = f(1) \cdot g(3) + f(2) \cdot g(2) + f(3) \cdot g(1) = f(1) \cdot g(3) + f(2) \cdot g(2) + f(3) \cdot g(1)$$

$$h(5) = f(1) \cdot g(4) + f(2) \cdot g(3) + f(3) \cdot g(2) = f(2) \cdot g(3) + f(3) \cdot g(2)$$

$$h(6) = f(1) \cdot g(5) + f(2) \cdot g(4) + f(3) \cdot g(3) = f(3) \cdot g(3)$$

$$h(7) = f(1) \cdot g(6) + f(2) \cdot g(5) + f(3) \cdot g(4) = 0$$

Das lässt sich auch folgendermaßen schreiben:

$$h(i) = \sum_{j,k=1}^n f(j) \cdot g(k) \quad i = j + k - 1$$