

Dipl.-Math. Dr. rer. nat.
Thomas Wilhelm Lohmann, Augsburg

Modellierung und Identifizierung der Reaktionskinetik der Kohlepyrolyse

Reihe **3**: Verfahrenstechnik

Nr. **499**

Inhaltsverzeichnis

Bezeichnungen	VIII
Einleitung	1
1 Modellierung der Reaktionskinetik der Kohlepyrolyse	5
1.1 Einführung in die verfahrenstechnische Problemstellung	5
1.1.1 Beschreibung der Grundvorgänge in einem Kohlereaktor	6
1.1.2 Anforderungen an ein Simulationsprogramm	8
1.1.3 Problemstellung	11
1.2 Modelle unabhängiger Parallelreaktionen	15
1.2.1 Modell der einfachen Zerfallsreaktion	15
1.2.2 Modelle mit unabhängigen Parallelreaktionen	16
1.2.3 Modelle mit verteilten Aktivierungsenergien	17
1.3 Modelle konkurrierender Reaktionen	19
1.3.1 Modelle mit Folgereaktionen	19
1.3.2 Ein Modell mit konkurrierenden Reaktionen	23
1.4 Netzwerkmodelle	28
1.4.1 Das FG-DVC-Modell	28
1.4.2 Weitere Netzwerkmodelle	32
1.5 Beurteilung der reaktionskinetischen Modelle zur Kohlepyrolyse	35
2 Verfahren zur Bestimmung unbekannter Modellkonstanten	37
2.1 Formulierung der Ausgleichsprobleme	38
2.1.1 Modelle unabhängiger Parallelreaktionen	38
2.1.2 Ein Modell mit konkurrierenden Reaktionen	41
2.2 Explizite Ansätze	43
2.2.1 Spezielle Integral-Darstellungen	43
2.2.2 Der Anfangswertproblemansatz	45
2.2.3 Unbeschränkte Ausgleichsprobleme	46

2.3	Ein impliziter Ansatz	47
2.3.1	Der Randwertproblemansatz	47
2.3.2	Beschränkte Ausgleichsprobleme	49
2.4	Statistische Analyse der Lösung von Ausgleichsproblemen	52
2.4.1	Unbeschränkte Ausgleichsprobleme	52
2.4.2	Beschränkte Ausgleichsprobleme	54
2.5	Beurteilung der Verfahren	57
3	Identifizierung in Modellen unabhängiger Parallelreaktionen	59
3.1	Parametertransformation	59
3.2	Gewichtung der Ausgleichsfunktion	62
3.2.1	Konstante Standardabweichung der Meßfehler	62
3.2.2	Relative Standardabweichungen der Meßfehler	66
3.3	Anzahl der Parallelreaktionen	68
3.3.1	Relative Standardabweichungen der Meßfehler	69
3.3.2	Konstante Standardabweichung der Meßfehler	72
3.4	Reaktionsordnung	74
3.4.1	Konstante Standardabweichung der Meßfehler	75
3.4.2	Relative Standardabweichungen der Meßfehler	77
3.4.3	Erhöhte Anzahl von Parallelreaktionen	79
3.5	Gesamtausbeuten der Flüssigkeiten	82
3.5.1	Reaktionsordnung Eins	82
3.5.2	Reaktionsordnung Zwei	85
3.6	Vergleich der Modellannahmen	87
4	Identifizierung in Modellen konkurrierender Reaktionen	89
4.1	Analyse der numerischen Schwierigkeiten	89
4.1.1	Detaillierte Untersuchung der Modellgleichungen	90
4.1.2	Erste Lösungsversuche	92
4.2	Adaptive Modellierung und Identifizierung	94

4.2.1	Ein reduziertes Modell	94
4.2.2	Erweiterung durch Zwischenprodukt	96
4.2.3	Erweiterung durch zusätzliche Reaktionen der Gase	98
4.2.4	Erweiterung durch zusätzliche Reaktionen der Flüssigkeiten	101
4.2.5	Fehlerhafte Modellierung	105
4.3	Ein modifiziertes Modell konkurrierender Reaktionen	108
4.3.1	Beschreibung der Modelländerungen	108
4.3.2	Relative Standardabweichungen der Meßfehler	114
4.3.3	Konstante Standardabweichungen der Meßfehler	117
4.3.4	Reaktionsordnung Zwei	120
4.3.5	Verbesserungen durch die Modelländerungen	124
4.4	Modellerweiterung durch zusätzliche Reaktionen der Flüssigkeiten	126
4.4.1	Modellgleichungen	126
4.4.2	Gase und Flüssigkeiten bei konstanten Standardabweichungen der Meßfehler	128
4.4.3	Gase und Flüssigkeiten bei relativen Standardabweichungen der Meßfehler	135
4.4.4	Unterschiedliche Größenordnungen der Messungen	139
4.5	Vergleich der Modelle nach Identifizierung der unbekanntten Modellkonstanten .	141
5	Schlußfolgerungen für die Modellbildung	145
A	Anhang	149
A.1	Detaillierte Begründungen	149
A.2	Auflistung der verwendeten Meßdaten	152
	Literaturverzeichnis	157