

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Anlagenplanung in der Energietechnik	1
1.2	Anlagenbilanzierung in der Energietechnik	2
1.3	Rechnereinsatz in der Energietechnik	3
<b>2</b>	<b>Energieanlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Anlagen zur Nutzung fester Brennstoffe	5
2.1.1	Verbrennungskraftwerke	5
2.1.2	Vergasungsanlagen	11
2.2	Anlagen zur Nutzung gasförmiger Brennstoffe	15
2.2.1	Verbrennungskraftwerke	15
2.2.2	Reformierungsanlagen	18
2.3	Anlagen zur Nutzung flüssiger Brennstoffe	23
2.3.1	Verbrennungskraftwerke	23
2.3.2	Vergasungsanlagen	24
<b>3</b>	<b>Programme zur Anlagenbilanzierung</b>	<b>25</b>
3.1	Programmmerkmale	26
3.2	Kommerzielle Programme	28
<b>4</b>	<b>Grundlagen der Thermodynamik</b>	<b>31</b>
4.1	Systeme	31
4.2	Zustandsgrößen	32
4.2.1	Einteilung von Zustandsgrößen	32
4.2.2	Druck	33
4.2.3	Temperatur	36
4.2.4	Volumen	37
4.2.5	Innere Energie	38
4.2.6	Enthalpie	39
4.2.7	Entropie	41

---

4.2.8	Chemisches Potenzial	44
4.2.9	Gibbs-Energie	45
4.3	Zustandsänderungen	46
4.4	Zustandsgleichungen	48
4.4.1	Einteilung von Zustandsgleichungen	48
4.4.2	Thermische Zustandsgleichungen	48
4.4.3	Kalorische Zustandsgleichungen	53
4.4.4	Fundamentalgleichung	55
4.5	Energie und ihre Erscheinungsformen	56
4.6	Arbeit, Wärme und Leistung	57
4.7	Wärmeübertragung	59
4.7.1	Wärmedurchgang	59
4.7.2	Wärmeübergang	62
5	<b>Grundlagen der Bilanzierungsrechnung</b>	65
5.1	Bilanzgleichungen	66
5.1.1	Allgemeine Form der Bilanzgleichungen	67
5.1.2	Massenbilanz	71
5.1.3	Energiebilanz	72
5.1.4	Impulsbilanz	75
5.1.5	Sonderfall: Komponentenbilanz	78
5.2	Auswertung und Darstellung	81
5.2.1	Auswertung von Bilanzierungsergebnissen	81
5.2.2	Darstellung von Bilanzierungsergebnissen	85
6	<b>Grundlagen der Reaktionsrechnung</b>	89
6.1	Reaktionsgleichgewichte	89
6.1.1	Gleichgewichtsberechnungen nach Le Chatelier	90
6.1.2	Gleichgewichtsberechnungen nach Gibbs	92
6.2	Reaktionskinetik	96
6.2.1	Reaktionsnetzwerke	97
6.2.2	Reaktionsgeschwindigkeit	100
6.2.3	Modellierungsansätze	106
7	<b>Grundlagen der Phasengleichgewichtsrechnung</b>	109
7.1	Phasengleichgewichte	109
7.2	Berechnung der Fugazitäten der Dampfphase	112
7.2.1	Ideales Fluidverhalten	113
7.2.2	Reales Fluidverhalten	113
7.3	Berechnung der Fugazitäten der Flüssigphase	116
7.3.1	Ideales Fluidverhalten	117
7.3.2	Reales Fluidverhalten	118

7.4	Aktivitätsmodelle	119
7.4.1	UNIQUAC-Modell	120
7.4.2	UNIFAC-Modell	121
7.5	Ausgewählte Rechenbeispiele	123
7.5.1	Rechenbeispiel: Aktivitätskoeffizienten UNIFAC	123
7.5.2	Rechenbeispiel: Fugazitätskoeffizienten	130
8	<b>Stoffwerte und Stoffklassen</b>	137
8.1	Wärmekapazität	137
8.1.1	Gase	138
8.1.2	Flüssigkeiten	140
8.1.3	Feststoffe	141
8.2	Dynamische Viskosität	142
8.2.1	Gase	142
8.2.2	Flüssigkeiten	144
8.2.3	Feststoffe	146
8.3	Kinematische Viskosität	146
8.3.1	Gase	146
8.3.2	Flüssigkeiten	147
8.4	Wärmeleitfähigkeit	147
8.4.1	Gase	147
8.4.2	Flüssigkeiten	147
8.4.3	Feststoffe	149
8.5	Diffusionskoeffizient	150
8.5.1	Gase	150
8.5.2	Flüssigkeiten	151
8.6	Verdampfungsenthalpie	151
8.7	Dampfdruck	153
8.8	Heizwert	155
8.8.1	Gase	155
8.8.2	Feststoffe	156
8.9	Zustandsgrößen	157
8.9.1	Ideale Gase	157
8.9.2	Ideale Flüssigkeiten	160
8.9.3	Ideale Feststoffe	161
8.9.4	Reale Fluide	162
8.9.5	Wasser und Wasserdampf	164
9	<b>Modellierung stationär betriebener Anlagenkomponenten</b>	169
9.1	Modellierungsansätze	169
9.1.1	Trockner	169
9.1.2	Vergasungsreaktoren	172

---

9.1.3	Brennkammern	176
9.1.4	Reformer	179
9.1.5	Pumpen	180
9.1.6	Kompressoren und Gebläse	182
9.1.7	Turbinen	184
9.1.8	Wärmeübertrager	186
9.1.9	Dampferzeuger	187
9.1.10	Kondensatoren	190
9.1.11	Splitter	192
9.1.12	Mixer	194
9.1.13	Abscheider	195
9.1.14	Isotherme Chemiereaktoren	197
9.1.15	Adiabate Chemiereaktoren	199
9.1.16	Gasmotorenprozesse	201
9.1.17	Gasturbinenprozesse	204
9.1.18	Flashtrommeln	206
9.1.19	Destillationskolonnen	208
9.2	Ausgewählte Rechenbeispiele	212
9.2.1	Rechenbeispiel: Trockner	212
9.2.2	Rechenbeispiel: Kompressor	220
9.2.3	Rechenbeispiel: Turbine	223
9.2.4	Rechenbeispiel: Wärmeübertrager	225
9.2.5	Rechenbeispiel: Isothermer Chemiereaktor	228
9.2.6	Rechenbeispiel: Flashtrommel	235
10	Modellierung instationär betriebener Anlagenkomponenten	241
10.1	Modellierungsansätze	241
10.1.1	Speicher	241
10.1.2	Wärmeübertrager	245
10.1.3	Chemiereaktoren	254
10.2	Ausgewählte Rechenbeispiele	281
10.2.1	Rechenbeispiel: Wärmeübertrager	281
10.2.2	Rechenbeispiel: Rührkesselreaktor im Batchbetrieb	287
10.2.3	Rechenbeispiel: Rührkesselreaktor im kontinuierlichen Betrieb	292
10.2.4	Rechenbeispiel: Strömungsreaktor	298
11	Numerik stationärer Bilanzierungsrechnungen	307
11.1	Formulierung der Bilanzgleichungen	308
11.2	Aufstellen des Gleichungssystems	309
11.3	Lösen des Gleichungssystems	310
11.3.1	Lineare Gleichungssysteme	310
11.3.2	Nichtlineare Gleichungssysteme	319

---

11.4 Ausgewählte Rechenbeispiele . . . . .	322
11.4.1 Rechenbeispiel: Newton-Verfahren . . . . .	322
12 Numerik instationärer Bilanzierungsrechnungen . . . . .	329
12.1 Formulierung der Bilanzgleichungen . . . . .	331
12.2 Diskretisierung . . . . .	332
12.3 Transformation der partiellen DGL in ein System gewöhnlicher DGL . . . . .	333
12.3.1 Finite-Differenzen-Methode . . . . .	333
12.3.2 Finite-Elemente-Methode . . . . .	337
12.3.3 Finite-Volumen-Methode . . . . .	343
12.4 Aufstellen des Gleichungssystems . . . . .	353
12.5 Lösen des Gleichungssystems . . . . .	353
12.5.1 Explizites Euler-Verfahren . . . . .	354
12.5.2 Implizites Euler-Verfahren . . . . .	355
12.5.3 Runge-Kutta-Verfahren . . . . .	355
12.5.4 PREDIKTOR-Korrektur-Verfahren . . . . .	358
12.6 Numerische Herausforderungen . . . . .	358
12.6.1 Konvektions-Diffusions-Probleme . . . . .	358
12.6.2 Numerische Diffusion . . . . .	359
12.6.3 Druck-Geschwindigkeits-Kopplung . . . . .	359
12.6.4 Steife Differentialgleichungssysteme . . . . .	360
12.7 Ausgewählte Rechenbeispiele . . . . .	360
12.7.1 Rechenbeispiel: Wärmeleitung 1D . . . . .	361
12.7.2 Rechenbeispiel: Wärmeleitung 2D . . . . .	377
12.7.3 Rechenbeispiel: Konvektions-Diffusions-Problem 1D . . . . .	411
12.7.4 Rechenbeispiel: Konvektions-Diffusions-Problem 2D . . . . .	415
<b>Anhang – Stoffdaten . . . . .</b>	<b>427</b>
<b>Literatur . . . . .</b>	<b>443</b>
<b>Sachverzeichnis . . . . .</b>	<b>449</b>