

L'équation générale ainsi déduite représente une moyenne, prise dans le temps, pour une parcelle et signifie qu'à l'équilibre il n'y a pas d'accumulation durable d'aucun des composants en aucun point du système.

On montre, à partir de cette équation, que la loi d'action de masse est un cas limite qui répond au modèle d'un système constitué par un ensemble de parcelles infiniment petites, ce qui ne correspond pas à la réalité.

Université de Genève, Ecole de Chimie

36. Optimalgesetze in der chemischen Reaktionstechnik¹⁾

von **W. F. Grütter** und **B. H. Messikommer**

(7. XII. 60)

1. Einleitung

Das allgemeine Ziel der chemischen Reaktionstechnik ist ohne Zweifel die Realisation eines chemischen Reaktionsgeschehens in technisch optimaler Ausführung. In vielen Fällen, besonders wenn die Ausgangsmaterialien kostbar sind, wird dies eine bezüglich der Ausbeute optimale Prozessführung erfordern. Die vorliegende Arbeit befasst sich ausschliesslich mit diesem Problem, und zwar angewandt auf kontinuierliche Arbeitsweise. Wir sind uns durchaus bewusst, dass die Ausbeute nicht immer der ausschlaggebende Faktor sein muss und dass eine kontinuierliche Prozessführung nicht immer möglich oder wünschenswert ist. Es wird aber sehr viele Fälle geben, in welchen ein kontinuierliches Verfahren mit grösstmöglicher Ausbeute die zweckmässigste Lösung darstellt.

Es ist nun festzuhalten, was im folgenden unter dem Begriff «optimaler Reaktor» verstanden werden soll. Man kann zunächst daran denken, ein gegebenes apparatives System, hier kurz Reaktor genannt, bezüglich seiner Betriebsweise zu optimieren, also z. B. die beste Verweilzeit, die beste Temperatur usw. für diesen bestimmten Reaktor und eine bestimmte Reaktion zu suchen. Das wird oft dann der Fall sein, wenn in einer bestehenden Anlage ein neues Verfahren eingeführt werden soll. Viel allgemeiner wird das Optimalproblem aber dann, wenn die Frage nach dem speziellen Reaktor vorderhand noch offen gelassen wird, man also das einer bestimmten Art von Reaktionen entsprechende optimale Reaktorsystem sucht. Dieses, unter günstigsten Bedingungen betrieben, soll als optimaler Reaktor bezeichnet werden. Dabei wird im allgemeinen eine Optimierung bezüglich mehrerer Variablen (z. B. Temperatur, Druck, pH, Verweilzeiten usw.) anzustreben sein.

Unsere Bemühungen gehen dahin, für ganze Problemklassen allgemeingültige Optimalgesetze herauszuarbeiten und allgemein verwendbare Schemata zur numerischen Auswertung aufzufinden. Das bedingt eine adäquate Problemformulierung,

¹⁾ Eine vorläufige Mitteilung darüber erschien in *Chimia* 14, 363 (1960).

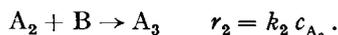
eine entsprechende rationelle mathematische Schreibweise und eine zweckmässige Lösungsmethodik²⁾.

Es wurde bereits gezeigt²⁾, dass für Reaktoren mit Rückführung ganz allgemein ein einzelner Rührkessel die beste Lösung darstellt, immer vorausgesetzt, dass als Optimalkriterium die Maximierung der integralen Ausbeute gelten soll, sowie dass in Fällen, wo eine Rückführung nicht möglich ist, die N-stufige Rührkesselkaskade diskutiert werden muss (diese enthält dann den einzelnen Kessel und das Strömungsrohr als Grenzfälle). Die vorliegende Arbeit behandelt nun als Problemklasse die Optimierung der Verweilzeitverteilung idealer, isothermer, N-stufiger Rührkesselkaskaden im stationären Zustand für beliebige, zusammengesetzte Reaktionen mit homogener Kinetik der Ordnungen Eins und Null. Die Methode der dynamischen Programmierung, welche hier angewandt wurde, scheint uns eine für solche Probleme vernünftige Lösungsmethodik zu sein, obgleich man im hier diskutierten Fall auch ohne sie auskommen könnte. Wir haben aber damit eine Möglichkeit, das Funktionieren dieser Methode zu überprüfen und sind vorbereitet für diejenigen Fälle, bei denen die Probleme so hochdimensional werden, dass eine Lösung mit konventionellen Methoden nicht mehr möglich ist. Publikationen über solche Untersuchungen, so namentlich über zusammengesetzte Reaktionen mit homogener Kinetik höherer Ordnung, mit nichthomogener Kinetik und für nichtisotherme Reaktorkaskaden, sind in Vorbereitung.

2. Darstellung der Methodik an Hand eines Beispiels:

Die Reaktionen 1. Ordnung $A_1 \rightarrow A_2 \rightarrow A_3$

Der Ausdruck «Reaktionen 1. Ordnung $A_1 \rightarrow A_2 \rightarrow A_3$ » entspreche im folgenden allen Fällen von in erster Näherung raumbeständigen Folgereaktionen, in denen gilt



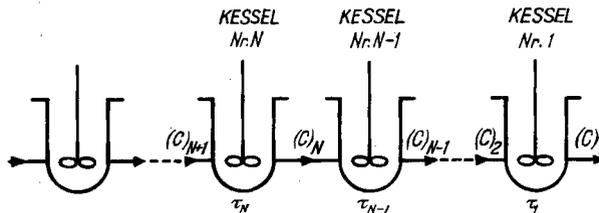
r_1 und r_2 hängen nur von den Konzentrationen c_{A_1} bzw. c_{A_2} ab; B übt somit keinen Einfluss auf die Reaktionsgeschwindigkeiten aus, ist also etwa in sehr grossem Überschuss (z. B. als Lösungsmittel) vorhanden. Die Optimierung der integralen Ausbeute Φ_{21}^* (N) (das ist die Ausbeute an gewünschtem Stoff A_2 , bezogen auf den Durchsatz an A_1) wird in Bezug auf die Verweilzeitverteilung einer N-stufigen Rührkesselkaskade durchgeführt. Es ist vorausgesetzt, dass alle anderen möglichen, die Reaktion beeinflussenden Grössen konstant bleiben sollen.

2.1 Problemformulierung. – Die allgemeine Problemfassung ist für diese zusammengesetzte Reaktion in einer der dynamischen Programmierung angepassten Schreibweise von uns bereits gegeben worden²⁾ und wir benützen hier dieselbe Nomenklatur. Die früher angegebene Formulierung eignet sich auch ohne weiteres zur numerischen Auswertung, worauf später noch eingegangen wird. Uns geht es hier aber vorderhand nicht um die zahlenmässige Erfassung eines Spezialfalles, sondern darum, allgemeine Optimalgesetze zu finden. Es soll deshalb im folgenden dargelegt werden,

²⁾ Die von uns verwendete Methodik ist am 2. Europ. Symposium über chemische Reaktionstechnik in Amsterdam, April 1960, vorgetragen worden. Es sei hier generell auch für das Folgende auf diese Arbeit verwiesen, die demnächst in einer Sondernummer der Chem. Engng. Sci. erscheinen wird.

wie man die Gedanken, die der Methode der dynamischen Programmierung zugrunde liegen, als mathematisches Hilfsmittel zu allgemeinerer Beweisführung verwenden kann. Wir stellen uns also das Problem wie folgt: Gibt es für die Reaktionen 1. Ordnung $A_1 \rightarrow A_2 \rightarrow A_3$ ein allgemeines Gesetz über die optimale Verweilzeitverteilung in einer N-stufigen Rührkesselkaskade? Falls es ein solches gibt, wie lautet dann dieses Gesetz?

Ein Weg zur Lösung dieser Aufgabe besteht darin, dass man sich zunächst eine (N – 1)-stufige Kesselreihe (s. Fig.) vorstellt, welche eine optimale Verweilzeitverteilung aufweist. Dieser Reihe wird ein weiterer Kessel auf der Einlaufseite angefügt und dessen Grösse bei vorgegebenem Zulauf solange variiert, bis die N-stufige Kaskade optimal arbeitet. Das erfordert natürlich, dass man sich die restliche, (N – 1)-stufige Reihe für jedes den ersten, zusätzlichen Kessel verlassende Gemisch jeweiligen optimiert vorstellt. Das beschriebene Vorgehen kann schrittweise beliebig weit fortgesetzt werden³⁾. Man betrachtet also das Problem m. a. W. als N-stufigen Entscheidungsprozess und verwendet die sich aus der Methode der dynamischen Programmierung ergebenden Rekursionsformeln.



Fließbild einer N-stufigen Rührkesselkaskade

2.2 Die optimale Verweilzeitverteilung zweistufiger Reaktoren. – Die zu optimierende, integrale Ausbeute ist in diesem Fall durch

$$\Phi_{21}^*(2) = (c_{21} - c_{23})/c_{13}$$

gegeben, wo allgemein c_{in} die Konzentration des Stoffes A_1 im N-ten Reaktor bzw. die Einlaufkonzentration in den (N – 1)-ten Kessel bedeutet. (Wir bezeichnen $\Phi_{21}^*(2)$ im folgenden kürzer mit Φ_2^* .)

Die Gleichungen der Stoffbilanz für eine kontinuierliche, zusammengesetzte Reaktion 1. Ordnung im (N – 1)-ten Rührkessel einer isothermen Kaskade lauten:

$$(c)_{N-1} - (c)_N = \tau_{N-1} \nu(r)_{N-1} = \tau_{N-1} L(c)_{N-1},$$

oder $(c)_N = [I - \tau_{N-1} L] (c)_{N-1} = H_{N-1} (c)_{N-1}.$

- $(c)_N$: Konzentrationsvektor im N-ten Kessel.
- τ_N : Verweilzeit im N-ten Kessel.
- ν : stöchiometrische Matrix.
- $(r)_N$: Reaktionsgeschwindigkeitsvektor im N-ten Kessel.

Im Falle der zweistufigen Kaskade erhält man also:

$$(c)_1 = H_1^{-1} (c)_2 = H_1^{-1} H_2^{-1} (c)_3. \tag{1}$$

³⁾ Man beachte, dass die Numerierung der Kessel in der zum Materialfluss umgekehrten Richtung läuft. Die schematische Darstellung und die Bezeichnung einer Kaskade sind in der Figur nochmals gegeben.

Die Gleichungen (1) gestatten, die Konzentrationen $(c)_1$ im Auslauf durch die Einlaufkonzentrationen $(c)_3$ und die Verweilzeiten τ_1 und τ_2 auszudrücken.

Für die hier betrachteten Reaktionen $A_1 \rightarrow A_2 \rightarrow A_3$ ist:

$$v = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (r) = \begin{bmatrix} k_1 c_1 \\ k_2 c_2 \end{bmatrix}$$

$$v(r) = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 - k_2 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = L(c)$$

Da $H_N = I - \tau_N L$ ist, treten in H_N immer die Glieder $k_1 \tau_N$ und $k_2 \tau_N$ auf. Es ist deshalb für alles Folgende zweckmässig, die Verweilzeit in den Einheiten von k zu messen, also $k_1 \tau_N$ durch τ_N zu substituieren, sowie das Verhältnis $\kappa = k_2/k_1$ einzuführen. Damit bekommt man den unseren früheren Angaben²⁾ entsprechenden Ausdruck:

$$H_N^{-1} = \begin{bmatrix} (1 + \tau_N)^{-1} & 0 & 0 \\ \frac{\tau_N}{(1 + \tau_N)(1 + \kappa \tau_N)} & (1 + \kappa \tau_N)^{-1} & 0 \\ \frac{\kappa \tau_N^2}{(1 + \tau_N)(1 + \kappa \tau_N)} & \frac{\kappa \tau_N}{(1 + \kappa \tau_N)} & 1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Da uns für die Maximierung von Φ_2^* nur die Komponente c_{21} des Konzentrationsvektors $(c)_1$ interessiert, benützen wir nur die zweite Zeile $(\tilde{X})_2 = (x_{21}, x_{22}, x_{23})$ des Produktes $X = H_1^{-1} H_2^{-1}$.

Es ist
$$c_{21} = \sum_{\nu=1}^3 x_{2\nu} c_{\nu 3},$$

und somit
$$\Phi_2^* = \frac{x_{21} c_{13} + x_{22} c_{23} + x_{23} c_{33} - c_{23}}{c_{13}}. \quad (3)$$

Aus (2) errechnen sich:

$$x_{21} = \frac{(1 + \tau_2)^{-1}}{1 - \kappa} [(1 + \kappa \tau_1)^{-1} - (1 + \tau_1)^{-1}] + \frac{(1 + \kappa \tau_1)^{-1}}{1 - \kappa} [(1 + \kappa \tau_2)^{-1} - (1 + \tau_2)^{-1}];$$

$$x_{22} = (1 + \kappa \tau_1)^{-1} (1 + \kappa \tau_2)^{-1};$$

$$x_{23} = 0.$$

Wir werden in allem Folgenden das oft auftretende Konzentrationsverhältnis $c_{i, N+1}/c_{k, N+1}$ der interessierenden Komponenten im Einlauf zur N-ten Stufe mit Y_{N+1} bezeichnen.

Zum Auffinden der Optimalbedingung ist nun Φ_2^* partiell nach τ_1 und τ_2 abzuleiten und Null zu setzen:

$$\frac{\partial \Phi_2^*}{\partial \tau_1} = \frac{\partial x_{21}}{\partial \tau_1} + \frac{\partial x_{22}}{\partial \tau_1} Y_3 = 0,$$

$$\frac{\partial \Phi_2^*}{\partial \tau_2} = \frac{\partial x_{21}}{\partial \tau_2} + \frac{\partial x_{22}}{\partial \tau_2} Y_3 = 0.$$

Die Durchführung dieser Rechnung ergibt, wie der Leser leicht nachprüfen kann, für $\kappa \neq 1$

$$\tau_1 = \tau_2 = \tau_{opt} = (1 - \varepsilon^{1/3}) / (\varepsilon^{1/3} - \kappa), \quad \text{wo } \varepsilon = \kappa + \kappa(1 - \kappa) Y_3 \text{ ist.} \quad (4)$$

Für $\kappa = 1$ wird $\tau_{opt} = \frac{1}{2}$ erhalten.

Damit ist bewiesen, dass bei einer optimalen zweistufigen Kaskade beide Kessel gleich gross sein müssen. Die zugehörige optimale Ausbeute erhält man durch Einsetzen von (4) in (3) zu

$$\text{Max } \Phi_2^* \equiv F_2 = \frac{1}{\kappa} \left(\frac{\varepsilon^{1/3} - \kappa}{1 - \kappa} \right)^3 - Y_3.$$

Für den Fall $\kappa = 1$ wird $F_2 = \frac{8}{27} - Y_3$.

(Praktisch wird meistens der einfache Fall $Y_3 = 0$ vorliegen. Dies bedeutet, dass sich im Einlauf zur Kaskade noch kein Reaktionsprodukt A_2 befinden soll.)

Diese Resultate lassen vermuten, dass für eine beliebige Anzahl Kessel die optimale Politik dann vorliegt, wenn alle Kessel gleich gross sind. Diese Behauptung wird im Abschnitt 2.4 bewiesen. Wir setzen nun zunächst ihre Gültigkeit voraus und leiten für diesen Fall die Ausdrücke für τ_{opt} und F_N , die optimale Ausbeute einer N-stufigen Kaskade, ab.

2.3 Die optimale Verweilzeit N-stufiger, gleichvolumig vorausgesetzter Kaskaden. – 2.3.1. *Ausbeuteformeln.* Die integrale Ausbeute Φ_{21}^* (N) einer N-stufigen Kaskade, kürzer mit Φ_N^* bezeichnet, ist gegeben durch

$$\Phi_N^* = (c_{21} - c_{2, N+1}) / c_{1, N+1}.$$

Da nach Voraussetzung $\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_N = \tau$, und somit auch $H_1 = H_2 = \dots = H_N = H$ sein sollen, folgt sofort

$$(c)_1 = H^{-N} (c)_{N+1}.$$

Aus

$$H^{-N} = \begin{bmatrix} (1 + \tau)^{-N} & 0 & 0 \\ \frac{1}{1 - \kappa} [(1 + \kappa \tau)^{-N} - (1 + \tau)^{-N}] & (1 + \kappa \tau)^{-N} & 0 \\ 1 + \frac{1}{1 - \kappa} [\kappa (1 + \tau)^{-N} - (1 + \kappa \tau)^{-N}] & 1 - (1 + \kappa \tau)^{-N} & 1 \end{bmatrix}$$

erhält man dann die Ausbeutegleichungen:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_N^* &= \frac{1}{1 - \kappa} [(1 + \kappa \tau)^{-N} - (1 + \tau)^{-N}] + [(1 + \kappa \tau)^{-N} - 1] Y_{N+1} \\ &\text{für } \kappa \neq 1 \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

und $\Phi_N^* = N \tau (1 + \tau)^{-(N+1)} + [(1 + \tau)^{-N} - 1] Y_{N+1}$ für $\kappa = 1$. (6)

2.3.2. *Optimale Ausbeute und Verweilzeit.* Die soeben hergeleiteten Ausbeuteformeln (5) und (6) werden in Bezug auf die Verweilzeit maximiert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_N^*}{\partial \tau} = 0 &= \frac{1}{1 - \kappa} [-\kappa N (1 + \kappa \tau)^{-(N+1)} + N (1 + \tau)^{-(N+1)}] - \\ &\quad - \kappa N (1 + \kappa \tau)^{-(N+1)} \cdot Y_{N+1}. \end{aligned}$$

Hieraus erhält man, nach Einführung von $\varepsilon = \kappa + \kappa(1 - \kappa)Y_{N+1}$, durch Umformung eine Bestimmungsgleichung für die optimale Verweilzeit:

$$\tau_{\text{opt}} = \left(1 - \varepsilon^{\frac{1}{N+1}}\right) / \left(\varepsilon^{\frac{1}{N+1}} - \kappa\right) \quad \text{für } \kappa \neq 1 \quad (7)$$

und $\tau_{\text{opt}} = (1 + Y_{N+1}) / (N - Y_{N+1}) \quad \text{für } \kappa = 1. \quad (8)$

Die optimale Ausbeute ist dann:

$$\mathfrak{F}_N = \frac{1}{\kappa} \left(\frac{\varepsilon^{\frac{1}{N+1}} - \kappa}{1 - \kappa} \right)^{N+1} - Y_{N+1} \quad [\kappa \neq 1], \quad (9)$$

$$\mathfrak{F}_N = \frac{(N - Y_{N+1})^N [N + Y_{N+1} (2N + 1)]}{(N + 1)^{N+1}} \quad [\kappa = 1]. \quad (10)$$

Es erscheint zweckmässig, für den besonders häufigen und einfacheren Fall, bei welchem sich kein Reaktionsprodukt im Kaskadeneinlauf befindet, die Formeln für κ und $1/\kappa$ miteinander zu vergleichen. Man bekommt, was leicht einzusehen ist:

$$\mathfrak{F}_N = \left(\frac{1 - \kappa^{\frac{N}{N+1}}}{1 - \kappa} \right)^{N+1} \quad (11); \quad \tau_{\text{opt}} = \frac{1 - \kappa^{\frac{1}{N+1}}}{\kappa^{\frac{1}{N+1}} - \kappa}. \quad (12)$$

und daraus:

$$\mathfrak{F}_N\left(\frac{1}{\kappa}\right) = \kappa \mathfrak{F}_N(\kappa) \quad (13); \quad \tau_{\text{opt}}\left(\frac{1}{\kappa}\right) = \kappa \tau_{\text{opt}}(\kappa). \quad (14)$$

2.4 Die optimale Verweilzeitverteilung N-stufiger, nicht gleichvolumig vorausgesetzter Kaskaden. – Es wurde bereits im Abschnitt 2.2 angetönt, dass man vermuten darf, die optimale Politik bedeute in diesem Fall, dass alle Kessel gleich gross sind. Die Verwendung der sich bei der dynamischen Programmierung ergebenden Rekursionsformeln erlaubt nun, den Beweis dazu durch vollständige Induktion zu führen. Die für die hier betrachteten Reaktionen gültige Rekursionsformel ist von uns²⁾ bereits gegeben worden. Sie lautet:

$$\text{Max } \Phi_N^* = F_N = \text{Max}_{0 < \tau_N < M} \left\{ \frac{c_{2N} - c_{2, N+1}}{c_{1, N+1}} + \frac{c_{1N}}{c_{1, N+1}} F_{N-1} \right\}. \quad (15)$$

Nehmen wir an, eine $(N - 1)$ -stufige Kaskade sei optimal, wenn sie gleichvolumig ist, so können wir für F_{N-1} in Formel (15) den entsprechenden Ausdruck (9) einsetzen. Wir erhalten damit:

$$F_N = \text{Max}_{0 < \tau_N < M} \left\{ \frac{c_{2, N} - c_{2, N+1}}{c_{1, N+1}} + \frac{c_{1, N}}{c_{1, N+1}} \left[\frac{1}{\kappa} \left(\frac{\varepsilon_N^{1/N} - \kappa}{1 - \kappa} \right)^N - Y_N \right] \right\},$$

worin $\varepsilon_N = \kappa + \kappa(1 - \kappa)Y_N$ ist.

Mit $c_{2, N+1}/c_{1, N+1} = Y_{N+1}$; $c_{2, N}/c_{1, N} = Y_N$ bekommt man daraus

$$F_N = \text{Max}_{0 < \tau_N < M} \left\{ \frac{c_{1N} (\varepsilon_N^{1/N} - \kappa)^N}{c_{1, N+1} \kappa (1 - \kappa)^N} - Y_{N+1} \right\}. \quad (16)$$

Die Maximierung des Klammerausdruckes in Formel (16) geschieht zweckmässigerweise nach der Methode der LAGRANGE'schen Multiplikatoren. Die dazu gehörenden Nebenbedingungen werden dargestellt durch die zwei Gleichungen:

$$g_1 = (1 + \tau_N) c_{1, N} - c_{1, N+1} = 0$$

$$g_2 = c_{1, N} [-\tau_N + (1 + \varkappa \tau_N) Y_N] - c_{2, N+1} = 0$$

τ_N : Verweilzeit im zusätzlichen N-ten Kessel.

Damit kommen wir zur Funktion:

$$\hat{\Phi}_N^* = \Phi_N^* (c_{1, N}; Y_N) + \lambda_1 g_1 (\tau_N; c_{1, N}) + \lambda_2 g_2 (\tau_N; c_{1, N}; Y_N),$$

deren Maximum nun durch partielle Differentiation nach allen Variablen und Nullsetzen zu bestimmen ist:

$$\frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial c_{1, N}} = \frac{(\varepsilon_N^{1/N} - \varkappa)^N}{c_{1, N+1} \cdot \varkappa (1 - \varkappa)^N} + \lambda_1 (1 + \tau_N) + \lambda_2 [-\tau_N + (1 + \varkappa \tau_N) Y_N] = 0,$$

$$\frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial Y_N} = \frac{c_{1, N} (\varepsilon_N^{1/N} - \varkappa)^{N-1} \varepsilon_N^{1/N-1} (1 - \varkappa)}{c_{1, N+1} (1 - \varkappa)^N} + \lambda_2 c_{1, N} (1 + \varkappa \tau_N) = 0,$$

$$\frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial \tau_N} = c_{1, N} \lambda_1 + \lambda_2 (-c_{1, N} + c_{1, N} \varkappa Y_N) = 0,$$

$$\frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial \lambda_1} = g_1, \quad \frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial \lambda_2} = g_2.$$

Aus diesen und früheren Gleichungen erhält man durch Elimination:

$$\tau_N = (1 - \varepsilon_N^{1/N}) / (\varepsilon_N^{1/N} - \varkappa). \tag{17}$$

Diese Beziehung entspricht genau der Formel (7) für τ_{opt} einer $(N - 1)$ -stufigen, gleichvolumig vorausgesetzten Kaskade.

Wir hatten angenommen, die N-stufige Kaskade bestehe aus $N - 1$ gleichvolumigen und einem beliebig grossen zusätzlichen Kessel. Formel (17) beweist also infolgedessen, dass das Ausbeutemaximum unter dieser Annahme dann erreicht wird, wenn wieder alle N Kessel unter sich gleich sind. Da weiter gezeigt wurde, dass bei einer optimalen zweistufigen Kaskade $\tau_1 = \tau_2$ sein muss, ist somit bewiesen, dass die optimale Politik einer N-stufigen Kaskade lautet

$$\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_N = \tau_{opt}.$$

Dies ist das ursprünglich gesuchte Optimalgesetz.

Die in Abschnitt 2.3.2 hergeleiteten Formeln (7) bis (14) für die optimale Verweilzeit und Ausbeute gleichvolumiger Kaskaden behalten damit ihre Gültigkeit auch für die Berechnung optimaler Kaskaden, bei denen die Gleichvolumigkeit nicht vorausgesetzt wurde.

3. Das verallgemeinerte Optimalproblem

3.1. Zusammengesetzte Reaktionen homogener Kinetik 1. Ordnung (lineare Kinetik). – Unter «zusammengesetzten Reaktionen homogener Kinetik der Ordnung q » wollen wir Systeme von mehreren stöchiometrisch unabhängigen Reaktionen verstehen, welche einem Geschwindigkeitsgesetz der Form

$$v(r) = K(c^q)$$

gehören. In K treten nur die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten auf. Für $q = 1$ (lineare Kinetik) ergibt sich damit unmittelbar

$$v(r) = \nu K(c) = L(c).$$

Die Stoffbilanzgleichungen für den idealen Rührkessel Nr. N lauten, in der durch die Figur gegebenen Bezeichnungsweise,

$$(c)_N - (c)_{N+1} = \tau_N v(r)_N.$$

Mit der Beschränkung auf homogene lineare Kinetik wird daraus:

$$(c)_{N+1} = (c)_N - \tau_N L(c)_N = [I - \tau_N L] (c)_N. \quad (18)$$

Die folgenden Beweise gelten also für alle komplexen Reaktionen, für welche Gleichung (18) formuliert werden darf. Wir gehen dabei grundsätzlich wieder wie in Abschnitt 2 vor und betrachten zunächst:

3. 1. 1. *Die optimale Verweilzeitverteilung zweistufiger Kaskaden.* Die Ausbeute an gewünschtem Reaktionsprodukt A_1 in Bezug auf das Ausgangsprodukt A_k ist wiederum gegeben durch

$$\Phi_{ik}^* (2) = (c_{i,1} - c_{i,3}) / c_{k,3} \quad (\text{abgekürzt } \Phi_2^*).$$

Die Gleichungen der Massenbilanz lauten genau wie in Formel (1):

$$(c)_1 = H_1^{-1} H_2^{-1} (c)_3,$$

und damit wird

$$\Phi_2^* = \frac{\widetilde{(H_1^{-1} H_2^{-1})_1} (c)_3 - c_{i,3}}{c_{k,3}}.$$

Die Optimalbedingung wird dann aus

$$\frac{\partial \Phi_2^*}{\partial \tau_1} = \frac{1}{c_{k,3}} \widetilde{(H_1^{-2} H_2^{-1} L)_1} (c)_3 = 0 \quad (19)$$

und

$$\frac{\partial \Phi_2^*}{\partial \tau_2} = \frac{1}{c_{k,3}} \widetilde{(H_1^{-1} H_2^{-2} L)_1} (c)_3 = 0 \quad (20)$$

gefunden.

Die vollkommene Symmetrie der Gleichungen (19) und (20) in Bezug auf die beiden Verweilzeiten hat zur Folge, dass

$$\tau_1 = \tau_2$$

sein muss.

Wir vermuten auch hier wieder, dass bei der optimalen N-stufigen Rührkesselkaskade

$$\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_N$$

sein wird, und leiten deshalb zunächst wie in Abschnitt 2 die Bestimmungsgleichungen für τ_{opt} einer gleichvolumigen Kaskade ab.

3. 1. 2. *Optimale Verweilzeit N-stufiger, gleichvolumig vorausgesetzter Kaskaden.* Wir formulieren zuerst wieder die Ausbeute

$$\Phi_{ik}^*(N) = (c_{i,1} - c_{i,N+1})/c_{k,N+1} \quad (\text{abgekürzt } \Phi^*)$$

und die Nebenbedingungen der Stoffbilanz, unter denen diese Ausbeute zu einem Maximum gemacht werden soll:

$$\mathfrak{S}(c) - (c)_{N+1} = (0), \tag{21}$$

worin $\mathfrak{S} = H_1 \cdot H_2 \dots \cdot H_N = H^N$, weil mit $\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_N = \tau$ auch $H_1 = H_2 = H_3 = \dots = H_N = H$ ist.

Die Stoffbilanzgleichungen lauten in etwas anderer Schreibweise:

$$\begin{aligned} \sum \mathfrak{S}_{1\nu} c_{\nu 1} - c_{1,N+1} &= g_1(\tau, c_{11}, c_{21}, \dots, c_{u1}) = 0, \\ \sum \mathfrak{S}_{2\nu} c_{\nu 1} - c_{2,N+1} &= g_2(\tau, c_{11}, c_{21}, \dots, c_{u1}) = 0, \\ \vdots & \\ \sum \mathfrak{S}_{u\nu} c_{\nu 1} - c_{u,N+1} &= g_u(\tau, c_{11}, c_{21}, \dots, c_{u1}) = 0. \end{aligned}$$

Wir bilden jetzt nach LAGRANGE eine neue Funktion ohne Nebenbedingungen:

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_N^* &= \Phi_N^* + \lambda_1 [\sum \mathfrak{S}_{1\nu} c_{\nu 1} - c_{1,N+1}] + \lambda_2 [\dots] + \dots + \lambda_u [\sum \mathfrak{S}_{u\nu} c_{\nu 1} - c_{u,N+1}] = \\ &= \frac{c_{i,1}}{c_{k,N+1}} - \frac{c_{i,N+1}}{c_{k,N+1}} + \sum_{j=1}^u \lambda_j [\sum \mathfrak{S}_{j\nu} c_{\nu 1} - c_{j,N+1}]. \end{aligned}$$

Diese Funktion $\hat{\Phi}_N^*$ ist nach den Variablen $c_{11}, c_{21}, \dots, c_{u1}, \tau$, und $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_u$ partiell abzuleiten und Null zu setzen. Man bekommt also folgendes System von $2u + 1$ Gleichungen:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial c_{11}} &= \lambda_1 \mathfrak{S}_{11} + \lambda_2 \mathfrak{S}_{21} + \dots + \lambda_u \mathfrak{S}_{u1} = 0 \\ \frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial c_{21}} &= \lambda_1 \mathfrak{S}_{12} + \lambda_2 \mathfrak{S}_{22} + \dots + \lambda_u \mathfrak{S}_{u2} = 0 \\ \vdots & \\ \frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial c_{i1}} &= \frac{1}{c_{k,N+1}} + \lambda_1 \mathfrak{S}_{1i} + \lambda_2 \mathfrak{S}_{2i} + \dots + \lambda_u \mathfrak{S}_{ui} = 0 \\ \vdots & \\ \frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial c_{u1}} &= \lambda_1 \mathfrak{S}_{1u} + \lambda_2 \mathfrak{S}_{2u} + \dots + \lambda_u \mathfrak{S}_{uu} = 0. \end{aligned} \right\} \tag{22}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_N^*}{\partial \tau} = & \lambda_1 \left[\frac{\partial \mathfrak{S}_{11}}{\partial \tau} c_{11} + \frac{\partial \mathfrak{S}_{12}}{\partial \tau} c_{21} + \dots + \frac{\partial \mathfrak{S}_{1u}}{\partial \tau} c_{u1} \right] + \\ & + \lambda_2 \left[\frac{\partial \mathfrak{S}_{21}}{\partial \tau} c_{11} + \dots \quad \dots + \frac{\partial \mathfrak{S}_{2u}}{\partial \tau} c_{u1} \right] + \dots \\ & \dots + \lambda_u \left[\frac{\partial \mathfrak{S}_{u1}}{\partial \tau} c_{11} + \dots \quad \dots + \frac{\partial \mathfrak{S}_{uu}}{\partial \tau} c_{u1} \right] = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

$$-\frac{\partial \Phi_N^*}{\partial \lambda_1} = g_1 = 0, \dots, \frac{\partial \Phi_N^*}{\partial \lambda_u} = g_u = 0. \quad (24)$$

Fasst man alle diese Gleichungen wieder gruppenweise zusammen, so bekommt man aus (22):

$$(\tilde{\lambda}) \mathfrak{S} = (0, 0, \dots, -\frac{1}{c_{k, N+1}}, 0, \dots, 0) = (\tilde{a}) \quad (\tilde{\lambda}) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_u); \quad (25)$$

i-te-Komponente

aus (23):

$$(\tilde{\lambda}) \frac{\partial \mathfrak{S}}{\partial \tau} (c)_1 = 0; \quad (26)$$

und aus (24) wieder die ursprünglichen Nebenbedingungen (21).

Da $\mathfrak{S} = H^N$ ist, folgt aus (25), (26) und (21) durch Substitutionen

$$(\tilde{a}) H^{-N} \frac{\partial H}{\partial \tau} H^{-1} (c)_{N+1} = 0,$$

bzw. weil $H = [I - \tau L]$ ist:

$$(\tilde{a}) H^{-(N+1)} L(c)_{N+1} = 0. \quad (27)$$

Weil in (a) ja nur die i-te Komponente von Null verschieden ist, vereinfacht sich für die Berechnung (27) noch zu

$$\widetilde{(H^{-(N+1)} L)_1} (c)_{N+1} = 0. \quad (28)$$

Mit Gl. (28) ist eine Bestimmungsgleichung für τ_{opt} einer N-stufigen, gleichvolumigen Rührkesselkaskade gegeben. Sind das Reaktionsschema und die Geschwindigkeitskonstanten bekannt, so kann τ_{opt} mit deren Hilfe ausgerechnet werden.

3. 1. 3. *Die optimale Verweilzeitverteilung N-stufiger, nicht gleichvolumig vorausgesetzter Kaskaden.* Wir behaupten, dass für alle zusammengesetzten Reaktionen mit homogener Kinetik erster Ordnung die optimale N-stufige Rührkesselkaskade gleichvolumig ist. Wir wollen diese Behauptung im folgenden in derselben Art beweisen, wie dies im Abschnitt 2 für die einfachere Reaktion $A_1 \rightarrow A_2 \rightarrow A_3$ geschehen ist.

Wir wenden deshalb wieder die aus der dynamischen Programmierung resultierenden Rekursionsformeln zur induktiven Beweisführung an. Hierzu stellen wir uns ebenfalls zunächst eine optimale, (N - 1)-stufige, gleichvolumige Kaskade vor, welcher wir auf der Einlaufseite einen zusätzlichen N-ten Kessel zufügen. Wir variieren die Verweilzeit τ_N in diesem N-ten Kessel, bis die gesamte Kaskade optimal ist. Wir machen also folgenden Ansatz für die optimale Ausbeute:

$$\text{Max } \Phi_N^* = F_N = \text{Max}_{\tau_N} \left\{ \frac{c_{i, N} - c_{i, N+1}}{c_{k, N+1}} + \frac{c_{k, N}}{c_{k, N+1}} \mathfrak{S}_{N-1} \right\}. \quad (29)$$

Die Nebenbedingungen zu der wiederum nach LAGRANGE zu maximierenden Funktion lauten:

$$(c)_{N+1} = H_N(c)_N; \quad [H_N = I - \tau_N L]. \quad (30)$$

Man erhält dadurch

$$\hat{\Phi}_N^* = \Phi_N^* + \lambda_1 [\sum H_{N,i} c_{iN} - c_{1,N+1}] + \lambda_2 [\dots] + \dots + \lambda_u [\sum H_{N,u} c_{uN} - c_{u,N+1}]. \quad (31)$$

Wir wissen, dass \mathfrak{F}_{N-1} , die maximale Ausbeute der $(N - 1)$ -stufigen, gleichvolumigen Teilkaskade, nur von den Einlaufkonzentrationen $(c)_N$ in diese Teilkaskade abhängt und dass H_N nur eine Funktion von τ_N ist, so dass also die Gleichung (31) nach den Variablen $c_{1N}, c_{2N}, \dots, c_{uN}, \tau_N, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_u$ abzuleiten ist.

Das ergibt:

$$\left(\frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial c_{jN}} \right) = \left(\frac{\partial \Phi_N^*}{\partial c_{jN}} \right) + (\tilde{\lambda}) H_N = (\tilde{0}), \quad (32)$$

$$\frac{\partial \hat{\Phi}_N^*}{\partial \tau_N} = (\tilde{\lambda}) \frac{\partial H_N}{\partial \tau_N} (c)_N = 0, \quad (33)$$

und die ursprünglichen Nebenbedingungen (30).

Aus (32), (33) und (30) erhält man durch Elimination von $(\tilde{\lambda})$ und $(c)_N$ die folgende Bestimmungsgleichung für τ_N :

$$\left(\frac{\partial \Phi_N^*}{\partial c_{jN}} \right) H_N^{-1} \frac{\partial H_N}{\partial \tau_N} H_N^{-1} (c)_{N+1} = 0. \quad (34)$$

Hierin ist der Vektor $\left(\frac{\partial \Phi_N^*}{\partial c_{jN}} \right)$ nun besonders zu untersuchen. Wir bilden folgende Ableitungen aus (29):

$$\frac{\partial \Phi_N^*}{\partial c_{jN}} \quad (j \neq i, k) = \frac{c_{k,N}}{c_{k,N+1}} \frac{\partial \mathfrak{F}_{N-1}}{\partial c_{jN}}, \quad (35)$$

$$\frac{\partial \Phi_N^*}{\partial c_{jN}} \quad (j = i) = \frac{1}{c_{k,N+1}} \left(1 + c_{k,N} \frac{\partial \mathfrak{F}_{N-1}}{\partial c_{iN}} \right), \quad (36)$$

$$\frac{\partial \Phi_N^*}{\partial c_{jN}} \quad (j = k) = \frac{c_{k,N}}{c_{k,N+1}} \frac{\partial \mathfrak{F}_{N-1}}{\partial c_{kN}} + \frac{\mathfrak{F}_{N-1}}{c_{k,N+1}}. \quad (37)$$

\mathfrak{F}_{N-1} ist nur eine Funktion der Einlaufkonzentrationen $(c)_N$:

$$\mathfrak{F}_{N-1} = \text{Max}_{c_{iI}} \frac{c_{iI} - c_{iN}}{c_{kN}} = \frac{m c_{iI} - c_{iN}}{c_{kN}}.$$

$m c_{iI}$: maximale Konzentration des Stoffes A_i im Reaktorauslauf.

Wir erhalten somit:

$$\frac{\partial \mathfrak{F}_{N-1}}{\partial c_{jN}} \quad (j \neq i, k) = \frac{1}{c_{k,N}} \frac{\partial m c_{iI}}{\partial c_{jN}}, \quad (38)$$

$$\frac{\partial \mathfrak{F}_{N-1}}{\partial c_{jN}} \quad (j = i) = \frac{1}{c_{k,N}} \left(\frac{\partial m c_{iI}}{\partial c_{iN}} - 1 \right), \quad (39)$$

$$\frac{\partial \mathfrak{F}_{N-1}}{\partial c_{jN}} \quad (j = k) = \frac{1}{c_{k,N}} \frac{\partial m c_{iI}}{\partial c_{k,N}} - \frac{m c_{iI} - c_{iN}}{c_{k,N}^2}. \quad (40)$$

Wir setzen (38) bis (40) in (35) bis (37) ein und erhalten dadurch für alle j :

$$\frac{\partial \Phi_N^*}{\partial c_{jN}} = \frac{1}{c_{k,N+1}} \frac{\partial {}^m c_{i1}}{\partial c_{jN}}.$$

Nun ist aber

$$({}^m c)_1 = {}^m H^{-N+1} (c)_N,$$

worin ${}^m H = I - \tau_{\text{opt}} L$ ist.

τ_{opt} bedeutet hier die für jedes $(c)_N$ jeweils optimal gedachte Verweilzeit in einem Kessel der $(N-1)$ -stufigen, gleichvolumigen Teilkaskade.

$$\text{Daraus wird } \left(\frac{\partial \Phi_N^*}{\partial c_{jN}} \right) = \frac{1}{c_{k,N+1}} \widetilde{(H^{-N+1})}_i.$$

Diese Gleichung setzen wir in (34) ein und das ergibt die folgende Bestimmungsgleichung für τ_N :

$$\widetilde{({}^m H^{-N+1})}_i H_N^{-2} L(c)_{N+1} = 0. \quad (41)$$

Die früher abgeleitete Bestimmungsgleichung (27) für τ_{opt} einer N -stufigen, gleichvolumig vorausgesetzten Kaskade lautet etwas umgeformt:

$$(\tilde{a}) H^{-N+1} H^{-2} L(c)_{N+1} = 0.$$

$$\text{Es ist aber } (\tilde{a}) H^{-N+1} = \frac{-1}{c_{k,N+1}} \widetilde{(H^{-N+1})}_i,$$

also kann man setzen:

$$\widetilde{(H^{-N+1})}_i H^{-2} L(c)_{N+1} = 0. \quad (42)$$

Wir haben zu Beginn dieses Abschnittes folgendes Optimalgesetz postuliert:

«Die optimale Politik einer N -stufigen, nicht gleichvolumig vorausgesetzten Rührkesselkaskade lautet: $\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_N$.»

Mit Hilfe der soeben abgeleiteten Formeln sind wir nun in der Lage, diesen Satz zu beweisen.

Wir gehen von der Annahme aus, der Satz sei für $N \leq r - 1$ Stufen richtig. Die hierzu gehörige Bestimmungsgleichung für die gemeinsame, optimale Verweilzeit wird dann durch Formel (42) wiedergegeben. Wir behaupten, dass der Satz unter den vorgegebenen Bedingungen auch für $N = r$ richtig sei. Zur Beweisführung rekapitulieren wir die Rekursionsformel für die Ausbeute

$$F_r = \text{Max}_{\tau_r} \left\{ \frac{c_{i,r} - c_{i,r+1}}{c_{k,r+1}} + \frac{c_{k,r}}{c_{k,r+1}} \mathfrak{F}_{r-1} \right\}$$

mit der zugehörigen Politik $\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_{r-1}, \tau_r$.

Unter diesen Umständen lautet die Gleichung (41) für τ_r :

$$\widetilde{({}^m H^{-r+1})}_i H_r^{-2} L(c)_{r+1} = 0.$$

Diese ist erfüllt, wenn man für τ_r $\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_{r-1}$ einsetzt. Damit ist bewiesen, dass auch die optimale Politik der r -stufigen Kaskade der Beziehung $\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_r$ gehorcht.

Wir wissen aber aus Abschnitt 3.1.1, dass das postulierte Optimalgesetz für $r - 1 = 2$ richtig ist. Damit ist es auch für beliebige Stufenzahlen gültig.

3. 1. 4. *Allgemeine Beweisführung ohne Zuhilfenahme der Rekursionsformeln.* Wir haben in der Einleitung darauf hingewiesen, dass man in den hier diskutierten Fällen von komplexen Reaktionen mit homogener Kinetik erster Ordnung die Optimierung der Verweilzeitverteilung einer Kaskade auch ohne die Rekursionsformeln der dynamischen Programmierung durchführen könne. Zur Vervollständigung sei deshalb hier noch ein anderer allgemeiner Beweis für das Optimalgesetz dieser Reaktionsklasse angeführt. Die Bezeichnungsweise der Kaskade bleibt dieselbe wie bisher (s. Figur).

Die verschiedenen auf den Stoff A_k bezogenen Ausbeuten in einem System sind gegeben durch

$$(\Phi_k^*) = [(c)_1 - (c)_{N+1}] / c_{k,N+1} .$$

Homogene Kinetik erster Ordnung setzt voraus, dass

$$(c)_{N+1} = H_N (c)_N \text{ gilt, wo } H_N = I - \tau_N L \text{ i.t. .}$$

Das bedeutet:

$$(c)_1 = H_1^{-1} H_2^{-1} \dots H_N^{-1} (c)_{N+1} = \mathfrak{H}(c)_{N+1}$$

und also:

$$(\Phi_k^*) = [\mathfrak{H} - I] (c)_{N+1} / c_{k,N+1} .$$

Zur Maximierung der verschiedenen Φ_{ik}^* werden nun sämtliche Ableitungen $\frac{\partial \Phi_{ik}^*}{\partial \tau_v}$ gebildet:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi_{1k}^*}{\partial \tau_1} & \dots & \frac{\partial \Phi_{ik}^*}{\partial \tau_1} & \dots & \frac{\partial \Phi_{uk}^*}{\partial \tau_1} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial \Phi_{1k}^*}{\partial \tau_N} & \dots & \frac{\partial \Phi_{ik}^*}{\partial \tau_N} & \dots & \frac{\partial \Phi_{uk}^*}{\partial \tau_N} \end{bmatrix} = \frac{1}{c_{k,N+1}} \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial \tau_1} \right)_1 (c)_{N+1} & \dots & \left(\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial \tau_1} \right)_i (c)_{N+1} & \dots & \left(\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial \tau_1} \right)_u (c)_{N+1} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \left(\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial \tau_N} \right)_1 (c)_{N+1} & \dots & \left(\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial \tau_N} \right)_i (c)_{N+1} & \dots & \left(\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial \tau_N} \right)_u (c)_{N+1} \end{bmatrix}$$

Da im allgemeinen nur eine einzige Ausbeute Φ_{ik}^* auf einmal maximal sein kann, wird der dieser interessierenden Ausbeute entsprechende Spaltenvektor obiger Matrix Null gesetzt, also z. B.

$$\left(\frac{\partial \Phi_{ik}^*}{\partial \tau} \right) = (0) ,$$

oder
$$\left(\left(\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial \tau} \right)_i (c)_{N+1} \right) = (0) . \tag{43}$$

Es ist nun
$$\frac{\partial H_v^{-1}}{\partial \tau_v} = H_v^{-2} L ,$$

oder
$$\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial \tau_v} = H_v^{-1} \mathfrak{H} L .$$

Damit wird
$$\left(\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial \tau_v} \right)_i = (H_v^{-1})_i \mathfrak{H} L .$$

Durch Einsetzen dieser Formel in (43) ergeben sich folgende Maximumbedingungen:

$$\begin{bmatrix} \widetilde{(H_1^{-1})_i} \mathfrak{S} L(c)_{N+1} \\ \widetilde{(H_2^{-1})_i} \mathfrak{S} L(c)_{N+1} \\ \vdots \\ \widetilde{(H_N^{-1})_i} \mathfrak{S} L(c)_{N+1} \end{bmatrix} = (0).$$

Dieses Gleichungssystem ist aus Symmetriegründen dann erfüllt, wenn alle τ gleich gross sind. Die Bestimmungsgleichung für τ_{opt} reduziert sich dann auf die einfache Form

$$\widetilde{(H^{-(N+1)})_i} L(c)_{N+1} = 0.$$

Wie man sieht, stimmt die Formel mit Gl. (28) genau überein.

3.2. Zusammengesetzte Reaktionen homogener Kinetik nullter Ordnung. –

Für diese Klasse von Reaktionen sind die Verhältnisse äusserst einfach. Sämtliche möglichen Ausbeuten in Bezug auf den Stoff A_k sind für eine N-stufige Kaskade wieder durch

$$(\Phi_k^*) = [(c)_1 - (c)_{N+1}] / c_{k,N+1}$$

gegeben.

Der Reaktionsgeschwindigkeitsvektor (r) ist konzentrationsunabhängig, da alle Reaktionen von nullter Ordnung sein sollen. Es gilt also

$$v(r) = (K).$$

Die Massenbilanz lautet dann

$$(c)_{N+1} = (c)_1 - (K) \sum_{\nu=1}^N \tau_{\nu}.$$

und daraus folgt:

$$(\Phi_k^*) = \frac{(K)}{c_{k,N+1}} \sum_{\nu} \tau_{\nu}.$$

Jede Ausbeute Φ_k^* ist nur von $\sum_{\nu} \tau_{\nu}$ abhängig, die Verweilzeitverteilung spielt also gar keine Rolle. Die Reaktionspfade im c -Raum sind Geraden, das ideale Rohr und der ideale Rührkessel sind gleichwertig.

SUMMARY

The optimization of the distribution of residence times for ideal, isothermal, stirred-tank reactor cascades in the steady state is examined. By means of the method of dynamic programming it is shown that the optimal policy of such a cascade is uniform for a system involving any combination of first order reactions, thus forming a principle for a whole class of optimization problems. The values of the optimum residence time and of the corresponding maximum yield can be calculated with the given formulas if the rate constants are known.