

Überraschend ist beim Versuch Nr. 91 die Abnahme der Verzweigung mit zunehmender Temperatur.

6.3.3 Kobalt-Katalysatoren mit den Zeolithtypen P und K

Im Versuch Nr. 99 ist der Katalysator Nr. 170 getestet worden, dessen Zeolithtyp P 10 % Co enthielt. Beim Versuch Nr. 92 wurde der Katalysator Nr. 169 erprobt, dem Co- und Mo-Verbindungen zugemischt waren.

Die Tab. 6.18 und die Abb. 6.18 zeigen die Ergebnisse. Bei beiden Versuchen kam wiederum wasserstoffreiches Gas (CO/H₂-Verhältnis 0,64 bis 0,66) bei 11 bar und Raumgeschwindigkeiten, die zumeist bei 100 h⁻¹ lagen, zum Einsatz. Die Temperaturbereiche lagen zwischen 250 und 310 °C bzw. 280 und 330 °C.

Ein Vergleich der Umsätze zeigt, daß der Kat. Nr. 170 wesentlich aktiver war. Es wurden zumeist über 90 % vom eingesetzten CO und H₂ umgesetzt.

Mit dem Katalysator Nr. 170 entstehen Paletten, die im gesamten Temperaturbereich hohe Methan- und C₅₊-Selektivitäten aufweisen. Dagegen ist beim Katalysator Nr. 169 trotz erheblich verminderter C₅₊-Anteil die Methanselektivität mit der des Katalysators Nr. 170 vergleichbar und die C_{2/4}-Selektivität wesentlich höher.

Mit steigender Temperatur gehen die geringen Olefingehalte zurück, wobei die hydrierende Wirkung des Katalysators Nr. 169 die des Katalysators Nr. 170 übertrifft.

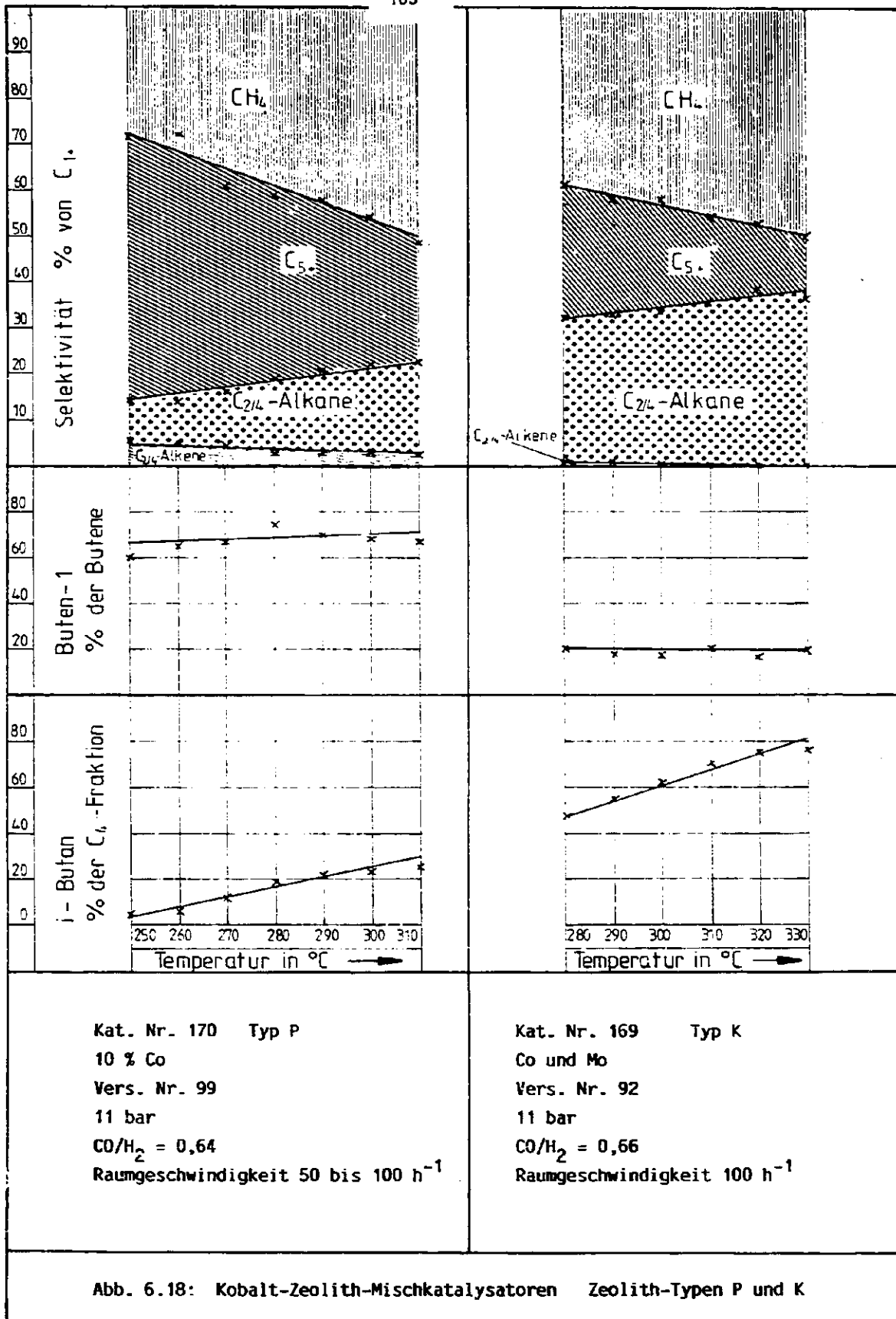
Der Katalysator Nr. 169 wirkt in starkem Maße doppelbindungsverschiebend. Während beim Katalysator Nr. 170 noch etwa 70 % der Doppelbindungen des Butens endständig sind, sind es beim Katalysator Nr. 169 nur noch 20 %. Unterschiede sind auch bei der Kettenstruktur zu beobachten. Der Katalysator Nr. 169 wirkt stärker kettenverzweigend. Bei 310 °C enthält die C₄-Fraktion beim Versuch 99 25 % und beim Versuch 92 70 % Isobutan.

Tab. 6.18: Kobalt-Zeolith-Mischkatalysatoren

Kat. Nr. 170, Typ P mit 10 % Co; Kat. Nr. 169, Typ K mit Co und Mo

KAT. NR.	REAKTIONS-DRUCK	TEMP.	RG	CO/F2	CO/H2	F-GAS	K-GAS	UMS.	CO	H2	CO/H2	GASUMSATZ	3 VCM EINSATZ	OLEFIN - GERÄLTE	FRAKTIONEN	C4 - FRAKTION	C2/4 - CLEFINE	GEHALT AN	
HR.	BAR	GRD.C	1/H	F-GAS	K-GAS	UMS.	CO	H2	CO/H2	CO	H2	CO/H2	CO	H2	CO/H2	ALPHA- ANTEIL	C2H4 C3H6 C4H8	ALPHA- ANTEIL	
170	99.35	11	250	70	0.65	1.35	3.52	77.1	93.0	07.3	0.0	23.5	57.2	35.9	60.4	4.4	0.0	16.8	01.2
170	99.36	11	260	70	0.65	1.68	0.57	85.8	94.6	01.2	0.0	23.5	57.3	35.1	65.5	6.7	0.0	17.9	02.1
170	99.37	11	273	90	0.64	1.26	0.58	84.0	94.1	01.8	0.0	16.1	68.2	26.4	67.1	11.1	0.0	16.4	03.6
170	99.38	11	293	99	0.64	1.77	0.60	92.3	94.1	03.4	0.0	8.3	29.4	13.5	74.5	19.3	0.0	16.1	03.4
170	99.39	11	300	99	0.64	1.63	0.61	94.5	94.7	04.6	0.0	4.6	26.8	13.2	70.3	21.5	0.0	11.4	08.6
170	99.11	11	300	99	0.64	1.53	0.62	95.6	94.9	05.1	0.0	5.4	24.9	12.3	68.2	23.0	0.0	14.9	05.1
170	99.11	11	310	52	0.64	1.51	0.63	96.0	95.2	05.5	0.0	5.7	22.2	10.7	64.6	24.9	0.0	16.6	01.4
169	92.35	11	200	90	0.66	1.62	0.77	27.6	23.3	25.0	1.4	3.5	3.7	2.6	20.0	48.4	21.6	43.4	35.0
169	92.36	11	290	131	0.66	1.50	0.04	16.3	20.3	31.4	0.9	3.0	2.8	2.1	17.5	55.4	17.5	43.6	38.9
169	92.37	11	300	131	0.66	1.53	0.92	44.0	31.9	37.0	0.0	2.5	2.2	1.4	18.2	62.4	0.0	54.8	45.2
169	92.38	11	313	191	0.66	1.47	0.56	55.2	37.4	44.4	0.0	1.8	1.5	0.9	20.0	70.4	0.0	57.0	43.0
169	92.39	11	323	134	0.66	1.47	1.98	52.9	35.1	42.1	0.0	1.6	1.2	0.7	16.7	74.8	0.0	60.3	39.7
169	92.13	11	330	192	0.66	1.42	0.96	62.6	41.9	50.0	0.0	1.3	1.0	0.6	20.0	77.2	0.0	59.9	40.1

KAT. NR.	REAKTIONS-DRUCK	TEMP.	RG	CO/F2	CO/H2	F-GAS	K-GAS	UMS.	CO	H2	CO/H2	GASUMSATZ	3 VCM EINSATZ	OLEFIN - GERÄLTE	FRAKTIONEN	C4 - FRAKTION	C2/4 - CLEFINE	GEHALT AN	
HR.	BAR	GRD.C	1/H	F-GAS	K-GAS	UMS.	CO	H2	CO/H2	CO	H2	CO/H2	CO	H2	CO/H2	ALPHA- ANTEIL	C2H4 C3H6 C4H8	ALPHA- ANTEIL	
170	99.35	11	250	70	0.65	5.1	28.3	3.2	3.8	7.3	57.4	30.7	0.0	3.3	9.9	2.8	4.0	3.1	55.2
170	99.36	11	260	70	0.65	5.0	27.7	3.2	3.8	7.1	50.2	30.1	0.0	3.2	0.8	2.9	3.9	3.0	50.0
170	99.37	11	273	90	0.64	4.3	39.4	4.4	4.4	7.4	44.5	42.1	0.0	4.4	0.7	3.6	3.3	3.7	42.2
170	99.38	11	280	55	0.64	3.1	43.2	5.1	6.0	0.8	36.9	45.8	0.0	5.1	0.5	5.4	2.4	6.0	34.9
170	99.01	11	293	99	0.64	2.8	43.6	5.2	6.9	9.3	35.0	46.2	0.0	5.1	0.3	6.4	2.3	6.5	33.1
170	99.11	11	300	99	0.64	2.0	47.1	5.5	7.6	9.5	30.3	49.7	0.0	5.4	0.4	7.0	2.2	6.8	28.6
170	99.11	11	310	52	0.64	2.4	52.6	6.0	8.0	8.9	24.5	55.1	0.0	5.9	0.4	7.2	1.8	6.6	23.0
169	92.35	11	280	98	0.66	0.8	17.8	12.2	10.1	9.5	30.4	40.1	0.2	12.0	0.3	5.4	0.3	8.8	28.9
169	92.36	11	290	101	0.66	0.7	41.9	13.3	10.0	9.6	25.2	44.1	0.1	13.0	0.3	5.4	0.2	8.9	23.9
169	92.37	11	300	101	0.66	0.5	42.0	14.4	10.0	9.3	28.3	44.2	0.0	14.2	0.2	9.4	0.2	8.7	23.0
169	92.38	11	310	101	0.66	0.3	45.7	16.4	10.7	9.1	18.8	47.9	0.0	16.1	0.2	9.5	0.1	8.5	17.7
169	92.39	11	320	104	0.66	0.3	47.8	18.9	13.4	9.1	13.7	50.0	0.0	18.5	0.2	5.8	0.1	8.6	12.9
169	92.13	11	330	102	0.66	0.2	49.8	18.3	9.7	8.4	13.9	51.9	0.0	17.9	0.1	9.1	0.1	7.8	13.1



6.3.4 Vergleich der Kobalt-Zeolith-Mischkatalysatoren

In der Tab. 6.19 und in der Abb. 6.19 werden die mit unterschiedlichen Kobalt-Zeolith-Mischkatalysatoren erzielten Ergebnisse verglichen. Die Reaktionsbedingungen (11 bar, 300 °C und $\text{CO}/\text{H}_2 = 0,66$) entsprechen denen bei den anderen Zeolith-Mischkatalysator-Vergleichen.

Die höchste Aktivität weist der Katalysator Nr. 170 mit dem Zeolithtyp P auf. Der Gasumsatz ist mit 95 % nahezu quantitativ. Die geringste Aktivität ist beim palladiumhaltigen Katalysator Nr. 166 mit dem Zeolithtyp M zu beobachten. Nur 18 % vom Frischgas werden umgesetzt.

Die gebildeten Produktpaletten, die alle sehr methanreich sind, unterscheiden sich erheblich voneinander. Die höchsten Methananteile entstehen bei den Versuchen Nr. 104 und 91 mit 57 bzw. 58 %, die niedrigsten mit 42 % beim Versuch Nr. 92, der auch die höchste $\text{C}_{2/4}$ -Selektivität aufweist. Die C_{5+} -Selektivitäten schwanken zwischen 16 % beim Versuch Nr. 104 und 30 % beim Versuch Nr. 99.

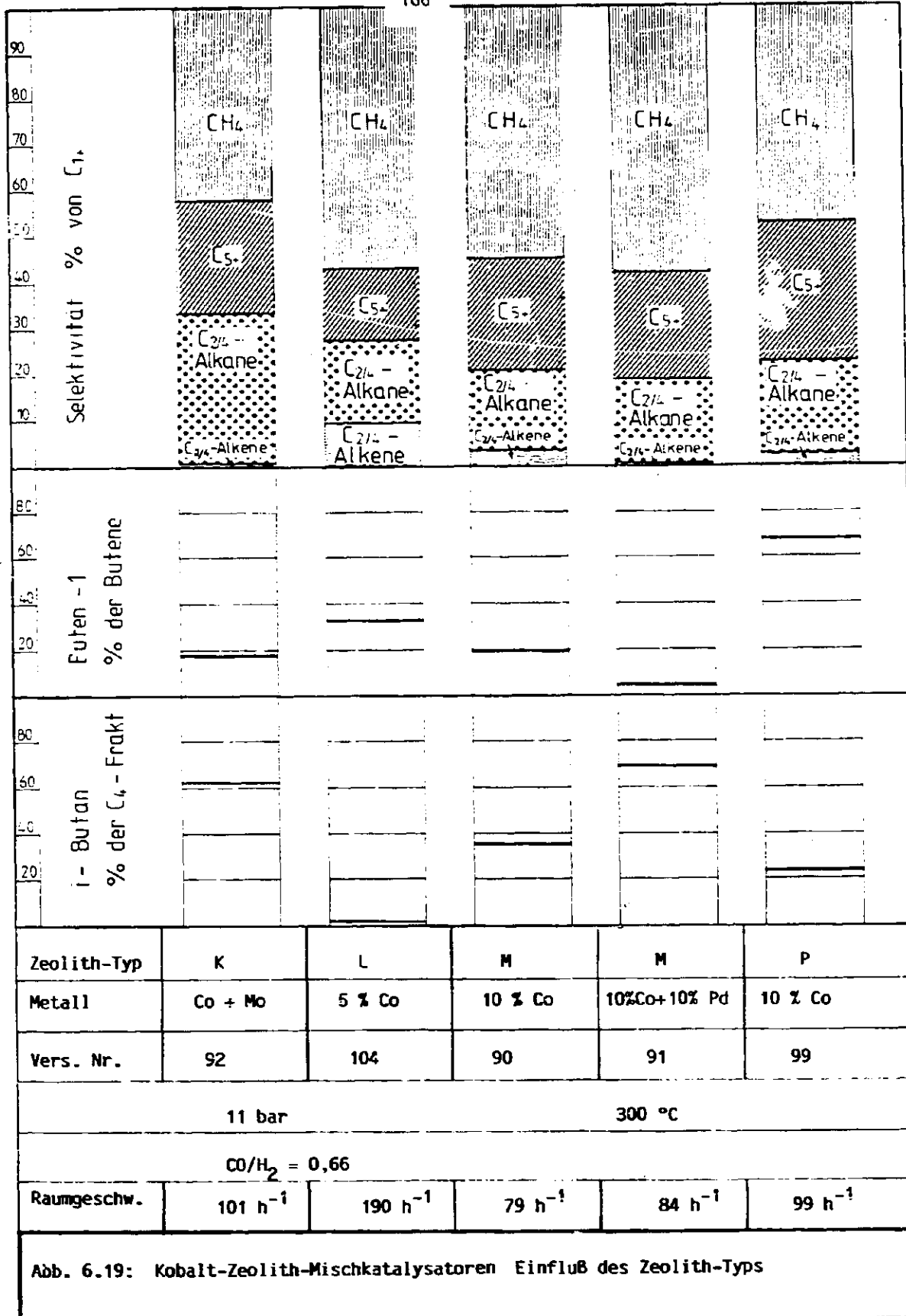
Praktisch olefinfrei sind die $\text{C}_{2/4}$ -Fraktionen bei den Versuchen Nr. 92 und 91. Der maximale Olefingehalt dieser Fraktion wird mit 35 % beim Versuch Nr. 104 erreicht. Die $\text{C}_{2/4}$ -Olefinselektivitäten sind unbedeutend und liegen in allen Fällen unter 10 %.

Die isomerisierende Wirkung auf die Olefindoppelbindung ist sehr unterschiedlich. Beim Versuch Nr. 99 mit dem Katalysator Nr. 170 sind noch 68 % der Butene Alpha-Olefine, beim Versuch Nr. 91 mit dem Katalysator Nr. 166 sind es hingegen nur noch 5 %.

Der Verzweigungsgrad der Kohlenstoffketten ist sehr verschieden. Beim Versuch Nr. 104 sind nur knapp 2 % der C_4 -Fraktion Isobutan, beim Versuch Nr. 91 hingegen 69 %.

Bei den Zeolith-Mischkatalysatoren lassen sich durch Änderung des Zeolithtyps und der Metallzusätze die Produktpaletten in einem weiten Bereich variieren und dem Bedarf anpassen.

Tab. 6.19: Kobalt-Zeolith-Mischkatalysatoren, Einfluß des Zeolith-Typs						
Kat. Nr.	169	172	163	166	170	
Zeolith-Typ	K	L	M	M	P	
Metalle	Co + Mo	5 % Co	10 % Co	10 % Co	10 % Co	10 % Co
				10 % Pd		
REAKTIONSBEDINGUNGEN					
KAT. VERS. DRUCK TEMP. RG	CO/H ₂ * CO/H ₂ CO/H ₂ *	GASUMSATZ * OLEFIN - GEMISCHTE * C ₄ - FRAKTION * C ₂ /4 - CLEFZAE *				
Nr. BAR GRD.C I/II F-GAS	R-GAS URS. * CO H ₂ CO*H ₂ *	VON EHSATZ * GER FRAKTIONEN * ALPHA - TSC - CCI-FALT * C ₂ /4 * ANTEIL ANTEIL * C ₂ H ₄ C ₃ H ₆ C ₄ H ₈ *				
169	92.37 11 300 101 0.66	1.53 3.72 * 44.8 31.9 37.0	0.0 2.5 2.2 1.4 18.2	62.4 * 0.3 54.8 45.2		
172	134.14 11 300 192 0.65	1.01 0.52 * 50.1 73.0 67.1	5.2 48.3 56.2 35.4	32.7 1.9 * 5.0 54.5 40.5		
163	90.17 11 300 75 0.66	1.24 0.54 * 77.2 64.5 78.9	3.0 26.8 16.2 15.6	20.0 35.3 * 6.7 63.4 29.5		
166	91.05 11 300 84 0.66	1.68 0.56 * 16.1 19.0 17.9	1.0 4.4 3.7 1.9	5.4 68.9 * 30.3 23.1 33.0		
170	99.13 11 300 99 0.64	1.53 0.62 * 92.6 94.9 95.1	0.0 5.4 24.9 12.3	28.2 23.0 * 0.3 16.5 45.1		
REAKTIONSBEDINGUNGEN					
KAT. VERS. DRUCK TEMP. RG	CO/H ₂ * C ₂ /4 -	ZUSAMMENSETZUNG DES FI-PIEDUKIES				
Nr. BAR GRD.C I/II F-GAS	BLEF. C1 L2 C3 C4 C5 *	IN H A S E N P R D Z E N Y * CLEF. * C ₂ /4 -				
169	92.37 11 300 101 0.66	0.5 42.0 14.4 19.0 9.3 26.3	44.2 0.0 14.2 0.2 5.4 0.7	8.7 23.0 * 0.3		
172	134.14 11 300 190 0.65	9.7 57.3 9.4 10.9 7.0 15.7	59.6 0.4 8.8 4.8 5.4 3.6	2.9 14.5 * 11.1		
163	93.17 11 300 79 0.66	3.3 55.0 7.2 7.7 6.0 24.1	57.5 0.2 6.8 1.9 5.4 0.5	4.8 22.5 * 4.4		
166	91.35 11 300 84 0.66	0.3 58.1 13.1 2.2 3.2 23.5	40.3 0.1 12.6 0.1 2.0 0.1	2.0 21.9 * 0.1		
170	93.13 11 300 95 0.64	2.8 47.1 5.5 7.6 9.5 30.3	45.7 0.0 5.4 0.4 7.0 2.2	6.0 20.0 * 4.6		



Das EDV-Programm FT 850

Zur Versuchsauswertung und Zusammenstellung der Ergebnisse wurde von vorverarbeiteten, gemittelten Daten, die in einer Datei abgespeichert waren, ausgegangen. Diese Datei enthielt neben den Versuchsbedingungen alle benötigten Analysenwerte sowie einige direkt ablesbare Daten wie z.B. Olefinanteile in den einzelnen Fraktionen. Eine Auflistung dieser Daten, ihre Bezeichnung sowie die Bezeichnung der verwendeten Rechengrößen folgt dem auf den nächsten Seiten wiedergegebenen FORTRAN-Programm FT 850, das für diese Auswertung benutzt wurde.

Die einzelnen Abschnitte des Programms sind mit Kommentarzeilen überschrieben. Am Anfang sind alle Lese- und Schreibformate zusammengefaßt. Danach wird die herangezogene Datei im Programm definiert. Schlüssel ist die Versuchsnummer, Unterschlüssel die Versuchsbedingung. Es muß eingegeben werden, ob alle oder nur einzelne Bedingungen eines Versuches zu berücksichtigen sind und ob ein einzelner oder ein mehrfacher Rechenlauf durchzuführen ist. Daran schließt die Eingabe der gewünschten Versuchsnummer und ggf. die der gewünschten Versuchsbedingungen an. Alle für die Rechnung benötigten Daten werden dann aus der Datei in den Speicher übertragen und stehen damit der Rechnung zur Verfügung.

Zu Beginn der Rechnung werden die Analysendaten durch eine bilanzierende Ausgleichsrechnung korrigiert. Daraus werden dann der Synthesegasumsatz und die erhaltene Produktpalette berechnet. Den Abschluß bildet die Ausgabe in der Tabellenform, wie sie in diesem Bericht enthalten ist.


```

*****
C      FT USC      FT-AUSWEFTUNG AUS DER MITTELWERTSDATEI
*****
:      M1=0 GESAMTVER SUCH-MAX.22 BED.      M1=1 EINZELBEDINGUNGEN
:      M2=0 EINZELRECHNUNG                    M2=1 RECHNUNGSWIEDERHOLUNG
*****

```

```

DIMENSION TAG(61),UA(61),UE(61),VNR(61),NR(61),AKT(61),KI(61),
1 AQ(61,12),BQ(61,12),CQ(61,15),VKR(61),IDRU(61),IBD(61),VS(61),
2 DQ(61,15),EQ(61,12),NRV(61),IT(61),
3 KAT(61),IFG(61),IB(61,22),INR(61),IANF(61),LIMIT(61),LJ(61)

```

```

*****
C      LESEFORMATE
*****
:
1      FORMAT(10I2)
3      FORMAT(I4,22I3)

```

```

*****
:      FORMATE ABSCHLUSSBERICHTTABELLEN
*****
233  FORMAT(11H1,3X,124('**'),/4X,'**',7X,'REAKTIONSBEDINGUNGEN',8X,
1  ' ',13X,'**',4X,'GASUMSATZ',4X,'**',3X,'OLEFIN - GEHALTE * ',
2  'C4 - FFAKTION * C2/4 - OLEFINE *',/4X,'* KAT. VERS. DRUCK ',
3  'TEMP. KG CO/H2 * C3/H2 CO/H2 * % VOM EINSATZ * DEK ',
4  'FRAKTIONEN * ALPHA- ISO- * GEHALT AN **',/4X,'* NR.',
5  'N- BAR GRD.C 1/H F-GAS * R-GAS UMS. * CC H2 CO+H2',
6  ' * C2 C3 C4 C2/4 * ANTEIL ANTEIL * C2H4 C3H6 C4H8 *')
234  FORMAT(4X,124('**'))
235  FORMAT(4X,'**',I4,2X,F6.2,2X,I3,2X,I4,I5,F5.2,' * ',2(F5.2,1X),
1  ' ',3F5.1,' ' * ',4F5.1,' * ',2(F5.1,2X),'**',3F5.1,' *')
236  FORMAT(//4X,124('**'),/4X,'**',7X,'REAKTIONSBEDINGUNGEN',8X,'**',4X
1  'S E L E K T I V I T A E T',4X,'**',6X,'ZUSAMMENSETZUNG DES FT-',
2  'PRODUKTES',6X,'* C2/4- **',/4X,'* KAT. VERS. DRUCK TEMP. ',
3  'FG CO/H2 * C2/4- % VON C 1+',5X,'**',2X,'I ',
4  'M A S S E I. P R O Z E N T',6X,'* OLEF. **',/4X,'* NR. NR.',
5  3X,'DAF GRD.C 1/H F-GAS * OLEF. C1 C2 C3 C4 C5+ *',
6  3X,'CH4 C2H4 C2H6 C3H6 C3H8 C4H8 C4H10 C5+ * G/KM2 *')
237  FORMAT(4X,'**',I4,2X,F6.2,2X,I3,2X,I4,I5,F5.2,' * ',F5.1,1X,
1  5F5.1,' ' * ',7F5.1,1X,F5.2,' * ',F5.2,' *')

```

```

C*****
C   LINGABE DER AUSZUWERTENDEN VERSUCHE UND BEDINGUNGEN
C*****
      DEFINE FILE @ (500,33,U,IASV)
      FIND (8*1)
      LEAD (8*IASV) I,REC
112  READ (1,1) M1,M2
      K=C
      FIND (8*1)
      K=K+1
      READ (1,2) INF(K),(IB(K-N),N=1,22)
      IF(INF(K).EQ.0) GO TO 32
      LJ(K)=0
      DO 31 N=1,22
      IF(IB(K,N).EQ. ) GO TO 31
31  LJ(K)=LJ(K)+1
      GO TO 31
32  K2=K-1
      READ (J*IASV) NVREC
      DO 77 K=1,K2
776  READ (8*IASV) NFV(K),IANF(K),LIMIT(K)
      IF(IASV.GE.NVREC) IASV=3001
      IF(NFV(K).NE.INF(K)) GO TO 776
      IF(INFV(K).NE.122) GO TO 771
      IANF(K)=1254
      LIMIT(K)=1674
771  IF(NFV(K).EQ.122) LIMIT(K)=1826
      IF(NFV(K).EQ.123) LIMIT(K)=1840
      IF(NFV(K).EQ.124) LIMIT(K)=1852
77  CONTINUE
      J=1
      LL=0
      DO 91 K=1,K2
      FIND (8*IANF(K))
91  READ (8*IASV) VNR(J),K1(J),KAT(J),FKT(J),TAG(J),UA(J),UE(J),
      1  VKR(J),IDFU(J),(AQ(J,I),I=1,12),(BQ(J,I),I=1,12)
      IF((IASV-1).GT.LIMIT(K)) GO TO 79
      NR(J)=INT(VNR(J))
      IF(NR(J).NE.INF(K)) GO TO 21
      BD=(VNR(J)-NR(J))*100.
      ID(J)=INT(BD)
      IF((BD-ID(J)).GE.0.5) ID(J)=ID(J)+1
      IF(M1.EQ.1) GO TO 21
      DO 78 N=1,22
      IF(ID(J).EQ.ID(K,N)) J=J-1
73  CONTINUE
      J=J+1
      GO TO 21
21  NN=J-LL
      IF(ID(J).NE.ID(K,NN)) GO TO 21
      NP1=NN+1
      IF(NP1.LE.22.AND.ID(K,NP1).LT.ID(K,NN)) FIND (8*IANF(K))
      J=J+1
      GO TO 21
21  CONTINUE
      GO TO 21
79  LL=LL+LJ(K)
80  CONTINUE
      J2=J-1

```

```

*****
J BEGINN DER RECHNUNG
*****
DU 52 J=1,J2
CQ(J,1)=BQ(J,3)/BQ(J,1)
CQ(J,2)=100.*BQ(J,7)/(BQ(J,7)+BQ(J,9))
IT(J)=INT(BQ(J,12))
IK(J)=INT(BQ(J,11))
BE=(1.-BQ(J,6)/100.)/5.
Q=BQ(J,2)/AQ(J,2)
*****
KORREKTUR
*****
E1=((3.+BE)*AQ(J,4)+(2.+BE)*AQ(J,3))*Q
E2=(2.+BE)*BQ(J,3)
S=(1.-DE)*AQ(J,5)
DU 81 I=2,4
JC AS=AS+(1.-BQ(J,I+2)/100.-BE*I)*AQ(J,I+4)
L3 = BQ(J,1) - (AQ(J,1) + AS)*Q
BE=((4.*E1+E2+E3**2)**0.5-E1-E2)/(E1-E2-E3)
S1=1.+(1.-0.02*BQ(J,3))*DE
S2=1.-(1.-0.02*(AQ(J,3)+AQ(J,4)))*DE
EQ(J,1)=100.*BE
LQ(J,2)=BQ(J,1)*(1.+DE)/S1
LQ(J,3)=BQ(J,2)*(1.+DE)/S1
LQ(J,4)=BQ(J,3)*(1.-DE)/S1
LQ(J,5)=AQ(J,1)*(1.-DE)/S2
LQ(J,6)=AQ(J,2)*(1.-DE)/S2
LQ(J,7)=AQ(J,3)*(1.+DE)/S2
LQ(J,8)=AQ(J,4)*(1.+DE)/S2
DU 81 I=5,8
JJ EQ(J,I+4)=AQ(J,I)*(1.-DE)/S2
*****
J BERECHNUNG DER UMSATZE UND PALETTEN MIT KORRIGIERTEN DATEN
*****
Q=C*(1.+DE)/(1.-DE)*S2/S1
CQ(J,4)=100.*(1.-Q*(EQ(J,5)+EQ(J,7)))/(EQ(J,2)+EQ(J,4))
E4=(EQ(J,4)-Q*(EQ(J,7)+LQ(J,8)))/100.
CQ(J,5)=Q*EQ(J,8)/E4
DU 82 I=1,4
J2 DQ(J,I)=Q*I*BQ(J,I+3)/E4
DQ(J,5)=100.-(CQ(J,1)+DQ(J,2)+DQ(J,3)+DQ(J,4))
DQ(J,6)=(BQ(J,4)*BQ(J,2)+BQ(J,5)*DQ(J,3)+BQ(J,6)*DQ(J,4))/100.
S3=DQ(J,2)
DU 83 I=2,4
J3 S3=S3+(1.-BQ(J,I+2)/100.)*DQ(J,I)/I
AM=14.027+0.02016*(S3+BE*DQ(J,5))
DU 84 I=2,4
J4 DQ(J,I+5)=DQ(J,I+2)*DQ(J,I)*0.14027/AM
DQ(J,10)=DQ(J,7)+DQ(J,8)+DQ(J,9)
DQ(J,11)=100./0.22414*AM*E4/(LQ(J,2)+EQ(J,4))
CQ(J,12)=DQ(J,11)*DQ(J,10)/100.
CQ(J,13)=DQ(J,12)*0.7/CQ(J,4)
CQ(J,14)=100.*(1.-Q*EQ(J,7)/EQ(J,4))
CQ(J,15)=100.*(1.-Q*EQ(J,5)/EQ(J,2))
CQ(J,16)=DQ(J,6)/(DQ(J,2)+DQ(J,3)+DQ(J,4))
CQ(J,17)=EQ(J,7)/EQ(J,5)
CQ(J,18)=EQ(J,4)/EQ(J,2)*CQ(J,13)/CQ(J,14)
CQ(J,19)=DQ(J,1)*16.143/AM
DU 85 I=2,4
J5 CQ(J,7+I)=(1.-DQ(J,2+I)/100.)*DQ(J,I)*(14.027+2.016/I)/AM
CQ(J,12)=100.-CQ(J,9)-CQ(J,5)-CQ(J,10)-CQ(J,11)-DQ(J,16)
DU 86 I=2,4
J6 DQ(J,11+I)=BQ(J,2+I)*DQ(J,I)/DQ(J,6)
J2 CONTINUE

```

```

C*****
C      SCHREIBEN DER ABSCHLUSSBERICHTTABELLEN
C*****
105  WRITE (3,233)
      WRITE (3,234)
      DO 56 J=1,J2
        WRITE (3,235) KAT(J),VNR(J),IDFU(J),IT(J),IRG(J),CQ(J,1),CQ(J,6),
1  CQ(J,7),CQ(J,12),CQ(J,14),CQ(J,4),IDC(J,I),I=4,6),CQ(J,15),
2  CQ(J,2),CQ(J,10),IDQ(J,I),I=13,15)
        IF(NR(J+1).NE.NR(J).OR.J.EQ.J2) WRITE (3,234)
56   CONTINUE
      WRITE (3,236)
      WRITE (3,234)
      DO 57 J=1,J2
        WRITE (3,237) KAT(J),VNR(J),IDFU(J),IT(J),IRG(J),CQ(J,1),DQ(J,6),
1  (DQ(J,I),I=1,5),CQ(J,8),DQ(J,7),CQ(J,9),DQ(J,3),CQ(J,10),DQ(J,9),
2  CQ(J,11),CQ(J,12),DQ(J,12)
        IF(NR(J+1).NE.NR(J).OR.J.EQ.J2) WRITE (3,234)
57   CONTINUE
113  IF(M2.EQ.0) CALL EXIT
      GO TO 112
      END

```

Eingaben zur Steuerung des Programmablaufs

- a) Auswertung aller oder einzelner, frei wählbarer Versuchsbedingungen eines Versuches

M1 = 0 alle Bedingungen
M1 = 1 Einzelbedingungen

- b) Wiederholung des Programmablaufs

M2 = 0 Nach Auswertung des Datensatzes
 Programmende
M2 = 1 Nach Auswertung des Datensatzes weiterer
 Rechenlauf mit neuem Datensatz

- c) Auswahl von Versuch und Versuchsbedingung

INR(K) Versuchsnummer
IB(K,N) Nummern der Versuchsbedingungen
 (max. 22)

Eingangsdaten aus der Mittelwertdatei

Schlüssel eines Datensatzes

VNR(J) Versuchsnummer: Zahl vor dem Dezimalpunkt
 Bedingungsnummer: Zahl nach dem Dezimalpunkt

Versuchsparameter

KAT(J) Katalysatornummer
 RKT(J) Reaktornummer
 TAG(J) Versuchsdatum
 UA(J) Uhrzeit beim Anfang einer Versuchsbedingung
 UE(J) Uhrzeit beim Ende einer Versuchsbedingung
 VKR(J) Kreislaufverhältnis
 DRU(J) Reaktionsdruck in bar
 BQ(J,11) Raumgeschwindigkeit in h^{-1}
 BQ(J,11) Reaktionstemperatur in $^{\circ}C$

Analysen

K1(J) Anzahl der gemittelten Analysen

Restgasanalysen (Konzentrationen in Molenbruch)

AQ(J,1) Wasserstoff
 AQ(J,2) Stickstoff
 AQ(J,3) Kohlenoxid
 AQ(J,4) Kohlendioxid
 AQ(J,5) Methan
 AQ(J,6) C₂-Fraktion
 AQ(J,7) C₃-Fraktion
 AQ(J,8) C₄-Fraktion
 AQ(J,9) C₅-Fraktion
 AQ(J,10) C₆-Fraktion
 AQ(J,11) C₇-Fraktion
 AQ(J,12) C₈-Fraktion

Frischgasanalysen (Konzentrationen in Molenbruch)

BQ(J,1) Wasserstoff
 BQ(J,2) Stickstoff

BQ(J,3) Kohlenoxid

Olefingehalte

BQ(J,4) Olefingehalt der C₂-Fraktion

BQ(J,5) Olefingehalt der C₃-Fraktion

BQ(J,6) Olefingehalt der C₄-Fraktion

Zusammensetzung der C₄-Fraktion

BQ(J,7) Gehalt an Buten-1

BQ(J,8) Gehalt an n-Butan

BQ(J,9) Gehalt an Buten-2

BQ(J,10) Gehalt an i-Butan