

Modellierung und Berechnung turbulenter Strömungen mit chemischer Reaktion in Festbettreaktoren

K. Till

1. Zur Problematik

In der chemischen Industrie werden häufig Reaktoren eingesetzt, in denen sich ein Katalysator in Form einer Feststoffschüttung befindet. Der Druckverlust einer solchen Schüttung ist für den technischen Prozeß eine charakteristische Größe. Hierzu wurden für eindimensional durchströmte Schüttungen viele Untersuchungen durchgeführt, deren Ergebnisse in der Literatur veröffentlicht wurden. Bei Reaktoren mit ungünstigen Eintrittsverhältnissen können stark exotherme Reaktionen Probleme im Eintrittsbereich bewirken. Um diesen Bereich näher zu untersuchen, muß außer der Stoff- und Energiebilanz zusätzlich die Impulsbilanz verwendet werden. Zur Anwendung kommt ein zweidimensionales mathematisches Modell.

Befindet sich in einem Reaktor ein Katalysator in Form einer Schüttung, so werden an die Modellierung höhere Forderungen gestellt. Das System Feststoffphase und Fluidphase stellt ein Zweiphasensystem dar, bei dem die eine Phase nicht bewegt wird. Innerhalb des vielverzweigten Kanalsystems gelten die Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie. Durch die ständigen Richtungsänderungen, Beschleunigungen und Verzögerungen des Fluids liefern die konvektiven Glieder der Impulsgleichung einen Hauptanteil für den Druckverlust. Wollte man sich an dieser Art der Modellierung orientieren, so müßte man die genaue Lage der einzelnen Feststoffteile fixieren und bei der numerischen Berechnung wäre ein äußerst feines Gitternetz zu verwenden. Das Lückensystem besitzt aber einen stochastischen Charakter. Beim Einfüllen der Schüttgüter entstehen teilweise durch „Brückenbildung“ größere Leerräume, über deren Lage keinerlei Aussagen möglich sind. Damit ist eine genaue Bestimmung des Schüttungswiderstandes nicht möglich. Die Problematik der Wandgängigkeit erhöht die Kompliziertheit der ablaufenden Vorgänge. Dies ist bedeutungsvoll bei Laborreaktoren, bzw. bei Reaktoren mit einem geringen Schlankheitsgrad.

Die Modellierung kann nach dem heutigen Stand der Erkenntnis das zufallsbedingt entstehende Poren- bzw. Kanalsystem nicht beschreiben. Einerseits sind die Konturen der Strömungskanäle nicht bekannt und andererseits ist es nicht möglich, eine solch feine Gitterteilung für eine numerische Lösung der Transportgleichungen zu verwenden. Der Sachverhalt, daß in dem Kanalsystem höhere Reibungswirkungen aufgrund des längeren Strömungsweges auftreten, das Fluid an engeren Stellen beschleunigt und an erweiterten wieder verzögert wird, soll als geeigneter Mittelwert in seiner integralen Wirkung auf das Gesamtsystem einbezogen werden. Die Schüttung

soll als Kontinuum betrachtet werden. Die Volumenelemente müssen demzufolge endliche Abmessungen besitzen und mehrere Katalysatorkörner in ihrem Volumen einschließen, so daß dieses groß ist gegenüber den charakteristischen Abmessungen des Katalysators, aber klein gegenüber den Reaktorabmessungen.

Bei der Anwendung dieser Vorstellung auf ein Volumenelement mit Körnern gleicher Eigenschaften besteht die Schwierigkeit, daß die Erhaltungssätze nur Gültigkeit für die Durchströmung des Kanalsystems haben. Für das Volumenelement kann jetzt die Geschwindigkeit, Druck, Temperatur, Dichte oder Konzentration nur als Mittelwert für diesen größeren Schüttungsbilanzraum ermittelt werden, aber nicht die Werte der Variablen in der Vielfalt ihrer Veränderungen innerhalb des Volumenelementes.

2. Das mathematische Modell

2.1. Die Modellgleichungen

Zu einem Volumenelement gehören mehrere Lagen mit Feststoffkörnern. Im Inneren des Elementes finden ständig Geschwindigkeitsschwankungen statt, die auch bei einer laminaren Strömung vorliegen, da sie durch die geometrische Lage der Festkörper verursacht werden. Die Geschwindigkeitsveränderung kann als eine „örtliche Schwankung“ bezeichnet werden. Bei einer turbulenten Strömung sind diese örtlichen Schwankungen zusätzlich von zeitlichen Schwankungen überlagert. Der Einfluß durch turbulente Wirkungen muß bedeutend sein, da Ablöseffekte hinter jedem einzelnen Korn auftreten. Aus diesen Gründen soll sich die Variable φ zusammensetzen aus einem zeitlichen und örtlichen Mittelwert über ein größeres Volumenelement $\bar{\varphi}$ sowie einer örtlichen Schwankung φ'_0 und einer zeitlichen Schwankung φ' .

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi'_0(x_i, t) + \varphi'(x_i, t) \quad (1)$$

Die Gleichungen für den Transport von Masse, Energie, Impuls und die Stoffbilanzgleichung wurden für eine Schüttung abgeleitet [6]. Führt man den Ansatz (1) für die Variablen in die Transportgleichungen ein und beachtet, daß die örtliche und zeitliche Mittelung für die örtliche und zeitliche Schwankung den Wert Null ergeben, so erhält man die Transportgleichung zur Beschreibung der Vorgänge in einer Schüttung.

$$\Phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j) = 0 \quad (2)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\bar{u}_j}{\Phi} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \eta \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{\rho}{\Phi} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(u'_{i0} + u'_i)(u'_{j0} + u'_j)} \quad (3)$$

Für den Energie- und Stofftransport müßten die Feststoffphase und die Fluidphase getrennt bilanziert werden. Wenn die Vorgänge nicht in einer sehr kurzen Zeit ablaufen und die Transportwiderstände fest-fluid vernachlässigt werden können, kann durch Zusammenfassung der Gleichungen für die zwei Phasen ein quasihomogenes Modell erstellt werden.

$$\rho \cdot c_p \cdot \frac{\bar{u}_i}{\Phi} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [\Phi \lambda_F^* + (1 - \Phi) \lambda_S^*] \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} + (1 - \Phi) \cdot \bar{Q}_R - \frac{\rho \cdot c_p}{\Phi} \cdot \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(u'_{j0} + u'_j)(T'_0 + T')}$$

$$\rho \frac{\bar{u}_j}{\Phi} \frac{\partial \overline{C(K)}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [\Phi D_F^* + (1 - \Phi) D_S^*] \frac{\partial \overline{C(K)}}{\partial x_j} + (1 - \Phi) \bar{R} - \frac{\rho}{\Phi} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(C_o^{(K)' + C^{(K)'}) (u'_{j0} + u'_j)} \quad (5)$$

Für die Korrelationsbeziehungen in den Transportgleichungen sind geeignete Hypothesen zu formulieren.

Für die Impulsgleichung wird die zusätzliche Spannung zerlegt in einen örtlichen, zeitlichen und einen gemischten Schwankungsterm. In Anlehnung an die Modellierung von leeren durchströmten Räumen kann der zeitliche Anteil durch den Deformationstensor aus den zeitlich gemittelten Geschwindigkeiten dargestellt werden. Die übrigen Terme können nicht durch einen Gradientenansatz beschrieben werden, da das gemittelte Geschwindigkeitsprofil für eine ausgebildete Strömung bis auf den Wandbereich die Form eines Pfropfenprofils aufweist. Für den laminaren Fall kann für den örtlichen Schwankungsanteil die DARCY-Beziehung und für das Produkt aus örtlichen und zeitlichen Schwankungen der ERGUN-Ansatz verwendet werden.

$$- \frac{\rho}{\Phi} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(u'_{i0} + u'_i)(u'_{j0} + u'_j)} = \eta_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - f_1 \bar{u}_i - f_2 \bar{u}_i |\mathcal{W}| \quad (6)$$

Das zusätzliche Transportglied in der Energiegleichung stellt einen durch die Schüttung hervorgerufenen Wärmestrom dar und läßt sich durch einen FOURIER-Ansatz berechnen.

$$- \frac{\rho \cdot c_p}{\Phi} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(u'_{j0} + u'_j)(T'_0 + T')} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda^S \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \right) \quad (7)$$

Der durch die Schüttung hervorgerufene Stoffstrom wird durch einen Fick'schen-Ansatz ermittelt

$$- \frac{\rho}{\Phi} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(u'_{j0} + u'_j)(C_o^{(K)' + C^{(K)'})} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D^S \frac{\partial \overline{C(K)}}{\partial x_j} \right) \quad (8)$$

In der Energie- und der Stofftransportgleichung werden die verschiedenen Transportkoeffizienten (Feststoff, leerer Raum, Wechselwirkung) zu einem effektiven Koeffizienten zusammengefaßt sowie für die Energieproduktion durch chemische Reaktion und die Bildung einer Komponente durch Reaktion entsprechende Beziehungen eingefügt. Hierbei ist zu beachten, daß in den experimentellen Untersuchungen der reaktionskinetischen Konstanten und den Beziehungen für die effektiven Koeffizienten der konvektive Anteil in der Form

$$\rho \cdot c_p \cdot \bar{u}_j \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} ; \quad \rho \cdot \bar{u}_j \frac{\partial \overline{C(K)}}{\partial x_j} \quad (9)$$

verwendet wird. Damit erhält man die Transportgleichungen für einen stationären Fall.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j) = 0 \quad (10)$$

$$\rho \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \Phi \left\{ - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\eta_e \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - f_1 \bar{u}_i - f_2 \bar{u}_i |\mathcal{W}| \right] \right\} \quad (11)$$

$$\rho c_p \bar{u}_j \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = \frac{\Phi}{\Phi_m} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda_e \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \right) - \sum r_m \cdot \Delta_R H_m \right] \quad (12)$$

$$\rho \bar{u}_j \frac{\partial \overline{C(K)}}{\partial x_j} = \frac{\Phi}{\Phi_m} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_c \frac{\partial \overline{C(K)}}{\partial x_j} \right) + \sum \nu_{mk} \cdot r_m \cdot M_k \right] \quad (13)$$

Zur Berechnung der turbulenten Koeffizienten kann ein Mischungswegansatz

$$\eta_t = \rho l^* w \quad (14)$$

verwendet werden. Es besteht auch die Möglichkeit, ein modifiziertes Zweiparametermodell zu verwenden [6].

Für die effektive Wärmeleitfähigkeit wird die Gleichung

$$\lambda_e = \lambda_e^0 + \lambda_t \quad (15)$$

mit

$$\lambda_t = \frac{l^*}{d_k \cdot Pr_t} Re \cdot Pr = \frac{\eta_t \cdot c_p}{Pr_t} \quad (16)$$

verwendet. Für die darin enthaltene Ruhewärmeleitfähigkeit wird näherungsweise eine Beziehung von Krupiczka [1] empfohlen. Für den Mischungsweg l^* kann eine Gleichung von De Ligny [2]

$$l^* = \left[0.129 - \frac{1.0}{15.39 + d_t/d_k} \right] \cdot \frac{d_k \cdot Pr_t}{1 + \frac{20}{Re \cdot Pr}} \quad (17)$$

Verwendung finden.

Für den Stofftransport zeigte Leckzik [3] einen Zusammenhang zwischen den turbulenten Austauschgrößen von Energie- und Stofftransport

$$D_t = \frac{\lambda_t}{\Phi \cdot c_p} \quad (18)$$

Tabelle 1
Die Koeffizienten zur allgemeinen Transportgleichung

G	a_G	b_G	c_G	d_G
$\frac{\bar{\omega}}{r}$	r^2	r^2	$\phi \cdot \rho_e$	$-r \cdot \phi \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\bar{w}^2 + \bar{v}^2}{2} \right) \frac{\partial \phi}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\bar{w}^2 + \bar{v}^2}{2} \right) \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] + S$
$\bar{\gamma}$	ϕ	$\frac{1}{g \cdot r^2}$	1	$-\left(\frac{\bar{\omega}}{r} \right)$
\bar{T}	1	λ_e / c_p	ϕ / ϕ_m	$\frac{\phi \cdot c_p}{\phi_m} \sum r_m \cdot \Delta_R H_m$
$\bar{c}^{(k)}$	1	D_e	ϕ / ϕ_m	$\frac{\phi}{\phi_m} \sum \nu_{mk} \cdot r_m \cdot M_k$
\tilde{K}	1	$\eta + \frac{\rho_t}{\sigma_k}$	ϕ	$\phi (g \tilde{E} - G - P)$
\tilde{E}	1	$\eta + \frac{\rho_t}{\sigma_\epsilon}$	ϕ	$\phi \left(g \cdot c_2 \frac{\tilde{E}^2}{K} - c_1 \cdot G \frac{\tilde{E}}{K} - c_3 \cdot P \frac{\tilde{E}}{K} \right)$

$$S = r \cdot \phi \left[r \cdot \left(\frac{\bar{\omega}}{r} \right) (f_1 + f_2 |u_0|) - \bar{w} \frac{\partial}{\partial r} (f_1 + f_2 |u_0|) \right]$$

$$G = \lambda \left[\left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 \right]$$

$$P = 2,25 \cdot T_{u_m}^4 \cdot g \cdot c_3 \frac{|u_0|^3}{l^*}$$

Aus den allgemeinen Transportgleichungen wurden die Gleichungen für eine stationäre, zweidimensionale Strömung ohne Drall in Zylinderkoordinaten aufgestellt. Schwierigkeiten können sich mit der numerischen Lösung der Impulsgleichungen ergeben, da geringe Fehler in der Druckberechnung zu großen Beschleunigungen der Strömung führen. Dies kann durch die Einführung einer Stromfunktion ψ , die die Kontinuitätsgleichung identisch integriert

$$\begin{aligned} \bar{w} &= \frac{1}{\rho \cdot r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \\ \bar{v} &= - \frac{1}{\rho \cdot r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \end{aligned} \quad (19)$$

und der Wirbelstärke

$$\bar{\omega} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} - \frac{\partial \bar{w}}{\partial r} \quad (20)$$

umgangen werden.

Die Gleichungen können durch eine allgemeine Transportgleichung in der Form

$$\begin{aligned} a_G \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left(\sigma \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left(\sigma \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) \right\} - \frac{\partial}{\partial z} \left\{ b_G \cdot r \right. \\ \left. \cdot \frac{\partial}{\partial z} (c_G \cdot \sigma) \right\} - \frac{\partial}{\partial r} \left\{ b_G \cdot r \cdot \frac{\partial}{\partial r} (c_G \cdot \sigma) \right\} \\ + r \cdot d_G = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

dargestellt werden. Die Koeffizienten sind der Tabelle 1 zu entnehmen.

2.2. Randbedingungen

Für den Eintrittsquerschnitt ist ein ausgebildetes Geschwindigkeitsprofil vorzugeben. Aus diesem können Werte für die Stromfunktion und die Wirbelstärke berechnet werden. Bei Verwendung eines k- ϵ -Modells für die turbulenten Austauschgrößen werden aus der Geschwindigkeit Werte für die kinetische Energie und die Dissipationsrate berechnet [6]. Die Eintrittstemperatur und Eintrittskonzentration werden als konstant über dem Eintrittsquerschnitt angenommen.

Für die festen Wände wird ein Energietransport durch die Rohrwand angenommen und durch eine Randbedingung dritter Art

$$- \lambda_e \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \Big|_R = \alpha_w (T_w^* - T_w) \quad (22)$$

realisiert. Da die Wand stoffundurchlässig sein soll und nicht an der Reaktion beteiligt ist, nimmt der Konzentrationsgradient normal zur Wand den Wert Null an. Für die Wirbelstärke werden in Wandnähe Werte aus einem speziellen Wandgesetz ermittelt [6].

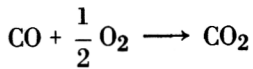
Für den Abströmquerschnitt wird für alle Variablen außer der Temperatur eine Abströmbedingung $\frac{\partial}{\partial z} = 0$ formuliert.

Die Temperatur wird mit Hilfe eines Gradienten am Austritt berechnet.

Für die Symmetrieachse wird für alle Variablen eine Symmetriebedingung der Form $\frac{\partial}{\partial r} = 0$ verwendet.

3. Überprüfung des mathematischen Modells

Das mathematische Modell wurde an experimentellen Untersuchungen von Fiant [5] überprüft. Fiant untersuchte eine katalytische Nachverbrennung von CO



Eintrittsmassestrom:	$1,1645 \cdot 10^{-3}$ kg/s	
mittlere Geschwindigkeit:	0,7	m/s
Zusammensetzung des Gasmisches:	0,0	CO ₂
(Molanteil)	0,0190	CO
	0,0492	O ₂
	0,9318	N ₂

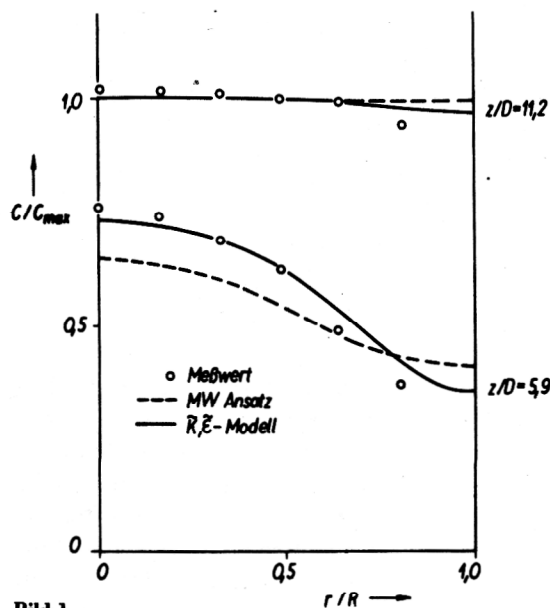


Bild 1
Gemessene und berechnete Werte der Konzentration von Kohlendioxid

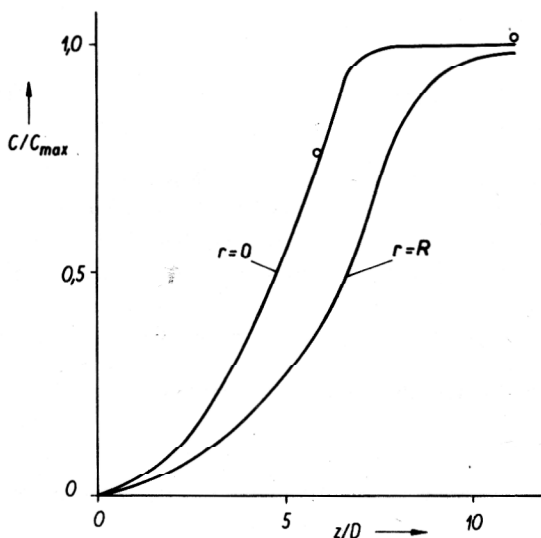


Bild 2
Die Konzentration in der Reaktormitte und an der Wand als Funktion der Reaktorlänge

Die reaktionskinetischen Parameter sowie der Wärmeübergangskoeffizient wurden dieser Arbeit entnommen. Das Bild 1 zeigt gemessene und nachgerechnete Werte

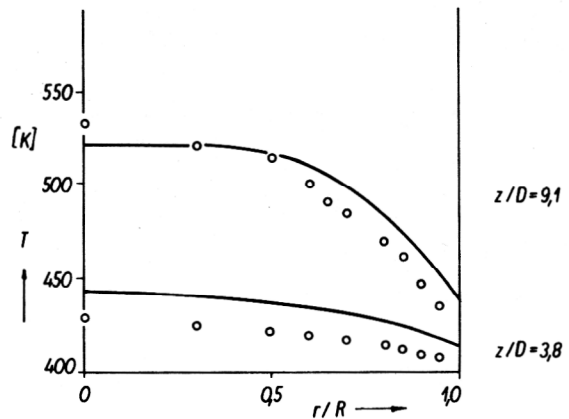


Bild 3
Die Temperaturverteilung über dem Radius

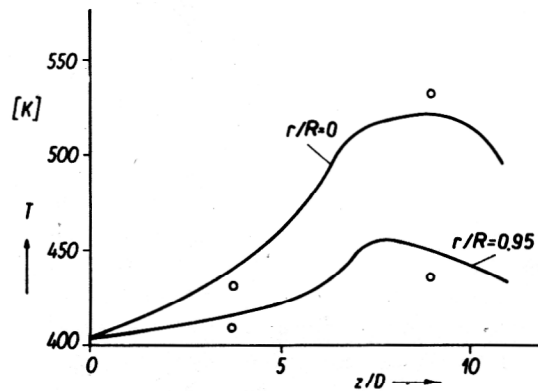


Bild 4
Die Temperatur in der Reaktormitte und in Wandnähe ($r/R = 0,95$) als Funktion der Reaktorlänge

für die Konzentration von CO₂. Diesem Bild ist zu entnehmen, daß die Verwendung eines Zweiparametermodells bessere Ergebnisse liefert als ein einfacher Mischungswegansatz. Im Bild 2 sind die Konzentration auf der Mitte des Reaktors ($r = 0$) und der Wand in Abhängigkeit von der Reaktorlänge aufgetragen. Man erkennt, daß der Konzentrationsunterschied zwischen der Symmetrieachse und der Wand bis 40 % beträgt. In den Bildern 3 und 4 ist der Vergleich zwischen berechneten und gemessenen Temperaturen enthalten. Hier sind die Differenzen größer. Es treten Abweichungen bis etwa 12 K auf. Diese Abweichungen können unterschiedliche Ursachen haben. So wurde eine Wärmestrahlung nicht berücksichtigt, obwohl diese bei Temperaturen von 400... 550 K schon einen merklichen Beitrag liefert. Eine weitere Ursache kann in der Ruhewärmeleitfähigkeit liegen. Die verwendete Beziehung von Krupiczka liefert Fehler bis 30 %. Genauere Gleichungen sind von Zehner/Schlünder [4] bekannt. Gegenüber diesem Ergebnis weicht der von Fiant ermittelte Wert um 60 % ab. Eine weitere Schwierigkeit liegt in der Wärmeüber-

gangszahl α_w . Hier wurden bei der Bestimmung die experimentellen Ergebnisse herangezogen. Mathematische gesicherte Beziehungen bei chemischen Umsetzungen mit hoher Wärmetönung existieren bisher noch nicht. Bei Fiannd wurden keinerlei Angaben über die Rauigkeit des Katalysatorgutes gemacht, die ebenfalls einen Beitrag bei der Bestimmung der Ruhewärmeleitfähigkeit liefert.

Zusammengefaßt kann aber festgestellt werden, daß für praktische Belange der Fehler in vertretbaren Grenzen liegt und das mathematische Modell als geeignet erscheint, die Vorgänge in Schüttungen zu beschreiben.

4. Probleme im Eintrittsbereich eines Reaktors

Der Eintritt wurde durch eine plötzliche Erweiterung dargestellt. Die mittlere Eintrittsgeschwindigkeit erhöht sich dadurch auf 3,1 m/s. Dem Stromlinienbild (Bild 5) ist zu entnehmen, daß sich ein ausgebildetes Strömungsprofil nach einer Weglänge von etwa einem Reaktordurchmesser eingestellt hat. Für die Konzentrationsfelder treten merkliche Unterschiede gegenüber dem ersten Fall auf. In den Bildern 6 und 7 ist der Konzentrations-

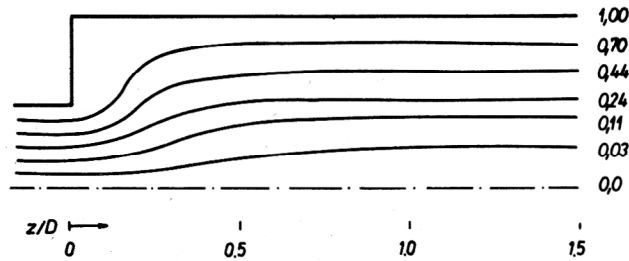


Bild 5
Das Stromlinienbild bei einer plötzlichen Erweiterung

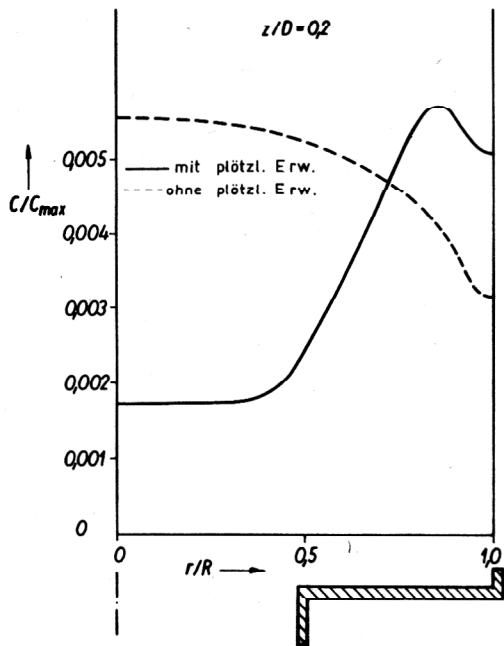


Bild 6
Die Konzentrationsverteilung mit und ohne plötzliche Erweiterung nach einem Strömungsweg von $z/D = 0,2$

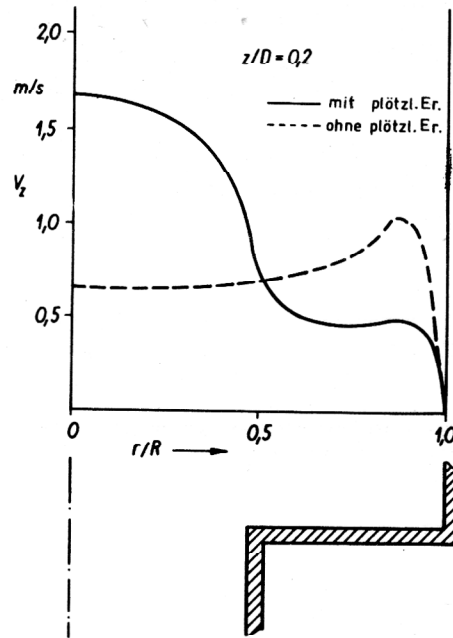


Bild 7
Die Geschwindigkeitsverteilung mit und ohne plötzliche Erweiterung nach einem Strömungsweg von $z/D = 0,2$

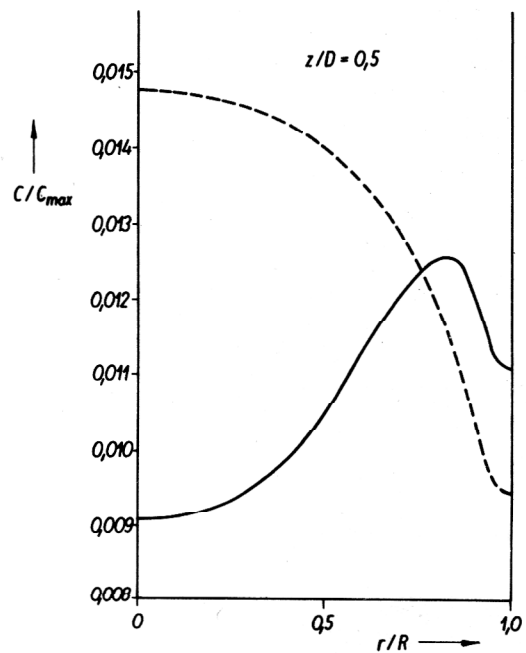


Bild 8
Die Konzentrationsverteilung mit und ohne plötzliche Erweiterung nach einem Strömungsweg von $z/D = 0,5$

und Geschwindigkeitsverlauf nach einer Weglänge von $z/D = 0,2$ dargestellt. Gegenüber dem Fall ohne plötzliche Erweiterung haben sich die Verhältnisse entscheidend verändert. Während in dem ersten Fall die parabolischen Temperaturverteilungen dazu führen, daß die chemische Umsetzung im Kernbereich stets größer ist als im Wandbereich, ist es in diesem Fall umgekehrt. Aus der Geschwindigkeitsverteilung ist ersichtlich, daß die Geschwindigkeit im Kernbereich dreimal größer ist als im Wandbereich. Dadurch sind die Verweilzeiten im Wandbereich größer und die Reaktion kann einen größere

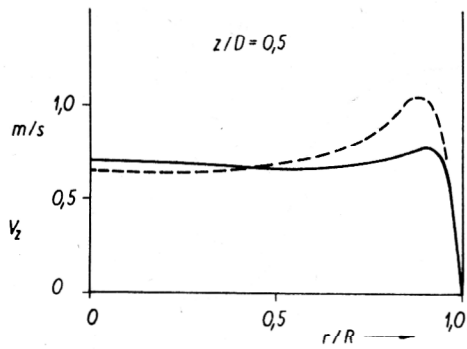


Bild 9
Die Geschwindigkeitsverteilung mit und ohne plötzliche Erweiterung nach einem Strömungsweg von $z/D = 0,5$

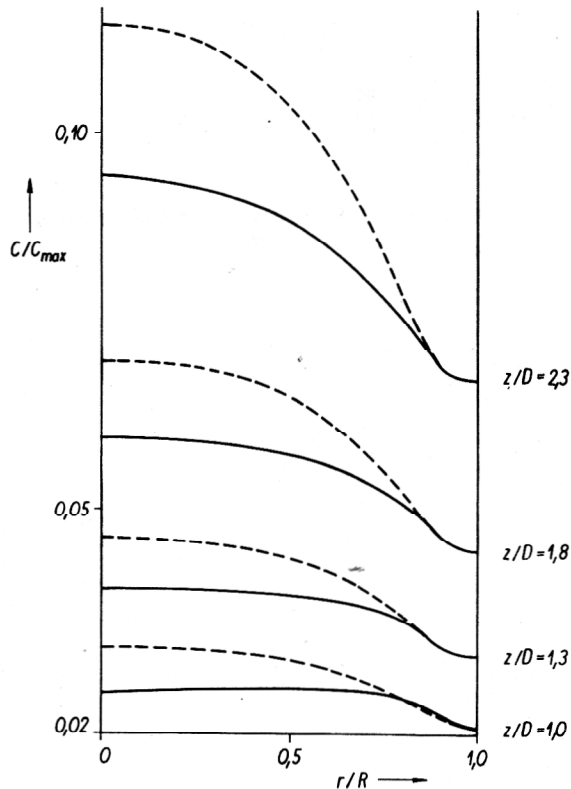


Bild 10
Die weitere Entwicklung der Konzentrationsprofile

ren Fortschrittsgrad erreichen. Aus den Bildern 8 und 9 sind die Verhältnisse nach einer Weglänge von $z/D = 0,5$ zu entnehmen. Das Geschwindigkeitsprofil weist keine großen Unterschiede mehr auf, dagegen sind im Konzentrationsprofil noch starke Abweichungen zu verzeichnen. Im Bild 10 ist die weitere Entwicklung der Konzentrationsprofile dargestellt. Ab $z/D = 1,3$ liegen wieder ähnliche Profile vor, die aber insgesamt nicht so hohe Werte annehmen wie im ersten Fall.

Ähnliche Unterschiede liegen auch im Temperaturfeld vor. Da die Eintrittstemperatur sehr niedrig ist, nimmt die Reaktionsgeschwindigkeit erst nach einer größeren Weglänge bedeutende Werte an. Aus diesem Grund eignet sich eine dimensionslose Darstellung besser, wie sie im Bild 11 enthalten ist. Gegenüber dem parabolischen Profil (----Linie) treten Abweichungen bis 350% auf, die sich mit Zunahme des Strömungsweges wieder schnell verkleinern. Dieser Sachverhalt ist im

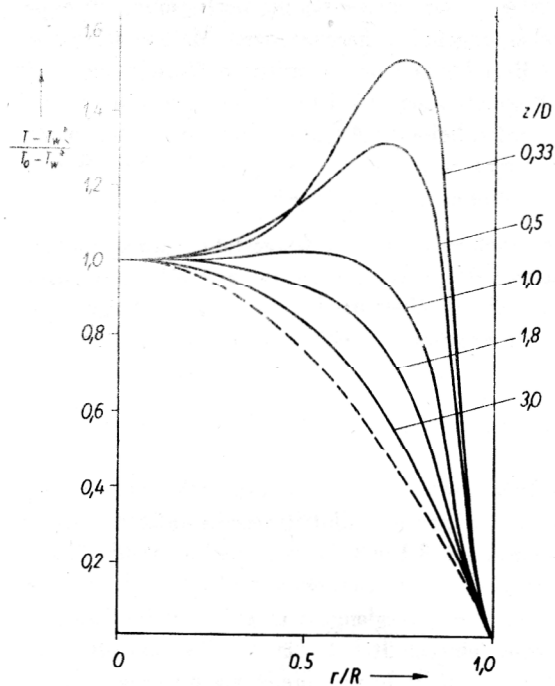


Bild 11
Dimensionslose Temperaturverteilung bei einer plötzlichen Erweiterung

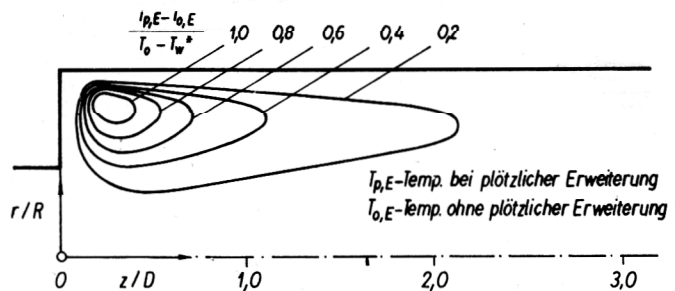


Bild 12
Lokales Überhitzungsgebiet bei einer plötzlichen Erweiterung

Bild 12 in Form eines lokalen Überhitzungsgebietes dargestellt.

Die mittleren Werte für die Konzentration und der Temperatur werden nach den Gleichungen

$$T_m = \frac{2\pi}{\dot{m}_E} \int_0^R r \cdot \bar{T} \cdot \rho \cdot \bar{w} \, dr \quad (23)$$

$$C_m^{(K)} = \frac{2\pi}{\dot{m}_E} \int_0^R r \cdot \overline{C^{(K)}} \cdot \rho \cdot \bar{w} \, dr$$

berechnet. Dem Bild 13 ist zu entnehmen, wie sich das Verhältnis der mittleren Konzentration für den Fall ohne plötzliche Erweiterung zum Fall mit plötzlicher Erweiterung verändert.

Die Austrittskonzentration ist im Fall einer plötzlichen Erweiterung geringer, da im Eintrittsbereich der Katalysator ungünstig ausgenutzt wird. Dies kann durch eine höhere Katalysatorschüttung kompensiert werden.

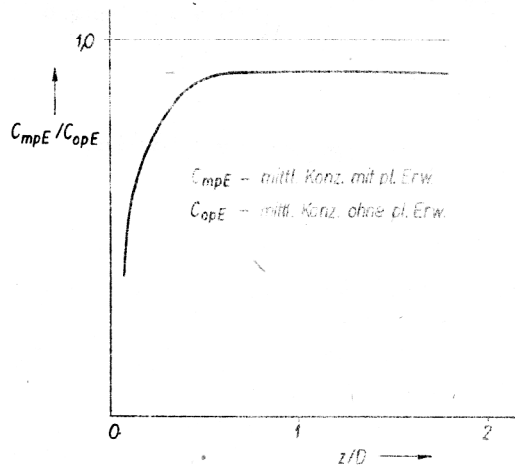


Bild 13

Das Verhältnis der über den Querschnitt gemittelten Konzentration mit plötzlicher Erweiterung zur gemittelten Konzentration ohne plötzliche Erweiterung

5. Zusammenfassung

Es wurde ein mathematisches Modell vorgestellt, in dem zusätzlich zur Energie- und Stoffbilanz die Impulsgleichung verwendet wurde, um die Einströmvorgänge in einem Reaktor zu untersuchen. Das Ergebnis des Modells wurde mit experimentellen Untersuchungen verglichen und ergab eine gute Übereinstimmung. Bei einer plötzlichen Erweiterung sind nach einem Strömungsweg von einem Reaktordurchmesser keine Veränderungen im Geschwindigkeitsprofil aufgrund der plötzlichen Erweiterung zu erwarten. In den Bereichen geringer Strömungsgeschwindigkeiten treten aufgrund der höheren Verweilzeit höhere Temperatur- und Konzentrationswerte auf, wobei die über dem Querschnitt gemittelten Temperatur- und Konzentrationsprofile durch die plötzliche Erweiterung geringere Werte haben. Lokale Überhitzungsgebiete lassen sich feststellen. Dadurch ist es möglich, gegebenenfalls mittels Kaltgaseinspritzungen an diesen Stellen den Reaktionsverlauf günstig zu beeinflussen.

Verwendete Formelzeichen

Φ	Volumenporosität
ρ	Dichte
t	Zeit
x	Koordinate
u	Geschwindigkeit
P	Druck
η	Zähigkeit
c_p	Wärmekapazität
T	Temperatur
λ_F^*	eff. Wärmeleitfähigkeit – Fluid
λ_S^*	eff. Wärmeleitfähigkeit – Festbett
$C(K)$	Konzentration der Komponente K
D_F^*	eff. Diffusionskoeffizient – Fluid
D_S^*	eff. Diffusionskoeffizient – Festbett

R	Stoffänderungsgeschwindigkeit
Q_R	Enthalpieproduktion durch chemische Reaktion
f_1, f_2	Widerstandsparameter der Schüttung
$ v $	Betrag der Geschwindigkeit
λ_S	Wärmeleitkoeffizient für den turbulenten Anteil
D^S	Diffusionskoeffizient für den turbulenten Anteil
Φ_m	mittlere Volumenporosität
λ_e	eff. Wärmeleitkoeffizient
D_e	eff. Diffusionskoeffizient
r_m	Reaktionsgeschwindigkeit
$\Delta_R H_m$	Reaktionsenthalpie
ν_{mk}	stöchiom. Faktor
M	Molmasse
l^*	Mischungsweg
Re	Reynolds-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
d_t	Reaktordurchmesser
d_K	Korndurchmesser
ψ	Stromfunktion
r, z	Koordinaten
v, w	Geschwindigkeitskomponenten
ω	Wirbelstärke
Tu_m	mittlerer Turbulenzgrad
α_w	Wärmeübergangskoeffizient Festbett – Wand

LITERATUR

- [1] Krupiczka, R.: Analysis of thermal conductivity in granular materials. Internat. Chem. Engin. 7 (1967) 1, S. 122 – 144.
- [2] De Ligny, C. L.: Coupling between diffusion and convection in radial dispersion of matter by fluid flow through packed beds. Chem. Ing. Sci. 25 (1970) 1177.
- [3] Leckzik, A.: Die Bestimmung effektiver Wärmeleitfähigkeiten in durchströmten Festbetten. Dissertation TU Berlin 1975.
- [4] Zehner, P.; Schlinder, E. U.: Wärmeleitfähigkeit von Schüttungen bei mäßigen Temperaturen. Chem.-Ing.-Techn. 42 (1970) 933.
- [5] Fiand, U.: Vergleichende Untersuchungen zum Wärmetransport in Schüttschichten mit und ohne chemische Reaktion. Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg, 1978.
- [6] Till, K.: Modellierung und Berechnung turbulenter Strömungen mit chemischer Reaktion in Festbettreaktoren. Dissertation (eingereicht an der TH Leuna-Merseburg 1981).

Anschrift des Verfassers:

Dr.-Ing. K. Till
Technische Hochschule „Carl Schorlemmer“
Wissenschaftsbereich Technische Strömungsmechanik
4200 Merseburg
Geusaer Straße