

TC-Schriftenreihe

Band 7

Matthias Schäfer

**Mathematische Modellierung
eines Zweiphasenströmungsrohres
zur Herstellung von Propylenchlorhydrin**

D 466 (Diss. Universität-GH Paderborn)

Shaker Verlag
Aachen 2000

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Schäfer, Matthias:

Mathematische Modellierung eines Zweiphasenströmungsrohres zur
Herstellung von Propylenchlorhydrin / Matthias Schäfer.

Aachen : Shaker, 2000

(TC-Schriftenreihe ; Bd. 7)

Zugl.: Paderborn, Univ., Diss., 2000

ISBN 3-8265-7592-X

Copyright Shaker Verlag 2000

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen
oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungs-
anlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8265-7592-X

ISSN 1433-6499

Shaker Verlag GmbH • Postfach 1290 • 52013 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Die vorliegende Arbeit wurde in der Zeit von Mai 1995 bis Juni 1999 im Fachgebiet Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik des Fachbereiches Chemie und Chemietechnik der Universität-Gesamthochschule Paderborn in Kooperation mit Dow Deutschland Inc., Werk Stade, angefertigt.

1. Referent: Prof. Dr.-Ing. H.-J. Warnecke
Universität-Gesamthochschule Paderborn
2. Referent: Prof. Dr. J. Prüß
Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg

Tag der Abgabe: 06. Oktober 1999
Tag der mündlichen Prüfung: 22. Oktober 1999

Ich möchte mich hiermit bei allen bedanken, die durch ihr Interesse und ihre Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt

Herrn Prof. Dr.-Ing. H.-J. Warnecke für die interessante Themenstellung, die ständige Diskussionsbereitschaft während der Anfertigung dieser Arbeit und die besondere Art der Unterstützung und Förderung,

Herrn Prof. Dr. J. Prüß für die Übernahme des Korreferates, die wertvolle Unterstützung bei der Bearbeitung mathematischer Problemstellungen und die stete Bereitschaft zur Diskussion mathematischer und technischer Fragestellungen

und den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Technische Chemie für das angenehme Arbeitsklima und ihre Unterstützung, namentlich Herrn Markus Voigt und Herrn Thomas Blume.

Der Firma Dow Deutschland Inc. danke ich für die finanzielle Unterstützung, ihren Mitarbeitern für das freundliche Entgegenkommen. Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. E. Dreher für die Unterstützung, insbesondere bei der Themengestaltung, und Herrn Dr. M. Weidenbach für die stete Diskussionsbereitschaft und die organisatorische Hilfestellung. Den Mitarbeitern der Propylenoxid-Anlage Herrn Brady Coomes und Herrn Frank Köster danke ich für die bereitwillige Unterstützung bei der Untersuchung des Reaktors.

Meiner Familie und Nicole danke ich für das entgegengebrachte Verständnis während der Anfertigung der Arbeit.

Meinen Eltern

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Problemstellung	3
1.2	Stand der Technik	4
1.3	Ziel der Arbeit	7
1.4	Inhalt der Arbeit	8
2	Verfahren zur Herstellung von Propylenoxid	9
3	Theoretische Grundlagen	12
3.1	Spezifische Phasengrenzfläche	12
3.2	Stoffaustausch	12
3.3	Einfluß der chemischen Reaktion auf den Stoffübergang	16
3.4	Impulsaustausch	17
3.5	Wärmeaustausch	19
3.6	Turbulenz	20
4	Modellierung	25
4.1	Mikroskopischer Bereich	26
4.1.1	Chemische Reaktionen	26
4.1.2	Reaktionskinetik	29
4.2	Stoffaustausch	31
4.3	Makroskopischer Bereich	33
4.3.1	Reaktorgeometrie	33
4.3.2	Modelle für stationäre Mischer	34
4.3.3	Eindimensionale Reaktormodelle	36
4.3.4	Mehrdimensionales Reaktormodell auf Basis von CFD	42
4.4	Modellparameter	48

4.4.1	Stoffübergang	48
4.4.2	Reaktionskinetik	49
4.4.3	Reaktionswärme	51
5	Reaktorsimulation	52
5.1	Anwendung des Stoffübergangsmodells	54
5.2	Anwendung eindimensionaler Reaktormodelle	57
5.2.1	Einfluß des Verhältnisses Feedwasserstrom/Feedgasstrom auf Zielgrößen	63
5.2.2	Einfluß der Temperatur auf Zielgrößen	65
5.2.3	Einfluß des Inertgasanteils auf Zielgrößen	67
5.3	Anwendung mehrdimensionaler Modelle	69
5.3.1	Vergleich der Simulationsergebnisse ein- und mehrdimensionaler Modelle	72
5.3.2	Inertgasmassenstrom	75
5.3.3	Mittlerer Tropfendurchmesser	78
5.3.4	Eintrittstemperatur	80
5.3.5	Wirkungsweise der Verjüngung	82
5.4	Experimentelle Untersuchung des technischen Reaktors	84
6	Diskussion	93
7	Zusammenfassung und Ausblick	98
A	Anhang	100
	Charakterisierung der Betriebszustände	100
	Symbolverzeichnis	101
	Abbildungsverzeichnis	103
	Tabellenverzeichnis	104
	Literatur	105