



Ausschreibung für eine Masterarbeit

CFD-Simulation von kinetischen Messungen an Einzelpartikeln in einem Berty-Reaktor

Die heterogene Katalyse ist ein wichtiges Grundwerkzeug der chemischen Industrie. Heterogenkatalytische Reaktionen werden durch Reaktionskinetiken beschrieben die aus Experimenten abgeleitet werden. Für qualitativ hochwertige kinetische Messungen müssen Limitierungen von Stoff- und Wärmetransport ausgeschlossen werden. Daher versuchen speziell entwickelte Reaktoren für kinetische Messungen möglichst nah an das Verhalten des idealen Rührkessel (CSTR) zu gelangen. Ein solcher Reaktor ist z. B. der Berty-Reaktor der durch eine bis zu 10.000 min^{-1} drehende Gasturbine hohe Rückvermischung erzeugt und dadurch limiterungsfreie Messbedingungen schaffen soll. Während im Berty-Reaktor meist pulverartige Katalysatorschüttung aus Partikeln mit einigen 10 bis $100 \mu\text{m}$ Durchmesser verwendet werden ist es ebenso möglich ganze Katalysatorpartikel in industriellen Größen (einige mm) zu vermessen. Industrielle Katalysatoren existieren in vielen verschiedenen Formen durch die das Zusammenspiel von Diffusion und Reaktion optimiert werden soll mit dem Ziel möglichst hohe Ausnutzung der Katalysatoren zu erreichen. Ebenso ist es möglich, den Einfluss der im Festbett auftretenden lokalen Unterschiede in den Reaktionsbedingungen direkt am Katalysatorpartikel zu untersuchen.

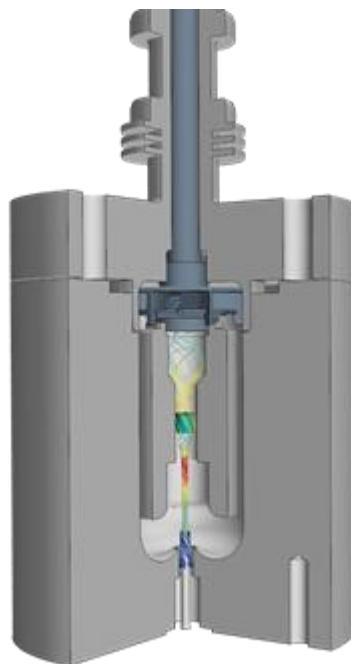


Abb. 1: Flow-Pattern im Inneren eines Berty-Reaktors, visualisiert anhand von Stromlinien aus einer CFD-Simulation.

Im Rahmen der simulativen Masterarbeit soll ein bereits bestehendes CFD-Modell des Berty-Reaktors um ein ebenfalls bestehendes Modell zum Stofftransport in poröse Feststoffe erweitert werden. Mit dem erweiterten CFD-Modell sollen anschließend kinetische Messungen an Einzelpartikeln im Berty-Reaktor unter charakteristischen Reaktionsbedingungen (p , T , c) simuliert werden, um Temperatur- und Konzentrationsverläufe im Reaktor und im Partikel zu untersuchen. Anhand der Simulationsergebnisse sollen Rückschlüsse zu kinetischen Messungen an Einzelpartikeln gezogen und Empfehlungen ausgesprochen werden.

Zusammenfassend sind im Rahmen der Masterarbeit folgende Punkte zu bearbeiten:

- Erweiterung des CFD-Modells um ein Modell für Stofftransport
- Simulation von kinetischen Experimenten an Einzelpartikeln
- Auswertung von Temperatur- und Konzentrationsprofilen
- Kritische Beurteilung der Machbarkeit von kinetischen Messungen an Einzelpartikeln

Betreuer: Scott Anderson, M. Sc.

Erstgutachter: Prof. Dr.-Ing. Thomas Turek