

**Computergenerierte Kugelschüttungen in zylindrischen
Rohren als Basis für eine differenzierte Modellierung
von Festbettreaktoren**

Von der Fakultät für Umweltwissenschaften und Verfahrenstechnik
der
Technischen Universität Cottbus
zur Erlangung
des akademischen Grades eines Doktor-Ingenieurs
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Diplom-Chemiker
Carsten Limberg

aus
Rinteln

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Klaus Schnitzlein

Tag der mündlichen Prüfung: 12.06.2002

1 Inhaltsverzeichnis

1	Inhaltsverzeichnis	2
2	Einleitung	5
3	Vorgehensweise und Zielsetzung	7
3.1	Vorgehensweise	7
3.2	Zielsetzung	9
4	Geometrische Parameter und Definitionen	10
4.1	Betrachtete Schüttungen	10
4.1.1	Geometrische Parameter des Reaktors	12
4.2	Koordinatensystem	14
4.3	Porositäten	16
4.3.1	Gesamtporosität und Schüttungsdichte	16
4.3.2	Porositätsverteilungen	17
5	Literaturübersicht	25
5.1	Ermittlung der geometrischen Beschreibungen der Reaktorschüttung	25
5.2	Einteilung der Reaktormodelltypen	30
5.2.1	Kontinuumsmodelle	33
5.2.2	Netzwerkmodelle	35
5.2.3	Zellenmodelle	40
6	Modellentwicklung	41
6.1	Schüttungsmodell / Simulationsverfahren von KS-OPT	42
6.1.1	Erste Kugellage	44
6.1.2	Zielfunktion und Optimierungsverfahren von KS-OPT	47
6.2	Ausgewählte Reaktormodelle	48
6.2.1	Kontinuumsmodell Epsilon2D	49
6.2.2	Netzwerkmodell TriKaMo-3D	52
6.2.3	Schritte der Modellbildung	53
6.2.3.1	Triangulation der von KS-OPT erzeugten Schüttung	54
6.2.3.1.1	Grundlegende Betrachtungen zur Triangulation	54

6.2.3.1.2	Triangulation nach Chu und Ng [62]	58
6.2.3.1.3	Triangulation als Delaunay-Netz	60
6.2.3.2	Konventionen im Netzwerkmodell	62
6.2.3.3	Berechnung der geometrischen Kanalparameter	64
6.2.3.4	Gewählte Druckverlustgleichungen in den Rohren	69
6.2.3.5	Aufstellung und Lösung des Gleichungssystems	71
7	Ergebnisse	75
7.1	Validierung des Kugelschüttungsmodells	75
7.1.1	Einordnung der von KS-OPT erzeugten Schüttungen in die Klassifizierungen in der Literatur	76
7.1.2	Vergleich der radialen Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi)$ mit Literaturwerten	88
7.1.3	Vergleich der axialen Porositätsverteilungen $\varepsilon(\phi)$ mit Literaturwerten	93
7.1.4	Vergleich der 2D-Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi, \phi)$ mit Literaturwerten	99
7.2	Ergebnisse der Strömungssimulationen	103
7.2.1	Anmerkungen zu den Simulationen	104
7.2.1.1	Simulationen mit Epsilon2D	104
7.2.1.2	Simulationen mit TriKaMo-3D	105
7.2.2	Druckverlust	107
7.2.2.1	Experimentelle Druckverluste und deren Vergleich mit Literaturwerten	109
7.2.2.2	Druckverlust im Modell Epsilon2D	112
7.2.2.3	Druckverlust im Modell TriKaMo-3D	115
7.2.3	Geschwindigkeitsverteilung	118
7.2.3.1	Experimentelle Geschwindigkeitsverteilung	118
7.2.3.2	Strömungsgeschwindigkeitsverteilung im Modell Epsilon2D	126
7.2.3.3	Strömungsgeschwindigkeitsverteilung im Modell TriKaMo-3D	134
7.2.4	Radiale Dispersion	139
7.2.4.1	Ansätze zur Bestimmung der radialen Dispersion	140
7.2.4.2	Meßergebnisse der radialen Dispersion	147
7.2.4.3	Radiale Dispersion im Modell Epsilon2D	150
7.2.4.4	Radiale Dispersion im Modell TriKaMo-3D	153
8	Zusammenfassung und Ausblick	157
8.1	Zusammenfassung	157
8.2	Ausblick	158
9	Anhang	160
9.1	Meßmethoden zur Bestimmung der Schüttungsparameter	160
9.1.1	Verteilung der Kugelgrößen	160

9.1.2	Bestimmung der ersten Kugellage der Schüttung	162
9.1.3	Messung der Gesamtporosität ε_g	164
9.2	Meßmethoden zur Bestimmung von Reaktordaten	167
9.2.1	Versuchsaufbau und Durchführung der Druckverlustmessung	167
9.2.2	Messung der Geschwindigkeitsverteilung	169
9.2.2.1	Verfahren zur Bestimmung von Geschwindigkeitsprofilen in Schüttungen	170
9.2.2.2	Verfahren zur Bestimmung von Geschwindigkeitsprofilen in Leerrohren	172
9.2.3	Versuchsaufbau und Durchführung der Strömungsmessung	173
9.2.4	Strömungsverteilung über der Querschnittsfläche des Reaktors	179
9.2.5	Meßverfahren und Auswertung der radialen Dispersionsmessung	183
9.3	Mathematische Methoden	188
9.3.1	Bestimmung der geometrischen Parameter im Modell TriKaMo-3D	188
10	Verzeichnisse	191
10.1	Formelverzeichnis	191
10.1.1	Lateinische Buchstaben	191
10.1.2	Griechische Buchstaben	195
10.1.3	Indizes	196
10.2	Abbildungsverzeichnis	197
10.3	Tabellenverzeichnis	202
10.4	Literaturverzeichnis	203
10.5	Programmverzeichnis	217

2 Einleitung

Eine Aufgabe der Verfahrenstechnik ist die Auswahl und Auslegung von chemischen Reaktoren. Dazu werden Modelle eingesetzt, die die chemischen sowie die Stoff-, Wärme- und Impulstransportvorgänge in einem Reaktor beschreiben [154]. Ein anderes Einsatzgebiet solcher Modelle ist die Entwicklung von Steuerungsstrategien für Reaktoren [154], da mit Hilfe von mathematischen Beschreibungen und wenigen Meßgrößen auf den Zustand des Reaktors geschlossen werden kann. In dieser Arbeit wird die Modellierung von Schütttschichtreaktoren betrachtet. Reaktoren dieses Typs sind in der chemischen Industrie weitverbreitet [277]. Sie kommen als gasdurchströmte Reaktoren z.B. bei der Schwefeltrioxid-[141], der Ammoniak- [141] und der Acrolein-Produktion [302] zum Einsatz. Ein weiteres Einsatzgebiet für Reaktoren mit einer Festbettschüttung sind Mehrphasenreaktoren, wie sie z.B. bei der Propanol-Synthese [302] oder bei der Behandlung von Abwässern verwendet werden.

Schütttschichtreaktoren zeichnen sich durch eine komplexe Struktur ihres Festbetts aus. Diese Struktur bestimmt die Durchströmung sowie das Vermischungsverhalten des Reaktors und beeinflußt so auch die chemische Reaktion. Die Komplexität der Schüttung kann, wie in dieser Arbeit gezeigt werden soll, in technischen Reaktoren kaum oder gar nicht bestimmt werden. Dies ist der Grund dafür, daß die Entwicklung neuer Prozesse und die Erweiterung alter Verfahren über viele Scaleup-Schritte laufen muß [112]. So wurden und werden eine Vielzahl von Untersuchungen durchgeführt sowie Modelle entwickelt¹, die die Wechselwirkung der Schüttungsstruktur mit der Strömung und der chemischen Reaktion beschreiben. Das Ziel dieser Untersuchungen und der darauf beruhenden Modellentwicklungen ist, die Auslegung chemischer Reaktoren zu vereinfachen, die Zahl teurer Scaleup-Schritte zu verringern und die Prozeßsteuerung sicherer zu machen.

Daher wurden und werden Modelle entwickelt, die versuchen, die Eigenschaften der Schüttung mit z.B. dem Druckverlust oder dem Umsatz in Beziehung zu setzen. Erste Schritte in diese Richtung wurden schon am Anfang unseres Jahrhunderts u.a. von Carman [53] gemacht, der ausgehend von den geometrischen Parametern der Schüttung (Partikeldurchmesser d_p und Leerraumanteil ε_g) Vorhersagen über den Druckverlust einer laminar durchströmten Schüttung entwickelte. Dieser Ansatz wurde von Ergun [97, 98] empirisch erweitert und wird bis in die heutige Zeit weiter verfolgt [191].

¹ [24, 25, 53, 55, 57, 65, 66, 70, 73, 74, 82, 87, 94, 97, 100, 101, 102, 106, 109, 120, 121, 125, 128, 140, 155, 156, 157, 160, 166, 172, 173, 174, 178, 185, 187, 191, 235, 236, 237, 250, 255, 260, 261, 275, 277, 281, 288, 292, 296, 298, 299, 314 u.v.m.]

Mit der Verfügbarkeit von Computern wurde es möglich die lokalen Dichteunterschiede innerhalb der Schüttung in die Modelle für die Durchströmung und für die chemische Reaktion einzubeziehen. Die Schüttung wird dabei als Kontinuum aufgefaßt, das im einfachsten Fall die gleiche radial gemittelte Dichteverteilung wie eine reale Schüttung besitzt². So soll der Einfluß der Wand des Reaktors auf die Durchströmung nachvollzogen werden. Um die Ein- bzw. Auslaufbereiche nachvollziehen zu können, wurde von Daszkowski [74] eine zweidimensionale Verteilung des Leerraumanteiles eingesetzt, die die Veränderungen der lokalen Dichte entlang der Reaktorhöhe und des Radius in der Nähe der Reaktorbegrenzungen betrachtet. Mit einer detaillierteren, zweidimensionalen Verteilung, die auch den Kernbereich erfaßt, wird in dieser Arbeit versucht, nicht nur die Durchströmung der Randbereiche nachzuvollziehen, sondern auch das Vermischungsverhalten von Festbettreaktoren ab-initio in das Modell einzubeziehen. Einen Ansatz der dreidimensionalen Beschreibung zeigen Debus, Nirschl, Delgado und Denk [80], die mit Hilfe der Chimärantechnik die Umströmung der Partikel in das Modell einfließen lassen. Die Begrenztheit dieser Lösung auf wenige Partikel [53] zeigt aber deutlich den Forschungs- und Entwicklungsbedarf.

Ein anderer Ansatz zur Beschreibung von Festbettreaktoren wurde von Fatt [100, 101, 102] initiiert. In diesem diskreten Modell wird der Leerraum der Schüttung als Netzwerk von Strömungswiderständen betrachtet. Diese Widerstände werden in der Anschauung als durchströmte Röhren aufgefaßt, die die gleiche Porenradienverteilung wie ein reales System besitzen. Dieser Modelltyp kann den Einfluß der Porenradienverteilung auf die Abscheidegrade von Filtern nachvollziehen [250]. Eine weitere Anwendung finden diese Modelle bei Gas-Feststoff-Reaktionen, bei denen sich die Form und die Größe der Kanäle während der Reaktion ändern, wie z. B. die Reaktion von Kalkstein mit SO_3 [250]. In den genannten Fällen ist der Wandbereich im Verhältnis zum Reaktor klein, so daß er vernachlässigt wurde [100, 101, 102, 250]. Erst in neuster Zeit haben Thompson und Fogler [288] versucht, diesen Modelltyp auf die Durchströmung von katalytischen Schüttungsschichtreaktoren zu übertragen. Ein weiterreichender Ansatz wird in dieser Arbeit dargestellt.

² [25, 74, 128, 163, 178, 255, 299]

3 Vorgehensweise und Zielsetzung

3.1 Vorgehensweise

Eine Eigenschaft der in dieser Arbeit entwickelten Reaktormodelle ist, daß sie mit möglichst einfach bestimmbar Parametern das Verhalten von Reaktoren vorhersagen können (Abbildung 3-1). Im Falle von Schüttschichtreaktoren wären solche Parameter die Strömungsgeschwindigkeit der Reaktanden sowie die Abmessungen der Schüttung und ihrer Partikel.

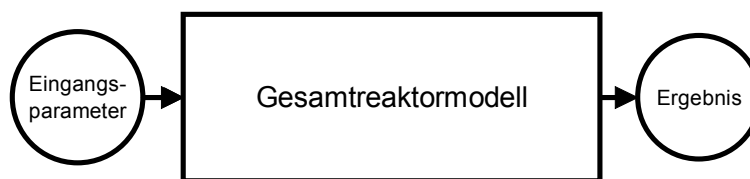


Abbildung 3-1: Skizze eines Reaktormodells

Die Ergebnisse eines solchen Modells wären neben einer Vorhersage des Umsatzes u.a. die Verteilung der Konzentrationen und der Temperaturen im Reaktor. Beide können für ein verbessertes Reaktordesign genutzt werden. Aufgrund der Komplexität dieses Reaktortyps werden zumeist noch andere Parameter als Eingangsgröße benötigt³, wie z.B. das Transportverhalten senkrecht zur Strömungsrichtung oder die Massenverteilung im Reaktor. Die zusätzlichen Parameter werden benötigt, um den Reaktor in seinem Inneren besser abbilden zu können und um Vorgänge wie Wandkühlungen, Hot-Spots oder Bypassing zu modellieren.

Um einen Ansatz aufzuzeigen, wie diese Effekte auch ohne zusätzliche Parameter in einem Reaktormodell erfaßt werden können, wird in dieser Arbeit das Gesamtmodell des Reaktors in zwei Teilprobleme zerlegt. Somit besteht das Gesamtreaktormodell aus einem Schüttungsmodell, das die Schüttung in ihrer gesamten Komplexität beschreibt, und aus einem Reaktormodell, das die Wechselwirkung zwischen der Schüttung und den Reaktanden darstellt (Abbildung 3-2).

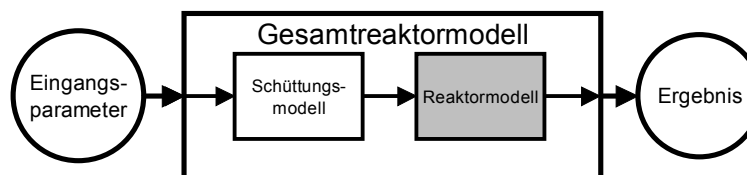


Abbildung 3-2: Skizze des verwendeten Modellansatzes

³ [25, 74, 128, 163, 178, 255, 299]

Das Schüttungsmodell benötigt nur die Schüttungs- und die Partikelgeometrie als Parameter. Das Reaktormodell kann mit Hilfe der Strömungsgeschwindigkeit der Reaktanden und mit dem Ergebnis des vorgeschalteten Strömungsmodells die komplexe Strömung im Innern der Schüttung beschreiben. Dabei sollen die Möglichkeiten aufgezeigt werden, wie die Schüttungsmodelle in ein solches Gesamtreaktormodell eingebunden werden können. Diese Möglichkeiten sollen anhand der Entwicklung der in dieser Arbeit verwendeten Reaktormodelle, einem Kontinuumsmodell und einem diskreten Modell, dargestellt werden. Dazu ist es notwendig, sowohl die Arbeitsweise als auch die Ergebnisse des Schüttungsmodells sowie der beiden Reaktormodelle darzustellen.

Das in Abbildung 3-2 dargestellte Gesamtreaktormodell und die verwendeten Reaktormodelle, werden anhand von charakteristischen Eigenschaften der Schüttungsreaktoren ausgehend von phänomenologischen Betrachtungen bewertet. Dabei wird auf die Kopplung mit chemischen Reaktionen verzichtet, da ihre Komplexität den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde. So stützt sich die Bewertung des gewählten Ansatzes insbesondere auf die radiale Dispersion, einem effektiven Mechanismus, der den radialen Stofftransport in einem Reaktor beschreibt. Problematisch bei dieser Beschreibung, wie sie z.B. von Hofmann [140], Kulkarni und Doraiswamy [167] sowie Daszkowski [74] vertreten wird, ist die im Hinblick auf das Größenverhältnis von Partikel und Reaktor begrenzte Gültigkeit [167] und die Zusammenfassung verschiedener physikalischer Effekte [306]. Eine Beschreibung der radialen Dispersion mit Hilfe der physikalischen Vorgänge, die sie verursacht, würde zu einer universelleren Beschreibung der Reaktoren führen. Die Vorteile dieser Vorgehensweise sind, daß zum einen aufwendige Messungen vermieden werden können und zum anderen nicht die Gefahr besteht, daß der mit Messungen validierte Bereich einer empirischen Beziehung in der Simulation verlassen werden kann.

Die radiale Dispersion wird nach Gunn [125] durch zwei Phänomene verursacht:

1. molekulare Diffusion
2. radiale Ströme, die durch die Umströmung der Partikel entstehen [125] und die von Wicke [306] noch detaillierter beschrieben werden.

Die radialen Ströme, die durch die Umströmung der Partikel entstehen, sind aufgrund der komplexen Struktur der Schüttung auf der Ebene der Phänomene schwierig zu beschreiben. Ein Ansatz hierfür soll in dieser Arbeit mit einer detailreichen Betrachtung von Festbettreaktoren auf der Basis computergenerierter Schüttungen aufgezeigt werden. Dies soll mit dem zweidimensionalen Kontinuumsmodell **Epsilon2D**, das auf der Basis des von Schnitzlein [257] entwickelten Gleichungslösers **flowsim** arbeitet, und mit dem dreidimensionalen Netzwerkmodell **TriKaMo-3D** realisiert werden, das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde.

3.2 Zielsetzung

Die in dieser Arbeit dargestellte Teilung des Gesamtreaktormodells in zwei Teilmodelle soll einen Weg zu einem allgemeingültigen ab-initio Modell für Schütttschichtreaktoren aufzeigen, das mit Hilfe von wenigen, einfach bestimmbaren Parametern das Verhalten des Reaktors vorhersagen kann. Dazu wird in dieser Arbeit aufgezeigt, daß eine Kopplung von Schüttungsmodellen und verschiedenen Reaktormodellen möglich ist und zu sinnfälligen Ergebnissen führt. Des weiteren soll aus dieser Arbeit abgeleitet werden, welche der beiden Kopplungen, Schüttungs- und Kontinuumsmodell bzw. Schüttungs- und diskretes Modell, in welchen Anwendungsbereichen sinnvoller sein könnte.

4 Geometrische Parameter und Definitionen

4.1 Betrachtete Schüttungen

Bei den in dieser Arbeit betrachteten Reaktoren (siehe Abbildung 4-1) handelt es sich um von oben mit Luft angeströmte Schütttschichtreaktoren. Die Reaktoren bestehen aus zylindrischen Schüssen mit einem Durchmesser d_i von 50 mm und Längen zwischen 250 und 500 mm. Den Boden der Reaktoren bildet ein etwa 3 cm hoher Wabenkörper⁴ oder ein Drahtnetz⁵. Der Kopf besteht aus einem 50 mm langen Schuß, der 5 feine Siebe (mesh 100) enthält, um die einströmende Luft gleichmäßig über den Querschnitt zu verteilen.

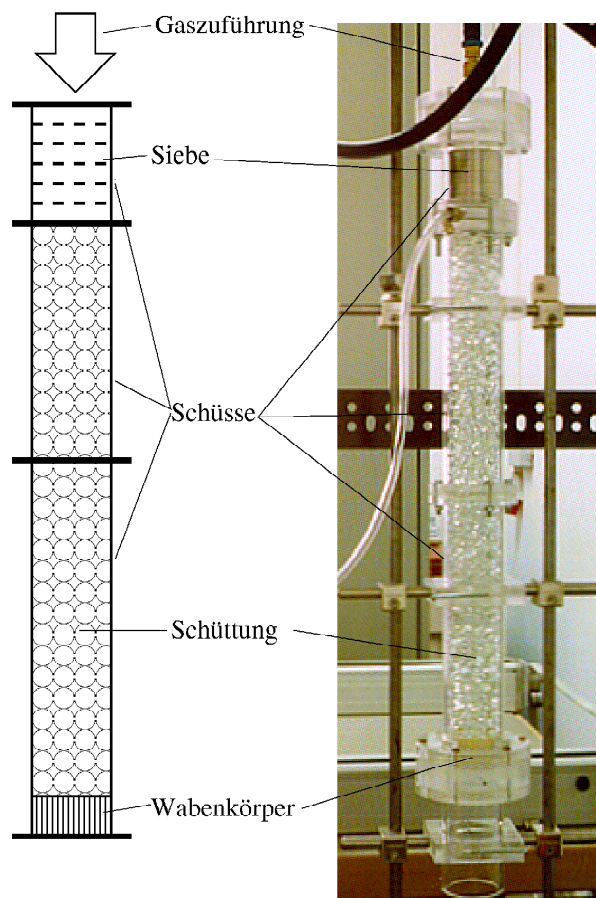


Abbildung 4-1: Aufbau des Reaktors

⁴ Größe der Kanäle 0,75 mm x 0,75 mm

⁵ Maschenweite 1 mm

Die Festbetten in den Reaktoren werden mit Glasperlen aufgebaut, die eine Zufallsschüttung bilden. Eine zufällige Schüttung ist nach Debbas und Rumpf [79] eine Mischung aus Partikeln gleicher Größe und Geometrie. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Partikel im Reaktor ist in der zufälligen Schüttung überall gleich groß. Die gleichmäßige Aufenthaltswahrscheinlichkeit wird in Festbettreaktoren durch ihre Begrenzungen eingeschränkt, so daß die Zufallsschüttung eher als das Gegenteil einer geordneten Packung zu verstehen ist. Diese geordneten Packungen zeichnen sich durch eine regelmäßige Struktur aus [79].

4.1.1 Geometrische Parameter des Reaktors

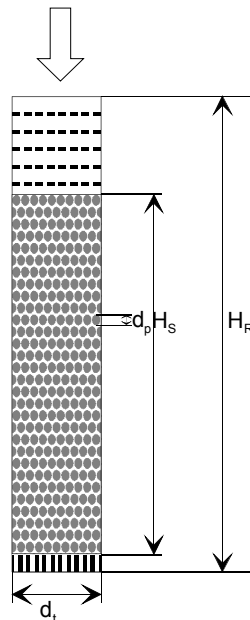


Abbildung 4-2: Geometrische Parameter des Reaktors

Die Reaktorhöhe H_R beschreibt, wie in Abbildung 4-2 dargestellt ist, die gesamte Länge des Reaktors einschließlich des Strömungsvergleichmäßigers und des Reaktorbodens. Sie kann zwischen 300 mm und 2030 mm variiert werden. Die Schüttungshöhe H_S ist der Abstand des höchsten Punktes in der Schüttung vom Reaktorboden, wobei die minimale Schüttungshöhe durch den Kugeldurchmesser d_p gegeben ist. Die maximale Schüttungshöhe von 1989 mm ergibt sich aus dem Abstand zwischen den Sieben des Strömungsvergleichmäßigers und dem Drahtnetz des Reaktorbodens. Die mit den beiden Höhen (H_R und H_S) und dem Reaktorinnendurchmesser d_t definierten Zylindervolumina sind das Reaktorvolumen V_R und das Schüttungsvolumen V_S .

Die Glasperlen der Schüttung können einen Durchmesser von 2, 4, 6, 8, 10, 12 oder 14 mm aufweisen. Die Kugeln werden von oben in den Reaktor gefüllt, wobei der mittlere Durchmesser der Kugeln mit d_p bezeichnet wird. Das Verhältnis a_{pt} (4-1) der Durchmesser der Kugeln d_p und des Reaktors d_t bewegt sich somit zwischen 0,04 ($d_p = 2$ mm) und 0,28 ($d_p = 14$ mm). Die Definition (4-1) des Durchmesserverhältnisses a_{pt} erfolgt in Anlehnung an Govindarao, Ramrao und Rao [120].

$$a_{pt} = \frac{d_p}{d_t} \quad (4-1)$$

Die zum Durchmesser Verhältnis a_{pt} inverse Größe a_{tp} ist gemäß Gleichung (4-2) definiert. Dieser Wert a_{tp} beschreibt, um wieviel Male der Reaktordurchmesser d_t größer als der Kugeldurchmesser d_p ist.

$$a_{tp} = \frac{d_t}{d_p} = \frac{1}{a_{pt}} \quad (4-2)$$

Das Höhenverhältnis a_{Hp} gibt das Verhältnis zwischen der Schüttungshöhe H_S und dem Kugeldurchmesser d_p (4-3) an.

$$a_{Hp} = \frac{H_S}{d_p} \quad (4-3)$$

In der Tabelle 1 sind die Werte für die Durchmesser- und die Höhenverhältnisse der Reaktoren aufgelistet, die im experimentellen Teil der Arbeit betrachtet werden.

Tabelle 1: Durchmesser- und Höhenverhältnisse in den betrachteten Reaktoren

d_p in mm	a_{pt}	a_{tp}	a_{Hp} im kurzen Reaktor ($H_S = 0,478$ m)	a_{Hp} im langen Reaktor ($H_S = 1,989$)
2	0,04	25	240	990
4	0,08	12,5	120	500
6	0,12	8,3	80	330
8	0,16	6,3	60	250
10	0,2	5,0	48	200
12	0,24	4,2	40	170
14	0,28	3,6	34	140

4.2 Koordinatensystem

Der verwendete Reaktor ist ein dreidimensionales Gebilde. Um ihn eingehender betrachten zu können, wird ein kartesisches Koordinatensystem verwendet, dessen Ursprung im Mittelpunkt des Reaktorbodens liegt (siehe Abbildung 4-3). Die z-Achse steht senkrecht auf dem Boden, wobei die Reaktorschüttung in der Höhe H_s endet. Der Reaktorrand schneidet die x- und die y-Achse in den Punkten $(R,0,0)$ und $(0,R,0)$. Der Durchmesser des Reaktors ist mit d_t und sein Radius mit R gegeben.

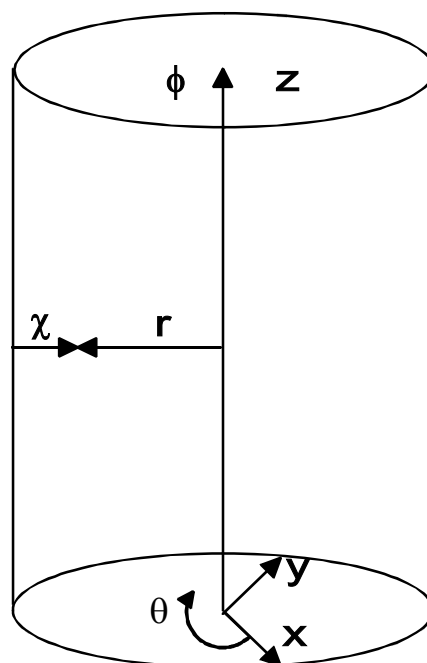


Abbildung 4-3: Koordinatensystem

Die radiale Koordinate, die in der Gleichung (4-4) definiert ist, gibt im Reaktor alle Punkte an, die den gleichen Abstand von der z-Achse haben. Sie ist u. a. wichtig, um z.B. radiale Porositätsverteilungen verschiedener Kugelgrößen vergleichbar zu machen.

$$r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (4-4)$$

Mit der Winkelkoordinate θ wird das Zylinderkoordinatensystem aus dem Radius r , dem Winkel θ und der Höhe z komplettiert.

Neben dem Radius r ist der Wandabstand χ die zweite wichtige radiale Koordinate, der gemäß Gleichung (4-5) aus der radialen Koordinate r , dem Reaktorradius R und dem Partikeldurchmesser d_p berechnet wird.

$$\chi = \frac{R - r}{d_p} \quad (4-5)$$

Eine zweite dimensionslose Koordinate ist der Bodenabstand ϕ , der gemäß Gleichung (4-6) definiert ist.

$$\phi = \frac{z}{d_p} \quad (4-6)$$

Der Bodenabstand ϕ gibt die Höhe in der Schüttung in Partikeldurchmessern an, so daß er am Boden der Schüttung den Wert null und am Kopf den Wert H_S/d_p annimmt. Analog zum Bodenabstand ist der Kopfabstand ϕ' als Abstand von der oberen Schüttungsgrenze definiert:

$$\phi' = \frac{z - H_S}{d_p} \quad (4-7)$$

4.3 Porositäten

4.3.1 Gesamtporosität und Schüttungsdichte

Eine wichtige Größe im Reaktor ist die Schüttdichte ρ_g (4-8). Normalerweise gibt sie die Masse der Schüttung in einer Volumeneinheit an. Da die in dieser Arbeit behandelten computergenerierten Schüttungsmodelle nicht massebehaftet sind, soll hier die Schüttdichte als das Verhältnis des Volumens aller Kugeln V_K zum Schüttungsvolumen V_S verstanden werden (4-8).

$$\rho_g = \frac{V_K}{V_S} \quad (4-8)$$

Mit der Gesamtporosität ε_g wird der Anteil des leeren Volumens zwischen den Partikeln am gesamten Schüttungsvolumen bezeichnet. Diese Porosität ist in einem gasdurchströmten Festbettreaktor, wie folgt, definiert:

$$\varepsilon_g = \frac{V_L}{V_S} = 1 - \frac{V_K}{V_S} = 1 - \rho_g \quad (4-9)$$

Um deutlich zu machen, daß sich diese Porosität integral auf die gesamte Schüttung bezieht, wird sie im folgenden auch als Gesamtporosität bezeichnet. Im Gegensatz dazu stehen die Porositätsverteilungen, die sich auf die Porosität an einem bestimmten Ort in der Schüttung beziehen. Die Gesamtporosität ε_g der betrachteten Schüttungsmodelle wird mit Hilfe des Kugelvolumens V_K bestimmt. Dieses Volumen wird aus der Zahl aller n_K Kugeln im Reaktor und deren Volumina ermittelt (4-10). Dabei wird ausgenutzt, daß alle Kugeln gleich groß sind.

$$V_K = n_K * \frac{\pi}{6} d_p^3 \quad (4-10)$$

Bei den vermessenen Reaktorschüttungen wurde das Kugelvolumen V_K direkt bestimmt, so daß die Gesamtporosität ε_g aller vermessenen und berechneten Schüttungen in gleicher Weise erfolgt.

4.3.2 Porositätsverteilungen

In dieser Arbeit werden neben den Gesamtporositäten auch Porositätsverteilungen verwendet. Die Detaillierteste der Porositätsverteilungen in dieser Arbeit ist die zweidimensionale Porositätsverteilung. Ihre in der Literatur [74, 74, 106, 163] beschriebenen Formen spiegeln keine zweidimensionalen Meßwerte wider, sondern sind aus den Messungen der radialen und axialen Porositätsverteilungen abgeleitet. In dieser Arbeit wird versucht eine zweidimensionale Messung nachzuahmen. Eine solche Messung wäre z.B. möglich, wenn man analog zur Bestimmung der radialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ vorgeht. An Stelle einer Messung der Porosität über die ganze Länge der Schüttung, könnte man die Porosität über einen Höhenabschnitt bestimmen. Das Resultat einer solchen Messung wäre eine gemittelte Porosität in einem Kreisring (Abbildung 4-4). Um dies in einem Schüttungsmodell nachzuvollziehen, wird der Kreisring in eine große Zahl von einzelnen Kreisen zerlegt. Aus den Schnittlinien dieser einzelnen Kreise mit den Kugeln wird mittels numerischer Integration das gesamte Kugelvolumen im Kreisring bestimmt [21].

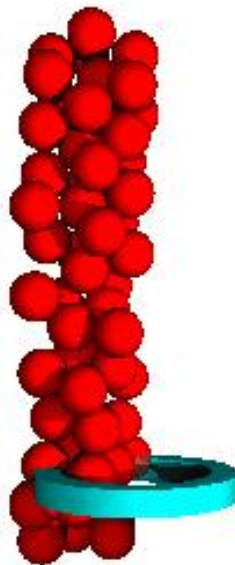


Abbildung 4-4: Skizze zur Bestimmung der zweidimensionalen Porositätsverteilung in einem Kreisring.

Aus dieser zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ kann mittels Integration über die Länge die radiale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ bestimmt werden (4-11).

$$\varepsilon(\chi) = \frac{d_p}{H_s} \int_0^{\phi=H_s/d_p} \varepsilon(\chi, \phi) d\phi \quad (4-11)$$

Damit erhält man die Gleichung (4-12), die in der Literatur als Definition für die radiale Porositätsverteilung anerkannt ist⁶.

$$\varepsilon(r) = \frac{\text{Summe aller Zylinderflächen mit dem Radius } r, \text{ die einen Hohlraum schneiden}}{\text{gesamte Mantelfläche des Zylinders mit dem Radius } r} \quad (4-12)$$

Die axiale Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$ kann nach einer Koordinatentransformation durch Integration der zweidimensionalen Verteilung $\varepsilon(r,z)$ über den Radius berechnet werden (4-13):

$$\varepsilon(z) = \frac{2}{R^2} \int_0^R \varepsilon(r,z) r dr \quad (4-13)$$

Das Ergebnis dieser Integration ist in der Gleichung (4-14) dargestellt und entspricht ebenfalls der allgemeinen Definition in der Literatur⁷.

$$\varepsilon(\phi) = \frac{\text{Fläche des Leerraums in der Höhe } \phi, \text{ der von der Querschnittsfläche geschnitten wird}}{\text{gesamte Querschnittsfläche}} \quad (4-14)$$

Sowohl die axialen wie auch die radialen Porositätsverteilungen in dieser Arbeit werden nicht gemäß den Gleichungen (4-11) und (4-13) aus den zweidimensionalen Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi,\phi)$ abgeleitet, sondern aus Gründen der Rechengenauigkeit direkt gemäß den Gleichungen (4-12) und (4-14) mit Hilfe eines Verfahrens nach Benner [21] und Eisfeld [96] berechnet.

Ein Beispiel für die in dieser Arbeit erzeugten Porositätsverteilungen ist in Abbildung 4-5 dargestellt. Die Ausschnitte (Abbildung 4-5, rechts) entstammen einer Schüttung, die ein Höhenverhältnis $a_{H\phi}$ von 250 hat. Würde diese Schüttung auf einer DIN-A4-Seite dargestellt, wären keine Details mehr erkennbar, so daß sich der Autor hier auf drei Ausschnitte, einen Boden-, einen Mittel- und einen Kopfabchnitt, beschränkt. Dies macht ein großes Problem der zweidimensionalen Porositätsverteilung deutlich. Da die Detailfülle dieser Beschreibung sehr hoch ist, kann die zweidimensionale Beschreibung unhandlich sein. Aus diesem Grund soll hier die Positionsangabe im zweidimensionalen Raum der Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi,\phi)$ eingeführt werden. Die Position $\{2,5; 0,5\}$ beschreibt den Kreis im Reaktor mit einem Wandabstand χ von 2,5 und einem Bodenabstand von 0,5.

⁶ [19, 66, 115, 121, 187, 196, 197, 240, 241, 287]

⁷ [275, 277]

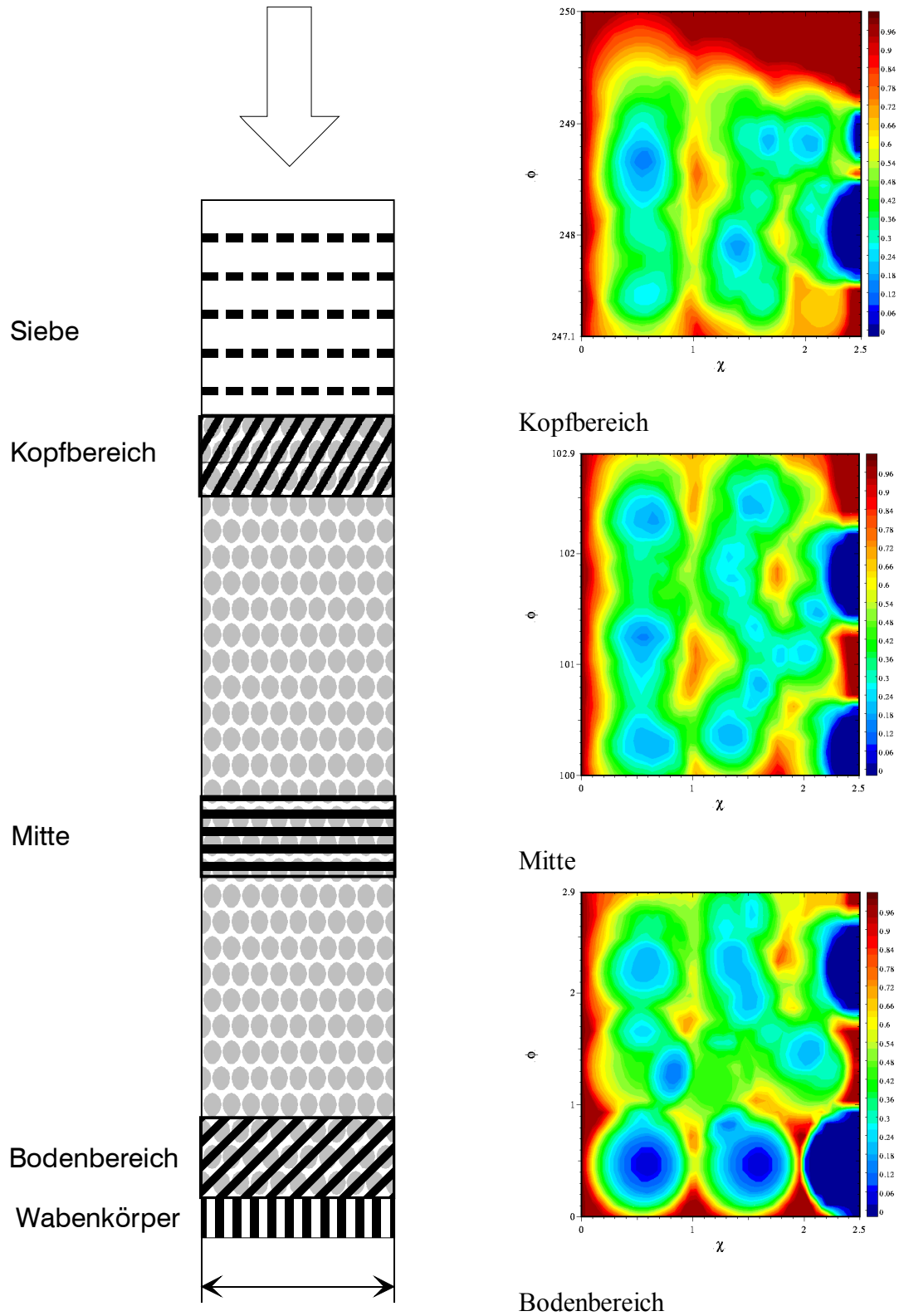


Abbildung 4-5: Zweidimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ ($a_{pt} = 0,2$, konzentrische erste Kugellage, $n_{opt} = 2$)

Am Boden des Reaktors kann man die Anordnung der erste Kugellage in Kugelringen gut erkennen. Bei kleinen Kreisradien ($r < 0,5 \cdot d_p$) ist es möglich, daß der ganze betrachtete Ring im Innern einer Kugel liegt. In diesem Fall ist die Porosität innerhalb des Kreisrings null (Abbildung 4-5, dunkelblauer Bereich um $\{2,5; 0,5\}$). Außerhalb dieser mittleren Kugel steigt die Porosität auf eins, ausgenommen sind hierbei die Kontaktpunkte mit den Nachbarkugeln. Wären die genutzten Kreisringe infinitesimal klein, würde die Porosität vom Wert null innerhalb der mittleren Kugel zum Wert eins außerhalb springen. Im Falle von differentiellen Kreisringen besitzen die Kreise, die die Oberfläche der Kugel beschreiben, die Porosität null. Ihre Nachbarkreisringe mit einem größeren Radius weisen, wenn keine Nachbarkugeln geschnitten werden, die Porosität eins auf. Da die Kreisringe aber eine endliche Ausdehnung besitzen, kommt es am Rand der mittleren Kugel zu Dichten zwischen null und eins. Diese Dichten entstehen durch die Mittelung im Kreisring, wenn ein Volumenelement sowohl eine Kugel als auch den Leerraum schneidet.

Das Phänomen, daß in der Nähe der z-Achse des Reaktors in der zweidimensionalen Verteilung Porositäten von null erreicht werden, ist nicht nur auf die erste Kugellage beschränkt, sondern existiert im ganzen Reaktor, z.B. in den Bereichen um $\{2,5; 2,3\}$, $\{2,5; 101,7\}$ und $\{2,5; 248,0\}$. Diese Bereiche treten immer dann auf, wenn ein Volumenelement vollständig innerhalb einer Kugel liegt. Aus ähnlichen Gründen kann nahe der z-Achse die Porosität eins auftreten, wenn die Kreisringe keine Kugel schneiden.

In der ersten konzentrischen Kugellage (Abbildung 4-5, Boden) gibt es noch zwei weitere Zonen ($\{0,55; 0,5\}$ und $\{1,6; 0,5\}$) hoher Dichte. Sie beschreiben die Kontaktpunkte der Kugeln innerhalb der beiden konzentrischen Kugelringe. Dabei wird augenscheinlich, wie Bey und Eigenberger [25] sowie Benenati und Brosilow [19] dies berechnen, daß diese Kontaktpunkte innerhalb der Kugelringe mit sinkendem Durchmesser derselben nach innen rücken. Der grüne Halo, der die geringeren Dichten um die Kontaktstellen ($\{0,55; 0,5\}$ und $\{1,6; 0,5\}$) markiert, beschreibt die Lage der Kugeln. Ausgehend von den Kontaktstellen steigt die Porosität im Halo, da dort der Kreisring einen zunehmend größeren Leerraum schneidet, bis dieser Ring an der Wand oder am Boden nur noch einen Leerraum schneidet (Abbildung 4-5, rote Bereiche).

Die zweidimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ bietet durch ihre hohe Detailfülle eine gute Basis, um die Verläufe der axialen und radialen Porositätsverteilungen zu erklären. So weist die axiale Porositätsverteilung in Abbildung 4-6 ein absolutes Maximum $\varepsilon(\phi=0) = 1$ auf. Dieses erste Maximum entsteht dadurch, daß die Kugeln der ersten Lage den Boden nur an jeweils einem Punkt berühren. In der zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ treten hier geringe Porositäten auf. Daß diese Porositäten nicht gleich null sind, liegt an der endlichen Auflösung der zweidimensionalen Verteilung. Die größte Dichte der ersten Kugellage (Abbildung 4-6, erstes Minimum) ist bei $\phi = 0,5$ zu finden, da dort der axiale Querschnitt der Kugeln am größten ist. In dieser Höhe liegen auch die maximalen Dichten der Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$. In der zweidimensionalen Porositäts-

verteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ ist das Ende der ersten Kugellage deutlich erkennbar (Abbildung 4-5, $\phi = 1$). In der axialen Porositätsverteilung wird diese Stelle durch das zweite Maximum markiert. Diese Unstetigkeit ergibt sich aus dem einheitlichen Ende der ersten Kugellage und kann durch theoretische Überlegungen nachvollzogen werden [239]. Auch der von Ridgway und Tarbuck [239] postulierte Überlappungsbereich der axialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$ (Abbildung 4-5, $\phi = 0,6-1$) läßt sich nachvollziehen. Dieser Übergangsbereich wird durch das Eindringen der zweiten Kugellage in den Bereich der ersten Kugellage verursacht ($\{1,4; 0,8\}$ und $\{0,8; 1,2\}$). Im Gegensatz zu den Arbeiten von Ridgway und Tarbuck [239] basieren die in dieser Arbeit betrachteten zufälligen Kugelschüttungen nicht auf einer geordneten Struktur, sondern die Kugeln der zweiten Lage dringen unterschiedlich weit in die erste Lage ein. Daher ist der Beginn des entsprechenden Überlappungsbereichs nicht durch ein weiteres unstetiges Maximum gekennzeichnet, sondern mit durch einen Wendepunkt bei $\phi \approx 0,7$ (Abbildung 4-6).

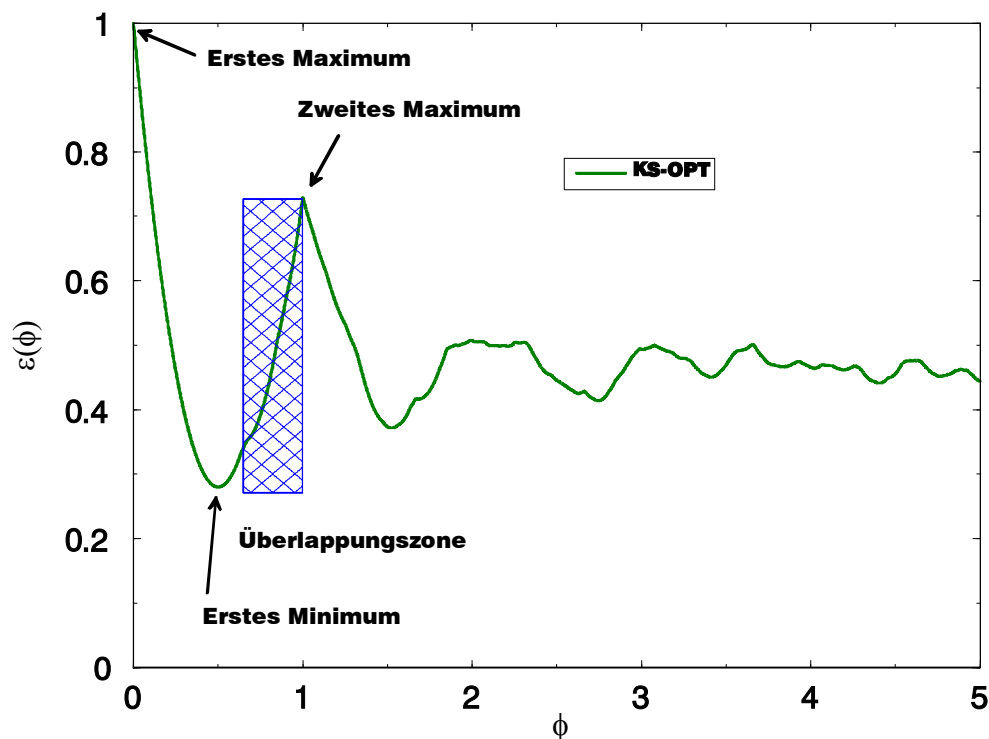


Abbildung 4-6: Axiale Porositätsverteilung der simulierten Schüttungen ($a_{pt} = 0,2$, $n_{opt} = 1$, $a_{Hp} = 250$, konzentrische erste Kugellage)

Der zufällige Charakter der Schüttungen macht sich auch darin bemerkbar, daß sich die Kugellagen mit zunehmender Höhe auflösen. So sind die zweite und dritte Kugellage in der zweidimensionalen Porositätsverteilung noch auszumachen, ihre maximalen Dichten sinken aber, da sich die Kugelmittelpunkte nicht mehr einheitlich in einer Höhe befinden, sondern über einen gewissen Bereich gestreut sind. Gleiches gilt für die radialen Positionen der Kugeln in den höheren Kugellagen, die ab der zweiten Kugellage an keine definierten Positionen mehr einnehmen, was in der zweiten Kugellage am durchgängigen Band einer mittleren Porosität zu erkennen ist (Abbildung 4-5,

$\phi = 0,9-1,8$). Beide Effekte bewirken bei der axialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$, wie sie in Abbildung 4-6 dargestellt ist, eine geringere Ausprägung des zweiten Minimums. Diese Auflösung der Kugellagen nimmt durch den zufälligen Charakter der betrachteten Schüttungen von Kugellage zu Kugellage zu und bewirkt, daß die Schwankungen um die mittlere Porosität der Schüttung immer geringer werden und der Graph einen immer zufälligeren Charakter bekommt, wie dies in Abbildung 4-7 dargestellt ist.

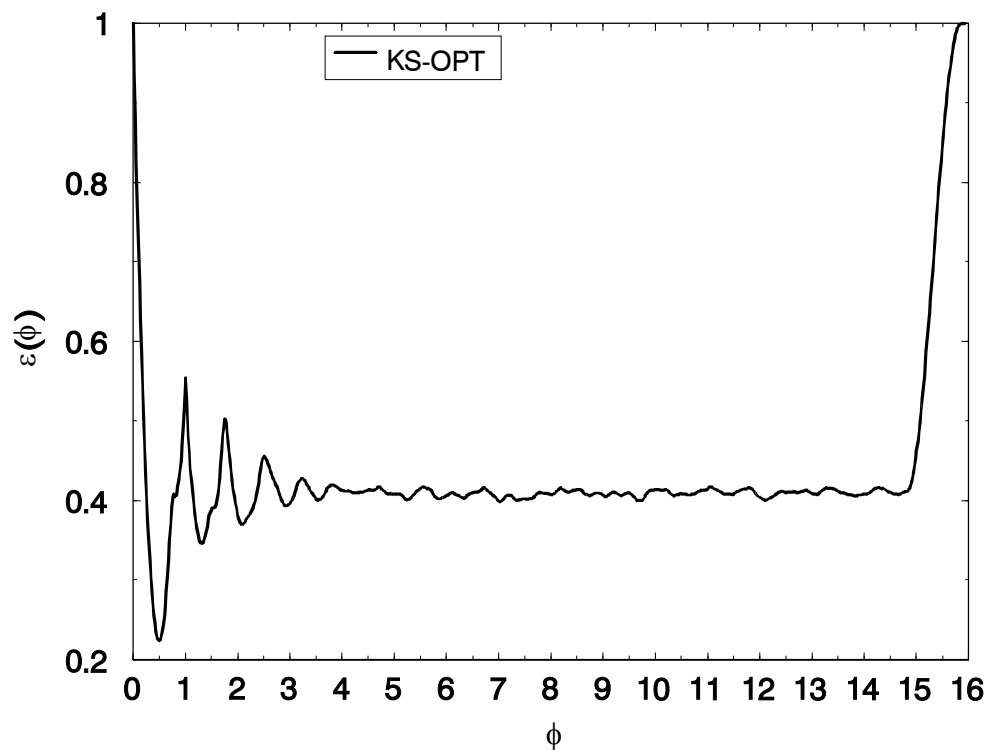


Abbildung 4-7: Axiale Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$ einer simulierten Schüttung ($a_{pt} = 0,04$, $a_{tp} = 16$, $n_{opt} = 3$)

Am Reaktorkopf muß wieder die Porosität $\varepsilon(\phi) = 1$ herrschen, da keine Kugel über die physikalischen Grenzen des Reaktors bzw. dessen Grenzdefinitionen hinaus gehen darf. Der Übergang kann, wie Stanek und Eckert [277, 278] in ihren Arbeiten gezeigt haben, analog zum Reaktorboden verlaufen, wenn die Schüttung am Kopf verdichtet wurde. Das in Abbildung 4-7 dargestellte Porositätsprofil zeigt den Verlauf ohne eine solche Verdichtung. Der verglichen mit dem Reaktorboden flachere Anstieg der Porosität zum Reaktorkopf hin, ist dadurch bedingt, daß die Kugeln der obersten Schicht keine einheitliche Höhe haben, wie dies durch die zweidimensionale Porositätsverteilung deutlich gemacht wird (Abbildung 4-5, $\phi = 248-250$).

Analog zur axialen Porositätsverteilung kann auch die radiale Porositätsverteilung gut mittels der zweidimensionalen Porositätsverteilung erklärt werden.

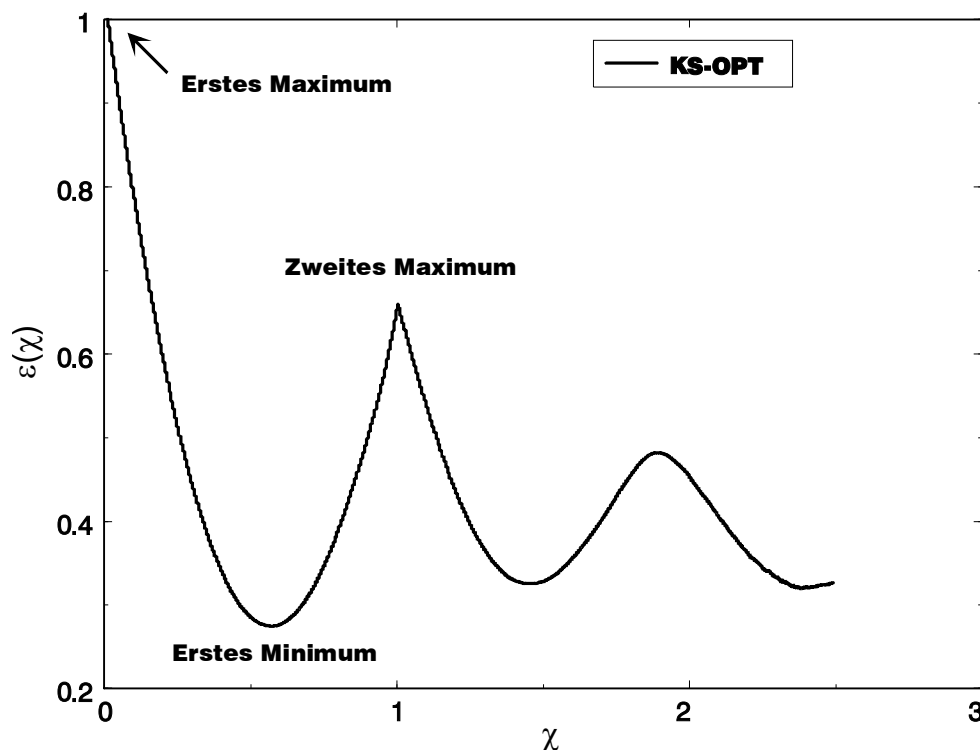


Abbildung 4-8: Radiale Porositätsverteilung ($a_{pt} = 0,2$, $n_{opt} = 1$, $a_{Hp} = 250$, konzentrische erste Kugellage)

So läßt sich ähnlich deutlich wie die erste Kugellage die erste Kugelschicht an der Wand identifizieren (Abbildung 4-5, $\chi < 1,0$). Sie ist als ein Band höherer Dichte zu erkennen, das im ganzen Reaktor nahezu parallel zur Wand verläuft. Im Bereich von Wandabständen χ , die etwa eins sind, wird dieses Band durch einen Bereich sehr niedriger Dichte begrenzt, was auf eine geringe Anzahl von Kugeln bei $\chi \approx 1$ hindeutet. Die radiale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ (Abbildung 4-8) bestätigt den optischen Eindruck, daß die Kugeln der ersten Schicht zumeist an der Wand liegen, durch das un stetige zweite Maximum bei $\chi = 1$. Die Kugeln der zweiten Kugelschicht dringen nicht gleichmäßig tief in erste Schicht ein, da bei der radialen Porositätsverteilung im Gegensatz zur axialen weder ein Extremum noch ein Wendepunkt auftritt. Durch die Krümmung der Wand sind die Kontaktpunkte etwas vom Wandabstand $\chi = 0,5$ nach innen verschoben, so daß auch das Minimum etwas vom Rand weg verschoben ist [19, 239].

Das zweite Minimum und das dritte Maximum der radialen Porositätsverteilung (Abbildung 4-8) werden maßgeblich von der zweiten Kugelschicht im Reaktor bestimmt. Diese beiden Extrema sind deutlich schwächer ausgeprägt als die entsprechenden der ersten Kugelschicht. Der Grund dafür läßt sich gut aus der zweidimensionalen Porositätsverteilung (Abbildung 4-5, $1 < \chi < 2,1$)

ableiten. So ist die zweite Schicht noch als eine Art „Perlenkette“ zu erkennen, sie ist aber nicht mehr so scharf begrenzt wie die erste Schicht. Auch werden in der zweiten Kugelschicht keine so hohe Dichten, wie in der ersten erreicht (Abbildung 4-5, $1 < \chi < 2,1$). Im allgemeinen setzt sich diese Tendenz mit zunehmendem Abstand von der Wand fort ⁸, wenn es sich nicht, wie in den Abbildung 4-5 und Abbildung 4-8, um eine Schüttung mit einem großen Durchmesser Verhältnis a_{pt} handelt.

⁸ [19, 66, 115, 121, 187, 196, 197, 241, 287]

5 Literaturübersicht

5.1 Ermittlung der geometrischen Beschreibungen der Reaktorschüttung

Für den ersten Teil des vorgestellten Gesamtreaktormodells wird eine Beschreibung der Schüttung benötigt. Diese könnte zum einen durch Messungen bestimmt und zum anderen durch Modelle vorhergesagt werden. Die Messungen, wie sie in der Literatur⁹ angedeutet bzw. vorgestellt werden, sind sehr zeit- und kostenintensiv sowie für industrielle Reaktoren nicht verwendbar. So werden die Schüttungen teilweise mit Polymerharzen fixiert, die eine weitere Verwendung der Reaktorschüttung unmöglich machen, oder es werden teure Tomographen zur Bestimmung der Kugelpositionen eingesetzt, die nicht für die stahlummantelten, industriellen Reaktoren geeignet sind.

Einen anderen Weg, um die Schüttungsstruktur zu erfassen, bilden Modelle von Schüttschichtreaktoren¹⁰. Diese Modelle haben den Vorteil, daß die Position und die Größe jeder Kugel bekannt ist. In der Literatur werden mehrere grundsätzliche Verfahren geschildert, um den Aufbau dieser Schüttungen im Computer nachzuvollziehen:

1. Kugelfallalgorithmen
2. Vibrationsalgorithmen
3. Wachstumsalgorithmen
4. Kugeloptimierungsalgorithmen

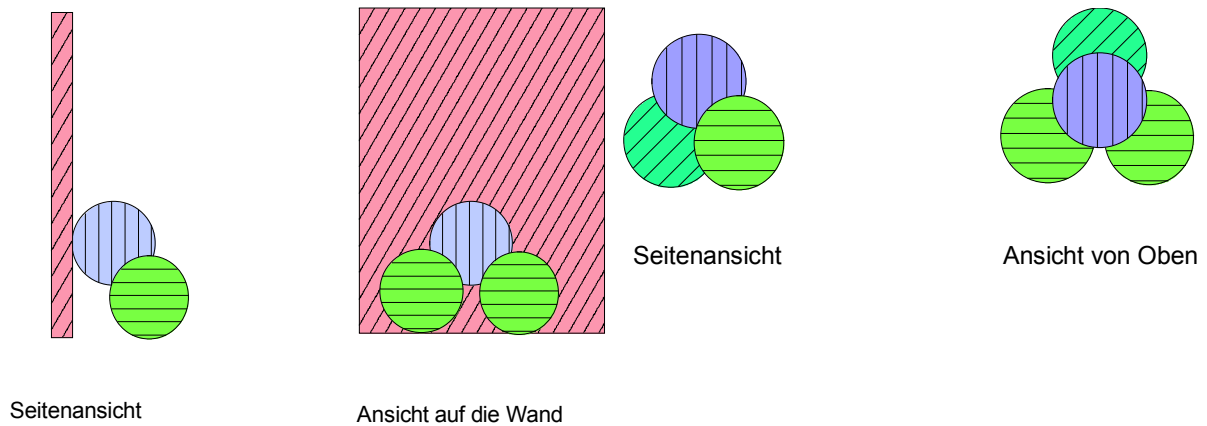
1. **Kugelfallalgorithmen** (Benner [21], Bennet [22], Chan und Ng [55], Rodriguez, Allibert und Chaix [242], Reyes und Iglesias [238], Tory et al.¹¹, Thompson und Fogler [288], Visscher und Bolsterli [295], Spedding und Spencer [275], Limberg [178])

Diese Algorithmen vollziehen den Fall einer oder mehrerer Kugeln nach, wie er beim Einfüllen der Schüttung in reale Reaktoren auftritt. Dabei wird eine Kugel von einer zufälligen Position über dem Reaktor fallengelassen. Trifft die Kugel auf den Reaktorboden, so bleibt sie dort liegen. Berührt sie aber eine andere Kugel im Reaktor, so rollt sie entlang der Oberfläche der ruhenden Kugel, bis sie eine stabile Position erreicht. In dieser Lage kann die Kugel nicht mehr weiter rollen, da sie entweder in einer Lücke zwischen der Wand und zwei weiteren Kugeln (Abbildung 5-1) oder in der Lücke von mindestens drei Kugeln liegt (Abbildung 5-2).

⁹ [65, 157, 227, 235, 236, 237, 262, 289, 299]

¹⁰ [1, 21, 22, 55, 65, 117, 119, 147, 181, 188, 205, 226, 238, 275, 288, 289, 295]

¹¹ [117, 119, 147, 289]

**Abbildung 5-1: Stabile Lage an der Wand****Abbildung 5-2: Stabile Lage in der Schüttung**

Visscher und Bolsterli [295] ergänzen dieses Verfahren, indem sie aus vier bzw. fünf Fallversuchen den mit der niedrigsten Kugelposition auswählen. Dadurch erreichen sie höhere Dichten als z.B. Reyes und Iglesias [238] oder Tory et al.¹². Weiterhin können mit Hilfe der Auswahl einer nicht optimalen stabilen Kugelposition gezielt Schüttungsmodelle mit einer niedrigeren Dichte generiert werden (Thompson und Fogler [288]). Spedding und Spencer [275] erweitern das Verfahren von Visscher und Bolsterli [295] um die Möglichkeit, Packungen mit einer noch höheren Porosität zu simulieren. Dazu führen sie eine Wahrscheinlichkeit ein, mit der eine Kugel in einer instabilen Position liegen bleibt und nicht mehr weiter rollt. Ist diese Wahrscheinlichkeit null, so ändert sich am oben genannten Verfahren nichts. Ist die Wahrscheinlichkeit eins, so bleibt eine Kugel an der Position liegen, in der sie zum ersten Mal auf die liegenden Kugeln im Reaktor trifft. In ihrer Arbeit ergänzen Rodriguez, Allibert und Chaix [242] den Algorithmus von Visscher und Bolsterli [295], um die Möglichkeit einen Ausschnitt aus einer unendlichen Packung zu simulieren. Dazu spiegeln sie jeden Punkt an der X/Y-Ebene.

Im wesentlichen unterscheiden sich diese Kugelfallalgorithmen darin, in wieweit bestimmte Kugelradienverteilungen in der Simulation zugelassen werden. So arbeiten die Verfahren von Benner [21], Chan und Ng [55], Reyes und Iglesias [238], Tory et al. [147, 289] und Spedding und Spencer [275] mit konstanten Kugelradien. Visscher und Bolsterli [295] arbeiten mit einer Kugelradienverteilung. Diesen Algorithmen ist aber gemein, daß sie nur Festbetten aus kugeligen Partikeln simulieren können.

¹² [117, 119, 147, 289]

2. **Vibrationsalgorithmen** (Jodrey und Tory [147])

Bei diesen Algorithmen werden im ersten Schritt den Kugeln zufällige Positionen in einem Raum mit periodischen Randbedingungen zugewiesen. Die dabei entstehenden Überlappungen der Kugeln werden in den folgenden Iterationsschritten verringert. Im zweiten Schritt wird zunächst der Radius der Kugeln verkleinert, so daß sich die Dichte der Schüttung um 0,0001 verringert. Im nächsten Schritt wird jede einzelne Kugel so verschoben, daß ihre Überlappungen minimal sind. Diese beiden Vorgänge werden wiederholt bis die Überlappung einen bestimmten Schwellenwert unterschreitet. Danach wird der Radius der Kugeln so erhöht, daß die Dichte der Schüttung um 0,0002 steigt. Anschließend werden die Überlappungen wieder für jede Kugel einzeln minimiert. Auch diese beiden Vorgänge werden bis zum Erreichen eines zweiten Schwellenwertes wiederholt. Ist dies geschehen, folgen Schritte, die die Überlappung der Kugeln minimieren, bis sie ihre Nachbarn nur noch in einem Punkt berühren.

Dabei werden höhere Dichten als bei den Kugelfallalgorithmen erreicht. Den niedrigeren Leerraumanteile stehen sehr hohen Rechenzeiten gegenüber. Diese werden von Jodrey und Tory [147] reduziert, indem sie eine kleine Kugelzahl (3000) in Verbindung mit periodischen Randbedingungen bearbeiten. So kann jedoch nur der Kern einer unendlich ausgehenden Packung betrachtet werden. Die Simulation einer gesamten Kugelpackung in zylindrischen Reaktoren erscheint grundsätzlich möglich, scheitert aber an der Rechenzeit, da hierzu bis zu 10^6 Kugeln optimiert werden müßten.

3. **Wachstumsalgorithmen** (Lubachevsky, Stillinger und Pinson [181])

Lubachevsky, Stillinger und Pinson [181] fassen die Packung als einen Raum mit periodischen Grenzen auf, indem sich eine Punktwolke bewegt. Die Punkte, Kugeln mit einem Radius von null, haben in dieser Wolke primär zufällige Positionen und Geschwindigkeitsvektoren.

Ausgehend von diesem Grundzustand nimmt der Kugelradius aller Kugeln linear mit der Simulationszeit zu. Dabei ist die Wachstumsgeschwindigkeit der Kugeln wesentlich kleiner als ihre Fortbewegung im Raum. Auf Grund ihrer Ausdehnung und ihrer Geschwindigkeit stoßen die Kugeln zusammen. Diese Zusammenstöße unterliegen den Gesetzen für elastische Stöße. Lubachevsky, Stillinger und Pinson [181] nehmen aber im Gegensatz zu den physikalischen Gegebenheiten an, daß sich die Geschwindigkeit der Kugeln proportional zu ihrem Radius bzw. der Wachstumsgeschwindigkeit erhöht. Die Simulation wird fortgesetzt, bis der Raum vollständig ausgefüllt ist. Mit diesem Algorithmus können die dichtesten computergenerierten Schüttungen erzeugt werden.

Der Algorithmus von Lubachevsky, Stillinger und Pinson [181] scheint geeignet zu sein, um Kugelpackungen in Reaktoren zu simulieren, wenn die Randbedingungen entsprechend modifiziert werden. Ein Nachteil dieses Algorithmus ist vermutlich, wie bei dynamischen Simulationen üblich, die hohen Rechenzeiten. Auch scheint das Ergebnis der Rechnungen sehr empfindlich auf die Eingangsparameter, wie die Wachstumsgeschwindigkeit, zu reagieren [181].

4. **Optimierung der Partikelposition** (Adams und Matheson [1], Matheson [188], Limberg [178], Spedding und Spencer [275])

In dem Algorithmus von Matheson [188] werden zuerst Kugeln so um den Ursprung gruppiert, daß sie sich berühren und ihre Mittelpunkte auf einer Kugeloberfläche liegen. Daran anschließend wird eine neue Kugel positioniert, so daß sie drei „alte“ Kugeln berührt. Gibt es mehrere mögliche Positionen für die neue Kugel, wird die gewählt, die dem Ursprung am nächsten liegt. Mit dieser neuen Kugel wird ein Tetraeder definiert. Durchdringt dieser neue Tetraeder einen alten, wird letzterer verworfen. Diese Schritte werden solange wiederholt, bis eine vorgegebene Kugelzahl erreicht ist. Dieser Algorithmus von Matheson [188] erstellt dichte Kugelpackungen. Die Dichte sinkt aber sehr schnell mit dem Abstand der neuen Kugeln vom Ursprung. Auch kann dieser Algorithmus nur die Kugelpackung im Innern einer unendlich ausgedehnten Packung simulieren und eignet sich nicht für die Simulation von Kugelschüttungen in Reaktoren. Der Algorithmus von Adams und Matheson [1] ist im wesentlichen mit dem vom Matheson identisch. Es werden im Gegensatz zum Algorithmus von Matheson [188] alle Lücken zwischen drei alten Kugeln mit neuen Kugeln besetzt.

Spedding und Spencer stellen in ihrer Arbeit [275] neben einem Kugelfallalgorithmus ein weiteres Verfahren zur Simulation von Kugelschüttungen vor, die ein kleines Verhältnis a_{pi} besitzen. Die erste Kugellage wird als Schicht einer dichtesten Kugelpackung angegeben. Daran anschließend werden alle stabilen Kugellagen (Abbildung 5-1 und Abbildung 5-2) berechnet. In die niedrigste dieser Kugellagen wird die nächste Kugel positioniert. Dieser Vorgang wird wiederholt, bis der Reaktor gefüllt ist. Um die Dichte der Schüttungen zu erhöhen, erweiterten Spedding und Spencer das Modell in zwei Richtungen. Zum einen bewerten sie die stabilen Positionen nach der möglichen Koordinationszahl, zum anderen fügen sie statt einer Kugel Kristallite aus bis zu 50 Kugeln in die Kugelschüttung ein. Dieses Verfahren stellt also einen Weg zur Simulation von zylindrischen Kugelschüttungen dar und bietet durch seine beiden Variationsmöglichkeiten Parameter an, um die Schüttungsdichte zu beeinflussen.

Ein anderes Verfahren [178] optimiert die Position einer oder mehrerer Kugeln im Reaktor. Die bearbeiteten Teilchen werden dabei in ihrer Lage nicht mehr verändert. Das Ziel dieser Optimierung kann entweder eine minimale Position der optimierten Kugeln oder eine minimale Gesamtporosität im Reaktor sein. Dieses Verfahren liefert im Vergleich mit den Kugelfallalgorithmen dichtere Packungen [178]. Nachteilig wirkt sich der höhere Rechenaufwand gegenüber den

Kugelfallalgorithmen aus. Eine weitere Schwierigkeit ist die Formulierung einer geeigneten mathematischen Beschreibung des Problems, da diese das Ergebnis der Optimierung entscheidend beeinflusst. Andererseits könnte man diese Beschreibung gezielt dazu einsetzen, lockere Packungen zu erzeugen.

Die Schüttungsmodelle, die in dieser Arbeit verwendet werden, beruhen auf einem Optimierungsalgorithmus. Es handelt sich dabei um eine Erweiterung des Programms **KS-OPT**¹³ [178]. Für die Auswahl eines Optimierungsverfahrens sprechen die einfache Implementierbarkeit, die hohe Zuverlässigkeit und die Geschwindigkeit. Bei diesem Algorithmus kann die Geometrie des Reaktors mit seinen äußeren Begrenzungen leicht eingebunden werden. Außerdem ließe sich dieser Algorithmus so modifizieren, daß auch andere Partikel als Kugeln möglich sind. Damit beinhaltet das Verfahren eine Perspektive zur Beschreibung aller Arten von Schütttschichtreaktoren.

¹³ Kugelschüttungsoptimierung

5.2 Einteilung der Reaktortypen

Der zweite Teil des verwendeten Gesamtreaktormodells beschreibt die Wechselwirkung zwischen dem Festbett und dem Fluid. Für diesen Anwendungsfall wurden, wie in der Einleitung angedeutet, viele Modelle¹⁴ entwickelt. Die große Zahl der Modelle zeigt zum einen die Komplexität der Festbettreaktoren, zum anderen ihre breite Anwendung in der Industrie und der Forschung. Ergänzt werden diese Modelle durch solche, die z.B. die Diffusion in porösen Medien [59, 273] anhand von Kugelschüttungen beschreiben, und durch jene, die Festbetten als Filter für Stäube und Suspensionen [218, 233, 234] modellieren. Die Modelle für die Durchströmung der Festbettreaktoren lassen sich nach Sahimi [250] in zwei Kategorien einteilen:

- pseudo-homogene Kontinuumsmodelle
- diskrete Modelle

1. pseudo-homogene Kontinuumsmodelle

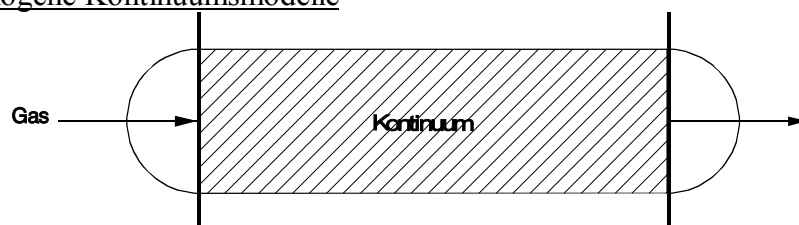
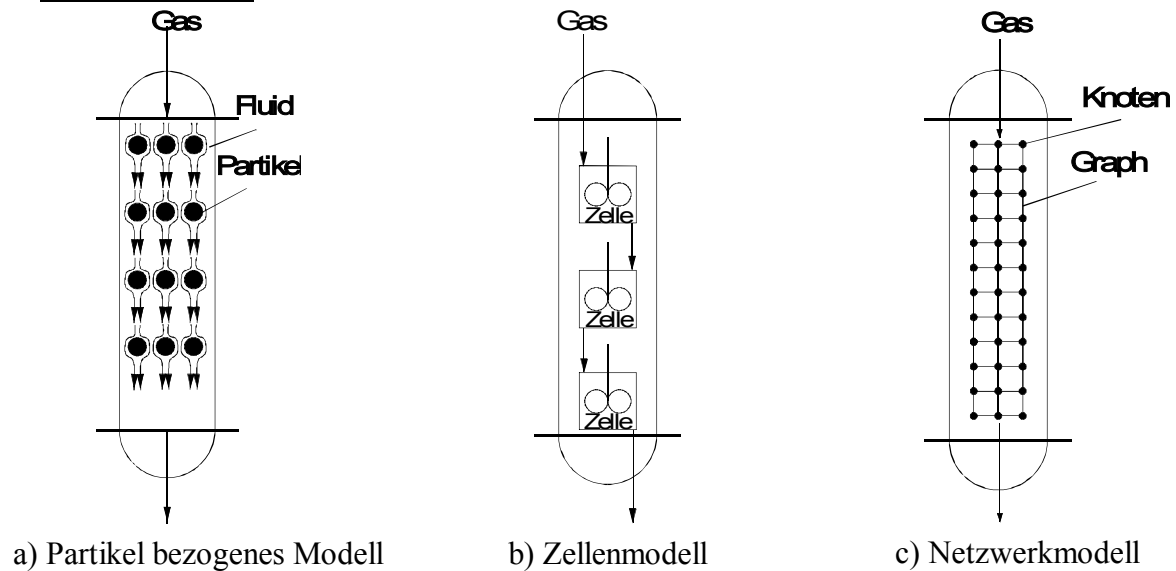


Abbildung 5-3: Skizze eines pseudo-homogenen Kontinuumsmodells

Als Kontinuumsmodelle werden in dieser Arbeit Modelle bezeichnet, die das Fluid als Kontinuum auffassen, d.h. für jedes beliebige Volumen im Reaktor besitzt das Medium die mittleren Eigenschaften einer großen Zahl von Fluidmolekülen. In pseudo-homogenen Modellen wird diese Betrachtungsweise auf die stationäre Phase erweitert und diese mit der fluiden Phase zu einem kontinuierlichen, pseudohomogenen Medium (Abbildung 5-3) zusammengefasst. Unter diesen Annahmen können die physikalischen Eigenschaften des Fluids und des Solids als stetige und differenzierbare Größen aufgefasst werden.

¹⁴ [6, 8, 10, 15, 17, 24, 25, 26, 28, 30, 31, 32, 33, 34, 36, 40, 41, 42, 47, 48, 52, 53, 55, 56, 57, 59, 62, 65, 67, 66, 68, 70, 72, 73, 74, 81, 82, 87, 90, 93, 94, 97, 100, 101, 102, 106, 109, 120, 121, 125, 128, 131, 133, 139, 140, 155, 156, 157, 159, 160, 164, 166, 169, 172, 173, 174, 178, 179, 184, 185, 187, 191, 192, 212, 216, 217, 218, 221, 232, 233, 234, 235, 236, 237, 247, 248, 250, 251, 252, 255, 260, 261, 265, 266, 268, 270, 272, 273, 275, 277, 281, 286, 288, 292, 296, 298, 299, 307, 311, 314, 317]

2. diskrete Modelle**Abbildung 5-4: Skizze der diskreten Modelle**

Unter diskreten Modellen werden in dieser Arbeit alle Festbettreaktormodelle subsummiert, deren Bilanzvolumen (Reaktor) in einzelne Elemente zerlegt wird. Diesen Elementen werden bestimmte Eigenschaften zugeordnet, die die Wechselwirkung des Fluids mit der stationären Phase und den Transport des Fluids definieren. Die globalen Eigenschaften des Reaktors werden so durch die Eigenschaften der Elemente und deren Vernetzung simuliert. In der Literatur existieren sowohl für die Elemente als auch für die Vernetzungsstruktur eine Vielzahl von Beschreibungen [250]. Diese Reaktormodelle sollen in dieser Arbeit in Anlehnung an Sahimi et al. [250] sowie an Hlavacek [138] in vier Gruppen eingeteilt werden:

2.a) partikelbezogene Modelle

Diese Modelle werden hauptsächlich zur Beschreibung von Gas-Feststoffreaktionen eingesetzt [250]. Ausgehend vom Modell eines einzelnen Partikels, wie z.B. dem Asche-Kern-Modell, wird der Reaktor als eine Verkettung dieser Partikelmodelle beschrieben, die über das Fluid miteinander verbunden sind. Um die Verbindung zu gewährleisten, müssen die Transporteigenschaften des Fluids, wie z.B. die Diffusion [284] in den Partikelzwischenräumen, definiert werden. Mit dem Zusammenwirken von Partikelmodell und Transporteigenschaften gelingt es, den räumlichen und zeitlichen Verlauf der reaktiven Komponenten zu simulieren [250, 284].

2.b) Zellenmodelle

Beim Zellenmodell (Abbildung 5-4 b)) wird der Reaktor in eine Anzahl an Bilanzzellen aufgeteilt, die sich wie ein kontinuierlicher Rührkesselreaktor verhalten. Durch die Verschaltung und die Zellenzahl können die Stofftransporteigenschaften des Reaktors mit den Zellenmodellen simuliert werden [138, 255]. Beispielsweise lässt sich das Verweilzeitverhalten eines Festbettreaktors durch eine Rührkesselkaskade nachvollziehen [176].

2.c) Netzwerk- und Kanalmodelle

Bei den Netzwerkmodellen (Abbildung 5-4 c)) wird der Leerraum durch ein Netz von Graphen dargestellt, die in Knoten zusammentreffen [233, 234]. Die Knoten repräsentieren den Zwischenraum zwischen den Kugeln der Schüttung. Die Graphen entsprechen den Verbindungskanälen zwischen diesen Zwischenräumen. Für die Netzwerk- bzw. Kanalmodelle werden in der Literatur sowohl reguläre als auch irreguläre Gitter in zwei bzw. drei Dimensionen [6, 47, 68, 100, 146] genannt.

2.d) Perkolationsmodelle

Die Perkolationsmodelle beruhen, wie Sahimi [250] zeigt, auf ähnlichen Netzen, wie sie von Netzwerkmodellen genutzt werden. Eine von mehreren Anwendungen der Perkolationsmodelle ist im Bereich der Partikelabscheidung zu sehen [250], bei der die Kanäle statistisch durch einzelne bzw. mehrere Partikel verlegt und somit unzugänglich werden. Die Modelle versuchen in diesem Fall einen oder mehrere Wege durch den Reaktor zu finden, durch die die Zweiphasenströmung (fluid/solid) den Reaktor passieren kann. Diese Modelle [108] werden auch zur Beschreibung der Benetzung im Kern poröser Strukturen (Katalysatoren, Böden etc.) durch Flüssigkeiten, zur Modellierung der Diffusion innerhalb dieser porösen Medien oder zur Simulation der Verdrängung von Flüssigkeiten in Zweiphasenströmungen (z.B. Erdöl/Wasser) verwendet. Da sich die mit den Perkolationsmodellen beschriebenen Mechanismen zumeist auf Flüssigkeitsströmungen oder zweiphasige Fluide beziehen, werden sie in dieser Arbeit nicht weiter berücksichtigt.

5.2.1 Kontinuumsmodelle

Die Kontinuumsmodelle sind ein häufig verwendeter Modelltyp für Festbettreaktoren [81, 138, 140, 255, 277]. Eine eingehendere Betrachtung insbesondere eine Bewertung der Bilanzgleichungen dieser Modelle soll an anderer Stelle [94] geschehen.

Die Kontinuumsmodelle werden nach Gros [123] und Hofmann [140] gemäß Tabelle 2 in sechs Gruppen A I bis A III und B I bis BIII eingeteilt.

Tabelle 2: Einteilung der Kontinuumsmodelle

		Pseudo-homogene Kontinuumsmodelle $T = T_s, c = c_s$	Heterogene Kontinuumsmodelle $T \neq T_s, c \neq c_s$		
		Eigenschaften der Modelle		Eigenschaften der Modelle	
$\frac{\delta}{\delta r} = 0$	A I	ideale Pfropfenströmung		B I	ideale Pfropfenströmung + Gradienten an der Phasengrenze
$\frac{\delta}{\delta r} = 0$	A II	ideale Pfropfenströmung + Axiale Dispersion von Größen		B II	ideale Pfropfenströmung + Gradienten an der Phasengrenze + Axiale Dispersion von Größen
$\frac{\delta}{\delta r} \neq 0$	A III	ideale Pfropfenströmung + Axiale Dispersion von Größen + Radiale Dispersion von Größen		B III	ideale Pfropfenströmung + Gradienten an der Phasengrenze + Axiale Dispersion von Größen + Radiale Dispersion von Größen

Während die Modelle des Typs A I, die nur für Festbetten mit kleinem Durchmesser Verhältnis a_{pt} und einer hohen Strömungsgeschwindigkeit gültig sind [138], eine idealisierte Strömung durch ein Festbett annehmen [176], berücksichtigen Kontinuumsmodelle des Typs A II beispielsweise die Abweichung vom idealen Vermischungsverhalten [138, 140, 176]. Die Modelle des Typs A III lassen auch Gradienten in radialer Richtung zu, was besonders bei wandgekühlten bzw. beheizten Reaktoren zum Tragen kommt [138, 140], da hier der Wärmetransport in radialer Richtung einen maßgeblichen Einfluß auf die Reaktion hat. Andererseits sind in zufälligen Schüttungen, deren Durchmesser Verhältnisse a_{pt} groß sind [178], radiale Auslenkungen des Fluids bei der Umströmung eines Reaktorpartikels gegenüber dem Reaktorradius nicht mehr vernachlässigbar. Sowohl die axiale als auch die radiale Dispersion wird mit Hilfe eines effektiven Mechanismus beschrieben, der analog dem 1. Fick'schen Gesetz modelliert wird [255].

Heterogene Kontinuumsmodelle (Tabelle 2) werden eingesetzt, wenn die Gradienten der Konzentration und der Temperatur zwischen Fluid und Solid nicht mehr vernachlässigt werden können. Da der betrachtete Reaktor dieses Verhalten nicht aufweist, werden Modelle dieses Typs nicht weiter berücksichtigt.

Die in Tabelle 2 dargestellten Kontinuumsmodelle zeigen aufgrund der Annahme, daß innerhalb der Schüttung eine konstante Porosität und damit eine konstante Strömungsgeschwindigkeit herrscht, Abweichungen zu Messungen. Diese Differenzen haben zu einer detailreicheren Betrachtung der Schüttung geführt, so setzen z.B. Eigenberger et al. [1, 25, 74] sowie Vortmeyer et al. [296 - 300] radiale Porositätsverteilungen zur Beschreibung der Feststoffmasse ein (Modellgruppe A III/1). Diese Modelle können die daraus resultierenden Verteilungen der Strömungsgeschwindigkeiten qualitativ nachvollziehen. Auch gelingt mit einem solchen Modell z.B. die Simulation des Bypassings in Festbettreaktoren [1, 25, 74, 296 - 300]. Dieser Effekt entsteht, wenn ein großer Teil des Fluids an der Reaktorwand entlang an der Festbettschüttung vorbei strömt.

Tabelle 3: Einteilung der Kontinuumsmodelle der Gruppe A III

Untergruppe	Eingesetzte Beschreibung der Schüttung
A III/0	Die Porosität besitzt in jedem Punkt des Reaktors den Wert ε_g .
A III/1	Die Porosität ist eine Funktion der radialen Koordinate ($\varepsilon(\chi)$) [1, 25, 296 -300].
A III/2	Die Porosität variiert in radialer und axialer Richtung ($\varepsilon(\chi, \phi)$) [74 - 74, 178].

Ein zweidimensionales Modell (Gruppe A III/2) wurde von Daszkowski [74] eingeführt, um die Ein- und Auslaufbereiche der Schüttung und den Übergang vom bzw. zum Leerrohr simulieren zu können. In diesen Bereichen treten, wie der Autor [178] darlegt, große radiale Strömungen auf, die aufgrund der veränderten geometrischen Situation am Beginn und am Ende der Schüttung entstehen. Ein weitergehender Ansatz wurde vom Autor [178] verfolgt und unter Einsatz eines weiterentwickelten Schüttungsmodells fortgeführt, um die Radialdispersion ohne empirische Gleichungen erfassen zu können. Dazu liegen den in dieser Arbeit verwendeten Kontinuumsmodellen der Gruppe A III/2 zweidimensionale Porositätsprofile zu Grunde, die den von **KS-OPT** erzeugten Schüttungsmodellen entnommen werden.

Andere Varianten der Kontinuumsmodelle basieren auf der Einführung zufällig verteilter Modellparameter. So führen Lamb und Wilhelm [170] statistisch verteilte Hohlräume in ein Kontinuumsmodell ein, durch die sie [170] eine verbesserte Beschreibung der Dispersion erreichen. Um das Verweilzeitverhalten des Reaktors zu beschreiben, definieren Buffham et al. [43] im Festbettmodell eine zufällige Zahl von Haltepunkten, an denen das Fluid eine ebenfalls zufällige Zeit verweilt.

5.2.2 Netzwerkmodelle

Netzwerkmodelle haben ein breites Anwendungsfeld. Sie können benutzt werden, um Messungen der Porenradienverteilung, die mittels Quecksilberporosimetrie bestimmt wurden, zu interpretieren [100]. Auch die Diffusion in porösen Medien [59], z.B. das Strömungsverhalten von Wasser in Böden [6], das Abscheiden von Partikeln in Festbettfiltern¹⁵, die Reaktion von Feststoffschüttungen (z.B. Kalk) mit Gasen (Schwefeldioxid oder Fluorwasserstoff)¹⁶ oder katalytischen Festbettreaktoren kann mit Netzwerkmodellen simuliert werden [62, 288]. Ebenso verschieden wie die Anwendungen sind die Modelle. Sie unterscheiden sich nicht nur in der Vernetzung und der Zahl der genutzten Dimensionen sondern auch in der Beschreibung der Kanäle und Knoten sowie der Strömung durch die Graphen.

Die Vernetzung in den Netzwerkmodellen soll die Struktur der Schüttung wiedergeben. Dazu stehen eine Vielzahl von Parametern zur Verfügung [112, 250], um die Modelle an die betrachteten Schüttungen, Filter oder Böden anzupassen.

1. Vermischungsverhalten in den Knoten

Das Vermischungsverhalten in den Knoten wird in der Literatur als ideal angesetzt [250], d.h. alle Stoffströme, die in einem Knoten zusammentreffen, vermischen sich dort spontan [8, 251]. Einige Autoren verzichten allerdings darauf ein Vermischungsverhalten für die Knoten zu modellieren [131, 217], da es z.B. für die Betrachtung in Partikelfiltern nicht notwendig ist.

2. Volumenverteilung zwischen Knoten und Graphen

Das Volumen der Knoten wird in der Literatur sehr unterschiedlich behandelt. Eine Möglichkeit ist, das Volumen in den Knoten auf null zu setzen, damit befindet sich das gesamte Leerraumvolumen in den Graphen¹⁷. Der entgegengesetzte Fall ist in den Zellenmodellen verwirklicht, bei denen das ganze Leerraumvolumen auf die Knoten verteilt ist. Zwischen diesen beiden Extremen wären noch viele andere Verteilungen möglich. Einige Autoren [100, 216] vermeiden die Aufteilung der Volumina, indem sie sog. gekrümmte Rohre entwickeln, die die Knoten und die Graphen gleichzeitig beschreiben (Abbildung 5-5). Diese Rohre besitzen im Bereich der Knoten einen größeren Querschnitt als ihrer Mitte¹⁸.

¹⁵ [15, 18, 17, 40, 41, 47, 72, 90, 131, 159, 164, 169, 192, 216, 217, 218, 248, 250, 251, 252, 266]

¹⁶ [28, 30, 31, 32, 33, 34, 72, 133, 221, 250, 268, , 284, 286, 317]

¹⁷ [52, 250, 270, 284, 286]

¹⁸ [40, 62, 63, 90, 142, 179, 192, 288]

3. Form und Längenparameter der Graphen

Die Graphen werden zum einen als zylindrische¹⁹, zum andern als gekrümmte Rohre²⁰ mit kreisförmigem Querschnitt beschrieben, wobei die in Abbildung 5-5 dargestellten Längsschnitte verwendet werden. Mit den gekrümmten Rohrformen wird versucht, die weiten Lücken (Kavernen) zwischen den Kugeln und die engeren Verbindungskanäle in die Beschreibung der Graphen einzubeziehen²¹. Folglich wird das Knotenvolumen mit null angesetzt.

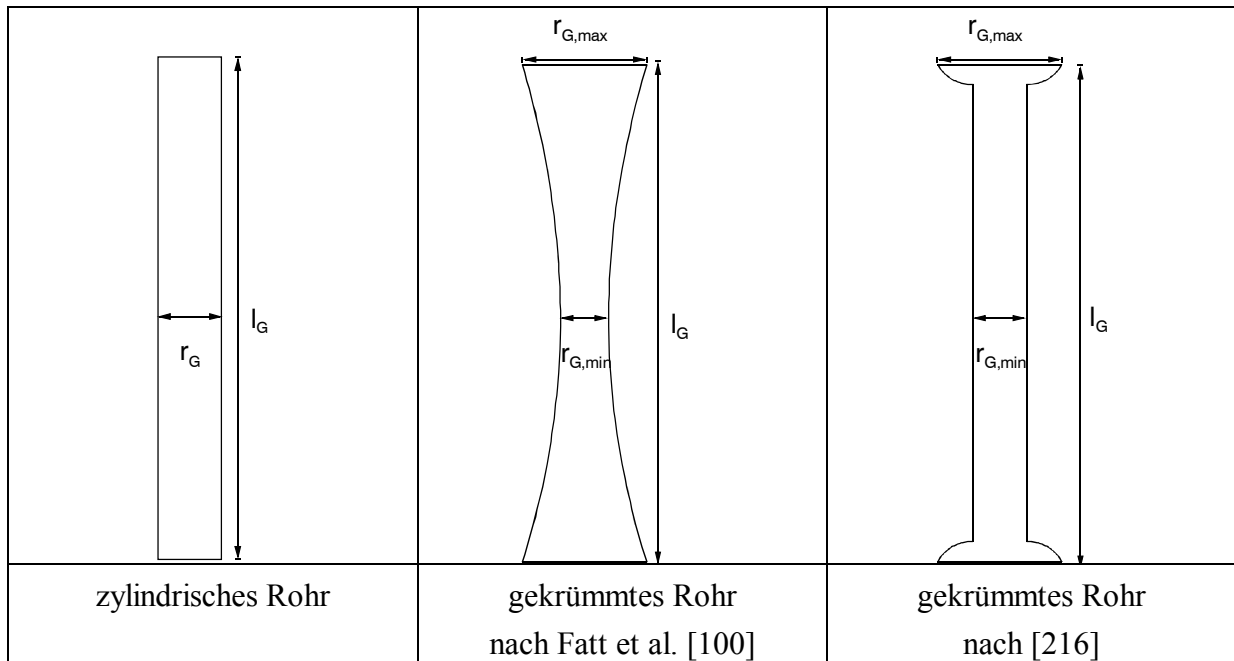


Abbildung 5-5: Verwendete Kanalformen zur Beschreibung der Graphen

Um die Längen l_G und die charakteristischen Radien r_G , $r_{G,min}$, $r_{G,max}$ der Graphen zu bestimmen (Abbildung 5-5), werden verschiedene Methoden beschrieben. Fatt wählt in seinen grundlegenden Arbeiten [100 - 102] eine konstante Länge l_G . Die Radien $r_{G,min}$ und $r_{G,max}$ werden so gewählt, daß eine Messung mit einem Quecksilberporosimeter durch das Modell nachvollzogen werden kann. Andere Arbeitsgruppen entnehmen die Verteilung der Radien r_G bzw. $r_{G,min}$ und $r_{G,max}$ direkt solchen Messungen. Hoefner und Fogler [139] setzen die Länge l_G umgekehrt proportional zum Radius r_G an. Andere Autoren entnehmen die Längen l_G bzw. die Radien (r_G bzw. $r_{G,min}$ und $r_{G,max}$) den Modellschüttungen von Finney [103] bzw. einem Schüttungsmodell von Visscher und Bolsterli [40, 295].

¹⁹ [8, 41, 52, 131, 248]

²⁰ [40, 62, 63, 90, 142, 179, 192, 217, 218, 221, 288]

²¹ [40, 62, 63, 90, 142, 179, 192, 217, 218, 221, 288]

4. Koordinationszahl m

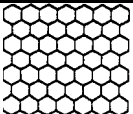
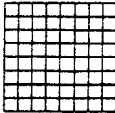
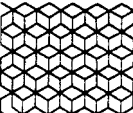
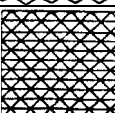
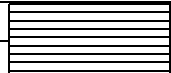
Die Koordinationszahl m beschreibt in Netzwerkmodellen die Zahl der Graphen, die in einem Knoten zusammen treffen. Diese Koordinationszahl m ist in Netzwerkmodellen normalerweise unbekannt [100]. In den zweidimensionalen Netzwerkmodellen werden Koordinationszahlen m von vier bis sechs angesetzt (Tabelle 4), wobei eine Zahl m^{22} oder eine Verteilung angesetzt wird [68, 233]. Eine andere Möglichkeit die Koordinationszahlen m der einzelnen Knoten zu ermitteln, besteht darin, die Struktur aus einem Schüttungsmodell, aus einer Modellschüttung oder aus einer zufälligen Punktwolke mittels einer Triangulation abzuleiten [288]. Dieses Verfahren wird bei der folgenden Darstellung der Vernetzungsstruktur beschrieben.

5. Vernetzungsstruktur

zweidimensionale Netze

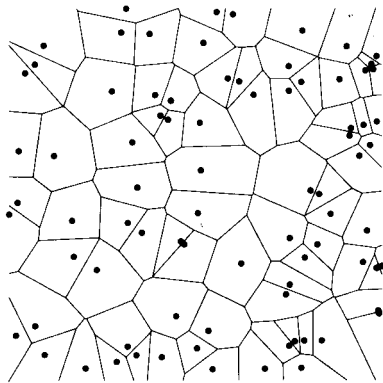
Um die Struktur der Schüttung zu beschreiben, werden in der Literatur zwei- oder dreidimensionale Netze mit einer regelmäßigen oder einer zufälligen Struktur verwendet. Fatt [100] sowie Rege und Fogler [233] nennen sechs Möglichkeiten für regelmäßige, zweidimensionale Netze, die in Tabelle 4 dargestellt werden.

Tabelle 4: Regelmäßige zweidimensionale Netze nach Fatt [100] sowie nach Rege und Fogler [233]

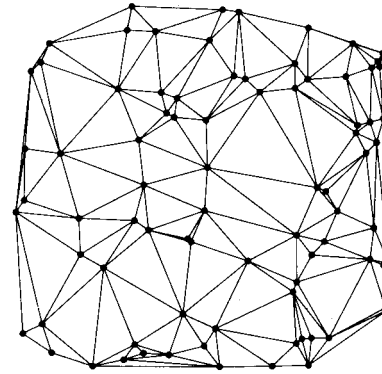
Modell	Koordinationszahl der Knoten m	Skizze aus [100,233]
einfaches hexagonales Netzwerk	3	
quadratisches Netzwerk	4	
zweifaches hexagonales Netzwerk	3,6	
dreifaches hexagonales Netzwerk, dreieckiges Netzwerk	6	
Paralleles Rohrbündel	2 - ∞	

²² [55, 68, 100, 101, 102, 142, 164, 192, 233]

Zufällige zweidimensionale Netze wurden von Chen und Hlavacek [58] erzeugt, indem sie eine zufällig verteilte, zweidimensionale Punktmenge mittels Voronoi-Triangulation aufteilten. Allerdings werden durch die Punkte der Punktmenge die Zentren eines parallelen Rohrbündels gekennzeichnet [58] und nicht, wie in der Tabelle 4, die Knoten des Netzes. Voronoi-Polygone (Abbildung 5-6) um einen Punkt werden durch die Mittelsenkrechte auf der Strecke zu einem der nächsten Nachbarpunkte begrenzt [264]. Die Ecken werden durch die Schnittpunkte zweier Mittelsenkrechten definiert.



Voronoi-Triangulation



Delaunay-Triangulation

Abbildung 5-6: Voronoi- und Delaunay-Triangulation einer zweidimensionalen Punktmenge [264]

dreidimensionale Netze

Zweidimensionale Netze haben den Nachteil, daß die Graphen mit hohen Strömungswiderständen überbewertet werden, da es in einer Ebene nur wenige Wege gibt, diese zu umgehen [68]. Dadurch steigt der Druckverlust und die mittlere Verweilzeit im Reaktormodell [68] gegenüber einer dreidimensionalen Betrachtung. Die Autoren Constantinides und Payatakes [68] empfehlen daher ein dreidimensionales Netz, dessen minimale Beschreibung sie vorstellen. In diesem Fall [68] besteht das dreidimensionale Gitter aus zwei parallelen, quadratischen Netzen, die über die Knoten vernetzt sind. So entsteht eine Koordinationszahl m von fünf, die durch zufälliges Entfernen von Graphen aus dem Netz auf einen Mittelwert von vier oder drei gesenkt werden kann, wobei Constantinides und Payatakes [68] den Wert vier für die Koordinationszahl m als optimal ansehen. Der zufällige Charakter der Kugelschüttungen kann in ein solches Modell eingeführt werden, indem sie die Position der Knoten zufällig auslenken [68]. Die maximale Auslenkung beschränken Constantinides und Payatakes [68] auf ein Zehntel der mittleren Kanallänge l_G . Größere dreidimensionale Netze werden dadurch gebildet, daß mehrere zweidimensionale, quadratische Netze parallel nebeneinander angeordnet werden, wodurch sich für die Knoten eine mittlere Koordinationszahl m von sechs ergibt [8].

Eine andere Möglichkeit eine dreidimensionale Struktur zu beschreiben, besteht darin, eine zufällige Punktmenge (Position-Punkte) mittels Delaunay-Triangulation in Kanäle oder Elemente aufzuteilen [40, 62, 288]. Die Delaunay-Triangulation unterscheidet sich von der Voronoi-Triangulation dadurch, daß die Verbindungslinien zwischen den nächsten Punkten betrachtet werden (Abbildung 5-6). Durch die Delaunay-Triangulation wird die Schüttung in Tetraeder aufgeteilt. Auch bei der Triangulation von Netzwerken werden Tetraeder benutzt, die die Grenzen der Tetraederlücke zwischen den Kugeln beschreiben. Die Knoten liegen in den Schwerpunkten der Tetraeder. Die Graphen werden durch die Normalen auf den Flächenschwerpunkten gebildet. Eine solche Delaunay-Triangulation wurde u.a. von Bryant, King und Mellor [40], Chu und Ng [62] sowie von Thompson und Fogler [288] benutzt, um die Strömung im Kern eines Festbetts zu beschreiben. Als Grundlage einer solchen Triangulation werden Finney's [103] oder computergenerierte Schüttungen genutzt. Chu und Ng [62] erweitern diese Betrachtungsweise auf Festbettschüttungen in Schichtreaktoren, wobei sie die Beschreibung der Reaktorkanten aussparen. Vorteil einer solchen Vorgehensweise ist, daß die Struktur der Schüttung direkt zur Simulation der Strömung durch dieses Festbett genutzt werden kann. Die geometrischen Parameter der Schüttung, wie die Länge l_{Kanal} und der Durchmesser der Kanäle d_{Kanal} bzw. $d_{\text{Kanal,min}}$ und $d_{\text{Kanal,max}}$, können direkt dem Aufbau der Schüttung entnommen werden. Die Messung dieser Parameter z.B. durch Quecksilberporosimetrie ist in diesen Festbettschüttungen aufgrund der Größe der Partikel und der Schüttung unmöglich.

6. Beschreibung der Strömung

In der Literatur beschränkt sich die Beschreibung der erzwungenen Strömung in Netzwerkmodellen auf den Bereich der laminaren Strömung. Der Grund für diese Beschränkung ist, daß die dazu notwendigen linearen Gleichungssystemen relativ einfach lösbar sind. Die Einführung turbulent durchströmter Rohre ist mit der Einführung von Termen höherer Ordnung in das Gleichungssystem verbunden, was deren Lösung erschwert. Aus dem gleichen Grund werden wahrscheinlich auch Druckverluste vernachlässigt, die beim Übergang der Kanäle von einem zu einem anderen Radius entstehen.

Die Strömung in zylindrischen Rohren wird mit dem Gesetz von Hagen-Poiseuille beschrieben²³. Für die gekrümmten Röhren leiten die Autoren eigene Abhängigkeiten der Strömungsgeschwindigkeit vom Druckverlust in den Graphen ab²⁴ oder berechnen die Abhängigkeiten der Strömung innerhalb der Kanäle mit anderen Methoden der Fluidodynamik [288]. Beide Methoden sollen im Zusammenhang mit Strömungsberechnungen in den Kanälen des Modells **TriKaMo-3D** dargestellt werden.

²³ [8, 36, 41, 90, 131, 139, 251]

²⁴ [40, 62, 63, 90, 142, 179, 192, 217, 218, 221, 288]

5.2.3 Zellenmodelle

Die Zellenmodelle beschreiben einen Reaktor als Schaltung kontinuierlicher Rührkessel. Das einfachste Modell dieser Art ist eine Reihenschaltung der Zellen. Es werden außerdem zweidimensionale Reaktorschaltungen verwendet, die analog zu den in Tabelle 4 dargestellten, zweidimensionalen Netzwerkmodelle aufgebaut sind [176]. Dabei markieren die Knoten den Sitz der Zellen. Die Verbindungen der Zellen (= Graphen im Netzwerkmodell) werden in den Zellenmodellen oft vernachlässigt [78].

Die Vermischung und damit das Verweilzeitverhalten des Modells wird allein von den geometrischen Abmessungen der Mischzellen bestimmt. Durch diese Beschreibung wird die Rückvermischung im Reaktor adäquat wiedergegeben [140]. Diesem Vorteil stehen jedoch einige Nachteile entgegen. So weist Hofmann [140] darauf hin, daß die Verfahren zur Lösung der mathematischen Beschreibung des Modells noch nicht so ausgereift sind, wie bei den Kontinuumsmodellen. Weiter prognostizieren diese Modelle eine unendliche Signalausbreitung, d.h. ein am Reaktoreingang aufgegebenes Signal (z.B. Tracer) hat unmittelbar ein Signal am Reaktorausgang zur Folge. Diese Vorhersage ist für Festbettreaktoren unrealistisch [283]. Aus diesen beiden Gründen wurde auf eine Verwendung dieser Modelle im Rahmen der vorliegenden Arbeit verzichtet.

6 Modellentwicklung

Da das Gesamtreaktormodell die Auswirkung der Schüttung auf die Durchströmung des Reaktors abbilden soll, muß es sowohl die Strukturinformation der Schüttung als auch deren Wechselwirkung mit der Strömung beinhalten. Im ersten Schritt werden durch **KS-OPT** Schüttungsmodelle erstellt, auf die die Reaktormodellierung aufbaut. Dieser zweite Schritt des Gesamtmodells wird in dieser Arbeit durch die Modelle **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D** realisiert.

Durch dieses zweistufige Modell kann die komplizierte Struktur [65, 112, 277] eines Festbettreaktors für die Erklärung des Vermischungsverhalten dieser Reaktoren nutzbar gemacht werden. Ein Vorteil dieser Vorgehensweise ist, daß das Modell der Schüttung getrennt von der Reaktormodellierung validiert werden kann. Letzteres eröffnet die Möglichkeit, das Verhalten der Gesamtlösung und die Lösung des Schüttungsmodells zu korrelieren, um den Einfluß der Schüttungsstruktur beleuchten zu können.

6.1 Schüttungsmodell / Simulationsverfahren von KS-OPT

Während die Strömung im Festbettreaktor durch seine Struktur und gegebenenfalls durch die chemische Reaktion bestimmt wird [277], wird das Vermischungsverhalten zum einen durch die molekulare Diffusion und zum anderen durch die komplizierte Strömung in einem Schütttschichtreaktor [125, 163] verursacht. Da die Struktur der Schüttung ein immanent wichtiger Parameter für die Durchströmungs- und Vermischungseigenschaften ist, soll die Modellierung der Schüttung eingehend dargestellt werden. Dazu wird das von Limberg [178] dargestellte Verfahren **KS-OPT** zur Schüttungssimulation genutzt.

Der Algorithmus von **KS-OPT** kennt zwei Kugelarten:

1. Liegende Kugeln, deren Positionen sich nicht mehr ändern.
2. Zu optimierende Kugeln

Die liegenden Kugeln resultieren zum einem aus der Vorgabe der ersten Kugellage und zum anderen aus der Optimierung. Unter dem Begriff „zu optimierende Kugeln“ werden jene zusammen gefaßt, deren Positionen Gegenstand der Optimierung mit Hilfe einer Zielfunktion sind. Die Zahl n_{opt} der zu optimierenden Kugeln ist ebenso ein Eingangsparameter von **KS-OPT** wie der Kugel- und der Reaktordurchmesser sowie die Schüttungshöhe. Erreicht die erste zu optimierende Kugel die Höhe H_s , so wird die Simulation abgebrochen.

Um die Dichte des Schüttungsmodells zu erhöhen, wurde das eingesetzte Programm **KS-OPT** gegenüber der von Limberg [178] genutzten Version in folgenden Punkten ergänzt:

1. Definition einer ersten Kugellage
2. Ergänzung der Zielfunktion um ein Randkriterium

Der Optimierungsalgorithmus $vfsr^{25}$ von Ingber und Rosen [144] wurde gegenüber der Version von Limberg [178] beibehalten. Damit ergibt sich der in Abbildung 6-1 dargestellte den Ablaufplan von **KS-OPT**.

²⁵ engl.: Very Fast Simulated Reannealing

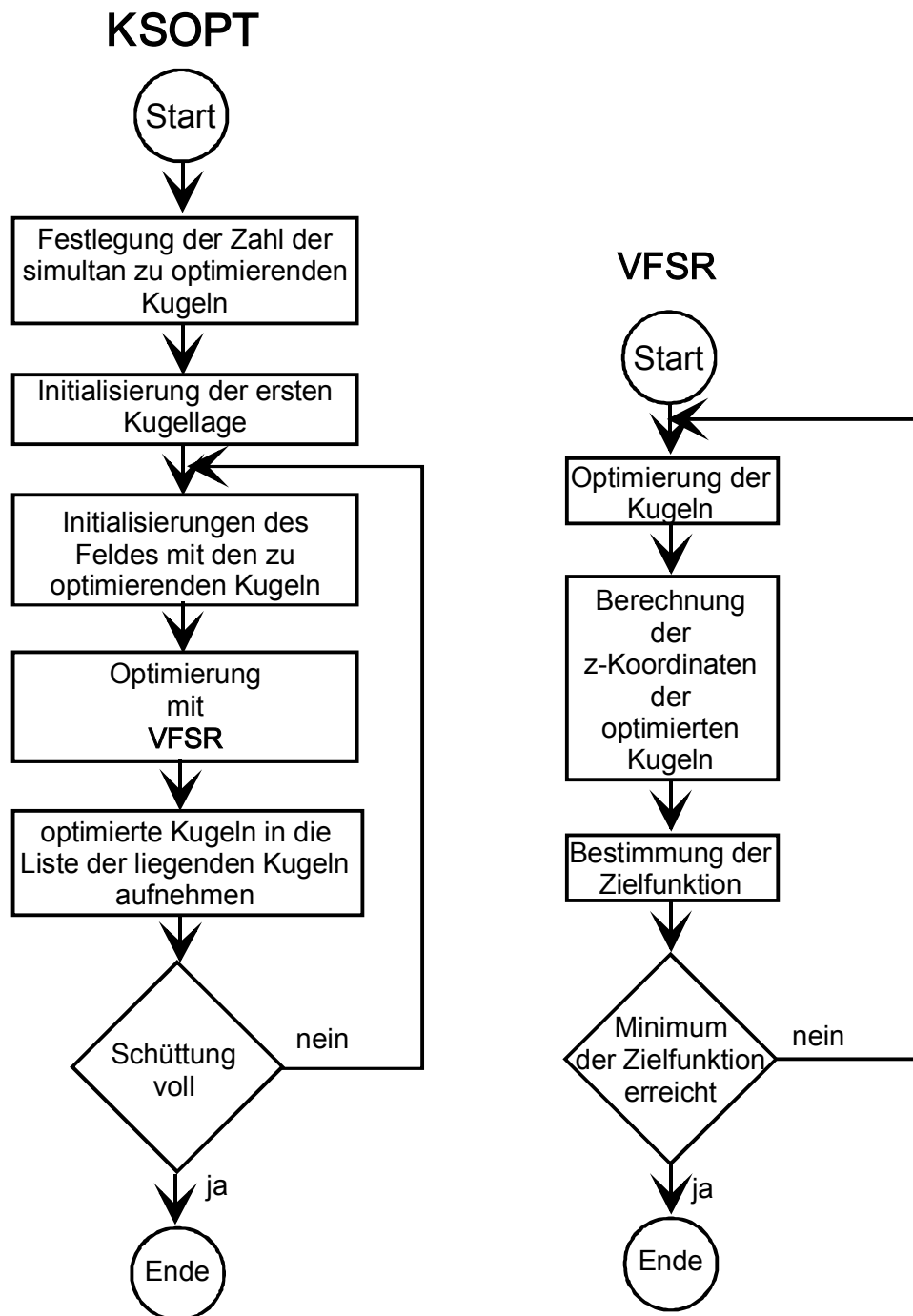


Abbildung 6-1: Ablaufschema von KS-OPT

6.1.1 Erste Kugellage

Um eine möglichst große Übereinstimmung der Strömungssimulationen und der Vergleichsmessungen gewährleisten zu können, wurde die erste Kugellage der Schüttungssimulationen gemäß Anhang 9.2 den Messungen entnommen. Diese möglichst genaue Wiedergabe dieser Kugellage ist notwendig, da sie – wie die Simulationen von Limberg [178] andeuten – die Strömung hinter der Schüttung maßgeblich beeinflusst. Folglich ist die Definition dieser ersten Lage ein wichtiger Schritt bei der Erstellung des Modells mit **KS-OPT**. So wurde das Simulationsprogramm um die Option ergänzt, gemessene erste Kugellagen verwenden zu können.

KS-OPT sieht die Möglichkeit vor, zufällige und gemessene erste Kugellagen zu verwenden:

1. Zufällige erste Kugellage (Abbildung 6-2):

Die Positionen der Kugeln werden von einem Zufallsgenerator [224] unter Berücksichtigung der Zielfunktion bestimmt.

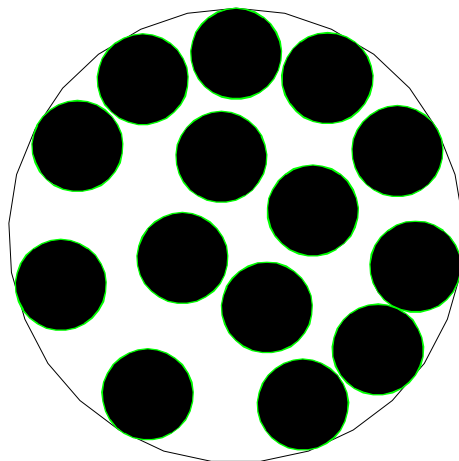


Abbildung 6-2: Erste Kugellage mit zufälliger Anordnung der Kugeln²⁶

²⁶ Diese erste Kugellagen werden unter Berücksichtigung des Randkriteriums erzeugt.

2. Gemessene erste Kugellage (Abbildung 6-3):

Die Positionen der Kugeln werden aus Bildern der ersten Kugellage im realen Reaktor gemäß Anhang 9.2 ermittelt. Dabei wird angenommen, daß die erste Kugellage nicht durch die darüberliegenden Kugeln verändert wird. Diese Annahme konnte durch die Strömungsmessungen weitgehend bestätigt werden.

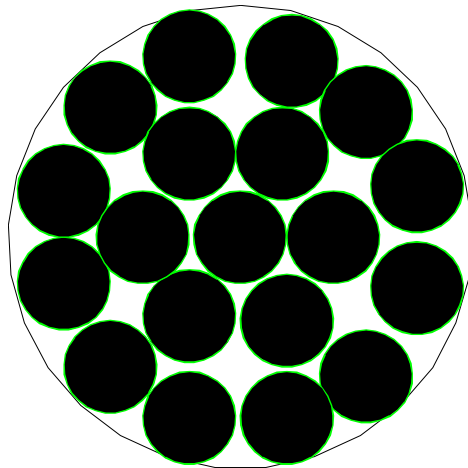


Abbildung 6-3: Gemessene erste Kugellage

Da nicht für alle Durchmesserhältnisse a_{pt} Messungen zur Verfügung standen, wurde noch eine konzentrische Kugellage definiert (Abbildung 6-4). Diese erste Kugellage zeichnet sich durch eine größere Ähnlichkeit mit der gemessenen erste Kugellage (Abbildung 6-3) aus, als dies bei der zufällige Kugellage (Abbildung 6-2) der Fall ist.

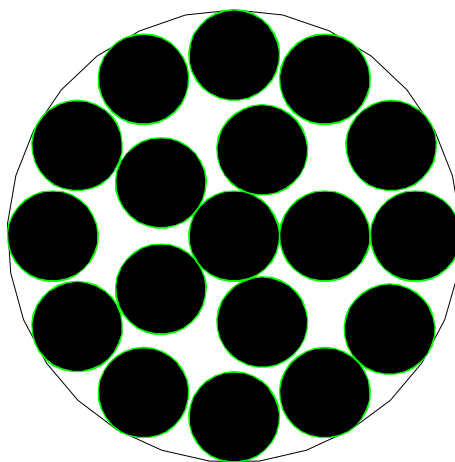


Abbildung 6-4: Erste Kugellage in konzentrischen Kreisen

Die Konstruktion dieser ersten Kugellage erfolgt vom äußeren Rand des Reaktors nach innen. Die ersten Kugeln liegen auf einem Kreis mit dem Durchmesser $d_t - d_p$ (Abbildung 6-5).

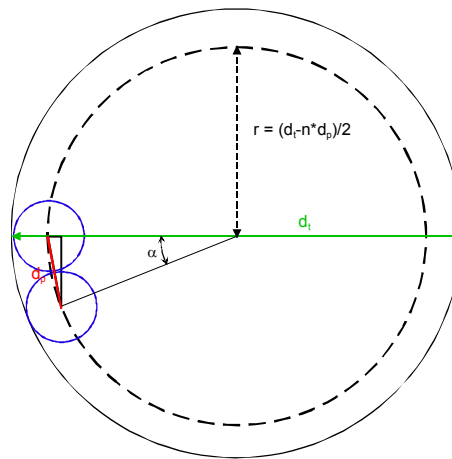


Abbildung 6-5: Konstruktion der ersten Kugellage

Alle weiteren Kreise liegen jeweils einen Kugeldurchmesser d_p nach innen verschoben, wobei der kleinste mögliche Kreisdurchmesser d_p beträgt. Auf den Kreisen werden die Kugeln so verteilt, daß sie keine anderen schneiden. Dies ist der Fall, wenn die Kugelmittelpunkte den Abstand von einem Partikeldurchmesser d_p haben. Damit ergibt sich für den minimalen Winkel α zwischen zwei Kugeln folgender Wert:

$$\alpha = \arcsin \left(\frac{\sqrt{r^2 - \left(\frac{2r^2 - d_p^2}{2r} \right)^2}}{r} \right) \quad \text{mit } r = \frac{d_t - n * d_p}{2} \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots \quad (6-1)$$

Daran anschließend wird der Teil des Kreisrings, der nicht von einer Kugel besetzt wird, gleichmäßig auf die Zwischenräume aufgeteilt, so daß eine Anordnung um die mittlere Kugel entsteht, wie sie in der Abbildung 6-4 zu sehen ist.

Ein bedeutender Nebeneffekt dieser gemessenen ersten Kugellage ist eine deutliche Verbesserung der Dichte in diesem Bereich. So erhöht sich die Zahl der Kugeln in der ersten Kugellage bei einem Durchmesser Verhältnis $a_{pt} = 0,2$ von 13 bei einer zufälligen Lage auf 18 bei einer konzentrischen bzw. 19 bei einer gemessenen ersten Kugellage.

6.1.2 Zielfunktion und Optimierungsverfahren von KS-OPT

Die Zielfunktion von KS-OPT in der vorangegangenen Arbeit [178] ist mit Gleichung (6-2) gegeben:

$$f(x_1, \dots, x_{n_{opt}}, y_1, \dots, y_{n_{opt}}) = \sum_{i=1}^{n_{opt}} z_i \quad (6-2)$$

Dabei ist z_i die z-Koordinate der zu optimierenden Kugel i , wenn diese die niedrigste Höhe einnimmt, bei der weder die Reaktorbegrenzungen noch eine liegende Kugel geschnitten wird. Die x- und die y-Koordinaten der zu optimierenden Kugeln werden durch den Optimierer vorgegeben. Positionen außerhalb des Reaktors werden durch die Randbedingung (6-3) ausgeschlossen.

$$R \geq \chi_i + 0,5d_p \quad (6-3)$$

Ereignisse, bei denen eine zu optimierende Kugel eine andere schneidet, werden verworfen.

Um die Simulation im wandnahen Bereich zu verbessern, wird ein „Randkriterium“ in die Zielfunktion eingeführt. Es bewirkt, daß die Kugeln, die nahe an der Wand liegen, diese berühren. Dazu wird die Zielfunktion aus Gleichung (6-2) für Kugeln, deren Abstand zur Wand kleiner als ein Partikeldurchmesser d_p ist, wie folgt modifiziert:

$$f(x_1, \dots, x_{n_{opt}}, y_1, \dots, y_{n_{opt}}) = \sum_{i=1}^{n_{opt}} \left(z_i + (z_i - d_p * 0.5 * (1 - \chi_i)) \right) \quad (6-4)$$

Für alle anderen Kugeln ist die Zielfunktion, wie folgt, definiert:

$$f(x_1, \dots, x_{n_{opt}}, y_1, \dots, y_{n_{opt}}) = \sum_{i=1}^{n_{opt}} (2 * z_i) \quad (6-5)$$

Im Randbereich wird zur eigentlichen Zielfunktion (6-2) ein Wert addiert, der proportional zum dimensionslosen Wandabstand χ (4-5) steigt. Um eine stetige Zielfunktion zu behalten, wird bei allen anderen Kugeln der Anteil an der Zielfunktion verdoppelt (6-5). Diese Optimierungszielfunktionen in den Gleichungen (6-4) und (6-5) wurde auf Grund vieler Experimente empirisch als die besten ermittelt.

6.2 Ausgewählte Reaktormodelle

Um ein Reaktormodell, das auf einem Schüttungsmodell beruht und die Struktur der Schüttung repräsentiert, zu generieren, werden in dieser Arbeit zwei Ansätze verfolgt. Zum einen wird ein Kontinuumsmodell eingesetzt, zum andern ein Netzwerkmodell. Das Kontinuumsmodell wurde gewählt, da dieser Modelltyp zur Beschreibung katalytischer Festbettreaktoren weit verbreitet und mit dem Programm **Epsilon2D** am Lehrstuhl vorhanden ist. Netzwerkmodelle werden dagegen in der Literatur zur Beschreibung von katalytischen Festbettreaktoren nur selten eingesetzt [40, 62, 288] und stellen somit eine wissenschaftliche Herausforderung dar. Ihr Vorteil gegenüber den Zellenmodellen ist die hohe Flexibilität. So lassen sich die einmal gewonnenen Netze zur Beschreibung unterschiedlicher Phänomene z.B. zur Simulation einer Filtration [233, 234, 250] oder einer Zweiphasenströmung [36, 159] einsetzen. Letzteres ist ein längerfristiges Ziel bei der Entwicklung eines Netzwerkmodells und soll z.B. mittels einer Erweiterung auf ein Perkulationsmodell oder mit dem von Spedding und Spencer [275, 276] geschilderten Verfahren realisiert werden.

In den folgenden Kapiteln werden die beiden genutzten Reaktormodelle **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D** vorgestellt. Die von **Epsilon2D** genutzten Porositätsprofile werden den Schüttungsmodellen von **KS-OPT** entnommen. Da die Struktur des Modells **TriKaMo-3D** und die Beschreibung des verwendeten Netzwerkmodells untrennbar sind, werden beide Modellaspekte im Zusammenhang dargestellt.

6.2.1 Kontinuumsmodell Epsilon2D

Das Kontinuumsmodell **Epsilon2D** wurde gewählt, da es zweidimensionale Porositätsverteilungen berücksichtigen kann [178]. Weiterhin zeichnet es sich durch eine hohe Flexibilität aus, denn mit diesem Modell können Rechnungen vom Typ A III/1 und A III/0 nachvollzogen werden. Letzteres ist wichtig, um die radialen Dispersionskoeffizienten des Modells abzuschätzen. Ein weiterer Aspekt, der für dieses Modell spricht, ist, daß es mit einer geringen Auflösung an Gitterpunkten, gute Ergebnisse liefert [258] und so die Rechenzeiten relativ kurz sind.

Das gewählte Kontinuumsmodell **Epsilon2D** berücksichtigt nicht nur die Schüttung sondern auch die Ein- und Auslaufbereiche, so daß analog zu Daszkowski [74] die Umlenkungen der Strömung am Beginn und am Ende der Schüttungen nachvollzogen werden können [178]. Auf die Simulation von Effekten wie Thermodiffusion, Druckdiffusion und erzwungene Diffusion wurde verzichtet, da diese auch im Vergleichsreaktor nicht zu erwarten sind und so die Komplexität des Modells reduziert wird. Damit ergibt sich für die Gesamtmassenbilanzen folgende Beziehung (6-6):

$$\varepsilon(\chi, \phi) \frac{\delta \rho}{\delta t} = \frac{\delta}{\delta z} (\rho u \varepsilon(\chi, \phi)) + \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} (\rho v r \varepsilon(\chi, \phi)) \quad (6-6)$$

In dieser Bilanz ist die Strömungsgeschwindigkeit in axialer Richtung mit u und jene in radialer Richtung mit v bezeichnet. Die individuelle Massenbilanz des Stoffes A_i wird mit der Gleichung (6-7) beschrieben:

$$\begin{aligned} \varepsilon(r, z) \frac{\delta \rho w_i}{\delta t} = & \frac{\delta}{\delta z} \left(\rho \varepsilon(r, z) D_{ax,i} \frac{\delta w_i}{\delta z} \right) \\ & + \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(\rho r \varepsilon(r, z) D_{rad,i} \frac{\delta w_i}{\delta r} \right) \\ & - \frac{\delta}{\delta z} (\rho w_i u \varepsilon(r, z)) \\ & - \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} (\rho w_i v r \varepsilon(r, z)) \end{aligned} \quad (6-7)$$

Die Impulsbilanz ist in axialer Richtung mit Gleichung (6-8) gegeben:

$$\begin{aligned} \varepsilon(r, z) \frac{\delta \rho u}{\delta t} = & -\frac{\delta}{\delta z} \left[\varepsilon(r, z) \mu \left(\frac{4}{3} \frac{\delta u}{\delta z} - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\delta r v}{\delta r} \right) \right] \\ & + \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left[\varepsilon(r, z) \mu r \left(\frac{\delta u}{\delta r} - \frac{\delta v}{\delta z} \right) \right] \\ & - \frac{\delta}{\delta z} (p \varepsilon(r, z)) \\ & - \frac{\delta}{\delta z} (\rho u u \varepsilon(r, z)) \\ & - \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} (\rho v r u \varepsilon(r, z)) \\ & + H_u(u, v, \varepsilon(r, z)) \end{aligned} \quad (6-8)$$

mit

$$H_u(u, v, \varepsilon(r, z)) = 150 \frac{(1 - \varepsilon(r, z))^2}{\varepsilon(r, z)^3 d_p^2} \mu u + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon(r, z))}{\varepsilon(r, z)^3 d_p} \rho u \sqrt{u^2 + v^2} \quad (6-9)$$

In radialer Richtung läßt sich die Impulsbilanz mit Gleichung (6-10) berechnen:

$$\begin{aligned} \varepsilon(r, z) \frac{\delta \rho v}{\delta t} = & -\frac{\delta}{\delta z} \left[\varepsilon(r, z) \mu \left(\frac{\delta u}{\delta z} - \frac{\delta v}{\delta r} \right) \right] \\ & + \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left[\varepsilon(r, z) \mu r \left(\frac{4}{3} \frac{\delta v}{\delta r} - \frac{2}{3} \left(\frac{\delta u}{\delta z} + \frac{\delta v}{\delta r} \right) \right) \right] \\ & + \frac{\delta}{\delta r} (p \varepsilon(r, z)) \\ & - \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} (\rho v r v \varepsilon(r, z)) \\ & - \frac{\delta}{\delta z} (\rho u v \varepsilon(r, z)) \\ & + H_v(u, v, \varepsilon(r, z)) \end{aligned} \quad (6-10)$$

mit

$$H_v(u, v, \varepsilon(r, z)) = 150 \frac{(1 - \varepsilon(r, z))^2}{\varepsilon(r, z)^3 d_p^2} \mu v + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon(r, z))}{\varepsilon(r, z)^3 d_p} \rho v \sqrt{u^2 + v^2} \quad (6-11)$$

Die Randbedingungen sind in Abbildung 6-6 dargestellt.

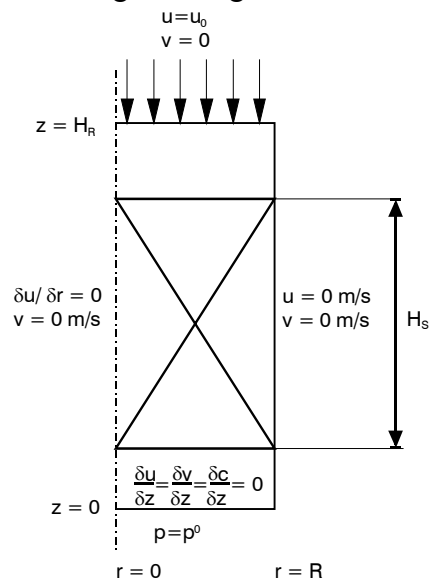


Abbildung 6-6: Randbedingungen des Kontinuumsmodells Epsilon2D

Die Lösung der obengenannten Differentialgleichungen ((6-6) bis (6-11)) erfolgt mit dem finiten Volumenverfahren **flowsim**. Dadurch erhält die Lösung axiale Dispersionseigenschaften, wie sie für eine Zellenmodell [178] zu erwarten sind. So ist die axiale Dispersion in diesem Modell, wie Schnitzlein [255] zeigen konnte, von der verwendeten Zahl der Bilanzvolumenien des Lösungsalgorithmus abhängig.

6.2.2 Netzwerkmodell TriKaMo-3D

Die Verwendung von **Epsilon2D** auf der Basis eines einfachen Kugelschüttungsmodells erfüllte im Falle des radialen Dispersionskoeffizienten nicht die Erwartungen hinsichtlich der Vorhersagegenauigkeit [178]. Dieses könnte auf die zum Rand hin zunehmende Vergleichmäßigung des Porositätsprofils zurückzuführen sein. Eine Lösung dieses Problems bietet ein dreidimensionales Modell. Um dies zu realisieren, stehen zwei Ansätze zur Verfügung:

1. Das zuvor dargestellte Kontinuumsmodell könnte um die dritte Raumdimension erweitert werden. Ein noch ungelöstes Problem dieses Ansatzes bildet die Entwicklung einer dreidimensionalen Porositätsverteilung. Ein Weg zu einem solchen Modell wäre, die Kreisringe der zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ in Segmente zu zerlegen. Während bei der Verwendung von großen Segmenten die Porositäten zwischen null und eins liegen und einen kontinuierlichen Verlauf andeuten, geht die dreidimensionale Porositätsverteilung bei einer punktwisen Betrachtung des Reaktors in eine diskrete Beschreibung über. Die Punkte befinden sich entweder im Leerraum oder in der Kugel, so daß jeder Punkt entweder eine Porosität von eins oder null besitzt. Letztere Beschreibung widerspricht jedoch dem Kontinuumsansatz. Ein anderer Ansatz, das oben genannte Problem zu lösen, ist die Verwendung von Chimärägittern [80]. Dieses Verfahren beschränkt sich z.Z. noch auf relativ wenige Partikel [80] und bedarf noch weiteren Forschungsanstrengungen.
2. Eine zweite Möglichkeit bilden diskrete Modelle, bei denen die Schüttung nicht durch ihre Partikel sondern durch die freien Räume repräsentiert wird, in denen sich das Fluid bewegt. Als Vertreter einer solchen Modellklasse wird in dieser Arbeit ein Netzwerkmodell zur Berechnung der radialen Dispersionskoeffizienten vorgestellt. Auf die Nutzung von Zellenmodellen, die ebenfalls zur Abbildung der Leerräume genutzt werden können, wird in dieser Arbeit verzichtet, da sie eine unrealistische, unendlich schnelle Signalausbreitung vorhersagen [283]. Das genutzte Netzwerkmodell soll die Struktur einer Schüttung möglichst realistisch wiedergeben. Dazu wird die Vernetzung des Leerraums den von **KS-OPT** generierten Schüttungsmodellen entnommen und als Grundlage für die Modellierung eines Festbettreaktors mit dem dreidimensionalen Netzwerkmodell **TriKaMo-3D** genutzt.

6.2.3 Schritte der Modellbildung

Die Modellbildung von **TriKaMo-3D** auf der Basis einer von **KS-OPT** generierten Schüttung geht in fünf Schritten vor:

1. Triangulation der von **KS-OPT** erzeugten Schüttung und die Bestimmung der Körper am Reaktorrand (Prismen, Hexaeder)
2. Bestimmung der Kanäle in den Körpern
3. Bestimmung der Strömungswiderstände in den Kanälen
4. Aufstellung der Gleichungssysteme für die Durchströmung
5. Lösung der Gleichungssysteme aus (4.)

Um die Radialdispersion durch die Schüttung zu bestimmen, wird mit Hilfe der berechneten Strömungsgeschwindigkeiten der Konzentrationsverlauf eines Tracers im Reaktor ermittelt. Dazu müssen zwei weitere Schritte durchgeführt werden:

6. Aufstellung des Gleichungssystems zu Berechnung des Tracerverlaufs
7. Lösung des Gleichungssystems (6.)

Die Punkte 1. bis 4. dienen zur Generierung des Netzwerks aus Strömungswiderständen auf der Basis eines Schüttungsmodells, das mit **KS-OPT** generiert wurde. Diese Schritte werden in den folgenden Kapiteln eingehend erläutert, da sie das Fundament des Netzwerkmodells bilden.

6.2.3.1 Triangulation der von KS-OPT erzeugten Schüttung

6.2.3.1.1 Grundlegende Betrachtungen zur Triangulation

Das in dieser Arbeit betrachtete Kanalmodell soll die Struktur der Hohlräume und deren Vernetzung wiedergeben.

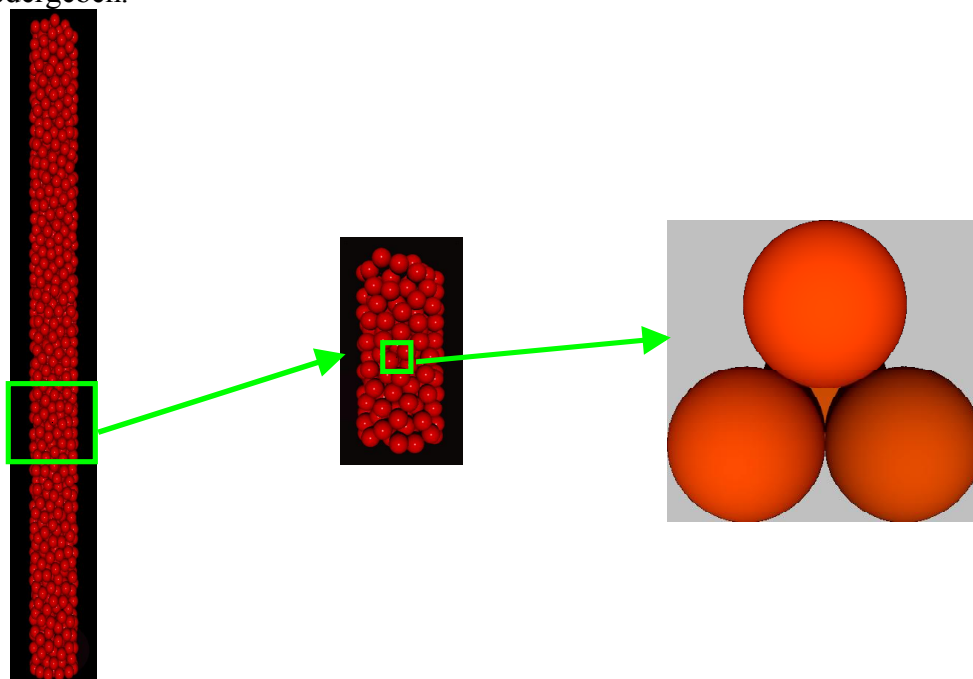


Abbildung 6-7: Detaillierte Betrachtung einer Schüttung

Wie sich im Detail zeigt, wird ein Hohlraum durch die ihn umgebenden Kugeln (Abbildung 6-7) begrenzt. Dies können, wie in den dichtesten Kugelpackungen, ideale Tetraederlücken und ideale Oktaederlücken sein. Aber auch verzerrte oder komplexere Geometrien sind möglich. Die Ecken der zu den Lücken gehörenden Körper werden durch die Mittelpunkte der Kugeln definiert, die den Hohlraum umgeben (Abbildung 6-8). Die Hohlräume sind über die Seitenflächen der Körper miteinander verbunden.

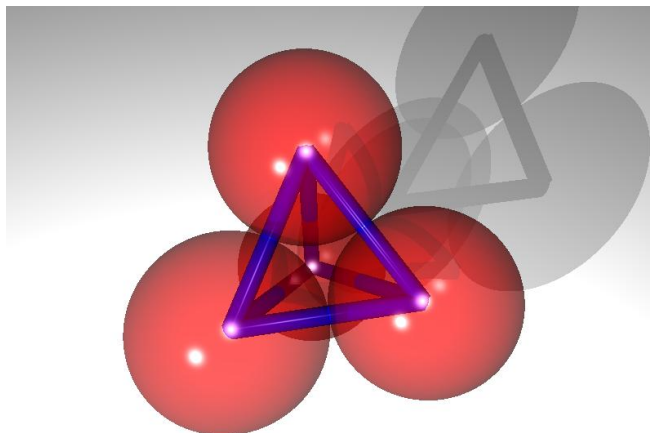


Abbildung 6-8: Beispiel für einen Körper (Tetraeder), der eine Lücke umschließt, indem seine Kanten die Mittelpunkte der Kugeln verbinden, die den Hohlraum bilden.

Vereinfacht kann man annehmen, daß sich das Fluid vom Schwerpunkt des einen Körpers zum Schwerpunkt des anderen parallel zur Verbindungslinie der beiden bewegt [40, 62, 288]. Der Leerraum entlang der Verbindungslinie wird im folgenden mit Kanal bezeichnet. Die Kanäle sollen in dieser Arbeit in Übereinstimmung mit der Literatur²⁷ als zylindrische Rohre aufgefaßt werden. Gekrümmte Rohre können nicht verwendet werden, da der Autor keine geeigneten Beziehungen zur Beschreibung einer turbulenten Strömung in diesen Röhren finden konnte.

Auf der Grundlage der Betrachtungen von Bryant, King und Mellor [40], Chu und Ng [62] sowie Thompson und Fogler [288] wird der Kern der Schüttung ($\chi < 0,5$) durch eine Triangulation in Tetraeder aufgeteilt. Wie Thompson und Fogler [288] darlegen, sind in zufälligen Schüttungen nicht-tetraedrische Lücken selten. Die Körper, die diese Lücken umschließen, können in Tetraederlücken aufgeteilt werden [288]. Bei dieser Delaunay-Triangulation werden die Ecken der Tetraeder durch die Kugelmitten gebildet (Abbildung 6-8).

²⁷ [8, 36, 41, 90, 131, 139, 251]

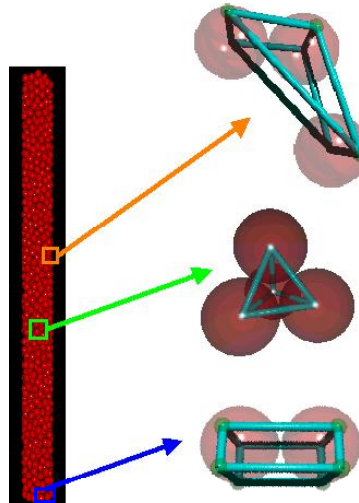


Abbildung 6-9: Elemente zur Erzeugung des Netzwerkmodells

Die Triangulation der Kugelmittelpunkte spart die Beschreibung der Reaktorrandbereiche aus ($\chi < 0,5$, $\phi < 0,5$ oder $\phi > H_S/d_p - 0,5$), da in diesem Bereich keine Kugeln liegen können. Mellor [40] sowie Thompson und Fogler [288] lösen dieses Problem, indem sie diese Bereiche vernachlässigen. Chu und Ng [62] schlagen eine Aufteilung in Prismen mit dreieckigen Grundflächen und viereckigen Seitenflächen vor (Abbildung 6-9).

Eine dreieckige Prismengrundfläche wird durch drei wand-/bodennahe Kugelmittelpunkte definiert, die andere durch deren Projektion auf die Wand bzw. dem Boden/Kopf des Reaktors. Die Projektionen der wandnahen Kugelmittelpunkte ($\chi < 0,5$) auf die Mantelfläche des Reaktors werden mit Gleichung (6-12) und jene auf dem Boden bzw. auf dem Kopf des Reaktors mit den Beziehungen (6-13) bzw. (6-14) berechnet.

$$x_{Wand} = x_K * \frac{d_t}{2r_K}, y_{Wand} = y_K * \frac{d_t}{2r_K}, z_{Wand} = z_K \quad (6-12)$$

$$\text{mit } r_K = \sqrt{x_K^2 + y_K^2}$$

Der Index K bezeichnet eine Kugel der Schüttung,
der Index Wand einen Punkt auf der Wand.

$$x_{Boden} = x_K, y_{Boden} = y_K, z_{Boden} = 0 \quad (6-13)$$

Der Index Boden kennzeichnet eine Punkt auf dem Boden des Reaktors.

$$x_{Kopf} = x_K, y_{Kopf} = y_K, z_{Kopf} = H_S \quad (6-14)$$

Der Index Kopf bezeichnet einen Punkt in der Höhe H_S .

Chu und Ng [62] lassen aber eine Beschreibung der Reaktorkanten offen, die durch die Schnittlinien der Reaktorgrundfläche und der Reaktorwand definiert werden. In dieser Arbeit wird Kantenbereich durch Hexaeder beschrieben (Abbildung 6-9), deren Lage durch zwei Kugeln definiert werden, die diesen Kanten am nächsten sind. Am Boden besitzen diese kantennahen Kugeln die Position $\{0,5 ; 0,5\}$. Da die Schüttung am Reaktorkopf, nicht so eindeutig definiert ist wie am Reaktorboden, werden hier alle Kugeln betrachtet, die einen Wandabstand χ von 0,5 und einen Kopfabstand $\phi' \geq 1$ aufweisen. Die Grundseiten eines Hexaeders durch die Projektion der jeweiligen kantennahen Kugel auf die Wand (6-12), den Boden (6-13) bzw. dem Kopf (6-14) und die Kante ((6-15) bzw. (6-16)) definiert.

$$x_{\text{Bodenkante}} = x_K * \frac{d_t}{2 * r_K}, \quad y_{\text{Bodenkante}} = y_K * \frac{d_t}{2 * r_K}, \quad z_{\text{Bodenkante}} = 0 \quad (6-15)$$

$$\text{mit } r_K = \sqrt{x_K^2 + y_K^2}$$

Der Index Bodenkante bezeichnet die Punkte, die auf der Kante des Reaktorbodens und der Wand liegen.

$$x_{\text{Kopfkante}} = x_K * \frac{d_t}{2 * r_K}, \quad y_{\text{Kopfkante}} = y_K * \frac{d_t}{2 * r_K}, \quad z_{\text{Kopfkante}} = H_S \quad (6-16)$$

$$\text{mit } r_K = \sqrt{x_K^2 + y_K^2}$$

Der Index Kopfkante bezeichnet die Punkte, die auf der Wand in der Höhe H_S liegen.

Eine andere Möglichkeit besteht darin, die zu triangulierenden Kugelmittelpunkte um die Punkte zu ergänzen, die zur Erzeugung der Prismen bzw. der Hexaeder notwendig sind. Damit würde sowohl der Kernbereich als auch die Randbereiche der Schüttung in Tetraeder aufgeteilt. Allerdings besitzen die Tetraeder im Randbereich verglichen mit denen in der Schüttung ein relativ kleines Volumen und sind verzerrt, was im Kanalnetz zu engen Kanälen mit hohen Widerständen und damit zu kleinen Volumenströmen führt. Letzteres würde den Messungen widersprechen, die innerhalb der Schüttung vorgenommen wurden [244]. Folglich wurde dieser Ansatz verworfen.

6.2.3.1.2 Triangulation nach Chu und Ng [62]

Primär wurde die Triangulation einer mit **KS-OPT** simulierten Schüttung mit dem von Chu und Ng [62] vorgestellten Algorithmus durchgeführt. Die folgenden Schritte zeigen das Vorgehen:

1. Zuerst werden drei Kugelmittelpunkte gesucht, die ein gleichseitiges Dreieck ergeben. Wenn diese Bedingung nicht erfüllt ist, wird ein Dreieck gewählt, dessen Seitenlängen am wenigsten voneinander abweichen. Eine weitere Bedingung für dieses Dreieck ist, daß keine anderen Kugeln diese Fläche schneiden.
2. Ausgehend von diesem Basisdreieck wird eine weitere Kugel gesucht, so daß ein möglichst idealer Tetraeder, d.h. ein Tetraeder mit sechs gleich langen Kanten und einem minimalen Verhältnis von Volumen und Oberfläche, entsteht.
3. Nun werden Punkte (Kugelmittelpunkte) gesucht, die mit einer Dreiecksseite des Basistetraeders als Grundfläche neue Tetraeder bilden. Diese neuen Tetraeder müssen folgende Kriterien erfüllen:
 - i) Im neuen Tetraeder liegt kein weiterer Kugelmittelpunkt.
 - ii) Die Kanten des neuen Tetraeders schneiden keine Seitenfläche eines, bestehenden Tetraeders.
 - iii) Die drei Seitenflächen, die den neuen Punkt gemeinsam haben, werden von keiner Kante eines bestehenden Tetraeders durchdrungen.
 - iv) Können bei einer Dreiecksseite des Basistetraeders mehrere Tetraeder gebildet werden, wird ein möglichst großer gewählt.
4. Der gewählte Tetraeder wird zu einem Basistetraeder, mit dem die Schritte 3. und 4. wiederholt werden, bis es keinen Kugelmittelpunkt mehr gibt, der nicht zu einem Tetraeder gehört, oder bis mit dem gemäß den Bedingungen von 3. kein weiterer Tetraeder gebildet werden kann.

Dieser Algorithmus arbeitet gut, wenn regelmäßige Packungen vorgegeben werden. Bei zufälligen Kugelschüttungen, wie sie von **KS-OPT** erzeugt werden, treten Lücken im Tetraedernetz auf. Diese entstehen, wenn innerhalb des Reaktors die Tetraeder so gewählt werden, daß in diesem Bereich keine neuen Tetraeder mehr gefunden werden können, die die Bedingungen 3.i) bis 3.iii) erfüllen. Eine Analyse der mit dem oben geschilderten Algorithmus erzeugten Tetraedernetze zeigt, daß die Lücken zum einen durch das Ziel von Chu und Ng [62], möglichst große Tetraeder zu erhalten, und zum anderen durch den rekursiven Charakter des Algorithmus hervorgerufen werden. Um den ersten Problempunkt zu beseitigen, wurde unter 3.iv) ein weitgehend idealer Tetraeder gesucht, der ein möglichst kleines Volumen-Oberflächen-Verhältnis besitzt.

Der rekursive Charakter des Algorithmus hat zur Folge, daß ausgehend von einer Dreiecksseite zuerst eine Kette von Tetraedern entsteht. Diese Kette läuft gewunden durch die ganze Schüttung bis ein Tetraeder eine Reaktorkante erreicht, so daß keine weiteren Kugelmittelpunkte zur Bildung neuer Tetraeder zur Verfügung stehen. Ausgehend von dieser Kette werden dann die nächsten Tetraeder gesucht, die über freie Seiten verfügen und so den Startpunkt von Seitenketten bilden. Durch diese Seitenketten können Reaktorbereiche so isoliert werden, daß dort kein weiterer Tetraeder generiert werden kann, der die Bedingungen 3.i) bis 3.iii) erfüllt. Um dies zu vermeiden, werden die Seitenflächen bestehender Tetraeder generationsweise nach neuen Tetraedern gemäß 3. durchsucht. Die erste Generation von Dreiecksflächen ist durch den ersten Tetraeder (siehe 2.) gegeben. Die nächste Generation von Flächen beinhaltet die Seitenflächen aller Tetraeder, die aus dem Basistetraeder entstanden sind. Letztere Vorgehensweise wird verfolgt, bis kein neuer Tetraeder mehr möglich ist.

Die Suche nach einem möglichst idealen Tetraeder und die Abkehr von einem streng rekursiven Algorithmus bewirken gegenüber vom dem Chu und Ng [62] verwendeten Algorithmus, daß der Reaktor über weite Teile trianguliert werden kann, die entstehenden Lücken sind wesentlich kleiner, aber noch existent, so daß nach anderen Lösungen zur Triangulation der von **KS-OPT** simulierten Schüttungen gesucht und in der Delaunay-Triangulation gefunden wurden.

6.2.3.1.3 Triangulation als Delaunay-Netz

Bei der Delaunay-Triangulation werden die nächsten Nachbarn mit Linien verbunden [150]. Diese Linien werden zumeist zu Dreiecksflächen zusammen gefaßt, da die Beschreibung komplexer Oberflächen eine Hauptanwendung der Delaunay-Triangulation im dreidimensionalen Raum ist [150]. Ein Beispiel für die Bestimmung einer Konvexen Hülle ist in Abbildung 6-10 dargestellt.

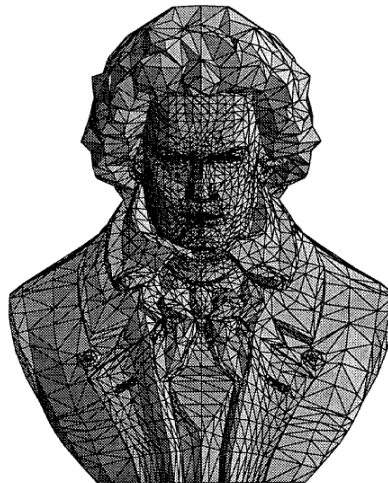


Abbildung 6-10: Konvexe Hülle einer Beethoven-Büste [37]

Die Vorgehensweise ist bei allen getesteten Verfahren zur Triangulierung gleich:

1. Zuerst werden drei beliebige Punkte (Kugelmittelpunkte) ausgewählt, die ein Basisdreieck bilden, dessen Fläche ungleich null ist.
2. Ausgehend von diesen drei Punkten wird ein vierter gesucht. Die drei Punkte des Basisdreiecks liegen ebenso wie der vierte Punkt auf der Oberfläche einer Umkugel (Abbildung 6-11). Der vierte Punkt wird so gewählt, daß die kleinste Umkugel gebildet wird. Die Seitenflächen des entstehenden Tetraeders bilden die Basisseiten weiterer Tetraeder.

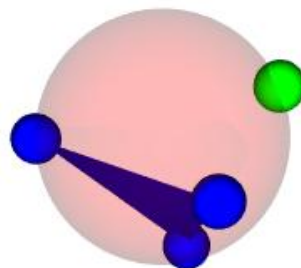


Abbildung 6-11: Basisdreieck der Delaunay-Triangulation (dunkel) mit viertem Punkt (hell) und Umkugel

3. Schneidet eine neue Kante eine Seite eines bestehenden Tetraeders, so wird letzterer gelöscht. Seine Punkte werden so mit den Ecken des neuen Tetraeders verbunden, daß keine Lücken auftreten.

Durch diesen Algorithmus ist es möglich, eine Punktwolke aus zufällig verteilten Punkten in Tetraeder aufzuteilen und die Umhüllende von Körpern, wie in Abbildung 6-10, zu beschreiben.

Da für **TriKaMo-3D** nicht nur die Umhüllende eines Körpers gesucht wird, sondern auch die gesamte Schüttung aufgeteilt werden soll, wurden mehrere für Forschungszwecke nutzbare Programme bzw. Routinenbibliotheken daraufhin getestet. Dabei wurden die Programme **detri**, **del-tree-3D**, **dwall**, **geompack** sowie **qhull** eingehender betrachtet. Weitere Programme bzw. Routinen konnten aufgrund von Problemen bei der Portierung der Software nicht berücksichtigt werden. Bei dem Versuch mit den oben genannten Programmen die von **KS-OPT** generierten Kugelschüttungen zu triangulieren, zeigten sich zwei Probleme. Zum einem traten sogenannte cosphärische Punkte auf [104], d.h. bei der Wahl eines optimalen vierten Punktes liegt mindestens noch ein fünfter Punkt auf der Umkugel. Ein anderes Problem wird durch die Punkte am Boden des Reaktors verursacht, die alle in einer Ebene liegen. Hier fanden die Algorithmen „Tetraeder“, deren Punkte auf einer Ebene bzw. einer Linie liegen. Nur das Programm **del-tree-3D** konnte trotz dieser beiden schwerwiegenden Probleme [104] die von **KS-OPT** generierten Schüttungen so triangulieren, daß es zur Aufteilung des Schüttungskerns bzw. der gesamten Schüttung in geometrische Körper mit diesem Programm verwendet werden kann. Aus den geometrischen Daten der Körper können die geometrischen Parameter der Kanäle innerhalb des Reaktors beschrieben werden.

6.2.3.2 Konventionen im Netzwerkmodell

Da das Netzwerkmodell durch seine Struktur sehr komplex ist, erfolgen an dieser Stelle einige Konventionen, die zur Berechnung der Strömungswiderstände notwendig sind.

Die Zahl N_K der Körper, in die die Schüttung aufgeteilt wurde, ist gleich der Summe der Anzahl der Tetraeder N_{TK} , der Prismen N_{PK} und der Hexaeder N_{HK} . Die Körper sowie die Knoten werden fortlaufend von eins bis N_K in der Reihenfolge ihrer Generierung numeriert, so daß z.B. das Volumen V_1 das Volumen des ersten Körpers bezeichnet. Der Index T der Bezeichnung V_{T2} weist zusätzlich daraufhin, daß der zweite Körper ein Tetraeder ist. Bei den Prismen wird der Index P und bei den Hexaedern der Index H zur Kennzeichnung verwendet.

Die Zahl der Graphen, die sich in einem Knoten treffen, ist durch die Koordinationszahl m gekennzeichnet. Für die Knoten der in dieser Arbeit verwendeten Körper ergeben sich die in Tabelle 5 dargestellten Koordinationszahlen m . Ausgehend von den Knoten der wandnahen Körper werden in Richtung der Wand keine Graphen angesetzt, da durch die Reaktorbegrenzung kein Stofftransport erfolgen kann. So besitzen die Hexaeder trotz ihrer sechs Seitenflächen nur die Koordinationszahl fünf, da sie per definitionem immer eine Seitenfläche mit der Boden-Deckfläche gemeinsam haben. Gleiches gilt für die Prismen und Tetraeder, die Seiten die Reaktorwand bilden, so daß sich deren Koordinationszahl um die Zahl der Seiten vermindert, die diese Körper mit der Wand gemeinsam haben.

Tabelle 5: Koordinationszahl m der Knoten in den Polyedern unter Berücksichtigung der Aufteilung der Reaktorrandbereiche

Polyeder	Koordinationszahl m (Randbereich aus Hexaedern und Prismen)
Tetraeder	4
Prismen	5,4 ²⁸
Hexaeder	5

²⁸ Das Prisma hat eine Seitenfläche mit der Reaktorwand gemeinsam.

Aus der Sicht eines Knotens werden die Graphen von eins bis zur Koordinationszahl m nummeriert, dabei steigt der Index eines Graphen mit der Nummer des angebenen Knotens. Letzteres ist sowohl wichtig bei der Verwaltung der Graphen in den Routinen von **TriKaMo-3D** als auch bei der Berechnung der einzelnen Kanäle. Im Falle der Länge eines Graphen m , der im Knoten j beginnt bzw. endet, wird diese mit l_{G,j_m} bezeichnet (Abbildung 6-12).

Die zweite Möglichkeit einen Graphen oder einen Kanal im Netzwerk zu kennzeichnen, besteht darin, die Nummern der verbundenen Knoten zu nennen. So wird die Länge des Graphen, der die Knoten i und j verbindet, mit $l_{G,i,j}$ bezeichnet (Abbildung 6-12).

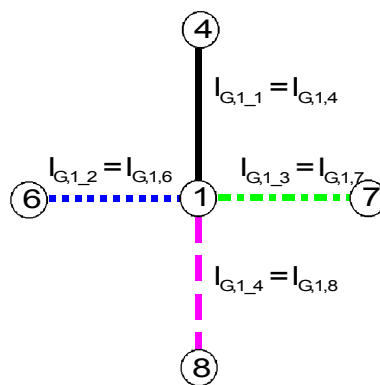


Abbildung 6-12: Konvention der Graphennumerierung

6.2.3.3 Berechnung der geometrischen Kanalparameter

Um das Gleichungssystem zur Strömungsberechnung im Modell **TriKaMo-3D** aufstellen zu können, müssen die geometrischen Parameter der einzelnen Kanäle bestimmt werden. Dabei muß grundsätzlich zwischen den Graphen und den Kanälen unterschieden werden. Die Graphen geben an, welche Knoten miteinander verbunden sind, während die Kanäle den Strömungswiderstand zwischen den beiden Knoten beschreiben. Um den Strömungswiderstand zwischen zwei Knoten zu bestimmen, wird im einfachsten Fall ein laminar durchströmtes Rohr verwendet. Sein Druckverlust ergibt sich bei Vernachlässigung von Ein- und Auslaufeffekten nach Hagen-Poiseuille [8, 41, 52, 131, 248] gemäß Gleichung (6-17).

$$\Delta p_{Kanal,i,j} = 32 \frac{l_{Kanal,i,j}}{d_{Kanal,i,j}^2} \rho \nu u_{Kanal,i,j} \quad (6-17)$$

In der Gleichung (6-17) sind neben der Strömungsgeschwindigkeit $u_{Kanal,ij}$ im Kanal sowie der Dichte ρ und der Viskosität ν des Fluids die Länge $l_{Kanal,i,j}$ und der Durchmesser $d_{Kanal,i,j}$ des Kanals gegeben, so daß nur die beiden letzten als variable Parameter in Frage kommen. Ähnliches gilt für den turbulenten Strömungsbereich.

Zur Berechnung der Länge $l_{Kanal,i,j}$ und des Durchmessers $d_{Kanal,i,j}$ werden in der Literatur viele verschiedene Methoden vorgeschlagen. An dieser Stelle sollen nur drei für die betrachtete Literatur²⁹ repräsentative Methoden vorgestellt werden:

- 1) Für die Berechnung der Strömung entlang der Graphen schlagen Chu und Ng [62] einen Kanal vor, der aus zwei Hälften zusammengesetzt ist, wobei die Parameter jeder Hälfte von dem jeweiligen Körper bestimmt wird. Die Länge einer Kanalhälfte ergibt sich aus dem Abstand zwischen dem Schwerpunkt des Körpers (Tetraeder, Prisma, Hexaeder) und dem der Seitenfläche, die der Kanal schneidet [62]. Da Chu und Ng [62] ein gekrümmtes Rohr zur Beschreibung des Strömungswiderstandes benutzen, müssen sie im Gegensatz zu Gleichung (6-17) zwei Durchmesser bestimmen. Den Durchmesser $d_{Kanal,max}$ einer Röhrenhälfte am Körperschwerpunkt bestimmen Chu und Ng [62] mit Gleichung (6-18) aus dem Volumen $V_{T,j}$ und der Porosität $\varepsilon_{T,j}$ des Tetraeders.

²⁹ [8, 36, 40, 41, 62, 63, 90, 131, 139, 142, 179, 192, 217, 218, 221, 251, 288]

$$d_{Kanal,max} = \left(\frac{6\varepsilon_{T,j} V_{T,j}}{\pi} \right)^{1/3} \quad (6-18)$$

Der Durchmesser der Halbrohre an der Seitenfläche des Tetraeders wird in der Arbeit von Chu und Ng [62] aus der freien Querschnittsfläche $A_{c,j}$ der jeweiligen Seite berechnet:

$$d_{Kanal,min} = \left(\frac{4A_{c,j}}{\pi} \right)^{1/2} \quad (6-19)$$

Die Summe der beiden Teilwiderstände ergeben den Gesamtwiderstand. Analog gehen Chu und Ng [62] bei den Prismen an der Wand vor. Sie verwenden dort aber eine modifizierte Kanalform, auf die in dieser Arbeit nicht weiter eingegangen wird, da der Autor für diese Form wie für die gekrümmten Rohre keine turbulente Strömungsbeschreibung finden konnte.

- 2) Bryant, King und Mellor [40] unterteilen das Volumen entlang eines Graphen in zwölfkonische Segmente. Die Eingangs- und Ausgangsdurchmesser bestimmen sie, indem sie am Beginn bzw. am Ende des Segments den größten Kreisdurchmesser suchen, der im Freiraum des Tetraeders möglich ist, ohne daß eine Kugel oder eine Seitenfläche geschnitten wird. Die Länge eines Segments beträgt ein Zwölftel des Abstandes zwischen den Tetraederschwerpunkten. Der laminare Strömungswiderstand in den Segmenten wird gemäß Happel und Brenner [130] berechnet. Mit Hilfe dieses Widerstands ermitteln die Autoren [40] den effektiven Radius eines zylindrischen Rohres mit demselben Strömungswiderstand und mit einer Länge, die dem Abstand der Tetraederschwerpunkte entspricht. Im Anschluß daran kürzen sie dies Rohr um einen nicht genannten Betrag, damit die Rohre sich im Knoten nicht überlappen. Der damit verbundene Volumenverlust wird vernachlässigt.
- 3) Eine dritte Möglichkeit stellen Thompson und Fogler [288] vor. Um eine lineare Abhängigkeit der Volumenströme vom Druckverlust über einen Kanal zu erhalten (6-20), berechnen die Autoren den Widerstand g entlang der Graphen mit Hilfe eines zweidimensionalen Modells.

$$\dot{V} = g * \Delta p \quad (6-20)$$

Dabei wird der Kanalquerschnitt als freie Querschnittsfläche in einer Tetraederseite definiert (Abbildung 6-13). Die Autoren [288] setzen zwei unterschiedliche Randbedingungen an, die mit ihrer Wirkung auf die Strömung in der Abbildung 6-13 dargestellt sind.

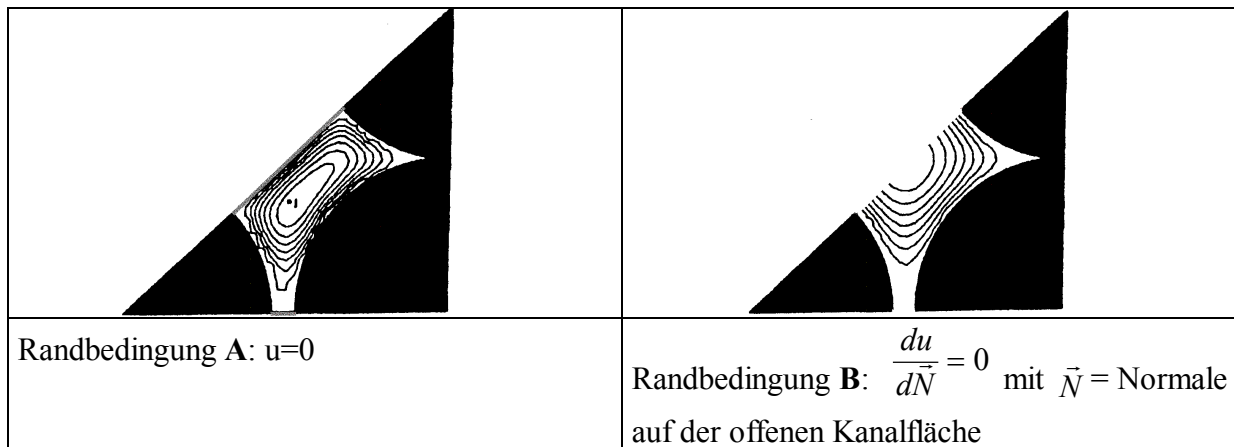


Abbildung 6-13: Berechnung für einen Kanal von Thompson und Fogler [288] unter Berücksichtigung der Randbedingung an den offenen Kanalgrenzen (hellgrau). Die Linien innerhalb der Kanäle geben die Orte gleicher Geschwindigkeit an.

Thompson und Fogler [288] weisen daraufhin, daß die Annahme von Haftbedingungen an allen Kanalgrenzen (Randbedingung A) zu wesentlich geringeren Volumenströmen als bei der Randbedingung B führt. Der Grund dafür ist wahrscheinlich, daß die innere Oberfläche der Kanäle und damit des Reaktors um die offenen Kanalgrenzen erhöht wird. Daher verwerfen die beiden Autoren die Lösungen gemäß der Randbedingung A [288].

Durch die Betrachtung der freien Querschnittsfläche des Kanals in den Tetraederflächen wird die engste Stelle entlang des Graphen zur Abschätzung der Widerstände g genutzt. Um die Aufweitung der Kanäle an deren Enden zu berücksichtigen, werden zur Strömungsberechnung Venturi-Rohre angenommen, deren kleinste Querschnitte die gleichen Strömungswiderstände g besitzen, wie die entsprechenden zweidimensionalen Rechnungen für die Seitenflächen der Tetraeder ergeben haben. Die Länge der Kanäle setzen Thompson und Fogler [288] gleich dem Durchmesser der Kugeln d_p . Auch die Krümmung der Venturi-Rohre leiten sie von dem Partikeldurchmesser ab.

In dieser Arbeit wird ein anderer als die obengenannten Ansätze genutzt, da das Verfahren von Chu und Ng [62] aufgrund der Kanalbeschreibung z.Z. keine Erweiterung auf eine turbulente Strömung, wie sie sich im Referenzreaktor einstellt, möglich ist. Der Ansatz von Bryant, King und Mellor [40] wurde zum einen wegen der Unwägbarkeit der Kanallängen, zum andern wegen des hohen Rechenaufwandes verworfen. Letzteres gilt auch für den Ansatz von Thompson und Fogler [288].

Der gewählte Ansatz geht, wie jener von Chu und Ng [62], von zweigeteilten Kanälen aus, wobei jede Hälfte durch die geometrischen Verhältnisse in den Körpern des jeweiligen Knotens bestimmt wird. Dabei werden im Rahmen dieser Arbeit drei Berechnungsarten vorgestellt:

- A) Die Länge einer Kanalhälfte $l_{H_Kanal,j}$ entspricht dem Abstand des Schwerpunktes des Körpers j zum entsprechenden Schwerpunkt der Seitenfläche. Der Durchmesser d_j der Kanäle in einem Körper j wird so gewählt, daß das Volumen des Zylinders, der den Kanal beschreibt, und das Leerraumvolumen des Körpers gleich sind (6-21).

$$d_j = \sqrt{\frac{4 * \varepsilon * V_j}{\pi * \sum_{k=1}^m l_{Kanal,j-k}}} \quad (6-21)$$

- B) Auch hier entspricht die Länge einer Kanalhälfte $l_{H_Kanal,j}$ dem Abstand zwischen dem Körperschwerpunkt und dem entsprechenden Schwerpunkt der Seitenfläche. Für den Kanaldurchmesser wird in diesem Fall der Äquivalentdurchmesser \underline{d}_j innerhalb der Körper angesetzt, der aus dem freien Volumen und der Oberfläche A_j der Kugeln innerhalb des Polyeders gemäß Gleichung (6-22) bestimmt wird.

$$\underline{d}_j = 6 \frac{\varepsilon * V_j}{A_j} \quad (6-22)$$

Das Problem bei dieser Vorgehensweise ist, daß zwar die Länge der Kanäle $l_{Kanal,i,j}$ identisch mit dem Abstand der Knoten ist. Jedoch das Leerraumvolumen eines Polyeders entspricht u. U. nicht dem Gesamtvolumen der Kanalhälften in diesem Körper.

- C) Um die Volumengleichheit der Kanalhälften und des Leerraums in den Polyedern wieder herzustellen, die bei der unter B) vorgeschlagenen Methode nicht immer gegeben ist, muß eine gedankliche Trennung der Geometrie des Kanalnetzes und der Graphen vorgenommen werden. In diesem Fall wird als Durchmesser innerhalb eines Knotens der in Gleichung (6-22) definierte Äquivalentdurchmesser \underline{d}_j gewählt. Die Gesamtlänge \underline{l}_j aller Kanalhälften, die zu einem Knoten gehören, wird so bestimmt, daß das freie Volumen in den Polyedern und das Gesamtvolumen der entsprechenden Kanalabschnitte gleich ist:

$$\underline{l}_j = \frac{4V_j}{\pi \underline{d}_j^2} \quad (6-23)$$

Um die Geometrie des Netzwerkes nachvollziehen zu können, wird die Länge der einzelnen Kanalhälften l_{H_Kanal,j_n} proportional zum Anteil der Länge l_{H_G,j_n} der einzelnen Graphen an der Gesamtlänge aller im Körper angesetzt:

$$l_{H_Kanal,j_n} = l_j \frac{l_{H_G,j_n}}{\sum_{n=1}^m l_{H_G,j_n}} \quad (6-24)$$

Das Berechnungsverfahren des Volumens V_j , der Porosität ε_j und der inneren Oberfläche $A_{c,j}$ des Körpers, die als Parameter für die Kanalbeschreibung notwendig sind, werden im Anhang Kapitel 9.3.1 dargestellt.

Die Widerstände der beiden Kanalabschnitte werden anschließend additiv zum Gesamtwiderstand des Kanals zusammengesetzt. Die Vorgehensweisen (A bis C) haben gegenüber den von Bryant, King und Mellor [40], Chu und Ng [62] sowie von Thompson und Fogler [288] den Vorteil, daß sie auf alle in dieser Arbeit benutzten Geometrien anwendbar sind und so die Struktur der Schüttung nicht nur im Kernbereich sondern auch im gesamten Randbereich wiedergeben können. Ein weiterer Vorteil ist, daß die Längen der Kanäle im gesamten Reaktor im Gegensatz zu Bryant, King und Mellor [40] eindeutig definiert sind. Durch die Verwendung von zylindrischen anstatt von gekrümmten Rohren ist auch eine turbulente Beschreibung der Durchströmung möglich, wie sie im folgenden Kapitel dargestellt ist.

6.2.3.4 Gewählte Druckverlustgleichungen in den Rohren

Für zylindrische Rohre, deren Durchmesser und Länge im vorhergehenden Kapitel bestimmt wurden, existieren viele Druckverlustbeziehungen [294]. In der Regel wird für den laminaren Strömungsbereich ($Re_{Kanal} < 2320$) das Gesetz von Hagen-Poiseuille (6-25) verwendet.

$$\Delta p_{Kanal,i_m} = 32 \frac{l_{Kanal,i_m}}{d_{Kanal,i}^2} \mu u_{Kanal,i_m} \quad (6-25)$$

Es beschreibt den Druckverlust in einer Kanalhälfte. Der Gesamtdruckverlust eines Kanals i,j ergibt sich dann durch Summation der Druckverluste der beiden Kanalhälften.

$$\begin{aligned} \Delta p_{Kanal,i,j} &= \Delta p_{H_Kanal,i_m} + \Delta p_{H_Kanal,j_n} \\ &= \left(32 \frac{l_{H_Kanal,i_m}}{d_i^2} \mu \right) u_{H_Kanal,i_m} + \left(32 \frac{l_{H_Kanal,j_n}}{d_j^2} \mu \right) u_{H_Kanal,j_n} \end{aligned} \quad (6-26)$$

Da die Strömungsgeschwindigkeiten u_{H_Kanal} in beiden Kanalhälften verschieden sind, eignen sie sich nicht für die Bilanzierung in den Kanälen. Daher werden die Volumenströme $\dot{V}_{Kanal,i,j}$ für die Beschreibung des Druckverlusts in den Kanälen angesetzt, denn sie sind unter der Annahme inkompressibler Strömungen in beiden Kanalhälften gleich. Damit ergibt sich für einen laminar durchströmten Kanal zwischen dem Druckverlust und dem Volumenstrom folgende Beziehung (6-27):

$$\Delta p_{Kanal,i,j} = \underbrace{\left(\frac{128 l_{H_Kanal,i_m}}{\pi d_i^4} \mu + \frac{128 l_{H_Kanal,j_n}}{\pi d_j^4} \mu \right)}_{g_{HP,i,j}} \dot{V}_{Kanal,i,j} \quad (6-27)$$

Für den turbulenten Bereich nennen Vauck und Müller [294] mehrere Beziehungen, um den Druckverlust in zylindrischen Rohren zu berechnen. Aufgrund einer Abschätzung der Strömungsgeschwindigkeiten in den zylindrischen Rohren, die durch die Rechnungen mit dem Modell **TriKaMo-3D** bestätigt wurden, wurde die Beziehung von Blasius (6-28) [294] gewählt.

$$\Delta p_{Kanal,i,j} = \underbrace{\left(0,3164 \frac{l_{H_Kanal,i_m} 2^{2,5}}{\pi^{1,75} d_i^{4,75}} \rho^{0,75} \mu^{0,25} + 0,3164 \frac{l_{H_Kanal,j_n} 2^{2,5}}{\pi^{1,75} d_j^{4,75}} \rho^{0,75} \mu^{0,25} \right)}_{g_{B,i,j}} \dot{V}_{Kanal,i,j}^{1,75} \quad (6-28)$$

Diese Beziehung gilt im Bereich für Reynolds-Zahlen Re_{Kanal} von 2320 bis 10^5 . Die Entscheidung, welche der Gleichungen ((6-27), (6-28)) jeweils gewählt werden muß, wird an Hand der mittleren Reynolds-Zahlen der Kanäle gemäß den genannten Grenzen getroffen.

Der laminare Strömungswiderstand $g_{HP,i,j}$ (6-27) ist analog zu den Beziehungen von Fatt³⁰ definiert. Während der Strömungswiderstand im Bereich der laminaren Strömung in den Kanälen einen Proportionalitätsfaktor darstellt, bezeichnet $g_{B,i,j}$ im turbulenten Bereich (6-28) die Proportionalität des Druckverlustes vom Ausdruck $\dot{V}_{Kanal,i,j}^{1,75}$.

Mit der Definition der Strömungswiderstände $g_{HP,i,j}$ und $g_{B,i,j}$ sind die ersten vier Schritte zur Berechnung der Strömung in einer Schüttung mit dem Netzwerkmodell **TriKaMo-3D** vollzogen. Auf der Grundlage dieser Berechnungen können die benötigten Gleichungssysteme aufgestellt und gelöst werden.

³⁰ [8, 36, 41, 90, 100, 131, 139, 251]

6.2.3.5 Aufstellung und Lösung des Gleichungssystems

Die Aufstellung des Gleichungssystems orientiert sich an den Bilanzen der einzelnen Knoten (Abbildung 6-14). Wenn für jeden Knoten die Massenerhaltung gewährleistet ist, so muß die Summe aller Volumenströme in einem Knoten null sein.

$$\sum_{n=1}^m \dot{V}_{\text{Kanal},j_n} = 0 \quad (6-29)$$

Dabei ist zu beachten, daß die in den Knoten laufenden Volumenströme mit einem positiven Vorzeichen behaftet sind, die auslaufenden Volumenströme mit einem negativen.

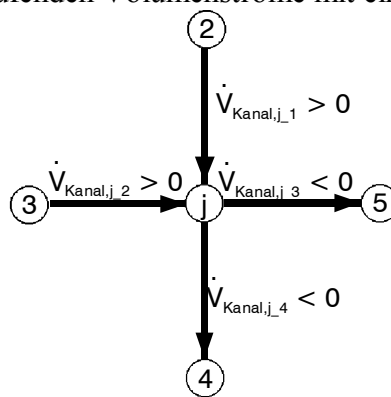


Abbildung 6-14: Zweidimensionale Skizze der Volumenströme in und aus einem Knoten

Für den Fall einer rein laminaren Strömung im Reaktor sind die Volumenströme proportional zu den Druckverlusten über den Kanälen. Damit ergibt sich aus den Gleichungen (6-27) und (6-29) nach Einführung der Vorzeichenkonvention folgender Zusammenhang für den Knoten, der in Abbildung 6-14 dargestellt ist:

$$\sum_{j=2}^5 - \frac{\Delta p_{\text{Kanal},1,j}}{g_{\text{HP},1,j}} = 0 \quad (6-30)$$

Da sich die Druckverluste der einzelnen Kanäle $\Delta p_{\text{Kanal},1,j}$ aus den Drücken in den entsprechenden Knoten ergeben, kann die Gleichung (6-30) auch folgendermaßen geschrieben werden:

$$\sum_{j=2}^5 \frac{p_j}{g_{\text{HP},1,j}} - p_1 \sum_{j=2}^5 \frac{1}{g_{\text{HP},1,j}} = 0 \quad (6-31)$$

Beziehungen, wie für das Beispiel in Abbildung 6-14, lassen sich für alle Knoten im Netzwerk von **TriKaMo-3D** unter der Annahme, einer rein laminaren Strömung aufstellen. Damit entsteht ein Gleichungssystem aus N_K Gleichungen mit $N_K + N_{Ru} + N_{Ro}$ Unbekannten, wobei N_{Ru} und N_{Ro} die Zahl der Graphen darstellen, die den Boden und den Kopf des Reaktors mit einem Knoten verbinden. Der Druck am Boden des Reaktors wird in Analogie zu den Artikeln [40, 100, 288] mit Null angesetzt, da die Berechnung der Zielgrößen $\dot{V}_{\text{Kanal},i,j}$, wie in Gleichung (6-27) zu erkennen ist, nur von den Druckdifferenzen abhängt. Am Kopf könnte analog zum Referenzreaktor und zu den Simulationen mit **Epsilon2D** eine Strömungsgeschwindigkeit u_0 vorgegeben werden. Diese Vor-

gehensweise führt bei der Lösung eines Gleichungssystems unter Berücksichtigung der turbulenten Strömung zu einer sehr schlechten Lösungskonvergenz, so daß dieses Verfahren verworfen wurde. Als Randbedingung am Reaktorkopf wurde daher ein weiterer Druck p^{ein} angesetzt. Für das Beispiel in Abbildung 6-14 ergibt sich, für den Fall, daß der Knoten 5 den Reaktorkopf repräsentiert, die Gleichung:

$$\sum_{j=2}^4 \frac{p_j}{g_{HP,1,j}} - p_1 \sum_{j=2}^4 \frac{1}{g_{HP,1,j}} = -\frac{p^{ein}}{g_{HP,1,5}} \quad (6-32)$$

Somit entsteht ein Gleichungssystem mit N_K unbekanntem Drücken und N_K Gleichungen, das mit einem Verfahren zur Lösung von spärlich besetzten Gleichungssystemen [224] gelöst wird. Aus den berechneten Drücken können dann mit Hilfe von Gleichung (6-33) die Strömungsgeschwindigkeiten berechnet werden.

$$\dot{V}_{Kanal,i,j} = \frac{\Delta p_{Kanal,i,j}}{g_{HP,i,j}} \quad (6-33)$$

Damit können Strömungsgeschwindigkeiten für den Fall einer rein laminaren Strömung im gesamten Reaktor durch das Modell **TriKaMo-3D** nachvollzogen werden. Diese Volumenströme bilden die Eingangslösung der Berechnung der turbulenten Strömung. Auch für den Fall, daß der Druckverlust mit der Gleichung (6-30) bestimmt wird, kann ein Gleichungssystem aufgestellt werden. Dazu werden die Gleichungen (6-33) und (6-34) genutzt, die aus den Gleichungen (6-27) bzw. (6-28) abgeleitet wurden.

$$\dot{V}_{Kanal,i,j} = -\text{sgn}(\Delta p_{Kanal,i,j})^{1,75} \sqrt{\frac{|\Delta p_{Kanal,i,j}|}{g_{B,i,j}}} \quad (6-34)$$

Da die Gleichung (6-28) nur für positive Druckdifferenzen umkehrbar ist, mußte in die Gleichung (6-34) eine Vorzeichenbetrachtung eingeführt werden, um die ein- und ausgehenden Ströme in den Knoten berücksichtigen zu können. Das mit Hilfe der Gleichungen (6-29), (6-33) und (6-34) aufgestellte nicht-lineare Gleichungssystem wird durch eine Optimierung der Drücke p_i in den Knoten gelöst. Zur Optimierung der Drücke wird die Routine **extrem** [145] genutzt, da diese schneller als **vfsr** arbeitet und das Gleichungssystem nur stetige Gleichungen enthält. Bei dieser Lösung werden die gleichen Randbedingungen angesetzt, wie bei der rein laminaren Strömung. Aus den optimierten Drücken können, wie bei der rein laminaren Lösung, die Volumenströme $\dot{V}_{Kanal,i,j}$ in den Kanälen berechnet werden.

Somit kann das Modell **TriKaMo-3D** sowohl eine rein laminare wie auch eine turbulente Strömung simulieren. Aus den Strömungsdaten wird das Gleichungssystem zur Bestimmung der radialen Dispersion aufgestellt.

Dazu wird in jedem Knoten der Molstrom $\dot{n}_{Kanal,i,j}$ des Tracers bilanziert, wobei die in den Knoten strömende Stoffmenge der ausgehenden entsprechen muß. Diese Molströme $\dot{n}_{Kanal,i,j}$ lassen sich als Produkt der Konzentration und des Volumenstroms $\dot{V}_{Kanal,i,j}$ im Kanal darstellen. Die Konzentrationen in den Kanälen entsprechen den Konzentrationen in den im stromaufwärts liegenden Knoten. Somit läßt sich der Molenstrom in einem Kanal gemäß Gleichung (6-35) beschreiben.

$$\dot{n}_{Kanal,i,j} = c_j * \dot{V}_{Kanal,i,j} \quad (6-35)$$

wobei Knoten i bilanziert wird und der Knoten j stromaufwärts liegt.

In jedem Knoten wird eine ideale Mischung angenommen, d.h. in allen ablaufenden Strömen herrscht die gleiche Konzentration. Diese läßt sich aus den einlaufenden Strömen gemäß Gleichung (6-36) berechnen.

$$c_i = \frac{\sum_{\substack{\text{Einlaufende Kanäle} \\ e}} c_e \dot{V}_{Kanal,i,e}}{\sum_{\substack{\text{Einlaufende Kanäle} \\ e}} \dot{V}_{Kanal,i,e}} \quad (6-36)$$

Mit Hilfe der Gleichung (6-36) läßt sich für jeden Knoten eine Bilanz (6-37) aufstellen, so daß ein lineares Gleichungssystem mit N_K Gleichungen entsteht.

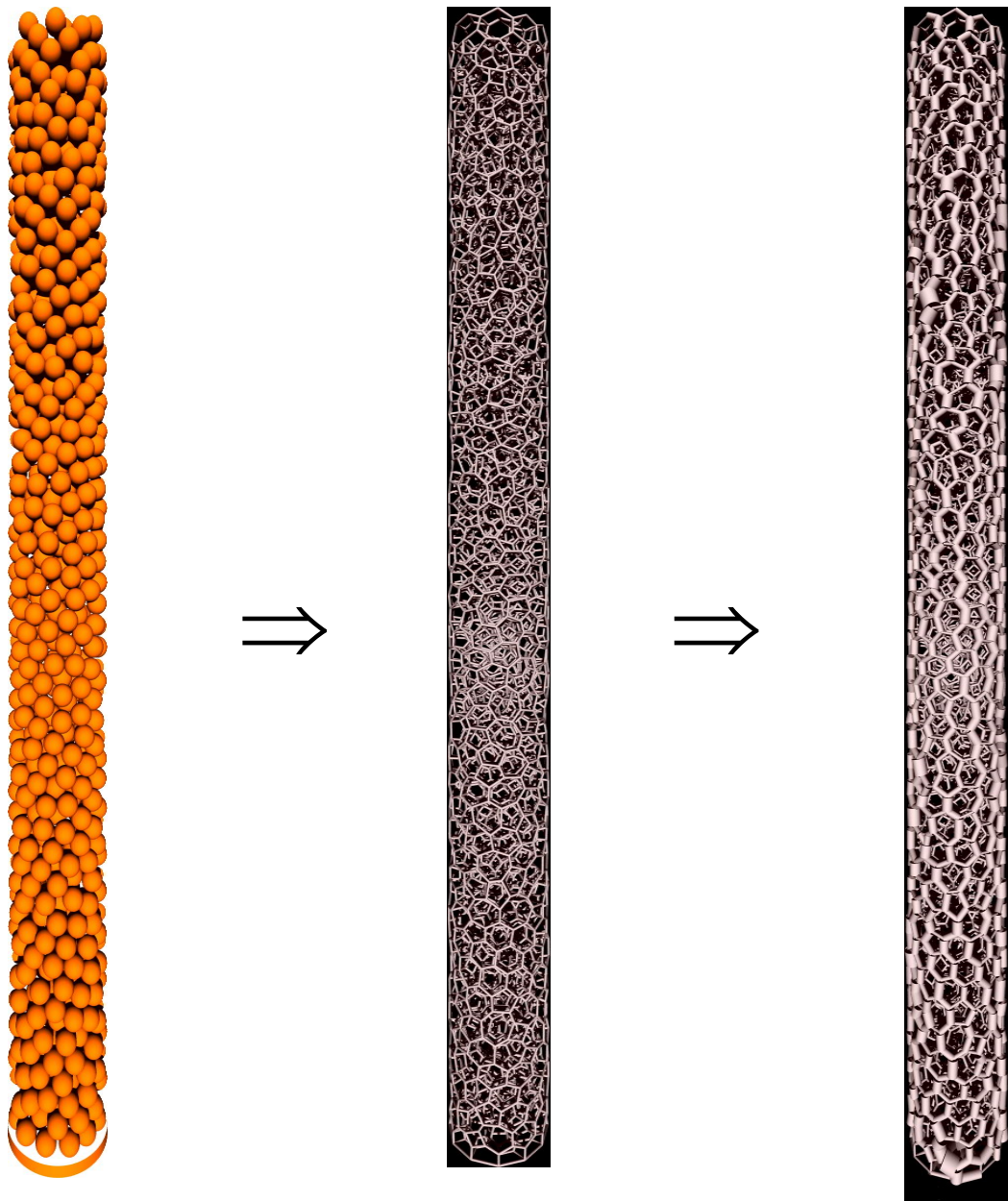
$$\sum_{\substack{\text{Einlaufende Kanäle} \\ e}} c_e \dot{V}_{Kanal,i,e} - c_i \sum_{\substack{\text{Einlaufende Kanäle} \\ e}} \dot{V}_{Kanal,i,e} = 0 \quad (6-37)$$

Für die Konzentrationen am Kopf des Reaktors wird null angenommen, so daß sich ein Gleichungssystem mit N_K Unbekannten ergibt. Um die Aufgabe des Tracers zu simulieren, wird in einer Höhe von $10*d_p$ der Knoten gesucht, der der Reaktorachse am nächsten liegt. Die Konzentration in diesem gewählten Knoten wird auf den Wert c_{Tracer}^0 gesetzt.

$$c_{i=\text{Aufgabeknoten}} = c_{Tracer}^0 \quad (6-38)$$

Da per definitionem kein Strom vom Boden in den Reaktor möglich ist, tritt dieser auch nicht im Gleichungssystem für die Konzentrationsberechnung auf, so daß keine Randbedingung am Reaktorboden gesetzt werden muß. Die Konzentrationen in den Kanälen, die den Boden des Reaktors erreichen, besitzen dieselbe Konzentration wie die Knoten, in denen sie beginnen. Auch dieses lineare Gleichungssystem wird mit einem Verfahren zur Lösung spärlich besetzter Gleichungssysteme [224] gelöst.

Die Terme, die die molekulare Diffusion wiedergeben, werden in der Bilanzierung des Tracers nicht berücksichtigt, da sie im Arbeitsbereich des Referenzreaktors keine Rolle spielen. Außerdem bestimmt die Schüttungsstruktur die radiale Dispersion erst im turbulenten Strömungsbereich, in dem die molekulare Diffusion als Dispersionsmechanismus vernachlässigbar ist [125], so daß die Betrachtung der Diffusion zur Klärung des Zusammenhangs der Modellschüttungen und der Simulationsergebnisse von **TriKaMo-3D** nicht notwendig ist.



Kugelschüttung

Netzwerk der Graphen³¹Durchströmtes Netzwerkmodell³²**Abbildung 6-15: Der Weg von der Schüttung zur Durchströmung im Netzwerkmodell**

Somit sind alle Voraussetzungen zur Berechnung der Strömungs- und Konzentrationswerte mit dem Netzwerkmodell **TriKaMo-3D** aus den Schüttungsdaten (Abbildung 6-15) erfüllt.

³¹ Die Graphen am Boden und am Kopf sind aus optischen Gründen nicht dargestellt.

³² Der Durchmesser der Zylinder deutet die Größe der Strömungsgeschwindigkeit an. Aus optischen Gründen werden Geschwindigkeiten, die kleiner als ein Schwellenwert sind, einheitlich dargestellt. Die Graphen am Boden und am Kopf sind aus optischen Gründen nicht dargestellt.

7 Ergebnisse

7.1 Validierung des Kugelschüttungsmodells

Das Ergebnis eines Programmlaufs von **KS-OPT** ist in Abbildung 7-1 zu sehen. Es gelingt also mit dem Verfahren eine Kugelpackung zu simulieren. Um diese Kugelpackung bewerten zu können, werden in folgenden Kapitel die Simulationen mit eigenen Meßwerten und Literaturangaben validiert. Mit der Verteilung der Leerräume wird analog verfahren.

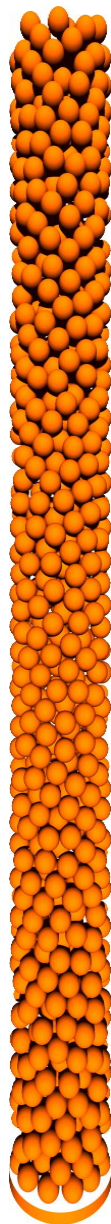


Abbildung 7-1: Eine mit KS-OPT generierte Schüttung

7.1.1 Einordnung der von KS-OPT erzeugten Schüttungen in die Klassifizierungen in der Literatur

Um die von **KS-OPT** erzeugten Schüttungen effektiver mit anderen vergleichen zu können, werden sie in die Klassifizierung von Haughey und Beveridge [134] bzw. von Zou und Yu [316] eingeordnet.

Haughey und Beveridge [134] unterteilen Kugelschüttungen anhand ihrer Porosität ε_g in vier Gruppen (Tabelle 6):

Tabelle 6: Porositäten der verschiedenen Packungsarten nach Haughey und Beveridge [134]

Packungsart	Porosität ε_g
sehr lockere Zufallspackung	0,46-0,47
lockere Zufallspackung	0,40-0,41
geschüttete Zufallspackung	0,375-0,391
dichte Zufallspackung	0,359-0,375

Bei dieser Einteilung weisen sie deutlich daraufhin, daß die Zuordnung nur für Kugelschüttungen mit kleinen Verhältnissen a_{pt} gilt. Für diese Durchmesserhältnisse geben Haughey und Beveridge [134] einen Zusammenhang zwischen der Dichte und der Entstehung der Kugelschüttungen an:

1. Sehr lockere Zufallspackungen werden erzeugt, indem man in Wirbelbetten die Strömungsgeschwindigkeit vom Wirbelpunkt ausgehend langsam auf null senkt.
2. Lockere Zufallspackungen entstehen, wenn jede Kugel einzeln in den Reaktor gegeben wird. Bei diesem Vorgang darf der Reaktor weder geschüttelt noch in Schwingungen versetzt werden.
3. Geschüttete Zufallspackungen werden erzeugt, wenn die Kugeln auf einmal in den Reaktor geschüttelt werden.
4. Dichte Zufallspackungen bilden sich aus den oben genannten Typen, wenn diese geschüttelt oder in Schwingung versetzt werden.

Mit einer Gesamtporosität ε_g von 0,4 für Durchmesserhältnisse $a_{pt} \rightarrow 0$ lassen sich die von **KS-OPT** erzeugten Schüttungen als lockere Schüttungen identifizieren. Für diese Einteilung spricht auch die Analogie in der Entstehung der Schüttung. Sowohl bei den realen lockeren Schüttungen, wie auch bei den Schüttungen, die mit **KS-OPT** generiert werden, ändern die Kugeln ihre Position nach der Zugabe in den Reaktor nicht mehr.

Für Schüttungen mit großen a_{pt} -Verhältnissen, wie sie in dieser Arbeit genutzt werden, weisen Haughey und Beveridge [134] darauf hin, daß die Porosität mit zunehmendem a_{pt} steigt. Dadurch können dichte Packungen Porositäten ε_g von z.B. 0,46 erreichen [316]. Folglich ist von der Porosität ausgehend ein Schluß auf den Schüttungstyp und auf die Weise, wie die Packung erzeugt wurde, nur bedingt möglich.

Um trotzdem eine Einteilung von Schüttungen in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} zu ermöglichen, bietet sich ein Vergleich mit Porositätsmessungen an, die das Durchmesser Verhältnis berücksichtigen. So haben Zou und Yu [316] sowie Dixon [87] für Kugelschüttungen eine detailliertere Einteilung der Schüttungen vorgenommen, indem sie die Schüttungen nicht nur nach der Dichte, sondern auch nach dem Durchmesser Verhältnis differenzieren.

Dixon [87] unterteilt die Schüttungen entsprechend der Durchmesser Verhältnisse a_{pt} in drei Bereiche:

1. Bereich ($0,536 \leq a_{pt} \leq 1$):

Der erste Abschnitt entspricht der von Carman [53] gefundenen Beziehung (7-1) für Schüttungen mit großen Durchmesser Verhältnissen a_{pt} . Der Extremfall dieser Schüttungsart ist erreicht, wenn der Durchmesser der Kugeln und des Reaktors gleich ist. Die Gesamtporosität ε_g beträgt in diesem Fall 1/3.

$$\varepsilon_g = 1 - \frac{2}{3} \frac{a_{pt}^3}{\sqrt{2 * a_{pt} - 1}} \quad (7-1)$$

2. Bereich ($0,5 \leq a_{pt} < 0,536$):

Dieser Bereich beschreibt den Übergang vom 1. Bereich, der durch Gleichung (7-1) beschrieben wird, zum 3. Bereich. Um einen stetigen Übergang zwischen den genannten Bereichen zu gewährleisten, verwendet Dixon [87] die Funktion (7-2).

$$\varepsilon_g = 0,528 + 2,464 * (a_{pt} - 0,5) \quad (7-2)$$

3. Bereich ($a_{pt} < 0,5$):

Der Bereich der zufälligen Schüttungen entspricht einer Anpassung (7-4) von Dixon's Messungen an die von Aerov [134] gefundene, empirische Beziehung (7-3).

$$\varepsilon_g = 0,39 + 0,07 a_{pt} + 0,54 * a_{pt}^2 \quad (7-3)$$

$$\varepsilon_g = 0,4 + 0,05 * a_{pt} + 0,412 * a_{pt}^2 \quad (7-4)$$

Auch Zou und Yu [316] definieren drei Grundtypen in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} :

1. Geordnete Schüttungen (Region 3):

Es sind Packungen, deren Struktur durch die Reaktorwand vorgegeben wird. Dies tritt nach Zou und Yu [316] ein, wenn weniger als zwei Kugeln ($a_{pt} \geq 0,53$) auf dem Reaktordurchmesser liegen können. Die Abhängigkeit (7-1) der Gesamtporosität ε_g bei geordneten Schüttungen vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} entstammt den geometrischen Überlegungen von Carman [53].

2. Zufällige Schüttungen (Region 1):

Unter zufälligen Schüttungen verstehen Zou und Yu [316] Kugelpackungen, bei denen der ordnende Einfluß der Wand klein ist. Sie fassen alle Schüttungen, die mehr als vier Kugeln ($a_{pt} \leq 0,256$) auf dem Reaktordurchmesser aufweisen, in diesem Bereich zusammen. Im Gegensatz zu den geordneten Schüttungen geben Zou und Yu eine empirische Gleichung für den Zusammenhang der Gesamtporosität ε_g und dem Durchmesser Verhältnis a_{pt} an. Dabei differenzieren die beiden Autoren zwischen lockeren (7-5) und dichten Schüttungen (7-6).

$$\text{Lockere Schüttung:} \quad \varepsilon_g = 0,40 + 0,01 * (\exp(10,68 * a_{pt}) - 1) \quad (7-5)$$

$$\text{Dichte Schüttung:} \quad \varepsilon_g = 0,372 + 0,002 * (\exp(15,3064 * a_{pt}) - 1) \quad (7-6)$$

3. Schüttungen des Übergangsbereichs (Region 2):

Hier werden ähnlich zu Dixon [87] alle Schüttungen zusammengefaßt, die nicht dem Bereich der geordneten und der zufälligen Schüttung angehören ($0,256 < a_{pt} < 0,53$). Im Gegensatz zu Dixon umfaßt dieser Übergangsbereich einen größeren Wertebereich von a_{pt} und weist zudem noch ein Minimum auf. Für die Schüttungen des Übergangsbereichs haben Zou und Yu eine quadratische Abhängigkeit der Gesamtporosität ε_g vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} gefunden. Dabei stellen die gefundenen Funktionen für lockere (7-7) und dichte Schüttungen (7-8) den stetigen Übergang zwischen den beiden anderen Regionen her.

$$\text{Lockere Schüttung:} \quad \varepsilon_g = 0,846 - 1,898 a_{pt} + 2,7257 a_{pt}^2 \quad (7-7)$$

$$\text{Dichte Schüttung:} \quad \varepsilon_g = 0,6851 - 1,363 a_{pt} + 2,241 a_{pt}^2 \quad (7-8)$$

Der Übergang zwischen dem Übergangsbereich und dem Bereich der zufälligen Schüttungen ist bei Zou und Yu durch eine Undifferenzierbarkeitsstelle gekennzeichnet (Abbildung 7-2, $a_{pt} = 0,256$), während der Übergang zwischen dem Bereich der geordneten Schüttungen und dem Übergangsbereich durch einen Wendepunkt markiert ist (Abbildung 7-2, $a_{pt} = 0,53$).

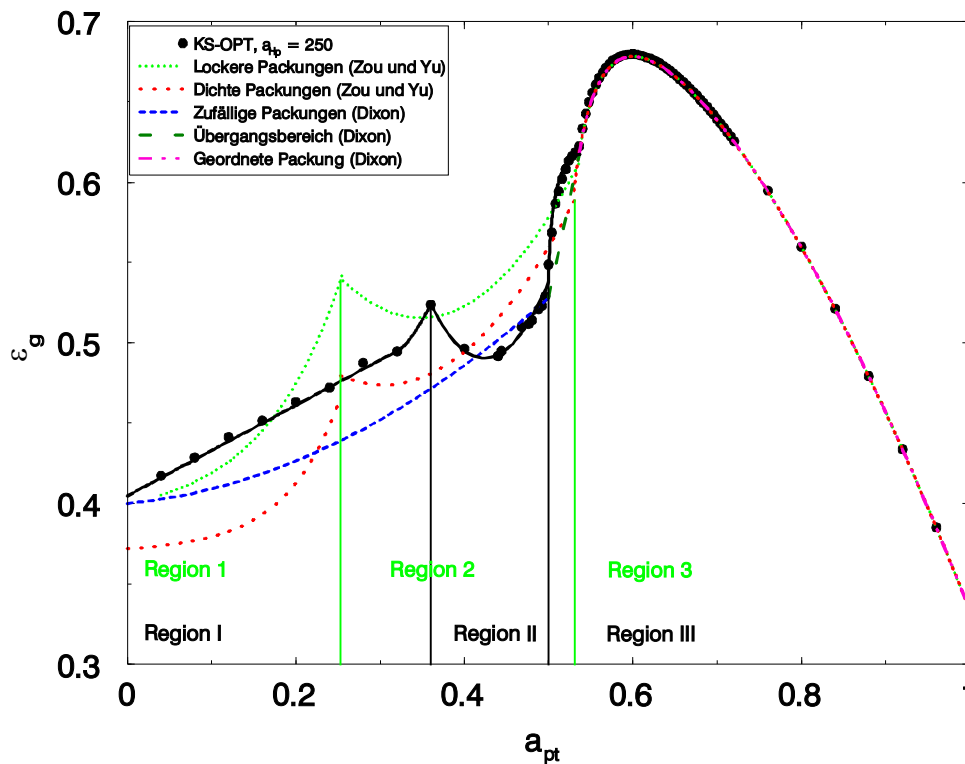


Abbildung 7-2: Vergleich der Simulation von KS-OPT³³ (zufällige Positionen in der ersten Kugelage und zwei gleichzeitig optimierte Kugeln) mit den Messungen von Dixon [87] sowie von Zou und Yu [316]

Obwohl sich die beiden Einteilungen von Dixon [87] sowie von Zou und Yu [316] (Abbildung 7-2) für Durchmesser-Verhältnisse $a_{pt} < 0,537$ deutlich voneinander unterscheiden, kann der Autor dieser Arbeit keine endgültige Bewertung vornehmen. Zum einen gibt es für Durchmesser-Verhältnisse a_{pt} im Bereich $0,256 \leq a_{pt} < 0,5$ zu wenige zusammenhängende Meßergebnisse für eine Bewertung der Kurven. Zum anderen deuten die Messungen für $a_{pt} < 0,256$ (Limberg [178]) an, daß die Art und Weise der Packungsherstellung und die Rundheit der verwendeten Kugeln einen deutlichen Einfluß auf den Verlauf der Porosität haben. Diese Vermutung wird durch die im Anhang 9.1.3 dargestellten Messungen des Autors unterstrichen. Außerdem konnte der Autor weder im Artikel von Zou und Yu [316] noch in dem von Dixon [87] einen Hinweis finden, der den Unterschied im Übergangsbereich erklärt.

³³ Die Verbindungslinie der von KS-OPT simulierten Werten besteht aus den Gleichungen (7-9) bis (7-11). Der Bereich von $a_{pt} = 0,35$ bis $0,36$ ist eine Splineinterpolation.

Aufgrund der besseren optischen Entsprechung (Abbildung 7-2) der Messungen von Zou und Yu mit den Simulationen von **KS-OPT** wird diese Bereichseinteilung und nicht die von Dixon auf die Simulation übertragen. Damit ergibt sich die in Tabelle 7 dargestellte Einteilung. Die Bereiche von Zou und Yu werden im folgenden mit arabischen Zahlen gekennzeichnet. Im Unterschied dazu werden die drei Regionen der Schüttungen von **KS-OPT** mit römischen Zahlen bezeichnet (Abbildung 7-2 und Tabelle 7).

Tabelle 7: Einteilung der Regionen

	Zou und Yu [316]	in dieser Arbeit
Bereich der zufälligen Schüttung	Region 1 $a_{pt} = 0$ bis 0,253	Region I $a_{pt} = 0$ bis 0,36
Übergangsbereich	Region 2 $a_{pt} = 0,253$ bis 0,537	Region II $a_{pt} = 0,36$ bis 0,5
Bereich der geordneten Schüttung	Region 3 $a_{pt} = 0,537$ bis 1	Region III $a_{pt} = 0,5$ bis 1

Der Vergleich der Simulationen mit den Messungen von Zou und Yu beim Übergang von Region II zu Region III bzw. von Region 2 zu Region 3 (Abbildung 7-2) zeigt, daß sich die Simulationen an dieser Stelle anders verhalten. Die Simulationen entsprechen in diesem Übergangsbereich den Messungen von Govindarao, Ramrao und Rao [120] sehr gut (Abbildung 7-3).

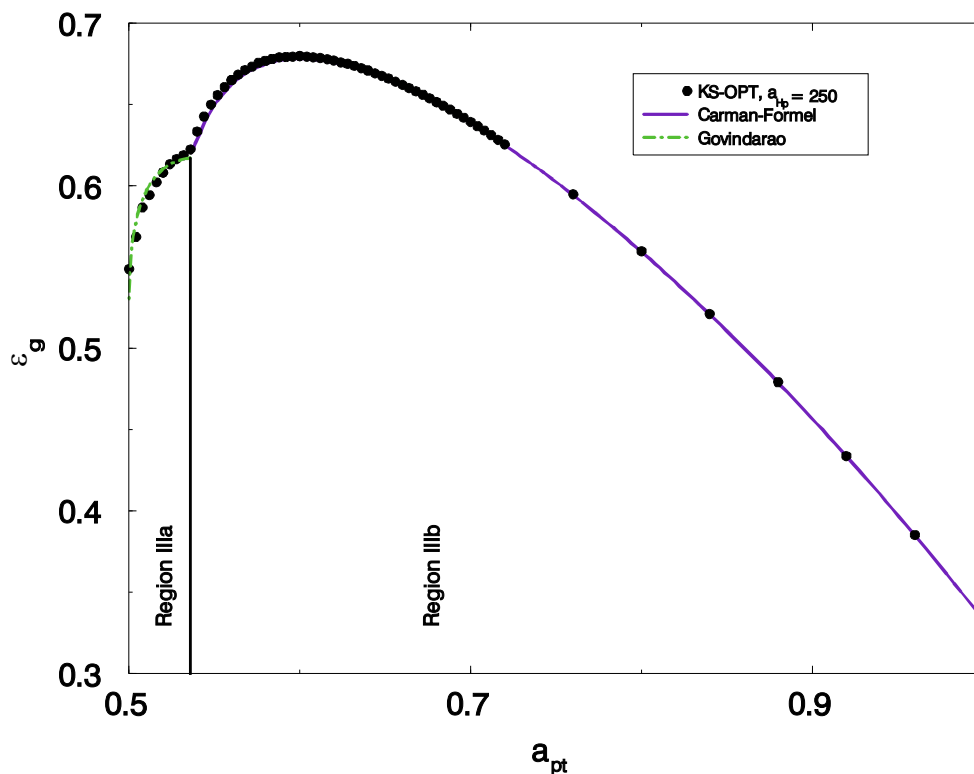


Abbildung 7-3: Ausschnitt der Region III aus Abbildung 7-2

Die Region III wird von Govindarao, Ramrao und Rao [120] auf Grund von geometrischen Betrachtungen und Messungen weiter unterteilt. Die beiden Regionen werden im folgenden als Region IIIa und IIIb bezeichnet. Govindarao, Ramrao und Rao [120] wenden für die Region IIIb ($0,586 \leq a_{pt} \leq 1$) die Formel (7-1) von Carman in der Form (7-9) an. In diesem Bereich liegen die Kugeln übereinander und berühren jeweils die Wand.

$$\varepsilon_g = 1 - \frac{2}{3 \left(\frac{1}{a_{pt}} \right)^2 \sqrt{2 * \frac{1}{a_{pt}} - \left(\frac{1}{a_{pt}} \right)^2}} \quad (7-9)$$

Im Gegensatz zur Region IIIb können die Kugeln für Durchmesserhältnisse a_{pt} von 0,5 bis 0,586 auch nebeneinander liegen. Folglich resultiert aus den geometrischen Betrachtungen von Govindarao, Ramrao und Rao [120] in der Region IIIa die Beziehung (7-10) für die Abhängigkeit der Kugelradien vom Partikel- und Reaktordurchmesser.

$$\varepsilon_g = 1 - \frac{8}{3 \left(\frac{1}{a_{pt}} \right)^2 \left[\sqrt{2 * \frac{1}{a_{pt}} - \left(\frac{1}{a_{pt}} \right)^2} + \sqrt{2 + 2 * \frac{1}{a_{pt}} - \left(\frac{1}{a_{pt}} \right)^2} \right]} \quad (7-10)$$

In Abbildung 7-2 ist der Verlauf der Gesamtporosität gegenüber dem Durchmesserhältnis a_{pt} dargestellt. Wie bei den von Zou und Yu [316] untersuchten Schüttungen treten alle drei Bereiche auf. Im Bereich der geordneten Schüttung weisen sowohl die simulierten Packungen als auch die Anpassungen an die Meßdaten von Zou und Yu sowie von Dixon einen ähnlichen Verlauf auf. Allerdings zeigt sich an der Grenze zur Region II eine Schulter, die sehr gut den von Govindarao, Ramrao und Rao [120] geforderten Verlauf wiedergibt. Damit werden die geometrischen Betrachtungen von Govindarao, Ramrao und Rao [120] durch die Simulationen von **KS-OPT** bestätigt.

Ähnlich wie bei Zou und Yu [316] tritt in den mit **KS-OPT** durchgeführten Simulationen ein Übergangsbereich auf. Dieser überstreicht aber einen kleineren Bereich von 0,36 bis 0,5 und besitzt bei $a_{pt} = 0,444$ ein ausgeprägtes Minimum. Bei diesem Verhältnis des Partikel- zum Reaktordurchmesser sind jeweils drei Kugeln analog einer annähernd hexagonal dichtesten Kugelpackung übereinander gelagert und bilden so eine relativ dichte Packung (Abbildung 7-4). Sowohl die Ausdehnung des Übergangsbereichs als auch sein Minimum deuten an, daß dieser Bereich die Porositäten derjenigen simulierten Festbetten beschreibt, bei denen maximal zwei Kugeln auf einem Reaktordurchmesser liegen. Dabei scheint die Kurvenform durch die zunehmende Abweichung von der idealen Packung geprägt zu sein, die beim Durchmesserhältnis a_{pt} von 0,444 auftritt.

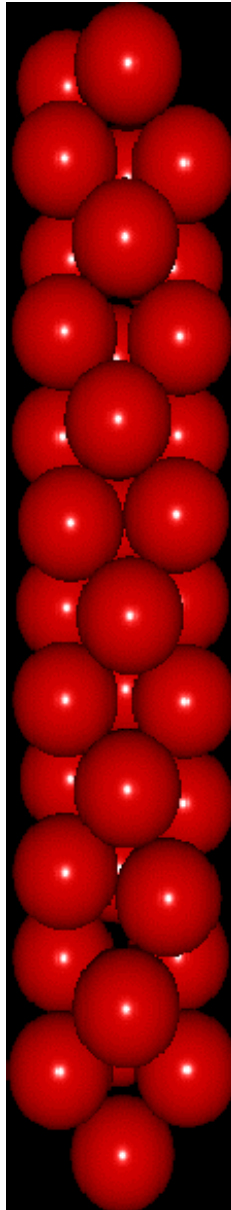


Abbildung 7-4: Ausschnitt aus der von KS-OPT simulierten Kugelschüttung mit $a_{pt} = 0.444$ und $n_{opt} = 1$

Der Übergangsbereich unterscheiden sich zwar deutlich sowohl von den Messungen Zou's und Yu's [316] als auch von denen Dixon's [87]. Der Bereich läßt sich aber, wie bei Zou und Yu [316], als quadratische Funktion beschreiben. In der Region II ergibt sich folgende Parabel (7-11):

$$\varepsilon_g = 1,964 - 6.974 * a_{pt} + 8,2231 * a_{pt}^2 \quad (7-11)$$

mit $a_{pt} = 0,253$ bis $0,537$

Daß der Übergangsbereich deutlich schmäler ist, könnte an der Annahme des Simulationsverfahrens von **KS-OPT** liegen, daß sich die Kugelpositionen nach ihrer Optimierung nicht mehr ändern. Dies läßt sich aber nur durch ein sehr komplexes Rechenmodell verifizieren, das diese Annahme vermeidet. Berechnungen von Schüttungsmodellen in der Region II sowie entsprechende Simulationsverfahren standen dem Autor dieser Arbeit nicht zur Verfügung und konnten auch nicht in der Literatur gefunden werden. So muß eine genauere Betrachtung dieses Bereichs der Zukunft überlassen bleiben.

Die Gesamtporosität ε_g (Abbildung 7-5) im Bereich der zufälligen Schüttungen (Region I), die mit **KS-OPT** simuliert wurden, verläuft analog zu den Messungen von Aerov (7-3) [134], von Dixon (7-4) [87], von Jeschar und Sonntag (7-12) [134, 271], von Leva (7-13) [174] sowie von Zou und Yu [316] (7-5).

$$\varepsilon_g = 0,392 + 0,320 * a_{pt} \quad (7-12)$$

$$\varepsilon_g = 0,325 + 0,460 * a_{pt} \quad (7-13)$$

Die Struktur der simulierten Kugelschüttungen wird auf eine ähnliche Weise wie die reale Packungen von der Reaktorwand und dem Boden beeinflusst.

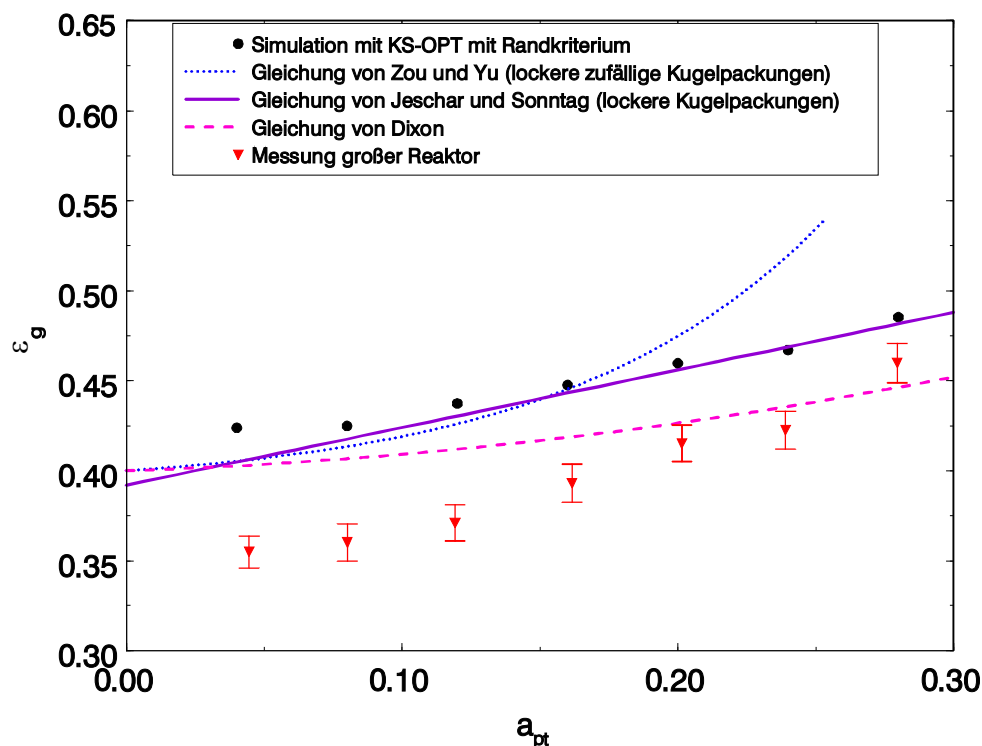


Abbildung 7-5: Vergleich der Porositäten der simulierten Schüttungen mit der Literatur und den durchgeführten Messungen

Die simulierten Schüttungen sind deutlich lockerer als die realen Kugelpackungen (Abbildung 7-5) und entsprechen näherungsweise den Messungen von Jeschar und Sonntag [134] für lockere Schüttungen. Deutlich wird dies auch in der Anpassung der Funktion $\varepsilon_g = a + b * a_{pt}$, die von anderen Autoren genutzt wird³⁴, an die Porositäten der von **KS-OPT** generierten Schüttungen:

$$\varepsilon_g = 0,4 + 0,28 * a_{pt} \quad \text{für } 0,05 \leq a_{pt} < 0,36 \quad (7-14)^{35}$$

Ein Grund für die höhere Porosität der Schüttung liegt in der Annahme des Modells, daß sich die Position der optimierten Kugeln nicht mehr verändern. In realen Schüttungen können schon im Reaktor liegende Kugeln durch neu hinzukommende in ihrer Lage verändert werden. Auch ist es möglich, daß Erschütterungen und Vibrationen die Packungen verdichten [134]. Um diesen Effekt in die Simulation einzubeziehen, werden mehrere Kugeln gleichzeitig optimiert. Die Verwendung von mehreren Kugeln während der Optimierung, kann aber die Porosität nur geringfügig steigern, da zum einen die Porositätszielfunktion des Optimierers mehrdeutig wird und zum andern die gelegten Kugeln weiterhin ihre Position behalten.

Während die simulierten Kugelschüttungen als lockere Kugelpackungen verstanden werden müssen, sind die gemessenen Kugelschüttungen dichte Kugelpackungen (Abbildung 7-5). Dies beruht wahrscheinlich auf zwei Ursachen. Zum einen haben die verwendeten Kugeln einen einheitlichen Durchmesser und zum anderen wurden die Kugeln von oben in den Reaktor gefüllt, so daß Erschütterungen durch den Aufprall der neuen Kugeln auf die bestehende Schüttung nicht zu vermeiden waren. Beide Effekte führen zu einer höheren Dichte [134]. Dieser Dichteunterschied bedingt, daß die gewonnenen Ergebnisse am Modellreaktor und vom Reaktormodell sorgfältig verglichen werden müssen. Außerdem zeigt der reale Reaktor einen „einfachen“ Weg auf, um die Dichte des Modells zu erhöhen, indem statt einer Kugelgröße dem Modell eine Größenverteilung zugrunde gelegt wird. Hierauf wurde in dieser Arbeit verzichtet, um die Berechnungen der Kanalgrößen im Modell **TriKaMo-3D** nachvollziehbar zu halten.

Um die mit **KS-OPT** erzeugten Schüttungen mit anderen Simulationen³⁶ vergleichen zu können, mußte ein anderer Weg als in den beiden vorangegangenen Kapiteln gewählt werden. Eine Betrachtung des Verlaufs der Gesamtporosität gegenüber dem Durchmesser Verhältnis a_{pt} ist nur bei Simulationen von Reyes und Iglesia [238] möglich. Bei den anderen in der Literatur³⁷ genannten Modellen fehlen die entsprechenden Daten. Der Vergleich der Gesamtporositäten ε_g von Reyes und Iglesia [238] und der von **KS-OPT** generierten Kugelschüttungen (Abbildung 7-6) zeigt, daß der Kugelfallalgorithmus [238] deutlich lockere Packungen liefert. Dabei wird die Differenz zwischen beiden Graphen um so größer, je größer das Durchmesser Verhältnis a_{pt} ist. Ein Grund dafür könnte der Zufallsgenerator im Modell von Reyes und Iglesia [238] sein, der die Wandbereiche

³⁴ [134], [174] und [271]

³⁵ Korrelationskoeffizient = 0,980

³⁶ [1, 22, 55, 117, 119, 147, 181, 188, 226, 238, 242, 275, 289, 295]

³⁷ [55, 147, 181, 188, 226, 275, 289, 295]

diskriminiert. Daher beginnt eine Kugel eher von der Mitte des Reaktors den Fall als vom Rand, so daß die Packung dort lockerer wird. Dieses Phänomen schildern auch Spedding und Spencer [275] für ihre sehr lockeren Packungen (Tower 5).

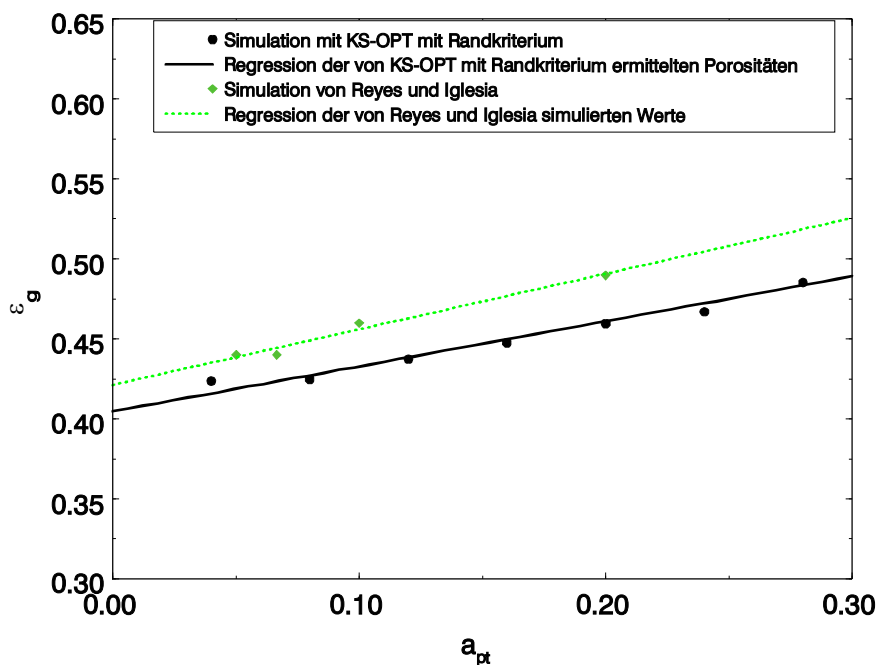


Abbildung 7-6: Vergleich der simulierten Gesamtporositäten ϵ_g von Reyes und Iglesia und von KS-OPT

Die anderen Autoren³⁸ nennen für ihre Schüttungsmodelle Grenzporositäten ϵ_0 bzw. die Kernporositäten ϵ_M . Beide Werte sind in Tabelle 8 dargestellt. Die Grenzporosität ϵ_0 beschreibt eine Schüttung, in der unendlich viele Partikel auf dem Durchmesser liegen. Da ein solcher Reaktor nicht **KS-OPT** simuliert werden kann, wird er dem Achsenabschnitt der Gleichung (7-14) entnommen.

³⁸ [55, 147, 181, 188, 226, 275, 289, 295]

Tabelle 8: Vergleich mit den Gesamtporositäten anderer Algorithmen

Algorithmus	Randbedingung	Grenzporosität ε_0 mit $a_{pl} \rightarrow 0$	Kernporosität ε_M
KS-OPT	kreisförmige Grundfläche	0,40	0,39
Adams und Matheson [1]	keine Randbedingung		0,37
Chan und Ng [55]	quadratische Grundfläche	nicht genannt	
Jodrey und Tory [147]	periodische Randbedingung		0,362-0,39
Lubachevsky et al. [181]	periodische Randbedingung		0,35
Matheson [188]	keine Randbedingung		0,40
Powell [226]	periodische Randbedingung		0,41
Rodriguez, Allibert und Chaix [242]	periodische Randbedingung		0,40
Reyes und Iglesia [238]	kreisförmige Grundfläche	0,414	
Spedding und Spencer [275], Kugelfallalgorithmus (Tower 3 ³⁹)	kreisförmige Grundfläche		0,419
Spedding und Spencer [275], Optimierungsverfahren (Tower 1 ³⁹)	kreisförmige Grundfläche		0,394
Spedding und Spencer [275], Optimierungsverfahren mit der Nebenbedingung zur Erhöhung der Koordinationszahl	kreisförmige Grundfläche		0,391
Spedding und Spencer [275], Optimierungsverfahren mit Kristalliten	kreisförmige Grundfläche		0,377
Tory et al., Gotoh et al. [117, 119, 117, 147, 289]	quadratische Grundfläche	0,42	
Visscher und Bolsterli [295]	kreisförmige Grundfläche	0,40	

Bei den Schüttungssimulationen mit periodischen Randbedingungen werden Ausschnitte aus dem Kern einer unendlichen Schüttung simuliert, wie sie z.B. bei Sedimenten postuliert werden [181]. Diese Simulationen beinhalten keine Einflüsse durch die Reaktorbegrenzungen, so daß auch die angegebenen Porositäten einen solchen Einfluß nicht enthalten können. Da aber die Grenzporosität ε_0 einen solchen Effekt berücksichtigt, wird eine vergleichbare Größe, die Kernporosität ε_M , für die von **KS-OPT** generierten Festbetten berechnet. Die Kernporosität ε_M ist die Porosität eines Ausschnitts aus dem Kern der Schüttung. Sie wird mit Hilfe einer Schüttung von **KS-OPT** berechnet,

³⁹ Nomenklatur nach Spedding und Spencer [275]

die ein Durchmesser Verhältnis $a_{pt} = 2/50$ aufweist. Der Ausschnitt aus dem Kernbereich wurde so gewählt, daß es zu keiner Beeinflussung der Dichte durch die Reaktorbegrenzung kommt und trotzdem genügend Kugeln im betrachteten Raum vorhanden sind. Der gewählte Bereich hat einen Durchmesser vom $10 \cdot d_p$ und eine Höhe von 500 Partikeldurchmesser. Die Porosität in diesem Bereich kann nicht mit der Gleichung (4-10) berechnet werden, da hier die Kugeln die Bereichsbegrenzungen schneiden können, so daß auf den Algorithmus von Einfeld [96] zurückgegriffen wird, der die Porosität in zylindrischen Ringen berechnet.

Der Vergleich (Tabelle 8 bzw. Abbildung 7-6) mit anderen Algorithmen⁴⁰ zeigt, daß das Verfahren von **KS-OPT** neben den Simulationen von Visscher und Bolsterli [295] sowie von Spedding und Spencer [275] die dichtesten Packungen liefert, die unter Berücksichtigung von Wandeffekten erzeugt werden können. Dabei ergeben sich mit dem Algorithmus von Spedding und Spencer [275] dichtere Packungen als mit **KS-OPT**, wenn statt Kugeln auch Kristallite eingefügt werden. Die Autoren [275] weisen aber darauf hin, daß die Porositätsberechnung dieses Schüttungstypes abweicht. Sie geben jedoch die Berechnungsmethode nicht an. Daher wird das Verfahren von Spedding und Spencer [275], das die Einfügung von Kristalliten erlaubt, in dieser Arbeit nicht weiter berücksichtigt. Ein weiterer Grund für diese Vorgehensweise ist, daß die Autoren die Schüttungsgeometrie nicht mit dem Verfahren betrachten, das die Einfügung von Kristalliten erlaubt. Spedding und Spencer [275] geben hierfür geometrische Probleme an.

Die Modelle von Adams und Matheson [1], Jodrey und Tory [147], Lubachevsky et al. [181], Matheson [188], Powell [226] sowie von Rodriguez, Allibert und Chaix [242] werden zumeist in der Filtertechnologie, in der Geologie und für die Beschreibung von Böden genutzt. In beiden Fällen kann und wird der Randbereich mit seiner wesentlich höheren Porosität vernachlässigt, so daß sich höhere Packungsdichten ergeben sollten. Dennoch können Matheson [188], Powell [226] sowie Rodriguez, Allibert und Chaix [242] nur Kugelpackungen generieren, die etwas lockerer sind als der Kernbereich einer von **KS-OPT** simulierten Schüttung. Die Modelle von Jodrey und Tory [147] und Lubachevsky et al. [181] liefern erwartungsgemäß dichtere Packungen. Dies liegt nur zum Teil am fehlenden Einfluß der Wandbereiche. Der andere Grund für die hohen Dichten wäre, daß die Kugeln eines ganzen Bereichs und nicht wie bei **KS-OPT** wenige Kugeln simuliert werden.

⁴⁰ Lubachevsky et al. [181], Matheson [188], Powell [226], Reyes und Iglesia [238], Tory et al. [147, 148, 289] sowie von Visscher und Bolsterli [295]

7.1.2 Vergleich der radialen Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi)$ mit Literaturwerten

In der Abbildung 7-7 sind die Meßwerte von Benenati und Brosilow [19] neben der radialen Porositätsverteilung einer von **KS-OPT** simulierten Schüttung mit äquivalenten geometrischen Parametern aufgetragen.

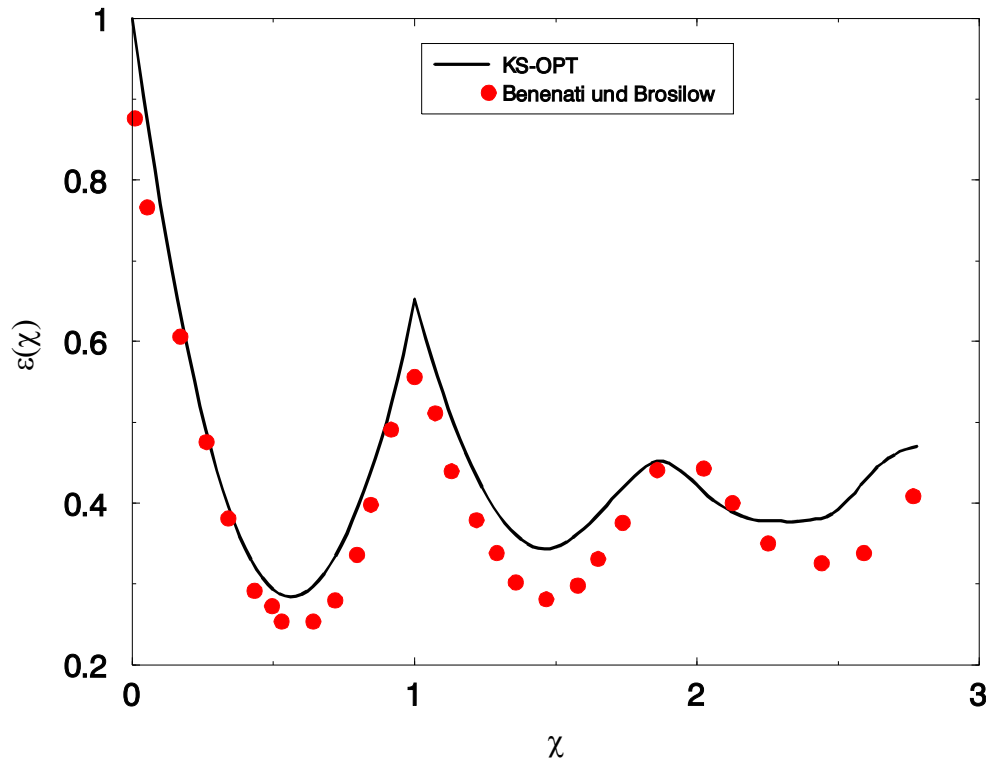


Abbildung 7-7: Vergleich der radialen Porositätsverteilung einer von KS-OPT generierten Schüttung mit den Messungen von Benenati und Brosilow [19] ($a_p = 5,6^{41}$, $a_{Hp} = 100^{42}$, $n_{opt} = 1$)

Die radialen Porositätsverteilungen zeigen die geringere Dichte der computergenerierten Schüttung, da diese mit nur wenigen Ausnahmen über den Meßwerten von Benenati und Brosilow [19] liegt. Die geringe Dichte zeigt sich auch in der geringeren Ausprägung der Minima. Beide Graphen besitzen einen vergleichbaren Verlauf mit ähnlichen Positionen bei den Extrema. Ein deutlicher Unterschied ist aber im zweiten Maximum auszumachen, das bei der computergenerierten Schüttung eine Undifferenzierbarkeitsstelle aufweist, die nicht durch die Messung von Benenati und Brosilow [19] bestätigt wird (Abbildung 7-7). Dies ist, wie die Messungen von Goodling et al. [115] und Mueller [197] nahelegen, durch die Auflösung der Messungen von Benenati und Brosilow [19] bedingt.

⁴¹ $a_{pt} = 0,179$

⁴² Die Autoren [19] nennen keine Schüttungshöhe, daher wurde diese vom Autor gewählt.

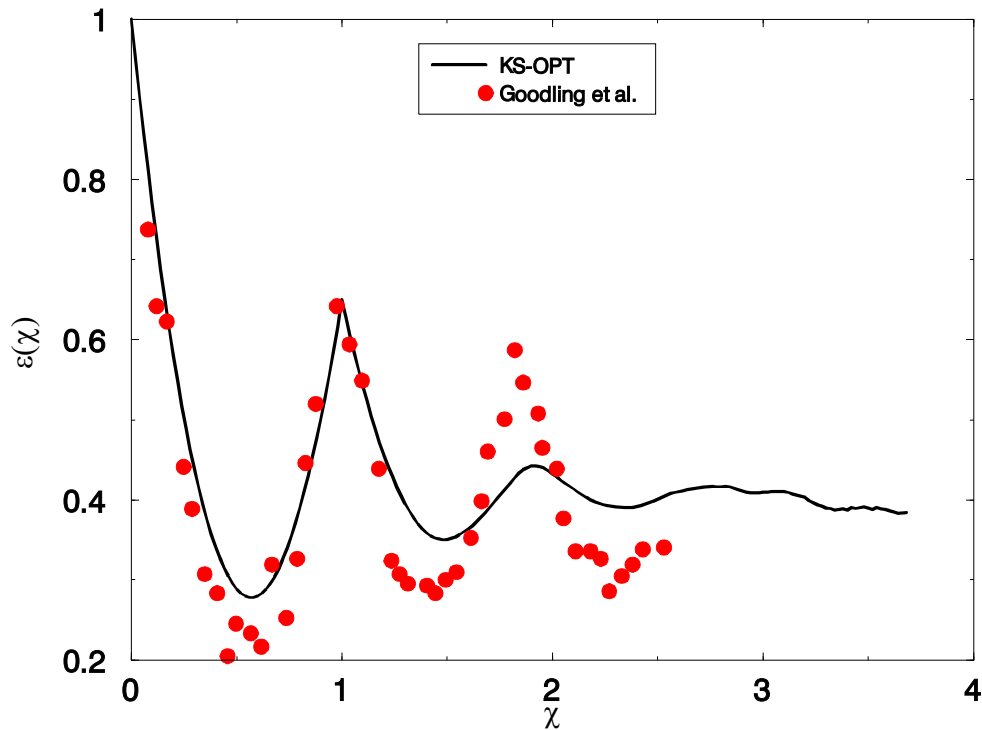


Abbildung 7-8: Vergleich der radialen Porositätsverteilung einer von KS-OPT simulierten Schüttungen mit den Messungen von Goodling, Vachon, Stelpflug und Ying [115] ($a_p = 7,4^{43}$, $a_{Hp} = 100^{44}$, $n_{opt} = 1$)

Die Messungen von Goodling, Vachon, Stelpflug und Ying [115] für eine Kugelschüttung mit einem Durchmesser Verhältnis a_p von $7,4^{45}$ sind in der Abbildung 7-8 dargestellt. Die Meßwerte, die die Autoren nur bis zu Wandabständen $\chi < 2,53$ aufnehmen konnten, zeigen eine deutlich kleinere Dämpfung als jene die mit **KS-OPT** unter Verwendung der gleichen Reaktorgeometrie erzeugt wurden. Die größere Frequenz der von Goodling et al. [115] erzeugten Packung deutet ebenfalls auf eine höhere Dichte hin. Die radialen Porositätsverteilungen aus der Arbeit von Goodling et al. [115] und der Simulation weisen aber eine nahezu identische Lage und Form der Extrema auf. Selbst die Undifferenzierbarkeitsstelle bei einem Wandabstand χ von eins wird durch die Messungen von Goodling et al. [115] bestätigt. Die Höhe des zweiten Maximums wird durch das Schüttungsmodell von **KS-OPT** gut wiedergegeben. Bei der dargestellten Messung von Goodling et al. [115] wird noch eine weitere Undifferenzierbarkeitsstelle angedeutet. Dies wird aber weder durch die Simulationen von **KS-OPT** noch durch andere Messungen [19, 115, 197] bestätigt.

⁴³ $a_{pt} = 0,14$

⁴⁴ Die Autoren nennen keine Schüttungshöhe, daher wurde diese gewählt.

⁴⁵ $a_{pt} = 0,14$

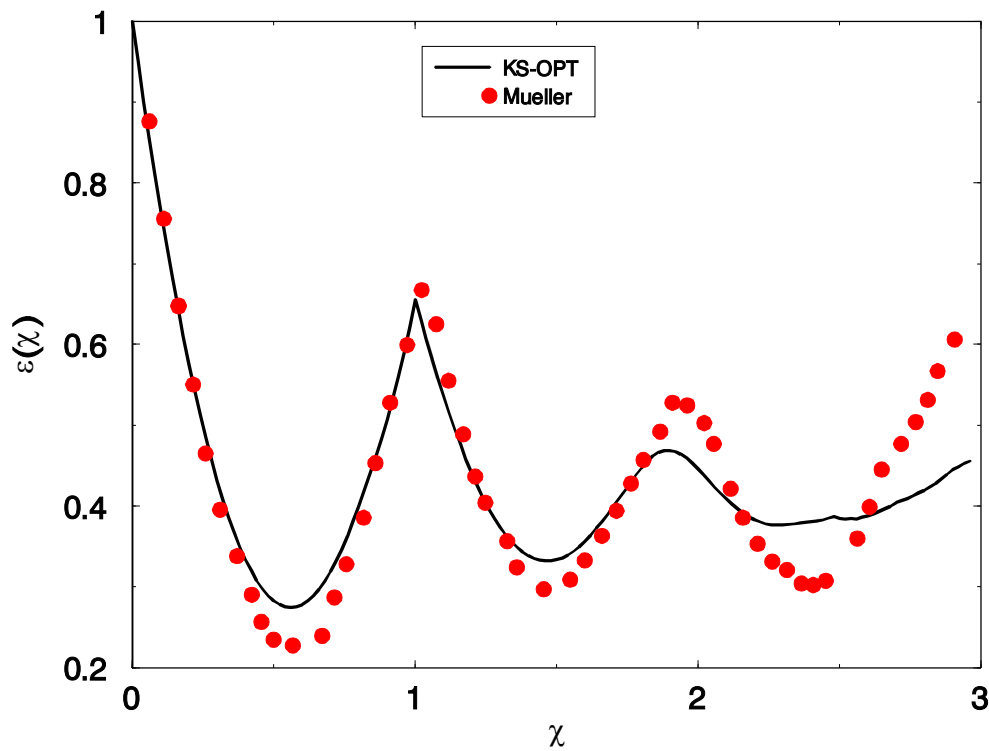


Abbildung 7-9: Vergleich der radialen Porositätsverteilung einer von KS-OPT generierten Schüttungen mit den Messungen von Mueller [197] ($a_{tp} = 5,96^{46}$, $a_{Hp} = 100$, $n_{opt} = 1$)

Beim Vergleich der simulierten radialen Porositätsprofile mit den Messungen von Mueller [197] wurde seitens der von **KS-OPT** generierten Modelle eine höhere Schüttungshöhe als bei Mueller [197] angenommen, um den großen Verdichtungsgrad der vermessenen Schüttung nachzuvollziehen. Auch hier bestätigt die Messung der radialen Porositätsverteilung die Undifferenzierbarkeit am Ende der wandnahen Kugelschicht und zeigt ebenfalls eine vergleichbare Größe. Ebenso weisen die Porositäten der Messung einen ähnlichen Verlauf wie die des Kugelschüttungsmodells auf, das mit **KS-OPT** generiert wurde. Die Unterschiede in der Ausprägung der Extrema beruhen auf der geringeren Dichte der Simulation.

In der Literatur konnte der Autor nur in drei Fällen [178, 238, 275] radiale Porositätsverteilungen von computergenerierten Schüttungen finden. Spedding und Spencer [275] vergleichen in ihrer Arbeit die radialen Porositätsverteilungen der in Tabelle 9 genannten Algorithmen. Die Charakteristika der radialen Porositätsverteilung des Towers 3 von Spedding und Spencer [275] sind für Kugelfallalgorithmen repräsentativ. Daher wird auf einen Vergleich der radialen Porositätsprofile der Simulationen von Reyes und Iglesia [238] und von Benner und Limberg [21, 178] mit der in dieser Arbeit verwendeten Version von **KS-OPT** verzichtet.

⁴⁶ $a_{pt} = 0,168$

Tabelle 9: Von Spedding und Spencer [275] verwendete Algorithmen

Tower ⁴⁷	Algorithmus	Kernporosität ε_M
1	Optimierungsalgorithmus	0,394
2	Gemischter Algorithmus aus Optimierungs- und Kugelfallalgorithmus. Die Wahl des Algorithmus ist zufällig, wobei beide gleich wahrscheinlich sind.	0,405
3	Kugelfallalgorithmus	0,419
4	Kugelfallalgorithmus mit einer Wahrscheinlichkeit von fünfzig Prozent, daß eine Kugel in einer nicht stabilen Lage liegenbleibt.	0,437
5	Kugelfallalgorithmus, bei dem jede Kugel in einer nicht stabilen Position liegenbleibt.	0,452

In ihrem Aufsatz [275] bestimmen Spedding und Spencer die radialen Porositätsverteilungen von Schüttungen, die mit den fünf, in Tabelle 9 dargestellten Algorithmen erzeugt wurden. Dabei verwendeten die Autoren [275] ein Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,02. Zum Vergleich wurde eine Kugelschüttung mit **KS-OPT** berechnet, die die gleiche Reaktorgeometrie besitzt.

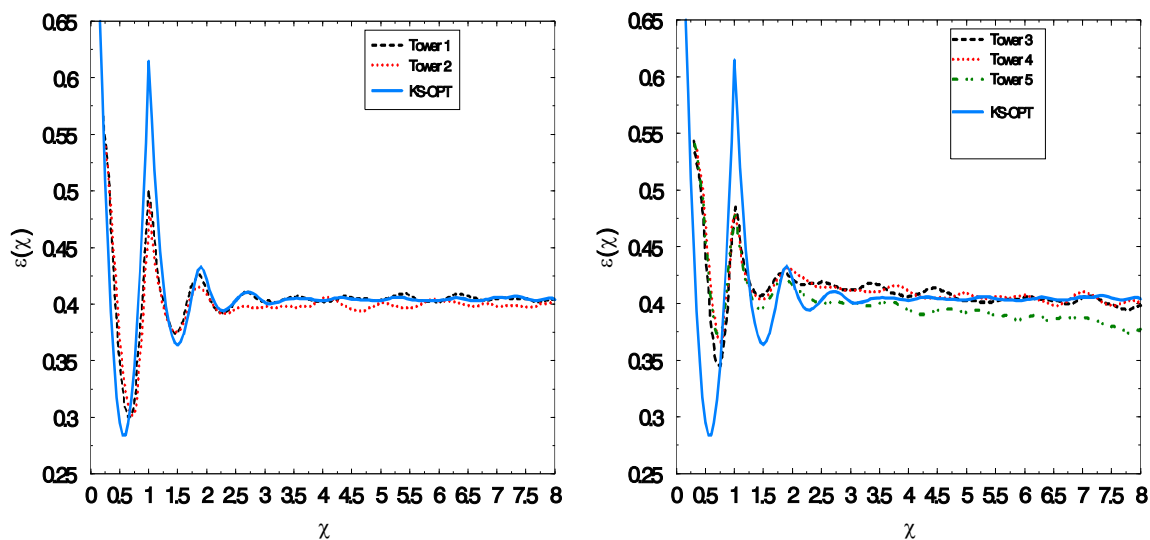


Abbildung 7-10: Vergleich der radialen Porositätsverteilung einer von KS-OPT erstellten Simulationen mit denen von Spedding und Spencer [275] ($a_{pt} = 0,02$, $a_{Hp} = 250$, $n_{opt} = 2$)

Ein besonderes Augenmerk bei diesem Vergleich soll dem Schüttungsmodell Tower 1 gewidmet werden. Dieses Schüttungsmodell besitzt, wie in Tabelle 9 dargestellt ist, eine kleinere Kernporosität als die Modelle von **KS-OPT**. Die radialen Porositätsverteilungen werden im Aufsatz von Spedding und Spencer [275] nur im Bereich der Porositäten $\varepsilon(\chi)$ von 0,25 bis etwa 0,57 dargestellt, daher kann keine Aussage darüber gemacht werden, wie die Porosität direkt an der Wand verläuft. Das erste Minimum der radialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ der Simulation von **KS-OPT**

⁴⁷ vgl. Spedding und Spencer [275]

liegt im Wandabstand χ von 0,55 (Abbildung 7-10). Benenati und Brosilow [19] geben für ihre Schüttung einen Wert χ von 0,51 für das erste Minimum an. Bei den von Spedding und Spencer [275] generierten Schüttungen (Tower 1) liegt dieses in einem Abstand von $0,68 \cdot d_p$ von der Wand entfernt. Damit weicht die Simulation von Spedding und Spencer [275] deutlicher von den experimentellen Werten ab, als dies bei den Simulationen von **KS-OPT** der Fall ist. Die Abweichung ist bei den Schüttungen 2 bis 5 von Spedding und Spencer [275] noch größer und erreicht bei dem Tower 3 den Wert χ von 0,73. Dieser Wert entspricht den Werten, die auch die Kugelfallalgorithmen von Reyes und Iglesia [238] sowie von Benner und Limberg [21, 178] erreicht haben.

Für das zweite Maximum sagen alle in Abbildung 7-10 dargestellten Schüttungsmodelle eine Undifferenzierbarkeitsstelle voraus, wobei die Höhe dieses Maximums von Spedding und Spencer [275] verglichen mit den Messungen von Goodling et al. [115] sowie von Mueller [197] deutlich unterschätzt wird. Somit entsprechen die Schüttungsmodelle von Spedding und Spencer [275] im zweiten Maximum weniger der Realität als jene von **KS-OPT**. Auch die Ausprägung der nächsten beiden Extrema ist bei allen von Spedding und Spencer dargestellten radialen Porositätsprofilen geringer, so daß die Abweichung zu den Meßwerten noch größer ist, als dies bei den Schüttungsmodellen der Fall ist, die im Rahmen dieser Arbeit erzeugt wurden. Ab dem dritten Minimum weisen die radialen Porositätsverteilungen der von Tower 1 und der von **KS-OPT** erzeugten Schüttung im betrachteten Ausschnitt nahezu die gleichen mittleren Porositäten auf. Dieser Wert ist mit den Kernporositäten ε_M (Tabelle 8) vergleichbar.

Die in Tabelle 9 dargestellte Abfolge der Kernporositäten ε_M von Spedding und Spencer's Schüttungen [275] kann nur dann aufrechterhalten werden, wenn sich die Verläufe nicht im dargestellten Teil noch drastisch ändern. So fällt die radiale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ beim Tower 5 in Richtung des Reaktormittelpunkts und unterschreitet die radialen Porositätsprofile aller anderen Packungen deutlich. Nach Spedding und Spencer [275] sollte aber Tower 5 die lockerste Schüttung (Tabelle 9) repräsentieren, so daß dieses Modell im nicht dargestellten Bereich, nahe der z-Achse des Reaktors, wesentlich poröser sein muß.

Die Vergleiche der radialen Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi)$ der von **KS-OPT** erzeugten Schüttungen mit Literaturwerten und Simulationen anderer Autoren haben gezeigt, daß es mit den gewählten Schüttungsmodell gelingt, lockere Schüttungen zu simulieren. Dabei können die von **KS-OPT** erzeugten Schüttungen die radialen Porositätsverteilungen realer Schüttungen besser nachvollziehen als andere Modelle [275]. Dies gilt besonders für den Randbereich der Schüttung, der in seinen Details - Position des ersten Minimums und des zweiten Maximums – gut erfaßt wird. Die größere Realitätsnähe der radialen Porositätsverteilungen gegenüber anderen Simulationen [275] zeigt die bessere Eignung als ersten Baustein eines Gesamtreaktormodells aus einem Schüttungs- und Strömungsmodell.

7.1.3 Vergleich der axialen Porositätsverteilungen $\varepsilon(\phi)$ mit Literaturwerten

Um die Messungen der axialen Porositätsverteilung von Daszkowski [74] mit den Simulationen vergleichen zu können, wurde eine Schüttung mit **KS-OPT** generiert, die das gleiche Durchmesser-Verhältnis a_{pt} von 0,16 aufweist. Die erste Kugellage wurde nach der Methode bestimmt, wie sie in Anhang 9.2 geschildert ist. Die Meßdaten zeigen im Gegensatz zu den radialen Porositätsverteilungen eine große Streuung der Meßwerte. Dies ist wahrscheinlich durch eine geringe Meßgenauigkeit bedingt. Dieser Umstand hat mit dazu beigetragen, daß eigene Messungen verworfen werden mußten.

Das erste Minimum der axialen Porositätsverteilung, das durch die erste Kugellage entsteht, stimmt gut mit den von Daszkowski [74] gemessenen Werten überein, was den Schluß nahelegt, daß die vermessene erste Kugellage und jene im Reaktor von Daszkowski in etwa die gleiche Kugelanzahl haben. Der darauffolgende Verlauf der axialen Porositätsverteilung spiegelt die geringere Dichte der von **KS-OPT** erzeugten Schüttung wider, da der Graph fast ausnahmslos über den Meßwerten von Daszkowski [74] liegt. Der Porositätsverlauf wird auf Grund der geringeren Dichte der simulierten Kugelschüttung überschätzt.

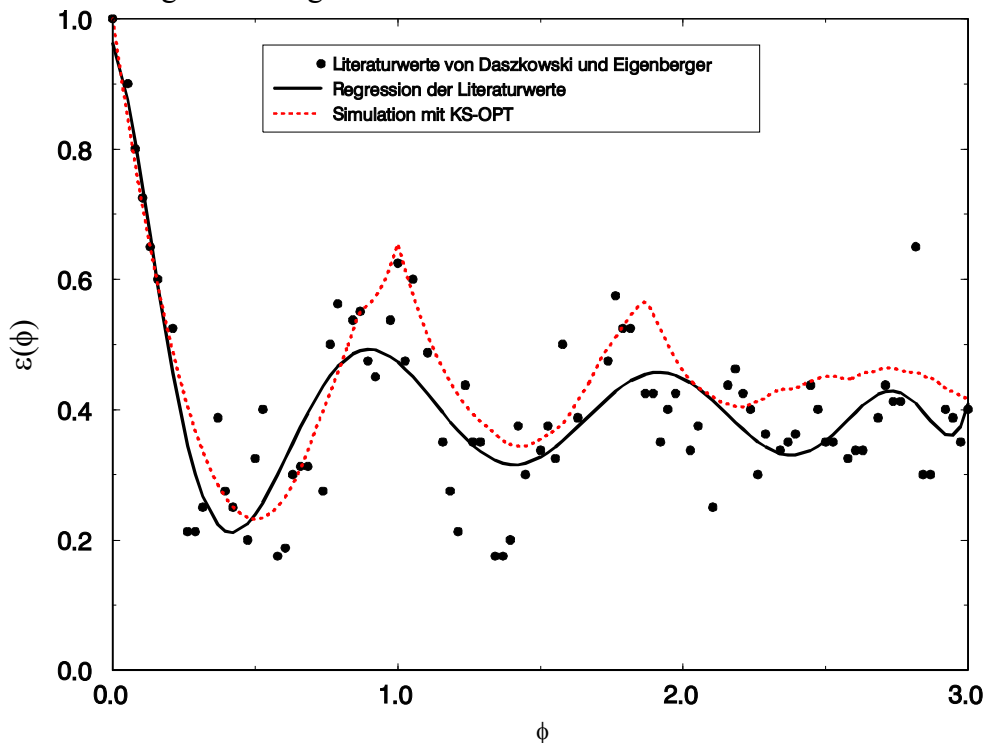


Abbildung 7-11: Vergleich der axialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$ von Daszkowski und Eigenberger [74] mit einer analogen von **KS-OPT** generierten Schüttung ($a_{pt} = 0,16$, $n_{opt} = 3$, gemessene erste Kugellage, Reaktorboden)

Die Lage des zweiten Maximums stimmt ebenfalls mit den Meßpunkten überein. Die höheren Dichten, die von Daszkowski [74] gemessen wurden, deuten darauf hin, daß sich dort die erste und zweite Kugellage stärker durchdringen. Dies könnte bei gleicher Kugelzahl in der ersten Schicht, wie der Vergleich des ersten Minimums nahegelegt hat, dadurch zustande kommen, daß die Kugeln der zweiten Kugellage die Kugeln der ersten Lage so in den Positionen verändern, daß die besetzten Lücken auf Kosten der unbesetzten größer werden. Diesen Umstand kann der Algorithmus von **KS-OPT** nicht nachvollziehen, da er alle optimierten Kugeln als ortsfest ansieht. Die Form des zweiten Maximums der axialen Porositätsverteilung charakterisiert die Durchdringung der ersten beiden Kugellagen. Die große Streuung der Meßwerte von Daszkowski [74] läßt aber keine Aussage darüber zu, ob ein ähnlicher Verlauf auch bei der realen Schüttung vorliegt.

Bei den von **KS-OPT** generierten Schüttungen ist die Lage des zweiten Minimums etwas zu höheren Bodenabständen verschoben und weniger dicht als die Meßwerte von Daszkowski [74]. Dies deutet darauf hin, daß im Schüttungsmodell deutlich weniger Kugeln als bei dem von Daszkowski [74] vermessenen Festbett vorhanden sind. Für diese Interpretation der simulierten Daten spricht auch die größere Breite des Minimums der Simulation (Abbildung 7-11). Der Grund hierfür ist wahrscheinlich ein Zusammenfallen des Minimums mit der Schulter bzw. dem Minimum, das nach Ridgway und Tarbuck [240] bei der Durchdringung von Kugellagen entsteht. Dieses Zusammenfallen des Minimums der zweiten Schicht mit dem Minimum des Übergangsbereichs zwischen der zweiten und der dritten Schicht kann die Verschiebung des dritten Maximums erklären. Das dritte Maximum würde in diesem Fall nicht das Ende der zweiten Schicht markieren, sondern das Ende des Übergangsbereichs zwischen der zweiten und dritten Schicht, das sich gemäß Ridgway und Tarbuck [240] bei höheren Bodenabständen ϕ befindet als die Grenze der zweiten Schicht.

Ab dem dritten Maximum läßt sowohl die axiale Porositätsverteilung von Daszkowski als auch die des Schüttungsmodells keine eindeutige Abgrenzung der Extrema mehr zu. Der zufällige Charakter der Schüttung überwiegt gegenüber dem ordnenden Einfluß der Wand (Abbildung 7-11 und Abbildung 7-12).

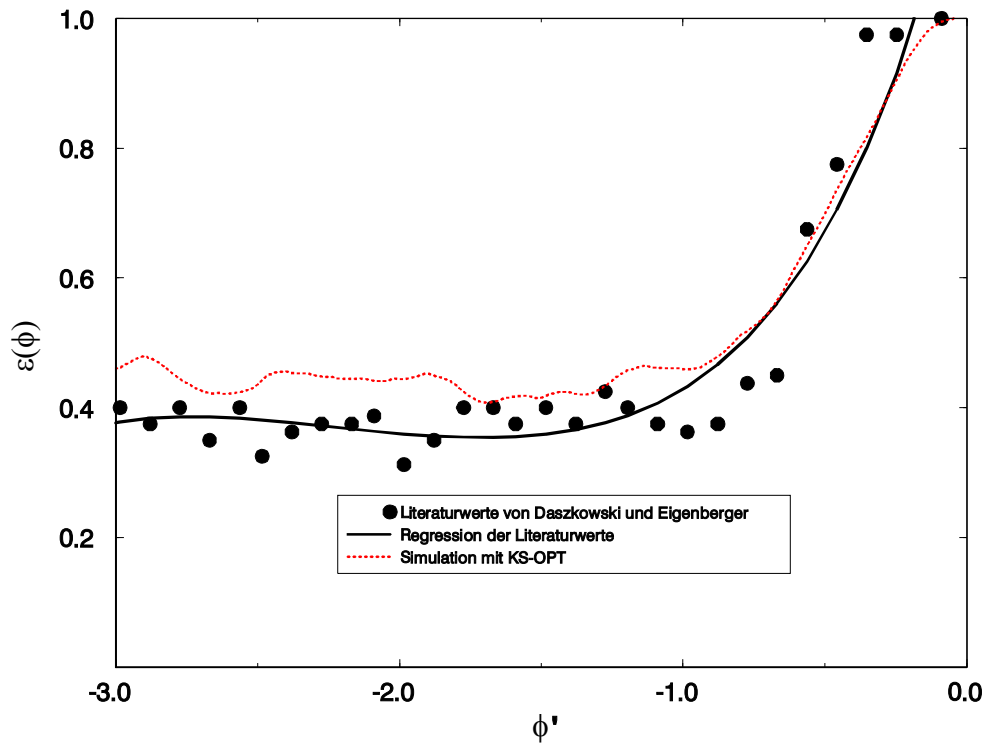


Abbildung 7-12: Vergleich der axialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$ von Daszkowski und Eigenberger [74] mit einer analogen von KS-OPT generierten Schüttung ($a_{pt} = 0,16$, $n_{opt} = 3$, gemessene erste Kugellage, Reaktorkopf).

Wie in Abbildung 7-12 dargestellt ist, bleibt die zufällige Struktur bis zum Ende der Schüttung erhalten. In der Höhe H_S ($\phi' = 0$) erreichen die beiden in Abbildung 7-12 dargestellten axialen Porositätsverteilungen den Wert eins. Diese axiale Koordinate wird nur durch einen Punkt der höchsten Kugeln erreicht. Der steilere Anstieg der axialen Porositätsverteilung bei Daszkowski [74] resultiert wahrscheinlich aus dem Bestreben des Experimentators, die Höhen in der obersten Lage zu vereinheitlichen. Dies erklärt auch das Minimum bei ein Kopfabstand ϕ' von ca. 0,9 in der Messung von Daszkowski [74]. Es ist wahrscheinlich durch leichtes Andrücken der obersten Lage entstanden. Stanek und Eckert [277] gehen in ihrer Arbeit einen Schritt weiter und verdichten die Schüttung von oben, so daß sie ein Spiegelbild der axialen Porositätsprofile am Boden erhalten. Bei den Kugelschüttungen, die mit **KS-OPT** erstellt wurden, ist die letzte Kugellage nicht bearbeitet, so daß die axiale Porositätsverteilung am Reaktorkopf das Verhalten einer ungeglätteten Schüttung wiedergibt.

Der Vergleich der Messwerte einer dichten und einer lockeren Schüttung von Stanek und Eckert [277] mit einer Kugelschüttung, die mit **KS-OPT** erzeugt wurde, ist in Abbildung 7-13 darstellt. Die dichte Packung erzeugten Stanek und Eckert [277], indem sie Glaskugeln mit einem Durchmesser d_p von 10 mm in einen leeren Zylinder schütteten, der einen Innendurchmesser von 247 mm hat. Um lockere Schüttungen zu erstellen, wurden die Glaskugeln in einen mit Ethanol gefüllten Zylinder geschüttet. Der Vergleich der beiden Schüttungen zeigt, daß die Extrema der lockeren Schüttung weniger ausgeprägt sind, als die der dichteren Schüttung und die Schüttung ein eher zufälliges Verhalten erreicht. Der Vergleich von weiteren lockeren und dichten Packungen mit anderen Durchmesserhältnissen, die in der Arbeit von Stanek und Eckert [277] dargestellt sind, stützen diese These. Hieraus kann gefolgt werden, daß die geringere Zahl an erkennbaren Extrema der axialen und radialen Porositätschwankungen und ihre geringere Ausprägung eine Folge einer geringeren Dichte sind.

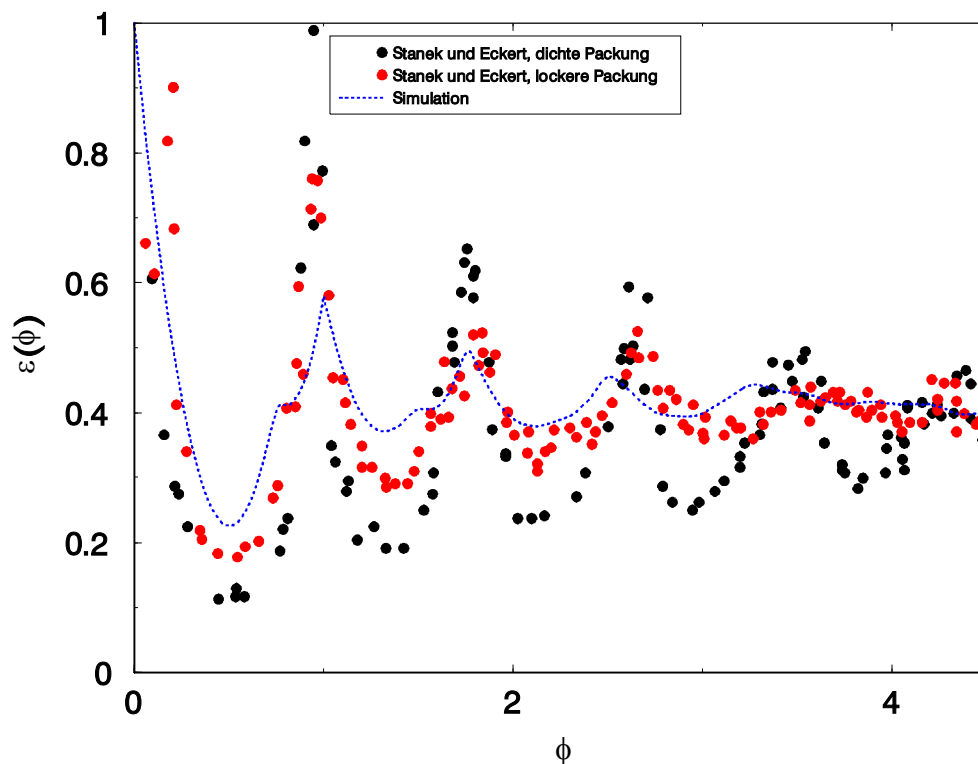


Abbildung 7-13: Vergleich der axialen Porositätsverteilungen der mit **KS-OPT** simulierten Schüttungen mit den experimentellen Werten von Stanek und Eckert [277] (Ausschnitt mit $\phi \leq 5$, $n_{opt} = 2$; die geometrischen Parameter der Schüttung wurden Stanek und Eckert [277] run 9 und 10 entnommen.)

Die beiden dargestellten Meßkurven von Stanek und Eckert [277] deuten die Undifferenzierbarkeitsstelle bei einem Bodenabstand ϕ von etwa eins an, die auch im Modell gefunden wurde. Aber die in den axialen Porositätsverteilungen des Kugelschüttungsmodells auftretenden Überlappungszonen werden durch die Meßwerte nicht bestätigt, können aber bedingt durch die große Streuung bzw. die geringe Zahl der Meßwerte in den betreffenden Bereichen des zweiten und dritten Maximums nicht widerlegt werden. Für die im Vergleich mit Messungen von Daszkowski [74] (s. Abbildung 7-11) und Klingman und Lee [163] sehr breiten Minima der Messung konnte der Autor in den Veröffentlichungen von Stanek [277] sowie Stanek und Eckert [277] keine Hinweise entnehmen.

Auf eine Darstellung der Meßwerte von Klingman und Lee [163] wird hier verzichtet, da sie gegenüber den hier dargestellten axialen Porositätsverteilungen keinen weiteren Erkenntnisgewinn bringen.

Die Abbildung 7-14 zeigt den Vergleich der axialen Porositätsverteilungen der Simulationen von Spedding und Spencer [275] und von **KS-OPT**. Deutlich werden die in Tabelle 9 dargestellten Kernporositäten ε_M nachvollzogen. Hier zeigt sich auch die höhere Kernporosität des Towers 1 gegenüber der Simulation von **KS-OPT**. So ist die axiale Porositätsverteilung von Tower 1 ab dem Bodenabstand ϕ von 3,0 dichter als die der von **KS-OPT** generierten Schüttung.

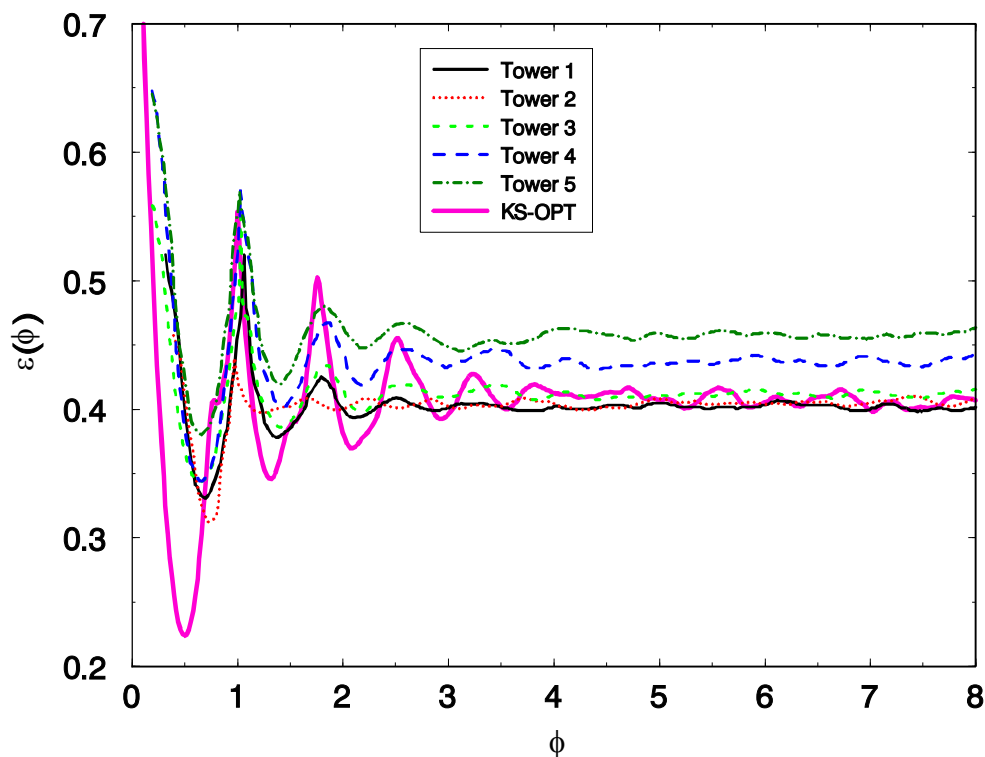


Abbildung 7-14: Vergleich der axialen Porositätsverteilung einer von **KS-OPT** erstellten Simulationen mit denen von Spedding und Spencer [275] ($a_{pt} = 0,02$, $a_{Hp} = 250$, $n_{opt} = 3$, Eigenschaften der Tower 1 bis 5 sind in Tabelle 9 dargestellt).

Im Bereich, der dem Boden näher ist, sind die Extrema der Schüttung von **KS-OPT** ausgeprägter als bei Spedding und Spencer [275]. Dies könnte daran liegen, daß die Packung von **KS-OPT** in diesem Bereich dichter oder besser geordnet ist. Für diese Vermutung spricht der Vergleich der lockeren und dichten Schüttungen von Stanek und Eckert [277], die relativ zueinander ein ähnliches Verhalten zeigen. Dabei entsprechen die größer ausgeprägten Extrema der Simulationen, die von **KS-OPT** erzeugt wurden, besser den realen Verhältnissen als die von Tower 1 bis 5 von Spedding und Spencer [275].

Eine weitere deutliche Differenz zeigt sich in den ersten Minima. Sie sind bei den Schüttungen von Spedding und Spencer [275] deutlich zu höheren Bodenabständen verschoben, als bei den Messungen von Daszkowski [74], Klingman und Lee [163] sowie von Stanek und Eckert [277]. Dies könnte an einer relativ geringeren Kugelzahl in dieser Lage liegen. Durch diese geringe Kugelzahl schiebt sich die zweite Kugellage soweit in die erste, daß die Überlappungszone der beiden Schichten bis zum Minimum der ersten Lage reicht. Durch diese Konstellation kann das Minimum der ersten Schicht mit dem Minimum der Überlappungszone interferieren und bei höheren Bodenabständen ein gemeinsames Minimum bilden. Dabei entspricht der Verlauf des ersten Minimums der Tower 1, 3 und 5 am ehesten einer zufälligen Kugellage. Dies läßt auch ihre Entstehung vermuten, da alle ersten Kugellagen mit einem Kugelfallalgorithmus erzeugt wurden. Die Schüttungen, die mit **KS-OPT** erzeugt wurden, entsprechen, wie der Vergleich mit der Literatur gezeigt hat, den Messungen besser als die Simulationen von Spedding und Spencer [275].

Damit ist **KS-OPT**, obwohl es im Vergleich mit dem Tower 1 von Spedding und Spencer [275] eine geringfügig höhere Porosität besitzt, besser für den Einsatz als Basis für weitere Simulationsrechnungen geeignet. Denn gerade eine realitätsnahe Wiedergabe der Region am Reaktorboden, wie sie von **KS-OPT** gewährleistet wird, kann eine gute Übereinstimmung von Strömungssimulation und Messungen im Auslauf der Schüttung bedingen. Sowohl das Modell als auch der reale Reaktor werden aber im Auslauf maßgeblich durch die letzte Reaktorschicht bestimmt [178].

7.1.4 Vergleich der 2D-Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi, \phi)$ mit Literaturwerten

Zweidimensionale Porositätsbeschreibungen sind in der Literatur z.Z. auf Modelle beschränkt. Messungen dieser Verteilungen oder Ableitungen aus dreidimensionalen Messungen konnte der Autor nicht finden. Die zum Vergleich herangezogenen Porositätsverteilungen von Foumeny, Bailey und Afandizadeh-Zargari [106], von Klingman und Lee [162] sowie von Daszkowski [74] unterscheiden sich deutlich von dem in dieser Arbeit genutzten Ansatz.

So beschreibt die zweidimensionale Porositätsfunktion $\varepsilon'(\chi, \phi)$ (7-15) von Foumeny, Bailey und Afandizadeh-Zargari [106] nicht die ganze Schüttung, sondern nur deren Kopf. Aus einer Anpassung von Meßwerten leiten die Autoren [106] folgende Beziehung für die Porositätsverteilung $\varepsilon'(X, \Phi)$ ab:

$$\varepsilon'(X, \Phi) = f_1 + f_2 * \exp\left(\frac{f_3}{\Phi^\lambda}\right) - f_4 * \left(\frac{1}{\Phi} + \frac{1}{X + a_p}\right) \quad (7-15)$$

Die Parameter f_1 bis f_4 sind Anpassungsparameter an das jeweilige Durchmesser Verhältnis a_{pt} , wobei die Werte dieser Parameter für jede Schüttung einzeln angegeben werden [106]. Mit der Variablen Φ bezeichnen Foumeny, Bailey und Afandizadeh-Zargari [106] den Abstand vom Einlaß, der sich über der Schüttung befindet. Die Variable X beschreibt einen dimensionslosen Wandabstand, wobei offen ist, mit welcher Länge die Normierung vorgenommen wurde. Aus diesem Grund kann an dieser Stelle nur ein qualitativer Vergleich stattfinden.

Wie in der Gleichung (7-15) zu erkennen ist, kann diese Porositätsfunktion $\varepsilon'(X, \Phi)$ weder die Porositätsschwankungen in radialer noch die in axialer Richtung wiedergeben. Diese sind für eine ab-initio Simulation der radialen Dispersion wichtig [178], da ohne sie keine radialen Ströme mit Ausnahme der Diffusion existieren. Dieses Manko wurde auch von den Autoren [106] erkannt. Sie weisen daher daraufhin, daß mit Modellen, denen es gelänge, auch die radialen und axialen Porositätsschwankungen wiederzugeben, ein bessere Beschreibung der Transportprozesse möglich wäre.

Ein weiteres Problem der Porositätsfunktion $\varepsilon'(X, \Phi)$ ist, daß sie Porositäten liefert, die größer als eins sind, d.h. die außerhalb des Wertebereichs liegen. Auf diesen Punkt gehen die Autoren [106] nicht weiter ein, weshalb auf eine Verwendung der Funktion in dieser Arbeit verzichtet wurde.

Bei der zweidimensionalen Betrachtung von Klingman und Lee [162] wird die Höhe der von ihnen genutzten Bilanzvolumina des Modells durch die axiale Porositätsverteilung bestimmt. Ansonsten basieren die Rechnungen der beiden Autoren [162] auf einer radialen Porositätsverteilung. Die Zweidimensionalität dieses Modells wird durch den Aufbau der Bilanzvolumina erreicht, so daß die zweidimensionale Beschreibung des Reaktors nicht vom Strömungsmodell getrennt werden kann, wie dies bei Daszkowski [74] und in dieser Arbeit der Fall ist. Daher kann ein Vergleich der mit **KS-OPT** erzeugten Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ mit der Reaktorbeschreibung von Klingman und Lee [162] nicht vorgenommen werden.

Daszkowski entwickelt in seiner Arbeit [74] eine zweidimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon^\circ(r, z)$ (7-16), die aus den axialen und radialen Porositätsverteilungen berechnet wird.

$$\varepsilon^\circ(r, z) = \varepsilon(r) + a(z) * (1 - \varepsilon(r)) \quad (7-16)$$

Die radiale Porositätsverteilung entnimmt Daszkowski [74] der Porositätsfunktion $\varepsilon'(\chi)$ von Cohen und Metzner [66]. Letzteres ist im Hinblick auf kleine Durchmesserhältnisse a_{pt} problematisch, da die radiale Porositätsfunktion von Cohen und Metzner [66] ((7-17) bis (7-19)) nur bis zu einem Durchmesserhältnis $a_{pt} < 0,1$ gültig ist. Für größere Verhältnisse weicht das erste Minimum mit einer Position von 0,5 deutlich von den Werten ab, die Benenati und Brosilow [19] gemessen haben. Die axiale Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$ entnahm Daszkowski [74] einer eigenen Messung.

Randzone ($0 \leq \chi \leq 0,25$):

$$\varepsilon'(\chi) = 1,0 - 4,5 * \left(\chi - \frac{7}{9} \chi^2 \right) (1 - \varepsilon_M) \quad (7-17)$$

Schwingungszone ($0,25 < \chi \leq 8,0$):

$$\varepsilon'(\chi) = \varepsilon_M + 0,3463 * \exp(-0,4273 * \chi) * \cos\left((2,4509 * \chi - 2,2011) * \pi\right) * (1 - \varepsilon_M) \quad (7-18)$$

Kernzone ($8,0 < \chi$):

$$\varepsilon'(\chi) = \varepsilon_M \quad (7-19)$$

Um die axialen und radialen Werte zu verknüpfen, führt Daszkowski [74] die Funktion $a(z)$ ein (7-20) :

$$\frac{2}{R} \int_0^R [\varepsilon(r) + a(z)(1 - \varepsilon(r))] r dr = \varepsilon(z) \quad (7-20)$$

Eisfeld [95] konnte die aus (7-20) resultierende zweidimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon^\circ(r,z)$ in die folgende Form überführen (7-21):

$$\varepsilon^\circ(\chi, \phi) = \varepsilon(\chi) + \frac{\varepsilon(\phi) - \varepsilon_g}{1 - \varepsilon_g} (1 - \varepsilon(\chi)) \quad (7-21)$$

Um die zweidimensionalen Porositätsverteilungen $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ von Daszkowski [74] mit den Rechnungen von **KS-OPT** vergleichbar zu machen, wurden die in der Gleichung (7-21) benötigten, eindimensionalen Verteilungen $\varepsilon(\chi)$ und $\varepsilon(\phi)$ dem gleichen Schüttungsmodell entnommen wie die zweidimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$.

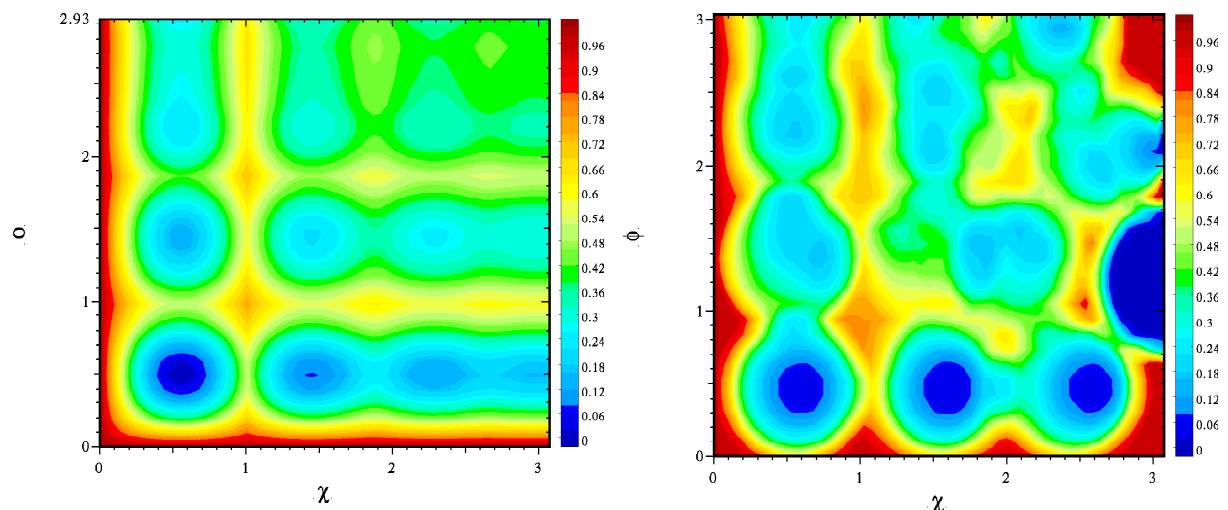


Abbildung 7-15: Zweidimensionale Porositätsverteilung nach Daszkowski (links) und Limberg (rechts) ($a_{pt} = 0,16$, $n_{opt} = 3$, gemessene erste Kugellage)

In der Abbildung 7-15 sind die ersten fünf Bodenabstände beider Porositätsverteilung dargestellt. Mit der Integration der Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ über die Länge des Reaktors H_S (4-13) oder den Reaktorradius R (4-11) geht ein Informationsverlust einher. So kann die radiale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ nur die über die Reaktorhöhe gemittelte Verteilung der Porosität beschreiben. Sie ist aber nicht in der Lage, die Verteilung der Porosität in einer bestimmten Höhe über dem Radius anzugeben. Dieser Informationsverlust kann, wie die radiale Porositätsverteilung $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ von Daszkowski [74] zeigt, nicht durch Rekombination der eindimensionalen Verteilungen zurückgewonnen werden (Abbildung 7-15, links).

Am deutlichsten wird dieser Informationsverlust in der ersten Kugellage. Während die in dieser Arbeit verwendete Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ die zwei Kugelringe und die mittlere Kugel der ersten gemessenen Kugellage ($a_{pt} = 0,16$) gut wiedergibt (Abbildung 7-15, rechts), zeigt die zweidimensionale Verteilung $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ von Daszkowski [74] ein anderes Bild (Abbildung 7-15, links). So kann die Porositätsverteilung $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ weder die Porosität von null innerhalb der mittleren Kugel vorhersagen noch die Leerräume am Reaktorboden zwischen den Kugelringen. Der problematischste Bereich der zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ von Daszkowski [74] ist der Bereich um die Position $\{0,5; 0,5\}$ (Abbildung 7-15, links). Dort vermutet Eisfeld [95] aus theoretischen Überlegungen, dass die Porosität in diesem Bereich durch die Rekombination der eindimensionalen Verteilungen $\varepsilon(\chi)$ und $\varepsilon(\phi)$ zu hoch ist.

tischen Erwägungen negative Porositäten, was durch die in dieser Arbeit erstellten Modelle bestätigt wird. Negative Porositäten sind definitionsgemäß unzulässig. Daszkowski erwähnt in seinen Veröffentlichungen [74 - 76] dieses Problem nicht, was auf die schlechtere Auflösung seiner Porositätsverteilung hindeutet, da bei der Diskretisierung der Porositätsverteilung eine Mittelung dieses Bereichs mit seinen Nachbarn höherer Porosität denkbar ist, so daß die negativen Porositäten verschwinden. Um für die Simulationsrechnungen die zweidimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ von Daszkowski [74] für Vergleiche nutzen zu können, werden alle negativen Porositäten auf null gesetzt, um eine physikalisch sinnvolle Beschreibung zu erhalten.

Eine weitere Folge des von Daszkowski [74] beschrittenen Weges ist eine gegenüber den Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi, \phi)$ höhere Detailarmut im Inneren der Schüttung. Sie wird durch den oben genannten Informationsverlust bei der Verwendung von eindimensionalen Porositätsverteilungen verursacht. Verstärkt wird dies durch den von Cohen und Metzner verwendeten Ansatz [66] im Schüttungskern eine konstante Porosität ($\chi > 8$) anzusetzen (7-19). Diese für die eindimensionale Betrachtung sinnvolle Beschreibung scheint aber bei einer zweidimensionalen Betrachtungsweise nicht sinnvoll, da gerade nahe der Reaktorachse wenige bzw. keine Kugeln die Porosität bestimmen. Diese wenigen Kugeln bewirken z.B., daß große Dichteänderungen entlang der Reaktorachse auftreten. Letztere können mit den zweidimensionalen Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi, \phi)$ der von **KS-OPT** erzeugten Schüttungen erfaßt werden. Dies sollte bei den auf dieser Verteilung basierenden Simulationen zu einer größeren Realitätsnähe führen und stellte für den Autor den Ansatz zur direkten Bestimmung der radialen Dispersion mittels eines geeigneten Strömungsmodells dar.

Verglichen mit den zweidimensionalen Porositätsverteilungen anderer Autoren [74, 106] zeigt einzig die vom Autor gefundene zweidimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ axiale und radiale Porositätsschwankungen, wie sie von Foumeny, Bailey und Afandizadeh-Zargari [106] sowie von Limberg [178] als Grundlage für eine bessere Simulation von Schütttschichtreaktoren gefordert werden.

7.2 Ergebnisse der Strömungssimulationen

Wichtige Meßparameter zur Charakterisierung der Durchströmung von Festbettreaktoren sind der Druckverlust über dem Festbett, die axiale und die radiale Dispersion sowie die Strömung hinter der Schüttung [154]. Der Druckverlust⁴⁸ ist ein relativ einfach meßbarer Parameter, der auch noch im Betrieb eines Reaktors gemessen werden kann. Die axiale Dispersion⁴⁹ ist eine ähnlich weitverbreitete Größe zur Charakterisierung von Festbettreaktoren. Seltener sind Messungen der radialen Dispersion⁵⁰, denn damit geht ein nicht unerheblicher Meßaufwand einher. Ähnliches gilt für die radial gemittelten Strömungsverteilungen hinter der Schüttung⁵¹. Letztere werden oft genutzt, um die Strömungsverteilung in der Schüttung zu charakterisieren [25, 26, 74].

Trotz der großen Zahl an veröffentlichten Messungen auf dem Gebiet der Festbettreaktoren sind weitere Messungen am vorgestellten Referenzreaktor notwendig, um die Modelle **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D** bewerten zu können. Neben den radial gemittelten Strömungsverteilungen zur Validierung des Netzwerkmodells **TriKaMo-3D** sind Messungen der Strömungsverteilung über den gesamten Reaktorquerschnitt notwendig, zumal Messungen des Druckverlusts und der radialen Dispersion für die verwendeten Durchmesserhältnisse a_{pt} selten [89, 99, 167] oder auf den laminaren Strömungsbereich beschränkt [191] sind.

Eine Messung der axialen Dispersion mußte verworfen werden, da die apparativen Voraussetzungen für eine Impulsmarkierung nicht gegeben waren. Es hätte eine Sprungmarkierung zur Bestimmung des Dispersionskoeffizienten D_{ax} verwendet werden müssen, bei der eine permanente Zuführung des Tracers während der Messung notwendig ist. Als Tracer sollte Kohlendioxid eingesetzt werden, dessen Dosierung im Prozentbereich nötig gewesen wäre, um eine Beeinflussung der Messung durch die CO_2 -Konzentration in der gefilterten und getrockneten Luft zu vermeiden. Durch die hohe Konzentration wäre aufgrund der großen Volumenströme ein sehr hoher Kohlendioxidverbrauch zu Stande kommen, der aus ökologischen und monetären Aspekten nicht vertretbar war. Da die entsprechende, eigene Referenzmessung der axialen Dispersion fehlte, wurde darauf verzichtet, diese mit den Modellen **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D** nachzuvollziehen, besonders da sie mangels geeigneter Vergleichsdaten nicht hätte validiert werden können.

⁴⁸ [9, 27, 35, 63, 135, 182, 202, 208, 213, 230, 229, 231, 243, 245, 269, 304]

⁴⁹ [11, 15, 20, 23, 43, 46, 50, 51, 60, 61, 71, 86, 92, 93, 105, 106, 110, 125, 127, 129, 137, 138, 143, 153, 155, 158, 167, 170, 180, 189, 200, 201, 207, 212, 225, 228, 248, 290, 305, 306]

⁵⁰ [11, 16, 51, 60, 61, 71, 78, 105, 106, 110, 111, 122, 136, 137, 167, 170, 177, 189, 279, 290, 298, 305, 306, 308, 313]

⁵¹ [25, 26, 49, 74 - 76, 173, 185, 173, 194, 206, 223, 261, 262, 263, 280, 310]

7.2.1 Anmerkungen zu den Simulationen

7.2.1.1 Simulationen mit Epsilon2D

Die Basis der Simulationen mit **Epsilon2D** bilden von **KS-OPT** generierte Schüttungsmodelle in Verbindung mit den von diesen Schüttungen abgeleiteten radialen und zweidimensionalen Strömungsverteilungen. In Strömungsrichtung wird hinter der Schüttung eine Auslaufzone simuliert, deren Länge mit 30 cm angesetzt wurde, da das Modell für größere Abstände nur einen geringfügigen Einfluß der Schüttung auf das Strömungsprofil vorhersagt. Vor der Schüttung wurde eine Zone angelegt, die den Bereich zwischen dem Strömungsvergleichmäßiger und der Schüttung im realen Reaktor widerspiegelt. Aus numerischen Gründen wurde dieser Bereich im Gegensatz zum Experiment von etwa 2 cm auf 20 cm ausgedehnt.

Das Reaktormodell wird zur Lösung mit einem finiten Volumenverfahren gemäß der zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ in Volumenelemente aufgeteilt. Um die Zahl der Volumenelemente innerhalb der Schüttung zu bestimmen, die zur Diskretisierung notwendig sind, wurde ein Gittertest durchgeführt, der am Beispiel der Peclet-Zahl für eine Schüttung ohne Randkriterium in Abbildung 7-16 dargestellt ist. Für die Vergleichsrechnungen werden analog zu Daszkowski die zweidimensionalen Porositätsverteilungen $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ eingesetzt.

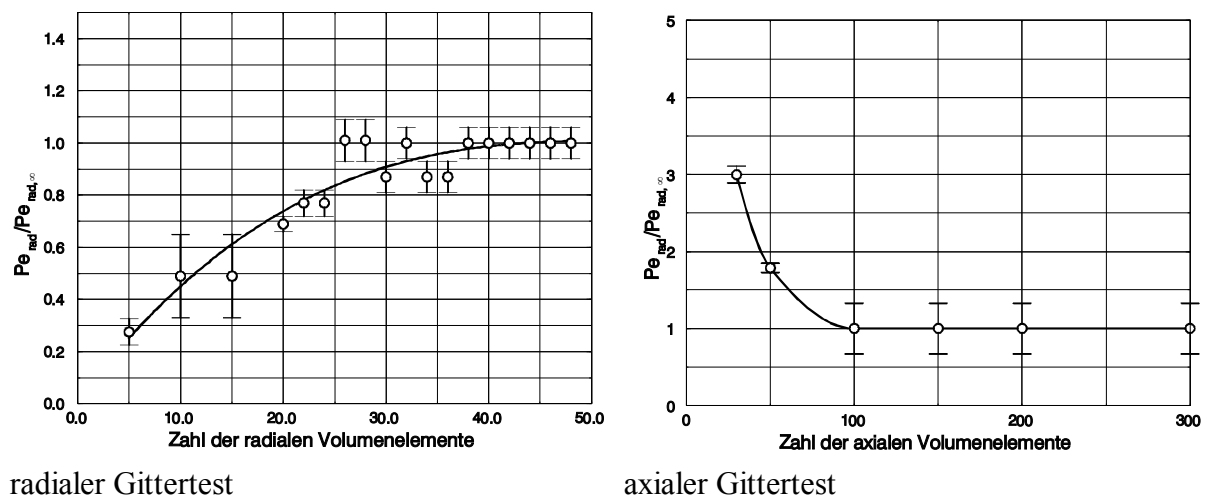


Abbildung 7-16: Gittertest

Beim Gittertest erhöht man die Zahl der Volumenelemente in radialer und axialer Richtung, bis ein konstanter Wert für die Zielgröße erreicht wird. Als Zielgröße ist in der Abbildung 7-16 die radiale Dispersion für einen Reaktor mit einem Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,2 und einem Längenverhältnis a_{Hp} von 50 dargestellt. Dabei zeigt sich, daß 32 radiale und 100 axiale Volumenelemente für diesen Reaktor optimal sind, da mit dieser Anzahl das Ergebnis erreicht werden kann. Eine größere Elementzahl erhöht nur die Rechenzeit, verbessert das Simulationsergebnis aber nicht. Die oben genannten Werte wurden bei den Druckverlusts- und den Geschwindigkeitssimulationen bestätigt.

7.2.1.2 Simulationen mit TriKaMo-3D

Die Grundlage für die im folgenden dargestellten Simulationen von **TriKaMo-3D** bilden Schütungsmodelle, die mit **KS-OPT** generiert wurden. Damit kann, wie in Abbildung 7-17 zu sehen ist, die Umströmung der Kugeln nachvollzogen werden.

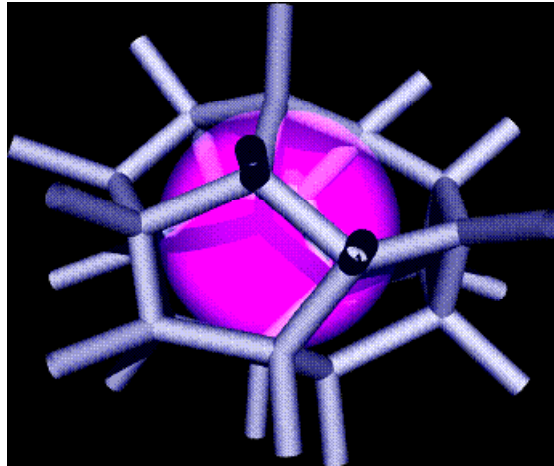


Abbildung 7-17: Simulation der Umströmung einer Kugel mit dem Kanalnetz von TriKaMo-3D

Dies ist im Gegensatz zum Kontinuumsmodell **Epsilon2D** nicht nur in der Nähe der Reaktorachse sondern im gesamten Reaktor möglich. Hiermit ergibt sich eine verbesserte Simulation der radialen Dispersion.

Die Simulation der Durchströmung im Modell **TriKaMo-3D** kann dabei unter Verwendung der Gleichung von Hagen-Poiseuille (6-25) für laminar durchströmte Rohre oder unter Einbeziehung des Gesetzes von Blasius (6-28) für die turbulente Durchströmung durchgeführt werden. Simulationen des ersten Typs werden im folgenden als „laminare Simulationen“ bezeichnet, die des zweiten Typs als „turbulente Simulationen“.

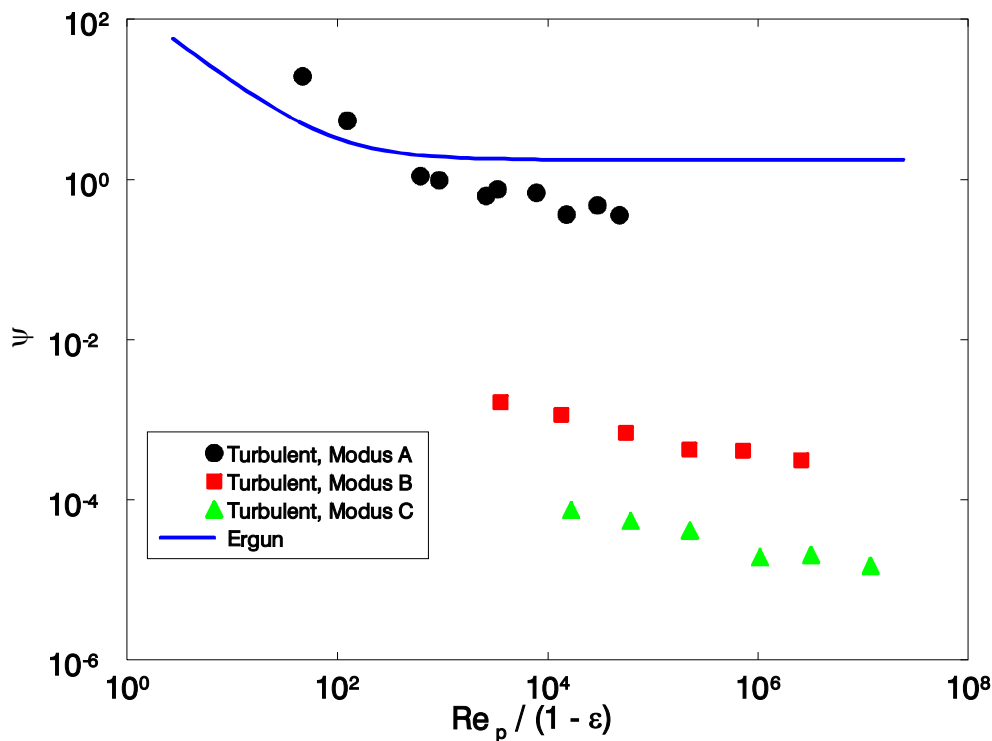


Abbildung 7-18: Vergleich der dimensionslosen Druckverluste ψ in Abhängigkeit von der Kanalgeometrie gemäß den Definitionen auf Seite 67

Von den dargestellten Methoden zur Berechnung der Kanalgeometrien wurde die Methode A ausgewählt, bei der das Gesamtvolumen der Kanäle in einem Körper mit dem jeweiligen freien Volumen übereinstimmt und bei der die Graphen und die Kanäle gleich lang sind. Diese Auswahl wurde aufgrund des Vergleichs der Ergun'schen Beziehung mit den Druckverlusten ψ (Abbildung 7-18) getroffen, die das Modell **TriKaMo-3D** unter Verwendung der einzelnen Methoden zur Kanalgenerierung berechnet. Die Druckverluste nach Ergun und gemäß der Methode A liegen in ähnlichen Größenordnungsbereichen, während die Drücke, die mit den anderen Kanalgeometrien (B bzw. C) simuliert werden, deutlich niedriger sind. Die Abfolge der Druckverluste spiegelt die Kanaldurchmesser und -längen wider, wie sie gemäß den drei Methoden bestimmt werden. So ist der Äquivalentdurchmesser \underline{d}_i , der in der Methode B verwendet wird, größer als die Größe d_i , die sich gemäß der Methode A aus dem freien Volumen und der Länge der Graphen im Kanal ergibt. Somit muß bei gleicher Kanallänge der resultierende Druckverlust bei Verwendung der Methode A geringer sein als bei B. Da die Methode C den Äquivalentdurchmesser \underline{d}_i nutzt und die Volumengleichheit von Kanälen und Leerraumvolumen wieder herstellt, sind die Kanallängen in der Methode C geringer als in A und B, so daß daraus noch kleinere Strömungswiderstände und somit kleinere Druckverluste bei gleicher Anströmgeschwindigkeit resultieren.

Ein Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten bzw. der radialen Peclet-Zahlen erscheint zur Auswahl der Methoden, die zur Kanalgenerierung genutzt werden, nicht sinnvoll, da beide Größen von den Widerständen in den Kanälen und damit vom Druckverlust abhängen.

7.2.2 Druckverlust

Druckverlustmessungen in Festbettschüttungen sind schon lange Gegenstand der Forschung [53], was u.a. an anderer Stelle [94] vorgestellt werden soll. Zwei der bekanntesten Arbeiten auf diesem Gebiet stammen von Ergun und Orning [97, 98]. In diesen Arbeiten wird eine empirische Anpassung einer Druckverlustbeziehung an eine Vielzahl von Messungen vorgestellt. Diese Beziehung (7-22) korreliert den Druckverlust über der Schüttung ($\Delta p/H_s$) mit der Strömungsgeschwindigkeit u , den geometrischen Parametern der Schüttung (Partikeldurchmesser d_p und Porosität ε_g) sowie mit der Dichte und der dynamischen Viskosität als Stoffgrößen des Fluids.

$$\frac{\Delta p}{l} = 150 * \frac{(1 - \varepsilon_g)^2}{\varepsilon_g^3} \frac{\mu}{d_p^2} u + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon_g)}{\varepsilon_g^3} \frac{\rho}{d_p} u^2 \quad (7-22)$$

μ : dynamische Viskosität

Die Ergun'sche Beziehung für den Druckverlust $\Delta p/l$ besteht aus zwei Teilen. Der erste Term $\left(150 * \frac{(1 - \varepsilon_g)^2}{\varepsilon_g^3} \frac{\mu}{d_p^2} u \right)$ beschreibt den auf die Reaktorlänge normierten Druckverlust einer laminar durchströmten Schüttung. Der zweite Term $\left(1,75 \frac{(1 - \varepsilon_g)}{\varepsilon_g^3} \frac{\rho}{d_p} u^2 \right)$ gibt dagegen den Druckverlust pro Längeneinheit einer turbulent durchströmten Schüttung an [294]. Mit diesen beiden Termen entsteht eine quadratische Form für die Druckverlustbeziehung. Diese quadratische Form wird, wie in der Abbildung 7-19 für ein Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,04 zu sehen ist, sehr gut von den Messungen (Anhang 9.2.1) nachvollzogen.

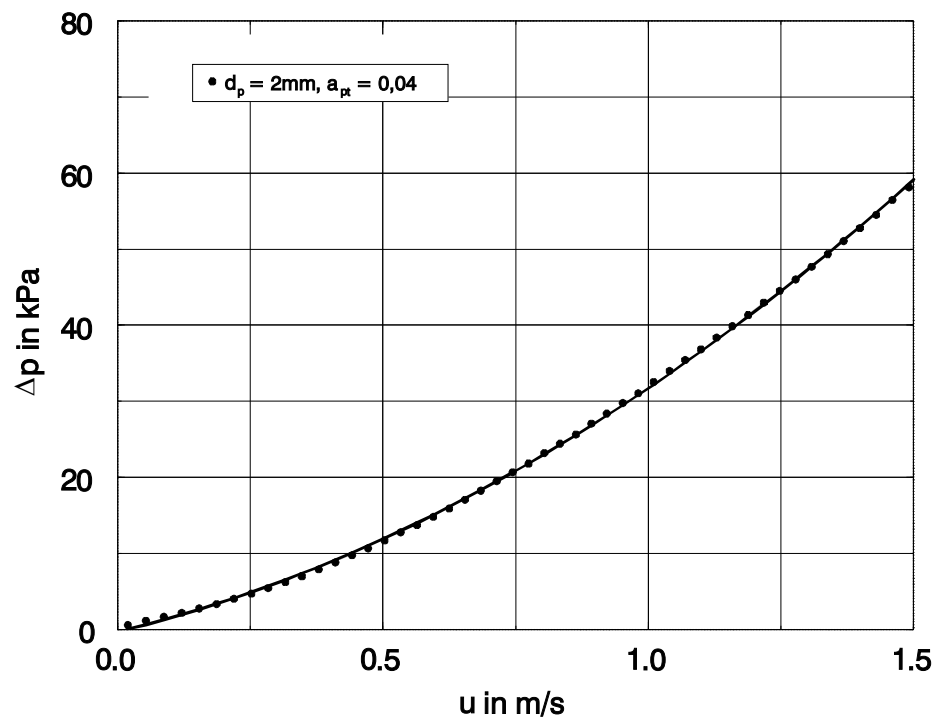


Abbildung 7-19: Druckverlust über dem Reaktor in Abhängigkeit von der Anströmgeschwindigkeit u ($a_{pt} = 0,04$)

7.2.2.1 Experimentelle Druckverluste und deren Vergleich mit Literaturwerten

Die in Abbildung 7-20 darstellten maximalen Fehler wurden gemäß [162] abgeschätzt. Die Hauptursache für die relativ großen Fehler sind Unsicherheiten in der Porositäts- und der Durchmesserbestimmung. Erstere bilden, wie Untersuchungen von Einfeld [94] gezeigt haben, die wichtigsten Einflußparameter, die den mittleren quadratischen Fehler von 19% [94] im Druckverlust der Ergun'schen Gleichung erklären konnten.

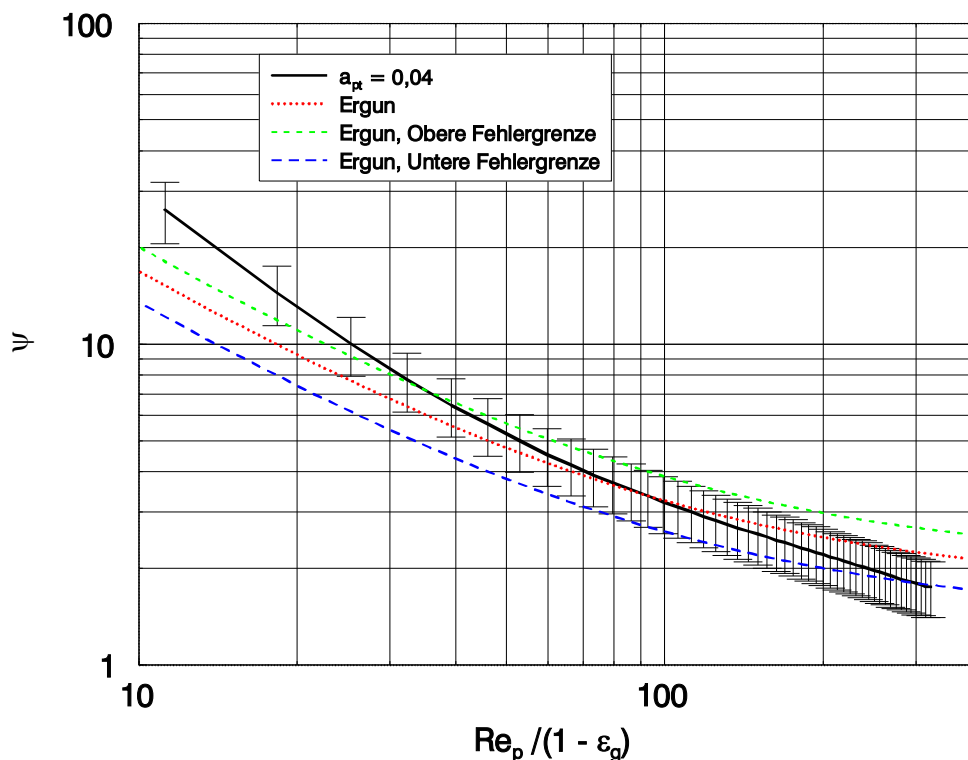


Abbildung 7-20: Dimensionsloser Druckverlust und sein maximaler Fehler im Vergleich zur Ergun'schen Beziehung ($a_{pt} = 0,04$, $a_{Hp} = 497$)

Obwohl die eigenen Messungen teilweise den mittleren quadratischen Fehler der Ergun'schen Gleichung über- bzw. unterschreiten (Abbildung 7-21), fallen die Meßwerte nicht aus dem Gesamtkontext der Messungen heraus, auf die die Anpassung von Ergun und Orning beruhen [94]. Nur der Verlauf der eigenen Messungen ist relativ zur Ergun'schen Beziehung auffällig. So liegt der dimensionslose Druckverlust, der gemäß Gleichung (7-23) definiert wurde, im laminaren Bereich über den von Ergun vorhergesagten Werten. Im turbulenten Bereich kehrt sich dieses Bild um.

$$\psi = \frac{\Delta p * d_p}{H_S * \rho * u^2} * \frac{\varepsilon_g^3}{(1 - \varepsilon_g)} = 150 * (1 - \varepsilon_g) * \underbrace{\frac{\mu}{u * d_p * \rho}}_{Re_p} + 1,75 \quad (7-23)$$

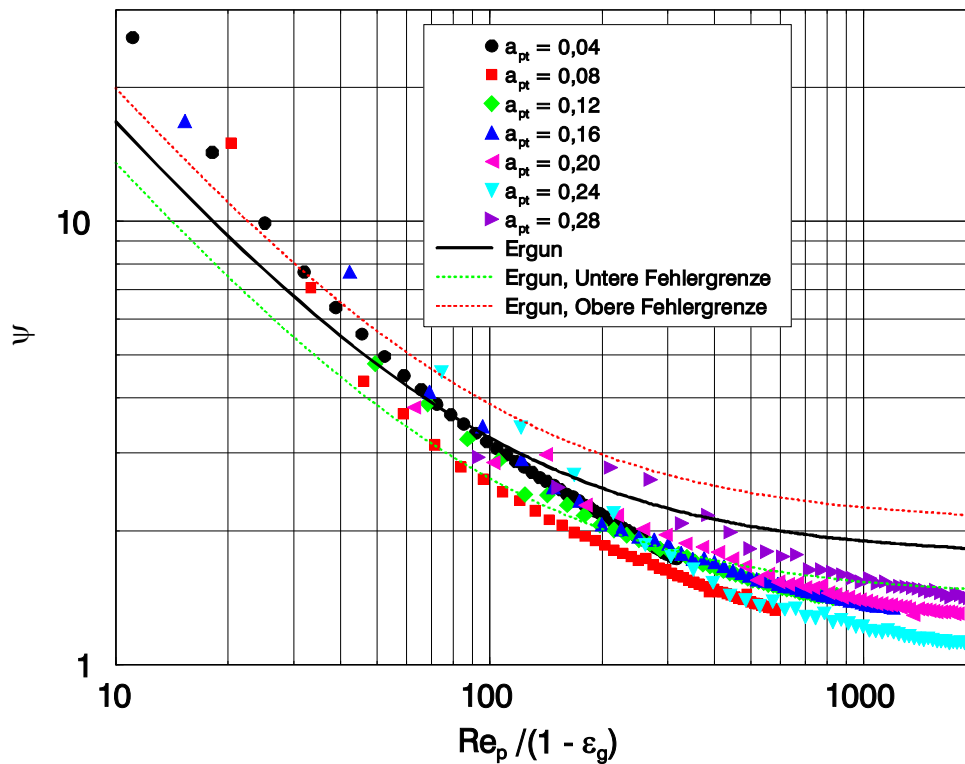


Abbildung 7-21: Dimensionsloser Druckverlust in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} im Vergleich mit dem Ergun'schen Druckverlust

Der Kurvenverlauf entspricht den Messungen von Rose [245], der bei großen Durchmesser Verhältnissen a_{pt} in zufälligen Schüttungen ($a_{pt} < 0,36$) im Bereich von kleinen Reynolds-Zahlen eine Druckverlustserhöhung und bei großen Reynolds-Zahlen eine Druckverlustserniedrigung ermittelte. Ersteres läßt sich mit einem Anstieg der spezifischen Oberfläche begründen, wie dies auch von Coulson [69] berechnet wird. Eine größere Oberfläche führt dazu, daß mehr Fluid an der Wand „haftet“ und aufgrund von viskosen Reibungskräften gebremst wird. Bei einer turbulenten Strömung tritt dieser Effekt in den Hintergrund, viel mehr wird der Druckverlust durch die Trägheitskräfte beeinflusst. Diese nehmen mit steigender Tortuosität zu [245], die aber im Randbereich geringer als im Kern ist, so daß mit zunehmendem Anteil des Wandbereichs der Druckverlust sinken sollte. Für den laminaren Strömungsbereich bestätigen Nield [204] sowie Mehta und Hawley [191] den von Rose [245] angedeuteten Verlauf des Druckverlustes in Abhängigkeit von der Reynolds-Zahl durch theoretische Überlegungen bzw. durch Messungen.

Allerdings müßten sowohl die Reibungs- als auch die Trägheitskräfte mit wachsenden Durchmesser-Verhältnissen a_{pt} größer werden, da der Einfluß des Wandbereichs steigt. Wie sich in Abbildung 7-21 zeigt, ist dies nicht der Fall. Auch eine vorgenommene Parameteranpassung der Ergun'schen Gleichung (7-22) an die einzelnen Meßpunkte, wie sie z.B. von Mehta und Hawley [191] für den laminaren Bereich vorgeschlagen wird, ergab keine auswertbare Tendenz. Ein Grund für den Verlauf der Messungen in Relation zur Ergun'schen Beziehung könnte die asphärische Form der verwendeten Partikel sein, da das Verhältnis von Oberfläche zum Volumen nach Carman [53] direkt in die Druckverlustberechnung eingeht und zumindest für den laminaren Teil mit $6/d_p$ angenommen wird. Dies ist im Hinblick auf die hohen Dichten der vermessenen Schüttungen wahrscheinlich, da auch die geringen Gesamtporositäten ϵ_g auf eine asphärische Form der Partikel hindeuten.

7.2.2.2 Druckverlust im Modell Epsilon2D

Das mit **Epsilon2D** berechnete Reaktormodell kann unter Annahme einer konstanten Porosität innerhalb der Schüttung den Druckverlust gemäß der Ergun'schen Gleichung nachvollziehen (Abbildung 7-22). Bei kleinen Geschwindigkeiten treten jedoch in der Simulation höhere Druckverluste ψ auf, die durch die im Modell berücksichtigte Haftbedingung an der Wand bedingt sind.

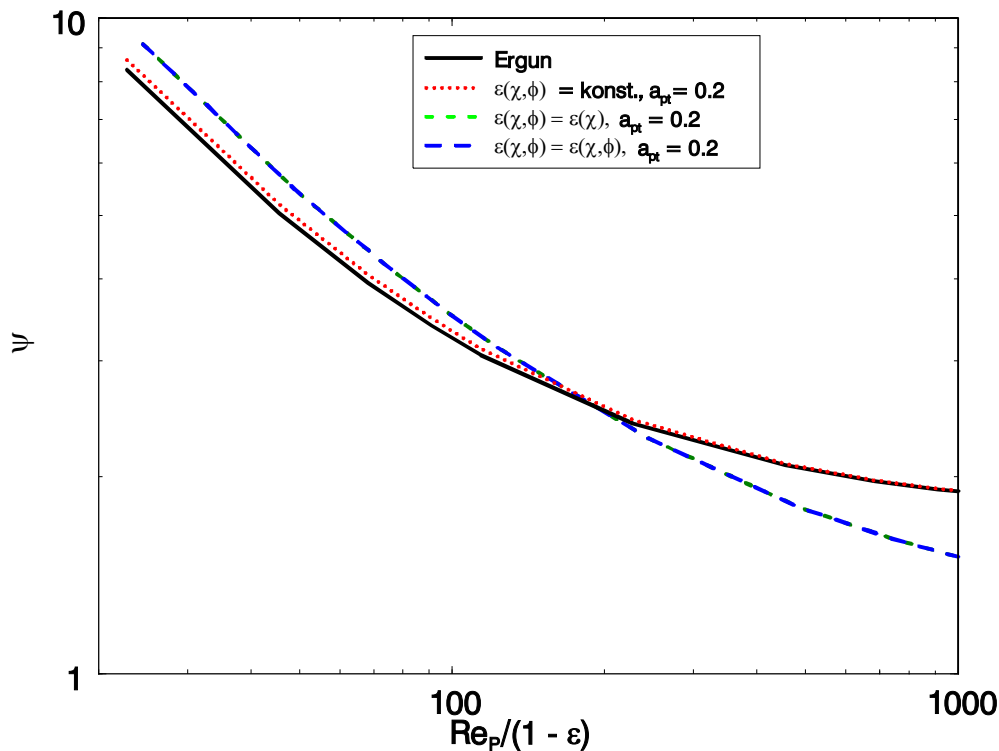


Abbildung 7-22: Vergleich der Simulation (Epsilon2D) mit der Ergun'schen Gleichung ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $a_{Hp} = 50$)

Die Rechnungen von **Epsilon2D** auf der Basis radialer und zweidimensionaler Porositätsverteilungen weisen ein identisches Verhalten auf. Die mit Hilfe von $\varepsilon(\chi)$ und $\varepsilon(\chi, \phi)$ simulierten Druckverluste zeigen ebenfalls das von Rose [245] vermutete Verhalten. So liegen die Druckverluste für Schüttungen mit großem Durchmesser Verhältnis a_{pt} im Bereich größerer Strömungsgeschwindigkeiten unter dem Ergun'schen Druckverlust, im Bereich kleiner Geschwindigkeiten darüber. Dieses Verhalten nimmt mit sinkendem Anteil des Wandbereichs ab (Abbildung 7-23), so daß sich der Verlauf des Druckverlusts mit dem sinkenden Durchmesser Verhältnis a_{pt} der Ergun'schen Beziehung nähert. Die einzige Ausnahme bildet die **Epsilon2D**-Simulation mit einem Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,24, deren geringer simulierter Druckverlust wahrscheinlich durch die besondere Struktur des Schüttungsmodells hervorgerufen wird.

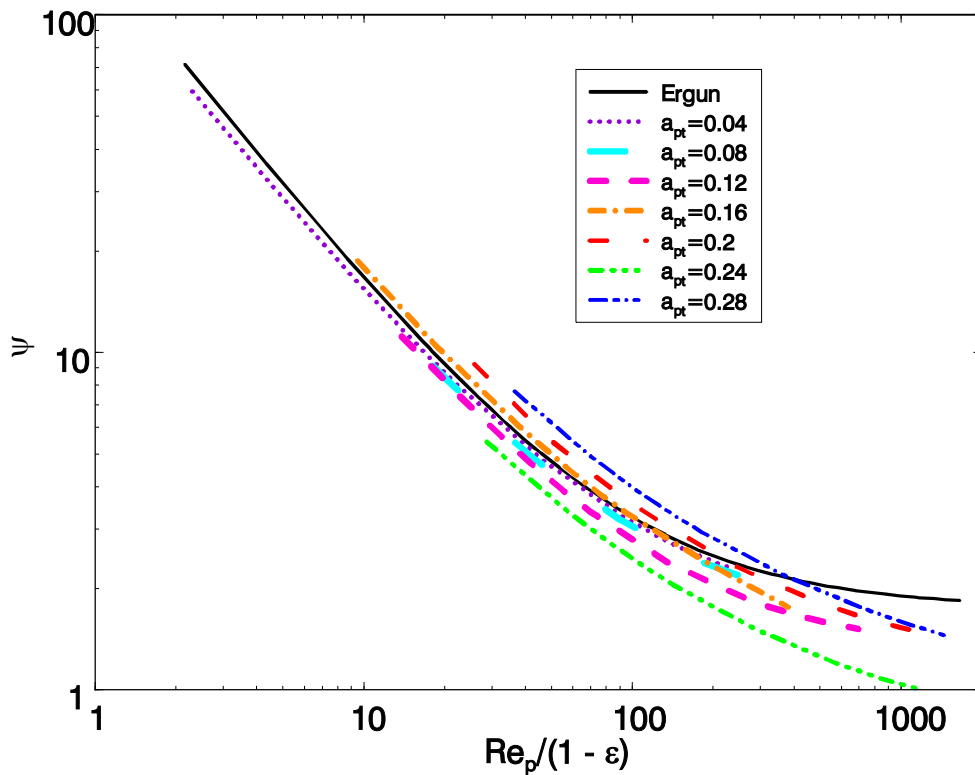


Abbildung 7-23: Druckverlust in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} (Epsilon2D)

Die geringe Dichte beruht vor allem auf einer Zone entlang der Z-Achse (Abbildung 7-24), in der ein nur gelegentlich von Kugeln unterbrochener Freiraum existiert. Für Kugelschüttungen mit einem Durchmesser Verhältnis $a_{pt} \approx 0,5$ wurden solche Anordnungen beobachtet [19, 197], so daß es wahrscheinlich ist, daß auch bei Werten $a_{pt} \approx 0,25$ ähnliche Verhältnisse entstehen. Dies gilt insbesondere dann, wenn man annimmt, daß die Kugelschicht an der Reaktorwand relativ geschlossen ist und alle Kugeln die Wand berühren. Dadurch entstünde ein Bereich im Schüttungskern von etwas mehr als zwei Kugeldurchmessern, der analog dem Kernbereich einer Schüttung mit dem Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,5 ist.

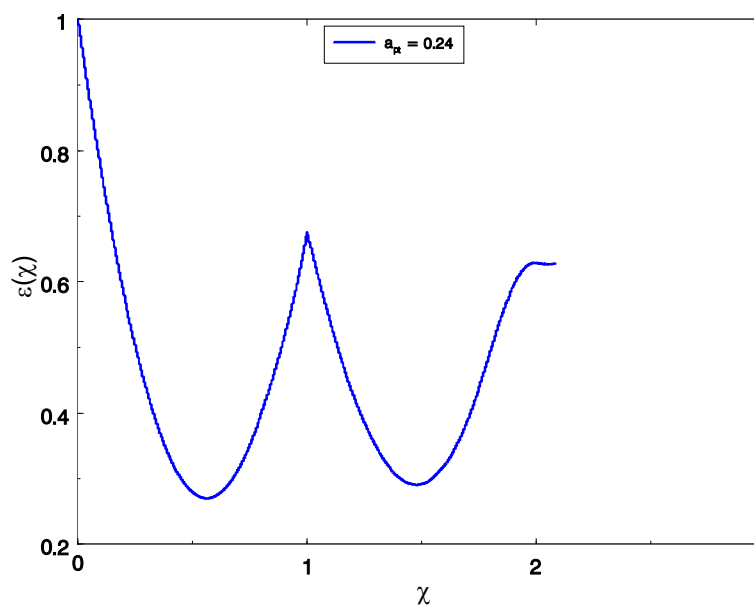


Abbildung 7-24: Radiale Porositätsverteilung der Schüttung $a_{pt} = 0,24$

Der bei dem Schüttungsmodell $a_{pt} = 0,24$ entstehende Freiraum würde über weite Strecken einem Kanal ähneln und damit verglichen mit einer anderen Schüttung eine geringere Tortuosität und eine geringere spezifische Oberfläche besitzen. Diese beiden Eigenschaften können die geringen Druckverluste im gesamten Reynolds-Bereich und somit die Ausnahmestellung (Abbildung 7-23) dieser Schüttung erklären.

Der in der Abbildung 7-25 dargestellte, repräsentative Vergleich zwischen einer Simulation mit **Epsilon2D** und der entsprechenden Messung zeigt eine deutliche Abweichung. Diese Unterschiedlichkeit hat wahrscheinlich ähnliche Ursachen wie die Abweichungen der Meßergebnisse von der Ergun'schen Gleichung. Auch hier könnte die Asphärizität der realen Kugeln die Ursache für die Abweichung sein. Ein anderer Grund für die Differenzen zwischen Simulation und der Messung könnte die Verwendung der Ergun'schen Gleichung in der differentiellen Form sein, wie er im Programm **flowsim** als auch von Vortmeyer et al.⁵² und Eigenberger et al.⁵³ verwendet wird. Dieser Ansatz ist problematisch, da die Ergun'sche Gleichung (7-23) nur integral validiert wurde. Außerdem werden mit der differentiellen Betrachtung die Randbereiche mit ihren hohen Porositäten beschrieben, für die der Ergun'sche Ansatz nicht validiert ist. Dies könnte eine weitere Erklärung für die Abweichung der Simulation von der Messung für den betrachteten Fall ($a_{pt} = 0,2$) sein. Da aber schon die Messung von der Ergun'schen Gleichung in ähnlicher Weise abweicht (Abbildung 7-21), ist die Asphärizität der Kugeln, die sich auch in der relativ hohen Dichte der vermessenen Schüttungen niederschlägt, die wahrscheinlichste Ursache für die Diskrepanz.

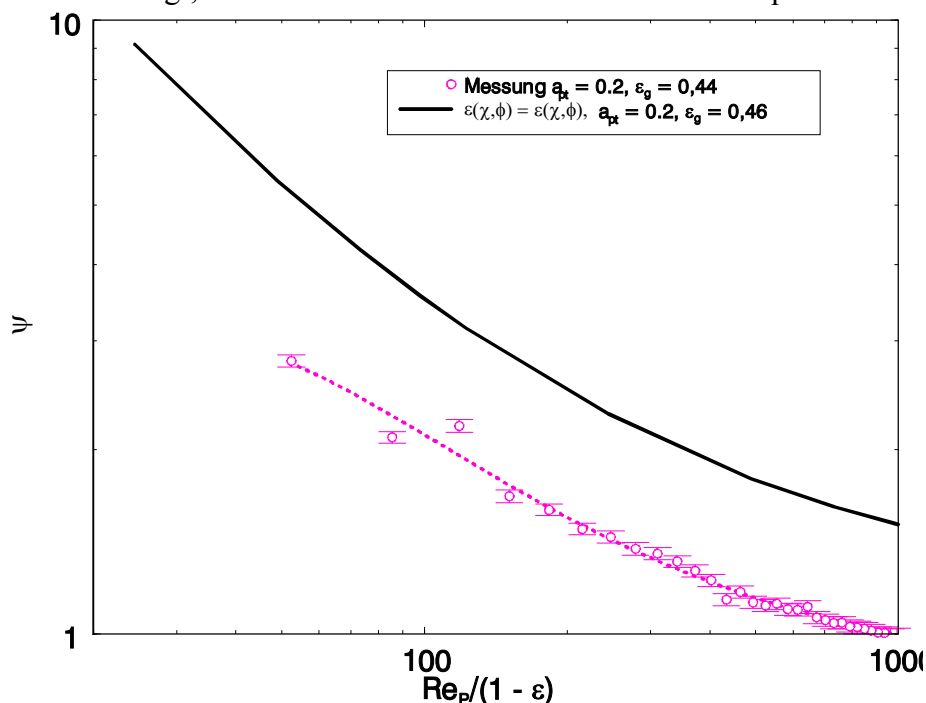


Abbildung 7-25: Vergleich der Simulation mit den Messungen ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $a_{Hp} = 50$)

⁵² [128, 296, 298, 299, 300]

⁵³ [25, 26, 74 - 76]

7.2.2.3 Druckverlust im Modell TriKaMo-3D

Der Vergleich der turbulenten Druckverlustsimulation von **TriKaMo-3D** mit dem Ergun'schen Druckverlust (Abbildung 7-26) zeigt, daß die turbulente Simulation einen zur Ergun'schen Druckverlustbeziehung analogen Verlauf besitzt, so daß sich durch lineare Regression für den dimensionslosen Druckverlust ψ die Beziehung (7-24) ergibt.

$$\psi = 760 \frac{(1 - \varepsilon)}{Re_p} + 0,42 \quad (7-24)$$

$$80 < Re_p < 5 \cdot 10^4, a_{pt} \in [0,12; 0,16; 0,20]^{54}$$

Für kleine Reynolds-Zahlen nähert sich der Druckverlust der turbulenten Simulation asymptotisch den Werten der laminaren Simulation, was gemäß der Ergun'schen Druckverlustbeziehung und dem verwendeten Simulationsverfahren zu erwarten ist. Die Druckverluste $\Delta p/H_S$ sind für eine ausschließlich laminare Betrachtung im Modell **TriKaMo-3D** proportional zum Volumenstrom. Diese Proportionalität wurde von Carman [53] für eine schleichende Strömung abgeleitet und entspricht dem Verhalten, das durch die verwendete Strömungsgleichung (6-33) festgelegt wurde.

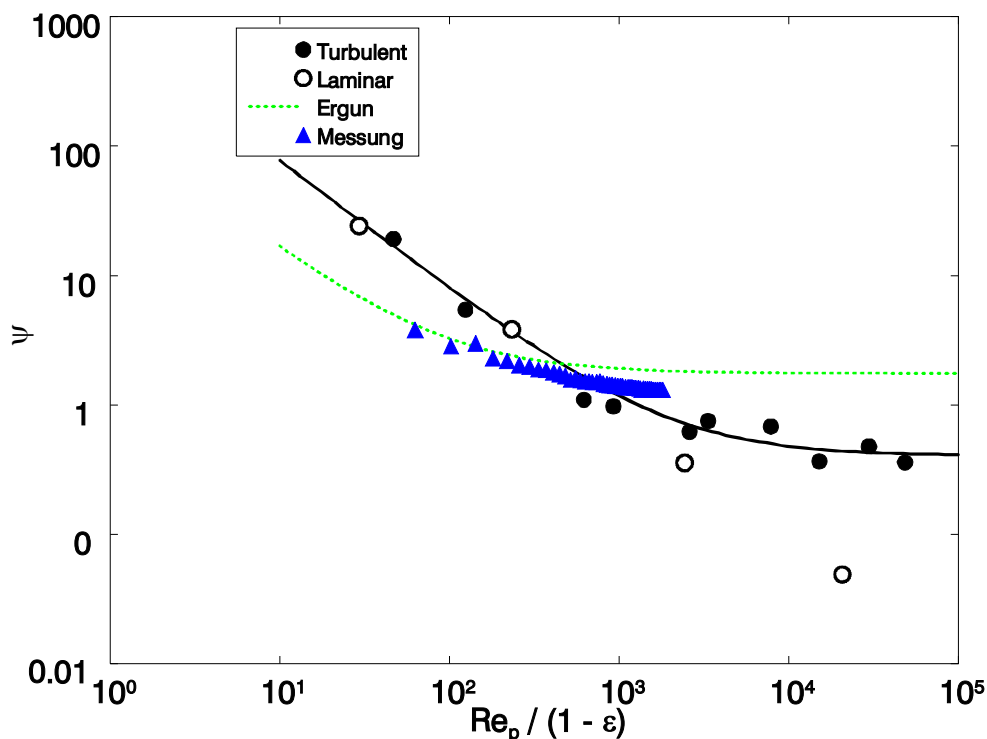


Abbildung 7-26: Vergleich des Ergun'schen Druckverlustgesetzes mit den laminaren und turbulenten TriKaMo-3D-Simulationen ($a_{pt} = 0,2$)

⁵⁴ Korrelationskoeffizient $R=0,9996$

Der Druckverlustverlauf der turbulenten Simulation zeigt in Relation zur Ergun'schen Beziehung, daß der Druckverlust bei einem Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,2 für kleine Reynolds-Zahlen vom Modell überschätzt und für große unterschätzt wird (Abbildung 7-26). Dies entspricht der Erwartung von Rose [245] für zufällige Schüttungen mit einem großen Wert a_{pt} . Die Druckverluste sollten sich mit sinkendem Durchmesser Verhältnis a_{pt} dem Ergun'schen Gesetz annähern. Um dies zu verifizieren, sind in der Abbildung 7-27 die mit **TriKaMo-3D** simulierten, turbulenten Druckverluste gegenüber der Ergun'schen Beziehung aufgetragen. Dabei ist zu erkennen, daß die zuletzt genannte Tendenz nicht erkennbar ist bzw. in der Simulationsgenauigkeit untergeht. Die Genauigkeit der turbulenten Simulation mußte auf etwa 1% der Volumenströme in den Knoten begrenzt werden, um einerseits endliche Rechenzeiten zu erhalten und um andererseits den numerischen Fehler auszugleichen.

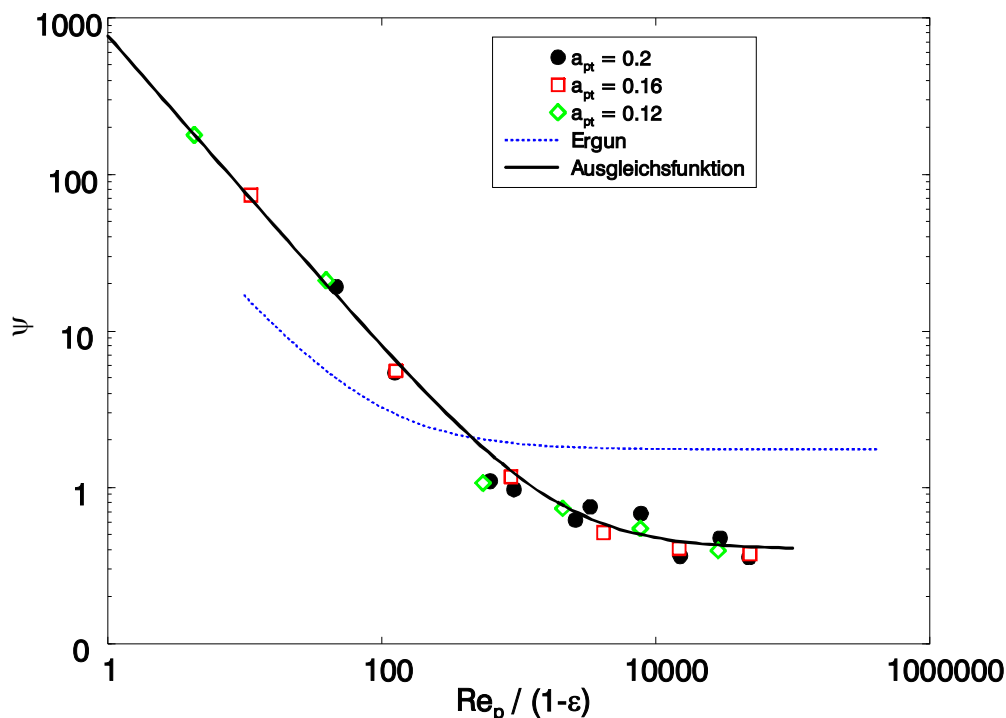


Abbildung 7-27: Druckverlust im Modell TriKaMo-3D in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt}

Ein anderer Grund für die Abweichung vom Ergun'schen Druckverlust könnte gemäß Rose [245] eine Überbewertung der Randbereiche, d.h. von zu großen Kanälen im Modell **TriKaMo-3D** sein. Wenn diese These zutreffend sein sollte, müßte der Vergleich in diesem Bereich erhöhte Strömungsgeschwindigkeiten aufweisen, was im nächsten Kapitel verifiziert werden soll.

Die Darstellung der mit **TriKaMo-3D** berechneten Druckverluste bei drei verschiedenen Durchmesser Verhältnissen a_{pt} im Bereich von 0,12 bis 0,2 zeigen untereinander nur geringe Abweichungen. Sie bestätigen somit nicht die von Rose [245] prognostizierte Abfolge der Druckverluste (Abbildung 7-27). Mit diesem Verhalten spiegeln die Simulationen das Verhalten der Messungen mit gleichen Durchmesser Verhältnissen (Abbildung 7-21) wider. Die Erklärung hierfür sollte sowohl bei der Simulation wie auch bei der Messung in der Struktur begründet liegen. Leider liegen dem Autor keine weiteren Vergleichsmessungen vor, um diese Vermutung verifizieren zu können.

Um den Zusammenhang zwischen der Struktur einer Schüttung und deren Druckverlust zu beschreiben, wären gezielte Schüttungen oder Schüttungsmodelle mit gleichem Durchmesser und gleicher Porosität notwendig. Zur Beschreibung dieser Schüttungsstrukturen sind weitere Parameter notwendig, die z.Z. noch nicht in der Literatur definiert sind. Die Definition solcher Parameter und die Klärung der Strukturabhängigkeit sollten Gegenstand zukünftiger Forschung sein.

7.2.3 Geschwindigkeitsverteilung

Die radiale Geschwindigkeitsverteilung soll in dieser Arbeit dazu dienen, die räumliche Auflösung und die Eigenschaften der Gesamtsimulation unter Verwendung von **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D** zu verdeutlichen. Von besonderer Bedeutung ist hierbei der Einfluß der ersten Kugellage auf die Geschwindigkeit im Nachlauf des Reaktors. Dies gilt insbesondere für die betrachteten Simulationen, da es mit den von **KS-OPT** generierten Kugelschüttungen erstmals gelungen ist, die ersten Kugellagen realer Schüttungen⁵⁵ in die Strömungssimulationen einzubeziehen.

7.2.3.1 Experimentelle Geschwindigkeitsverteilung

Während die Strömungsverteilung hinter dem Reaktor gut mit der ersten Kugellage korrelierbar ist, läßt sich die radiale Geschwindigkeitsverteilung, die durch Mittelung der Geschwindigkeitswerte auf einem Kreisbogen entsteht, mit der radialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ vergleichen. Da im Rahmen dieser Arbeit nur die radiale Porositätsverteilung $\varepsilon^1(\chi)$ der ersten Kugellage zur Verfügung stand, kann nur sie zum direkten Vergleich herangezogen werden, so daß sich die These von Lerou und Froment [173], daß die Strömungsverteilung hinter der Schüttung von der letzten Kugellage abhängt, verifizieren läßt.

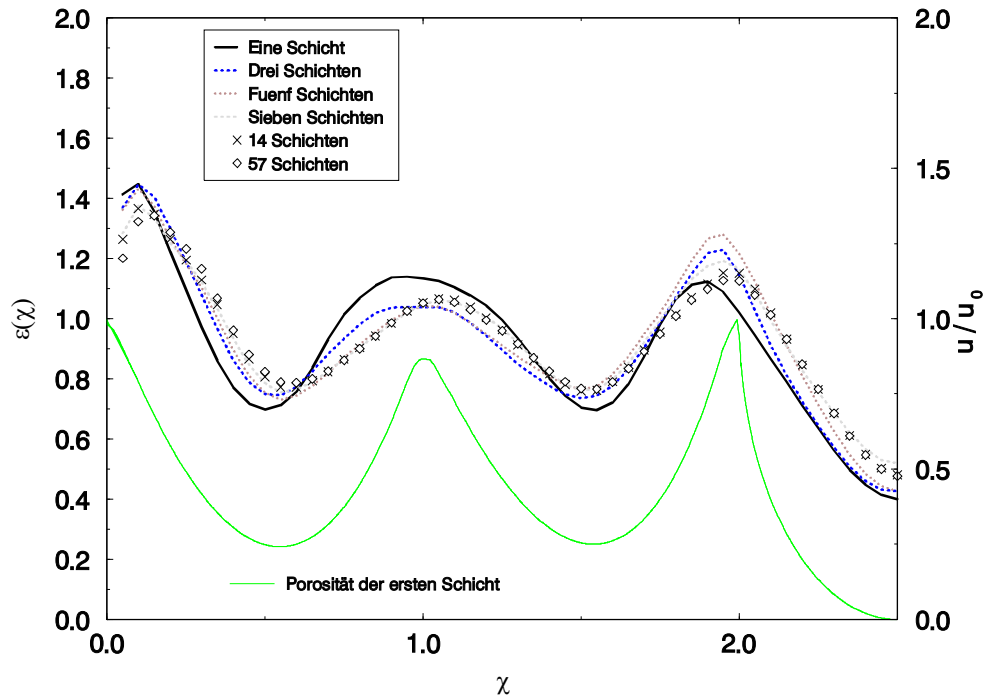


Abbildung 7-28: Änderung der radialen Strömungsverteilung in Abhängigkeit von der Zahl der Kugellagen ($a_{pt} = 0,2$, $u_0 = 0,40$)

⁵⁵ Bestimmung siehe Kapitel 9.1.2

So zeigt die Abbildung 7-28 die radialen Geschwindigkeitsverteilungen hinter der Schüttung in Abhängigkeit von der Schüttungshöhe, die durch die Zahl der übereinander liegenden Kugellagen repräsentiert wird, im Vergleich zur radialen Porositätsverteilung in der ersten Schicht. Die Darstellung der Schüttungshöhe in Kugellagen wurde gewählt, da die ersten Kugellagen der vom Autor vermessenen Reaktoren geordnet sind, d.h. die Kugeln in den einzelnen Lagen eine einheitliche z-Koordinate haben. Diese Eigenschaft unterscheidet die vermessenen Reaktoren von den mit KS-OPT simulierten Schüttungen, bei denen nur die Kugeln der ersten Lage eine einheitliche z-Koordinate aufweisen.

Im Bereich in der Reaktormitte fällt die Porosität auf null, da sich in der Mitte der ersten Lage eine Kugel befindet. Somit sollte an dieser Stelle im Bodenabstand ϕ von null kein Fluidstrom auftreten. Hinter der Schüttung kann aber eine Geschwindigkeit gemessen werden, da zum einen ein Geschwindigkeitsausgleich stattfindet, der zu einem laminaren bzw. turbulenten Strömungsprofil im Leerrohr führt [74, 194, 261]. Zum anderen könnte die Kugel umströmt werden, so daß die wieder zusammengeführten Stromfäden gemessen werden. Außerdem wird mit dem Hitzdrahtanemometer die Geschwindigkeit entlang der Sensorlänge bestimmt, so daß die für die radiale Koordinate r von null angegebene Geschwindigkeit den Mittelwert eines Kreises mit einem Durchmesser von 2.5 mm entspricht.

Das dritte Maximum der radialen Geschwindigkeitsverteilung ($\chi \approx 1,9$) ist gegenüber der Porositätsverteilung zu kleineren Wandabständen χ verschoben (Abbildung 7-28). Der Vergleich mit den Strömungsverteilungen im Reaktorquerschnitt zeigt den Grund für dieses Phänomen. Die Maxima in dieser Strömungsverteilung liegen nicht am Rand der mittleren Kugeln, sondern in den Lücken zwischen den Kugeln des inneren Kugelrings und der mittleren Kugel. Das dritte Maximum der radialen Geschwindigkeitsverteilung ist auch kleiner als das Randmaximum, obwohl die Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ einen größeren Bereich hoher Porosität als am Rand ausweist. Ein Grund für diesen Effekt könnte sein, daß am Rand ein Ausgleich der Geschwindigkeit nur in Richtung des Schüttungskerns möglich ist. Beim dritten Maximum ist dagegen ein Ausgleich in Richtung zur Mitte und zur Wand möglich, wodurch die Gradienten schneller abgebaut werden können. Gleiches gilt für das zweite Maximum. Seine große Breite ist wahrscheinlich durch die Größe der Lücken zwischen der ersten und zweiten Kugelschicht bedingt.

Mit steigender Zahl der Kugellagen in der Schüttung scheint sich das Strömungsprofil dem Porositätsprofil der letzten Kugellage anzugleichen (Abbildung 7-28), da die Übereinstimmung der Extrema besser wird. Somit werden die Messungen von Lerou und Froment [173] für die radial gemittelte Strömungsverteilung bestätigt. Die Messungen über den Reaktorquerschnitt weisen aber darauf hin, daß die Strömungsmaxima durch die höheren Kugellagen mitbestimmt werden. Der Grund für diesen Effekt kann nur durch eine Korrelation von Strömungsmessungen in und hinter derselben Schüttung ermittelt werden, die im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich war und erst durch verbesserte Meßtechnik⁵⁶ möglich wird.

⁵⁶ [49, 206, 223, 262, 263]

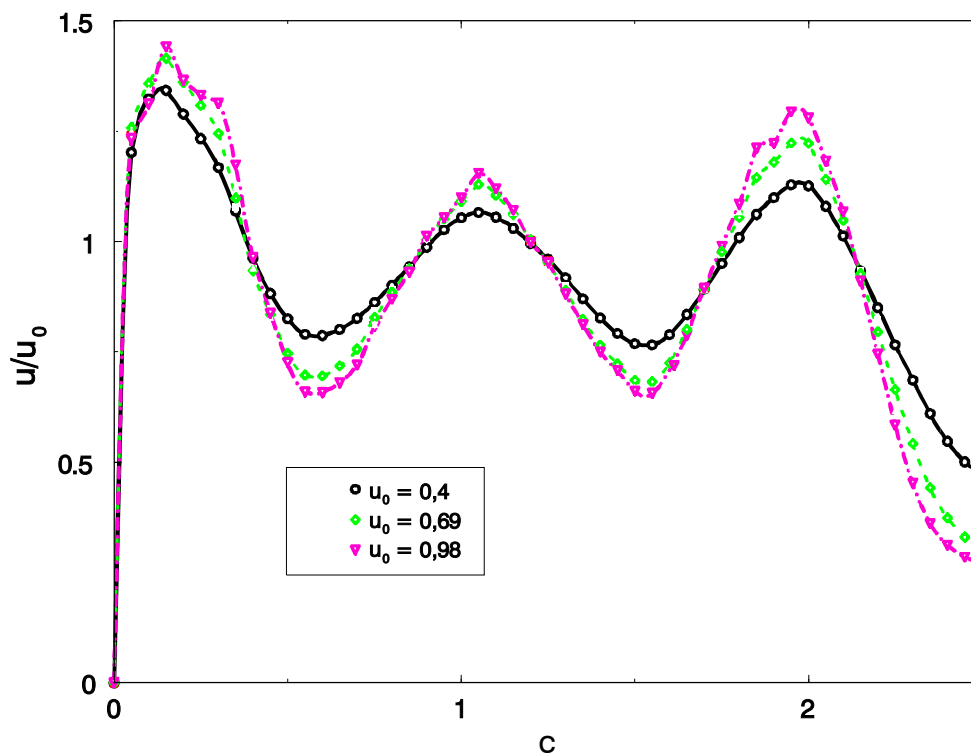


Abbildung 7-29: Veränderung des radialen Strömungsprofils mit der Anströmgeschwindigkeit u_0 ($a_{pt} = 0,20, 57$ Kugellagen)

Eine Steigerung der Anströmgeschwindigkeit u_0 führt zu einer stärkeren Ausprägung der Extrema der radialen Geschwindigkeitsverteilung (Abbildung 7-29). Dies beruht wahrscheinlich darauf, daß die Strömung weniger Zeit zum Ausgleich der Strömungsgeschwindigkeiten in den 5 mm vom Wabenkörper zum Sensor hat, so daß wahrscheinlich die Messungen bei höheren Geschwindigkeiten das Strömungsprofil direkt hinter der Schüttung besser wiedergeben als bei kleineren Anströmgeschwindigkeiten. Für diese These sprechen auch die Messungen von Daszkowski [74], die in verschiedenen Abständen hinter der Schüttung einen Abbau der Extrema aufzeigen. Das Vergrößern der Abstände zwischen der Schüttung und dem Sensor wie auch das Absenken der Anströmgeschwindigkeit läßt dem Medium mehr Zeit, die Geschwindigkeitsgradienten hinter der Schüttung vor dem Erreichen des Sensors auszugleichen.

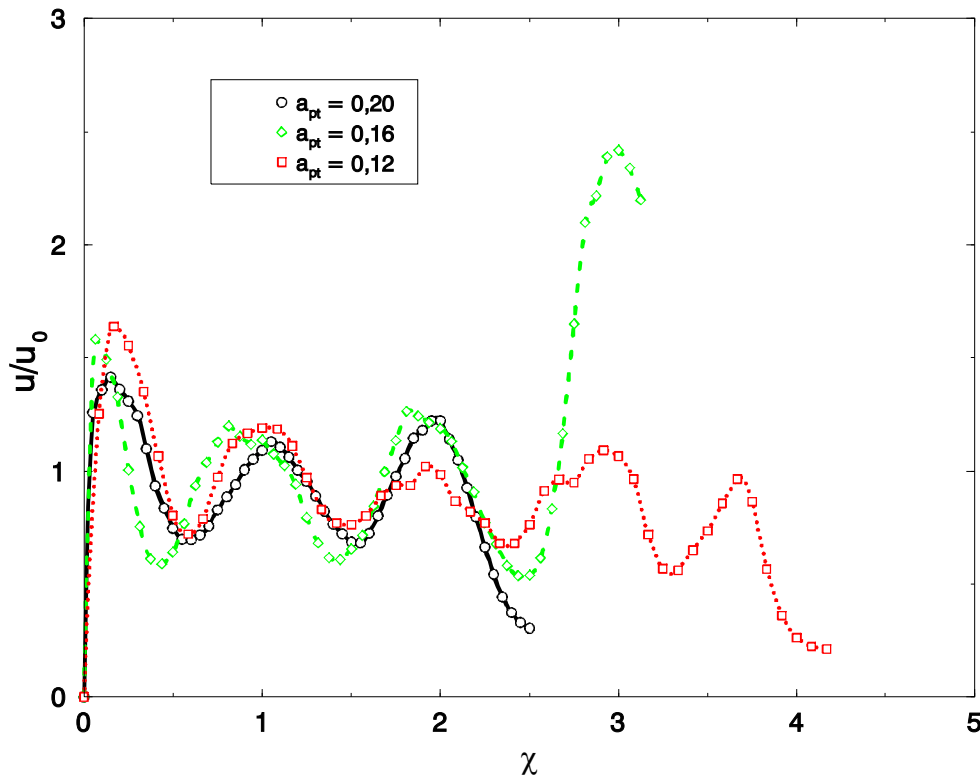


Abbildung 7-30: Vergleich der radialen Verteilung der Strömungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} ($u_0 = 0,4$, $H_S = 0,478$)

Wie bei den radialen Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi)$ steigt mit sinkendem Durchmesser Verhältnis a_{pt} die Zahl der Extrema (Abbildung 7-30). Dabei zeigen die Schüttungen mit den Durchmesser Verhältnissen a_{pt} von 0,12 und 0,2 einen in erster Näherung parallelen Verlauf, wobei beim Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,12 zwei weitere Minima auftreten. Dies korrespondiert mit den zwei weiteren Kugelringen, die die erste Kugellage (Abbildung 7-31) mit dem Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,12 gegenüber der mit einem Verhältnis a_{pt} von 0,2 aufweist. Auch die radiale Strömungsverteilung der Schüttung mit einem Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,16 entspricht der Porositätsverteilung $\varepsilon^1(\chi)$ der ersten Kugellage, weist aber im Gegensatz zu den anderen beiden Schüttungen in der Mitte ein Maximum und kein Minimum ($\chi = 3,125$) auf. Der Grund dafür liegt im Aufbau der Schüttung, da in der ersten Kugellage (Abbildung 7-31) eine Lücke im Zentrum existiert, durch die das Fluid ungehindert strömen kann. Auch bei Neupackungen dieser Schüttung war die Lücke reproduzierbar. In dieser besonderen Struktur in der Schüttungsmittle scheint auch die Verschiebung des zweiten und dritten Minimums der radialen Geschwindigkeitsverteilung begründet zu sein.

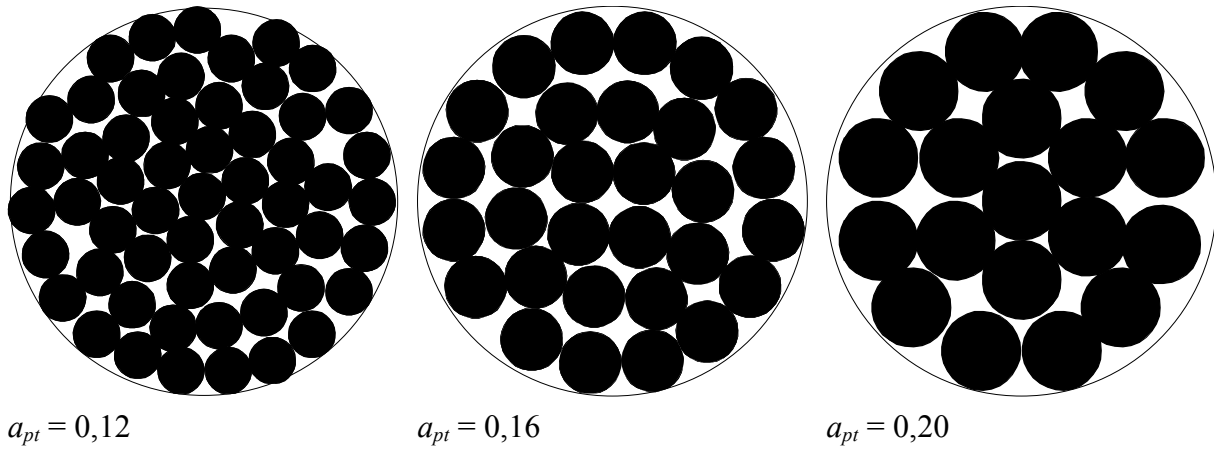


Abbildung 7-31: Erste Kugellage in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt}

Der Grund für die relativ hohen Strömungsgeschwindigkeiten am Rand der Schüttung mit dem Durchmesser Verhältnis $a_{pt} = 0,16$ konnte nicht aus der ersten Kugellage abgeleitet werden. Diese Randüberhöhung wurde durch Messungen bei höheren Geschwindigkeiten ($u_0 = 0,55; 0,69; 0,84; 0,98$ m/s) bestätigt. Eine sinnvolle Erklärung für dieses Phänomen konnte aber nicht gefunden werden.

Ein Vergleich der Meßdaten mit Literaturwerten ist nur sehr eingeschränkt möglich, da trotz gleicher geometrischer Abmessungen a_{pt} und a_{Hp} eine große Varianz in den Gesamtporositäten ε_g und den Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi)$ existiert [316] [134]. Außerdem sind aufgrund der Bandbreite der möglichen Partikel- und Reaktordurchmesser sowie der Reynolds-Zahlen vergleichbare Messungen eher zufällig. Mit den Messungen von Daszkowski [74] konnte für den Fall einer Kugelschüttung, die ein Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,16 besitzt, eine vergleichbare Messung gefunden werden.

Der Vergleich der radialen Geschwindigkeitsverteilungen in Abbildung 7-32 zeigt, daß der Randbereich ($\chi < 1$) bei den Messungen von Daszkowski [74] kleiner zu sein scheint, d.h. das erste Minimum und das erste Maximum der radialen Verteilung der Strömungsgeschwindigkeiten näher an der Reaktorwand liegen. Weiterhin ist das erste Minimum bei der Strömungsmessung von Daszkowski [74] gegenüber den Messungen, die im Rahmen dieser Arbeit gemacht wurden, weniger ausgeprägt. Diese Abweichung kann auf mehrere Effekte zurückgeführt werden.

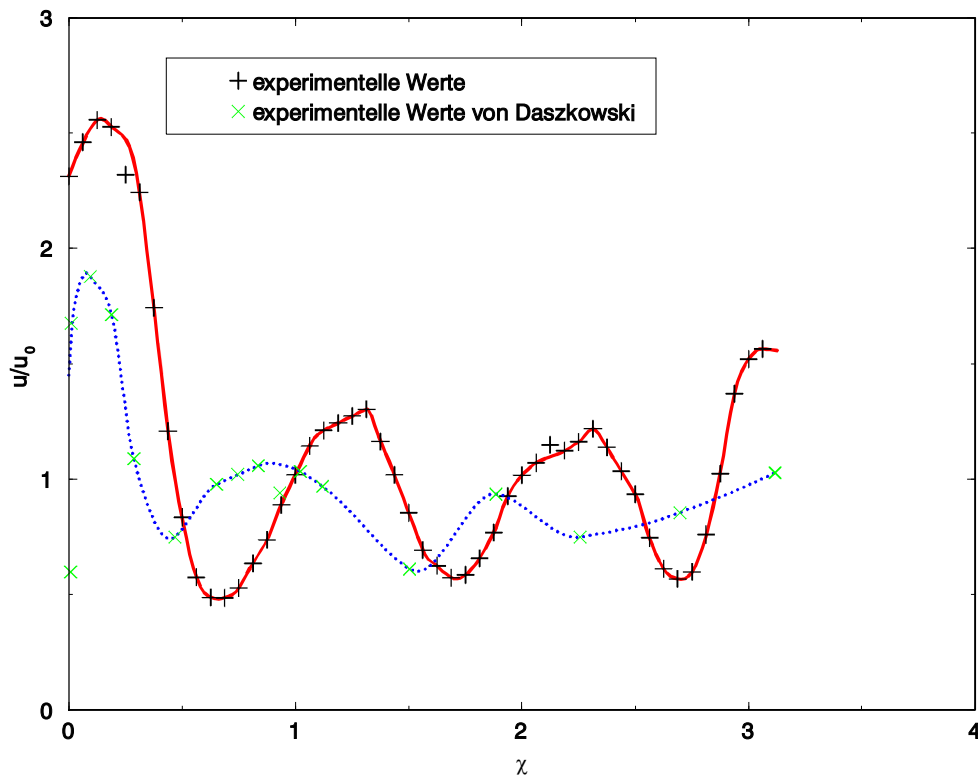


Abbildung 7-32: Vergleich der radialen Strömungsgeschwindigkeiten hinter der Schüttung ($a_{pt} = 0,16$) von Daszkowski [74] ($u_0 = 0,856$) mit eigenen Meßwerten ($u_0 = 0,84$)

Der zweite Kugelring der ersten Kugellage besitzt im Vergleich zu jenen der anderen beiden in der Abbildung 7-31 dargestellten Schüttungen, einen größeren Abstand zum äußeren Ring. Dies zeigt sich deutlich daran, daß nur wenige Kugeln des zweiten Rings den ersten berühren. Aufgrund der geringfügigen Differenzen in den Kugeldurchmessern, 8 mm bei Daszkowski [74] und 8,04 mm in dieser Arbeit, könnte die Lücke zwischen den ersten beiden Kugelringen noch größer und damit das erste Minimum bei Daszkowski [74] breiter werden. Gegen diese These spricht aber, daß die Position und die Ausprägung der ersten Minima der in dieser Arbeit vermessenen Schüttungen gut übereinstimmen (Abbildung 7-30), obwohl die Schüttungen zwischen dem ersten und dem zweiten Kugelring unterschiedliche Abstände besitzen.

Ein weiterer Erklärungsansatz für die Abweichungen der eigenen Messungen von Daszkowski's experimentellen Werten [74] (Abbildung 7-32) könnte sein, daß die radialen Strömungsverteilungen relativ zu einander verschoben sind. So deutet bei den Messungen von Daszkowski [74] sowohl der Meßwert „auf“ dem Reaktorrand als auch der Wandabstand $\chi \approx 0,4$ des ersten Minimums daraufhin, daß die Messung etwas zum Rand verschoben ist. Allerdings läßt sich durch diese Verschiebung das breite, zweite Maximum der Messung von Daszkowski [74] nicht erklären.

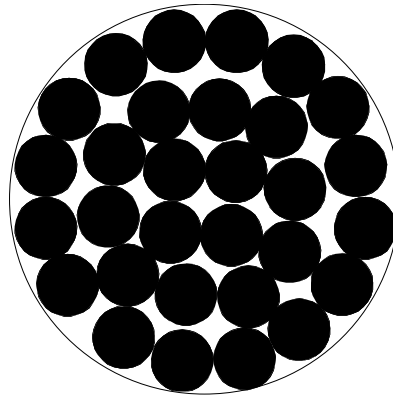


Abbildung 7-33: Erste Kugellage $a_{pt} = 0,16$

Die beiden vorangegangenen Erklärungsversuch lassen es wahrscheinlich erscheinen, daß bei den von Daszkowski [74] vermessenen Schüttungen eine andere erste Kugellage existiert als die, die in der Abbildung 7-33 dargestellt ist. Mit der ersten Kugellage könnte sowohl die Lage und die Ausprägung der ersten beiden Extrema als auch das breite zweite Maximum erklärt werden. Allerdings läßt sich diese erste Kugellage anders als bei den Strömungsmessungen über dem Reaktorquerschnitt nicht aus den radial gemittelten Strömungsdaten rekonstruieren, da mit der radialen Mittelung ein Informationsverlust verbunden ist. Wenn dies zuträfe, wäre es wahrscheinlich, daß sich die Struktur der von Daszkowski [74] betrachteten Schüttung im Bereich der ersten beiden Kugelringe deutlich von der in Abbildung 7-33 dargestellten Struktur unterscheidet. Eine solche erste Kugellage, die die Messungen von Daszkowski [74] nachvollziehen kann, läßt sich nicht aus den in dieser Arbeit gemachten Messungen ableiten, da sich diese im Randbereich kaum in der Lage des ersten Extremums unterscheiden. Auch mit **KS-OPT** konnte keine erste Kugellage aufgebaut werden, die eine zu den Strömungsmessungen von Daszkowski [74] korrelierende radiale Porositätsverteilung hat, so daß die Frage nach der von Daszkowski [74] verwandten ersten Kugellage unbeantwortet bleiben muß.

Der relativ hohe Wandabstand für das erste Minimum der Messungen dieser Arbeit (Abbildung 7-32) könnte auch auf einen höheren Abstand zwischen dem Sensor und der Schüttung als bei Daszkowski 's Messungen [74] hindeuten, da sich das erste Minimum mit steigendem Abstand der Meßebeene nach innen verschiebt [74].

Als die wahrscheinlichste Erklärung erscheint jedoch, daß Daszkowski [74] eine wesentlich geringere Zahl an Messungen pro Umfang durchgeführt hat. Im Gegensatz zu den Messung im Rahmen dieser Arbeit verwendet Daszkowski [74] nur acht Messungen auf dem Umfang als Grundlage zur radialen Mittelung. Die wenigen Meßpunkte können gerade im Randbereich der radial gemittelten Strömungsverteilungen problematisch sein, da hier (z.B. $\chi = 0,5$) jedem Meßpunkt ein Kreisbogen von ca. 1,5 Kugeldurchmessern d_p zugeordnet ist. Im Bereich eines solch großen Kreisbogens existieren, legt man die in Abbildung 7-33 dargestellten Kugellagen zu Grunde, zwei

xistieren, legt man die in Abbildung 7-33 dargestellten Kugellagen zu Grunde, zwei Strömungsmaxima und zwei -minima, so daß man durch nur eine Messung in diesem Bereich die mittlere Geschwindigkeit in diesem Kreisbogen nicht bestimmen kann.

Vergleiche über das zweite Maximum hinaus sind nicht möglich, da die Messungen von Daszkowski [74] in diesem Bereich nicht genügend Meßpunkte aufweisen.

7.2.3.2 Strömungsgeschwindigkeitsverteilung im Modell Epsilon2D

Um die Strömung hinter der Schüttung mit den Simulationsrechnungen von **Epsilon2D** vergleichen zu können, werden die Porositätsverteilungen vom Typ $\varepsilon(\chi, \phi)$ verwendet, die auf einem Schüttungsmodell mit einer gemessenen ersten Kugellage basieren. In der Abbildung 7-34 sind ein repräsentatives, gemessenes, radiales Strömungsprofil und die entsprechenden Berechnungen mit **Epsilon2D** dargestellt, die der Simulation im Abstand a_k in Strömungsrichtung hinter der Schüttung entnommen wurden.

Dabei zeigt sich im Gegensatz zu den Messungen an der Wand eine deutliche Überhöhung des ersten Maximums der Simulation. Für diese große Abweichung sind wahrscheinlich mehrere Effekte verantwortlich. So wird im Modell der Wabenkörper hinter der Schüttung nicht berücksichtigt, der eine radiale Umlenkung der Strömung vermeiden soll und so die Strömung hinter der Schüttung beeinflusst. Dieser Einfluß konnte aber nicht quantifiziert werden, da dem Autor keine Messungen vor und hinter dem Wabenkörper am Ende der Schüttung bekannt sind.

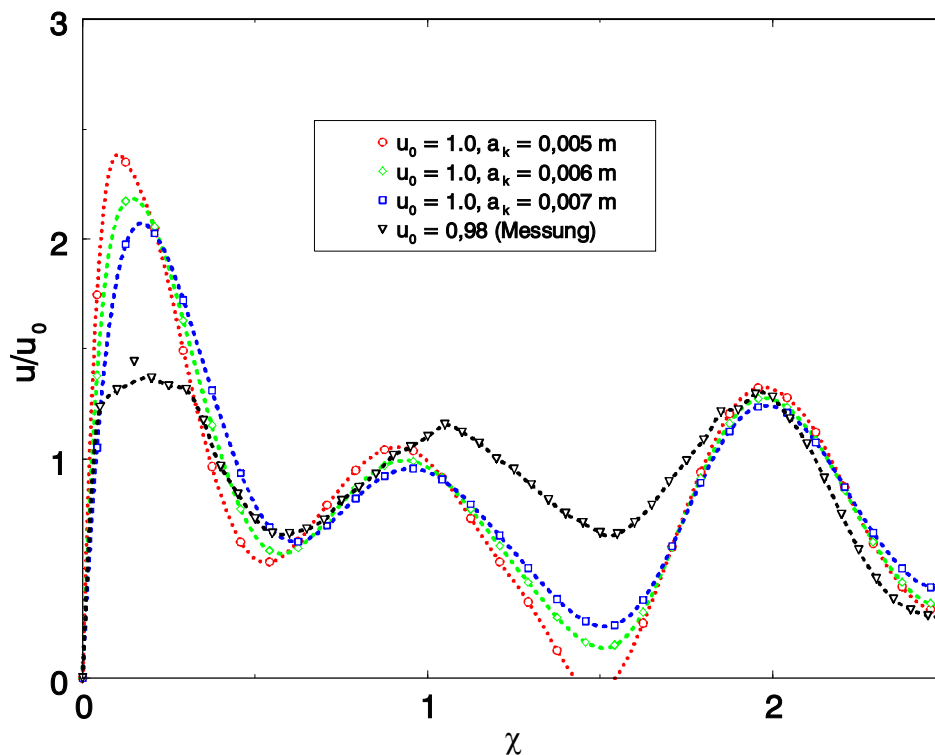


Abbildung 7-34: Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten der Messung mit der Simulation von Epsilon2D ($a_{pt} = 0,2, n_{opt} = 3$, gemessene erste Kugellage)

Ein anderer Grund für die höheren Strömungsgeschwindigkeiten könnte sein, daß die Bilanzgleichungen von **Epsilon2D** keinen turbulenten Strömungswiderstand berücksichtigen. Der Ausgleich der Strömungsgeschwindigkeiten erfolgt daher ausschließlich durch viskose Reibung und ist somit langsamer als die Messungen erwarten lassen, wo zusätzlich Trägheitskräfte wirken. Die Entwicklung und Implementierung eines Turbulenzmodells im Modell **Epsilon2D** sollte daher eine Forschungsaufgabe darstellen, um das Modell mit Messungen hinter der Schüttung validieren zu können.

Ein dritter Effekt könnte auf dem differentiellen Ansatz der Ergun'schen Gleichung (7-23) beruhen [94], wie er auch von Vortmeyer et al.⁵⁷ und Eigenberger et al.⁵⁸ verwendet wird. Dieser Ansatz ist dahingehend problematisch, daß die Ergun'sche Gleichung (7-23) nur integral validiert wurde und daß mit der differentiellen Betrachtung der Geltungsbereich z.B. auf sehr hohe Porositäten ausgedehnt wird. Zur Lösung dieses Problems werden z.Z. effektive Viskositäten eingeführt [114, 244]. Dies scheint aber in mehrfacher Hinsicht ungünstig. So muß ein effektiver Parameter eingeführt werden, der aber nicht direkt aus physikalischen Größen abgeleitet werden kann. Folglich führt dieser Ansatz von dem wünschenswerten Ziel einer ab-initio Simulation eines Reaktors weg. Weiterhin ist der Ansatz der effektiven Viskosität zur Lösung der Probleme, die durch die Einführung der differentiellen Ergun'schen Gleichung ((6-9) (6-11)) verursacht zu sein scheinen [94], nur bedingt sinnvoll, da das Problem nicht an der Basis gelöst wird. Daher ist eine verbesserte Beschreibung des Druckverlustansatzes [94] Gegenstand der Forschung und wird für den Bereich der ein-dimensionalen Modelle (A III/1) an anderer Stelle vorgestellt [94]. Trotz dieser Probleme gelingt eine gute Anpassung der Strömungsprofile an die Meßdaten [114], wobei aber anscheinend ein Parameter verwendet werden muß, dessen Genauigkeitsklasse die aller anderen verwendeten Größen und Konstanten um Größenordnungen übersteigt [114].

Um die Auswirkung der radialen Porositätsverteilung auf die Strömungsgeschwindigkeit innerhalb des Schüttungsmodells darstellen zu können, sind in der Abbildung 7-35 die gemittelten radialen Geschwindigkeitsprofile $\hat{u}(\chi)$ (7-25) in Abhängigkeit von der Anströmgeschwindigkeit u_0 dargestellt.

$$\hat{u}(\chi) = \frac{d_p}{H_s} \int_{\phi=0}^{\phi=H_s/d_p} u(\chi, \phi) d\phi \quad (7-25)$$

Dabei ist zu beachten, daß die Höhenkoordinate ϕ gemäß der Definition nur innerhalb der Schüttung definiert ist.

⁵⁷ [128, 296, 298, 299, 300]

⁵⁸ [25, 26, 74 -76]

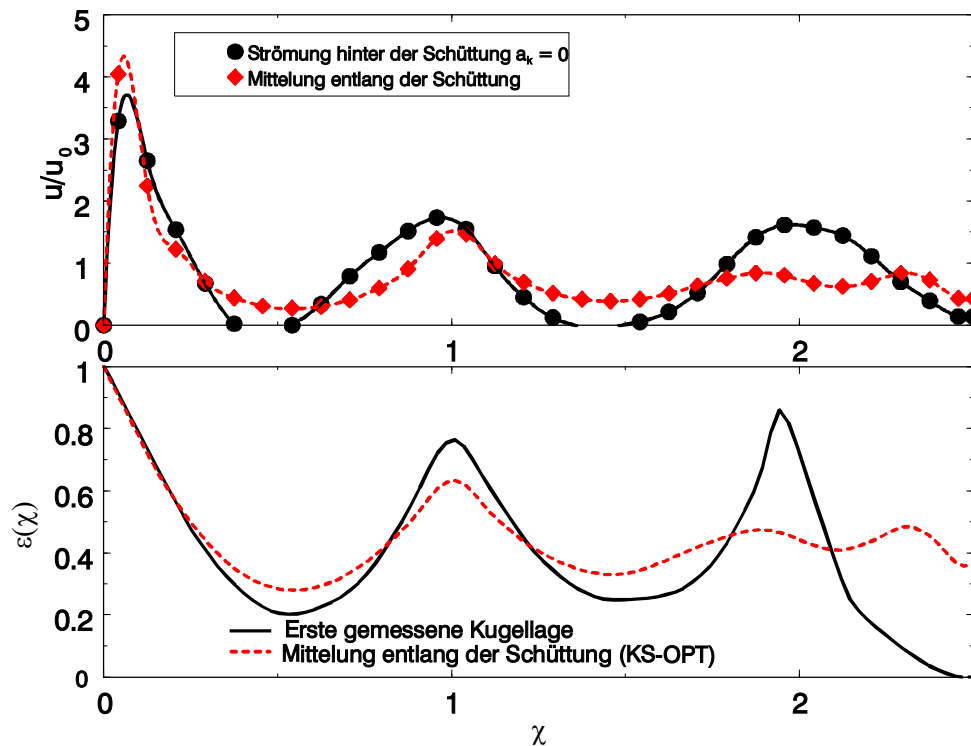


Abbildung 7-35: Strömung entlang und hinter der Schüttung in der Simulation von Epsilon2D ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $n_{opt} = 2$, Zielfunktion mit Randkriterium)

Ebenso wie die gemessene radiale Porositätsverteilung läßt sich auch die Strömungsgeschwindigkeit direkt hinter der Schüttung ($a_k = 0$) gut mit der radialen Porositätsverteilung in der gemessenen ersten Kugellage korrelieren (Abbildung 7-35). Damit wird die Beobachtung von Lerou und Froment [173] bestätigt, daß die erste Kugellage die Geschwindigkeit hinter der Schüttung maßgeblich beeinflusst. Weiterhin kann am Strömungsmodell von **Epsilon2D** verdeutlicht werden, daß die Strömungsverhältnisse hinter der Schüttung nicht die Verhältnisse in der Schüttung wiedergeben. So unterscheiden sich die beiden radialen Strömungsverteilungen besonders im Kernbereich der Schüttung deutlich voneinander. Diese Beobachtung wurde von Giese, Rottschäfer und Vortmeyer [114] für reale Systeme bestätigt.

Direkt hinter der Schüttung sind im Bereich des ersten und des zweiten Minimums Rückströmungsbereiche zu erkennen, die wahrscheinlich darauf beruhen, daß innerhalb der Schüttung die Strömung durch die hohe Dichte stellenweise (Abbildung 7-35) nahezu blockiert wird und in direkter Nachbarschaft Orte hoher Porosität und damit hoher Strömungsgeschwindigkeiten liegen. Um diese Ungleichverteilung im Leerrohr hinter der Schüttung auszugleichen, entstehen dort Rückströmungen. Dieses Phänomen scheint im ersten Minimum der radialen Geschwindigkeitsverteilung stärker ausgeprägt zu sein, da hier größere negative Strömungsgeschwindigkeiten auftreten (Abbildung 7-35). Sie werden wahrscheinlich durch die Nachbarschaft zum absoluten Strömungsmaximum nahe der Wand verursacht.

Um den Einfluß der letzten Kugellage im Modell ermitteln zu können, wurde in der Abbildung 7-35 die axial-gemittelte Strömungsverteilung $\hat{u}(\chi)$ gemäß Gleichung (7-25) sowie die entsprechenden Porositätsverteilungen zum Vergleich aufgetragen. Diese Strömungsverteilung $\hat{u}(\chi)$ läßt sich gut mit der radialen Porositätsverteilung korrelieren (Abbildung 7-35). So besitzt die gemittelte, radiale Strömungsverteilung $\hat{u}(\chi)$ an den gleichen Orten Extrema wie die radiale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$. Dies entspricht dem Verhalten, das gemäß der eingesetzten differentiellen Ergun'schen Druckverlustbeziehung ((6-9), (6-11)) zu erwarten ist.

Ähnlich wie die Porosität und die gemittelten, radialen Strömungsgeschwindigkeiten $\hat{u}(\chi)$ gemäß der eingesetzten differentiellen Ergun'schen Druckverlustbeziehung ((6-9), (6-11)) korrelieren, wird die Veränderung der Geschwindigkeitsverteilung mit der Anströmgeschwindigkeit u_0 durch diese Druckverlustbeziehung bestimmt (Abbildung 7-36, Abbildung 7-37).

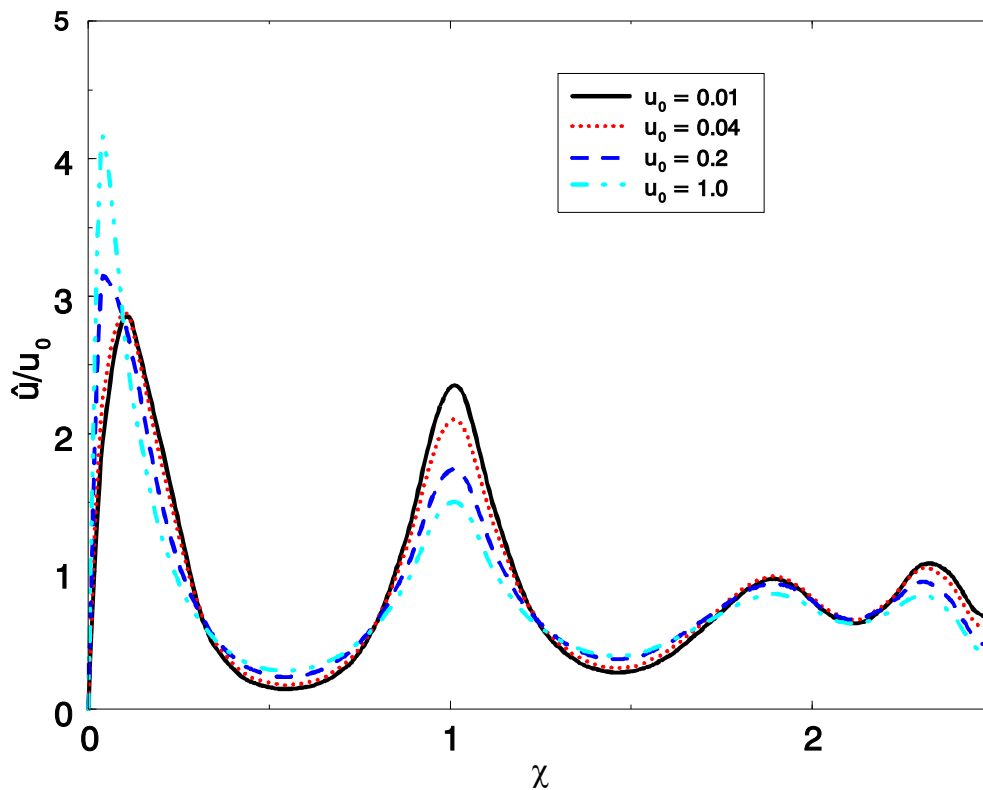


Abbildung 7-36: Gemittelte radiale Geschwindigkeitsprofile $\hat{u}(\chi)$ in Abhängigkeit von der Anströmgeschwindigkeit u_0 ($a_{pt} = 0,2$, $n_{opt} = 3$)

Mit steigender mittlerer Leerrohrgeschwindigkeit u_0 nimmt die maximale Geschwindigkeit relativ zu u_0 zu. Gleichzeitig wird das erste Maximum steiler, während die Ausprägung aller folgenden Extrema abnimmt. Ursache für dieses Verhalten ist die Ergun'sche Druckverlustbeziehung, die im Kontinuumsmodell mit den Gleichungen (6-9) und (6-11) berücksichtigt wird. Um die Wechselwirkung dieser Porositätsverteilungen mit den Geschwindigkeiten auf der Basis dieser Beziehung zu verdeutlichen, ist in Abbildung 7-37 die Strömungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Porosität bei definierten Druckverlusten $\Delta p/l$ dargestellt.

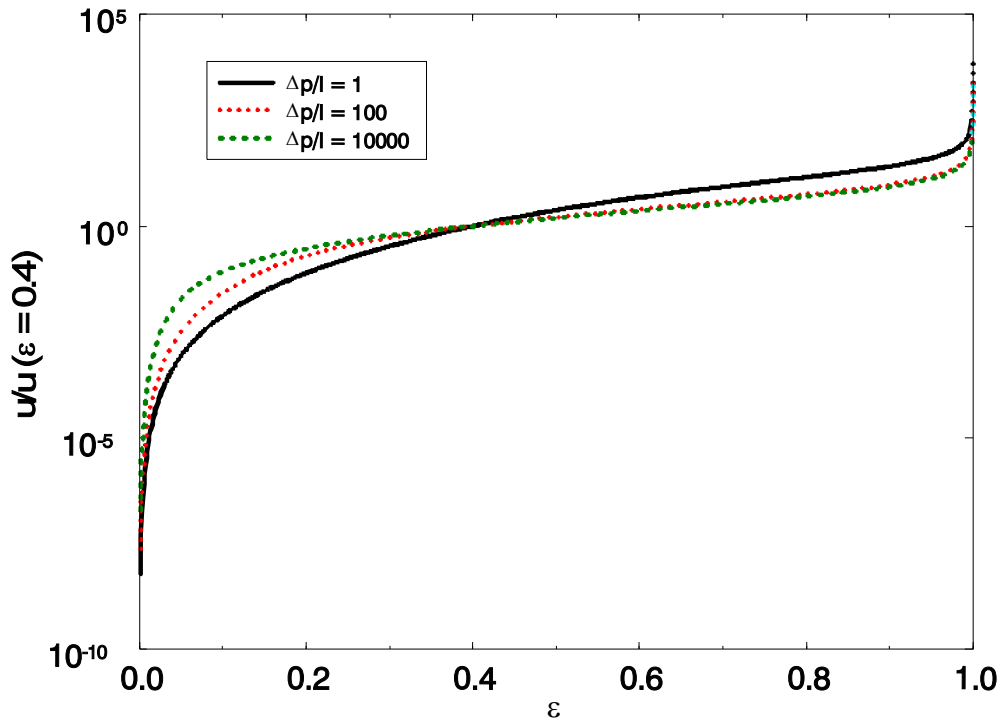


Abbildung 7-37: Abhängigkeit der Strömungsgeschwindigkeit von der Porosität bei einem gewählten Druckverlust in der Ergun'schen Gleichung

Dabei zeigt die Ergun'sche Beziehung einen Bereich ($\varepsilon = 0,2$ bis $0,9$), in dem sich die Geschwindigkeiten moderat mit der Porosität ändern, wobei die Steigung der Geschwindigkeitsfunktion $u(\varepsilon)|_{\Delta p/l}$ in diesem Bereich mit wachsendem Druckverlust abnimmt. Letzteres kann die Angleichung der Geschwindigkeiten im Kernbereich ($\chi > 0,4$) der Schüttung mit steigender Anströmgeschwindigkeit u_0 (Abbildung 7-36) und damit mit steigendem Druckverlust $\Delta p/l$ erklären, denn in diesem Bereich schwankt das radiale Porositätsprofil $\varepsilon(\chi)$ um einen Wert ε von $0,4$. In direkter Nähe der Reaktorwand steigt die Porosität $\varepsilon(\chi)$ auf nahezu eins. In diesem Fall deutet die Abbildung 7-37 eine Unendlichkeitsstelle für die Geschwindigkeit als Funktion der Porosität an. Dabei scheint dort die Geschwindigkeit um so schneller gegen unendlich zu streben, je größer der Druckverlust über der Schüttung ist, so daß mit steigender Anströmgeschwindigkeit u_0 vermehrt Fluid an der Reaktorwand entlang strömt. Diesem Effekt entgegen wirkt die Wandhaftung des Fluids und das Phänomen, daß sich mit steigendem Druckverlust und damit auch mit steigender Anströmgeschwindigkeit u_0 der Porositätsbereich mit moderaten Geschwindigkeitsänderungen weiter zu den Grenzen ausdehnt (Abbildung 7-37). All diese Effekte bewirken, daß das Randmaximum mit der Anströmgeschwindigkeit u_0 schmaler wird. Dies wird auch von der Simulation (Abbildung 7-36) sowie von Daszkowski et al. [74 - 76] bestätigt.

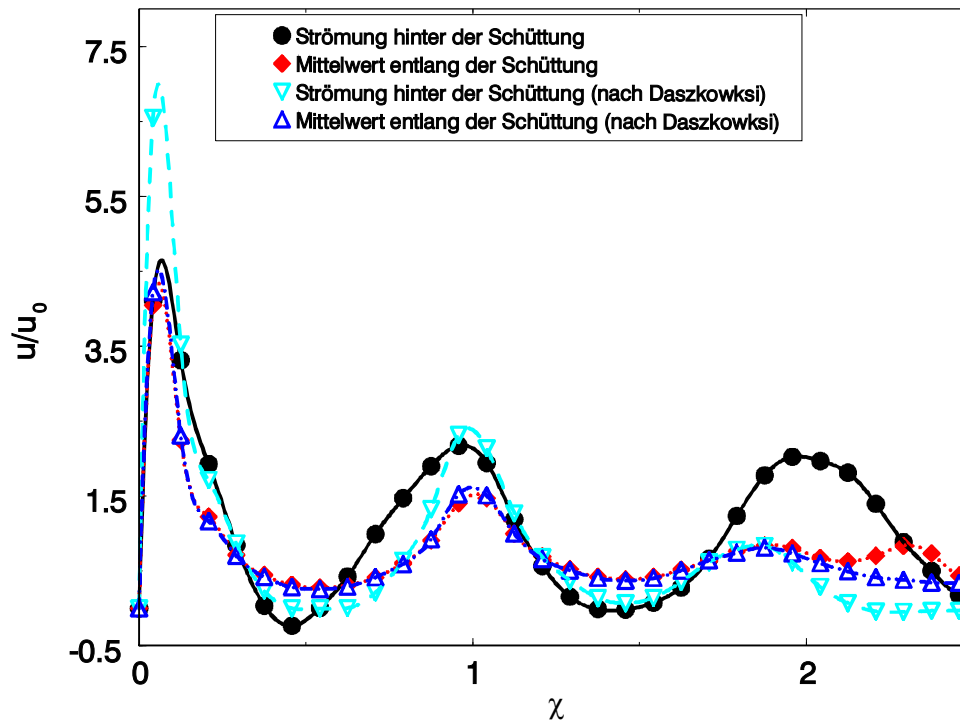


Abbildung 7-38: Vergleich der Epsilon2D-Simulation mit der zu Daszkowski [74] analogen Porositätsfunktion $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $n_{opt} = 2$, Zielfunktion mit Randkriterium)

Die gemittelten Strömungsgeschwindigkeiten $\hat{u}(\chi)$ der Simulationen mit der Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ bzw. mit der Porositätsverteilung $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ nach Daszkowski entsprechen sich weitgehend, da auch die radialen Porositätsprofile $\varepsilon(\chi)$ identisch sind. Die einzige Ausnahme bildet der Schüttungsbereich nahe der z -Achse, wo es aufgrund der Diskretisierung der zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ zu Abweichungen kommt. Da Daszkowski [74] für die Erstellung zweidimensionaler Porositätsprofile $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ entlang der gesamten Schüttung ein radiales Porositätsprofil $\varepsilon(\chi)$ nutzt, sind die radialen Geschwindigkeitsprofile $\hat{u}(\chi)$ entlang der gesamten Schüttung und die radiale Geschwindigkeitsverteilung $u(\chi)$ hinter der ersten Kugellage weitgehend identisch (Abbildung 7-38). Daher kann die Beobachtung von Lerou und Froment [173], daß die Strömung hinter der Schüttung maßgeblich von der in Strömungsrichtung letzten Kugellage beeinflusst wird, mit den zweidimensionalen Porositätsprofilen $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ nach Daszkowski [74] nicht nachvollzogen werden.

In der Abbildung 7-39 wird die Abhängigkeit des gemittelten radialen Geschwindigkeitsprofils $\hat{u}(\chi)$ vom verwendeten Porositätsprofil gezeigt. Wenn die Strömung auf der Basis einer konstanten Porosität simuliert wird, resultiert daraus eine über den Radius nahezu konstante Geschwindigkeitsverteilung, die an der Wand aufgrund der Haftbedingungen auf null abfällt.

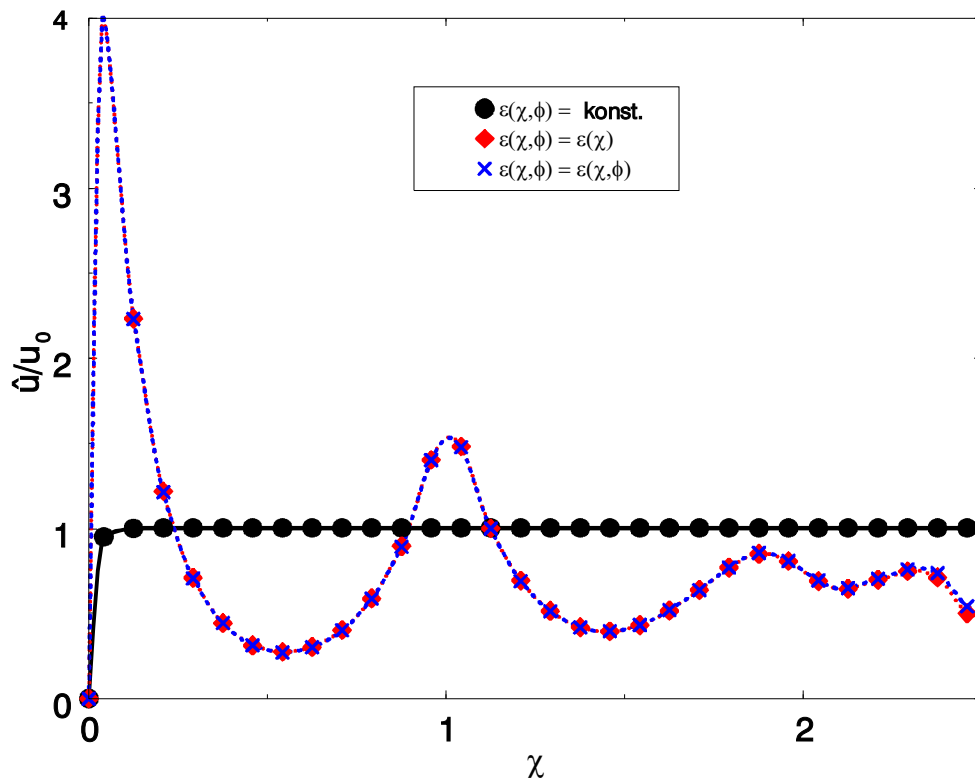
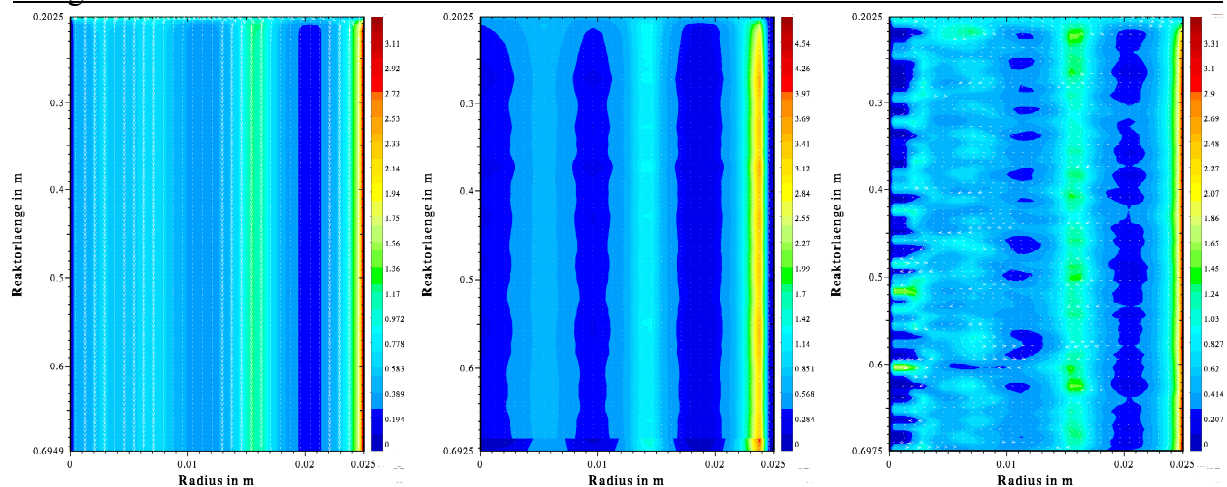


Abbildung 7-39: Gemittelte Strömungsprofile⁵⁹ $\hat{u}(\chi)$ in Abhängigkeit von der Dimension der Porositätsverteilung ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $a_{Hp} = 50$)

Wird der Simulation im Kontinuumsmodell eine konstante Porosität, eine radiale oder eine zwei-dimensionale Porositätsverteilungen zu Grunde gelegt, resultieren daraus Geschwindigkeitsverteilungen $\hat{u}(\chi)$, die diese Porositätsprofile widerspiegeln. Da die gemäß Gleichung (4-11) über die Reaktorlänge gemittelte zwei-dimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ der radialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ entspricht, sind auch die gemittelten radialen Geschwindigkeitsprofile $\hat{u}(\chi)$ gleich (Abbildung 7-39). In der Simulation, in der die Schüttung durch ihre Gesamtporosität repräsentiert wird, bildet sich erwartungsgemäß eine über dem Radius konstante Geschwindigkeit \hat{u} aus, die gemäß der Wandhaftung an der Reaktorwand auf null abfällt.

Ähnlich wie sich die eingesetzten Porositätsprofile in den gemittelten radialen Geschwindigkeitsverteilungen widerspiegeln, lassen sich diese Profile auch in den zwei-dimensionalen Verteilungen der axialen Geschwindigkeiten $u(\chi, \phi)$ wiedererkennen.

⁵⁹ Die Punkte markieren hier die Werte in den Bilanzzellen von **Epsilon2D**. Die gestrichelten Linien sind Splineinterpolationen durch diese Werte.



- a) Simulation auf der Basis einer radialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$
- b) Simulation auf der Basis einer Daszkowski'schen Porositätsverteilung $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$ [74]
- c) Simulation auf der Basis einer zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$

Abbildung 7-40: Zweidimensionale Geschwindigkeitsverteilung $u(\chi, \phi)$ in Abhängigkeit von der zugrunde gelegten Porositätsverteilung innerhalb der Schüttung

So zeigt sich bei der Simulation a) (Abbildung 7-40) auf der Basis einer radialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi)$ mit Ausnahme des Ein- und des Auslaufbereichs keine lokale Variation der axialen Geschwindigkeiten $u(\chi, \phi)$, so daß bei diesem Modellansatz die Dispersion auf der Basis der Schüttungsbeschreibung nicht erfaßt werden kann. Ähnliches gilt für den von Daszkowski gewählten Ansatz b) (Abbildung 7-40) der zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$, denn trotz der Porositätsschwankungen innerhalb der Schüttung treten nur geringfügige Variationen der Geschwindigkeit $u(\chi, \phi)$ auf. Diese geringfügigen Variationen sind wahrscheinlich auf die geringen Porositätsänderungen im Ansatz von Daszkowski [74] zurückzuführen. Im Gegensatz dazu treten bei der zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ (Modell c, Abbildung 7-40) deutliche Schwankungen der Strömungsgeschwindigkeit auf, die mit den radialen Strömungen verbunden sind. Diese Radialströme bilden den Ansatz zur Modellierung der radialen Dispersion auf der Basis einer detaillierteren Beschreibung der Schüttung.

7.2.3.3 Strömungsgeschwindigkeitsverteilung im Modell TriKaMo-3D

In dieser Arbeit werden beim Vergleich mit Messungen Schüttungsmodelle mit einer gemessenen ersten Kugellage zugrunde gelegt. Dieser Vergleich gestaltet sich bei **TriKaMo-3D** sehr schwierig, da dieses Modell den Reaktor zwar dreidimensional aber mit einer Zahl an Kanäle in einer Querschnittsebene (Abbildung 7-41) auflöst, die wesentlich geringer als die Zahl der Messungen bzw. der Volumenelemente pro Radius bei **Epsilon2D** ist.

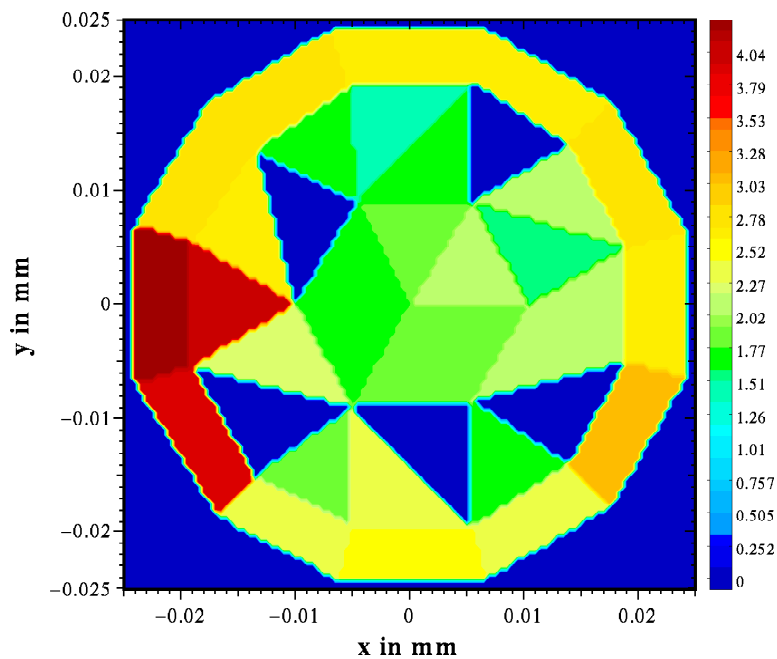


Abbildung 7-41: Strömung in der Austrittsfläche des Reaktors im Modell TriKaMo-3D (Die Farbskala zeigt die Strömungsgeschwindigkeit u_0 in m/s; $\phi = 0$, $a_{pt} = 0,2$)

In der Abbildung 7-41 sind die freien Enden der Kanäle am Reaktorboden ($\phi=0$) an den deutlich voneinander abgegrenzten Geschwindigkeiten zu erkennen. Vergleicht man diese Darstellung mit den Messungen der Strömungsgeschwindigkeit über den Reaktorquerschnitt (Anhang 9.2.4), wird die schlechte zweidimensionale Auflösung des Modells offensichtlich. Verbessert werden könnte diese Auflösung durch eine Mittelung der Strömungsgeschwindigkeiten über die Reaktorhöhe, was aber nicht sinnvoll ist, da in ca. 40% des Reaktorvolumens keine Geschwindigkeit definiert ist. Der Vergleich der radialen Geschwindigkeitsprofile der Referenzmessungen mit simulierten Geschwindigkeitsprofilen von **TriKaMo-3D** (Abbildung 7-42) zeigt ebenfalls diese geringe Auflösung des Modells.

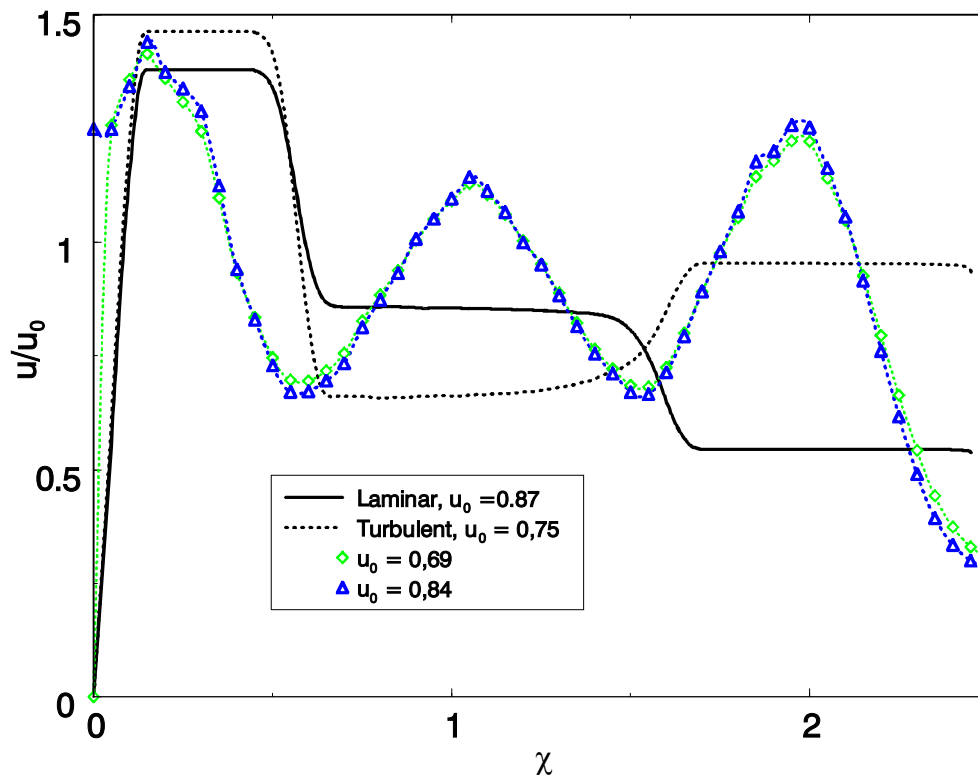


Abbildung 7-42: Radiale Geschwindigkeitsverteilung im Modell TriKaMo-3D und in den Referenzmessungen ($a_{pt} = 0,2$, $\phi = 0$)

Die radiale Geschwindigkeitsverteilung läßt im Modell **TriKaMo-3D** (Abbildung 7-42) für $a_{pt} = 0,2$ drei Zonen erkennen, die sich aus der Aufteilung der Bodenfläche in Drei- und Vierecke ergeben. Es handelt sich um die Seitenflächen der Prismen, mit denen der Bereich vom Boden bis zu den Kugelmittelpunkten in der ersten Kugellage aufgeteilt wurde, während die Referenzmessung mit ihren ausgeprägten Extrema die Porositätsverteilung in der ersten Kugellage gut wiedergibt. Folglich kann das Modell **TriKaMo-3D** die Strömung nur mit einer sehr groben Auflösung darstellen. Diese ließe sich durch eine Aufteilung der Körper in kleinere verbessern, allerdings würde dabei der Zusammenhang zwischen der Schüttungs- und der Netzgeometrie zerstört werden. Um die örtliche Auflösung zu steigern, müßte beispielsweise ein Prisma am Reaktorboden so aufgeteilt werden, daß die dreieckige Grundfläche in mehrere Teilflächen zerfällt. Jede dieser Teilflächen repräsentiert den Austritt eines Kanals, so daß der freie Raum zwischen den Kugeln durch mehrere Kanäle repräsentiert würde. Dies würde aber der Anschauung widersprechen. Außerdem würden die Durchmesser der Kanäle mit jeder Erhöhung der Auflösung kleiner, da das zur Verfügung stehende Volumen auf immer mehr Kanäle aufgeteilt würde, was ebenfalls die Kopplung der Schüttungs- und der Netzwerksgeometrie aufheben würde.

Am Reaktorrand (Abbildung 7-42, $\chi = 0$) zeigt sowohl die Simulation als auch die Messung einen Abfall der radialen Geschwindigkeitsverteilung auf null. Um diesen Abfall im Modell **TriKaMo-3D** qualitativ nachvollziehen zu können, wurden alle Geschwindigkeiten außerhalb der Polygone, die die Reaktorgrundfläche beschreiben, und dem kreisförmigen Reaktorrand auf den Wert 0 m/s gesetzt. Der gegenüber den Messungen wesentlich flachere Übergang von der Strömungs-

geschwindigkeit 0 m/s an der Wand zum ersten Maximum der radialen Geschwindigkeitsverteilung in der Simulation ist durch den mit χ wachsenden Anteil der Grundfläche von **TriKaMo-3D** an den Kreisradien bedingt, über die die Geschwindigkeit gemittelt wurde. Da der Abfall an der Wand durch die Mittelung der Geschwindigkeiten über den Radius entsteht, kann dieser Bereich, wie bei den Simulationen von **Epsilon2D**, mit steigenden Anströmgeschwindigkeiten näher an die Wand rücken.

Das erste Maximum des radialen Geschwindigkeitsprofils von **TriKaMo-3D** reicht bis zu einem Wandabstand χ von ca. 0,5 (Abbildung 7-42), da die Mittelpunkte der wandnahen Kugeln, die die Hexaeder an der Wand definieren, in dieser Position liegen. Die Geschwindigkeit im laminaren Modell ist an dieser Stelle relativ zur Anströmgeschwindigkeit größer als bei der turbulenten Durchströmung. Der Grund hierfür könnte die Druckverlustbeschreibung in den Kanälen sein. So hängt der Volumenstrom in der Gleichung von Blasius (6-28) mit einer Potenz von $-4.75^{4/7}$ vom Kanaldurchmesser ab, während er beim Gesetz von Hagen-Poiseuille (6-27) mit der $-4.$ Potenz sinkt. Dies führt dazu, daß die Strömungsgeschwindigkeit in den weiten Kanälen am Reaktorrand gegenüber jenen im engen Reaktorkern bei der laminaren Simulation größer ist als im turbulenten Fall.

Der Bereich des ersten Maximums im Modell **TriKaMo-3D** ist mit seiner Ausdehnung bis zu einem Wandabstand χ von 0,5 breiter als bei den Referenzmessungen (Abbildung 7-42). Daher scheint es wahrscheinlich, daß die Volumenströme, die im Randbereich des Referenzreaktors auftreten, kleiner sind als die in der laminaren und der turbulenten Simulation. Um diese Vermutung beantworten zu können, wird die Darstellung der Meßwerte mit der im Netzwerkmodell in Übereinstimmung gebracht, indem die Meßdaten jeder Kanalgrundfläche am Reaktorboden gemittelt werden. Dadurch entsteht eine Strömungsverteilung für die Messungen, wie sie in Abbildung 7-41 für die Simulation dargestellt ist. Diese Daten werden im zweiten Schritt über den Umfang gemittelt, um den in Abbildung 7-43 dargestellten Vergleich der Simulationsdaten von **TriKaMo-3D** mit den Referenzmessungen zu ermöglichen. Die Abbildung 7-43 bestätigt, daß ein höherer Anteil am Gesamtvolumenstrom das Netzwerkmodell im Randbereich verläßt, als die Referenzmessungen ergeben haben. Ein Grund hierfür ist, daß das Modell **TriKaMo-3D** bei der gewählten Methode zur Netzgenerierung die Reaktorwand vernachlässigt, da es nur das Leerraumvolumen nicht aber die innere Oberfläche in den Polyedern berücksichtigt. Ersteres setzt sich ausschließlich aus den Kugeln zusammen, letzteres wird in den Randelementen zusätzlich durch die Oberfläche der Reaktorwand bestimmt, was nach Carman [53] zu einem weiteren Druckverlustterm führt.

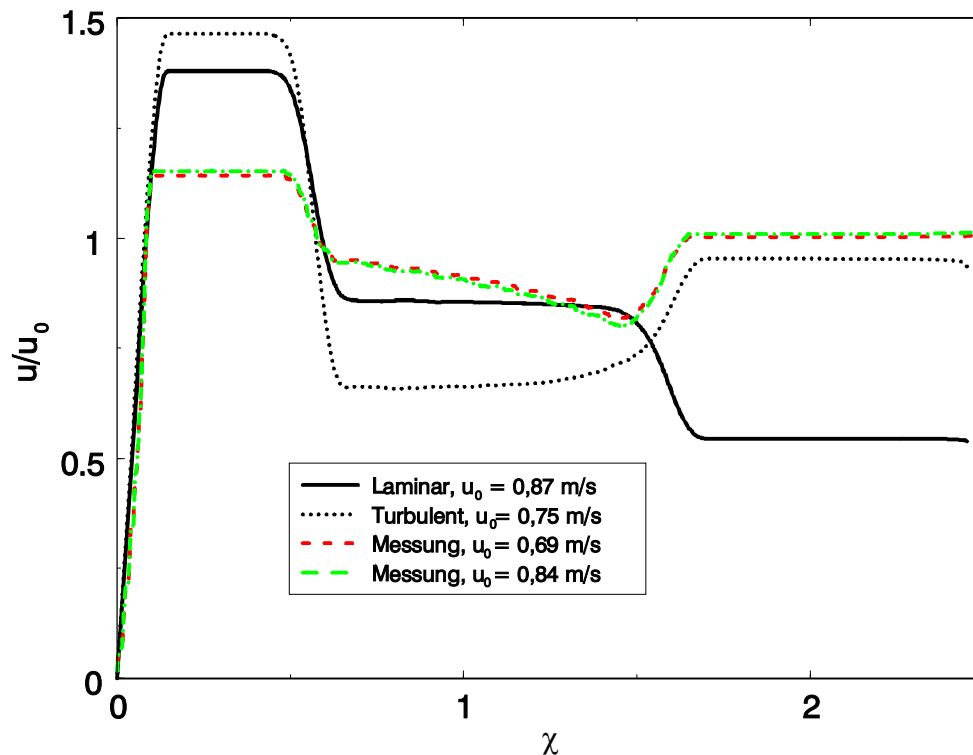


Abbildung 7-43: Vergleich der radialen Geschwindigkeitsverteilung der Simulation von TriKaMo-3D mit der Referenzmessung bei gleicher Auflösung über dem Rohrquerschnitt ($a_{pt} = 0,2$)

Desweiteren zeigt die Abbildung 7-43, daß das Netzwerkmodell im Gegensatz zu den Referenzmessungen im Kernbereich der Schüttung deutliche Unterschiede in den Volumenströmen aufweist. Der Referenzreaktor läßt aufgrund der geringeren Dichte im Kern ein kleineres Verhältnis zwischen den Geschwindigkeiten am Reaktorrand ($\chi < 0,5$) und im Reaktorkern ($\chi \geq 0,5$) vermuten. Daß dieser Effekt nicht eintritt, liegt wahrscheinlich auch an der Vernachlässigung der Reaktorwand, wodurch der Volumenstrom im Bereich von $\chi < 0,5$ gegenüber der mittleren Geschwindigkeit steigt und somit der Fluidstrom im Kernbereich sinkt.

Die Verteilung der Volumenströme in Abbildung 7-43 auf die beiden Bereiche im Schüttungskern ($\chi \geq 0,5$) ist wahrscheinlich durch den Übergang von der laminaren zur turbulenten Beschreibung des Druckverlustes in den Kanälen bedingt, mit denen die Umströmung der ersten Kugellage am Boden des Reaktors im Modell dargestellt wird. Da sich die Prismen dieses Bereichs in ihren Geometrien sehr ähneln, entsprechen sich auch die Beschreibungen der Kanäle, so daß die Strömungsverteilung in den vorgeschalteten Kanälen als weiterer Einflußparameter auf die Strömung in der Höhe $\phi = 0$ zu berücksichtigen ist. In diesem Bereich treten unterschiedliche Kanalgeometrien auf, in denen sich das Strömungsregime je nach Anströmgeschwindigkeit u_0 unterschiedlich ausbilden kann.

Die gegenüber dem Kernbereich höheren Geschwindigkeiten im Randbereich bestätigen die Vermutung, daß die Abweichung des mit **TriKaMo-3D** berechneten Druckverlustes von der Ergun'schen Gleichung (Abbildung 7-27) durch die Überbewertung der Randbereiche entsteht.

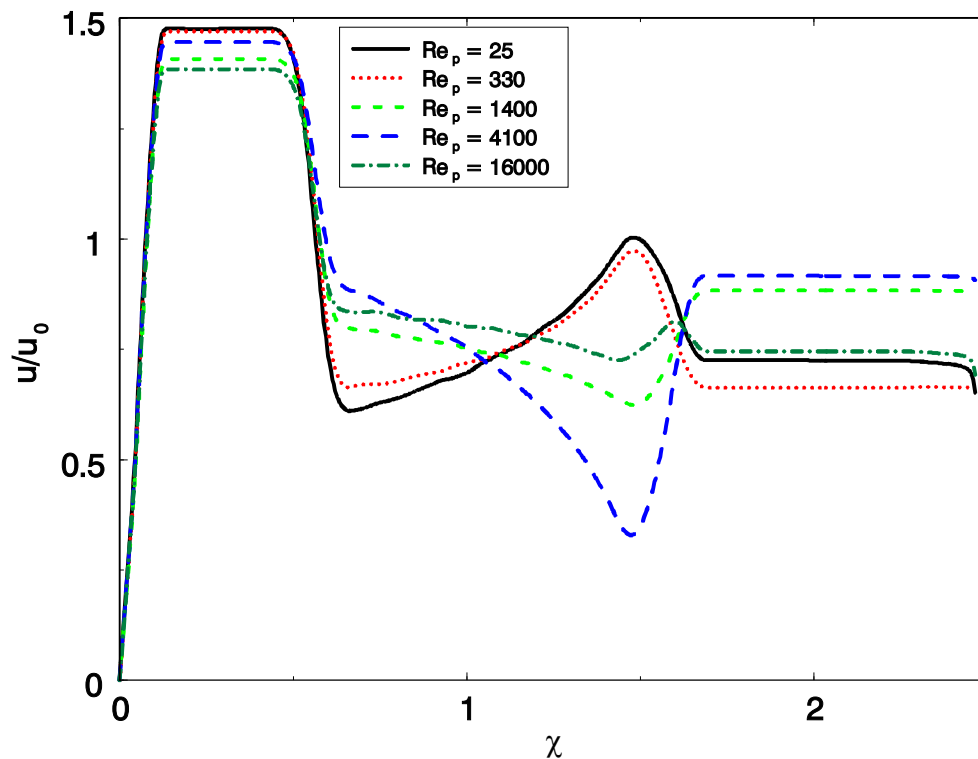


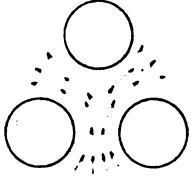
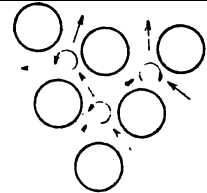
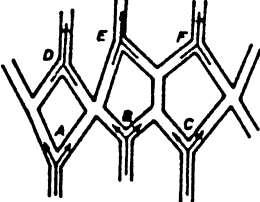
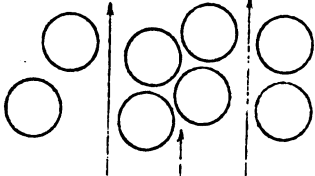
Abbildung 7-44: Radiale Geschwindigkeitsverteilung in Abhängigkeit von der Reynoldszahl Re_p ($a_{pt} = 0,2$, $\phi = 0$)

Analog scheinen die Veränderungen der relativen Geschwindigkeiten u/u_0 bei veränderter Anströmgeschwindigkeit u_0 begründet zu sein, die in Abbildung 7-44 dargestellt sind. Die Veränderungen im Kern der Schüttung spiegeln den Übergang vom laminaren Strömungsregime zum turbulenten Regime wider. Auffällig ist dabei die sinkende Geschwindigkeit im Bereich von $\chi = 1,4$ bei $Re_p < 4100$. Da bei den Rechnungen mit **TriKaMo-3D** Knoten, die in einer Höhe liegen, den gleichen Druck besitzen, können Untersuchungen mit parallelen Röhren unter Verwendung der Gleichungen (6-34) und (6-35) zum Vergleich herangezogen werden. Diese Untersuchungen bestätigen die Simulationen (Abbildung 7-44) mit **TriKaMo-3D**, wenn die Durchmesser der einzelnen Röhren einander ähnlich sind. Dieses Ergebnis von **TriKaMo-3D** konnte vom Autor nicht direkt verifiziert werden, da die eigenen Messungen einen solch großen Geschwindigkeitsbereich aus apparativen Gründen nicht erfassen konnten. Qualitativ ähnliche Ergebnisse hat Rottschäfer [244] für Messungen innerhalb der Schüttung erhalten. Er führt diese Veränderungen ebenso auf den Übergang von einer laminaren zu einer turbulenten Strömung innerhalb des Reaktors zurück.

7.2.4 Radiale Dispersion

Die radiale Dispersion beschreibt den Stoffstrom in radialer Richtung, d.h. senkrecht zur Anströmrichtung. Mit dem effektiven Mechanismus der radialen Dispersion werden mehrere physikalische Effekte zusammengefaßt, zu denen Wicke [306] die in Tabelle 10 genannten Phänomene zählt.

Tabelle 10: Mechanismen der radialen Dispersion nach Wicke [306]

1. Molekulare Diffusion	
2. Eddy-Diffusion	
3. Verzweigungseffekte der Strömung in der Schüttung	
4. Channeling	

Die letzten drei Effekte, die durch die Strömung in der Schüttung bedingt sind, bilden nach Gunn [125] die Ursache der radialen Dispersion im Bereich der turbulenten Strömung, während im Falle der laminaren Durchströmung der Schüttung die Diffusion der bestimmende Mechanismus ist.

7.2.4.1 Ansätze zur Bestimmung der radialen Dispersion

Um den Effekt der radialen Dispersion bestimmen zu können, wird die radiale Ausbreitung eines Stoffes ermittelt. Dabei kann der Tracer entweder in der Mitte (Abbildung 7-45 a) oder in einer Hälfte des Reaktors aufgegeben werden, so daß im letzteren Fall in einer Hälfte eine gleichmäßige Tracerkonzentration herrscht, während in der anderen die Konzentration des Tracers null ist (Abbildung 7-45 b). Die Betrachtungen der lateralen Dispersion in rechteckigen Schachtreaktoren, wie im Versuchsaufbau b), (Abbildung 7-45), wird in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt, da die mathematischen Beschreibungen von Harleman und Rumer [132] sowie von Han, Bhakta und Carbonell [129] nicht auf den Fall der zylindrischen Schüttungen, die dieser Arbeit zu Grunde liegen, anwendbar sind.

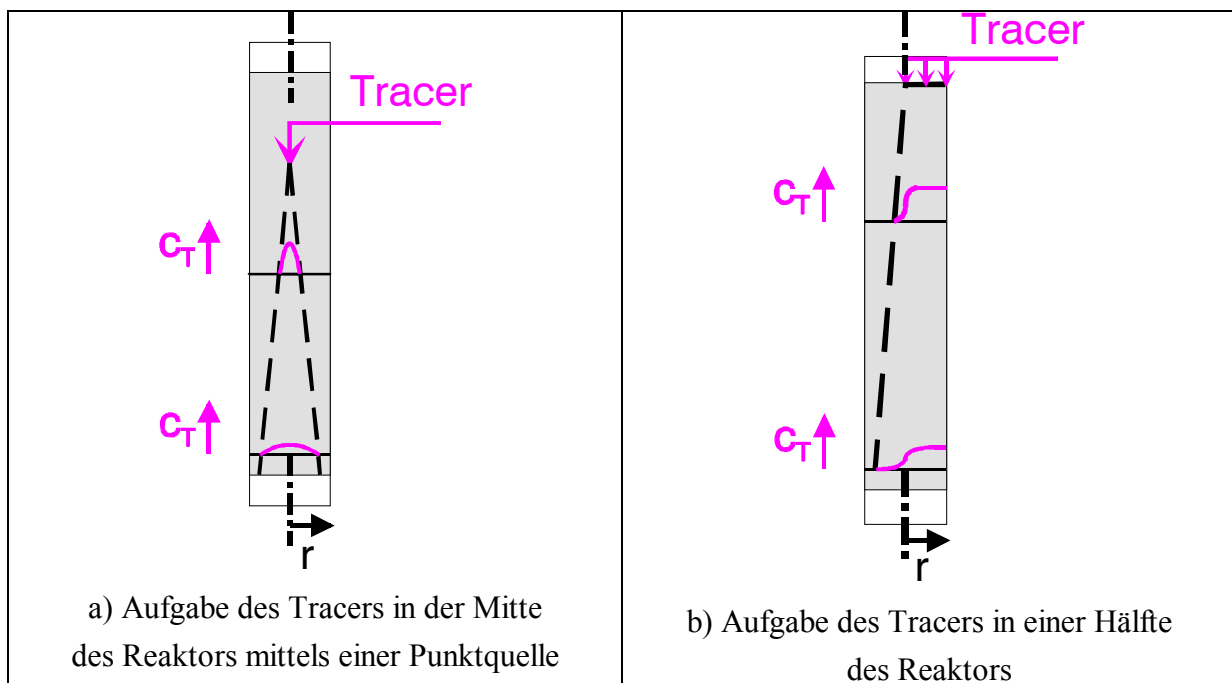


Abbildung 7-45: Skizze der Signalausbreitung

Zahlreiche Untersuchungen zur Charakterisierung der Tracerausbreitung finden sich in der Literatur⁶⁰. Sie weisen alle als Gemeinsamkeit auf, daß der Stoffstrom durch einen effektiven Mechanismus analog zu dem Fick'schen Gesetz beschrieben wird. Dies führt in einem radialsymmetrischen pseudo-homogenen Modell zu einer Beschreibung gemäß Gleichung (7-26), in der der Stoffstrom in radialer Richtung mit dem Dispersionskoeffizienten D_{rad} beschrieben wird.

$$0 = -ur \frac{\delta c}{\delta r} + D_{rad} \frac{\delta}{\delta r} \left(r \frac{\delta c}{\delta r} \right) \quad (7-26)$$

⁶⁰ [11, 16, 23, 51, 60, 61, 71, 78, 89, 99, 105, 106, 110, 122, 127, 129, 132, 136, 137, 167, 170, 177, 189, 279, 290, 298, 305, 306, 308, 313]

Dabei wird in der Regel angenommen, daß die radiale Dispersion von der axialen Dispersion unabhängig ist, was durch Messungen hinreichend verifiziert wurde [89, 132, 136]. Andere Autoren [106, 106, 306] bewerten die Kopplung der beiden Effekte höher, da sie eine zweidimensionale Beschreibung (7-27) ansetzen, um die Meßwerte der radialen Dispersion interpretieren zu können.

$$0 = -ur \frac{\delta c}{\delta r} + D_{rad} \frac{\delta}{\delta r} \left(r \frac{\delta c}{\delta r} \right) + D_{ax} \frac{\delta^2 c}{\delta z^2} \quad (7-27)$$

Fahien und Smith [89], Harleman und Rumer [132] sowie Hiby [136] weisen aber darauf hin, daß bei der Vernachlässigung der axialen Dispersion ein Fehler entsteht, der kleiner als 1% ist.

Ausgehend von dem Ansatz in der Gleichung (7-26) erhalten Bernard und Wilhelm [23] als Folge einer zentralen Aufgabe des Tracers die Beziehung (7-28) für die radiale Konzentrationsverteilung. Sie nehmen an, daß keine Wandeffekte die Ausbreitung behindern. Dies ist gemäß den beiden Autoren der Fall, wenn der Quotient von z und r größer als fünf bzw. die Tracerkonzentration an der Reaktorwand null ist.

$$\frac{c(r)}{\bar{c}} = \frac{\dot{N}}{4\pi D_{rad} z} \exp\left(-\frac{u_0 * r^2}{4D_{rad} z}\right) \quad (7-28)$$

mit

$$\bar{c} = \frac{2}{R^2} \int_0^R c(r) r dr$$

Wenn die Wände berücksichtigt werden müssen, kommen die Autoren zu der Beziehung (7-29), wobei sie die unter (7-30) genannten Randbedingungen annehmen.

$$\frac{c(r)}{\bar{c}} = \frac{\dot{V}_0}{D_{rad,0} * z} \sum_0^\infty \frac{\exp\left(-\left[\frac{u_0}{D_{rad}} - \sqrt{\left(\frac{u_0}{D_{rad}}\right)^2 + 4\beta_n^2} \right] \frac{z}{2}\right)}{\sqrt{\left(\frac{u_0}{D_{rad}}\right)^2 + 4\beta_n^2}} * \frac{J_0(\beta_n r)}{J_0^2\left(\frac{\beta_n u_0}{D_{rad}}\right)} \quad (7-29)$$

$$\text{mit } J_1\left(\frac{\beta_i u_0}{D_{rad}}\right) = 0 \text{ für alle } \beta_i$$

$$\text{mit } \beta_i > 0$$

$$z = +\infty: \quad c = \bar{c} \quad (7-30)$$

$$z = -\infty: \quad c = 0$$

$$r = \frac{d_t}{2}: \quad \frac{\delta c}{\delta r} = 0$$

Die beiden Gleichungen (7-28) und (7-29) enthalten den radialen Dispersionskoeffizienten D_{rad} als Parameter, der durch Anpassung der experimentellen, radialen Konzentrationsverteilung $c(r)$ an die oben genannten Funktionen ermittelt werden kann. Zur Lösung der Gleichung (7-29) genügen nach Bernard und Wilhelm [23] maximal zwei Iterationen der Summation (7-29), um den Dispersionskoeffizienten zu beschreiben.

Dorrweiler und Fahien [89] benutzen zwei Ansätze zur Lösung der Gleichung (7-26). Als Randbedingungen wählen sie [89] die in Gleichung (7-32) genannten Bedingungen für eine Tracerquelle mit dem Radius R_T . Als analytische Lösung (7-31) nutzen Dorrweiler und Fahien [89] eine von Kurihara [168] modifizierte Beziehung der Lösung (7-29) von Bernard und Wilhelm [23].

$$\frac{c(r)}{\bar{c}} = 1 + \frac{2}{R_T} \frac{1}{\beta_1} \frac{J_0(\beta_1 R_T)}{J_0^2(\beta_1 R)} J_0(\beta_1 r) * \exp\left(-\frac{\beta_1 u_0 z}{D_{rad}}\right) \quad (7-31)$$

mit $J_1(\beta_1 R_T) = 0$ für $\beta_1 > 0$

$$0 < r < R_T, z = 0: \quad c = c_0 \quad (7-32)$$

$$R_T < r < R: \quad c = 0$$

$$r = R, z > 0: \quad \frac{\delta c}{\delta r} = 0$$

$$r = 0, z > 0: \quad \frac{\delta c}{\delta r} = 0$$

Die Lösung (7-31) von Dorrweiler und Fahien [89] gilt für radiale Konzentrationsprofile $c(r)$ mit kleinen Quotienten der maximalen und minimalen Konzentrationen, d.h. mit einer hohen Konzentration an der Wand des Reaktors. Ist dies nicht der Fall, so müssen analog zur Beziehung (7-29) von Bernard und Wilhelm [23] weitere Summanden verwendet werden.

Als zweiten Ansatz nutzen Dorrweiler und Fahien [89] sowie Fahien und Smith [99] ein seminumerisches Verfahren, bei dem die Gleichung (7-33) an die Meßdaten punktweise angepaßt wird.

$$D_{rad}(r_{k+1/2}) = \frac{\lambda_1 h^2 \sum_{k=0}^k P_k (c_k - \bar{c})}{r_{k+1/2} (c_k - c_{k+1})} \quad (7-33)$$

mit k = Nummer des Meßpunkts,

$k+1/2$ = Verweis auf einen Punkt in der Mitte zwischen den Meßpunkten k und $k+1$,

$$\lambda_1 = -\frac{R_T}{z} \ln Z_1, \lambda_k = \text{Eigenwert der numerischen Lösung}$$

und

$$Z_1 = \frac{\sum_{k=0}^{k_{\max}} P_k (c_k - \bar{c})^2 * \sum_{k=0}^{R_T} P_k}{\sum_{k=0}^{R_T} P_k (c_k - \bar{c})^2 * \sum_{k=0}^{k_{\max}} c_k P_k}$$

mit P_k = Wichtungsfunktion der numerischen Lösung

Dabei setzen Dorrweiler und Fahien [89] eine radiale Verteilung für den Koeffizienten $D_{rad}(r)$ an, die sie mit Hilfe einer hinter der Schüttung gemessenen Strömungsverteilung $u(r)$ berechnen. Mit diesem Ansatz versuchen Dorrweiler und Fahien [89] sowie Fahien und Smith [99] den Einfluß der Eddy-Diffusion auf die Dispersion nachzuvollziehen. Wie Bernard und Wilhelm [23] ausführen, ist die Größe und der Einflußbereich der Turbulenzballen, die für die Eddy-Diffusion verantwortlich sind, von der Strömungsgeschwindigkeit und der Größe der Lücken abhängig. Diese Vorgehens-

weise scheint aber zweifelhaft, da McGreavy [189] und Gladden et al. [263, 262] gezeigt haben, daß die Strömungsverteilung in der Schüttung für die Dispersion verantwortlich ist. Desweiteren ist die Vorgehensweise von Dorrweiler und Fahien [89] sowie Fahien und Smith [99] nicht konsequent, da das radiale Porositätsprofil $\varepsilon(\chi)$ nicht in die Betrachtung aufgenommen wurde, obwohl es ein Maß für den lokalen Leerraumanteil ist.

Gunn und Pryce [127] erhalten als Lösung der Gleichung (7-27) für den Fall einer Tracerquelle mit dem Radius R_T (Abbildung 7-45 a) die Gleichung (7-34). Dabei nehmen sie die unter (7-35) stehenden Randbedingungen an.

$$\frac{c}{\bar{c}} = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{2R_T J_1(\beta_j R_T/R)}{\beta_j R_T J_0^2(\beta_j)} J_0\left(\beta_j \frac{r}{R}\right) * \exp\left\{ \left[\frac{u_0 R}{D_{rad}} - \sqrt{\left(\frac{u_0 R}{D_{rad}}\right)^2 + 4\beta_j \frac{D_{ax}}{D_{rad}}} \right] \frac{x}{2R} \frac{D_{rad}}{D_{ax}} \right\} \quad (7-34)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } J_1(\tilde{u}) = 0 \text{ für alle } \beta_i \text{ mit } \beta_i > 0 \\ 0 < r < R_T, z = 0 \quad c = c_0 \\ R_T < r < R \quad c = 0 \\ r = R, z > 0 \quad \frac{\delta c}{\delta r} = 0 \end{aligned} \quad (7-35)$$

Leider konnte der Autor dieser Arbeit die Bedeutung des Terms \tilde{u} nicht aus dem Artikel ableiten, so daß diese Lösung im weiteren Verlauf der vorliegenden Arbeit unberücksichtigt bleiben muß.

Foumeny et al. [105, 106] verwenden zur Lösung von Gleichung (7-27) ein vollständig numerisches Verfahren auf der Basis der finiten Differenzen. Die so erhaltenen radialen Konzentrationsverteilungen $c(r)$ werden mit den Meßdaten in Übereinstimmung gebracht, indem mit Hilfe der Methode von Marquardt [186] die Abweichungen der simulierten und der experimentellen Werte durch die Variation des radialen Dispersionskoeffizienten D_{rad} minimiert werden. Der so bestimmte Koeffizient D_{rad} dient Foumeny et al. [105, 106] als Basis zur Bewertung der Meßergebnisse.

Wie die Bewertung der Lösungen der Differentialgleichungen (7-26) und (7-27) gezeigt hat, sind nur die analytischen Beziehungen von Bernard und Wilhelm [23] ((7-28), (7-29)) sowie von Dorrweiler und Fahien [89] (7-31) für Punktquellen in zylindrischen Reaktoren aus den obengenannten Gründen nutzbar. Neben diesen Methoden sind auch numerische Verfahren denkbar, wie sie von Foumeny et al. [105, 106] vorgestellt wurden.

Um die radiale Dispersion vergleichbar zu machen, wird eine dimensionslose Kennzahl, die radiale Peclet-Zahl Pe_r , eingeführt, die den konvektiven mit dem dispersiven Stofftransport ins Verhältnis setzt und in dieser Arbeit analog zu der Literatur⁶¹ gemäß Gleichung (7-36) definiert ist.

$$Pe_r = \frac{u_0 d_p}{D_{rad}} \quad (7-36)$$

⁶¹ [23, 89, 99, 105, 106, 125 u.v.m.]

Trotz der unterschiedlichen Verfahrensweisen zur Bestimmung des radialen Dispersionskoeffizienten ((7-28) (7-29) (7-31) (7-33)) kommen alle oben genannten Autoren zu ähnlichen Ergebnissen bei der Bestimmung der radialen Peclet-Zahlen Pe_r . Dabei werden Schüttungen, bei denen der Wandeffekt nicht mehr zu vernachlässigen ist, gemäß der von Fahien und Smith [99] gefundenen Beziehung (7-37) berücksichtigt. Dieser Ausdruck (7-37) ist gemäß Kulkarni und Doraiswamy [167] nur bis zu einem Durchmesser Verhältnis $a_{pt} = 0,1$ validiert.

$$Pe_r = \frac{u_0 d_p}{D_{rad}} * \frac{1}{1 + 19,4 a_{pt}^2} \quad (7-37)$$

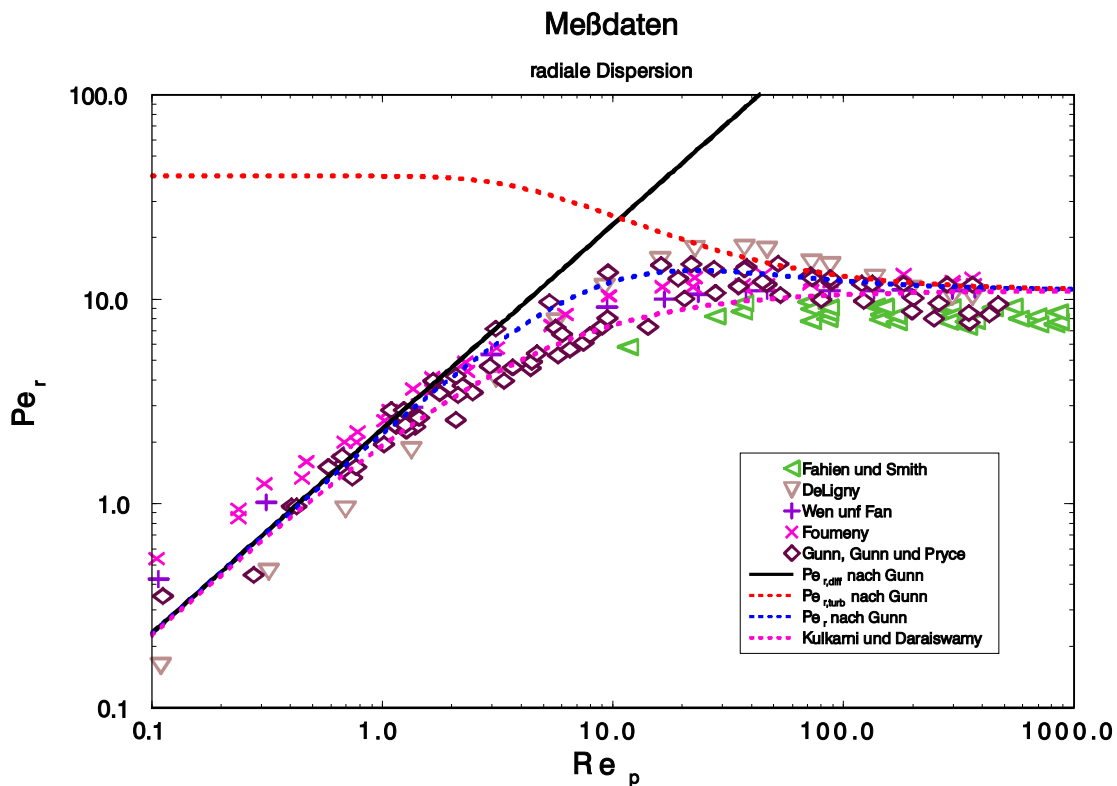


Abbildung 7-46: Dispersionsmessungen in der Literatur

Die in Abbildung 7-46 dargestellten Messungen zeigen zwei charakteristische Zonen. Im Bereich der laminaren Strömung ($Re_p < 10$ [244]) ist die radiale Peclet-Zahl Pe_r linear von der Reynolds-Zahl Re_p abhängig (7-38). Bei einer turbulenten Durchströmung ($Re_p > 100$ [244]) des Festbetts ist die Peclet-Zahl Pe_r konstant. Während die Konstanz der radialen Peclet-Zahl Pe_r von allen Autoren bestätigt wird, kommen sie zu unterschiedlichen Werten im Bereich von fünf [14] bis 15 [14], wobei ein Wert von etwa elf [99, 171⁶², 228⁶³] für geordnete Packungen berechnet bzw. gemessen wurde. Die Ursache für die lineare Abhängigkeit der radialen Peclet-Zahl Pe_r von der

⁶² $Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) = 11,2$

⁶³ $Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) = 11,3$

Reynolds-Zahl Re_p im laminaren Strömungsbereich ist nach Gunn [125] die molekulare Diffusion, die in diesem Fall gegenüber allen anderen in Tabelle 10 genannten Mechanismen dominiert. Gunn [125] setzt hierfür die Peclet-Zahl die in Gleichung (7-38) genannte Abhängigkeit an.

$$Pe_{r,m} = \frac{\tau Re_p Sc}{\varepsilon_g} \quad (7-38)$$

mit $\tau = 1,2$ (für Kugeln)

D_m = molekularer Diffusionskoeffizient

$$\text{Schmidt-Zahl: } Sc = \frac{\nu}{D_m}$$

Im turbulenten Bereich, in dem die Mechanismen der Durchströmung des Festbetts (Tabelle 10) gegenüber der molekularen Diffusion überwiegen, paßt Gunn [125] die Funktion (7-39) an die Meßdaten an.

$$Pe_{r,turb} = 40 - 29 * \exp\left(-\frac{7}{Re_p}\right) \quad (7-39)$$

Dabei entsprechen die Meßwerte des Autors [125], wie in der Abbildung 7-46 dargestellt ist, nicht ganz dem Erwartungswert elf für hohe Reynolds-Zahlen Re_p . Die Meßwerte sind niedriger als die radiale Peclet-Zahl $Pe_{r,turb}$ (7-39). Der Grund für diese Unstimmigkeit konnte dem Artikel [125] nicht entnommen werden.

Um eine über den gesamten Strömungsbereich gültige Beziehung für die radiale Peclet-Zahl Pe_r in Abhängigkeit von der Reynolds-Zahl zu erhalten, fassen Gunn [125] sowie Dorrweiler und Fahien [89] gemäß Gleichung (7-40) die laminare und die turbulente Peclet-Zahl zusammen.

$$\frac{1}{Pe_r} = \frac{1}{Pe_{r,m}} + \frac{1}{Pe_{r,turb}} \quad (7-40)$$

Kulkarni und Doraiswamy [167] kommen zu einem ähnlichen Ansatz. Allerdings geben sie eine von der Reynolds-Zahl Re_p unabhängige Peclet-Zahl $Pe_{r,turb}$ an (7-41):

$$\frac{1}{Pe_r(Re_p)} = \frac{\varepsilon}{\tau Re_p * Sc} + \frac{1}{\underbrace{11}_{1/Pe_{r,turb}}} \quad (7-41)$$

Wen und Fan [303] leiten aus ihren Messungen eine Abhängigkeit der radialen Peclet-Zahl im Bereich der laminaren Strömung sowohl von der Reynolds-Zahl Re_p als auch von der Schmidt-Zahl Sc ab.

$$\frac{1}{Pe_r(Re_p)} = \frac{0,4}{(Re_p * Sc)^{0,8}} + \frac{0,09}{1 + \frac{10}{Re_p * Sc}} \quad (7-42)$$

Foumeny et al. [106, 287] leiten je eine Beziehung aus Meßwertanpassungen an statische (7-43) bzw. an dynamische (7-44) Simulationen ab.

$$\frac{1}{Pe_r(Re_p)} = \frac{0,34}{(Re_p * Sc)^{0,8}} + \frac{0,08}{1 + \frac{10,8}{Re_p * Sc}} \quad (7-43)$$

$$\frac{1}{Pe_r(Re_p)} = \frac{0,38}{(Re_p * Sc)^{0,8}} + \frac{0,08}{1 + \frac{11,1}{Re_p * Sc}} \quad (7-44)$$

Die Autoren [106, 287] weisen jedoch darauf hin, daß die Anpassung an die dynamischen Simulationen nicht dazu geeignet ist, die Messungen im Bereich kleiner Reynolds-Zahlen nachzuvollziehen.

Alle gefundenen Beziehungen für die Peclet-Zahl $Pe_r(Re_p)$ scheinen für hohe Reynolds-Zahlen Re_p gegenüber den Messungen zu hohe Peclet-Zahlen vorherzusagen (Abbildung 7-46). Die Abhängigkeiten der Peclet-Zahl $Pe_r(Re_p)$ von der Reynolds-Zahl bewegen sich aber in dem von der Literatur gesteckten Rahmen ($Pe_r(Re_p \rightarrow \infty)$: 5 bis 15 [14]). Die Abweichungen der Meßwerte von $Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) = 11$ für geordnete Packungen könnte auf den zufälligen Charakter der vermessenen Schüttungen hinweisen. Allerdings zeigt die Abbildung 7-46 eine deutliche Meßwertstreuung, die auch durch die dargestellten Beziehungen ((7-39), (7-41) bis (7-44)) wiedergegeben wird. Diese Streuung kann sowohl aus den Messungen resultieren als auch aus den verschiedenen Möglichkeiten, diese zu interpretieren ((7-28) (7-29) (7-31) (7-33)). Dabei ist besonders wichtig, den Einfluß der Meßdateninterpretation auf die Bestimmung der Peclet-Zahl zu klären, da diese Daten die Grundlage von Simulationen sind, wie sie z.B. von Daszkowski [74] und von Hofmann [140] eingesetzt werden.

Fahien und Smith [89] sowie Harleman und Rumer [132] weisen darauf hin, daß beim Übergang vom zweidimensionalen (7-27) zum eindimensionalen Modell (7-26) ein zu vernachlässigender Fehler entsteht. Andere Autoren [89, 99, 127, 306] halten eine Kopplung der axialen und radialen Dispersion für unabdingbar, kommen aber zu ähnlichen Ergebnissen hinsichtlich der radialen Dispersionskoeffizienten und bestätigen damit die Aussagen von Hiby [136], Fahien und Smith [89] sowie Harleman und Rumer [132] bezüglich des Fehlers beim Übergang von einem zweidimensionalen (7-27) zu einem eindimensionalen Modell. Daher wird auf eine zweidimensionale Betrachtung verzichtet.

7.2.4.2 Meßergebnisse der radialen Dispersion

Der Vergleich der vom Autor gewonnenen Meßdaten⁶⁴ zur radialen Dispersion mit anderen Messungen (Abbildung 7-47) zeigt eine große Übereinstimmung mit Ausnahme der Peclet-Zahlen Pe_r der Schüttung mit einem Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,24. Der Bereich, in dem die Messungen von Gunn [125], Gunn und Pryce [127], Bernard und Wilhelm [23], Fahien und Smith [89] sowie Foumeny et al. [105, 106] liegen, ist in dieser Graphik durch die untere und obere Meßwertgrenze gegeben.

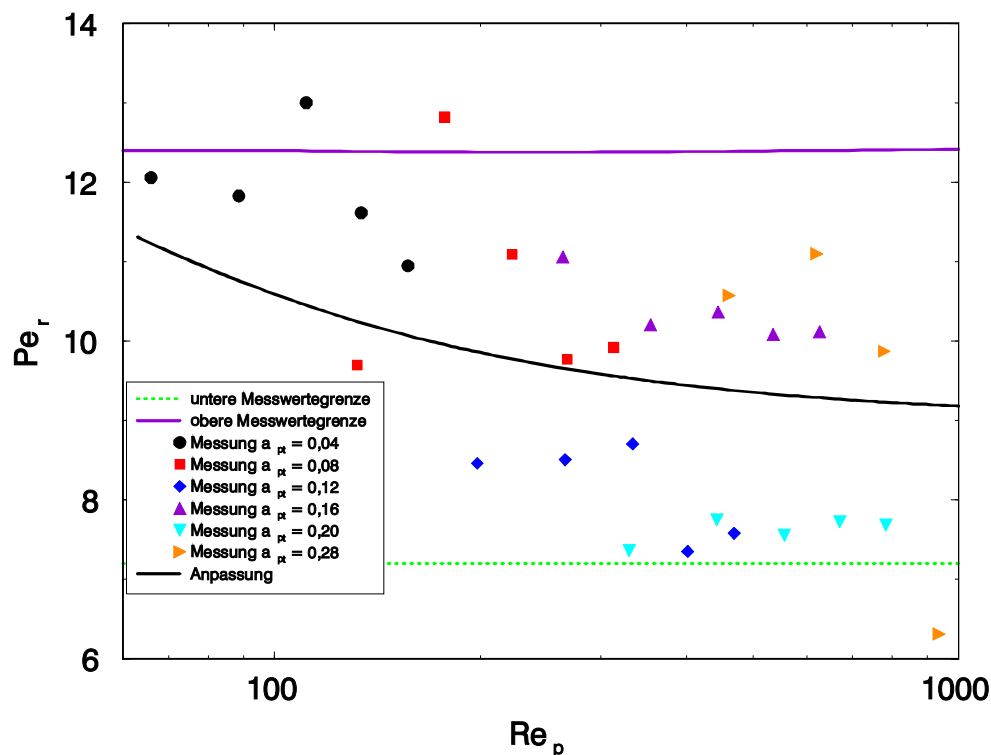


Abbildung 7-47: Vergleich der Messungen mit den Literaturwerten

Die Meßwerte, die im Rahmen dieser Arbeit ermittelt wurden bzw. den Arbeiten anderer Autoren⁶⁵ entnommen wurden, liegen unter den Werten, die mit Hilfe der von Foumeny et al. [106], von Gunn [125] sowie von Kulkarni und Doraiswamy [167] gefundenen Beziehungen vorhergesagt werden. Ein Grund für die Abweichung der Meßwerte könnte sein, daß die genannten Gleichungen ((7-39), (7-41) bis (7-44)) bei großen Schüttungen ($a_{pt} \rightarrow \infty$) eine geordnete Packung ($Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) \approx 11$ [99, 171]⁶⁶ [228]⁶⁷) annehmen, die bei den Messungen nicht vorlag. Die Peclet-Zahlen könnten auch aufgrund der Unrundheit der verwendeten Kugeln fehlerbehaftet sein, da diese Asphärizität schon im Zusammenhang mit der Gesamtporosität als wahrscheinliche Ursache für die auftretenden Abweichungen von den Literaturwerten erkannt wurde. Der Einfluß der Un-

⁶⁴ siehe Anhang 9.2.5

⁶⁵ [23, 99, 105, 106, 125, 127, 167]

⁶⁶ $Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) = 11,2$

⁶⁷ $Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) = 11,37$

rundheit der Kugeln auf die Peclet-Zahl Pe_r konnte nicht getestet werden und muß Gegenstand weiterer Forschungen sein, da die dazu notwendigen Partikel im Falle von Stahlkugeln für die Reaktorhalterung zu schwer und im Falle von geschliffenen Partikeln zu kostenintensiv sind. Auch konnte aus den Literaturdaten keine Abhängigkeit oder Tendenz abgeleitet werden, die den Einfluß der Güte der verwendeten Kugeln berücksichtigt. Bernard und Wilhelm [23] zeigen im turbulenten Strömungsbereich, daß Schüttungen aus Granulat oder Würfeln gegenüber Kugelschüttungen eine geringere Peclet-Zahl aufweisen. Da aber kein geeignetes Maß für die Sphärizität der Kugeln aus den Messungen abgeleitet werden konnte, wurde auf eine weitere Korrektur verzichtet, zumal aus den Messungen in der Literatur keine einheitlichen Werte für die radiale Peclet-Zahl Pe_r hervorgehen. Für diese Vorgehensweise spricht auch die gute Entsprechung der Meßdaten mit den in der Literatur gefundenen Werten.

Daher wurde in dieser Arbeit die Gleichung (7-39) von Gunn [125] an die Meßdaten angepaßt⁶⁸ (Abbildung 7-47), so daß sich für den gemessenen Bereich die folgende Funktion (7-45) ergibt:

$$Pe_{r,turb} = 40 - 31 \cdot \exp\left(-\frac{7}{Re_p}\right) \quad (7-45)$$

$$65 < Re_p < 1095$$

Dabei muß deutlich darauf hingewiesen werden, daß diese Modifizierung nur im gewählten Bereich gültig ist. Ausgehend von den Messungen darf nur vorbehaltlich weiterer Messungen auf den Endwert der radialen Peclet-Zahl $Pe_r(Re_p \rightarrow \infty)$ geschlossen werden, der in diesem Fall bei neun liegen würde. Die Gleichung (7-45) wurde entwickelt, um die Simulationsdaten der Modelle **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D** mit den Messungen in einfacherer Weise korrelieren zu können.

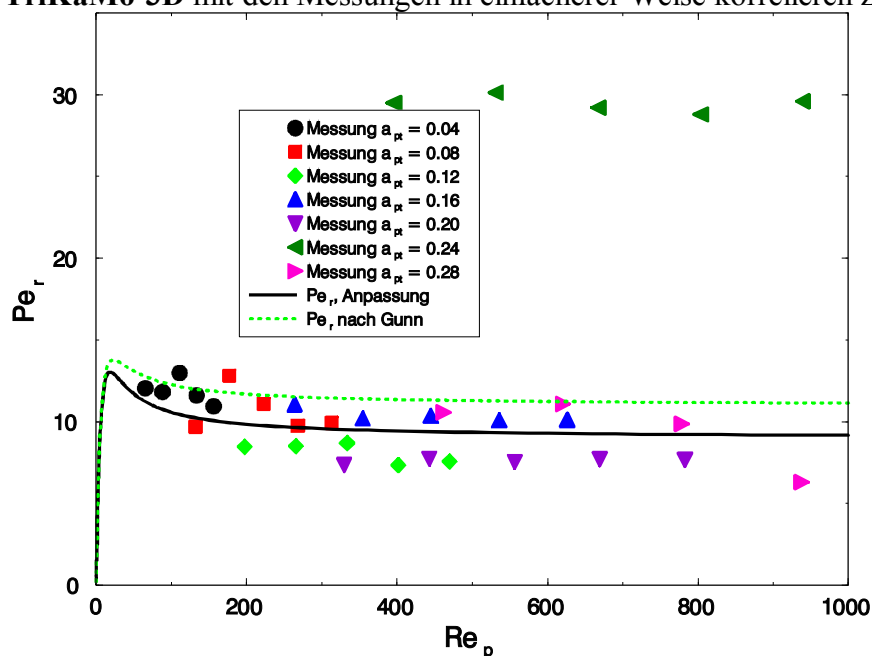


Abbildung 7-48: Experimentelle radiale Peclet-Zahlen Pe_r

⁶⁸ Anpassung mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate

Wie die korrigierten radialen Peclet-Zahlen Pe_r in Abbildung 7-48 zeigen, weicht die Meßreihe mit dem Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,24 deutlich von den anderen Messungen ab.

Die Erklärung für dieses Phänomen ist wahrscheinlich die Struktur der Schüttung. Die erste Kugellage wies in der Mitte eine relativ große Lücke auf (Abbildung 7-49), die sich in der Schüttung weiter fortsetzte, da die Lanze zur Tracergasaufgabe bei der Demontage durch diese Lücke auf den Reaktorboden fiel.

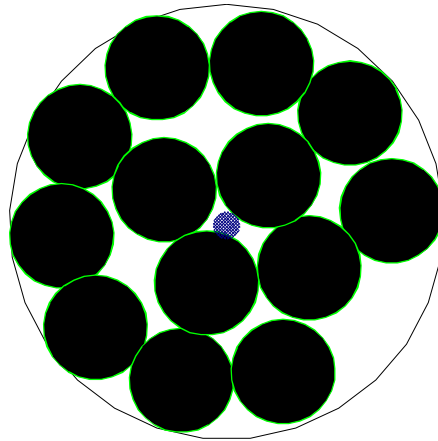


Abbildung 7-49: Erste gemessene Kugellage des Reaktors mit einem Durchmesser Verhältnis von $a_{pt} = 0,24$ (Der schraffierte Kreis markiert den Außendurchmesser und die Lage der Lanze zur Traceraufgabe)

In dieser großen Lücke konnte das Kohlendioxid nahezu ungehindert strömen (Abbildung 7-49), so daß die Ausbreitung des Tracers in radialer Richtung und damit der Dispersionskoeffizient kleiner als bei den anderen vermessenen Schüttungen ist. Die Messung mit einem Durchmesser a_{pt} von 0,24 deutet auch an, daß die radiale Dispersion, wie sie von Wicke [306] beschrieben wurde, nicht ausschließlich durch die Eddy-Diffusion [23] hervorgerufen wird, sondern, daß die mit der Schüttung verbundenen Effekte - die Verzweigung und das Channeling der Strömung (Tabelle 10) - einen großen Einfluß auf die Radialdispersion ausüben. Die beiden Effekte, die Eddy-Diffusion und die Verzweigung der Strömung, sind zu vernachlässigen, wenn das Fluid durch die Lücke in der Mitte des Reaktors strömt. Die großen Peclet-Zahlen bei dem Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,24 zeigen, wie wichtig es ist, die Schüttungsstruktur in die Modellierung eines Schütttschichtreaktors detailliert einzubeziehen, wie dies in dieser Arbeit erfolgt.

7.2.4.3 Radiale Dispersion im Modell Epsilon2D

Um die radialen Peclet-Zahlen Pe_r in einer Simulation des Kontinuumsmodells **Epsilon2D** zu bestimmen, wird eine Dispersionsmessung mit einer zentralen Traceraufgabe simuliert. Im Gegensatz zu den in dieser Arbeit dargestellten Messungen erfolgt die Traceraufgabe isokinetisch, indem am Ort der Aufgabe die Tracerkonzentration auf einen definierten Wert gesetzt wird und kein weiterer Stoffstrom in den Reaktor erfolgt. Bei dieser Vorgehensweise muß darauf geachtet werden, daß die Aufgabe nicht in einem Bereich sehr kleiner Porosität erfolgt, da in diesem Bereich auch der Volumenstrom sehr klein ist, so daß die simulierte Tracermenge unter Umständen kleiner werden kann als der numerische Fehler. Um diesen Umstand zu berücksichtigen, erfolgt die Traceraufgabe an einem Ort in der Mitte des Reaktors, an dem die Porosität $\varepsilon(\chi=R/d_p, \phi)$ größer als 40% ist. Dabei wird die in der Abbildung 7-50 dargestellte Verteilung des Tracers über den Radius genutzt, um auch im Falle geringer Dispersionskoeffizienten auswertbare, stetige Konzentrationsverläufe über dem Radius zu erhalten.

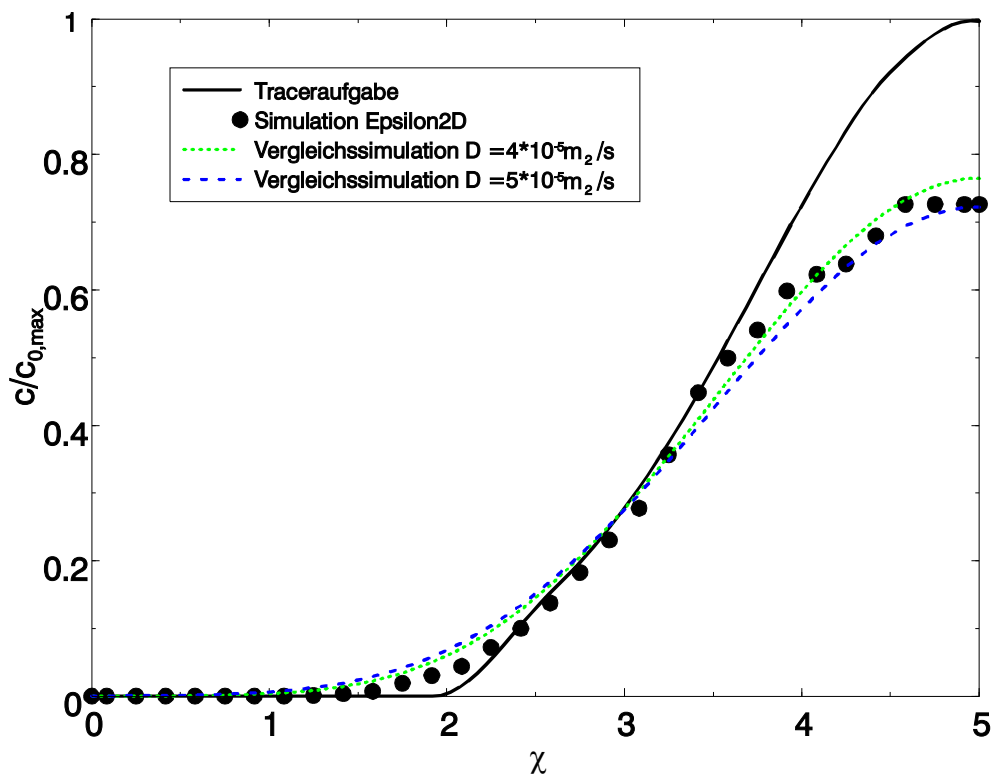


Abbildung 7-50: Bestimmung des radialen Dispersionskoeffizienten durch den Vergleich eines zweidimensionalen Modells mit Rechnungen, in denen die radiale Dispersion mit einem Ausdruck auf der Basis des ersten Fick'schen Gesetzes modelliert wird

Da aufgrund des Eingangssignals die im Rahmen der Messungen dargestellten analytischen Lösungen nicht nutzbar sind, wurde die Gleichung (7-28) analog zu Foumeny et al. [105, 106] numerisch mit **flowsim** gelöst und der Dispersionskoeffizient an die Simulation mit **Epsilon2D** angepaßt, wie dies an Hand der in Abbildung 7-50 dargestellten Konzentrationsprofile der Simulation und der Vergleichsrechnungen zu sehen ist. Die zur Anpassung verwendeten Konzentrationsprofile werden drei Kugeldurchmesser vor dem Ende der Schüttung entnommen, um einen Einfluß durch die Umlenkungen am Rektorausgang zu vermeiden.

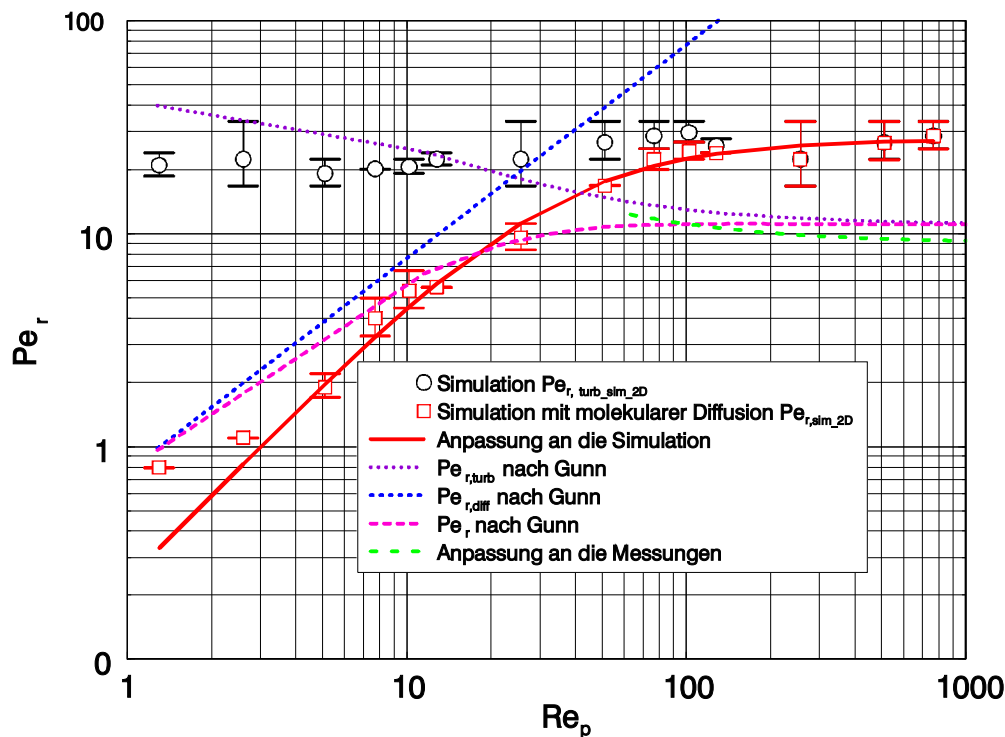


Abbildung 7-51: Simulation der radialen Dispersion im Vergleich mit eigenen Meßwerten und mit Literaturwerten

Um ausschließlich die Dispersion durch die Schüttung auf der Basis der zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ zu erfassen, werden die Dispersionsterme in der Gleichung (6-7) nicht berücksichtigt. Der Vergleich der Simulationsergebnisse von **Epsilon2D**, die gemäß Gleichung (7-37) korrigiert wurden, mit den Peclet-Zahlen Pe nach Gunn ((7-38) bis (7-40)) ist in der Abbildung 7-51 dargestellt. Die simulierten Peclet-Zahlen $Pe_{r,turb_sim_2d}$ sind im betrachteten Bereich der Reynolds-Zahlen im Rahmen der Bestimmungsgenauigkeit konstant, während die Peclet-Zahlen $Pe_{r,turb}$, die durch die Umströmung der Schüttung entstehen, mit steigender Reynolds-Zahl fallen (Abbildung 7-51). Ein Grund für dieses Verhalten könnte sein, daß bei den Bilanzgleichungen von **Epsilon2D** die Eddy-Diffusion nicht berücksichtigt wurde. Wahrscheinlicher ist aber, daß der von Gunn [125] gewählte Verlauf der Peclet-Zahlen $Pe_{r,turb}$ eine reine Anpassungsfunktion ohne physikalischen Hintergrund ist. Für diese These spricht, daß der Wert der Peclet-Zahl $Pe_{r,turb}(Re_p \rightarrow 0) = 40$ von Gunn [125] nicht weiter interpretiert wird. So ist davon auszugehen, daß der Dispersionskoeffizient im gesamten Reynolds-Bereich vom Modell **Epsilon2D** unterschätzt wird. Dieses Phänomen könnten auf der Annahme der Rotationssymmetrie des Reaktors beruhen,

da durch diese der Anteil der radialen Umströmung einer einzelnen Kugel an der radialen Dispersion nicht mehr erfaßt wird, sondern nur der Mittelwert aller radialen Ströme. Diese Varianz der Mittelwerte wird mit zunehmendem Radius immer kleiner, da auf dem Umfang, über den gemittelt wird, immer mehr Kugeln liegen. Somit wird die Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ und die Strömung $u(\chi, \phi)$ immer gleichmäßiger (Abbildung 7-52). Die möglichen radialen Ströme bei der Umströmung einer Kugel sollten aber konstant sein, da sich entlang der radialen Koordinate die Kugelgröße nicht ändert. So kann sich der Tracer durch die Umströmung in Verbindung mit Diffusionsmechanismen weiter in radialer Richtung ausbreiten, als dies vom Kontinuumsmodell vorhergesagt wird. Abhilfe könnte hier eine dreidimensionale Beschreibung der Schüttungsstruktur als Grundlage für ein Strömungsmodell bieten, wie dies mit dem Netzwerkmodell **TriKaMo-3D** realisiert wird.

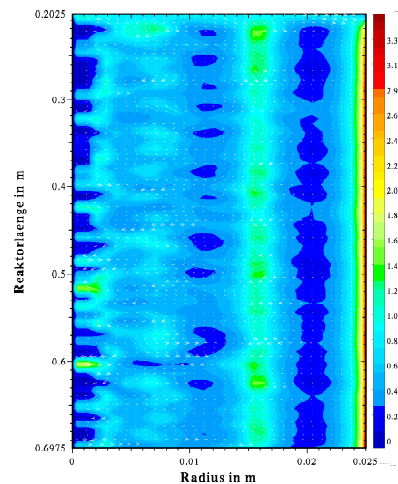


Abbildung 7-52: Zweidimensionale Geschwindigkeitsverteilung $u(\chi, \phi)$ auf der Basis einer zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$

Wird die molekulare Diffusion im Modell berücksichtigt, kann **Epsilon2D** im Bereich der laminaren Strömung einen ähnlichen linearen Zusammenhang berechnen, wie er in der Literatur [125] (7-38) für reale Festbetten bestimmt wurde. Allerdings weicht die Steigung erheblich von dem von Gunn [125] vorgeschlagenen Verlauf ab (7-38). Die Abweichung ist bedingt durch die Korrektur der Peclet-Zahl gemäß Gleichung (7-37), die das endliche Verhältnis von Reaktordurchmesser d_t und Partikeldurchmesser d_p berücksichtigt ($a_{pt} \neq 0$). Diese Beziehung ist nur für Reynolds-Zahlen Re_p bis 10 validiert [99] und scheint, wie die Abbildung 7-51 für die Simulation andeutet, nicht im Bereich der laminaren Strömung zu gelten. Mangels geeigneter Beziehungen und aufgrund der Gleichbehandlung von Meß- und Simulationsdaten wurde vom Autor dieser Arbeit eine einheitliche Vorgehensweise hinsichtlich der Korrektur gewählt, so daß sich die Steigungen der beiden linearen Abschnitte der Kurven um den Korrekturterm $\frac{1}{1+19,4 * a_{pt}^2}$ unterscheiden.

7.2.4.4 Radiale Dispersion im Modell TriKaMo-3D

Die radiale Dispersion im Kanalmodell **TriKaMo-3D** wird analog zu den Messungen am Referenzreaktor bestimmt. Dazu wird eine zentrale Traceraufgabe mit Hilfe der Gleichung (6-37) simuliert, aus der die Konzentrationsdaten über dem Reaktorquerschnitt resultieren. Diese Traceraufgabe bildet die Grundlage für die Bestimmung der Peclet-Zahlen. Da das Verhältnis zwischen der maximalen Konzentration in der Mitte des Reaktors und der minimalen Konzentration am Reaktorrand kleiner als fünf ist, kann nicht die Gleichung von Bernard und Wilhelms [23] (7-28) genutzt werden, sondern muß die Gleichung von Dorrweiler und Fahien [89] (7-31) angewandt werden. Dabei wird der Abfall der radialen Konzentrationsverteilung an der Reaktorwand auf den Wert null außer acht gelassen, da dieser nicht durch die Dispersion sondern durch die Mittelung der Konzentrationen über den Kreisumfang entsteht. In der Abbildung 7-53 ist sowohl die Konzentrationsverteilung, die aus der Strömungsverteilung im Netzwerkmodell resultiert, als auch die Konzentrationsverteilung nach Dorrweiler und Fahien [89] (7-31) dargestellt, die mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate an die Simulation angepaßt wurden. Die aus dieser Anpassung resultierenden Peclet-Zahlen Pe_r' werden mit der Gleichung (7-36) korrigiert, um den Einfluß der großen Durchmesserhältnisse a_{pt} auf die radiale Dispersion berücksichtigen zu können. Dadurch erhält man mit den Messungen vergleichbare Peclet-Zahlen Pe_r .

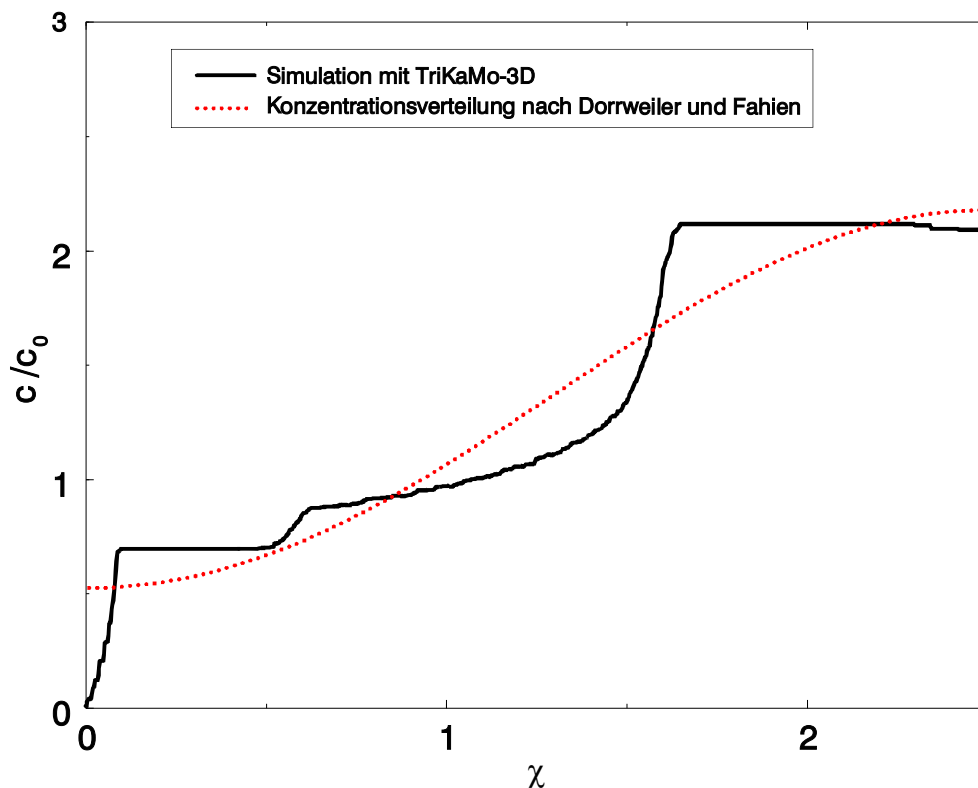


Abbildung 7-53: Bestimmung der radialen Peclet-Zahl im Netzwerkmodell TriKaMo-3D

Die so gewonnenen radialen Peclet-Zahlen Pe_r sind in der Abbildung 7-54 gegenüber der Reynolds-Zahlen Re_p im Vergleich mit den Referenzmessungen und mit dem Grenzwert der Peclet-Zahlen von elf für große Strömungsgeschwindigkeiten aufgetragen. Bei der laminaren Simulation eines Festbettreaktors mit dem Netzwerkmodell **TriKaMo-3D** bleibt die Peclet-Zahl konstant, da der diffusive Stofftransport z.Z. nicht in der Modellgleichung (6-37) berücksichtigt wird und da das Verhältnis der Stoffströme in jedem Knoten aufgrund ihrer linearen Beschreibung konstant bleibt. Mit dem Übergang zur turbulenten Simulation nimmt die Streuung der radialen Peclet-Zahlen zu. Numerische Fehler sind in diesem Fall unwahrscheinlich, da die größte Streuung im Bereich kleiner Fehler auftritt. Wahrscheinlicher für die Streuung der turbulent simulierten, radialen Peclet-Zahlen ist, daß im Bereich von Reynolds-Zahlen $Re_p < 1400$ einzelne Kanäle von der laminaren zur turbulenten Beschreibung im Netzwerkmodell übergehen. Da sich dieser Wechsel in jedem Kanal des Netzwerkmodells mit dem Erreichen der Reynolds-Zahl Re_{Kanal} von 2320 vollzieht, können sich die Strömungsverhältnisse in den einzelnen Knoten sprunghaft ändern. Befindet sich mindestens ein solcher Knoten im Bereich der simulierten Ausbreitung des Tracers, so kann sich der radiale Dispersionskoeffizient ebenso sprunghaft ändern. Dies könnte zu einer Verteilung der Peclet-Zahlen führen, wie die Abbildung 7-54 für die Reynolds-Zahlen $Re_p < 1400$ zeigt. Für Reynolds-Zahlen $Re_p > 1400$ tritt dieser Übergang nur noch bei einigen wenigen Kanälen auf, so daß sich die Peclet-Zahlen nicht mehr so sprunghaft ändern.

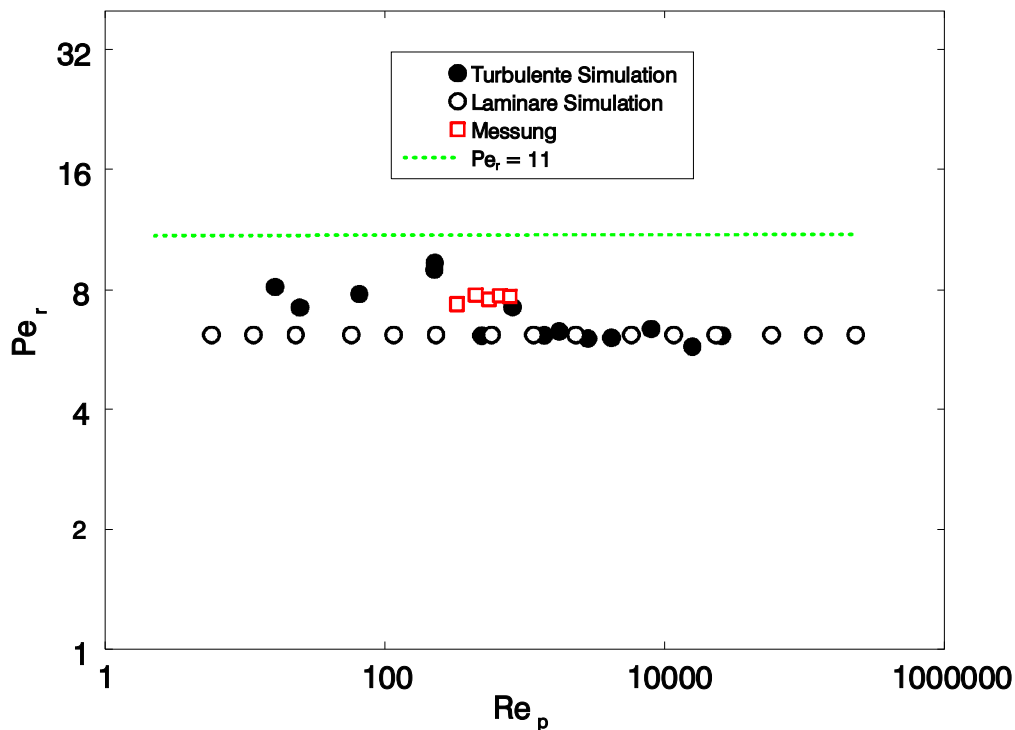


Abbildung 7-54: Radiale Dispersion der laminaren und turbulenten Simulation mit TriKaMo-3D im Vergleich mit den Referenzmessungen ($a_{pt} = 0,2$)

Vergleicht man die simulierten, radialen Peclet-Zahlen mit den Messungen und dem Grenzwert von elf für unendliche Reynolds-Zahlen Re_p (Abbildung 7-54), so liegen die von **TriKaMo-3D** simulierten Werte im gleichen Größenordnungsbereich, aber mit Werten um $Pe_r = 7$ niedriger als der turbulente Grenzwert ($Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) \approx 11$ [99, 171]⁶⁹ [228]⁷⁰). Für das Durchmesser Verhältnis a_{pt} von 0,2 liefert die laminare Simulation, wie auch die turbulente Simulation bei großen Reynolds-Zahlen ($Re_p > 1400$) kleinere Werte als die Messungen. Für kleine Reynolds-Zahlen zeigt die turbulente Modellierung des Reaktors ähnliche Peclet-Zahlen wie die Meßwerte. Die große Ähnlichkeit (Abbildung 7-54) der Simulationen und der Messungen deutet auf eine gute Übereinstimmung des Netzwerkmodells mit dem Referenzreaktor hin. Die geringfügig zu großen Dispersionskoeffizienten in der Simulation könnten zwei Ursachen haben. So könnte die größere Porosität des Schüttungsmodells, auf dem die Simulationen mit **TriKaMo-3D** basieren, zu etwas größeren Kanaldurchmessern geführt haben. Diese weiteren Kanäle wiederum könnten größere radiale Ströme und damit einen größeren radialen Dispersionskoeffizienten hervorrufen. Ein weiterer Grund für die kleineren radialen Peclet-Zahlen könnte die Annahme einer vollständigen Vermischung in den Knoten des Netzwerkmodells sein, wogegen im realen Reaktor ein Teil des Fluids an den Kugeln entlang strömt, ohne am Vermischungsprozeß in den Lücken teilzunehmen.

Der Vergleich der Simulationen des Netzwerkmodells **TriKaMo-3D** mit jenen des Kontinuumsmodells **Epsilon2D** zeigt, daß **TriKaMo-3D** eine deutlich bessere Übereinstimmung der radialen Dispersionskoeffizienten mit den Messungen am Referenzreaktor sowie mit dem Grenzwert $Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) \approx 11$ aufweist. Dies ist ein Indiz für die Vermutung, daß die Annahme der Radial-symmetrie des Reaktors die Ursache für die schlechte Übereinstimmung des Kontinuumsmodells mit den Messungen ist.

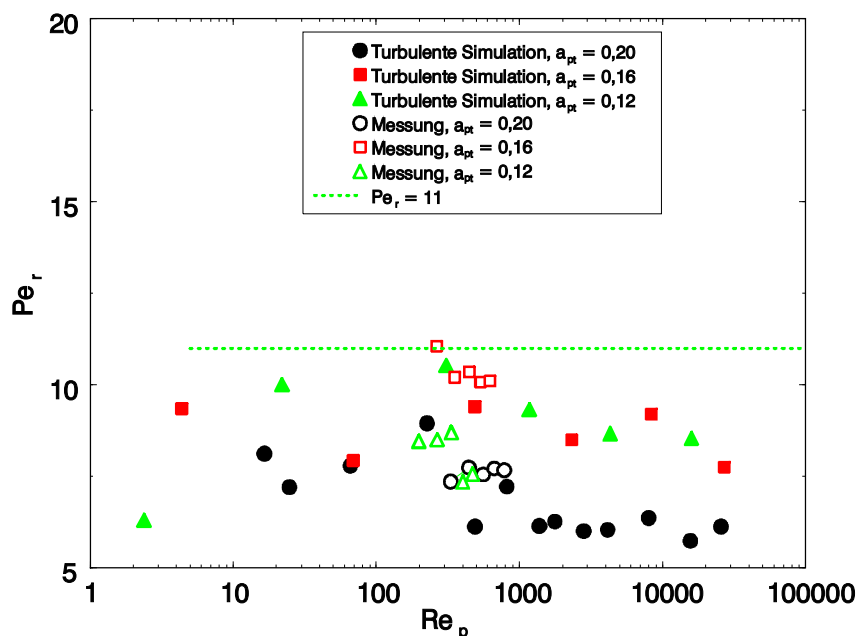


Abbildung 7-55: Radiale Dispersion in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt}

⁶⁹ $Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) = 11,2$

⁷⁰ $Pe_r(Re_p \rightarrow \infty) = 11,3$

Die in der Abbildung 7-55 dargestellte Abhängigkeit der turbulent simulierten und der in dieser Arbeit gemessenen radialen Peclet-Zahlen Pe_r vom Durchmesser Verhältnis zeigt eine gute Übereinstimmung. Der Bereich, in dem die simulierten radialen Peclet-Zahlen verteilt sind, entspricht dem Bereich, der von Dorrweiler und Fahien [89] für die mit Gleichung (7-31) korrigierten Messungen in Reaktoren mit einem großen Durchmesser Verhältnis a_{pt} bestimmt wurde. Ebenso markant wie die gute Übereinstimmung der Messungen mit Simulationen von **TriKaMo-3D** ist die Streuung der Simulationen. Diese Streuung ist wahrscheinlich durch den sprunghaften Übergang des Strömungsregimes in den einzelnen Kanälen des Modells bedingt. Versuche, die Simulationen Streuung durch den Einsatz einer stetigen Übergangsfunktion zu vermindern, wurden verworfen, da zum einen geeignete Beziehungen zwischen der Geschwindigkeit und dem Druckverlust nicht eindeutig umkehrbar waren und zum anderen dieser Ansatz den gewählten Beziehungen für glatte Rohre, wie sie in den Gleichungen (6-33) und (6-34) verwendet werden, widerspricht.

8 Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Zusammenfassung

Dem Autor ist es gelungen, mit dem in dieser Arbeit dargestellten Gesamtmodell, das radiale Dispersionsverhalten eines Festbettreaktors nachzuvollziehen, ohne effektive Parameter dafür zu nutzen. Dieser Vorteil gegenüber den bestehenden Systemen entsteht aus der Kopplung der mit **KS-OPT** erstellten Schüttungsmodelle mit den Strömungsmodellen **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D** zu einem Gesamtmodell. Bedingt durch den dreidimensionalen Ansatz liefert **TriKaMo-3D** eine realitätsnähere Beschreibung der radialen Dispersion, während **Epsilon2D** einen größeren Detailreichtum bei der Beschreibung der radialen Strömungsprofile zuläßt.

Ein wesentliches Element des Gesamtmodells ist das Schüttungsmodell, ohne dessen gute Übereinstimmung mit lockeren Kugelschüttungen die darauf aufbauenden Simulationsschritte nicht möglich wären. Diese gute Kongruenz konnte gegenüber anderen Schüttungsmodellen [178, 238, 275] gerade im Randbereich erreicht werden. Eine richtige Beschreibung dieses Bereichs ist notwendig, um Effekte wie Bypassing zu erfassen [178]. Auch bewirkt eine nicht-realitätsnahe Beschreibung dieses Bereichs eine zu geringe Strömung im Kern der Schüttung. Letztere kann, wie von Limberg [178] gezeigt, zu einer Fehleinschätzung des radialen Dispersionskoeffizienten führen.

Beide Strömungsmodelle des Gesamtmodells zeigen, daß der in dieser Arbeit verwendete Ansatz der Kopplung von Schüttungs- und Strömungsmodell ein Schritt auf dem Weg zu einem ab-initio Modell sein kann. So gelingt es durch die detaillierte Schüttungsstruktur, den effektiven Parameter D_{rad} zu eliminieren, so daß entsprechende Messungen bzw. Abschätzungen für die Simulation eines Reaktors nicht mehr notwendig sind. Dies gilt insbesondere für den Bereich großer Durchmesserhältnisse a_{pt} , in dem die Abschätzungen wie z.B. von Kulkarni und Doraiswamy [167] (7-31) nicht mehr validiert sind.

8.2 Ausblick

Mit weiterführenden ab-initio Simulationen wäre es möglich, die Reaktoren auszulegen, ohne auf teure und aufwendige Messungen oder Scaleup-Schritte zurückgreifen zu müssen. Damit würde eine kosten-optimale Planung von Reaktoren möglich. Außerdem würde mit der Vermeidung von Scaleup-Schritten eine erhebliche Zeitersparnis einhergehen. Ein weiterer Effekt von ab-initio Reaktormodellen wäre, daß sie ausschließlich auf physikalischen Gleichungen beruhen würden. Dies hätte gegenüber Simulationen, die auf empirischen Abschätzungen beruhen, den Vorteil, daß ihr Gültigkeitsbereich weiter gefaßt ist. Folglich wären die Simulationsergebnisse über weitere Bereiche der Eingangsparameter verläßlich.

Ausgehend von dem in dieser Arbeit dargestellten Gesamtmodell scheinen zwei Entwicklungswege zu solchen ab-initio Modellen möglich:

1. Das Modell **Epsilon2D** sollte bezüglich eines besseren Zusammenhangs der lokalen Porosität $\varepsilon(\chi, \phi)$ und der Strömungsgeschwindigkeit optimiert werden. Damit könnte die nicht validierte, differentielle Nutzung der Ergun'schen Gleichung, wie sie den Simulationen von **Epsilon2D** und anderen Autoren⁷¹ zugrunde liegt, entfallen. Dies könnte bewirken, daß die hohen Geschwindigkeiten am Reaktorrand vermieden werden und daß u.U. die radiale Dispersion im Innern der Schüttung besser erfaßt wird.
2. Das Ziel der Weiterentwicklung von **TriKaMo-3D** sollte eine verbesserte örtliche Auflösung der Geschwindigkeiten vor allem in der in Strömungsrichtung letzten Schicht sein. Dies ließe sich u.U. durch die Berücksichtigung der Geschwindigkeitsprofile in den Kanälen erreichen. Während Letzteres zu einer besseren Vergleichbarkeit von Modell und Messung führen könnte, würde eine optimale Beschreibung des Reaktorrandes und der Kanalgeometrien das Gesamtmodell leistungsfähiger machen.

Eine mögliche Grundlage für die beiden Entwicklungsrichtungen wäre eine verbesserte Parametrisierung von Schüttungen. So haben die Messungen und die Simulationen in dieser Arbeit gezeigt, daß die Gesamtporosität ε_g und die Abmessungen der Schüttung sowie ihrer Partikel nicht ausreichen, eine Schüttung und ihre Auswirkungen auf die Durchströmung zu charakterisieren. Es fehlen Parameter, die den Ordnungsgrad einer Schüttung und besondere Anomalien, wie z.B. eine sehr geringe Dichte entlang der Reaktorachse, erfassen können. Mit Hilfe solcher Parameter wäre es möglich, die Wechselwirkung zwischen Schüttung und Strömung besser zu erfassen und zu beschreiben sowie universellere Zusammenhänge zwischen z.B. der Porosität und dem Durchmesser-verhältnis zu erhalten.

⁷¹ 1, 25, 74 - 76, 178, 296 - 300

Andere Ansätze zur Steigerung der Qualität und der Anwendbarkeit des in dieser Arbeit vorgestellten Gesamtmodells sollten auf das Schüttungsmodell zielen. Vor allem wäre eine Erhöhung der Dichte notwendig. Dazu könnte zum einen in **KS-OPT** die Möglichkeit vorgesehen werden, daß die liegenden Kugeln ihre Position z.B. durch neue Kugeln oder Vibrationen verändern können oder daß die ganze Schüttung in einem Schritt optimiert wird. Letzteres wäre mit **KS-OPT** unter Einsatz eines wesentlich leistungsfähigeren Optimierers möglich. Ebenso kann eine verbesserte Realitätsnähe durch den Einsatz von Kugelradienverteilungen statt von fixen Kugelgrößen d_p erreicht werden.

9 Anhang

9.1 Meßmethoden zur Bestimmung der Schüttungsparameter

9.1.1 Verteilung der Kugelgrößen

Die Glaskugeln in den verwendeten Chargen mit einem Durchmesser d_p von 2, 4, 6, 8, 10, 12 und 14 mm unterliegen in ihren Durchmessern einer statistischen Verteilung. Um diese Verteilung zu bestimmen, wurde analog zu Gamson et al. [111] ein Zählverfahren benutzt. Bei dem verwendeten Verfahren wird eine Stichprobe von mindestens 400 Kugeln einzeln auf 50 μm genau vermessen. Aus den Meßwerten wurde der Mittelwert und die Standardabweichung gemäß den in [39] gegebenen Formeln (9-1) und (9-2) berechnet.

$$\text{Mittelwert} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N d_{p_i} \quad (9-1)$$

$$\text{Standardabweichung} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (d_{p_i} - \text{Mittelwert})^2}{N-1}} \quad (9-2)$$

In der Tabelle 11 sind die ermittelten Durchmesser und die Standardabweichungen aller benutzten Kugelchargen angegeben. Die Chargengrößen stimmen im Rahmen der Standardabweichungen mit den gemessenen Durchmessern d_p überein.

Tabelle 11: Gemessene Kugelgrößen

Chargengröße	gemittelter Durchmesser d_p	Standardabweichung
2 - 2.5 mm	2,21 mm	0,16 mm
4 mm	4,01 mm	0,07 mm
6 mm	5,96 mm	0,13 mm
8 mm	8,04 mm	0,16 mm
10 mm	10,08 mm	0,23 mm
12 mm	11,93 mm	0,16 mm
14 mm	13,99 mm	0,21 mm

Um zu überprüfen, ob die aus den Meßwerten resultierende Verteilung der Partikeldurchmesser d_p einer Gauss'schen Normalverteilung genügen, wird die gemessene Häufigkeitsverteilung und die aus den berechneten Momenten resultierende Normalverteilung überlagert. Wie in der Abbildung 9-1 zu sehen ist, beschreibt die Häufigkeitsverteilung eine Normalverteilung, wobei die angegebene Messung exemplarisch für alle anderen ist.

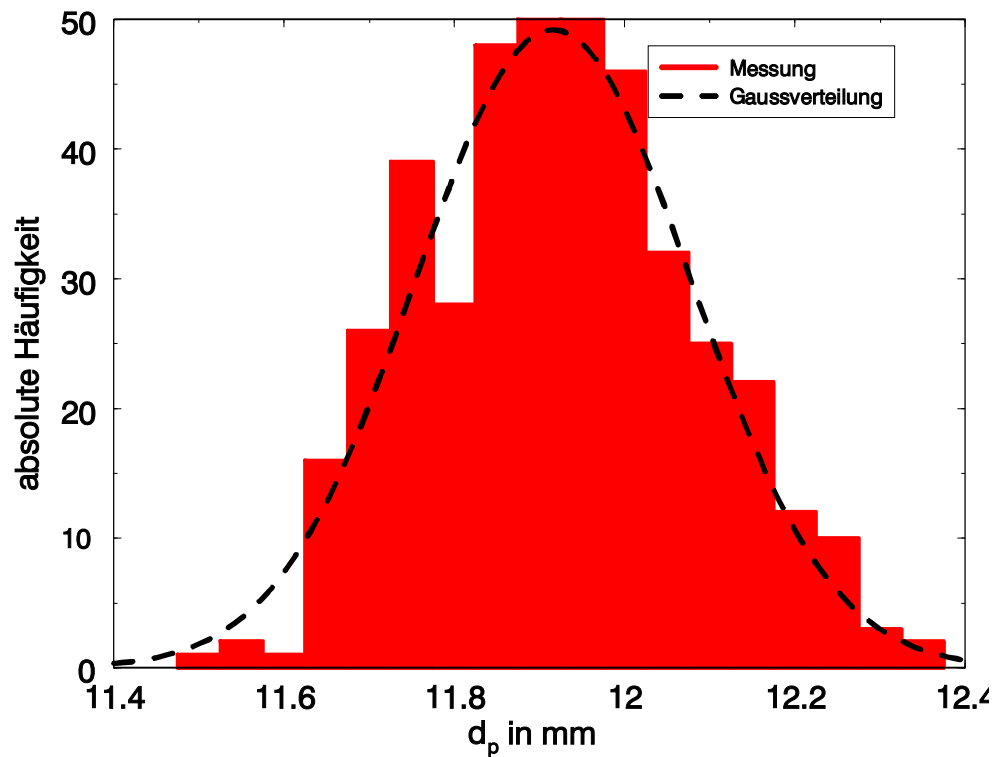


Abbildung 9-1: Kugeldurchmesserverteilung der 12-mm-Charge

9.1.2 Bestimmung der ersten Kugellage der Schüttung

Die in Strömungsrichtung letzte Kugellage hat einen großen Einfluß auf die Strömung im Nachlauf des Reaktors sowie auf die Dichte der simulierten Kugelschüttung [173, 178]. Um dem Gesamtreaktormodell eine verbesserte Übereinstimmung mit den realen Schüttungen zu ermöglichen, wird mit dem in diesem Kapitel dargestellten Verfahren ein Weg aufgezeigt, mit dem die letzte Kugellage digitalisiert wird und so die Grundlage eines Schüttungsmodells bilden kann.

In den betrachteten Reaktoren liegt die erste Kugellage auf dem Boden des Reaktors. Um die Positionen der Kugeln in dieser Kugellage zu erfassen, werden so viele Kugeln wie möglich auf den Reaktorboden gelegt. Durch diese Vorgehensweise können sich die Kugeln kaum mehr bewegen und sich in ihrer Lage nur noch geringfügig verändern. Diese Positionstabilität ist notwendig, da die Schüttung weder von der Seite noch von oben einen Einblick auf die inneren Kugeln oder die erste Kugellage gewährt. Eine Auswertung der ersten Schicht durch den Wabenkörper scheiterte zum einen an der geringen Lichtmenge, die die Schüttung passieren läßt, zum anderen an den Spiegelungen und Brechungen der höher liegenden Kugeln. Ein Begleiteffekt dieses Aufbaus der ersten Kugellage könnte sein, daß Schüttungen mit einer hohen Dichte entstehen.

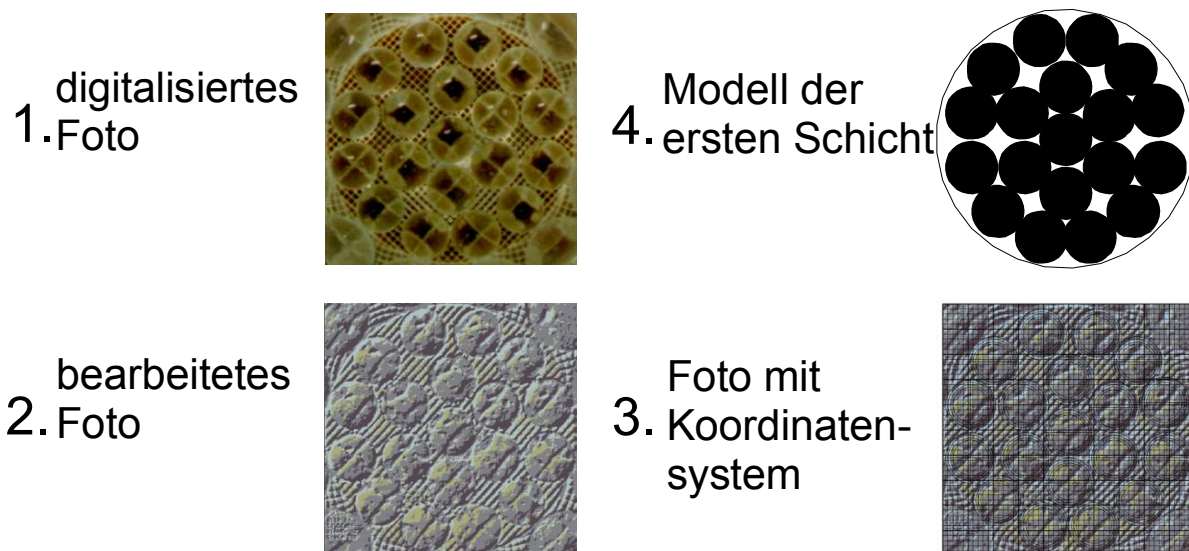


Abbildung 9-2: Bestimmung der Positionen in der ersten Kugellage

Die Bestimmung der Kugelpositionen beginnt mit ihrer Fotografie. Die so erhaltenen Bilder werden eingescannt⁷² und der Bereich des Reaktorquerschnittes ausgeschnitten (siehe Abbildung 9-2 (1.)). Anschließend wird der Kontrast des digitalen Bildes erhöht (siehe Abbildung 9-2 (2.)) und auf etwa 18 x 18 cm vergrößert. Über das Bild wird nun ein Raster gelegt, das einem Abstand von 0,1 mm im Reaktor entspricht. Die Positionen der Kugeln werden ermittelt, indem über das Abbild

⁷² Verwendete Materialien: HP Deskscan 3c und Software

jeder einzelnen ein Kreis mit einem Fadenkreuz so gelegt wird, daß die Ränder des Kreises und der Kugel übereinstimmen (siehe Abbildung 9-2 (3.)). Der Schwerpunkt einer Kugel ist mit dem Schnittpunkt des Fadenkreuzes definiert. Zur Kontrolle der Positionsbestimmung wird ein Schnitt durch die digitalisierte erste Kugellage berechnet (siehe Abbildung 9-2 (4.)).

Da die optische Qualität der eingescannten Fotos ein feineres Raster als 0,1 mm sinnlos macht, steigt der relative Fehler in den Positionen der Kugeln mit sinkendem Durchmesser d_p . Dies führt insbesondere bei Kugeln, die kleiner als 8 mm sind, zu geringfügigen Überlappungen in der digitalisierten ersten Kugellage. Diese Überlappungen wurden in dieser Arbeit vernachlässigt.

9.1.3 Messung der Gesamtporosität ε_g

Die Gesamtporosität ε_g ist ein wichtiger Parameter der realen Schüttungen. Sie wird in dieser Arbeit mit dem Gesamtvolumen aller Kugeln gemäß Gleichung (4-8) bestimmt. Das Leerraumvolumen V_L konnte nur sehr schlecht und nicht reproduzierbar durch Auslitern ermittelt werden, da trotz eines vorsichtigen Befüllens von unten nach oben Luftbläschen im Reaktor zurückblieben, die nicht durch Rütteln entfernt werden dürfen, da sich sonst die Schüttung verdichten würde. Ein weiteres Problem dieser Messung ist, daß der Wabenkörper durch die Einwirkung der Flüssigkeit, insbesondere von Wasser, in seiner Struktur und damit in seiner Tragfähigkeit geschädigt werden kann. Auch müßte der Reaktor nach dem Auslitern wieder getrocknet werden und stände folglich nicht sofort für weitere Messungen zur Verfügung.

Das gesamte Volumen aller Kugeln wurde parallel mit drei Methoden bestimmt:

1. Das Gesamtvolumen der Kugeln wird durch die Multiplikation des mittleren Kugelvolumens, das durch die gemessenen Kugelradien bestimmt wird, mit der Anzahl der Partikel berechnet. Letztere wird aus dem Gewicht mehrerer Stichproben mit bekannter Kugelzahl und dem Gesamtgewicht der Kugeln im Reaktor ermittelt.
2. Das Volumen der Schüttungspartikel wird aus der Dichte der Glaskugeln und dem Gewicht aller Kugeln im Reaktor berechnet. Die Dichte der Kugeln wird gemäß dem Archimedisches Prinzip [198] aus dem verdrängten Volumen einer Flüssigkeit bestimmt. Dazu wird eine Stichprobe von etwa 300 g in einen mit etwa 600 ml Wasser gefüllten 1l-Standzylinder gegeben. Der Anstieg des Wasserspiegels entspricht dem Volumen der Kugeln. Aus dem Gewicht der Stichprobe und dem Kugelvolumen wird die Dichte des Glases bestimmt.
3. Analog zu 2. wird die ganze Schüttung vermessen, so daß sich aus den Summen der einzelnen Messungen das Volumen aller Kugeln ergibt.

Die Messungen führten im Rahmen der Meßgenauigkeiten zu gleichen Ergebnissen.

Aus dem Gesamtvolumen der Kugeln wird mit Hilfe der Gleichung (4-9) die Gesamtporosität ε_g berechnet. In der Tabelle 12 sind die Ergebnisse der einzelnen Chargen für die Schüttungshöhen H_S von 470 mm und 1989 mm dargestellt. Der maximale Fehler wird gemäß [162] berechnet. Dabei werden folgende Fehler abgeschätzt:

Fehler in der Reaktorhöhe: 2 mm

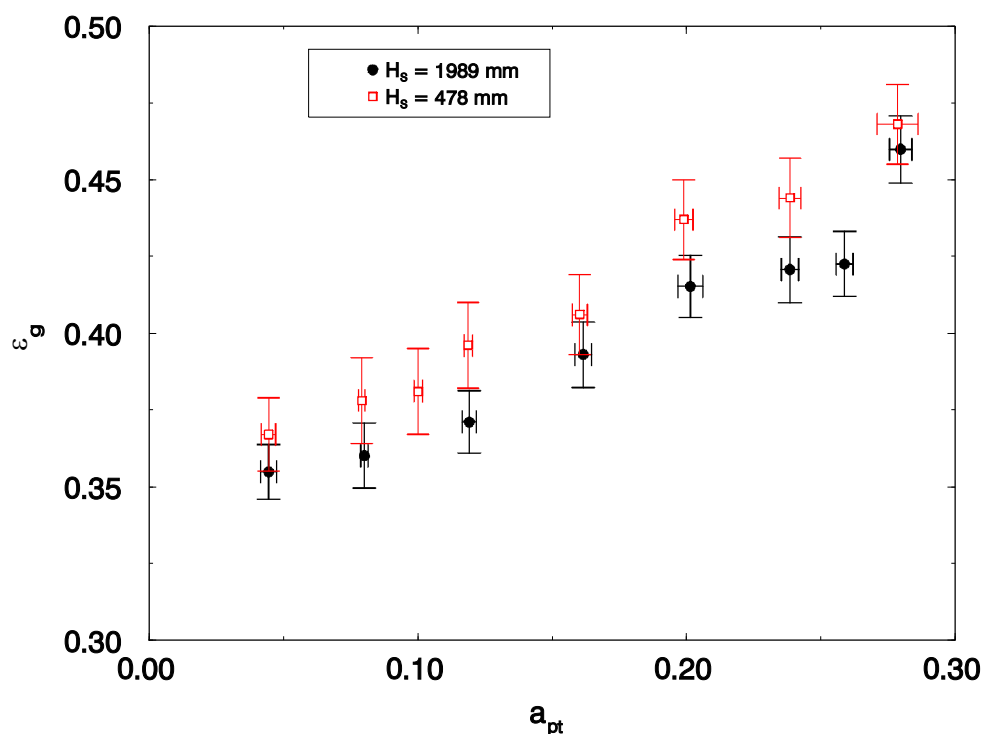
Fehler im Kugelvolumen: 10 ml/Messung

Andere Fehler, wie z.B. durch Temperaturschwankungen, werden vernachlässigt.

Tabelle 12: Porositäten der Schüttungen

Charge	$\varepsilon_{g,}$ $H_S = 478 \text{ mm}$	Fehler	$\varepsilon_{g,}$ $H_S = 1989 \text{ mm}$	Fehler
2 mm	0,361	0,012	0,355	0,009
4 mm	0,378	0,014	0,360	0,011
6 mm	0,396	0,014	0,371	0,009
8 mm	0,406	0,013	0,389	0,011
10 mm	0,437	0,013	0,419	0,008
12 mm	0,444	0,013	0,422	0,011
14 mm	0,468	0,013	0,460	0,011

Die Schüttungen überstreichen, wie in Abbildung 9-3 und in der Tabelle 12 zu sehen ist, einen weiten Porositätsbereich von 36% bis 47%. Dabei nimmt die Porosität mit abnehmender Partikelgröße d_p ab. Dies spiegelt den Einfluß der Reaktorbegrenzungen (Abbildung 9-4) wider. Mit steigendem Partikeldurchmesser d_p nimmt der Wandbereich relativ zum Reaktorvolumen zu. In diesem Bereich ist der Leerraumanteil größer als in der Schüttung, da die Lücken zwischen den Kugeln auf der Wandseite nicht durch andere aufgefüllt werden können. Dies führt dazu, daß bei größerem Anteil der Wandbereiche die Dichte der Schüttung sinkt. Zu einer ähnlichen Beobachtung und Schlußfolgerung kommen Zou und Yu [316]. Dies zeigt sich auch in den Messungen von Jeschar und Sonntag [134, 271], Leva [174] und Aerov [134].

Abbildung 9-3: Veränderung der Porosität als Funktion des Verhältnisses a_{pt}

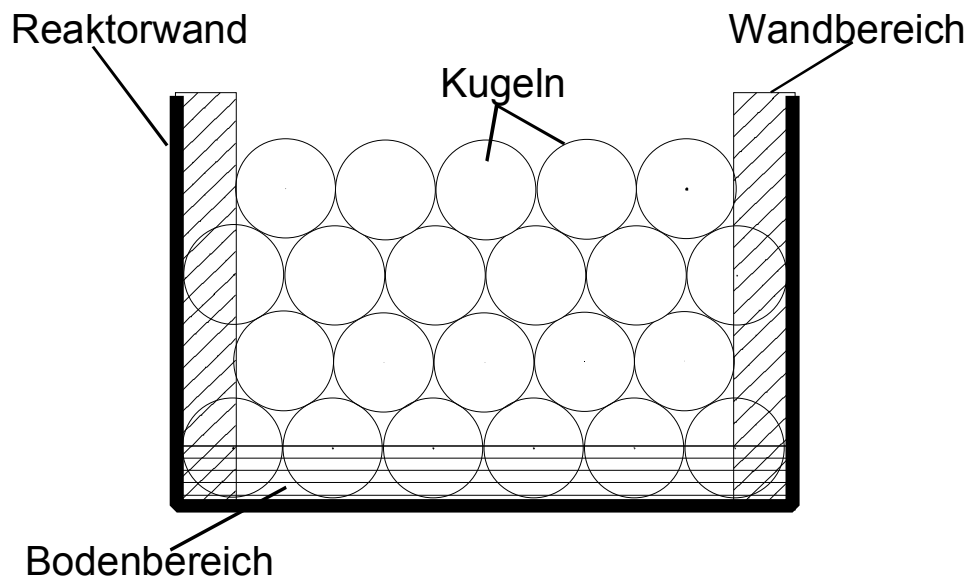


Abbildung 9-4: Bereiche in einem Reaktor (Skizze)

Die Vergrößerung der Schüttungshöhe H_S führt bei gleichem Partikel- (d_p) und Reaktordurchmesser (d_t) zu geringeren Porositäten (siehe Abbildung 9-3). Dabei bleibt der Anteil des Wandbereichs am Schüttungsvolumen konstant und der Anteil des Boden- und Kopfabschnitts sinkt. Folglich nehmen die weniger dichten Bereiche der Schüttung ab. Letzteres führt, wie es auch Zou und Yu [316] beschreiben, zu geringeren Gesamtporositäten ε_g bei steigender Schüttungshöhe. Aus dem gleichen Grund müßten die Kurven der beiden Schüttungshöhen bei sinkenden Durchmesser-Verhältnissen a_{pt} konvergieren. Diese Tendenz wird jedoch weder durch die beiden Messungen noch durch die angepaßten Funktionen bestätigt. Letztere deuten einen nahezu parallelen Verlauf der Gesamtporositäten an. Diese Abweichung von den theoretischen Überlegungen könnte aus den unterschiedlichen maximalen Fallhöhen der Kugeln (0,5 bzw. 2 m) beim Befüllen des Reaktors resultieren.

9.2 Meßmethoden zur Bestimmung von Reaktordaten

9.2.1 Versuchsaufbau und Durchführung der Druckverlustmessung

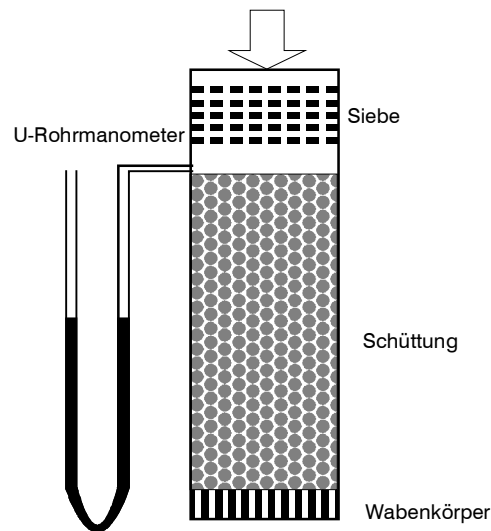


Abbildung 9-5: Skizze des Versuchsaufbaus

Die Messung des Druckverlustes erfolgt mit dem in Abbildung 9-5 skizzierten Versuchsaufbau. Der Massenstrom der Luft wurde mit Hilfe von Massendurchflußreglern eingestellt und über die Dichte und den Reaktorquerschnitt in die Anströmgeschwindigkeit u umgerechnet. Die Messung des Druckverlustes erfolgte mit einem wassergefüllten U-Rohrmanometer. Mit diesem ist es möglich, den Druckverlust im gesamten Meßbereich von 0 bis 350.000 Pa mit einer Auflösung von 10 Pa zu bestimmen. Sowohl das Manometer als auch die Gasdosierung bewirkten, wie die Abbildung 9-6 zeigt, eine geringe Streuung der Meßwerte.

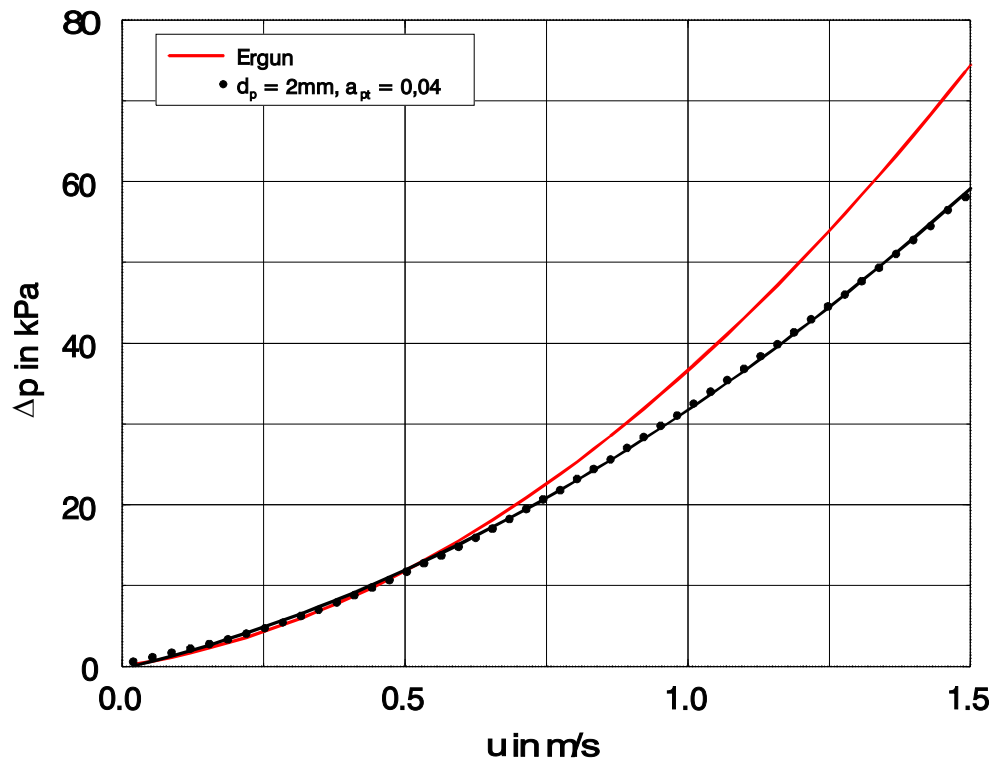


Abbildung 9-6: Druckverlust über dem Reaktor in Abhängigkeit von der Anströmgeschwindigkeit u ($a_{\rho t} = 0,04$)

9.2.2 Messung der Geschwindigkeitsverteilung

Die Geschwindigkeitsverteilungen in und hinter der Schüttung werden genutzt, um Festbettreaktormodelle zu validieren⁷³. Dazu werden zumeist radiale Verteilungen verwendet, weil sie in ihrer Form den Ergebnissen der ein- bzw. zweidimensionalen Reaktormodelle entsprechen. Die radialen Strömungsverteilungen werden durch Mittelung aus den Strömungsmessungen über den gesamten Querschnitt berechnet. Sie können aber auch, wie Schwarz und Smith [261] zeigen, durch konzentrische Meßsonden direkt bestimmt werden. Die erste der beiden Methoden wird in dieser Arbeit verwendet und in Beziehung mit der Schüttungsstruktur bewertet. Dies ist insbesondere für die Validierung der Modelle **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D** wichtig, da diese die Festbettreaktoren unter besonderer Berücksichtigung der Schüttungsstruktur simulieren sollen.

Neben den herkömmlichen Meßmethoden, wie Hitzdrahtanemometern oder Laser-Doppler-Anemometern, stehen noch andere Methoden zur Verfügung, die u.a. mit Hilfe der NMR-Technik die Strömung [262, 263] in und hinter der Schüttung bestimmen können. Die NMR-Technik war zur Zeit der Planung und des Aufbaus des Referenzreaktors nicht verfügbar, so daß sie bei der Auswahl des Meßsystems keine Rolle spielte. Mit diesen Verfahren könnte aber in Zukunft eine Möglichkeit zur störungsfreien Strömungsmessung innerhalb der Schüttung zur Verfügung stehen. Eine Bewertung dieser Methode ist aber z.Z. noch nicht möglich, da keine radialen Strömungsmessungen veröffentlicht wurden, die einen Vergleich mit Messungen oder mit den Ergebnissen von Modellen, wie **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D**, ermöglichen, so daß in dieser Arbeit auf eine eingehendere Behandlung verzichtet wird.

Ein wichtiger Parameter bei der Messung in Festbetten ist der Messungsort, wobei sowohl Messungen in als auch hinter der Schüttung denkbar sind. Am günstigsten zur Erforschung von Festbettreaktoren sind Messungen im Reaktorbett. Sie sind aber, wie der folgende Abschnitt zeigt, sehr problembehaftet, so daß in der Regel⁷⁴, wie auch in dieser Arbeit, Messungen in Strömungsrichtung hinter der Festbettschüttung zur Charakterisierung eingesetzt werden.

⁷³ [25, 26, 74 - 76, 163, 178, 189, 262, 263]

⁷⁴ [25, 26, 74 - 76, 163, 178, 189, 262, 263]

9.2.2.1 Verfahren zur Bestimmung von Geschwindigkeitsprofilen in Schüttungen

In der Arbeit von Wright [310] wird das Strömungsprofil in der Schüttung durch Hitzdrähte ermittelt, die sich in mehreren radialen Positionen in den Lücken innerhalb des Bettes befinden. Dieses Verfahren wird von Ziólkowska und Ziólkowski [314] eher als Methode zur qualitativen Erfassung des radialen Strömungsprofils gesehen.

Messungen mit Laser-Doppler-Anemometern (LDA) wurden von Rottschäfer [244] und McGreevy et al. [190] vorgenommen. Diese Messungen stellen hohe Anforderungen an die Schüttung und das Fluid. Beide müssen lichtdurchlässig sein und den gleichen Brechungsindex besitzen, um Brechungen an den Partikeloberflächen zu vermeiden. Dabei können Flüssigkeits-/Feststoffsysteme genutzt werden, wie sie von Bultman [45] sowie Schneider und Rippin [253] zur Bestimmung der Porositätsverteilung vorgestellt werden. Schneider und Rippin [253] weisen aber bei ihren Messungen daraufhin, daß eine Bestimmung der Porosität entlang eines optischen Weges von mehr als zehn Kugellagen aufgrund von Verunreinigungen der Flüssigkeit und der benutzten Glaskugeln problematisch ist. Dies sollte auch für die Laser-Doppler-Anemometrie gelten, da hier ähnliche Bedingungen herrschen. Ein weiteres Problem ist, daß zur Strömungsmessung mit einem Laser-Doppler-Anemometer dem Fluid kleine Partikel zugesetzt werden müssen. Gemäß einer der Hauptanwendungsgebiete von Festbettschüttungen werden diese Partikel im Festbett abgeschieden, wodurch die Struktur der Schüttung verändert wird. Rottschäfer [244] versucht diese Probleme zu umgehen, indem die Messungen mit geringen Tracerpartikelkonzentrationen und mit Durchmesserhältnissen a_{pt} von mehr als 0,1 durchgeführt werden. Um die Wirkung des Festbetts als Partikelfilter zu vermindern, muß die Schüttung nach jedem vermessenen Querschnitt gereinigt und neu gepackt werden, so daß die Messungen nicht direkt mit einander korrelierbar sind [244]. Die Messungen [244] beschränken sich aufgrund des hohen Meßaufwands auf nur wenige Ebenen innerhalb des Reaktors, weshalb der Nutzen hinsichtlich einer Bewertung der lokalen Struktur zweifelhaft erscheint.

Sowohl die optischen Probleme als auch die Effekte durch Tracerpartikel existieren auch bei der Partikelverfolgung (PIV⁷⁵), da es sich ebenfalls um ein optisches Verfahren handelt, das die Strömung anhand von Partikeln bestimmt [49, 206, 223], die sich mit der Strömung bewegen. Stephenson und Stewart [280] lösen das Problem der Partikelabscheidung im Reaktor, dadurch, daß sie als Strömungsmarker statt Partikel kleine Glasbläschen verwenden. Gegen dieses Vorgehen sprechen Beobachtungen, die im Zusammenhang mit der optischen Porositätsmessung [45] gemacht wurden. So führt die Lichtbrechung der Bläschen, die sich außerhalb der Beobachtungsebene im Lichtstrahl befinden, dazu, daß die Position der Blasen in der Beobachtungsebene und somit

⁷⁵ PIV = Particel-Image-Velocimetry

deren Geschwindigkeiten falsch bestimmt werden. Auch scheint die Bläschengröße die lokale Auflösung der Messung zu beschränken. Es können aber sowohl laminare als auch turbulente Strömungen vermessen werden. Bei Partikeln als Streuteilchen merkt Rottschäfer [244] an, daß die Meßmethodik der PIV auf eine schleichende Strömung beschränkt ist, da die Belichtungszeit mit der Geschwindigkeit der Teilchen abnimmt und somit das von den Partikeln gestreute Licht nicht mehr zur Belichtung des Film bzw. des CCD-Chips ausreicht.

9.2.2.2 Verfahren zur Bestimmung von Geschwindigkeitsprofilen in Leerrohren

Um ein radiales Strömungsprofil in einem freien Rohr zu messen, müssen Staurohre, Flügelräder und Hitzdrahtanemometer die Schnittfläche, an der das Profil bestimmt werden soll, mit Hilfe einer präzisen Steuerung Punkt für Punkt vermessen [74]. Dadurch ergeben sich lange Zeiten, über die die Strömung stabil gehalten werden muß. Aus den Einzelmessungen wird durch Integration über den Kreisbogen die radiale Strömungsgeschwindigkeitsverteilung berechnet. Bei Laser-Doppler-Anemometern müssen sowohl der Laser als auch der Detektor so justierbar sein, daß mit ihnen die Schnittfläche gescannt werden kann.

Schwartz und Smith [261] vermeiden eine Integration der Meßwerte über den Winkel, indem sie die Heizdrähte in konzentrischen Ringen im zylindrischen Reaktor anordnen. So erhalten sie direkt das Integral der Geschwindigkeit in einem bestimmten Abstand zur Wand. Problematisch ist dabei, daß nur wenige Meßpunkte möglich sind, da größere Abstände zwischen den Heizdrähten eingehalten werden müssen, um Wechselwirkungen zwischen den einzelnen konzentrischen Heizdrähten und den Strömungen durch die zahlreichen Befestigungen der Meßdrähte zu vermeiden.

Wie die Übersicht der Meßmethoden und der Meßorte gezeigt hat, ist eine Messung innerhalb der Schüttung problematisch, so daß im Rahmen dieser Arbeit darauf verzichtet wurde. Für die Messung hinter der Schüttung wurde die Hitzdrahtanemometrie gewählt, da sie gegenüber den Staurohren und den Flügelrädern ein besseres zeitliches Ansprechverhalten hat und auch eine Messung der Strömungsrichtung zuläßt. Die optischen Verfahren, LDA und PIV, wurden in der Planungsphase aufgrund der möglichen Partikelabscheidung im Reaktor und den relativ hohen Kosten verworfen. Alternativ zu den Heizdrähten könnten auch elektrochemische Sensoren, wie sie von Jolls und Hanratty [152] vorgestellt wurden, genutzt werden. Diese Sensoren sind aber auf die Strömungsmessung in Flüssigkeiten beschränkt, so daß sie ebenfalls nicht berücksichtigt wurden.

Aus der Wahl der Hitzdrahtanemometrie ergibt sich der im folgendem Kapitel dargestellte Aufbau. Die Wahl von Luft als strömendes Medium resultiert zum einen aus ihrer Verfügbarkeit, zum anderen aus der guten Regelbarkeit der Volumenströme mittels Massendurchflußreglern.

9.2.3 Versuchsaufbau und Durchführung der Strömungsmessung

Um die Strömung hinter der Schüttung messen zu können, wurde die in Abbildung 9-7 skizzierte Meßanlage realisiert. Die Skizze enthält vier wichtige Bereiche:

1. **Reaktor mit Meßzone**
2. **Anemometer mit Eichdose**
3. **Prozeßsteuerung und Traverseneinheit**
4. **Meßwertaufbereitung**

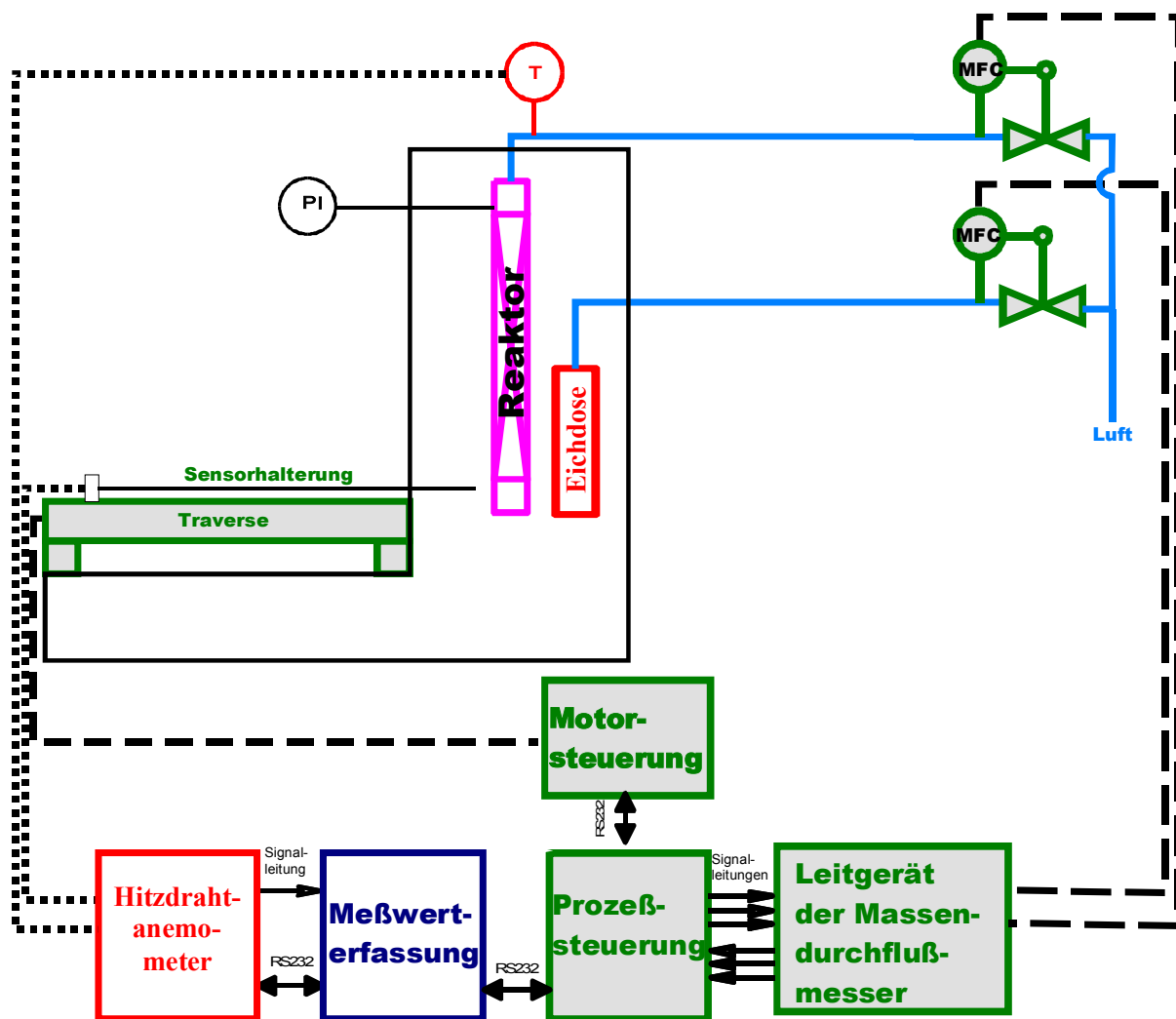


Abbildung 9-7: Skizze der Anlage zur Strömungsmessung

1. Reaktor mit Meßzone

Um die Strömung möglichst wenig zu stören, wird der Hitzdraht mit dem Sensorhalter durch ein nur wenige Zehntel Millimeter größeres Loch in den Schuß unter der Schüttung eingebracht (Abbildung 9-8), so daß der Sensor einen Abstand von 5 mm zum Wabenkörper besitzt. Dies entspricht der Vorgehensweise von Daszkowski [74]. Analog zu dieser Arbeit [74] wurde der Reaktorquerschnitt unter der Schüttung vermessen, indem die Querschnittsfläche in einzelne Radien zerlegt wird. Jeder Radius wird vermessen, indem ausgehend von der Mitte der Sensor schrittweise nach außen bewegt wird. Der Wechsel von Radius zu Radius erfolgt, indem der Reaktor über dem Meßschuß gedreht wird. Die Zahl von 50 Meßpunkten auf einem Radius ergibt sich aus der Positionierungsgenauigkeit der Traverseneinheit von 0,05 mm. Die Zahl der gemessenen Radien von 36 wurde so festgelegt, daß sich die Meßzonen des Hitzdrahtanemometers auf dem äußeren Umfang der Schüttung nicht überlappen. Eine Alternative zu diesem Vorgehen wäre mit der Traverseneinheit den Reaktorquerschnitt schachbrettartig oder in konzentrischen Kreisen zu vermessen. Dieses Vorgehen wurde verworfen, da dazu der Schuß unter der Schüttung geschlitzt werden müßte, was mit einer massiven Störung der Strömung einhergehen würde.

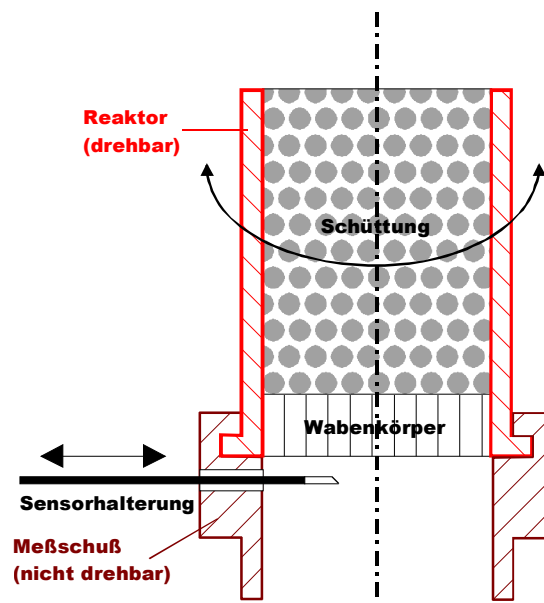


Abbildung 9-8: Detailskizze des drehbaren Reaktors und des Meßschusses

Da die Dimension der Sonden und die Genauigkeit der Positionierung, wie oben gezeigt, die maximale Anzahl der Meßpunkte definieren, wird dadurch auch die Auswahl der Kugelgrößen eingeschränkt. So ist es sinnvoll, die Meßpunkte so zu legen, daß mehr als ein Meßpunkt auf einem Kreisbogen im Bereich einer Kugel liegt. Ist dies nicht der Fall, können nicht einmal Tendenzen über die Strömung unter bzw. zwischen den Kugeln erfaßt werden, da relativ große Lücken eventuell nicht erfaßt werden. Um diesen Fall zu vermeiden, muß der Kugeldurchmesser d_p größer oder gleich 6 mm sein. Als größte Kugelcharge wurden die 10 mm Kugeln gewählt, da größere Kugeln beim Vergleich der Messungen mit dem Netzwerkmodell aufgrund der wenigen Kanälen in der Grundfläche Probleme bereitet hätten.

2. Anemometer und Eichdose

Der wichtigste Teilschritt der Messung mit einem Anemometer ist seine Kalibrierung, da die Geschwindigkeit nicht wie bei der LDA, PIV oder der NMR-Technik direkt gemessen wird, sondern durch den Vergleich des Meßsignals mit einer Kalibriermessung bestimmt wird. Zur Kalibrierung wird der Sensor des Anemometers in das Zentrum eines laminaren Freistrahls [309, 312] gefahren. Die Geschwindigkeit in diesem Freistrahls wird mit Hilfe eines Massendurchflußreglers im Bereich von 0,05 bis 4,3 m/s kalibriert. Der untere Grenzwert ist sowohl durch den unteren Meßbereich des Hitzdrahtanemometers als auch durch den unteren Regelbereich des Massendurchflußreglers festgelegt. Die Obergrenze wird durch den maximalen Wert des Reglers definiert. Der Regelbereich schließt, wie die Messungen in den folgenden Kapiteln zeigen werden, den gesamten Bereich der auftretenden Strömungsgeschwindigkeiten ein. Um die Geschwindigkeiten zwischen den Kalibrierpunkten mit dem Spannungssignal des Anemometers korrelieren zu können, wurde nicht die King'sche Gleichung verwendet, sondern ein Polynom vierten Grades, wie es vom Hersteller⁷⁶ des verwendeten Anemometers⁷⁷ empfohlen wird. Zur Kalibrierung wurden 50 Geschwindigkeiten in dem oben beschriebenen Meßbereich herangezogen. Damit ergibt sich die in Abbildung 9-9 dargestellte Kalibrierfunktion. Die Fehler [162] bei der Kalibrierung steigen mit abnehmender Strömungsgeschwindigkeit, da zum einen die Regelgenauigkeit der Massendurchflußregler abnimmt und zum anderen der Hitzdraht durch seine Temperatur (150°C) eine thermische Konvektion auslöst, die bei sehr kleinen Geschwindigkeiten die zumessenden Strömungen überlagert.

3. Prozeßsteuerung

Die Notwendigkeit einer Prozeßsteuerung ergab sich aus der Notwendigkeit die Ströme in den Reaktor und in die Eichdose über den Zeitraum der Messung, d.h. über ca. drei Tage, zu überwachen und konstant zu halten. Dazu mußten Massenströme entsprechend der auftretenden Druck- und Temperaturänderungen nachgeführt werden. Die Temperatur wurde, wie in der Abbildung 9-8 dargestellt ist, bei jeder Messung automatisch vom Anemometer aktualisiert. Der Luftdruck wurde vor und nach jeder Messung entlang eines Radius aufgenommen. Mit diesen Werten wurde die Kalibrierung manuell korrigiert.

Die zweite Aufgabe der Prozeßsteuerung ist die elektrische Entkopplung des Anemometers und der Traverseneinheit⁷⁸, da Vorversuche zeigten, daß ohne diese Entkopplung die Steuerströme der Traverseneinheit das Signal des Anemometers stören. Durch die Trennung fiel der Prozeßsteuerung auch die Überwachung der Sensorposition und der -fahrwege zu, die notwendig ist, um Zusammenstöße des wertvollen Sensors mit dem Reaktor und seiner Halterung zu vermeiden. Aus dem gleichen Grund mußte der Reaktor auch vertikal positionierbar sein, um das

⁷⁶ TSI GmbH, Zieglerstr. 1, 52078 Aachen

⁷⁷ Flowpoint 1500-2SH, Sensor 1210-20

⁷⁸ Hersteller: ISEL-Automation, Hugo Isert, Im Leibolzgraben 16, 36132 Eiterfeld

Eintrittsloch des Sensors in den Meßschuß und den Sensor in einer Höhe anordnen zu können. Die Höhenverstellbarkeit des Reaktors wurde realisiert, indem die gesamte Reaktorhalterung auf einen Laborlift gestellt wurde, dessen Tragkraft auf 30 kg begrenzt ist, was den Einsatz von z.B. Stahlkugeln als Reaktorschüttung verbot.

Der dritte Grund für diese Trennung ist die geplante Erweiterung der Anlage, um Rieselbettreaktoren betrachten zu können, bei denen zusätzlich Flüssigkeitsströme eingestellt und überwacht werden müssen. Weiterhin sind bei diesen Reaktoren der dynamische und statische Hold-up der Flüssigkeit wichtige Parameter, deren Messung eine definierte Abschaltung der Prozeßströme benötigt.

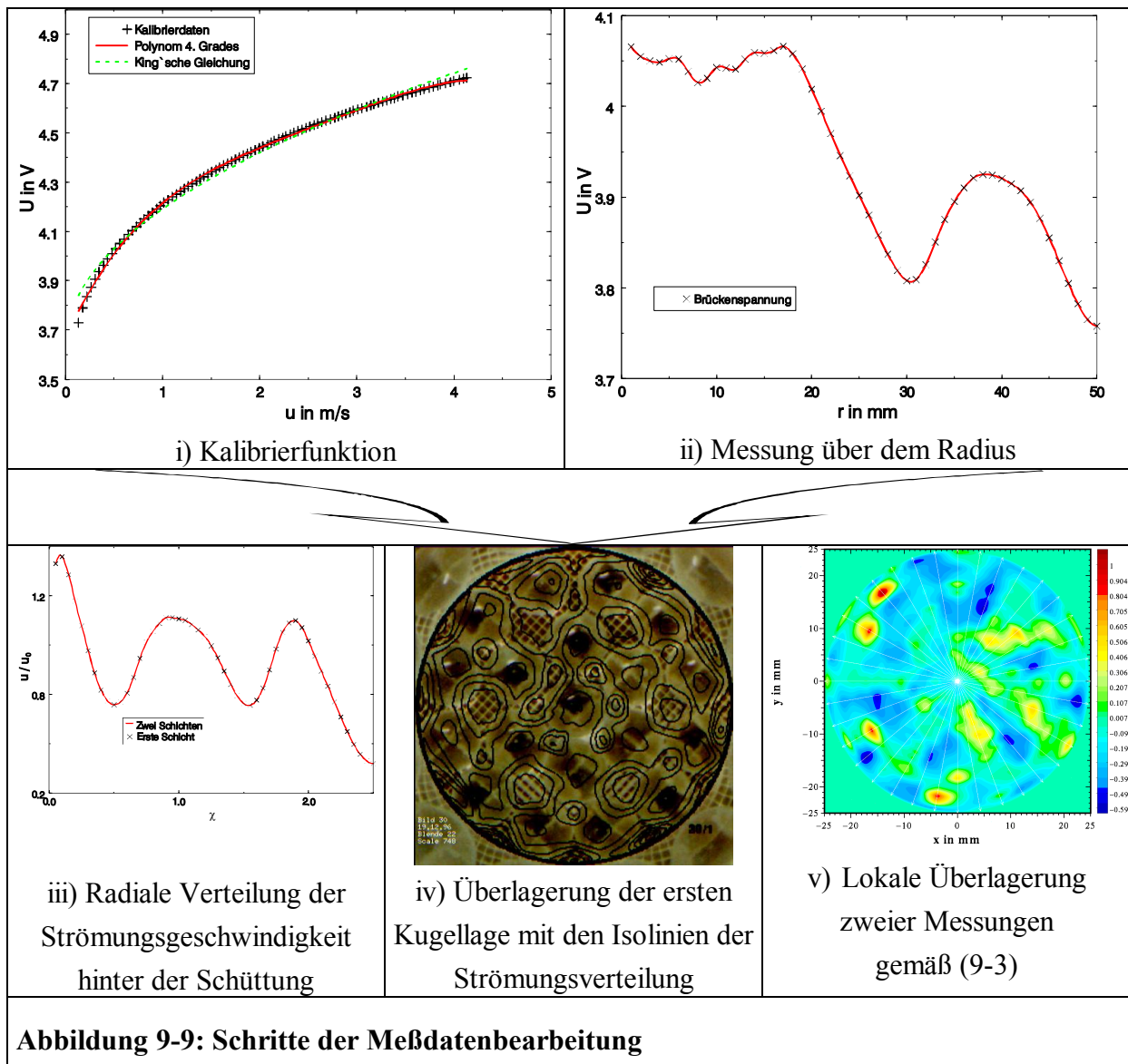
4. Meßwerterfassung

Die Meßwerterfassung gibt der Prozeßsteuerung die Parameter der Messung (Strömungsgeschwindigkeit und Meß- bzw. Kalibrierungsort) an, steuert das Anemometer und sammelt die Meßwerte sowie die folgenden Prozeßparameter:

- Strömungsgeschwindigkeit
- Temperatur
- Druckverlust über der Schüttung
- Luftdruck
- eventuelle Störungsmeldungen

An dieser Stelle erfolgt keine Auswertung der Daten, sondern nur eine Bewertung hinsichtlich ihrer Sinnfälligkeit. So werden Meßreihen abgebrochen und verworfen, bei denen die Standardabweichung einen gewissen Schwellwert überschreitet, da dies auf Schäden im Bereich des Sensors oder auf eine falsche Abstimmung des Anemometers hindeutet.

Die Auswertung der Spannungsdaten, die das Anemometer liefert, erfolgt auf einem anderen Rechner, um den Operator als Quelle für Luftbewegungen auszuschließen und den Meßrechner nicht zu belasten. Letzteres ist notwendig, da die Synchronisation der einzelnen Überwachungs-, Steuerungs- und Meßprozeduren zeitkritisch ist.



Die Verarbeitung der Rohdaten erfolgt in mehreren Stufen:

- A) Im ersten Schritt werden die Daten (Abbildung 9-9 ii) entsprechend der Kalibrierung (Abbildung 9-9 i) in die Strömungsgeschwindigkeit $u(r, \theta)$ umgerechnet. Zur Überprüfung der Massenbilanz werden die Strömungsdaten unter Bewertung ihrer radialen Position aufsummiert.
- B) Im zweiten Schritt wird die radiale Mittelung der Daten vorgenommen, indem das arithmetische Mittel aller Meßpunkte mit der gleichen radialen Koordinate r gebildet wird (Abbildung 9-9 iii).
- C) Anschließend werden die fehlenden Punkte auf den Kreisringen mittels einer Splineinterpolation 4. Grades ergänzt.
- D) Im vierten Schritt werden die Strömungsgeschwindigkeiten über dem Reaktorquerschnitt mit den Kugelpositionen der ersten gemessenen Kugellage (Anhang 9.2) überlagert, um diese optisch mit einander korrelieren zu können (Abbildung 9-9 iv).

E) Im letzten Schritt wird die relative Abweichung (9-3) in jedem Meßpunkt zur vorhergehenden Messung berechnet (Abbildung 9-9 v).

$$\alpha_{m_1, m_2}(r, \theta) = \frac{u_{m_2}(r, \theta) - u_{m_1}(r, \theta)}{u_{m_1}(r, \theta)} \quad (9-3)$$

mit m_1 und m_2 als Index der Messungen

Um bewerten zu können, wie sich die Strömung von Messung zu Messung ändert, wird aus diesen Abweichungen eine quadratische Abweichung berechnet (9-4).

$$\alpha_{m_1, m_2} = \sqrt{\frac{\int_0^R \int_0^{2\pi} a_{m_1, m_2}(r, \theta)^2 * r d\theta dr}{2\pi r^2}} \quad (9-4)$$

9.2.4 Strömungsverteilung über der Querschnittsfläche des Reaktors

Aus den Meßdaten der einzelnen Radien läßt sich nach den Verarbeitungsschritten A) und C) eine Strömungsverteilung unter der Schüttung bestimmen, die in Abbildung 9-10 dargestellt ist. Dabei zeigt sich eine deutliche Ungleichverteilung der Strömung. Die in der Abbildung 9-10 ($u_0 = 0,98$) dargestellten Schwankungen in den Strömungsmaxima spiegeln nicht etwa den Einfluß des Wabenkörpers wider, sondern sind Artefakte, die durch die Splineinterpolation entstehen.

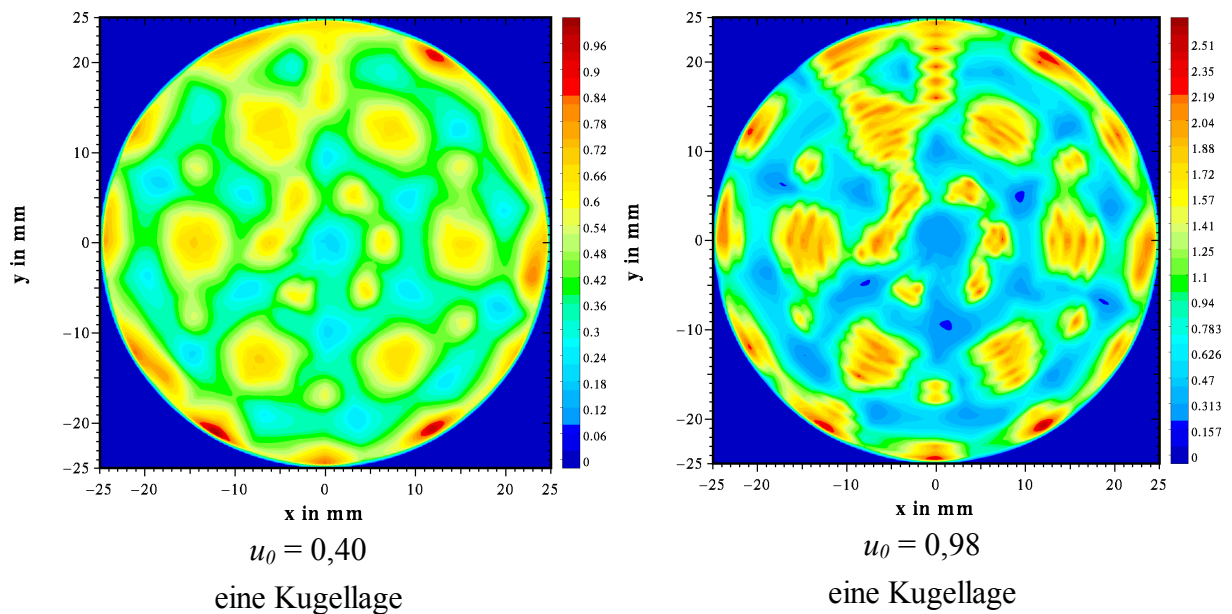


Abbildung 9-10: Messung der Strömungsgeschwindigkeiten über dem Reaktorquerschnitt ($a_{pt} = 0,2$).

Die Verteilung der Minima der Strömungsverteilung erinnert an die Positionen der Kugeln in der ersten Kugellage (Abbildung 9-11). Um diese Vermutung zu überprüfen, wird ein Bild der ersten Kugellage mit den Isolinien der Messung überlagert (Abbildung 5-22). Dabei zeigt sich eine gute Übereinstimmung (Abbildung 9-12) der Kugeln mit den Minima der Strömungsverteilung sowie der Maxima mit den Lücken.

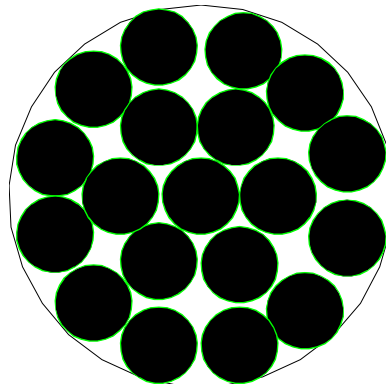


Abbildung 9-11: Gemessene erste Kugellage

Bei diesem Vergleich fällt auf, daß die größten Geschwindigkeiten nicht in den Lücken mit den größten Querschnittsflächen sondern in den Randbereichen auftreten, in denen bei nur einer Kugelschicht verglichen mit dem Kern der „Schüttung“ kleinere Lücken zu finden sind (Abbildung 9-12). Eine mögliche Erklärung ist, daß bei der Durchströmung der Lücken kein Druckausgleich über dem Querschnitt des Reaktors erfolgt, sondern daß das Medium in den engeren Lücken aufgrund seiner Trägheit stärker beschleunigt als in den größeren Lücken [95]. Für diese These spricht, daß dieser Effekt mit steigender Geschwindigkeit stärker ausprägt ist. Eine weitere Erklärung zeigen die Messungen von Daszkowski [74], von Schwarz und Smith [261] sowie von Morales, Spinn und Smith [194], daß ein Ausgleich der Maxima und Minima der Geschwindigkeitsverteilung im Innern des Reaktorquerschnitts schneller als außerhalb erfolgt.



Abbildung 9-12: Überlagerung der ersten Kugellage und der Isolinien der gemessenen Strömungsgeschwindigkeiten ($a_{pt} = 0,2$, $a_{Hp} = 1$, $u_0 = 0,40$)

Wird eine zweite Kugellage auf die erste gelegt, wird die Strömung nach außen verlagert (Abbildung 9-13). Dies könnte dadurch verursacht werden, daß die Lücken im Kern der Schüttung mit den Kugeln der neuen Kugellage verlegt werden, die Lücken im Wandbereich aber in ihrer Größe weitgehend erhalten bleiben, was auch durch die zweidimensionalen Porositätsverteilungen $\varepsilon(\chi, \phi)$, die aus den Schüttungsmodellen von **KS-OPT** abgeleitet wurden, bestätigt wird.

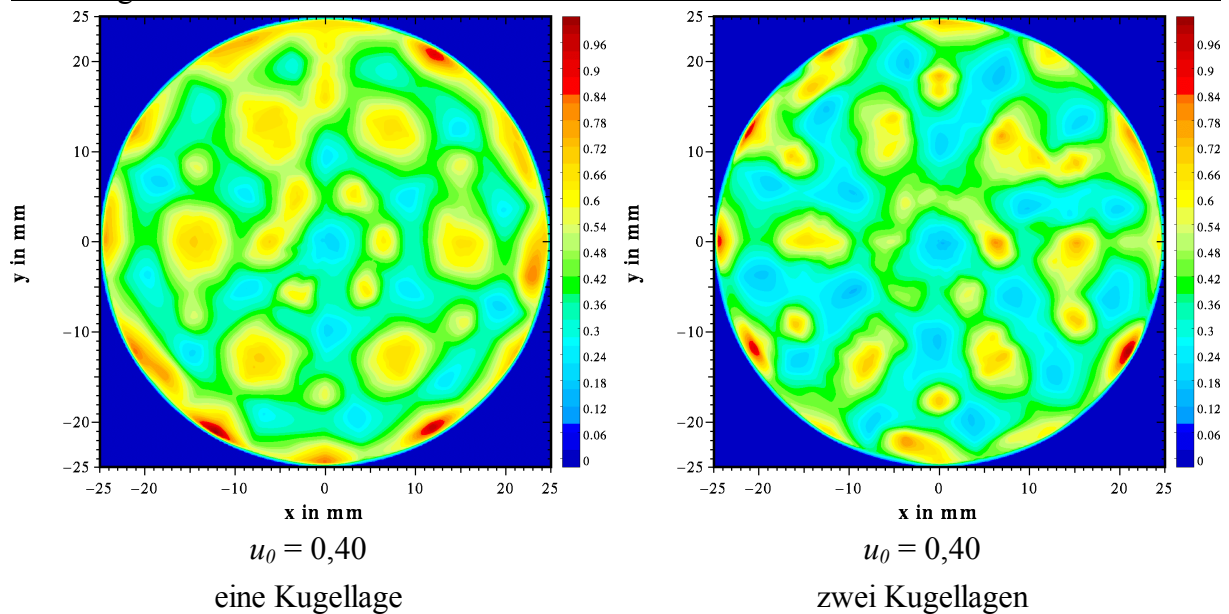


Abbildung 9-13: Messung der Strömungsgeschwindigkeiten über dem Reaktorquerschnitt ($a_{pt} = 0,2$)

Mit dieser zweiten Kugellage im Reaktor ändert sich der Ort der minimalen und maximalen Strömungsgeschwindigkeiten im Reaktorquerschnitt kaum. Dies deutet im Vergleich mit der gemessenen ersten Kugellage darauf hin, daß die Position dieser Extrema durch die erste Kugellage bestimmt wird, was den Messungen von Lerou und Froment [173] entspricht, die feststellten, daß die erste Kugellage die Strömung im Nachlauf der Schüttung bestimmt. Diese experimentellen Ergebnisse bildeten einen der Anstöße, die erste Kugellage exakter zu erfassen und in die Modelle **Epsilon2D** und **TriKaMo-3D** einzubinden.

Obwohl die erste Schicht einen wesentlichen Einfluß auf den Strömungsnachlauf der Schüttung hat, scheint die Verteilung der Maxima der Strömungsgeschwindigkeiten durch neu hinzukommende Kugellagen beeinflusst zu werden. So ändern die Orte der maximalen Geschwindigkeiten ihre Position, wenn neue Kugellagen hinzugefügt werden. Dieser Effekt ist noch bis zum Hinzufügen der 6. Lage mit Hilfe der quadratischen Abweichungen α_{m_1/m_2} (9-4) nachweisbar (Abbildung 9-14). Dies deutet darauf hin, daß die Strömung hinter der Schüttung nicht nur durch die erste Lage im Reaktor bestimmt wird, sondern auch von ihrem Weg durch die Schüttung abhängig ist. Zu einem ähnlichen Schluß kommen Sederman et al. [262, 263] bei ihren Messungen im Innern der Schüttung. Sie stellen fest, daß die Strömung in einer Pore nicht allein durch ihre Geometrie, sondern auch durch ihre vor- und nachfolgenden Poren bestimmt wird. Um diese These zu bestätigen, bedarf es noch weiterer Forschungsanstrengungen, insbesondere auf dem Gebiet der Korrelation der Geschwindigkeitsverteilung in und hinter der Schüttung.

Allerdings weisen Van der Merwe und Gauvin [293] darauf hin, daß der längenbezogene Druckverlust $\Delta p/l$ erst nach der sechsten Kugellage konstant bleibt, was sich mit dem Verlauf der quadratischen Abweichungen α_{m_1/m_2} deckt, die in Abbildung 9-14 dargestellt sind. Im Anschluß an die ersten sechs Kugellagen bleiben die Abweichungen α_{m_1/m_2} annähernd konstant. Van der Merwe und Gauvin [293] kommen bei den Messungen des Druckverlust $\Delta p/l$ zu ähnlichen Beobachtungen.

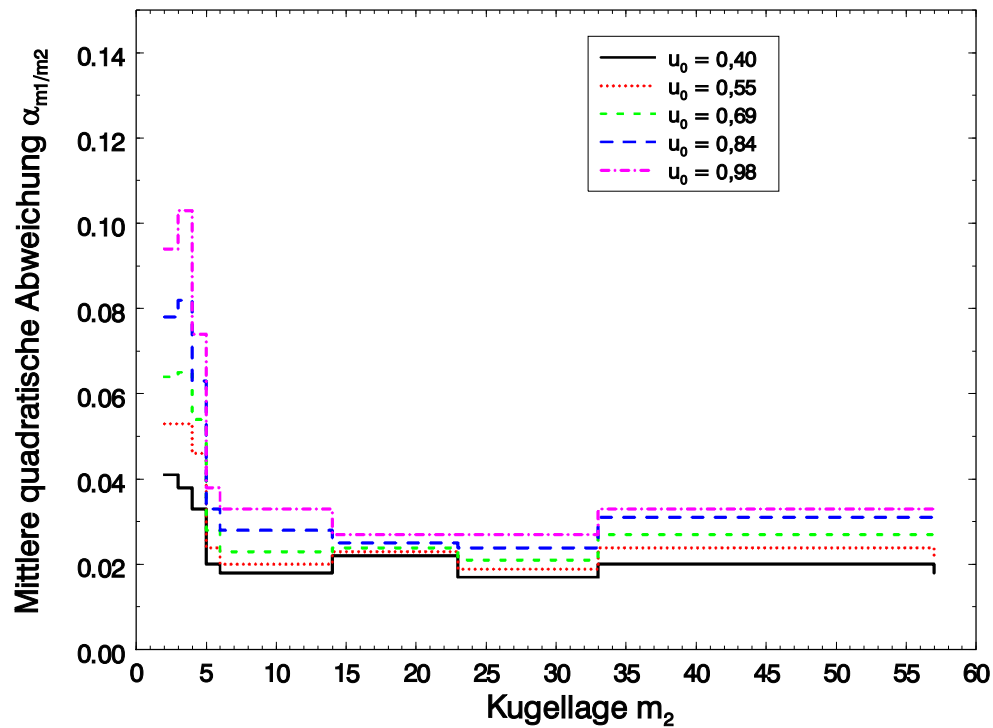


Abbildung 9-14: Gesamtabweichung in Abhängigkeit von der Anzahl der Kugellagen

9.2.5 Meßverfahren und Auswertung der radialen Dispersionsmessung

Aufgrund des einfacheren Versuchsaufbaus wurde eine zentrale Traceraufgabe gewählt. In diesem Fall muß nur eine Lanze zur Tracerdosierung in die Mitte der Schüttung eingebracht werden. Die Lanze kann dabei in die Schüttung hineinreichen, um eine Dispersion aufgrund der Strömungsumlenkungen am Reaktoreingang auszuschließen. Der Nachteil dieser Lösung ist, daß eine isokinetische Aufgabe des Tracers nicht möglich ist, denn die Strömungsgeschwindigkeit am Tracerauslaß ist mit den vorhandenen Mitteln nicht bestimmbar. Um einer isokinetischen Aufgabe möglichst nahezukommen, wird der Tracer mit der Zwischenraumgeschwindigkeit u_0/ε_g dosiert. Als Tracer für Dispersionsmessungen in gasdurchströmten Reaktoren wird zumeist⁷⁹ Kohlendioxid verwendet, weil es nicht brennbar und ungiftig ist [105, 106].

Um die Traceraufgabe zu realisieren, wurde der Meßaufbau für die Strömungsmessung gemäß Abbildung 9-15 geändert. Dadurch fällt der Steuerung die Aufgabe zu, das Kohlendioxid mittels eines Massendurchflußreglers parallel zur Luftmenge zu dosieren.

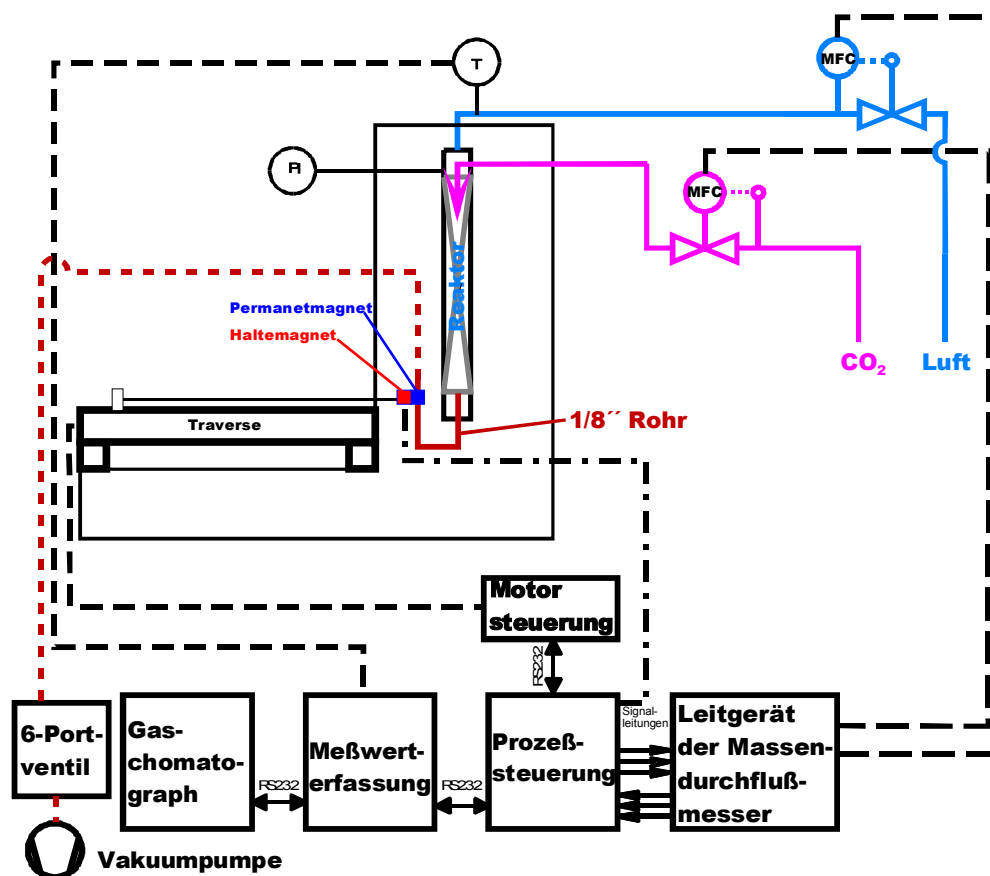


Abbildung 9-15: Meßaufbau der Dispersionsmessung

⁷⁹ [23, 89, 99, 105, 106, 200]

Die Messung der radialen Konzentrationsverteilung des Kohlendioxids erfolgt, wie bei den Strömungsmessungen, indem die Querschnittsfläche in radiale Strahlen aufgeteilt wird, entlang derer mit Hilfe einer Vakuumpumpe Proben zur Analyse abgesaugt werden. Dabei werden die Meßpunkte so verteilt, daß sie sich am Rand und auf den Radien nicht überlappen. Folglich ergeben sich für das verwendete 1/8''-Stahlrohr, das zum Ansaugen des Gases unter der Schüttung (Abbildung 9-15) genutzt wird, 20 Radien und 7,5 Punkte auf dem Radius bzw. 15 Punkte auf dem Durchmesser. Die Positionierung erfolgt ausschließlich durch die Traverseneinheit, da das Stahlrohr, wie in Abbildung 9-15 dargestellt, von unten durch den Meßschuß (Abbildung 9-8), an die Schüttung herangeführt wird. Der Vorteil dieser Anordnung ist, daß der Reaktor und seine Halterung gegenüber der Strömungsmessung nicht umgebaut werden muß.

Um die Wiederholungsgenauigkeit zu gewährleisten, muß die Traverse einen Nullpunkt anfahren, bei dem die Kapillare außerhalb des Reaktorquerschnitts liegen würde, was aus sterischen Gründen nicht möglich ist. Daher wurde die Kapillare über einen Haltemagneten an die Traverse gekoppelt, der mit der Prozeßsteuerung angesteuert wird. Die andere Möglichkeit wäre ein um 90° gekrümmtes Rohr durch die Reaktorwand zu führen, um das zu messende Gas parallel zur Strömung abziehen zu können und so eine eindeutige Zuordnung der Position der Kapillare und der gemessenen Konzentration zu ermöglichen. Diese Möglichkeit wurde, obwohl sie technisch einfacher ist, verworfen, da die Öffnung in der Reaktorwand relativ groß sein müßte, so daß die Strömung hinter der Schüttung im erheblichen Maße gestört werden würde.

Die Gasprobe wird statt dessen mit einer Membranpumpe durch die Kapillare angesaugt, um der Analyse zugeführt zu werden. Da die Geschwindigkeit im Bereich der Probenahme nicht exakt bekannt war, mußte auf eine isokinetische Entnahme der Gasprobe verzichtet werden. Das Gas wird mit der mittleren Gasgeschwindigkeit u_0 abgezogen. Durch dieses Verfahren kann auch Gas aus Nachbarbereichen angesaugt werden, wenn die lokale Strömungsgeschwindigkeit am Ort der Kapillare kleiner als die mittlere Geschwindigkeit u_0 ist. Dies könnte zu nicht vorhersagbaren Fehlern bei der Bestimmung der lokalen Konzentration führen. Es ist aber anzunehmen, daß dieser Fehler durch die Vielzahl der Messungen kompensiert wird, da die in der Literatur genannten Messungen mit Kohlendioxid als Tracer⁸⁰, die ebenfalls mit diesem Problem behaftet sind, nicht systematisch von anderen Messungen z.B. mit Leitfähigkeitsmeßzellen im Strom des Reaktorausgangs [136] abweichen.

Zur Messung des Kohlendioxids schlagen Foumeny et al. [105, 106] ein Massenspektrometer vor, das eine Probe mit einer Kapillare an definierten Punkten im Auslauf des Reaktors ansaugt. Eine andere von Fahien und Smith [99] vorgeschlagene Methode besteht darin, Gas unter der Schüttung abzusaugen und die CO₂-Konzentration mit einem Wärmeleitfähigkeitsdetector (WLD) zu bestimmen. Diese Methode eignet sich gut zur Quantifizierung des Kohlendioxids, da sich die Wärmeleitfähigkeit c_p der Luft (1,00 kJ/(kg*K))⁸¹ und des Kohlendioxids (0,891 kJ/(kg*K))⁸²

⁸⁰ [23, 89, 99, 105, 106, 200]

⁸¹ Wert bei 20°C und 101300 Pa [38]

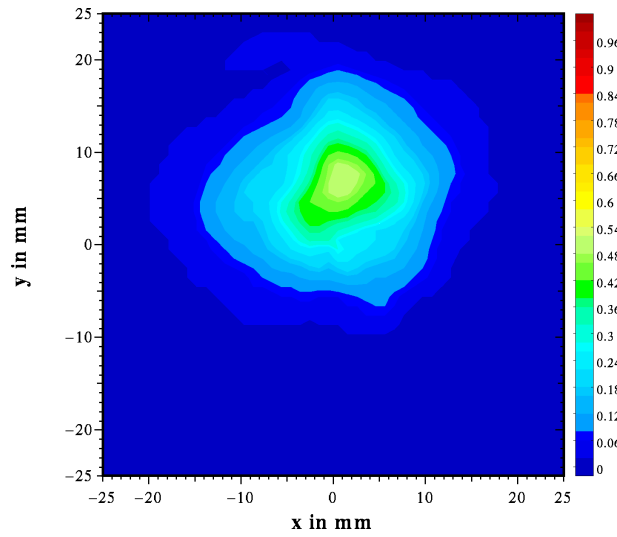
deutlich voneinander unterscheiden. Versuche den Aufbau mit Hilfe eines Wärmeleitfähigkeitsdetektors (WLD), der permanent vom zumessenden Medium durchströmt wird, nachzuvollziehen, wurden aufgrund der Gefahr verworfen, daß die Filamente des Detektors durch die hohen Sauerstoffpartialdrücke verzundern und damit in ihrer Funktion gestört werden könnten. Deshalb wurde, wie in der Abbildung 9-15 dargestellt ist, ein Gas-Chromatograph zur Bestimmung der CO₂-Konzentration eingesetzt. Die Probenahme aus dem angesaugten Probengasstrom wurde mit einem 6-Port-Ventil realisiert. Zur Trennung der Gasprobe in Kohlendioxid, Sauerstoff und Stickstoff, Argon sowie Wasser dient eine Hayesep Q-Säule⁸³ mit Helium als Trägergas. Die Gase werden mit einem WLD bestimmt, wobei die Messung für jeden Meßpunkte dreimal wiederholt wurde.

Die Kalibrierung erfolgt mit dem in Abbildung 9-15 dargestellten Meßaufbau, bei dem das Kohlendioxid nicht mit der Lanze, sondern gleichzeitig mit der Luft in den Reaktor geführt wird. Der Reaktor wird als statischer Mischer genutzt und ist mit Kugeln gefüllt, die einen Durchmesser d_p von vier Millimetern besitzen. Mit den beiden Massendurchflußreglern können alle zur Kalibrierung benötigten Kohlendioxid/Luft-Gemische erzeugt werden.

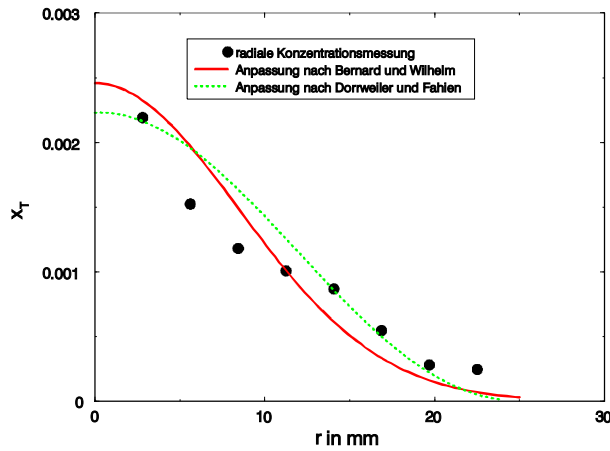
Die Auswertung der erhaltenen Daten erfolgt mittels der Beziehungen von Dorrweiler und Fahien [89] (7-31) sowie von Bernard und Wilhelm [23] (7-28) für radiale Konzentrationsverteilungen, die sich in Folge der radialen Dispersion hinter einer Punktquelle ausbilden. Auf die Ermittlung der radialen Dispersionskoeffizienten mit der Gleichung (7-29) von Bernard und Wilhelm [23], die die Konzentrationsprofile interpretiert, wurde zu Gunsten der Erweiterung von Kurihara [168] (7-31) verzichtet, die eine Tracerquelle mit einem endlichen Radius R_T statt einer Punktquelle berücksichtigt. Ein numerischer Ansatz zur Anpassung des aus der Differentialgleichung (7-26) folgenden Konzentrationsprofils an die Meßdaten wurde an dieser Stelle aufgrund des hohen Zeitbedarfs nicht verfolgt.

⁸² Wert bei 20°C und 101300 Pa [38]

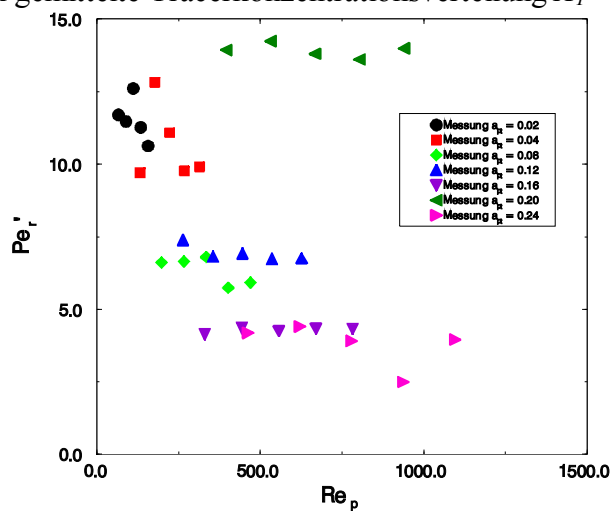
⁸³ 3 m, 1/8", Trägergasstrom 29,1 ml/min (He), Ofentemperatur: Rampe von 60°C bis 115°C in 6 min,



A) Messung der Konzentrationen (zweidimensional)



B) radial gemittelte Tracerkonzentrationsverteilung $X_T = c_T(r)/\bar{c}_T$



C) Peclet-Zahl Pe_r' als Funktion der Reynolds-Zahl Re_p

Abbildung 9-16: Meßauswertung der Radialdispersion

Um einer Schüttung mit einem Durchmesser Verhältnis a_{pt} und einer Anströmgeschwindigkeit u_0 eine Peclet-Zahl zuordnen zu können, wird für jeden Durchmesser gemäß den Beziehungen (7-28) und (7-31) ein Dispersionskoeffizient mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate angepaßt. Aus den zehn über den Querschnitt (Abbildung 9-16 A) gemessenen Durchmessern wird der arithmetische Mittelwert (Abbildung 9-16 B) gebildet. Dabei stellen sich die beiden Methoden von Dorrweiler und Fahien [89] (7-31) sowie von Bernard und Wilhelm [23] (7-28) als gleichwertig dar. Allerdings können mit der Beziehung von Dorrweiler und Fahien [89] (7-31) nicht alle Messungen interpretiert werden, da die Konzentrationsprofile wesentlich steiler sind, als dies die Funktion (7-31) zuläßt. Letzteres ist besonders bei den kleinen Partikelgrößen ($d_p = 2$ und 4 mm) zu beobachten, da die Tracerkonzentration $c_T(R_T)$ an der Wand verglichen mit der Konzentration $c_T(0)$ in der Mitte klein ist. Die Nutzung weiterer Summanden in der Gleichung (7-31) führt zwar zu einer besseren Entsprechung der Messungen mit dem Modell, aber auch zu größeren Fehlern bei der Anpassung des radialen Dispersionskoeffizienten D_{rad} . Daher wurde dieser Ansatz verworfen, zumal mit der Beziehung (7-28) eine Alternative zur Verfügung steht.

Im letzten Schritt des Verfahrens wird die aus dem radialen Dispersionskoeffizienten D_{rad} bestimmte Peclet-Zahl Pe_r gemäß Gleichung (7-37) unter Verwendung des Durchmesser Verhältnisses korrigiert, um mit den in der Literatur veröffentlichten Meßwerten für Reaktoren mit vernachlässigbaren Wandbereichen vergleichbare Peclet-Zahlen Pe_r zu erhalten. In der Abbildung 9-17 sind die gemessenen Peclet-Zahlen Pe_r und die gemäß Gleichung (7-37) korrigierten Werte Pe_r' dargestellt. Diese Korrektur führt zu einer einheitlichen Beschreibung der Peclet-Zahl. Einzig die Messung mit einem Durchmesser Verhältnis $a_{pt} = 0,24$ fällt aus dem von der Literatur gesteckten Rahmen von ca. 11, wobei die dargestellte Messung durch eine weitere Meßreihe bestätigt wurde.

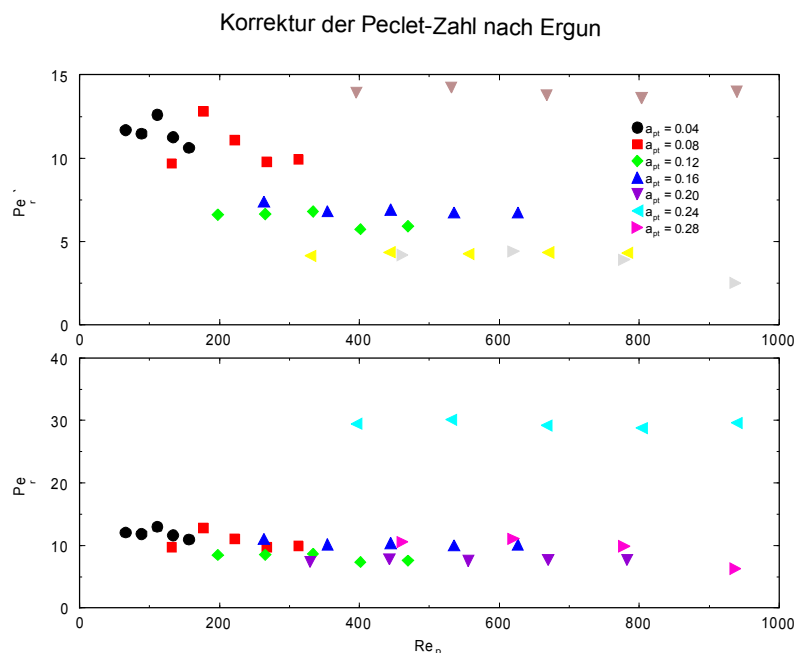


Abbildung 9-17: Korrektur der gemessenen radialen Peclet-Zahl Pe_r mit dem Durchmesser Verhältnis a_{pt} gemäß Gleichung (7-37)

9.3 Mathematische Methoden

9.3.1 Bestimmung der geometrischen Parameter im Modell TriKaMo-3D

Das Volumen, die Porosität und die innere Oberfläche eines Polyeders müssen bestimmt werden, um die geometrischen Parameter der Kanäle ermitteln zu können. Um eine einheitliche Beschreibung dieser Größen zu ermöglichen, werden die Prismen und Hexaeder in Tetraeder unterteilt. Dabei wird ein Prisma in drei Tetraeder unterteilt, ein Hexaeder in sechs. Aus den Eigenschaften dieser Teiltetraeder werden dann die Größen der Polyeder berechnet. Damit ergeben sich für das Volumen, die Porosität und die innere Oberfläche eines Prismas folgende drei Beziehungen:

$$V_p = V_T(1) + V_T(2) + V_T(3) \quad (9-5)$$

$$\varepsilon_p = \frac{\varepsilon_T(1) * V_T(1) + \varepsilon_T(2) * V_T(2) + \varepsilon_T(3) * V_T(3)}{V_p} \quad (9-6)$$

$$A_p = A_T(1) + A_T(2) + A_T(3) \quad (9-7)$$

Während das Volumen (9-5) und die innere Oberfläche (9-7) der Prismen durch Addition der entsprechenden Werte der Teiltetraeder ((1) bis (3)) berechnet werden, kann die Porosität ε_p nur über den Quotienten aus dem Leerraum im Prisma und dem Volumen V_p berechnet werden (9-6). Für die geometrischen Parameter des Hexaeders gelten analoge Beziehungen ((9-8) bis (9-10)).

$$V_H = V_T(1) + V_T(2) + V_T(3) + V_T(4) + V_T(5) + V_T(6) \quad (9-8)$$

$$\varepsilon_H = \frac{\sum_{i=1}^6 \varepsilon_T(i) * V_T(i)}{V_H} \quad (9-9)$$

$$A_H = \sum_{i=1}^6 A_T(i) \quad (9-10)$$

Die am einfachsten zu bestimmende Größe in einem Tetraeder ist sein Volumen. Das Tetraedervolumen kann gemäß [39] aus dem Spatprodukt der drei Kantenvektoren \vec{K}_1 , \vec{K}_2 und \vec{K}_3 , die in Abbildung 9-18 dargestellt sind, mit Hilfe der Gleichung (9-11) berechnet werden. Dabei ist es irrelevant, von welchem der vier Eckpunkte die Vektoren aufgespannt werden.

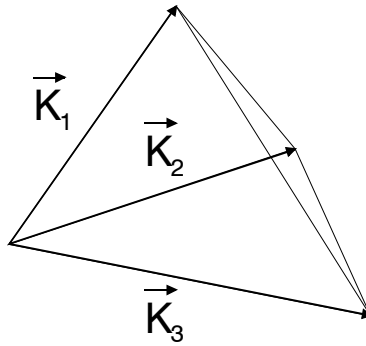


Abbildung 9-18: Vektoren zur Volumenberechnung in Tetraedern

$$V_T = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} K_{1,x} & K_{1,y} & K_{1,z} \\ K_{2,x} & K_{2,y} & K_{2,z} \\ K_{3,x} & K_{3,y} & K_{3,z} \end{vmatrix} \quad (9-11)$$

Eine algebraische Berechnung sowohl der Porosität ε_T als auch der inneren Oberfläche A_T ist sehr aufwendig. Während die Bestimmung des Volumens der Kugeln in den Eckpunkten der Tetraeder noch relativ einfach ist, entstehen beim Schnitt der Kugeln mit den Kanten eines Körpers sehr komplexe Geometrien, deren Beschreibung ebenfalls sehr komplex ist. Ein weiteres Problem bei der algebraischen Berechnung der Porosität ε_T und der inneren Oberfläche A_T bilden numerische Fehler, die insbesondere bei Tetraedern mit kleinen Winkeln zu großen Fehlern führen.

Auf Grund der genannten Schwierigkeiten wurden im Rahmen dieser Arbeit eigene numerische Verfahren zur Berechnung der Porosität ε_T und der inneren Oberfläche A_T entwickelt. Zur Bestimmung der Porosität ε_T wird ein schiefwinkliges Koordinatensystem mit den Vektoren \vec{K}_1 , \vec{K}_2 und \vec{K}_3 aufgespannt. Die Vektoren werden in jeweils 40 Abschnitte zerlegt, so daß jeder Tetraeder in 32.000 Punkte⁸⁴ aufgeteilt wird. Die Porosität ε_T (9-12) entspricht dem Verhältnis der Punkte, die im Leerraum liegen, zur gesamten Punktzahl (32.000).

$$\varepsilon_T = \frac{\text{Zahl der Punkte, die im Leerraum liegen}}{\text{Gesamtzahl der Punkte, in die der Tetraeder zerlegt wird}} \quad (9-12)$$

Die gesamte innere Oberfläche A_T eines Tetraeders ergibt sich aus der Summe der Kugeloberflächen $A_{T,j}$, die im Innern des Tetraeders liegen.

$$A_T = \sum_{i=1}^{N_{K,T}} A_{T,i} \quad (9-13)$$

mit $N_{K,T}$ = Zahl der Kugeln, die den Tetraeder T schneiden

⁸⁴ Durch die Aufteilung der Vektoren \vec{K}_1 , \vec{K}_2 und \vec{K}_3 ergeben sich 64.000 Punkte, von denen nur die Hälfte im Tetraeder liegen.

Zur Berechnung der Oberfläche A_T jeder Kugel, die den Tetraeder schneidet, wird die Kugeloberfläche in 5000 Punkte zerlegt. Der Anteil der Punkte, die im Innern des Tetraeders liegen, an der Gesamtpunktzahl entspricht dem Anteil der Oberfläche der Kugeln, die im Tetraeder liegt.

Mit Hilfe dieser Näherung läßt sich die innere Oberfläche eines Tetraeders mit Gleichung (9-14) beschreiben.

$$A_T = \sum_{i=1}^{N_{k,T}} \frac{\text{Zahl der Punkte auf der Oberfläche der Kugel } i \text{ im Tetraeder}}{\text{Zahl der Punkte auf der Oberfläche der Kugel } i} * \pi * d_p^2 \quad (9-14)$$

Bei den geometrischen Körpern, die eine oder mehrere Seiten mit der Reaktorwand gemeinsam haben, werden diese Seitenflächen zur inneren Oberfläche $A_{T,j}$ hinzu gerechnet, um den Einfluß der Reaktorwände auf die Strömung berücksichtigen zu können.

Bei beiden numerischen Verfahren wurde die Zahl der Punkte so gewählt, daß sich bei ihrer Vergrößerung keine Änderungen der Gesamtporosität ε_g bzw. der gesamten inneren Oberfläche einer Schüttung ergab.

Somit stehen für die Berechnung der geometrischen Kenngrößen Verfahren zur Verfügung. Alternative Verfahren konnte ich der Literatur nicht entnehmen, da dort zwar die verwendeten Größen genannt werden, ihre Berechnung aber offengelassen wird.

10 Verzeichnisse

10.1 Formelverzeichnis

10.1.1 Lateinische Buchstaben

a	Steigung eines Flügelrads
a_{Hp}	Verhältnis der Schüttungshöhe zum Kugeldurchmesser
a_{pt}	Verhältnis des Kugel- zum Reaktordurchmesser
a_{ip}	Verhältnis des Reaktor- zum Kugeldurchmesser
A	Absorption
A_c	Freie Querschnittsfläche eines Kanals in einer Seitenfläche eines Polyeders [m^2]
A_H	Innere Oberfläche eines Hexaeders [m^2]
A_P	Innere Oberfläche eines Prismas [m^2]
$A_T(N)$	Innere Oberfläche des Teiltetraeders N [m^2]
b	Anlaufgeschwindigkeit eines Flügelrads [m/s]
c	Konzentration [mol/m^3]
\bar{c}	mittlere Konzentration einer Spezies im Reaktor [mol/m^3]
c_0	Konzentration des Tracers bei einer Aufgabe in einer Hälfte des Reaktors [mol/m^3]
c_j	Konzentration im Knoten j [mol/m^3]
c_p	Wärmekapazität [$J/(kg \cdot K)$]
c_s	Konzentration einer Spezies in den Schüttungspartikeln [mol/m^3]
c_T	Tracerkonzentration [mol/m^3]
c_{Tracer}^0	Konzentration im Aufgabeknoten im Model TriKaMo-3D [mol/m^3]
C	Parameter der radialen Porositätsfunktion nach Vortmeyer und Schuster [298]
d	Schichtdicke im Lambert-Beerschen-Gesetz [m]
$d_{Kanal,a,b}$	Durchmesser des Kanals vom Knoten a zum Knoten b [m]
d_p	Durchmesser der Kugeln [m^3]
d_t	Durchmesser des Reaktors [m^3]
D_{ax}	axialer Dispersionskoeffizient [m^2/s]
D_{rad}	radialer Dispersionskoeffizient [m^2/s]

erf	Fehlerfunktion
f_1, f_2, f_3	zweidimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon'(X, \Phi)$ nach Foumeny, Bailey und Afandizadeh-Zargari [106]
Δf	Frequenzverschiebung bei der LDA
F_1	Parameter der radialen Porositätsverteilung nach Ridgway und Tarbuck [239]
F_2	Parameter der radialen Porositätsverteilung nach Ridgway und Tarbuck [239]
ΔF_2	Parameter der radialen Porositätsverteilung nach Ridgway und Tarbuck [239]
$g_{B,a,b}$	turbulenter Widerstand nach Blasius im Kanal vom Knoten a zum Knoten b [$\text{Pa}\cdot\text{s}/\text{m}^3$]
g_{B,a_m}	turbulenter Widerstand nach Blasius in der Hälfte des m-ten Kanals im Knoten a [$\text{Pa}\cdot\text{s}/\text{m}^3$]
$g_{HP,a,b}$	laminarer Widerstand im Kanal vom Knoten a zum Knoten b [$\text{Pa}\cdot\text{s}/\text{m}^3$]
g_{HP,a_m}	laminarer Widerstand in der Hälfte des m-ten Kanals im Knoten a [$\text{Pa}\cdot\text{s}/\text{m}^3$]
H_R	Reaktorhöhe [m^3]
H_S	Schüttungshöhe [m^3]
$H_u(\dots)$	axialer Druckverlustansatz im Kontinuumsmodell Epsilon2D
$H_v(\dots)$	radialer Druckverlustansatz im Kontinuumsmodell Epsilon2D
i_S	Zahl der Schichten in der radialen Porositätsverteilung nach Ridgway und Tarbuck [239]
I, I_0	Intensität des Lichtstrahls [W/m^2]
I_H	Heizspannung [A]
J_0	Besselfunktion erster Ordnung
J_1	Besselfunktion zweiter Ordnung
\vec{k}_B	Beleuchtungsvektor der LDA
k_f	Wärmeleitfähigkeit [$\text{J}/(\text{s}\cdot\text{m}\cdot\text{K})$]
\vec{K}_i	Kantenvektor eines Tetraeders, der eine Ecke mit einer der drei anderen Ecken verbindet
l_G	Länge des Graphen [m]
$l_{G,a,b}$	Länge des Graphen vom Knoten a zum Knoten b [m]
l_S	Länge eines Hitzdrahtes [m]
m	Koordinationszahl der Knoten
n_d	Drehzahl eines Flügelrads [1/s]
n_K	Zahl aller Kugeln im Reaktor
$\dot{n}_{\text{Kanal},a,b}$	Molstrom durch den Kanal vom Knoten a zum Knoten b [mol/s]
n_{opt}	Zahl aller gleichzeitig optimierten Kugeln in Programm KS-OPT
N_K	Zahl aller Körper
N_{HK}	Zahl der Hexaeder in TriKaMo-3D
N_{PK}	Zahl der Prismen in TriKaMo-3D
N_{Ro}	Zahl aller Körper, die den Reaktorkopf bilden
N_{TK}	Zahl der Tetraeder in TriKaMo-3D

N_{Ru}	Zahl aller Körper, die den Reaktorboden bilden
Nu	Nusselt-Zahl
$N_{K,T}$	Zahl der Kugeln, die einen Tetraeder schneiden
p	Druck [Pa]
p^0	Druck am Reaktorausgang [Pa]
Δp	Druckverlust [Pa]
$\Delta p_{Kanal,a,b}$	Druckverlust entlang des Kanals vom Knoten a zum Knoten b [Pa]
p_{dyn}	dynamischer Druck eines fließenden Mediums [Pa]
p_{ges}	Gesamtdruck eines fließenden Mediums [Pa]
p_{stat}	statischer Druck eines fließenden Mediums [Pa]
P_k	Wichtungsfunktion der Lösung zur Bestimmung der Konzentrationsverteilung $c(r)$ nach Dorrweiler und Fahien [89]
Pe_r	partikelbezogene radiale Peclet-Zahl
$Pe_{r,m}$	Peclet-Zahl im laminaren Strömungsbereich
$Pe_{r,turb}$	Peclet-Zahl im turbulenten Strömungsbereich
\dot{Q}	Wärmeabfuhr eines Hitzdrahtes [J/s]
r	radiale Koordinate (4-4) [m]
Δr	Breite eines Kreisrings, in dem die Porosität bestimmt wird [m]
\hat{r}	radiale Koordinate nach Martin
r_G	Radius des Graphen [m]
$r_{G,max}$	größter Radius in einem gekrümmten Graphen [m]
$r_{G,min}$	kleinster Radius in einem gekrümmten Graphen [m]
r_K	radiale Koordinate einer Kugel [m]
r_{min1}	Position des ersten Minimus der radialen Porositätsfunktion nach Bey und Eigenberger [25] [m]
R	Radius des Reaktors [m]
R_T	Radius der Traceraufgabe [m]
Re_p	partikelbezogene Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl
t	Zeit [s]
T	Parameter der radialen Porositätsverteilung nach Martin [187]
T	Temperatur des Fluids [K]
T_a	Medientemperatur [K]
T_m	mittlere Temperatur eines Hitzdrahtes [K]
T_S	Temperatur der Schüttung [K]
u	axiale Geschwindigkeit im Modell Epsilon2D [m/s]
$u(r, \theta)$	Strömungsgeschwindigkeit hinter der Schüttung am Ort $\{r, \theta\}$ [m/s]
u_0	Anströmgeschwindigkeit [m/s]
$u_{Kanal,a,b}$	Geschwindigkeit im Kanal vom Knoten a zum Knoten b [m/s]
$u_S(r, \theta)$	Strömungsgeschwindigkeit hinter einer Schüttung aus S Kugellagen am Ort $\{r, \theta\}$ [m/s]

v	radiale Geschwindigkeit im Modell Epsilon2D [m/s]
V_H	Volumen eines Hexaeders [m ³]
V_K	Volumen aller Kugeln im Reaktor [m ³]
$\dot{V}_{Kanal,a,b}$	Volumenstrom durch den Kanal vom Knoten a zum Knoten b [m ³ /s]
V_L	Leerraumvolumen in der Schüttung [m ³]
V_P	Volumen eines Prismas [m ³]
V_R	Reaktorvolumen [m ³]
V_S	Schüttungsvolumen [m ³]
$V_{T,j}$	Volumen des j-ten Tetraeders [m ³]
$V_T(N)$	Volumen des N-ten Teiltetraeders eines Prismas oder eines Hexaeders
w_i	Massenanteil der Spezies im Kontinuumsmodell Epsilon2D
x,y,z	Koordinaten im 3d-Raum [m]
x_{Boden} y_{Boden} z_{Boden}	Koordinaten der Punkte, die den Boden des Reaktors im Modell TriKaMo-3D beschreiben [m]
$x_{Bodenkante}$ $y_{Bodenkante}$ $z_{Bodenkante}$	Koordinaten der Punkte, die die Kante am Boden des Reaktors im Modell TriKaMo-3D beschreiben [m]
x_i,y_i,z_i	Koordinaten der Kugel i im 3d-Raum [m]
x_K,y_K,z_K	Koordinaten der Kugeln im 3d-Raum [m]
x_{Kopf} y- y_{Kopf} z_{Kopf}	Koordinaten der Punkte, die den Kopf des Reaktors im Modell TriKaMo-3D beschreiben [m]
$x_{Kopfkante}$ $y_{Kopfkante}$ $z_{Kopfkante}$	Koordinaten der Punkte, die die Kante am Kopf des Reaktors im Modell TriKaMo-3D beschreiben [m]
x_{Wand} y_{Wand} z_{Wand}	Koordinaten der Punkte, die die Wand des Reaktors im Modell TriKaMo-3D beschreiben. [m]

10.1.2 Griechische Buchstaben

α_{m_1, m_2}	mittlere Abweichung der Strömungsgeschwindigkeit nach m_1 und m_2 Schichten
$\alpha_{m_1, m_2}(r, \theta)$	Abweichung der Strömungsgeschwindigkeit am Ort $\{r, \theta\}$ nach m_1 und m_2 Schichten
β_i	Parameter, der Konzentrationsverteilung $c(r)$ nach Bernhard und Wilhelm [23]
ε_0	Grenzwert ($a_{pt} \rightarrow 0$) der Porosität für eine Meßreihe
ε_g	Gesamtporosität
ε_H	Porosität in einem Hexaeder
$\varepsilon_{Lambert}$	Extinktion im Lambert-Beerschen-Gesetz
ε_M	Kernporosität
ε_{min}	minimale Porosität in der radialen Porositätsverteilung nach Martin [187]
ε_p	Porosität in einem Prisma
$\varepsilon_T(N)$	Porosität des N-ten Teiltetraeders eines Prismas oder eines Hexaeders
$\varepsilon(r)$	radiale Porositätsverteilung als Funktion der radialen Koordinate
$\varepsilon(z)$	axiale Porositätsverteilung als Funktion der axialen Koordinate
$\varepsilon(\phi)$	axiale Porositätsverteilung als Funktion des Bodenabstands
$\varepsilon(\chi)$	radiale Porositätsverteilung als Funktion des Wandabstands
$\varepsilon(\chi, \phi)$	zweidimensionale Porositätsverteilung
$\varepsilon'(\chi)$	radiale Porositätsfunktion als Funktion des Wandabstands
$\varepsilon'(X, \Phi)$	zweidimensionale Porositätsverteilung nach Foumeny, Bailey und Afandizadeh-Zargari [106]
$\varepsilon^\circ(\chi, \phi)$	zweidimensionale Porositätsverteilung nach Daszkowski [74]
$\varepsilon^1(\chi)$	radiale Porositätsverteilung der ersten Schicht
θ	Winkelkoordinate des Zylinderkoordinatensystems aus r, θ, z
λ_V	Wellenlänge des Lasers der LDA [m]
μ	Dynamische Viskosität [Pa s]
ρ	Dichte [kg/m^3]
ρ_{Fl}	Dichte des strömenden Fluids [kg/m^3]
ρ_g	Dichte der Schüttung ($1-\varepsilon$)
τ	Tortuosität
ϕ	Bodenabstand (4-6)
ϕ'	Kopfabstand (4-7)
Φ	Abstand vom Einlaß in der Porositätsverteilung $\varepsilon'(X, \Phi)$ nach Foumeny, Bailey und Afandizadeh-Zargari [106]
χ	dimensionsloser Wandabstand (4-5)
X	Wandabstand nach Foumeny, Bailey und Afandizadeh-Zargari [106]

10.1.3 Indizes

a	Knoten mit der Nummer a , $a \in [1, \dots, N_K]$
b	Knoten mit der Nummer b , $b \in [1, \dots, N_K]$
G,a,b	Graph vom Knoten a zum Knoten b (z.B. $l_{G,a,b}$: Länge des Graphen vom Knoten a zum Knoten b)
H_{Kanal,a_m}	Hälfte des m -ten Kanals im a -ten Körper
H	Hexaeder (z. B. $V_{H,j}$: Volumen des j -ten Hexaeders)
$Kanal,a,b$	Kanal vom Knoten a zum Knoten b (z.B. $u_{Kanal,a,b}$: Geschwindigkeit im Kanal vom Knoten a zum Knoten b)
$Kanal,a_m$	m -ter Kanal vom Knoten a (z.B. d_{Kanal,a_b} : Durchmesser des m -ten Kanals am Knoten a)
G,a_m	m -ter Graph vom Knoten a (z.B. l_{G,a_m} : Länge des m -ten Graphen am Knoten a)
m	m -ter Graph in einem Knoten, $m \in [1,2,3,4,5]$
P	Prisma (z. B. $V_{P,j}$: Volumen des j -ten Prismas)
T	Tetraeder (z. B. $V_{T,j}$: Volumen des j -ten Tetraeders)

10.2 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 3-1: Skizze eines Reaktormodells	7
Abbildung 3-2: Skizze des verwendeten Modellansatzes	7
Abbildung 4-1: Aufbau des Reaktors	10
Abbildung 4-2: Geometrische Parameter des Reaktors	12
Abbildung 4-3: Koordinatensystem	14
Abbildung 4-4: Skizze zur Bestimmung der zweidimensionalen Porositätsverteilung in einem Kreisring.	17
Abbildung 4-5: Zweidimensionale Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$ ($a_{pt} = 0,2$, konzentrische erste Kugellage, $n_{opt} = 2$)	19
Abbildung 4-6: Axiale Porositätsverteilung der simulierten Schüttungen ($a_{pt} = 0,2$, $n_{opt} = 1$, $a_{Hp} = 250$, konzentrische erste Kugellage)	21
Abbildung 4-7: Axiale Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$ einer simulierten Schüttung ($a_{pt} = 0,04$, $a_{Hp} = 16$, $n_{opt} = 3$)	22
Abbildung 4-8: Radiale Porositätsverteilung ($a_{pt} = 0,2$, $n_{opt} = 1$, $a_{Hp} = 250$, konzentrische erste Kugellage)	23
Abbildung 5-1: Stabile Lage an der Wand	26
Abbildung 5-2: Stabile Lage in der Schüttung	26
Abbildung 5-3: Skizze eines pseudo-homogenen Kontinuumsmodells	30
Abbildung 5-4: Skizze der diskreten Modelle	31
Abbildung 5-5: Verwendete Kanalformen zur Beschreibung der Graphen	36
Abbildung 5-6: Voronoi- und Delaunay-Triangulation einer zweidimensionalen Punktmenge [264]	38
Abbildung 6-1: Ablaufschema von KS-OPT	43
Abbildung 6-2: Erste Kugellage mit zufälliger Anordnung der Kugeln	44
Abbildung 6-3: Gemessene erste Kugellage	45
Abbildung 6-4: Erste Kugellage in konzentrischen Kreisen	45
Abbildung 6-5: Konstruktion der ersten Kugellage	46
Abbildung 6-6: Randbedingungen des Kontinuumsmodells Epsilon2D	51
Abbildung 6-7: Detaillierte Betrachtung einer Schüttung	54
Abbildung 6-8: Beispiel für einen Körper (Tetraeder), der eine Lücke umschließt, indem seine Kanten die Mittelpunkte der Kugeln verbinden, die den Hohlraum bilden.	55
Abbildung 6-9: Elemente zur Erzeugung des Netzwerkmodells	56
Abbildung 6-10: Konvexe Hülle einer Beethoven-Büste [37]	60
Abbildung 6-11: Basisdreieck der Delaunay-Triangulation (dunkel) mit viertem Punkt (hell) und Umkugel	60
Abbildung 6-12: Konvention der Graphennumerierung	63

- Abbildung 6-13: Berechnung für einen Kanal von Thompson und Fogler [288] unter Berücksichtigung der Randbedingung an den offenen Kanalgrenzen (hellgrau). Die Linien innerhalb der Kanäle geben die Orte gleicher Geschwindigkeit an. 66
- Abbildung 6-14: Zweidimensionale Skizze der Volumenströme in und aus einem Knoten 71
- Abbildung 6-15: Der Weg von der Schüttung zur Durchströmung im Netzwerkmodell 74
- Abbildung 7-1: Eine mit KS-OPT generierte Schüttung 75
- Abbildung 7-2: Vergleich der Simulation von KS-OPT (zufällige Positionen in der ersten Kugellage und zwei gleichzeitig optimierte Kugeln) mit den Messungen von Dixon [87] sowie von Zou und Yu [316] 79
- Abbildung 7-3: Ausschnitt der Region III aus Abbildung 7-2 80
- Abbildung 7-4: Ausschnitt aus der von KS-OPT simulierten Kugelschüttung mit $a_{pt} = 0.444$ und $n_{opt} = 1$ 82
- Abbildung 7-5: Vergleich der Porositäten der simulierten Schüttungen mit der Literatur und den durchgeführten Messungen 83
- Abbildung 7-6: Vergleich der simulierten Gesamtporositäten ε_g von Reyes und Iglesia und von KS-OPT 85
- Abbildung 7-7: Vergleich der radialen Porositätsverteilung einer von KS-OPT generierten Schüttung mit den Messungen von Benenati und Brosilow [19] ($a_{tp} = 5,6$, $a_{Hp} = 100$, $n_{opt} = 1$) 88
- Abbildung 7-8: Vergleich der radialen Porositätsverteilung einer von KS-OPT simulierten Schüttungen mit den Messungen von Goodling, Vachon, Stelpflug und Ying [115] ($a_{tp} = 7,4$, $a_{Hp} = 100$, $n_{opt} = 1$) 89
- Abbildung 7-9: Vergleich der radialen Porositätsverteilung einer von KS-OPT generierten Schüttungen mit den Messungen von Mueller [197] ($a_{tp} = 5,96$, $a_{Hp} = 100$, $n_{opt} = 1$) 90
- Abbildung 7-10: Vergleich der radialen Porositätsverteilung einer von KS-OPT erstellten Simulationen mit denen von Spedding und Spencer [275] ($a_{pt} = 0,02$, $a_{Hp} = 250$, $n_{opt} = 2$) 91
- Abbildung 7-11: Vergleich der axialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$ von Daszkowski und Eigenberger [74] mit einer analogen von KS-OPT generierten Schüttung ($a_{pt} = 0,16$, $n_{opt} = 3$, gemessene erste Kugellage, Reaktorboden) 93
- Abbildung 7-12: Vergleich der axialen Porositätsverteilung $\varepsilon(\phi)$ von Daszkowski und Eigenberger [74] mit einer analogen von KS-OPT generierten Schüttung ($a_{pt} = 0,16$, $n_{opt} = 3$, gemessene erste Kugellage, Reaktorkopf). 95
- Abbildung 7-13: Vergleich der axialen Porositätsverteilungen der mit KS-OPT simulierten Schüttungen mit den experimentellen Werten von Stanek und Eckert [277] (Ausschnitt mit $\phi \leq 5$, $n_{opt} = 2$; die geometrischen Parameter der Schüttung wurden Stanek und Eckert [277] run 9 und 10 entnommen.) 96

Abbildung 7-14: Vergleich der axialen Porositätsverteilung einer von KS-OPT erstellten Simulationen mit denen von Spedding und Spencer [275] ($a_{pt} = 0,02$, $a_{Hp} = 250$, $n_{opt} = 3$, Eigenschaften der Tower 1 bis 5 sind in Tabelle 9 dargestellt).	97
Abbildung 7-15: Zweidimensionale Porositätsverteilung nach Daszkowski (links) und Limberg (rechts) ($a_{pt} = 0,16$, $n_{opt} = 3$, gemessene erste Kugellage)	101
Abbildung 7-16: Gittertest	104
Abbildung 7-17: Simulation der Umströmung einer Kugel mit dem Kanalnetz von TriKaMo-3D	105
Abbildung 7-18: Vergleich der dimensionslosen Druckverluste ψ in Abhängigkeit von der Kanalgeometrie gemäß den Definitionen auf Seite 67	106
Abbildung 7-19: Druckverlust über dem Reaktor in Abhängigkeit von der Anströmgeschwindigkeit u ($a_{pt} = 0,04$)	108
Abbildung 7-20: Dimensionsloser Druckverlust und sein maximaler Fehler im Vergleich zur Ergun'schen Beziehung ($a_{pt} = 0,04$, $a_{Hp} = 497$)	109
Abbildung 7-21: Dimensionsloser Druckverlust in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} im Vergleich mit dem Ergun'schen Druckverlust	110
Abbildung 7-22: Vergleich der Simulation (Epsilon2D) mit der Ergun'schen Gleichung ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $a_{Hp} = 50$)	112
Abbildung 7-23: Druckverlust in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} (Epsilon2D)	113
Abbildung 7-24: Radiale Porositätsverteilung der Schüttung $a_{pt} = 0,24$	113
Abbildung 7-25: Vergleich der Simulation mit den Messungen ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $a_{Hp} = 50$)	114
Abbildung 7-26: Vergleich des Ergun'schen Druckverlustgesetzes mit den laminaren und turbulenten TriKaMo-3D-Simulationen ($a_{pt} = 0,2$)	115
Abbildung 7-27: Druckverlust im Modell TriKaMo-3D in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt}	116
Abbildung 7-28: Änderung der radialen Strömungsverteilung in Abhängigkeit von der Zahl der Kugellagen ($a_{pt} = 0,2$, $u_0 = 0,40$)	118
Abbildung 7-29: Veränderung des radialen Strömungsprofils mit der Anströmgeschwindigkeit u_0 ($a_{pt} = 0,20$, 57 Kugellagen)	120
Abbildung 7-30: Vergleich der radialen Verteilung der Strömungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt} ($u_0 = 0,4$, $H_S = 0,478$)	121
Abbildung 7-31: Erste Kugellage in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt}	122
Abbildung 7-32: Vergleich der radialen Strömungsgeschwindigkeiten hinter der Schüttung ($a_{pt} = 0,16$) von Daszkowski [74] ($u_0 = 0,856$) mit eigenen Meßwerten ($u_0 = 0,84$)	123
Abbildung 7-33: Erste Kugellage $a_{pt} = 0,16$	124
Abbildung 7-34: Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten der Messung mit der Simulation von Epsilon2D ($a_{pt} = 0,2$, $n_{opt} = 3$, gemessene erste Kugellage)	126

Abbildung 7-35: Strömung entlang und hinter der Schüttung in der Simulation von Epsilon2D ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $n_{opt} = 2$, Zielfunktion mit Randkriterium)	128
Abbildung 7-36: Gemittelte radiale Geschwindigkeitsprofile $\hat{u}(\chi)$ in Abhängigkeit von der Anströmgeschwindigkeit u_0 ($a_{pt} = 0,2$, $n_{opt} = 3$)	129
Abbildung 7-37: Abhängigkeit der Strömungsgeschwindigkeit von der Porosität bei einem gewählten Druckverlust in der Ergun'schen Gleichung	130
Abbildung 7-38: Vergleich der Epsilon2D-Simulation mit der zu Daszkowski [74] analogen Porositätsfunktion $\varepsilon^o(\chi, \phi)$ ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $n_{opt} = 2$, Zielfunktion mit Randkriterium)	131
Abbildung 7-39: Gemittelte Strömungsprofile $\hat{u}(\chi)$ in Abhängigkeit von der Dimension der Porositätsverteilung ($a_{pt} = 0,2$, gemessene erste Kugellage, $a_{Hp} = 50$)	132
Abbildung 7-40: Zweidimensionale Geschwindigkeitsverteilung $u(\chi, \phi)$ in Abhängigkeit von der zugrunde gelegten Porositätsverteilung innerhalb der Schüttung	133
Abbildung 7-41: Strömung in der Austrittsfläche des Reaktors im Modell TriKaMo-3D (Die Farbskala zeigt die Strömungsgeschwindigkeit u_0 in m/s; $\phi = 0$, $a_{pt} = 0,2$)	134
Abbildung 7-42: Radiale Geschwindigkeitsverteilung im Modell TriKaMo-3D und in den Referenzmessungen ($a_{pt} = 0,2$, $\phi = 0$)	135
Abbildung 7-43: Vergleich der radialen Geschwindigkeitsverteilung der Simulation von TriKaMo-3D mit der Referenzmessung bei gleicher Auflösung über dem Rohrquerschnitt ($a_{pt} = 0,2$)	137
Abbildung 7-44: Radiale Geschwindigkeitsverteilung in Abhängigkeit von der Reynoldszahl Re_p ($a_{pt} = 0,2$, $\phi = 0$)	138
Abbildung 7-45: Skizze der Signalausbreitung	140
Abbildung 7-46: Dispersionsmessungen in der Literatur	144
Abbildung 7-47: Vergleich der Messungen mit den Literaturwerten	147
Abbildung 7-48: Experimentelle radiale Peclet-Zahlen Pe_r	148
Abbildung 7-49: Erste gemessene Kugellage des Reaktors mit einem Durchmesser Verhältnis von $a_{pt} = 0,24$ (Der schraffierte Kreis markiert den Außendurchmesser und die Lage der Lanze zur Traceraufgabe)	149
Abbildung 7-50: Bestimmung des radialen Dispersionskoeffizienten durch den Vergleich eines zweidimensionalen Modells mit Rechnungen, in denen die radiale Dispersion mit einem Ausdruck auf der Basis des ersten Fick'schen Gesetzes modelliert wird	150
Abbildung 7-51: Simulation der radialen Dispersion im Vergleich mit eigenen Meßwerten und mit Literaturwerten	151
Abbildung 7-52: Zweidimensionale Geschwindigkeitsverteilung $u(\chi, \phi)$ auf der Basis einer zweidimensionalen Porositätsverteilung $\varepsilon(\chi, \phi)$	152
Abbildung 7-53: Bestimmung der radialen Peclet-Zahl im Netzwerkmodell TriKaMo-3D	153

Abbildung 7-54: Radiale Dispersion der laminaren und turbulenten Simulation mit TriKaMo-3D im Vergleich mit den Referenzmessungen ($a_{pt} = 0,2$)	154
Abbildung 7-55: Radiale Dispersion in Abhängigkeit vom Durchmesser Verhältnis a_{pt}	155
Abbildung 9-1: Kugeldurchmesser verteilung der 12-mm-Charge	161
Abbildung 9-2: Bestimmung der Positionen in der ersten Kugellage	162
Abbildung 9-3: Veränderung der Porosität als Funktion des Verhältnisses a_{pt}	165
Abbildung 9-4: Bereiche in einem Reaktor (Skizze)	166
Abbildung 9-5: Skizze des Versuchsaufbaus	167
Abbildung 9-6: Druckverlust über dem Reaktor in Abhängigkeit von der Anströmgeschwindigkeit u ($a_{pt} = 0,04$)	168
Abbildung 9-7: Skizze der Anlage zur Strömungsmessung	173
Abbildung 9-8: Detailskizze des drehbaren Reaktors und des Meßschusses	174
Abbildung 9-9: Schritte der Meßdatenbearbeitung	177
Abbildung 9-10: Messung der Strömungsgeschwindigkeiten über dem Reaktorquerschnitt ($a_{pt} = 0,2$).	179
Abbildung 9-11: Gemessene erste Kugellage	179
Abbildung 9-12: Überlagerung der ersten Kugellage und der Isolinien der gemessenen Strömungsgeschwindigkeiten ($a_{pt} = 0,2$, $a_{Hp} = 1$, $u_0 = 0,40$)	180
Abbildung 9-13: Messung der Strömungsgeschwindigkeiten über dem Reaktorquerschnitt ($a_{pt} = 0,2$)	181
Abbildung 9-14: Gesamtabweichung in Abhängigkeit von der Anzahl der Kugellagen	182
Abbildung 9-15: Meßaufbau der Dispersionsmessung	183
Abbildung 9-16: Meßauswertung der Radialdispersion	186
Abbildung 9-17: Korrektur der gemessenen radialen Peclet-Zahl Pe_r' mit dem Durchmesser Verhältnis a_{pt} gemäß Gleichung (7-37)	187
Abbildung 9-18: Vektoren zur Volumenberechnung in Tetraedern	189

10.3 Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Durchmesser- und Höhenverhältnisse in den betrachteten Reaktoren	13
Tabelle 2: Einteilung der Kontinuumsmodelle	33
Tabelle 3: Einteilung der Kontinuumsmodelle der Gruppe A III	34
Tabelle 4: Regelmäßige zweidimensionale Netze nach Fatt [100] sowie nach Rege und Fogler [233]	37
Tabelle 5: Koordinationszahl m der Knoten in den Polyedern unter Berücksichtigung der Aufteilung der Reaktorrandbereiche	62
Tabelle 6: Porositäten der verschiedenen Packungsarten nach Haughey und Beveridge [134]	76
Tabelle 7: Einteilung der Regionen	80
Tabelle 8: Vergleich mit den Gesamtporositäten anderer Algorithmen	86
Tabelle 9: Von Spedding und Spencer [275] verwendete Algorithmen	91
Tabelle 10: Mechanismen der radialen Dispersion nach Wicke [306]	139
Tabelle 11: Gemessene Kugelgrößen	160
Tabelle 12: Porositäten der Schüttungen	165

10.4 Literaturverzeichnis

1. Adams, D.J., Matheson, H.A., *Computation of Dens Random Packings of Hard Spheres*, J. Chem. Phys., 1972, 56, 1986-1994
2. Addison, P.A., Buffham, B.A., Mason, G., Yadav, *Gasphase Dispersion Assessed from Tracer Holdup Measurements on a Packed Bed: Theory, Apparatus and Experimental Tests (or How to Measure Dispersion with a Pressure Gauge)*, Chem. Eng. Sci., 1994, 49(4), 561-572
3. Addison, P.A., Osborne, L.C., *An Axial Dispersion Meter*, IChemE Research Event, 2nd European Conference for Young Researchers, 1996, 436-438
4. Adinberg, R.Z., Dilman, V., *Measurement of Local Flow Rates in a Fixed Granular Bed*, Teor. Osn. Khim. Tekhnol., 1985, 19, 213-216
5. Aerov, M.E., *Some Problems of Aerodynamics and Heat Exchange in Catalytic Reaction Vessels*, Promotionsarbeit, Moskau, 1951 zitiert in Haughey und Beveridge [134]
6. Ameri, S., Meloy, P., Aminian, K., Drescher, S., *Permeable Rock Model using an Array of Pores*, Power Technology, 1993, 75, 107-112
7. Atkins, P.W., *Memofix Physikalische Chemie*, VCH-Verlag, Weinheim 1996
8. Aviles, B.E., Levan, M.D., *Network Models for non-uniform Flow and Adsorption in Fixed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1991, 42(6), 1935-1944
9. Avontuur, P.P.C., Geldart, D., *A Quality Assessment of the Ergun Equation*, IChemE Research Event, 2nd European Conference for Young Researchers, 1996, 994-996
10. Avrami, M., *Kinetics of Phase Change: II Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei*, J. Chem. Phys., 1940, 8, 212-226
11. Bailey, L., Foumeny, E.A., Kulkanrni, A., *Influence of Bed Structure on Mass Dispersion Characteristics of Fixed Beds*, IChemE Research Event, 2nd European Conference for Young Researchers, 1996, 707-709
12. Barber, C. B., Dobkin, D. P., Huhanpaa, H., *The Quickhull Algorithm for Convex Hulls*, ACM Transactions on Mathematical Software, 1996, 22, 469-463, <http://www.acm.org/pubs/toc/Abstracts/toms/235821.html>
13. Barber, C. B., Huhanpaa, H., *qhull: Readme.txt*, The Geometry Center, University of Minnesota, 400 Lind Hall, 207 Church Street S. E., Minneapolis, MN 55455
14. Baron, Th., *Generalized Graphical Method for the Design of Fixed Bed Catalytic Reactors*, Chem. Eng. Prog., 1952, 48, 118-124
15. Bear, J., *On the Tensor Form of Dispersion in Porous Media*, J. Geophys. Research, 1961, 66(4), 1185-1197
16. Bear, J., *Dynamics of Fluids in Porous Media*, American Elsevier Publishing Company inc, New York, 1972
17. Bear, J., Corapcioglu, M.Y., *Mathematical Model for Regional Land Subsidence Due to Pumping - 1. Integrated Aquifer Subsidence Equations Based on Vertical Displacement Only*, Water Resource Research, 1981, 17, 937-946
18. Bear, J., Corapcioglu, M.Y., *Mathematical Model for Regional Land Subsidence Due to Pumping - 2. Integrated Aquifer Subsidence Equations Based on Vertical and Horizontal Displacement*, Water Resource Research, 1981, 17, 947-956
19. Benenati, R.F., Brosilow, C.B., *Void Fraction Distribution in Beds of Spheres*, AIChE J., 1963, 8(3), 359-362
20. Benneker, A.H., Kronberg, A.E., Post, J.W., Van der Hamn, A.G.J., Westerterp, K.R., *Axialdispersion in Gases Flow Through a Packed Bed at Elevated Pressures*, Chem. Eng. Sci., 1996, 51, 2099-2108
21. Benner, T., *Anleitung zum Programm KSIM*, TU Braunschweig

22. Bennet, C.H., *Serial Deposited Amorphous Aggregates of Hard Spheres*, J. Appl. Phys. 1971, 43, 2727-2734
23. Bernard, R.A., Wilhelm, R.H., *Turbulent Diffusion in Fixed Beds of Packed Solids*, Chem. Eng. Prog., 1950, 46, 233-244
24. Bey, O., *Mitteilungen*, 1997
25. Bey, O., Eigenberger, G., *Fluid Flow through Catalyst Filled Tubes*, Chem. Eng. Sci., 1997, 52, 1365-1376
26. Bey, O., Eigenberger, G., *Bestimmung und Einfluß von radialer Strömungsverteilung und radialem Wärmetransport in katalytischen Festbettreaktoren*, Chem.-Ing.-Tech, 1997, 69, 1308
27. Bezpálov, A.V., Demin, V.V., Beskov, V.S., *Pressure Drop in Catalysts with Different Geometric Shapes and Dimensions*, Theoretical Foundations of Chem. Eng. 1991, 447-454 aus *Teor. Osn. Khim. Tekhnol.*, 1991, 25(4), 533-541
28. Bhatia, S.K., Perlmutter, D.D., *A Random Pore Model for Fluid-Solid Reactions: I. Isothermal, Kinetic Control*, AIChE J., 1980, 26(3), 279-386
29. Bhatia, S.K., *Combined Surface and Pore Volume Diffusion in Porous Media*, AIChE J. 1981, 27(2), 226-235
30. Bhatia, S.K., Perlmutter, D.D., *The Effect of Pore Structure on Fluid-Solid Reactions: Application to the SO₂-Lime Reaction*, AIChE J., 1981, 27(2), 236-246
31. Bhatia, S.K., Perlmutter, D.D., *A Random Pore Model for Fluid-Solid Reactions: II. Diffusion and Transport Effects*, AIChE J., 1981, 27(2), 247-255
32. Bhatia, S.K., Perlmutter, D.D., *Effect of the Product Layer on the Kinetics of the CO₂-Lime Reaction*, AIChE J., 1983, 29(1), 79-86
33. Bhatia, S.K., Perlmutter, D.D., *Unified Treatment of Structural Effects in Fluid-Solid Reactions*, AIChE J., 1983, 29(2), 281-288
34. Bhatia, S.K., *Stochastic Theory of Transport in Inhomogeneous Media*, Chem. Eng. Sci., 1986, 41(5), 1311-1324
35. Biswas, J., Bhaskar, G.V., Greenfield, P.F., *Stratified Flow Model for Two-Phase Pressure Drop Prediction in Trickle Beds*, AIChE J., 1988, 34, 511-513
36. Blunt, M., King, P., *Relative Permeabilities from Two- and Three-Dimensional Pore-Scale Network Modeling*, Transport in Porous Media, 1991, 6, 407-433
37. Boissonat, J.-D., Teillaud, M., *On the Randomized Construction of the Delaunay Tree*, Rapport de Recherche, 1989, INRIA, 2004 Route des Lucioles, B.P.109, 06561 Valbonne cedex (France)
38. Bronkhorst High-Tech B.V., *Benutzerhandbuch für Massendurchflußmesser und -regler für Gase*, 1995
39. Bronstein, I.N., Semendjajew, K. A., *Taschenbuch der Mathematik*, 23. Auflage, Thun: 1997
40. Bryant, S.L., King, P.R., Mellor, D.W., *Network Model Evaluation of Permeability and Spatial Correlation in a Real Random Sphere Packing*, Transport in Porous Media, 1993, 11, 53-70
41. Bryant, S.L., Mellor, D.W., Cade, C.A., *Physically Representative Network Models of Transport in Porous Media*, AIChE J. 1993, 39, 387-396
42. Bryden, K.M., Ragland, K.W., *Numerical Modeling of a Deep, Fixed Bed*, Combustion Energy & Fuels, 1986, 10, 269-275
43. Buffman, B. A., Gibilaro, L. G., Rathor, M. N., *A Probabilistic Time Delay Description of Flow in Packed Beds*, AIChE J., 1970, 14, 218-223
44. Buffham B.A., Rathor, M.N., *The Influence of Viscosity on Axial Mixing in Trickle Flow in Packed Beds*, Trans IChemE, 1978, 56, 266-273
45. Bultman, E., *Optische Porositätsmessung*, Studienarbeit, Lehrstuhl für Chemische Reaktionstechnik, 1999

46. Burdett, I.D., Webb, D.R., Davies, G.A., *A New Technique for Studying Dispersion Flow, Holdup and Axial Mixing in Packed Extraction Columns*, Chem. Eng. Sci., 1981, 36, 1915-1919
47. Burganos, V.N., Sotirchos, S.V., *Diffusion in Pore Networks: Effective Medium Theory and Smooth Field Approximation*, AIChE J. 1987, 34(10), 1678-1689
48. Burganos, V.N., Paraskeva, C.A., Payatakes, A.C., *Monte Carlo Network Simulation of Horizontal Upflow and Downflow Depth Filtration*, AIChE J., 1995, 41(5), 272-285
49. Cairns, E.J., Prausnitz, J.M., *Velocity Profiles- In Packed and Fluidized Beds*, Ind. Eng. Chem., 1959, 51, 1441 – 1443
50. Carbonell, R.G., *Effect of Pore Distribution and Flow Segregation on Dispersion in Porous Media*, Chem. Eng. Sci., 1979, 34, 1031-1039
51. Carbonell, R.G., *Flow Non-uniformities in Packed Beds Effect on Dispersions*, Chem. Eng. Sci., 1980, 35, 1347-1356
52. Carbonell, R.G., Whitaker, S., *Dispersion in Pulsed Systems II*, Chem. Eng. Sci., 1983, 38 (11), 1795-1802
53. Carman, P.C., *Fluid Flow Through Granular Beds*, Trans. Instn. Chem. Eng., 1937, 15, 150-166
54. hgg.: Chaouki, J., Larachi, F., Dudukovic, M.P., *Non-invasive Monitoring of Multiphase Flows*, Elsevier, Amsterdam, 1997
55. Chan, S.K., Ng, K.M., *Geometrical Characteristics of a Computer-Generated Three-Dimensional Packed - Column of Equal and Unequal Sized Spheres - With Special Reference to Wall Effects*, Chem. Eng. Commun., 1986, 48, 215-236
56. Chan, S.K., Ng K.M., *Geometrical Characteristics of the Pore Space in a Random Packing of Equal Spheres*, Powder Technology, 1988, 54, 147-155
57. Chase, G.G., Baru, P., *Study of Wall Effects in Packed Beds*, Adv. Filt. Sep. Tech., 1996, 10, 363-368
58. Chen, V.C., Hlavacek, M., *Application of Voronoi Tessellation for Modeling Randomly Packed Hollow-Fiber Bundles*, AIChE J., 1994, 40(4), 606-612
59. Cho, B.K., Hegedus, L.L., Aris, R., *Discrete Cell Model of Pore-Mouth Poisoning of Fixed-Bed Reactors*, AIChE J., 1983, 29(2), 289-297
60. Choudhary, M., Szekely, J., Weller, S.W., *The Effect of Flow Maldistribution on Conversion in Catalytic Packed-Bed Reactor (Part I. Analysis)*, AIChE J. , 1976, 22, 1021-1027
61. Choudhary, M., Szekely, J., Weller, S.W., *The Effect of Flow Maldistribution on Conversion in Catalytic Packed-Bed Reactor (Part II. Experimental Studies)*, AIChE J. , 1976, 22, 1027-1033
62. Chu, C.F., Ng, K.M., *Flow in Packed Tubes with a Small Tube to Particle Diameter Ratio*, AIChE J., 1989, 35, 148-158
63. Chu, C.F., Ng, K.M., *Model for Pressure Drop Hysteresis in Trickle Beds*, AIChE J., 1989, 35, 1365-1369
64. Cignoni, P., Montani, C., Scopigno, R. , *DeWall: A Program for Generating 3d Delaunay Triangulations*
65. Clancy, B.E., *Calculation of Hard Spheres in Large Cylinders*, BNL 997, T424, 1966, 1-21 zitiert in [275]
66. Cohen, Y., Metzner, A.B., *Wall Effects in Laminar Flow of Fluids through Packed Beds*, AIChE. J., 1981, 27, 705-715
67. Cohen, Y., Metzner, A.B., *Diffusion of Macromolecules: A Constitutive Theory*, Chem. Eng. Commun., 1985, 41, 73-99
68. Constantinides, G.E., Payatakes, A.C., *A Three Dimensional Network Model for Consolidated Porous Media Basic Studies*, Chem. Eng. Commun. 1989, 81, 55-81
69. Coulson, Ph. D. Thesis, University of London 1935 zitiert in [53] und [245]

70. Crider, J.E., Foss, A.S., *Effective all Heat Transfer Coefficients and Thermal Resistances in Mathematical Models of Packed Beds*, AIChE J., 1012-1019
71. Daccord, G., Lenormand, R., *Fractal Patterns from Chemical Dissolution*, Nature, 1987, 325, 41-43
72. Daccord, G., Touboul, E., Lenormand, R., *Carbonate Acidizing: Toward a Quantitative Model of the Wormholing Phenomenon*, SPE Production Engineering, 1989, 63-68
73. Dankworth, D.C., Sundaresan, S., *A Macroscopic Model for Countercurrent Gas-Liquid Flow in Packed Columns*, AIChE J., 1989, 35, 1282-1292
74. Daszkowski, Th., *Strömung, Stoff- und Wärmetransport in schüttungsgefüllten Rohrreaktoren*, Promotionsarbeit, Univ. Stuttgart, 1991
75. Daszkowski, Th., Eigenberger, G., *Zum Einfluß einer genaueren Strömungsmodellierung auf die Beschreibung von Festbettreaktoren*, Chem.-Ing.-Tech., 1990, 62, 852-855
76. Daszkowski, Th., Eigenberger, G., *A Reevaluation of Fluid Flow, Heat Transfer and Chemical Reaction in Catalyst Filled Tubes*, Chem. Eng Sci, 1992, 47, 2245-2250
77. de Ligny, C.L., *Coupling between Diffusion and Convection in Radial Dispersion of Matter by Fluid Flow Through Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1970, 255, 1177-1181
78. Deans, H.A., Lapidus, L., *A Computational Model for Predicting and Correlating the Behavior of Fixed-Bed Reactors: 1. Derivation of Model for Nonreactive Systems*, AIChE J., 1960, 6, 656-663
79. Debbas, D., Rumpf, H., *On the Randomness of Beds Packed with Spheres or Irregular Shaped Particles*, Chem. Eng. Sci., 1966, 21, 583ff
80. Debus, K., Nirschl, H., Delgado, A., Denk, V., *Numerische Simulation des lokalen Impulsaustausches in Kugelschüttungen*, Chem.-Ing.-Tech., 1998, 70, 415-418
81. Deckwer, W.D., *Reaktormodelle*, Dechema-Monographie Band 114, VCH Verlagsgesellschaft Weinheim, 1989, 248-263
82. Delmas, H., Froment, G.F., *A Simulation Model accounting for Structural Radial Nonuniformities in Fixed Bed Reactors*, Chem. Eng. Sci., 1988, 43(8), 2281-2287
83. Deront, M., Samb, F.M., Adler, N., Péringer, P., *Biomass Growth Monitoring Using Pressure Drop in Cocurrent Biofilter*, Biotechnology & bioengineering, 1998, 60 (1), 97-104
84. Devillers, O., *del-tree3:Readme*
<http://www.inria.fr/prisme/personnel/devillers/devillers.html>
85. Devillers, O., *Robust and Efficient implementation of the Delaunay Tree*, Rapport de Recherche INRIA 1619, Février 1992, INRIA, 2004 Route des Lucioles, B.P.109, 06561 Valbonne cedex (France)
86. Dhingra, S.C., Gunn, D. J., Narayanan, P. V., *The Analysis of Heat Transfer in Fixed Beds of Particles at Low and Intermediate Reynolds Numbers*, J. Heat. Mass Transfer 1984, 27, 2377-2383
87. Dixon, A.G., *Correlation for Wall and Particle Shape Effects on Fixed Bed Bulk Voidage*, Can. J. of Chem. Eng., 1988, 66, 705-708
88. Dixon, A.G., *An Improved Equation for the Overall Heat Transfer Coefficient in Packed Beds*, Chem. Eng. Processing, 1996, 35, 323-331
89. Dorweiler, V.P., Fahien, R.W., *Mass Transfer at Low Flow Rates in a Packed Column*, AIChE J., 1959, 5, 139-144
90. Dullien, F.A.L., *Single Phase Flow Through Porous Media and Pore Structure*, The Chemical Engineering Journal, 1975, 10, 1-34
91. Dullien, F.A.L., *New Network Permeability Model of Porous Media*, AIChE, J, 1975, 21(2), 299-307
92. Ebach, E.A., White, R.R., *Mixing of Fluids Flowing Through Beds of Packed Solids*, AIChE J., 1958, 4(2), 161-169
93. Eidsath, A., Carbonell, R.G., Whitaker, S., Hermann, L.R., *Dispersion in Pulsed Systems III*, Chem. Eng. Sci. 1983, 38(11), 1803-1816

94. Eisfeld, B., Dissertation in Vorbereitung, BTU Cottbus
95. Eisfeld, B., Interne Mitteilungen
96. Eisfeld, B., Studienarbeit, TU Braunschweig
97. Ergun, S., Orning, A.A., *Fluid Flow through Packed Columns and Fluidized Beds*, Ind. Eng. Chem., 1949, 41, 1179-1184
98. Ergun, S., *Fluid Flow through Packed Columns*, Chem. Eng. Prog., 1952, 48, 89ff
99. Fahien, R.W., Smith, J.M., *Mass Transfer in Packed Beds*, AIChE J., 1955, 1, 28-37
100. Fatt, L., *The Network Model of Porous Media I.*, Petroleum Transactions, AMIE, 1956, 207, 144-159
101. Fatt, L., *The Network Model of Porous Media II.*, Petroleum Transactions, AMIE, 1956, 207, 160-163
102. Fatt, L., *The Network Model of Porous Media III.*, Petroleum Transactions, AMIE, 1956, 207, 164-177
103. Finney, J. L., Ph. D. Thesis, University of London, 1968
104. Fleischmann, P., Selberherr, S., *Three-Dimensional Delaunay Mesh Generation Using a Modified Advancing Front Approach*, Proceedings, 6th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, 1997, 267-278
105. Foumeny, E.A., Chowdhury, M.A., *Dynamics of Fixed-Bed Reactors in Terms of Mass Dispersion*, Catalysis Today 1994, 20, 501-514
106. Foumeny, E.A., Chowdhury, M.A., McGreavy, C., Castro, J.A.A., *Estimation of Dispersion Coefficients in Packed Beds*, Chem. Eng. Tech., 1992, 15, 168-181
107. Foumeny, E.A., Bailey, L., Afandizadeh-Zargari, S., *Randomly Packed Towers: Statistical Description of their Structure*, IChemE Research Event, 2nd European Conference for Young Researchers, 1996, 793-795
108. Frisch, H.L., Hammersley, J.M., *Percolation Processes and Related Topics*, J. Soc. Indust. Appl. Math, 1963, 11, 894-918
109. Froment, G.F., Govindarao, V.M.H., *Voidage Profiles in Packed Beds of Spheres*, Chem. Eng. Sci. 1986, 41, 533-539
110. Galloway, L.R., Komarnicky, W., Epstein, N., *Effect of Packing Configuration on Mass and Heat Transfer in Beds of Stacked Spheres*, Can. J. Chem. Eng., 1957, 35, 139-150
111. Gamson, B.W., Thodos, G., Houge, V.A., *Heat, Mass and Momentum Transfer in the Flow of Gases Through Granular Solids*, AIChE J., 1993, 39, 1-35
112. Gianetto, A., Silverston, P. C., *Multiphase Chemical Reactors*, Springer Verlag, Heidelberg, 1988
113. Giese, M., Lehrstuhl für Thermodynamik B, TU München, mündliche Mitteilung
114. Giese, M., Rottschäfer, K., Vortmeyer, D., *Measured and Modeled Superficial Flow Profiles in Packed Beds with Liquid Flow*, AIChE J., 1988, 44, 484-490
115. Goodling, D. S., Vachon, R. I., Stelpflug, W. S., Ying, S.J., *Radial Porosity Distribution in Cylindrical Beds Packed with Spheres*, Powder Technology, 1983, 35, 23-29
116. Gorden, Y., Printz, M., Shvidki, V., *Multidimensional Mathematical Model of Gas Dynamics and Heat Exchange in The Packed Bed of Lump Materials*, Recent Advances in Heat Transfer, 1992, 1095-1109
117. Gotoh, K., *A Random Structure of Particle Assemblies and Physicochemical Properties of Liquids*, Adv. Mech. Flow. Granular Mater, 1983, 1, 41-52
118. Gotoh, K., Jodrey, W.S., Tory, E.M., *A Random Packing Structure of Equal Spheres - Statistical Geometrical Analysis of Tetrahedral Configurations*, Powder Tech., 1978, 20, 233-243
119. Gotoh, K., Jodrey W.S., Tory, E.M., *Variation in the Local Packing Density Near the Wall of a Randomly Packed Bed of Equal Spheres*, Powder Technology, 1978, 23, 257-260
120. Govindarao, V.M.H., Ramrao, K.V.S., Rao, A.V.S., *Structural Characteristics of Packed Beds of Low Aspect Ratio*, Chem. Eng. Sci., 1992, 47(8), 2105-2109

121. Govindarao, V.M.H., Subbanna, M., Rao, A.V.S., Ramrao, K.V.S., *Voidage Profile in Packed Beds by Multi-Channel Model: Effects of Curvature of the Channels*, Chem. Eng. Sci., 1990, 45, 362f
122. Gros, J.B., Burgarel, R., *Determination of Transport Phenomena in a Non-isothermal Non-adiabatic Fixed Bed*, International Congress of Chemical Engineering, Chemical Equipment Design and Automation 5th 1975, Volume I, Prague
123. Gros, J.B., Burgarel, R., *Etude Comparative de Modèles de Réacteurs Catalytiques à Lit Fixe*, Chem. Eng. J., 1977, 13, 165-177
124. Gumhold, S., *WSI/GRIS-Projekte*, <http://www.gris.uni-tuebingen/gris/proj/index.html>
125. Gunn, D.J., *Axial and radial Dispersion in Fixed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1987, 42, 363-373
126. Gunn, D.J., *On Axial Dispersion in Fixed Beds*, Chem. Eng. and Processing, 1993, 32, 333-338
127. Gunn, D.J., Pryce, C., *Dispersion in Packed Beds*, Trans. Instn. Chem. Eng. 1969, 47, T341-T350
128. Haidegger, E., Vortmeyer, D., Wagnern, P., *Simultane Lösung von Energie-, Stoff- und Impulsgleichung für wandgekühlte chemische Festbettreaktoren*, Chem.-Ing.-Tech., 1989, 61, 647-650
129. Han, N-W., Bhakta, J., Carbonell, R.G., *Longitudinal and Lateral Dispersion in Packed Beds: Effect of Column Length and Particle Size Distribution*, AIChE J., 1985, 31, 277-288
130. Happel, J., Brenner, H., *Low Reynolds Number Hydrodynamics*, in hgg.: Marius Nijhoff, Dordrecht, 2. Auflage, 1983, 138-141, zitiert in [40]
131. Haring, R.E., Greenkorn, R.A., *A Statical Model of a Porous Medium with Non-uniform Pores*, AIChE J., 1970, 16(3), 477-483
132. Harleman, D.R.F., Rumer, R.R., *Longitudinal and Lateral Dispersion in an Isotropic Porous Medium*, Fluid Mech., 1963, 385-394
133. Hashimoto, K., Silverston, P.L., *Gasification: Part I. Isothermal, Kinetic Control Model for a Solid with a Pore Size Distribution*, AIChE J., 1973, 19(2), 259-268
134. Haughey, D.P., Beveridge, G.S.G., *Structural Properties of Packed Beds - A Review*, Can. J. Chem. Eng., 1969, 47, 130-140
135. Heggs, P.J., Bryant, A.J., Ewen, E.L.G., Phillips, N.D., Yau, K.C., *Pressure Drop Characterisation of Carbon in Packed Beds*, IChemE Research Event, 2nd European Conference for Young Researchers, 1996, 790-792
136. Hiby, J.W., *Longitudinal and Transverse Mixing During Single-Phase Flow through Granular Beds*, Interaction Between Fluids & Particles (London: Instn. Chem. Engers.)
137. Hinduja, M.J., Sundaresan, S., Jackson, R., *A Cross flow Model of Dispersion in Packed Bed Reactors*, AIChE J., 1980, 26, 274-281
138. Hlavacek, V., *Fixed Bed Reactors, Flow and Chemical Reaction*, in hgg.: Pethö A., Nobler, R.D., *Residence Time Distribution Theory*, Verlag Chemie Weinheim, 1992
139. Hoefner, M.I., Fogler, H.S., *Pore Evolution and Channel Formation During Flow and Reaction in Porous Media*, AIChE J., 1988, 34, 45-68
140. Hofmann, H., *Fortschritte bei der Modellierung von Festbettreaktoren*, Chem.-Ing.-Tech., 1979, 51, 257-265
141. Holleman, E., Wiberg, N., *Lehrbuch der Anorganischen Chemie*, 91. - 100. Auflage Walter de Gruyter & CO, Berlin 1985
142. Hopkins, M.R., Ng, K.M., *Liquid-Liquid Relative Permeability: Network Models and Experiments*, Chem. Eng. Commun, 1986, 46, 253-279
143. Iliuta, I., Thyron, F.C., Muntean, G., Giot, M., *Residence Time Distribution of the Liquid in Gas-Liquid Cocurrent Upflow Fixed-Bed Reactors*, Chem. Eng. Sci., 1996, 51, 4579-4593

144. Ingber, L., Rosen, B., *Genetic Algorithms and Very Fast Simulates Reannealing: A Comparison*, Mathematical and Computer Modeling, 16, 1992
145. Jacob, H.G., *Rechnergestützte Optimierung statischer und dynamischer Systeme: Beispiele in FORTRAN-Programmen*, Springer, Berlin, 1982
146. Jerauld, G.R., Hatfield, J.C., Scriven, L.E., Davis, H.T., *Percolation and Conduction on Voronoi and Triangular Networks: A Case Study in Topological Disorder*, J. Phys. C: Solid State Phys. 1964, 17, 1519-1529
147. Jodrey, W.S., Tory, E.M., *Simulation of Random Packing of Spheres*, Simulation, 1979, 32, 1-12
148. Jodrey, W.S., Tory, E.M., *Computer Simulations of Isotropic, Homogeneous, Dense Random Packing of Equal Spheres*, Powder Technology, 1981, 30, 111-118
149. Joe, B., *Three-Dimensional Triangulations from Local Transformations*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 1989, 10, 718-741
150. Joe, B., *Geompack - A Software Package for the Generation of Meshes using Geometric Algorithms*, Advances in Engineering Software and Workstation, 1991, 13, 325-331
151. Joe, B., Simpson, R. B., *Triangular Meshes for Regions of Complicated Shape*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1986, 23, 751-778
152. Jolls, K.R., Hanratty, Th. J., *Use of Electrochemical Techniques to Study Mass Transfer Rates and Local Skin Friction to a Sphere in a Dumped Bed*, AIChE J., 1969, 15, 199-205
153. Jones, M.C., Nassimbene, R.D., Wolfe, J.D., Fredrick N.V., *Mixing and Dispersion Measurements on Packed Bed Flows using a Fiberoptic Probe Array*, Chem. Eng. Sci., 1996, 51, 1009-1021
154. Jørgensen, S.B., *Fixed Bed Reactor Dynamics and Control - A Review*, AC Control of Distillation Columns and Chemical Reactors, 1986, Band 4, 11-24
155. Juncu., Gh. , Floarea O., *Sensitivity Analysis of Tubular Packed-Bed Reaktor by Pseudohomogeneous* , AIChE J, 1995, 41, 2625-2631
156. Kalthoff, O., Vortmeyer, D., *Ignition/Extinction Phenomena in a Wall Cooled Fixed Bed Reactor*, Chem. Eng. Sci., 1980, 35, 1637-1643
157. Kantzas, A., *Computation of Holdups in Fluidized and Trickle Beds by Computer-Assisted Tomography*, AIChE J., 1994, 40, 1254-1267
158. Kehinde, A.J., Hudgins, R.R., Silverston, P.L., *Measurement of Axial Dispersion in Packed Beds at Low Reynolds Numbers by Imperfect Pulse Chromatography*, J. of Chem. Eng. of Japan, 1983, 16, 476 - 482
159. Keller, A.A., Blunt, M.J., Roberts, P.V., *Micromodel Observation of the Role of Oil Layers in Three-Phase Flow*, Transport in Porous Media, 1997, 26, 277-297
160. Khanna, R., Seinfeld, J.H., *Mathematical Modeling of Packed Bed Reactors: Numerical Solutions and Control Model Development*, Adv. Chem. Eng., 13, 113-191
161. Klein, R., Krämer, J., *WSI/GRIS - Projekte/Algorithmische Geometrie in der Computer Graphik*, <http://www.gris.uni-tuebingen/gris/proj/algo.html>
162. Kline, S.J., McClintock, F. A., *Describing Uncertainties in Single-Sample Experiments*, Mechanical Engineering, 1953, 3-8
163. Klingman, K.J., Lee H.H., *Alternating Flow Model for Mass and Heat Dispersion in Packed Beds*, AIChE J., 1987, 33, 366-38
164. Koplik, J., *Creeping Flow in Two-Dimensional Networks*, J. Fluid Mech., 1982, 119, 219-247
165. Küfner R., *Dissertation*, Erlangen, 1989
166. Küfner, R., Hofmann, H., *Implementation of Radial Porosity and Velocity Distribution in a Reactor Model for Heterogeneous Catalytic Gasphase Reactions*, Modell: Torus-Modell, Chem. Eng. Sci., 1990, 45, 2141-2146
167. Kulkarni, B.D., Doraiswamy, I.K., *Estimation of Effective Transport Properties in Packed Bed Reactors*, Catal. Rev.-Sci. Eng. 1980, 22(3), 431-483

168. Kuruhara, H.M., M.S. Thesis, Purdue Univ., Lafayette, Indiana, 1954, zitiert in [89]
169. Kuznetsov, A.V., *Analysis of Heating a Three-Dimensional Porous Bed Utilizing the Two Energy Equation Model*, Heat and Mass Transfer, 1996, 31, 173-177
170. Lamb, D.E., Wilhelm, R.H., *Effects of Packed Bed Properties on Local Concentration and Temperature Patterns*, I&EC Fundamentals, 1963, 2, 173-182
171. Lathinen, P.H. D., Thesis, Princeton, 1951, zitiert in [99]
172. Latifi, M.A., Midoux, N., *Velocity Gradient at the Wall of a Packed Bed Reactor with Single Phase Liquid Flow: Measurements and Modeling*, Chem. Eng. Processing, 1997, 26, 251-254
173. Lerou, J.J., Froment, G.F., *Velocity, Temperature and Conversion Profiles in Fixed Bed Catalytic Reactors*, Chem. Eng. Sci., 1977, 32, 853-861
174. Leva, M., *Variables in Fixed Bed Systems*, Chem. Eng., 1957, 32(8), 263-266
175. Leva, M., Grummer, M., Chem. Eng. Proc., 1947, 43, 713-716 zitiert in [174]
176. Levenspiel, O., *Chemical Reaction Engineering*, 2. Edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1972
177. Li, Y., Gao, X., *Relationships of Exponents with Coefficients of Equations of Axial and Radial Dispersions in Flow-Injection Analysis*, Laboratory Robotics and Automation, 1996, 8, 171-179
178. Limberg, C., *Geometrische und Fluiddynamische Eigenschaften computergenerierter Kugelschüttungen*, Diplomarbeit TU Braunschweig, 1993
179. Lin, C., Slattery, J.C., *Three-Dimensional, Randomized Network Model for Two-Phase Flow through Porous Media*, AIChE J., 1982, 28(2), 311-324
180. Lio, L., Yhou, X., Yuan, W., *A New on-Line Parameter estimation Strategy for Fixed-Bed Reactors*, Chem. Eng. Sci., 1996, 51, 3071-3076
181. Lubachevsky, B.D., Stillinger, F.H., Pinson, E.N., *Disk vs. Spheres: Contrasting Properties of Random Packings*, Journal of Statistical Physics, 1991, 64, 501-524
182. MacDonald, I.F., El-Sayed, M.S., Mow, K., Dullien, F.A.L., *Flow through Porous Media - the Ergun Equation Revisited*, Ind. Eng. Chem. Fundam., 1979, 18, 199 - 208
183. Majumdar, S., Rodi, W., Zhu, J., *Three-Dimensional Finite-Volume Method for Incompressible Flows with Complex Boundaries*, Journal of Fluids Engineering, 1992, 114, 497-503
184. Marcoulaki, E., Kokossis, A.C., *Reactor Network Synthesis using Stochastic Optimization Methods*, IChemE Research Event, 2nd European Conference for Young Researchers 1996, 113-115
185. Marivoet, J., Teodoroiu, P., Wajc, S.J., *Porosity, Velocity and Temperature Profiles in Cylindrical Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1974, 29, 1836-1840
186. Marquardt, D.M., *An Algorithm for Least Squares Estimation of Nonlinear Parameters*, J. Soc. Indust. Appl. Math, 1963, 11, 431 zitiert in [277, 277]
187. Martin, H., *Peclet Number Particle-to-Fluid Heat and Mass Transfer in Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1978, 33, 913-919
188. Matheson, A.J., *Computation of a Random Packing of Hard Spheres*, J. Phys. C: Solid State Phys., 1974, 7, 2569-2576
189. McGreavy, C., Andrade, J.S., Shibusu, Y., Arai, Y., *A Network Model for Diffusion and Adsorption in Compacted Pellets of Bidisperse Grains*, Chem. Eng. Sci., 1995, 50, 1943-1951
190. McGreavy, C., Foumeny, E.A., Javed, K.H., *Characterisation of Transport Properties for Fixed Bed in Terms of local Bed Structure and Flow Distribution*, Chem. Eng. Sci., 1986, 41, 787-797
191. Mehta, D., Hawley, M.C., *Wall Effect in Packed Columns*, I&EC Process Design and Development, 1969, 8, 280-282

192. Mihail, R., Singer, C., *Simulation of Residence Time Distributions in a Packing of Equal Spheres using a Structural Model for a Fixed Bed*, Chem. Eng. Sci., 1988, 43, 2781-2794
193. Miller, G. L., Talmor, D., Teng, Sh., Walkington, N., Wang, H., *Control Volume Meshes using Sphere Packing: Generation, Refinement and Coarsening*, 56th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, 1996, 47-62
194. Morales, M., Spinn, C.W., Smith, J.M., *Velocities and Effective Thermal Conductivities in Packed Beds*, Industrial and Engineering Chemistry, 1951, 225-232
195. Mucke, E., *Readme.detri*, Department of Computer Science, University of Illinois at Urbana-Champaign
196. Mueller, G.E., *Prediction of Radial Porosity Distributions in Randomly Packed Beds of Uniformly Sized Spheres in Cylindrical Containers*, Chem. Eng. Sci., 1991, 46, 706-708
197. Mueller, G.E., *Radial Void Fraction Distributions in Randomly Packed Fixed Beds of Uniformly Sized Spheres in Cylindrical Containers*, Powder Technology, 1992, 72, 269-275
198. Mueller, G.E., *Angular Porosity Distributions in Fixed Packed Beds of Low Diameter Aspect Ratio*, Can. J. Chem. Eng., 1997, 75, 677-683
199. Münnich, F., *Einführung in die Physik für Naturwissenschaftler*, Braunschweig 1988
200. Nadeau, P., Berk, D., Munz, R.J., *Measurement of Residence Time Distribution by Laser Absorption Spectroscopy*, Chem. Eng. Sci., 1996, 51, 2607-2612
201. Nam, T.T., Marr, D.F., Gola-Galimidi, A.M., Stewart, W.E. *Transport Modelling of Packed-Tube Reactors: II. Step-Response Experiments and a Cell Model*, Chem. Eng. Sci., 1991, 46, 2913-2925
202. Narayan, R., Coury, J.R., Masliyah, J.H., Gray, M.R., *Particle Capture and Plugging in Packed-Bed Reactors*, Ind. Eng. Chem. Res., 1997, 36, 4620-4627
203. Narkhede, A., Manocha, D., *Fast Polygon Triangulation based on Seidel's Algorithm*, <http://www.cs.unc.edu/~dm/CODE/GEM/chapter.html>
204. Nield, D.A., *Alternativ Model for Wall Effect in Laminar Flow of a Fluid through a Packed Column*, AIChE J., 1983, 29, 688-689
205. Norman, L.D., Maust, E., Skolnick, L., *Computer Simulation of Particulate Systems*, U.S Dept. Interior Bureau Mines Bull. 1971, 658, 1-48, zitiert in [242] und [275]
206. Northrup, M.A., Kulp, Th. J., Angel, S.M., *Direct Measurement of Interstitial Velocity Field Variations in a Porous Medium Using Fluorescent-Particle Image Velocimetry*, Chem. Eng. Sci., 1993, 48, 13-21
207. Oliveros, G., Smith, J.M., *Dynamic Studies of Dispersion and Channeling in Fixed Beds*, AIChE J., 1982, 28(5), 751-759
208. O'Neill, K., Benyahia, F., *Packed Bed Systems: An Insight into Mode Flexible Design*, IChemE Research Event 1997-THE 1997 Jubilee Research Event, 1853
209. Osinski, E.J., Barr, P.V., Brimacombe, J.K., *Mathematical Model for Gas Flow Through a Packed Bed in the Presence of Source and Sinks*, Can. J. Chem. Eng., 1989, 67, 722-730
210. Owen, S., *Delaunay Methods*, <http://www.andrew.cmu.edu/user/sown/topics/delaunay>
211. Owen, S., *Mesh Generation: A Quick Introduction*, <http://www.andrew.cmu.edu/user/sown/mintro.htm>
212. Paine, M.A., Carbonell, R.G., Whitaker, S., *Dispersion in Pulsed Systems - I*, Chem. Eng. Sci., 1983, 38, 1781-1793
213. Palica, M., *A Method to Investigate Filtration by the Use of a Pressure Test Filter*, Chem. Eng. Proc., 1996, 35, 333-342
214. Papageorgiou, J.N., Froment G.F., *Simulation Models Accounting for Radial Voidages Profiles in Fixed-Bed Reactors*, Chem. Eng. Sci., 1995, 50, 3043-3056
215. Parsons, I.M., Porter, K.E., *Gas Flow Patterns in Packed Beds: A Computational Fluid Dynamics Model for Wholly Packed Domains*, Gas Separation and Purification 1992, 6(4), 221-222

216. Payatakes, A.C., Neira, M.A., *Model of the Constricted Unit Cell Type for Isotropic Granular Porous Media*, AIChE J. 1977, 23(6), 922-930
217. Payatakes, A.C., Tien, C., Turian, R.M., *A New Model for Granular Porous Media: Part I. Model Formulation*. AIChE J., 1973, 19(1), 58-67
218. Payatakes, A.C., Tien, C., Turian, R.M., *Incompressible Newtonian Flow Through Periodically Constricted Tubes*, AIChE J., 1963, 19(1), 67-76
219. Payatakes, A.C., Tien, C., Turian, R.M., *Trajectory Calculation of Particle Deposition in Deep Bed Filtration*, AIChE J., 1974, 20(3), 889-900
220. Payatakes, A.C., Tien, C., Turian, R.M., *A New Model for Granular Porous Media: Part II. Case Study of the Effect of the Dimensionless Groups and Comparison with Experimental Data*, AIChE J., 1974, 20(3), 900-905
221. Petersen, E.E., *Reaction of Porous Solids*, AIChE J., 1957, 3(4), 1957, 443-448
222. Petersen, E.E., *Diffusion in a Pore of Varying Cross Section*, AIChE J., 1958, 4(3), 343-345
223. Peurrung, L. M., Rashidi, M., Kulp, Th. J., *Measurement of Porous Medium Velocity Fields and their Volumetric Averaging Characteristics using Particle Tracking Velocimetry*, Chem. Eng. Sci., 1995, 50, 2243-2253
224. hgg.: Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P., *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, 2. Edition, Cambridge, 1992
225. Platzer, B., *Massen- und ortsfeste Betrachtungsweisen bei der Reaktormodellierung*, Chem.-Ing.-Tech. 1996, 68, 769-781
226. Powell, M.J., *Computer-Simulated Random Packing of Spheres*, Powder Technology, 1980, 25, 45-52
227. Sonderband: Process Tomography, Chem. Eng. Sci. 1997, 13, 2011-2197
228. Ranz., W.E., *Friction and Transfer Coefficients for Single Particles and Packed Beds*, Chem. Eng. Prog. 1952, 247-253
229. Rao, V.G., Ananth, M.S., Varma, Y.B.G., *Hydrodynamics of Two-Phase Cocurrent Downflow through Packed Beds, Part I. Macroscopic Model*, AIChE J., 1983, 467-473
230. Rao, V.G., Ananth, M.S., Varma, Y.B.G., *Hydrodynamics of Two-Phase Cocurrent Downflow through Packed Beds, Part II. Experiment and Correlations*, AIChE J., 1983, 473-482
231. Rao, V.G., Drinkenburg, A.A.H., *Pressure Drop and Hydrodynamic Properties of Pulses in Two-phase Gas-Liquid Downflow Through Packed Columns*, Can J. Eng Chem, 1983, 61, 158-167
232. Ratycky, B.P., Blunt, M.J., Thiele, M.R., *A 3D Field-Scale Streamline-Based Reservoir Simulator*, SPE Reservoir Engineering, 1997, Nov, 246-254
233. Rege, S.D., Fogler, H.S., *A Network Model for Deep Bed Filtration of Solid Particles and Emulsion Drops*, AIChE J., 1988, 34, 1761-1772
234. Rege, S.D., Fogler, H.S., *Network Model for Straining Dominated Particle Entrapment in Porous Media*, Chem. Eng. Sci., 1987, 42, 1553-1564
235. Reinecke, N., Mewes, D., *Untersuchung der Fluidodynamik in Rieselbettreaktoren mit Hilfe der kapazitiven Tomographie*, Dechema-Arbeitsausschuß, Technische Reaktionen, 35. Sitzung
236. Reinecke, N., Mewes, D., *Investigation of the Two-Phase Flow in Trickle-Bed Reactors using Capacitance Tomography*, Chem. Eng. Sci., 1997, 52, 2111-2127
237. Reinecke, N., Petrisch, G., Schmitz, D., Mewes, D., *Tomographische Meßverfahren - Visualisierung zweiphasiger Strömungsfelder*, Chem.-Ing.-Tech., 1997, 69, 1379-1388
238. Reyes, S.C., Iglesia, E., *Monte Carlo Simulation of Structural Properties of Packed Bed*, Chem. Eng. Sci. 46, 1991, 1089-1099
239. Ridgway, K., Tarbuck, K.J., *Variation of Local Void Fraction in Randomly Packed Beds of Equal Spheres*, J. Pharm. Pharmac., 1966, 18 Sup., 168-175 zitiert in [253] und [240]

240. Ridgway, K., Tarbuck, K.J., *Voidage Fluctuations in Randomly - Packed Beds of Spheres Adjacent to a Containing Wall*, Chem. Eng. Sci., 1968, 23 ,1147-1155
241. Roblee, L.H.S., Baird, R.M., Tierney, J.W., *Radial Porosity Variations in Packed Beds*, AIChE J., 1958, 4, 460-469
242. Rodriguez, J., Allibert, C.H., Chaix, J.M., *A Computer Method for Random Packing of Spheres of Unequal Size*, Powder Tech. 1986, 47, 25-33
243. Rose, H.E., *An Investigation into the Laws of Flow of Fluids through Beds of Granular Materials*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, 1945, 153, 141-148
244. Rottschäfer, K., *Geschwindigkeitsverteilungen in durchströmten Füllkörperschüttungen*, Forschungsberichte VDI, Reihe 3: Verfahrenstechnik, Nr. 464, VDI Verlag, 1997
245. Rowe, P.N., Henwood, G.A., *Drag Forces in a Hydraulic Model of a Fluidized Bed – Part I*, Trans. Inst. Chem. Engrs., 1961, 39, 43-54
246. Rumpf, H., *Mechanische Verfahrenstechnik*, Carl Hanser Verlag, 3. Auflage, München 1975
247. Sabiri, N.-E., Comoiti, J., *Experimental Validation of a Model Allowing Pressure Gradient Determination for non-Newtonian Purely Viscous Fluid-flow through Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1997, 52, 3589-3592
248. Saffman, P.G., *Dispersion in Flow through a Network of Capillaries*, Chem. Eng. Sci. 1959, 11, 125-129
249. Saffman, P.G., *Dispersion Due to Molecular Diffusion and Macroscopic Mixing in Flow through a Network of Capillaries*, Fluid Mech., 1959, 7, 194-208
250. Sahimi, M., Gavalas, G.R., Tsotsis, T.T., *Statistical and Continuum Models of Fluid-Solid Reactions in Porous Media*, Chem. Eng. Sci., 1990, 45(6), 1443-1502
251. Sahimi, M., Hughes, B.D., Scriven, L.E., Davis, H.T., *Dispersion in Flow Through Porous Media: I. One-Phase Flow*, Chem. Eng. Sci., 1986, 41, 2103-2122
252. Sahimi, M., Hughes, B.D., Scriven, L.E., Davis, H.T., *Dispersion in Flow Through Porous Media: II. Two-Phase Flow*, Chem. Eng. Sci., 1986, 41, 2123-2136
253. Schneider, F.A., Rippin, D.W.T., *Determination of the Local Voidage Distribution in Random Packed Beds of Complex Geometry*, Ind. Eng. Chem. Res., 1988, 27, 1936-1941
254. Schneiders, R., *Meshing-Software*,
http://www._users.informatik.rwth-aachen.de/~roberts/software.html
255. Schnitzlein, K., *Alternative Modellierung von Schüttschichtreaktoren für heterogen-katalytische Gasphasenreaktionen*, Dissertation, Erlangen, 1986
256. Schnitzlein, K., *Prediction of Velocity Profiles in Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1993, 48, 811-815
257. Schnitzlein, K., *Anleitung zum Gleichungslöser **Flowsim***, interne Mitteilung
258. Schnitzlein, K., Löwe, A., *Anwendung einer konservativen finiten Volumen-Methode auf Probleme der Chemischen Reaktionstechnik*, Chem.-Ing.-Tech., 1988, 60, 1049-1051
259. Schnitzlein, K., Löwe, A., *Numerical Simulation of The Performance of Ceramic Fiber Coil Diesel Particulate Traps*, Chem. Eng. Sci., 1990, 45, 2671 - 2678
260. Schuster, J., Vortmeyer, D., *Ein Einfaches Verfahren zur näherungsweise Bestimmung der Porosität in Schüttungen als Funktion des Wandabstandes*, Chem.-Ing.-Tech., 1980, 52, 848-849
261. Schwartz, C.E., Smith, J.M., *Flow Distribution in Packed Beds*, Ind. Eng. Chem., 1953, 45, 1209-1218
262. Sederman, A.J., Johns, M.L., Alexander, P., Gladden, L.F., *Structure-Flow Correlations in Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1998, 53, 2117-2128
263. Sederman, A.J., Johns, M.L., Bramley, S., Alexander, P., Gladden, F.L., *Magnetic Resonance Imaging of Liquid Flow and Pore Structure within Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1997, 52, 2239-2250

264. Sedgewick, R., *Algorithmen in C*, Addison-Wesly Publishing Company, 1. Auflage, Bonn, 1992
265. Serpemen, Y., Deckwer, W.D., *Ein Beitrag zur Lösung zweidimensionaler Reaktormodelle*, Chem.-Ing.-Tech., 1975, 23, 993
266. Sharma, M.M., Yortsos, Y.C., *Transport of Particulate Suspensions in Porous Media: Model Formulation*, AIChE J., 1987, 33(10), 1636-1643
267. Shimada, K., *Anisotropic Triangular Meshing of Parametric Surfaces via Close Packing of Ellipsoidal Bubbles*, Proceedings, 6th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, 1997, 375-390
268. Singh B.P., Kaviany, M., *Modelling Radiative Heat Transfer in Packed Beds*, Int. J. Heat. Transfer, 1992, 35(6), 1397-1405
269. Slattery, J.C., *Single-Phase Flow through Porous Media*, AIChE J., 1969, 15(9), 886-872
270. Sohn, H.Y., Szekely, J., *A Structural Model for Gas Solid Reactions with a Moving Boundary III*, Chem. Eng. Sci., 1972, 27, 763-778
271. Sonntag, G., *Einfluß des Lückenvolumens auf den Druckverlust in gasdurchströmten Füllkörpersäulen*, Chem.-Ing.-Tech., 1960, 32, 317-329
272. Sorbie, K.S., Clifford, P.J., *The Inclusion of Molecular Diffusion Effects in the Network Modelling of Hydrodynamic Dispersion in Porous Media*. Chem. Eng. Sci., 1991, 46, 2525-2542
273. Sotirchos, S.V., *On a Class of Random Pore and Grain Models for gas-solid Reactions*, Chem. Eng. Sci., 1987, 42(5) 1262-1265
274. Sotirchos, S.V., Burganos, V.N., *Analysis of Multicomponent Diffusion in Pore Networks*, AIChE J., 1988, 34(7), 1106-1119
275. Spedding, P.L., Spencer, R.M., *Simulation of Packing Density and Liquid Flow in Fixed Beds*, Computers Chem. Eng., 1995, 19, 43-73
276. Spedding, P.L., Spencer, R.M., *Simulation of Packing Density and Liquid Flow Fixed Beds - II. Voronoi Polyhedra Studies*, Computers Chem. Sci., 1998, 53, 247-257
277. Stanek, V., *Fixed Bed Operations - Flow Distribution and Efficiency*, Ellis Horwood Limited, New York, 1994
278. Stanek, V., Eckert, V., *A Study of the Area Porosity Profiles in a Bed of Equal-Diameter Spheres Confined by a Plane*, Chem. Eng. Sci., 1979, 34, 933-940
279. Stephan, R., *Untersuchung zur Modellierung der hydrierenden Entschwefelung von Erdölfraktionen in Rieselfraktoren*, Dissertation, Erlangen 1986
280. Stephenson, J.I., Stewart, W.E., *Optical Measurements of Porosity and Fluid Motion in Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1986, 41, 2161-2170
281. Stroh, F., Balakotaiah, V., *Flow Maldistributions in Packed Beds: Effect of Reactant Consumption*, Chem. Eng. Sci., 1993, 48(9), 1629-1640
282. Subagyo H., Standish, N., Brooks, G.A., *A New Model of Velocity Distribution of a Single-Phase Fluid Flowing in Packed Beds* Chem. Eng. Sci., 1998, 53, 1375-1385
283. Sundaresan, S., Amundson, N.R., Aris, R., *Observation on fixed-bed dispersion models: The role of the interstitial fluid*, AIChE J. 1980, 26, 529 ff
284. Szekely, J., Evans, J.W., *A Structural Model for Gas Solid Reactions with a Moving Boundary I*, Chem. Eng. Sci., 1970, 25, 1091-1107
285. Szekely, J., Evans, J.W., *A Structural Model for Gas Solid Reactions with a Moving Boundary II*, Chem. Eng. Sci., 1971, 26, 1901-1913
286. Szekely, J., Propster, M., *A Structural Model for Gas Solid Reactions with a Moving Boundary VI*, Chem. Eng. Sci., 1975, 30, 1049-1055
287. Thadani, M.C., Peebles, F.N., *Variation of Local Void Fraction in Randomly Packed Beds of Equal Spheres*, Ind Eng Chem Proc Des & Dev, 1966 5, 265-268
288. Thompson, K., Fogler, K., Scott, H., *Modeling Flow in Disordered Packed Beds from Pore-Scale Fluid Mechanics*, AIChE J, 1997, 43, 1337-1389

289. Tory, E.M., Church, B.H., Tam, M.K., Ratner, M., *Variation of Local Void Fraction in Randomly Packed Beds of Equal Spheres*, Can. J. Chem. Eng., 1988, 51, 15-31
290. Tsotsas, E., Schlünder, E.U., *Some Remarks on Channeling and on Radial Dispersion in Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1998, 43(5), 1200-1203
291. *Ullmann's Enzyklopädie der Technischen Chemie*, 4. Auflage, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 1990
292. Vafai, K., Sozen, M., *Analysis of Energy and Momentum Transport for Fluid Flow through a Porous Bed*, Transactions of the AMSE: Journal of Heat Transfer, 1990, 112, 690-699
293. Van der Merwe, D.F., Gauvin, W.H., *Velocity and Turbulence Measurements of Air Flow through a Packed Bed*, AIChE J., 1971, 17, 519-529
294. Vauck, W.R.A., Müller, H.A., *Grundoperationen der Verfahrenstechnik*, 9. Auflage, Leipzig, 1992
295. Visscher, W.M., Bolsterli, M., *Random Packings of Equal and Unequal Spheres in Two or Three Dimensions*, Nature, 1972, 239, 504-507
296. Vortmeyer, D., *Packed Bed Thermal Dispersion Models and Consistent Sets of Coefficients*, Chem. Eng. Process, 1989, 26, 263-268
297. Vortmeyer, D., Haidegger, E., *Discrimination of Three Approaches to Evaluate Heat Fluxes for Wall-Cooled Fixed Bed Chemical Reactors*, Chem. Eng. Sci., 1991, 46, 2651-2660
298. Vortmeyer, D., Schuster, J., *Evaluation of Steady Flow Profiles in Rectangular and Circular Packed Beds by Variational Method*, Chem. Eng. Sci., 1981, 38, 1691-1699
299. Vortmeyer, D., Winter, R. P., *Impact of Porosity and Velocity Distribution on the Theoretical Prediction of Fixed-Bed Chemical Reactor Performance - Comparison with Experimental Data*, ACS Symp. Ser., 196, 1983, 49-61 zitiert in [253]
300. Vortmeyer, D., Winter, R.P., *On the Validity Limits of Packed Bed Reactor Continuum Models with Respect to Tube to Particle Diameter Ratio*, Chem. Eng. Sci., 1984, 39, 1430-1432
301. Wakao, N., Funazkri, T., *Effect of Fluid Dispersion Coefficients on Particle-to-Fluid Mass Transfer Coefficients in Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1978, 33, 1375-1384
302. Weissermel, K., Arpe, H.-J., *Industrielle organische Chemie*, VCH Verlag, 3. Auflage, Weinheim, 1988
303. Wen, C.T., Fan, *Models for Flow System and Chemical Reactors*, 1. Auflage, Macel Dekker, New York, 1975 zitiert in [105]
304. Wenfei, Z., Xiajiang, L., *Semi-Analytic Axisymmetric Pressure Distribution in a Consolidating Porous Medium*, Transp. in Porous Media, 1997, 29, 179-189
305. Whitaker, S., *Diffusion and Dispersion in Porous Media*, AIChE J., 1967, 13(3), 420-427
306. Wicke, E., *Physical Processes in Chemical Reactor Engineering*, Advances in Chemistry Series, 1955, 148, 75 - 97
307. Wijngaarden, R.J., Westerterp, K. R., *A Heterogeneous Model for Heat Transfer in Packed Beds*, Chem. Eng. Sci., 1993, 48(7), 1273-1280
308. Wilhelm, R.H., *Progress towards the A Priori Design of Chemical Reactors*, Pure Appl. Chem., 403-421
309. Willenborg, K., *Prädiktion der Strömungsverhältnisse im Filterkanal bei Keramik- Wickelfiltern und Vergleich mit Messungen*, Studienarbeit, TU Braunschweig, Inst. f. Technische Chemie, 1992
310. Wright, D.E., Proc. Am. Soc. Civ. Eng., J. Hydraul. Div., 1968, 4, 851-872, zitiert in [314]
311. Yortsos, Y.C., Sharma, M., *Application of Percolation Theory to Noncatalytic Gas-Solid Reactions*, AIChE J. 1986, 32(1), 46-55
312. Zimmer, M.M., *Untersuchung des Strömungsfeldes am Dieselpartikelfilter mit Hilfe der Heißfilmanemometrie*, Vertiefungspraktikum, TU Braunschweig, Inst. f. Technische Chemie, 1991 zitiert in [309]

313. Zimmerman, S.P., Chu, C.F., Ng, K.M., *Axial and Radial Dispersion in Trickle-Bed Reactors with Trickling Gas-Liquid Down-Flow*, Chem. Eng. Comm. 19987, 50, 213-240
314. Ziolkowska, I., Ziolkowski, D., *Fluid Flow inside Packed Beds*, Chem Eng Proc, 1988, 23, 137-164
315. Ziolkowska, I., Ziolkowski, D., *Modeling of Gas interstitial Velocity Radial Distribution over a Cross-Section of a Tube Packed with Granular Catalyst Bed*, Chem. Eng. Sci., 1993, 48(18), 3282-3292
316. Zou, R.P., Yu, A.B., *The Packing of Spheres in a Cylindrical Container: The Thickness Effect*, Chem. Eng. Sci., 1994, 50, 1504-1507
317. Zygourakis, K., Sandmann, C.W., *Discrete Structural Models and Their Applications to Gas-Solid Reacting Systems*, AIChE J., 1988, 34, 2030-2040

10.5 Programmverzeichnis

del-tree	Autor: O. Devillers [84] Version: - Verwendung: Delaunay-Triangulation
Deskscan	Hersteller: Hewlett-Packard Ltd. Version: - Verwendung: Software zum HP-Scanner
detri	Autor: Ernst Mucke [195] Version: 2.2 Verwendung: Delaunay-Triangulation
dwall	Autoren: P. Cignoni, C. Montani und R. Scopigno [64] Version: 1992 Verwendung: Delaunay-Triangulation
flowsim	Autor: Klaus Schnitzlein [257] Version: 2 Verwendung: Gleichungslöser für Kontinuumsmodelle
gcc	Autor: GNU.org Version: z.Z. 2.8.1 Verwendung: C-Compiler Herkunft: http://www.gnu.org
Geompack	Autor: B. Joe [150] Version: - Verwendung: Delaunay-Triangulation Herkunft: http://www.netlib.org
gnuplot	Autoren: Thomas Williams, Colin Kelley u.v.m. Version: 3.6pre Verwendung: Darstellung und Aufbereitung von Meßdaten Herkunft: ftp.gwdg.de

NIH Image	Autoren: - Version: 1.47 Verwendung: Bildauswertungssoftware, LS Mechanische Verfahrenstechnik, BTU Cottbus
plotmtv	Autoren: K.K.H. Toh, Visualisation Working Group, TCAD Department, Intel Corp. Version: 1.4.2 Verwendung: Darstellung von zwei- und dreidimensionalen Daten
PovRay	Autoren: Christopher J. Cason. PovRay-Team Version: 3.0.2 Verwendung: Raytracing Herkunft: ftp.tu-cottbus.de
qhull	Autoren: C. B. Barber, H. Huhdanpaa [13] Version: 2.5 Verwendung: Delaunay-Triangulation
Rayshade	Autor: C.E. Kolb Version: 0.4 Verwendung: Raytracing
vfsr	Autoren: L. Ingber, B. Rosen [144] Version: - Verwendung: Optimierungsroutine Herkunft: http://www.netlib.org (z.Z. wird nur noch der Nachfolger ASA unterstützt)
xmgr	Autoren: Paul J. Turner (bis. Vers. 3.10) ACE/gr Development Team Version: 4.1.2 Verwendung: Darstellung von zweidimensionalen Daten

Computergenerierte Kugelschüttungen in zylindrischen Rohren als Basis für eine differenzierte Modellierung von Festbettreaktoren

In dieser Arbeit wird der Weg zu einem ab-initio Modell für gasdurchströmte Schüttungsschichtreaktoren dargestellt. Diese Reaktoren zeichnen sich durch eine komplexe Struktur ihres Festbetts aus. Diese Struktur bestimmt die Durchströmung sowie das Vermischungsverhalten dieses Reaktortyps und beeinflusst so auch die chemische Reaktion. Um die Wechselwirkung auf das radiale Vermischungsverhalten von Reaktoren und deren Schüttung zu untersuchen, wurde ein Gesamtmodell geschaffen, das ausgehend von einer Simulation der Schüttung die Durchströmung beschreibt. Aufbauend auf der Schüttungssimulation wird die Strömung in einem zweidimensionalen Kontinuumsmodell und einem diskreten Modell beschrieben und mit Messungen verglichen.

Dem Autor ist es gelungen, mit dem in dieser Arbeit dargestellten Gesamtmodell, das radiale Dispersionsverhalten eines Festbettreaktors nachzuvollziehen, ohne effektive Parameter dafür zu nutzen. Dieser Vorteil gegenüber den bestehenden Ansätzen entsteht aus der Kopplung der Schüttungsmodelle mit den Strömungsmodellen zu einem Gesamtmodell. Bedingt durch den dreidimensionalen Ansatz liefert das diskrete Modell eine realitätsnähere Beschreibung der radialen Dispersion, während das zweidimensionale Kontinuumsmodell einen größeren Detailreichtum bei der Beschreibung der radialen Strömungsprofile zuläßt.

Ein wesentliches Element des Gesamtmodells ist das Schüttungsmodell, ohne dessen gute Übereinstimmung mit lockeren Kugelschüttungen die darauf aufbauenden Simulationsschritte nicht möglich wären. Diese gute Kongruenz konnte gegenüber anderen in der Literatur dargestellten Schüttungsmodellen gerade im Randbereich erreicht werden. Eine richtige Beschreibung dieses Bereichs ist notwendig, um Effekte wie Bypassing zu erfassen. Auch bewirkt eine nicht-realitätsnahe Beschreibung dieses Bereichs eine zu geringe Strömung im Kern der Schüttung.

Beide Strömungsmodelle des Gesamtmodells zeigen, daß der in dieser Arbeit verwendete Ansatz der Kopplung von Schüttungs- und Strömungsmodell ein Schritt auf dem Weg zu einem ab-initio Modell sein kann. So gelingt es durch die detaillierte Schüttungsstruktur, den effektiven Parameter der radialen Dispersion zu eliminieren, so daß entsprechende Messungen bzw. Abschätzungen für die Simulation eines Reaktors nicht mehr notwendig sind. Dies gilt insbesondere für den Bereich großer Durchmesserhältnisse von Kugel- zu Reaktordurchmesser, in dem die Abschätzungen, wie sie in der Literatur genutzt werden, nicht mehr validiert sind.

Computer-Generated Randomly Packed Cylindrical Beds of Equal Spheres as Basis for a Differentiated Modelling of Fixed Bed Reactors

In this work an ab-initio model for the gas flow through packed reactors is discussed. These reactors are characterized by a complex structure of their fixed bed. This structure determines fluid-flow as well as the mixture behaviour of this type of reactor and affects therefore the chemical reaction. In order to examine the interaction between the radial dispersion and the packed bed structure, an universal model was created, which is able to simulate the gas flow within the reactor on the base of the packed bed structure. The universal model is based on a packed bed simulation. The gas flow through the model, simulated by a two-dimensional continuums model and a discrete model, was compared with measurements.

By using the universal model, that is shown in this work, the author succeeded in reconstructing the radial dispersion behaviour in a fixed bed reactor without using effective parameters for it. This advantage in comparison with approaches is the effect of coupling of the packed bed models with the flow models to a universal model. Due to the three-dimensional description of reactors the discrete model supplies a closer-to-reality description of the radial dispersion, while the two-dimensional continuum model describes the radial flow profiles more detailed.

A substantial element of the universal model is the packed bed simulation. This simulation fits the properties of loose packed beds. So it is a good base for the second simulation step. In contrast to other packed bed models described in literature, this good congruence could be achieved in the boundary region. A correct description of this range is necessary, in order to gather effects such as bypassing. A second effect of a non-close-to-reality description of the boundary region is to cause a too small flow in the core of pouring.

Both flow models of the universal model show that the approach of the coupling of a packed bed and a flow model, used in this work, can be a step on the way to an ab-initio model. The detailed packed bed from the packed bed model can be used for simulating the radial mixture behaviour with out the effective parameter of the radial dispersion. This means that appropriate measurements respectively estimations are no longer necessary for the simulation of packed reactors. Therefore the universal model can be used in the range of large diameter rates from spheres to the tube of the packed bed, where estimations known from the literature are not valid any more.