


CFD-Simulation einer generischen Reaktion in einem gerührten Behälter

Thomas Kleiner^{1,*}, Michael Gottanka², Alexander Stary¹, Sebastian Rehfeldt¹, Evangelos Bertakis² und Harald Klein¹

DOI: 10.1002/cite.201900188

 This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution License, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Gerührte Behälter werden in der chemischen Verfahrenstechnik weitreichend eingesetzt, weshalb es sehr viele unterschiedliche Designs gibt. Für ihre Untersuchung wird daher vermehrt die numerische Strömungsmechanik eingesetzt, wobei bislang hauptsächlich die Strömung im Fokus stand. Innerhalb dieser Arbeit wird eine generische chemische Reaktion in einem gerührten Behälter simuliert und die Temperierung des Reaktors mittels numerischer Strömungsmechanik betrachtet. Mithilfe der Simulation lassen sich designkritische Aspekte ableiten und eine reaktionsspezifische Optimierung des gerührten Behälters durchführen.

Schlagwörter: Chemische Reaktionen, Computational Fluid Dynamics, Gerührte Behälter, Reaktorsimulationen, Wärmetransport

Eingegangen: 19. Dezember 2019; *revidiert:* 27. März 2020; *akzeptiert:* 08. Mai 2020

CFD Simulation of a Generic Reaction in a Stirred Tank

Stirred tanks are widely used in chemical engineering, which is why there is a large variety of different designs. Numerical fluid dynamics is therefore often used in stirred tank studies that focus on flow behavior. In this work, a generic reaction in a stirred tank is simulated using computational fluid dynamics and the temperature control of the reactor is investigated. Design-critical aspects are derived from the simulation. In addition, the simulation approach is very well suited for a reaction-specific optimization of a stirred tank.

Keywords: Chemical reactions, Computational fluid dynamics, Heat transfer, Reactor simulations, Stirred tanks

1 Einleitung

Gerührte Behälter gehören zu den Standardapparaten in der chemischen Verfahrenstechnik. Aufgrund des weitreichenden Einsatzgebietes gerührter Behälter gibt es eine sehr große Auswahl an unterschiedlichen Ausführungen [1]. Bislang waren die Möglichkeiten bei der Auslegung gerührter Behälter durch die Verwendung von empirischen Korrelationen sehr eingeschränkt [2]. Neben den Behälterabmessungen spielt die richtige Auswahl und optimale Dimensionierung des Rührorgans eine zentrale Rolle. Es wird so gewählt, dass eine möglichst gute Durchmischung im Behälter bei möglichst niedrigem Leistungseintrag des Rührorgans ins Rührmedium vorliegt. Zusätzlich gibt es unterschiedliche Varianten für die Wärmeabfuhr [3]. Oldshue und Gretton [4] haben hierfür bspw. einen Rührkessel mit Kühl- und Heizschlangen entworfen, um damit experimentell den Wärmeübergang ihres gerührten Behälters im stationären Zustand zu betrachten.

Wegen der großen Vielfalt an möglichen Designs bieten sich Untersuchungen mittels numerischer Strömungsmechanik (*computational fluid dynamics*, CFD) an [2]. Bedingt durch steigende Rechenleistungen und einer damit verbundenen steigenden Genauigkeit der Simulationen wird CFD mittlerweile vermehrt in der Reaktionstechnik eingesetzt.

Eine Herausforderung der Simulation ist die Berücksichtigung der Relativbewegung zwischen dem rotierenden Rührer und dem statischen Behälter. Dabei können zwei

¹Thomas Kleiner, Alexander Stary, Dr.-Ing. Sebastian Rehfeldt, Prof. Dr.-Ing. Harald Klein
Thomas.Kleiner@tum.de

Technische Universität München, Fakultät für Maschinenwesen, Lehrstuhl für Anlagen- und Prozesstechnik, Boltzmannstraße 15, 85748 Garching, Deutschland.

²Michael Gottanka, Dr.-Ing. Evangelos Bertakis
Wacker Chemie AG, Johann-Hess-Straße 24, 84489 Burghausen, Deutschland.

grundlegende Simulationsansätze unterschieden werden: der SG (*sliding grid*)-Ansatz und der FR (*frozen rotor*)-Ansatz [5]. Bei beiden Ansätzen wird die Simulationsdomäne in zwei unterschiedliche Regionen aufgeteilt, wobei eine Region den Rührer umschließt.

Bei dem SG-Ansatz wird das Netz der Region, in welcher der Rührer abgebildet wird, zur anderen Region gedreht. Dieser Ansatz setzt eine transiente Simulation voraus und ermöglicht eine detaillierte Untersuchung der transienten Strömung, jedoch mit sehr großem Rechenaufwand.

Der FR-Ansatz approximiert die Rotation des Rührers mit einer stationären Lösung auf einem stationären Gitter. Folglich wird die Strömung für eine Momentaufnahme des Rotors berechnet und setzt voraus, dass keine merkbare Abhängigkeit der betrachteten Zielgrößen von der Rotorposition vorhanden ist. Bei diesem Ansatz hat sich das MRF (*multiple reference frame*)-Modell von Luo et al. [6] etabliert, bei dem das Fluid im Bereich des Rotors durch eine aufgeprägte Kraft beschleunigt wird. Die Simulationsergebnisse weisen eine hohe Genauigkeit bei niedrigen Rechenzeiten auf [7], die um eine Größenordnung kleiner sind als die des SG-Ansatzes.

Neben der Wahl des Simulationsansatzes spielt das Turbulenzmodell eine wichtige Rolle. Eine detaillierte Literaturrecherche zu den einzelnen Turbulenzmodellen ist in Singh et al. [2] und Murthy und Josh [8] gegeben.

Insgesamt gibt es viele detaillierte Untersuchungen der Strömung in gerührten Behältern mittels CFD und wenige Untersuchungen von deren Temperierung [9]. Roudsari et al. [10] betrachten die Polymerisierung von Methacrylsäuremethylester in einem kontinuierlich durchströmten Rührkesselreaktor (*continuous stirred tank reactor*, CSTR) mit Mantelkühlung und einem Impellerrührer unter Verwendung des MRF-Modells. Rudniak et al. [11] simulieren das instabile Verhalten eines CSTRs mit einem Impellerrührer unter Verwendung des SG-Ansatzes.

Innerhalb dieser Arbeit soll untersucht werden, ob es möglich ist, den stationären Zustand einer stark exothermen chemischen Reaktion in einem gerührten Behälter zu simulieren, um damit Rückschlüsse für ein optimiertes Reaktordesign ziehen zu können. Als Rührwerk wird ein Scheibenrührer verwendet und zur Kühlung des Behälters werden Rohrschlangen eingesetzt. Damit dieses Vorgehen industriell relevant ist, soll die Simulation bei überschaubaren Rechenzeiten realisierbar sein, weswegen das MRF-Modell in Kombination mit einem RANS (*Reynolds averaged Navier-Stokes*)-Turbulenzmodell verwendet wird.

2 Mathematische Formulierung

Innerhalb des gerührten Behälters soll eine generische chemische Reaktion der Form $A + B \rightarrow C$ abgebildet werden, bei der die Reaktionsgeschwindigkeit deutlich höher als die Stofftransportgeschwindigkeit sein soll. Zusätzlich wird angenommen, dass die chemische Reaktion die Strömung

selbst nicht beeinflusst und lediglich Auswirkungen auf die sich einstellende Temperaturverteilung hat.

Zur Abbildung der chemischen Reaktion mit den genannten Annahmen werden zuerst die Transportgleichungen einer turbulenten, inkompressiblen Einphasenströmung im Rührkessel gelöst. Anschließend werden die Transportgleichungen der Konzentrationen und des Wärmetransports gelöst.

Für die Simulation der Einphasenströmung wird das MRF-Modell nach Luo et al. [6] verwendet. Für die Berechnung der Turbulenz wird das $k-\omega$ -SST-Modell [12] verwendet. Die folgenden Erhaltungsgleichungen (Gln. (1) und (2)) werden gelöst, wobei es sich bei den Erhaltungsgrößen um zeitlich gemittelte Werte handelt und die Reynoldsspannung über die turbulente kinematische Viskosität ν_t berücksichtigt wird.

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \nabla \cdot [(\nu + \nu_t) \nabla \mathbf{u}] - \nabla p + \mathbf{f} \quad (2)$$

Die Kraft \mathbf{f} ist wie folgt definiert und beinhaltet die Corioliskraft und die Zentrifugalkraft. Diese ergeben sich aus der Winkelgeschwindigkeit Ω und des Positionsvektors \mathbf{r} .

$$\mathbf{f} = 2 (\Omega \times \mathbf{u}) - (\Omega \times (\Omega \times \mathbf{r})) \quad (3)$$

Zur Lösung der Kopplung zwischen Druck und Geschwindigkeit wird der SIMPLE (*semi-implicit method for pressure-linked equations*)-Algorithmus verwendet [13].

Für die Eduktkonzentrationen der Komponenten A und B wird jeweils die folgende Transportgleichung, die für das Edukt A angegeben ist, gelöst. Zusätzlich wird die Schmidt-Zahl Sc_A der jeweiligen Komponente und die turbulente Schmidt-Zahl $Sc_t = 0,9$ eingeführt.

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}c_A) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\nu}{Sc_A} + \frac{\nu_t}{Sc_t} \right) \nabla c_A \right] - \dot{n}_R \quad (4)$$

Die Konzentrationsänderung durch die Reaktion wird über den Quellterm \dot{n}_R berücksichtigt. Es wird angenommen, dass wenn die beiden Edukte A und B zusammen in einer Zelle vorliegen, diese vollständig im stöchiometrischen Verhältnis miteinander reagieren. Somit ergibt sich der Quellterm nach Gl. (5). Bei diesem Ansatz wird angenommen, dass die Mikrovermischung [14] bei einer netzunabhängigen Lösung keinen merklichen Einfluss auf den Zielparameter hat.

$$\dot{n}_R = \begin{cases} \frac{c_A}{\Delta t} & \text{für } c_A < c_B \\ \frac{c_B}{\Delta t} & \text{für } c_B < c_A \end{cases} \quad (5)$$

Bei der Transportgleichung der Produktkonzentration c_C wird der Quellterm \dot{n}_R für die chemische Reaktion mit einem positiven Vorzeichen berücksichtigt. Die Produktkonzentration c_C wird in dieser Arbeit jedoch nicht näher betrachtet.

Zusätzlich zur Verteilung der Komponenten im Reaktor wird die abgeführte Wärme betrachtet. Es wird folgende Energiebilanz unter Zuhilfenahme der Prandtl-Zahl Pr und der turbulenten Prandtl-Zahl $Pr_t = 0,9$ unter Berücksichtigung der frei werdenden Energien \dot{q}_R aufgrund der Reaktionsenthalpie und \dot{q}_D bedingt durch Wärmedissipation gelöst.

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}c_p T) = \nabla \cdot \left[c_p \left(\frac{\nu}{Pr} + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \nabla T \right] + \frac{1}{\rho} (\dot{q}_R + \dot{q}_D) \quad (6)$$

Die Reaktionsenthalpie ΔH_R wird im Quellterm \dot{q}_R berücksichtigt, der nach Gl. (7) berechnet wird.

$$\dot{q}_R = -\dot{n}_R \Delta H_R \quad (7)$$

Der Energieeintrag durch Dissipation \dot{q}_D wird nach Kleiner et al. [15] wie folgt berücksichtigt.

$$\dot{q}_D = [(\nu + \nu_t) \nabla \mathbf{u}] : \nabla \mathbf{u} \quad (8)$$

3 Validierung

Zur Validierung des verwendeten Turbulenz- und MRF-Modells werden Wärmeübergangssimulationen analog zu der Arbeit von Prada und Nunhez [3] an dem gerührten Behälter von Oldshue und Gretton [4] durchgeführt. Hierfür wird der Wärmeübergang mit den experimentellen Daten von Oldshue und Gretton [4], die aus der Veröffentlichung von Prada und Nunhez [3] entnommen wurden, verglichen. Zusätzlich wird über das auf den Rührer wirkende Moment die Rührerleistung aus den Simulationen bestimmt und mit korrigierten, experimentellen Rührerleistungen von Bates et al. [16] verglichen. Die Newton-Zahlen von Bates et al. [16] werden, bedingt durch die zusätzlichen Rohrschlangen im Reaktoraufbau von Oldshue und Gretton [4], für den Vergleich mit den Simulationsergebnissen korrigiert. Dazu werden die Werte von Bates et al. [16] mit dem Faktor 1,04 multipliziert.

Der Aufbau und die Abmessungen des gerührten Behälters sind in Abb. 1 gegeben. Im betrachteten Behälter sind vier Stromstörer eingebaut. Als Rührer wird ein Scheibenrührer mit sechs senkrecht stehenden Rührblättern verwendet. Bei den Experimenten von Oldshue und Gretton [4] werden zur Temperierung des Behälters eine Heiz- und eine Kühlschlange verwendet, die mit jeweils fünf heizenden und kühlenden Ringen in der Simulation abgebildet werden. Diese haben denselben Abstand zueinander und sind abwechselnd angeordnet. Die Kühlschlangen sind in Abb. 1 durch die karierten, die Heizschlangen durch die leeren Kreisquerschnitte dargestellt. Die Stoffdaten und relevanten Parameter für die Validierungssimulationen sind in Tab. 1 gegeben. Simuliert wurden Wasser, ein niedrig- und ein hochviskoses Öl.

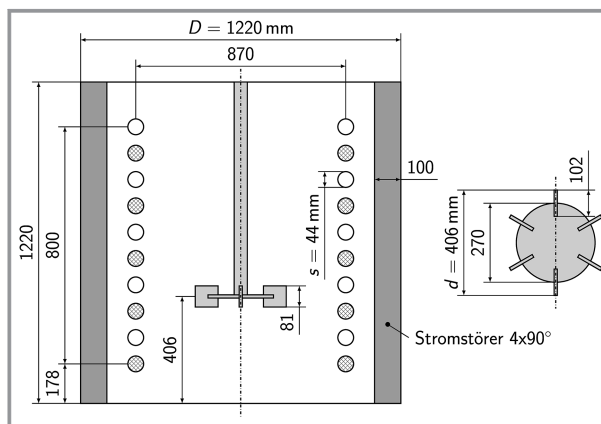


Abbildung 1. Abmessungen des betrachteten gerührten Behälters.

Tabelle 1. Relevante Parameter für die Validierungssimulationen.

Parameter	Wasser	Niedrigviskoses Öl	Hochviskoses Öl
Kinematische Viskosität ν [m ² s ⁻²]	$3,69 \cdot 10^{-7}$	$5,78 \cdot 10^{-5}$	$4,68 \cdot 10^{-4}$
Dichte ρ [kg m ⁻³]	977	848	877
Wärmekapazität c_p [kJ kg ⁻¹ K ⁻¹]	4,19	2,12	1,97
Wärmeleitfähigkeit λ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	0,665	0,125	0,127
Prandtl-Zahl Pr [-]	2,32	835	6330
Wärmestromdichte \dot{q}_h [kW m ⁻²]	80	20	10
Kühltemperatur T_k [K]	331,82	321,30	279,71

Zur Vernetzung der Simulationsdomäne wird ANSYS Meshing verwendet. Die Simulationsdomäne umfasst den Raum im Rührkessel, der vom Fluid eingenommen wird. Das Netz besteht hauptsächlich aus Tetraedern, die in wandnahen Regionen verfeinert werden. Für eine zusätzliche Verfeinerung werden Prismenschichten zu den Wänden hin eingesetzt, die abhängig von der gewünschten Auflösung der Grenzschichtströmung (y^+ -Wert) angepasst werden können. An den Wänden wird Haftbedingung angenommen und die Oberseite des Rührkessels wird als freie Oberfläche simuliert, wofür eine *Slip*-Randbedingung verwendet wird. Diese setzt lediglich die Geschwindigkeit normal zur Oberfläche auf null.

Für die Netzunabhängigkeit der Wärmeübergangssimulationen ist die Auflösung zu den Kühl- bzw. Heizschlangen am relevantesten, weshalb deren Wandregionen am feinsten aufgelöst werden. Die kleinste Zelldicke dieser Prismenschicht beträgt für die netzunabhängige Lösung 1,5 μ m.

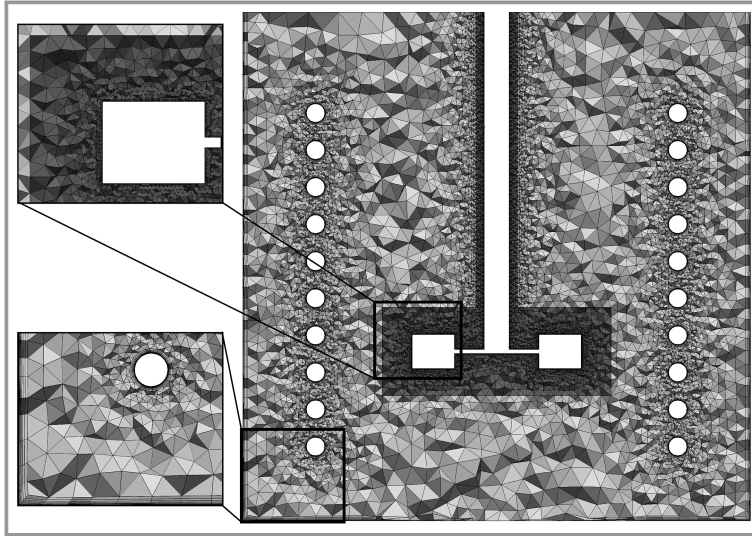


Abbildung 2. Aufbau des Rechengebietes.

Insgesamt besteht das Netz aus 5,6 Millionen Zellen. Der Aufbau des Rechengebietes für Netzunabhängigkeit ist in Abb. 2 dargestellt. Der MRF-Bereich, in dem die Zentrifugal- und Corioliskraft wirken, ist in dunkelgrau dargestellt.

Für die Validierungssimulationen wird dem System über die Randbedingung der Heizschlangen eine konstante Wärmestromdichte \dot{q}_h zugeführt, die durch eine konstante Wandtemperatur T_k der Kühlschlangen als Randbedingung abgeführt wird. Die Außenwände des Reaktors werden als adiabatisch angenommen. Der Wärmeübergangskoeffizient α wird nach Gl. (9) bestimmt, wobei die Bulktemperatur T_{bulk} der mittleren Reaktortemperatur entspricht.

$$\alpha = \frac{\dot{q}_h}{T_{\text{bulk}} - T_k} \quad (9)$$

Zusätzlich wird zur Validierung des Simulationsaufbaus die Newton-Zahl Ne mit den korrigierten Messwerten von Bates et al. [16] verglichen. Die Rührerleistung P ergibt sich nach Gl. (10).

$$P = (M_p + M_t) \cdot \Omega \quad (10)$$

Zur Bestimmung der Rührerleistung werden die auf den Rührer wirkenden Momente M_p der Normalkräfte und M_t der Tangentialkräfte verwendet.

Die Abhängigkeit der Newton-Zahl Ne von der Reynolds-Zahl Re für die Simulationsergebnisse und die korrigierten Messwerte von Bates et al. [16] ist in Abb. 3 gegeben. Die Newton-Zahl und die Reynolds-Zahl ergeben sich aus der Rührerdrehzahl N und sind wie folgt definiert.

$$Ne = \frac{P}{d^5 N^3 \rho} \quad (11)$$

$$Re = \frac{d^2 N}{\nu} \quad (12)$$

Wie anhand von Abb. 3 ersichtlich ist, steigt die Newton-Zahl mit der Reynolds-Zahl für die Messwerte und die Simulationen kontinuierlich an. Die Simulationsergebnisse stimmen mit den Messwerten mit einer Genauigkeit von 10 % überein.

Die Genauigkeit des simulierten Wärmeübergangs wird anhand der Nußelt-Zahl Nu betrachtet.

$$Nu = \frac{\alpha D}{\lambda} \quad (13)$$

In Abb. 4 wird die Abhängigkeit der auf geometrische Größen des gerührten Behälters bezogenen Nußelt-Zahl von der Reynolds-Zahl betrachtet. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den simulierten Nußelt-Zahlen

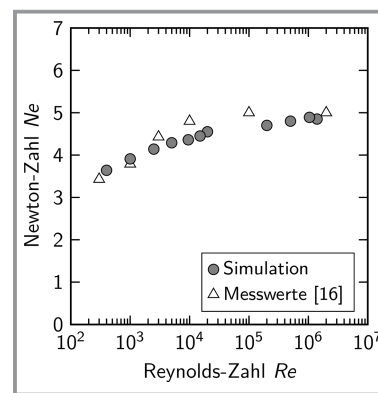


Abbildung 3. Validierung der simulierten Newton-Zahl.

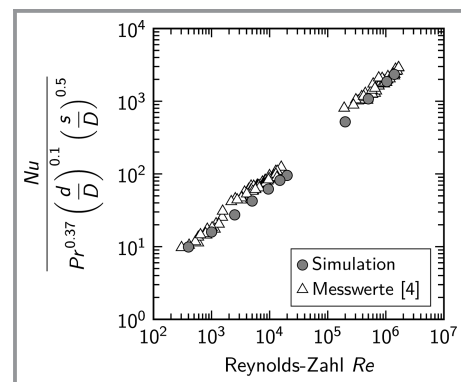


Abbildung 4. Abhängigkeit der auf geometrische Größen des gerührten Behälters bezogenen Nußelt-Zahl von der Reynolds-Zahl.

und den Messwerten von Oldshue und Gretton [4] erkennbar. Die simulierten Nußelt-Zahlen liegen immer geringfügig unterhalb der Messwerte, womit der Simulationsansatz

im gesamten Bereich konservative Ergebnisse hinsichtlich des Wärmeübergangs liefert.

Bedingt durch die gute Übereinstimmung zwischen den Messwerten und den Simulationsergebnissen kann die Simulation zur Vorhersage der Rührerleistung und des sich ergebenden Wärmeübergangs verwendet werden.

4 Winkelvariation der Rührblätter des Scheibenrührers

Zur weiterführenden Betrachtung des gerührten Behälters wird eine generische exotherme Reaktion ($\Delta H_R = -100 \text{ kJ mol}^{-1}$) der Form $A + B \rightarrow C$ in einem CSTR für hochviskoses Öl simuliert. Hierfür wird die Simulationsdomäne mit zwei Einlässen am oberen Simulationsrand und einem Auslass am unteren Simulationsrand erweitert. Die Positionen der Ein- und Auslässe der Simulationsdomäne werden in Abb. 5 gezeigt. Zur Veranschaulichung werden der betrachtete Behälter und die Rohrschlangen entlang der xz -Ebene geschnitten. Die Ein- und Auslässe sind die jeweils schwarz umrandeten Flächen.

Die Einlaufgeschwindigkeit der beiden Einlässe wird jeweils auf $u_{\text{ein}} = 0,1 \text{ m s}^{-1}$ mit einer konstanten Einlauftemperatur von $T_{\text{ein}} = 280 \text{ K}$ gesetzt. Die Komponente A wird durch den linken und die Komponente B durch den rechten Einlass in Abb. 5 eingeleitet. Die durch die Reaktion im Behälter freigesetzte Wärme wird über die Rohrschlangen abgeführt. Die Wände der Rohrschlangen haben eine konstante Kühltemperatur von $T_k = 280 \text{ K}$.

Zunächst wird der Einfluss des Anstellwinkels der Rührblätter des Scheibenrührers auf die Rührerleistung und den Wärmeübergang betrachtet. Es wird eine konstante Drehzahl des Rührers von $2,8 \text{ s}^{-1}$ und eine konstante Zeitschrittweite von $\Delta t = 1 \text{ s}$ verwendet. Der Anstellwinkel der Rührblätter ist definiert als der Winkel zwischen dem Flächennormalenvektor der Rührblätter und der Ebene der Rührerscheibe und wird zwischen -60° und $+60^\circ$ variiert. Die untersuchten Anstellwinkel sind zusätzlich in Abb. 6 verdeutlicht.

Die Veränderung des Strömungsfeldes abhängig vom Anstellwinkel ist in Abb. 6 dargestellt. Gezeigt werden die Ergebnisse der xz -Ebene. Da das Ergebnis des Strömungsprofils symmetrisch zur Rührerachse ist, wird lediglich die linke Seite der Schnittebene dargestellt.

Wie anhand von Abb. 6 erkennbar ist, wird das Strömungsfeld bei einem negativen Anstellwinkel nach unten geleitet und bei einem positiven Anstellwinkel nach oben. Die Maxi-

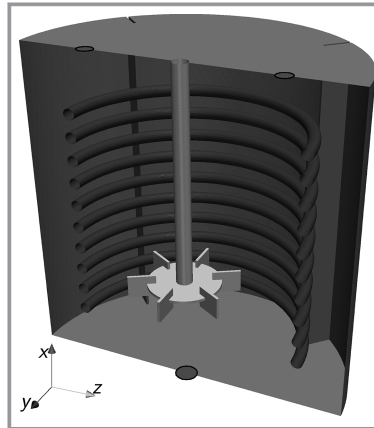


Abbildung 5. Simulationsdomäne für die Simulation eines CSTR.

malgeschwindigkeit nimmt dabei mit steigendem Betrag des Anstellwinkels ab.

Die sich ergebenden Konzentrationsfelder c_A der Komponente A und c_B der Komponente B sowie die aus der Reaktion freiwerdende latente Reaktionswärme \dot{Q}_R sind in Abb. 7 für die xz -Ebene dargestellt. Die freiwerdende latente Reaktionswärme \dot{Q}_R ergibt sich durch Multiplikation des Quellterms \dot{q}_R und dem jeweiligen Zellvolumen. Da die Konzentrationen jeweils an einem exzentrischen Punkt aufgegeben werden, ergibt sich kein symmetrisches Ergebnis, jedoch werden die beiden Komponenten symmetrisch zueinander aufgegeben, weswegen die jeweils andere Komponente das gespiegelte Ergebnis des nicht dargestellten Bereiches zeigt. Für die freigesetzte Reaktionswärme ergibt sich ein symmetrisches Ergebnis.

Bei einem genaueren Vergleich der Konzentrationsfelder der Komponenten A und B in Abb. 7 wird erkennbar, dass

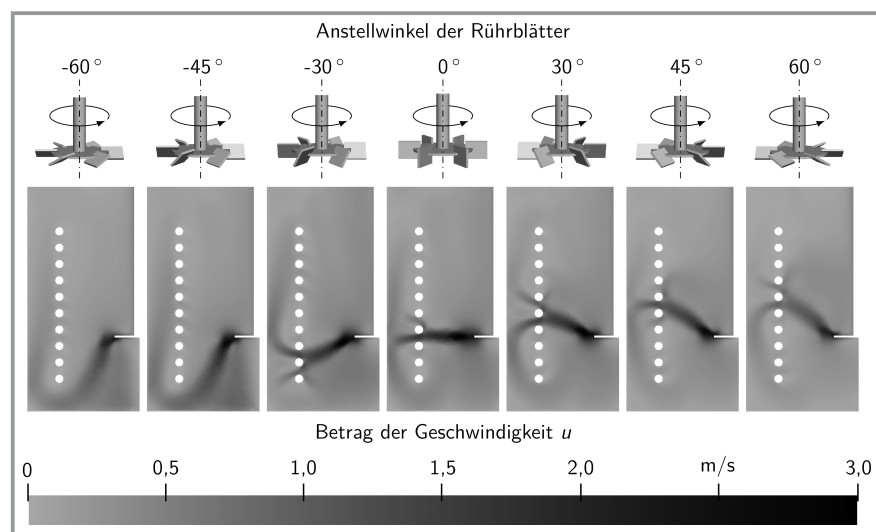


Abbildung 6. Veränderung des Geschwindigkeitsfeldes mit verändertem Anstellwinkel der Rührblätter.

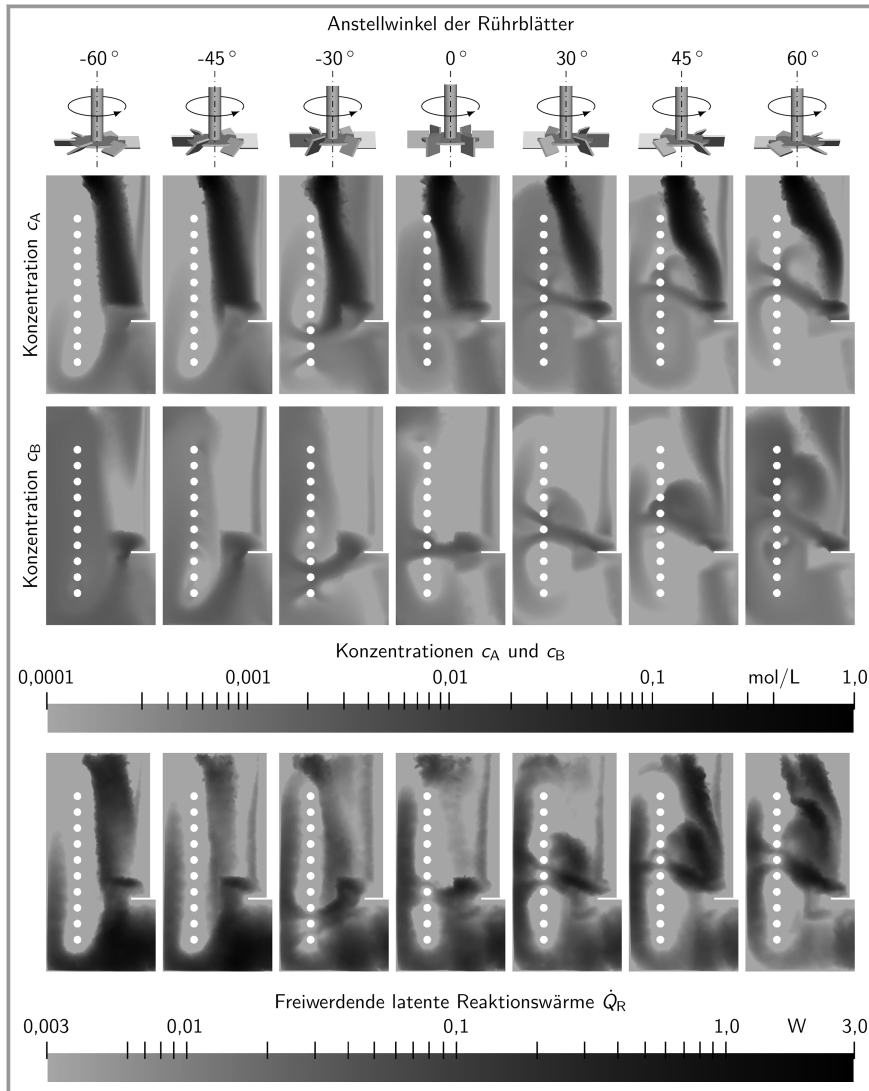


Abbildung 7. Veränderung der Konzentrationsfelder und der freigesetzten latenten Reaktionswärme mit verändertem Anstellwinkel der Rührblätter.

die Konzentrationen der Komponenten im Rührkessel nach dem Einlass durch die generische Reaktion sehr schnell abnehmen. Komponente A tritt am linken Einlass in den Rührkessel ein, weswegen dessen maximale Konzentration im dargestellten Bereich um Größenordnungen größer ist als die der Komponente B. Bei der Verteilung der Komponenten im Rührkessel ist eine starke Abhängigkeit vom Anstellwinkel der Rührblätter erkennbar.

Die Verteilung der freigesetzten latenten Reaktionswärme \dot{Q}_R weist ebenfalls eine starke Abhängigkeit vom Anstellwinkel auf. Anhand dieser können Rückschlüsse auf den lokalen Umsatz und damit auf die chemische Reaktion gezogen werden. Bei einem positiven Anstellwinkel findet die Reaktion hauptsächlich oberhalb des Rührers statt, wohingegen bei einem negativen Anstellwinkel die Reaktion hauptsächlich unterhalb des Rührers stattfindet.

Bei der Reaktion wird insgesamt ein Wärmestrom von 28,0 kW freigesetzt. Bei einem Anstellwinkel von 0° und einer Drehzahl von $2,8 \text{ s}^{-1}$ wird zusätzlich ein Wärmestrom von 0,3 kW durch Dissipation freigesetzt, somit spielt diese eine untergeordnete Rolle. Insgesamt muss ein Wärmestrom von 28,3 kW abgeführt werden. Davon werden bei dem betrachteten Anstellwinkel 15,8 kW durch Konvektion am Reaktorauslass ausgetragen und 12,5 kW an die Rohrschlangen übertragen.

Für eine quantitative Betrachtung des Einflusses des Anstellwinkels werden erneut die Rührerleistung und der Wärmeübergangskoeffizient berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. 8 dargestellt. Die Ergebnisse zeigen einen Sprung im Wärmeübergangskoeffizienten zwischen einem Anstellwinkel von -45° und -30° , weswegen eine weitere Simulation mit einem Anstellwinkel von -35° durchgeführt wurde. Dessen Ergebnis ist ebenfalls in Abb. 8 gegeben.

Zur Überprüfung der Plausibilität der Ergebnisse des kontinuierlich durchströmten Behälters werden zunächst die Ergebnisse bei einem Anstellwinkel von 0° mit den Simulationen von Abschn. 3 verglichen. Der berechnete Wärmeübergangskoeffizient erhöht sich infolge der zusätzlichen Durchströmung um 2 %, wobei der Leistungseintrag sich um 1 % erhöht.

Die maximale Rührerleistung in Abb. 8 ergibt sich bei einem Anstellwinkel von 0°. Sowohl eine Änderung des Winkels in positiver als auch negativer Richtung führt zu einer kleineren benötigten Rührerleistung. Dieses Ergebnis deckt sich mit der zuvor genannten Beobachtung zu Abb. 6, in der sich eine maximale Flüssigkeitsgeschwindigkeit bei einem Anstellwinkel von 0° ergibt.

Im Verlauf des Wärmeübergangskoeffizienten ergibt sich ein Sprung zwischen -35° und -30° in Abb. 8. Dieser Sprung ist auf die direkte Anströmung der Rohrschlangen zurückzuführen. Bei einem Anstellwinkel von -30° wird das durch den Rührer verdrängte Fluid in Richtung der unteren beiden Rohrschlangen umgelenkt. Bei -35° ähnelt das Geschwindigkeitsfeld dem Geschwindigkeitsfeld von -45° , bei dem die Rohrschlangen nicht direkt angeströmt werden. Dies hat zur Folge, dass die Rohrschlangen durchschnittlich weniger schnell umströmt werden, was sich im

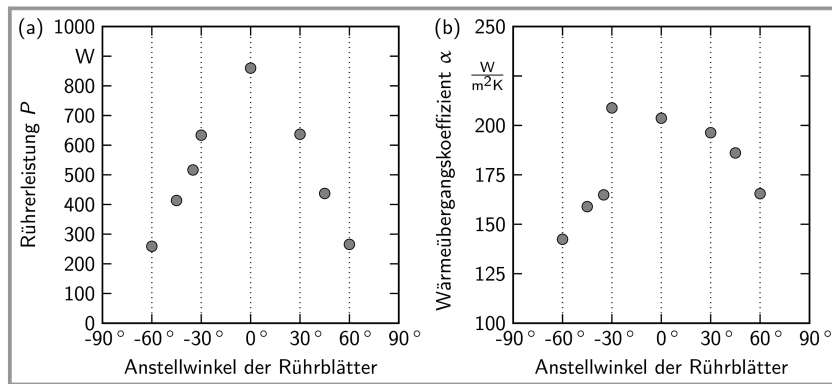


Abbildung 8. Veränderung der Rührerleistung (a) und des Wärmeübergangskoeffizienten (b) mit verändertem Anstellwinkel der Rührblätter.

Wärmeübergang bemerkbar macht. Der Wärmeübergangskoeffizient steigt mit niedrigerem Anstellwinkel bis zu einem Anstellwinkel von -30° leicht an. Dort ergibt sich ein Sprung im Verlauf des Wärmeübergangskoeffizienten aufgrund der diskutierten Umströmung der Rohre. Insgesamt ergibt sich ein maximaler Wärmeübergangskoeffizient bei einem Anstellwinkel von -30° .

5 Drehzahlvariation

Neben der Variation der Ausrichtung der Rührblätter soll folgend der Einfluss der Rührerdrehzahl untersucht werden. Dafür werden Simulationen bei einem Anstellwinkel der Rührblätter von 0° und Rührerdrehzahlen N von 1 s^{-1} , $2,8\text{ s}^{-1}$, 6 s^{-1} und 10 s^{-1} durchgeführt. Die Auswirkung der Rührerdrehzahl auf die Verteilung der Konzentrationen und der freigesetzten Wärme wird in Abb. 9 dargestellt.

Durch die Drehzahlvariation ändert sich das Verhältnis zwischen der Wärmefreisetzung durch die Reaktion und durch Dissipation deutlich. Die jeweilige Wärmefreisetzung ist in Abb. 10 dargestellt. Abb. 10 zeigt, dass die frei werdende dissipierte Leistung mit steigender Drehzahl überproportional ansteigt und ab einer Drehzahl von 6 s^{-1} an Bedeutung gewinnt. Diese dissipierte Leistung bei hohen Drehzahlen muss bei der Temperierung des Reaktors zusätzlich abgeführt werden. Dies hat einen Einfluss auf die Reaktorauslasstemperatur. Die Ergebnisse der Rührerdrehzahlvariation sind in Tab. 2 gegeben. Zusätzlich ist die jeweilige Newton-Zahl angegeben.

Mit steigender Drehzahl steigt der Wärmeübergangskoeffizient kontinuierlich an. Die Reaktorauslasstemperatur sinkt zunächst bis zu einer Rührerdrehzahl von 6 s^{-1} und steigt anschließend wieder an. Zur Beschreibung der Effektivität der Wärmeabfuhr wird, angelehnt an den Wirkungsgrad von Wärmeübertragern [17], ein Wirkungsgrad η in Gl. (14) eingeführt.

$$\eta = \frac{T_{\text{ad,R}} - T_{\text{aus}}}{T_{\text{ad,R}} - T_{\text{ein}}} \quad (14)$$

Die Temperatur $T_{\text{ad,R}}$ entspricht der Austrittstemperatur des Behälters durch die adiabate Temperaturerhöhung der Reaktion. Wichtig beim eingeführten Wirkungsgrad η ist, dass die Kühltemperatur T_{k} bei den zu vergleichenden Fällen gleich ist. Die Abhängigkeit des Wirkungsgrades von der Drehzahl ist in Abb. 11 dargestellt.

Abb. 11 zeigt einen maximalen Wirkungsgrad bei einer Drehzahl von 6 s^{-1} . Bei höheren Drehzahlen gewinnt die freiwerdende dissipierte Leistung an Bedeutung, weswegen die Reaktorauslasstemperatur T_{aus} bei größerer Drehzahl

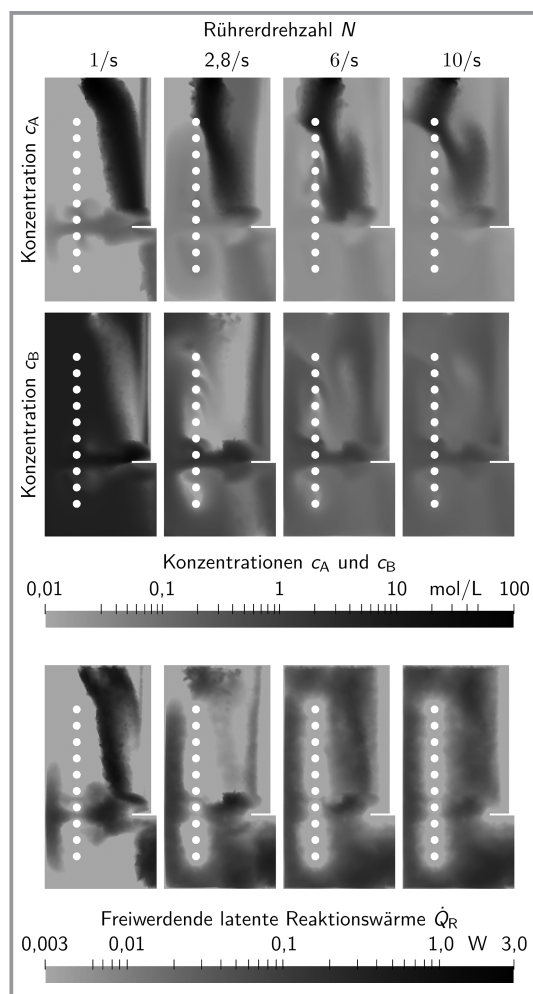


Abbildung 9. Veränderung der Konzentrationsfelder und der freigesetzten latenten Reaktionswärme mit veränderter Rührerdrehzahl.

trotz steigendem Wärmeübergangskoeffizienten ansteigt. Deshalb ist ein Betrieb oberhalb des maximalen Wirkungsgrades in Bezug auf die Wärmeabfuhr nicht sinnvoll.

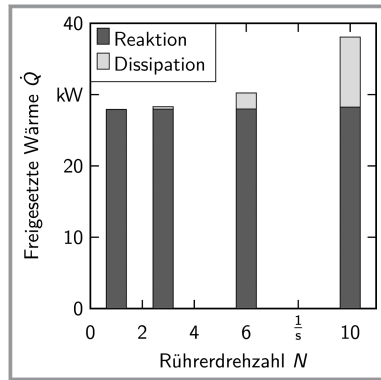


Abbildung 10. Wärmefreisetzung bei veränderter Rührerdrehzahl.

Tabelle 2. Ergebnisse der Rührerdrehzahlvariation.

Rührerdrehzahl [s^{-1}]	Reynoldszahl [-]	Newton-Zahl [-]	Reaktorauslasstemperatur [K]	Wärmeübergangskoeffizient [$W m^{-2} K^{-1}$]
1	352,6	3,88	299,7	118,1
2,8	1000	3,90	296,3	203,6
6	2116	3,98	294,2	308,9
10	3526	4,08	294,8	422,6

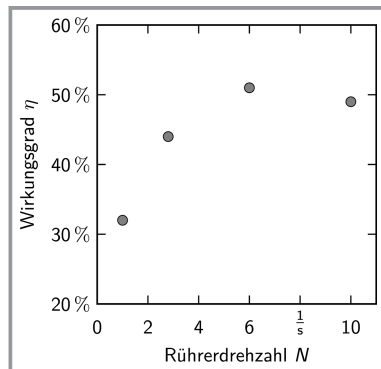


Abbildung 11. Abhängigkeit des Wirkungsgrades von der Rührerdrehzahl.

Der Wirkungsgrad η ist insb. bei einer hohen Viskosität und bei exothermen Reaktionen relevant, da die dissipierte Energie zusätzlich zur freiwerdenden Reaktionsenthalpie zu einer Erhöhung der Reaktorauslasstemperatur führt und sich somit ein maximaler Wirkungsgrad bei mittleren Drehzahlen ergibt.

6 Schlussfolgerung

Zusammenfassend betrachtet eignet sich die Kombination aus MRF-Modell und RANS-Turbulenzmodell zur Simula-

tion einer generischen Reaktion in einem gerührten Behälter sehr gut. Aus den Simulationen ergeben sich wichtige Kenngrößen, wie Rührerleistung und Wärmeübergangskoeffizient, die mit den Messwerten sehr gut übereinstimmen. Durch die Simulation der generischen chemischen Reaktion können die Komponentenverteilung und Wärmeentwicklung im Reaktor dargestellt werden, weswegen ebenfalls Rückschlüsse auf das Reaktordesign gezogen werden können.

Aus der Studie zum Anstellwinkel der Rührerblätter und der Drehzahlvariation lassen sich wichtige Erkenntnisse in Bezug auf das Reaktordesign und den Reaktorbetrieb ableiten. Der Anstellwinkel der Rührerblätter sollte bei der Verwendung eines Scheibenrührers in Kombination mit Rohrschlangen so gewählt werden, dass die unterste Kühlschlange gerade noch angeströmt wird. Hierbei ergibt sich ein maximaler Wärmeübergang bei einer verringerten Rührerleistung im Vergleich zu einem Anstellwinkel von 0° .

Bei der Drehzahlvariation ist eine verbesserte Durchmischung anhand der Verteilung der Reaktionskomponenten und Wärmefreisetzung erkennbar. Es ergibt sich ein steigender Einfluss der freiwerdenden dissipierten Energie mit steigender Rührerdrehzahl. Die Dissipation hat zur Folge, dass durch die zusätzlich induzierte Energie eine effiziente Temperierung des Reaktors bei hohen Drehzahlen nicht mehr möglich ist, wodurch der definierte Wirkungsgrad mit steigender Drehzahl abnimmt. Dieses Verhalten ist insb. bei hochviskosen Medien stark ausgeprägt und kann durch die Simulationen genauer untersucht werden.

Insgesamt eignet sich der Simulationsansatz sehr gut, um die große Vielfalt von gerührten Behältern zu untersuchen und ein Screening möglicher Bauformen und Adaptionen für eine betrachtete Reaktion durchzuführen. Zusätzlich ist angesichts der hohen Simulationsgenauigkeit des Wärmeübergangs bei vergleichsweise niedrigen Rechenzeiten durch die Kombination aus dem MRF-Ansatz und einem RANS-Turbulenzmodell eine reaktionsspezifische, automatisierte Optimierung des Reaktordesigns denkbar.

Formelzeichen

c	[$mol m^{-3}$]	Konzentration
c_p	[$J kg^{-1} K^{-1}$]	spezifische Wärmekapazität
d	[m]	Durchmesser des Rührers
D	[m]	Durchmesser des Behälters
f	[N]	Kraft
ΔH_R	[$J mol^{-1}$]	molare Reaktionsenthalpie
M_p	[J]	Moment der Normalkräfte
M_τ	[J]	Moment der Tangentialkräfte
N	[s^{-1}]	Rührerdrehzahl
\dot{N}	[$mol s^{-1}$]	Stoffmengenstrom
Ne	[-]	Newton-Zahl
\dot{n}_R	[$mol m^{-3} s^{-1}$]	Quellterm für Reaktionsumsatz
Nu	[-]	Nußelt-Zahl
p	[Pa]	Druck

P	[W]	Leistung
Pr	[-]	Prandtl-Zahl
\dot{q}_D	[W m ⁻³]	Quellterm für Dissipation
\dot{q}_h	[W m ⁻²]	Wärmestromdichte
\dot{q}_R	[W m ⁻³]	Quellterm für Reaktion
\dot{Q}	[W]	Wärmestrom
\dot{Q}_R	[W]	freiwerdende latente Reaktionswärme
\mathbf{r}	[m]	Positionsvektor
Re	[-]	Reynolds-Zahl
s	[m]	Durchmesser der Rohrschlangen
Sc	[-]	Schmidt-Zahl
t	[s]	Zeit
Δt	[s]	Zeitschrittweite
T	[K]	Temperatur
u	[m s ⁻¹]	Betrag der Geschwindigkeit
\mathbf{u}	[m s ⁻¹]	Geschwindigkeitsvektor
x, y, z	[m]	Koordinatenrichtung

Griechische Symbole

α	[W m ⁻² K ⁻¹]	Wärmeübergangskoeffizient
η	[-]	Wirkungsgrad
λ	[W m ⁻¹ K ⁻¹]	Wärmeleitfähigkeit
ν	[m ² s ⁻¹]	kinematische Viskosität
ρ	[kg m ⁻³]	Dichte
Ω	[s ⁻¹]	Winkelgeschwindigkeit

Indizes

A	Edukt A
ad	adiabat
aus	Reaktorauslass
B	Edukt B
bulk	Bulkphase
C	Produkt C
D	Dissipation
ein	Reaktoreinlass
h	Heizschlange
k	Kühlschlange
R	Reaktion
t	Turbulenz

Abkürzungen

CFD	computational fluid dynamics
CSTR	continuous stirred-tank reactor

FR	froze rotor
MRF	multiple reference frame
RANS	Reynolds averaged Navier-Stokes
SG	sliding grid
SIMPLE	semi-implicit method for pressure-linked equations

Literatur

- [1] A. Brucato, M. Ciofalo, F. Grisafi, G. Micale, *Chem. Eng. Sci.* **1998**, *53* (21), 3653–3684. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(98\)00149-3](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(98)00149-3)
- [2] H. Singh, D. F. Fletcher, J. J. Nijdam, *Chem. Eng. Sci.* **2011**, *66* (23), 5976–5988. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.08.018>
- [3] R. Prada, J. R. Nunhez, *AIChE J.* **2017**, *63* (9), 3912–3924. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.15765>
- [4] J. Oldshue, A. Gretton, *Chem. Eng. Prog.* **1954**, *50* (12), 615–621.
- [5] C. Harris, D. Roekaerts, F. Rosendal, F. Buitendijk, P. Daskopoulos, A. Vreenegoor, H. Wang, *Chem. Eng. Sci.* **1996**, *51* (10), 2569–1594. DOI: [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(96\)00021-8](https://doi.org/10.1016/0009-2509(96)00021-8)
- [6] *Proc. of the 8th Eur. Conf. on Mixing* (Eds: J. Y. Luo, R. I. Issa, A. D. Gosmann), Institution of Chemical Engineers, Rugby **1994**.
- [7] J. Aubin, D. Fletcher, C. Xuereb, *Exp. Therm. Fluid Sci.* **2004**, *28* (5), 431–445. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2003.04.001>
- [8] B. Murthy, J. Joshi, *Chem. Eng. Sci.* **2008**, *63* (22), 5468–5495. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.06.019>
- [9] M. Schäfer, *Charakterisierung, Auslegung und Verbesserung des Makro- und Mikromischens in gerührten Behältern*, Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg **2001**.
- [10] S. Roudsari, F. Ein-Mozaffari, R. Dhib, *Chem. Eng. J.* **2013**, *219*, 429–442. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.12.049>
- [11] L. Rudniak, P. M. Machniewski, A. Milewska, E. Molga, *Chem. Eng. Sci.* **2004**, *59* (22–23), 5233–5239. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.09.014>
- [12] F. R. Mentner, *Improved Two-Equation k-Omega Turbulence Models for Aerodynamic Flows*, Technical Report, NAS 1.15:103975, NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA **1992**.
- [13] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1st ed., Hemisphere Publishing, New York **1980**.
- [14] D. L. Marchisio, A. A. Barresi, *Chem. Eng. Sci.* **2003**, *58* (16), 3579–3587. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(03\)00264-1](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(03)00264-1)
- [15] J. Kleiner, B. Münch, F. Rößler, J. Fernengel, F. Habla, O. Hinrichsen, *Chem. Eng. Process.* **2018**, *131*, 150–160. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2018.07.010>
- [16] R. Bates, P. Fondy, R. Corpstein, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* **1963**, *2* (4), 310–314. DOI: <https://doi.org/10.1021/i260008a011>
- [17] W. Polifke, J. Kopitz, *Wärmeübertragung: Grundlagen, analytische und numerische Methoden*, 2nd ed., Pearson Studium, München **2009**.