



Modellierung reaktiver Trennverfahren

E. Y. Kenig, A. Górak

Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik

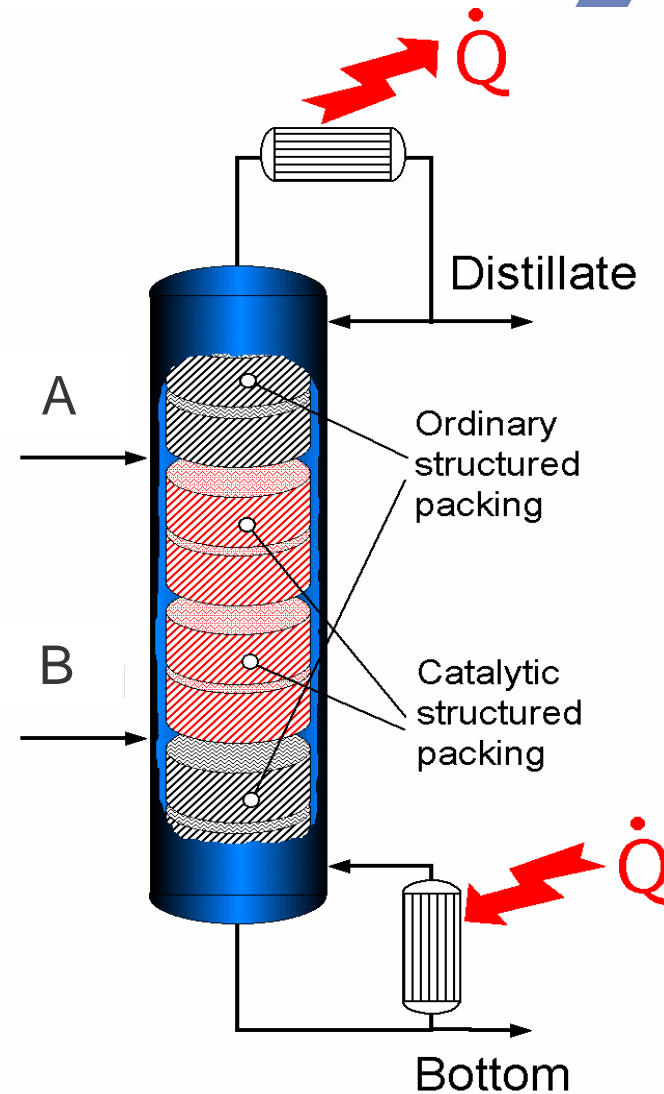
24. November 2003



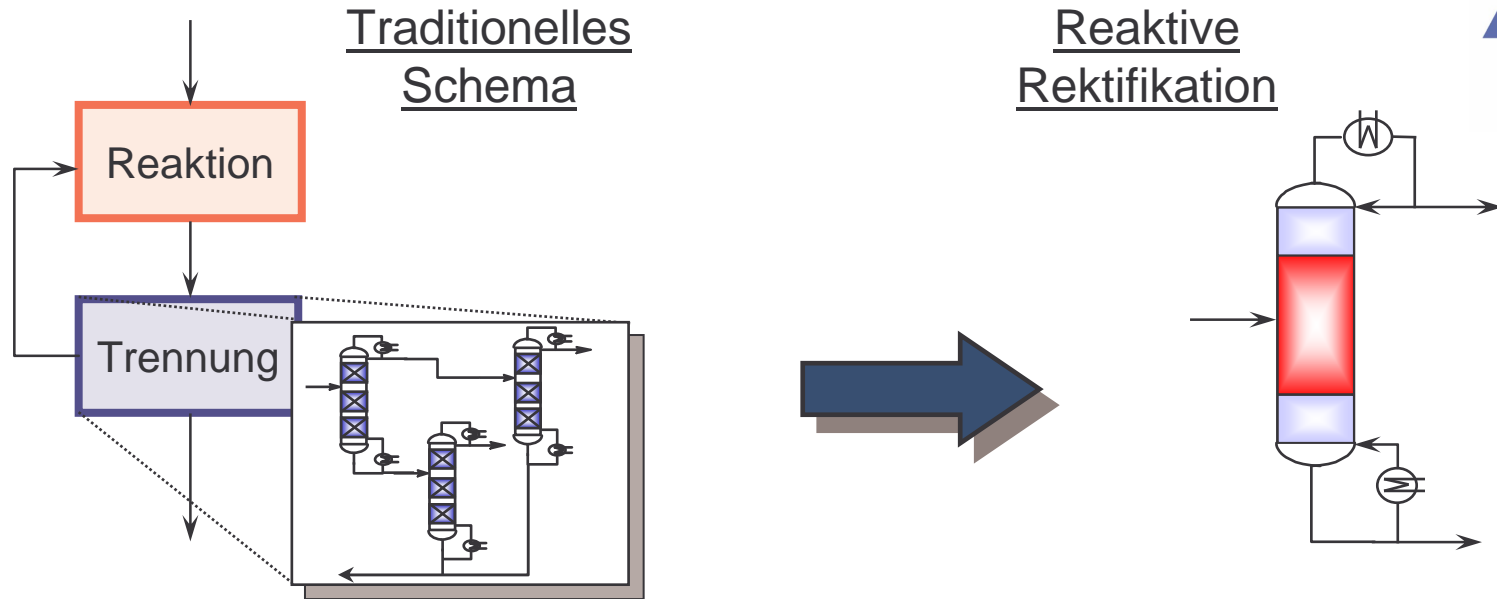
Kolloquium des Forschungsbandes "Modellbildung und Simulation"



1. Charakteristika der reaktiven Trennverfahren
2. Modellierungsansätze
3. Simulationsbeispiele
4. CFD-Anwendung
5. Zusammenfassung



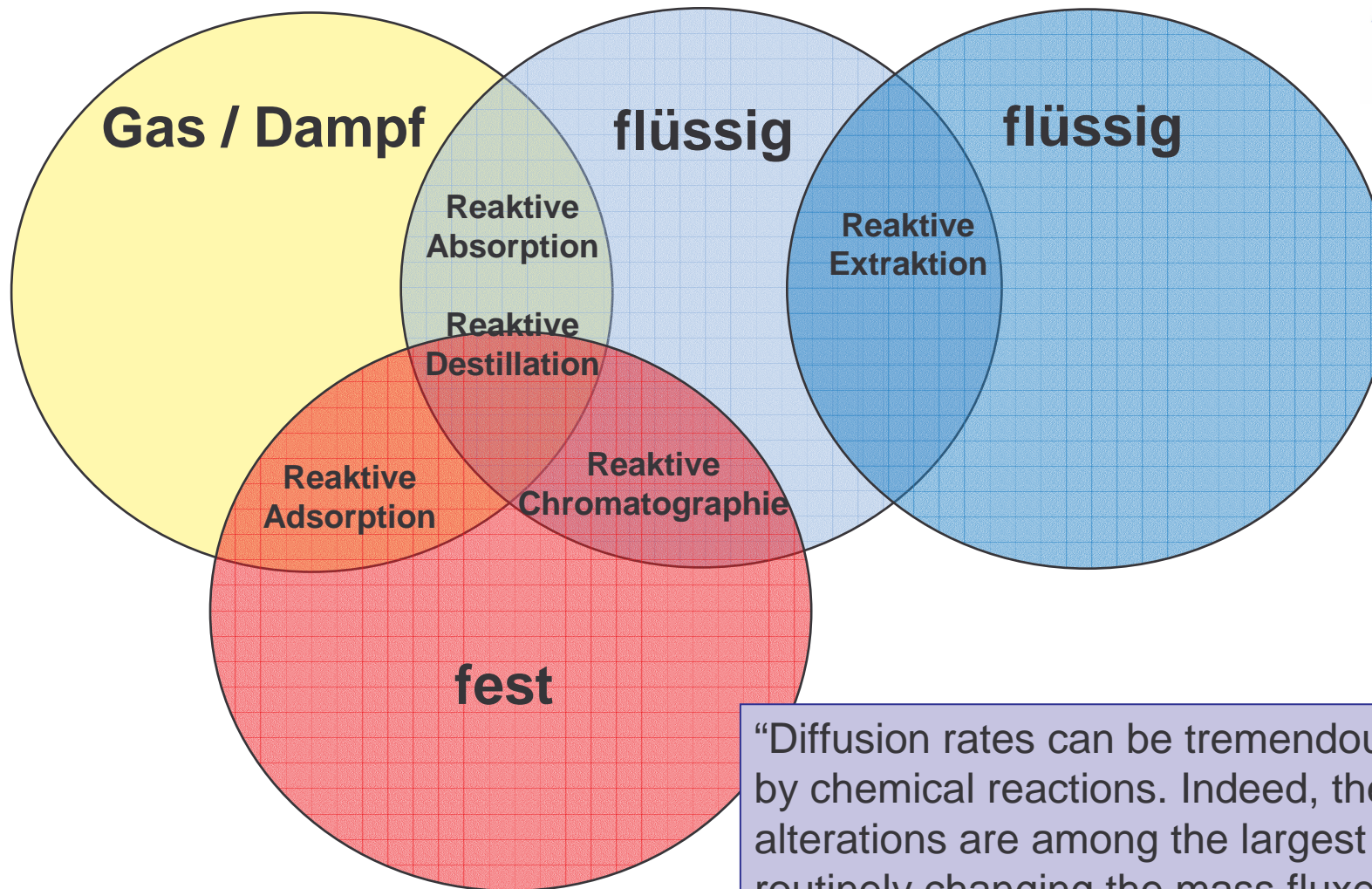
Reaktive Rektifikation



- § Höhere Umsätze
- § Steigerung der Selektivität
- § Direkte Wärmeintegration
- § Vermeidung von Hot Spots
- § Auftrennung azeotroper oder engsiedender Gemische
- § Unterdrückung unerwünschter Nebenreaktionen
- § Senkung von Betriebs- und Apparatekosten

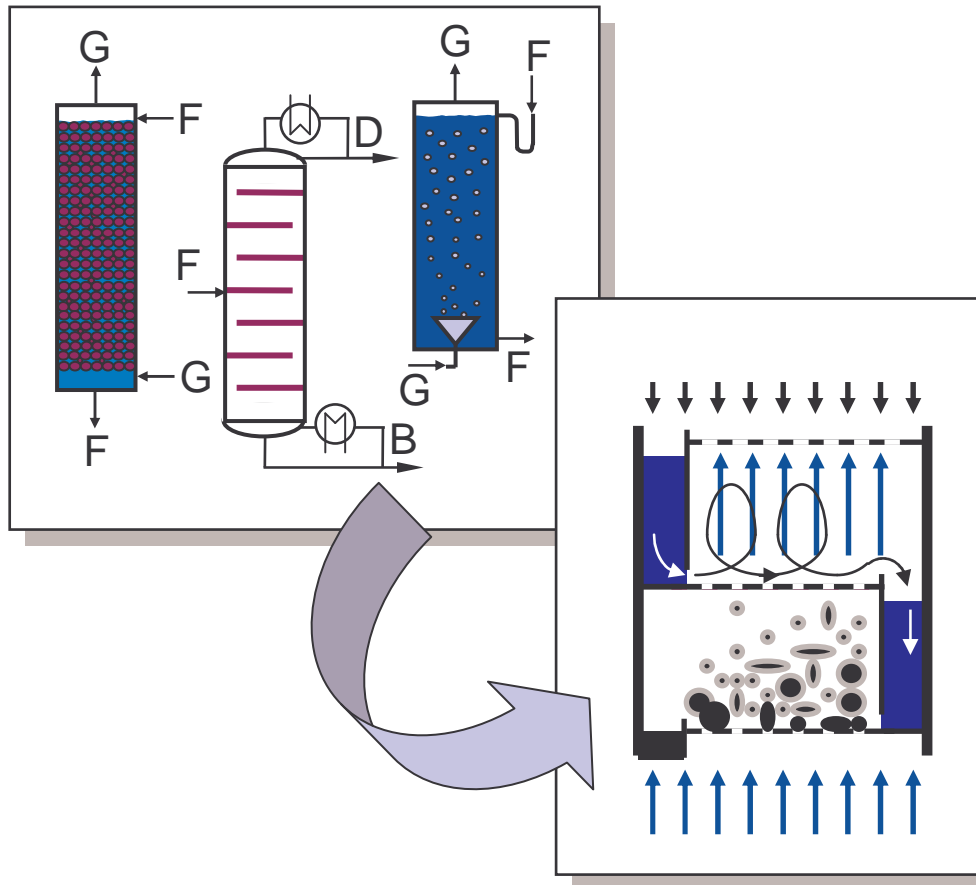


Reaktive Trennverfahren



“Diffusion rates can be tremendously altered by chemical reactions. Indeed, these alterations are among the largest effects ... routinely changing the mass fluxes by orders of magnitude“ (E. L. Cussler)



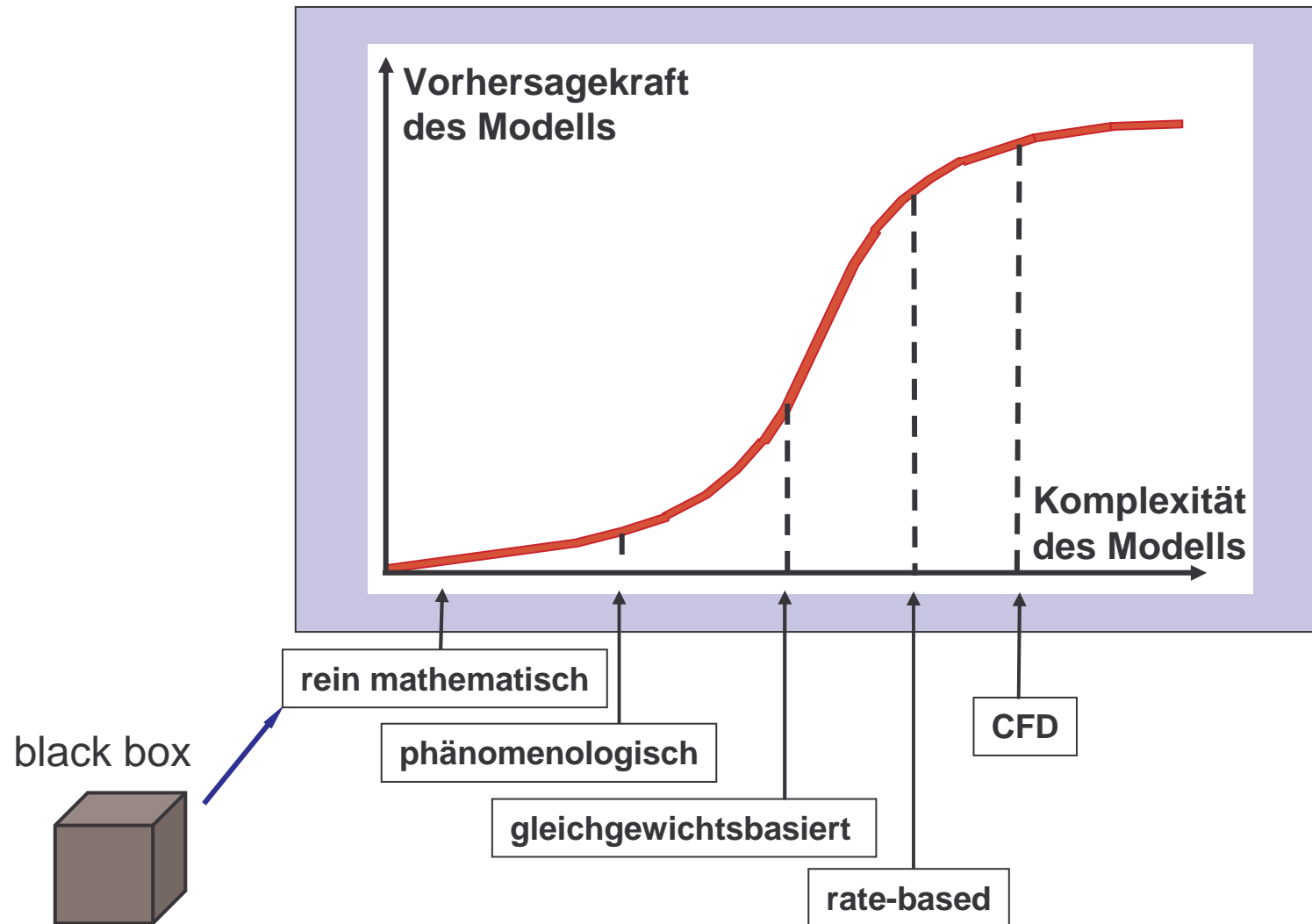


- ⌘ Zwei, drei oder vier Phasen
- ⌘ Mehrkomponentensysteme
- ⌘ Komplexe Thermodynamik (häufig Elektrolytsysteme)
- ⌘ Komplexes Design und komplexe Geometrie der Kolonnen
- ⌘ Rückführungen, komplexe Apparateverschaltungen

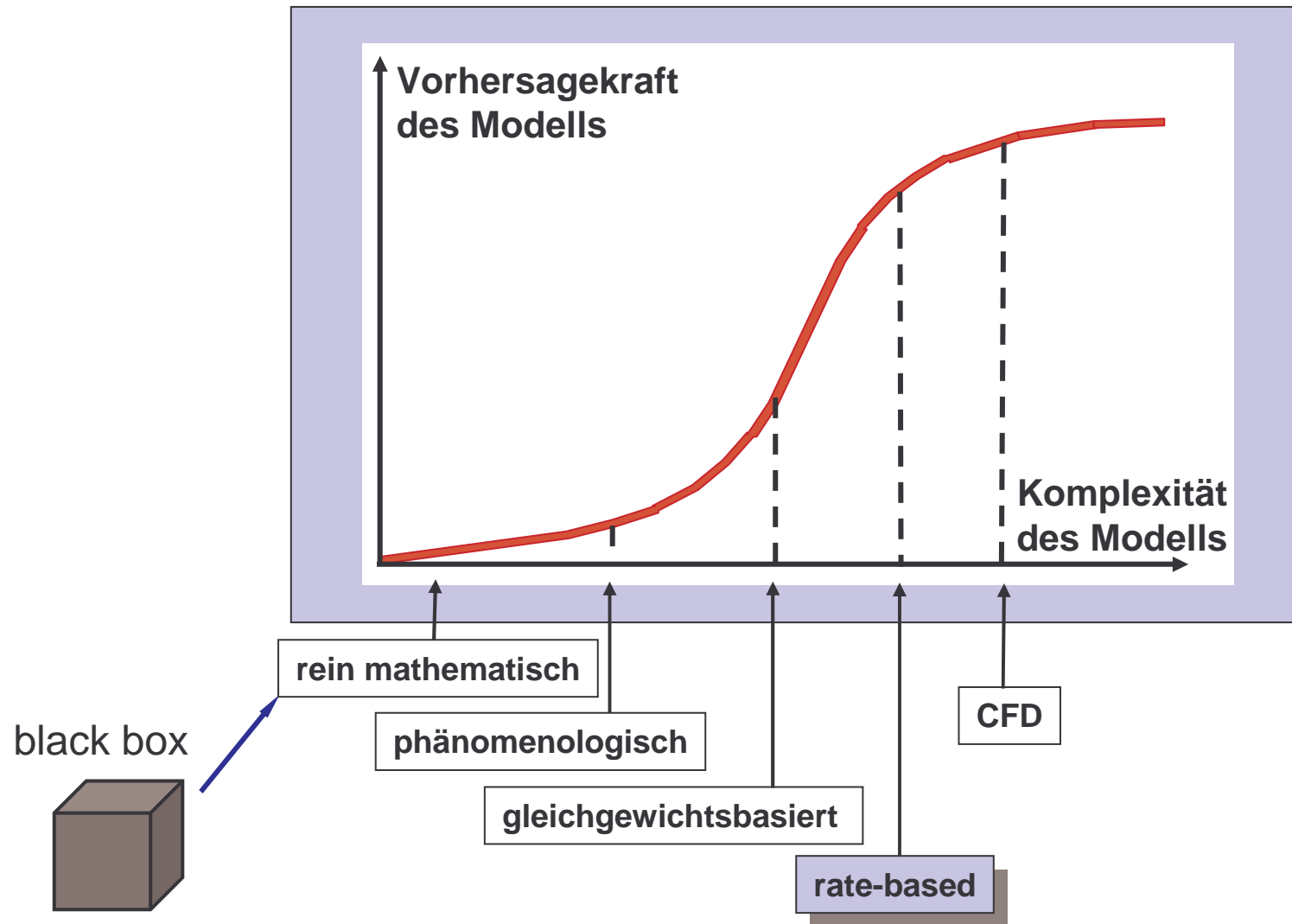
Zuverlässige Modellierung ist eine Herausforderung!



Adäquate Modellierung



Adäquate Modellierung

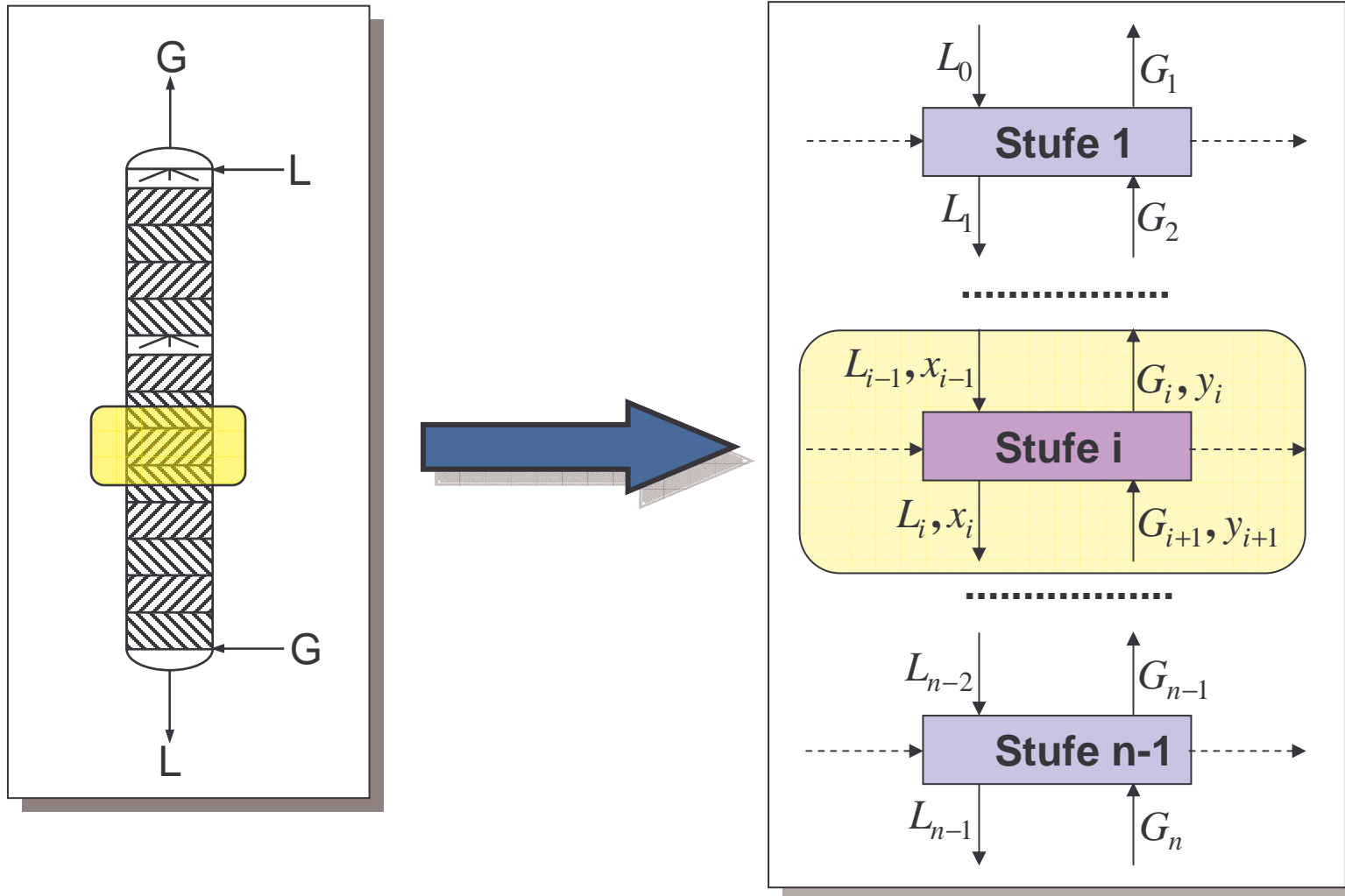




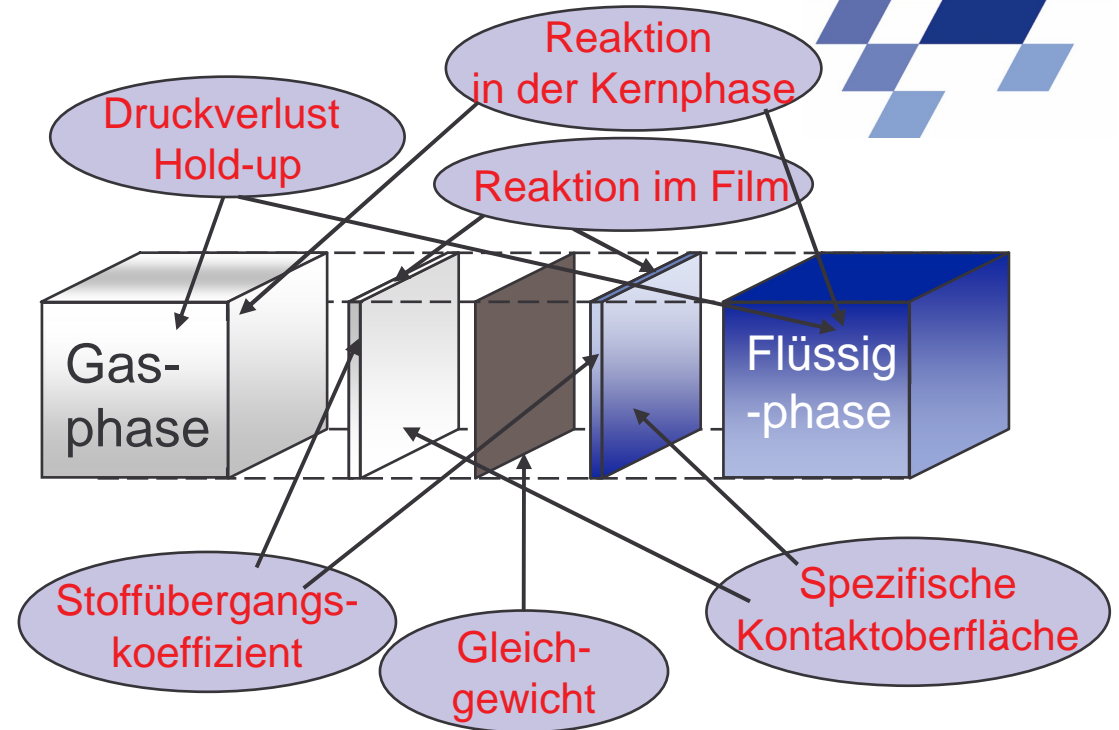
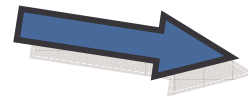
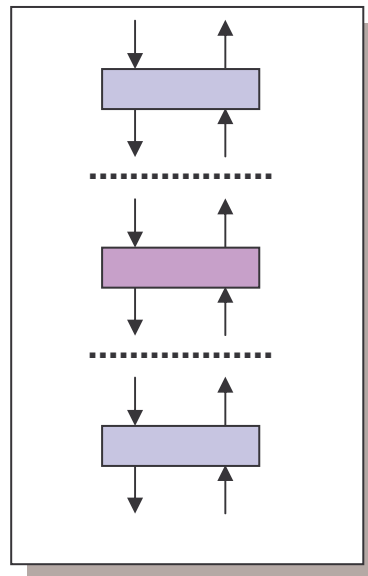
- § kinetisch basierte Modellierungsmethode für den Stoff- und Wärmeaustausch
- § Gleichgewicht nur an der Phasengrenzfläche
- § Brutto-Parameter wie Bodenwirkungsgrade sind überflüssig
- § Reaktionskinetik, Hydrodynamik und Apparateaufbau sind direkt mitberücksichtigt



Diskretisierung: von der Kolonne zur Stufe



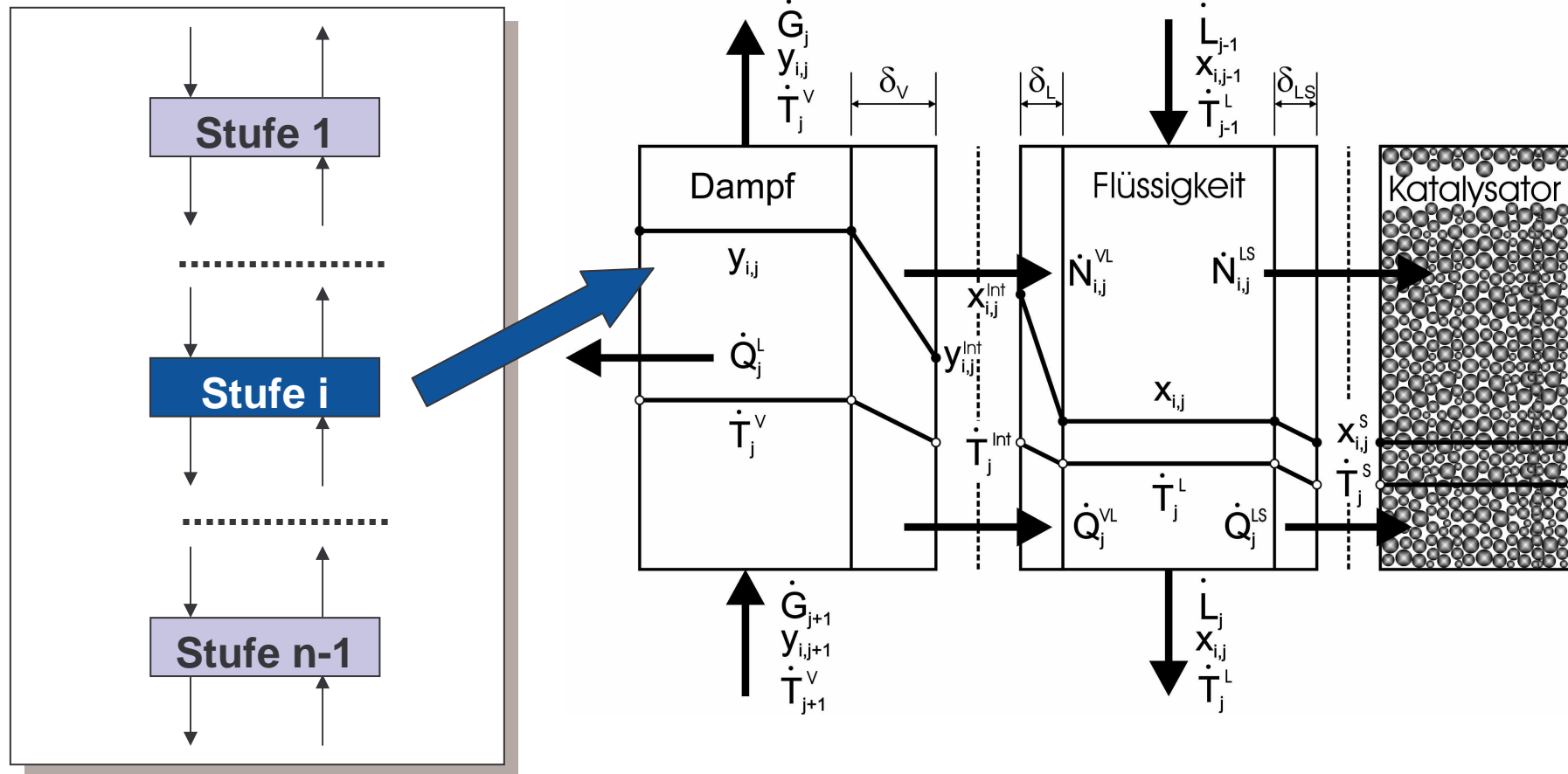
Rigoroses Rate-based-Modell (2 Phasen)



- § Massen- und Energiebilanzen für die Kernphasen
- § Beschreibung von Stoff- und Wärmetransport
- § (Elektrolyt)-Thermodynamik
- § Hydrodynamik und Stofftransportkorrelationen
- § Reaktionskinetik



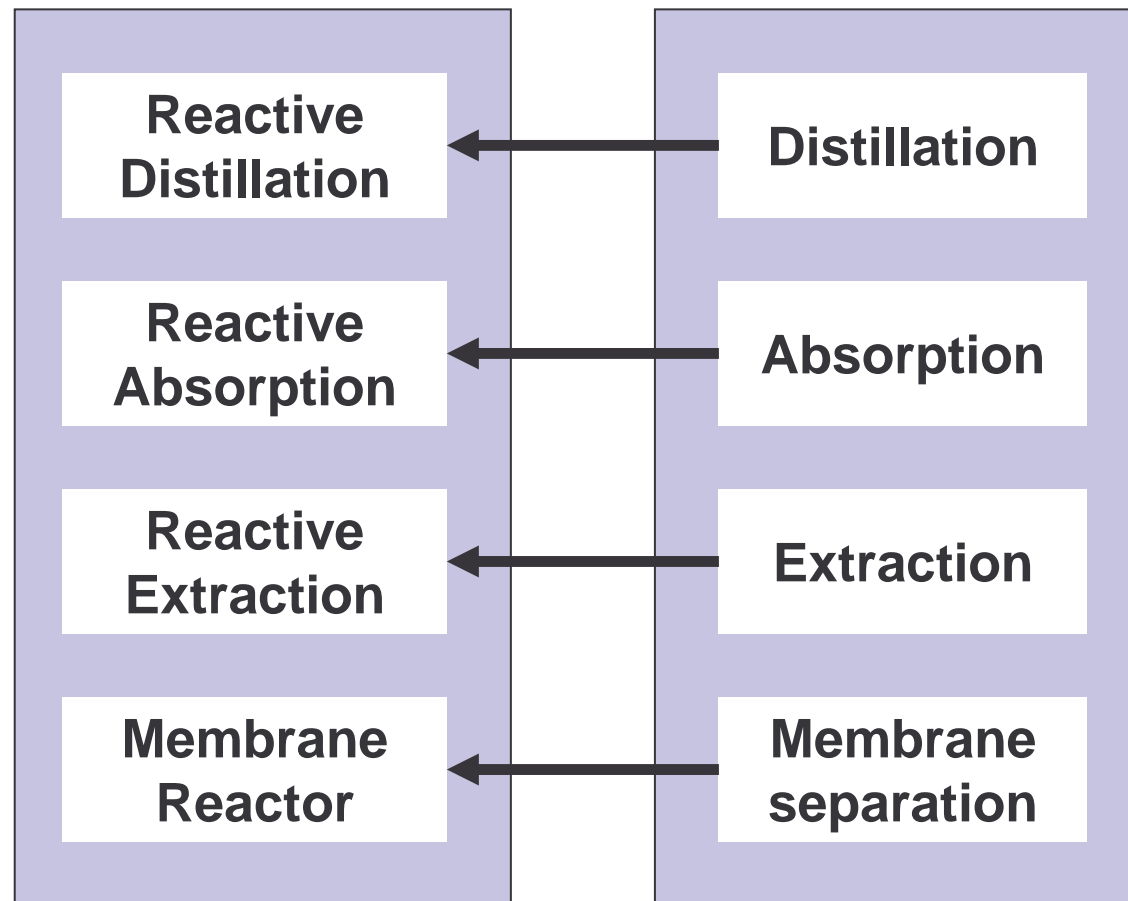
Rigoroses Rate-Based-Modell (3 Phasen)





Reaktive Trennverfahren

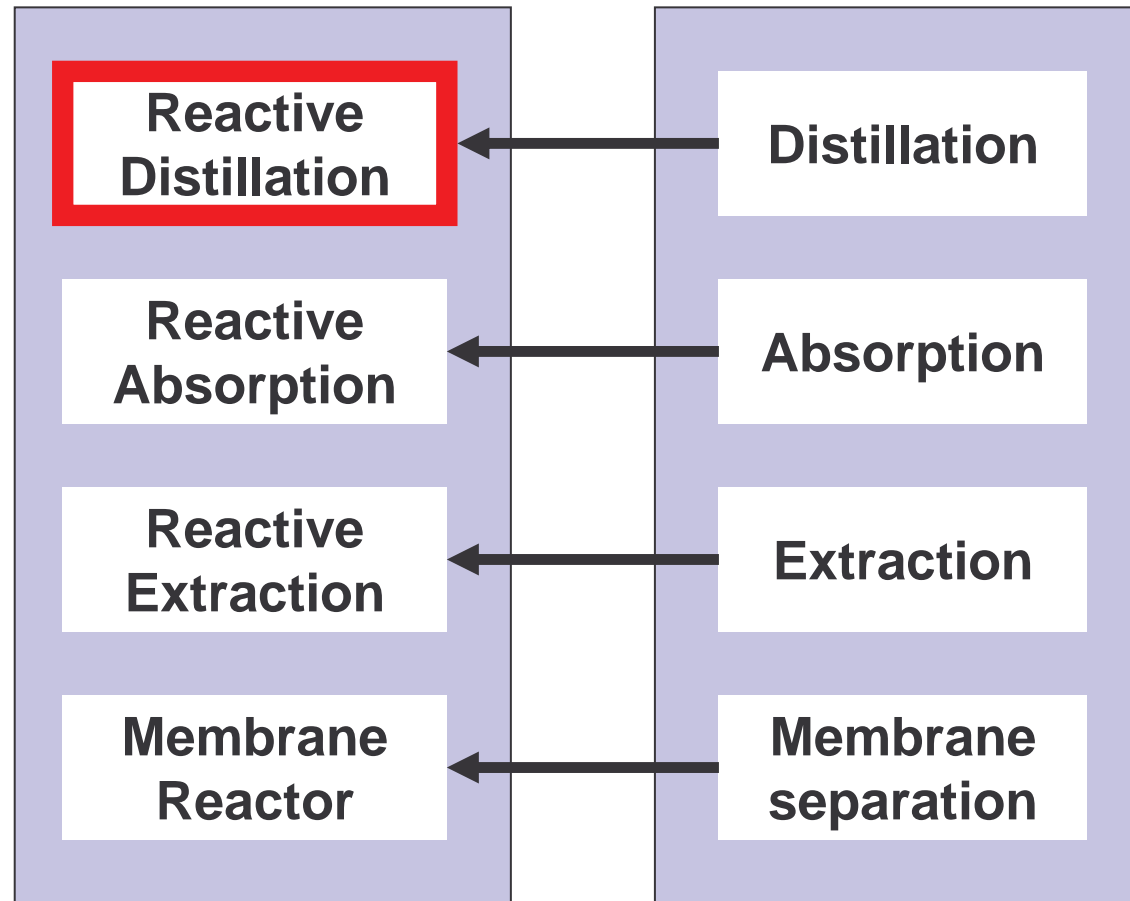
Trennverfahren



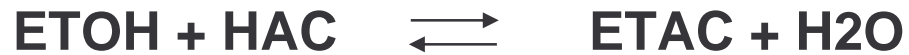


Reaktive Trennverfahren

Trennverfahren



Beispiel 1: Prozesssimulation mit ACM

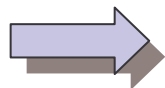
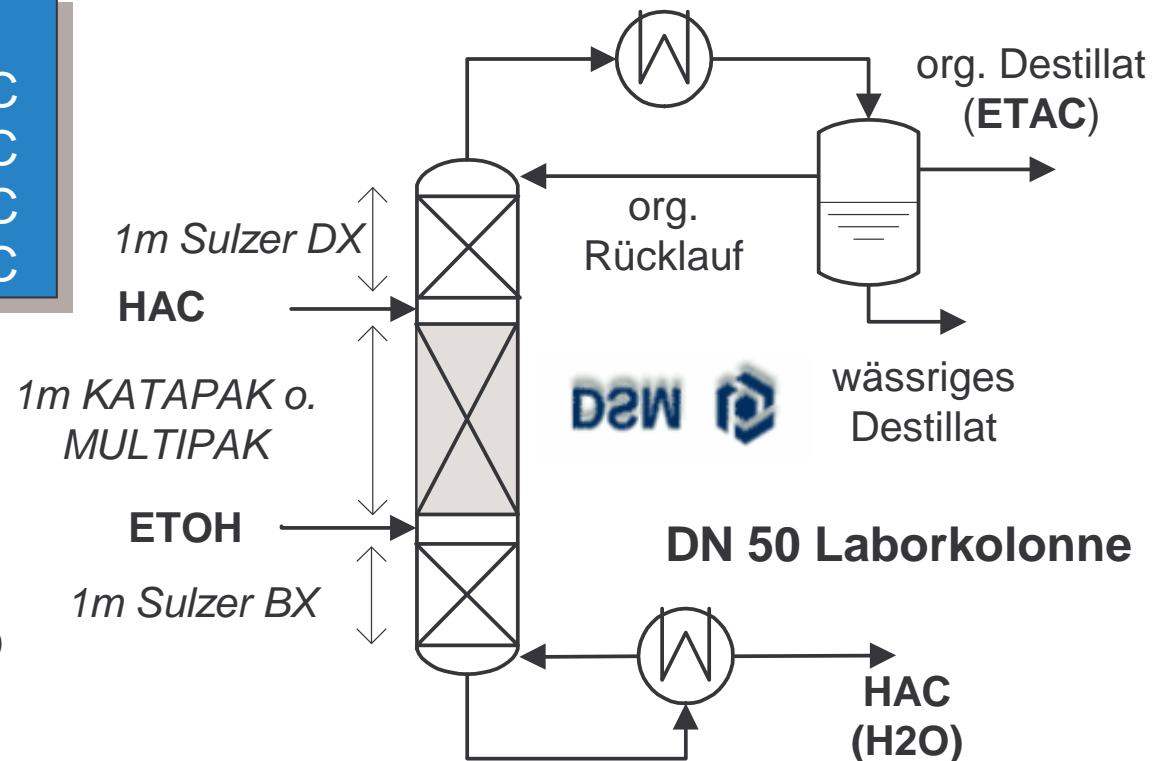


Siedepunkte (1 atm):

Ethanol (ETOH)	78,3°C
Essigsäure (HAC)	118,0°C
Ethylacetat (ETAC)	77,2°C
Wasser (H ₂ O)	100,0°C

4 Minimumazeotrope:

ETOH-H₂O, **ETAC**-ETOH,
ETAC-H₂O, **ETAC**-ETOH-H₂O

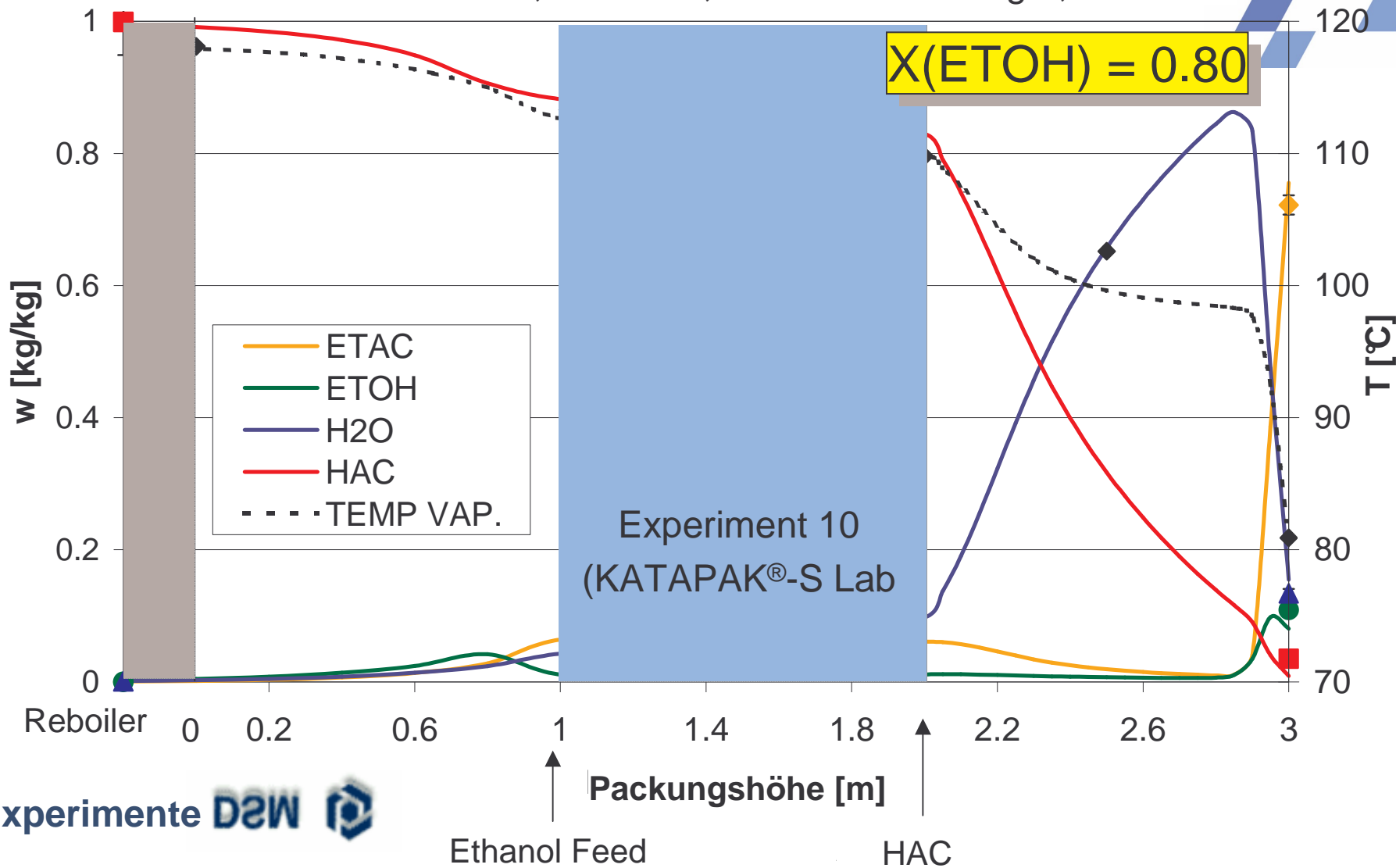


Ethylacetat als "reines" Destillat nicht möglich



Beispiel 1: Modellvalidierung

Feedverhältnis HAC/ETOH=1.02, RR=4.41, Feedstrom=0.7 kg/h, D/F = 0.9



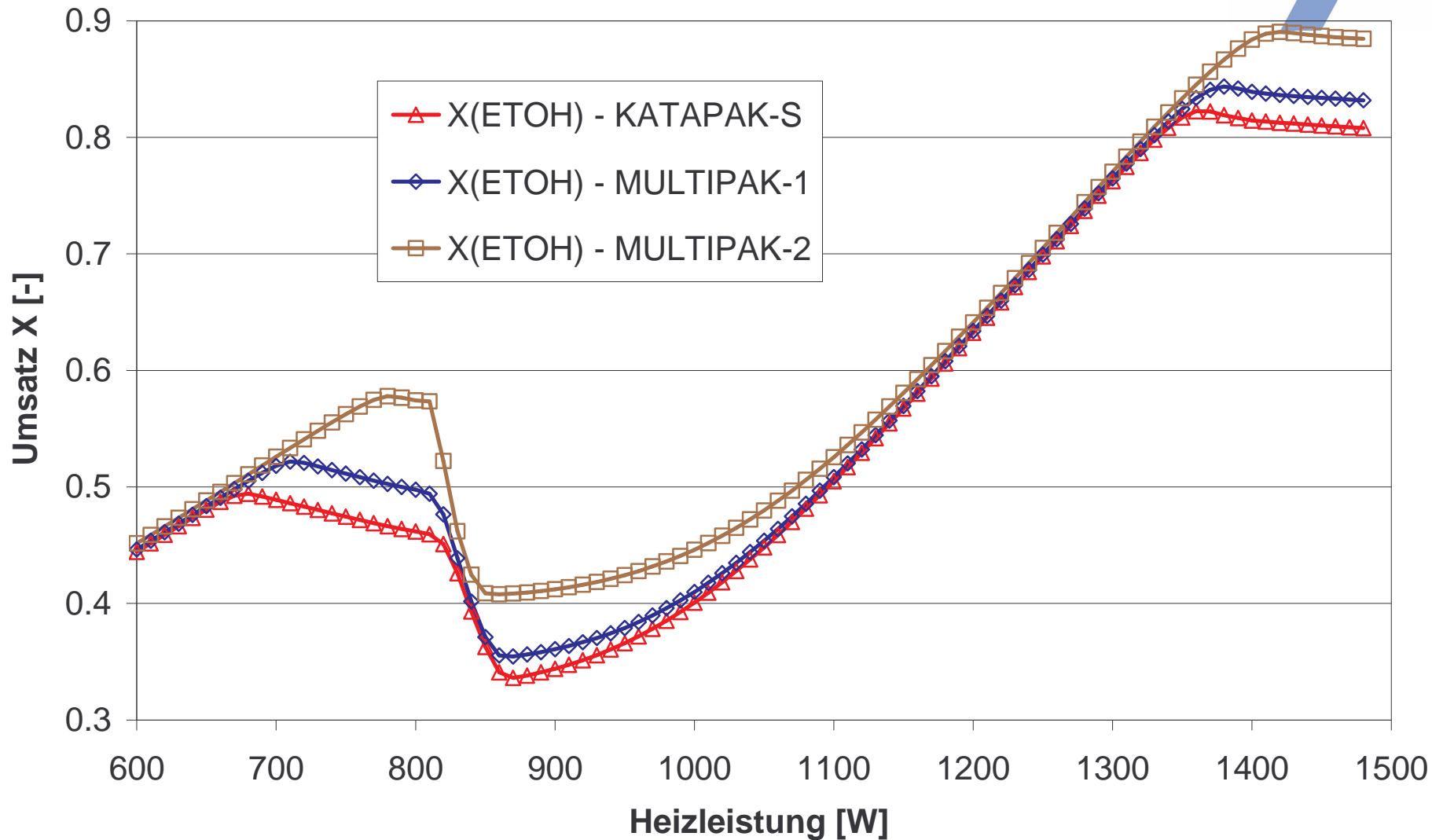
Experimente D2W

Klöker, Kenig, et al., *Canad. J. Chem. Eng.* 81, 725-732 (2003)



Beispiel 1: Sensitivitätsstudien

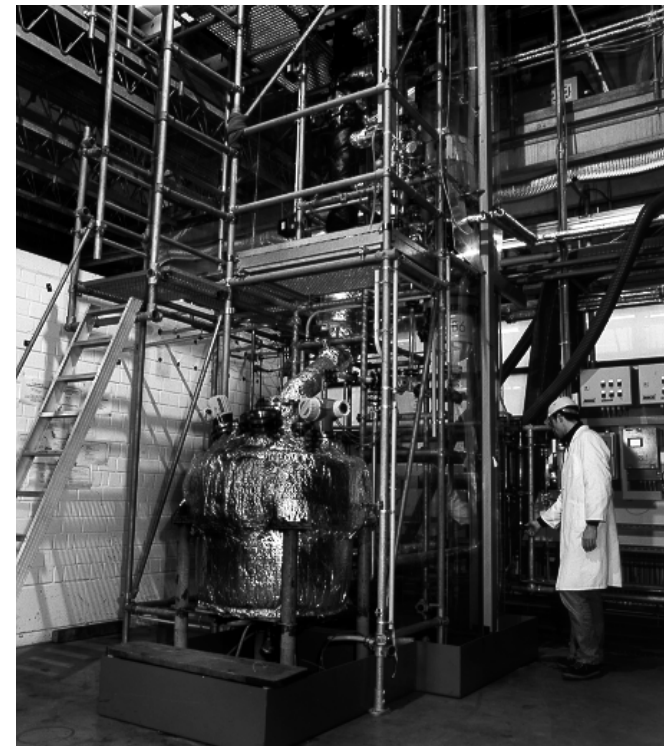
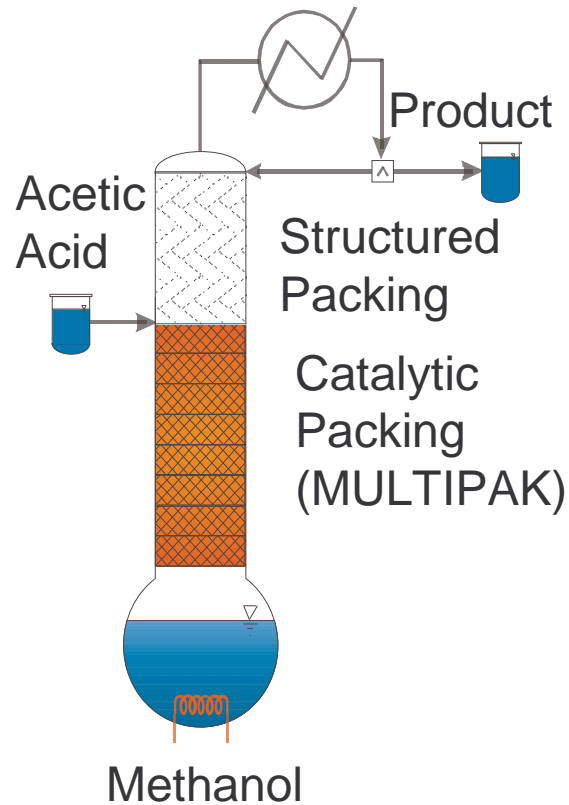
DN 50, Feedstrom = 1.4 kg/h, Feedverhältnis HAC/ETOH=1.02, RR=4.41



Klöker, Kenig, et al., *Canad. J. Chem. Eng.* 81, 725-732 (2003)



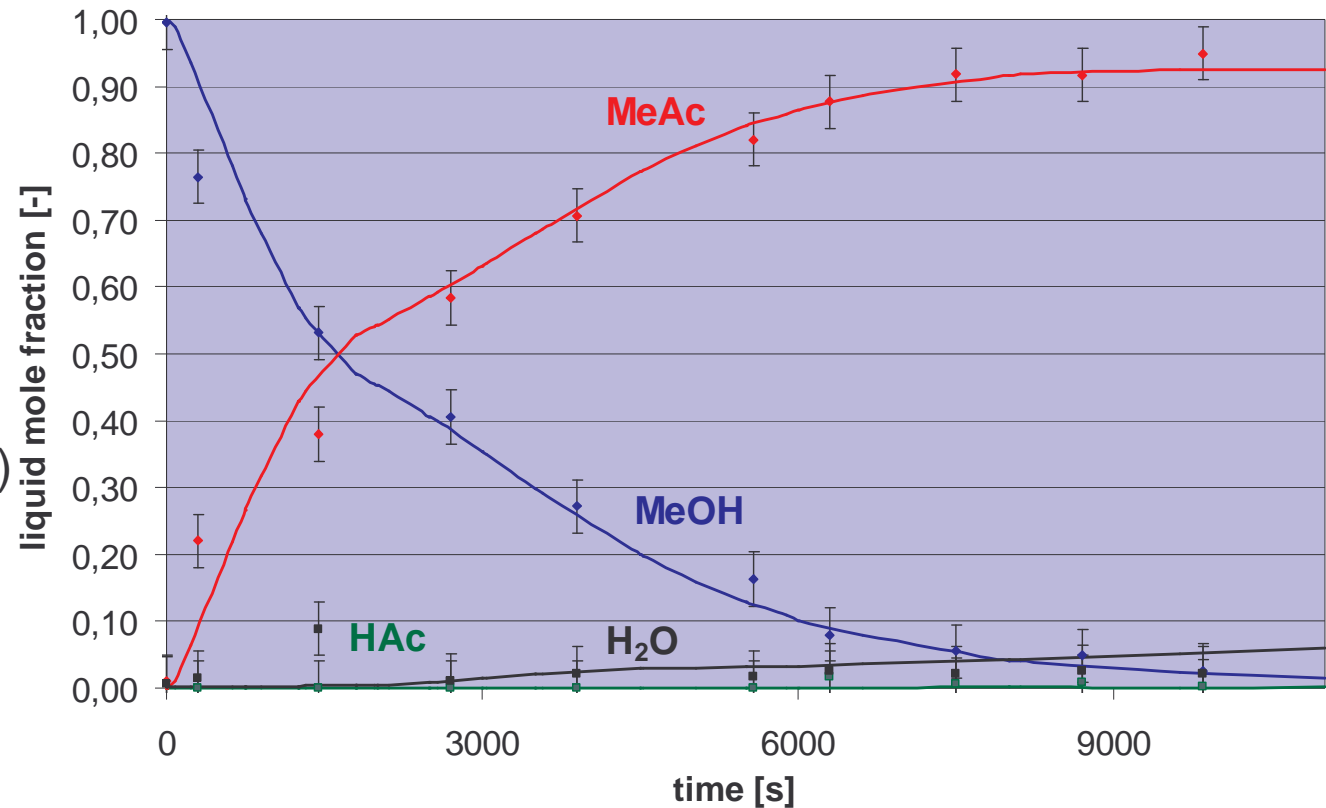
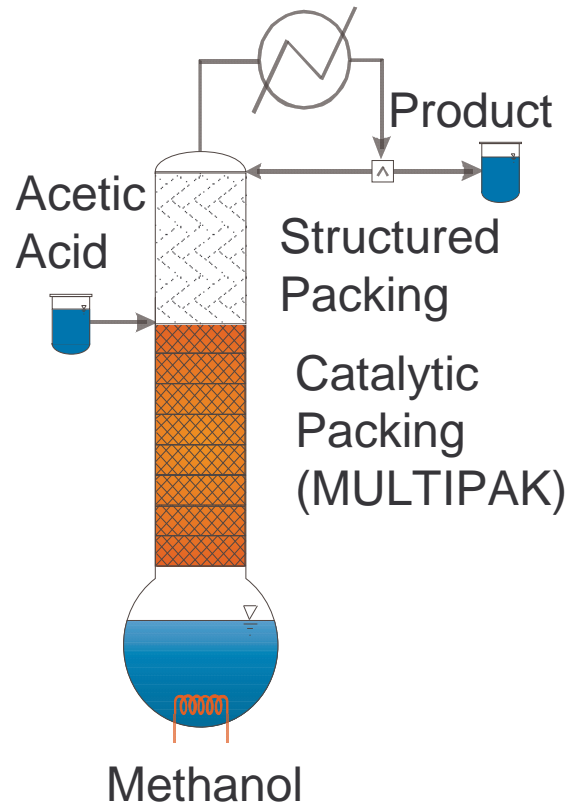
Beispiel 2: Semi-batch Prozess



- ⌘ Column diameter: 100 mm
- ⌘ Column height: 3 m
- ⌘ Dynamic increase of reflux ratio



Beispiel 2: Modellvalidierung



Eigene Experimente

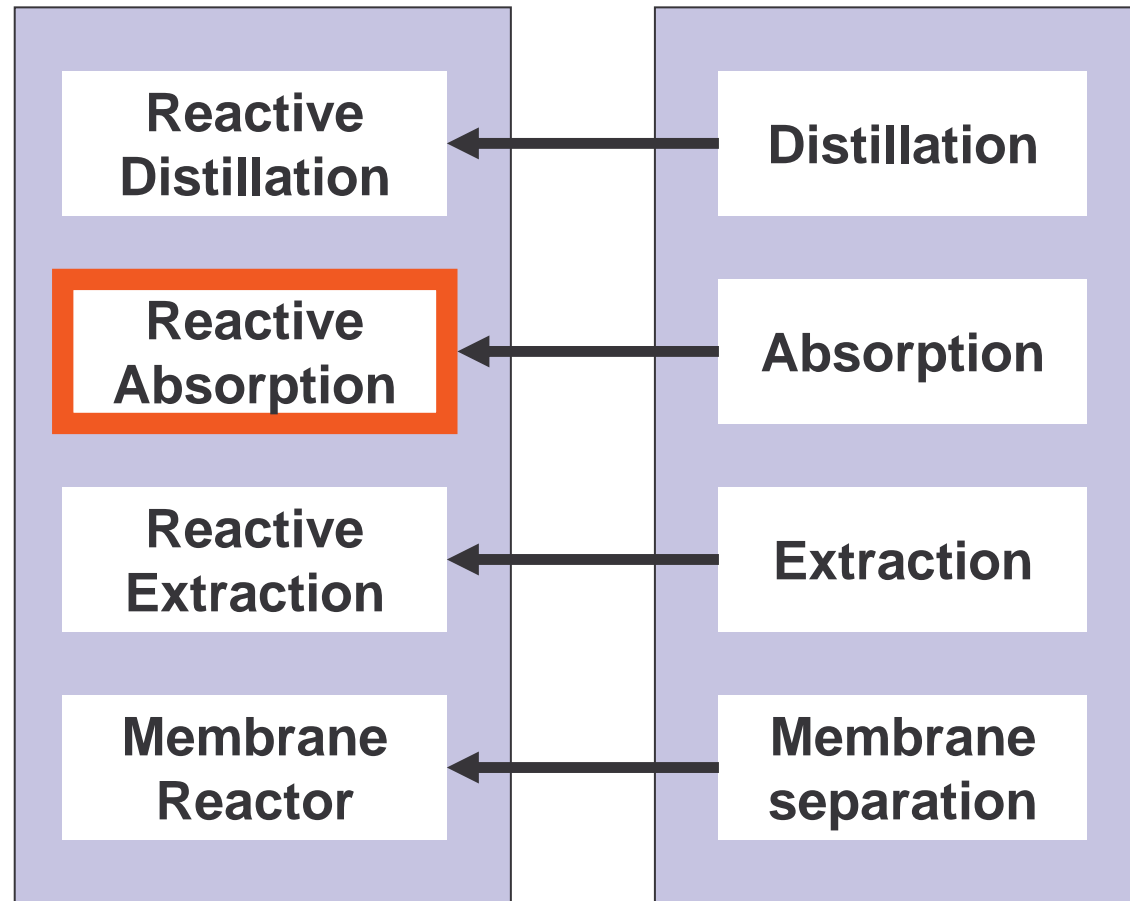
Noeres, Kenig & Górak, Chem. Eng. Process. 42, 157-178 (2003)



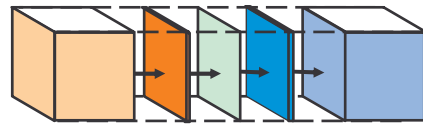


Reaktive Trennverfahren

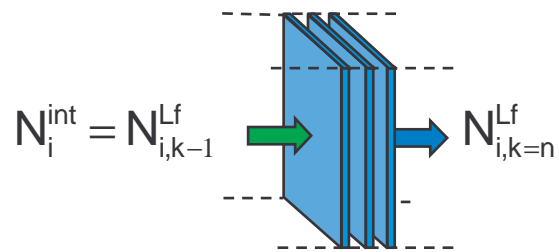
Trennverfahren



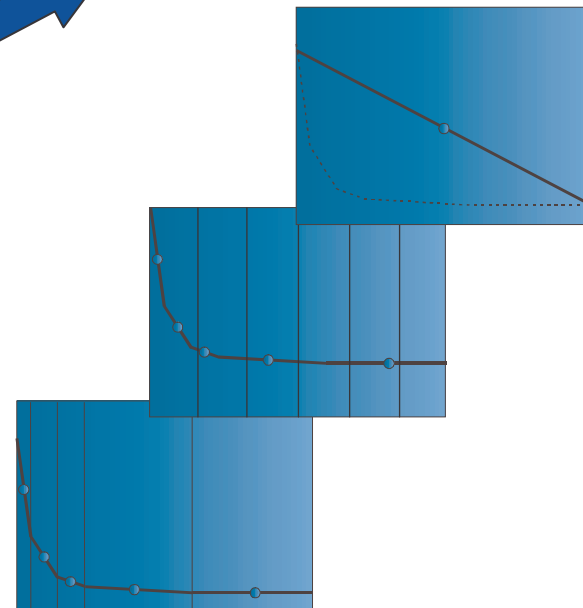
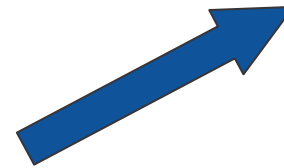
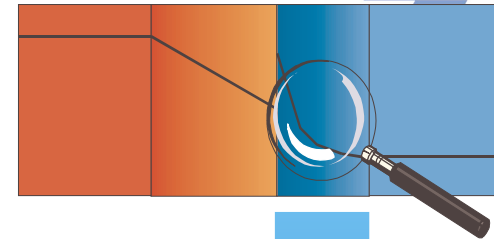
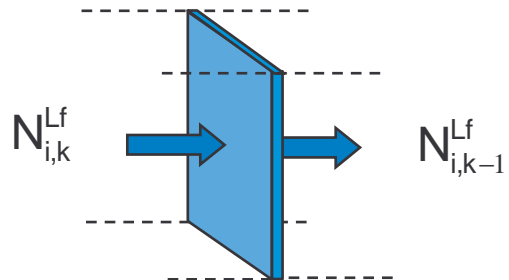
Diskretisierung des Filmbereichs



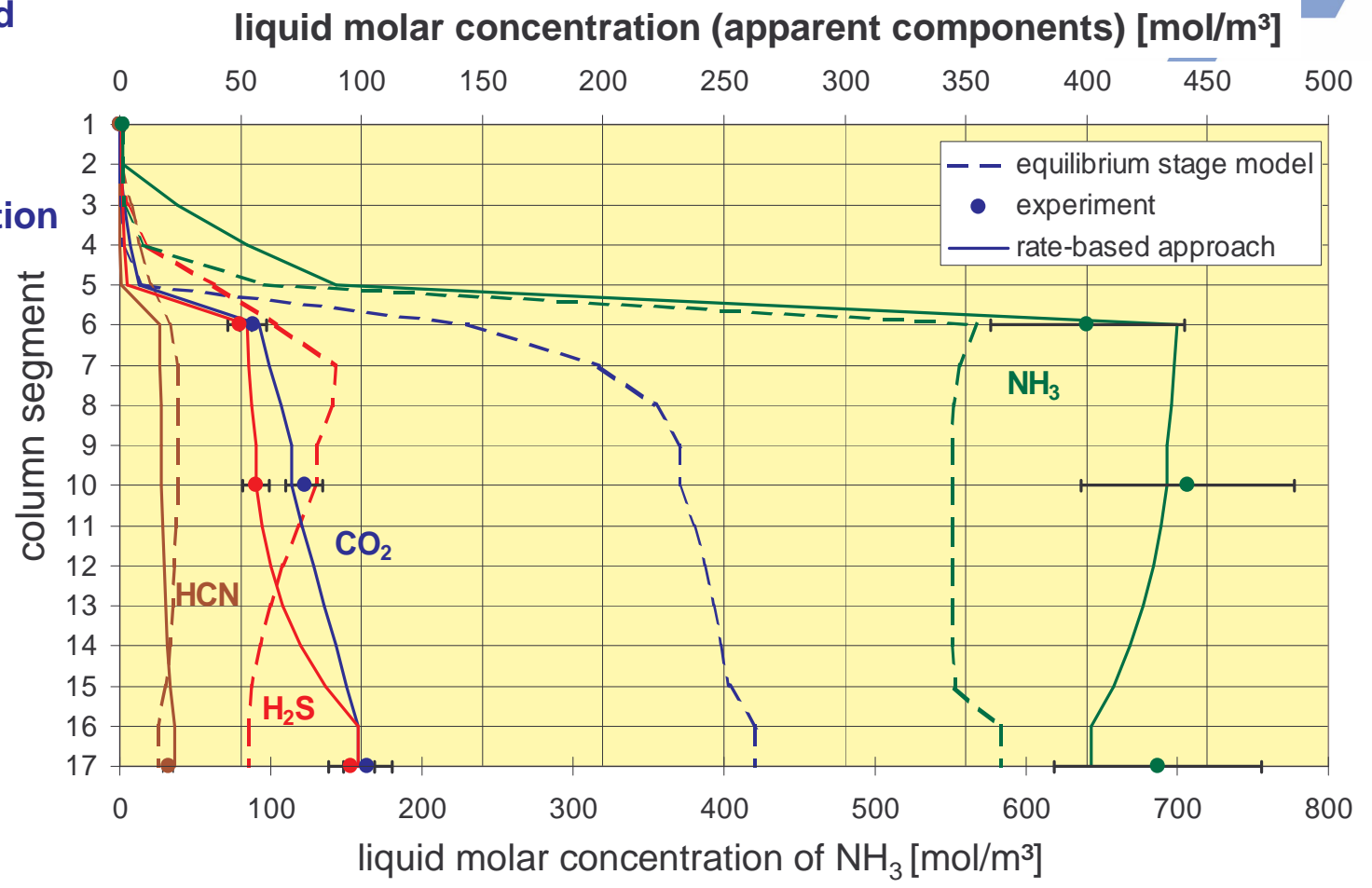
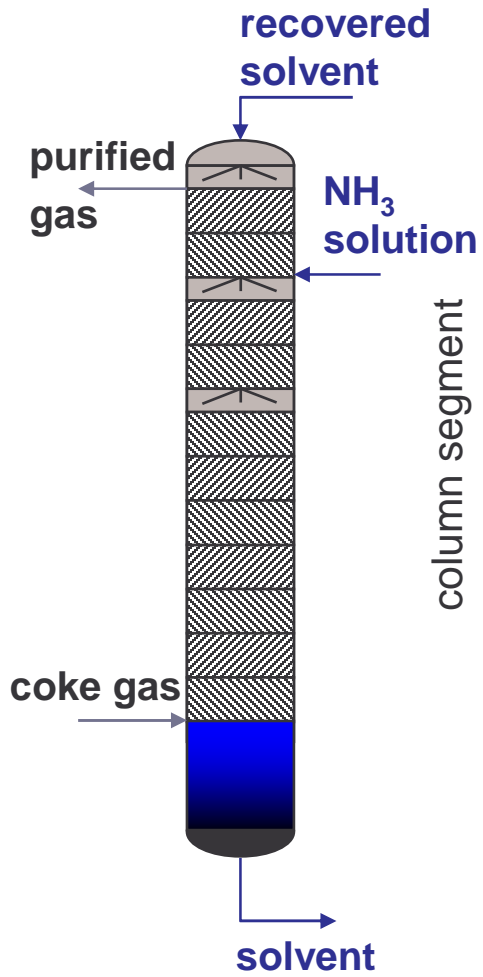
Diskretisierter Film



ein Diskret (k)



Beispiel 3: Kokereigasreinigung

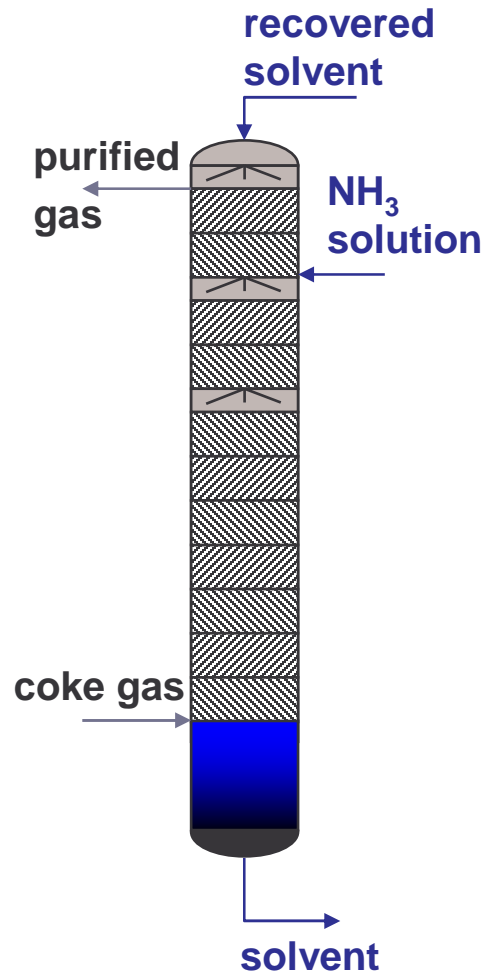


Experimente TU Berlin

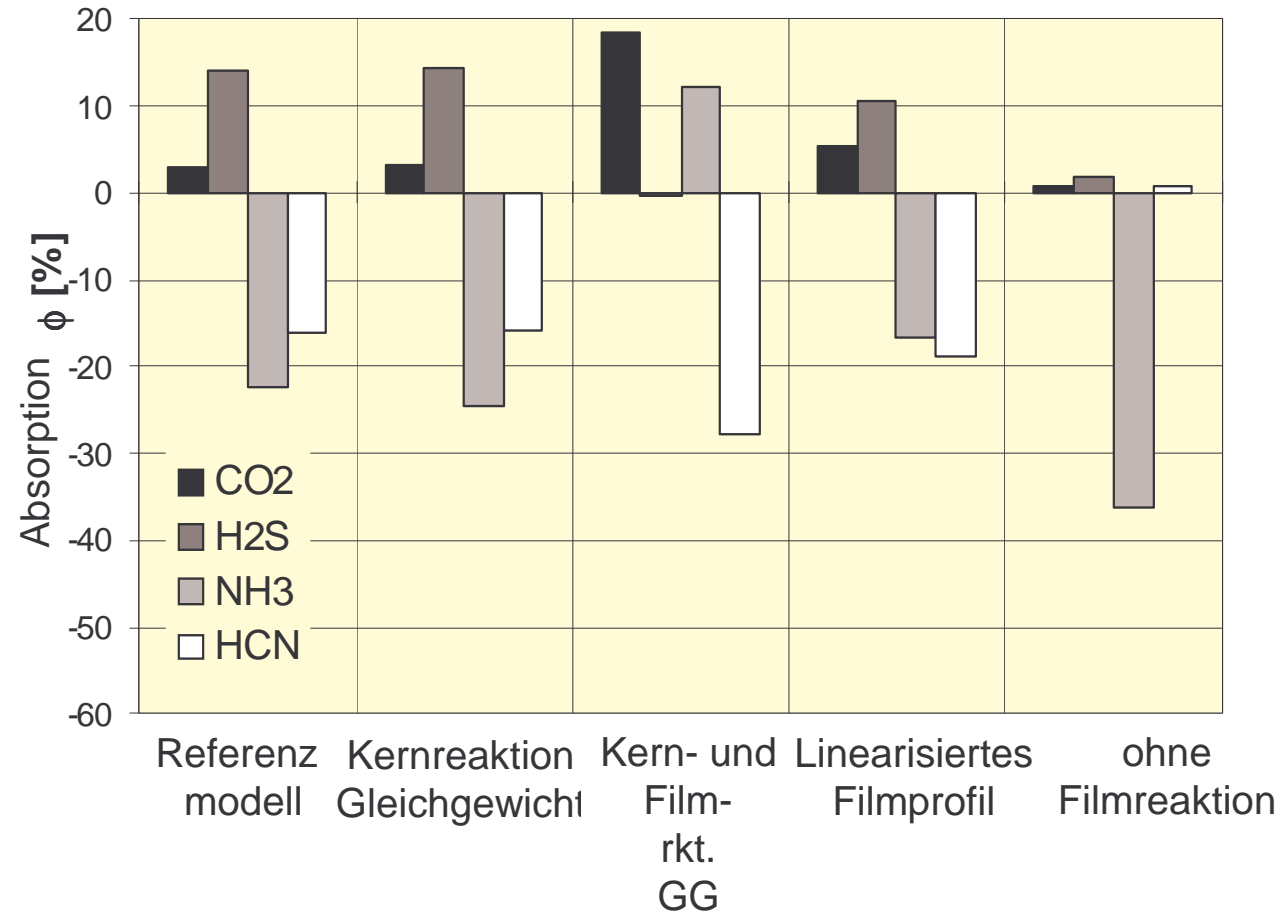
Schneider, Kenig & Górak, *Trans. Inst. Chem. Engrs*, 77 (1999) 633-638



Beispiel 3: Sensitivitätsstudien



Berechnete Absorptionsgrade der Kolonne



Schneider, Kenig & Górak, Chem. Ing. Tech. 72, 1224-1229 (2000)

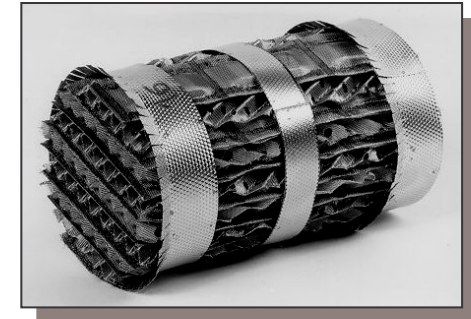
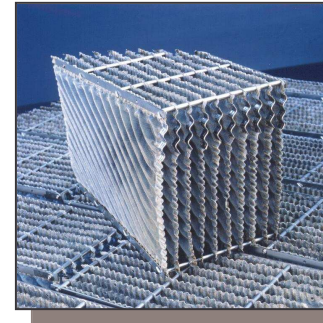


Notwendige Modellparameter



Einbautenspezifische Parameter:

- § Druckverlust
- § Trennleistung
- § Spezifische Kontaktfläche
- § Stoff- und Wärmetransportkoeffizienten
- § ...



Abhängigkeit von:

- § Strömungsgeschwindigkeiten
- § Stoffeigenschaften (ρ , ν , σ , D)
- § Geometrie

→ Korrelationen

Bislang:

Experimentelle Bestimmung
der Packungsparameter

Neuer Ansatz:

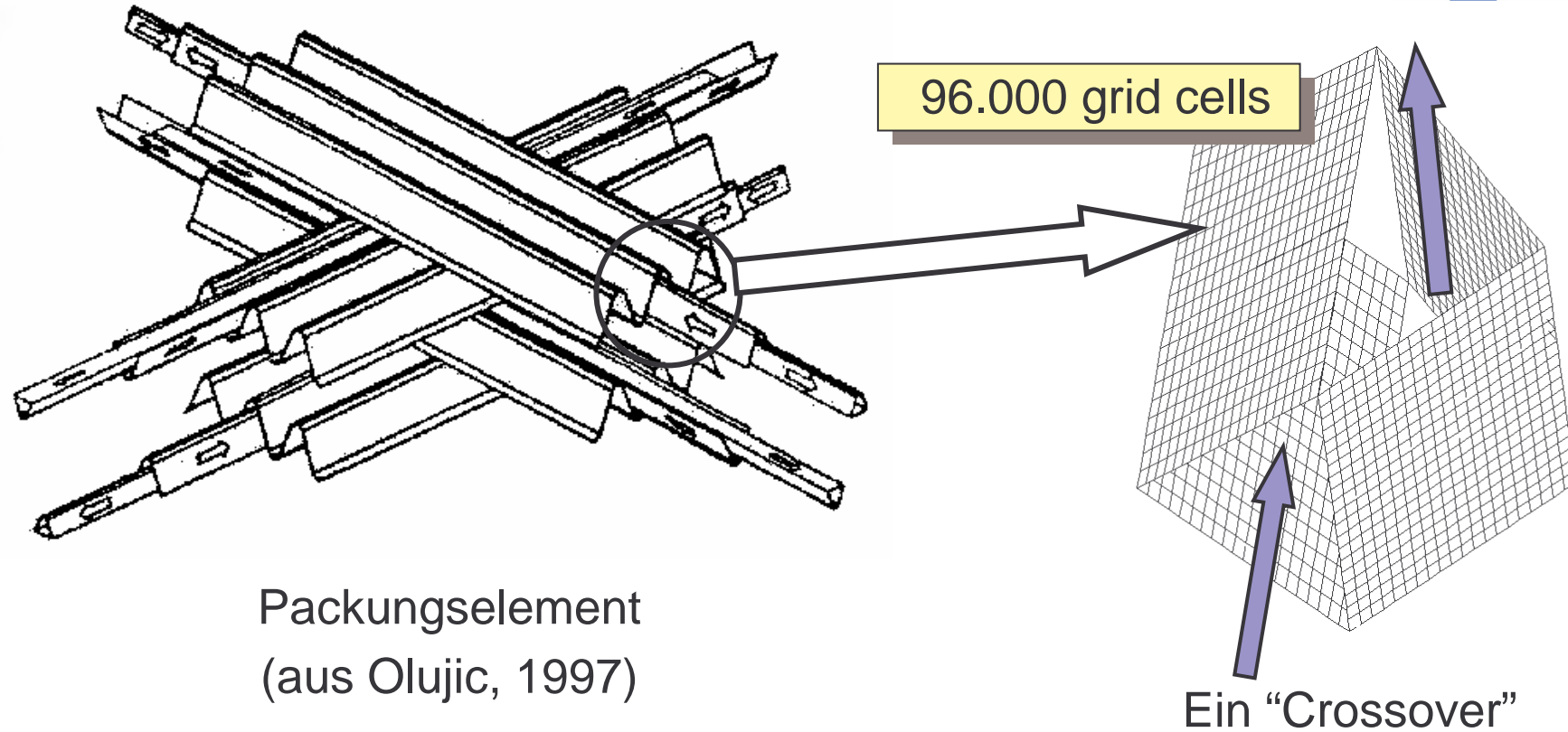
Bestimmung mit Hilfe von
CFD



Beispiel 4: Eine strukturierte Packung



Auflösung mit CFX 4.3

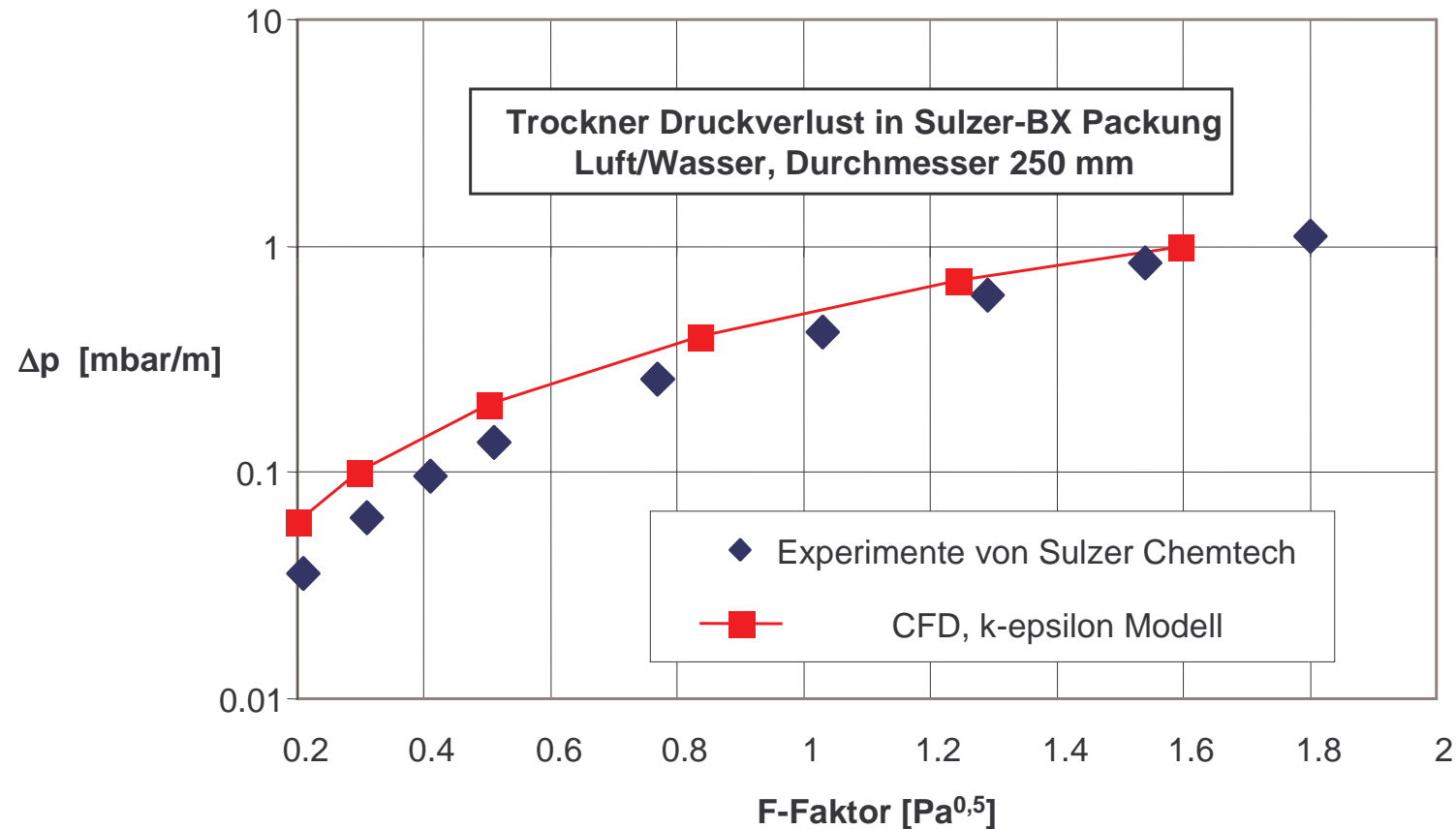


Modellierung einer Packung als periodische Struktur



Beispiel 4: Modellvalidierung

Druckverlust: CFD vs. Experimente



Korrelationen -> Prozesssimulator

Kenig, Klöcker, et al., Int. Symp. Mult. React. ISMR-2, Nürnberg, 2001



Beispiel 5: Eine katalytische Packung

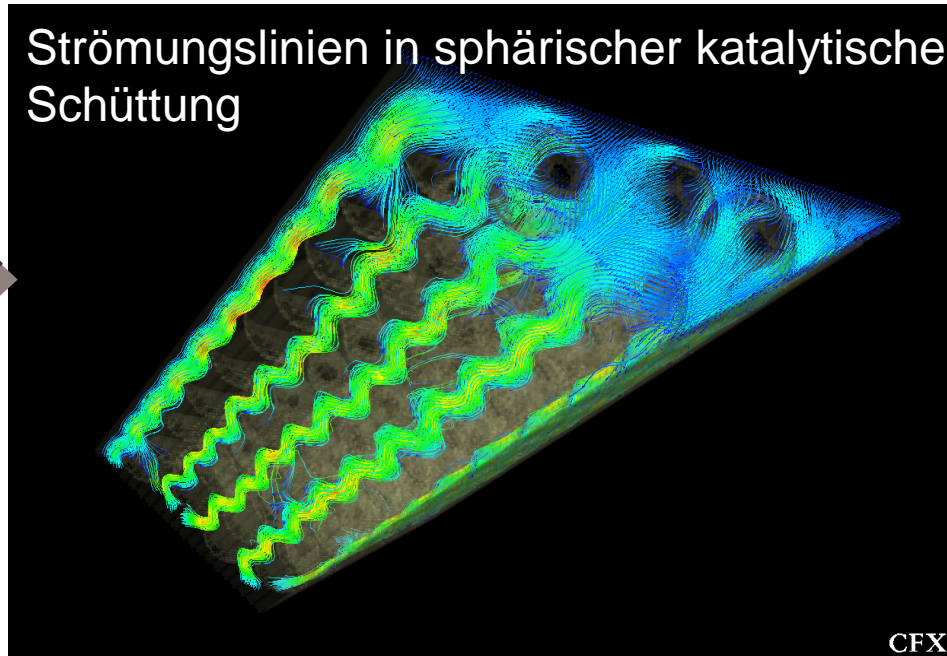


Auflösung mit CFX 5

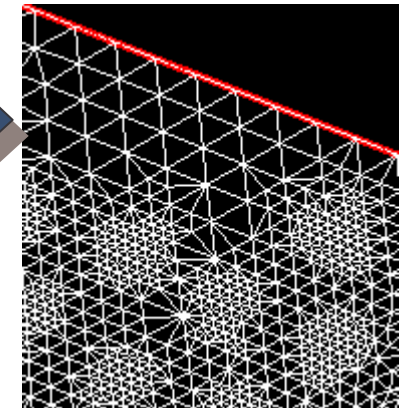
Sulzer
KATAPAK®-S



Strömungslinien in sphärischer katalytischer
Schüttung



Adaptives Gitter



- ⌘ Regellose Schüttung
- ⌘ Direkte Auflösung der Partikel
- ⌘ Postprocessing --> Verweilzeitverteilung

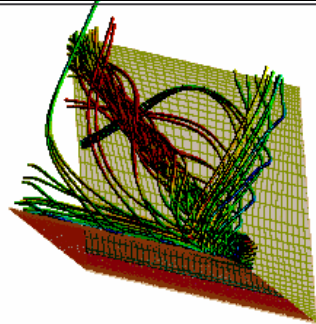
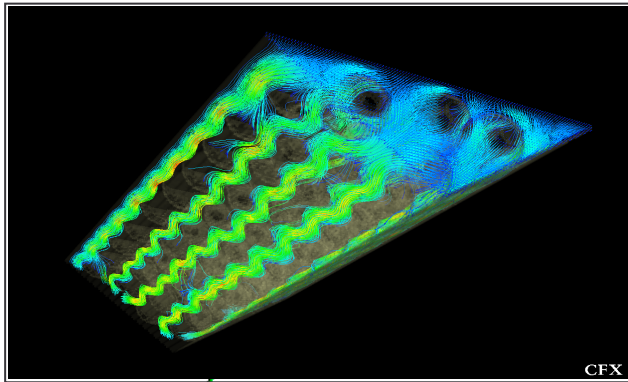
Gitterverfeinerung
nur an den
Grenzflächen

Egorov, Menter, Klöcker & Kenig, GVC-Fachausschuss "CFD", Weimar, März 2002



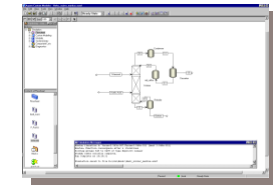
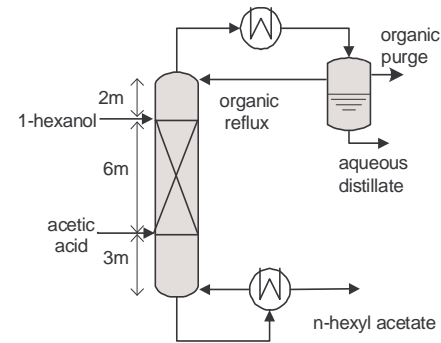
Eine vielversprechende Kombination

CFD-Simulation

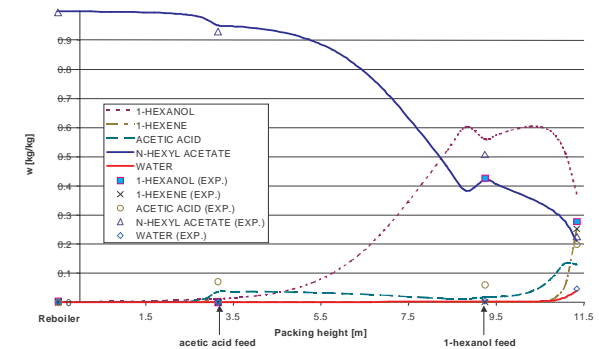


ein kleines Element

Prozesssimulation



162 mm diameter



Korrelationen für
Hydrodynamik und
Stofftransport
(Postprocessing)

kompletter Prozess





- § **Reaktive Trennverfahren sind eine attraktive Alternative zu konventionellen Verfahren**
- § **Reaktive Trennverfahren verlangen eine detaillierte, kinetisch basierte („rate-based“) Modellierung**
- § **Simulationsergebnisse stehen in guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten**
- § **Bestimmung geeigneter Modellparameter ist wichtig**
- § **CFD-Methoden („virtuelle Experimente“) reduzieren Anzahl teurer Experimente zur Parameterbestimmung**
- § **Kombination von CFD und Prozesssimulationen ebnet den Weg zu virtuellen prozessangepassten Apparateeinbauten**

