

Masterarbeit

Thema: Wärmetransportmodelle in der Reaktormodellierung

Motivation

Stark exotherme, heterogen katalysierte Reaktionen, wie die Maleinsäureanhydrid(MA)-Synthese, werden industriell in salzbadgekühlten Rohrbündelreaktoren durchgeführt, die trotz geringer Rohrdurchmesser ausgeprägte Hotspots aufweisen. Dies wirkt sich negativ auf die Reaktorleistung und Katalysatorlebensdauer aus. Der modellgestützten Prozessoptimierung kommt daher eine immer größere Bedeutung zu. Die Beschreibung des Wärmetransports ist dabei aufgrund von Inhomogenitäten in der Katalysatorschüttung aber immer noch herausfordernd. CFD-Simulationen liefern zwar einen guten Einblick in die Wärmetransportprozesse, sind aufgrund des enormen Rechenaufwands für den industriellen Einsatz jedoch nicht praktikabel. Eine möglichst genaue Beschreibung des Temperaturprofils mit „klassischen“ Reaktormodellen ist daher unerlässlich. Bestehende Modelle auf Basis des α -Wand-Modells haben sich dabei allerdings als häufig zu ungenau erwiesen.

Aufgaben

Im Rahmen der Arbeit soll am Beispiel selektiver Oxidationsreaktionen untersucht werden, ob eine Beschreibung des radialen Wärmetransports mit dem $\lambda(r)$ -Modell Vorteile gegenüber dem bislang verwendeten α -Wand-Modell bietet. Dazu soll zunächst ein Reaktormodell entwickelt und in gPROMS implementiert werden. Basierend auf zur Verfügung gestellten, aus CFD-Simulationen abgeleiteten Temperaturfeldern und Porositätsprofilen soll anschließend ein geeignetes Modell zur Berechnung effektiver Transportgrößen ausgewählt und angepasst werden.

Anforderungsprofil

Erfahrungen im Bereich der Reaktormodellierung wünschenswert

Beginn der Arbeit: ab sofort

Dauer der Arbeit: 6 Monate

Arbeitsweise: theoretisch

Anmerkungen: Durchführung bei Clariant,
Standort München und/oder Heufeld

Verknüpfung mit Industriepraktikum wünschenswert

Kontakt:

Dr.-Ing. Mauritio Müller

mauritio.mueller@clariant.com

+49 152 28276423