

TC-Schriftenreihe

Band 7

Matthias Schäfer

**Mathematische Modellierung
eines Zweiphasenströmungsrohres
zur Herstellung von Propylenchlorhydrin**

D 466 (Diss. Universität-GH Paderborn)

Shaker Verlag
Aachen 2000

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Schäfer, Matthias:

Mathematische Modellierung eines Zweiphasenströmungsrohres zur
Herstellung von Propylenchlorhydrin / Matthias Schäfer.

Aachen : Shaker, 2000

(TC-Schriftenreihe ; Bd. 7)

Zugl.: Paderborn, Univ., Diss., 2000

ISBN 3-8265-7592-X

Copyright Shaker Verlag 2000

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen
oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungs-
anlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8265-7592-X

ISSN 1433-6499

Shaker Verlag GmbH • Postfach 1290 • 52013 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Zusammenfassung: Ein Zweiphasenströmungsrohr zur Herstellung von Propylenchlorhydrin wird unter verfahrenstechnischen Aspekten untersucht und physikalisch-chemisch begründete Modelle zur Optimierung von Reaktorkapazität und Hauptprodukt-Selektivität bereitgestellt. Im ersten Verfahrensschritt des konventionellen Propylenchlorhydrinverfahrens folgen der simultanen Absorption von gasförmigem Chlor und Propen wärmegetönte Reaktionen in der dispersen Flüssigphase. Im Verlauf der Umsetzung kommt es durch Absorption großer Gasmengen zu ausgeprägten axialen Profilen von Systemgrößen. Zur Beschreibung eines technischen Reaktors finden eindimensionale Modelle und ein mehrdimensionales Modell auf Basis von Computational Fluid Dynamics (CFD) Anwendung. Bei beiden Ansätzen kommt in der Bilanzierung von Masse, Wärme und Impuls der einzelnen Phasen der Beschreibung der jeweiligen Austauschprozesse zwischen den Phasen besondere Bedeutung zu, in erster Linie dem limitierenden Stofftransport. Die Modellierung des Stoffdurchgangs geschieht auf Basis der Zweifilmtheorie. Dabei wird auf numerische Methoden zur Berechnung des Diffusions-Reaktionsgeschehens im Grenzfilm zurückgegriffen. Eindimensionale Reaktormodelle kombiniert mit dem Stoffdurchgangsmodell werden zur Simulation von Betriebszuständen verwendet, um funktionale Zusammenhänge zwischen den Zielgrößen und den System- bzw. Betriebsparametern zu ermitteln. Schwerpunkt der Modellierung mittels CFD sind hydrodynamische Aspekte der Zweiphasenströmung, insbesondere der radialen und axialen Phasenverteilung. Aus Ergebnissen der eindimensionalen Modellierung werden Vorschläge zur Prozeßintensivierung mittels veränderter Betriebsbedingungen abgeleitet, aus Ergebnissen der CFD-Modellierung Vorschläge zur Prozeßintensivierung mittels veränderter Reaktorgeometrien und Betriebsbedingungen.

Suchbegriffe: Propylenchlorhydrin, Strömungsrohr, Zweiphasenströmung, Chemische Reaktion, Stoffübergang, Modellierung, CFD

Abstract: A two phase tube reactor for production of propylene chlorohydrin is examined under engineering aspects and mathematical models based on fundamental process physics are provided for optimization of reactor capacity and selectivity of main product. In the first step of the conventional propylene chlorohydrin process simultaneous absorption of gaseous chlorine and propylene is accompanied by chemical reactions in the dispersed liquid phase. During conversion absorption of considerable amounts of gas cause distinct axial profiles of system variables. To predict performance of an industrial size reactor one dimensional models and a model on base of Computational Fluid Dynamics (CFD) are used. In both approaches description of respective transfer processes between phases have significance in mass, heat and momentum balances, first and foremost the limiting mass transfer. Mass transfer is modeled by means of two film theory. Numerical methods are used to calculate diffusion and reaction processes in the laminar boundary layer. Operating conditions are simulated with a one dimensional model combined with the mass transfer model to determine functional interdependencies between crucial parameters and system respectively model parameters. Main focus of CFD modeling are hydrodynamic aspects of the two phase flow, especially radial and axial phase distribution. From results of one dimensional modeling suggestions for process intensification by changing operating conditions are derived, from results of CFD modeling suggestions for process intensification by changing reactor geometry and operating conditions.

Key words: Propylene chlorohydrin, tube reactor, two phase flow, chemical reaction, mass transfer, modeling, CFD