

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Problemstellung	3
1.2	Stand der Technik	4
1.3	Ziel der Arbeit	7
1.4	Inhalt der Arbeit	8
2	Verfahren zur Herstellung von Propylenoxid	9
3	Theoretische Grundlagen	12
3.1	Spezifische Phasengrenzfläche	12
3.2	Stoffaustausch	12
3.3	Einfluß der chemischen Reaktion auf den Stoffübergang	16
3.4	Impulsaustausch	17
3.5	Wärmeaustausch	19
3.6	Turbulenz	20
4	Modellierung	25
4.1	Mikroskopischer Bereich	26
4.1.1	Chemische Reaktionen	26
4.1.2	Reaktionskinetik	29
4.2	Stoffaustausch	31
4.3	Makroskopischer Bereich	33
4.3.1	Reaktorgeometrie	33
4.3.2	Modelle für stationäre Mischer	34
4.3.3	Eindimensionale Reaktormodelle	36
4.3.4	Mehrdimensionales Reaktormodell auf Basis von CFD	42
4.4	Modellparameter	48

4.4.1	Stoffübergang	48
4.4.2	Reaktionskinetik	49
4.4.3	Reaktionswärme	51
5	Reaktorsimulation	52
5.1	Anwendung des Stoffübergangsmodells	54
5.2	Anwendung eindimensionaler Reaktormodelle	57
5.2.1	Einfluß des Verhältnisses Feedwasserstrom/Feedgasstrom auf Zielgrößen	63
5.2.2	Einfluß der Temperatur auf Zielgrößen	65
5.2.3	Einfluß des Inertgasanteils auf Zielgrößen	67
5.3	Anwendung mehrdimensionaler Modelle	69
5.3.1	Vergleich der Simulationsergebnisse ein- und mehrdimensionaler Modelle	72
5.3.2	Inertgasmassenstrom	75
5.3.3	Mittlerer Tropfendurchmesser	78
5.3.4	Eintrittstemperatur	80
5.3.5	Wirkungsweise der Verjüngung	82
5.4	Experimentelle Untersuchung des technischen Reaktors	84
6	Diskussion	93
7	Zusammenfassung und Ausblick	98
A	Anhang	100
	Charakterisierung der Betriebszustände	100
	Symbolverzeichnis	101
	Abbildungsverzeichnis	103
	Tabellenverzeichnis	104
	Literatur	105