



Doctoral Thesis

## Zur Dimensionierung katalytischer Festbettreaktoren

**Author(s):**

Sgarlata Lattmann, Massimo

**Publication Date:**

1969

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000093403> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

**Diss. Nr. 4302**

## **Zur Dimensionierung katalytischer Festbettreaktoren**

ABHANDLUNG  
zur Erlangung der Würde eines  
Doktors der technischen Wissenschaften  
der  
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN  
HOCHSCHULE ZÜRICH

vorgelegt von

**Massimo Sgarlata Lattmann**  
dipl. Chem. ETH

geboren am 29. 4. 1943  
italienischer Staatsangehöriger

Angenommen auf Antrag von

Prof. Dr. A. Guyer, Referent  
Prof. Dr. W. Richarz, Korreferent

1969  
Bamberg  
aku-Fotodruck

## 6. ZUSAMMENFASSUNG

In der vorliegenden Arbeit wurde versucht, auf Grund der Untersuchung eines typischen Falles einen Einblick in die relative Wichtigkeit der einzelnen Faktoren zu erlangen, die bei der a priori Dimensionierung eines katalytischen Festbettreaktors mit Hilfe eines zweidimensionalen Reaktormodelles und von Laboratoriumsmessungen die Genauigkeit der Berechnungen beeinflussen:

- 1) Methoden der Dimensionierung sowie mathematische Modelle katalytischer Festbettreaktoren sind bezüglich ihres Aufwandes und ihrer Zuverlässigkeit diskutiert worden.
- 2) Die Herleitung und die dabei eingeführten Vereinfachungen eines zweidimensionalen, einphasigen Reaktormodelles sowie die Vorstellungen, auf welche die dabei eingeführten phänomenologischen Transportparameter gründen, sind beschrieben worden.
- 3) Zu deren Lösung wurden die Reaktorgleichungen nach zwei verschiedenen Methoden diskretisiert, nämlich implizit nach Crank-Nicholson sowie nach einer expliziten Formel. Durch die Aufstellung von ALGOL-Rechenprogrammen wurden dann die erhaltenen Differenzgleichungen numerisch gelöst. Beide Verfahren wurden dann bezüglich Rechenzeit und Genauigkeit untersucht. Bei der impliziten Berechnung wurden ausserdem zwei verschiedene Fälle betrachtet, je nachdem ob die physikalisch-chemischen Eigenschaften des Reaktionsgemisches entlang dem Reaktor konstant gehalten oder den herrschenden Bedingungen entsprechend örtlich variiert wurden.
- 4) Bei der impliziten Methode konnte - im Unterschied zu früheren Arbeiten - durch die Einführung eines Iterationsverfahrens die Lösung der Differenzgleichungen bei jedem Integrationsschritt auf eine fast beliebige Genauigkeit gesteigert werden. Durch numerische Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass der durch dieses implizite numerische Verfahren bei der Lösung der Modellgleichungen eingeführte Fehler extrem klein und somit vernachlässigbar ist.

- 5) Es wurden Messsonden entwickelt, die eine minimale Störung des Festbettes bewirken und somit genaue Messungen der axialen und radialen Profile in Festbetten erlauben.
- 6) Die effektive Bettleitfähigkeit und der Wandfilmkoeffizient eines mit zylindrischen Katalysatorkörnern bepackten Rohres wurden durch Messung der bei Wärmeaustauschexperimenten auftretenden radialen und axialen Temperaturprofile bestimmt. Die Messungen erfolgten sowohl mit Luft als auch mit Wasserstoff.
- 7) Die Kinetik der Toluolhydrierung an einem Nickel-Kieselgur-Katalysator als Testreaktion wurde in einem Differentialreaktor experimentell untersucht. Es konnte festgestellt werden, dass im Temperaturbereich  $100 < T < 230$  °C sowohl die Adsorptions- bzw. Desorptionsgleichgewichte aller Reaktionspartner als auch die Oberflächenreaktionsgeschwindigkeitsbestimmend sind. Zur Korrelation der Messdaten wurden 8 verschiedene kinetische Ausdrücke herangezogen. Die weitere Untersuchung der Messdaten weist auf die Porendiffusion als einen die Reaktionsgeschwindigkeit ebenfalls mitbestimmenden Schritt hin. Im tieferen Temperaturbereich beträgt die Aktivierungsenergie 14,4 kcal/Mol und fällt der Theorie entsprechend im oberen Temperaturbereich auf ungefähr ihren halben Wert herab. Der kinetische Messbereich deckt den im Integralreaktor vorkommenden Variablenbereich vollständig.
- 8) Zur Aufnahme experimenteller radialer und axialer Temperatur- und Umsatzprofile wurde eine kleintechnische Apparatur mit einem Integralreaktor gebaut.
- 9) Mit deren Hilfe wurden Versuche mit variabler Gasumlaufgeschwindigkeit, Toluolkonzentration und Wandtemperatur ausgeführt und die gemessenen Temperatur- und Umsatzprofile mit den berechneten Werten verglichen. Diese letzteren zeigen eine allgemeine Abflachung. Die Abweichungen betragen meistens ungefähr 10 % in der Uebertemperatur bzw. im Umsatz am Ort des Temperaturmaximums.

10) Durch die Untersuchung der Genauigkeit der gemessenen Profile konnte die Güte des Vergleiches zwischen gemessenen und berechneten Werten als Kriterium für die Erfassung des totalen Fehlers bestätigt werden. Es wurde sodann die Auswirkung von Fehlern in den experimentell bestimmten Transport- und Reaktionsgeschwindigkeitsparametern durch numerische Simulation untersucht und gefunden, dass die Genauigkeit der experimentell bestimmten Aktivierungsenergie die Genauigkeit der Berechnungen stark beeinflusst, wogegen sich Fehler in den übrigen Parametern wenig auswirken.

11) Es konnte weiter geschlossen werden, dass im Falle stark exothermer Reaktionen mit merklichen Intrapartikelvorgängen der im zweidimensionalen, einphasigen mathematischen Reaktormodell enthaltene Modellfehler zur totalen Ungenauigkeit massgebend beiträgt.