

Zur Reduzierung des experimentellen und des Investitionsaufwands erfolgte ein semiquantitativer Vergleich von verschiedenen Mikromischern mittels CFD. Die Untersuchungen beschäftigten sich dabei mit einem LTF-Schikanenmischer, einem IMM-Interdigitalmischer, verschieden dimensionierten

IMM-Raupenmischern sowie einem LTF-Y-Mischer als Referenz. Zusätzlich wurden für alle Mischer die Betriebsbedingungen variiert, um deren Einfluss auf die Reaktionsführung zu untersuchen. Die Ergebnisse zeigen, dass beide LTF-Mischer für alle Betriebsbedingungen bei Mischzeiten im Bereich von

1000 ms liegen. Die IMM-Mischer zeigen deutlich kürzere Mischzeiten von weniger als 250 ms. Die kürzesten Mischzeiten werden vom IMM-Interdigitalmischer und vom IMM-Raupenmischer mit einer Kanalweite von 300  $\mu\text{m}$  erzielt.

### T1.01

## Modellierung und Simulation chemischer Reaktoren: Beispiel Autoabgaskatalyse

Dr. M. Votsmeier<sup>2)</sup>, Prof. Dr. O. Deutschmann<sup>1)</sup> (E-Mail: deutschmann@kit.edu)

<sup>1)</sup>Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Technische Chemie und Polymerchemie, Engesserstraße 18 – 20, D-76128 Karlsruhe, Germany

<sup>2)</sup>Umicore AG & Co. KG, Automotive Catalysts, Rodenbacher Chaussee 4, D-63457 Hanau-Wolfgang, Germany

DOI: 10.1002/cite.201050694

Mathematische Modellierung und numerische Simulation unterstützen zunehmend die Entwicklung, das Design und die Optimierung der Betriebsbedingungen von industriellen chemischen Reaktoren. Die jährlich millionenfach produzierten Autoabgaskatalysatoren zählen zu den am häufigsten verwendeten chemischen Reaktoren und sollen daher als Beispiel für die Fortschritte auf diesem Gebiet dienen.

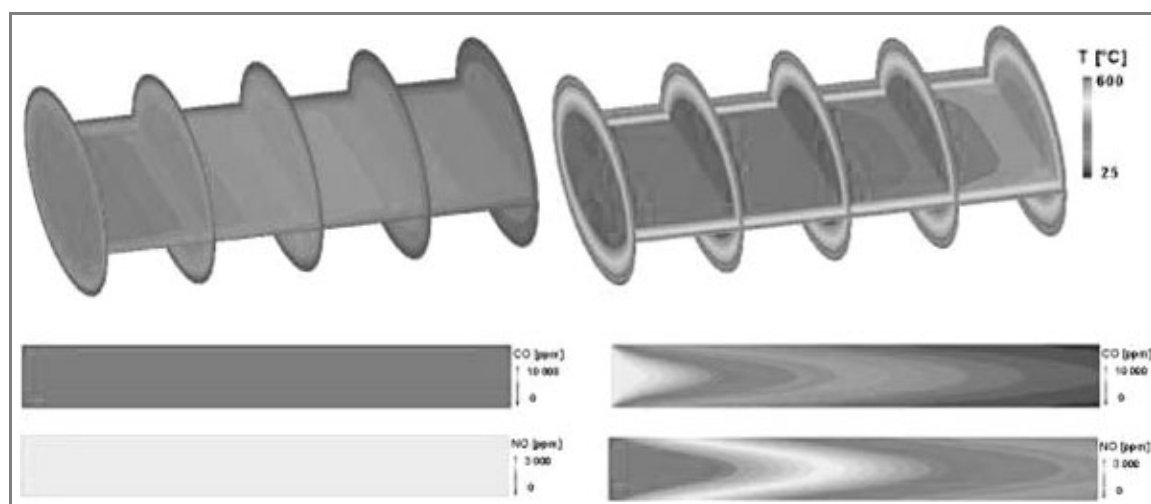
Moderne Abgasnachbehandlungssysteme enthalten heute eine Vielzahl chemisch aktiver Komponenten wie Edelmetalle (Pt, Pd, Rh), Sauerstoff- und Stickoxidspeicher (Ce, Ba), und SCR-Ka-

talysatoren ( $\text{V}_2\text{O}_5$ , Zeolithe). Die Modellierung der ablaufenden chemischen Reaktionen basiert zunehmend auf dem molekularen Geschehen. Diese sind mit Stoff- und Wärmetransportvorgängen (Diffusion im Washcoat, Strömung im Kanal, Wärmetransport in fluider und fester Phase) zu koppeln [1]. Darüber hinaus ändert sich mit jedem Lastwechsel die Temperatur, der Massenstrom und die Zusammensetzung des Abgases. Wärmeverluste an der Reaktorwand und örtlich ungleichförmige Massenströme am Reaktoreingang führen dazu, dass die chemischen Umsätze in den einzelnen Kanälen des wabenförmigen Kata-

lysatoren variieren. Diese zeitlich und räumlich kontinuierlich variierenden Einström- und Randbedingungen machen den Abgaskatalysator zu einem der komplexesten Systeme der chemischen Technik. Der Vortrag diskutiert heutige Modellierungs- und Simulationswerkzeuge im Bereich der Abgaskatalyse und deren Anwendung in der industriellen Praxis [2].

[1] N. Mladenov, J. Koop, S. Tischer, O. Deutschmann, *Chem. Eng. Sci.* **2010**, 65, 812.

[2] M. Votsmeier et al., *Catal. Today* **2010**, 151, 271.



**Abbildung.** Berechnete Temperaturverteilung der festen Struktur eines Dreibegekatalysators (oben) sowie CO- und NO-Molebrüche (unten) in einem Einzelkanal 12 s (links) und 149 s (rechts) nach dem Kaltstart des Fahrzeugs.