

## 7 Simulation von Mehrfachrührersystemen

In der industriellen biotechnischen Produktion sind Rührkesselreaktoren mit Mehrfachrührersystem sehr weit verbreitet. Dabei beträgt die Füllhöhe zum Teil ein Vielfaches des Tankdurchmessers. Als wesentliche Vorteile der hohen und schlanken Bauform gegenüber einer Standardgeometrie mit nur einem Rührer sind bei identischem Volumen die folgenden Punkte zu nennen:

- Geringerer Bedarf an Stellfläche.
- Bei großen Reaktorvolumina wird die Wärmeabfuhr aus dem Reaktionsvolumen häufig problematisch, insbesondere wenn bei temperatursensitiven Prozessen die Entstehung von Temperaturgradienten im Reaktor verhindert werden muss. Dem kann mit im Reaktorinneren installierten Wärmeaustauschern begegnet werden. Soll die Wärmeabfuhr jedoch über einen Doppelmantel oder über an der Innere der Außenwand angeschweisste Rohrschlangen erfolgen, so bietet die schlanke Bauform ein günstigeres Verhältnis von Mantelfläche zu Reaktorinhalt.
- Die lange Rührerwelle erlaubt die Installation unterschiedlicher Anzahlen sowie unterschiedlicher Typen von Rührern. So können prozessrelevante Parameter wie die großräumige Strömungsstruktur, der spezifische Leistungseintrag oder die Dispergierung der Gasphase gezielter beeinflusst werden.

Nachteilig wirkt sich die höhere Bauform auf die Zeitkonstanten für den axialen Stofftransport aus. Aus diesem Grund muss in Mehrfachrührersystemen immer die Möglichkeit der Ausbildung von erheblichen Konzentrationsgradienten für zudosierte Stoffe (z.B. Nährsubstrate) oder Sauerstoff beachtet werden. Hier kann die Simulation der relevanten Konzentrationsverteilungen einen wichtigen Beitrag zur Auslegung und Prozessführung biotechnischer Stoffumsetzungen in Rührkesselreaktoren im Produktionsmaßstab leisten. In den folgenden beiden Abschnitten werden entsprechende Simulationsergebnisse für zwei Rührkesselkonfigurationen mit Drei- bzw. Vierfachrührer diskutiert.

### 7.1 Rührkesselreaktoren mit Vierfachrührer

Die in diesem Abschnitt dargestellten Simulationsergebnisse sind für eine Reaktorkonfiguration berechnet, die einem Rührkesselreaktor im Biozentrum der Firma Statoil (Norwegen) entspricht (Abb. 37)<sup>1</sup>. Die geometrischen Abmessungen sind in Tabelle 9 zusammengefasst.

---

<sup>1</sup>In diesem Rührkesselreaktor wurden im Rahmen des „Nordic program on bioprocess engineering“ Untersuchungen zum Einfluss der Strömungsverhältnisse auf die Produktion von Hefe-Biomasse durchgeführt [98].

$T$	2,09 m
$H$	6,25 m
$V_T$	21,4 m <sup>3</sup>
$D$	0,7 m = $T/3$
$B$	0,21 m = $T/10$

Tabelle 9: Geometrische Abmessungen des simulierten Vierfachrührersystems

	Rührerkombination	$C_1$ [m]	$C_1/D$	$S_i$ [m]	$S_i/D$
1.	4 Rushton-Turbinen	1,05	1,50	1,31	1,87
2.	4 Schrägblattrührer	1,05	1,50	1,31	1,87
3.	2 Rushton-Turbinen und 2 Schrägblattrührer	1,05	1,50	1,31	1,87
4.	2 Rushton-Turbinen und 2 Schrägblattrührer in asymmetrischer Anordnung	1,05	1,50	$S_1$	$S_1/D$
				1,78	2,54
				$S_2$	$S_2/D$
				0,84	1,20
				$S_3$	$S_3/D$
				1,78	2,54

Tabelle 10: Simulierte Rührerkombinationen (s. auch Abb. 37).

Bei den nachfolgenden Untersuchungen steht der Vergleich verschiedener Kombinationen radial bzw. axial fördernder Rührer hinsichtlich der Auswirkungen auf Makrovermischung und Konzentrationsgradienten im Vordergrund. Die Makrovermischung wird anhand der Simulation eines Pulsexperimentes verglichen (Abschnitt 7.1.1). Die Darstellung der Auswirkungen der Rührerkombination auf die Ausbildung von Konzentrationsgradienten erfolgt anhand des Beispiels der Substratverteilung während einer Fed-Batch-Fermentation der Hefe *Saccharomyces cerevisiae* (Abschnitt 7.1.3). Die vier betrachteten Rührerkombinationen sind in Tab. 10 zusammengefasst, die beiden verwendeten Rührertypen zeigt Abb. 33.

Die Rushton-Turbinen fördern bevorzugt radial-tangential, die Schrägblattrührer axial-tangential. Obwohl ausgehend von diesen beiden Rührertypen zahlreiche abgewandelte Bauformen mit verbesserten Eigenschaften unter bestimmten Betriebsbedingungen (geringerer Leistungsrückgang unter Begasung, Verhalten in hochviskosen Medien) entwickelt worden sind, können sie als Standardrührer für die genannten Pumprichtungen bezeichnet werden. Auf die Untersuchung weiterer Rührertypen, die im Wesentlichen ähnliche grossräumige Strömungsstrukturen erzeugen, wird daher verzichtet.

Für alle betrachteten Rührer entspricht der Rührerdurchmesser den in Tab. 9 angegebenen Werten. Da sich die Bodenform nur auf den Einflussbereich des unteren Rührers auswirkt, ist in den Simu-

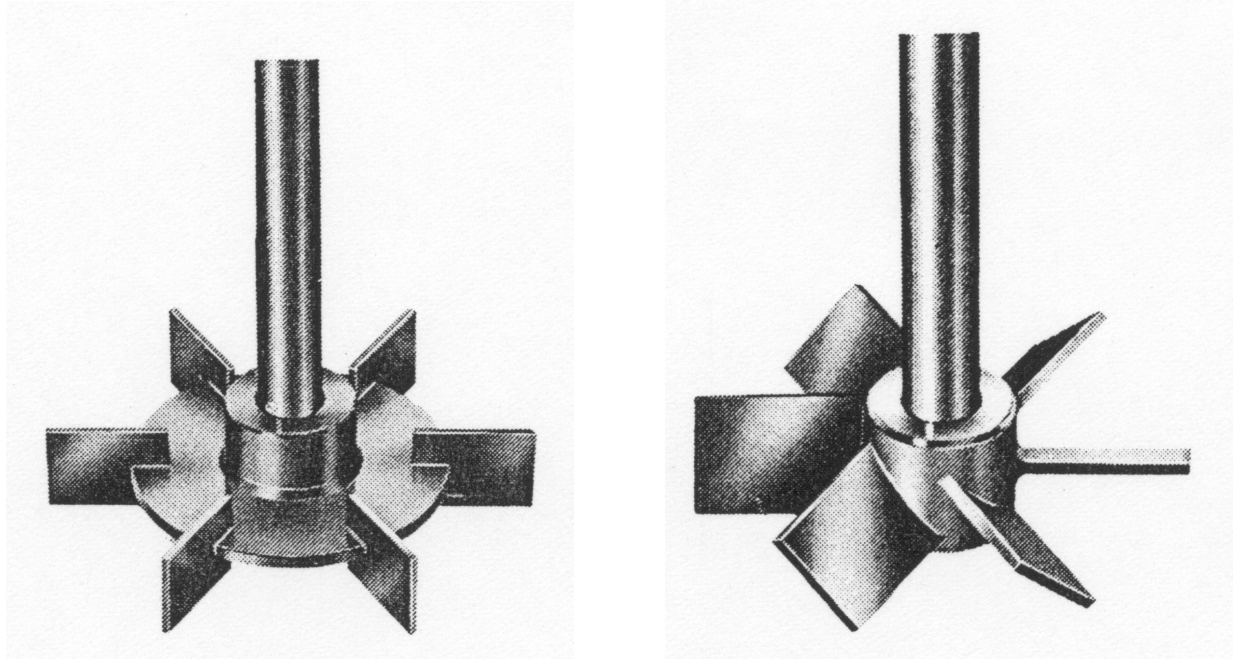


Abbildung 33: Simulierte Rührertypen: Links Rushton-Turbine, rechts Schrägblattrührer (aus [35]).

lationen vereinfachend ein ebener Boden berücksichtigt. Wegen der Dominanz der axial-radialen Flüssigkeitszirkulation wird in den vergleichenden Simulationen zunächst auf axialsymmetrisch simulierte Strömungsfelder zurückgegriffen, die Wirkung der Strombrecher ist als Impulssenke in der Reynolds-Gleichung für die tangentielle Raumrichtung berücksichtigt (s. Jenne [59] sowie Harvey und Greaves [50], [51]). In den Reaktorkonfigurationen 1, 2 und 3 (Tab. 10) beträgt der Rührerabstand  $S_i = 1,87 \cdot D$ . Für Rushton-Turbinen wird der für einen unabhängigen Betrieb der einzelnen Rührer erforderliche minimale Rührerabstand  $S_i$  zwischen  $1,16 \cdot D$  (Rutherford et al. [117]),  $1,5 \cdot D$  (Smith et al. [125]) und  $2,0 \cdot D$  (Armenante und Chang [3]) angegeben. Oberhalb dieser Werte bildet sich ein Strömungsfeld mit den charakteristischen Großwirbeln ober- und unterhalb der Rührer aus, der gesamte Leistungseintrag entspricht dem einer entsprechenden Anzahl von Einzelrührern. Auch der Bodenabstand von  $C_1 = 1,5 \cdot D$  ist ausreichend, um einen Einfluss des Bodens auf die Rührwerksströmung auszuschließen. In den fluiddynamischen Simulationen werden daher für alle Rushton-Turbinen die Randbedingungen des Einzelrührers eingesetzt. Im Falle der Schrägblattrührer kann eine gegenseitige Beeinflussung jedoch nicht ausgeschlossen werden, da der oben liegende Rührer in den Ansaugbereich des unter ihm liegenden Rührers fördert. Trotzdem werden auch in diesem Fall sowie auch für die Rührerkombination (3) die unveränderten Randbedingungen des Einzelrührers verwendet.

Zur Veranschaulichung der resultierenden großräumigen Strömungsstrukturen und zum Verständnis der in den beiden folgenden Abschnitten gezeigten Ergebnisse sind in den Abb. 34 und 35 die simulierten Geschwindigkeitsfelder bei einer Rührerdrehzahl von  $n = 140$  1/min dargestellt. Diese

Abbildungen sind der Dissertation von Jenne [59] entnommen.

### 7.1.1 Mischzeitexperimente

In einem Vierfachrührersystem mit großem  $H/T$ -Verhältnis ist der axiale Stofftransport die entscheidende Komponente für die Makrovermischung. Zur Ermittlung einer Mischzeit in einem Pulsexperiment liegt es also nahe, die Spurstoffzugabe auf die Flüssigkeitsoberfläche, die Aufnahme des Antwortsignals unterhalb des untersten Rührers vorzunehmen. Simulationen eines solchen Pulsexperiments für die verschiedenen Rührerkombinationen sind in diesem Abschnitt dargestellt.

Wichtige Aussagen zur axialen Durchmischung lassen sich jedoch auch bereits anhand der großräumigen Strömungsstrukturen treffen. Abb. 34 zeigt für die vier Rushton-Turbinen deutlich die Ausbildung von Zirkulationszellen, die nur in geringem axialen Austausch miteinander stehen. Die Abfolge der Reaktorstufen, jeweils bestehend aus einem Rührer und den typischen Großwirbeln ober- und unterhalb der Rührerebene, ähnelt einer Rührkesselkaskade aus Rührkesseln mit zentral eingebautem Einzelrührer. Jeweils zwischen zwei Rührern treffen sich an der Aussenwand die Großwirbel und bilden einen gemeinsamen Strom in Richtung des Kesselzentrums. Dieser nach innen fließende Volumenstrom weist keine axiale Komponente auf und bildet daher eine Art Trennfläche für den axialen Stofftransport. Völlig anders gestaltet sich die großräumige Strömung im Falle der vier Schrägblattrührer (rechtes Bild in Abb. 34). Zwar bilden sich auch hier vier großräumige Wirbel, aber ein durchgehender axialer Strom ist im Kesselzentrum nach unten, an der Aussenwand nach oben gerichtet. Die gemischten Konfigurationen 3 und 4 können als Kombinationen zweier Zweifachrührersysteme betrachtet werden. In solchen Rührkesselreaktoren wird häufig eine unten eingebaute Rushton-Turbine zur Gasdispergierung eingebaut, während der oben verwendete axial fördernde Rührer die Makrovermischung verbessern soll. Abb. 35 zeigt, dass sich nur noch oberhalb des unteren Schrägblattrührers eine Trennfläche ausbildet. Unterhalb der Schrägblattrührer bildet sich ein großräumiger Wirbel mit starker Konvektion aus. Wie im rechten Bild von Abb. 35 zu sehen ist, kann die Ausdehnung dieses Wirbels durch die Vergrößerung des Abstands zwischen Rushton-Turbine und Schrägblattrührer variiert werden, ohne dass die prinzipielle Strömungsstruktur beeinflusst wird. Besonders deutlich werden die Unterschiede der einzelnen Konfigurationen hinsichtlich des axialen Transports anhand der in Abb. 36 dargestellten Profile der axialen, konvektiven Austauschströme in positiver  $z$ -Richtung. Der axiale Austauschstrom  $F_{z,konv}^{iz}$  in der Ebene  $iz$  wird durch Integration der Einzelströme über den Reaktorquerschnitt berechnet:

$$F_{z,konv}^{iz} = \frac{1}{2} \sum_{ir}^{nr} \sum_{i\varphi}^{n\varphi} |u_{ir,i\varphi}^{iz}| A_{ir,i\varphi} \quad (90)$$

Darin ist  $A_{ir,i\varphi}$  die Querschnittsfläche eines finiten Volumens in axialer Richtung. Aufgrund der Kontinuitätsbedingung entspricht natürlich jedem dieser Austauschströme ein gleich großer Strom in entgegengesetzter Richtung.

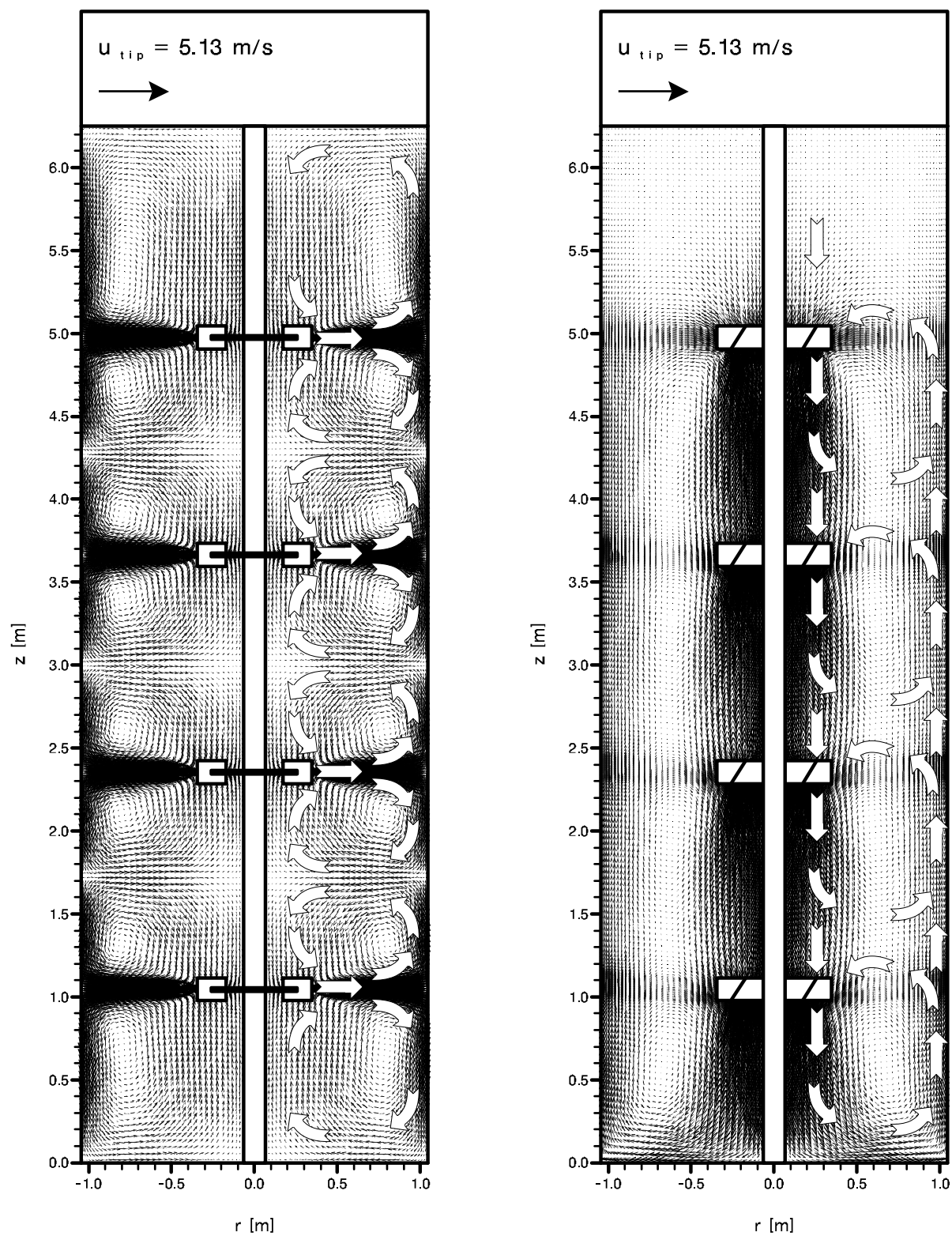


Abbildung 34: Geschwindigkeitsfelder im Vierfachrührersystem, links vier Rushton-Turbinen, rechts vier Schrägblattrührer (aus Jenne [59]).

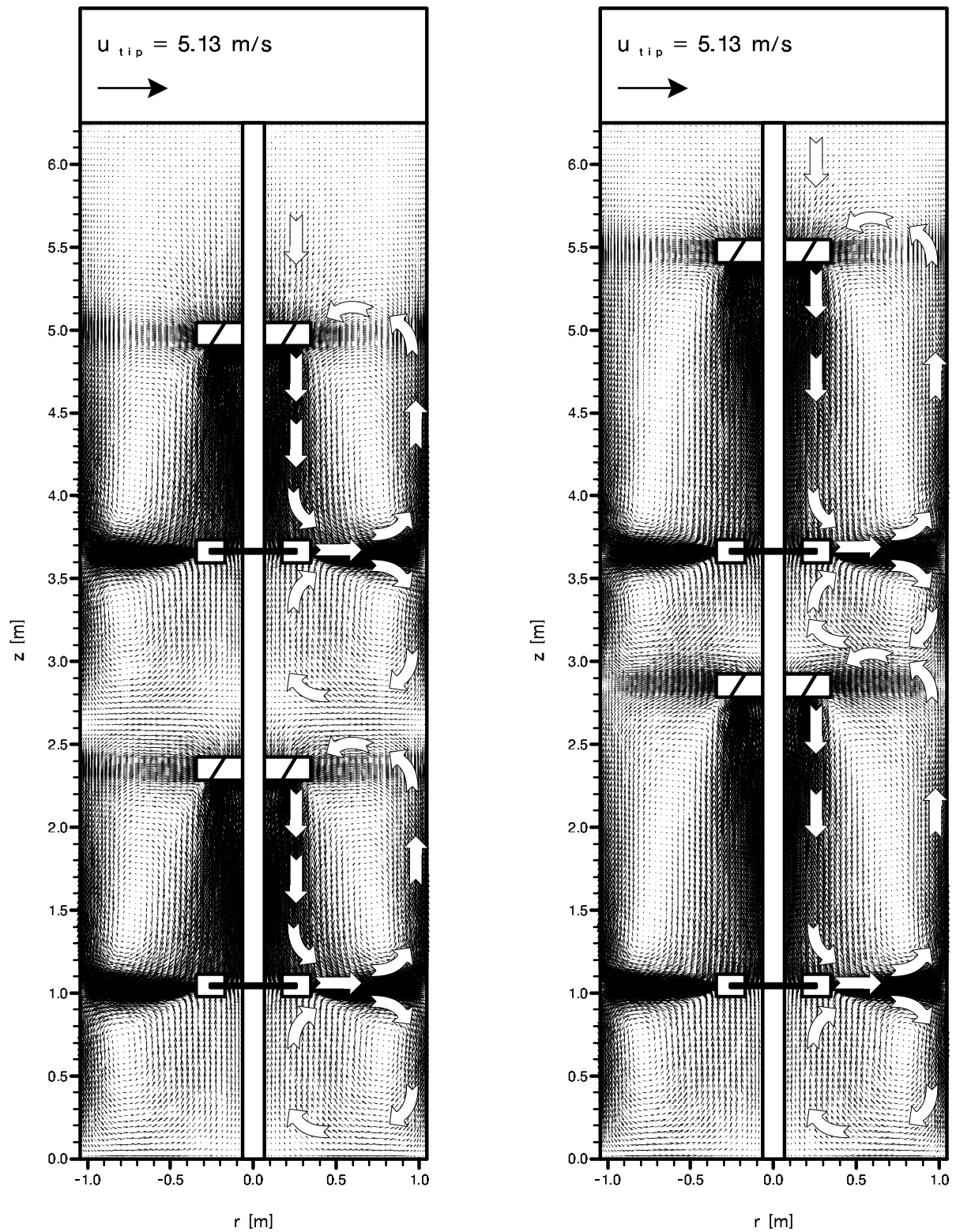


Abbildung 35: Geschwindigkeitsfelder im Vierfachrührersystem, 2 Rushton-Turbinen und zwei Schrägblattrührer mit unterschiedlichem Abstand (aus Jenne [59]).

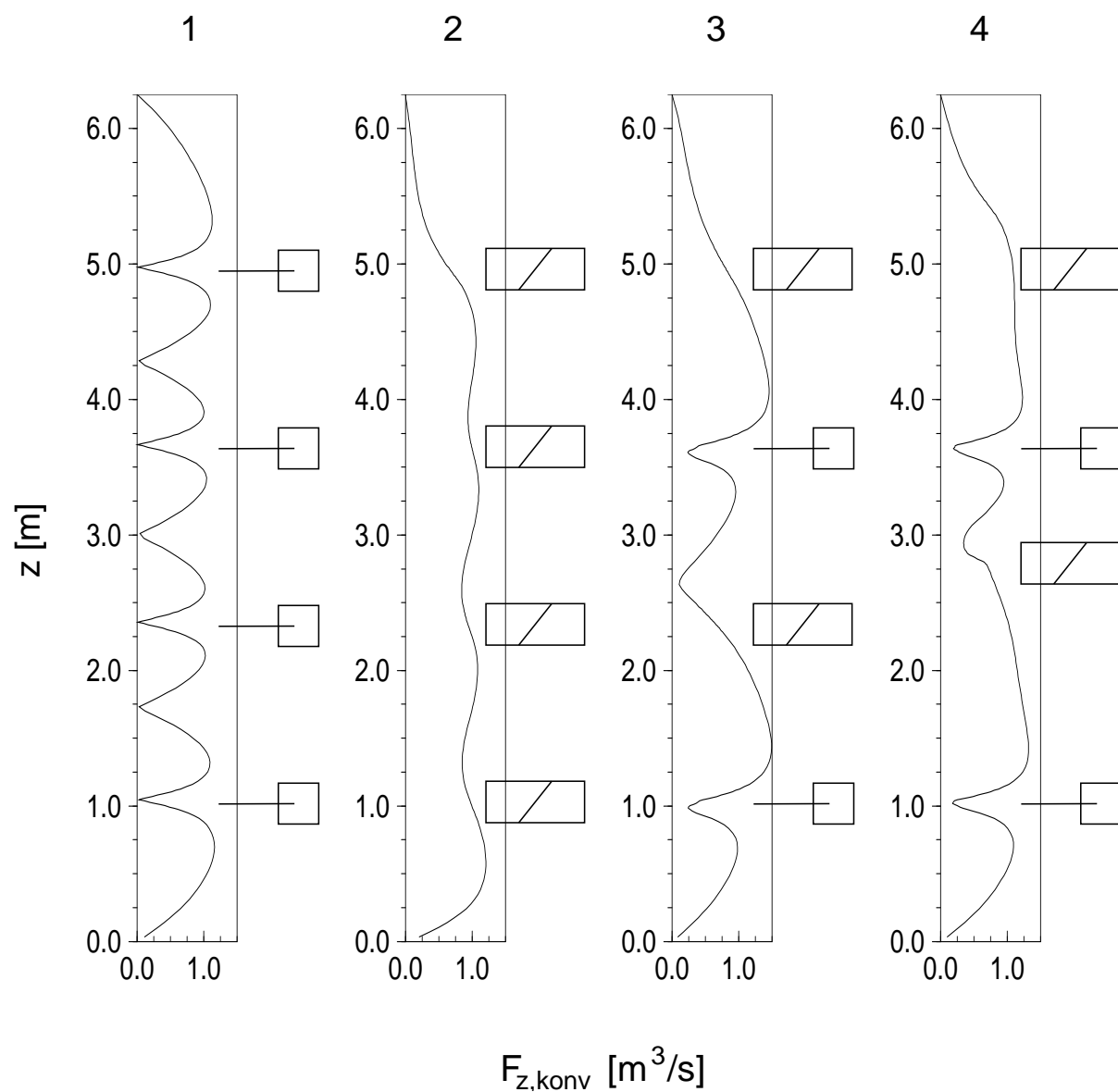


Abbildung 36: Axiale Profile der über den Reaktorquerschnitt integrierten axialen Konvektionsströme für die vier Rührerkombinationen aus Abb. 34 und Abb. 35.

Anhand von Profil 1 für die vier Rushton-Turbinen ist deutlich zu erkennen, dass weder über die vier Rührerebenen, wo die Strömung streng in radial-tangentialer Richtung ausgerichtet ist, noch über die Trennflächen zwischen den großräumigen Wirbeln hinweg ein konvektiver axialer Volumenstrom vorhanden ist. In der Konfiguration mit den vier Schrägblattrührern (Profil 2) liegt im Gegensatz dazu über die gesamte Reaktorhöhe ein axialer Volumenstrom nahezu konstanter Größe vor. Eine Ausnahme bildet nur der Bereich über dem obersten Rührer, der offensichtlich recht schlecht an die Durchströmung des restlichen Volumens angebunden ist. In Profil 3 zeichnet sich deutlich die verbleibende Trennfläche oberhalb des zweiten Schrägblattrührers ab, während hier im Gegensatz zu Konfiguration 1 offensichtlich eine kleine axiale Konvektionskomponente über die Rührzonen der Rushton-Turbinen hinweg erhalten bleibt. Dies ist eine Folge der vom oberhalb liegenden Schrägblattrührer erzeugten Strömung, die senkrecht von oben auf den Ausfluss der Rushton-Turbine trifft, und diesen etwas nach unten ablenkt. Durch die asymmetrische Anordnung der Rührer (Profil 4) kann die in Profil 3 noch erkennbare Trennfläche so beeinflusst werden, dass sie eine axiale Restkomponente erhält. Im Folgenden wird nun gezeigt, wie sich das beschriebene großräumige Strömungsverhalten auf den Stofftransport während eines Pulsexperiments und damit auf die Mischzeit im Reaktor auswirkt.

In den Simulationen der Pulsexperimente wird am angenommenen Zulaufort eine konzentrierte Spurstofflösung über einen Zeitraum von  $\Delta t = 0,25$  s zugegeben. Die gepulste Gesamtstoffmenge führt im Reaktorvolumen zu einer mittleren Konzentration von  $c^\infty = 1,0$ :

$$F c_F \Delta t = c^\infty V_T \quad \text{mit } c^\infty = 1,0 \quad (91)$$

Die dynamische Simulation der Stoffbilanz Gl. 27 ergibt dann die normierte Spurstoffkonzentration als Funktion von Ort und Zeit. Abb. 37 zeigt die Lage von Puls- und betrachteten Messorten sowie die zugehörigen Pulsantworten in unterschiedlichen Höhen für den Reaktor mit vier Rushton-Turbinen. In den Diagrammen mit den Antwortsignalen ist auch der für das Erreichen der Mischzeit  $t_{m,95}$  ( $0,975 < c < 1,025$ ) erforderliche Konzentrationsbereich eingezeichnet.

Anhand der Pulsantworten ist deutlich zu erkennen, wie der Spurstoff nur sehr langsam über die Trennflächen in axialer Richtung transportiert wird. Abb. 38 zeigt dies anschaulich anhand der Verteilung der Spurstoffkonzentration zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Die aus den Antwortkurven ablesbaren Mischzeiten sind in Tab. 11 zusammengefasst.

In Abb. 38 sind die fluiddynamischen Trennschichten zwischen den Rührerebenen deutlich anhand axialer Konzentrations sprünge zu erkennen. Das Fehlen axialer Konvektion in den Rührerebenen wirkt jedoch offensichtlich nicht im selben Maße als Stofftransporthindernis. Hier findet aufgrund des hohen Niveaus an effektiver turbulenter Viskosität im Rührerausfluss ein ausreichend großer dispersiver Stoffaustausch statt. Zur Verdeutlichung ist in Abb. 39 die Verteilung des effektiven turbulenten Dispersionskoeffizienten dargestellt.



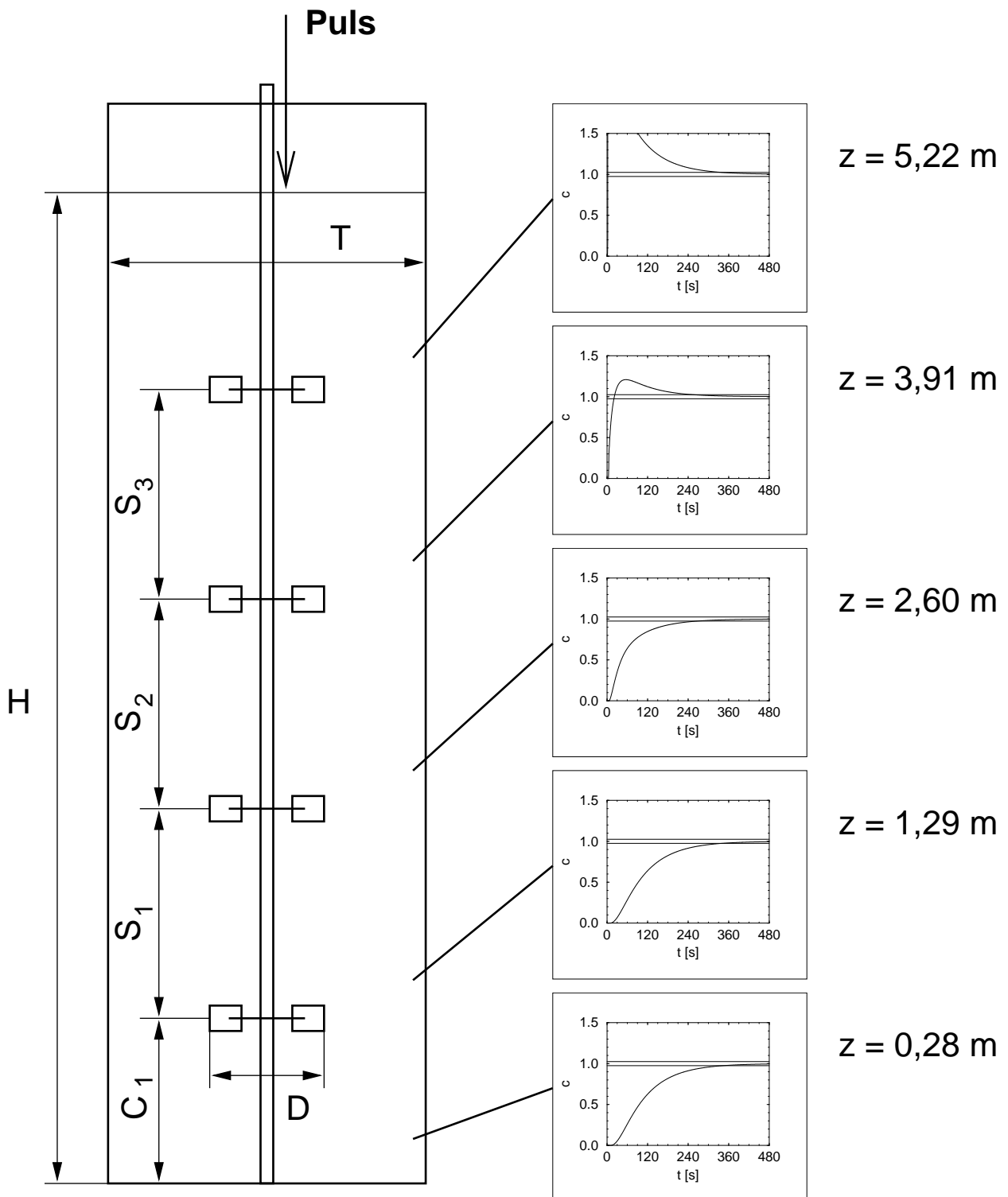


Abbildung 37: Lage von Puls- und Messorten im Vierfachrührersystem. Rechts die simulierten Pulsantworten in unterschiedlichen Reaktorhöhen für vier Rushton-Turbinen.

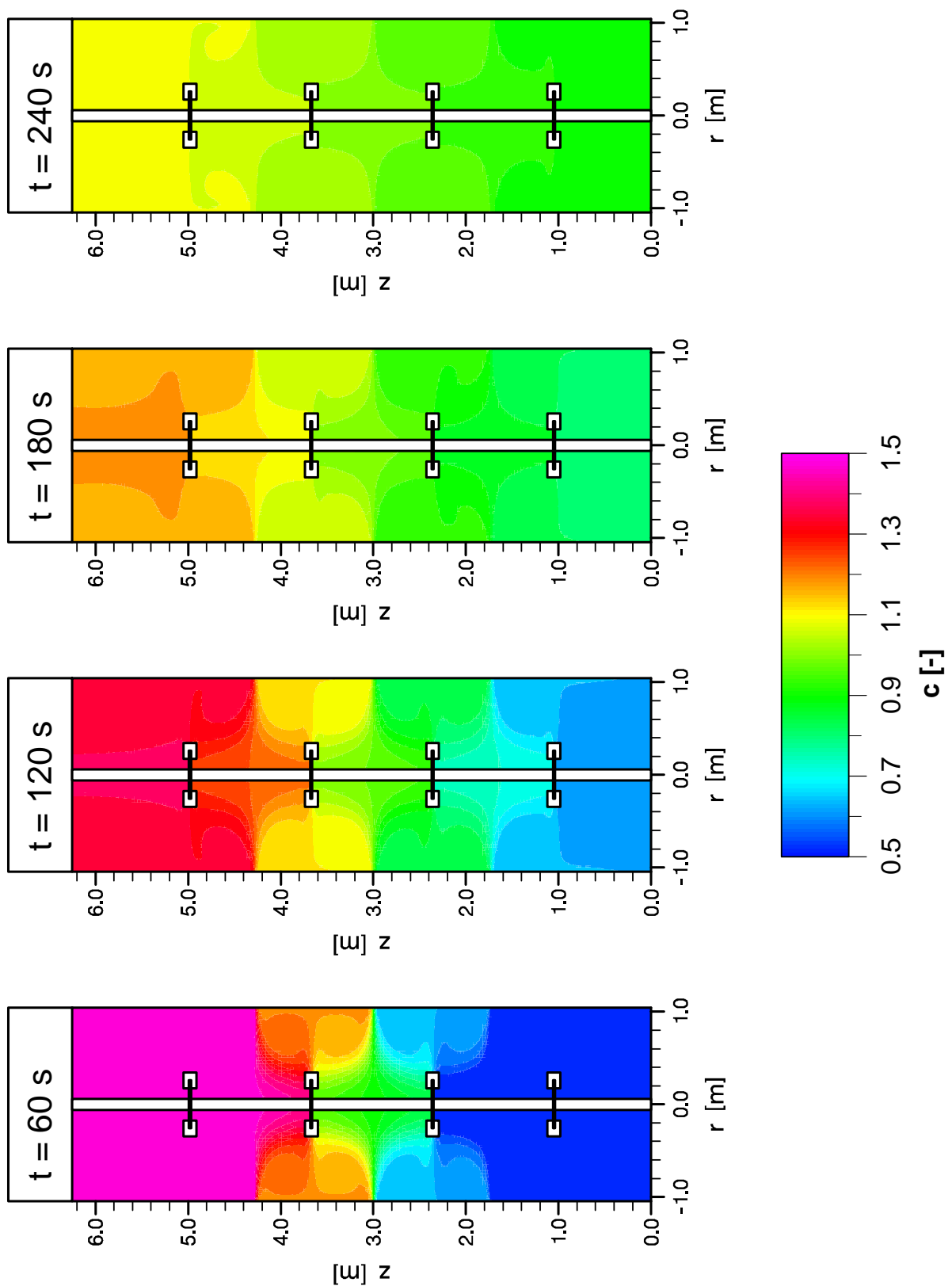


Abbildung 38: Örtliche Verteilung der Spurstoffkonzentration zu unterschiedlichen Zeitpunkten nach dem Spurstoffpuls. Vier Rushton-Turbinen.

$z$ [m]	$t_{m,90}$ [s]	$t_{m,95}$ [s]
5,22	281	338
3,91	195	253
2,60	212	269
1,29	284	341
0,28	287	344

Tabelle 11: Simulierte Mischzeiten im Vierfachrührersystem mit vier Rushton-Turbinen. Rührerdrehzahl  $n = 140$  1/min, Puls auf die Flüssigkeitsoberfläche ( $r = 0,1$  m,  $z = 6,25$  m), Pulsantworten bei  $r = 1,0$  m.

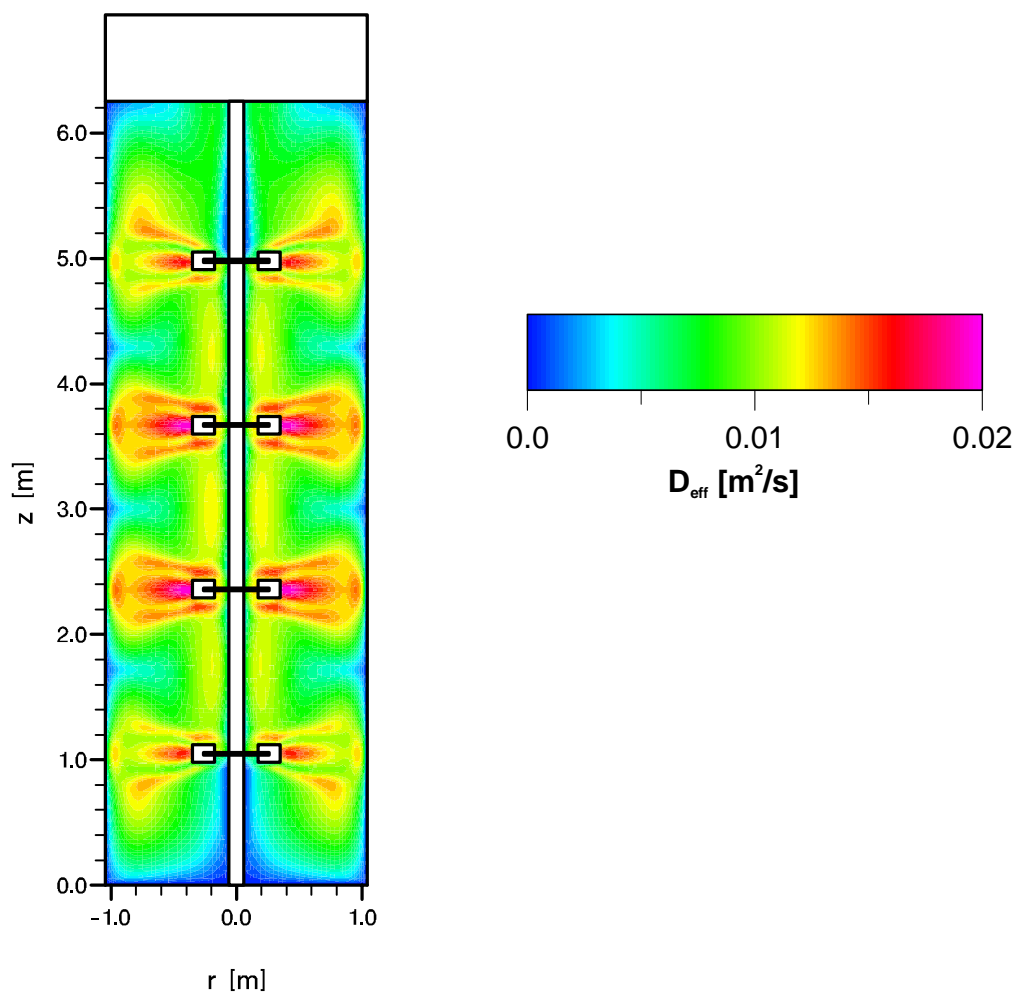


Abbildung 39: Verteilung des effektiven turbulenten Dispersionskoeffizienten  $D_{eff}$ . Vier Rushton-Turbinen.  $n = 115$  1/min.

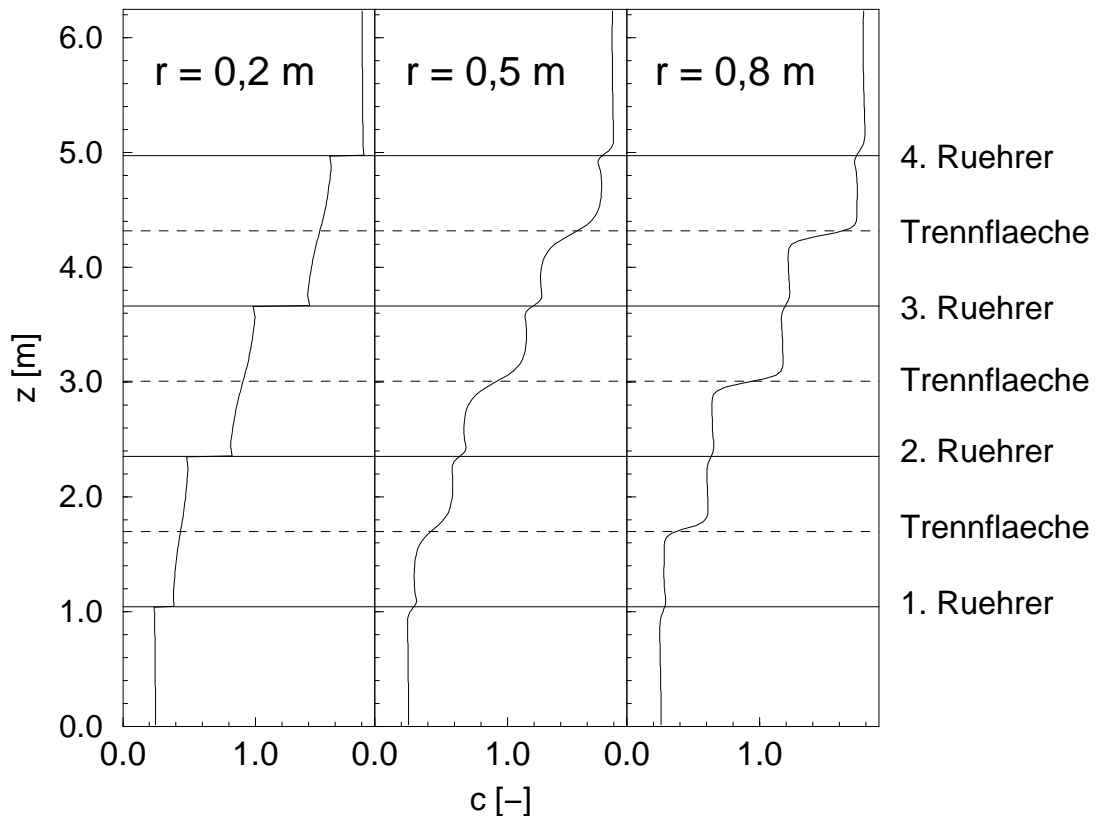


Abbildung 40: Axiale Konzentrationsprofile während des Pulsexperiments. Vier Rushton-Turbinen. Zeitpunkt  $t = 120$  s,  $n = 115$  1/min.

Tab. 11 veranschaulicht die Problematik der Wahl eines aussagekräftigen Messortes. Am oberen und an den beiden unteren Messpunkten sind die Mischzeiten nahezu identisch, an den beiden mittleren Punkten ergeben sich kürzere Zeiten. Auch die Verschärfung des Kriteriums von  $t_{m,90}$  nach  $t_{m,95}$  bringt in diesem Fall keine Verbesserung. Abb. 38 zeigt, dass während des gesamten Einmischvorgangs von oben nach unten ein mit der Zeit abnehmender negativer Konzentrationsgradient vorliegt. In der mittleren Zone stellt sich deshalb schon relativ schnell ein mittleres Konzentrationsniveau ein, das dort zu reduzierten Mischzeiten führt. Dieses Verhalten ist typisch für Reaktoren mit mehrfachen Rushton-Turbinen und wird u.a. von Cronin et al. [29] beschrieben.

Axiale Konzentrationsprofile an verschiedenen Radien zum Zeitpunkt  $t = 120$  s nach dem Puls auf die Oberfläche sind in Abb. 40 dargestellt. Im vom Rührerblatt überstrichenen Bereich bei  $r = 0,2$  m liegen Konzentrationssprünge vor. Hier ist der axiale Austausch durch die Rührerscheibe vollständig unterbunden. Dieser Gradient in den Rührerebenen wird aufgrund der starken turbulenten Dispersion im Rührerausfluss in Richtung Aussenwand aber sehr schnell abgebaut. Auf Höhe der Trennflächen sind die Verhältnisse genau umgekehrt. Im Kesselzentrum, wo sich die von aussen nach innen gerichtete Strömung in einer Stauzone mit geringer Konvektion in zwei nach oben bzw. unten gerichtete Teilströme aufteilt, ist Zeit für dispersiven Austausch, während nach aussen hin sehr grosse axiale Konzentrationsgradienten vorliegen. Abb. 39 zeigt ausserdem, dass

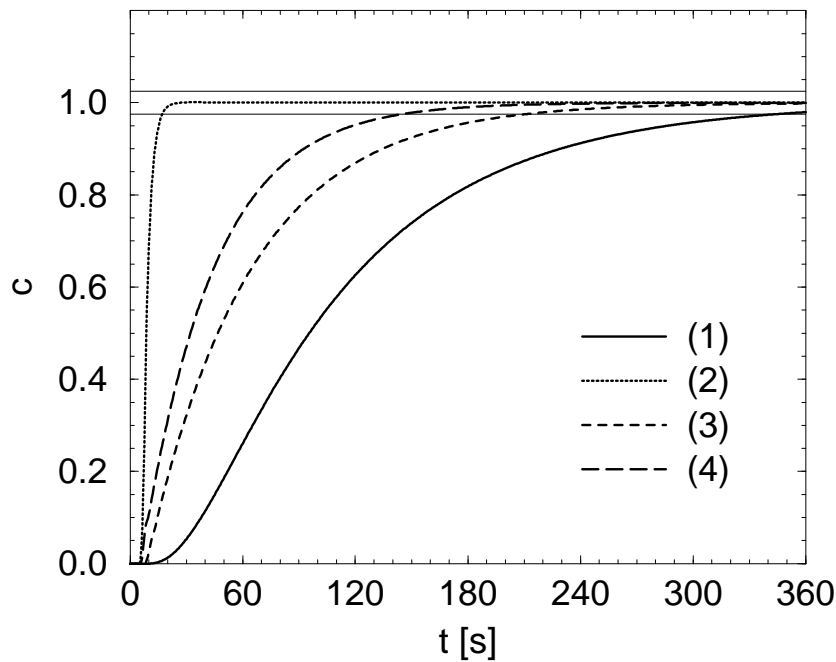


Abbildung 41: Pulsantworten am unteren Messort ( $z = 0,28$  m) für die vier Rührerkombinationen aus Tab. 10.

Rührerkombination (s. Tab. 10)		$t_{m,95}$ [s]	$t_{m,90}$ [s]
1.	4 Rushton	344	287
2.	4 Schrägblatt	18	16
3.	2 Rushton / 2 Schrägblatt	211	173
4.	2 Rushton / 2 Schrägblatt asymmetrisch	145	119

Tabelle 12: Simulierte Mischzeiten für vier verschiedene Rührerkombinationen bei  $n = 140$  1/min.

auf den Trennflächen der turbulente Dispersionskoeffizient mit dem Radius nach aussen hin abnimmt. Dabei ist zusätzlich zu beachten, dass bei Umfangsmittelung ein Profil bei einem größeren Radius einen viel größeren Anteil der gesamten Austauschfläche repräsentiert als eines bei einem kleineren Radius.

Die Profile der axialen Austauschströme (Abb. 36) lassen deutlich kürzere Mischzeiten bei Einsatz von Schrägblattrührern erwarten. In Abb. 41 sind die Pulsantworten am unteren Messort ( $z = 0,28$  m) für die vier untersuchten Rührerkombinationen im Vergleich dargestellt, Tab. 12 zeigt die daraus ermittelten Mischzeiten  $t_{m,95}$ . Die vergleichende grafische Darstellung der örtlichen Verteilungen der Spurstoffkonzentration zum Zeitpunkt  $t = 60$  s nach dem Puls (Abb. 42) veranschaulicht die drastischen Unterschiede zusätzlich.

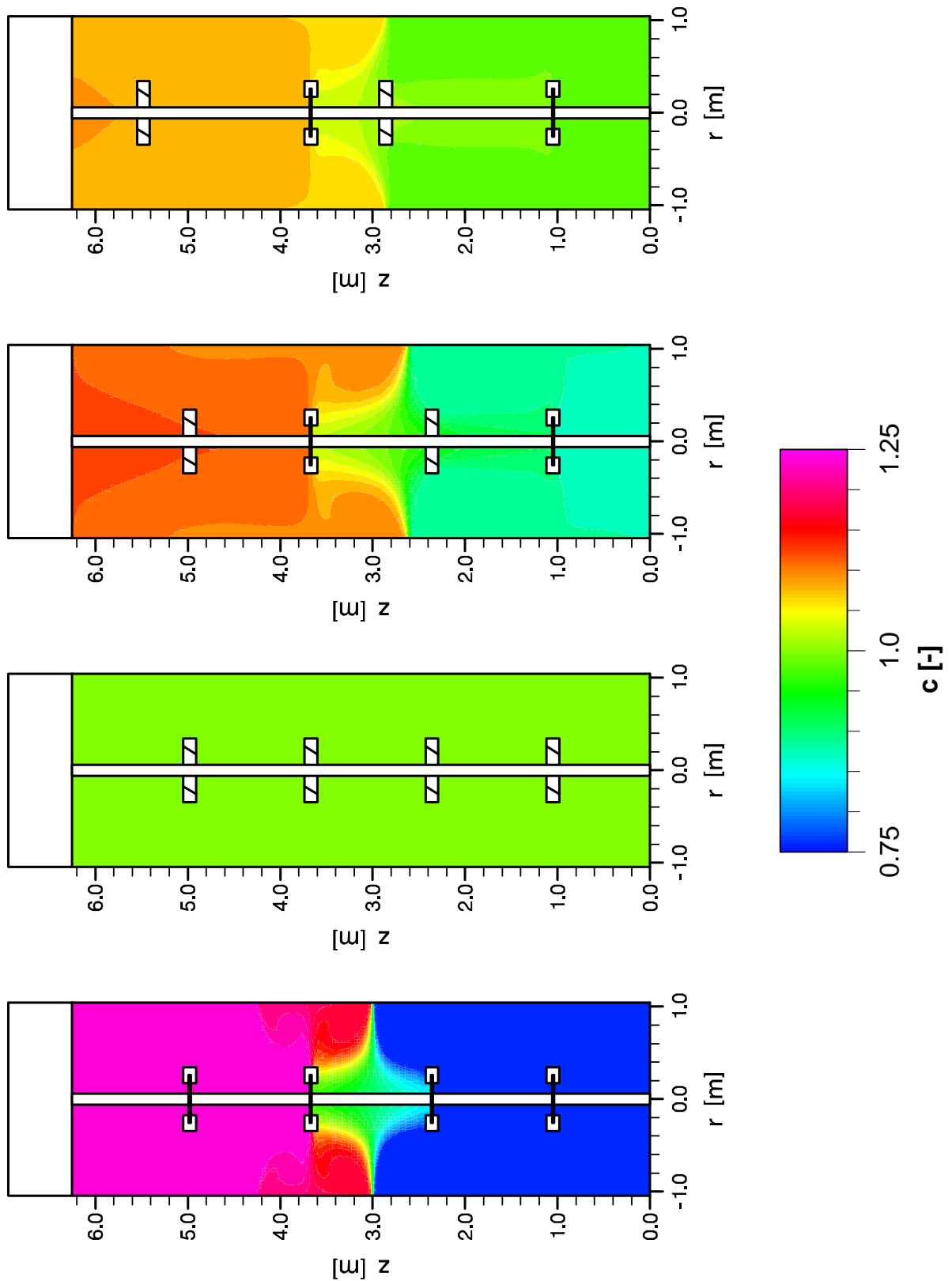


Abbildung 42: Örtliche Verteilung der Spurstoffkonzentration zum Zeitpunkt  $t = 60$  s nach dem Puls auf die Oberfläche für vier verschiedene Rührerkombinationen bei  $n = 140$  1/min.

$n$ [1/min]	$t_{m,95}$ [s]	$n t_{m,95}$	$t_{m,90}$ [s]	$n t_{m,90}$
115	420	805	350	670
140	344	803	284	663
165	292	803	240	660

Tabelle 13: Simulierte Mischzeiten im Vierfachrührersystem mit vier Rushton-Turbinen bei unterschiedlichen Rührerdrehzahlen.

Das Fehlen der axialen Trennschichten in der Konfiguration mit vier Schrägblattrührern führt zu der mit Abstand kleinsten Mischzeit. Nach 60 s ist der zugespülte Spurstoff bereits vollständig vermischt. Bei vier Rushton-Turbinen ist der erste Spurstoff zu diesem Zeitpunkt gerade erst bis zum Reaktorboden vorgedrungen ( $c \approx 0,2$ , im Bild wegen des Abbildungsmaßstabs nicht zu erkennen), während sich in den beiden Mischkonfigurationen die Konzentration nur noch im Bereich zwischen 0,85 und 1,15 (symmetrische Anordnung) bzw. 0,9 und 1,1 (asymmetrische Anordnung) bewegt. Hinsichtlich der Mischzeit wäre also ein nur mit Schrägblattrührern bestücktes Rührwerk zu bevorzugen. Die Auswirkungen auf Raum-Zeit-Ausbeute bzw. Selektivität bei einer Fed-Batch-Fermentation werden in Kap. 7.1.3 untersucht.

Im Einfachrührersystem gilt der Zusammenhang  $n t_m = \text{const.}$  Im Vierfachrührersystem mit vier Rushton-Turbinen ist der dispersive axiale Stofftransport über die fluiddynamischen Trennflächen der die Mischzeit bestimmende Schritt. Da jedoch sowohl die Hauptgeschwindigkeiten  $u_i$  als auch die turbulente Wirbelviskosität  $\nu_t$  und damit die turbulenten Dispersionskoeffizienten  $D_t$  im Rührkesselreaktor mit der Rührerumfangsgeschwindigkeit  $u_{tip}$  skalieren, sollte dieser Zusammenhang auch im Vierfachrührersystem gelten. Tab. 13 zeigt die simulierten Mischzeiten bei drei unterschiedlichen Rührerdrehzahlen. Offensichtlich ist  $n t_{m,95} = \text{const.}$  sehr gut erfüllt.

Die Verifizierung der Simulationen muss anhand des Vergleichs mit gemessenen Mischzeiten erfolgen. Dazu wird auf Ergebnisse von Pulsexperimenten zurückgegriffen, die in dem bereits erwähnten Rührkesselreaktor der Firma Statoil (Stavanger, Norwegen) von Cui et al. [31] durchgeführt wurden. Die Ergebnisse werden zum Teil auch von Vrabel et al. [138] dargestellt. Cui et al. verwenden in ihren Pulsexperimenten Natriumfluoreszinlösung als Spurstoff in unbegasten und begasten Rührkesseln und messen als Antwortsignal die Fluoreszenz. Dabei wird der Spurstoff in einer Höhe von 6,48 m zugegeben, der Rührerabstand ist mit 1,45 m geringfügig größer als in den Simulationen ( $S_i = 1,31$  m). Die großräumige Strömungsstruktur mit den die Mischzeit bestimmenden Trennschichten ändert sich dadurch nicht, so dass ein Vergleich trotzdem sinnvoll ist. Die gemessenen Mischzeiten bei unterschiedlichen Rührerdrehzahlen sind in Tab. 14 zusammengefasst. Die Messung erfolgt dabei auf einer Höhe von  $z = 1,12$  m, also im Ausfluss des unteren Rührers.

Auch Noorman [97] führt Pulsexperimente im selben Vierfachrührersystem durch, wobei der Rührerabstand genau den auch in den Simulationen betrachteten Wert hat, die Füllstandshöhe beträgt

	Cui et al. [31]	Noorman [97]	Groen (Gl. 92)
$n$ [1/min]	$t_{m,95}$ [s]	$t_{m,95}$ [s]	$t_{m,90}$ [s]
70	254	–	510
95	190	–	376
115	150	139	310
133	127	108	268

Tabelle 14: Gemessene und nach Gl. 92 berechnete Mischzeiten im Vierfachrührersystem mit vier Rushton-Turbinen.

allerdings ca. 7,3 m. In diesem Fall wird ein Salzsäurepuls aufgegeben und als Antwortsignal der pH-Wert in einer Höhe von  $z = 1,04$  m gemessen. Die ermittelten Mischzeiten sind ebenfalls in Tab. 14 eingetragen.

Groen [45] gibt die folgende Korrelation zur Berechnung der Mischzeit in Rührkesselreaktoren mit mehrfachen Rushton-Turbinen an:

$$\frac{t_m \epsilon^{1/3}}{T^{2/3}} = 0,11 \left(\frac{s}{T}\right)^{-4/3} \left(\frac{H + n_R T}{H}\right)^2 \left(\frac{H}{T}\right)^2 \quad (92)$$

Zu beachten ist, dass die Gleichung mit dem Parameter 0,11 nach der hier verwendeten Definition der Mischzeit für  $t_{m,90}$  und für Pulsaufgabe/Messung an den Orten Oberfläche/Bodennähe gilt. Die Korrelation wird von Groen anhand von Reaktoren mit ein, zwei und drei Rührern und Volumina zwischen  $0,015 \text{ m}^3$  und  $130 \text{ m}^3$  verifiziert. Nach Gl. 92 berechnete Mischzeiten im hier untersuchten Vierfachrührersystem sind in der letzten Spalte von Tab. 14 angegeben. Dazu wird der spezifische Leistungseintrag mit

$$\epsilon = \frac{P}{\rho V_T} = \frac{n_R}{V_T} Ne n^3 D^5 \quad (93)$$

berechnet. Es werden  $n_R = 4$  und die eine Füllstandshöhe von  $H = 6,25$  m eingesetzt.

Der Vergleich mit Tab. 13 zeigt, dass simulierte und gemessene Mischzeiten ca. um den Faktor drei differieren. Im Gegensatz dazu beträgt die Abweichung zu der nach der Korrelation von Groen (Gl. 92) berechneten Mischzeit nur ca. 12 %. Einer der Gründe für diese sehr unterschiedlichen Ergebnisse ist das flache Einmünden des Antwortsignals in den geforderten Konzentrationsbereich (s. Abb. 37). Schon kleinere Abweichungen im Antwortsignal schlagen sich so in großen Unterschieden bei der Mischzeit nieder. Im Folgenden wird als weitere Ursache der Abweichungen der Einfluss der Dimensionalität der Ortsdiskretisierung bei der zu Grunde liegenden Strömungssimulation auf die Berechnung der Mischzeit untersucht.

Den entscheidenden Einfluss auf die simulierten Mischzeiten im Reaktor mit mehrfachen Rushton-Turbinen hat die exakte Berechnung des Stofftransports über die Trennflächen zwischen den Rühr-



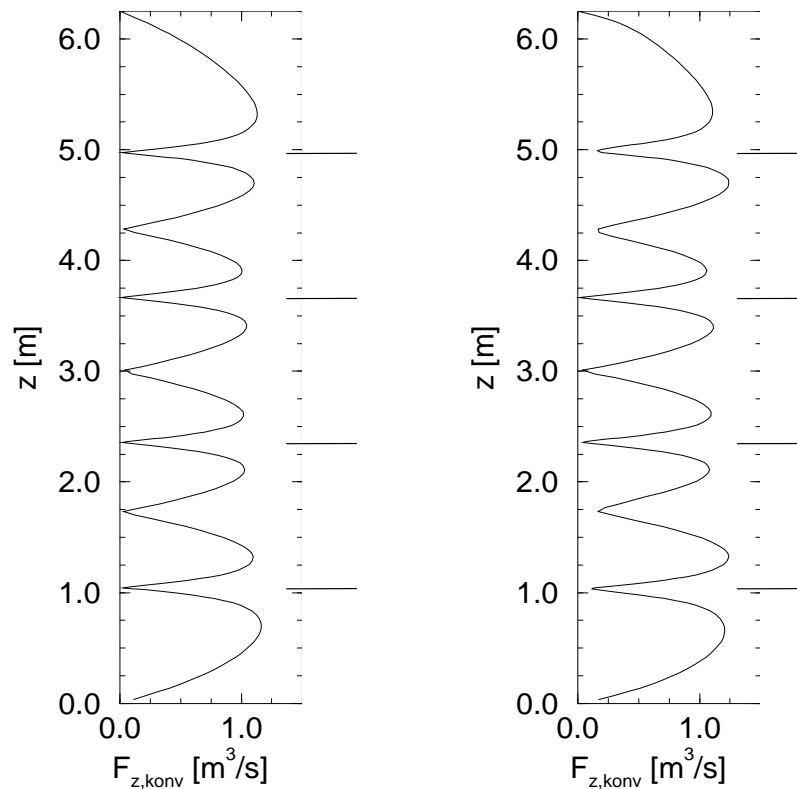


Abbildung 43: Axiale Profile der über den Reaktorquerschnitt integrierten axialen Konvektionsströme. Links axialsymmetrische, rechts dreidimensionale Strömungssimulation.

rerebenen, in denen die axialsymmetrische Strömungssimulation keinerlei axiale Konvektionskomponente ergibt (s. Abb. 36). Den Unterschied zum Ergebnis einer dreidimensionalen Modellierung der Fluidodynamik zeigt Abb. 43. Dargestellt sind wiederum axiale Profile der über den Querschnitt integrierten axialen Konvektionsströme.

Im Ergebnis der dreidimensionalen Betrachtung zeigt sich, dass nur die drei mittleren Trennschichten keine axiale Konvektion aufweisen. Es handelt sich dabei um die Ebenen auf Höhe von bzw. zwischen zweitem und drittem Rührer. Da jedoch über die Rührerebenen ausreichender dispersiver Stofftransport vorliegt, bleibt im Vergleich zur axialsymmetrischen Strömungssimulation nur ein wesentliches axiales Stofftransporthindernis. Interessant ist es nun zu betrachten, an welchen Stellen am Reaktorquerschnitt sich die Unterschiede ergeben. Dazu ist in Abb. 44 die örtliche Verteilung der axialen Hauptgeschwindigkeit auf einer Höhe von  $z = 1,73$  m (Ebene zwischen erstem und zweitem Rührer von unten) als Ergebnis einer Simulation der Strömungsverhältnisse in dreidimensionaler Auflösung bei  $n = 140$  1/min dargestellt.

Offensichtlich befindet sich in dieser Höhe im Staubereich vor dem Strombrecher ein tangential-axialer Wirbel, in dem die Flüssigkeit direkt am Strombrecher nach oben und kurz davor nach unten strömt. Dieser Wirbel, der bei axialsymmetrischer Betrachtung natürlich nicht aufgelöst werden

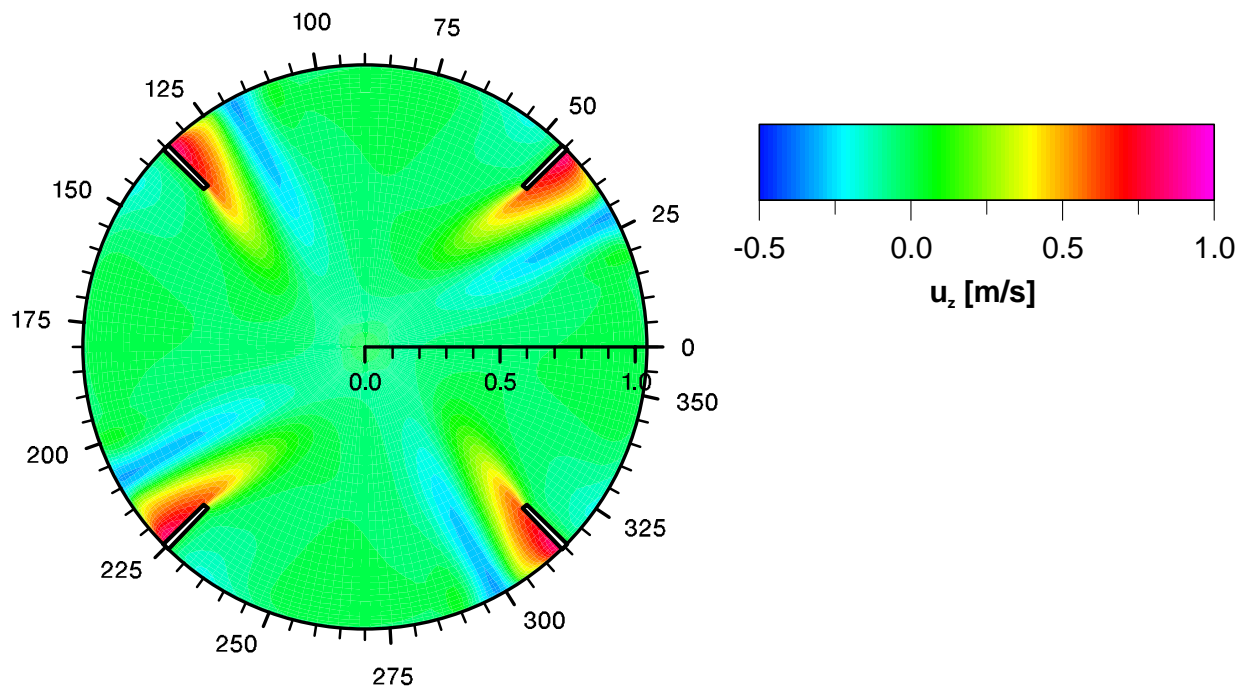


Abbildung 44: Verteilung der axialen Hauptgeschwindigkeit  $u_z$  auf einer Höhe von  $z = 1,73$  m.

kann, wirkt als eine Art Pumpe über die Trennfläche hinweg. Sein Einfluss auf den axialen Stofftransport wird in den Abb. 45 und 46 deutlich. In Abb. 45 sind die auf axialsymmetrischem bzw. dreidimensionalem Strömungsfeld simulierten Pulsantworten dargestellt, während Abb. 46 simulierte dreidimensionale Spurstoffverteilungen zu unterschiedlichen Zeitpunkten nach dem Puls im Vergleich zu den axialsymmetrischen Verteilungen aus der Simulation in Abb. 38 zeigt. Zusätzlich ist in Abb. 45 der von Cui et al. [31] experimentell ermittelte Verlauf der Pulsantwort eingezeichnet. Die auf dem dreidimensionalen Strömungsfeld simulierten Mischzeiten bei unterschiedlichen Rührerdrehzahlen sind in Tab. 15 zusammengestellt.

Die Spurstoffverteilungen in Abb. 46 verdeutlichen die Bedeutung der Strombrecher für den axialen Austausch. Man erkennt in einigen der radial-tangentialen Schnitte gut die Konzentrationsdifferenzen zwischen den Bereichen vor bzw. hinter den Strombrechern. Insgesamt sind die tangentialen Konzentrationsgradienten jedoch nicht sehr groß, haben aber entscheidenden Einfluss auf den axialen Stofftransport über die Trennflächen.

Dreidimensional bzw. axialsymmetrisch simulierte Mischzeiten unterscheiden sich ca. um den Faktor 1,4. Abb. 45 und der Vergleich mit Tab. 14 zeigen, dass die 3d-Ergebnisse damit immer noch über den von Cui et al. gemessenen, jedoch unter den mit Gl. 92 berechneten Werten liegen.

Die vorhergehenden Betrachtungen unterstreichen die starke Abhängigkeit der aus den Simulationen ermittelten Mischzeit im Reaktor mit mehrfachen Rushton-Turbinen von der Berechnung des Stofftransports über die Trennflächen zwischen den Rührerkompartimenten. Die Modellierung

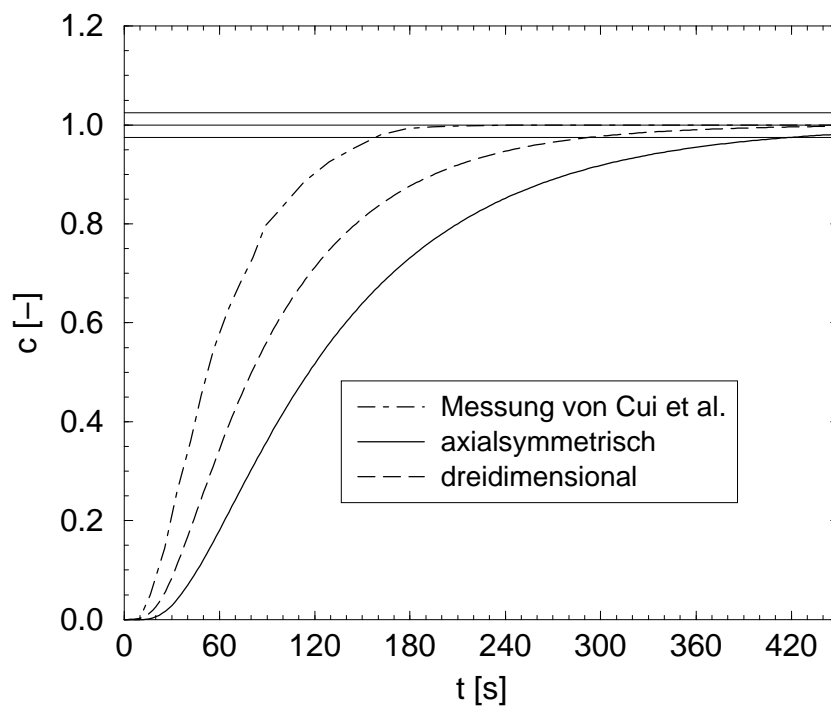


Abbildung 45: Auf axialsymmetrischem bzw. dreidimensionalem Strömungsfeld simulierte Pulsantworten am unteren Messort bei  $n = 115$  1/min.

$n$ [1/min]	$t_{m,90}$ [s]		$t_{m,95}$ [s]	
	2d	3d	2d	3d
115	350	246	420	294
140	284	212	344	256
165	240	170	292	203

Tabelle 15: Mischzeiten aus Simulationen auf der Basis von zweidimensionalen (2d) bzw. dreidimensionalen (3d) Strömungsfeldern.

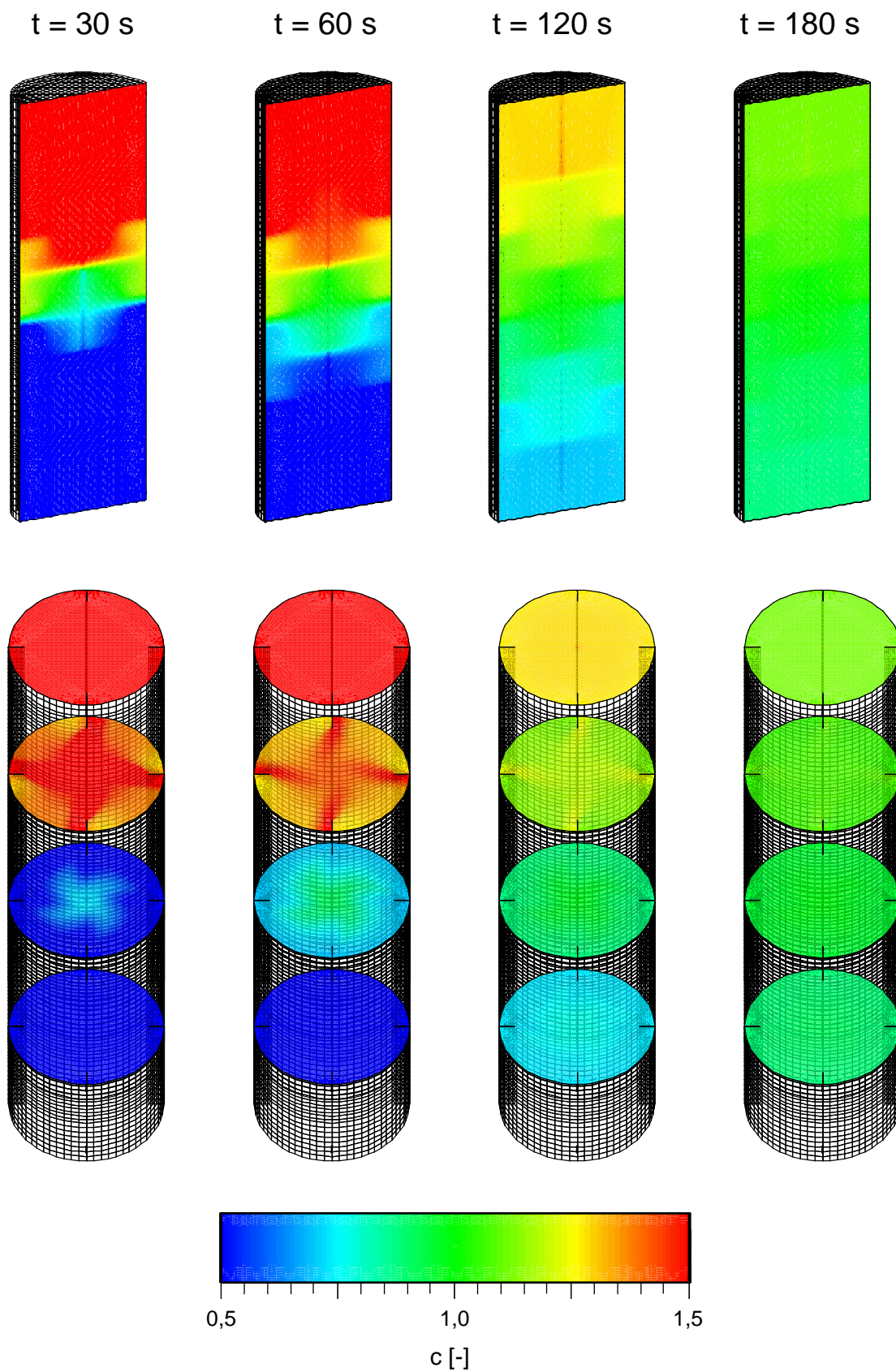


Abbildung 46: Spurstoffverteilungen zu verschiedenen Zeitpunkten, Puls auf die Oberfläche.

der einzelnen Rührer sowie der Turbulenz folgen der von Jenne [59] anhand eines Einfachrührersystems entwickelten Vorgehensweise, für die eine sehr gute Übereinstimmung mit den gemessenen Strömungsverhältnissen erzielt wird. Da die Strömung im Einflussbereich eines einzelnen Rührers im Vierfachrührersystem derjenigen in einem Einfachrührersystem sehr ähnlich ist, bleibt als Fehlerquelle bei der Mischzeitsimulation also nur der Bereich der Trennflächen. Dort erfolgt der Stofftransport jedoch fast ausschliesslich dispersiv, so dass bereits sehr kleine Fehler in der Berechnung der Dispersionskoeffizienten aus den Turbulenzgrößen, die in der ansonsten konvektionsdominierten Strömung im Rührkessel kaum merkbare Auswirkungen haben, zu einer erheblichen Verfälschung des Ergebnisses für den axialen Stofftransport führen. In diesem Zusammenhang ist auch zu beachten, dass auf Höhe der Trennflächen in Wandnähe, wo sich die von oben bzw. unten kommenden Hauptströmungen treffen (s. Abb. 34), eine Prallströmung vorliegt, deren Berechnung mit den üblichen  $k$ - $\epsilon$ -Turbulenzmodellen bekanntermaßen fehlerbehaftet ist. Abgesehen von der Turbulenzmodellierung wäre eine Verbesserung des Simulationsergebnisses allenfalls durch eine wesentliche Verfeinerung des Rechengitters in diesem Bereich zu erwarten, wenn dadurch weitere kleinere Wirbel aufgelöst werden könnten. Zu beachten ist auch der Einfluss des Rechengitters auf die Diskretisierung der Dispersion (s. Kap. 7.1.2).

Die CFD-Simulationen liefern also im Vierfachrührersystem mit Rushton-Turbinen mit der hier zugrunde liegenden Modellierung auf den untersuchten Berechnungsgittern noch keine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Pulsantwortkurven. Die vergleichenden Betrachtungen zu den unterschiedlichen Rührerkombinationen behalten aber unabhängig von den Abweichungen bei der Bestimmung der Mischzeit ihre Gültigkeit, da sie ja im Wesentlichen auf Unterschieden in der großräumigen Strömungsstruktur beruhen, die von den Simulationen richtig wiedergegeben wird. Bei allen Rührerkombination außer den vier Rushton-Turbinen treten auch bei axialsymmetrischer Betrachtung keine Trennflächen ohne konvektiven Transport auf, weswegen in diesen Fällen von einer höheren Genauigkeit bei der Mischzeitberechnung ausgegangen werden kann.

### 7.1.2 Modellreduktion

Detaillierte mehrdimensionale Simulationen von Mischvorgängen oder Stoffumsetzungen in Rührkesselreaktoren liefern eine Fülle an detailliertem Datenmaterial. Oft ist der dafür benötigte Rechenaufwand nicht gerechtfertigt, weil beispielsweise nur grobe, qualitative Aussagen für erste Abschätzungen benötigt werden. Andererseits ist auch heute noch trotz leistungsfähiger Hardware und Simulationswerkzeuge die Rechenzeit für eine detaillierte Simulation auf einem feinauflösenden Gitter zu groß, insbesondere wenn der Rührkesselreaktor nicht für sich, sondern als Teil einer Gesamtanlage betrachtet werden soll. Eine Modellierung als ideal durchmischter Rührkessel, beispielsweise bei der Reglerauslegung, stellt aber eine zu starke Vereinfachung der realen Verhältnisse dar. In solchen Anwendungsfällen besteht Bedarf an einfachen, reduzierten Modellstrukturen, die mit möglichst geringem Berechnungsaufwand ein Ergebnis liefern, das möglichst wenig von

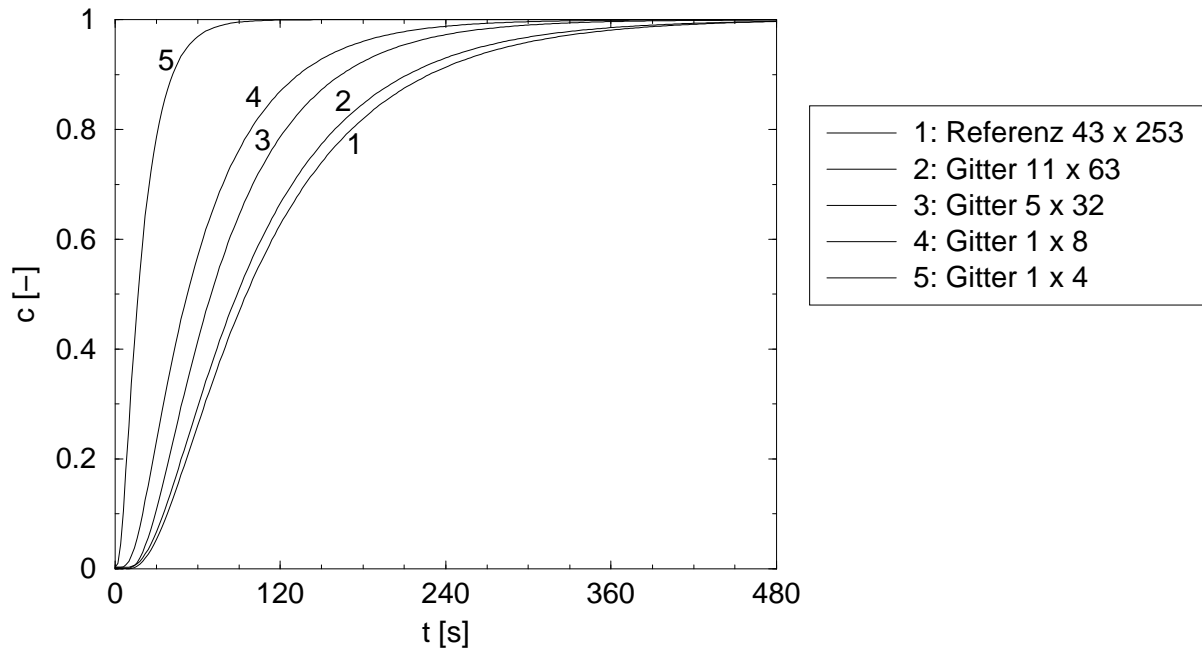


Abbildung 47: Einfluss regelmäßiger Gitterreduktion auf die simulierte Pulsantwort.

dem der detaillierten Simulation abweicht. In diesem Abschnitt wird anhand des Beispiels der Simulation des Pulsexperiments im Mehrfachrührersystem mit Rushton-Turbinen dargestellt, welche Schwierigkeiten bei der Modellreduktion auftreten können.

Bei der hier untersuchten Modellreduktion wird das numerische Gitter finiter Volumen aus der Strömungssimulation wie in Kap. 5.2.4 beschrieben vergrößert. Eine nahe liegende Vorgehensweise ist dabei die sukzessive Vergrößerung des Gitters durch regelmäßiges Herausstreichen finiter Volumen. Abb. 47 zeigt die simulierte Pulsantwort auf derart immer weiter vergrößerten Gittern. Referenzlösung ist das Simulationsergebnis aus Kap. 7.1.1 auf dem axialsymmetrischen Gitter mit 43 und 253 finiten Volumen in radialer bzw. axialer Richtung. Das Ergebnis dieser Simulation weicht zwar von den experimentell ermittelten Resultaten ab, für die Modellreduktion ist aber nur die möglichst exakte Wiedergabe des Simulationsergebnisses auf dem Referenzgitter das entscheidende Beurteilungskriterium.

Auf dem in jede Raumrichtung zweifach vergrößerten Gitter mit 11·63 finiten Volumen erhält man immer noch ein recht gutes Ergebnis, obwohl die Anzahl der zu lösenden gewöhnlichen Differentialgleichungen bereits um den Faktor sechzehn reduziert ist. Weitere Gitterreduktion hat dann allerdings unvermeidbare Abweichungen von der Referenzlösung in Richtung deutlich zu kurzer Mischzeiten zur Folge. Dafür sind zwei Gründe zu nennen:

1. Die Diskretisierung erfolgt mit dem Hybrid-Schema, auf dem groben Gitter tritt also in großem Maße numerische Dispersion auf.

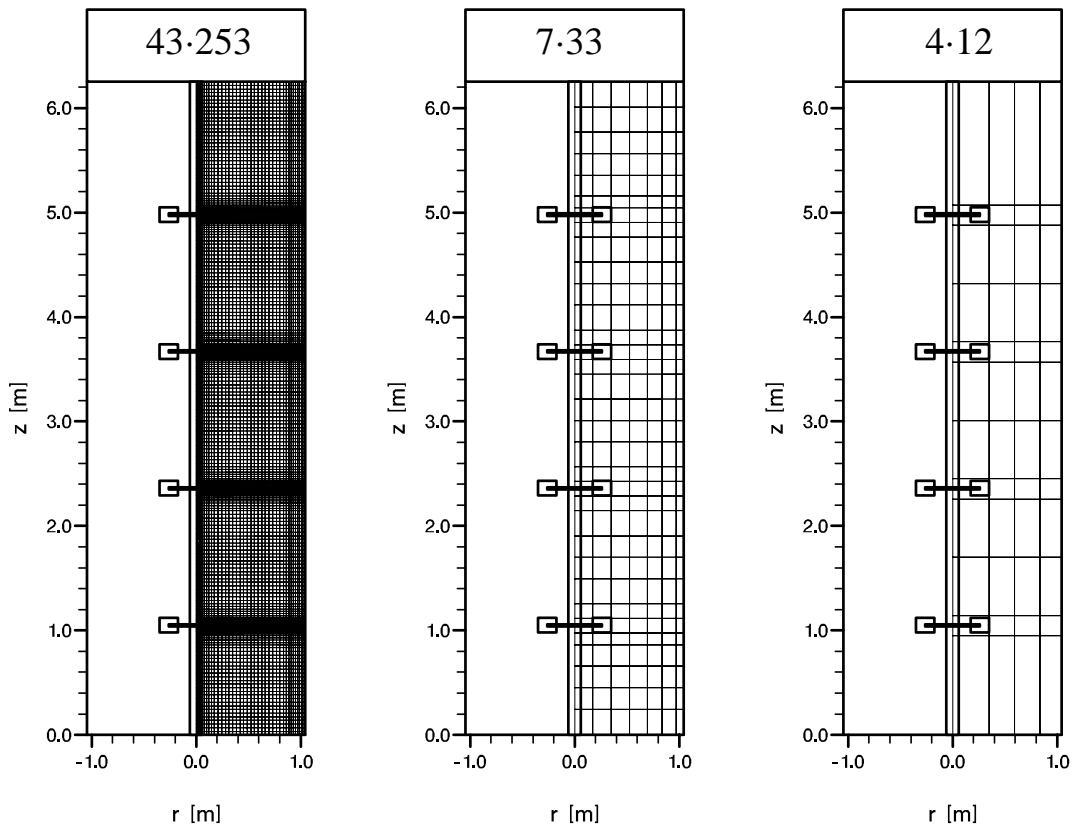


Abbildung 48: Referenzgitter und reduzierte Gitter.

2. Die Lage der für das Strömungsfeld charakteristischen Trennflächen ohne axiale Konvektion, die ja für die Geschwindigkeit des axialen Stofftransports bestimmend sind, wird bei der regelmäßigen Gitterreduktion nicht berücksichtigt. Es ergibt sich ein qualitativ verfälschtes Strömungsfeld.

Zur Reduktion des numerischen Fehlers bei Simulationen auf groben Gittern muss auf jeden Fall eine hochauflösende Ortsdiskretisierung verwendet werden. Wenn, wie im hier untersuchten Fall, als Grundlage der Modellreduktion das Ergebnis einer detaillierten Strömungssimulation vorliegt, sollte darüber hinaus bei der Festlegung der Gitterstruktur immer die großräumige Strömungsstruktur berücksichtigt werden. Im vorliegenden Fall bedeutet das, dass die Volumengrenzen auf den Trennflächen auch Bestandteil des reduzierten Gitters sein müssen. In radialer Richtung ist es sinnvoll, zumindest die Bereiche mit eindeutig abwärts- bzw. aufwärtsgerichteter Strömung in Wandnähe noch getrennt zu erfassen. Abb. 48 zeigt neben dem Referenzgitter zwei reduzierte Gitter, die den eben genannten Kriterien entsprechen. Das Referenzgitter wird von 43·253 finiten Volumen auf 7·33 bzw. 4·12 Elemente reduziert. Die Anzahl der zu lösenden gewöhnlichen Differentialgleichungen wird damit also um ca. 98 % bzw. 99,6 % verkleinert.

Das Gitter mit 4·12 finiten Volumen entspricht der Struktur eines von Cui et al. [31] zur Simulation von Mischzeitexperimenten vorgeschlagenen Kompartimentmodells. Darin werden die Aus-

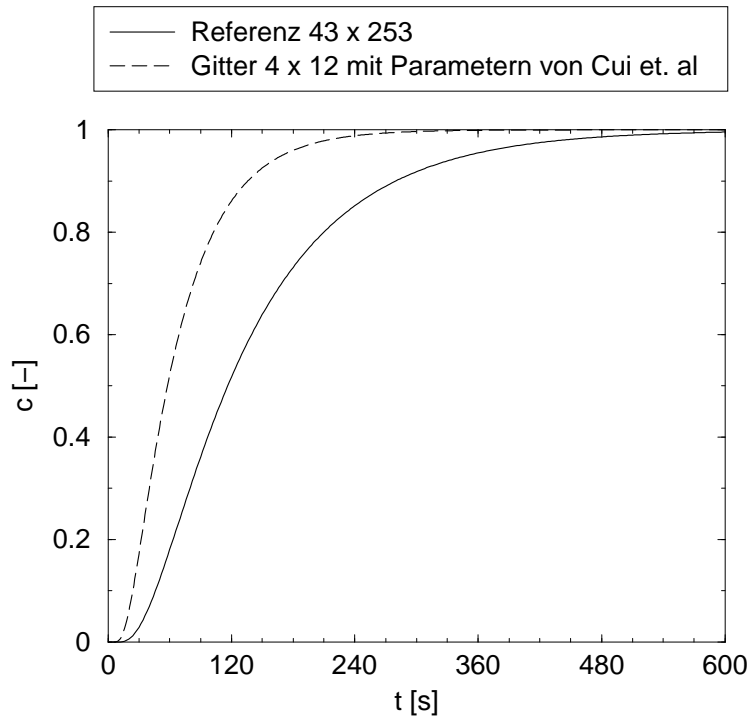


Abbildung 49: Simulierte Pulsantwort auf Gitter 4·12 mit Austauschströmen von Cui et al. (Gl. 94).

tauschströme zwischen den Kompartimenten allerdings nicht wie hier aus dem Ergebnis einer detaillierten fluiddynamischen Simulation, sondern aus experimentellen Resultaten bestimmt. Der Zirkulationsstrom innerhalb eines Rührerbereichs folgt dabei aus der Pumpkapazität des Rührers. Der für die Mischzeitsimulation entscheidende Austauschstrom  $F_E$  über die Trennfläche aufgrund turbulenter Dispersion wird als Anteil der Pumpkapazität und in Abhängigkeit von der Reaktor-geometrie berechnet:

$$F_E = K_E n D^3 \left[ \left( \frac{T}{D} \right)^{4/3} \left( \frac{H_i}{D} \right)^{-1/3} \right] \quad (94)$$

Der Parameter  $K_E$  wird aus den Ergebnissen von Flow-follower Experimenten abgeschätzt [1] [128]. Mit diesem Kompartimentmodell konnten von Cui et al. experimentell ermittelte Pulsantworten mit geringem Fehler berechnet werden. Wenn die Austauschströme  $F_E$  über die Trennflächen auf dem Gitter mit 4·12 Elementen mit den von Cui et al. [31] angegebenen Zahlenwerten parametrisiert werden, ergibt sich die Pulsantwort in Abb. 49 und daraus eine Mischzeit von  $t_{m,95} = 203$  s. Dies stellt eine im Vergleich zu den CFD-Simulationen deutlich bessere Übereinstimmung mit den experimentell bestimmten Werten dar. Wegen der Verwendung des experimentell bestimmten Parameters  $K_E$  kann diese Vorgehensweise jedoch nicht im Rahmen vollständig prädiktiver Berechnungen eingesetzt werden und weist daher nicht mehr den entscheidenden Vorteil von CFD-Simulationen auf.

Abb. 50 zeigt im Unterschied dazu die auf den reduzierten Gittern aus Abb. 48 mit den Parametern



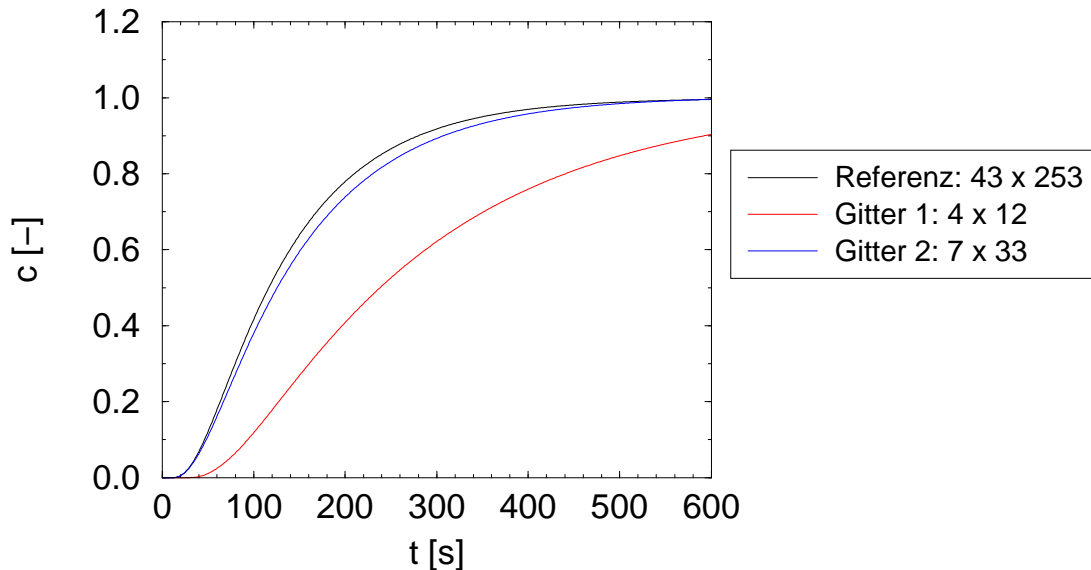


Abbildung 50: Simulierte Pulsantworten auf reduzierten Gittern.

aus der fluiddynamischen Simulation simulierten Pulsantworten. Um den Fehler bei der Berechnung der Stoffströme zu minimieren, erfolgt die Ortsdiskretisierung dabei mit einem TVD-Ansatz.

Im Unterschied zu den Ergebnissen mit regelmäßiger Gittervergrößerung resultieren hier auf den groberen Gittern zeitlich verzögerte Pulsantworten, wobei auf dem Gitter mit 7·33 Elementen noch eine sehr geringe Abweichung von der Referenzlösung vorliegt. Auf Gitter 4·12 ergibt die Simulation allerdings ein sehr deutlich verzögertes Antwortsignal. Da an den Trennflächen nur dispersiver Transport vorliegt, ist der Fehler bei der Diskretisierung des dispersiven Stoffstroms zu suchen:

$$\dot{n}_D = -A_z D_{eff} \frac{\partial c}{\partial z} \quad (95)$$

Auf grobem und feinem Gitter wird dasselbe  $D_{eff}$  verwendet, und bei einem linearen Verlauf  $c(z)$  ergäbe sich auch in der Berechnung des Gradienten  $\partial c/\partial z$  keine Gitterabhängigkeit. In Abb. 40 wird aber bereits gezeigt, dass über die Trennflächen hinweg sehr große axiale Konzentrationsgradienten vorliegen. Abb. 51 zeigt einen Ausschnitt des axialen Konzentrationsprofils aus Abb. 40 beim Radius  $r = 0,8$  m auf Höhe der mittleren Trennfläche. Zusätzlich eingezeichnet sind die auf den drei Gittern für die Berechnung des Konzentrationsgradienten  $\partial c/\partial z$  verwendeten Werte.

Die Darstellung zeigt deutlich, warum auf den vergrößerten Gittern ein zu kleiner Konzentrationsgradient berechnet wird. Nur auf dem Referenzgitter wird er wegen des in diesem engen Bereich beinahe linearen Konzentrationsverlaufs nahezu exakt approximiert.

Die gezeigten Schwierigkeiten bei der Diskretisierung des dispersiven Stofftransports auf groben Gittern legen die Anwendung eines Algorithmus zur adaptiven Gitterverfeinerung im Bereich großer Gradienten der Lösung nahe. Bei einem dynamischen Vorgang wie dem hier untersuchten

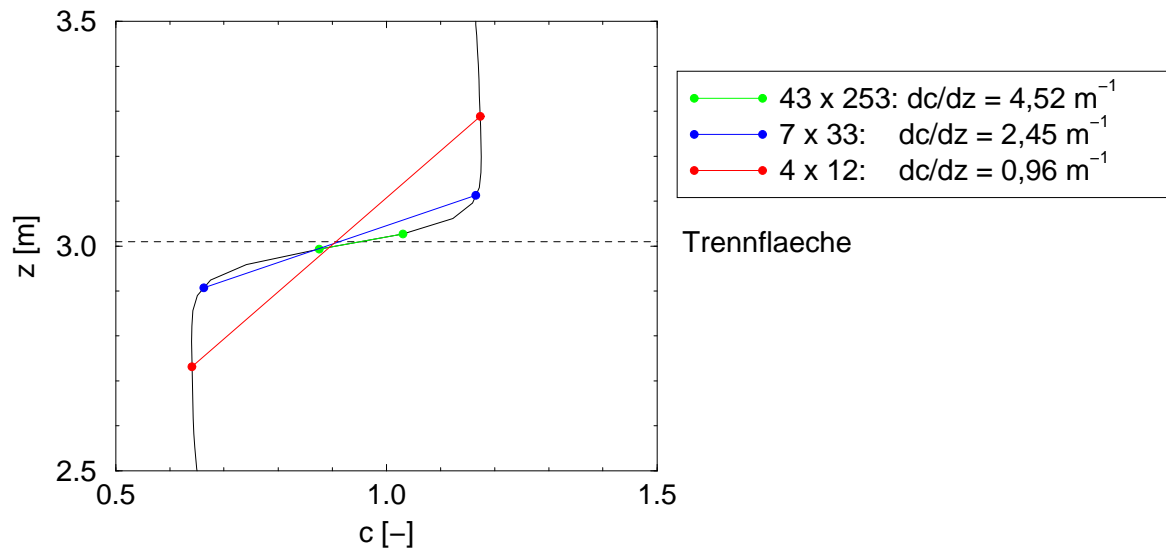


Abbildung 51: Berechnung der Konzentrationsgradienten an der Trennfläche auf verschiedenen Gittern.

Pulsexperiment müsste dann allerdings zunächst abgeschätzt werden, ob der Aufwand für laufende Fehlerschätzung, Neuberechnung der Koeffizienten und Interpolation nicht den gewünschten Rechenzeitgewinn gegenüber dem Referenzgitter wieder aufwiegt.

### 7.1.3 Substratgradienten während einer Fed-Batch Fermentation der Hefe *Saccharomyces cerevisiae*.

Die Simulation von Pulsexperimenten und die daraus abgeleiteten Mischzeiten liefern den Zeitraum, der zur Verteilung eines pulsartig zugegebenen Volumens bzw. des in ihm gelösten Stoffes im Reaktor notwendig ist. In einem kontinuierlich durchströmten System ist die Pulsantwort die Verweilzeitverteilung für die betrachtete Kombination von Zu- und Ablaufort. Dabei wird jedoch von einem inerten Spurstoff ausgegangen. Für die Beurteilung der Auswirkungen der nicht idealen Durchmischung auf eine Stoffumsetzung ist dies nur in wenigen Sonderfällen ausreichend. Beispielsweise kann aus der Verweilzeitverteilung der Umsatz einer Reaktion erster Ordnung abgeschätzt werden. Im Allgemeinen liegen jedoch komplexere, nichtlineare Zusammenhänge zwischen Stofftransport und Reaktionskinetik vor, so dass nur die Kopplung von numerischer Strömungssimulation und kinetischer Modellierung die Vorhersage von Umsätzen, Raum-Zeit-Ausbeuten oder Selektivitäten in Abhängigkeit von den Betriebsbedingungen erlaubt. Dabei liefert die Lösung der Stoffbilanzen (Gl. 27) die Konzentrationen aller im kinetischen Modell berücksichtigten Stoffe als Funktion von Ort und Zeit. Neben der detaillierten Analyse der Konzentrationsverteilungen erlaubt auch die integrale Auswertung dieser Ergebnisse die Beurteilung der untersuchten Betriebsbedingungen und liefert Hinweise zu deren Verbesserung. In diesem Kapitel ist dies

am Beispiel der Fed-Batch Fermentation der Hefe *Saccharomyces cerevisiae* dargestellt. Experimentelle Untersuchungen des Prozesses in einem der im Folgenden untersuchten Konfiguration sehr ähnlichen Rührkesselreaktor wurden von Larsson et al. [71] durchgeführt.

Zahlreiche biotechnische Produktionsprozesse werden bezüglich der Kohlenstoff- und Energiequelle (Substrat) im Zulaufverfahren durchgeführt, da das Überschreiten einer kritischen Substratkonzentration zur Bildung unerwünschter Nebenprodukte und zum Rückgang der Biomasseausbeute führt. So bildet *Escherischia coli* unter Substratüberschuss Essigsäure, bei der Hefe *Saccharomyces cerevisiae* ist die Alkoholbildung unter aeroben Bedingungen und Substratüberschuss als Crabtree-Effekt bekannt. Bei beiden Mikroorganismen, die eine wichtige Rolle als Produktionsstämme in der Biotechnik, insbesondere bei der Herstellung rekombinanter Proteine spielen, liegen also ähnliche Problemstellungen vor. Die im Folgenden dargestellten Untersuchungen sind somit als exemplarisch für zahlreiche wichtige biotechnische Produktionsprozesse zu betrachten. Im Einzelfall sind selbstverständlich immer Berechnungen mit einem möglichst exakt parametrisierten kinetischen Modell durchzuführen.

Entsprechend den obigen Aussagen besteht die Aufgabe bei der Auslegung einer Hefefermentation mit dem Ziel der Biomassegewinnung in der Vermeidung der Alkoholbildung, ohne dass in anderen Bereichen des Reaktors gleichzeitig Substratlimitierung auftritt (s. auch Abb. 5 in Kap. 4). Die Hefezellen sollen möglichst im gesamten Volumen jederzeit mit  $\mu_{krit}$ , der maximalen Wachstumsrate ohne Alkoholbildung, wachsen. Das ist nur dann möglich, wenn im Rührkessel keine Konzentrationsgradienten des Substrats vorliegen. Im realen Rührkesselreaktor ist diese Forderung nicht erfüllbar. Mit welchen Betriebsbedingungen bzw. mit welcher Rührerkonfigurationen ihr am nächsten zu kommen ist, lässt sich anhand der Simulation der entsprechenden Substratverteilungen beurteilen. Da während eines Fed-Batch Prozesses das Reaktionsvolumen zunimmt, kann eine dynamische Simulation der gesamten Fermentation nicht auf nur einem stationären Strömungsfeld erfolgen. Wenn allerdings bestimmte, besonders kritische Prozesszustände bekannt sind, kann eine quasistationäre Betrachtung bereits die notwendigen Informationen liefern. Für die Simulation einer Substratverteilung zu einem bestimmten Zeitpunkt wird dabei von einem quasistationären Zustand mit konstantem Volumen und einer konstanten Biomassekonzentration ausgegangen. Der kritischste Prozesszustand hinsichtlich der Substratzufütterung ist häufig dann erreicht, wenn gegen Ende der Fermentation bei hohem Füllstand die maximale Biomassekonzentration vorliegt.

Die im Anschluss dargestellten Ergebnisse beruhen auf den in den Abb. 34 und 35 dargestellten axialsymmetrischen Strömungsfeldern sowie dem in Abschnitt 4.3.2 (Gl. 43-45) beschriebenen unstrukturierten kinetischen Modell von Bajpai und Reuss [5]. Die Biomassekonzentration beträgt jeweils  $c_X = 15$  g/l. Aus der Stoffbilanz für das Substrat

$$\frac{d}{dt} (c_S V_T) = F c_S^F - \frac{\mu c_X}{Y_{X/S}} V_T \quad (96)$$

folgt für eine konstante spezifische Wachstumsrate  $\mu = \mu_{max}/2$ ,  $dc_S/dt = 0$  und  $c_S \ll c_S^F$ :

$$\frac{F c_S^F}{V_T} = \frac{\mu_{max}}{2 Y_{X/S}} c_X \quad (97)$$

Abb. 52 zeigt örtliche Verteilungen der Substratkonzentration, die sich für einen Substratzulauf auf die Flüssigkeitsoberfläche mit den unterschiedlichen Rührerkombinationen ergeben. Aufgrund der Lage des Zulaufs in der Nähe des Kesselzentrums ist der Fehler durch die axialsymmetrische Approximation gering.

Erwartungsgemäß bildet sich in allen Fällen in der Umgebung des Zulaufs eine Zone mit überkritischer Substratkonzentration und Alkoholbildung. Im Falle der vier Rushton-Turbinen zeigt sich, wie auch schon im Pulsexperiment, deutlich die Schichtung anhand der Trennflächen mit geringem axialem Austausch. Nur ein kleiner Volumentanteil im Bereich des dritten Rührers von unten befindet sich im erwünschten Konzentrationsbereich, während in der gesamten unteren Hälfte des Reaktors das Wachstum durch sehr niedrige Substratkonzentrationen zusätzlich limitiert wird. Im Falle der Mischkonfiguration sorgt der obere, axial fördernde Rührer für einen besseren Abtransport des Substrats von der Oberfläche, aber auch hier verhindert die fluiddynamische Trennfläche oberhalb des zweiten Schrägblattrührers eine ausreichende Substratversorgung des unteren Reaktorbereichs. Da es sich um einen aeroben Prozess handelt und die Gasphase immer unter dem unteren Rührer eingetragen wird, besteht also ausgerechnet in dem am besten mit Sauerstoff versorgten Volumenanteil keine ausreichende Versorgung mit der Kohlenstoff- und Energiequelle. In der Konfiguration mit den vier Schrägblattrührern gibt es zwar keine Bereiche mit Substratkonzentrationen nahe Null, aber der Einmischbereich mit Alkoholbildung umfasst immer noch einen wesentlichen Anteil des Reaktionsvolumens.

Wenn man den Reaktor mit den vier Rushton-Turbinen als vier einzelne Rührkesselreaktoren mit Einfachrührer interpretiert, liegt es nahe, auch jeden dieser Rührkessel einzeln mit Substrat zu versorgen. Abb. 53 zeigt Substratverteilungen, wie sie sich für dieselben Betriebsbedingungen wie in Abb. 52 ergeben, allerdings ist der Zulaufstrom auf die vier Reaktorstufen verteilt. Um die bestmögliche Verteilung zu gewährleisten, wird angenommen, dass der Zulaufstrom direkt in die Rührzonen eingeleitet werden kann. Da die Mischzeit im Einfachrührersystem jedoch nur in der Größenordnung von ca. 10 s liegt, ist unabhängig von der Lage des Zulaufs in den einzelnen Reaktorstufen eine insgesamt deutlich homogenere Konzentrationsverteilung zu erwarten. Zum Vergleich sind wieder alle drei Rührerkombinationen dargestellt.

Offensichtlich ergibt sich unter diesen Bedingungen für die vier Rushton-Turbinen die homogenste Substratverteilung. In den beiden Reaktoren mit Axialrührern kommt es von oben nach unten zu einer Anhäufung von Substrat, der Bereich über dem obersten Rührer wird nicht ausreichend versorgt.

Zur besseren Beurteilung der einzelnen, in den vorhergehenden Abbildungen dargestellten Kon-

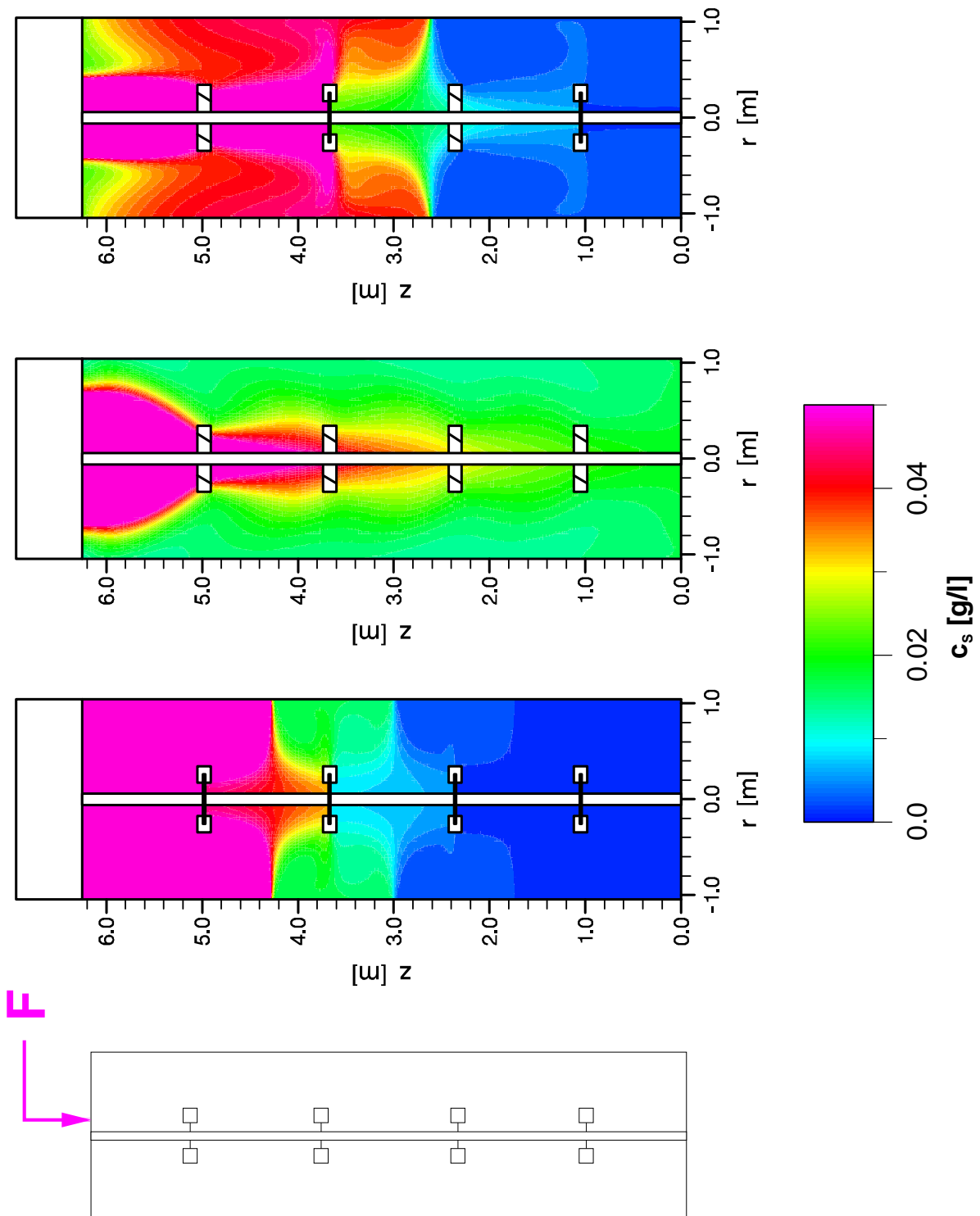


Abbildung 52: Örtliche Verteilung der Substratkonzentration für drei verschiedene Rührerkombinationen bei  $n = 140$  1/min,  $F = 2,84 \cdot 10^{-5}$  m<sup>3</sup>/s,  $c_S^F = 610$  kg/m<sup>3</sup> und  $c_X = 15$  kg/m<sup>3</sup>. Kesselabmessungen s. Tab. 9 und 10 sowie Abb. 37,  $c_{S,krit} = 0,03$  kg/m<sup>3</sup>. Ein Zulauf auf die Oberfläche.

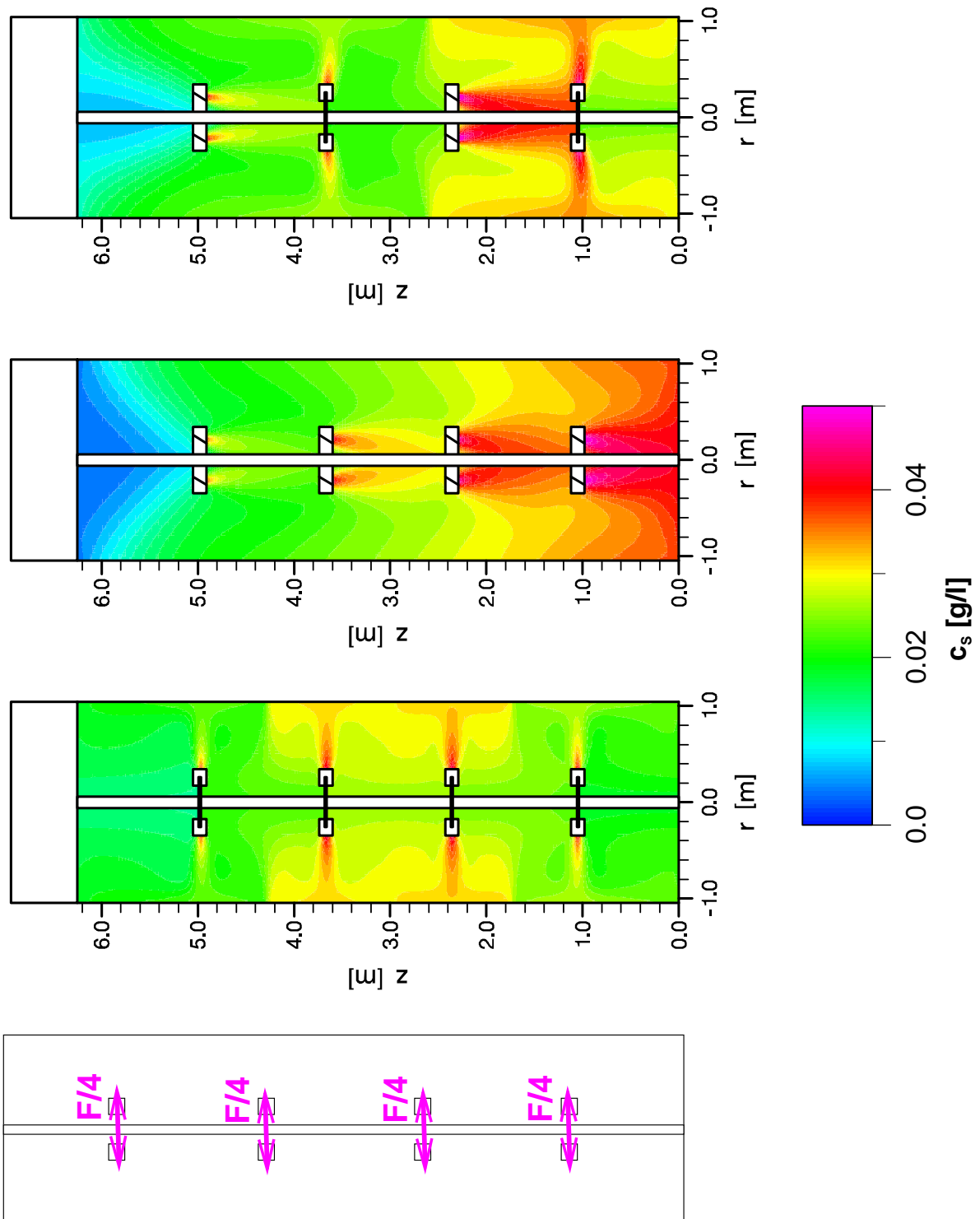


Abbildung 53: Örtliche Verteilung der Substratkonzentration für drei verschiedene Rührerkombinationen bei  $n = 140$  1/min,  $F = 2,84 \cdot 10^{-5}$  m<sup>3</sup>/s,  $c_S^F = 610$  kg/m<sup>3</sup> und  $c_X = 15$  kg/m<sup>3</sup>. Kesselabmessungen s. Tab. 9 und 10 sowie Abb. 37,  $c_{S,krit} = 0,03$  kg/m<sup>3</sup>. Verteilung des Zulaufstroms auf die vier Rührzonen.

	Rührer- kombination	$\overline{Q}_X$ [g/(lh)]	$\overline{Q}_P$ [g/(lh)]	$V_{krit}/V_T$ [-]	$c_S^{max}$ [g/l]	$c_S^{min}$ [g/l]
1 Zulauf auf die Oberfläche	4 R	2,14	0,97	0,33	3,53	0
	2 R /2 S	2,53	0,61	0,51	6,29	0,001
	4 S	2,79	0,36	0,12	1,55	0,012
4 Zuläufe in die Rührzonen	4 R	3,12	0,02	0,16	0,13	0,014
	2 R/2 S	3,10	0,05	0,22	0,11	0,007
	4 S	3,02	0,13	0,34	0,08	0,003
idealer Rührkesselreaktor		3,15	0	0	0,025	0,025

Tabelle 16: Quantitative Auswertung der berechneten quasistationären Substratverteilungen bei einer Biomassekonzentration von  $c_X = 15$  g/l. R: Rushton-Turbine, S: Schrägblattrührer.

zentrationsverhältnisse ist eine Quantifizierung der Ergebnisse wünschenswert. Von Interesse sind dabei der Anteil des Volumens mit überkritischer Konzentration am Gesamtvolumen sowie die integrale Biomasse- und Nebenproduktbildungsrate. Diesbezügliche Zahlenwerte sind in Tab. 16 zusammenstellt. Zusätzlich angegeben sind die maximalen und minimalen Substratkonzentrationen im Reaktor.

Da die Produktbildung nicht einer Kinetik nullter Ordnung folgt, reicht  $V_{krit}$  alleine nicht als Beurteilungskriterium aus. So hat die gemischte Konfiguration mit einem Zulauf das insgesamt höchste  $V_{krit}$ , weist jedoch eine deutlich geringere integrale Nebenproduktbildungsrate als der Reaktor mit vier Rushton-Turbinen auf. Die Angabe von  $c_S^{min}$  zeigt, dass in allen Fällen gebietsweise unterkritisches Wachstum vorliegt, am wenigsten bei verteiltem Zulauf mit vier Rushton-Turbinen. Hier wird auch die größte integrale Biomassebildungsrate ermöglicht. Bei der Beurteilung der Zahlenwerte sei nochmals auf die bereits in Kap. 4.3.2 erläuterten Einschränkungen hinsichtlich des verwendeten kinetischen Modells hingewiesen.

Die Auswirkungen der Mischeffekte auf die integrale Biomasseausbeute der Fermentation können am besten anhand der Simulation des gesamten Prozessverlaufs beurteilt werden. Dazu werden die Stoffbilanzen von Biomasse, Substrat und Produkt (Gl. 27 mit Gl. 43-45) mit den verschiedenen Strömungsfeldern parametrisiert, auf axialsymmetrischen Berechnungsgittern mit 43·253 finiten Volumen diskretisiert und bis zum Zeitpunkt  $t = 15$  h instationär simuliert. Vereinfachend wird die Volumenzunahme durch den Substratzulauf vernachlässigt, so dass die Simulation des gesamten Prozesses für jede Rührerkombination nur ein Strömungsfeld erfordert. Biomassebilanz

$$\frac{d}{dt}(c_X V_T) = \mu c_X V_T \quad (98)$$

und Substratbilanz Gl. 96 liefern mit  $dc_S/dt = 0$  und  $c_S \ll c_S^F$  den zum Erreichen der gewünschten

	Rührer- kombination	$\bar{c}_X$ [g/l]	$\bar{c}_S$ [g/l]	$\bar{c}_P$ [g/l]
1 Zulauf auf die Oberfläche	4 R	19,9	0,076	10,8
	2 R /2 S	22,7	0,058	8,1
	4 S	27,4	0,048	3,6
4 Zuläufe in die Rührzonen	4 R	29,7	0,029	1,2
	2 R/2 S	29,3	0,030	1,6
	4 S	28,3	0,031	2,6
idealer Rührkesselreaktor		30,9	0,025	0

Tabelle 17: Mittlere Konzentrationen nach 15 h Fermentationszeit. Ergebnis der dynamischen Simulation des gesamten Prozesses. R: Rushton-Turbine, S: Schrägblattrührer.

Wachstumsrate von  $\mu_{max}/2$  erforderlichen zeitabhängigen Zulaufvolumenstrom:

$$F = \frac{\mu_{max} c_X^0 V_T}{2 Y_{X/S} c_S^F} e^{(\mu_{max}/2)t} \quad (99)$$

Die Biomassekonzentration beträgt zu Beginn der Fermentation  $c_X^0 = 1,0$  g/l. In Tab. 17 sind die erreichten gemittelten Konzentrationen nach fünfzehn Stunden Fermentationszeit angegeben.

In den hier vorgestellten Untersuchungen erweist sich das Vierfachrührersystem mit vier Axialrührern als die beste Alternative hinsichtlich der Mischzeit und der Substratverteilung, wenn nur ein Zulauf zur Verfügung steht. Lokal wird mit den Rushton-Turbinen die bessere Vermischung erreicht. Allerdings beruhen alle Berechnungen auf der Voraussetzung, dass zu keinem Zeitpunkt und an keinem Ort im Reaktor Sauerstofflimitierung vorliegt. Gerade um den dafür notwendigen Stoffübergang von der Gasphase in die Flüssigkeit zu ermöglichen, wird üblicherweise die Rushton-Turbine zur Dispergierung der über den Begaserring eingetragenen Gasphase eingesetzt, ein Schrägblattrührer ist für diese Aufgabe ungeeignet. Für einen ausreichenden  $k_{La}$ -Wert muss zudem ein entsprechender spezifischer Leistungseintrag vorhanden sein. Im unbegasteten Zustand beträgt die Leistungskennziffer der Rushton-Turbine 5,0, die des Schrägblattrührers 1,55. Während sich also der Leistungseintrag bei identischem Rührerdurchmesser und gleicher Drehzahl stark unterscheidet, haben beide Rührer vergleichbare Flüssigkeitspumpkapazitäten (Pumpkennziffer Rushton-Turbine ca. 0,75, Schrägblattrührer ca. 0,81). Da jedoch der Leistungseintrag  $\sim D^5$  ist, kann mit einem Schrägblattrührer dieselbe Leistung wie mit einer Rushton-Turbine eingetragen werden, wenn der Rührerdurchmesser um den Faktor 1,26 vergrößert wird. Mit dieser Maßnahme würde gleichzeitig die Pumpkapazität verdoppelt. Allerdings sind für die Dispergierereigenschaften eines Rührers weniger der absolute Leistungseintrag, als die detaillierten Strömungsvorgänge im Bereich der Rührerblätter ausschlaggebend. So findet bei einem Scheibenrührer die Zerteilung der Gasblasen in den Wirbelschleppen hinter den einzelnen Rührerblättern statt [124].