

Vergabe einer Abschlussarbeit Bachelor/Master

Thema:

CFD (Computational Fluid Dynamics) -Simulation von CPOX (Catalytic Partial Oxidation) - Reformern

Beschreibung:

Bei der Auslegung und Optimierung von Reformern zur Wasserstoffherzeugung stellt der Einsatz von numerischen Methoden ein wichtiger Bestandteil des Entwicklungsprozesses dar. Dabei wird sowohl das Strömungsfeld als auch das komplexe Zusammenspiel zwischen Wärme- und Stofftransportvorgängen unter dem Einfluss komplexer heterogen katalysierter Oberflächenreaktionen und Gasphasenreaktionen modelliert.

Auch unter dem Einsatz leistungsfähiger Großrechner ist es nicht möglich alle Details eines technischen Systems ohne jegliche Modellannahmen zu berechnen. Limitierender Faktor ist unter anderem die benötigte Rechenzeit. Um die Rechenzeiten in einem vertretbaren Rahmen zu halten besteht ein Lösungskonzept in der Kopplung verschiedener Berechnungsprogramme.

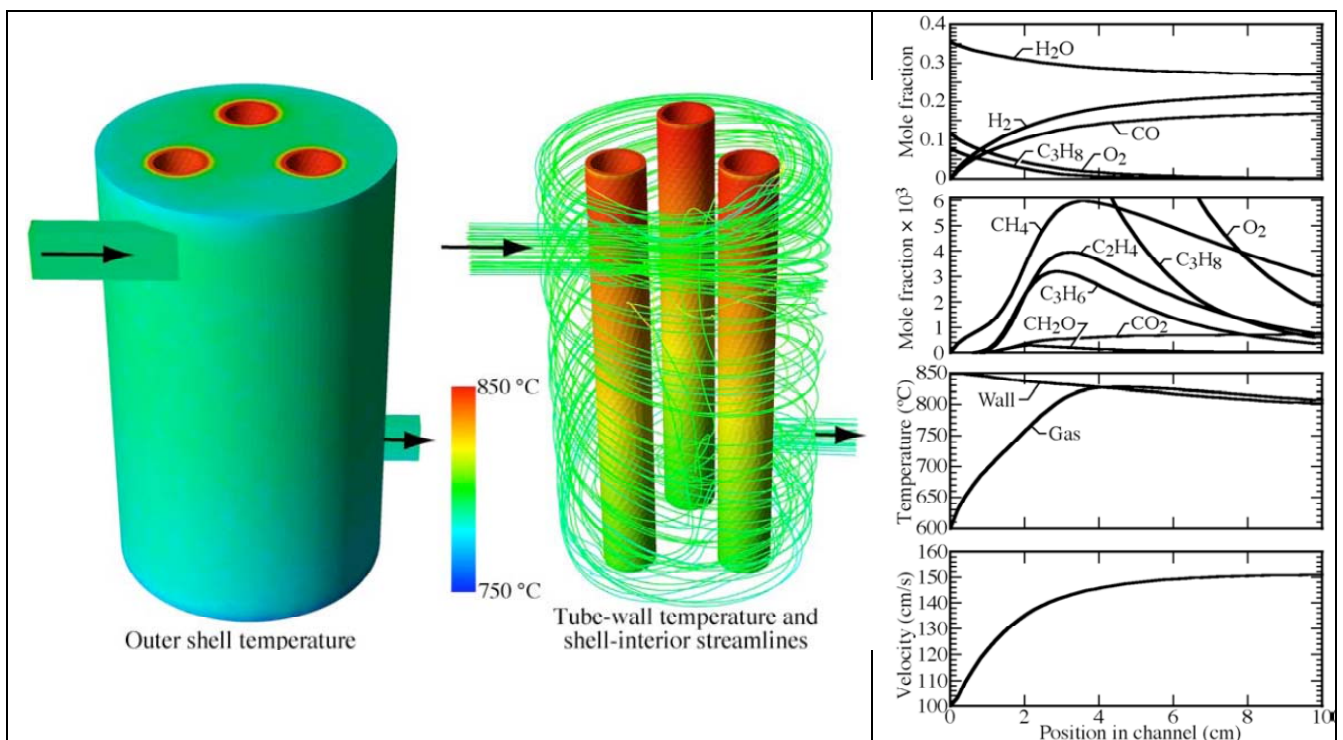


Abbildung 1: Ergebnisse der Modellierung eines Reformers zur Synthesegaserzeugung aus Propan [1]

Die katalytische Partialoxidation (CPOX – Catalytic Partial Oxidation) von Kraftstoffen kann zur Bereitstellung von Wasserstoff für Brennstoffzellen in der mobilen und dezentralen Kraftstoffherzeugung eingesetzt werden. Die Umsetzung findet meist in katalytisch beschichteten Kanälen oder Rohren statt, bei der die Strömung in guter Näherung als ein- oder zweidimensional betrachtet werden kann, was die Rechnung stark beschleunigt. Die Vorgänge in den einzelnen Kanälen werden mit dem im Arbeitskreis von Prof. Deutschmann entwickelten Softwarepaket DETCHEM modelliert. Dieses erlaubt die Berücksichtigung detaillierter Gasphasen- und Oberflächenchemie. Die dreidimensionale Strömung im Umfeld der Kanäle sowie der Wärmetransport in begrenzenden Festkörpern (Reaktorwände, Kanalwände) wird mit einem CFD-Programm durchgeführt (z. B. FLUENT oder OpenFOAM). Beide Programme tauschen untereinander Daten aus.

In Abbildung 1 ist ein typisches Ergebnis der Berechnung eines Reformers gezeigt [1]. Eine Mischung aus Propan, Luft und Wasser tritt mit einer Temperatur von 600°C von unten in drei Rohre (Länge = 10 cm, Innendurchmesser = 5 mm) ein und wird auf der mit einem auf Rhodium basierenden Katalysator beschichteten Innenwand zu Synthesegas umgesetzt. Die Rohre werden von außen mit Luft beheizt, welche mit einer Temperatur von 800°C von links in den Reformer eintritt und die Rohre umströmt. Links ist die Temperatur der äußeren Oberfläche des Reformers gezeigt, in der Mitte die Oberflächentemperatur der Rohre sowie einige Streichlinien. Rechts sind die Verläufe der Konzentrationen einiger Spezies, die Temperatur des Gases und innerhalb der Rohrwand sowie die Gasgeschwindigkeit längs eines der drei Rohre gezeigt.

Bei derzeit durchgeführten experimentellen Arbeiten [2] wird das Potential der Verwendung von flüssigen Kraftstoffen zur Wasserstoffherzeugung untersucht. Dabei wird der Kraftstoff an einem mit Rh/Al₂O₃ beschichteten monolithischen Wabenkörper zu Wasserstoff umgesetzt. Für verschiedene Betriebsbedingungen werden Konzentrations- und Temperaturprofile entlang einzelner Kanäle des Monolithen gemessen.

Im Rahmen einer Masterarbeit sollen diese Experimente nachgerechnet werden. Ziel ist hierbei ein tiefgehendes Verständnis des Zusammenspiels der innerhalb derartiger Systeme ablaufenden komplexen Vorgänge zu gewinnen und daraus Aussagen über optimale Betriebsbedingungen abzuleiten.

[1] G. Goldin, H. Zhu, K. Katte, A. Dean, R. Braun, R. Kee, D. Zhang, L. Maier, O. Deutschmann. Coupling Complex Reformer Chemical Kinetics with Three-Dimensional Computational Fluid Dynamics. ECS Transactions 25, No 2, (2009) 1253-1262.

[2] M. Hettel, C. Diehm, B. Torkashvand, O. Deutschmann. Critical Evaluation of In-situ Probe Techniques for Catalytic Honeycomb Monoliths. Catalysis Today, (2013) Article in press

Voraussetzungen:

Interesse am Umgang mit Computern und Programmen

Betreuer:

Dr. Matthias Hettel

Möglicher Beginn:

Jederzeit nach Absprache