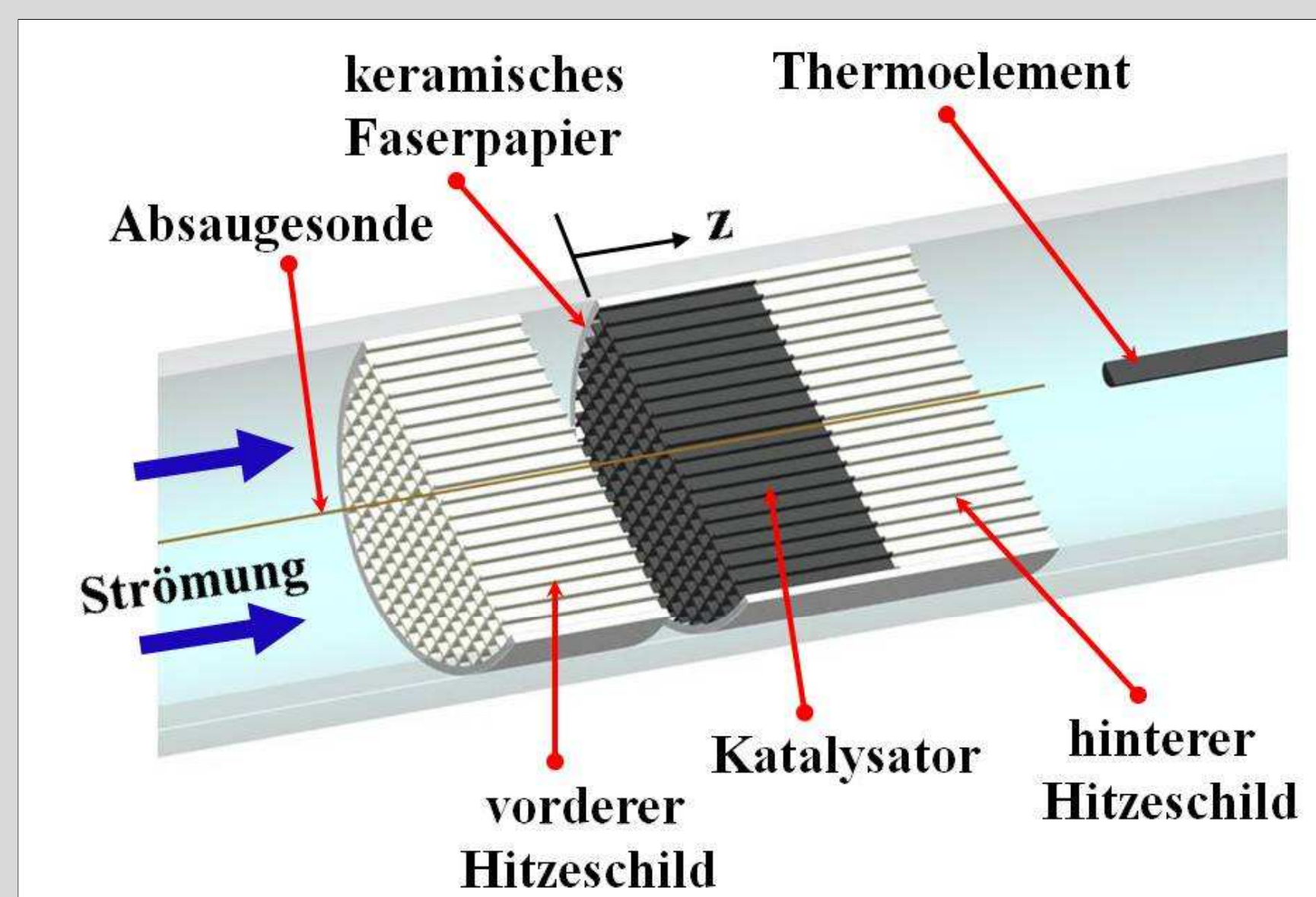
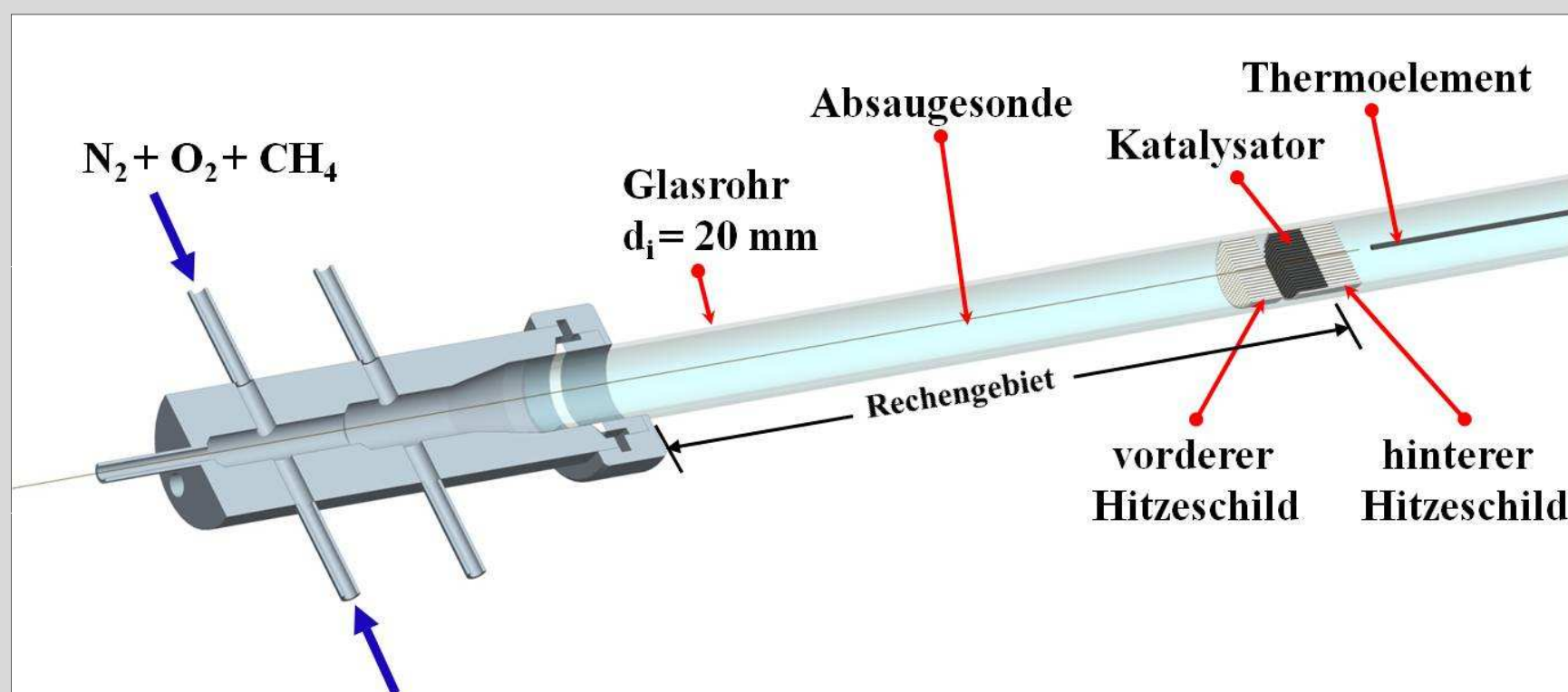


Gekoppelte 2D/3D-CFD-Berechnung eines monolithischen Reaktors für die katalytische Partialoxidation

Matthias Hettel¹, Claudia Diehm², Olaf Deutschmann^{1,2}

Untersuchtes System^[1]

Katalytische Partialoxidation Methan



Monolithische Reaktoren

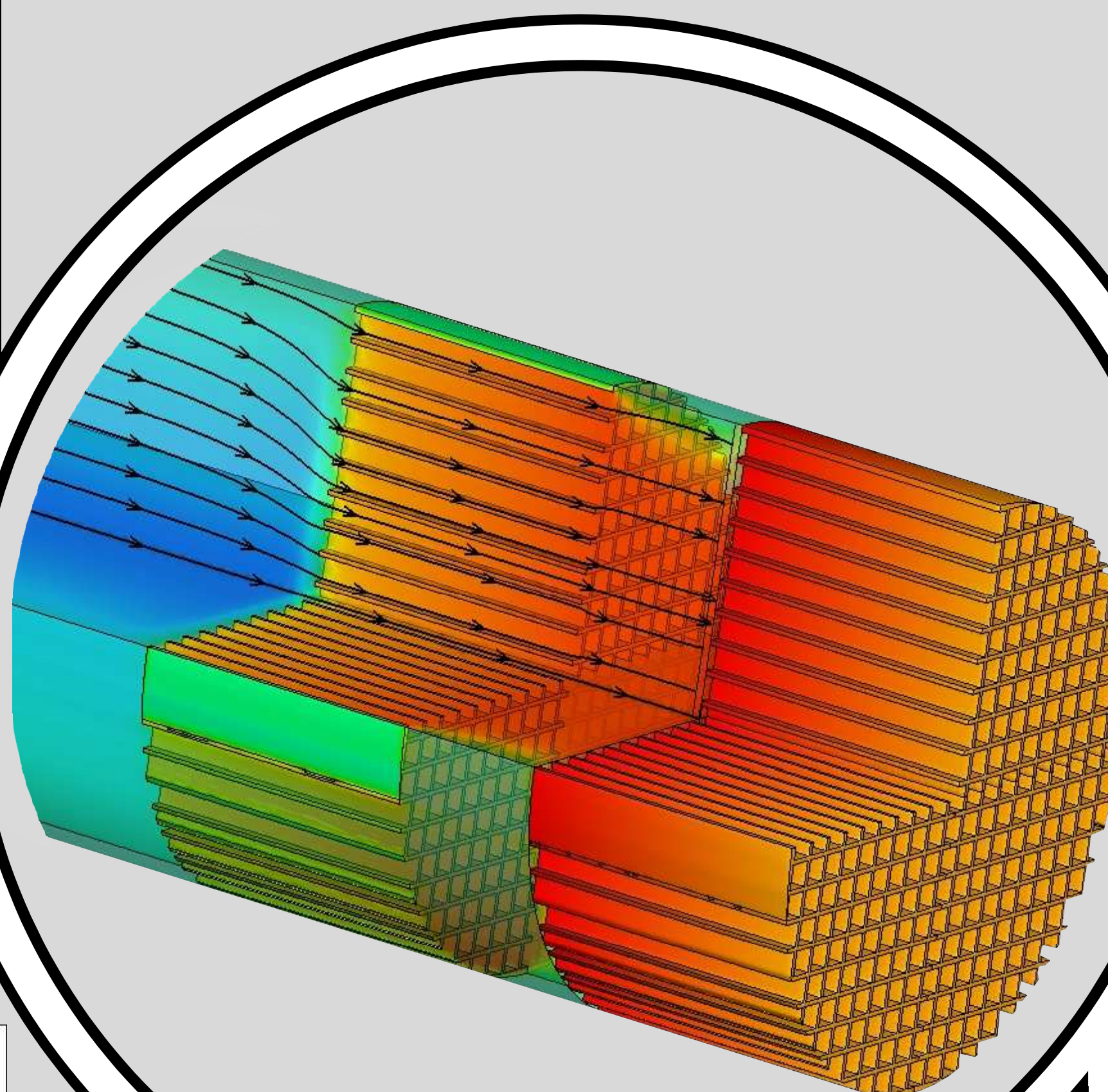
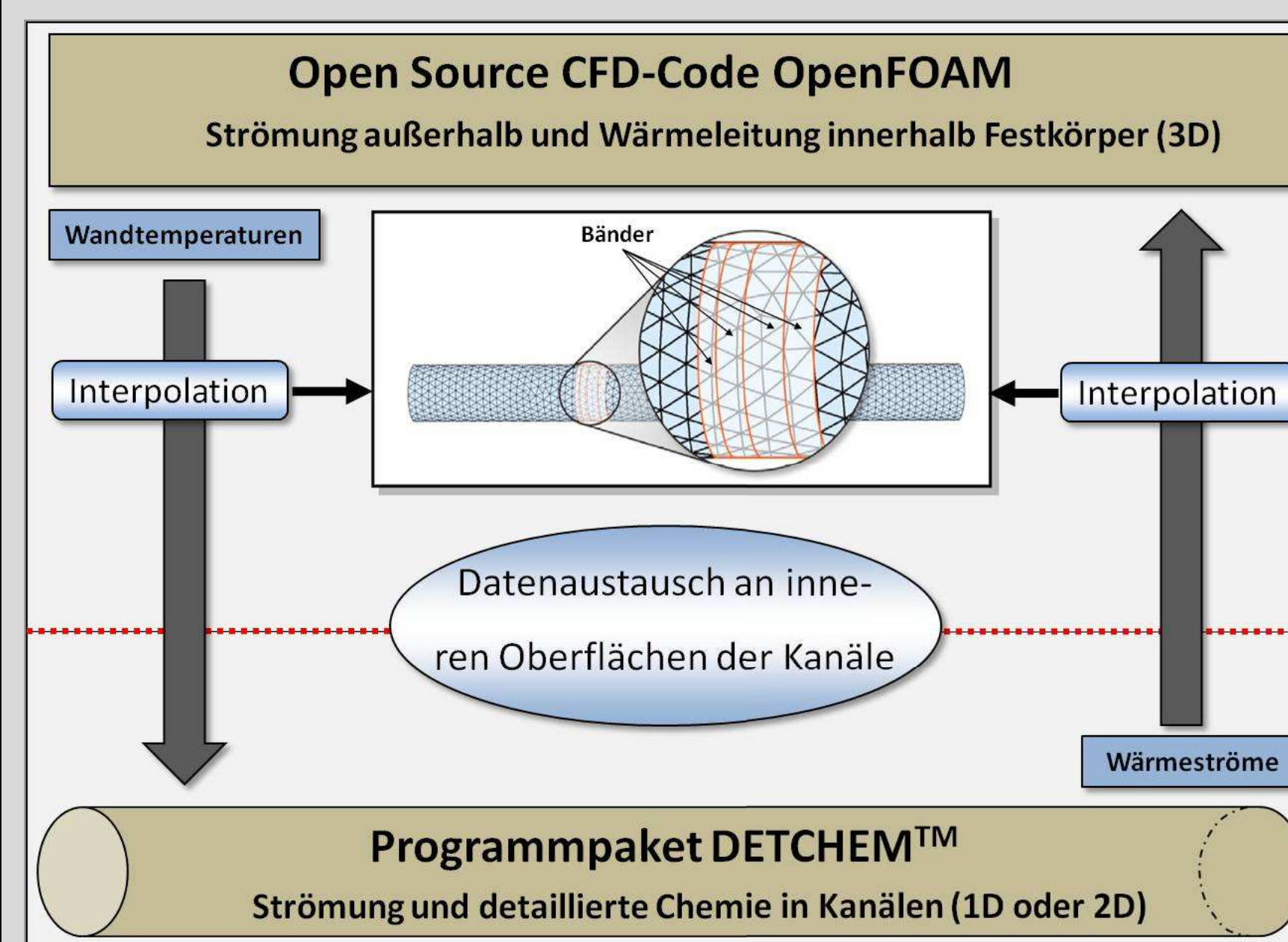
- Komplexes 3D-Strömungsfeld ohne Reaktion außerhalb Monolith (z. B. Turbulenz)
- "Einfaches" Strömungsfeld in den Kanälen des katalytisch beschichteten Monolithen
- Komplexe Chemie in Kanälen des kat. Monolithen
- Wärmeleitung innerhalb des Festkörpers

Neues Berechnungswerkzeug: DUO

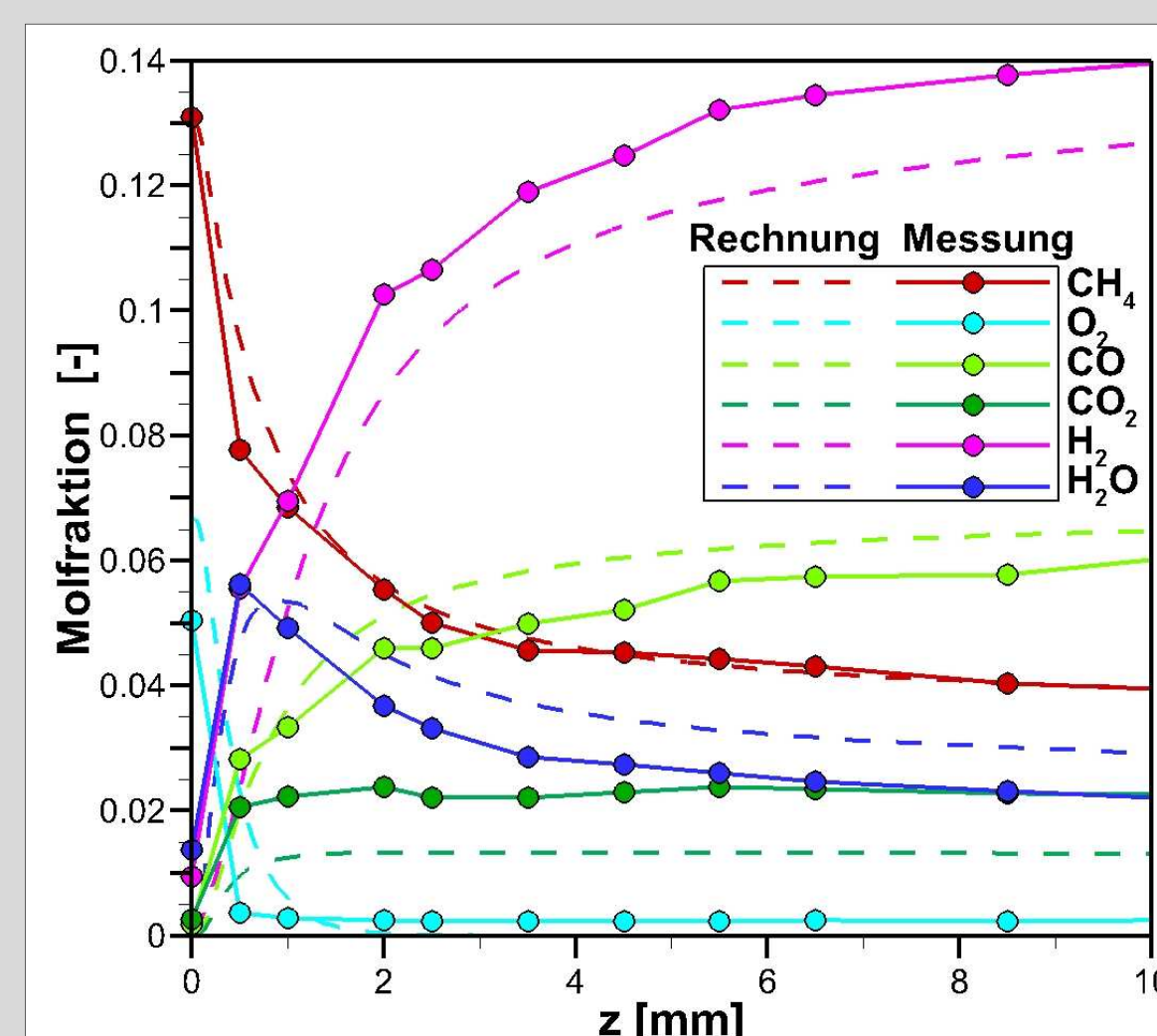
CFD - Code OpenFOAM + Programmpaket DETCHEM™

3D-Berechnung des Strömungsfeldes außerhalb des kat. Monolithen sowie der Wärmeleitung innerhalb der Monolithen.

1D / 2D - Berechnung des Strömungsfeldes in den Kanälen des kat. Monolithen unter Berücksichtigung detaillierter Chemie.



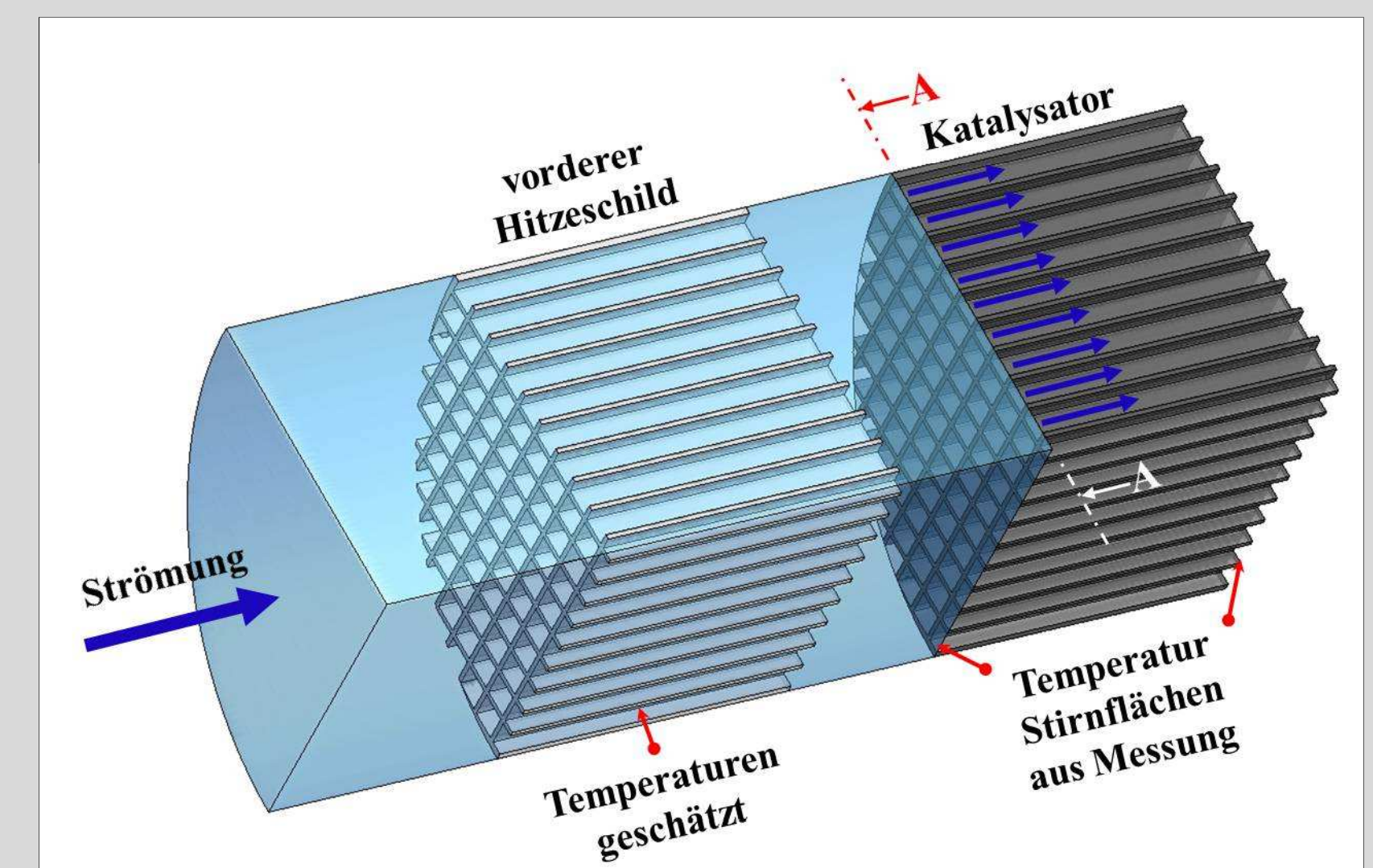
Messung^[3]/Rechnung Gaskonz.



Modellierung mit DUO

Rechengebiet

- Viertelgeometrie (D = 20 mm, L = 30 cm)
- Gitter: blockstrukturiert, 2700 Blöcke, 1 Mio. Zellen



Gruppierung

- 5 Kanalgruppen

Stoffwerte

- Gas: DETCHEM Shared Library
- Codierit: $\lambda = 2 \text{ [W/(m}^2 \cdot \text{K)]}$

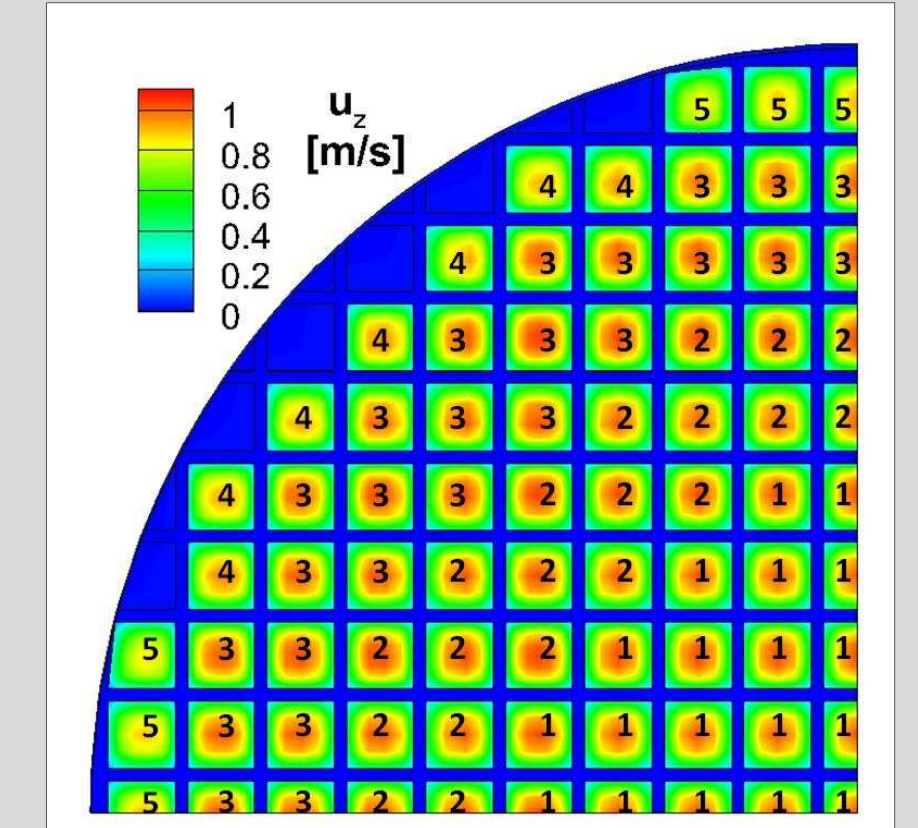
Parameter

- Mischung: CH₄ / O₂ (C/O=1) in 80% N₂
- Volumenstrom: 4 SLPM, Temp.: 463 K
- Kat.: Rhodium (4.23 mg/cm³) auf Al₂O₃, 600 cps, L = 11 mm, Ø = 19 mm

Modelle

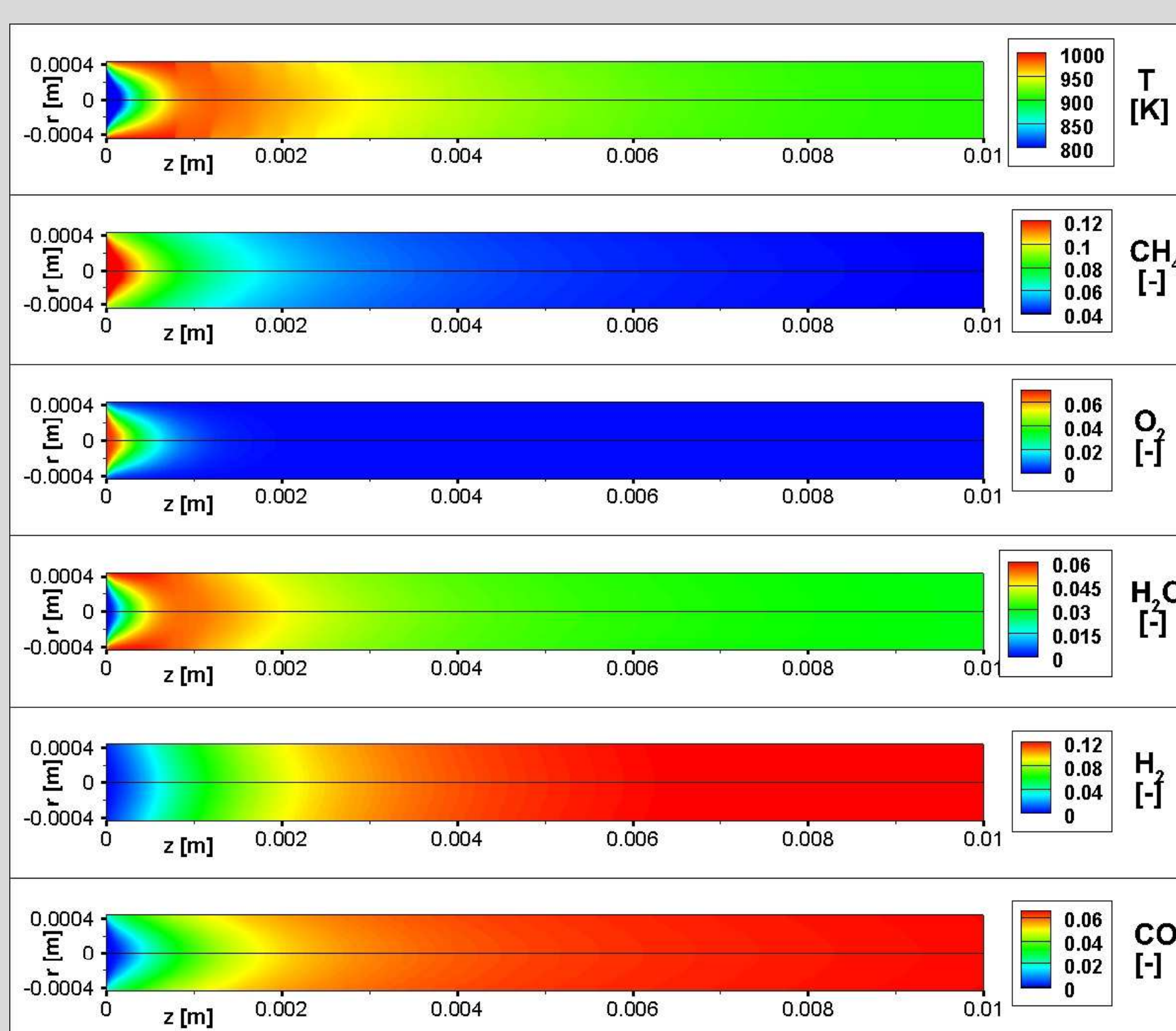
- Oberflächenmechanismus^[2]: CPOX von Methan über Rhodium (20 Spezies, 38 Reaktionen)
- Mean-Field-Näherung

Ansicht A-A



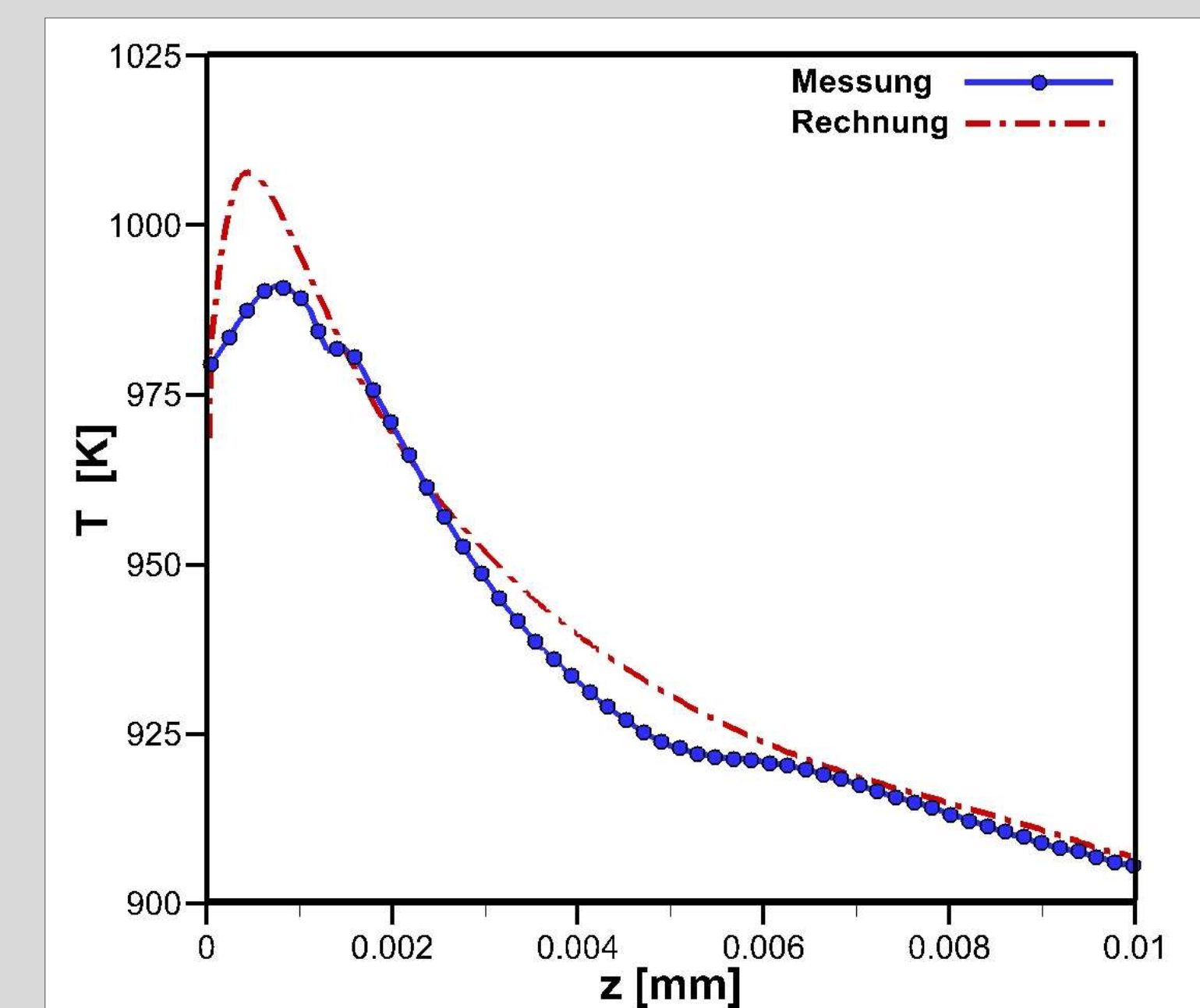
Ergebnisse Gasphase

Verteilungen in einem Monolithkanal



Ergebnisse Festkörper

Messung^[3]/Rechnung Temperatur Monolith



Zusammenfassung

Neues Berechnungswerkzeug DUO

- Effizient: (Kopplung 3D + 1D/2D)
- Gruppierung erlaubt große Anzahl von Kanälen
- Erweiterung OpenFOAM: Shared Library ermöglicht volle 3D Rechnung mit detaillierter Oberflächenchemie

Vergleich Rechnung / Messung

- Übereinstimmung mit Messung gut (sowohl Spezies als auch Temperatur im Festkörper)
- Problemfeld: Randbedingungen Temperatur/Strahlung (neue Randbedingungen in Arbeit)

Literatur

- [1] D. Livio, C. Diehm, A. Donazzi, A. Beretta, O. Deutschmann. Catalytic Partial Oxidation of Ethanol over Rh/Al₂O₃: Spatially Resolved Temperature and Concentration Profiles. Appl. Catal. A: Gen. 467 (2013) 530–541.
- [2] O. Deutschmann, R. Schwiendernoch, L.I. Maier and D. Chatterjee, in J.J.S. E. Iglesia and T.H. Fleisch (Editors), Studies in Surface Science and Catalysis, Vol. Volume 136, Elsevier, 2001, p. 251.
- [3] M. Hettel, C. Diehm, B. Torkashvand, O. Deutschmann. Critical Evaluation of In-situ Probe Techniques for Catalytic Honeycomb Monoliths. CatalysisToday

Acknowledgement

The authors would like to thank KIC InnoEnergy, a project initiative of the European Institute for Innovation and Technology (EIT), for financial support. The investigations were carried out within the project SynCon, proposal No. CCG_P16 in the topic "Energy from Chemical Fuels".