

MODELLIERUNG UND OPTIMIERUNG CHEMISCHER REAKTOREN

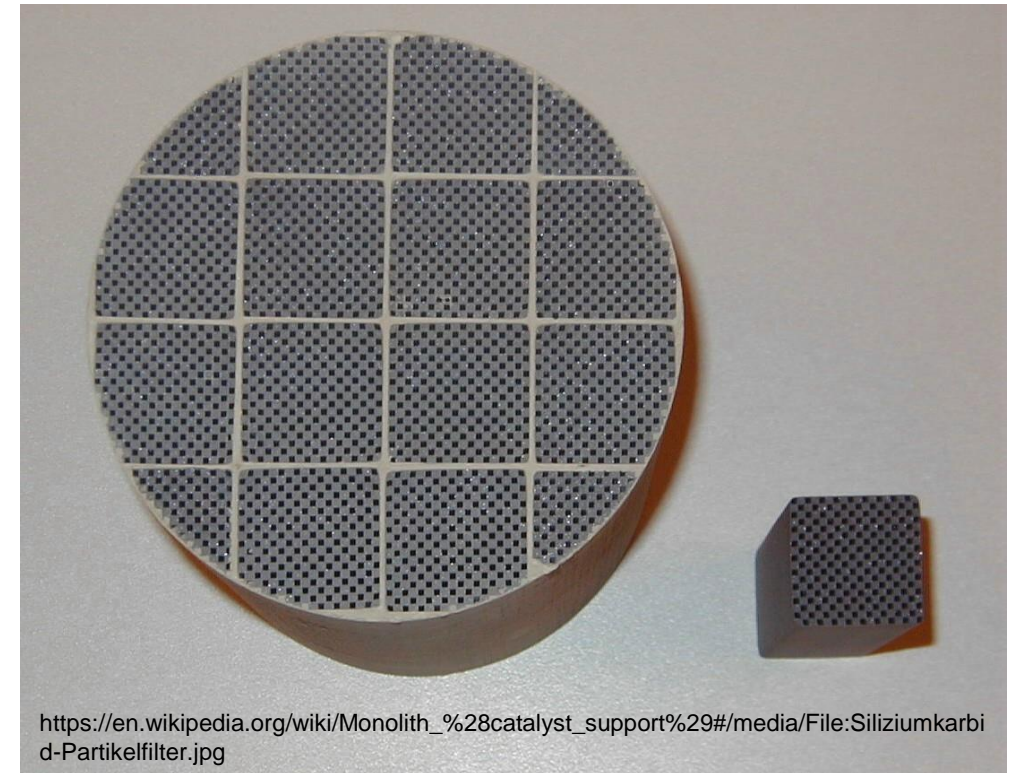
Seminar 2 – Chemkin-Pro

Sophie Rodmacher – 08. November 2024

Sophie.Rodmacher@iec.tu-freiberg.de

Zielstellung

1. Einführung in Chemkin → grundlegende Funktionsweise und Möglichkeiten
2. Aufbau eines Festbettmodells → katalytische Methanoxidation in einem Wabenkörper-Monolith-Reaktor
3. Durchführung von Parameterstudien
4. Zusatzaufgabe → Entwicklung eines reduzierten POX-Modells zur selbstständigen Bearbeitung


















Ansys Chemkin-Pro

- Kommerzielle Software für die Reaktormodellierung
- Studenten-Lizenzen am Campus verfügbar
- Fokus auf industrielle Bedingungen und reaktive Strömungen
- Die Benutzeroberfläche erleichtert die Problemeingabe und ermöglicht die visuelle Erstellung von Reaktornetzwerkdiagrammen zur Modellierung komplexer Systeme
- Komplexe Reaktionsmechanismen können genutzt werden → umfangreiche Datenbank und verschiedene Tutorials vorhanden



Reaktormodelle und Komponenten

Icon	Reactor Model Component	Description
	Inlet Source	External source for inlet gas.
	Initialization	External source of initialization.
	Outlet	Outlet flow (product) of reactor or network of reactors — indicates no further processing of the gas.
	Gas Mixer	Non-reactive gas mixer, which accepts multiple inlets.
	Gas Flow Splitter	Splits a gas stream into multiple streams.
	Equilibrium	Chemical and phase equilibrium calculations.

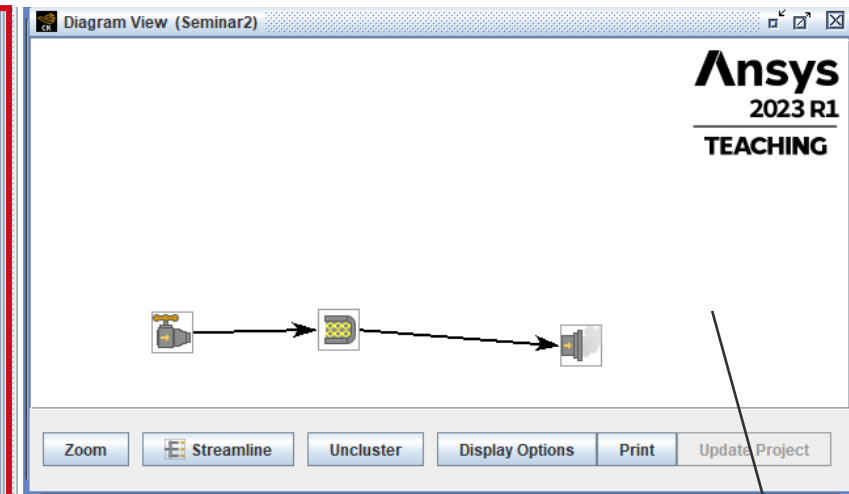
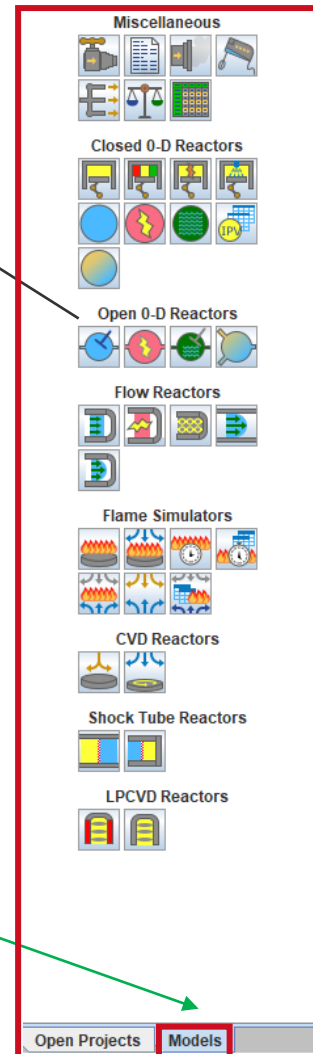
Icon	Reactor Model Component	Description
	Perfectly Stirred Reactor (PSR)	Transient or steady-state perfectly stirred reactor, also known as continuously stirred tank reactor (CSTR).
	Plasma Stirred Reactor (Plasma PSR)	Transient or steady-state well mixed plasma reactor.
	Closed Multiphase Reactor	Transient, closed, homogeneous system or batch reactor for multiphase liquid- and gas-phase reactions.
	Partially Stirred Reactor (PaSR)	Open, partially stirred or un-mixed reactor for determining rate limitations between mixing, kinetics, and flow.
	Plug-flow Reactor (PFR)	Plug-flow reactor, where convection dominates transport.
	Plasma Plug-flow Reactor	Plasma reactor under plug-flow conditions.
	Planar Shear Flow	Shear-flow reactor, which accounts for boundary-layer effects in planar channels.
	Cylindrical Shear Flow	Shear-flow reactor, which accounts for boundary-layer effects in cylindrical channels.
	Honeycomb Monolith	Plug-flow fixed-bed catalyst reactor with internal surface area defined by honeycomb properties and catalyst loading.

Nutzeroberfläche

verfügbare
Reaktormodelle

Reaktormodelle werden
per Doppelklick oder mit
der Maus eingefügt.

✓ Update Project



Arbeitsbereich

Nutzeroberfläche

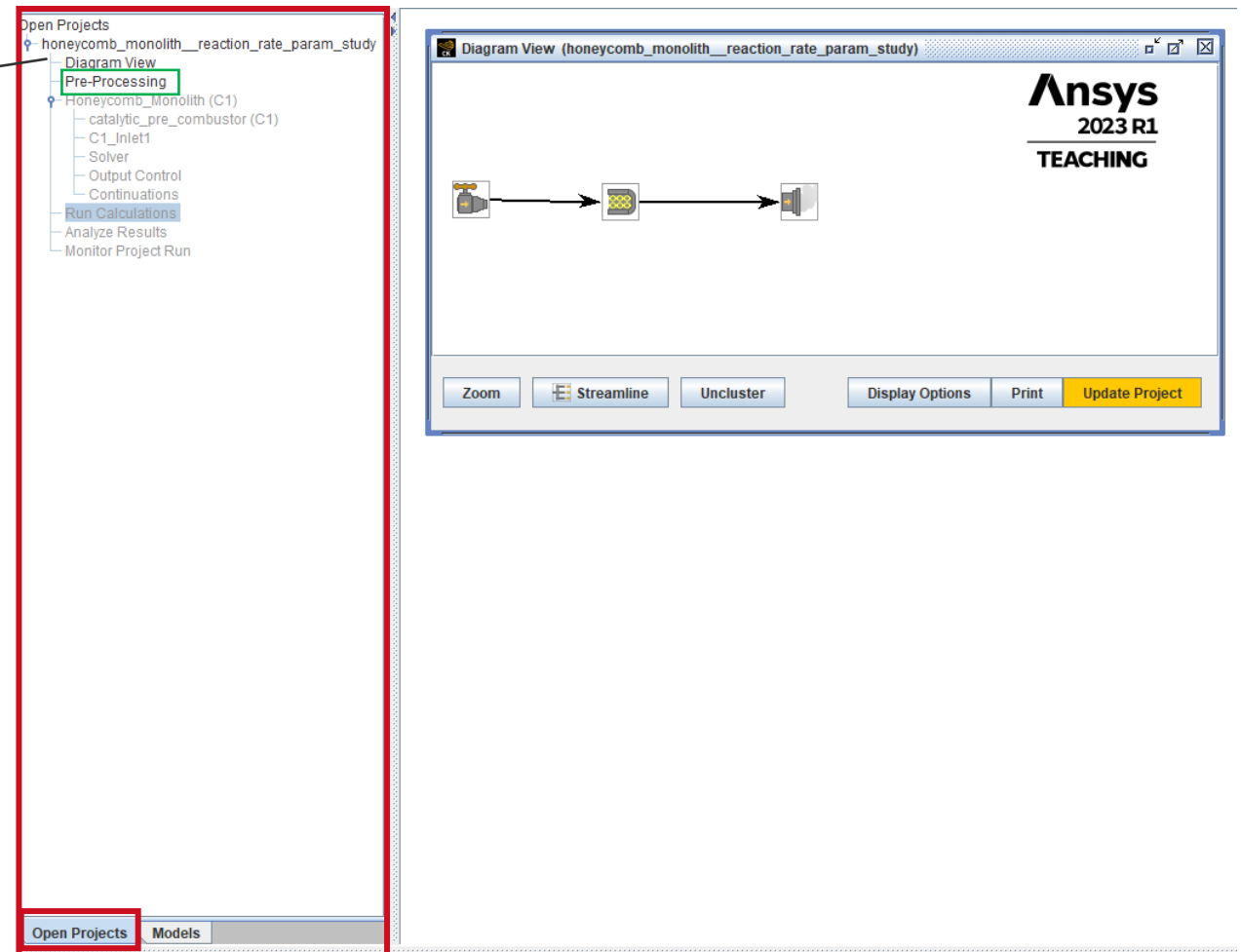
Projektbaum

- Verwaltung der offenen Projekte
- Beinhaltet einzelne Teilschritte

Nächster Schritt:

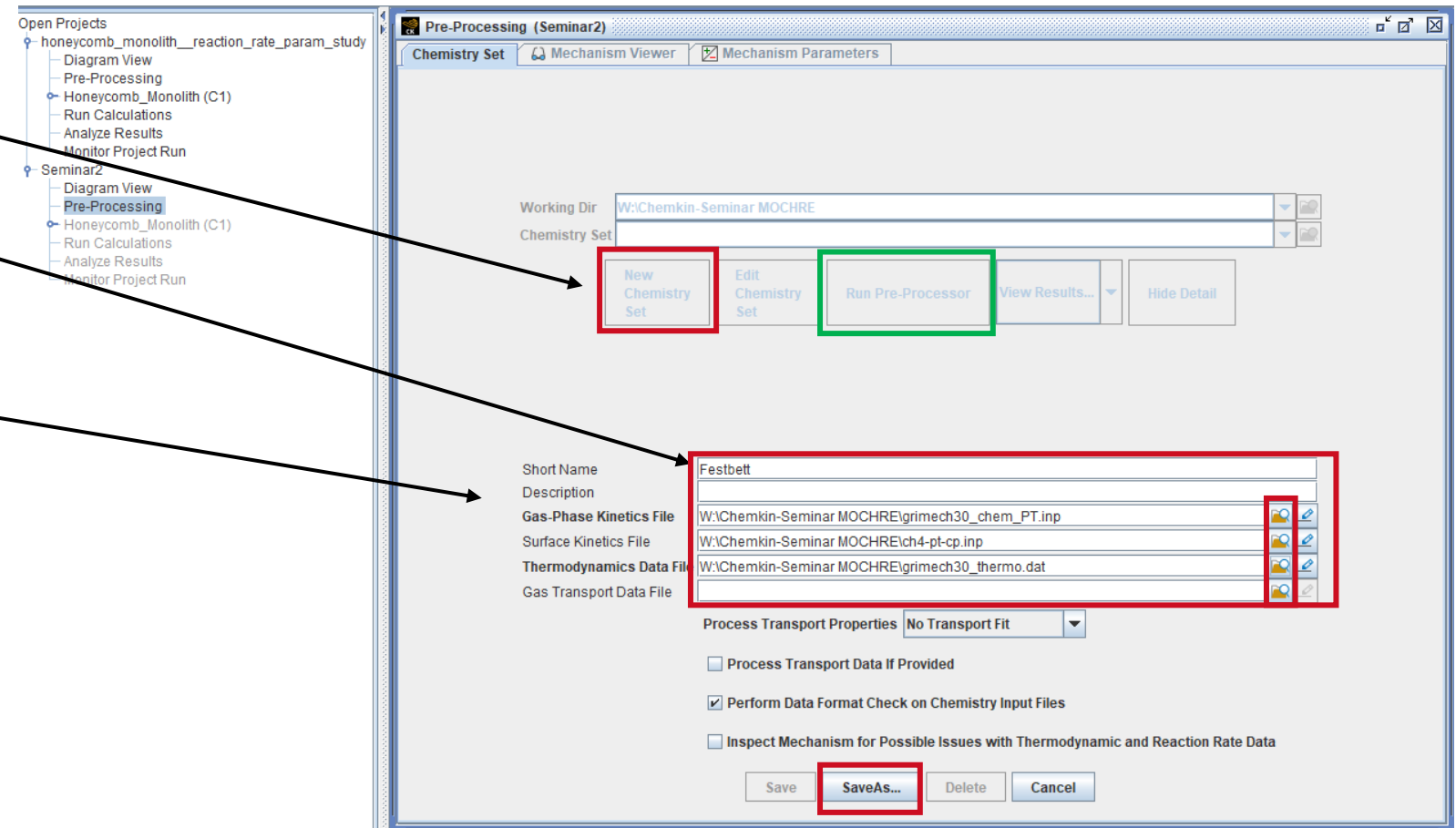
Reaktionsmechanismus

✓ Pre-Processing



Pre-Processing, Reaktionsmechanismus

1. Neues Chemistry-Set erstellen
2. Eingabe eines Namens
3. Auswahl der Gas-Phasen-Reaktionen:
grimech30_chem_PT.inp
4. Auswahl der Oberflächenreaktionen am Kat: **ch4-pt-cp.inp**
5. Auswahl der thermodynamischen Daten:
grimech30_thermo.dat
6. Chemistry Set speichern
7. **Run Pre-Processor**



Reaktoreigenschaften und Prozessbedingungen

- Definition des Problems (**Lösung der Energieerhaltungsgleichung** oder isotherme Betrachtung)
- Definition der Prozessbedingungen
 - Einlasstemperatur
 - Druck

C1_Honeycomb Monolith (Seminar2:Honeycomb_Monolith (C1))

Reactor Physical Properties | Honeycomb Monolith | Species-specific Properties

Problem Type: Solve Gas Energy Equation

☐ Turn on Momentum Equation
☒ Turn off Momentum Equation

☒ Turn on Residence Time Calculation
☐ Turn off Residence Time Calculation

Temperature: 780.0 K
Pressure: 3.75 atm

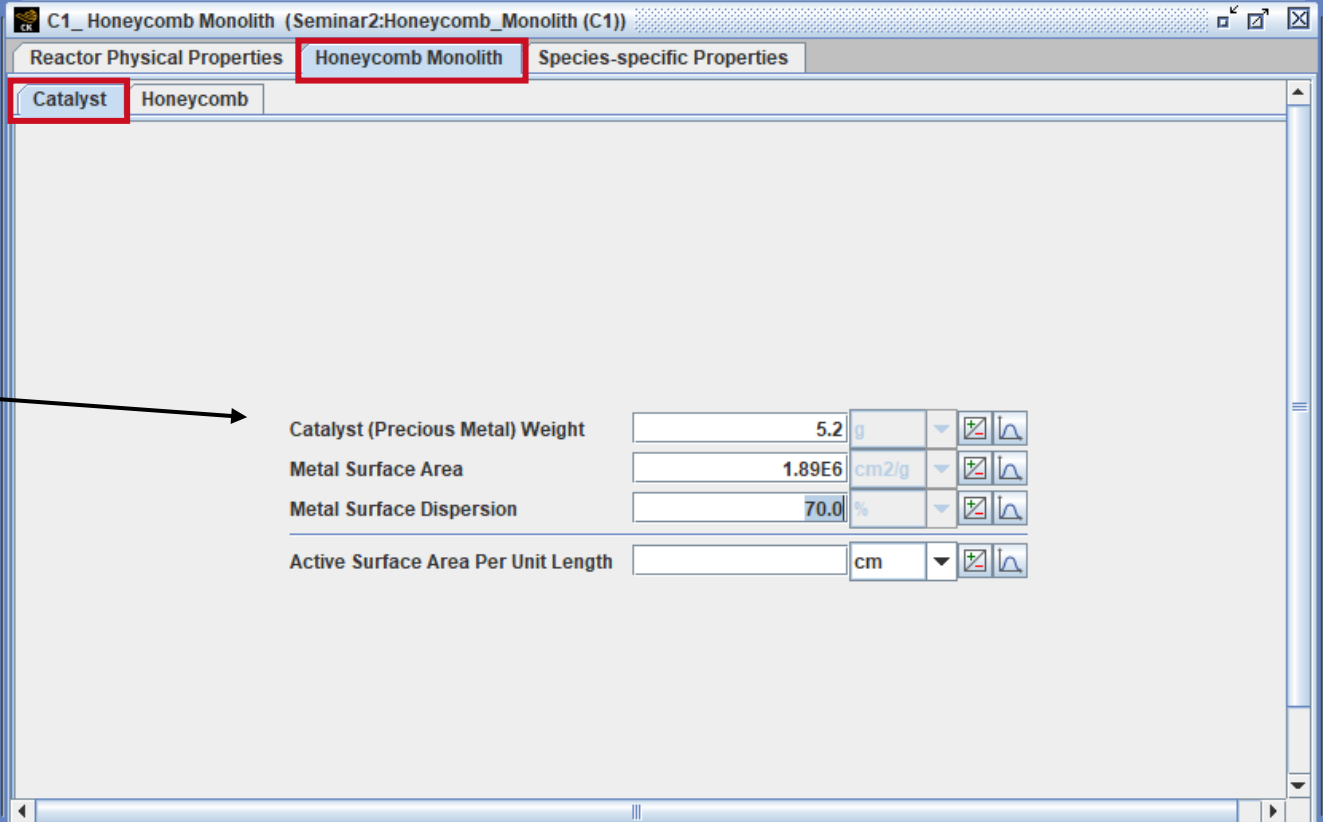
☒ Heat Flux Per Unit Length: 0.0 cal/cm-sec
☐ Heat Transfer Coefficient: erg/cm2-K-sec
Ambient Temperature: K

☒ Surface Temperature Same as Gas Temperature
☐ Surface Temperature: K

Mixture Viscosity at Inlet: 0.0 g/cm-sec
Gas Reaction Rate Multiplier: 1.0
Surface Reaction Rate Multiplier: 1.0

Eigenschaften Festbett I

- Definition der Katalysatoreigenschaften (Gewicht, Oberfläche usw.)



The screenshot shows the 'Catalyst' tab in the 'Honeycomb Monolith' section of the Chemkin-Pro software. The 'Catalyst' tab is highlighted with a red box. The 'Honeycomb Monolith' tab is also highlighted with a red box. The 'Catalyst' tab contains the following properties:

Property	Value	Unit
Catalyst (Precious Metal) Weight	5.2	g
Metal Surface Area	1.89E6	cm ² /g
Metal Surface Dispersion	70.0	%
Active Surface Area Per Unit Length		cm

Eigenschaften Festbett II

- Definition des Festbettes (hier dargestellt als Wabenkörper) → Länge, Durchmesser, Porosität (hier Zelldichte) usw.

Property	Value	Unit
Diameter	10	cm
Height		cm
Width		cm
Length	10	cm
Cell Density	400	CPI (cell/in)
Cell Wall Thickness	0.018	cm
Pressure Drop	0.064	PSI/cm

Definition der Einlassbedingungen - Strömungseigenschaften

The screenshot displays the Chemkin-Pro interface. On the left, the 'Open Projects' tree shows the project hierarchy, with 'C1_Inlet1' selected under 'Honeycomb_Monolith (C1)'. The main window shows the 'Stream Properties Data' tab for 'C1_Inlet1 (honeycomb_monolith_reaction_rate_param_study:Honeycomb_Monolith (C1))'. A red box highlights the 'Stream Properties Data' tab. Below the tab, a red text label reads 'See Reactor Property Panel for specification of Temperature.' The 'Axial Velocity' property is selected, with a value of '1200.0' and units of 'cm/sec'. Other properties listed are 'Mass Flow Rate' (g/sec), 'Volumetric Flow Rate in SCCM' (standard-cm3/min@298.15K), and 'Volumetric Flow Rate' (cm3/sec). Each property has a 'Constant' button and a plot icon.

Property	Value	Units	Buttons
<input checked="" type="radio"/> Axial Velocity	1200.0	cm/sec	Plot, Constant
<input type="radio"/> Mass Flow Rate		g/sec	Plot, Constant
<input type="radio"/> Volumetric Flow Rate in SCCM		standard-cm3/min@298.15K	Plot, Constant
<input type="radio"/> Volumetric Flow Rate		cm3/sec	Plot, Constant

- Definition der Einlassgeschwindigkeit

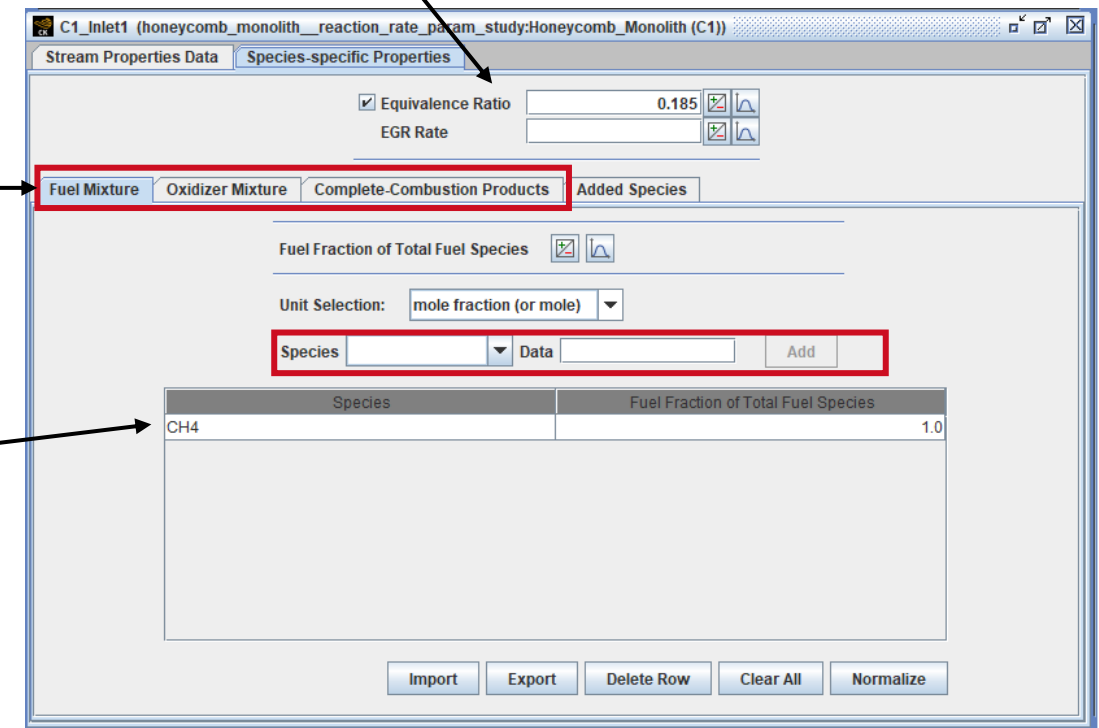
Zusammensetzung am Einlass I

1. Möglichkeit: Definition der Reaktanten

2. Möglichkeit: Definition über das Äquivalenzverhältnis $\varphi = \frac{\frac{x_{fuel}}{x_{oxidizer}}}{\left(\frac{x_{fuel}}{x_{oxidizer}}\right)_{stoich}}$

- Definition der Brennstoffzusammensetzung
- Definition des Oxidationsmittels
- Definition der Verbrennungsprodukte

- Auswahl oder Eintippen der Spezies mit Mol- oder Massenanteil



Stream Properties Data Species-specific Properties

☒ Equivalence Ratio 0.185

EGR Rate

Fuel Mixture Oxidizer Mixture Complete-Combustion Products Added Species

Fuel Fraction of Total Fuel Species

Unit Selection: mole fraction (or mole)

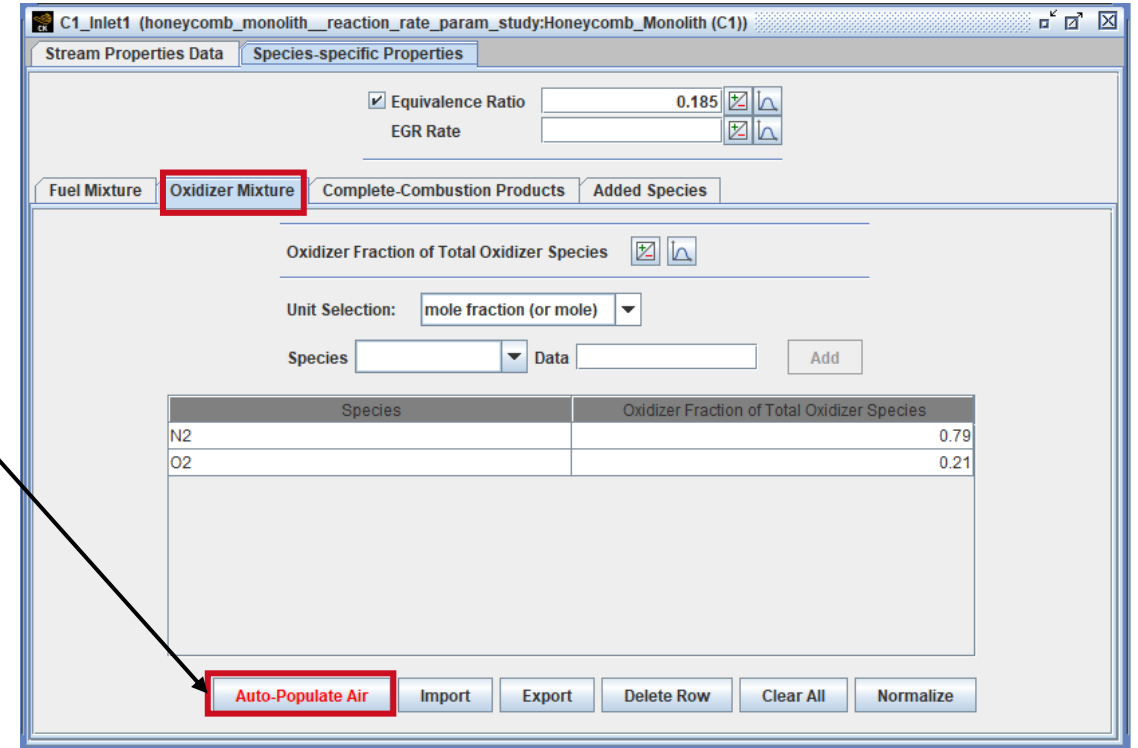
Species CH4 Data Add

Species	Fuel Fraction of Total Fuel Species
CH4	1.0

Import Export Delete Row Clear All Normalize

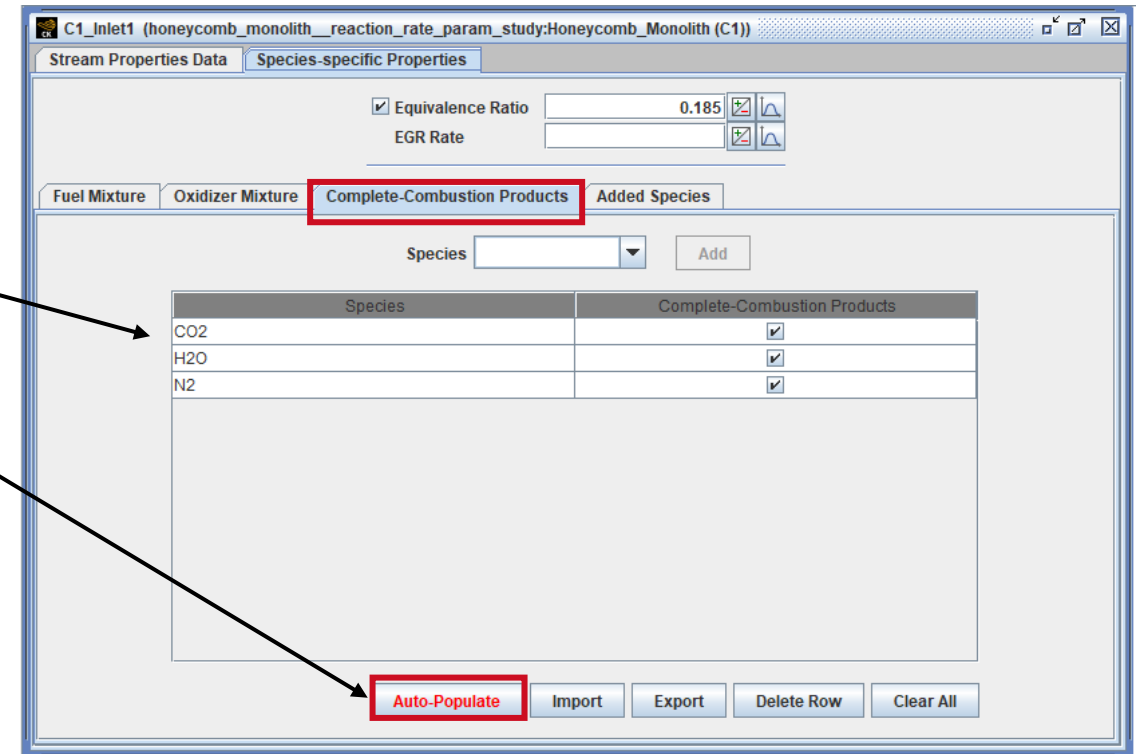
Zusammensetzung am Einlass II

- Zusammensetzung für Luft eingeben
- Durch Klick auf „Auto-Populate-Air“ kann die Eingabe erleichtert werden



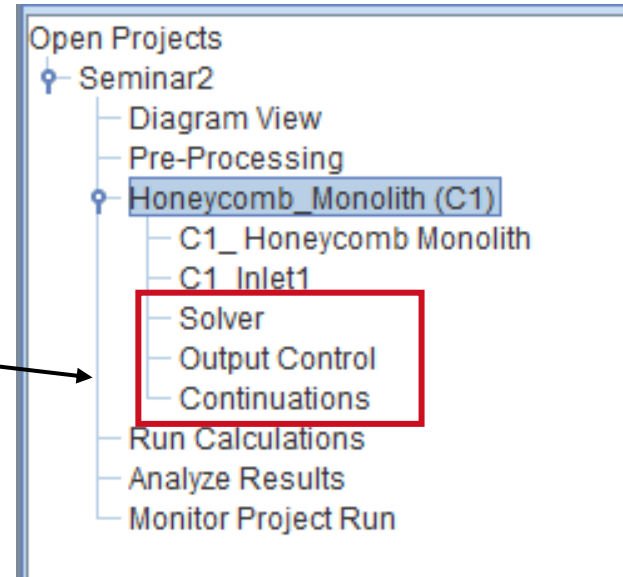
Zusammensetzung am Einlass III

- Eingabe der vollständigen Verbrennungsprodukte
- Durch Auto-Populate kann die Eingabe beschleunigt werden

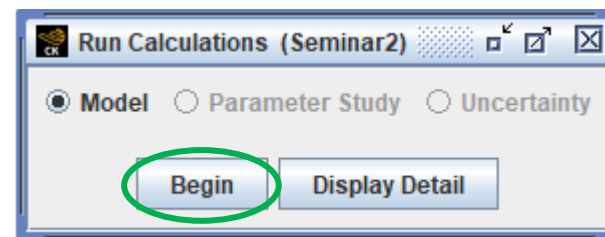


Solver-Einstellungen

- Standardeinstellungen werden beibehalten

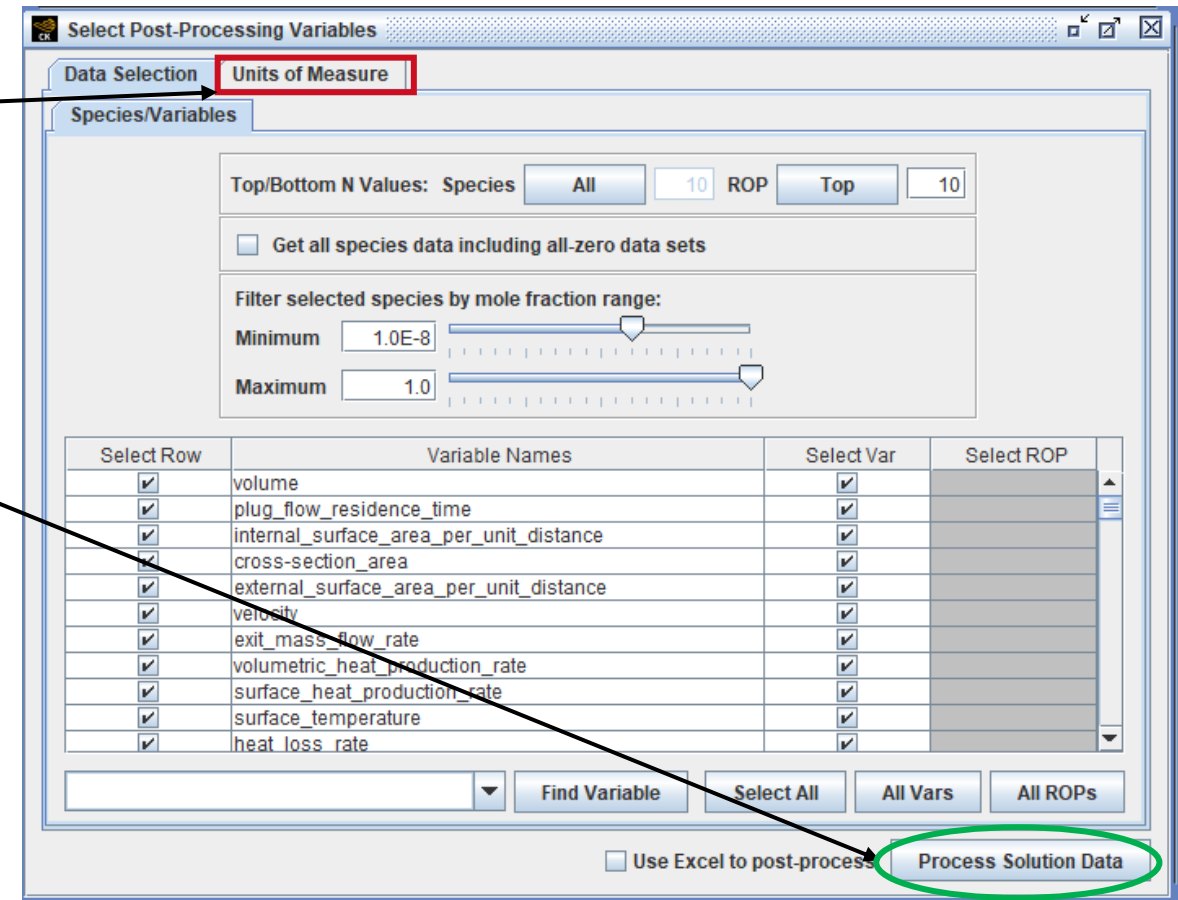


Run Calculation



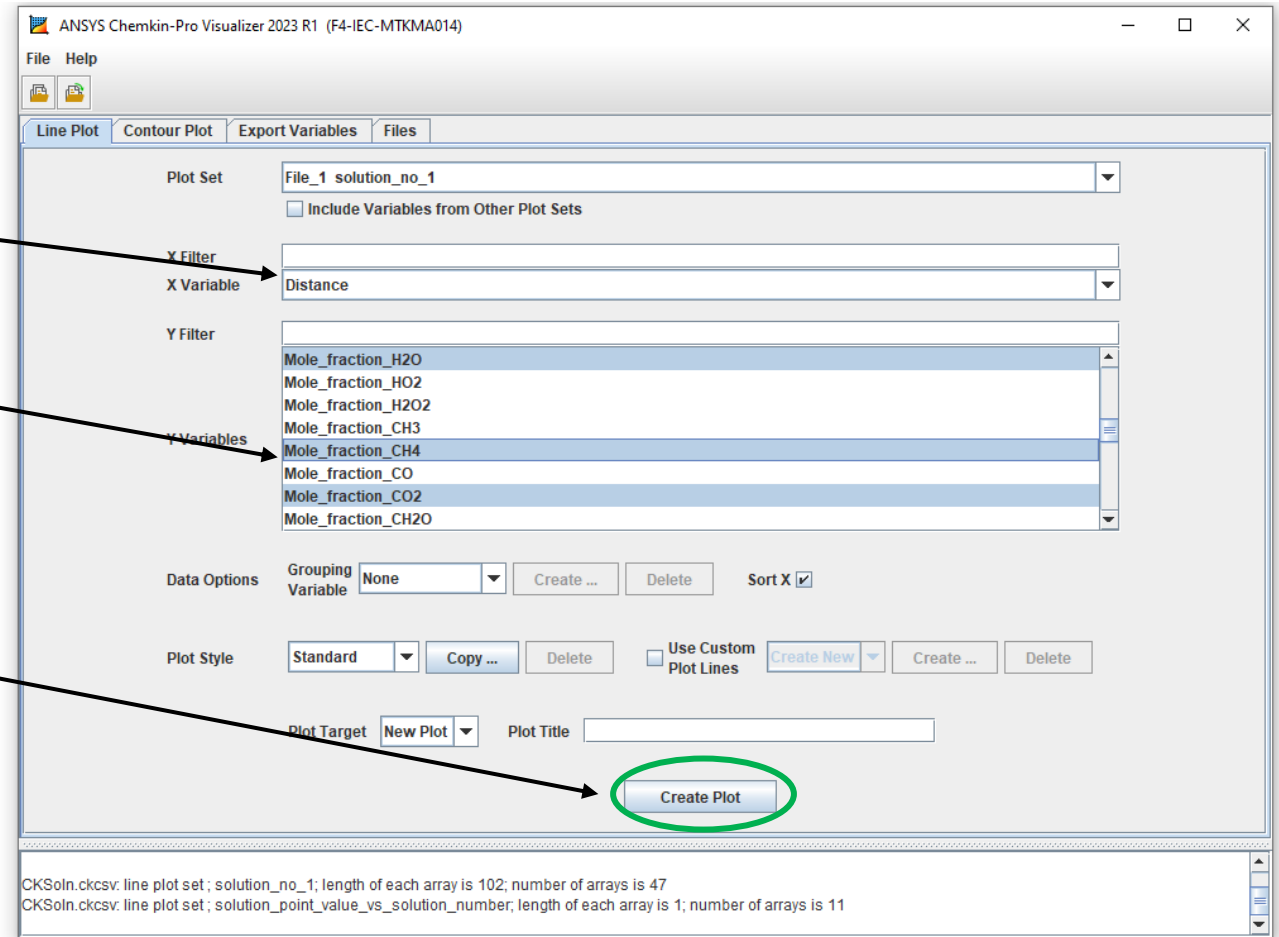
Post-Processing

- Bei „Units of Measure“ können die Einheiten für die Auswertung eingestellt werden → SI-Einheiten werden empfohlen
- Process Solution Data

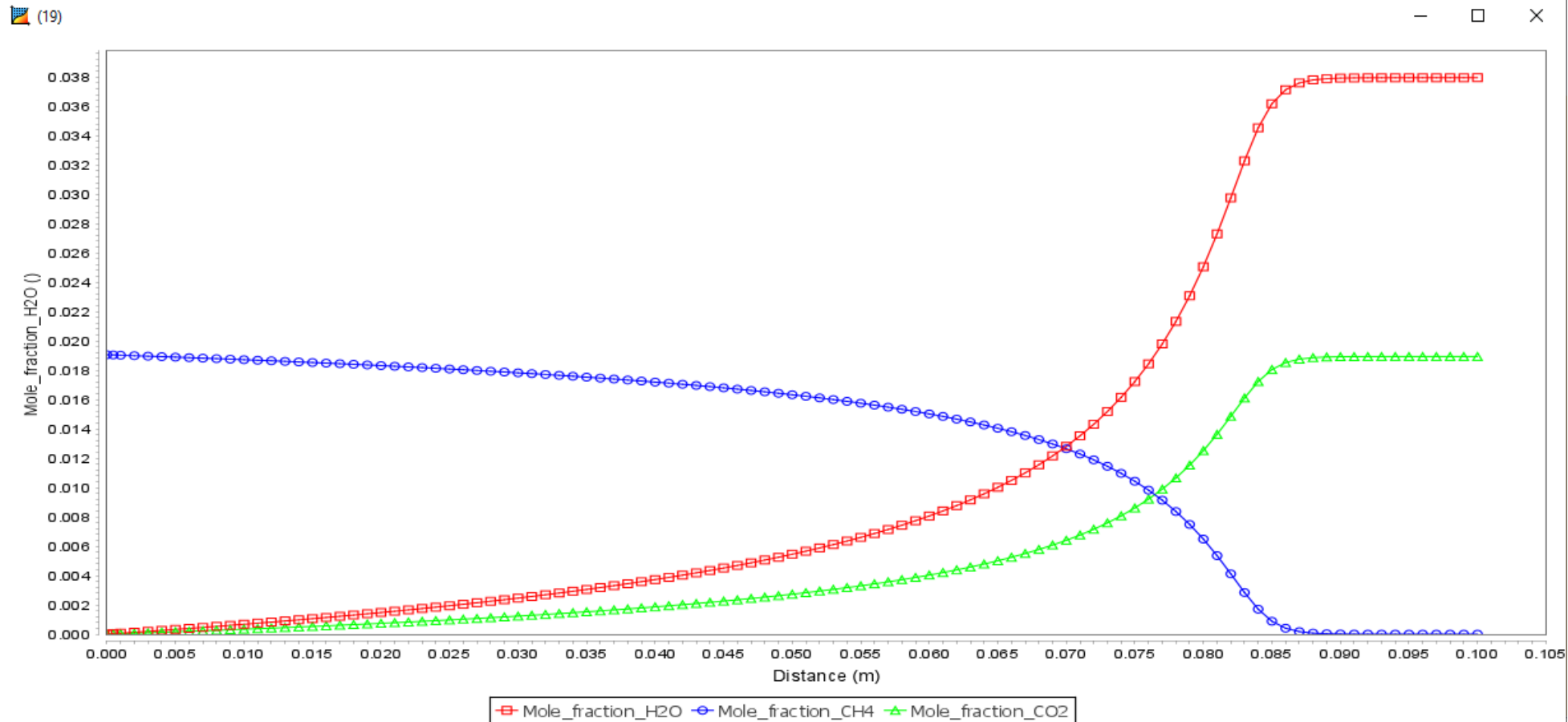


Post-Processing II

- Auswahl der x-Variable (beim Plug-Flow üblicherweise die Länge)
- Auswahl der y-Variablen (Spezieskonzentrationen, Temperatur, Druckverlust usw.)
- Create Plot



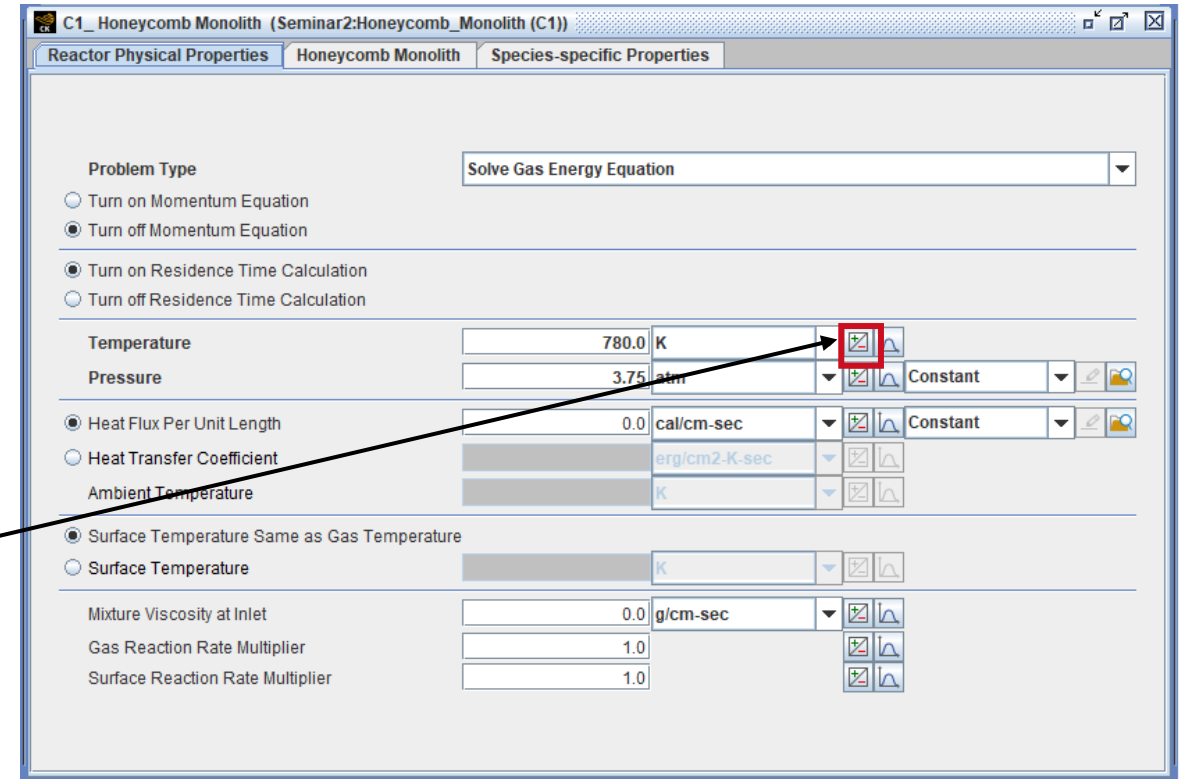
Post-Processing III



Parameterstudie I

- Variation verschiedener Größen (Temperatur, Zusammensetzung am Einlass, Geschwindigkeit usw.)

Symbol für Parameterstudie



Parameterstudie II

- Eingabe des Wertebereichs → In welchem Bereich soll die Parameterstudie durchgeführt werden?

- Eingabe der Schrittweite

Parameter Study for Honeycomb_Monolith (C1) :: C1_ Honeycomb Monolith :: Temperature

Temperature :: C1_ Honeycomb Monolith :: Honeycomb_Monolith (C1)

Nominal Value = 780.0 K Current Row Count = 0

Select Unit: K

☒ Superimpose all parameter variations so that more than one parameter varies on each run
☐ Vary each parameter independently so that only one parameter varies on each run

Number of Empty Entries to be Added:

Start: End: Increment:

Erstellt die Werte

Parameterstudie III

✓ Werte für Parameterstudie erstellt

Parameter Study for Honeycomb_Monolith (C1) :: C1_Honeycomb Monolith :: Temperature

Temperature :: C1_Honeycomb Monolith :: Honeycomb_Monolith (C1)

Nominal Value = 780.0 K Current Row Count = 11

Select Unit: K

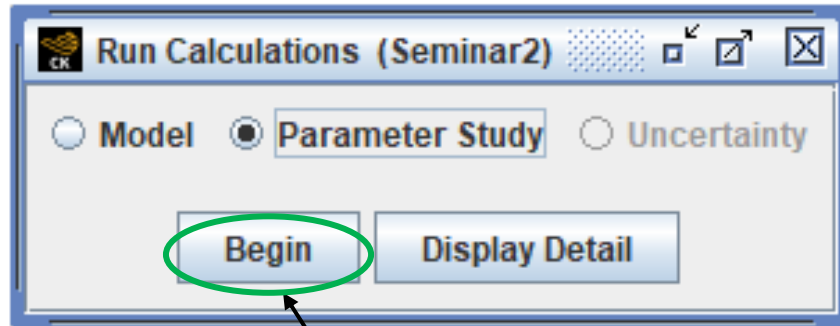
☒ Superimpose all parameter variations so that more than one parameter varies on each run
☐ Vary each parameter independently so that only one parameter varies on each run

Number of Empty Entries to be Added:

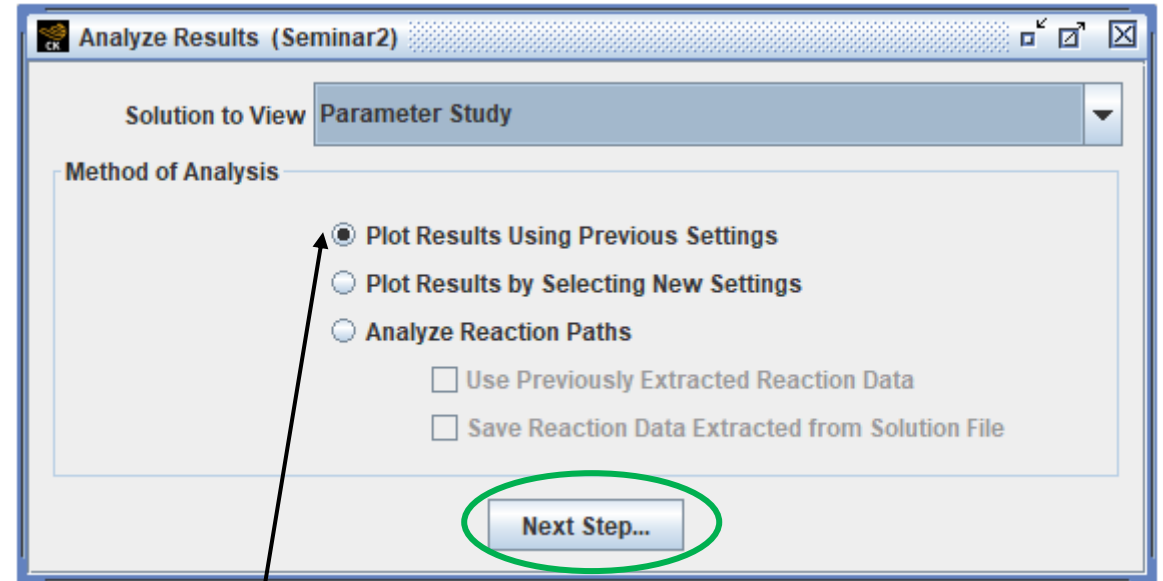
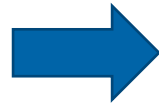
Start: End: Increment:

Temperature
750.0
760.0
770.0
780.0
790.0
800.0
810.0
820.0
830.0
840.0
850.0

Parameterstudie IV



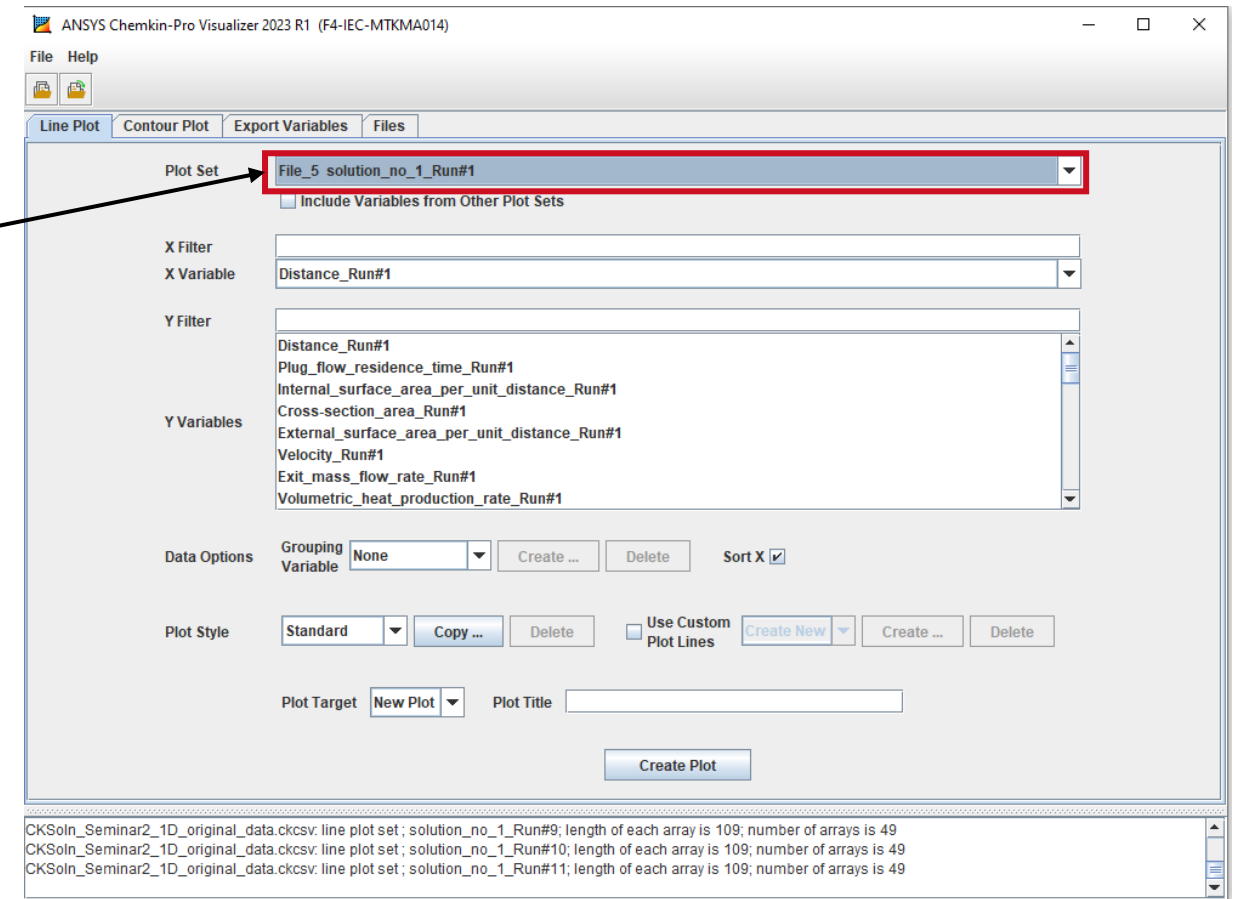
- Durchführen der Parameterstudie



- Zuvor verwendete Einstellungen (z.B. Einheiten) können wiederwendet werden oder neu ausgewählt werden

Ergebnisse I

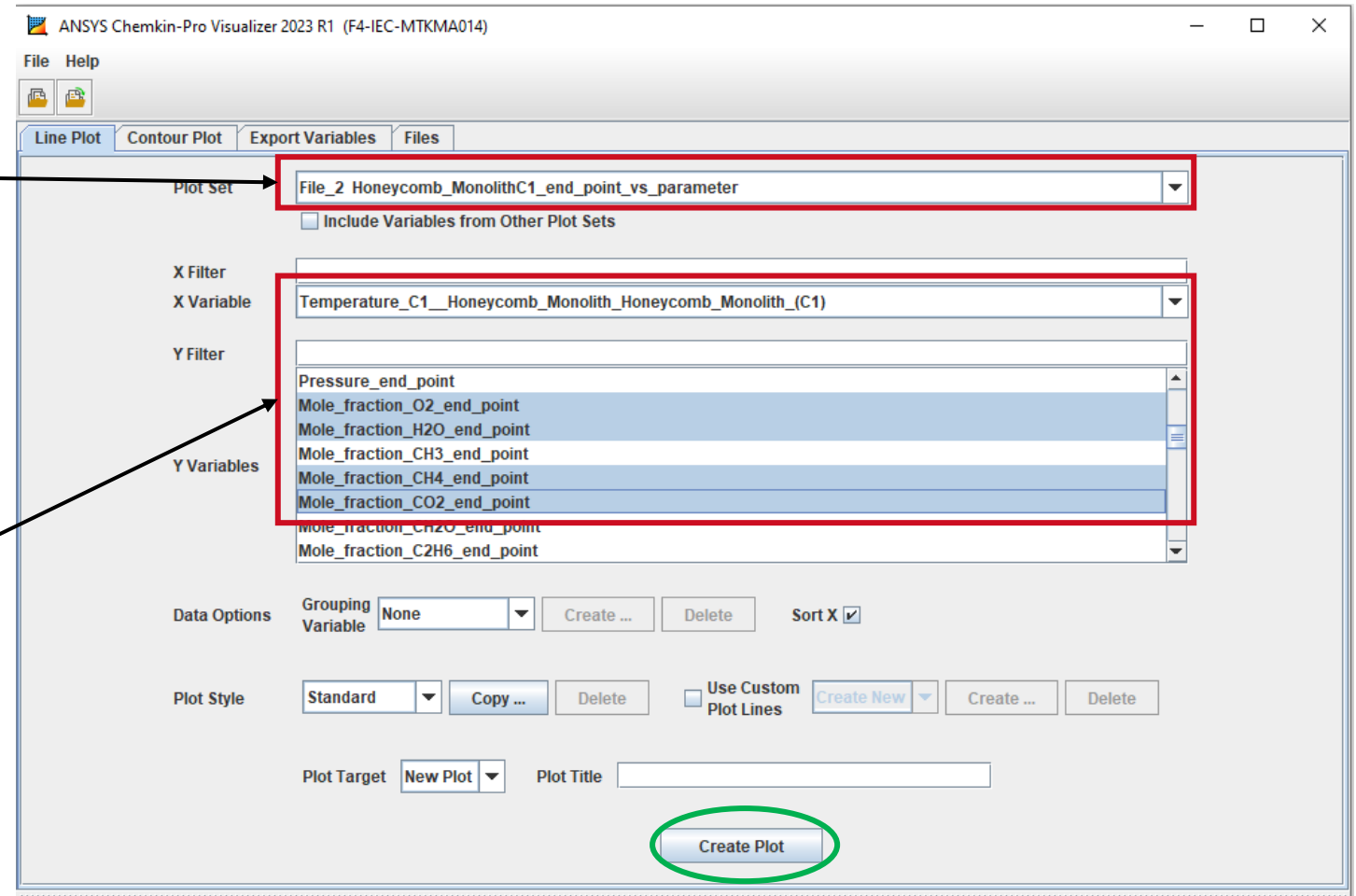
- Ergebnisse können für den einzelnen Parameter (RUN#x) untersucht werden



Ergebnisse II

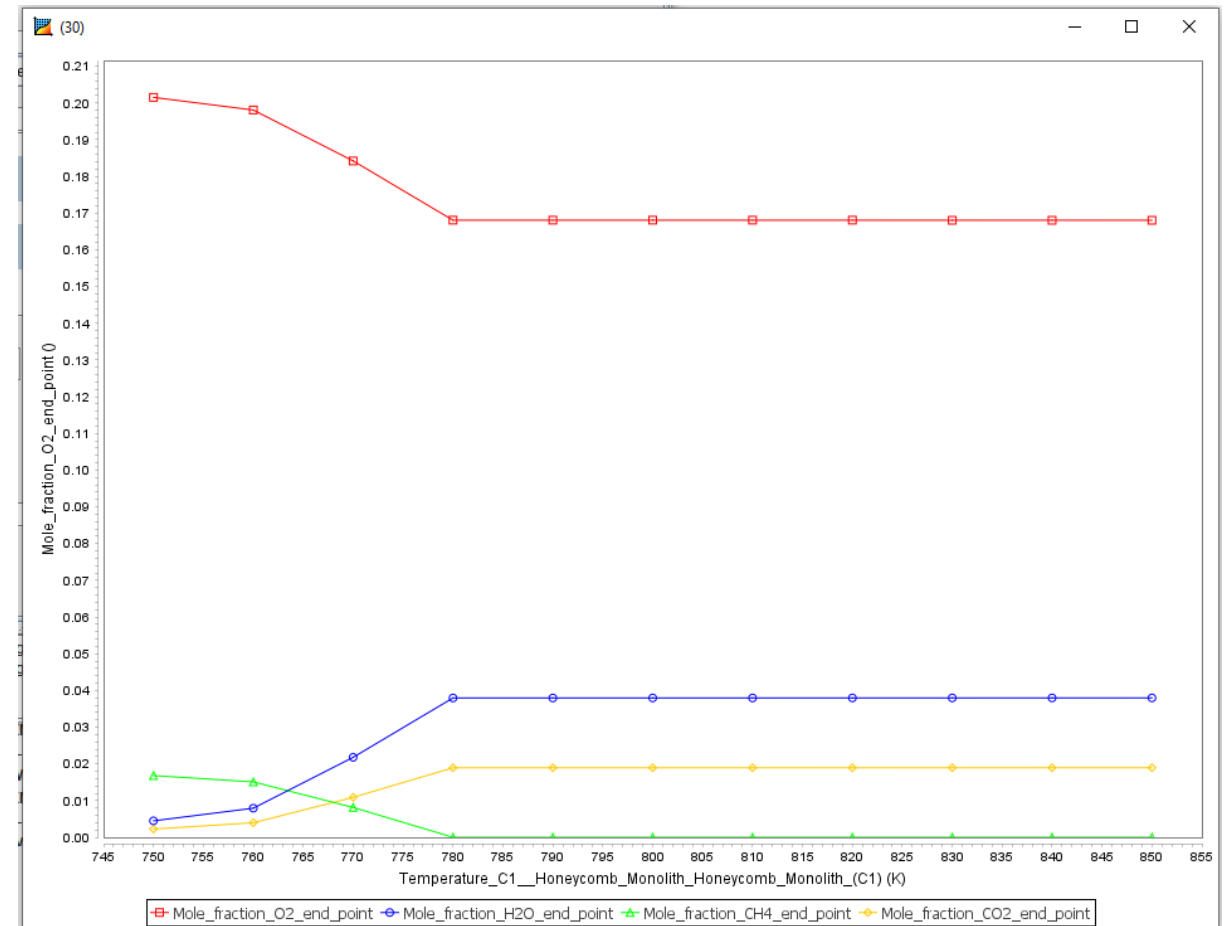
- Untersuchung des Einflusses des variierten Parameters auf eine Größe am Austritt

- Abbildung der Eintrittstemperatur auf die Gaskonzentration am Austritt

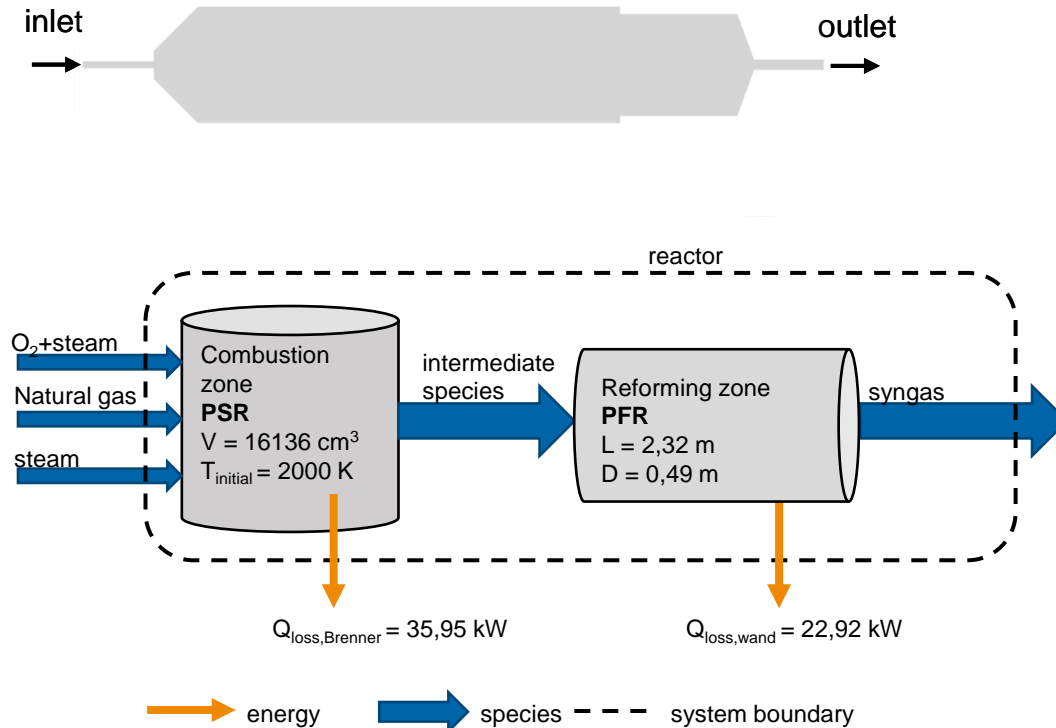


Ergebnisse III

Darstellung des Einfluss der Einlasstemperatur auf Produktgaszusammensetzung



Zusatzaufgabe – Reduziertes POX-Modell

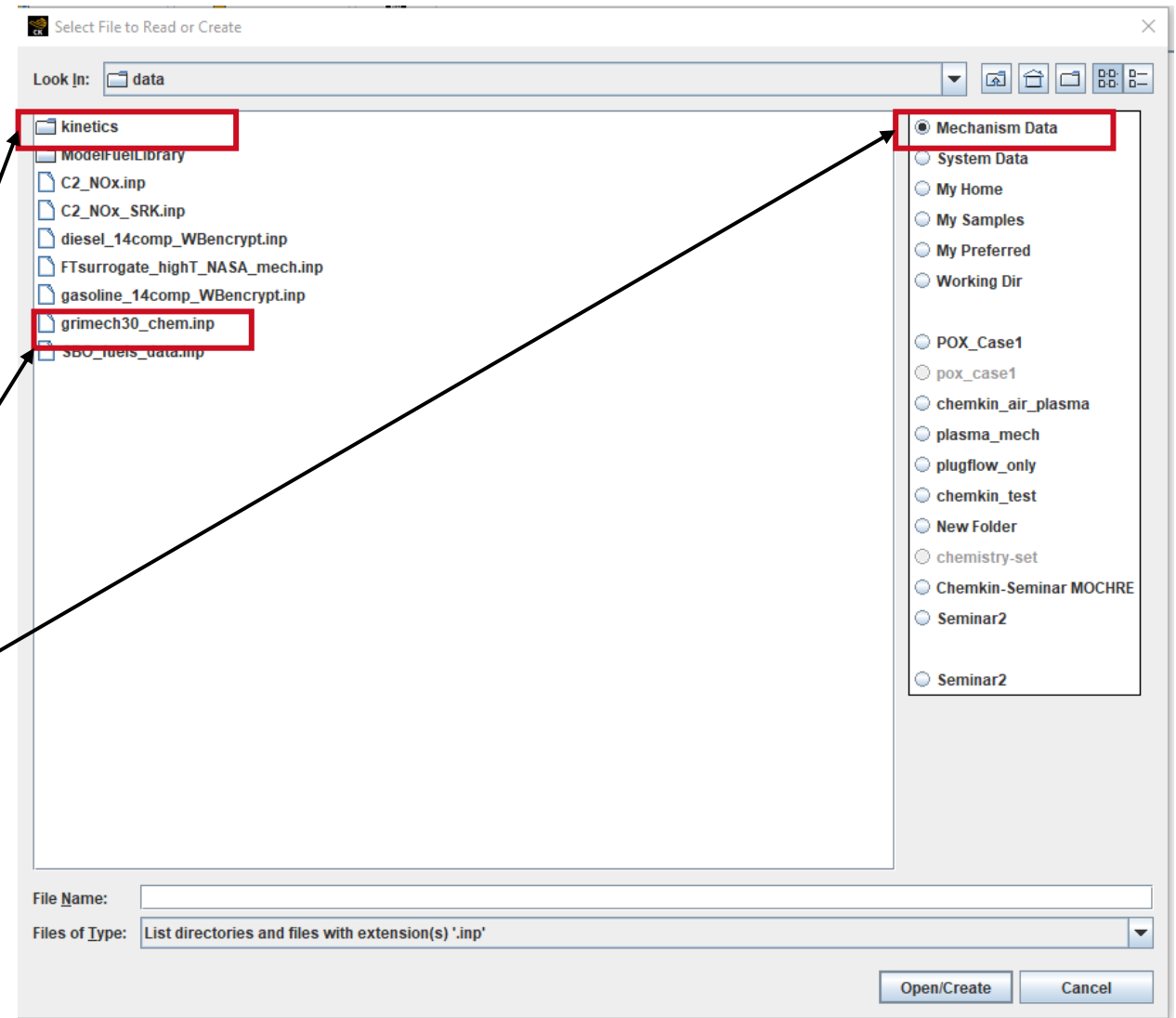


- Zur Entwicklung eines reduzierten Reaktormodells müssen die wesentlichen ablaufenden Prozesse identifiziert werden
- Unterteilung des Reaktors in unterschiedliche Bereiche
- POX ist gekennzeichnet durch Verbrennungs- und Reformierungszone
- Initiierung der Reaktionen durch Zündung → ausreichend hohe Initialtemperatur im PSR

Einlassbedingungen POX

Einlass	Brennstoff	Dampf	O2+Dampf
Massenstrom [kg/s]	0.06355	0.02168	0.08014
Temperatur [K]	632.27	562.75	513.39
Zusammensetzung [Masseanteil]			
CH4	0.9527		
CO2	0.0033		
CO	0.0002		
C2H6	0.0277		
H2O	0	1	0.0802
O2	0		0.9198
N2	0.0161		

- Reaktionsmechanismus: GRI-Mech 3.0 → enthalten in der Chemkin-Datenbank



Synthesegaszusammensetzung

Parameter am Austritt	Wert
H ₂ / Mol.-%	48.27
N ₂ / Mol.-%	0.65
CO / Mol.-%	23.79
CO ₂ / Mol.-%	4.19
H ₂ O / Mol.-%	19.33
CH ₄ / Mol.-%	3.76
Temperatur / °C	1200

