

Ausschreibung/Announcement

Studentische Arbeit/Student work

(see English version below)



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Am Fachbereich Maschinenbau, Fachgebiet Simulation reaktiver Thermo-Fluid Systeme (STFS) ist ab sofort eine studentische Arbeit zum Thema

Clean Circles - Eisen als Energieträger einer klimaneutralen Kreislaufwirtschaft:

Skalenreduzierte Modellierung unter Berücksichtigung heterogener Kinetik

zu vergeben.

Motivation:

In einem einzigartigen Forschungsansatz sollen Eisen und seine Oxide in einem Kreislauf als kohlenstofffreier chemischer Energieträger für erneuerbare Energie genutzt werden. Eisen hat ein enormes Potenzial die Energiewende voranzutreiben. Im Projekt **Clean Circles** erforschen Wissenschaftler aus verschiedenen Disziplinen wie Eisen und seine Oxide in einem Kreislauf als kohlenstofffreier chemischer Energieträger zur Speicherung von Wind- und Sonnenstrom genutzt werden können (siehe <https://www.tu-darmstadt.de/clean-circles>).

Für ein umfassendes Modell zur Beschreibung der Reduktion und Oxidation von Eisen(oxid) müssen geeignete skalen- und komplexitätsreduzierte Ansätze (z. B. Reaktornetzwerke) betrachtet und entwickelt werden. In einem Reaktornetzwerk kann das Reaktorvolumen in funktionale Kompartments mit repräsentativen Konzentrationen, Temperaturen oder Mischungszuständen unterteilt werden. Die Kopplung idealer Strömungsreaktoren (Strömungsrohr, Rührkessel) kann z. B. zur Annäherung an das Verweilzeit- und Umsatzverhalten realer Prozesse genutzt werden. Die Kopplung erfolgt über den Austausch von z.B. Stoff- und Energieströmen. Am Fachgebiet STFS wurden Reaktornetzwerke bereits für die Simulation praxisnaher Verbrennungssysteme gasförmiger Brennstoffe angewendet, wobei ein eigens entwickeltes C++ Tool zum Einsatz kam.

Aufgabenstellung:

In Rahmen dieser studentischen Arbeit soll eine Erweiterung der Reaktornetzwerkmodellierung, d.h. ihrer idealen Strömungsreaktoren und

Simulation reaktiver Thermo-Fluid-Systeme

Simulation of reactive Thermo-Fluid Systems



Dr.-Ing. Sandra Hartl
Dr. Paulo Debiagi

L1/01 284
Otto-Berndt-Straße 2
64287 Darmstadt

Tel. +49 6151 16 - 24153
Fax +49 6151 16 - 28900
hartl@stfs.tu-darmstadt.de
debiagi@stfs.tu-darmstadt.de

27. Mai 2021



deren Kopplung, für heterogene Kinetik durchgeführt werden. Diesbezüglich soll in einem ersten Schritt ein Verständnis der aktuellen Implementierung idealer Strömungsreaktoren, sowie die Identifikation notwendiger Erweiterungen für heterogene Kinetik erarbeitet werden. Folgend gilt es die notwendigen Änderungen in das bestehende Framework für Reaktornetzwerke zu integrieren und zu validieren. Als Anwendungsfall stehen kinetische Daten aus dem Bereich der Feststoffverbrennung zur Verfügung.

Empfohlene Qualifikationen:

- Interesse an strömungsmechanischen/thermodynamischen Prozessen
- Grundlegende Kenntnisse im Bereich chemischer Reaktionskinetik
- Grundlegende Kenntnisse in C/C++



At the Department of Mechanical Engineering, Simulation of Reactive Thermo-Fluid Systems (STFS) a student work on the topic of

Clean Circles - Iron as an energy carrier of a climate-neutral circular economy:

Scale-reduced modeling under consideration of heterogeneous kinetics

is to be assigned.

Motivation:

In a unique research approach, iron and its oxides will be used in a cycle as a carbon-free chemical energy carrier for renewable energies. Iron has enormous potential to drive the energy transition. In the project **Clean Circles**, scientists from various disciplines are exploring how iron and its oxides can be used in a cycle as a carbon-free chemical energy carrier for storing wind and solar power (see <https://www.tu-darmstadt.de/clean-circles>).

Appropriate scale- and complexity-reduced models (e.g. reactor networks) must be considered and developed for a comprehensive model describing the reduction and oxidation of iron(oxide). In a reactor network, the reactor volume can be divided into functional compartments with representative concentrations, temperatures, or mixing states. The coupling of ideal flow reactors (plug flow reactor, perfectly stirred reactor) can be used, for example, to approximate the residence time and turnover behavior of real processes. The coupling is done by exchanging mass and energy. At STFS, reactor networks have already been applied for the simulation of practical combustion systems of gaseous fuels, using a specially developed C++ tool.

Task:

In the context of this student work, an extension of the reactor network modeling, i.e. its ideal flow reactors and their coupling, for heterogeneous kinetics is to be carried out. In this respect, the first step is to gain an understanding of the current implementation of ideal flow reactors, as well as to identify necessary extensions for heterogeneous kinetics. Subsequently, the necessary changes will be integrated and validated in the existing framework for reactor networks. As a use case, kinetic data from the field of solid combustion are available.



Recommended Qualifications:

- Interest in fluid mechanical/thermodynamic processes
- Basic knowledge in the field of chemical reaction kinetics
- Basic knowledge in C/C++