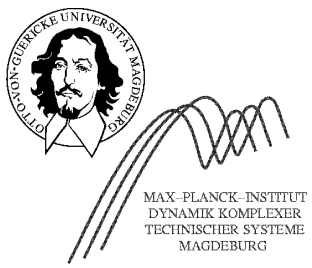
Studienarbeit

Modellierung und Simulation thermisch gekoppelter autonom oszillierender Festbettreaktoren

Frank Buhrandt

Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik
Studiengang Systemtechnik und Technische Kybernetik



Betreuer: Dr.-Ing. Michael Mangold,
Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme
Gruppe Prozesssynthese und Prozessdynamik
Prof. Dr.-Ing. A. Kienle
Magdeburg

Hochschullehrer: Prof. Dr.-Ing. A. Kienle
Institut für Automatisierungstechnik
Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

2006

Danksagung

Hiermit möchte ich mich bei
Herrn Dr. Ing. Michael Mangold,
für die umfassende persönliche Betreuung,
die ständige Diskussionsbereitschaft
und die aufgebrachte Geduld bedanken.
Durch die entgegengebrachte Unterstützung
hat er sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Magdeburg, den 02.05.2006

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung

1.1 Reaktorkonzept

1.2 Vorangegangene Untersuchungen

2. Zielstellung der Arbeit

2.1 Die Arbeitspunkte der Aufgabenstellung

3. Umsetzung der Aufgabenstellung

3.1 Implementation der Reaktionskinetik

3.2 Implementation der Wärmeverlustgleichungen für die Rohrbrücke

4. Ermittlung benötigter Parameter

5. Bestimmung von Betriebsbereichen für den autonom oszillierenden Betrieb

5.1 Untersuchung der Modellverbesserungen

5.2 Ermitteln eines Oszillationsbereiches für das bestehende Reaktormodell

6. Vorschläge zur konstruktiven Verbesserung der Anlgae

6.1 Ermittlung eines Oszillationsbereiches für verkürzte Rohrbrücken

7. Zusammenfassung

7.1 Fazit

Anhang

Verwendete Formelzeichen und Symbole

Zahlenwerte der Modellparameter

Literatur

Quellcode

A: *reactive_ce_ethan-2.mdl*

B: *tube_bridge.mdl*

1. Einführung

Am Max-Planck-Institut Magdeburg wird ein autothermes Reaktorkonzept entwickelt, das aus zwei thermisch gekoppelten, aber stofflich getrennten Festbetten besteht (Abb.1.1).

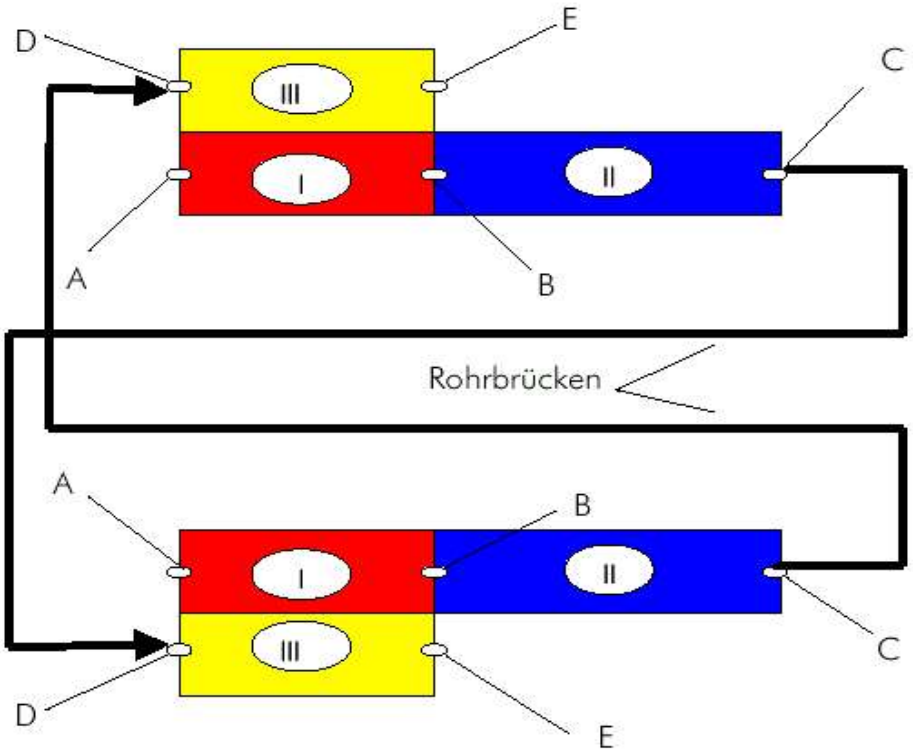
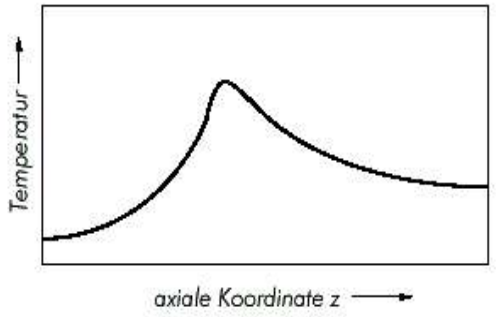


Abb.1.1: Schematische Darstellung des Reaktors (aus [2])

I: Katalysatorbett des Reaktor-Wärmetauschermoduls
II: Katalysatorbett des nichttemperierten Reaktormoduls
III: Wärmetauscherwendel
A: Eintritt in I
B: Übergang von I zu II
C: Übergang von II zu Rohrbrücke
D: Übergang von Rohrbrücke zu III
E: Austritt aus Wärmetauscherwendel

1.1 Reaktorkonzept

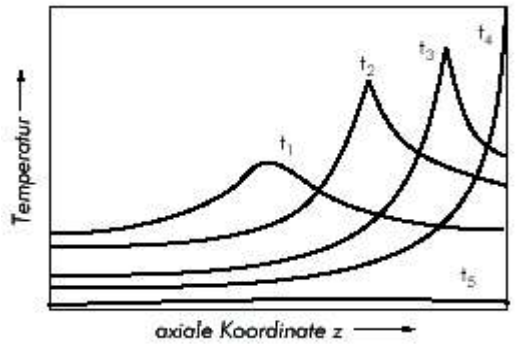
Durch eine solche Anordnung der Reaktorstränge ist es möglich, beide Reaktoren mit unterschiedlichen Zulaufbedingungen (Durchflüsse, Temperaturen und Konzentrationen) zu betreiben, wodurch sich weitere Freiheitsgrade ergeben. In dem betrachteten Fall wird der Doppelzirkulationsreaktor unter symmetrischen Betriebsbedingungen, d.h. gleiche Zulaufkonzentration, gleiche Zulauftemperatur und gleiche Zulaufströme in beiden Strängen, betrachtet. Die gekoppelten Festbettreaktoren sollen so betrieben werden, dass sich in der Anlage autonome Oszillationen und wandernde Reaktionen ausbilden, die zu hohen Temperaturen führen und eine vollständige Verbrennung geringer Konzentrationen von Kohlenwasserstoffen – hierbei handelt es sich um eine exotherme Reaktion – ohne externe Heizung ermöglichen. Um den Betriebszustand der autonomen Oszillation mit wandernden Reaktionszonen zu erzielen, werden nach dem Erreichen eines stationären Zustandes (Abb.1.2) die Zuflusstemperaturen der Reaktorschüsse abgesenkt.



Schematische Darstellung des typischen stationären Temperaturprofils für eine exotherme Reaktion in einem kathalytischen Festbett.

Abb. 1.2: (aus [2])

Dadurch erlischt zunächst die Reaktion im vorderen – jetzt relativ kalten – Teil des Reaktors und das Katalysatorbett kühlt aus. Folglich trifft nun das Edukt in Zulaufkonzentration auf die bereits aufgeheizten, stromabwärts gelegenen Bereiche des Katalysatorbettes. Hier erfolgt die Reaktion, welche eine Wärmemenge frei setzt, die proportional zur umgesetzten Stoffmenge ist. Je nach Zulaufstrom kann sich ein neuer stationärer Zustand herausbilden oder die Kaltzone wandert entlang des Katalysatorbetts weiter vorwärts. In diesem Fall entsteht ein sogenannter überadiabatischer “Hot Spot”. Dieser wandert langsam vorwärts bis die Reaktionszone das Bett verlässt und die Reaktion verlischt. In Abb.1.3 ist dieser Vorgang dargestellt.



Schematische Darstellung einer wandernden Reaktionszone in einem katalytischem Festbettreaktor, angeregt durch Absenkung der Zulauftemperatur.
t_1 – stationär gezündeter Zustand
t_2 u. t_3- Anwachsen und Verschlankung des wandernden "Hot Spots"
t_4- Raktionsfront erreicht das Ende des Katalysatorbetts
t_5- Verlöschen der Reaktion

Abb. 1.3: (aus [2])

Die Ausbildung eines solchen "Hot Spots" ist in industriellen Anlagen in der Regel nicht erwünscht, kann jedoch eine energiesparende Möglichkeit sein einen Reaktionsprozess zu fahren, wenn das Stoffsystem und der Reaktor dies zulassen. In dem Doppelzirkulationsreaktor soll nun durch das Vorheizen des Reaktionsgases über einen Wärmetauscher die Reaktion am Leben erhalten werden. Das heiße Abgas des einen Reaktors soll das eintretende Gas des anderen Reaktors vorheizen, damit die Reaktionsfront den jeweiligen Reaktor nicht verlässt, sondern eine neue Reaktionsfront am Reaktoreingang gezündet wird.

1.2 Vorangegangene Untersuchungen

Um das Verhalten der Anlage simulieren und somit vorherbestimmen zu können, wurde im Rahmen einer früheren Diplomarbeit [1] ein in ProMot implementiertes Modell erweitert und untersucht. Die Totaloxidation von Ethan wurde hierbei als Modellreaktion gewählt. Bei den im Labormaßstab durchgeführten experimentellen Untersuchungen wurden die benötigte Reaktionskinetik und die entsprechenden Parameter bestimmt. Auf Grund der in den Experimenten gewählten Bedingungen entschied man sich für die Anwendung eines einfachen Potenzansatzes (Gl. 3.2).
Dies ergab folgendes Bild in der für ProMot typischen Moduldarstellung (Abb.1.4):

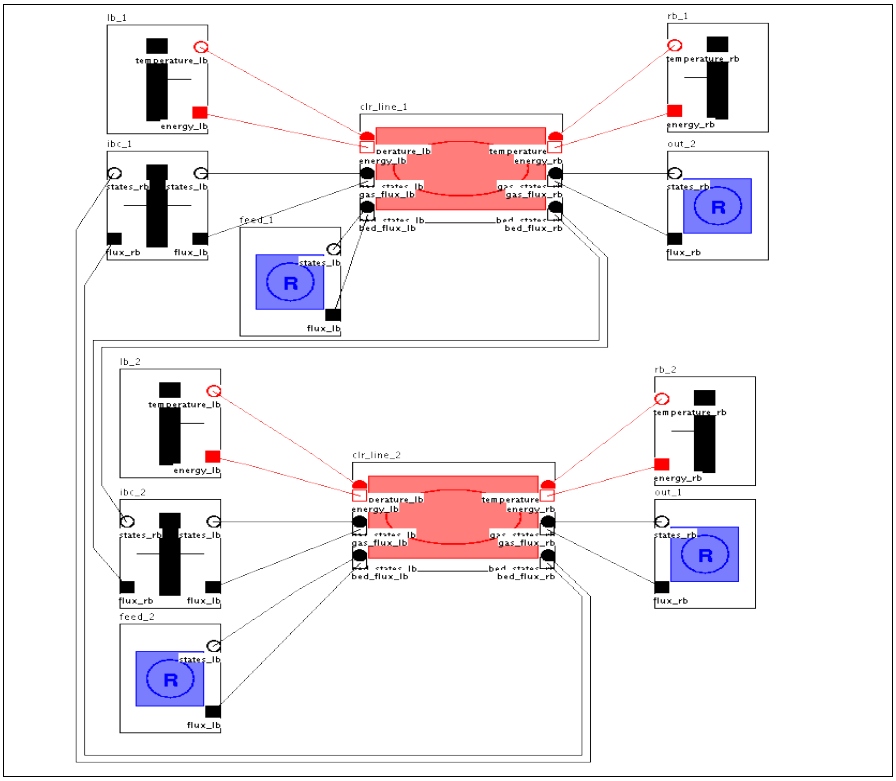


Abb. 1.4: Reaktormodell in Promotvisualisierung

Betrachtet man nun eines der beiden Reaktormodule genauer, d.h. man dringt eine Ebene tiefer in das Modell ein, so ist zu erkennen, dass sich der modulare Modellaufbau durch das gesamte Reaktormodell zieht.

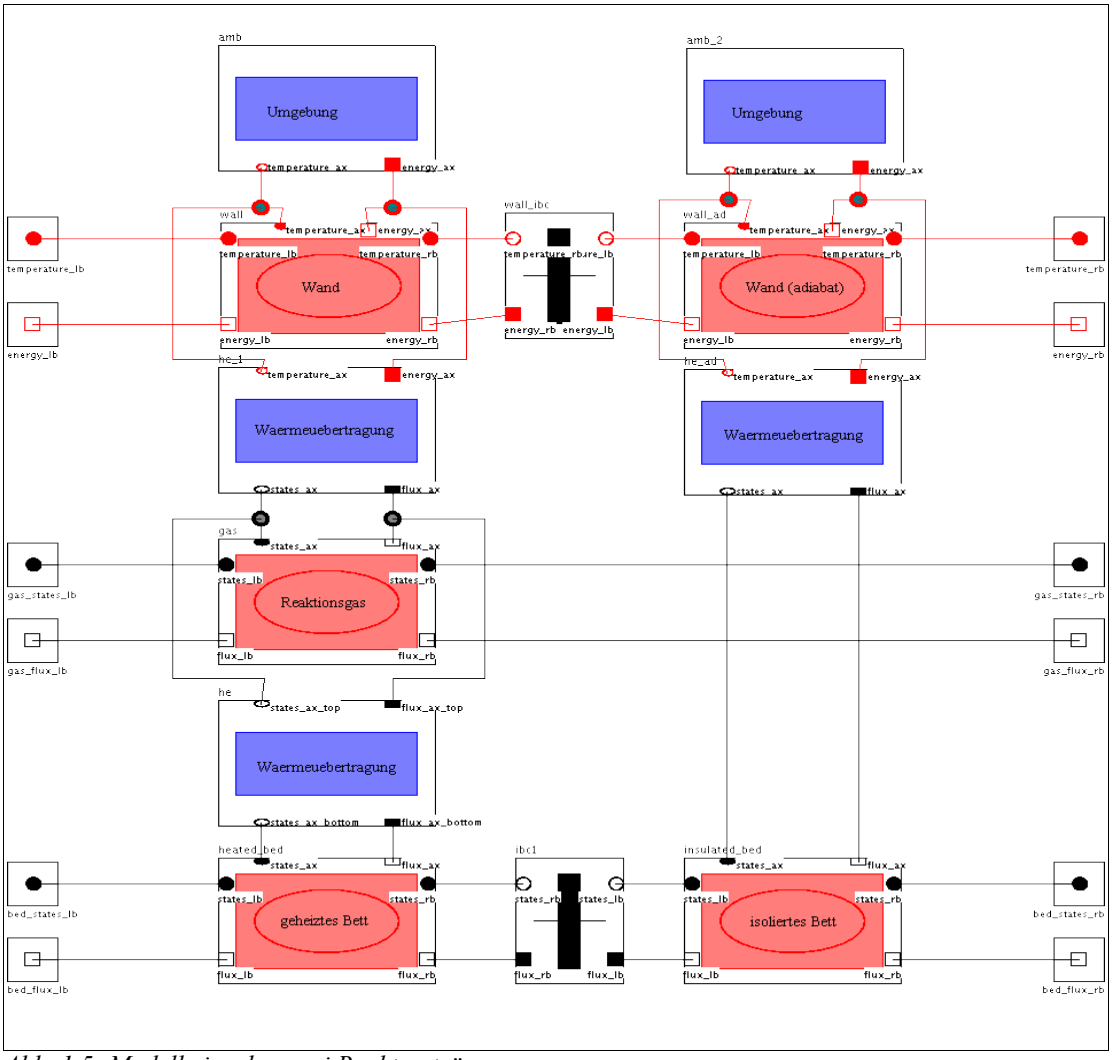


Abb. 1.5: Modell eins der zwei Reaktorstränge

Da die Modellierung und Zusammensetzung der einzelnen Bestandteile in [1] ausführlich erläutert und bebildert dargestellt ist, soll sie für diese Arbeit nicht weiter von Bedeutung sein.

Bei den darauf folgenden experimentellen Untersuchungen des autonomen periodischen Betriebs der Reaktionsanlage stellte sich heraus, dass das Modell aus [1] noch verfeinert werden muss, um die Versuchsanlage zuverlässiger beschreiben zu können. Diese Untersuchungen waren Gegenstand einer zweiten Diplomarbeit [2], aus der Verbesserungsvorschläge hervorgingen, deren Umsetzung nun Zielstellung dieser Studienarbeit sein sollen.

2. Zielstellung der Arbeit

Auf Grund der Vereinfachungen – die bei der Implementierung des Modells der Versuchsanlage getroffen wurden – konnten die Vorhersagen des numerischen Modells durch die experimentellen Untersuchungen nicht bestätigt werden.
Um das Modell besser an den Versuchsaufbau anzupassen, wurden zwei Kernverbesserungen vorgeschlagen, die zu einer größeren Übereinstimmung führen sollen.
Zum einen die Anpassung der Reaktionskinetik für die Totaloxidation von Ethan und zum anderen die Implementierung eines Moduls, welches die Wärmeverluste in den Rohrbrücken zwischen den Reaktorausgängen und den Wärmetauschern des jeweils anderen Reaktors beschreibt. Die notwendigen Berechnungsvorschriften – die bereits in [2] erbracht wurden – müssen nochmals überarbeitet werden, um sie in das bestehende ProMot-Modell integrieren zu können.
Das so angepasste numerische Modell der Reaktoranlage soll dann dazu benutzt werden, Betriebsbereiche für den angestrebten autonom oszillierenden Betrieb zu ermitteln.
Abschließend soll diskutiert werden, welche konstruktiven Maßnahmen an der Versuchsanlage getroffen werden können, um den ermittelten Betriebsbereich noch zu erweitern.

2.1 Die Arbeitspunkte der Aufgabenstellung

- Implementierung der Reaktionskinetik aus [2] in das ProMot-Modell aus [1]
- Implementierung eines Modells aus [2] zur Beschreibung der Wärmeverluste zwischen den Katalysatorsträngen in das ProMot-Modell der Gesamtanlage
- Bestimmung unbekannter Modellparameter anhand der in [2] durchgeführten reaktiven und nichtreaktiven Experimente
- Bestimmung von Betriebsbereichen für autonom oszillierenden Betrieb mit Hilfe des überarbeiteten Anlagenmodells
- Diskussion möglicher konstruktiver Verbesserungen an der Anlage, die zu einem größeren Betriebsfenster mit autonomen Oszillationen führen

3. Umsetzung der Aufgabenstellung

3.1 Implementation der Reaktionskinetik

Die Bruttoreaktionsgleichung der Ethanoxidation hat folgende Struktur:

$$C_2H_6 + 3.5\,O_2 \rightarrow 2\,CO_2 + 3\,H_2O$$

Gl. 3.1

Blanco [1] ermittelte für diese Reaktion den folgenden formalkinetischen Ansatz:

$$r_{C_2H_6} = k * c_{C_2H_6}^{\alpha} \quad mit \quad k = k_0 * e^{\frac{-E_a}{R*T}}$$

Gl. 3.2

Vázquez [2] verfeinerte diesen Ansatz durch Berücksichtigung der Sauerstoffabhängigkeit in der Reaktionskinetik:

$$r_{C_2H_6} = k * c_{C_2H_6}^{\alpha} * c_{O_2}^{\beta} \quad mit \quad k = k_0 * e^{\frac{-E_a}{R*T}}$$

Gl. 3.3

Dabei wurden folgende Parameter experimentell ermittelt:

$$\alpha = 0.86$$
$$\beta = 0.04$$
$$k_0 = 1{,}15 * 10^{10}$$
$$E_a = 727000\,J/mol$$

Die neu zu implementierende Kinetik lautet somit:

$$r_{C_2H_6} = k * c_{C_2H_6}^{0.86} * c_{O_2}^{0.04} \quad mit \quad k = 1.15 * 10^{10}\, e^{\frac{-727000\,J/mol}{R*T}}$$

Gl. 3.4

Die Implementierung der neuen Reaktionskinetik geschah dann auf der "Quell-Ebene" des Reaktormodells. Das Modell für die Simulation der gekoppelten Festbettreaktoren besteht aus einer Vielzahl vom MDL-Dateien die sich in Klassen und Unterklassen aufgliedern. Diese beschreiben die einzelnen Module der Anlage, die verschiedenen Transportvorgänge für Energie und Stoffe zwischen den Modulen und der Umwelt, sowie das reaktive Verhalten der den Reaktoren zugefügten Komponenten.
Die Kinetik für die Oxidation des Ethan ist im Wesentlichen in der Datei *reactive-ce-ethan-2.mdl* verankert. Am Beispiel dieser Datei soll nun kurz die Implementation der neuen Oxidationskinetik beschrieben werden.

Der im Anhang A befindliche Quellcode stellt den Inhalt der überarbeiteten Datei *reactive-ce-ethan-2.mdl* dar. Hier werden Variablen definiert und deklariert, die Bestandteil der Ethan-Oxidationsreaktion sind.
Mit der Verbesserung der Reaktionskinetik wurden die Werte einiger Parameter verändert und neue Parameter kamen hinzu. (Diese sind zur besseren Übersicht farbig makiert.)
Im Gegensatz zur alten verwendet die neue Kinetik nicht nur die Ethankonzentration sondern auch die des Sauerstoffs. Es müssen also die Sauerstoffkonzentration c_{O_2} sowie die Reaktionsordnung β des Sauerstoffs ergänzt werden. Die Berechnung der Reaktionsrate $r_{c_2h_6}[r1]$ für die Ethanoxidation erfolgt dann mit Hilfe zweier Approximationen die verhindern sollen, dass es durch negative Konzentrationen zu numerischen Komplikationen kommt. Ab einem gewissen Minimum-Grenzwert wird der Potenzansatz durch einen gebrochen rationalen Ansatz approximiert.
Nun müssen die neuen Variablen noch in den übergeordneten Klassen des Reaktormodells bekannt gemacht werden, da die dateiinterne Deklarierung nur lokaler Natur ist.
Die Erweiterung der Reaktionskinetik wirkt sich optisch nicht auf die Moduldarstellung in Abbildung 1.4 aus, da sich das Modul – welches die Variablen und Gleichungen für die Berechnung der Oxidationsprozesse beinhaltet – in den Teilmodulen *clr_line_1* und *clr_line_2* in weiteren Untermodulen befindet und somit nicht offensichtlich ist.

3.2 Implementation der Wärmeverlustgleichungen für die Rohrbrücke

Die in dem Modell aus [1] angenommene Vereinfachung, dass es sich bei der Leitung durch die Rohrbrücken um einen adiabaten Vorgang handelt bzw. dass die Wärmeverluste einfach vernachlässigt wurden, führt zu einer starken Abweichung zwischen den Werten des realen Versuchsaufbaus und denen, die das Modell liefert.

Um den – im ursprünglichen Modell vernachlässigten – Wärmeverlust zwischen den Katalysatorsträngen zu modellieren wird in das Ausgangsmodell ein neues Modul eingefügt. Dieser neue Baustein bezieht die Wärmeübergänge – vom heißen Gas über das Rohr und die Isolierung bis hin zur Umgebung und den Transport im Innern des Rohres – in das Gesamtmodell mit ein.

Die hierzu notwendingen Beziehungen ergeben sich wie folgt:

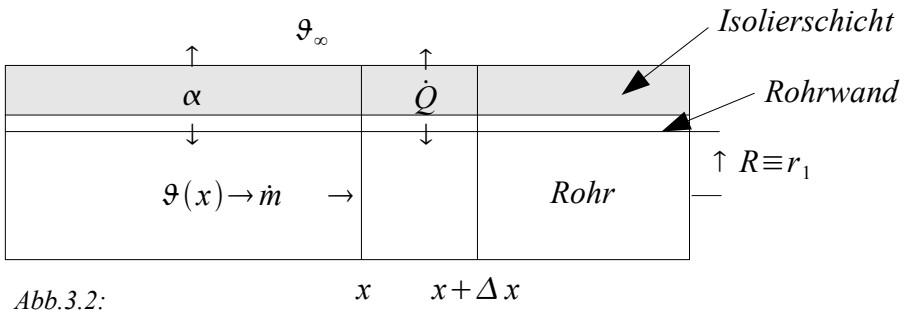


Abb.3.2:
Schematische Darstellung einer Rohrbrücke

Unter der Annahme rein konvektiven Transportes ergibt sich aus der stationären Energiebilanz:

$$\dot{m} c_p \frac{d\vartheta}{dx} = 2\pi \alpha_r r_1 (\vartheta_\infty - \vartheta), \quad \vartheta(0) = \vartheta_{\text{in}}$$

die folgende Beziehung für die Austrittstemperatur $\vartheta_{out} = \vartheta(L)$:

$$\vartheta_{out} = (\vartheta_{\text{in}} - \vartheta_\infty) e^{\left(\frac{-2\pi \alpha_r r_1}{\dot{m} c_p} L\right)} + \vartheta_\infty$$

Gl. 3.5

Der noch zu bestimmende Wärmedurchgangskoeffizient α_r hängt dabei von den Eigenschaften der Rohrwand und der Isolierung ab, wie nachfolgend beschrieben wird.

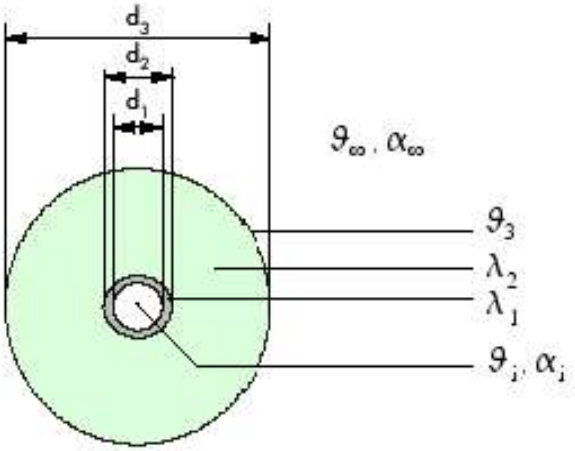


Abb.3.3: Schematische Darstellung einer Rohrbrücke (aus [2])

Der Wärmestrom $\dot{Q}$ – in radialer Richtung – durchdringt das Metallrohr und die Isolationsschicht bevor er die Umgebung erreicht. Es erfolgt also ein Wärmedurchgang durch zwei Schichten.

Nach dem Fourierschen Gesetz wird durch eine Zylinderfläche vom Radius **r** und der Länge **L** ein Wärmestrom $\dot{Q} = -\lambda\, 2\pi\, r\, L \left[\frac{\delta\vartheta}{\delta r}\right]_{r_i}$ übertragen [4].

Gl.3.6

Im stationären Fall wird der in eine Schicht der Dicke Δr eindringende Wärmestrom und der austretende Wärmestrom gleich groß, es gilt also:

$$0 = -\lambda \left[\frac{\delta\vartheta}{\delta r}\right]_r 2\pi\, r\, L + \lambda \left[\frac{\delta\vartheta}{\delta r}\right]_{r+\Delta r} 2\pi\, r\,(r+\Delta r)\, L$$

Gl.3.7

Für $\Delta r \to 0$ erhält man: $0 = \frac{\delta}{\delta r}\left(\lambda\, r \frac{\delta\vartheta}{\delta r}\right)$

Daraus ergibt sich: $0 = \lambda\, r \frac{\delta\vartheta}{\delta r} - c_1 \;\rightarrow\; \frac{c_1}{r} = \lambda \frac{\delta\vartheta}{\delta r}$

Durch Integration $$-c_1 \int_{r_i}^{r_0} \frac{dr}{r} = \lambda \int_{\vartheta_i}^{\vartheta_0} d\vartheta \;\rightarrow\; -c_1 \ln \frac{r_0}{r_i} = \lambda (\vartheta_{out} - \vartheta_i)$$

erhält man: $$-c_1 \ln \frac{r}{r_i} = \lambda (\vartheta - \vartheta_i)$$

Gl.3.8

Dies lässt sich zu $$\left[\frac{\delta \vartheta}{\delta r}\right]_{r_i} = \frac{-c_1}{\lambda} \frac{1}{r_i}$$ umformen und in Gl. 3.6 einsetzten.

Gl.3.9

Daraus ergibt sich dann $$2\pi r_i L \lambda \left[\frac{\delta \vartheta}{\delta r}\right]_{r_i} = -2\pi r_i L c_1 \frac{1}{r_i} = \dot{Q}$$

was man zu $$c_1 = \frac{\dot{Q}}{2\pi L}$$ umstellen kann.

Gl.3.10

Ebenfalls aus der Gl. 3.8 lässt sich der Ansatz $\vartheta_{\text{out}} - \vartheta_{\text{in}} = \frac{c_1}{\lambda} \ln \frac{r_0}{r_i}$ gewinnen, der ergänzt um Gl. 3.10 die Ausgangsgleichung für den radialen Wärmedurchgang durch die Rohrbrücke liefert.

$$\vartheta_{\text{out}} - \vartheta_{\text{in}} = \frac{1}{2\pi L \lambda} \ln \frac{r_0}{r_i} \dot{Q}$$

Gl.3.11

Mit Hilfe dieser Gleichung ergibt sich für das zweischichtige Rohr der Verbindungsstücke folgender Ansatz:

$$\vartheta_{\text{out}} - \vartheta_{\text{in}} = \left[\frac{1}{2\pi L \lambda_1} \ln \frac{r_2}{r_1} + \frac{1}{2\pi L \lambda_2} \ln \frac{r_3}{r_2}\right] \dot{Q}$$

Dieser kann - über den Newtonschen Ansatz - zu $\dot{Q} = 2\pi \alpha r_1 L (\vartheta_\infty - \vartheta_i)$ umgeformt werden. Aus diesem Zusammenhang kann dann folgende Bedingung für den Wärmeübergangskoeffizienten ermittelt werden:

$$\alpha_r r_1 = \frac{1}{\frac{1}{\lambda_1} \ln \frac{r_2}{r_1} + \frac{1}{\lambda_2} \ln \frac{r_3}{r_2}}$$

Gl.3.12

Die Zusammenführung der axialen und radialen Wärmegleichungen ergibt schließlich das vollständige Modell des Wärmedurchgangs durch die Rohrbrücken.

axial **radial**

$$\vartheta_{out} = (\vartheta_{\text{in}} - \vartheta_{\infty}) e^{\left(\frac{-2\pi\alpha_r r_1}{\dot{m} c_p} L\right)} + \vartheta_{\infty} \quad \text{mit} \quad \alpha_r r_1 = \frac{1}{\frac{1}{\lambda_1}\ln\frac{r_2}{r_1} + \frac{1}{\lambda_2}\ln\frac{r_3}{r_2}}$$

Natürlich mussten auch für die Implementierung der Rohrbrückengleichungen einige Anpassungen der mathematischen Lösungen durchgeführt werden, damit sie in das ProMot-Modell eingebunden werden konnten. Im Anhang B befindet sich der Quellcode der Datei *tube_bridge.mdl* – welche den Hauptbestandteil der Rohrbrücken-Modellerweiterung ausmacht.

In ihr befinden sich die modifizierten Gleichungen, die das thermische Verhalten der Rohrbrücken beschreiben.

Die Komponente für den radialen Wärmestrom konnte eins zu eins übernommen werden und verbirgt sich in der Hilfsvariablen *alpha_R1*, die sich im Variablen-Deklarationsteil der Datei befindet.

Die Austrittstemperatur ϑ_{out} errechnet sich aus der im Modul definierten Variablen t_loss – weche aus der Wärmeübergangsgleichung gebildet wird. Diese wird dazu verwendet die Randbedingungen des Rohrbrückenmoduls zu bestimmen und somit den Temperaturverlust zu erfassen und an das folgende Modul weiter zu geben.

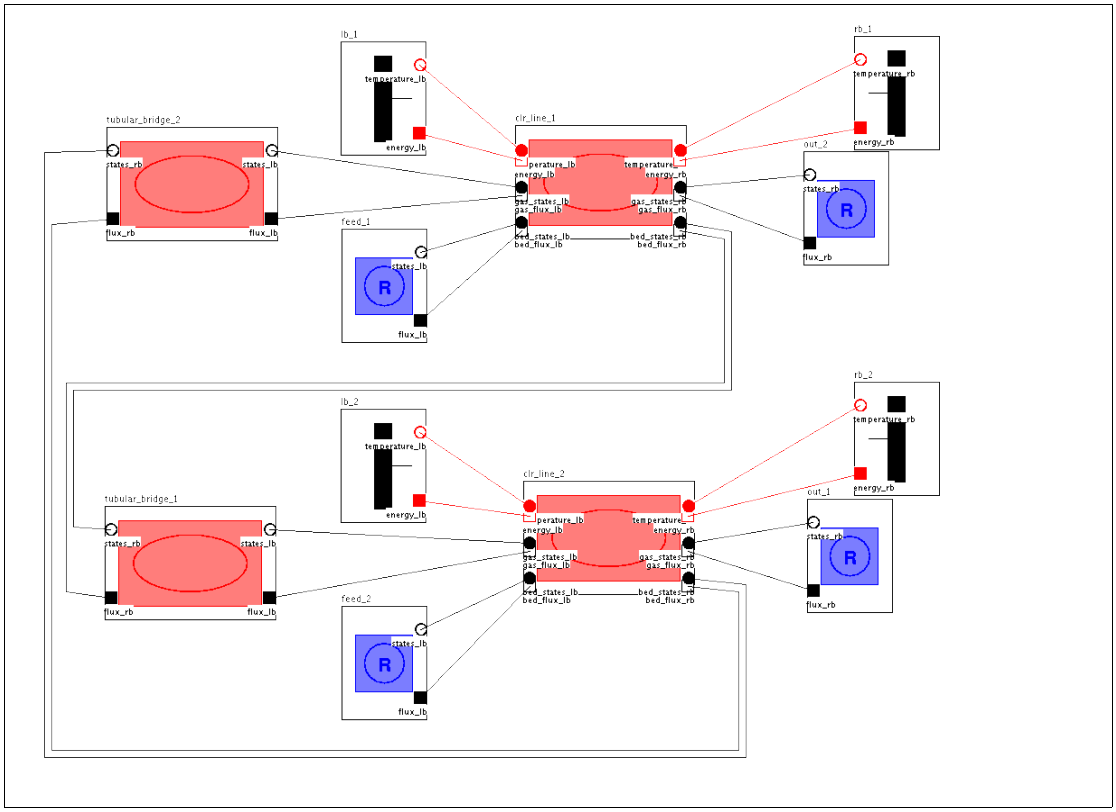


Abb.3.4: Reaktormodell mit Rohrbrückenmodulen

Durch das Hinzufügen der Rohrbrückenmodule hat sich nunmehr die Modellabbildung des Reaktorsystems verändert. Im Vergleich zwischen Abbildung 1.4 und 3.4 ist zu erkennen, dass die Module *ibc_1* und *ibc_2* (inner boundary condition) durch die Module *tubular_bridge_1* und *tubular_bridge_2* ersetzt wurden.

Diese sorgen dafür, dass der vorher vernachlässigte Wärmeverlust beim Durchfließen der Rohrbrücke – zwischen dem Austritt aus dem nicht temperierten Reaktormodul und dem Eintritt in die Wärmetauscherwendel – für jeden Reaktor berücksichtigt wird.

4. Ermittlung benötigter Parameter

Um den Wärmeverlust der Rohrbrücke berechnen zu können, mussten für die vorhergehend aufgestellten und implementierten Gleichungen die entsprechenden Materialwerte ermittelt werden. Wie in den Abbildungen 3.2 und 3.3 dargestellt besteht das zu beschreibende Rohrstück - zwischen dem Ausgang eines Reaktors und dem Eingang des Wärmetauschers des anderen Reaktors - aus einem Metallrohr mit einer mineralischen Isolierschicht.

Der Wert für die Wärmeleitfähigkeit des Metallrohrs ist bekannt und kann dementsprechend verwendet werden.

Die Anpassung des Rohrbrückenmodells an das reale Verhalten des Verbindungsstücks zwischen den Reaktoren erfolgte mit Hilfe der Wärmeleitfähigkeit λ_2 des Isolationsmaterials.

Hierzu dienten die bereits in [2] durchgeführten Messungen, die das thermische Verhalten der Reaktormodule offenlegen. (Abb.4.1)

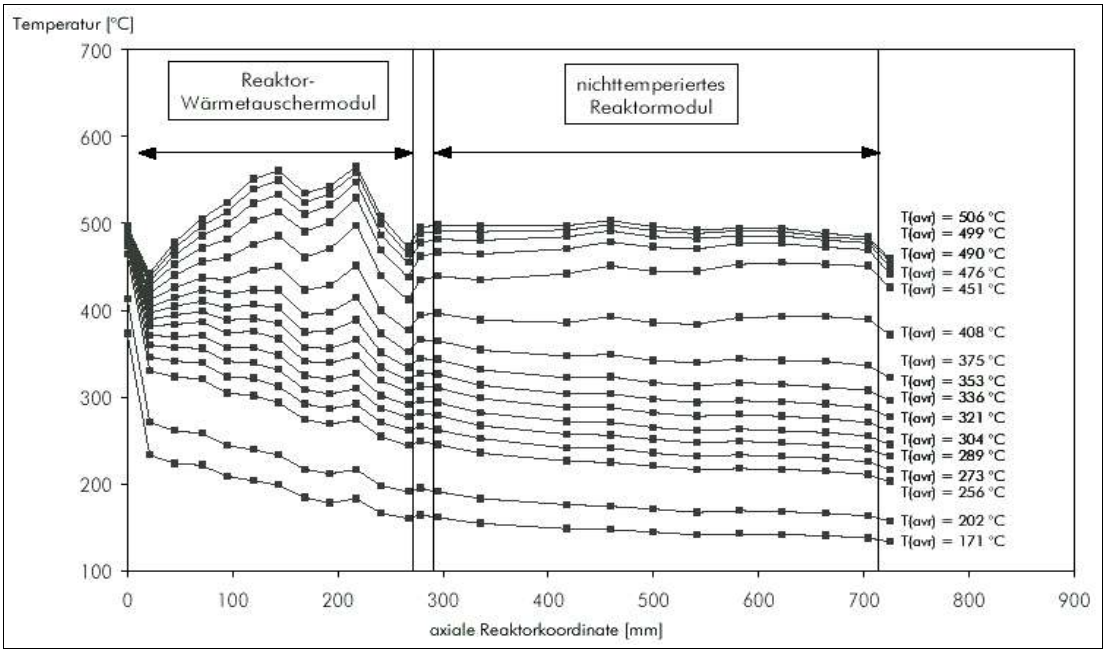


Abb. 4.1:

Axiale Temperaturprofile im stationären Betrieb (aus [2])

Dabei wurde mit Hilfe der in den Reaktor integrierten Thermoelemente ein Temperaturprofile erstellt, welches den Temperaturverlauf im Innern des temperierten und des nicht temperierten Reaktorbereiches wiedergibt.

Diese Darstellung war die Grundlage für die Modifikation der Modellparameter. Anhand der realen Temperaturverläufe wurde die Wärmeleitfähigkeit der Rohrbrücke im Modell so gefittet, dass die simulierten Ausgangstemperaturen der Brücke an die des Versuchsaufbaus angepasst werden konnten.
Bei den dafür notwendigen Simulationen wurden die Zulauftemperaturen wie in Abb.4.1 festgelegt. Da es sich bei dem Isoliermaterial um ein mineralisches Material handelt, wurde als empirischer Startwert für das Fitten von λ_2 ein Wert von 0,04 $\frac{W}{m\,K}$ für Glaswolle angenommen.

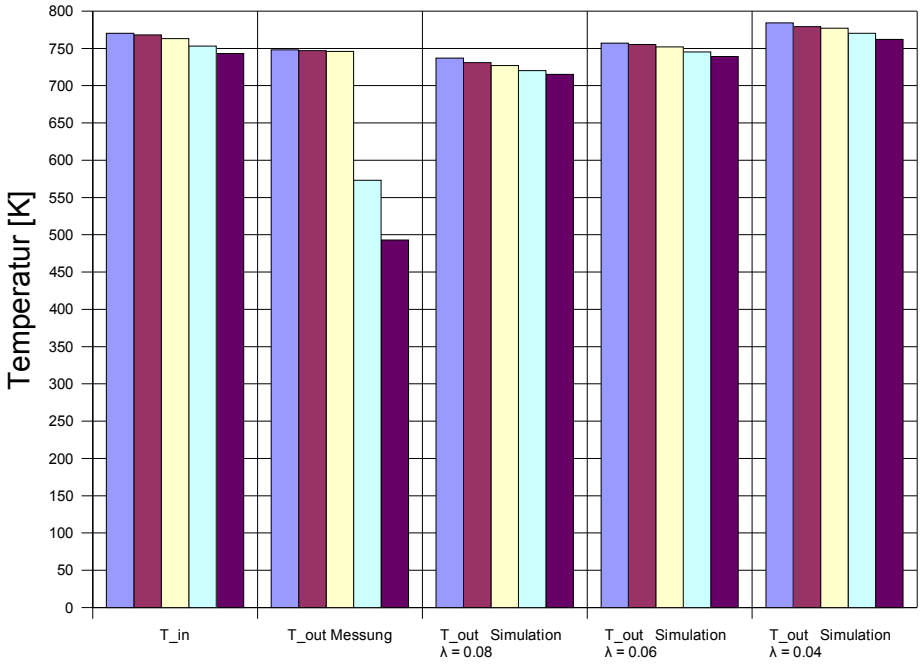


Abb. 4.2:

Austrittstemperatur aus Reaktor in Abhängigkeit von $T_{in}[K]$ *und* $\lambda_2\left[\frac{W}{mK}\right]$

Abbildung 4.1 stellt die Austrittstemperaturen aus dem Reaktor, in Abhängigkeit von den Reaktoreintrittstemperaturen und dem gewählten Lambdawert der Isolationsschicht der Rohrbrücke, gegenüber. Für einen direkten Vergleich sind in der zweiten Spalte die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen aufgetragen. Balken gleicher Farbe haben hierbei die gleiche Eintrittstemperatur.

Die Auswertung der ersten Simulationsergebnisse (*Abb.4.1 und Tab.4.1*) zeigte, dass die – in der realen Versuchsanordnung stattfindende – starke Abnahme der Austrittstemperaturen aufgrund des Verlöschens der Reaktion ab einer bestimmten Eingangstemperatur durch das Modell nicht korrekt wiedergegeben wird. Eine mögliche Ursache für die Abweichungen könnten zusätzliche Wärmeverluste über die Reaktorflansche sein, die sehr massiv gebaut sind und über eine hohe Wärmekapazität verfügen.

T_in [K]	T_out Mess	0,08	0,06	0,04
770	748	11	-9	-36
768	747	16	-8	-32
763	746	19	-6	-31
753	573	-142	-172	-197

Tab.4.1: Differenzen zw. $T_{out\ Mess.}$ *und* $T_{out\ Sim.}$

In der folgenden Grafik sind die Austrittstemperaturen für weitere Lambda-Werte dargestellt. Die Simulationen, die diesem Diagramm (Abb.4.2) zugrundeliegen, wurden durchgeführt um das Verhalten des virtuellen Systems im niederen Temperaturbereich anzupassen.

Die hierbei verwendeten Werte für die Wärmeleitfähigkeit des Isolators waren jedoch unrealistisch groß.

Zudem lieferten sie für den hohen Temperaturbereich nicht die erwarteten Ergebnisse.

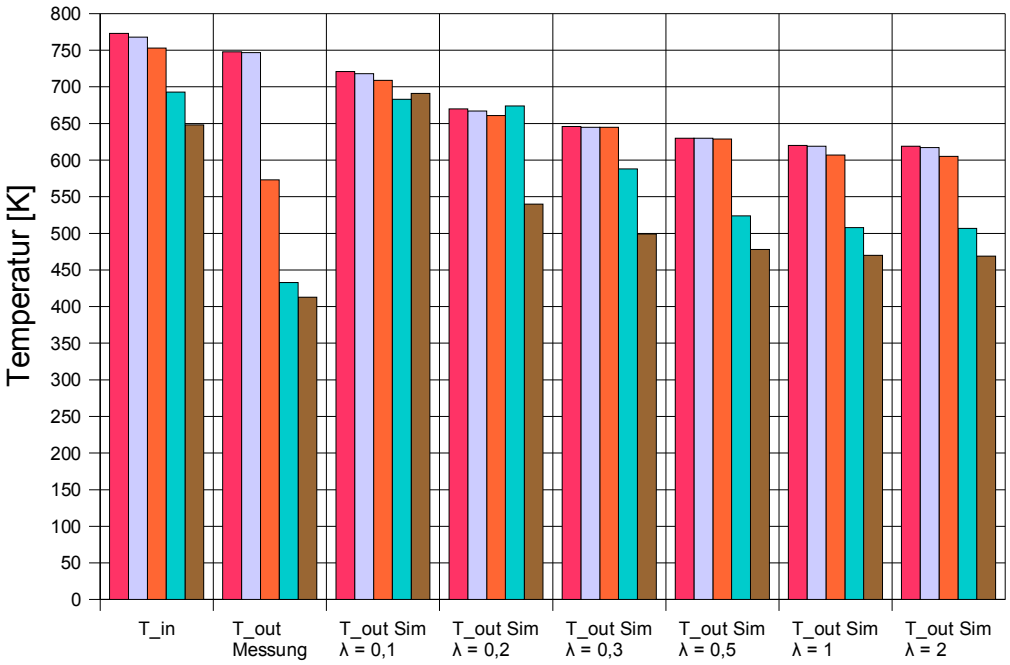


Abb. 4.3:

Austrittstemperatur aus Rohrbrücke in Abhängigkeit von $T_{in}[K]$ *und* $\lambda_2\left[\frac{W}{mK}\right]$

Betrachtet man das Temperaturprofil für $\lambda_2 = 1$ stellt man fest, dass bei einer Eintrittstemperatur von 773K die Abweichung etwa 153K bzw. 19,8% beträgt. Bei Eintrittstemperaturen von 648K ergeben sich immer noch 57K bzw. 13,8% Abweichung zum realen Reaktorverhalten.

Angesichts dieser Ergebnisse wurde $\boxed{\lambda_2 = 0{,}06\frac{W}{m\,K}}$ festgelegt und in den weiteren Untersuchungen verwendet.

Das Fitten der Modellparameter für die Wärmeleitfähigkeit des Katalysatorbettes und den Wärmeübergangskoeffizienten des Wärmetauschers brachte keine nennenswerten Veränderungen der Simulationsergebnisse. Daher wurden diese in ihrer Ausgangskonfiguration belassen.

Weitere für die Implementierung der Wärmeverlustgleichungen benötigte Parameter konnten über das bestehende Modell numerisch ermittelt und so direkt eingebunden werden.

5. Bestimmung von Betriebsbereichen für den autonom oszillierenden Betrieb

5.1 Untersuchung der Modellverbesserungen

Nachdem nun die neue Reaktionskinetik und Verlustgleichungen für die Rohrbrücken in das Modell eingearbeitet und angepasst wurden, musste untersucht werden, in wie weit die – durch die Rohrbrückenmodule berücksichtigten – Wärmeverluste einen Einfluss auf das Verhalten des Modellreaktorsystem hatten.

Schon durch die folgenden Abbildungen wird deutlich, dass sich die vernachlässigten Wärmeabgaben negativ auf die Genauigkeit der Simulationsergebnisse auswirkten.

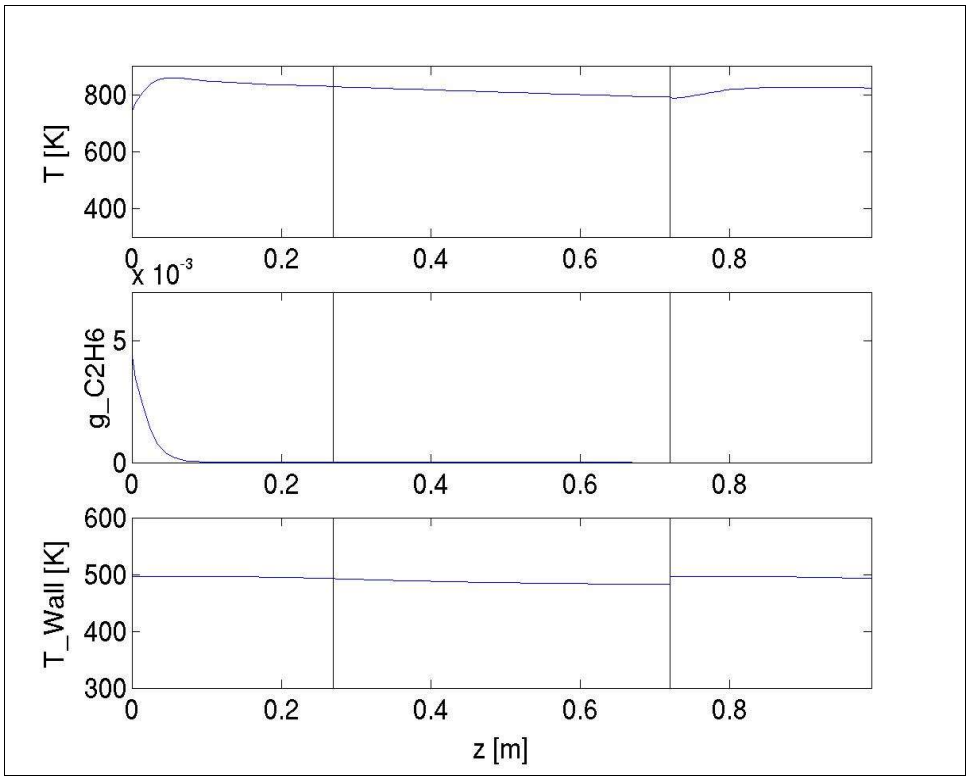


Abb. 5.1: Simulationsergebnisse mit Rohrbrücke = 0,01m

Die abgebildeten Simulationsdaten ergeben sich aus einer Zulauftemperatur von 700K, einem Ethananteil von 0,45%, einem Zulaufstrom von 1000l/h und einer Rohrbrückenlänge von 0,01m. Der auftretende Verlust zwischen dem Austritt am nicht temperierten Reaktorteil und dem Eintritt am Wärmetauscher beträgt 2,3K und wäre somit zu vernachlässigen. Dies entspricht einer Simulation ohne die

implementierte Rohrbrücke – also mit der Annahme, dass dort keine Wärmeverluste auftreten.
In dem realen Versuchsaufbau ist dies jedoch nicht der Fall – dort haben die Rohrbrücken eine Länge von ca. 0,75m. Stattet man nun das Modell – bis auf die Länge der Rohrbrücken – mit den gleichen Parametern wie zuvor aus, ergibt sich folgender Verlauf.

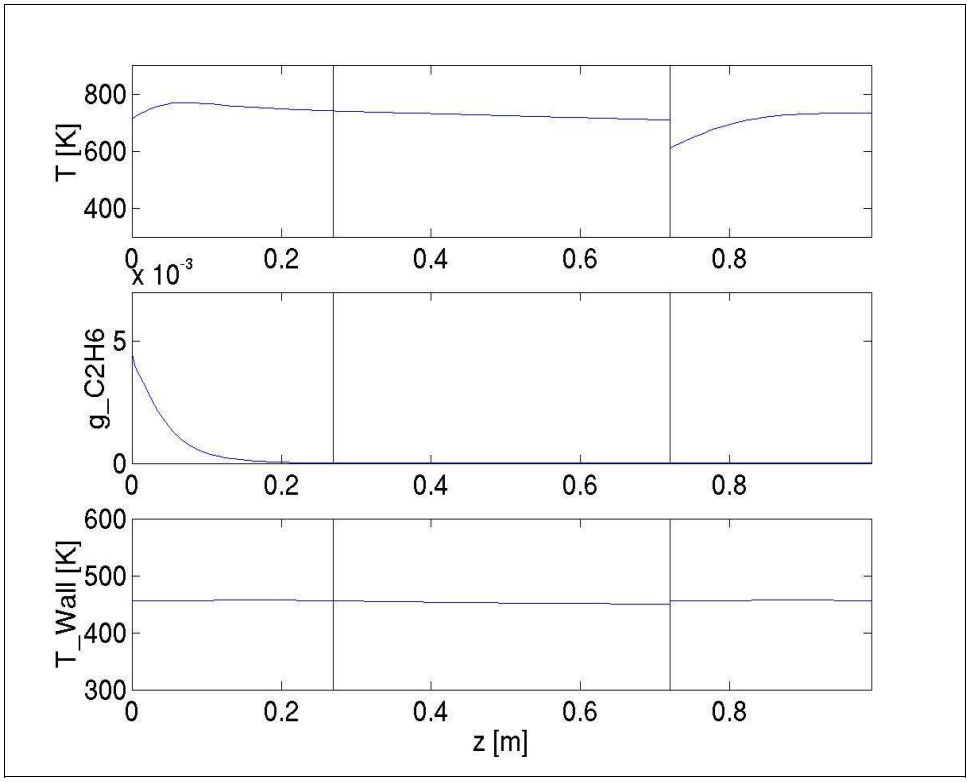


Abb. 5.2: Simulationsergebnisse mit Rohrbrücke = 0,75m

Die Differenz zwischen Reaktorausfluss und Wärmetauschereinfluss beträgt in dieser Konstellation 103K und ist vermutlich ein Grund für die starken Abweichungen der bisherigen Modellvorhersagen von den mit der Versuchsanlage erzielten Ergebnissen.

Um weitere Aussagen über das Reaktormodell treffen zu können wurde im nächsten Schritt das Verhalten unter verschiedenen Betriebsbedingungen untersucht. Hierbei wurde wie gehabt vorgegangen: die Zulauftemperatur wird erhöht, bis sich ein gezündeter stationärer Zustand einstellt. Von diesem Zustand ausgehend wird eine schrittweise Temperaturabsenkung vorgenommen. Ab einem

bestimmten Wert treten dann die Oszillationen im Reaktor auf. Wird die Zulauftemperatur weiter abgesenkt, erreicht man einen Zustand, an dem die Oszillationen zu verlöschen beginnen. Ab diesem Punkt treten verlöschte stationäre Zustände auf.

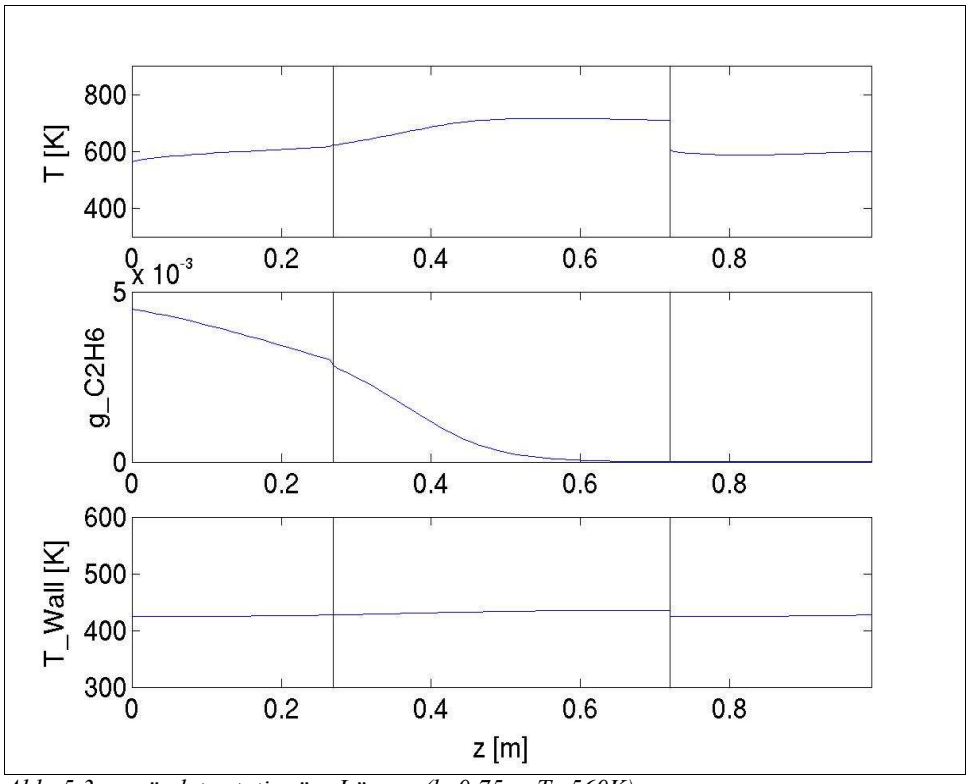


Abb. 5.3: gezündete stationäre Lösung (l=0,75m, T=560K)

Der in Abbildung 5.3 abgebildete Zustand entspricht einer gezündeten stationären Lösung mit einer Zulauftemperatur von 560K und einem Ethananteil von 0,45%. Das zugeführte Ethan wird oxidiert und letztlich im adiabaten Reaktorteil vollkommen aufgebraucht. Dies ist auch an der Temperaturkurve zu erkennen, die mit dem Auslaufen der Reaktion im adiabaten Teil einen beinahe konstanten Wert annimmt .

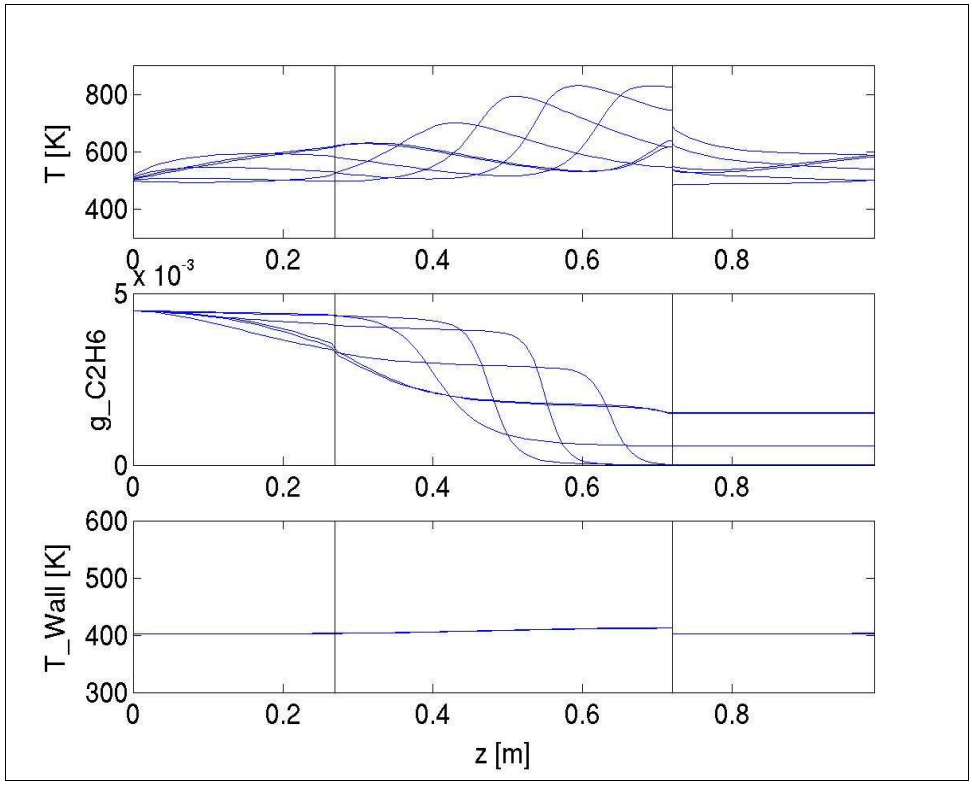


Abb. 5.4: Oszillation (l=0,75m, T=500K)

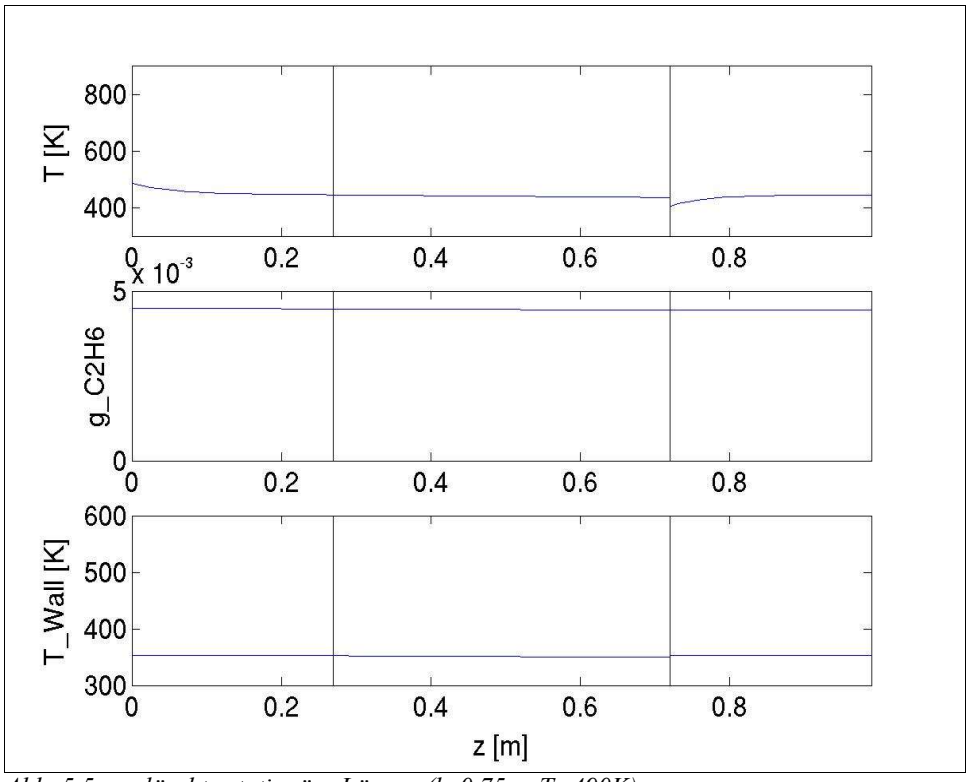


Abb. 5.5: verlöschte stationäre Lösung (l=0,75m, T=490K)

Nach dem Herunterfahren der Zulauftemperatur stellen sich die wandernden Reaktionszonen ein. (Abb. *5.4*) Da dies die erwünschte Betriebsweise für die gekoppelten Festbettreaktoren ist, soll der anschließende Absatz einen Aufschluss darüber geben, bei welchen Betriebsbedingungen die autonom periodischen Oszillationen zu erwarten sind. Betrachtet man zunächst noch die verlöschten stationären Lösung in Abbildung 5.5, so ist zu erkennen, dass keine bzw. nur eine geringe Umsetzung des einfließenden Ethans statt gefunden hat. Eine Zuflusstemperatur von 490K reicht – in diesem Fall – also bei einem Ethananteil von 0,45% nicht aus, um die Reaktion aufrecht zu erhalten.

5.2 Ermitteln eines Oszillationsbereiches für das bestehende Reaktormodell

Der folgende Absatz widmet sich der Findung eines Oszillationsbereiches für das überarbeitete Reaktormodell. Hierbei wurde wie zuvor beschrieben verfahren. Durch eine Vielzahl von Simulationen wurden zu unterschiedlichen Betriebsszenarien die Parameter ermittelt, welche die wandernden Reaktionszonen als Modelllösung hervorbrachten. Die so bestimmten Werte wurden zur besseren Veranschaulichung in der Abbildung 5.6 aufgetragen.

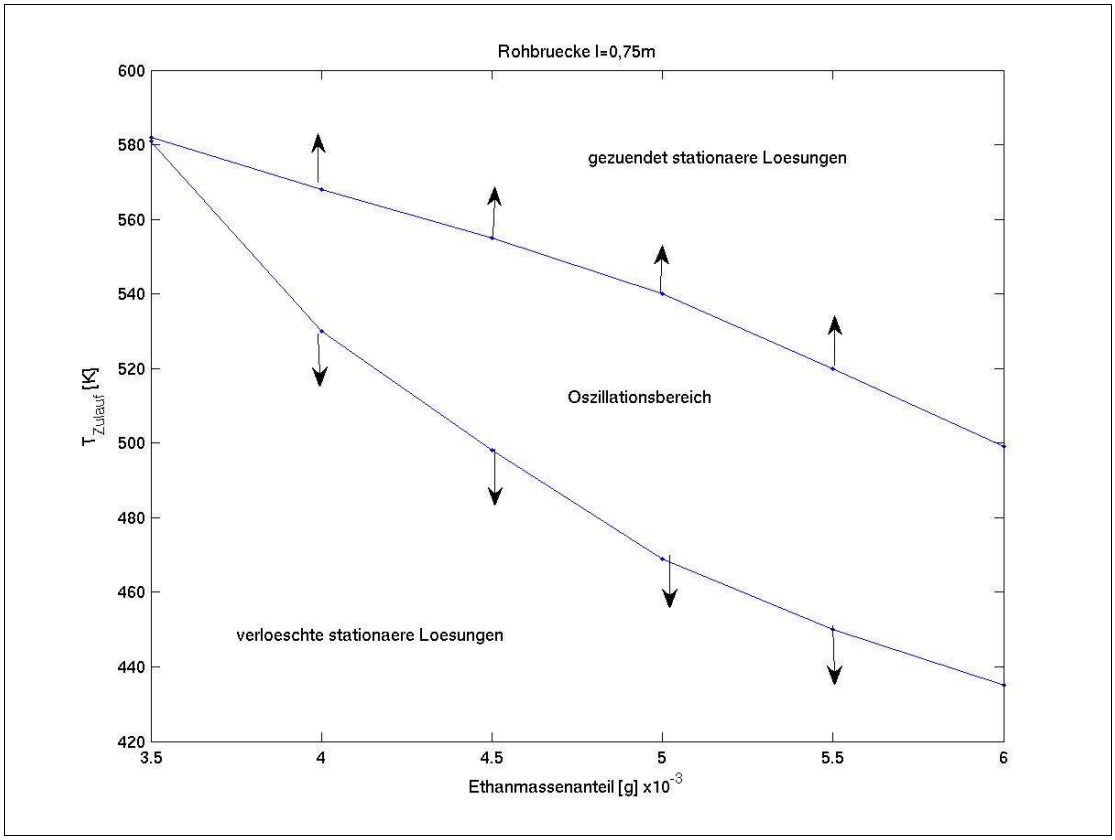


Abb.5.6: Existenzbereich wandernder Reaktionszonen (l=0,75m)

Vergleicht man den neu ermittelten Oszillationsbereich mit dem Bereich, der in [1] auf Seite 53 zu finden ist, so lässt sich leicht erkennen, dass die zu den jeweiligen Ethananteilen gehörenden Randpunkte des alten Existenzbereiches – zwischen 80 und 100K – niedriger liegen als die des überarbeiteten Modells.
Im Unterschied zum Experiment tritt aber auch im verfeinerten Modell ein großer Bereich oszillierender Lösungen auf.

6. Vorschläge zur konstruktiven Verbesserung der Anlage

Eine bereits in [2] genannte Möglichkeit – die durch die Rohrbrücken auftretenden Wärmeverluste zu minimieren – ist die bauliche Veränderung der Versuchsanlage. Vorgeschlagen wird ein Quereinbau der Reaktoren der eine Verkürzung des Brückenleitungsweges mit sich bringen würde. (*Abb.6.1*)

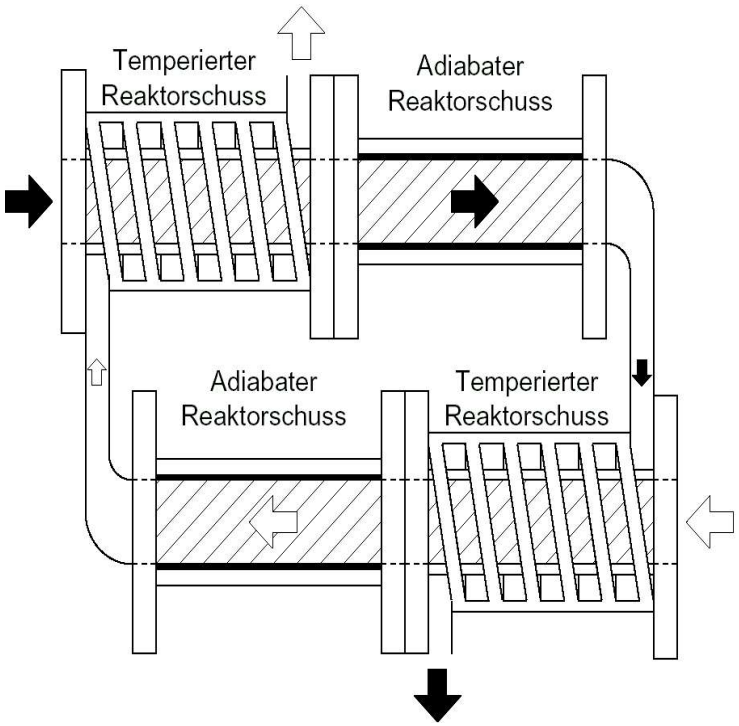


Abb. 6.1:

Grundschema eines Doppelrohrzirkulationsreaktors nit Wärmetausch im Kreuz-/Gleichstrom (aus [3])

Im Unterschied zu Abbildung 1.1 kann bei einem Quereinbau der Ausgang des Reaktors auf kürzerem Weg an den Eingang des Wärmetauschers angeschlossen werden.

6.1 Ermitteln eines Oszillationsbereiches für verkürzte Rohrbrücken

Im folgenden Abschnitt wird eine Verkürzung der Rohrbrücken um die Hälfte angenommen und als Basis für das Anstellen vergleichender Untersuchungen und die Erstellung eines weiteren Existenzbereiches genutzt.
Mit der Verkürzung der Verbindungsstücken zwischen den nicht temperierten Reaktorteilen und den Wärmetauscherwendeln wird erreicht, dass sich die Wärmeverluste beim Durchfließen der Rohrbrücken verringern. Der Vergleich zwischen den Abbildungen 5.3 und 6.2 zeigt dies anschaulich.

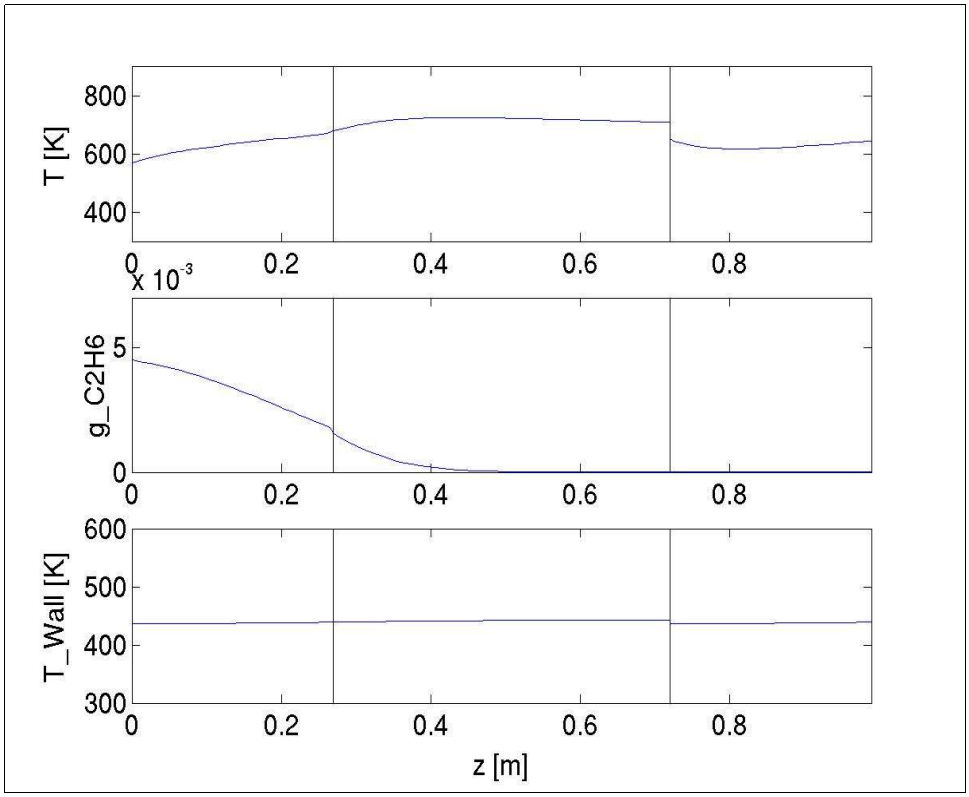


Abb. 6.2: Simulationsergebnisse für halbierte Rohrbrücken (l=0,375m, T=560K)

So ergibt sich mit halbierter Brückenlänge ein Temperaturverlust von 57K zu 105K bei voller Länge. Für einer Zulauftemperatur von 560K entspricht dies beinahe einer Halbierung der Verluste.
Da mit zunehmenden Reaktoreingangstemperaturen auch der Temperaturschwund in den Verbindungsrohren zunimmt, macht sich die Verkürzung besonders in diesem Temperaturbereich bemerkbar. Bei allen diesbezüglich durchgeführten Simulationen fielen die Verluste des Kurzbrückenmodells etwa halb so hoch wie

die Wärmeverluste des Standardmodells aus. Durch diese Feststellung konnte für die Ermittlung des neuen Oszillationsbereiches folgende Vorhersage getroffen werden:

> Durch die Verringerung der Wärmeverluste sollten sich die Oszillationen nun auch bei geringeren Zulauftemperaturen einstellen. Dadurch vergrößert sich der Existenzbereich der wandernden Reaktionszonen hin zu niedrigeren Zulauftemperaturen.

Nach Auswertung der neuerlichen Simulationen ergab sich folgendes:

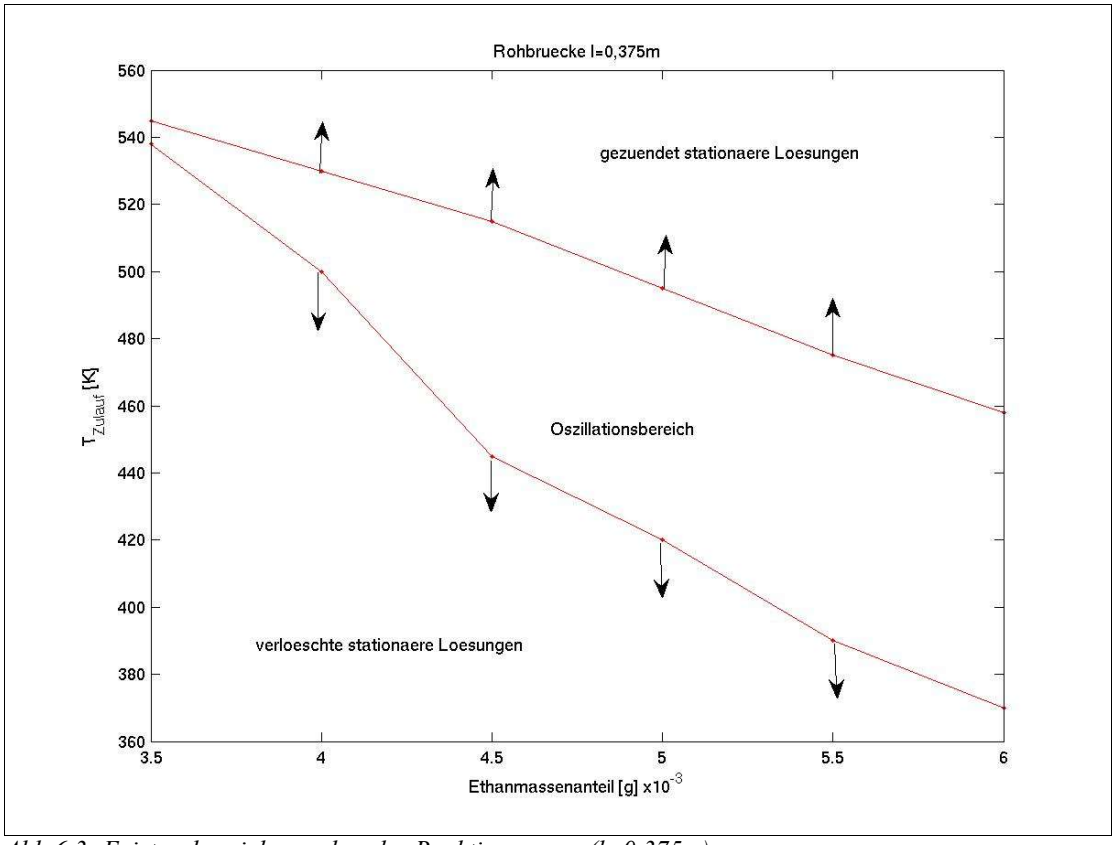


Abb.6.3: Existenzbereich wandernder Reaktionszonen (l=0,375m)

Das Oszillationsfeld hat sich - wie erwartet – vergrößert und in einen niedrigeren Temperaturbereich verlagert. Das heißt der Bereich der wandernden Reaktionszonen kann in dieser Parametrierung mit geringeren Eingangstemperaturen erreicht und über ein größeres Spektrum erhalten werden.
Zu besseren Veranschaulichung der erzielten Verbesserung sind in der folgenden Abbildung die Oszillationsbereiche für beide Rohrbrückenlängen dargestellt.

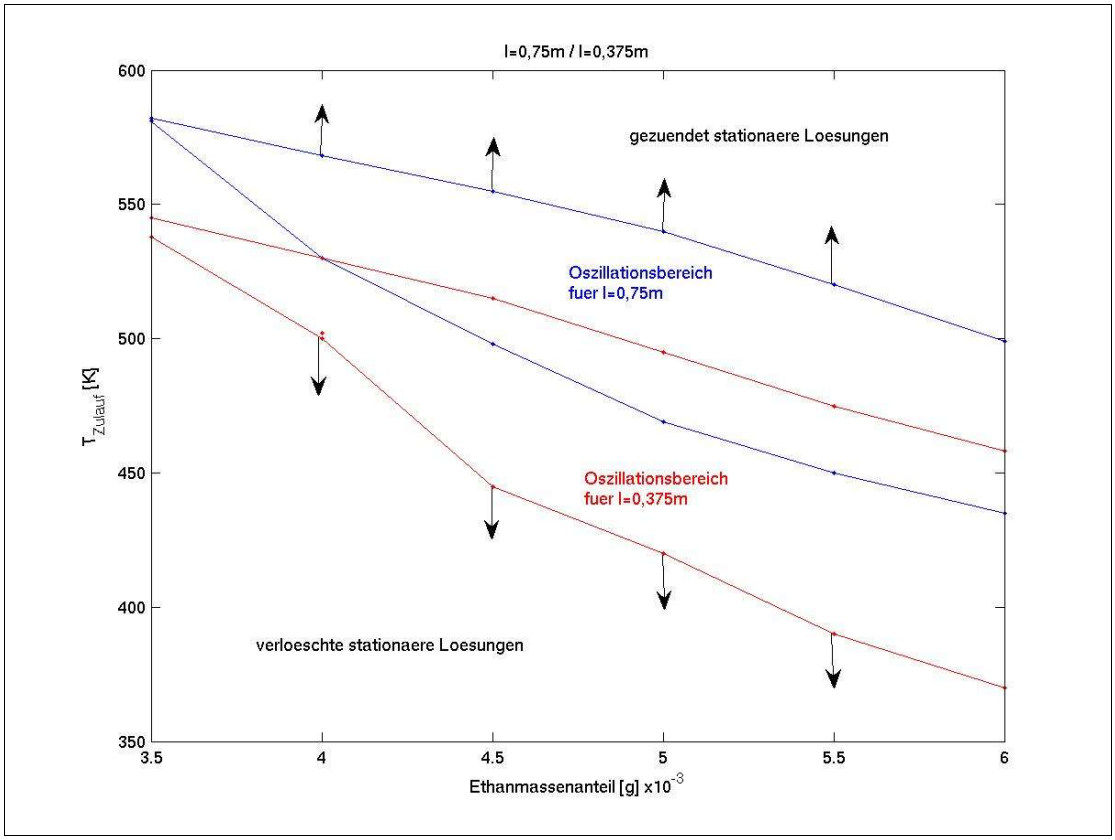


Abb.6.4: Vergleich der Oszillationsbereiche für unterschiedliche Rohrbrückenlängen

Es ist eine deutliche Verschiebung der oberen und unteren Bereichsgrenzen zu erkennen. Die sich ergebenden Differenzen zwischen den jeweiligen Grenzpunkten sind in Abbildung 6.5 noch einmal grafisch dargestellt.

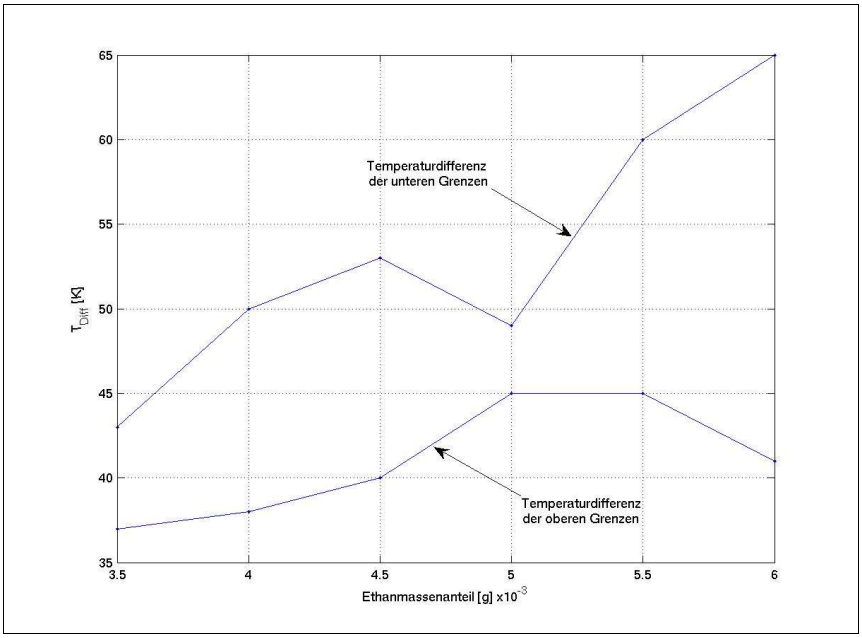


Abb.6.5: Temperaturdifferenzen der Existenzbereichsgrenzen bei Vergleich der Rohrbrückenlänge von 0,75m und 0,375m

Anhand der Grafik lässt sich sehr gut erkennen, dass die Differenzen zwischen den unteren Bereichsgrenzen höher ausfallen, als die zwischen den oberen. Dies bestätigt die Beobachtung, dass sich – bei verkürzten Rohrbrücken – der Existenzbereich nicht nur in ein tieferes Temperaturniveau verlagert, sondern auch erweitert.

7. Zusammenfassung

Die Hauptziele dieser Arbeit waren zum einen die Implementierung der verbesserten Reaktionskinetik und des Wärmetransports über die Rohrbrücken, zum anderen das Ermitteln von Betriebsbereichen für den autonom oszillierenden Betrieb und die Diskussion möglicher konstruktiver Verbesserungen der Anlage.

(1) Die Simulationsergebnisse nach der Implementierung der überarbeiteten Reaktionskinetik wiesen keine signifikanten Veränderungen des Modellverhaltens auf.

(2) Da die vorangegangenen experimentellen Untersuchungen mit der gegebenen Versuchsanlage zeigten, dass eine autonome periodische Oszillation nicht erreicht werden kann, die Simulationen mit dem überarbeiteten Modell jedoch sehr wohl diesen Betriebszustand hervorbrachten, ist die Genauigkeit des Reaktormodells immer noch als fragwürdig einzuschätzen. Offensichtlich konnten durch die vorgenommenen Verbesserungen nicht alle Fehlerquellen des bestehenden Modells eliminiert werden.

Daher stellt sich die Frage, ob ein Umbau der bestehenden Reaktoranlage sinnvoll wäre und dem Aufwand gerecht werden würde.

(3) Mögliche bauliche Maßnahmen wären:

- wie bereits erwähnt der Quereinbau der Reaktorschüsse, der eine Verkürzung der Rohrbrücken und somit eine Verringerung der Wärmeverluste zur Folge hätte
- eine Neukonstruktion der Wärmetauscher für eine stärkere Wärmeübertragung, was bereits in [2] diskutiert wurde.

7.1 Fazit:

Da keine Konvergenz zwischen den bisherigen Vorhersagen des Modells und den experimentellen Ergebnissen der Versuchsanlage vorliegt, ist von einem Umbau eher abzusehen.

Statt dessen wäre eine Erstellung eines verfeinerten Reaktormodells im Zusammenhang mit einer Neukonzeption der Versuchsanlage denkbar. Hierbei könnten die bissher gewonnen Erfahrungen genutzt werden, um die offensichtliche Diskrepanz zwischen Modell und Realität zu kompensieren.

Verwendete Formelzeichen und Symbole

α	Reaktionsordnung des Kohlenwasserstoffs	-
α_r	Wärmeübergangskoeffizient (allgemein)	W / m² K
α_i	Wärmeübergangskoeffizient (vom Reaktionsgas auf die Rohrinnenwand)	W / m² K
α_∞	Wärmeübergangskoeffizient (von Isolierschicht auf die Umgebung)	W / m² K
β	Reaktionsordnung des Sauerstoffs	-
λ_1	Wärmeleitfähigkeit des Rohrmaterials	W / m K
λ_2	Wärmeleitfähigkeit der Isolierschicht	W / m K
ϑ_i	Temperatur	K
ϑ_i	Temperatur im Innern der Rohrbrücke	K
ϑ_2	Temperatur auf der Außenseite des Rohres	K
ϑ_3	Temperatur auf der Außenseite der Isolierschicht	K
ϑ_{in}	Temperatur des einströmenden Gases	K
ϑ_{out}	Temperatur des ausströmenden Gases	K
ϑ_∞	Temperatur der Umgebung	K
A	Fläche	m²
c	Konzentration	mol / m³
d_1	Innendurchmesser des Rohres	m
d_2	Außendurchmesser des Rohres = Innen-durchmesser der Isolierschicht	m
d_3	Außendurchmesser der Isolierschicht	m
E_a	Aktivierungsenergie	J / mol
$g_{C_2H_6}$	Massenanteil des Ethan	%
g_{O_2}	Massenanteil des Sauerstoff	%
k	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante	$(l / mol)^{Ord-1} / s$
k_0	Stoßfaktor	$(l / mol)^{Ord-1} / s$
L	Länge der Rohrbrücke	m
R	universelle Gaskonstante	J / mol K
$r_{C_2H_6}$	Reaktionsgeschwindigkeit	mol / m³ s
r_1	Innenradius des Rohres	m
r_2	Außenradius des Rohres = Innenradius der Isolierschicht	m
r_3	Außenradius der Isolierschicht	m
T	Temperatur	K

Zahlenwerte der Modellparameter

r_1	= 0,003175	m
r_2	= 0,004175	m
r_3	= 0,05	m
L	= 0,75	m
T_∞	= 300	K
λ_1	= 36,0	W / m K
λ_2	= 0,06	W / m K
$g_{C_2H_6}$	= 0,45	%
g_{O_2}	= 20,0	%

Literatur

[1] Paula Álvarez Blanco. Untersuchung autonom periodischer Betriebszustände in gekoppelten Festbettreaktoren
Diplomarbeit, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2003

[2] Álvaro Rodriguez Vázquez. Erprobung der Technikums-Versuchsanlage "Gekoppelte Festbettreaktoren"
1. Diplomarbeit, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2004

[3] Michael Mangold. Nichtlineare Analyse und technische Nutzun zirkulierender Reaktionszonen
Disertation, Universität Stuttgart, 2000

[4] Dubbel, Taschenbuch für den Maschinenbau (Springer Verlag)
19. Auflage, 1997

Quellcode

A: Quellcode von *reactive-ce-ethan-2.mdl*
(Änderungen durch neue Reaktionskinetik sind blau gekennzeichnet.)

```
(define-module :class "reactive-ce-ethane-1"
  :super-classes ("distributed-reactive-ce")
  :documentation
  "oxidation total of ethane to carbondioxid.
   Pseudohomogeneous power law kinetics according to
   Klose/Thomas:
  "
  ;;=============================================================
  :properties (("abstract" :value "no"))
  ;;=============================================================
  :terminals
  (
   ("comp_mass_flux"
    :geometry-side "top"
    :geometry-position "0.5"
    )
    ;;-------------------------------------------------------------
   ("comp_mass_fractions"
    :geometry-side "bottom"
    :geometry-position "0.3"
    )
   ;;
   );;end-of-terminals
  ;;=============================================================
  :variables
  (
   ("pi"
    :is-a "pi-constant")
    ;;-------------------------------------------------------------
   ("rho_cat"
    :is-a "real_parameter"
    :documentation
    "catalyst density in the bed: calculated from 3.1 g catalyst
     in a bed of 15 mm diameter and 30 mm length"
    :value "3.27e-03/(pi*(15.0e-3^2)/4.0*30.0e-03)"
    :unit "kg/m^3")
    ;;-------------------------------------------------------------
   ("k0"
    :is-a "real_parameter"
    :documentation "preexponential factor of the reaction "
    :value "1.15e+10/3600.0")
    ;;-------------------------------------------------------------
   ("Eact"
    :is-a "real_parameter"
    :documentation "activation energy of the reaction "
    :unit "J/mol"
    :value "72700.00")
    ;;-------------------------------------------------------------
   ("alpha"
    :is-a "real_parameter"
    :documentation "exponent of ethane concentration in the reaction rate"
    :value "0.86")
    ;;-------------------------------------------------------------


  ("beta"
    :is-a "real_parameter"
    :documentation "exponent of oxygen concentration in the reaction rate"
    :value "0.04")
```

```
;;-------------------------------------------------------------
 ("rgas"
  :is-a "gas-constant")
  ;;-------------------------------------------------------------
 ("c_C2H6"
  :is-a "help_variable"
  :documentation "concentration of ethane"
  :unit "mol/l"
  :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
  :value "rho[iz]*g[1,iz]/MolarMass[1]/1000.0")
  ;;-------------------------------------------------------------
 ("c_O2"
  :is-a "help_variable"
  :documentation "concentration of oxygen"
  :unit "mol/l"
  :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
  :value "rho[iz]*g[3,iz]/MolarMass[3]/1000.0")
 ;;-------------------------------------------------------------
 ("c_limit"
  :is-a "real_parameter"
  :value "100.0e-04")
 ;;-------------------------------------------------------------
 ("act_c2h6"
  :is-a "variable"
  :system-theoretic "state"
  :documentation "activity of ethane in reaction "
  :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
  :value "0.0")
 ;;-------------------------------------------------------------
 ("act_O2"
  :is-a "variable"
  :system-theoretic "state"
  :documentation "activity of oxygen in reaction "
  :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
  :value "0.0")
 ;;-------------------------------------------------------------
 ("r1"
  :is-a "help_variable"
  :documentation "reaction rate of the reaction "
  :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
  :unit "mol/s/kg"
  :value "k0*:exp(-Eact/rgas/temp[iz])*act_c2h6[iz]*act_O2[iz]")
 ;;
 );;end-of-variables
;;=============================================================
:equations
(
 ("act_c2h6_eqn"
  :is-a "rate-approximation"
  :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
  :variables
  (
   ("rate" :is-eq-to "parent.act_c2h6[iz]")
   ("c"    :is-eq-to "parent.c_c2h6[iz]")
   ("c0"   :is-eq-to "parent.c_limit")
   ("alpha":is-eq-to "parent.alpha") ) )
 ;;-------------------------------------------------------------
 ("act_O2_eqn"
  :is-a "rate-approximation"
  :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
  :variables
  (
   ("rate" :is-eq-to "parent.act_O2[iz]")
   ("c"    :is-eq-to "parent.c_O2[iz]")
   ("c0"   :is-eq-to "parent.c_limit")
   ("alpha":is-eq-to "parent.beta") ) )
```

```
   ;;-------------------------------------------------------
   ("ethane_reactive_flux"
    :is-a "equation"
    :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
    :relation "jreac[1,iz] == rho_cat * (-r1[iz] )")
   ;;-------------------------------------------------------
   ("carbon_dioxide_reactive_flux"
    :is-a "equation"
    :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
    :relation "jreac[2,iz] == rho_cat * (2.0*r1[iz])")
   ;;-------------------------------------------------------
   ("oxygen_reactive_flux"
    :is-a "equation"
    :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
    :relation "jreac[3,iz] == rho_cat * (-3.5*r1[iz])")
   ;;-------------------------------------------------------
   ("water_reactive_flux"
    :is-a "equation"
    :indices ((:index "iz" :lower "1" :upper "nz"))
    :relation "jreac[4,iz] == rho_cat * (3*r1[iz])")
   ;;
   );;end-of-equations
  );;end-of-define-module
```

B: Quellcode von *tube_bridge.mdl*
(Wichtige Bestandteile sind blau gekennzeichnet)

```
(define-module
  :class "tubular_bridge"
  :super-classes
  ("reactor"
       "cross-sectional-area"
       "component-molar-masses"
       "void-fraction-bed")
  :documentation "model of one bridge between the two reactors"
  :properties
  (("abstract"
   :value "no"))
  :geometry-width "900"
  :geometry-height "800"

  ;;============================================================
  :terminals
  (
   ("states_rb"
    :is-a "states_rb_in_terminal"
    :geometry-side "left"
    :geometry-position "0.2")
   ("states_lb"
    :is-a "states_lb_in_terminal"
    :geometry-side "right"
    :geometry-position "0.2")
   ("flux_rb"
    :is-a "flux_rb_out_terminal"
    :geometry-side "left"
    :geometry-position "0.8")
   ("flux_lb"
    :is-a "flux_lb_out_terminal"
    :geometry-side "right"
    :geometry-position "0.8"))
```

```
;;
;;end-of-terminals
;;============================================================
:modules
(
 ("hpart_module_rb"
  :is-a "partial-molar-enthalpies"
  :variables
  (
   ("ic"       :is-eq-to "parent.ic")
   ("nc"       :is-eq-to "parent.nc")
   ("p"        :is-eq-to "parent.p_rb")
   ("temp"     :is-eq-to "parent.temp_rb")
   ("hpartial" :is-eq-to "parent.hpartial_rb")
   ;;---------------------------------------
   ("href"     :is-eq-to "parent.href")
   ("tref"     :is-eq-to "parent.tref")
   ("cp"       :is-eq-to "parent.cp")
   )
 )
 ("hpart_module_lb"
  :is-a "partial-molar-enthalpies"
  :variables
  (
   ("ic"       :is-eq-to "parent.ic")
   ("nc"       :is-eq-to "parent.nc")
   ("p"        :is-eq-to "parent.p_lb")
   ("temp"     :is-eq-to "parent.temp_lb_in")
   ("hpartial" :is-eq-to "parent.hpartial_lb")
   ;;---------------------------------------
   ("href"     :is-eq-to "parent.href")
   ("tref"     :is-eq-to "parent.tref")
   ("cp"       :is-eq-to "parent.cp")
   )
 )
);;end-of-modules
;;============================================================
:variables
(("rho_rb"
  :is-a "density_variable"
  :system-theoretic "input"
  :documentation "total densities inside the finite volumes")
 ("p_rb"
  :is-a "pressure_variable"
  :system-theoretic "input")
 ("rho_v_rb"
  :is-a "momentum_variable"
  :system-theoretic "input")
 ("g_rb"
  :is-a "mass_fraction_variable"
  :system-theoretic "input"
  :documentation "component mass fractions at the left boundary z=0"
  :indices ((:index "ic" :lower "1" :upper "nc")))
 ("temp_rb"
  :is-a "temperature_variable"
  :system-theoretic "input"
  :documentation "temperature at the right boundary z=0")
 ("jmass_tot_rb"
  :is-a "mass_flux_variable"
  :system-theoretic "output"
  :positive-vector-direction "out")
 ("jenergy_rb"
  :is-a "energy_flux_variable"
  :system-theoretic "output"
  :positive-vector-direction "out")
 ("jenergy_lb"
```

```
 :is-a "energy_flux_variable"
 :system-theoretic "output"
 :positive-vector-direction "out")
("jmass_comp_rb"
 :is-a "mass_flux_variable"
 :system-theoretic "output"
 :positive-vector-direction "out"
 :indices ((:index "ic" :lower "1" :upper "nc-1")))
("rho_lb"
 :is-a "density_variable"
 :system-theoretic "input"
 :documentation "total densities inside the finite volumes")
("p_lb"
 :is-a "pressure_variable"
 :system-theoretic "input")
("rho_v_lb"
 :is-a "momentum_variable"
 :system-theoretic "input")
("g_lb"
 :is-a "mass_fraction_variable"
 :system-theoretic "input"
 :documentation "component mass fractions at the left boundary z=0"
 :indices ((:index "ic" :lower "1" :upper "nc")))
("temp_lb"
 :is-a "temperature_variable"
 :system-theoretic "input"
 :documentation "temperature at the left boundary z=0")
("temp_lb_in"
 :is-a "temperature_variable"
 :system-theoretic "state"
 :documentation "outflux temperature")
("jmass_tot_lb"
 :is-a "mass_flux_variable"
 :system-theoretic "output"
 :positive-vector-direction "out")
("jmass_comp_lb"
 :is-a "mass_flux_variable"
 :system-theoretic "output"
 :positive-vector-direction "out"
 :indices ((:index "ic" :lower "1" :upper "nc-1")))
;;
;;-------------------------------------------------------
("hpartial_rb"
 :is-a "molar_energy_variable"
 :system-theoretic "state"
 :indices ((:index "ic" :lower "1" :upper "nc")))
;;
("hpartial_lb"
 :is-a "molar_energy_variable"
 :system-theoretic "state"
 :indices ((:index "ic" :lower "1" :upper "nc")))
;;
("t_amb"
 :is-a "real_parameter"
 :documentation "temperarure of the ambiance"
 :unit "K"
 :value "300.00")
;;
;;
("lamb1"
 :is-a "real_parameter"
 :documentation "heat conductivity of the tube"
 :unit "W / (m*K)"
 :value "36.00")
;;
("lamb2"
```

```
    :is-a "real_parameter"
    :documentation "heat conductivity of the isulation"
    :unit "W / (m*K)"
    :value "0.06")
   ;;
   ("rad1"
    :is-a "real_parameter"
    :documentation "inner radius of the tube"
    :unit "m"
    :value "0.003175")
   ;;
   ("rad2"
    :is-a "real_parameter"
    :documentation "external radius of the tube"
    :unit "m"
    :value "0.004175")
   ;;
   ("rad3"
    :is-a "real_parameter"
    :documentation "external radius of the isulation"
    :unit "m"
    :value "0.05")
   ;;
   ("cp" :is-eq-to "parent.cp")
   ;;
   ("l"
    :is-a "real_parameter"
    :documentation "length of the tube"
    :unit "m"
    :value "0.75")
   ;;
   ("pi" :is-a "pi-constant")
   ;;
   ("molarmass" :is-eq-to "parent.molarmass")
   ;;
   ("alpha_R1"
    :is-a "help_variable"
    :value " 1/((1/lamb1)*:ln(rad2/rad1)+(1/lamb2)*:ln(rad3/rad2))")
   ;;
   ("cp_tot"
    :is-a "help_variable"
  :value "cp[nc]/molarmass[nc]+:sum<ic,1,nc-1>( (cp[ic]/molarmass[ic]-cp
[nc]/molarmass[nc])*g_lb[ic])")
   ;;
   ("t_loss"
    :is-a "help_variable"
    :value "(t_amb-temp_rb)*(:exp(-(2*pi*alpha_R1)/(jmass_tot_lb*cp_tot)*l)-
1.0)")
   ;;
   ("ic" :is-eq-to "parent.ic")
   ("nc" :is-eq-to "parent.nc")
   ;;
  );;end-of-variables
  ;;============================================================
  :equations
  (
   ("jenergy_rb_eqn"
    :is-a "equation"
    :relation "jenergy_rb == -Across*epsilon*rho_v_rb*
               (hpartial_rb[nc]/MolarMass[nc] +
               :sum<ic,1,nc-1> ((hpartial_rb[ic]/MolarMass[ic]-hpartial_rb
[nc]/MolarMass[nc])*g_rb[ic]))")
   ;;
   ("jenergy_lb_eqn"
    :is-a "equation"
    :relation "jenergy_lb == jmass_tot_lb*( hpartial_lb[nc]/MolarMass[nc] +
```

```
               :sum<ic,1,nc-1> ((hpartial_lb[ic]/MolarMass[ic]-hpartial_lb
[nc]/
               MolarMass[nc])*g_lb[ic]))")
    ;;
   ("temp_lb_in_eqn"
    :is-a "equation"
    :relation "temp_lb_in == temp_rb - t_loss")
   ;;
   ("mechanical_eq"
    :is-a "equation"
    :relation "p_lb == p_rb")
   ;;
   ("tot_mass_balance"
    :is-a "equation"
    :relation "jmass_tot_rb + jmass_tot_lb == 0.0")
   ;;
   ("chemical_eq"
    :is-a "equation"
    :indices ((:index "ic" :lower "1" :upper "nc-1"))
    :relation
    "g_rb[ic] == g_lb[ic]")
   ;;
   ("comp_mass_balance"
    :is-a "equation"
    :indices ((:index "ic" :lower "1" :upper "nc-1"))
    :relation "jmass_comp_rb[ic] + jmass_comp_lb[ic] == 0.0")
   ;;
   );; end of equations
   ;;=================================================================
   );; end of module
```