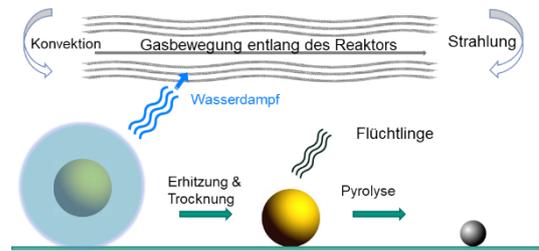


## Themengebiet von Abschlussarbeiten (BA/MA)

### „Simulation des Pyrolyseprozesses eines Kunststoffpartikels mittels CFD“

#### Hintergrund:

Pyrolyse bezeichnet den thermischen Abbau langkettiger organischer Moleküle zu kleineren Kohlenwasserstoffen, was eine der effizienten Möglichkeiten zur stofflichen Weiternutzung von Kunststoffabfällen darstellt. Dabei werden Kunststoffabfälle durch thermische Zersetzung in verschiedenste Chemikalien umgewandelt. Die Pyrolyse von Kunststoffabfällen wurde als Lösung für das Dilemma des enormen Plastikabfallaufkommens und als alternative Energiequelle angesehen. Viele laufende Forschungsstudien versuchen, die Pyrolysetechnologie besser zu verstehen, mit dem Ziel, neue industrielle Prozesse für das Kunststoffrecycling zu etablieren. Das Konzept der Pyrolyse ist weitgehend validiert und wird im Labormaßstab im Hinblick auf die Charakterisierung des Prozesses und seiner Nebenprodukte angewendet. Andererseits wird selten über die numerische Modellierung und Optimierung des Prozesses zum Zwecke der Entwicklung und effizienten Umsetzung im industriellen Maßstab berichtet. Da eine Reihe komplexer chemisch-physikalischer Phänomene beteiligt sind, angefangen bei der Zuführung des Feedstocks bis hin zur Gewinnung der Pyrolyseprodukte, sind zuverlässige Modelle wichtig, um den gesamten Prozess besser verstehen und optimieren zu können. In diesem Rahmen ist das Ziel der aktuellen Arbeit die Modellierung und Validierung der Erwärmung und des Abbaus einzelner kugelförmiger Kunststoffpartikel unter Verwendung der Computational Fluid Dynamics (CFD) Methode, die als wesentlicher Schritt im vollständigen Pyrolyseprozess von Kunststoffabfällen dient. .



#### Ziel der Arbeit:

Um ein detailliertes Verständnis des thermochemischen Umwandlungsprozesses von Kunststoff zu erlangen, soll eine CFD-Simulation für die Erheizungs- und Pyrolyseprozesse eines einzelnen Partikels aus nicht-schmelzendem Kunststoff (Duroplast) durchgeführt werden. Für die Simulationen werden verfügbare numerische Werkzeuge verwendet, die die mehrphasigen (Feststoff-Gas) Wechselwirkungen, den Wärme- und Stofftransport sowie die Pyrolysereaktionen behandeln. Das Modell löst die grundlegenden Bilanzgleichungen, um die Temperaturen der festen (porenfrei) und gasförmigen Phase sowie die Umsatzrate des Kunststoffes zu bestimmen. Die Simulation der Kunststoffpyrolyse soll im Temperaturbereich bis 600 °C mit verschiedenen Aufheizraten durchgeführt werden. Der Einfluss der Aufheizrate sowie der Betriebstemperatur des Reaktors auf die Umsatzrate und die Produktausbeute in Bezug auf die Gaszusammensetzung (CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub> und C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>) wird überwacht und analysiert. Die erforderlichen thermodynamischen Eigenschaften der Primärkunststoffe sowie die Parameter für eine mehrstufige komplexe Reaktionskinetik des Crackens von Kunststoffen werden durch vorhandene Messungen am ITC und Literaturdaten bereitgestellt. Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit bestehenden Messungen aus der thermogravimetrischen Analyse (TGA) dient als Grundlage für die weitere Optimierung des Modellierungswerkzeugs. Die Arbeit umfasst die folgenden Schritte:

1. Literaturrecherche und Einarbeiten in die benötigten Programmtools.
2. Erstellung des Rechengebiets und des Rechengitters.
3. Durchführung der Simulationen auf den Hochleistungsrechnern am SCC/KIT.
4. Darstellung und Auswertung der Ergebnisse, Vergleich mit vorhandenen Daten.
5. Zusammenfassung der Arbeit und Präsentation.

**Sprache:** Englisch oder Deutsch  
**Arbeitsbeginn:** Ab sofort bzw. nach Vereinbarung  
**Aufgabensteller:** Prof. Dr.-Ing. Dieter Stapf  
**Betreuer:** Dr.-Ing. Salar Tavakkol  
 E-Mail: [salar.tavakkol@kit.edu](mailto:salar.tavakkol@kit.edu)