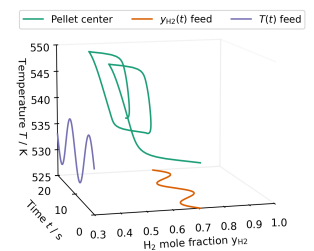
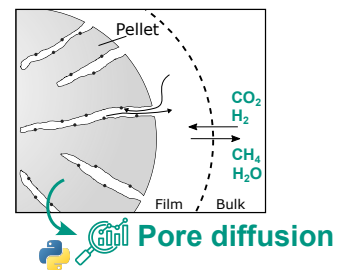


Masterarbeit

Dynamische Modellierung der CO₂-Methanisierung im katalytischen Einzelpartikel

Motivation

Im Zuge der Energiewende nimmt die Methanisierung, im Besonderen beim Power-to-Gas Verfahren, eine zentrale Rolle ein. Dabei wird Kohlenstoffdioxid mit grünem Wasserstoff katalytisch zu Methan umgesetzt, zumeist in einem gekühlten Festbettreaktor. Der dynamische Betrieb solcher Reaktoren wird zunehmend wichtig und erfordert Kenntnisse der Systemdynamiken auf der Reaktor- als auch der Partikelskala. Letztere wird in neu entwickelten Laborreaktoren für Einzelpartikel untersucht. Hierfür wird eine rigorose Modellierung der Reaktions-Diffusions-Prozesse benötigt. Im Rahmen dieser Arbeit soll ein bestehendes, transientes 1D-Modell für die Methanisierung weiterentwickelt werden, das im Pellet die Porendiffusion anhand eines geeigneten Diffusionsmodells detailliert abbildet.



Aufgaben

- I. Erweiterung eines bestehenden dynamischen Einzelpartikelmodells durch ein geeignetes Porendiffusionsmodell für Mehrkomponentendiffusion.
- II. Implementierung geeigneter Reaktionskinetiken.
- III. Auswertung und Visualisierung der Simulationsergebnisse.

Anforderungsprofil

- Sehr gute Kenntnisse der Reaktionstechnik und Transportphänomene in Katalysatoren.
- Kenntnisse in der Programmierung mit Python hilfreich aber nicht erforderlich.
- Kenntnisse im Bereich Numerik hilfreich aber nicht erforderlich.

Beginn der Arbeit: ab Feb. 2025

Dauer der Arbeit: 6 Monate

Arbeitsweise: theoretisch

Anmerkungen: Mobiles Arbeiten möglich

Kontakt:

Philipp Reinold

philipp.reinold@kit.edu

Tel.: +49 721 608 45426