

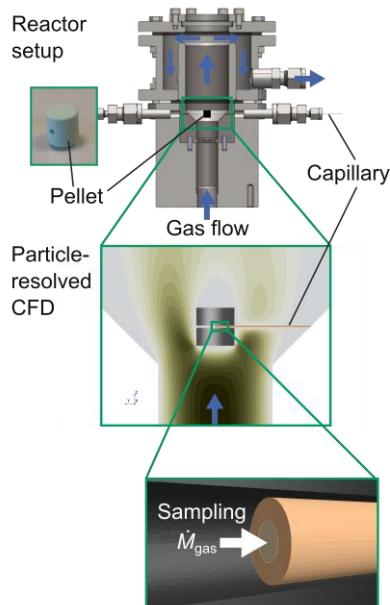
Masterarbeit

Untersuchung des Einflusses der Probekapillare in Einzelpartikel-Profilreaktoren für die CO₂-Methanisierung

Motivation

Zur Untersuchung der Dynamik aus gekoppelter Reaktion und Diffusion in porösen Katalysatoren kommen neuartige Einzelpartikel-Profilreaktoren zum Einsatz. Hierbei werden örtlich und zeitlich aufgelöste *in situ*-Messungen an einem Katalysatorpartikel durchgeführt, welches sich einzeln im Laborreaktor befindet. Im Partikel befindet sich eine Kapillare, die durch ein Bohrloch verschoben werden kann.

Ziel dieser Arbeit ist es, mittels eines 3D partikel-aufgelösten strömungsmechanischen (PRCFD) Modells den Einfluss des Bohrloches und der Kapillare auf Konzentrations- und Temperaturfelder zu quantifizieren. Hierfür wird ein systematischer Simulationsplan entworfen und anschließend stationäre und transiente Simulationen zur CO₂-Methanisierung durchgeführt und ausgewertet.



Aufgaben

- I. Entwurf eines Simulationsplans (DoE) zur systematischen Untersuchung des Einflusses der Kapillare für unterschiedliche Betriebsbedingungen.
- II. Entwicklung eines partikel-aufgelösten CFD-Modells für die betrachteten Fälle mit STAR-CCM+ und geeigneter Kinetik zur Methanisierung.
- III. Auswertung und Visualisierung der Simulationsergebnisse.

Anforderungsprofil

- Gute Kenntnisse in der Reaktionstechnik und heterogenen Katalyse (CVT-Vertiefung).
- Kenntnisse in numerischer Strömungsmechanik (CFD) hilfreich aber nicht erforderlich.
- Kenntnisse in der Programmierung mit Python hilfreich aber nicht erforderlich.

Beginn der Arbeit: ab sofort

Dauer der Arbeit: 6 Monate

Arbeitsweise: theoretisch

Anmerkungen: Mobiles Arbeiten möglich

Kontakt:

Philipp Reinold

philipp.reinold@kit.edu

Tel.: +49 721 608 45426

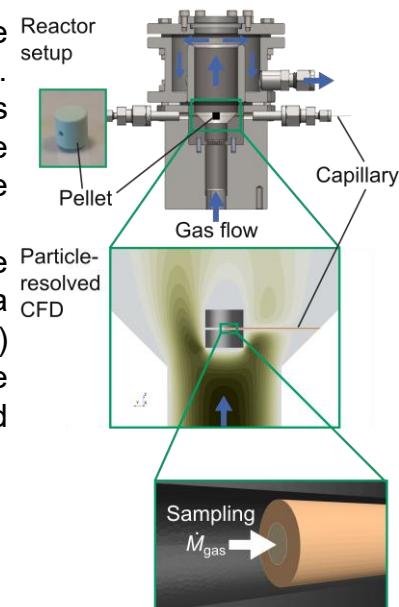
Master's thesis

Investigating the Influence of the Sampling Capillary in Single Pellet Profiling Reactors for CO₂ Methanation

Motivation

Novel single-particle profile reactors are used to investigate the dynamics of coupled reaction and diffusion in porous catalysts. Here, spatially and temporally resolved in situ measurements are performed on a catalyst particle located individually in the laboratory reactor. The particle contains a capillary that can be moved within a borehole for local measurements.

The aim of this work is to quantify the influence of the borehole and the capillary on concentration and temperature fields using a 3D particle-resolved computational fluid dynamics (PRCFD) model. For this purpose, a systematic simulation plan will be designed prior to performing and evaluating steady-state and transient simulations for CO₂ methanation.



Tasks

- I. Design of a Simulation Plan (DoE) to systematically investigate the influence of the capillary over a range of operating conditions.
- II. Development of a 3D particle-resolved CFD model in STAR-CCM+ using suitable methanation kinetics.
- III. Evaluation and visualization of the simulation results.

Requirements

- Good knowledge in the fields of reaction engineering and heterogeneous catalysis.
- Prior knowledge in numerical fluid mechanics (CFD) preferred but not required.
- Programming skills with Python/MATLAB helpful but not mandatory.

Project start: as of now

Duration: 6 months

Type of work: theoretical

Notes: remote work partially possible

Contact:

Philipp Reinold

philipp.reinold@kit.edu

Tel.: +49 721 608 45426