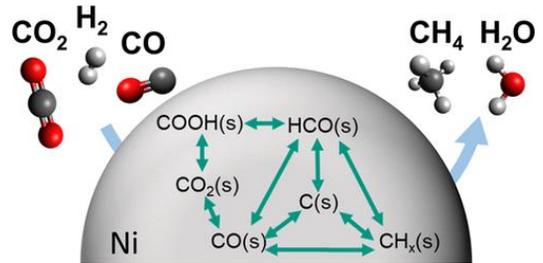


Masterarbeit

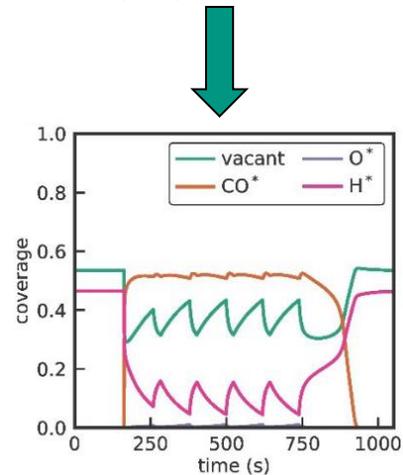
Thema: Untersuchung des Einflusses von Mikrokinetiken auf die dynamische Modellierung der CO₂-Methanisierung

Motivation

Die katalytische CO₂-Methanisierung ist eine Schlüsseltechnologie im Rahmen der Energiewende: Sie ermöglicht es, erneuerbaren Strom über Power-to-Gas-Prozesse in speicherbares Methan zu überführen. Hierfür gewinnen dynamische Betriebsweisen von Reaktoren zunehmend an Bedeutung. Herkömmliche, auf LHHW-Kinetik basierende Modelle stoßen bei dynamischen Lastwechseln allerdings an ihre Grenzen, da sie stationäre Oberflächenbedeckungen voraussetzen und transiente Effekte nicht ausreichend abbilden. Ziel dieser Masterarbeit ist es, ein mikrokinetisches Modell in ein bestehendes Reaktormodell zu implementieren, das die dynamischen Oberflächenprozesse realitätsnah erfasst und so die Optimierung und Auslegung von Mikroreaktoren für die Methanisierung unter aufgeprägter Dynamik ermöglicht.



D. Schmider et al., *Industrial & Engineering Chemistry Research* 60, Nr. 16, 2021



B. Kreitz et al., *ChemCatChem* 14, Nr. 18, 2022

Aufgaben

- I. Implementierung einer Mikrokinetik in ein Reaktormodell in Python/CasADi
- II. Simulation von dynamischen Betriebsbedingungen und Validierung der Ergebnisse
- III. Vergleichende Simulationen zwischen LHHW-Kinetiken und der implementierten Mikrokinetik

Anforderungsprofil

- Sehr gute Kenntnisse der Reaktionstechnik und heterogener Katalyse
- Kenntnisse in der Programmierung mit Python hilfreich aber nicht erforderlich
- Kenntnisse im Bereich Numerik hilfreich aber nicht erforderlich

Beginn der Arbeit: ab sofort

Dauer der Arbeit: 6 Monate

Arbeitsweise: theoretisch

Anmerkungen: Mobiles Arbeiten möglich. Betreuung auf englisch oder deutsch möglich

Kontakt:

Alexander Schulz

Alexander.Schulz@kit.edu

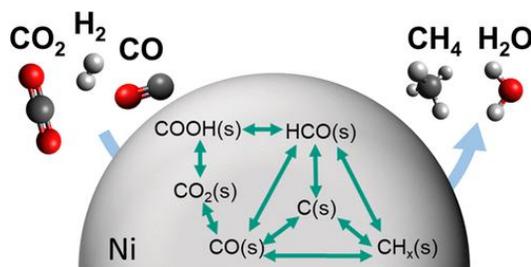
Tel. : +49 721 608-46115

Master's Thesis

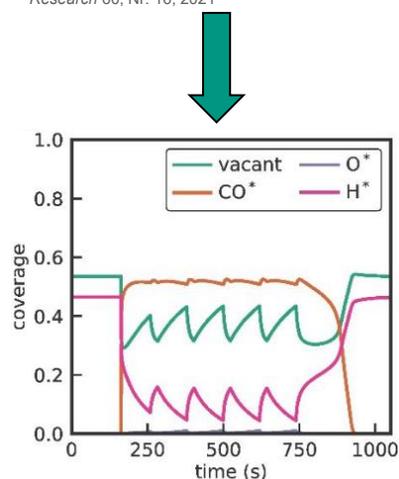
Topic: Investigation of the Influence of Microkinetic Mechanisms on the Dynamic Modeling of CO₂-Methanation

Motivation

Catalytic CO₂ methanation is a key technology for sector coupling in the energy transition: it enables the conversion of renewable electricity into storable methane via power-to-gas processes. Dynamic operating modes of reactors are becoming increasingly important for this purpose. However, conventional models based on LHHW kinetics reach their limits under dynamic load changes, since they assume steady-state surface coverages and do not adequately capture transient effects. The aim of this master's thesis is to implement a microkinetic model into an existing reactor model that realistically represents dynamic surface processes and thus enables the optimization and design of microreactors for methanation under imposed dynamic conditions.



D. Schmider et al., *Industrial & Engineering Chemistry Research* 60, Nr. 16, 2021



B. Kreitz et al., *ChemCatChem* 14, Nr. 18, 2022

Tasks

- I. Implement a microkinetic model into a reactor model using Python/CasADi
- II. Simulate dynamic operating conditions and validate the simulation results
- III. Perform comparative simulations between conventional LHHW kinetics and the implemented microkinetic

Requirements

- Excellent knowledge of reaction engineering and heterogeneous catalysis
- Python programming skills beneficial but not required
- Experience with numerical methods beneficial but not required

Start Date: As of now

Duration: 6 Months

Working mode: Theoretical

Notes: Remote work possible. Supervision possible in english or german language

Contact:

Alexander Schulz

Alexander.Schulz@kit.edu

Tel. : +49 721 608-46115