

PtX-MeOH-CFD

Multiskalige CFD-Modellierung und experimentelle Validierung der Methanolsynthese in Festbettreaktoren

Programm / Ausschreibung	Dissertationen FH OÖ, Dissertationsprogramm FH OÖ, Dissertationsprogramm der FH OÖ 2026	Status	laufend
Projektstart	11.01.2027	Projektende	10.01.2030
Zeitraum	2027 - 2030	Projektlaufzeit	37 Monate
Barwert der Projektförderung	€ 120.000		
Keywords	Methanolsynthese; Power-to-X; Computational Fluid Dynamics (CFD); Festbettreaktor		

Projektbeschreibung

Derzeit wird der überwiegende Teil des weltweit produzierten Methanols aus fossilen Rohstoffen hergestellt und primär als Ausgangsstoff in der chemischen Industrie eingesetzt. Wird Methanol hingegen aus abgeschiedenem CO₂ und grünem Wasserstoff synthetisiert, kann es zusätzlich als Träger und Speicher erneuerbarer Energie fungieren und somit einen wichtigen Beitrag zur Energiewende leisten.

Industriell erfolgt die Methanolsynthese üblicherweise in Festbettreaktoren. Die Auslegung und der Betrieb solcher Reaktoren erfordern ein detailliertes Verständnis des Zusammenspiels von Strömung, Wärme- und Stofftransport sowie heterogener Katalyse. Der Stand der Technik basiert jedoch häufig auf vereinfachten Reaktormodellen und globalen kinetischen Ansätzen, die lokale Effekte innerhalb der Katalysatorschüttung nur unzureichend erfassen. Hochaufgelöste CFD-Modelle in Kombination mit detaillierten mikrokinetischen Reaktionsmechanismen bieten zwar das Potenzial für eine deutlich genauere Beschreibung, sind jedoch aufgrund ihres hohen Rechenaufwands bislang nur eingeschränkt praktikabel. Ziel dieses Dissertationsprojekts ist die Entwicklung eines Modellierungsansatzes für die Methanolsynthese aus CO₂ und H₂, der eine konsistente und zugleich effiziente Beschreibung der relevanten physikalisch-chemischen Prozesse von der Katalysatorpartikel- bis zur Reaktorebene ermöglicht. Hierzu werden zunächst partikel aufgelöste CFD-Modelle eines Laborreaktors in unterschiedlichen Detaillierungsstufen entwickelt. Parallel dazu werden experimentelle Daten am Laborreaktor generiert, die zur Validierung der Simulationen herangezogen werden. Durch den systematischen Vergleich von Simulation und Experiment soll ermittelt werden, welche Modellierungstiefe erforderlich ist, um die Methanolsynthese im Reaktor realitätsnah abzubilden.

Ein weiterer Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der Frage ob und wie stark die Rechendauer von CFD-Modellen mit detaillierter Mikrokinetik durch den Einsatz physikbasierter maschineller Lernverfahren beschleunigt werden kann. Darüber hinaus wird der Einfluss von Katalysatorstruktur und Pelletgeometrie auf Transportphänomene und Reaktionsverhalten analysiert.

Die gewonnenen Erkenntnisse dienen als Grundlage für die Entwicklung reduzierter Modellansätze in Form von porösen Medium-Modellen, die eine effiziente Simulation industriell relevanter, auch dynamischer Betriebszustände- wie Lastwechsel

oder Startvorgänge – ermöglichen.

Das Projekt liefert sowohl grundlegende Erkenntnisse zum Zusammenspiel von Transport- und Reaktionsprozessen in heterogenen Katalysereaktoren als auch methodische Ansätze zur effizienten Simulation komplexer Systeme. Die Ergebnisse tragen zur verbesserten Auslegung und Optimierung von Methanolsyntheseprozessen bei und leisten damit einen Beitrag zur Entwicklung nachhaltiger chemischer Produktionsverfahren sowie zur Umsetzung der Energiewende.

Abstract

Currently, the vast majority of methanol produced worldwide is derived from fossil raw materials and is primarily used as a feedstock in the chemical industry. If, however, methanol is synthesised from captured CO₂ and green hydrogen, it can also serve as a carrier and storage medium for renewable energy, thereby making a significant contribution to the energy transition.

On an industrial scale, methanol synthesis is typically carried out in fixed-bed reactors. The design and operation of such reactors require a detailed understanding of the interaction between flow, heat and mass transfer, and heterogeneous catalysis. However, the state of the art is often based on simplified reactor models and global kinetic approaches, which do not adequately capture local effects within the catalyst bed. Although high-resolution CFD models combined with detailed microkinetic reaction mechanisms offer the potential for a significantly more accurate description, they have so far been of limited practical use due to their high computational cost.

The aim of this PhD project is to develop a modelling approach for methanol synthesis from CO₂ and H₂ that enables a consistent yet efficient description of the relevant physico-chemical processes, from the catalyst particle level down to the reactor level. To this end, particle-resolved CFD models of a laboratory reactor will first be developed at various levels of detail. In parallel, experimental data will be generated on the laboratory reactor, which will be used to validate the simulations. Through the systematic comparison of simulation and experiment, the aim is to determine the level of modelling detail required to realistically represent methanol synthesis in the reactor.

Another part of the work addresses the question of whether and to what extent the computation time of CFD models with detailed microkinetics can be accelerated through the use of physics-based machine learning methods.

In addition, the influence of catalyst structure and pellet geometry on transport phenomena and reaction behaviour is analysed.

The findings obtained to date serve as the basis for the development of reduced-order models in the form of porous medium models, which enable the efficient simulation of industrially relevant operating conditions – including dynamic ones such as load cycling or start-up procedures.

The project provides both fundamental insights into the interaction of transport and reaction processes in heterogeneous catalytic reactors and methodological approaches for the efficient simulation of complex systems. The results contribute to the improved design and optimisation of methanol synthesis processes, thereby supporting the development of sustainable chemical production processes and the implementation of the energy transition.

Projektpartner

- FH OÖ Forschungs & Entwicklungs GmbH