



**TUBAF**  
Die Ressourcenuniversität.  
Seit 1765.



## **Studienarbeit**

# **Vergleich von Reaktornetzwerk- modellen für die nichtkatalyti- sche Partialoxidation von Erdgas**

TU Bergakademie Freiberg

vorgelegt von

**Erik Domogalla**

Matrikel: 67 470

Prüfer:

Prof. Dr. Andreas Richter  
Gabriel Gonzales Ortiz

Studiengang:

Diplom Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen

Tag der Einreichung:

4. August 2025

# Inhaltsverzeichnis

<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>iii</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 theoretische Grundlagen</b>	<b>2</b>
2.1 Chemische Prozesse . . . . .	2
<b>3 Vergleich von Reaktionsmechanismen</b>	<b>3</b>
3.1 Überblick der Reaktionsmechanismen . . . . .	3
3.2 Simulationen . . . . .	4
3.2.1 Simulation ohne CO <sub>2</sub> . . . . .	4
3.2.2 Simulation mit CO <sub>2</sub> . . . . .	6
3.2.3 Wahl des Reaktionsmechanismus . . . . .	8
<b>Quellenverzeichnis</b>	<b>9</b>

# Abbildungsverzeichnis

3.1	Darstellung der Stoffmengenanteile Wasserstoff und Methan für die Simulation ohne $\text{CO}_2$ . . . . .	5
3.2	Darstellung der Stoffmengenanteile Wasserstoff und Methan für die Simulation mit $\text{CO}_2$ . . . . .	7

# 1 Einleitung

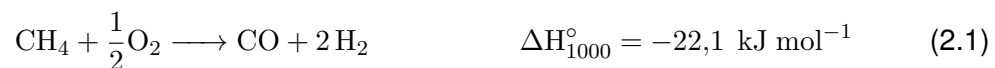
Hier steht ne super Einleitung

## 2 theoretische Grundlagen

### 2.1 Chemische Prozesse

Die Partielle Oxidation (POx) ist ein thermochemischer Prozess zur Umwandlung von Kohlenwasserstoffen in Synthesegas, welches hauptsächlich aus Wasserstoff ( $\text{H}_2$ ) sowie Kohlenstoffmonoxid (CO) besteht. Im Gegensatz zur vollständigen Oxidation (Verbrennung) wird bei der partiellen Oxidation gezielt eine Reaktion unter Sauerstoffmangel herbeigeführt.

Gleichung (2.1) beschreibt die partielle Oxidation von Methan [1].



Darüber hinaus können folgende Nebenreaktionen auftreten, welche die Wasserstoffausbeute senken können:



Zusätzlich kann die Wassergas-Shift-Reaktion auftreten:



## 3 Vergleich von Reaktionsmechanismen

### 3.1 Überblick der Reaktionsmechanismen

Als Grundlage der Modellierung chemischer Reaktionen nutzt Chemkin Datensätze für Reaktionsmechanismen. Es gibt verschiedene Datensätze, welche sich in der Anzahl von Spezies sowie Reaktionen unterscheiden. In Tabelle 3.1 sind die in dieser Arbeit genutzten Reaktionsmechanismen aufgelistet.

Reaktionsmechanismus	Anzahl Spezies	Anzahl Reaktionen
ATR (in-house)	28	112
GRI3.0	53	325
Aramco2.0	581	3037
NUIG1.1	2746	11270

Tabelle 3.1: Überblick über Anzahl der Spezies sowie Reaktionen verschiedener Reaktionsmechanismen

#### ATR

ATR (autothermal reforming)

#### GRI-Mech 3.0

GRI-Mech 3.0 ist ein Mechanismus, der für die Verbrennung von Erdgas entwickelt wurde. Dabei berücksichtigt das Modell sowohl die Bildung von Stickoxiden (NO) als auch Nachverbrennungsreaktionen [2].

#### AramcoMech 2.0

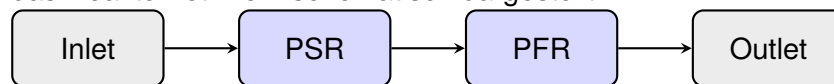
AramcoMech 2.0 wurde entwickelt, um eine große Anzahl an kurzkettigen Kohlenwasserstoffen  $C_1$  bis  $C_4$  zu charakterisieren. Entwickelt wurde das Modell von der Universität Galway, finanziert wurde es von Saudi Aramco [3].

#### **NUIGMech1.1**

NUIGMech1.1 ist ein sehr umfangreicher Reaktionsmechanismus, welcher umfassend validiert wurde - unter anderem für die Oxidation von  $C_1$  -  $C_2$  Kohlenwasserstoffen, Erdgasgemischen, Propan/Propen-Gemischen. Propin, Isobuten sowie für die Autozündung und Pyrolyse von  $C_2$  bis  $C_6$  Alkenen [4].

## **3.2 Simulationen**

Für den Vergleich der Reaktionsmechanismen wurde ein einfaches Reaktornetzwerk, bestehend aus einem PSR und einem PFR durchgeführt. In diesem Reaktornetzwerk stellt der PSR die Flammzone dar, der PFR die Nachbrennzone. In Abbildung 3.2 ist das Reaktornetzwerk schematisch dargestellt.



#### **3.2.1 Simulation ohne $CO_2$**

Über die Länge der Nachbrennzone lassen sich die Stoffmengenanteile aufteilen. In Abbildung 3.1 sind beispielsweise die Stoffmengenanteile von Wasserstoff und Methan dargestellt.

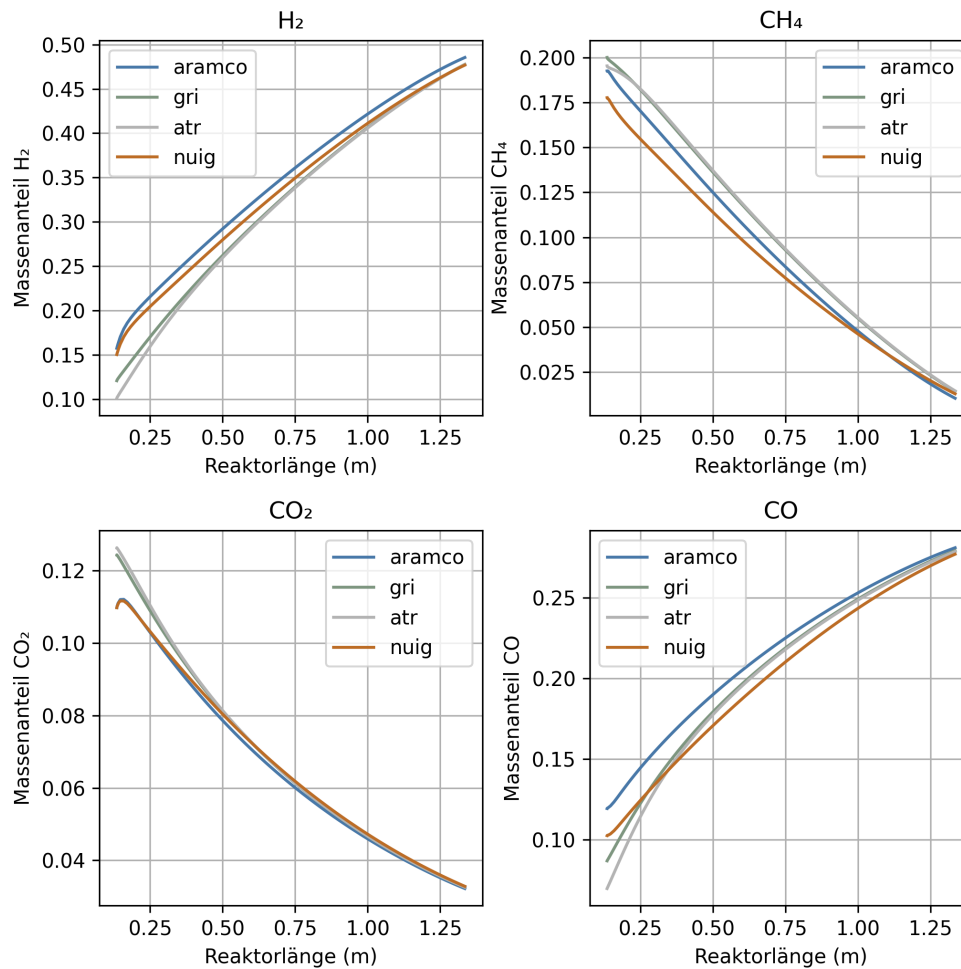


Abbildung 3.1: Darstellung der Stoffmengenanteile Wasserstoff und Methan für die Simulation ohne CO<sub>2</sub>

Zwar zeigen sich kleine Unterschiede für die verschiedenen Reaktionsmechanismen, allerdings ähnelt sich der Verlauf immer stark. So ist die berechnete Zusammensetzung des Abgases annähernd identisch. In Tabelle 3.2 sind die Ergebnisse der Simulationen sowie die experimentell vorliegenden Daten dargestellt. Dabei handelt es sich um trockengas, bei dem Wasserdampf entfernt worden ist.



Tabelle 3.2: Vergleich der Modell- und Experimentalwerte der Molenbrüche ohne CO<sub>2</sub>-Zugabe

	<b>Exp.</b>	<b>GRI</b>	<b>ARAMCO</b>	<b>ATR</b>	<b>NUIG</b>
<b>H<sub>2</sub></b> [Vol.-%]	0,599	0,594	0,600	0,594	0,596
<b>CO</b> [Vol.-%]	0,341	0,347	0,347	0,347	0,346
<b>CH<sub>4</sub></b> [Vol.-%]	0,007	0,018	0,013	0,018	0,016
<b>CO<sub>2</sub></b> [Vol.-%]	0,048	0,041	0,040	0,041	0,041

Die erhaltenen Werte weisen eine hohe Ähnlichkeit zu den experimentell ermittelten Werten auf, wobei es jedoch leichte Abweichungen beim Methan und Kohlenstoffdioxid gibt.

#### 3.2.2 Simulation mit CO<sub>2</sub>

Analog zur Simulation ohne CO<sub>2</sub> werden die Stoffe über die Länge der Nachbrennzone analysiert (siehe Abbildung 3.2).

### 3 Vergleich von Reaktionsmechanismen

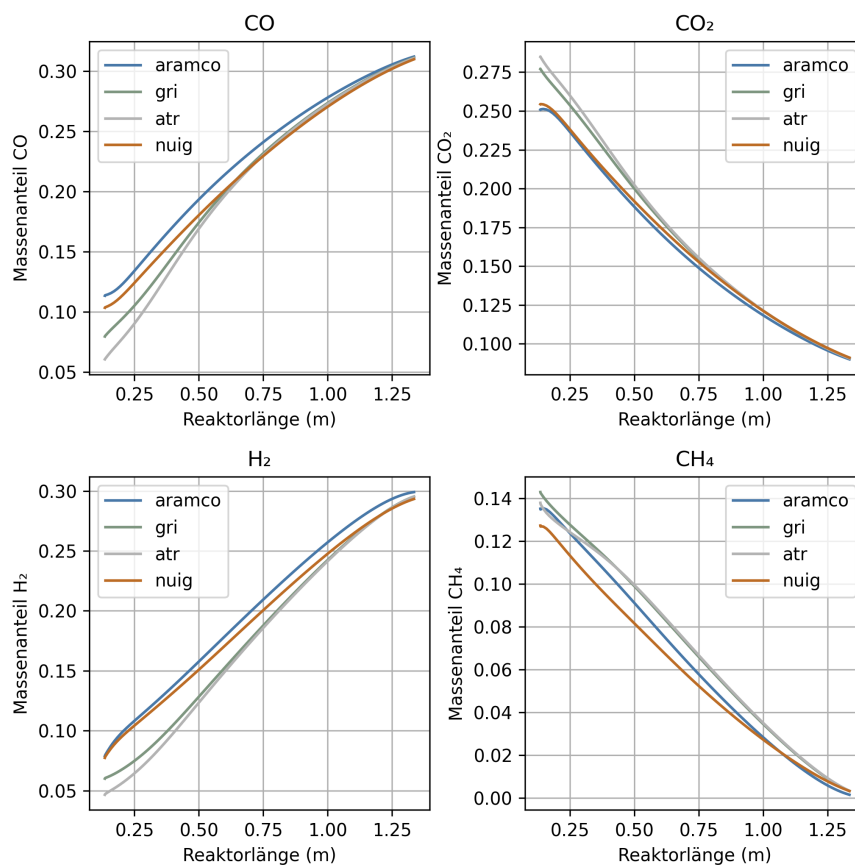


Abbildung 3.2: Darstellung der Stoffmengenanteile Wasserstoff und Methan für die Simulation mit CO<sub>2</sub>

Auch hier zeichnet sich ein ähnliches Bild. Die Verläufe sind alle sehr ähnlich und führen zu sehr ähnlichen Abgaszusammensetzungen. In Tabelle sind die berechneten Stoffmengenanteile sowie die experimentell ermittelten Daten dargestellt (wie in Tabelle 3.2).

Tabelle 3.3: Vergleich der Modell- und Experimentalwerte der Molenbrüche mit CO<sub>2</sub>-Zugabe

	Exp.	GRI	ARAMCO	ATR	NUIG
<b>H<sub>2</sub></b> [Vol.-%]	0,4160	0,4215	0,4255	0,4217	0,4204
<b>CO</b> [Vol.-%]	0,4240	0,4444	0,4443	0,4440	0,4444
<b>CH<sub>4</sub></b> [Vol.-%]	0,0012	0,0047	0,0022	0,0049	0,0048
<b>CO<sub>2</sub></b> [Vol.-%]	0,1510	0,1293	0,1280	0,1294	0,1305

Auch hier zeigt sich, dass das simulierte Abgas eine hohe Ähnlichkeit mit den experi-

mentellen Daten aufweist

#### **3.2.3 Wahl des Reaktionsmechanismus**

GriMech

# Quellenverzeichnis

- [1] C.R.H. Smet, de. "Partial oxidation of methane to synthesis gas : reaction kinetics and reactor modelling". English. Phd Thesis 1 (Research TU/e / Graduation TU/e). Chemical Engineering und Chemistry, 2000. ISBN: 90-386-2921-4. doi: 10.6100/IR535178.
- [2] Gregory P. Smith u. a. *Gri-Mech*. 19. Juni 2025. URL: [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/).
- [3] University of Galway. *AramcoMech 2.0*. 19. Juni 2025. URL: <https://www.universityofgalway.ie/combustionchemistrycentre/mechanismdownloads/aramcomech20/>.
- [4] Sergio Martinez u. a. "An experimental and kinetic modeling study of the ignition delay characteristics of binary blends of ethane/propane and ethylene/propane in multiple shock tubes and rapid compression machines over a wide range of temperature, pressure, equivalence ratio, and dilution". In: *Combustion and Flame* 228 (2021), S. 401–414. ISSN: 0010-2180. doi: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.02.009>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218021000729>.