



Forschungsbericht 2023

Institut für Verfahrenstechnik

INSTITUT FÜR VERFAHRENSTECHNIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg Tel. 49 (0)391 67 58783, Fax 49 (0)391 67 42762 berend.vanwachem@ovgu.de

1. LEITUNG

Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel

Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl

Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem (geschäftsführender Leiter)

2. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl

Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem

Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel Jun.-Prof. Dr.-Ing. Fabian Denner

apl. Prof. Dr. rer. nat. habil. Heike Lorenz

Hon.-Prof. Dr.-Ing. Mirko Peglow
PD Dr. rer. nat. habil. Yvonne Genzel
PD Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani

3. FORSCHUNGSPROFIL

- 1. Chemische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. C. Hamel)
 - Untersuchung heterogen katalysierter Reaktionen
 - Kopplung von Reaktion und Stofftrennung
 - Membranreaktoren
 - Chromatographische Trennverfahren
 - Enantiomerentrennung
- 2. Bioprozesstechnik (Prof. Dr.-Ing. U. Reichl)
 - Fermentationstechnik
 - Säugerzellen, Hefen, Bakterien
 - Aufarbeitungstechnik
 - Modellierung, Simulation und Optimierung von Bioprozessen
 - Prozessüberwachung und -regelung

- Metaproteomics mikrobieller Gemeinschaften
- 3. Mechanische Verfahrenstechnik (Prof. Dr. Ir. B. van Wachem)
 - Partikeltechnologie
 - Mehrphasenströmungen
 - Numerische Mechanik
- 4. Mehrphasenströmungen (Prof. Dr.-Ing. habil. M. Sommerfeld)
 - Mehrphasenströmungen
 - Partikeltechnologie
 - Numerische Mechanik
- 5. Systemverfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. K. Sundmacher)
 - Modellgestützte Analyse, Synthese und Optimierung komplexer verfahrenstechnischer Prozesssysteme
 - Neue Methoden für die Prozesssynthese
 - Nachhaltige chemische Produktionsverfahren
 - Prozesse der chemischen Energiewandlung
 - Elektrochemische Prozesse
 - Algen-Biotechnologie
 - Synthetische Biosysteme
- 6. Thermische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. E. Tsotsas)
 - Trocknungstechnik
 - Wirbelschichttechnik
 - Partikelformulierung (Agglomeration, Granulation, Coating)
 - Strukturelle Charakterisierung (u.a. X-ray micro-CT)
 - Diskrete Modellierung (u.a. Porennetzwerke)

4. KOOPERATIONEN

- AstraZeneca GmbH, Wedel
- AVA Anhaltinische Verfahrens- und Anlagentechnik GmbH, Magdeburg
- BASF AG, Ludwigshafen
- Department of Mechanical Engineering der Universität Delaware (USA)
- Evonik AG, Hanau
- Fraunhofer IFF, Magdeburg
- Glatt Ingenieurtechnik Weimar
- Helmholtz-Zentrum für Infektionsforschung, Braunschweig
- IDT Biologika GmbH, Dessau-Roßlau
- Instituto de Biologia Experimental e Tecnológica, Lissabon (Portugal)
- IPT Pergande, Weißandt-Gölzau
- Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg
- Petrobras, Rio de Janeiro (Brasilien)
- Politechnico di Milano, Italien
- ProBioGen AG, Berlin
- Sartorius Stedim Biotech GmbH, Göttingen
- Shell, Den Haag (Niederlande)
- TU Berlin

- TU Dortmund
- TU Hamburg-Harburg
- Weierstraß-Institut, Berlin

5. FORSCHUNGSPROJEKTE

Projektleitung: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.07.2020 - 14.07.2023

Akustisch getriebene Wolkenkavitation beschichteter Mikroblasen

Akustische Kavitation, d.H. das druckgetriebene Verhalten von Blasen in einer flüssigen Umgebung, wird in einer Vielzahl von technischen Anwendungen, die von Ultraschallreinigung bis zu beschichteten Mikroblasen als Ultraschallkontrastmittel (UKM) in der medizinischen Bildgebung reichen, eingesetzt. Insbesondere die akustische Kavitation von UKM-Mikroblasen, die mit einer Phospholipid-Einzelschicht oder Proteinschicht benetzt sind, hat zu einer stetig wachsenden Anzahl diagnostischer und therapeutischer biomedizinischer Anwendungen geführt, einschließlich der gezielten Arzneimittelverabreichung und neuartiger Krebsbehandlungen. Trotz eines umfangreichen Fundus an Literatur über die akustische Kavitation von Mikroblasenwolken gibt es nach wie vor noch kein umfassendes Verständnis des Verhaltens von Wolken von beschichteten Mikroblasen in einem akustischen Feld. Insbesondere ein detailliertes Verständnis der Druck-, Geschwindigkeits- und Temperaturverteilung als Ergebnis des Kollapses der Blasenwolke ist für die Sicherheit und den Erfolg der Behandlung in biomedizinischen Anwendungen von entscheidender Bedeutung, wurde jedoch noch nicht systematisch untersucht. Vor diesem Hintergrund sind die Hauptziele des vorgeschlagenen Projekts (i) eine detaillierte Analyse des Drucks und der Temperatur in der Nähe kollabierender Mikroblasenwolken und (ii) ein umfassender Vergleich der akustischen Wolkenkavitation von unbeschichteten und beschichteten Mikroblasen, was gemeinsam den Grundstein für eine sicherere und effizientere Nutzung der akustischen Kavitation in biomedizinischen Anwendungen legen wird. Um diese Forschung zu ermöglichen, werden wir im Rahmen eines Euler-Lagrange-Algorithmus neue numerische Berechnungsmethoden entwickeln, die den Stand der Technik erweitern, indem aktuelle Einschränkungen hinsichtlich der Blasengröße beseitigt und die Temperaturvorhersage in Flüssigkeiten erheblich verbessert werden. Insbesondere für biomedizinische Anwendungen erwarten wir, dass solche numerische Methoden ein wertvolles Forschungsinstrument darstellen, das Experimente ergänzen kann.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel, Dr.-Ing. Klaus-Peter Kalk, Dr.-Ing. Martin

Gerlach, M.Sc. Adrian Baum

Kooperationen: Leuna-Harza GmbH Leuna

Förderer: Industrie - 01.10.2023 - 30.09.2026

Experimentelle und modellbasierte Studien zur Hydrochlorierung von Glycerin zu Dichlorhydrin

Im Projekt soll die Synthese der Hydrochlorierung von Glycerin zu Dichlorhydrin experimentell und modellbasiert untersucht werden, um neue, effizientere Reaktoren zu entwickeln und den Gesamtprozess optimieren zu können. Hierfür soll zunächst eine mechanistische kinetische Modellbildung basierend auf Katalysezyklen inkl. Modellreduktion, u.a. unter Nutzung operandospektroskopischer Methoden (GC-MS, NMR, FTIR-/Raman-Spektroskopie), durchgeführt werden. Der Einfluss des Stofftransports im voligenden Mehrphasensystem bzw. dessen Berücksichtigung in der Modellierung unter Berücksichtigung realer Feeds inkl. Verunreinigungen stehen im Fokus. Neben der Kinetik erfolgt die Ermittlung thermodynamischer Daten wie Gaslöslichkeiten, Reaktionsgleichgewichte und -konstanten, Reaktionsenthalpien und Stofftransportkoeffizienten unter Nutzung von Gruppenbeitragsmethoden und Messungen im Reaktionskalorimeter RC1e.

Die kinetischen und thermodynamischen Modelle, inkl. Parameter, sollen anschließend der simulationsbasierten Auslegung neuer Reaktorkonzepte, inkl. Stofftransportmodell und unter expliziter Berücksichtigung der Wärme-/Impulsbilanzen, den Simulationsumbegungen mittels Matlab[®] und Comsol[®] zugeführt werden.

Eine experimentelle Validierung des präferierten Reaktorkonzepts unter Verwendung von Dosierstrategien sowie Berücksichtigung von Umlauf- und Rückführströmen ist vorzunehmen. Das Projekt wird durch

eine Gesamtprozessmodellierung, inkl. Rohstoffvorbereitung, Feedkonditionierung, Reaktor, nachgeschaltete Trennoperationen und Rückführströme, mittels Flow-Sheet-Simulation in AspenPlus abgeschlossen.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: M.Sc. Igor Gamm, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2023 - 30.09.2024

Kinetic description of the enzymatic depolymerization of single-grade plastic waste and product purificaion

The depolymerization of polymers by (bio)chemical methods fundamentally aims at the desired recovery processes that have repeatedly demonstrated their efficiency through high selectivity even under explicitly mild reaction conditions. Thus, the depolymerization of single-grade plastic waste with functional backbones, precisely PET and PEF, for subsequent re-synthesis will be studied together by the PIs Hamel, von Langermann und Thiele by combining enzymatic and chemical degradation routes with focus on the integrated separation and (re-) recovery of the degradation products. Novel chemo-enzymatic depolymerization routes of PET and PEF by tailor-made enzymes (PETase, cutinase, etc.) and combining kinetics and separation processes (membranes, adsorption) should be investigated.

For a preselected enzyme/solvent system from Jan von Langermann kinetic experiments will be performed with BHET and PET (Trimer) as feeds providing a profound knowledge about the reaction network which should be used for the kinetic analysis and modelling. Operando spectroscopy is applied for mixture analysis. The methods and kinetic models derived for PET will then be applied to PEV to prove their applicability. The data for PEF will be provided by Julian Thiele. The kinetic models derived for free enzymes allow to study and to suggest new reactor concepts using immobilized enzymes to improve sustainability in the group of Jan von Langermann.

Besides the depolymerization kinetics suitable separation processes and its combination should be evaluated in order to separate resulting degradation products (PET, PEV, BHET, MHET, Terephthalic acid, etc.). Therefore, feasibility, application and limits, e.g., of membrane, adsorption and SMB separation technology, will be studied.

The PIs and scientists financed by the project bring all necessary experimental/numerical methods and experience needed for a successful investigation. Based on the existing experience in each group, a first demonstration of the design procedure integrating all mentioned aspects should be presented.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: M.Sc. Jan Paul Walter, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel

Kooperationen: OHplus GmbH Staßfurt

Förderer: Industrie - 01.09.2023 - 31.08.2024

Kinetische Studien zur Synthese von Glycerincarbonat aus biobasiertem Glycerin

Durchführung von experimentellen und modellbasierten kinetischen Studien zur heterogen katalysierten Umsetzung von biobasiertem Glycerin mit CO_2 zu Glycerincarbonat. Stoffliche Fixierung von CO_2 . Potentialbewertung und Machbarkeitsstudien.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel, Dr.-Ing. Leo Alvarado Perea

Kooperationen: Universidad Autónoma de Zacatecas (UAZ), Mexico

Förderer: Deutscher Akademischer Austauschdienst e.V. (DAAD) - 08.10.2023 - 07.01.2024

Improvement of selective oxidations of green methanol and propane on VOx based catalysts for the production of sustainable, valuable chemical products including deactivation-regeneration studies

This project aims to support the continuation of a success cooperation between the Chair for Chemical Process Engineering at OvGU (Prof. Christof Hamel) with Dr.-Ing. Leo Alvarado Perea who works at the Universidad Autónoma de Zacatecas and at the OvGU from Magdeburg Germany.

During the time of the doctorate studies and more recently, Mr. Alvarado Perea studied a promising process to produce directly propene from ethene (2010-2021). Since then, we have had a close cooperation by working in this topic. New and novel processes for producing valuable chemical products are subject of study and still being new cooperation opportunities. One of the questions that have motivated these new cooperation options is the catalyst deactivation that has been reported in our previous contributions during the propene production. Thus, we present this proposal for continuing our successful cooperation by studying two new promising reactions for producing valuable products, building blocks and platform chemicals.

- a) The coupled oxidative and thermal dehydrogenation of propane using $VOx-Al_2O_3$ based catalysts, taking into account catalyst deactivation by coking and periodically regeneration, as bridging technology in chemical industry.
- b) The selective oxidation of bio-based methanol to methylformate (MF), dimethylether (DME) and dimethoxymethane (DMM) as potential green platform chemicals using VOx/TiO_2 catalytic systems.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: B.Sc. Lisa Sommer, Dr.-Ing. Martin Gerlach, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel

Kooperationen: Cargill Deutschland GmbH

Förderer: Industrie - 01.09.2023 - 31.12.2023

Untersuchungen zur Umsetzung biogener Reststoffe aus der Produktion zu Methan

Experimentelle Untersuchung der fermentativen Umsetzung verschiedener biogener Reststoffe im Bereich der Weizenstärkeverarbeitung zu Methan mit dem Ziel der Erdgasreduktion und Erhöhung der Prozesseffizienz. Analyse und Bewertung der Gaszusammensetzung und Nebenprodukte.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: M.Sc. Tobias Fritsche, Dr.-Ing. Martin Gerlach, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel

Förderer: Industrie - 01.09.2023 - 31.12.2023

Syntheseoptimierung zur Selektivitätssteuerung der Pyrazolreaktion

Experimentelle Untersuchung und Syntheseoptimierung zur Selektivitätssteuerung der Pyrazolreaktion mittels dynamischer Versuchsführung in Kopplung mit Dosierkonzepten. Reduktion der Nebenproduktbildung in komplexen Reaktionsnetzwerken. Minimierung von sequentiellen Aufbereitungsverfahren.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: M.Sc. Katrin Hofmann, M.Sc. Tobias Fritsche **Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt) - 01.11.2022 - 31.12.2023

Konzeptentwicklung und Koordination "Laborgestaltung - neue Anforderungen"

Konzeptentwicklung und Koordination "Laborgestaltung - neue Anforderungen" - Detail-/ Ausführungsplanung sowie Überführung von Know-how und Kompetenz zum Betrieb von lebensmitteltechnologischen bzw. verfahrenstechnischen Anlagen/Verfahren im Pilotmasstab

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: M.Sc. Tobias Fritsche, Dr.-Ing. Martin Gerlach, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel

Kooperationen: AECI Schirm Schönebeck

Förderer: Industrie - 01.04.2023 - 30.06.2023

Prozessintensivierung der Pyrazolreaktion

Durchführung und Optimierung von Synthesen der gleichgewichtslimitierten Pyrazolreaktion mit dem Ziel der signifikaten Reduktion von Reaktions- und Aufarbeitungszeiten. Durchführung thermodynamischer Berechnungen zur Gleichgewichtslage. Kinetische Modellbildung als Basis der Prozessoptimierung.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: Dipl.-Chem. Pottratz Ines, M.Sc. Hofmann Katrin, M.Sc. Müller Ines

Kooperationen: Hochschulverbundpartner: Prof. Dr.-Ing. Thomas Kleinschmidt, Hochschule An-

halt, Fachbereich BWP Lehrstuhl: Lebensmittelverfahrenstechnik, Bernburger Straße 55, 06366 Köthen; Verbundpartner "Kooperative Promotion": Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Seidel- Morgenstern Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg Institut für Verfahrenstechnik; Workingpartner: Claudia Krines, Milchwerke "Mittelelbe" GmbH, Heerener Straße 49, D- 39576 Stendal; Workingpartner: Dr. Aleš Štrancar, BIA Separations, Mirce 21, SI-5270 Ajdovšcina, Slovenia; Workingpartner: Dr. Marcus Weyd, Fraunhofer- Institut für Keramische Technologien und Systeme (IKTS) Hermsdorf,

Michael-Faraday- Straße 1, 07629 Hermsdorf

Förderer: Bund - 01.09.2018 - 31.03.2023

Kopplung von enzymatischer Synthese, Produktabtrennung und Recycling zur Prozessintensivierung der Herstellung von Präbiotika

Im Projekt soll der Schwerpunkt und die Profilbildung der Lebensmitteltechnologie an der Hochschule Anhalt weiter durch Etablierung einer Forschungsnachwuchsgruppe ausgebaut und der wissenschaftliche Nachwuchs durch Mentoring und Promotion gefördert werden. In Kooperation mit den Industriepartnern Milchwerke "Mittelelbe" GmbH, der BIA Separations GmbH, dem Fraunhofer IKTS sowie der Universität Magdeburg, an der ein kooperatives Promotionsverfahren durchgeführt wird, soll ein Verfahren zur Synthese von Präbiotika am Beispiel der Galactooligosaccharide (GOS) mittels experimenteller und modellbasierter Forschungsarbeit durch Wissens- und Technologietransfer der Partner für den preisgünstigen Rohstoff Molkenpermeat entwickelt, realisiert und optimiert werden.

Für Molkenpermeat existiert gegenwärtig keine nachhaltige Wertschöpfung. Demgegenüber besteht eine Marktnachfrage nach lactose- und glucosefreien Präbiotika für eine gesunde Ernährung. Aufgrund weniger Kooperationen bzw. Wissens-/ Technologietransfer zwischen angewandter Forschung und Industrie sowie fehlender Fokussierung auf diese Thematik in einer Forschergruppe, konnte bisher noch kein wirtschaftliches Verfahren zur Herstellung lactose- und glucosefreier Präbiotika realisiert und etabliert werden. Hier setzt das Projekt konkret an.

Das Ziel des beantragten Projekts ist die experimentelle und modellbasierte Untersuchung zweier Verfahrensstrategien zur Gewinnung und Aufreinigung von GOS aus Molkenpermeat inklusive Prozessintensivierung

durch Kopplung von Synthese, Produktabtrennung und Recycling. Hierzu werden zwei Strategien verfolgt:

- a) diskontinuierlicher, enzymatischer Prozess, Trennung des Produkts von Lactose mittels Nanofiltration inkl. Recycling
- b) kontinuierlicher Porendurchflussreaktor mit immobilisierten Enzym, SMB-Trennung inkl. Recycling.

Projektleitung: Dr.-Ing. Robert Heyer, Prof. Dr. Gunter Saake Projektbearbeitung: MSc. Daniel Micheel, MSc. Daniel Walke

Kooperationen: Gunter Saake

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2021 - 30.11.2024

Optimizing graph databases focussing on data processing and integration of machine learning for large clinical and biological datasets

Graphdatenbanken stellen eine effiziente Technik zur Speicherung und zum Zugriff auf hochgradig verknüpfte Daten unter Verwendung einer Graphstruktur dar, wie z.B. Verbindungen zwischen Messdatenzu Umweltparametern oder klinischen Patientendaten. Die flexible Knotenstruktur macht es einfach, die Ergebnisse verschiedener Untersuchungen hinzuzufügen. Dies reicht von einfachen Blutdruckmessungenüber die neuesten CTund MRT-Scans bis hin zu hochauflösenden Omics-Analysen (z.B. von Tumorbiopsien, Darmmikrobiom-Proben). Allerdings wird das volle Potenzial der Datenverarbeitung und -analyse mittelsGraphdatenbanken in biologischen und klinischen Anwendungsfällen noch nicht vollständig ausgeschöpft. Insbesondere die riesige Menge an miteinander verbundenen Daten, die geladen, verarbeitet und analysiertwerden müssen, führt zu zu langen Verarbeitungszeiten, um in klinische Arbeitsabläufe integriert werdenzu können. Um dieses Ziel zu erreichen sind neuartige Optimierungen von Graph-Operatoren sowie eine

geeignete Integration von Analyseansätzen notwendig.

Dieses Projekt zielt darauf ab, die oben genannten Probleme in zwei Richtungen zu lösen: (i) Vorschlag geeigneter Optimierungen für Graphdatenbank-Operationen, auch unter Einsatz moderner Hardware, und(ii) Integration von Algorithmen des maschinellen Lernens für eine einfachere und schnellere Analyse der biologischen Daten. Für die erste Richtung untersuchen wir den Stand der Technik von Graphdatenbanksystemen Anschließend schlagen wir Optimierungen für und deren Speicherung sowie ihr Verarbeitungsmodell. effizienteoperationale und analytische Operatoren vor. Für die zweite Richtung stellen wir uns vor, Algorithmen desmaschinellen Lernens näher an ihre Datenlieferanten - die Graphdatenbanken - heranzubringen. diesemZweck füttern wir in einem ersten Schritt die Algorithmen des maschinellen Lernens direkt mit dem Graphenals Eingabe, indem wir geeignete Graphenoperatoren entwerfen. In einem zweiten Schritt integrieren wir dasmaschinelle Lernen direkt in die Graphdatenbank, indem wir spezielle Knoten hinzufügen, die das Modell des Algorithmus für maschinelles Lernen repräsentieren. Die Ergebnisse unseres Projekts sind verbesserte Operatoren, die sowohl moderne Hardware als auch Integrationskonzepte für Algorithmen des maschinellen Lernens nutzen. Unsere allgemein entwickeltenAnsätze werden das Verarbeiten und Analysieren riesiger Graphen in einer Fülle von Anwendungsfällen überunseren angestrebten Anwendungsfall der biologischen und klinischen Datenanalyse hinaus vorantreiben.

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani

Kooperationen: Nestlé, Switzerland; Merck Group; Carbion Innovation Centre; Danone Nutricia Re-

search; International Fine Particle Research Institute

Förderer: Sonstige - 01.09.2023 - 31.08.2026

Modeling porosity development during drying of porous systems

The formation and development of pores in porous systems during drying processes are attributed to multiple adjoining and competitive mechanisms. This project seeks to develop computational models that can capture these mechanisms and can be used to reliably describe a variety of formulations and dryers, relating the final pore structure to formulation properties and process variables.

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani **Projektbearbeitung:** Dr.-Ing. Lu Xiang, MSc. Chen Jing

Förderer: Stiftungen - Sonstige - 01.06.2022 - 31.05.2026

Drying of thick porous media simulated through integrating pore network models and machine learning algorithms

A key pillar of the project is to work out an overarching methodology that jointly leverages pore network models and supervised machine learning techniques. A methodology as such will aid simulations of drying in thick porous media, but also thermo-chemical processes (such as pyrolysis) in thermally-thick particles.

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2022 - 31.10.2025

Continuum model with gas-liquid interfacial area for evaporation in porous media

The drying kinetics of porous materials is influenced by the liquid-gas interfaces (menisci) developed and displaced in the course of drying. This project seeks to incorporate the liquid-gas interfacial area into continuum models of drying by combination of state of the art of pore network modeling, pore network simulations, and new experiments.

Projektleitung: MSc. Bürger Johannes, Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani

Kooperationen: Dr. Maciej Jaskulski, TU Lodz

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.05.2022 - 30.04.2025

Mechanism of agglomeration in spray drying with the fine particle recirculation

Powders manufactured by spray drying often require an additional enlargement step, which is mainly carried out either outside the drying tower or by recycling dry undersized particles into the drying tower. In this project, we advance the knowledge in the enlargement of powders in spray drying with fines return, targeting both the process quality and product quality. An efficient prediction tool within a computational fluid dynamics (CFD) framework is constructed and assessed by means of spatially and temporally resolved pilot-scale plant experiments.

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani

Projektbearbeitung: MSc. Xiang Lu

Kooperationen: Prof. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2024

Adaptive pore network modelling of thermochemical processes in single porous particles

A single particle model with high accuracy is central to DEM/CFD simulations of a bed packed with a population of thermally-thick solid particles and exposed to a thermal process (such as drying) or a thermochemical process (such as calcination, pyrolysis, or combustion). A model as such must essentially account for heat and mass transfer within a single porous particle, morphological changes of its pore structure, chemical reactions and the connection to the particle's fluid-solid surroundings. Project B4 aims at performing a major breakthrough in the modelling and simulation of these porescale phenomena at the level of a single particle and under realistic process conditions. This project will concentrate on microscopic discrete and macroscopic continuum modelling as well as on experimental characterisation of the drying and calcination processes. Discrete models will be developed based on first principles. Since the pore size will change over time due to thermal stress (shrinkage

during drying) or chemical reactions (consumption of solid phase), the pore structure must be traced over time and updated accordingly. Full consideration of structural changes is one of the major advances that will be made with the help of adaptive discrete pore network models - a new family of discrete models. Model extensions shall be made to account for internal temperature gradients and unstructured networks with physically realistic pore structures. The interior pore structure and volumetric change of a particle will be characterised by techniques such as μ -CT imaging. Pore-scale phenomena are directly accessible by discrete models. This fact will be used to revisit the classical continuum models, taking inputs from representative discrete pore network simulations and feeding effective parameters to a macro-scale continuum model. To endow the continuum model with predictive capabilities, high-quality and trustworthy gravimetric measurements will be conducted for single particles in thermo-balance reactors under controlled conditions. On this basis, the classical continuum models will be upgraded and thus implemented in the DEM/CFD libraries after their model-order reduction.

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani

Kooperationen: Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg; Prof. Avi Levy

Förderer: Stiftungen - Sonstige - 01.04.2020 - 31.12.2023

Enhancement of heat and mass transfer in low temperature drying of slurry droplets

This project aims to develop advanced models to predict the drying characteristics of single slurry droplets in the presence of soluble gases at low temperature and atmospheric pressure. The models will account for internal and external heat and mass transfer as well as species transport, both in the gas phase and inside the droplet and porous particle. To assess the model predictions, several sets of single slurry droplet experiments under various well-controlled process conditions will be carried out.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2023 - 30.09.2027

"Mehrstufige katalytische Produktionssyysteme für die Feinchemie durch integriertes Design von Molekülen, Materialien und Prozessen (IMPD4Cat)"

Kooperationsprojekt in der Forschergruppe 5538 Mehrstufige katalytische Produktionssysteme für die Feinchemie durch integriertes Design von Molekülen, Materialien und Prozessen.

Teilprojekt SP6

"Integriertes computergestütztes Molekül-, Material- und Prozessdesign für die mehrstufige katalytische Umwandlung von Olefinen in alpha-Aminosäuren und beta- Aminoalkohole

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher, Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.06.2023 - 31.12.2025

Smart Process Systems for a Green Carbon-based Chemical Production in a Sustainable Society

Smart Process Systems for a Green Carbon-based Chemical Production in a Sustainable Society

The SmartProSys research initiative aims to replace fossil raw materials in chemical production with renewable carbon sources, thus contributing to a carbon-neutral society. It follows a system-oriented strategy and investigates resource-efficient degradation and synthesis strategies at process level, intelligent catalytic conversions at molecular level, and economic and societal impacts at a higher system level. The complexity of the system requires the development of powerful computational and machine learning methods for the design, simulation, optimization and control of the system. SmartProSys involves researchers from the fields of systems-oriented process engineering, chemistry, mathematics, logistics, political science, and psychology.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2023 - 31.12.2025

Autonome Regelung einer Prozesskette zur CO2-Karbonisierung unter Verwendung von Bergbauabfällen

Das Ziel des Projekts ist die Entwicklung einer autonomen und selbst-lernenden Prozesskette, um aus CO2 und Bergbauabfällen über die Karbonatbildung einen schwer löslichen Feststoff herzustellen. Dabei werden in vier Schritten

1. Calcium- und Magnesiuminonen aus dem Mineral herausgelöst, 2. die entstandene Suspension filtriert, um 3. in der wässrigen Lösung bei einem pH-Wechsel-Prozess unter Zugabe von CO2 die gezielte Bildung von Calciumkarbonat und Magnesiumkarbonat hervorzurufen und dann 4. die Feststoffe abzuzentrifugieren.

Dabei soll der Prozess auch bei Änderungen in den Anfangs- und Randbedingungen autonom die optimalen Bedingungen zur gezielten Herstellung der Feststoffe finden und einstellen, um damit die gewünschten Produkteigenschaften zu erzielen und möglichst wenig Energie zu verbrauchen. Das Projekt ist eingebettet in den SPP2364 und wird gemeinsam mit Kollegen am KIT Karlsruhe und der TU Kaiserslautern bearbeitet.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher, Dr. Andreas Voigt

Kooperationen: TU Kaiserslautern; KIT Karlsruhe

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2022 - 31.12.2025

Autonome Regelung einer Prozesskette zur Karbonatbildung aus CO2 unter Einsatz von Bergbauabfällen

Eine Prozesskette, beginnend mit der Auslösung von Calcium und Magnesium aus Begbauabfällen mit sauren Lösungen, der Filtration der Suspension bis hin zur Endverarbeitung der Lösung in einem pH-Wechsel-Prozess unter Einsatz von CO2 unter höherem Druck und Zugabe von Base zur gezielten Herstellung von Calcium-und Magnesiumkarbonat als schwerlöslichen Fällungsprodukten soll unter wechselden Bedingungen der Ausgangsmeatrialien und Prozessumgebung optimal gesteuert und autonom geregelt werden. In Kooperation mit der TU Kaiserslautern (Regelung) und des KIT (Auslösung und Filtration) soll in Magdeburg im Rahemn des SPP2364 der komplexe Prozess in einer Miniplant als Pilotanlage aufgebaut, detailliert untersucht und optimiert werden.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas, Ali Kaabi Fallahyehasl Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 16.10.2023 - 15.10.2026

Incipient spray fluidized bed agglomeration at the border to coating

The project aims to track the border between spray fluidized bed agglomeration and coating, which are the important key processes for advanced particle engineering. We will investigate experimentally agglomeration in the vicinity of this border (borderline agglomeration), focusing on the starting period of it (incipient agglomeration), in which dimers (to single particles stacked together) are formed from primary particles. The main focus is on simplest agglomerate structure and clearest conditions of spray fluidized bed agglomeration process. The process will also be described by modeling. Here, we can capitalize on own Monte Carlo models, which are stochastic and discrete, able of representing micro-scale events and processes. The goal is to radically improve these models. So the crucial model constituents will be revised, namely the sub-models for breakage and drying, based on separate experiments without spraying (for breakage) or without binder in the spray (for drying). The criterion for aggregation or rebound after wet collision will also be revisited, though still based on normal momentum dissipation. The improved model will provide direct and unconditional access to the agglomeration-coating border, making regime maps obsolete.

Projektleitung: MSc. Aisel Ajalova, Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Kooperationen: Prof. Achim Kienle, OvGU Magdeburg; Prof. Andreas Bück, Friedrich-Alexander

University Erlangen-Nuremberg

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.12.2022 - 14.11.2025

Autonomous structure formation rocesses in spray fluidized bed agglomeration

Recent progress in spray fluidized bed agglomeration enables to model kinetics and particle formation during the process. With minimal amount of empirical information on the influence of operating conditions on fractal dimension, agglomerates can be produced in silico, even printed out in 3D. Such advanced technologies shall be applied to the continuously operated process, in combination with new methods for inline monitoring and automatic control. The goal is to automatic control. The goal is to automatic tours and structure-dependent end-user properties.

Projektleitung: MSc. Subash Reddy Kolan, Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Kooperationen: MSc. Rui Wang, supportes by CSC (Chinese Scholarship council), on agglomerate

generation and characterization; Dr. Stutee Bhoi, supported by AvH (Alexander von Humboldt Foundation) on advanced population balance and Monte Carlo modeling

of agglomeration

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2021 - 30.09.2024

Hetero-aggregation of fluidized nanoparticles and solid-containing aerosol droplets

The project aims at mixing in fluidized bed very small particles (nanoparticles or submicron particles) of different composition to hetero-agglomerates, which may additionally be encapsulated or coated with the help of aerosol droplets that contain embedding solid material. In this way, binary or ternary particulate composites of extremely finely dispersed constituents will be produced, aiming at new and superior properties. Instead of conventional fluidization, special spouted bed equipment with adjustable air inlet will be used for processing. High-velocity air inlet jets, which may be assisted by an immersed impactor and admixed large breaker particles, help to shift the highly dynamic equilibrium between aggregation and breakage towards smaller and stronger agglomerates in this kind of equipment. Submicron aerosol will be generated by a novel technique which is simple, robust and easily scalable. Regarding the characterization of agglomerates, new methods to reconstruct 3D agglomerate structure from 2D imaging data will be developed. In this frame, the level of sub-agglomerate mixing will be identified and pushed towards individual nanoparticles by use of non-flame, i.e. not sintered, raw material. Finally, the project will set ground for hierarchical discrete models that can describe process kinetics and agglomerate formation even with very large number of primary particles. In SPP 2289, methodic cooperation and technical complementarity is seen with, especially, projects on crossing flames, high shear mixing, assisted fluidization, and imaging.

Projektleitung: MSc. Akbas Serap, Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2021 - 30.09.2024

Ultrathin coating of fluidized particles by means of aerosol

Coated particles for various applications are usually produced by spraying solid-containing liquid on mechanically agitated or fluidized cores. Every spray droplet which is deposited on the surface of a core particle leaves behind a solid remnant after evaporation of the solvent or suspension liquid (preferably water). Each such deposit is a building block (BB) of the coating layer. However, spray droplets are quite large (typically 40 μ m with two-fluid nozzles) in present technology, so that BBs are also large, resulting in coarse and thick coating. Radically thinner and finer resolved coating layers (down to the nanoscale) could be produced on fluidized particles by using aerosol (with droplet diameters around 1 μ m or less) instead of common spray. Feasibility

of the respective aerosol fluidized bed (AFB) coating process has recently been shown by a proof-of-principle experiment. On this basis, the present project aims at a thorough scientific investigation of the novel AFB process. This includes batch coating experiments with variation of operating parameters, materials, as well as aerosol generation and entrance conditions. The quality of coated particles is characterized thoroughly by scanning electron microscopy and various image analysis techniques in regard of intra-particle coating thickness distribution, inter-particle coating thickness distribution, average porosity, porosity distribution, and pore size distribution. Supported by such unique data, a stochastic (Monte Carlo) model is developed and parameterized to accurately simulate the buildup of coating layers on single particles and in the population of particles; Moreover, in the surface coverage period (possibly with island growth) and later on (in the coating layer growth period). Finally, measurements are conducted and a model is developed to predict solids yield of the process, which is equivalent to the efficiency of the fluidized bed in filtering aerosol droplets out of the gas flow.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas, Dr.-Ing. Kaicheng Chen

Kooperationen: Dr. Fabian Sewerin, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik; Prof. Berend van

Wachem, OVGU, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik Institut für Verfahrenstechnik Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik; Prof. Alba Dieguez Alonso

Land (Sachsen-Anhalt) - 01.07.2023 - 30.06.2024

Design of Novel Fluidized Bed Processes for Plastics Recycling

Förderer:

Pyrolysis has been also identified as the most promising pathway for chemical (tertiary) recycling of end-of-life plastics, especially when separation of the different fractions is challenging and costly or when the plastics are contaminated with e.g., biowaste. Both processes pose significant challenges, such as: (i) the melting of plastics before conversion and coking leading to upstream and downstream clogging problems, (ii) the emissions of dioxins and other chlorinated organic compounds, or (iii) the high oxygen content of bio-oils, requiring important upgrading in the case of biomass pyrolysis.

This project is part of the research initiative SmartProSys -Smart Process Systems for Sustainable Chemical Production at Otto von Guericke University Magdeburg. The aim is to develop a novel and flexible method, based on fluidized bed technology, for the co-pyrolysis of biomass and plastic waste to produce useful raw products. The development of this new process needs to be based on the detailed modeling of the chemical and physical phenomena involved in the conversion process in conjunction with the complex behavior inside a fluidized bed. Special attention needs to be put on the physico-chemical properties and morphology of the used feedstock, as well as their evolution during the conversion process.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Projektbearbeitung: MSc. Simson Rodrigues

Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Prof. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.07.2020 - 14.06.2024

Contact heat transfer and heat conduction in packed beds of edged particles

A central parameter of thermal DEM is the particle-particle heat transfer coefficient during binary contacts. Contact heat transfer is always important when heat is transmitted from a wall to an ad-joining bed of particles in order to conduct thermochemical processes, but in presence of steep temperature profiles it can also be significant when heat is supplied from the gas phase. Despite of its central role, simplified models, the validity of which is questionable even in case of equally sized spheres, are used to calculate contact heat transfer. Any reliable background is missing in case of edged, polyhedral particles, despite of many applications in practice. The project aims at a new and more reliable way of predicting the heat transferred when particles come for a certain period of time in contact with each other from effective packed bed thermal conductivity. Therefore, effective packed bed thermal conductivity shall be investigated by experiments and simulations for a wide range of different polyhedral particles. This will enable the prediction of effective thermal conductivity and contact heat transfer not only for spheres but also for arbitrary materials that consist of polyhedron-like particles. In this frame, packed bed porosity and the relative area of flat interparticle contacts will also be derived from X-ray μ -CT imaging

results and correlated with adequately defined particle form parameters. Moreover, interstitial packed bed morphology, in-cluding pore size variability, will be characterised. Ultimately, the research goal is to place the thermal part of the DEM on a scientifically well founded and technically easily usable basis for particles of any shape.!!!

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Projektbearbeitung: MSc. Haashir Altaf

Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Dr. Tanja Vidakovic-Koch, MPI Magdeburg

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.09.2019 - 31.12.2023

Pore network modeling of the anode porous transport layer of water electrolysers

Transport and distribution of water in conjunction with the oppositely occurring transport of oxygen in the anodic porous transport layer (PTL) restrain crucially the performance of water electrolysers. To remove such limitations pore network models of the PTL will be developed. Pore networks will first be generated (based on 3D X-ray μ -CT data) and validated for real materials. Then, systematic pore network simulations will be conducted to track modifications of the internal structure that would be beneficial for performance. Validation experiments will be provided by a joint experimental project. Discrete simulation results that can be used for deriving effective transport parameters for continuum modelling will be delivered to it.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Projektbearbeitung: MSc. Supriya Bhaskaran

Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Dr. Tanja Vidakovic-Koch, MPI Magdeburg

Förderer: Sonstige - 01.11.2020 - 31.08.2023

Lattice Boltzmann modeling of gas-liquid distribution in anodic transport layer during water electrolysis

Transport phenomena in electrochemically relevant thin porous layers are key for the further development of environmentally friendly energy production technologies. In case of water splitting by electrolysis, wetting and drying of the anodic transport layer are of special importance. Those processes are here investigated by the Lattice Boltzmann method, which allows for computation on the real porous structure, reconstructed by micro-CT. The research is complementary to a parallel project that uses pore network modeling.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Projektbearbeitung: MSc. Xiaodan Yao

Kooperationen: Dr. Torsten Hoffmann; AVA - Anhaltinische Verfahrens- und Anlagentechnik GmbH,

Magdeburg; DDP Specialty Products Germany GmbH & Co. KG, Bomlitz; Dr. Wernecke Feuchtemesstechnik GmbH, Potsdam; BASF SE, Ludwigshafen; Evonik Technology & Infrastructure GmbH, Hanau; Glatt Ingenieurtechnik GmbH, Weimar; Gra-

nolis GmbH, Meiningen; IPT Pergande GmbH, Weißandt-Gölzau

Förderer: BMWi/AIF - 01.12.2020 - 31.05.2023

Granulation in der Sprühwirbelschicht mit Gasbeimischung zum Feed

We are exploring spray fluidized bed granulation (or coating) by mixing of inert gas (air) to the feed. In this way we are expecting to break path for new classes of particulate products, placed between spray dried powders and conventional spray fluidized bed granules. Easy handling of relatively large product particles shall be combined with fast reconstitution in water and with relatively high bulk density by the new technology.

Projektleitung: Dr. Andreas Voigt

Kooperationen: Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg

Förderer: Haushalt - 01.11.2020 - 31.12.2023

Carbon Capture and Storage - Using mine tailings for long-time storage of Carbondioxide via carbonization

It will be investigated how to capture and store CO_2 in wastes from a mine operations, for example mine tailings from Montana, USA. Successful tests could help pave the way to avoid additional emissions from mining operations and potentially help remove CO_2 that is already in the atmosphere, helping to contribute to the fight against climate change.

Projektleitung: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Alba Dieguez-Alonso, Prof. Dr. Nora Kulak, Dr. Nicole Vorhauer-

Huget

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2022 - 31.12.2023

In-situ investigation of the pyrolysis mechanisms (solid-phase) of biomass and plastics

We will contribute to the elucidation of pyrolysis mechanisms of biomass and plastics by applying NMR and IR analytical techniques (responsible scientist: Dr. Liane Hilfert). Different plastic (wastes) and lignocellulosic biomass will be tested towards their pyrolysis. More importantly, different mixtures of plastics and biomass will then be investigated.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2023 - 31.12.2025

Nichtlineare Kapillarsysteme mit tensidebeladenen Grenzflächen

An Fluidgrenzflächen adsorbierte oberflächenaktive Substanzen sind allgegenwärtig und das Verständnis ihres subtilen, aber oft dominanten Einflusses ist daher für eine Vielzahl von technischen Anwendungen und Naturphänomenen von zentraler Bedeutung. Theoretische Untersuchungen zur physikalisch-chemischen Hydrodynamik von Kapillarsystemen mit Tensiden beschränkten sich bisher überwiegend auf einfache Tenside, Fälle ohne Topologieänderungen und kleine Reynolds-Zahlen. Infolgedessen gibt es kein umfassendes Verständnis des Einflusses von Oberflächenviskosität und Trägheit, der in technischen Anwendungen von der Biotechnik bis zur Fertigung wichtig ist, in Kapillarsystemen einschließlich Änderungen der Grenzflächentopologie. Dieses Projekt untersucht die grundlegenden physikalischen Mechanismen, die mit dem nichtlinearen Verhalten von tensidbeladenen Kapillarsystemen verbunden sind, und konzentriert sich auf den subtilen, aber wichtigen Einfluss der Oberflächenviskosität sowie die Entwicklung von Kapillarinstabilitäten und -fragmentierung.

Dies wird zu einem detaillierteren Verständnis der Wechselwirkung von Oberflächenviskosität und Trägheit mit der oberflächenspannungsdominierten Grenzflächenbewegung und ihrer Auswirkungen auf Topologieänderungen in Kapillarsystemen über einen weiten Bereich von Längenskalen beitragen. Um diese Strömungen zu untersuchen, werden wir neue numerische Methoden zur Simulation von Grenzflächenströmungen mit unlöslichen Tensiden und Oberflächenviskosität im Bereich der Kontinuumsmechanik entwickeln, die, integriert in modernste numerische Simulationswerkzeuge, einen rationalen rechnerischen Rahmen für die genaue Modellierung oberflächenaktiver Substanzen stellen werden.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2022 - 31.10.2025

Optimierung des Betriebs von Wirbelschichtverfahren mittels maschinellen Lernens

Wirbelschichtverfahren sind die Basis für viele Anwendungen, bei denen eine schnelle Vermischung, Wärmeund Stoffübertragung zwischen Gas und Feststoffpartikeln erforderlich ist. Ihre Leistung hängt weitgehend von der Blasendynamik ab: aufsteigende Blasen treiben die Feststoffzirkulation an und verbessern den Gas-Feststoff-Kontakt erheblich, wodurch Misch-, Reaktions- und Transporteigenschaften verbessert werden. Dabei werden bisher fast alle Wirbelschichten mit einem gleichförmigen Gasstrom betrieben. Aktuelle wissenschaftliche Arbeiten zeigen jedoch, dass der Betrieb einer Wirbelschicht mit einer alternierenden Gasströmung (z.B. sinusförmige

Gasfluidisierungsgeschwindigkeit) zu unterschiedlichen Blasenmustern und -dynamiken führt. Ziel dieses Projekt ist es, die Blasen in einer Wirbelschicht durch Anwendung von Methoden der Künstlichen Intelligenz

(KI) wie evolutionäre Algorithmen und genetische Programmierung zu kontrollieren. Wir werden unsere Wirbelschicht im Labormaßstab mit Kamerasystem und Berechnungsmodellen im Euler-Euler- und Euler-Lagrange-Verfahren verwenden, um die Dynamik von Blasen in der Wirbelschicht zu erfassen, während die Wirbelgasgeschwindigkeit räumlich und zeitlich variiert wird. Zunächst werden diese Ergebnisse verwendet, um das optimale Zuflusssmuster für gegebene Zielfunktionen zu finden.

Die Herausforderung für die KI-Algorithmen besteht darin, das richtige Gleichgewicht zwischen den zeitintensiven experimentellen Daten und den Simulationsdaten zu finden, um das erforderliche Fluidisierungsgeschwindigkeitsprofil effizient bereitzustellen. Darüber hinaus werden wir mehrere widersprüchliche Zielfunktionen mithilfe von multikriteriellen Optimierungsalgorithmen betrachten. Zweitens werden die KI-Algorithmen verwendet, um durch Steuerung und Kontrolle des Geschwindigkeitsprofils eine optimale Blasengröße und Dynamik zu erhalten. Die Möglichkeit, das Verhalten der Blasen in einer Wirbelschicht zu kontrollieren, ermöglicht die Verbesserung von unter anderem Produktqualität, Effizienz und Selektivität des Verfahrens.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2021 - 30.11.2024

Verbesserung der Simulation vn großen, mit dichten Partikeln beladenen Strömungen durch maschinelles Lernen: ein genetischer Programmieransatz

Mit Partikeln beladene Strömungen treten in vielen natürlichen und industriellen Prozessen auf, wie zum Beispiel dem Fluss roter und weißer Blutkörperchen im Plasma, oder in der Fluidisierung von Biomasse in Wirbelschichten. In den letzten 40 Jahren haben Wissenschaftler Euler-Lagrange (EL) Simulationen verwendet, um das Verhalten solcher Strömungen vorherzusagen.

Die EL-Simulationen stützen sich jedoch auf Modelle, um die Wechselwirkung zwischen der Fluidströmung und den individuell verfolgten Partikeln zu beschreiben. Diese Modelle erfordern die sogenannte "\textit{ungestörte}" Fluidgeschwindigkeit am Ort des Partikels, was der Geschwindigkeit des Fluids entspricht, wenn der Partikel nicht dort wäre. Aktuelle Modelle hierfür sind sehr rudimentär und die genaue Berechnung der ungestörten Flüssigkeitsgeschwindigkeit ist extrem teuer, da viele zusätzliche, hochaufgelöste Simulationen desselben Falls erforderlich sind, bei denen jeweils ein Partikel weggelassen wird.

Ziel des Projekts ist es, ein neues Modell für die ungestörte Strömungsgeschwindigkeit bei jedem Partikel zu entwickeln. Dieses Modell basiert auf den Eigenschaften der Strömung um den Partikel und den Eigenschaften der umgebenden Partikel. Zur Entwicklung des Modells wird ein Verfahren aus dem Bereich des überwachten maschinellen Lernens verwendet: Genetische Programmierung (GP). GP eignet sich insbeondere für dieses Projekt, weil es sich nicht um ein "Black-Box" Modell handelt, sondern eine überprüfbare Gleichung für die ungestörte Strömungsgeschwindigkeit darstellen kann. Diese Gleichung wird durch analytische Lösungen und hochaufgelöste Simulationen validiert und ermöglicht genaue Simulationen in großem Maßstab, während nur ein Bruchteil der Kosten für vollständig aufgelöste Simulationen erforderlich ist.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2021 - 30.09.2024

Modellentwicklung zur Untersuchung dichter partikelbeladener Strömungen auf der Mesoskala

Dichte partikelbeladene Strömungen können in vielen natürlichen und industrielle Prozessen, wie der Strömung roter Blutkörperchen im Plasma oder der Fluidisierung von Kohl- oder Biomasspartikel in Wirbelschichten, vorkommen, um nur einige zu nennen. Diese Strömungen werden von einem komplizierten Gleichgewicht zwischen der Strömung-Wand, Strömung-Partikel, Partikel-Wand, und Partikel-Partikel Wechselwirkungen geprägt. Die Vorhersage solcher Strömungen mit vollständig aufgelösten oder direkten numerischen Simulationen ist normalerweise viel zu rechenintensiv. Mesoskalige Ansätze, wie Euler-Lagrange Partikel Tracking ermöglichen es, das Verhalten von viel größeren partikelbeladenen Strömungssystemen als vollständig aufgelösten Ansätze.

Sie verwenden jedoch reduzierte Modelle, anstatt die Strömung um einzelne Partikel aufzulösen, die derzeit mit sehr strengen Einschränkungen verbunden sind.

Dies ist ein Projekt zur Entwicklung neuartigen volumengefilterten Euler-Lagrange Ansatzes für die Vorhersage des Verhaltens dichter partikelbeladener Strömungen auf der Mesoskala. Dieser Ansatz wird die derzeit bestehende Lücke zwischen vollständig aufgelösten Simulationen und klassischem Euler-Lagrange Partikel Tracking schließen. Hierzu werden Modelle entwickelt, um die Kopplung der Partikel mit der Strömung genau zu berücksichtigen. Dies wird erreicht, indem in das Model den lokalen Effekt jedes Partikels innerhalb der Strömung ermittelt und berücksichtigt wird, wobei auch die Wände berücksichtigt werden. Der neu vorgeschlagene Euler-Lagrange Ansatz wird viel genauere Ergebnisse liefern als aktuelle Euler-Lagrange Partikel Tracking Verfahren, wobei nur ein Bruchteil der Berechnugskosten für vollständig aufgelöste Simulationen benötigt wird.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: EU - HORIZONT 2020 - 01.10.2021 - 30.09.2024

Horizont 2020, Marie S. Curie Individual Fellowships

Das Ziel dieses Projekts ist es, einen neuartigen Rahmen für die rechnerisch effiziente und genaue Simulation von Zweiphasenströmen bereitzustellen, indem die Reihenfolge der Darstellung der Schnittstelle in dem geometrischen VOF-Verfahren von linear bis quadratisch erhöht wird. Dies ermöglicht einen genauen Transport von dritter Ordnung, und eine genaue genaue Schätzung der an der Grenzfläche wirkenden Oberflächenspannungskraft, wodurch Fehler auf eine Weise reduziert wird, die bisher nicht erreicht wurde. Darüber hinaus werden diese Schemata entwickelt, so dass sie auf komplexe Domänen angewendet werden können, was ebenfalls eine Begrenzung vorhandener Verfahren ist, die typischerweise nur in der Lage sind, zweiphasige Flüsse in rechteckigen Strömungsdomänen genau zu simulieren. Das Ergebnis der vorgeschlagenen Forschung ist zweifach. Erstens erhöht die Reihenfolge der Genauigkeit der vorherrschenden zweiphasigen Durchflussmodelliermethode - das VOF-Verfahren - ergibt genauere Simulationsergebnisse. Zweitens erlaubt die vorgeschlagene Arbeit auch die Berücksichtigung komplexer, realistischer Flussdomänen.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Prof. Dr.-Ing. habil. Manja Krüger

Projektbearbeitung: Janett Schmelzer

Förderer: Haushalt - 01.09.2022 - 30.06.2024

Determining the comminution behavior of plastic particles in milling processes

The recycling of plastics is an important issue in terms of environmental sustainability, recyclability and of waste management. The development of proper technologies for plastic recycling is generally recognized as a priority. To achieve this aim, the technologies that have been developed and applied in mineral processing can be adapted to recycling systems. In particular, the improvement of comminution technologies is one of the main actions to improve the quality of recycled plastics. The aim of this work is to study the comminution processes in milling for different types of plastic materials.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2022 - 30.06.2024

Einheitliche konservative numerische Berechnungs- methode für Grenzflächenströmungen

Der Großteil der numerischen Methoden für die Berechnung von Strömungen mit Grenzflächen wurde bisher entweder für inkompressible oder kompressible Fluide entwickelt, was die Leistungsfähigkeit und die möglichen Anwendungsbereiche und Applikationen stark einschränkt.

Ferner erschweren offene Fragen bezüglich der Massen-, Impuls- und Energieerhaltung von numerischen Methoden für die Berechnung von Grenzflächenströmungen bei allen Strömungsgeschwindigkeiten die Anwendung moderner Berechnungsmethoden in Forschung und Entwicklung, für Anwendungen die von der Treibstoffeinspritzung in Flugzeugtriebwerken bis hin zur Stoßwellenlithotripsie für die Behandlung von Nierensteinen reichen.

Das vorrangige Ziel dieses Forschungsprojekts ist die Entwicklung einer neuen einheitlichen numerischen Berechnungsmethode welche die Simulation von Grenzflächenströmungen bei allen Geschwindigkeiten, mit Machzahlen von M=0 bis M »1, inklusive Grenzflächenströmungen bei denen kompressible und inkompressible Fluide miteinander in direkter Wechselwirkung stehen, zum ersten Mal mit dem gleichen konservativen numerischen Berechnungsmodell ermöglichen.

Die vorgeschlagene Forschung konzentriert sich dabei auf zentrale Aspekte des Berechnungsalgorithmus, neue numerische Methoden und die relevanten Erhaltungsfehler, wodurch wichtige derzeitige Lücken in der Fachliteratur bezüglich der Massen-, Impuls- und Energieerhaltung für Grenzflächenströmungen, auch mit Oberflächenspannung, und der thermodynamischen Modelle für kompressible-inkompressible Grenzflächenströmungen geschlossen werden.

Darüber hinaus wird eine systematische Studie zum Einfluss und der Bedeutung der Kompressibilität von Flüssigkeiten für die Simulation von Grenzflächenströmungen sowie eine umfangreiche Analyse der Leistungsfähigkeit des neuen Berechnungsalgorithmus durchgeführt. Die Prüfung und Validierung der entwickelten Berechnungsmethoden wird eine wichtige Komponente des Forschungsprojekts sein.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2021 - 30.06.2024

Verteilung und Ablagerung von Partikeln in verdampfenden festsitzenden Tröpfchen

Festsitzende partikelbeladene Tröpfchen lagern die in ihnen suspendierten Partikel beim Verdampfen auf dem Substrat ab und erzeugen dabei eine Vielzahl von Partikelablagerungsmustern. Die Kontrolle der Form und Eigenschaften dieser Partikelablagerungen kann für viele Anwendungen, vom Tintenstrahldruck bis zur RNA-Sequenzierung, von entscheidender Bedeutung sein. Trotz der erheblichen Forschungsanstrengungen die der Partikelablagerung in verdampfenden festsitzenden Tröpfchen gewidmet wurden, fehlt uns nach wie vor ein grundlegendes Verständnis vieler Aspekte des Partikelverteilungs- und -ablagerungsprozesses. Insbesondere eine detaillierte Quantifizierung der einzelnen Beiträge von Partikel-Partikel- und Partikel-Substrat-Wechselwirkungen, von Partikelanordnung an der Gas-Flüssig-Grenzfläche und von Partikelgrößenverteilungen ist bisher nicht verfügbar. Vor diesem Hintergrund sind die Hauptziele dieses Projekts: (i) die Quantifizierung des Einflusses attraktiver van-der-Waals-Kräfte auf die Partikelverteilung, (ii) die Ermittlung optimaler Bedingungen für die Partikelanordnung an der Gas-Flüssig-Grenzfläche und (iii) die Analyse des Einflusses der Partikelgrößenverteilung von polydispersen Partikelpopulationen auf die Verteilung und Trennung von Partikeln nach Größe für kugel- und ellipsenförmige Partikel. Um diese Forschung zu ermöglichen, werden wir ein effizientes Simulationswerkzeug entwickeln, um die Verdampfung partikelbeladener festsitzender Tröpfchen zu simulieren, alle relevanten physikalischen Mechanismen aufzulösen und die kapillare Anziehung von Partikeln an der Gas-Flüssig-Grenzfläche zu berücksichtigen.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2024

Bulk-Reaction - Teilprojekt C5

Aus Rechenzeitgründen wird derzeit in großskaligen DEM-CFD Simulationen die Gasphasenströmung nur stark vereinfacht abgebildet. Die exakte Geometrie einzelner Partikel wird auf der Gasseite nicht abgebildet, sondern lediglich pauschal durch eine lokal verteilte, isotrope Porosität berücksichtigt. Gerade für chemisch reagierende Schüttungen ist dies ein unbefriedigender Ansatz, da das Gasphasenströmungsfeld über die örtliche Verteilung des Oxidators (beeinflusst Gasphasen- und

Partikelreaktion) und die lokale Mischungsrate ganz wesentlich den Reaktionsfortschritt bestimmt. Deshalb sollen im Projekt C5 neue Modelle für eine genauere Impulskopplung in CFD-DEM, unter Berücksichtigung der heterogenen und anisotropen Natur der Partikelkonfigurationen, hergeleitet, entwickelt und validiert werden. Dabei werden die Details der Umströmung einzelner Partikel (Impuls, Diffusion, Konvektion) auf größeren Raumund Zeitskalen projiziert (coarse graining). Die grundlegende Idee des Teilprojektes ist hierbei, dass im Rahmen von numerischen Simulationen, sowohl mikrostrukturelle Größen, z.B.

Partikeldurchmesser, Volumenanteile und Partikelgeometrien als auch deren Verteilung berücksichtigt werden können. Zentrale wissenschaftliche Fragestellungen des Projektes sind Ziele des Teilprojekts sind:

- Wie kann der lokale Volumenanteil in den Impulsgleichungen der Fluid- und Widerstandskraft formuliert werden, so dass die lokale anisotrope und heterogene Struktur der Partikelkonfiguration berücksichtigt wird?
- Wie kann die derzeitige stark vereinfachte Widerstandskraftformulierung zwischen der Gas- und der Partikelphase mit einer Widerstandskraftformulierung ersetzt werden, welche die lokalen Strukturen der Partikelkonfiguration und das komplexe Strömungsverhalten berücksichtigt und gleichzeitig der starken Inhomogenität der Kräfteverteilung in Partikelkonfigurationen Rechnung trägt?
- Wie kann Diffusion in den stark inhomogen verteilten und komplexe geformten Hohlräumen zwischen den Partikeln beschrieben werden?

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2024

Bulk Reaction - Teilprojekt C2

Die Brennstoffzufuhr zur Erwärmung der Schüttung und zur thermischen Behandlung der Partikel hat zentrale Bedeutung für die Auslegung und Optimierung von Prozessen. Je nach Prozess wird über verschiedene Lanzensysteme seitlich Brennstoff und Luft, seitlich vorgewärmte Verbrennungsluft oder axial Brennstoff mit Luft eingeblasen. Die Brennstoffstrahlen vermischen sich dabei auch mit der axialen Gasströmung. Daher ist die langfristige wissenschaftliche Fragestellung, wie sich ein eingeblasener Brennstoffstrahl im Querschnitt als Funktion der Prozessparameter und der Schüttungsmorphologie verteilt und wie letztendlich die Ausbildung der Flammen ist. In der Flamme erwärmt sich die Schüttung am stärksten, so dass die Ausbreitung des Wärmestroms in radialer und peripherer Richtung durch Strahlung, Leitung und Kontakt ermittelt werden muss. In der ersten Förderperiode konzentrieren sich die Untersuchungen zunächst auf die Vermischung konditionierter, inerter Gasstrahlen, dabei ist zu untersuchen:

- Wie hängen die Eindringtiefe und die räumliche Ausbreitung des Gasstrahls von der Eindüsungsgeschwindigkeit, dem Verhältnis vom eingeblasenem zum axialen Volumenstrom, der Partikelgröße, dem Lückengrad und der Partikelform ab.
- Wie hängt das Erwärmungsverhalten individueller Partikel ab von deren Größe, der Größenverteilung, der Partikelform, der Strahlung der Partikel untereinander und durch Kontakt der Partikel?

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem **Projektbearbeitung:** Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.05.2021 - 30.04.2024

Aerosolenstehung in der Lunge und Einkapselung von Viren

Mikroskopische Aerosole wurden als die Hauptinfektionswege für SARS-CoV-2 identifiziert. Diese Tröpfchen werden tief in der Lunge aus Auskleidungsflüssigkeiten erzeugt. Während der Atmung bilden sich dünne Filme und reißen auf, wodurch feine Tröpfchen freigesetzt werden, die die Viruslast einkapseln. Im Gegensatz zu größeren Tröpfchen, die sich in den oberen Atemwegen bilden, bleiben mikroskopisch kleine Tröpfchen, die hier untersucht wurden, viel länger in der Luft schwebend und stellen somit ein höheres Risiko für luftübertragene Infektionen dar. Hier wird sich ein interdisziplinäres Forschungsteam mit der Wissenschaft der Aerosolerzeugung und Viruseinkapselung befassen, das medizinisches, biologisches und strömungsmechanisches Fachwissen verbindet. Wir werden den Schwerpunkt auf realistische Flüssigkeiten zusammen mit Viruspartikeln legen und uns auf die schnellen und empfindlichen Strömungen konzentrieren, die zu Filmbrüchen, Tröpfchenbildung, Verkapselung und Stabilisierung führen. Der Schwerpunkt liegt auf Experimenten mit hoher räumlich-zeitlicher Auflösung, Simulationen des Zerstäubungs- und Tropfenbildungsprozesses von dünnen Filmen und der biologischen Virulenz der dabei erzeugten Aerosolpartikel. Während die Forschung durch die Virulenz von SARS-CoV-2 motiviert wurde, werden auch andere Virenarten getestet, um die grundlegende Mechanismen zu entschlüsseln, die zu einer Übertragung von Krankheitserregern aus der Lunge über die Luft erlauben.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.02.2021 - 31.01.2024

Das Verhalten von länglichen nicht-sphärischen Partikeln in wandnahen turbulenten Scherströmungen ...

Der Transport nicht-sphärischer Partikel in Fluiden ist für eine Reihe von industriellen Prozessen, aber auch für unsere Umwelt, von großer Bedeutung. Als Beispiele können genannt werden, Kristallisation, Papierherstellung, Widerstandsminimierung durch Fasern, Transport von Sedimenten und Bewegung von Mikroplastik in Ozeanen. Sehr häufig sind diese Prozesse durch Wandungen berandet, wie z.B. in Rührkesseln, Rohrleitungssystemen oder in Trennapparaten. Derartige Strömungsvorgänge sind in der Regel turbulent und beinhalten starke Scherschichten.

Numerische Analysen zur Auslegung und Optimierung sind heutzutage aufgrund der geringen Kosten und der damit verbundenen Möglichkeit die ablaufenden Elementarprozesse detailliert zu visualisieren sehr bedeutend. Allerdings wird bisher in den meisten Berechnungen davon ausgegangen, dass die dispergierten Partikel sphärisch sind.

Um eine zuverlässige numerische Berechnung der genannten partikelbeladenen Prozesse unter Verwendung des Punktpartikel-Euler/Lagrange Verfahrens zu ermöglichen sollen im beantragten Projekt die notwendigen Modelle für längliche nicht-sphärische Partikel grundlegend erweitert werden. Der Schwerpunkt liegt dabei besonders auf turbulenten Scherströmungen mit Wandwechselwirkungen. Beispielhaft werden als Partikel ausgeprägt längliche Formen wie Fasern und Plättchen betrachtet, da deren Modellierung durch Punktpartikelapproximationen eine besondere Herausforderung darstellt.

Zu diesem Zweck wird ein Mehrskalenansatz verfolgt, wobei zunächst die erforderlichen Beiwerte für die relevanten Strömungskräfte und Momente als auch die Wechselwirkung mit der Strömung für längliche Partikel durch voll-aufgelöste numerische Simulationen (PR-DNS) analysiert werden. Diese umfangreichen Simulationsergebnisse werden für eine öffentlich verfügbare Datenbank aufbereitet und wo erforderlich mit dreidimensionalen experimentellen Untersuchungen durch bildgebenden Messverfahren verglichen. Auf der Grundlage dieser Simulationsergebnisse werden dann Lagrangesche Modelle für Punktpartikel entwickelt und in vorhandene numerische Berechnungsprogramme (i.e. MulitiFlow und OpenFOAM) implementiert. In Bezug auf die Turbulenzmodellierung werden ergänzend LES (large-eddy simulations) und RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes) Ansätze verwendet und deren Ergebnisse verglichen. Die zu entwickelnden Modelle und Korrelationen beziehen sich im Einzelnen auf die Fluidkräfte, Widerstand, virtuelle Masse, Basset Kraft und transversale Auftriebskräfte durch Scherung und Partikelrotation, als auch die bei nicht-sphärischen Partikeln wirkenden Drehmomente.

Weiterhin müssen alle Fluidkräfte auf die Partikel durch Modifikationen aufgrund von Wandeinflüssen mit Hilfe der PR-DNS ergänzt werden um diese bei der Lagrangeschen Berechnung berücksichtigen zu können. Besonders in Flüssigkeitsströmungen mit länglichen Partikeln sind Wandeffekte sehr wichtig und werden einen großen Einfluss auf deren Orientierung in Wandnähe haben.

Schließlich sind noch detaillierte Validierungsdaten für die entwickelten Euler/Lagrange Verfahren erforderlich, welche mit einem vorhandenen geschlossenen Wasserkanal gewonnen werden sollen. Hierbei wird die Bewegung länglicher Partikel (Fasern und Plättchen), alsauch des umgebenden Fluids mit Hilfe eines zu entwickelnden dreidimensionalen Visualisierungs-verfahrens voll aufgelöst erfasst.

Durch die erfolgreiche Bearbeitung des Forschungsvorhabens werden Erkenntnisse und Modelle bereitgestellt, die eine zuverlässige numerische Vorhersage von wandnahen turbulenten Strömungen mit länglichen nicht-sphärischen Partikeln für einen weiten Anwendungsbereich ermöglichen.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem **Projektbearbeitung:** Dr.-Ing. Fabian Sewerin

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2021 - 31.12.2023

Nachwuchsgruppe im Emmy Noether-Programm (1. Förderphase)

wird ergänzt wird ergänzt wird ergänzt wird ergänzt wird ergänzt wird ergänztwird ergänztwird ergänzt wird er

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2021 - 31.12.2023

Modellentwicklung der Grobstruktursimulationen für turbulente Gas-Partikel Strömungen

Während für unbeschränkte einphasige Strömungen eine Reihe validierter Turbulenzmodelle zur Verfügung stehen, hat sich viel weniger Forschung mit partikelbeladenen Strömungen beschäftigt. Der Einfluss von Partikeln auf die Turbulenz und die Dispersion von Partikeln aufgrund von Turbulenzen spielen eine wichtige Rolle für das Gesamtströmungsverhalten, die physikalischen Wechselwirkungen sind jedoch noch weitgehend unbekannt. Obwohl die Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation, LES) einen großen Einfluss auf die einphasige Strömungsmodellierung hatte, ist ein solcher Berechnungsrahmen noch nicht reif genug, um partikelbeladene Strömungen genau vorherzusagen.

Bisher verwendete Modelle zur Vorhersage turbulenter partikelbelandene Strömungen basieren typischerweise auf einphasigen Annahmen oder vereinfachten Strömungsszenarien. Die aktuellen LES-Modelle für partikelbeladene Strömungen berücksichtigen das Verhalten der unaufgelösten Skalen auf die Partikel nicht ausreichend genau und berücksichtigen nicht den Einfluss der Partikel auf die Turbulenz.

Dieses Forschungsprojekt zielt darauf ab, ein LES-Modell zu entwickeln um das komplexe Verhalten partikelbeladener unbeschränkter turbulenter Strömungen genau vorherzusagen. Um dies zu erreichen wird eine Reihe grundsätzlicher wissenschaftlicher Fragen untersucht, z.B. wie die Strömungsstatistik anhand der

ungelösten Skalen genau rekonstruiert werden kann, wie die Auswirkungen des Verhaltens der Partikel auf die Turbulenz berücksichtigt werden können, und wie die Wellenzahlen bei denen die Modulation der Strömung auftritt genau vorhergesagt werden können. Ein solches neuartiges zweiphasiges LES-Modell wird aus detaillierten Studien der Wechselwirkungen zwischen Partikeln und Wirbel durch echte direkte numerische Simulationen entwickelt. Das neuartige Berechnungsmodell wird mit einer Reihe herausfordernder Testfälle geprüft und validiert.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2020 - 31.10.2023

Verhalten und Modellierung nicht sphärischer Partikel in kompressiblen Strömungen

Dispergierte Partikel in einer Strömung sind sowohl in der Natur als auch in technischen und technologischen Anwendungen allgegenwärtig und reichen vom Sedimenttransport in Flüssen bis zur nadelfreien transdermalen Injektion von pharmazeutischen Pulvern.

Obwohl die Partikel in den meisten Anwendungen nicht kugelförmige sind, konzentrierte sich die überwiegende Mehrheit der in der Literatur veröffentlichten Forschung auf das Verhalten von kugelförmigen Partikeln in inkompressiblen Strömungen.

Eine Reihe früherer Studien hat auch das Verhalten von kugelförmigen Partikeln in kompressiblen Strömungen untersucht, ein umfassendes Verständnis des Verhaltens von nicht kugelförmigen Partikeln in kompressiblen Strömungen und ihrer Wechselwirkung mit Stoßwellen besteht jedoch nach wie vor nicht.

Insbesondere ein detailliertes Verständnis der Kräfte und Drehmomente, die auf nicht kugelförmige Partikel in Schallnahen- und überschallströmungen sowie aufgrund der Wechselwirkung mit einer Stoßwelle einwirken, ist für das Verständnis der physikalischen Phänomene in technischen Anwendungen mit partikelbeladenen kompressiblen Strömungen von entscheidender Bedeutung, z.B. die Qualität von Beschichtungen, die durch Kaltgasspritzen aufgebracht werden, oder die Behandlungssicherheit der transdermalen Arzneimittelinjektion, wurden jedoch noch nicht systematisch untersucht. Vor diesem Hintergrund besteht das Hauptziel dieses vorgeschlagenen Projekts in der detaillierten Analyse und Quantifizierung von (i) Kräften und Drehmomenten, die auf stationäre und sich bewegende nicht kugelförmige Partikel in kompressiblen Strömungen einwirken, und (ii) der Reaktion einzelner und mehrer nicht kugelförmiger Partikel auf eine vorbeiziehende Stoßwelle. Dies wird die Grundlage für eine sicherere und effizientere Gestaltung und Nutzung der relevanten technischen Anwendungen legen. Um diese Forschung zu ermöglichen, werden wir im Rahmen einer Immersed-Boundary-Methode (IBM) neue numerische Schemata entwickeln, die den Stand der Technik erweitern und einen neuartigen Ansatz vorschlagen, der für Strömungen bei allen Geschwindigkeiten anwendbar ist und häufig auftretende Probleme mit IBM für kompressible Strömungen beseitigt, sowie ein Modell für die Kräfte und Drehmomente auf nicht kugelförmige Partikel entwickeln, das für Punkt-Partikel-Simulationen verwendet werden kann.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem **Projektbearbeitung:** Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2023

Akustisch getriebene Wolkenkavitation beschichteter Mikroblasen

Akustische Kavitation, d.h. das druckgetriebene Verhalten von Blasen in einer flüssigen Umgebung, wird in einer Vielzahl von technischen Anwendungen, die von Ultraschallreinigung bis zu beschichteten Mikroblasen als Ultraschallkontrastmittel (UKM) in der medizinischen Bildgebung reichen, eingesetzt. Insbesondere die akustische Kavitation von UKM-Mikroblasen, die mit einer Phospholipid-Einzelschicht oder Proteinschicht benetzt sind, hat zu einer stetig wachsenden Anzahl diagnostischer und therapeutischer biomedizinischer Anwendungen geführt, einschließlich der gezielten Arzneimittelverabreichung und neuartiger Krebsbehandlungen. Trotz eines umfangreichen Fundus an Literatur über die akustische Kavitation von Mikroblasenwolken gibt es nach wie vor noch kein umfassendes Verständnis des Verhaltens von Wolken von beschichteten Mikroblasen in einem akustischen Feld. Insbesondere ein detailliertes Verständnis der Druck-, Geschwindigkeits- und

Temperaturverteilung als Ergebnis des Kollapses der Blasenwolke ist für die Sicherheit und den Erfolg der Behandlung in biomedizinischen Anwendungen von entscheidender Bedeutung, wurde jedoch noch nicht systematisch untersucht. Vor diesem Hintergrund sind die Hauptziele des vorgeschlagenen Projekts (i) eine detaillierte Analyse des Drucks und der Temperatur in der Nähe kollabierender Mikroblasenwolken und (ii) ein umfassender Vergleich der akustischen Wolkenkavitation von unbeschichteten und beschichteten Mikroblasen, was gemeinsam den Grundstein für eine sicherere und effizientere Nutzung der akustischen Kavitation in biomedizinischen Anwendungen legen wird. Um diese Forschung zu ermöglichen, werden wir im Rahmen eines Euler-Lagrange-Algorithmus neue numerische Berechnungsmethoden entwickeln, die den Stand der Technik erweitern, indem aktuelle Einschränkungen hinsichtlich der Blasengröße beseitigt und die Temperaturvorhersage in Flüssigkeiten erheblich verbessert werden. Insbesondere für biomedizinische Anwendungen erwarten wir, dass solche numerische Methoden ein wertvolles Forschungsinstrument darstellen, das Experimente ergänzen kann.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Berend van Wachem **Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt) - 01.08.2022 - 31.05.2023

Design of Novel Fluidized Bed Processes for Plastics Recycling

Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung eines neuartigen und flexiblen Verfahrens auf Basis der Wirbelschichttechnologie zur Co-Pyrolyse von Biomasse und Kunststoffabfällen zur Herstellung verwertbarer Rohstoffe.

Die Entwicklung dieses neuen Prozesses muss auf der detaillierten Modellierung der chemischen und physikalischen Phänomene des Umwandlungsprozesses mit dem komplexen Verhalten innerhalb eines Wirbelbetts basieren. Besonderes Augenmerk muss auf die physikalisch-chemischen Eigenschaften und die Morphologie der verwendeten Rohstoffe sowie auf deren Entwicklung während des Umwandlungsprozesses gelegt werden.

Als erster Schritt wird eine detaillierte Bewertung des Stands der Technik bei der Pyrolyse (Co-Pyrolyse) von Biomasse und Abfall auf intrinsischer Ebene durchgeführt, mit dem Ziel, die relevantesten entwickelten kinetischen Mechanismen und Parameter zu identifizieren und bisher in der Praxis umgesetzt. Solche Ergebnisse werden mit den Ergebnissen der Pyrolyse einzelner ausgewählter Verbindungen und ihrer Mischungen verglichen. Dies wird die kinetischen Parameter der Umwandlung als Funktion der Rohstoffzusammensetzung und der Prozessbedingungen liefern und die gleichzeitige Identifizierung der relevantesten Wissens- und methodischen Lücken in der Pyrolysemodellierung solch komplexer Mischungen auf intrinsischer und Partikelebene ermöglichen. Darüber hinaus werden auch die Reaktionswärme und das thermische Verhalten der verschiedenen Materialien untersucht, insbesondere mit dem Ziel, die Erweichungs- und Schmelzpunkte der Rohstoffkombinationen zu ermitteln, die zu Agglomerationsproblemen und Verstopfungen führen können.

Dies wird mit der Bewertung des Stands der Technik zur Pyrolyse

(Co-Pyrolyse) von Kunststoffabfällen und Biomasse auf Reaktorebene kombiniert mit dem Ziel, die relevantesten Lösungen sowie Prozessbeschränkungen (Sintern, Agglomeration) zu identifizieren , De-fluidisierung, Spannen, ...) in Wirbelschichtreaktoren, die zur Pyrolyse von Biomasse und Abfall verwendet werden.

Abschließend werden alle diese Informationen mittelfristig in ein detailliertes Rechenmodell umgesetzt. Basierend auf diesem umfassenden Modell wird die optimale mehrstufige Reaktorkonfiguration ermittelt.

6. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFSÄTZE

Akbas, Serap; Chen, Kaicheng; Hoffmann, Torsten; Scheffler, Franziska; Tsotsas, Evangelos

Investigation of Island Growth on fluidized particles coated by means of aerosol

Processes - Basel : MDPI, Bd. 11 (2023), Heft 1, Artikel 165, insges. 18 S.

[Imp.fact.: 3.5]

Alavia, Wilson; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hermsdorf, Dana; Lorenz, Heike; Graber, Teófilo A.

Real-time crystal growth monitoring of boric acid from sodium or lithium sulfate containing aqueous solutions by atomic force microscopy

ACS omega - Washington, DC: ACS Publications, Bd. 8 (2023), Heft 12, S. 10822-10835

[Imp.fact.: 4.1]

Alcalá-Orozco, E. Alberto; Grote, Valerian; Fiebig, Timm; Klamt, Steffen; Reichl, Udo; Rexer, Thomas

A cell-free multi-enzyme cascade reaction for the synthesis of CDP-glycerol

ChemBioChem - Weinheim: Wiley-VCH . - 2023, Artikel e202300463;

[Early view] [Imp.fact.: 3.2]

Attanayake, Don Dasun; Sewerin, Fabian; Kulkarni, Shreyas; Dernbecher, Andrea; Dieguez-Alonso, Alba; Wachem, Berend

Review of modelling of pyrolysis processes with CFD-DEM

Flow, turbulence and combustion - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V., Bd. 111 (2023),

Heft 2, S. 355-408

[Imp.fact.: 2.4]

Burock, Robert; Cajic, Samanta; Henning, René; Buettner, Falk, F. R.; Reichl, Udo; Rapp, Erdmann

Reliable N-glycan analysis - removal of frequently occurring oligosaccharide impurities by enzymatic degradation Molecules - Basel : MDPI, Bd. 28 (2023), Heft 4, Artikel 1843, insges. 19 S.

[Imp.fact.: 4.6]

Cajic, Samanta; Hennig, René; Grote, Valerian; Reichl, Udo; Rapp, Erdmann

Removable Ddes - the missing link for in-depth N-glycan analysis via multi-method approaches

Engineering - Beijing: Engineering Sciences Press., Bd. 26 (2023), S. 132-150

[Imp.fact.: 12.8]

Cheng, Chi; Wei, Guan; Zhisong, Ou; Sundmacher, Kai; Thévenin, Dominique

Direct numerical simulations of polypropylene gasification in supercritical water

Physics of fluids - Melville, NY: American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 6, insges. 14 S.

[Imp.fact.: 4.4]

Chéron, Victor; Evrard, Fabien; Wachem, Berend

A hybrid immersed boundary method for dense particle-laden flows

Computers & fluids - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 259 (2023), Artikel 105892

[Imp.fact.: 2.8]

Dogra, Tanya; Pelz, Lars; Boehme, Julia D.; Kuechler, Jan; Kershaw, Olivia; Marichal-Gallardo, Pável Alejandro; Baelkner, Maike; Hein, Marc Dominique; Gruber, Achim; Benndorf, Dirk; Genzel, Yvonne; Bruder, Dunja; Kupke, Sascha Young; Reichl, Udo

Generation of "OP7 chimera" defective interfering influenza A particle preparations free of infectious virus that show antiviral efficacy in mice

Scientific reports - [London]: Macmillan Publishers Limited, part of Springer Nature, Bd. 13 (2023), Artikel 20936, insges. 13 S.

[Imp.fact.: 4.6]

Duill, Finn Felix; Schulz, Florian; Jain, Aman; Wachem, Berend; Beyrau, Frank

Comparison of portable and large mobile air cleaners for use in classrooms and the effect of increasing filter loading on particle number concentration reduction efficiency

Atmosphere - Basel, Switzerland : MDPI AG, Bd. 14 (2023), Heft 9, Artikel 1437, insges. 23 S. [Imp.fact.: 2.9]

Espinel-Ríos, Sebastián; Huber, Nicolas; Alcalá-Orozco, Edgar Alberto; Morabito, Bruno; Rexer, Thomas F. T.; Reichl, Udo; Klamt, Steffen; Findeisen, Rolf

Cell-free biosynthesis meets dynamic optimization and control - a fed-batch framework

IFAC-PapersOnLine / Internationale Förderung für Automatische Lenkung - Frankfurt : Elsevier, Bd. 55 (2022), Heft 23, S. 92-97

Evrard, Fabien; Chiodi, Robert; Wachem, Berend; Desjardins, Olivier

First moments of a polyhedron clipped by a paraboloid

SIAM journal on scientific computing / Society for Industrial and Applied Mathematics - Philadelphia, Pa. : SIAM, Bd. 45 (2023), Heft 5, S. A2250-A2274

[Imp.fact.: 3.1]

Faridi, Ibtihaj Khurram; Tsotsas, Evangelos; Heineken, Wolfram; Koegler, Marcus; Kharaghani, Abdolreza

Spatio-temporal prediction of temperature in fluidized bed biomass gasifier using dynamic recurrent neural network method

Applied thermal engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 219 (2023), Heft Part A, Artikel 119334 [Imp.fact.: 6.4]

Fischer, Jonas; Rodrigues, Simson Julian; Kriegeskorte, Max; Hilse, Nikoline; Illana, Enric; Scherer, Viktor; Tsotsas, Evangelos

Particle-particle contact heat transfer models in thermal DEM - a model comparison and experimental validation Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 429 (2023), Artikel 118909 [Imp.fact.: 5.2]

Gerlach, Martin; Jameel, Froze; Seidel-Morgenstern, Andreas; Stein, Matthias; Hamel, Christof Operando characterization of rhodium catalyst degradation in hydroformylation Catalysis science & technology - London: RSC Publ., Bd. 13 (2023), Heft 6, S. 1788-1801

[Imp.fact.: 5.0]

Gorges, Christian; Hodžić, Azur; Evrard, Fabien; Wachem, Berend; Velte, Clara M.; Denner, Fabian Efficient reduction of vertex clustering using front tracking with surface normal propagation restriction Journal of computational physics - Amsterdam : Elsevier, Bd. 491 (2023), Artikel 112406 [Imp.fact.: 4.1]

Guo, Shenghui; Chen, Kaicheng; Tsotsas, Evangelos; Shang, Fei; Ge, Zhiwei; Jin, Hui; Chen, Yunan; Guo, Liejin

A large-eddy simulation study of the transcritical mixing process in coaxial jet flow under supercritical condition The journal of supercritical fluids - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 203 (2023), Artikel 106080 [Imp.fact.: 3.9]

Göbel, Sven; Jaén, Karim E.; Dorn, Marie; Neumeyer, Victoria; Jordan, Ingo; Sandig, Volker; Reichl, Udo; Altomonte, Jennifer; Genzel, Yvonne

Process intensification strategies toward cell culture-based high-yield production of a fusogenic oncolytic virus Biotechnology & bioengineering - New York, NY [u.a.]: Wiley . - 2023, insges. 19 S. [Imp.fact.: 3.8]

Göbel, Sven; Jaén, Karim E.; Fernandes, Rita P.; Reiter, Manfred; Altomonte, Jennifer; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne

Characterization of a quail suspension cell line for production of a fusogenic oncolytic virus Biotechnology & bioengineering - New York, NY [u.a.]: Wiley . - 2023, insges. 12 S.; $[Early\ view]$

[Imp.fact.: 3.8]

Hausmann, Max; Evrard, Fabien; Wachem, Berend

Large eddy simulation model for two-way coupled particle-laden turbulent flows

Physical review fluids - College Park, MD : APS, Bd. 8 (2023), Heft 8, Artikel 084301, insges. 29 S.

[Imp.fact.: 2.7]

Hausmann, Max; Evrard, Fabien; Wachem, Berend

Wavelet-based modeling of subgrid scales in large-eddy simulation of particle-laden turbulent flows Physical review fluids - College Park, MD: APS, Bd. 8 (2023), Heft 10, Artikel 104604, insges. 24 S. [Imp.fact.: 2.7]

Hein, Marc D.; Kazenmaier, Daniel; van Heuvel, Yasemin; Dogra, Tanya; Cattaneo, Maurizio; Kupke, Sascha Y.; Stitz, Jörn; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo

Production of retroviral vectors in continuous high cell density culture Applied microbiology and biotechnology - Berlin : Springer, Bd. 107 (2023), S. 5947-5961 [Imp.fact.: 5.0]

Hofmann, Katrin; Hamel, Christof

Screening and Scale-Up of Nanofiltration Membranes for Concentration of Lactose and Real Whey Permeate Membranes - Basel : MDPI, Bd. 13 (2023), Heft 2, S. 1-23, 1 Online-Ressource (23 Seiten) [Imp.fact.: 4.2]

Hülsmann, Jörn; Fraune, Theresa; Dodawatta, Baratha; Reuter, Fabian; Beutner, Martin; Beck, Viktoria; Hackert-Oschätzchen, Matthias; Ohl, Claus-Dieter; Bettenbrock, Katja; Janiga, Gábor; Wippermann, Jens; Wacker, Max

Integrated biophysical matching of bacterial nanocellulose coronary artery bypass grafts towards bioinspired artery typical functions

Scientific reports - [London]: Macmillan Publishers Limited, part of Springer Nature, Bd. 13 (2023), Artikel 18274, insges. 12 S.

[Imp.fact.: 4.6]

Jain, Aman; Duill, Finn F.; Schulz, Florian; Beyrau, Frank; Wachem, Berend

Numerical study on the impact of large air purifiers, physical distancing, and mask wearing in classrooms Atmosphere - Basel, Switzerland : MDPI AG, Bd. 14 (2023), Heft 4, Artikel 716, insges. 17 S. [Imp.fact.: 2.9]

Jain, Aman; Duill, Finn Felix; Schulz, Florian; Beyrau, Frank; Wachem, Berend

Numerical study on the impact of large air purifiers, physical distancing, and mask wearing in classrooms Atmosphere - Basel, Switzerland : MDPI AG, Bd. 14 (2023), Heft 4, Artikel 716, insges. 17 S. [Imp.fact.: 2.9]

Jain, Aman; Evrard, Fabien; van Wachen, Berend

The effect of side walls on particles mixing in rotating drums Particuology - Amsterdam : Elsevier, Bd. 72 (2023), S. 112-121 [Imp.fact.: 3.5]

Jamil, Iffat; Mostaghim, Sanaz; Wachem, Berend; Chéron, Victor; Hausmann, Max

Landscape analysis of multi-objective control of fluidized beds

Proceedings of the Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation - New York, NY, United States : Association for Computing Machinery . - 2023, S. 1950-1955 ;

[Konferenz: Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation, GECCO '23 Companion, Lisbon, Portugal, July 15 - 19, 2023]

Kolan, Subash Reddy; Wang, Rui; Hoffmann, Torsten; Tsotsas, Evangelaos

Mixing sub-micron particles in a ProCell type spouted bed

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 428 (2023), Artikel 118828

[Imp.fact.: 5.2]

Kortuz, Wieland; Kirschtowski, Sabine; Seidel-Morgenstern, Andreas

Mechanistic kinetic modeling of the rhodium-catalyzed tandem hydroaminomethylation of 1-decene in a thermomorphic solvent system

Catalysis Communications - [Erscheinungsort nicht ermittelbar]: Elsevier, Bd. 177 (2023), Artikel 106633, insges. 8 S.

[Imp.fact.: 3.7]

König-Mattern, Laura; Komarova, Anastasia O.; Ghosh, Arpa; Linke, Steffen; Rihko-Struckmann, Liisa K.; Luterbacher, Jeremy; Sundmacher, Kai

High-throughput computational solvent screening for lignocellulosic biomass processing

The chemical engineering journal - Amsterdam : Elsevier, Bd. 452 (2023), Heft Part 4, Artikel 139476, insges. 16 S.

[Imp.fact.: 15.1]

Küchler, Jan; Willenbücher, Katharina; Reiß, Elisabeth; Nuß, Lea; Conrady, Marius; Ramm, Patrice; Schimpf, Ulrike; Reichl, Udo; Szewzyk, Ulrich; Benndorf, Dirk

Degradation kinetics of lignocellulolytic enzymes in a biogas reactor using quantitative mass spectrometry Fermentation - Basel : MDPI, Bd. 9 (2023), Heft 1, Artikel 67, 1 Online-Ressource (12 Seiten) [Imp.fact.: 3.7]

Lehr, Annemarie; Vu, Giang Truong; Janiga, Gabor; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique

Experimental investigation of the residence time distribution in a screw-type apparatus designated to extract artemisinin

Chemical engineering and processing - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 187 (2023), Artikel 109337 [Imp.fact.: 4.3]

Li, Xujun; Chen, Kaicheng; Wei, Xueying; Jin, Hui; Wang, Gaoyun; Guo, Liejin; Tsotsas, Evangelos Distribution characteristics of salt crystals in a supercritical water fluidized bed reactor with CFD-PBM coupled model

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 420 (2023), Artikel 118357 [Imp.fact.: 5.2]

Lu, Xiang; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza

Scale transition - pore network study of how pore structure affects the macroscopic parameters of the continuum model for drying

Drying technology - Philadelphia, Pa. : Taylor & Francis, Bd. 41 (2023), Heft 6, S. 948-967 [Imp.fact.: 3.3]

Mahiques, Enric Illana; Brömmer, Maximilian; Wirtz, Siegmar; Wachem, Berend; Scherer, Viktor Simulation of reacting, moving granular assemblies of thermally thick particles by discrete element method/computational fluid dynamics

Chemical engineering & technology - Weinheim : Wiley-VCH Verl.-Ges., Bd. 46 (2023), Heft 7, S. 1317-1332 [Imp.fact.: 2.1]

Men, Jialin; Kolan, Subash Reddy; Massomi, Ali; Hoffmann, Torsten; Schmidt, Jochen; Tsotsas, Evangelos; Bück, Andreas

Formulation of nanostructured heteroaggregates by fluidization technologies

Chemie - Ingenieur - Technik - Weinheim : Wiley-VCH Verl., Bd. 95 (2023), Heft 1-2, S. 107-113 [Imp.fact.: 1.9]

Mondal, Rahul; Do, Minh Dung; Ahmed, Nasim Uddin; Walke, Daniel; Micheel, Daniel; Bronske, David; Saake, Gunter; Heyer, Robert

Decision tree learning in Neo4j on homogeneous and unconnected graph nodes from biological and clinical datasets

BMC medical informatics and decision making - London : BioMed Central, Bd. 22 (2023), Heft S6, Artikel 347, insges. 12 S.

[Imp.fact.: 3.5]

Pelz, Lars; Piagnani, Elena; Marsall, Patrick; Wynserski, Nancy; Hein, Marc Dominique; Marichal-Gallardo, Pavel; Kupke, Sascha Young; Reichl, Udo

Broad-spectrum antiviral activity of influenza A Defective Interfering Particles against respiratory syncytial, yellow fever, and Zika virus replication in vitro

Viruses - Basel: MDPI, Bd. 15 (2023), Heft 9, Artikel 1872, insges. 17 S.

[Imp.fact.: 4.7]

Peña Arias, Ivonne Karina; Hanke-Rauschenbach, Richard; Sundmacher, Kai

Electrochemical performance of a spatially distributed ECPrOx reactor

ECS advances - Bristol: IOP Publishing Ltd., Bd. 2 (2023), Heft 3, Artikel 034501

Pour, Yehonatan David; Krasovitov, Boris; Fominykh, Andrew; Hashemloo, Ziba; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Levy, Avi

Combined effect of acoustic field and gas absorption on evaporation of slurry droplet

Drying technology - Philadelphia, Pa.: Taylor & Francis, Bd. 41 (2023), Heft 5, S. 767-782

[Imp.fact.: 3.3]

Rodrigues, Simson Julian; Vorhauer-Huget, Nicole; Richter, Thomas; Tsotsas, Evangelos

Influence of particle shape on tortuosity of non-spherical particle packed beds

Processes - Basel: MDPI, Bd. 11 (2023), Heft 1, Artikel 3, insges. 16 S.

[Imp.fact.: 3.5]

Rodrigues, Simson Julian; Vorhauer-Huget, Nicole; Tsotsas, Evangelos

Prediction of effective thermal conductivity of packed beds of polyhedral particles

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 430 (2023), Artikel 118997

[Imp.fact.: 5.2]

Schenke, Sören; Sewerin, Fabian; Wachem, Berend; Denner, Fabian

Amplitude modulation of acoustic waves in accelerating flows quantified using acoustic black and white hole analogues

The journal of the Acoustical Society of America - Melville, NY: AIP Publ., Bd. 154 (2023), Heft 2, S. 781-791 [Imp.fact.: 2.4]

Schiødt, M.; Hodžić, Azur; Evrard, Fabien; Hausmann, Max; Wachem, Berend; Velte, Clara M.

Spectral response between particle and fluid kinetic energy in decaying homogeneous isotropic turbulence Physics of fluids - [Erscheinungsort nicht ermittelbar]: American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 5, Artikel 053333, insges. 13 S.

[Imp.fact.: 4.6]

Sourya, Dasika Prabhat; Panda, Debashis; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Gurugubelli, Pardha S.; Surasani, Vikranth Kumar

Lattice Boltzmann simulations for the drying of porous media with gas-side convection-diffusion boundary Physics of fluids - Melville, NY: American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 11, Artikel 113324, insges. 19 S.

[Imp.fact.: 4.4]

Sui, Maohong; Sommerfeld, Martin; Pasternak, Lars

Extended model of bouncing boundary for droplet collisions considering numerous different liquids International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 162 (2023), Artikel 104418 [Imp.fact.: 3.8]

Svitnič, Tibor; Beer, Katrin; Sundmacher, Kai; Böcher, Michael

Optimal design of a sector-coupled renewable methanol production amid political goals and expected conflicts - costs vs. land use

Sustainable production and consumption - Amsterdam [u.a.]: Elsevier . - 2023, insges. 44 S.

[Imp.fact.: 12.1]

Tan, Qianyan; Hosseini, S. A.; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique; Lorenz, Heike

Mandelic acid single-crystal growth - experiments VS numerical simulations

Communications in computational physics - Hong Kong : Global Science Press, Bd. 33 (2023), Heft 1, S. 77-100 [Imp.fact.: 3.7]

Thomik, Maximilian; Faber, Felix; Gruber, Sebastian; Foerst, Petra; Tsotsas, Evangelos; Vorhauer-Huget, Nicole

A non-isothermal pore network model of primary freeze drying

Pharmaceutics - Basel: MDPI, Bd. 15 (2023), Heft 8, Artikel 2131, insges. 25 S.

[Imp.fact.: 5.4]

Wenzel, Lisa; Hoffmann, Marcus; Rapp, Erdmann; Rexer, Thomas F. T.; Reichl, Udo

 $Cell-free\ N-glycosylation\ of\ peptides\ using\ synthetic\ lipid-linked\ hybrid\ and\ complex\ N-glycans$

Frontiers in molecular biosciences - Lausanne : Frontiers, Bd. 10 (2023), insges. 11 S.

[Imp.fact.: 5.0]

Yisheng, Zhang; Hodžić, Azur; Evrard, Fabien; Wachem, Berend; Velte, Clara M.

Phase proper orthogonal decomposition of non-stationary turbulent flow

Physics of fluids - [Erscheinungsort nicht ermittelbar]: American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 4, Artikel 045109, insges. 24 S.

[Imp.fact.: 4.6]

NICHT BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFSÄTZE

Krüger, Jacob; Çalıklı, Gül; Bershadskyy, Dmitri; Heyer, Robert; Zabel, Sarah; Otto, Siegmar

Registered report: A laboratory experiment on using different financial-incentivization schemes in software-engineering experimentation

De.arxiv.org - [S.I.]: Arxiv.org . - 2023, Artikel 2202.10985, insges. 10 S.

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Briest, Lucas; Dharmananda, Prajwal; Tretau, Anne; Wagner, Ralf; Thomik, Maximilian; Tsotsas, Evangelos; Vorhauer-Huget, Nicole

Microwave heating as a possible route for the defossilization of green brick drying

EuroDrying 2023 - Lodz; Musielak, Grzegorz, S. 58-64;

[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

Bürger, Johannes Vincent; Jaskulski, Maciej; Kharaghani, Abdolreza

CFD simulations of agglomeration in counter-current spray drying with fines return

EuroDrying 2023 - Lodz; Musielak, Grzegorz, S. 75-80;

[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

Chen, Jin; Lu, Xiang; Kharaghani, Abdolreza

Evolution of pore structure during the drying of porous media

EuroDrying 2023 - Lodz; Musielak, Grzegorz, S. 81-88;

[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

Gruber, Sebastian; Thomik, Maximilian; Vorhauer-Huget, Nicole; Coppens, Frederik; Tsotsas, Evangelos; Först, Petra

In-situ analysis of the 3-D microstructure and its impact on the freeze-drying kinetics

EuroDrying 2023 - Lodz; Musielak, Grzegorz;

[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

Göbel, Sven; Pelz, Lars; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne

Upstream processing for viral vaccines - process intensification

Bioprocessing of viral vaccines, First edition - Abgingdon: Taylor & Francis; Kamen, Amine. - 2023, S. 137-173

Hashemloo, Ziba; Pour, Yehonatan; Krasovitov, Boris; Fominykh, Andrew; Levy, Avi; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza

Intensification of spray drying by absorption and desorption of soluble gases investigated experimentally at the level of single liquid droplets

EuroDrying 2023 - Lodz; Musielak, Grzegorz, S. 156-163;

[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

Hussain, Farooq; Ali, Faizan; Jaskulski, Maciej; Piatkowski, Marcin; Tsotsas, Evangelos

Prediction of spray dried product properties using machine learning algorithms

EuroDrying 2023 - Lodz; Musielak, Grzegorz, S. 181-189;

[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

Martensen, Carl Julius; Plate, Christoph; Keßler, Tobias; Kunde, Christian; Kaps, Lothar; Kienle, Achim; Seidel-Morgenstern, Andreas; Sager, Sebastian

Towards machine learning of power-2-methanol processes

Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 52 (2023), S. 561-568

Pelz, Lars; Göbel, Sven; Jaen, Karim; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne

Upstream processing for viral vaccines - general aspects

Bioprocessing of viral vaccines, First edition - Abgingdon: Taylor & Francis; Kamen, Amine. - 2023, S. 79-135

Peterson, Luisa; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai

Hybrid modeling of the catalytic CO2 methanation using process data and process knowledge

33rd European Symposium on Computer Aided Process Engineering, 2023 - Amsterdam, Netherlands: Elsevier; Kokossis, Antonios C., Bd. 52 (2023), S. 1489-1494

Pour, Yehonatan; Krasovitov, Boris; Fominykh, Andrew; Hashemloo, Ziba; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Levy, Avi

Spray drying of slurry droplets: effect of acoustic field and gas absorption

EuroDrying 2023 - Lodz; Musielak, Grzegorz, S. 339-346;

[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

Reuter, Julia; Elmestikawy, Hani; Evrad, Fabien; Mostaghim, Sanaz; Wachem, Berend

Graph networks as inductive bias for genetic programming - symbolic models for particle-laden flows

Genetic Programming, 1st ed. 2023. - Cham: Springer Nature Switzerland; Pappa, Gisele, S. 36-51 - (Lecture notes in computer science; volume 13986);

[Konferenz: 26th European Conference on Genetic Programming, EuroGP 2023, Brno, Czech Republic, April 12-14, 2023]

Vorhauer-Huget, Nicole; Thomik, Maximilian; Gruber, Sebastian; Först, Petra; Tsotsas, Evangelos

Pore network simulation of heat and mass transfer during freeze-drying of porous media

EuroDrying 2023 - Lodz; Musielak, Grzegorz, S. 451-457;

[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

Wachem, Berend

Eulerian-Eulerian modeling approach for turbulent particle-laden flows

Modeling approaches and computational methods for particle-laden turbulent flows - London : Academic Press, an imprint of Elsevier ; Subramaniam, Shankar . - 2023, S. 449-481

Zhang, Xiang; Sundmacher, Kai

Optimal design of anion-pillared metal-organic frameworks for gas separation

 $33 rd\ European\ Symposium\ on\ Computer\ Aided\ Process\ Engineering\ ,\ 2023\ -\ Amsterdam,\ Netherlands\ :\ Elsevier\ ;\ Kokossis,\ Antonios\ C.,\ Bd.\ 52\ (2023),\ S.\ 991-996$

DISSERTATIONEN

Du, Jiajie; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]

Experimental investigation and stochastic simulation of continuous spray agglomeration process in a horizontal fluidized bed

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (xxiii, 162 Seiten, 7,99 MB);

[Literaturverzeichnis: Seite 135-146] [Literaturverzeichnis: Seite 135-146]

Espinel Ríos, Sebastián; Klamt, Steffen [AkademischeR BetreuerIn]

Modeling, optimization, and predictive control for metabolic cybergenetics

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (iv, 92 Seiten, 28,18 MB);

[Literaturverzeichnis: Seite 83-92][Literaturverzeichnis: Seite 83-92]

Haraldseid, Ingunn; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]; Schmidt, Martin [AkademischeR BetreuerIn]

Effects of changes in external conditios on smoldering in biomass pellets

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (IX, 114, v Seiten, 12,6 MB);

[Literaturverzeichnis: Seite 111-114] [Literaturverzeichnis: Seite 111-114]

Janocha, Manuel; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Scheffler, Franziska [AkademischeR BetreuerIn]

Ex situ and in silico study of layer build-up and structure formation phenomena during convective drying of deposited droplets

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (XIV, 176 Seiten, 46,75 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite 161-172][Literaturverzeichnis: Seite 161-172]

Pralow, Alexander; Reichl, Udo [AkademischeR BetreuerIn]

Method development and its application for N-glycan analysis of influenza A virus antigens

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (XV, 145 Seiten, 7,1 MB);

[Literaturverzeichnis: Seite 96-109] [Literaturverzeichnis: Seite 96-109]

Rätze, Karsten Hans Georg; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]

Computer-aided model development, process design and operating strategies for transient liquid multiphase systems

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (xvi, 263 Seiten, 4.92 MB) ;

[Literaturverzeichnis: 217-238] [Literaturverzeichnis: 217-238]

Schmalfuß, Silvio; Sommerfeld, Martin [AkademischeR BetreuerIn]

Transportvorgänge in Fluidphasenresonanzmischern

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (xvii, 135 Seiten, 50,85 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite 121-132] [Literaturverzeichnis: Seite 121-132]

Triemer, Susann; Lorenz, Heike [AkademischeR BetreuerIn]

 $Reactive\ transformation\ of\ extraction\ by products\ -\ enhanced\ production\ of\ the\ animalarial\ artemisin in$

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (verschiedene Seitenzählung, 7,67 MB) ; [Literaturangaben][Literaturangaben]