



OTTO VON GUERICKE
UNIVERSITÄT
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-
UND SYSTEMTECHNIK

Forschungsbericht 2024

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 - Anhaltische 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-Görlau
- Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg
- Petrobras, Rio de Janeiro (Brasilien)
- Politecnico 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: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Lea Hilfert
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 01.01.2024 - 31.12.2027

Innovative Membranreaktoren für die nachhaltige, regionale Produktion von grünen Basischemikalien aus Methanol

Hintergrund

Die Synthese von Basischemikalien, wie Dimethylether (DME), Dimethoxymethan (DMM) und Methylformiat (MF) sind großindustrielle Prozesse, die hohe Treibhausgasemissionen durch die Verwendung fossiler Rohstoffe und die benötigten hohen Prozesswärmen verursachen. Für die nachhaltige Herstellung der Chemikalien kann alternativ klimaneutrales Methanol aus grünem Wasserstoff, der durch regenerative Energie gewonnen wird, eingesetzt werden. Der Transformationsprozess der chemischen Industrie bietet den KMUs in Sachsen-Anhalt die Chance, durch regionale Produktion den zukünftigen Bedarf an Basischemikalien, sowie deren Lieferketten zu sichern. Um den Technologietransfer zu gewährleisten, sind vor allem Forschung und Entwicklung im öffentlichen Sektor essentiell.

Projektziele

Im Projekt soll eine Wertschöpfung des grünen Wasserstoffs und seiner Folgeprodukte realisiert werden, indem grünes Methanol zu DME, DMM und MF umgewandelt wird. Dazu wird erstmals eine synergetische Integration eines bereits entwickelten -Katalysators (4,8%) mit einer inerten Membran in Membranreaktoren mit ausschließlich partikulären Katalysatorschüttungen realisiert. Dadurch wird eine gezielte Reaktionslenkung und damit Selektivitätskontrolle durch eine getrennte, verteilte Dosierung von Methanol und Sauerstoff gegenüber dem konventionellen Festbettreaktor erreicht. Das Ziel des Projektes ist, Synergien zwischen kommerziellen Membranen und dem Katalysator aufzuzeigen. Wissenschaftliche Grundlage dafür sind umfassende kinetische Studien und die Entwicklung mechanistischer kinetischer Modelle, die der Evaluation des Reaktorsystems dienen. Abschließend sollen die modellbasierten Ergebnisse experimentell validiert werden.

Aus grünem Methanol werden somit drei Wertprodukte gewonnen, die Anwendung in der chemischen Industrie finden. Das Produktspektrum kann durch Temperatursteuerung und intelligente Reaktionsführung in Membranreaktoren gezielt gelenkt werden.

...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Jan Paul Walter
Kooperationen: Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme Institutsteil Hermsdorf IKTS-HD; Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V.; Rauschert Kloster Veilsdorf GmbH; Chemiewerke Bad Köstritz GmbH; OHplus GmbH Staßfurt; AECl Schirm Schönebeck
Förderer: Bundesministerium für Bildung und Forschung - 01.11.2024 - 31.10.2027

Innovative Katalytische Membran-Reaktoren für die nachhaltige, effiziente Produktion von Plattform-chemikalien - Materialinnovationen von Katalysator und Membran (I-KaMeRa)

Um nachhaltig den Bedarf von Industrie und Konsumenten in der Gesellschaft an bereits etablierten Produkten zu decken, ist eine neue Rohstoffbasis und Weiterentwicklung der konventionellen Herstellungsverfahren notwendig. Damit zukünftig Produkte aus nachwachsenden Rohstoffen und mit Hilfe von erneuerbaren Energien hergestellt werden können, ist die Entwicklung neuer Materialien in Form hocheffizienter katalytischer und membranbasierter Technologien unerlässlich. Beide Technologien finden synergetisch, gekoppelt in katalytischen Membranreaktoren

Anwendung.

Für die Entwicklung von innovativen, ressourcenschonenden Membranreaktoren ist insbesondere die Kopplung zwischen transmembranem Stofftransport und der Reaktionskinetik essenziell. Unter optimalen Bedingungen werden genauso viele Moleküle durch die Membran in die Reaktionszone transportiert, wie durch die Reaktion umgesetzt werden. Demzufolge ist die Kombination aus Katalysator und Membranmaterial sowie deren Abstimmung von entscheidender Bedeutung für die Entwicklung von Membranreaktoren. Daher werden in diesem Projekt alle drei Teilaspekte Katalysatorentwicklung, Membranentwicklung und deren Kopplung in Membranreaktoren sowohl separat als auch in Kombination untersucht, bewertet und up-skaliert. Die Membranentwicklung wird durch die Rauschert Kloster Veilsdorf GmbH gemeinsam mit dem Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme durchgeführt, die Katalysatorentwicklung sowie die Kopplung der entwickelten Membranen und Katalysatoren in Membranreaktoren durch die Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg. Begleitet wird das Projekt durch die assoziierten Partner AECI Schirm GmbH, Chemiewerke Bad Köstritz GmbH und die OHplus GmbH.

In den einzelnen Entwicklungsstufen kommen sowohl experimentelle als auch simulationsbasierte Forschungsansätze zum Tragen, um die im Labormaßstab erzielten Ergebnisse in den Demonstratormaßstab zu übertragen und zu ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung:	Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung:	M.Sc. Rucha Shirish Medhekar, PD. Dr. Andreas Vorholt, Dr. Martin Gerlach
Kooperationen:	Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion (CEC) Mülheim
Förderer:	Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.06.2024 - 31.05.2027

Überwachung und Steuerung von Reaktionen in der homogenen Katalyse auf der Grundlage von Daten eines molekularen Katalysators

Die Katalyse ist eine der wichtigsten Technologien unserer Zeit, die die Nachhaltigkeit in der chemischen Industrie verbessern wird. Die Katalysatorforschung konzentriert sich eher auf Aktivität und Selektivität als auf die Stabilität des Katalysators. Letztere ist für die industrielle Umsetzung von entscheidender Bedeutung, bestimmt die Anschlussfähigkeit von Forschungsprojekten und ist für die Umstellung auf erneuerbare Energieträger unerlässlich. Insbesondere bei der homogenen Katalyse ist der Anteil der Stabilitätsstudien im Vergleich zur heterogenen Katalyse gering.

Das Hauptziel dieses Projekts ist es, ein tieferes Verständnis der Deaktivierungsmechanismen in der homogenen Katalyse zu erlangen und herauszufinden, wie die damit einhergehenden negativen Auswirkungen auf katalysierte Reaktionen bei kontinuierlichen Reaktionsprozessen vermieden werden können. Die vorgestellten 4 Deaktivierungsmodi werden im Rahmen dieses Projekts im Detail behandelt:

- Modus 1: Langfristige Deaktivierung aufgrund inhärenter dynamischer Katalysatorkomplexreaktionen (Alterung)
- Modus 2: Katalysatorverluste aufgrund von Auslaugung bei kontinuierlichen Prozessen einschließlich Katalysatorabtrennung/-rückführung
- Modus 3: Deaktivierung aufgrund von Beschränkungen des Gas-/Flüssigkeitstransports
- Modus 4: Verunreinigungsinduzierte Deaktivierung (inhärenter dynamischer Reaktorbetrieb)

Methodisch wird dies durch den Einsatz multispektroskopischer Messungen in Kombination mit fortschrittlicher chemometrischer Analyse während kinetischer und kontinuierlicher Experimente einschließlich Katalysatorabtrennung und -rückführung auf Prozessebene erreicht. Die daraus resultierenden zeitaufgelösten molekularen Daten von Katalysatorspezies und Reaktanten werden zur Entwicklung neuer mechanistischer kinetischer Modelle der Deaktivierung verwendet. Diese Modelle dienen als Ausgangspunkt für eine modellbasierte Prozesssteuerung und -optimierung durch Katalysatordosierungsstrategien als ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Pascal Kumar
Kooperationen: Dr. Manfred Anders, ZFB Projektmanagement GmbH, Leipzig; Dr. Steffen Mozer, requisimus AG Esslingen
Förderer: ZIM Zentrales Innovationsprogramm Mittelstand - 01.05.2024 - 30.11.2026

Herstellung von grünem Methanol aus Biogas durch die Direktsynthese mittels Mikrowellenplasma

Die Elektrifizierung ist eine der Säulen der aktuellen Defossilisierungsstrategien insbesondere für den Individualverkehr, was jedoch den Auf- und Ausbau der bestehenden Netzinfrastruktur für Strom und Wasserstoff erfordert. Luftfahrt, Schifffahrt und der Güterverkehr lassen sich nicht ohne weiteres Elektrifizieren, sodass die Branchen auf alternative und regenerative Kraftstoffe setzen. Das geplante Projekt zielt daher auf die Herstellung von grünem Methanol als klimaneutraler Roh- und Kraftstoff durch ein neuartiges Herstellungsverfahren für Methanol mittels eines Mikrowellenplasmas und der Nutzung von Biogas. Das so gewonnene Methanol kann direkt als Kraftstoff, in Brennstoffzellen oder zu Kerosin weiterverarbeitet, eingesetzt werden. Durch die geplante Direktsynthese mittels Mikrowellenplasma soll der energieintensive Zwischenschritt der Synthesegasgewinnung aus fossilem Erdgas und den damit verbundenen CO₂-Emissionen eliminiert und Energie-/Betriebskosten signifikant reduziert werden. Ziel des Projekts ist deshalb die Entwicklung und Testung eines geeigneten Mikrowellenplasmareaktors und Demonstration der Direktsynthese von Methanol im Labormaßstab.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: B.Sc. Lucas Schmidt, M.Sc. Jan Paul Walter
Kooperationen: Mercer Stendal GmbH
Förderer: Industrie - 01.10.2024 - 30.09.2026

Selektive Abtrennung von grünem CO₂ aus Abgasströmen der Papierindustrie zur Wertschöpfung

Das Forschungsprojekt widmet sich der Untersuchung von CO₂-Absorptions- und -Desorptionsprozessen unter Einsatz wässriger Amin-Lösungen. Ziel ist es, die Effizienz, Stabilität und Langzeitbeständigkeit dieser Lösungen im Rahmen der CO₂-Abscheidung und -Nutzung (Carbon Capture and Utilization, CCU) zu bewerten. Dies ist besonders relevant im Kontext der Nutzung von CO₂-reichen Abgasen aus Biomasseverbrennungsanlagen. Neben CO₂ enthalten diese Abgase weitere Komponenten wie Sauerstoff (O₂), Stickstoffdioxid (NO₂), Schwefelwasserstoff (H₂S), Schwefeldioxid (SO₂), Stickstoff (N₂) sowie feine Stäube. Diese Begleitstoffe können die chemische Stabilität und Absorptionskapazität der verwendeten Amine erheblich beeinflussen.

Die Untersuchungen fokussieren sich auf drei spezifische Amine/Mischungen: N-Methyldiethanolamin (MDEA), Ethanolamin (MEA) und Diethylentriamin (DETA). Die Konzentration der Amine wird dabei gezielt variiert, um den Einfluss unterschiedlicher Bedingungen auf die Absorption und Desorption von CO₂ zu analysieren. Während der CO₂-Beladung reagieren die Amine mit dem CO₂ unter Bildung von Carbamaten. Die Experimente umfassen die systematische Variation mehrerer Parameter, um deren Einfluss auf die Effizienz der CO₂-Abscheidung zu untersuchen. Hierzu zählen insbesondere die Aminkonzentration, die Temperatur und die Verweilzeit der Lösung im Prozess. Durch die gezielte Veränderung dieser Parameter können optimale Bedingungen für die Absorption und Desorption ermittelt werden. Zudem wird in einem zweiten Schritt untersucht, wie Störkomponenten aus Biomasse-Abgasen die CO₂-Absorptionskapazität und die chemische Stabilität der Amine beeinflussen.

Die Experimente erfolgen zunächst unter idealisierten Bedingungen mit einem Modellgasgemisch aus 20 % CO₂ und 80 % Stickstoff (N₂). Dies ermöglicht die detaillierte Analyse der Grundreaktionen und die Ermittlung optimaler Betriebsparameter ohne Störeinflüsse. Anschließend werden Langzeitexperimente mit ...

[Mehr hier](#)

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 vorliegenden 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 Simulationsumgebungen 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 - 30.09.2025

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

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 PEF 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, PEF, 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 ...
[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 01.04.2024 - 31.12.2024

Modulares Reaktorsystem für die heterogene Katalyse zur Untersuchung industrieller, skalierbarer Katalysatoren

Der Rohstoffwandel in der Chemischen Industrie bedingt neue Reaktoren und dynamische Prozesse. Die aktuelle Roadmap *Katalyse* sowie *Reaktionstechnik* messen diesem für die Zukunft eine hohe Bedeutung bei, um die gesetzten Nachhaltigkeitsziele zu erfüllen und auch regional wettbewerbsfähig zu sein. Neue, flexible, biobasierte Rohstoffe mit fluktuierenden Eigenschaften stellen eine besondere Herausforderung für die Entwicklung neuer Katalysatoren und Prozesse dar. Explizit ist hierbei die Deaktivierung und Regeneration teurer edelmetallbasierter Katalysatoren zu nennen.

Basis für die modellbasierte Entwicklung und Optimierung neuer Prozesse ist ein detailliertes Verständnis der Kinetik im Katalysator. Insbesondere bei komplexen Deaktivierungsprozessen durch Verkokung und periodischer Regeneration ist eine Analyse der zeitlichen/örtlichen Aktivität essentiell, um die Dynamik von Reaktion und Temperaturfronten zu verstehen, die Katalysatorstandzeit und damit die Nachhaltigkeit deutlich zu erhöhen sowie in den industriellen Maßstab zu skalieren bzw. gezielt zu beeinflussen.

Das im Projekt zu realisierende modulare Reaktorsystem für die heterogene Katalyse (Abbildung 1) bietet erstmalig die Möglichkeit einer dynamischen und intrapartikulären Katalysatorpartikeldiagnostik in der Katalyse, gekoppelt mit Spektroskopie durchzuführen und so die Dynamik der Systeme hochaufgelöst zu erfassen bzw. diese unter Verwendung dynamischer Methoden gezielt anzuregen. Folglich können Daten mit hohem Informationsgehalt bei reduziertem experimentellem Aufwand/Kosten für die kinetische Analyse und mechanistische Modellbildung von Katalysatoren erhalten werden. Damit ist der Schlüssel zur Auslegung neuer Reaktorkonzepte, zur Prozessintensivierung, der Erhöhung von Katalysatorstandzeiten im Sinne der Nachhaltigkeitsstrategie und dem modellbasierten Scale-up gegeben.

Hier setzt das Projekt mit dem Modulares Reaktorsystem in Form dynamischer, experimenteller und ...
[Mehr hier](#)

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 CO₂ zu Glycerincarbonat. Stoffliche Fixierung von CO₂. 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 VO_x 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 VO_x-Al₂O₃ 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 VO_x/TiO₂ catalytic systems.

Projektleitung: Prof. Dr. Gunter Saake, Dr.-Ing. Robert Heyer
Projektbearbeitung: Daniel Walke
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2021 - 30.04.2025

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 Messdaten zu Umweltparametern oder klinischen Patientendaten. Die flexible Knotenstruktur macht es einfach, die Ergebnisse verschiedener Untersuchungen hinzuzufügen. Dies reicht von einfachen Blutdruckmessungen über die neuesten CT- und MRT-Scans bis hin zu hochauflösenden Omics-Analysen (z.B. von Tumorbiopsien, Darmmikrobiom-Proben). Allerdings wird das volle Potenzial der Datenverarbeitung und -analyse mittels Graphdatenbanken in biologischen und klinischen Anwendungsfällen noch nicht vollständig ausgeschöpft. Insbesondere die riesige Menge an miteinander verbundenen Daten, die geladen, verarbeitet und analysiert werden müssen, führt zu zu langen Verarbeitungszeiten, um in klinische Arbeitsabläufe integriert werden zu 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 und deren Speicherung sowie ihr Verarbeitungsmodell. Anschließend schlagen wir Optimierungen für effiziente operationale und analytische Operatoren vor. Für die zweite Richtung stellen wir uns vor, Algorithmen des maschinellen Lernens näher an ihre Datenlieferanten - die Graphdatenbanken - heranzubringen. Zu diesem Zweck füttern wir in einem ersten Schritt die Algorithmen des maschinellen Lernens direkt mit dem Graphen als Eingabe, indem wir geeignete Graphenoperatoren entwerfen. In einem zweiten Schritt ...

[Mehr hier](#)

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 Blutdruckmessungen über die neuesten CT- und MRT-Scans bis hin zu hochauflösenden Omics-Analysen (z.B. von Tumorbiopsien, Darmmikrobiom-Proben). Allerdings wird das volle Potenzial der Datenverarbeitung und -analyse mittels Graphdatenbanken in biologischen und klinischen Anwendungsfällen noch nicht vollständig ausgeschöpft. Insbesondere die riesige Menge an miteinander verbundenen Daten, die geladen, verarbeitet und analysiert werden müssen, führt zu langen Verarbeitungszeiten, um in klinische Arbeitsabläufe integriert werden zu 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 und deren Speicherung sowie ihr Verarbeitungsmodell. Anschließend schlagen wir Optimierungen für effiziente operationale und analytische Operatoren vor. Für die zweite Richtung stellen wir uns vor, Algorithmen des maschinellen Lernens näher an ihre Datenlieferanten - die Graphdatenbanken - heranzubringen. Zu diesem Zweck füttern wir in einem ersten Schritt die Algorithmen des maschinellen Lernens direkt mit dem Graphen als Eingabe, indem wir geeignete Graphenoperatoren entwerfen. In einem zweiten Schritt integrieren wir ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Reza Kharaghani
Projektbearbeitung: MSc. Enqi Liu
Kooperationen: Prof. Alba Dieguez Alonso; Prof. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.08.2024 - 31.07.2028

Adaptive pore network modelling and experiments of thermochemical processes in single porous particles

A crucial component in the development of DEM/CFD computational tools to describe the thermochemical behaviour of bulk solids are the single particle models for DEM. Only with accurate single particle models, particle conversion and/or particle product qualities can be reliably predicted at the outlet of industrial reactors. The complexity in the description lies in the fact that at particle scale chemistry and transport compete at similar time scales.

Project B4 is driving the advancement in the modelling of reactive processes at particle level, with a primary focus on biomass pyrolysis and char conversion as model reactive systems in FP2. Biomass conversion has been selected as it can serve as a highly complex model system for DEM single particle models including heterogeneous reactions, change of particle shape and pore structure, as well as anisotropic intra-particle transport properties. As methodological approach to develop sophisticated single particle models, a novel, one-of-a-kind simulative-experimental framework will be derived. This framework will be sustained on three pillars: the development of adaptive pore network models (PNM), the parametrisation of continuum models (CM) based on effective transport, chemical, and morphological properties derived from the highly resolved PNM simulations, and the provision of measurement data that facilitate the bridging of scales from PNM to CM.

Projektleitung: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Reza Kharaghani
Kooperationen: Nestlé, Switzerland; Merck Group; Caribion Innovation Centre; Danone Nutricia Research; 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: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Reza 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: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Reza 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, apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Reza Kharaghani
Kooperationen: Dr. Maciej Jaskulski, TU Lodz
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.05.2022 - 30.06.2025

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: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Reza 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 ...
[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2023 - 30.09.2027

"Mehrstufige katalytische Produktionssysteme 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 Magnesiumionen 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 Bergbauabfällen 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 wechselnden Bedingungen der Ausgangsmaterialien 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 Rahmen des SPP2364 der komplexe Prozess in einer Miniplant als Pilotanlage aufgebaut, detailliert untersucht und optimiert werden.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Neda Kazemi, MSc. Simson Rodrigues
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Prof. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2028

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 important for thermochemical processes in particle systems, but, commonly calculated by simplified models, the validity of which is questionable even in case of equally sized spheres. Any reliable background is missing in case of 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 investigated by experiments and simulations for a wide range of different polyhedral particles. On this basis new correlations for the prediction of effective thermal conductivity for arbitrary materials that consist of polyhedron-like particles are developed. The transition to particle-particle heat transfer coefficients is calibrated by experiments in a small rotary drum. Binary mixtures of particles that differ in size, shape, or

conductivity are also considered. Packed bed porosity and the relative area of flat interparticle contacts is derived from X-ray μ -CT imaging results. Interstitial packed bed morphology, including pore size variability, is considered.

Projektleitung: MSc. Subash Reddy Kolan, Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Kooperationen: MSc. Rui Wang, supported 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 - 30.09.2027

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 are produced. Instead of conventional fluidization, special spouted bed equipment with adjustable air inlet is used for processing. High-velocity air inlet jets help to shift the dynamic equilibrium between aggregation and breakage towards smaller and stronger agglomerates in this kind of equipment. Regarding the characterization of agglomerates, new methods to reconstruct 3D agglomerate structure from 2D imaging data are developed. In this frame, the level of sub-agglomerate mixing can be identified and pushed towards individual nanoparticles by use of non-flame, i.e. not sintered, raw material. To describe the process, novel population balances and discrete models are used. Hetero-agglomerate conductivity (thermal, electrical) is measured and modelled.

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 processes 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 autonomously run the process towards desired agglomerate structures and structure-dependent end-user properties.

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 - 31.05.2025

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, 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
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.07.2023 - 31.12.2024

Design of Novel Fluidized Bed Processes for Plastics Recycling

Pyrolysis has is a 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. However, the process poses significant challenges, such as: (i) the melting of plastics before conversion and coking leading to upstream and downstream clogging problems, (ii) the emission 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: MSc. Akbas Serap, Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2021 - 31.12.2024

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 μm 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 μm 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
Projektbearbeitung: MSc. Haashir Altaf
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Dr. Tanja Vidakovic-Koch, MPI Magdeburg
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.09.2019 - 30.06.2024

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

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 electrolyzers. 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. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2023 - 30.06.2028

SFB 287 FP2 Bulkreaktion - Teilprojekt C5

Das Ziel von Projekt C5 ist die Entwicklung, Ableitung und Validierung neuer Modelle für eine präzisere Kopplung zwischen Fluid und Partikeln in DEM/CFD-Frameworks, wobei die heterogene und anisotrope Struktur lokaler Partikelpackungen berücksichtigt wird. Hierfür werden aufgelöste Simulationen von Partikelpackungen durchgeführt, die folgende Aspekte umfassen: i) Partikel mit variierenden Größenverteilungen, ii) nicht-isotherme Strömungen und iii) bewegte Partikel. Diese Erweiterungen stellen eine natürliche Weiterentwicklung unserer numerischen Werkzeuge dar und sind von hoher Relevanz für die Forschungsgemeinschaft im Bereich DEM/CFD.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2023 - 30.06.2028

SFB 287 FP2 Bulk-Reaktion - Teilprojekt C2

Strömungsmischung, Wärmeübertragung und chemische Reaktionen in Festbett- und bewegten Bettreaktoren. Das Projekt C2 untersucht die Strahlausbreitung in Festbett- und bewegten Bettreaktoren, die für zahlreiche Anwendungen in der chemischen und energieverfahrenstechnischen Industrie von Bedeutung sind, z. B. in katalytischen Festbettreaktoren, Pelletheizungen, Schachtföfen und Rostfeuerungsanlagen. Die experimentellen Ergebnisse werden mit numerischen Simulationen verglichen, um die Validierung durchzuführen und Fehler in den

verschiedenen Mittelungsansätzen der DEM/CFD-Modellierung zu quantifizieren. Zudem werden PR-DNS- und DEM/CFD-Simulationen mit den neuen Partikelkonfigurationen aus FP2 fortgesetzt, um Fehler in bestehenden DEM/CFD-Ansätzen zu identifizieren und verbesserte Mittelungsverfahren zu entwickeln. Diese Simulationen adressieren auch den Wärmeübergang und tragen zur Weiterentwicklung des DEM/CFD-Rahmenwerks bei.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2024 - 30.09.2027

Zwei-, Drei-, und Vier-Wege-Kopplung suspensierter länglicher Partikel in turbulenten Strömungen

Das Projekt befasst sich mit der Entwicklung präziser Modelle zur Beschreibung des Verhaltens nicht-sphärischer Partikel in turbulenten Mehrphasenströmungen, die in industriellen Prozessen häufig auftreten.

Ziel ist es, die bisherige Annahme sphärischer Partikel zu überwinden, da sie oft zu ungenauen Ergebnissen führt. Mit einem Euler/Lagrange-Ansatz, der LES- und RANS-Methoden integriert, sollen Rückwirkungen der Partikel auf die Strömung, fluiddynamische Wechselwirkungen und Partikelkollisionen berücksichtigt werden. Die Modelle basieren auf grundlegenden physikalischen Prinzipien und werden mittels partikel aufgelöster direkter numerischer Simulationen (PR-DNS) abgeleitet. Die Ergebnisse sollen die Vorhersage und Optimierung von Prozessen mit nicht-sphärischen Partikeln deutlich verbessern.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2024 - 31.12.2026

Nachwuchsgruppe im Emmy Noether-Programm (2. Förderphase)

Sowohl Staubflammen als auch industrielle Zellkultivierungen weisen häufig Trägerströmungen auf, die turbulent sind. Turbulenz ist dabei eine scheinbar zufällige Bewegung des Trägerfluids, die von kleinen Störungen hervorgerufen wird. Da Turbulenz den kleinskaligen Impuls-, Stoff- und Wärmeaustausch zwischen dem Trägermedium und den dispergierten Partikeln beeinflusst, liegt unser Fokus im zweiten Förderabschnitt auf der Frage, wie sich diese Beeinflussung im Mittel auf großskalige Vorhersagegrößen wie beispielsweise die Oxidpartikelgrößenverteilung oder die Zellanzahl auswirkt? Zur Beantwortung dieser Frage wird die Bewegungsgleichung, die das Verhalten der Partikelpopulation beschreibt, in eine übergeordnete statistische Beschreibung eingebettet. Ein Vorteil dieses geschichteten Ansatzes ist, dass Ausdrücke für chemische Reaktionen und für den Gas-Partikel Stoff- und Wärmeaustausch, die in laminaren Strömungen bestimmt wurden, gültig bleiben und geschlossen behandelt werden können.

Das vollständige Modellierungsrahmenwerk wird schließlich eingesetzt, um den Schadstoff- und Oxidpartikel ausstoß einer turbulenten Staubflamme zu beurteilen und sowohl die räumliche Mikroträgerverteilung in einem Bioreaktor als auch mögliche Substratlimitierungen vorherzusagen. Zu Validierungszwecken ziehen wir dabei Vergleiche mit existierenden experimentellen Messungen heran.

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, Wärme- und 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 Zuflussmuster 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 ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.08.2022 - 30.06.2025

Understanding the role of particle shape in gas-solid processes (1.-3. Förderphase)

Das Projekt widmet sich der Entwicklung eines umfassenden Simulationsframeworks, basierend auf CFD-DEM, zur Modellierung der Kunststoffpyrolyse in Wirbelschichtreaktoren, einem vielversprechenden Ansatz zur Bewältigung der Herausforderungen des Kunststoffrecyclings.

Während experimentelle Studien aufgrund begrenzter Einblicke in mikro- und mesoskalige physikochemische Wechselwirkungen nur eingeschränkte Erkenntnisse liefern, bietet CFD-DEM eine geeignete Methode zur Analyse und Optimierung der komplexen Prozesse in Wirbelschichten. Insbesondere adressiert das Projekt offene Herausforderungen wie das Schmelzverhalten von Kunststoffen, das in Wirbelschichten zu Problemen wie

Sinterung und Agglomeration führen kann, die eine De-fluidisierung des Reaktors verursachen. Die chemischen Reaktionen, Partikelschrumpfung und Schmelzverhalten werden detailliert untersucht, und das Projekt zielt darauf ab, das erste valide Simulationsmodell für die Kunststoffpyrolyse in Wirbelschichten zu entwickeln. Dieses Modell soll sowohl zur Optimierung von Reaktorbetrieben als auch zur Förderung einer zirkulären Wirtschaft beitragen.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Berend van Wachem
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.08.2022 - 30.06.2025

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 solcher 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 ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2021 - 30.11.2024

Verbesserung der Simulation von 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 "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 insbesondere 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 industriellen Prozessen, wie der Strömung roter Blutkörperchen im Plasma oder der Fluidisierung von Kohl- oder Biomassapartikeln 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 Modell 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 Berechnungskosten 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 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 Durchflussmodellierungsmethode - 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 $M \gg 1$, 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

Dieses Forschungsprojekt untersucht die Partikelablagerungsmuster von Tropfen, die mit Partikeln beladen sind, während sie verdunsten. Solche Ablagerungen sind für Anwendungen wie Tintenstrahldruck und RNA-Sequenzierung von entscheidender Bedeutung. Trotz umfangreicher Forschung fehlen grundlegende Einblicke in die Mechanismen der Partikelstreuung und -ablagerung, insbesondere im Hinblick auf Partikel-Partikel- und Partikel-Substrat-Wechselwirkungen, die Partikelanordnung an der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche und die Auswirkungen der Partikelgrößenverteilung. Die Ziele des Projekts

umfassen: (i) die Quantifizierung der Rolle von van-der-Waals-Kräften bei der Partikelstreuung, (ii) die Identifikation optimaler Bedingungen für die Partikelanordnung an der Grenzfläche und (iii) die Analyse der Auswirkungen der Partikelgrößenverteilung auf die Streuung und Trennung von kugelförmigen und ellipsoiden Partikeln. Dazu wird ein effizientes Simulationstool entwickelt, das die Verdunstung von partikelbeladenen Tropfen modelliert und physikalische Mechanismen wie kapillare Anziehung berücksichtigt.

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 Raum- und 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

...
[Mehr hier](#)

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, inerte 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 grundlegenden 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 ...

[Mehr hier](#)

6. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

Akbas, Serap; Zhang, Jinchi; Hoffmann, Torsten; Tsotsas, Evangelos

Aerosol fluidized bed coating - exploring the impact of process conditions on process yield, coating coverage and thickness

The chemical engineering journal - Amsterdam : Elsevier, Bd. 495 (2024), Artikel 153349, insges. 14 S.

[Imp.fact.: 13.3]

Alkadhem, Ali M.; Mohamed, Hend Omar; Kulkarni, Shekhar R.; Hoffmann, Torsten; Zapater, Diego; Musteata, Valentina E.; Tsotsas, Evangelos; Castaño, Pedro

Shaping technical catalyst particles in a bottom-spray fluidized bed

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 438 (2024), Artikel 119602, insges. 11 S.

[Imp.fact.: 5.2]

Baum, Philipp Adrian; Gerlach, Martin; Hamel, Christof

Modeling an industrial hydrochlorination of glycerol - A systematic study of basic reactor types

Chemie - Ingenieur - Technik - Weinheim : Wiley-VCH Verl., Bd. 96 (2024), Heft 12, S. 1545-1561

[Imp.fact.: 1.5]

Bhaskaran, Supriya; Miličić, Tamara; Vidaković-Koch, Tanja; Surasani, Vikranth Kumar; Tsotsas, Evangelos; Vorhauer-Huget, Nicole

Model PEM water electrolyzer cell for studies of periodically alternating drainage/imbibition cycles

International journal of hydrogen energy - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 77 (2024), S. 1432-1442

[Imp.fact.: 8.1]

Bhoi, Stutee; Kolan, Subash Reddy; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Population balance modeling of formation and breakage of nanoparticle agglomerates in a spouted bed

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 433 (2024), Artikel 119271

[Imp.fact.: 5.2]

Chen, Kaicheng; Li, Zhongyi; Akbas, Serap; Tsotsas, Evangelos

Monte Carlo modeling of particle agglomeration during polymer pyrolysis in bubbling fluidized bed

Fuel - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 367 (2024), Artikel 131487, insges. 15 S.

[Imp.fact.: 7.4]

Chéron, Victor; Evrard, Fabien; van Wachem, Berend

Drag, lift and torque correlations for axi-symmetric rod-like non-spherical particles in locally linear shear flows

International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 171 (2024), insges. 19 S.

[Imp.fact.: 3.6]

Chéron, Victor; van Wachem, Berend

Drag, lift, and torque correlations for axi-symmetric rod-like non-spherical particles in linear wall-bounded shear flow

International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 179 (2024), insges. 19 S.

[Imp.fact.: 3.6]

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

Deterministic drag modelling for spherical particles in Stokes regime using data-driven approaches

International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 178 (2024), Artikel 104880, insges. 13 S.

[Imp.fact.: 3.6]

Elmestikawy, Hani; Reuter, Julia; Evrard, Fabien; Mostaghim, Sanaz; van Wachem, Berend

Deterministic drag modelling for spherical particles in Stokes regime using data-driven approaches

International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 178 (2024), insges. 13 S.

[Imp.fact.: 3.6]

Faridi, Ibtihaj Khurram; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza

Advancing process control in fluidized bed biomass gasification using model-based deep reinforcement learning
Processes - Basel : MDPI, Bd. 12 (2024), Heft 2, Artikel 254, insges. 21 S.
[Imp.fact.: 3.5]

Gorges, Christian; Brömmer, Maximilian; Velten, Christin; Wirtz, Siegmund; Mahiques, Enric Illana; Zähringer, Katharina; Wachem, Berend

Comparing two IBM implementations for the simulation of uniform packed beds
Particuology - Amsterdam : Elsevier, Bd. 86 (2024), S. 1-12
[Imp.fact.: 3.5]

Gruber, Sebastian; Greiner, Joshua; Eppink, Alexander; Thomik, Maximilian; Coppens, Frederik; Vorhauer-Huget, Nicole; Tsotsas, Evangelos; Foerst, Petra

Pore shape matters - in-situ investigation of freeze-drying kinetics by 4D XCT methods
Food research international - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 193 (2024), Artikel 114837, insges. 13 S.
[Imp.fact.: 7.0]

Göbel, Sven; Kazemi, Ozeir; Ma, Ji; Jordan, Ingo; Sandig, Volker; Paulissen, Jasmine; Kerstens, Winnie; Thibaut, Hendrik Jan; Reichl, Udo; Dallmeier, Kai; Genzel, Yvonne

Parallel multifactorial process optimization and intensification for high-yield production of Live YF17D-vectored zika vaccine
Vaccines - Basel : MDPI, Bd. 12 (2024), Heft 7, Artikel 755, insges. 23 S.
[Imp.fact.: 5.2]

Göbel, Sven; Pelz, Lars; Silva, Cristina A. T.; Brühlmann, Béla; Hill, Charles; Altomonte, Jennifer; Kamen, Amine; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne

Production of recombinant vesicular stomatitis virus-based vectors by tangential flow depth filtration
Applied microbiology and biotechnology - Berlin : Springer, Bd. 108 (2024), Artikel 240, insges. 18 S.
[Imp.fact.: 5.0]

Hausmann, Max; Chéron, Victor; Evrard, Fabien; van Wachem, Berend

Study and derivation of closures in the volume-filtered framework for particle-laden flows
Journal of fluid mechanics - Cambridge [u.a.]: Cambridge Univ. Press, Bd. 996 (2024), insges. 45 S.
[Imp.fact.: 3.6]

Hausmann, Max; Elmestikawy, Hani; van Wachem, Berend

Physically consistent immersed boundary method: A framework for predicting hydrodynamic forces on particles with coarse meshes
Journal of computational physics - Amsterdam : Elsevier, Bd. 519 (2024), S. 22
[Imp.fact.: 3.8]

Heinks, Tobias; Hofmann, Katrin; Last, Simon; Gamm, Igor; Blach, Luise; Wei, Ren; Bornscheuer, Uwe T.; Hamel, Christof; @von Langermann, Jan

Selective Modification of the Product Profile of Biocatalytic Hydrolyzed PET via Product-Specific Medium Engineering
ChemSusChem - Weinheim : Wiley-VCH . - 2024, insges. 10 S.
[Imp.fact.: 7.5]

Heinks, Tobias; Hofmann, Katrin; Zimmermann, Lennard; Gamm, Igor; Lieb, Alexandra; Blach, Luise; Ren, Wei; Bornscheuer, Uwe T.; Thiele, Julian; Hamel, Christof; Langermann, Jan

Analysis of the product-spectrum during the biocatalytic hydrolysis of PEF (poly(ethylene furanoate)) with various esterases
RSC sustainability - [Cambridge]: Royal Society of Chemistry . - 2024, insges. 13 S.

Hellwig, Patrick; Kautzner, Daniel; Heyer, Robert; Dittrich, Anna; Wibberg, Daniel; Busche, Tobias; Winkler, Anika; Reichl, Udo; Benndorf, Dirk

Tracing active members in microbial communities by BONCAT and click chemistry-based enrichment of newly synthesised proteins
ISME communications - Oxford : Oxford University Press, Bd. 4 (2024), Heft 1, Artikel ycae153, insges. 43 S.

Heyer, Robert; Hellwig, Patrick; Maus, Irena; Walke, Danile; Schlüter, Andreas; Hassa, Julia; Sczyrba, Alexander; Tubbesing, Tom; Klocke, Michael; Mächtig, Torsten; Schallert, Kay; Seick, Ingolf; Reichl, Udo; Benndorf, Dirk

Breakdown of hardly degradable carbohydrates (lignocellulose) in a two-stage anaerobic digestion plant is favored in the main fermenter

Water research - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 250 (2024), Artikel 121020, insges. 11 S.
[Imp.fact.: 12.8]

Huber, Nicolas; Alcalá-Orozco, Edgar Alberto; Rexer, Thomas; Reichl, Udo; Klamt, Steffen

Model-based optimization of cell-free enzyme cascades exemplified for the production of GDP-fucose
Metabolic engineering - Orlando, Fla. : Academic Press, Bd. 81 (2024), S. 10-25

[Imp.fact.: 8.4]

Jain, Amjain; Denner, Fabian; van Wachem, Berend

Dispersion of particles in a sessile droplet evaporating on a heated substrate

International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 180 (2024), insges. 19 S.
[Imp.fact.: 3.6]

Karsten, Christina B.; Buettner, Falk F.R.; Cajic, Samanta; Nehlmeier, Inga; Roshani, Berit; Klippert, Antonina; Sauermann, Ulrike; Stolte-Leeb, Nicole; Reichl, Udo; Gerardy-Schahn, Rita; Rapp, Erdmann; Stahl-Hennig, Christine

Macrophage- and CD4+ T cell-derived SIV differ in glycosylation, infectivity and neutralization sensitivity
PLoS pathogens / Public Library of Science - Lawrence, Kan. : PLoS . - 2024, insges. 20 S. ;

[Online first]

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

Mixing nanoparticles in a ProCell type spouted bed

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 431 (2024), Artikel 119129
[Imp.fact.: 5.2]

Matthies, Ellen; Beer, Katrin; Böcher, Michael; Sundmacher, Kai; König-Mattern, Laura; Arlinghaus, Julia C.; Blöbaum, Anke; Jaeger-Erben, Melanie; Schmidt, Karolin

Framework conditions for the transformation toward a sustainable carbon-based chemical industry - a critical review of existing and potential contributions from the social sciences

Journal of cleaner production - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 470 (2024), Artikel 143279, insges. 13 S.

Patil, Shirin; Gorges, Christian; Lòpez Bonilla, Joel; Stelter, Moritz; Beyrau, Frank; Wachem, Berend

Experimental and numerical investigation to elucidate the fluid flow through packed beds with structured particle packings

Particuology - Amsterdam : Elsevier, Bd. 89 (2024), S. 218-237

Pelz, Lars; Dogra, Tanya; Marichal-Gallardo, Pavel; Hein, Marc Dominique; Hemissi, Ghada; Young Kupke, Sascha; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo

Production of antiviral "OP7 chimera" defective interfering particles free of infectious virus

Applied microbiology and biotechnology - Berlin : Springer, Bd. 108 (2024), Artikel 97, insges. 15 S.
[Imp.fact.: 5.0]

Pottgießer, Vivien; Preim, Bernhard; Saalfeld, Patrick; Vahlbruch, Jan-Willem; Walther, Christian

Virtual radionuclide laboratory - an e-learning solution for a tailored training event

Nuclear engineering and design - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 423 (2024), Artikel 113173, insges. 7 S.

Rüdiger, Daniel; Piasecka, Julita; Küchler, Jan; Pontes, Carolina; Laske, Tanja; Kupke, Sascha Y.; Reichl, Udo

Mathematical model calibrated to in vitro data predicts mechanisms of antiviral action of the influenza defective interfering particle "OP7"

iScience - Amsterdam : Elsevier, Bd. 27 (2024), Heft 4, Artikel 109421, insges. 22 S.
[Imp.fact.: 4.6]

Sourya Prabat, Dasika; Gurugubelli, Pardha S.; Bhaskaran, Supriya; Vorhauer-Hugel, Nicole; Tsotsas, Evangelos; Surasani, Vikanth Kumar

A comparative study on the Lattice Boltzmann Method and the VoF-Continuum method for oxygen transport in the anodic porous transport layer of an electrolyzer

International journal of hydrogen energy - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 92 (2024), S. 1091-1098

Vorhauer-Huget, Nicole; Seidenbecher, Jakob; Bhaskaran, Supriya; Schenkel, Fancesca; Briest, Laura; Gopalkrishna, Suresh; Barowski, Jan; Dernbecher, Andrea; Hilfert, Liane; Rolfes, Ilona; Dieguez-Alonso, Alba

Dielectric and physico-chemical behavior of single thermally thick wood blocks under microwave assisted pyrolysis

Particuology - Amsterdam : Elsevier, Bd. 86 (2024), S. 291-303

[Imp.fact.: 3.5]

Wu, Wencong; Chen, Kaicheng; Tsotsas, Evangelos

Prediction of particle mixing in rotary drums by a DEM data-driven PSO-SVR model

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 434 (2024), Artikel 119365

[Imp.fact.: 5.2]

Wu, Yan; Liu, Daoyin; van Wachem, Berend G. M.; van Ommen, J. Ruud

Simulation of Nanoparticle Agglomerate Fluidization Based on Continuum Theory of Cohesive Particles

Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio : American Chemical Society, Bd. 63 (2024), Heft 16, insges. 12 S.

[Imp.fact.: 3.8]

Yuan, Fei-Liang; Sommerfeld, Martin; van Wachem, Berend

SR-DEM: An efficient discrete element method for particles with surface of revolution

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 446 (2024), insges. 19 S.

[Imp.fact.: 4.5]

Zhan, Ninghua; Wang, Yiping; Lu, Xiang; Wu, Rui; Kharaghani, Abdolreza

Pore-corner networks unveiled - extraction and interactions in porous media

Physical review fluids - College Park, MD : APS, Bd. 9 (2024), Heft 1, Artikel 014303, insges. 22 S.

[Imp.fact.: 2.5]

Zinnecker, Tilia; Badri, Najd; Araujo, Diogo; Thiele, Kristin; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne

From single-cell cloning to high-yield influenza virus production - implementing advanced technologies in vaccine process development

Engineering in life sciences - Weinheim : Wiley-VCH . - 2024, insges. 14 S. ;

[Online first]

Zinnecker, Tilia; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne

Innovations in cell culture-based influenza vaccine manufacturing – from static cultures to high cell density cultivations

Human vaccines & immunotherapeutics - Austin, Tex. : Landes Bioscience, Bd. 20 (2024), Heft 1, insges. 15 S.

[Imp.fact.: 4.1]

van Wachem, Berend; Elmestikawy, Hani; Chéron, Victor

Microstructure-based prediction of hydrodynamic forces in stationary particle assemblies

International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 175 (2024), insges. 20 S.

[Imp.fact.: 3.6]

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Heinks, Tobias; Hofmann, Katrin; Last, Simon; Gamm, Igor; Blach, Luise; Wei, Ren; Bornscheuer, Uwe T.; Hamel, Christof; Langermann, Jan von

Selective modification of the product profile of biocatalytic hydrolyzed PET via product-specific medium engineering

ChemSusChem - Weinheim : Wiley-VCH . - 2024, insges. 10 S.

Otto, Eric; Dürr, Robert; Kienle, Achim; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Dynamic modeling of particle size and porosity distribution in fluidized bed spray agglomeration

Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 53 (2024), S. 163-168 ;

[Symposium: 34th European Symposium on Computer Aided Process Engineering / 15th International Symposium on Process Systems Engineering, ESCAPE-34/PSE2024, Florence, Italy, 2-6 June 2024]

Vhora, Kasimhussen; Neeraj, Tanya; Thévenin, Dominique; Janiga, Gábor; Sundmacher, Kai

Investigating fluid flow dynamics in triply periodic minimal surfaces (TPMS) structures using CFD simulation

Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 53 (2024), S. 709-714 ;

[Symposium: 34th European Symposium on Computer Aided Process Engineering / 15th International Symposium on Process Systems Engineering, ESCAPE-34/PSE2024, Florence, Italy, 2-6 June 2024]

DISSERTATIONEN

Brune, Andreas; Hamel, Christof [AkademischeR BetreuerIn]

Intensification of the selective propane dehydrogenation in integrated membrane reactors

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2024, 1 Online-Ressource (viii, 226 Seiten, 26,73 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite 161-174][Literaturverzeichnis: Seite 161-174]

Hausmann, Max; Wachem, Berend [AkademischeR BetreuerIn]; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]

Advanced modeling using large eddy simulations applied to particle-laden turbulent flows

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2024, 1 Online-Ressource (verschiedene Seitenzählungen, 34,19 MB) ;

[Literaturangaben][Literaturangaben]

Zimmermann, Ronny Tobias; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]

Computer-aided catalyst pellet design for load-flexible fixed-bed reactor operation

Magdeburg, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2024, xxv, 154 Seiten ;

[Literaturverzeichnis: Seite 119-134][Literaturverzeichnis: Seite 119-134]

AUFSÄTZE

Khesali Aghtaei, Hoda; Hyer, Robert; Reichl, Udo; Benndorf, Dirk

Improved biological methanation using tubular foam-bed reactor

Biotechnology for biofuels and bioproducts - London : BioMed Central, Bd. 17 (2024), Artikel 66, insges. 12 S.