



OTTO VON GUERICKE
UNIVERSITÄT
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-
UND SYSTEMTECHNIK

Forschungsbericht 2022

Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS- UND SYSTEMTECHNIK

Universitätsplatz 2, Gebäude 10, 39106 Magdeburg

Tel. 49 (0)391 67 58842

fvst.dekanat@ovgu.de

www.vst.ovgu.de

1. LEITUNG

Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas (Dekan)

Prof. Dr.-Ing. habil. Dominique Thévenin (Prodekan)

Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler (Studiendekanin)

2. INSTITUTE

Institut für Strömungstechnik und Thermodynamik

Institut für Verfahrenstechnik

Institut für Apparate- und Umwelttechnik

Institut für Chemie

3. FORSCHUNGSPROFIL

- *Partikeltechnologie und Partikelsysteme* - insbesondere Herstellung, Funktionalisierung, Charakterisierung und Handhabung von partikulären Produkten, z.B. Pulver und Granulate; Wirbelschichttechnik; Porennetzwerke
- *Chemische Produktgestaltung und analytische Produktcharakterisierung* - z.B. Synthese von Natur- und Wirkstoffen; metallorganische Verbindungen für Halbleiter-, Sensor- und Katalysetechnik; Stoffe für die Energie- und Umwelttechnik
- *Innovative Stoff- und Energiewandlungsprozesse* - z.B. Membranreaktoren, chromatographische Reaktoren; Elektroden, Batterien und Brennstoffzellen; Recycling und Kreislaufwirtschaft
- *Dynamik verfahrenstechnischer Systeme* - z.B. Dynamik von chemischen und biologischen Prozessen und Produktionsanlagen; Mehrphasenströmungen und reaktive Strömungen
- *Anlagen- und Sicherheitstechnik* - z.B. probabilistische Sicherheitsanalyse, Unsicherheiten, Brand- und Explosionsschutz; Verhinderung der Ausbreitung von Schadstoffen

4. KOOPERATIONEN

- Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme

5. VERÖFFENTLICHUNGEN

HABILITATIONEN

Zinke, Ronald; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]

Unsicherheitsbetrachtungen und Fehlerfortpflanzung in quantitativen Risikoanalysen

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (xv, 214 Seiten, 11,97 MB), Illustrationen;

DISSERTATIONEN

Ahmad, Faez; Kharaghani, Abdolreza [AkademischeR BetreuerIn]; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]

Development and assessment of advanced continuum models for drying porous media on the basis of discrete pore network simulations

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (xv, 125 Seiten, 3,27 MB), Illustrationen;

Ahmad, Raheel; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]

Integration of a light-switchable ATP regeneration system with motility modules - toward building an artificial cell and bio-hybrid micro-swimmer - Integration eines durch Licht schaltbaren ATP-Regenerationssystems mit Motilitätsmodulen - auf dem Weg zu einer künstlichen Zelle und einem Biohybriden Mikro-Schwimmer

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (vii, 195 Seiten, 15,57 MB), Illustrationen;

Cleynen, Olivier; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]

Optimization of low-impact hydropower devices

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (153 Seiten, 25,35 MB), Illustrationen;

Franke, Georg; Wachem, Berend [AkademischeR BetreuerIn]; Mörl, Lothar [AkademischeR BetreuerIn]

Entwicklung einer neuartigen Austrageinrichtung zur Steuerung der Verweilzeitverteilung in Schüttgutapparaten

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (166 Seiten, 13,74 MB), Illustrationen;

Gerlach, Martin; Seidel-Morgenstern, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]

Reaktionsanalyse und Modellierung der Rhodium-BiPhePhos-katalysierten Hydroformylierung langkettiger Alkene

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (1 Band (verschiedene Seitenzählungen, 6,58 MB)), Illustrationen;

Hein, Marc Dominique; Reichl, Udo [AkademischeR BetreuerIn]

Cell culture-based production of influenza A virus-derived defective interfering particles

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XV, 98, XVII-L Seiten, 5,1 MB), Illustrationen;

Huskova, Nadiia; Seidel-Morgenstern, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]

Dynamic modeling and optimization of a continuous fluidized bed process for the separation of enantiomers by preferential crystallization

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (130 Seiten, 2,76 MB), Illustrationen;

Künzel, Christian; Scheffler, Franziska [AkademischeR BetreuerIn]; Scheffler, Michael [AkademischeR BetreuerIn]; Sauerhering, Jörg [AkademischeR BetreuerIn]

Entwicklung eines dispersionsbasierten Druckverfahrens zur Herstellung von thermoelektrischen Mikroschichten

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XII, 146, Seite IX-LXXVII, 98,21 MB), Illustrationen;

Lizzadro, Luca; Schinzer, Dieter [AkademischeR BetreuerIn]; Haak, Edgar [AkademischeR BetreuerIn]

(-)-disorazole C1 and new analogs - total synthesis and biological evaluation

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (viii, 199 Seiten, 9,53 MB), Illustrationen;

Mahmood, Hafiz Tariq; Kharaghani, Abdolreza [AkademischeR BetreuerIn]; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]

Discrete modeling of capillary ring structures during drying of particle aggregates

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (xvi, 117 Blätter, 8,52 MB), Illustrationen;

Müller, Daniel; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]

Processing strategies and limitations of continuous Wurster coating with product classification

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XVI, 301 Seiten, 9,84 MB), Illustrationen;

Otrin, Nika; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]

A modular platform for growth of hybrid and polymer membrane systems by vesicle fusion

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XV, 254 Seiten, 17,3 MB), Illustrationen;

Pramudita, Daniel; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Dièguez Alonso, Alba [AkademischeR BetreuerIn]

Process intensification during powder production in pulsed gas flow

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (xviii, 157 Seiten, 8,57 MB), Illustrationen;

Rüdiger, Daniel; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Reichl, Udo [AkademischeR BetreuerIn]

Mathematical models of influenza A virus infection - multiplicity of infection and its impact on co-infection and virus production

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XVIII, 179 Seiten, 8,16 MB), Illustrationen;

Schulze-Niemand, Eric; Naumann, Michael [AkademischeR BetreuerIn]

Molecular recognition and selectivity - computational investigations on the dynamics of non-bonded interactions

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (192, XV, 13,18 MB), Illustrationen;

Voß, Samuel; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]; Preim, Bernhard [AkademischeR BetreuerIn]; Behme, Daniel [AkademischeR BetreuerIn]

Unsicherheit in der hämodynamischen Charakterisierung intrakranieller Aneurysmen

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XVI, 202 Seiten, 18,77 MB), Illustrationen;

Wang, MinHui; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]

Bottom-up synthesis of Nicotinamide Adenine Dinucleotide (NAD) regeneration modules for artificial cells

Magdeburg, 2022, 1 Online-Ressource (xiii, 110 Seiten, 6,51 MB), Illustrationen;

Weigel, Thomas; Reichl, Udo [AkademischeR BetreuerIn]

Development of chromatography-based purification processes for cell culture-derived influenza virus particles

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XXII, 145 Seiten, 2,22 MB), Illustrationen;

INSTITUT FÜR APPARATE- UND UMWELTTECHNIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. 49 (0)391 67 58831, Fax 49 (0)391 67 41128
iaut@ovgu.de
www.iaut.ovgu.de

1. LEITUNG

Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause (geschäftsführender Leiter)

2. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause
Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Lothar Mörl
Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Köser
Dr.-Ing. Dieter Gabel
Dr.-Ing. Andrea Klippel
PD Dr. rer. nat. habil. Ronald Zinke
PD Dr.-Ing. habil. Holger Grosshans

3. FORSCHUNGSPROFIL

Einsatz von verschiedenen Brennstoffen in Wirbelschichten zur Vergasung und zur emissionsarmen Verbrennung in Kooperation mit dem Fraunhofer-Institut IFF Magdeburg

- Untersuchung des Abbrand- und Emissionsverhaltens von festen Brennstoffen in Wirbelschichtfeuerungen
- Untersuchung der Verbrennungsbedingungen, wie Brennkammertemperatur, Luftverhältnis und Luftführung, Additivzugabe und Optimierung aus verbrennungs- und emissionstechnischer Sicht
- Schadstoffbildungsmechanismen, insbesondere die NO_x-Bildung
- Wirbelschichtvergasung von biogenen Brenn- und Abfallstoffen zur Erzeugung eines in Gasmotoren nutzbaren Brenngases
- Wirtschaftlichkeit der energetischen Nutzung von Biomassen

Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Wirbelschichtbehandlung (Trocknen, Granulieren, Agglomerieren, Coating, Rösten) von feststoffhaltigen Flüssigkeiten und körnigen Substanzen im Luft- und Heißdampfstrom

- Nutzung von DEM-Simulationen zur Analyse der Fluidodynamik bei gleichzeitiger Granulation in einer blasenbildenden Wirbelschicht
- Nutzung von DEM-Simulationen zur Analyse der Fluidodynamik in der Strahlschicht
- Einsatz von faseroptischen Messverfahren in Wirbelschichten
- Nichtlineare Dynamik der kontinuierlichen Wirbelschicht-Bindestrich-Sprühgranulation
- Regelungskonzepte für kontinuierliche Wirbelschicht-Sprühgranulationsanlagen
- Deformations- und Bruchverhalten von kugelförmigen Granulaten bei Druck- und Stossbeanspruchung: Experiment und DEM-Simulation
- Modellierung der Temperatur- und Konzentrationsfelder sowie die Aufstellung von Populationsbilanzen in flüssigkeitsbedühten Wirbelschichten an Versuchsanlagen DN 1500, 400 und 200

- Modellierung diskontinuierlich ablaufender Prozesse in der Wirbelschicht (Aufheizen, Rösten, Kühlen, Trocknen) mit dem Fluidisierungsmedium Heißdampf und Luft
- Modellierung des Prozesses der SO₂-Absorption in der Wirbelschicht und die experimentelle Verifizierung an der WS-Anlage DN 400
- Modellierung des Zerfallsverhaltens von Partikeln in Wirbelschichten
- Entwicklung neuer Strahlschichtapparaturen
- Wirbelschicht-Verfahren zur schonenden Gewinnung pflanzlicher Wirkstoffe durch Anwendung tiefer Temperaturen
- Untersuchungen zur Adsorption für die Trocknung temperaturempfindlicher Produkte (auch unter Vakuum)
- Wirbelschicht-Extraktion von Ätherischen und fetten Ölen
- Experimentelle Untersuchung von membrangestützten Wirbelschicht-Reaktoren mit Katalysatoren
- Untersuchung von Prozessen der Kaffeeröstung, -kandierung und -kühlung in der Wirbelschicht hinsichtlich Emissionen und Anlagenoptimierung
- Durchführung von experimentellen Untersuchungen zur Trocknung, Granulation, Agglomeration und zum Coating im Industrieauftrag
- Entwicklung neuer Trocknungsverfahren mit interner Kälteerzeugung

Instrumentelle Schadstoffanalytik und Emissionsmesstechnik

- Quecksilberminderung in Rauchgasen
- Abwasserreinigung
- Luftreinhaltung

Anlagensicherheit

- Explosionseigenschaften von Stoffen und Stoffsystemen
- Modellierung von Stoff-Freisetzungen, Bränden und Explosionen
- Sicherheit elektrochemischer Energiespeicher
- Sicherheitsbetrachtungen für Wasserstofftechnologien
- Experimentelle Untersuchung durchgehender Reaktionen
- Weiterentwicklung von Methoden der quantitativen Risikoanalyse
- Experimentelle Untersuchungen an Mehrphasenreaktoren
- chemische Umwandlung von Rest- und Abfallstoffen
- Unsicherheiten bei Ingenieurberechnungen

4. SERVICEANGEBOT

Brand- und Explosionsschutz

- Auftragsarbeiten zur Bestimmung von Brand- und Explosionseigenschaften von Stoffen
- Unterstützung bei der Erstellung von Brandschutz- und Explosionsschutzgutachten
- Simulation von Ereignisabläufen mit numerischer Strömungssimulation

Sicherheits- und Risikoanalysen

- Unterstützung bei der Erstellung von Sicherheitsberichten
- Qualitative Risikoanalysen
- Quantitative Risikoanalysen

Sicherheitstechnische Bewertung von Stoffen

- Simultane thermische Analyse von thermisch instabilen Stoffen
- Bestimmung von Partikeleigenschaften
- Dynamische Differenzkalorimetrie

- Analyse gasförmiger Reaktionsprodukte

5. METHODIK

- Bestimmung der Mindestzündtemperatur aufgewirbelter Stäube
- Bestimmung der Explosionskenngrößen von Gasen, Dämpfen und aufgewirbelten Stäuben in geschlossenen Apparaturen
- Bestimmung der Explosionskenngrößen aufgewirbelter Stäube in offenen Apparaturen
- Bestimmung der Mindestzündenergie aufgewirbelter Stäube
- Bestimmung des Flammpunktes brennbarer Flüssigkeiten
- Bestimmung der Mindestzündtemperatur abgelagerter Stäube (Glimmtemperatur)
- adiabate und isoperibole Warmlagerungsversuche
- Zündtemperatur brennbarer Flüssigkeiten und Gase
- Simultan thermische Analyse (TGA DSC) mit Gasanalyse (MS und FTIR)
- Elementaranalyse für die Elemente C, H, N und Elementaranalyse für die Elemente C und S
- Bestimmung der Bruchwerte und Kraft-Deformationsverläufe im uniaxialen Bruchversuch
- Thermogravimetrische Analyse (TG)
- Partikelgrößenanalyse mit digitaler Bildverarbeitung
- Bestimmung des Brennwertes einer Probe

6. KOOPERATIONEN

- BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Bergische Universität Wuppertal
- Berliner Feuerwehr
- Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- DIN e. V., Berlin
- Dräger Safety AG & Co. KGaA
- Feuerwehr der Stadt Frankfurt am Main
- Glatt Ingenieurtechnik Weimar GmbH
- Inburex GmbH, Hamm
- Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB), Braunschweig
- Solvay Werk Bernburg
- Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e.V.
- ZVEI - Zentralverband Elektrotechnik- und Elektronikindustrie e.V.

7. FORSCHUNGSPROJEKTE

Projektleitung: Dr.-Ing. Paul Geörg, Dr.-Ing. Dieter Gabel
Kooperationen: BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung; DIN e. V., Berlin; Inburex GmbH, Hamm; PTB, Braunschweig
Förderer: BMWi/AIF - 01.03.2019 - 28.02.2022

Entwicklung von normungsfähigen Bestimmungsverfahren für sicherheitstechnische Kenngrößen des Explosionsschutzes für hybride Stoffgemische (NEX-HYS)

Für den sicheren Betrieb von chemischen, petrochemischen und verfahrenstechnischen Anlagen ist die Kenntnis der sicherheitstechnischen Kenngrößen des Explosionsschutzes von entscheidender Bedeutung. Sie dienen zur Festlegung von Prozessparametern und zur Auslegung von Sicherheitseinrichtungen. Da sicherheitstechnische Kenngrößen in den meisten Fällen von den verwendeten Bestimmungsverfahren beeinflusst werden, sind diese Verfahren im Explosionsschutz in der Regel genormt. Sowohl für brennbare Gase und Dämpfe brennbarer Flüssigkeiten als auch für brennbare Stäube gibt es deshalb Normen, die die Bedingungen zur Ermittlung der Kenngrößen festlegen und so eine Vergleichbarkeit der Werte sicherstellen.

Die Normen behandeln gasförmige oder feste brennbare Komponenten aufgrund Ihrer Explosionseigenschaften separat. Sie unterscheiden sich bei Brenngasen und Stäuben teilweise wesentlich in der Auslegung der Zündgefäße, der Zündquellen und dem Prüfprozedere. Die getrennte Anwendung für Brenngase und Stäube steht oft im Widerspruch zur alltäglichen Praxis, wo die Stoffe häufig gleichzeitig vorhanden sind. Beim gleichzeitigen Auftreten von brennbaren Stäuben mit brennbaren Gasen bzw. Lösemitteldämpfen liegen sogenannte hybride Gemische vor. Typische Beispiele für Prozessanlagen, in denen hybride Gemische auftreten können, sind Sprühtrockner, Extraktoren, Lackieranlagen und Maschinen zur Metallbearbeitung. In der Zukunft werden verstärkt innovative Materialien, z. B. Nanostäube und hochporöse Materialien, eingesetzt werden. Über das Verhalten der sicherheitstechnischen Eigenschaften dieser Stoffe als Bestandteil hybrider Gemische gibt es zurzeit kaum Kenntnisse und keine Bestimmungsnormen. Gerade bei fein verteilten Feststoffen ist aber wegen der vergleichsweise großen aktiven Oberflächen eine besonders starke Wechselwirkung mit Gasen und Dämpfen zu erwarten.

Für hybride Gemische lassen sich die sicherheitstechnischen Kenngrößen nach den vorhandenen Normen nicht bestimmen. Aus bisherigen Forschungsarbeiten ist allerdings bekannt, dass hybride Gemische teilweise zündempfindlicher sind, erweiterte Explosionsbereiche aufweisen und die Auswirkungen von Explosionen heftiger ausfallen können im Vergleich zu Gemischen, deren brennbare Komponenten nur in einem Aggregatzustand vorliegen. Damit ist es zur Gefährdungsbeurteilung nicht hinreichend, sich auf die jeweiligen sicherheitstechnischen Kenngrößen der Einzelkomponenten (jeweils im Gemisch mit Luft) zu verlassen.

Damit in Zukunft auch standardisierte Verfahren zur Bestimmung sicherheitstechnischer Kenngrößen für hybride Gemische zur Verfügung stehen, ist es das Ziel des Verbundvorhabens geeignete Bestimmungsverfahren für hybride Gemische zu entwickeln und mit Unterstützung von DIN eine DIN-Spezifikation (DIN SPEC) zu veröffentlichen.

Projektleitung: Dr.-Ing. Andrea Klippel
Projektbearbeitung: Lukas Heydick
Kooperationen: BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung; OneSeven GmbH
Förderer: EU HORIZON Europe - 01.12.2021 - 31.05.2025

TREEADS - A Holistic Fire Management Ecosystem for Prevention, Detection and Restoration of Environmental Disasters

Akronym: TREEADS

Ausführlicher Projekttitle: A Holistic Fire Management Ecosystem for Prevention, Detection and Restoration of Environmental Disasters

Forschung im Bereich: Umwelttechnik

Projekttitle (Deutsch): Ganzheitliches Brandmanagement-Konzept zur Verhütung, Erkennung und Behebung von Umweltkatastrophen

Titel des deutschen Pilot-Projekts lautet: Brandforschung bei Waldbränden und Ableiten von Sicherheits-

maßnahmen (Fire Science of wildfires and safety measures)

Unmittelbare Folgen des Klimawandels sind längere Dürreperioden, selbst in Ländern, die traditionell viel Regen hatten, z. B. in Deutschland. Die Bundesländer Sachsen-Anhalt und Brandenburg gehören zu den am stärksten von extremer Trockenheit betroffenen Bundesländern in Deutschland. Trockene Sommer haben zu erheblichen Mengen an trockener Biomasse und zunehmenden Schäden durch Insekten und Krankheiten geführt. Wetterextreme wie Starkregen und Stürme haben zu zusätzlichen Schäden in den Wäldern geführt.

Der Trockenheitsmonitor für Deutschland zeigt, dass Sachsen-Anhalt und Brandenburg zu den trockensten Gebieten Deutschlands gehören. Bei den meisten Bränden in beiden Bundesländern handelt es sich um Bodenbrände. Es ist von entscheidender Bedeutung, die Mechanismen der Brandausbreitung bei Bodenbränden für diese Gebiete mit ihrem Lebensraum und ihrer Vegetation unter dem wachsenden Einfluss von Trockenheit und geschädigter Vegetation zu verstehen. Zu diesem Zweck werden im Deutschen Pilotprojekt des Forschungsprojekts TREEADS Experimente in mittlerem und großem Maßstab mit Bodenproben von bis zu mehreren Quadratmetern durchgeführt, um die Abhängigkeit der Brandausbreitung von verschiedenen Vegetationsarten sowie unterschiedlichen Mengen an organischer Masse im Boden und Trockenheit zu bewerten. Rauchentwicklung und Rauchtoxizität hängen von den Verbrennungsbedingungen - Verfügbarkeit von Sauerstoff und Wärmeübertragung - sowie von der Art der brennenden Vegetation ab. Ein besseres Verständnis dieser Mechanismen ermöglicht eine genauere Vorhersage der Brand- und Rauchentwicklung, was für die Bewertung und Verbesserung der Brandbekämpfungstaktik von entscheidender Bedeutung ist. Einerseits wird Wasser als das umweltfreundlichste Löschmittel angepriesen. Andererseits sind vor allem bei Bodenbränden oft erhebliche Mengen an Wasser notwendig. Zusatzstoffe können zu einer deutlichen Erhöhung des Volumens führen und so dazu beitragen, die in Trockengebieten wertvolle Ressource Wasser zu schonen. Eine wirksame Löschung verringert den Schaden, denn es ist wichtig, sowohl den Schaden am Ökosystem durch das Feuer selbst als auch die Löschmethode zu bewerten. Es wird davon ausgegangen, dass für verschiedene Brandszenarien unterschiedliche Löschmethoden und Brandbekämpfungsmaßnahmen erforderlich sind, die von der Vegetation, dem Wetter, der Topografie und dem Gebiet abhängen. In einem Gebiet mit restriktiven Naturschutzvorschriften sind möglicherweise andere Maßnahmen und Löschmittel erforderlich als in einem Industriebwaldgebiet. Die Rauchentwicklung dieser Brände stellt ein Gesundheitsrisiko für die Feuerwehrleute sowie für die Bewohner von Dörfern in der Nähe von Waldgebieten dar. Sicherheitsmaßnahmen und Leitlinien für Situationen mit starker Rauchentwicklung, Raumbewegung und -ausbreitung sind für die Sicherheit von Feuerwehrleuten und Bewohnern von grundlegender Bedeutung.

Projektleitung: Pascal Vorwerk, Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause
Kooperationen: Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung; Hekatron GmbH; Siemens AG; Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e.V.; Westfälische Wilhelms-Universität Münster; GTE Industrieelektronik GmbH
Förderer: Bund - 01.01.2021 - 31.12.2023

BRAWA -Kulturgut bewahren durch Helfermotivation und geringe Brandwahrscheinlichkeiten

Ziel des Verbundvorhabens BRAWA ist, eine systemische, kombiniert technisch-operative Lösung für die Verbesserung der Brandsicherheit in historischen Bauwerken zu schaffen, die zugleich flexibel und adaptiv auf historische Bauwerke verschiedener Art anwendbar ist. Der innovative Ansatz besteht darin, mit Multisensor-Knoten (mehrere Brandindikatoren werden simultan gemessen), sowie durch Vernetzung der Sensorik (mehrere, in ihren Wirkungsbereichen überlappende Detektoren müssen die Brandindikatoren wahrnehmen) eine hohe Sensitivität bei gleichzeitig niedriger Täuschungsalarmlrate zu erzielen. Dabei sollen Detektoren zum Einsatz kommen, die auch den ästhetischen Anforderungen von Kulturdenkmälern genügen, d.h. funkbasiert und energieautark arbeiten können, um Kabelinstallationen zu vermeiden.

Weiterhin soll durch Einführung einer Brandwahrscheinlichkeit in Kombination mit der auf die Weitergabe dieser Information folgenden, situationsangemessenen Aktion der Helfer eine frühe Brandbekämpfung eingeleitet werden, die die Brandausbreitung unterbindet oder zumindest verzögert. Dies wird zur Reduzierung der Brandschäden und zur Entlastung der Feuerwehren führen. Im Ergebnis soll dieser systemische Ansatz dazu führen, dass Brände in kulturhistorisch wertvollen Gebäuden früher erkannt und bekämpft werden können, so dass die Brandentwicklung kein katastrophales Ausmaß annimmt und das Kulturgut bewahrt werden kann.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause
Kooperationen: Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung; Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e.V.
Förderer: Bund - 01.02.2021 - 31.01.2023

SEE-2L Sicherheit elektrochemischer Energiespeicher in Second-Life-Anwendungen

Ziel des Vorhabens ist die Schaffung von Verfahrensgrundlagen für den sicheren Betrieb elektrochemischer Energiespeichersysteme mit hohem Energieinhalt in sogenannten Second-Life-Anwendungen anhand eines Demonstrators mit bis zu 500 Kilowattstunden Speicherkapazität. Dabei wird davon ausgegangen, dass die Einspeisung von elektrischer Energie in die Speichersysteme aus nachhaltigen Primärenergiequellen (Windgeneratoren, Photovoltaikanlagen) erfolgt. Die Speicherkapazität entspricht etwa 10 Batteriesätzen mit 60 kWh Energieinhalt bei einer Restkapazität von 80 % (ergibt 480 kWh). In diesem Zustand werden die Batteriesätze aus den Elektrofahrzeugen ausgemustert. 60 kWh ist die Batterieausstattung eines vollelektrischen Mittelklassewagens. Die Gefahren, denen mit dem Vorhaben begegnet werden soll, ergeben sich aus dem Übergang der in den Batteriezellen enthaltenen Materialien in unkontrollierte Reaktionszustände ("durchgehende" Reaktionen), aus denen Brände mit großer Wärmefreisetzung entstehen können.

8. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

Abbas, Zaheer; Gabel, Dieter; Krietsch, Arne; Krause, Ulrich

Quasi-static dispersion of dusts for the determination of lower explosion limits of hybrid mixtures
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 74 (2022);
[Imp.fact.: 3.66]

Amano, Kofi Owusu Ansah; Hahn, Sarah-K.; Tschirschwitz, Rico; Rappsilber, Tim; Krause, Ulrich

An experimental investigation of thermal runaway and gas release of NMC lithium-Ion pouch batteries depending on the state of charge level
Batteries - Basel: MDPI, Bd. 8 (2022), 5, insges. 16 S.;

Gabel, Dieter; Geoerg, Paul; Napetsching, Philipp; Krause, Ulrich

Minimum ignition temperature of hybrid mixtures
Chemical engineering transactions - Milano: AIDIC, Bd. 90 (2022), S. 373-378;

Geoerg, Paul; Schumann, Jette; Boltes, Maik; Kinateder, Max

How people with disabilities influence crowd dynamics of pedestrian movement through bottlenecks
Scientific reports - [London]: Macmillan Publishers Limited, part of Springer Nature, 2011, Bd. 12 (2022), insges. 16 S.;

Klippel, Andrea; Hofmann, Anja; Gnutzmann, Tanja; Piechnik, Kira

Reaction-to-fire testing of bus interior materials - assessing burning behaviour and smoke gas toxicity
Fire and materials - New York, NY [u.a.]: Wiley . - 2022, insges. 16 S. ;
[Imp.fact.: 1.979]

Koch, Florian; Thurnherr, Peter; Markus, Detlev; Krause, Ulrich

Thermal evaluation of junction and connection boxes in explosion protection
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 81 (2023);
[Imp.fact.: 3.916]

Kombe, Emmanuel Yeri; Lang'at, Nickson; Njogu, Paul; Malessa, Reiner; Weber, Christian-Toralf; Njoka, Francis; Krause, Ulrich

Numerical investigation of sugarcane bagasse gasification using Aspen Plus and response surface methodology
Energy conversion and management - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 254 (2022);
[Imp.fact.: 9.709]

Kombe, Emmanuel Yeri; Lang'at, Nickson; Njogu, Paul; Malessa, Reiner; Weber, Christian-Toralf; Njoka, Francis; Krause, Ulrich

Process modeling and evaluation of optimal operating conditions for production of hydrogen-rich syngas from air gasification of rice husks using aspen plus and response surface methodology
Bioresource technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 361 (2022);
[Imp.fact.: 11.889]

Krause, Ulrich; Grosshans, Holger

13th International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 74 (2022);
[Imp.fact.: 3.916]

Schick, R.; Götze, O.; Ziman, T.; Zinke, Ronald; Richter, Johannes; Zhitomirsky, M. E.

Ground-state selection by magnon interactions in a fcc antiferromagnet
Physical review - Woodbury, NY: Inst., Bd. 106 (2022), 9, insges. 10 S. ;
[Imp.fact.: 3.908]

Spitzer, Stefan H.; Askar, Enis; Benke, Alexander; Cloney, Chris; D'Hyon, Sebastian; Dufaud, Olivier; Dydych, Zdzislaw; Gabel, Dieter; Geoerg, Paul; Heilmann, Vanessa; Jankuj, Wojtech; Jian, Wang; Krause, Ulrich; Krietsch, Arne; Mynarz, Miroslav; Norman, Frederik; Skrinky, Jan; Taveau, Jerome; Vignes, Alexis; Zakel, Sabine; Zhong, Shengjun

1st international round robin test on safety characteristics of hybrid mixtures

Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science . - 2022;
[Imp.fact.: 3.916]

Spitzer, Stefan H.; Askar, Enis; Hecht, Kristin J.; Gabel, Dieter; Zakel, Sabine; Krietsch, Arne
Requirements for a hybrid dust-gas-standard - influence of the mixing procedure on safety characteristics of hybrid mixtures
Fire - Basel: MDPI, Bd. 5 (2022), 4, insges. 10 S.;
[Imp.fact.: 2.726]

Vorwerk, Pascal; Hahn, Sarah-Katharina; Daniel, Christian; Krause, Ulrich; Keutel, Karola
Detection of critical conditions in pouch cells based on their expansion behavior
Batteries - Basel: MDPI, Bd. 8 (2022), 5, insges. 18 S.;

Wu, Dejian; Krietsch, Arne; Schmidt, Martin; Krause, Ulrich
Effect of oxygen concentration, inert gas and CH₄/H₂ addition on the minimum ignition energy of coal dusts
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 77 (2022);

Wu, Wenying; Huang, Weixing; Wei, Aizhu; Schmidt, Martin; Krause, Ulrich; Wu, Dejian
Inhibition effect of N₂/CO₂ blends on the minimum explosion concentration of agriculture and coal dusts
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 399 (2022);
[Imp.fact.: 5.134]

Zinke, Ronald; Wothe, Kevin; Dugarev, Dmitry; Götze, Oliver; Köhler, Florian; Schalau, Sebastian; Krause, Ulrich
Uncertainty consideration in CFD-models via response surface modeling - application on realistic dense and light gas dispersion simulations
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 75 (2022);
[Imp.fact.: 3.916]

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Heydick, Lukas; Piechnik, Kira; Köhler, Florian; Klippel, Andrea
Experimental studies on the fire behaviour and smoke toxicity of German pine vegetation (*Pinus sylvestris*)
Advances in Forest Fire Research 2022 - Imprensa da Universidade de Coimbra; Viegas, Domingos Xavier . - 2022, S. 1616-1621;

WISSENSCHAFTLICHE MONOGRAFIEN

Zinke, Ronald; Köhler, Florian
Emissionen leichtflüchtiger Kohlenwasserstoffe aus Schwimmdachtanks und deren lokale Ausbreitung - Betrachtungen zum bestimmungsgemäßen Betrieb und im Schadenfall : Forschungsbericht Emissionsverhalten von Schwimmdachtanks
Heidelberg: Berufsgenossenschaft Rohstoe, Chemische Industrie (BG- RCI), 2019, 139 Seiten;

NICHT BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Hahn, Sarah-K.; Meinert, Marion; Festag, Sebastian
Detection of CO - results of the research project TEBRAS
2021 AUBE/SUPDET papers - National Fire Protection Association (NFPA) . - 2022, S. I-81-I-95;

HABILITATIONEN

Zinke, Ronald; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]

Unsicherheitsbetrachtungen und Fehlerfortpflanzung in quantitativen Risikoanalysen

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (xv, 214 Seiten, 11,97 MB), Illustrationen;

DISSERTATIONEN

Franke, Georg; Wachem, Berend [AkademischeR BetreuerIn]; Mörl, Lothar [AkademischeR BetreuerIn]

Entwicklung einer neuartigen Austrageinrichtung zur Steuerung der Verweilzeitverteilung in Schüttgutapparaten

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (166 Seiten, 13,74 MB), Illustrationen;

INSTITUT FÜR CHEMIE

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg

1. LEITUNG

Prof. Dr. rer. nat. Julian Thiele
Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler
Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß
Prof. Dr. rer. nat. Nora Kulak (Institutsleitung)
Prof. Dr. rer. nat. Jan von Langermann
Prof. Dr. rer. biol. hum. Heike Walles

2. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

Hon.-Prof. Dr. Ernst R.F. Gesing
apl. Prof. Dr. Edgar Haak
Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler
Prof. Dr. rer. nat. habil. Dieter Schinzer
Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß
PD Dr. rer. nat. habil. Jochen Vogt
Prof. Dr. rer. nat. Nora Kulak
Prof. Dr. rer. biol. hum. Heike Walles
Prof. Dr. rer. nat. Julian Thiele
Prof. Dr. rer. nat. Jan von Langermann

3. FORSCHUNGSPROFIL

AG Anorganische Chemie

Koordinationschemie

→ mit biologischen Funktionen

- Metallbasierte künstliche Nucleasen, Proteasen und Enzyminhibitoren
- Fluorierte Ligandensysteme für bioaktive Metallkomplexe
- Supramolekulare Aggregation und Immobilisierung bioaktiver Metallkomplexe
- Oligonucleotid- und Peptid-Metallkomplex-Konjugate

→ in der Diagnostik

- Detektion von reaktiven Sauerstoffspezies
- Neuartige MRT-Kontrastmittel

→ in der Katalyse

- Oxidationskatalyse mit earth-abundant metal-Katalysatoren

AG Organische Chemie

- Entwicklung moderner Synthesemethoden: Diastereo- und enantioselektive C-C-Verknüpfungen
- Metallorganische Chemie: Synthese und Reaktionen von Chrom-, Mangan-, Silicium- und Zinn-Verbindungen
- Synthese von Heterocyclen durch Tandemreaktionen
- Wirkstoffsynthese: Stereoselektive Synthese von biologisch aktiven Substanzen
- Struktur-Wirkungs-Beziehungen
- Naturstoffchemie: Synthese von Terpenen, Alkaloiden und Macroliden
- Computeranwendungen in der Chemie: Reaktionsdatenbanken und Molecular Modelling

AG Physikalische Chemie

- "Membranunterstützte Reaktionsführung": Adsorption, Reaktion und Desorption an anorganischen, katalytisch aktivierten Membranmaterialien
- Charakterisierung vanadium- und eisenhaltiger Katalysatoren mit Photoelektronenspektroskopie und Infrarotspektroskopie
- Ceroxid-basierte Abgaskatalysatoren: Einfluß von Dotierung, Temperatur, Reduktionsgrad und Leerstellenkonzentration auf katalytische Aktivität, Oberflächenstruktur und -dynamik
- "Inverse Katalysatoren": Beeinflussung der katalytischen CO-Oxidation auf Edelmetallen durch Ceroxid
- Katalytische Reaktionen auf atomarer Skala
- Struktur, Thermodynamik und Dynamik reiner und adsorbatbedeckter Isolator-Einkristallflächen

AG Technische Chemie

- Katalysatorentwicklung: Zeolithe und zeolithartige Materialien, Optimierung der Struktur, Oberflächenchemie, Morphologie
- Metallorganische Gerüstverbindungen (MOFs)
- Beschichtungen: Trägergestützte (Reaktiv-)Kristallisation von katalytisch aktiven Systemen
- Zelluläre Kompositmaterialien: katalytisch aktive Keramik- und Glasformkörper durch neue Prozessierungsverfahren
- Thermische Energiespeicherung: Support für Wärmespeichermaterialien, neuartige (keramische und hybride) Wärmespeichermaterialien
- Thermoelektrika: Prozessierung von thermoelektrischen Pulvern mittels Techniken aus der keramischen Fertigung
- Photokatalyse: Entwicklung und Testung monolithisch geträgerter Katalysatoren auf Titanoxidbasis

AG Biokatalyse

- Integration thermischer Trennverfahren in (bio-)katalytische Syntheseprozesse zur Überwindung von Prozesslimitierungen
- Synthese chiraler Amine, Alkohole, Ester und Imine
- Kompartimentierung von (Bio-)katalysatoren
- (enantio)selektive Kristallisation

AG Core Facility Tissue Engineering

- Tissue Engineering: Herstellung von menschlichen gesunden oder kranken Gewebemodellen zur Entwicklung und Risikobewertung von Medizinprodukten oder Materialien
- Studien von Infektionsmechanismen an humanen Gewebemodellen DFG Projekt AGAVE
- Zellkulturtechnik: Verfahrensentwicklung für die Stammzellbiologie
- Medizintechnik: Entwicklung von Biophantomen (BMBF Projekt Stimulate 2) zur Prüfung und Zertifizierung von Implantaten, Biomaterialien, Medizinprodukten (BMBF Projekt TIRAMISU)
- Regenerative Medizin: Translation neuer Arzneimittel, Biomedical Engineering (BMBF Projekt Patch)

4. SERVICEANGEBOT

NMR-Messungen verschiedener Kerne an Feststoffen und Flüssigkeiten
Röntgenpulverdiffraktometrie (XRD) in Reflexion, Transmission und Kapillare, auch temperaturabhängig
Stickstoff-Tiefemperaturadsorption
Sorptionsmessungen mit CO₂, Wasser etc.
Quecksilberporosimetrie
Rheologische Messungen
Katalysatorrestung

5. KOOPERATIONEN

- Bayerisches Zentrum für Angewandte Energieforschung e.V. Würzburg
- CeramTec GmbH, Plochingen
- Charité Universitätsmedizin Berlin, Prof. Dr. Eyk Schellenberger
- Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR)
- Dr. Wolf von Tümpling, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ), Magdeburg
- Evonik GmbH & Co KG, Stuttgart
- Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
- Leoni Bordnetze-Systeme GmbH, Kitzingen
- Prof. Dr. Norbert Stock, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Prof. Dr. Wolfgang Grünert, Ruhr-Universität Bochum
- Stiebel Eltron GmbH & Co KG, Holzminde

6. FORSCHUNGSPROJEKTE

Projektleitung: apl. Prof. Dr. Edgar Haak
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.09.2019 - 28.02.2023

Kaskadentransformationen ungesättigter Alkohole mit bifunktionellen Rutheniumkatalysatoren, 2. Förderperiode (DFG-Nr. 265182801) ...

Kaskadenreaktionen sind im Kontext der Wirkstoffforschung von besonderem Interesse. Die Ausbildung mehrerer Bindungen in einem Eintopfprozess erhöht die Syntheseeffizienz signifikant und erleichtert die Erzeugung verschiedener Derivate strukturell komplizierter Moleküle. Die Transformationen erzeugen molekulare Komplexität und eignen sich besonders zur Herstellung von Naturstoffen und ihren Analoga als wichtige Leitstrukturen für die Entwicklung bioaktiver Verbindungen. Übergangsmetallkatalysierte Kaskaden-transformationen einfacher acyclischer Untereinheiten, die Alken- und Alkin-Fragmente enthalten, bieten einen atomökonomischen Ansatz für die Eintopfsynthese komplexer Gerüste aus leicht zugänglichen Ausgangsmaterialien. Hinsichtlich der Zugänglichkeit sind Propargylalkohole besonders bemerkenswert. Sie sind direkt aus Aldehyden oder Ketonen durch Acetylid-Addition erhältlich. Das 1-Alkenylpropargylalkohol-Motiv stellt eine besonders vielseitige C₅-Untereinheit dar, da alle fünf Kohlenstoffatome selektiv adressiert werden können und ein breites Spektrum unterschiedlich substituierter Alkine und α,β -ungesättigter Aldehyde oder Ketone zugänglich ist. Aufgrund verschiedener funktioneller Gruppen (Alken, Alkin, -OR) können unterschiedliche Aktivierungsmodi angewendet werden, die zu diversen Kaskadentransformationen führen. Wir entdeckten, dass bifunktionelle Cyclopentadienon-Ruthenium(0)-Komplexe und ihre Iminoderivate verschiedene Additions-/Cyclisierungs-kaskaden von Propargylalkoholen mit unterschiedlichen Nucleophilen katalysieren. Die basische Koordinationsstelle des donorstibuierten Cyclopentadienon-Liganden und die Redoxkopplung zwischen Ligand und Metall sind entscheidend für diese hochselektiven Transformationen. In Fortführung unserer bisherigen Arbeiten planen wir die Entwicklung weiterer metallkatalysierter Kaskadenreaktionen für die effiziente Synthese polycyclischer naturstoffähnlicher Verbindungen. Die Prozesse basieren auf rutheniumkatalysierten Allylierungs-/Cycloisomerisierungsreaktionen und Redoxisomerisierungs-/Michaeladditions-kaskaden und sollen auch im Rahmen der Totalsynthese von bioaktiven Naturstoffen angewendet werden. Die asymmetrisch-katalysierte Reaktionsführung unter Verwendung chiraler Vertreter der Komplexserien bildet im Hinblick auf zukünftige Anwendungen auf dem Gebiet der Wirkstoffsynthese einen besonderen Schwerpunkt. Darüber hinaus

sollen Optionen für photokatalytische Anwendungen der entwickelten Katalysatoren ausgelotet werden.

Projektleitung: Prof. Dr. Nora Kulak
Förderer: Haushalt - 01.05.2020 - 30.04.2023

Entwicklung von Assays für Enzyminhibierung und reaktive Sauerstoffspezies

Es werden fluorimetrische Assays entwickelt, mit denen eine Enzyminhibierung durch Metallkomplexe verfolgt werden kann. Darüberhinaus sollen für die Detektion von reaktiven Sauerstoffspezies fluorimetrische Methoden im Hochdurchsatz angewandt werden.

Projektleitung: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Alba Dieguez-Alonso, Prof. Dr. Nora Kulak, Dr. Nicole Vorhauer-Huget
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2022 - 31.05.2023

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

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

Projektleitung: Dr. med. Laura Gartmann, apl. Prof. Dr. habil. Ulrich Vorwerk, Prof. Dr. med. Dörthe Jechorek (geb. Kuester), Prof. Dr. Franziska Scheffler
Förderer: Haushalt - 01.10.2021 - 31.10.2024

Expression von Zinktransporterproteinen und Bedeutung der Zink-Konzentration bei Patienten mit Kopf- und Hals-Karzinomen

Ziel der Studie ist es, die Expression von Zinktransporterproteinen und die Bedeutung der Zink-Konzentration bei Patienten mit Kopf- und Hals-Karzinomen zu bestimmen. Dabei soll zunächst die methodische Machbarkeit der Bestimmung von Zink-Konzentrationen im Gewebe geklärt werden. Des Weiteren wird die Expression des Zinktransporterproteins untersucht. Dabei ist die Rolle des Zinks, insbesondere bei der Karzinogenese von Kopf- und Hals-Karzinomen, unzureichend untersucht. Im Rahmen dieser Studie sollen nun hinsichtlich der Zinktransporterexpression tumorales und extratumorales Gewebe von Patienten mit Kopf- und Hals-Tumoren sowie aus der Mundschleimhaut von gesunden Patienten immunhistochemisch untersucht werden und wenn möglich, soll der Zinkgehalt in dem Gewebe und im Serum verglichen werden. Es wird sich ein Hinweis auf vermeintliche tumorsuppressive Effekte des Zinks erhofft. Diese könnten für zukünftige Therapien, die in die Zink-Homöostase eingreifen, genutzt werden.

Projektleitung: Dr. habil. Jochen Vogt
Förderer: Haushalt - 28.06.2021 - 28.06.2024

Numerische Analyse molekularer Strukturen auf Oberflächen

Die Kenntnis der Wechselwirkungsmechanismen molekularer Strukturen auf Oberflächen ist im Zusammenhang mit einer Vielzahl von Fragestellungen von fundamentalem Interesse.

Ziel des Projekts ist die Fortführung der Simulation solcher Strukturen mit Hilfe von quantenchemischen und molekulardynamischen Methoden. Darüberhinaus erfordert die experimentelle Untersuchung von Filmstrukturen mit Hilfe der Beugung langsamer Elektronen (LEED, DLEED) eine nachgeschaltete numerische Auswertung, deren Aufwand z. B. im Falle von Defektstrukturen erheblich ist. Ziel des Projekts ist einerseits die Durchführung von Oberflächenstrukturanalysen mit existierenden Computercodes. Darüberhinaus wird die begonnene Erforschung und der Test neuer numerischer Methoden zur Strukturanalyse auf Grundlage von LEED-Experimenten fortgeführt

Projektleitung: Prof. Dr. Heike Walles
Förderer: Bund - 01.10.2020 - 30.09.2025

Stimulate 2 - Teilprojekt Immunoprofilung

Stimulate 2 - Teilprojekt Immunoprofilung - Bestimmung der für den Patienten individualisierten interventionell-onkologischen Therapieform zur kurativen minimalinvasiven bildgeführten Behandlung von Tumoren im iCT Setup

Projektleitung: Prof. Dr. Heike Walles
Kooperationen: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner (FVST - Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik); Prof. Dr. rer. nat. Claus-Dieter Ohl (FNW - Institut für Physik – Abt. Physik der Weichen Materie)
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.05.2021 - 30.04.2024

Aerosolentstehung in der Lunge und Einkapselung von Viren WA2915/12-1

Ziel des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft DFG mit fast 900.000 Euro geförderten interdisziplinären Projektes ist es, herauszufinden, warum es das Phänomen so genannter "Superspreader" gibt. Die drei geförderten Forscherteams gehen den Fragen nach, wie die Viruspartikel im menschlichen Körper in die winzigen Aerosole verpackt werden und welche Mechanismen dann dazu führen, dass diese Aerosolpartikel anschließend in den Atemwegen anderer Menschen anhaften, dort platzen und zu weiteren Infektionen führen. Verfahrenstechniker entwickeln anschließend Simulationsmodelle, um belastbare Vorhersagen über die Verteilung und Verbreitung der Aerosole zu treffen.

Projektleitung: Prof. Dr. Heike Walles
Kooperationen: Omicron-Laserage[®] Laserprodukte GmbH (Omicron); MedFact Engineering GmbH (MedFact); Photonscore GmbH (Photonscore; Leibniz Institute for Neurobiology Combinatorial NeuroImaging Core Facility (LIN CNI); Medical Faculty of the University Hospital Magdeburg - University Clinic for Otolaryngology, Head and Neck Surgery (UKM ENT)
Förderer: Bund - 01.08.2021 - 31.07.2024

Zeitaufgelöste Raman- und metabolische Spektroskopie-Untersuchungen zur Detektion, Identifikation und Behandlungskontrolle mikrobieller Aktivität bei chronischer Inflammation und Kanzerogenese (TIRAMISU) - Teilvorhaben: 3D Gewebemodelle des Rachenraums FKZ: 13N15789

Das übergeordnete Ziel, dieses mit insgesamt 4,8 Millionen Euro geförderten FuE-Verbundvorhabens, ist die Erforschung eines nicht-invasiven endoskopischen Verfahrens zur Früherkennung von mikrobiellen Infektionsherden im Menschen anhand von Stoffwechselveränderungen und molekülspezifischer ‚Fingerabdrücke‘ der Mund-Rachenmucosa und seines Mikrobioms. Das zusammengestellte Konsortium besteht mit den KMU Omicron-Laserage[®] Laserprodukte GmbH (Omicron), MedFact Engineering GmbH (MedFact), Photonscore GmbH (Photonscore) sowie den wissenschaftlichen Partnern Leibniz Institut für Neurobiologie Combinatorial NeuroImaging Core Facility (LIN CNI), Otto-von-Guericke Universität (OvGU) Magdeburg, Core Facility Tissue Engineering (CF TE) und der Medizinischen Fakultät des Universitätsklinikum Magdeburg - Universitätsklinik

für Hals-, Nasen-, Ohrenheilkunde, Kopf- und Halschirurgie (UKM HNO). Das Konsortium besteht aus hochspezialisierten Partnern mit höchster Expertise in ihren jeweiligen Fachbereichen und stellt somit die bestmögliche Voraussetzung für das hier beschriebene hoch anspruchsvolle FuE-Projekt dar. Im Kontext des Verbundprojektes ist die Core Facility TE verantwortlich für die Unterstützung des Partners LIN bei der Festlegung der Wellenlängen, Messzeiten und Definition der Spektren für die Detektion von Biofilmen und entstehenden Tumoren im Rachenraum. Nach der Entwicklung der Flächendetektoren, können diese an den Gewebemodellen sehr präzise für die Evaluation der Belastung gesunder Zellen durch die eingesetzten Laser und Messzeiten verwandt werden. Abschließend kann mit den Gewebemodellen in "Doppelt-Blind-Studien" die Sensitivität und Spezifität des neuen TIRA-Verfahrens (Endoskops) zur Detektion von Biofilmen und Tumorentstehungen im Rachenraum eingesetzt werden. Die beiden letzten Aspekte sind wichtige Zulassungsvoraussetzungen für den zukünftigen klinischen Einsatz des neuen Endoskops.

Projektleitung: Prof. Dr. Helmut Weiß
Förderer: Haushalt - 01.10.2018 - 30.09.2024

Untersuchungen zur Adsorption von Wasser auf wohldefinierten NaCl(100)-Einkristallflächen

Das Adsorptionssystem Wasser auf definierten NaCl(100)-Einkristallflächen ist aufgrund seiner Relevanz für verschiedenste Bereiche experimentell wie auch theoretisch wiederholt untersucht worden. Für die gesättigte erste Lage wurden zwei verschiedene Strukturen beobachtet eine (1x1)- und eine c(4x2)-Struktur. Es konnte gezeigt werden, dass erstgenannte erst durch Elektroneneinfluss (z.B. bei Beugung langsamer Elektronen, LEED) irreversibel in die c(4x2)-Struktur umgewandelt wird. Der Mechanismus ist nicht verstanden, kann aber von großer Bedeutung auch für andere Systeme sein, da LEED eine elementare Untersuchungsmethode zur Strukturaufklärung ist. Unklarheit herrscht auch über den Bedeckungsgrad; hier wurden für die erste Lage Wasser zwischen 0,5 und 3 Moleküle je NaCl(100)-Elementarzelle vorgeschlagen. Theoretische Untersuchungen trugen bislang wenig zur Klärung bei.

Mittlerweile konnten erste Messungen mittels Photoelektronenspektroskopie an diesem Adsorptionssystem durchgeführt werden. Sie werden jetzt weitergeführt mit dem Ziel der Absolutbestimmung der Belegung der ersten Wasserlage auf NaCl(100)-Einkristallflächen. und der Aufdeckung des Mechanismus der elektroneninduzierten Strukturumwandlung.

7. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

Al-Maatoq, Marwah; Facht, Melanie; Walles, Heike; Hoeschen, Christoph

Susceptibility artifacts evaluation for non-metallic biopsy needles in a biological-engineered 3D tumor model
Current directions in biomedical engineering - Berlin : De Gruyter, Bd. 8 (2022), 2, S. 289-292

Doniz Kettenmann, Sebastian; White, Matthew; Colard-Thomas, Julien; Kraft, Matilda; Feßler, Andrea T.; Danz, Karin; Wieland, Gerhard; Wagner, Sylvia; Schwarz, Stefan; Wiehe, Arno; Kulak, Nora

Investigating alkylated prodigiosenes and their Cu(II)-dependent biological activity - interactions with DNA, antimicrobial and photoinduced anticancer activity
ChemMedChem - Weinheim [u.a.]: Wiley-VCH, Bd. 17 (2022), 3, insges. 11 S.; <http://dx.doi.org/10.1002/cmdc.202100702>
10.25673/92118
[Imp.fact.: 3.466]

Edelmann, Frank T.; Wang, Sida; Liebing, Phil; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Goldhahn, Rüdiger

Synthesis and structural characterization of a series of homoleptic firstrow transition metal tris(alkynylamidinates)
Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie - Weinheim: Wiley-VCH . - 2022, insges. 26 S.;
[Imp.fact.: 1.492]

El Gaayda, Jamila; Ezzahra Titchou, Fatima; Oukhrib, Rachid; Karmal, Ilham; Abou Oualid, Hicham; Berisha, Avni; Zazou, Hicham; Swanson, Claudia; Hamdani, Mohamed; Ait Akbour, Rachid

Removal of cationic dye from coloured water by adsorption onto hematite-humic acid composite - experimental and theoretical studies
Separation and purification technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 288 (2022);
[Imp.fact.: 9.136]

Herminghaus, Anna; Kozlov, Andrey V.; Szabó, Andrea; Hantos, Zoltán; Gylstorff, Severin; Kuebart, Anne Konstanze Charlotte; Aghapour, Mahyar; Wissuwa, Bianka; Walles, Thorsten; Walles, Heike; Coldewey, Sina; Relja, Borna

A barrier to defend - models of pulmonary barrier to study acute inflammatory diseases
Frontiers in immunology - Lausanne: Frontiers Media, 2010, Bd. 13 (2022), insges. 16 S.;
[Imp.fact.: 8.786]

Liu, Zhe; Hartinger, Christian; Kulak, Nora

Editorial: Metals in medicine
Frontiers in Chemistry - Lausanne: Frontiers Media, Bd. 10 (2022), insges. 2 S.;
[Imp.fact.: 5.545]

Lizzadro, Luca; Spieß, Oliver; Collisi, Wera; Stadler, Marc; Schinzer, Dieter

Extending the structure-activity relationship of disorazole C1 - exchanging the oxazole ring by thiazole and influence of chiral centers within the disorazole core on cytotoxicity
ChemBioChem - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 23 (2022), 20, insges. 6 S.;

Möckel, Marion; Baldok, Nino; Walles, Thorsten; Hartig, Roland; Müller, Andreas Johann; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne; Walles, Heike; Wiese-Rischke, Cornelia

Human 3D airway tissue models for real-time microscopy - visualizing respiratory virus spreading
Cells - Basel: MDPI, 2012, Bd. 11 (2022), 22, insges. 21 S.;
[Imp.fact.: 7.666]

Terazzi, Constanza; Laatz, Karoline; Langermann und Erlencamp, Jan; Werner, Thomas

Synthesis of cyclic carbonates catalyzed by $\text{CaI}_2\text{Et}_3\text{N}$ and studies on their biocatalytic kinetic resolution
ACS sustainable chemistry & engineering/ American Chemical Society - Washington, DC: ACS Publ., Bd. 10 (2022), 40, S. 13335-13342;
[Imp.fact.: 9.224]

Vogt, Jochen

Strain modulation in small molecule physisorption in two dimensions - LEED structure analysis and DFT modeling of the system NaCl(100) / (3 $\sqrt{2}$ \times $\sqrt{2}$)R45° - C₂H₂
Physical chemistry, chemical physics - Cambridge: RSC Publ. . - 2022, insges. 8 S.;
[Imp.fact.: 3.676]

Wang, Sida; Liebing, Phil; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Goldhahn, Rüdiger; Edelmann, Frank T.

Synthesis and complexation study of new aminoalkynyl amidinate ligands
Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie - Weinheim: Wiley-VCH . - 2022, insges. 10 S.;
[Imp.fact.: 1.414]

Wang, Yin-Hu; Noyer, Lucile; Kahlfuß, Sascha; Raphael, Dimitrius; Tao, Anthony Y.; Kaufmann, Ulrike; Zhu, Jingjie; Mitchell-Flack, Marisa; Sidhu, Ikjot; Zhou, Fang; Vaeth, Martin; Thomas, Paul G.; Saunders, Sean P.; Stauderman, Kenneth; Lafaille, Maria A. Curotto; Feske, Stefan

Distinct roles of ORA1 in T cell-mediated allergic airway inflammation and immunity to influenza A virus infection
Science advances - Washington, DC [u.a.]: Assoc., 2015, Bd. 8 (2022), 40, insges. 21 S.;
[Imp.fact.: 14.957]

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Wacker, Max; Riedel, Jan; Veluswamy, Priya; Scherner, Maximilian Philipp; Wippermann, Jens; Walles, Heike; Hülsmann, Jörn

Bacterial nanocellulose-based grafts for cell colonization studies - an in vitro bioreactor perfusion model
Bioreactors in Stem Cell Biology - New York, NY: Springer US; Turksen, Kursad . - 2022, S. 205-222;

DISSERTATIONEN

Künzel, Christian; Scheffler, Franziska [AkademischeR BetreuerIn]; Scheffler, Michael [AkademischeR BetreuerIn]; Sauerhering, Jörg [AkademischeR BetreuerIn]

Entwicklung eines dispersionsbasierten Druckverfahrens zur Herstellung von thermoelektrischen Mikroschichten
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XII, 146, Seite IX-LXXXVII, 98,21 MB),
Illustrationen;

Lizzadro, Luca; Schinzer, Dieter [AkademischeR BetreuerIn]; Haak, Edgar [AkademischeR BetreuerIn]

(-)-disorazole C1 and new analogs - total synthesis and biological evaluation
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (viii, 199 Seiten, 9,53 MB), Illustrationen;

Sutygina, Alina; Scheffler, Michael [AkademischeR BetreuerIn]; Scheffler, Franziska [AkademischeR BetreuerIn]

Manufacturing and characterization of open-cell metal foams with high strut porosity
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XIV, 134 Blätter, 10,97 MB), Illustrationen;

Wilke, Markus; Halle, Thorsten [AkademischeR BetreuerIn]; Weiß, Helmut [AkademischeR BetreuerIn]

Pyroelektrische Röntgenquellen zur Materialanalyse
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XII, 118 Blätter, 22,27 MB), Illustrationen;

INSTITUT FÜR STRÖMUNGSTECHNIK UND THERMODYNAMIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. 49 (0)391 67 58576, Fax 49 (0)391 67 12762
frank.beyrau@ovgu.de

1. LEITUNG

Prof. Dr.-Ing. F. Beyrau (geschäftsführender Leiter)
Prof. Dr.-Ing. D. Thévenin
Jun.-Prof. Dr.-Ing. A. Diéguez-Alonso

2. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

Prof. Dr.-Ing. F. Beyrau (Lehrstuhl für Technische Thermodynamik)
Prof. Dr.-Ing. D. Thévenin (Lehrstuhl für Strömungsmechanik und Strömungstechnik)
Jun.-Prof. Dr.-Ing. A. Diéguez Alonso (Wärme- und Stoffübertragung)
Apl.-Prof. Dr.-Ing. Gábor Janiga
Prof. Dr.-Ing. (i.R.) E. Specht
Prof. Dr.-Ing. (i. R.) J. Schmidt

3. FORSCHUNGSPROFIL

Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau).

- Experimentelle Untersuchungen von Wärme- und Stofftransportprozessen: Einlaufströmungen und Mikrokanäle; Mikro-Makro-Wechselwirkungen bei der Sprühkühlung; Wärmetransportprozesse im Verbrennungsmotor.
- Ein- und zweiphasiger Wärmeübergang unter Mikrosystembedingungen: Experimentelle Untersuchung des Wärmeübergangs in Kapillarrohren und Mikrokanalverdampfern bei ebener und Ringspalt-Geometrie; Betriebscharakteristik von Kompaktverdampfern und Dimensionierung.
- Wärmeübergang und Strahl-Wand-Wechselwirkungen bei Sprühprozessen: Messung des Wärmeübergangs mittels Infrarotthermografie und Korrelation mit den charakteristischen Sprühstrahlparametern; Mikromodell auf Basis von Einzeltropfen; PDA-Messungen zur Sprühstrahlcharakterisierung.
- Automotive: thermisches Energiemanagement; Spraycharakterisierung und Gemischbildung sowie Wandfilmbildung bei der motorischen Verbrennung, Einsatz optischer Messmethoden (PDA, PIV, LIF/LIEF), Druckkammeruntersuchungen.
- Infrarotthermografie, Phasen-Doppler-Anemometrie, Thermographic Particle Image Velocimetry und Thermoanalyse: Anwendung und Weiterentwicklung von Methoden zur Bestimmung von Wärmeübergangskoeffizienten, Temperaturfeldern, Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilungen, sowie der thermischen Stoffwerte.

Lehrstuhl für Strömungsmechanik und Strömungstechnik (Prof. Dr.-Ing. Dominique Thevenin)

- Zweiphasenströmungen: experimentelle und numerische Untersuchung von partikel- und blasenbeladenen Strömungen, sowie von tropfenbeladenen Strömungen im Zweiphasenwindkanal (Anwendungen für Meteorologie, Automobilindustrie); Einsatz verschiedener optischer Messmethoden (LDV, PDA, PTV, PIV-LIF, Shadowgraphy).

- Strömungen mit chemischen Reaktionen: Charakterisierung des Mischungsverhaltens in Mischern mit chemischen Reaktionen; Untersuchung der Flammen/Wirbel- und der Flammen/Akustik-Wechselwirkung; Eigenschaften von turbulenten Flammen in Brenner- und Motorensystemen; Vorhersage der Schadstoffemissionen in Brennern; plasma-gestützte Verbrennung.
- Strömungsmaschinen: Untersuchung der Strömung und der Instabilitäten in Laufrädern und Gehäusen, insbesondere im off-design-Betrieb; Betriebsverhalten und Wirkungsgrad von Pumpen, auch bei Förderung von Flüssigkeit-Gas-Gemischen; Berechnung und Optimierung unkonventioneller Systeme (Savonius- und Darrieus-Turbinen, Tesla-Turbinen und -Pumpen...); Validierung von Strömungsberechnungsverfahren.
- Biomedizinische und bioverfahrenstechnische Strömungen (z.B. Hämodynamik zerebraler Aneurysmen, Wave-Bioreaktoren).
- Eigenschaften von Flüssigkeiten: Rheologie, Widerstandsverminderungsprozesse in Suspensionen, hydraulischer Transport.
- Entwicklung numerischer Methoden und Computerprogramme für die Simulation laminarer und turbulenter 3D-Strömungen, evtl. mit Berücksichtigung chemischer Reaktionen; Kopplung mit einer Optimierungsschleife.
- Anwendung und Weiterentwicklung optischer Messmethoden: PIV; LIF und Two-Tracer LIF; LDA/PDA; Rayleigh; Shadowgraphy; Dreifarben Particle Tracking Velocimetry; quantitative Spezies-Messungen in reaktiven Strömungen; Filmdickenmessung; simultane quantitative Messungen (z.B. PIV-LIF, Zweiphasen-PIV).

Juniorprofessur für Wärme- und Stofftransport (Jun.-Prof. Dr.-Ing. Alba Dieguez-Alonso)

- Experimentelle Untersuchungen zur Festbettpyrolyse von Holz
- Messungen zum Wärmetransport in Festbetten
- Laser-Induzierte Fluoreszenz an Sekundär-Teersubstanzen (Phenol, Cresol, Guaiacol) in der Gasphase

Arbeitsgruppe Thermodynamik und Verbrennung (Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht, i.R.)

- Industrieofenprozesse: Wärmeübergangsbedingungen in Tunnelöfen, Wärmeübergangsmessungen in einem Versuchsdrehrohröfen, Simulation des Kalkbrennens in Schachtöfen, Simulation von Prozessen in Drehrohröfen. Simulation des Sinterns von Keramik in Tunnelöfen.
- Berechnung von Flammen. Optimierung von Brennern und Luftzuführung für Ausbrand, Flammenlänge, Vermischung und Vergleichmäßigung.
- Simulation des Abkühlvorganges bei der Härtung von Metallen. Modellierung der Plastizität, Berechnung von Gefüge, Wärmespannungen und Verzug, Ermittlung einer Strategie zur verzugsfreien Abkühlung.

4. SERVICEANGEBOT

Wir bieten unter anderem:

- Experimentelle Bestimmung und numerische Berechnung von Um- und Durchströmungsfeldern in ruhenden und rotierenden Systemen, bei Ein- und Zweiphasenströmungen
- 3D-Simulation des Strömungs-, Konzentrations- und Temperaturfeldes mit CFD-Programmsystemen
- Druckverlust- bzw. Durchflussbestimmung, Kennwertermittlung für Durchströmungselemente
- Rheologische Untersuchungen, Fließverhaltensbestimmung von Flüssigkeiten, Suspensionen und nicht Newtonschen Fluiden
- Numerische Strömungs- und Temperaturfeldberechnungen, Analyse und Bewertung von Wärmetransportvorgängen
- Infrarotthermografische Untersuchungen mit hoher örtlicher und zeitlicher Auflösung
- Untersuchung von Intensivkühlprozessen und Kühlstreckenauslegung
- Messung der Betriebscharakteristik von Klein- und Mikro-Wärmeübertragern bei ein- und zweiphasigem Betrieb
- Durchführung von Thermoanalysen (simultane thermogravimetrische und kalorische Messungen, TG, DTA, DSC, LFA) bis 1600 °C
- Messung von Geschwindigkeitsverteilungen sowie Partikelgrößen- und -dichteverteilungen (2 Komponenten LDA und PDA, Shadowgraphy)
- Messungen mit autonomen Sonden in Industrieanlagen

- Düsenuntersuchungen (Sprühstrahlcharakteristiken und Wärmeübergang, insbesondere an hoch erhitzten Oberflächen) sowie Ermittlung von Sprühstrahl-Wand-Wechselwirkungen
- Spraycharakterisierung bei der motorischen Verbrennung mit optischen Messtechniken (PDA, PIV, LIF/LIEF)
- Berechnung der Spannungen, der Gefügezusammensetzung und der Formänderung bei der Kühlung von Metallen
- Numerische und experimentelle Prozesssimulation in Schacht-, Drehrohr- und Rollenöfen

5. METHODIK

Am Institut stehen hochqualitative Messmethoden und numerische Simulationsprogramme zur Verfügung. Details hierzu finden Sie auf den jeweiligen Internetseiten der Lehrstühle.

6. KOOPERATIONEN

- Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung IFF, Magdeburg
- Prof. Andreas Seidel-Morgenstern, MPI Magdeburg
- Prof. Bernhard Preim, Inst. für Simulation und Grafik, FIN
- Prof. Georg Rose, Lehrstuhl für Medizinische Telematik und Medizintechnik, FEIT
- Prof. Gunther Brenner, T.U. Clausthal
- Prof. Jens Strackeljan, IFME
- Prof. Kai Sundmacher, MPI Magdeburg
- Prof. Klaus Tönnies, Inst. für Simulation und Grafik, FIN
- Prof. Martin Skalej, Zentrum für Radiologie, FME
- Prof. Szilard Szabo, University of Miskolc (Ungarn)
- Prof. Udo Reichl, MPI Magdeburg
- Prof. Ulrich Maas (KIT, Technische Thermodynamik)
- Prof. Uwe Riedel, Univ. Stuttgart & DLR
- Prof. Volker John, Freie Universität Berlin
- Volkswagen AG Wolfsburg

7. FORSCHUNGSPROJEKTE

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau
Förderer: BMWi/AIF - 01.07.2020 - 31.12.2022

Kalkbasierter Feststoffreaktor zur CO₂-Abtrennung aus Abgasen mit regenerativer Rückgewinnung der Reaktionsenthalpie

Im Rahmen dieses beantragten Forschungsvorhabens soll ein neues Calcium-Looping-Verfahren entwickelt und untersucht werden. Die Grundidee dieses Verfahrens besteht darin, dass die Reaktionsenthalpie, die bei der exothermen CO₂-Aufnahme frei wird, direkt im Reaktor zur endothermen Calcination (CO₂-Freisetzung) wieder genutzt wird.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.06.2020 - 31.05.2024

Strahlvermischung und Schüttguterwärmung in Festbettreaktoren

Im Rahmen des SFB/TRR 287 (BULK-Reaktion) untersucht dieses Projekt die Wechselwirkung zwischen der Erwärmung einer Schüttung und der darin stattfindenden Gasstrahl dispersion. C2 nutzt einen verfügbaren Laborschacht als Modellsystem. Zur Untersuchung der Quervermischung wird in die Schüttung von unten Umgebungsluft und von der Seite ein heißes Gas eingeblasen. Das räumliche Temperaturfeld der Gasphase und der Schüttung aus kugelförmigen Partikeln wird mittels Raman-Streuung in Lichtwellenleitern gemessen. Die Experimente werden mit Simulationen verglichen. Dabei werden die Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilung der Schüttung mit dem Standard Porösen Medium Modell berechnet. Damit klärt C2 die Frage, wie groß heute die Fehler in großskaligen DEM/CFD-Simulationen sind.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.06.2020 - 31.05.2024

Experimentelle Untersuchung der Wechselwirkung von Flamme und Partikeln in Schüttungen

Im Rahmen des SFB/TRR 287 (BULK-Reaktion) liefert dieses Projekt Messdaten von turbulenten, reaktiven Strömungen in Schüttungen. Neben der Visualisierung der Flammenausbreitung mittels Chemilumineszenzaufnahmen liefert die kohärente anti-Stokes Raman-Spektroskopie zeitlich und örtlich hochaufgelöste Gasphasen-Temperaturmessungen sowie die Konzentration einzelner ausgewählter Spezies. Laser-Doppler-Anemometrie wird zur Bestimmung der Strömungsgeschwindigkeit eingesetzt, und Oberflächentemperaturen der Partikel werden mit Phosphor-Thermometrie bestimmt. Um eine optische Zugänglichkeit zu erreichen, wird eine zweidimensionale Geometrie von Flamme (Methan) und Partikeln aufgebaut. Ebenso wird die Calzinierung von Magnesit untersucht, um eine mögliche Rückwirkung der CO₂-Freisetzung auf die Gasphasenverbrennung festzustellen.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.06.2017 - 31.05.2023

Numerische Simulation und experimentelle Charakterisierung der Nanopartikelbildung in Sprayflammen

Die Sprayflammsynthese bietet vielfältige Möglichkeiten für die Herstellung maßgeschneiderter Nanopartikel. Allerdings ist das Zusammenspiel zwischen Spray, Turbulenz, Phasenübergang, Prekursorzerfall, Chemie und Partikelbildung so komplex, dass das Prozessverständnis als eher rudimentär zu bezeichnen wäre. Während der ersten Förderperiode (FP1) des SPP wurden dazu ein Referenzbrenner und mehrere Referenzsysteme festgelegt, sowie Experimente und Modelle zur Beschreibung der komplexen Vorgänge entwickelt. In der zweiten Förderperiode (FP2) sollen die Experimente und Modelle erweitert und für den mittlerweile optimierten Referenzbrenner, sowie für neue Referenzsysteme angepasst werden. Dafür muss der Referenzbrenner mittels verschiedener Messverfahren experimentell charakterisiert werden (Particle Image Velocimetry, Phasen-Doppler-Anemometrie, Laser-induzierten Fluoreszenz, Elastic Light Scattering und Multiple-Angle Light Scattering). In Mehrphasensystemen sind solche Methoden allein bislang nur bedingt einsetzbar, weshalb hier die Leistungsfähigkeit der in FP1 entwickelten Kombination aus bildgebender Diagnostik und numerischen Simulationen auf das Gebiet der Partikeldiagnostik angewandt werden. Um trotz der inhärent vorhandenen Mehrdeutigkeiten eine sinnvolle Validierung von Modellen zu erzielen, werden bei dieser Methode synthetische Signale aus den numerischen Simulationen gewonnen, die anschließend direkt mit den experimentellen Signalen verglichen werden können. Die Modellierung auf Basis der stochastischen Methode "Multiple Mapping Conditioning" (MMC) erlaubt hier eine, bei hohem Detailgrad, effiziente Beschreibung aller involvierter Prozesse und ihrer Interaktionen. Aufbauend auf den Ergebnissen aus FP1 und den für FP2 zu erwartenden Optimierungen des Referenzsystems werden dabei neue Anforderungen an die Modellierung gestellt. Es müssen neue Randbedingungen definiert werden und ein neues Düsendesign mit partieller Vormischung des Dispersionsgases erfordert unter Umständen eine Erweiterung der Modellierung bezüglich der Beschreibung von stratifizierten Flammen. Zudem soll die Beschreibung des

Transports der Nanopartikel von der des Gasphasentransports entkoppelt werden, um den sehr unterschiedlichen diffusiven Flüssen der beiden Phasen gerecht zu werden. Zuletzt sollen die - bisher meist unberücksichtigten - Mikroexplosionen der Prekursor-Lösungsmittel Mischungen näher untersucht werden. Mikroexplosionen werden für die meisten Zielsysteme des SPP in Einzeltropfenuntersuchungen beobachten und es ist zu vermuten, dass auf Phasengleichgewicht basierte, konventionelle Verdampfungsmodelle die Dynamik der Stofffreisetzung nicht ausreichend genau beschreiben können. Deshalb sollen (1) die Existenz dieser Mikroexplosionen erstmalig experimentell in der SpraySyn-Konfiguration nachgewiesen und (2) semi-empirische Modelle für die Darstellung in der Gesamtsimulation entwickelt werden.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.02.2020 - 30.04.2022

Dreidimensionale Temperatur- und Geschwindigkeitsmessungen in Fluiden unter Verwendung Thermographischer Phosphore als Tracer-Partikel

Turbulente Strömungen sind von Natur aus dreidimensional. Im Laufe des letzten Jahrzehnts hat die Entwicklung der Tomographischen Particle Image Velocimetry (PIV) dreidimensionale Geschwindigkeitsmessungen ermöglicht, wodurch erhebliche Fortschritte im Verständnis turbulenter Strömungsstrukturen erzielt werden konnten. In vielen Wärmeübertragungsprozessen - unabhängig davon, ob sie natürlichen Ursprungs sind (z.B. freie Konvektion) oder induziert werden, um die Effizienz verschiedener Geräte (z.B. Gasturbinen und elektronische Schaltungen) zu verbessern - ist die alleinige Kenntnis des Geschwindigkeitsfeldes zur eindeutigen Beschreibung der Strömung nicht ausreichend. Vielmehr werden simultane Temperaturmessungen benötigt. Dieses Projekt stellt ein neues Konzept für simultane dreidimensionale Temperatur- und Geschwindigkeitsmessungen vor. Das Messkonzept basiert auf der Kombination Thermographischer Phosphore mit dreidimensionalen, partikelbasierten Geschwindigkeitsmesstechniken. Anders als bei dreidimensionalen skalaren Messtechniken, die auf tomographischer Rekonstruktion volumetrischer Signale basieren, wird hier die Temperatur individueller, Mikrometergroßer Phosphorpartikel untersucht. Die Position der Partikel kann entweder durch Triangulation, oder durch Tomographische PIV Algorithmen präzise rekonstruiert werden, sodass ein dreidimensionales Temperaturfeld entsteht. Dieses Konzept ermöglicht hohe räumliche Auflösung. Zur Anregung der Partikel und zur spektral gefilterten Aufnahme ihrer Lumineszenz werden lediglich zwei zusätzliche Kameras und ein UV Laser benötigt. Im Rahmen dieses Projektes wird unter Verwendung bereits vorhandener Laser- und Kamerasysteme ein 6-Kamera-System in Kombination mit breiten Lichtschnitten (~7-10 mm) aufgebaut. Erste Messungen werden in einer beheizten Düse durchgeführt. Da sich in diesem Standard-Testfall klar definierte isotherme Gebiete ausbilden, kann dieser Versuch dazu genutzt werden, die Messtechnik hinsichtlich ihrer Temperaturgenauigkeit zu beurteilen, und mögliche Fehler in der Positionsbestimmung zu detektieren. Erste Imaging-Tools für geringe Partikelanzahldichten (0,005 Partikel pro Pixel) werden unter Verwendung von Triangulation zur Positionsbestimmung und simpler Pinhole-Projektion zur Zuordnung der Lumineszenzsignale entwickelt. Anschließend werden Methoden für Messungen mit höheren Partikelanzahldichten basierend auf tomographischen Rekonstruktionsalgorithmen konzipiert. Zur Demonstration wird diese innovative 3D Temperatur- und Geschwindigkeitsmesstechnik für Messungen in Nachlauf eines beheizten Zylinders verwendet. Diese Messungen ermöglichen eine simultane Visualisierung isothermer und iso-vortizitärer Oberflächen und verdeutlichen die Bedeutung solcher Messungen für die Untersuchung komplexer Wärmeübertragungs-Phänomene. Dies ist essentiell z.B. für das fundamentale Verständnis freier Konvektion in der Natur oder zur Verbesserung der Kühlleistung von Industriegeräten.

Projektleitung: Dr.-Ing. Florian Schulz, Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 01.11.2019 - 31.10.2022

Detektion von Teilentladungen

In elektrischen Übertragungsnetzen kann die Alterung von Erdkabeln zu Teilentladungen zwischen den Leitungen und dem Erdreich führen. Die Intensität nimmt mit zunehmendem Alter der Erdkabel zu. Die bisher zur Verfügung stehenden Methoden zur Bestimmung des Zustandes der Kabel sind sehr kosten- und zeitintensiv.

Auf Basis der Laser-Vibrometrie soll ein Verfahren entwickelt werden, mit dem kleinste Vibrationen, die aus den Teilentladungen resultieren, detektiert werden können.

Projektleitung: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Alba Dieguez-Alonso, Prof. Dr. Nora Kulak, Dr. Nicole Vorhauer-Huget
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2022 - 31.05.2023

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

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

Projektleitung: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Alba Dieguez-Alonso
Förderer: Haushalt - 01.09.2020 - 31.08.2023

Numerische Untersuchung von heterogenen reaktiven Partikelsystemen

Umwandlungsprozesse von reaktiven Partikeln werden mittels computational fluid dynamics (CFD) untersucht. Dafür werden sowohl die Strömungen der Gasphase um den Partikel herum, als auch durch die Porenstruktur simuliert. Darüber hinaus werden die chemischen Reaktionen und die Transportprozesse der reagierenden Spezies zur Oberfläche und von der Oberfläche hinweg in den Modellen berücksichtigt. Als Modellsysteme für die Simulationen dienen die Pyrolyse von Biomasse. Die Simulationen werden mit Daten aus den experimentellen Arbeiten ergänzt und validiert. Die Genauigkeit der Simulationen wird durch die Verwendung dreidimensionaler Geometrie (inner Partikel Morphologie) der Partikel verbessert. Zur Validierung der Modelle werden Versuchsergebnisse aus einer speziell angefertigten Messzelle für reaktive Partikel verwendet.

Projektleitung: Jun.-Prof. Dr. Benoit Fond
Kooperationen: Polish Academy of Sciences Institute of Low Temperatures and Structure Research, Division of Optical Spectroscopy
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2019 - 01.11.2022

Co-doping von Übergangsmetallen in Lanthanoid-basierten Phosphoren zur Steigerung der Lichtemission als Grundlage für helle, abstimmbare Thermometer.-

Das Hauptziel des Projektes ist es, die Photolumineszenz-Eigenschaften von Lanthanoid-basierten, optischen Thermometern durch Co-doping mit Übergangselementen zu verbessern. Aufgrund des signifikant höheren Absorptionsquerschnitts von Übergangsmetallen wird die Emissionsintensität der Lanthanoid-Ionen erhöht, was zu einer höheren Signalstärke des resultierenden Thermometers führt. Darüber hinaus ist die Energieübertragung zwischen dem Übergangsmetall und dem Lanthanoid stark von der Temperatur abhängig, weshalb diese Methode die Temperatursensitivität von codotierten, lumineszierenden Thermometern verbessern kann. Um dieses Ziel zu erreichen, muss

der Co-doping-Prozess von Übergangsmetallen in Lanthanoidbasierten Phosphoren in mikrokristallinen Partikeln verstanden werden. Die Emissionsintensität und die Sensitivität von Lumineszenz-Thermometern hängt von vielen Werkstoffparametern ab. Zu diesen zählen das lokale Kristallfeld, die Phononen-Energie, die Dotierstoff-Konzentration oder die Energieniveau-Differenz zwischen angeregten Zuständen der Lanthanoide und dem Übergangsmetall. Ein besseres Verständnis des temperaturabhängigen Energieübertragungs-Prozesses ermöglicht die Kontrolle und die gezielte Entwicklung von Lumineszenz Thermometern. Für die Untersuchung der Energieübergang werden mikrokristalline Partikeln in Wroclaw synthetisiert und die spektroskopischen Eigenschaften in Magdeburg analysiert. Die Quanteneffizienz

wird an abgesonderten Partikeln durchgeführt, um die Prozesse der Absorption, des Energieübergangs und der Emission in einzelnen Partikeln eindeutig zu verstehen. Host-Übergangsmetall- und Lanthanoid-abhängige Parameter werden anhand von Kombinationen systematisch analysiert. Der Absorptionsquerschnitt, die Energieübertragungsraten, und die strahlenden und nicht-strahlenden Quenchingraten werden gemessen und mit theoretischen Modellen aus Wrocław verglichen.

Diese Raten werden auch für eine Serie von Dotierstoffkonzentrationen (Übergangsmetall und Lanthanoid), Leistungsdichte der Anregung und Temperaturen gemessen, um den Einfluss der einzelnen Parameter auf den Sensibilisierungsprozess zu bestimmen. Das vorgeschlagene Projekt kombiniert die Expertise der Gruppe aus Wrocław im Bereich Synthese, Strukturelle Charakterisierung und Theorie von Übergangsmetall- und Lanthanoid-dotierten Phosphoren mit der Expertise der Magdeburg-Gruppe im Bereich der spektroskopischen Untersuchung der

Lumineszenzeigenschaften abgesonderter Partikeln in temperaturgeregelten Strömungssystemen. Die Implementierung des Projektes wird zu einer ausführlichen Charakterisierung von Energieübergangprozessen zwischen Übergangsmetallen und Lanthanoiden führen, sowohl für das Grundlagenverständnis, als auch für die angewandte Entwicklung von Lumineszenz-Thermometern mit verbesserten Eigenschaften (besser passendes Anregungsfenster, höhere Emissionsintensität, höhere Temperaturempfindlichkeit).

Projektleitung: Dr.-Ing. Stefan Hoerner, Prof. Dr.-Ing. Roberto Leidhold, Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin, Prof. Dr.-Ing. Christian-Toralf Weber, Prof. Dr. Jürgen Häberle, Prof. Yves Delannoy, Dr.-Ing. Pierre-Luc Delafin, Dr.-Ing. Cyrille Bonamy
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2021 - 31.12.2023

OPTIDE – Leistungssteigerung und Verbesserung der Dauerfestigkeit von vertikalachsigen Wasserturbinen durch aktive Schaufeljustierung

Vertikalachsige Turbinen sind eine flächeneffiziente Technologie zur nachhaltigen Nutzung von Gezeitenströmungen. Die vertikale Drehachse sorgt allerdings zu einem dynamischen Strömungsabriss, der die Effizienz der Turbinen herabsetzt und im schlimmsten Fall zu Materialversagen durch Ermüdungsbrüche führen kann. In die Schaufeln integrierte Antriebe sollen dafür sorgen, dass sich die Turbinenschaufeln während jeder Umdrehung optimal an die Strömung anpassen, in dem die Schaufel gepitcht wird. Ein dynamischer Strömungsabriss kann so verhindert werden. Das führt zu einer höheren Effizienz bei geringeren Strukturbelastungen und das Selbststartverhalten der Turbine kann verbessert werden. Zur Ermittlung einer optimierten Regelung der Pitchfunktion werden experimentelle Hardwarebasierte Optimierungsmethoden mit numerischen Methoden kombiniert.

Das Projekt ist eine internationale Kooperation des Instituts für Strömungstechnik und Thermodynamik und des Instituts für Elektrische Energiesysteme der Otto-von-Guericke Universität Magdeburg mit dem Institut für Maschinenbau der Hochschule Magdeburg-Stendal und dem Laboratoire des Écoulements Géophysiques et Industriels der Université Grenoble-Alpes.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Roberto Leidhold, Dr.-Ing. Stefan Hoerner, Prof. Dr.-Ing. Jürgen Stamm, Dr. rer. nat. Falko Wagner, Dr.-Ing. Matthias Schneider, Dr.-Ing. Jeffrey Tuhtan

Projektbearbeitung: M.Sc. Shokoofeh Abbaszadeh, M.Sc. Dennis Powalla

Kooperationen: Prof. Dr.-Ing. Jürgen Stamm, Technische Universität Dresden, Institut für Wasserbau und Technische Hydromechanik; Dr.rer.nat. Falko Wagner, Institut für Gewässerökologie & Fischereibiologie, Jena; Dr.-Ing. Matthias Schneider, SJE Ecohydraulic Engineering GmbH, Stuttgart; Dr.-Ing. Jeffrey Tuhtan, Technischen Universität Tallin, Center for Biorobotics, Tallin

Förderer: Bund - 01.03.2019 - 31.03.2024

Alternativmethoden zum Tierversuch: RETERO - Reduktion von Tierversuchen zum Verletzungsrisiko von Fischen bei Turbinenpassagen durch Einsatz von Roboterfischen, Strömungssimulationen und Vorhersagemodellen

Bei der Bewertung von Wasserkraftanlagen (WKA) werden zuvor gefangene Wildfische den Kraftwerksturbinen zugeführt und nach erfolgtem Abstieg die Mortalität sowie Anzahl und Schwere der Verletzungen festgestellt. In Deutschland wurden in den vergangenen drei Jahren >460.000 Versuchstiere für die Untersuchung des Fischabstiegs an WKA genutzt.

Ziel des Forschungsvorhabens ist es, Fischversuche zur Evaluierung der Schädigung von Fischen bei der Passage von Turbinen und anderen Abstiegskorridoren an Kraftwerken zu reduzieren und sie durch Modelle zur Schädigungsprognose mit Daten von teilautonomen Robotersystemen und numerische Simulationen zu ergänzen und langfristig komplett zu ersetzen.

Projektleitung: Sebastian Lang, Prof. Dr.-Ing. Sebastian Stober, Dr.-Ing. Tobias Reggelin, Jun.-Prof. Dr.-Ing. Ingo Siegert, Prof. Dr. Philipp Pohlentz, apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Gábor Janiga

Projektbearbeitung: M.Sc. Marcel Müller, M.Sc. Johann Schmidt

Kooperationen: Hochschule Anhalt; Hochschule Merseburg; Hochschule Harz; Hochschule Magdeburg Stendal

Förderer: Bund - 01.12.2021 - 30.11.2025

AI Engineering - Ein interdisziplinärer, projektorientierter Studiengang mit Ausbildungsschwerpunkt auf Künstlicher Intelligenz und Ingenieurwissenschaften

AI Engineering (AiEng) umfasst die systematische Konzeption, Entwicklung, Integration und den Betrieb von auf Künstlicher Intelligenz (KI) basierenden Lösungen nach Vorbild ingenieurwissenschaftlicher Methoden. Gleichzeitig schlägt AiEng eine Brücke zwischen der Grundlagenforschung zu KI-Methoden und den Ingenieurwissenschaften und macht dort den Einsatz von KI systematisch zugänglich und verfügbar. Das Projektvorhaben konzentriert sich auf die landesweite Entwicklung eines Bachelorstudiengangs «AI Engineering», welcher die Ausbildung von Methoden, Modellen und Technologien der KI mit denen der Ingenieurwissenschaften vereint. AiEng soll als Kooperationsstudiengang der Otto-von-Guericke-Universität (OVGU) Magdeburg mit den vier sachsen-anhaltischen Hochschulen HS Anhalt, HS Harz, HS Magdeburg-Stendal und HS Merseburg gestaltet werden. Der fächerübergreifende Studiengang wird Studierende befähigen, KI-Systeme und -Services im industriellen Umfeld und darüber hinaus zu entwickeln und den damit einhergehenden Engineering-Prozess - von der Problemanalyse bis zur Inbetriebnahme und Wartung / Instandhaltung - ganzheitlich zu begleiten. Das AiEng-Curriculum vermittelt eine umfassende KI-Ausbildung, ergänzt durch eine grundlegende Ingenieurausbildung und eine vertiefende Ausbildung in einer gewählten Anwendungsdomäne. Um eine Symbiose von KI- und ingenieurwissenschaftlicher Lehre zu erreichen, wird ein neuer handlungsorientierter Rahmen entwickelt und gelehrt, welcher den vollständigen Engineering-Prozess von KI-Lösungen beschreibt und alle Phasen methodisch unterstützt. AIEng zeichnet sich durch eine modulübergreifende Verzahnung von Lehr- und Lerninhalten innerhalb eines Semesters sowie durch ein fakultäts- und hochschulübergreifendes Tandem-Lehrkonzept aus und verfolgt ein studierendenzentriertes Didaktikkonzept, welches durch viele praxisorientierte (Team-)Projekte und ein großes Angebot an Open Educational Resources (OERs) mit (E)-Tutorenprogramm getragen wird.

Projektleitung: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Gábor Janiga
Projektbearbeitung: M.Sc. Franziska Gaidzik
Kooperationen: OVGU/FVST/ISUT-LSS, Christoph Roloff; OVGU/FNW/IfP-BMMR, Daniel Stucht
Förderer: EU - ESF Sachsen-Anhalt - 01.12.2017 - 30.04.2022

MEMoRIAL-M1.8 | Augmented 4D flow

The phase-contrast magnetic resonance imaging (PC-MRI) method can provide dynamic, three-dimensional flow information in vivo, for instance revealing the blood flow velocity in subject-specific geometries. Although being limited with respect to spatial and temporal resolution, this non-invasive measurement technique may, however, not least point to essential (domain) boundary conditions for computational high-quality simulations.

The application of PC-MRI methods combined with detailed computational simulations will not just exploit measured flow information at domain boundaries but also those throughout the volume. Moreover, this 'hybrid approach' is supposed to open up new possibilities for enhancing the quality of flow information. Within the context of this sub-project, computational methods allowing for enhancement of measured data ranging below the temporal and spatial experimental resolution limits will be developed.

Projektleitung: Denny Mathew Alex, Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht
Förderer: BMWi/AIF - 01.04.2021 - 30.09.2023

Neues Transportsystem auf Basis von Hochtemperaturlagern zum energieeffizienten Brennen von Ziegeleiprodukten im Tunnelofen

Ziel des Vorhabens ist es, ein neuartiges Ofenkonzept zur deutlichen Verbesserung des Energiehaushaltes durch die Verwendung keramischer Rollenlager umzusetzen. Am Ende des Projekts soll daher ein Lager zur Verfügung stehen, das im Ofen platziert werden kann. Über dieses wird das Gut auf Platten stehend durch den Ofen gedrückt, wie dieses bisher mit Wagen der Fall ist. Die Festigkeit und Lebensdauer der Lager soll ermittelt werden. Damit soll eine Auslegung der Lager hinsichtlich Größe und Anzahl möglich sein. Die Ergebnisse sollen durch Versuche an einem Labortunnelofen validiert sein. Es wird ein mathematisches Modell zur Verfügung stehen, mit dem der Brennprozess für verschiedene Bedingungen simuliert werden kann. Damit können optimale Besatzverbände hergeleitet werden. D. h., es kann berechnet werden, wie weit die Besatzhöhe reduziert und dafür die Durchlaufzeit verkürzt werden kann, um einen gleichen Durchsatz zu erhalten. Eine geringe Besatzhöhe verringert die Belastung der Lager und die kürzere Durchlaufzeit erhöht die Flexibilität des Prozesses. Letztendlich soll durch das neue Transportsystem so viel Energie eingespart werden, dass ab dem Jahr 2050 wirtschaftlich CO₂-frei produziert werden kann.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht
Förderer: BMWi/AIF - 01.03.2021 - 31.08.2023

Intensivierung der Trocknung in Trommelkonvektivtrocknern durch Optimierung des Einflusses von Einbauten am Beispiel von Modellstoffen und holzartiger Biomasse

Der thermische Trocknungsvorgang stellt häufig, ne-ben einer ggf. notwendigen mechanischen Zerkleinerung, den zeit- und energieintensivsten Schritt bei der stofflichen und thermischen Nutzung feuchter Biomassen dar. Die dabei zu behandelnden Güter umfassen ein sehr breites Spektrum von natürlichen Ausgangsmaterialien, von erntefrischen Lebensmitteln, landwirtschaftlichen Abfällen bis hin zu unterschiedlichsten holzartigen Stoffen. Bei allen diesen Gütern sind nicht nur der Zeit- und Energieaufwand, sondern auch die Qualität des Trocknungsvorgangs von sehr großer Bedeutung für die Nutzbarkeit der zu gewinnenden Produkte.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht
Förderer: BMWi/AIF - 01.07.2020 - 30.06.2023

Kalkbasierter Feststoffreaktor zur CO₂-Abtrennung aus Abgasen mit regenerativer Rückgewinnung der Reaktionsenthalpie

Die Kalk- und Zementindustrie sind für ca. 5 % der weltweiten CO₂-Emissionen verantwortlich. Etwa die Hälfte des CO₂ kommt aus dem Produkt selbst durch die Kalksteinzersetzung $\text{CaCO}_3 \rightarrow \text{CaO} + \text{CO}_2$. Dieses CO₂ kann durch den Einsatz regenerativer Energien nicht vermeiden werden. Daher muss das CO₂ abgeschieden werden. In dem Vorhaben wird ein Feststoffreaktor entwickelt, der nach dem Calcium-Looping-Verfahren arbeitet. Hier wird zur CO₂ exothermen Absorption ($\text{CaO} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CaCO}_3$) das Abgas verdichtet und zur endothermen Calcination ($\text{CaCO}_3 \rightarrow \text{CaO} + \text{CO}_2$) mit der CO₂-Freisetzung das Gas entspannt. Dadurch läuft die exotherme Absorption (Carbonisation) auf einem höheren Temperaturniveau ab als die endotherme Calcination. Die freiwerdende Wärme wird in den Partikeln des Reaktors regenerativ gespeichert und danach zur Calcination verwendet.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht
Förderer: BMWi/AIF - 01.02.2021 - 31.01.2022

Neues Tunnelofenkonzept zur Einsparung fossiler Energie und CO₂ beim Brennen von Ziegeln

Ziel des Forschungsvorhabens ist das theoretische Einsparpotential zu nutzen und sowohl die Energieeffizienz des Tunnelofens zu steigern, als auch den Verbund zwischen Ofen und Trockner optimaler zu nutzen.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht
Förderer: BMWi/AIF - 01.04.2021 - 30.11.2023

Einfluss des Ejectings auf die Kühlung beim Stranggießen von NE-Metallen

Die angestrebten Forschungsergebnisse verbessern das Prozessverständnis für den Strangguss von NE-Metallen. Dazu werden die örtlichen Verläufe des Wärmeübergangs und die Wirkung der Einflussparameter bereitgestellt. Die angestrebten Forschungsergebnisse ermöglichen daher eine bessere Auslegung und ein verbessertes Design von Kühleinrichtungen von Stranggussanlagen.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht
Förderer: BMWi/AIF - 01.08.2019 - 31.01.2022

Definierte Einstellung von Wärmeübergangsprofilen in Sprühdüsenfeldern zur Optimierung der Wärmebehandlung in Banddurchlaufanlagen.

In vielen Industriezweigen wird aus ökonomischen und ökologischen Gesichtspunkten auf Gewichtseinsparung und Ressourcenschonung gesetzt. Die Umsetzung dieser Zielsetzungen, sowie die Vorgaben der Politik, führen zur Entwicklung verbesserter Strukturwerkstoffe. Zur Herstellung dieser Werkstoffe werden neue Wärmebehandlungsmöglichkeiten benötigt, um die geforderten mechanischen Eigenschaften mit günstigen Legierungskonzepten zu erreichen.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Projektbearbeitung: Dr. Cheng Chi
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 01.01.2022 - 31.07.2022

Direkte Numerische Simulation der Zündung eines Wasserstoffgemisches mit einer Vorkammerzündkerze

Im Rahmen dieses Projekts soll wissenschaftlich geprüft werden, in wie weit eine sichere und stabile Zündung eines mageren Wasserstoffgemisches mit einer Vorkammerzündkerze erreicht werden kann, wie dies in einem anderen Projekt für Erdgas als Brennstoff kürzlich gezeigt wurde.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Kooperationen: Prof. Andreas Seidel-Morgenstern, MPI Magdeburg
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 01.02.2020 - 31.01.2024

Strömungstechnische Optimierung der Gegenstrom-Extraktion für Artemisinin

In diesem Projekt wird die Anwendung eines Gegenstrom-Extraktors untersucht, um Artemisinin aus *Artemisia Annua* Blättern gewinnen zu können; Artemisinin ist als Heilmittel gegen Malaria höchst wertvoll. Die Verweilzeiten (RTD: Residence Time Distribution) der Fest- und der Flüssiggase im Reaktor sind essentiell, um den Prozess zu verstehen und die Effizienz der Abtrennung zu steigern. Die Arbeit beinhaltet sowohl numerische wie auch experimentelle Untersuchungen zur Bestimmung der RTD, auf Basis der Computational Fluid Dynamics (CFD) einerseits, mit einem optisch durchsichtigen Reaktor auf der anderen Seite.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.03.2022 - 28.02.2025

Lattice-Boltzmann- Simulation des Wärmeübergangs in turbulenten Rohrströmungen mit aufgelösten nicht-sphärischen Partikeln

Turbulente, mit Partikeln beladene Strömungen sind in einer Vielzahl von industriellen und natürlichen Prozessen allgegenwärtig, z.B. bei der Verbrennung von Biomasse, beim Schadstofftransport, bei Sandstürmen, Eiswolken usw. In den meisten dieser Anwendungen ist die Partikelform nicht kugelförmig. Die numerische Simulation von turbulenten Strömungen mit nicht kugelförmigen Partikeln ist kompliziert, da die Orientierung und Verteilung der Partikel eine wichtige Rolle spielt und das Strömungs- und Turbulenzverhalten erheblich verändern kann. Die meisten numerischen Studien, die sich mit turbulenten Strömungen mit nicht-kugelförmigen Partikeln beschäftigen, sind auf Punktpartikel beschränkt. Wenn die Partikel jedoch größer als die Kolmogorov-Längenskala werden, werden die Simulationen komplexer und erfordern einen hohen Rechenaufwand. In der wissenschaftlichen Literatur finden sich bisher nur sehr wenige numerische Studien zu turbulenten Strömungen mit grenzflächen aufgelösten nicht-kugelförmigen Teilchen. Die meisten dieser Studien haben isotherme Bedingungen betrachtet. Der Wärmetransport von/zu den Partikeln kann jedoch wiederum alle Strömungseigenschaften signifikant verändern. Heiße Partikel können auch die Turbulenzspektren durch Druckdilatation verändern. Solche Effekte wurden in der Vergangenheit nie gründlich untersucht. Das Ziel dieser Studie ist es, diese Lücke zu schließen, indem eine direkte numerische Simulation (DNS) von turbulenten Strömungen durchgeführt wird, die nicht-kugelförmige Partikel enthalten und Wärmeübertragungseffekte berücksichtigen. Angesichts der Komplexität des Problems und der sehr hohen Rechenkosten, die für die Simulationen erforderlich sind, wird für diese Studie ein Lattice-Boltzmann-Methode (LBM)-Löser gewählt. Aufgrund der Lokalität aller Operationen sind parallele Berechnungen mit LBM problemlos möglich. Außerdem kann es relativ einfach auf komplexe Gebiete angewendet werden, was es für den Zweck des vorliegenden Vorschlags geeignet macht. Zu diesem Zweck wird ein Immersed Boundary Verfahren (IBM) in Kombination mit einem LBM-Löser eingesetzt. Um Informationen zu liefern, die für praktische Anwendungen relevant sind, wird in den abschließenden Simulationen eine Rohrströmung betrachtet, die ein besseres physikalisches Verständnis wichtiger Phänomene wie z.B. der Partikelposition in katalytischen Reaktoren oder der Verschmutzung in Wärmetauschern ermöglicht. Solche DNS (hier basierend auf LBM) werden unser Verständnis der physikalischen Übertragungsmechanismen verbessern. Die Kombination von Turbulenz-, nicht-isothermen und fluiddynamischen Aspekten und die Berücksichtigung

der gegenseitigen Wechselwirkungen, die während der Bewegung von nicht-sphärischen Partikeln auftreten, sind die zentralen Ziele dieses Vorschlags. Die Ergebnisse dieser Studie werden auch praktische Fortschritte bei der Verbesserung des Wärmeübergangs ermöglichen, möglicherweise gekoppelt mit Effekten zur Verringerung des Luftwiderstands.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Förderer: BMWi/AIF - 01.07.2021 - 31.08.2023

Entwicklung neuartiger Entlüftungselemente für den Druckguss auf Basis von Simulationsmodellen

Das Druckgussverfahren oder HPDC (aus dem englischen **H**igh **P**ressure **D**ie **C**asting) ist ein Gießverfahren für Metalle, wie Aluminium, Zink, Magnesium oder Siliziumtombak, das durch seine Eignung für die Serienproduktion insbesondere im Automobilbereich angewendet wird. Bei dem Verfahren wird die flüssige Schmelze unter hohem Druck von ca. 5 - 20 MPa und mit einer hohen Formfüllgeschwindigkeit bis zu 80 m/s in eine Druckgussform gedrückt, wo sie dann erstarrt. Der Vorteil des Verfahrens ist, dass eine Dauerform verwendet wird, die je nach Gießwerkstoff für 100.000 - 2.000.000 Schuss verwendet werden kann.

Ziel im hier geplanten Projekt ist die Entwicklung eines mehrskaligen Simulationsmodells mit dessen Hilfe die Entlüftungselemente berechnet werden können. Weiteres Ziel ist es, dass für jede Anwendung optimal ausgelegte Entlüftungselemente entwickelt und hergestellt werden können. Dies soll im Rahmen des Projektes an mindestens einem Bauteil nachgewiesen werden. Der innovative Lösungsansatz im Projekt besteht darin, dass ein validiertes, multiskaliges Simulationsmodell für das betrachtete Problem entwickelt werden soll.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Projektbearbeitung: M.Sc. Seyed Ali Hosseini
Kooperationen: Prof. Fathollah Varnik, Ruhr-Universität Bochum
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.08.2020 - 31.07.2024

Lattice-Boltzmann-Simulationen der reagierenden Gasströmung in ruhenden und bewegten Schüttungen kleiner Abmessungen mit Partikeln komplexer Form

Das Projekt führt zeit- und orts aufgelöste LB-Simulationen der reagierenden Gasströmung in statischen und bewegten Partikelschüttungen durch. Es wird ein gemeinsamer LB-Solver für direkte numerische Simulation entwickelt. Aufgrund des großen numerischen Aufwands werden Schüttungen mit wenigen Partikeln simuliert. Angefangen wird mit nicht-reaktiven Simulationen in statischen Schüttungen sphärischer, monodisperser Partikel, gefolgt von polydispersen sphärischen Partikeln, einer vorgegebenen, langsamen Partikelbewegung, vereinfachten Gasphasenreaktionen, Schüttungen von Partikeln mit nicht-regelmäßiger Geometrie und als letzter Schritt mit vollständigen Reaktionsmechanismen für die Gasphase. Über Parametervariation werden die wesentlichen Kontrollprozesse ermittelt und umfangreiche Referenzdaten generiert. Auf Basis der reagierenden LB-Simulationen werden reduzierte Reaktormodelle in Form von Tabellen für die Hohlräume zwischen Partikeln für großskalige DEM/CFD-Simulationen zur Verfügung gestellt.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Kooperationen: Prof. Romuald Skoda, Ruhr-Universität Bochum; Prof. Christian Hasse, TU Darmstadt
Förderer: Industrie - 01.04.2019 - 30.06.2022

Flüssig-Gasgemischförderung mit Kreiselpumpen

Kreiselpumpen werden für die Förderung reiner Flüssigkeiten ausgelegt. Die Förderung bricht besonders bei Radialpumpen bereits bei sehr geringen Gasbeladungen der Flüssigkeit ein. Bereits bei erwarteter geringer oder kurzzeitiger Gasbeladung weicht der Anlagenbetreiber trotz einer u.U. nicht zu der jeweiligen Anlage passenden

Auslegung auf andere, gegen Gasbeladung resistere Pumpenbauarten aus, was mit wirtschaftlichen und energetischen Nachteilen verbunden ist. Eine rechnerische Erfassung dieses Vorgangs ist bisher nicht möglich, und die Einsatzgrenzen der Kreiselpumpen bei der Förderung gasbeladener Flüssigkeiten sind nicht vorhersagbar. In dem vorgeschlagenen Vorhaben soll ein 3D-Rechenverfahren zur möglichst genauen Vorhersage des Förderhöhenbruchs entwickelt und an Radialpumpen messtechnisch validiert werden. Von besonderer Bedeutung ist dabei ein geringer Rechenaufwand durch die Entwicklung von recheneffizienten momentenbasierten Mehrphasenmodellen und die Verwendung von lizenzkostenfreier OpenSource Software, die die Nutzung des Rechenverfahren auch in KMU erlaubt. Das Rechenverfahren soll nach Projektende in den F&E-Prozess der Pumpenindustrie implementiert werden. Der Transfer wird durch die Einbindung in eine durchgängige Toolkette und Schulungen für die Industrie unterstützt.

Kreiselpumpen sind die am weitesten verbreitete Pumpenbauart. Die Entwicklung von Hocheffizienz-Kreiselpumpen leistet einen entscheidenden Beitrag zur Einsparung von Antriebsenergie. Das Projekt schafft das notwendige Basiswissen, um Hocheffizienz- Kreiselpumpen für die Förderung von Flüssigkeiten mit moderater oder kurzzeitiger Gasbeladung auszulegen und wirtschaftlich sinnvoll zu betreiben. Ein Wettbewerbsvorteil entsteht, indem die Pumpenhersteller durch den Einsatz der Berechnungsmethode die Einsatzgrenzen ihrer Pumpen präziser bestimmen und ausweiten können. Dadurch kommt es zu einer Diversifizierung des Marktes für Kreiselpumpen und zu erheblichen Energieeinsparungen.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Kooperationen: Prof. Holger Theisel, Inst. für Simulation und Grafik
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2019 - 30.06.2023

DNS und visuelle Analyse von Superstrukturen in turbulenten Kanälen mit Mischung durch parallele Injektion

Um das Auftreten und die Auswirkungen von Superstrukturen in turbulenten Mischungen in Kanälen bei hohen Reynoldszahlen unter paralleler Injektion zu untersuchen, wird eine Kombination aus Direct Numerical Simulation (DNS), Wirbelextraktion, sowie eine feature-basierte Visualisierung vorgeschlagen. Hierfür sind keine Standardansätze vorhanden.

Für die DNS ist die Herausforderung, hohe Reynoldszahlen auf HPC-Systemen zu behandeln.

Weiterhin müssen Modelle bereitstehen, die numerisch alle Strömungseigenschaften, die für die Vermischung relevant sind, beschreiben.

Für die Wirbelextraktion gibt es drei Herausforderungen: zum einen verhindert die vorhandene Turbulenz, dass lokale Standard-Wirbelmasse genutzt werden können. Stattdessen sind Lagrange- oder hierarchische Wirbeldefinitionen notwendig. Zum zweiten muss die Wirbelextraktion so parametrisiert werden, dass die interessantesten und nicht unbedingt die stärksten Wirbelstrukturen gefunden werden. Zum dritten muss die Extraktion on-the-fly erfolgen, da die pure Menge an Simulationsdaten keine anderen Lösungen zulässt.

Um die Phänomene zu analysieren, werden DNS, Wirbel-Extraktion und Visualisierung in einem feedback-loop kombiniert. Während eine mehrstufige POD zusammen mit einer automatischen Wirbel-Extraktion on-the-fly durchgeführt wird, werden die dabei entstehenden Wirbelstrukturen in einem Postprocessing-Schritt visuell analysiert.

Diese effiziente Kombination aus DNS, POD und visueller Analyse soll die Identifizierung von Superstrukturen ermöglichen und helfen, deren Auswirkungen auf Transportprozesse zu erklären.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Kooperationen: Prof. Andreas Seidel-Morgenstern, MPI Magdeburg; Prof. Heike Lorenz, MPI Magdeburg
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 30.09.2019 - 30.09.2022

Vermessung und Modellierung des Wachstums von Kristallen

Zur gezielten Auslegung und Optimierung von Kristallisationsprozessen ist die Kenntnis der Wachstumsgeschwindigkeiten der Kristalle von zentraler Bedeutung. Diese Geschwindigkeiten sind spezifisch für die jeweils betrachteten Stoffsysteme und hängen stark vom eingesetzten Lösungsmittel, der Temperatur und den aktuellen Konzentrationsverhältnissen ab. Gegenwärtig verfügen wir über kein ausreichend zuverlässiges Instrumentarium zur Vorhersage dieser wichtigen Eigenschaft von Kristallen und es besteht ein Bedarf an zuverlässigen Mess- und Modellierungsmethoden. Unter den vorgeschlagenen Möglichkeiten eignet sich insbesondere der Einsatz der experimentellen Beobachtung der Dynamik der Größen- und Formveränderung von Einzelkristallen unter in sogenannten Wachstumszellen zuverlässigen und effizient einstellbaren Bedingungen. Numerisch erscheinen Lattice-Boltzmann-Ansätze besonders zielführend, um das Kristallwachstum unter Berücksichtigung der Hydrodynamik und aller Konzentrations- und Temperaturfelder zu beschreiben. Die Analyse der Versuchsergebnisse mit dem Ziel der Identifikation von Wachstumsmechanismen sowie der Schätzung von kinetischen Parametern erfordert dabei eine genaue Kenntnis der Fluidynamik in den Messzellen. Diesem Aspekt wurde in bisherigen Arbeiten, die in der Regel auf der Annahme idealer Vermischungen basierten, kaum Rechnung getragen. Weiterhin wurden bisher die Einflüsse von Abweichungen von isothermen Bedingungen sowie Auswirkungen von Verunreinigungen und gezielt zugesetzten Additiven nicht bewertet. Die hier angestrebte Kombination aus Einzelkristallexperimenten mit detaillierten numerischen Simulationen soll eine vollständige Aufklärung der zugrundeliegenden Mechanismen erlauben.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Kooperationen: Prof. Matthias Kraume, FG Verfahrenstechnik, TU Berlin
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2014 - 30.06.2022

Dispersion und Koaleszenz in gerührten mizellaren Dreiphasensystemen

Apolare Edukte können in mizellaren Lösungsmittelsystemen mit wasserlöslichen Katalysatoren umgesetzt werden. Um eine ökonomisch sinnvolle Reaktionsgeschwindigkeit und eine schnelle Abscheidung des Produkts zu erreichen, müssen die Bedingungen so eingestellt werden, dass sich ein Dreiphasensystem bildet. Die Tropfengrößenverteilungen (TGV) der durch den Rührer erzeugten bidispersen Systeme sind für beide Prozessschritte entscheidend, wurden aber bisher noch nicht charakterisiert. Diese TGV sollen durch Erweiterung experimenteller (AG Kraume) und numerischer Methoden (AG Thévenin) bestimmt werden.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Kooperationen: Prof. Einar Kruijs, Univ. Duisburg-Essen; Prof. Hartmut Wiggers, Univ. Duisburg-Essen
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.08.2017 - 31.07.2023

Nanopartikelentstehung aus Prekursor-beladenen Tröpfchen: Strömungssimulation; Populationsdynamik von Partikeln und Tröpfchen; experimentelle Validierung

Der Übergang von der Flüssig- in die Gasphase und das sich daran anschließende beginnende Partikelwachstum ist im Bereich der Sprayflammsynthese ein wenig untersuchtes Forschungsgebiet. Dabei fehlt es bisher sowohl an geeigneten experimentellen Untersuchungsmöglichkeiten als auch an numerischen Modellen, diese Phasenübergänge im Verlauf der Sprayflammsynthese umfassend zu beschreiben. Somit bleiben wichtige Teilschritte auf dem Weg vom Spray zum Partikel im Bereich der Spekulation.

Dieses Projekt hat es sich zum Ziel gesetzt, in einem Sprayflammenreaktor den Übergang von der flüssigen (Tropfen)-Phase in die feste Partikel-Phase detailliert zu untersuchen. Dabei kommt eine Kombination aus experimentellen und numerischen Werkzeugen zum Einsatz, die sich in ihren Möglichkeiten hervorragend ergänzen.

Diese Arbeiten sollen insbesondere dazu dienen, den Übergang von der Spray/Tropfenphase in die Partikelphase zu untersuchen und so die Partikelentstehungsprozesse besser zu verstehen, um daraus relevante Parameter bezüglich einer zielgerichteten Sprayflammsynthese zu identifizieren, die dann zur Prozessoptimierung und zur Skalierung des Verfahrens verwendet werden können.

Die Aufgaben in Magdeburg betrifft die Berechnung der Trajektorien von verdampfenden Tropfen mittels DNS.

Projektleitung: Dr.-Ing. Katharina Zähringer
Förderer: Haushalt - 01.07.2022 - 31.12.2024

Charakterisierung des laminar-turbulenten Umschlagpunktes in gewendelten (Helix-) Reaktoren

Kompakte Anlagen, die sehr schnell zu einer exzellenten Homogenisierung von Impuls-, Temperatur- und Konzentrationsfeldern führen, sind für unzählige Anwendungen der Prozess- und Energietechnik unabdingbar. Dabei ist eine robuste und wartungsfreie Lösung immer zu bevorzugen, so dass auf den Einsatz von beweglichen Teilen (z.B. Rührern) so weit möglich verzichtet werden sollte. Als Alternative können zwar statische Mischer eingesetzt werden. Diese führen aber zu sehr hohen Druckverlusten, und dementsprechend auch zu hohen Prozesskosten. Außerdem ist die Benetzung großer Kontaktflächen im statischen Mischer mit möglicherweise abrasiven oder korrosiven Werkstoffen, eventuell verbunden mit Kavitationserscheinungen, für die Lebensdauer des Systems häufig ein Problem.

Die perfekte Anlage zur Homogenisierung wäre also: 1) weiterhin kompakt; 2) relativ kostengünstig in der Konstruktion; 3) ohne bewegliche Teile; 4) ohne Hindernisse innerhalb der Strömung. Bereits seit 100 Jahren werden derartige Anlagen auf der Basis von Wendelreaktoren konzipiert, allerdings ist die genaue Kenntnis der Strömungs- und Stoffübergangsphänomene, die für eine präzise Auslegung und Optimierung solcher Apparate unabdingbar ist, immer noch zu gering. Dieses Projekt ist als weiterer, großer Schritt in Richtung genauerer Kenntnisse zu verstehen, indem das Prozessverständnis bzgl. Hydodynamik, laminar-turbulentem Übergang und gas-flüssig Stofftransfer in gewendelten Rohren spürbar verbessert werden soll.

Hauptziel des Projektes ist ein besseres Verständnis der laminaren, transienten und turbulenten Gas-Flüssigkeits-Strömungsverhältnisse in Wendelreaktoren und deren Einfluss auf Stoffübergang und Homogenisierung. Dabei soll besonderer Wert auf die Untersuchung der Strukturen im Flüssigkeit-spfropfen gelegt werden, die für den gas-flüssig Stoffübergang und die Mischung verantwortlich sind. Der positive Einfluss einer zusätzlichen Strömungsumlenkung auf Mischung, Stoff- und Wärmetransport, wie er in Coiled-Flow-Invertoren und Coiled-Flow-Reversern bereits festgestellt wurde, soll durch die detaillierte Untersuchung des 3-dimensionalen Strömungsfeldes aufgeklärt werden. Dabei spielen sicherlich im transienten Bereich auch zusätzlich vorhandene, sekundäre Strömungsstrukturen eine wichtige Rolle, deren Auftreten und Stabilität untersucht werden soll. **Auf dieser Basis soll es am Ende des Projektes möglich werden, den Zusammenhang zwischen Geometrie des Wendelreaktors, Prozessbedingungen und Homogenisierung bzw. Stoffübergang mit Hilfe relevanter dimensionsloser Kennzahlen zu analysieren und aufzuzeigen.**

Projektleitung: Dr.-Ing. Katharina Zähringer
Projektbearbeitung: B.Sc. Christin Velten
Kooperationen: OVGU Magdeburg, Arbeitsgruppe für Echtzeit-Computergraphik, J. Prof. Christian Lessig
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2024

Experimental investigation of flow fields in the interstices of bulk particles with ray tracing based reconstruction

The flow behaviour of the gas phase in a packed bed has important effects on mass and energy transport processes that are taking place in the bed. It is hence also a central parameter for process optimisation of such systems. Currently, however, only very limited data on the gas flow in packed beds exists, since the access to the particle interstices is very challenging with both probe-based and optical measurement methods. Furthermore, the existing results were typically obtained using refractive index matching, and are hence limited to liquids. For gaseous flows, mainly conclusions obtained using similarity theory are available, which limits the potential range of application.

In this project, we extend optical particle image velocimetry (PIV) of the velocity fields in the gas phase within packed beds by ray tracing reconstructions. For this, we use beds consisting of transparent bulk material so that the velocity field determination can be aided with a numerical simulation of light propagation through the bed. The simulation is performed with ray tracing, and the resulting information is used to correct the raw PIV particle images of the flow. This technique then allows for the direct measurement of velocity fields in the gas phase of transparent packed beds. For the development of the reconstruction method, the packed bed is modelled using transparent spherical packing material in regular arrangements. The high sensitivity of the method to a precise correspondence between the experimental set-up and the simulation, including, for example, the exact shape and refractive indices of the spheres, will be addressed systematically through the numerical optimisation of the parameters used in the simulation as well as new methods for PIV illumination, calibration and post-processing. The gas flow in the bed will be varied concerning Reynolds number, arrangement of the gas inlets to the bed, and packing material size and arrangement. High-speed PIV will give access not only to the mean velocities but also to fluctuations and turbulence quantities in the interstices. These are important for heat and mass transfer modelling. The project will also deliver a complete methodology, including a ray tracing software, that facilitates the adoption of the method by the scientific community.

Projektleitung: Dr.-Ing. Katharina Zähringer
Projektbearbeitung: M.Sc. Péter Kováts
Kooperationen: Rzehak, Roland, Institut für Fluid-Dynamik Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf
Bautzner Landstrasse 400 01328 Dresden
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.09.2019 - 31.03.2023

Charakterisierung des Stoffübergangs von Sauerstoff in Blasensäulen: Entwicklung optisch-experimenteller und numerischer Euler-Euler Methoden

Eine Berechnung von Blasenströmungen *auf der Skala ganzer Apparate* ist gegenwärtig nur mittels der Euler-Euler oder Euler-Lagrange Modellierung realisierbar. Zu rein hydrodynamischen Fragestellungen existieren bereits zahlreiche Untersuchungen, eine Betrachtung von Stoffübergang und Vermischung ist dagegen bislang nur in Ansätzen erfolgt, insbesondere bei *gleichzeitigem Vorliegen einer chemischen Reaktion*. Ähnlich gibt es auch zur experimentellen Charakterisierung solcher größer-skaliger Blasenströmungen mit Stoffübergang und chemischer Reaktion nur wenige methodische Ansätze, die mit genügender Genauigkeit und *zeitlicher sowie räumlicher Auflösung* Daten liefern können. Ziel des vorliegenden Projektes ist es, solche numerischen, wie auch experimentellen Werkzeuge weiterzuentwickeln, die es erlauben, die Euler-Euler Modellierung und die experimentelle Untersuchung des Stofftransports in Blasensäulen auf einen vergleichbaren Stand zu der der Strömungsdynamik zu bringen. Hierbei stehen insbesondere die Problematiken der *Vermischung in der Säule* und der daraus entstehenden *Wechselwirkung zwischen chemischer Reaktion und Hydrodynamik* im Mittelpunkt, welche für Reaktionen mit moderater Geschwindigkeit wichtig sind. Dazu werden *numerische und experimentelle Methoden entwickelt* und Simulations-Modelle durch den Vergleich mit Messdaten *validiert*.

Da sich bezüglich des Stofftransports in der Literatur kaum geeignete Daten für eine solche Modellvalidierung finden, werden neue Messungen mit innovativen optischen Messtechniken durchgeführt. Der Schwerpunkt dabei liegt auf der simultanen Erfassung aller relevanten Größen, d.h. neben der Konzentration der Übergangskomponente auch der Geschwindigkeit der Blasen und der Flüssigkeit, sowie der Blasengrößen und -trajektorien mit hinreichender zeitlicher und räumlicher Auflösung. Zu diesem Zweck werden hochauflösende optische Messmethoden eingesetzt: Laser-induzierte Fluoreszenz für die Konzentration der Übergangskomponente, Particle-Image-Velocimetry für das Flüssigkeitsfeld und Shadowgraphie für die Blasen. Die betrachtete Geometrie wird, ausgehend von einer Blasenkette, im Laufe der Projektdauer über einen Blasenvorhang hin zum Blasenschwarm im Schwierigkeitsgrad gesteigert.

8. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

Abbaszadeh, Shokoofeh; Leidhold, Roberto; Hoerner, Stefan

A design concept and kinematic model for a soft aquatic robot with complex bio-mimicking motion
Journal of bionic engineering - Cham: Springer International Publishing . - 2022, insges. 13 S.;
[Imp.fact.: 2.682]

Anca-Couce, Andrés; Berg, Lukas; Pongratz, Gernot; Scharler, Robert; Hochenauer, Christoph; Geusebroek, Marco; Kuipers, Johan; Vilela, Carlos Mourao; Kraia, Tzouliana; Panopoulos, Kyriakos; Funcia, Ibai; Dieguez-Alonso, Alba; Almuina-Villar, Hernán; Tsiotsias, Timotheos; Kienzl, Norbert; Martini, Stefan

Assessment of measurement methods to characterize the producer gas from biomass gasification with steam in a fluidized bed
Biomass and bioenergy - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 163 (2022), insges. 13 S.;
[Imp.fact.: 5.774]

Chi, Cheng; Abdelsamie, Abouelmagd; Thévenin, Dominique

Transient ignition of premixed methane/air mixtures by a pre-chamber hot jet - a DNS study
Flow, turbulence and combustion - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V., Bd. 108 (2022),
3, S. 775-795;
[Imp.fact.: 2.566]

Chi, Cheng; Han, Wang; Thévenin, Dominique

Effects of molecular diffusion modeling on turbulent premixed NH₃/H₂/air flames
Proceedings of the Combustion Institute/ Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier . - 2022;
[Imp.fact.: 6.535]

Chi, Cheng; Sreekumar, Srijith; Thévenin, Dominique

Data-driven discovery of heat release rate markers for premixed NH₃/H₂/air flames using physics-informed machine learning
Fuel - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 330 (2022);
[Imp.fact.: 8.035]

Chi, Cheng; Thévenin, Dominique; Smits, Alexander J.; Wolligandt, Steve; Theisel, Holger

Identification and analysis of very-large-scale turbulent motions using multiscale proper orthogonal decomposition
Physical review fluids - College Park, MD: APS, Bd. 7 (2022), 8, insges. 19 S.;
[Imp.fact.: 2.895]

Chi, Cheng; Xu, Xiaopeng; Thévenin, Dominique

Efficient premixed turbulent combustion simulations using flamelet manifold neural networks - a priori and a posteriori assessment
Combustion and flame - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 245 (2022);
[Imp.fact.: 5.767]

Cleynen, Olivier; Powalla, Dennis; Hoerner, Stefan; Thévenin, Dominique

An efficient method for computing the power potential of bypass hydropower installations
Energies - Basel: MDPI, Bd. 15 (2022), 9, insges. 13 S.;
[Imp.fact.: 3.004]

Das, Tapas K.; Kerikous, Emeel; Venkatesan, Nithya; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique; Samad, Abdus

Performance improvement of a Wells turbine through an automated optimization technique
Energy conversion and management: X - Amsterdam: Elsevier, Bd. 16 (2022);

Deylen, Jan; Köpplin, Jessica; Thévenin, Dominique

Development and validation of a design tool for an improved pitot-tube jet-pump allowing continuous fluid-fluid separation

Journal of fluids engineering - New York, NY: ASME, Bd. 144 (2022), 1, insges. 11 S.;

[Imp.fact.: 1.998]

Graichen, Henrik-Christian; Sauerhering, Jörg; Stamann, Olena; Beyrau, Frank; Boye, Gunar

Influence of adhesive tapes as thermal interface materials on the thermal load of a compact electrical machine

World electric vehicle journal - Basel: MDPI, Bd. 13 (2022), 2, insges. 23 S.;

[Imp.fact.: 2.2]

Hellmeier, Florian; Brüning, Jan; Berg, Philipp; Saalfeld, Sylvia; Spuler, Andreas; Sandalcioglu, Ibrahim Erol; Beuing, Oliver; Larsen, Naomi; Schaller, Jens; Goubergrits, Leonid

Geometric uncertainty in intracranial aneurysm rupture status discrimination - a two-site retrospective study

BMJ open - London: BMJ Publishing Group, Bd. 12 (2022), 11, insges. 10 S.;

[Imp.fact.: 3.007]

Hosseini, Seyed Ali; Darabiha, Nasser; Thévenin, Dominique

Low mach number lattice Boltzmann model for turbulent combustion - flow in confined geometries

Proceedings of the Combustion Institute/ Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier . - 2022, insges. 8 S.;

[Imp.fact.: 6.535]

Hosseini, Seyed Ali; Huang, F.; Thévenin, Dominique

Lattice Boltzmann model for simulation of flow in intracranial aneurysms considering non-Newtonian effects

Physics of fluids - [S.l.]: American Institute of Physics, Bd. 34 (2022), 7, insges. 14 S.;

[Imp.fact.: 4.98]

Huang, Feng; Noel, Romain; Berg, Philipp; Hosseini, Seyed Ali

Simulation of the FDA nozzle benchmark: A lattice Boltzmann study

Computer methods and programs in biomedicine - Amsterdam: Elsevier, Bd. 221 (2022);

[Imp.fact.: 7.027]

Hundshagen, Markus; Rave, Kevin; Nguyen, Bich-Diep; Popp, Sebastian; Hasse, Christian; Mansour, Michael; Thévenin, Dominique; Skoda, Romuald

Two-phase flow simulations of liquid/gas transport in radial centrifugal pumps with special emphasis on the transition from bubbles to adherent gas accumulations

Journal of fluids engineering - New York, NY: ASME, Bd. 144 (2022), 10, insges. 15 S.;

[Imp.fact.: 1.998]

Khan, Ali Hassan; Hussmann, Karla Ruiz; Powalla, Dennis; Hoerner, Stefan; Kruusmaa, Maarja; Tuhtan, Jeffrey A.

An open 3D CFD model for the investigation of flow environments experienced by freshwater fish

Ecological informatics - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 69 (2022), insges. 12 S.;

[Imp.fact.: 3.142]

Lee, Hsu Chew; Abdelsamie, Abouelmagd; Dai, Peng; Wan, Minping; Lipatnikov, Andrei N.

Influence of equivalence ratio on turbulent burning velocity and extreme fuel consumption rate in lean hydrogen-air turbulent flames

Fuel - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 327 (2022);

[Imp.fact.: 8.035]

Lee, Hsu-Chew; Liu, Xiaoyu; Dai, Peng; Chen, Zheng; Abdelsamie, Abouelmagd; Wan, Minping

Effects of Lewis and Karlovitz numbers on transport equations for turbulent kinetic energy and enstrophy

Acta mechanica Sinica - Berlin: Springer, Bd. 38 (2022), 7, insges. 16 S.;

[Imp.fact.: 2.91]

Li, Xiangjie; He, Fang; Cai, Junmeng; Behrendt, Frank; Dieguez-Alonso, Alba; Schliermann, Thomas

Oxidation kinetics of maize stover char at low temperature based on surface area and temperature correction

Energy - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 241 (2022);

Mansour, Michael; Kopparchy, Saketh; Thévenin, Dominique

Investigations on the effect of rotational speed on the transport of air-water two-phase flows by centrifugal pumps

International journal of heat and fluid flow - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 94 (2022);
[Imp.fact.: 2.643]

Mohamed, Mohamed H.; Alqurashi, Faris; Ramadan, A.; Thévenin, Dominique

Enhancement attempts for a three-bladed savonius turbine performance

Frontiers in energy research - Lausanne: Frontiers Media, Bd. 10 (2022), insges. 13 S.;
[Imp.fact.: 4.008]

Mohamed, Mohamed H.; Alqurashi, Faris; Thévenin, Dominique

Automatic blade shape optimization of a three-bladed modified savonius turbine

Frontiers in energy research - Lausanne: Frontiers Media, Bd. 9 (2022), insges. 9 S.;
[Imp.fact.: 3.858]

Mohammadpour, Kamyar; Chitsazan, Ali; Specht, Eckehard

The CFD simulation of reactive flow in parallel flow regenerative shaft kilns using porous media model

Thermal science - Belgrade: Soc., 2001, Bd. 26 (2022), 2, Part A, S. 1175-1183;

Mostafa, Wafaa; Abdelsamie, Abouelmagd; Sedrak, Momtaz; Thévenin, Dominique; Mohamed, Mohamed H.

Quantitative impact of a micro-cylinder as a passive flow control on a horizontal axis wind turbine performance

Energy - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 244 (2022), Part A;
[Imp.fact.: 8.857]

Niemann, Annika; Janiga, Gábor; Preim, Bernhard; Behme, Daniel; Saalfeld, Sylvia

Centerline and blockstructure for fast structured mesh generation

Current directions in biomedical engineering - Berlin: De Gruyter, 2015, Bd. 8 (2022), 1, S. 13-16;

Ojo, Anthony O.; Escofet-Martin, David; Abram, Christopher; Fond, Benoit; Peterson, Brian

Precise surface temperature measurements at kHz-rates using phosphor thermometry to study flame-wall interactions in narrow passages

Combustion and flame - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 240 (2022);

Ou, Zhisong; Chi, Cheng; Guo, Liejin; Thévenin, Dominique

A directional ghost-cell immersed boundary method for low Mach number reacting flows with interphase heat and mass transfer

Journal of computational physics - Amsterdam: Elsevier, Bd. 468 (2022);
[Imp.fact.: 4.645]

Ou, Zhisong; Guo, Liejin; Chi, Cheng; Zhao, Jiuyun; Jin, Hui; Thévenin, Dominique

Fully resolved direct numerical simulation of single coal particle gasification in supercritical water

Fuel - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 329 (2022);
[Imp.fact.: 8.035]

Ou, Zhisong; Guo, Liejin; Chi, Cheng; Zhu, Shixing; Ren, Changsheng; Jin, Hui; Thévenin, Dominique

Interface-resolved direct numerical simulations of interphase momentum, heat, and mass transfer in supercritical water gasification of coal

Physics of fluids - Melville, NY: American Institute of Physics, Bd. 34 (2022), insges. 18 S.;
[Imp.fact.: 4.98]

Parikh, Trupen; Mansour, Michael; Thévenin, Dominique

Maximizing the performance of pump inducers using CFD-based multi-objective optimization

Structural and multidisciplinary optimization - Berlin: Springer, Bd. 65 (2022), 9, insges. 23 S.;
[Imp.fact.: 4.279]

Piotrowski, W. M.; Maciejewska, K.; Dalipi, L.; Fond, Benoit; Marciniak, L.

Cr³⁺ ions as an efficient antenna for the sensitization and brightness enhancement of Nd³⁺, Er³⁺-based ratiometric thermometer in GdScO₃ perovskite lattice
Journal of alloys and compounds - Lausanne: Elsevier, Bd. 923 (2022), insges. 9 S.;
[Imp.fact.: 6.371]

Powalla, Dennis; Hoerner, Stefan; Cleynen, Olivier; Thévenin, Dominique

A numerical approach for active fish behaviour modelling with a view toward hydropower plant assessment
Renewable energy - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 188 (2022), S. 957-966;
[Imp.fact.: 8.001]

Pravdivtseva, Mariya S.; Gaidzik, Franziska; Berg, Philipp; Ulloa, Patricia; Larsen, Naomi; Jansen, Olav; Hövener, Jan-Bernd; Salehi Ravesh, Mona

Influence of spatial resolution and compressed SENSE acceleration factor on flow quantification with 4D Flow MRI at 3 Tesla
Tomography - Ann Arbor, Michigan: Grapho Publications, Bd. 8 (2022), 1, S. 457-478;
[Imp.fact.: 3.0]

Roloff, Christoph; Berg, Philipp

Effect of flow diverter stent malposition on intracranial aneurysm hemodynamics - an experimental framework using stereoscopic particle image velocimetry
PLOS ONE - San Francisco, California, US: PLOS, Bd. 17 (2022), 3, insges. 15 S.;
[Imp.fact.: 3.752]

Saalfeld, Sylvia; Stahl, Janneck; Korte, Jana; Marsh, Laurel Morgan Miller; Preim, Bernhard; Beuing, Oliver; Cherednychenko, Yuri; Behme, Daniel; Berg, Philipp

Can endovascular treatment of fusiform intracranial aneurysms restore the healthy hemodynamic environment? - a virtual pilot study
Frontiers in neurology - Lausanne: Frontiers Research Foundation, 2008, Bd. 12 (2022), insges. 9 S.;
[Imp.fact.: 4.086]

Sabariman, ; Specht, Eckeard

Investigation on salts mixture effect to the Leidenfrost temperature during spray quenching with use of actual cooling water from metal industries
Thermal science and engineering progress - Amsterdam: Elsevier, Bd. 28 (2022);
[Imp.fact.: 4.56]

Schulz, Florian; Reincke, Franziska; Beyrau, Frank

Infrared pattern based method for inspecting multi-nozzle spraying tools
Measurement science and technology - Bristol: IOP Publ., Bd. 34 (2023), 1, insges. 14 S.;
[Imp.fact.: 2.398]

Shingala, Abhishekkumar; Cleynen, Olivier; Jain, Aman; Hoerner, Stefan; Thévenin, Dominique

Genetic optimisation of a free-stream water wheel using 2D computational fluid dynamics simulations points towards design with fully immersed blades
Energies - Basel: MDPI, Bd. 15 (2022), 10, insges. 20 S.;
[Imp.fact.: 3.004]

Stahl, Janneck; Bernovskis, Anna; Behme, Daniel; Saalfeld, Sylvia; Berg, Philipp

Impact of patient-specific inflow boundary conditions on intracranial aneurysm hemodynamics
Current directions in biomedical engineering - Berlin: De Gruyter, 2015, Bd. 8 (2022), 1, S. 125-128;

Taborda, Manuel A.; Kováts, Peter; Zähringer, Katharina; Sommerfeld, Martin

The influence of liquid properties on flow structure, bubble dynamics and mass transfer in a laboratory bubble column - experimental analysis versus numerical modelling and computation
Chemical engineering research and design - Amsterdam: Elsevier, Bd. 185 (2022), S. 51-72;
[Imp.fact.: 4.119]

Tan, Q.; Hosseini, Seyed Ali; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique; Lorenz, Heike

Modeling ice crystal growth using the lattice Boltzmann method
Physics of fluids - [S.l.]: American Institute of Physics, Bd. 34 (2022), 1, S. 14;
[Imp.fact.: 4.98]

Voß, Samuel; Vutlapalli, Swetha Chowdary; Saalfeld, Patrick; Arens, Christoph; Janiga, Gábor

CFD simulations of inhalation through a subject-specific human larynx - impact of the unilateral vocal fold immobility
Computers in biology and medicine - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 143 (2022);
[Imp.fact.: 4.589]

Weldon, Simon; Veen, Bert; Farkas, Eva; Kocatürk-Schumacher, Nazlı Pelin; Dieguez-Alonso, Alba; Budai, Alice; Rasse, Daniel

A re-analysis of NH₄⁺ sorption on biochar - have expectations been too high?
Chemosphere - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 301 (2022), insges. 7 S.;

Welschhof, L.; Boye, Gunar; Klink, A.; Bergs, T.

Influence of the WEDM rim zone on material specific thermo-physical properties
Procedia CIRP/ CIRP - The International Academy for Production Engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 113 (2022), S. 29-34;

Xuan, Guangtao; Ebert, Mirko; Rodrigues, Simson Julian; Lessig, Christian; Vorhauer-Huget, Nicole; Fond, Benoît

Temperature distribution in granular assemblies using luminescence thermometry and radiative transfer simulation
Conference proceedings from OSA Publishing/ Optical Society of America - Washington, DC . - 2022;

Yang, W.; Ranga Dinesh, K. K. J.; Luo, K. H.; Thévenin, Dominique

Direct numerical simulation of turbulent premixed ammonia and ammonia-hydrogen combustion under engine-relevant conditions
International journal of hydrogen energy - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 47 (2022), 20, S. 11083-11100;
[Imp.fact.: 7.139]

Yang, W.; Ranga Dinesh, K. K. J.; Luo, K. H.; Thévenin, Dominique

Direct numerical simulations of auto-igniting mixing layers in ammonia and ammonia-hydrogen combustion under engine-relevant conditions
International journal of hydrogen energy - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 47 (2022), 89, S. 38055-38074;
[Imp.fact.: 7.139]

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Dernbecher, Andrea; Dieguez-Alonso, Alba

Advanced porous particle model in biomass pyrolysis
Chemical engineering transactions - Milano: AIDIC, Bd. 92 (2022), S. 685-690, 2022;

Hombeck, Jan; Meuschke, Monique; Lieb, Simon; Lichtenberg, Nils; Datta, Rabi; Krone, Michael; Hansen, Christian; Preim, Bernhard; Lawonn, Kai

Distance visualizations for vascular structures in desktop and VR - overview and implementation
VCBM 2022 - Eurographics Ass. . - 2022;

Lehr, Annemarie; Janiga, Gábor; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique

Numerical study on the solid phase residence time distribution in a counter-current screw extractor
Symposium: 32nd European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 51 (2022), S. 13-18;

Meuschke, Monique; Voß, Samuel; Eulzer, Pepe; Janiga, Gabor; Arens, Christoph; Wickenhöfer, Ralph; Preim, Bernhard; Lawonn, Kai

COMFIS - Comparative Visualization of Simulated Medical Flow Data
VCBM 2022 - Eurographics Ass. . - 2022;

Schulz, Florian; Martins, Fabio J. W. A.; Beyrau, Frank

Liquid pattern and velocity field on a surface during spray impingement

Symposium: 20th International Symposium on the Application of Laser and Imaging Techniques to Fluid Mechanics, Lisbon, 11-14 July 2022, Proceedings of the 20th International Symposium on the Application of Laser and Imaging Techniques to Fluid Mechanics - Lisbon . - 2022, S. 1539-1552;

Zhao, Zhao; Hoerner, Stefan; Leidhold, Roberto

Design and analysis of a blade-embedded limited-angle torque motor for vertical-axis water turbines

Konferenz: 11th International Conference on Power Electronics, Machines and Drives, PEMD 2022, Newcastle, UK, 21-23 June 2022, The 11th International Conference on Power Electronics, Machines and Drives (PEMD 2022) - IEEE . - 2022, S. 204-208;

NICHT BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Gopalkrishna, Suresh Babu; Specht, Eckehard

Inverse heat conduction method to estimate the heat flux during quenching process of hot metals with infrared thermography measurements

Proceedings of the Thermal and Fluids Engineering Summer Conference - Begell House Inc. . - 2022, S. 719-731

Khodsiani, Mohammadhassan; Beyrau, Frank; Fond, Benoit

Investigation of a flame in a packed bed using a cylindrical geometry and single-side optical diagnostics

Laser Applications to Chemical, Security and Environmental Analysis - Washington, D.C., USA: OSA - the Optical Society . - 2022;

Stenzel, Karsten; Sazonov, Vladyslav; Rottengruber, Hermann; Cheng, Chi; Duill, Finn; Rotter, Max; Janas, Peter

Numerical and experimental investigation of an active pre-chamber spark plug for high-speed natural gas engines

Konferenz: 12. Dessauer Gasmotoren-Konferenz, Dessau, 5.-6. Mai 2022, 12. Dessauer Gasmotoren-Konferenz - Dessau-Roßlau: WTZ Roßlau . - 2022, insges. 19 S.;

ABSTRACTS

Hülsmann, Jörn; Reuter, Fabian; Beutner, Martin; Wacker, Max; Hackert-Oschätzchen, Matthias; Ohl, Claus-Dieter; Bettenbrock, Katja; Janiga, Gábor; Scherner, Maximilian Philipp; Wippermann, Jens

How to optimize coronary artery bypass graft prosthesis based on bacterial nanocellulose

5th International Symposium on Bacterial Cellulose/ International Symposium on Bacterial Cellulose - Jena, 2022; Bismarck, Alexander . - 2022, S. 31;

DISSERTATIONEN

Cleynen, Olivier; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]

Optimization of low-impact hydropower devices

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (153 Seiten, 25,35 MB), Illustrationen;

Gugel, Sebastian; Rose, Georg [AkademischeR BetreuerIn]; Berg, Philipp [AkademischeR BetreuerIn]; Pech, Maciej [AkademischeR BetreuerIn]

Evaluation der Perfusionsbildgebung zur Schlaganfalldiagnostik am C-Arm-CT

Magdeburg, 2022, XIV, 114 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm

Künzel, Christian; Scheffler, Franziska [AkademischeR BetreuerIn]; Scheffler, Michael [AkademischeR BetreuerIn]; Sauerhering, Jörg [AkademischeR BetreuerIn]

Entwicklung eines dispersionsbasierten Druckverfahrens zur Herstellung von thermoelektrischen Mikroschichten

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XII, 146, Seite IX-LXXVII, 98,21 MB), Illustrationen;

Pramudita, Daniel; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Dièguez Alonso, Alba [AkademischeR BetreuerIn]

Process intensification during powder production in pulsated gas flow

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (xviii, 157 Seiten, 8,57 MB), Illustrationen;

Voß, Samuel; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]; Preim, Bernhard [AkademischeR BetreuerIn]; Behme, Daniel [AkademischeR BetreuerIn]

Unsicherheit in der hämodynamischen Charakterisierung intrakranieller Aneurysmen

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XVI, 202 Seiten, 18,77 MB), Illustrationen;

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. Andreas Seidel-Morgenstern
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. habil. Andreas Seidel-Morgenstern
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

3. FORSCHUNGSPROFIL

1. Chemische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. A. Seidel-Morgenstern)

- Untersuchung heterogen katalysierter Reaktionen
- Kopplung von Reaktion und Stofftrennung
- Membranreaktoren
- Chromatographische Trennverfahren
- Enantiomerentrennung

2. Bioprosesstechnik (Prof. Dr.-Ing. U. Reichl)

- Fermentationstechnik
- Säugerzellen, Hefen, Bakterien
- Aufarbeitungstechnik
- Modellierung, Simulation und Optimierung von Bioprosessen

- Prozessüberwachung und -regelung
- Metaproteomics mikrobieller Gemeinschaften

3. Mechanische Verfahrenstechnik (Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem)

- Partikeltechnologie
- Mehrphasenströmungen
- Numerische Mechanik

4. Mehrphasenströmungen (Prof. Dr.-Ing. habil. Martin 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-Gölzau
- 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: Dr. rer. nat. Fabian Reuter, Prof. Dr. Claus-Dieter Ohl, Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner
Förderer: Sonstige - 01.01.2021 - 01.06.2022

Präzisionsreinigung mit Mikrojets

Das Entfernen von unpolaren tröpfchenartigen Anhaftungen mittels eines schnellen und transienten Wasserstrahls soll in diesem Forschungsprojekt untersucht werden. Hierzu werden Experimente und Strömungssimulationen von laserinduzierten Kavitationsblasen auf mikroskopischer räumlicher Skala und einer Submikrosekunden-Zeitskala zur quantitativen Analyse durchgeführt. Die durch den asymmetrischen Blaskollaps gebildeten Mikrojets erreichen Geschwindigkeiten von bis zu 100 m/s und erzeugen Wandschubspannungen von über 105 N/m². Auf Basis dieser Mikrojets gehen wir die Frage an, welche Stärke und Einwirkzeit der vom Jet erzeugten Wandschubspannungen notwendig ist, um hochviskose unpolare Verschmutzungen abzulösen. Die angestrebten Experimente und Simulationen erlauben es mit bisher nicht erreichter Auflösung die Mechanismen des mikroskopischen Kärcherns zu verstehen und den Weg für neue Techniken zur kavitationsgestützten Präzisionsreinigung zu bereiten. Wir erwarten als Ergebnis, dass nicht nur Vorschläge für die Optimierung von bisherigen Strahlreinigern gemacht werden können, sondern wir auch Vorschläge geben, wie optische und hydrodynamische Kavitation zur schonenden Entfernung von Oberflächenverschmutzungen genutzt werden können.

Projektleitung: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.07.2020 - 14.07.2023

Akustisch getriebene Wolkenkavitation beschichteter Mikroblasen

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

Projektleitung: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner
Projektbearbeitung: Prof. Dr. Berend [Projektleiter][96889], van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2019 - 30.06.2022

Nichtlineare Kapillarsysteme mit tensidebeladenen Grenzflächen

Theoretische Studien der physisch-chemischen Hydrodynamik von Kapillarsystemen mit Tensiden haben sich bisher vorzugsweise auf das lineare Regime konzentriert, was diese Studien auf kleine Obflächenamplituden, diffusionsdominierten Transport von unlöslichen Tensiden und kleine Reynoldszahlen beschränkt. Ein ausführliches Verständnis des Einflusses von tensidebeladenen Grenzflächen mit endlicher Amplitude und der Adsorptionskinetik von löslichen Tensiden, welche für Anwendung im Bioingenieurwesen bis hin zu Fertigungsverfahren von direkter Bedeutung sind, ist daher nicht vorhanden. Das vorgeschlagene Forschungsprojekt untersucht das nichtlineare Verhalten von tensidebeladenen Kapillarsystemen, wobei es sich auf die Dispersion und Dämpfung von Kapillarwellen mit endlicher Amplitude, sowie auf die Entwicklung und Stabilisierungsmechanismus von Einzelwellen auf flüssigen trägheitsdominierten Fallfilmen, unter dem Einfluss von unlöslichen und löslichen Tensiden konzentriert. Dies wird ein detailliertes Verständnis der Wechselwirkung von unlöslichen und löslichen Tensiden mit oberflächenspannungsdominierten Grenzflächenbewegungen, sowie deren Effekt auf die Entwicklung und Dämpfung von Grenzflächenwellen, in einem weiten Bereich von Längenskalen für visko-kapillare und trägheitsdominierte Strömungen beisteuern. Um diese Strömungen zu untersuchen werden wir neue numerische Methoden zur Simulation von Grenzflächenströmungen mit löslichen Tensiden im Rahmen der Kontinuumsmechanik entwickeln, welche gemeinsam mit modernen numerischen Berechnungsprogrammen ein rationales computergestütztes Rechenmodell für die genaue Modellierung von unlöslichen und löslichen Tensiden bereitstellt.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Katrin Hofmann, M.Sc. Tobias Fritsche
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.11.2022 - 31.12.2023

Konzeptentwicklung und Koordination "Laborgestaltung - neue Anforderungen"

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

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Andreas Brune
Kooperationen: Otto-von-Guericke Universität Magdeburg
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.08.2021 - 31.07.2022

Kontrolle und Intensivierung von Reaktionen durch Einsatz zyklisch betriebener Distributoren (Folgeantrag)

Die heterogene Katalyse besitzt in der chemischen Industrie, in der Umwelttechnik und bei der Entwicklung neuer, selektiver Synthesewege ein erhebliches Potential. Entwicklungsaktivitäten zielen auf Katalysatoren mit optimierter Selektivität und Ausbeute aber insbesondere auf die Intensivierung der Prozesse und somit auf die Einsparung von Energie und Rohstoffen.

Vor diesem Hintergrund ist das Ziel des Projekts, eine Ausbeutesteigerung bei der Synthese gewünschter Olefine, die u.a. zur Kunststoffproduktion eingesetzt werden, durch verteilte Reaktandendosierung mittels Membranen (Distributor) herbeizuführen. In einem zyklisch betriebenen Distributor soll hierzu die oxidative Dehydrierung (ODH) und die thermische Dehydrierung (TDH) am industriell relevanten Modellsystem Propan, bei Vorliegen einer stofflichen und energetischen Kopplung, in einem integrierten Reaktor für maximale Synergieeffekte (autothermer Betrieb) untersucht und bewertet werden. Dieses Konzept soll den gesamten Reaktor/Katalysator auch bei der thermischen Dehydrierung im Vergleich zu bestehenden Konzepten permanent, d.h. ohne Schlupf oder separate Regenerationsphasen, nutzen können. Hierzu ist ein optimal gesteuerter

transmembraner Sauerstoffstrom, der sich temporär dem Stand des Katalysatorzustands/Aktivität anpasst zu ermitteln, wobei die Kontrolle der Temperatur und der Geschwindigkeit im Apparat durch verteilte Dosierung effizient gestaltet werden kann. Modellgestützte Untersuchungen (1D und 2D) sollen dabei helfen, optimale Dosierprofile bzw. Anforderungen an die Membran (Kompatibilität von Reaktion und Membran), zu identifizieren.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: Feisthauer Reik, M.Sc. Christin Fischer, Ines Pottratz
Förderer: Bund - 01.01.2018 - 31.12.2022

Forschungs- und Technologietransfer für das Leben im digitalen Zeitalter, Teilvorhaben 7: Transfer durch Branchenkopplung im Web -FoodProcessEngineering 4.0

Ausgangspunkt ist die Forderung der Partner in der Lebensmittelbranche, ein definiertes Produkt mit jederzeit konstanten Eigenschaften und konstanter Qualität herstellen zu können, obwohl die Eigenschaften und die Qualität der landwirtschaftlichen Rohstoffe schwanken. Ziele des Teilvorhabens sind daher

- Vernetzung der Rohstoffproduzenten und der Lebensmittelhersteller über die Schaffung einer gemeinsam zu entwickelnden disruptiven Technologie, die beiden Branchen Nutzen bringt
 - interdisziplinäre Gesamtprozesserneuerung durch Einsatz von Industrie 4.0 - Technologien von der Rohstoffherstellung und der Rohstoffaufbereitung über die Synthese bis zum Produkt
 - Vernetzung aller Komponenten der Produktionskette in Echtzeit über eine Cloud
-

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: Dr.-Ing. Martin Gerlach, M.Sc. Sabine Kirschtowski
Kooperationen: Otto-von-Guericke Universität Magdeburg; Technische Universität Berlin; Technische Universität Dortmund
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2018 - 30.06.2022

Sonderforschungsbereich Transregio 63 - Integrierte chemische Prozesse in flüssigen Mehrphasensystemen, Teilprojekt A3: Kinetik der reduktiven Aminierung und der Hydroaminomethylierung in reaktiven Mehrphasensystemen

Im Mittelpunkt des Teilprojekts stehen experimentelle und theoretische Untersuchungen zum Mechanismus und der Kinetik der reduktiven Aminierung von langkettigen Aldehyden sowie der Hydroaminomethylierung als komplexe Tandemreaktion. Ziel ist es, die Reaktionsnetzwerke und katalytischen Zyklen systematisch aufzuklären, kinetische Modelle abzuleiten und zu reduzieren, sowie die Modellparameter durch Perturbationsversuche und Parameterreduktionstechniken zu ermitteln. Es wird die Grundlage für die Auslegung von Reaktoren und Prozessen geschaffen. Darüber hinaus werden die Katalysatordeaktivierung betrachtet und allgemeine Regeln zur Bewertung von Tandemreaktionen (Mehrtopf- vs. Eintopfsynthese) erarbeitet.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: Dipl.-Chem. Pottratz Ines, M.Sc. Hofmann Katrin, M.Sc. Müller Ines
Kooperationen: Hochschulverbundpartner: Prof. Dr.-Ing. Thomas Kleinschmidt, Hochschule Anhalt, Fachbereich BWP Lehrstuhl: Lebensmittelverfahrenstechnik, Bernburger Straße 55, 06366 Köthen; Verbundpartner „Kooperative Promotion“: Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Seidel- Morgenstern Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg Institut für Verfahrenstechnik; Workingpartner: Claudia Krines, Milchwerke "Mittelbe" GmbH, Heerener Straße 49, D- 39576 Stendal; Workingpartner: Dr. Aleš Štrancar, BIA Separations, Mirce 21, SI-5270 Ajdovščina, Slovenia; Workingpartner: Dr. Marcus Weyd, Fraunhofer- Institut für Keramische Technologien und Systeme (IKTS) Hermsdorf, Michael-Faraday- Straße 1, 07629 Hermsdorf
Förderer: Bund - 01.09.2018 - 31.03.2023

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

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

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

Das Ziel des beantragten Projekts ist die experimentelle und modellbasierte Untersuchung zweier Verfahrensstrategien zur Gewinnung und Aufreinigung von GOS aus Molkenpermeat inklusive Prozessintensivierung durch Kopplung von Synthese, Produktabtrennung und Recycling. Hierzu werden zwei Strategien verfolgt: a) diskontinuierlicher, enzymatischer Prozess, Trennung des Produkts von Lactose mittels Nanofiltration inkl. Recycling b) kontinuierlicher Porendurchflussreaktor mit immobilisierten Enzym, SMB-Trennung inkl. Recycling.

Projektleitung: Dr.-Ing. Robert Heyer, Prof. Dr. Gunter Saake
Projektbearbeitung: MSc. Daniel Micheel, MSc. Daniel Walke
Kooperationen: Gunter Saake
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2021 - 30.11.2024

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

Graphdatenbanken stellen eine effiziente Technik zur Speicherung und zum Zugriff auf hochgradig verknüpfte Daten unter Verwendung einer Graphstruktur dar, wie z.B. Verbindungen zwischen Messdatenzu Umweltparametern oder klinischen Patientendaten. Die flexible Knotenstruktur macht es einfach, die Ergebnisse verschiedener Untersuchungen hinzuzufügen. Dies reicht von einfachen 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 Graphoperatoren entwerfen. In einem zweiten Schritt integrieren wir das maschinelle Lernen direkt in die Graphdatenbank, indem wir spezielle Knoten hinzufügen, die das Modell des Algorithmus für maschinelles Lernen repräsentieren. Die Ergebnisse unseres Projekts sind verbesserte Operatoren, die sowohl moderne Hardware als auch Integrationskonzepte für Algorithmen des maschinellen Lernens nutzen. Unsere allgemein entwickelten Ansätze werden das Verarbeiten und Analysieren riesiger Graphen in einer Fülle

von Anwendungsfällen über unseren angestrebten Anwendungsfall der biologischen und klinischen Datenanalyse hinaus vorantreiben.

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Projektbearbeitung: Dr.-Ing. Lu Xiang, MSc. Chen Jing
Förderer: Stiftungen - Sonstige - 01.06.2022 - 31.05.2026

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

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

Projektleitung: MSc. Bürger Johannes, Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Kooperationen: Dr. Maciej Jaskulski, TU Lodz
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.05.2022 - 30.04.2025

Mechanism of agglomeration in spray drying with the fine particle recirculation

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

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Projektbearbeitung: MSc. Xiang Lu
Kooperationen: Prof. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2024

Adaptive pore network modelling of thermochemical processes in single porous particles

A single particle model with high accuracy is central to DEM/CFD simulations of a bed packed with a population of thermally-thick solid particles and exposed to a thermal process (such as drying) or a thermochemical process (such as calcination, pyrolysis, or combustion). A model as such must essentially account for heat and mass transfer within a single porous particle, morphological changes of its pore structure, chemical reactions and the connection to the particle's fluid-solid surroundings. Project B4 aims at performing a major breakthrough in the modelling and simulation of these porescale phenomena at the level of a single particle and under realistic process conditions. This project will concentrate on microscopic discrete and macroscopic continuum modelling as well as on experimental characterisation of the drying and calcination processes. Discrete models will be developed based on first principles. Since the pore size will change over time due to thermal stress (shrinkage during drying) or chemical reactions (consumption of solid phase), the pore structure must be traced over time and updated accordingly. Full consideration of structural changes is one of the major advances that will be made with the help of adaptive discrete pore network models - a new family of discrete models. Model extensions shall be made to account for internal temperature gradients and unstructured networks with physically realistic pore structures. The interior pore structure and volumetric change of a particle will be characterised by techniques such as μ -CT imaging. Pore-scale phenomena are directly accessible by discrete models. This fact will be used to revisit the classical continuum models, taking inputs from representative discrete pore network simulations and feeding effective parameters to a macro-scale continuum model. To endow the continuum model with predictive capabilities, high-quality and trustworthy gravimetric measurements will be conducted for single particles in

thermo-balance reactors under controlled conditions. On this basis, the classical continuum models will be upgraded and thus implemented in the DEM/CFD libraries after their model-order reduction.

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Kooperationen: Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg; Prof. Avi Levy
Förderer: Stiftungen - Sonstige - 01.04.2020 - 31.03.2023

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

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

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher, 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. Kai Sundmacher
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.04.2019 - 31.03.2022

„Computergestützter Entwurf von stark eutektischen Lösungsmitteln für Trennprozesse zur Separation von Naturstoffen aus flüssigen Gemischen“

The project focuses on the development of a model-based methodology for systematic component selection and process design for Deep Eutectic Solvents (DES) to be used as mass separation agents in liquid-liquid extraction of target molecules from natural product mixtures. The extraction of tocopherol (Vitamin E) from deodorizer distillate (tocopherol/ methyloleate), a valuable stream from the vegetable oil production, is taken as example of practical relevance.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2018 - 30.06.2022

SFB/TR 63: Integrierte chemische Prozesse in flüssigen Mehrphasensystemen - TP B1: Optimale Reaktionsführung in flüssigen Mehrphasensystemen / 3. Förderperiode

Das Teilprojekt B1 hat zum Ziel, Methoden zur Ermittlung der optimalen Reaktionsführung für flüssige Mehrphasensysteme zu entwickeln und exemplarisch auf die Hydroformylierung langkettiger Alkene anzuwenden. Dabei übernimmt es wichtige Funktionen innerhalb des SFB/TR. Zum Einen wird eine Methodik für die optimale Reaktionsführung und die ideale Reaktorgestaltung als generische Fragestellung entwickelt. Zum Anderen werden konkrete Reaktorkonzepte für den im SFB/TR behandelten Hydroformylierungsprozess langkettiger Alkene in temperaturgesteuerten Lösungsmittelsystemen entworfen. Diese werden apparativ realisiert und hinsichtlich ihres reaktionstechnischen und strömungstechnischen Realverhaltens charakterisiert. Danach wird der resultierende optimale Reaktor in Kooperation mit dem Teilprojekt B5 in eine Mini-plant integriert, um das Reaktorverhalten im Gesamtprozess mit geschlossenen Rückführungsströmen zu untersuchen und robust auszulegen. Das Teilprojekt B1 übernimmt dabei eine wichtige Brückenfunktion für den SFB/TR, indem es alle drei Projektbereiche miteinander verknüpft.

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

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 - 30.09.2024

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

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

mentarity is seen with, especially, projects on crossing flames, high shear mixing, assisted fluidization, and imaging.

Projektleitung: MSc. Akbas Serap, Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2021 - 30.09.2024

Ultrathin coating of fluidized particles by means of aerosol

Coated particles for various applications are usually produced by spraying solid-containing liquid on mechanically agitated or fluidized cores. Every spray droplet which is deposited on the surface of a core particle leaves behind a solid remnant after evaporation of the solvent or suspension liquid (preferably water). Each such deposit is a building block (BB) of the coating layer. However, spray droplets are quite large (typically 40 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. Simson Rodrigues
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Prof. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.07.2020 - 14.06.2024

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

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

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Rongyi Zhang
Kooperationen: Dr. Torsten Hoffmann; Dr. Maksim Mezhericher, Princeton University
Förderer: Stiftungen - Sonstige - 01.01.2018 - 31.10.2022

Coating of fine particles by aerosol and other techniques

Coating of very small particles in gas atmosphere at nearly ambient conditions is highly desirable but still a challenge in industry. Conventional spray fluidized bed (or similar) processes tend to extensive agglomeration when the core particles are too small. The process can, though, be shifted to smaller core particles when conducted with aerosol, instead of conventional spray droplets. Apart from fully coated particles, particulate products with interesting patterns of island surface growth can also be achieved in this way. Conventional sprays are also investigated, based on the idea of embedding single particles to be coated in single spray droplets.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Lucas Briest
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Institut für Ziegelforschung Essen e.V.; Materialforschungs- und prüfanstalt, Bauhaus Universität Weimar
Förderer: BMWi/AIF - 01.01.2020 - 31.12.2022

Intermittierende Mikrowellentrocknung für die Ziegelindustrie

Bricks belong to the oldest building materials, but they are still in frequent use and of a great importance. Especially the drying of bricks is of key interest for energy savings and product quality. The new generation of industrial processes for the drying of bricks is prepared in this project, based on the intermittent use of microwaves in combination with conventional convective drying. The drying process is investigated by experiments and simulations in Magdeburg. We are cooperating closely with experts on clay materials and on microwave irradiation.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Xiaodan Yao
Kooperationen: Dr. Torsten Hoffmann; AVA - Anhaltische Verfahrens- und Anlagentechnik GmbH, Magdeburg; DDP Specialty Products Germany GmbH & Co. KG, Bomlitz; Dr. Wernecke Feuchtemesstechnik GmbH, Potsdam; BASF SE, Ludwigshafen; Evonik Technology & Infrastructure GmbH, Hanau; Glatt Ingenieurtechnik GmbH, Weimar; Granolis GmbH, Meiningen; IPT Pergande GmbH, Weißandt-Görlau
Förderer: BMWi/AIF - 01.12.2020 - 31.05.2023

Granulation in der Sprühwirbelschicht mit Gasbeimischung zum Feed

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

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Supriya Bhaskaran
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Dr. Tanja Vidakovic-Koch, MPI Magdeburg
Förderer: Sonstige - 01.11.2020 - 31.08.2023

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

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

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Wencong Wu, Dr. Kaicheng Chen
Kooperationen: Deutsche Industrie aus Exzellenzcluster WIGRATEC (Glatt Ingenieurtechnik); niederländische Projektpartner (Bodec, Nestlé NL)
Förderer: Bund - 01.04.2019 - 31.07.2022

Advanced processing of mixed-ingredient food particles (ADMIX)

Aus mehreren Ingredienzien bestehende Lebensmittelpartikel werden heute noch durch Beimischung von Funktionszutaten in sprühgetrocknetes Pulver hergestellt. Neben anderen Eigenschaften ist die Homogenität des Produktes dabei wichtig. Um das Profil der Produkteigenschaften und die Prozesseffizienz zu verbessern, wird im Verbundprojekt des internationalen Exzellenzclusters einerseits die Kombination aus Sprühtrockner und Mischer verbessert. Andererseits werden hybride, auf Sprühwirbelschichten beruhende Technologien eingeführt. Schließlich wird eine neuartige, Sprühtrocknung und Sprühwirbelschicht in einem einzigen Apparat integrierende Technologie entwickelt und demonstriert.

An der Universität Magdeburg werden Mischer für Pulver unterschiedlicher Art und Form durch kleine, mittels der diskrete Elemente Methode (DEM) schnell simulierbare Partikelsysteme dargestellt. Solche Simulatoren sollen neue Möglichkeiten für die Auslegung von Mischprozessen eröffnen. Darüber hinaus werden Struktur und Zusammensetzung von Partikeln aus allen Produkten bildgebend sowie spektroskopisch charakterisiert. Die genannten Verfahrensalternativen werden im Hinblick auf Effizienz und Produktqualität vergleichend ausgewertet.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Farooq Hussain, MSc. Abhinandan Kumar Singh
Kooperationen: Kooperationen: Deutsche Industrie aus Exzellenzcluster WIGRATEC (Pergande Group); niederländische Projektpartner (Bodec, Agglomix); Dr. Maciej Jaskulski, TU Lodz
Förderer: Bund - 01.04.2019 - 31.07.2022

Combined agglomeration technology for food (COAGG)

Agglomerate sind wegen günstiger Instandeigenschaften von großem Interesse für die Lebensmittelindustrie. Diese werden heute vorwiegend durch Sprühtrocknung, gelegentlich auch in Sprühwirbelschichten hergestellt. Jeder dieser Prozesse wird im Verbundprojekt des internationalen Exzellenzclusters aufgewertet, um die Prozesseffizienz und das Eigenschaftsprofil der Produkte zu verbessern. Darüber hinaus wird eine neue Technologie eingeführt, die die genannten Einzelprozesse miteinander kombiniert. Untersuchungen werden sowohl mit Modellstoffen als auch mit hochwertigen Lebensmittelprodukten durchgeführt.

An der Universität Magdeburg werden im Rahmen des Verbundprojektes Apparate mit multiplen Sprays mittels Computational Fluid Dynamics simuliert. Dabei wird neben dem üblichen Zulaufmaterial eine Bindersubstanz so gesprüht, dass die Wechselwirkung zwischen den Sprays zu einem günstigen Agglomerationsergebnis führt. Die Struktur von Produktpartikeln wird mittels Röntgen-Mikrotomographie sowie Rasterelektronenmikroskopie bildgebend charakterisiert. Aus den Bildern werden Deskriptoren abgeleitet, die die Struktur der Produktpartikel

beschreiben und mit Gebrauchseigenschaften korrelieren. Verfahrensalternativen werden in Hinblick auf Effizienz und Produktqualität vergleichend ausgewertet.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Maximilian Thomik
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Prof. Petra Först, TU München; Prof. Harald Schuchmann, Hochschule Darmstadt
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 04.01.2019 - 31.03.2022

Pore network modeling of freeze drying on the basis of lyomicroscopic and tomographic measurements

Freeze drying is a necessary and common process in the manufacturing of high-value products, but it is also slow and expensive. Efforts to increase the efficiency push the process into regions, in which the solid scaffold of the product can soften and collapse. Such damaging events are always local and can thus not be captured by conventional continuum models, which are also otherwise limited in their predictive ability. Therefore, and for the first time, a pore network model capable of representing the microscale shall be developed for freeze drying in this project. The pore network will be three-dimensional and irregular. It will account for the local, pore-scale variation of heat and mass transport as well as of structure and properties of the drying body, with two-way coupling between heat transport and drying. Freezing experiments and experiments of subsequent freeze drying of aqueous sugar solutions in a lyomicroscope will guide model development. Freezing is a crucial step, because it creates around ice crystals of different size and shape the solid scaffold to be subsequently dried. The morphology of the frozen or freeze dried material is evaluated on the basis of three-dimensional X-ray tomography data and used to generate realistic pore networks. Parameters of the pore network model are identified and the model is validated by freeze drying experiments conducted both outside and within the region of conditions that result in structural collapse.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Gerd Strenzke
Kooperationen: Dr. Torsten Hoffmann; Prof. Achim Kienle; Prof. Andreas Bück, Friedrich-Alexander University Erlangen-Nuremberg
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.11.2016 - 31.10.2022

Kontinuierliche Wirbelschichtsprühagglomeration

In diesem Projekt wird die kontinuierliche Sprühagglomeration in einstufigen Wirbelschichten untersucht. Ziel ist dabei die Herausarbeitung kinetischer Daten zum Prozess, sowie die Untersuchung des dynamischen Verhaltens und der erzielbaren Produktqualität in Abhängigkeit der Prozessbedingungen.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Hashir Altaf
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Dr. Tanja Vidakovic-Koch, MPI Magdeburg
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.09.2019 - 31.08.2023

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.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Manuel Janocha
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.09.2018 - 28.02.2022

Layer buildup and structure from single deposited droplets

This project replicates experimentally in a droplet-by-droplet manner how layers are successively built from drying droplets that contain solid material. Contour and porosity are measured incrementally during layer buildup by means of white interferometry. Salt solutions, nanosuspensions and microsuspensions are investigated for different drying conditions. Purpose of the project is to elucidate the principles of granulation and coating.

Projektleitung: Dr. Andreas Voigt
Kooperationen: Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg
Förderer: Haushalt - 01.11.2020 - 31.12.2023

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

It will be investigated how to capture and store CO₂ in wastes from a mine operations, for example mine tailings from Montana, USA. Successful tests could help pave the way to avoid additional emissions from mining operations and potentially help remove CO₂ that is already in the atmosphere, helping to contribute to the fight against climate change.

Projektleitung: Dr. Andreas Voigt
Projektbearbeitung: MSc. Maren Huhle, MSc. Mario Zierau
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.11.2019 - 31.12.2022

Moosaik - Luftreinigung durch Mooswände

Das Start-Up Moosaik wird basierend auf einer Konzeptstudie durch eine Masterarbeit im Bereich Nachhaltige Energiesysteme autonome Moospaneele planen, bauen und unter realen Anwendungsbedingungen testen. Diese Vorarbeiten sollen zur Gründung eines eigenständigen Unternehmens führen, das Systeme zur Luftreinigung durch vertikale Pflanzenpaneele für öffentliche Einrichtungen, Städte und Gemeinden, Unternehmen und Privatanwender anbietet.

Projektleitung: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Alba Dieguez-Alonso, Prof. Dr. Nora Kulak, Dr. Nicole Vorhauer-Huget
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2022 - 31.05.2023

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Prof. Dr.-Ing. habil. Manja Krüger
Projektbearbeitung: Janett Schmelzer
Förderer: Haushalt - 01.09.2022 - 31.05.2023

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) - 01.12.2021 - 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) - 01.01.2022 - 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) - 01.10.2021 - 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 Biomasspartikel in Wirbelschichten, vorkommen, um nur einige zu nennen. Diese Strömungen werden von einem komplizierten Gleichgewicht zwischen der Strömung-Wand, Strömung-Partikel, Partikel-Wand, und Partikel-Partikel Wechselwirkungen geprägt. Die Vorhersage solcher Strömungen mit vollständig aufgelösten oder direkten numerischen Simulationen ist normalerweise viel zu rechenintensiv. Mesoskalige Ansätze, wie Euler-Lagrange Partikel Tracking ermöglichen es, das Verhalten von viel größeren partikelbeladenen Strömungssystemen als vollständig aufgelösten Ansätze.

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

Dies ist ein Projekt zur Entwicklung neuartigen volumengefilterten Euler-Lagrange Ansatzes für die Vorhersage des Verhaltens dichter partikelbeladener Strömungen auf der Mesoskala. Dieser Ansatz wird die derzeit bestehende Lücke zwischen vollständig aufgelösten Simulationen und klassischem Euler-Lagrange Partikel Tracking schließen. Hierzu werden Modelle entwickelt, um die Kopplung der Partikel mit der Strömung genau zu berücksichtigen. Dies wird erreicht, indem in das 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: Sonstige - 01.05.2021 - 30.09.2022

Einsatz von Raumlufreiniger an Schulen

In diesem Projekt werden wir grundlegende Untersuchungen zur Entstehung und Ausbreitung von Aerosolen in Innenräumen durchführen, wobei die Raumgeometrie, die Quellstärke der Aerosole, die Wirkung der Belüftung und die Wirkung eines Raumlufilters berücksichtigt werden. Wir werden eine Reihe offener Fragen beantworten, die die wirksame Entfernung von Aerosolen, die von Menschen in Innenräumen verursacht werden, ermöglichen soll. Die offenen Forschungsfragen in diesem Kontext sind:

- Was sind die Menge an Aerosolen, die von Menschen beim Atmen, Sprechen, Husten und Singen produziert werden?
 - Wie ist die Größenverteilung der produzierten Aerosole?
 - Was ist die Ausbreitungsrate der Aerosole in einem geschlossenen Raum?
 - Was ist die beste Strategie für die Ventilation von geschlossenen Räumen, um das langfristige Vorhandensein dieser Aerosole in den Innenräumen zu verhindern?
 - Wie effektiv sind Raumluftfilter mit HEPA Filter oder mit UV Licht?
-

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: 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 Durchflussmodelliermethode - das VOF-Verfahren - ergibt genauere Simulationsergebnisse. Zweitens erlaubt die vorgeschlagene Arbeit auch die Berücksichtigung komplexer, realistischer Flussdomänen.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Projektbearbeitung: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner
Förderer: Sonstige - 01.01.2021 - 28.02.2022

Präzisionsreinigung mit Mikrojets

In diesem Forschungsprojekt wird die Entfernung unpolarer tröpfchenartiger Verunreinigungen durch einen schnellen und transienten Wasserstrahl untersucht. Dazu werden Experimente und Strömungssimulationen von laserinduzierten Kavitationsblasen auf einer mikroskopischen Raumskala und einer Submikrosekunden-Zeitskala zur quantitativen Analyse durchgeführt. Die durch den asymmetrischen Blasenkollaps gebildeten Mikrojets erreichen Geschwindigkeiten von bis zu 100 m/s und erzeugen Wandschubspannungen von über 105 Pa. Anhand dieser Mikrojets gehen wir der Frage nach, welche Stärke und Einwirkungszeit der erzeugten Wandschubspannungen entstehen durch den Strahl ist notwendig, um hochviskose, unpolare Verschmutzungen und Rückstände zu entfernen. Die angestrebten Experimente und Simulationen ermöglichen es, die Mechanismen der Reinigung mit bisher nicht erreichter mikroskopischer Präzision zu verstehen und den Weg für neue Techniken der kavitationsgestützten Präzisionsreinigung zu ebnet.

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 geformten Hohlräumen zwischen den Partikeln beschrieben werden?
-

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2024

Bulk Reaction - Teilprojekt C2

Die Brennstoffzufuhr zur Erwärmung der Schüttung und zur thermischen Behandlung der Partikel hat zentrale Bedeutung für die Auslegung und Optimierung von Prozessen. Je nach Prozess wird über verschiedene Lanzensysteme seitlich Brennstoff und Luft, seitlich vorgewärmte Verbrennungsluft oder axial Brennstoff mit Luft eingeblasen. Die Brennstoffstrahlen vermischen sich dabei auch mit der axialen Gasströmung. Daher ist

die langfristige wissenschaftliche Fragestellung, wie sich ein eingeblasener Brennstoffstrahl im Querschnitt als Funktion der Prozessparameter und der Schüttungsmorphologie verteilt und wie letztendlich die Ausbildung der Flammen ist. In der Flamme erwärmt sich die Schüttung am stärksten, so dass die Ausbreitung des Wärmestroms in radialer und peripherer Richtung durch Strahlung, Leitung und Kontakt ermittelt werden muss. In der ersten Förderperiode konzentrieren sich die Untersuchungen zunächst auf die Vermischung konditionierter, inerter Gasstrahlen, dabei ist zu untersuchen:

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
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) - 01.01.2021 - 31.12.2023

Modellentwicklung der Grobstruktursimulationen für turbulente Gas-Partikel Strömungen

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

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

Dieses Forschungsprojekt zielt darauf ab, ein LES-Modell zu entwickeln um das komplexe Verhalten

partikelbeladener unbeschränkter turbulenter Strömungen genau vorherzusagen. Um dies zu erreichen wird eine Reihe grundsätzlicher wissenschaftlicher Fragen untersucht, z.B. wie die Strömungsstatistik anhand der ungelösten Skalen genau rekonstruiert werden kann, wie die Auswirkungen des Verhaltens der Partikel auf die Turbulenz berücksichtigt werden können, und wie die Wellenzahlen bei denen die Modulation der Strömung auftritt genau vorhergesagt werden können. Ein solches neuartiges zweiphasiges LES-Modell wird aus detaillierten Studien der Wechselwirkungen zwischen Partikeln und Wirbel durch echte direkte numerische Simulationen entwickelt. Das neuartige Berechnungsmodell wird mit einer Reihe herausfordernder Testfälle geprüft und validiert.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2020 - 31.10.2023

Verhalten und Modellierung nicht sphärischer Partikel in kompressiblen Strömungen

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

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

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.02.2021 - 31.01.2024

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

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

Numerische Analysen zur Auslegung und Optimierung sind heutzutage aufgrund der geringen Kosten

und der damit verbundenen Möglichkeit die ablaufenden Elementarprozesse detailliert zu visualisieren sehr bedeutend. Allerdings wird bisher in den meisten Berechnungen davon ausgegangen, dass die dispergierten Partikel sphärisch sind.

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

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

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

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Industrie - 01.08.2018 - 31.01.2022

A study concerning in silico simulations of dry powder inhalers

In diesem Projekt führen wir Diskrete Elementsimulationen von Agglomeraten, die auf andere Agglomerate aufprallen, und von Agglomeraten, die auf eine Wand aufprallen, durch. Die Agglomerate bestehen aus mehreren kleinen Primärpartikeln. In den Simulationen haben wir die Haftfähigkeit der Primärpartikel, die Agglomeratgröße sowie die Aufprallgeschwindigkeit des Aufpralls variiert. Die quantitativen Trends in den Ergebnissen der Simulationen wurden durch eine dimensionale Analyse des Problems erfasst, und die resultierende Anpassung einer aufgelösten Mikroskalenmodellierung der Auswirkungen wurde verwendet, um ein diskretes Fragmentierungsmodell auf Makroebene zu konstruieren, um Agglomerate zu beschreiben Fragmentierung im Rahmen des Diskreten-Elemente-Modells, jedoch ohne die Notwendigkeit, das Verhalten jedes einzelnen Primärteilchens aufzuklären. Die Funktionsweise des diskreten Fragmentierungsmodells wurde mit den Ergebnissen der detaillierten Mikrosimulationen validiert.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Projektbearbeitung: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2023

Akustisch getriebene Wolkenkavitation beschichteter Mikroblasen

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2019 - 30.06.2022

Nichtlineare Kapillarsysteme mit tensidebeladenen Grenzflächen

Theoretische Studien der physisch-chemischen Hydrodynamik von Kapillarsystemen mit Tensiden haben sich bisher vorzugsweise auf das lineare Regime konzentriert, was diese Studien auf kleine Obflächenamplituden, diffusionsdominierten Transport von unlöslichen Tensiden und kleine Reynoldszahlen beschränkt. Ein ausführliches Verständnis des Einflusses von tensidebeladenen Grenzflächen mit endlicher Amplitude und der Adsorptionskinetik von löslichen Tensiden, welche für Anwendung im Bioingenieurwesen bis hin zu Fertigungsverfahren von direkter Bedeutung sind, ist daher nicht vorhanden. Das vorgeschlagene Forschungsprojekt untersucht das nichtlineare Verhalten von tensidebeladenen Kapillarsystemen, wobei es sich auf die Dispersion und Dämpfung von Kapillarwellen mit endlicher Amplitude, sowie auf die Entwicklung und Stabilisierungsmechanismus von Einzelwellen auf flüssigen trägheitsdominierten Fallfilmen, unter dem Einfluss von unlöslichen und löslichen Tensiden konzentriert. Dies wird ein detailliertes Verständnis der Wechselwirkung von unlöslichen und löslichen Tensiden mit oberflächenspannungsdominierten Grenzflächenbewegungen, sowie deren Effekt auf die Entwicklung und Dämpfung von Grenzflächenwellen, in einem weiten Bereich von Längenskalen für visko-kapillare und trägheitsdominierte Strömungen beisteuern. Um diese Strömungen zu untersuchen werden wir neue numerische Methoden zur Simulation von Grenzflächenströmungen mit löslichen Tensiden im Rahmen der Kontinuumsmechanik entwickeln, welche gemeinsam mit modernen numerischen Berechnungsprogrammen ein rationales computergestütztes Rechenmodell für die genaue Modellierung von unlöslichen und löslichen Tensiden bereitstellt.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Projektbearbeitung: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2019 - 30.06.2022

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 tensidebeladenen Grenzflächen mit endlicher Amplitude, 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 neue numerische Methoden zur Simulation von Grenzflächenströmungen mit unlöslichen Tensiden und Oberflächenviskosität im Bereich der Kontinuumsmechanik entwickelt, die, integriert in modernste numerische Simulationswerkzeuge, einen rationalen rechnerischen Rahmen für die genaue Modellierung oberflächenaktiver Substanzen stellt.

6. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

Abel, Ken Luca; Beger, Tobias; Poppitz, David; Zimmermann, Ronny T.; Kuschel, Oliver; Sundmacher, Kai; Gläser, Roger

Monolithic Al₂O₃ xerogels with hierarchical meso-/macropore system as catalyst supports for methanation of CO₂

ChemCatChem - Weinheim: WILEY-VCH Verlag, Bd. 14 (2022), 15, insges. 13 S.;

[Imp.fact.: 5.497]

Ahmad, Faez; Prat, Marc; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza

Two-equation continuum model of drying appraised by comparison with pore network simulations

International journal of heat and mass transfer - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 194 (2022);

[Imp.fact.: 5.584]

Bhandari, Shashank; Carneiro, Thiane; Lorenz, Heike; Seidel-Morgenstern, Andreas

Shortcut model for batch preferential crystallization coupled with racemization for conglomerate-forming chiral systems

Crystal growth & design - Washington, DC: ACS Publ., 2001, Bd. 22 (2022), 7, S. 4094-4104;

[Imp.fact.: 4.01]

Bhaskaran, Supriya; Pandey, Divyansh; Panda, Debashis; Paliwal, Shubhani; Vorhauer, Nicole; Tsotsas, Evangelos; Surasani, Vikranth Kumar

Study on film effects during isothermal drying of square capillary tube using Lattice Boltzmann method

Drying technology - Philadelphia, Pa.: Taylor & Francis, Bd. 40 (2022), 4, S. 735-747;

[Imp.fact.: 4.452]

Bhaskaran, Supriya; Pandey, Divyansh; Surasani, Vikranth Kumar; Tsotsas, Evangelos; Vidakovic-Koch, Tanja; Vorhauer-Huget, Nicole

LBM studies at pore scale for graded anodic porous transport layer (PTL) of PEM water electrolyzer

International journal of hydrogen energy - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 47 (2022), 74, S. 31551-31565;

[Imp.fact.: 7.139]

Castang, C.; Laín, S.; García, D.; Sommerfeld, Martin

Aerodynamic coefficients of irregular non-spherical particles at intermediate Reynolds numbers

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 402 (2022);

[Imp.fact.: 5.64]

Chen, Jiahui; Zhu, Fengyuan; Qin, Hao; Song, Zhen; Qi, Zhiwen; Sundmacher, Kai

Rational eutectic solvent design by linking regular solution theory with QSAR modelling

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 262 (2022);

[Imp.fact.: 4.889]

Cheng, Jie; Qin, Hao; Cheng, Hongye; Song, Zhen; Qi, Zhiwen; Sundmacher, Kai

Rational screening of deep eutectic solvents for the direct extraction of α -tocopherol from deodorized distillates

ACS sustainable chemistry & engineering/ American Chemical Society - Washington, DC: ACS Publ., Bd. 10 (2022), 25, S. 8216-8227;

[Imp.fact.: 9.224]

Cui, Yan; Sommerfeld, Martin

Lattice-Boltzmann simulations for analysing the detachment of micron-sized spherical particles from surfaces with large-scale roughness structures

Particuology - Amsterdam: Elsevier, Bd. 61 (2022), S. 47-59;

[Imp.fact.: 3.251]

Denner, Fabian; Evrard, Fabien; Wachem, Berend

Breaching the capillary time-step constraint using a coupled VOF method with implicit surface tension

Journal of computational physics - Amsterdam: Elsevier, Bd. 459 (2022);

[Imp.fact.: 4.645]

Du, Jiajie; Strenzke, Gerd; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Monte Carlo modeling of spray agglomeration in a cylindrical fluidized bed - from batch-wise to continuous processes

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Volume 396 (2022), Part A, Seite 113-126;
[Imp.fact.: 5.134]

El Gaayda, Jamila; Ezzahra Titchou, Fatima; Oukhrib, Rachid; Karmal, Ilham; Abou Oualid, Hicham; Berisha, Avni; Zazou, Hicham; Swanson, Claudia; Hamdani, Mohamed; Ait Akbour, Rachid

Removal of cationic dye from coloured water by adsorption onto hematite-humic acid composite - experimental and theoretical studies

Separation and purification technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 288 (2022);
[Imp.fact.: 9.136]

Felischak, Matthias; Kaps, Lothar; Hamel, Christof; Nikolic, Daliborka; Petkovska, Menka; Seidel-Morgenstern, Andreas

Corrigendum to "Analysis and experimental demonstration of forced periodic operation of an adiabatic stirred tank reactor - Simultaneous modulation of inlet concentration and total flow-rate"

The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 430 (2022);
[Imp.fact.: 16.744]

Felischak, Matthias; Wolff, Tanya; Alvarado Perea, Leo; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof

Evaluation of catalysts for the metathesis of ethene and 2-butene to propene

The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 12 (2022), 2, insges. 18 S.;
[Imp.fact.: 4.501]

Felischak, Matthias; Wolff, Tanya; Alvarado Perea, Leo; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof

Evaluation of catalysts for the metathesis of ethene and 2butene to propene

Catalysts - Basel: MDPI, Bd. 12 (2022), 2;
[Imp.fact.: 4.501]

George, Oluwafemi Ayodele; Putranto, Aditya; Xiao, Jie; Olayiwola, Patrick Shola; Chen, Xiao Dong; Ogbemhe, John; Akinyemi, Teminijesu Jesufemi; Kharaghani, Abdolreza

Deep neural network for generalizing and forecasting on-demand drying kinetics of droplet solutions

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 403 (2022);
[Imp.fact.: 5.64]

Gorges, Christian; Evrard, Fabien; Wachem, Berend; Denner, Fabian

Reducing volume and shape errors in front tracking by divergence-preserving velocity interpolation and parabolic fit vertex positioning

Journal of computational physics - Amsterdam: Elsevier, Bd. 457 (2022);
[Imp.fact.: 4.645]

Göbel, Sven; Kortum, Fabian; Chavez, Karim Jaén; Jordan, Ingo; Sandig, Volker; Reichl, Udo; Altomonte, Jennifer; Genzel, Yvonne

Cell-line screening and process development for a fusogenic oncolytic virus in small-scale suspension cultures

Applied microbiology and biotechnology - Berlin: Springer, Bd. 106 (2022), 13/16, S. 4945-4961;
[Imp.fact.: 5.56]

Hamel, Christof; Seidel-Morgenstern, Andreas

Potenzial von Membranen zur verbesserten Reaktionsführung von Selektivoxidationen: Katalysator-, Reaktor- und Prozessebene

Chemie - Ingenieur - Technik - Weinheim: Wiley-VCH Verl., Bd. 94 (2022), 1-2;
[Imp.fact.: 1.794]

Hausmann, M.; Evrard, F.; Wachem, Berend

An efficient model for subgrid-scale velocity enrichment for large-eddy simulations of turbulent flows

Physics of fluids - Melville, NY: American Institute of Physics, Bd. 34 (2022), insges. 18 S.;
[Imp.fact.: 4.534]

Herminghaus, Anna; Kozlov, Andrey V.; Szabó, Andrea; Hantos, Zoltán; Gylstorff, Severin; Kuebart, Anne Konstanze Charlotte; Aghapour, Mahyar; Wissuwa, Bianka; Walles, Thorsten; Walles, Heike; Coldewey, Sina; Relja, Borna

A barrier to defend - models of pulmonary barrier to study acute inflammatory diseases
Frontiers in immunology - Lausanne: Frontiers Media, 2010, Bd. 13 (2022), insges. 16 S.;
[Imp.fact.: 8.786]

Hessel, Volker; Tran, Nam Nghiep; Asrami, Mahdiah Razi; Tran, Quy Don; Van Duc Long, Nguyen; Escribà-Gelonch, Marc; Tejada, Jose Osorio; Linke, Steffen; Sundmacher, Kai

Sustainability of green solvents - review and perspective
Green chemistry - Cambridge: RSC, Bd. 24 (2022), 2, S. 410-437;
[Imp.fact.: 11.034]

Himmel, Andreas; Findeisen, Rolf; Sundmacher, Kai

Closed-loop real-time optimization for unsteady operating production systems
Journal of process control - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 113 (2022), S. 80-95;
[Imp.fact.: 3.951]

Hussain, Farooq; Chen, Kaicheng; Jaskulski, Maciej; Piatkowski, Marcin; Tsotsas, Evangelos

Experimental study of the parametric impact on size growth of maltodextrin particles in counter-current spray dryer
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 409 (2022);
[Imp.fact.: 5.64]

Janocha, M.; Tsotsas, Evangelos

Coating layer formation from deposited droplets - a comparison of nanofluid, microfluid and solution
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 399 (2022);
[Imp.fact.: 5.134]

Keßler, Tobias; Kunde, Christian; Linke, Steffen; Sundmacher, Kai; Kienle, Achim

Integrated computer-aided molecular and process design - green solvents for the hydroformylation of long-chain olefines
Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 249 (2022);
[Imp.fact.: 4.889]

Khesali Aghtaei, Hoda; Püttker, Sebastian; Maus, Irena; Heyer, Robert; Huang, Liren; Sczyrba, Alexander; Reichl, Udo; Benndorf, Dirk

Adaptation of a microbial community to demand-oriented biological methanation
Biotechnology for biofuels and bioproducts - London: BioMed Central, Bd. 15 (2022), 1, 1 Online-Ressource (19 Seiten), Diagramme, Illustrationen;

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

Kinetics of the rhodium-catalyzed hydroaminomethylation of 1-decene in a thermomorphic solvent system
Chemie - Ingenieur - Technik : CIT - Weinheim : Wiley-VCH Verl. , 1949 . - 2022

Krause, Ulrich; Grosshans, Holger

13th International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 74 (2022);
[Imp.fact.: 3.916]

Kweyu, Cleophas; Feng, Lihong; Stein, Matthias; Benner, Peter

Reduced basis method for the nonlinear Poisson-Boltzmann equation regularized by the range-separated canonical tensor format
International journal of nonlinear sciences and numerical simulation - Berlin: de Gruyter . - 2022;
[Imp.fact.: 2.156]

Küchler, Jan; Püttker, Sebastian; Lahmann, Patrick; Genzel, Yvonne; Kupke, Sascha; Benndorf, Dirk; Reichl, Udo

Absolute quantification of viral proteins during single-round replication of MDCK suspension cells
Journal of proteomics - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 259 (2022), insges. 10 S.;
[Imp.fact.: 3.855]

Long, Shanshan; Yang, Xiaogang; Yang, Jie; Sommerfeld, Martin

Euler/Euler large eddy simulation of bubbly flow in bubble columns under CO₂ chemisorption conditions
The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 445 (2022), insges. 19 S.;
[Imp.fact.: 13.273]

Marušič, Nika; Otrin, Lado; Rauchhaus, Jonas; Zhao, Ziliang; Kyrilis, Fotis L.; Hamdi, Farzad; Kastritis, Panagiotis L.; Dimova, Rumiana; Ivanov, Ivan; Sundmacher, Kai

Increased efficiency of charge-mediated fusion in polymer/lipid hybrid membranes
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America/ National Academy of Sciences - Washington, DC: National Acad. of Sciences, Bd. 119 (2022), 20, insges. 12 S.;
[Imp.fact.: 12.779]

Marušič, Nika; Zhao, Ziliang; Otrin, Lado; Dimova, Rumiana; Ivanov, Ivan; Sundmacher, Kai

Fusion-induced growth of biomimetic polymersomes - behavior of poly(dimethylsiloxane)-poly(ethylene oxide) vesicles in saline solutions under high agitation
Macromolecular rapid communications - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 43 (2022), 5, insges. 11 S.;
[Imp.fact.: 5.006]

Miličić, Tamara; Altaf, Haashir; Vorhauer-Huget, Nicole; Živković, Luka A.; Tsotsas, Evangelos; Vidaković-Koch, Tanja

Modeling and analysis of mass transport losses of proton exchange membrane water electrolyzer
Processes - Basel: MDPI, Bd. 10 (2022), 11, insges. 20 S.;
[Imp.fact.: 3.352]

Möckel, Marion; Baldok, Nino; Walles, Thorsten; Hartig, Roland; Müller, Andreas Johann; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne; Walles, Heike; Wiese-Rischke, Cornelia

Human 3D airway tissue models for real-time microscopy - visualizing respiratory virus spreading
Cells - Basel: MDPI, 2022, Bd. 11 (2022), 22, insges. 21 S.;
[Imp.fact.: 7.666]

Nikolić, Daliborka; Seidel, Carsten; Felischak, Matthias; Miličić, Tamara; Kienle, Achim; Seidel-Morgenstern, Andreas; Petkovska, Menka

Forced periodic operations of a chemical reactor for methanol synthesis - the search for the best scenario based on Nonlinear Frequency Response method. Part I: Single input modulations
Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 248 (2022);
[Imp.fact.: 4.311]

Nikolić, Daliborka; Seidel, Carsten; Felischak, Matthias; Miličić, Tamara; Kienle, Achim; Seidel-Morgenstern, Andreas; Petkovska, Menka

Forced periodic operations of a chemical reactor for methanol synthesis - the search for the best scenario based on Nonlinear Frequency Response method. Part II: Simultaneous modulation of two inputs
Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 248 (2022);
[Imp.fact.: 4.311]

Offersgaard, Anna; Duarte Hernandez, Carlos Rene; Pihl, Anne Finne; Venkatesan, Nadini Prabhakar; Krarup, Henrik; Lin, Xiangliang; Reichl, Udo; Bukh, Jens; Genzel, Yvonne; Gottwein, Judith Margarete

High-titer hepatitis C virus production in a scalable single-use high cell density bioreactor
Vaccines - Basel: MDPI, Bd. 10 (2022), 2, insges. 24 S.;
[Imp.fact.: 4.961]

Panda, Debashis; Bhaskaran, Supriya; Paliwal, Shubhani; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Surasani, Vikranth Kumar

Pore-scale physics of drying porous media revealed by Lattice Boltzmann simulations
Drying technology - Philadelphia, Pa.: Taylor & Francis, Bd. 40 (2022), 6, S. 1114-1129;
[Imp.fact.: 4.452]

Papakonstantinou, Georgios; Spanos, Ioannis; Dam, An Phuc; Schlögl, Robert; Sundmacher, Kai

Electrochemical evaluation of the de-/re-activation of oxygen evolving Ir oxide
Physical chemistry, chemical physics - Cambridge: RSC Publ., Bd. 24 (2022), S. 14579-14591;
[Imp.fact.: 3.945]

Pham, Son Thai; Chareyre, Bruno; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza

Pore network modeling of phase distribution and capillary force evolution during slow drying of particle aggregates
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 407 (2022);
[Imp.fact.: 5.64]

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

Combined effect of acoustic field and gas absorption on evaporation of slurry droplet
Drying technology - Philadelphia, Pa.: Taylor & Francis . - 2022;
[Imp.fact.: 3.556]

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

Intensification of spray drying granulation process by gas absorption accompanied by chemical dissociation reactions
The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Volume 433, 2022, part. 2, article 133566;
[Imp.fact.: 13.273]

Pramudita, Daniel; Humjaa, Sowat; Tsotsas, Evangelos

Droplet drying and whey protein denaturation in pulsed gas flow - a modeling study
Journal of food engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 321 (2022);
[Imp.fact.: 5.354]

Qin, Hao; Cheng, Jie; Yu, Hantao; Zhou, Teng; Song, Zhen

Hierarchical ionic liquid screening integrating COSMO-RS and aspen plus for selective recovery of hydrofluorocarbons and hydrofluoroolefins from a refrigerant blend
Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 61 (2022), 11, S. 4083-4094;
[Imp.fact.: 4.326]

Qin, Hao; Wang, Zihao; Song, Zhen; Zhang, Xiang; Zhou, Teng

High-throughput computational screening of ionic liquids for butadiene and butene separation
Processes - Basel: MDPI, Bd. 10 (2022), 1, insges. 13 S.;
[Imp.fact.: 3.352]

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

Effective thermal conductivity of packed beds made of cubical particles
International journal of heat and mass transfer - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 194 (2022);
[Imp.fact.: 5.584]

Sanchez Medina, Edgar Ivan; Linke, Steffen; Stoll, Martin; Sundmacher, Kai

Graph neural networks for the prediction of infinite dilution activity coefficients
Digital discovery - Cambridge: Royal Society of Chemistry, Bd. 1 (2022), 3, S. 216-225;

Schallert, Kay; Verschaffelt, Pieter; Mesuere, Bart; Benndorf, Dirk; Martens, Lennart; Van Den Bossche, Tim

Pout2Prot - an efficient tool to create protein (sub)groups from percolator output files
Journal of proteome research - Washington, DC: ACS Publications, Bd. 21 (2022), 4, S. 1175-1180;
[Imp.fact.: 5.37]

Schenke, S.; Sewerin, F.; Wachem, Berend; Denner, Fabian

Acoustic black hole analogy to analyze nonlinear acoustic wave dynamics in accelerating flow fields
Physics of fluids - Melville, NY: American Institute of Physics, Bd. 34 (2022), 9, insges. 15 S.;
[Imp.fact.: 4.534]

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

Explicit predictor-corrector method for nonlinear acoustic waves excited by a moving wave emitting boundary
Journal of sound and vibration - London: Academic Press, Bd. 527 (2022);
[Imp.fact.: 4.761]

Schiødt, M.; Hodžić, A.; Evrard, F.; Hausmann, M.; Wachem, Berend; Velte, C. M.

Characterizing Lagrangian particle dynamics in decaying homogeneous isotropic turbulence using proper orthogonal decomposition
Physics of fluids - Melville, NY: American Institute of Physics, Bd. 34 (2022), insges. 12 S.;
[Imp.fact.: 4.98]

Scoma, Alberto; Cern Khor, Way; Coma, Marta; Heyer, Robert; Props, Ruben; Bouts, Tim; Benndorf, Dirk; Li, Desheng; Zhang, Hemin; Rabaey, Korneel

Lignocellulose fermentation products generated by giant panda gut microbiomes depend ultimately on pH rather than portion of bamboo - a preliminary study
Microorganisms - Basel: MDPI, Bd. 10 (2022), 5, insges. 18 S.;
[Imp.fact.: 4.926]

Singh, Abhinandan Kumar; Tsotsas, Evangelos

Agglomeration of spray-dried milk powder in a spray fluidized bed - a morphological modeling
Processes - Basel: MDPI, Bd. 10 (2022), 12, insges. 12 S.;
[Imp.fact.: 3.352]

Sommerfeld, Martin

Detailed evaluation of drug powder deposition in swirl-type dry powder inhalers
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 407 (2022);
[Imp.fact.: 5.64]

Song, Zhen; Long, Nguyen Van Duc; Qin, Hao; Tran, Nam Nghiep; Fulcheri, Laurent; Hessel, Volker; Sundmacher, Kai

Thermal-plasma-assisted renewable hydrogen and solid carbon production from ionic liquid-based biogas upgrading - a process intensification study
Chemical engineering and processing - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 180 (2022);
[Imp.fact.: 4.264]

Strenzke, Gerd; Janocha, Manuel; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Morphological descriptors of agglomerates produced in continuously operated spray fluidized beds
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 397 (2022);
[Imp.fact.: 5.134]

Svitnič, Tibor; Sundmacher, Kai

Renewable methanol production - optimization-based design, scheduling and waste-heat utilization with the FluxMax approach
Applied energy - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 326 (2022);
[Imp.fact.: 11.446]

Sydor, Svenja; Dandyk, Christian; Schwerdt, Johannes; Manka, Paul; Benndorf, Dirk; Lehmann, Theresa; Schallert, Kay; Wolf, Maximilian; Reichl, Udo; Canbay, Ali E.; Bechmann, Lars P.; Heyer, Robert

Discovering biomarkers for non-alcoholic steatohepatitis patients with and without hepatocellular carcinoma using fecal metaproteomics
International journal of molecular sciences - Basel: Molecular Diversity Preservation International, Bd. 23 (2022), 16, insges. 14 S.;
[Imp.fact.: 6.208]

Taborda, Manuel A.; Kováts, Peter; Zähringer, Katharina; Sommerfeld, Martin

The influence of liquid properties on flow structure, bubble dynamics and mass transfer in a laboratory bubble column - experimental analysis versus numerical modelling and computation
Chemical engineering research and design - Amsterdam: Elsevier, Bd. 185 (2022), S. 51-72;
[Imp.fact.: 4.119]

Tan, Q.; Hosseini, Seyed Ali; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique; Lorenz, Heike

Modeling ice crystal growth using the lattice Boltzmann method
Physics of fluids - [S.I.]: American Institute of Physics, Bd. 34 (2022), 1, S. 14;
[Imp.fact.: 4.98]

Tenberg, Vico; Saghedi, Masoud; Seidel-Morgenstern, Andreas; Lorenz, Heike

Bypassing thermodynamic limitations in the Crystallization-based separation of solid solutions
Separation and purification technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 283 (2022);
[Imp.fact.: 7.312]

Thomik, Maximilian; Gruber, Sebastian; Kaestner, Anders; Foerst, Petra; Tsotsas, Evangelos; Vorhauer-Huget, Nicole

Experimental study of the impact of pore structure on drying kinetics and sublimation front patterns
Pharmaceutics - Basel: MDPI, 2009, Bd. 14 (2022), 8, insges. 15 S.;
[Imp.fact.: 6.525]

Thomik, Maximilian; Vorhauer, Gruber, S.; Foerst, E.; Tsotsas, Evangelos; Vorhauer-Huget, Nicole

Determination of 3D pore network structure of freeze-dried maltodextrin
Drying technology - Philadelphia, Pa.: Taylor & Francis, Bd. 40 (2022), 4, S. 748-766;
[Imp.fact.: 4.452]

Vorhauer-Huget, Nicole; Briest, Lucas; Wagner, R.; Tretau, A.; Rahimi, A.; Tsotsas, Evangelos

Einsatz von Mikrowellenerwärmung zur Elektrifizierung der Ziegelrohlingstrocknung
Ziegelindustrie international: ZI / Hrsg.: Bundesverband der Deutschen Ziegelindustrie e.V., Bonn - Gütersloh: Bauverl. . - 2022, 3, S. 8-24

Vorhauer-Huget, Nicole; Shokri, N.

30 Years of pore network modeling in drying
Drying technology - Philadelphia, Pa.: Taylor & Francis, Bd. 40 (2022), 4, S. 689-690;
[Imp.fact.: 3.556]

Wang, Rui; Singh, Abhinandan Kumar; Kolan, Subash Reddy; Tsotsas, Evangelos

Fractal analysis of aggregates - correlation between the 2D and 3D box-counting fractal dimension and power law fractal dimension
Chaos, solitons & fractals - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 160 (2022);
[Imp.fact.: 5.944]

Wang, Rui; Singh, Abhinandan Kumar; Kolan, Subash Reddy; Tsotsas, Evangelos

Investigation of the relationship between the 2D and 3D box-counting fractal properties and power law fractal properties of aggregates
Fractal and fractional - Basel: MDPI AG, Fractal Fract Editorial Office, Bd. 6 (2022), 12, insges. 19 S.;
[Imp.fact.: 3.577]

Wang, Zihao; Zhou, Teng; Sundmacher, Kai

Interpretable machine learning for accelerating the discovery of metal-organic frameworks for ethane/ethylene separation
The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 444 (2022);
[Imp.fact.: 13.273]

Wang, Zihao; Zhou, Yageng; Zhou, Teng; Sundmacher, Kai

Identification of optimal metal-organic frameworks by machine learning - structure decomposition, feature integration, and predictive modeling
Computers & chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 160 (2022);
[Imp.fact.: 4.13]

Weber, Sebastian; Zimmermann, Ronny T.; Bremer, Jens; Abel, Ken L.; Poppitz, David; Prinz, Nils; Ilsemann, Jan; Wendholt, Sven; Yang, Qingxin; Pashminehazar, Reihaneh; Monaco, Federico; Cloetens, Peter; Huang, Xiaohui; Kübel, Christian; Kondratenko, Evgenii V.; Bauer, Matthias; Bäumer, Marcus; Zobel, Mirijam; Gläser, Roger; Sundmacher, Kai; Sheppard, Thomas L.

Digitization in catalysis research - towards a holistic description of a Ni/Al₂O₃ reference catalyst for CO₂ methanation

ChemCatChem - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 14 (2022), 8, insges. 18 S.;

[Imp.fact.: 5.497]

Wu, Wencong; Chen, Kaicheng; Tsotsas, Evangelos

Prediction of particle mixing time in a rotary drum by 2D DEM simulations and cross-correlation

Advanced powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 33 (2022), 4;

[Imp.fact.: 4.833]

Wünsche, Steffi; Seidel-Morgenstern, Andreas; Lorenz, Heike

Cocrystallization of curcuminoids with hydroxybenzenes pyrogallol and hydroxyquinol - investigations of binary thermal phase behaviors

Crystal growth & design - Washington, DC: ACS Publ., Bd. 22 (2022), 5, S. 3303-3310;

[Imp.fact.: 4.01]

Xu, Jialing; Rong, Siqi; Sun, Jingli; Peng, Zhiyong; Jin, Hui; Guo, Liejin; Zhang, Xiang; Zhou, Teng

Optimal design of non-isothermal supercritical water gasification reactor - from biomass to hydrogen

Energy - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 244 (2022), Part B;

[Imp.fact.: 8.857]

Xuan, Guangtao; Ebert, Mirko; Rodrigues, Simson Julian; Lessig, Christian; Vorhauer-Huget, Nicole; Fond, Benoît

Temperature distribution in granular assemblies using luminescence thermometry and radiative transfer simulation

Conference proceedings from OSA Publishing/ Optical Society of America - Washington, DC . - 2022;

Yang, W.; Ranga Dinesh, K. K. J.; Luo, K. H.; Thévenin, Dominique

Direct numerical simulations of auto-igniting mixing layers in ammonia and ammonia-hydrogen combustion under engine-relevant conditions

International journal of hydrogen energy - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 47 (2022), 89, S. 38055-38074;

[Imp.fact.: 7.139]

Zanutto, Conrado P.; Evrard, Fabien; Wachem, Berend; Denner, Fabian; Paladino, Emilio E.

Modeling interfacial mass transfer of highly non-ideal mixtures using an algebraic VOF method

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 251 (2022);

[Imp.fact.: 4.889]

Zanutto, Conrado P.; Paladino, Emilio E.; Evrard, Fabien; Wachem, Berend; Denner, Fabian

Modeling of interfacial mass transfer based on a single-field formulation and an algebraic VOF method considering non-isothermal systems and large volume changes

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 247 (2022);

[Imp.fact.: 4.311]

Zhan, Ninghua; Wu, Rui; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza

Proposal for extraction of pore networks with pores of high aspect ratios

Physical review fluids - College Park, MD: APS, Bd. 7 (2022), insges. 27 S.;

Zhang, Xiang; Sethi, Sahil; Wang, Zihao; Zhou, Teng; Qi, Zhiwen; Sundmacher, Kai

A neural recommender system for efficient adsorbent screening

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 259 (2022);

[Imp.fact.: 4.889]

Zhang, Xiang; Zhou, Teng; Sundmacher, Kai

Integrated metal-organic framework (MOF) and pressure/vacuum swing adsorption process design - MOF matching
AIChE journal/ American Institute of Chemical Engineers - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 68 (2022), 9, insges. 13 S.;
[Imp.fact.: 4.167]

Zhou, Teng; Sundmacher, Kai

Multiscale process systems engineering - analysis and design of chemical and energy systems from molecular design up to process optimization
Frontiers of chemical science and engineering - Heidelberg: Springer, Bd. 16 (2022), 2, S. 137-140;
[Imp.fact.: 4.803]

Zhou, Yageng; Zhang, Xiang; Zhou, Teng; Sundmacher, Kai

Computational screening of metal-organic frameworks for ethylene purification from ethane/ethylene/acetylene mixture
Nanomaterials - Basel: MDPI, Bd. 12 (2022), 5, insges. 14 S.;
[Imp.fact.: 5.719]

Zimmermann, Ronny Tobias; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai

Load-flexible fixed-bed reactors by multi-period design optimization
The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 428 (2022), insges. 14 S.;
[Imp.fact.: 16.744]

Zinke, Ronald; Wothe, Kevin; Dugarev, Dmitry; Götze, Oliver; Köhler, Florian; Schalau, Sebastian; Krause, Ulrich

Uncertainty consideration in CFD-models via response surface modeling - application on realistic dense and light gas dispersion simulations
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 75 (2022);
[Imp.fact.: 3.916]

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Denner, Fabian; Wachem, Berend

A unified algorithm for interfacial flows with incompressible and compressible fluids
Advances in Fluid Mechanics - Singapore: Springer Nature Singapore; Zeidan, Dia . - 2022, S. 179-208;

Lehr, Annemarie; Janiga, Gábor; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique

Numerical study on the solid phase residence time distribution in a counter-current screw extractor
Symposium: 32nd European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 51 (2022), S. 13-18;

Linke, Steffen; Keßler, Tobias; Kunde, Christian; Kienle, Achim; Sundmacher, Kai

Integrated solvent and process design
Integrated Chemical Processes in Liquid Multiphase Systems - Berlin: De Gruyter; Kraume, Matthias . - 2022, S. 535-551;

Lu, Xiang; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza

A continuum approach to the drying of small pore network
Mass transfer driven evaporation of capillary porous media - Boca Raton: CRC Press; Wu, Rui Ming . - 2022, S. 155

Panda, Debashis; Paliwal, Shubhani; Bhaskaran, Supriya; Zachariah, Githin Tom; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza; Surasanai, Vikranth Kumar

A mesoscopic approach for evaporation in capillary porous media - shan chen lattice Boltzmann method
Mass transfer driven evaporation of capillary porous media - Boca Raton: CRC Press; Wu, Rui Ming . - 2022, S. 71

Reuter, Julia; Cendrollu, Manoj; Evrard, Fabien; Mostaghim, Sanaz; Wachem, Berend

Towards improving simulations of flows around spherical particles using genetic programming

Kongress: 2022 IEEE Congress on Evolutionary Computation, CEC, Padua, Italy, 18-23 July 2022, 2022 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)/ IEEE Congress on Evolutionary Computation - Piscataway, NJ, USA: IEEE . - 2022;

Wang, Zihao; Zhou, Teng; Sundmacher, Kai

A novel machine learning-based optimization approach for the molecular design of solvents

Symposium: 32nd European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 51 (2022), S. 1477-1482;

Wu, Rui; Tsotsas, Evangelos

Evaporation from straight capillary tubes

Mass transfer driven evaporation of capillary porous media - Boca Raton: CRC Press; Wu, Rui Ming . - 2022, S. 21

Zhang, Xiang; Zhou, Teng; Sundmacher, Kai

Metal-organic framework targeting for optimal pressure swing adsorption processes

Symposium: 14th International Symposium on Process Systems Engineering, Kyoto, Japan, June 19-23, 2022, Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 49 (2022), S. 295-300;

Zhou, Teng; Wang, Zihao; Sundmacher, Kai

A new machine learning framework for efficient MOF discovery - application to hydrogen storage

Symposium: 14th International Symposium on Process Systems Engineering, Kyoto, Japan, June 19-23, 2022, Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 49 (2022), S. 1807-1812;

Zimmermann, Ronny T.; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai

Optimal catalyst-reactor design for load-flexible CO₂ methanation by multi-period design optimization

Symposium: 14th International Symposium on Process Systems Engineering, Kyoto, Japan, June 19-23, 2022, Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 49 (2022), S. 841-846;

ANDERE MATERIALIEN

Ramos, João Rodrigues Correia; Bissinger, Thomas; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo

Impact of influenza A virus infection on growth and metabolism of suspension MDCK cells using a dynamic model

Metabolites - Basel: MDPI, 2011, Bd. 12 (2022), 3, insges. 27 S.;

DISSERTATIONEN

Ahmad, Faez; Kharaghani, Abdolreza [AkademischeR BetreuerIn]; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]

Development and assessment of advanced continuum models for drying porous media on the basis of discrete pore network simulations

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (xv, 125 Seiten, 3,27 MB), Illustrationen;

Ahmad, Raheel; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]

Integration of a light-switchable ATP regeneration system with motility modules - toward building an artificial cell and bio-hybrid micro-swimmer - Integration eines durch Licht schaltbaren ATP-Regenerationssystems mit Motilitätsmodulen - auf dem Weg zu einer künstlichen Zelle und einem Biohybriden Mikro-Schwimmer

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (vii, 195 Seiten, 15,57 MB), Illustrationen;

Franke, Georg; Wachem, Berend [AkademischeR BetreuerIn]; Mörl, Lothar [AkademischeR BetreuerIn]

Entwicklung einer neuartigen Austrageinrichtung zur Steuerung der Verweilzeitverteilung in Schüttgutapparaten

Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (166 Seiten, 13,74 MB), Illustrationen;

Gerlach, Martin; Seidel-Morgenstern, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]

Reaktionsanalyse und Modellierung der Rhodium-BiPhePhos-katalysierten Hydroformylierung langkettiger Alkene
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (1 Band (verschiedene Seitenzählungen, 6,58 MB)), Illustrationen;

Hein, Marc Dominique; Reichl, Udo [AkademischeR BetreuerIn]

Cell culture-based production of influenza A virus-derived defective interfering particles
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XV, 98, XVII-L Seiten, 5,1 MB), Illustrationen;

Huskova, Nadiia; Seidel-Morgenstern, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]

Dynamic modeling and optimization of a continuous fluidized bed process for the separation of enantiomers by preferential crystallization
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (130 Seiten, 2,76 MB), Illustrationen;

Mahmood, Hafiz Tariq; Kharaghani, Abdolreza [AkademischeR BetreuerIn]; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]

Discrete modeling of capillary ring structures during drying of particle aggregates
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (xvi, 117 Blätter, 8,52 MB), Illustrationen;

Müller, Daniel; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]

Processing strategies and limitations of continuous Wurster coating with product classification
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XVI, 301 Seiten, 9,84 MB), Illustrationen;

Otrin, Nika; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]

A modular platform for growth of hybrid and polymer membrane systems by vesicle fusion
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XV, 254 Seiten, 17,3 MB), Illustrationen;

Pramudita, Daniel; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Dièguez Alonso, Alba [AkademischeR BetreuerIn]

Process intensification during powder production in pulsated gas flow
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (xviii, 157 Seiten, 8,57 MB), Illustrationen;

Rüdiger, Daniel; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Reichl, Udo [AkademischeR BetreuerIn]

Mathematical models of influenza A virus infection - multiplicity of infection and its impact on co-infection and virus production
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XVIII, 179 Seiten, 8,16 MB), Illustrationen;

Wang, MinHui; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]

Bottom-up synthesis of Nicotinamide Adenine Dinucleotide (NAD) regeneration modules for artificial cells
Magdeburg, 2022, 1 Online-Ressource (xiii, 110 Seiten, 6,51 MB), Illustrationen;

Weigel, Thomas; Reichl, Udo [AkademischeR BetreuerIn]

Development of chromatography-based purification processes for cell culture-derived influenza virus particles
Magdeburg: Universitätsbibliothek, 2022, 1 Online-Ressource (XXII, 145 Seiten, 2,22 MB), Illustrationen;