



OTTO VON GUERICKE
UNIVERSITÄT
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-
UND SYSTEMTECHNIK

Forschungsbericht 2023

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

DISSERTATIONEN

Baumann, Florian; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]; Beyer, Michael [AkademischeR BetreuerIn]; Blum, Carsten [AkademischeR BetreuerIn]

Über elektrostatische Zündgefahren beim Versprühen von Wasser in explosionsgefährdeten Bereichen
Braunschweig: Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Presse und Öffentlichkeitsarbeit, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, XII, 157 Seiten - (PTB-Bericht; Diss, Dissertationen; 1), ISBN: 978-3-944659-26-8 ;
[Literaturverzeichnis: Seite 125-130]

Du, Jiajie; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]

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

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (xxiii, 162 Seiten, 7,99 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 135-146][Literaturverzeichnis: Seite 135-146]

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

Modeling, optimization, and predictive control for metabolic cybergenetics

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (iv, 92 Seiten, 28,18 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 83-92][Literaturverzeichnis: Seite 83-92]

Fotovati, Mohsen; Scholl, Stephan [AkademischeR BetreuerIn]

Isolating valuable ingredients of saffron using extraction and preparative chromatography

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (XXIII, 138 Seiten, 9,9 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 115-127][Literaturverzeichnis: Seite 115-127]

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

Effects of changes in external conditions on smoldering in biomass pellets

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (IX, 114, v Seiten, 12,6 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 111-114][Literaturverzeichnis: Seite 111-114]

Iqbal, Muhammad Zahid; Schinzer, Dieter [AkademischeR BetreuerIn]; Haak, Edgar [AkademischeR BetreuerIn]

Synthesis of new benzimidazole-derived eptothilone analogues

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (110 Seiten, 3,38 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 102-108][Literaturverzeichnis: Seite 102-108]

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

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

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (XIV, 176 Seiten, 46,75 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 161-172][Literaturverzeichnis: Seite 161-172]

Köhler, Florian; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]

Einsatz von Response Surface Methoden für Sensitivitäts- und Unsicherheitsbetrachtungen bei numerischen Brandsimulationen

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (xv, 131 Seiten, 24,63 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 115 -122]

Lubinski, Stefan; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]

Entwicklung von Salzbetonrezepturen für Betonwaren des Garten- und Landschaftsbaus (GaLaBau) und Überprüfung der Eignung

Magdeburg, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, XII, 295 Seiten ;

[Literaturverzeichnis: Seite 285-294]

Munt, Maxim; Schinzer, Dieter [AkademischeR BetreuerIn]; Haak, Edgar [AkademischeR BetreuerIn]

Formale Totalsynthese von (+)-Neosorangicin A

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (178, V Seiten, 6,45 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite I]

Pralow, Alexander; Reichl, Udo [AkademischeR BetreuerIn]

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

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

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

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

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

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

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

Schmalfuß, Silvio; Sommerfeld, Martin [AkademischeR BetreuerIn]

Transportvorgänge in Fluidphasenresonanzmischern

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

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

Schmidt, Natalie Kathleen; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]

Experimentelle Untersuchung und Modellierung von Atmungsphänomenen bei der Beregnung von Lagertanks

Magdeburg, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, XIX, 190 Seiten ;

[Literaturverzeichnis: Seite 144-152]

Spitzer, Stefan H.; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]

Influence of the ignition source on the safety characteristics of hybrid dust-gas mixtures

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (verschiedene Seitenzählung, 11,56 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite106-132]

Sui, Maohong; Sommerfeld, Martin [AkademischeR BetreuerIn]; Beyrau, Frank [AkademischeR BetreuerIn]

Generalised modelling of droplet collisions in the frame of Euler/Lagrange calculations

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (XIV, 160 Seiten, 95,54 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite 151-158][Literaturverzeichnis: Seite 151-158]

Tenberg, Vico

Separation of solid solutions using counter-current crystallization - improved operation through antisolvents

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (viii, 127, XXI Seiten, 8,95 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite 103-111]

Triemer, Susann; Lorenz, Heike [AkademischeR BetreuerIn]

Reactive transformation of extraction byproducts - enhanced production of the animalarial artemisinin
Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für
Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (verschiedene Seitenzählung, 7,67 MB) ;
[Literaturangaben][Literaturangaben]

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

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
- Unsicherheiten bei Ingenieurberechnungen

Umweltverfahrenstechnik

- chemische Umwandlung von Rest- und Abfallstoffen
- Nutzung von PUR-Hartschaum-Rezyklat zur Abwasserbehandlung
- Nutzung von Reifen-Rezyklat zur Beseitigung von Ölkontaminationen
- Experimentelle Untersuchungen an Mehrphasenreaktoren

Sicherheit bei Naturereignissen

- Untersuchung der Entstehung und Ausbreitung von Waldbränden
- Methoden zur Löschung von Waldbränden

4. SERVICEANGEBOT

Brand- und Explosionsschutz

- 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

Bewertung der Sicherheit von Batteriespeichern

- Testverfahren nach UL 9540

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. 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 Projekttitel: A Holistic Fire Management Ecosystem for Prevention, Detection and Restoration of Environmental Disasters

Forschung im Bereich: Umwelttechnik

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

Titel des deutschen Pilot-Projekts lautet: Brandforschung bei Waldbränden und Ableiten von Sicherheitsmaßnahmen (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 Rauchtotoxicität 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: M.Sc. 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 Täuschungsalarmrate 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

Amano, Kofi Owusu Ansah; Hahn, Sarah-K.; Butt, Noman; Vorwerk, Pascal; Gimadieva, Elena; Tschirschwitz, Rico; Rappsilber, Tim; Krause, Ulrich

Composition and explosibility of gas emissions from lithium-ion batteries undergoing thermal runaway
Batteries - Basel : MDPI, Bd. 9 (2023), Heft 6, Artikel 300
[Imp.fact.: 4.0]

Heilmann, V.; Zakel, S.; Gabel, Dieter; Krause, Ulrich

Influence of different ignition delay times on the pressure rise rate in hybrid mixture explosions in the 20-L sphere
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 84 (2023), Artikel 105106
[Imp.fact.: 3.5]

Jordan, Thomas; Askar, Enis; Holtappels, Kai; Deeg, Sabine; Jopen, Manuela; Stoll, Uwe; Reinecke, Ernst-Arendt; Krause, Ulrich; Beyer, Michael; Markus, Detlev

Stand der Kenntnisse und Technik bezüglich Wasserstoffsicherheit - State of knowledge and technology regarding hydrogen safety
Chemie - Ingenieur - Technik - Weinheim : Wiley-VCH Verl. . - 2023, insges. 20 S. ;
[Online first]
[Imp.fact.: 3.1]

Spitzer, Stefan H.; Askar, Enis; Hecht, Kristin J.; Gabel, Dieter; Georg, Paul; Krause, Ulrich; Dufaud, Olivier; Krietsch, Arne

The maximum rate of pressure rise of hybrid mixtures
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 86 (2023), Artikel 105178
[Imp.fact.: 3.5]

Tschirschwitz, Rico; Bernardy, Christopher; Wagner, Patrick; Rappsilber, Tim; Liebner, Christian; Hahn, Sarah-K.; Krause, Ulrich

Harmful effects of lithium-ion battery thermal runaway - scale-up tests from cell to second-life modules
RSC Advances / Royal Society of Chemistry - London : RSC Publishing, Bd. 13 (2023), Heft 30, S. 20761-20779
[Imp.fact.: 3.9]

Vorwerk, Pascal; Kelleter, Jörg; Müller, Steffen; Krause, Ulrich

Distance-based analysis of early fire indicators on a new indoor laboratory dataset with distributed multi-sensor nodes
Fire - Basel : MDPI, Bd. 6 (2023), Heft 8, Artikel 323, insges. 16 S.
[Imp.fact.: 3.2]

Wu, Dejian; Zhao, Peng; Spitzer, Stefan H.; Krietsch, Arne; Amyotte, Paul; Krause, Ulrich

A review on hybrid mixture explosions: Safety parameters, explosion regimes and criteria, flame characteristics
Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 82 (2023), Artikel 104969
[Imp.fact.: 3.5]

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Klippel, Andrea; Hofmann-Böllinghaus, Anja; Piechnik, Kira

Development of toxicity assessment method for bus interior materials
Proceedings from the seventh International Proceedings from the Seventh International Conference on Fires in Vehicles - Borås, Sweden : RISE Research Institutes of Sweden AB ; Willstrand, Ola . - 2023, S. 80-90

DISSERTATIONEN

Baumann, Florian; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]; Beyer, Michael [AkademischeR BetreuerIn]; Blum, Carsten [AkademischeR BetreuerIn]
Über elektrostatische Zündgefahren beim Versprühen von Wasser in explosionsgefährdeten Bereichen
Braunschweig: Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Presse und Öffentlichkeitsarbeit, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, XII, 157 Seiten - (PTB-Bericht; Diss, Dissertationen; 1), ISBN: 978-3-944659-26-8 ;
[Literaturverzeichnis: Seite 125-130]

Haraldseid, Ingunn; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]; Schmidt, Martin [AkademischeR BetreuerIn]
Effects of changes in external conditios on smoldering in biomass pellets
Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (IX, 114, v Seiten, 12,6 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 111-114][Literaturverzeichnis: Seite 111-114]

Köhler, Florian; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]
Einsatz von Response Surface Methoden für Sensitivitäts- und Unsicherheitsbetrachtungen bei numerischen Brandsimulationen
Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (xv, 131 Seiten, 24,63 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 115 -122]

Schmidt, Natalie Kathleen; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]
Experimentelle Untersuchung und Modellierung von Atmungsphänomenen bei der Beregnung von Lagertanks
Magdeburg, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, XIX, 190 Seiten ;
[Literaturverzeichnis: Seite 144-152]

Spitzer, Stefan H.; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]
Influence of the ignition source on the safety characteristics of hybrid dust-gas mixtures
Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (verschiedene Seitenzählung, 11,56 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite106-132]

INSTITUT FÜR CHEMIE

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg

1. LEITUNG

Prof. Dr. rer. nat. Julian Thiele (Institutsleitung)

Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler

Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß

Dr. rer. nat. Christian Hering-Junghans

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

Seniorprof. 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

Dr. rer. nat. Christian Hering-Junghans

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

- Oxidation mit "earth-abundant" Metallkatalysatoren

AG Organische Chemie

Makromolekulare organische Synthese und Polymerforschung

- Synthese von funktionalen Monomeren und Makromeren für den Aufbau definierter Polymermaterialien
- Skalenübergreifende Materialverarbeitung mittels Mikrofluidik und additiver Fertigung
- Polymermikrogele als Bausteine für integrierte Materialsysteme
- Zellähnliche experimentelle Plattformen aus Mikrogelen für Zellbiologie und synthetische Biologie
- Hybride Polymerfertigungsverfahren
- 3D-Druck von (hybriden Zell-)Mikrogelsuspensionen

Synthese/Charakterisierung/Anwendung niedermolekularer Systeme

- 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-Tieftemperaturadsorption

Sorptionsmessungen mit CO₂, Wasser etc.

Quecksilberporosimetrie

Rheologische Messungen

Katalysatortestung

Testung der Biokompatibilität entsprechend der EN ISO 10993 „Biologische Beurteilung von Medizinprodukten“

Entwicklung von Gewebemodellen für die Validierung neuer diagnostischer Verfahren

Additive Fertigung von Polymermaterialien mittels Stereolithographie und Bioplotting

5. METHODIK

- Additive Fertigung mittels Projektionsmikrostereolithographie, Xolographie, Fused-Deposition Modeling
- Mikrofluidik zur Produktion tensid-stabilsierter Mikrotropfen, Vesikeln und Mikrogelelen

6. 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, Holzminden

7. 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 donorsubstituierten 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: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Alba Dieguez-Alonso, Prof. Dr. Nora Kulak, Dr. Nicole Vorhauer-Huget
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2022 - 31.12.2023

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. 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: Prof. Dr. Julian Thiele
Förderer: EU HORIZON Europe - 01.04.2020 - 31.03.2026

ERC Starting Grant "3DPartForm"

New polymer materials are necessary to match the demand for highly integrated, multifunctional, responsive systems for sensing, information processing, soft robotics or multi-parametric implants. Both established material design concepts based on lithography, and emerging engineering efforts based on additive manufacturing (AM) are currently not able to fully address the need for topologically complex, multifunctional and stimuli-responsive polymer materials. This proposal aims at establishing a radically new approach for polymer material design, rethinking AM on both material and process level. Here, functionality will be already embedded at the building block level to emerge into larger scales. The exact methodology relies on polymer microparticles as a novel material basis with arbitrary geometry, function, mechanics and responsiveness. These microparticulate formulations will serve as predefined, voxel-like building blocks in AM yielding hierarchical assemblies with spatially defined voxel position and programmable, adaptive properties, which clearly go beyond existing functional material classes.

With that, 3DPartForm will address the current lack of additive manufacturing providing multifunctional, stimuli-responsive materials, in which not only strongly different, but most importantly functional building blocks with intrinsic time axis will be processed into true 4D-polymer multimaterials. Products emerging from this approach will reach a previously unknown level of system integration, where optical transparency, electric and thermal conductivity as well as diffusivity and mechanical rigidity will become spatiotemporally tunable at single-voxel level. Coupled sensing and actuation operations will be realized by processing, transforming and manipulating single or combined input stimuli within these materials in the focus of 3DPartform, and platforms for biomimetics and cell-free biotechnology will be implemented as a long-term goal.

Projektleitung: Prof. Dr. Julian Thiele
Förderer: Haushalt - 01.09.2023 - 30.09.2024

Ligninolytic degradation of lignin-based functional materials for resynthesis

Being the second most abundant natural polymer, lignin and its depolymerization as well as resynthesis has become a key research target to generate chemicals, biofuels, and polymers. Common depolymerization processes of lignin(-derived materials) utilize energy-intensive (high pressure/temperature) and harsh chemicals (NaOH, H₂SO₄). To overcome these issues, this project will explore a sustainable path to efficiently degrade lignin-based materials utilizing ligninolytic enzymes. In particular, the focus will be on elucidating the influence of the type of formulation (lignin blending vs. lignin functionalization) in lignin-derived polymer plastics as well as structure and design features on the efficiency of an enzyme-driven depolymerization process.

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
Förderer: Bund - 01.10.2022 - 30.09.2024

Patch- lokalablativ Tumorthherapie

Lokal begrenzte Tumore können durch chirurgische Verfahren vollständig entfernt und damit geheilt werden. Zusätzlich können einzelne kleinere Tumorherde durch Hitze- oder Kälteeinwirkung, also durch lokalablativ Verfahren, abgetötet werden. Häufig lassen sich Tumore durch diese Behandlungen nicht vollständig entfernen. Da für eine erfolgreiche Behandlung von Krebserkrankungen die vollständige Entfernung des Tumorgewebes erforderlich ist, sind oftmals mehrere chirurgische Entfernungsoperationen (Resektionen) notwendig

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. 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. 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.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Jan von Langermann
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2023 - 30.11.2027

Selection, design and application of novel biocatalytic reactive crystallization concepts for the preparation of chiral beta-amino alcohols and alpha-amino acids

This is the sub project of the DFG research unit 5538 (Multistep Catalytic Production Systems for Fine Chemistry by Integrated Molecular, Material and Process Design (IMPD4Cat))

The primary goal of this subproject is to develop an efficient combination of biocatalytic reactions and selective crystallization procedures for the synthesis of chiral beta-amino alcohols and alpha amino acids on a preparative scale. The project builds on the investigation of the fundamental physicochemical properties of the target compounds, which are to be isolated directly from aqueous reaction solutions. In parallel, the decision on the selection and use of suitable biocatalysts or their corresponding preparations is relevant for the selection of the integrated reaction route, since the corresponding reaction conditions have an influence on

the solubilities of the target compounds. For amino acids, direct crystallization under the selected crystallization conditions is preferred, whereas suitable crystallization agents are required for amino alcohols to crystallize these often hydrophilic products in the form of a salt. Process control will be supported by the integration of suitable concepts for process analytical technology (PAT) including automated liquid chromatographic methods for real-time monitoring, control and optimization of the integrated biocatalysis-crystallization process. In the combination of all the processes described above, the process is to be optimized and scaled up to preparative scale in the sense of a pilot plant.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Jan von Langermann
Förderer: Haushalt - 01.12.2023 - 30.11.2026

Kinetic and thermodynamic investigation of selective crystallization techniques in biocatalytic reactions.

The research project deals with the reactive crystallization of chiral amines and organic phosphates, here in particular nucleotides, from biocatalytic reactions. The aim is the fundamental investigation of the primary kinetic and thermodynamic limitations and the development of suitable technologies to overcome these constraints.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Jan von Langermann
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.06.2023 - 31.05.2026

Entwicklung von unspezifischen Peroxygenasen für die β -Hydroxylierung von Aminen im präparativen Maßstab.

Wir sind davon überzeugt, dass unspezifische Peroxygenasen (UPOs) hervorragende Enzyme für C-H-Funktionalisierungen mit einem außergewöhnlichen synthetischen Potenzial darstellen. Durch die Kombination von Protein- und Verfahrenstechnik soll das Potenzial der UPOs durch die Synthese pharmazeutisch wichtiger Bausteine im Gramm-Maßstab demonstriert werden. UPOs sind pilzliche Enzyme, die einen peroxidischen Sauerstoff auf sp³-Kohlenstoffe übertragen und weisen mit mehr als 400 bekannten Beispielen eine beeindruckende Substratvielfalt auf. Sie weisen ausgezeichnete Enantioselektivitäten und beeindruckende Gesamtumsatzzahlen von bis zu 300.000 für benzyliche Hydroxylierungen auf. Etwa viertausend putative UPO-Gene wurden annotiert, aber weniger als 20 verschiedene UPO-Enzyme wurden aufgrund ihrer schwierigen heterologen Expression im Detail untersucht. Diese Produktionsbeschränkungen haben auch die gezielte Entwicklung dieser Proteine erheblich behindert, so dass die derzeitige Substratpalette hauptsächlich aus Wildtyp-Aktivitäten besteht. Es wäre von größter Bedeutung, die katalytische Maschinerie der UPOs für neue industriell relevante Substrate zu nutzen. Insbesondere Substrate mit aliphatischen Aminen sind in pharmazeutischen Wirkstoffen (API) allgegenwärtig, aber es gibt nur wenige Beispiele für UPOs, die diese Verbindungen hydroxylieren. Die Molekülklasse der vicinalen Aminoalkohole ist von besonderem Interesse, da diese Gruppen von UPOs aus Aminen synthetisiert werden könnten und spannende Gerüste für die Pharmaindustrie darstellen. Das vorgeschlagene Forschungsprojekt befasst sich direkt mit den derzeitigen Beschränkungen von UPOs gegenüber Aminsubstraten und zielt darauf ab, einen integrierten Ansatz aus Biochemie und Verfahrenstechnik für die Entwicklung und Anwendung von gentechnisch veränderten UPOs zu nutzen. Auf dem Gebiet des Protein-Engineerings umfasst die Methodik die Entwicklung eines schnellen Analysesystems für den Nachweis von Aminoalkoholen und eine Neugestaltung des aktiven Zentrums einschließlich der aminverankerten Regionen für das Design potenter aminumwandelnder UPOs. Auf der Seite der Verfahrenstechnik werden Online-Methoden für die Kontrolle von Wasserstoffperoxid und die Integration von Ionenaustausch- und Kristallisationstechniken auf die Anforderungen von UPO-katalysierten Reaktionen zugeschnitten. Die Implementierung der entwickelten Biokatalysatoren und Methoden wird explizit für eine hohe Substratbreite und im Gramm-Maßstab untersucht. Das Forschungsprojekt ist in acht Ziele und vier Meilensteine gegliedert, die von den beiden Projektpartnern strukturiert angegangen werden sollen. Es beginnt mit der Entwicklung und dem Engineering von Assays, Proteinen, Echtzeitanalysen und selektiven Produktentfernungen und kulminiert in präparativen Synthesen im Gramm-Maßstab.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Jan von Langermann
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.09.2022 - 31.08.2025

Neuartige Ansätze für die Integration der induzierten Kristallisation in biosynthetische Prozessen: von neuen konzeptionellen Ansätzen zu praktikablen Lösungen.

Das Projekt dient der Untersuchung von biokatalytischen Reaktionssystemen und der Integration von selektiven Kristallisationstechniken. Hauptschwerpunkte sind die Synthese von chiralen Aminen und Carbonsäuren. Zum Projekt gehört zudem die Einführung von computergestützten Technologie zur Vorhersage, zum Entwurf und schliesslich zur Verbesserung der reaktiven Kristallisation in biosynthetischen Prozesse. Diese direkte Verbindung zu technischen Systemen, einschliesslich des Zugangs zu den erforderlichen Instrumenten, ermöglicht Synergieeffekte zu verwandten Forschungsgebieten.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Jan von Langermann
Förderer: Haushalt - 01.07.2023 - 31.12.2024

Combination of Crystallization and (biocatalytic) dynamic kinetic resolution.

The combination of dynamic kinetic resolution coupled with selective crystallization techniques is investigated. Racemization is achieved either by mesomerism-based (spontaneous) methods or biocatalysts (isomerases). The fundamental aim is to produce enantiomerically pure compounds, which in turn represent intermediates for pharmaceutical and agrochemical compounds.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Jan von Langermann
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.11.2021 - 14.11.2024

Untersuchung komplexer Aminosäure- und Amin-basierter in situ-Produktkristallisationsstrategien in Transaminase- und Amin-Dehydrogenase-katalysierten Reaktionen und deren Entwicklung zu flow-Reaktionskonzepten.

Transaminasen sind äußerst selektive Biokatalysatoren für die Synthese von chiralen Aminen. Ungünstiger weise beinhalten zahlreiche Anwendungen dieser Biokatalysatoren ungünstige Gleichgewichtslagen und damit geringe Atomeffizienzen in der asymmetrischen Syntheserichtung, welche aufwendig kompensiert werden müssen. Üblich sind mehrstufige biokatalytische Kaskadenreaktionen, ein überstöchiometrischer Einsatz des Donoramins und spezielle Donoramine mit nicht-enzymatischen Nebenreaktionen. Das vorgestellte Forschungsvorhaben trägt dieser Limitierung Rechnung und hat das Ziel in einem integrierten Verfahrensansatz die direkte Entfernung des Produktamins aus der Reaktionslösung durch eine selektive in situ-Kristallisation zu ermöglichen. Die Kristallisation des Produktamins soll gezielt durch die Bildung eines schwer löslichen Salzes erfolgen, welches dadurch im Zuge der biokatalytischen Reaktion kontinuierlich aus der Reaktionslösung entfernt wird. Hierdurch soll dann das Reaktionsgleichgewicht auf die Produktseite verschoben werden und gleichzeitig das Produkt (als Salz) durch eine einfache Filtration aus der Reaktionslösung abgetrennt werden. Das Konzept soll schlussendlich auf eine kontinuierliche Prozessführung, incl. einer vollen Rezyklierung der nicht umgesetzten Reaktanden zur Überwindung der geringen Atomeffizienz, bis in den Multi-Gramm-Maßstab übertragen werden. Strukturiert ist das Forschungsvorhaben in 7 Arbeitspakete und 2 Meilensteine, welche die Fragestellung ausgehend von dem Screening geeigneter Säuren bis hin zur optimierten integrierten Reaktionsführung strukturiert bearbeiten werden. Nach Auswahl geeigneter Säuren zur Kristallisation des Amins werden die Salzpaare charakterisiert und die Reaktionsbedingungen für eine effiziente Kopplung für verschiedene Transaminasen angepasst. Danach wird die Maßstabsvergrößerung incl. einer kontinuierlichen Reaktionsführung etabliert. Abschließend soll die selektive Kristallisation des Co-Produktes Pyruvat untersucht werden, was analog zu einer Gleichgewichtsverschiebung führen kann.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Jan von Langermann
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2023 - 30.09.2024

Implementation of polymer degrading enzymes for selective product isolation in unconventional reaction (within SmartProSys)

Enzymatic degradation of polymer materials has become an efficient alternative to "classical" chemical processes and catalysts. Especially in recent years, the efficiency of the enzyme systems involved has been significantly increased. In addition to the basic question of which enzyme system to use, the efficient process approach is relevant.

Within this initial start-up project, the corresponding enzyme systems will be i) established for on-site conversions and ii) transferred to unconventional reaction media (PETase, cutinase, etc.). This will be achieved by the selective formation of intermediates and separation in/from equilibrium systems, which are not accessible in/from purely aqueous reaction systems. In particular, selective crystallization for the separation of monoesters/monocarboxylic acids will be investigated, which allow a simplified re-synthesis pathway. Further methods for selective separation of the desired compounds will be carried out in cooperation with the other working group within the SmartProSys-Initiative.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Jan von Langermann
Förderer: BMWi/AIF - 01.10.2020 - 30.09.2023

Entwicklung effizienter Produktionsverfahren für die Darstellung von Baclofen und hiermit verwandter pharmazeutischer Produkte

Entwickelt werden neuartige Syntheseverfahren für die Darstellung von Baclofen und verwandten beta-chiralen Aminen. Die Kombination beinhaltet Hydroformylierung zur Synthese geeigneter Intermediate, die biokatalytische Umsetzung mittels Transaminasen und selektive Kristallisation zur Isolierung der gewünschten finalen Produkte.

8. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

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

Investigation of Island Growth on fluidized particles coated by means of aerosol Processes - Basel : MDPI, Bd. 11 (2023), Heft 1, Artikel 165, insges. 18 S.
[Imp.fact.: 3.5]

Belov, Feodor; Mildner, Andrea; Knaus, Tanja; Mutti, Francesco G.; Langermann und Erlencamp, Jan

Crystallization-based downstream processing of ω -transaminase- and amine dehydrogenase-catalyzed reactions
Reaction chemistry & engineering - Cambridge : Royal Society of Chemistry . - 2023, Heft 6, S. 1427-1439

Dammler, Kathleen; Sutygina, Alina; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael; Betke, Ulf

Increased microporosity in ceramic and metal foams - a novel processing combination
Advanced engineering materials - Weinheim : Wiley-VCH Verl. . - 2023, Artikel 2300799, insges. 9 S.
[Imp.fact.: 3.6]

Dieguez-Alonso, Alba; Vu-Han, Tu-Lien Eliane; Almuina-Villar, Hernán; Fuentes, Juan Jesús Rico; Hilfert, Liane; Dernbecher, Andrea; Rosa, José María; Behrendt, Frank

Tailored production and application of biochar for tar removal
Fuel - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 348 (2023), Artikel 128306
[Imp.fact.: 7.4]

Grigoryev, Evgeny; Liubimtsev, Nikolai; Neuendorf, Talika A.; Vigogne, Michelle; Thiele, Julian

Reversible assembly of conductive supragel building blocks by metallo-complexes
Macromolecular chemistry and physics - Weinheim : Wiley-VCH, Bd. 224 (2023), Heft 24, Artikel 2300275, insges. 9 S.
[Imp.fact.: 5.2]

Harmgarth, Nicole; Liebing, Phil; Lorenz, Volker; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Goldhahn, Rüdiger; Edelmann, Frank T.

Synthesis and structural characterization of p-carboranylaminidene derivatives
Molecules - Basel : MDPI, Bd. 28 (2023), Heft 9, Artikel 3837, insges. 11 S.
[Imp.fact.: 4.6]

Hohlfeld, Benjamin F.; Steen, Dorika; Wieland, Gerhard D.; Achazi, Katharina; Kulak, Nora; Haag, Rainer; Wiehe, Arno

Bromo- and glycosyl-substituted BODIPYs for application in photodynamic therapy and imaging
Organic & biomolecular chemistry - Cambridge : Royal Society of Chemistry, Bd. 21 (2023), Heft 15, S. 3105-3120
[Imp.fact.: 3.2]

Hormann, Jan; Verbitsky, Olga; Zhou, Xiaoyu; Battistella, Beatrice; Meer, Margarete; Sarkar, Biprajit; Zhao, Cunyuan; Kulak, Nora

Experimental and computational investigation of heteroatom substitution in nucleolytic Cu(ii) cyclen complexes for balancing stability and redox activity
Dalton transactions - London : Soc., Bd. 52 (2023), Heft 10, S. 3176-3187
[Imp.fact.: 4.0]

Krüger, Marcus; Kopp, Sascha

Tumor models and drug targeting in vitro - where are we today? : Where do we go from here?
Cancers - Basel : MDPI, Bd. 15 (2023), Heft 6, Artikel 1768, insges. 5 S.
[Imp.fact.: 5.2]

Malikidogo, Kyangwi P.; Drommi, Marielle; Atrián-Blasco, Elena; Hormann, Jan; Kulak, Nora; Esmieu, Charène; Hureau, Christelle

Ability of azathiacyclen ligands to stop Cu(A β)-Induced production of reactive oxygen species - [3N1S] is the right donor set
Chemistry - a European journal - Weinheim : Wiley-VCH, Bd. 29 (2023), Heft 14, Artikel e202203667, insges. 12 S.

[Imp.fact.: 4.3]

Melnik, Daniela; Cortés-Sánchez, José Luis; Sandt, Viviann; Kahlert, Stefan; Kopp, Sascha; Grimm, Daniela; Krüger, Marcus

Dexamethasone selectively inhibits detachment of metastatic thyroid cancer cells during random positioning
Cancers - Basel : MDPI, Bd. 15 (2023), Heft 6, Artikel 1641, insges. 25 S.

[Imp.fact.: 5.2]

Neuburger, Jan Eric; Gazizova, Alina; Tiedemann, Sven; Langermann und Erlencamp, Jan

Chemoenzymatic synthesis of enantiopure amino alcohols from simple methyl ketones

European journal of organic chemistry - Weinheim : Wiley-VCH Verl., Bd. 26 (2023), Heft 34\$e202201471

[Imp.fact.: 2.8]

Neuburger, Jan Eric; Tiedemann, Sven; Michalik, Dirk; Langermann und Erlencamp, Jan

Rare earth element-based recovery concept for cofactors Containing phosphate groups from aqueous solutions
Chemical engineering & technology - Weinheim : Wiley-VCH Verl.-Ges., Bd. 46 (2023), Heft 4, S. 766-775

[Imp.fact.: 2.1]

Reuter, Christian; Hauf, Laura; Imdahl, Fabian; Sen, Rituparno; Vafadarnejad, Ehsan; Fey, Philipp; Finger, Tamara; Jones, Nicola G.; Walles, Heike; Barquist, Lars; Saliba, Antoine-Emmanuel; Groeber-Becker, Florian; Engstler, Markus

Vector-borne Trypanosoma brucei parasites develop in artificial human skin and persist as skin tissue forms

Nature Communications - [London]: Nature Publishing Group UK, Bd. 14 (2023), Artikel 7660, insges. 16 S.

[Imp.fact.: 16.6]

Skowaisa, Steffen; Haak, Edgar

Diaminocyclopentadienone ruthenium complex catalyzed alkylation of indoles and ketones with primary alcohols
European journal of organic chemistry - Weinheim : Wiley-VCH Verl. . - 2023, insges. 7 S.

[Imp.fact.: 2.8]

Terazzi, Constanza; Spannenberg, Anke; Langermann und Erlencamp, Jan; Werner, Thomas

Chemoenzymatic synthesis of chiral building blocks Based on the kinetic resolution of glycerol-derived cyclic carbonates

ChemCatChem - Weinheim : Wiley-VCH, Bd. 15 (2023), Heft 19\$e202300917

[Imp.fact.: 4.5]

Vigogne, Michelle; Neuendorf, Talika A.; Bernhardt, Ricardo; Thiele, Julian

Combining parallelized emulsion formation and sequential droplet splitting for large-scale polymer microgel production

Journal of polymer science - Hoboken, NJ : Wiley, Bd. 61 (2023), Heft 16, S. 1902-1911

[Imp.fact.: 5.4]

Wang, Sida; Liebing, Phil; Feneberg, Martin; Sroor, Farid M.; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Kluth, Elias; Goldhahn, Rüdiger; Edelmann, Frank T.

Synthesis and structural characterization of divalent transition metal alkynylamidinate complexes

European journal of inorganic chemistry - Weinheim : Wiley-VCH, Bd. 26 (2023), Heft 14, Artikel e202300027

[Imp.fact.: 2.3]

Weigel, Niclas; Grigoryev, Evgeny; Fertala, Nicole; Thiele, Julian

Fabrication of thermoresponsive and multimaterial hydrogel sheets by spatially controlled aspiration and interconnection of microgel building blocks

Advanced Materials Technologies - Weinheim : Wiley, Bd. 8 (2023), Heft 23, Artikel 2300374, insges. 9 S.

Weigel, Niclas; Li, Yue; Thiele, Julian; Fery, Andreas

From microfluidics to hierarchical hydrogel materials

Current opinion in colloid & interface science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 64 (2023), Artikel 101673, insges. 18 S.

[Imp.fact.: 8.9]

Weigel, Tobias; Christ, Bastian; Dembski, Sofia; Ewald, Andrea; Groneberg, Dieter; Hansmann, Jan; Luxenhofer, Robert; Metzger, Marco; Walles, Heike; Willy, Christian; Groeber-Becker, Florian; Probst, Jörn

Biomimetic connection of transcutaneous implants with skin

Advanced healthcare materials - Weinheim : Wiley-VCH, Bd. 12 (2023), Heft 30, Artikel 2301131, insges. 15 S. [Imp.fact.: 15.5]

ABSTRACTS

Müller, Noah; Kopp, Sascha; Gerlach, Thomas; Gylstorff, Severin; Walles, Heike

3D bio-phantom for evaluating irreversible electroporation (IRE) on tumor cells in imaged guided interventions

Konferenz: 6th Conference on Image-Guided Interventions, IGIC 2023, Mannheim, 19-20 October 2023, 6th Conference on Image-Guided Interventions - Mannheim . - 2023, S. 70-71

DISSERTATIONEN

AL-Matooq, Marwah; Hoeschen, Christoph [AkademischeR BetreuerIn]; Friebe, Michael [AkademischeR BetreuerIn]; Walles, Heike [AkademischeR BetreuerIn]

Investigation of artifacts and mechanical properties of non-metallic MRI biopsy needles in interventional procedures - phantom and simulation studies

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik 2023, 1 Online-Ressource (iii, 142 Seiten, 14,1 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite 117-133][Literaturverzeichnis: Seite 117-133]

Iqbal, Muhammad Zahid; Schinzer, Dieter [AkademischeR BetreuerIn]; Haak, Edgar [AkademischeR BetreuerIn]

Synthesis of new benzimidazole-derived epothilone analogues

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (110 Seiten, 3,38 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite 102-108][Literaturverzeichnis: Seite 102-108]

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

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

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

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

Munt, Maxim; Schinzer, Dieter [AkademischeR BetreuerIn]; Haak, Edgar [AkademischeR BetreuerIn]

Formale Totalsynthese von (+)-Neosorangicin A

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (178, V Seiten, 6,45 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Seite I]

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 Optimierungschleife.
- 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: 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 Gasstrahldispersion. 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: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Alba Dieguez-Alonso, Prof. Dr. Nora Kulak, Dr. Nicole Vorhauer-Huget
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2022 - 31.12.2023

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

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

Projektleitung: 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: Dr.-Ing. Stefan Hoerner, Dr.-Ing. Pierre-Luc Delafin, Dr.-Ing. Cyrille Bonamy
Förderer: Sonstige - 01.10.2021 - 30.09.2024

Experimental and numerical optimization of a cross-flow tidal turbine

The project aims to explore the effect of variable pitch blades on vertical axis tidal turbines. At the turbine scale, it appears interesting to consider a systematic optimization with the deployment of a dedicated AI based optimizer, that takes into account the increase in the turbine hydrodynamic efficiency as well as the energy cost of the actuation needed to pitch the blades. Most of the time, only the increase in the hydrodynamic efficiency is considered. Also, when considering tidal farm applications, it becomes necessary to understand the effect of variable pitch on the wake of the turbine. The aim is then to optimize the pitching laws with regard to the efficiency of a single turbine and the power density of the farm.

This project is the french part of the OPTIDE project.

Projektleitung: Dr.-Ing. Stefan Hoerner, Prof. Dr.-Ing. Roberto Leidhold, Dr.-Ing. Pierre-Luc Delafin, Dr.-Ing. Cyrille Bonamy
Projektbearbeitung: Prof. Yves Delannoy, Prof. Dr. Jürgen Häberle, Prof. Dr.-Ing. Christian-Toralf Weber, Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2021 - 30.09.2024

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 Selbstartverhalten 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: Dr.-Ing. Stefan Hoerner
Projektbearbeitung: M.Sc. Shokoofeh Abbaszadeh, M.Sc. Dennis Powalla, Dr.-Ing. Jeffrey Tuhtan, Dr.-Ing. Matthias Schneider, Dr. rer. nat. Falko Wagner, Prof. Dr.-Ing. Jürgen Stamm, Prof. Dr.-Ing. Roberto Leidhold
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; Prof.Dr.-Ing. Roberto Leidhold, Institut für Elektrische Energiesysteme, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
Förderer: Bund - 15.04.2022 - 31.03.2024

Projektphase II : 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: Dr.-Ing. Stefan Hoerner, Dr.-Ing. Emeel Kerikous, Dennis Powalla
Kooperationen: KSB Supreme Serv GmbH Bremen; Dr.rer.nat. Falko Wagner, Institut für Gewässerökologie & Fischereibiologie, Jena; Dr.-Ing. Jeffrey Tuhtan, Technischen Universität Tallin, Center for Biorobotics, Tallin
Förderer: Industrie - 01.04.2023 - 01.12.2023

Numerische Untersuchung der Fischverträglichkeit der Schöpfwerkspumpe ‚Kudensee‘

Untersuchung des Prototypen einer Fischverträglichen Axialpumpe am Standort Schöpfwerk Kudensee mit am ISUT entwickelten numerischen Methoden auf Basis von CFD-DEM.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Sebastian Stober, Sebastian Lang, Dr.-Ing. Tobias Reggelin, Jun.-Prof. Dr.-Ing. Ingo Siegert, Prof. Dr. Philipp Pohlenz, apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Gábor Janiga
Projektbearbeitung: M.Sc. Johannes Schleiss, M.Sc. Marcel Müller
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: Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht
Förderer: BMWi/AIF - 01.03.2021 - 31.05.2024

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 - 01.04.2021 - 29.02.2024

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 - 01.07.2020 - 31.12.2023

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: 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 Ziegleiprodukten 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. Dominique Thévenin, Dr. Wei Guan
Kooperationen: Prof. Manja Krüger (OvGU, IWF); Prof. Frank Beyrau, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2023 - 30.09.2026

Additively-manufactured bluff-body burner investigated by high-fidelity simulations and experiments for fuel-flexible, stable, and safe combustion of NH₃/H₂ mixtures

In diesem Projekt wird ein additiv gefertigter Bluff-Body-Brenner für die brennstoffflexible, stabile und sichere Verbrennung von NH₃/H₂-Gemischen betrachtet. Zur Untersuchung der Verbrennungseigenschaften und der Schadstoffemissionen werden numerische Simulationen und detaillierte experimentelle Untersuchungen mit hoher Genauigkeit durchgeführt. Die Brennerkonstruktion wird dann optimiert (in Bezug auf Form, Größe und Position des Flammenhalters), um ein effizientes Verbrennungsverhalten zu erreichen. Es werden offene und geschlossene Brennergeometrien betrachtet. Die Seite des Flammenhalters in Kontakt mit der Flamme und andere Hochtemperaturteile werden durch additive Fertigung unter Verwendung von Ni-Basis-Legierungen und ultrahochtemperaturbeständigen Refraktärmetall-Legierungen hergestellt, um Geometrievariationen zu ermöglichen. Die Dynamik der turbulenten Flamme, die Wechselwirkungen zwischen Flamme und Wand, die

Grenze der stabilen Verbrennung, der Flammenrückschlag und die Wärmefreisetzung werden im Detail untersucht. Schließlich wird ein optimales Bluff-Body-Brennerdesign für eine stabile, sichere, brennstoffflexible und saubere Verbrennung von NH_3/H_2 als Mischbrennstoff entwickelt.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Kooperationen: Prof. Romuald Skoda, Ruhr-Universität Bochum; Prof. Christian Hasse, TU Darmstadt
Förderer: Industrie - 01.10.2023 - 01.03.2026

Experimentelle und simulative Bestimmung von Wirkzusammenhängen zwischen Oberflächenstrukturierung, Einblasung/Absaugung und dem Gemisch-Förderverhalten von Radialpumpen zur Auslegung von Hoch-Effizienz-Kreiselpumpen für die Flüssig-Gasgemischförderung

Die Auslegung von Kreiselpumpen erfolgt i.d.R. für die Förderung reiner Flüssigkeiten. Die Förderung bricht besonders bei Radialpumpen bereits bei sehr geringen Gasbeladungen der Flüssigkeit aufgrund der Bildung von Gasakkumulationen im Schaufelkanal ein. Alle bisher bekannten betrieblichen und konstruktiven Maßnahmen zur Verbesserung der Gemischförderung sind mit wirtschaftlichen und energetischen Nachteilen wie z.B. einem niedrigen Wirkungsgrad verbunden.

Die Antragsteller haben in ihren Vorarbeiten ein 3D-Rechenverfahren entwickelt und validiert, mit dem die Bildung von Gasakkumulationen physikalisch richtig prognostiziert werden kann. Dieses Rechenverfahren soll hier eingesetzt werden, um minimalinvasive Maßnahmen zu evaluieren, die den Fördereinbruch effektiv hemmen sollen. Diese Maßnahmen können nach Projektende genutzt werden, um Kreiselpumpen, die für Flüssigkeitsförderung ausgelegt wurden, für die zuverlässige Förderung von Flüssigkeiten mit mäßiger oder kurzzeitiger Gasbeladung zu ertüchtigen. Eine wichtige Nebenbedingung ist die Beibehaltung eines hohen Wirkungsgrades. Eine Validierung erfolgt durch Experimente.

Neben der Untersuchung von fertigungsbedingten Rauigkeiten sollen durch 3D-Druck gezielt künstliche Mikro-Strukturen in die Schaufeloberflächen eingebracht werden. Darüber hinaus wird ein Ausspülen der Gasakkumulationen durch Bohrungen zwischen Schaufeldruck- und Saugseite untersucht. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der grundsätzlichen Wirkweise dieser Maßnahmen und auf der Beschreibung der strömungsmechanischen Prozesse, die zur Hemmung von Gasakkumulationen führen.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin, Dr. Cheng Chi
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2023 - 31.12.2025

Direct numerical simulations and data-driven analysis of ignition and combustion in realistic pre-chamber/ engine systems with NH_3/H_2 blend fuel

To facilitate carbon-free and low emission combustion in practical engine systems, this project investigates the transient ignition and turbulent combustion process in a realistic pre-chamber/engine geometry with NH_3/H_2 blend fuel. Direct numerical simulations (DNS) are carried out for this system with exascale computation on Supercomputers, generating a vast amount of high-fidelity data. Machine learning techniques are applied to accelerate the chemical kinetic computation in DNS. The realistic geometry is represented by the immersed boundary method. Data-driven analysis is done to investigate in detail the ignition characteristics and the multi-scale features of the turbulent flames. NO_x emissions are also investigated. A better understanding of the practical pre-chamber/engine system using NH_3/H_2 fuel should be finally obtained, which would be useful for both fundamental academic research and practical applications.

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 grenzflächenaufgelösten 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
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. 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 Annuua* 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: 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
Kooperationen: Prof. Einar Krus, 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: 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: 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 Röhren 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, Dr.-Ing. Péter Kováts
Förderer: Industrie - 01.09.2023 - 15.01.2024

Aufbau und Inbetriebnahme eines Versuchsstandes zum hydraulischen Feststofftransport

Um in Zukunft Versuche zum hydraulischen Transport von Feststoffen in Abwasserrohren im eigenen Hause durchführen zu können, möchte die Firma einen Versuchsstand dazu aufbauen und testen lassen. Ziel dieses Projektes ist es daher einen solchen Versuchsstand zu konzipieren, aufzubauen und in Betrieb zu nehmen. Der Auftraggeber stellt dazu die benötigten Daten zur Konzeption (gewünschter Volumenstrom, Hauptabmessungen, ...) sowie die Testkörper zur Versuchsdurchführung zur Verfügung. Am Ende des Projekts sollen im Rahmen einer Bachelorarbeit erste Versuchsreihen unter Variation der Prüfkörperform und deren Menge durchgeführt werden.

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; Kiiski, Yanneck; Leidhold, Roberto; Hoerner, Stefan

On the influence of head motion on the swimming kinematics of robotic fish

Bioinspiration & biomimetics - London : Inst. of Physics, Bd. 18 (2023), Heft 5, Artikel 056007, insges. 14 S.

[Imp.fact.: 3.4]

Abdelghafar, Islam; Kerikous, Emeel; Hoerner, Stefan; Thévenin, Dominique

Evolutionary optimization of a Savonius rotor with sandeel-inspired blades

Ocean engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 279 (2023), Artikel 114504

[Imp.fact.: 5.0]

Abdelghafar, Islam; Refaie, Abdelaziz G.; Kerikous, Emeel; Thévenin, Dominique; Hoerner, Stefan

Optimum geometry of seashell-shaped wind turbine rotor - maximizing output power and minimizing thrust

Energy conversion and management - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 292 (2023), Artikel 117331

[Imp.fact.: 10.4]

Abdelsamie, Abouelmagd; Voß, Samuel; Berg, Philipp; Chi, Cheng; Arens, Christoph; Thévenin, Dominique; Janiga, Gábor

Comparing LES and URANS results with a reference DNS of the transitional airflow in a patient-specific larynx geometry during exhalation

Computers & fluids - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 255 (2023), Artikel 105819

[Imp.fact.: 2.8]

Abdelsamie, Abouelmagd; Wiggers, Hartmut; Kruis, Frank Einar; Thévenin, Dominique

Direct numerical simulation of SpraySyn burner - impact of liquid solvent

International journal of spray and combustion dynamics - Thousand Oaks, CA : SAGE Publications, Bd. 15 (2023), Heft 4, S. 237-247

[Imp.fact.: 1.6]

Alex, Denny Mathew; Redemann, Tino; Specht, Eckehard

Effect of kiln car weight on the tunnel kiln process

Thermal science and engineering progress - Amsterdam : Elsevier, Bd. 41 (2023), Artikel 101861

[Imp.fact.: 4.8]

Allgaier, Mareen; Spitz, Lena; Behme, Daniel; Mpotsaris, Anastasios; Berg, Philipp; Preim, Bernhard; Saalfeld, Sylvia

Design of a virtual data shelf to effectively explore a large database of 3D medical surface models in VR

International journal of computer assisted radiology and surgery - Berlin : Springer, Bd. 18 (2023), Heft 11, S. 2013-2022

[Imp.fact.: 3.0]

Arndt, Christoph; Stahlberg, Anna-Lena; Patnaik, Anil; Beyrau, Frank; Bood, Joakim; Hsu, Paul; Seeger, Thomas

Laser applications to chemical, security, and environmental analysis - introduction to the feature issue

Applied optics - Washington, DC : Optical Soc. of America, Bd. 62 (2023), Heft 6, S. LAC1-LAC3

[Imp.fact.: 1.9]

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

Review of modelling of pyrolysis processes with CFD-DEM

Flow, turbulence and combustion - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V., Bd. 111 (2023), Heft 2, S. 355-408

[Imp.fact.: 2.4]

Chang, Yinjie; Xu, Qiang; Zou, Suifeng; Zhao, Xiangyuan; Wu, Quanhong; Wang, Yechun; Thévenin, Dominique; Guo, Liejin

An improved void fraction prediction model for gas-liquid two-phase flows in pipeline-riser systems
Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 278 (2023), Artikel 118919
[Imp.fact.: 4.7]

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

Direct numerical simulations of polypropylene gasification in supercritical water
Physics of fluids - Melville, NY : American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 6, insges. 14 S.
[Imp.fact.: 4.4]

Chi, Cheng; Han, Wang; Thévenin, Dominique

Effects of molecular diffusion modeling on turbulent premixed NH₃/H₂/air flames
Proceedings of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 39 (2023), Heft 2, S. 2259-2268
[Imp.fact.: 3.4]

Chi, Cheng; Theisel, Holger; Thévenin, Dominique

Interaction of a turbulent flame with the very-large-scale structures in a channel flow
European journal of mechanics / B - Paris : Gauthier-Villars, Bd. 101 (2023), S. 167-175
[Imp.fact.: 2.6]

Chi, Cheng; Thévenin, Dominique

DNS study on reactivity stratification with prechamber H₂ air turbulent jet flame to enhance NH₃ air combustion in gas engines
Fuel - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 347 (2023), Artikel 128387
[Imp.fact.: 7.4]

Dieguez-Alonso, Alba; Vu-Han, Tu-Lien Eliane; Almuina-Villar, Hernán; Fuentes, Juan Jesús Rico; Hilfert, Liane; Dernbecher, Andrea; Rosa, José María; Behrendt, Frank

Tailored production and application of biochar for tar removal
Fuel - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 348 (2023), Artikel 128306
[Imp.fact.: 7.4]

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

Comparison of portable and large mobile air cleaners for use in classrooms and the effect of increasing filter loading on particle number concentration reduction efficiency
Atmosphere - Basel, Switzerland : MDPI AG, Bd. 14 (2023), Heft 9, Artikel 1437, insges. 23 S.
[Imp.fact.: 2.9]

Elattar, Hassan F.; Specht, Eckehard; Almohammadi, Bandar Awadh; Mohamed, Mohamed H.; Refaey, Hassanein A.

Impact of P-1 radiation model on simulated free jet flame characteristics of gaseous fuels - CFD with PDF approach
Thermal science - Belgrade : Soc., Bd. 27 (2023), Heft 5, Part B, S. 3921-3938
[Imp.fact.: 1.7]

Guan, Wei; Abdelamie, Abouelmagd; Chi, Cheng; He, Zhixia; Thévenin, Dominique

A dedicated reduced kinetic model for ammonia/dimethyl-ether turbulent premixed flames
Combustion and flame - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 257 (2023), Heft Part 2, Artikel 113002
[Imp.fact.: 4.4]

Hosseini, S. A.; Thévenin, Dominique

Toward pore-scale simulation of combustion in porous media using a low-Mach hybrid lattice Boltzmann/finite-difference solver
Physics of fluids - Melville, NY : American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 6, Artikel 067129, insges. 13 S.
[Imp.fact.: 4.4]

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 - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 39 (2023), Heft 4, S. 5357-5364
[Imp.fact.: 3.4]

Hundshagen, Markus; Rave, Kevin; Mansour, Michael; Thévenin, Dominique; Skoda, Romuald

Three-dimensional flow simulation by a hybrid two-phase solver for the assessment of liquid/gas transport in a volute-type centrifugal pump with twisted blades
International journal of turbomachinery, propulsion and power - Basel : MDPI, Bd. 8 (2023), Heft 3, Artikel 28, insges. 15 S.
[Imp.fact.: 1.4]

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

Integrated biophysical matching of bacterial nanocellulose coronary artery bypass grafts towards bioinspired artery typical functions
Scientific reports - [London]: Macmillan Publishers Limited, part of Springer Nature, Bd. 13 (2023), Artikel 18274, insges. 12 S.
[Imp.fact.: 4.6]

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

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

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

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

Jayaprasad Remani, Jijo Prasad; Palanisamy, Saravanakumar; Nallathambi, Ashok Kumar; Oterkus, Selda; Juhre, Daniel; Specht, Eckehard

Peridynamic simulation of heat transfer during quenching of semi-solid plate with occurrence of hot cracks
Journal of thermal stresses - London [u.a.]: Taylor & Francis . - 2023
[Imp.fact.: 2.8]

Korte, Jana; Gaidzik, Franziska; Larsen, Naomi; Schütz, Erik; Damm, Timo; Wodarg, Fritz; Hövener, Jan-Bernd; Jansen, Olav; Janiga, Gábor; Berg, Philipp; Pravdivtseva, Mariya S.

In vitro and in silico assessment of flow modulation after deploying the Contour Neurovascular System in intracranial aneurysm models
Journal of neuroInterventional surgery - London : BMJ Journals . - 2023, insges. 9 S.
[Imp.fact.: 4.8]

Korte, Jana; Groschopp, P.; Berg, Philipp

Resolution-based comparative analysis of 4D-phase-contrast magnetic resonance images and hemodynamic simulations of the aortic arch
Current directions in biomedical engineering - Berlin : De Gruyter, Bd. 9 (2023), Heft 1, S. 650-653

Korte, Jana; Rauwolf, Thomas; Thiel, Jan-Niklas; Mitrasch, Andreas; Groschopp, Paulina; Neidlin, Michael; Schmeißer, Alexander; Braun-Dullaes, Rüdiger; Berg, Philipp

Hemodynamic assessment of the pathological left ventricle function under rest and exercise conditions
Fluids - Basel : MDPI, Bd. 8 (2023), Heft 2, Artikel 71, insges. 15 S.
[Imp.fact.: 1.9]

Korte, Jana; Voß, Samuel; Janiga, Gábor; Beuing, Oliver; Behme, Daniel; Saalfeld, Sylvia; Berg, Philipp

Is accurate lumen segmentation more important than outlet boundary condition in image-based blood flow simulations for intracranial aneurysms?

Cardiovascular engineering and technology - New York, NY : Springer, Bd. 14 (2023), Heft 5, S. 617-630
[Imp.fact.: 1.8]

Kösters, Wolf Iring; Hoerner, Stefan

Simultaneous flow measurement and deformation tracking for passive flow control experiments involving fluid-structure interactions

Journal of fluids and structures - Orlando, Fla. : Elsevier, Bd. 121 (2023), Artikel 103956, insges. 14 S.
[Imp.fact.: 3.6]

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

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

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

Mansour, Michael; Koppa, Saketh Bharadwaj; Thévenin, Dominique

Improving air-water two-phase flow pumping in centrifugal pumps using novel grooved front shrouds

Chemical engineering research and design - Amsterdam : Elsevier, Bd. 197 (2023), S. 173-191
[Imp.fact.: 3.9]

Mansour, Michael; Müller, Conrad; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina

Impact of flow conditions and geometrical parameters on the separation of two immiscible liquids in helical pipes
Technische Mechanik - Magdeburg : Inst., Bd. 43 (2023), Heft 1, S. 59-72

Mansour, Michael; Thévenin, Dominique

State of the art on two-phase non-miscible liquid/gas flow transport analysis in radial centrifugal pumps. Part B: Review of experimental investigations

International journal of turbomachinery, propulsion and power - Basel : MDPI, Bd. 8 (2023), Heft 4, Artikel 42, insges. 49 S.
[Imp.fact.: 1.4]

Mehdi, Bilal; Ryll, Stephan; Specht, Eckehardt

Analysis of the local heat transfer of quenching of moving metal sheets made of different materials using flat spray nozzles

Heat and mass transfer - Berlin : Springer, Bd. 59 (2023), S. 1767-1779
[Imp.fact.: 2.2]

Narayan, Nithin Mohan; Gopalkrishna, Suresh Babu; Mehdi, Bilal; Ryll, Stephan; Specht, Eckehardt; Fritsching, Udo

Multiphase numerical modeling of boiling flow and heat transfer for liquid jet quenching of a moving metal plate

International journal of thermal sciences - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 194 (2023), Artikel 108587
[Imp.fact.: 4.5]

Neeraj, Tanya; Velten, Christin; Janiga, Gabor; Zähringer, Katharina; Namdar, Reza; Varnik, Fathollah; Thévenin, Dominique; Hosseini, Seyed Ali

Modeling gas flows in packed beds with the lattice Boltzmann method - validation against experiments

Flow, turbulence and combustion - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V., Bd. 111 (2023), Heft 2, S. 463-491
[Imp.fact.: 2.4]

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

Large eddy simulations of turbulent gas-liquid flows in a diverging horizontal channel using a hybrid multiphase approach

Journal of fluids engineering - New York, NY : ASME, Bd. 145 (2023), Heft 3, Artikel 031501, insges. 11 S.
[Imp.fact.: 2.0]

Pallares, Jordi; Fabregat, Alexandre; Lavrinenko, Akim; bin Norshamsudin, Hadifathul Akmal; Janiga, Gabor; Fletcher, David F.; Inthavong, Kiao; Zasimova, Marina; Ris, Vladimir; Ivanov, Nikolay; Castilla, Robert; Gamez-Montero, Pedro Javier; Raush, Gustavo; Calmet, Hadrien; Mira, Daniel; Wedel, Jana; Štraki, Mitja; Ravnik, Jure; Fontes, Douglas; Souza, Francisco José; Marchioli, Cristian; Cito, Salvatore

Numerical simulations of the flow and aerosol dispersion in a violent expiratory event: Outcomes of the "2022 International Computational Fluid Dynamics Challenge on violent expiratory events"

Physics of fluids - Melville, NY : American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 4, Artikel 045106, insges. 23 S.

[Imp.fact.: 4.4]

Stahl, Janneck; Kassem, Leheng; Behme, Daniel; Klebingat, Stefan; Saalfeld, Sylvia; Berg, Philipp

Fabrication of flexible intracranial aneurysm models using stereolithography 3D printing

Current directions in biomedical engineering - Berlin : De Gruyter, Bd. 9 (2023), Heft 1, S. 395-398

Stahl, Janneck; Marsh, Laurel Morgan Miller; Thormann, Maximilian; Ding, Andreas; Saalfeld, Sylvia; Behme, Daniel; Berg, Philipp

Assessment of the flow-diverter efficacy for intracranial aneurysm treatment considering pre- and post-interventional hemodynamics

Computers in biology and medicine - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 156 (2023), Artikel 106720

[Imp.fact.: 7.7]

Stelter, Moritz; Martins, Fabio J. W. A.; Beyrau, Frank; Fond, Benoît

Thermographic 3D particle tracking velocimetry for turbulent gas flows

Measurement science and technology - Bristol : IOP Publ., Bd. 34 (2023), Heft 7, Artikel 074008, insges. 16 S.

[Imp.fact.: 2.4]

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

Mandelic acid single-crystal growth - experiments VS numerical simulations

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

[Imp.fact.: 3.7]

Velten, Christin; Zähringer, Katharina

Flow field characterisation of gaseous flow in a packed bed by particle image velocimetry

Transport in porous media - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V., Bd. 150 (2023), Heft 2, S. 307-326

[Imp.fact.: 2.7]

Yu, Chunkan; Cai, Liming; Chi, Cheng; Mashruk, Syed; Valera-Medina, Agustin; Maas, Ulrich

Numerical investigation on the head-on quenching (HoQ) of laminar premixed lean to stoichiometric ammonia-hydrogen-air flames

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

[Imp.fact.: 2.4]

Zirwes, Thorsten; Sontheimer, Marvin; Zhang, Feichi; Abdelsamie, Abouelmagd; Hernández Pérez, Francisco E.; Stein, Oliver T.; Im, Hong G.; Kronenburg, Andreas; Bockhorn, Henning

Assessment of numerical accuracy and parallel performance of OpenFOAM and its reacting flow extension EBI dnsFoam

Flow, turbulence and combustion - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V., Bd. 111 (2023), Heft 2, S. 567-602

[Imp.fact.: 2.4]

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Bennecke, Timo; Ruiz-Hussmann, Karla; Joedecke, Paul; Abbaszadeh, Shokoofeh; Delafin, Pierre-Luc; Weber, Christian-Toralf; Hoerner, Stefan

A methodology to capture the single blade loads on a cross-flow tidal turbine flume model

15th Proceedings of the European Wave and Tidal Energy Conference - Southampton, UK : Energy and Climate Change Division ; Blanko Ilzarbem Jesús María . - 2023

Hoerner, Stefan; Leidhold, Roberto; Abbaszadeh, Shokoofeh; Ruiz-Hussmann, Karla; Bennecke, Timo; Zhao, Zhao; Joedecke, Paul; Weber, Christian-Toralf; Delafin, Pierre-Luc; Bonamy, Cyrille; Delannoy, Yves

Experimental optimization environment for developing an intracycle pitch control in cross flow turbines

15th Proceedings of the European Wave and Tidal Energy Conference - Southampton, UK : Energy and Climate Change Division ; Blanko Ilzarbem Jesús María . - 2023

Kerikous, Emeel; Hithaish, Doddamani; Samad, Abdus; Hoerner, Stefan; Thévenin, Dominique

Performance enhancement of fluidic diode for a wave energy system through genetic Algorithm

15th Proceedings of the European Wave and Tidal Energy Conference - Southampton, UK : Energy and Climate Change Division ; Blanko Ilzarbem Jesús María . - 2023

Ruiz-Hussmann, Karla; Delafin, Pierre-Luc; Bonamy, Cyrille; Delannoy, Yves; Thévenin, Dominique; Hoerner, Stefan

Objective functions for the blade shape optimisation of a cross-flow tidal turbine under constraints

15th Proceedings of the European Wave and Tidal Energy Conference - Southampton, UK : Energy and Climate Change Division ; Blanko Ilzarbem Jesús María . - 2023

Wolligant, Steve; Rössl, Christian; Chi, Cheng; Thévenin, Dominique; Theisel, Holger

Autonomous particles for in-situ-friendly flow map sampling

VMV 2023: Vision, Modeling & Visualization - Eurographics Association ; Guthe, Michael, S. 189-197 ; [Konferenz: VVV 2023, Braunschweig, Germany, September 27 - 29, 2023]

Zhao, Zhao; Bennecke, Timo; Hoerner, Stefan; Leidhold, Roberto

Intracycle active blade pitch control for cross-flow tidal turbines using embedded electric drive systems

15th Proceedings of the European Wave and Tidal Energy Conference - Southampton, UK : Energy and Climate Change Division ; Blanko Ilzarbem Jesús María . - 2023

NICHT BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Chatterjee, Soumick; Schulz, Franziska; Sciarra, Alessandro; Mattern, Hendrik; Janiga, Gábor; Speck, Oliver; Nürnberger, Andreas; Pathiraja, Sahani

Exploiting the inter-rater disagreement to improve probabilistic segmentation

Konferenz: ISMRM 2023, Toronto, Canada, June 2023, ResearchGATE - Cambridge, Mass. : ResearchGATE Corp. . - 2023, insges. 4 S.

ABSTRACTS

Chatterjee, Soumick; Gaidzik, Franziska; Sciarra, Alessandro; Mattern, Hendrik; Gabor, Janiga; Speck, Oliver; Nürnberger, Andreas; Pathiraja, Sahani

Exploiting the inter-rater disagreement to improve probabilistic segmentation

ISMRM & ISMRT Annual Meeting & Exhibition - Concord, CA : International Society for Magnetic Resonance in Medicine . - 2023, Artikel 0810

Korte, Jana; Voß, Samuel; Janiga, Gábor; Beuing, Oliver; Behme, Daniel; Saalfeld, Sylvia; Berg, Philipp

Comparative analysis of the impact of lumen segmentation and outlet boundary condition in image-based blood flow simulations for intracranial aneurysms

Konferenz: 6th Conference on Image-Guided Interventions, IGIC 2023, Mannheim, 19-20 October 2023, 6th Conference on Image-Guided Interventions - Mannheim . - 2023, S. 24-25, Artikel 107

Schwab, Roland; Stahl, Janneck; Klebingat, Stefan; Thormann, Maximilian; Behme, Daniel

Realistic 3D-printed skull model in CT and DSA imaging for endovascular training and validation purposes
Clinical neuroradiology - München : Urban & Vogel, Bd. 33 (2023), Heft Suppl 1, S. S69-S71, Artikel 149
[Imp.fact.: 2.8]

Stahl, Janneck; Saalfeld, Sylvia; Behme, Daniel; Kaneko, Naoki; McGuire, Laura Stone; Alaraj, Ali; Berg, Philipp

Image-based multimodal hemodynamic investigation of patient-specific intracranial arteriovenous malformations
Konferenz: 6th Conference on Image-Guided Interventions, IGIC 2023, Mannheim, 19-20 October 2023, 6th
Conference on Image-Guided Interventions - Mannheim . - 2023, S. 15-16

DISSERTATIONEN

Lubinski, Stefan; Specht, Ekehard [AkademischeR BetreuerIn]

Entwicklung von Salzbetonrezepturen für Betonwaren des Garten- und Landschaftsbau (GaLaBau) und
Überprüfung der Eignung
Magdeburg, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik
2023, XII, 295 Seiten ;
[Literaturverzeichnis: Seite 285-294]

INSTITUT FÜR VERFAHRENSTECHNIK

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

1. LEITUNG

Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel
Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl
Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld
Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem (geschäftsführender Leiter)

2. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl
Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld
Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem
Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel
Jun.-Prof. Dr.-Ing. Fabian Denner
apl. Prof. Dr. rer. nat. habil. Heike Lorenz
Hon.-Prof. Dr.-Ing. Mirko Peglow
PD Dr. rer. nat. habil. Yvonne Genzel
PD Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani

3. FORSCHUNGSPROFIL

1. Chemische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. C. Hamel)
 - Untersuchung heterogen katalysierter Reaktionen
 - Kopplung von Reaktion und Stofftrennung
 - Membranreaktoren
 - Chromatographische Trennverfahren
 - Enantiomerentrennung
2. 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. B. van Wachem)

- Partikeltechnologie
- Mehrphasenströmungen
- Numerische Mechanik

4. Mehrphasenströmungen (Prof. Dr.-Ing. habil. M. Sommerfeld)

- Mehrphasenströmungen
- Partikeltechnologie
- Numerische Mechanik

5. Systemverfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. K. Sundmacher)

- Modellgestützte Analyse, Synthese und Optimierung komplexer verfahrenstechnischer Prozesssysteme
- Neue Methoden für die Prozesssynthese
- Nachhaltige chemische Produktionsverfahren
- Prozesse der chemischen Energiewandlung
- Elektrochemische Prozesse
- Algen-Biotechnologie
- Synthetische Biosysteme

6. Thermische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. E. Tsotsas)

- Trocknungstechnik
- Wirbelschichttechnik
- Partikelformulierung (Agglomeration, Granulation, Coating)
- Strukturelle Charakterisierung (u.a. X-ray micro-CT)
- Diskrete Modellierung (u.a. Porennetzwerke)

4. KOOPERATIONEN

- AstraZeneca GmbH, Wedel
- AVA - Anhaltinische Verfahrens- und Anlagentechnik GmbH, Magdeburg
- BASF AG, Ludwigshafen
- Department of Mechanical Engineering der Universität Delaware (USA)
- Evonik AG, Hanau
- Fraunhofer IFF, Magdeburg
- Glatt Ingenieurtechnik Weimar
- Helmholtz-Zentrum für Infektionsforschung, Braunschweig
- IDT Biologika GmbH, Dessau-Roßlau
- Instituto de Biologia Experimental e Tecnológica, Lissabon (Portugal)
- IPT Pergande, Weißandt-Gölzau
- Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg
- Petrobras, Rio de Janeiro (Brasilien)
- 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: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.07.2020 - 14.07.2023

Akustisch getriebene Wolkenkavitation beschichteter Mikroblasen

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

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel, Dr.-Ing. Klaus-Peter Kalk, Dr.-Ing. Martin Gerlach, M.Sc. Adrian Baum
Kooperationen: Leuna-Harza GmbH Leuna
Förderer: Industrie - 01.10.2023 - 30.09.2026

Experimentelle und modellbasierte Studien zur Hydrochlorierung von Glycerin zu Dichlorhydrin

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

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

Eine experimentelle Validierung des präferierten Reaktorkonzepts unter Verwendung von Dosierstrategien sowie Berücksichtigung von Umlauf- und Rückführströmen ist vorzunehmen. Das Projekt wird durch eine Gesamtprozessmodellierung, inkl. Rohstoffvorbereitung, Feedkonditionierung, Reaktor, nachgeschaltete Trennoperationen und Rückführströme, mittels Flow-Sheet-Simulation in AspenPlus abgeschlossen.

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

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

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

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

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Jan Paul Walter, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel
Kooperationen: OHplus GmbH Staßfurt
Förderer: Industrie - 01.09.2023 - 31.08.2024

Kinetische Studien zur Synthese von Glycerincarbonat aus biobasiertem Glycerin

Durchführung von experimentellen und modellbasierten kinetischen Studien zur heterogen katalysierten Umsetzung von biobasiertem Glycerin mit CO₂ zu Glycerincarbonat. Stoffliche Fixierung von CO₂. Potentialbewertung und Machbarkeitsstudien.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel, Dr.-Ing. Leo Alvarado Perea
Kooperationen: Universidad Autónoma de Zacatecas (UAZ), Mexico
Förderer: Deutscher Akademischer Austauschdienst e.V. (DAAD) - 08.10.2023 - 07.01.2024

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

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

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

- a) The coupled oxidative and thermal dehydrogenation of propane using VO_x-Al₂O₃ based catalysts, taking into account catalyst deactivation by coking and periodically regeneration, as bridging technology in chemical industry.
- b) The selective oxidation of bio-based methanol to methylformate (MF), dimethylether (DME) and dimethoxymethane (DMM) as potential green platform chemicals using VO_x/TiO₂ catalytic systems.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: B.Sc. Lisa Sommer, Dr.-Ing. Martin Gerlach, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel
Kooperationen: Cargill Deutschland GmbH
Förderer: Industrie - 01.09.2023 - 31.12.2023

Untersuchungen zur Umsetzung biogener Reststoffe aus der Produktion zu Methan

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

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Tobias Fritsche, Dr.-Ing. Martin Gerlach, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel
Förderer: Industrie - 01.09.2023 - 31.12.2023

Syntheseoptimierung zur Selektivitätssteuerung der Pyrazolreaktion

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

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

Konzeptentwicklung und Koordination "Laborgestaltung - neue Anforderungen"

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

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Tobias Fritsche, Dr.-Ing. Martin Gerlach, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel
Kooperationen: AECl Schirm Schönebeck
Förderer: Industrie - 01.04.2023 - 30.06.2023

Prozessintensivierung der Pyrazolreaktion

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

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: Dipl.-Chem. Pottratz Ines, M.Sc. Hofmann Katrin, M.Sc. Müller Ines
Kooperationen: Hochschulverbundpartner: Prof. Dr.-Ing. Thomas Kleinschmidt, Hochschule 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 "Mittelelbe" 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 "Mittelelbe" GmbH, der BIA Separations GmbH, dem Fraunhofer IKTS sowie der Universität Magdeburg, an der ein kooperatives Promotionsverfahren durchgeführt wird, soll ein Verfahren zur Synthese von Präbiotika am Beispiel der Galactooligosaccharide (GOS) mittels experimenteller und modellbasierter Forschungsarbeit durch Wissens- und Technologietransfer der Partner für den preisgünstigen Rohstoff Molkenpermeat entwickelt, realisiert und optimiert werden.

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

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

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

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

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

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

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

Dieses Projekt zielt darauf ab, die oben genannten Probleme in zwei Richtungen zu lösen: (i) Vorschlag geeigneter Optimierungen für Graphdatenbank-Operationen, auch unter Einsatz moderner Hardware, und (ii) Integration von Algorithmen des maschinellen Lernens für eine einfachere und schnellere Analyse der biologischen Daten. Für die erste Richtung untersuchen wir den Stand der Technik von Graphdatenbanksystemen und deren Speicherung sowie ihr Verarbeitungsmodell. Anschließend schlagen wir Optimierungen für effiziente operationale und analytische Operatoren vor. Für die zweite Richtung stellen wir uns vor, Algorithmen des maschinellen Lernens näher an ihre Datenlieferanten - die Graphdatenbanken - heranzubringen. Zu diesem Zweck füttern wir in einem ersten Schritt die Algorithmen des maschinellen Lernens direkt mit dem Graphen als Eingabe, indem wir geeignete Graphenoperatoren entwerfen. In einem zweiten Schritt integrieren wir 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
Kooperationen: Nestlé, Switzerland; Merck Group; Caribion Innovation Centre; Danone Nutricia Research; International Fine Particle Research Institute
Förderer: Sonstige - 01.09.2023 - 31.08.2026

Modeling porosity development during drying of porous systems

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

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

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

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

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2022 - 31.10.2025

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

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

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

Mechanism of agglomeration in spray drying with the fine particle recirculation

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

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

Adaptive pore network modelling of thermochemical processes in single porous particles

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

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

Projektleitung: Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Kooperationen: Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg; Prof. Avi Levy
Förderer: Stiftungen - Sonstige - 01.04.2020 - 31.12.2023

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

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

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

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

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

Teilprojekt SP6

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

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher, Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.06.2023 - 31.12.2025

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

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

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

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2023 - 31.12.2025

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

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

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

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

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher, Dr. Andreas Voigt
Kooperationen: TU Kaiserslautern; KIT Karlsruhe
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2022 - 31.12.2025

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

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

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

Incipient spray fluidized bed agglomeration at the border to coating

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

Projektleitung: MSc. Aisel Ajalova, Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Kooperationen: Prof. Achim Kienle, OvGU Magdeburg; Prof. Andreas Bück, Friedrich-Alexander University Erlangen-Nuremberg
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.12.2022 - 14.11.2025

Autonomous structure formation processes in spray fluidized bed agglomeration

Recent progress in spray fluidized bed agglomeration enables to model kinetics and particle formation during the process. With minimal amount of empirical information on the influence of operating conditions on fractal dimension, agglomerates can be produced in silico, even printed out in 3D. Such advanced technologies shall be applied to the continuously operated process, in combination with new methods for inline monitoring and automatic control. The goal is to 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 complementarity is seen with, especially, projects on crossing flames, high shear mixing, assisted fluidization, and imaging.

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

Ultrathin coating of fluidized particles by means of aerosol

Coated particles for various applications are usually produced by spraying solid-containing liquid on mechanically agitated or fluidized cores. Every spray droplet which is deposited on the surface of a core particle leaves behind a solid remnant after evaporation of the solvent or suspension liquid (preferably water). Each such deposit is a building block (BB) of the coating layer. However, spray droplets are quite large (typically 40 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, Dr.-Ing. Kaicheng Chen
Kooperationen: Dr. Fabian Sewerin, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik; Prof. Berend van Wachem, OVGU, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik Institut für Verfahrenstechnik Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik; Prof. Alba Dieguez Alonso
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.07.2023 - 30.06.2024

Design of Novel Fluidized Bed Processes for Plastics Recycling

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

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

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Simson Rodrigues
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Prof. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.07.2020 - 14.06.2024

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

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

results and correlated with adequately defined particle form parameters. Moreover, interstitial packed bed morphology, 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. Haashir Altaf
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Dr. Tanja Vidakovic-Koch, MPI Magdeburg
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.09.2019 - 31.12.2023

Pore network modeling of the anode porous transport layer of water 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. Supriya Bhaskaran
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huget; Dr. Tanja Vidakovic-Koch, MPI Magdeburg
Förderer: Sonstige - 01.11.2020 - 31.08.2023

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

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

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Xiaodan Yao
Kooperationen: Dr. Torsten Hoffmann; AVA - 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-Gölzau
Förderer: BMWi/AIF - 01.12.2020 - 31.05.2023

Granulation in der Sprühwirbelschicht mit Gasbeimischung zum Feed

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

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

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

It will be investigated how to capture and store 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: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Alba Dieguez-Alonso, Prof. Dr. Nora Kulak, Dr. Nicole Vorhauer-Huget
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2022 - 31.12.2023

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2023 - 31.12.2025

Nichtlineare Kapillarsysteme mit tensidebeladenen Grenzflächen

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2022 - 31.10.2025

Optimierung des Betriebs von Wirbelschichtverfahren mittels maschinellen Lernens

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

Gasfluidisierungsgeschwindigkeit) zu unterschiedlichen Blasenmustern und -dynamiken führt. Ziel dieses Projekt ist es, die Blasen in einer Wirbelschicht durch Anwendung von Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) wie evolutionäre Algorithmen und genetische Programmierung zu kontrollieren. Wir werden unsere Wirbelschicht im Labormaßstab mit Kamerasystem und Berechnungsmodellen im Euler-Euler- und Euler-Lagrange-Verfahren verwenden, um die Dynamik von Blasen in der Wirbelschicht zu erfassen, während die Wirbelgasgeschwindigkeit räumlich und zeitlich variiert wird. Zunächst werden diese Ergebnisse verwendet, um das optimale Zuflussmuster für gegebene Zielfunktionen zu finden.

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

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

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

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

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2021 - 30.09.2024

Modellentwicklung zur Untersuchung dichter partikelbeladener Strömungen auf der Mesoskala

Dichte partikelbeladene Strömungen können in vielen natürlichen und industriellen Prozessen, wie der Strömung roter Blutkörperchen im Plasma oder der Fluidisierung von Kohl- oder 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: 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, Prof. Dr.-Ing. habil. Manja Krüger
Projektbearbeitung: Janett Schmelzer
Förderer: Haushalt - 01.09.2022 - 30.06.2024

Determining the comminution behavior of plastic particles in milling processes

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2022 - 30.06.2024

Einheitliche konservative numerische Berechnungs- methode für Grenzflächenströmungen

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

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

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

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2021 - 30.06.2024

Verteilung und Ablagerung von Partikeln in verdampfenden festsitzenden Tröpfchen

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

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

Bulk-Reaction - Teilprojekt C5

Aus Rechenzeitgründen wird derzeit in großskaligen DEM-CFD Simulationen die Gasphasenströmung nur stark vereinfacht abgebildet. Die exakte Geometrie einzelner Partikel wird auf der Gasseite nicht abgebildet, sondern lediglich pauschal durch eine lokal verteilte, isotrope Porosität berücksichtigt. Gerade für chemisch reagierende Schüttungen ist dies ein unbefriedigender Ansatz, da das Gasphasenströmungsfeld über die örtliche Verteilung des Oxidators (beeinflusst Gasphasen- und Partikelreaktion) und die lokale Mischungsrate ganz wesentlich den Reaktionsfortschritt bestimmt. Deshalb sollen im Projekt C5 neue Modelle für eine genauere Impulskopplung in CFD-DEM, unter Berücksichtigung der heterogenen und anisotropen Natur der Partikelkonfigurationen, hergeleitet, entwickelt und validiert werden. Dabei werden die Details der Umströmung einzelner Partikel (Impuls, Diffusion, Konvektion) auf größeren Raum- und Zeitskalen projiziert (coarse graining). Die grundlegende Idee des Teilprojektes ist hierbei, dass im Rahmen von numerischen Simulationen, sowohl mikrostrukturelle Größen, z.B. Partikeldurchmesser, Volumenanteile und Partikelgeometrien als auch deren Verteilung berücksichtigt werden können. Zentrale wissenschaftliche Fragestellungen des Projektes sind Ziele des Teilprojekts sind:

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

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

Bulk Reaction - Teilprojekt C2

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

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

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Projektbearbeitung: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.05.2021 - 30.04.2024

Aerosolenstehung in der Lunge und Einkapselung von Viren

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

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

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

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

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

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

Zu diesem Zweck wird ein Mehrskalenansatz verfolgt, wobei zunächst die erforderlichen Beiwerte für die relevanten Strömungskräfte und Momente als auch die Wechselwirkung mit der Strömung für längliche Partikel durch voll-aufgelöste numerische Simulationen (PR-DNS) analysiert werden. Diese umfangreichen Simulationsergebnisse werden für eine öffentlich verfügbare Datenbank aufbereitet und wo erforderlich mit dreidimensionalen experimentellen Untersuchungen durch bildgebenden Messverfahren verglichen. Auf der Grundlage dieser 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.

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

Akustisch getriebene Wolkenkavitation beschichteter Mikroblasen

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

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

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

Design of Novel Fluidized Bed Processes for Plastics Recycling

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

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

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

Dies wird mit der Bewertung des Stands der Technik zur Pyrolyse

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

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

6. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

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

Investigation of Island Growth on fluidized particles coated by means of aerosol Processes - Basel : MDPI, Bd. 11 (2023), Heft 1, Artikel 165, insges. 18 S.
[Imp.fact.: 3.5]

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

Real-time crystal growth monitoring of boric acid from sodium or lithium sulfate containing aqueous solutions by atomic force microscopy
ACS omega - Washington, DC : ACS Publications, Bd. 8 (2023), Heft 12, S. 10822-10835
[Imp.fact.: 4.1]

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

A cell-free multi-enzyme cascade reaction for the synthesis of CDP-glycerol
ChemBioChem - Weinheim : Wiley-VCH . - 2023, Artikel e202300463 ;
[Early view]
[Imp.fact.: 3.2]

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

Review of modelling of pyrolysis processes with CFD-DEM
Flow, turbulence and combustion - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V., Bd. 111 (2023), Heft 2, S. 355-408
[Imp.fact.: 2.4]

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

Reliable N-glycan analysis - removal of frequently occurring oligosaccharide impurities by enzymatic degradation
Molecules - Basel : MDPI, Bd. 28 (2023), Heft 4, Artikel 1843, insges. 19 S.
[Imp.fact.: 4.6]

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

Removable Ddes - the missing link for in-depth N-glycan analysis via multi-method approaches
Engineering - Beijing : Engineering Sciences Press., Bd. 26 (2023), S. 132-150
[Imp.fact.: 12.8]

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

Direct numerical simulations of polypropylene gasification in supercritical water
Physics of fluids - Melville, NY : American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 6, insges. 14 S.
[Imp.fact.: 4.4]

Chéron, Victor; Evrard, Fabien; Wachem, Berend

A hybrid immersed boundary method for dense particle-laden flows
Computers & fluids - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 259 (2023), Artikel 105892
[Imp.fact.: 2.8]

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

Generation of "OP7 chimera" defective interfering influenza A particle preparations free of infectious virus that show antiviral efficacy in mice
Scientific reports - [London]: Macmillan Publishers Limited, part of Springer Nature, Bd. 13 (2023), Artikel 20936, insges. 13 S.
[Imp.fact.: 4.6]

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

Comparison of portable and large mobile air cleaners for use in classrooms and the effect of increasing filter loading on particle number concentration reduction efficiency
Atmosphere - Basel, Switzerland : MDPI AG, Bd. 14 (2023), Heft 9, Artikel 1437, insges. 23 S.
[Imp.fact.: 2.9]

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

Cell-free biosynthesis meets dynamic optimization and control - a fed-batch framework
IFAC-PapersOnLine / Internationale Förderung für Automatische Lenkung - Frankfurt : Elsevier, Bd. 55 (2022), Heft 23, S. 92-97

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

First moments of a polyhedron clipped by a paraboloid
SIAM journal on scientific computing / Society for Industrial and Applied Mathematics - Philadelphia, Pa. : SIAM, Bd. 45 (2023), Heft 5, S. A2250-A2274
[Imp.fact.: 3.1]

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

Spatio-temporal prediction of temperature in fluidized bed biomass gasifier using dynamic recurrent neural network method
Applied thermal engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 219 (2023), Heft Part A, Artikel 119334
[Imp.fact.: 6.4]

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

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

Gerlach, Martin; Jameel, Froze; Seidel-Morgenstern, Andreas; Stein, Matthias; Hamel, Christof

Operando characterization of rhodium catalyst degradation in hydroformylation
Catalysis science & technology - London : RSC Publ., Bd. 13 (2023), Heft 6, S. 1788-1801
[Imp.fact.: 5.0]

Gorges, Christian; Hodžić, Azur; Evrard, Fabien; Wachem, Berend; Velte, Clara M.; Denner, Fabian

Efficient reduction of vertex clustering using front tracking with surface normal propagation restriction
Journal of computational physics - Amsterdam : Elsevier, Bd. 491 (2023), Artikel 112406
[Imp.fact.: 4.1]

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

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

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

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

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

Characterization of a quail suspension cell line for production of a fusogenic oncolytic virus
Biotechnology & bioengineering - New York, NY [u.a.]: Wiley . - 2023, insges. 12 S. ;
[Early view]
[Imp.fact.: 3.8]

Hausmann, Max; Evrard, Fabien; Wachem, Berend

Large eddy simulation model for two-way coupled particle-laden turbulent flows
Physical review fluids - College Park, MD : APS, Bd. 8 (2023), Heft 8, Artikel 084301, insges. 29 S.
[Imp.fact.: 2.7]

Hausmann, Max; Evrard, Fabien; Wachem, Berend

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

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

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

Hofmann, Katrin; Hamel, Christof

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

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

Integrated biophysical matching of bacterial nanocellulose coronary artery bypass grafts towards bioinspired artery typical functions
Scientific reports - [London]: Macmillan Publishers Limited, part of Springer Nature, Bd. 13 (2023), Artikel 18274, insges. 12 S.
[Imp.fact.: 4.6]

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

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

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

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

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

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

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

Landscape analysis of multi-objective control of fluidized beds
Proceedings of the Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation - New York, NY, United States : Association for Computing Machinery . - 2023, S. 1950-1955 ;
[Konferenz: Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation, GECCO '23 Companion, Lisbon, Portugal, July 15 - 19, 2023]

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

Mixing sub-micron particles in a ProCell type spouted bed
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 428 (2023), Artikel 118828
[Imp.fact.: 5.2]

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

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

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

[Imp.fact.: 3.7]

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

High-throughput computational solvent screening for lignocellulosic biomass processing

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

[Imp.fact.: 15.1]

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

Degradation kinetics of lignocellulolytic enzymes in a biogas reactor using quantitative mass spectrometry

Fermentation - Basel : MDPI, Bd. 9 (2023), Heft 1, Artikel 67, 1 Online-Ressource (12 Seiten)

[Imp.fact.: 3.7]

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

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

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

[Imp.fact.: 4.3]

Li, Xujun; Chen, Kaicheng; Wei, Xueying; Jin, Hui; Wang, Gaoyun; Guo, Liejin; Tsotsas, Evangelos

Distribution characteristics of salt crystals in a supercritical water fluidized bed reactor with CFD-PBM coupled model

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

[Imp.fact.: 5.2]

Lu, Xiang; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza

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

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

[Imp.fact.: 3.3]

Mahiques, Enric Illana; Brömmer, Maximilian; Wirtz, Siegmund; Wachem, Berend; Scherer, Viktor

Simulation of reacting, moving granular assemblies of thermally thick particles by discrete element method/computational fluid dynamics

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

[Imp.fact.: 2.1]

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

Formulation of nanostructured heteroaggregates by fluidization technologies

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

[Imp.fact.: 1.9]

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

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

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

[Imp.fact.: 3.5]

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

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

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

[Imp.fact.: 4.7]

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

Electrochemical performance of a spatially distributed ECP_{ro} reactor

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

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

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

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

[Imp.fact.: 3.3]

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

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

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

[Imp.fact.: 3.5]

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

Prediction of effective thermal conductivity of packed beds of polyhedral particles

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

[Imp.fact.: 5.2]

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

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

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

[Imp.fact.: 2.4]

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

Spectral response between particle and fluid kinetic energy in decaying homogeneous isotropic turbulence

Physics of fluids - [Erscheinungsort nicht ermittelbar]: American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 5, Artikel 053333, insges. 13 S.

[Imp.fact.: 4.6]

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

Lattice Boltzmann simulations for the drying of porous media with gas-side convection-diffusion boundary

Physics of fluids - Melville, NY : American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 11, Artikel 113324, insges. 19 S.

[Imp.fact.: 4.4]

Sui, Maohong; Sommerfeld, Martin; Pasternak, Lars

Extended model of bouncing boundary for droplet collisions considering numerous different liquids

International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 162 (2023), Artikel 104418

[Imp.fact.: 3.8]

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

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

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

[Imp.fact.: 12.1]

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

Mandelic acid single-crystal growth - experiments VS numerical simulations

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

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

A non-isothermal pore network model of primary freeze drying

Pharmaceutics - Basel : MDPI, Bd. 15 (2023), Heft 8, Artikel 2131, insges. 25 S.
[Imp.fact.: 5.4]

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

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

Frontiers in molecular biosciences - Lausanne : Frontiers, Bd. 10 (2023), insges. 11 S.
[Imp.fact.: 5.0]

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

Phase proper orthogonal decomposition of non-stationary turbulent flow

Physics of fluids - [Erscheinungsort nicht ermittelbar]: American Institute of Physics, Bd. 35 (2023), Heft 4, Artikel 045109, insges. 24 S.
[Imp.fact.: 4.6]

NICHT BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

Krüger, Jacob; Çaliklı, Gül; Bershadskyy, Dmitri; Heyer, Robert; Zabel, Sarah; Otto, Siegmund

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

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

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

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

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

EuroDrying 2023 - Lodz ; Musielak, Grzegorz, S. 58-64 ;
[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

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

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

EuroDrying 2023 - Lodz ; Musielak, Grzegorz, S. 75-80 ;
[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

Chen, Jin; Lu, Xiang; Kharaghani, Abdolreza

Evolution of pore structure during the drying of porous media

EuroDrying 2023 - Lodz ; Musielak, Grzegorz, S. 81-88 ;
[Konferenz: 8th European Drying Conference, EuroDrying 2023, Lodz, 04. - 07. July 2023]

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

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

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

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

Upstream processing for viral vaccines - process intensification

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

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

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

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

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

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

Prediction of spray dried product properties using machine learning algorithms

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

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

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

Towards machine learning of power-2-methanol processes

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

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

Upstream processing for viral vaccines - general aspects

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

Peterson, Luisa; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Wachem, Berend

Eulerian–Eulerian modeling approach for turbulent particle-laden flows

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

Zhang, Xiang; Sundmacher, Kai

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

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

DISSERTATIONEN

Du, Jiajie; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]

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

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (xxiii, 162 Seiten, 7,99 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 135-146][Literaturverzeichnis: Seite 135-146]

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

Modeling, optimization, and predictive control for metabolic cybergenetics

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (iv, 92 Seiten, 28,18 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 83-92][Literaturverzeichnis: Seite 83-92]

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

Effects of changes in external conditios on smoldering in biomass pellets

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (IX, 114, v Seiten, 12,6 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 111-114][Literaturverzeichnis: Seite 111-114]

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

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

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (XIV, 176 Seiten, 46,75 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 161-172][Literaturverzeichnis: Seite 161-172]

Pralow, Alexander; Reichl, Udo [AkademischeR BetreuerIn]

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

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (XV, 145 Seiten, 7,1 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 96-109][Literaturverzeichnis: Seite 96-109]

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

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

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (xvi, 263 Seiten, 4,92 MB) ;
[Literaturverzeichnis: 217-238][Literaturverzeichnis: 217-238]

Schmalfuß, Silvio; Sommerfeld, Martin [AkademischeR BetreuerIn]

Transportvorgänge in Fluidphasenresonanzmischern

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2023, 1 Online-Ressource (xvii, 135 Seiten, 50,85 MB) ;
[Literaturverzeichnis: Seite 121-132][Literaturverzeichnis: Seite 121-132]

Triemer, Susann; Lorenz, Heike [AkademischeR BetreuerIn]

Reactive transformation of extraction byproducts - enhanced production of the animalarial artemisinin

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