

Teilprojekte im SFB/Transregio 63

A Chemisch-physikalische Grundlagen

- A1 Übergangsmetallkatalysierte Hydroformylierung und Hydroesterifizierung petro- und oleochemischer Edukte mit temperaturgesteuerter Katalysatorabtrennung in Gas/flüssig/flüssig-Systemen
- A2 Katalytische Veredelung von langkettigen Olefinen durch Hydroformylierung und Hydroesterifizierung in tensid-modifizierten Mehrphasensystemen
- A3 Mechanistische und kinetische Untersuchungen zur Isomerisierung, Hydroformylierung und Hydroesterifizierung petro- und oleochemischer Edukte in flüssigen Mehrphasensystemen
- A4 Reaktionskinetiken und Phasengleichgewichte in komplexen Gemischen
- A6 Stofftransport und Grenzflächenphänomene in mizellaren dreiphasigen Systemen und Pickering Emulsionen
- A8 Thermodynamik der Kristallisation und der Adsorption von linearen und verzweigten Molekülen

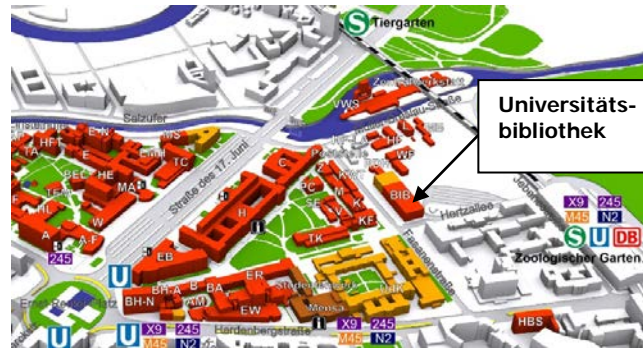
B Prozesstechnik

- B1 Optimale Reaktionsführung in flüssigen Mehrphasensystemen
- B4 Hydroformylierung petro- und oleochemischer Edukte in mizellaren Lösungsmittelsystemen (MLS) mit hocheffizienter Katalysatorrückführung in einer kontinuierlich betriebenen Miniplant
- B5 Kontinuierliche Hydroformylierung und Hydroesterifizierung petro- und oleochemischer Edukte in thermomorphen Lösungsmittelsystemen (TMS) mit hocheffizienter Katalysatorrückführung in einer kontinuierlich betriebenen Miniplant
- B6 Pickering-Emulsionen zum Formulieren und Trennen zweier nicht-mischbarer Systeme für den Rückhalt des Katalysators
- B8 Dispersion und Koaleszenz in gerührten mizellaren Dreiphasensystemen

C Systemtechnik

- C1 Modellgestützte Steuerung der Entwicklung neuartiger chemischer Produktionsprozesse
- C3 Globale Optimierung von integrierten flüssigen Mehrphasensystemen
- C4 Prozessführung der Miniplants

Wegbeschreibung



Universitätsbibliothek
Fasanenstraße 88
10623 Berlin

Haltestellen

Tiergarten
S-Bahn: S5, S7, S75

Ernst-Reuter-Platz
U-Bahn: U2 / Bus: 245, X9, M45

Zoologischer Garten
DB / S Bahn: S5, S7, S75 / Bus: 245, X9, M45

Sonderforschungsbereich/Transregio 63

Sprecher: Prof. Dr.-Ing. Matthias Kraume

Geschäftsführung: Dr. Martin Uhlig
FH 6-2, Fraunhoferstr. 33-36

D-10587 Berlin

Tel./Fax: 030/314-23407/21134

office@inprompt.tu-berlin.de



Integrierte chemische Prozesse in
flüssigen Mehrphasensystemen
- InPROMPT -

6. Kolloquium

Dr. Christian Kahle
29. Juni 2017, 15:00 h

Technische Universität Berlin
Fachgebiet Dynamik und Betrieb
technischer Anlagen

Veranstaltungsort: Universitätsbibliothek,
Hörsaal BIB 014

InPrompt

Der SFB/TR 63 befasst sich mit der Entwicklung von effizienten Produktionsverfahren auf Basis von chemischen Reaktionen, die in flüssigen Mehrphasensystemen durchgeführt werden. Für diese Verfahrensentwicklung werden eine Bottom-up-Vorgehensweise, die von der Reaktion ausgehend in den Gesamtprozess mündet, und ein Top-down-Lösungsansatz, der basierend auf möglichen Prozessvarianten Anforderungen an einzelne Prozessschritte formuliert, miteinander kombiniert und umgesetzt. In der Konsequenz wird nicht allein der Reaktionsschritt, sondern - im Sinne einer ganzheitlichen schnellen Verfahrensentwicklung - der gesamte Prozess vom Rohstoff bis zum Reinprodukt behandelt. Mit Blick auf diese integrierte Prozessbetrachtung werden neue Methoden zur zielgerichteten Ermittlung der kinetischen und thermodynamischen Grunddaten, zur optimalen Gestaltung der verfahrenstechnischen Grundoperationen für Reaktion und Stofftrennung sowie zur beschleunigten Prozessentwicklung und -optimierung erarbeitet. Mittels der entwickelten Methoden und Werkzeuge verfolgt der SFB/TR 63 das Ziel, das Tor für die technische Realisierung einer neuen Klasse chemischer Produktionsprozesse zu öffnen. Die oben genannten methodischen Forschungsarbeiten erfolgen am Beispiel der Hydroformylierung langkettiger Olefine unter Nutzung von thermomorphen oder mizellaren Lösungsmittelsystemen. Der SFB/TR 63 gliedert sich in drei Projektbereiche, zu deren Bearbeitung experimentelle und theoretische Methoden aus den Fachdisziplinen Technische Chemie, Thermodynamik, Verfahrenstechnik und Systemtechnik eingesetzt und weiterentwickelt werden. Im Projektbereich A werden anhand repräsentativer Stoffsysteme die chemisch-physikalischen Grundphänomene untersucht. Darauf aufbauend werden im Projektbereich B einzelne Prozessschritte sowie Teilsequenzen für chemische Umsetzungen und Stofftrennungen erforscht. Diese werden im Projektbereich C in Interaktion mit den Projektbereichen A und B auf optimale Weise zu effizienten Gesamtprozessen vernetzt.

6. Kolloquium

Dr. Christian Kahle

Technische Universität München,
Zentrum Mathematik,
Lehrstuhl für Optimalsteuerung

Vortrag mit nachfolgender Diskussion zum
Thema:

**Simulation of two-phase flow using the
diffuse-interface approach**

Abstract siehe Anhang

Donnerstag, 29.06.2017

15:00 h

im

**Hörsaal BIB 014,
Universitätsbibliothek,
Fasanenstraße 88,
10623 Berlin**

Technische Universität Berlin
Fachgebiet Dynamik und Betrieb technischer
Anlagen

Simulation of two-phase flow using the diffuse-interface approach

Christian Kahle

The simulation of multiphase fluids has attained growing interest in the last decades. While for one phase flow with the Navier-Stokes system the basic model is well understood, for multiphase system additional challenges arise by the necessity to track the distribution of the different phases inside the spatial domain. This distribution is defined by the transition zones between different fluid components, that we call interfaces.

Methods to track these zones split in two general concepts. On the one hand, there are concepts, that represent the interface as a lower dimensional manifold. These methods are thus called 'sharp interface' approaches, since the fluids are sharply separated by the interface and material properties like density and viscosity jump across the interface. The resulting model consist of a Navier-Stokes system with additional evolution laws for the motion of the interfaces. Unfortunately these methods are by construction not able to deal with topology changes, like droplet collision in a natural and thermodynamical consistent way.

On the other hand, 'diffuse interface' models represent the interface by a transition zone of positive thickness proportional to some small positive constant. Inside this interface both fluids are present and coexist in a mixed state. They introduce a smooth (vector-valued) indicator function to represent the distribution of fluids and solve an additional evolution equation for this indicator function. Since this indicator function is not aware of any interface, there is no need for a special treatment of topology changes. A further advantage of this approach is the possibility to apply well established techniques from the field of finite elements, like a-posteriori error estimation techniques to develop optimized spatial grids for the numerical treatment.

In this talk a diffuse interface model is presented that is consistent with thermodynamics. We introduce a discretization scheme for the numerical approximation of the model and show that it is able to preserve the thermodynamical consistency. An outlook on extensions of the proposed model is provided.