



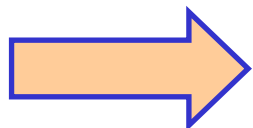
*Institut für Chemische Verfahrenstechnik
Institut für Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik*

Anwendungsfächer in Technischer Kybernetik:
Chemische und Thermische Verfahrenstechnik

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nieten



- **Thermodynamik**
- **Fluidmechanik**
- **Beschreibung chemischer Reaktionen**
- **Beschreibung biologischer Systeme**
- ...

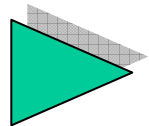


Beschreibung verfahrenstechnischer Prozesse

Pflichtfach SS 2009:

Modellierung verfahrenstechnischer Prozesse

bisher: Dynamik verfahrenstechnischer Systeme

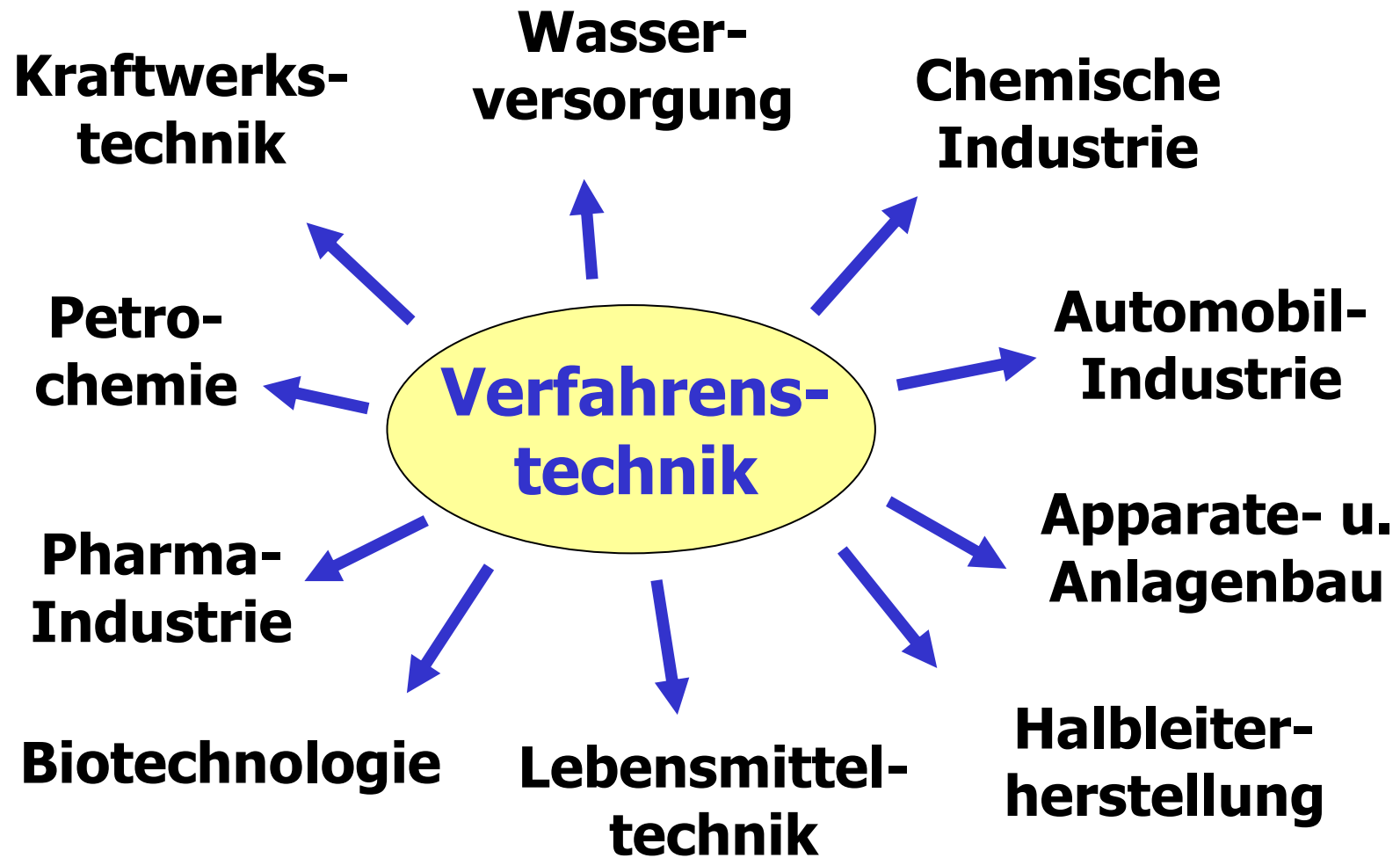


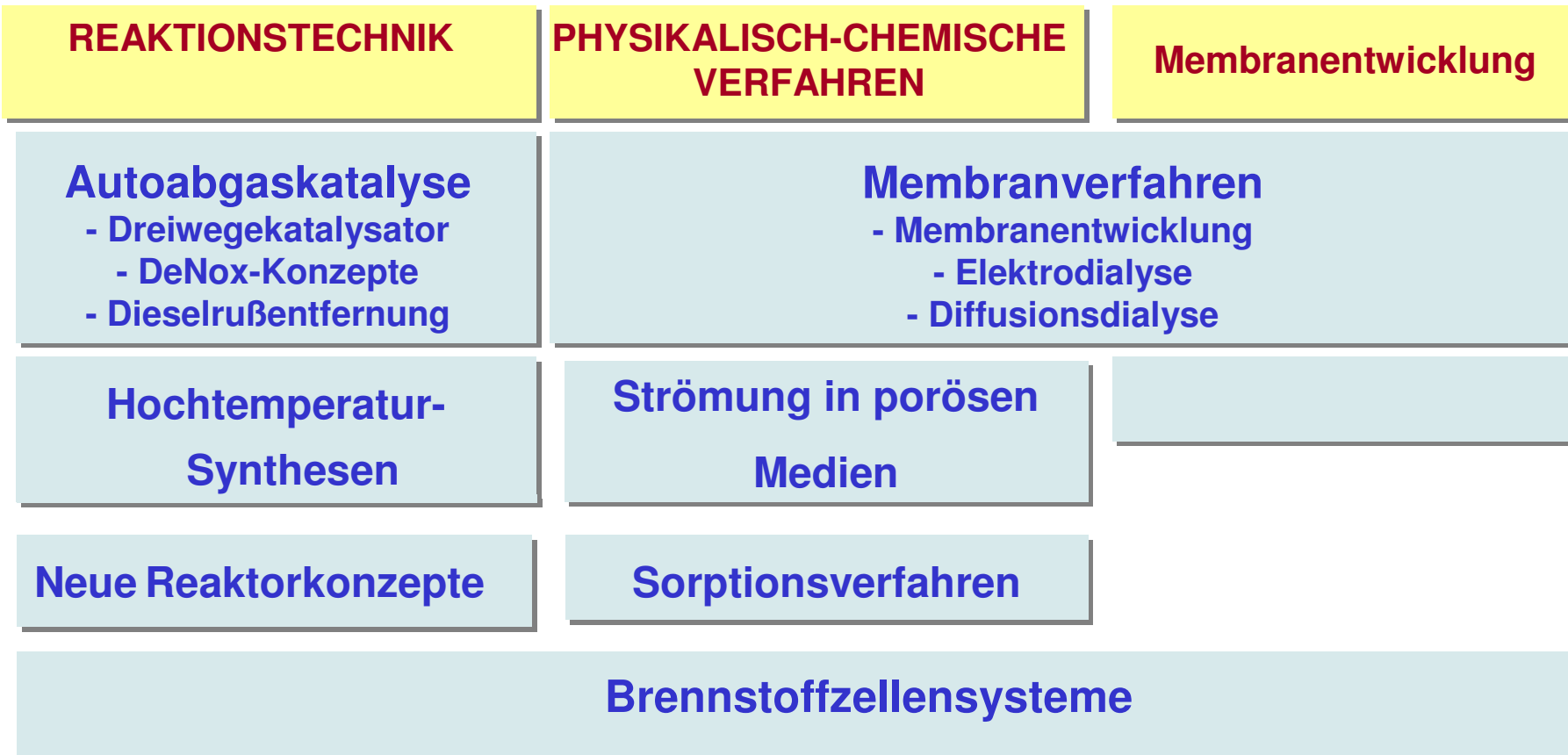
konsistente Modelle für **Kontinua**

- Gesamtmassenbilanz
- Massenbilanzen der Komponenten
- Energiebilanz
- Impulsbilanz
-

+ konstitutive Gleichungen, Quellen und Senken

Thermodynamik von Gemischen





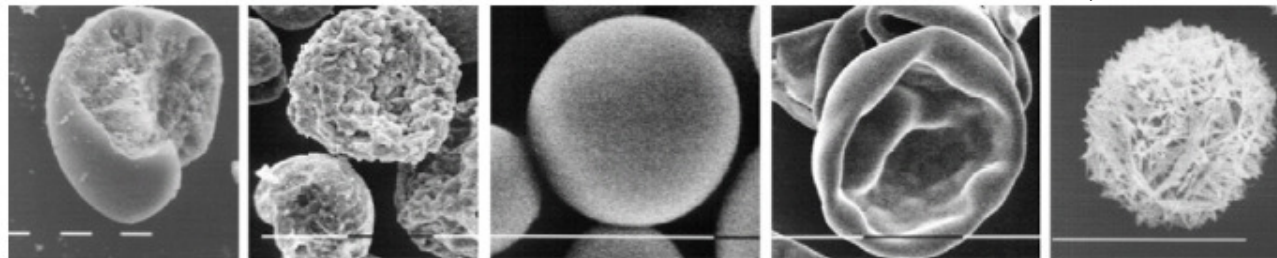
MODELLBILDUNG UND RECHNERSIMULATION

KINETIK VON TRANSPORT- UND REAKTIONSPROZESSEN

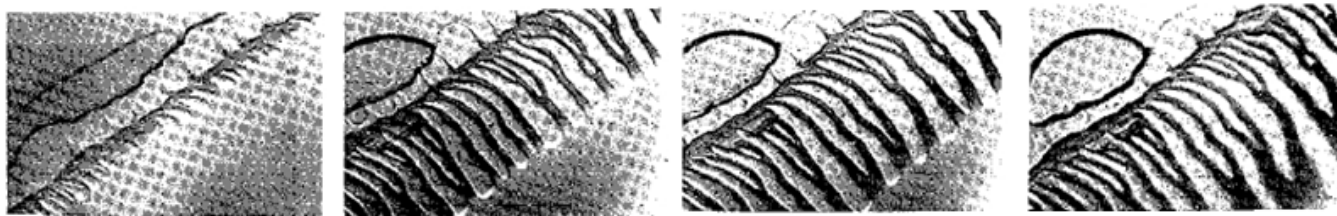
Arbeitsbereich: Modellbildung und Simulation von Strukturbildungsprozessen mittels gitterfreier Verfahren

Struktur ist entscheidende Eigenschaft:

Sprühpolymerisation:



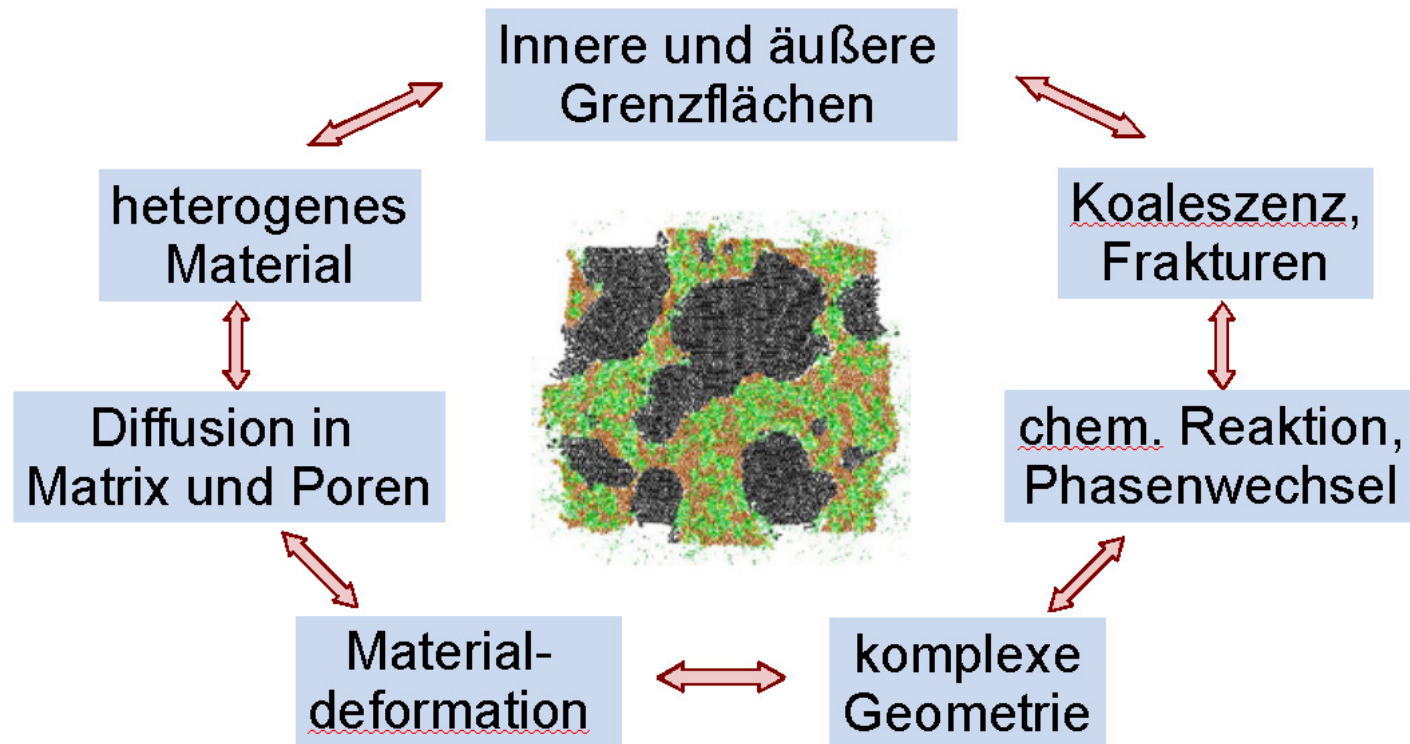
Membranherstellung (Fällungsmembran):



- ➡ Herstellungsprozess nach experimentellen Erfahrungswerten
- ➡ Modellbasierte Vorhersage der Struktureigenschaften

Modellierung Strukturbildungsprozess:

Berücksichtigung vielfältiger, gekoppelter Prozesse

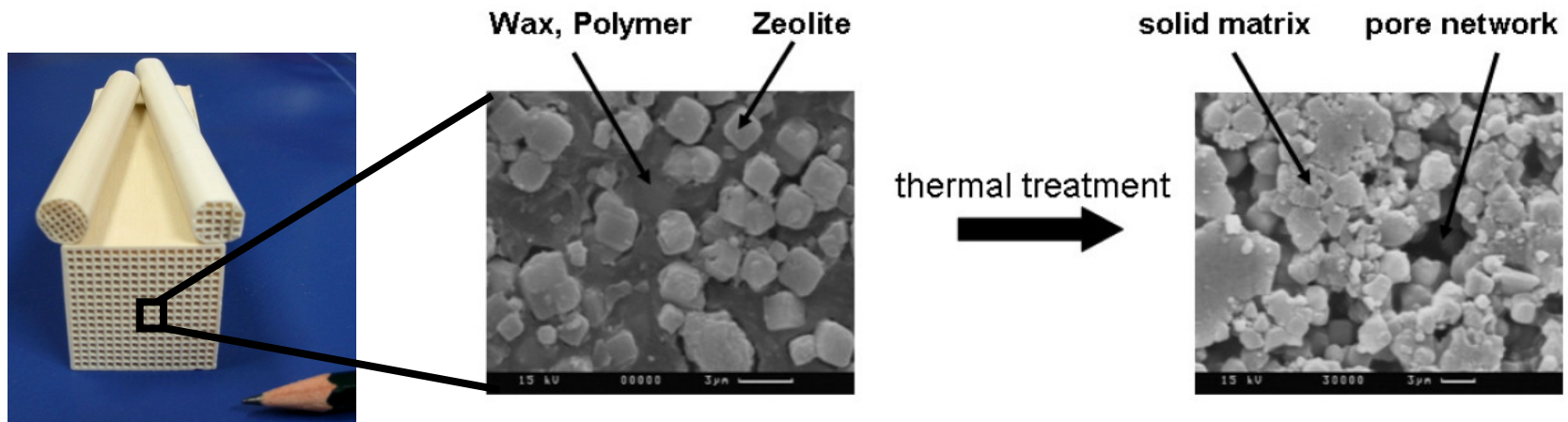


Beschreibung mittels gitterbasierten Verfahren sehr aufwändig

➔ **Gitterfeie Methoden**

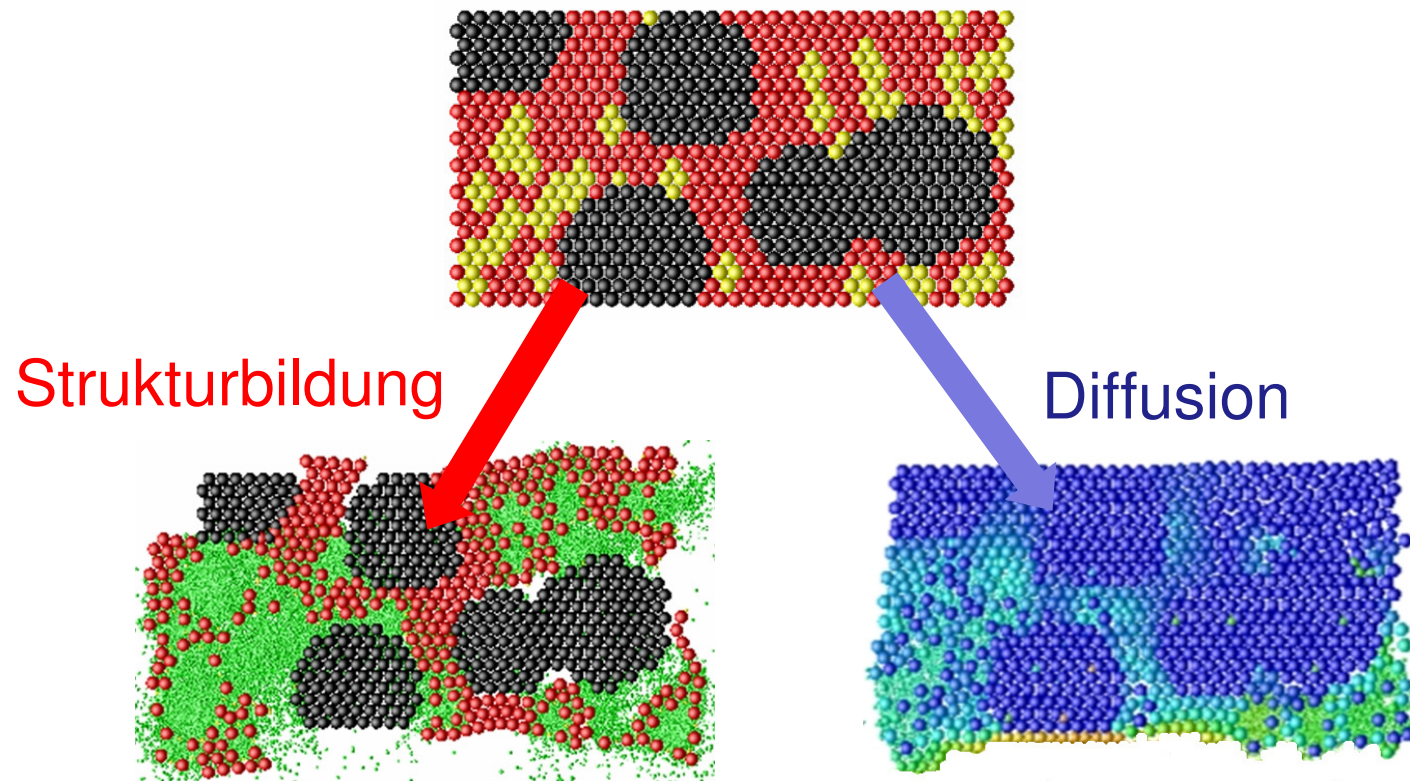
Illustratives Beispiel einer Strukturbildung:

Poröse Funktionsmaterialien (Polymer-Zeolith-Compound):



Illustratives Beispiel einer Strukturbildung:

Poröse Funktionsmaterialien (Polymer-Zeolith-Compound):



➔ **Quantitative Vorhersage der resultierenden Struktur**



ITT:

- Thermodynamik der Gemische (ITT, 2V, 1Ü, WS)
- Thermische Verfahrenstechnik (ITT, 4V, 2Ü, SS)
- weitere Vorlesungen...

ICVT:

- Chemische Reaktionstechnik I (Nieken, 3V, 1Ü, WS)
- Chemische Reaktionstechnik II (Nieken, 3V, 1Ü, SS)
- Membrantechnik und Elektromembran-Anwendungen (ICVT, SS)
- Polymer-Reaktionstechnik (ICVT, SS)

Was können sie bei uns lernen ?

- **Entwicklung technischer Verfahren**
Reaktions-, Adsorptions- und Membranverfahren
- **Modellerstellung und Simulationstechniken**
 - speziellen Programmcodes
 - kommerziellen Programmen
- **Beurteilungskompetenz für mathematische Modelle**
- experimentelles Arbeiten an Prototypreaktoren
- Vergleich von Simulation und Experiment
- interdisziplinäres Arbeiten an Problemlösungen

Chemische Reaktionstechnik I Stöchiometrie, Thermodynamik, Kinetik;
Idealisierte Reaktormodelle (Rührkessel-, Rohrreaktoren, Festbettreaktoren);
Bilanzierung und Auslegung von Reaktionsanlagen

Chemische Reaktionstechnik II Modellierung von mehrphasigen Reaktionssystemen;
Heterogen-katalysierte Gasphasenreaktionen: Einzelkornmodellierung,
Reaktormodellierung, neuartige Reaktorkonzepte;
Gas-Flüssig-Reaktionen: Stofftransportmodellierung

Membrantechnik & Elektromembranverfahren Grundlagen zu Membrantechnik und
Elektrochemie; Transport, Modellierung, Polymermembranen; Gastrennung,
Pervaporation, Modellierung, Batterien, Brennstoffzellen, elektrochemische
Trennverfahren, Materialien

Polymer-Reaktionstechnik Reaktionstechnik verschiedener Polymerisationstypen,
Charakterisierung Polymere (rechnerisch und experimentell), Markov-Ketten,
Modellierung von Polymerisationsreaktionen (Monte Carlo Simulationen)