

Erstellung eines chemometrischen Modells in einem kontinuierlichen Reaktor unter realen Betriebsbedingungen

Typ: Forschungspraktikum
Schwerpunkt: Spektroskopie
Datum: ab August 2019

Prof. Dr. Marcel A. Liauw

Lehr- und Forschungsgebiet Technische
Chemie

Betreuerin: Diana Trunina

42 B 340
Worringerweg 2
52074 Aachen
GERMANY
Telefon: +49 241 80-24793
Fax: +49 241 80-22177

Trunina@itmc.rwth-aachen.de

In der Regel ist eine Optimierung in vielen Hinsichten attraktiv und kann in allen erdenklichen Bereichen eingesetzt werden. In der Chemie spielen die Prozessparameteroptimierung, sowie die Optimierung des Reaktor-Designs und noch anderer Aspekte besonders wichtige Rollen. Die Art wie eine Optimierung durchgeführt wird ist ebenfalls wichtig. Eine systematische Optimierung kann in vielen Fällen wichtige Erkenntnisse über das untersuchte System liefern und weiterhin kann dadurch der experimentelle Aufwand und damit die Kosten gesenkt werden. Der Zeitfaktor kann ebenfalls durch Automatisierung verringert werden, in dem eine Optimierung autonom abläuft. Hinter den Optimierungen stecken verschiedene Optimierungsalgorithmen. Die Algorithmenauswahl hängt von der Zielfunktion, sowie den Prozessbedingungen ab. Zum Validieren verschiedener Algorithmen werden Modellreaktionen benötigt, die unterschiedlichen Prozessbedingungen ausgesetzt werden können. Eine Voraussetzung für eine Selbstoptimierung ist, dass die Modellreaktion zu jedem Zeitpunkt überwacht werden kann, ohne den Prozess zu unterbrechen.

In dieser Arbeit soll für eine gegebene Nitroaldolkondensation ein chemometrisches Modell erstellt und kalibriert werden. Die Nitroaldolkondensation verläuft in einem kontinuierlichen Reaktor, der mit einer ATR-Sonde am Ende des Reaktors ausgestattet ist. Der Einbau der ATR-Sonde erlaubt den Erhalt kontinuierlicher Ergebnisse, die aus variierenden Prozessbedingungen resultieren. Bei der Erstellung und Kalibrierung des Modells müssen somit mehrere Prozessparameter, sowie einige Erkenntnisse bezüglich der Reaktion berücksichtigt werden. Das Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines chemometrischen Modells unter prozessechten und -relevanten Bedingungen, im Sinne eines Parameternetzwerks.

Was bietet dir die Arbeit:

- Neues Wissen im Bereich der *Inline*-Spektroskopie (UV) im kontinuierlichen Prozess
- Neues Wissen im Bereich kontinuierlicher Synthese/kontinuierlicher Reaktoren
- Systematische Modellentwicklung unter Berücksichtigung der Effekte realer Betriebsbedingungen

Was solltest du mitbringen:

- Spaß an praktischer Laborarbeit und Motivation an Entwicklung neuer Modelle
- Hohes Maß an Selbstständigkeit und Pflichtbewusstsein

Der Umfang kann je nach Form der Arbeit angepasst werden.