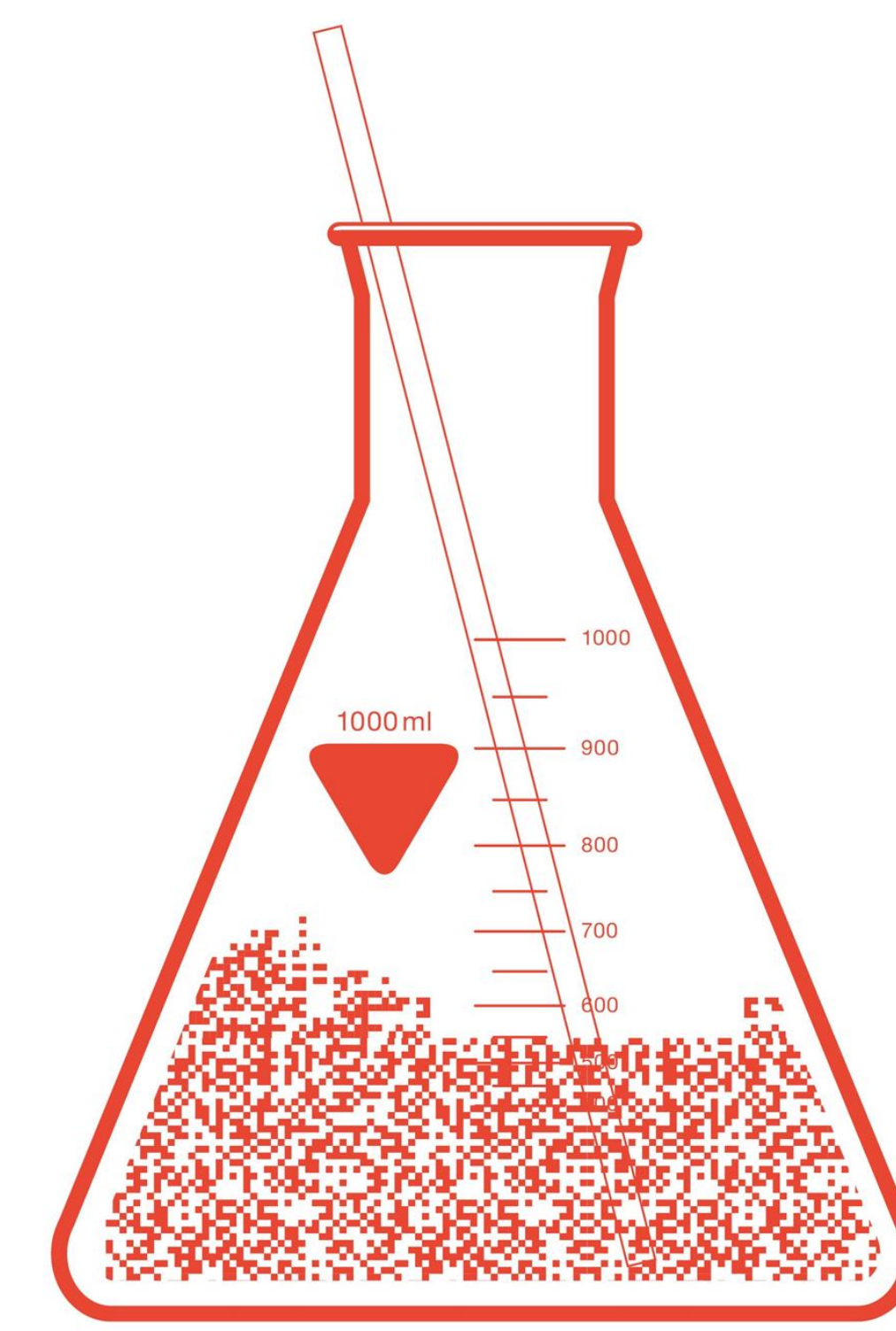


Modellbasierter Digital Twin zur Schulung von Produktionsmitarbeitenden

Luca Mischa Moschen

Bachelor-Thesis, Studienrichtung Chemie



Betreuer HLS, Dr. Andreas Zogg
Experte: Sebastian Hoffmann, Dottikon Exclusive Synthesis AG
Betreuer Projektpartner: Dr. Alois Boog, Dottikon Exclusive Synthesis AG

Ausgangslage

- Untersuchte Reaktion: Nitrierung einer organischen Verbindung in einem Semi-Batch-Prozess.
- Die thermische Akkumulation führt zu regelmässiger Überschreitung des registrierten Temperaturbereichs.

Ziele

- Die Betriebsmitarbeitenden sollen über ein Simulink-Tool geschult werden können.
- Zur Erstellung des Tools müssen folgende Modelle erstellt werden:
 - Reaktionsmodell (Thermodynamik und Kinetik)
 - Heiz/Kühl-System Modell
 - Wärmetransport im Betriebsreaktor

Vereinfachte Annahmen zur Erstellung des Modells

- Zweiphasiges Reaktionsgemisch: Stofftransport, Dispersion → Annahme: homogenes Reaktionsgemisch
- Die Zersetzung bezüglich der Sicherheit im Betrieb wird nicht betrachtet.
- Die Akkumulation der Reagenzien wird oberflächlich betrachtet.

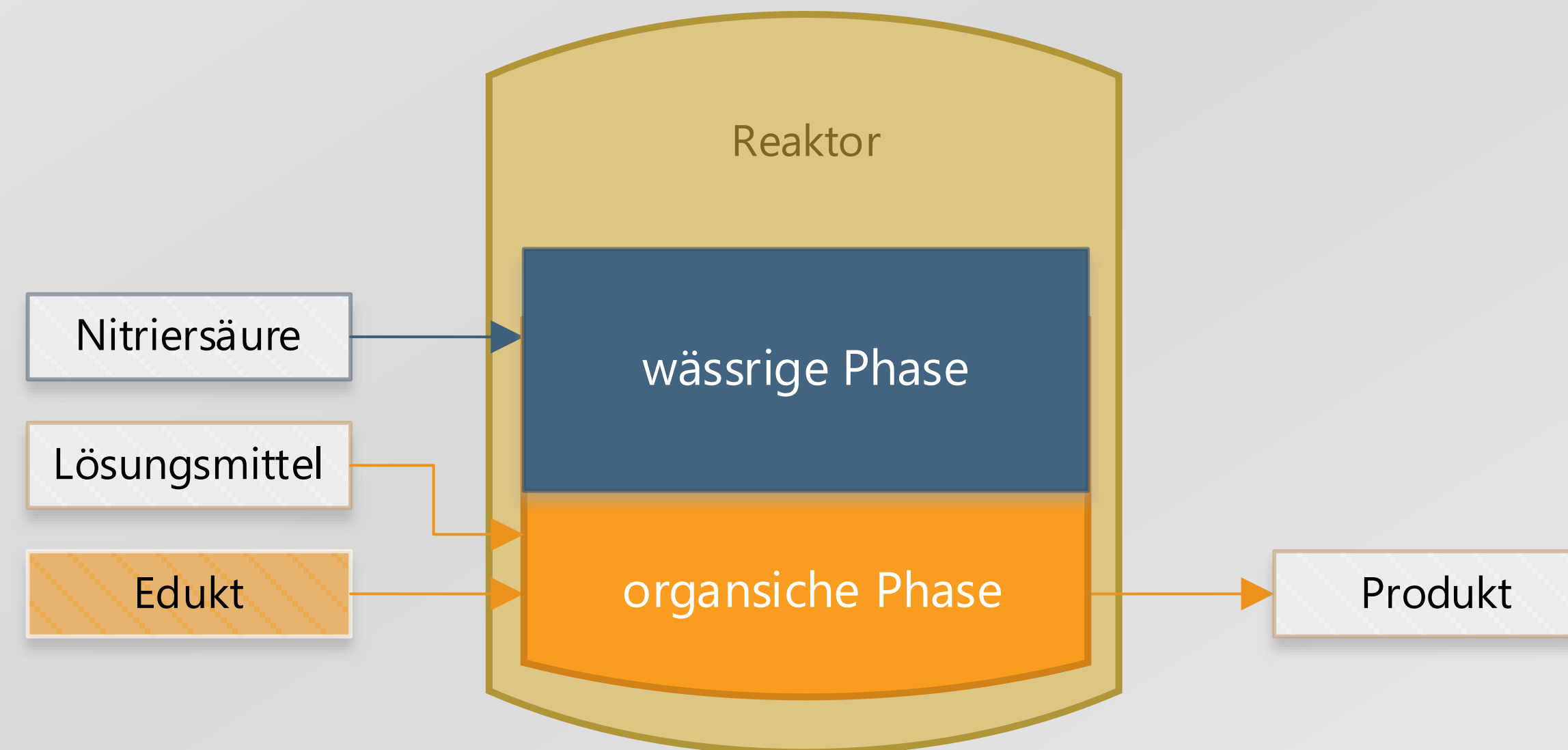
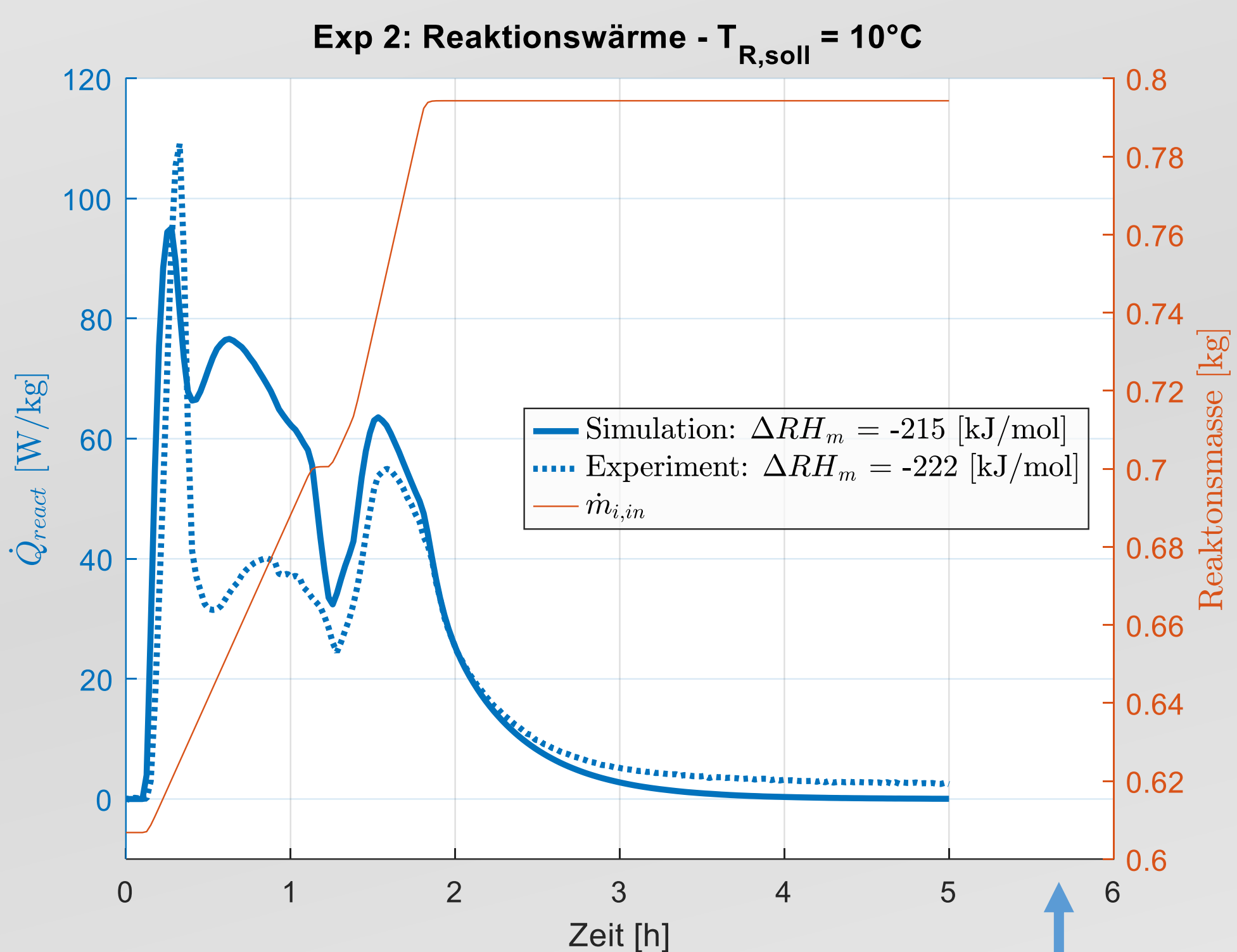


Abbildung Reaktor: Zusammensetzung der beiden Phasen.

Experimenteller Teil

- Es wurden Reaktionskalorimetrie-Experimente im Sicherheitslabor durchgeführt.
- Überwachung des Reaktionsverlaufs mittels ¹H-NMR
- Quantifizierung des ausreagierten Reaktionsgemisches mittels ¹H-qNMR

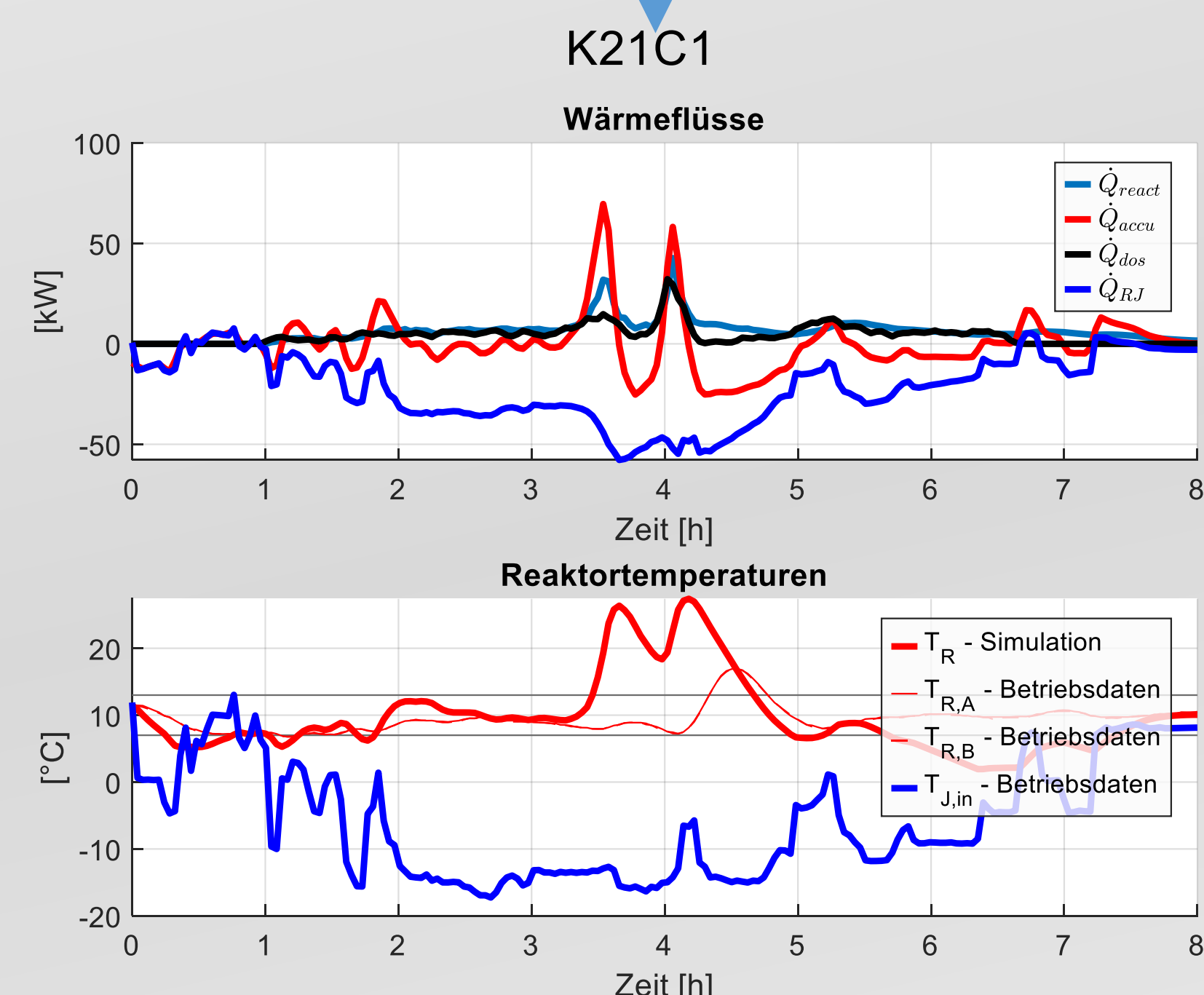
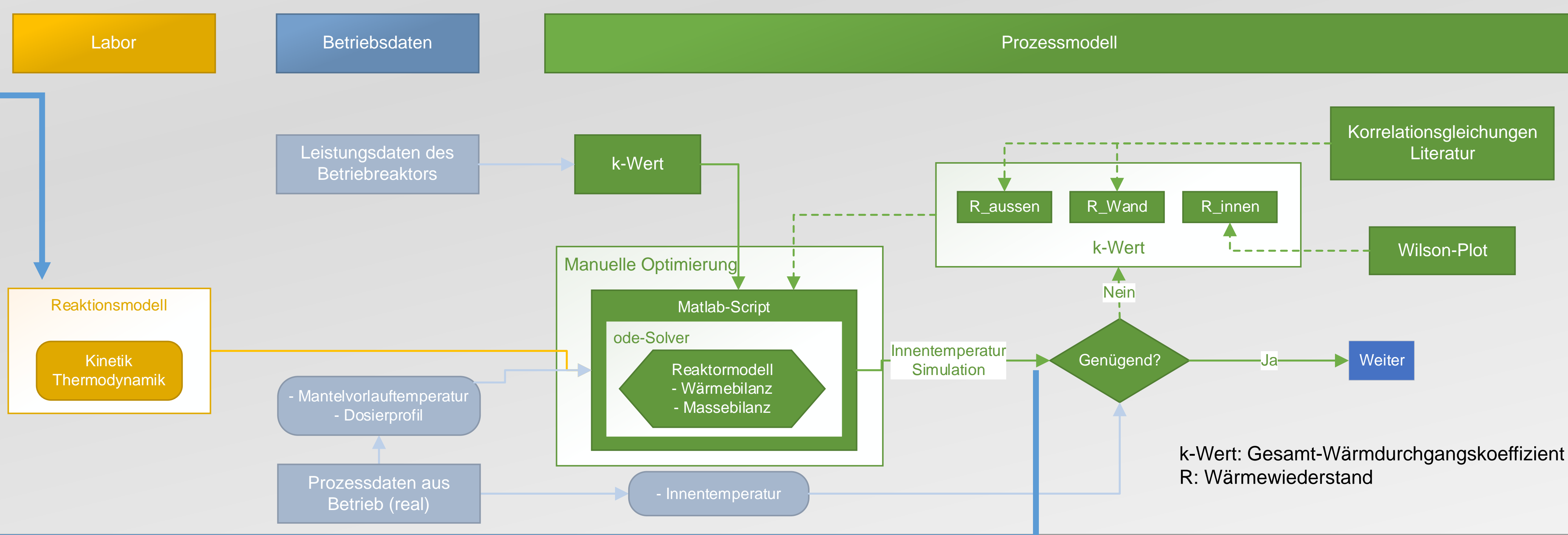


Reaktionsmodell

- Das Modell wurde in MATLAB aus den Reaktionskalorimetrie-Experimenten aus dem Sicherheitslabor erstellt.
- Manuelles Anpassen der kinetischen Parameter bis die Reaktionswärmeflusskurven möglichst gut übereinstimmen.
- Als Zweites wurde auch der Gehalt des Produkts in der Reaktionslösung an die NMR-Daten angepasst.
- Die Reaktion verläuft nicht mit vollständigem Umsatz. Deshalb wurde ein chemisches Gleichgewicht eingebaut.
- Die Aktivierungsenergie wurde geschätzt.

Prozessmodell

- Aus der angepassten Reaktionskinetik wurde das Prozessmodell erstellt.
- MATLAB löst die „ordinary differential equations“ mit einem Solver.
- Der Wärmeübergang (k-Wert) wurde manuell angepasst. Eine erste Annäherung ermöglichten Leistungstests des Reaktors mit Wasser.
- Es wurde eine Massen- und Wärmebilanz integriert, um die Innentemperatur zu berechnen.
- Das Prozessmodell wurde mit Betriebsdaten validiert.



Schlussfolgerung

- Das Prozessmodell kann den Betrieb nicht genügend gut abbilden, um ein verlässliches Schulungstool zu erstellen.
- Die Reaktion hat sich als deutlich komplexer herausgestellt als dies angenommen wurde.
- Die Vereinfachung eines homogenen Gemisches eignet sich nicht.
- Es wird vermutet, dass sich die Löslichkeit der einzelnen Reagenzien während der Reaktion verändert.
- Das Labor kann die Reaktion im Betrieb zu wenig gut abbilden.

Ausblick

- Das Labor muss den Betrieb besser abbilden können.
- Erhöhung der Reaktionstemperatur im Betrieb → weniger Akkumulation
- qNMR könnte als Ergänzung zur Gehaltsbestimmung im Betrieb eingesetzt werden.