

Abstract zur Arbeit "Einsatz von Metamodellen chemischer Reaktoren für die Prozessentwicklung":

Die Verlässlichkeit von Prozessmodellen ist grundlegend abhängig von der Datenbasis zur Reaktion bzw. dem Stoffsystem allgemein und zu den Prozesseinheiten im Einzelnen. Großen Einfluss hat dabei die Modellierung des Reaktionsschrittes, da die Zusammensetzung des Reaktionsgemisches grundlegend bestimmt, ob und welche Trennoperationen vorteilhaft sind. Fehler in der Reaktormodellierung können somit unter Umständen zu ungünstigen Entscheidungen in der Produktaufreinigung führen. Um dies zu verhindern, kommen komplexe Modelle zur korrekten Darstellung des Reaktions- und Phasenverhaltens im Reaktor zum Einsatz, deren Erstellung jedoch zeitaufwendig ist. Da es im wirtschaftlichen Interesse liegt, die Prozessentwicklungszeit so kurz wie möglich zu gestalten, muss also ein Kompromiss zwischen Genauigkeit und Zeitaufwand getroffen werden.

Ziel dieser Arbeit war es, mögliche Strategien zur hinreichend genauen Modellierung des Reaktionsschrittes mit möglichst wenigen Experimenten ausfindig zu machen. Als Werkzeuge wurden Kriging-basierte Metamodellansätze zur Darstellung des Reaktionsverhaltens der Hydroformylierung von n-Dodecen zu n-Tridecanal in einem thermomorphen Lösungsmittelsystem verwendet. Durch das mehrkomponentige Lösungsmittelsystem ist die Reaktionskinetik maßgeblich beeinflusst durch die Gaslöslichkeiten der Synthesegaskomponenten im Reaktionsgemisch. Somit wurden in dieser Arbeit geeignete Metamodellierungsmethoden zur Darstellung sowohl der Kinetik als auch des Phasenverhaltens der Reaktion gesucht.