

Masterarbeit

„Modellierung thermischer Durchgehreaktionen für verschiedene Reaktorbetriebsweisen anhand eines ausgewählten Prozesses“ (RunawayMod)

Projektpartner: Bayer

Hintergrund

Im Zuge der Digitalisierung ergeben sich vollkommen neue Möglichkeiten Sicherheitseinrichtungen zu realisieren. In Zukunft werden Überdruckschutzsysteme nicht mehr statisch, sondern dynamisch auf den Prozess reagieren. Diese neuen intelligenten Safety 4.0-Konzepte besitzen ein großes wirtschaftliches Potential, weil Anlagen nah an ihrer mechanischen Belastungsgrenze betrieben werden können. Für die dynamische Anpassung der Sicherheitseinrichtung an den Prozess werden Modelle benötigt, die das Reaktorverhalten genau beschreiben. Zusätzlich müssen mögliche Gefahrensituationen, wie Kühlsystem- und Rührerausfall mit dem Modell beschreibbar sein. Die daraus ermittelten Druck- und Temperaturverläufe sowie weitere Prozessparameter dienen als Grundlage zur Bewertung des thermischen Durchgehpotentials der chemischen Reaktion. Abhängig von diesem Durchgehpotential reagiert die intelligente Sicherheitseinrichtung adaptiv, um so ein kritisches Ereignis zu verhindern.

Aufgabe

Im Rahmen dieser Arbeit soll anhand eines Musterprozesses ein Reaktormodell für Batch, Fed-Batch und kontinuierliche betriebsweise erstellt werden. Dazu muss eine geeignete Reaktionskinetik numerisch mit Hilfe einer Stoff- und Energiebilanz für den Reaktor simultan gelöst werden. In einem weiteren Schritt wird das Verhalten des Reaktormodells untersucht und dokumentiert. Mögliche Gefahrensituationen müssen in der Modellsimulation abgebildet werden. Anhand einer Sensitivitätsanalyse sollen kritische Modellparameter, die das System maßgeblich beeinflussen, ermittelt werden. Zum Schluss sollen Kennziffern bzw. Prozessparametermuster für das thermische Durchgehpotentials definiert werden.

Vorgehen (Kurzfassung):

1. Literaturrecherche zu Durchgehreaktion und Reaktormodellierung
2. Erstellung von Reaktormodellen für verschiedene Reaktorbetriebsweisen anhand eines Prozesses

- a. Homogene Reaktion (optional heterogen)
 - b. Miteinbeziehung der Viskositätsfunktion
 - c. Berechnung der Druck und Temperaturverläufe, Umsätze, Enthalpie
3. Sensitivitätsanalyse der Modelle
 4. Modellsimulation mit Untersuchung verschiedener Gefahrensituationen.
 5. Definieren von Kennziffern für das thermische Durchgehen

Die Ergebnisse sind geeignet darzustellen und ausführlich zu dokumentieren. Bei der Ausführung der Arbeit ist das Merkblatt „Grundzüge wissenschaftlichen Arbeitens“ zu beachten.

Beginn der Arbeit: 2017
 Aufgabensteller: Prof. Dr. Jürgen Schmidt, CSE-Institut
 Betreuer: Dipl.-Ing. Fabian Görlich

Ereignisse | Relevanz des Themas

Ereignis:
 19. Dezember 2007
 Jacksonville Florida
 Thermische Durchgehreaktion
 von (Methylcyclopentadienyl)-
 mangantricarbonyl
 (4 Tote / 14 Verletzte)



Beispiel: Kopplung eines Reaktors mit einem intelligenten Sicherheitsventil mit Hilfe einer sicherheitsgerichteten, speicherprogrammbaren Steuerung (sSPS)

