Kémiai reakciók spektroszkópiai módszerrel történő nyomon követésének és kemometriai alapú szabályozásának fejlesztése

Development of Spectroscopic Monitoring and Chemometrics-Based Control of Chemical Reactions

FENT Máté

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3,
(06 1) 463 1111

ABSTRACT

Real-time spectroscopic monitoring combines in-line spectral acquisition with chemometric evaluation to provide continuous information about the state of a chemical process. Building on this information, process control can be implemented which can make appropriate interventions into the reaction. In this work, the approach was investigated using two model reactions. In one model reaction a state-dependent control strategy was developed by combining Raman and infrared spectroscopy. Since the reliability and information content of the two techniques can change during a reaction, the spectroscopic information used for control is selected according to the actual process state automatically by a PLC. In the second model reaction, in-process control (IPC) development were conducted for the real-time chemometric evaluation of continuously recorded spectra. Chemometrics-based evaluation was used to follow relative changes in the main reaction components and to provide continuously updated information about the process state. These developments contribute to more robust real-time reaction monitoring and control.

Keywords: PAT, Spectroscopy, chemometrics, state-dependent control, IPC

ÖSSZEFOGLALÓ

A valós idejű spektroszkópiai nyomon követés az in-line spektrumfelvételt és a kemometriai kiértékelést kapcsolja össze annak érdekében, hogy folyamatos információt szolgáltasson egy kémiai folyamat állapotáról. Erre az információra építve olyan folyamatszabályozás valósítható meg, amely beavatkozásokat tesz lehetővé a reakcióban. Munkám során ezt a megközelítést két modellreakción vizsgáltam. Az egyik modellreakció esetében Raman- és IR-spektroszkópia kombinálásával állapotfüggő szabályozási stratégiát dolgoztam ki. Mivel a két módszer megbízhatósága és információtartalma a reakció során változhat, a szabályozáshoz felhasznált spektroszkópiai adatokat egy PLC automatikusan választja ki az aktuális állapot alapján. A második modellreakció esetében in-process control (IPC) módszert fejlesztettem a folyamatosan rögzített spektrumok valós idejű kemometriai kiértékelésére. A kemometriai kiértékelést a fő reakciókomponensek relatív változásainak követésére és a rendszer állapotáról folyamatosan frissülő információ biztosítására alkalmaztam. Ezek a fejlesztések hozzájárulnak a robusztusabb valós idejű reakciókövetéshez és szabályozáshoz.

Kulcsszavak: PAT, Spektroszkópia, kemometria, állapotfüggő szabályozás, IPC