

Propionsav katalitikus szintézisének kinetikai modellezése és modell bázisú optimalizációja

Kinetic modelling and model-based optimization of propionic acid synthesis

BALOGH László^{1,*}, SZILÁGYI Botond²,
BÓDIS Jenő³, BÁRKÁNYI Ágnes¹, EGEDY Attila¹

¹ Department of Process Engineering, Faculty of Engineering,
University of Pannonia, Egyetem u.10, 8200, Veszprém, Hungary

² Department of Chemical and Environmental Process Engineering,
Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest

University of Technology and Economics, Műegyetem rkp. 3., H-1111 Budapest, Hungary

³ Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, Raluca Ripan
Institute for Research in Chemistry,

Babes-Bolyai University, Mihail Kogalniceanu 1, 400084 Cluj-Napoca, Romania

*Elérhetőség: balogh.laszlo@mk-uni.pannon.hu

ABSTRACT

Current research points in the direction in which heterogeneous catalytic processes come to the fore, which are easy to handle in contrast to their homogeneous counterparts. In case of the heterogeneous catalysts the reaction is easy to control and optimize. One of these researches is the propionic acid synthesis development. In this work we deal with the carbon monoxide, water and ethylene based catalytic propionic acid synthesis, where the catalyst is rhodium-iodine-carbonyl complex what is fixed to the carrier. The process was investigated in packed tube reactor. The measurements on the tubular reactor were carried out at several working points from which the stationary behavior can be recognized. During the tests the pressure, the temperature, the mole flow of the ethyl iodide and the mole ratio of the starting material were the investigated variables. Using the measuring points the reaction literary reaction mechanism can be identification and with the used Eley-Rideal type reaction mechanism can be handled the adsorption on the solid surface. During the identification process we used a global extreme value finding method with the help of which the whole searching space can be inspected. During optimization the optimal value of the unit variables (pressure, temperature, mole rat etc.) determination was the aim.

Keywords: propionic acid, kinetic modelling, analysis, optimization

ÖSSZEFOGLALÓ

A jelenkori kutatások azon irányba mutatnak melyben a heterogén katalitikus eljárások kerülnek előtérbe, melyek könnyebben kezelhetőek a homogén társaikkal ellentétben. A hordozóra rögzített katalizátorok esetében a reaktor könnyebben irányítható és a működés optimalizálható. Ezen kutatások egyike a propionsav előállító eljárások fejlesztése. Jelen munkában a víz, etilén és szén-monoxid alapú katalitikus propionsav szintézissel foglalkozunk. A választott katalizátor ródium-jód-karbonil komplex, mely hordozóra van rögzítve, a folyamatot pedig töltetes csőreaktorban vizsgáltuk. A csőreaktoron végzett mérések több munkapontban is el lettek végezve, melyből a reaktor stationer viselkedése ismerhető meg. A mérések során a nyomás, a hőmérséklet, az etil-jodid betáplálási mólárama, valamint az alapanyagok betáplálási mólaránya volt a vizsgált jellemző. Ezen mérési

adatpontokat felhasználva, az irodalmi reakciómechanizmus alapján felírt kinetikai modell paramétereit identifikáltuk. A felírt Eley-Rideal típusú kinetikai modell figyelembe veszi az egyes komponensek adszorpcióját is a szilárd katalizátoron. Az identifikáció során globális szélsőértékkereső módszert használtunk, melynek segítségével a teljes keresési tér átvizsgálható. Az optimalizáció során pedig az egyes üzemviteli paraméterek, mint pl.: a betáplált anyagáramok, nyomás, hőmérséklet optimális értékének meghatározása volt a cél.

Kulcsszavak: propionsav, kinetikai modell, analízis, optimalizáció