

Acrolein 및 Acrylic Acid 생산을 위한 고정층 촉매반응기의 모델링 및 최적화

하경수*

LG화학 기술연구원

(philoseus@lgchem.com*)

프로필렌의 부분산화반응을 통하여 acrolein을 생산하는 고정층 촉매반응기를 대상으로 유사균질 모델에 기반한 반응기 모델을 개발하고 이를 바탕으로 공정 조건을 최적화하는 연구를 수행하였다. 본 연구에서는 촉매 반응 메커니즘에 기반한 반응속도식과 effectiveness factor를 이용하여 반응속도식을 전개하였다. 각 반응속도식의 반응속도 상수는 비선형 파라메타 추정법에 의하여 얻었으며, 수치모사결과와 문헌의 실험데이터를 비교하여 모델의 타당성을 검증하였다. 수치모사 연구를 통하여, 제열을 위하여 shell-and-tube 반응기 내부 공간을 순환시키는 용융염의 온도는 acrolein 과 acrylic acid의 수율과 열점의 크기에 큰 영향을 미치는 것으로 나타났다. 일반적으로 등온으로 운전되는 해당 산화공정에 대하여, 본 연구에서는 용융염의 온도를 조절함으로써 제어가능한 조업 온도 범위에서 acrolein의 수율을 개선하는 전략을 채택하였다. 계산량의 무리한 증가 없이 제한 조건이 있는 비선형 시스템에 대한 최적 조건을 찾는 데 효율적인 것으로 널리 알려진 iterative dynamic programming (IDP) 알고리즘을 사용하여 acrolein의 수율과 열점의 크기를 최적의 용융염의 온도와 acrolein 수율 및 열점의 크기를 얻었다. 그 결과, 대략 5~20%에 이르는 높은 수율증가를 보여 주었으며, 제안한 운전전략이 실제 반응공정에 적용될 경우 높은 효과를 얻을 수 있을 것으로 기대되며, 또한 이를 바탕으로 상업적인 반응기의 설계가 가능하리라 사료된다.