

Stanovenie koncentrácie Ni-katalyzátora pri hydrogenácii triacylglycerolov malou výpočtovou technikou

VÁCLAV KOMAN

Súhrn. Uvádza sa algoritmus a programové zabezpečenie na výpočet všetkých koncentračných relácií Ni-katalyzátora v podmienkach priemyselnej hydrogenácie triacylglycerolov, ktorej špecifikom je, že sa v rozhodujúcej miere používa katalyzátor pozostávajúci zo zmesi väčšieho, ale neurčitého množstva vyčerpaného katalyzátora s nedefinovateľnou aktivitou a iba menšieho známeho množstva aktívneho – čerstvého katalyzátora.

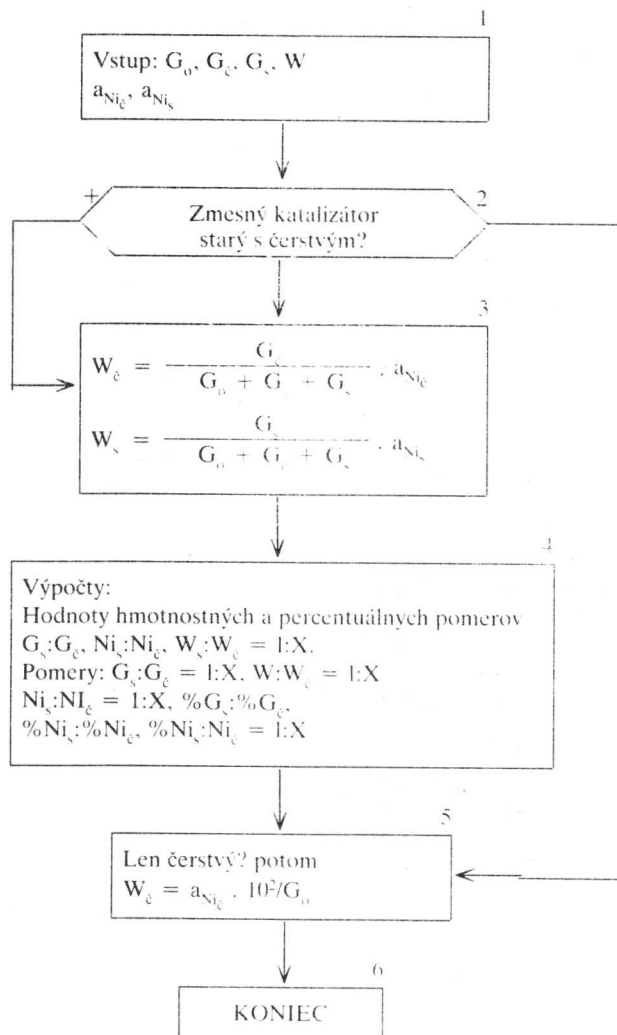
Princípy, význam a prepojenie PKH triacylglycerolov do priemyselnej výroby jedlých tukov uvádzajú citácie [1, 2]. Otázky súvisiace s vlastnosťami hydrogenačných katalyzátorov a vplyvom katalyzátorov na priebeh reakcie a chemické, fyzikálne a biochemické vlastnosti výsledného produktu, sú podrobnejšie opísané v [3]. V kontexte s priemyselnou výrobou jedlých tukov je po kvantitatívnej i kvalitatívnej stránke rozhodujúci technologický proces parciálnej katalytickej hydrogenácie (PKH). Z pohľadu vlastného procesu PKH determinujúcim je heterogénny kovový katalyzátor, ktorého kvalitatívne vlastnosti sú aktivita a selektivita, kvantitatívny parameter jeho koncentrácia, resp. koncentračné relácie vyčerpaného a čerstvého katalyzátora alebo čistého kovu, ktorým v súčasnosti v priemyselných podmienkach je takmer výhradne nikel.

Návrh nového spôsobu hodnotenia Ni-katalyzátorov hodnotou „komplexná selektivita“ uvádza [4] a vyjadrovania aktivity hodnotou „relatívna aktivita“ [5].

Toto oznámenie má za cieľ informovať o doplnujúcom – kvantitatívnom parametri, ktorým sú koncentračné relácie katalyzátora. Bol vypracovaný algoritmus a jeho programová realizácia v strojovom kóde programovateľného minipočítača TI 58/59, ktorý z 5 elementárnych vstupných dát umožňuje výpočet 18 koncentračných údajov. Údaje sú z hľadiska technologickej praxe

Doc. Ing. Václav Koman, DrSc., Katedra technickej mikrobiológie a biochémie, Chemicko-technologická fakulta SVŠT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava.

PKH a vo vzťahu k podmienkam jej reproducibility, regulovania, optimalizácie i vo vzťahu k výsledným chemickým, fyzikálnym i biologickým vlastnostiam nevyhnutné. Vypočítavané údaje sa zameriavajú predovšetkým na hmotnostné pomery čerstvého i starého katalyzátora k hydrogenovanému oleju, ich čistých kovov k oleju, potom navzájom v hmotnostných i percent-



Obr. 1. Vývojový diagram výpočtu koncentračných katalyzátorových relácií priemyselného procesu hydrogenácie triacylglycerolov.

Fig. 1. The flow diagram of the calculation for the concentration catalytic relations of the industrial hydrogenation of triacylglycerols. ¹Input; ²Mixed catalyst used and fresh? ³Calculations: values of the mass-ratios and percentage. Ratios: ⁴Fresh only? Then; ⁵The end.

tuálnych reláciách, ako aj na relácie s promótorom a bez neho. Vývojový diagram na výpočet koncentračných relácií priemyselného Ni-katalyzátora je na obrázku 1.

Príklad výpočtu všetkých koncentračných relácií katalyzátora z reálneho priebehu PKH vo výrobných podmienkach o.p. Palma podľa algoritmu na obrázku 1 a jeho programového vyjadrenia v strojovom kóde minipočítača TI 58/59 dokumentujú prílohy 1 a 2. Príloha 1 je súčasne návodom inštrukčných postupností na použitie prezentovaného programu výpočtu koncentračných katalyzátorových relácií priemyselnej hydrogenácie triacylglycerolov.

Vlastný program výpočtov pozostáva zo 186 programových krokov, obsahuje 5 pamäťových registrov so vstupnými údajmi a 9 pamäťových registrov pre medzioperačné údaje. Čistý čas výpočtu je asi 20 sekúnd, displejované výsledky sa zapisujú ručne. V uvádzanej podobe je program výpočtu koncentračných katalyzátorových relácií hydrogenácie triacylglycerolov vhodný na priame využívanie v priemyselnej praxi. Transformácie programu zo strojového jazyka do vyšších programovacích jazykov, napr. BASIC, FORTRAN a i., nebudú zložité. Súčasne sa uvažuje o zabudovaní týchto katalyzátorových relácií do už vypracovaného matematického modelu, resp. jeho simulačnej verzie v jazyku SIKOS s pracovným názvom HYDOPT [6–8], ktorý umožňuje celú simuláciu neizotermického priemyselného procesu PKH, t.j. všetkých technologických premenných neizotermického priemyselného procesu PKH na vopred zvolený čas reakcie alebo požadovanú hodnotu jódového čísla, prípadne teplotu topenia produktu.

Za technickú pomoc pri vypracovaní príspevku autor ďakuje M. Bystrickej a V. Grmanovej.

Používané skratky a symboly

A	užívateľom definované funkčné návěstie uloženého programu
a_{Ni_c}	množstvo Ni v aktívnom katalyzátore [hm. %]
a_{Ni_s}	množstvo Ni v neaktívnom katalyzátore [hm. %]
G_c	množstvo čerstvého – aktívneho katalyzátora [kg]
G_o	množstvo oleja v reaktore [kg]
G_s	množstvo starého – neaktívneho – recyklovaného katalyzátora [kg]
LRN	klávesa umožňujúca zapísanie celého programu do operačnej pamäte TI 58/59
RCL	klávesa s príkazmi vyvolania z pamäti
R/S	klávesa podmieňujúca chod a zastavenie programu
STO	klávesa s príkazom uloženia do pamäti
W	množstvo niklu z čerstvého katalyzátora v oleji [hm. %]

Príloha 1. Výpočtový program pre koncentračné relácie Ni katalyzátora v priemyselných podmienkach parciálnej katalytickej hydrogenácie triacylglycerolov v strojovom kóde minipočítača TI 58/59

Appendix 1. Computation program for concentration Ni-catalyst relations in the industrial conditions of parcial catalytic hydrogenation (PCH) of triacylglycerol using minor computer technique TI 58/59

Krok ¹	Symbol ²	Kód ³	Krok ¹	Symbol ²	Kód ³
000	2nd LBL	76	33	[06]	06
1	A	11	34	RCL	43
2	RCL	43	35	[02]	00
3	[01]	01	36	X	65
4	÷	55	37	1	01
5	(53	38	0	00
6	RCL	43	39	0	00
7	[01]	01	40	55	
8	+	85	41	RCL	43
9	RCL	43	42	[00]	00
10	[02]	02	43	=	95
11	+	85	44	STO	42
12	RCL	43	45	[07]	07
13	[00]	00	46	RCL	43
14)	54	47	[02]	02
15	=	95	48	X	65
16	X	65	49	RCL	43
17	RCL	43	50	[04]	04
18	[03]	03	51	÷	55
19	=	95	52	1	01
20	STO	42	53	0	00
21	[05]	05	54	0	00
22	RCL	43	55	=	95
23	[01]	01	56	STO	42
24	X	65	57	[08]	08
25	RCL	43	58	X	65
26	[03]	03	59	1	01
27	÷	55	60	0	00
28	1	01	61	0	00
29	0	00	62	÷	55
30	0	00	63	5	05
31	=	95	64	0	00
32	STO	42	65	0	00

Príloha 1. (pokračovanie)
Appendix 1. (Continued)

Krok ¹	Symbol ²	Kód ³	Krok ¹	Symbol ²	Kód ³
66	0	00	101	RCL	05
67	=	95	102	[00]	00
68	STO	42	103	=	95
69	[09]	09	104	STO	42
70	RCL	43	105	[13]	13
71	[01]	01	106	RCL	43
72	+	85	107	[01]	01
73	RCL	43	108	X	65
74	[02]	02	109	1	01
75	=	95	110	0	00
76	STO	42	111	0	00
77	[10]	10	112	÷	55
78	X	65	113	RCL	43
79	1	01	114	[00]	00
80	0	00	115	=	95
81	0	00	116	STO	42
82	÷	55	117	[14]	14
83	RCL	43	118	R/S	91
84	[00]	00	119	2nd LBL	76
85	=	95	120	B	12
86	STO	42	121	RCL	43
87	[11]	11	122	05	05
88	RCL	43	123	R/S	91
89	[06]	06	124	RCL	43
90	+	85	125	[06]	06
91	RCL	43	126	R/S	91
92	[08]	08	127	RCL	43
93	=	95	128	[07]	07
94	STO	42	129	R/S	91
95	[12]	12	130	RCL	43
96	X	65	131	[08]	08
97	1	01	132	R/S	91
98	0	00	133	RCL	43
99	0	00	134	[09]	9
100	÷	55	135	R/S	91

Príloha 1. (pokračovanie)
Appendix 1. (Continued)

Krok ¹	Symbol ²	Kód ³	Krok ¹	Symbol ²	Kód ³
136	RCL	43	170	[07]	07
137	[10]	10	171	÷	55
138	R/S	91	172	RCL	43
139	RCL	43	173	[14]	14
140	[11]	11	174	=	95
141	R/S	91	175	R/S	91
142	RCL	43	176	1/ ×	35
143	[12]	12	177	R/S	91
144	R/S	91	178	[RCL]	43
145	RCL	43	179	09	09
146	[13]	13	180	÷	55
147	R/S	91	181	RCL	43
148	RCL	43	182	[05]	05
149	[14]	14	183	=	95
150	R/S	91	184	R/S	91
151	RCL	43	185	1/ ×	35
152	[02]	02	186	R/S	91
153	÷	55			
154	RCL	43			
155	[01]	01			
156	=	95			
157	R/S	91			
158	1/ ×	35			
159	R/S	91			
160	RCL	43			
161	[06]	06			
162	÷	55			
163	RCL	43			
164	[06]	06			
165	=	95			
166	R/S	91			
167	1/ ×	35			
168	R/S	91			
169	RCL	43			

¹Step; ²Symbol; ³Code.

Príloha 2. Postupnosť inštrukcií pre výpočet koncentračných relácií katalyzátorov v priemyselnom procese PKH triacylglycerolov

Appendix 2. Computing sequence for the calculation of concentration catalyst relations in the industrial process PCH of triacylglycerols.

Krok ¹	Inštrukcia ²	Číselný vstupný údaj ³	Tlačidlo ⁴		Číselný výstupný údaj ⁵
1	Vstupné hodnoty. Vstup a ukončenie programu ⁶		LRN	LRN	
2	Množstvo oleja [kg] ⁷	5 000	STO	00	5 000
3	Množstvo katalyzátora, čerstvý [kg] ⁸	15	STO	01	15
4	Množstvo katalyzátora, starý [kg] ⁹	620	STO	02	620
5	% Ni v čerstvom katalyzátore [kg] ¹⁰	14,1	STO	03	14,1
6	% Ni v starom katalyzátore [kg] ¹¹	18,6	STO	04	18,6
7	Výstupné hodnoty ¹²				
8	Výpočet výsledkových hodnôt ¹³		A		
9	Hm. % Ni čerstvého v oleji ¹⁴		R/S		0,0375
10	Množstvo čistého Ni v oleji [kg] ¹⁵		R/S		2,115
11	Hm. % starého katalyzátora v oleji ¹⁶		R/S		2,31
12	Množstvo vyčerpaného starého katalyzátora v oleji [kg] ¹⁷		R/S		115,5
13	Hm. % Ni starého v oleji ¹⁸		R/S		2,308
14	Celkové množstvo katalyzátora (starý + nový) [kg] ¹⁹		R/S		635,0
15	Celkové Hm. % katalyzátora (starý + čerstvý) ²⁰		R/S		12,7
16	Celkové množstvo Ni v starom a čerstvom katalyzátore [kg] ²¹		R/S		117,62

Príloha 2. (pokračovanie)
Appendix 2. (Continued)

Krok ¹	Inštrukcia ²	Číselný vstupný údaj ³	Tlačidlo ⁴	Číselný výstupný údaj ⁵
17	Celkové % Ni starého a čerstvého katalyzátora v oleji ²²		R/S <input type="text"/>	2,345
18	Hm. % čerstvého katalyzátora v oleji ²³		R/S <input type="text"/>	0,3
19	Hodnota pomeru starý:čerstvý katalyzátor [kg] ²⁴		R/S <input type="text"/>	41,33
20	Pomer starý:čerstvý katalyzátor [kg] = 1:x ²⁵		R/S <input type="text"/>	1:0,02424
21	Hodnota pomeru Ni _s :Ni _č [kg] = 1:X ²⁶		R/S <input type="text"/>	54,61
22	pomer hm. % starého:čerstvý katalyzátor = 1:x ²⁷		R/S <input type="text"/>	1:0,0183
23	Hodnota pomeru hm. % starého:čerstvý katalyzátor = 1:x ²⁸		R/S <input type="text"/>	7,70
24	Pomer hm. % katalyzátor starý: čerstvý = 1:x ²⁹		R/S <input type="text"/>	1:0,1299
25	Hodnota pomeru hm. % Ni _s :Ni _č = 1:X ³⁰		R/S <input type="text"/>	61,5466
26	Pomer hm. % Ni _s :Ni _č = 1:x ³¹		R/S <input type="text"/>	1:0,1625
27	Pri novom príklade choď na krok 2 ³²		<input type="text"/> <input type="text"/>	

¹Step; ²Instruction; ³Numeric input data; ⁴Key; ⁵Numeric output data; ⁶Input data. Input and end of the program; ⁷Oil quantity; ⁸Quantity of fresh catalyst; ⁹Quantity of old catalyst; ¹⁰% of Ni in the fresh catalyst; ¹¹% of Ni in the old catalyst; ¹²Output values; ¹³Calculation of resultant values; ¹⁴Wt. % of fresh Ni in oil; ¹⁵Quantity of pure Ni in oil; ¹⁶Wt. % of old catalyst in oil; ¹⁷Quantity of exhausted old catalyst in oil; ¹⁸Wt. % of old Ni in oil; ¹⁹Total quantity of catalyst (old and new); ²⁰Total wt. % of catalyst (old and new); ²¹Total quantity of Ni in the old and new catalyst; ²²Total wt. % of Ni in the old and new catalyst; ²³Wt. % of fresh catalyst in oil; ²⁴Value of ration of old:new catalyst; ²⁵Ration old:new catalyst; ²⁶Value of ratio Ni_s:Ni_č; ²⁷Ration wt. % old:new catalyst; ²⁸Value of ration wt. % old:new catalyst; ²⁹Ration wt. % old:new catalyst; ³⁰Value of ration wt. % Ni_s:Ni_č; ³¹Ration wt. % Ni_s:Ni_č; ³²At the beginning of new example go to step 2.

LITERATÚRA

- [1] BAILEY, A. E.: Industrial Oil and Fat Products. New York, Intersci. Publ., Inc. 1951, s. 672.
- [2] ULLRICH, L.: Chémia a technológia jedlých tukov a olejov. Bratislava, SNTL 1963, s. 338.
- [3] KOMAN, V. – GONDA, P.: Možnosť určovania rýchlostných konštánt v maximálnom reakčnom modeli procesu parciálnej katalytickej hydrogenácie rastlinných olejov. Bull. PV, 23 (3), 1984, č. 4, s. 381.
- [4] KOMAN, V.: Štruktúry lipidov. Bratislava, Veda 1987.
- [5] KOMAN, V. – RAIS, I. – CSICSAYOVÁ, M. – SLÁDEK, J.: Nový numerický spôsob určovania aktivity priemyselných katalyzátorov hydrogenácie triacylglycerolov. Bull. PV, 25 (5), 1986, č. 4, s. 415.
- [6] KOMAN, V. – RAIS, I., Správa HZ č. 9/79. Bratislava 1979.
- [7] RAIS, I. – KOMAN, V., In: Zborník 21. seminára z chémie, analýzy a technológie tukov, Liblice, 1982.
- [8] RAIS, I. – KOMAN, V., In: Zborník 23. seminára z chémie, analýzy a technológie tukov, Smolenice, 1984.

Определение концентрации Ni-катализатора при гидрогенации триацилглицеролов малой вычислительной техникой

Резюме

Автор приводит алгоритм и программное обеспечение для расчета всех концентрационных соотношений никелевого катализатора в условиях промышленной гидрогенации триацилглицеролов, специфика которой заключается в том, что в решающей мере применяется катализатор, состоящий из смеси большего но неопределенного количества исчерпанного катализатора с неопределенной активностью и только из меньшего определенного количества активного – свежего катализатора.

The determination of Ni-catalyst concentration during the triacylglycerol hydrogenation using the minor computer technique

Summary

The algorithm and software for the calculation of all concentration relations of Ni-catalyst under the condition of industrial hydrogenation of triacylglycerols are described. The catalyst composed of the mixture of indefinite major part of exhausted catalyst with the undefinable activity and only of the minor part of the active – fresh catalyst is largely used.