

유체접촉분해 공정에 대한 동적 모사기 개발

한인수, 정창복
전남대학교 공업화학과

Development of a Dynamic Simulator for a Fluid Catalytic Cracking Process

In-Su Han, Chang-Bock Chung

Department of Chemical Technology, Chonnam National University

서론

유체접촉분해(Fluid Catalytic Cracking (FCC)) 공정은 원유 정제 공정으로부터 얻어지는 다양한 성분들로 구성된 고 비점 혼합물들을 보다 고가의 성분인 gasoline 또는 중간 증류물로 전환하는 공정이다. 유체접촉분해 공정은 대량의 원료 처리로 인하여 고 에너지를 소비하는 공정이기 때문에 이 공정의 최적 제어가 전체 원유 정제 공정의 경제적인 이익에 끼치는 효과가 상당히 크다. 따라서 이러한 요인이 공정에 대한 특성 연구 및 보다 진보된 제어 기법, 공정의 최적화 등에 관련된 연구를 수행하게 하는 동기가 되어 왔다. 그러나 각 단위 공정간의 상호작용이 상당히 복잡하고 반응에 대한 메커니즘, 유동층에 대한 유체역학적 모델이 제대로 성립되지 않은 상태이기 때문에 만족할 만한 연구 결과가 나오지 않고 있다.

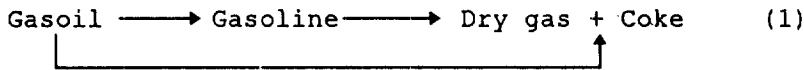
본 연구의 목적은 Model IV FCCU를 기본 모사 대상으로 하여 일반적인 유체접촉분해 공정에 대한 수학적 모델을 개발하고, 이를 바탕으로 모사기를 완성함으로써 전체 공정 및 각 단위 공정에 대한 동 특성을 파악하고, 추후 공정에 대한 제어 및 최적화에 사용될 수 있는 기본 도구를 마련하는데 있다.

본론

유체접촉분해 공정은 크게 반응기, 재생기(regenerator), 촉매순환부(U-band), 원료예열시스템, 송풍기(blower) 및 주분류기(main-fractionator) 등으로 나뉘는데, 이중 반응기와 재생기가 전체 공정의 주요 역할을 담당한다. 반응기에서는 재생기로부터 운반된 고온의 촉매와 섞여 기화된 원료가 실제 분해 반응이 일어나는 부분인 riser를 따라 상승하면서 반응이 진행되고, 반응이

끝난 촉매는 반응기 내의 탈거부(stripping section)에서 표면의 탄화수소 혼합물이 제거된다. 또한 생성된 중간 제품은 주분류기로 운반되어 C₄ 유분, gasoline, LGO 및 HGO 와 같은 다양한 증류물로 분리된다. 재생기에서는 반응 과정에서 활성도가 떨어진 촉매를 송풍기로부터 공급된 공기에 의해서 태움으로써 재생하고, 촉매 재생 과정에서 생성된 열을 반응기 내에서 원료의 기화 및 분해 반응에 쓰이도록 촉매를 매체로 하여 공급한다. 촉매순환부는 재생기와 반응기 사이에 촉매 운반을 담당하며, 원료에열부는 riser 하단에 공급되는 원료를 적절한 온도까지 높인다.

반응기에 대한 모델링은 riser 부분과 탈거부의 두 부분으로 나누어 진행하였다. Riser 를 관형 반응기로 가정하고 촉매 입자와 기체상에 대하여 각각 모델식을 구성하였으며, 반응 모델은 (1)식과 같은 three-lumped 모델¹¹⁾을 적용하였다. 또한 탈거부는 촉매 입자와 수증기의 두개의 상으로 구성된 CSTR 모델을 적용하였다.



재생기는 촉매 입자의 분포가 높은 하단부의 밀집층(dense bed)과 비교적 입자의 농도가 낮은 희박영역(dilute region)의 두 영역으로 구분하여, 유동층의 난류영역(turbulent region)에 속하는 밀집층은 기포상(bubble phase)과 유화상(emulsion phase)에 대한 CSTR 모델을 적용하였고, 희박영역의 경우 촉매 입자와 기체상에 대한 관형 반응기 모델을 적용하였다.

최종적으로 riser 와 재생기의 희박영역에 대해서는 (2)식과 같은 편미분 방정식계를 반응기의 탈거부와 재생기의 밀집층에 대해서는 (3)식과 같은 상미분방정식계를 얻게 된다.

for riser and dilute region

$$\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \alpha} + \frac{\partial (v\bar{\psi})}{\partial \alpha} = \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\bar{D}_* \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \alpha} \right) + \bar{S} \quad (2)$$

for stripping section and dense bed

$$\bar{\lambda} \frac{\partial (V\bar{\psi})}{\partial \alpha} = \bar{S} \quad (3)$$

for another units or sections

$$f(\bar{\psi}) = 0 \quad (4)$$

여기서 $\bar{\psi}$ 는 각 성분(촉매입자, gasoil, gasoline, CO, CO₂, coke, 기포상, 유화상 등)의 온도, 질량분율, 부피분율 및 유속을 나타내며, \bar{S} 는 각 성분에게 따라 대수적 관계식을 갖는다.

각 단위 공정간의 복잡한 상호작용 때문에 (2)-(4)식은 상당한 비선형성을 띄게 되므로 유한차분법 만으로는 안정된 해를 얻기가 쉽지 않다. 본 연구에서는 각 성분의 운동량 수지식에 대한 수치해법으로 유한체적법(Finite Volume Method (FVM))^[2]을 도입하여, riser 및 재생기의 회박영역의 길이 방향에 대한 속도 분포를 구하고, 운동량 수지식을 제외한 각 편미분방정식을 method of line을 사용하여 상미분방정식으로 전환한 후 GEAR의 방법을 사용하는 적분기인 LSODE^[3]를 사용하여 각 방정식의 모사 해를 구하였다.

문헌의 MODEL-IV FCCU에 대한 재원 및 공정 조건을 바탕으로 모사를 수행한 결과를 Figure 1 - 2에 보였다. Figure 1은 riser 출구에서 모사 시작 후 몇 초간에 걸쳐 각 성분의 질량분율 및 온도를 나타내고 있는데, 전 구간에서 걸쳐 상당히 안정된 해를 얻을 수 있었다. Figure 2는 공정 모사 시작 후 300초에 공급 원료의 온도를 20°F 높였을 때 반응기와 재생기 하단의 온도 변화를 보이고 있다.

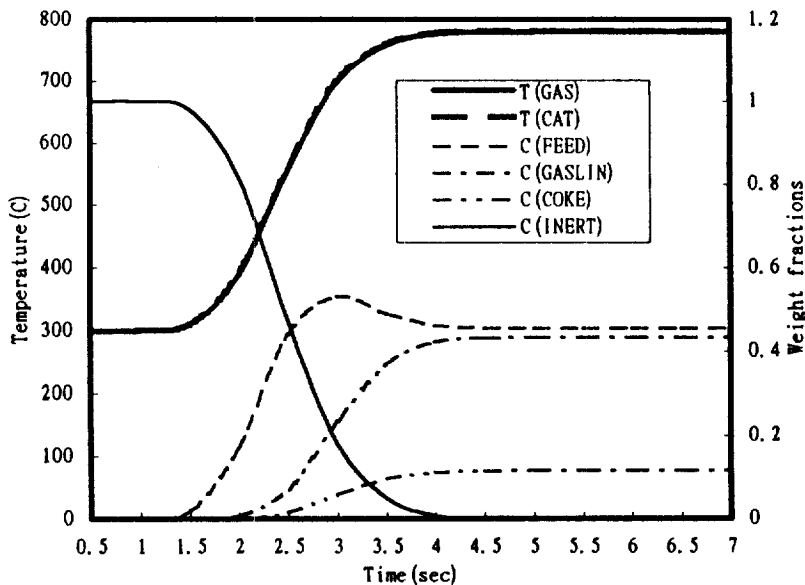


Figure 1. Temperature and conversion profiles at the outlet of the riser

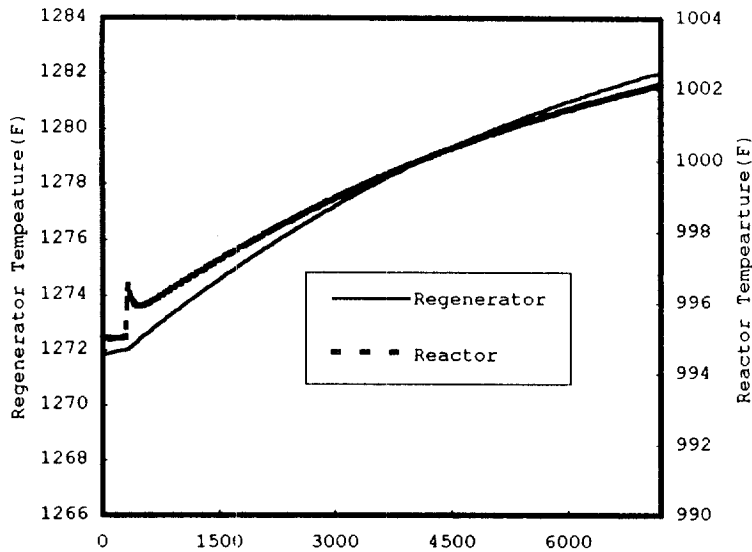


Figure 2. Open-loop responses of the reactor and the regenerator temperature for 20 °F positive step change in feed temperature

결론

유체접촉분해 공정의 각 단위 공정에 대하여 편미분 및 상미분방정식으로 표현되는 수학적 모델을 개발하고 이를 효과적으로 풀 수 있는 수치 알고리즘을 도입하여 모사기의 기본 틀을 마련하였다. 현재까지 개발된 모사기를 이용하여 반응기, 재생기 등을 비롯한 각 단위 공정에 대한 동적 모사와 전체 공정의 개루프 응답 특성을 파악하였다. 지금까지 개발된 FCCU 모사기는 추후 공정의 제어 및 최적화에 사용될 수 있는 방향으로 개발될 것이다.

참고문헌

- [1] Weekman, V.W., and D.M. Nace, "Kinetics of Catalytic Cracking Selectivity in Fixed, Moving and Fluid Bed Reactors," *AIChE J.*, **16**, 3, 397 (1970)
- [2] Patankar Suhas V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGRAW-HILL (1980)
- [3] Hindmarsh, A.C., "Solving Ordinary differential Equations on an IBM-PC using LSODE," *Int J. numer. methods in eng.*, **6**, 4 (1986)