

나프타 개질 공정 전문 모사기의 개발

최영호, 권영운, 윤인섭

호남정유 주식회사
서울대학교 공과대학 화학공학과

Development of Naphtha Reforming Process Simulator

Yeong-Ho Choi, Young-Woon Kwon, En-Sup Yoon

Honam Oil Refinery Co. Ltd.
Dept. of Chemical Engineering, Seoul National University

ABSTRACT

A naphtha reforming process treats the feed naphtha for the production of BTX and high octane gasoline. In this paper, the development of NAFOS (Naphtha Reformer Steady-State Simulator), which is the efficient tool for the wide range of reforming process studies, is presented.

NAFOS system is based on the sequential modular approach and composed of unit computation routines, physical properties data base, numerical routines, flowsheet convergence routine and user interfaces for input-output control.

The developed NAFOS system has been tested by computation of the UOP Platforming process. Simulation results of NAFOS corresponded with that of established general purpose simulator (ASPEN PLUS), and faster for the same simulation case.

1. 서론

나프타는 원유를 정제하여 얻어지는 비등점 80~180°C 정도의 유분으로 가솔린, 석유 화학의 기초 원료인 에틸렌, BTX (Benzene, Toluene, Xylene) 등의 제조에 사용된다. 나프타 개질 공정은 그 중에서도 가솔린과 BTX를 생산하기에 적합하도록 나프타의 성질을 조정하는 공정이다.

나프타 개질 공정에 대한 수요가 급증하고 있는 상황에서, 본 연구에서는 나프타 개질 공정에 대한 정상 상태 모사기 (steady-state simulator)를 개발하였다. 개발된 모사기를 사용하면 공정의 모사, 최적화, 제어에 대한 토대를 마련하여, 에너지 절감 등의 경제적 효과를 기대할 수 있을 것이다.

급속한 컴퓨터의 발달로 인하여 화학 공정의 컴퓨터를 이용한 모사가 활발한 가운데 널리 사용되는 ASPEN

PLUS, PROCESS, DESIGN II 등과 같은 범용 모사기를 연구에 직접 활용할 수도 있겠지만, 범용 모사기는 다양한 화학공정을 융통성 있게 모사하기 위한 구조적 특징을 가지고 있기 때문에 특정 공정의 전문적인 모사에 있어서는 효율성이 떨어질 뿐만 아니라 대상 공정의 특징을 충분히 고려하지 못한다는 단점이 있다. 이러한 면을 극복하기 위하여 전문 모사기 (specific simulator)의 개발이 필요하다. 이렇게 개발된 전문 모사기와 개발과정에 축적되는 기술은 대상 공정에 대한 충분한 지식을 제공하기 때문에 본 연구에 이어서 공정 최적화에 대한 연구를 수행함으로써 궁극적인 목적인 에너지 및 원가 절감을 기할 수 있게 된다.

2. 나프타 개질 공정의 개요

1930년대에는 촉매를 사용하지 않고 550°C, 80 기압하에서 열처리하여 옥탄가 80 정도 되는 가솔린을 얻는 열개질 (thermal reforming) 공정이 이용되었다. 그러나 옥탄가가 높은 가솔린의 수요가 증대되어 열개질법 만으로는 수요를 감당하지 못하게 되자 촉매를 사용하는 접촉 개질법 (catalytic reforming)이 개발되었다.

초기에는 Mo-Al₂O₃ 계 촉매에 의한 Hydroforming법이 채용되었으나 촉매 수명이나 촉매 재생법이 번잡하여 별로 보급되지 못하였다. 1949년에 UOP사에 의해 Pt/Al₂O₃를 촉매로 하는 Platforming법이 공정화 되었다^[1].

2.1 나프타 개질 반응

개질반응에 의하여 나프타 원료종의 방향족 (aromatics)은 거의 변화하지 않지만 나프텐 (Naphthene)은 빠른 속도로 방향족으로 전환된다. 파라핀 (Paraffin)은 일부가 방향족으로 변환되고 일부는 수소화 분해 반응 (hydrocracking)에 의하여 C₂~C₄ 기체로 변환된다. 따라서 개질공정에서 요구되는 반응은 파라핀의 방향족으로의 전환이며, 이는 촉매 및 조업조건에 영향을 받는다. 반응기

에 들어 있는 촉매 (catalyst)는 염소를 포함하고 있고 그 양은 촉매에 따라 다르지만 대략 1 wt% 정도가 되어 반응 도중에 염소의 양을 이 수준으로 유지하기 위하여 원료를 반응기에 투입하기 전에 H₂O와 Cl을 적당량 혼합하여 투입한다. 개질반응에서 가장 요구되는 파라핀의 탈 수소화 환화반응 (脫水素化環化反應, dehydrocyclization)은 촉매의 금속과 산성기가 균형을 유지해야 최적화 되므로 반응기의 산성도 제어는 매우 중요하다[12].

개질반응의 비활성화는 코크 (Coke) 형성에 의한 것이며, 주로 알루미나 (alumina)에서 일어난다. 코킹 (coking)은 올레핀 (olefin)과 방향족 화합물의 고분자화 (polymerization)에 의한다. 코킹은 반응의 초기에 급격히 증가하고 어느 정도 시간이 지나면 일정한 속도로 진행되는 데, 촉매의 금속/산성 균형이 깨어 지는 경우에 비활성화가 촉진된다. 또한 코킹은 수소분압이 낮을 때와 온도가 높은 경우에 촉진된다[4].

2.2 공정의 개요

UOP의 나프타 개질공정인 Platforming 공정을 그림 1에 도시하였다. 나프타 원료는 재순환된 수소와 함께 열 교환기와 히터 (heater)를 거쳐 반응기에 유입된다. 나프타 개질반응은 흡열 반응이기 때문에 반응기의 온도를 높은 상태로 유지하기 위해서 반응기를 세 개로 분리하고 반응기와 반응기 사이에는 히터가 설치되어있다. 반응기에서 유출되는 생성물은 열 회수를 위해 열 교환기를 거친 다음 다시 공기 냉각기 (air cooler)에서 냉각되어 분리기 (flash)로 들어 간다. 분리기의 탑상 제품 (overhead)에는 다량의 수소가 포함되어 있는데 일부는 압축기를 거쳐 재순환되고 나머지는 부산물로 생산된다. 이때 재순환되는 수소와 나프타 원료는 일정한 비율로 조정된다. 분리기의 탑저 제품 (bottom)에는 다량의 방향족이 포함되어 있고, 이것을 Platformate라 부른다. Platformate는 다음의 정제공정으로 보내져 용도에 따라 분리된다[12]. 초기에 개발된 공정은 주로 낮은 옥탄가의 나프타를 높은 옥탄가의 가솔린으로 개질하는데 사용되었는데, 요즘에는 LPG나 고순도의 방향족을 생산하는데 이용되고 있다. Platforming 공정의 중요 조업변수 (process variables)로는 촉매의 종류, 반응기의 온도 및 압력, H₂/HC 비율, 공기 냉각기의 효율 (duty), 분리기의 압력 등이 있다.

3. 중요 단위공정 및 전체 공정의 모델링

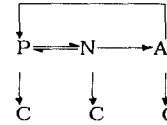
3.1 반응기

나프타 개질공정의 모사에서 반응기에 대한 정확한 모델링은 전체 공정 모사기의 정확성을 가능하는 중요한 요인이다. 가장 간단한 반응기 모델로는 Stoichiometric Reactor Model이 있는데 이것은 반응 kinetics를 전혀 고려하지 못

하고 단순히 반응기의 입,출력 (input-output) 만을 맞출 수 있다. 실제 kinetics에 근거한 모델로는 Smith Model^[9], Krane Model^[6] 등이 있다. 본 연구에서는 다음에 설명한 두가지 모델을 사용하였다.

Krane 모델

Krane 등은 C₅~C₁₀ 탄화수소 각각에 대하여 1차 반응 계수를 결정하였다. 이때 사용한 반응 구조는 다음과 같다.



P=파라핀, N=나프텐, A=방향족,
C=가벼운 탄화수소

이 반응 구조에서 C는 재차 작은 분자로 분해되어 Cracking Network를 구성한다. 고려된 반응은 53개이고 예를 들어 C₇ 파라핀의 반응 속도는 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{dC_{P7}}{d(1/SV)} = 0.0109C_{P10} + 0.0039C_{P9} + 0.0019C_{P8} + \dots$$

Krane 모델에서는 활성화 에너지를 결정하지 않았고 H₂/HC 비에 따른 반응 구조 (yield structure)의 변화에 대한 언급이 없지만, 생성물의 조성을 파라핀에 대하여는 C₁부터 C₁₀ 까지, 나프텐과 방향족에 대하여는 C₆부터 C₁₀ 까지 추정할 수 있다. 이 모델에서는 53개의 1차 반응속도식을 각각의 순물질에 대해 정리하여 21개식의 연립 상미분 방정식이 구성된다. 반응기의 SV 값과 유입되는 반응물의 조성이 정해지면, 초기치가 주어진 연립 상미분 방정식 문제가 된다. 이것을 SV를 독립변수로 하여 Gear method^[5]로 풀면 된다.

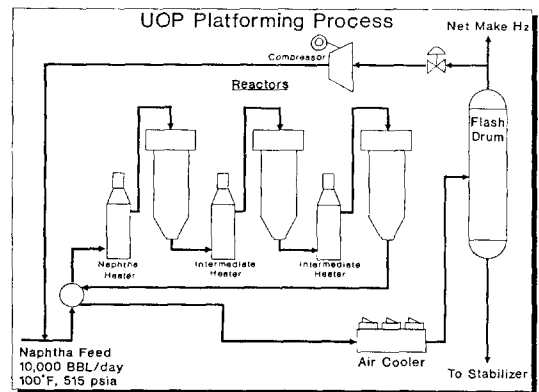
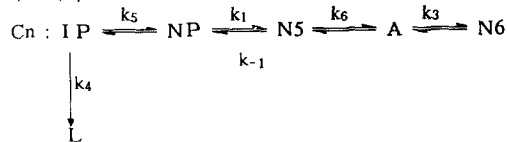


그림 1. UOP Platforming 공정

Fig 1. UOP Platforming Process

새로운 나프타 개질 반응 모델

Krane 모델은 여러가지 장점에도 불구하고 실제 공정의 모사에 있어서 몇가지 부족한 점이 있다. 그 약점들로는, 반응기에 주입되는 원료의 H₂/HC 비에 따른 반응의 반응 구조의 변화를 예측할 수 없다는 점과, 가상 1차 반응식으로 표시된 각 반응의 활성화 에너지 (activation energy)가 주어지지 않아서 반응기 내부 온도의 변화에 따른 반응의 전환율과 평형 관계를 알 수 없다는 것등이었다. 따라서 본 연구에서는 국내에서 연구 개발된 새로운 나프타 개질 공정의 반응 모델^[11]을 도입하여 이러한 단점들을 보완 하였다. 다음은 새로운 반응 모델의 대략적인 반응 구조이다



IP : iso-Paraffin, NP : n-Paraffin, A : Aromatics

N5 : Branched Cycloheptane

(Number of carbon on branch = n - 5)

N6 : Branched Cyclohexane

(Number of carbon on branch = n - 6)

새로운 반응 모델은 기존의 Krane 모델과는 달리 나프타 개질 공정에 수반되는 반응물과 생성물을 29개의 성분으로 구분하고 있으며, 각각의 반응을 1차 가역 반응으로 가정하고 각 가역 반응의 평형 상수를 온도와 수소 분압의 함수로 표현하고 있다. 또한 각 정반응의 활성화 에너지를 결정하였고, 반응 속도 상수의 수소 분압에 대한 의존성도 결정하였다.

3.2 원료 유출 열교환기

고온 반응의 경우 열 회수를 위해서 반응기의 유출 스트림과 유입 스트림을 열교환시킨다. 나프타 개질반응도 1000°F 정도에서 일어나는 고온 반응이므로 원료 유출 열교환기를 사용하여 고온의 유출 스트림으로 유입 스트림을 가열한다. 열교환기의 수학적 모델은 Single-pass, double-pipe, counter current heat exchanger model을 사용하였다.

본 논문에서 개발된 열교환기 모델은 총괄 열전달 계수가 주어지고 다음중 하나의 변수가 정해졌을때 다른 모든 변수들을 계산할 수 있는 알고리즘을 갖고 있다.

- (1) 최소 접근 온도 (Minimum temperature approach, MTA)
- (2) 뜨거운 스트림의 유출 온도
- (3) 찬 스트림의 유출 온도
- (4) 열전달 속도 (Heat exchanger duty)
- (5) 열전달 면적

3.3 전체 공정의 모델링

전체 공정의 모델 다이어그램을 그림 2에 도시하였다. 공정도 상에 보면 두 개의 재순환 스트림이 있다. 그런데 공정을 자세히 분석해 보면 MX1에서 나온 스트림이 열교환기, HX1과 히터, HTR1을 거치면서, 조성은 일정한 채로 단지 온도와 압력 만이 변하게 된다. 공정에서 첫번째 반응기, RX1에 들어 가는 온도는 1000°F로 정해져 있고 압력 또한 정해져 있기 때문에 모사를 할 때 MX1을 계산한 다음 RX1을 계산할 수 있으므로, 전체 공정은 한 개의 재순환 스트림만 수렴시키면 된다. SPL1과 압축기, CP1 사이의 스트림을 tear하고 Wegstein 법으로 수렴시켰다.

공정도 상의 피드 포워드 제어기 (Feed-forward controller), FC는 나프타 원료와 재순환되는 수소를 일정한 비율로 조정하는데, SPL1에서 분리비를 결정하는 것으로 이런 기능을 모델링할 수 있다.

4. NAFOS 시스템의 구조 및 특성

4.1 시스템의 구조

NAFOS는 순차적 모듈 접근법 (sequential modular approach)에 기본을 둔 모사기이다. 화학공정 모사기법에는 크게 나누어 방정식 중심 접근법 (equation-oriented approach)과 순차적 모듈 접근법이 있는데, 현재 실용화되어 있는 모사기는 대부분 후자에 기본을 두고 있다. 이 방법은 공정도 상의 물질 흐름 순서대로 단위공정을 하나씩 모사하기 때문에 소형 컴퓨터로도 규모가 큰 공정을 모사할 수 있고, 사용 및 이해가 편리한 장점이 있다. 그러나 재순환 스트림이 많은 공정 구조에서는 수렴이 어렵고, 설계 문제나 최적화 문제에서는 반복계산이 많아지는 어려움이 있다^[2]. 그래서 본 연구에서는 각 단위공정의 순차적 계산에는 순차적 모듈 접근법을 사용하지만 전체공정의 수렴과 설

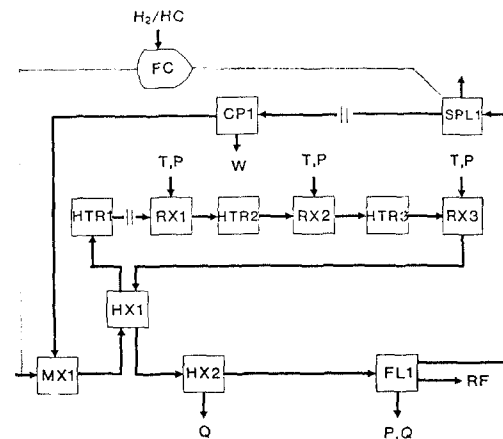


그림 2. 공정의 블럭 다이어그램

Fig 2. Block Diagram of Process

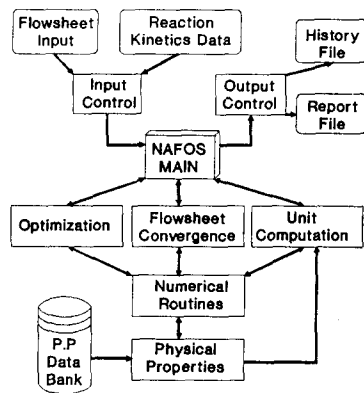


그림 3. NAFOS의 구조
Fig 3. Structure of NAFOS

계문제는 한꺼번에 모아서 계산하는 동시 모듈 접근법 (simultaneous modular approach)의 개념^[7]을 사용하였다.

NAFOS의 기본 구조를 그림 3 에 도시하였는데, 단위 공정 계산 루틴 (unit computation routine), 물성치 계산 루틴 (physical properties routine), 수치 해석 루틴 (numerical routine), 공정도 수렴 루틴 (flowsheet convergence routine), 입출력 루틴등으로 구성되어 있다. 최적화 기구 (optimization routine) 는 갖추고 있지 않으나 모사기와 결합된다면 그림의 위치에 추가될 수 있다. NAFOS MAIN은 계산의 흐름과 데이터의 입출력을 제어한다. 이 루틴은 전체 공정의 결합상태를 결정하고 각 단위 공정 계산 루틴을 수행시키며, 공정도 수렴 루틴을 수행시켜 전체 공정 계산을 수렴시킨다. 또 입출력 루틴을 수행시켜, 모사에 필요한 데이터를 입력시키고 계산의 중간 결과와 최종 결과를 출력시킨다.

단위공정 계산 루틴은 MIXER, SPLITTER, TWO-PHASE FLASH, HEATER/COOLER, HEAT EXCHANGER, COMPRESSOR, REACTOR 등의 모델을 가지고 있다. 각각의 단위공정 모델은 다양한 설계변수의 선택에 대해 물질수지와 열수지를 계산한다. 공정도 수렴 루틴은 나프타 개질 공정의 재순환 스트림을 tear하고 수렴시킨다. 나프타 개질공정과 같이 물질 스트림의 조성이 20 개 이상의 성분으로 구성된 경우, Newton-Raphson 법을 사용하면 Jacobian을 구하는데 너무 많은 시간이 소요되어 비효율적이다. 본 연구에서는 Wegstein 법을 사용하여 효과적인 수렴을 하였다.

4.2 데이터의 구조

NAFOS의 입력 제어 루틴 (input control routine) 은 모사에 필요한 각종 데이터를 파일로 부터 읽고, 이것을 컴퓨터의 기억장소에 저장한다. 입력되는 데이터는 공정도 데이터, 반응 데이터, 물성치 데이터등이 있다. 각각의 데이터가 어떠한 형태로 저장되어 계산에 사용되는지 다음에 설

명하였다.

스트림 데이터

화학공정에는 물질 스트림, 냉각수 스트림, 스팀 스트림, 제어신호 스트림 등 여러가지 종류의 스트림이 있다. NAFOS는 정상상태 모사기로 물질 스트림만을 취급하는데, 공정 모사에서 물질 스트림의 각 변수들의 값을 정확하게 결정해 준다. 물질 스트림의 상태를 정확하게 표현하기 위해서는 온도, 압력, 조성이 결정되어야 한다. 스트림 데이터는 온도, 압력, 조성외에도 엔탈피, 기상분율 등 보조적인 물성치들을 가지고 있다.

장치 파라미터 데이터

NAFOS는 여러가지 종류의 단위공정 모델을 포함하고 있다. 각각의 단위공정에 대한 수학적 모델은 고유의 자유도 (degree of freedom) 를 가지고 있는데, 이 자유도에 해당하는 만큼의 변수들을 결정해 주어야 해를 구할 수 있다. 이때 미리 정해주는 변수들을 설계변수라 한다. NAFOS의 단위공정 모델들은 다양한 설계변수의 선택에 대해 각각 다른 계산 알고리즘을 사용하여 공정모사를 수행할 수 있다. 이러한 각 단위공정의 설계변수와 어떠한 계산 알고리즘을 선택할 것인가에 대한 정보가 장치 파라미터 데이터에 저장되어 있다.

물성치 데이터

각각의 화합물들은 고유의 물리적 상수들에 의하여 물리 화학적 특성이 표현된다. 공정 스트림의 엔탈피나 엔트로피를 계산하거나 플래쉬에서의 평형상수를 계산하기 위해서는 각각의 화합물에 대한 기초 물성 데이터가 필요하다. NAFOS에서는 Krane 모델의 경우 6개의 순물질과 15개의 기상 순물질을 취급하는데, 새로운 반응 모델의 경우는 모두 29개의 성분을 취급하게 된다. 이 두가지 모델에서 사용하는 여러가지 물질들은 하나의 물성치 데이터 베이스에 저장하여 각 모델의 경우에 따라 선택하여 사용하게 된다. 가 물질의 기본 물성치는 그 가물질을 구성하는 순물질들의 혼합물을 플래쉬 계산을 하여 계산하였다.

스트림 연결 데이터

각 단위공정의 입력 스트림과 출력 스트림이 결정되어야 단위공정의 계산 순서가 결정될 수 있다. 각 단위공정의 연결상태는 변수 IM과 LM에 저장되어 있다.

4.3 물성치 계산 루틴

공정 모사에 필요한 각종 열역학적 물성치를 계산하는

물성치 계산 루틴은 이상 기체 상태식, Soave-Redlich-Kwong 상태식^[10], Peng-Robinson 상태식^[8] 등의 열역학적 관계식들을 갖추고 있다. 특히 나프타 개질공정의 각 물질 스트림에는 다량의 수소가 포함되어 있기 때문에, 정확한 계산을 위해서 수소가 포함된 시스템에 적용할 수 있도록 알맞게 고쳐진 S-R-K 상태식을 사용하였다. 물성치 계산 루틴은 각 단위공정 계산 루틴이 필요로 하는 평형상수, 엔탈피, 엔트로피 뿐만 아니라 혼합물의 비등점 온도나 압력 (bubble point temperature or pressure), 이슬점 온도나 압력 (dew point temperature or pressure) 등을 계산한다.

4.4 수치 해석 루틴

수치 해석 루틴은 단위공정 계산 루틴과 물성치 계산 루틴에서 풀고자 하는 여러 가지 선형 및 비선형 방정식의 해를 구한다. 초기 가정치가 하나 주어진 문제는 단변수 Newton-Raphson 법을 사용하여 풀고, 해의 범위가 정해진 문제는 Half interval 법과 단변수 Secant법에 의해 푼다. 다변수 연립 비선형식을 풀기 위해서는 Wegstein 법을 사용한다. 반응기 모델의 연립 상미분 방정식을 풀기 위해서는 Gear의 방법을 사용한다.

Newton-Raphson 수렴 전략

화학공정의 모델식들은 비선형성이 심하고 여러가지 복잡한 식들이 얽혀 있는 경우가 많다. 그리고 혼합물의 비등점을 구하는 경우와 같이, 물리적으로 존재하지 않는 영역에서 계산을 시작하여 물리적으로 의미를 갖는 값을 최종적인 해로 구해야 하기 때문에 계산 도중 발산하기 쉽다. 그래서 보다 해에 가까운 초기치를 주는 것과 아울러, 효과적인 계산 수렴 전략이 필요하다. NAFOS에서 각종 해를 구하는데 사용되는 Newton-Raphson 루틴은 수렴 계산의 경로를 내부에 기억하고 있다가 수렴이 잘 되고 있다고 판단되면 감쇄 계수 (damping parameter)를 늘여 주고, 그 반대의 경우에는 감쇄 계수를 줄여 주어 수렴의 안정성과 효율성을 향상 시켰다.

5. 사례연구

Krane Model

국내 모 정유 공장에 부속된 나프타 개질공정의 조업 데이터와 나프타 원료 조성을 사용하여 NAFOS 시스템을 시험해 보았다. 공정도는 그림 1 과 같으며 각 단위공정에서의 압력 강하도 공정도에 표시된 것과 같다. 재순환되는 수소와 나프타 원료의 비는 5.5로 유지된다. 원료 유출 열교환기의 최소 접근 온도 (MTA)는 40°F이고 각 반응기에 유입되는 반응물의 온도는 히터에 의해 931°F로 유지된다. 이와 같은 조업 데이터를 사용하여 NAFOS 시스템과 ASPEN PLUS로 공정 모사를 수행하였다. 표 1 에 모사

표 1. Platformate와 Net Make H₂의 모사 결과

Table 1. Results of Platformate Composition

(lbmole/hr)

성분	중요 스트림의 조성		
	원료 (%)	Platformate	Net Make H ₂
H ₂	0.0	9.3820	514.6444
P1	0.0	4.2870	22.4026
P2	0.0	16.6017	16.3185
P3	0.0	47.4073	13.9522
P4	0.0	44.1869	4.7428
P5	1.3191	46.2428	2.0397
P6	18.6836	188.1439	2.4055
P7	17.9899	150.4513	0.7131
P8	14.8850	93.1445	0.1678
P9	8.2276	39.0407	0.0281
P10	2.4971	6.0193	0.0013
N6	4.1105	13.3529	0.0992
N7	5.1521	16.5791	0.0549
N8	4.4804	6.8487	0.0090
N9	2.4555	3.0376	0.0010
N10	0.7510	0.7066	0.0001
A6	1.0197	29.5765	0.2078
A7	2.9215	85.1882	0.1866
A8	4.7593	117.6756	0.0921
A9	0.6557	44.6433	0.0129
A10	0.2500	13.9196	0.0021
합계	100.000	976.4357	578.0817

결과 Platformate와 Net make H₂의 조성을, 표 2 에는 각 단위공정의 모사 결과를 표시하였다.

공정 모사에 사용된 컴퓨터로는 Micro VAX-II가 사용되었고, 문제에 따라 다르지만 같은 초기치 설정에 대해 NAFOS 시스템의 경우에는 25분-1시간 정도의 실행시간이 걸렸고, ASPEN PLUS (VAX)는 2시간 30분-3시간 정도의 실행 시간이 소요되었다.

사례연구에서 Platformate의 조성은 NAFOS 시스템과 ASPEN PLUS가 큰 오차 없이 일치하는데 반해, 각 단위

표 2. 단위 공정의 모사 결과

Table 2. Simulation Results of Unit Processes

단위 공정 변수	NAFOS	ASPEN +
압축기 입력 (HP)	1131.20	1138.53
#1 반응기 출구 온도 (°F)	819.66	954.98
#2 반응기 출구 온도 (°F)	892.15	958.31
#3 반응기 출구 온도 (°F)	916.25	959.35
#1 히터 duty (Btu/hr)	9.587×10 ⁶	4.595×10 ⁶
#2 히터 duty (Btu/hr)	1.718×10 ⁷	2.909×10 ³
#3 히터 duty (Btu/hr)	8.116×10 ⁶	-4.336×10 ⁵
열교환기 duty (Btu/hr)	9.191×10 ⁷	9.717×10 ⁷
공기 냉각기 duty (Btu/hr)	-9.220×10 ⁶	-9.847×10 ⁶
플래쉬 온도 (°F)	99.53	99.51

공정 모사 결과에서 열 용량등은 상당한 차이를 보이고 있다. 이것은 NAFOS 시스템의 순물질에 대한 엔탈피 데이터가 ASPEN PLUS의 데이터와 다르기 때문이다. ASPEN PLUS의 경우 가장 순물질의 생성열을 0으로 취급하는데, 이것은 실제와 다르므로 NAFOS 시스템에서는 PROCESS의 데이터를 사용하여 생성열 데이터는 보충해 주었다. 이 결과 표 2에서 나타난 것처럼, 개질반응이 흡열반응인데도 ASPEN PLUS의 모사 결과는 반응기의 온도가 상승한 것으로 나타나지만, NAFOS 시스템은 온도가 감소한 결과를 보여 주고 있다. 이상에서 처럼 나프타 개질공정에 대해서는 NAFOS 시스템의 결과가 ASPEN PLUS보다 더 실제에 가까움을 알 수 있다.

새로운 반응 모델에 의한 모사 결과

새로운 반응 모델에 의한 모사의 사례 연구는 이 반응 모델이 온도와 수소 분압의 변화가 반응의 전환율과 구조에 미치는 영향을 예측할 수 있으므로 이에 대하여 연구를 수행하였다. 모사 결과 실제 공정의 조업 결과와 부합되는 경향을 나타내었다. 자세한 모사 결과는 생략하였다.

6. 결과 검토 및 제안

(1) 본 연구에서 개발된 NAFOS 시스템은 FORTRAN 77로 작성 되었고, 전체 프로그램의 크기는 7,000줄 정도이다. 범용 모사기인 ASPEN PLUS를 사용하여 Platforming 공정에 대한 사례 연구를 해 본 결과, 나프타 개질공정에 대해서는 NAFOS 시스템이 보다 빠른 실행속도와 정확함을 보였다.

(2) 본 나프타 개질공정의 모사에 사용된 열역학적 모델은 Soave-Redlich-Kwong 상태 방정식이다. 개질공정에서 취급하는 각 성분들은 물리적으로 상호작용이 없는 비극성 내지는 극성이 약한 물질이므로, 이 계산 방법이 유효하게 적용되었다.

(3) Tear 스트림 초기치 설정은 전체 공정의 수렴에 막대한 영향을 미친다. 본 연구에서는 2단계 수렴 전략을 사용하여, 1차 공정 모사에서 적당한 오차 범위내에 수렴된 결과를 2차 모사에서 초기치로 설정하여 수렴의 효율을 높였다.

(4) 수렴 계산의 경로를 컴퓨터가 기억하고 있다가 수렴이 잘 되고 있는가를 판단하여, Newton-Raphson 법의 감쇄 계수를 조정해 줌으로서 NAFOS 시스템의 열역학 계산 및 단위공정 계산의 효율성과 안정성을 향상 시켰다.

(5) 컴퓨터 모사 결과를 현재 조업 중인 나프타 개질공정의 결과와 비교 검토하여 적용성을 평가하고, 오차가 있을 경우 모델을 조정하여 정확성을 높여 가는 것이 필요하다. 본 연구에서 채택한 반응기 모델은 문헌에 발표된 것을 현장 적용성 검토 없이 사용했기 때문에, 현장 적용성을 갖

추려면 보다 상세하고 정확한 모델이 필요하다. NAFOS 시스템은 새로운 루틴의 첨가가 용이한 모듈식 구조이기 때문에 반응기 모델의 변화나 열역학적 모델의 변화를 쉽게 구현할 수 있다.

감 사

본 연구는 목적기초 연구의 일환으로 수행되었으며, 이를 지원해 준 한국과학재단에 감사함을 드립니다.

참 고 문 헌

- [1] 신세희, "나프타 개질공정 반응 모델," 중앙대학교 화학공학과 연구 보고, (1991)
- [2] 조인호, 윤인섭, "순차적 모듈 접근법과 이중 모델 접근법을 혼합한 공정 최적화 전략," 화학 공학, 제27권, 제4호, (1989)
- [3] 최영호, "나프타 개질공정 정상상태 모사기 개발," 석사 학위 논문, 서울대학교 화학공학과, (1990)
- [4] Gates, B.C., J.R.Katzer and G.C.A.Schit., "Chemistry of Catalytic Process," McGraw-Hill, New York, (1978)
- [5] "fMSL Library," International Mathematical & Statistical Libraries, Inc., Houston, (1985)
- [6] Krane, H.G., A.B.Groh, B.L.Schulman and J.H.Sinfelt, Proc. 5th World Petroleum Congress, New York, (1959)
- [7] Lee, J.W., "A Simultaneous Modular Approach to Chemical Process Simulation," M.S. Thesis, Seoul National University, (1987)
- [8] Peng, D.Y., D.B.Robinson, Ind. Eng. Chem. Fund., Vol.15, (1976)
- [9] Smith, R.B., Chem. Eng. Progr., Vol.55, No.6, (1959)
- [10] Soave, G., "Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State," Chem. Eng. Sci., Vol.27, (1972)
- [11] Spitz, P.H., "Petrochemicals," John-Wiley & Sons, New York, (1988)
- [12] Weiszmann, J.A., "Handbook of Petroleum Refining Process," R.A. Meyers, Editor, McGraw-Hill, New York, (1988)