

gPROMS를 이용한 FT 반응기 상세 모델링

한상필*, Zbigniew Urban¹

PSE Korea Ltd; ¹Process Systems Enterprise Ltd.

(s.phil.han@psenterprise.com*)

Syngas로 부터 Hydrocarbon 제품을 생산하는 Fischer-Tropsch (FT) 반응기는 고정층 촉매 (Fixed Catalyst Bed) 반응기 형태와 슬러리 (Slurry) 반응기 형태가 있으며, PSE사는 gPROMS를 기반으로 이 두 가지 반응기 종류에 대한 상세 모델을 개발하여 FT 반응기 개발 및 운전과 관련한 여러 단계에서 활용을 하고 있다. 이 모델은 FT 반응 Kinetics, component 정의 및 물성 계산, catalyst pellet 주변에서의 3-phase mass and heat transfer, catalyst deactivation, catalyst bed에서의 mass and heat transfer, population balance, 등 고정층 또는 슬러리 반응기의 해석 및 설계를 위해 고려해야 할 모든 현상들이 개별적/종합적으로 고려되었다. 이에 따라서, 촉매 성상의 결정에서부터 반응기 형태 및 Size의 결정에 이르기까지 다양한 단계에서 해석/설계용으로 사용이 가능하며, gPROMS의 기본 기능인 Parameter Estimation과 Optimization 기능을 활용하여 실험 Data를 기반으로 parameter 값들을 구하거나, 성능과 경제성이 최적화된 반응기 설계안을 도출하는 등의 일도 가능하다. 더 나아가서 상기의 반응기 모델을 그대로 다양한 다른 공정과 함께 Flowsheet에 포함시켜 Dynamic Simulation 및 Optimization 기능을 이용하여 Plant 수준에서 다양한 진단/ 평가를 하는 데에도 활용이 가능하다.