

三相共流充填塔의 動的差異에 關한 考擦 (I)

金 永 旭*

Dynamic Discrepancies of Trickle Phase Recorder (I)

Young Wook Kim

Dept. of Chem. Eng., Korea Univ.

Abstract

Dynamic discrepancies of a trickling reactor was studied. The trickling phase reactor has been widely employed in the area of hydrotreating and/or hydrocracking processes during the last decade. Since the process has not been understood thoroughly, the scale-up process solely depends on matching the residence time of two reactors, pilot and actual, reactor, based on the plug flow assumption. Therefore the dynamic discrepancies between a pilot unit and a commercial unit has been often reported in the literature. This study pursuits two major categories namely the process time constant discrepancy and the steady gain discrepancy which have already been reported elsewhere. The first report deals the time constant discrepancy and its analog computer analysis and the second report describes the steady gain analysis via Digital Computation simulation.

1. 緒 論

Hydrocracking 을 위한 trickle phase reactor 의設計를 目的으로 reactor dynamic model 을 hybrid computer 에 simulate 한 것이 報告되었다(7). 이는 그基礎實驗에 쓰여진 pilot plant reactor 에서 얻어진 材料와 情報(information)를 그대로 적용하였기 때문에 scale-up 된 reactor 와는 그 dynamic 에 큰 差異를 갖어왔고 自動制御研究(control study)에도 많은 混亂을 招來하였다(1, 2, 3). 本研究는 이러한 dynamic discrepancy 등을 分析하였고 새로운 方法으로 reactor simulation 을 통해 그 dynamic discrepancy 의 原因을 규명함으로 充填塔(packed bed)全般에 있어 小規模 reactor 와 大規模(scale-up) reactor 間의 dynamic discrepancies 를 一括적으로 分析하였다. 本報에서는 그중 process

time discrepancy 에 對한 問題만을 다루었고 그過程에서 偏微分方程式(partial differential equations)을 보다 쉬운 常微分方程式(ordinary differential equations)으로 對置하여 analog computer 만으로도 real time simulation 을 할 수 있는 方法을 提示하였다.

2. 研究方向과 範圍

本研究에서 다룬 reactor model 은 adiabatic trickling reactor 이다. 이는 尙今 그 工程이 系統的으로 理解되고 있지 않다(3). 그러므로 scale-up 의 方法마저도 잘 研究되어 있지 않으나 實驗結果를 土臺로 滞在時間(residence time) 만을 爲主로 하여 scale-up 해오고있다(1). 그러나 事實上 pilot plant reactor 와 full scale reactor 間에는 많은 物性的差異(plupical difference)를 否認할 수 없다. 卽 斷熱條件(Adiabatic condition)을 만족 시키기 爲하여 pilot plant 에서는 相當한 裝置

*高대 工理大 化學工學科

를 요한다. 그러나 reactor의 크기가 충분히 크면 斷熱은 自然的으로 이루어 지므로 reactor의 外壁에 若干의 斷熱材만을 써도 斷熱이 可能케 된다. 둘째로 reactor의 直徑이 크면 相當한 channelling 現象을 豫測할 수 있는데 比하여 작은 pilot scale에서는 오히려 wall flow가 더 걱정해 진다고 볼 수 있다(6). 이렇게 다른 두 system을 두고 滯在時間(residence time)을 plug flow model에 依하여 계산하고 두 reactor system을 滯在時間(residence time)만 맞추었다고 해서 그 dynamic이 같을 수는 없는 것이다. 그 結果 다음의 두가지의 問題가 야기 되었다(2).

(a) Process time constant의 差異

(b) Steady gain의 差異

上記 두 問題로 말미암아 pilot plant의 dynamic을 土臺로한 一連의 制御研究(control study)는 自紙化되고 말 것이다(3,7). 그러므로 本研究은 의를 分析하여 앞으로 일어날 수 있는 dynamic discrepancy의 原因을 규명하는데 目的을 두었고 本報에서는 process time constant의 問題만을 報告 하겠다.

3. 裝置(Heater Controlled Adiabatic Reactor)

實驗室 bench scale이나 pilot scale reactor의 경우 adiabatic reactor의 설계 方法은 多樣할 것이다. 그러나 보다 正確한 實驗을 爲하여서는 Fig. 1에 表示된

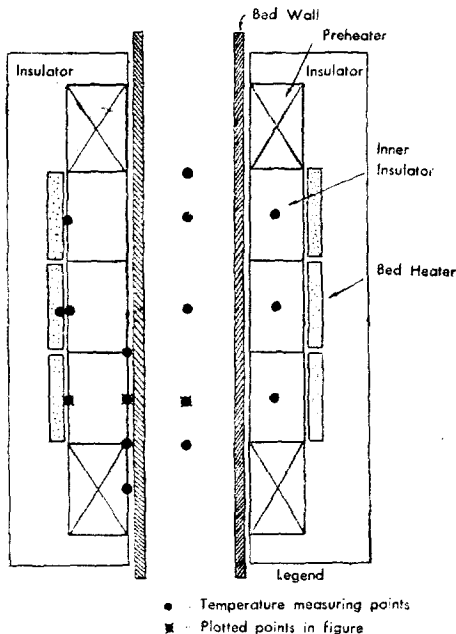


Fig. 1. Heater Controlled Adiabatic Bed.

바와 같이 reactor 外部에 heater를 裝置하여 reactor 內外部의 溫度差가 없도록 heater를 control하는 方法 일 것이다. 그 外는 그에 關한 附帶장치로서 여러 겹의 다른 斷熱材 등이 장치되고 또 高壓下의 反應이므로 reactor wall은 두꺼운 stainless steel로 되어 있다. 이 점에서 留意할 점은 이 塔壁의 두께인데 이는 full scale이나 pilot scale이나 같은 壓力下이므로 두께의 差異가 별로 없지만 reactor 單位 높이에 對한 塔壁이 차지하는 重量을 해당 catalyst 量에 比할때 pilot plant의 경우는 엄청나게 큰 比重을 차지하고 있다. 그래서 于先 이 pilot plant의 time constant는 full scale보다도 엄청나게 다를 것이 豫想되나 그 order 결정이 있어서 實驗裝置와의 對照가 要求되므로 pilot plant의 히터(heater)와 斷熱材 등의 real time simulation이 있어야 되겠다. 이런 研究에는 analog computer가 가장 손쉬운 것이나 그 simulation 過程에 있어 어려운 偏微分方程式을 연립으로 다루어야 한다. 더욱이 reactor의 壁이 圓形이므로 그 方程式은 analog computer로써 취급하기 어려운 點이 많다(4,8).

4. Analog Computer Simulation Technique

Tubular reactor의 壁과 斷熱材 등을 simulate하기 爲한 方程式은 (1)式으로 表示된다.

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = \alpha_i \left(\frac{\partial T_i^2}{\partial r_i} + \frac{1}{r_i} \frac{\partial T_i}{\partial r_i} \right) \quad (1)$$

이는 고 物性(physical property)이 같은 한점(i-th layer)에만 局限되고 다른 층과는 서로 接面條件(interface condition)을 감안해서 이를 連結시켜야 한다. 이 式을 CTDS (continuous time discrete space)로 취급해서 finite difference equation으로 하면 되겠지만 그렇게 되면 이 (1)式의 右邊이 $\frac{1}{r_i} \frac{\partial T_i}{\partial r_i}$ 項 때문에 오는 計算上安定度(Stability)도 問題이러니와(4) 그 increment의 數에 따른 數式의 복잡으로 원만한 analog computer로는 취급할 수 없을 만큼 그 규모가 커진다. 卽 PACE 231R의 size로도 취급하기 어려울만큼 amplifier의 數가 늘어나고 그럴수록 프로그램이 어려워지고 복잡하여진다. 그래서 이 方程式(1)을 直接使用하지 않고 다음과 같이 layer by layer 式의 熱收支(energy balance)를 세워서 풀도록 했다. Fig. 2는 그 熱收支(energy balance)를 잡기 爲하여 만들어진 Schematic Diagram이다. 그중 i-층項의 熱收支(energy balance of i-th layer)의 energy balance를 잡아보면

$$q_{i \text{ IN}} - q_{i \text{ OUT}} = \frac{dQ_i}{dt} \quad (2)$$

그리고

$$q_{i \text{ OUT}} = k_i 2\pi r_i \Delta Z \frac{dT_i}{dr_i} \quad (3a)$$

$$= \frac{k_i 2\pi \Delta Z}{\ln \frac{r_i}{r_{i-1}}} (T_i - T_{i-1}) \quad (3b)$$

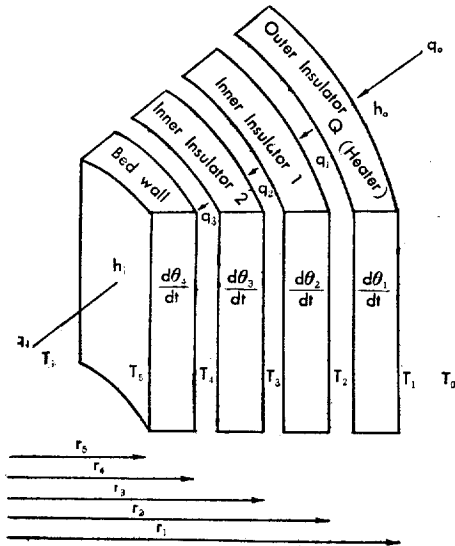


Fig. 2. Schematic Diagram of Outer layer of Packed Bed.

그래서 i 제 층의 정상상태(steady state) 때의 온도 분포식은

$$q_{i \text{ OUT}} = \ln \frac{r}{r_{i-1}} = k_i 2\pi \Delta Z (T - T_{i-1}) \quad (4)$$

혹은

$$q_{i \text{ OUT}} = \ln \frac{r_i}{r_{i-1}} = k_i 2\pi \Delta Z (T_i - T_{i-1}) \quad (5)$$

으로 표시된다. 식(4)는 어떤 점 r 까지의 분포를 표시하고 식(5)는 $i-1$ 에서 i 까지의 온도분포를 나타내는 식이다. 그러므로 식(4)와 (5)에서

$$T - T_{i-1} = (T_i - T_{i-1}) \frac{\ln \frac{r}{r_{i-1}}}{\ln \frac{r_i}{r_{i-1}}} \quad (6)$$

以上 정상상태의 온도분포(temperature profile)를 구명했다. 이제 편미분방程式를 풀지 않고 과도기 熱傳達束(transient heat flux)을 나타내기 위하여 다음과 같은 가정을 세운다. 卽 各層 内部 或은 外部에 갑자기

溫度差가 생기면 그 溫度의 分布(Profile)는 卽時로 式(6)에 表示된대로 따른다고 생각한다. 이런 가정은 熱전도율이 아주 나쁜 두꺼운 층에서는 不適當하겠으나 普通의 경우 그 結果가 滿足스러웠던 것으로 알려졌다 (5).

以上의 가정으로 과도기 熱傳達項(transient component) $\frac{dQ_i}{dt}$ 를 계산하기 爲해서 Fig. 3의 그림을 참조하였다. Fig. 3에 依해서 實地로 溫度를 올리는데 쓰인 熱(sensible heat)의 時間 t 때와 $t + \Delta t$ 때를 각각 생각하면

$$Q_i(t) = \int_{r_{i-1}}^{r_i} \rho_i C p_i (T - T_{i-1}) 2\pi r \Delta Z dr \quad (7)$$

式(6)과 (7)에서

$$\begin{aligned} Q_i(t) &= \int_{r_{i-1}}^{r_i} \rho_i C p_i \frac{T_i(t) - T_{i-1}(t)}{\ln \left(\frac{r}{r_{i-1}} \right)} \ln \left(\frac{r}{r_{i-1}} \right) 2\pi r \Delta Z dr \\ &= \rho_i C p_i \pi \Delta Z \left[r_i^2 - \frac{1}{2} \frac{r_i^2 - r_{i-1}^2}{\ln \frac{r_i}{r_{i-1}}} \right] (T_i(t) - T_{i-1}(t)) \end{aligned} \quad (8)$$

時間 $t + \Delta t$ 때는 式(8)과 對等한 項과 또 全體溫度에 上昇을 表示하는 項의 結合으로 되겠다. 卽

$$\begin{aligned} Q_i(t + \Delta t) &= \rho_i C p_i \pi \Delta Z \left(r_i^2 - \frac{1}{2} \frac{r_i^2 - r_{i-1}^2}{\ln \frac{r_i}{r_{i-1}}} \right) \\ &\quad \{ T_i(t + \Delta t) - T_{i-1}(t + \Delta t) \} \\ &\quad + \rho_i C p_i \pi (r_i^2 - r_{i-1}^2) \Delta Z [T_{i-1}(t + \Delta t) - T_{i-1}(t)] \end{aligned} \quad (9)$$

$$\frac{dQ_i}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{Q(t + \Delta t) - Q_i(t)}{\Delta t} \quad \text{이므로}$$

式(8)과 式(9)에서

$$\begin{aligned} \frac{dQ_i}{dt} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\{ A \frac{T_i(t + \Delta t) - T_i(t)}{\Delta t} \right. \\ &\quad \left. + (-A + B) \frac{T_{i-1}(t + \Delta t) - T_{i-1}(t)}{\Delta t} \right\} \\ &= A \frac{dT_i}{dt} + (-A + B) \frac{dT_{i-1}}{dt} \end{aligned} \quad (10)$$

여기에서 常數項 A 와 B 는

$$A = \rho_i C p_i \pi \Delta Z \left[r_i^2 - \frac{1}{2} \frac{r_i^2 - r_{i-1}^2}{\ln \frac{r_i}{r_{i-1}}} \right]$$

$$B = \rho_i C p_i \pi \Delta Z (r_i^2 - r_{i-1}^2)$$

i 번째 층(i -th layer)의 熱收支(heat balance)는 式(2)에 表示된 바와 같이 $q_{i \text{ IN}} - q_{i \text{ OUT}} = \frac{dQ_i}{dt}$ 이나 i -th section의 $q_{i \text{ IN}}$ 은 $i-1$ section의 $q_{i \text{ OUT}}$ 과 같다. 卽

그러므로 $q_i \text{ IN} = q_{i-1} \text{ OUT}$ (11)

$$\frac{dQ_i}{dt} = q_{i-1} - q_i \quad (12)$$

q 의 一般式은

$$q_i = \frac{h_i 2\pi \Delta Z}{\ln \frac{\pi_i}{\pi_{i+1}}} (T_i - T_{i+1}) \quad (13)$$

인테 reactor의 内外壁 即 境界條件(boundary condition)에서는

$$q_0 = h_0 2\pi r_1 \Delta Z (T_0 - T_1) \quad (14)$$

$$q_4 = h_i 2\pi r_5 \Delta Z (T_5 - T_i) \quad (15)$$

로써 표시된다.

그리고 $\frac{dQ}{dt}$ 의 一般式은

$$\frac{dQ_i}{dt} = A_i \frac{dT_i}{dt} + (-A_i + B_i) \frac{dT_{i+1}}{dt} \quad (16)$$

以上 경우를 종합해서 연결지우면

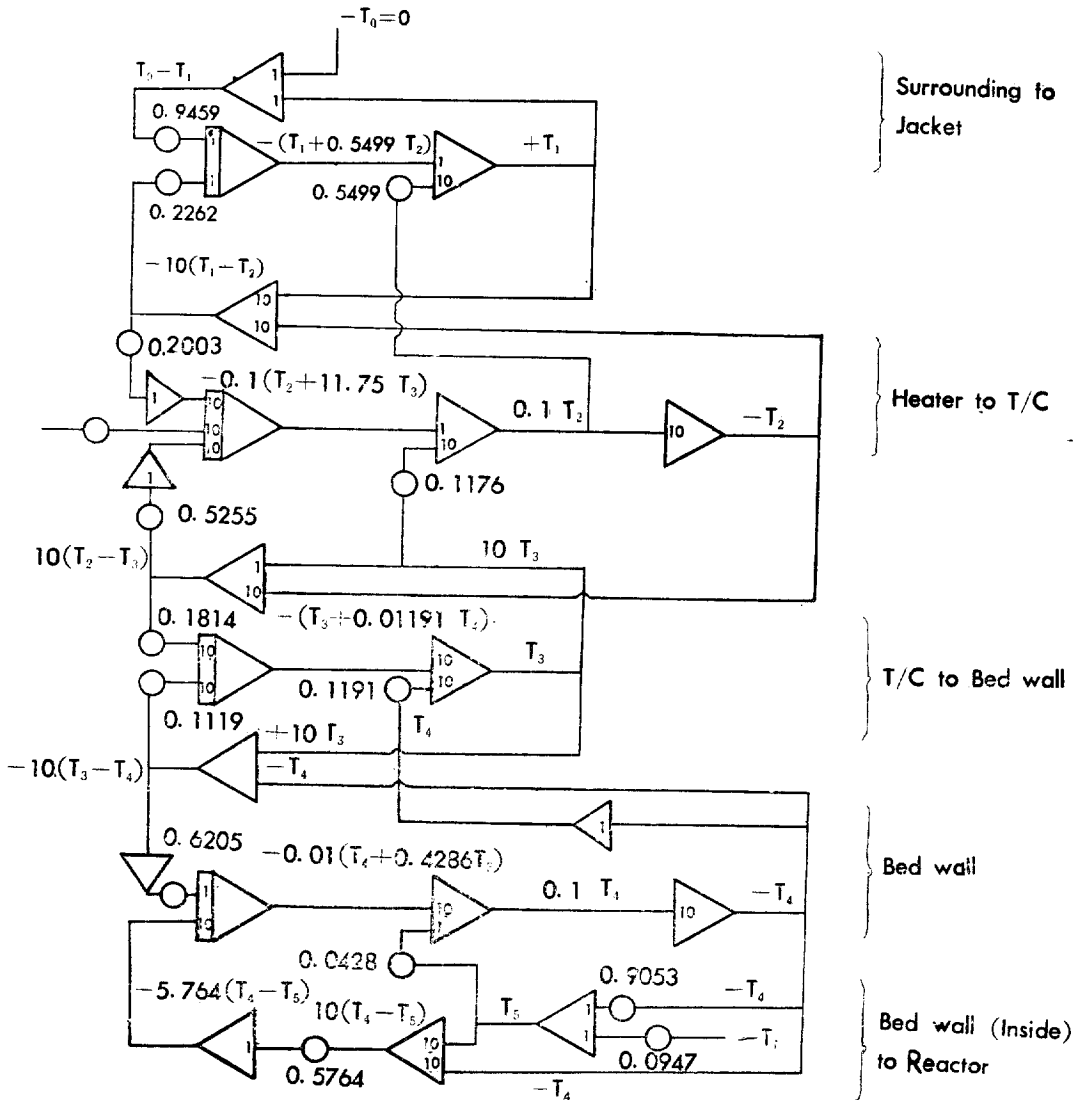


Fig. 4. Analog Computer Simulation of Outer wall Area of Packed Bed.

$$A_i \frac{dT_i}{dt} + (-A_i + B_i) \frac{dT_{i+1}}{dt} = C_i(T_i - T_{i+1})C_{i+1}(T_{i+1} - T_{i+2}) \quad (17)$$

여기서

$$C_i = \frac{k_i 2\pi \Delta Z}{\ln \frac{r_i}{r_{i+1}}}$$

$$C_{i+1} = \frac{k_{i+1} 2\pi \Delta Z}{\ln \frac{r_{i+1}}{r_{i+2}}}$$

이다.

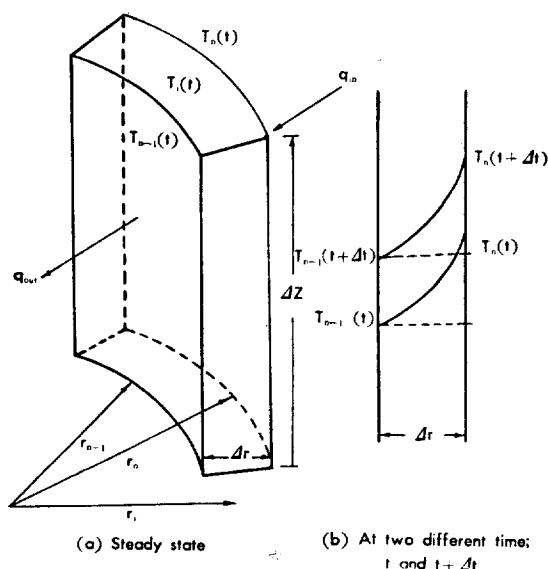


Fig. 3. Analysis of Transient Heat Component.

(17)식의 常數를 計算하고 또 scaling 을 하여 이것을 analog computer 에 simulate 하였는데 이는 다루기가 쉬운 常微分方程式이고 또 Fig. 4에서 보는 바와 같이 層別로 diagram 에 表示되므로 恒常 必要에 따라 첨가 혹은 삭제할 수도 있는 간편한 diagram 이다. 그 결과인 heater 의 step input response 를 Fig. 5 에 나타내었다. 이는 各層의 界面溫度(interface temperature)를 X-Y recorder 에 依해서 圖示하였다.

5. 結 論

以上에 依한 方法으로 偏微分方程式을 常微分方程式으로 改쳐서 손 쉽게 電子計算機에 依해서 그 解를 求할 수 있고 이는 電子計算機에 依해서 解를 求할때 問題點인 安定度(stability)에 對해서 影響을 받고 그 解

를 얻었다. 그러나 단지 주의해야 될 것은 이 解가 實地充填塔을 代辯하는 simulation 이냐? 아니냐? 하는 問題만이 남는데 이는 各層의 熱傳導度(conductivity)가 均일하고 各層사이에 빈 空間이 없는 경우 滿足스러운 結果를 얻을 수 있다는 것은 實際實驗値와의 比較(Fig. 5 참조)에서 잘 보여주고 있다. 이러한 simula-

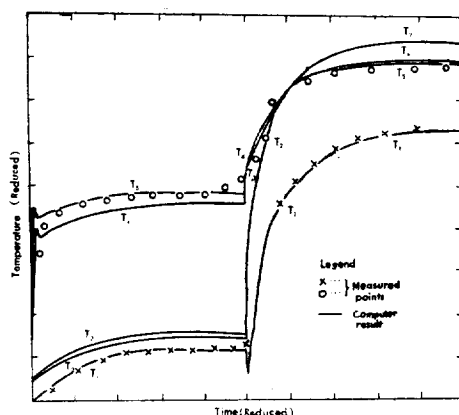


Fig. 5. Step Response of Reactor Surface.

tion 方法은 값싸게 analog computer 만으로 real time simulation 을 可能하게 함으로 工程制御研究에 도움이 된다고 생각된다. 勿論 이 方法이 計算上의 安定度(calculation stability)에 全혀 無關한가에 對한 數學的 解析을 將來의 宿題로 思料된다.

Nomenclature

T_i	: Temperature at i th layer	(°F)
r_i	: Radius	(ft)
α_i	: Thermal diffusivity	(ft ² /hr)
k_i	: Thermal conductivity of i th layer	(Btu/fr hr)
t	: Time	(hr)
q	: Heat	(Btu/hr)
Q	: Sensible heat	(Btu)
Z	: Axial distance	(ft)
A	: Constant	(=)
B	: Constant	(=)
C	: Constant	(=)

References

1. Abbott, M.D. and fountain, E.B; Shell Dev. Co. Tech. Report. No. 9-64.
2. Borsboom, A.C.H.; Shell Dev. Co. Tech. Report. No. 67-65.
3. Bremer, A. and Stanton, B.D.; Shell Dev. Co. Tech. Report. No. 101-63.
4. Johnson, C.L; "Analog Computer Techniques" McGraw-Hill Co New York (1963).
5. Kim, Y.W.; "A Study of Automatic Control in the area of Hygrometer," M.S. Thesis, Univ. of Tenn. (1964).
6. Lapidus, L.; *Ind. Eng. Chem.*, **49** (6) 1,000 (1957).
7. Moser, J.H., Orr, C.R., and Clithoff, C.J.; Houston Research Lab, Shell oil co. Tech Report No. 67-65 (1965).
8. Smith, G.W. and Wood, R.C.; "Principles of Analog Computation" McGraw Hill Co. New York. (1959).