

고압흡착평형에 대한 열효과 모델링

서봉국^{*} · 조찬휘^{**} · 이창하^{***} · 백기황^{*}

*선경건설(주) 연구소

** 영동공과대학교 화학공학과

*** 연세대학교 화학공학과

A Modeling of Heat Effects on the Adsorption Equilibrium at Elevated Pressure

B.K.Seo^{*}, C.H.Cho^{**}, C.H.Lee^{***}, K.H.Baek^{*}

* Res. and Dev. Center, Sunkyong Engineering and Construction

** Department of Chemical Engineering, Youngdong Institute of Technology.

*** Department of Chemical Engineering, Yonsei University

서론

초기 PSA 공정의 이론적 해석은 기체정제와 같이 흡착량이 작아 상대적으로 등온공정을 가정할 수 있어서 선형이나 비가역 모델을 이용한 해석이 주류를 이루었지만, 최근에는 수소의 벌크분리와 같이 비선형 흡착공정에 대한 모델링이 시도되고 있다. 이러한 공정에 대한 모델의 해석은 많은 계산시간과 수학적 기법이 요구되고 있다.¹⁾

현재 상용화된 흡착공정 모델링 프로그램은 ASPEN Tech.에서 개발된 ADSIM/SU로서 SPEEDUP을 기본으로 흡착공정 모델을 적용한 프로그램이다. 본 연구는 ADSIM/SU를 이용하여 H₂/CO₂ 성분 시스템의 공정모사를 수행한 결과를 보여주고 있다. 또한, PSA공정에 대해 등온모델, 단열모델, 비등온모델 등의 모사결과를 비교, 검토하였다.

본론

1) 모델링

모사에 사용된 모델은 다음과 같다.²⁾

- Plug flow model
- Flow model; Compressible flow model (Darcy's law)
- Mass transfer model; Lumped resistance model (linear solid film model, constant mass transfer coefficient)
- isothermal model; Langmuir-Freundlich model
- Heat effect; Isothermal model
Adiabatic model
Nonisothermal model
- heat of adsorption; constant heat value.

- Gas law type; Ideal gas law
- Numerical method; Upwind finite difference method.

2) 모사결과 비교

파과곡선 모사결과를 그림 1에 나타내었다. 단열공정인 경우 파과 시간은 출구의 CO농도 0.05를 기준으로 460초이며, 파과곡선이 예리하게 나타났다. 등온 모델의 경우 파과시간은 단열모델과 같은 조건하에서 690으로 나타났으며, 비등온 모델의 경우 파과시간이 550초로 나타났다. 따라서 단열모델의 경우가 가장 짧은 파과시간을 보여주었다.

그림 2와 그림 3에 흡착탑 위치와 시간에 따른 온도 분포를 나타내었다. 단열공정의 경우 최고 온도는 327 K였으며, 비등온 모델의 경우 최고 온도는 316 K였다. 단열공정의 경우 시간에 따라 흡착탑 전체가 최고 온도에 접근하고 있었으나, 비등온 모델은 최고온도가 흡착탑 입구에서 출구부분으로 이동하였고, 최고 온도가 시간에 따라 점차로 낮아졌다.

그림 4는 단열공정의 경우 시간에 따른 일산화탄소의 흡착량을 나타낸 그래프로써, 일정시간 이후 흡착탑 입구를 제외한 중간부분에서 출구부분까지 최고온도로 유지되는 범위가 커지기 때문에 입구보다는 낮은 한계흡착량을 갖게된다. 흡착탑 입구의 한계 흡착량은 $1.60 \times 10^{-3} \text{ kmol/kg}$ 이고 중간부분과 출구쪽의 한계흡착량은 $1.00 \times 10^{-3} \text{ kmol/kg}$ 의 차이를 보인다. 그러나 등온모델의 경우 흡착탑 전체가 일정한 온도로 가정되므로 온도에 의한 흡착탑 내부의 한계흡착량 변화가 없다. 등온공정의 한계흡착량은 $1.69 \times 10^{-3} \text{ kmol/kg}$ 이다. 비등온공정의 입구부분의 한계흡착량은 $1.5 \times 10^{-3} \text{ kmol/kg}$ 이며, 흡착탑 중간부분과 출구부분은 온도가 높아졌다가 낮아지기 때문에 한계흡착량에 도달하는 시간이 늦어진다. 따라서 단열공정의 경우 흡착탑의 감압단계 및 Purge단계의 에너지 소모가 다른 공정에 비해 적어짐을 알 수 있다.

결론

H₂/CO 벌크 분리의 경우 파과시간의 차이는 단열공정이 460초, 등온공정이 690초, 비등온 공정이 550초를 나타내어, 큰 차이를 나타냈으며, 공정에 따라 흡착탑 부분적으로 흡착량 및 흡착분포에 차이를 보였다. 이 차이는 모델에 따른 탑내 온도분포 예측의 차이에 그 원인이 있음을 알 수 있었다.

참고문헌

- 1) Gas Separation by Adsorption Process, R.T.Yang, 1987
- 2) ADSIM/SU User Manual, Aspen Tech., Inc. 1994

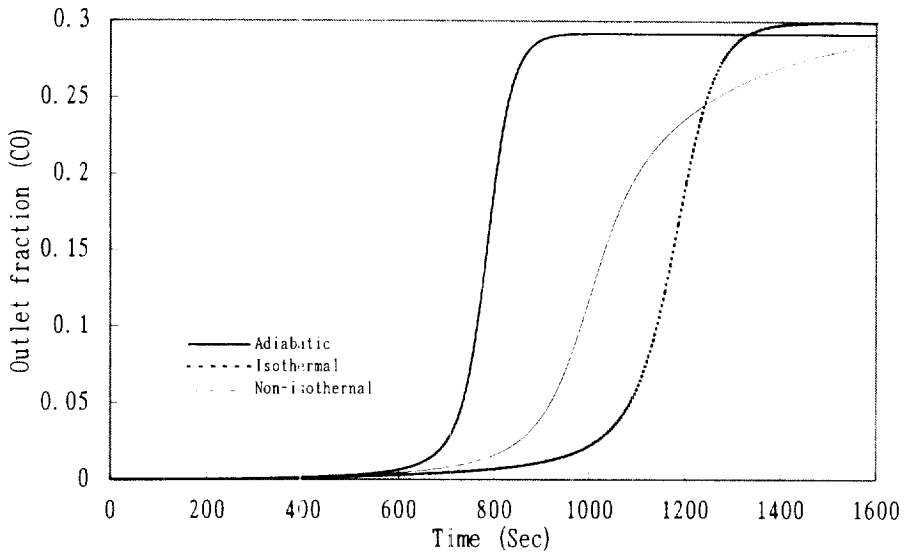


그림 1 Breakthrough Curve vs Time

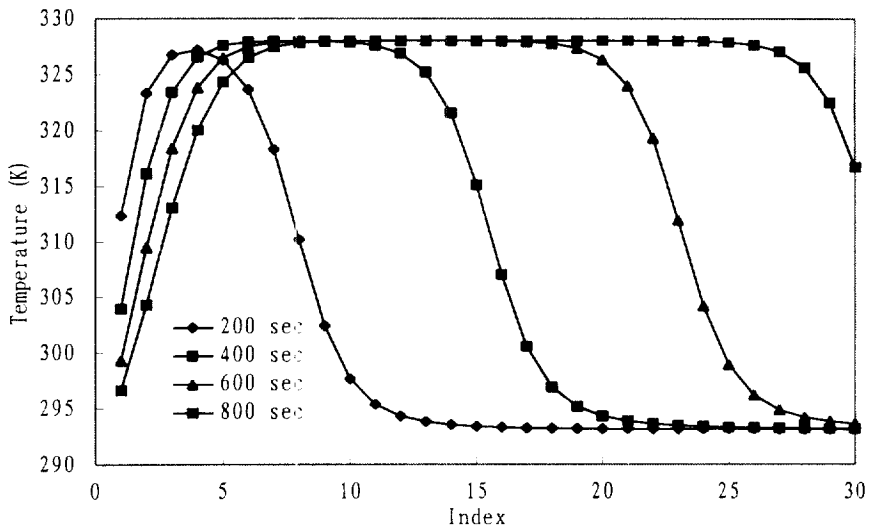


그림 2. Temperature Profiles of Adiabatic Process

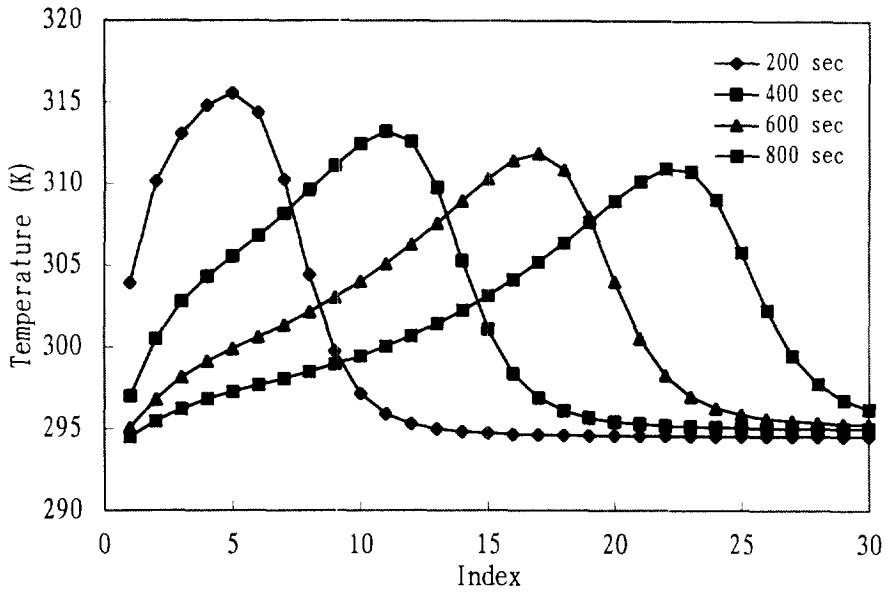


그림 3. Temperature Profiles of Nonisothermal Process

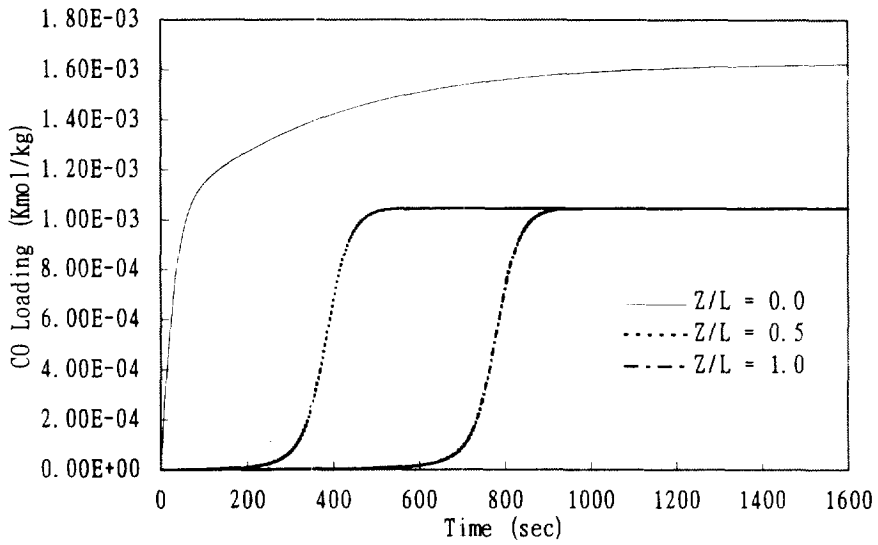


그림 4. CO Loading Profiles vs Time