

MATLAB/Simulink에 기반한 비닐아세테이트 단량체 제조공정의 동적모사기 개발

이정빈, 허수현, 김두일, 김의식, 유영재, 류기윤*
 서울산업대학교 화학공학과
 (kyyoo@snut.ac.kr*)

Development of MATLAB/Simulink-based Dynamic Simulator for Vinyl Acetate Monomer Process

Jeong-Bin Lee, Su-Hyun Heo, Du-Eil Kim, Ui-Sik Kim, Young-Jae Yoo, Kee-Youn Yoo*
 Department of Chemical Engineering, Seoul National University of Technology
 (kyyoo@snut.ac.kr*)

1. 서론

비닐아세테이트 단량체는 에틸렌과 아세트산을 원료로 하여 만들어지는데, 실제 산업에서는 주로 비닐아세테이트 수지로 중합하여 도료, 접착제나 제지용 사이즈제와 추잉검의 베이스 등에 사용된다. 대표적인 비닐아세테이트 단량체 제조 공정에 대한 자료는 Luyben과 Tyreus이 제시하였는데, 아래의 Figure 1.1과 같다¹⁾.

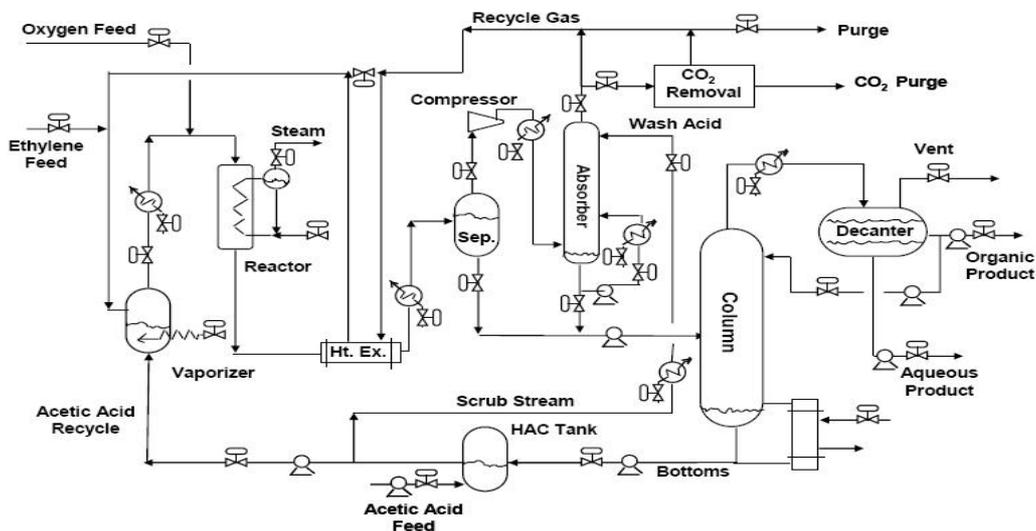


Figure 1.1 Vinyl acetate monomer process flowsheet.

Figure 1.1에 제시된 비닐 아세테이트 제조공정은 기화기, 반응기, 열교환기, 분리기, 압축기, 흡수탑, 증류탑, 아세트산 탱크 및 CO₂ 제거기의 총 10개의 단위장치들로 구성되어 있으며, 각 단위장치들의 설계사양과 전체 공정의 정상상태 운전조건이 비교적 자세히 보고되어 있다. 본 연구에서는 이와 같은 비닐아세테이트 단량체 제조공정을 대상으로 현재 공학 분야에서 널리 사용되고 있는 MATLAB/Simulink[®]를 사용하여 동적 공정모사기를 개발하고, 운전조건 변화

에 따른 단위공정의 동특성 변화와 단위장치들 간의 상호작용으로 인한 전체공정의 동특성 변화추이를 관찰하였다. 추후에는 개발된 공정모사기를 활용하여 전체 공장 규모에서의 효과적인 제어전략과 경제적인 운전을 위한 최적화 연구를 진행할 예정이다.

2. 단위공정의 동특성

본 절에서는 비닐아세테이트 단량체 제조공정 중 주요 단위장치들의 모델링 결과를 제시하였다.

1) 반응기

반응기는 622개의 튜브로 구성된 관형반응기이다. 반응물은 기체상으로 공급되어서 금속촉매로 채워진 튜브를 통과하면서 반응하게 된다. 유체와 촉매 사이에서의 물질전달과 열전달은 매우 빨라서 두 상에서의 농도와 온도가 항상 동일하다고 가정할 수 있다. 또한 반응물의 속도, 농도 및 온도는 radial 방향으로 변화하지 않는다고 가정하여, 플러그 흐름 반응기로 생각할 수 있으며, 축 방향 확산은 벌크 흐름과 비교해서 무시할 만하다. 개발된 반응기 모사기는 반응기의 길이에 따른 농도와 온도변화를 Figure 2.1과 같이 10개의 CSTR이 직렬로 연결되어 있다고 가정하여 모델링을 수행하였다.

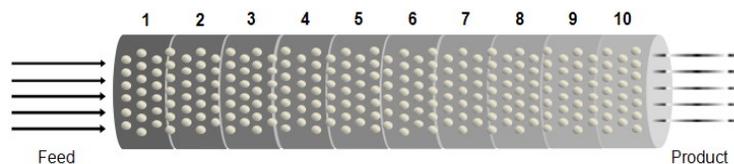


Figure 2.1 Reactor model - 10 CSTRs in series.

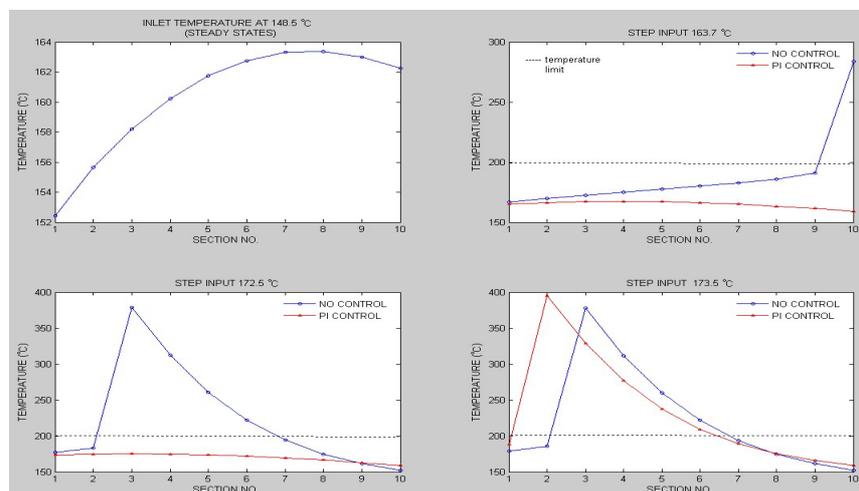


Figure 2.2 Reactor temperature variations in axial direction according to the inlet feed temperature.

Figure 2.2에는 반응공급물의 온도변화에 따른 반응기 내의 온도변화를 개발된 모사기를 사용하여 제시하였다. Hotspot이 발생하면 촉매의 활성이 결정적으로 손상되기 때문에 주요 운전 제한조건으로 반응기 내의 온도는 200°C를 이내를 유지해야 한다. 설계치인 146.5°C에서 15.2°C이상 높은 온도로 반응물이 공급될 때 반응기 끝부분에서 hotspot이 발생이 예측되었고, 25°C이상 높은 온도로 반응물이 공급될 때는 반응기 제열시스템의 수용능력을 초과하는 발열반응으로 200°C 이내로 반응기 온도를 유지할 수 없는 것으로 나타났다.

2) 흡수탑

분리기에서 유입되는 기상의 흐름은 흡수탑 하부로 들어가고, HAc 탱크에서 액상으로 유입되는 흐름은 탑상부로 들어간다. Figure 2.3에 흡수탑의 개략도를 제시하였다. 흡수탑은 총 8단으로 구성되어 있으며, 각 단에서는 기상과 액상 간의 물질전달과 열전달이 각각 유효하다고 가정하였다. 또한 각 단에서의 액상에 대한 물질 및 에너지수지를 사용하여 액상의 농도 및 온도 변화를 모델링하였고 기상은 액상에 비하여 짧은 시간 안에 정상상태에 도달한다고 가정하여 농도와 온도변화를 계산하였다.

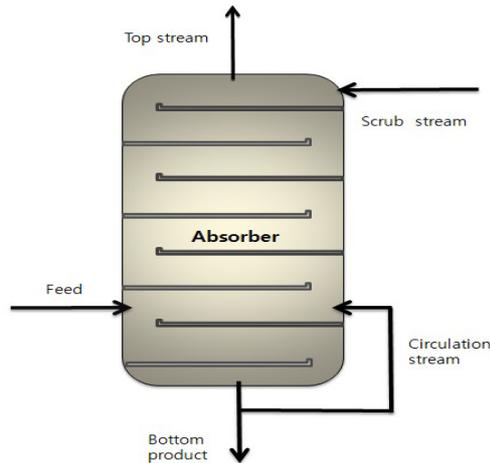


Figure 2.3 Absorption.

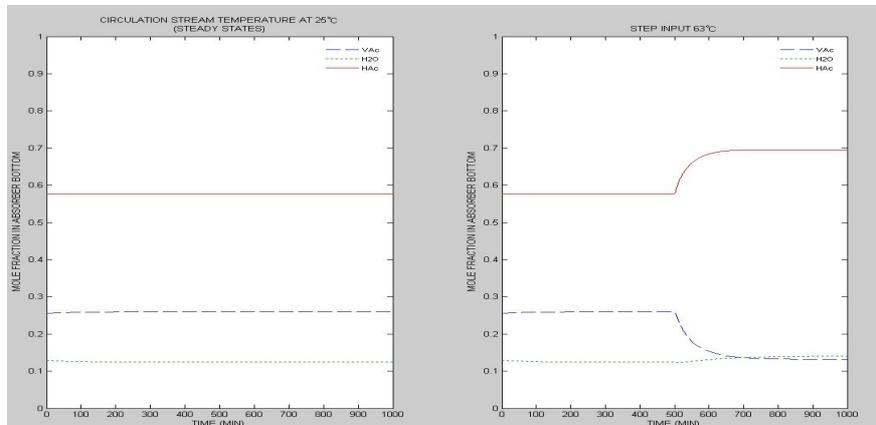


Figure 2.4 Composition variation in absorption bottom according to the circulation stream temperature.

Figure 2.4에는 circulation 흐름의 온도제어 실패에 따른 흡수탑 탑저의 농도 변화를 제시하였다.

3) 증류탑

흡수탑 탑저에서 유출된 흐름의 VAc, HAc 및 H₂O를 휘발도의 차이를 이용하여 원하는 VAc를 분리해내는 증류탑은 20개의 평형단으로 구성된다. 탑저로는 미반응된 HAc가 회수되어 반응기로 recycle 된다. 또한 탑상으로는 VAc와 H₂O로 회수되며, decanter에서 다시 VAc와 H₂O의 상분리가 일어나게 된다. Figure 2.6에 증류탑 공급물의 온도가 10°C 증가하였을 때 decanter의 유기용매 상의 VAc의 조성과 액위변화를 도시하였다.

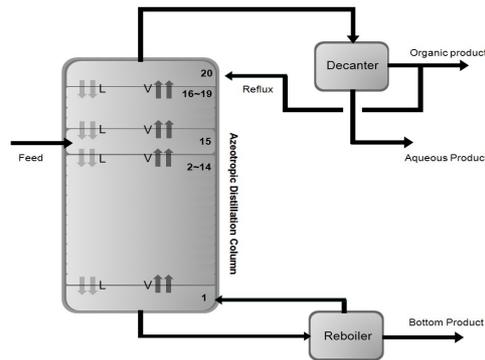


Figure 2.5 Distillation column.

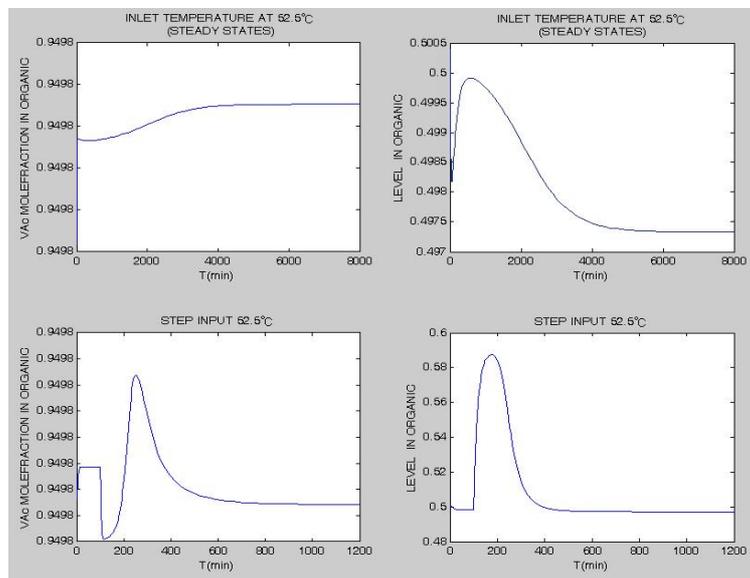


Figure 2.6 Composition and level variation in decanter organic phase according to the feed temperature.

3. 결론

화장품 및 섬유의 원료로 광범위하게 사용되는 비닐 아세테이트 단량체 제조공정에 대한 동적모사기를 MATLAB/Simulink를 사용하여 구현하였다. 전체 공정은 에틸렌, 아세트산 및 산소를 원료로 비닐 아세테이트 단량체를 생성하는 촉매 반응기와 분리기, 흡수탑 및 공비 증류탑으로 구성된 분리공정 및 미반응 물질을 환류시키는 부분으로 구성되어 있다. 개발된 공정 모사기를 활용하여 운전조건의 변화에 따른 단위공정의 동특성 변화를 포괄한 단위공정들 간의 상호작용으로 인한 전체공정의 동특성 변화추이를 관찰할 수 있었다. 또한 개발된 모사기를 활용하여 전체 공장 규모에서의 효과적이고 경제적인 운전을 위한 plantwide control 연구를 진행할 예정이다.

참고문헌

1. M.L. Luyben and B.D. Tyreus, "An Industrial Design/Control Study for the Vinyl Acetate Monomer Process," *Computers and Chemical Engineering*, **22**, 876 (1998).
2. R. Chen, K. Dave, T. J. McAvooy and M. Luyben, "A Nonlinear Dynamic Model of a Vinyl Acetate Process," *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **42**, 4478 (2003).