

Modeling of the water lean amine solvent CO₂ capture process using Bayesian parameter estimation김정남, 나종걸¹, 이용^{1,†}서울대학교; ¹KIST(ulee@kist.re.kr[†])

기존 CO₂ 포집공정의 아민 용매 결점을 극복한 새로운 용매인 K₂Sol을 개발하여 pilot scale testing을 완료하였고, MEA 대비 재생에너지가 65%로 감축됨을 보였다. Pilot scale test로부터 ASPEN Plus를 이용하여 K₂Sol용매로 한 CO₂ 포집공정을 모델링하고자 한다. 기존에는 새로운 용매가 적용된 공정을 모델링하기 위해선 용매의 물리화학적 특성을 반영하는 파라미터를 구하기 위한 고비용의 실험이 수반되어야 했다. 이를 극복하기 위해서 추가적인 실험없이 Bayesian parameter estimation 기법을 통해 중요 파라미터의 수치를 추산하도록 한다. 먼저 global sensitivity analysis를 이용한 subset selection으로 흡수탑 output에 가장 영향력을 많이 주는 파라미터들을 선정한다. 각 실험 별 선정된 파라미터를 입력변수로 하는 ASPEN Plus 모델을 만든 후, Deep Neural Network(DNN)을 통해 surrogate model을 만든다. 이 후 Metropolis-Hastings algorithm를 기반으로 한 Markov Chain Monte Carlo 법으로 Bayesian parameter estimation을 수행하여 각 파라미터의 posterior inference를 분석한다. 이후 추산 파라미터를 ASPEN Plus에 적용하여 K₂Sol을 용매로 한 CO₂ 포집공정 전체를 모사하고 이를 pilot scale test의 data와 비교 분석해 본다.