

일반강연 II-10

투과증발 시스템 모사기 개발

장재화, 유제강, 안승호, 이규현

선경건설(주) 연구소

Development of pervaporation simulator

Jae-Hwa Chang, Je-Kang Yoo, Seung-Ho Ahn and Kyu-Hyun Lee

R&D Technology Center, Sunkyong Engineering & Construction Ltd.

투과증발 시스템은 막 분리 기술의 일종으로 액체 혼합물 중의 한 성분에 대해 친화적인 비다공성 막을 사용하여 그 성분을 선택적으로 투과시켜 혼합물을 분리하는 기술이다. 투과증발 시스템에서는 Feed가 비교적 높은 온도에서 액상 형태로 막의 Feed side에 공급되어 막을 투과한 물질(Permeate)은 Permeate side에서 기화된 후 냉각기로부터 공급되는 Cold brine에 의하여 응축되며, 이는 투과증발막 투과 구동력이 각 성분의 증기압 차이기 때문에 이를 크게 유지하기 위함이다.

현재 투과증발 시스템이 상업적으로 적용되고 있는 공정은 유기물 탈수 공정으로, 이 공정에서는 물에 대한 용해도 및 투과 속도가 우수한 친수성 막을 이용하여 유기물과 물의 혼합물로부터 물을 제거하여 유기물을 농축하며, 대표적인 유기물은 에탄올, Isopropyl alcohol (IPA), 아세톤, MIBK, Ethyl acetate, THF 등의 중성 유기물이다.

투과증발 시스템은 막/모듈 부분과 함께 투과 구동력을 제공하는 Heater, 냉각기, 진공 펌프 등의 주변 장치로 구성된다. 따라서 시스템을 Scale-up하는 경우 투자비 및 운전비를 최소화하는 경제적인 최적 운전 조건을 구해야 하며, 시스템 설계를 최적화하기 위해서는 시스템 성능을 정확히 예측, 모사할 수 있는 시스템 모사기가 필요하다.

본 연구에서는 투과증발 시스템을 모사하기 위한 Computer-based tool을 개발하였으며, 이를 PVSIM(PerVaporation SIMulator)이라 명명하였다. PVSIM 소프트웨어는 Microsoft FORTRAN 5.1에 의하여 시스템 모델링 및 수치 해석 알고리즘이 구현되었으며, Windows 환경에서 사용자가 쉽게 입, 출력할 수 있도록 하기 위하여 Visual C++ 1.5를 이용하여 GUI(Graphical User Interface) 환경을 구축하였다.

유기물 농축 및 분리 등의 공정에서 Client에 의해 생성물 용량 및 조성 등의 Specification이 주어질 때 PVSIM은 시스템 모델 및 관련 Database 등을 활용하여 필요한 막 면적 및 Permeate 응축 온도와 같은 운전 조건을 결정하며 아울러 시스템에 소비되는 에너지 사용량을 산출한다.

투과증발 시스템에서 혼합물 분리는 투과증발막에 의해 이루어지기 때문에 투과증발막/모들에 대한 모델링이 필요하며, 이는 혼합물 전체 및 선택적인 투과 성분에 관한 물질 수지 및 Permeate의 기화 잠열 공급으로 인한 Feed의 온도 감소 등을 고려한 에너지 수지 관계를 연립 상미분 방정식으로 표현하며, 이 식은 Runge-Kutta algorithm에 의해 수치적으로 적분, 계산된다. 이러한 모사식 및 수치 해석 알고리즘은 FORTRAN Language로 Coding되어 모사기의 Simulation engine을 구성한다.

PVSIM에 구축되는 Database는 크게 투과증발막 특성 Database와 혼합물에 대한 열역학 Database로 나눌 수 있으며, 투과증발막 특성 Database는 막의 소재 및 분리하고자 하는 혼합물의 종류에 따라 결정되는 것으로 각 성분의 Partial permeation flux, Arrhenius coefficient 등을 포함하며 이는 실험을 통하여 경험식의 형태로 결정된다. 열역학 Database는 각 성분의 기화 잠열, 열용량, 활동도 계수 등으로 문헌으로부터 구한다.

PVSIM은 Windows 환경에서 입, 출력이 용이하도록 구성된 User-friendly computing system으로 사용자가 PVSIM에 입력해야 하는 값들은 다음과 같다.

- Feed input data: 분리하고자 하는 이성분 혼합물의 성분 및 Feed 유량, 농도, 온도
- Product input data: Product의 용량, 순도 등의 Specification
- Membrane input data: 막 종류, Stage당 막면적, Feed의 Stage 입구 온도
- Heater input data: Saturated Steam의 압력, 온도
- Parameters for Run: Step size, 수렴 인자

이상의 값들에 대한 입력이 완료된 후 PVSIM은 Simulation engine을 통한 Run을 실행하고 수렴이 이루어지면 출력값들을 다음의 Screen에서 각각 모사 결과를 출력하며 필요에 따라 표, 그림의 형태로 결과를 볼 수 있다.

- Feed output results: Feed 유량, 조성 및 온도
- Product output results: Product 용량, 순도 및 용제 회수율
- Membrane output results: 전체 막면적 및 Stage, Vessel당 막면적
- Heater output results: Stage, Vessel당 Heat duty 및 Total heat duty
- Permeate output results: Permeate 유량, 조성 및 응축 온도
- Cooler output results: 응축 온도 및 Cooling power