

PTSA 공정의 상세 동적 모사

Rigorous Dynamic Simulation of PTSA Process

이혜진, 고대호, 문일, 최대기

연세대학교 화학공학과(Tel:82-02-361-2761; Fax:82-02-312-6401; E-mail:ilmoon@yonsei.ac.kr)
한국과학기술연구원*(Tel:82-02-958-5872; Fax:82-02-958-5809; E-mail:dkchoi@kistmail.kist.re.kr)

Abstract : The main objective of this study is to understand the regeneration step of the PTSA(Pressure and thermal swing adsorption) process below the atmospheric pressure by rigorous dynamic simulation. This target process is to recover toluene using activated carbon as an adsorbent. To do this, the dynamic simulations for the regeneration step are performed at 360, 490, 590mmHg and at high temperature after the simulation of the adsorption step at 1atm and 298K. A mathematical model was developed to simulate the column dynamics of the adsorption systems. This model is based on non-equilibrium, non-isothermal and non-adiabatic conditions, and axial dispersion and heat conduction are also considered. Heat transfer resistances are considered in gas-solid, gas-column wall and column wall-outside air. The LDF(Linear Driving Force) approximation model describes the mass transfer rate between the gas and solid phase. This study shows that the recovery of toluene by PTSA is more preferable than that by general TSA.

Key words : PTSA, Rigorous Dynamic Simulation, Parameter Analysis, Adsorption, Regeneration

1. 서론

화학공정에서 생성되는 공해 물질인 휘발성 유기화합물(Volatile organic compounds) 제거 기술에는 열 또는 촉매를 이용한 분해, 흡착 및 추출 등이 있으며, 일반적으로 유기 용매 회수 목적으로 하는 여러 흡착 분리 공정의 효율성은 사용된 흡착제로부터 흡착질을 효과적으로 제거하는가에 의해 평가된다. 여러 분리 공정 중에서 포화된 흡착제의 재생에 효과적으로 이용되는 흡착 공정으로는 벌크 분리에 이용되는 PSA(pressure swing adsorption)와 정제 및 재생을 목적으로 하는 TSA(thermal swing adsorption) 공정이 있다. PSA는 흡착시에는 압력을 높여주고, 탈착에서는 압력을 낮춰준다. 그리고 TSA는 상온에서 흡착시키는 반면, 온도를 높여 탈착시킨다. 본 연구에서 사용된 기법인 PTSA는 PSA와 TSA의 기법이 합쳐진 것으로서, 탈착시에 온도를 높이고 압력을 낮춰 흡착제의 재생 효율을 높이고자 사용된 방법이다.

대부분의 화학공정과 마찬가지로 PTSA 공정은 그 동적 거동이 매우 복잡한 양상을 보이므로 동특성을 분석 및 예측하는 일은 쉽지 않으며, 이를 위해서는 실험 및 컴퓨터를 이용한 모사를 수행해야 한다. 컴퓨터를 이용한 모사를 수행하는 경우에는 실험에 비하여 비용 및 시간을 절약할 수 있을 뿐만 아니라, 실험적으로 측정이 불가능한 데이터를 산정할 수 있다. 또한 공정의 최적 설계와 설계 공정의 타당성을 검토하고, 공정의 운전 방식의 변화에 따른 공정의 효율 증대를 위해서는 실제 공정의 현상을 정확하게 표현할 수 있는 상세 동적 모사 기술이 반드시 필요하다. 그러나 실제 조건과 유사한 비평형, 비등온, 비단열 조건에서 PTSA 공정의 탈착 거동에 대한 상세 동적 모사가 진공의 압력에서 수행된 바가 거의 없는데, 이는 PTSA의 수학적 모델이 매

우 복잡하기 때문이다. 본 연구에서 제시된 모델은 미분식, 대수식으로 구성되어있고 공정이 변할 때마다 경계조건이 변하며 흡착등온선이 비선형을 나타낸다. 또한 Langmuir 흡착등온선은 exponential 항을 포함하고 있기 때문에 수치적으로 계산되기가 어렵다. 따라서 본 연구에서 목표로 하는 상세 동적 모델링 및 모사에 대한 연구는 그 동적 거동이 매우 복잡한 양상을 보이는 PTSA공정의 경우에는 더욱 중요하다고 할 수 있다.

본 연구는 공기로부터 톨루엔을 제거하는 흡착/탈착 공정의 동특성 연구를 위해서 상세한 수학적 모델을 구축하고 동적 모사를 수행하여 탈착 거동에 대한 동특성을 연구하였다. 또한 탈착시 흡착등온선의 파라미터를 온도와 압력에 대한 함수로 간주하여 탈착 실험치를 이용하여 그 값을 계산함으로써 정확한 탈착 거동을 예측할 수 있었다. 실험은 1기압, 상온에서 activated carbon에 흡착시키고, 360, 490, 590mmHg의 진공압력과 고온에서 탈착시켰다. 동적 모사를 위해 제시된 모델은 물질수지식 및 기상과 흡착상, 흡착탑 벽에 대한 에너지수지식, 평형흡착식, 흡착상으로의 물질전달식 등을 포함하고 흡착열 또한 변수로 나타내었다. 본 연구는 4-slot CPU를 탑재한 SUN SPARC Enterprise 3000 server의 화학공정 범용 모사기 gPROMS를 이용하여 수행되었다.

2. 이론

2.1 수학적 모델

유체의 농도와 속도, 압력, 그리고 온도는 시간과 탑내의 위치의 함수로 나타내어진다. 수학적 모델링에는 흡착탑 내의 물질 및 에너지수지식, 흡착등온선 및 흡착속도식이 포함된다. 본 모