

**Analysis of the Behavior of Tubular-Type Equipment
for Nuclear Waste Treatment :
Sensitivities of the Parameters Affecting Mass Transfer Yield**

**방사성폐기물의 화학처리공정에 사용되는 유동관식 장치의 해석
: 물질전달 수율에 미치는 매개변수들의 민감도**

Jae-Hyung Yoo, Byung-Jik Lee, Joon-Bo Shim and Eung-Ho Kim

Korea Atomic Energy Research Institute, 150 DukJin-Dong, Yuseong-Ku, Daejeon

nihyou@kaeri.re.kr

유재형, 이병직, 심준보, 김응호

한국원자력연구소, 대전시 유성구 덕진동 150번지

(Received January 8, 2007 / Approved February 16, 2006)

Abstract

It was intended in this study to investigate the effects of various parameters on the chemical reaction or mass transfer yield in a tubular-type nuclear waste treatment equipment. Since such equipments, as a tubular reactor, multistage solvent extractor, and adsorption column, accompany chemical reaction or mass transfer along the fluid-flowing direction, mathematical modeling for each equipment was carried out first. Then their behaviors of the chemical reaction or mass transfer were predicted through computer simulations. The inherent major parameters for each equipment were chosen and their sensitivities affecting the reaction or mass transfer yield were analyzed. For the tubular reactor, the effects of axial diffusion coefficient and reaction rate constant on the reaction yield were investigated. As for the multistage solvent extractor, the backmixing of continuous phase and the distribution coefficient between fluid and solvent were considered as the major parameters affecting the extraction yield as well as concentration profiles throughout the axial direction of the extractor. For the adsorption column, the equilibrium constant between fluid and adsorbent surface, and the overall mass transfer coefficient between the two phases were taken as the major factors that affect the adsorption rate.

Key words : tubular reactor, stagewise solvent extractor, adsorption column

요 약

본 연구에서는 방사성폐기물의 화학처리공정에 자주 사용되는 유동관식 장치 중 튜브형 반응기, 다단식 용매추출 장치, 흡착탑 등 물질전달이 수반되는 장치에 있어 각종 매개변수들이 반응수율이나 물질전달수율에 미치는 영향과 민감도를 살펴보았다. 먼저 각 장치에 대한 거동을 묘사하기 위하여 수학적 모델링을 수행하였고 전산모사를 통하여 해당 장치의 거동을 예측하였다. 그리고 그 결과로부터 해당 공정의 고유한 매개변수들이 반응수율 또는 물질전달수율에 미치는 영향과 민감도를 분석하였다. 튜브형 반응기에서는 확산계수, 반응속도상수 등이 반응수율에 미치는 영향을, 다단식 용매추출 장치에서는 연속상과 분산상의 분배계수, 연속상 흐름의 역혼합 등이 추출수율 및 장치 내 농도 분포에 미치는 영향을 고찰하였다. 또 흡착탑에 있어서는 흡착평형상수 및 유체-흡착재간 물질전달계수 등이 흡착 속도에 미치는 영향을 조사하였다.

중심단어 : 튜브형 반응기, 다단식 용매추출기, 흡착탑

I. 서 론

물질전달이 수반되는 화학처리 공정에서 가장 많이 사용되는 장치는 각종 유동관식 장치이다. 즉, 장치 내에 유체가 흐르고 유체 내 또는 유체와 다른 상 사이에 화학반응 또는 물질전달이 일어나는 경우, 장치 내부에는 축방향에 따라 해당 물질의 농도 분포가 생기고 그 농도 분포는 매개변수들의 크기에 따라 영향을 받는다. 그러므로 목적 물질의 반응 수율, 물질전달수율 등은 매개변수들의 크기에 따라 좌우된다. 따라서 이 매개변수들의 크기가 장치 거동에 미치는 영향을 정확히 파악하는 것은 공정 및 장치의 설계와 안전한 운전을 위하여 필수적인 일이다. 특히 각종 매개변수들이 갖는 민감도를 파악함으로써 장치 설계시 이를 반영하여 보다 효율적인 장치의 제작이 가능하고 반응 수율이나 물질전달수율을 향상시킬 수 있는 장치가 되도록 조작 조건을 조절할 수도 있을 것이다.

이러한 유동관식 화학처리장치로는 용매추출탑, 이온교환탑, 흡착탑, 증류탑, 튜브형 화학반응기 등을 들 수 있으며 이들은 일반 화학처리 공정 뿐만 아니라 방사성 물질을 다루는 여러 가지 공정에도 사용되고 있다. 예를 들면 우라늄 배소/환원, 우라늄 분리/정제, 요오드 흡착, 고준위 폐액의 증발농축 및 폐질

산 회수 등에 사용되고 있다[1]. 본 연구에서는 이러한 공정에 쓰이는 장치들의 몇 가지 예를 들어 물질전달 모델링과 모사를 통하여 장치 거동을 예측하고 해당 매개변수들이 분리/회수 수율에 미치는 민감도를 분석하였다. 이는 해당 장치의 크기 결정, 구조 설계, 운전 조건 결정 및 공정 제어 효과 등을 사전에 미리 점검해 볼 수 있고 제품의 순도 및 회수율 등을 예측할 수 있는 중요한 정보를 제공해 줄 것이다.

II. 튜브형 반응기

가. 화학반응기 모사

튜브형 반응기는 튜브 속을 유체가 흐르면서 유체 내에서 화학반응이 일어나는 장치를 말한다. Fig.1에서 보는 바와 같이 튜브 속을 유체가 유추 방향으로 흐르면서 다음과 같은 1차반응이 일어난다고 가정하자.

$$- \frac{dC}{dt} = kC \dots\dots\dots (1)$$

반응기 내부에서 유체 흐름을 plug flow로 가정하고 반경 방향의 농도 구배는 없다고 가정하면, 축방향의 미소 구간에 대한 물질수지로부터 다음과 같은 식을 유도할 수 있다.

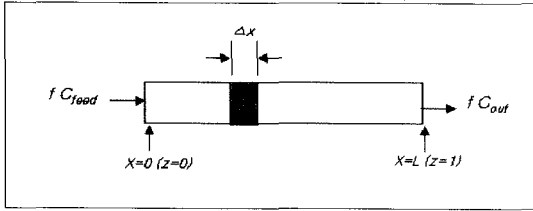


Fig.1. A tubular chemical reactor

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -\frac{f}{SL} \frac{\partial Y}{\partial z} + \frac{D}{L} \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} - k Y \quad (2)$$

단, $z = \frac{x}{L}, Y = \frac{C}{C_{feed}}$

(2)식에서 보는 바와 같이 이 과정에 나타나는 변수는 유속(f), 확산계수(D), 화학반응속도상수(k) 및 장치 크기(길이: L , 단면적: S) 등이며 유속과 장치의 크기 등 인위적으로 조절할 수 있는 운전변수를 임의의 값으로 고정시킨다면, 확산계수와 화학반응 속도상수가 이 공정의 수율을 좌우할 수 있는 고유의 매개변수가 된다. 이제 (2)식을 풀면 축방향의 농도분포 즉, $Y(t, z)$ 값을 구할 수 있다. 그러므로 확산계수와 반응속도상수를 변화시키면서 농도 분포를 구하고 매개변수가 반응수율에 미치는 영향을 살펴볼 수 있을 것이다. (2)식을 풀기 위하여 본 연구에서는 orthogonal collocation 방법[2,5,7]을 적용하였으며 $z=0$ 와 $z=1$ 사이에 6개의 orthogonal collocation point 를 구하고 그들에 근거한 수치해석 방법으로 (2)식의 근사해를 구하였다. 그리고 다음과 같은 식으로 정의된 반응 수율을 구하였다.

$$\Phi (\%) = (1 - Y_{out}) \times 100 \quad (3)$$

한편, 유체 이동에 있어 축방향의 분산(dispersion)

이 무시할 수 있을 정도로 작은 경우 (2)식에서 $D = 0$ 으로 놓을 수 있어 확산에 관한 항이 소멸되므로 더욱 간단한 식이 되며, 더구나 정상상태에서는 $\frac{\partial Y}{\partial t} = 0$ 조건마저 성립되므로 이를 정리하면 다음과 같은 식으로 변화된다.

$$\frac{\partial Y}{\partial z} = -\frac{SLk}{f} Y \quad (4)$$

그리고 이 식은 다음과 같은 정해를 갖는다.

$$Y = \exp\left(-\frac{SLk}{f} z\right) \quad (5)$$

나. 확산계수의 영향

반응속도상수 k 를 고정시킨 상태에서 확산계수를 변화시키면서 정상상태에서의 유동관 내 축방향 농도분포 $Y(t \rightarrow \infty, z)$ 를 구하였다. Table 1에서 보는 바와 같이 확산계수가 농도분포(Y) 및 반응수율(Φ)에 미치는 영향은 극히 작다는 것을 알 수 있다.

다. 반응속도상수의 영향

앞서 언급한 바와 같이 유동관식 반응기 내에서 확산계수의 영향은 무시할 수 있을 정도로 지극히 미미하다는 것을 알 수 있었다. 그러나 반응속도상수의 영향은 그렇지 않았다. Table 2에서 보는 바와 같이 $D = 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{min}$ 로 고정시키고 k 를 $0.01/\text{min} \sim 0.1/\text{min}$ 범위에서 변화시키면서 정상상태의 농도 분포 $Y(t \rightarrow \infty, z)$ 를 구하였다. 이 표에서 보는 바와 같이 k 값이 클수록 해당 물질의 전환되는 양이 크기 때문에 반응기의 후미 부분으로 갈수록 농도가 감소하는 경향을 보여주고 있다. 그리고 k 값이 작을수록 미처 반응하지 못하고 반응기를 빠져나가는 양이 증가하는 것을 알 수 있다.

Table 1. Concentration profiles and reaction yields with diffusivity

D (cm^2/min)	ϕ z		Concentration profile(Y) with z							
	ϕ	z	0.	0.0338	0.1694	0.3807	0.6193	0.8306	0.9662	1.
0.	86.47	1.	0.9347	0.7126	0.4670	0.2898	0.1899	0.1448	0.1353	
10^4	86.46	1.	0.9347	0.7127	0.4671	0.2899	0.1900	0.1448	0.1354	
10^3	86.41	1.	0.9348	0.7131	0.4677	0.2905	0.1905	0.1453	0.1359	

$k = 0.02/\text{min}, f = 10 \text{ cm}^3/\text{min}$

Table 2. Concentration profiles with reaction rate constant

k (min ⁻¹)	φ (%)	Concentration profiles (Y) with z								
		0.	.0338	.1694	.3807	.6193	.8306	.9662	1.	
0.01	63.18	1.	.9668	.8443	.6836	.5387	.4362	.3808	.3682	
0.02	86.41	1.	.9348	.7131	.4677	.2905	.1905	.1453	.1359	
0.05	99.31	1.	.8455	.4304	.1505	.0458	.0161	.0082	.0069	
0.10	100	1.	.7188	.1843	.0251	.0008	0.	0.	0.	

D = 10⁻³ cm²/min, f = 10 cm/min

<기호>

- C: 농도 (mole/cm³)
- D: 확산계수 (cm²/min)
- f: 유량 (cm³/min)
- k: 반응속도상수(1/min)
- L: 반응기의 길이 (cm)
- S: 반응기의 단면적 (cm²)
- t: 시간 (min)
- x: 축방향 위치 (cm)
- Y: 무차원 농도
- z: 무차원 축방향 위치
- φ: 반응수율 (%)

III. 다단식 용매추출 장치

Fig.2에서 보는 바와 같이 연속상과 분산상의 향류 흐름을 가진 다단식 용매추출 장치가 있다고 가정하자. 그리고 각단에서는 연속상과 분산상 간에 일정한 추출 평형을 이루고 있다고 가정하자. 일반적으로 향류 흐름을 가진 용매추출 장치에서 분산상의 역혼합(back mixing)은 무시할 수 있지만 연속상은 역혼합 흐름을 갖는다. 따라서 목적 성분의 추출 수율에 영향을 미치는 주요 매개변수는 연속상 역혼합 흐름의 크기와 연속상과 분산상 사이의 분배계수이다.

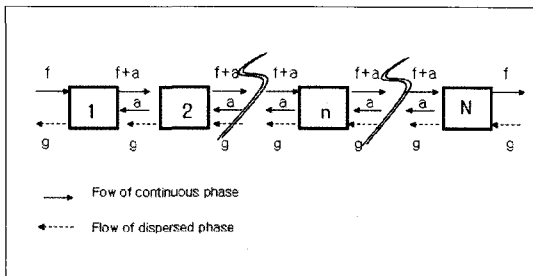


Fig.2. Schematic diagram of a stagewise solvent extractor with backmixing

가. 용매추출 장치 내에서의 농도 분포

향류 다단식 용매추출 장치에서 모든 운전변수 (연속상과 분산상의 유량, 교반속도, 추출단수 등)가 고정되어 정상상태로 운전되고 있을 때 연속상과 분산상 내에 일정한 농도 분포가 형성된다. 그리고 앞서 언급한 여러 가지 가정 하에 그 농도 분포를 다음과 같이 이론적으로 구할 수 있다. 단수를 N이라고 하면 정상상태에서 각단 (1~N)의 물질수지로부터 다음과 같은 수식이 성립된다.

$$(1\text{단}) fC_{feed} + aC_2 + gQ_2 = (f+a)C_1 + gQ_1 \dots\dots\dots (6)$$

$$(n\text{단}) (f+a)C_{n-1} + aC_{n+1} + gQ_{n+1} = (f+2a)C_n + gQ_n \dots\dots\dots (7)$$

$$(N\text{단}) (f+a)C_{N-1} + gQ_{N+1} = (f+a)C_N + gQ_N \dots\dots\dots (8)$$

여기서 C와 Q는 각각 연속상과 분산상의 농도를 나타낸다. Q_{N+1}은 분산상 공급액의 농도인데 일반적인 경우 "Q_{N+1} = 0" 으로 처리되어 (8)식으로부터 소멸된다. f와 g는 각각 연속상과 분산상의 유량, 또는 연속상의 역혼합 흐름을 표시한다. 각단에서 C와 Q 사이에 다음과 같은 추출평형 관계가 이루어지고

$$Q_i = DC_i \dots\dots\dots (9)$$

분배계수 D가 모든 단에서 일정하다고 가정하면 (6)~(8)식은 다음과 같이 정리된다.

$$(1\text{단}) -(1 + \frac{a}{f} + \frac{gD}{f})X_1 + (\frac{a}{f} + \frac{gD}{f})X_2 = -1 \dots\dots\dots (10)$$

$$(n\text{단}) (1 + \frac{a}{f})X_{n-1} - (1 + \frac{2a}{f} + \frac{gD}{f})X_n + (\frac{a}{f} + \frac{gD}{f})X_{n+1} = 0$$

$$(N\text{단}) (1 + \frac{a}{f})X_{N-1} - (1 + \frac{a}{f} + \frac{gD}{f})X_N = 0 \quad (12)$$

$$\text{단, } X_n = \frac{C_n}{C_{feed}} \quad (13)$$

(10)~(12)식은 tri-diagonal matrix를 이루기 때문에 X_n 에 관한 정해를 다음과 같이 구할 수 있다[3].

$$X_N = \gamma_N \quad (14)$$

$$X_i = \gamma_i - \frac{(\frac{a}{f} + \frac{gD}{f})X_{i+1}}{\beta_i} \quad (15)$$

$$(i = N-1, N-2, \dots, 1)$$

$$\text{단, } \beta_1 = -(1 + \frac{a}{f} + \frac{gD}{f}) \quad (16)$$

$$\gamma_1 = -\frac{1}{\beta_1} \quad (17)$$

$$\beta_i = -(1 + \frac{2a}{f} + \frac{gD}{f}) - \frac{(1 + \frac{a}{f})(\frac{a}{f} + \frac{gD}{f})}{\beta_{i-1}} \quad (18)$$

$$(i = 2, 3, \dots, N-1)$$

$$\beta_N = -(1 + \frac{a}{f} + \frac{gD}{f}) - \frac{(1 + \frac{a}{f})(\frac{a}{f} + \frac{gD}{f})}{\beta_{N-1}} \quad (19)$$

$$\gamma_i = -\frac{(1 + \frac{a}{f})\gamma_{i-1}}{\beta_i} \quad (20)$$

$$(i = 2, 3, \dots, N)$$

그리고 이 장치에서 얻어지는 추출수율은 다음과 같이 정의할 수 있으므로

$$\xi(\%) = (1 - X_N) \times 100 \quad (21)$$

장치 내 농도 분포로부터 추출수율을 구할 수 있다.

나. 역혼합의 영향

10개의 단수를 갖는 임의의 추출 장치에서 분배계수를 일정하게 고정시키고 연속상의 역혼합 유량을 정유량의 20~100% 범위 내에서 변화시키면서 목적 성분의 농도 분포와 추출수율을 구하였다. Table 3에

서 보는 바와 같이 역혼합은 농도 분포와 추출 수율에 큰 영향을 미치지 않음을 알 수 있다. 이와 같은 현상을 고려할 때 향류 다단식 추출 장치의 각 단은 역혼합이 없고 이상적인 mixed flow를 갖는 혼합조로 가정하더라도 농도 분포에 큰 오차를 가져오지 않음을 알 수 있다.

다. 분배계수의 영향

이번에는 역혼합 유량을 “0”으로 놓고 분배계수를 1~10의 범위 내에서 변화시켰다. 그 결과 농도 분포 및 추출 수율에 상당히 큰 변화가 초래되었다 (Table 4 참조). 또 분배계수가 작은 경우에는 주어진 단수로는 목적 성분이 100% 추출되지 못하고 일부는 추잔액에 남아 장치 외부로 유출됨을 알 수 있다. 따라서 이러한 손실을 사전에 예측할 뿐만 아니라 주어진 운전조건에서 최적 단수를 구하기 위해서는 이와 같은 전산모사가 필요하며 이 경우 가장 민감도가 큰 매개변수는 분배계수임을 알 수 있다.

IV. 흡착탑

흡착탑은 튜브형 반응기 및 용매추출 장치와는 달리 일정한 수명을 가지고 있다. 즉, 흡착용량 한계를 초과하여 사용할 수 없으므로 정상상태에 도달되기 이전의 전이상태의 거동을 추적하지 않으면 안 된다. 따라서 흡착탑의 거동에 있어서는 흡착속도와 흡착용량이 중요한 인자이며 시간 경과와 유체의 축방향 위치에 따라 연속상(유체)과 흡착상(흡착제)의 농도 변화를 파악할 필요가 있다.

Table 3. Effect of back mixing on the extraction yield and concentration profile

Back flow rate (%)	Stage Extraction yield (%)	Concentration profiles in the continuous phase									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
20	.89	.89	.81	.72	.63	.54	.46	.37	.28	.19	.11
40	.88	.88	.80	.71	.63	.54	.46	.37	.29	.20	.12
60	.87	.87	.79	.70	.62	.54	.46	.38	.30	.21	.13
100	.85	.85	.77	.69	.62	.54	.46	.38	.31	.23	.15

* D = 5.0, f = 5 cm/sec, g = 1 cm/sec

Table 4. Effect of distribution coefficient on the extraction yield and concentration profile

Back flow rate (%)	Stage Extraction yield (%)	Concentration profiles in the continuous phase									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.	20	1.	1.	1.	1.	1.	1.	1.	.28	.96	.80
2.	40	1.	1.	1.	1.	1.	.99	.97	.29	.84	.60
5.	91	.91	.82	.73	.64	.55	.45	.36	.30	.18	.09
10.	100	.50	.25	.12	.06	.03	.02	.01	.31	0.	0.

$\alpha = 0 \text{ cm/min}$, $f = 5 \text{ cm/min}$, $g = 1 \text{ cm/min}$

<기호>

α : 연속상의 역혼합 흐름 (cm/min)

C : 연속상의 농도 (mole/cm)

D : 분배계수

f : 연속상의 유량 (cm/min)

g : 분산상의 유량 (cm/min)

Q : 분산상의 농도 (mole/cm)

X : 연속상의 무차원 농도

ξ : 추출수율 (%)

가. 흡착탑 모사

앞서 유동관식 반응기 내에서 유체의 축방향 확산 영향은 무시할 수 있을 정도로 작다는 것이 확인되었기 때문에 흡착탑 모사에 있어서도 유체의 축방향 확산은 무시하였다. Fig.3에서 보는 바와 같이 흡착탑의 축방향 미소 구간(회색 부분)에 대한 물질수지로부터 다음과 같은 수식을 유도할 수 있다. 한편, 흡착에 의한 물질전달항은 linear driving force model[3]을 적용하여 수식을 전개하였다.

$$S(1-\phi) \frac{\partial C}{\partial t} = -f \frac{\partial C}{\partial x} - Sk\psi(Q_m - \bar{Q}) \quad (22)$$

$$\frac{d\bar{Q}}{dt} = \frac{k\psi}{\phi} (Q_m - \bar{Q}) \quad (23)$$

여기서 C 는 유체 내 용질의 농도, t 는 시간, x 는 축방향의 위치, S 는 탑의 단면적, ϕ 는 단위체적당 흡착재가 차지하는 체적분율, f 는 유속, k 는 물질전달계수, ψ 는 단위체적당 물질전달 표면적, \bar{Q} 는 흡착된 용질의 평균 농도를 나타낸다. 한편, Q_m 은 C 와 흡착평형을 이루는 용질의 농도를 표시하는데 본 연

구에서는 이 흡착평형을 (24)식과 같이 가장 간단한 Freundlich형 관계식[3]으로 가정하여 수식을 풀었다. 여기서 m 은 유체와 흡착재 사이의 흡착평형상수를 나타낸다.

$$Q_m = mC^{1/n} (n=1) \quad (24)$$

(22)식을 무차원 형태로 변환시키기 위하여 다음과 같이 무차원항을 정의하면

$$C^* = \frac{C}{C_{feed}} \quad Q^* = \frac{Q}{C_{feed}} \quad z = \frac{x}{L} \quad (25)$$

다음과 같은 수식을 유도할 수 있다.

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = -\alpha \frac{\partial C^*}{\partial z} - \beta (mC^* - Q^*) \quad (26)$$

$$\frac{dQ^*}{dt} = \frac{k\psi}{\phi} (mC^* - Q^*) \quad (27)$$

$$t = 0, \quad C^* = 0, \quad Q^* = 0$$

$$t > 0, \quad C^* (z=0) = 1$$

단, $\alpha = \frac{f}{SL(1-\phi)}$ $\beta = \frac{k\psi}{1-\phi}$ $\gamma = \frac{k\psi}{\phi}$ (28)

한편, 흡착탑 내에서 흡착된 용질의 농도는 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\eta = \int_0^1 Q^* dz \quad (29)$$

따라서 (26),(27)식을 동시에 풀면 시간에 따른 C 와 Q 를 구할 수 있다. 본 연구에서는 이 수식들을

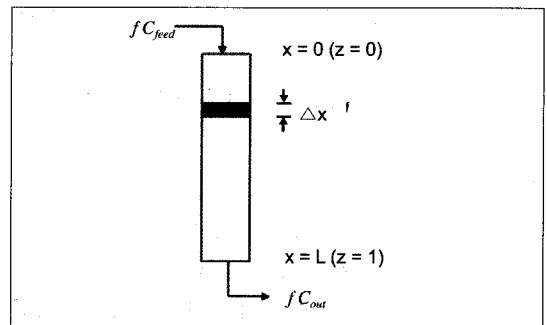


Fig.3. Schematic diagram of an adsorption column

finite difference 법으로 풀어 C 와 Q 를 구하였다. 한편, 계산 결과에서 무차원으로 표시한 시간 즉, τ 는 다음과 같이 정의하였다.

$$\tau = \frac{ft}{SL(1-\phi)} \quad \dots \dots \dots (30)$$

나. 흡착 속도 및 흡착 용량

흡착이 진행됨에 따라 탑 내에서 유체가 갖는 용질의 농도 분포는 Fig. 4와 같은 양상을 띠었다. 또 본 연구에서 적용한 흡착탑의 운전조건에서는 $\tau > 300$ 이상이면 미처 흡착되지 못하고 탑을 빠져나가는 용질이 나타나며 이는 곧 breakthrough curve가 상승하기 시작함을 나타내고 있으며 종국에는 탑 전체가 $C=1$, $Q=m$ 에 도달하여 흡착용량이 포화상태에 이르게 된다. 본 연구에서 흡착공정의 주요 매개변수로 유체와 흡착재 사이의 흡착평형상수, 흡착재 표면에서의 물질전달계수 등을 고려하였으며 이들이 흡착탑의 거동에 미치는 영향을 고찰해 보았다.

Fig. 5에서 보는 바와 같이 다른 변수는 모두 고정시켜 놓고 흡착평형상수를 $m=50 \sim 150$ 범위 내에서 변화시켜 보았다. 흡착평형상수를 증가시키면 동일한 운전 시간 내에 탑 전체의 흡착량이 있어서는 큰 차이가 없지만 (Fig. 5-(a) 참조), Fig. 5-(b)에서 보는 바와 같이 흡착평형상수가 클수록 동일한 형상의 breakthrough curve가 탑 뒤쪽으로 이동하는 결과를 볼 수 있다. 이는 곧 흡착용량이 증가되어 흡착탑의 수명이 길어짐을 보여주고 있다. 이와 같이 흡착속도가 어느 정도 큰 경우에는 흡착평형상수가 곧 흡착용량을 결정해주는 주요 인자임을 반영하고

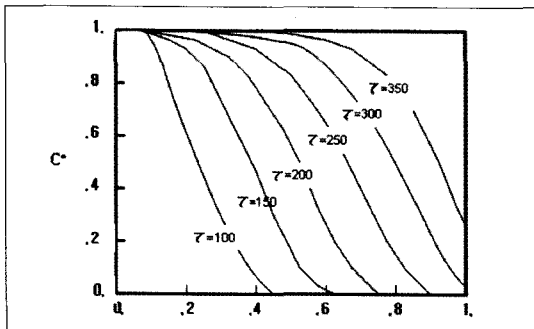


Fig. 4. Development of concentration profiles in an adsorption column ($m=100, k=0.01$)

있다.

흡착 속도에 영향을 주는 또 하나의 주요 변수는 유체와 흡착재 사이의 물질전달계수이다. 물질전달 시 흡착재의 표면적도 함께 영향을 주지만 본 연구에서 이 표면적은 일정하다고 가정하고 물질전달계수의 변화만 고려하였다. Fig. 6-(a)에서 보는 바와 같이 물질전달계수가 $k(10^5 \text{ cm/sec}$ 인 경우에는 탑 내 Q 의 분포에 변형이 일어나고 즉, Q 분포의 전반부는 아래쪽으로 처지고 후반부는 탑의 뒤쪽으로 꼬리가 길어지지만 $k > 10^4 \text{ cm/sec}$ 인 경우에는 k 의 값에 상관없이 거의 일정한 Q 분포를 주었다. 이는 (26)식에서 $mC \approx Q$ 의 관계가 이루어져 k 값이 rate-determining 한계를 초과하므로 흡착속도에 큰 영향을 미치지 못 하기 때문이다. 또 breakthrough curve(Fig. 6-(b))도 $k > 10^4 \text{ cm/sec}$ 인 경우에는 k 값에 상관없이 거의 일정한 결과를 나타내고 있다. 따라서 물질전달계수가 흡착 속도에 큰 영향을 미치지 않는 영역은 본 연구에서 다루고 있는 흡착탑의 경우, $k > 10^4 \text{ cm/sec}$ 임을 알 수 있다.

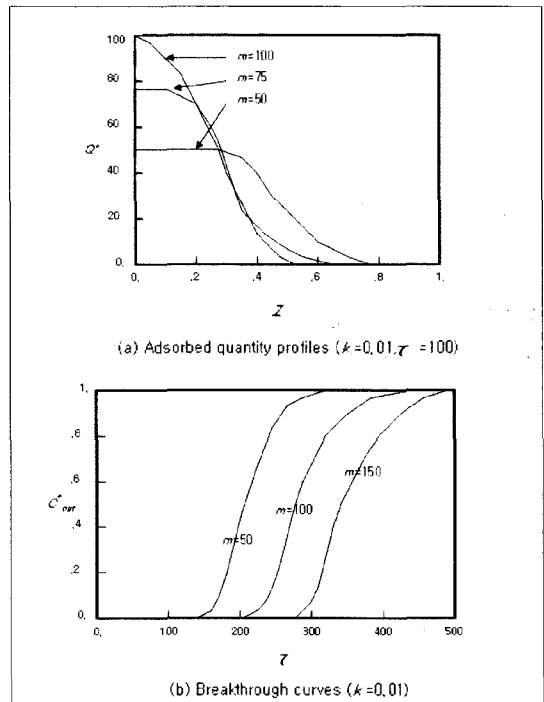


Fig. 5. Adsorbed quantity profiles and breakthrough curves with the adsorption equilibrium constant

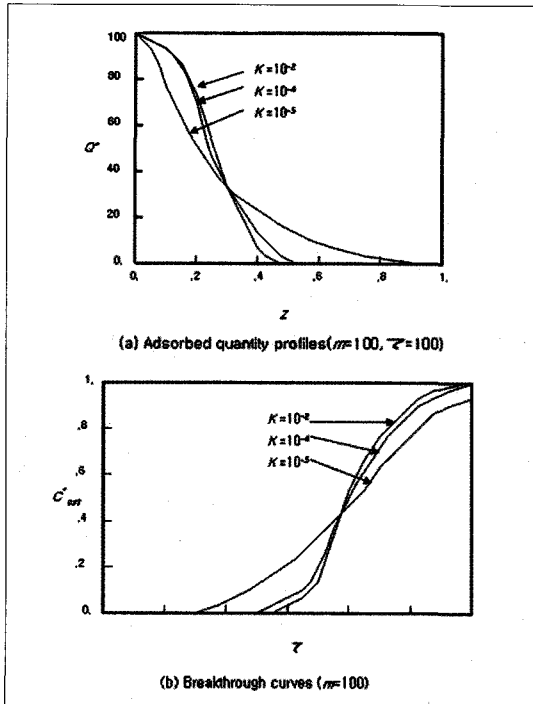


Fig.6. Adsorbed quantity profiles and breakthrough curves with the mass transfer coefficient

<기호>

- C: 유체 내 용질 농도 (mole/cm³)
- D: 유체 내 확산계수 (cm²/sec)
- f: 유량 (cm³/sec)
- k: 물질전달계수 (cm/sec)
- L: 흡착탑의 길이 (cm)
- m: 흡착평형상수
- \bar{Q} : 흡착제에 흡착된 용질의 평균 농도 (mole/cm³)
- Q_m : C와 평형을 이루는 흡착 용질 농도 (mole/cm³)
- S: 흡착탑의 단면적 (cm²)
- t: 시간 (sec)
- x: 축방향 위치 (cm)
- C*: 유체 내 용질 농도(무차원)
- Q*: 흡착된 용질의 평균 농도(무차원)
- Q_m^* : C*와 평형을 이루는 흡착 용질 농도(무차원)
- z: 무차원 축방향 위치
- η : 흡착탑 전체의 흡착 용질의 농도(무차원)
- ϕ : 흡착탑의 단위체적당 흡착제가 차지하는 체적분율
- ψ : 탑의 단위체적당 물질전달 표면적 (cm²/cm³)
- τ : (30)식에 정의된 무차원 시간

V. 결론

튜브형 반응기의 전산모사를 통하여 장치 내 농도 분포에 대한 근사해를 구할 수 있었다. 또 그 반응기의 거동을 조사한 결과, 반응수율에 미치는 유체 내 용질의 확산계수의 영향은 무시할 수 있을 만큼 작다는 것을 확인하였다. 이 경우 반응수율을 가장 크게 지배하는 매개변수는 반응속도상수임을 확인하였다. 또 하나의 유동관식 장치로 연속상의 역혼합을 갖는 다단식 용매추출 장치를 고찰해 보았다. 역혼합이 추출율에 미치는 영향은 상당히 미미하였으며 연속상과 분산상간의 분배계수가 가장 민감도가 높은 인자임을 알 수 있었다. 아울러 전산모사에서 목적 성분에 대한 추출율과 각단의 연속상 농도와 분산상 농도 분포 및 추산상으로 유출되는 양 즉, 추출 손실율을 구할 수 있기 때문에 이는 주어진 조건에서 최적 단수를 구하는 데 이용할 수 있을 것이다. 한편, 일정한 수명을 갖는 흡착탑의 거동에 있어서는 대부분의 흡착 공정에서 장치 출구의 농도가 "0" ($C_{out}=0$)으로 유지되어야 하므로 즉, 흡착 손실을 방지하여야 하므로 흡착 속도 및 탑 내 농도 분포가 중요한 인자들이다. 전산모사 결과 흡착탑에 있어서는 유체와 흡착제 사이의 흡착평형상수, 물질전달계수, 흡착제의 표면적 등이 영향을 주었다. 그 가운데서도 특히, 물질전달계수가 어느 한계치 이상만 되면 흡착평형상수가 곧 흡착 용량을 결정하는 중요 인자라는 결과를 얻었다.

감사의 글

본 연구는 과학기술부가 시행한 원자력 중장기 연구사업의 일환으로 수행되었습니다.

참고 문헌

- [1] Justin T. Long, Engineering for Nuclear Fuel Reprocessing, Gordon and Breach Science Publishers INC.(1967)
- [2] Finlayson, Bruce A, Nonlinear Analysis in Chemical Engineering, McGraw-Hill International

Book Co.1980

- [3] Brice Camahan, H.A.Luther, James O.Wilkes, Applied Numerical Methods, John Wiley & Sons, INC (1969)
- [4] Motoyuki Suzuki, Adsorption Engineering, Kodansha, Tokyo (1990)
- [5] John H.Seinfeld, Leon Lapidus, Mathematical Methods in Chemical Engineering Vol.3, Process Modeling, Estimation, and Identification, Prentice-Hall, INC. (1974)
- [6] Shan S. Kuo, Computer Applications of Numerical Methods, Addison-Wesley Publishing Co. (1972)
- [7] John Villadsen, Michael L. Michelsen, Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation, Prentice-Hall INC. (1978)