

Poly(ethersulfone) 중공사막에 의한 이산화탄소 분리 수치 해석 : 향류 흐름

송인호, 이영진, 전현수, 이용택*, 김정훈¹
 충남대학교 화학공학과, ¹한국화학연구원
 (ytlee@cnu.ac.kr*)

Numerical Analysis on Separation of Carbon Dioxide from Nitrogen by Hollow Fiber Membrane of Poly(ethersulfone) : Counter-current Flow

In-ho Song, Youngjin Lee, Hyunsoo Jeon, Yongtae Lee*, Jeon-Hoon Kim¹
 Department of Chemical Eng. Chungnam National University,
¹Korea Research Institute of Chemical Technology
 (ytlee@cnu.ac.kr*)

서론

적절한 이산화탄소의 분리는 지구온난화의 가속 현상을 늦출 수 있을 뿐만 아니라 경제적으로 각종 탄화수소 가스의 원료로 정제된 이산화탄소를 재이용할 수 있기 때문에 매우 중요하다. 종전에는 이산화탄소를 흡수제를 이용한 흡수탑(absorption tower)의 정제 기술이나 흡착제를 이용한 고정층 칼럼(packed column) 기술을 사용하여 분리하였으나 가스에 의한 흡수제의 범람(flooding) 현상이나 편류(channeling) 현상과 같은 단점들을 최소화하기 위하여 새로운 개념의 분리 기술들이 개발되기 시작하였다.

본 연구에서는 중공사 분리막 모듈을 이용한 이산화탄소의 투과거동을 예측하기 위하여 이산화탄소 혼합기체의 시스템 지배방정식을 유도하였고, 유도된 시스템 지배방정식을 공정모사하기 위하여 무차원화 시켰다. 프로그램 코딩을 위한 물성치(각 기체의 점도, 투과도, 분자량, 분리막의 길이, 두께)들을 문헌 조사하였다. 무차원화된 시스템 지배 방정식을 공정모사를 위한 프로그램으로 Compaq Visual Fortran 6.6을 사용하였다.

각각의 성분에 대한 농도구배를 구하기 위하여 상미분방정식의 형태를 취하고 있는 시스템 지배 방정식을 해석하기 위하여 4차 Runge - Kutta 방법을 사용하였다. IMSL Fortran 90 MP Library version 4.01에서 병류 시스템 지배방정식을 이용하여 초기값을 해석하기 위하여 IVPRK, FCN 부프로그램(subroutine)을 사용하였고, 향류 시스템 지배방정식을 이용하여 경계값을 해석하기 위하여 BVPDF, FCNEQN, FCNJAC, FCNBC 부프로그램을 사용하였다. 혼합기체의 점도를 해석하기 위하여 VIS 부프로그램을 사용하였으며 컴퓨터 프로그램을 통하여 중공사 분리막 모듈의 이산화탄소 분리 효율에 영향을 주는 변수들의 변화에 따른 이산화탄소의 분리 효율을 예측, 해석하였다.

본론

향류(counter-current flow)에서의 시스템 지배 방정식을 유도하는 과정에서 중공사 막 내부 및 외부의 유체 흐름은 층류(laminar flow) 또는 플러그 흐름(plug flow)로 단순화하였고, 축방향 혹은 반경방향의 혼합이 존재하지 않으며 중공사 바깥쪽(shell side)은 압

력 강하가 존재하지 않고 일정하게 유지된다고 가정하였다. 또한 기체의 투과도는 각 기체의 분압에 의존하지 않고 각 기체간의 상호 작용이 존재하지 않으며, 공급되는 기체의 점도는 일정하고 압력에 의한 분리막의 기계적 변화도 없으며 농도 분극이 존재하지 않는다고 가정하였다.

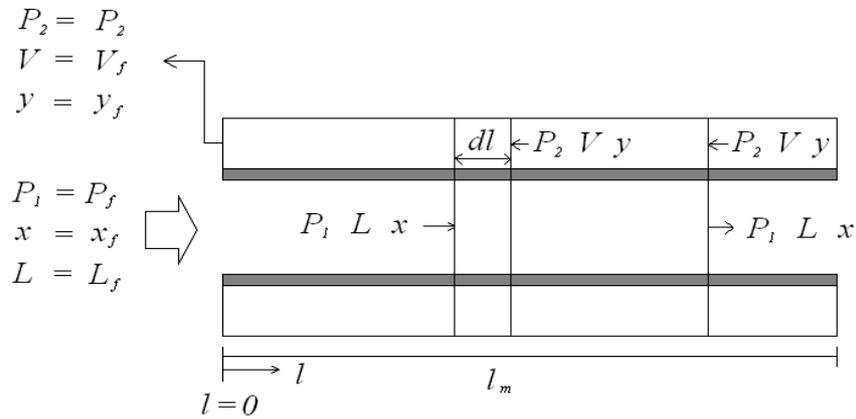


Fig. 1. Counter-current flow

항류에서의 시스템 지배 방정식은 총괄 물질 수지식, CO₂와 N₂의 총괄 물질 수지식, dl의 미분 구간에서의 CO₂와 N₂의 미분 물질 수지, 공급 측의 압력 강하 식은 Hagen - Poiseuille 식으로부터 유도되었다. 유도된 시스템 지배 방정식을 수치해석하기 위해서는 시스템 지배 방정식들을 모두 무차원화 해야 한다. 정의된 무차원군을 대입하여 정리하면 다음과 같이 무차원화 된 최종 시스템 지배 방정식을 얻을 수 있다.

$$\frac{dV^*}{dt^*} = -K_1 \{ \alpha(\gamma_1 x - \gamma_2 y) + \gamma_1(1-x) - \gamma_2(1-y) \} \quad (1)$$

$$\frac{dL^*}{dt^*} = -K_1 \{ \alpha(\gamma_1 x - \gamma_2 y) + \gamma_1(1-x) - \gamma_2(1-y) \} \quad (2)$$

$$\frac{dx}{dt^*} = -\frac{K_1}{L^*} [\alpha(\gamma_1 x - \gamma_2 y) - x \{ \alpha(\gamma_1 x - \gamma_2 y) + \gamma_1(1-x) - \gamma_2(1-y) \}] \quad (3)$$

$$\frac{dy}{dt^*} = -\frac{K_1}{V^*} [\alpha(\gamma_1 x - \gamma_2 y) - y \{ \alpha(\gamma_1 x - \gamma_2 y) + \gamma_1(1-x) - \gamma_2(1-y) \}] \quad (4)$$

$$\frac{dy}{dt^*} \Big|_{r=1} = \frac{ \{ \alpha x(1-y) - y(1-x) \} \frac{d\gamma_1}{dt^*} + \{ \alpha \gamma_1(1-y) + \gamma_1 y \} \frac{dx}{dt^*} }{ 2\alpha(\gamma_1 x - \gamma_2 y) + 2\gamma_1(1-x) + \gamma_2(1-y)(\alpha-2) + \gamma_2 y } \quad (5)$$

$$\frac{d\gamma_1}{dt^*} = -K_2 \frac{L^*}{\gamma_1} \quad (6)$$

이때, $l^* = 0$ 에서 미분식 해석에 필요한 경계조건은

$$P=P_f, \quad \gamma_1=1 \quad (7)$$

$$x=x_f \quad (8)$$

$$L=L_f, \quad L^*=l \quad (9)$$

또한 $l^* = 1$ 에서의 경계 조건은 다음과 같다.

$$V=0, \quad V^*=0 \quad (10)$$

$$y = \frac{(a-1)(\gamma_2 + \gamma_1 x) + \gamma_1 - \sqrt{\{(a-1)(\gamma_2 + \gamma_1 x) + \gamma_1\}^2 - 4\gamma_2(a-1)(a\gamma_1 x)}}{2\gamma_2(a-1)} \quad (11)$$

위에서 사용한 무차원군은 다음과 같다.

$$a \equiv \frac{(Q/d)_{CO_2}}{(Q/d)_{N_2}} \quad (12), \quad \gamma_1 \equiv \frac{P_1}{P_f} \quad (13)$$

$$\gamma_2 \equiv \frac{P_2}{P_f} \quad (14), \quad l^* \equiv \frac{l}{l_m} \quad (15)$$

$$V^* \equiv \frac{V}{L_f} \quad (16), \quad L^* \equiv \frac{L}{L_f} \quad (17)$$

$$K_1 \equiv \pi D_{LM} \frac{l_m}{L_f} \left(\frac{Q}{d} \right)_{N_2} P_f \quad (18), \quad K_2 \equiv \frac{128\mu_f R T L_f l_m}{\pi P_f^2 d_i^4} \quad (19)$$

프로그램 코딩

각각의 성분에 대한 거리에 따른 농도변화를 구하기 위하여 상미분방정식의 형태를 취하고 있는 시스템 지배 방정식을 4차 Runge - Kutta 방법을 사용하여 프로그램을 코딩하였다. 이를 위한 소프트웨어로 Compaq Visual Fortran 6.6 프로그램이며, IMSL Fortran 90 MP Library version 4.01에서 IVPRK, BVPFD를 이용하여 코딩작업을 수행하였다. 이를 통하여 중공사 분리막 모듈의 이산화탄소 분리 효율에 영향을 주는 변수들의 변화에 따른 이산화탄소의 분리 효율을 예측, 해석하였다. 다음 그림은 주프로그램과 부프로그램의 순서도(Flow chat)를 나타내었다.

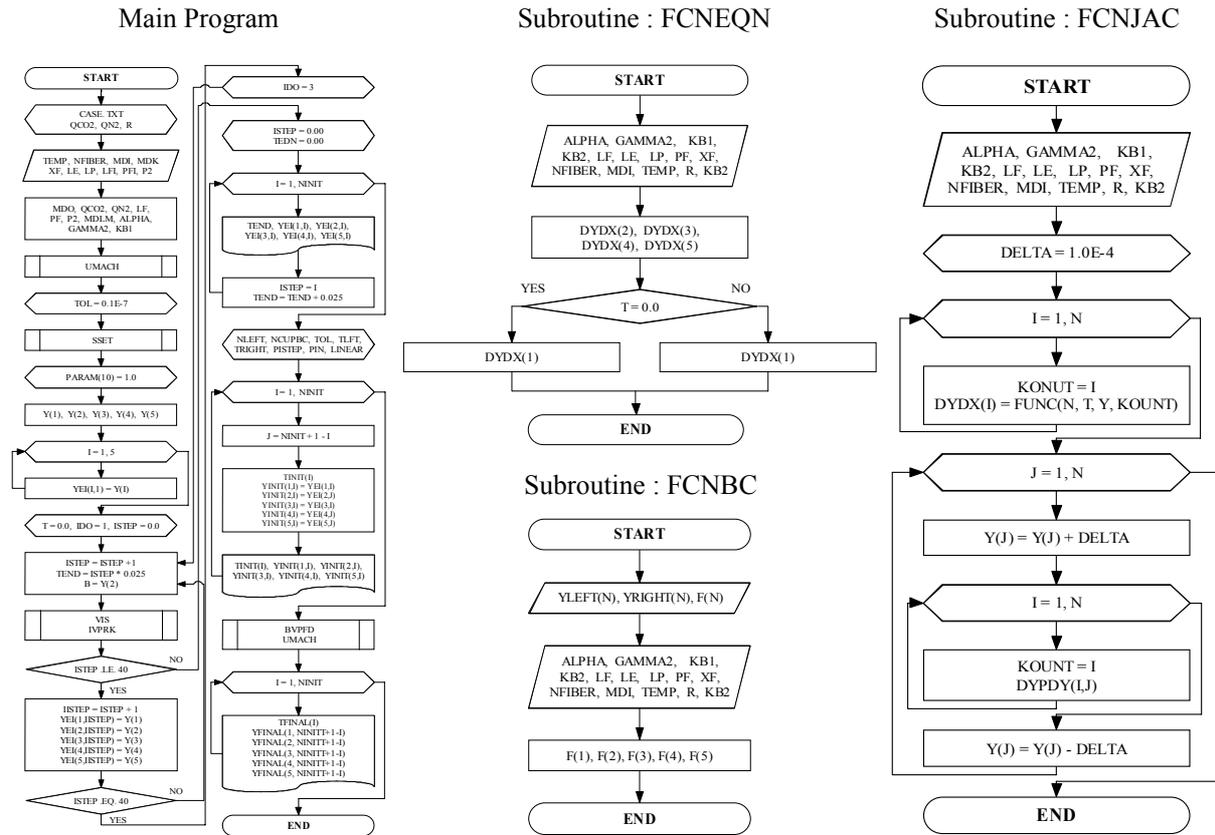


Fig. 2. Flow Chart for solving nonlinear ordinary differential equations

결론

본 연구를 통해서 이산화탄소 분리 효율에 영향을 미치는 여러 조작변수들 즉, 공급기 체중의 이산화탄소의 농도와 온도, 공급측과 탈거측의 압력, 공급기체의 유속, 분리막의 길이에 따른 이산화탄소의 투과 거동들을 확인할 수 있었다.

그 결과 이산화탄소의 분리 효율은 공급기체중의 이산화탄소의 농도 증가와 공급측의 압력 증가와, 분리막의 길이가 증가에 따라서 이산화탄소의 분리 효율은 증가하고, 공급기체의 온도의 감소와 유속의 감소와 탈거측의 압력 감소에 따라서 이산화탄소의 분리 효율은 증가함을 확인할 수 있었다.

참고문헌

1. Nouredine Boucif, Amitava Sengupta, and Kamalesh K. Sirkar., " Hollow Fiber Gas Permeator with Countercurrent or Cocurrent Flow : Series Solutions", I&EC FUNDAMENTALS, 25, 217, 1986.
2. A. Sengupta and K. K. Sirkar., "Ternary Gas Mixture Separation in Two-Membrane Permeators", AIChE JOURNAL, 1987
3. M. Sidhoum, A. Sengupta, K. K. Sirkar., "Asymmetric Cellulose Acetate Hollow Fibers : Studies in Gas Permeation", AIChE JOURNAL, 1988