

## Poly(ethersulfone) 중공사막에 의한 이산화탄소 분리 수치 해석

이영진, 송인호, 최봉길, 이용택, 김정훈\*  
충남대학교 화학공학과, 한국화학연구원\*

### Numerical Analysis on Separation of Carbon Dioxide by Hollow Fiber Membrane of Poly(ethersulfone)

Youngjin Lee, In-ho Song, Bong-gill Choi, Jeong-Hoon Kim\*,  
and Yongtaek Lee

*Department of Chemical Eng. Chungnam National University,  
Korea Research Institute of Chemical Technology\**

#### 1. 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) 정제기술이나 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, 무차원화된 시스템 지배 방정식을 공정모사를 위한 프로그램으로 Compaq Visual Fortran 6을 사용하였다. 시스템 지배 방정식을 해석하기 위하여 IMSL Fortran 90 MP Library version 4.01에서 IVPRK subroutine을 이용하여 시스템 지배 방정식을 4차 Runge - Kutta 방법으로 해석하였다. 시스템 지배 방정식을 해석하기 위하여 IVPRK subroutine과 FCN subroutine을 사용하였고, 혼합 기체의 점도를 해석하기 위하여 VIS subroutine을 사용하였으며 컴퓨터 프로그램을 통하여 중공사 분리막 모듈의 이산화탄소 분리 효율에 영향을 주는 변수들의 변화에 따른 이산화탄소의 분리 효율을 예측, 해석하였다.

## 2. 이론

병류(co-current flow)에서의 시스템 지배 방정식을 유도하는 과정에서 증공사 막 내부 및 외부의 유체 흐름은 층류(laminar flow) 또는 plug flow로 단순화 하였고, 축 방향 혹은 반경방향의 혼합이 존재하지 않으며 증공사 바깥쪽(shell side)은 압력 강하가 존재하지 않고 일정하게 유지된다고 가정하였다. 또한 각 기체의 투과도는 각 기체의 분압에 의존하지 않고 공급되는 기체의 점도는 농도의 함수이며 압력에 의한 분리막의 기계적 변화도 없으며 농도 분극이 존재하지 않는다고 가정하였다.

모듈의 물질 수지식을 유도하였으며, 수치 해석에 사용될 미분 물질 수지식들은 다음과 같은 무차원군을 사용하여 다음에 간략하게 정리하였다.

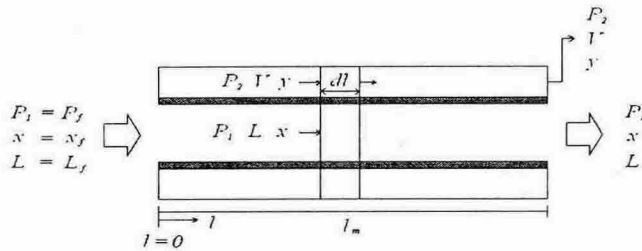


Fig. 1. Schematic flow diagram for co-current flow.

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

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

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

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

$$\left. \frac{dy}{dt^*} \right|_{t^*=0} = \frac{ \{ \alpha x(1-y) - y(1-x) \} \frac{d\gamma_1}{dt^*} + \{ \alpha \gamma_1(1-y) + \gamma_1 y \} \frac{dx}{dt^*} }{ 2\alpha(\gamma_1 x - \gamma_2 y) + 2\gamma_1(1-x) + \gamma_2(1-y)(\alpha-2) + \gamma_2 y } \quad (5)$$

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

이때,  $t^* = 0$ 에서 시스템 지배 방정식 해석에 필요한 초기 조건은

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

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

$$L=L_f, \quad L^*=1 \quad (9)$$

$$V=0, \quad V^*=1 \quad (10)$$

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

단,

$$\alpha \equiv \frac{(Q/d)_{CO_2}}{(Q/d)_{N_2}}, \quad \gamma_1 \equiv \frac{P_1}{P_f}, \quad \gamma_2 \equiv \frac{P_2}{P_f},$$

$$l^* \equiv \frac{l}{l_m}, \quad V^* \equiv \frac{V}{L_f}, \quad L^* \equiv \frac{L}{L_f},$$

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

### 3. 프로그램 코딩

각각의 성분에 대한 농도구배를 구하기 위하여 상미분방정식의 형태를 취하고 있는 시스템 지배 방정식을 수치 해석적 방법을 사용하여 해석하기 위하여 4차 Runge - Kutta 방법을 사용하였다. 해석을 위하여 Fortran 언어를 사용하여 Fig. 2와 같은 흐름도를 따라 프로그램을 코딩하였다.

### 4. 결과 및 토론

본 공정모사를 통하여 이산화탄소 분리 효율에 영향을 미치는 여러 조작변수들 즉 공급기체중의 이산화탄소의 농도와 온도, 공급, 탈거측의 압력, 공급기체의 유속, 분리막의 길이와 개수에 따른 이산화탄소의 투과 거동들을 확인할 수 있었다. 기본적으로 공급기체중의 이산화탄소의 농도가 증가, 분리막의 길이가 증가, 공급 측 압력이 증가하면 이산화탄소의 분리 효율은 증가하고, 공급 기체의 유속, 공급 기체의 온도가 감소하면 이산화탄소의 분리 효율이 증가하는 것을 확인할 수 있었다.

## 5. 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., "Teranry Gas Mixture Separation in Tow-Membrane Permeators", *AICHE JOURNAL*, 1987
3. M. Sidhoum, A. Sengupta, K. K. Sirkar., "Asymmetric Cellulose Acetate Hollow Fiber : Studies in Gas Permeation", *AICHE JOURNAL*, 1988

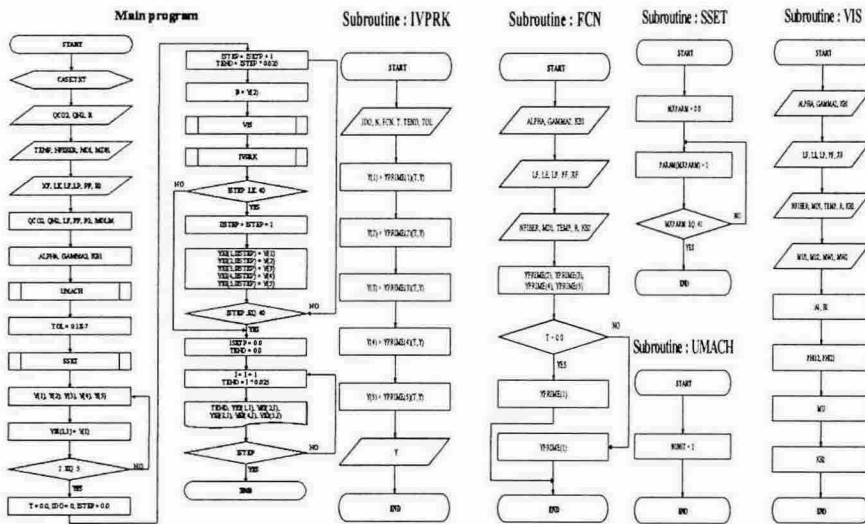


Fig. 2. Flow chart for solving nonlinear ordinary differential equations.

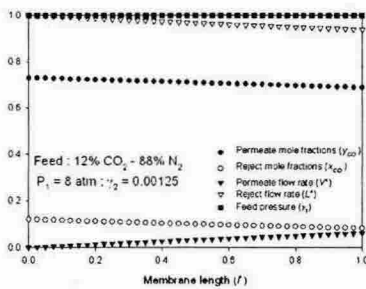


Fig. 3. Typical Concentration Profiles.

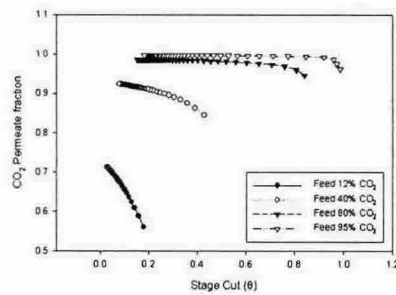


Fig. 4. CO<sub>2</sub> Mole Fraction in a Permeate vs. Stage Cut.