

에탄올 스크러버의 공정 최적화에 대한 연구

노상균[†]

동양대학교 철도운전관계학과

Study on the Process Optimization for the Ethanol Scrubber

SANGGYUN NOH[†]

Department of Railroad Drive & Control, Dongyang University, 145 Dongyangdae-ro, Punggi-eup, Yeongju 36040, Korea

[†]Corresponding author :
sgnoh@dyu.ac.kr

Received 25 July, 2024
Revised 9 August, 2024
Accepted 12 August, 2024

Abstract >> In this paper, scrubber modeling and optimization works have been performed for the removal of ethanol contained in the feed nitrogen gas. Ethanol content at scrubber top gas stream was reduced to 20 ppm in mole by contacting counter-currently with water as a solvent. Some of the liquid withdrawn at the scrubber bottom stream has been recycled to the scrubber in order to reduce the amount of waste water.

Key words : Scrubber(스크러버), Henry's law(헨리의 법칙), Optimization(최적화), Computer simulation(전산 모사), Liquid activity coefficient model(액체 활동도계수 모델)

1. 서론

본 연구에서는 반도체 세정 공정 중에 발생하는 에탄올이 6,724 ppm이 포함되어 있는 질소 가스를 에탄올 스크러버를 이용해서 물에 의한 스크러빙을 통해 대기 중으로 방출하기 전에 에탄올 함량을 20 ppm 이하로 낮추기 위한 스크러버 공정에 대한 전산 모사와 공정 최적화 작업을 수행하였다.

스크러버 하부로는 에탄올이 함유된 질소 가스를 주입하고 상부로는 물을 주입하여 스크러버에서 서로 향류로 접촉하면서 질소 가스 중에 포함되어 있는 에탄올을 선택적으로 흡수함으로써 스크러버 상부의 기상류를 통해서 대기 중으로 방출하는 에탄올

함량을 환경 법규 이하로 낮추는 공정에 대해서 PRO/II with PROVISION V2023.1 (PRO/II; AVEVA, Cambridge, UK)¹⁾를 이용한 모델링 작업을 수행하였다.

스크러버 컬럼은 기본적으로 흡수탑으로 그 목적에 따라서 absorber, stripper 및 scrubber의 명칭으로 불리고 있다²⁻⁵⁾. 스크러버 컬럼에 대한 공정 개요도는 Fig. 1에 나타내었다. Fig. 1에 의하면 하부 액상류의 일부를 펌프를 통해서 스크러버 중간부로 환류시켜 주는 공정으로 구성하였다. 스크러버 상부로 주입되는 순수한 물의 소모량을 최소화하기 위해서는 하부에서 스크러버 중간부로 환류하는 액상류의 질량 유량을 증가시키면 된다. 하지만 그렇게 되면 하부 펌프의 소요 동력이 증가하는 단점이 있다.

상부로 주입하는 물의 유량과 하부에서 펌프를 통해 스크러버 중간부로 환류시키는 에탄올이 용해되어 있는 액상류의 질량 유량은 서로 반비례한다. 상부로 주입하는 물의 유량을 증가시키면 하부 액상류에서 펌프의 소요 동력과 환류 냉각기의 용량을 줄일 수 있지만 폐수 발생량이 증가하게 된다. 본 연구에서는 이에 대한 공정 최적화 작업을 수행하였다.

2. 올바른 열역학 모델식의 선정

모든 화학 공정의 설계에 있어서 가장 필수 불가결한 요소는 바로 주어진 공정의 전산 모사에 적합한 가장 올바른 열역학 모델식을 선정하는 작업일 것이다.

에탄올 스크러버의 전산 모사는 기본적으로 증기-액 상평형 관계에서 출발한다. 즉 식 (1)의 증기-액 상평형 관계식으로부터 시작한다.

$$\hat{\phi}_i^v(T, P, y_i) y_i P = \gamma_i x_i H_i(T, P) \quad (1)$$

식 (1)에서 $\hat{\phi}_i^v$ 는 증기상에서 혼합물 중의 성분 i의 퓨개시티 계수이며 γ_i 는 액체 혼합물 중의 성분 i의 활동도계수이다. 그리고 $H_i(T, P)$ 는 온도와 압력의 함수로 표현한 Henry 상수이다. 여기에서 스크러버

의 운전 압력은 상압 근처이므로 증기상은 이상기체 혼합물로 간주할 수 있기 때문에 $\hat{\phi}_i^v$ 는 1로 보아도 무방하다. γ_i 는 non random two liquid mixture (NRTL) 액체 활동도계수 모델식⁶⁾을 적용하였는데 이는 물과 에탄올 사이의 액체 혼합물에 대한 열역학적인 비이상성을 해석하는 데 적용하였다.

또한 질소 가스의 물에 대한 용해도 추산을 위한 Henry 법칙은 식 (2)와 같이 온도와 압력의 함수로 표현된 식을 적용하였다.

$$\ln H_i(T, P) = C_{1,i} + \frac{C_{2,i}}{T} + C_{3,i} \ln T + C_{4,i} P \quad (2)$$

Table 1에는 물과 에탄올 사이의 NRTL 이성분계 상호작용 매개변수를 나타내었다.

Fig. 2에는 1 atm 조건에서 물과 에탄올 사이의 이

Table 1. Coefficients in NRTL model

Component	$A(I, J)$	$B(I, J)$	α
	$A(J, I)$	$B(J, I)$	
Ethanol	0.498538	-456.0020	0.1448
Water	1.015340	536.2640	

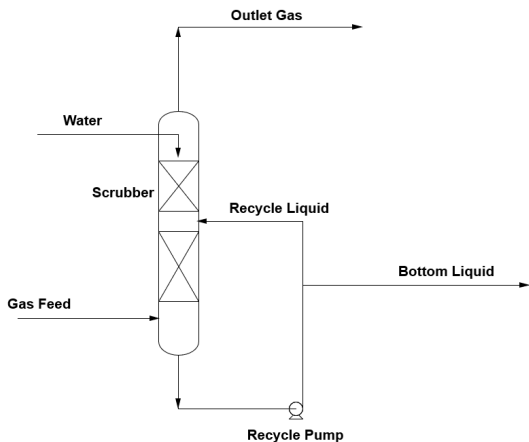


Fig. 1. Schematic drawing for an ethanol scrubber

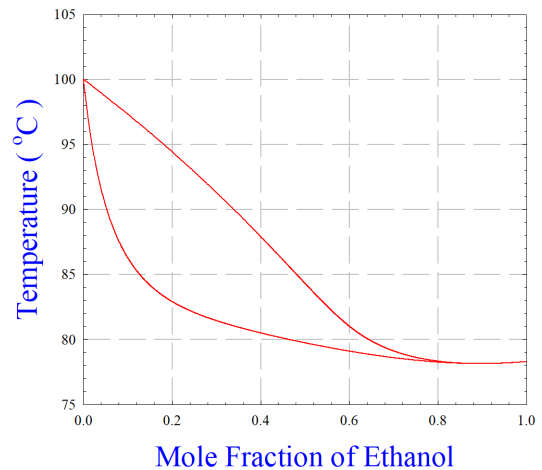


Fig. 2. Temperature-composition phase diagram for ethanol-water binary at 1 atm

성분계 온도-조성 증기-액 상평형 실험 데이터를 나타내었다. Fig. 2에 의하면 Table 1의 NRTL 모델식의 이성분계 상호작용 매개변수를 이용해서 상평형을 추산해 본 결과 에탄올의 몰분율 0.88 근처에서 물과 공비 혼합물을 형성하는 것을 알 수 있다.

Table 2에는 질소 가스와 물 용매 그리고 질소 가스와 에탄올 용매 사이의 Henry 법칙의 계수들을 나타내었다. 각 계수들은 온도와 압력의 함수로 질소 가스의 액체에 대한 실험 데이터의 회귀 분석을 통해 결정한 것들이다.

3. 전산 모사

Fig. 3에는 에탄올 스크러버에 대해서 PRO/II를 이용한 플로우시트를 나타내었다.

Fig. 3에 의하면 에탄올 증기를 포함하고 있는 질소 가스는 1번 스트림에 의해 스크러버 하부로 주입된다. 한편 스크러버 상부로는 2번 스트림으로 순수한 물이 공급되며 스크러버 하부 액상류에서는 물에

Table 2. Coefficients in Henry's law

Coefficients	Solute	Solvent
C ₁	31.0470	162.8900
C ₂	-555.5900	-760.1400
C ₃	-2.1065	-20.7005
C ₄	0.0000	1.4117×10 ⁻⁸

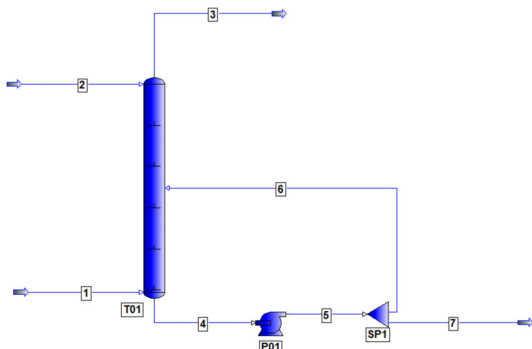


Fig. 3. PRO/II flow sheet drawing for an ethanol scrubber

용해된 에탄올 수용액을 얻을 수 있다. 이는 펌프에 의해서 가압된 후 일부는 스크러버 중간부로 환류되며 나머지 액상류는 7번 스트림에 의해서 폐수로 방류된다. 한편 스크러버 상부 기상류인 3번 스트림에 의해서 에탄올이 20 ppm 이하로 낮추어진 스트림은 대기로 방출된다.

Table 3에는 원료 기체의 온도, 압력, 유량 및 조성 조건을 나타내었다.

Fig. 4는 controller를 사용해서 상부 기상류인 3번 스트림으로 방출되는 에탄올 함량을 환경 제약 조건인 20 ppm 이하로 낮추도록 하였으며 이에 대한 조절 변수로는 스크러버 상부로 주입되는 용매의 질량 유량을 택하였다. 이때 6번 스트림을 통해 스크러버로 환류되는 질량 유량은 500 kg/h로 고정하였으며

Table 3. Feedstock condition

Component	Mole %
Nitrogen	99.3276
Ethanol	0.6724
Flow rate	240 Nm ³ /h
Temperature	25°C
Pressure	30,362.2 mmH ₂ O

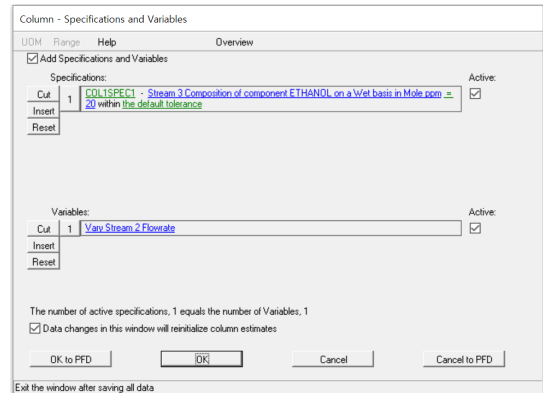


Fig. 4. Product specification in scrubber

Stream	Specification
1	Parameter = value
2	Stream 5 Flowrate of All Components on a Wet basis in kg/hr = 500

Fig. 5. Recycle stream mass flow specification

이는 Fig. 5에 나타내었다

Table 4에는 에탄올 스크러버에 대한 전산 모사 결과를 요약하여 정리하였다. Table 4에 의하면 환류 질량 유량을 500 kg/h로 고정하였을 때 스크러버 상부 기상류에서는 제품 사양인 에탄올 함량 20 ppm by mol을 얻을 수 있었으며 이때 펌프의 소요 동력은 0.0654 kW였다. 그리고 용매로써 상부 액상류로 주입된 물의 유량은 369 kg/h로 산출되었다. 한편 폐수 중에 에탄올의 함량은 3,551 ppm by mol이 되는 것을 알 수 있었다.

공정 최적화를 위한 case study로 우선 환류 유량의 변화에 따른 스크러버 상부에서 액상 용매의 주입 유량의 변화를 추산하였고 이에 대한 전산 모사 결과는 Fig. 6에 나타내었다. Fig. 6에 의하면 환류 유량이 증가함에 따라서 상부로 주입되는 용매의 질량 유량은 선형적으로 감소하는 것을 알 수 있었다. 환류 유량이 500 kg/h일 경우에는 상부에서 주입되

Table 4. Simulation result summary for a scrubber

Item	Result
Recycle flow rate	500 kg/h
Ethanol content at top	20 ppm by mol
Recycle pump power	0.0654 kW
Solvent water feed rate	369 kg/h
Waste water flow rate	366.3 kg/h
Ethanol content at waste water	3,551 ppm by mol

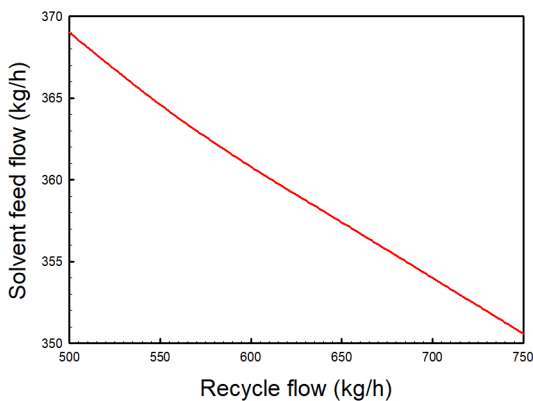


Fig. 6. Solvent feed rate versus recycle flow rate

는 용매의 질량 유량은 Table 4에 나타낸 바와 같이 369 kg/h이며 Fig. 6에서 환류 유량을 750 kg/h까지 증가시키면 상부에서 주입하는 용매의 질량 유량은 350.6 kg/h까지 감소하는 것을 알 수 있었다.

또한 환류 질량 유량의 변화에 따른 펌프의 소요 동력의 변화에 대한 전산 모사를 수행하였으며 이는 Fig. 7에 나타내었다. Fig. 7에 의하면 환류되는 질량 유량이 증가할수록 하부의 펌프의 소요 동력은 이에 비례하여 선형적으로 증가하는 것을 알 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 공정 중에 발생하는 질소 가스 중에 포함되어 있는 에탄올의 대기 방출을 20 ppm 이하로 낮추기 위해서 스크러버 컬럼에 대한 전산 모사와 공정 최적화 작업을 수행하였다. 전산 모사 결과 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

- 1) 스크러버 컬럼의 전산 모사에 가장 적합한 열역학 모델식은 물과 에탄올 사이의 열역학적인 비이상성을 추산하기 위해서 NRTL 액체 활동도계수 모델식을 적용하였으며 질소 기체와 물 사이의 용해도 추산을 위해 온도와 압력의 함수로 표현된 4개의 매개변수를 가지는 Henry의 법칙을 적용하였다.
- 2) 대기 중으로 유출되는 에탄올 함량을 20 ppm by mol 이하로 맞춘 상태에서 환류되는 액상류의 질

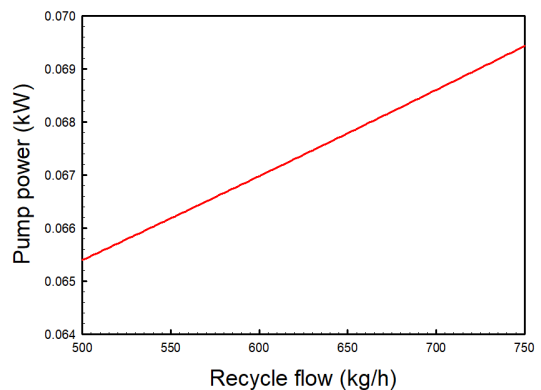


Fig. 7. Recycle pump power consumption versus recycle flow rate

량 유량이 증가할수록 스크러버 상부로 주입되는 액상류의 질량 유량은 선형적으로 비례하여 감소하는 것을 알 수 있었다.

3) 대기 중으로 유출되는 에탄올 함량을 20 ppm by mol 이하로 맞춘 상태에서 환류되는 액상류의 질량 유량이 증가할수록 스크러버 하부의 펌프의 소요 동력은 선형적으로 비례하여 증가하는 것을 알 수 있었다.

후 기

이 논문은 2022년도 동양대학교 학술연구비의 지원으로 수행되었음.

References

1. D. C. Y. Foo, "Chemical engineering process simulation", 2nd ed, Elsevier, Netherlands, 2022.
2. J. D. Seader, E. J. Henley, and D. K. Roper, "Separation process principles", 3rd ed, John Wiley & Sons, USA, 2010.
3. J. H. Noh, H. K. Park, D. S. Kim, and J. H. Jo, "Comparison of CO₂ removal capabilities among Rectisol[®], Selexol[™], and Purisol[®] process for DME synthesis and separation process", Clean Technology, Vol. 23, No. 3, 2017, pp. 237-247, doi: <https://doi.org/10.7464/ksct.2017.23.3.237>.
4. J. Kang, J. Noh, J. S. Ahn, and J. Cho, "A comparative study on the carbon dioxide removal capability between the processes using physical solvent and membrane process", Journal of the Korea Academia-Industrial cooperation Society, Vol. 14, No. 12, 2013, pp. 6590-6596, doi: <https://doi.org/10.5762/KAIS.2013.14.12.6590>.
5. D. Cho, J. Rho, D. S. Kim, and J. Cho, "A study for carbon dioxide removal process using methanol solvent in DME manufacture process", Journal of the Korea Academia-Industrial cooperation Society, Vol. 14, No. 3, 2013, pp. 1502-1511, doi: <https://doi.org/10.5762/KAIS.2013.14.3.1502>.
6. J. Y. Seyf, L. Nasiri, and B. Medi, "Development of the NRTL functional activity coefficient (NRTL-FAC) model using high quality and critically evaluated phase equilibria data. 2", Fluid Phase Equilibria, Vol. 577, 2024, pp. 113982, doi: <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2023.113982>.