# 탈에탄탑 설계를 위한 공정 최적화에 대한 연구

조정호 $^{1}$ , 김영우 $^{2^{*}}$   $^{1}$ 공주대학교 화학공학부,  $^{2}$ 호서대학교 자동차공학과

# Optimization Study for the Design of Deethanizer Column

Jungho Cho1 and Young-Woo Kim2\*

<sup>1</sup>Department of Chemical Engineering, Kongju National University, <sup>2</sup>Department of Automotive Engineering, Hoseo University

요 약 본 연구에서는 천연가스 처리공정 및 석유화학 공정의 Saturated gas plant에서 주로 사용되고 있는 탈에탄탑 (Deethanizer)에 대한 설계 과정과 재비기의 heat duty를 최소화시킬 수 있는 원료 주입단의 위치를 최적화시켰다. 탈에탄탑의 공정 모사를 위해서 상용성 모사기인 Invensys사의 PRO/II with PROVISION을 사용하였으며, 열역학 모델식으로는 Soave가 변형시킨 Redlich-Kwong 상태방정식을 사용하였다. 본 연구를 통해서 분리를 위한 최소이론단수는 9.02단이며, 최소환류비는 0.62437이며, 최적의 이론단수는 20단이며, 최적의 원료 주입단은 9단이고 이때 재비기의 heat duty의 최소값은 12.7470x10<sup>6</sup> KJ/hr임을 알 수 있었다.

**Abstract** In this study, we have completed the simulation and optimization work for the deethanizer column which was used for natural gas processing plant or saturated gas plant in a petrochemical process. An optimal feed stage location which minimizes the reboiler heat duty was determined. For the modeling of deethanizer, PRO/II with PROVISION was used and Soave modified Redlich-Kwong equation of state model was selected. Through this study, we have found that the minimum number of stage and minimum reflux ratio for separation were 9.03 and 0.62437, respectively and the theoretical stage number was 12, optimal feed stage location was 9 and minimum reboiler heat duty was 12,7470x10<sup>6</sup> KJ/hr.

Key Words: Deethanizer modeling, Optimal feed tray location, Equation of state, Simulation

# 1. 서론

탈에탄탑은 탈메탄탑(Demethanizer)과 탈프로판탑 (Depropanizer) 등과 함께 천연가스 처리공정 및 석유화학공정의 saturated gas plant 설계에서 주로 사용되는 증류탑이다. 본 연구에서는 탈에탄탑의 설계 과정을 나타내고 각 설계 단계에서 결정되어져야 할 설계 변수들을 상용성 화학공정 모사기인 Invensys사의 PRO/II with PROVISION 8.2를 사용하여 결정하였다[1]. 탈에탄탑[2]의 설계 과정에서 주어져야 할 설계 변수들은 표 1에 나타내었다. [표 1]에 의하면 증류탑 설계 엔지니어는 통상적으로 Step 1에서 Step 3 사이에 대한 정보는 사업주로부터 받아야 한다. 그 이후에 Step 4에서부터 Step 10까

지의 단계는 설계 엔지니어가 독자적으로 결정할 수 있다.

[규 1] 탁에타탐의 석계 과정

Step	설계 변수
1	원료의 유량, 조성 및 열적 상태
2	탑상 및 탑저 제품의 사양
3	공급되는 Utility 조건
4	응축기의 종류 및 overhead reflux drum의 운전 압력
5	응축기 및 증류탑의 압력강하
6	분리에 필요한 최소이론단수 및 최소 환류비
7	Case study를 통한 최소이론단수
0	재비기의 heat duty를 최소화시키는 최적의 원료 주
8	입단의 위치 결정
9	증류탑 Internal type 결정 및 사이징

10 탈에탄탑에 대한 전산모사 결과 요약

\*교신저자 : 김영우(ywkim@hoseo.edu)

접수일 09년 10월 16일 수정일 (1차 09년 11월 13일, 2차 09년 11월 24일)

게재확정일 09년 12월 16일

표 2에는 탈에탄탑으로 주입되는 원료에 대한 정보를 나타내었다. 원료의 압력은 탈에탄탑의 탑상압력보다 2.5 bar가 높게 지정되어 있으며 원료의 상 조건은 포화액체 상태로 공급하도록 지정되어 있다.

[**표 2**] 원료에 대한 정보

	1 11 11 11 11 11 11 11 11 11 11 11 11 1
Component	Flowrate (kmol/hr)
Methane	160
Ethane	370
Propane	240
Normal butane	25
Normal pentane	5
Flowrate (kmol/hr)	800
_	2.5 bar higher than top
Pressure	pressure
Phase condition	Saturated liquid

표 3에는 제품에 대한 사양을 나타내었다.

[표 3] 제품에 대한 사양

Component	Stream	Flowrate (kmol/hr)
Ethane	Bottom	2
Propane	Тор	2

표 3에 의하면 탑저제품에서 에탄의 유량을 2 kmol/hr로 제한하였으며, 탑상제품에서는 프로판의 유량을 역시 2 kmol/hr로 제한하였다. 본 탈에탄탑은 다성분계 증류이지만 실제적인 분리는 에탄과 프로판 사이의 분리라고볼 수 있다. 따라서 에탄은 light key component에 해당하며, 프로판은 heavy key component에 해당한다. 탑상제품에서 기대되는 각 성분의 몰 유량은 다음과 같다. 메탄은 탑상으로 160 kmol/hr 전량이 얻어질 것이다. 그리고 에탄은 탑저로 2 kmol/hr를 제외한 368 kmol/hr가 얻어지게되며 프로판은 탑상으로 표 2에 나타낸 바와 같이 2 kmol/hr가 얻어질 것이다. 아래의 표 4에는 기대되는 탑상제품의 각 성분의 몰 유량을 나타내었다.

[표 4] 탑상제품의 몰 유량

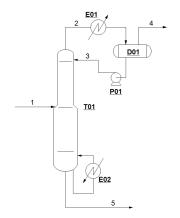
	 	п о	11 12	- '	_	11 0
Component						Flowrate (kmol/hr)
Methane						160
Ethane						368
Propane						2
Flowrate						530

한편 표 5에는 utility에 대한 공급조건을 나타내었다.

[표 5] Utility 공급조건

Cold utility	Cooling water
공급온도	32°C
회수온도	40°C
Refrigerant	Pure propylene
공급온도	-30°C
Hot utility	Steam
공급조건	130°C 포화온도

그림 1에는 탈에탄탑에 대한 공정 개요도를 나타내었다. 그림 1에 의하면 응축기는 부분 응축기를 사용하였으므로 탑상 제품은 증기상으로 얻어진다.



[그림 1] 탈에탄탑에 대한 공정 개요도

### 2. 열역학 모델식

탄화수소 계열에 대한 혼합물의 기액 상평형을 추산할 수 있는 방법은 상태방정식을 사용하여 기상과 액상의 퓨개시티를 계산하는 것이다. 이것은 아래의 식 (1)과 같이 쓸 수 있다.

$$\widehat{\phi_i^v}(T, P, y_i) y_i = \widehat{\phi_i^l}(T, P, x_i) x_i \tag{1}$$

한편 상태방정식 모델식으로는 Soave가 변형시킨 Redlich-Kwong 상태방정식을 사용하였는데 이는 다음의식 (2)와 같이 표현된다[3]. 이 식은 탄소수가 적은 탄화수소 계열의 기액 상평형 추산에 적합한 모델식으로 알려져 있다.

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a\alpha}{v(v + b)} \tag{2}$$

위의 식 (2)에서 a와 b는 각각 energy parameter와 size parameter로써 각각 임계온도와 임계압력의 함수로써 식

(3)과 식 (4)와 같이 나타낼 수 있다.

$$a = 0.42747 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \tag{3}$$

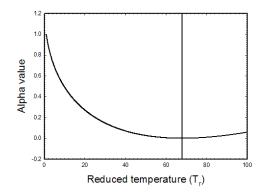
$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} \tag{4}$$

한편 식 (2)에서  $\alpha$ 는 alpha function으로써 순수성분의 온도에 따른 증기압을 잘 추산하기 위해서 도입한 각 성분의 환산온도와 편심인자의 함수인데 원식은 다음의 식 (5)와 식 (6)과 같이 표현된다.

$$\alpha = \left[1 + m\left(1 - \sqrt{T_r}\right)\right]^2 \tag{5}$$

$$m = 0.48508 + 1.55171\omega - 0.15613\omega^2 \tag{6}$$

식 (5)와 식 (6)의 alpha function을 수소에 대해서 적용한 것은 그림 2에 나타내었다.



[그림 2] 수소의 환산온도의 함수로 표현한 Alpha 값

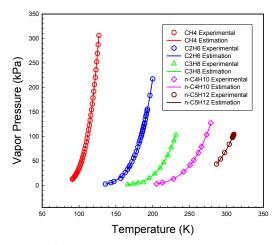
위의 그림 2는 수소의 환산온도의 함수로 alpha 값을 도시한 것이다. 그림 2에 의하면 수소의 환산온도가 68 근처에서 alpha 값은 최소값을 나타내다가 환산온도가 증가하면 다시 증가하는 경향을 나타낸다. 환산온도에 대한 alpha 값은 환산온도가 1일 때 1의 값을 가져야 하며, 환산온도가 증가하면 alpha 값은 계속적으로 감소하여 0에 수렴하여야 한다. 따라서 Soave의 alpha function은 원리상 틀렸다. 한편 식 (7)에는 Twu 등이 제안한 새로운 alpha function[4]을 나타내었으며 표 6에는 PRO/II with PROVISION에 내장되어 있는 메탄, 에탄, 프로판, 노말부탄 및 노말 펜탄에 대한 alpha function 앞의 계수인  $C_1$ ,  $C_2$ 와  $C_3$ 를 나타내었다.

$$\alpha = T_r^{C_3(C_2 - 1)} \exp\left[C_1(1 - T_r^{C_2C_3})\right] \tag{7}$$

[표 6] 순수 성분에 대한 alpha function에 대한 계수들

Component	$C_1$	$C_2$	$C_3$
1. CH <sub>4</sub>	0.51438	0.99026	1.0000
2. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0.24238	0.88001	1.9845
3. C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0.23488	0.86618	2.2076
7. $nC_4H_{10}$	0.18474	0.87462	2.9482
8. nC <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0.53159	0.86996	1.4810

아래의 그림 3에는 메탄, 에탄, 프로판, 노말 부탄 및 노말 펜탄 순수성분의 온도에 따른 증기압 데이터와 식 (7)의 새로운 alpha function을 이용해서 추산한 증기압을 나타내었다.



[그림 3] 순수성분의 온도에 따른 증기압 추산[5]

또한 SRK 상태방정식을 혼합물에 적용하기 위해서 energy parameter와 size parameter에 대해서 혼합규칙을 적용할 수 있는데 이는 아래의 식 (8)과 식 (9)와 같이 표현할 수 있다.

$$a_{mix} = \sum_{i} \sum_{j} x_i x_j a_{ij} \tag{8}$$

$$b_{mix} = \sum_{i} x_i b_i \tag{9}$$

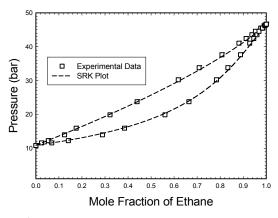
위의 식 (8)에서 성분 'i'와 성분 'j' 사이의 이성분계에 대한 energy parameter인  $a_{ij}$ 에 대해서는 van der Waals 혼합규칙을 사용하였는데 이는 식 (10)과 같이 쓸 수 있다.

$$a_{ij} = \sqrt{a_i a_j} \left( 1 - k_{ij} \right) \tag{10}$$

위의 식 (10)에서  $k_{ij}$ 는 이성분계 상호작용 매개변수로써 이는 각각의 이성분계 사이의 기액 상평형 실험 데이터를 잘 추산하도록 회귀분석을 통해서 결정한다. 한편탈에탄탑에 참여하는 각각의 이성분계에 대한 이성분계 상호작용 매개변수는 표 7에 나타내었다. 한편 아래의 성분 'i'와 성분 'j'에서 1에서 5 사이의 숫자는 각각 표 6에서 제시한 성분의 번호와 일치한다. 한편 그림 4에는 실제적인 분리가 이루어지는 에탄과 프로판의 기-액 상평형실험 데이터와 SRK 상태방정식을 이용해서 이를 추산한 것을 나타내었다. 그림 4에 의하면 에탄과 프로판사이의 303.15K에서 기액 상평형실험 데이터를 SRK 상태방정식을 이용하고 표 7의 에탄과 프로판 사이의 이성분계 상호작용 매개변수 값인 -0.0022를 이용하여 도시한결과 실험 데이터와 잘 일치함을 알 수 있다.

[표 7] 각각의 이성분계 사이의 이성분계 상호작용 매 개변수 값 (PRO/II)

성분 i	성분 j	$k_{ij}$	성분 i	성분 j	$k_{ij}$
1	2	-0.0078	2	4	0.0067
1	3	0.0090	2	5	0.0056
1	4	0.0056	3	4	-0.0022
1	5	0.0190	3	5	0.0233
2	2	-0.0022	4	5	0.0204



[그림 4] 303.15K에서 에탄과 프로판의 기액 상평형 실험 데이터와 SRK 상태방정식을 이용한 추산[6]

## 3. 탈에탄탑의 전산모사

#### 3.1 Overhead reflux drum 운전압력의 결정

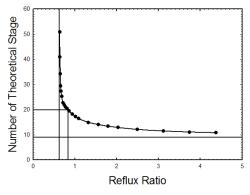
그림 1에 나타낸 탈에탄탑의 개요도에 의하면 응축기는 부분 응축기의 형태를 나타내었다. 이것은 냉매로 냉각시킬 수 있는 overhead reflux drum의 운전온도에서 이슬점 압력과 같아진다. 한편 overhead reflux drum의 운전 온도를 결정하여야 하는데 이는 탑상제품의 조성에서의 임계점 온도보다 충분히 낮아야 한다. 표 4에 나타낸 탑상제품의 조성에서 임계온도를 계산하면 -2.23°C이다. 따라서 냉각수는 냉매로써 적당하지 않고 더 낮은 온도의 냉매를 사용하여야 한다. Overhead reflux drum의 운전온도를 -20°C로 정하였으며, 냉매는 순수한 프로필렌을 사용하였으며, 냉매의 공급온도는 프로세스 측과의 대수평균 온도차를 고려하여 -30°C로 정하였다. 표 8에는 탈에탄탑의 응축기 주변에 대한 전산모사 결과를 요약하였다.

[표 8] 응축기 주변의 전산모사 결과

항목	모사 결과
응축기 종류	부분 응축기
Reflux drum 운전온도	-20°C
Reflux drum 운전압력	21.1275 bar
냉매의 종류	Pure propylene
냉매 공급온도	-30°C
응축기 압력강하	0.2 bar
탈에탄탑 압력강하	0.3 bar

#### 3.2 최소이론단수와 최소환류비의 결정

최소이론단수와 최소환류비의 결정을 위해서 Invensys 사의 PRO/II with PROVISION에 내장되어 있는 Shortcut 모듈을 사용하였다. Shortcut 모듈을 사용하여 전산모사 를 수행한 결과 최소이론단수는 9.02단을 최소환류비는 0.62437임을 알 수 있었다. 한편 그림 5에는 환류비에 대 한 이론단수의 관계를 그래프를 통해서 나타내었다.



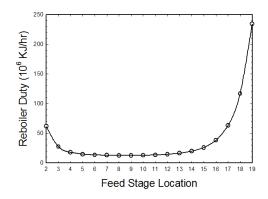
[그림 5] 탈에탄탑에서 환류비와 이론단수 사이의 관계

그림 5에 의하면 환류비와 이론단수는 서로 반비례함

을 알 수 있다. 그림 5의 환류비와 이론단수 사이의 그래 프를 이용해서 최적의 이론단수를 결정할 수 있다. 환류비가 너무 큰 쪽에서 조업하게 되면 이론단수는 줄일 수 있으나 응축기와 재비기에서 heat duty가 증가하게 되어 연간 운전비용이 많이 소요되게 된다. 한편 환류비가 작은 영역에서 조업하게 되면 연간 운전비용은 줄일 수 있으나 이론단수가 급격하게 증가하게 되어 초기 장치 투자비용이 증가하게 된다. 따라서 환류비에 대한 이론단수의 그래프가 가장 급격하게 기울어지는 이론단수 20단에서 운전비용과 초기장치투자비용의 합을 최소화시킬 수있을 것이다. 따라서 이론단수를 20단으로 결정하였으며[2], 실제단수는 35단에서 40단 가량이며 단의 효율은 65%에서 70% 사이에 존재한다[7].

### 3.3 탈에탄탑에 대한 전산모사 및 공정 최적화

3.2절에서 결정한 이론단수를 이용하여 탈에탄탑을 rigorous하게 전산모사 작업을 수행할 수 있다. 우선 이론 단수는 20단으로 정하였으며, 응축기의 형태는 부분 응축기를 overhead reflux drum의 운전압력은 21.1275 bar를 응축기에 대한 압력강하는 0.2bar를 증류탑 전체에 대한 압력강하는 0.3bar를 적용하였다. 한편 재비기의 heat duty를 최소화시키기 위하여 원료 주입단의 위치를 변화시켰는데 이것은 그림 6에 나타내었다.



[그림 6] 재비기의 heat duty를 최소화시키는 최적의 원료 주입단의 결정

그림 6에 의하면 원료 주입단의 위치를 9단으로 했을때 재비기의 heat duty는 12.7470x10<sup>6</sup> KJ/hr로 최소를 나타냄을 알 수 있었다. 이는 원료 주입단의 위치를 탑상에 주입하였을 때 61.8721x10<sup>6</sup> KJ/hr의 재비기의 heat duty가 소모되 탑저에 주입하였을 때 234.2945x10<sup>6</sup> KJ/hr의 재비기의 heat duty가 소모되는 것에 비해서 매우 적은 값임을 알 수 있다. 아래의 표 9에는 탈에탄탑에 대한 전

산모사 및 최적화 과정을 통해서 결정한 설계 변수들을 요약하였다.

[표 9] 탈에탄탑 설계 결과 요약

결과
부분 응축기
-20°C
21.2175 bar
0.2 bar
0.3 bar
순수한 프로필렌
-30°C
9,512 Kg/hr
9.02
0.62437
20
9
-4.0181x10 <sup>6</sup> KJ/hr
12.7470x10 <sup>6</sup> KJ/hr
0.7047
5,863 Kg/hr

한편 정류부와 회수부에 대하여 valve tray를 가정하고 flooding percent를 80%로 가정하여 증류탑의 직경과 높이를 결정하였는데 계산결과 정류부의 직경은 1.1m이고 회수부의 직경은 1.8m임을 알 수 있었다. 이것은 그림 1에 탈에탄탑에 대한 개요도와 같이 상부보다 하부의 직경이 큰 형태임을 알 수 있다.

## 4. 결론

본 연구에서는 천연가스 처리공정과 석유화학공정에서 사용되고 있는 탈에탄탑에 대한 전산모사를 통한 설계 과정 및 최적화 과정에 대해서 나타내었는데 결과적으로 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

- 1. 본 연구에서 적용한 열역학 모델식으로는 탄화수소 계열의 혼합물에 대한 기액 상평형을 잘 추산할 수 있는 SRK 상태방정식을 사용하였으며, 기존의 편 심인자를 사용한 alpha function의 단점을 보완한 새 로운 alpha function을 적용하였다.
- 2. 증류탑의 운전압력을 결정하는 방법과 최소이론단 수와 최소환류비를 결정한 다음에 환류비와 이론단 수 사이의 관계로부터 최적의 이론단수인 20단을 결정할 수 있었다.
- 3. 탈에탄탑에서 소요되는 재비기의 heat duty를 최소 화시키기 위해서 원료 주입단의 위치를 최적화시켰

으며 그 결과 최적의 원료 주입단의 위치는 9단임 을 알 수 있었다.

# 참고문헌

- [1] 조정호, 박종기, 김성태 "PRO/II with PROVISION을 활용한 화학공정의 모사". 도서출판 아진, 2004.
- [2] PRO/II Application Brief, 2005.
- [3] Soave, G., "Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state", Chem. Eng. Sci., vol. 27, pp. 197-1203, 1972.
- [4] Twu, C.H., D. Bluck, J.R. Cunningham, and J.E. Coon, "A Cubic Equation of State with a New Alpha Function and New Mixing Rule", Fluid Phase Equil., vol.69, pp. 33-50, 1991.
- [5] Tomas, B., Vojtech, F., and Eduard, H., "The vapour pressures of pure substances", Elsevier, 1984.
- [6] Petr, U and Ivan, W, "Liquid-vapour critical region of the most volatile component of a ternary system. I. Vapour-liquid equilibria in the ethane - propane n-butane system", vol. 15, pp. 209-217, 1983.
- [7] Gerald L. Kaes, "Refinery Process Modeling: A Practical Guide to Steady State Modeling of Petroleum Processes", Kaes Enterprises, Inc. 2000.

#### 조 정 호(Jungho Cho)

#### [정회원]



- 1988년 2월 : 한양대학교 공과대 학 화학공학과 (공학사)
- 1991년 8월 : 한국과학기술원 화 학공학과 (공학석사)
- 1998년 2월 : 서울대학교 공과대 학 화학공학과 (공학박사)
- 1991년 1월 ~ 1997년 2월 : 대 림산업(주) 공정부 과장
- 1997년 3월 ~ 2000년 2월 : 경인여자대학 산업환경공학부
  전임강사
- 2000년 3월 ~ 2008년 2월 : 동양대학교 공과대학 생 명화학공학과 조교수
- 2008년 3월 ~ 현재 : 공주대학교 화학공학부 부교수

<관심분야⇒ 열역학, 공정 Simulation

# 김 영 우(Young-Woo Kim)

#### [정회원]



- 2005년 3월 : 미 듀크대학교 공 과대학 토목환경공학과 (공학석사)
- 2006년 1월 : 미 듀크대학교 공 과대학 토목환경공학과 (공학박사)
- 2006년 1월 ~ 2006년 12월 : 미 듀크대학교 토목환경공학과 박사후 연구원
- 2007년 1월 ~ 2007년 7월 : 미 듀크대학교 공과대학 토목환경 공학과 연구교수
- 2008년 3월 ~ 현재 : 호서대학교 자동차공학과 전임강사

<관심분야> 유체역학, 공정 Simulation