

Multi-scale simulation for adsorption process development: A case study of methanol adsorption on activated carbon

손혜정, 박호재, 임영일*
한경대학교
(limyi@hknu.ac.kr*)

본 연구는 흡착공정 설계 및 개발을 위하여 분자규모에서 시작하여 상업적 공정규모에 이르는 모사과정을 기술한다. 분자수준의 모사는 Material Studio 4.1 의 GCMC (Grand Canonical Monte Carlo) 방법을 이용하는 Sorption 모듈을 사용하여 흡착평형식과 분자 사이의 에너지를 예측한다.

유체역학 모사 (CFD) 는 분자수준의 모사를 통해 얻은 흡착평형식을 이용하여 흡착 컬럼 내의 유동상의 속도와 농도를 2차원 또는 3차원으로 보여준다. CFD code 는 Fluent 6.2 를 사용한다.

공정 모사단계에서는 앞서 수행한 모사결과를 이용하여, 공정의 설계인자를 찾고 운전조건을 최적화한다. 이러한 공정모사는 자체 개발한 FAST-Chrom/SMB 를 사용한다.

평균 체류시간에 있어서 공정모사결과와 실험결과와의 최대 오차는 15%이다. 본 결과로 부터 multiscale simulation 은 흡착공정개발을 가속화할 수 있는 방안으로 여겨진다.

본 연구는 한국과학재단 특정기초연구 (R01-2006-000-10786-0) 지원으로 수행되었다.