용매 탈아스팔트화 공정의 모델링을 위한 PC-SAFT 상태방정식 association parameter 계산

박준우, 이기봉†, 고강석[1], 노남선[1]
고려대학교; [1]한국에너지기술연구원
(kibonglee@korea.ac.kr†)

중질유분 고품위화 공정들에 앞서 코크 생성 및 촉매 피독을 유발하는 아스팔텐 성분은 제거되어야 하며 이를 제거하는 공정으로는 용매 탈아스팔트화 (solvent deasphalting, SDA) 공정이 대표적이다. SDA 공정은 공급물로 감압잔사유와 같은 중질유분, 용매로 C3~C6의 알케인 용매를 사용하여 용매에 녹는 탈아스팔트화 오일 성분을 탑상으로 추출하고 용매에 녹지 않는 아스팔텐 성분은 탑저로 제거하는 공정이다. 기존의 연구에서는 실험적으로 운전조건이나 첨가제의 투입에 따른 추출 과정의 결과를 제시한 문헌은 많으나 모델링을 통하여 SDA 공정의 추출과정을 모사하는 연구는 거의 진행되지 않았다. 모델링에 관한 문헌이 있다 하더라도 모델에 사용되는 파라미터들이 실험 결과에 맞춰서 조절되는 선에 머물러 있다. 본 연구에서는 PC-SAFT 방정식을 이용하여 SDA 추출 과정의 모델링을 진행하고자 하였고 이에 필요한 파라미터 값들을 이론적 근거에 의해 설정하는 방법에 대해 고찰하였다. 특히 PC-SAFT 방정식의 5가지 파라미터 가운데 association energy parameter를 이론적으로 계산하기위해 분자 동역학 시뮬레이션에서 두 오일 분자의 거리를 조절해 가며 에너지의 변화를 살펴보았다.