(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0049248
(43) 공개일자 2022년04월21일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G06Q 10/06 (2012.01) *G06Q 10/10* (2022.01)
G06Q 50/26 (2012.01) *G16C 20/10* (2019.01)
G16C 20/70 (2019.01)
(52) CPC특허분류
G06Q 10/0639 (2013.01)
G06Q 10/067 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2020-0132658
(22) 출원일자 2020년10월14일
심사청구일자 2020년10월14일

(71) 출원인
인천대학교 산학협력단
인천광역시 연수구 아카데미로 119 (송도동)
(72) 발명자
김지용
인천광역시 연수구 아트센터대로97번길 15, 1106동 501호
(74) 대리인
차준용

전체 청구항 수 : 총 9 항

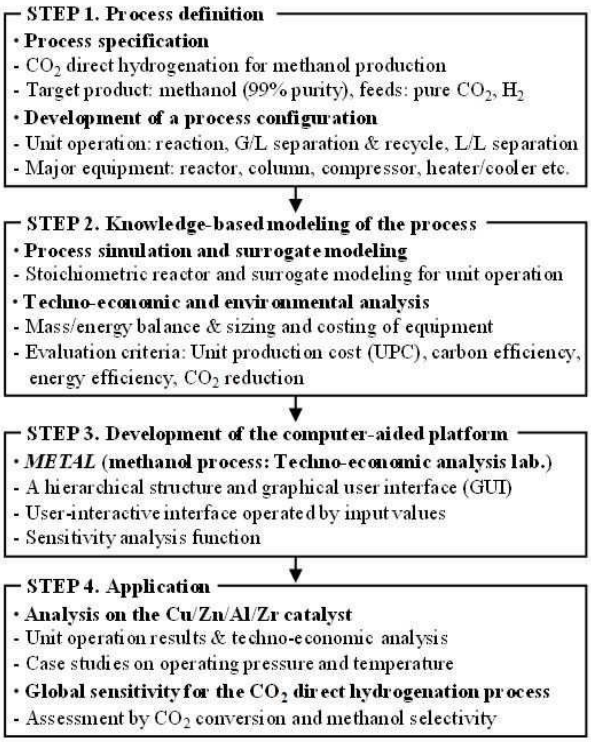
(54) 발명의 명칭 **이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼**

(57) 요 약

본 발명에서는 이산화탄소(CO_2) 직접 수소화 촉매의 초기 단계 선별을 위한 새로운 지식 기반 평가 플랫폼을 제공한다. 본 발명을 달성하기 위해, 새로운 메탄올 생산 공정이 지식 기반 대리 모형을 채택하여 CO_2 직접 수소화를 통해 시뮬레이션된다. 본 발명의 플랫폼에서 물질 및 에너지 수지 뿐만 아니라 사이징 및 비용 정보는 CO_2 공

(뒷면에 계속)

대 표 도 - 도2



급량, 촉매의 변환 및 선택성, 반응의 온도 및 압력, 배출 분율의 선택된 주요 변수를 기준으로 결정된다. 메탄올 생산 공정의 기술적, 경제적, 환경적 역량을 평가하기 위해 단위 생산비, 탄소 및 에너지 효율성, CO_2 감소의 4가지 평가 기준을 적용한다. 일 실시예로서 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 통한 메탄올 생산 공정의 에너지 효율과 경제성을 서로 다른 작동 온도와 압력에서 분석한다. 이어 문헌에 보고된 38개의 CO_2 직접 수소화 촉매에 대해 평가 플랫폼을 적용해 촉매 발견 초기 연구개발 단계에서 연구개발 목표와 방향 설정에 필요한 기술적·경제적 장점과 장벽을 분석한다.

(52) CPC특허분류
G06Q 10/10 (2021.08)
G06Q 50/26 (2013.01)
G16C 20/10 (2019.02)
G16C 20/70 (2019.02)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 1711116324
과제번호 2017M1A2A2043137
부처명 과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명 한국연구재단
연구사업명 기후변화대응기술개발(R&D)
연구과제명 최적화 기법을 이용한 CO2 직접자원화 공정 개발 및 평가
기 여 율 0.5/1
과제수행기관명 인천대학교
연구기간 2020.02.15 ~ 2020.12.14
이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 1711107644
과제번호 2019R1F1A1063653
부처명 과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명 한국연구재단
연구사업명 개인기초연구(과기정통부)(R&D)
연구과제명 강화기계학습을 이용한 촉매 화학반응 시스템 모델링 및 최적 촉매 반응 시스템 설계 방법론 개발
기 여 율 0.5/1
과제수행기관명 인천대학교
연구기간 2020.03.01 ~ 2021.02.28

명 세 서

청구범위

청구항 1

초기 연구개발 단계에서 CO_2 수소화 촉매의 능력을 평가하기 위한 플랫폼으로서,

CO_2 공급량, 촉매의 변환성(Conversion), 메탄올 선택성(Selectivity), 반응 온도, 반응 압력 및 배출 분율(Vent-out Fraction)을 포함하는 조작 변수(Manipulated Variables)를 이용하여 촉매 반응이 수반되는 전체 메탄올 생산 공정의 질량 수지 및 에너지 수지를 결정하는 단계와

단위생산비(Unit Production Cost, UPC), 탄소효율, 에너지효율 및 순 CO_2 감소의 평가 기준을 활용하여 CO_2 수소화 촉매의 기술적, 경제적 및 환경적 성과를 평가하는 단계를 포함하며,

상기 단계들을 수행하기 위하여 그래픽 사용자 인터페이스(GUI)가 탑재된 컴퓨터 지원 플랫폼으로 패키징된 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 메탄올 생산 공정은,

메탄올 합성을 위한 CO_2 수소화, 재순환을 위한 가스/액체 분리 및 생산된 메탄올을 정제하기 위한 액체/액체 분리의 단위 공정을 포함하는 것을 특징으로 하는 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 메탄올 생산 공정의 질량 수지 및 에너지 수지의 결정은,

지식 기반 대리 모형(knowledge-based surrogate models)을 사용하여 상기 생산 공정을 시뮬레이션함으로써 수행하는 것을 특징으로 하는 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 메탄올 생산 공정의 질량 수지 및 에너지 수지를 결정하기 위하여,

Aspen Plus의 화학양론형 반응기 모델을 사용하는 것을 특징으로 하는 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼.

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 메탄올 생산 공정 중 분리기(splitter), 믹서, 히터, 냉각기 및 압축기와 같은 공통 프로세스 유닛은 대리 모형 (surrogate models)을 사용하여 시뮬레이션하고, 이로부터 각 공정의 질량 수지 및 에너지 수지를 결정하는 것을 특징으로 하는 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 지식 기반 평가 플랫폼은 상기 단위생산비(Unit Production Cost, UPC), 탄소효율, 에너지효율 및 순 CO_2 감소의 평가 기준에 대한 상기 CO_2 공급량, 촉매의 변환성(Conversion), 메탄올 선택성(Selectivity), 반응 온도, 반응 압력 및 배출 분율(Vent-out Fraction)을 포함하는 조작 변수(Manipulated Variables)의 영향을 평가하기 위한 민감도 분석 단계를 더 포함하는 것을 특징으로 하는 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 단계들을 수행하기 위하여 그래픽 사용자 인터페이스(GUI)가 탑재된 컴퓨터 지원 플랫폼은 입력 및 출력 모듈로 구성되며,

상기 입력 모듈은 상기 CO_2 공급량, 촉매의 변환성(Conversion), 메탄올 선택성(Selectivity), 반응 온도, 반응 압력 및 배출 분율(Vent-out Fraction)을 포함하는 조작 변수를 지정할 수 있는 세부 탭을 포함하며,

상기 출력 모듈은 몰 흐름, 에너지 소비량, CO_2 배출량 및 비용을 포함하는 시뮬레이션 결과를 표시하는 것을 특징으로 하는 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 입력 모듈이 포함하는 세부 탭은 전체 메탄올 생산 공정의 질량 수지 및 에너지 수지 그리고, 경제적, 기술적, 환경적 지수를 산출하기 위해 연산 엔진을 실행하도록 하는 시작(Start) 버튼을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼.

청구항 9

제7항에 있어서,

상기 입력 모듈은 상기 단위생산비(Unit Production Cost, UPC), 탄소효율, 에너지효율 및 순 CO_2 감소의 평가 기준에 대한 상기 CO_2 공급량, 촉매의 변환성(Conversion), 메탄올 선택성(Selectivity), 반응 온도, 반응 압력 및 배출 분율(Vent-out Fraction)을 포함하는 조작 변수의 영향을 평가하기 위한 민감도 분석 탭을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 이산화탄소 직접 수소화 촉매를 위한 지식 기반 평가 플랫폼에 관한 발명이다.

배 경 기 술

[0002] 대부분의 국가들이 직면하고 있는 중요한 에너지 및 환경 문제 중 하나는 온실가스(GHG) 배출로 인한 기후 변화다. 다양한 온실가스 중 이산화탄소(CO_2)가 2010년 전 세계 온실가스 배출량의 65%를 차지했다. CO_2 배출량이 지속적이고 빠르게 증가할 것으로 예상되었기 때문에, 이러한 문제를 해결하기 위한 많은 시도가 전세계적으로 이

루어졌다. 특히 선진국과 신흥국 대다수는 지구 온도 상승을 산업화 이전 수준보다 2℃ 이하로 제한하는 것을 목표로 기후변화 완화를 위한 실질적인 노력을 장려하는 유엔기후변화협약(UNFCCC)에서 파리협정을 채택했다.

[0003] 이런 맥락에서 CO_2를 원료로 선제적으로 활용하는 것은 부가가치가 있는 화학물질을 생산하고 CO_2 배출량을 완화하기 때문에 지속 가능한 전략이다. 수십 년 동안 CO_2 활용 화학물질과 그 경제성, 석유 및 가스 회수를 위한 CO_2 사용, 주요 화학구축블록(예: CO, 메탄, 포르믹산, 에틸렌)에 대한 CO_2 전기화학적 감소, 산업 생태계의 관점에서 CO_2 활용 기술의 평가, CO_2 활용 기술을 재생 에너지원에 통합함으로써 얻을 수 있는 타당성 및 편익 분석 등 CO_2 활용전략의 개발 및 전개에 많은 연구가 집중되어 왔다.

[0004] 고부가가치 화학제품 생산을 위한 CO_2 활용에 대한 다양한 경로가 있지만, 촉매 변환은 CO_2를 유용한 화학 물질로 전환하는 가장 널리 사용되고 유망한 방법 중 하나이다. 특히 역수성가스변환(RWGS)반응은 CO_2를 수소(H_2)와 반응시켜 이질적인 촉매를 이용한 일산화탄소(CO)와 물(H_2O)을 생산하는 것으로 잘 알려진 촉매 과정이다. RWGS 반응에 의해 생성된 CO는 CO_2보다 활성도가 높기 때문에, CO는 각각 메탄올 합성 반응과 피셔-트롭시(FT) 반응을 통한 메탄올과 액체연료 등의 제품을 제조하기 위해 합성가스(CO와 H_2의 혼합물) 형태의 핵심 반응제로 사용되어 왔다. RWGS 반응에 대한 이전 문헌 보고서와 관련하여, 새로운 촉매의 발견에 대한 실험 및 이론적 접근방식이 모두 조사되었다. 예를 들어, 장(Zhang) 등 연구진은 RWGS 공정에 대한 새로운 Cu 기반 촉매(Cu/β-Mo_2C)를 합성했으며, CO_2 변환과 CO 선택성이 각각 최대 40%, 100%에 이를 수 있음을 확인했다. 또한 왕(Wang) 등 연구진은 일반화된 경사도 근사 함수(DFT-GGA) 방법과 상관관계가 있는 밀도 함수이론을 이용한 수성가스변환(WGS)과 역수성가스변환(RWGS) 공정의 반응 메커니즘을 연구하였고 CO_2 분리의 전환 상태를 분석하여 구조 민감도를 조사했다. 또한 Wilkinson 외 연구진은 메탄올 합성 반응에서 Cu/ZnO/Al_2O_3 촉매의 동작을 표현하기 위해 정상/비정상 상태 운동학 모델을 생성하고 새로운 운동학 모델을 적용함으로써 결과를 비교했다.

[0005] 또한, 기술-경제 및 환경 분석과 관련된 연구가 수행되었다. 이러한 맥락에서 주(Joo) 외 연구진은 CAMERE (Carbon dioxide hydrogenation to form Methanol via a Reverse-water-gas-shift reaction) 공정(역수성가스변환 반응을 통해 메탄올을 형성하기 위한 이산화탄소의 수소화)을 위한 Cu/ZnO/ZrO_2/Ga_2O_3 조성물과 함께 새로운 촉매를 개발하여 상업용 메탄올 합성 공정과 비교하여 그 경제성을 평가하였다. 또한 킴(Kim) 등은 일반적인 생산 공정과 태양열 기술을 통합함으로써, CO_2로부터 새로운 메탄올과 FT(피셔-트롭시) 연료 생산 공정을 설계하고 에너지 효율, 경제 및 환경 영향을 분석하였다.

[0006] 합성가스 생산 없이 CO_2를 메탄올이나 탄화수소로 직접 전환시키는 CO_2 직접 수소화 반응도 프로세스 설계가 단순하고 조작이 용이해 새로운 촉매변환 반응으로 주목받았다. 실제로, 최근 CO_2 직접 수소화 촉매와 공정에 대한 많은 연구가 있었다. 예를 들어, Li 등은 Cu 기반 촉매(Cu/Al_2O_3, Cu/AlCeO, Cu/CeO_2)를 개발하고 서로 다른 작동 조건에서 촉매 활성과 반응 메커니즘을 분석하였다. 또한, Gao 등은 Cu/Zn/Al/Zr 촉매들을 합성하여 CO_2 변환과 메탄올 선택성이 반응 압력과 알루미늄 무게 비율이 증가함에 따라 증가하였음을 확인했다. 또한 Willauer 등 연구진은 고정형 베드 반응기와 연속식 교반-탱크형 반응기(A continuous stirred-tank reactor, CSTR)에서 CO_2 변환과 제품 선택성 모두에 대한 공간 속도의 영향을 비교했다.

[0007] 새로운 촉매 발견 연구 외에도 CO_2 직접 수소화 과정의 프로세스 설계와 기술성-경제성 분석(TEA)도 수행되었다. 이러한 맥락에서 Kiss 등은 습식 수소를 사용하는 CO_2 직접 수소화를 통해 Cu/Zn/Al/Zr 촉매 기반 메탄올 생산 공정을 시뮬레이션하고 기술 성과와 경제성을 평가했다. 또한, Do 외 연구진은 열화학 분할 기술과 통합된 CO_2 직접 수소화 프로세스를 설계하고 기술-경제 분석을 수행했다.

[0008] 기술-경제성 분석 연구에 대한 문헌 검토 결과 CO_2 변환과 메탄올 수율이 낮아 중간화학물질로서의 CO(즉 CO_2→합성가스→메탄올)를 통한 기존 경로에 비해 CO_2 직접 수소화에 의한 메탄올 생산의 경제성이 떨어지는 것으로 나타났다. 이러한 문제를 해결하기 위해, 높은 메탄올 수율을 촉진하는 데 헌신하는 새로운 촉매들을 개발하려는 많은 시도가 있었다. 수많은 새로운 촉매들이 발견되고 문헌에 보고된 반면, 기술적 및 경제적 타당성을 검증하고 평가하기 위한 후속 작업들은 결국 실제적인 배치로 이어지는 새로운 촉매 발견 R&D만큼 빠르게 수행되

지 않았다(도 1(a) 참조).

[0009] 나아가 기존 CO를 통한 공정에 더해 실제 메탄올 생산시장에서 경쟁력을 갖출 수 있도록 하는 연구개발 측면에서도 촉매 연구원들이 명확한 목표와 방향성을 갖추지 못해 어려움을 겪고 있다.

[0010] 이와는 달리, 엄격한 모델링 및 시뮬레이션, 프로세스 통합 및 강화, TEA 연구와 같은 프로세스 시스템 엔지니어링(PSE) 중심 접근법은 새로운 촉매의 성공적인 배치를 위해 널리 사용되어 왔다. 실제로 PSE 기법을 이용한 연구개발은 대개 새로운 촉매의 보고 후 수행된다. 새로운 촉매 발견에서 실제 구현을 위한 프로세스 시뮬레이션 및 TEA 연구에 이르는 순차적 R&D 접근방식은 매우 정확한 결과(예: 에너지 및 물질 수지, 사이징 및 비용 데이터, 경제성)를 보장한다.

[0011] 그러나 이러한 종래의 연구개발방법은 빠른 속도의 촉매발견 R&D 뿐만 아니라 첨단기술 전개를 위한 긴급한 사회적 요구에 대응한다는 측면에서 미흡하다. 순차적 R&D에서 또 다른 중요한 문제는 엄격한 모델링과 시뮬레이션은 일반적으로 알려진 표적 반응의 상세한 특성(예: 명확하게 정의된 운동학 및 속도 매개변수)을 필요로 하며, 많은 시간이 소요되는 실험을 수반해야 한다는 점이다.

[0012] CO_2 직접 수소화를 위한 많은 새로운 촉매들이 보고되었지만, 그들의 열역학 및 반응 메커니즘은 여전히 조사 중에 있다. 이는 실제 산업 응용을 위한 새로운 CO_2 수소화 촉매의 잠재력을 매우 초기 연구개발 단계에서 시간이 많이 걸리는 과정을 거쳐 조사될 수 있다는 것을 의미한다.

선행기술문헌

특허문헌

[0014] (특허문헌 0001) 대한민국 등록특허 제10-1937160호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0015] 새로 발견된 촉매의 실제 적용을 위한 기존 R&D의 한계를 극복하기 위해서는 촉매의 기술적, 경제적 타당성을 신속하고 정확하게 평가하는 새로운 인터페이스 단계가 필요하다(도 1(b) 참조). 새롭게 도입된 단계는 촉매의 성능을 정량화하여 대량 스크리닝(High Throughput Screening, HTS) 및 높은 잠재력을 갖는 촉매의 평가 등 연구개발 전략에서 보다 신속한 의사결정을 용이하게 할 수 있도록 사용이 편리하고 신속하며 이해할 수 있는 단계여야 한다. 예를 들어, 새로운 촉매 발견을 연구하는 연구자들은 변환 대 선택성 사이의 우선 순위 또는 고수율과 보통 수준의 작동 조건 사이의 절충 해결과 같은 실질적인 연구개발 방향과 목표를 확립할 수 있다. 또한 효율적이고 신속한 방법을 통해 연구자들이 비유망 후보를 선별하고 이상적인 반응 조건을 파악함으로써 촉매의 산업적 구현을 빠르게 추적할 선택된 연구개발 프로젝트에 집중할 수 있어야 한다.

[0016] 따라서 본 발명에서는 초기 연구개발 단계에서 CO_2 수소화 촉매의 능력을 평가하기 위한 새로운 플랫폼의 개발을 보고한다. 본 발명에 따른 평가 플랫폼은 세부적인 운동학, 열역학, 전달 현상이 요구되는 기존의 접근방식과 달리 촉매 성능(변환성 및 선택성)만을 사용하여 촉매반응이 수반되는 전체 메탄올 생산 공정의 질량과 에너지 수지를 결정한다. 단위 운전 모델링, 재순환 전략, TEA 연구와 같은 기존의 PSE 중심 기법의 핵심 지식을 채용하여 에너지 및 탄소 효율성, 순 CO_2 절감, 제품의 단위 생산비(the unit production cost, UPC) 등 다양한 기준을 이용하여 시험 촉매의 기술적·경제적 타당성을 종합적으로 분석한다. 마지막으로, 그래픽 사용자 인터페이스(GUI)가 탑재된 컴퓨터 지원 플랫폼으로 패키징되어 쉽고 빠르고 정밀하게 적용할 수 있는 새로운 촉매 발견 분야의 연구자에게 사용자 친화적인 환경을 제공한다.

과제의 해결 수단

[0018] 상기 기술적 과제를 해결하고자, 본 발명의 목적은 새로운 촉매 설계와 발견의 초기 연구개발 단계에서 CO_2 수소

화 촉매의 기술적, 경제적 성과를 평가하기 위한 새로운 컴퓨터 지원 플랫폼을 개발하는 것이다. 이를 위해 CO_2와 H_2에서 고순도 메탄올을 생산하는 새로운 메탄올 생산 공정 방식을 제안했다. 새로운 메탄올 생산 공정 방식은 메탄올 합성을 위한 CO_2 수소화, 재순환을 위한 가스/액체 분리, 생산된 메탄올을 정제하기 위한 액체/액체 분리 등 3가지 주요 단위 공정을 포함한다. 주어진 프로세스 체계를 사용하여, 프로세스의 에너지와 물질 수지를 결정하기 위해 지식 기반 대리 모형(knowledge-based surrogate models)을 사용하여 이러한 프로세스를 시뮬레이션했다.

[0019] 반응 모델링의 경우, Aspen Plus의 화학양론형 반응기 모델이 선택되는데, 이는 반응 동력학을 알 수 없거나 중요하지 않을 때 지정된 반응 범위 또는 변환을 사용하여 제품 사양과 반응 열을 계산하는 강력한 모델이다.

[0020] 따라서, 본 발명의 프레임워크는 원패스 변환 및 선택성과 같은 사용자 입력 데이터(즉, 조작 변수들)를 사용하여 반응기의 에너지 흐름뿐만 아니라 입구 및 출구 스트림 정보를 결정할 수 있다.

[0021] 분리기(splitter), 믹서, 히터, 냉각기 및 압축기와 같이 본 발명의 생산 공정에서 공통 프로세스 유닛에 대해서는 대리 모형을 사용하여 이러한 프로세스 유닛을 시뮬레이션하여 물질과 에너지 흐름을 계산한다.

[0022] 엔지니어링 설계와 운영의 복잡성을 줄이기 위해 대리 모형(메타모델 또는 축소된 순서 모델이라고 함)을 시뮬레이션 프로그램에서 얻은 매우 정확한 데이터로 구축하였는데, 이는 단위 공정의 동작과 현상을 나타낸다.

[0023] 개별 유닛에 대한 구획 모델을 구축하기 위한 시뮬레이션 데이터의 사용도 복합 시스템의 모델링 시뮬레이션에서 널리 사용되는 다단계 모델링 방법으로 간주될 수 있다. 본 발명에서는 Aspen Plus를 1차 프로세스 시뮬레이터로 사용하여 관련 프로세스 유닛의 광범위한 데이터 세트를 생성하였다. 그리고 나서 본 발명의 프레임워크는 메탄올 생산 공정의 물질 및 에너지 정보뿐만 아니라 관련 유닛의 사이징 및 비용 데이터를 추정함으로써 메탄올 생산 공정의 기술적-경제적 분석을 수행한다. 특히 기술, 경제, 환경 성과, 즉 단위생산비(UPC), 탄소효율, 에너지효율, 순 CO_2 감소의 4가지 평가기준을 활용했다.

[0024] 마지막으로 윈도우 형태 환경에서 C# 언어를 채택하여 제안된 플랫폼을 METAL(메탄올 공정: 기술적-경제적 분석 연구소)이라는 이름으로 결정했다. 이 플랫폼은 사용자-인터랙티브 인터페이스가 있어 사용자가 입력값을 변경할 때 결과를 즉시 확인할 수 있다.

[0025] 이 플랫폼을 이용하면 다양한 CO_2 수소화 촉매의 사용에 따른 메탄올 생산 공정의 경제적, 환경적 성과를 정밀하게 평가할 수 있다. 나아가 METAL 은 4가지 평가 지표에 대한 주요 조작 변수(즉, 변환, 선택성, 작동 온도, 압력)의 영향을 분석하기 위한 민감도 분석 기능을 제안한다. 따라서 임베디드 민감도 분석 모듈을 통해 사용자는 대상 촉매의 장단점을 파악하고 실질적인 연구개발 방향과 목표를 설정할 수 있다.

[0026] 지식 기반 모델링, 평가 및 선별 플랫폼 개발에 관련된 주요 단계는 도 2에 요약되어 있다.

발명의 효과

[0028] 본 발명의 플랫폼을 이용하면 다양한 CO_2 수소화 촉매의 사용에 따른 메탄올 생산 공정의 경제적, 환경적 성과를 정밀하게 평가할 수 있다. 나아가 본 발명의 플랫폼은 4가지 평가 지표에 대한 주요 조작 변수(즉, 변환, 선택성, 작동 온도, 압력)의 영향을 분석하기 위한 민감도 분석 기능을 제안한다. 따라서 임베디드 민감도 분석 모듈을 통해 사용자는 대상 촉매의 장단점을 파악하고 실질적인 연구개발 방향과 목표를 설정할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0029] 도 1은 (a) 종래 촉매 R&D의 종래 단계 및 (b) 본 발명에 따른 지식 기반 모델링, 평가 및 선별 플랫폼에 대한 도면이다.

도 2는 지식 기반 모델링, 평가 및 선별 플랫폼 개발을 위한 주요 단계를 나타내는 공정도이다.

도 3은 메탄올 생산을 위한 CO_2 직접 수소화 공정의 프로세스 구성을 나타내는 모식도이다.

도 4는 본 발명에 따른 지식 기반 평가 플랫폼의 구조를 나타내는 도면이다.

도 5는 CO_2 수소화 반응에 대한 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 이용한 메탄올 생산 공정의 질량 흐름 정보를 나타내는 도

면이다.

도 6은 (a) 총 비용, (b) 에너지 소비 및 (c) CO_2 배출에 대한 주요 섹션의 기여도를 나타내는 그래프이다.

도 7은 다양한 온도 범위에서 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 사용하여 수행된 반응에 대한 기술적 및 경제적 결과를 나타내는 그래프이다.

도 8은 다양한 압력 범위에서 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 사용하여 수행된 반응에 대한 기술적 및 경제적 결과를 나타내는 도면이다.

도 9는 H_2 가격을 기준으로 한 UPC 값의 글로벌 변동값: (a) $3/kg, (b) $2/kg, (c) $1/kg, (d) $0/kg (기본 CO_2 공급 = 370kmol/h, CO_2:H_2 공급비 = 1:3)을 나타내는 도면이다.

도 10은 촉매의 (a) 탄소 효율성, (b) 에너지 효율성 및 (c) CO_2 감소 특성 (기본 CO_2 공급 = 370kmol/h, CO_2:H_2 공급 비 = 1:3)의 글로벌 변화를 나타내는 도면이다.

도 11은 반응 섹션의 결과: (a) 몰 흐름, (b) 비용, (c) 에너지 소비, (d) CO_2 배출을 나타내는 스크린샷이다.

도 12는 G/L 분리 및 재순환 섹션의 결과: (a) 몰 유동, (b) 비용, (c) 에너지 소비, (d) CO_2 배출을 나타내는 스크린샷이다.

도 13은 L/L 분리 섹션 결과: (a) 몰유량, (b) 비용, (c) 에너지 소비량, (d) CO_2 배출량을 나타내는 스크린샷이다.

도 14는 총생산원가(TPC) 및 단위생산원가(UPC)의 원가 기여도를 나타내는 스크린샷이다.

도 15는 재료비 및 변동 운영비의 비용 분담을 나타내는 스크린샷이다.

도 16은 메탄올 생산 공정의 CO_2 감소 및 에너지 효율을 나타내는 스크린샷이다.

도 17은 CO_2 변환에 의한 메탄올 양, 탄소 효율, 에너지 효율, CO_2 감소, UPC의 민감도 결과를 나타내는 스크린샷이다.

도 18은 메탄올 수율에 의한 메탄올 양, 탄소효율, 에너지효율, CO_2 감소, UPC의 민감도 결과를 나타내는 스크린샷이다.

도 19는 배출 분율에 의한 메탄올 양, 탄소 효율, 에너지 효율, CO2 감소, UPC의 민감도 결과를 나타내는 스크린샷이다.

도 20은 (a) 경제적 파라미터의 민감도 분석 및 (b) H_2 가격 및 (c) CO_2 가격별 메탄올 단가 변경을 나타내는 스크린샷이다.

도 21은 Cu/Zn/Al/Zr 촉매와 Cu/ZnO@m-SiO_2 촉매의 UPC 비교를 나타내는 스크린샷이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0030] 이하, 실시예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다. 그러나 이들 예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 것일 뿐 어떠한 의미로든 본 발명의 범위가 이들 예로 한정되는 것은 아니다.

[0032] **1. 문제 제기 (PROBLEM DESCRIPTION)**

[0033] 1.1. 메탄올 생산을 위한 CO_2 직접 수소화 (CO_2 direct hydrogenation for methanol production)

[0034] 도 3은 메탄올 생산 공정을 위한 CO_2 직접 수소화의 개념 체계를 보여준다. 이러한 프로세스 구성은 이전 작업들의 설계에 기초하여 제안되었다. 본 발명을 위해, CO_2는 파워 플랜트에서 공급되고 H_2는 재생 전기를 이용한 물 전기분해(water electrolysis)를 통해 생산된다고 가정하였다. 도 3과 같이, 그 과정은 반응, 가스/액체(G/L) 분리 및 재순환, 액체/액체(L/L) 분리 등 3개의 주요 부분으로 구성된다. CO_2와 H_2 피드의 초기 압력과 온도는

각각 10bar와 25 ℃로 가정되었다. CO_2와 H_2는 반응기에 공급되기 전에 CO_2 수소화 반응에 유리한 작동 조건을 달성하기 위해 압축 및 가열된다. 반응기에서 발생하는 주요 반응 즉, CO_2 직접 수소화는 세 가지 반응을 포함한다.

[0035] [수학식 1]

[0036] $$CO+2H_2 \leftrightarrow CH_3OH, \quad \Delta H_{298K} = -90.7kJ/mol$$

[0037] [수학식 2]

[0038] $$CO_2 + H_2 \leftrightarrow CO + H_2O, \quad \Delta H_{298K} = +41.2kJ/mol$$

[0039] [수학식 3]

[0040] $$CO_2 + 3H_2 \leftrightarrow CH_3OH + H_2O, \quad \Delta H_{298K} = -49.2kJ/mol$$

[0042] 참조 문헌에 따르면, CO_2 직접 수소화 반응은 각각 250-350 ℃와 35-55 bar의 온도 및 압력 범위에서 발생하므로, 압축기와 히터는 CO_2와 H_2의 물리적 특성을 수정하기 위해 반응 섹션에 포함된다. 반응 섹션에 포함된 온도 컨트롤러는 작동 조건에 따라 히터 또는 쿨러로 사용할 수 있다는 점에 유의해야 한다. 반응 결과물(메탄올, 물, CO)과 미반응 CO_2와 H_2가 혼합된 반응기 출구 스트림은 G/L 분리구간의 플래시 탱크에 공급되어 기체와 액체 스트림으로 분리된다. 플래시 탱크는 30-95 ℃와 25-55 bar에서 작동하므로 냉각기와 히터는 제품을 냉각시키거나 분리 가스를 가열하여 재순환하는 데 사용된다. 이 공정의 원활한 작동을 위해 일부 가스를 공정에서 분리하여 배출하고, 배출 분율을 통해 공정에서 방출되는 가스의 양을 결정한다. 가스 상류(즉, CO_2, H_2, CO)는 반응기에 다시 재순환되지만 액체 상류(즉, 메탄올과 H_2O의 혼합물)는 L/L 분리구간에 공급되어 고순도 메탄올을 산출한다. 이 절에서는 증류탑 상단으로 불순물을 제거하고, H_2O는 하단으로 배수한다. 증류탑의 상단과 하단은 각각 35~65 ℃와 1bar, 105 ℃와 1bar에서 작동한다. 탑 상단의 일부 기체는 응축기에서 냉각되고, 탑 하단의 일부 액체는 재보일러에서 가열된 후 다시 탑으로 이동한다.

[0044] 2. 지식 기반 모델링 (Knowledge-based modeling)

[0045] 촉매 개발과 관련된 본 발명에서는 작동 온도와 압력을 기준으로 촉매 변환 및 선택도를 조사한다. 본 발명의 목적상, 화학적 공정 및 촉매 성능과 관련된 변수 6개(즉, 공급량, 촉매의 변환 및 선택성, 반응의 온도 및 압력, 배출 분율)를 조작 변수로 선택했다. CO_2 변환 및 메탄올 선택성은 수학식 4~5와 같이 정의되며, 배출 분율은 총 유입에 대한 폐기물 흐름의 비율을 나타낸다.

[0046] [수학식 4]

[0047] $$\text{CO}_2 \text{ conversion}[\%] = \frac{\text{The amount of CO}_2 \text{ consumed (kmol/hr)}}{\text{The total amount of CO}_2 \text{ (kmol/hr)}}$$

[0048] [수학식 5]

[0049] $$\text{Methanol selectivity}[\%] = \frac{\text{The amount of CH}_3\text{OH produced (kmol/hr)}}{\text{The amount of CH}_3\text{OH and CO produced (kmol/hr)}}$$

[0050] 상기와 같은 방정식을 사용하여 메탄올 생산 공정을 간략하게 나타내기 위해 몇 가지 가정을 수립한다.

[0051] 1) 촉매 정보를 이용하여 반응을 정량적으로 분석하고, 반응 화학양론, 변환, 선택도에 근거하여 결과물 또는 반응물의 양을 계산할 수 있는 화학양론형 반응기가 사용되며,

[0052] 2) G/L 분리구간의 플래시 탱크와 L/L 분리구간의 증류탑은 각각 30 ℃와 50 bar, 35 ℃와 1 bar로 운전되는 것으로 가정한다.

[0053] 3) 얻어진 결과물 스트림은 플래시 탱크에서 기체와 액체 분율로 분리되며, 양쪽 스트림의 각 화합물은 99% 초과의 회수율을 가진다.

[0054] 4) 메탄올의 수율은 $(H_2-CO_2)/(CO+CO_2)$로 정의되는 R 값에 의해 영향을 받는다. 범위 2-2.1의 R 값은 메탄올 수율을 최대화하는 데 가장 유리하므로 R 값 2를 만족하면서 수소가 반응기에 공급되는 것으로 가정한다.

[0055] 5) 증류탑에서는 메탄올과 H_2O가 분리되어 있으며, 메탄올의 회수율과 순도가 모두 99% 초과이다.

[0056] 6) 장비로부터의 손실이나 누수는 무시할 수 있는 것으로 가정한다.

[0058] 2.1 물질 수지 (Mass balance)

[0059] 첫 번째 혼합기로 들어가는 총 CO_2 및 H_2 피드는 혼합기를 나가는 몰 흐름과 동일하다(수학식 6). 흡입구와 배출구 스트림 사이의 질량 흐름의 변화가 거의 없는 압축기와 히터에 유입되는 스트림은 수학식 7과 같이 일정하다고 가정한다.

[0060] [수학식 6]

$$\sum_{i\in I^F} I_i = \sum_{i\in I^F} F_{ij}^{out} \quad \forall j = Mx1$$

[0061]

[0062] [수학식 7]

$$F_{ij}^{in} = F_{ij}^{out} \quad \forall i \in I, j = Cp, Ht1$$

[0063]

[0064] 여기서, I_i는 CO_2와 H_2의 초기 공급이며, $F^{in}{}_{ij}$와 $F^{out}{}_{ij}$는 각각 장비 j로 들어가거나 나가는 화합물의 몰 흐름이다. 반응 조건에 최적화된 흐름은 두 번째 혼합기의 재순환 흐름과 병합되어 반응기에 공급된다. 이는 다음과 같이 표현된다.

[0065] [수학식 8]

$$F_{ij}^{out} = F_{ij'}^{out} + F_{ij''}^{out} \quad \forall i \in I, j = Mx2, j' = Ht1, j'' = Ht2$$

[0066]

[0067] [수학식 9]

$$F_{ij}^{in} = F_{ij'}^{out} \quad \forall i \in I, j = Re, j' = Mx2$$

[0068]

[0069] 반응기에서 남아 있는 CO_2와 생산된 메탄올의 양은 변환과 선택도를 사용하여 다음과 같이 표현된다.

[0070] [수학식 10]

$$F_{ij}^{out} = (1-\Theta)F_{ij}^{in} \quad i = CO_2, j = Re$$

[0071]

[0072] [수학식 11]

$$F_{ij}^{out} = \frac{\Phi}{(1-\Phi)} F_{i'j}^{out} \quad i = MeOH, i' = CO, j = Re$$

[0073]

[0074] 여기서, Θ는 CO_2의 변환이며 , Φ은 메탄올 선택성이다. 메탄올 합성은 발열 반응(수학식 1~3 참조)이기 때문

에 반응기에서 나오는 출구 스트림의 온도는 반응기에 추가 에너지가 공급되지 않는 한 증가할 것으로 예상된다. 따라서 배출구 온도는 다음과 같이 변환, 엔탈피 및 열 용량을 이용하여 계산할 수 있다.

[0075] [수학식 12]

$$T_j^{out} = T_j^{in} + \frac{\Theta(-\Delta H_{rxn})}{\sum_i \vartheta_i \mu_i} \quad j = Re$$

[0076]

[0077] 여기서, $T^{in}{}_j$ 와 $T^{out}{}_j$는 장비에 출입하는 흐름의 온도이고, H_{rxn} 는 반응 엔탈피, μ_i는 화합물 i의 열 용량 및 ϑ_i 는 몰비이다.

[0078] 한편 반응기를 나가는 흐름은 냉각기로 이동하여 제품을 30 ℃에서 냉각시키며 냉각기의 흡입 및 출구 흐름 사이의 물질 흐름도 일정하다(수학식 13). 플래시 탱크로 유입되는 흐름은 두 흐름으로 나뉘는데, 여기서 한 흐름은 분리기로 들어가고 다른 흐름은 증류탑으로 이동한다. 이를 나타내는 것은 다음과 같다.

[0079] [수학식 13]

$$F_{ij}^{in} = F_{ij}^{out} \quad \forall i \in I, j = Cl$$

[0080]

[0081] [수학식 14]

$$F_{ij}^{in} = F_{ij'}^{in} + F_{ij''}^{in} \quad \forall i \in I, j = Ft, j' = Sp, j'' = Dc$$

[0082]

[0083] 분리기에서 나오는 두 개의 흐름으로 볼 때 하나는 반응기로 재순환되고 다른 하나는 폐기된다(수학식 15~17). 재순환 흐름은 조작 온도에 도달하기 위해 히터에서 가열되며 물질 수지는 수학식 18에 표시된다.

[0084] [수학식 15]

$$F_{ij}^{in} = F_{ij}^{re} + F_{ij}^{vo} \quad \forall i \in I, j = Sp$$

[0085]

[0086] [수학식 16]

$$F_{ij}^{re} = (1 - \Psi) F_{ij}^{in} \quad \forall i \in I, j = Sp$$

[0087]

[0088] [수학식 17]

$$F_{ij}^{vo} = \Psi F_{ij}^{in} \quad \forall i \in I, j = Sp$$

[0089]

[0090] [수학식 18]

$$F_{ij}^{re} = F_{ij'}^{in} \quad \forall i \in I, j = Sp, j' = Ht2$$

[0091]

[0092] 여기서, $F^{re}{}_{ij}$ 와 $F^{vo}{}_{ij}$ 는 분리기(splitter) j=Sp 에서 반응기로 재순환하는 화합물의 몰 흐름과 분리기(splitter) j=Sp 에서 폐기된 몰 흐름이며, Ψ는 배기가스 분율이며, 이는 조작된 변수 중 하나이다.

[0093] 증류탑을 빠져나가는 흐름은 불순물 가스, H_2O, 메탄올(MeOH) 등 세 가지 요소로 구성된다. 이를 나타내는 것은 다음과 같다.

[0094] [수학식 19]

$$\sum_{i \in I} F_{ij}^{out} = \sum_{i \in I^G} F_i^{im} + F_{H_2O} + F_{MeOH} \quad j = Dc$$

[0095]

[0096] 여기서, F^{im}_i는 불순물의 몰 흐름이며, F_{H2O} 은 폐기물 H_2O의 몰 흐름이며, F_{MeOH} 은 생산된 메탄올의 몰 흐름이다.

[0098] 2.2 에너지 소비 (Energy consumption)

[0099] 스팀, 전기, 냉각수와 같은 유틸리티는 압축기, 히터/냉각기 및 증류탑에서 소비되어 화합물의 물리적 특성을 변경하거나 혼합물을 기체와 액체 흐름으로 분리한다. 상술한 바와 같이 반응기에 추가 에너지가 공급되지 않는다고 가정했기 때문에 운전 중에는 반응기가 유틸리티를 소비하지 않는다는 점에 유의해야 한다. 이 프로세스에 사용되는 유틸리티의 양을 계산하기 위해, 다음 방정식과 Aspen Plus에서 얻은 관련 데이터를 사용한다. 특히 등방성 압축기를 채용하여 전기의 형태로 사용되는 에너지를 다음과 같이 계산한다.

[0100] [수학식 20]

$$E_{jk} = \frac{\gamma R T_j^{in} \sum_i F_{ij}^{in}}{(\gamma - 1)\eta_j} \left[\left(\frac{p_j^{out}}{p_j^{in}} \right)^{\gamma - 1/\gamma} - 1 \right] \quad j = Cp, k = Ec$$

[0101]

[0102] 여기서, E_{jk} 는 장비 j에서 소비되는 유틸리티 k의 양이고, R은 기체 상수이며, P^{in}_j 와 P^{out}_j 은 각각 장비 j를 출입하는 흐름의 압력이며, γ는 1.4로 가정되는 비열(specific heat)의 비율이다. 등방성 압축은 다음과 같이 정의된 온도 변화를 포함한다.

[0103] [수학식 21]

$$\frac{T_j^{out}}{T_j^{in}} = \left(\frac{p_j^{out}}{p_j^{in}} \right)^{\gamma - 1/\gamma} \quad j = Cp$$

[0104]

[0105] 여기에서 절대 온도를 사용하여 컴프레서의 온도 변화를 계산해야 한다. 또한, 히터에서 소비되는 증기의 양은 수학식 22를 사용하여 계산한다. 증기에는 저압(LP), 중압(MP), 고압(HP) 증기 등 3가지 유형이 존재하며, 기기의 작동 압력에 따라 선택된다. 특히 고압(50bar)에서 작동하는 히터는 HP 증기를 사용하는 반면, 정상 압력(1bar)에서 작동하는 증류탑은 LP 증기를 사용하는 것으로 가정한다.

[0106] [수학식 22]

$$E_{jk} = \frac{\sum_i \mu_i F_{ij}^{in} (T_j^{out} - T_j^{in})}{\eta_j} \quad j \in Ht, k = St$$

[0107]

[0108] 냉각기에 사용되는 냉각수의 양은 다음과 같이 계산된다.

[0109] [수학식 23]

$$U_k = \frac{-E_{jk}\eta_j}{\mu_k (T^{nor} - T_j^{out})} \quad j = Cl,\ k = Cw$$

[0110]

[0111] 여기서, μ_k 는 냉각수의 열 용량이고, U_k 는 사용되는 냉각수의 양이며, T^{nor} 는 정상 온도이다. 열 용량은 다음과 같이 쇼마이트(Shomate) 방정식을 사용하여 계산한다.

[0112] [수학식 24]

[0113] $$\mu_i = A + BT_j^{in} + C(T_j^{in})^2 + D(T_j^{in})^3 + E(T_j^{in})^{-2} \quad i = CO_2, CO, H_2O, H_2, j \in J$$

[0114] 여기서 A, B, C, D 및 E는 열 용량을 계산하는 데 사용되는 계수다.

[0115] 메탄올의 열 용량은 수학식 25을 사용하여 계산한다.

[0116] [수학식 25]

[0117] $$\mu_i = A + BT_j^{in} + C(T_j^{in})^2 \quad i = MeOH, j \in J$$

[0118] 나아가 증류탑에서 소비되는 에너지는 작동 온도와 압력, 유량, 피드 조성, 및 목표 순도 등 다양한 기술적 요인에 의해 영향을 받는다. 응축기와 리보일러에 사용되는 에너지를 계산하기 위해 Aspen Plus와 다른 조건 및 다양한 피드 조성(즉, H_2O와 MeOH의 비율)을 사용하여 유도된 공식에서 광범위한 데이터 세트를 수집했다. 이미 참조에서 값을 가정하고 채택했기 때문에 운용 조건이나 목표 순도 등 다른 요인의 영향은 배제한다. 따라서 증류탑의 에너지 소비 방정식은 다음과 같다.

[0119] [수학식 26]

[0120] $$E_{jk} = \sum_i F_{ij}^{in}(75,679\psi + 8,756) \quad j = Dc, k = Cw$$

[0121] [수학식 27]

[0122] $$E_{jk} = \sum_i F_{ij}^{in}(43,527\psi + 11,771) \quad j = Dc, k = St$$

[0123] 여기서, ψ는 증류탑으로 들어가는 총 흐름 대비 메탄올의 비율이다.

[0125] 2.3 원가 계산 (Cost calculation)

[0126] 메탄올에 대한 CO_2 직접 수소화의 총생산원가(TPC)는 자본 원가(CC), 운영 원가(OC), 재료 원가(MC) 등 3개 원가항목으로 구성된다.

[0127] [수학식 28]

[0128] $$TPC = \alpha CC + OC + MC$$

[0129] [수학식 29]

[0130] $$\alpha = \frac{s(1+s)^n}{(1+s)^n - 1}$$

[0131] 여기서, α는 자본비용을 연간 자본원가로 상각하는 데 사용되는 자본충전요인을 말하며, 수학식 (29)과 같이 장비의 수명(n)과 이자율(s)을 사용하여 계산한다. 여기서 수명과 금리는 각각 20년과 10%로 가정한다. 자본 원가(CC)는 직접원가(DC)와 간접원가(IC)로 구성된다(수학식 30).

[0132] 구체적으로, DC는 구매한 장비, 장비 설치, 계측 및 제어, 배관과 관련된 비용을 포함하며, IC는 공사비 및 우발 상황과 관련된 비용을 포함한다. DC와 IC는 구매한 장비 비용(PE_j)과 자본 투자 요인(β)으로 추정한다(수학식 31-32). 구매한 장비 비용 데이터는 Aspen Process Economic Analyzer로부터 채택되며, 6/10 인자 규칙(수학식 33)을 적용하여 유속이 변화함에 따라 조정된다.

[0133] [수학식 30]

$$CC = DC + IC$$

[0134]

[0135] [수학식 31]

$$DC = \sum_j \beta^D PE_j$$

[0136]

[0137] [수학식 32]

$$IC = \sum_j \beta^I PE_j$$

[0138]

[0139] [수학식 33]

$$PE_j = PE^0 \cdot \left(\frac{f_j^{hn}}{f^0} \right)^{0.6}$$

[0140]

[0141] 여기서, β^D 와 β^I는 직접/간접 비용에 대한 자본 투자 요인이고, PE^0와 f^0은 경제 데이터가 이미 알려진 기준 사례에서 각각 구매한 장비 비용과 흐름이다. 운영 원가(OC)는 고정 운영비(FC)와 가변 운영비(VC)로 구성되며, 고정 운영비(FC)는 장비가 가동 중일 때와 관련되며, 가변 운영비(VC)는 유틸리티 비용을 가리킨다.

[0142] [수학식 34]

$$OC = FC + VC$$

[0143]

[0144] [수학식 35]

$$FC = \sum_j \beta^F PE_j$$

[0145]

[0146] [수학식 36]

$$VC = \sum_{j \in J} \sum_{k \in K^E} \varepsilon_k E_{jk} + \varepsilon_{Cw} U_{Cw}$$

[0147]

[0148] 여기서, β^F 는 고정 운영비에 대한 자본투자요인이고, ε_k 는 유틸리티의 단가, ε_{Cw} 는 냉각수의 단가이다.

[0149] 재료 원가(MC)는 원자재 구입비이다.

[0150] [수학식 37]

$$MC = \sum_{i \in I^F} \phi_i I_i$$

[0151]

[0152] 여기서, ϕ_i는 화합물 $i \in I^F$ 의 단위 구매 비용이다.

[0154] 2.4. 평가 기준 (Evaluation criteria)

[0155] 본 발명은 물질 및 에너지 정보 뿐만 아니라 관련 단위의 사이징 및 비용 데이터를 사용하여 계산되는 네 가지 평가 기준(단위 생산비, 탄소 효율성, 에너지 효율성, CO_2 감소)을 사용한다. 메탄올의 단위생산비(UPC)는 TPC에 의해 표현되며, 생산되는 메탄올의 양은 다음과 같다.

[0156] [수학식 38]

$$UPC = \frac{TPC}{\omega_{MeOH} F_{MeOH}}$$

[0157]

[0158] 여기서, ω_{MeOH} 은 메탄올의 분자량이다.

[0159] 탄소효율(CE)은 반응물질 내 탄소에 대한 결과물 내 탄소의 비율이며, 최종 제품으로 환산한 탄소의 양을 평가한다.

[0160] [수학식 39]

$$CE = \frac{\tau_{MeOH} F_{MeOH}}{\tau_{CO_2} I_{CO_2}}$$

[0161]

[0162] 여기서, τ_{MeOH}와 τ_{CO2} 는 각각 메탄올과 CO_2의 탄소수이다.

[0163] 에너지 효율(EE)은 유틸리티 소비량 외에 공급(CO_2, H_2)과 제품(메탄올)의 화학 에너지를 사용하여 계산한다. 이 값은 이산화탄소로부터 메탄올을 생산하는데 에너지가 얼마나 효율적으로 사용되는지를 나타낸다.

[0164] [수학식 40]

$$EE = \frac{\kappa_{MeOH} F_{MeOH}}{\sum_{i \in I^F} \kappa_i I_i + \sum_{j \in J} \sum_{k \in K^E} E_{jk}}$$

[0165]

[0166] 여기서, κ_i는 화합물 i의 발열량이며, 특히 κ_{MeOH}는 메탄올의 발열량이다. 이 과정에서 CO_2가 반응물로 사용돼 감소가 예상된다. 그러나 CO_2는 운전 중 직접 배출과 간접 배출이라는 두 가지 방법으로 배출될 수 있다. 직접배출은 배출가스의 한 형태로 배출되는 CO_2를 말하며, 간접배출은 유틸리티 소비에 의한 CO_2배출을 말한다. CO_2 감소량(CR) 값은 공정 중 생산 및 소비된 CO_2의 양에서 계산된 CO_2의 순량을 나타내며 다음과 같다.

[0167] [수학식 41]

$$CR = \frac{\omega_{CO_2} I_{CO_2} - (\omega_{CO_2} F^{vo}_{CO_2,Sp} + \sum_{j \in J} \sum_{k \in K^E} \upsilon_k E_{jk})}{\omega_{MeOH} F_{MeOH}}$$

[0168]

[0169] 여기서, υ_k는 유틸리티 k에 의한 CO_2 배출 계수이며, F^{vo}_{CO2} 는 분리기 j=Sp로부터의 배출 CO_2의 몰 유량이다.

[0171] 3. 플랫폼 개발 (Platform development)

[0172] 3.1. 플랫폼 구조 (Platform architecture)

[0173] METAL (Methanol process: Techno-economic Analysis Laboratory) 플랫폼은 상술한 일련의 대리 모형을 사용하여 개발되었다. 이 플랫폼은 6가지 변수(즉, CO_2 공급량, 촉매 변환 및 선택성, 반응온도와 압력, 배출 분율)를

조작하여 CO_2 직접 수소화를 통한 메탄올 생산 공정의 기술적-경제적, 환경적 영향을 분석할 수 있다.

[0174] 도 4에서 설명한 바와 같이, METAL 플랫폼은 세 가지 설계 단계, 즉 프로세스 체계 설계, 백본 모델링 및 프런트 엔드 인터페이스로 구성된다. 컴퓨터 지원 플랫폼을 개발하기 위해 C# 프로그래밍 언어가 윈도우 형태 애플리케이션 환경에서 구현되었다.

[0175] METAL 플랫폼은 주로 입력 및 출력 모듈로 구성된다. 입력 모듈의 I/O 세부(Details) 탭에서 사용자는 CO_2 공급량, 촉매 성능, 작동 조건 등 6개의 조작 변수를 지정한다.

[0176] 이코노미 탭을 사용하여 사용자는 CO_2와 H_2의 가격과 같은 경제 매개변수에 대한 광범위한 값을 지정할 수 있다. 이 입력 모듈에서는 문헌에서 채택한 기본값을 제시하여 사용자를 돕는다.

[0177] 사용자가 I/O 세부(Details) 탭의 중간에 있는 Start 버튼을 클릭하면 METAL은 질량과 에너지 흐름뿐만 아니라 경제적, 기술적, 환경적 지수를 산출하기 위해 연산 엔진을 실행한다.

[0178] 그 결과 시뮬레이션 결과(예: 몰 흐름, 에너지 소비량, CO_2 배출량, 비용)는 I/O Details 탭 하단에 섹션별 및 스트림별로 표시된다.

[0179] TPC, UPC 및 주요 비용 동인의 비용 기여도를 포함한 전반적인 경제 산출물은 기술 결과(즉, 에너지 효율 및 CO_2 감소)와 함께 프로세스 결과 탭에 그래픽으로 표시된다. 민감도 분석 탭은 주요 경제, 기술 및 환경 지수의 변화를 매개변수(또는 동시에 복수의 매개변수)의 변동으로 제시한다. 조정 가능한 주요 매개변수에는 CO_2 변환, 배출 분율, 메탄올 수율 및 원료 비용이 포함된다.

[0180] 개발된 METAL 소프트웨어는 사용자에게 관심의 촉매를 평가하고 연구개발 전략을 수립할 수 있는 유연성을 제공하기 위해 대중이 접근할 수 있다.

[0182] 3.2. 파라미터 수집 (Parameter collection)

[0183] 분자량, 발열량 및 열 용량 계수와 같은 공정 화학적 매개변수는 하기 표 S1-S3에서 확인할 수 있다. Aspen Process Economic Analyzer에서 채택한 유틸리티(전기, 증기 및 냉각수)의 단가와 그 CO_2 배출 계수는 하기의 표 S4에 요약되어 있다. 전기의 CO_2 배출 계수는 천연가스(38%), 석탄(23%), 원자력(20%), 재생가능(17%), 석유(1%)로 구성된 2019년 미국 전기발전의 에너지 믹스를 바탕으로 산출한 것이다. 공정열(예: 고압 및 저압 흐름)은 천연가스에서 생성되는 것으로 가정되었다. 하기의 표 S5와 S6는 기준 사례(370kmol/h의 CO_2 공급)를 시뮬레이션하여 얻은 기본 구매 장비 비용과 용량 확장에 대한 자본 투자 요인을 나타낸다.

[0184] [표 S1]

[0185]

$$Heat\ capacity: \mu_i = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^{-2}$$

	H_2	CO_2	CO	H_2O
A	33.06618	24.99735	25.56759	30.092
B	-11.3634	55.18696	6.09613	6.832514
C	11.43282	-33.6914	4.054656	6.793435
D	-2.77287	7.948387	-2.6713	-2.53448
E	-0.15856	-0.13664	0.131021	0.082139

[0186] [표 S2]

Temperature (K)	Heat capacity (J/mol/K)	Temperature (K)	Heat capacity (J/mol/K)
50.00	34.00	700.00	73.86
100.00	36.95	800.00	79.76
150.00	38.64	900.00	84.95
200.00	39.71	1000.00	89.54
273.15	42.59	1100.00	93.57
298.15	44.06	1200.00	97.12
300.00	44.17	1300.00	100.24
400.00	51.63	1400.00	102.98
500.00	59.70	1500.00	105.40
600.00	67.19		

[0187]

[0188] [표 S3]

Compounds	Molecular weight (kg/kmol)	Heating value (kJ/mol)	Carbon number
CO_2	44.010	0	1
CO	28.010	283.24	1
CH_3OH	32.042	638.55	1
H_2	2.016	244	0
H_2O	18.015	0	0

[0189]

[0190] [표 S4]

Utility type	Emission factor (kg of CO_2/MJ) [4]	Unit price ($/MJ) [5]
Electricity	0.155[1]	0.01667
Steam HP	0.062[2]	0.0025
LP		0.0019
Cooling water	0	0.00003

[1]: the CO_2 emission factor by electricity is calculated by considering the energy mix of US electricity generation in 2019 (Energy Mix; of natural gas (38%), coal (23%), nuclear (20%), renewable (17%), and oil (1%))

[2]: it is assumed that heat utility is only made by the natural gas

[0191]

[0192] [표 S5]

Equipment type	Equipment cost (PE^0) ($)
Compressor	1,602,400
Heater#1	8,000
Heater#2	118,700
Reactor	751,300
Cooler	203,400
Flash tank	40,900
Distillation column	445,300

[0193]

[0194] [표 S6]

Direct costs	330%
Purchased equipment	100%
Equipment installation & setting	55%
Piping	27%
Civil & steel	6%
Instrumentation & control	23%
Electrical systems (including insulation)	66%
Yard improvement & building	55%
Indirect costs	87%
Engineering	23%
Construction	24%
Legal and contract fee	16%
Project contingency	26%
Fixed operating costs	37%
Operating labor	24%
Maintenance	3%
Operating changes	4%
Plant overheads	7%

[0195]

[0197] 4. Cu/Zn/Al/Zr 촉매에의 적용 (Application to Cu/Zn/Al/Zr catalysts)

[0198] 위에서 논의한 바와 같이, METAL 플랫폼은 연구자들이 새로운 촉매의 기술적, 경제적, 환경적 타당성을 사전 분석함으로써 촉매 발견의 매우 초기 연구개발 단계에서 연구개발 목표와 방향을 수립할 수 있도록 한다. 본 발명의 METAL 플랫폼의 기능을 설명하기 위해 CO_2 수소화 반응의 유망 촉매인 Cu/Zn/Al/Zr 촉매가 대상 촉매로 선택되었다. CO_2 공급량 = 370kmol/h, CO_2 변환 = 25.7%, MeOH 선택도 = 61.3%, 작동온도 = 250° C, 작동압력 = 50bar 등의 매개변수를 기준조건으로 가정했다. 또한, 재순환을 위한 배출 분율은 3%로 가정되었다.

[0200] 4.1. 시뮬레이션 결과 (Simulation results)

[0201] 도 5는 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 사용하는 메탄올 생산 공정의 물질 흐름 정보를 보여준다. 3개 섹션(즉, 반응, G/L 분리 및 재순환, L/L 분리 섹션)의 물질 흐름, 에너지 소비, 소요 비용, CO_2 배출 등 보다 상세한 정보는 도 11-13 에서 확인할 수 있다. 도 5와 같이, 370kmol/h의 CO_2 흐름에서 322kmol/h의 메탄올 흐름을 생성하기 위해 1082kmol/h의 H_2 흐름이 필요했다. 위에서 설명한 것처럼 온도가 25℃에서 199℃로 상승할 때 컴프레서(Cp)에서 압력이 10bar(스트림 #3)에서 50bar(스트림 #4)로 증가한다. CO_2 수소화를 통한 메탄올 합성이 발열 반응이라는 사실 때문에 스트림 #6의 온도는 336 ℃로 상승한다. 또한 CO_2 변환 및 배출 분율(3%)이 낮아 초기 이송량(스트림 #12)의 3배 가량이 반응기로 다시 재순환되었고, 이렇게 많은 양의 재순환으로 인해 CO_2 배출량이 29kmol/h (스트림 #10)의 직접적인 원인이 된 것으로 확인되었다.

[0202] 도 6 (a)부터는 반응기와 압축기의 높은 장비 비용(표 S5 참조)과 압축 동안의 높은 전기 소비량 때문에 반응 구간이 두 분리 구간에 비해 연간 최고의 자본과 운영비를 요구하였음을 알 수 있다.

[0204] 또한 도 6 (b)와 같이, 두 개의 분리 구간은 반응 구간에 비해 많은 양의 유틸리티를 소비한다. 특히 G/L 분리 구간은 293 TJ/y HP 증기를 사용해 재순환 스트림(도 5의 #11)을 30~250℃로 가열하는 한편, 증류탑의 재보일러 부분은 증류 작업에 178 TJ/y LP 증기를 소비하여 다량의 고순도 메탄올을 얻는다. 또한 도 6(c)는 모든 구간의 직접 및 간접 CO_2 배출량을 나타낸다. 구체적으로는 G/L 분리구간에서는 배출 분율이 낮고 재순환 정도가 높아 CO_2가 직접 배출되며, 직접 CO_2 배출이 전체 배출량의 35%를 차지한다. 3개 구간 중 G/L 분리구간 역시 간접 CO_2 배출량이 가장 높은 구간으로 전체적으로는 유틸리티 소비가 높기 때문이다.

[0206] 4.2. 기술적-경제적 및 환경적 결과 (Techno-economic and environmental results)

[0207] Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 사용한 메탄올 생산 공정의 기술, 경제, 환경 평가 결과는 표 1에 요약되어 있다. 자세한 내용은 도 14-16에서 확인할 수 있다. 주어진 조건(CO_2 공급 = 370kmol/h, 50bar, 250℃, CO_2 변환 = 25.7%, 메탄올 선택성 = 61.3%, 배출 분율 = 3%)에서 메탄올을 322kmol/h의 비율로 생산하는 공정의 탄소 효율은 87%로 추정되었다. 이러한 높은 탄소 효율은 CO_2 직접 수소화 공정 계획의 단순성에서 비롯되었다. 또한 CO_2 직접 수소화 공정의 단순성은 두 개의 반응 구간(CO_2를 CO로 변환하기 위한 RWGS 반응, 합성 가스에서 MeOH를 생성하기 위한 메탄올 합성)을 제어하기 위해 다량의 에너지가 필요한 CAMERE 공정보다 운전에 필요한 유틸리티의 양이 적다. 그 결과 에너지 효율은 ~62%로 추정되어 CAMERE 공정에 비해 상대적으로 높은 수준이다 (~36%).

[0208] [표 1]

[0209]

Carbon efficiency [=b/a] (%)	**87**
(a) Feed CO_2 (kmol/h)	370 (130,269,600[1])
Required H_2 (kmol/h)	1,082 (17,450,496[1])
(b) Produced MeOH (kmol/h)	322 (82,617,093[1])
Energy efficiency [=c/(d+e)] (%)	**62**
(c) Product energy (GJ/y)	1,648,738
(d) Feed energy (GJ/y)	2,112,214
(e) Utility consumption (GJ/y)	563,189
Electricity (GJ/y)	69,223
Steam (GJ/y)	493,966
Cooling water (Mkg/y)	24,575
CO_2 reduction [={a-(f+g)}/b] (kg CO_2/kg of MeOH)	**0.946**
(f) Direct CO_2 emission (kg/yr)	13,412,266
(g) Indirect CO_2 emission (kg/yr)	38,586,579
Total production cost (TPC) [=h+i+j] ($/yr)	**63,078,020**
Capital cost ($)	12,062,043
Capital charge factor (y^{-1})	0.1175
(h) Annualized capital cost	1,417,290
(i) Operating costs	4,097,853
Fixed operating cost	1,078,434
Variable operating cost	3,019,419
Electricity	1,153,952
Steam	1,128,207
Cooling water	737,260
(j) Material costs	**57,562,877**
CO_2 purchase	5,210,784
H_2 purchase	52,352,093
Unit production cost (UPC) [=(h+i+j)/c] ($/kg of MeOH)	**0.763**

[0211] 또한 표 1은 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 사용하여 수행되는 메탄올 생산 공정의 CO_2 감소율을 보여준다. CO_2 감소량은 CO_2 재고 자산에 따라 결정된 프로세스 물질 수지와 에너지 소비량에 기초하여 계산되었다. 양의 CO_2 감소량 (MeOH의 kg 당 CO_2 0.946kg)은 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 사용하여 수행되는 CO_2 직접 수소화 공정이 음의 CO_2 감소 값(-2.475)을 갖는 CAMERE 공정에 비해 환경적 이점을 제공함을 의미한다. CAMERE 공정은 각각 많은 양의 재순환과 높은 에너지 소비로 인한 막대한 직접 및 간접 CO_2 배출량을 보여준다.

[0212] 게다가 표 1은 경제 평가 결과를 보여주고 있는데, 여기서 단위 생산 비용(UPC)은 kg당 0.763달러로 계산되었다. UPC의 주요 기여자는 원재료비($ 57.6M/yr, TPC의 91%)이며, 변동 운영비($ 3.0M/y, 5%)와 연도별 자본비용($ 1. 4M/y 달러, 2%)이 그 뒤를 잇고 있다. 또한, H_2 구매원가는 CO_2 구매원가의 약 10배에 달해 고가의 H_2를 매우 많이 소비하는 공정이기 때문에 CO_2 구매원가의 약 10배에 달하는 원재료 원가를 지배하고 있다.

구체적으로는, H_2의 1,056 kmol/h ($3/kg) 외에, CO_2의 370 kmol/h ($0.04/kg)를 원료로 소비한다. 이 경우 채용된 수소는 재생 전력을 이용한 물 전기분해로 생산되기 때문에 기존 H_2에 비해 구매 비용이 현저히 높다는 점에 유의해야 한다. 공과금 차이에 따라 증기가 6배 이상 필요한 경우(즉, 49만4966 GJ/y 증기, 6만9223 GJ/y 전기)에도 증기의 사용과 관련한 비용보다 전기 운전비가 약간 높다.

[0214] 4.3. 민감도 분석 (Sensitivity analysis)

[0215] 본 발명의 일 실시형태에 따른 플랫폼인 METAL의 고유 기능 중 하나는 사용자가 광범위한 범위에서 다양한 파라미터(즉, 촉매 성능 또는 경제적 파라미터)를 변경하여 민감도 분석을 수행할 수 있다는 것이다. 예를 들어 사용자가 CO_2 변환에 대한 최소값과 최대값이나 메탄올 수율을 삽입하면, 플랫폼은 탄소 효율, 에너지 효율, UPC의 변화를 자동으로 계산해 표시한다. 여기서는 주요 결과만 논의되지만, METAL 플랫폼의 "민감도 분석" 스크린샷은 보다 상세한 결과를 보여준다(도 17-21).

[0216] 따라서 Cu/Zn/Al/Zr 촉매들이 서로 다른 온도와 압력에서 사용되는 7가지 다른 사례를 만들었다. 상기 사례들은 부분적으로 Cu:Zn:Al:Zr 원자비가 2:1:1.2:0.1인 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 합성하고 광범위한 작동 조건(즉, 443-583 K 및 1-9 MPa)에서 촉매 성능을 평가한 Gao 등의 작업을 기초로 하였다. 이 기준 사례 뿐만 아니라 7개의 대체 사례에 대한 실험 조건은 표 2에 요약되어 있다. 동일한 압력 조건에서 CO_2 변환은 온도가 증가함에 따라 증가하는 반면 메탄올 선택성은 감소하였다. 이와는 대조적으로 CO_2 변환과 메탄올 선택성은 고압 조건에서 모두 증가하였다.

[0218] [표 2]

[0219]

	Base	Constant pressure				Constant temperature		
		Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6	Case 7
Temperature (°C)	250	210	230	270	290	250	250	250
Pressure (MPa)	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	3.0	7.0	9.0
CO_2 conversion (%)	25.7	14.8	20.7	27.7	29.9	20.2	29.6	36.2
MeOH selectivity (%)	61.3	69.1	64.6	56.2	41.1	44.9	73.4	84.6
MeOH yield (%)	15.8	10.2	13.4	15.6	12.3	9.1	21.7	30.6

[0221] 4.3.1. 다른 온도에서의 촉매 분석 (Analysis of the Cu/Zn/Al/Zr catalysts at different temperatures)

[0222] Cu/Zn/Al/Zr 촉매와 CO_2 수소화 반응을 사용하여 수행된 메탄올 생산 공정이 다른 온도 범위에서 발생하는 것으로 확인되었다(표 2, 사례 1-4). 탄소 및 에너지 효율성, CO_2 감소 및 UPC와 같은 이러한 사례에 대한 자세한 결과는 표 S7에서 확인할 수 있다. 표 S7에서 보여주는 것과 같이 사례 3에서는 가장 많은 양의 메탄올(즉, 324kmol/h, 탄소 효율성 = 88%)이 생산되었는데, CO_2 변환 27.7%, 메탄올 선택성 56.2%를 달성하였다. 기준 사례에 사용된 촉매가 실험 단계에서 사례 3(15.6%)에 비해 약간 우월한 메탄올 수율(15.8%)을 보였지만, 기준 사례는 산업 환경에서 실제 화학공정이 수행되는 사례 3에 비해 메탄올(322kmol/h)을 적게 생산했다. 좋은 촉매 성능(예: 전환 또는 수율)이 항상 좋은 공정 능력(예: 생산률, 효율성 또는 경제성)으로 이어질 수 없으므로, 촉매를 비교하고 산업적 관점에서 선택해야 한다.

[0223] [표 S7]

	Case 1	Case 2	Base	Case 3	Case 4
Temperature (°C)	210	230	250	270	290
Pressure (MPa)	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0
CO_2 one-pass conversion (%)	14.8	20.7	25.7	27.7	29.9
Methanol selectivity (%)	69.1	64.6	61.3	56.2	41.1
Methanol yield (Catalyst) (%)	10.2	13.4	15.8	15.6	12.3
Carbon efficiency (%)	**79**	**85**	**87**	**88**	**87**
Feed CO_2 [stream #1] (kmol/h)	370	370	370	370	370
Required H_2 [stream #2] (kmol/h)	1,060	1,074	1,082	1,085	1,087
Recycle [stream #12] (kmol/h)	7,104	5,274	4,321	4,140	4,441
Produced MeOH [stream #15] (kmol/h)	294	313	322	324	321
Energy efficiency (%)	**56**	**60**	**62**	**61**	**59**
Product energy (GJ/y)	1,504,722	1,599,451	1,648,738	1,658,066	1,642,284
Feed energy (GJ/y)	2,068,237	2,096,834	2,112,214	2,117,014	2,121,641
Utility consumption (GJ/y)	631,538	581,185	563,189	586,538	640,292
Electricity (GJ/y)	68,149	68,848	69,223	69,341	69,454
Steam (GJ/y)	563,389	512,336	493,966	517,197	570,838
Cooling water (Mkg/y)	28,234	25,604	24,575	25,635	28,310
CO_2 reduction (kg CO_2/kg MeOH)	**0.838**	**0.915**	**0.946**	**0.938**	**0.92**
Direct CO_2 emission (kg/y)	24,233,772	17,196,932	13,412,266	12,231,284	11,092,517
Indirect CO_2 emission (kg/y)	42,767,288	39,682,389	38,586,579	40,040,431	43,379,159
Total production cost (TPC) ($/y)	**62,442,314**	**62,835,955**	**63,078,020**	**63,276,074**	**63,634,219**
Capital cost ($)	12,935,906	12,380,255	12,062,043	12,003,174	12,130,851
Annualized capital cost ($/y)	1,519,969	1,454,680	1,417,290	1,410,373	1,425,375
Operating costs ($/y)	4,449,463	4,199,608	4,097,853	4,183,869	4,412,310
Fixed operating cost ($/y)	1,156,564	1,106,884	1,078,434	1,073,171	1,084,586
Variable operating cost ($/y)	3,292,899	3,092,724	3,019,419	3,110,698	3,327,724
Electricity ($/y)	1,136,048	1,147,691	1,153,952	1,155,906	1,157,790
Stream ($/y)	1,309,829	1,176,899	1,128,207	1,185,744	1,320,628
Cooling water ($/y)	847,022	768,134	737,260	769,048	849,306
Material costs ($/y)	56,472,882	57,181,667	57,562,877	57,681,832	57,796,534
CO_2 purchase cost ($/y)	5,210,784	5,210,784	5,210,784	5,210,784	5,210,784
H_2 purchase cost ($/y)	51,262,098	51,970,883	52,352,093	52,471,048	52,585,750
Unit production cost (UPC) ($/kg MeOH)	**0.827**	**0.783**	**0.763**	**0.761**	**0.773**

[0224]

[0226] 도 7(a)는 5건의 시험 사례의 에너지 소비율과 에너지 효율을 비교한다. 구체적으로는 사례 1이 에너지 효율이 가장 낮은 결과(56%)를 보인 반면, 기준 사례는 5건 중 에너지 효율이 가장 높은 결과(62%)를 나타낸다. 전력 소비량은 사례 1로부터 기준 사례로 감소하지만, 기준 사례로부터 사례 4로 증가했다는 점이 특징이다. 이 결과는 도 5와 같이 히터 #2로 진입하는 스트림 #11을 나타내는 대상 온도와 재순환량(도 7 (a)의 노란색 막대)을 통해 설명될 수 있다. 1번 사례의 높은 재순환 유량으로 인해 히터 #2의 열 부하가 확대되어 스트림 온도가 30 ℃에서 목표 온도(즉, 반응기의 운전조건 210 ℃)로 상승하지만, 기준 사례의 경우 목표 온도가 더 높음에도 불구하고 1번 사례에 비해 낮은 재순환 유량으로 인한 전력 소비량이 적다. (250 ℃). 반응기의 운전온도가 각각 기준 사례 (즉, 270 ℃, 290 ℃)보다 높은 사례 3과 4는 낮은 재순환 유량에도 불구하고 더 많은 양의 가열 유틸리티를 소비한다. 특히 사례 4에서는 비교적 낮은 재순환 유량에도 불구하고 반응 온도가 가장 높아 유틸리티를 가장 많이 요구한다. 5건의 유틸리티 소비율은 간접 CO_2 배출량에서도 비슷한 추세를 보여 히터 #2의 열 부하에 크게 의존하고 있다. 표 S7에 나타난 바와 같이, 5가지 경우에 대한 간접적인 CO_2 배출은 볼록 형태를 보이며, 기준 사례에 의해 생산된 메탄올 kg 당 0.946kg CO_2 의 CO_2 감소 값이 가장 우수하였다.

[0228] 도 7(b)는 5가지 사례 각각에 대한 메탄올 생산량, 총 생산비, UPC를 나타낸다. 표시된 바와 같이 총 생산비는 사례 1에서 사례 5까지 62.4-63.6 M$/y의 범위에서 꾸준히 증가한다. 장비의 크기에 따라 결정되는 자본 비용은 재순환 유량이 가장 낮기 때문에 사례 3의 경우 가장 낮은 반면, 주로 유틸리티 소비에 의해 결정되는 운영 비용은 기준 사례에서 가장 낮은 것이다. 또한 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 사용한 메탄올 생산 공정의 경제적, 환경적 역량은 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 사용한 적절한 운영 전략(예: 작동 조건 및 재순환 비율)과 촉매 성능(예: 변환 및 선택도)의 선택에 의해 결정된다는 것을 나타내는 사례 3의 UPC가 가장 낮았다.

[0230] 4.3.2. 다른 압력에서의 촉매 분석 (Analysis of the Cu/Zn/Al/Zr catalysts at different pressures)

[0231] 도 8은 Cu/Zn/Al/Zr 촉매의 작동 압력 변화에 따라 얻은 결과를 요약한 것이다. 자세한 결과는 표 S8에서 확인할 수 있다. 사례 6 및 7과 같이 고압 조건에서 작동되는 경우에는 플래시 탱크의 작동 압력이 반응기 압력보다 낮기 때문에 재순환 스트림의 압력을 증가시키기 위해 압축기를 추가로 설치했다는 점에 유의해야 한다.

[0232] [표 S8]

[0233]

	Case 5	Base	Case 6	Case 7
Temperature (°C)	250	250	250	250
Pressure (MPa)	3.0	5.0	7.0	9.0
CO_2 one-pass conversion (%)	20.2	25.7	29.6	36.2
Methanol selectivity (%)	44.9	61.3	73.4	84.6
Methanol yield (%)	9.1	15.8	21.7	30.6
Carbon efficiency (%)	**83**	**87**	**90**	**92**
Feed CO_2 [stream #1] (kmol/h)	370	370	370	370
Required H_2 [stream #2] (kmol/h)	1,073	1,082	1,087	1,092
Recycle [stream #12] (kmol/h)	6,005	4,321	3,471	2,546
Produced MeOH [stream #15] (kmol/h)	305	322	331	340
Energy efficiency (%)	**56**	**62**	**65**	**67**
Product energy (GJ/y)	1,561,535	1,648,738	1,692,827	1,740,803
Feed energy (GJ/y)	2,094,948	2,112,214	2,121,046	2,132,101
Utility consumption (GJ/y)	670,348	563,189	504,365	459,357
Electricity (GJ/y)	43,455	69,223	117,531	142,946
Steam (GJ/y)	626,893	493,947	386,834	316,411
Cooling water (Mkg/y)	29,657	24,362	21,647	18,606
CO_2 reduction (kg CO_2/kg MeOH)	**0.878**	**0.946**	**0.961**	**0.982**
Direct CO_2 emission (kg/y)	17,616,454	13,412,266	11,210,747	8,497,269
Indirect CO_2 emission (kg/y)	43,864,693	38,586,579	37,499,749	36,056,263
Total production cost (TPC) ($/y)	**62,828,563**	**63,078,020**	**64,610,118**	**64,704,901**
Capital cost ($)	12,633,864	12,062,043	17,042,860	15,354,834
Annualized capital cost ($/y)	1,484,479	1,417,290	2,002,536	1,804,193
Operating costs ($/y)	4,209,154	4,097,853	4,825,808	4,844,929
Fixed operating cost ($/y)	1,129,720	1,078,434	1,359,206	1,224,583
Variable operating cost ($/y)	3,079,434	3,019,419	3,466,602	3,620,346
Electricity ($/y)	724,392	1,153,952	1,959,235	2,382,913
Stream ($/y)	1,465,324	1,128,207	857,958	679,251
Cooling water ($/y)	889,718	737,260	649,409	558,182
Material costs ($/y)	57,134,930	57,562,877	57,781,774	58,055,779
CO_2 purchase cost ($/y)	5,210,784	5,210,784	5,210,784	5,210,784
H_2 purchase cost ($/y)	51,924,146	52,352,093	52,570,990	52,844,995
Unit production cost (UPC) ($/kg MeOH)	**0.802**	**0.763**	**0.761**	**0.741**

[0235] 도 8(a)와 같이, 작동 압력이 높을수록 재순환 스트림의 유량이 감소하기 때문에, 작동 압력이 사례 5에서 사례 7까지 증가함에 따라 소비되는 유틸리티의 총량은 감소한다. 그러나 사용전력이 증가함에 따라 압축기의 압력이 증가하여 온도가 증가함에 따라 소비되는 스트림의 양은 감소한다. 총 유틸리티 소비량은 사례 5에서 사례 7로 감소하지만, 다른 난방원에 비해 단가가 높은 전기 비중이 확대돼 운영비가 증가한다. 전체적으로 도 8(b)와 같이, 메탄올의 최대 생산량(사례 7)은 이 경우에도 불구하고 가장 낮은 UPC(0.741달러/kg 메탄올)로 이어진다.

[0237] 5. 이산화탄소 수소화를 위한 촉매의 초기 단계 스크리닝 (Early-stage screening of catalysts for CO_2 hydrogenation)

[0238] 본 발명의 메탈 플랫폼은 초기 연구개발 단계에서 새로운 촉매의 기술적, 환경적, 경제적 능력에 대한 사전 분석이 가능하다. 이 플랫폼은 촉매 개발을 위한 연구개발 목표와 방향을 설정하는 데 유용하며, 산업적 관점에서 기술적·경제적 타당성을 평가하여 이미 발견된 촉매의 초기 단계 선별(예: 알려진 변환 및 선택성)의 도구로 사용할 수 있다. 따라서 본 발명에서는 문헌에 보고된 다양한 CO_2 수소화 촉매를 평가하기로 한다. 여러 문헌에서 금속 및 프로모터, 촉매 성능, 작동 조건 등이 다른 총 38개의 촉매를 선정했으며, 탄소 효율성, 에너지 효율성, CO_2 감소 특성, UPC 등을 분석하였다.

[0239] 도 9는 4개의 서로 다른 H_2 공급 비용에서 CO_2 변환 및 메탄올 선택성에 기초한 UPC의 분포를 보여준다. 각 도면의 뒷면에 있는 컬러 밴드는 UPC를 나타내며, H_2 가격에 따라 0.1~1.2달러/kg의 넓은 범위를 갖는다. 도 9(a)~9(d)에 나타낸 색상 프로파일을 비교하여 CO_2 변환과 메탄올 선택성이 향상됨에 따라 UPC가 감소하는 것을 확인했다. 엄선된 38개 촉매의 경우 8~100%에 이르는 다양한 메탄올 선택성을 보였지만 CO_2 변환은 40%를 넘지 못했고, 메탄올 산출량이 10%를 넘는 것은 9개 촉매에 불과했다. 앞서 언급했듯이, H_2 공급 비용은 CO_2 수소화 공정의 경쟁력을 결정하는 데 중요하다. H_2의 가격이 2~3달러/kg (도 9(a)와 (b)) 사이인 경우, 메탄올 수율이 30%인 가장 효율적인 촉매(#5)를 사용해 얻은 UPC는 시장가격(0.26-0.3달러/kg)보다 현저히 높았다.

[0240] 촉매의 메탄올 수율은 비슷하지만 메탄올의 UPC는 CO_2 변환과 메탄올 선택성에 따라 달라진다. 예를 들어 수소 가격이 \$2/kg H_2인 경우 (도 9(b)), CO_2 변환 14.8%, 메탄올 선택도 69.1%인 촉매 #11, CO_2 변환 25.8%, 메탄올 선택도 40.9%인 촉매 #27은 유사한 메탄올 수율 (즉, ~10%)을 제공한다. 다만 촉매 #11의 UPC(MeOH 0.65달러/kg)는 촉매 #27의 UPC(MeOH 0.55달러/kg)보다 약 20% 높았다. 도 9(c)의 빨간색 라인은 가장 높은 메탄올 시장 가격(kg당 0.36달러)을 나타낸다. 도 9(c)와 같이 화학 산업에서 메탄올 수율이 10% 미만인 새로운 촉매를

사용할 수 있는데, 이러한 촉매를 사용하여 생산된 메탄올의 UPC 값이 메탄올의 시장가격과 비교 가능하기 때문이다. 적당한 조건 (CO_2 변환: 22-57%, 선택성: 17-45%)에서는, 메탄올 수율이 10% 미만이었을 때에도, 촉매 #32는 경제적으로 경쟁적이었다. 그러나 한 촉매 성능이 다른 촉매보다 훨씬 좋았던 촉매 #11의 경우 메탄올 수율이 10%를 초과해도 경제성이 없다. CO_2 수소화 공정을 성공적으로 전개하기 위한 추가 선택사항은 부산물 수소나 개질 수소 등 값싼 H_2를 사용하는 것이라는 점에 유의해야 한다. 그러나, 이것이 다른 환경 문제(예: 생산된 H_2의 탄소 발자국 증가)로 이어질 수 있기 때문에, 본 발명에서는 이 문제를 자세히 논의하지 않기로 한다.

[0241] 마지막으로, 선택된 촉매의 탄소 및 에너지 효율과 CO_2 감소 특성이 도 10에 설명되어 있다. 도 9에 제시된 경제적 결과와 달리, 조사된 촉매들 사이의 탄소 및 에너지 효율성의 차이는 크지 않다. 이는 저수율 촉매(예: 메탄올 수율이 10% 미만인 경우)의 CO_2 변환 및 메탄올 선택성이 약간 개선되면 효율성이 크게 향상될 수 있음을 나타낸다. 또한 조사된 모든 촉매들이 양의 CO_2 감소값을 보이고 있어 CO_2 직접 수소화 과정이 촉매 종류와 무관하게 메탄올 생산을 위한 녹색 경로임을 보장한다는 점을 알 수 있다.

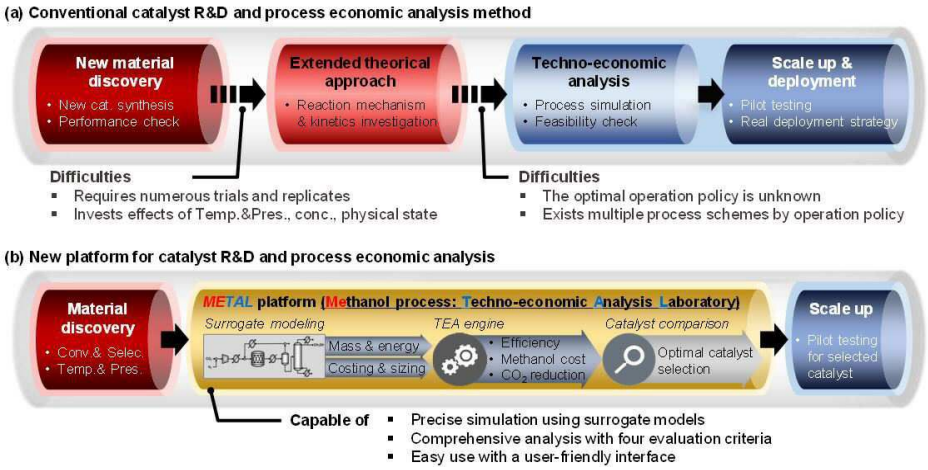
[0243] 6. 결론

[0244] 본 발명의 목적은 CO_2 직접 수소화 촉매를 위한 새로운 지식 기반 평가 플랫폼을 개발하고 산업적 관점에서 촉매의 초기 단계 선별을 수행하는 것이다. 이를 위해 3개 섹션 (반응, 가스/액체 분리 및 재순환, 액체/액체 분리)으로 구성된 메탄올 생산 공정이 새로 제안됐다. 이후, 사이징 및 비용 정보 뿐만 아니라 조작된 변수(즉, CO_2 공급량, 촉매 변환 및 메탄올 선택성, 반응 온도 및 압력, 배출 분율)로부터 물질과 에너지 수지를 얻기 위해 제안된 프로세스의 주요 장치에 대한 대리 모델이 개발되었다. 또한, 공정의 기술적, 경제적, 환경적 역량을 평가하기 위해 단위 생산비, 탄소 및 에너지 효율성, CO_2 감소 특성 등 4가지 평가 기준을 적용하였다. METAL 플랫폼을 패키지 소프트웨어로 사용하여 Cu/Zn/Al/Zr 촉매를 이용한 메탄올 생산 공정을 사례 연구로 분석하고, 앞서 문헌에 보고된 38종의 CO_2 수소화 촉매를 이용한 다양한 메탄올 생산 공정을 평가하여 분석을 확대했다. 따라서 본 발명은 초기 R&D 단계에서 촉매의 기술-경제적 및 환경적 역량을 평가하기 위한 새로운 평가 플랫폼을 제공한다. 이 플랫폼을 이용하면 촉매 개발에 종사하는 연구자들이 R&D 목표를 설정하고 경제적으로 실현 불가능한 촉매들을 지정하여 걸러낼 수 있도록 안내할 수 있다. 메탈 플랫폼에 대한 추가 연구는 촉매 설계의 특징을 반영하는 머신 러닝 기법의 채택이나 최적 설계 및 운용 전략을 식별하는 최적화 기법을 추가함으로써 보다 엄격하고 정밀한 플랫폼으로의 개발에 초점을 맞추어야 한다.

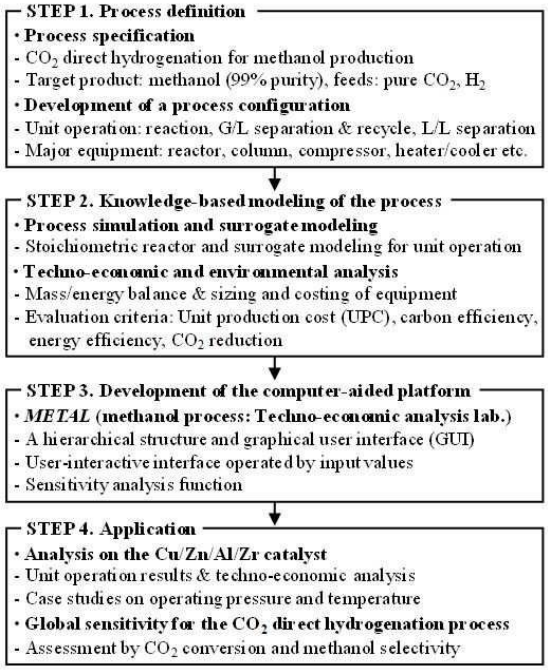
[0246] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명에 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 한다.

도면

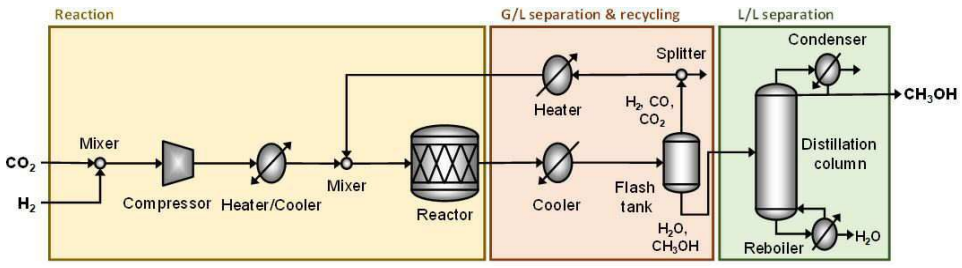
도면1



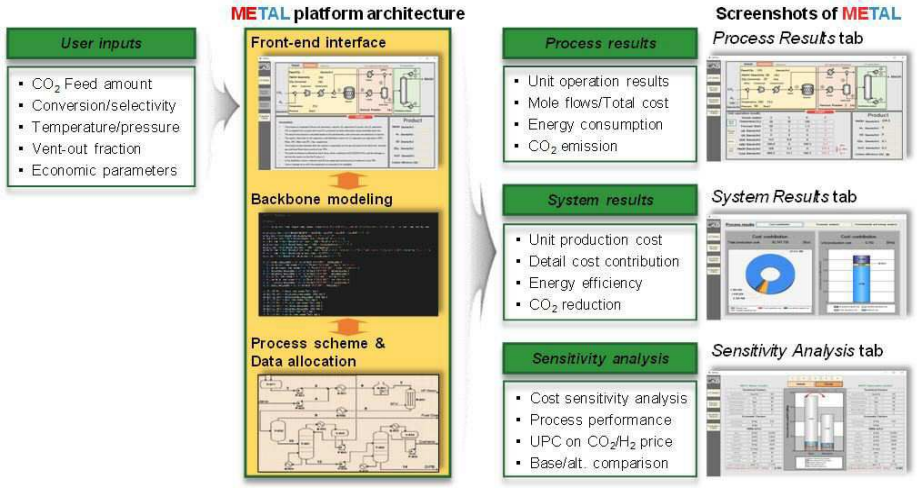
도면2



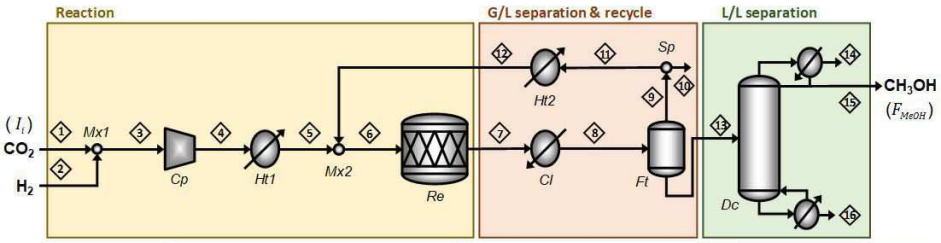
도면3



도면4

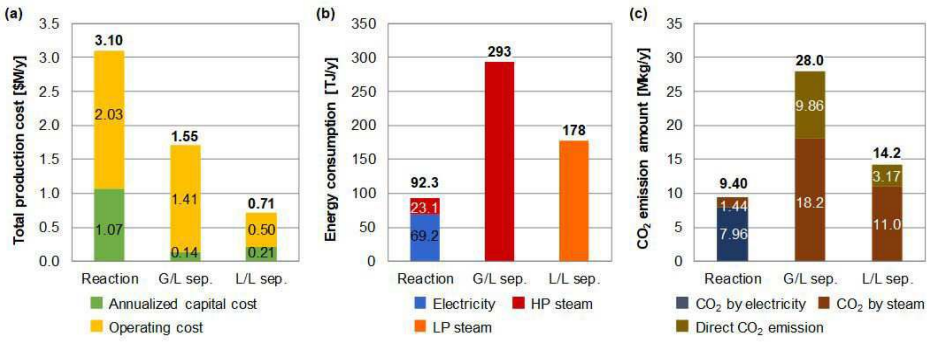


도면5

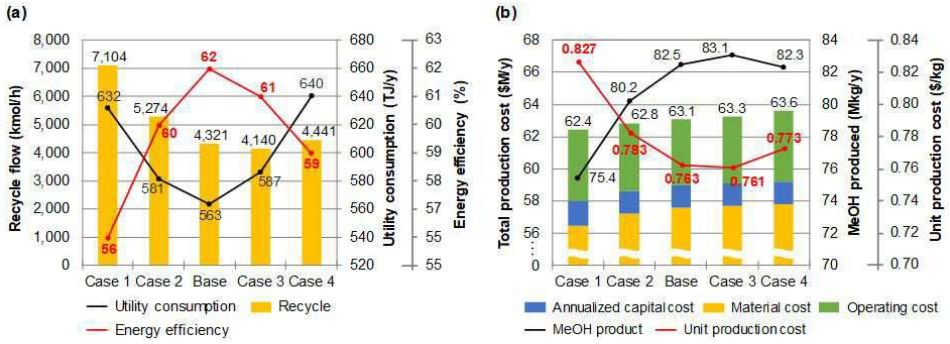


Stream number	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Temperature [°C]	25	25	25	199	250	250	336	30	30	30	30	250	30	35	35	105
Pressure [bar]	10	10	10	50	50	50	50	50	50	50	50	50	50	1	1	1
Mole flow [kmol/h]	370	1,082	1,452	1,452	1,452	5,773	5,122	5,122	4,455	134	4,321	4,321	667	13	323	332
H_2	0	1,082	1,082	1,082	1,082	4,277	3,291	3,291	3,294	99	3,195	3,195	0	0	0	0
CO	0	0	0	0	0	201	208	208	208	6	202	202	0	0	0	0
CO_2	370	0	370	370	370	1,292	960	960	950	29	921	921	10	10	0	0
H_2O	0	0	0	0	0	0	332	332	0	0	0	0	332	0	0	332
MeOH	0	0	0	0	0	3	329	329	3	0	3	3	326	3	322	0

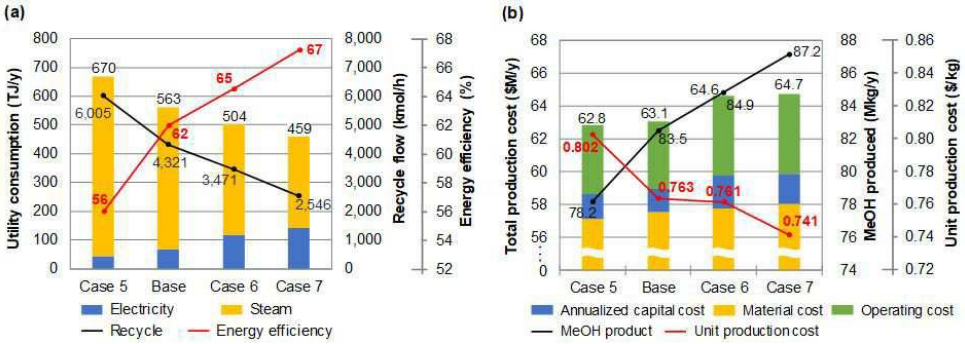
도면6



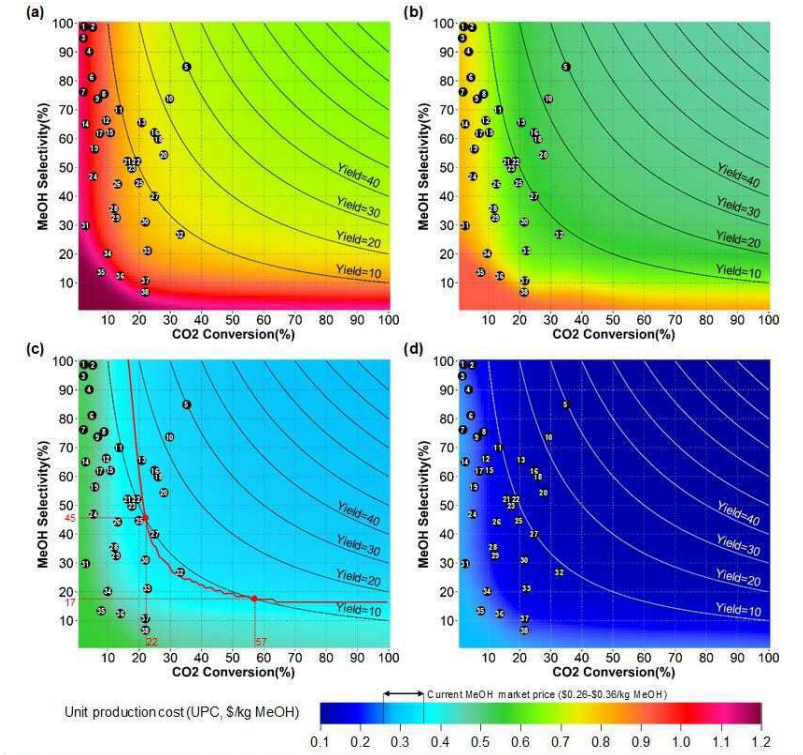
도면7


(a)
Recycle flow (kmol/h)
Utility consumption (TJ/y)
Energy efficiency (%)
7,104
632
5,274
581
4,321
563
4,140
587
4,441
640
62
60
61
59
56
Case 1 Case 2 Base Case 3 Case 4
Utility consumption
Recycle
Energy efficiency
(b)
Total production cost ($M/y)
MeOH produced (Mkg/y)
Unit production cost ($/kg)
0.827
62.4
75.4
80.2
62.8
0.783
82.5
63.1
0.763
83.1
63.3
0.761
82.3
63.6
0.773
Case 1 Case 2 Base Case 3 Case 4
Annualized capital cost
Material cost
Operating cost
MeOH product
Unit production cost

도면8

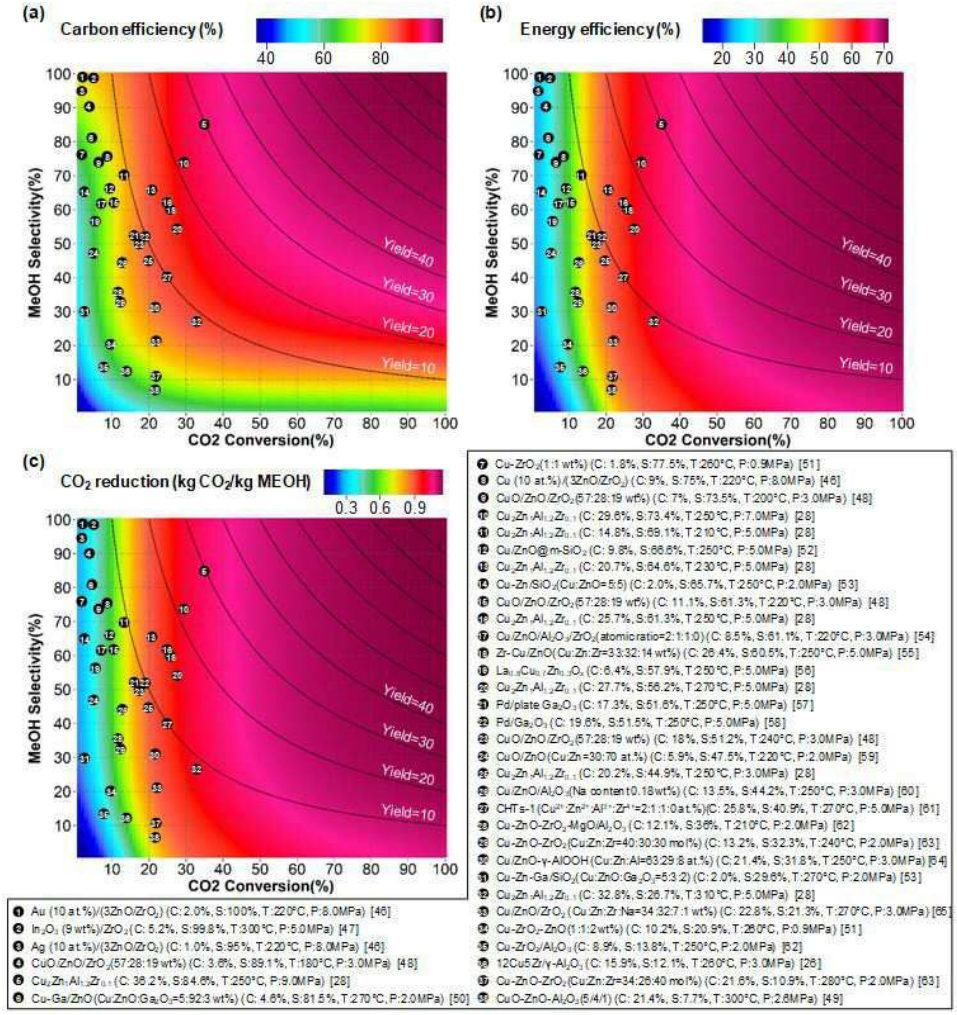

(a)
Utility consumption (TJ/y)
Recycle flow (kmol/h)
Energy efficiency (%)
670
6,005
563
4,321
504
3,471
459
2,546
67
65
62
56
Case 5 Base Case 6 Case 7
Electricity
Steam
Recycle
Energy efficiency
(b)
Total production cost ($M/y)
MeOH produced (Mkg/y)
Unit production cost ($/kg)
0.802
62.8
78.2
63.1
83.5
64.6
84.9
87.2
64.7
0.763
0.761
0.741
Case 5 Base Case 6 Case 7
Annualized capital cost
Material cost
Operating cost
MeOH product
Unit production cost

도면9

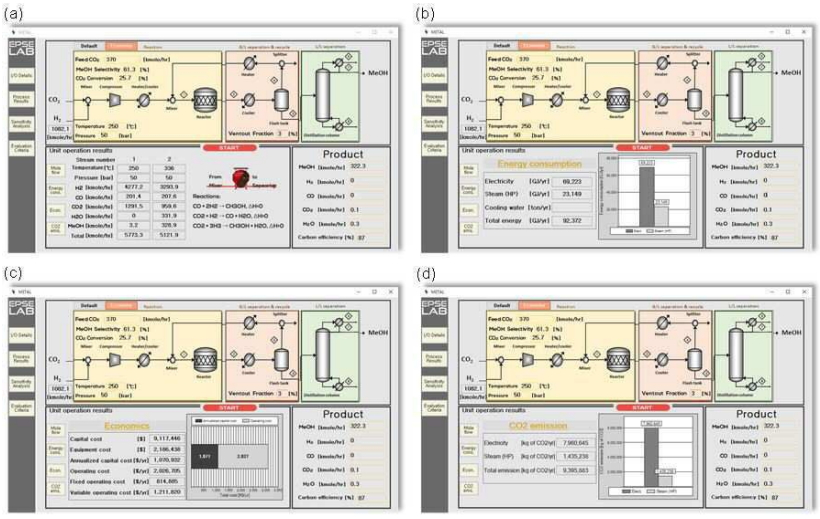


❶ Au (10 at.%)/(3ZnO/ZrO_2) (C: 2.0%, S:100%, T:220°C, P:8.0MPa) [46]
❷ In_2O_3 (9 wt%)/ZrO_2 (C: 5.2%, S:99.8%, T:300°C, P:5.0MPa) [47]
❸ Ag (10 at.%)/(3ZnO/ZrO_2) (C: 1.0%, S:95%, T:220°C, P:8.0MPa) [46]
❹ CuO/ZnO/ZrO_2(57:28:19 wt%) (C: 3.6%, S:89.1%, T:180°C, P:3.0MPa) [48]
❺ $Cu_2Zn_1Al_{1.2}Zr_{0.1}$ (C: 36.2%, S:84.6%, T:250°C, P:9.0MPa) [28]
❻ Cu-Ga/ZnO(Cu:ZnO:Ga_2O_3=5:92:3 wt%) (C: 4.6%, S:81.5%, T:270°C, P:2.0MPa) [50]
❼ Cu-ZrO_2(1:1 wt%) (C: 1.8%, S:77.5%, T:260°C, P:0.9MPa) [51]
❽ Cu (10 at.%)/(3ZnO/ZrO_2) (C: 9%, S:75%, T:220°C, P:8.0MPa) [46]
❾ CuO/ZnO/ZrO_2(57:28:19 wt%) (C: 7%, S:73.5%, T:200°C, P:3.0MPa) [48]
❿ $Cu_2Zn_1Al_{1.2}Zr_{0.1}$ (C: 29.6%, S:73.4%, T:250°C, P:7.0MPa) [28]
⓫ $Cu_2Zn_1Al_{1.2}Zr_{0.1}$ (C: 14.8%, S:69.1%, T:210°C, P:5.0MPa) [28]
⓬ Cu/ZnO@m-SiO_2 (C: 9.8%, S:66.6%, T:250°C, P:5.0MPa) [52]
⓭ $Cu_2Zn_1Al_{1.2}Zr_{0.1}$ (C: 20.7%, S:64.6%, T:230°C, P:5.0MPa) [28]
⓮ Cu-Zn/SiO_2(Cu:ZnO =5:5) (C: 2.0%, S:65.7%, T:250°C, P:2.0MPa) [53]
⓯ CuO/ZnO/ZrO_2(57:28:19 wt%) (C: 11.1%, S:61.3%, T:220°C, P:3.0MPa) [48]
⓰ $Cu_2Zn_1Al_{1.2}Zr_{0.1}$ (C: 25.7%, S:61.3%, T:250°C, P:5.0MPa) [28]
⓱ Cu/ZnO/Al_2O_3/ZrO_2(atomic ratio=2:1:1:0) (C: 8.5%, S:61.1%, T:220°C, P:3.0MPa) [54]
⓲ Zr-Cu/ZnO(Cu:Zn:Zr= 33:32:14 wt%) (C: 26.4%, S:60.5%, T:250°C, P:5.0MPa) [55]
⓳ $La_{0.3}Cu_{0.7}Zn_{0.3}O_x$ (C: 6.4%, S:57.9%, T:250°C, P:5.0MPa) [56]
⓴ $Cu_2Zn_1Al_{1.2}Zr_{0.1}$ (C: 27.7%, S:56.2%, T:270°C, P:5.0MPa) [28]
㉑ Pd/plate Ga_2O_3 (C: 17.3%, S:51.6%, T:250°C, P:5.0MPa) [57]
㉒ Pd/Ga_2O_3 (C: 19.6%, S:51.5%, T:250°C, P:5.0MPa) [58]
㉓ CuO/ZnO/ZrO_2(57:28:19 wt%) (C: 18%, S:51.2%, T:240°C, P:3.0MPa) [48]
㉔ CuO/ZnO(Cu:Zn=30:70 at.%) (C: 5.9%, S:47.5%, T:220°C, P:2.0MPa) [59]
㉕ $Cu_2Zn_1Al_{1.2}Zr_{0.1}$ (C: 20.2%, S:44.9%, T:250°C, P:3.0MPa) [28]
㉖ Cu/ZnO/Al_2O_3(Na content 0.18 wt%) (C: 13.5%, S:44.2%, T:250°C, P:3.0MPa) [60]
㉗ CHTs-1(Cu^{2+}:Zn^{2+}:Al^{3+}:Zr^{4+}≈2:1:1:0 at.%)(C: 25.8%, S:40.9%, T:270°C, P:5.0MPa) [61]
㉘ Cu-ZnO-ZrO_2-MgO/Al_2O_3 (C: 12.1%, S:36%, T:210°C, P:2.0MPa) [62]
㉙ Cu-ZnO-ZrO_2(Cu:Zn:Zr=40:30:30 mol%) (C: 13.2%, S:32.3%, T:240°C, P:2.0MPa) [63]
㉚ Cu/ZnO-γ-AlOOH (Cu:Zn:Al=63:29:8 at.%) (C: 21.4%, S:31.6%, T:250°C, P:3.0MPa)[64]
㉛ Cu-Zn-Ga/SiO_2(Cu:ZnO:Ga_2O_3=5:3:2) (C: 2.0%, S:29.6%, T:270°C, P:2.0MPa)[53]
㉜ $Cu_2Zn_1Al_{1.2}Zr_{0.1}$ (C: 32.8%, S:26.7%, T:310°C, P:5.0MPa) [28]
㉝ Cu/ZnO/ZrO_2 (Cu:Zn:Zr:Na=34:32:7:1 wt%) (C: 22.8%, S:21.3%, T:270°C, P:3.0MPa) [65]
㉞ Cu-ZrO_2-ZnO(1:1:2 wt%) (C: 10.2%, S:20.9%, T:260°C, P:0.9MPa) [51]
㉟ Cu-ZrO_2/Al_2O_3 (C: 8.9%, S:13.8%, T:250°C, P:2.0MPa) [62]
㊱ 12Cu5Zr/γ-Al_2O_3 (C: 15.9%, S:12.1%, T:260°C, P:3.0MPa) [26]
㊲ Cu-ZnO-ZrO_2(Cu:Zn:Zr=34:26:40 mol%) (C: 21.6%, S:10.9%, T:280°C, P:2.0MPa) [63]
㊳ CuO-ZnO-Al_2O_3(5/4/1) (C: 21.4%, S:7.7%, T:300°C, P:2.6MPa) [49]

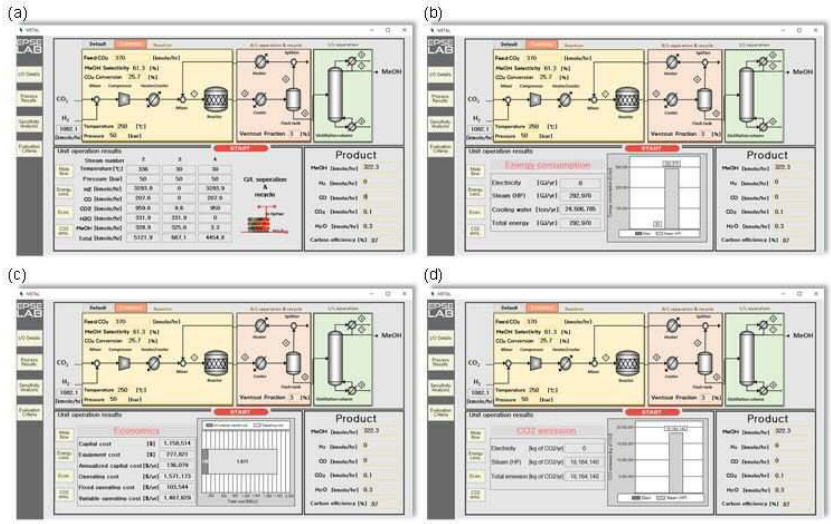
도면10


(a)
Carbon efficiency (%)
40 60 80
MeOH Selectivity(%)
CO2 Conversion(%)
Yield=40
Yield=30
Yield=20
Yield=10
(b)
Energy efficiency(%)
20 30 40 50 60 70
MeOH Selectivity(%)
CO2 Conversion(%)
Yield=40
Yield=30
Yield=20
Yield=10
(c)
CO2 reduction (kg CO2/kg MEOH)
0.3 0.6 0.9
MeOH Selectivity(%)
CO2 Conversion(%)
Yield=40
Yield=30
Yield=20
Yield=10
❶ Au (10 at.%)/(3ZnO/ZrO2) (C: 2.0%, S:100%, T:220℃, P:8.0MPa) [46]
❷ In2O3 (9 wt%)/ZrO2 (C: 5.2%, S:99.8%, T:300℃, P:5.0MPa) [47]
❸ Ag (10 at.%)/(3ZnO/ZrO2) (C: 1.0%, S:95%, T:220℃, P:8.0MPa) [46]
❹ CuO/ZnO/ZrO2(57:28:19 wt%) (C: 3.6%, S:89.1%, T:180℃, P:3.0MPa) [48]
❺ Cu0.2Zn2.8Al1.2Zr0.8O7 (C: 36.2%, S:84.6%, T:250℃, P:9.0MPa) [28]
❻ Cu-Ga/ZnO(Cu:ZnO:Ga2O3=5:92:3 wt%) (C: 4.6%, S:81.5%, T:270℃, P:2.0MPa) [50]
❼ Cu-ZrO2(1:1 wt%) (C: 1.8%, S:77.5%, T:260℃, P:0.9MPa) [51]
❽ Cu (10 at.%)/(3ZnO/ZrO2) (C:9%, S:75%, T:220℃, P:8.0MPa) [46]
❾ CuO/ZnO/ZrO2(57:28:19 wt%) (C: 7%, S:73.5%, T:200℃, P:3.0MPa) [48]
❿ Cu2Zn2.4Al1.2Zr0.4 (C: 29.6%, S:73.4%, T:250℃, P:7.0MPa) [28]
⓫ Cu2Zn2.4Al1.2Zr0.4 (C: 14.8%, S:69.1%, T:210℃, P:5.0MPa) [28]
⓬ Cu/ZnO@m-SiO2 (C: 9.8%, S:66.6%, T:250℃, P:5.0MPa) [52]
⓭ Cu2Zn2.4Al1.2Zr0.4 (C: 20.7%, S:64.6%, T:230℃, P:5.0MPa) [28]
⓮ Cu-Zn/SiO2(Cu:ZnO=5:5) (C: 2.0%, S:65.7%, T:250℃, P:2.0MPa) [53]
⓯ CuO/ZnO/ZrO2(57:28:19 wt%) (C: 11.1%, S:61.3%, T:220℃, P:3.0MPa) [48]
⓰ Cu2Zn2.4Al1.2Zr0.4 (C: 25.7%, S:61.3%, T:250℃, P:5.0MPa) [28]
⓱ Cu/ZnO/Al2O3/ZrO2(atomic ratio=2:1:1:0) (C: 8.5%, S:61.1%, T:220℃, P:3.0MPa) [54]
⓲ Zr-Cu/ZnO(Cu:Zn:Zr=33:32:14 wt%) (C: 26.4%, S:60.5%, T:250℃, P:5.0MPa) [55]
⓳ La0.8Cu0.2Zn0.2O3 (C:6.4%, S:57.9%, T:250℃, P:5.0MPa) [56]
⓴ Cu2Zn2.4Al1.2Zr0.4 (C: 27.7%, S:56.2%, T:270℃, P:5.0MPa) [28]
㉑ Pd/plate Ga2O3 (C: 17.3%, S:51.6%, T:250℃, P:5.0MPa) [57]
㉒ Pd/Ga2O3 (C: 19.6%, S:51.5%, T:250℃, P:5.0MPa) [58]
㉓ CuO/ZnO/ZrO2(57:28:19 wt%) (C: 18%, S:51.2%, T:240℃, P:3.0MPa) [48]
㉔ CuO/ZnO(Cu:Zn=30:70 at.%) (C: 5.9%, S:47.5%, T:220℃, P:2.0MPa) [59]
㉕ Cu2Zn2.4Al1.2Zr0.4 (C: 20.2%, S:44.9%, T:250℃, P:3.0MPa) [28]
㉖ Cu/ZnO/Al2O3(Na content 0.18wt%) (C: 13.5%, S:44.2%, T:250℃, P:3.0MPa) [60]
㉗ CHTs-1(Cu2+:Zn2+:Al3+:Zr4+=2:1:1:0 at.%)(C: 25.8%, S:40.9%, T:270℃, P:5.0MPa) [61]
㉘ Cu-ZnO-ZrO2-MgO/Al2O3 (C:12.1%, S:36%, T:210℃, P:2.0MPa) [62]
㉙ Cu-ZnO-ZrO2(Cu:Zn:Zr=40:30:30 mol%) (C: 13.2%, S:32.3%, T:240℃, P:2.0MPa) [63]
㉚ Cu/ZnO-γ-AlOOH(Cu:Zn:Al=63.29:8 at.%) (C: 21.4%, S:31.8%, T:250℃, P:3.0MPa) [64]
㉛ Cu-Zn-Ga/SiO2(Cu:ZnO:Ga2O3=5:3:2) (C: 2.0%, S:29.6%, T:270℃, P:2.0MPa) [53]
㉜ Cu2Zn2.4Al1.2Zr0.4 (C: 32.8%, S:26.7%, T:310℃, P:5.0MPa) [28]
㉝ Cu/ZnO/ZrO2 (Cu:Zn:Zr:Na=34:32:7:1 wt%) (C: 22.8%, S:21.3%, T:270℃, P:3.0MPa) [65]
㉞ Cu-ZrO2-ZnO(1:1:2 wt%) (C: 10.2%, S:20.9%, T:260℃, P:0.9MPa) [51]
㉟ Cu-ZrO2/Al2O3 (C: 8.9%, S:13.8%, T:250℃, P:2.0MPa) [52]
㊱ 12Cu5Zr/γ-Al2O3 (C: 15.9%, S:12.1%, T:260℃, P:3.0MPa) [26]
㊲ Cu-ZnO-ZrO2(Cu:Zn:Zr=34:26:40 mol%) (C: 21.6%, S:10.9%, T:280℃, P:2.0MPa) [63]
㊳ CuO-ZnO-Al2O3(5/4/1) (C: 21.4%, S:7.7%, T:300℃, P:2.6MPa) [49]

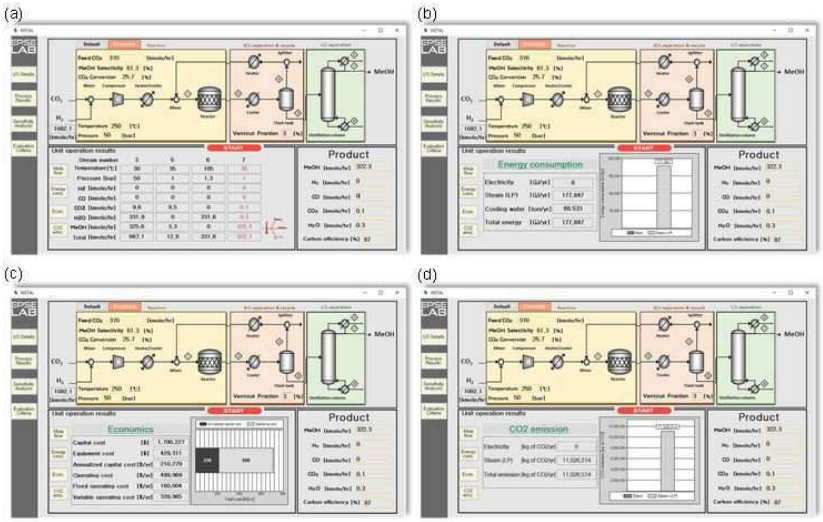
도면11


(a)
(b)
(c)
(d)
Product
Economics
Energy consumption
CO2 emission

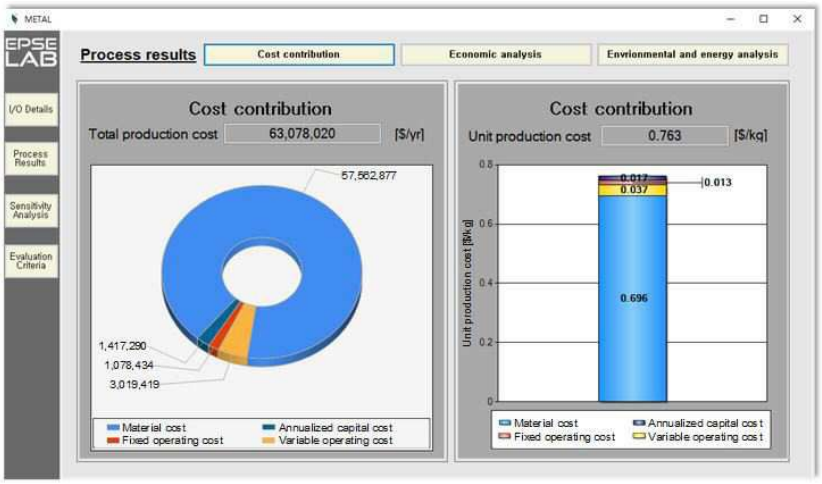
도면12



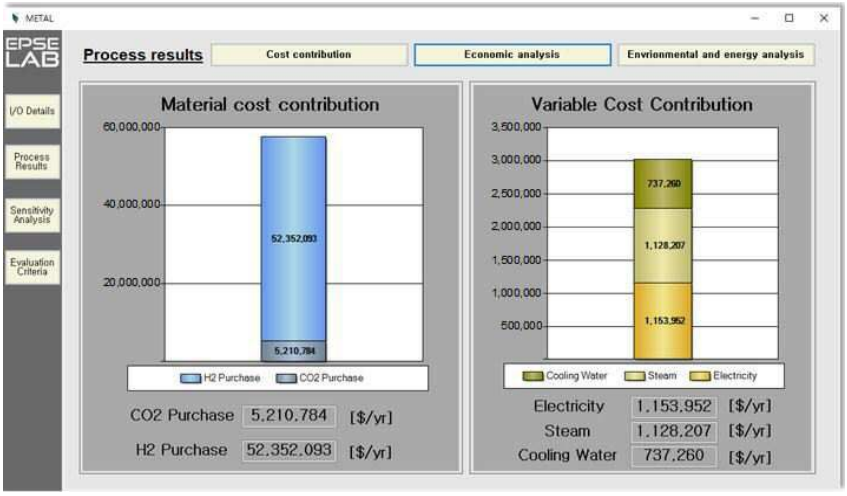
도면13



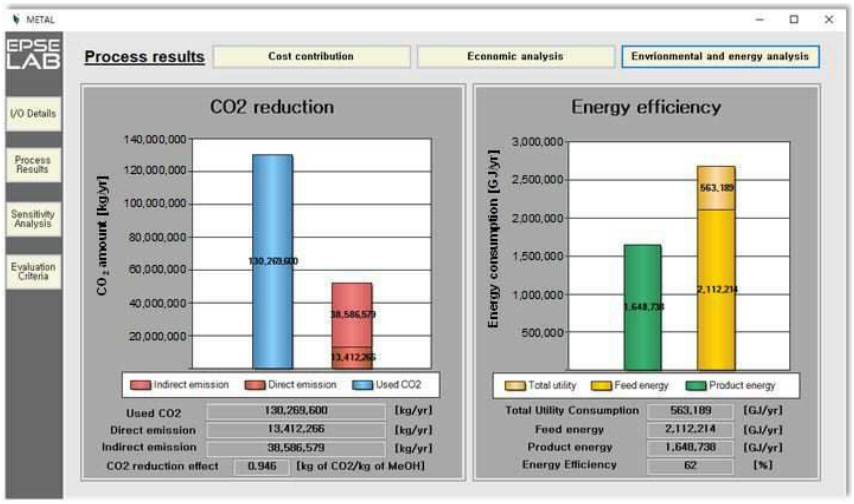
도면14



도면15



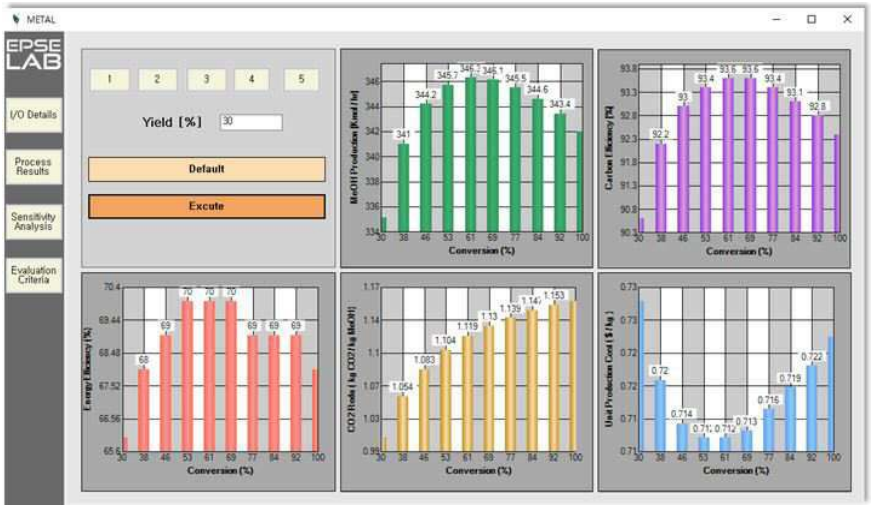
도면16



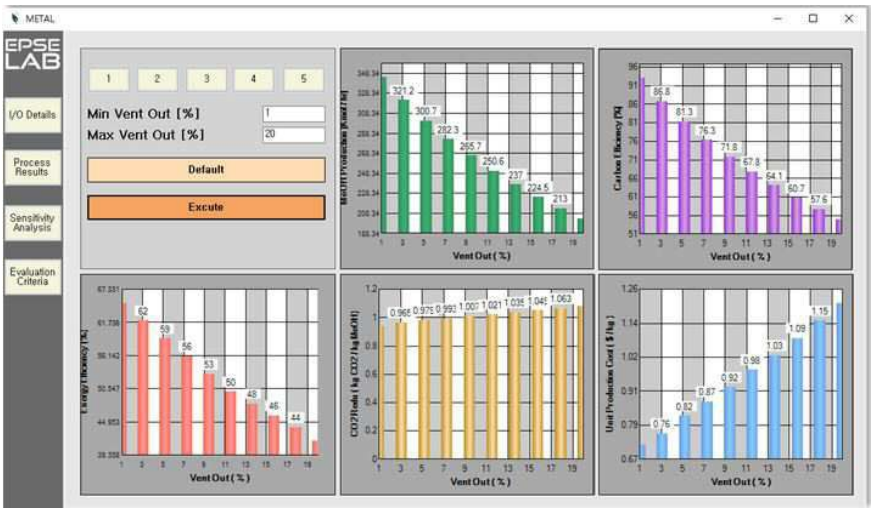
도면17



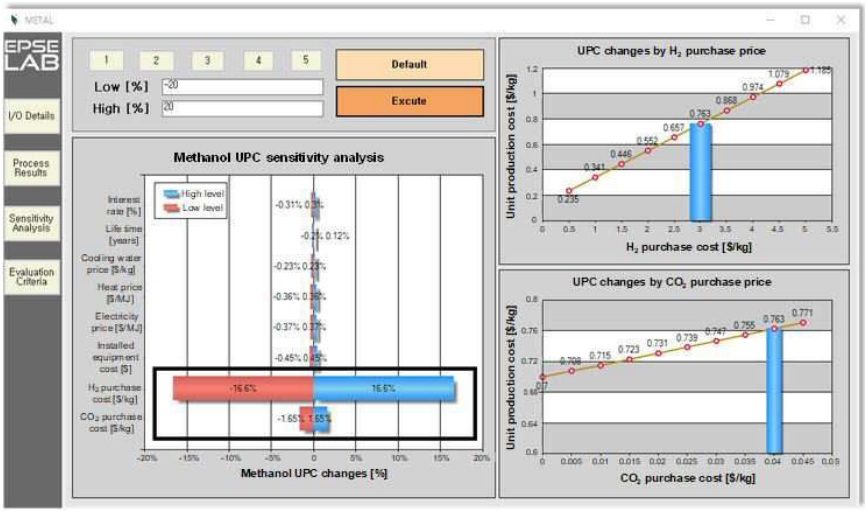
도면18



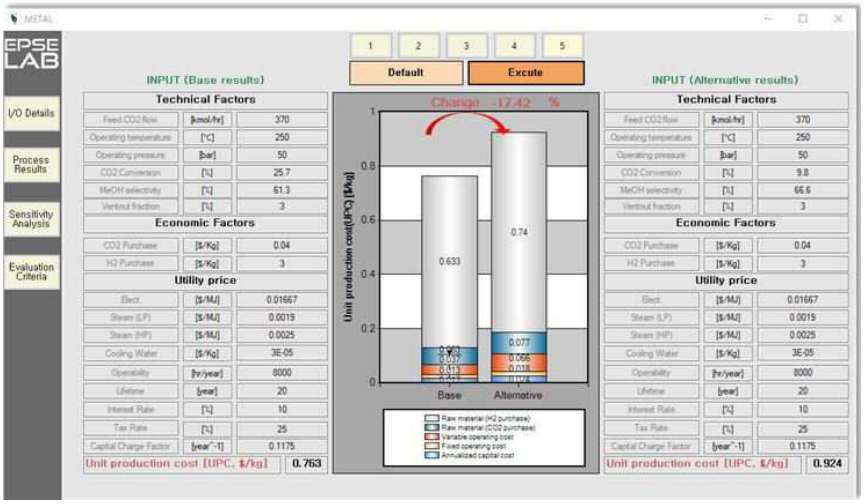
도면19



도면20



도면21


METAL
EPSE LAB
I/O Details
Process Results
Sensitivity Analysis
Evaluation Criteria
1
2
3
4
5
Default
Excute
INPUT (Base results)
Technical Factors
Feed CO2 flow [kmol/hr] 370
Operating temperature [°C] 250
Operating pressure [bar] 50
CO2 Conversion [%] 25.7
MeOH selectivity [%] 61.3
Venting fraction [%] 3
Economic Factors
CO2 Purchase [$/Kg] 0.04
H2 Purchase [$/Kg] 3
Utility price
Elect [$/MJ] 0.01667
Steam (LP) [$/MJ] 0.0019
Steam (HP) [$/MJ] 0.0025
Cooling Water [$/Kg] 3E-05
Operability [hr/year] 8000
Lifetime [year] 20
Interest Rate [%] 10
Tax Rate [%] 25
Capital Charge Factor [year^-1] 0.1175
Unit production cost [UPC, $/kg] 0.763
Change -17.42 %
Unit production cost(UPC)[$/kg]
0.633
0.74
0.077
0.056
Base
Alternative
Raw material (H2 purchase)
Raw material (CO2 purchase)
Variable operating cost
Fixed operating cost
Annualized capital cost
INPUT (Alternative results)
Technical Factors
Feed CO2 flow [kmol/hr] 370
Operating temperature [°C] 250
Operating pressure [bar] 50
CO2 Conversion [%] 9.8
MeOH selectivity [%] 66.6
Venting fraction [%] 3
Economic Factors
CO2 Purchase [$/Kg] 0.04
H2 Purchase [$/Kg] 3
Utility price
Elect [$/MJ] 0.01667
Steam (LP) [$/MJ] 0.0019
Steam (HP) [$/MJ] 0.0025
Cooling Water [$/Kg] 3E-05
Operability [hr/year] 8000
Lifetime [year] 20
Interest Rate [%] 10
Tax Rate [%] 25
Capital Charge Factor [year^-1] 0.1175
Unit production cost [UPC, $/kg] 0.924