

CO₂ 흡수탑 내 최적 펌프어라운드 설치와 핀치 분석 기반 열통합을 이용한 전기화 블루수소 공정의 에너지 최적화

서다빈 · 박예준 · 주영환[†]

한국에너지기술연구원 에너지AI·계산과학실
34129 대전광역시 유성구 가정로 152
(2024년 11월 18일 접수, 2025년 2월 10일 수정본 접수, 2025년 2월 13일 채택)

Energy Optimization of the Electrified Blue Hydrogen Process Using the Optimal Installation of Pumparound Flow in CO₂ Absorber and Heat Integration Based on Pinch Analysis

Dabin Seo, Yejun Park and Young-Hwan Chu[†]

Energy AI & Computational Science Laboratory, Korea Institute of Energy Research, Gajeong-ro 152, Yuseong-gu, Daejeon, 34129, Korea
(Received 18 November 2024; Received in revised from 10 February 2025; Accepted 13 February 2025)

요약

온실가스를 배출하지 않고 수소를 생산할 수 있는 기술로서 최근 블루수소 제조기술이 주목받고 있으며, 천연가스의 스팀개질반응과 수성가스전환반응을 이용하여 수소를 생산하되, 이 과정에서 생산되는 CO₂는 별도의 포집공정을 통해 제거하는 것을 특징으로 한다. 하지만 스팀개질반응의 온도가 높고 흡열반응이므로 다량의 에너지를 공급해 주어야 하며, CO₂ 포집 공정도 흡수제 재생에 많은 양의 에너지가 소모된다. 이에 본 연구에서는 전기에너지를 이용해 스팀개질반응에 필요한 열에너지를 공급한다는 가정 하에 흡수탑 내 펌프어라운드 흐름을 최적으로 배치하고 수소 생산부와 CO₂ 포집부 간 최적의 열교환망을 구축하여 흡수제 재생에 필요한 에너지를 포함해 블루수소 제조공정 전체 에너지 소모량을 단계적으로 감소시키고자 하였다. 공정 시뮬레이션을 이용한 연구 결과, 흡수탑 내 펌프어라운드 유입단수를 8단으로 지정할 경우, 블루수소 제조공정 전체의 가열유틸리티와 냉각유틸리티 소모량이 각각 9%, 10% 감소하였으며, 핀치 분석 기반 최적 열통합을 적용한 경우 추가로 각각 29%, 42% 더 감소하는 결과를 보였다. 흡수제 재생탑의 재비기 에너지 소모량만 봤을 때는 총 51% 감소하는 효과를 보여 더 경제적인 방법으로 CO₂ 포집과 수소 생산이 가능할 것으로 예상된다.

Abstract – Blue hydrogen manufacturing technology has recently attracted attention as a technology that can produce hydrogen without emitting greenhouse gases. The characteristics of this technology are that it produces hydrogen by using the steam methane reforming and water-gas shift reactions of natural gas, and that the CO₂ produced in the process is removed by a separate capture process. However, since the temperature of the steam methane reforming reaction is high and the reaction is endothermic, a large amount of energy should be supplied, and the CO₂ capture process also consumes a large amount of energy to regenerate the absorbent. In this study, under the assumption of electrified reformer, we aimed to significantly reduce the overall energy consumption of the blue hydrogen manufacturing process, including the energy required to regenerate the absorbent, by optimizing the location of a pumparound flow in the absorber and constructing the optimal heat exchange network. The results showed that the total heating and cooling utility consumption of this process was reduced by 9% and 10%, respectively, when the return stage of the pumparound flow in the absorber was set to eight, and further reduced by 29% and 42%, respectively, by performing heat integration. By implementing the two proposed methods, the energy consumption in the reboiler of the absorbent regenerator was also reduced by 51%, leading to the possibility of an economically feasible blue hydrogen process.

Key words: Pumparound, Pinch analysis, Heat integration, Blue hydrogen, Energy optimization

[†]To whom correspondence should be addressed.

E-mail: yhchu@kier.re.kr

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

1. 서 론

최근 수소 경제 시대가 도래함에 따라 다양한 방식으로 수소를 생산하는 기술이 연구되고 있다. 온실가스 배출 없이 순수하게 재생에너지만으로 수소를 생산할 수 있는 그린수소 기술은 아직 경제성이 낮아 그 대안으로서 블루수소 기술이 관심을 받고 있다[1,2]. 블루수소 기술은 천연가스를 개질하여 생산하는 기존의 수소 생산 방식과 유사하나 반응 과정에서 생성되는 CO₂를 별도의 포집 공정을 이용하여 제거해 줌으로써 온실효과를 방지할 수 있다는 장점이 있다. 그러나 CO₂ 포집 공정이 추가됨으로 인해 투자비 및 운전비 증가가 불가피하여, 경제성이 낮아지는 문제가 있다. 따라서 투자비 증가는 어쩔 수 없는 부분이라고 하더라도 CO₂ 포집 공정의 에너지 절감을 포함해 블루수소 공정 전반의 운전비를 최대한 절감할 필요가 있다.

수소 생산 공정에서 개질 반응은 다량의 에너지가 필요하며, 지금까지 대부분 별도의 연소기를 이용하여 배출되는 고온의 배기가스를 이용해 흡열 특성을 보이는 개질 반응에 필요한 에너지를 공급해 왔다. 하지만 배기가스 또한 CO₂ 함유량이 많아 열전달 이후 대기로 방출 시 온실효과를 유발하는 원인이 되었다. 하지만 최근 신재생에너지에 의해 생산된 전기에너지만으로 열에너지를 공급하는 방법이 연구되고 있어, 본 연구에서는 신재생 전기를 개질 반응에 필요한 열에너지 공급원으로 사용한다고 가정하였다[3]. 따라서 본 연구에서는 블루수소 공정 내 개질반응 과정에서 발생하는 CO₂만을 배출원으로 고려하였고, 이를 별도의 포집 공정을 통해 제거하는데 주안점을 두었다.

현재까지 개발되고 있는 CO₂ 포집 공정은 종류가 매우 다양하나 액상 흡수제를 사용하는 습식 포집 공정과 고상 흡착제를 사용하는 건식 포집 공정이 다수를 이루고 있다[1]. 본 연구에서는 CO₂ 포집 공정으로서 MDEA(MethylDiEthanolAmine)를 흡수제로 사용하는 습식 포집 공정을 채택하였다. 습식 포집 공정은 재생탑에서 흡수제를 CO₂로부터 다시 분리하기 위해 많은 에너지가 필요하므로 이를 절감하는 것이 매우 중요하다[4]. 개질 반응기에서는 고온 다량의 열에너지를 보유하고 있는 합성가스과 잔여 스팀을 배출하므로, 이들을 재생탑 재비기 및 스팀개질반응의 원료를 예열하는데 사용하면 유틸리티 소모량을 충분히 절감할 수 있을 것으로 예상하였다. 따라서 본 연구에서는 핀치 분석을 통한 에너지 절감량 확인 및 최적 열교환망 구성을 통한 유틸리티 사용량 최소화를 도모하였다.

한편, CO₂ 흡수 과정에서 다량의 흡수열이 발생하므로 이를 적절히 제거해 줌으로써 흡수 효율을 높일 필요가 있다[5]. 본 연구에서는 흡수탑 내에 펌프어라운드 흐름을 설치하여 흡수 효율을 증대시켜 주고 대신 흡수제 사용량을 감소시켜 목표 흡수율을 달성할 수 있도록 하였다. 이러한 과정을 통해 흡수제 재생탑에서 필요한 에너지를 상당 부분 절감할 수 있을 것으로 예상하였다. 결과적으로 CO₂ 흡수탑 내 펌프어라운드 흐름 설치와 블루수소 공정 전반의 열통합을 통해 유틸리티 소모량을 최소화하는 것이 본 연구의 목표라고 할 수 있으며, 본 연구에서는 흡수탑 내 펌프어라운드 흐름의 최적 설치를 통해 먼저 재생탑 필요 에너지를 최소화한 이후 전체 블루수소 공정의 열통합을 통해 외부 유틸리티 사용량을 최소화하도록 하였다.

Pinto와 Limpach 등은 블루수소 공정에 사용되는 에너지를 절감하기 위해 연소기에서 배출되는 고온의 배기가스를 중심으로 열교

환망을 설계하는 연구를 하였다[6,7]. Pedrozo 등은 펌프어라운드 흐름을 통해 흡수탑 내 온도를 낮추어 CO₂ 포집률 향상 및 연간 비용 절감에 관한 연구를 하였다[8]. Karimi 등은 흡수열로 인한 포집 성능 저하를 막기 위해 펌프어라운드 배출 단수의 최적화를 수행하였으며, 최적 배출 단수가 정해지면 바로 아랫단으로 유입시켜 포집률 향상 및 재생에너지 절감을 도모하였다[4]. 이와 같이 펌프어라운드 흐름의 설치를 통해 흡수탑 내부 온도를 낮추어 재생에너지를 절감하는 연구가 수행된 바는 있으나, 펌프어라운드 흐름의 유입 단수를 최적화시키고 흡수제 사용량을 줄여 재생탑 에너지 소모량을 저감시키고자 하는 연구사례는 많지 않다. 특히 본 연구는 블루수소 공정을 전기화하여 스팀개질반응에 필요한 에너지를 연소기 배기가스 대신 신재생 전기로 공급하고, 수소 제조부와 CO₂ 포집부 간 최적 열교환망 설치를 통해 공정 전체 유틸리티 사용량을 최소화시킨다는 점에서 기존 연구들과 차별점이 있다고 할 수 있다.

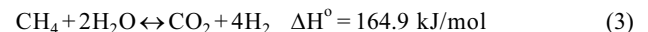
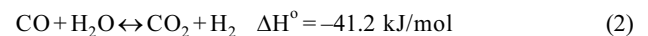
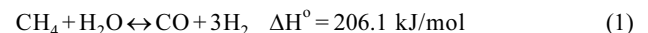
본 논문의 구성은 다음과 같다. 이론적 배경에서는 스팀개질반응을 기반으로 한 수소 생산 공정과 MDEA 흡수제를 이용한 CO₂ 포집 공정에 대해 설명하였다. 결과 및 토의에서는 공정 모델링 결과와 펌프어라운드 흐름의 최적화 과정 및 핀치 분석을 통한 열통합 과정을 설명하였고, 각각의 결과를 정리하였다. 결론에서는 연구 결과의 정리 및 한계점, 향후 계획 등을 기술하였다.

2. 이론적 배경

2-1. 블루수소 공정

2-1-1. 스팀개질반응(Steam Methane Reforming) 기반 수소 제조 공정

스팀개질반응은 천연가스와 수증기를 800 °C 이상의 조건에서 반응시켜 합성가스를 생산하는 반응으로서 아래 식 (1)과 같이 외부에서 다량의 열을 공급해 주어야 하는 흡열반응이다. 본 연구에서는 합성가스로부터 수소만을 분리하여 생산하고자 하며, 수소 생산량을 증대시키기 위해 아래 식 (2)와 같이 수성가스전환반응(Water-Gas Shift Reaction)을 추가하였다. 수성가스전환반응은 발열반응이며, 흡열 특성을 가지고 있는 스팀개질 반응과 일부 동시에 진행될 수 있어 이 경우 아래 식 (3)과 같이 정의될 수 있다[6].



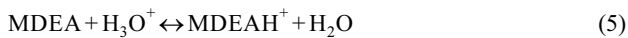
수성가스전환반응까지 완료되면 최종적으로 수소와 CO₂가 발생하며, 이 중 CO₂만을 선별적으로 포집, 분리하여 고순도의 수소를 생산한다. 본 연구에서는 CO₂ 포집 공정으로서 MDEA를 흡수제로 사용하는 습식 공정을 고려하였으며, 최종 제품으로서 수소는 CO₂ 흡수탑 상부에서 생산되는 것으로 전체 공정을 구성하였다.

2-1-2. MDEA 흡수제를 이용한 습식 CO₂ 포집 공정

본 연구에서는 스팀개질반응과 수성가스전환반응을 통해 생산된 수소와 CO₂의 혼합물로부터 CO₂만을 효과적으로 분리하기 위해 MDEA 흡수제를 사용한 습식 포집 공정을 고려하였다. 본 습식 포집 공정은 다른 포집 공정과 유사하게 흡수탑과 재생탑으로 구성되어 있으며, 건식 포집 공정 대비 포집 효과가 높고 비용이 적게 드는 장점이 있다[1]. 특히 MDEA는 3차 아민으로 분류되며, CO₂와의

반응속도는 1차 아민인 MEA보다 느리지만, CO₂와의 결합이 MEA보다 약해서 탈착 과정에서 필요한 에너지가 상대적으로 적게 든다는 장점이 있다[9].

MDEA와 CO₂의 흡수 반응식은 아래 식 (4)~(8)과 같다. 먼저 식 (4)과 같이 CO₂가 물에 녹아 하이드로늄 이온과 탄산수소염으로 변하면, 하이드로늄 이온과 MDEA가 반응하여 식 (5)에서와 같이 MDEA가 그 짝산(Conjugate Acid)으로 변화하고 다시 물이 생성된다. 흡수 과정을 식 (6)과 같이 표현할 수 있으며, 결국 MDEA를 이용한 CO₂의 흡수는 MDEA 수용액이 하이드로늄 이온으로부터 수소 이온을 넘겨받고, CO₂는 탄산수소염으로 전환되는 과정이라고 볼 수 있다. MDEA의 재생 과정은 식 (6)의 역반응으로 정의될 수 있다. 수용액 내에서 발생할 수 있는 부반응은 식 (7)~(8)와 같다[10].



MDEA 흡수제를 이용한 습식 CO₂ 포집 공정은 다음과 같은 절차로 진행된다. 흡수탑 상부로 30~50 wt% MDEA 수용액이 투입되고, 하부로 CO₂가 포함된 가스가 투입된다[11]. 이 과정에서 MDEA는 CO₂를 선택적으로 흡수하여 제거한다. CO₂가 제거된 가스는 흡수탑 상부로 배출되고, CO₂가 흡수된 MDEA는 하부로 배출된다. CO₂가 흡수된 MDEA 수용액은 재생탑 하부에서 나온 고온의 MDEA 수용액과의 열교환을 통해 예열된 후 재생탑으로 투입된다. 재생탑에서는 열적 재생에 의해서 분리된 CO₂가 물 일부와 함께 재생탑 상단으로 배출되고, 재생된 MDEA는 다량의 물에 용해된 상태에서 재생탑 하단으로 배출된다. 상단으로 올라간 물은 응축되어, 재생탑 하부에서 배출되는 MDEA 수용액과 합류된 후 흡수탑 상부로 환류된다. 이상과 같은 MDEA 흡수제를 이용한 습식 CO₂ 포집 공정을 Fig. 1에 나타내었다.

2-1-3. 펌프어라운드 흐름을 이용한 흡수제 재생에너지 최소화

흡수탑 내에서 MDEA가 CO₂를 흡수하게 되면 흡수열을 방출하므로 흡수탑 내부의 온도가 하부로 갈수록 상승하게 된다. 흡수탑 내부의 온도가 상승하면 CO₂의 흡수율도 감소하게 되므로, 이러한 경우 펌프어라운드 흐름(Pumparound Stream)을 흡수탑 중간에 설치하여 냉각 후 다시 흡수탑으로 유입시키면 흡수탑 내부 온도를 낮춰 흡수율을 다시 높일 수 있다[8].

펌프어라운드 흐름을 설치할 때 고려할 요소에는 냉각 온도, 유량, 배출 및 유입단수가 있다. 일반적으로 흡수탑에서 아래로 내려갈수록 흡수가 진행되므로 최하단의 온도가 가장 높다. 따라서 흡수열이 가장 많이 발생하는 최하단을 배출 단수로 사용하는 것이 효과적이다[12,13]. 유입 단수와 배출 단수의 차이가 작을 때는 펌프어라운드로 인한 흡수율 개선이 미미하며, 차이가 클 때는 배출 단수의 MDEA 내 CO₂ 포집 농도가 높아 유입 단수에서 펌프어라운드 흐름과 합쳐졌을 때 MDEA 포집용량이 감소되어 오히려 흡수율이 감소할 수 있다. 따라서 CO₂의 흡수율을 높이기 위해서는 최적의 유입 단수를 설정하는 것이 중요하다. 뿐만 아니라 펌프어라운드 흐름을 설치한 이후에 흡수탑 내 단별 온도가 급격히 변화하지 않아야 흡수탑 운영을 안정적으로 수행할 수 있으므로 이러한 부분도 최적 유입 단수 결정에 고려되어야 한다.

본 연구에서는 흡수 효율을 최대화할 수 있는 유입 단수를 결정한 후 목표 흡수 효율을 설정하고 이에 도달할 수 있는 MDEA의 최소 사용량을 결정하였다. 이를 통해 MDEA의 재생 과정에서 요구되는 에너지를 최소화하고자 하였다.

2-2. 핀치 분석 기반 최적 열교환망 구성

2-2-1. 합성커브를 이용한 최소 유틸리티 요구량 예측

핀치 분석은 공정 내에서 필요로 하는 최소 유틸리티 요구량을 확인하고 열교환망을 최적화시키는 기법으로서, 합성커브(Composite Curve) 작도와 격자 다이어그램(Grid Diagram)을 이용한 최적 열교환망 구성 등으로 이루어진다. 우선 합성커브 작도를 통해서 최소 유틸리티 요구량을 확인할 수 있는데, 가장 먼저 공정 내에서 열교환할 수 있는 온류(Hot Stream)들과 냉류(Cold Stream)들을 지정한 후 이들의 유입 온도 및 유출 온도, 엔탈피, M*C_p(질량유량과 등압

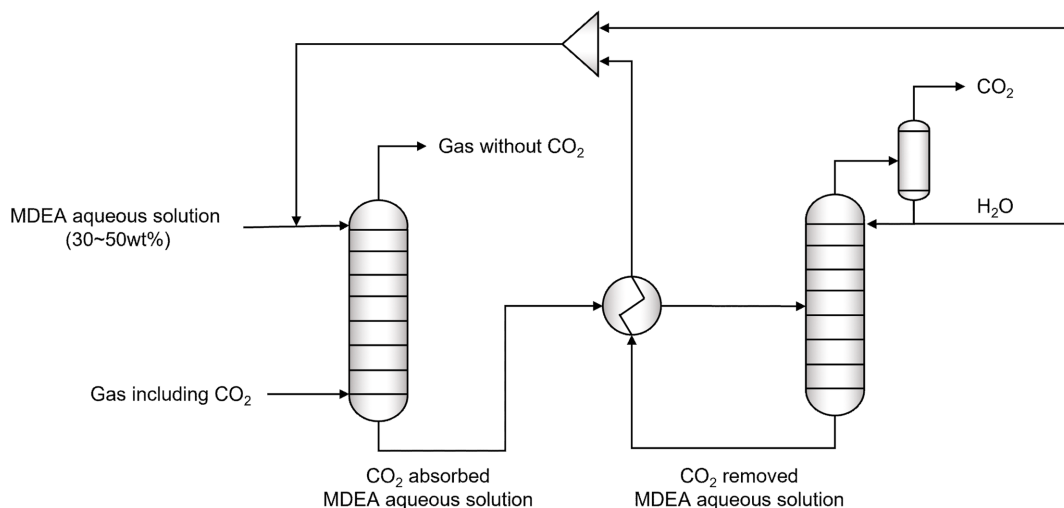


Fig. 1. Schematic of the CO₂ capture process using MDEA aqueous solution as absorbent.

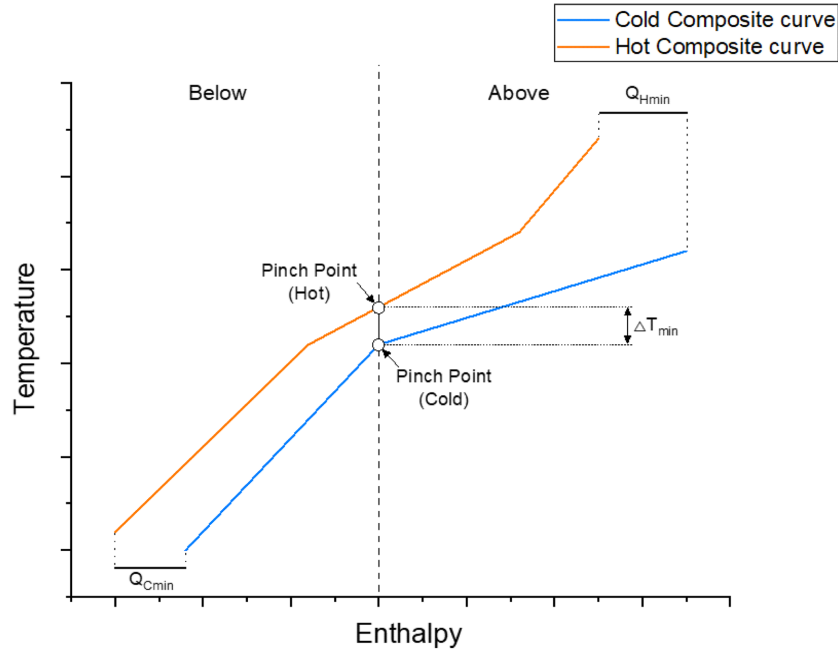


Fig. 2. Example of the composite curve and pinch point determined by minimum temperature approach.

열용량의 곱) 값들을 정리한다. 그리고 이를 이용하여 온류 및 냉류 각각에 대해 온도 구간별로 병합한 합성커브를 온도-엔탈피 다이어그램에 표현하면 Fig. 2[14]와 같이 나타낼 수 있다. 온류 합성커브는 공정 내에서 공급할 수 있는 에너지의 양을 온도 구간별로 나타낸 것이며, 냉류 합성커브는 공정 내에서 공급받아야 할 에너지의 양을 온도 구간별로 나타낸 것이다. 두 합성커브가 최우로 가장 근접할 수 있는 위치는 사용자가 미리 지정하는 최소 접근 온도, ΔT_{min} 에 의해서 결정되며, 가장 근접한 위치를 핀치 포인트(Pinch Point)라고 한다.

최소 접근 온도에 따라 핀치 포인트가 결정되고 두 합성커브의 위치가 고정되면 두 합성커브가 위아래로 겹치는 구간이 결정되는데, 이 구간의 크기가 열교환을 통해 절감할 수 있는 에너지의 양이 된다. 반면 두 합성커브가 겹치지 않는 양 끝 구간은 열교환을 할 수 없는 영역이며, 이 부분은 유틸리티를 사용해 필요한 에너지를 공급해야 한다. 이렇게 결정된 최소 가열 유틸리티(Minimum Hot Utility, Q_{Hmin})와 최소 냉각 유틸리티(Minimum Cold Utility, Q_{Cmin})가

공정에서 최소한으로 요구하는 외부 에너지가 되며, 열교환망 구성을 통해 궁극적으로 달성해야 하는 유틸리티 사용량의 목표치가 된다.

2-2-2. 격자 다이어그램을 이용한 최적 열교환망 배치

격자 다이어그램은 공정 내 온류와 냉류, 그리고 가열 유틸리티와 냉각 유틸리티의 흐름을 가로선으로 표현하고, 이들을 서로 연결하는 열교환기와 가열기, 냉각기를 세로선으로 표현한 그림으로서, 이를 이용해 핀치 포인트를 기준으로 윗부분과 아랫부분으로 나누어 최적의 열교환망을 구축하는데 사용할 수 있다. Fig. 3는 격자 다이어그램의 대표적인 예로서[14], 이 그림을 통해 3기의 열교환기와 1기의 가열기, 1기의 냉각기가 각각 어떠한 흐름들과 연결되어 있는지 한 눈에 볼 수 있다. 또한 핀치 포인트를 기준으로 그 좌측과 우측으로 별도 구분하여 열교환망을 구축함으로써 불필요한 유틸리티 사용을 배제할 수 있다[15,16].

격자 다이어그램을 이용해 열교환망을 최적으로 배치하기 위해

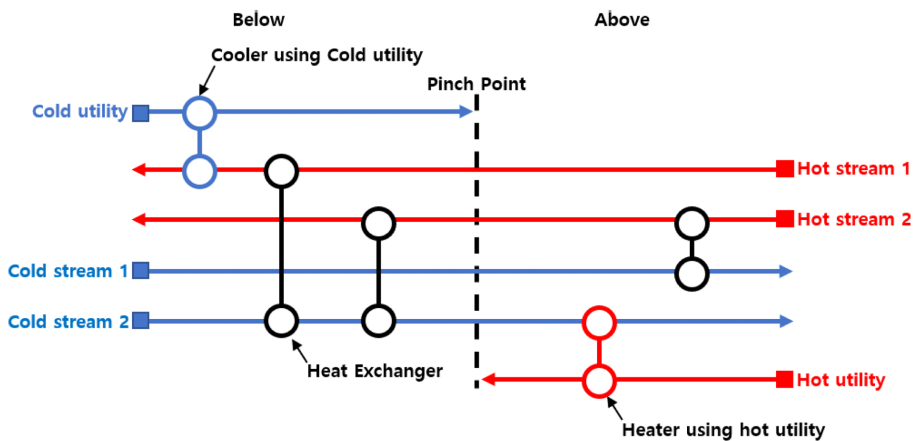


Fig. 3. Example of the grid diagram of a heat exchanger network.

서는 온류와 냉류의 $M \cdot C_p \Delta T$ 값을 비교해 보고 가급적 열교환을 통해 온류 또는 냉류 중 어느 한쪽이 필요한 모든 열을 공급받을 수 있도록 열교환기를 설치해야 한다. 이를 통해 열교환기 개수를 줄일 수 있으며, 가급적 외부 유틸리티 사용을 최소화함으로써 최소 유틸리티 요구량 목표를 만족시키는 방향으로 열교환망을 구축해야 한다 [16]. 다만, 이렇게 설치한 열교환기들 중에서 열교환량이 매우 작을 경우에는 투자비로 인한 비용 상승이 더 클 수 있으므로 삭제 후 유틸리티 사용을 일부 증가시키는 것이 더 나을 수도 있다. 이렇게 구축된 열교환망을 대상으로 가열 유틸리티와 냉각 유틸리티 사용량을 계산하여 그 값들이 최소 유틸리티 요구량에 근접하면 상당 부분 최적화된 결과로 볼 수 있다. 본 연구에서는 최적화의 목적함수로 열교환기의 개수나 투자비 측면보다 유틸리티 사용량을 최소화하는데 더 중점을 두었다.

3. 결과 및 토의

3-1. 블루수소 공정 모델의 구성

블루수소 공정 모델은 AspenTech®사의 Aspen HYSYS® V11을 사용하여 Fig. 4와 같이 구성하였다. 본 공정 모델에 대한 열 및 물질 수치 데이터(Stream table)는 Appendix 1에 별도 기재하였다. 스팀개질반응 및 수성가스전환반응을 이용한 수소 생산부는 열역학 모델로서 액화천연가스(LNG) 등 탄화수소 사용에 적합한 Peng-Robinson 상태방정식을 사용하였으며, MDEA를 이용한 CO₂ 포집부는 Aspen HYSYS®에서 별도로 제작한 “Acid Gas – Chemical Solvents” 물질 모델(Fluid Package)을 사용하였다. 원료로 투입되는 액화천연가스는 40 °C, 8 bar로 공급되며, 가스압축기(C-101) 및 가열기(E-101)를 거치며 370 °C, 30 bar로 승압, 승온된 이후 흡착 분리기(S-101)에 투입되어 천연가스 내에 포함된 황화수소(H₂S)가

분리된다. 황화수소가 제거된 천연가스는 다시 예열기(E-102)를 통해 500 °C까지 승온된 후, 사전개질반응기(Pre-reformer, R-101)에 투입된다. 또한, 사전개질반응의 또 다른 원료로 사용되는 스팀은 상온 및 상압의 물을 펌프(P-101) 및 가열기(E-103)를 이용해 500 °C, 30 bar의 과열 스팀으로 변환시켜 사용한다. 사전개질반응기에서는 천연가스의 주성분인 메탄을 제외한 C₂~C₅ 범위의 탄화수소(에탄, 프로판, 부탄, 펜탄)가 메탄 및 합성가스로 전환되며, 투입되는 스팀의 양은 이들 C₂~C₅ 범위 탄화수소 몰 유량 합 of 3배 수준이다.

사전개질반응기에서 배출된 메탄 및 합성가스는 밸브(V-101) 및 예열기(E-104)를 통해 승온, 강압되어 800 °C, 20 bar로 조정된 후, 펌프(P-102)와 가열기(E-107)를 통해 생성된 800 °C, 20 bar의 과열 스팀과 나란히 스팀개질반응기(R-102)에 투입된다. 스팀개질반응기에서는 식 (1)~(3)과 같은 반응식을 통해 합성가스 및 CO₂가 생산된다. 합성가스를 생산하는 사전개질반응 및 스팀개질반응은 강한 흡열반응이므로 반응 온도 유지를 위해 외부에서 열에너지 공급이 필요하며, 본 연구에서는 이러한 열에너지를 신재생 전기로 공급한다고 가정하였다. 또한, 스팀개질반응기에 투입되는 스팀의 양은 원료 탄화수소 몰 유량의 3배가 되도록 과잉 투입하여 합성가스로의 전환이 충분히 이루어질 수 있도록 하였다.

스팀개질반응기에서 배출되는 물과 합성가스는 냉각기(E-105)에서 320 °C까지 온도가 하강한 후, 수성가스전환반응기(Water-Gas Shift Reactor, R-103)에 투입되어 수소가 추가로 생산된다. 수성가스전환반응기에서 배출되는 잔여 물과 CO₂, 수소는 냉각기(E-106)를 거치면서 58 °C까지 냉각된 후, 기액분리기(S-102)에서 응축된 물과 가스들이 분리된다. 기액분리기 하부로 배출되는 물은 보충수와 합쳐져 다시 스팀개질반응기로 투입된다. 기액분리기 상부로 배출되는 가스는 수소 및 CO₂를 주 성분으로 포함하고 있으며 CO₂ 제거 및 수소 생산을 위해 CO₂ 포집부로 투입된다.

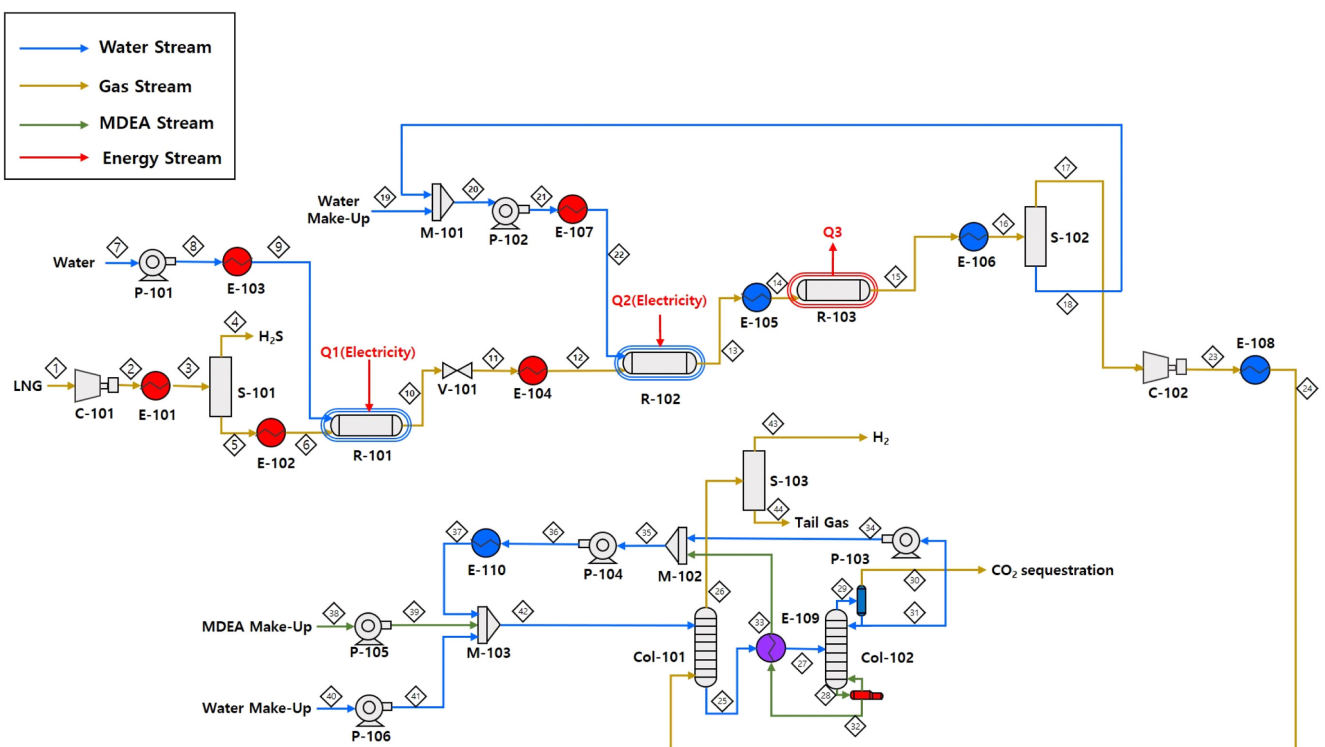


Fig. 4. Process flow diagram of the blue hydrogen process.

수소생산 공정을 통해 배출되는 가스는 가스압축기(C-102) 및 냉각기(E-108)를 통해 감온, 승압되어 28.3 °C, 40 bar로 조정된 후, CO₂ 흡수탑(Col-101) 하부로 투입된다. 흡수탑은 이론단수 30단을 적용하였으며, 상부와 하부의 압력차는 1 bar로 지정하였다. CO₂ 흡수제로 사용되는 MDEA 수용액은 흡수탑 상부로 투입되며, 하부로 투입되는 가스와 동일한 조건으로 펌프(P-104) 및 냉각기(E-110)에 의해 미리 맞춰진다. 흡수탑 상부에서 하강하는 MDEA 수용액은 하부에서 투입되는 가스와 향류(Countercurrent)로 접촉하면서 가스 내에 있는 CO₂가 MDEA 수용액에 흡수된다. CO₂가 상당량 제거된 가스는 흡수탑 상부로 배출되고, 다시 압력변환흡착기(Pressure Swing Adsorber, S-103)를 통해 잔여 불순물이 제거된 후 고순도 수소가 생산된다. 본 공정 모델에서 흡수탑의 흡수율은 85%로 확인되었으며, 압력변환흡착기는 정상 상태의 물질수지 정보를 반영해 편의상 Component Splitter를 사용해 모사하였다.

흡수탑 하부로 배출되는 CO₂ 포집 MDEA 용액은 열교환기(E-109)를 거쳐 80 °C까지 예열된 후, CO₂ 분리를 위해 재생탑(Col-102)에 투입된다. 재생탑은 이론단수 20단을 적용하였으며, 상부와 하부의 압력차는 1bar로 지정하였다. 재생탑에서는 재비기가 공급해주는 열에너지를 통해 CO₂가 MDEA로부터 분리되며 이를 통해 MDEA가 다시 재생된다. 본 연구에서는 재생탑의 분리 조건으로 CO₂ 회수율 99.95%, MDEA 회수율 100%를 지정하였으며, 환류비(Reflux Ratio)는 0.2로 지정하였다. 재생탑 상부로는 물과 CO₂가 배출되며, 응축기를 통해 상당량의 물이 응축된 후 펌프(P-103)를 통해 다시 흡수탑으로 환류되어 흡수제와 함께 재활용된다. 재생탑 하부로 배출되는 MDEA 수용액은 열교환기(E-109)를 통과하며 냉각된 후, 재생탑 상부에서 환류되는 물과 합쳐져 흡수탑으로 다시 투입된다. 물과 MDEA는 흡수탑으로 투입되기 전 펌프(P-105, P-106)를 통해 공정 내에서 손실된 양만큼 각각 보충된다.

이렇게 블루수소 공정을 구성할 경우, 가열 유틸리티 총 사용량은 247 MW, 냉각 유틸리티 총 사용량은 168 MW로 계산되었다. 이상과 같이 구성된 블루수소 공정 모델을 토대로 흡수탑 내 펌프어라운드 흐름 설치 및 핀치 분석 기반 최적 열교환망 구성을 통해 에너지 절감 효과를 분석하고자 하였다.

3-2. 펌프어라운드 흐름의 설치 효과 분석

펌프어라운드 흐름을 설치할 때 고려할 요소는 냉각 온도, 유량, 배출 및 유입 단수로 나눌 수 있다. 본 연구에서 펌프어라운드 흐름의 배출 단수는 흡수열로 인해 가장 온도가 높은 맨 아래 단수(30단)로 고정하였고, 냉각 온도(ΔT)는 11 °C, 유량은 10,000 kmol/h로 지정하였다. 냉각 온도와 유량이 너무 클 경우에는 흡수탑 전체의 열적 밸런스가 크게 흔들릴 수 있고, 너무 작을 경우에는 냉각 효과가 약해지므로 적절한 냉각 온도 및 유량의 지정이 필요하다. 본 연구에서는 펌프어라운드 흐름의 유입 단수를 최적화시키는데 집중하였으며, 너무 높은 단수로 유입되면 유입 단수 내 MDEA 농도가 낮아져 CO₂ 포집 용량이 실질적으로 감소하는 문제가 발생하며, 너무 낮은 단수로 유입되면 흡수탑 내 냉각 효과가 약해지는 문제가 있어 적절한 유입 단수 지정이 중요하다.

Fig. 5는 펌프어라운드 흐름 유입 단수에 따른 흡수율의 변화를 나타낸 그래프이다. 유입 단수가 상단일수록 냉각 효과가 커져 흡수율이 점차 증가하나 1~5단까지 더 올라가게 되면 포집용량 감소 효과가 강해져 오히려 흡수율이 감소하는 것을 볼 수 있다. 유입 단수가

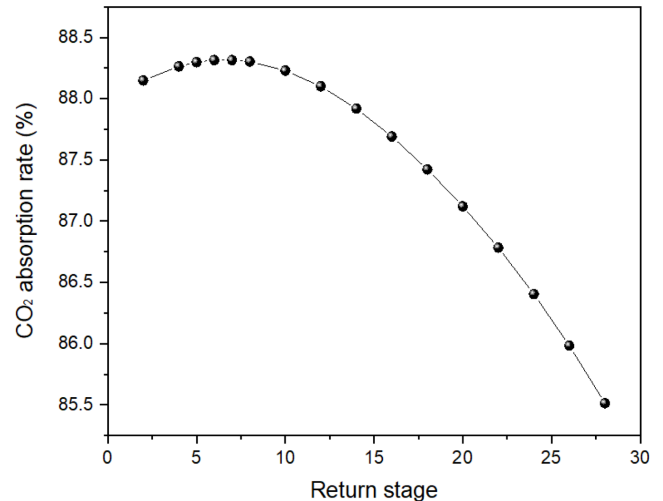


Fig. 5. Changes of CO₂ absorption rate depending on the return stage of the pumparound stream.

Table 1. Comparison of the stability in temperature profile of the CO₂ absorber depending on the return stage of the pumparound stream

Return Stage	ΔT from the above stage	Standard deviation of all ΔT
	(°C)	(°C)
5	0.686	0.277
6	0.590	0.273
7	0.502	0.271
8	0.413	0.269

5~8단 사이가 될 경우에 흡수율이 가장 높은 수준인 88.30~88.32%로 유지되는 모습을 볼 수 있고, 그 이하인 9단 이상으로 유입될 경우에는 냉각 효과 감소로 인해 흡수율이 급격히 감소하는 모습을 볼 수 있다. 따라서 펌프어라운드 흐름의 최적 유입 단수를 5~8단 사이에서 우선 찾고자 하였다.

펌프어라운드 흐름이 5~8단으로 유입되는 경우에는 사실 상 흡수율의 차이가 거의 없기 때문에 이들 중 유입 단수를 최종 결정하기 위한 기준으로 흡수탑 내 온도 프로파일의 안정성을 고려하였다. Table 1은 유입 단수별로 바로 윗단과의 온도 차이와 전체 단수를 대상으로 이웃 단수 간 온도 차이의 표준편차를 계산한 결과이다. 펌프어라운드 흐름의 유입 단수 위쪽은 냉각 효과의 영향을 받지 않기 때문에 펌프어라운드 흐름으로 인한 온도 프로파일의 안정성을 살펴보기 위해서 바로 윗단과의 온도 차를 살펴보는 것은 타당하다고 할 수 있다. 만약, 유입 단수와 그 윗단의 온도 차이가 크다면 흡수탑 내 온도가 펌프어라운드 흐름의 유입으로 갑자기 변한다는 의미이므로 온도 안정성에 문제가 발생할 수 있다. 유입단수를 5단에서 8단까지 각각 조정해 줄 경우, 유입 단수가 8단인 경우에 바로 윗단인 7단과 온도 차이가 0.413 °C로 가장 낮게 도출되었다. 또한 유입단수를 4가지로 다르게 해 주었을 때, 모든 단수를 대상으로 직전 단수와의 온도 차에 대한 표준편차를 구한 결과, 역시 8단 유입의 경우에 0.269로 가장 낮은 결과가 나왔다. 결론적으로 펌프어라운드 흐름이 8단으로 유입될 때 흡수탑 내 온도 편차가 가장 적은 것을 확인할 수 있었으며 온도 프로파일의 안정성이 가장 높다고 볼 수 있었다. 이에 펌프어라운드 흐름의 최적 유입 단수를 8단

으로 최종 결정하였다.

펌프어라운드 흐름이 8단으로 유입될 때 흡수율이 85%에서 88.3%로 증가했기 때문에 본 연구에서는 목표 흡수율을 펌프어라운드 설치 이전 흡수율인 85%로 정하고 MDEA의 사용량을 줄이고자 하였다. 펌프어라운드 흐름이 설치된 상태에서 흡수율 85% 달성 시 MDEA의 사용량은 3,972 kmol/hr로 계산되어 이전 MDEA 사용량 5,027 kmol/hr와 비교하면 21% 정도가 감소하는 결과를 보였다. MDEA 사용량 감소를 통해 궁극적으로 재생탑 재비기의 에너지 사용량을 절감할 수 있는데, 계산 결과 76 MW로 도출되어 기존 재생탑 재비기의 에너지 사용량 98 MW 대비 22% 감소한 결과를 보였다.

3-3. 핀치 분석 기반 열통합 효과 분석

흡수탑에 펌프어라운드 흐름을 설치하여 흡수율을 높게 유지하면서도 MDEA 사용량을 줄임으로써 재생탑 재비기의 에너지 소모량을 감소시켰으나, 수소 제조부에서 스팀개질반응기 배출물의 온도가 800 °C, 수성가스전환반응기 배출물의 온도가 320 °C로 높고 이들 흐름들은 모두 다음 설비로 투입되기 전에 냉각을 시켜야 하는 상황이므로 이들 흐름들의 에너지를 재생탑 재비기의 열원으로 활용할 수 있다. 따라서 수소 제조부와 CO₂ 포집부 간 최적 열교환망 설치를 통해 가열 유틸리티 사용을 추가로 절감하고자 하였다. 뿐만 아니라 수소 제조부 내에서도 천연가스 및 물 등의 원료를 스팀개질반응 온도도 예열하기 위해 많은 양의 열에너지가 필요하므로 이를 가열 유틸리티 대신 공정 내 고온의 스트림과의 열교환을 통해 공급받을 수 있다면 가열 유틸리티 사용량을 크게 절감할 수 있을 것이다.

우선 공정 내부에서 열에너지의 공급과 수요 간의 밸런스를 확인하기 위해 온류와 냉류를 지정하고 핀치 분석을 수행해 보았다. Table 2에 핀치 분석을 위해 사용될 온류와 냉류를 정의하고, 이들의 유입 온도, 유출 온도, 엔탈피, M*Cp값을 함께 정리하였다. 총 6개의 온류와 7개의 냉류로 정의되었으며, 온류에는 수성가스전환반응기(R-103)의 발열, 냉류에는 스팀개질반응기(R-102)의 흡열을 포함시켜 이들 반응기의 남은 열과 부족한 열을 공정 내 스트림과의 열교환을 통해 공급하거나 제공받을 수 있도록 하였다. 또한 온류와 냉류가 속한 공정이 수소 제조부인지 CO₂ 포집부인지에 따라서 이름에 Reform과 Cap을 부여하여 두 공정 간에 실질적인 열교환이 이루어지는지 쉽게 확인할 수 있도록 하였다.

핀치 분석 및 최적 열교환망 구성을 위해 Aspen[®]사의 Aspen Energy Analyzer[®] V11를 사용하였으며, 최소 접근 온도로 10 °C를 지정한 후 합성커브를 그려본 결과 Fig. 6과 같은 결과를 얻었다. 핀치 포인트의 위치는 온류부(Hot Side) 136.3 °C, 냉류부(Cold Side) 126.3 °C로 도출되었으며, 최소 유틸리티 요구량은 가열 유틸리티(Q_{Hmin})가 145 MW, 냉각 유틸리티(Q_{Cmin})가 68 MW로 계산되었다. 따라서 현재 공정의 유틸리티 사용량과 비교 시, 가열 유틸리티는 41%, 냉각 유틸리티는 59%까지 이론적으로 절감할 수 있는 것으로 예측되었다.

이러한 핀치 분석 결과를 바탕으로, 격자 다이어그램을 이용하여 핀치 룰(Pinch Rule)에 맞게 열교환망을 설계하였다. 가열 유틸리티와 냉각 유틸리티를 추가할 경우, 유틸리티 온도 범위에 따라 핀치 포인트가 추가될 수 있으며, 본 사례에서도 320.1 °C에서 유틸리티 핀치 포인트가 발생하여 두 개의 핀치 포인트를 기준으로 총 3개의 구역으로 나누어 열교환망을 합성하였다.

Fig. 7은 열교환망 합성 결과이며, 본 구조는 최소 유틸리티 요구량을 만족하는 것으로 확인되었다. 총 8기의 열교환기, 4기의 냉각기, 10기의 가열기가 추가되었으며, 최소 유틸리티 요구량을 만족시키는 결과를 얻을 수 있었으나, 일부 열교환기의 경우에는 열교환량이 너무 작아 비용 측면에서 투자비 대비 절감 효과가 미미한 것으로 나타났다. 따라서 열교환량이 1MW 이하인 열교환기 2기를 제거하고, 대신 기존 열교환기 1기 및 냉각기 2기와 가열기 1기의 유틸리티 사용량을 조정하여, Fig. 8과 같은 최종 열교환망 구조를 도출하였다.

본 열교환망은 가열 유틸리티가 154 MW, 냉각 유틸리티가 81 MW로 계산되어, 최소 유틸리티 요구량 대비 가열 유틸리티는 6%, 냉각 유틸리티는 19% 증가했으나, 여전히 열통합 효과가 큰 것으로 나타났다. 한편 재생탑 재비기 에너지 소모량만을 살펴봤을 때는 펌프어라운드 흐름을 흡수탑에 추가함으로써 기존의 98 MW에서 76 MW로 감소한 상태에서 열통합을 통해 다시 47 MW까지 감소 시킴으로써 29%의 추가 절감이 가능한 것으로 예측되었다.

최종 열교환망 구조를 반영한 전체 공정 모델은 Fig. 9와 같으며, 수소 제조부와 CO₂ 포집부 간에 상호 열교환이 이루어져 에너지 절감에 있어 두 공정이 상호 시너지 효과가 있는 것을 알 수 있다. 본 공정 모델에 대한 열 및 물질 수치(Stream table)는 Appendix 2에 별도 기재하였다.

Table 2. Definition of hot & cold streams for pinch analysis

		T ^{Inlet} (°C)	T ^{Outlet} (°C)	Enthalpy (kW)	M*Cp (MW/°C)	Note
Hot Stream	Reform-H1	800	320	35,634	0.074	Output from R-102
	Reform-H2	320	320	5,274	52.740	Reaction Heat of R-103
	Reform-H3	320	58	41,837	0.160	Output from R-103
	Cap-H1	147	28	5,458	0.046	Output from C-102
	Cap-H2	94	84	27,374	2.802	Input to Regen. Condenser
	Cap-H3	91	28	32,106	0.511	Output from P-104
Cold Stream	Reform-C1	168	370	3,765	0.019	Output from C-101
	Reform-C2	370	500	2,883	0.022	Output from S-101
	Reform-C3	25	500	5,236	0.011	Output from P-102
	Reform-C4	500	800	8,823	0.029	Output from R-101
	Reform-C5	48	800	73,441	0.098	Output from P-101
	Reform-C6	800	800	54,238	542.380	Reaction Heat of R-102
	Cap-C1	126	133	76,225	12.099	Input to Regen. Reboiler

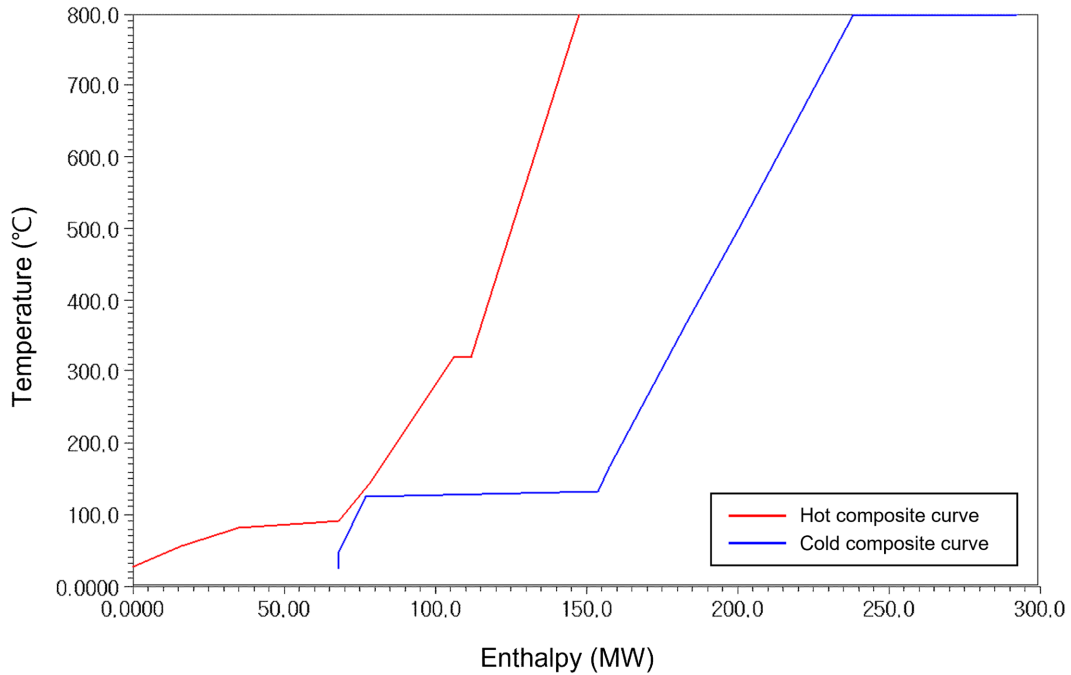


Fig. 6. Composite curves as the pinch analysis result for the blue hydrogen process.

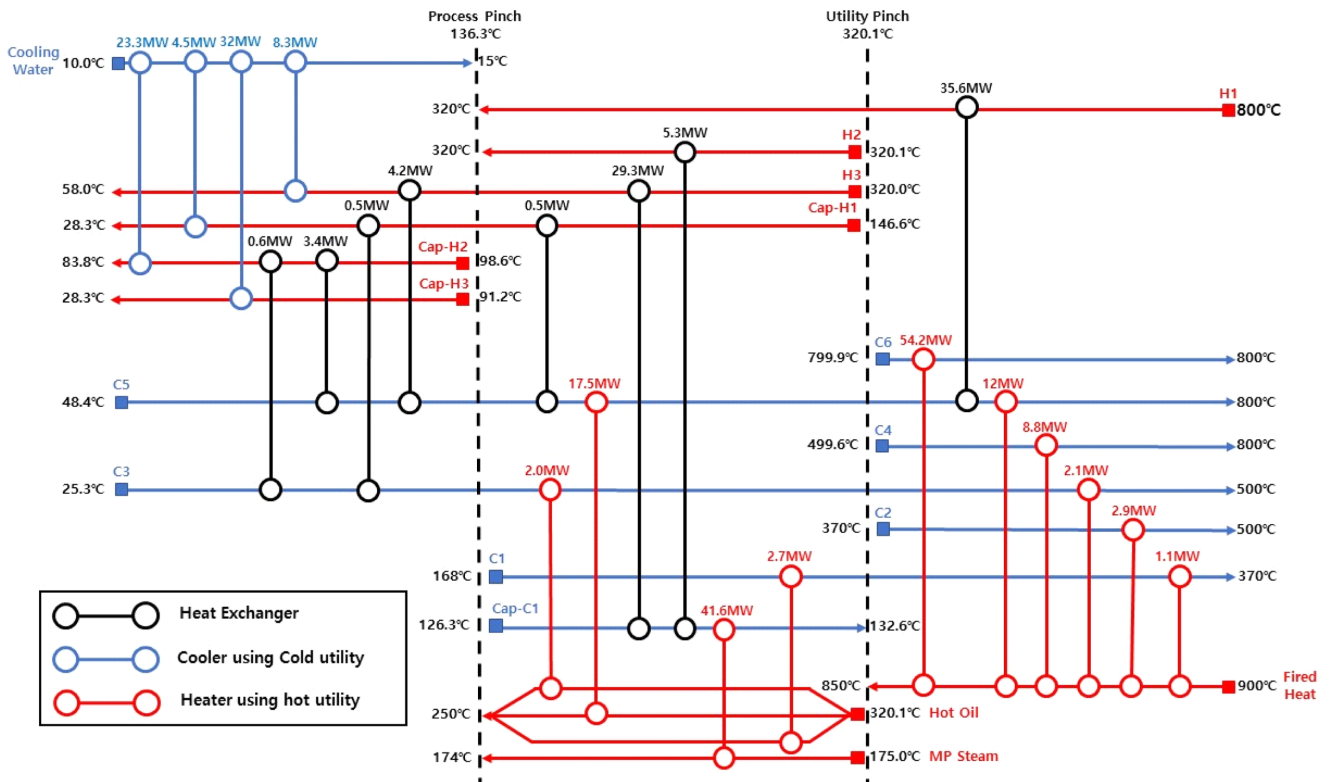


Fig. 7. Grid diagram of the optimal heat exchanger network.

3-4. 에너지 절감을 비교

이상의 결과들을 토대로 펌프어라운드 흐름 추가 및 수소 제조부와 CO₂ 포집부 간 열통합에 의한 에너지 절감 효과를 정리해 보았다. 아래 Fig. 10은 기본 공정, 흡수탑 내 펌프어라운드 흐름 설치 공정, 펌프어라운드 흐름 설치와 열통합을 동시에 수행한 공정에 대해 가

열 유틸리티 사용량, 냉각 유틸리티 사용량, 재생탑 재비기 에너지 소모량을 각각 비교한 자료이다. Fig. 10(a)에 나타나 있는 가열 유틸리티 사용량의 절감 효과를 살펴보면 펌프어라운드 흐름 설치 효과가 9%, 열통합 효과가 29%로 나타나 상대적으로 열통합에 의한 효과가 더 큰 것으로 나타났고, Fig. 10(b)에 나타나 있는 냉각 유틸

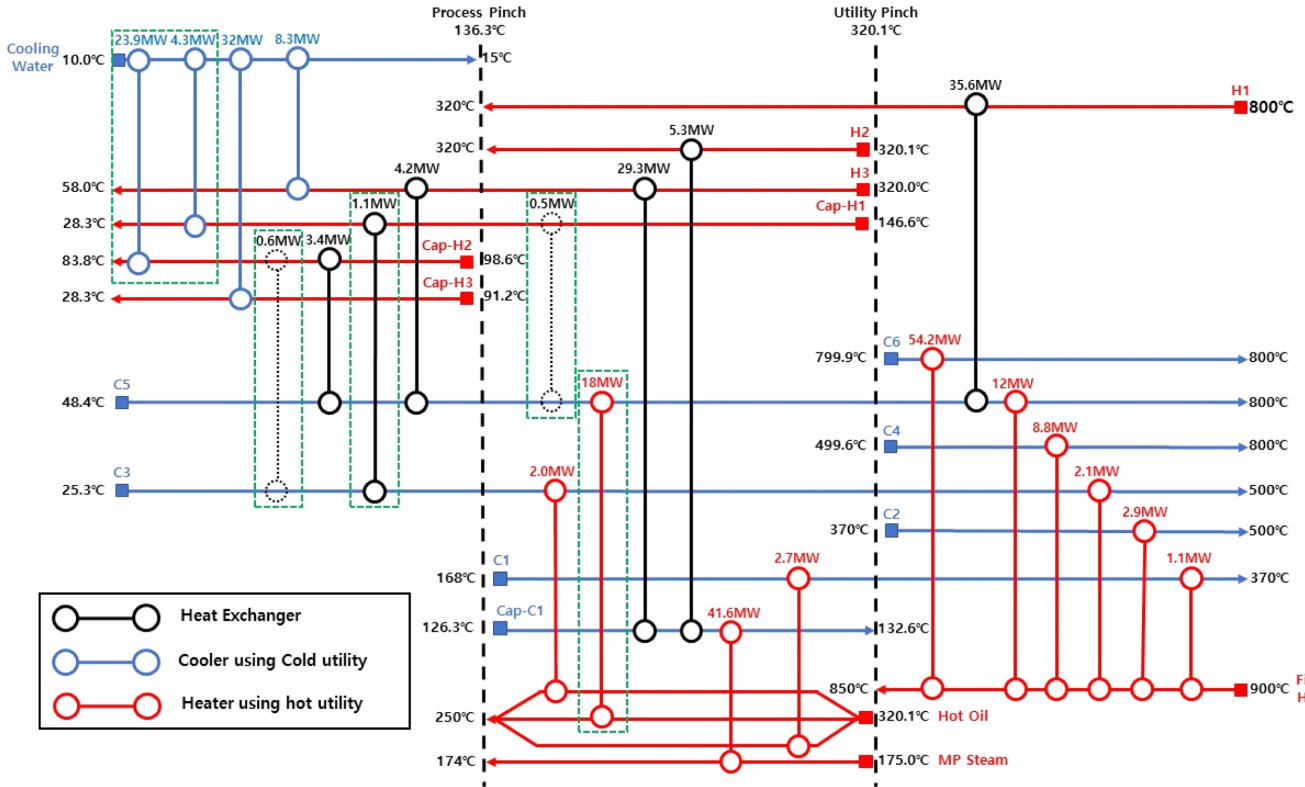


Fig. 8. Grid diagram of the heat exchanger network after final adjustment. Green dotted boxes denote the two heat exchangers removed, one heat exchanger, two coolers and one heater where the amount of heat exchange has been changed.

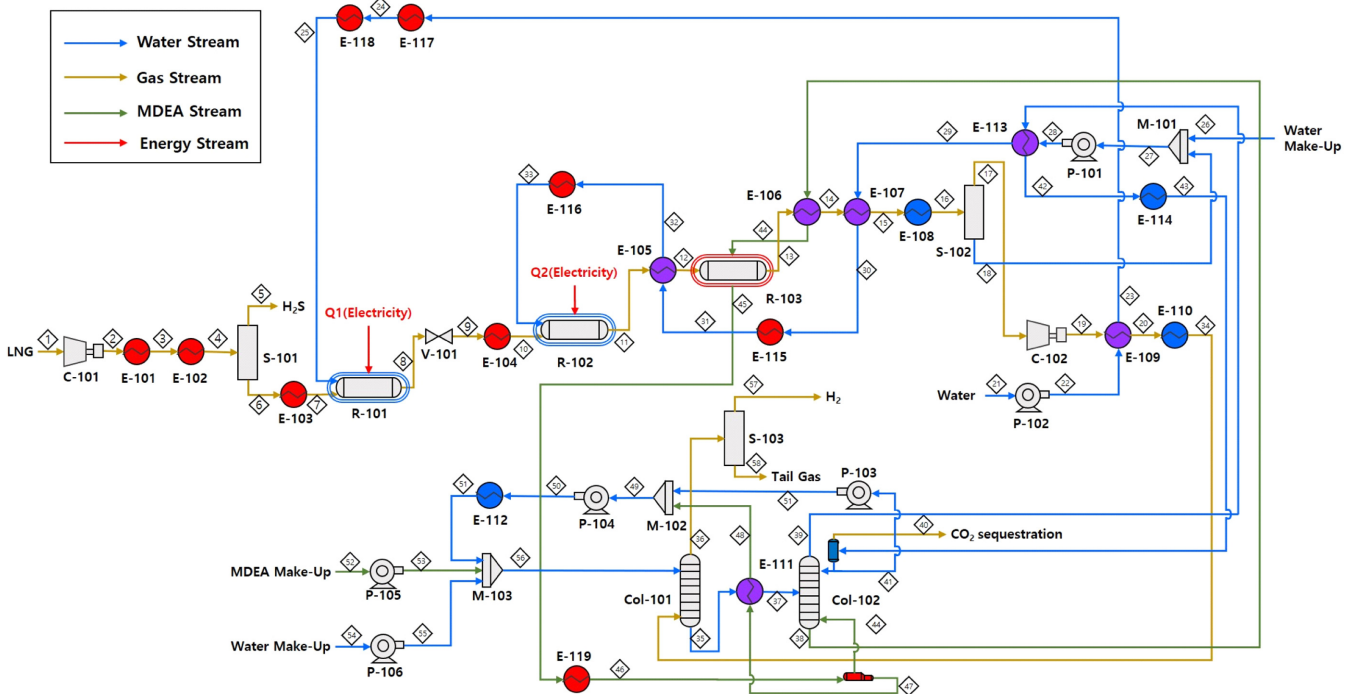


Fig. 9. Process flow diagram of the heat-integrated blue hydrogen process.

리터 사용량의 절감 효과도 비슷한 양상을 보이고 있다. 다만, 냉각 유틸리티 사용량의 절감 비율이 가열 유틸리티 사용량의 절감 비율 보다 좀 더 큰 것으로 나타났다.

두 개선안을 모두 적용한 경우와 최소 유틸리티 요구량(MER)

값을 비교해 보면 가열 유틸리티는 4%, 냉각 유틸리티는 8% 정도 더 높은 수준을 보이고 있어, 개선 공정의 에너지 소모량이 거의 최소 유틸리티 요구량에 근접해 있음을 알 수 있다. 또한 Fig. 10(c)에 나타나 있는 재생탑 재비기 에너지 소모량의 절감 효과를 살펴보면

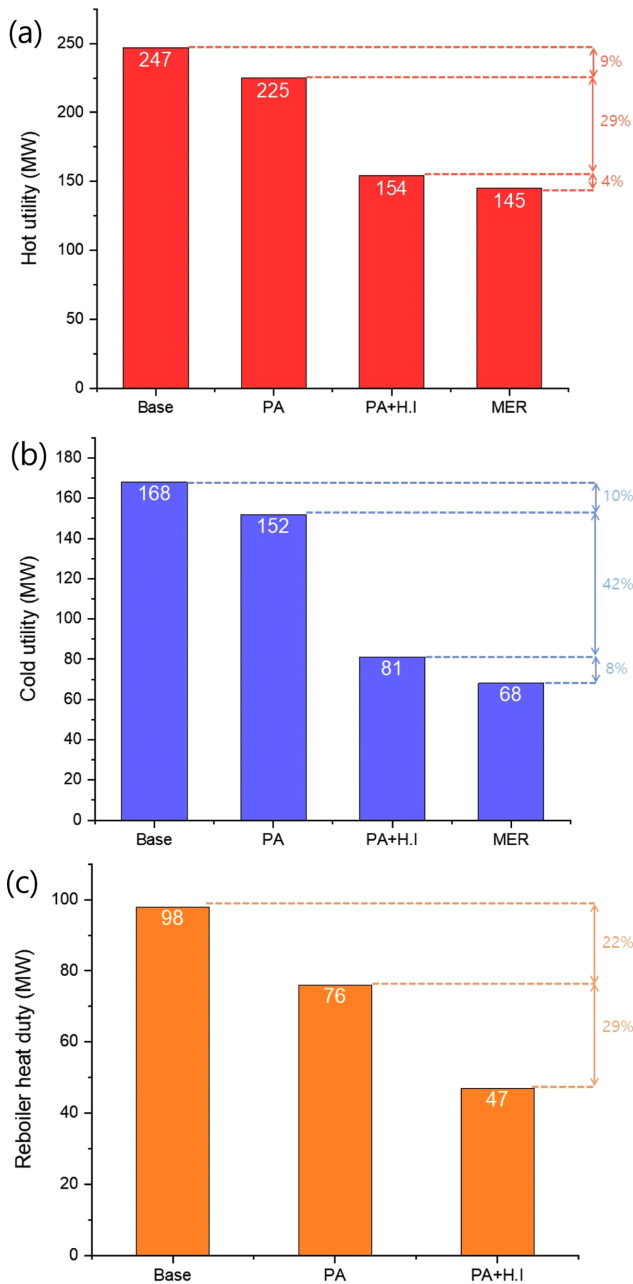


Fig. 10. Comparison of utility consumption for the improved cases. (a) Hot utility consumption (b) Cold utility consumption (c) Reboiler heat duty. Base, PA, PA+H.I, MER denote the base case, the case with the pumaround stream, the case with both the pumaround stream and heat integration, and minimum energy requirement, respectively.

펌프어라운드 흐름 설치 효과가 22%, 열통합 효과가 29%로 나타나 두 개선안의 효과가 다소 비슷한 것으로 나타났으며, 총 절감율이 51%에 달해 CO₂ 포집 공정의 에너지 절감 효과가 매우 큰 것으로 나타났다.

4. 결 론

본 연구에서는 스팀개질반응과 수성가스전환반응을 기반으로 한 수소 생산 공정에 MDEA 흡수제를 이용한 습식 CO₂ 포집 공정을

결합한 블루수소 공정을 모델링하고, 흡수탑 내 펌프어라운드 흐름 최적 배치 및 핀치 분석을 이용한 최적 열통합망 구성을 통해 에너지 사용량을 최소화한 사례를 제시하였다.

본 공정은 흡열반응인 사전개질반응과 스팀개질반응에 전기로 열원을 공급하고, 반응에서 생성되는 CO₂는 별도의 포집 공정으로 제거함으로써 CO₂ 배출 없이 수소를 생산할 수 있는 장점이 있다. 기존의 블루수소 공정은 CO₂ 포집부의 투자비와 운전비 증가 때문에 경제성이 낮은 문제가 있었으나 본 연구를 통해 전체 공정의 에너지 소모를 크게 절감할 수 있어 블루수소 공정의 경제성을 개선할 수 있는 가능성을 제시했다는 데 의의가 있다.

흡수탑의 최하단에서 배출되는 펌프어라운드 흐름의 최적 유입 단수를 찾기 위해서, 유입 단수에 따른 전체 흡수율의 변화와 흡수탑 내 온도 프로파일의 안정성을 고려하였으며, 결과적으로 최적 유입 단수를 8단으로 결정하였다. 흡수율을 85%로 고정된 상태로 펌프어라운드 흐름을 8단으로 유입시켰을 때, MDEA 사용량을 21% 절감할 수 있었고, 이로 인해 재생탑 재비기의 에너지 소모량은 22% 감소한 결과를 얻어 펌프어라운드 흐름의 최적 설치로 인한 에너지 절감 효과가 큰 것으로 나타났다.

추가적인 에너지 절감을 위해 수소 제조부와 CO₂ 포집부 간 최적 열교환망 구성을 통해 블루수소 공정 전반의 열통합을 수행하였다. 그 결과, 기본 공정 대비 가열 유틸리티 사용량은 38%, 냉각 유틸리티 사용량은 52%가 감소하였다. 또한 재생탑 재비기의 추가 에너지 절감율은 29%로 도출되어 두 개선안을 모두 적용 시 기본 공정 대비 총 51%의 흡수제 재생 에너지를 절감할 수 있는 것으로 나타났다.

참고로 본 결과는 MDEA를 흡수제로 사용하여 얻은 결과이므로, 흡수제 종류가 달라질 경우 최적화 결과가 달라질 수 있다. 또한 본 연구는 블루수소 공정 전체 및 재생탑 재비기의 에너지 소모량 절감에 중점을 두었으므로, 향후 투자비 등을 고려한 전반적인 경제성 분석이 필요하다.

감 사

본 연구는 한국에너지기술연구원 기본사업(C4-2450)과 한국에너지기술연구원 에너지저장 공정측매 재자원화 기술개발사업(No. 20228A10100020)의 지원으로 수행되었습니다.

References

1. Woo, K. T., Kim, B. G., So, Y. S., Baek, M. S., Park, S. S. and Jung, H. J., "Analysis of CO₂ Emission and Effective CO₂ Capture Technology in the Hydrogen Production Process," *Korean Institute of Gas*, **27**(3), 77-83(2023).
2. Ishaq, H., Dincer, I. and Crawford, C., "A Review on Hydrogen Production and Utilization : Challenges and Opportunities," *Hydrogen Energy*, **47**, 26238-26264(2022).
3. Do, T. N., Kwon, H. E., Park, M. S., Kim, C. S., Kim, Y. T. and Kim, J. Y., "Carbon-neutral Hydrogen Production from Natural Gas via Electrified Steam Reforming : Techno-economic-environmental Perspective," *Energy Conversion and Management*, **279**, 116758 (2023).
4. Karimi, M., Hillestad, M. and Svendsen, H. F., "Investigation of Intercooling Effect in CO₂ Capture Energy Consumption," *Energy*

- Procedia*, **4**, 1601-1607(2011).
5. Mullen, D., Herraiz, L., Gibbins, J. and Lucquiaud, M., "On the Cost of Zero Carbon Hydrogen: A Techno-economic Analysis of Steam Methane Reforming with Carbon Capture and Storage," *Greenhouse Gas Control*, **126**, 103904(2023).
 6. Pinto, D. D. D., Limpach, J. M. and Knuutila, H. K., "Simulation-based Assessment of the Potential of Offshore Blue Hydrogen Production with High CO₂ Capture Rates with Optimised Heat Recovery," *Gas Science and Engineering*, **121**, 205177(2024).
 7. Limpach, J. M., Pinto, D. D. D. and Knuutila, H. K., "Heat Integration Study of CO₂ Capture in Blue Hydrogen Production," *Chemical Engineering Transactions*, **99**, 373-378(2023).
 8. Pedrozo, A., Valderrama-Ríos, C. M., Zamarripa, M. A., Morgan, J., Osorio-Suárez, J. P., Uribe-Rodríguez, A., Diaz, M. S. and Biegler, L. T., "Optimization of CO₂ Capture Plants with Surrogate Model Uncertainties," *Computers and Chemical Engineering*, **186**, 108709(2024).
 9. Noh, H. J., Kang, K. G., Huh, C. and Lee, H. S., "Life Cycle Assessment of Carbon Capture and Storage in the Natural Gas Steam Methane Reforming Process for Hydrogen Production," *Energy & Climate Change*, **18**(2), 179-193(2023).
 10. Nozaeim, A. A., Tavasoli, A., Mortaheb, H. R. and Mafi, M., "CO₂ Absorption/desorption in Aqueous DEEA/MDEA and Their Hybrid Solutions with Sulfolane," *Natural Gas Science and Engineering*, **76**, 103219(2020).
 11. Jang, W. J., Yoon, Y. I., Park, S. D., Rhee, Y. W. and Baek, I. H., "Absorption of CO₂ Using Mixed Aqueous Solution of N-methyldiethanolamine with Piperazine for Pre-combustion CO₂ Capture," *Applied Chemistry for Engineering*, **19**(6), 645-651(2008).
 12. Zhang, Y., Rochelle, G. T., "Absorber Performance with High CO₂," *Energy Procedia*, **63**, 1329-1338(2014).
 13. Tsay, C., Patiison, R. C., Zhang, Y., Rochelle, G. T. and Baldea, M., "Rate-based Modeling and Economic Optimization of Next-generation Amine-based Carbon Capture Plants," *Aspentech Workshop Material*, **252**, 113379(2019).
 14. Improved Energy Efficiency Through Heat Integration, Aspentech Workshop Material.
 15. Wi, J. H., Choi, C. K., Joo, H. S., Cho, Y. S. and Kim, H. Y., "Heat Exchanger Network Synthesis by Using Exergy Analysis and Pinch Design Method," *Korean Institute of Chemical Engineers*, **30**(4), 406-414(1992).
 16. Kemp, I. C., "Pinch Analysis and Process Integration: A User Guide on Process Integration for the Efficient Use of Energy," 2nd ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, UK(2007).

Authors

Dabin Seo: Researcher, Computational Science & Engineering Laboratory/R&D Strategy Division, Korea Institute of Energy Research, Gajeong-ro 152, Yuseong-gu, Daejeon 34129, Korea; tjekqls046@kier.re.kr

Yejun Park: Researcher, Computational Science & Engineering Laboratory/R&D Strategy Division, Korea Institute of Energy Research, Gajeong-ro 152, Yuseong-gu, Daejeon 34129, Korea; jyr10007@kier.re.kr

Young-Hwan Chu: Principal Researcher, Computational Science & Engineering Laboratory/R&D Strategy Division, Korea Institute of Energy Research, Gajeong-ro 152, Yuseong-gu, Daejeon 34129, Korea; yhchu@kier.re.kr

Appendix 1. Stream Table for Figure 4

Number	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.7168	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000
Temperature [C]	40.00	168.40	370.00	370.00	370.00	500.00	25.00	25.25	500.00	500.00	499.64	800.00	800.00	320.00	320.00	58.00	58.00	58.00	35.00	48.20	48.39	800.00
Pressure [bar]	8.00	30.00	30.00	30.00	30.00	30.00	1.00	30.00	30.00	30.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	1.00	1.00	20.00	20.00
Molar Flow [kgmole/h]	1276	1276	1276	0.0064	1276	1276	311	311	311	1704	1704	1704	7246	7246	7246	7246	5149	2097	1602	3700	3700	3700
Mass Flow [kg/h]	23000	23000	23000	0.2175	23000	23000	5595	5595	5595	28594	28594	28594	95246	95246	95246	95246	57463	37783	28855	66651	66651	66651
Liquid Volume Flow [m ³ /h]	71	71	71	0.0003	71	71	6	6	6	81	81	81	205	205	219	219	182	38	29	67	67	67
Heat Flow [MW]	-29	-27	-23	0.0000	-23	-20	-25	-25	-19	-39	-39	-30	-195	-230	-236	-277	-113	-165	-127	-292	-292	-219
Molar Composition																						
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0627	0.0627	0.0627	0.4497	0.4497	0.5171	0.5171	0.7277	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
CO	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0045	0.0045	0.0045	0.0747	0.0747	0.0073	0.0073	0.0103	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
CO ₂	0.0200	0.0200	0.0200	0.0000	0.0200	0.0200	0.0000	0.0000	0.0000	0.0448	0.0448	0.0448	0.0641	0.0641	0.1314	0.1314	0.1850	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Nitrogen	0.0089	0.0089	0.0089	0.0000	0.0089	0.0089	0.0000	0.0000	0.0000	0.0067	0.0067	0.0067	0.0016	0.0016	0.0016	0.0016	0.0022	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.1182	0.1182	0.1182	0.3577	0.3577	0.2903	0.2903	0.0012	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.8900	0.8900	0.8900	0.0000	0.8900	0.8900	0.0000	0.0000	0.0000	0.7632	0.7632	0.7632	0.0523	0.0523	0.0523	0.0523	0.0736	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Ethane	0.0700	0.0700	0.0700	0.0000	0.0700	0.0700	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0100	0.0100	0.0100	0.0000	0.0100	0.0100	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0010	0.0010	0.0010	0.0000	0.0010	0.0010	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Mass Composition																						
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0075	0.0075	0.0075	0.0690	0.0690	0.0793	0.0793	0.1315	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
CO	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0075	0.0075	0.0075	0.1591	0.1591	0.0155	0.0155	0.0257	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
CO ₂	0.0488	0.0488	0.0488	0.0000	0.0488	0.0488	0.0000	0.0000	0.0000	0.1175	0.1175	0.1175	0.2145	0.2145	0.4401	0.4401	0.7295	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Nitrogen	0.0138	0.0138	0.0138	0.0000	0.0138	0.0138	0.0000	0.0000	0.0000	0.0111	0.0111	0.0111	0.0033	0.0033	0.0033	0.0033	0.0055	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.1268	0.1268	0.1268	0.4902	0.4902	0.3979	0.3979	0.0020	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.7924	0.7924	0.7924	0.0000	0.7924	0.7924	0.0000	0.0000	0.0000	0.7295	0.7295	0.7295	0.0638	0.0638	0.0638	0.0638	0.1058	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Ethane	0.1168	0.1168	0.1168	0.0000	0.1168	0.1168	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0245	0.0245	0.0245	0.0000	0.0245	0.0245	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0032	0.0032	0.0032	0.0000	0.0032	0.0032	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0004	0.0004	0.0004	0.0000	0.0004	0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Appendix 1. (Continued) Stream Table for Figure 4

Number	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44		
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.6760	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.9963	
Temperature [C]	146.62	28.31	47.92	33.16	80.00	125.98	95.11	88.03	88.03	133.21	93.81	88.04	95.49	96.21	28.31	27.40	28.31	27.86	28.31	29.78	35.89	35.89		
Pressure [bar]	40.00	40.00	40.00	39.00	40.00	2.00	1.00	1.00	1.00	2.00	2.00	2.00	2.00	40.00	40.00	1.00	40.00	1.00	40.00	40.00	39.00	39.00		
Molar Flow [kgmole/h]	5149	5149	17580	4326	17580	21105	5446	2356	2184	13040	13040	2184	15224	15224	15224	0.0004	0.0004	1533	1533	16757	3739	587		
Mass Flow [kg/h]	57463	57463	846097	21738	846097	891268	119024	63350	39354	743393	743393	39354	782747	782747	782747	0.0470	0.0470	27625	27625	810372	7537	14201		
Liquid Volume Flow [m ³ /h]	182	182	834	138	834	869	127	72	39	723	723	39	762	762	762	0.0000	0.0000	28	28	790	108	30		
Heat Flow [MW]	-109	-114	-1664	-25	-1639	-1673	-396	-190	-171	-1216	-1241	-171	-1412	-1411	-1454	-0.0001	0.0000	-122	-122	-1576	0.2965	-25		
Molar Composition																								
Hydrogen	0.7277	0.7277	0.0005	0.8642	0.0005	0.0000	0.0015	0.0035	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	
CO	0.0103	0.0103	0.0000	0.0122	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0897
CO ₂	0.1850	0.1850	0.0461	0.0331	0.0461	0.0002	0.1486	0.3434	0.0001	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.2439
Nitrogen	0.0022	0.0022	0.0000	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0193
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	0.0012	0.0012	0.6674	0.0008	0.6674	0.7604	0.8494	0.6521	0.9999	0.6145	0.6145	0.9999	0.6698	0.6698	0.6698	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.7000	0.0000	0.0057		
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.0736	0.0736	0.0001	0.0871	0.0001	0.0000	0.0004	0.0010	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.6414
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.0000	0.0000	0.2860	0.0000	0.2860	0.2394	0.0000	0.0000	0.0000	0.3855	0.3855	0.0000	0.3302	0.3302	0.3302	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.3000	0.0000	0.0000		
Mass Composition																								
Hydrogen	0.1315	0.1315	0.0000	0.3467	0.0000	0.0000	0.0001	0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	
CO	0.0257	0.0257	0.0000	0.0679	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1039
CO ₂	0.7295	0.7295	0.0421	0.2900	0.0421	0.0002	0.2993	0.5622	0.0002	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4440
Nitrogen	0.0055	0.0055	0.0000	0.0146	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0224
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	0.0020	0.0020	0.2498	0.0028	0.2498	0.3244	0.7002	0.4369	0.9998	0.1942	0.1942	0.9998	0.2347	0.2347	0.2347	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.2608	0.0000	0.0042		
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.1058	0.1058	0.0000	0.2780	0.0000	0.0000	0.0003	0.0006	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4255
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.0000	0.0000	0.7080	0.0000	0.7080	0.6754	0.0000	0.0000	0.0000	0.8058	0.8058	0.0000	0.7653	0.7653	0.7653	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.7392	0.0000	0.0000		

Appendix 2. Stream Table for Figure 9

Number	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.8606	0.8243	0.7168	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000
Temperature [C]	40.00	168.40	310.10	370.00	370.00	370.00	500.00	500.00	499.62	800.00	800.00	320.00	320.00	136.30	128.28	58.00	58.00	58.00	146.62	131.94	25.00	25.25
Pressure [bar]	8.00	30.00	30.00	30.00	30.00	30.00	30.00	30.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	40.00	40.00	1.00	30.00
Molar Flow [kgmole/h]	1276	1276	1276	1276	0.0064	1276	1276	1704	1704	1704	7246	7246	7246	7246	7246	7246	5149	2097	5149	5149	311	311
Mass Flow [kg/h]	23000	23000	23000	23000	0.2175	23000	23000	28594	28594	28594	95243	95243	95243	95243	95243	95243	57463	37780	57463	57463	5595	5595
Liquid Volume Flow [m ³ /h]	71	71	71	71	0.0003	71	71	81	81	81	205	205	219	219	219	219	182	38	182	182	6	6
Heat Flow [MW]	-28803	-26960	-24405	-23196	-0.0141	-23196	-20312	-38962	-38962	-30138	-194688	-230321	-235595	-259107	-262591	-277430	-112770	-165214	-108780	-109465	-24690	-24684
Molar Composition																						
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0629	0.0629	0.0629	0.4497	0.4497	0.5171	0.5171	0.5171	0.5171	0.7277	0.0000	0.7277	0.7277	0.0000	0.0000
CO	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0045	0.0045	0.0045	0.0747	0.0747	0.0073	0.0073	0.0073	0.0073	0.0103	0.0000	0.0103	0.0103	0.0000	0.0000
CO ₂	0.0200	0.0200	0.0200	0.0200	0.0000	0.0200	0.0200	0.0448	0.0448	0.0448	0.0641	0.0641	0.1314	0.1314	0.1314	0.1314	0.1850	0.0000	0.1850	0.1850	0.0000	0.0000
Nitrogen	0.0089	0.0089	0.0089	0.0089	0.0000	0.0089	0.0089	0.0067	0.0067	0.0067	0.0016	0.0016	0.0016	0.0016	0.0016	0.0016	0.0022	0.0000	0.0022	0.0022	0.0000	0.0000
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1181	0.1181	0.1181	0.3577	0.3577	0.2903	0.2903	0.2903	0.2903	0.0012	1.0000	0.0012	0.0012	1.0000	1.0000
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.8900	0.8900	0.8900	0.8900	0.0000	0.8900	0.8900	0.7631	0.7631	0.7631	0.0523	0.0523	0.0523	0.0523	0.0523	0.0523	0.0736	0.0000	0.0736	0.0736	0.0000	0.0000
Ethane	0.0700	0.0700	0.0700	0.0700	0.0000	0.0700	0.0700	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0100	0.0100	0.0100	0.0100	0.0000	0.0100	0.0100	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0010	0.0010	0.0010	0.0010	0.0000	0.0010	0.0010	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Mass Composition																						
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0076	0.0076	0.0076	0.0690	0.0690	0.0793	0.0793	0.0793	0.0793	0.1315	0.0000	0.1315	0.1315	0.0000	0.0000
CO	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0075	0.0075	0.0075	0.1591	0.1591	0.0155	0.0155	0.0155	0.0155	0.0257	0.0000	0.0257	0.0257	0.0000	0.0000
CO ₂	0.0488	0.0488	0.0488	0.0488	0.0000	0.0488	0.0488	0.1176	0.1176	0.1176	0.2145	0.2145	0.4401	0.4401	0.4401	0.4401	0.7295	0.0000	0.7295	0.7295	0.0000	0.0000
Nitrogen	0.0138	0.0138	0.0138	0.0138	0.0000	0.0138	0.0138	0.0111	0.0111	0.0111	0.0033	0.0033	0.0033	0.0033	0.0033	0.0033	0.0055	0.0000	0.0055	0.0055	0.0000	0.0000
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1267	0.1267	0.1267	0.4902	0.4902	0.3979	0.3979	0.3979	0.3979	0.0020	1.0000	0.0020	0.0020	1.0000	1.0000
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.7924	0.7924	0.7924	0.7924	0.0000	0.7924	0.7924	0.7295	0.7295	0.7295	0.0638	0.0638	0.0638	0.0638	0.0638	0.0638	0.1058	0.0000	0.1058	0.1058	0.0000	0.0000
Ethane	0.1168	0.1168	0.1168	0.1168	0.0000	0.1168	0.1168	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0245	0.0245	0.0245	0.0245	0.0000	0.0245	0.0245	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0032	0.0032	0.0032	0.0032	0.0000	0.0032	0.0032	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0004	0.0004	0.0004	0.0004	0.0000	0.0004	0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Appendix 2. (Continued) Stream Table for Figure 9

Number	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44
Vapour Fraction	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.3237	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0001	0.0016	1.0000	1.0000	0.0000	0.9416	0.4396	0.1180
Temperature [C]	126.30	310.10	500.00	35.00	48.28	48.47	83.61	126.30	212.87	504.49	800.00	28.31	44.39	32.99	80.00	125.80	93.62	83.89	83.89	93.16	83.84	127.36
Pressure [bar]	30.00	30.00	30.00	1.00	1.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	40.00	40.00	39.00	40.00	2.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	2.00
Molar Flow [kgmole/h]	311	311	311	1602	3700	3700	3700	3700	3700	3700	3700	5149	14060	4328	14060	16862	4178	1839	1644	4178	4178	16862
Mass Flow [kg/h]	5595	5595	5595	28852	66648	66648	66648	66648	66648	66648	66648	57463	675964	21749	675964	707435	96209	54065	29623	96209	96209	707435
Liquid Volume Flow [m ³ /h]	6	6	6	29	67	67	67	67	67	67	67	182	668	138	668	691	104	62	30	104	104	691
Heat Flow [MW]	-23999	-20103	-19449	-126981	-292261	-292214	-289394	-285910	-266910	-231277	-218783	-114238	-1338268	-25153	-1315539	-1475097	-311606	-156071	-128524	-314427	-339138	-1451584
Molar Composition																						
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.7277	0.0005	0.8642	0.0005	0.0000	0.0015	0.0034	0.0000	0.0015	0.0015	0.0000
CO	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0103	0.0000	0.0122	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
CO ₂	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1850	0.0576	0.0331	0.0576	0.0003	0.1937	0.4400	0.0001	0.1937	0.1937	0.0003
Nitrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0022	0.0000	0.0026	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0012	0.6593	0.0008	0.6593	0.7631	0.8043	0.5555	0.9999	0.8043	0.8043	0.7631
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0736	0.0001	0.0871	0.0001	0.0000	0.0004	0.0010	0.0000	0.0004	0.0004	0.0000
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.2825	0.0000	0.2825	0.2366	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.2366
Mass Composition																						
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1315	0.0000	0.3467	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.0000	0.0001	0.0001	0.0000
CO	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0257	0.0000	0.0679	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
CO ₂	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.7295	0.0527	0.2898	0.0527	0.0003	0.3703	0.6587	0.0002	0.3703	0.3703	0.0003
Nitrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0055	0.0000	0.0146	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0020	0.2471	0.0027	0.2471	0.3277	0.6293	0.3404	0.9998	0.6293	0.6293	0.3277
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1058	0.0000	0.2782	0.0000	0.0000	0.0003	0.0006	0.0000	0.0003	0.0003	0.0000
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.7002	0.0000	0.7002	0.6720	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.6720

Appendix 2. (Continued) Stream Table for Figure 9

Number	45	46	47	48	51	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58
Vapour Fraction	0.1442	0.3724	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.9964
Temperature [C]	127.69	132.60	132.61	88.85	83.90	90.48	91.19	28.31	27.40	28.31	27.86	28.31	29.54	35.72	35.72
Pressure [bar]	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	40.00	40.00	1.00	40.00	1.00	40.00	40.00	39.00	39.00
Molar Flow [kgmole/h]	16862	16862	10577	10577	1644	12221	12221	12221	0.0004	0.0004	1019	1019	13239	3741	588
Mass Flow [kg/h]	707435	707435	592276	592276	29623	621899	621899	621899	0.0463	0.0463	18352	18352	640251	7541	14208
Liquid Volume Flow [m ³ /h]	691	691	576	576	30	606	606	606	0.0000	0.0000	18	18	624	108	30
Heat Flow [MW]	-1446310	-1398893	-982031	-1004759	-128523	-1133282	-1132416	-1164503	-0.0492	-0.0492	-80781	-80755	-1245252	291	-25444
Molar Composition															
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000
CO	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0897
CO ₂	0.0003	0.0003	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.2437
Nitrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0193
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	0.7631	0.7631	0.6245	0.6245	0.9999	0.6750	0.6750	0.6750	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.7000	0.0000	0.0056
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.6417
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.2366	0.2366	0.3755	0.3755	0.0000	0.3250	0.3250	0.3250	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.3000	0.0000	0.0000
Mass Composition															
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000
CO	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1039
CO ₂	0.0003	0.0003	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4437
Nitrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0224
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H ₂ O	0.3277	0.3277	0.2009	0.2009	0.9998	0.2389	0.2389	0.2389	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.2608	0.0000	0.0042
H ₂ S	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4259
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Butane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Pentane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MDEAmine	0.6720	0.6720	0.7991	0.7991	0.0000	0.7610	0.7610	0.7610	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.7392	0.0000	0.0000