1-프로판올과 벤젠 혼합물의 압력변환 증류공정을 통한 전산모사 및 공정 최적화

박회경, 조정호* 공주대학교 화학공학부

Computer Simulation and Optimization Study on the Pressure-Swing Distillation of 1-propanol-benzene Mixture

Hoey Kyung Park, Jungho Cho*
Department of Chemical Engineering, Kongju national university

요 약 압력변환 증류공정(Pressure-Swing Distillation, PSD)을 통해서 1-프로판을과 벤젠 이성분계 혼합물의 분리공정에 대한 전산모사 및 공정 최적화를 수행하였다. Schneider Electric사의 PRO/II with PROVISION V10.0을 사용하였으며, 열역학모델식으로는 NRTL 액체 활동도계수 모델식을 적용하였다. 고압에서 저압 증류탑 배열 공정과 저압에서 고압 증류탑 배열 공정에 대한 재비기의 총 heat duty의 소모량의 합을 서로 비교하였다. 유틸리티 소모량을 최소화하기 위해서 각 공정의 저압 증류탑과 고압 증류탑 상부 벤젠의 조성, 이론단수와 원료 주입단의 위치를 최적화하였으며, 각각의 증류탑의 환류비를 조절하였다. 공정 최적화 수행결과, 총 재비기 heat duty 값은 각각 고압에서 저압 증류탑 배열 공정의 경우 3.10×10⁶ kcal/h 이었으며, 저압에서 고압 증류탑 배열 공정의 경우 2.75×10⁶ kcal/h로 나타났다. 또한, 저압-고압 증류탑 배열 공정에 열통합 공정 (heat integration)을 적용한 경우 재비기의 총 heat duty 값이 고압-저압 증류탑 배열 공정에 비해서 약 57.36%정도 적게 추산되었다.

Abstract Computer modeling and optimization works have been performed for the separation of the binary mixture of 1-propanol and benzene through a pressure-swing distillation. PRO/II with PRIVISION V10.0 at Schneider Electric company and NRTL liquid activity coefficient model were utilized. The sum of the total reboiler heat duties of the low-high and high-low pressure column configurations were compared. To minimize the utility consumptions, low column, and high column to obtain pure benzene at the top, the number of theoretical stages and optimal feed tray locations for each distillation column were determined and the reflux ratios for each distillation column were also adjusted. As a result of the optimization works, the sum of the total reboiler heat duties for the high-low and low-high pressure configurations were 3.10x10⁶ kcal/h and 2.75x10⁶ kcal/h, respectively. In the case where heat integration was applied to low-high pressure configurations, 57.36 % of the total reboiler heat duties could be saved compared to the high-low pressure configurations.

Keywords: benzene, computer simulation, heat integration, optimization, pressure-swing distillation, 1-propanol

1. 서론

1-프로판올과 벤젠 이성분계 혼합물은 일정한 온도와

압력에서 액상과 기상의 성분비가 동일해지는 현상을 나타내는 공비 혼합물로써[1,2], 통상적인 증류방법을 통해서는 공비 혼합물 이상으로 분리시키는 것이 불가능하

본 연구는 ITER사업단의 연구비지원에 의해 수행되었습니다.

*Corresponding Author : Jungho Cho(Kongju National Univ.)

Tel: +82-41-521-9366 email: jhcho@kongju.ac.kr

Received April 10, 2018 Revised May 31, 2015 Accepted June 1, 2018 Published June 30, 2018 다. 두 성분을 각각의 거의 순수한 성분으로 분리하기 위 해서는 추출 증류공정(Extractive Distillation), 공비 증 류공정(Azeotropic Distillation), 압력변환 증류공정 (Pressure-Swing Distillation)등과 같은 특수증류 공정을 사용해야 한다. 추출 증류공정의 경우 용매를 추가하여 혼합물의 상대휘발도를 변화시키는 원리를 사용하여 증 류하는 공정이며[4], 공비 증류공정은 공비점 분리제를 첨가하여 상대 휘발도를 변경시켜 공비점을 제거하거나 공비점을 이동시키는 원리를 이용하는 공정으로[5-7], 두 공정 모두 제3의 성분을 필요로 한다. 이에 비해서 압 력변환 증류공정의 경우 증류탑에 운전압력에 따라 공비 점 조성이 변화하는 원리를 이용하여 혼합물의 분리를 용이하게 하는 원리를 이용하기 때문에 제3의 성분을 필 요로 하지 않는다는 이점을 가지고 있어[8,9], 최종 제품 에 제3의 성분인 유기물이 추가되어 환경문제를 일으키 지 않는다는 장점이 있다. 하지만 압력변환 증류공정 뿐 아니라 추출 증류공정 및 공비 증류공정 모두 에너지 집 약적인 기술이기 때문에 유틸리티 소모량 감소가 무엇보 다 중요하다[24,25].

압력변환 증류공정의 경우 두 기의 증류탑이 모두 공비점 근처에서 운전되기 때문에 유틸리티 소모량을 줄이기 위한 공정 최적화가 필수적이다. 운전압력에 따라 공비점 조성이 변하는 원리를 이용하는 압력변환 증류공정은 혼합물의 특성에 따라 두 가지 공정 배열 중 고압-저압 증류탑 배열 공정과 저압-고압 증류탑 배열이 가능하다.

압력변환 증류공정의 전산모사를 처음으로 적용한 이성분계는 테트라하이드로퓨란과 물 이성분계이며[10], 그 외에 메탄올과 디메틸 카보네이트[11], 아세토니트릴과 물[12], 에탄올과 벤젠[13] 등 다양한 이성분계 분리에 이용되고 있다. 그러나 대부분 두 가지 공정 배열을통한 전산모사 및 공정 최적화만 이루어지고 열 통합 (heat integration) 공정까지는 적용하지 않았다.

Fig. 1에는 1-프로판올과 벤젠 이성분계의 저압(1 bar)과 고압(10 bar)에서의 기액 상평형도를 나타내었다. Fig. 1에 의하면 저압에서의 공비점 조성은 52.06 mol.%이며, 고압에서의 공비점 조성은 76.81 mol.%이다. 따라서 두 압력 사이에서 공비 조성의 조성 차이는 약 24.75 mol.%이다.

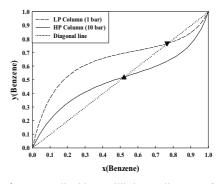


Fig. 1. Vapor-liquid equilibrium diagram for the 1-propanol and benzene system at high pressure(10 bar) and low pressure(1 bar).

한편 Fig. 2와 Fig. 3에는 저압-고압 증류탑 배열 공정과 고압-저압 증류탑 배열 공정에 대해 나타내었다.

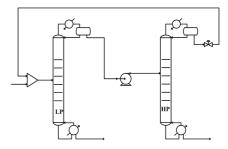


Fig. 2. Schematic drawing of pressure-swing distillation for low-high pressure distillation column configuration.

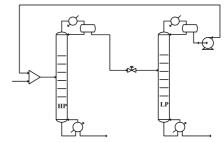


Fig. 3. Schematic drawing of pressure-swing distillation for high-low pressure distillation column configuration.

본 연구에서는 Schneider Electric사의 PRO/II with PROVISION V10.0을 사용하여 1-프로판올과 벤젠 혼합물의 분리를 위해 압력변환 증류공정을 통하여 고압-저압 증류탑 배열 공정과 저압-고압 증류탑 배열 공정의

전산모사 및 공정 최적화를 수행하였으며, 유틸리티 소 모량 감소를 위해 열 통합 공정을 적용하였다.

2. 열역학 이론

열역학적인 비이상성이 큰 혼합물로부터 증류를 통해서 원하는 성분을 분리해 내기 위해서는 증기상-액상 상평형에 대한 이해가 필수적이다. 증기상-액상 상평형의 출발점은 혼합물 중 성분 'i'의 퓨개시티가 증기상과 액상에서 서로 같다는 식 (1)에서부터 시작된다.

$$\hat{f}_i^v(T, P, y_i) = \hat{f}_i^v(T, P, x_i) \tag{1}$$

기상과 액상 모두에 퓨개시티 계수를 도입하면, 기상과 액상의 퓨개시티 계수는 각각 식 (2)와 식 (3)과 같이나타낼 수 있다.

$$\hat{\phi_i^v}(T, P, y_i) = \frac{\hat{f_i^v}(T, P, y_i)}{u \cdot P}$$
(2)

$$\hat{\phi}_{i}^{l}(T,P,x_{i}) = \frac{\hat{f}_{i}^{l}(T,P,x_{i})}{x_{i}P} \tag{3}$$

식 (2)와 식 (3)을 식 (1)에 대입하면 식 (4)와 같다.

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

$$\tag{4}$$

식 (4)는 증기상과 액상의 퓨개시티 계수는 상태방정식을 이용해서 계산할 수 있다. 증기상과 액상을 모두 상태방정식을 이용해서 계산하기 때문에 식 (4)와 같은 접근방법을 One model approach라고 한다[14-16]. 이에반해서 기상의 퓨개시티는 상태방정식 모델식을 적용하고, 액상의 퓨개시티를 계산을 위해 활동도계수로 표현되는 식 (5)를 식 (2)와 식 (1)에 대입하면 식 (6)을 얻을수 있다.

$$\gamma_i(T, P, x_i) = \frac{\hat{f}_i^i(T, P, x_i)}{x_i P_i^{vap}(T)} \tag{5}$$

$$y_i \hat{\phi_i^v} P = \gamma_i x_i P_i^{vap}(T) \tag{6}$$

식 (5)와 식 (6)은 증기상의 퓨개시티는 활동도계수를

이용하는 반면에 액상의 퓨개시티는 활동도계수를 적용하기 때문에 이는 Two model approach라고 한다 [17-19]. 본 연구에서는 기본적으로 Two model approach를 가정하고 증기상은 이상기체로 간주하여 전산모사를 수행하였다.

액체 혼합물의 열역학적인 비이상성을 표현하기 위한 액체 활동도계수 모델식은 NRTL[20] 모델식으로 식 (7)에서 식 (9)와 같이 표현된다.

$$\ln \gamma_{i} = \frac{\sum_{j} \tau_{ji} G_{ji} x_{j}}{\sum_{k} G_{ki} x_{k}} + \sum_{j} \frac{x_{j} G_{ij}}{\sum_{k} G_{kj} x_{k}} \left[\tau_{ij} - \frac{\sum_{l} x_{l} \tau_{lj} G_{lj}}{\sum_{k} G_{kj} x_{k}} \right] \tag{7}$$

$$\tau_{ij} = A_{ij} + \frac{B_{ij}}{T} \tag{8}$$

$$G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij}\tau_{ij}) \tag{9}$$

3. 전산모사

3.1 압력변환 증류공정의 전산모사

압력변환 증류공정을 통한 1-프로판을과 벤젠 혼합물은 증류탑의 운전압력에 따라 혼합물의 공비점이 민감하게 변하는 원리를 이용하는 공정으로, 고압 증류탑과 저압 증류탑의 공정 배열에 따라 고압-저압 증류탑 배열 공정과 저압-고압 증류탑 배열 공정의 두 가지 공정이있다[21].

1-프로판을과 벤젠 혼합물의 전산모사 및 공정 최적화를 위해 상용공정 모사기인 Schneider Electric사의 PRO/II with PROVISION V10.0을 사용하였다. 정확한 공정 최적화를 위해서는 증류탑 가격과 유틸리티 비용등을 포함한 면밀한 비용 산출이 요구되지만, 본 연구에서는 공정 최적화를 통한 총 재비기의 heat duty를 통한유틸리티 비용만을 고려하여 1-프로판올과 벤젠 혼합물의 분리에 있어 더 경제적인 공정을 살펴보았다.

원료의 조성, 유량, 온도, 압력 등을 포함한 기본사양 은 Table 1과 같으며. 고압 증류탑과 저압 증류탑 하부 에서 얻어지는 1-프로판올과 벤젠의 순도는 각각 99.50%(ppm)로 설정하였다.

| Table | 1 | Feedstock | inform | atione |
|-------|----|-----------|--------|---------|
| rabie | Ι. | reedstock | шиопп | iations |

| Component | Composition mole | |
|-------------------------|------------------|--|
| n-propanol | 0.40 | |
| benzene | 0.60 | |
| Contents | Value | |
| Total flow rate, Kmol/h | 100.00 | |
| Temperature, K | 298.15 | |
| Pressure, bar | 2.0 | |

3.2 고압-저압 증류탑 배열 전산모사 및 공정 최적화

고압-저압 증류탑 배열의 원리를 Fig. 1의 그래프를 바탕으로 설명하면, 1-프로판올과 벤젠 혼합물이 10 bar 의 고압 증류탑으로 주입되면 조성분포는 실선을 따라 이동된다. 따라서 고압 증류탑의 하부로는 고순도의 벤 젠을 얻게 되고, 상부로는 1-프로판올과 벤젠의 공비점 근처까지 농축된 후 밸브를 통해 압력이 변화된 후 1 bar 의 저압 증류탑으로 주입된다. 주입된 1-프로판올과 벤 젠의 조성분포는 점선을 따라 이동되며, 혼합물의 상대 휘발도가 역전되는 현상이 나타나게 된다. 그러므로 저 압 증류탑의 하부로는 고순도의 1-프로판올을 얻게 되 고, 상부로는 1-프로판올과 벤젠의 공비점 근처까지 농 축되어 고압의 증류탑으로 다시 환류되어 진다. 때문에 압력변환 증류공정은 순환공정으로 고압과 저압 증류탑 상부에서 1-프로판올과 벤젠의 순환되는 양에 따라 전체 공정 재비기의 heat duty 값에 중요한 영향을 미치므로 고압과 저압 증류탑 상부 스트림에 조성 변화를 통해 재 비기의 heat duty 값의 변화를 살펴보았다. 그 결과, Fig. 4와 Fig. 5에 같이 고압 증류탑의 경우 벤젠의 조성이 54.70 mol.%에서 heat duty 값이 최소값을 보였으며, 저 압 증류탑의 경우 벤젠의 조성 73.50 mol.%에서 heat duty 값이 최소값을 나타내었다.

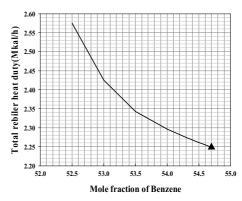


Fig. 4. Total reboiler heat duty of high-low pressure distillation columns based on various mole percentages of benzene in high pressure distillation column.

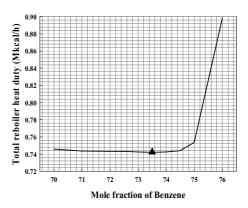


Fig. 5. Total reboiler heat duty of high-low pressure distillation columns based on various mole percentages of benzene in low pressure distillation column.

최적화된 재비기의 heat duty 값을 얻기 위해 환류비와 이론단수와의 관계를 통해 증류탑 최적의 이론단수를 알아보았다. Fig. 6와 Fig. 7에서 보여지는 것과 같이 환류비가 증가될수록 이론단수는 감소되어 초기 장치 투자비용을 줄일 수 있으나, 환류비가 커질수록 재비기의 heat duty 값이 증가되어 운전비용이 증가되는 상관관계를 보이게 된다[22]. 그러므로 초기장치 투자비용과 운전비용을 최소화 시킬 수 있는 최적의 이론단수[23]로고압과 저압 증류탑 모두 25단으로 결정하였다.

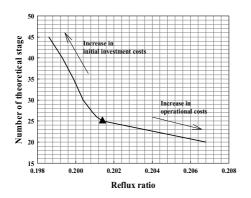


Fig. 6. Number of theoretical stage base on various reflux ratio at high pressure distillation column.

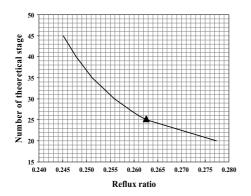


Fig. 7. Number of theoretical stage base on various reflux ratio at low pressure distillation column.

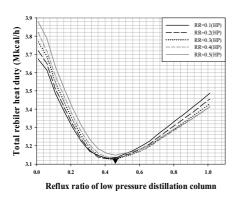


Fig. 8. Total reboiler heat duties base on various reflux ratios of high and low pressure distillation columns.

좀 더 최적화된 증류탑에 환류비 값을 얻기 위해 고압과 저압 증류탑의 환류비를 살펴보았다. Fig. 8에서 보여지는 것과 같이 고압 증류탑의 환류비를 0.1에서 0.5까

지 고정시키고, 저압 증류탑의 환류비를 0.1에서 1.00까지 0.05씩 변화시키면서 재비기의 heat duty 값을 변화를 알아보았다. 그 결과, 고압 증류탑의 환류비 0.30, 저압 증류탑의 환류비 0.46 일 때 재비기의 heat duty 값이 3.13×10⁶ kcal/h로 최소값을 나타내었다.

또한, 고압과 저압 증류탑의 원료 주입단의 위치에 따른 재비기의 heat duty 값의 변화를 Fig. 9와 Fig. 10에 각각 나타내었다. 고압 증류탑의 경우 원료 주입단 16단에서 소요되는 총 재비기의 heat duty 값이 2.33×106 kcal/h으로 최소값을 보였으며, 저압 증류탑의 경우 15단에서 0.77×106 kcal/h로 고압-저압 증류탑 공정에 소요되는 총 재비기의 heat duty 값은 3.10×106 kcal/h로 결정되었다.

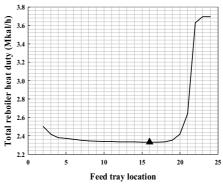


Fig. 9. Total reboiler heat duty base on various feed tray locations for high pressure distillation column.

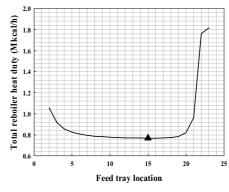


Fig. 10. Total reboiler heat duty base on various feed tray locations for low pressure distillation column.

3.3 저압-고압 증류탑 배열 전산모사 및 공정 최적화

저압-고압 증류탑 배열 공정에서는 저압(1 bar) 증류탑 하부로는 고순도의 1-프로판올이 얻어지고, 고압(10 bar) 증류탑의 하부로는 고순도의 벤젠을 각각 얻을 수 있다.

전산모사 및 공정 최적화는 고압-저압 증류탑 배열과 동일하게 수행하였다. 고압과 저압 증류탑 상부 벤젠의 조성 변화에 따른 재비기의 heat duty 변화를 살펴본 결과를 Fig. 11와 Fig. 12에 나타내었다. Fig. 11에서와 같이 저압의 증류탑에서는 벤젠의 조성 69.50 mol.%에서 재비기의 heat duty 값이 최소값을 나타내었으며, 고압의 증류탑에서는 벤젠의 조성 54.50 mol.%에서 최소값을 보였다(Fig. 12).

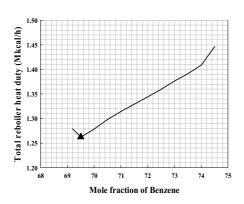


Fig. 11. Total reboiler heat duty of low-high pressure distillation columns based on various mole percentages of benzene in low pressure distillation column.

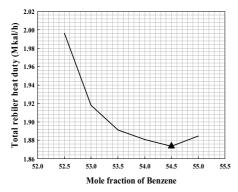


Fig. 12. Total reboiler heat duty of low-high pressure distillation columns based on various mole percentages of benzene in high pressure distillation column.

저압과 고압 증류탑에서 환류비에 대한 이론단수와의 관계를 Fig. 13과 Fig. 14에 각각 나타내었다. 최적의 이론단수는 저압과 고압 증류탑 모두 25단으로 이는 고압저압 증류탑 배열 공정과 동일하며, 1-프로판올과 벤젠 혼합물의 공정모사에서는 증류탑의 이론단수가 모두 25단으로 결정됨을 확인 할 수 있었다.

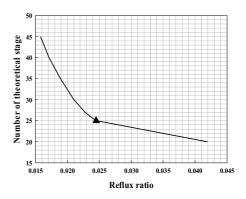


Fig. 13. Number of theoretical stage base on various reflux ratio at low pressure distillation column.

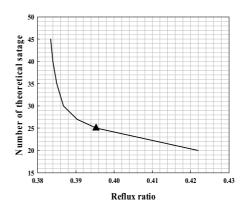


Fig. 14. Number of theoretical stage base on various reflux ratio at high pressure distillation column.

Fig. 15는 저압과 고압 증류탑의 환류비와 총 재비기의 heat duty와의 관계를 나타내었다. 0.20에서 0.60까지고압 증류탑의 환류비를 변화시키면서, 0.04에서부터 1.04까지 0.05씩 변화시켜 저압 증류탑의 환류비 변화를 살펴본 결과 저압 증류탑과 고압 증류탑의 환류비가 각각 0.44, 0.60 일 때 2.78×106 kcal/h로 총 재비기의 heat duty 값이 최소값을 갖는 것을 확인 할 수 있었다.

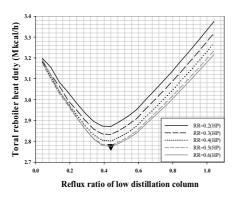


Fig. 15. Total reboiler heat duties base on various reflux ratios of low and high pressure distillation columns.

저압과 고압 증류탑의 원료 주입단과 재비기의 heat duty와의 관계를 Fig. 16과 Fig. 17에 각각 나타내었다. 원료 주입단의 변화에 따른 재비기의 heat duty 변화를 알아본 결과, 저압 증류탑의 경우 원료 주입단 13단에서 고압 증류탑의 경우 원료 주입단 18단에서 각각 1.48×10⁶ kcal/h와 1.27×10⁶ kcal/h로 최소의 재비기 heat duty 값을 나타내었으며, 총 재비기 heat duty 값은 2.75×10⁶ kcal/h로 결정되었다.

고압-저압 증류탑 배열 공정과 저압-고압 증류탑 배열 공정의 최적화된 결과는 Table. 2에 나타내었다.

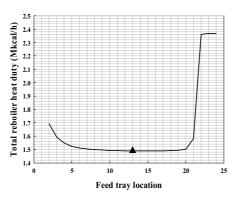


Fig. 16. Total reboiler heat duty base on various feed tray locations for low pressure distillation column.

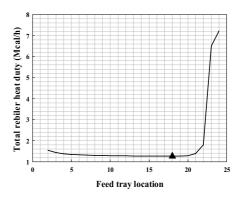


Fig. 17. Total reboiler heat duty base on various feed tray locations for low pressure distillation column.

Table 2. Results for optimized process

| 1 1 | | | | | |
|---|-----------|-------|--|--|--|
| High-Low pressure distillation column | | | | | |
| Column | HP | LP | | | |
| Number of stage | 25 | 25 | | | |
| Reflux ratio | 0.46 | 0.30 | | | |
| Feed stage location | 16 | 15 | | | |
| Pump heat duty (kcal/h) | 2,559.63 | | | | |
| Condenser duty (10 ⁶ kcal/h) | -1.35 | -1.27 | | | |
| Reboiler heat duty (10 ⁶ kcal/h) | 2.33 | 0.77 | | | |
| Low-High pressure distillation column | | | | | |
| Column | LP | HP | | | |
| Number of stage | 25 | 25 | | | |
| Reflux ratio | 13 | 18 | | | |
| Feed stage location | 0.44 | 0.60 | | | |
| Pump heat duty (kcal/h) | 13,084.82 | | | | |
| Condenser duty (10 ⁶ kcal/h) | -1.50 | -0.77 | | | |
| Reboiler heat duty (10 ⁶ kcal/h) | 1.48 | 1.27 | | | |

3.4 열 통합 공정의 전산모사

압력변환 증류공정에서 요구되는 총 재비기의 heat duty 감소를 위해 열 통합(heat integration) 공정[3]을 적용해 보았다. Fig. 18과 같이 열 통합 공정이란 두 개의 증류탑 중 하나의 증류탑 응축기에서 제거되어야 하는 열량이 다른 하나의 증류탑 재비기로 공급되야 되는 열량과 동일하거나 부분적일 때, 공정의 스트림을 연결하여 열 통합을 통해 열량을 효율적으로 사용하는 방법이다. 1-프로판을과 벤젠 혼합물의 경우 저압-고압 증류탑 배열 공정에서 저압 증류탑의 reboiler 후단 온도가 376.69 K이며 고압 증류탑의 상단에서 나오는 증기의

온도가 435.65 K이므로, 고압 증류탑에서 나오는 증기의 뜨거운 열만큼 저압 증류탑 재비기에 사용하면 저압 증류탑에 필요한 heat duty가 줄어들게 된다. 따라서 응축기에서 제거하고자하는 열량 0.77×10⁶ kcal/h를 저압 증류탑의 재비기로 공급하여 실질적인 저압 증류탑에 필요한 재비기의 heat duty는 0.71×10⁶ kcal/h로 감소하는 효과를 보이게 된다. 따라서 열 통합 공정을 적용한 경우저압-고압 증류탑 배열 공정에서 필요한 총 재비기의 heat duty 값이 1.97×10⁶ kcal/h로 감소하여, 고압-저압 증류탑 배열 공정보다 약 56.36%의 에너지를 감소 할수 있음을 보였다.

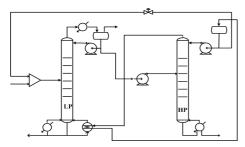


Fig. 18. Schematic diagram of pressure-swing distillation for low-high pressure configuration with heat integration.

4. 결론

1-프로판올과 벤젠 혼합물의 분리를 위해 고압-저압 증류탑 배열 공정과 저압-고압 증류탑 배열 공정을 통한 압력변환 증류공정을 통해 에너지 소모량을 최소로 하는 공적 최적화를 수행하였다. 고압-저압 증류탑 배열 공정 의 경우 최적의 운전조건은 고압 증류탑의 이론단수 25 단에서 환류비 0.46, 원료 주입단 16단 이었으며, 저압 증류단의 경우 이론단수 25단, 환류비 0.30, 원료 주입단 의 위치 15단에서 최적화된 총 재비기 heat duty 값은 3.10×10⁶ kcal/h이었다. 반면 저압-고압 증류탑 배열 공 정에서는 저압 증류탑의 이론단수 25단, 환류비 0.44, 원 료 주입단 13단에서 최적의 조건을 나타내었으며, 고압 증류탑에서는 이론단수 25단, 환류비 0.60, 원료 주입단 18단 일 때 총 재비기의 heat duty 값이 2.75×10⁶ kcal/h 로 나타났다. 따라서 1-프로판올과 벤젠 혼합물의 분리 공정에 압력변환 증류 공정을 사용할 경우 저압-고압 증 류탑 배열 공정으로 운전하는 것이 에너지를 더 절감할

수 있었다. 또한, 저압-고압 증류탑 배열 공정에 열 통합 공정을 적용한 경우 고압-저압 증류탑 배열 공정보다 약 57.36%의 heat duty를 절감할 수 있었어 더 경제적인 공 정으로 나타났다.

Nomenclatures

 \widehat{f}_i^v and \widehat{f}_i^l : liquid and vapor phase fugacity coefficient of component i in mixture

 $\hat{\phi}^l$: fugacity coefficient

T : absolute temperature [K]

P : pressure [bar]

 $P_i^{\it vap}$: vapor pressure of component i

R : gas constant [J/gmole K]

: liquid and vapor phase mole fraction of \boldsymbol{x}_i and \boldsymbol{y}_i

component i

 $a_{ij}, a_{ji}, b_{ij}, b_j$: binary interaction parameters in NRTL model α . β .

lpha : alpha function

 r_i : activity coefficient of component i

References

- I. Nagata, "Isothermal vapour-liquid equilibria for the ethanol+1-propanol+acetonitrile+benzene system", Phys. Chem. Liq., vol. 21, pp. 137-145, 1990.
 DOI:https://doi.org/10.1080/00319109008028475
- [2] R. S. Andrade, M. Iglesias, "Fluid phase topology of benzene+cyclohexane+1-propanol at 101.3 kPa", Int J. Thermophys vol. 36, pp. 1498-1518, 2015. DOI:https://doi.org/10.1007/s10765-015-1922-3
- [3] L. L. William, L. I. Chien, "Design and control of distillation systems for separating azeotropes", A John Wiley & Sons, INC., Publication, p.371-374, 2010.
- [4] X. Wu, JH. Nho, Kim, D. S., JH. Cho, "Comparison of consumption of two-column configuration and three-column configration in the extractive distillation precess for high purity refinement of isopropyl alcohol", Asian J. Chem., vol. 26, no. 16, pp. 5223-5229, 2014.

DOI:https://doi.org/10.14233/ajchem.2014.16804

- [5] J. R. Messick, W. R. Ackley, G. D. Moon, "Anhydrous Ethanol Distillation Method and Apparatus," U.S.Pat. US4,422,903, Dec. 1983.
- [6] JH. Cho, J. K. Jeon, "Optimization Study on the Azeotropic distillation process for isopropyl alcohol dehydration", Korean J. Chem. Eng., vol. 23, no. 1, pp. 1-7, 2006. DOI:https://doi.org/10.1007/BF02705684
- [7] JH. Cho, J. K. Park, J. K. Jeon, "Comparison of three and two-column configurations in ethanol dehydration using azeotropic Distillation", J. Ind. Eng. Chem., vol. 12, no. 2, pp. 206-215, 2006.
- [8] L. L. William, L. I. Chien, "Design and Control of Distillation systems for Separating Azeotropes", A John Wiley & Sons, Inc., 2010.
- [9] E. K. Hilmen, "Separation of Azeotropic Mixtures: Tools for Analysis and Studies on Batch Distillation Operation", Ph. D. Thesis, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway, 2000.
- [10] J. H. Lee, J. H. Cho, D. M. Kim, S. J. Park, "Separation of Tetrahydrofuran and Water using Pressure Swing Distillation: Modeling and Optimization", Korean. J. Chem. Eng., vol. 28, no. 2, pp. 591-596, 2011. DOI:https://doi.org/10.1007/s11814-010-0467-1
- [11] J. S. Cho, Y. M. Kim, J. H. Noh, D. S. Kim, JH. Cho, "Experimental Study of Vapor-Liquid Equilibrium and Optimization of Pressure-Swing Distillation for Methanol-Dimethyl Carbonate Binary System", Asia J. Chem., vol. 26, no. 20, pp. 6769-6779, 2014.
- [12] K. W. Kim, J. S. Shin, S. H. Kim, S. K. Hong, J. H. Cho, S. J. Park, "A Computational Study on the Separation of Acetonitrile and Water Azeotropic Mixture Using Pressure Swing Distillation", J. Chem. Eng. Japan, vol. 46, no. 5, pp. 1-6, 2013. DOI:http://dx.doi.org/10.1252/jcej.12we252
- [13] H. K. Park, D. S. Kim, J. H. Cho, "Simulation Optimization Study on the Pressure-Swing Distillation of Ethanol-Benzene Azeotrope", Korean Chem. Eng. Res., vol. 53, no. 4, pp. 450-456, 2015. DOI:http://dx.doi.org/10.9713/kcer.2015.53.4.450
- [14] J. Gross and G. Sadowski, "Perturbed-Chain SAFT: An Equation of State Based on a Perturbation Theory for Chain Molecules," Industrial and Engineering Chemistry Research, vol. 40, no. 4, pp. 1244-1260, 2001. DOI:https://doi.org/10.1021/ie0003887
- [15] S. H. Huang and M. Radosz, "Equation of State for Small, Large, Polydisperse and Associating Molecules", Industrial and Engineering Chemistry Research, vol. 29, no. 11, pp. 2284-2294, 1990. DOI:https://doi.org/10.1021/ie00107a014
- [16] S. H. Huang and M. Radosz, "Equation of State for Small, Large, Polydisperse and Associating Molecules: Extension to Fluid Mixtures", Industrial and Engineering Chemistry Research, vol. 30, no. 8, pp. 1994-2005, 1991. DOI:https://doi.org/10.1021/ie00056a050
- [17] J. T. Jung, J. H. Rho, and J. H. Cho, "A Study for Carbon Dioxide Removal Process Using N-Methyl-2-Pyrrolidone Solvent in DME Production Process",

- Clean Technology, vol. 18, no. 4, pp. 347-354, 2012. DOI:https://doi.org/10.7464/ksct.2012.18.4.347
- [18] G. G. Lim, S. K. Park, J. H. Rho, and Y. S. Baek, "A Study on Separation Process for Over 95 wt% DME Recovery from DME Mixture Gases," Clean Technology, vol. 15, no. 4, pp. 287-294, 2009.
- [19] JH. Noh, H. K. Park, DS. Kim, JH. Cho, "Comparative Study on the Estimation of CO₂ absorption Equilibrium in Methanol using PC-SAFT equation of state and Two-model approach", J. Korea Academia-Industrial cooperation Society, vol. 18, no. 10, pp. 136-152, 2017. DOI:https://doi.org/10.5762/KAIS.2017.18.10.136
- [20] H. Renon, J. M. Prausnitz, "Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures", AIChE J., vol. 14, no. 1, pp. 135-144, 1968. DOI:http://dx.doi.org/10.1002/aic.690140124
- [21] Z. Lei, B. Chen, Z. Ding, "Special Distillation Process, Elsevier Science", p.320-327, 2005.
 DOI: http://dx.doi.org/10.1016/B978-044451648-0/50007-0
- [22] J. J. Jr. McKetta, "Unit Operations Handbook 1", CRC Press, pp. 298-322, 1992.
- [23] "PRO/II Application Briefs", Simulation Sciences Inc. 2005.
- [24] Choonghee Kwon, Jaekyung Yang, Finding Optimal Conditions for the Densification Process of Carbon Materials, J. Soc. Korea Ind. Syst. Eng, vol. 40, no. 3 pp. 76-82, Sep. 2017. DOI: https://doi.org/10.11627/jkise.2017.40.3.076
- [25] Yong-Jun Kim, Young-Bae Chung, A Study on the Design of Tolerance for Process Parameter using Decision Tree and Loss Function, J. Soc. Korea Ind. Syst. Eng., vol. 39, no. 1, pp. 123-129, Mar. 2016. DOI: http://dx.doi.org/10.11627/jkise.2016.39.1.123

박 회 경(Hoey Kyung Park)

[정회원]



- 2005년 2월 : 공주대학교 공과대학 화학공학부 (공학사)
- 2007년 2월 : 공주대학교 공과대학 화학공학과 (공학석사)
- •2014년 2월 : 공주대학교 공과대학 화학공학과 (공학박사)
- •2014년 3월 ~ 2016년 6월 : 공주 대학교 화학공학과 박사 후 연구원
- 2014년 3월 ~ 현재 : 공주대학교 화학공학과 시간강사

<관심분야>

반응공학, 에어로졸 공정, 화학공정 모델링, CFD 전산모사

조 정 호(Jungho Cho)

[정회원]



- 1988년 2월 : 한양대학교 공과대학 화학공학과 (공학사)
- ●1991년 8월 : 한국과학기술원 화학 공학과 (공학석사)
- 1998년 2월 : 서울대학교 공과대학 화학공학과 (공학박사)
- 1991년 1월 ~ 1997년 2월 : 대림 산업(주) 공정부 과장
- •1997년 3월 ~ 2000년 2월 : 경인여자대학 산업환경공학부 전임강사
- 2000년 3월 ~ 2008년 2월 : 동양대학교 공과대학 생명화학공학과 조교수
- •2008년 3월 ~ 현재 : 공주대학교 화학공학부 부교수

<관심분야> 열역학, 공정 Simulation