추출 열 통합 증류계의 설계 및 최적화

조 훈 · 우대식 · 최유미 · 한명완[†]

충남대학교 화학공학과
305-764 대전광역시 유성구 궁동 220번지
(2011년 6월 21일 접수, 2011년 7월 25일 채택)

Design and Optimization of Extractive Thermally Coupled Distillation System

Hoon Cho, Daesik Woo, Yumi Choi and Myungwan Han[†]

Department of Chemical Engineering, Chungnam National University, 220 Gung-dong, Yuseong-gu, Daejeon 305-764, Korea
(Received 21 June 2011; accepted 25 July 2011)

요 약

본 연구에서는 두 개의 증류탑으로 이루어진 기존 추출 증류 공정과 열 통합된 연속식 증류탑으로 이루어진 추출 열 통합 증류 공정의 시스템에 대하여 에너지가 가장 적게 드는 최적의 구조 및 운전조건을 실현하기 위하여 Aspen plus의 최적화 기능을 이용하여 최적화를 행하였다. 두 구조 모두 추출제를 재순환시키는 구조로 모사하였다. 최적화 문제를 구성하여 에너지 비교, 다른 조성비, 추출제의 양에 따라 최적 조건의 변화를 파악하여 최적화된 공정 조업 조건 및 설계지침을 제시하였다. 두 구조의 비교에서 열 통합 증류 시스템이 기존의 증류시스템에 비하여 에너지 효율 및 장치비 면에서 보다 나은 것으로 나타났다.

Abstract – In this study, thermally coupled distillation system and conventional two-column process were investigated for extractive distillation. The two processes were simulated and optimized using Aspen plus. Objective function for the optimization was energy consumption and optimization results to reduce energy consumption were used to get guidelines for design and operation for the two extractive distillation processes. Comparison of these two processes showed that thermally coupled distillation system provided better energy efficiency and lower capital cost than conventional distillation system.

Key words: Thermally Coupled Distillation System, Extractive Distillation, Energy Consumption, Optimization

1. 서 론

증류는 혼합물을 분리하기 위한 방법으로 석유 및 화학 공정 산업에서 널리 쓰이고 있다. 영리적인 목적의 증류는 석유를 증류하여 휘발유, 경유, 등유와 같은 여러 종류의 연료로 분리하는 데에서부터, 공기를 증류하여 아르곤과 같은 특수한 기체를 얻는 데 이르기까지 광범위하게 사용된다[1]. 그러나 증류법이 주로 이용되는 석유 및 화학 공정 산업은 에너지 소비가 높기 때문에 제품의 에너지 절감 문제를 해결하기 위한 것이 증류시스템 설계에서 중요한 핵심이 되고 있으며 에너지 소비는 CO₂ 배출과 밀접한 관련이 있기 때문에 많은 나라에서는 이를 줄이기 위해 연구가 진행되고 있다[2]. 몇몇 나라에서는, 대안으로 열 통합 증류 공정이 개발되어 일부 상용화시켜 사용하고 있으며 기존 공정과 비교하여 최대 30%까지 에너지를 절감할 수 있으며 CO₂ 배출량도 줄일 수 있는 구조로 알려져 있다. 또한

열 통합 증류 공정은 재비기 또는 응축기를 하나만 가지는 구조로써 장치비도 절감할 수 있다[1,2,3]. 그러나 재순환 흐름을 포함하고 있어 구조가 복잡하며 설계 및 최적화의 어려움이 있다[4].

그 중 공비 혼합물의 분리에 이용되는 증류는 추출 증류와 공비 증류 등이 이용되며, 이 중 추출 증류는 끓는점이 비슷한 성분이 혼합되어 있는 경우, 보통의 증류법으로 분리할 수 없기 때문에 이 때 추출제를 병용하면 쉽게 분리할 수 있다. 혼합된 두 성분보다 끓는점이 높은 제 3성분을 가하면 두 성분 중 제 3성분에 친화성이 강한 성분의 휘발도가 내려가게 되고 두 성분 간의 상대 휘발도가 커진다. 그 결과 분리조작이 쉬워지고 증류로 두 성분을 나눌 수 있다.

본 연구에서는 추출제가 재순환 되는 기존 추출 증류 공정과 추출 열 통합 증류 공정 ETCDS(Extractive Thermally Coupled Distillation System) 구조의 에너지 소모를 비교하기 위해 두 가지 경우의 공비 혼합물에 대하여 모사하였다. 에너지 소모량을 최소화하는 최적화 문제를 구성하여 공정변수(에너지 소비, 다른 원료 조성비, 추출제의 양)에 따른 최적 조건의 변화를 살펴보았다. 이를 바탕으로 추출 열 통합 증류 공정의 특성을 파악하여 최적화된 공정 조업 조건 및 이

[†]To whom correspondence should be addressed.
E-mail: mwchan@cnu.ac.kr

[‡]이 논문은 KAIST 박선원 교수님의 정년을 기념하여 투고되었습니다.

를 위한 설계지침을 제시하였다.

2. 공정 설계

Fig. 1은 공비 혼합물을 분리하기 위한 구조로 2가지로 분류하였다. Fig. 1(a)는 가장 기본적인 구조로써 두 개의 증축기와 재비기를 가지고 있는 공정이다. 이 공정은 탑 상부에서 두 번째 탑으로 연결하는 구조와 탑 하부에서 두 번째 탑으로 연결되는 구조로 나눌 수 있는데, Fig. 1(a)는 탑 하부에서 두 번째 탑으로 연결되는 구조를 이용하였다. Fig. 1(b)의 추출 열 통합 증류 공정은 첫 번째 탑과 두 번째 탑을 상호 연결 흐름을 사용하여 증축기나 재비기의 수를 하나로 줄일 수 있다. 이를 통하여 장치비 및 에너지 소비를 줄일 수 있다. 상호 연결 흐름을 액상이나 기상 흐름으로 선택해 줄 수 있으며, 이는 두 번째 탑에서 생성되는 물질의 회수율과 순도에 영향을 준다. 또 한 추출제를 재순환 시킴으로써 추출제를 계속 공급해주지 않고, 초기 공급된 양을 효율적으로 재사용할 수 있다. 열역학 모델은 UNIQUAC 식을 이용하였다[5]. Table 1에 기존 추출 증류 구조 및 추출 열 통합 증류 공정에 적용한 공비 혼합물, 원료 조성비, 추출제를 나타냈다. M1(THF : water)은 THF(tetrahydrofuran)와 물의 공비 혼합물이며 추출제로 1,2-Propanediol을 사용하여 분리하는 경우를 나타냈다. M2(ethanol : water)는 에탄올과 물의 공비 혼합물을 추출제로 EG(ethylene glycol)을 사용하여 분리하는 경우이다. 원료 혼합물의 비는 8:2를 기본으로 사용하였다[5,6].

Table 2,3에 기존 추출 증류 구조와 추출 열 통합 증류 공정에 대한 공정 조업 조건을 나타냈다. 모든 공정에서 압력은 동일하게 하였으며, 두 구조에 대하여 총 단수는 36단으로 동일한 조건으로 하였다. 측면 흐름단 및 원료 투입단의 선정은 다음과 같이 행하였다.

Table 2. Specification of the two processes for M1 (conventional column & ETCDS)

	Conventional column	ETCDS
1st Column pressure (atm)	1.14	1.14
2nd Column pressure (atm)	1.14	1.14
1st Column stage	24	33
2nd Column stage	12	3
1st Feed stage (feed ratio)	21(8:2), 18(5:5)	21(8:2), 19(5:5)
2nd Feed stage	6	—
Extractant stage	3	3
Interconnection stage	—	28
Extractant make up (kmol/h)	0.1	0.1

Table 3. Specification of the two processes for M2 (conventional column & ETCDS)

	Conventional column	ETCDS
1st Column pressure (atm)	1.14	1.14
2nd Column pressure (atm)	1.14	1.14
1st Column stage	24	33
2nd Column stage	12	3
1st Feed stage (feed ratio)	18(8:2), 21(5:5)	20(8:2), 23(5:5)
2nd Feed stage	6	—
Extractant stage	3	3
Interconnection stage	—	29
Extractant make up (kmol/h)	0.1	0.1

Fig. 2의 추출 열 통합 증류 공정에서 각 단의 기체 조성에 대하여 나타내었다. 두 번째 탑에서 생성되는 물질인 원료 혼합물 중 중비점 물질(물)의 농도가 제일 높은 28단으로 측면 기체 흐름의 단을 선택

Fig. 1. Extractive distillation processes: (a) conventional column, (b) extractive thermally coupled distillation system.

Table 1. Analysis of azeotropic mixtures

Mixture	Feed composition	Feed component flows (kmol/h)	Extractant
M1	THF(tetrahydrofuran)/water	36.28/9.07(8:2)	1,2-Propanediol
M2	ethanol/water	36.28/9.07(8:2)	EG(ethylene glycol)

Fig. 2. Vapor composition profile in column (ETCDS).

Table 4. Variation of water purity and energy consumption of water with the change of Fv stage

Stage	Water purity	Heat duty (kW)
30	0.9899986	1334.226
28	0.9900777	1083.018
26	0.9899965	1166.754
24	0.9900112	1459.830

Table 5. Variation of component purities with the change of feed stage (M1, feed ratio 8:2)

Feed stage	THF purity	Water purity	1,2-Propanediol
15	0.9890993	0.9889388	0.9999857
18	0.9891104	0.9889842	0.9999857
21	0.9891739	0.9890325	0.9999857
24	0.9870687	0.9801259	0.9999897
27	0.6894026	0.9182936	0.9999925

해줄 수 있다. 이는 두 번째 탑으로 가는 흐름 중의 중비점 물질(물)의 농도가 높으므로 측면 증류탑에서의 분리 정제가 쉬워져 에너지 소모량이 감소된다. Table 4는 측면 기체 흐름의 단 변화에 대한 중비점 물질(물)과 에너지 소비량에 대해 나타내었다. 28단일 때 에너지 소비가 가장 적었으며, 이 때 중비점 물질(물)의 순도가 가장 높게 나타났다. 이로써 측면 기체 흐름의 단수는 28단이 적절하다는 것을 알 수 있다. 원료 주입단의 경우에는 원료 조성과 가장 비슷한 조성을 나타내는 단수를 최적의 단수로 설정해줄 수 있다. Table 5는 원료 주입단 변화에 대한 각 물질의 순도를 나타내었다. 최소의 에너지 일 때 21단에서 각 물질의 순도가 99%를 만족하였으며, 이로써 원료 주입단은 21단이 적절하다는 것을 알 수 있다.

3. 최적화

최적화는 많은 미결정 변수들에 대한 최적화 알고리즘을 이용하여 결정 변수 혹은 공정의 최적의 설정값(set point)을 찾아내는

것이다. 이는 공정 모델을 개선한 후 공정의 제약 조건과 상위 단계의 경제성을 고려하여 최적의 효율을 얻을 수 있는 조업 조건을 제시하는 것이다. 일반적인 최적화는 다음과 같이 표현할 수 있다.

Minimize $f(x)$

Subject to

$c(x)=0$ (equality constraints)

$g(x)\leq 0$ (inequality constraints)

$f(x)$ 는 목적함수이며 공정으로부터 얻을 수 있는 이익을 말한다. 등식 제약 조건인 $c(x)$ 는 수식 기반 모델로서 물질 수지식, 에너지 수지식, 열역학적 관계식, 물리적 제약식 및 도함수를 의미한다. $g(x)$ 는 공정의 제약 조건식 혹은 제약 조건을 의미한다.

공정을 최적화 하는 것은 목적함수와 그에 따른 제약 조건을 이용하여 목적함수를 극대화하는 조업 조건 혹은 설계 조건을 찾는 것이다. 공정 이득을 대변하는 목적함수는 일반적으로 생산량, 운전 비용, 에너지 사용량, 유틸리티 사용량 등으로 구성된다.

최적화는 실제 공정 내용과 거의 근접하게 계산해주는 모델을 통하여 얻을 수 있으며, 계산 결과를 바탕으로 최적의 조업 및 설계 조건을 구할 수 있다.

본 연구에서는 최근 널리 사용되는 Aspen plus에 내장된 SQP (Successive Quadratic Programming)를 사용하였다. 추출 증류계에 대한 최적화 문제를 기존 추출 증류 공정과 추출 열 통합 증류 공정으로 각각 구성하였다.

<기존 추출 증류 공정>

Minimize (Q) = f (Q1, Q2, FE, D1, D2)

Subject to Purity (XD1)=0.99

Purity (XD2)=0.99

<추출 열 통합 증류 공정>

Minimize (Q) = f (Fv, Q, FE, D1, D2)

Subject to Purity (XD1)=0.99

Purity (XD2)=0.99

Table 6은 최적의 공정을 모사하기 위한 최적화 변수와 제한조건을 나타냈다. 목적함수로 각 탑의 에너지 소모량(Q)을 고려하였다. 공정의 제한조건으로는 물질의 순도가 99%가 되도록 하였다. 최적화 변수는 재비기 열량(Q1, Q2), 탑 상 물질 유속(D1, D2), 측면 기체 흐름(Fv), 추출체의 양(FE)을 고려하였다[7].

에너지 소모량(Q)은 첫 번째 탑과 두 번째 탑의 재비기에 사용되는 총괄 에너지이다. 따라서 본 최적화 문제는 각 물질들의 순도를 99%로 유지하면서 에너지 소모량을 최소화 하는 최적화 조건을 찾는 것이다. 각 증류탑의 단수와 측면 흐름단의 위치는 고정하였다. 각 증류탑의 단수는 분리에 충분한 단수로 예비 모사를 통하여 선정

Table 6. Optimization variables and constraints

	Conventional Column	ETCDS
Optimization variables	Q1, Q2, D1, D2, FE	Q, Fv, FE, D1, D2
Constraints	Low-boiling substances (99%) Mid-boiling substance (99%)	Low-boiling substances (99%) Mid-boiling substance (99%)

하였으며 탑의 전체 단수를 같게 하였다. 측면 흐름단의 위치는 저비점 물질(THF)이 측면 정류기(side rectifier)에 유입되지 않는 단을 선정하였다. 다양한 경우의 최적화 모사를 통하여 최적 조업을 위한 설계 지침을 얻을 수 있도록 하였다.

4. 결과 및 토론

4-1. 추출제 양에 따른 최적 에너지의 변화

Fig. 3(a)는 공비 혼합물(M1), 원료 조성비 8:2, 5:5이며 추출 열 통합 증류 공정일 때 추출제의 양에 대한 최적의 에너지 소비를 나타냈다. Fig. 3(a)에서 각 원료 조성비에 대한 최적의 추출제 양이 존재하였으며, 추출제 양이 증가할수록 에너지 소비는 증가하였다.

4-2. 추출제 양에 따른 최적 환류 유속의 변화

Fig. 3(b)는 공비 혼합물(M1), 원료 조성비 8:2, 5:5이며 추출 열 통합 증류 공정일 때 추출제의 양에 대한 최적점에서의 환류 유속을 나타냈다. 추출제의 양이 증가할수록 최적 환류 유속도 증가하였다. 즉 추출제 유속과 환류 유속은 최적의 비를 갖는 것으로 보인다. 환류 유속의 증가는 에너지 소모량의 증가와도 상통하므로, 추출제의 양이 증가할수록 에너지 소비가 증가하는 경향에 대한 설명이 될 수 있다.

4-3. 최적 측면 기체 흐름 유속의 선정

Fig. 4는 공비 혼합물(M1)이며 추출 열 통합 증류 공정일 때 원료 조성비에 대한 최적 측면 기체 흐름을 나타냈다. 중비점 물질(물)의 비가 증가할수록 최적 측면 기체 흐름은 증가하였다. 이는 중비점 물질(물)의 비가 증가함에 따라 두 번째 탑에서 탑 상 물질 유속이 증가하기 때문이다. 측면 기체 흐름량은 중비점 물질의 양에 일정비를 곱한 값이 최적값으로 나타났다. 이는 측면 기체 흐름은 높은 중비점 물질농도를 유지하기 때문에 두 번째 탑에서 낮은 환류비가 유지될 정도의 측면 기체 유속이 최적으로 되는 것으로 보인다.

Fig. 5는 원료 조성비 8:2와 5:5일 때 공비 혼합물 M1(THF : water)을 이용하여 추출제 변화에 대한 최적 측면 기체 흐름을 나타내었다. 추출제의 유속변화에 대하여는 일정한 경향성을 나타내지 않았다. 이는 중비점 물질(물)의 순도는 측면 기체 흐름의 영향보다 두 번째 탑의 탑 상 물질 유속에 더 많은 영향을 받으므로 측면 기체 흐름이 일

Fig. 4. Variation of optimum vapor side stream flow (F_v) with feed composition ETCDS (M1).

Fig. 5. Variation of optimum vapor side stream flow (F_v) with change of extractant flow rate: feed ratio 8:2, 5:5 (M1, ETCDS).

정한 범의 안에서 최소한의 에너지 소비를 갖는 최적점을 구할 수 있기 때문이다.

Fig. 3. Variation of energy consumption ((a) M1, feed ratio 8:2, 5:5) and optimum reflux rate ((b) M1, feed ratio 8:2, 5:5) with the change of extractant flow.

Table 7. Variation of recoveries and quantity of water for feed composition

Feed ratio	Extractant flow rate (kmol/h)	Recovered water flow rate (kmol/h)	Recoveries of water(%)
9:1(40.82 : 4.53)	46.002	4.1214	90.9798
8:2(36.28 : 9.07)	42.360	8.6771	95.6749
7:3(31.71 : 13.59)	35.542	13.2592	97.4225
6:4(27.18 : 18.12)	33.332	17.8690	98.5062
5:5(22.65 : 22.65)	31.120	22.4223	98.9945

Fig. 6. Variation of optimum extractant rate with change of feed composition (M1, ETCDS).

4.4. 원료 조성에 따른 최적점의 변화

Table 7은 원료 조성에 대하여 중비점 물질(물)의 비에 대한 최적의 추출제 양과 중비점 물질(물)의 회수율, 회수율을 나타냈다. 물의 비가 증가할수록 추출제의 양은 감소하였고, 회수율은 증가하였다. 이는 제약조건으로 순도만 고려하고, 회수율의 변화를 고려하지 않았기 때문에 99%의 순도를 갖는 최적의 에너지 소비에서 회수율은 중비점 물질(물)의 비가 증가할수록 증가하였다. Fig. 6은 공비 혼합물(THF : water)일 경우 원료 조성에 대한 최적의 추출제 양을 나타낸 그래프이다. 중비점 물질(물)의 비가 증가할수록 추출제 양은 감소하였다. 이는 중비점 물질(물)의 양이 증가할수록 탑 상에서의 저비점 물질(THF)의 양이 적어지고 이에 따라 최적의 환류 유속이 감소하고, 최적의 추출제 유속도 감소하게 된다. 따라서 원료 혼합물 중 중비점(물)이 증가할수록 소모되는 에너지도 줄어들게 된다.

4.5. 추출 열 통합 증류계의 설계

앞서 나타난 모사 결과에서 얻은 설계 지침들을 바탕으로 하여 다음의 추출 열 통합 증류계를 위한 설계 순서를 제안하였다.

1. 첫 번째 탑의 단수 선정은 예비모사를 통하여 물질을 분리하기

에 적절한 단수를 선택한다.

2. 두 번째 탑의 단수 선정은 추출 증류의 경우 중비점과 고비점 물질의 상대휘발도가 크기 때문에 비교적 적은 단수를 선택한다.

3. 원료 주입단의 선정은 조성 프로파일을 확인하여 원료의 조성 과 가장 비슷한 조성을 나타내는 단수를 최적의 단수로 설정해 줄 수 있다.

4. 측면 흐름단의 선정은 조성 프로파일을 확인하여 중비점 물질의 농도가 높고, 저비점 물질의 농도가 가장 낮은 단을 선정한다. 이는 두 번째 탑에서 생성되는 중비점 물질의 농도를 쉽게 만족시켜 줄 수 있기 때문이다.

5. 측면 흐름 유속(F_p) 선정은 중비점 물질의 비가 증가할수록 측면 흐름 유속도 증가하며, 측면 흐름 유속은 중비점 물질의 양에 낮은 비(예를 들어 1.2배)를 곱한 값이 최적값이 된다. 이는 측면 기체 흐름은 높은 중비점 물질 농도를 유지하기 때문에 두 번째 탑에서 낮은 환류비가 유지될 정도의 측면 기체 유속이 최적이다.

6. 첫 번째 탑의 탑 상 물질 유속(D1)은 원료 물질인 저비점 물질의 양을 기준으로 한다.

7. 원료 조성에 따른 최적의 추출제 양이 존재한다. 추출제 양을 변화시켜 저비점 물질의 순도를 만족하면서 재비기 열량(Q_r)이 최소화되는 추출제 양을 구한다.

8. 두 번째 탑의 탑 상 물질 유속(D2)을 조절하여 중비점 물질의 순도를 얻는다.

4.6. 기존 추출 증류 공정과 추출 열 통합 증류계의 성능 비교

최적의 에너지 소비를 가지는 기존 추출 증류 공정과 추출 열 통합 증류 공정을 모사하였고, 기존 추출 증류 공정에 비해 에너지를 감소시킬 수 있는지에 대해 알아보았다. Table 8은 원료 조성비 8:2와 5:5일 때 공비 혼합물 M1(THF : water), M2(ethanol : water)에 대하여 최적점에서 두 공정의 에너지 소비를 비교하였다. 기존 추출 증류 공정에 비해 추출 열 통합 증류 공정은 약 6~25% 정도 에너지가 감소되는 것으로 나타났다. 이는 에너지면에서 효율적이라 볼 수 있다. M2, 8:2일 경우에도 M1, 8:2일 때의 결과와 비슷한 에너지 감소를 보였다. 또한 M2, 5:5일 경우에는 5~10% 정도 에너지가 감소되는 것으로 나타났다. 기존 추출 증류 공정에 비교하여 추출 열 통합 증류 공정은 기존 추출 증류 공정의 두 번째 탑에서 중비점 물질과 고비점 물질의 분리 기능을 측면 정류탑으로 대체한 것이 특징이

Table 8. Comparison of energy consumption between ETCDS and conventional column

Feed ratio	Optimum extractant flow rate (kmol/h)	ETCDS (kW)	Conventional column (kW)	Energy savings of ETCDS compared to the conventional column (%)
8:2, M1	42.36	1083.018	1414.647	23.44
8:2, M2	25.6	783.653	952.069	17.69
5:5, M1	31.12	986.049	1189.083	16.87
5:5, M2	10.4	775.876	831.709	6.71

Table 9. Comparison of energy consumption between ETCDS and conventional column for the change of water purity constraint ((kW), (feed ratio 8:2, M1))

Optimum extractant flow rate (kmol/h)	Purity constraint of water (%)	ETCDS (kW)	Conventional column (kW)	Energy savings of ETCDS compared to the conventional column(%)
42.36	99	1083.018	1414.647	23.44
42.82	95	1058.516	1220.757	13.29
39.76	90	1055.419	1158.484	8.90

Fig. 7. Liquid composition profile in 1st column : (a) M1, ETCDS, (b) M1, conventional column.

다. 따라서 중비점 물질(물)의 순도 사양에 따라 두 구조의 성능을 비교하였다. Table 9는 공비 혼합물 M1(THF : water)에 대하여 원료 조성비 8:2에 대하여 물의 순도를 95, 90%로 변화를 주었을 때 두 공정의 에너지 소비를 비교하였다. 중비점 물질(물)의 순도가 99%일 경우에는 기존 추출 증류 공정에 비해 ETCDS 구조의 에너지 소비 감소는 약 23%로 나타났으며, 물의 순도를 95%에서 90%로 낮출수록, 에너지 감소의 폭이 줄어들는 것으로 나타났다. Fig. 7은 추출 열 통합 증류 공정과 기존 추출 증류 공정에서 각 단계에서의 액체 조성에 대하여 나타내었다. 기존 추출 증류 공정은 중비점 물질(물)이 탑저로 내려감에 따라 농축되어 농도가 상승하다가 다시 재혼합에 의하여 농도가 감소하는 것을 볼 수 있다. 반면에 추출 열 통합 증류 공정은 이러한 재혼합 효과가 없는 것을 확인할 수 있다. 즉 기존 추출 증류 공정에 비해 추출 열 통합 증류 공정은 재혼합 효과를 막고 두 번째 탑으로 높은 농도의 중비점 물질(물)을 보내 에너지 소모량을 감소시킨다.

5. 결 론

증류는 혼합물을 분리하기 위한 방법으로 석유 및 화학공장에서 널리 사용되고 있다. 그러나 에너지 소비가 높은 단점을 가지고 있기 때문에 에너지 절감문제가 설계에서 중요한 문제이다. 본 연구에서는 Aspen plus의 최적화 기능을 이용하여 두 구조의 최적화된 공정을 모사하여 비교 분석하였다. 이를 위하여 최적화 문제를 구성하고, 각 설계구조들을 SQP 방법을 사용하여 최적화를 수행하였다. 각 구조의 최적화 결과를 이용하여 에너지 비교, 다른 원료 조성비, 추출제의 양에 따라 변화를 파악하였고, 다음의 결론을 도출하였다.

원료 공급단은 원료 혼합물의 조성과 유사한 조성을 갖는 단으로 하는 것이 효과적이며 이는 원료 혼합물과 탑 내 원료 공급단의 내용물 간 재혼합에 의한 에너지 손실을 최소화하는 것에 기인한다. 최적 측면 흐름단은 중비점 물질(물)의 기체 농도가 제일 높은 단을 설정해야 하며, 이는 측면 정류기(side rectifier)로 많은 양의 중비점 물질(물)을 보낼 수 있기 때문이다.

공비 혼합물 M1(THF : water), M2(ethanol : water)를 이용하여 2가지 공정 구조에 관하여 원료 조성비에 따른 최적화 작업을 수행하였을 때 최적의 추출제 양이 존재하였고, 최소의 에너지 소비를 나타냈다. 추출제의 양이 증가할수록 에너지 소비와 환류 유속이 증가하였다. 이는 추출제의 양과 환류 유속은 최적의 비를 가지며, 추출제의 양이 증가할수록 에너지 소비가 증가하는 경향을 보인다.

측면 기체 흐름의 최적점은 중비점 물질(물)의 비가 증가할수록 증가하였다. 측면 정류기는 중비점 물질(물)과 추출제인 고비점 물질과의 분리가 일어나지만 두 성분 간 휘발도 차가 일반적으로 크기 때문에 높은 환류비가 필요하지 않다. 따라서 중비점 물질의 양에 대해 낮은 환류비가 유지될 정도의 측면 기체 흐름이 최적이 된다. 추출제 변화에 대해서는 일정한 경향성을 나타내지 않는다. 이는 측면 기체 흐름은 일정한 범위 안에 존재하게 되면 최소한의 에너지 소비를 갖는 최적점을 구할 수 있기 때문이다.

중비점 물질(물)의 비가 증가할수록 최적 추출제의 양은 감소하였다. 이는 중비점 물질(물)의 양이 증가할수록 탑 상에서의 저비점 물질(THF)의 양이 적어지고 이에 따라 최적의 환류 유속이 감소하고, 최적의 추출제 양도 감소하게 된다. 따라서 원료 혼합물 중 중비점(물)이 증가할수록 에너지 소비는 줄어들게 된다.

공비 혼합물(M1, M2)을 이용하여 원료 조성비(8:2, 5:5)에 대하여 최적점에서 두 공정의 에너지 소비를 비교하였다. 기존 추출 증류 공정에 비해 추출 열 통합 증류 공정일 때 에너지 소비량이 감소하는 경향을 보였다. 또 한 중비점 물질(물)의 순도를 99, 95, 90%로 변화를 주어 두 공정의 에너지 소비를 비교하였다. 중비점 물질(물)의 순도가 높을수록, 추출 열 통합 증류 공정의 에너지 효율이 좋은 것으로 나타났다.

사용기호

ETCDS	: Extractive thermally coupled distillation system
SQP	: Successive quadratic programming
Q_i	: Heat duty of column i [kW]
Q	: Total energy consumption [kW]
F_v	: Vapor side stream flow rate [kmol/h]
F_E	: Flow rate of extractant [kmol/h]
D_i	: Distillate rate of column i [kmol/h]

참고문헌

1. Juan Gabriel Segovia-Hernandez, Adrian Bonilla-Petriciolet and Luis Ignacio Salcedo-Estrada, "Dynamic Analysis of Thermally Coupled Distillation Sequences with Unidirectional Flows for the Separation of Ternary Mixtures," *Korean J. Chem. Eng.*, **23**(5), 689-698(2006).
2. Juan Gabriel Segovia-Hernandez, Esteban Abelardo Hernandez-Vargas, Jorge Alberto Marquez-Munoz, "Control Properties of Thermally Coupled Distillation Sequences for Different Operation Conditions," *Comput. Chem. Eng.*, **31**, 867-874(2007).
3. Nelly Ramirez and Arturo Jimenez, "Two Alternatives to Thermally Coupled Distillation Systems with Side Columns," *AIChE Journal November*, **50**(11), (2004).
4. Glinos, K. and Malone, M. F., "Optimality Regions for Complex Column Alternatives in Distillation Columns," *Trans. Ichme cherd*, **66**, 229(1988).
5. Hernandez, S. and Roberto, G.-G., "Design and Optimization of Thermally Coupled Extractive Distillation Sequences," 19th European Symposium on Computer Aided Process Engineering.
6. Universidad de Guanajuato, Facultad de Quimica, Guanajuato, "Analysis of Energy-Efficient Complex Distillation Options to Purify Bioethanol," *Chem. Eng. Technol*, **31**(4), 597-603(2008).
7. Barbel Kolbe and Sascha Wenzel, "Novel Distillation Concepts Using One-shell Columns," *Chem. Eng. Process.*, **43**, 339-346 (2004).