Introduction
of
Chemical Process Simulator

조 정 호 Ph.D.

1st Week

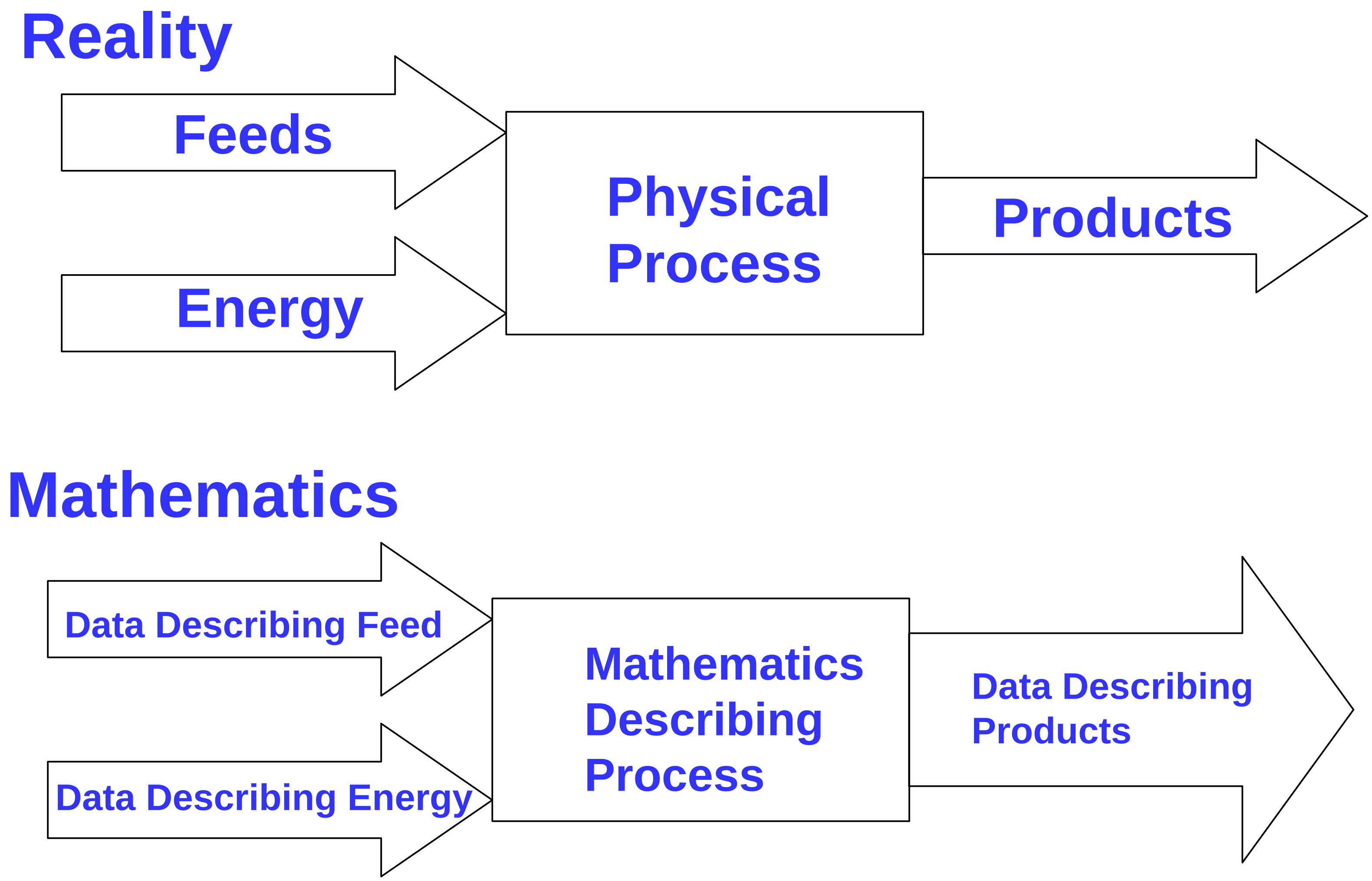
August 20, 2001 through August 26, 2001

화학공정 모사기란 무엇인가?

- **화학공정 모사기**(Chemical Process Simulator)**는 화학공정을 열역학을 이용하여 수학적으로 모델화하여서 이를** Computer Hardware**를 이용하여 실제 공장에서 일어나는 상황을 묘사하는** Software**이다**.

Henry Cho

Process Simulation



공정모사의 목적
(Purposes for Simulation?)

- 새로운 공장의 설계

  New Plant Design

- 기존 공장의 개조 (증설)

  Existing Plant Revamp (Expansion)

- 기존 공장의 운전조건 진단

  Existing Plant Operations

- 교육 훈련

  Engineer Training

공정모사의 목적

- 공정 모사기를 사용하는 목적은 첫째, 새로운 화학공장의 설계를 들 수 있다. 새로운 공장을 설계하기 전에 대부분의 경우에는 타당성 조사와 여러 가지 사례 조사를 실시해야 하는 데, 이 경우 시험공장을 가동하는 경우보다 비용도 적게 소요되지만 타당성 조사의 경우 대부분은 빠른 시간 내에 결론을 내야 하므로 이러한 일에는 공정 모사기를 사용하지 않고는 불가능하다고 할 수 있다.
- 기존 공장의 개조도 마찬가지이다. 대부분의 화학공장은 처음에 설계할 당시와는 원료의 성분이 다르므로 기존 공장을 증설하는 경우도 처음 설계하는 것과 같이 모사기를 사용하지 않고는 많은 비용과 시간이 들게 된다.
- 기존 공장의 운전조건을 개선하는 경우도 공정모사를 통하여 정량적으로 정확히 알지 못하고는 개선사항을 파악하기 힘들다.

공정 모사의 장점
Advantages of Simulation

- Faster Calculations - More solutions
- Accurate Results
- Standardization
  - Pure Component / Binary Database
  - Thermodynamic Methods
- Solution of Recycle Processes
- Less Costly than Plant Tests !!

공정 모사의 장점 (I)
Faster Calculations

- The equilibrium flash separator is the simplest equilibrium-stage process with which the designer must deal. Despite the fact that only one stage is involved, the calculation of the compositions and the relative amount of the vapor and liquid phases at any given pressure and temperature usually involves a tedious trial-and-error solution.

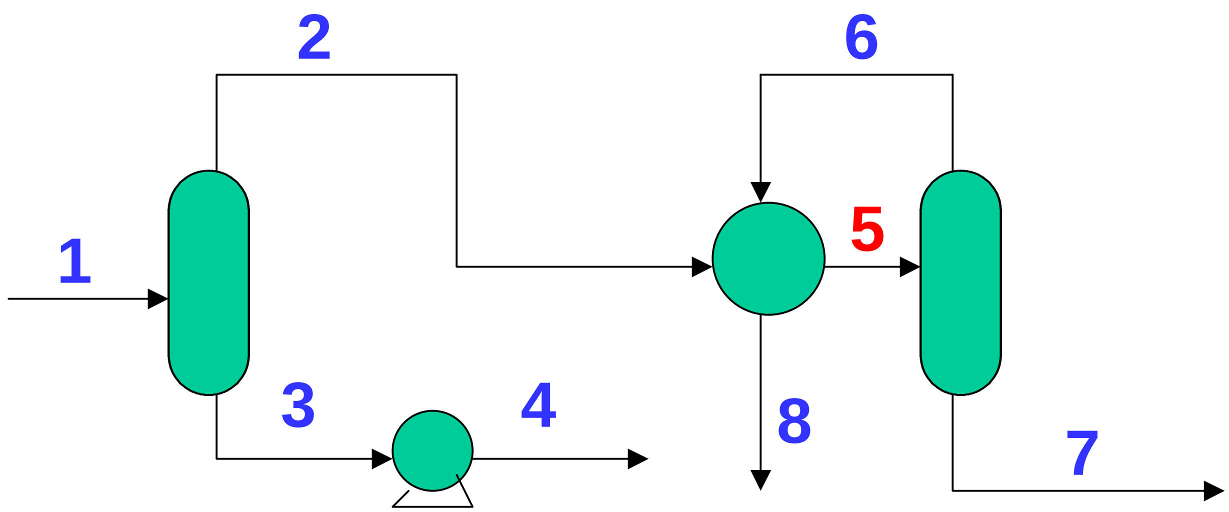
Buford D. Smith, 1963

공정 모사의 장점 (II)
Standardization

- Pure Component Database
  - 1,700개 이상의 순수성분 데이터베이스
- Binary Database
  - 10,000여 쌍의 이성분계에 대한 매개변수 내장
- Thermodynamic Option
  - 60여 개의 열역학 모델식 내장
  - EOS Model, LACT Model, Special Package !

공정 모사의 장점 (III)
Solution of Recycle Process

- Sequential-Modular Approach



공정 모사의 장점 (IV)
Less Costly than Plant Tests !

- 파일럿 플랜트에 비해 비용이 적게 소요 (파일럿 플랜트의 경우 증류탑 1기당 최소한 5,000만원 소요)될 뿐더러, 모사기는 여러 가지 다양한 공정에 적용(파일럿 플랜트는 특성상 한가지 공정에만 적용가능)할 수 있다. 또한 잘 만 사용하면 같은 공정에 대해서는 언제나 같은 결과를 도출하므로 재현성(파일럿 플랜트는 실험시간, 실험자에 따라 약간씩 다른 결론 도출)이 있다.

DONG YANG UNIVERSITY

New Plant Design

When should we use it?

1. Feasibility Study
2. Case Study
3. Final Heat and Material Balance
4. Equipment Sizing and Rating

Ex) Depropanizer (Dec3)

1. 각종 Product의 질과 양
2. Tower 직경과 필요단수
3. 각종 열교환기의 Duty와 Size
4. Basic and Detail Engineering에 필요한 물성치

Depropanizer New Design (I)

- **Feedstock Characterization**

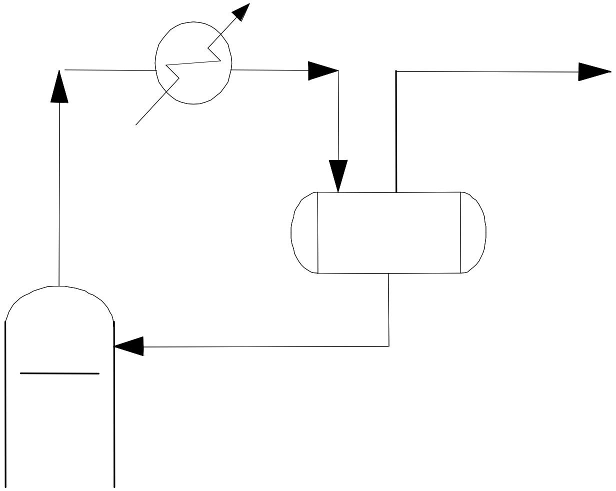
No.	Component	Moles/hr
1	C2	0.04
2	C3	23.49
3	iC4	15.02
4	nC4	20.40
5	iC5	7.14
6	nC5	5.62
7	nC6	4.86
8	C7+	3.61
	Temp. (oF)	225
	Press. (psia)	400

Depropanizer New Design (II)

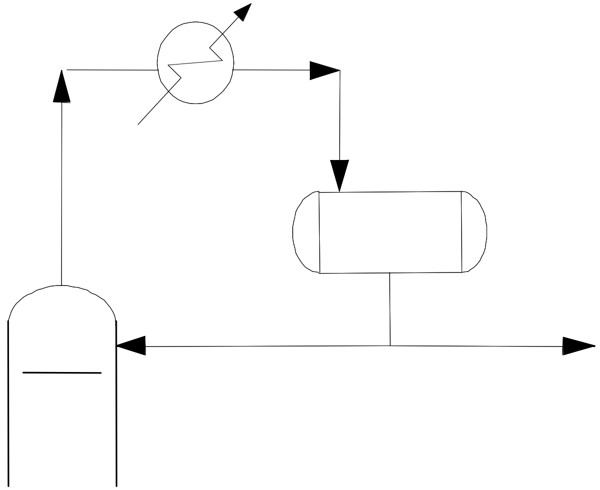
1. Determine the number of tray to obtain:
   a) less than 2 mole % of iC4 impurity at overhead
   b) less than 1.5 mole % of C3 impurity at bottoms
2. Determine the column pressure, based on a condenser outlet temp. of 120^{o}F.
3. Use SRK method for VLE.
4. A design basis of 1.5 times the min. number of tray is to be assumed.

How we can determine the condenser type?

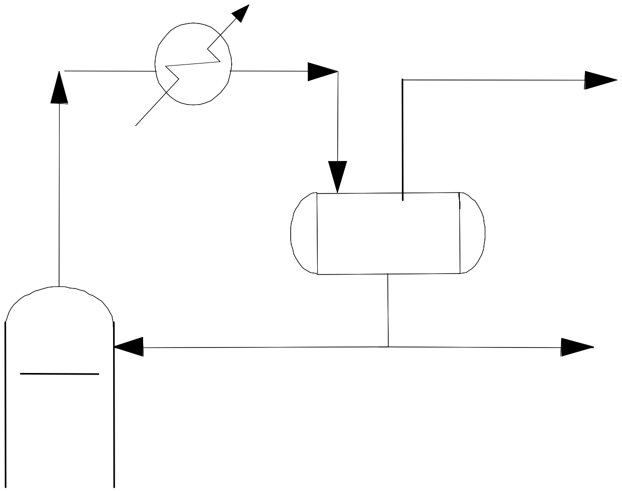
A. Partial



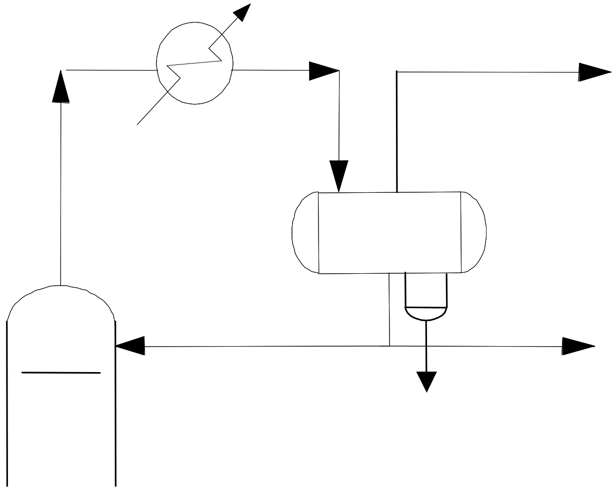
B. Bubble or sub-cooled



C. Mixed



D. Mixed with decanter



It depends on the refrigerant available and feed composition.

- Overhead molar flow rate (assume)

  C2 = 0.04, C3 = 23.49, iC4 = ? (2 %)

- Normalize ! (Component mole %)

  C2 = 1.69, C3 = 97.83, iC4 = 0.48

- Bubble pressure at 129 ^{o}F = **282 psia**
- Column top pressure = **287 psia**
- Column pressure drop = **5 psia**

Shortcut Model

- **Key components**

  Light key component

  = C3

  Heavy key component

  = iC4

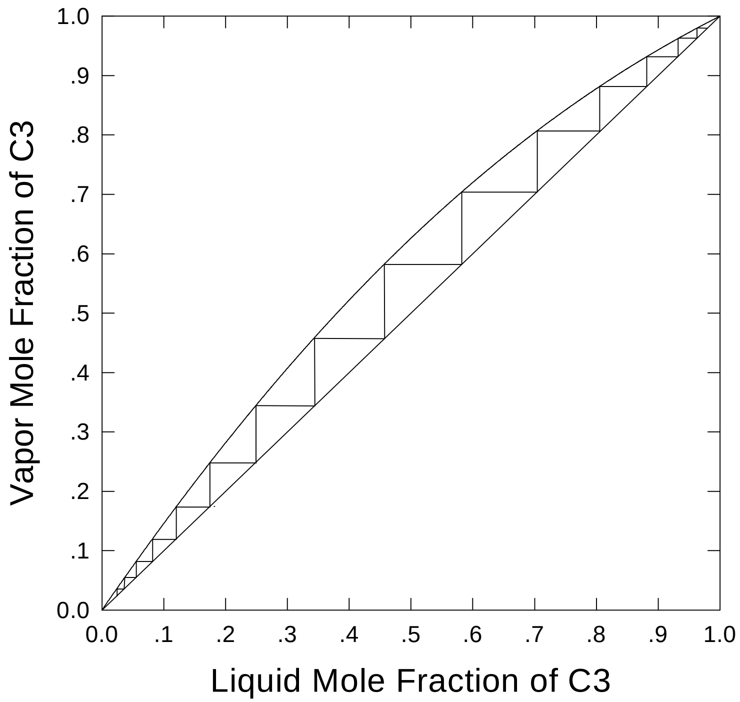
- **Minimum No. of tray**

  = 15

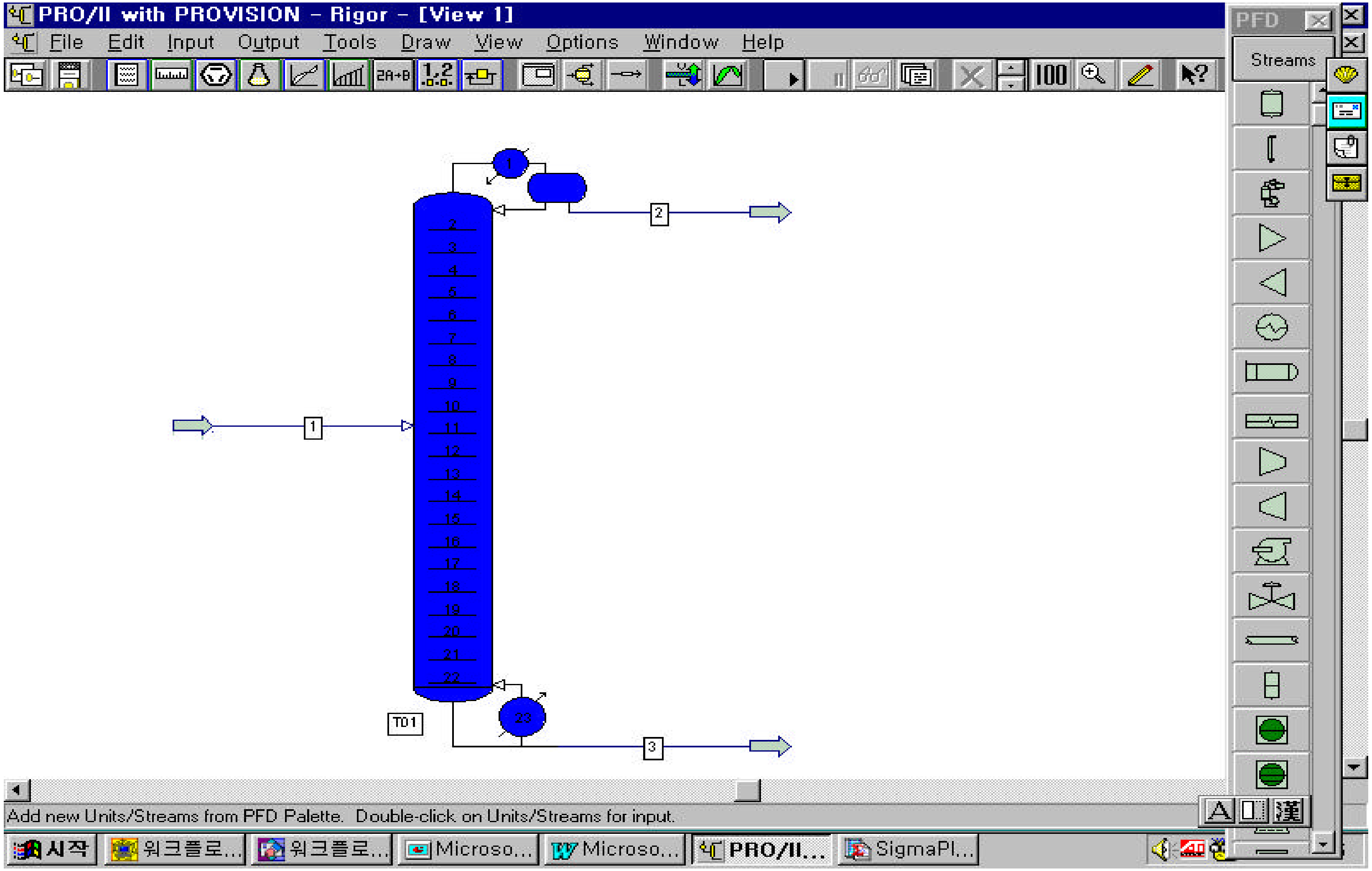
- **Theoretical No. of tray**

  = 15 x 1.5 = 23

BVLE for C3/iC4 at 287psia



Rigorous Simulation (I)



COLUMN SUMMARY

			---------- NET FLOW RATES -----------			HEATER	
TRAY	TEMP	PRESS	LIQUID	VAPOR	FEED	PRODUCT	DUTIES
	DEG F	PSIA	LB-MOL/HR				MM BTU/HR
1C	120.0	282.00	165.4			29.0L	-1.1022
2	135.9	287.00	180.7	194.4			
4	141.9	287.48	175.4	207.4			
5	146.9	287.71	171.8	204.4			
8	169.4	288.43	161.3	193.6			
9	178.0	288.67	157.2	190.3			
10	187.7	288.90	149.2	186.2			
11	201.6	289.14	240.6	178.1	100.0M		
16	220.7	290.33	249.2	176.2			
17	224.3	290.57	251.2	178.2			
21	239.0	291.52	251.6	183.1			
22	246.5	291.76	242.3	180.6			
23R	262.9	292.00		171.3		71.0L	1.1347

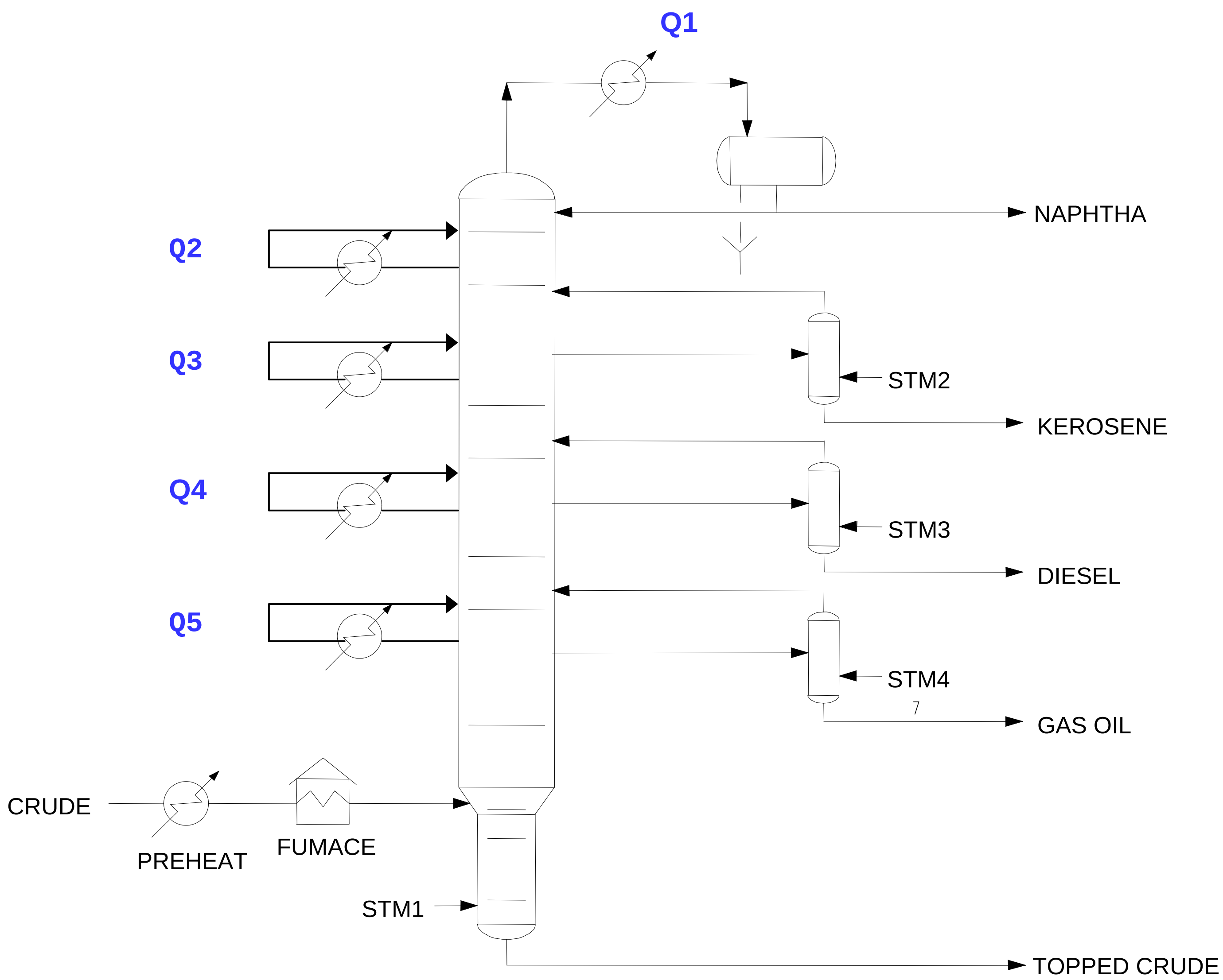
Existing Plant Revamping

1. 기존 공정 진단 (Debottlenecking)
2. 새로운 Feed에 대한 운전조건 검토
3. 새로운 운전조건에 따른 기존 장치류의 사용 가능성 여부 검토
4. 적절한 열교환망을 통한 에너지 절약 검토
5. 새로운 Product의 질과 양 검토
6. 기존공정의 변경 없이 가능한 최대 생산량 추산

Existing Plant Operations

1. 현재 공장 운전조건 진단
2. 운전조건을 변경하여 에너지 절약 연구
3. Yield 개선 연구
4. Capacity를 증가할 수 있는 연구

Crude Distillation Column



Crude Distillation Column

MM BTU/HR

	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5	SUM	RECOVER(%)
CASE 1	104	0	15	10	0	129.0	19.4%
CASE 2	70	26	22	10	0	128.0	45.3%
CASE 3	70	19	20	20	0	129.0	45.7%
CASE 4	70	9.6	15	25	10	129.6	46.0%

PRODUCT (BPD)

	NAPH	KERO	DIES	GASOIL	RESID
CASE 1	480	213	322	68	1405
CASE 2	478	217	330	69	1405
CASE 3	478	166	399	37	1420
CASE 4	477	140	427	40	1417

PRODUCT TARGET	ASTM D86 (95%)
NAPHTHA	300 ^{o}F
KEROSENE	445 ^{o}F
DIESEL	576 ^{o}F
GAS OIL	690 ^{o}F

Case Study

- Case 1과 Case 2는 거의 같은 Product의 양을 내면서 Case 2에서는 약 34MMBTU/HR의 High Quality Heat(온도가 높은 상태의 열)을 회수할 수 있다.
- Case 3과 Case 4를 비교하면, 열을 제거하는 장소에 따라 Kerosene과 Diesel의 양이 달라진다. 값의 차이가 없다면 Case 4가 고온의 열을 가장 잘 회수하는 경우이다.
- 에너지 가격은 Steam 1톤 당 약 13,000(' 99년도 한화에너지 기준) 원으로 했을 적에 Case 1에 비해 년간 **약 15억원 가량을 절감**할 수 있다.
- 보통의 경우 다른 제약조건이 없을 적에 총 에너지의 60 – 70% 가량을 Pumparound Side Cooler에서 회수하므로 이 경우 총 회수열이 78 – 91 MM Btu/HR 가량의 열을 회수할 수 있다.

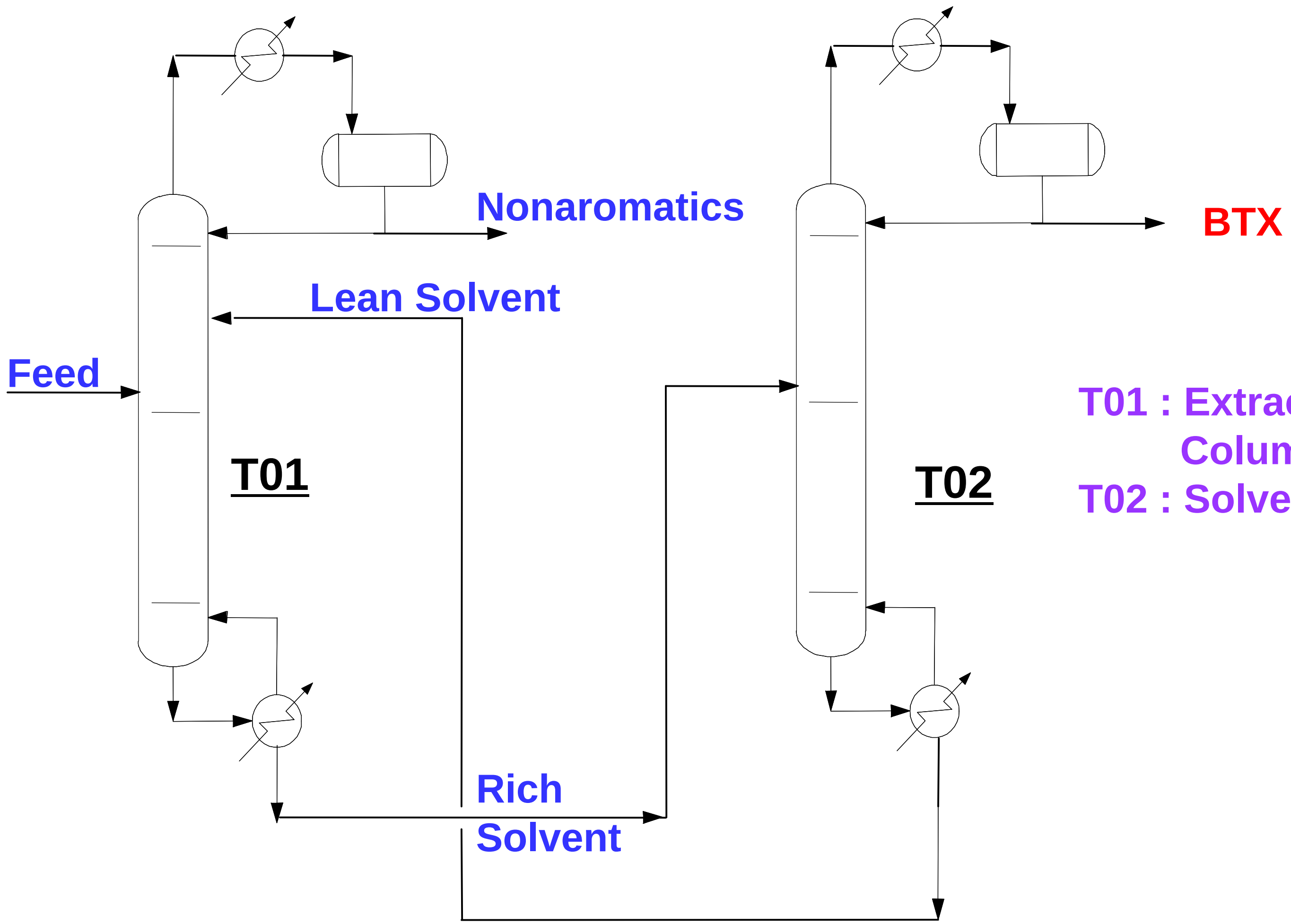
Pumparound Cooler의 장점

- Overhead Condenser의 Heat Duty를 줄여 줌으로써 Cold Utility를 줄여 준다.
- 고온의 열을 회수함으로써 Furnace Heater의 Load를 줄여 준다.
- Column 내의 Vapor Load를 줄임으로써 Column Diameter를 줄여 준다.

NFM 용매를 이용한 방향족 추출증류공정

- 독일의 Krupp-Koppers사의 License 공정임.
- 국내 3곳의 석유화학사에서 가동중인 공정 (삼성종합화학, SK 주식회사, 거평제철화학)
- Reformate(BTX가 주성분인 Gasoline원료)에 함유되어 있는 방향족 성분을 회수하기 위하여 용매인 NFM을 사용하는 공정
- 상평형 데이터의 부재로 ASPEN PLUS, PRO/II 모두 공정모사가 불가능한 공정
- 순수성분 증기압 데이터와 상평형 데이터의 확보가 필수적임

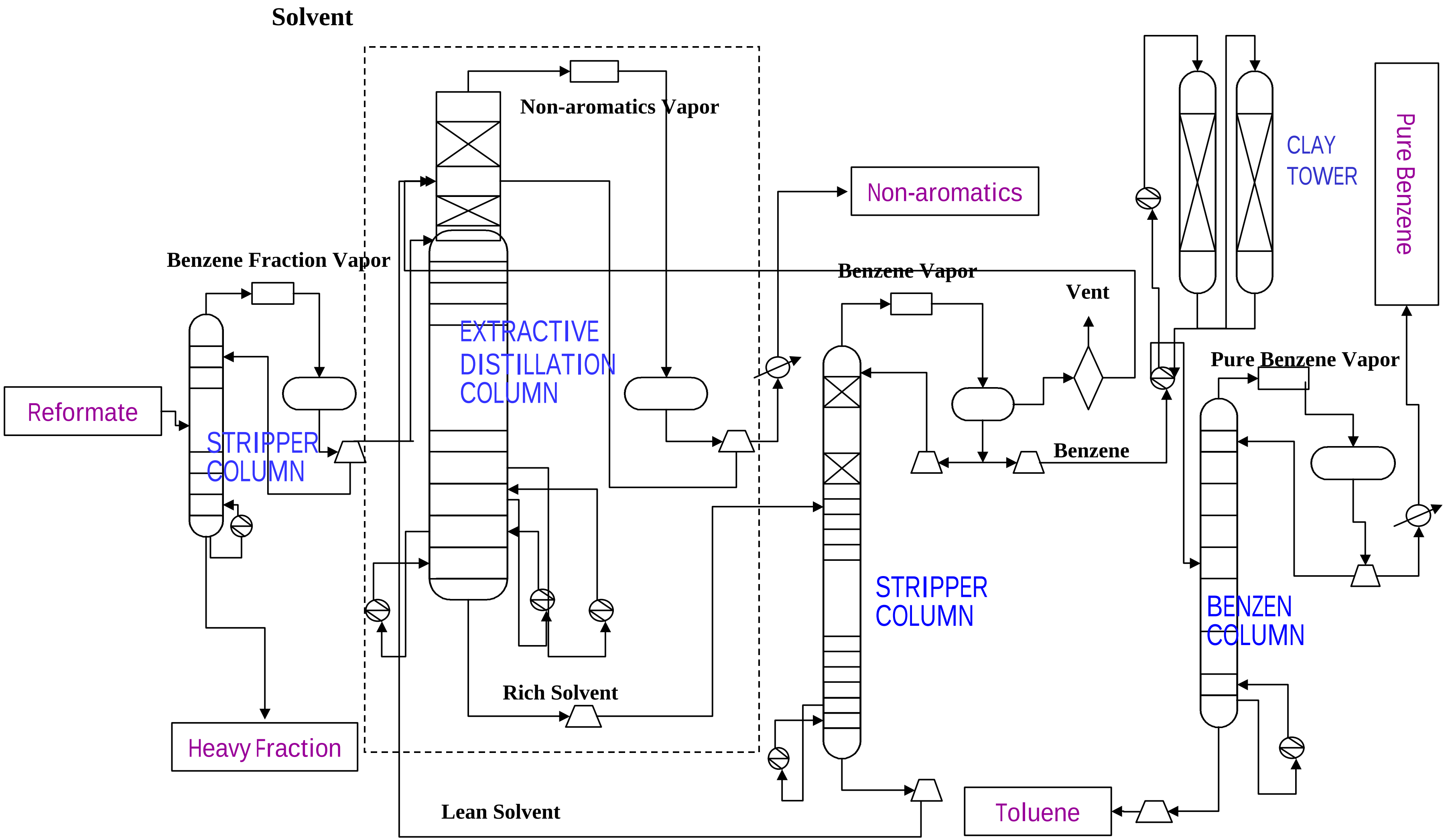
NFM 공정의 개요



T01 : Extractive Distillation Column

T02 : Solvent Recovery Column

NFM 공정의 개요 (2)



Solvent
Non-aromatics Vapor
Non-aromatics
Benzene Fraction Vapor
Benzene Vapor
Vent
CLAY
TOWER
Pure Benzene
Pure Benzene Vapor
Reformate
STRIPPER
COLUMN
EXTRACTIVE
DISTILLATION
COLUMN
Benzene
STRIPPER
COLUMN
BENZEN
COLUMN
Rich Solvent
Heavy Fraction
Lean Solvent
Toluene

Simulation시 필요한 물성확보방법

모사에 필요한 열역학적 물성 예측 및 확보방법

Thermophysical properties	Method using in the simulation
Critical properties[Tc, Pc, Zc, etc.]	Joback method (molecular structure)
Pure vapor pressure of NFM	Peng-Robinson eqution
Binary: LLE	Experimental data and estimation(NRTL binary parameters of component i and j , UNIFAC-LLE model, Dortmund modified UNIFAC model, and Lyngby modified UNIFAC model) NFM / n-Heptane NFM / n-Hexane NFM / Cyclopentane NFM / iso-Hexane NFM / Methylcyclohexane
: VLE	Database and UNIFAC model

NFM 순수성분의 물성확보방법

임계점(By Joback method)

$$T_c = T_b\,[\,0.584 + 0.965\sum\Delta_T - (\sum\Delta_T)^2\,]^{-1}$$

$$P_c = (\,0.113 + 0.0032n_A - \sum\Delta_P)^{-2}$$

$$V_c = 17.5 + \sum\Delta_V$$

Acentric 인자(By Peng-Robinson)

$$w = -\log P\,(at\ Tr = 0.7) - 1.000$$

증기압

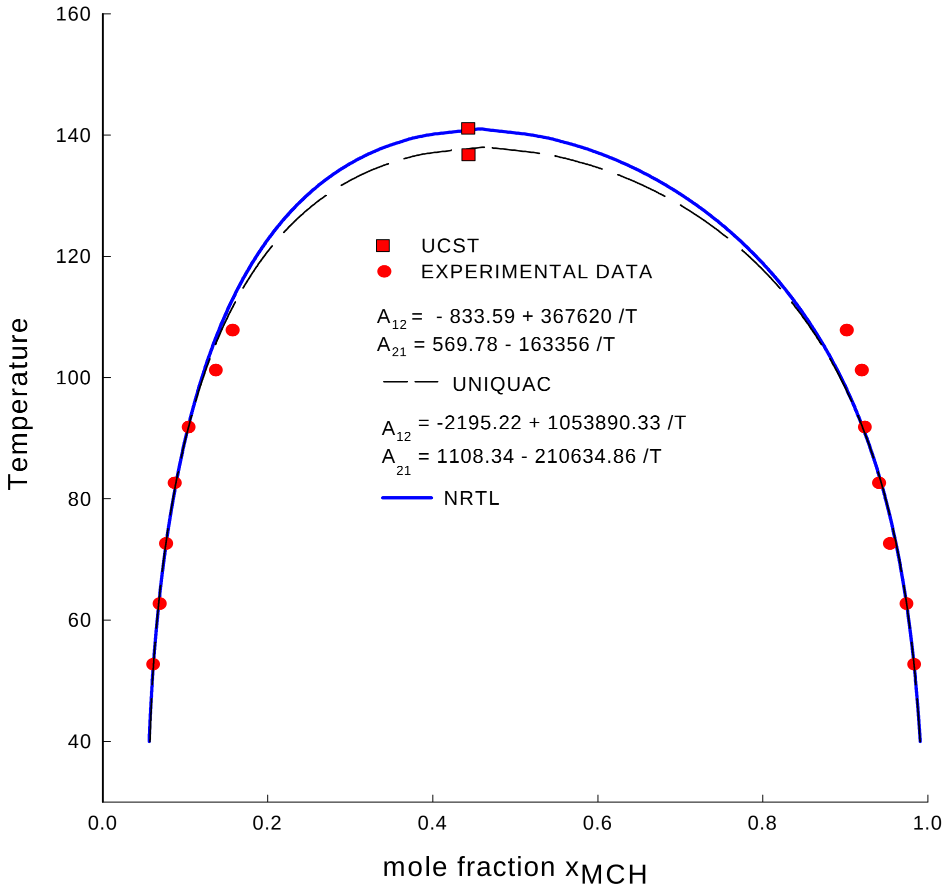
Temperature(℃)	Pressure(mbar)
127.700	30.18
129.800	33.13
133.150	38.30
136.200	43.30
138.700	48.10
140.600	53.20
143.300	58.00
146.000	64.90
152.800	84.40
156.300	94.80
157.900	99.10
160.700	109.15
163.350	119.80
165.650	130.00
167.600	139.65
169.750	150.00
170.750	154.90

NFM과 탄화수소와의 상평형 물성확보방법

	NC5	NC6	NC7	NC8	CP	CHX	MCH	MCP	ECH	IC6	BEN	TOL	EB	NFM
NC5		O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
NC6			O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
NC7				O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
NC8					O	O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
CP						O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
CHX							O	O	O	O	O	O	O	LLE
MCH								O	O	O	O	O	O	LLE
ECH									O	O	O	O	O	LLE
IC6										O	O	O	O	LLE
BEN											O	O	O	LLE
TOL												O	O	VLE
EB													O	VLE
NFM														VLE

NFM 혼합물성확보: LLE

MCH(1) + NFM(2)
혼합물의 액-액 상평형



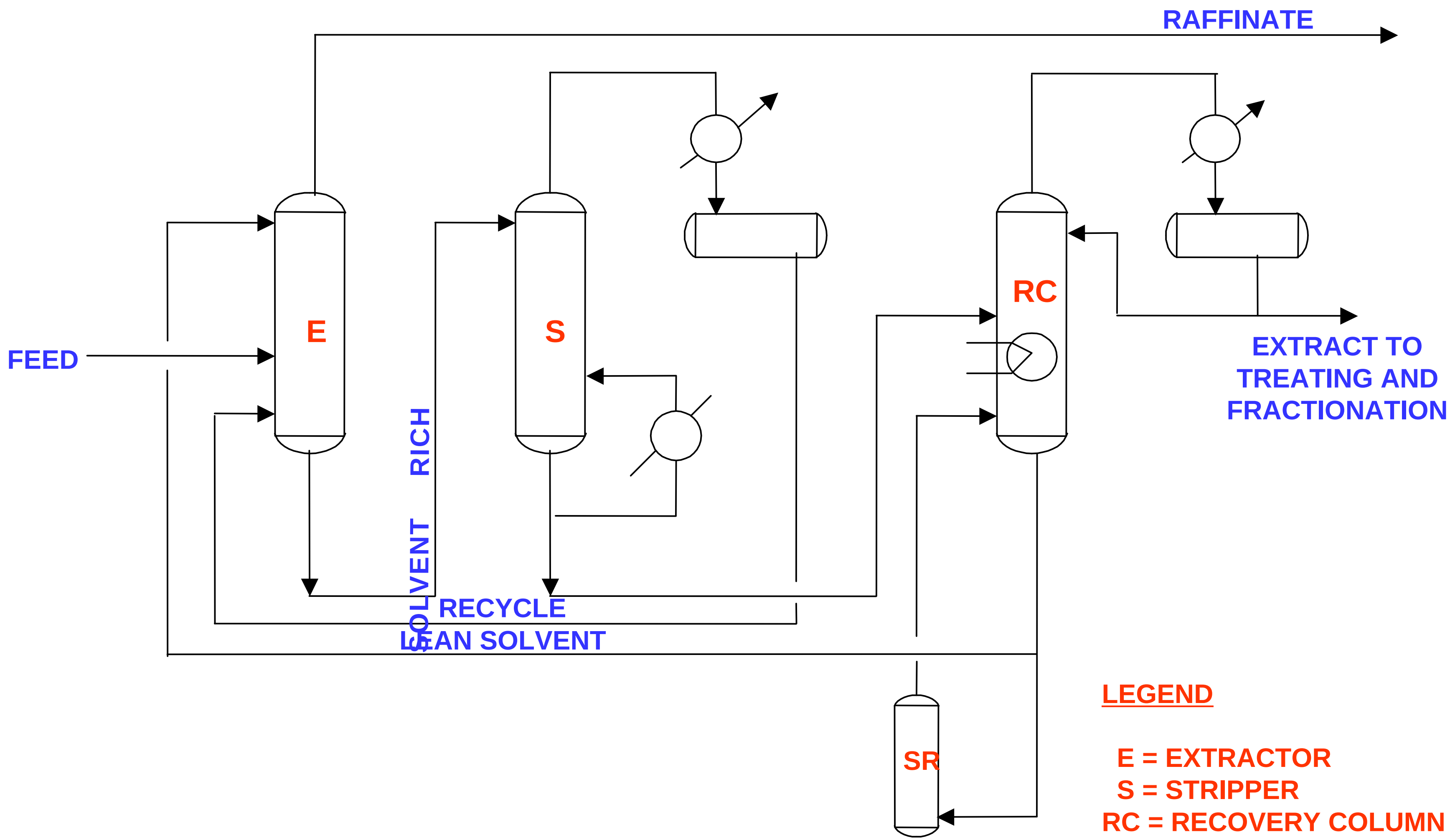
ED Column 물질 수지식

	OVHD Nonaromatics		BTMS Rich Solvent	
Component	DESIGN	*SIM.*	DESIGN	*SIM.*
NC5	0.5	*0.5*	0.0	*0.0*
NC6	4.1	*4.1*	0.0	*0.0*
NC7	2.3	*2.2*	0.0	*0.0*
NC8	0.1	*0.0*	7.0	*7.3*
CP	68.3	*68.4*	0.0	*0.0*
CHX	75.7	*75.7*	0.0	*0.0*
MCP	0.8	*0.8*	0.0	*0.0*
MCH	11.3	*9.9*	1.5	*2.9*
ECH	0.0	*0.0*	0.5	*0.5*
IC6	0.0	*0.0*	2.0	*0.0*
BENZENE	8.6	*7.7*	13342.0	*13343.0*
TOLUENE	0.2	*0.4*	2392.9	*2392.6*
EBENZENE	0.0	*0.0*	5.0	*5.0*
NFM	0.0	*0.0*	75626.0	*75626.0*
FLOW (Kg/Hr)	171.9	*171.5*	91377.1	*91377.3*
Temperature (°C)	72.0	*72.9*	151.0	*158.9*

Sulfolane 용매를 이용한 방향족 추출공정

1. UOP Licensed Process (국내 11개 보유)
2. 국내 엔지니어링 사 기본설계 능력 미비
3. 중국의 사이노팩사의 경우 공정모사 시 50,000불 요구
4. 방향족/비방향족/용매간의 상평형 데이터와 확보가 관건
5. 국내의 경우 S 종합화학사의 Sulfolane 공정모사 최초 성공
6. 그 외에 H 석유화학, L 석유화학의 Sulfolane 공정의Revamping Study 부분적으로 시행

EXTRACTION SECTION HYDROCARBON CIRCUIT OF THE SULFOLANE PROCESS



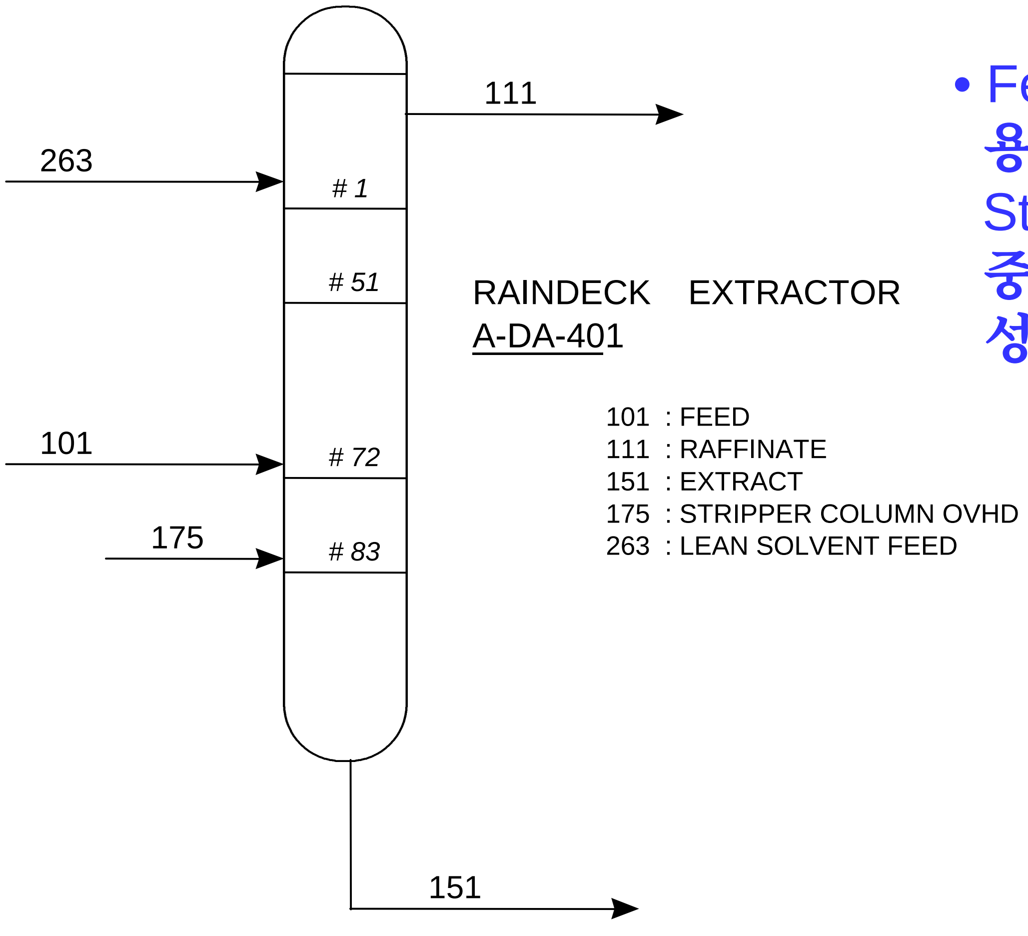
<u>LEGEND</u>

E = EXTRACTOR
S = STRIPPER
RC = RECOVERY COLUMN
SR = SOLVENT REGENERATOR

Sulfolane Process

Name	Objective
Extractor	• Feed중에서 방향족 성분을 용매를 이용하여 추출하고, Stripper에서 환류되는 혼합류 중에 포함되어 있는 방향족 성분들의 회수가 목적이다.
Stripper Column	• Extractor 하부류의 Extract에서 용매와 비방향족 탄화수소 성분들을 Reboiler 를 이용해서 날려 버리는 역할을 한다 • 상부층의 증기는 응축되어 물을 제거한 후 Raindeck Extractor로 환류시킨다
Recovery Column	• Stripper에서 비방향족 성분들이 제거된 하부류를 주입하여 증류탑 상부로는 방향족 성분들을 뽑고, 증류탑 하부로는 용매를 회수한다.

Raindeck Extractor



- Feed중에서 방향족 성분을 용매를 이용하여 추출하고, Stripper에서 환류되는 혼합류 중에 포함되어 있는 방향족 성분들의 회수가 목적이다.

Extractor, Rich Case에 대한 물질 수지식

		RAFFINATE (111)		EXTRACT (151)	
		DESIGN	SIMULATION	DESIGN	SIMULATION
1.	H2O	0.00	0.36	96.55	96.19
2.	SULF	2.58	18.44	2395.62	2379.77
3.	BZ	0.00	0.00	392.44	392.46
4.	TOL	0.05	0.00	410.62	410.67
5.	M-X	0.00	0.00	3.60	3.61
6.	CH	3.86	3.91	3.69	3.64
7.	MCH	5.91	6.17	4.10	3.84
8.	NC4	0.10	0.10	0.13	0.23
9.	NC5	95.70	95.67	91.44	91.47
10.	NC6	127.31	130.07	88.36	85.59
11.	NC7	29.56	31.31	15.44	13.69
12.	NC8	0.00	0.00	0.11	0.11
	KMOL.HR	256.06	285.93	3502.13	3481.28
	TEMP (^oC)	93.00	93.00	76.00	76.00
	PRES (G)	6.33	6.33	8.79	8.79

Raindeck Extractor에 대한 개선 방안

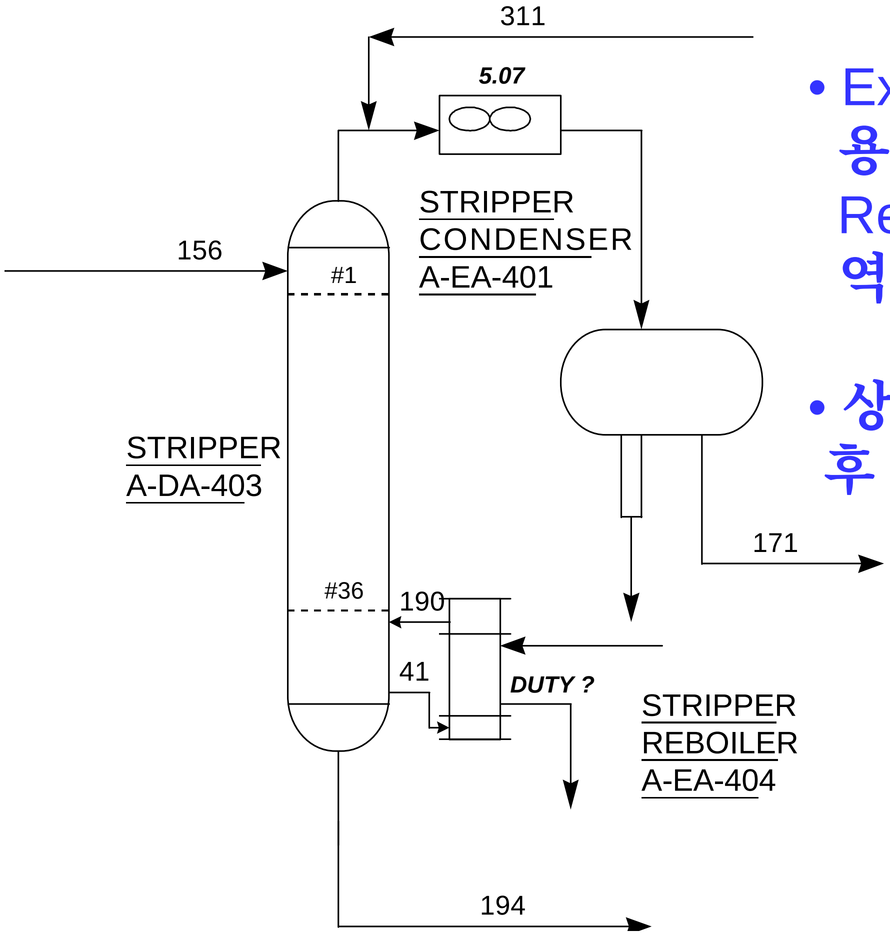
1. 공정모사 결과를 이용한 고정된 용매량이 대한 최대 생산 가능한 최대 Feed 량의 결정

2. 공정모사 결과를 이용한 고정된 Feed량에 대한 최소 가능한 용매량의 결정

3. Solvent/Feed 비의 최소치 결정을 통한 공장 전체의 에너지 절감

4. Major Equipment의 교체 또는 변경 없이 가능한 최대 생산량의 결정

Stripper Column



- Extractor 하부류의 Extract에서 용매와 비방향족 탄화수소 성분들을 Reboiler 를 이용해서 날려 버리는 역할을 한다
- 상부층의 증기는 응축되어 물을 제거한 후 Raindeck Extractor로 환류시킨다.

Stripper, Rich Case에 대한 물질 수지식

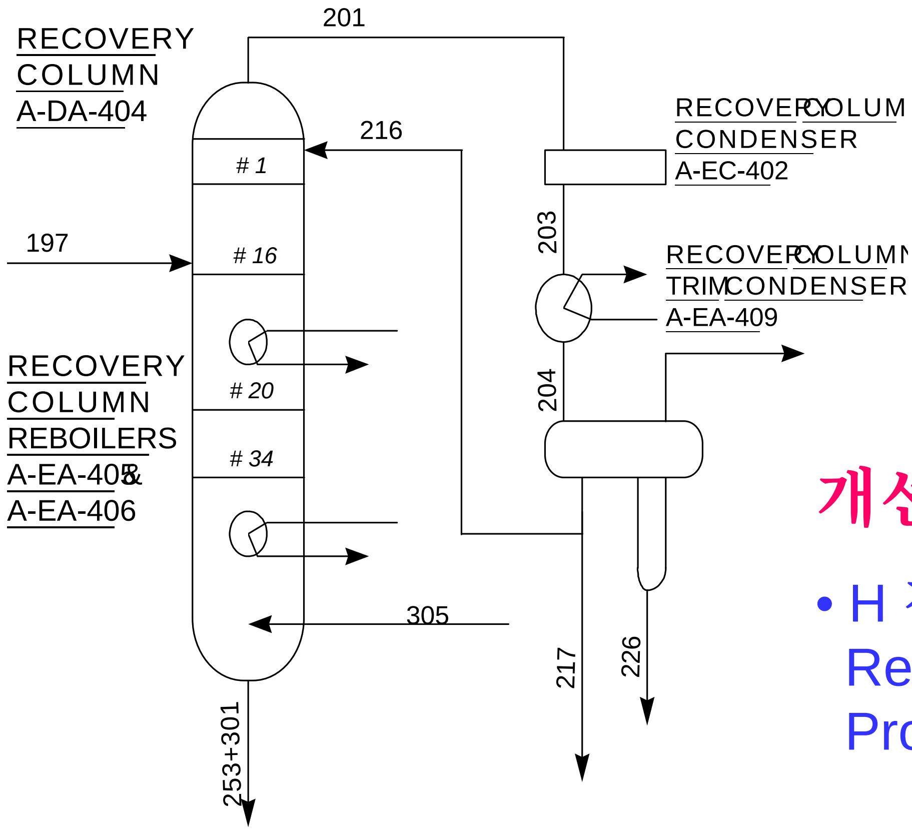
	OVDH, 161		H/C, 171		BTMS, 194	
	DESIGN	SIM.	DESIGN	SIM.	DESIGN	SIM.
H2O	63.62	60.79	0.00	1.75	33.49	35.76
SULF	0.92	0.77	0.00	0.77	2394.71	2394.80
BZ	146.31	151.19	146.31	151.19	246.14	241.24
TOL	66.49	64.25	66.49	64.25	344.14	346.37
M-X	0.31	0.10	0.31	0.10	3.30	3.50
CH	3.69	3.69	3.69	3.69	0.00	0.00
MCH	4.10	4.10	4.10	4.10	0.00	0.00
NC4	0.13	0.13	0.13	0.13	0.00	0.00
NC5	91.44	91.44	91.44	91.44	0.00	0.00
NC6	88.37	88.36	88.37	88.36	0.00	0.00
NC7	15.44	15.44	15.44	15.44	0.00	0.00
NC8	0.11	0.01	0.11	0.01	0.00	0.00
KMOL.HR	480.38	480.26	416.40	421.22	3021.77	3021.77
TEMP (°C)	123.00	125.20	49.00	49.00	174.00	185.00
PRES (G)	1.43	1.43	0.52	0.52	1.85	1.85

Stripper에 대한 개선 방안

1. Stripper Column 운전압력 감소에 따른 Reboiler Duty 감소 추산 *(S사의 경우 : 11.8MM Kcal/hr)*

2. H 석유화학의 경우 Internal Change 없이 가능한 최대 처리량과 140% Load 증가시 Internal Type 교체 등 Study 가능

Recovery Column



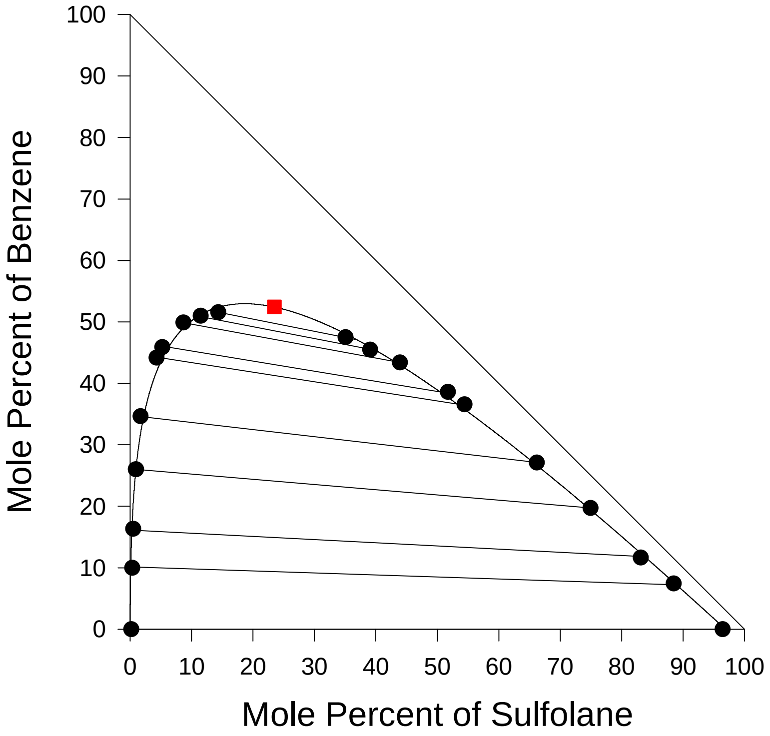
Stripper에서 비방향족 성분들이 제거된 하부류를 주입하여 증류탑 상부로는 방향족 성분들을 뽑고, 증류탑 하부로는 용매를 회수한다.

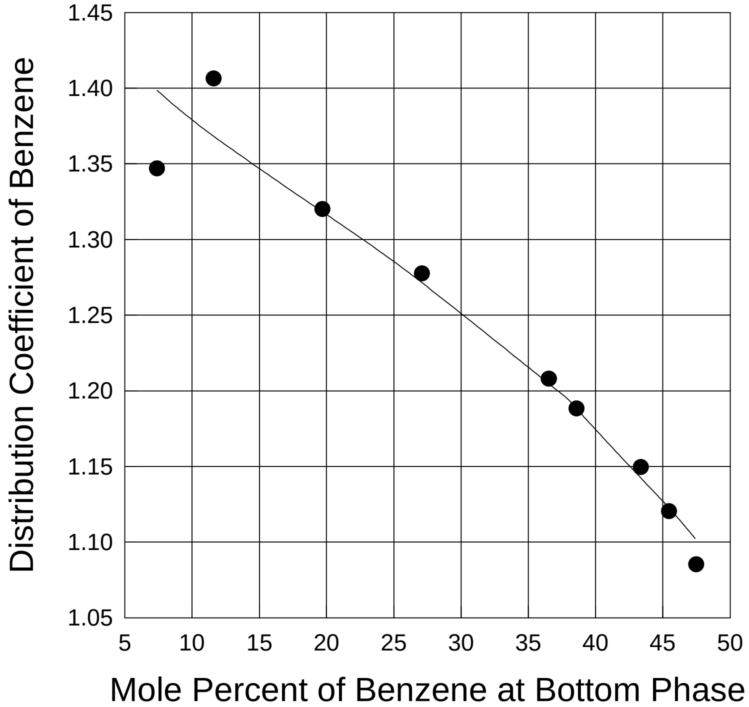
개선방안

- H 정유사, D 석유화학의 경우 Upper Reboiler 를 가동하지 않고 정상적인 Product spec.을 얻어내고 있음.

삼성분계 액-액 상평형 데이터

Sulfolane+benzene+cyclohexane





개선 방안 및 기대 효과 (I)

- **공정모사를 통한 에너지 절감방안**
  - Stripper Column Reboiler Loading 감소
  - Recovery Column 의 Upper Reboiler 제거방안
  - Sulfolane 주입량 감소를 통한 전체적인 Utility 량 감소

- **정확한 상평형 추산을 통한 생산량 증대**
  - 동일한 용매량에서 Feed량 증가를 통한 생산량 증가
  - Major Equipment의 추가 또는 변경 없이 가능한 최대 생산량 추산
  - 정확한 상평형 추산을 위한 Solvent / Feed Ratio의 추산

개선 방안 및 기대 효과 (II)

- 공정모사를 통한 Revamping 기간 단축
  - 엔지니어링 회사의 초기 Study 기간 단축 (프로젝트 기간 약 3개월 단축 예상)
  - 경험 없는 엔지니어의 교육에 이용
  - 다양한 Case Study에 이용

- 용매 및 BTX 가격 **(14,000 BPD)**
  - Benzene : $193 / Ton
  - Toluene : $165 - $170 / Ton
  - Mixed Xylene : $165 - $170 / Ton
  - *p*-Xylene : $400 - $440 / Ton
  - Sulfolane : $4,600 / Ton

유사 공정과의 비교

Licensor	Krupp Koppers	GTC	UOP
Type	Extractive Distillation	Extractive Distillation	Extraction
Solvent	NFM	Sulfolane	Sulfolane
Column 수	2	2	Extractor = 1 Distil. Column = 5
Solvent / Feed Ratio (Mass)	3.43	3.58	3.97
Aromatics wt % in Feed	89.65 %	67.27% (Rich) 59.34% (Lean)	70.22% (Rich) 65.04% (Lean)
Aromatics Recovery %	Benzene > 99.5% for Overall Plant	99.3 wt% in ED Col.	> 99.5 wt% in Extractor
특 징	주로 벤젠/톨루엔 회수	BTX 모두 회수	BTX 모두 회수
국내 보유 현황	3	1	11

Binary Data Approach rather than Ternary Data

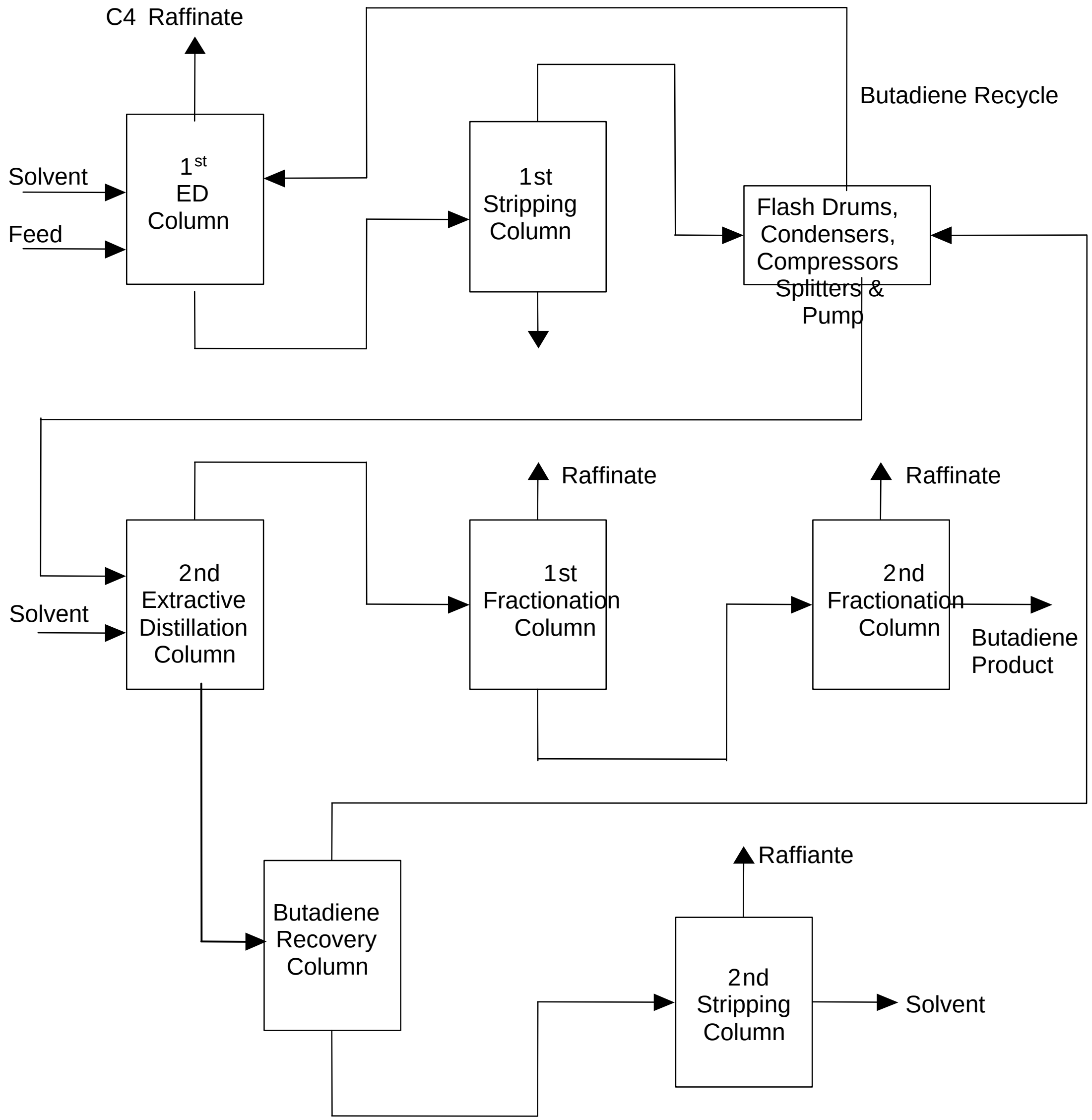
"The NRTL parameters obtained (regressed) from the ternary LLE experimental data give a better result than the NRTL parameters obtained from the binary experimental data only. However, the above state holds true when you simulate a system containing only three components in the ternary system. On the other hand, for a system containing components more than ternary system like Sulfolane unit, a better approach should be the binary interaction parameters."

ACN (또는 NMP, DMF) 용매를 이용한 1,3부타디엔 추출증류공정

- ACN 용매 : 일본의 Nippon-Zeon 특허 공정
- NMP 용매 : 독일의 BASF 특허 공정
- DMF 용매 : 독일의 Krupp-Kopper사 특허 공정
- 국내에 10여 개의 1,3부타디엔 공정 가동 중
- NMP의 경우 순수성분 데이터조차 내장되어 있지 않음
- 용매와 C4 성분간의 이성분계 기액 및 액액 상평형 물성치의 확보가 중요함

주요 단위공정에 대한 1,3부타디엔 회수 공정도

DONG YANG UNIVERSITY



DONG YANG UNIVERSITY

ACN (또는 NMP, DMF)와 C4 성분간의 상평형 데이터의 확보

	C3	C3=2	NC4	IC4-	TC4-	CC4-	13BD	MAC	12BD	EAC	VAC	IC5	H2O	SOL
C3		O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
C3=2			O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
NC4				O	O	O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
IC4-					O	O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
TC4-						O	O	O	O	O	O	O	O	LLE
CC4-							O	O	O	O	O	O	O	LLE
13BD								O	O	O	O	O	O	VLE
MAC									O	O	O	O	O	LLE
12BD										O	O	O	O	VLE
EAC											O	O	O	LLE
VAC												O	O	LLE
IC5													O	LLE
H2O														VLE
SOL														

공비 증류 공정

- Ethanol-Water System

- Using Benzene as an Entrainer

- Comparison of two-columns & three-columns configuration

- Comparison of Extractive Distillation using Glycol as a Solvent and Azeotropic Distillation using Benzene/NC5 as an Entrainer

- Replacing NC5 instead of using Benzene (VOC)

Azeotropic and Extractive Distillation

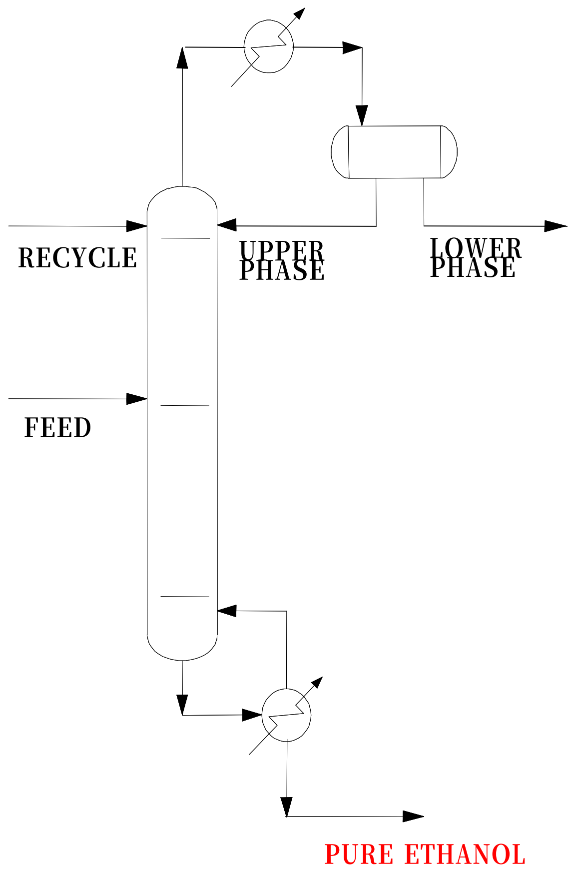
Azeotropic Distillation

- By forming a ternary heterogeneous azeotrope lower than any other binary azeotropic temperatures, nearly pure ethanol can be obtained as a bottom product in an azeotropic distillation column.
- Ethanol is obtained *as a bottom product* from an azeotropic distillation column using an entrainer such as benzene or normal pentane.

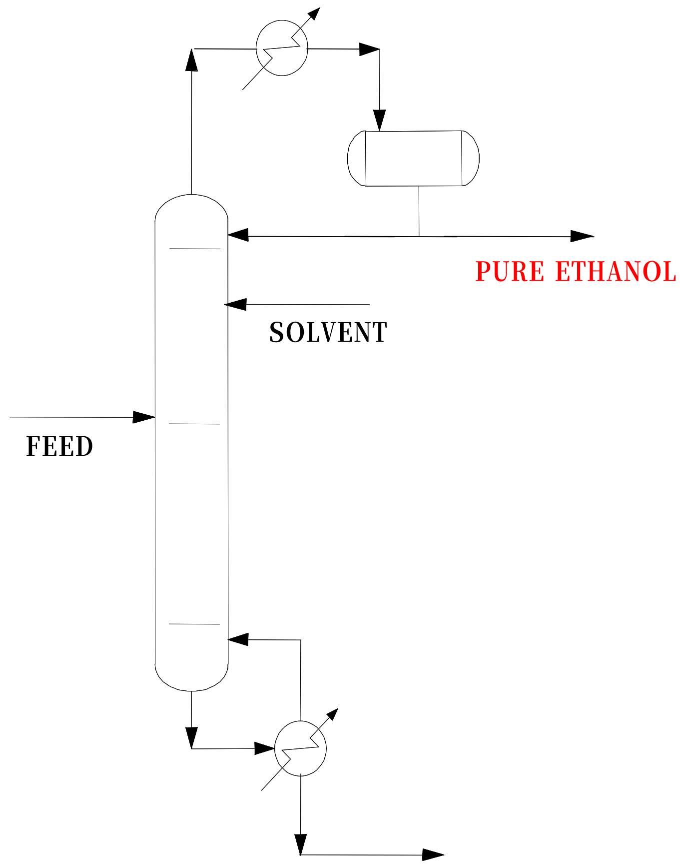
Extractive Distillation

- By adding a solvent which is exclusively familiar with a wanted component in a feed mixture, a desired component can be obtained in an extractive distillation column overhead.
- Ethanol is obtained *as a top product* from an extractive distillation with ethylene glycol solvent.

Azeotropic and Extractive Distillation



Azeo. Distil.



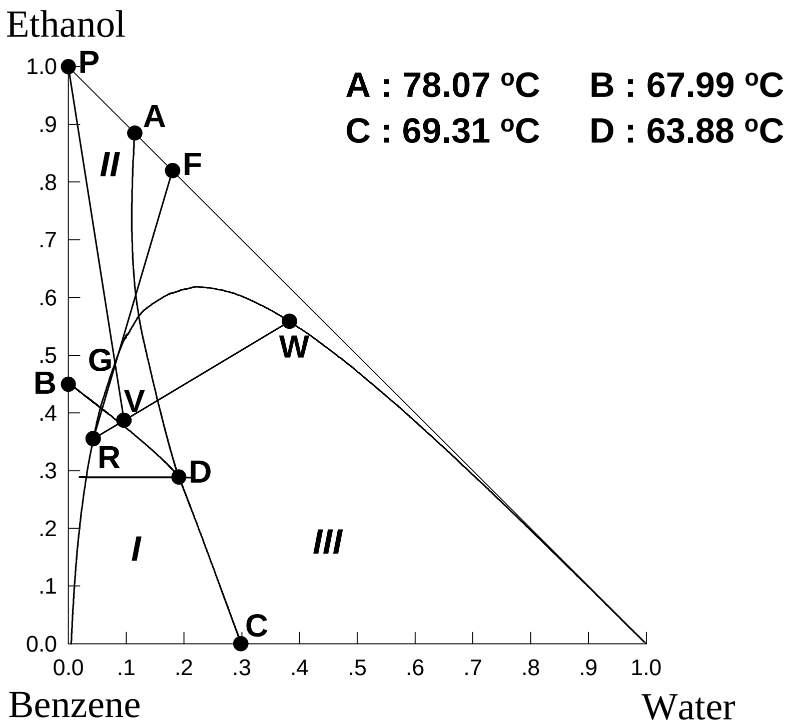
Extr. Distil.

Fundamental Principle of Alcohol Dehydration using Entrainer

- Aqueous ethanol can be separated into their pure components by distillation by the addition of a third component, so called the entrainer, which forms a ternary heterogeneous azeotrope with a lower than any other binary azeotropes.

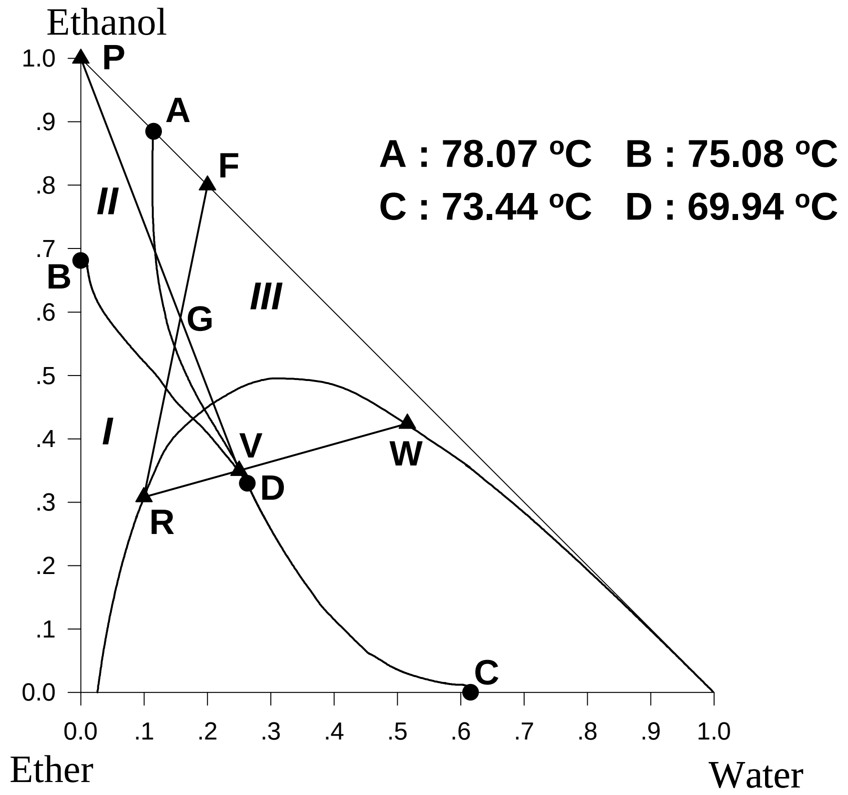
- Ex) A : Ethanol, B : Water, C : Benzene
  - A-B = 78.07 ^{o}C
  - A-C = 69.77 ^{o}C
  - B-C = 69.31 ^{o}C
  - A-B-C = 63.88 ^{o}C

Understanding of Phase Diagram (I)



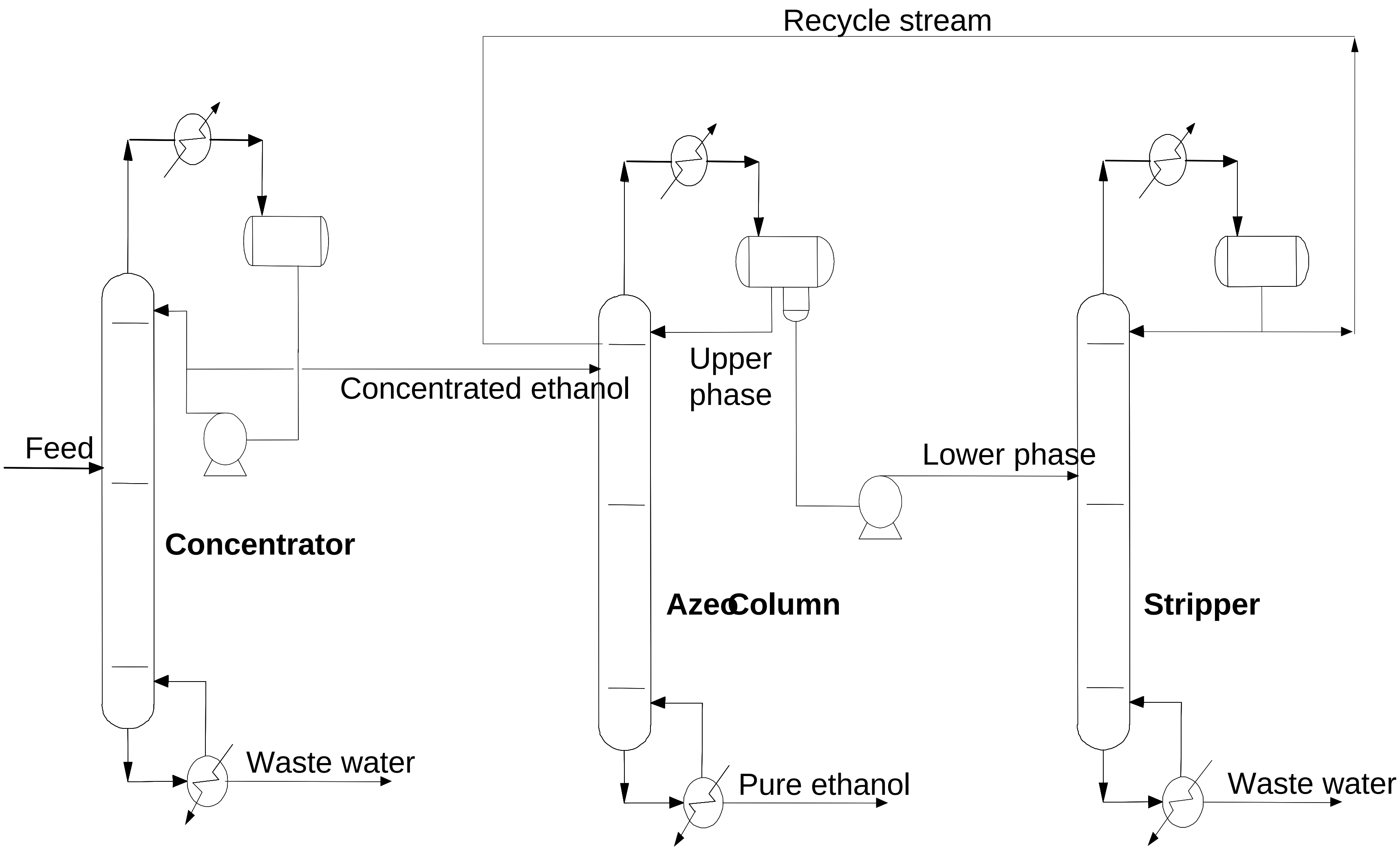
Only mixtures in region *II* will give the desired products of pure ethanol as a bottom product.

Understanding of Phase Diagram (II)

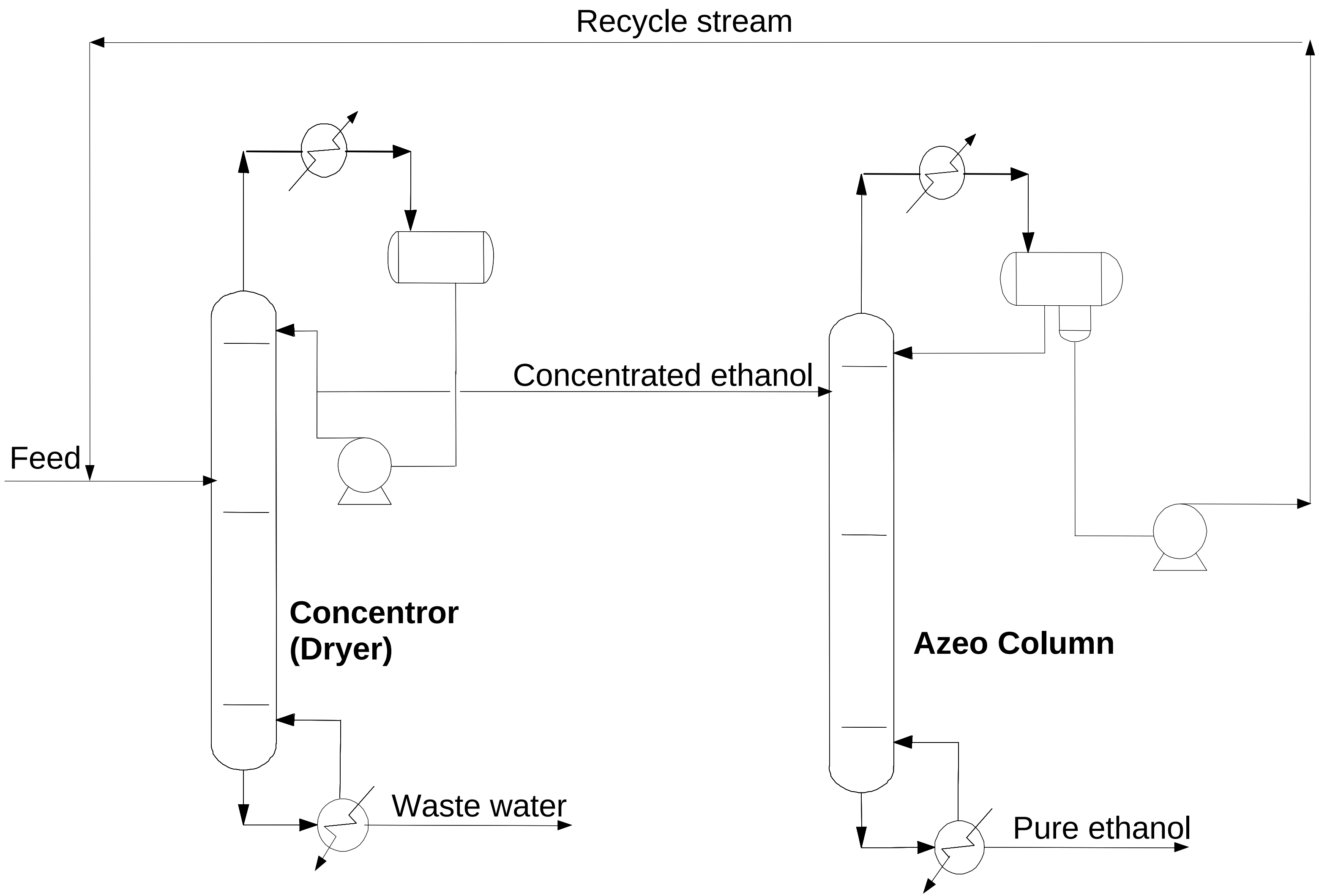


In this case, pure ethanol cannot be obtained since *G* is in region *III*.

Three-columns Configuration in Ethanol Dehydration



Two-columns Configuration in Ethanol Dehydration



DONG YANG UNIVERSITY

Performance Comparison between Benzene & NC5 as an Entrainer

	Benzene	NC5
Top Press.	1.38 Kg/cm^2	3.5 Kg/cm^2
Entrainer	Benzene	NC5
RRATIO	651 Kgmol/hr	439 Kgmol/hr
Theo. Trays	25	25
Feed Tray	5	5
Reboiler Heat Duty	5.2268×10^6 Kcal/hr	2.6964×10^6 Kcal/hr
Condenser Heat Duty	3.3290×10^6 Kcal/hr	2.8552×10^6 Kcal/hr
Column Diameter	1600 mm (valve tray)	120 mm (valve tray)
Impurities	Water : 16ppm Benz. : 12ppm	Water < 3ppm NC5 < 1ppm
Ethanol Recovery	99.99 mole %	> 99.99 mole%

	Stripping Column	
Theo. Trays	25	25
Reboiler Heat Duty	2.2512×10^6 Kcal/hr	0.1543×10^6 Kcal/hr
Condenser Heat Duties	2.0437×10^6 Kcal/hr	0.1369×10^6 Kcal/hr
Total Reboiler Duties	7.7580×10^6 Kcal/hr	0.1369×10^6 Kcal/hr
Total Condenser Duties	5.3727×10^6 Kcal/hr	2.9912×10^6 Kcal/hr

Conclusions

- Although the azeotropic distillation scheme, using NC5, operates at a higher pressure, comparative calculation results through this study show that azeotropic distillation using NC5 as an entrainer is better than that using benzene as an entrainer.