

## 추출 증류계의 최적화

한명완 · 김희영 · 박선원\*

한국화학연구소 화학공학연구부  
\*한국과학기술원 화학공학과  
(1991년 3월 19일 접수, 1992년 8월 17일 채택)

## Optimization of an Extractive Distillation System

Myung Wan Han, Hee Young Kim and Sun Won Park\*

Dept. of Chemical Engineering, KRICT

\*Dept. of Chemical Engineering, KAIST

(Received 19 March 1991; accepted 17 August 1992)

### 요 약

추출 증류탑과 추출 용제 회수탑으로 구성되는 추출 증류계에 대한 최적화 문제가 연구되었다. 대상 증류 물질은 에탄올과 물 혼합물이었으며, 추출 용제로 에틸렌 글리콜이 사용되었다. 실험을 통해 각 탑의 단효율을 구하고 이를 적용한 정상 상태 엄밀(rigorous) 증류 모델을 사용하여 최적화를 행하였다. 최적화 기법으로 SQP와 GRG 방법 및 Box의 complex 방법이 사용되었으며, 목적 함수는 각 탑의 열수지, 에틸렌 글리콜의 보충량, 탑상 제품량으로 구성하였다. 이를 통해 제약 범위 내에서 조업 변수의 변화에 따른 목적 함수값의 변화를 잘 모사할 수 있었으며 주어진 증류 공정의 최적 조업 조건을 효과적으로 구할 수 있었다.

**Abstract**—An optimization problem for an extractive distillation system composed of one extractive distillation column and one stripping column was formulated. Tray efficiency of each column was determined by experiments for the separation of ethanol-water mixture where ethylene glycol was used as an extractive solvent. Optimization was then performed to find optimum operating condition using a steady-state rigorous model. Three optimization algorithms were tested to find the most effective algorithm for this system. An objective function was established in terms of heat balance, make up of the extractive solvent, and overhead product. The proposed optimization procedure yielded effectively not only the dependence of the objective function upon the operation parameters but also, within given constraint regime, an optimum operating condition for an extractive distillation process.

### 1. 서 론

공비점을 갖는 두 성분은 일반적인 증류 방법으로는 공비점 이상의 농도로 분리해 내기 어렵다. 의료용, 음료용, 주류용 또는 연료용으로 널리 사용되는 에탄올은 물과 90몰%에서 공비점을 갖는다. 에탄올이 함유된 수

분을 제거해 내어 무수 에탄올을 얻어내는 방법으로 감압증류, 공비증류, 추출증류 등이 사용될 수 있는데, 추출증류가 에너지 효율이 큰 것으로 보고되어 있다[1]. 추출 증류는 공비점을 갖는 이성분계의 비이상형의 기액 평형곡선을 이상형의 형태로 변화시켜 분리 정제가 용이하도록 하는 방법으로 탑 내에 비휘발성 추출 용

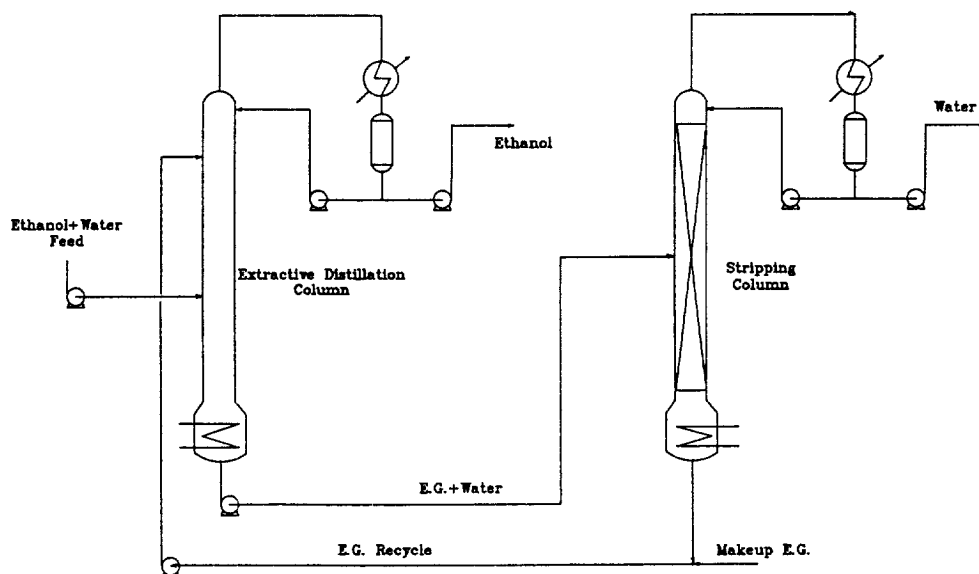


Fig. 1. Schematic diagram of extractive distillation process.

제를 유입시켜 추출 작용과 증류작용이 동시에 일어나도록 하는 것이다. 본 연구에서는 추출 용제로 에틸렌 글리콜을 사용하는 에탄올-물의 분리를 대상으로 하고, 증류계는 추출 증류가 일어나는 추출 증류탑과 추출 용제를 다시 회수하는 용제 회수탑으로 구성하였다.

공정을 최적화하는 것은 어떤 목적 함수와 그에 따른 제약조건들을 가지고 이 목적함수를 극대화하는 최적의 조업조건을 찾는 것이다. 공정 이득을 대변하는 목적 함수는 일반적으로 유틸리티 사용량, 비용 혹은 생산량으로 구성된다. 이러한 목적 함수는 주어진 조업 조건 및 경계 조건에 대해 실제의 공정 내용을 잘 묘사해 주는 모델을 통해 계산할 수 있다. 이 계산 결과를 바탕으로 공정 이득을 극대화하는 최적 조업 조건을 구한다. 본 논문에서는 최적화 대상인 추출 증류탑과 용제 회수탑 각각에 대해 엄밀(rigorous) 모델을 만들고 이 모델이 실제 공정을 잘 나타낼 수 있도록 탑 효율은 실험을 통해 구하였다. 그리고 각 탑의 에너지 소모량을 주요 변수로 하는 최적화 문제를 구성한 다음 이 모델을 이용 최적화를 행함으로써 최적 조업점을 구하였다.

## 2. 추출 증류계의 구성

추출 증류는 Fig. 1에 개략적으로 나타낸 바와 같이 두 단계의 분리가 필요하다. 먼저 원료 물질인 에탄올-물 혼합물은 첫 번째 탑인 추출 증류탑에 유입되고, 탑 상부로 유입되는 추출 용제인 에틸렌 글리콜의 추출 작용을 통해 정제된 에탄올은 탑 상단으로, 물-에틸렌

글리콜 혼합물은 탑 하단으로 분리된다. 이 추출 혼합물은 두 번째 탑인 용제 회수탑에서 물은 탑상으로 에틸렌 글리콜은 탑저로 분리되고 회수된 에틸렌 글리콜은 첫 번째 탑 상부로 재순환된다. 또한 이 때 손실된 만큼의 에틸렌 글리콜의 양은 재순환 과정에서 보충되도록 하였다.

일반적으로 증류탑은 주어진 원료 물질에 대하여 다섯 개의 자유도를 갖는다. 즉, 압력  $P$ , 탑저 제품량  $B$ , 탑상 제품량  $D$ , 환류량  $R$ 과 열소모량  $Q$ 이다. 여기서  $R$ 과  $B$ 는 각각 액위 제어에 사용되고  $P$ 를 고정하면 자유도는 둘이 된다. 본 추출 증류계는 두 개의 탑이 연관되어 있으므로 독립변수로 첫 번째 탑의 탑상 제품량  $D_1$ 과 열소모량  $Q_1$  그리고 두 번째 탑의 탑상제품량  $D_2$ 와 열소모량  $Q_2$ 를 갖는다. 여기서  $D_1$ 과  $D_2$ 는 탑 물질 수지로부터  $B_1$  및 추출 용제 순환량( $R_{EG}$ )인  $B_2$ 로 각각 대체될 수 있다. 여기에 보충되는 에틸렌 글리콜을 또 하나의 원료 물질로 보면 자유도는 다섯이 된다. 실험에 사용된 증류탑의 사양을 Table 1에 나타내었다.

## 3. 추출 증류계 모델의 구성

추출 증류는 추출 용제가 에탄올과 물의 상대 휘발도를 변화시켜 공비점을 갖는 비 이상형 기-액 평형 곡선을 분리 정제가 용이하도록 이상형의 형태로 바뀌게 한다. 따라서 추출 증류탑의 모사를 위해서는 이 추출 용제로 인한 기-액 평형 관계의 변화가 고려되어야 한다. 기-액 평형 관계의 변화는 활동도 계수와 관계를 가지

Table 1. Distillation column specification

Section	Item	Spec.
Extractive	Trays	20
	column Type of tray	single-pass cross flow sieve tray
	Column diameter	7.62 cm
	Tray spacing	30 cm
	Active area	33.6 cm <sup>2</sup>
	Hole area	4.4 cm <sup>2</sup>
	Hole area/column area	0.10
	Hole area/active area	0.131
	Reboiler volumn	2 l
	Electricity	6 kw
Stripping	Height	2 m
	column Packing material	Rachig ring(ceramic) 10 mmL×6 mmφ
	Column diameter	5.08 cm
	Electricity	4 kw

므로 이 활동도 계수를 계산하기 위해서 Wilson식을 이용하였으며 이 식에 사용되는 매개 변수는 홍[6]이 발표한 데이터를 이용하였다. 추출 증류탑의 모사에는 Holland[5]가 제시한 엄밀 모델이 사용되었다. 용제 회수탑인 충전탑을 모사하기 위해서 Holland[5]가 제안한 단탑(stage column)과 충전탑의 함수관계를 이용하였다. 즉, 연속적인 분리 공정인 충전탑의 충전 부분을 여러 개의 물질전달 구간으로 나누어 각 구간을 그에 상응하는 비 연속적인 하나의 단(stage)으로 나타내었다. 예로서 j 구간에 대한 물질전달 관계는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$Y_{ji} = E_j \alpha_{ji} K_{ji} X_{ji} \quad (1)$$

여기서  $E_j$ 는 j 구간의 증발 효율이고  $K_{ji}$ 는 이상 용액의 평형 상수값이다.  $\alpha_{ji}$ 는 j 구간을 나가는 액체의 성분 i에 대한 활동도 계수를 나타낸다. 따라서 탑의 충전된 부분을  $\Delta Z_1, \Delta Z_2, \dots$ 의 구간으로 나누면 (1)식에서  $Y_{ji}$ 는  $\Delta Z_j$ 를 나가는 기상 성분 i,  $X_{ji}$ 는  $\Delta Z_j$ 를 나가는 액상 성분 i의 물분율을 나타낸다. 유사하게  $\alpha_{ji}$ ,  $K_{ji}$ 는 이 구간을 나가는 액체 조건으로부터 결정된다.

본 증류계는 비 이상 용액이 분리되는 상호 연관된 두 탑으로 구성되어 있으므로 두 탑의 모사는 동시에 이루어져야 한다. 이를 위해서 Holland[5]가 제안한 capital  $\theta$  수렴 방법을 이용하였다. Positive multiplier인  $\theta_1$ 과  $\theta_2$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$\left(\frac{b_{i,1}}{d_{i,1}}\right) = \theta_1 \left(\frac{b_{i,1}}{d_{i,1}}\right)_{ca} \quad (2)$$

$$\left(\frac{b_{i,2}}{d_{i,2}}\right) = \theta_2 \left(\frac{b_{i,2}}{d_{i,2}}\right)_{ca} \quad (3)$$

여기서  $ca$ 는 가장 최근에 계산된 변수를 나타내고  $b_{i,1}/d_{i,1}$  그리고  $b_{i,2}/d_{i,2}$ 는 capital  $\theta$  방법에 의해 수정된 값이다.  $\theta$ 값은 다음의 각 탑 성분 물질 수지식을 만족하도록 결정된다.

$$F_1 X_{1i} + F_{EG} + b_{i,2} - b_{i,1} - d_{i,1} = 0 \quad (4)$$

$$b_{i,1} - b_{i,2} - d_{i,2} = 0 \quad (5)$$

(4)식은 추출 증류탑에 대한 식으로  $F_1$ 은 원료물질,  $F_{EG}$ 는 에틸렌 글리콜의 보충량,  $b_{i,2}$ 는 용제 회수탑에서 정제되어 재순환되는 추출 용제를 나타낸다. (3)식은 용제 회수탑에 대한 것으로 추출 증류탑의 탑저 제품이 원료물질로 사용된다. 또한  $\theta$ 값은 주어진 탑저 성분 유량의 합이 탑저 유량과 같도록 설정되어야 한다. 따라서

$$g_1(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{B_1} \sum_{i=1}^c b_{i,1} - 1 = 0 \quad (6)$$

$$g_2(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{B_2} \sum_{i=1}^c b_{i,2} - 1 = 0 \quad (7)$$

를 만족하여야 한다. 이상에서 원하는  $\theta$ 값은 Newton-Raphson 방법을 이용하여 구할 수 있다. 각 탑의 모사는 모듈화시켰으며 다음과 같은 순서로 모사를 행하였다. 첫 번째 탑에 대하여 모사를 행하여 탑저 성분 유량을 구하고 이를 두 번째 탑의 원료로 사용한다. 다음에 두 번째 탑에 대한 모사를 행하여 탑저 성분 유량을 구한다. 얻어진 각 탑에서 나가는 성분 유량값을 가지고  $\theta$  수렴 방법을 이용, 수정값을 얻는다. 이상의 과정을  $\theta_1 = \theta_2 = 1$ 이 될 때까지 반복한다.

#### 4. 증류탑의 효율 측정

증류탑 모델이 실제 증류 공정을 잘 나타내기 위해서는 증류탑의 효율을 실험적으로 결정하는 것이 최선의 방법이다. 본 증류 공정에서는 두 가지 종류의 효율을 사용하였다. 즉, 단탑에서는 Murphree 효율을, 충전탑에서는 증발 효율(vaporization efficiency)을 사용하였다. 각 탑에서의 효율은 여러 변수들의 함수이지만 본 연구에서는 각 탑에서 원료 유량 변화에 따른 효율을 측정하여 이 값을 최적화의 매개 변수로 사용하였다. 각 단 및 충전탑의 경우 각 물질전달 구간의 효율은 일정하다고 가정하였고 효율 측정은 다음과 같이 행하였다[11].

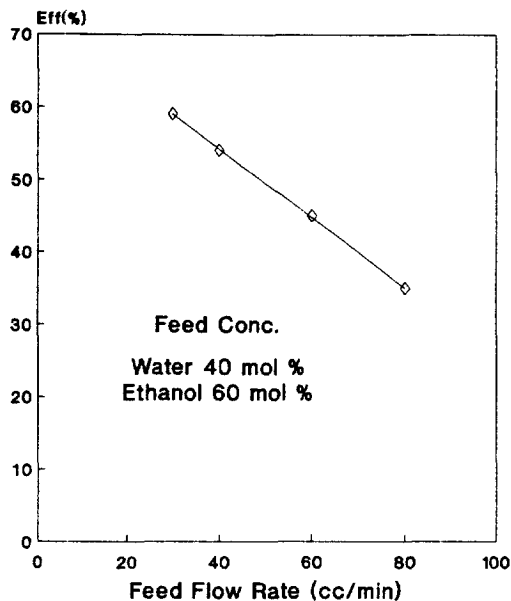


Fig. 2. Murphree efficiency of plate column.

(1) 유량, 가열 열량, 원료 조성 등의 조업 조건을 확정된 후 실험을 통하여 탑정 농도와 탑저 농도를 측정한다.

(2) 같은 조업 조건을 이용하여 정상상태 도사를 행한다.

(3) 정상상태 도사의 매개 변수를 효율로 하여 실험 결과와 일치되는 값을 찾는다.

(4) 원료 유량을 변화시켜 가면서 이에 따른 효율을 구한다.

Fig. 2는 단탑에서의 효율을, Fig. 3은 충전탑에서 효율 값의 변화를 보여준다.

## 5. 최적화 문제의 구성

### 5-1. 목적 함수

최적 조업 조건을 찾는다는 것은 주어진 제약 조건을 만족하면서 어떤 목적함수  $J$ 를 극대화 혹은 극소화하는 운전 조건을 찾는 일이다. 추출 증류탑의 성능은 증류탑 효율에 의한 영향을 제외할 때 환류량과 추출 용제의 순환량, 순도 및 온도와 같은 인자들의 영향을 받고 이들의 증류 분리능에 대한 영향은 대단히 비선형적이고 상호 간섭적이다[2]. 예를 들어 환류량이 아무리 많아도 추출 용제가 충분치 않으면 원하는 정도의 분리가 이루어지지 않는다. 따라서 원하는 분리를 위해서 어떤 변수를 어떻게 조정함으로써 최적의 조업 조건을 얻을 수 있는지가 관건이 된다. 이들 변수들은 다시 각 탑의

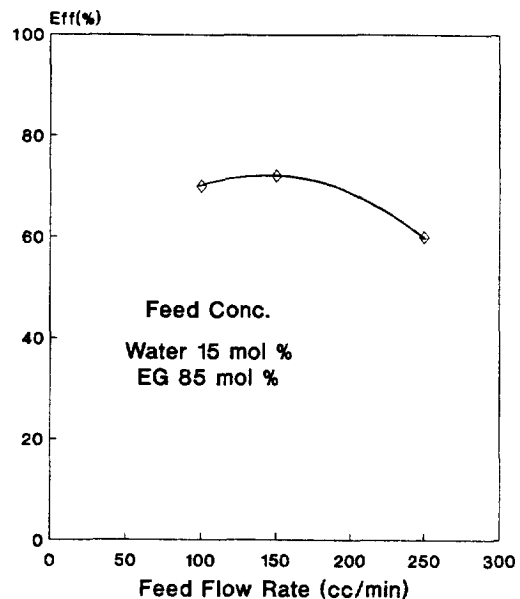


Fig. 3. Vaporization efficiency of packed column.

열소모량, 추출 증류탑의 탑상 제품량, 추출 용제의 순환량, 추출 용제의 보충량에 따라 결정된다.

조업이 넓은 범위의 영역에서 최적의 될 수 있도록 하는 최적의 기준을 나타내는 목적함수의 구성은 대단히 중요한 문제 중의 하나이다. 추출 증류탑에서 탑상제품인 에탄올이 탑저로 빠져 나가는 경우 이는 경제적인 손실로 생각할 수 있다. 이 손실은  $C_1 B X_B$ 와 같이 쓸 수 있는데 여기서  $C_1$ 은 이 성분이 탑상 제품이 되었을 경우와 탑저 제품이 되었을 경우의 가격 차이이다. 또한 순도 요구 조건은 다음과 같은 비용을 통하여 사양에서 벗어난 제품에 대해 정량적으로 표시할 수 있다. 이 비용은 다음과 같이 일차와 이차 함수의 조합으로 나타내었는데 이는 Waller 등[3]이 제안한 것을 수정한 것이다.

$$J_D' = D_1 [C_1 10 (X_D' - X_D) + C_{qo} 10 (X_D' - X_D)^2] \quad (8)$$

제품의 판매 이득은  $C_D D_1$ , 열 소모 가격은  $C_Q (Q_1 + Q_2)$ , 냉각수 사용 가격은  $C_{CW} (Q_{C1} + Q_{C2})$ , 에틸렌 글리콜 보충 비용은  $C_{EG} F_{EG}$ 로 나타낼 수 있다. 이상에서 목적함수는 다음과 같이 구성할 수 있다.

$$J = C_D D_1 - C_Q (Q_1 + Q_2) - C_{CW} (Q_{C1} + Q_{C2}) - C_{EG} F_{EG} - J_D' - C_1 B X_B \quad (9)$$

여기서,

$$J_D' = D_1 [C_{1D} 10 (X_D' - X_D) + C_{qo} 10 (X_D' - X_D)^2] \\ X_D \leq X_D'$$

Table 2. Constraint and cost factor

Heat input to first column	$0 \leq Q_1 \leq 2.16 \times 10^7 \text{ J/h}$
Heat input to second column	$0 \leq Q_2 \leq 1.08 \times 10^7 \text{ J/h}$
Feed flow rate	$0 \leq F \leq 113 \text{ mol/h}$
Flooding	$0 \leq Q_1 \leq 1.0 \times 10^7 \text{ J/h}$ $0 \leq Q_2 \leq 1.8 \times 10^6 \text{ J/h}$
Ethanol product purity	$X_D \geq 99 \text{ wt\% (97.4 mol\%)}$
Ethylene glycol cost	W 730/1
Ethanol(99 wt%) cost	W 2500/1
Electricity	W 60/Kwh
Cooling water cost	W 100/ton

$$J_D' = 0 \quad X_D > X_D' \quad (10)$$

(10)식에 나타낸 바와 같이 제품의 사양보다 순도가 더 높은 경우에 대해서는 보상도 손실도 없다.

## 5-2. 제약조건

증류 공정은 조업 조건이나 사양이 원하는 범위 내에 들어가야 원활한 조업을 행할 수 있다. 아무리 좋은 최적 조업 조건을 구하였어도 이것이 증류탑의 물리적인 제약 조건에 위배된다면 구현할 방법이 없기 때문이다. 증류 공정에서 야기되는 장치상의 제약으로는 증류탑 장치 이외에 펌프의 유량, 재비기의 가열량 등 장치 사용 범위로 인한 제한 요소이다. 순도상의 제약은 원하는 제품의 사양을 맞추기 위한 것으로 본 연구에서는 에탄올의 순도를 99 무게 %로 정하였다. 운전상의 제약은 증류탑 조업시 flooding, weeping과 같이 조업을 원활히 못하게 하는 현상이다. 본 연구에서는 flooding만을 고려하였는데 각 단의 spacing에 대해 최대 기체 유량은 단탑의 경우는 Fair 등[9]의 식으로 구하였고 충전탑의 경우 일반적인 증류탑 문헌[10]을 참조하였다. 이상에서 구한 최대 기체 유량을 일으키는 열소모량을 증류탑 모사를 통해 구함으로써 flooding을 대표하는 제한 조건으로 설정하였다. Table 2에 이러한 제약 조건들과 원료 및 제품에 대한 가격율을 나타내었다.

## 6. 최적화 기법

최근에 많은 최적화 알고리즘이 사용 가능하여졌다. 이들은 함수의 미분치를 이용하는 gradient 방법과 직접 함수 값을 이용하는 직접법의 두 가지로 대별될 수 있다. Gradient 방법으로는 SQP(Successive Quadratic Programming)와 GRG(Generalized Reduced Gradient)를 들 수 있다. 직접법으로는 Box의 complex 방법이 널리

Table 3. Performance test of three optimization techniques

Optimization technique	Computing time	Global convergence
SQP	—	0% (0/20)
GRG	about 1hr	80% (16/20)
Complex	about 10 hrs	100% (20/20)

사용되고 있다. 이상 세 가지 방법을 본 공정에 적용하여 그 장단점을 살펴보았다.

Gradient 방법은 앞서의  $\theta$  수렴 방법 대신에 최적화 방법을 사용할 수 있다. 즉 물질 수지식 (4), (5)를 상등 제약 조건으로, 순도상의 제약 조건을 부등 제약 조건으로 하는 최적화 문제를 구성할 수 있다. 따라서 목적 함수 내의 순도 항은 생략된다. 여기서 최적화 변수는 각 탑의 탑저 성분 유량과 열소모량이 된다. 또한 용제 보충량을 또 하나의 변수로 잡을 수 있다. 이와 같이 최적화 변수가 추출 증류계의 구성에서의 독립 변수와 다르게 나타난 것은 본 논문에서 사용된 gradient 방법이 공정 모사와 최적화가 동시에 처리되기 때문이다. 즉 최적화의 제약 조건이 아니었던 식 (4), (5)가 최적화 문제의 상등 제약 조건으로 사용됨에 따라 각 탑의 탑저 성분 유량이 최적화 변수로 사용된다. 이 방법은 재순환 수렴 과정이 최적화 문제와 동시에 처리됨으로써 제 1 탑과 2탑 각각에 독립된 모사 모듈을 사용할 수 있고 빠르게 최적해를 구할 수 있는 장점이 있다. 그러나 정확한 미분치가 구해져야 최적해가 보장이 되는 단점을 가지고 있다. SQP 방법은 IMSL library[12]를 이용하였고 GRG 방법은 GRG2 code[13]를 사용하였다. SQP는 모두 비 최적점에서 최적화가 멈추는 결과를 보여주었는데 GRG 방법은 모든 초기점에서 최적점을 찾지는 못하였으나 많은 경우에 최적점에 도달함을 확인하였다.

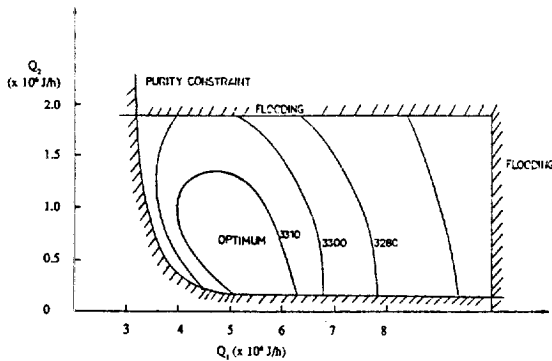
Box의 complex 방법은 시작점을 가능한 영역에 무작위로 분산시켜 최적점을 구할 수 있도록 수정된 방법을 사용하였다. 이 경우에 서로 다른 시작점에서 최적화 과정 수렴성은 모든 경우에 만족스러우나 상당한 시간이 소요되었다. Table 3은 각기 다른 시작점에서 각 최적화 기법이 최적점에 도달하는데 소요되는 시간과 그 성공율을 나타내었다. 결론적으로 세 방법 중 GRG 방법이 가장 효율적인 것으로 나타났다.

## 7. 최적화 결과 및 고찰

최적화에 사용된 입력 변수들에 대해 Table 4에 나타내었다. Fig. 4는 추출 증류탑의 탑상 제품량( $D_1$ ) 및 추출 용제의 순환량( $R_{EG}$ )을 고정시켰을 때 목적 함수

Table 4. Input parameters

Section	Item	Parameter value
Extractive distillation column	No. of sieve trays	20
	Feed trays	EtOH + water 7
	Extractant recycle	2
	EG make-up	1 mol/hr
	Feed conc.	60 mol % EtOH
	Feed flow rate	30-80 mol/h
	Extractant recycle rate	60-100 mol/h
Stripping column	Column pressure	760 mmHg
	No. of equivalent trays	6
	Feed tray	3
	Column pressure	760 mmHg

Fig. 4. Operating window and value of objective function ( $F = 40$  mol/h,  $R_{EG} = 100$  mol/h,  $D_1 = 24.5$  mol/h).

값을 조업 가능 영역내에서 나타내고 있다. 추출 증류탑의 열소모량( $Q_1$ )과 용제 회수탑의 열소모량( $Q_2$ )은 이 영역 안에서 유지되어야 한다. 이상에서 주요 조업 제약 조건은 flooding과 순도 사양으로 나타났다. 또한 최적 조업점이 제약 조건 선상에 위치하지 않는 것은 제품 손실량에 대한 항이 목적 함수에 포함되어 있기 때문인 것으로 생각된다. 최적화 결과에 대하여 Table 5에 나타내었다.

추출 용제 보충량을 일정량(1 mol/h)로 놓고 임의의 원료량(feed)에 대하여 최적의  $D_1$ ,  $R_{EG}$ ,  $Q_1$ ,  $Q_2$ 를 구하도록 하였다. 원료량이 40 mol/h일 때 최적점을 Table 5(b)에 나타내었다. Fig. 5는 용제의 순환량에 따른 최대 목적 함수값의 변이를 나타낸 것이고 이 때 각 탑의 열소모량을 Fig. 6에 나타내었다. 추출 용제 순환량이 적을수록 회수탑의 열소모량은 증가하고 추출 증류탑의 열소모량은 감소한다. 이는 추출 용제 순환량의 감소로 인한 증류 성능의 하락을 환류량의 증대보다는 추출

Table 5. Optimization results

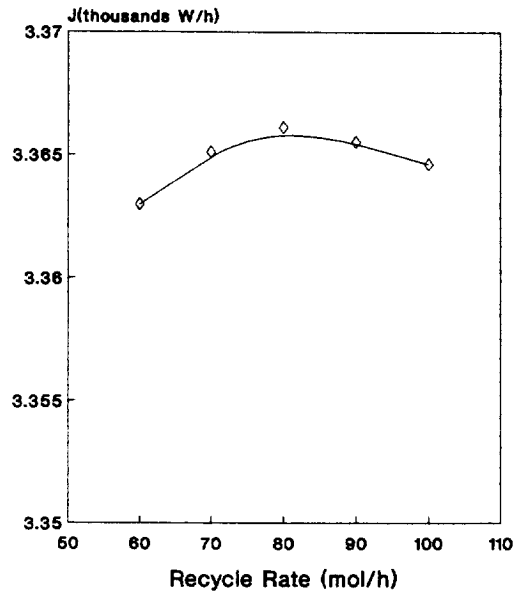
	F	$F_{EG}$	$R_{EG}$	$D_1$	$Q_1$	$Q_2$	J	J/F
	mol	moh	mol	mol	J/h	( $\times 10^6$ )	Won	Won
	/h	/h	/h	/h			/h	/mol
(a)	30	1	100	19.4	3.63	0.48	2509	83.6
	40	1	60	24.5	3.77	0.81	3363	84.1
	40	1	70	24.5	3.88	0.73	3365	84.1
	40	1	80	24.5	3.93	0.66	3366	84.2
	40	1	90	24.5	4.02	0.62	3365	84.1
	40	1	100	24.5	4.45	0.61	3364	84.1
	50	1	100	30.5	5.86	0.93	4192	83.8
	60	1	100	36.5	7.34	1.03	5009	83.5
	70	1	100	42.5	8.82	1.26	5812	83.0
	80	1	100	48.0	9.99	1.79	6584	82.3
(b)	40	1	78.1	24.5	3.92	0.67	3366	84.2
(c)	40	0.764	77.6	24.5	4.08	0.852	3368	84.3
(d)	30	0.5	74.3	19.4	3.0	0.64	2586	86.2

(a)  $F$ ,  $F_{EG}$ ,  $R_{EG}$  : given;  $Q_1$ ,  $Q_2$ ,  $D_1$  : optimization variables (Complex)

(b)  $F$ ,  $F_{EG}$  : given;  $Q_1$ ,  $Q_2$ ,  $D_1$ ,  $R_{EG}$  : optimization variables (GRG)

(c)  $F$  : given;  $Q_1$ ,  $Q_2$ ,  $D_1$ ,  $R_{EG}$ ,  $F_{EG}$  : optimization variables (GRG)

(d)  $F$ ,  $Q_1$ ,  $Q_2$ ,  $D_1$ ,  $R_{EG}$ ,  $F_{EG}$  : optimization variables (GRG)

Fig. 5. Maximum J versus recycle rate ( $F = 40$  mol/h).

용제의 순도를 높임으로써 보다 경제적으로 방지할 수 있음을 보여준다. 이러한 내용은 Fig. 7에 나타난 추출 용제 순환량에 따른 최적 추출 용제 순도의 변화로 잘 뒷받침된다. 이는 추출 용제 순환량과 용제 내의 물 농

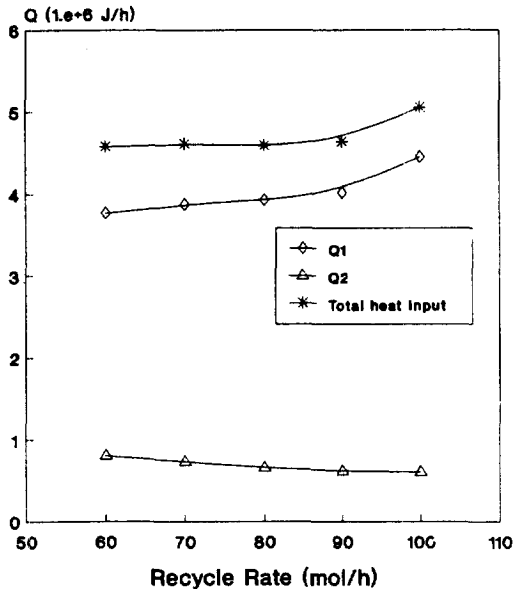


Fig. 6. Optimum heat input versus recycle rate ( $F=40 \text{ mol/h}$ ).

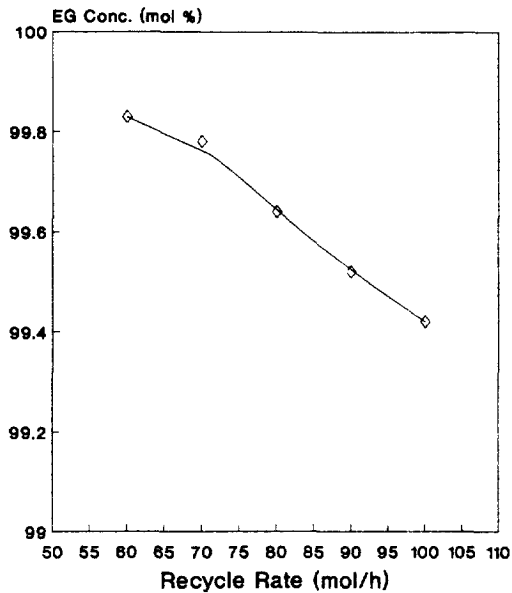


Fig. 7. Optimum purity of recycled solvent for the change of recycle rate ( $F=40 \text{ mol/h}$ ).

도의 감소는 제 1탑의 열소모량을 감소시키나 제 2탑에서는 용제 내의 물 농도 감소를 위해 보다 많은 열이 소모되는 것에 기인한다. 즉 추출 용제 순환량과 용제의 순도는 상호 보완적인 면을 가지고 있음을 알 수 있다.

추출 용제 보충량이 또 하나의 독립 변수로 추가되는

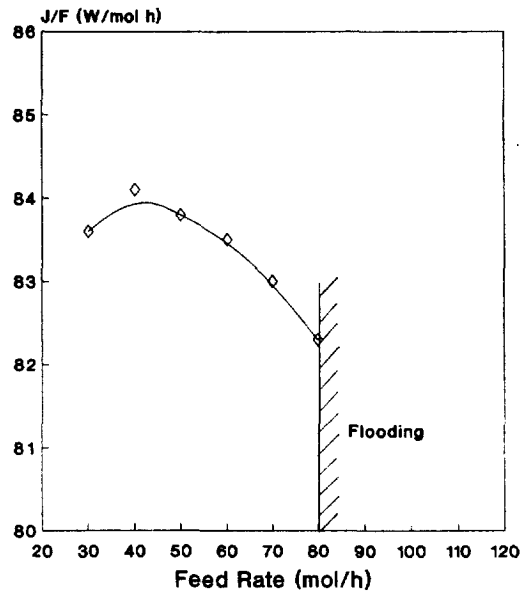


Fig. 8. Maximum J/F versus feed rate ( $R_{EG}=100 \text{ mol/h}$ ).

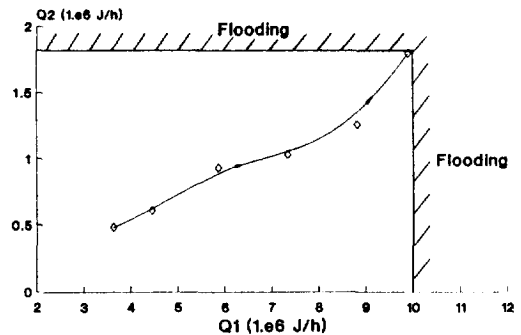


Fig. 9. Trajectory of optimum operating point with the increase of feed flow rate ( $R_{EG}=100 \text{ mol/h}$ ).

경우 최적 조업점은 Table 5(c)에 나타내었다. Table 5(b)에 비하여 용제 보충량이  $0.764 \text{ mol/h}$ 으로 감소하면서 제 2탑 열소모량이  $0.852 \times 10^6 \text{ J/h}$ 로 증가하였다. 즉 용제 보충량이 줄어들면 제 2탑 열소모량을 증가시키는 것이 보다 경제적인을 알 수 있다.

단위 원료당 목적 함수 값인 J/F가 목적 함수로 사용되는 경우는 상품 판매가 시장에 의해 제한을 받는 경우로 단위 원료당 이익을 utility나 원료의 사용량을 최적화하여 증가시키는 것이 주된 목표가 된다[14]. 추출 용제 순환량을  $100 \text{ mol/h}$ 로 고정시키고 원료량을 변화시켰을 때 단위 원료당의 이익을 최대로 하는 조업 조건을 구하기 위해 최적화 모사를 행하였다. Fig. 8은 원료량의 변화에 따른 J/F 값의 변화를 보여준다. 이

결과에서 최적의 원료량은 40 mol/h로 나타났다. 이 때 최적 조업점의 변화는 Fig. 9와 같은데 원료량 증가에 따라 각 탑의 열소모량을 어떻게 증가시켜야 하는지를 잘 나타내준다.

최적화 변수로  $F$ ,  $D_1$ ,  $R_{EG}$ ,  $Q_1$ ,  $Q_2$ ,  $F_{EG}$  변수가 동시에 사용되는 경우 최적 조업점은 Table 5(d)에 나타난 바와 같다. 추출 용제 순환량을 고정시키지 않은 경우 원료량이 적을수록 단위 원료당 이득은 증가하는 것으로 나타났다. 원료량 증가에 따라 J/F 값이 증가하지 않은 것은 원료량에 따른 탑 효율 변화에 기인하는 것으로 생각된다.

## 8. 결 론

추출 증류계는 여러 인자들이 서로 상호 간섭을 하고 또한, 이들이 증류에 미치는 영향이 대단히 비선형적인 공정이다. 추출 증류탑과 추출 용제 회수탑으로 구성된 증류계에 대하여 각 탑의 열 소모량 및 추출 용제 순환량을 주요 최적화 변수로 하는 최적화 문제를 구성하고 실험을 통해 탑 효율을 구하고 공정에 대한 엄밀 모사를 행함으로써 최적화를 행하였다. 사용된 최적화 기법은 SQP와 GRG 방법과 Box의 complex 방법이었으며 GRG와 complex 방법의 경우에만 최적 조업점을 얻을 수 있었고 GRG 방법이 본 공정에 가장 효율적인 것으로 나타났다. 목적 함수는 제품의 판매 이득, 열소모 가격, 냉각수 사용가격, 에틸렌 글리콜 보충량으로 나타내었으며 순도 요구조건을 맞추기 위한 항이 추가되었다. 최적화 모사 결과 각 탑에서의 최적 열 소모량, 추출 용제 순환량, 탑상 제품량(에탄올) 및 최적 용제 보충량을 구할 수 있었으며 또한 이들 각 변수들이 추출 증류 성능 및 목적 함수에 미치는 영향을 분석할 수 있었다.

## 감 사

본 연구는 과학 기술처에서 시행한 특정 연구 개발 사업의 연구 결과이며 본 연구비를 지원해 준 과학기술처에 감사드립니다.

## 사용기호

B	: flow of bottom product [mol/h]
$C_{index}$	: cost or value factors
D	: flow of distillate [mol/h]
$E_j$	: vaporization efficiency of jth section
F	: feed rate [mol/h]

J	: objective function [W/h]
P	: column pressure [mmHg]
Q	: reboiler heat duty [J/h]
$Q_c$	: condenser duty [J/h]
R	: reflux rate [mol/h]
$R_{EG}$	: recycle rate of extractant [mol/h]
V	: vapor rate [mol/h]
$b_i$	: molar flow rate at which component i leaves the reboiler [mol/h]
$d_i$	: molar flow rate at which component i leaves the column [mol/h]
$g_1, g_2$	: functions defined by Eqs. (6) and (7), respectively
$X_D'$	: overhead product purity constraint
$x_i$	: mole fraction of component i in the liquid phase
$y_i$	: mole fraction of component i in the vapor phase

## 그리스 문자

$\alpha_i$	: activity coefficient
$\theta_1, \theta_2$	: multipliers defined by Eqs. (2) and (3)

## 하첨자

1	: extractive distillation column
2	: stripping column
CW	: cooling water
EG	: ethylene glycol
D	: overhead product
B	: bottom product
i	: component no.
j	: tray no.

## 참고문헌

1. Lee, F. M. and Phal, R. H.: *I&EC Proc. Des. Dev.*, **24**, 168(1985).
2. Shinsky, F. G.: *Distillation Control*, 2nd ed. R. R. Donnelley & Sons Company(1984).
3. Waller, K. V. and Gustafsson, T. K.: *I&EC Proc. Des. Dev.*, **17**, 3, 313(1978).
4. Roffel, B. and Fontein, H. J.: *CES*, **34**, 1007(1979).
5. Holland, C. D.: *Fundamentals and Modeling of Separation Process*, Prentice-Hall, N. J.(1975).
6. 홍완기 : 물-에탄올-첨가제 3성분 혼합물의 기-액 평형, 서강대학교 화학공학과 석사 학위 논문(1988).
7. Box, M. J.: *Computation Journal*, Vol. 8(1975).
8. Kuester, J. L. and Mize, J. H.: *Optimization Tech-*



- niques, McGraw-Hill(1973).
9. Fair, J. R.: *Petro. Chem. Engng.*, Sept., 45-52(1961).
  10. Coulson, J. M. and Richardson, J. F.: *Chemical Engineering*, Pergamon Press(1983).
  11. 윤 풍, 강신이, 한명완 : 소형 컴퓨터를 이용한 전산 제어 시스템의 개발(III), 한국화학연구소 보고서 (1989).
  12. IMSL library user's manual(1987).
  13. Lasdon, L. S. and Waren, A. D.: *GRG2 user's guide* (1982).
  14. Edgar, T. F. and Himmelblau, D. M.: *Optimization of Chemical Processes*, McGraw-Hill, 7(1988).