

## 회분식 충전 증류탑을 이용한 아세톤-메탄올-2-프로판올계의 농도분포 예측

이영상 · 주동표<sup>†</sup>

아주대학교 화학공학과  
(1999년 1월 15일 접수, 1999년 3월 9일 채택)

## Estimation of Concentration Profiles of the Acetone-Methanol-2-Propanol System in a Batch Packed Distillation Column

Young Sang Lee and Dong Pyo Ju<sup>†</sup>

Department of Chemical Engineering, Ajou University  
(Received 15 January 1999; accepted 9 March 1999)

### 요 약

1-cm Pall ring<sup>o</sup> 150-cm 높이로 충전된 내경 10-cm인 회분식 증류탑을 사용하여 acetone-methanol-2-propanol계의 농도분포를 실측하고 이를 이론적 농도분포와 비교하였다. 실험은 1기압, 전환류조건 및 0.05 gmol/s의 증기속도하에서 수행되었다. 이론적인 농도분포는 Krishna와 Standart가 제안한 행렬모델을 사용하여 계산되었으며 물질전달계수 및 전달단위높이와 같은 계의 물질전달 특성은 Onda 등, Bravo와 Fair, Billet 및 Bolles와 Fair의 경험식을 사용하여 추정하였다. 계산된 농도분포는 실측치와 대체로 잘 부합하였으며 Bolles와 Fair의 방법이 실측된 농도를 0.021 AAD 이내로 가장 잘 모사함을 알 수 있었다.

**Abstract** – Concentration profiles of the acetone-methanol-2-propanol system, obtained experimentally using a batch distillation column packed with 1-cm Pall rings were compared with theoretical profiles. The I.D. and the total packed height of the column were 10-cm and 150-cm respectively. The experiments were performed under 1 atm, total reflux condition and a vapor boil-up rate of 0.05 gmol/s. The theoretical concentration profiles were calculated using the matrix model proposed by Krishna and Standart. The mass transfer characteristics of the system, such as mass transfer coefficients and the heights of a transfer unit, were estimated by empirical correlations of Onda et al., Bravo and Fair, Billet, and Bolles and Fair. The calculated profiles were in reasonable agreement with the experimental profiles. It was found that the method of Bolles and Fair gave the best results showing 0.021 AAD between predicted and measured concentrations.

Key words : Ternary Batch Distillation, Packed Tower, Number of Transfer Units, Concentration Profiles

### 1. 서 론

증류공정은 크게 연속식과 회분식으로 구분된다. 특히 회분식 증류는 양이 적고 고부가가치인 생산물을 생산하는 화학산업에서 널리 사용되고 있으며 단일 장치를 사용하여 여러 가지 생성물을 얻을 수 있고 조업이 간단하며 장치의 효용성이 뛰어난 장점이 있다. 충전탑은 단타입에 비하여 기액 접촉면적이 넓고 압력손실이 작아 회분식 증류 공정에 자주 사용되고 있으나 탑 내의 유동현상이 복잡하여 계의 전달특성 해석이 용이하지 않은 특성이 있다. 특히 다성분계 충전 증류 탑을 설계하거나 경제적인 운전을 하기 위해서는 계의 물질전달 특성에 대한 바른 이해가 필요하다. 이성분계와는 달리 다성분계의 경우 확산 성분들의 간섭효과에 의하여 osmotic diffusion, diffusion barrier 또는 reverse diffusion 현상이 일어날 수 있음을 Toor[1]가 이론적으로 주장하고 또한 이 현상이 실험적으로 입증됨에 따라 다성분계의 물질전달 특성을 이해하고자 하는 많은 노력이 진행되고 있다.

<sup>†</sup>E-mail : dpju@madang.ajou.ac.kr

다성분계 충전 증류탑의 물질전달 특성을 고찰하기 위해서는 탑 내의 농도분포를 정확히 모사할 수 있어야 하며 농도분포는 평형단 모델 또는 비평형단 모델을 이용하여 모사 가능하다[2]. 다성분계 충전 증류탑의 농도분포를 예측하기 위해서는 다성분계를 구성하는 성분들로 이루어진 여러 이성분계의 물질전달계수, 전달단위높이 또는 전달 단위수 등이 필요하다. Krishna와 Standart[3]는 이성분계의 특성치를 사용하여 다성분계를 해석할 수 있는 행렬모델을 제안한 바 있다. Gorak 등[4]은 SULZER-CY 충전물로 채워진 지름이 10 cm인 충전탑을 사용하여 methanol-2-propanol-water계에 대해 증류실험을 수행하고 실측된 삼성분계의 농도분포를 이론치와 비교하였다. 이론적인 농도분포의 계산에는 이성분계의 물질전달계수 추정을 위한 Zogg[5]의 경험식 및 Krishna와 Standart의 행렬모델이 적용되었다. 계의 활동도 계수 추정을 위하여 이들은 여러 가지 모델들을 검토하였으며 계산된 탑의 농도분포는 이들 모델에 따라 실측된 농도분포와 상당한 차이가 존재함을 보고하였다. Taylor 등[6]은 Gorak 등의 실험결과를 모사하여 이성분계의 물질전달계수를 Zogg의 경험식 대신 Bravo와 Fair[7]의 경험식을 사용하여 추정하였다. 이 방법에 의하여 계산된 탑의 농

도분포는 실측치와 훨씬 더 잘 부합하는 것으로 보고되었다. 또한 Taylor 등은 내경 7.62 cm의 충전탑에 0.635 cm 크기의 Raschig ring을 충전하고 전환류조건 하에서 acetone-methylacetate-methanol계의 증류실험을 한 Arwickar[8]의 실험결과를 모사하였다. 이성분계의 물질전달계수 및 유효접촉면적의 추정을 위하여는 Onda 등[9]의 경험식이 이용되었다. 실측치와 이론치 사이의 편차는 acetone과 methylacetate의 경우는 2.0% 정도인 반면 methanol의 경우는 4.0% 가량인 것으로 보고되었다.

이상을 종합할 때 다성분계 충전 증류탑의 농도분포는 이성분계 전달특성치(물질전달계수, 전달단위높이 등)를 사용하여 추정 가능함을 알 수 있으나 전달특성치를 추정하는 방법[7, 9-13]에 따라 서로 다른 결과가 나타날 수 있을 것으로 예상된다. 따라서 여러 가지 다성분계에 대한 검토와 함께 특정 다성분계에 가장 적합한 추정방법에 대한 검토가 필요하다. 이에 따라 본 연구에서는 acetone-methanol-2-propanol로 이루어진 삼성분계에 대해 지름이 1 cm인 Pall ring<sup>o</sup> 150 cm 높이로 충전된 회분식 증류탑을 사용하여 상압, 전환류 조건하에서 증류실험을 수행하고 각 성분들의 탑 내 농도분포를 실측하였다. 또한 이성분계의 전달특성치와 행렬모델을 사용하여 본 삼성분 충전 증류탑의 농도분포를 계산하고 이를 실측치와 비교함으로서 본 계에 대한 행렬모델의 적용 가능성 및 검토한 이성분계 전달특성치의 경험식 중 본 계에 가장 적합한 경험식을 알아보자 하였다. 이성분계 전달특성치의 추정을 위하여는 Onda 등과 Bravo와 Fair가 제안한 이성분계 충전탑의 물질전달계수 추정식, Billet[10, 11] 및 Bolles와 Fair[12, 13]가 제안한 전달단위높이 추정식을 검토하였다. 이러한 네 가지 방법으로 추정한 이성분계들의 전달특성치는 전달단위수로 환산된다 다음 Krishna와 Standart의 행렬모델에 의하여 삼성분계로 확장되었다.

## 2. 삼성분계 충전 증류탑의 농도분포 추정

n개의 성분으로 이루어진 다성분계 충전 증류탑의 경우 기상의 조성 변화는 물질수지로부터 다음과 같이 표현된다[3].

$$V \frac{d(y)}{dz} = c_i^V [K_{ov}] (y^* - y) a' A_c \quad (1)$$

기상의 총괄물질전달계수 행렬  $[K_{ov}]$ 는

$$[K_{ov}] = \frac{V}{c_i^V H a' A_c} [N_{ov}] \quad (2)$$

로 나타낼 수 있으며 무차원좌표  $\zeta = z/H$ 를 도입할 경우 식 (1)은 다음과 같은 무차원 식이 된다.

$$\frac{d(y)}{d\zeta} = [N_{ov}] (y^* - y) \quad (3)$$

여기서  $(y)$ 와  $(y^* - y)$ 는 n-1개의 원소를 갖는 열 행렬이며, 총괄전달단위수행렬  $[N_{ov}]$ 는  $n-1 \times n-1$  차원의 정방 행렬로서 이중막 이론에 근거하여 다음 관계식으로부터 추정될 수 있다.

$$[N_{ov}]^{-1} = [N_V]^{-1} + [\Lambda][N_L]^{-1} \quad (4)$$

$$[\Lambda] = \left( \frac{V}{L} \right) [M] \quad (5)$$

$$[M] = [K][\Gamma] \quad (6)$$

여기서  $[K]$ 는

$$K_{ij} = \frac{\partial y_i^*}{\partial x_j} \quad (i, j=1, 2, \dots, n-1) \quad (7)$$

의 원소를 갖는 평형상수 행렬이며, 행렬  $[\Gamma]$ 는 액상의 비이상성을 보정하는 열역학적 보정인자로서 다음과 같은 원소를 갖는다.

$$G_{ij} = \delta_{ij} + x_i \frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial x_j} \quad (i, j=1, 2, \dots, n-1) \quad (8)$$

$[\Gamma]$ 의 추정에는 여러 열역학적 모델들이 이용될 수 있으며 본 연구에서는 Wilson 모델[14]을 사용하였다.

총괄전달단위수행렬  $[N_{ov}]$ 를 추정하기 위해서는 식 (4)에 표시된 바와 같이 기상과 액상의 전달단위수행렬  $[N_V]$ 와  $[N_L]$ 이 필요하다. 삼성분계의 경우  $[N_V]$  및  $[N_L]$ 의 원소들은 이성분계의 전달단위수( $N_{12}$ ,  $N_{13}$ ,  $N_{23}$ ) 및 삼성분계의 조성( $y_1$ ,  $y_2$ ,  $y_3$ )을 사용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} N_{11} &= N_{13}[y_1 N_{23} + (1-y_1)N_{12}]/S \\ N_{12} &= y_1 N_{23}(N_{13}-N_{12})/S \\ N_{21} &= y_2 N_{13}(N_{23}-N_{12})/S \\ N_{22} &= N_{23}[y_2 N_{13} + (1-y_2)N_{12}]/S \\ S &= y_1 N_{23} + y_2 N_{13} + y_3 N_{12} \end{aligned} \quad (9)$$

이성분계의 전달단위수  $N$ 은 해당 성분사이의 기상 및 액상 물질전달계수( $k^V$  및  $k^L$ ) 또는 전달단위높이( $H_V$  및  $H_L$ )를 사용하여 다음과 같이 환산될 수 있다.

$$\begin{aligned} N_V &= k^V a' h / u_V = h / H_V \\ N_L &= k^L a' h / u_L = h / H_L \end{aligned} \quad (10)$$

이성분계 충전 증류탑의 물질전달계수 및 전달단위높이의 추정을 위하여 사용할 수 있는 경험식들은 Ponter 등[15]에 요약되어 있다. 본 연구에서는 Onda 등, Bravo와 Fair, Billet 및 Bolles와 Fair 등의 네 가지 경험식을 사용하여 이성분계 전달단위수를 추정하였으며 이들을 사용하여 총괄전달단위수행렬  $[N_{ov}]$ 를 구하고 식 (3)을 4차의 Runge-Kutta 방법으로 수치 적분함으로서 삼성분계의 농도분포를 계산하였다.

## 3. 실험장치 및 방법

### 3-1. 실험장치

본 실험에 사용된 회분식 충전 증류장치의 개략도를 Fig. 1에 나타낸다. 탑은 pyrex glass로 제작한 내경이 10 cm, 높이가 50 cm인 3개의 관을 연결하여 사용하였고 충전물로는 지름이 1 cm인 Pall ring을 사용하였다. 재비기는 용량이 20 l이며 3.6 kw의 mantle을 사용하여 가열하였다. 탑 상부와 하부에는 rotameter를 설치하였으며 압력강하는 manometer를 사용하여 실측하였다. 관의 연결부위에는 redistributor를 설치함으로서 균일한 액체의 분산을 도모하였으며 탑 상부 및 관의 연결부위에 sampling tap을 설치하여 동일한 충전높이에서 기액상 각각 두 개씩의 시료를 채취할 수 있도록 하였다.

### 3-2. 실험방법

실험은 1 atm, 전환류조건하에 세 쌍의 이성분계(acetone-methanol, acetone-2-propanol, methanol-2-propanol) 및 삼성분계(acetone-methanol-2-propanol)를 수행하였다. 증기의 boil-up rate는 0.05 gmol/s로 일정하게 유지시켰으며 사용한 이성분계 및 삼성분계 시료의 초기조성을 Table 1과 2에 수록하였다. 탑이 전환류상태로 가동되기 시작한 후 매 30분 간격으로 sampling tap으로부터 액상과 기상의 시료를 채취, 분석하였다. 약 2시간이 경과된 다음부터는 기액상의 조성이 일정한 값을 나타내는 정상상태임을 알 수 있었으나 1시간 동안 더 운전하였다. 채취한 시료는 gas chromatograph를 사용하여 분석하였고 동일한 충전높이에서 실측된 조성들의 산술 평균치를 취함으로서 정상상태하의

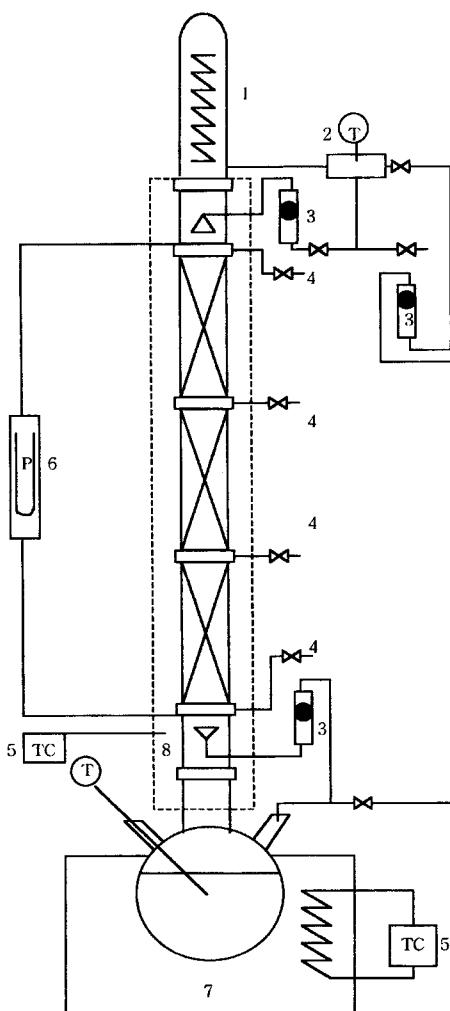


Fig. 1. Schematic diagram of experimental apparatus.

- |                    |                           |
|--------------------|---------------------------|
| 1. Condenser       | 5. Temperature controller |
| 2. Reflux divider  | 6. Manometer              |
| 3. Flow meter      | 7. Mantle                 |
| 4. Sampling valves | 8. Insulation             |

Table 1. Feed compositions of binary systems

Component(1-2)	Feed composition (mol% of component 1)
Acetone-Methanol	5.33-21.34
Acetone-2-Propanol	5.38-23.06
Methanol-2-Propanol	6.72-25.91

Table 2. Feed compositions of ternary system

Run no.	Feed composition(mol%)	
	Acetone(1)-Methanol(2)-2-Propanol(3)	
1	15.10-37.86-47.04	
2	12.34-26.24-61.42	
3	9.71-24.94-65.35	
4	7.31-24.28-68.41	

농도분포를 구하였다.

### 3-3. 분석

시료의 분석은 chromosorb로 충진된 stainless steel column(1/8 inch

Table 3. Binary parameters of the Wilson equation [16]

i	j	Binary systems	$\lambda_{ij}-\lambda_{ii}$ (cal/g mol)	$\lambda_{ji}-\lambda_{jj}$ (cal/g mol)
1	2	Acetone(1)-Methanol(2)	-128.1900	498.9400
1	3	Acetone(1)-2-Propanol(3)	205.7209	265.4683
2	3	Methanol(2)-2-Propanol(3)	231.9242	0.1696

$\times 1.5 \text{ ft}$ )을 사용하여 TCD가 부착된 G.C.(Hewlett Packard, 5890 series II plus)로 분석하였다. 분석조건은 oven temperature는  $180^\circ\text{C}$ , injection temperature는  $200^\circ\text{C}$  그리고 detector temperature는  $250^\circ\text{C}$ 이며 carrier gas는 He을 사용하였다. 시료의 분석오차는 0.5 mol%이내이다.

### 3-4. 상평형 Data

농도분포를 예측하기 위해서는 acetone-methanol-2-propanol계에 대한 이성분계 및 삼성분계의 기-액 상평형 값이 필요하다. 기-액 상평형값은 실측된 액상조성의 bubble point를 계산하여 결정하였고 액상의 활동도 계수는 Wilson 모델을 사용하여 계산하였다. Wilson 모델에 사용되는 이성분계 파라미터들은 문헌[16, 17]에 보고된 값을 사용하였다. 추정된 상평형값은 실측치를 0.0047 AAD 이내로 잘 모사하는 것으로 판단되었다. Wilson 모델의 이성분계 파라미터를 Table 3에 나타내었으며 볼 부피는 Hankinson 등[18]의 식을 사용하여 계산하였다.

## 4. 결과 및 고찰

### 4-1. 이성분계의 전달단위수

Fig. 2-4에 acetone-methanol, acetone-2-propanol 및 methanol-2-propanol 등 세 쌍의 이성분계에 대하여 기상전달단위수( $N_L$ ) 및 액상전달단위수( $N_V$ )와 조성사이의 관계를 나타내었다. 기상과 액상의 전달단위수는 물질전달계수 또는 전달단위높이를 추정할 수 있는 경험식을 사용하여 환산한 것이다. 이러한 환산을 위해서는 각상의 유량 또는 사용된 충전물의 특성과 같은 조업 및 장치 특성치와 아울러 충전증류탑의 농도변화에 따른 밀도, 점도, 확산계수와 같은 물성치가

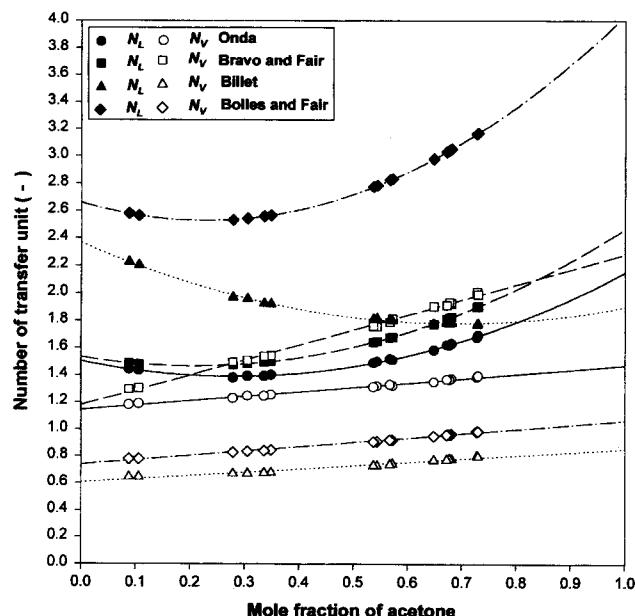


Fig. 2. Variation of number of transfer units for acetone-methanol system.

필요하다. 본 연구에서는 세 쌍의 이성분계에 대하여 실측한 정상상태의 농도분포를 이용하여 bubble point 계산을 함으로서 여러 충전높이에 대한 기액상의 온도를 결정하였고 이를 바탕으로 문헌식[18-32]을 이용하여 물성치들을 추정하였다.

Fig. 2는 acetone-methanol계의  $N_V$ 와  $N_L$ 을 전술한 네 가지 경험식을 이용하여 추정하고 이를 조성의 함수로 표시한 것이다. 추정된  $N_V$ 와  $N_L$ 은 사용하는 경험식에 따라 큰 차이를 보이고 있다. 동일한 조성에 대하여 Bolles와 Fair의 방법이 가장 큰  $N_L$ 을 예측하고 있는 반면 Onda 등은 가장 작은 값을 나타내었으며  $N_L$ 은 일반적으로 조성이 증가하면서 값이 커지는 경향을 보이고 있으나 Billet의 방법은 오히려 값이 감소되는 것으로 추정되었다.  $N_L$ 은 조성의 변화에 따라 비선형적인 변화거동을 보이는 반면  $N_V$ 는 경험식에 따라 차

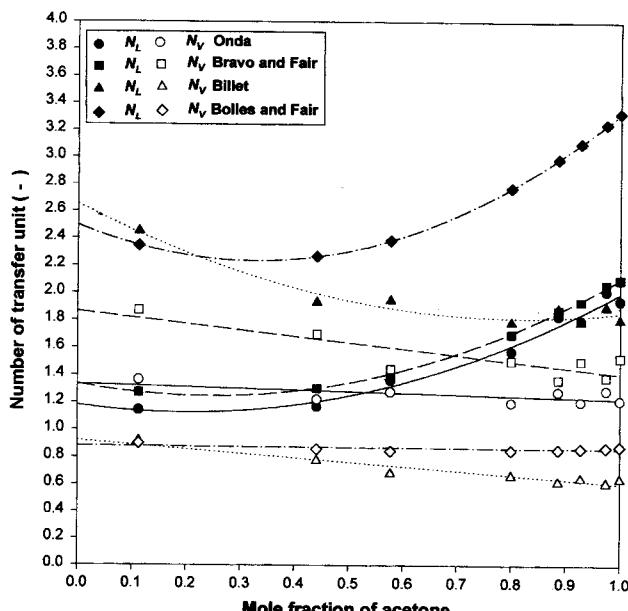


Fig. 3. Variation of number of transfer units for acetone-2-propanol system.

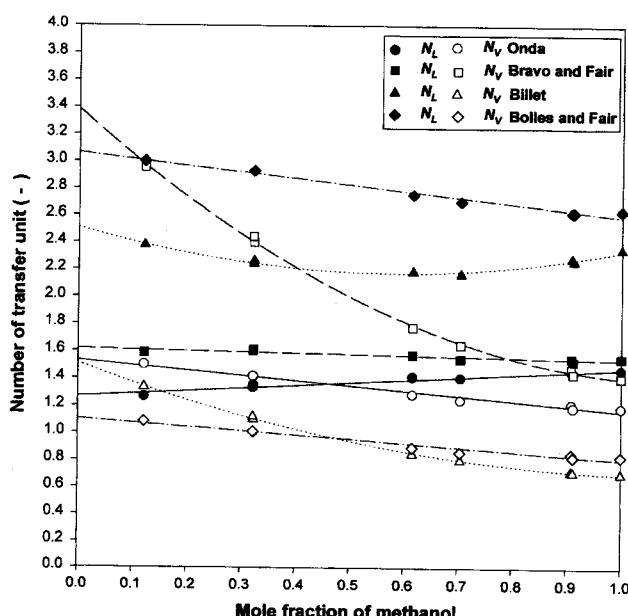


Fig. 4. Variation of number of transfer units for methanol-2-propanol system.

이는 있으나 조성의 증가에 따라 값이 선형적으로 증가하는 것으로 나타났다. Bravo와 Fair의 방법이 가장 큰  $N_V$ 를 예측한 반면 Billet의 방법은 가장 작은  $N_V$ 를 추정하고 있다. Fig. 3은 acetone-2-propanol계의 전달단위수와 조성사이의 거동으로 전달단위수 추정방법 및 조성에 따른 전달단위수의 변화거동은 acetone-methanol계와 유사한 것으로 나타났다. Fig. 4는 methanol-2-propanol계의 결과를 수록한 것이다.  $N_L$ 은 Billet의 방법을 제외하고는 조성에 따라 선형적으로 변화하고 있으며  $N_V$ 는 다른 두 이성분계와는 달리 Bravo와 Fair의 방법을 사용할 경우 조성 증가에 따라 비선형적인 감소 거동을 나타내었다.

Fig. 2-4의 결과를 검토할 때 acetone-methanol, acetone-2-propanol 및 methanol-2-propanol계의 전달단위수들은 계의 조성과 추정에 사용한 경험식에 따라 상당히 다른 값을 나타냄을 알 수 있으며, acetone-methanol-2-propanol 삼성분 충전증류법의 이론적인 농도분포는 이성분계 전달단위수의 추정에 사용된 경험식에 따라 서로 다른 결과를 나타낼 것으로 예상된다.

#### 4-2. Acetone-Methanol-2-Propanol 계의 농도분포

Acetone-methanol-2-propanol계에 대하여 실측된 각 성분의 농도분포와 전술한 여러 가지 경험식들을 사용하여 추정한 농도분포를 Fig. 5 및 6에 비교하였다. 삼성분계 충전탑의 농도분포의 추정은 다음과 같은 순서로 진행하였다. 탑의 하부에서 유출되어 재비기로 유입되는 실측한 액상조성  $x_i$  ( $i=1, 2, 3$ )로부터  $i-j$  이성분계에 대한 pseudobinary 조성  $x'_{ij}$ 을 다음 관계식으로 계산한다.

$$x'_{ij} = \frac{x_i}{x_i + x_j} \quad (11)$$

$x'_{ij}$ 를 이용하여 이성분계의 전달단위수  $N_V, N_L$ 을 Fig. 2-4에서 추정하고 식 (4)-(9)를 이용하여  $[N_{OV}]$ 를 구한 다음 식 (3)의 수치해를 통하여 탑 하부로부터  $\Delta\zeta$  위쪽에서 배출되는 증기상의 조성을 계산한다. 본 연구에서는  $\Delta\zeta$ 를 10 cm로 고정하였다. 계산된 증기상의 삼성분 조성은 전환류조건하에서는 같은 충전높이에 위치한 액상 조성과 동일하므로 이 증기상 조성에 대한 pseudobinary 조성을 다시 계

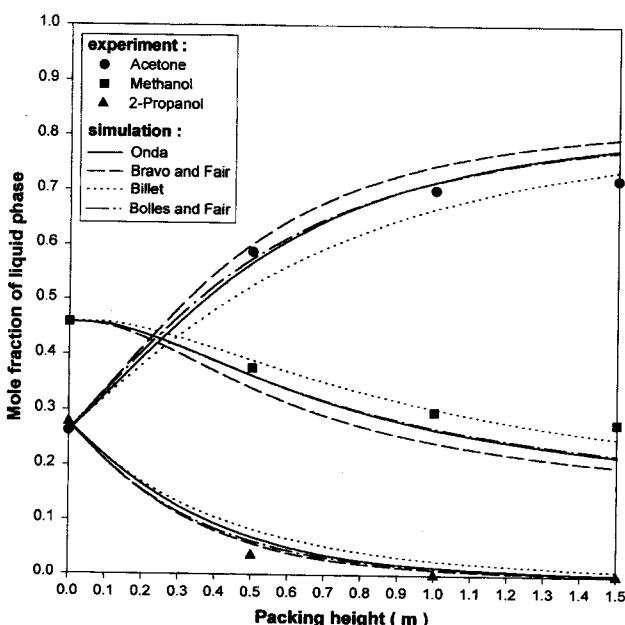


Fig. 5. Comparison of experimental and estimated concentration profiles for acetone(1)-methanol(2)-2-propanol(3) system(Run No. 1).

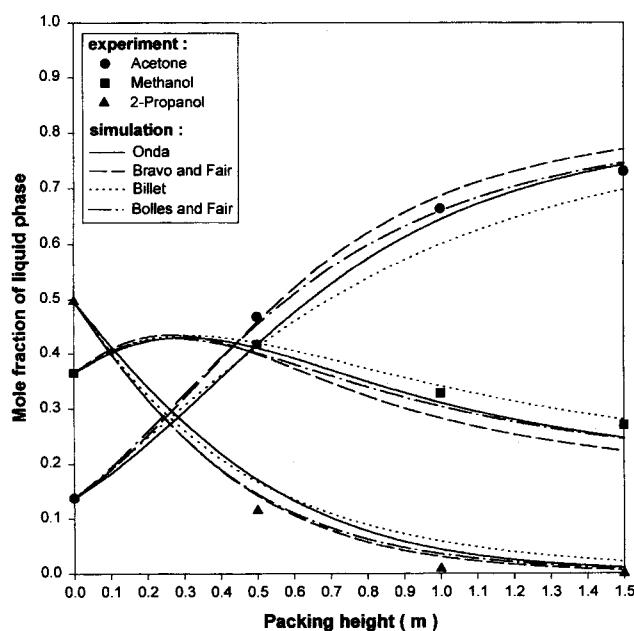


Fig. 6. Comparison of experimental and estimated concentration profiles for acetone(1)-methanol(2)-2-propanol(3) system(Run No. 4).

산하고 같은 방법으로 탑을 상승시키면서 농도분포를 구한다. Fig. 7에 이상의 계산과정을 나타내었다.

추정된 농도분포는 동일 조성에 대한 이성분계의 전달단위수값(Fig. 2-4)들이 경험식과 계에 따라 큰 편차가 있음에도 불구하고 실측한 농도분포를 비교적 잘 모사하는 것으로 나타났다. Table 4에 네 가지 방법에 대한 추정치와 실측치 사이의 평균절대오차를 수록하였다. Onda

Table 4. Comparison of average absolute deviation

Run no.	Component	AAD			
		Onda et al.	Bravo and Fair	Billet	Bolles and Fair
1	$\Delta y_1$	0.0300	0.0324	0.0372	0.0270
	$\Delta y_2$	0.0356	0.0304	0.0154	0.0332
	$\Delta y_3$	0.0171	0.0286	0.0283	0.0414
2	$\Delta y_1$	0.0173	0.0344	0.0327	0.0134
	$\Delta y_2$	0.0246	0.0192	0.0131	0.0244
	$\Delta y_3$	0.0162	0.0325	0.0285	0.0110
3	$\Delta y_1$	0.0217	0.0234	0.0182	0.0288
	$\Delta y_2$	0.0362	0.0283	0.0081	0.0368
	$\Delta y_3$	0.0145	0.0328	0.0264	0.0080
4	$\Delta y_1$	0.0256	0.0555	0.0503	0.0110
	$\Delta y_2$	0.0174	0.0059	0.0085	0.0219
	$\Delta y_3$	0.0342	0.0586	0.0418	0.0222
	$\bar{\Delta y}_1$	0.0237	0.0364	0.0346	0.0201
	$\bar{\Delta y}_2$	0.0285	0.0210	0.0113	0.0291
	$\bar{\Delta y}_3$	0.0205	0.0381	0.0313	0.0138
	$\bar{\Delta y}$	0.0242	0.0318	0.0257	0.0210

$$AAD = \frac{1}{N} \sum |y_{exp} - y_{cal}|$$

등, Billet 방법은 각각 0.0242 및 0.0257, Bravo와 Fair 방법은 0.0318 AAD 내에서 실측치를 모사하는 반면 Bolles와 Fair 방법은 0.0210 AAD 내에서 실측치와 부합하였다.

이상의 결과로부터 acetone-methanol-2-propanol계의 농도분포를 추정하는 경우에는 검토된 네 가지 방법 중 Bolles와 Fair 방법이 가장 적합하며 이성분계의 전달특성치들을 사용하여 다성분계를 해석하는 Krishna와 Standart의 모델이 본 삼성분계에 대하여 잘 적용됨을 알 수 있었다.

## 5. 결 론

전환류조건하에서 지름이 1 cm인 Pall ring<sup>o</sup> 충전된 화분식 중류탑을 사용하여 acetone-methanol, acetone-2-propanol, methanol-2-propanol의 이성분계 및 acetone-methanol-2-propanol계의 삼성분 중류실험을 수행하였다. 실측한 이성분계 중류탑의 농도분포와 Onda 등, Bravo와 Fair, Billet 및 Bolles와 Fair의 경험식을 이용하여 이성분계 기액상의 전달단위수를 추정하고 이 결과를 삼성분계로 확장하여 삼성분 충전 중류탑의 농도분포를 이론적으로 계산하였다. 계산치와 실측치의 비교를 통하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 본 삼성분계 충전중류탑의 농도분포는 계를 구성하는 세 쌍의 이성분계의 물질전달계수 또는 전달단위높이 및 행렬모델을 사용하여 잘 모사될 수 있다.

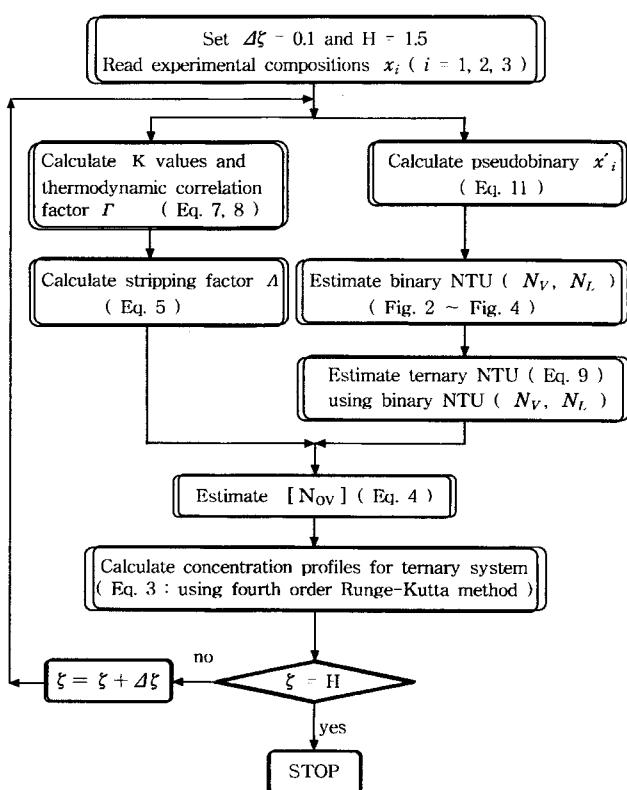
(2) 본 삼성분계의 농도분포는 검토한 네 가지 경험식 중 어느 방법을 사용하더라도 실측치를 0.032 AAD 이내로 잘 모사할 수 있다.

(3) 네 가지 경험식들 중 Bolles와 Fair의 방법이 농도분포 추정에 가장 적합하였으며 실측치와 0.021 AAD 이내로 부합되었다.

## 사용기호

$a'$	: effective interfacial area per unit volume [ $m^2/m^3$ ]
$A_c$	: cross-sectional area [ $m^2$ ]
$c_t$	: mixture molar density [ $mol/m^3$ ]
$h$	: packed height with a default value of 0.5 [m]
$H$	: total height of packing [m]

Fig. 7. Flow chart for the calculation of concentration profiles in a ternary packed column.



$H_L$	: height of transfer unit for liquid [m]
$H_V$	: height of transfer unit for vapor [m]
$k^L$	: mass transfer coefficient for liquid [m/s]
$k^V$	: mass transfer coefficient for vapor [m/s]
[K]	: diagonal matrix of the first (n-1) K values [-]
[ $K_{OV}$ ]	: matrix of multicomponent overall mass transfer coefficient [m/s]
L	: molar flow rate of the liquid phases [mole/s]
[M]	: matrix of equilibrium constants [-]
$N_{ij}$	: element of $[N_V]^{-1}$ and $[N_L]^{-1}$ defined by Eq. (9)
N	: number of transfer units in binary system [-]
[ $N_L$ ]	: matrix of numbers of transfer units for the liquid phase [-]
[ $N_V$ ]	: matrix of numbers of transfer units for the vapor phase [-]
[ $N_{OV}$ ]	: matrix of overall number of transfer units [-]
$u_L$	: superficial velocity of liquid [m/s]
$u_V$	: superficial velocity of vapor [m/s]
V	: molar flow rate of the vapor phases [mole/s]
x	: mole fraction of liquid phase [-]
x'	: mole fraction of pseudo binary [-]
y	: mole fraction of vapor phase [-]
z	: differential height in packed column [m]
[ ]	: square matrix, (n-1)×(n-1)
( )	: column matrix of dimension (n-1)
[ ] <sup>-1</sup>	: inverted matrix

### 그리아스 문자

$\Gamma_{ij}$	: thermodynamic correction factor
$\gamma$	: activity coefficient
$\delta_{ij}$	: Kronecker delta
$\zeta$	: dimensionless coordinate
$\Lambda$	: stripping factor

### 상첨자

L	: liquid phase
V	: vapor phase
*	: equilibrium

### 하첨자

1, 2, 3	: component indices
i, j	: component indices
L	: liquid phase
OV	: overall parameter referred to the vapor phase
V	: vapor phase

### 참고문헌

- Toor, H. L.: *AIChE J.*, **10**(4), 448(1964).
- Krishnamurthy, R. and Taylor, R.: *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, **24**, 513(1985).
- Krishna, R. and Standart, G. L.: *AIChE J.*, **22**, 383(1976).

- Gorak, A. and Vogelpohl, A.: *Sep. Sci. and Technol.*, **20**(1), 33(1985).
- Zogg, M.: PhD Thesis, ETH Zurich(1972).
- Taylor, R., Powers, M. F., Lao, M. and Arehole, A.: The Institute of Chemical Engineers Symposium Series No. 104, Distillation and Absorption, B321(1987).
- Bravo, J. L. and Fair, J. R.: *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, **21**, 162(1982).
- Arwickar, K. J.: PhD Thesis in Chemical Engineering, Univ. of California, Santa Barbara, CA(1981).
- Onda, K., Takeuchi, H. and Okumoto, Y.: *J. Chem. Eng. Jpn.*, **1**, 56 (1968).
- Billet, R. and Schultes, M.: *Chem. Eng. Technol.*, **18**, 371(1995).
- Billet, R.: "Packed Towers in Processing and Environmental Technology," VCH(1995).
- Bolles, W. L., Monsanto, Co. and Fair, J. R.: *Chemical Engineering*, July, **12**, 109(1982).
- Perry, R. H. and Green, D. W.: "Perry's Chemical Engineers' Handbook," McGraw-Hill, 7th edition, section 5, 32(1997).
- Wilson, G. M.: *J. Am. Chem. Soc.*, **86**, 127(1964).
- Ponter, A. B. and Au-Yeung, P. H.: "Handbook of Heat and Mass Transfer," Cheremisinoff, N. P. (Ed.), Gulf Publishing Corp., Houston, TX, Chap. 20, Vol. II, 903(1986).
- Gültekin, N.: *J. Chem. Eng. Data*, **35**, 132(1990).
- Gültekin, N.: *J. Chem. Eng. Data*, **34**, 168(1989).
- Hankinson, R. W. and Thomson, G. H.: *AIChE J.*, **25**, 653(1979).
- Antoine, C.: *Compt. Rend.*, **107**, 681(1888).
- Lee, B. I. and Kesler, M. G.: *AIChE J.*, **21**, 510(1975).
- Chung, T. H., Lee, L. L. and Starling, K. E.: *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **23**, 6(1984).
- Reichenberg, D.: NPL Rept. Chem. 29, National Physical Laboratory, Teddington, England, May(1974).
- Reichenberg, D.: Natl. Eng. Lab. Rept. Chem. 53, East Kilbride, Glasgow, Scotland(1977).
- Reichenberg, D.: Symp. Transp. Prop. Fluids and Fluid Mixtures, Natl. Eng. Lab., East Kilbride, Glasgow, Scotland(1979).
- van Velzen, D., Cardozo, R. L. and Langenkamp, H.: "Liquid Viscosity and Chemical Constitution of Organic Compounds: A New Correlation and a Compilation of Literature Data," Euratom, 4735e, Joint Nuclear Research Center, Ispra Establishment, Italy(1972).
- Yaws, C. L., Miller, J. W., Shah, P. N., Schorr, G. R. and Patel, P. M.: *Chem. Eng.*, **83**(25), 153(1976).
- Grunberg, L. and Nissan, A. H.: *Nature*, **164**, 799(1949).
- Wilke, D. R. and Chang, P.: *AIChE J.*, **1**, 264(1955).
- Vignes, A.: *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **5**, 189(1966).
- Fuller, E. N., Schettler, P. D. and Giddings, J. C.: *Ind. Eng. Chem.*, **58**(5), 18(1966).
- Macleod, D. B.: *Trans. Faraday Soc.*, **19**, 38(1923).
- Pranusnitz, J. M.: "Molecular Thermodynamics of Fluid-phase Equilibria," Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 128(1969).