

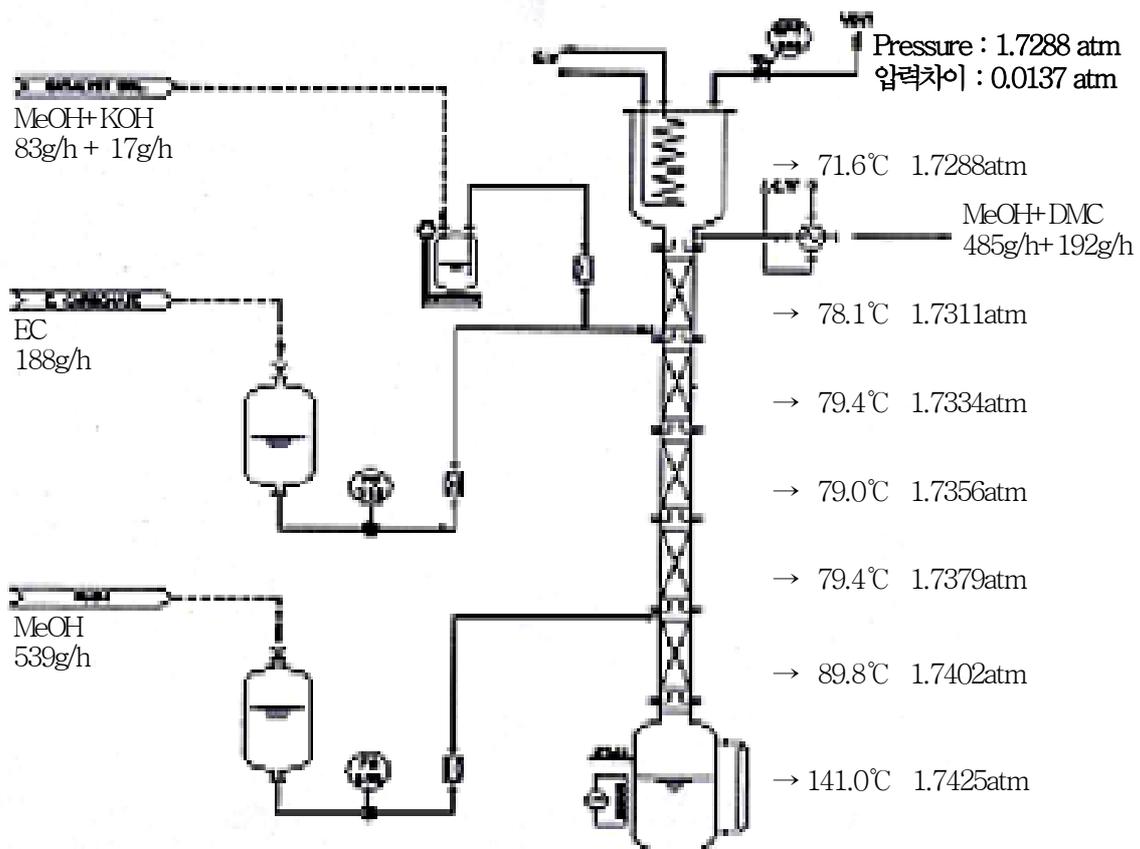
제 5 장 상용공정모사기를 사용한 공정모사

1. Aspen Plus를 사용한 공정모사

액체 KOH 촉매를 이용한 균일계 시스템 실험 중에서, DMC 수율이 98.5% (EC 수율: 100%)가 나왔던 2003년 4월 11일 실험을 Aspen Plus(12.1) 프로그램을 이용하여 모사하였다. 정상상태 모사를 하였으며, 그 후 탐하부의 생성물을 막는 비정상상태 모사를 수행하였다.

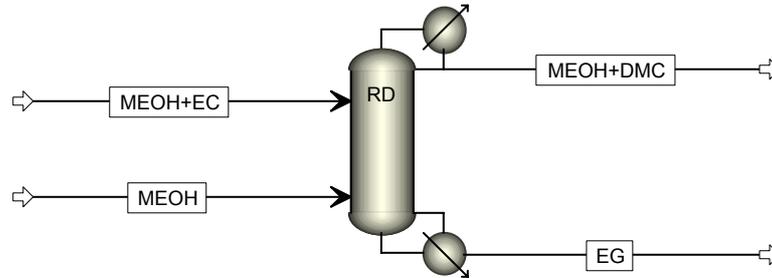
1.1. 실험값

원료는 MeOH이 622 g/h, EC가 188 g/h 로 공급되며, 결과물은 탑상에서 MeOH 485 g/h, DMC 192 g/h로 생산된다. 그리고, 그 때의 각단에서의 온도와 압력은 다음 그림과 같다.

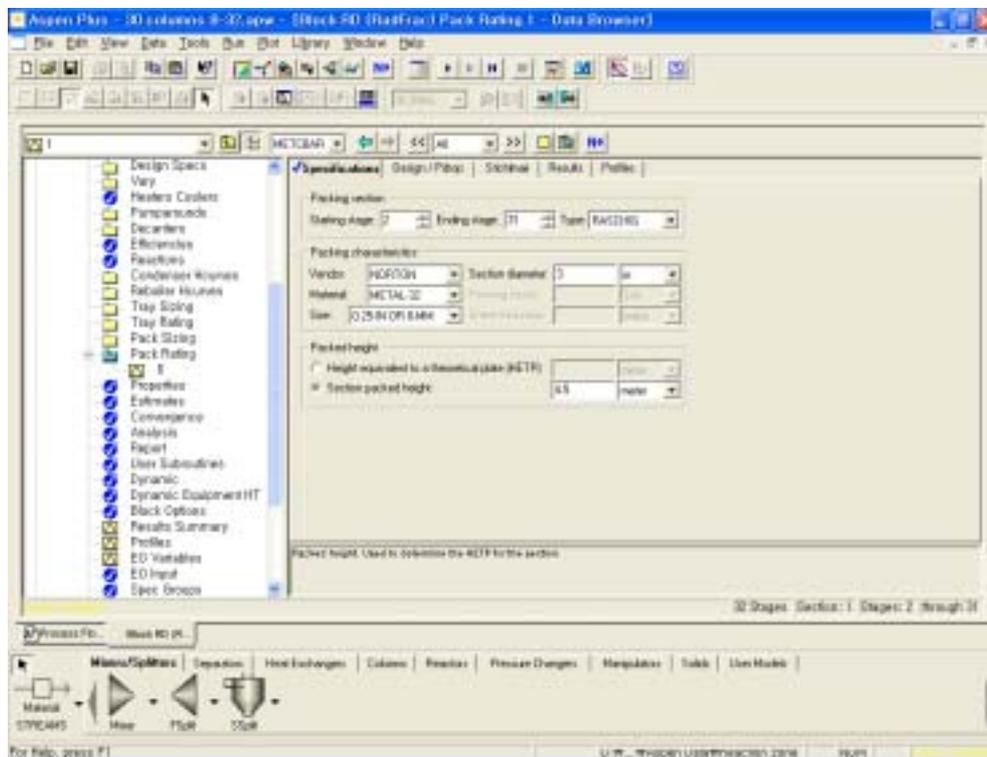


1.2. 입력값

1) 반응증류장치



- 단수 : 32단 (실험단수 30단 + 컨덴서 + 리보일러)
- 원료공급단 : 5단(EC Feed) / 16단(MeOH Feed)
- 리보일러 열공급량 : 2600W
- 환류비 : 15 (mass)
- 칼럼의 내부 구조 : 지름 3인치, 길이 5m (1/4" 라쉬링 4.5m 채워짐)



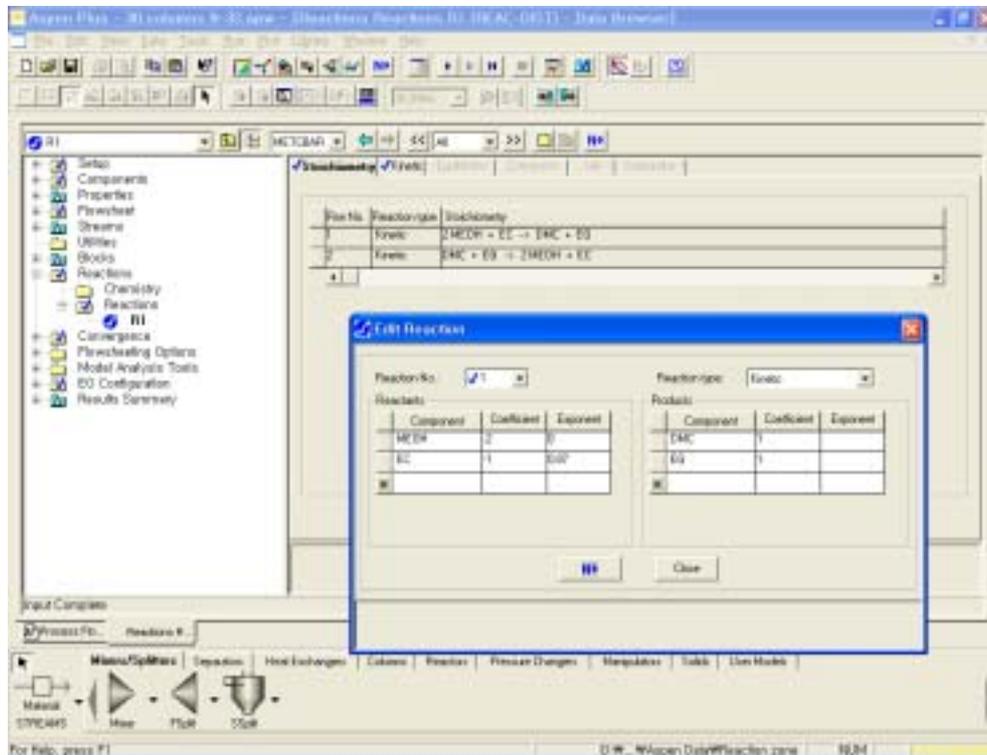
2) Binary Parameters(NRTL) in Activity coefficient

i 물질	MeOH	MeOH	MeOH	DMC	DMC	EC
j 물질	DMC	EC	EG	EC	EG	EG
b ₁₂	218.6422	228.0107	-54.9584	-94.9684	-273.2938	-630.0674
b ₂₁	257.0238	81.7986	24.6539	121.5937	351.7876	102.9258
a	0.3	0.3	0.298	0.3	0.3	0.3

3) 반응속도

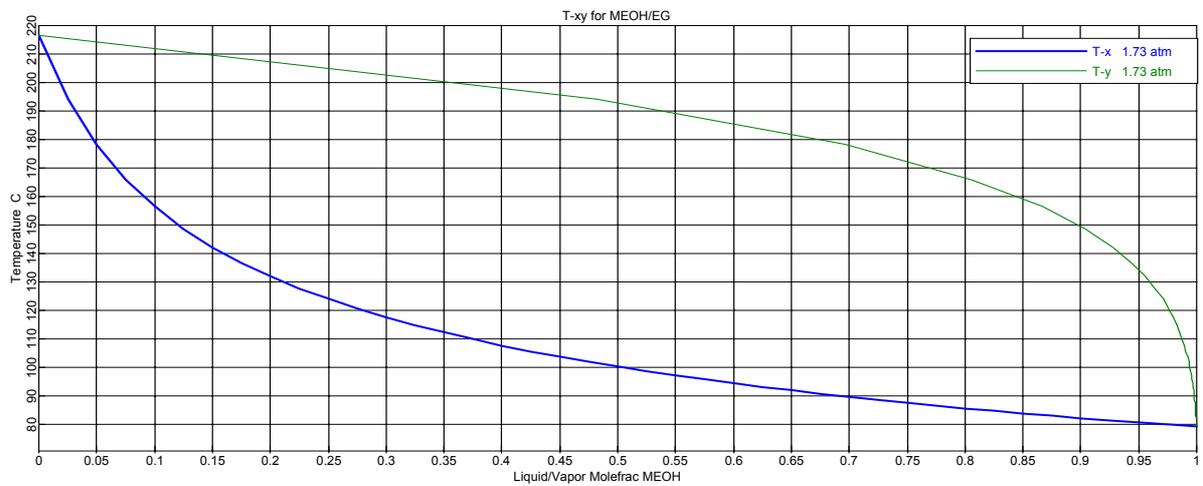
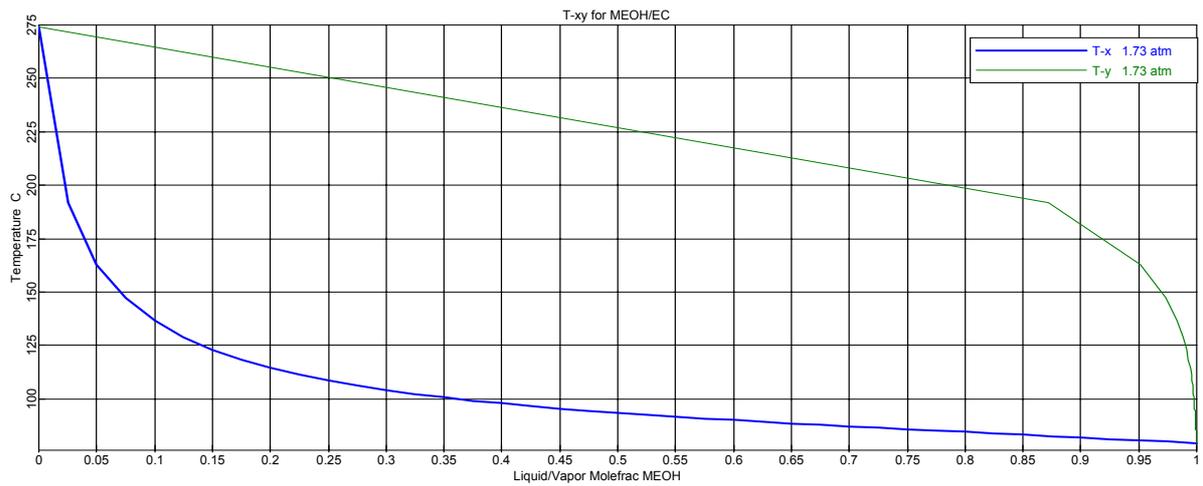
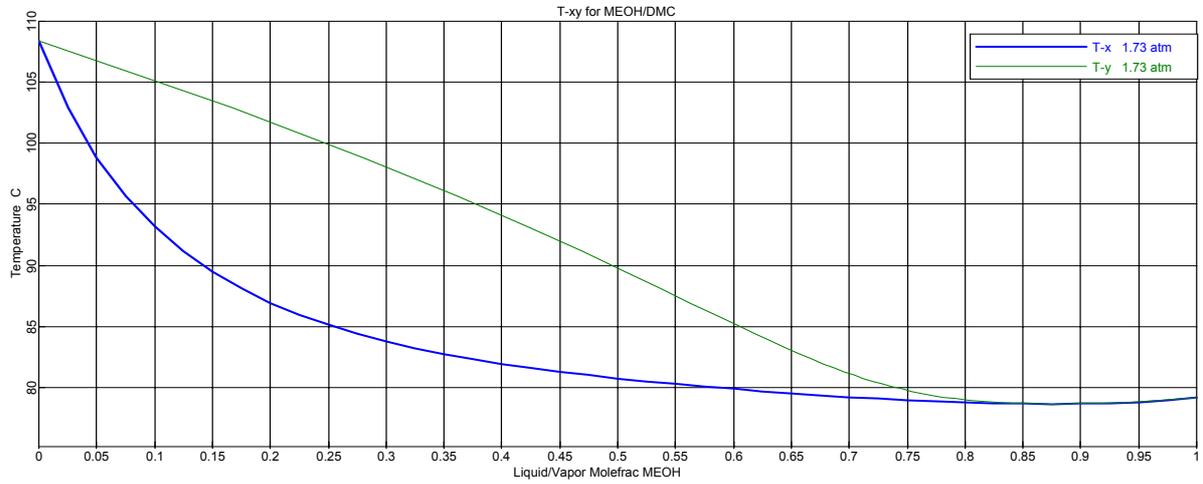
$$-r_{EC} = k_{forward} C_{MeOH}^a C_{EC}^b - k_{backward} C_{DMC}^c C_{EG}^d$$

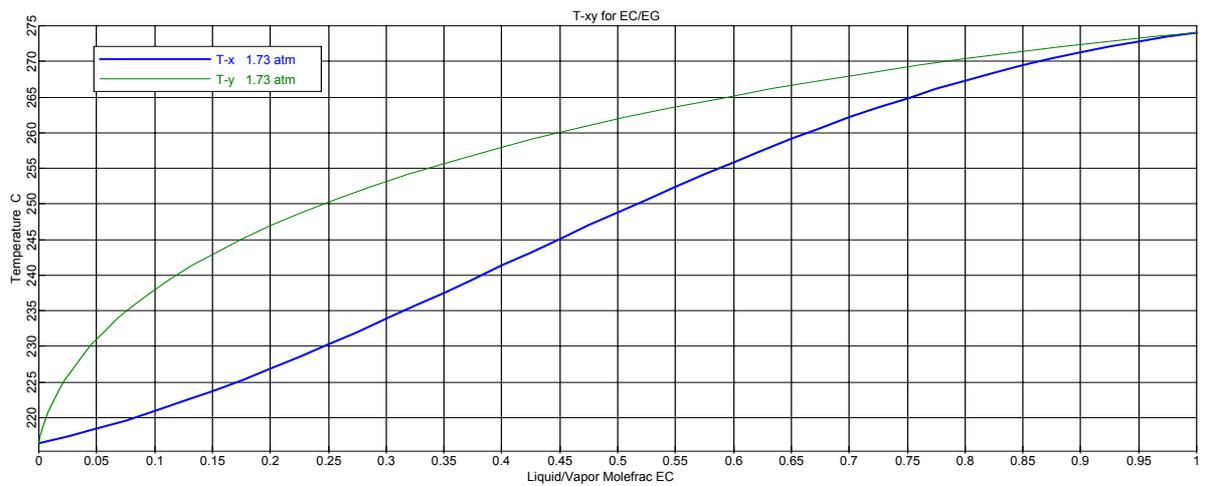
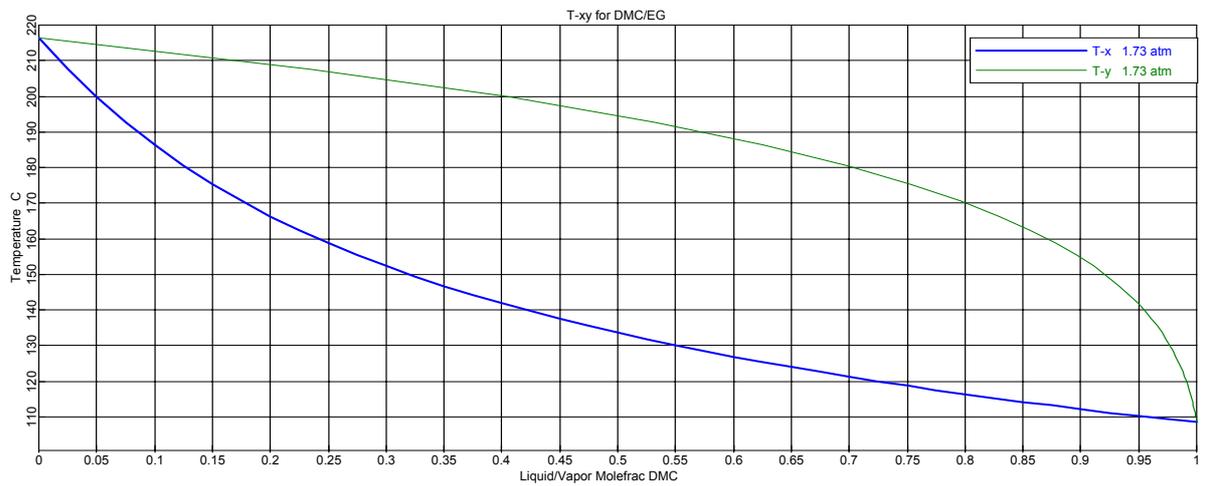
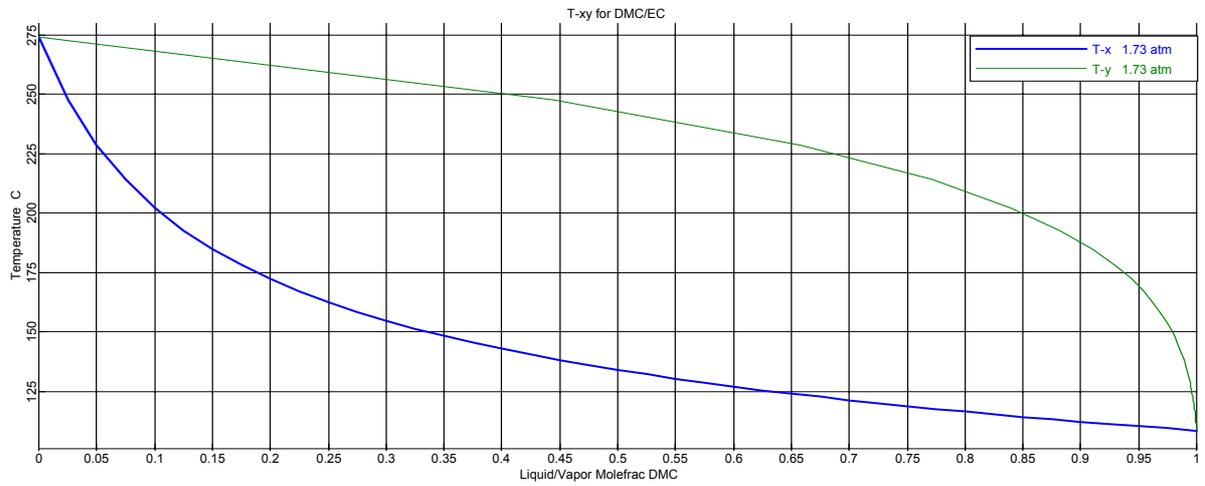
반응	반응차수	활성화 에너지 (KJ/mol)	반응 상수
정반응	b = 0.87	12.73	18.1e ^{-12734.2/RT}
역반응	c = 1.25 d = 0.9	29.28	2457.5e ^{-29276.6/RT}



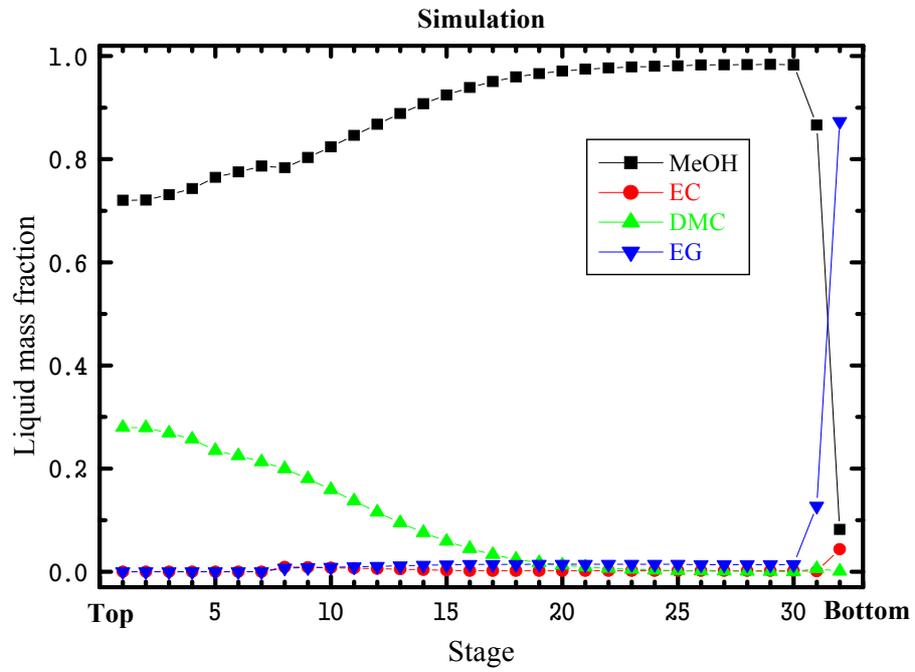
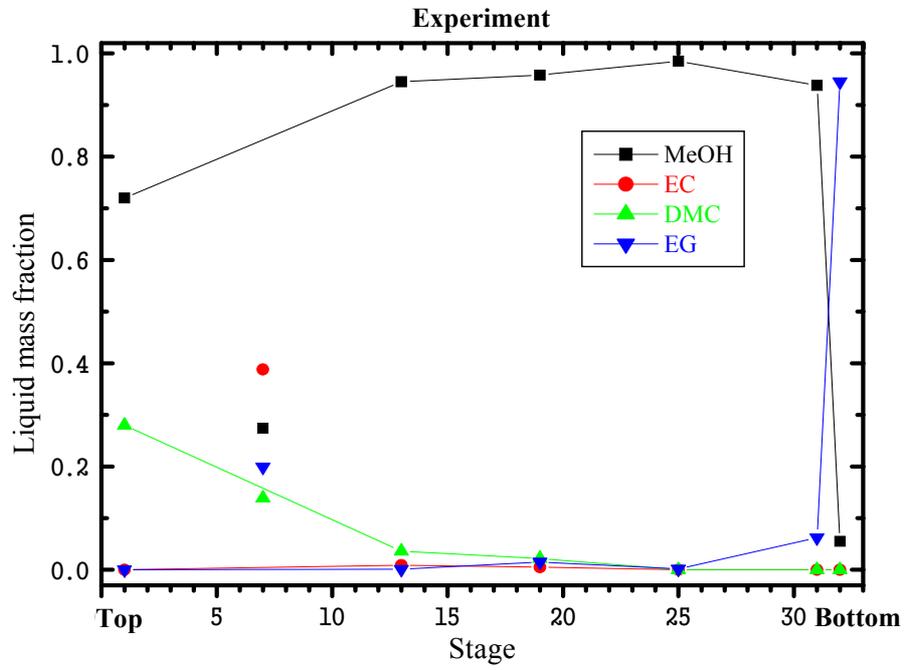
1.3. 결과값

1) 이성분간의 기액평형 (1.73 atm)

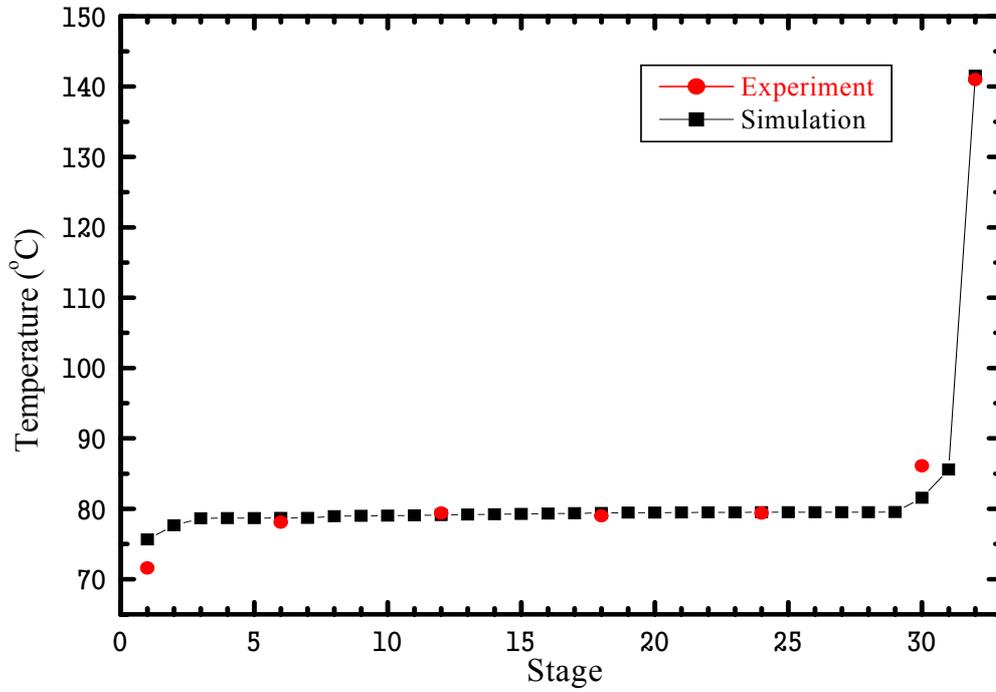




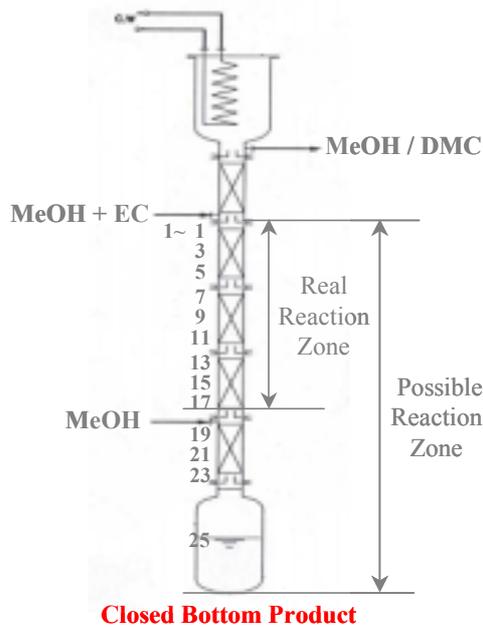
2) 정상상태에서의 조성분포



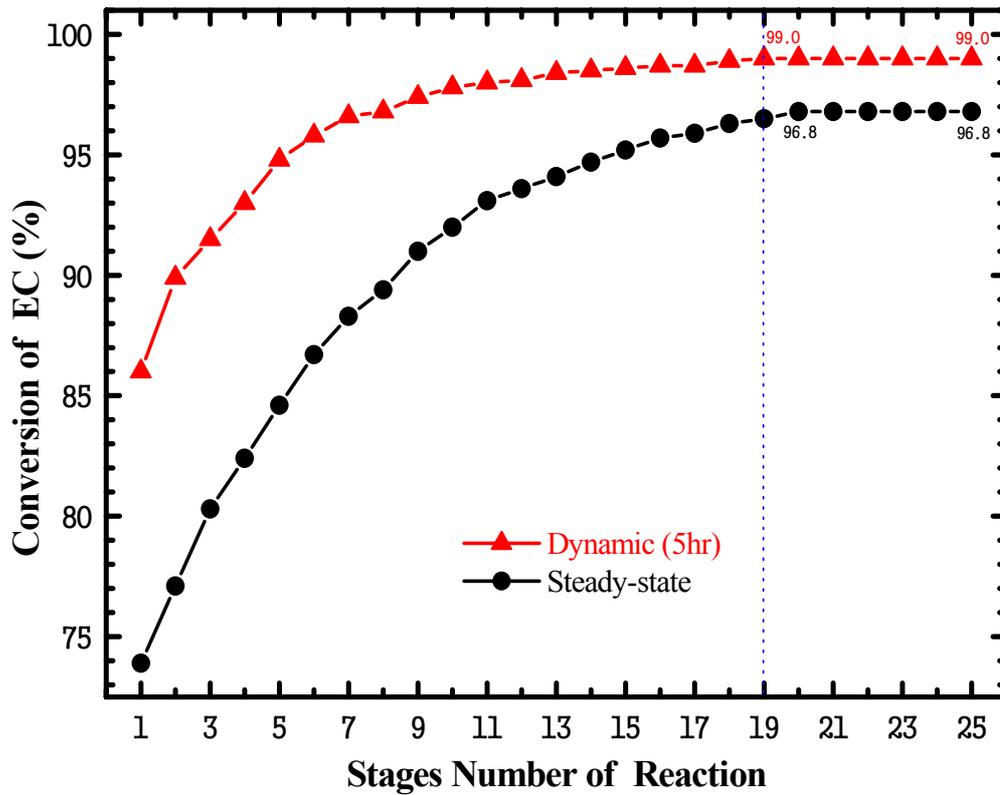
3) 정상상태에서의 온도분포



4) 비정상상태에서의 EC 전환율(%) - 5시간 동안 탑저 생성물 막음



정상상태에서 반응단수가 증가함에 따라 EC 전환율이 증가함을 알 수 있었다. 20개 단에서 반응이 일어나면, 96.8%의 EC 전환율이 나타났다. 그 후 탑저 생성물을 5시간 동안 막는 비정상상태 모사를 하였고, 19개 단에서 반응이 일어날 때, 99.0%의 EC 전환율이 나타났다.



※ Aspen Plus를 이용하여 에스테르교환반응으로 DMC 합성하는 반응증류공정을 모사할 수 있었다. 실험에 의하면 EC 전환율이 100%였고 정상상태 모사결과 96.8%가 나타났다. 탑저 성분을 막는 비정상상태(5시간)에서는 99%의 EC 전환율이 나타남을 알 수 있었다. 그리고, 1/4" 라쉬링으로 채워진 칼럼은 30단의 평형단 효과가 나타남을 알 수 있었다.