

Ethanol-Benzene 공비혼합물의 분리를 위한 압력변환 증류공정의 전산모사

박희경 · 김동선 · 조정호[†]

공주대학교 화학공학부
 330-717 충남 천안시 부대동 275
 (2014년 11월 6일 접수, 2014년 12월 22일 수정본 접수, 2014년 12월 31일 채택)

Simulation and Optimization Study on the Pressure-Swing Distillation of Ethanol-Benzene Azeotrope

Hoey Kyung Park, Dong Sun Kim and JungHo Cho[†]

Department of Chemical Engineering, Kongju National University, 275 Budae-Dong, Cheonan-si, Chungnam 330-717, Korea
 (Received 6 November 2014; Received in revised form 22 December 2014; accepted 31 December 2014)

요 약

본 연구에서는 압력변환 증류공정(Pressure-Swing Distillation, PSD)을 사용하여 에탄올-벤젠 공비혼합물의 분리공정에 대한 전산모사 및 공정 최적화를 수행하였다. 신뢰성 있는 공정 최적화 결과를 도출하기 위해 에탄올-벤젠 이성분계에 대한 기-액 상평형 실험을 수행한 후, 열역학 모델식의 회귀분석을 통해 이성분계 상호작용 매개변수를 도출하였다. 저압-고압 컬럼 배열, 고압-저압 컬럼 배열을 통한 압력변환 증류공정을 적용하여 고순도 에탄올과 고순도 벤젠을 얻기 위한 공정 최적화를 수행하였으며, 재비기의 heat duty량을 비교하였다.

Abstract – In the present study, modelling and optimization of ethanol-benzene separation process were performed using pressure-swing distillation. Order to obtain a reliable results, vapour-liquid equilibrium (VLE) experiments of ethanol-benzene binary system were performed. The parameters of thermodynamic equation were determined using experimental data and the regression. The pressure-swing distillation process optimization was performed to obtain high purity ethanol and high purity benzene into a low-high pressure columns configuration and a high-low pressure columns configuration. The heat duty values of the reboiler from simulation were compared, and the process was optimized to minimize the heat duty.

Key words: Ethanol, Benzene, Azeotrope, Liquid-Vapor Equilibrium, Pressure-Swing Distillation

1. 서 론

공비 혼합물을 형성하는 혼합물은 통상적인 증류방법을 통해서도 각각을 거의 순수한 성분으로 분리해 내는 것은 불가능하기 때문에 순수한 성분으로 분리해 내기 위해서는 특수 증류공정을 사용해야 한다. 에탄올과 벤젠은 341.4 K, 1 atm (101.325 kPa)[1] 뿐 아니라 감압과 고압의 조건하에서도 공비 혼합물을 형성한다. 따라서 일반적인 증류방법으로는 에탄올과 벤젠을 고순도의 성분으로 분리하는 것은 불가능하다. 특수 증류공정에는 공비 증류공정, 추출 증류공정, 압력변환 증류공정이 있다. 공비 증류공정은 1983년 Messick 등[2]에 의해 소개된 공정으로 공비점 분리제가 필요한 반면, 추출 증류공정은

추가적인 용매 성분이 필요한 것으로 알려져 있으나, 압력변환 증류공정(Pressure-Swing Distillation, PSD)은 제3의 성분을 필요로 하지 않기 때문에 환경 친화적인 공정이라는 장점을 가지고 있다[3,4].

본 연구에서는 에탄올-벤젠 공비 혼합물의 분리를 위한 공정으로 압력변환 증류공정을 이용하여 전산모사 및 공정 최적화를 수행하였다. 압력변환 증류공정은 압력에 따라 혼합물에 공비점이 변화는 원리를 이용하여 운전압력을 변화시켜 상대휘발도를 역전시킴으로써 혼합물의 분리를 용이하게 하는 원리를 이용한 공정이다. Fig. 1은 저압(100 kPa)과 고압(1,000 kPa)의 조건에서 에탄올과 벤젠의 상평형도를 도시하여 나타내었다.

압력변환 증류공정은 저압과 고압의 증류탑의 배열에 따라 Fig. 2와 같이 저압-고압 공정배열과 Fig. 3과 같은 고압-저압 공정배열로 나눌 수 있다. Fig. 2와 같은 공정배열의 경우, 에탄올과 벤젠의 혼합물이 첫 번째 증류탑으로 주입되게 되면, 첫 번째 증류탑은 저압(100 kPa)의 운전조건으로 운전되기 때문에 에탄올의 조성분포는 점선을 따라 움직이게 된다. 따라서 첫 번째 증류탑의 상부로는 에탄올과 벤젠이

[†]To whom correspondence should be addressed.

E-mail: jhcho@kongju.ac.kr

*이 논문은 공주대학교 박규영 교수님의 정년을 기념하여 투고되었습니다. This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

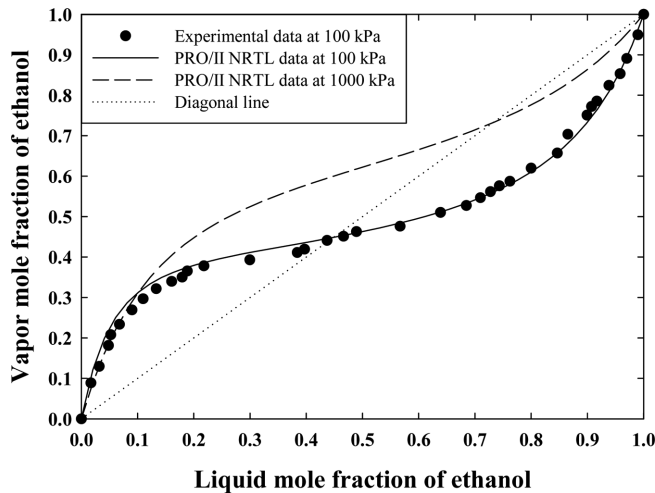


Fig. 1. Vapor-liquid equilibrium diagram for the ethanol-benzene system at low pressure and high pressure.

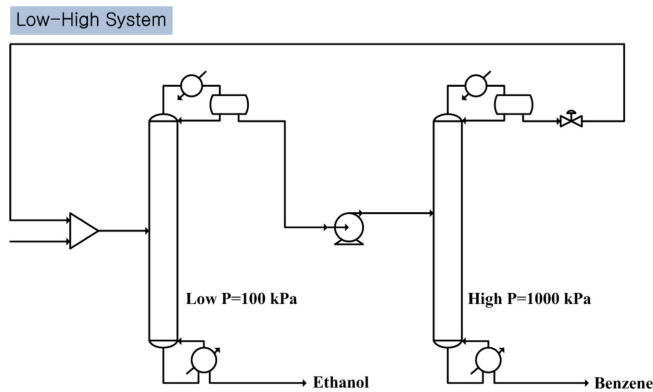


Fig. 2. Schematic drawing of pressure-swing distillation for low-high pressure column configuration (Case I).

100 kPa에서의 공비점 근처까지 농축되고, 증류탑의 하부에서는 고순도의 에탄올을 얻게 된다. 첫 번째 증류탑의 상부 물질은 펌프를 이용하여 고압(1,000 kPa 이상)으로 가압하게 되면, 에탄올과 벤젠의 기-액 상평형은 Fig. 1의 실선을 따라 움직이게 되므로 혼합물의 상대 휘발도가 역전하게 된다. 두 번째 증류탑으로 주입된 첫 번째 증류탑 상부 물질은 두 번째 증류탑 상부에서는 고압(1,000 kPa)의 공비점 근처의 물질이 얻어지게 되며, 이것은 첫 번째 증류탑으로 환류되어 진다. 그러므로 두 번째 증류탑의 하부에서는 고순도의 벤젠을 얻을 수 있게 된다. 반면, Fig. 3과 같은 고압-저압 공정배열의 경우, 고압의 증류탑 하부에서는 고순도 벤젠을 얻을 수 있으며, 저압의 증류탑 하부에서는 고순도 에탄올을 얻게 된다.

본 연구에서는 에탄올-벤젠 공비 혼합물의 분리를 위해 위에서 설명한 것과 같이 압력변환 증류공정의 저압-고압 공정배열과 고압-저압 공정배열을 각각 모사하고 최적화를 수행하였다. 신뢰성 있는 공정모사 결과 도출을 위해서는 적절한 열역학 모델식의 선정과 이성분계 매개변수가 중요한 요인으로 작용하기 때문에 에탄올-벤젠 이성분계에 대한 기-액 상평형 실험을 수행한 후, 열역학 모델식의 회귀분석을 통해 이성분계 상호작용 매개변수를 도출하였다.

공정모사 툴은 Invensys사의 PRO/II with PROVISION 9.2[5]를 사용하였으며, 에너지 소모량을 최소화하는 것을 목적으로 하였다.

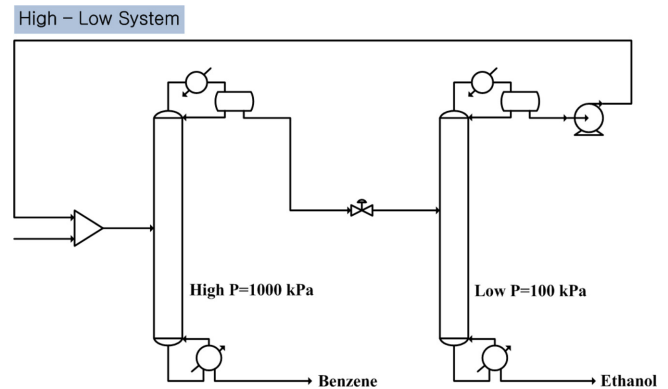


Fig. 3. Schematic drawing of pressure-swing distillation for high-low pressure column configuration (Case II).

2. 이론 배경

이성분계에서 a 상과 b 상이 평형을 이루고 있을 때, 성분 i에 대해 a 상과 b 상의 퓨게시티는 같아야 하므로 식 (1)과 같이 나타낼 수 있다.

$$\hat{f}_i^a = \hat{f}_i^b \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (1)$$

이 때 각 상의 퓨게시티는 열역학적 특성치로 나타낼 수 있으며, 기체상과 액체상에서 i 성분의 퓨게시티는 식 (2)와 식 (3)과 같다.

$$\hat{f}_i^v(T, P, y_i) = \phi_i^v y_i P \quad (2)$$

$$\hat{f}_i^l(T, P, x_i) = \gamma_i x_i P_i^{vap} \quad (3)$$

본 연구에서는 저압 증류탑과 고압 증류탑의 운전압력은 각각 100 kPa와 1,000 kPa로 각 상에서의 보다 정확한 상거동을 알아보기 위해, 기체상의 경우에는 Soave-Redlich-Kwong (SRK)[6] 상태 방정식을 액체상의 경우에는 NRTL[7] 액체 활동도계수 모델식을 각각 사용하였다.

SRK 상태 방정식은 식 (4)와 같으며, 매개변수 a와 b는 에너지 파라미터와 사이즈 파라미터로 임계온도와 임계압력의 함수로써 식 (5)와 식 (6)으로 표현할 수 있다.

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a\alpha}{v(v+b)} \quad (4)$$

$$a = 0.42747 \frac{(RT_c)^2}{P_c} \quad (5)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} \quad (6)$$

액체상의 성분 i에 대한 활동도계수 추산에 사용된 NRTL 모델식은 식 (7)과 같으며, 매개변수 τ_{ij} 와 G_{ij} 는 식 (8)에서 식 (10)과 같이 표현할 수 있다.

$$\ln r_i = \frac{\sum_j \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_k G_{ki} x_k} + \sum_j \frac{x_j G_{ij}}{\sum_k G_{kj} x_k} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_k x_k \tau_{kj} G_{kj}}{\sum_k G_{kj} x_k} \right) \quad (7)$$

$$\tau_{ij} = a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T} \quad (8)$$

$$G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij}\tau_{ij}) \quad (9)$$

$$\alpha_{ij} = \alpha'_{ij} + \beta'_{ij}T \quad (10)$$

식 (8)과 식 (10)에 T 는 절대온도이며, 각각의 이성분계에 관하여 a_{ij} , a_{ji} , b_{ij} , b_{ji} , α_{ij} , β_{ij} 의 상호작용 매개변수를 갖고 있다.

3. 실험

기-액 상평형 실험에 사용된 에탄올(Aldrich, 99.8%)과 벤젠(Aldrich, 99.9%)은 추가 정제 없이 사용하였다. Fig. 4는 에탄올-벤젠 기-액 상평형 실험에 사용된 장치 개략도로 독일 i-Fischer Engineering GmbH 사의 VLE 602를 나타내었다. 실험 장치는 크게 가열기, mixing chamber, separation chamber, 응축기, 액상/기상 냉각기, 액상/기상 시료 채집부분으로 구성되어 있다. 본 장비로 측정 가능한 압력의 범위는 0~400 kPa로써 저압과 상압 영역에서 상평형 실험이 가능하다.

에탄올-벤젠 이성분계 혼합물 시료의 정량 분석은 가스 크로마토그래피(영린기기, YL6100 GC)에 의해 분석하였으며, HT300A autosampler를 장착하여 함께 사용함으로써 분석의 효율성, 정확성, 재현성이 향상되도록 하였다.

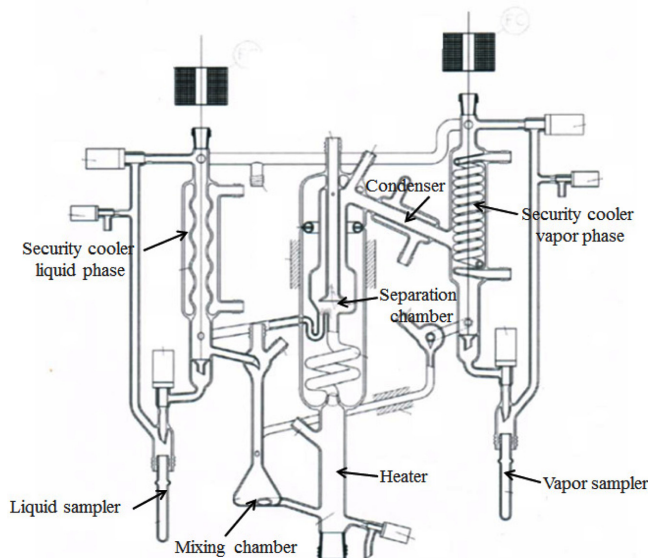


Fig. 4. Apparatus for vapor-liquid equilibrium experiment.

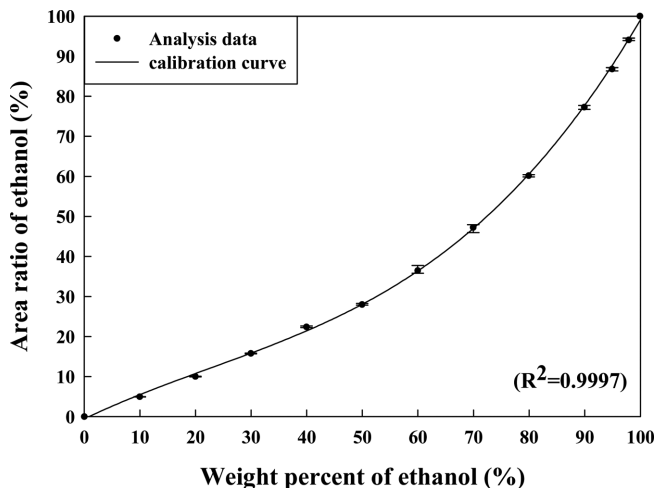


Fig. 5. Calibration curve for ethanol-benzene system.

기-액 상평형 실험을 통해 채취한 시료의 정확한 농도를 알아보기 위해 에탄올-벤젠 이성분계 혼합물을 농도별로 표준시료를 제조하여 가스 크로마토그래피 분석을 통해 검량선을 작성하였으며, Fig. 5에 나타내었다.

3-1. 실험 결과 및 회귀분석 결과

저압인 100 kPa에서 기-액 상평형 실험 데이터는 본 연구에서 실험을 수행하였으며, NRTL 열역학 모델식을 이용하여 회귀분석을 수행하였다. 한편 고압인 1,000 kPa에서 기-액 상평형의 추산은 PRO/II with PROVISION에 내장되어 있는 NRTL 이성분계 상호작용 매개변수를 이용하여 추산하였다.

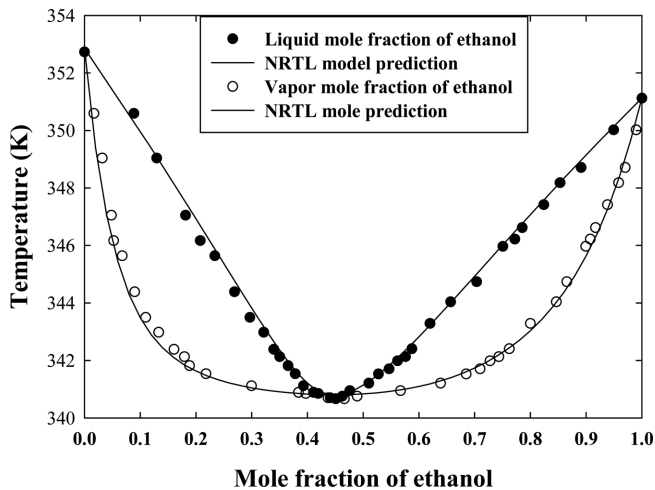
저압(100 kPa)의 조건에서 얻은 에탄올-벤젠 이성분계 혼합물의 기-액 상평형 실험결과를 Table 1에 나타내었다. 실험 결과를 바탕으로 NRTL 모델식의 회귀분석을 통해 에탄올-벤젠 이성분계 상호작용 매

Table 1. Experimental Vapor-Liquid Equilibrium data for ethanol(1)-benzene(2) system at 100 kPa

Temperature (K)	x_1	y_1
351.12	1.0000	1.0000
350.02	0.9493	0.9898
348.71	0.8909	0.9701
348.18	0.8532	0.9583
347.42	0.8242	0.9384
346.62	0.7853	0.9167
346.22	0.7720	0.9074
345.97	0.7505	0.8993
344.74	0.7036	0.8652
344.04	0.6569	0.8464
343.29	0.6198	0.8000
342.41	0.5873	0.7621
342.13	0.5759	0.7435
341.99	0.5615	0.7275
341.71	0.5465	0.7097
341.53	0.5274	0.6847
341.21	0.5101	0.6387
340.95	0.4760	0.5668
340.76	0.4627	0.4892
340.67	0.4510	0.4662
340.70	0.4409	0.4370
340.85	0.4194	0.3970
340.89	0.4110	0.3840
341.12	0.3930	0.2996
341.54	0.3780	0.2180
341.82	0.3653	0.1884
342.13	0.3502	0.1794
342.39	0.3397	0.1607
342.98	0.3216	0.1333
343.50	0.2968	0.1099
344.39	0.2692	0.0901
345.64	0.2337	0.0677
346.17	0.2078	0.0523
347.05	0.1813	0.0482
349.04	0.1296	0.0318
350.59	0.0887	0.0170
352.73	0.0000	0.0000

Table 2. NRTL binary interaction parameters for ethanol(1)-benzene(2) system at 100 kPa

Thermodynamic model	Parameters	Absolute Average Deviation (%)	
		Ethanol	Benzene
NRTL	$\beta_{12} = 0.438$		
	$\beta_{21} = 1.551$	0.233	0.043
	$\alpha_{12} = 0.300$		

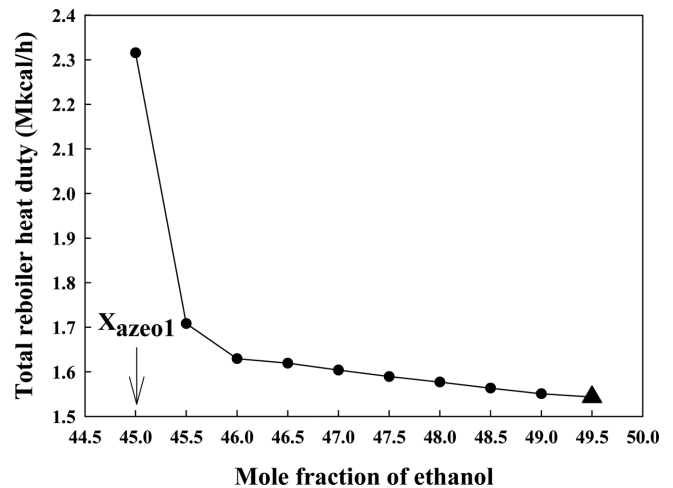
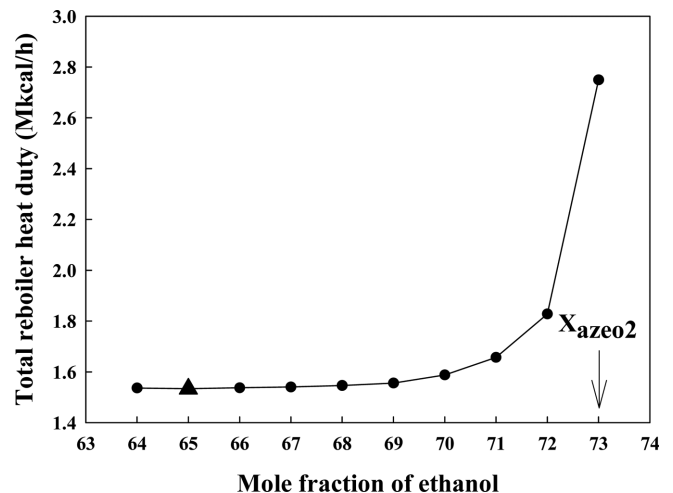
**Fig. 6.** Comparison between experimental VLE data and model prediction of NRTL at 100 kPa.

개변수를 도출하였다. 최적화된 NRTL 이성분계 상호작용 매개변수들은 Table 2에 나타내었으며, Fig. 6에 기-액 상평형 실험결과와 회귀분석으로 추산된 결과를 비교하여 나타내었다. 100 kPa에서 실험 결과와 추산된 매개변수를 적용하여 계산된 에탄올과 벤젠의 공비 조성점과 공비점은 각각 0.451, 340.67 K와 0.446, 340.84 K로 유사함을 보였다. 회귀분석 결과의 적합도를 확인하기 위하여 100 kPa의 압력에서 추산된 에탄올의 기상 몰분율(y_i)을 이용하여 AAD(Average absolute deviation)%를 식 (11)로 부터 계산하였으며, 계산 결과는 Table 2에 나타내었다.

$$AAD(\%) = \left(\frac{100}{N} \right) \sum_j \left| \frac{(y_i^{\text{exp}} - y_i^{\text{cal}})}{y_i^{\text{exp}}} \right| \quad (11)$$

4. 압력변환 증류공정의 전산모사

에탄올-벤젠 공비혼합물의 전산모사 및 최적화를 위해 상용공정 모사기인 Invensys사의 PRO/II with PROVISION 9.2를 사용하여 저압-고압 배열(Case I)과 고압-저압 배열(Case II)의 압력변환 증류공정을 모사하고 에너지 소모량을 최소화 하도록 공정 최적화를 수행하였다. 원료의 몰 조성과 온도, 압력, 유량에 대한 정보는 Table 2에 나타내었으며, 각 증류탑 하부에서 에탄올과 벤젠의 순도는 99.5%로 설정하였다. 공정 최적화 수행과정은 세 단계로 나누어 수행하였다. 압력변환 증류공정은 순환공정이므로 에탄올이나 벤젠의 순환되는 양이 전체 공정 재비기의 heat duty 값에 영향을 준다. 그러므로 각 증류탑 상부 스트림에서 에탄올의 조성이 중요한 요소로 작용한다. 따라서 각 증류탑 상부에서의 에탄올의 조성을 결정하고, 환류비와 이론단수 그래프로부터 적절한 증류탑의 이론단수를 결정하고, 마지막으로 각 증류탑의 원료 투입단을 변화시키면서 재비기의 총 heat duty가 최소가 되는 최적의 원료 투입단을 결정하였다.

**Fig. 7.** Total reboiler heat duty of low-high pressure columns based on various mole percentages of ethanol in low-pressure column (Case I).**Fig. 8.** Total reboiler heat duty of low-high pressure columns based on various mole percentages of ethanol in high-pressure column (Case I).

4-1. 저압-고압 컬럼 배열에 대한 전산모사 및 최적화(Case I)

저압 컬럼과 고압 컬럼 상부 에탄올의 조성을 변화시켜 가면서 재비기의 heat duty 변화를 알아보았다. Fig. 7에 저압 컬럼 상부 에탄올의 조성을 45.0 mol%부터 49.5 mol%까지 변화시키면서 증류탑 재비기의 heat duty 변화를 Fig. 8에 고압 컬럼 상부 에탄올의 조성을 64.0 mol%부터 73.0 mol%까지 변화시키면서 증류탑 재비기의 heat duty 변화를 각각 나타내었다. 그 결과, 저압 컬럼 상부 에탄올 조성이 49.5 mol%일 때 재비기의 heat duty가 1.543 Mkcal/h로 최소값을 나타내었으며, 고압 컬럼 상부 에탄올의 조성이 65.0 mol%일 때 재비기의 heat duty가 1.533 Mkcal/h로 최소값을 나타내었다.

Fig. 9와 Fig. 10에 저압 컬럼과 고압 컬럼에서 환류비와 이론단수와의 관계 그래프를 나타내었다. 환류비가 커질수록 이론단수는 줄 수 있으나 재비기의 heat duty가 증가하게 되어 운전비용이 많이 소요되게 되고, 환류비가 작을수록 운전비용을 감소시킬 수 있으나 이론단수가 급격히 증가되어 초기 장치 투자비용이 증가하게 된다 [8]. 따라서 환류비와 이론단수 사이에는 서로 반비례 관계가 성립하게

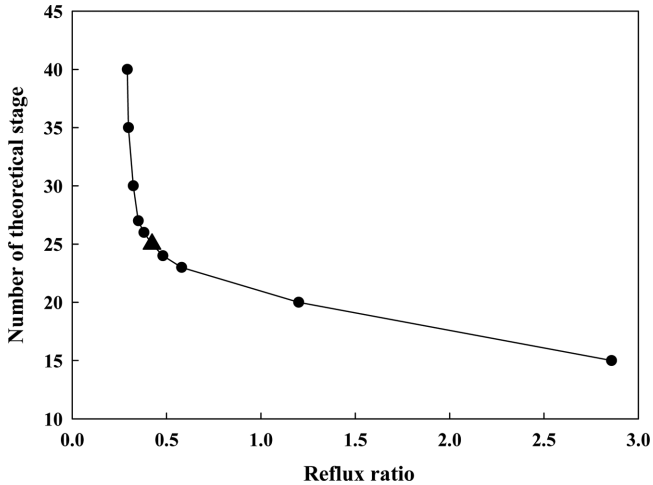


Fig. 9. Number of theoretical stage base on various reflux ratios at low-pressure column (Case I).

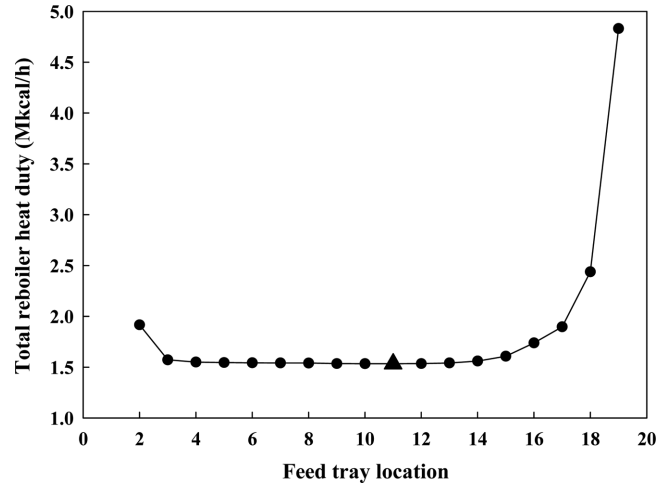


Fig. 12. Total reboiler heat duty based on various feed tray locations for high-pressure column (Case I).

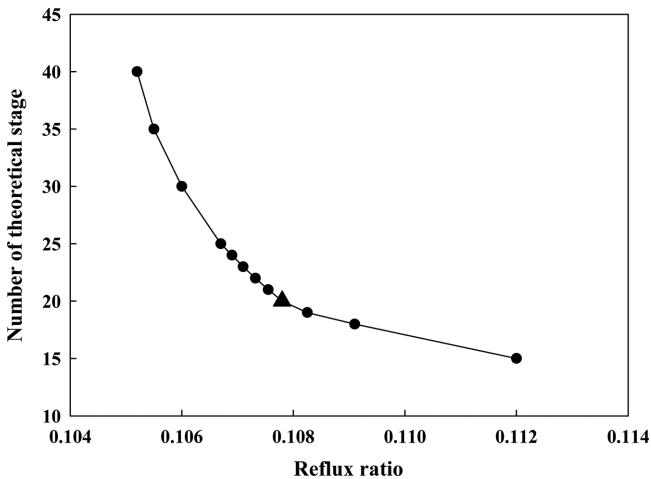


Fig. 10. Number of theoretical stage base on various reflux ratios at high-pressure column (Case I).

Table 3. Feedstock information

Component	mol%
Ethanol	60.0
Benzene	40.0
Contents	Value
Total flow (kmol/h)	100.0
Temperature (K)	298.15
Pressure (kPa)	200

되므로 운전비용과 초기 장치투자 비용의 합을 최소화시킬 수 있는 지점[9]을 찾아야 한다. 따라서 저압 컬럼의 경우 25단 고압 컬럼의 경우 20단으로 결정하였다.

저압 컬럼과 고압 컬럼의 원료 주입단의 변화에 따른 재비기의 heat duty 그래프를 Fig. 11과 Fig. 12에 각각 나타내었다. 저압 컬럼과 고압 컬럼의 최적의 원료 주입단은 각각 8단과 11단이었으며, 공정에서 소요되는 총 재비기의 heat duty 값은 2.766 Mkcal/h로 결정되었으며, 최적화된 결과는 Table 4에 나타내었다.

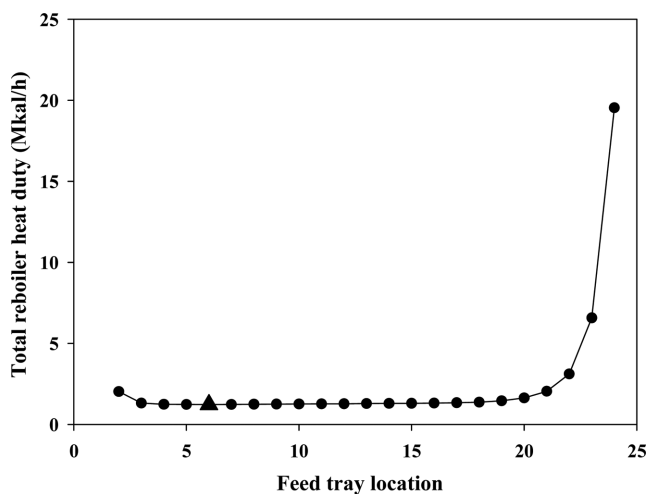


Fig. 11. Total reboiler heat duty based on various feed tray locations for low-pressure column (Case I).

4-2. 고압-저압 컬럼 배열에 대한 전산모사 및 최적화(Case II)

고압-저압 컬럼 배열에서의 최적화는 저압-고압 컬럼 배열에 사용된 방법과 동일하게 진행하였다. Fig. 13과 Fig. 14에 고압 컬럼과 저압 컬럼 상부 에탄올의 조성을 변화시킬 때 증류탑 재비기의 heat duty 변화를 각각 나타내었다. 고압 컬럼 상부 에탄올의 조성을 65.5 mol%부터 70.5 mol%까지 변화시킬 때 에탄올의 조성 65.5 mol%에서 재비기의 heat duty 값이 1.877 Mkcal/h로 최소값을 보였으며, 저압 컬럼의 경우 에탄올의 조성을 45.0 mol%에서 49.0 mol%까지 변화시킨 결과 47.0 mol%에서 0.999 Mkcal/h로 재비기의 heat duty 값이 최소값을 나타내었다.

환류비와 이론단수 관계 그래프를 Fig. 15과 Fig. 16에 각각 나타내었으며, 고압 컬럼과 저압 컬럼 모두 최적의 이론단수는 20단으로 동일하였다. 최적의 원료 주입단은 고압 컬럼은 12단(Fig. 17), 저압 컬럼은 9단(Fig. 18)으로 결정되었으며, 고압-저압 컬럼 배열 공정에서 최적화된 결과는 Table 4에 나타내었다. 따라서 고압-저압 컬럼 배열 공정에서 소요되는 총 재비기의 heat duty 값은 3.033 Mkcal/h

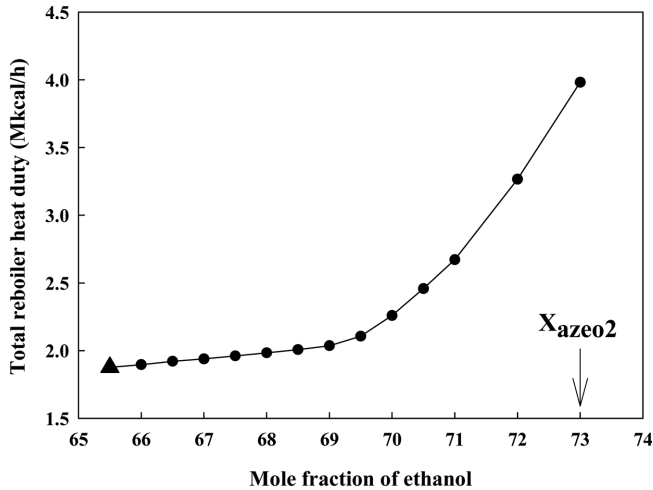


Fig. 13. Total reboiler heat duty of high-low pressure columns based on various mole percentages of ethanol in high-pressure column (Case II).

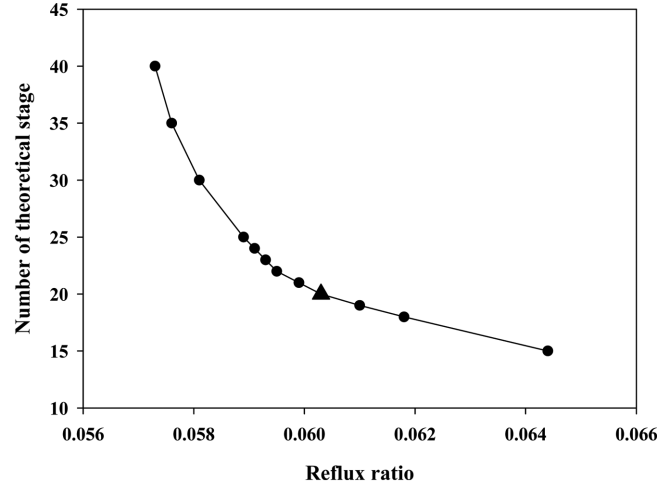


Fig. 16. Number of theoretical stage base on various reflux ratios at low-pressure column (Case II).

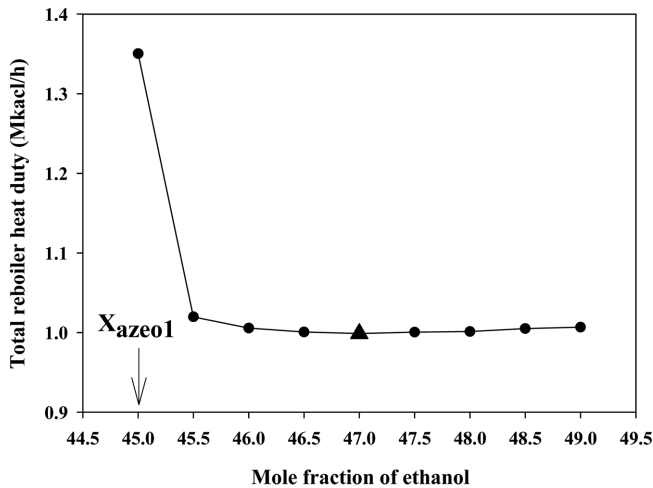


Fig. 14. Total reboiler heat duty of high-low pressure columns based on various mole percentages of ethanol in low-pressure column (Case II).

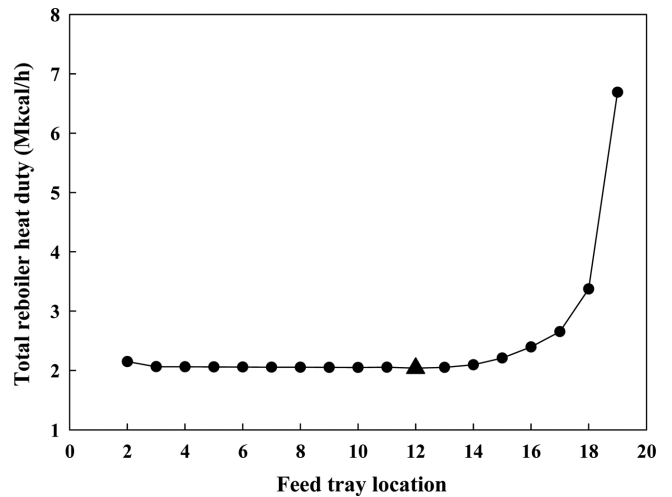


Fig. 17. Total reboiler heat duty based on various feed tray locations for high-pressure column (Case II).

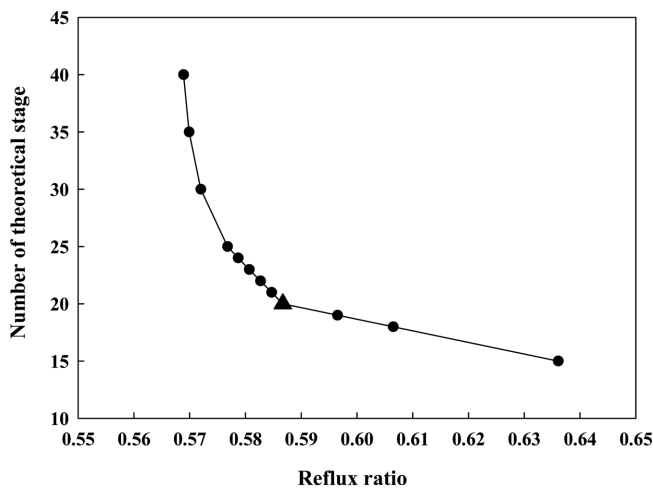


Fig. 15. Number of theoretical stage base on various reflux ratios at high-pressure column (Case II).

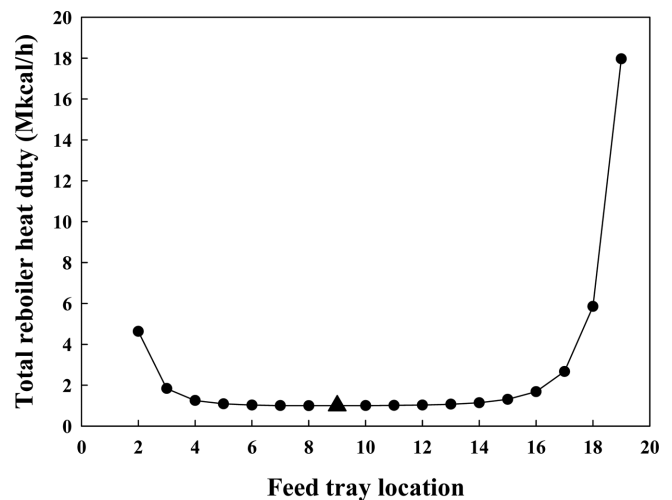


Fig. 18. Total reboiler heat duty based on various feed tray locations for low-pressure column (Case II).

Table 4. Results for optimized process

Column	LP Column	HP Column
Number of stage	25	20
Reflux ratio	0.423	0.108
Feed stage location	8	11
Pump heat duty (kcal/h)	2,862.941	
Total reboiler heat duty (10^6 kcal/h)	1.243	1.523
Column	HP Column	LP Column
Number of stage	20	20
Reflux ratio	0.060	0.587
Feed stage location	12	9
Pump heat duty (kcal/h)	2,301.118	
Total reboiler heat duty (10^6 kcal/h)	2.038	0.995

로 저압-고압 컬럼 배열 공정 보다 약 9.653% 정도 heat duty 값이 증가되는 것으로 나타났다.

5. 결 론

공비점을 형성하는 에탄올과 벤젠의 이성분계 혼합물에 대하여 100 kPa에서 기-액 상평형 실험을 수행하고, 실험 결과를 바탕으로 NRTL 회귀분석을 통해 이성분계 상호작용 매개변수를 도출하였다. 수정된 NRTL 모델식을 적용하여 에탄올과 벤젠의 분리를 위한 압력변환 증류공정에 전산모사를 수행하였다. 에너지 소모량을 최소화하기 위해 각 컬럼 상부 에탄올의 조성과 이론단수, 원료 투입단을 결정하는 순으로 공정 최적화를 수행하였다. 공정 최적화 수행 결과 저압-고압 컬럼 배열(Case I) 공정의 총 재비기의 heat duty 값은 2.766 Mkal/h, 고압-저압 배열(Case II) 공정 총 재비기의 heat duty 값은 3.033 Mkal/h로 저압-고압 컬럼 배열 공정에 에너지가 약 9.653% 정도 heat duty 값이 감소됨을 확인할 수 있었다. 압력변환 증류 공정을 통해 공비점을 형성하는 에탄올-벤젠 이성분계 혼합물의 분리가 원활히 이루어짐을 확인하였으며, 저압-고압 컬럼 배열 공정이 고압-저압 컬럼 배열 공정보다 재비기의 heat duty를 고려할 때 더 경제적임을 확인할 수 있었다.

Nomenclatures

T	: absolute temperature [K]
P	: pressure [kPa]
R	: gas constant [J/gmole K]

N	: number of data points
v	: molar volume [m^3/gmole]
x_i and y_i	: liquid and vapor phase mole fraction of component i
$\hat{f}_i^v$ and $\hat{f}_i^l$	: liquid and vapor phase fugacity coefficient of component i in mixture
P_i^{vap}	: vapor pressure of component i
r_i	: activity coefficient of component i
$\hat{\phi}_i^l$	: fugacity coefficient
a_{ij} , a_{ji} , b_{ij} , b_{ji} , α_{ij} , β_{ij}	: binary interaction parameters in NRTL model
a	: energy parameter in SRK equation
b	: size parameter in SRK equation
T_c	: Critical temperature
P_c	: Critical pressure
α	: alpha function
y_i^{exp} and y_i^{cal}	: experimental and calculated dew point temperature [K]

References

- Nam, Z., Jiao, Q. Z., Tan, Z. C. and Sun, L. X., "Thermodynamic Investigation of the Binary System of Ethanol + benzene," *Thermochim. Acta*, **401**, 151-159 (2003).
- Messick, J. R., Ackley, W. R. and Moon, G. D., "Anhydrous Ethanol Distillation Method and Apparatus," U.S.Pat. US4,422,903, Dec. (1983).
- William, L. L. and Chien, L. I., "Design and Control of Distillation Systems for Separating Azeotropes," A John Wiley & Sons, Inc., (2010).
- Hilmen, E. K. "Separation of Azeotropic Mixtures: Tools for Analysis and Studies on Batch Distillation Operation," Ph. D. Thesis, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway(2000).
- "PRO/II TM Keyword Manual," Invensys Systems, Inc. (2010).
- Soave, G., "Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State," *Chem. Eng. Sci.*, **27**, 1197-1203(1972).
- Renon, H. and Prausnitz, J. M., "Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures," *AIChE J.*, **14**(1), 135-144(1968).
- McKetta, J. J. Jr., "Unit Operations Handbook 1," CRC Press, 298-322(1992).
- "PRO/II Application Briefs," Simulation Sciences Inc. (2005).