

Modular Approach Model 에 의한 분리 공정의 모사

(Modular Approach Model for Separation Process Simulation)

김 경속 조 영상
(K. S. Kim, Y. S. Cho)

한국 과학 기술원 화학 공정 연구실
(KIST, Chemical Process Lab.)

One of the major difficulties with modular approach model of separation process simulation is initial guess problem. Only accurate initial guess make the problem converge and large computer memory and calculating time are required. In this study, we use the initial bottom guess value same as given feed condition and update the value by θ method. So we examine: (1) the problem converges using initial guess with large range, (2) computer memory and calculating time are reduced considerably.

1. 서 론

화학 및 석유 화학 공업에서 분리 공정은 매우 중요한 공정의 하나로 증류탑 및 흡수탑 등이 그 대표적인 예이다. 일반적으로 이들 분리 공정은 상당한 양의 에너지를 소비하므로 에너지 절약 및 공정의 효율적 운영을 목적으로 공정 개선 및 보수, 최적화, 구조 변경, 열 병합, 정밀 제어 등에 관한 연구가 꾸준히 진행되어왔다.

분리 공정에 관한 계산은 비 정상 상태 계산과 정상 상태 계산으로 구분할 수 있는데 비 정상 상태 계산은 공정의 동적 현상을 분석하는데 용이하여 제어기 설계, start up, 및 shut down 운전 등에 필요한 자료를 제공하지만 각 단계에 대한 조건이 모두 요구되어 계산상에 어려움이 있다.

이에 반하여 정상 상태 계산은 필요한 조건이 비교적 간단하고 계산 시간도 짧으며 응용 범위도 매우 넓어 공정의 설계, 최적화, 공정의 조업 상태 분석 등의 목적으로 많이 이용된다. 본 연구는 정상 상태의 계산에 포함된다.

정상 상태의 계산은 간단한 식을 이용하는 개략적 방법과(short-cut method) 복잡한 식을 이용하여 정밀하게 계산하는 방법(rigorous method) 있는데 이를 좀더 세분하면 다음의 세 가지로 분류할 수 있다. (King(1))

- 1) Group method
- 2) Stage to Stage method
- 3) Successive Approximation method

Group method 는 개략적 계산 방법에 속하는 방법으로 Kremser(2)가 제안하였으며 Souders 와 Brown(3), Edmister(4) 등이 개선하였다.

본 방법은 요구되는 단순만큼 유입되는 흐름과 유출되는 흐름 간의 관계식을 유도한 것으로 각 단계에서의 온도 및 조성의 변화를 고려하지 않고 전체만을 고려한 방법이다.

Stage to Stage 계산방법 또는 Tray by Tray 계산 방법이라 불리는 두번째 방법은 각각 1932년과 1933년에 발표된 Lewin-Matheson(5), Thiele-Geddes(6)의 equation tearing 방법을 기초로 한 방

법과 방정식 동시해법(simultaneous solution method) 등이 있다. 본 방법은 다양한 공정 구조를 효율적으로 처리할 수 있고 규정 변수의 선택이 용이하다는 장점이 있어 1970년대 이후로 계속 연구가 진행중에 있다.

그러나 계산 시간이 길고 전산기 소요 공간이 크다는 단점도 전산기 하드웨어가 발전함에 따라 해소되어 이용이 가증되고 있다. 현재 본 방법이 갖고있는 가장 큰 문제점은 모든 변수들에 대하여 상당히 해에 근접하는 초기 가정치를 제공하여야 한다는 점으로 이는 본 방법을 사용하는데 있어 가장 큰 장애 요인이 되고있다. 본 연구는 이 초기 가정치 문제를 해결하고자 하였다.

Successive approximation 방법은 가장 최근에 개발된 방법으로 Block Resubstitution, Tridiagonal Matrix, Newton-Raphson 방법 및 Relaxation 을 이용한 알고리즘이 여기에 속하며 Reduced Order Model도 여기에 속한다.

본 방법은 계산 시간이 짧고 전산기 소요 공간이 작아 많이 이용되고 있지만 모델링 능력에 한계가 있어 복잡한 공정 처리가 비효율적이며 규정 변수의 선택에 제한을 받는다는 단점이 있다.

이외에 stage to stage model의 일종인 modular approach 방법을 변형시켜 맨윗단과 맨밑단에서 계산을 함께 시작하여 feed 가 유입되는 단에서 계산을 마감하는 two-part modular approach 방법 등이 있다.

본 연구는 modular approach 를 이용하여 증류탑 및 흡수탑 등의 분리 공정을 해석하는데 있어 가장 큰 문제점인 초기 가정치 문제를 해결하고자 하였다.

2. 이 론

가장 일반적인 연속 정상 상태 기.액 또는 액.액 분리탑-향류로 배열된 단들로 구성된-을 생각해 보자. 이때 각 단계에서는 상 평형이 이루어졌으며 아무런 화학 반응도 없다고 가정한다. 그림 1은 일반적인 증류탑의 개요도로써 단들은 맨 밑에서부터 번호를 매겼다.

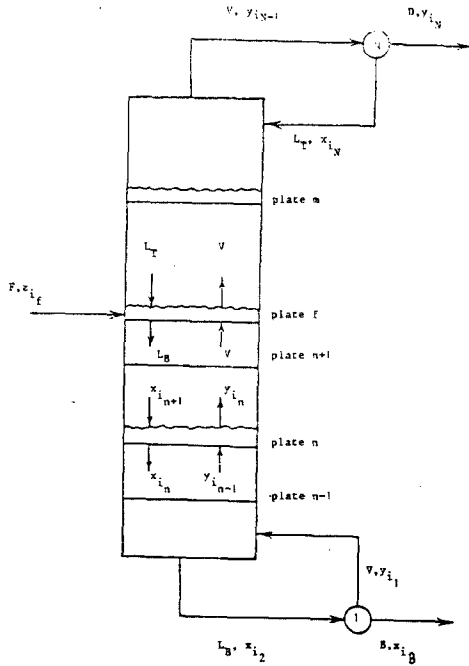


Fig.1. Schematic representation of the distillation column.

f 번째 단으로 들어가는 feed의 물유량은 F 는 성분 i 의 조성으로 Z_i 를 가지며 이때 단의 온도는 T_f 로 표시된다. 또한 압력은 P_f 로 이때 feed의 압력은 P_f 보다 크거나 동일하다고 가정한다. feed의 총 enthalpy는 $H_{f,feed}$ 로 표시된다.

같은 방식으로 모든 단에서도 단수와 함께 위에 표시된 부호를 이용하는데 이때 n 번째 단을 들어오고 나가는 기상과 액상은 그림에서 처럼 각각 n-1과 n의 단수를 갖는다.

이외에 가열량은 Q_b , 증류탑 상단으로 유출되는 흐름은 D , 그리고 기상의 enthalpy는 $H_{d,i}$, 액상의 enthalpy는 $h_{d,i}$ 등으로 표시하며 i 는 성분을 표시한다.

본 연구에서 제안하고 있는 새로운 방법은 초기 가정치를 결정할때 유입된 모든 feed의 총 유량 및 조성을 맨 밑단에서 유출된 제품의 그것과 같다고 해주는 것으로 이는 초기 가정값을 충분히 크게 해주자는 의도로 시도된 것으로 만족할 만한 결과를 얻을 수 있었다. 그리고 모든 계산을 맨 밑단에서 맨 윗단까지 순서대로 되풀이 하였는데 이때 중간 단, 특히 feed 가 유입되는 단 이후에서 액상의 조성이 음의 값이 나오는 경우 음이 되는 조성을 모두 0으로 바꾸어 계산하였다.

이는 homotopy 함수를 이용한 continuation 방법과 유사한 원리를 이용하여 homotopy 함수 대신 간단하게 상수 0을 사용한 것이다. 이러한 시도도 발산을 방지하는 데 도움이 되었다. 또한 발산을 막기 위한 또 하나의 방법으로 새로운 담지제품의 가정값을 개선할때 θ method 를 이용하였다.

위의 방법들을 적용한 계산 과정을 소개하기 전에 우선 분리 공정의 각 단의 수학적 모델에

이용되는 식들은 다음과 같다. 그림 2는 계산이 시작되는 맨 밑단의 개요도이다.

$$1) X_{i,B} \text{ 에 대한 비등점 관계식} \\ \sum_{i=1}^c K_{i,B} X_{i,B} = 1 \quad (1)$$

여기서 $X_{i,B}$ 는 bottom product 의 성분 i 에 대한 평형 상수로 T_1 의 함수이다.

$$2) \text{ 평형 관계식} \\ Y_{i,1} = K_{i,B} X_{i,B} \quad (2)$$

3) 물질 수지식
전체 유량에 대하여

$$L_2 = B + V_1 \quad (3)$$

각 성분에 대하여

$$L_2 X_{i,2} = B X_{i,B} + V_1 Y_{i,1} \quad (4)$$

식(3)을 식(4)에 대입하면 다음과 같다.

$$L_2 X_{i,2} = B X_{i,B} + (L_2 - B) Y_{i,1} \quad (5)$$

4) $X_{i,2}$ 에 대한 비등점 관계식

$$\sum_{i=1}^c K_{i,2} X_{i,2} = 1 \quad (6)$$

5) 에너지 수지식

$$L_2 h_2 + Q_b - B h_b - V_1 h_1 = 0 \quad (7)$$

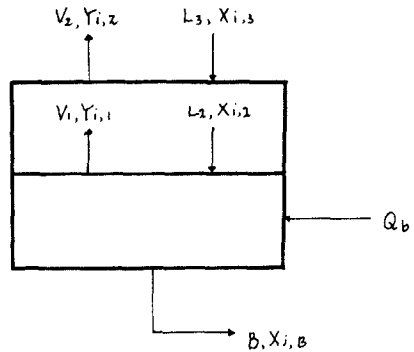


Fig.2. Schematic representation around bottom stage

위의 식들을 이용한 맨 밑단에서의 계산과정은 다음과 같다.

- 초기 가정치를 이용하여 $X_{i,B}$ 를 계산한다.
- $K_{i,B} = f(T_1)$ 의 식을 이용하여 식(1)로부터 T_1 을 계산한다.
- 식(2)를 이용하여 $y_{i,1}$ 을 계산한다.
- 다음 단으로부터 유입되는 액상의 유량 L_2 를 가정한다.
- 식(5)를 이용하여 $X_{i,2}$ 를 계산한다.
- 식(6)으로부터 T_2 를 계산한다.

- g) 가정값 L_2 가 식(7)을 만족하는지 확인하고 만족하지 않을 경우 Newton-Raphson 방법을 이용하여 L_2 값을 새로이 결정하여 d)-g)의 과정을 식(7)을 만족할 때까지 반복한다.

맨첫단에서 위의 과정을 거쳐 나온 결과들 이용하여 이후의 단들에서는 c)-g)의 과정을 되풀이한다.

맨뒷단의 결과가 나오면 이를 θ method 를 이용하여 탑저제품의 가정값을 개선한후 주어진 조건을 만족할때까지 위의 과정을 반복한다.

θ method 란 발산하기 쉬운 분리공정 문제의 해에 대한 접근 방식으로 Lyster 등(7)이 제안하였으며 이를 Thiele와 Geddes, Lewis와 Matheson 등이 이용하여 만족할만한 결과를 얻은 바있다. 이 방법의 기본원리는 계산된 성분 i 의 distillate 값을 조건에서 주어진 값 D 와 전체 물질 수지식을 만족하도록 보정 인자를 이용하여 계산된 값을 보정하는 것이다. 이 때 이용하는 식은 다음과 같다.

$$(d_i)_{co} = \frac{FX_i}{1 + \theta (b_i/d_i)_{ca}} \quad (8)$$

여기서 co 는 보정된 값, ca 는 계산 값을 각각 나타내고있다. 다음 식에서 나타낸 계산값과 주어진 조건값의 차, $g(\theta)$ 를 0이 되게하는 값을 구하여

$$g(\theta) = \sum_{i=1}^c \frac{FX_i}{1 + \theta (b_i/d_i)_{ca}} - D \quad (9)$$

다음식에 의해 액상조성, $X_{j,i}$ 와 기상조성 $Y_{j,i}$ 를 구할 수있다.

$$X_{j,i} = \frac{\left(\frac{L_{j,i}}{b_i} \right)_{ca} (b_i)_{co}}{\sum_{i=1}^c \left(\frac{L_{j,i}}{b_i} \right)_{ca} (b_i)_{co}} \quad (10)$$

$$Y_{j,i} = \frac{\left(\frac{V_{j,i}}{d_i} \right)_{ca} (d_i)_{co}}{\sum_{i=1}^c \left(\frac{V_{j,i}}{d_i} \right)_{ca} (d_i)_{co}} \quad (11)$$

3. 결과 및 토론

본 연구는 증류탑과 흡수탑을 대상으로 시도되었는데 여기에서는 증류탑에 관한 결과들만을 싣고 있으며 이용된 예제들은 여러 문헌들을 참고로 하여 선택된 것이다. 예제들은 표 1에 나타난 바와 같다.

표 1. 주어진 예제들

예제 번호	성분 수	FEED				단수 1st 2nd	가열량
		조성	유량	온도	압력		
예제 1	1	.400	265E4	115	1000	20	4E10
	2	.600					
예제 2	1	.439	365E4	115	1000	35	5E10
	2	.561					
예제 3	1	.439	365E4	115	1000	35	5E10
	2	.179					
	3	.382					
예제 4	1	.439	365E4	115	1000	35	5E10
	2	.179	200E4				
	3	.382	165E4				
예제 5	1	.409	365E4	115	1000	30	5E10
	2	.179					
	3	.382					
	4	.030					

유량: lbmole/hr 온도: °F 압력: psia 가열량: B.T.U./hr

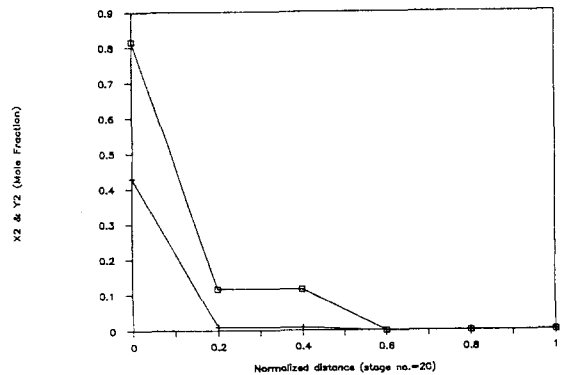


Fig.3. Steady-state X_2 & Y_2 profiles for example 1.
 X_2 : \square , Y_2 : $+$

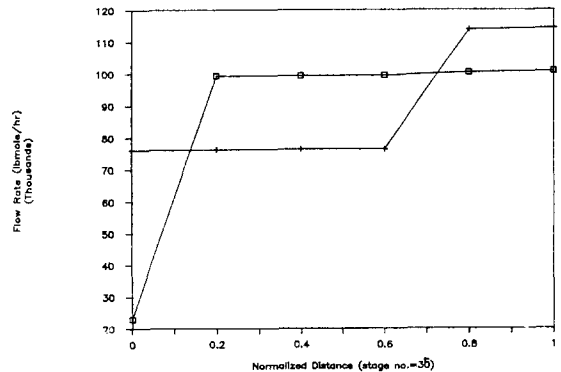


Fig.4. Steady-state vapor-liquid flowrate profiles for example 2.
Liquid: \square , Vapor: $+$

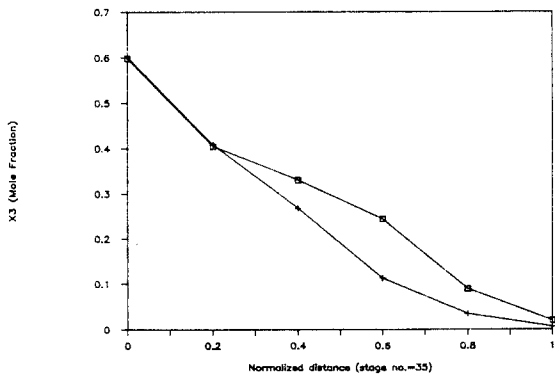


Fig. 5. Steady-state X_3 profiles for example 3 and example 4.
Example 3; □ , Example 4; +

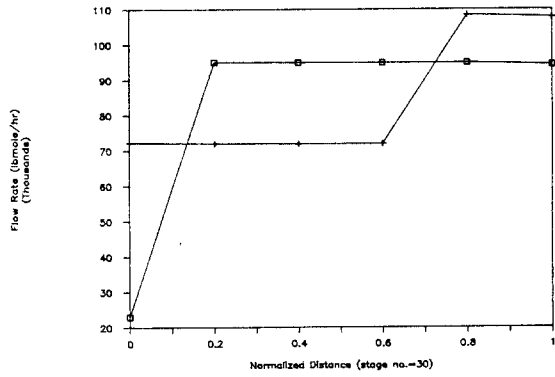


Fig. 6. Steady-state T profiles for example 3 and example 4.
Example 3; □ , Example 4; +

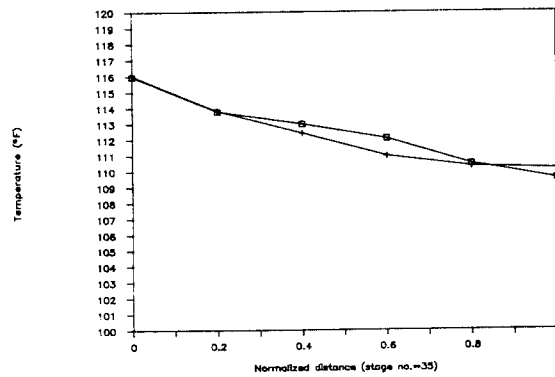


Fig. 7. Steady-state vapor-liquid flowrate profiles for example 5.
Liquid; □ , Vapor; +

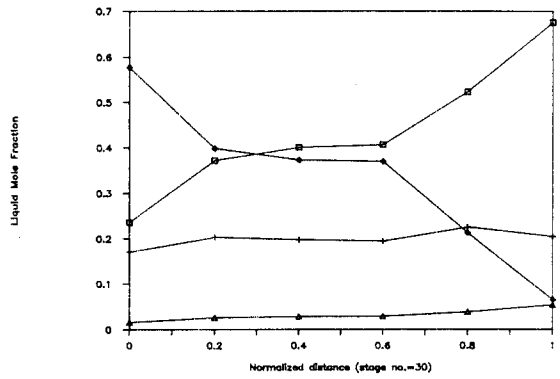


Fig. 8. Steady-state liquid composition profiles for example 5.
Component 1; □ , Component 2; +
Component 3; ◇ , Component 4; Δ

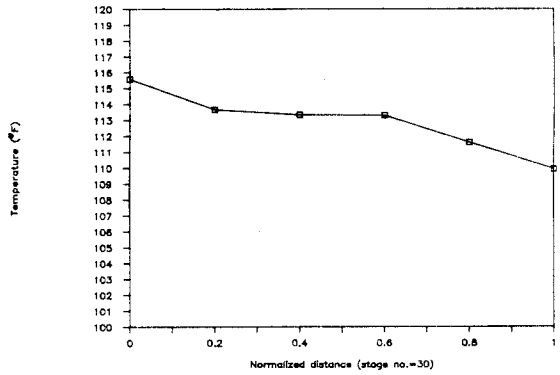


Fig. 9. Steady-state T profiles for example 5.

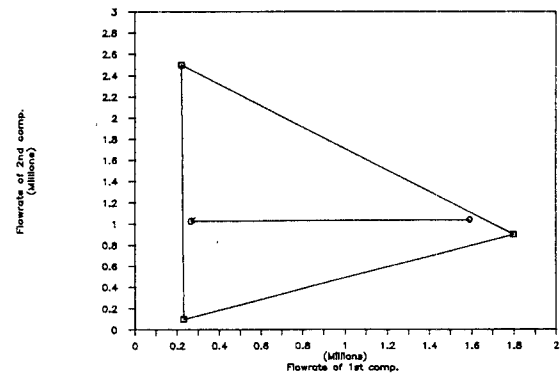


Fig. 10. Conversion range for example 1.

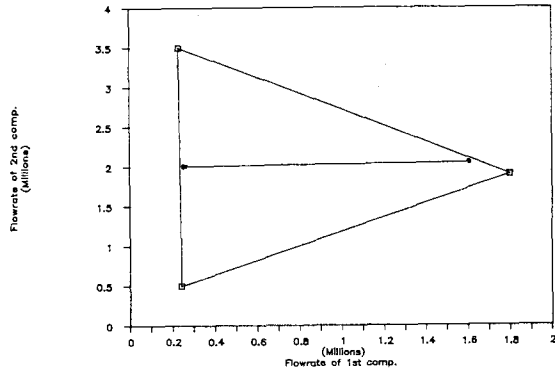


Fig.11. Conversion range for example 2.

위의 예제들에 대한 결과들은 대체적으로 잘 들어맞는 경향을 보였으며 여기에 신지는 않았으나 조건이 바뀌는 경우, 즉 reflux ratio 가 바뀌거나 withdraw 가 있는 경우 또 multi feed 의 경우에 대해서도 모두 만족할 만한 결과를 나타내었다. 이들 예제들이 모두 초기 가정값을 feed 조건과 동일하게 주었을 경우라는 것에 착안하여 binary distillation 예제에 대하여 그림 10, 11과 같은 수렴하는 해를 나타내는 탐저 제품의 가정치의 영역을 도시하여 본 결과 다음과 같은 수렴 영역이 존재함을 알 수 있었으며 이로부터 3성분, 4성분 등 다성분 계에서도 총 feed 값과 동일한 탐저제품의 가정값은 일반적으로 수렴 영역에 들어가는 것을 추론 할 수 있다.

4. 결론

본 연구는 종래의 modular approach 가 갖는 단점인 초기 가정치 문제를 해결하기 위하여 초기 가정치를 총 feed의 유량 및 조성과 동일하게 가정하고 θ method 를 이용하여 탐저제품의 가정값을 개선하는 방법을 제안하였다. 본 방법을 몇 개의 예제에 적용한 결과 만족할 만한 결과를 얻을 수 있었으며 feed를 초기 가정치로 주는 것에 대한 타당성을 조사하기 위하여 역으로 초기 가정치의 수렴 영역을 조사함으로써 유입된 총 feed 의 조건과 같은 탐저 제품의 가정치 값은 이 수렴 영역 내에 존재할 가능성이 매우 높다는 추론을 이끌어 낼 수 있었다.

본 연구에서 제안한 방법은 종래의 modular approach 문제가 갖는 초기치 가정의 정확성 요구와 과다한 초기치 지정에 의한 전산 처리 시간의 과대사용 문제를 어느 정도 해결하여 비교적 부정확한 초기치값으로도 수렴토록함으로서 비교적 복잡한 분리 공정의 해석을 용이하게 하였으며 더불어 전산 처리 시간도 축소시킬 수 있었다.

본 연구는 이제 시작 단계로서 현재 흡수탑에 대한 모사는 거의 완성단계에 있으며 앞으로 적용 범위를 넓혀 A tower에 대한 모사도 시도하려고 하며 더불어 이론적 근거에 대한 연구도 계속하고자 한다.

1. King, C. J., "Separation Processes," Mc Graw-Hill, 1980.
2. Kremser, A., Nat. Petroleum News, 22(21), pp43-49, 1930.
3. Souders, M., and G. G. Brown, Ind. Eng. Chem., 24, pp519-522, 1932.
4. Edmister, W. C., Ind. Eng. Chem., 35, pp837-839, 1957.
5. Lewis, W. K. and G. L. Matheson, Ind. Eng. Chem., 24, pp494-510, 1932.
6. Thiele, E. W., and R. L. Geddes, Ind. Eng. Chem., 25, pp289-295, 1933.
7. Lyster, W. N. et al, Petroleum Refiner, 38(6), pp221-231, 1959.
8. Holland, C. D., and A. I. Liapis, "Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems", Mc Graw-Hill, 1983.
9. Henly, E. J., and J. D. Seader, "Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering," John Wiley & Sons, 1981.
10. Holland, C. D., "Fundamentals and Modeling of Separation Processes," Prentice-hall, 1975.
11. Reid, R. C. et al, "The Properties of Gases and Liquids," Mc Graw-Hill, 1987.
12. Maxwell, J. B., "Databook on Hydrocarbons," R. E. Krieger Pub. Co., New York, 1950.
13. Holland, C. D., "Multicomponent Distillation", Prentice-Hall, 1963.