

연속증류탑의 정상상태 모사를 위해 변형한 뉴턴-랩손 방법

이 지 태 · 이 원 규
한국과학기술원 화학공학과
(1982년 9월 28일 접수)

A Modified Newton-Raphson Method for Steady-State Simulation of Distillation Column

Jietae Lee and Won-Kyoo Lee

*Department of Chemical Engineering,
Korea Advanced Institute of Science and Technology, Seoul 131, Korea*

(Received; September 28, 1982)

요 약

일반적이고 계산시간이 빠른 증류탑의 정상상태 모사 프로그램을 구성하기 위한 변형 Newton-Raphson 방법을 제시하였다.

증류탑의 정상상태 모사는 서로 간섭하는 비선형 대수방정식계의 해를 구하는 문제로써 반복계산이 요구된다. 따라서 효율적이고 믿을 수 있는 반복계산법이 필요하다. 본 연구에서는 서로 간섭하는 비선형 대수방정식계의 모든 방정식들을 선형화하여 푸는 효율적인 Newton-Raphson 방법의 성능을 향상시키기 위하여, Quasi-Newton 방법과 Random-Search 방법을 첨가하였다. 이 변형된 방법으로 각각의 방법들의 잇점을 효율적으로 잘 이용할 수 있었으며 Quasi-Newton 방법은 계산부담을 줄이고, Random-Search 방법은 수렴영역을 넓혔다.

ABSTRACT

A modified Newton-Raphson method was proposed to develop a general and fast computer program for the simulation of steady-state distillation column.

Efficient and reliable numerical methods are required to solve highly interacting nonlinear algebraic equations for the simulation of steady-state distillation column. To improve the perfor-

mance of Newton-Raphson method, which is often very effective in solving nonlinear equations through the use of linearization, quasi-Newton method and Random-Search technique were utilized. The results show the modified method to be an effective combination of the advantage of each method, with reduction in computing load by the use of quasi-Newton method and expansion in convergence region through the use of the Random-Search technique.

1. 서 론

증류탑의 정상상태 모사는 1930 년대의 간단한 방법 (short-cut method)에서부터 최근의 정밀한 방법 (rigorous method)에 이르기까지 많은 방법들이 제시되어 있다. 그러나 아직 많은 경우 개선되어야 할 여지를 남겨두고 있어 계속 기존의 방법을 개량하거나 새로운 방법들이 연구되어지고 있다.¹⁾

증류탑의 정상상태 모사는 서로 간섭하는 비선형 대수방정식계의 해를 구하는 문제로써, (1) 방정식들과 변수들을 분류하여 각 방정식 조합들을 순차적으로 푸는 방법,^{1,2)} (2) 모든 방정식들을 동시에 선형화하여 푸는 방법,^{1,3)} 그리고 (3) 대수 방정식들을 비정상 상태로 변형하거나⁴⁾ Imbedding technique 를 도입하거나⁵⁾ 하여 서로 간섭하는 비선형 미분방정식계를 푸는 방법들이 주목을 받고 있다. 방법 (1)에 속하는 것으로 bubble-point 방법 (B-P 법), sum-rates 방법 (S-R 법) 그리고 inside-out 방법 (I-O 법)들이 있다. B-P 법은 성분들의 휘발도가 비슷한 문제에 적합하고, S-R 법은 휘발도의 차이가 심한 문제에 적합한 것으로 추천된다.¹⁾ I-O 법은 최근에 Boston-Sullivan²⁾에 의해 제시된 방법으로 성분들간의 휘발도 차이나 초기값에 따라 수렴이 별로 영향을 받지 않는 우수한 방법으로 flash 계산, 일반적인 증류탑의 모사 및 삼상 증류탑의 모사³⁾에 응용되었다. 방법 (2)은 방법 자체의 간단함과 수렴 속도가 빠른 것으로 인하여 Newton-Raphson 방법 (N-R 법)이 각광을 받고 있다. 증류탑의 정상상태 모사를 할 때는 방정식의 수가 많기 때문에 N-R 법을 적용

하기가 힘들지만 방정식과 변수들을 잘 분류하면 N-R 법에 필요한 Jacobi 행렬이 특수한 구조를 갖기 때문에 Jacobi 행렬을 위한 기억용량과 이 행렬의 역행렬을 계산하는 부담이 크게 줄어들어 경제적으로 가능하였다. 그러나 다른 방법에 비해서는 아직 기억용량과 매 반복제산당 계산량이 많은 것이 단점이고, 여기에 수렴영역이 다소 좁다는 단점도 있다.⁴⁾ 방법 (3)은 수렴속도가 느린 반면 수렴영역이 매우 넓은 방법이다.²⁾ 최근에는 방법 (2)의 수렴속도가 빠른 것과 방법 (3)의 수렴영역이 넓은 것을 동시에 향유하는 방법이 발표되고 있다.^{5,6)} 각 방법 모두 장단점이 있지만 컴퓨터가 점점 대형화 되어가고 계산속도가 빨라짐에 따라 방법 (2)에 많은 잇점이 있게 된다. 방법 (2)에 의한 것으로써 Naphtali-Sandholm³⁾은 많은 장점들을 갖고 있는 증류탑의 모사 방법을 제시하였다. 그들이 발표한 방법이 갖고 있는 장점들은 각 성분의 휘발도의 차이에 수렴이 영향을 받지 않고, 같은 프로그램으로 흡수탑, 탈거탑 (stripper) 등에 적용할 수 있고, 모사의 조건들이나 입력, 측류에 제한이 없으며, 비이상성을 보정하는 물성치 계산에 신속성이 있고, Murphree 단효율을 정확하게 고려할 수 있으며 수렴속도가 대단히 빠르다는 것들이다. 가정들은 각단이 단열이고, 주어진 일정 압력하에서 동작한다는 것이다.

본 연구에서는 Naphtali-Sandholm³⁾에 의해 제시된 방법을 따랐으며 N-R 법을 개량하여 계산시간을 줄이고 수렴영역을 넓혔다. N-R 법의 단점으로 반복제산당 많은 계산부담은 Quasi-Newton 방법 (Q-N 법)^{7,8)}을 이용하여 줄였고, 수렴영역이 좁은 것은 Random-Search 방법 (R-S 법)⁹⁾을 도입하여 보완하였다. Q-N 법은 N-R 법

이 매년 Jacobi 행렬을 계산하여야 하는 단점을 보완하는 것으로써, 반복계산 횟수는 다소 증가하지만 전체적인 계산부담은 줄어들었다. R-S 법은 가장 확실하게 수렴을 보장하는 방법으로 초기값이 답에서 매우 많이 떨어져 있을 때 혹은 문제가 N-R법으로는 풀기 어려울 때 이용된다. 특별한 경우 R-S 법이 수렴속도에서도 N-R 법과 필적할 수 있다는 것이 보고 되고 있지만,⁸⁾ 본 증류탑의 정상상태 모사에서는 수렴속도가 매우 느렸다. 따라서 N-R 법이 발산할 경우 새로운 시작점을 찾는 데만 이용하였다.

2. 증류탑의 정상상태 모델

증류탑의 정상상태 모델은 비교적 가정을 적게 도입한 MESH(Material balance equations, Equilibrium relationships, Summation equations and Heat balance equations) 식들로 구성하였다. MESH 식들은 심하게 서로 간섭하는 비선형 대수방정식제를 형성하여 계산이 어렵지만, 대형의 빠른 컴퓨터의 발달로 답을 얻을 수 있게 되었다. MESH 식들을 동시에 선형화하여 풀기 위해서는 식들을 잘 분류하여야 한다. Naphtali-Sandholm 에 의하여 제시된 평형단 별로 분류하는 방법을 이용하였으며, Fig. 1 을 참고로 하여 MESH 식을 세우면 다음과 같다.³⁾

물질수지식 :

$$M_{ij} = \left(1 + \frac{S_i^L}{L_i}\right)l_{ij} + \left(1 + \frac{S_i^V}{V_i}\right)v_{ij} - v_{i+1j} - l_{i-1j} - f_{ij} \quad (1)$$

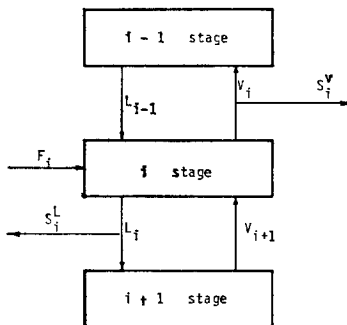


Fig. 1. Typical Internal Stage

평형관계식 :

$$Q_{ij} = \eta_{ij}K_{ij}l_{ij} - \frac{L_i}{V_i}v_{ij} + (1 - \eta_{ij})\frac{L_i}{V_{i+1}}v_{i+1j} \quad (2)$$

열수지식 :

$$E_i = \left(1 + \frac{S_i^L}{L_i}\right)h_i^L + \left(1 + \frac{S_i^V}{V_i}\right)h_i^V - h_{i+1}^V - h_{i-1}^L - h_{fi} \quad (3)$$

$$K_{ij} = K_{ij}(P_i, T_i, l_i/L_i, \bar{v}_i/V_i) \quad (4)$$

$$h_i^L = h_i^L(P_i, T_i, l_i/L_i) \quad (5)$$

$$h_i^V = h_i^V(P_i, T_i, \bar{v}_i/V_i) \quad (6)$$

$$j = 1 \ 2 \cdots n_c$$

$$i = 2 \ 3 \cdots (n-1)$$

양끝의 condenser 와 reboiler 에서의 MESH 식들은 환류비, 탑상 생성물의 총유량, condenser 와 reboiler 로 각각 유출 혹은 유입되는 열량들 중 두가지를 주어진 모사 조건으로 우선 고려하면 다음과 같이 된다.

$$M_{1j} = \left(1 + \frac{S_1^L}{L_1}\right)l_{1j} + \left(1 + \frac{S_1^V}{V_1}\right)v_{1j} - v_{2j} - f_{1j} \quad (7)$$

$$M_{nj} = \left(1 + \frac{S_n^L}{L_n}\right)l_{nj} + \left(1 + \frac{S_n^V}{V_n}\right)v_{nj} - l_{n-1j} - f_{nj} \quad (8)$$

$$Q_{1j} = \eta_{1j}K_{1j}l_{1j} - \frac{L_1}{V_1}v_{1j} + (1 - \eta_{1j})\frac{L_1}{V_2}v_{2j} \quad (9)$$

$$Q_{nj} = K_{nj}l_{nj} - \frac{L_n}{V_n}v_{nj} \quad (\eta_{nj} = 1) \quad (10)$$

$$j = 1 \ 2 \cdots n_c$$

$$E_1 = \sum_j l_{1j} - L_1, \quad L_1 = R \cdot D \quad (11)$$

$$\text{or } E_1 = \left(1 + \frac{S_1^L}{L_1}\right)h_1^L + \left(1 + \frac{S_1^V}{V_1}\right)h_1^V - h_2^V - h_{f1} - Q_1 \quad (12)$$

$$E_2 = \sum_i l_{n,i} - L_n, \quad L_n = \sum_i \sum_j f_{ij} - D - \sum_i (S_i^L + S_i^V) \quad (13)$$

$$\text{or } E_n = \left(1 + \frac{S_n^L}{L_n}\right)h_n^L + \left(1 + \frac{S_n^V}{V_n}\right)h_n^V - h_{n-1}^L - h_{fn} - Q_n \quad (14)$$

위의 MESH 식들에서 물성치들, 즉 평형상수 K_{ij} , 액상 기상의 엔탈피 h_i^L h_i^V 들은 상태변수

들의 복잡한 형태의 함수로써, 계산이 복잡하고 비선형 특성을 갖고 있다.²⁾ 증류탑의 정상상태 모사의 정확도는 물성치 계산의 정확도에 다르지만, 정확한 물성치 계산은 계산부담을 가중시킨다.

3. 계산방법

MESH 식들은 각 평형단당 $(2n_c + 1)$ 개의 식들로 구성되어 있으므로 전체로 $n \times (2n_c + 1)$ 개의 식으로 구성된 서로 간섭하는 비선형 대수 방정식계를 형성한다. 반복계산을 통하여 푸는데 반복계산 변수들로 각 평형단의 액상의 각 성분의 유량, 기상의 각 성분의 유량, 그리고 온도를 선택하고, MESH 식을 물질수지식, 평형관계식, 그리고 열수지식 순으로 모으면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\bar{x} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2 \dots \bar{x}_n)^T \quad (15)$$

$$\bar{F} = (\bar{F}_1, \bar{F}_2 \dots \bar{F}_n)^T \quad (16)$$

$$\bar{x}_i = (l_{i1}l_{i2} \dots l_{inc} v_{i1} v_{i2} \dots v_{inc} T_i)^T \quad (17)$$

$$\bar{F}_i = (M_{i1}M_{i2} \dots M_{inc}Q_{i1}Q_{i2} \dots Q_{inc} E_i)^T \quad (18)$$

식 (16)에서 $\bar{F} = 0$ 를 만족하는 \bar{x} 를 반복 계산을 통하여 구한다.

(1) Newton-Raphson 방법(N-R 법)

N-R 법은 Taylor 전개를 기초로 반복계산식을 얻는다.

$$\bar{F}(\bar{x}) \cong \bar{F}(\bar{x}_0) + \left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial \bar{x}_0} \right) (\bar{x} - \bar{x}_0) = 0 \quad (19)$$

$$\bar{x} = \bar{x}_0 - \left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial \bar{x}_0} \right)^{-1} \bar{F}(\bar{x}_0) \quad (20)$$

식 (19)에서 $\bar{F}(\bar{x}_0)$ 의 잔류치(residual, $\epsilon = \bar{F}^T \bar{F}$)가 작을수록 Taylor 전개가 정확해지고, 여기서 계산된 \bar{x} 에 의한 잔류치는 더욱 작게 된다. N-R 법은 식 (19)에서 알 수 있듯이 수렴속도가 점점 가속되는데 답에 가까워지면 제곱승으로 가속된다는 것이 증명되어 있다. 이 방법은 수렴속도가 매우 빠르지만, 매번 Jacobi 행렬인 $\left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial \bar{x}} \right)$ 를 구성하기 위한 각 방정식들의 변수

들에 대한 부분미분값이 필요하고, 이 행렬의 역행렬을 계산하여야 한다. MESH 식에 대한 Jacobi 행렬은 (i) 평형단에 대한 방정식들이 $(i-1)$, (i) , $(i+1)$ 평형단의 변수들만의 함수로 되어 있기 때문에 아래 식에서와 같이 tri-block-diagonal 형태를 갖는다.

$$\bar{F}(\bar{x}) = 0 \quad (21)$$

$$\bar{x}^{m+1} = \bar{x}^m - \alpha^m J^{m-1} \bar{F}^m \quad (22)$$

$$J^m \triangleq \left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial \bar{x}^m} \right) = \begin{pmatrix} B_1 C_1 & & & \\ A_2 B_2 C_2 & & & \\ & \dots & & \\ & & A_{n-1} B_{n-1} C_{n-1} & \\ & & & A_n B_n \end{pmatrix} \quad (23)$$

$$A_i \triangleq \left(\frac{\partial \bar{F}_i}{\partial \bar{x}_{i-1}} \right) = \begin{pmatrix} -I & \bigcirc & \bigcirc \\ \bigcirc & \bigcirc & \bigcirc \\ \Delta & \bigcirc & \Delta \end{pmatrix} \quad (24)$$

$$B_i \triangleq \left(\frac{\partial \bar{F}_i}{\partial \bar{x}_i} \right) = \begin{pmatrix} \Delta & \Delta & \bigcirc \\ \Delta & \Delta & \Delta \\ \Delta & \Delta & \Delta \end{pmatrix} \quad (25)$$

$$C_i \triangleq \left(\frac{\partial \bar{F}_i}{\partial \bar{x}_{i+1}} \right) = \begin{pmatrix} \bigcirc & -I & \bigcirc \\ \bigcirc & \Delta & \bigcirc \\ \bigcirc & \Delta & \Delta \end{pmatrix} \quad (26)$$

\bigcirc ; zero components

Δ ; non-zero components

I ; Identity matrix

(2) Quasi-Newton 방법(Q-N 법)^{7,9)}

식 (19)에서 \bar{x} 만을 계산하는 것이 아니라 \bar{x} 를 계산한 후에 \bar{x} 와 \bar{F} 가 갖고 있는 정보로 식 (19)를 기초로 근사 Jacobi 행렬도 계산하여 이용하는 방법이다. 근사 Jacobi 행렬 B 는 다음 관계식을 만족한다.

$$\bar{F}(\bar{x}) - \bar{F}(\bar{x}_0) = B(\bar{x} - \bar{x}_0) \cong \left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial \bar{x}_0} \right) (\bar{x} - \bar{x}_0) \quad (27)$$

식 (27)로 구한 B 는 Jacobi 행렬을 근사하는 것이 되며, Q-N 법은 \bar{x} 와 B 를 동시에 순환식으로 구한다. Broyden에 의해 처음 소개되었고, 수렴도 증명되었다.⁷⁾ Broyden 방법을 기초로 하여 Schubert는 Jacobi 행렬이 특수한 형태를 갖는 경우에 그 형태를 계속 유지하는 순환식을 발표하였다.⁹⁾ MESH 식을 푸는데는 Schubert 방

법이 이용된다.

$$\bar{F}(\bar{x}) = 0 \quad (21)$$

$$\bar{x}^{m+1} = \bar{x}^m - \alpha^m B^{m-1} \bar{F}^m \quad (28)$$

$$B^{m+1} = B^m + \frac{(\bar{y}^{m+1} - B^m \bar{S}^{m+1}) S^{m+1T}}{S^{m+1T} S^{m+1}} \quad (29)$$

$$\bar{S}^{m+1} = \bar{x}^{m+1} - \bar{x}^m$$

$$\bar{y}^{m+1} = \bar{F}(\bar{x}^{m+1}) - \bar{F}(\bar{x}^m)$$

$$B^0 = \left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial x_0} \right)$$

S^{m+1} = column vector derived from \bar{S}^{m+1}
by setting some elements zero so that
 B^{m+1} maintains property of tri-block-
diagonal

(3) Random-Search 방법(R-S 법)⁸⁾

임의의 \bar{x} 를 취하여 잔류값을 비교한다. 수렴 속도는 매우 느리지만 방정식의 형태에 관계없이 항상 수렴한다. 따라서 N-R 법이 발산하는 경우 새로운 시작점을 찾는데 이용한다.

$$\bar{c}^{m+1} = \bar{x}^m + (\Delta x) \bar{r}^m \quad (30)$$

$$\bar{x}^{m+1} = \begin{cases} \bar{x}^m & \text{if } \bar{F}^T(\bar{c}^{m+1}) \bar{F}(\bar{c}^{m+1}) \\ & > \bar{F}^T(\bar{x}^m) \bar{F}(\bar{x}^m) \\ \bar{c}^{m+1} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (31)$$

\bar{r}^m = pseudo random number $\epsilon [-1, 1]$

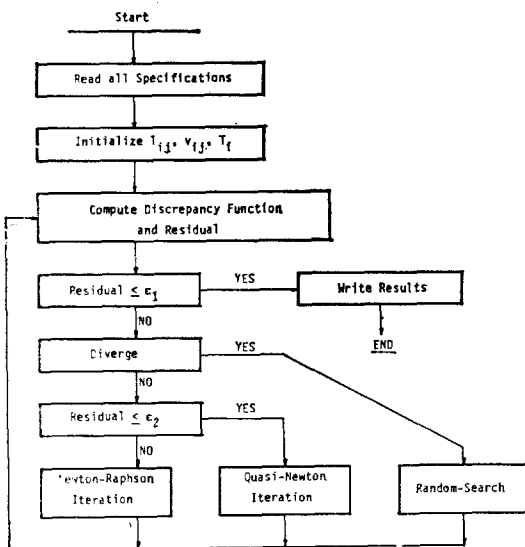


Fig. 2. Simplified Flow Chart for Calculation

4. 프로그램 세부 사항

앞절에서 기술한 반복계산 절차는 Fig. 2와 같으며 전체 프로그램은 Fortran 언어로 구성되어 미니 컴퓨터 HP-3000/III (256 KB)에 설치하였다. 여기서는 프로그램 구성에 필요한 사항들과 개략적인 설명을 하고자 한다.

증류탑의 정상상태 모사에 필요한 물성치들은 Prausnitz¹⁰⁾ 등에 의해 최근에 발표된 물성치 계산 부프로그램을 본 증류탑의 정상상태 모사 프로그램에 맞도록 입력과 출력을 고쳐 이용하였다. 그들이 사용한 모델은 Virial 상태 방정식, UNIQUAC 모델, Henry의 법칙, 그리고 dimer를 형성하는 물질의 기체에 대한 화학이론들이다. 필요한 부분미분값은 유한차분법에 의한 수치미분을 하여 사용하였다.

Jacobi 행렬 혹은 이의 근사 행렬은 tri-block-diagonal 특성뿐만 아니라 각 block 행렬의 0 항도 고려하여 기억용량 및 계산부담을 줄였으며, 변수들의 최대 변화량에 한계를 주었고 유량이 음수로 되면 0에 고정시켰다.¹¹⁾

수렴정도는 잔류값 $\epsilon = \bar{F}^T \bar{F}$ 로 추정하였으며, 잔류값을 계산할 때 열수지식은 다른 방정식에 비하여 상대적으로 큰 값을 가지므로 $\frac{1}{1000}$ 로 보정하였다.¹¹⁾ 수렴은 먼저 N-R 법을 시도하여

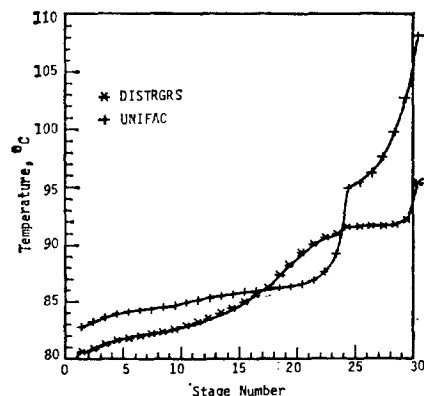


Fig. 3. Temperature Profile in Ethanol, n-Propanol, Water, and Acetic acid System: UNIFAC-Fredenslund¹²⁾ & DISTRGRS-Proposed

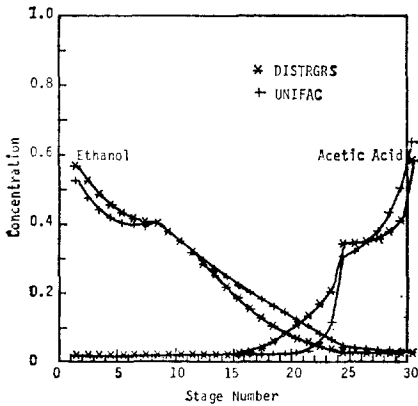


Fig. 4. Concentration Profile in Ethanol, n-Propanol, Water, and Acetic acid System: UNIFAC-Fredenslund¹²⁾ & DISTRGRS-Proposed

원하는 만큼 잔류값을 줄인 후 Q-N 법으로 변환하였다. Q-N 법으로 변환되는 잔류값의 한계는 경험으로 정하였는데 $10^0 \sim 10^{-1}$ 정도의 값이 추천된다. 발산하는 경우에는 R-S 법을 먼저 이용하여 원하는 만큼 반복한 후 N-R 법에서 다시 시작하였다.

5. 결과 및 검토

본 연구에서 구성한 증류탑 정상상태의 모사

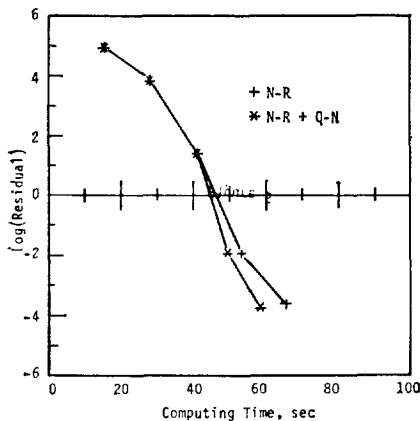


Fig. 5. Convergence Comparison of N-R and N-R plus Q-N in C_1 , C_2 , C_3 , $n-C_4$, and $n-C_5$ System with 24 stages

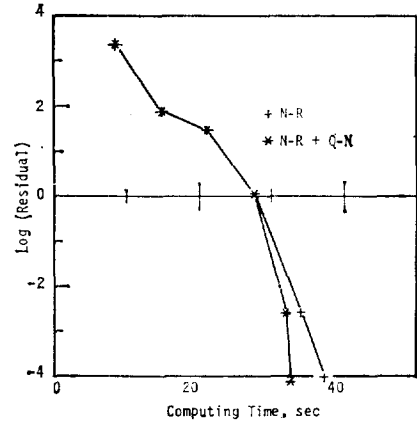


Fig. 6. Convergence Comparison of N-R and N-R plus Q-N in C_3 , $i-C_4$, $n-C_4$, $i-C_5$, and $n-C_5$ System with 12 stages

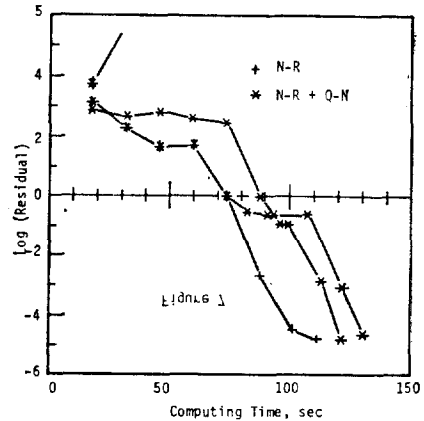


Fig. 7. Convergence Comparison of N-R and N-R plus Q-N in Ethanol, n-Propanol, Water, and Acetic acid System with 30 stages

프로그램을 시험해 보기 위하여 Fredenslund 등¹²⁾에 의해 상술되어 있는 Ethanol, n-Propanol, Water 그리고 Acetic acid 계를 이용하였다. 본 프로그램 (DISTRGRS)을 이용하여 모사한 결과와 그들의 프로그램 (UNIFAC)의 결과를 비교하기 위하여 Figs. 3과 4에 온도와 농도의 분포를 보였다. 온도 분포에서는 약간의 차이를 보였지만, 농도 분포에서는 잘 일치하는 것을 알 수 있었다. 이 차이는 물성치 계산 부프로그램의 차이에서 기인된 것으로 볼 수 있다.

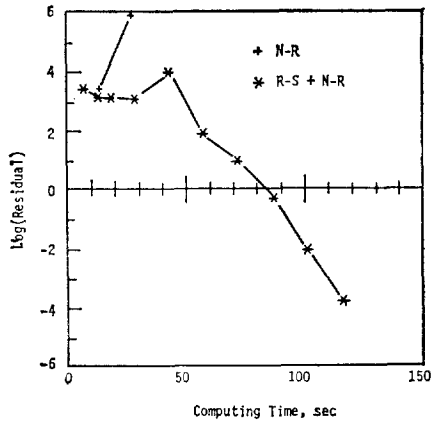


Fig. 8. Convergence Comparison of N-R and N-R plus R-S in Ethanol, n-Propanol, Water, and Acetic acid System with 30 stages

Figs. 5, 6 그리고 7에 N-R 법과 본 프로그램에서 채택한 N-R 법과 Q-N 법을 혼용한 방법과의 수렴정도를 비교하였다. Figs. 5와 6은 가벼운 탄화수소계에 적용한 결과로써 계산 시간에서 약 10%의 이득이 있음을 볼 수 있다. 반면에 Fig. 7은 이와 반대의 결과를 보여준다. 가벼운 탄화수소계와 같이 각 성분의 물성치의 비이상성 혹은 비선형 특성이 다소 적은 문제에 Q-N 법이 잘 적용되는 것을 알 수 있다.

Fig. 7에는 초기값의 영향도 보여주는데, 초기값에 수렴이 영향을 받으며 세 초기값중 한 경우에는 발산하는 것을 볼 수 있었다. 초기 잔류값이 작을수록 수렴할 확률이 많지만, 수량적으로 수렴영역을 일반적으로 제시하기는 매우 힘들다. 본 프로그램은 발산하는 경우에만 R-S 법으로 초기값을 새로이 구할 수 있게 하였다. Fig. 8에 앞의 Fig. 7에서 발산한 초기값에 R-S 법을 이용 수렴하게 한 것을 보였다.

이상의 결과를 종합하면 혼합물의 각 성분의 비이상성 혹은 비선형 특성이 심한 경우에는 N-R 법을 적용하고, 이러한 특성이 다소 적은 경우에는 Q-N 법을 첨가하여 적용하는 것이 바람직하겠다. 그리고 초기값의 추정이 어려운 경우 R-S 법을 먼저 이용하여 수렴의 영역을 넓히는 것이 추천된다.

6. 결 론

Newton-Raphson 방법을 변형하여 일반적이고 계산시간이 빠른 증류탑의 정상상태 모사 프로그램을 구성하는데 이용하였다. 전체 프로그램은 Fortran 언어로 구성하여 미니 컴퓨터 HP 3000/III (256 KB)에 설치하였으며, 이 컴퓨터의 성능의 한도내에서 행한 제한된 시험 결과 물성치 계산 부프로그램의 물성치 계산의 정확도에 따르는 정확한(rigorous) 증류탑의 정상상태 모사를 할 수 있었다.

반복계산법으로는 혼합물의 각 성분의 비이상성 혹은 비선형 특성이 심한 경우에는 Newton-Raphson 방법을 적용하고, 이러한 특성이 다소 적은 경우에는 Quasi-Newton 방법을 첨가하여 적용하고, 초기값이 나쁠 경우 Random-Search 방법을 응용하는 것이 바람직할 것으로 보인다. 이와같이 Newton-Raphson 방법을 변형하여 사용함으로써 계산시간이 빠르면서 수렴영역이 다소 넓은 계산을 할 수 있었다.

감 사

본 연구를 위하여 연구비를 지원해준 한국과학재단에 감사를 드립니다.

Nomenclature

- B* Approximate Jacobi matrix
- c* Trial point for Random-Search
- D* Distillate flow rate
- E* Heat balance equation
- F* Feed flow rate, discrepancy function
- f* Feed, component feed flow rate
- h* Enthalpy
- I* Identity matrix
- i* Stage number
- j* Component number
- J* Jacobi matrix
- K* Equilibrium constant

- l Component liquid flow rate
- \bar{l} Vector of component liquid flow rate,
 $\bar{l}_i = (l_{i1}, l_{i2}, \dots, l_{inc})$
- L Liquid flow rate, liquid
- m Iteration number
- M Material balance equation
- n Number of stages
- n_c Number of components
- Q Equilibrium relationship, heat input or output
- r Pseudo random number
- S Side stream
- T Temperature, transposition
- V Vapor flow rate, vapor
- v Component vapor flow rate
- \bar{v} Vector of component vapor flow rate,
 $\bar{v}_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{inc})$
- x Independent variable
- α step size
- η Murphree stage efficiency
- ϵ Residual ($= \bar{F}^T \bar{F}$), element of set

REFERENCES

1. E.J. Henley and J.D. Seader, "Equilibrium-Stage Separation Operation in Chemical Engineering," John Wiley & Sons, N.Y., 1981, p.556.
2. J.F. Boston and S.L. Sullivan, Jr., Can. J. Chem. Eng., 50(1972), 663.
3. L.M. Naphtali and D.P. Sandholm, AIChE J., 17(1971), 148.
4. R.G. Ketchum, Chem Eng. Sci., 34(1979), 387.
5. A. Šalgovič, V. Hlavaček and J. Ilavský, Chem. Eng. Sci., 36(1981), 1599.
6. B.A. Ross and W.D. Seader, Comp. Chem. Eng., 5(1980), 7.
7. J.E. Dennis and J.J. More, SIAM. Review, 19(1977), 46.
8. M.A. Schumer and K. Steiglitz, IEEE Trans. Aut. Contr., AC-13 (1968), 270.
9. L.K. Schubert, Math. Comp., 25(1970), 27.
10. J.M. Prausnitz, T.F. Anderson, E.A. Greens, C.A. Eckert, R. Hsieh and J.P. O'Connell, "Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria," Prentice-Hall, Tokyo, 1980, p.1.
11. R.S.H. Mah and T.D. Lin, Comp. Chem. Eng., 4(1980), 75.
12. A. Fredenslund, J. Gmehling and P. Rasmussen, "Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC, a Group-Contribution Method," Elsevier, Amsterdam, 1977, p.165.