

규정변수의 변화에 대한 다단분리공정의 연속적 계산을 위한 Arclength Continuation 방법의 이용

고홍철·윤인섭

서울대학교 공과대학 화학공학과
(1988년 7월 28일 접수, 1988년 12월 12일 채택)

Use of Arclength Continuation Method for a Sequence of Solutions on Specification Changes in Stagewise Separation Processes

Hong Cheol Ko and En Sup Yoon

Department of Chemical Engineering, College of Engineering, Seoul National University, Seoul 151-742, Korea
(Received 28 July 1988; accepted 12 December 1988)

요 약

분리공정에서 규정변수(specified variable)의 변화가 운전 및 설계에 미치는 영향을 효율적으로 계산하기 위한 목적으로 arclength continuation 방법을 기본으로 한 전산프로그램을 개발하였다. 이 방법은 흔히 사용되는 Newton-Raphson 방법에 의한 분리공정 계산프로그램에 간단히 구성 가능하다. 환류비나 회수율과 같은 여러 변수의 함수형태로 표현되는 변수도 그 변화의 영향을 직접적으로 계산할 수 있도록 하였다. 계산효율을 향상시키기 위하여 적분간격 계산, Jacobi 행렬계산 및 처리 등에 중점을 두었다. 다중해를 갖는 문제도 효과적으로 다룰 수 있음을 예제를 통하여 확인하였다.

Abstract—A computational procedure based on the arclength continuation method is designed for finding a sequence of solutions on variations of specifications in stagewise separation processes. The arclength continuation method can be implemented simply with an existing code that solves the modelling equations by Newton-Raphson method. The procedure is capable of direct handling of functional form specifications as varying variables. In order to promote the computational efficiency, emphasises are given to generation and handling of Jacobian matrices and calculation of integration step-sizes. The applicability of the designed procedure to the problems with multiple solutions is shown on numerical examples.

1. 서 론

다단분리공정의 설계, 최적화 및 제어에 있어서, 어떤 변수의 변화가 공정에 미치는 영향의 분석은 주어진 문제를 체계적으로 다루기 위해서 매우 중요하다. 특히 공정의 특성 파악, 간편한 지형적인 최적화, 그리고 제어 전략 연구 등에 자주 필요하다. 변수 변화의 영향분

석은 분리공정을 나타내는 수학적 모델의 해들을 영향을 조사하고자 하는 변수의 여러 값에 대해 구하고, 구한 해들의 변화를 분석함으로써 수행할 수 있다. 일반적으로, 수학적 모델의 해들은 주어진 변수값 구간내에서 일련의 값에 의해 정의되는 각각의 해를 개별적으로 구하는 사례연구(case-study) 계산방식에 의존한다. 기존의 분리공정 계산 알고리즘을 고려할 때 이러한 계

산방식은 당연하다고 판단된다. 그러나 여러 값에 대해 개별적으로 계산하여야 하기 때문에 비효율적이다.

미분식에 의한 continuation 방법은 이러한 연속적인 해들을 구하는 문제에 효율적인 방법으로 알려져 있다. 이 방법은 변화시키고자 하는 변수에 대해 모델식을 미분하고, 이에 의한 미분방정식을 주어진 초기조건을 적용하여 적분함으로써 연속적인 해들을 구한다. 최초로 Jelinek 등[1]이 이 방법을 분리공정 계산에 이용하였다. 초기치 문제의 해법으로서 Adams-Bashforth 방법을 사용하였다. 그들은 문제를 간략화하기 위하여 등몰흐름(constant molar overflow) 가정을 도입하였다. Ellis 등[2]은 정밀한 모델을 기본으로 하여 이 방법을 Newton-Raphson(N-R) 방법으로는 계산이 힘든 분리공정 문제에 응용하였다. 즉 초기가정의 정확성에 절대적으로 의존하는 N-R 방법 대신에 미분방정식의 적분법을 이용함으로써 정확한 초기가정의 필요성을 배제시켰다.

한편, 이러한 미분에 의한 방법은 변화시키고자 하는 변수에 대해 여러 개의 해가 존재할 때 그 한계를 보인다. 따라서 다중해를 갖는 문제도 다룰 수 있도록 호의 길이조건(arclength condition)을 도입하여 초기치 문제를 변형하여 적분하는 arclength continuation 방법을 사용한다. Hlavacek와 van Rompay[3]가 언급하였듯이, 이 방법의 구현은 오늘날 한층 용이하게 되었다. 그 이유는 Jacobi 행렬의 계산 및 회소행렬의 처리가 일반화하였기 때문이다. 그들은 Kubicek[4]의 프로그램과 같은 continuation 방법을 수행하는 프로그램에 효율적인 회소행렬 처리루틴을 연결 사용하도록 제안하였다. Arclength continuation 방법은 이와같은 규정변수에 대한 분리공정의 종속성 계산외에 초기가정이 부정확한 문제들에도 매우 다양하게 응용되고 있다[2, 5, 6].

본 연구의 목적은 규정변수의 변화에 대한 영향을 정밀하게 계산할 수 있는 전산프로그램을 개발하는데 있다. 특히 계산효율 및 성능을 개선하기 위하여 적분간격 계산 및 함수로서 표현되는 변수 처리에 중점을 두고자 한다.

2. Arclength continuation 방법

다음의 행렬식이 분리공정의 수학적 모델을 간단히 표현한 것이라면

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, p) = 0 \quad (1)$$

벡터 \mathbf{x} 는 n 차원의 변수를, p 는 변화시키고자 하는 규정변수를 나타낸다. 식 (1)은 $n+1$ 개의 변수로써 n 개의 비선형 방정식으로 구성되어 있다. 따라서 규정변수 p 의 주어진 값에 의해 종속변수 \mathbf{x} 가 정의된다. 즉 \mathbf{x} 는 $\mathbf{x}(p)$ 로서 음함수적으로 정의된다. 규정변수 p 가 구간 $\langle p_0, p_f \rangle$ 에서 연속적으로 주어질 때 연속적인 해 \mathbf{x} 가 정의된다. 연속적인 해의 연결곡선을 '해곡선'이라 하며, 변수값을 연속적으로 변화시켜 해곡선을 찾는 계산방법을 'continuation 방법'이라 한다. 이때 p 를 '연속변수(continuation parameter)'라 한다.

$\mathbf{x} = \mathbf{x}(p)$ 로 정의되므로, 식 (1)을 p 에 대해 미분하면

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{dp} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial p} = 0 \quad (2)$$

즉

$$\frac{d\mathbf{x}}{dp} = -\mathbf{J}^{-1}(\mathbf{x}, p) \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial p} \quad (3)$$

여기서 \mathbf{J} 는 Jacobi 행렬 $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}}$ 를 나타낸다. 우변을 $\mathbf{G}(\mathbf{x}, p)$ 라 하면 다음과 같은 초기치 문제를 얻는다.

$$\frac{d\mathbf{x}}{dp} = \mathbf{G}(\mathbf{x}, p) \quad (4)$$

$$p = p_0 \text{에서 } \mathbf{x} = \mathbf{x}_0$$

윗 식을 주어진 구간에서 적당한 간격으로 적분해 나가면서 해곡선을 찾는다. Euler 방법에 의해 식 (4)를 적분한다면 $k+1$ 번째 단계에서의 해는 다음과 같이 계산된다.

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + (p_{k+1} - p_k) \frac{d\mathbf{x}}{dp} \Big|_{p=p_k} \quad (5)$$

정확한 해를 얻기 위하여 더욱 높은 차수 적분법의 사용도 가능하다. 그러나 높은 차수 방법에 부가되는 계산량 및 기억용량의 증가와 미분방정식이 대수방정식으로부터 유도되었다는 사실을 고려할 때 Euler 방법에 의한 예측 및 N-R 방법에 의한 수정이 적합한 사용으로 알려져 있다[7, 8]. 계산과정을 개념적으로 Fig. 1에 도시하였다. Fig. 1에서 알 수 있듯이 이 방법은 Jacobi 행렬 \mathbf{J} 의 역변환이 불가능한 점, 즉 회전점(turning point) 이상에서는 적분을 계속할 수 없다. 회전점은 연속변수값의 일정 구간에서 다중해가 정의될 때 존재한다. 회전점이 존재할 때 해곡선을 계속 찾아 나가기 위하여, 호의 길이조건을 식 (3)에 도입하면

$$\mathbf{J} \frac{d\mathbf{x}}{dq} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial p} \frac{dp}{dq} = 0 \quad (6)$$

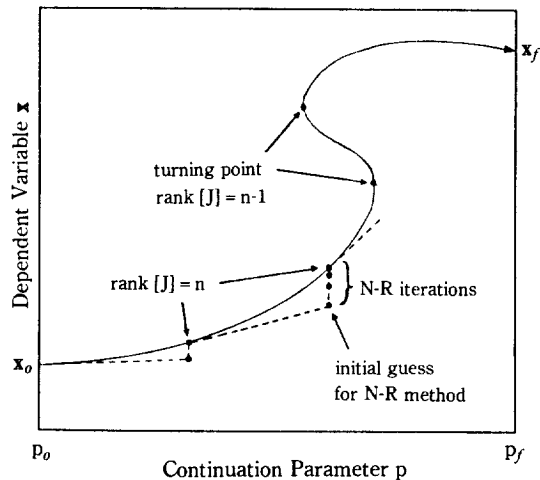


Fig. 1. Continuation method by differentiation.

호의 길이조건

$$\left(\frac{dx}{dq}\right)^2 + \left(\frac{dp}{dq}\right)^2 = 1 \quad (7)$$

$q=0$ 에서의 초기조건

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0, p = p_0 \quad (8)$$

여기서 q 는 호의 길이를 나타내는 변수로서, 해 \mathbf{x} 와 연속변수 p 는 q 에 의해서 종속적으로 $\mathbf{x} = \mathbf{x}(q)$ 와 $p = p(q)$ 로 정의된다. 따라서 적분변수는 q 이다. Euler 방법에서 요구하는 해곡선의 접선 벡터 \mathbf{v} , 즉 $[d\mathbf{x}/dq, dp/dq]^T$ 는 다음의 선형식을 계산하여 얻는다.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{J} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial p} \\ (\mathbf{e}^i)^T \end{bmatrix} \mathbf{v} = \mathbf{e}^{n+1} \quad (9)$$

여기서 벡터 \mathbf{e}^i 는 $n+1$ 개의 원소중 i 번째 원소만이 1이고 그외의 원소들은 0인 벡터(natural basis vector)이다. 식 (9)는 Jacobi 행렬 \mathbf{J} 가 singular할지라도(즉, 회전점에서), 행벡터 $(\mathbf{e}^i)^T$ 에 의해서 좌변의 $(n+1) \times (n+1)$ 행렬은 $n+1$ 의 rank를 지니게 된다. 따라서 접선 벡터 \mathbf{v} 를 구할 수 있다. 접선 벡터 \mathbf{v} 는 식 (9)의 우변의 크기에 따라서 결정되므로 호의 길이조건을 적용하여 단위 접선 벡터 \mathbf{u} 를 얻는다.

$$\mathbf{u} = \pm \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|_2} \quad (10)$$

여기서 $\|\mathbf{v}\|_2$ 는 Euclidian norm을 나타낸다. 식 (10)의 부호는 전 단계의 접선 벡터와 \mathbf{u} 가 이루는 각이 작은 것을 선택한다. 인덱스 i 는 전 단계의 접선 벡터 원

소중에서 가장 큰 것의 위치를 나타내는 정수로써 결정한다. 여기서 i 번째 변수를 '지역적 연속변수(local continuation parameter)'라 부른다. Euler 방법에 의한 $k+1$ 번째 단계의 예측하는 다음과 같이 계산된다.

$$\left(\frac{\mathbf{x}}{p}\right)_{k+1} = \left(\frac{\mathbf{x}}{p}\right)_k + h_k \mathbf{u} \quad (11)$$

여기서 h_k 는 k 번째 단계에서의 적분간격을 의미한다. 예측하는 N-R 방법의 초기가정치로서 사용된다. N-R 방법으로써 다음의 확장된 비선형 방정식의 해를 구한다.

$$\bar{\mathbf{F}}(\mathbf{x}, p) = \begin{bmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{x}, p) \\ (\mathbf{e}^i)^T \left[\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_{k+1}}{p - p_{k+1}} \right] \end{bmatrix} = 0 \quad (12)$$

3. 분리공정의 수학적 모델

분리공정의 정밀한 수학적 모델은 기본적으로 MESH(Material balance equations, Equilibrium relationships, Summations of mole fractions, Heat balance equations)식들로 표현된다[9]. Fig. 2는 분리공정의 중간단을 간략하게 도시한 그림이다. 단, j 에 대한 MESH 식은 다음과 같이 표현 가능하다.

물질수지식

$$L_{j-1} x_{ij-1} - (L_j + SL_j) x_{ij} - (V_j + SV_j) y_{ij} + V_{j+1} y_{ij+1} + F_j z_{ij} = 0 \quad (i=1, M; j=1, N) \quad (13)$$

평형관계식

$$y_{ij} - K_{ij} x_{ij} = 0 \quad (i=1, M; j=1, N) \quad (14)$$

조성의 합

$$\sum_i x_{ij} - 1 = 0 \quad (j=1, N) \quad (15)$$

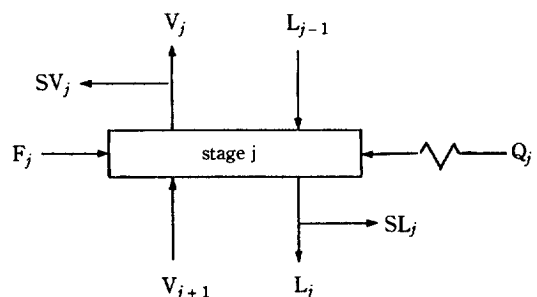


Fig. 2. Schematic representation of a stage.

$$\sum_i y_{ij} - 1 = 0 \quad (j=1, N) \quad (16)$$

열수지식

$$L_{j+1}h_{j+1} - (L_j + SL_j)h_j - (V_j + SV_j)H_j + V_{j+1}H_{j+1} + F_jH_j + Q_j = 0 \quad (j=1, N) \quad (17)$$

M은 성분수를, N은 단수를 나타낸다. 분리공정 전체를 표현하는 수학적 모델은 $N(2M+3)$ 개의 식으로 구성된다. 식 (13)-(17)로부터 식의 수에 비해 변수의 수가 많음을 알 수 있다. 따라서 자유도에 해당되는 만큼의 변수를 규정하거나 규정식을 첨가함으로써 문제를 정의하여야 한다. 열역학적 성질을 나타내는 변수는 공정변수로서 다루지 않는다. 자유도를 만족함으로써 정의된 문제, 즉

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0 \quad (18)$$

의 계산은 n개의 대수방정식을 만족하는 n차원의 해벡터 \mathbf{x} 를 구하는 것이다. 한편 식 (18)을 연속변수를 포함하여 표현한다면 식 (1)과 같이

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, p) = 0 \quad (19)$$

해곡선을 계산하는 문제를 정의할 수 있다.

4. N-R 방법을 이용한 모델식의 해법

이 절에서는 N-R 방법에 의한 식 (18)의 해법에 관하여 설명하고자 한다. 이를 기본으로 하여 식 (1)의 계산을 위한 arclength continuation 방법이 구현된다. 식 (18)로서 정의된 문제는 반복적인 수치해석적 방법을 통하여 수렴된 해 \mathbf{x} 를 구한다. 해를 구하기 위한 여러 종류의 알고리즘이 제시되어 왔다. 본 연구에서는 그 중 동시수렴법(simultaneous solution method)으로 분류되는 N-R 방법을 사용한다. N-R 방법은 식 (18)을 다음과 같이 선형식으로 근사하고,

$$\mathbf{J}_m \Delta \mathbf{x}_m = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_m) \quad (20)$$

$m+1$ 번째 반복계산의 \mathbf{x} 는 다음과 같이 수정된다.

$$\mathbf{x}_{m+1} = \mathbf{x}_m + \delta \Delta \mathbf{x}_m \quad (21)$$

단, δ 는 감쇠계수로서 $0 < \delta \leq 1$ 의 값을 가지며 $\mathbf{F}^T(\mathbf{x}_{m+1})\mathbf{F}(\mathbf{x}_{m+1}) < \mathbf{F}^T(\mathbf{x}_m)\mathbf{F}(\mathbf{x}_m)$ 하도록 정의된다. $\Delta \mathbf{x}_m$ 이 주어진 오차범위보다 작을 때 수렴된 해를 얻고, 크면 $m=m+1$ 이 되어 식 (19)와 (20)을 반복한다.

5. Arclength continuation 방법의 이용

본 연구에서의 규정변수의 변화에 대한 종속성 계산은 Fig. 3과 같은 절차로써 수행된다. 해곡선의 시작점, 즉 미분방정식의 초기치는 p_0 와 이에 의해 종속적으로 정의되는 해 \mathbf{x}_0 인데, \mathbf{x}_0 는 N-R 계산을 통해서 구한다. 시작점이 계산되었다면, Euler 예측과 N-R 수정을 $p=p_0$ 혹은 $p=p_f$ 까지 반복한다. 해곡선이 홀수개의 회전점을 가질 때 $p=p_0$ 에서, 회전점이 존재하지 않거나 짝수개를 가질 때 $p=p_f$ 에서 계산이 완료된다. 본 프로그램의 구성중 주요 세부사항은 다음과 같다.

5-1. Jacobi 행렬 계산

Jacobi 행렬은 예측 및 수정과정에서 각각 계산된다. 계산시간을 좌우하는 Jacobi 행렬의 계산수를 줄이기 위하여 변형된 N-R 방법을 사용하였다. 각 단계마다 첫 N-R 계산시에만 Jacobi 행렬을 구하고 그 이

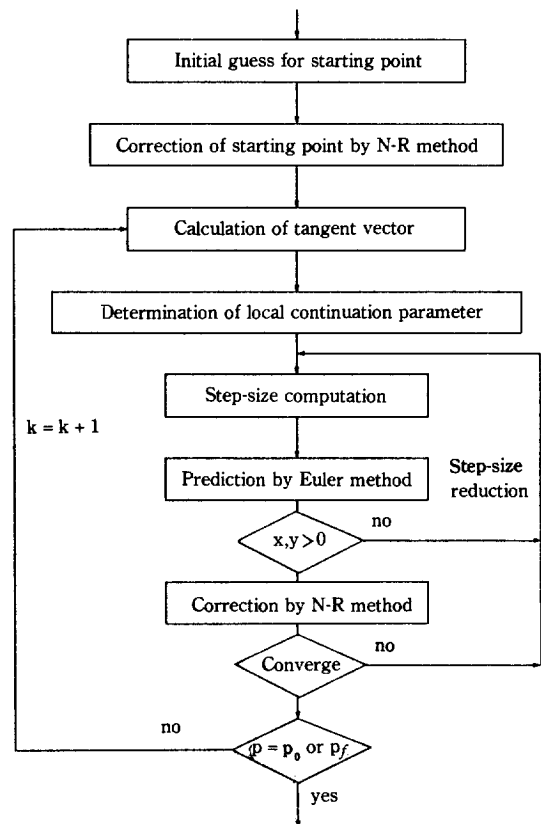


Fig. 3. Schematic flow chart for the calculation.

상의 N-R 반복계산은 첫 반복계산에서 구한 Jacobi 행렬을 이용하는 방법이다. 따라서 매 적분단계마다 Jacobi 행렬이 2번 계산된다. Euler 방법에 의한 예측하는 정확한 해에 근사하기 때문에 이와같은 변형 N-R 방법은 안정성을 유지할 수 있다.

5-2. 선형식의 해법

다음과 같은 2종류의 선형식 계산이 필요하다. 식 (21)은 Euler의 예측에서, 식 (22)는 N-R 반복계산에서 필요하다.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{J} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{p}} \\ \hline (\mathbf{e}')_k^T & \end{bmatrix} \mathbf{v} = \mathbf{e}^{n+1} \quad (21)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{J} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{p}} \\ \hline (\mathbf{e}')_{k+1}^T & \end{bmatrix} \Delta \mathbf{x} = -\bar{\mathbf{F}} \quad (22)$$

식 (21)과 (22)로부터 지형적 연속변수를 나타내는 인덱스 i 가 같으면 Euler와 N-R 방법에서의 선형식들은 동일한 LU 분할 과정을 거치게 된다. Arclength continuation 방법이 진행됨에 따라 인덱스 i 는 적분단계별로 변할 수도 있다. 본 연구에서는 Harwell MA28 루틴[10]을 사용하여 선형식들의 해를 구하였다. Harwell MA28 루틴은 일반적인 회소행렬식 계산을 수행하는 프로그램으로서 LU 분할 과정의 기억이 가능하다. 그러므로 인덱스 i 가 변하지 않는 동안은 Jacobi 행렬의 값만을 대입하여 사용할 수 있는 이점이 있다.

5-3. 함수형태의 연속변수 처리

모든 종속변수들은 호의 길이를 나타내는 변수 q 에 의해서 음함수적으로 정의된다. 종속변수들은 예측 및 수정과정에서 직접적으로 다루어진다. 그러나 환류비 L_1/V_1 나 회수를 $V_1 y_{11}/F_1 z_{11}$ 과 같은 함수형태로서 표현되는 변수는 직접적인 적분 및 수정이 힘들다. 따라서 이러한 함수형태의 변수는 다음과 같은 식을 이용하여 하나의 변수로 치환이 가능하도록 하였다. 어떤 함수형태의 변수가 $g(\mathbf{x})$ 로 표현된다면,

$$g(\mathbf{x}) - p = 0 \quad (23)$$

로 치환하고, 이 식을 MESH 식과 규정식으로 구성된 문제 정의식에 포함시켜 직접적으로 적분 및 수정할 수 있도록 하였다.

5-4. 적분간격 계산

적당한 적분간격은 Jacobi 행렬의 계산수를 줄일 수 있기 때문에 그 계산방법은 매우 중요하다. Continuation 방법에 사용할 목적으로 몇가지의 정교한 기법들 [7, 11, 12]이 문헌상에 제안된 바 있지만, 본 연구에서는 이 방법들에 비해 덜 정교하지만 훨씬 간단한 식, 즉 Michelsen[13]이 일반적인 초기치 문제에 사용할 목적으로 제시한 식을 변형후 사용하였다.

Michelsen의 적분간격 계산식은 다음과 같다.

$$h_{k+1} = h_k \min [(4r)^{-0.25}, 3] \quad (24)$$

여기서

$$r = \max_i \left| \frac{e_i}{\epsilon_i} \right| \quad (25)$$

이고 e_i 는 적분간격 h 에 의한 예측값과 $(h/2)$ 로써 2번 적분한 예측값의 i 번째 변수의 차이를 나타내며, ϵ_i 는 외부로부터 지정된 i 번째 변수의 허용오차이다. 식 (24)의 지수 -0.25 는 적분차수로부터 주어진 값이며, 계수 4와 최대치 3은 적분간격이 지나치게 커지는 것을 방지하기 위한 수이다. 식 (25)의 r 값이 1보다 크면 h 를 반으로 줄여 r 을 다시 계산하도록 되어 있다. 식 (24)로부터 r 이 1/4보다 작으면 적분간격은 증가하고, 1/4보다 크면 축소함을 알 수 있다.

위 식들을 continuation 방법에 직접 사용할 경우 ϵ_i 값이 작게 주어지면 적분간격은 작아지고, 많은 수의 적분이 요구된다. 반면에 크게 주어지면 적분간격은 커지고, N-R 수정계산의 안정성이 상실되기도 한다. 따라서 해곡선의 가파름 정도에 따라, N-R 수정계산의 안정성을 유지하면서 적절한 적분간격 계산이 요구된다.

본 연구에서 제안한 변형된 식은 다음과 같다.

$$h_{k+1} = h_k \min [(2r')^{-0.5}, 3] \quad (26)$$

그리고

$$r' = \max_i \left| \frac{e'_i}{\epsilon_{id,i}} \right| \quad (27)$$

위 식에서 e'_i 는 $k-1$ 번째 적분단계에서의 예측값과 수정값의 i 번째 변수의 차이를, $\epsilon_{id,i}$ 는 변형된 N-R 수정법의 안정성을 유지할 수 있는 이상적 오차를 나타낸다. 첫 적분단계에서의 $\epsilon_{id,i}$ 는 규정변수의 주어진 변화 (Δp_i)에 해당되는 호의 길이로써 적분하여 구한 예측값과 수정값의 차이로써 계산된다. 계속된 적분단계의 $\epsilon_{id,i}$ 값은 N-R 반복계산 수의 크기에 따라 변하도록

하여, 해곡선의 가파름 정도 및 N-R 수렴특성에 적응할 수 있도록 하였다. 즉, N-R 반복계산 수가 3, 4이면 변화없이 그대로 유지되며, 이보다 작으면 2배로 확장하고, 이보다 크면 1/2배로 축소할 수 있도록 하였다. 이는 변형된 N-R 방법의 반복계산 수가 3이나 4를 유지하기 위하여 설정된 기준이다. 즉 4를 넘어설 경우 변형된 N-R 방법이 안정성을 상실할 가능성이 있다는 간주하에서, 반복계산 수가 1이나 2의 경우 적분간격의 크기를 확장시켜도 안정성이 유지될 수 있다는 간주하에서 설정된 기준이다. 식 (26)의 지수 -0.5 는 Euler 방법의 local truncation 오차의 적분간격 h 에 대한 차수 2로부터 결정된 수이다. Euler 및 N-R 방법에 의한 continuation 방법의 오차는 전 단계의 오차와는 무관하기 때문이다. 식 (26)의 계수 2와 최대치 3은 식 (24)처럼 안전인자로서 사용하였다.

5-5. 적분간격 축소

Michelsen의 기법에서는 r 값이 1보다 크면 적분간격 h_k 를 반으로 축소하여 k 번째 단계의 계산을 다시 수행하여야 한다. 그러나 본 연구에서는 r 값이 1보다 크더라도 예측값이 N-R 수렴영역 내에 위치할수만 있다면 해곡선 상의 한 점을 찾아낼 수 있기 때문에 적분간격을 반으로 축소하여 k 번째 단계의 계산을 반복할 필요는 없다. 다만 적분간격이 지나치게 크면, 예측값이 N-R 수렴영역 밖에 위치하여 수렴된 해를 구할 수 없거나, 예측값이 음수가 되어 log 및 sqrt를 포함한 열역학적 성질 계산 루틴에서 에러가 발생하는 수가 있다. 이에 Euler 예측값중 조성에 해당되는 변수가 음의 값을 갖거나, N-R 반복계산 수가 주어진 수 (예, 10)를 넘어설 경우 적분간격을 축소하여 k 번째 단계의 계산을 반복하도록 하였다. 적분간격 축소는 $\epsilon_{id,i}$ 를 반으로 줄임으로써 수행된다.

6. 응용결과 및 고찰

본 연구에서 개발된 프로그램은 FORTRAN77 언어로 구성되었으며 미니컴퓨터 Micro VAXII에서 구현되었다. 본 프로그램은 증류, 흡수 추출 등의 일반적인 다단분리공정에 이용할 수 있다. 최대 변화 가능 간격의 제한을 입력할 수 있도록 하여 사용자의 요구에 따라 적분간격의 크기를 제한할 수 있도록 하였다. 아래의 응용 예제에서는 이 제한을 배제한 상태에서 해곡선을 구하였다. 이용 예로서 다중해를 갖는 증류공정의

계산과 간단한 최적화 문제를 선택하였다. 열역학적 성질 계산은 Redlich-Kwong-Soave 식을 사용하였다.

예 1) 이 예제는 연속변수에 대해 다중해가 존재하는 문제의 개발된 프로그램의 이용을 보이기 위한 것이다. Ellis 등[2]은 조성 및 온도의 규정에 대한 다중해를 피하기 위해 총유량을 연속변수로 선택할 것을 제

Table 1. Feed data for example 1 (data from Ellis et al. [2])

flow rate (Kg- mol/hr)	2722
pressure (atm)	20.4
temperature (K)	404
mole fraction	
propane	0.05
i-butane	0.15
n-butane	0.25
i-pentane	0.20
n-pentane	0.35

TITLE

PROBLEM #1

BASE DATA

STAGE 13 COMP 5 PRO 103 I-BU 105 BUT 104
I-PE 107 PEN 106

THERMODYNAMIC OPTION

RKSO

CALCULATION OPTION

HOM4

FEED DATA

STAGE 5 RATE 2722. TEMP 440. PRES 20.4
PHAS L
FRACTION PRO 0.05 I-BU 0.15 BUT 0.25 I-PE
0.20 PEN 0.35

PRESSURE DATA

STAGE 1 VALUE 20.4

PRODUCT DATA

STAGE 9 RATE 136. PHAS L

SPECIFICATION

LFLOW STAGE 1 VALUE 4762.8

DECISION VARIABLE

HEAT DUTY STAGE 1

HEAT DUTY STAGE 13

CONTINUATION DATA

CTARGET 0.5 HSTAR 0.1

CPARAMET TYPE YCOM STAGE 1 COMP 2

GUESS VALUES

DISTILLATE 2450. REFLX RATI 1.9444

ENDJOB

Fig. 4. Input data for example 1.

안한 바 있다. 이 제안은 회전점 이상에서의 해를 찾을 수 없는 식 (5)에 의한 continuation 방법에 기본을 둔 것으로서 제한적 의미가 있다. 그러나 본 연구에서 사용한 arclength continuation 방법은 이와 같은 제한을 필요로 하지 않는다. 문제는 다음과 같다. Table 1과 같은 원료가 13이상단 증류탑의 5번째 단으로 공급되고 있다. 증류탑은 20.4 atm에서 운전되며 9번째 단으로부터 136 Kg-mol/hr의 액상 제품이 탑정 및 탑저 제품과 함께 분리된다. 탑정 제품의 iso-butane 농도가 연속변수로서 선택되었으며 탑정 제품의 유량이 원료의 90% (2450)이고 환류비가 1.9444하에서 계산된 값으로부터 0.5까지 변화한다. 단 응축기로부터의 환류량은 4762.8 Kg-mol/hr로 고정되어 있다. 계산결과로부터 iso-butane 농도의 초기치는 0.1658이었다. 초기 적분간격은 계산된 초기치 0.1658과 최종치 0.5구간의 10% 간격을 입력하였다. Fig. 4는 본 문제의 입력자료이다.

결과의 일부를 Fig. 5와 6에 나타내었다. 결과로부터 iso-butane의 조성 0.3815에서 회전점이 존재하는 것을 알 수 있으며, 해곡선은 다시 연속변수의 시작점, 즉 0.1658로 되돌아갔다. 결국 이 문제는 iso-butane의 조성 0.3815 이하에서 다중해가 존재함을 알 수 있다.

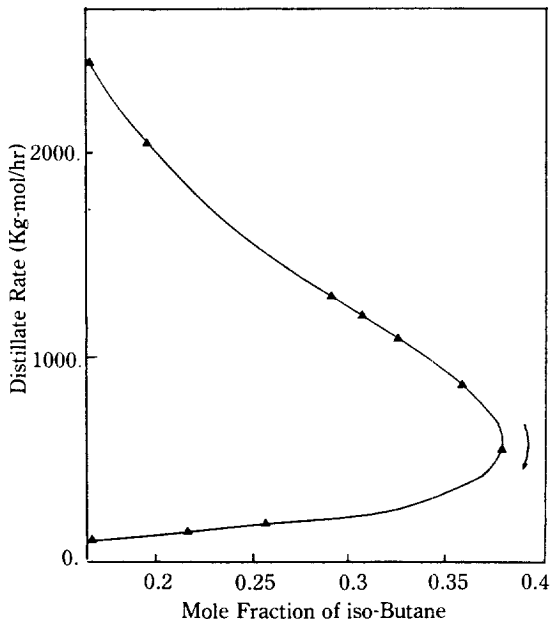


Fig. 5. Variations of the distillate rate with respect to the mole fraction of iso-butane for example 1.

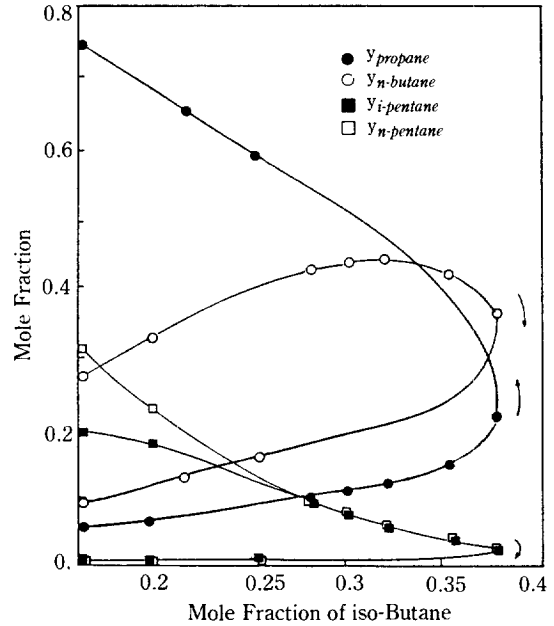


Fig. 6. Variations of the mole fractions in distillate with respect to the mole fraction of iso-butane for example 1.

예 2) 이 예제는 본 연구에서 개발된 프로그램의 유연성 및 간단한 최적화 문제의 응용을 보이기 위한 것이다. Table 2와 같은 탄화수소 가스가 27.2 atm에서 13이상단의 증류탑에서 분리되고 있다. 가스 원료는 6번째 단으로, 공급된다. 대부분의 ethane을 탑정 제품으로, 대부분의 propane을 탑저 제품으로 분리하고자 한다. 단 propane 이상의 성분은 탑정 제품에 3%만 포함되어야 한다. 이러한 규정은 다음과 같은 규정식으로써 문제 정의식에 표현된다.

$$y_{3,1} + y_{4,1} + y_{5,1} - 0.03 = 0 \quad (28)$$

이때 최적화를 위한 목적함수 (English unit 기준)는

Table 2. Feed data for example 2 (data from Henley and Seader [14])

flow rate (Kg-mol/hr)	362.9
pressure (atm)	27.2
temperature (K)	314
mole fraction	
methane	0.2
ethane	0.4625
propane	0.3
n-butane	0.03125
n-pentane	0.00625

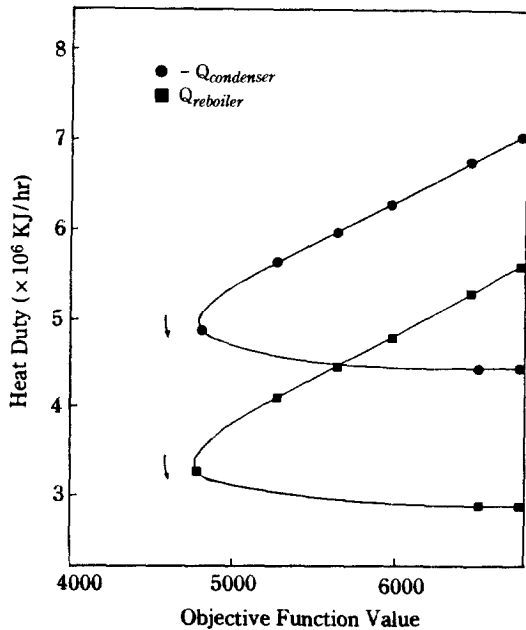


Fig. 7. Variations of the heat duties with respect to the objective function value for example 2.

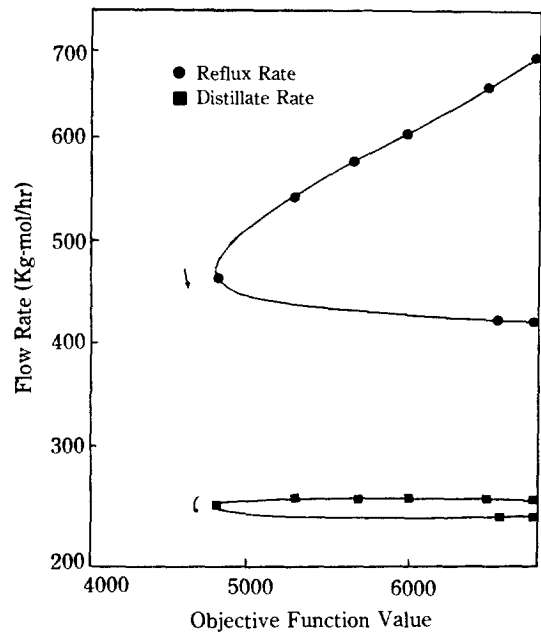


Fig. 8. Variations of the distillate and reflux rate with respect to the objective function value for example 2.

다음과 같다.

$$\Phi = \frac{-Q_1}{10000} + \frac{Q_{13}}{1000} + 10 \exp \left(100 \frac{x_{2,13} L_{13}}{z_{2,6} F_6} \right) + \exp \left(100 \frac{y_{3,1} V_1}{z_{3,6} F_6} \right) \quad (29)$$

여기서 Q_1 과, Q_{13} 은 각각 응축기와 재비기의 열부하를 나타내며, V_1 과 L_{13} 은 탑정과 탑저 제품 유량을 나타낸다. 스팀 가격을 냉각수 가격의 10배로 가정하였으며 ethane과 propane 손실량을 지수함수로 포함시켰다. 이와 같은 최적화 문제는 한 변수의 변화에 대하여 목적함수 값을 계산함으로써 최적 운전조건을 찾을 수 있다. 즉 환류비나 제품 순도 등의 변수를 연속변수로 선택하여 해곡선을 구하고, 그때의 해들에 대한 목적함수의 값을 계산하여 최소값을 찾을 수 있다. 한편 본 연구에서 개발한 프로그램은 함수형태의 변수를 연속변수로 다룰 수 있기 때문에, 목적함수 자체를 연속변수로 선택할 수도 있다. 식 (28)의 규정식을 만족하면서 환류량이 원료의 187.5%하의 목적함수 값을 초기치로 하여, 이로부터 0까지의 구간에서 변화시키므로써 최적조건을 찾았다. 계산된 목적함수의 초기치는 6975였다. 초기 적분간격은 초기치 6975와 최종치 0구간의 5% 간격을 입력하였다. Fig. 7과 8에 목적함수를 연속

변수로 하여 구한 해곡선을 나타내었다. 그림으로부터 회전점에서 목적함수가 최소값을 가짐을 알 수 있다. 정해진 구간 내에서 극소값이 존재한다면 그 해곡선은 항상 목적함수에 대해 다중해가 정의됨을 알 수 있다.

7. 결 론

Arclength continuation 방법을 이용하여 규정변수의 변화에 대한 연속적인 해들을 정밀하게 구할 수 있는 프로그램을 개발하였다. Euler 방법에 의한 예측과 N-R 방법에 의한 수정법을 기존의 N-R 방법을 이용한 프로그램에서 간단하게 구성할 수 있었다. 복잡한 함수형태의 변수도 연속변수로서 처리 가능하도록 하여 응용범위를 확장시킬 수 있었다. 적분간격을 결정할 수 있는 간단한 식을 제안하였으며, 이 식을 이용하여 효율적으로 적분간격을 제어할 수 있었다. 변형된 N-R 방법을 이용함으로써 계산부하가 큰 Jacobi 행렬 계산을 매 적분 단계마다 2번으로 줄일 수 있었다. 연속변수의 선택에 관계없이 다중해를 구할 수 있음을 확인하였다.

NOMENCLATURE

e	: Difference between predicted and corrected values
$F(\mathbf{x})$: Mathematical model equations
F_j	: Feed rate
$G(\mathbf{x}, p)$: Functions defined by Eq. (4)
$g(\mathbf{x})$: Functional form variable
H_j	: Vapor molar enthalpy
H_{fj}	: Molar enthalpy of feed
h_j	: Liquid molar enthalpy
h_k	: Integration step-size
\mathbf{J}	: Jacobian matrix
L_j	: Total liquid flow rate
M	: Number of components
N	: Number of stages
p	: Continuation parameter
Q_j	: Heat duty
q	: Arclength parameter
r	: Ratio of errors defined by Eq. (25)
SL_j	: Liquid side-draw rate
SV_j	: Vapor side-draw rate
\mathbf{u}	: Unit tangent vector
\mathbf{v}	: Tangent vector
V_j	: Total vapor flow rate
\mathbf{x}	: Vector of solution of $F(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$
x_{ij}	: Liquid mole fraction
y_{ij}	: Vapor mole fraction
z_{ij}	: Feed mole fraction

Greek Letters

δ	: Damping factor
ϵ	: Preassigned tolerance
ϵ_{id}	: Ideal tolerance

Subscripts

i	: Component number
---	--------------------

j	: Stage number
k	: Integration step number
m	: N-R iteration number

REFERENCES

1. Jelinek, J., Hlavacek, V., and Kubicek, M.: *Chem. Eng. Sci.*, **28**, 1555 (1973).
2. Ellis, M.F., Koshy, R., Mijares, G., Gomez-Munoz, A., and Holland, C.D.: *Comput. Chem. Engng.*, **10**, 433 (1986).
3. Hlavacek, V. and van Rompay, P.: *AIChE J.*, **28**, 1033 (1982).
4. Kubicek, M.: *ACM Trans. Math. Software*, **2**, 98 (1976).
5. Vickery, D.J., Ferrari, J.J., and Taylor, R.: *Comput. Chem. Engng.*, **12**, 99 (1988).
6. Wayburn, T.L. and Seader, J.D.: *Comput. Chem. Engng.*, **11**, 7 (1987).
7. den Heijer, C.D. and Rheinboldt, W.C.: *SIAM J. Numer. Anal.*, **18**, 925 (1981).
8. Salgovic, A., Hlavacek, V., and Ilavsky, J.: *Chem. Eng. Sci.*, **36**, 1599 (1981).
9. Wang, J.C. and Wang, Y.L.: "Foundations of Computer-aided Chemical Process Design", Edited by R.S.H. Mah and W.D. Seider, Engineering Foundation, NY (1981).
10. Harwell Subroutine Library, Computer Science and Systems Division of the United Kingdom Atomic Energy Authority, Oxford, England (1980).
11. Deuffhard, P.: *Numer. Math.*, **33**, 115 (1979).
12. Georg, K.: *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **2**, 35 (1981).
13. Michelsen, M.L.: *AIChE J.*, **22**, 594 (1976).
14. Henley, E.J. and Seader, J.D.: "Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering," John Wiley & Sons. Inc., NY (1981).