

Two-Tier Approach 를 이용한 증류탑의 최적 설계 전략

조인호 · 윤인섭

서울대학교 공과대학 화학공학과
(1988년 8월 6일 접수, 1989년 4월 15일 채택)

A New Strategy on the Optimal Design of Distillation Column Using Two-Tier Approach

In Ho Cho and En Sup Yoon

Department of Chemical Engineering, College of Engineering Seoul National University, Seoul 151-742, Korea
(Received 6 August 1988; accepted 15 April 1989)

요 약

증류탑의 최적 설계를 위한 새로운 전략을 제시하였다. 증류탑의 설계에서 가장 어려운 문제점은 탑의 단수가 정수 변수로 주어지며 탑의 단수의 변화에 따라 모델링 방정식의 수가 달라진다는 점이다. 본 연구에서는 이를 해결하기 위하여 Two-Tier Approach를 이용하였다. 정밀 모델과 축소 모델의 2가지 모델을 한꺼번에 가지는 Two-Tier Approach에서는, 방정식만으로 구성되는 축소 모델에서 탑의 단수를 실수 변수로 취급함을 이용하여 단수를 포함하는 최적화 계산을 수행하고 이를 기본으로 정밀 모델에서 정확한 모사를 하는 작업을 반복함으로써 증류탑의 최적 설계를 완성하게 된다. 위의 Two-Tier Approach 개념을 구현한 증류탑 최적 설계 기구인 ODDS(Optimal Design of Distillation System)를 개발하였다. ODDS는 아직 몇가지 문제점을 남기고 있으나 사례 연구를 통하여 그 효용성을 확인하였다.

Abstract—A new strategy for the optimal design of a distillation column is developed. Major difficulties in the optimal design of a distillation column are such facts that the number of stages is discrete and the total number of modeling equations varies with the number of stages. In this study, Two-Tier Approach in which both rigorous and reduced model exist is applied to solve such difficulties. Reduced model is composed of equations only and the numbers of stages in the column sections are treated as real variables. In these respects, optimization calculation is performed with reduced model and rigorous simulation follows on the basis of the results obtained. The recursive execution of the above mentioned optimization and simulation step results in the optimal design of distillation column. ODDS(Optimal Design of Distillation System) system which implemented Two-Tier Approach is developed. ODDS system is proved to be effective by case studies though not perfect yet.

1. 서 론

화학공정에 있어 증류탑의 역할이 중요한 만큼 화학 공정의 설계에 있어 증류탑의 설계는 중요한 일이 아닐 수 없다. 그러나 증류탑의 설계문제에서는 탑의 단수

결정이 포함되고, 탑의 단수가 달라짐에 따라 모델링 방정식의 수와 변수의 수가 변하게 되는 어려움이 따르게 된다. 이러한 어려움을 해결하기 위하여 단수를 고려하지 않는 모델링 방법, 단수의 변화에 따른 반복적 계산법, 몇 점에서의 계산값을 이용하여 전체단에서의

변수값을 내삽(interpolation)하는 방법 등의 연구가 이루어져 왔다.

1940년대에 Fenske[1], Underwood[2], Kirkbride [3] 등에 의해 각 단계에서의 계산을 필요로 하지 않는 Short-cut 설계방법이 개발되어, 정확도가 떨어지기는 하나 간단한 계산에 의해 증류탑을 설계할 수 있게 되었다. 이 방법들은 계산의 간편성으로 인하여 현재까지도 널리 쓰이고 있으며 보다 정밀한 설계방법들의 초기 값을 결정하는 방법으로도 널리 사용되고 있다. 그러나 증류탑의 단순한 설계에서 벗어나 주어진 목적함수를 최소화(또는 최대화)하는 최적 설계를 고려한다면 최적화 절차를 도입해야만 한다. 1965년 Sigley와 Holland[4]는 Hook and Jeeves 방법을 이용하여 증류탑을 설계하고자 하였으나 주어진 환류비에 대한 최소한의 단수 계산에 국한되었다. Ricker와 Grens[5]는 1974년 Naphtali[6] 등에 의한 증류탑 모사방법을 반복적으로 수행하여 최적 설계를 하고자 하였으나 한 가지 종류의 최적 설계만을 할 수 있었다. Najeh와 Holland[7]는 1979년 증류탑의 단수를 정수로 포함하고 직접 탐색법의 일종인 Box[8]의 Complex Method를 변형한 방법으로 증류탑을 최적 설계하고자 하였다.

그런데, 1970년대 후반부터 급격히 발달한 비선형 계획법은 화학공정 최적화에 많은 영향을 미치게 되었고, 또한 증류탑의 최적 설계에서도 응용되게 되었다. 1986년 Swartz와 Stewart[9] 등은 Reduced Order Collocation Approach를 증류탑의 최적 설계에 응용하였다. 여기서는 증류탑의 단수를 실수 변수로 취급하였으며 최적화 기법으로는 Han-Powell[10]에 의해 정립되고 Westerberg[11, 12] 등에 의해 개선된 SQP (Successive Quadratic Programming)법을 사용하였다. 비록 효과적이고 상당히 정확한 결과를 보이기는 했으나 정밀한 계산이 아니라는 점을 지적할 수 있을 것이다.

본 연구의 목적은 증류탑에 대한 새로운 최적 설계 전략을 제시하는 것으로 정밀 모델(Rigorous Model) 및 축소 모델(Reduced Model)을 모두 이용하는 Two-Tier Approach를 응용하는 증류탑 최적 설계 전략을 개발하였다. 증류탑의 설계에서 가장 곤란한 문제가 되는 탑의 단수 처리방법에 중점을 두었다.

2. Two-Tier Approach

Two-Tier Approach의 가장 큰 특징은 Sequen-

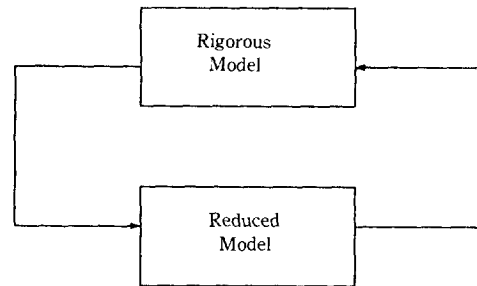


Fig. 1. Concept of two-tier approach.

tial Modular 개념에 의한 정밀한(Rigorous) 모델과 Equation Based Approach 개념의 축소(Reduced) 모델을 동시에 가진다는 점이다. 이러한 2가지 모델을 이용하는 알고리즘의 기본개념을 Fig.1에 나타내었다. 공정의 설계 문제나 최적화 문제에 대해서는 Equation Based Approach가 Sequential Modular Approach에 비해 월등한 성능을 가진다는 것은 잘 알려져 있다. Two-Tier Approach는 이러한 성질을 이용하기 위한 것으로, 설계 문제나 최적화 문제를 Equation Based 축소 모델로 해결을 하고 축소 모델이 필연적으로 가질 수 밖에 없는 부정확성을 Fig. 1과 같이 정밀 모델과의 순차적 계산을 통하여 보완함으로써 정확성과 효율성의 양면에서 좋은 효과를 거두고자 한다. 이와 같은 개념은 Boston[13] 등의 'Inside-out Algorithm'에서 제시되었으며 Fig.2는 이것을 좀 더 구체적으로 표현한 것

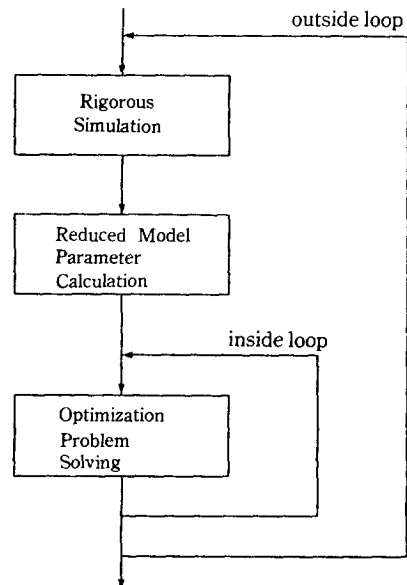


Fig. 2. Structure of two-tier approach.

이다. Two-Tier Approach의 큰 특징으로 나타나는 축소 모델은 선형인 것과 비선형인 것으로 나누어 생각할 수 있는데 Jiraphongphan[14]은 이에 대한 자세한 비교를 한 바 있다. 본 연구에서는 비선형 축소 모델을 사용하였다(부록 참고). Two-Tier Approach에 대한 자세한 설명은 본 고에서 생략하였으며 필요한 경우 참고문헌[14,19,20]을 이용할 수 있을 것이다.

3. Two-Tier Approach에 의한 증류탑의 최적 설계

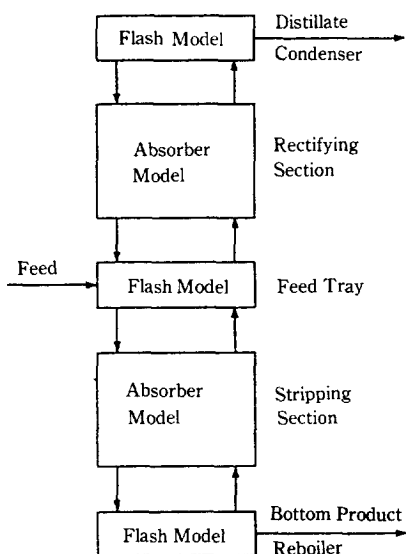
Two-Tier Approach를 이용하는 증류탑의 최적 설계의 기본개념은 Two-Tier Approach가 가지는 2가지 모델 중 축소 모델에서 다단탑을 나타내기 위해 Kremser [15] 방정식을 사용하며 여기서 탑의 단수를 실수 변수로 취급한다는 것이다. 따라서 단수를 설계 변수로 설정하면 증류탑의 고정 비용과 운전 비용을 동시에 고려할 수 있는 최적 설계가 가능하다. Collocation Approach와 마찬가지로 Two-Tier Approach에 의한 최적 설계에서도 증류탑을 Fig.3의 원편과 같이 몇 개 유니트의 조합으로 본다. 이와 같은 증류탑의 자유도를 구해보기 위해 먼저 흡수탑을 나타내는 축소 모델의 자유도를 보면 다음과 같다(부록 참고).

흡수탑의 축소 모델

1. 성분별 물질 수지식 : NC 개

2. 에너지 수지식 : 1개
 3. 평형 상수 모델식 최상단 : 1개
최하단 : 1개
 4. 상평형 및 구성 방정식 최상단 : 1개
최하단 : 1개
 5. Kremser 분리 방정식 : NC 개
총 방정식수 : $2NC+5$
총 변수의 수 : $4NC+10$
자유도 = $4NC+10-2NC-5=2NC+5$
- 일반적으로 $2NC+5$ 개의 자유도는 다음과 같은 변수들로 지정된다.
- 입력 원료의 성분별 유량 : $2NC$
입력 원료의 온도 : 2
최상단 및 최하단 압력 : 2
단수 : 1

Flash 유니트 및 입력이 여러 개인 Flash 유니트에 대해서도 이와 같은 자유도 해석을 하여(부록 참고), 증류탑을 구성하는 전체 시스템에 대한 자유도 해석을 하면 Fig.3과 같다. 전체 변수의 수에서 식 수를 뺀 자유도는 $NC+14$ 가 된다. 여기서 원료에 대한 성분별 유량 NC 개, 원료의 온도, 압력, 냉각기와 재비기를 나타내는 Flash 모듈의 압력, 흡수탑 모듈의 최상단 및 최하단의 압력, 원료 입력단을 나타내기 위한 Flash 모듈에서의 열량=0(단열 입력) 등이 고정된다면 자유도는 4가 된다. 그런데 단순 증류탑의 모사 문



Number of Variables	Number of Redundant Variables	Number of Equations
$3NC + 7$		$2NC + 3$
$4NC + 10$	$2NC + 3$	$2NC + 5$
$5NC + 11$	$2NC + 3$	$2NC + 3$
$4NC + 10$	$2NC + 3$	$2NC + 5$
$3NC + 7$		$2NC + 3$
$19NC + 45$	$8NC + 12$	$10NC + 19$
D.O.F. = $19NC + 45 - (8NC + 12 + 10NC + 19)$ = $NC + 14$		
Actual D.O.F = $NC + 14 - (NC + 2 + 7 + 1)$ = 4		

Fig. 3. Reduced models for distillation column and degrees of freedom analysis.

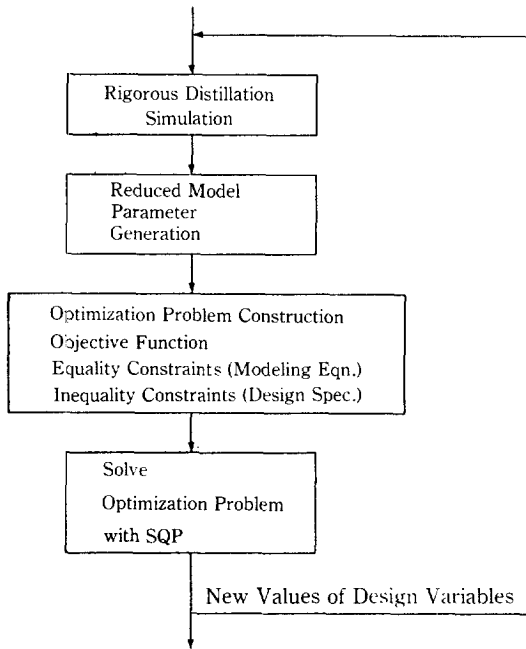


Fig. 4. Overall design strategy of ODDS.

제에서 입력되는 원료에 관한 모든 정보, 각 단계에서의 압력, 열량, 단수 등이 고정되면 자유도가 2가 된다 [16]. 따라서 위와 같은 축소 모델을 이용하는 최적 설계법에서는 Rectifying 영역과 Stripping 영역의 단수를 포함하여 4개의 설계 변수를 지정하여 최적 설계할 수 있으며 자연히 최적인 원료 입력단의 위치도 결정된다.

Fig. 4는 Two-Tier Approach를 이용한 증류탑의 최적 설계 방법의 구조를 나타내고 있다. 본 연구에서는 정밀한 증류탑의 모사를 위하여 θ -Method를 사용하였는데, 이는 θ -Method에서 수렴을 촉진시키기 위하여 θ 에 의한 루우프를 구성하게 되는 점을 이용하여 정밀 모사와 축소 모델에 의한 최적화 계산이 θ 값을 기준으로 연결될 수 있기 때문이다. 본 연구를 통하여 개발된 최적 설계 전략을 구현한 시스템을 ODDS (Optimal Design of Distillation System)이라 명명하였으며 ODDS의 정보 흐름도는 Fig. 5와 같다.

Fig. 5를 알고리즘으로 정리하면,

1. 최적 설계 대상 증류탑의 구조(중간단 생성물의 유무 등)를 읽는다.
2. 구조에 따라 Formulation III에 맞게 변수를 지정한다[17].
3. 대상 증류탑에 대한 축소 모델 방정식을 만들어

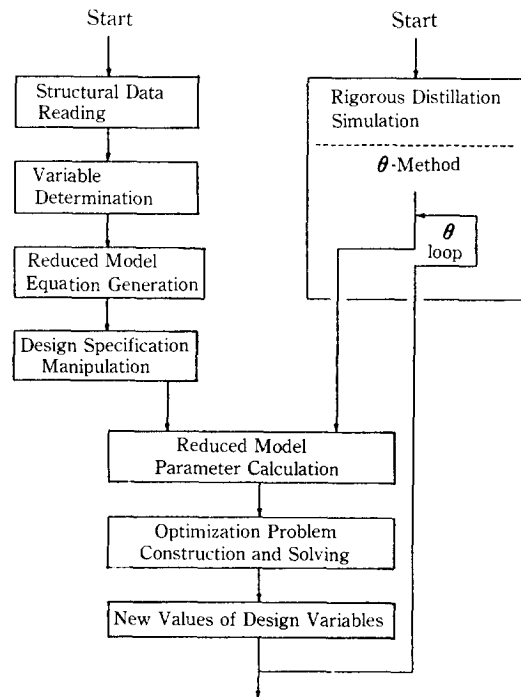


Fig. 5. The information flow of ODDS (Optimal design of distillation system).

내고 설계 사양을 첨가한다.

4. 대상 증류탑에 대한 정밀 계산을 수행한다. 이때 θ -Loop를 지정된 정도 만큼 수렴시킨다.

5. 위의 결과를 이용하여 축소 모델의 매개 변수를 결정한다.

6. 주어진 목적 함수와 제약조건이 되는 설계사양 및 축소 모델 방정식들로 최적화 문제를 구성한다.

7. 최적화 문제를 푼다[11].

결과로써 새로운 설계 변수값 결정.

8. 전체 최적화 문제 수렴? 수렴했으면 끝, 아니면 단계 4로 간다.

그러나 단계 8에서 수렴여부를 판별하는 것은 단순한 문제가 아니다. 그것은 최적화 계산 단계에서는 증류탑의 단수를 실수 변수로 보고, 모사 단계에서는 정수 변수로 보기 때문에 최적화 계산 단계에서 모사 단계로 이동할 때 단수를 정수화시키는 과정에서 발생하는 차이에 의해 자연스러운 수렴을 기대할 수 없기 때문이다. 따라서 정수화된 단수가 더 이상 변하지 않게 되면 단수를 포함한 최적 설계 문제에서 단수를 빼 최적 설계 문제로 변화시켜 가야 한다.

그런데 Biegler 등[18]은, 축소 모델이 매개 변수를

사용하여 기준점에서 정확한 모델과 같은 값을 가질 수 있도록 조정되므로 모사 문제의 응용에는 잘 적용되지만 축소 모델이 정확한 모델과 꼭 같은 기율기를 가지지는 못하므로 최적화 문제에서의 응용에서는 근사값에 수렴할 가능성이 있음을 제시하였다. 따라서 본 연구에서 제시된 최적 설계 전략이 정확한 해에 수렴하지 못할 가능성이 존재하지만, Trevino-Rozano[19]는 Boston 등[13]에 의한 축소 Flash 모델의 약점이 압력에 대한 충분한 관계식을 제공하지 못하는 것이라고 밝혔고, 다른 변수는 설계 변수로 지정했을 때도 정확한 값을 제공함을 주장하고 있다. 이와 같은 논리는 축소 흡수탑 모델[20]에서도 똑같이 적용될 수 있다(모델링 식의 구조에 의해). 그런데 대부분의 증류탑 모사 문제에 있어서는 압력이 고정되어 있는 것으로 생각하므로 최적치를 찾기 못할 가능성을 거의 없애 준다.

본 연구에서 개발된 최적 설계 전략의 성능을 검토하기 위하여 ODDS를 이용하여 다음과 같은 사례 연구를 수행하였다.

4. 사례 연구

본 연구에서 제시된 Two-Tier Approach를 이용한 증류탑의 최적 설계법을 시험하기 위하여 다음과 같은 가상적인 문제를 마련하였다.

사례 연구1

원료 입력량(kgmol/hr) : 100

성분 : Propane Iso-butane

성분비 : 0.9 0.1

온도(K) : 330

압력(atm) : 20

설계사양(최상단 생성물에서 Propane의 유량) :

89.2(kgmol/hr)

위의 문제를 위한 목적 함수는 Swartz와 Stewart[9]의 연구에서 제시된 목적 함수 형태를 그대로 사용하였다.

목적 함수

총 비용=연간 고정 비용+연간 운전 비용

운전 비용 = $C1 \times Qc + C2 \times Qr$

고정 비용 = $C3 \times (N1 + N2 + 2)$

$C1 = (\$0.322/\text{million KJ}) (8640 \text{ h/yr})$

$C2 = (\$0.790/\text{million KJ}) (8640 \text{ h/yr})$

$C3 = (118.752 + 360.2D + 368.1D - 1.438D + 28.78D)/10$

Qc =냉각기 용량

Qr =재비기 용량

$N1, N2$ = 원료 입력단 위와 아래의 단수

D =최상단에서의 증기 유량이 0.127 m/s 되게 하는 탑의 직경

이러한 최적 설계 문제를 시작하기 위해서는 적당한 초기조건을 알아야 한다. 물론 경험이 풍부한 엔지니어라면 대략 몇 단의 증류탑과 환류비(Reflux Ratio)가 필요한지 짐작할 수 있을 것이나 일반적으로 Short-cut 설계법을 사용하여 대략적인 조건을 구하게 된다. 본 연구에서도 초기조건을 위하여 ASPEN+의 Short-cut 설계 기능을 이용하였다. Table 1은 그 결과를 나타내고 있는데 실제 환류비를 최소 환류비의 2배로 잡을 경우 주어진 생성물 규격을 만족하기 위해서는 총 13단의 증류탑이 필요하고 원료의 입력은 위에서부터 6번째 단에 들어가는 것으로 나타났다.

본 연구에서 개발된 ODDS(Optimal Design of Distillation System)를 적용시키기 위하여 위의 결과와 거의 유사한 초기점을 잡았다. 그런데 이 문제의 경우 원래 단순 증류탑이 가지는 4개의 자유도 중 최상단 생성물의 양이 설계사양으로 주어짐에 따라 자유도는 3개가 되고 따라서 3개의 설계 변수를 지정해야 한다. 여기서는 원료 입력단 아래 위의 단수와 재비기의 열량을 설계 변수로 지정하여 문제를 풀었다.

ODDS에 의한 결과로 Table 2를 얻었다. 즉, 초기점으로 냉각기와 재비기를 포함하지 않고(환류비=1) 10단의 증류탑의 6번째 단에 원료를 넣었다. 3번의 최적화 계산단계를 거쳤을 때 최종 결과와 같은 총 7단(원료 입력단은 3번째 단)의 증류탑 단수와 0.837의 환류비를 얻었다. 이후의 최적화 계산에서 단수는 더 이상 줄지 않고 있으므로 단수를 현재값에서 고정시키면 자유도는 3에서 1로 줄어들고 따라서 단수가 고정된

Table 1. The result of short-cut design with ASPEN+

Distillate Temperature (°K)	293.208
Bottom Temperature (°K)	326.332
Minimum Reflux Ratio	0.59853
Actual Reflux Ratio	1.19705
Minimum Stages	7.44879
Actual Equilibrium Stages	12.5032
Number of Actual Stages Above Feed	4.67902
Distillate vs Feed	0.89999
Condensor Duty (cal/sec)	-203.886
Reboiler Duty (cal/sec)	168.031

Table 2. The results of ODDS: case study 1

	N1	N2	Feed Location	Qreb (MMcal/hr)	Reflux Ratio	Cost(\$)
Initial	5	4	6	516,700	1	18836
Optimization 1 Iteration	4	4	5	491,700	0.936	17809
Optimization 2 Iteration	3	4	4	476,900	0.882	17175
Optimization 3 Iteration	2	4	3	465,500	0.837	16674
Optimization 4 Iteration	2	4	3	452,700	0.794	16149
Optimization 5 Iteration	2	4	3	432,700	0.739	15344

이후부터는 단변수 최적화 문제로 바뀌게 된다. Table 2의 결과에서 탑의 단수와 환류비가 모두 줄어든 것은 처음 조건이, 재비기에서는 과다하게 끓여주고 냉각기에서는 그만큼 과다하게 식혀주기 때문이다.

사례 연구2

원료 입력량(kgmol/hr) : 100

성분 : I-butane N-butane Pentane

성분비 : 0.5 0.4 0.1

온도(K) : 340

압력(atm) : 20

설계 사양 : 최상단 생성물에서 I-butane 유량=49.2 (kgmol/hr)

최상단 전체 생성물의 유량=50 (kgmol/hr)

목적 함수의 형태는 사례 연구1과 동일하다. 단, 고정 비용을 계산에 필요한 상수 C3의 값을 10배 크게 잡았다. 본 연구에서 사용된 증류탑 모사기가 50단 이하 계산만 가능하게 되어 있어 너무 많은 단수가 필요하지 않도록 조절할 필요가 있었으며, 이러한 일이 개발된 전략의 검토에 영향을 미치지 않을 것으로 생각된다.

이 문제에서는 2개의 설계사양이 주어졌다. 따라서 자유도는 2가 되므로 원료 입력단 위와 아래의 단수가 고정되면 모든 값들이 결정되고 계산이 끝나는 점이 앞의 문제와 다른 점이다. Table 2에 계산의 초기조건 및 결과를 나타내었다.

5. 검 토

본 고에서 제시한 최적화 전략에서 가장 큰 문제점

Table 3. The result of ODDS: case study 2

	N1	N2	Feed Location	Reflux Ratio	Cost (\$)
Initial	15	18	16	6,6000	70620
Optimization 1 Iteration	16	17	17	6.3869	69149
Optimization 2 Iteration	17	17	18	6.3887	69165
Optimization 3 Iteration	18	16	19	6.4512	69707
Optimization 4 Iteration	19	18	20	6.0257	67081
Optimization 5 Iteration	17	20	18	5.9877	66748
Optimization 6 Iteration	19	20	20	5.7977	65787
Optimization 7 Iteration	18	20	19	5.8710	66082
Optimization 8 Iteration	20	22	21	5.5634	64760
Optimization 9 Iteration	19	24	20	5.5197	64718
Optimization 10 Iteration	19	24	20	5.5150	64677

은, 어떻게 단수가 더 이상 변하지 않는가를 효과적으로 확인하여 본래 문제를 단수를 고정시키는 문제로 전환할 것인지를 결정하는 일이다. 이 문제점은 축소 모델이 필연적으로 가질 수밖에 없는 부정확성에서 기인하는 것이므로 근본적으로 보다 근사한 축소 모델을 개발함으로써 해결될 수 있다. 특히 단수를 포함하는 최적 설계에 있어서는 축소 모델에서 탑의 단수와 관련된 관계식이 정확해야 한다. 앞에서 언급한 대로 본 연구에서는 Boston[13] 등이 제시한 Absorber 축소 모델을 사용하였는데 이 모델에서 탑의 단수와 성분별 유량의 관계를 나타내는 Kremser 식이 가장 큰 문제가 되는 것으로 나타났다. 따라서 본 연구에서 개발된 전략을 개선하기 위해서 제일 먼저 생각할 수 있는 것은 여러가지 근사 과정을 거친 Kremser 식을 근사 과정을 덜 거친 보다 정밀한 형태로 개선하는 것이다. 다음으로 생각할 수 있는 것은 단수에 관한 미분값을 정밀 모델에서부터 구해 오는 것이다. 이 방법은 보통의 증류탑 모델로는 비효율적일 것으로 보인다. 그러나 최근에 와서 민감도 분석(Sensitivity Analysis)을 할 수 있는 기능을 가진 모델의 개발이 많이 연구되고 있는 바, 탑의 단수에 대해서만이라도 이러한 기능을 가지는 모

델이 개발된다면 단수에 대한 미분값을 정밀 모델에서부터 구해오는 것이 좋은 개선책이 될 수 있을 것이다. 이러한 방향으로의 많은 연구가 필요할 것으로 보여진다.

또한 Two-Tier Approach를 이용하는 최적화 전략을 단순 증류탑에 대해서만 전개하였으나 Fig. 3의 원편 그림에서의 원료 입력단과 같이 Flash 유닛를 첨가하는 구조를 필요한 위치에 삽입함으로써 다수 원료 입력이나 중간단 생성물을 가지는 증류탑의 설계도 가능하며 다수의 증류탑이 시스템을 이루고 있는 경우에 대해서도 확장이 가능하다.

Appendix

1. Reduced Model of Flash Unit

1) Component material balances: NC

$$i=1, NC$$

$$I_i + V_i - f_i = 0$$

2) Energy balance: 1

$$\left(\sum_{i=1}^{NC} f_i \right) \cdot H(T_f) + Q - \left(\sum_{i=1}^{NC} I_i \right) H(T) - \left(\sum_{i=1}^{NC} V_i \right) H(T) = 0$$

3) Constitutive and phase equilibrium equations: NC

$$i=1, NC$$

$$V_i(1-\beta) - \alpha_i \cdot K_b \cdot I_i \cdot \beta = 0$$

4) K_b and T, P relation: 1

$$\ln(K_b \cdot P) - A - B/T = 0$$

5) Vapor fraction equation: 1

$$\beta \left(\sum_{i=1}^{NC} f_i \right) - \left(\sum_{i=1}^{NC} V_i \right) = 0$$

—이 모델에서 A, B는 정밀 모델과 축소 모델을 Base Point에서 일치시키기 위한 매개 변수이며, α 는 상대 휘발도, β 는 증기 분율로서 Base Point에서의 정밀 계산 결과로부터 계산되어 진다(참고문헌에서 보다 자세한 내용을 알 수 있다).

2. Reduced Model of Absorber

1) Component material balances: NC

$$i=1, NC$$

$$(I_{i,0} - I_{i,N}) - (V_{i,1} - V_{i,N+1}) = 0$$

2) Energy balance: 1

$$\left(\sum_{i=1}^{NC} I_{i,0} \right) H(T_0) + \left(\sum_{i=1}^{NC} V_{i,N+1} \right) H(T_{N+1})$$

$$- \left(\sum_{i=1}^{NC} I_{i,N} \right) H(T_N) - \left(\sum_{i=1}^{NC} V_{i,1} \right) H(T_1) = 0$$

3) Equilibrium constant models: 2

$$\text{— Top stage } \ln(K_{b1} \cdot P_1) = A_1 + B_1(1/T_1 - 1/T_1^*)$$

$$\text{— Bottom stage } \ln(K_{bN} \cdot P_N) = A_N + B_N(1/T_N - 1/T_N^*)$$

4) Constitutive and phase equilibrium equations: 2

$$\text{— Top stage } \sum_{i=1}^{NC} V_{i,1} [1/(\alpha_{i,1} \cdot K_b) - 1] + 0$$

$$\text{— Bottom stage } \sum_{i=1}^{NC} (K_{bN} \cdot \alpha_{i,N} - 1) \cdot I_{i,N} = 0$$

5) Kremser separation equations: NC

$$i=1, NC$$

$$(V_{i,N+1} + I_{i,0}) [1 - (\beta_i \cdot S_b)^N] + I_{i,0} [(\beta_i \cdot S_b)^N - \beta_i \cdot S_b] - I_{i,N} [1 - (\beta_i \cdot S_b)^{N+1}] = 0$$

— $A_i, A_N, B_i, B_N, \beta_i$ 는 매개 변수이며 α 는 상대 휘발도

감 사

본 연구의 수행을 위하여 연구비를 지원하여 준 주식회사 유공에 깊은 감사를 드립니다.

NOMENCLATURE

A, A_1, A_N, B, B_1, B_N :	Parameters for reduced model
f_i :	Component flow rates of feed stream in Flash
$H(T)$:	Enthalpy as a function of T
K_b :	Reference equilibrium constant
K_{bj} :	Reference equilibrium constant at jth stage
I_i :	Component flow rates of liquid output stream in Flash
I_{ij} :	Component flow rates of liquid stream in Absorber (ith component, from jth stage)
N:	Number of stages
NC:	Number of components
P_j :	Pressure of jth stage
S_b :	Reference Stripping factor
T:	Temperature of Flash drum
T^* :	Reference temperature
T_f :	Temperature of feed stream in Flash
T_j :	Temperature of jth stage
V_i :	Component flow rates of vapor output stream in Flash
V_{ij} :	Component flow rates of vapor stream in Absorber (ith component, from jth stage)
α_i :	Relative volatility in Flash
α_{ij} :	Relative volatility (ith component, jth stage)
β :	Vapor fraction

β : Parameter for i th component in absorber model

REFERENCES

1. Fenske, M.R.: *Ind. Eng. Chem.*, **24**, 482 (1932).
2. Underwood, A.J.V.: *Chem. Eng. Prog.*, **44**, 603 (1948).
3. Kirkbride, J.M.: *Prt. Re.*, **23**(9), 321 (September, 1944).
4. Sigley, J.M. and Holland, C.D.: *AIChE J.*, **11**, 695 (1965).
5. Ricker, N.L. and Grens, E.A.: *AIChE J.*, **20**(2), 238 (1974).
6. Naphtali, L.M.: *Chem. Eng. Prog.*, **60**, 9 (1964).
7. Najeh, S.A. and Holland, C.D.: *Hydrocarbon Processing*, July, 166 (1979).
8. Box, M.J.: *Com. J.*, **8**, 42 (1965).
9. Swartz, C.L.E. and Stewart, W.E.: *AIChE J.*, **32**(11), 1832 (1986).
10. Powell, M.J.D.: Technical Report, Presented at Dundee Conference on Numerical Analysis (1977).
11. Berna, T.J., Locke, M.H., and Westerberg, A.W.: *AIChE J.*, **26**(1), 37 (1980).
12. Locke, M.H., Westerberg, A.W., and Edhal, R.H.: *AIChE J.*, **29**(5), 871 (1983).
13. Boston, J.F. and Britt, H.I.: *Comput. Chem. Eng.*, **2**, 109 (1978).
14. Jirapongphan, S.: "Simultaneous Modular Convergence Concept in Process Flowsheet Optimization", Ph.D. Thesis, MIT, (1980).
15. Kremser, A.: *Natl. Petrol. News*, **22**(21), 48 (1930).
16. Holland, C.D.: "Fundamentals of Multicomponent Distillation", McGraw-Hill, New York, (1981).
17. Chen, H.S. and Stadther, M.A.: *AIChE J.*, **31**(11), 1843 (1985).
18. Biegler, L.T., Grossmann, I.E., and Westerberg, A.W.: *Comput. Chem. Eng.*, **11**(6), 553 (1987).
19. Trevino-Rozano, R.A.: "Simultaneous Modular Concept in Chemical Process Simulation and Optimization", Ph.D. Thesis, MIT, (1985).
20. Trevino-Rozano, R.A., Kisala, T.K., and Boston, J.F.: *Comput. Chem. Eng.*, **8**(2), 105 (1984).