

단일탑 증류공정의 정상상태 해의 다중성

장광식 · 한경택 · 이강주 · 윤인섭

서울대학교 공과대학 화학공학과
(1992년 5월 11일 접수, 1992년 11월 6일 채택)

Multiplicity of Steady State Solutions of Single Column Distillation

Gwang Sik Jang, Kyung Taek Han, Kang Ju Lee and En Sup Yoon

Dept. of Chem. Eng., College of Eng., Seoul Nat'l Univ.
(Received 11 May 1992; accepted 6 November 1992)

요 약

본 연구에서는 증류공정을 포함한 단 분리공정에 적합한 Continuation 알고리즘을 통하여 단일탑 증류공정에서의 정상상태 해의 다중성을 구현하였다. 다중해는 주로 농도의 설계사양에 대하여 많이 나타났으며 농도의 설계사양은 공정의 조업 유연성을 떨어뜨리는 역할을 하였다. 열역학적 비이상성이 큰 문제의 경우는 주로 내부 유량 변수들에 대하여 다중해를 나타냈으며 다중해를 갖는 공정이라 해서 모든 변수에 대하여 정상상태 해의 다중성이 존재하지는 않았다.

Abstract—This paper presents the steady state multiplicity for single column distillation. A continuation method which is adequate to implement the multiplicity of separation processes including distillation is employed. Tight design specification, especially concentration specification, causes most of multiplicity of the solutions and this takes a role of deteriorating the flexibility of process operation. In case of having severe nonideality in the thermodynamic properties, the column internal flow rates may have multiple solutions. But, not all the variables have multiplicities.

1. 서 론

1981년 Allgower와 Georg[1]는 homotopy continuation이 비선형 방정식계 해법에 효과적으로 적용될 수 있음을 보고하였다. 그 이후 homotopy continuation 방식은 '80년대 이후 몇몇 화학공학자들에 의하여 화학공학 분야에 응용되어 오면서 비선형 방정식계로 표현되는 화학공정 문제의 해석을 위한 새로운 수학적 기법으로 여겨지게 되었다. Homotopy continuation 방식은 총괄적 수렴(global convergency)의 특성뿐 아니라 다중해의 구현과 선택된 변수에 대한 방정식계의 민감도 연구 등이 용이하다는 특징을 갖는다.

Homotopy 함수는 $n+1$ 차원의 (x, t) 공간에서 정의되는 n 개의 방정식으로 구성된다. 이들의 해를 구하기 위하여 어떠한 형태로든 자유도를 만족할 수 있도록 매개변수화하여야 한다. 이러한 매개변수화 작업은 수학적으로 해곡선상의 각점(point solution)을 구하는 수단이다. 보통 $h(x, t)=0$ 에서 t 를 매개변수로 사용할 수도 있으나 회전점(turning point)이 존재하는 경우 특별히 고안된 수정자(corrector)가 아닌 경우 실패를 유발하게 된다[1-3]. t 이외의 p 라는 parameter를 계에 도입하면 x 와 t 는 p 에 의하여 종속적으로 정의된다. $x(p)$, $t(p)$ 의 $n+1$ 개의 변수와 n 개의 방정식으로 구성되는 homotopy 함수는 매개변수화(parameterization)를 통하여 다음과

같이 스칼라(scalar) 방정식, $s(x, t, p)=0$ 을 부가시킴으로서 자유도를 만족할 수 있다[3].

$$\begin{bmatrix} h(x, t) \\ s(x, t, p) \end{bmatrix} = 0 \quad (1)$$

자유도를 만족하는 방정식계를 p 에 관하여 풀면 우리는 p 에 의하여 종속적으로 정의되는 $x(p)$ 와 $t(p)$ 를 얻을 수 있다[3, 4].

이 경우 (1)식에 직접 Newton 방식과 같은 수치해석 기법을 적용할 수도 있으며, 또 다른 방식으로 예측-수정(predictor-corrector) 방식을 사용하여 해를 구할 수도 있는데 주로 고전적인 continuation 방식이 이에 속한다[5]. 일반적으로 쓰이는 예측-수정 알고리즘은 homotopy 방정식이 도입된 매개변수에 대하여 미분하여 초기치 문제로 변형한 후 해를 구해내는 방식으로 정의되는데 해곡선 추적시 일어나는 회전점 등을 극복하기 쉽고 continuation 간격의 조절이 용이하다는 특징을 갖는다[4-6].

현재 널리 사용되는 예측-수정(predictor-corrector) 방식의 homotopy continuation 방식의 기원은 Davidenko[8]로부터 찾을 수 있다. 그 후 Allgower와 Georg[1]는 회전점(turning point)를 극복하기 위해 differential-arclength homotopy continuation 방식을 도입하였으며 Wayburn과 Seader[9]는 이 알고리즘을 다탑 분리공정에 적용하였다. 그 이후 homotopy continuation의 알고리즘상에 발전은 거의 없었으나 최근 Rion과 Brunt[10] 등이 미분 기하(differential geometry)에 기본적인 high order homotopy continuation 방식을 발표하였다. 이외에 수학적이기 보다는 물리적 의미에 충실한 continuation 기법도 개발되었는데 그 대표적인 것이 thermodynamic homotopy 함수이다. 이는 증류공정 등의 계산을 행할 때 필요한 열역학의 성질을 이상방정식으로부터 출발하여 서서히 비이상성을 계에 도입함으로써 비이상성이 큰 분리공정을 효과적으로 해석하였다. 이 알고리즘은 이미 상업용 모사기(ASPEN PLUS, PRO II)의 증류공정 해석을 위한 기법으로 구현되어 있다. Homotopy continuation 방식의 화학공학에 대한 응용성 및 원리 등은 Seydel과 Hlavacek[3], Wayburn[11]에 의해서 정리되었다.

지금까지 연구되어온 homotopy continuation 방식에 대한 화학공학에의 적용성은 대부분 초기치 부담을 줄일 수 있는 기법으로 여겨지며 homotopy 함수 자체의 성질 파악과 화학공정이 갖는 문제의 특성에 잘 부합되는 응용의 예라고는 할 수 없다. 화학공학을 표시하는 방정식계는 제약조건을 갖는다. 예를들면 증류공정과 같은 문제에서 유량과 조성 등은 항상 0 또는 양수로 정의

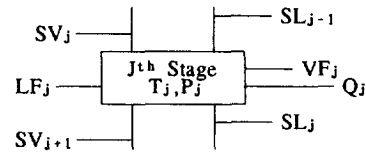


Fig. 1. Equilibrium stage model.

되어야 한다. 만일 음의 값을 가진 조성 또는 유량에 대하여서는 열역학 성질 계산시 실패를 유발하게 된다. 해의 다중성을 파악하는 것도 해결해야 할 문제로 지적되고 있다. Seader[12], Choi[13] 등이 밝힌 바와 같이 다항식으로 표시되지 않는 일반적인 비선형 방정식계에 대하여서는 다중해의 갯수를 예측할 수 있는 증명된 방법이 없다. 그러나 일반적인 비선형 방정식계로 표시되는 화학공정은 다중해를 가질 확률이 매우 높다. 이에따라 방정식계가 갖는 다중해를 효율적으로 구현할 수 있는 알고리즘이 필요한 것으로 지적된다.

2. 증류공정의 모델

Fig. 1에 본 연구에 사용된 평형단 모델을 나타내었으며, 이 모델에 대한 지배 방정식은 아래에 나타내었다.

Component material balance

$$CM_{ij} = L_{j-1}X_{ij-1} + V_{j+1}Y_{ij+1} + LF_jXF_{ij} + LF_jYF_{ij} - (L_j + SL_j)X_{ij} - (V_j + SV_j)Y_{ij} \quad (2)$$

Equilibrium relation

$$E_{ij} = Y_{ij} - K_{ij}X_{ij} \quad (3)$$

Summation equation

$$S_j = \sum X_{ij} - \sum Y_{ij} \quad (4)$$

Enthalpy balance

$$H_j = L_{j-1}HL_{j-1} + V_{j+1}HV_{j+1} + LF_jHLF_j + VF_jHVF_j - (L_j + SL_j)HL_j - (V_j + SV_j)HV_j - Q_j \quad (5)$$

Overall material balance

$$OM_j = L_{j-1} + V_{j+1} + LF_j + VF_j - L_j - SL_j - V_j - SV_j \quad (6)$$

*i : Component index

j : Stage index

이 모델은 2상(two-phases) 비 반응성(non-reactive) 모델로서 입력 스트림은 기상과 액상으로 나누어 모델링하였다.

3. 알고리즘의 구현

비선형 방정식 $f(x, p)=0$ 에 대한 Newton homo-

topy와 해 벡터 w 는 (7)과 (8)식과 같이 정의될 수 있다. 이 식에서 p 는 초기 규정 변수(parameter)로 정의되며 방정식계의 자유도를 0으로 만족시키기 위해 필요한 설정값들이다.

$$h(x, p, t) = f(x, p) - (1-t)f(x_0, p_0) \quad (7)$$

$$w = \begin{bmatrix} x \\ t \end{bmatrix} \in R^{n+1} \quad (8)$$

3-1. 예측단계

Homotopy 함수는 n 차원 공간에서 $n+1$ 개의 변수로 정의되며, 이를 호의 길이(arc length) s 로 매개변수화 한 후 s 에 대하여 미분하고, 호의 길이 s 에 대한 제약 조건을 부가하면 (9)식과 같은 초기치 미분방정식(IVP)의 형태를 얻을 수 있다.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial w}(w^k) \\ \frac{dw^T}{ds}(s^k) \end{bmatrix} \frac{dw}{ds}(s^k) = e^{n+1} \quad (9)$$

여기에서 w^k 는 k 번째 continuation 단계의 해 벡터이며, s^k 는 k 번째 단계의 호의 길이로 정의된다. e^{n+1} 는 $n+1$ 번째 요소 이외에는 모두 0의 요소를 갖는 열 벡터로 정의된다. 해 곡선 추적의 방향은 다음의 식을 일관성있게 만족할 수 있도록 결정된다.

$$\frac{dw^T}{ds}(s^{k-1}) \frac{dw}{ds}(s^k) > 0 \quad (10)$$

단위 기울기 벡터(dw/ds)를 구하는 방식으로는 2가지 형태를 들 수 있는데, 그 첫째가 기본 단위(standard base) 벡터를 이용하는 방식으로 (9)식의 맨 아래열을 $(e)^T$ 로 치환하여 구할 수 있다. 이 방식은 Rheinboldt 등이 처음 택한 방식으로 지역변수(local parameter)에 의한 continuation으로 정의된다[2, 4, 14]. 다른 방식으로는 Watson[15] 등이 사용한 이전 단계의 기울기(previous tangent)를 이용하는 방식으로 이전 단계의 기울기식을 위의 방식과 같이 치환하여 얻을 수 있다.

한 등[21]은 $k=0$ 에서는 기본단위 행렬을 $j=n+1$ 로 고정시킴으로써 기울기 벡터를 구하였으며 $k \geq 1$ 에서는 이전단계의 기울기를 사용하는 방식을 사용하였다. 이는 예측단계의 자코비 행렬의 구조를 수정단계의 것과 같은 것으로 설정하기 위한 것으로 선형 행렬의 계산에 보다 효율적이기 때문이다.

해곡선 추적을 위한 다음 continuation 단계의 초기 해는 다음식과 같이 정의된다.

$$w_0^{k+1} = w^k + \frac{dw}{ds}(s^k) \Delta s^k \quad (11)$$

여기에서 Δs^k 는 적분간격(stepsize)이다.

3-2. 수정단계

해곡선 상에서 예측된 지점으로부터 좀더 정확한 수렴지점을 찾기 위하여 Newton 방식의 correction을 행하였다. 만일 예측된 해가 해곡선에 충분히 가깝다면 수정단계에서 예측해를 해곡선 위에 정확히 일치시킬 수 있다[4]. 수정단계는 (12)식과 같이 Newton 방식으로 행하여 진다.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial w}(w_i^{k+1}) \\ \frac{dw^T}{ds}(s^k) \end{bmatrix} \Delta w_i^{k+1} = \begin{bmatrix} -h(w_i^{k+1}) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (12)$$

(12)식의 마지막 열벡터는 homotopy 함수에 부가된 방정식으로 수정단계가 전 단계의 기울기 벡터에 수직으로 행하여지는 것을 의미한다. 수정단계는 주어진 수렴 정의식이 만족될 때까지 반복된다.

구해진 수정자는 다음과 같은 Newton 방식에 의하여 새로운 점을 계산한다.

$$w_{i+1}^{k+1} = w_i^{k+1} + \alpha \lambda \Delta w_i^{k+1} \quad (13)$$

w_{i+1}^{k+1} 는 수렴정의가 만족될 때 $k+1$ 단계의 해로 받아들이며 w 는 다음단계의 예측을 위한 값으로 사용된다. 여기에서 λ 는 감쇄계수(damping factor)로 정의되며 Newton 방식에서는 $\lambda=1$, 수정된 Newton 방식에서는 $0 < \lambda < 1$ 의 값으로 정의된다. α 는 Schacham[16] 등이 제안한 개연계수(feasibility factor)로 제약조건(i. e. $x > 0$)이 주어진 방정식계에 대하여 제약조건이 주어진 변수가 항상 제약조건 안에 위치하도록 조정하는 보정 변수이다.

3-3. 적분간격 제어

Continuation에 있어서 적분간격(stepsize)의 결정은 그 계산 효율에 상당한 영향을 미친다. 적분 간격이 너무 작게 결정되면 계산상 효율을 상실하게 되며 너무 크면 수정단계의 실패를 유발하게 된다. 그러나 Rheinboldt [2] 등이 밝힌 바와 같이 continuation의 각 단계에서의 수렴가능 반경은 이전단계의 수렴반경으로부터 일반적으로 추정하는 것이 불가능하다. 이러한 이유로 아직 까지도 적절한 전략은 나오지 못하고 있다. 본 연구에서는 곡률의 근사식을 이용한 적분간격의 결정기법을

구현하였다. 곡률은 해곡선 상의 상당히 가까운 두 점에서의 기울기 벡터 $T(s)$ 가 이루는 각의 radian 값으로 표현할 수 있으며, 이는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$K = \lim_{ds \rightarrow 0} \frac{\cos^{-1}[T(s)T(s+ds)]}{ds} \quad (14)$$

곡률 K 는 미분 기하에 근거하여 해곡선의 기준 단위 벡터(principal unit vector)와 기울기 벡터(tangent vector) 그리고 수직 벡터(binormal vector)에 연관되어 계산되어진다. 그러나 ds 가 상당히 크지 않다면 곡률은 다음과 같은 근사식으로 표시할 수 있다.

$$K \approx \frac{\cos^{-1}[T(s)T(s+\Delta s)]}{\Delta s} \quad (15)$$

이 식에 의하여 결정된 $k+1$ 단계의 곡률로부터 $k+1$ 단계의 적분간격은 다음과 같이 표시될 수 있다.

$$\Delta s^{k+1} = \theta^d / K \quad (16)$$

θ^d 는 이상적인 회전각으로 라디안(radian) 값으로 정의된다. (15)와 (16)식으로 표현되는 곡률과 적분간격은 근사식이기는 하나 회전각에 의하여서만 결정되는 적분간격 보다는 훨씬 효율적으로 여겨진다. 즉 이전 단계의 적분간격의 크기를 감안하여 기울기 벡터의 변화량을 계산해 냄으로써 해곡선을 실제와 더욱 근사하게 표현할 수 있다. 알고리즘은 한 등[21]의 연구를 바탕으로 최대와 최소 허용 곡률을 설정함으로써 적분간격이 지나치게 크거나 작아짐에 따른 계산의 효율 상실을 방지하였다. 또한 최대 허용 회전각을 지정함으로써 해곡선의 극심한 회전으로 인한 해곡선 이탈현상을 방지하게 되었다.

3-4. Parametric Continuation 알고리즘

비선형 방정식 $f(x, p) = 0$ 의 자유도를 만족시키기 위해서는 초기 규정변수(parameter) p 의 값을 설정하여야 한다. p 의 값에 따라 방정식계는 다른 해를 가지며 공학 문제에서는 이미 적절하게 p 를 변화시킴으로써 p 에 대한 방정식계의 민감도 연구 등이 되어왔다. 이러한 기법을 parametric continuation이라 부르며 이 기법이 homotopy continuation과 구별되는 이유는 추적되는 해곡선 자체가 비선형 방정식계의 해라는 점이다. 그러나 이 기법은 continuation을 하기 위해서는 설정된 p 에 대하여 변수 x 의 시작점 해를 미리 알고 있어야 한다는 단점을 갖는다. 대규모 방정식계에 대하여 초기조건을 해로 지정하는 것은 거의 불가능하므로 이는 주로 반응기 해석 등의 소규모 방정식계 또는 시작점의 해를 쉽게 알 수 있는 계에 대하여 쓰이는 것이

보통이었다. 본 연구에서는 대규모 계에 대하여 homotopy continuation으로 구한 해를 시작점으로 효율적으로 parametric continuation을 구현하는 알고리즘을 제시하고자 한다.

아래의 식과 같이 초기 설정치중 하나(p_c)를 변수로 지정하고 이에 대하여 설정치의 규정식을 첨가하면 R^{n+2} 에서 정의되는 Newton homotopy 함수를 얻을 수 있다.

$$\begin{bmatrix} f(x, p) \\ p - p_c \end{bmatrix} = 0, \text{ where } p = p_c \text{ but } p_c \quad (17)$$

$$h(x, p, t) = \begin{bmatrix} f(x, p) \\ p - p_c \end{bmatrix} - (1-t) \begin{bmatrix} f(x_0, p_0) \\ p_0 - p_c \end{bmatrix} = 0 \quad (18)$$

$$w = \begin{bmatrix} x \\ p \\ t \end{bmatrix} \in R^{n+2} \quad (19)$$

위와 같이 구성된 증강된 방정식계에 continuation 알고리즘을 적용하면 $t=1$ 에서 방정식계의 해를 찾을 수 있으며 이 지점에 대하여 c 값을 원하는 값 c_r 로 다시 설정하고 다시 continuation 알고리즘을 수행하면 자동적으로 parametric continuation을 수행할 수 있다. Homotopy continuation에 의한 (17)식의 해를 각각 x^* , p^* 라 하면 이 지점으로부터의 p_c 에 대한 parametric continuation은 (15)식에 의하여 진행된다.

$$h(x, p, t) = \begin{bmatrix} f(x, p) \\ p - p_c \end{bmatrix} - (1-t) \begin{bmatrix} 0 \\ p^* - c_r \end{bmatrix} = 0 \quad (20)$$

즉, parametric continuation의 시작점 x^0 와 p^* 는 $p_c = c_r$ 에서의 구성된 방정식계의 해이므로 이 지점으로부터의 parametric continuation은 다음과 같은 형태로 p_c 가 t 에 의하여 매개변수화된 homotopy continuation으로 간주될 수 있다.

$$t = \frac{p_c^* - p_c}{p_c^* - c_r} \quad (21)$$

그러므로 설정된 방정식계에 대하여 homotopy continuation을 한 후 선택된 규정식의 목표값을 다시 지정하고 homotopy continuation을 재차 수행함으로써 선택된 변수에 대한 parametric continuation을 자동적으로 수행할 수 있다. 이 때 선택되는 식은 변수값에 대한 음함수적인 표현 뿐만 아니라 함수형태의 규정식도 가능하다. 증류 공정에서 이러한 함수형태의 규정식은 흔히 볼 수 있다. 그 예로는 환류비의 고정, 재비기와 응축기의 열용량 합의 고정, 그리고 회수율 등을 들 수 있다. 이들은 음함수적으로 표시될 수 있으므로 이 알고리즘은 분리공정문제에 효과적으로 적용될 수 있을 것으로 여겨진다. 구현된 알고리즘의 자세한 내용은 한

[21] 등에 의하여 정리되어 있다.

4. 모사기의 구현과 결과 고찰

4-1. 모사기의 특징

단 분리공정의 모사를 위하여 개발된 모사기는 작성된 입력의 해석기 부분, 계산 루틴, 출력관리 부분으로 나뉘며, VAX 기종의 하드웨어 상에서 fortran을 이용하여 구현되었다. 열역학 계산 루틴은 Prausnitz 등이 개발한 UNIQUAC 루틴[17]과 Edmister와 Lee[18] 등에 의하여 개발된 탄화수소들에 대한 열역학 계산 루틴을 갖추고 있다. 모사기의 입력은 주요어(keyword)를 중심으로 free format으로 입력이 가능하며 사용자의 편의성과 간결성을 고려하여 설계되었다. 본 연구에

의해 개발된 모사기의 입력예를 부록에 나타내었다. 모사기는 주어진 설계사양(specification)중 하나에 대하여 parametric continuation을 구조 변환없이 시행할 수 있다. 모사기의 초기치 설정 루틴은 두 가지인데 그 하나는 사용자의 입력을 바탕으로 내삽(interpolation) 또는 외삽(extrapolation)을 하는 방식이며, 다른 하나는 모사기에 의하여 이루어지는 방식으로 이는 다음과 같다.

기상과 액상의 등물 흐름을 가정으로 원료 조성에 대한 비등점과 응축점을 계산한 후 다음의 관계식에 의하여 단내에서 동일한 값으로 가정하였다.

$$T = T_{\text{dew}} + (T_{\text{dew}} - T_{\text{bubble}})(D/F) \quad (22)$$

각 단의 기상과 액상의 조성은 가정된 온도와 주어진

Table 1. Specifications of examples for continuation

Ex. #	Configuration	Condenser (P in Bar)	Specifications	Feed conditions [Stage, Temp., Rate(Kmol/h)]	Reference
1.	N=21	Total P=1.013	Dcl=0.507 B=75	1 Liquid 11,330.7 K, 100 Acetone 0.3 Chloroform 0.47 Methanol 0.23	[19]
2.	N=12	Partial P=1.013	R=180 D=5 ⇒ 90	1 Liquid 5,364.3 K, 100 n-Butanol 0.13 n-Propanol 0.22 Water 0.65	[20]
3.	N=15	Partial P=1.013	R=60 ⇒ 100 D=50	1 Liquid 8,335.5 K, 100 Acetone 0.5 Furfural 0.05 Water 0.45	[19]
4.	N=21	Total P=1.013	R=112.5 D=80 ⇒ 35	1 Liquid 11,351.9 K, 100 Ethanol 0.25 Methanol 0.25 n-Propanol 0.25 Water 0.25	[20]
5.	N=13 N _p =9	Total P=20.4	Set 1. R=200 P=5 D=5 ⇒ 95 Set 2. D=5 P=40 R=5 ⇒ 500 Set 3. D=5 P=40 D _(i-Bu) =0.16 ⇒ 0.5	1 Vapor 5,404 K, 100 Propane 0.05 i-Butane 0.15 n-Butane 0.25 i-Pentane 0.2 n-Pentane 0.35	[6]

R=Reflux rate, D=Distillate rate, B=Bottom product rate, P=Side product rate, Di=Mole fraction of component i in distillate, N_p=Index of side product stage.

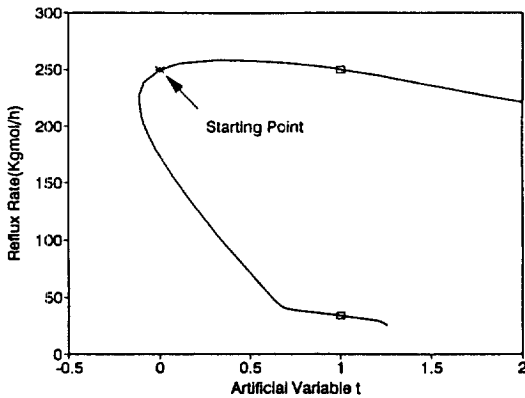


Fig. 2. Homotopy path of reflux rate of Ex 1.
(Spec.: $B = 75$ Kgmol/h, $D_{Cl} = 0.507$)

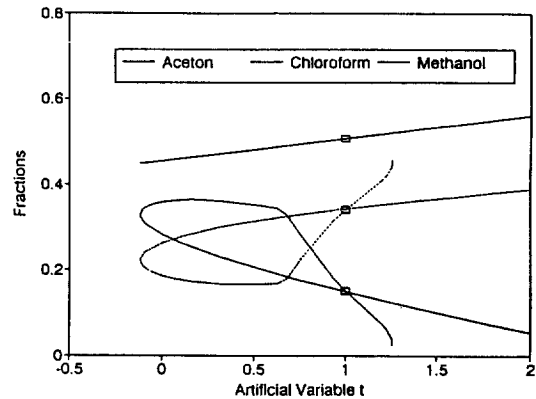


Fig. 3. Homotopy paths of concentrations of Ex 1.
(Spec.: $B = 75$ Kgmol/h, $D_{Cl} = 0.507$)

압력에서 원료에서의 조성을 가정치로 단일 플래쉬로 구하였다. 설계 변수들에 대한 초기치는 설정된 값들을 기본으로 MESH식을 이용하여 구하였다. 이와 같은 방식의 초기치 설정이 우수한 성능을 보이는 것은 아니지만 단 분리공정의 수렴성에 대한 초기치 설정의 역할을 검토하기 위하여 위와 같이 간단한 방식을 택하였다. 자코비 행렬은 해석적으로 구한 것을 입력하였으며 이에 필요한 열역학 성질의 계산은 유한 차분법 (finite difference approximation)에 의하여 구하였다. 이 때 차분 간격은 변수값의 0.005%로 유연성있게 적용하였다. 이는 변수값의 scale 차가 클에 따라 차분 간격을 고정할 경우 발생될 수 있는 계산상의 부정확도를 보정하기 위한 것이다.

4-2. 정상상태 다중성의 구현

문헌으로부터 발췌한 14개의 예제에 대하여 모사를 행한 결과 몇몇 예제에 대하여 다중해가 존재함을 확인할 수 있었다. 다중해는 열역학적 비이상성이 큰 문제를 포함하여 비교적 비이상성이 작은 문제에 대하여서 존재하였다. 다중해가 존재한 예제에 대하여 각각의 설계사양과 parametric continuation 변수를 Table 1에 나타내었다. 예로써 예제 2의 경우 reflux rate를 180 (Kmol/h), top product를 5(Kmol/h)로 하여 homotopy continuation에 의하여 이 설계사양에 대한 해를 구한 후 top product를 90(Kmol/h)까지 변화시키면서 연속적으로 parametric continuation 행한 것이다.

Fig. 2와 3은 예제 1에 대하여 homotopy continuation을 +와 -t의 방향으로 행한 것이다. 설계사양에 농도 사양이 포함되지 않은 경우는 다중해를 찾을 수 없었으나 농도의 설계사양이 주어졌을 경우 환류량에 대하여 다중해를 나타내었다. 그러나 탑정제품의 조성은 두개의

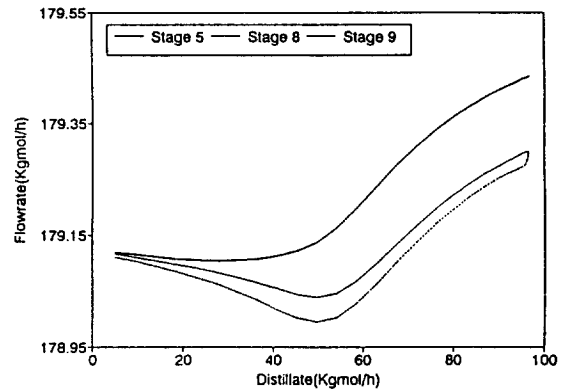


Fig. 4. Steady state multiplicity of internal liquid flow of Ex 2.
(Spec.: $R = 180$ Kgmol/h, $D = 5 \Rightarrow 90$ Kgmol/h)

환류량에 대하여 모두 같은 값을 갖는 것으로 나타났다. 예제 1로부터 homotopy 변수인 t에 대하여 주어진 계의 모든 변수가 다중해를 갖지는 않을 수 있다는 것을 알 수 있었다. 즉, 주어진 농도규정하에서 이를 만족시키는 환류량 등의 유량변수가 여러 개 존재할 수 있으며 이러한 다중해는 에너지 방정식에 대하여 농도규정을 만족시키는 유량이 다수 존재하기 때문인 것으로 여겨진다.

Fig. 4는 예제 2의 조건에 대하여 parametric continuation을 행한 결과이다. 모사결과 탑정과 탑저 제품에서는 다중해가 발견되지 않았으나 내부액상의 유량에 대하여 탑정 유량이 다중해를 갖는 것으로 나타났다. 즉, 동일한 내부 유량을 만족하는 탑정 유량이 2개인 영역이 존재하였다.

이러한 현상은 예제 3과 예제 4에서도 발견할 수 있

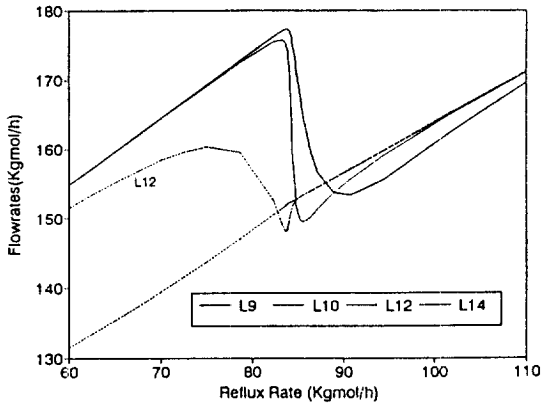


Fig. 5. Steady state multiplicity of internal liquid flow of Ex 3.

(Spec.: $D=50$ Kgmol/h, $R=60 \Rightarrow 100$ Kgmol/h, L_i : Internal liquid flow rate of i -th stage)

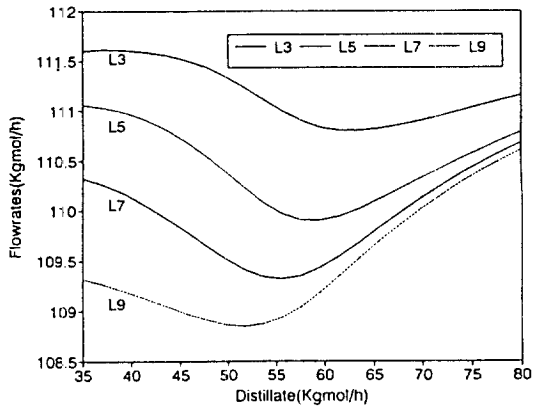


Fig. 6. Steady state multiplicity of internal liquid flow of Ex 4.

(Spec.: $R=112.5$ Kgmol/h, $D=80 \Rightarrow 35$ Kgmol/h, L_i : Internal liquid flow rate of i -th stage)

었다. Fig. 5는 예제 3의 조건에 대하여 parametric continuation을 행한 결과이다. 역시 내부 액상의 유량에 대하여 환류율이 2개 혹은 3개의 다중해를 갖는 것으로 나타났다. Fig. 6 역시 예제 4의 내부 액상 유량에 대하여 탐정 유량이 다중해를 나타내고 있다. 이러한 현상은 열역학적 비이상성에 기인한 것으로 생각되며 주로 내부 유량에 대하여서만 다중해를 나타내었다. 그러나 다중해를 나타내는 문제는 열역학적 비이상성이 비교적 적은 문제에 대하여서도 발견할 수 있었는데 이에 대한 예를 Fig. 7부터 9에 나타내었다. 예제 5는 탄화수소 화합물로 구성된 예제로 열역학적 비이상성이 비교적 적은 문제로 Table 1의 Set 1, 2, 3에 대하여 각각 parametric contin-

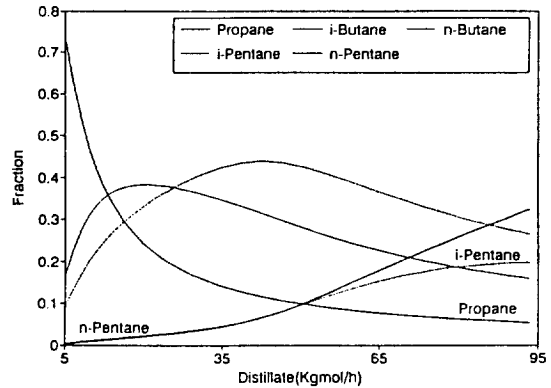


Fig. 7. Steady state multiplicity of Ex 5.

(Spec.: $P=5$ Kgmol/h, $R=200$ Kgmol/h, $D=5 \Rightarrow 95$ Kgmol/h)

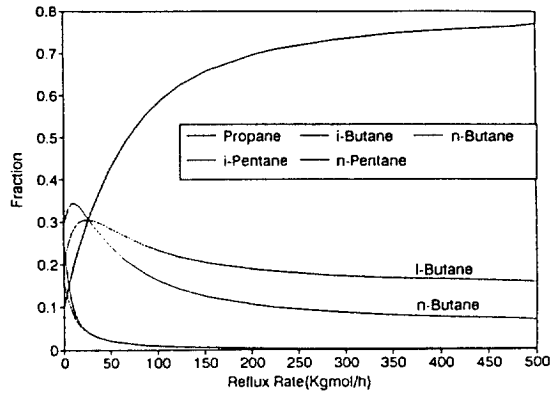


Fig. 8. Steady state multiplicity of Ex 5.

(Spec.: $P=40$ Kgmol/h, $D=5$ Kgmol/h, $R=5 \Rightarrow 500$ Kgmol/h)

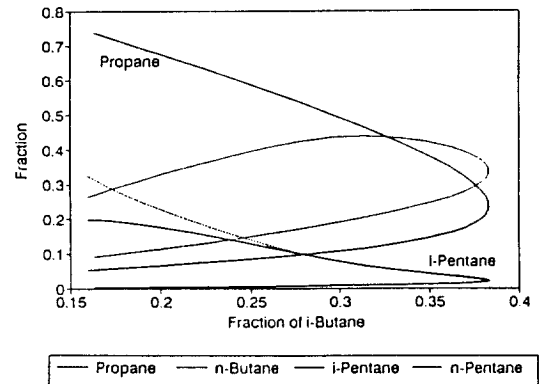


Fig. 9. Steady state multiplicity of Ex 5.

(Spec.: $D=5$ Kgmol/h, $P=40$ Kgmol/h, $D_{(i-Bu)}=0.16 \Rightarrow 0.5$)

uation을 행한 결과를 그림에 나타내었다. Set 1의 조건에 대하여 Fig. 7에서 볼 수 있듯이 탑정농도에 대하여 탑정 유량이 24개의 해를 갖는 영역이 존재하였다. 이러한 결과는 탑정제품의 농도가 설계사양으로 주어질 때 이에 대하여 2개의 탑정 유량을 해로 갖는다는 것을 의미한다. Set 2의 조건에 대한 Fig. 8 역시 탑정제품의 농도에 대하여 환류량이 다중해를 갖는 영역을 발견할 수 있었다. 또한 주어진 사양에 대하여 환류량을 증가 시키더라도 propane의 농도가 0.77 이상은 달성될 수 없는 설계 사양임을 알 수 있다. 이러한 현상은 Fig. 9에서 더욱 쉽게 이해될 수 있다. Set 3의 조건에 대한 parametric continuation 결과를 도시한 Fig. 9에서 볼 수 있듯이 각 농도의 설계사양에 대하여 다중해가 존재함은 물론 i-butane의 농도가 0.38 이상은 달성될 수 없음을 보여주고 있다.

5. 결 론

단일탑에 대한 다중해 구현에 있어 homotopy continuation은 제약조건을 위배하여 더 이상 계산을 진행할 수 없는 경우가 많았으며 적절한 시작점을 재선정하는 것도 쉬운 일은 아니었다. 그러나 parametric continuation의 경우는 제약조건을 위배하지 않고 보다 효율적으로 다중해를 구현할 수 있었다. 이러한 단일 탑내에서의 정상상태 해의 다중성은 간단한 구조의 분리공정 일지라도 주어진 설계사양에 따라 다중해가 존재할 가능성이 있음을 입증할 수 있었다.

다중해는 주로 농도의 설계사양에 대하여 많이 나타났으며 농도의 설계사양은 공정의 조업 유연성을 떨어뜨리는 역할을 하였다. 열역학적 비이상성이 큰 문제의 경우는 주로 내부 유량 변수들에 대하여 다중해를 나타냈으며 다중해를 갖는 공정이라 해서 모든 변수에 대하여 정상상태 해의 다중성이 존재하지는 않았다.

감 사

본 연구는 대림엔지니어링 및 ERC(포항공대 장근수)의 연구비 지원하에 이루어진 결과입니다. 그간 아낌없는 지원을 하여 주신 대림엔지니어링 및 ERC에 감사드립니다.

사용기호

C_i : target value for parametric continuation
 D : distillate flow rate
 F : feed flow rate

K : curvature
 s : arclength
 p : parameter
 p_r : selected parameter for continuation
 T : unit tangent vector
 t : artificial continuation parameter
 w : variable vector = $[x, t]^T$
 x : variable vector
 α : feasibility coefficient
 θ : turning angle
 λ : damping factor

상첨자

k : continuation step index
 id : ideal value

하첨자

i : Newton iteration index

참고문헌

- Allgower, E. and Georg, K.: *SIAM Rev.*, **22**, 28 (1980).
- Rheinboldt, W. C.: Numerical Analysis of Parameterized Nonlinear Equations, John Wiley & Sons Inc., New York (1986).
- Seydel, R. and Hlavacek, V.: *Chem. Eng. Sci.*, **42** (6), 1281 (1987).
- Den Heijer, C. and Rheinboldt, W. C.: *SIAM J. Numer. Anal.*, **18**, 925 (1981).
- Rose, A., Sweeny, R. F. and Schrodt, V. N.: *Ind. Eng. Chem.*, **50**(5), 737 (1958).
- Ellis, M. F., Koshy, R., Mijares, G., Gomez-Munoz, A. and Holland, C. D.: *Comput. Chem. Engng.*, **10** (5), 433 (1986).
- Georg, K.: Proceedings of NATO Advanced Research Institute on Homotopy Methods and Convergence, Plenum Press, New York, 145 (1980).
- Davidenko, D.: *Dokl. Akad. Nauk USSR*, **88**, 601 (1953).
- Wayburn, T. L. and Seader, J. D.: "Solution Systems of Interlinked Distillation Columns by Differential Homotopy Continuation Methods", Foundations of Computer-aided Chemical Process Design (1983).
- Rion, W. L. and Brunt, V. V.: *Comput. Chem. Engng.*, **14**, 889 (1990).
- Wayburn T. L.: "A Review of Continuation Methods and Their Application to Separation Prob-

- lems", in CAST Newsletter, Summer(1989).
12. Seader, J. D.: "Recent Developments in Methods for Finding All Solutions to General Systems of Nonlinear Equations", in Proc. of Conf. on Foundations of Computer Aided Process Design(1989).
 13. Choi, S. H.: Ph. D. Dissertation, Univ. of Missouri-Rolla(1990).
 14. Rheinboldt, W. C. and Burkardt, J. V.: *ACM Trans. Math. Soft.*, **9**(2), 215(1983).
 15. Watson, L. T., Billup, S. C. and Morgan, A. P.: *ACM Trans. Math. Soft.*, **13**, 281(1987).
 16. Shacham, M.: "Recent Developments in Solution Techniques for Systems of Nonlinear Equations", in Proc. of Conf. on Foundations of Computer Aided Process Design(1984).
 17. Prausnitz, J. M., Anderson, T. F., Grens, E. A., Eckert, C. A., Hsieh, R. and O'Connell, J. P.: Computer Calculation for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibrium, Prentice-Hall, Inc., New Jersey(1980).
 18. Edmister, W. C. and Lee, B. I.: "Applied Hydrocarbon Thermodynamics", Gulf Publishing(1984).
 19. Naka, Y., Araki, M. and Takamatsu, T.: *Ind. Chem. Engng.*, **19**, 137(1979).
 20. Block, M. and Hegner, B.: *AIChE J.*, **22**, 582(1976).
 21. 한경택, 이강주, 윤인섭, 김화용: *화학공학*, **30**(1), 34(1992).

부 록

예제 5의 모사기 입력 예.

TITLE 'EX5: PARAMETRIC MULTIPLICITY OF HYDROCARBON DISTILLATION'
COMPONENT PRO 103/I-BU 105/N-BU 104/I-PE

107/N-PE 106
PROPERTIES SRK
CONFIG
NSTAGE=13
FEEDS=1, 5
PRODS=1, 1/1, 9/1, 13
STREAM DATA
FEED 1 FLOW=100, TEMP=404, PRES=20.4&
FRAC=0.05 0.15 0.25 0.2 0.35
PRODS 1 FLOW=5 TYPE=2
PRODS 2 FLOW=40 TYPE=3
PRODS 3 FLOW=55 TYPE=1
COLUMN SPEC
PRESS 1, 1, 20.4
DESIGN SPEC
SPEC 5 COLU=1 STAGE=1 TYPE=2
SPEC 50 COLU=1 STAGE=1 TYPE=1
VARI COLU=1 STAGE=1 TYPE=1
VARI COLU=1 STAGE=13 TYPE=1
SIMULATION OPTION
ALGORITHM=1, CORRECTOR=1, DIRECTION
=1, ERR1=1, & ERR2=0.01 STEP=0.3 MXST
=0.3 PRST 0.05
CONTINUATION SPEC 2 TARGET .1
TRACK COLU=1 STAGE 1 TYPE 1
TRACK COLU=1 STAGE 13 TYPE 1
TRACK COLU=1 STAGE 1 TYPE 5 COMP 1
TRACK COLU=1 STAGE 1 TYPE 5 COMP 2
TRACK COLU=1 STAGE 1 TYPE 5 COMP 3
TRACK COLU=1 STAGE 1 TYPE 5 COMP 5
TRACK COLU=1 STAGE 1 TYPE 8
TRACK COLU=1 STAGE 13 TYPE 8
RRATIO 1, 5, 40
END