

화학공정 동적모사에서 발생하는 이산사건의 분류 및 특성

박선용 · 오 민* · 문 일†

연세대학교 화학공학과

*LG엔지니어링

(1995년 10월 18일 접수, 1996년 4월 3일 채택)

The Classification and Characteristics of Discrete Events Arising in Dynamic Simulation of Chemical Processes

Seon Yong Park, Min Oh* and Il Moon†

Department of Chemical Engineering, Yonsei University, Seoul

*LG Engineering, Seoul

(Received 18 October 1995; accepted 3 April 1996)

요 약

시간에 따른 계의 동특성을 파악하고 예측하는 동적모사는 화학공정의 설계, 제어 및 운전을 위해 매우 중요하다. 기존의 동적모사기들은 주로 연속변수들에 대해서만 모사가 가능하였으나, 연속변수를 다룰 수 있는 기능만으로 공정을 모사하는 것은 이산사건으로 인한 공정의 변화를 기술하기 어렵기 때문에 불완전하다. 본 논문에서는 공정을 수학적으로 모델링할 때 일관되게 적용할 수 있도록 화학공정에서 발생하는 이산사건을 체계적으로 분류하였으며 각 유형별로 gPROMS (General PROcesses Modeling and Simulation)라는 동적모사기에서 어떻게 구현되는지 예를 들어 보였다. 이를 기반으로 회분반응 공정에서의 응용을 통해 전체 공정의 운전개시와 운전정지, 공정 진행 중의 이산사건 등의 처리예를 고찰하였다.

Abstract—Dynamic simulation which enables to analyze and predict dynamic behavior of process systems as time varies is very important for the design, control and operation of chemical processes. Current dynamic simulation packages are mainly suitable for handling only continuous variables. However few processes can be fully modeled through existing dynamic simulator mainly due to discrete changes that affect most systems to a great extent. In this paper, we developed the classification of discrete events arising in chemical process control systems for the consistent mathematical modeling. Dynamic simulation examples including all the types of discrete events were solved using gPROMS (General PROcesses Modeling and Simulation). Based on the discrete event handling technique, start-up and shutdown procedures of a batch reaction process were also studied.

Key words: Discrete Events, Dynamic Simulation, Batch Process, Model, Safety

1. 동적모사의 필요성

시간에 따른 대상계의 동특성을 파악하고 예측하는 동적모사(dynamic simulation)는 공정 설계, 제어 및 운전의 분석에서 매우 중요하다. 본 논문에서는 이러한 분석 중 특히 동적모사에서 발생하는 이산적인 변화들을 체계적으로 분류하고 이를 처리하는 방법들을 소개하며 화학공정에서의 응용을 보이고자 한다. 과거 수년간 동적모사는 국내외에서 많은 관심을 끌고 연구가 진행된 분야 중의 하나이다. 기존의 동적모사는 제어기의 튜닝과 같이 공정의 상태가 변화하였을 때 정상상태(steady-state)에서 벗어나는 정도를 시간에 따라 추적하는 연속변수에 대한 변화를 모사하는 정도였으나 최근에는 다양하고 복잡한 계에 대해 발생하는 다양한 이산사건을 모사함으로써 안전도 검색, 조업성 탐색, 비상 자동제어 시스템의 능력분석

등에도 활용하는 단계에 와 있다[1]. 이러한 동적모사는 대상 공정의 동특성을 파악함으로써 설계단계에서 공정을 최적화시키고 공정 운전 효율을 향상시키는 부분뿐만 아니라 다양한 입력값에 대한 동적인 응답을 통해 안전도 검색과 경제적인 운전을 계획하는데도 널리 쓰일 수 있다. 공정이 거대해지고 복잡해질수록 조작에 따른 정량적인 해석은 더욱 중요하게 대두된다. 이러한 동적모사는 위의 응용뿐 아니라 공정 모델을 기반으로 반응이 있는 회분 증류(batch distillation with reaction), 구조 합성(structure synthesis), 오퍼레이터를 훈련시킬 수 있는 조업자 교육 시스템(OTS: Operator Training System) 등으로의 확장[1], 제어 시스템과의 연계, 회분 공정 관리기(batch manager)와의 연계까지 가능하며 이중 조업자 교육 시스템의 경우 많은 공정에서 훈련 시스템이 적용되어 안전도를 높이고 작업 효율과 생산성을 높이는 것으로 나타나 있다[2].

2. 이산변수 처리의 중요성

대부분의 화학공정의 동적모사는 DAEs(Differential Algebraic Equations)로 표현가능하며, 상세한 모사를 위해서 PDAEs(Partial Differential Algebraic Equations)나 일반변수에 대한 적분이 포함된 편미분방정식인 IPDAEs(Integral Partial Differential Algebraic Equations)로 확장하여 표현된다[3]. 대신 화학공정에서 쓰이는 방정식의 개수가 수 천개에서 수 만개에 이르므로 이를 푸는 방법적인 접근이 오래 전부터 연구되었으며 크게 순차적 모듈법(sequential modular method)과 방정식 지향법(equation-oriented method)의 두 가지로 나누어 볼 수 있다. 기존의 동적모사기들은 대부분 순차적 모듈법(sequential modular method)을 사용하며, 근래에는 컴퓨터 환경이 좋아짐에 따라 방정식 지향법을 많이 적용하기 시작하였으며 방정식 지향법이라도 순차적 모듈법을 혼용하여 구현하는 경우가 최근의 추세이다. 방정식 지향법 솔버(solver)의 경우 화학공정의 모델링에서 흔히 나타나는 성긴 행렬(sparse matrix)을 다루는 기능이 뛰어나야 하며, 해의 수렴속도가 빨라야 한다.

공정을 방정식이나 블록형태로 기술하는 정의 언어형태의 화학공정 모사기가 지난 수 십년간 연속, 이산 혹은 연속/이산변수가 혼합된 시스템에 대해 계속적으로 연구되어 왔다[2]. SpeedUp, Diva, Ascend, Hysis 등 기존의 대표적 동적모사기들도 시간에 따라 연속적으로 변화하는 값들을 다룰 수 있지만 이산변수가 포함된 공정을 다루는데 있어서는 많은 한계가 있다. 범용 모사기의 특성에 대한 비교는 Table 1과 같다. 특히 회분공정의 경우 운전개시(start-up), 운전정지(shutdown) 등과 같은 장치들의 켜고 끄, 물성의 변화 등이 매우 급격히 일어나게 되며 이를 다루는데 기존의 모사기들이 제공하는 기능은 매우 미약했다. 단지 상태에 따른 조건문의 기능만을 제공함으로써 실제 밸브 여닫음, 펌프 움직임, 상변화 등을 수반하는 공정을 효율적으로 모사하는데는 많은 어려움이 따른다. 따라서 이러한 회분공정을 표현하기 위해서는 새로운 도구가 필요하며 이산변수를 처리하고 계산하는데 매우 뛰어난 기능을 제공하는 동적모사 기술이 절실히 요구된다.

3. 화학공정 이산사건의 분류

화학공정에서 일어나는 이산사건은 상변화, 폭발, 제장의 논리/구조 등과 같이 계 자체의 물리, 화학적인 성질에 의해 외부의 간섭없이 일어나는 본질적 이산사건(intrinsic discrete events)과 장치의 개폐, 제어의 변화 등과 같이 조업자나 간섭에 의해 외부에서 계에 대해 임의의 변화를 가하여 계 자체의 물리, 화학적인 성질과 무관하게 일어나는 비본질적 이산사건(extrinsic discrete events)의 두 가지로 크게 나눌 수 있다. 이를 좀더 세분하여 정리하면 Table 2와 같다. 본질적 이산사건은 물리-화학적인 기준에서 본다면 3가지로[6] 분류

(Fig. 1)할 수 있으며, 비본질적 이산사건의 경우 시스템의 수학적 구조에 미치는 형태에 따라 세 가지로 분류할 수 있다.

본질적 이산사건의 첫 번째인 가역(reversible) 이산사건은 두 상태가 하나의 조건에 의해 다른 상태를 가지지 않고 서로 전환되는 관계로 탱크에서 물이 흘러 넘치는 경우, 증류탑내의 흐름독 밖으로 유체가 흐르는 경우 등이 대표적인 예이다. 이 경우 하나의 조건에 의해 상태가 결정되게 된다.

비가역(irreversible) 이산사건은 한 상태에서 다른 상태로 일방적으로 상태가 진행되어 이전의 상태로 되돌아올 수가 없는 경우의 이산사건을 의미한다. 대표적인 예로서는 탱크내에서 가스의 방출, 순간적인 폭발 등을 들 수 있다.

비대칭(asymmetric) 이산사건은 상태간의 전이가 이루어지고 그 과정이 대칭적이지 않고 다른 상태를 거쳐야 하는 경우이다. 대표적인 예로서는 안전밸브에 의한 기체의 방출, 온도조절장치, 스프링클러 등을 들 수 있다.

비본질적 이산사건의 구분은 외부에서 가해지는 조작이 대상계를 기술하는 수학모델에 미치는 변화에 따라 구분한 것이다. 화학공정 모델링에서 얻어지는 DAEs는 다음과 같은 형태로 표현이 가능하다[5].

$$f(x, x', y, u, t) = 0$$

여기서 x 는 상태변수(state variables), u 는 입력변수(input variables), y 는 출력변수(output variables), t 는 시간(time)을 의미하며, x' 는 x 의 시간에 대한 미분값을 의미한다. u 의 이산변화에 해당하는 것이 입력변수(input variables) 이산사건, x, x' 의 이산변화에 해당하는 것이 상태변수(state variables) 이산사건, f 식 자체의 구조 변화에 해당하는 이산변화를 방정식(equations) 이산사건으로 분류하였다. 기존의 동적 모사기는 u 의 이산변화를 처리할 수 있었으나, 내부 상태의 변화에 의한 x, x' 의 변화, 혹은 f 식 자체의 변화와 같은 이산사

Table 2. Classification of discrete events

Classification with respect to cause of event	Details
Intrinsic discrete events	Reversible
	Irreversible
	Asymmetric
Extrinsic discrete events	Input vars
	State vars
	Equations

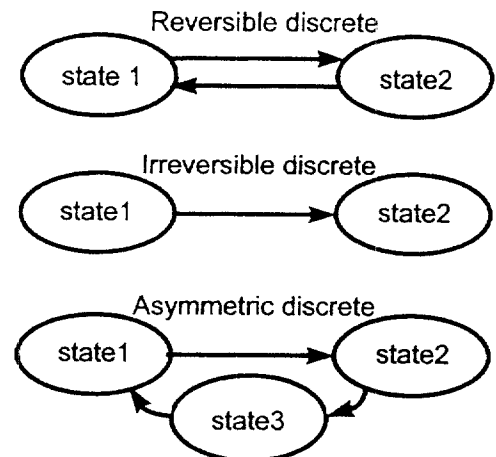


Fig. 1. Types of intrinsic discrete events.

Table 1. Relative characteristics of general dynamic simulators[4]

	Modeling tools	Output results	Dynamic solution
Ascend (CMU, USA)	equation / unit based	interactive graphics	simultaneous solution
DIVA (Stuttgart, FRG)	unit based / graphic	interactive graphics	simultaneous solution
SpeedUp (Imperial, GB)	equation / unit based	batch graphics / report generator	simultaneous solution
gPROMS (Imperial, GB)	equation / unit based	batch graphics / report generator	simultaneous solution

```

IF Liquid_Height > Weir_Height THEN
  Total_Flow_Out = 1.84*Bulk_Density*Weir_Length
    *ABS(Liquid_Height - Weir_Height)^1.5 ;
ELSE
  Total_Flow_Out = 0 ;
END

```

Fig. 2. An example of the reversible discrete event(model).

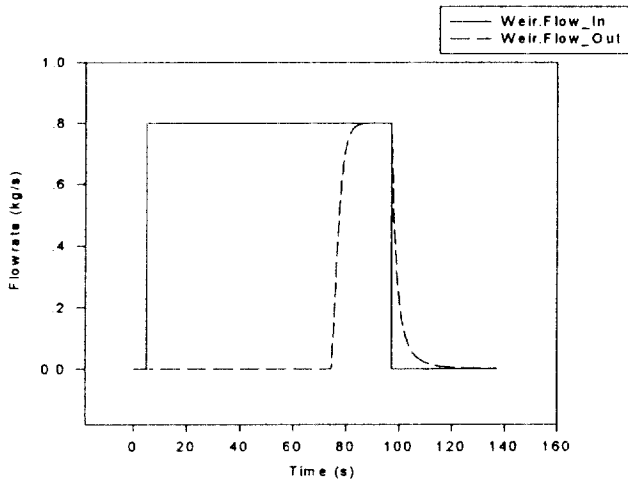


Fig. 3. An example of the reversible discrete event(result).

건을 다루기는 어렵거나 불가능하였다.

이러한 시스템과 관련없이 외부의 조작에 의해 발생하는 비본질적인 이산사건(extrinsic discrete events)은 주로 회분공정과 같이 중간 조작이 많이 가해지는 공정에서 특히 많이 나타난다. 첫 번째 경우인 입력변수 이산사건의 경우 도입밸브의 변화에 따른 유량의 변화, 제어 루프에서 입력값의 변화 등과 같은 예로써 수학적으로는 어떤 함수의 입력변수, 즉 독립변수의 값을 바꾸어주는 것을 의미한다. 이러한 독립변수를 바꾸어 주는 이산사건의 경우 기존의 동적모사기들도 충분히 처리 가능하다. 그러나 액위, 압력, 온도 등의 시간에 따른 상태변수의 값들을 임의로 사용자가 바꾸어 주는 두 번째 상태변수 이산사건의 경우 기존의 동적모사기로는 이러한 이산사건을 처리하기가 매우 어렵거나 불가능하다. 세 번째 방정식 이산사건의 경우는 플래시 드럼(flash drum)과 같이 기체/액체 상에서 순간적으로 한 상으로만 변환 때 방정식의 형태뿐 아니라 숫자까지도 변화하게 되며, 이러한 경우 기존의 동적모사기로는 처리가 거의 불가능하다.

4. 이산사건의 예

위에서 고찰한 이산사건의 분류를 gPROMS라는 동적모사기를 이용하여 구체적인 예를 들어 고찰해 보자. 먼저 본질적 이산사건 중 첫 번째 경우에 해당하는 가역 이산사건으로서 증류탑내의 흐름дук에서 액체가 흐름дук을 기준으로 넘치거나 넘치지 않는 경우 다음과 같이 나타낼 수 있다(Fig. 2, 3). 이 경우는 흐름дук의 높이에 대한 액위가 조건변수가 되어 흐름을 생기거나 생기지 않도록 한다.

두 번째 비가역 이산사건의 경우로서 폭발밸브의 예이다. 어느 한 계 이상의 압력이 도입되면 밸브는 폭발을 하여 외부 압력과 같게

```

CASE Disc_Status OF
  WHEN Bursting :
    Relief_Flow = Disc_Constant*Pressure
      /SQRT(Temp*273.15);
  WHEN Intacting :
    Relief_Flow = 0;
  SWITCH TO Bursting IF Pressure >= Burst_Pressure;
END

```

Fig. 4. An example of the irreversible discrete event(model).

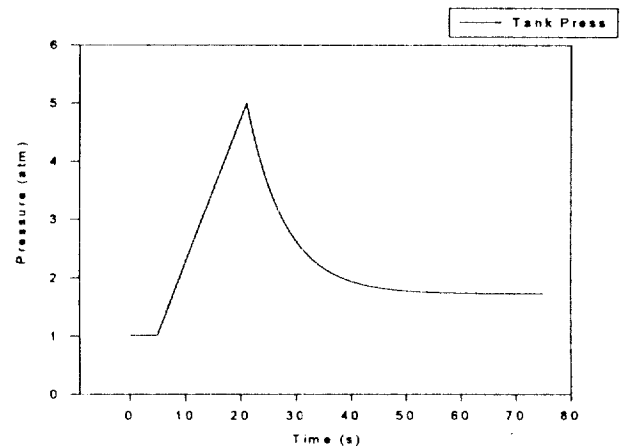


Fig. 5. An example of the irreversible discrete event(result).

```

CASE Valve_Status OF
  WHEN Closed :
    Relief_Flow = 0;
    SWITCH TO Open IF Pressure >= Set_Pressure;
  WHEN Open :
    SWITCH TO Closed IF Pressure <= Reset_Pressure;
END

```

Fig. 6. An example of the asymmetric discrete event(model).

된다(Fig. 5). 이 경우 압력이 조건변수가 되며 압력이 일정 압력보다 높을 경우 폭발흐름이 형성되며 이전의 상태로 되돌아 올 수 없게 된다.

마지막 세 번째 비대칭적 이산사건은 안전밸브가 압력이 어느 이상 증가하면 기체를 배출함으로써 용기내의 압력이 줄고 기준 이하로 내려오면 밸브가 닫혀서 다시 내부 압력이 증가하게 되는 경우이다(Fig. 6, 7).

비본질적 이산사건의 경우 입력변수, 상태변수, 방정식 이산사건의 세 가지 경우에 대한 처리가 가능하여야 한다.

첫 번째 계 외부의 조작에 의해 입력변수가 바뀌는 입력변수(input variables) 이산사건의 경우 RESET문을 이용하여 처리할 수 있다. Fig. 8은 입력변수 이산사건의 예이다.

제어기의 경우 적분값에 해당하는 변수를 새롭게 재설정시켜 주어야 하는 경우와 같이 상태변수의 값을 변경시켜 주어야 하는 경우가 생긴다. 이러한 상태변수 이산사건을 처리할 때 이용할 수 있는

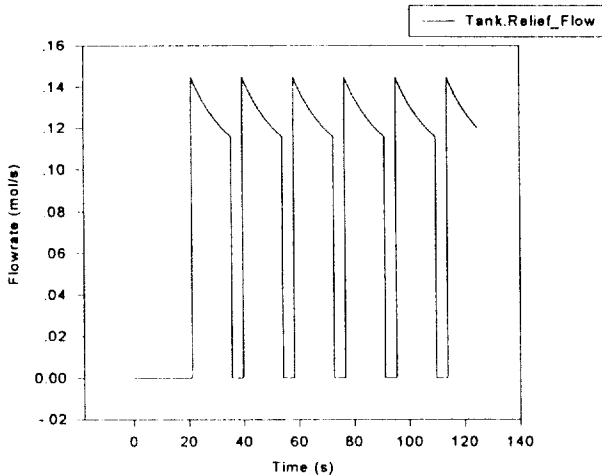


Fig. 7. An example of the asymmetric discrete event(result).

```

RESET # open a manual valve
  Valve.Status := 1.0 ;
END # reset

```

Fig. 8. An example of input variable change.

것이 REINITIAL문이며 문 형태는 Fig. 9와 같다.

외부조작에 의해 수식이 바뀌어 계산될 필요가 있는 경우 방정식 자체를 바꾸어야 되는 방정식 이산사건이 발생한다. 이러한 이산사건을 처리할 수 있는 것이 REPLACE문이다. Fig. 10은 방정식 이산사건의 예이며 제어기의 방정식이 새롭게 설정되어 계산되는 예이다.

이상에서 이산사건의 분류에 대한 예를 고찰하였다.

5. 회분공정

회분공정은 일반적으로 연속공정보다 활용도가 다양하고 초기 설비투자비가 적게 드는 특징을 갖고 있다. 연속공정을 표시하는데 순서도(flowsheet)가 전통적으로 사용되었지만 회분공정에서는 상태-작업-네트워크(state-task-network)를 사용한다[7]. 상태(state)란 공정이 진행되면서 기본원료, 중간물, 생산물까지의 과정 중의 형태를 의미하며, 작업(task)이란 상태와 상태간의 전이를 위해 상태에 조작(operation)을 가하는 것을 의미한다.

회분공정의 경우 연속공정에 비해 동특성이 크며 다양한 이산사건이 발생하게 된다. 본질적인 이산사건뿐 아니라 정상조업, 운전개시(start-up)와 운전정지(shutdown)같은 조작에서 비본질적 이산사건이 연속공정에 비해 다양한 형태로 발생하게 되며 이를 처리하기 위해 앞에서 기술한 이산사건의 분류와 처리방법을 적용한 예를 제시한다. 이러한 이산사건이 포함된 모사를 위해 gPROMS를 도입하였으며, 회분반응공정의 예를 모사함으로써 앞에서 분류한 이산사건을 쉽게 처리할 수 있음을 예시한다.

5-1. 회분반응공정의 모델링

아래에 대표적인 회분반응공정을 제시하고 이를 모델링함으로써 실제 회분공정에서 발생하는 이산사건에 대한 고찰을 하였다. 반응이 진행되는 동안 냉각수로 반응기의 온도를 제어하게 하였다. 장치는 도입탱크, 도입밸브, 반응기, 냉각 재킷, 안전밸브, 저장탱크로 구

```

REINITIAL
  PI_Controller.Integral_Error
WITH
  PI_Controller.Integral_Error = 0;
END # reinitia

```

Fig. 9. An example of state variable change.

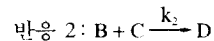
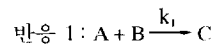
```

REPLACE
  Controller.Error
WITH
  Controller.Bias := OLD(Controller.Bias);
END # replace

```

Fig. 10. An example of equation change.

성되었으며 반응 원료의 도입과 각 반응단계에서의 조작, 반응온도 제어, 기상의 압력이 높아지는 것을 안전밸브를 통한 제어, 생산물의 방출에 이르는 과정 중에서 나타나는 공정의 이산사건을 모델링하고 처리하는 것을 보인다.



반응기모델을 간단히 하기 위해서 기계적인 에너지 손실은 무시하기로 한다. 회분반응에 쓰이는 일반적인 물질, 에너지 수지는 다음과 같다.

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j F_j' x_{ij} - x_i F'^{out} + V \sum_k r_k v_{ik} \quad (1)$$

$$\frac{dU}{dt} = \sum_j F_j' h_j - h F'^{out} + V \sum_k r_k (-\Delta H_r)_k + Q \quad (2)$$

$$r_k = k_k \prod_i c_i^{a_{ik}} \quad (3)$$

$$k = k_0 e^{\frac{-E}{RT}} \quad (4)$$

N_i : 성분 i의 물질량 h : 물 엔탈피

V : 혼합 부피 $(-\Delta H_r)$: 반응열

V_{ik} : 양론계수 r_k : 반응속도

U : 내부에너지 k : 반응계수

반응기 모델링에 주로 쓰인 가정은 다음과 같다.

- 반응은 완전혼합이다.
- 반응 중 냉각 재킷과 반응기 내부와의 총괄열전달계수는 일정하다.
- 반응이 진행되는 동안 혼합물의 밀도는 평균밀도를 유지한다.
- 반응물의 열용량은 일정하다.
- 반응물, 반응혼합물, 세척용 물질의 열용량은 같다.
- 반응모델은 연계, 복합반응, 발열반응이다.
- 반응은 완전혼합하고 단일액상 반응이다.
- 반응기내의 압력 변화범위는 반응에 영향을 미치지 않는다.

Fig. 11은 반응기에 대한 그림이다. 이 회분반응기의 실제적인 물

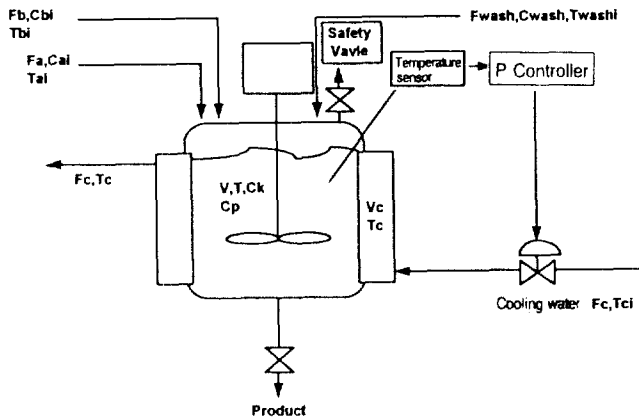


Fig. 11. A batch reactor.

질, 에너지수지식은 다음과 같다.

$$\frac{dV}{dt} = F_a + F_b + F_{wash} - F_{out} \quad (5)$$

$$\frac{dC_a}{dt} = \frac{F_a * (C_{ai} - C_a)}{V} - k_1 * C_a * C_b - \frac{F_{out} * C_a}{V} \quad (6)$$

$$\frac{dC_b}{dt} = \frac{F_b * (C_{bi} - C_b)}{V} - k_1 * C_a * C_b - k_2 * C_b * C_c - \frac{F_{out} * C_b}{V} \quad (7)$$

$$\frac{dC_c}{dt} = k_1 * C_a * C_b - k_2 * C_b * C_c - \frac{F_{out} * C_c}{V} \quad (8)$$

$$\frac{dC_d}{dt} = k_2 * C_b * C_c - \frac{F_{out} * C_d}{V} \quad (9)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_a * (T_{ai} - T)}{V} + \frac{F_b * (T_{bi} - T)}{V} + \frac{F_{wash} * (T_{wash} - T)}{V} + \frac{(-\Delta H_{r1}) * k_1 * C_a * C_b}{\rho * C_p} + \frac{(-\Delta H_{r2}) * k_2 * C_b * C_c}{\rho * C_p} - \frac{U * A * (T - T_c)}{V * \rho * C_p} \quad (10)$$

$$k_1 = k_{01} * e^{\frac{-E_1}{R * (T + 273.15)}} \quad (11)$$

$$k_2 = k_{02} * e^{\frac{-E_2}{R * (T + 273.15)}} \quad (12)$$

5-2. 냉각재킷 모델

냉각재킷으로 들어오는 냉각수의 양은 비례제어기로 제어된다. 이 제어기는 온도가 제어 영역에 들어올 때까지 열려 있다가 온도가 제어영역에 들어오면 제어를 시작한다. 이러한 기능을 위해 모사에서 ACTIVE와 INACTIVE 두 가지 상태변수를 설정하였다. 만약 제어가 OFF 상태이면 유입되는 냉각수는 없으며 제어가 ON이면 일정한 냉각수가 유입된다. 이때 에너지 수지식은 아래와 같다.

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{U * A * (T - T_c)}{V_c * \rho_c * C_{p,c}} - \frac{F_c * (T_c - T_{ci})}{V_c} \quad (13)$$

5-3. 안전밸브 모델

안전밸브는 반응물이 반응을 하여 기상의 압력이 높아져서 한계 압력이상이 될 때 열려 기체를 외부로 방출하게 된다. 기상은 이상 기체방정식을 따른다고 가정하였고, 액상은 이상액체로 가정하였다. 밸브는 230 kPa에서 열리고 200 kPa에서 닫힌다. 밸브에 관련된 수

Table 3. Basic data for the batch reactor example

ΔH_{r1} : -9.86×10^7 J/kmol	k_{01} : 0.0744 m ³ /skgmol
ΔH_{r2} : 11.23×10^7 J/kmol	k_{02} : 0.0892 m ³ /skgmol
E_1 : 1.182×10^7 J/kmol	Average mixing density : 19.2 kgmol/m ³
E_2 : 1.573×10^7 J/kmol	Average mixing heat capacity : 1.85×10^3 J/kgmolC

Table 4. Values of parameters

A : 10.8 m ²	C_p : 4184 J/kgC
ρ_c : 1000 kg/m ³	U : 7100 J/s m ² C
V_c : 1.82 m ³	C_{m} : 2.88 kgmol/m ³
C_{bi} : 2.54 kgmol/m ³	

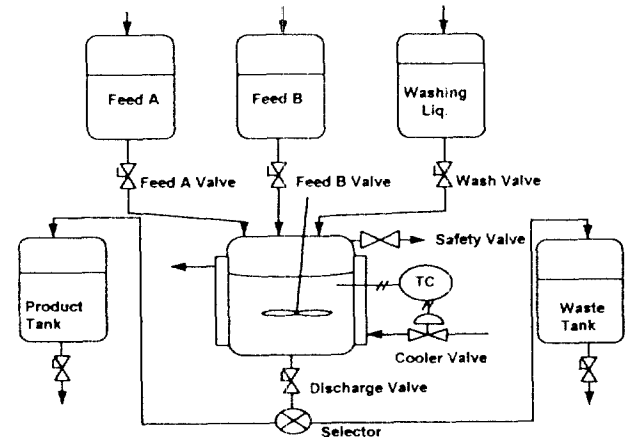


Fig. 12. A diagram of the batch process.

식은 아래와 같다.

$$\frac{dN_{vap}}{dt} = F_{vapin} - F_{Safe flow} \quad (14)$$

$$\Delta P = P^{Equi} - P^{vap} \quad (15)$$

$$F_{vapin} = f(\Delta P) \quad (16)$$

$$P^{vap} = \frac{N_{vap} * R * T}{V} \quad (17)$$

$$P^{Equi} = \sum_i x_i * P_i^{sat} \quad (18)$$

$$P_i^{sat} = a_i - \frac{b_i}{(T + c_i)} \quad (19)$$

$$F_{Safe flow} = f(P^{vap}, T) \quad (20)$$

5-4. 저장탱크 모델

저장탱크에서는 화학반응이 일어나지 않으므로 간단하게 모델링이 될 수 있다. 단 더욱 간단한 모델링을 위해서 다음과 같은 가정들이 쓰였다.

- 외부와의 열 교환이 없다.
- 펌프나 파이프 등 장치에 의한 기계적 에너지 출입을 무시하였다.

위의 가정에 따라 저장탱크에서의 물질수지와 에너지 수지는 간단하게 기술할 수 있다.

```

TASK Shut_Down_Batch_Process
PARAMETER
  Plant      AS MODEL Plant_FlowSheet
SCHEDULE
  SEQUENCE
    OpenLoop(Valve IS Plant.CoolerValve);
    # Product Flow
    SelectProductFlow(Splitter IS Plant.ChargeSplitter);
    ValveOn(Valve IS Plant.ChargeValve);
    CONTINUE UNTIL Plant.Batch.V < 0.01
    ValveOff(Valve IS Plant.ChargeValve);

    # Wash
    ValveOn(Valve IS Plant.WashValve);
    CONTINUE UNTIL Plant.Batch.V > 7
    ValveOff(Valve IS Plant.WashValve);
    CONTINUE FOR 30
    SelectWasteFlow(Splitter IS Plant.ChargeSplitter);
    ValveOn(Valve IS Plant.ChargeValve);
    CONTINUE UNTIL Plant.Batch.V < 0.01
    ValveOff(Valve IS Plant.ChargeValve);
  END # Sequence
END # Shut Down Task

```

Fig. 13. An example of a shutdown task.

```

SCHEDULE
  SEQUENCE
    CONTINUE FOR 200
    Start_Up_Batch_Process(Plant IS Plant);
    CONTINUE UNTIL Plant.Batch.Cb < 0.001
    Shut_Down_Batch_Process(Plant IS Plant);
    CONTINUE FOR 200
  END # SEQUENCE

```

Fig. 14. An example of a process schedule.

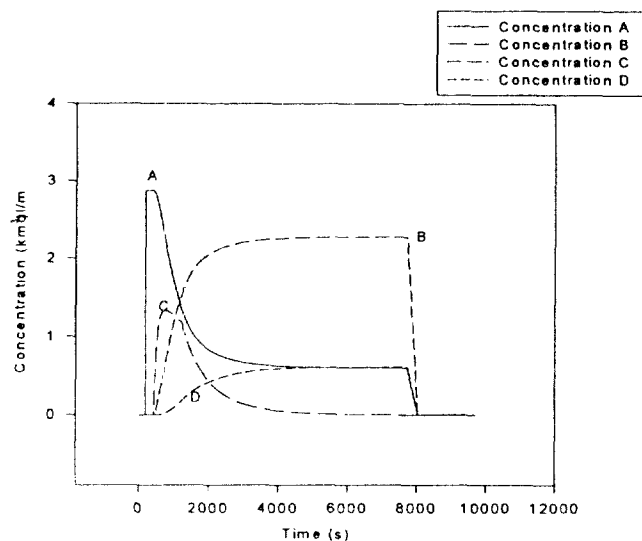


Fig. 15. Change of molar concentration in one batch process.

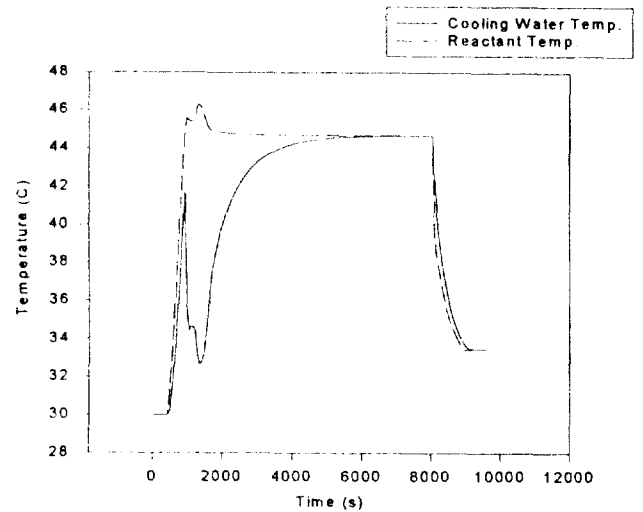


Fig. 16. Temperature change of reactants and cooling water in reaction.

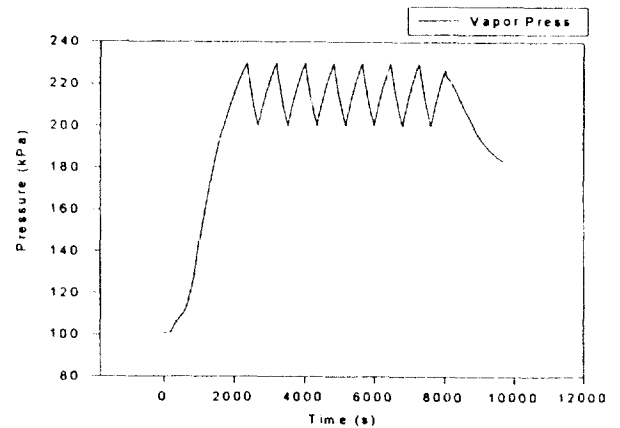


Fig. 17. Change of vapor pressure in reaction.

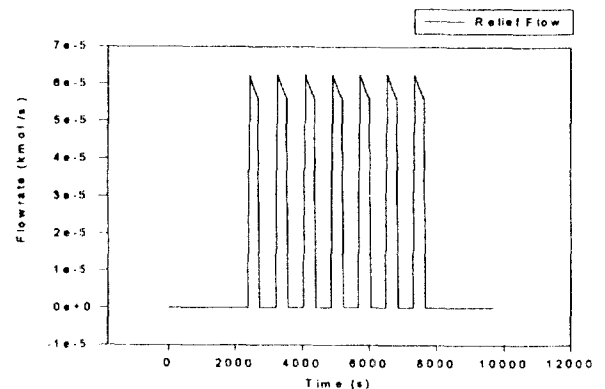


Fig. 18. A relief flowrate through safety valve.

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j^{n_i} F_j^{input} x_{ij} - x_i F^{output} \quad (21)$$

$$\frac{dH}{dt} = \sum_j^{n_i} F_j^{input} h_j - h F^{output} \quad (22)$$

6. 모사(Simulation)

실제 모사에 쓰인 전체 공정은 Fig. 12와 같다. 공정은 물질 A와 B를 공급하는 2개의 공급탱크와 세척액을 공급하는 탱크 1개, 안전 밸브가 달린 반응기 1개, 생산물을 담는 탱크 1개, 세척액을 버리는 탱크 1개로 구성되어 있으며 반응기와 탱크를 연결하는 사이에는 밸브가 있고, 특히 반응물이 배출되는 곳에는 선택기(selector)가 있어서 내용물에 따라 생산물 탱크나 폐기물 탱크로 서로 전환하게 되어 있다. 아래의 회분 공정의 반응은 크게 반응을 시작하는 운전개시(start-up)와 반응물을 배출하는 운전정지(shutdown) 작업으로 나눌 수 있으며 각 작업은 다음과 같은 세부적인 작업(task)을 거쳐 진행된다. Fig. 13은 운전정지 과정의 입력과일 예를 나타낸 것이다.

6-1. 운전개시(start-up)

- (1) A의 도입 밸브를 연다.
- (2) 부피가 일정량에 도달할 때까지 기다렸다가 밸브를 닫는다.
- (3) 동시에 B의 도입밸브를 열고, 제어기를 자동전환시킨다
- (4) 반응기가 찰 때까지 기다렸다가 B의 밸브를 닫는다.

6-2. 운전정지(shutdown)

- (1) 제어기를 수동전환시킨다.
- (2) 선택기(selector)를 생산물 탱크쪽으로 한다.
- (3) 배출밸브를 연다.
- (4) 내용물이 모두 배출될 때까지 기다렸다가 배출밸브를 닫는다.
- (5) 세척밸브를 연다.
- (6) 부피가 일정량까지 도달할 때까지 기다렸다가 세척밸브를 닫는다.
- (7) 내부를 세척한다.
- (8) 선택기를 폐기물 탱크쪽으로 한다.
- (9) 배출밸브를 연다.
- (10) 내용물이 모두 나올 때까지 기다렸다가 배출밸브를 닫는다.

운전개시와 운전정지가 위와 같이 나타내면 전체공정은 Fig. 14와 같이 나타낼 수 있다. Fig. 15는 A반응물이 들어온 후 B가 들어와서 반응이 이루어지면서 반응물의 몰농도변화를 보인 것이다. Fig. 16은 반응제어온도인 45°C로 제어하기 위해 반응물의 온도가 45°C보다 올라가면 냉각수의 유입량이 증가하고 그에 따른 냉각재킷온도가 변화되는 것을 1회 회분반응에서 나타낸 것이다. 초기 발열반응이 비교적 커서 냉각수의 도입이 컸다가 반응이 진행됨에 따라 서서히 감소한다. Fig. 17은 반응이 진행되면서 기상의 압력이 높아짐에 따라 일정압력이상인 경우 안전밸브가 열려 기상의 압력을 낮추는 예를 1회 회분공정에서 보았다. 각 상태의 전이가 이산적으로 분산되어 있음을 알 수 있으며 안전밸브를 나가는 배출물의 유량은 Fig. 18에 나와 있다.

Fig. 18에서 안전밸브가 작동하는 것은 조업상태가 정상운전이 아닌 경우의 예이기 때문이다. 이상의 결과에서 시간에 따른 변화를

통해 회분반응공정의 시간에 따른 동특성과 설정된 이산사건에 대한 결과를 통해 대상 공정 내부에서 발생하는 이산사건을 효율적으로 처리할 수 있음을 알 수 있다.

7. 결 론

회분공정의 모사는 연속공정에 비해 이산성이 매우 크다. 그러나 기존의 모사기들은 이산사건을 다룰 수 있는 기능이 미약해서 회분공정의 동특성을 완전하게 기술하는데 많은 어려움이 있었다. 또한 공정에서 발생하는 이산사건에 대한 분류가 정확하지 않음으로 인하여 사용자나 개발자가 이러한 이산사건을 기술하거나 처리방법을 개발하는데 일관성이 결여되어 있었다. 본 논문에서는 각 이산사건의 형태를 본질적, 비본질적인 요인들을 중심으로 세분하여 정리 제시함으로써 공정에서 발생하는 이산사건에 대한 이해를 체계화하였으며, 각 경우에 따른 공정에서의 실제적인 예를 보였다. 또한 회분반응기 모델을 통해 전체 공정에 적용하는 방법을 제시하였고 그에 따른 모사결과를 보였다.

지금까지 화학공정에서 나타나는 이산사건에 대한 예를 들어 그 형태를 예시하였고 살펴본 바와 같이 다양한 이산사건에 대해 모사가 가능함을 고찰하였다. 동적모사를 통해 물리 화학적인 계의 기동현상을 이해할 수 있으며, 폭발, 누수 등과 같은 공정의 이산사건들의 체계적인 구분과 모사를 통해 대상계에 대한 극한치의 예측, 안전도 검색 등에 적용할 수 있음을 알 수 있다. 특히 기존의 동적 모사기로는 구현이 어려운 공정의 운전개시와 운전정지 과정, 모델안에서의 이산적 기동의 모사법이 제시되었으며, 전체 공정을 일관된 체계로서 구축할 수 있음을 보였다.

감 사

본 연구는 과학재단 목석기초연구의 연구비 지원에 의하여 이루어진 것으로서, 연구비를 지원해 주신 과학재단에 감사드립니다.

참고문헌

1. Wozny, G. and Jeromin, L.: *Int. Chem. Eng.*, **34**(2), 159(1994).
2. 박선용, 문 일: 화학공업과 기술, **12**(6), 22(1994).
3. Oh, M. and Pantelides, C.C.: *Centre for Process Systems Engineering*, Imperial College, London(1993).
4. Marquardt, W.: *Proceedings CPC IV*, Texas, USA(1991).
5. Jarvis, R.B.: Ph.D. Dissertation, Centre for Process Systems Engineering, Imperial College, London(1993).
6. Pantelides, C.C. and Barton, P.I.: Ph.D. Dissertation, "Centre for Process Systems Engineering", Imperial College, London(1993).
7. Watzdorf, R.V.: Technical Report, Centre for Process Systems Engineering, Imperial College, London(1992).