

氣液平衡 寫像關係를 使用한 蒸溜塔의 解析

南宮 寬* 李成熙* 權英秀** 李相傑**

Distillation Column Analysis using Vapor-Liquid Equilibrium Mapping Data

*Shik Namkoong, *Sung Hee Lee **Young Soo Kwon, **Sang Keol Lee

*Dept. of Chem. Eng., College of Eng., Seoul National Univ.

**Korea Engineering Consultants Corp.

Abstract

Two simultaneous solution type methods are proposed and compared, which solve distillation column analysis problem using the composition mapping relation as vapor-liquid equilibrium data, and they differ in linearization process of the component balance equation.

The one is "Strong interdependency method", and the other is "Weak interdependency method."

By computed results for the upper column of an air separation tower with some variety of number of trays, it is proved that the latter is much more effective one than the former in points of convergency, computing time, and simplicity.

1. 緒 論

지금까지 2 성분系 이상의 多成分系 蒸溜塔의 分析方法으로는 Plate to plate calculation 형식인 Lewis-Matheson method^{7,8,10)} Thiele-Gedde's method^{10,11)} O-method 등의 방법과 Simultaneous solution 형식인 Amundson's matrix method¹⁾, Ball's relaxation method, Naphthali's method, Wang's tridiagonal matrix method²⁾ 등의 여러 방법이 發表되었으나, 이 모든 방법이 氣液平衡 data 로써 溫度를 parameter 로한 氣液平衡 係數나 相對揮發度를 使用하는 방법이다.

여기서는 3 성분系의 蒸溜塔 解析에 氣液平衡 data 로써 氣液平衡 濃度를 직접 mapping 시킨 Triangle equilibrium diagram 을 使用하는 strong 과 weak 2 가지 方法을 提示하고 O₂-Ar-N₂ 3 성분系의 分離인 空氣分離 上部塔 解析을 例로 들어 이 2 가지 方法의 收斂性과 Computing time 을 비교하였다.

*서울工大 化學工學科

**韓國綜合技術開發公社 化工部

2. 平衡 寫像과 그의 數式化

濃度를 mole 分率로 表示할때 各 濃度의 合은 1 이므로 n 성분系의 濃度를 $n-1$ 次元 space E^{n-1} 內의 아래와같이 定義되는 closed subset S^{n-1} 內에 存在하는 $n-1$ 次 vector 로 表示할 수 있다.

$$S^{n-1} = \{x : x_i \geq 0, \sum x_i = 1, x \in E^{n-1}\} \quad (1)$$

n 성분系의 氣相과 液相의 濃度를 各各 $x \in S_x^{n-1}$, $y \in S_y^{n-1}$ 로 表示하면 氣液平衡 關係란 2 個의 subset S_x^{n-1} 과 S_y^{n-1} 사이의 一對 對應關係, 즉 아래와 같은 寫像(mapping), f 을 의미하는 것이다.

$$\left. \begin{aligned} S_x^{n-1} &\xrightarrow{f} S_y^{n-1} \\ \text{또는 } y &= f(x), \text{ for } x \in S_x^{n-1}, y \in S_y^{n-1} \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

예를 들면 2 성분系에서의 f 는 一般的인 $x-y$ diagram 이며, 3 성분系에서의 f 는 Fig. 1 과 같은 Triangle equilibrium diagram 이다. Fig. 1 은 Weishaupt⁹⁾ 에 의해 發表된 O₂-Ar-N₂의 3 성분系의 1000 mmHg 의 壓力下에서의 氣液平衡 關係를 圖示한것으로 液相의 argon 과 酸素濃度 各各의 contour 가 그려져있어

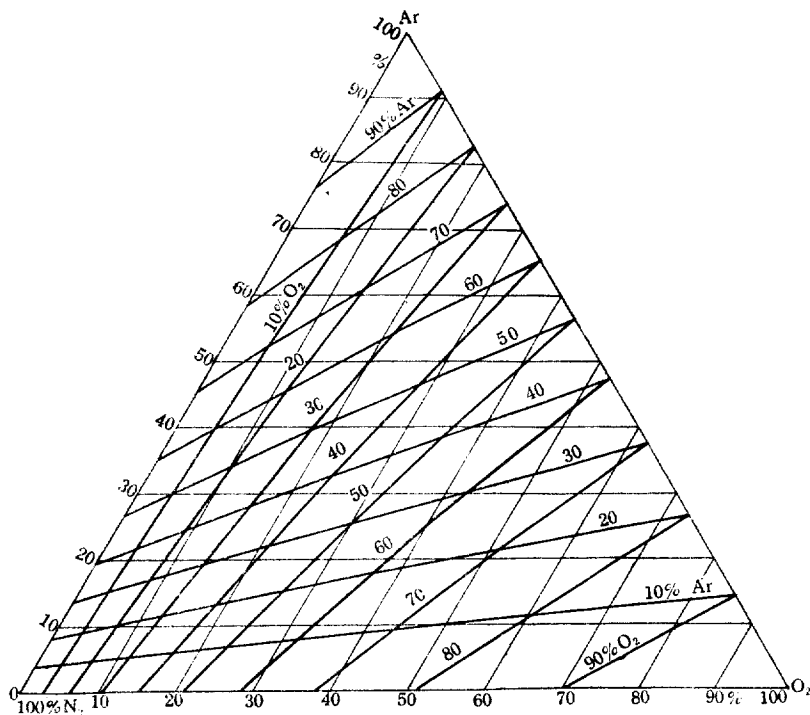


Fig. 1 Triangle Vapor-Liquid Equilibrium Diagram of O₂-Ar-N₂ System at 1000 mmHg.

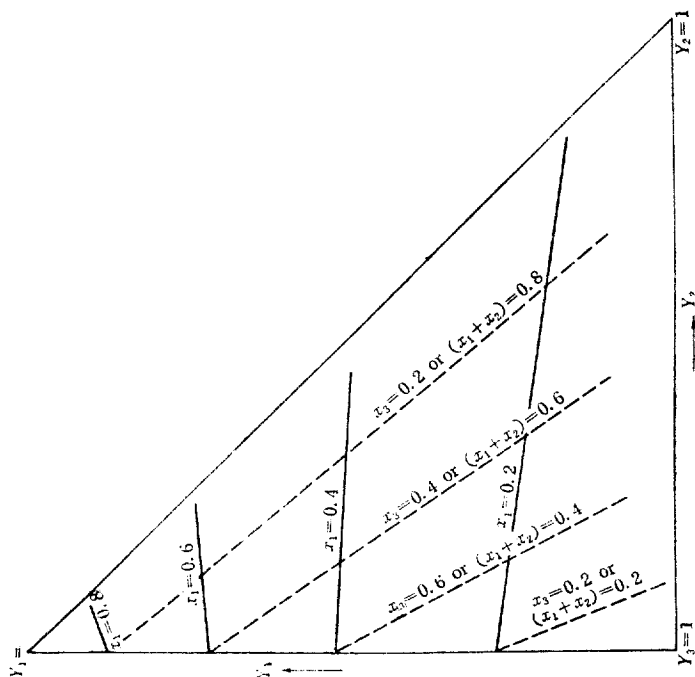


Fig. 2 Simulation of Mapping Diagram.

液相의 濃度を 알면 그 濃도에 해당하는 2개의 contour의 交點의 座標를 읽음으로써 그 液相에 平衡되는 氣相의 濃도를 求할 수 있게 表示 한 것이다. 이와같이 圖示된 data를 使用하여 蒸溜塔 計算을 하려면 우선 이러한 data를 數式化 하여야 하는데 著者들이 택한 方法은 아래와 같다.

우리가 數式化하고자 하는 diagram을 Fig. 2와 같이 第1成分과 第2成分의 濃도를 獨立變數로 생각하고, y_2 를 橫軸, y_1 을 縱軸으로 잡은 直角座標에서의 直角三角型으로 變形하여 생각하자. Fig. 2에서 實線은 x_1 이 一定한 contour이며 點線은 x_3 즉 (x_1+x_2) 가 一定한 contour이다.

여기서 간단히 하기 위하여 각 contour를 直線이라고 가정하면 2가지 contour 直線群은 아래와 같이 $y_1 \times y_2$ 平面에서의 直線으로 表示된다.

$$x_1 - \text{contour}; y_1 = a(x_1) - b(x_1) \cdot y_2 \quad (3)$$

$$x_3 = \text{contour}; y_1 = a(x_1 + x_2) - c(x_1 + x_2) \cdot y_2 \quad (4)$$

윗식에서 $b(x_1)$ 과 $c(x_1 + x_2)$ 는 각각 x_1 -contour와 x_3 -contour의 기울기로써 각각 x_1 과 $(x_1 + x_2)$ 의 함수이다. a 는 제1 성분과 제3 성분간의 2 성분계에서의 아래식과 같은 mapping function으로 $a(x_1)$ 과 $a(x_1 + x_2)$ 는 각각 x_1 -contour와 x_3 -contour의切片이된다.

$$y_1 = a(x_1) \quad (5)$$

式(3)과 式(4)을 聯立으로 풀면 아래와같이 液相濃度 x_1, x_2 로부터 氣相濃度 y_1, y_2 를 求할 수 있는 mapping 關係式을 얻을 수 있다.

$$y_1 = f_1(x_1, x_2) = \frac{a(x_1) \cdot c(x_1 + x_2) - a(x_1 + x_2) \cdot b(x_1)}{c(x_1 + x_2) - b(x_1)} \quad (6)$$

$$y_2 = f_2(x_1, x_2) = \frac{a(x_1 + x_2) - a(x_1)}{c(x_1 + x_2) - b(x_1)} \quad (7)$$

그러므로 x_1 -contour와 x_3 -contour의 기울기, 즉 각각 x_1 과 $(x_1 + x_2)$ 의 함수인 b, c 와, 제1 성분과 제3 성분의 2 성분계 mapping 함수인 a 만을 diagram으로부터 simulation하여 數式化하여 式(6) (7)에 代入하면 3 성분계의 mapping 함수를 얻을 수 있다.

3. 條件式의 整理

Fig. 3과 같이 feed F_j 와 vapor state로의 side product, W_j 와 liquid state로의 side product, U_j 를 모두 갖은 塔上으로부터 j 번째의 universal plate를 생각하고 數式을 展開하여본다. 만일 ② 段에 feed나 side product가 없으면 그 flow rate을 零으로 取扱하면된다.

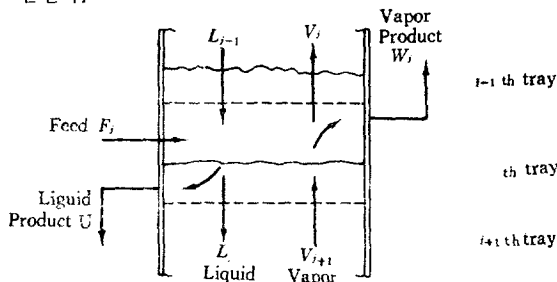


Fig. 3 Stream of Distillation Tray

蒸溜塔을 解析한다는것은 各段, 各成分에 對하여 아래의 다섯가지 條件式을 만족시키는 液相濃度 x_i 氣相濃度 y_i vapor와 liquid의 各段에서의 flow rate V_j, L_j 를 求하는 問題이다.

1) Flow Rate Balance

$$L_{j-1} - (V_j + W_j) - (L_j + U_j) + V_{j+1} + F_j = 0, (j=1 \dots m) \quad (8)$$

2) ith Component Balance

$$L_{j-1}x_{ij-1} - (V_j + W_j)y_{ij} - (L_j + U_j)x_{ij} + V_{j+1}y_{ij} + F_jZ_{ij} = 0, (j=1, m \dots; i=1 \dots n) \quad (9)$$

3) Equilibrium Condition (Mapping Relation)

$$y_{ij} = f_i(x_{ij}), (j=1, \dots, m; i=1, \dots, n) \quad (10)$$

4) Concentration Sum Constrain

$$\sum_i x_{ij} = 1, \sum_i y_{ij} = 1, (j=1, \dots, m) \quad (11)$$

5) Enthalpy Balance

$$L_{j-1} \cdot h_{j-1} - (V_j + W_j)H_j - (L_j + U_j)h_j + V_{j+1}H_{j+1} + F_j h_{Fj} = 0, (j=1, \dots, m) \quad (12)$$

여기서 H_j 와 h_j 는 각각 vapor와 liquid의 enthalpy로 濃度와 溫度의 函數이나 一定 壓力에서는 平衡溫度도 濃度의 函數임으로 H_j 와 h_j 를 濃度만의 函數로 取扱하기로 한다.

한편 式(9)을 모든 成分에 對하여 合한후 式(10)을 代入하면 式(8)이 되므로, 이 다섯式이 모두가 獨立的인 條件이 되지 못하고 이 式들 사이에 redundancy가 存在함을 알 수 있다. 그러므로 n 성분계에 있어서 $(n-1)$ 가지 成分에 對하여만 式(9)와 式(10)을 適用하면 式(11)의 條件은 自動적으로 式(8)에 의하여 滿足될 것이다. 따라서 式(12)와 式(8)을 1段부터 j 段까지 合한후 V_{j+1} 와 L_j 에 對하여 정리한 式(13), (14)과 式(10)을 式(9)에 代入한 式(15)을 $(n-1)$ 個 成分에 對해서 聯立으로 풀면된다.

$$V_{j+1} =$$

$$\frac{V_1(H_1 - h_1) + \sum_{i=1}^j \{W_k(H_k - h_j) + U_k(h_k - h_j) - F_k(h_{Fk} - h_j)\}}{(H_{j-1} - h_j)} \quad (13)$$

$$L_j = V_{j+1} - V_1 - \sum_{k=1}^j (W_k + U_k - F_k) \quad (14)$$

$$L_{j+1}x_{ij-1} - (V_j + W_j)f_i(x_j) - (L_j + U_j)x_{ij} + V_{j+1}f_i(x_{j+1}) + F_jZ_{ij} = 0, (j=1 \dots m; i=1 \dots n-1) \quad (15)$$

위의 式(13) (14)을 各段에 對하여 式(15)을 各段과 $(n-1)$ 가지 成分에 對하여 直接 聯立으로 풀다는것은 式(15)의 mapping function, f_i 가 非線型이며 enthalpy가 濃도의 函數이어서 V_j, L_j 도 各 濃度의 函數이므로 不可能하다. 그리하여 다음과 같은 iteration method를 使用하였다.

- 1) 各成分의 各段에서의 液相濃度 profile을 假定한다.
- 2) 이 假定된 液相濃度로부터 氣相濃度を 式(10)혹은 式(8), (7)에 의하여 求한다.
- 3) 各 stream의 enthalpy를 計算한 後 (13), (14)에 依해 V_j 와 L_j 를 從단부터 차례로 求한다.
- 4) 위에서 求한 V_j 와 L_j 값을 使用하여 式(15)을 假

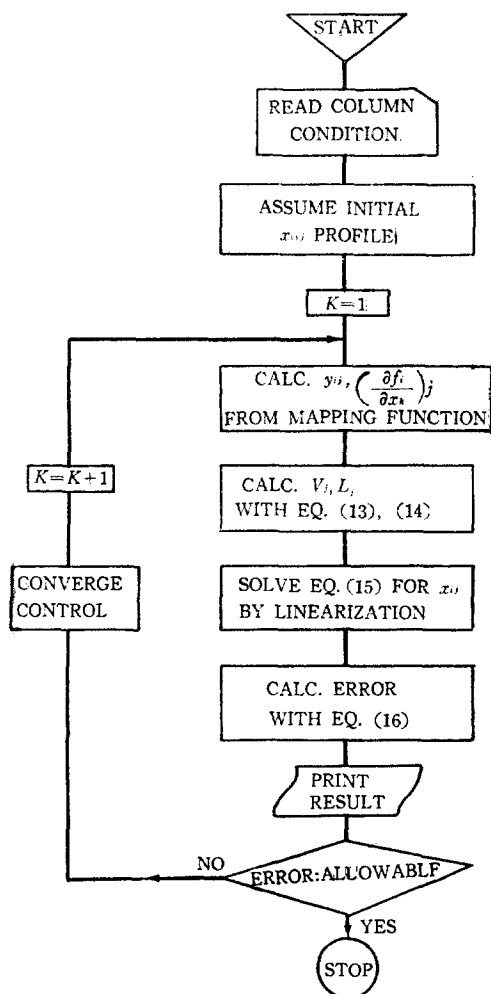


Fig. 4 Block Diagram for Computation.

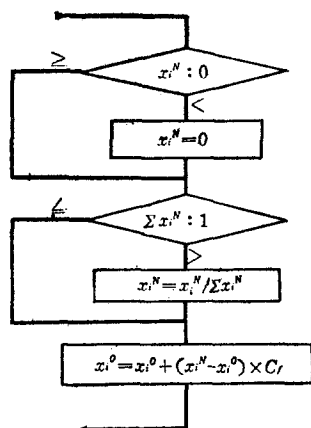


Fig. 5 Flow Chart for Re-assumption.

定한 液相濃度(x_{ij} 부근에서 線型化하여 얻은 m_{\star} ($n-1$)元 1次 聯立方程式를 풀어 各段 各成分의 液相濃度を 同時に 求한다.

5) 假定한 液相濃도와 計算된 液相濃度の 差의 절대치의 合을 아래의 式(16)에 의하여 計算하여 該값이 定해진 許容誤差 보다 적으면 計算을 중단하고 만일 크면 Fig. 5의 flow chart의 方法에 依하여 새로운 液相濃度 profile을 假定하여, 위의 第(2)번부터 第(5)번까지의 過程을 되풀이하여 계산된 誤差가 許容誤差보다 적어 질때까지 반복한다.

$$\text{Error} = \sum_j \sum_i |x_{ij}^0 - x_{ij}^N| \quad (16)$$

Fig. 4는 위의 計算방법을 block diagram으로 表示한 것이며, Fig. 5의 flow chart에 表示된 것은 收斂을 調整하는 方法으로 우선 第(4)번 과정에서 計算된 液相濃도가 陰數이면 該값을 零으로 두고 該값이 1보다 크면 normalization하여 該값이 1이 되게 하여 各濃度の 값이 物理的 意味를 잃지 않게 한후 새로 假定한 濃度を converge control factor C_f 로 調整하여 먼저 假定한 濃도와 計算된 濃度の 中間값을 取하게 하는 것이다. 즉 發散하면 C_f 의 값을 적게 주고, 收斂이 너무 느리면 C_f 의 값을 크게 주어 收斂속도를 증가 시킬 수 있다.

위의 第(4)번째 過程에서의 式(15)의 線型化에 依한 풀이는 다음 節에서 論한다.

4. Component Balance Equation의 線型化

式(15)를 假定한 液相濃度 x_j^0 부근에서 線型化한 右 정리하면 아래의 式(17)이 된다. 여기서 x_j^0 는 假定한 값이며 x_j^N 은 새로 計算된 값이다.

$$\begin{aligned} L_j + x_{ij}^N - (L_j + U_j)x_{ij}^N - (V_j + W_j) \sum_i \frac{\partial f_i(x_j^0)}{\partial x_{ij}} \\ x_{ij}^N + V_{k+1} \sum_i \frac{\partial f_i(x_{k+1}^0)}{\partial x_{k+1}} x_{i,j+1}^N = (V_j + W_j) \{ y_{ij}^0 \\ - \sum_i \frac{\partial f_i(x_j^0)}{\partial x_{ij}} x_{ij}^0 \} - V_{j+1} \{ y_{i,j+1}^0 - \sum_i \frac{\partial f_i(x_{j+1}^0)}{\partial x_{i,j+1}} \\ x_{i,j+1}^0 \} - F_i Z_{ij} \end{aligned} \quad (17)$$

式(17)을 Matrix型으로 表示하고 各成分別로 partitioning하여 정리하면 아래와 같이 된다.

$$\begin{pmatrix} (A+G+B_{1,1})GB_{1,2} \cdots GB_{1,n-1} \\ GB_{2,1}(A+GB_{2,2}) \cdots GB_{2,n-1} \\ \cdots \cdots \cdots \\ GB_{n-1,1}GB_{n-1,2} \cdots (A+GB_{n-1,n-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1^N \\ X_2^N \\ \vdots \\ X_{n-1}^N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ \vdots \\ D_{n-1} \end{pmatrix} \quad (18)$$

$$\text{여기서 } D_i = G(\sum_k B_{ik} X_k - Y_i) - FZ_i \quad (19)$$

$$A = \begin{pmatrix} -(L_1 + U_1) & & 0 \\ L_1 - (L_2 + U_2) & & \\ 0 & \ddots & \\ 0 & L_{m-1} - (L_m + U_m) & \end{pmatrix} \quad (20)$$

$$G = \begin{pmatrix} -(V_1 + W_1) & V_2 & 0 \\ 0 & -(V_2 + W_2) & V_3 \\ 0 & & \ddots \\ 0 & & & -(V_m + W_m) \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$F = \begin{pmatrix} F_1 & & 0 \\ 0 & F_2 & \\ & \ddots & \\ 0 & & F_m \end{pmatrix} \quad (22)$$

$$B_{ik} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_k}\right)_1 & & \\ & \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_k}\right)_2 & \\ & & \ddots \\ 0 & & & \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_k}\right)_m \end{pmatrix} \quad (23)$$

$$X_i = [x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,m}]^T \quad (24)$$

$$Y_i = [y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,m}]^T \quad (25)$$

$$Z_i = [z_{i,1}, z_{i,2}, \dots, z_{i,m}]^T \quad (26)$$

위식에서 알 수 있듯이 A 와 G 는 각 liquid와 vapor의 flow rate에 관계되는 $(m \times m)$ 次 B_i -diagonal matrix이며, F 와 B_{ik} 는 각각 F_j 와 $\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_k}\right)_j$ 를 element로 하는

$(m \times m)$ 次 diagonal matrix이며, X_i , Y_i 와 Z_i 는 각각 제 i 번째 成分의 液相, 氣相과 feed 中の 濃度인 X_{ij} , Y_{ij} 와 Z_{ij} 를 element로 하는 m 次 vector이다.

式(18)의 係數 matrix를 分析하여 보면 partition된 대각선 부분의 Sub-matrix, $(A + GB_{i,i})$ 는 tridiagonal matrix으로 한成分의 假定한 液相濃도가 自己成分의 濃도에 영향을 주는 部分이며, 대각선外의 sub-matrix $(GB_{i,j})$ 는 bidiagonal matrix으로 他成分에 영향을 주는 部分이다.

Partition된 式(18)을 풀기 위하여는 $(n-1)$ 個의 $(m \times m)$ 次 sub-matrix를 inverse하여야 한다. 例를들면 3成分系에 대하여는 式(18)을 풀기 위하여는 아래와같은 순서로 $(m \times m)$ 次 sub-matrix equation을 처리하여 풀 수 있다.

$$X_1^* = (A + GB_{1,1})^{-1} D_1 \quad (27)$$

$$X_2^N = [(A + GB_{2,2}) - GB_2(A + GB_{1,1})^{-1} GB_{1,2}]^{-1} (D_2 - GB_{2,1} X_1^*) \quad (28)$$

$$X_1^N = (A + GB_{1,1})^{-1} (D_1 - GB_{1,2} X_2^N) \quad (29)$$

한편 만일 式(23)에서 $i \neq k$ 인 $\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_k}\right)$ 값을 '零'으로 假定한다면, 즉 液相의 한成分의 濃度變化가 氣相의 他成分의 濃度變化에 미치는 영향을 무시한다면, 式(18)의 係數 matrix 中の 대각선에 있는 sub-matrix 以外의 sub-matrix $(GB_{i,j})$ null matrix이 되어 式(18)은

아래와 같은 $(n-1)$ 個의 獨立的인 $(m \times m)$ 次 Matrix equation이 된다.

$$(A + GB_{ii}) X_i^N = [G(B_{ii} X_i^0 - Y_i) - FZ_i] \quad (30)$$

여기서 重視할것은 matrix $(A + GB_{ii})$ 는 tridiagonal이므로 $(n-1)$ 個의 式(30)을 푸는 計算量은 式(18)을 푸는 計算量에 비교도 되지않을 정도로 적다는 것이다. 왜냐하면 (mxm) 次 matrix를 Gauss Jordan elimination

method로 inverse하기 위하여는 약 $\frac{m^3 + 4m^2 - m}{2}$ 번의 乘除算이 要求되지만²⁾ (mxm) 次의 tridiagonal matrix equation은 풀기위하여는 단지 $5m$ 번의 乘除算이 要求된다³⁾. 式(18)은 式(30)에 비하여 더 엄격히 線型化한것이지만 어차피 全體계산을 여러번 iteration하여야 할것임으로 收斂性에는 지장이 없는것이 예상될 것이다. 다만 먼저의 방법은 막중한 計算量으로 Round-off error와 computing time만을 증가시킬 것이다.

以後로부터 著者들은 먼저의 式(18)에 의한 방법을 strong interdependency method, 나중의 式(30)에 의한 방법은 weak interdependency method라 各各 부르기로하고, 다음의 實際計算結果로 strong method와 weak method를 비교한다.

5. 實際 計算例와 Strong Weak method 비교

2節에서 例로 든 O_2 -Ar- N_2 의 3成分系의 蒸溜인 Fig. 6에 圖示한 空氣分離 上部塔의 解析을 實際 計算例로 택하였으며 그塔의 操業條件은 Fig. 6에 明示되었다.

實際로 空氣分離 上部塔에서 overhead로 N_2 가 bottoms로 O_2 가 나오며 Ar의 濃度는 가장 濃축된 단에서도 20% 以下이므로 2節에서의 液相濃度 contour가 直線이라는 假定을 좀더 現實化하기 위하여 N_2 , Ar, O_2 를 各各 第1, 第2, 第3, 成分으로 택하였다. 이렇게 택하면 Fig. 1과 Fig. 2에서 Ar 濃도가 20% 미만인 部分에서의 N_2 , 즉 x_1 -contour와 O_2 , 즉 x_3 -contour의 實際 사용되는 길이가 짧아서 各 contour가 거의 完全한 直線이 되기 때문이다. 즉 mapping data를 數式化할때 가장 稀薄한 成分을 Fig. 2에서의 第2成分으로 택하는것이 좋다.

式(3), (4)에서의 $b(x_1)$ 와 $c(x_1 + x_2)$ 즉 x_1 과 x_3 -contour의 기울기를 Fig. 1에서 읽어 그 變數에 대하여 plot한 결과 Fig. 7과 같으며, O_2 - N_2 의 2成分系의 mapping function인 $a(x_1)$ 을 N_2 의 O_2 에 대한 relative volatility, α 를 使用하여 表示하면 아래와 같다.

$$a(x_1) = \frac{\alpha x_1}{\alpha x_1 + (1 - x_1)} \quad (31)$$

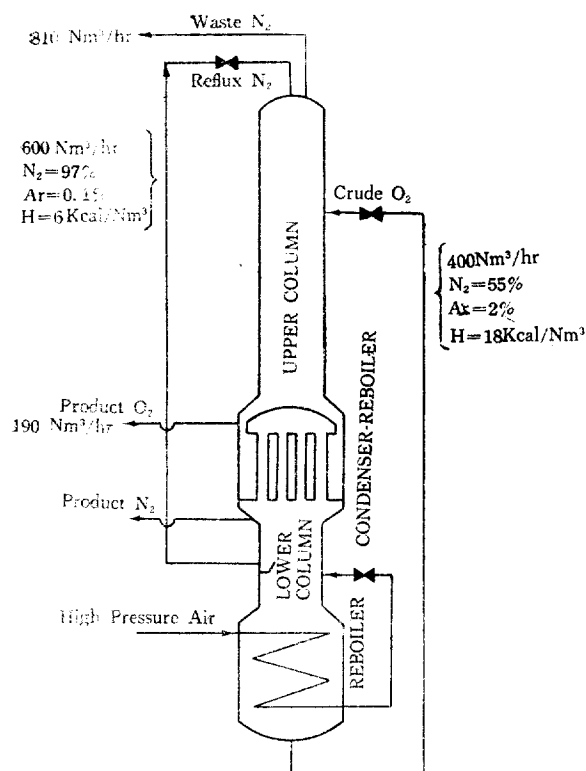


Fig. 6 Air Separation Column.

Fig. 7 에 Latimer²³⁾ 가 發表한 方法에 의하여 1000 mmHg 壓力에 對해 算出한 α 값도 같이 plot 하였다. Fig. 7 의 α, b, c curve 는 最小 自乘法를 써서 아래와 같이 函數化하여 使用했으며.

$$\alpha(x) = 3.72 + 0.9986x - 1.895x^2 + 0.5942x^3 \quad (32)$$

$$b(x) = x(1,557 - 2,817x + 1,560x^2 - 0.0135x^3) \quad (33)$$

$$c(x) = 1 + (1-x)(1,238 + 1,809x - 6,673x^2 + 4,049x^3) \quad (34)$$

氣相과 液相의 enthalpy H_i 와 h_i 는 argon 과 O_2 의 enthalpy 을 같다고 假定하고⁶⁾ N_2-O_2 의 2成分系의 各組成에 對한 平衡溫度에서의 saturated liquid 와 vapor 의 enthalpy 부터 氣相과 液相의 enthalpy 을 계산하여 濃度만의 函數로 만들어 사용했다.

Fig. 4 의 block diagram 의 計算法과 Fig. 5 의 converge control 法을 利用하여 IBM-1130 computer 로, 4節에서 定義한 Strong method 에 對하여는 computer core 의 制限으로 15, 20 와 28段까지 계산 하였으며, Weak method 에 對하여는 15, 20, 30, 50 段에 對하여 計算하였다.

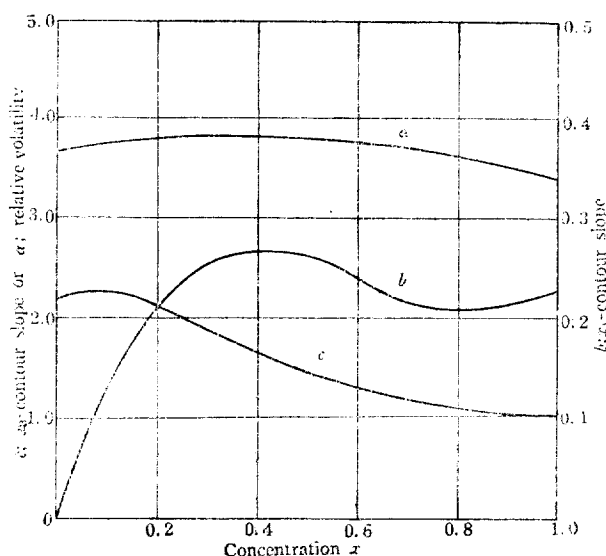
Fig. 8, 9, 10, 11, 12 와 Table 1 은 그 結果를 要約한 것이다. Fig. 8 은 15段인 경우에 N_2 의 濃度의 濃度 profile 直線인 假定으로부터 차차 實際 profile에, strong, weak 그방법이 거의 같은 傾向으로, 접근됨을 보여주고있다.

Fig. 9, 10, 11, 12 은 strong, weak 2방법의 收斂性을 iteration 마다의, 式(16)에서 定義된, error 값으로 비교 한것으로, 15段인 경우는 2방법이 거의 같이 20 번 정도의 iteration 으로 收斂하였다.

Strong method 로는 20段以上인 경우부터 어느정도 收斂하다가 다시 發散하였으나, weak method 로는 30段인 경우까지 許容誤差 0.01 以下로 收斂 시킬수있었다. 물론 converge control factor cf 의 값으로 收斂, 發散 조절할 수 있겠지만, weak method 가 strong method 보다 收斂性이 훨씬 더 좋은것은 틀림이 없다.

Table 1 은 各 方法에 對해서 한번 iteration 하는데 걸리는 시간을 비교한 것으로, 앞 節에서 예측 한바와 같이 weak method 가 strong method 에 비교할 수 없을 정도로 빠름을 보여 준다.

한편 computer memory core(32bit=1word) 使用量을 비교하면 extended precision mode 로 strong method 때는 28段으로 dimension 을 잡았을때 약 12,000 個였으나, weak method 때는

Fig. 7 α, b, c , vs. Concentration x

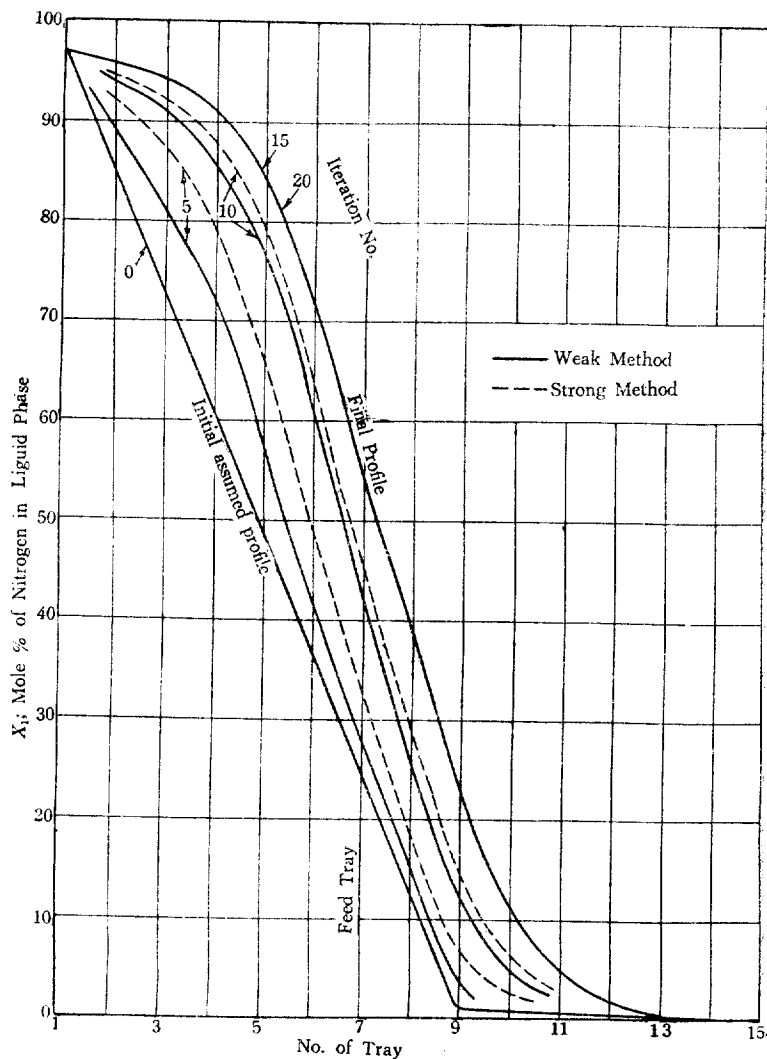


Fig. 8 Converge Pattern of Nitrogen Concentration Profile.

50段으로 dimension 을 잡았어도 불과 2,800 個밖에
않되었다.

Table 1. Comparison of Computing Time

| No. of Tray | Computing Time per Iteration | |
|-------------|------------------------------|---------|
| | Strong | Weak |
| 15 | 1.5 min | 2.5 sec |
| 20 | 3 min | 3 sec |
| 28 | 8 min | — |
| 30 | — | 5 sec |
| 50 | — | 8 sec |

結 論

本방법을 一種의 simultaneous solution 形式으로 氣
液平衡 data 가 triangle diagram 과 같이 composition
mapping relation 으로 주어졌을때 使用하기 便利한 방
법으로, 特히 3 成分系에 適合하여, 이때 稀薄成分을
Fig. 2 에서의 第2 成分으로 택하는 것이 좋다.

計算方法으로는 component balance 의 線型化 方式
에 따라 strong method 와 weak method 를 提示하였
으나, 收斂性이나, 計算時間이나, 使用하는 memory

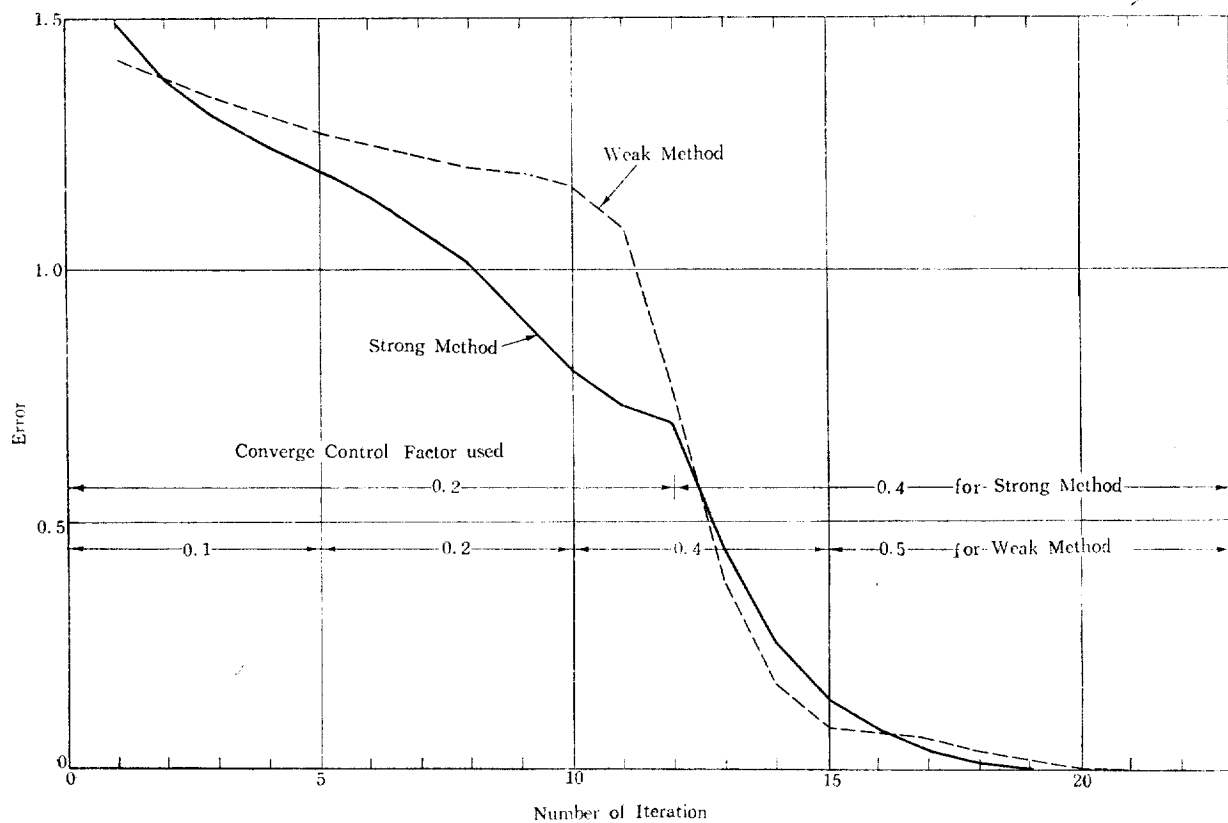


Fig. 9 Convergency of 15 tray Distillation Column Calculation.

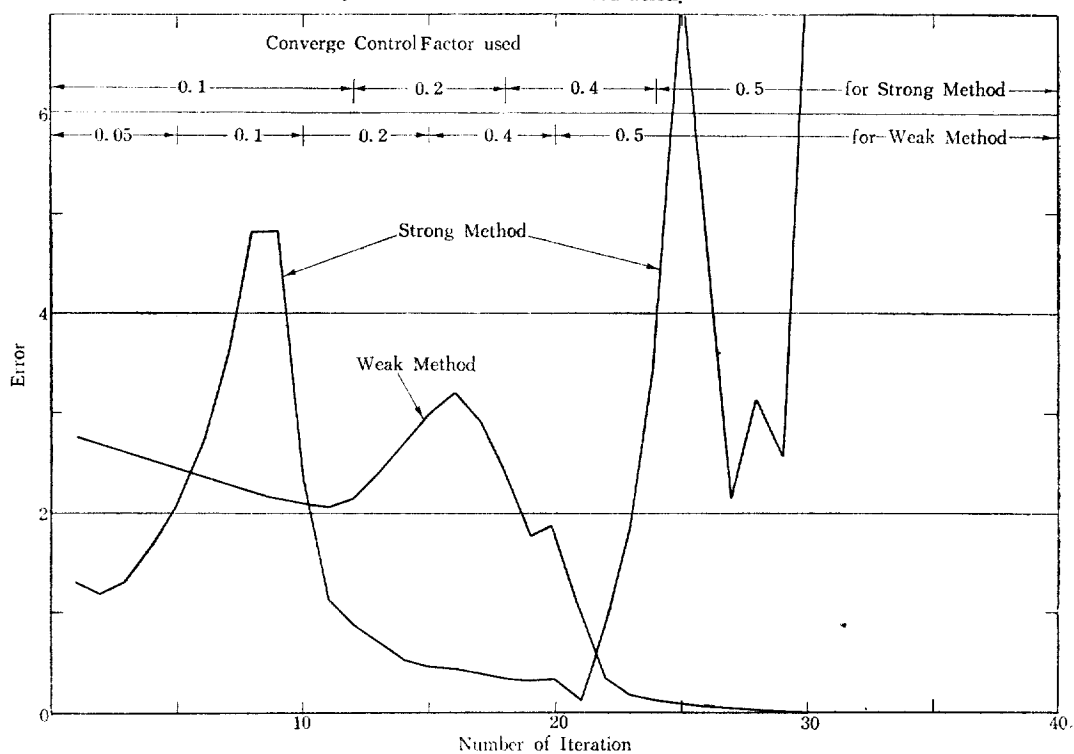


Fig. 10 Convergency of 20 tray Distillation Column Calculation.

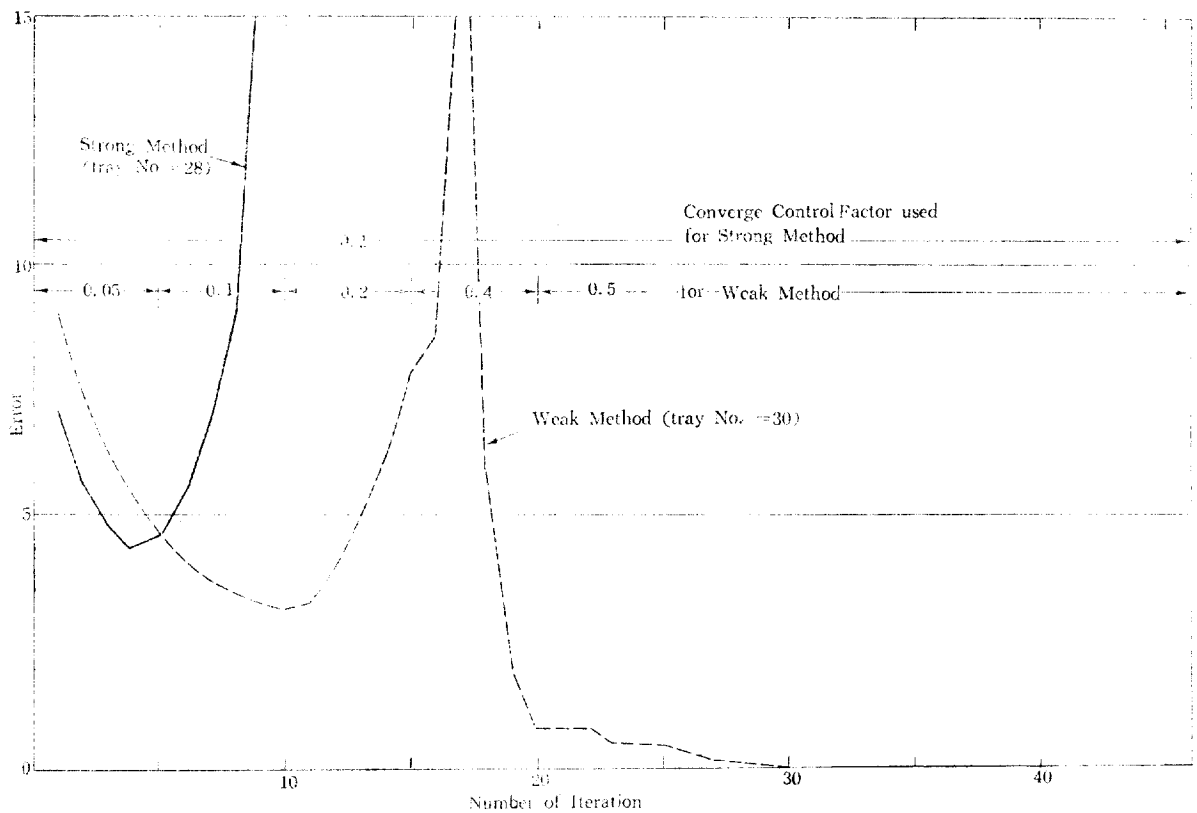


Fig. 11 Convergency of 28, 30 tray Distillation Column Calculation.

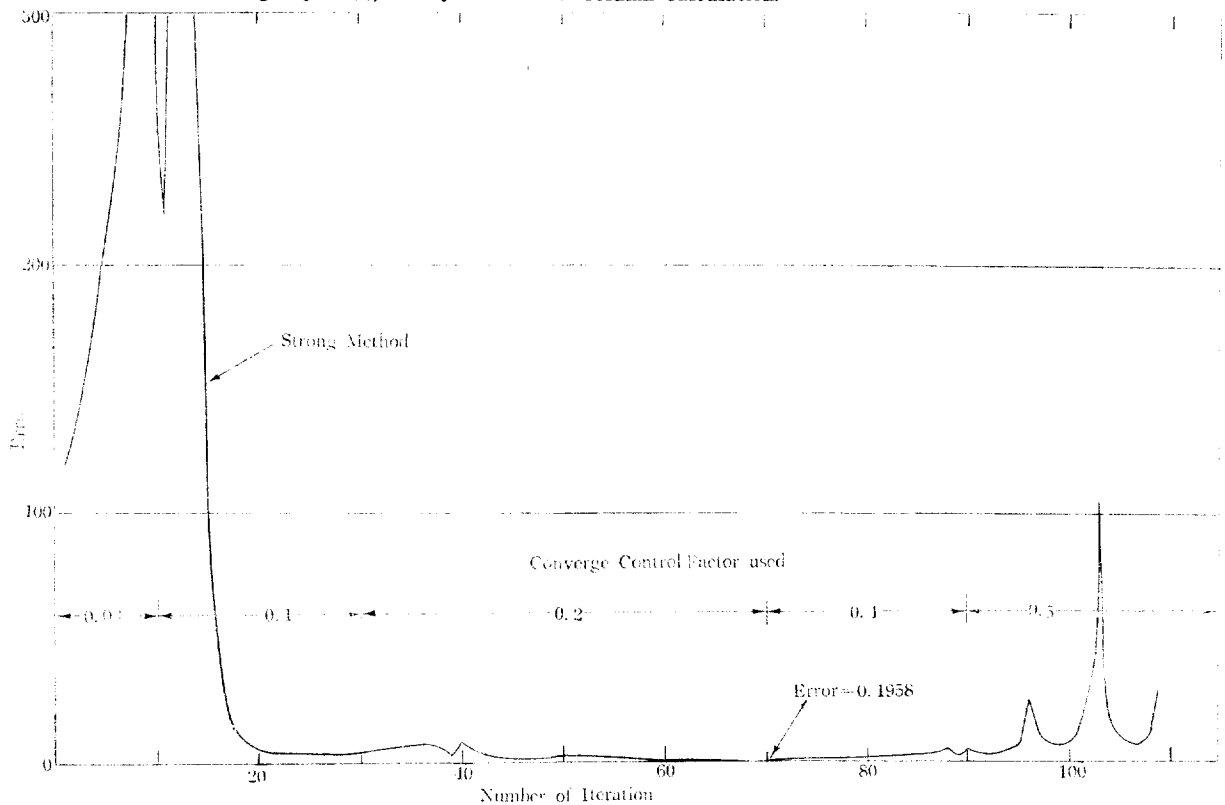


Fig. 12 Convergency of 50 tray Distillation Column Calculation.

core의 값 어느면으로 보더라도 weak method가 훨씬
優越하다.

本 방법에 平衡 data로서 表示된 相對揮發度나 氣液
平衡係數는 濃度만의 函數이면 그대로 使用되나, 溫度
가 parameta 역할을 할때면 組成으로부터 平衡溫度를
求하는 routine을 추가하면 되나, 이렇게 되면 wang
등의 방법과 거의 비슷한것이 된다.

溫度를 parameta로 사용치 않으므로 enthalphy data
의 取扱이 不便하며 各段의 溫度를 알려면 計算된 組
成으로 부터 平衡溫度를 求하여야 하는 缺點이었다.

Nomenclature.

- a : Interopt of contours
 A : Matrix defined by eq. (20)
 b : Slop of x_1 -contour
 B : Matrix defined by eq. (23)
 c : Slop of x_3 -contour
 cf : Converge control factor
 D : Vector defined by eq. (19)
 E^n : n -dimensional euclidion space
 f : Vapor-liquid mapping function
 f : Vapor-liquid mapping function, vector form
 F : Feed rate
 F : Matrix defined by eq. (22)
 G : Matrix defined by eq. (21)
 h : Liquid enthalphy
 h_F : Feed enthalphy
 H : Vapor enthalphy
 i : Component index
 j : Tray index
 k : Summation index
 L : Liquid flow rate
 m : Total number of tray
 n : Total number of component
 S^n : Subset defined by eq. (1)
 U : Liquid state side product rate
 V : Vapor flow rate
 W : Vapor state side product rate
 x : Liquid concentration, mole fraction
 x : Liquid composition, vector form
 x : Liquid concentration profile vector
 y : Vapor concentration, mole braction

- y : Vapor composition, vector form
 y : Vapor concentration profile vector
 z : Feed concentration, mole fraction
 z : Feed concentration profile vector
 α : Relative volatility
 Subscript
 i : Value of ith component
 j : Value at jth tray
 k : Summation index
 Superscript
 N : Calculated value
 O : Assumed value
 $*$: Intermediate value

▲ 參考文獻

- (1) Amundson, N. R., Pontinen, A. J.; *Ind. Eng. Chem.*, **50**, 730 (1958).
- (2) Blunn, O. M., Booth, A. D.; "Computing Method", Vol. II pp.12, Addison-Wesley (1965).
- (3) Cook, G. A.; "Argon, Helium, and the Rare Gasses", Vol. II, Interscience (1961).
- (4) Hanson, D. N., Duffin, J. H. Somerville, G. F.; "Computation of "Multistage Separation Processes", Chap. 5—6, Reinhold (1962).
- (5) Lapidus, L.; "Digital Computation for Chemical Engineers", McGraw-Hill (1962).
- (6) Latimer, R. E.; *Chem. Eng. Progr.*, **63**, No. 2 (1967).
- (7) Lewis, W. K., Matheson, G. L.; *Ind. Eng. Chem.*, **24**, 494 (1932).
- (8) Robinson, C. S., Gilliland, E. R.; "Elements of Fractional Distillation", 4th ed, McGraw-Hill (1950).
- (9) Ruhemann, M.; "The Spartion of Gases" 2nd ed., Oxford (1949).
- (10) Smith, B. D.; "Design of Equilibrium Stage Processes", Chap. 10, McGraw-Hill (1963).
- (11) Thiele, E. W., Geddes, R. L.; *Ind. Eng. Chem.*, **25**, 289 (1933).
- (12) Wang, T. C., Henke, G. F.; *Hydrocarbon Processing*, **45**, No. 8 (1966).