

분리공정의 모사를 위한 차수감소모델

(Reduced Order Models for Separation Process Simulation)

° 최호석, 조영상
(H. S. Choi, Y. S. Cho)

한국과학기술연구원 화학공정연구실 (KIST, Chem. Proc. Lab.)

Reduced order steady state models for separation columns are developed. The accuracy and efficiency of the reduced order models are also demonstrated by comparing the simulation results obtained using the reduced order models with rigorous tray by tray calculations.

1. 서론

지금까지 많은 문헌들이 다단 분리탑의 해석을 위해서 여러가지 모델을 소개하였고, 각 문헌에서는 모두 정상상태에서의 모델링을 함께 다루고 있다. 대부분의 문헌에서는 다단 분리탑의 모델링을 각 단에서의 모델 (tray-by-tray model) 로 풀이하고 있는데, 이 모델에 의한 분리탑 해석의 가장 큰 어려움은 탑의 단수가 증가할 수록 문제의 차원이 커진다는 것이다. 따라서 여러개의 탑 (column) 을 해석하거나 매우 큰 탑을 최적화하는 경우에는 계산 시간이 너무 많이 소요되는 단점이 있다. 이런 경우에는 차수 감소 모델 (reduced-order model) 이 매우 효율적이다.

Cho 와 Joseph (1)(2) 은 역류식 다단 분리계 (countercurrent staged separation systems) 에 관한 차수 감소 모델 방법을 개발 하였다. 차수 감소 모델을 사용하여 얻어진 모사 결과와 정밀한 각 단에서의 계산 결과의 비교를 통해서 차수 감소 모델의 정확성과 효율이 증명되었다. 그러나 이전 작업의 주된 목적은 분리탑에 대한 비정상상태의 차수 감소 모델의 개발이었다. 이전에 개발된 차수 감소 모델을 사용하여 정상상태에서의 해를 얻기 위해서는 분리탑의 동특성을 나타내는 상미분 방정식들이 적당한 초기 조건들로 부터 풀려져야 한다. 정상상태에서의 해를 구하기 위한 이와 같은 방법은 확실히 바람직한 방법은 아니다.

현 작업에서는 분리계에 관한 정상상태 차수 감소 모델이 개발 되었다. 개발된 이 모델은 단지 대수식들로만 구성되어 있음을 나중에 보여 줄 것이다. 모델의 차수를 줄이기 위해서 탑의 길이를 따라서 어떤 불연속 점도 갖고 있지 않는 탑을 고려하였다. 지금의

정상상태 차수 감소 방법의 개발이 이전의 작업에서 개발된 차수 감소 방법 개발과 그 절차가 비슷하기 때문에 여기서 상세한 사항은 기술하지 않았다.

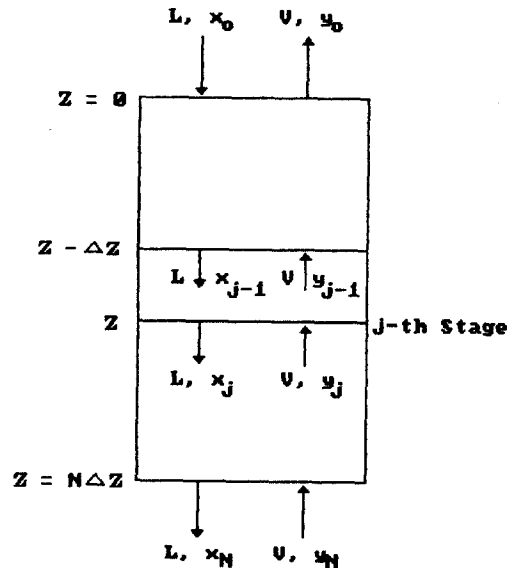


그림 1. 단순 흡수탑

2. 단순 흡수계에 대한 차수 감소 모델의 적용

차수 감소 절차는 단의 한 부분의 정확한 수치식들을 고려 함으로써 시작된다. 차수 감소의 절차를 개략적으로 설명하기 위해서는 간단한 기체 흡수계(그림.1)를 선택 하였다. 이 계에서는 비교하기에 유용한 결과들을 유도해 내기가 쉽다. 복잡한 비선형계로의 확장작업은 이 논문의 뒷부분에 정리

하였다. 기체 및 액체 중 용질의 양이 매우 적다는 가정으로 부터 기체와 액체의 흐름량은 일정하다고 볼 수 있고, 열의 영향을 무시한 이상적인 단들을 가진 등은 조작으로 가정하였다. 이 가정들을 가지고 정상상태에서 각 성분들의 수지식은 다음과 같이 쓰여질 수 있다.

$$(L x_{j-1} - V y_{j-1}) - (L x_j - V y_j) = 0 \quad (1)$$

여기에서 새로운 변수

$$u_j = L x_j - V y_j$$

를 고려하자.

그러면, 식 (1) 은

$$u_{j-1} = u_j = u = \text{상수} \quad (2a)$$

가 된다.

이 식은 평형 관계식

$$y_{j-1} = K x_j \quad (2b)$$

과 함께 풀려져야 한다.

식 (2a) 와 식 (2b) 를 조합하면,

$$y_{j-1} = (K V / L) y_j + K u / L \quad (3a)$$

또는

$$x_{j-1} = (K V / L) x_j + u / L \quad (3b)$$

이 된다.

여기서, 경계조건은

$$x(j=0) = x_0, y(j=N) = y_N \quad (3c)$$

이다.

여기서, 두가지 형태의 모델들이 가능함을 알 수 있다. 모델 1 은 식 (3a) 와 식 (3c) 로 이루어져 있고, 모델 2 는 식 (3b) 와 식 (3c) 를 사용하여 만들어 진다. 두 모델들은 각 단에서의 자세한 모델들을 나타낸다. 비록 모델 1 과 모델 2 의 해가 같다고 해도 계산 결과의 정확성면에서 모델 1 로의 근사해가 모델 2 로의 근사해와는 다를 수 있음을 위에서 보여줄 것이다.

개별적인 각 단에서의 모델들의 근사는 x 와 y , u 같은 변수들이 모두 탑의 길이 방향을 따라서 연속인 변수들 이라는 가정에 의해서 얻어질 수 있다. 각 단마다 각각 다른 변수들을 가지고 탑을 모델링하는 것도 한가지 방법이다. 만일 x 와 y , u 가 위치 변수 z 에 대해서 연속인 변수라고 한다면 x 와 y , u 를 근사하기 위해서 다항식을 사용할 수 있다. 편리한 한 방법이 Lagrange 다항식 $l_k(z)$ 을 사용하는 것이다. y 에 관하여 $n+1$ 차수의 다항함수는 Lagrange 다항식의 합으로 다음과 같이 표시할 수 있다.

$$y(z) = \sum_{k=1}^{n+2} l_k(z) y_k \quad (4)$$

여기서, $k=1$ 일때, $y_k = y_0$
 $2 \leq k \leq n+1$ 일때, $y_k =$ 내삽점 z_k 에서 y 값
 $k = n+2$ 일때, $y_k = y_N$

이 개념을 가지고, 식 (3a) 는 다음 근사식으로 근사될 수 있다.

$$\sum_{k=1}^{n+2} l_k(z - \delta z) y_k = (K V / L) y(z) + K u / L \quad (5a)$$

여기서, δz 은 $1/N$ 으로 주어진 한 단의 균일화된 높이이다. 이 경우에 경계 조건 (3c) 는 다음과 같다.

$$y(1) = y_N, L x_0 - V y(0) = u \quad (5b)$$

식 (5a) 에는 y_1, \dots, y_{n+2}, u 의 $n+3$ 개의 미지수들이 있다. 그러므로, $y(z)$ 에 관해서 풀기 위해서는 식 (5a) 로 부터 $n+1$ 개의 독립된 식들을 만들어 내야 한다. 독립된 식들을 만들어 내는 방법들 가운데 orthogonal collocation 방법이 가장 효과적임이 증명되었다. 여기서 사용된 collocation 점들은 아래와 같이 정의된 orthogonal Jacobi 다항식, $P_n^{(\alpha, \beta)}(z)$ 의 해들로서 선택된다.

$$\int_0^1 z^\alpha (1-z)^\beta z^j P_n^{(\alpha, \beta)}(z) dz = 0 \quad (6)$$

경계 조건이 주어진 점을 제외한 각 collocation 점들에서 식 (5a) 를 고려함으로써 아래의 독립된 식들이 얻어진다.

$$\sum_{k=1}^{n+2} l_k(z_j - \delta z) y_k = (K V / L) y_j + K u / L \quad (7a)$$

$$j = 1, 2, \dots, n+1$$

collocation 점들이 식 (7a) 에서의 내삽점들과 같음이 알려져 있다. 적합한 경계 조건들은 다음과 같다.

$$y_{n+2} = y_N, \quad L x_0 - V y_1 = u \quad (7b)$$

간단히 하기 위해서 식 (7a) 와 식 (7b) 는 더 간단한 matrix 형태로 다음과 같이 나타내 진다.

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1,n+1} \\ A_{21}+S & A_{22}-S & & A_{2,n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n+1,1}+S & \dots & A_{n+1,n+1}-S & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Kx_0 - A_{1,n+2}y_N \\ Kx_0 - A_{1,n+2}y_N \\ \vdots \\ Kx_0 - A_{1,n+2}y_N \end{bmatrix} \quad (8)$$

여기서, $A_{jk} = 1_k (z_j - \theta z)$ 이고, $S = KV / L$ 이다. 편이상 식 (8) 을 차수 감소 모델 1 (ROM 1) 이라 한다.

ROM 1 은 상수인 계수들 만을 갖고 있는 간단한 대수식들 만으로 구성되어 있음을 알 수 있다. y_j 에 대한 ROM 1 을 풀기 위해서 가우스 소거법이 사용될 수 있다. 만일 $n+1$ 이 N 보다 더 작게 선택된다면 위 식으로 부터 차수에서의 감소가 가능함을 알 수 있다. 여기서 차수 감소 비는 $N/(n+1)$ 로 주어진다.

같은 절차가 차수 감소 모델 2 (ROM 2) 를 유도하기 위해서 식 (3b) 와 식 (3c) 에 적용될 수 있다.

식 (3a) 와 식 (3b) 대신에 아래의 두식을 사용하면,

$$y_j = (KV / L) y_{j+1} + Ku / L \quad (9a)$$

$$x_j = (KV / L) x_{j+1} + u / L \quad (9b)$$

모델 3 (ROM 3) 과 모델 4 (ROM 4) 를 유도할 수 있다.

표.1 여러가지 차수 감소 모델들의 비교

Z	X	XJN	YJN	XJ	YJ
0	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15
0.5	0.70235	0.65175	0.962055	0.64713	0.915788
1	0.88687	0.88942	0.871822	0.88932	0.875488

X : Rigorous model
XJN : ROM2
YJN : ROM1
XJ : ROM4
YJ : ROM3

이 4 가지 모델들을 사용하여 간단한 흡수계를 1 point collocation 점으로 근사한 결과를 정밀한 각 단에서의 모사 결과와 비교하여 그림.2 과 표.1 에 도시하였다.

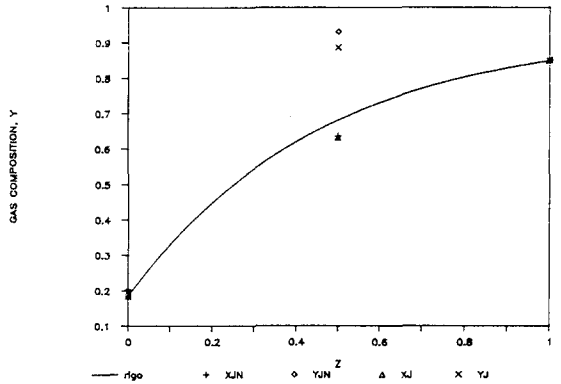


그림 2. 여러가지 차수 감소 모델들의 비교

그림.2 에서 보는 바와 같이 4가지 모델중 모델 2 (ROM 2) 가 가장 정확함을 알 수 있다. 따라서 앞으로의 차수 감소 모델을 이용한 모사에서는 모델 2 (ROM 2) 를 사용하였다.

3. 다성분 흡수계에 차수 감소 모델의 적용

차수 감소 모델을 다성분 흡수계(그림.3)에 적용하여 보았다. Orthogonal collocation 방법을 각 단에서 성분들의 수지식과 기-액 평형 관계식에 적용하면, 아래 와 같은 관계식들을 세울 수 있다.

전체 물질 수지식은

$$L_j - V_j = \text{상수} \quad (j = 1, \dots, n+2) \quad (10)$$

이고, 각 성분의 물질 수지식은

$$L_j x_{ij} - V_j y_{ij} = u_i \quad (j = 1, \dots, n+2) \quad (11)$$

이고, 에너지 수지식은

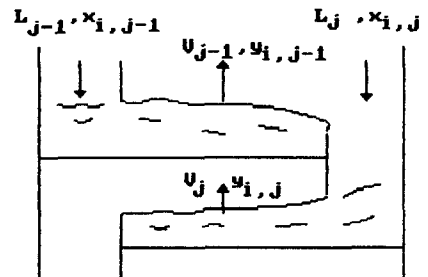


그림 3. 다성분 흡수계

$$L_j h_j - V_j H_j = U \quad (j = 1, \dots, n+2) \quad (12)$$

이며, 기-액 평형 관계식은 다음과 같다.

$$y_{i,j-1} = \sum_{k=1}^{n+2} L_k (z_j - \delta z) y_{ik} = K_{ij} x_{ij} \quad (13)$$

$$(j = 2, \dots, n+2)$$

식 (11) 를 y_{ij} 에 관해서 정리하면,

$$y_{ij} = (1/V_j) (L_j x_{ij} - u_i) \quad (14)$$

$$(j = 1, \dots, n+2)$$

이다.

여기서, 경계조건은

$$x_{ij} (j=0) = x_{i0}, L_{n+2} x_{i,n+2} - V_N y_{i,N} = u_i \quad (15)$$

이다.

식 (14) 와 식 (15) 으로부터

$$y_{ij} = (1/V_j) (L_j x_{ij} - L_{n+2} x_{i,n+2} + V_N y_{i,N}) \quad (16)$$

식 (16) 을 식 (13) 에 대입하여 정리하면,

$$\sum_{k=1}^{n+2} L_k (z_j - \delta z) \{ (L_k / V_k) x_{ik} - (L_{n+2} / V_k) x_{i,n+2} + (V_N / V_k) y_{i,N} \} = K_{ij} x_{ij} \quad (17)$$

이 된다.

4. 다성분 흡수계의 풀이

세가지 예제를 풀어서 차수 감소 모델의 정확도를 시험하였다. 각 문제들의 조작 조건들은 표.2 에 나타내었다.

계산에 사용된 물성치는 다음과 같다.

$$H_j = \sum_{i=1}^c y_{ij} H_{ij} \quad (18)$$

$$h_j = \sum_{i=1}^c x_{ij} h_{ij} \quad (19)$$

$$H_{ij} = A + B T + C T^2 \quad (20)$$

$$h_{ij} = a + b T + c T^2 \quad (21)$$

$$K_{ji} = \alpha + \beta T + \gamma T^2 + \delta T^3 \quad (22)$$

여기서, 각 물성치들의 계수 값들은 Amundson 과 Pontinen (3) 등이 사용한 자료들을 사용하였다. 정밀한 각 단에서의 모델로 예측된 정상상태의 결과를 차수 감소 모델의 결과와 비교함으로써 본 모델의 정확성을 확인하였다. 차수 감소 모델의 정확성을 비교 조사하기 위해서 Thomas algorithm 을 사용한 각 단에서 정밀한 모델이 사용되었다.

예제.1의 정상상태 모사 결과를 그림.4 와 그림.5, 그림.6 에서 비교하여 도시하였다. 네개의 collocation 점들을 사용하였을때, 정밀한 각단에서의 모사 결과에 큰 오차 없이 잘 근사되고 있음을 알 수 있다. 그림.4 은 정상상태에서 혼합물의 주성분인 프로판의 액상 및 기상 조성의 탑 길이 방향 변화를 도시한 것이다. 중간 collocation 점들에서 다소의 오차가 보이지만 탑 하단과 탑 상단에서의 결과는 잘 일치함을 알 수

표.2 각 예제들의 조업 조건

	예제.1	예제.2	예제.3
단수	20	20	25
성분의 수	2	3	5
압력(lbm/in ²)	250	250	250
액상의 각 성분의 조성			
성분.1(C ₁)	none	0.01	0.049
성분.2(C ₂)	0.98	0.97	0.895
성분.3(C ₃)	0.02	0.02	0.066
성분.4(C ₄)	none	none	none
성분.5(C ₅)	none	none	none
액상 유속 (kmol/hr)	1260	1260	1000
액상 온도 (°F)	122.07	122.07	122.07
기상의 각 성분의 조성			
성분.1(C ₁)	none	0.02513	0.0284
성분.2(C ₂)	0.72	0.6995	0.4003
성분.3(C ₃)	0.28	0.27537	0.4586
성분.4(C ₄)	none	none	0.1061
성분.5(C ₅)	none	none	0.0066
기상 유속 (kmol/hr)	1800	1800	1800
기상 온도 (°F)	165.2	165.2	215.43

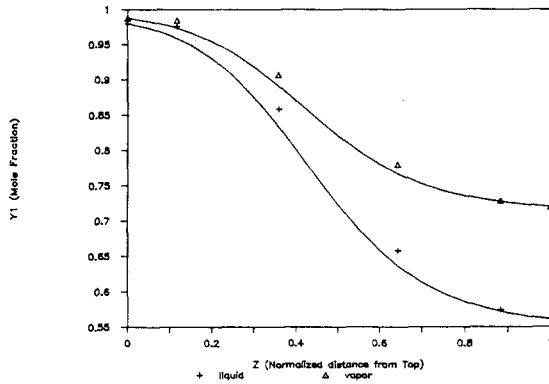


그림 4. 액상 및 기상 조성의 탑길이 방향 변화 (2성분계)

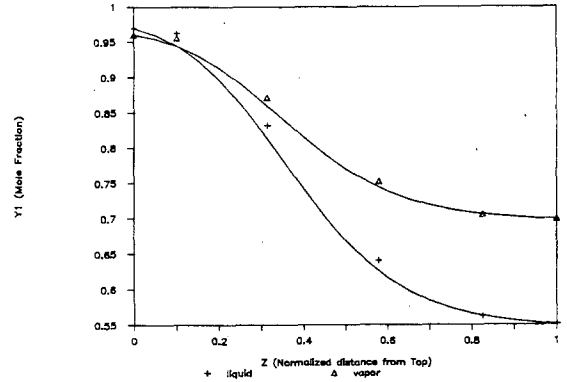


그림 7. 액상 및 기상 조성의 탑길이 방향 변화 (3성분계)

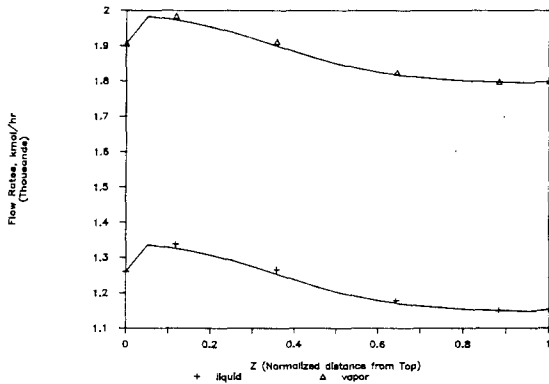


그림 5. 액상 및 기상 유속의 탑길이 방향 변화 (2성분계)

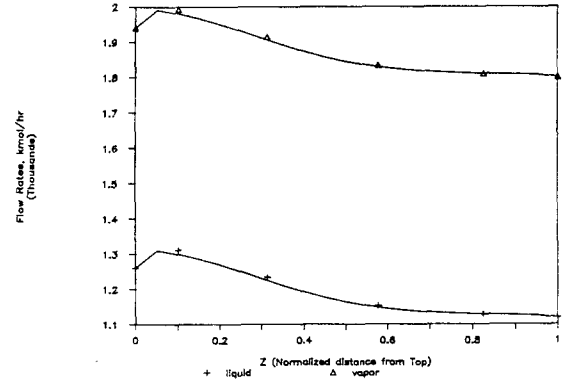


그림 8. 액상 및 기상 유속의 탑길이 방향 변화 (3성분계)

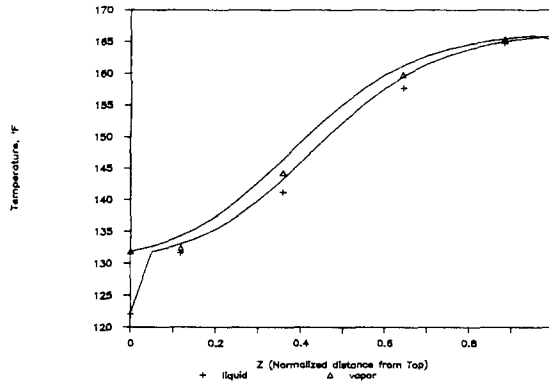


그림 6. 액상 및 기상 온도의 탑길이 방향 변화 (2성분계)

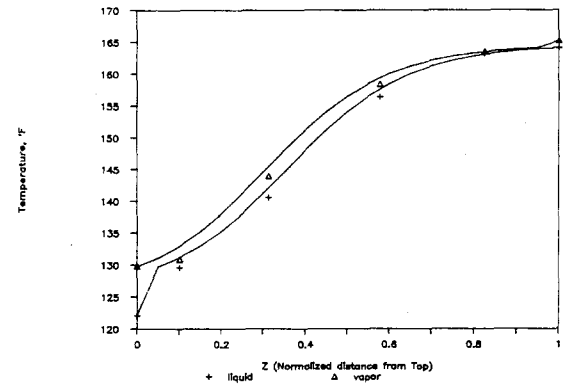


그림 9. 액상 및 기상 온도의 탑길이 방향 변화 (3성분계)

있다. 그림.5 는 액상 및 기상 유속의 탑 길이 방향 변화를 도시한 것으로 잘 근사하고 있다. 그림. 6 은 액상, 기상 온도의 탑 길이 방향 변화를 도시한 것이다. 예제.2 는 예제.1 과 마찬가지로 4 개의 collocation 점들을 사용하였고, 그림.7 와 그림.8, 그림.9 에 각각 액상, 기상의 조성, 유속 및 온도를 계산하여 정밀한 모사결과와 비교 도시 하였다. 예제.3 은 단수가 25

단이고, 에탄 과 프로판, 노말 부탄, 노말 펜탄, 노말 헥산의 5 성분계이다. 예제.1,2 에서와 마찬가지로 그 결과를 그림. 10 과 그림.11, 그림.12 에 비교하여 도시하였다.

표.3 는 또 다른 예제들의 조업조건들을 나타내고 있다. 표.3 의 예제에서는 각 성분을 이상용액으로 보고, Antoine 식으로 부터 K 값을 계산하여

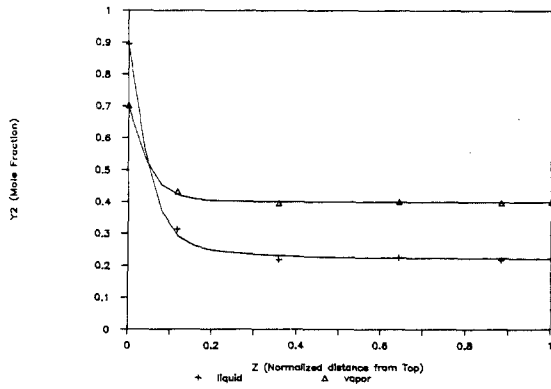


그림 10. 액상 및 기상 조성의 탑길이 방향 변화 (5성분계)

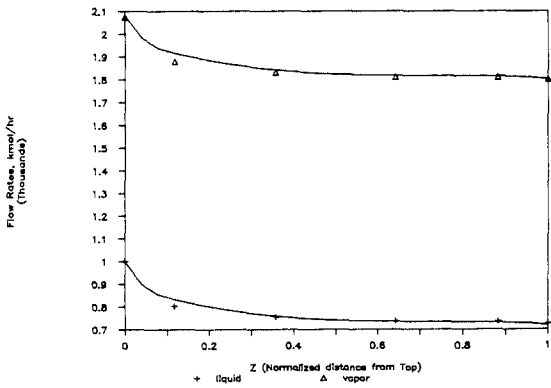


그림 11. 액상 및 기상 유속의 탑길이 방향 변화 (5성분계)

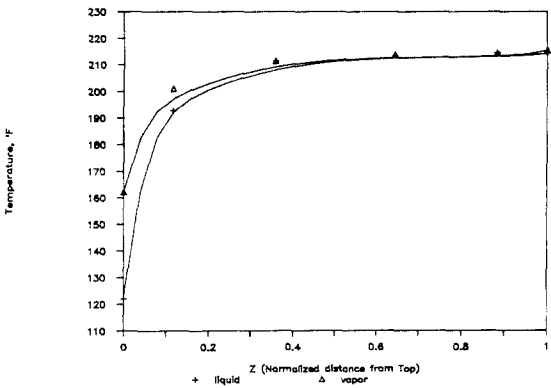


그림 12. 액상 및 기상 온도의 탑길이 방향 변화 (5성분계)

표.3 각 예제들의 조업 조건

	예제.4	예제.5
단수	25	25
성분의 수	3	3
압력(mm Hg)	1000	1000
액상의 각 성분의 조성		
성분.1	0.61875	0.61875
성분.2	0.29914	0.29914
성분.3	0.08211	0.08211
액상 유속 (mol/min)	1.008×10^7	1.008×10^7
액상 온도 ($^{\circ}$ C)	110	110
기상의 각 성분의 조성		
성분.1	0.2832	0.2832
성분.2	0.18473	0.18473
성분.3	0.53207	0.53207
기상 유속 (mol/min)	0.73929×10^7	0.73929×10^7
기상 온도 ($^{\circ}$ C)	117	117
열 유입량	none	-10^9
유입 stream 수	none	2
유입단 번호	none	5, 15

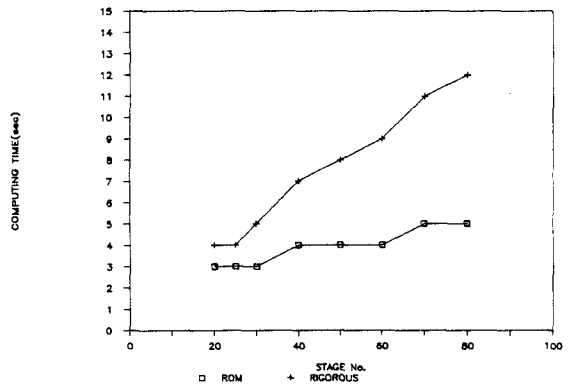


그림 13. 두 모델의 계산 시간 비교

사용하였다. 예제.4에서는 흡수탑의 단수를 변화시키면서 계산에 소요되는 시간을 측정하였다. 두 모델 간에 소요되는 계산 시간을 비교하여 그림.13에 도시하였다. 계산은 IBM/PC-AT (8 MHz)를 사용하였다. 그림.13에서 보는 바와 같이 차수 감소 모델의 경우 6개의 collocation 점들만을 사용하여 거의 비슷한 정확도를 유지하면서 계산에 소요되는 시간은 단수가

증가할수록 더욱 크게 줄일 수 있음을 알 수 있다. 차수 감소 모델의 경우, 단수가 증가하여도 계산에 소요되는 시간이 거의 변화가 없는 반면에 각 단계에서의 모델식을 풀 경우, 단수가 증가할수록 계산 소요

시간이 크게 증가함을 알 수 있다. 따라서 단수가 매우 큰 장치의 모사에 차수 감소 모델을 적용하는 것이 매우 바람직함을 알 수 있다.

예제.5 는 예제.4 와 같은 성분들의 흡수계에서 중간에 열 이동이 있는 문제이다. 실제 흡수탑에서는 탑 중간 부분에서 열교환을 해주는 경우가 많이 있다. 그런 경우에 차수 감소 모델을 적용하여 그 모사 결과를 그림.14 에 도시하였다. 그림.14 에서 보는 바와 같이 중간 단에서 profile 에 불연속 점이 있지만, 차수 감소 모델로써 매우 잘 근사되고 있음을 알 수 있다.

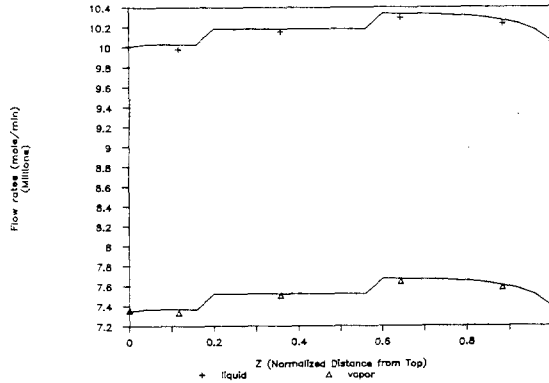


그림 14. 열 이동이 있는 흡수탑의 모사 결과 비교

5. 결론 및 토론

여기서 개발된 정상상태에서의 차수 감소 모델은 앞에서의 여러 예제를 통한 시험결과 그 정확성과 효율성이 입증되었다. 지금까지 정상상태의 모델링을 하기 위해서 적당한 초기 조건으로부터 dynamic 모델을 풀어서 정상상태에서의 결과들을 계산하였는데, 본 모델의 개발로 여러가지 변수들을 신속하게 계산할 수 있었다. 특히 다 성분계의 해석이나, 단수가 매우 많은 분리탑의 해석에 이용할 경우, 문제의 차원을 크게 증가시키지 않아도 결과의 정확성을 보장할 수 있었다. 그러므로 본 모델은 정상상태 혹은 비정상상태의 최적화, 프로세스의 체계적 분석, 제어계의 합성 및 평가 등과 같이 모사해야 할 문제의 수가 많은 종합적인 상황에 잘 이용될 수 있다⁽⁴⁾. 대부분의 예제에서 알 수 있듯이 4 개의 collocation 점들을 사용하여 훌륭한 근사 결과를 얻을 수 있었다. 또한 흡수탑의 중간단에서 불연속적인 냉각, 가열 또는 side draw 나 side feed 가 있을 경우 예도, 본 모델의 예측은 특히 탑상과 탑저에서 매우 정확함을 알 수 있었으며⁽⁵⁾, 이러한 특성은 분리탑의 설계나 최적화에 매우 중요한 것이다.

본 모델을 예제에 적용하면서 collocation 점의 선택이 상당히 중요함을 알 수 있었다. 가장 바람직한 형태의 차수 감소 모델은 가능한 한 적은 collocation 점들을 사용하여 원하는 정확도를 보증해 주어야 한다.

이를 위해서는 본모델을 두가지 방향에서 개선할 수 있음을 Srivastava 와 Joseph⁽⁶⁾ 등이 제시하고 있다. 한가지는 문제의 특성에 적합한 근사 다항식의 선택이다. 본 예제에서는 Jacobi 다항식을 사용하였는데, Hahns 의 다항식도 사용될 수 있다. 또한 방법은 기 선택된 다항식으로 부터 가산인자인 α , β 를 잘 선택하여 collocation 점들의 바람직한 위치를 정하는 것이다. 앞의 예제에서도 예제.2 의 경우에 $\alpha=1$, $\beta=1$ 인 경우에는 4 점 근사로 잘 안되었지만, $\alpha=2$, $\beta=1$ 로 계산한 결과 4 점 근사로 좋은 결과를 얻을 수 있었다.

6. 참고 문헌

- (1) Y. S. Cho, B. Joseph, Reduced order steady state and dynamic models for separation processes, Part I. Development of the model reduction procedure. *AIChE J.*, 29, 2, p.261, (1983)
- (2) Y. S. Cho, B. Joseph, Reduced order models for separation processes, Part II. Application to multicomponent distillation, *AIChE J.*, 29, 2, p.270, (1983)
- (3) N. R. Amundson, A. J. Pontinen, Multicomponent distillation calculations on a large digital computer, *I & EC*, 50, 5, p.730, (1958.5)
- (4) B. Drozdowicz, E. Martinez, Reduced models for separation processes in real-time simulators., *Computer and Chemical Engineering*, 12, 6, p.547, (1988)
- (5) Y. S. Cho, B. Joseph, Reduced order models for separation columns, Part III. Application to columns with multiple feeds and sidestreams. *Computers and Chemical Engineering*, 8, 2, p.81, (1984)
- (6) R. K. Srivastava and B. Joseph, Reduced order models for staged separation columns, Part V. Selection of collocation points. *Computers and Chemical Engineering*, 9, 6, p.601, (1985)