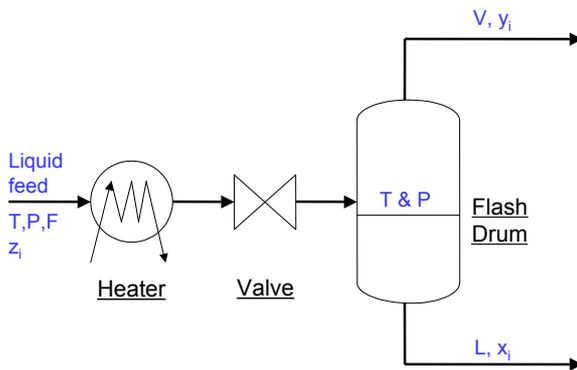


## 제 3주차 공정모사 인터넷 강의록

### 1. 서론

PRO/II with PROVISION은 전신이 Dr. Wang이 1968년도에 개발한 PROCESS로써 윈도우 상에서 구현되는 Simulation Science사의 그래픽용 화학공정 모사기이다. 본 장에서는 5.1버전을 중심으로 다음의 예제에 주어진 간단한 플래쉬 계산 문제에 대한 그래픽 입력방법과 키워드입력 방법을 소개하기로 한다. PRO/II는 Aspen Technology사의 ASPEN PLUS와 쌍벽을 이루는 범용성 화학공정 모사기으로써 현재 국내의 많은 설계회사와 조업회사, 연구소 및 대학에서 새로운 공장의 설계나 기존공장의 개조 및 연구용으로 이용되고 있다.

#### [예제] Isothermal Flash Calculation



위의 그림과 같이 벤젠과 톨루엔 이성분계로 구성된 액체 용액이 열교환기를 통해서 가열된 후 밸브를 통해서 압력을 떨어뜨린 후 플래쉬 드럼을 통해서 증기와 액을 서로 분리시킨다. 원료액의 조건은 다음과 같다. 플래쉬 드럼의 온도는 100℃이고 압력은 1.2bar로 운전할 때 플래쉬 드럼을 떠나는 증기와 액의 몰유량과 각 성분의 조성을 구하라. 열역학 모델식으로는 Raoult의 법칙을 이용하라.

풀이 1) Antoine 증기압 식을 이용하여 이 문제를 수계산으로 풀어라.

풀이 2) PRO/II를 이용해서 이 문제를 풀고 그 결과를 수계산의 결과와 비교하라.

풀이 3) 위의 두 결과를 ASPEN PLUS의 결과와 비교하라.

Component	Mole %
Benzene	60.0
Toluene	40.0
Temperature (°C)	25.0
Pressure (bar)	3.0
Flow Rate (Kgmole/hr)	100

### 풀이 1) Antoine식을 이용한 수계산을 이용한 Flash Calculation

먼저 이 문제를 풀기위해서 플래쉬 드럼 주위의 물질수지를 세워 보면,

Overall Material Balance에 의해서,

$$F = V + L \quad (1)$$

Component Material Balance에 의해서,

$$Fz_i = Vy_i + Lx_i \quad (2)$$

플래쉬 드럼을 떠나는 증기상과 액상은 각각 평형이므로 Raoult의 법칙을 적용하면,

$$y_i P = x_i P_i^{vap} \quad (3)$$

여기에서 K-value를 도입하기 위해서 (3)식을 변형하면 다음과 같다.

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{P_i^{vap}}{P} \quad (4)$$

위의 (4)식에서  $P$ 는 플래쉬 드럼의 운전압력이고  $P_i^{vap}$ 는 플래쉬 드럼의 운전온도에서 각 성분의 증기압이다. 그러면 벤젠과 톨루엔의 증기압 표현식을 위해서 Antoine 증기압식을 적용하면 다음과 같다.

$$\log P_1^{vap}(kPa) = 6.01905 - \frac{1204.637}{t(^{\circ}C) + 220.069} \quad (5)$$

$$\log P_2^{vap}(kPa) = 6.08436 - \frac{1347.620}{t(^{\circ}C) + 219.787} \quad (6)$$

여기에서 원료유 중에서 플래쉬 드럼을 통해서 증기로 나가는 분률,  $\phi$ 을 정의하면 다음과 같다.

$$\phi = \frac{V}{F} \quad (7)$$

그리고, 각상에서 각성분들의 조성의 합은 1이므로 다음과 같다.

$$\sum_i x_i = 1 \quad (8a)$$

$$\sum_i y_i = 1 \quad (8b)$$

(2)식에 (1), (4), (7), (8a)와 (8b)식을 대입하면 다음을 얻는다.

$$z_i = \phi K_i x_i + (1 - \phi) x_i \quad (9)$$

윗식을 변형하여 플래쉬 드럼의 액상의 조성,  $x_i$ 와  $y_i$ 에 대해서 정리하면 다음을 얻는다.

$$x_i = \frac{z_i}{\phi(K_i - 1) + 1} \quad (10)$$

$$y_i = K_i x_i = \frac{K_i z_i}{\phi(K_i - 1) + 1} \quad (11)$$

(10)과 (11)식을 (8a) 및 (8b)식에 적용해서 정리하면 다음을 얻는다.

$$F(\phi) = \sum_i \frac{z_i(K_i - 1)}{\phi(K_i - 1) + 1} = 0 \quad (12)$$

(12)식에서  $z_i$ 는 원료성분인 벤젠과 톨루엔의 조성이고,  $K_i$ 는 각 성분의 K-value이다. 위의 방정식을 만족하는  $\phi$ 값을 0과 1 사이에서 찾으려 한다. 먼저 각 성분의 K-value를 구하기 위해서 100°C에서 각 성분의 증기압을 구하면 다음과 같다.

$$P_1^{vap} = 180.04 \text{ kPa}, \quad P_2^{vap} = 74.17 \text{ kPa}$$

그리고 전체압력 1.2bar는 121.59kPa이므로 각 성분의 K-value는 다음과 같다.

$K_1 = 1.4824$ ,  $K_2 = 0.6100$ 이다. 그리고,  $z_1 = 0.6$ ,  $z_2 = 0.4$ 이므로 이를 (12)식에 대입하면 다음을 얻는다.

$$F(\phi) = \frac{0.28944}{0.4844\phi + 1} - \frac{0.156}{-0.39\phi + 1} = 0 \quad (13)$$

위의 (13)식을 그래프로 나타내면 다음의 그림 1과 같아진다.

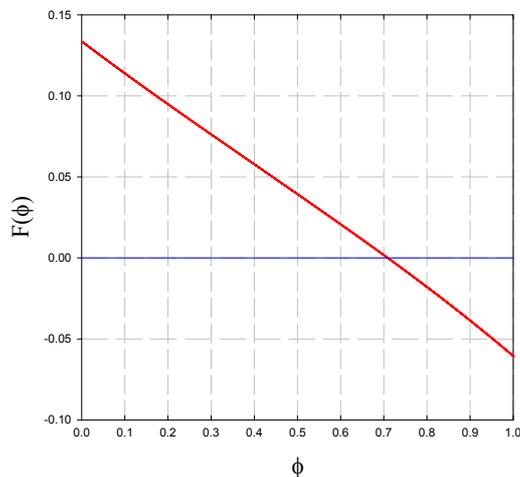


그림 1:  $\phi$ 대  $F(\phi)$ 곡선,  $\phi = 0.708$ 에서  $F(\phi) = 0$ 이 된다.

최종적으로,

$$V = 70.8 \text{Kgmole/hr}$$

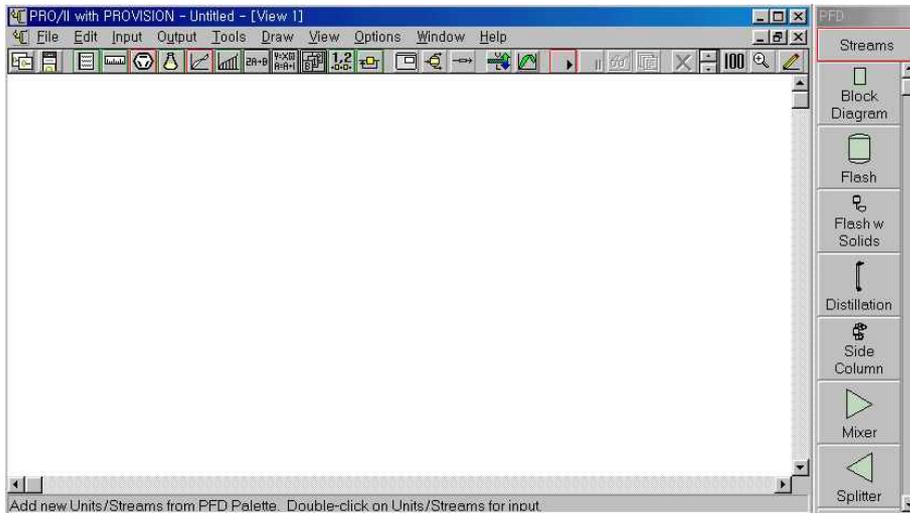
$$L = 29.2 \text{Kgmole/hr}$$

$$x_1 = 0.4468, \quad x_2 = 0.5532, \quad y_1 = 0.6632 \text{와} \quad y_2 = 0.3368$$

## 폴이 2) PRO/II with PROVISION을 이용한 Flash Calculation

### Step 1) Process Flowsheet의 구성

먼저 이 PRO/II를 구동하기 위해서 다음의 아이콘을 두 번 클릭하면 초기화면이 나타나는데 이때 File 메뉴에서 New를 선정하면 다음과 같은 화면이 나타난다.



### 그림 2: Building the Flowsheet

다음 단계는 Flowsheet상에 플래쉬 드럼을 그리는 작업일 것이다. 이는 화면 오른쪽의 PFD에 Flash를 왼쪽 마우스로 클릭한 후에 Flowsheet 윈도우 상의 원하는 곳에 위치시키면 된다. 그러면 다음 그림 3과 같이 나타날 것이다. 그 다음 작업은 플래쉬 드럼에 입력과 출력 Stream을 연결하는 작업인데 이는 오른쪽의 PFD 아래 아래의 Streams를 클릭한 후에 플래쉬 드럼의 연결 port에 Stream을 연결하면 된다.

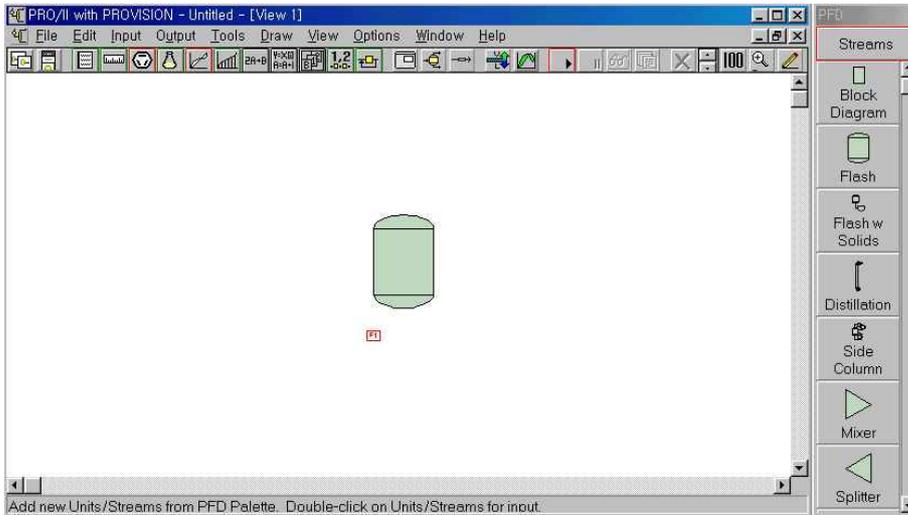


그림 3: PFD: Selection of Flash Unit

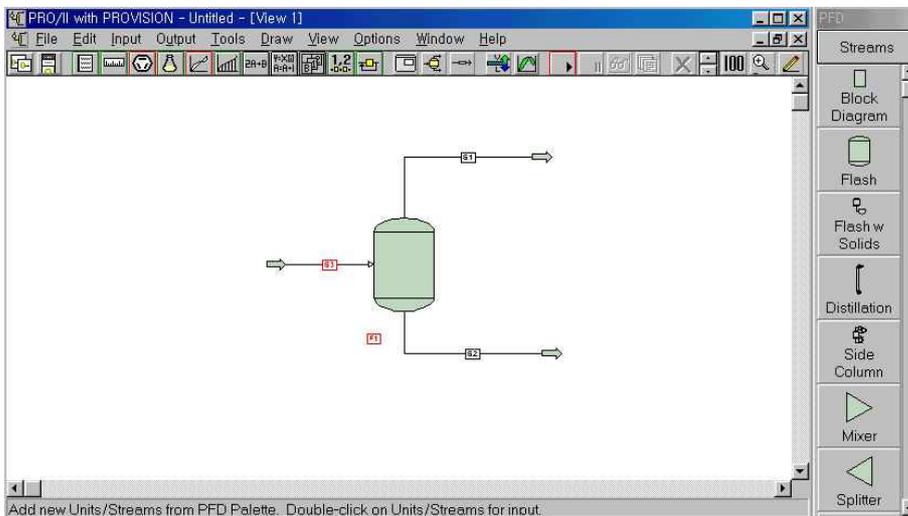


그림 4: PFD: Flash Unit과 Stream의 연결

## Step 2) The Default Units of Measure Window

주어진 공정의 모사를 위해서 입력 및 출력의 단위계를 선정하는 단계이다. 이는 메뉴상에서 다음을 클릭하면 된다. 그러면 다음과 같은 창이 나타난다.



여기에서 Default 단위계는 영국식 단위계이므로 이것을 Metric 단위계로 변환하기 위해서 왼쪽 상단에 있는 Initialize from UOP Library...를 선택한 후에 Metric으로 변환하고 압력단위를 Bar(abs)로 선정한다.

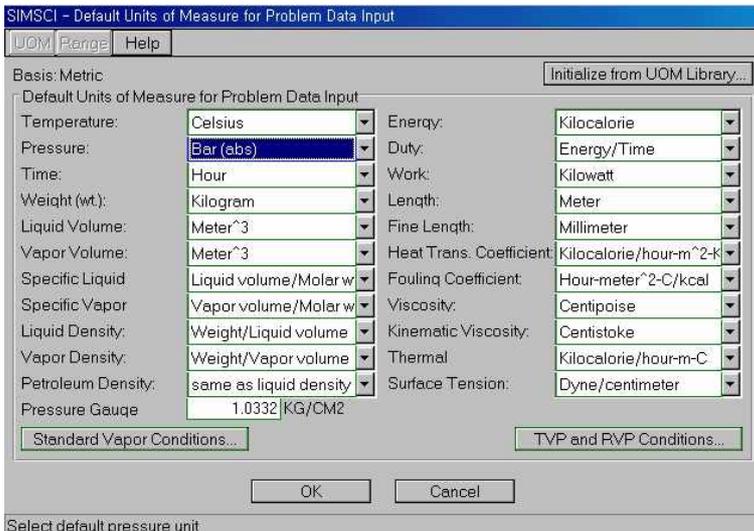


그림 5: 입력 및 출력 단위 입력 창

### Step 3) The Component Selection Window

다음과 같이 벤젠 모양의 버튼을 클릭하면 PRO/II Database에 내장되어 있는 많은 순수성분들 중에서 원하는 성분들을 선정할 수 있다.

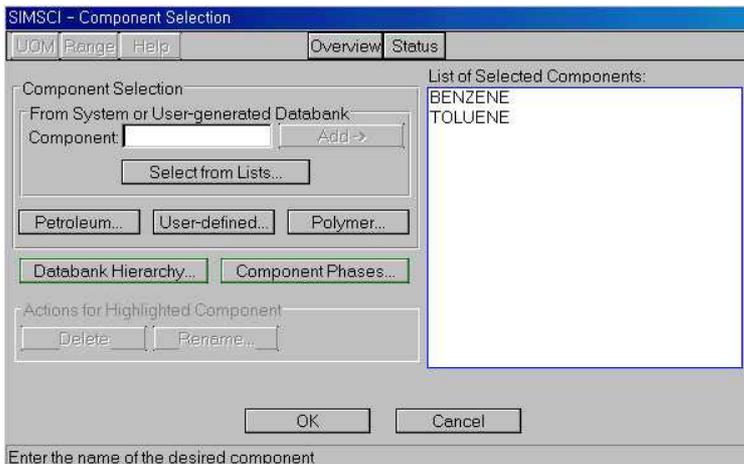


그림 6: Component 선정 창

위의 그림 6에서 Component 박스안에 BENZENE이라고 입력한 후 Add →를 클릭하고 그 다음에 TOLUENE을 입력하고 Add →를 클릭하면 위의 그림과 같이 보일 것이다. 그러면 문제의 조건에 주어진 벤젠과 톨루엔의 성분을 모두 선정 입력한 것이다.

### Step 4) The Thermodynamic DataWindow

다음의 공비점 모양의 버튼을 클릭하면 열역학 모델이 내장되어 있는 창으로 들어간다.



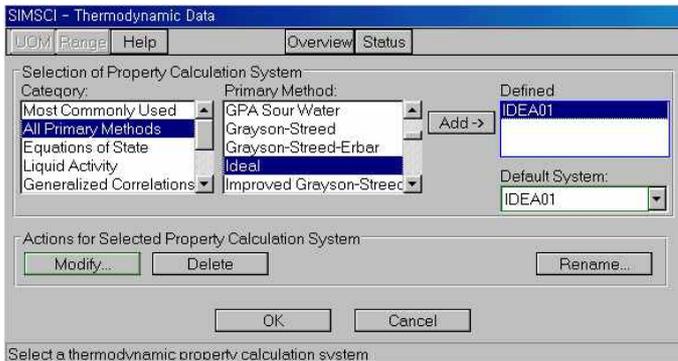


그림 7: 열역학 모델식들이 내장되어 있는 창

그림 7에서처럼 Category 박스에서 All Primary Methods를 선택한 후에 Primary Method 박스에서 Ideal을 선택한 후 Add →를 클릭하면 IDEA0가 정의된다. 이는 Ideal Raoult의 법칙을 의미하는 것이다.

#### Step 5) The Stream Data Window

Main Process Flowsheet 상에서 Feed Stream을 왼쪽 마우스로 클릭하 후 다시 오른쪽 마우스로 클릭하면 입력창이 나타나는데 여기에서 Data Entry를 클릭하면 다음과 같은 창이 나타난다.

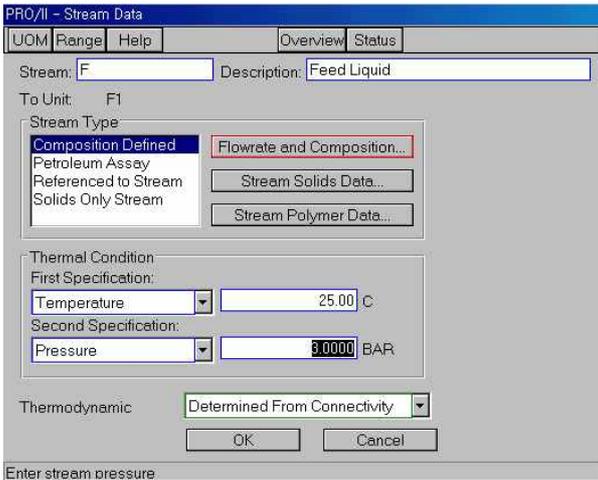


그림 8: Stream Data 입력 창

Stream number는 F로 하였으며 온도와 압력을 입력하였다. 그 다음 작업은 입력유량과 각 성분의 조성을 입력하는 일이다. 이는 Flowrate and Composition항을 클릭한다.

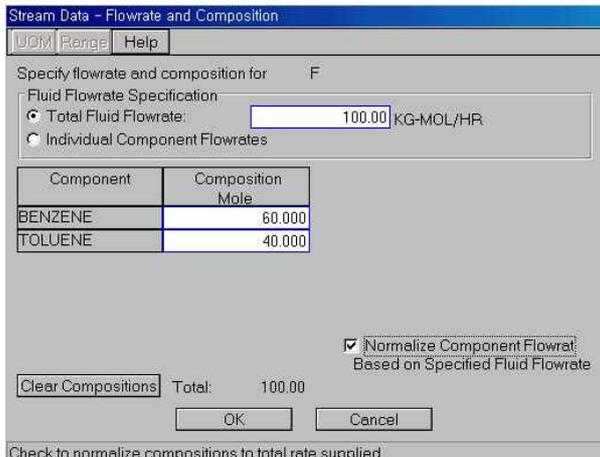


그림 9: Flowrate과 Composition 입력 창

### Step 6) Unit Operations Window

Main Process Flowsheet 상에서 Feed Unit을 마우스로 두 번 클릭하면 다음의 창이 생성된다.

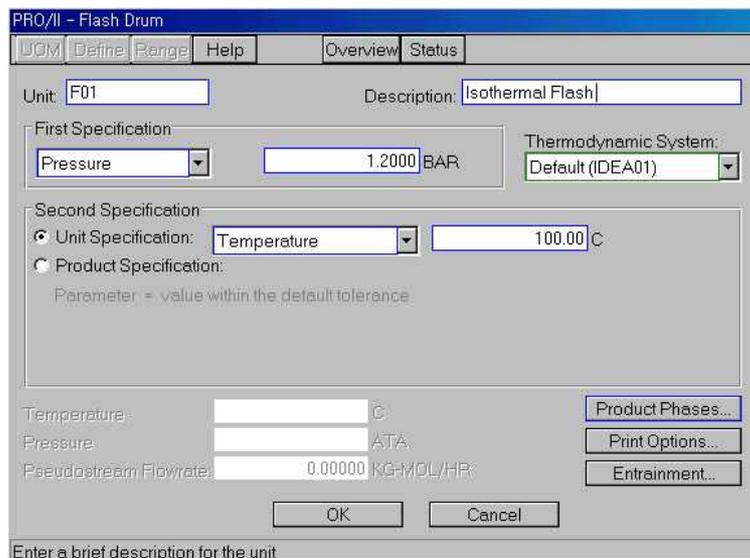


그림 10: Flash Window

문제의 조건에서 주어진 대로 압력은 1.2bar로 온도는 100℃로 입력한 후에 OK버튼을 클릭하면 모든 필요한 입력이 완결되었다.

### Step 7) Run the Simulation

플래쉬 드럼을 모사하기 위해서는 다음의 버튼을 클릭하면 PRO/II 공정모사가 수행된다. 제대로 결과가 수행되면 다음과 같이 Flash Unit이 파란색으로 변한다. 만일 계산이 제대로 이루어지지 않았다면 플래쉬 드럼은 빨간색으로 변하게 된다.



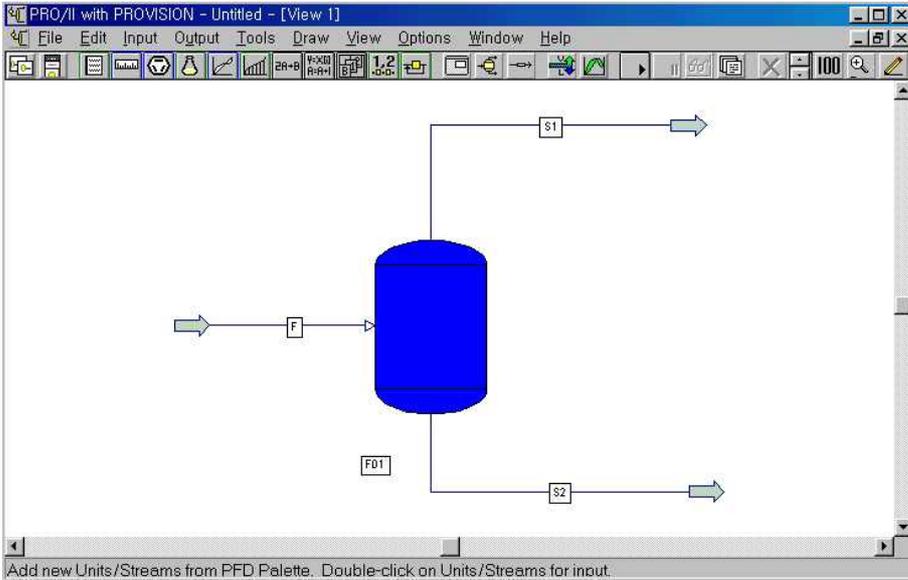


그림 11: 잘 수렴된 Flash Unit

### Step 8) View the Results

공정모사 후에 계산 결과를 보기 위해서 Output 메뉴에서 Stream Property Table을 선택한 후에 스프레드쉬트가 나타나면 이를 두 번 클릭하면 다음과 같은 창이 나타난다.

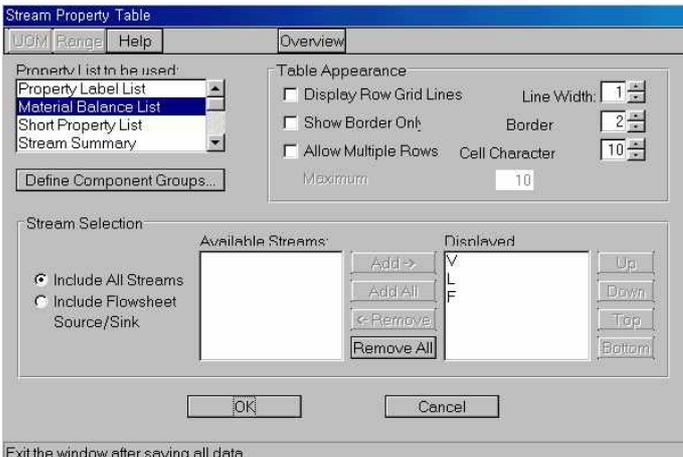


그림 12: Stream Property table

계산결과는 다음과 같은 물질수지 테이블로 나타난다.

Stream Name		V	L	F
Stream Description				Feed Liquid
Phase		Vapor	Liquid	Liquid
Temperature	C	100.000	100.000	25.000
Pressure	BAR	1.200	1.200	3.000
Flowrate	KG-MOL/HR	77.299	22.701	100.000
Composition				
BENZENE		0.649	0.433	0.600
TOLUENE		0.351	0.567	0.400

### PRO/II Keyword Input Listings:

지금까지는 PRO/II Graphic 입력에 대해서 알아보았는데 PRO/II는 Text 입력이 다른 공정모사기에 비해서 비교적 쉬우며 잘 발달되어 있다. 따라서 앞의 Flash Calculation 예제에 대한 Keyword 입력은 다음과 같다.

```
TITLE PROJECT=SIMULATION, PROBLEM=FLASH,USER=JHCHO
  DIMENSION METRIC, PRES=BAR
COMPONENT DATA
  LIBID 1,BENZENE/2,TOLUENE
THERMODYNAMIC DATA
  METHOD SYSTEM=IDEAL
STREAM DATA
  PROPERTY STREAM=F, TEMPERATURE=25, PRESSURE=3, PHASE=M, RATE (M)=100, &
    COMPOSITION (M)=1,60/2,40, NORMALIZE
  NAME F,Feed Liquid
UNIT OPERATIONS
  FLASH UID=F01, NAME=Isothermal Flash
    FEED F
    PRODUCT V=V, W=L
    ISO TEMPERATURE=100, PRESSURE=1.2
END
```

### 풀이 3) ASPEN PLUS를 이용한 Flash Calculation

ASPEN PLUS의 사용법에 대해서는 제 2주 강의록에 플래쉬 드럼을 계산하는 예제를 소개했으므로 여기에서는 결과만 나타내도록 한다. ASPEN PLUS 예제파일은 Chapter3-Flash1.bkp 파일에 저장하였다.

각각의 세가지 방법에 대한 계산 결과는 다음 테이블에 요약해 놓았다.

	수계산	PRO/II	ASPEN PLUS
$\phi$	0.708	0.773	0.765
$V$	70.8	77.3	76.5
$L$	29.2	22.7	23.5
$x_1$	0.4468	0.4326	0.4342
$x_2$	0.5532	0.5674	0.5658
$y_1$	0.6632	0.6492	0.6510
$y_2$	0.3368	0.3508	0.3490