

그래프 이론을 이용한 Mass Exchange Network의 합성

이 승권, 박선원

한국과학기술원 화학공학과 공정시스템 연구실

Synthesis of Mass Exchange Network using Graph-Theory

Seung-Kwon Lee and Sunwon Park

Dept. of Chem. Eng. KAIST

요약

환경 규제의 강화등에 의해서 mass exchange network (MEN)을 이용한 폐기물의 최소화는 새로운 분리 공정 합성의 분야로 각광받고 있다. MEN에서는 규제 농도보다 높은 stream들을 여러가지 separating agent를 사용하여 규제 농도 이하로 줄인다. 본 연구에서는 그래프 이론을 이용하여 MEN합성의 superstructure를 생성하였다. 또한 superstructure를 최적화 문제로 구성하여 MEN을 합성하였다.

서론

본 연구의 목표는 Mass Exchange Network (MEN)을 자동으로 합성하는 것이다. MEN이란 rich stream의 집합에서 lean stream의 집합으로 어떤 물질을 이동시키는 경제적인 mass exchanger 네트워크를 의미한다. 현재까지 두 가지 접근법에 의해서 MEN을 자동 합성하고자 하는 시도가 있었다. 첫째는 열교환망 합성과의 유사성을 이용 Pinch-Technology기반의 접근법이고 두번째는 MINLP의 최적화 문제로 합성하는 접근법이다. Pinch 기반의 방법은 decomposition method를 사용하기 때문에 운전비용과 고정비용을 동시에 최적화 시키지 못한다. 또한 네트워크 구조를 시스템적으로 적절히 표현하지 못하는 한계가 있다. MINLP에 근거한 방법은 MINLP로 적절히 공식화 되는 이점이 있으나, MINLP를 풀기가 어렵다는 문제점이 있다.

위 방법들의 문제점들을 해결하고자, 우리는 화학공정의 네트워크를 효과적으로 표현하는 그래프 이론으로 super structure를 생성하고 이로부터 모든 feasible structure를 구한다. 각각의 feasible structure는 integer 문제가 없는 비 선형 문제가 되므로 적절한 비 선형 최적화 기법을 사용하여 쉽게 최적화하여 결정된 구조하의 최적 MEN을 구할 수 있다. 각각의 최적화된 MEN을 비교하여 가장 비용이 적게드는 MEN을 결정할 수 있다. 제안된 절차를 개념도로 나타내면 그림 1과 같다.

최적화 문제구성

. Rich Stream 집합 = $\{i \mid i=1, \dots, NR\}$, rich stream의 유량은 G_i 이고, 초기농도는 y_i^S , 상한값은 y_i^U 이다. Rich stream에서는 richraw, richproduct, richintermediate 세가지 형태의 material node가 생성될 수 있다. Richraw와 richproduct node는 반드시 하나씩 존재해야 한다.

. Lean Stream 집합 = $\{j \mid j=1, \dots, NL\}$, lean stream의 유량의 상한값은 L_j^U 이고, 초기농도는 x_j^S , 상한값은 x_j^U 이다. Lean stream에서는 leanraw, leanproduct, leanintermediate 세가지 형태의 material node가 생성될 수 있

다. 만일 lean stream이 존재한다면 leanraw와 leanproduct node는 반드시 하나씩 존재해야 한다.

. Mass transfer equipment는 operating unit node로 묘사된다. 물질 전달이 일어나는 operating node에서는 두개의 rich material node와 두개의 lean material node가 연결된다.

. 평형관계식: rich stream i와 lean stream j 사이에

$$y_i^* = \phi_{ij}(x_j^*), \quad \phi_{ij} = m_{ij}(x_j^* + \varepsilon_{ij}) + b$$

. 최소 접근 농도 ε_{ij} : 열교환망에서의 최소접근온도와 유사한 의미로 각각의 mass transfer unit에서의 물질전달이 가능하도록 하는 값

. 최적화의 목적함수는 rich, lean stream의 요구조건을 만족하는 최소 비용의 mass exchange network의 합성이다.

문제의 단순화를 위해 사용한 가정은 다음과 같다.

- (1) 네트워크를 통과하는 각 stream의 유량의 일정하다.
- (2) 고려하는 물질의 평형은 다른 용질에 영향받지 않는다.
- (3) mass exchanger는 countercurrent 형태이다.
- (4) rich 사이 또는 lean stream사이에는 물질이동이 없다.
- (5) stream사이에 열교환합성은 고려하지 않는다.
- (6) 네트워크는 일정 압력하에서 운전된다.
- (7) 최소 접근 농도는 0.0001로 하였다.

그래프 이론에 의해서 결정된 네트워크 구조는 비선형 최적화 문제로 공식화될 수 있다. 이때의 제약조건은 다음과 같다.

(a) material node에서의 제약조건

. 들어오는 총괄 질량 수지

$$\langle MAT \rangle \cdot F = \sum_{i=1}^m \langle OP_i^{IN} \rangle \cdot RF \quad \text{for rich material node}$$

$$\langle MAT \rangle \cdot F = \sum_{i=1}^m \langle OP_i^{IN} \rangle \cdot LF \quad \text{for lean material node}$$

. 나가는 총괄 질량 수지

$$\langle MAT \rangle \cdot F = \sum_{j=1}^n \langle OP_j^{OUT} \rangle \cdot RF \quad \text{for rich material node}$$

$$\langle MAT \rangle \cdot F = \sum_{j=1}^n \langle OP_j^{OUT} \rangle \cdot LF \quad \text{for lean material node}$$

. 들어오는 이동 물질 질량 수지

$$\langle MAT \rangle \cdot F * \langle MAT \rangle \cdot c = \sum_{i=1}^m \langle OP_i^{IN} \rangle \cdot RF * \langle OP_i^{IN} \rangle \cdot y_{out} \quad \text{for rich material node}$$

$$\langle MAT \rangle \cdot F * \langle MAT \rangle \cdot c = \sum_{i=1}^m \langle OP_i^{IN} \rangle \cdot LF * \langle OP_i^{IN} \rangle \cdot x_{out} \quad \text{for lean material node}$$

. 나가는 이동물질 질량 수지

$$\langle MAT \rangle \cdot F * \langle MAT \rangle \cdot c = \sum_{j=1}^n \langle OP_j^{OUT} \rangle \cdot RF * \langle OP_j^{OUT} \rangle \cdot y_{in} \quad \text{for rich material node}$$

$$\langle MAT \rangle \cdot F * \langle MAT \rangle \cdot c = \sum_{j=1}^n \langle OP_j^{OUT} \rangle \cdot LF * \langle OP_j^{OUT} \rangle \cdot x_{in} \quad \text{for lean material node}$$

(b) operating node에서의 제약조건

. rich stream의 물질이동량 = lean stream의 물질이동량
 $\langle OP \rangle \cdot RF * (\langle OP \rangle \cdot y_{in} - \langle OP \rangle \cdot y_{out}) =$

$\langle OP \rangle \cdot LF * (\langle OP \rangle \cdot x_{out} - \langle OP \rangle \cdot x_{in})$

. 열역학적인 물질이동의 제약조건

$m_{ij}(x_j^{OUT} + \epsilon_{ij}) + b - y_i^{IN} \leq 0$

$m_{ij}(x_j^{IN} + \epsilon_{ij}) + b - y_i^{OUT} \leq 0$

예제

예제 1. Copper recovery system

발생되는 rich stream과 이를 회수하기 위해서 사용가능한 lean stream에 대한 자료는 표 1에 있다. 예제의 운전 조성하에서의 평형식은 다음과 같다.

R1-S1: $y_1 = 0.734 x_1 + 0.001$

R1-S2: $y_1 = 0.111 x_2 + 0.008$

R2-S1: $y_2 = 0.734 x_1 + 0.001$

R2-S2: $y_2 = 0.148 x_1 + 0.013$

그래프이론에 적용하기 위해서 표 2와 같이 raw material, product, operating unit 집합을 만들어 super structure를 구하면 그림 3(R1에 대한 부분만 나타냄)이다.

표1. Copper recovery system의 stream data.

Rich Stream				Lean Stream			
Stream	G _i	y _i ^S	y _i ^U	Stream	L _i ^U	x _i ^S	x _i ^U
R1	0.25	0.13	0.10	S1	∞	0.030	0.070
R2	0.1	0.06	0.02	S2	∞	0.001	0.020

표 2 Materials and operating units of example 1.

Raw Materials	R1, R2, S1, S2
Product Materials	R1O, R2O, S1O, S2O
Intermediate Materials	R1M1, R1M2, R1S1, R1S2, R2M1, R2M2, R2S1, R2S2, S1M1, S1M2, S1S1, S1S2, S2M1, S2M2, S2S1, S2S2
Operating Units	R1-S1= { {R1M1, S1M1}, {R1S1, S1S1} } R1-S2= { {R1M2, S2M1}, {R1S2, S2S1} } R2-S1= { {R2M1, S1M2}, {R2S1, S1S2} } R2-S2= { {R2M2, S2M2}, {R2S2, S2S2} } DR11= { {R1}, {R1M1, R1M2} }, DR12= { {R1S1}, {R1M2} } DR13= { {R1S2}, {R1M1} }, DR14= { {R1S1}, {R1O} } DR15= { {R1S2}, {R1O} }, DR21= { {R2}, {R2M1, R2M2} } DR22= { {R2S1}, {R2M2} }, DR23= { {R2S2}, {R2M1} } DR24= { {R2S1}, {R2O} }, DR25= { {R2S2}, {R2O} } DS11= { {S1}, {S1M1, S1M2} }, DS12= { {S1S1}, {S1M2} } DS13= { {S1S2}, {S1M1} }, DS14= { {S1S1}, {S1O} } DS15= { {S1S2}, {S1O} }, DS21= { {S2}, {S2M1, S2M2} } DS22= { {S2S1}, {S2M2} }, DS23= { {S2S2}, {S2M1} } DS24= { {S2S1}, {S2O} }, DS25= { {S2S2}, {S2O} }

그림 4에는 최종적으로 구해진 최적의 MEN 이다.

참고 문헌

El-Halwagi, M. M. and V. Manousiouthakis, 1989, "Synthesis of Mass Exchange Networks", AIChE J., 35, 8.

El-Halwagi, M. M. and V. Manousiouthakis, 1990, "Automatic Synthesis of Mass Exchange Networks with Single Component Targets", Chem. Eng. Sci., 45, 9.

Papalexandri, K. P., E. N. Pistikopoulos, C. A. Floudas, 1993, "Synthesis of Mass Exchange Networks without Decomposition", AIChE Annual Meeting, Nov., St. Louis.

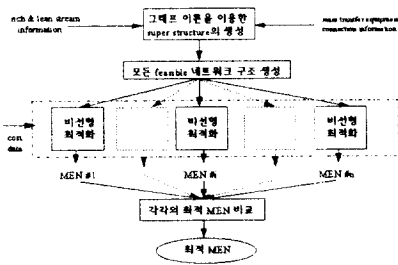


그림 1 제안된 MEN 합성법의 개념도

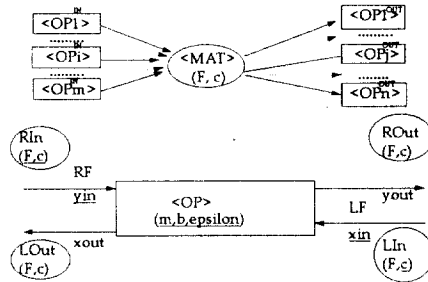


그림 2 Material and operating units

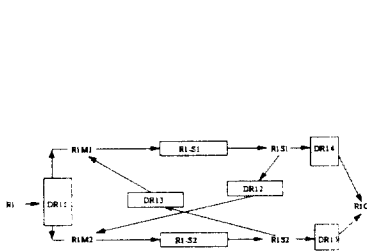


그림 3 super structure of R for example 1

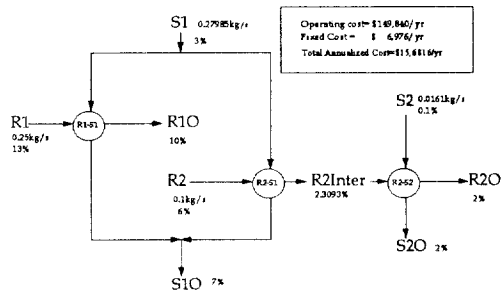


그림 4 예제 1의 최적 MEN 합성