

## Homotopy Continuation 방법을 이용한 다탑 분리 공정의 해석

한경택\*, 이강주, 윤인섭, 김화용

서울대학교 공과대학 화학공학과

### Analysis of Interlinked Separation Processes Using Homotopy Continuation Methods

Kyung Taek Han\*, Kang Ju Lee, En Sup Yoon, Hwayoung Kim

Dept. of Chem. Eng., College of Eng., Seoul Nat'l University

#### ABSTRACT

An improved and flexible matrix algorithm for solving interlinked separation problems which is based on the homotopy continuation method has been developed. A flexible model of the interlinked stream in standardized matrix form and JACOBIAN generation algorithm for homotopy continuation are suggested. Also DOF analysis is performed for easy-understanding of equation based simulation of complex column systems.

The Algorithm is tested on several problems of interlinked separation processes and some of results are documented.

#### 1. 서론

화학공정의 모사 문제는 많은 수의 비선형 방정식으로 나타내어지며 이들의 해석은 주로 Newton 방식에 의하여 이루어져 왔다. 그러나 이미 널리 알려진 바와 같이 Newton 방식은 해에 근사한 초기치를 항상 제공하여야 하며 지역적인 수렴 특성의 단점을 안고있다.[13] 이러한 제약으로 인해 화학공정의 해석은 방정식 중심 해법의 장점에 도 불구하고 순차적인 모듈방식이 선호되고 있는 실정이다. 그러나 공정의 모사 및 해석의 궁극적 목표가 최적화라는 것을 감안 할 때 방정식 동시 해법이 선호 되어야 할 것으로 여겨지고 있다. 이를 위해서는 무엇보다도 강력한 비선형 방정식의 해법이 요구된다. Homotopy Continuation 방식은 이러한 필요성에 적절한 것으로 알려져 있다. 1981년 Allgower와 Georg [1]에 의하여 비선형 방정식계에 해법에 효과적으로 적용될 수 있음을 밝힘으로써 널리 알려진 Homotopy Continuation 방식은 80년대 이후 몇몇 화학공학자들에 의하여 화학공학 분야에 응용 되어 오면서 비선형 방정식계로 표현되는 화학공정의 문제의 해석을 위한 새로운 수학적 기법으로 여겨지게 되었다. Homotopy Continuation 방식은 종괄적 수렴(Global Convergence)의 특성뿐 아니라 다중해의 구현과 선택된 변수에 대한 방정식계의 민감도 연구등이 용이하다는 특징을 갖는다. 현재 널리

사용되는 예측-수정(Predictor-Corrector) 방식의 Homotopy Continuation 방식의 기원은 Davidenko[2]로 부터 찾을 수 있다. 그후 Allgower와 Georg는 회전점(Turning Point)를 극복하기 위해 Differential-Arclength Homotopy Continuation 방식을 도입하였다.[1] Homotopy Continuation 방식에 대한 화학공학에서의 응용성 및 원리들은 Seydel 과 Hlavacek[12], Wayburn[15]등에 의해 잘 정리 되어 있다.

본 연구에서는 화학공정의 문제에 Homotopy Continuation 방법을 적용 함에 있어 보다 효율적인 Continuation 알고리즘을 개발하고 이를 다탑 분리공정에 적용함으로써 Homotopy Continuation 방식의 적용성을 확대 함은 물론 방정식 중심의 다탑 증류 공정의 해석을 위한 기본 행렬 알고리즘을 제시하려 한다.

#### 2. Homotopy Continuation 알고리즘의 구현

비선형 방정식계  $f(x)=0$  의 해 벡터  $x^* \in R^n$  을 위한 Homotopy함수  $h(x,t)$ 는 인위적 매개변수  $t$ 에 의한  $f(x)$ 와  $g(x)$ 의 조합으로 정의된다.

$$h(x,t) = tf(x) + (1-t)g(x) \quad (1)$$

$$\text{where } t \in [0,1] \text{ and } H : R^n \times R^1 \Rightarrow R^n$$

여기에서  $f(x)$ 는 풀고자하는 문제의 정의이며  $g(x)$ 는 간소화된 또는 이미 해를 알고 있는 함수로 정의된다. 즉  $t=0$  일때  $h(x,t) = g(x)$ 가 되며  $t=1$ 일때  $h(x,t) = f(x)$ 가 되어  $t$ 가 0 에서 1 까지 변화함에 따라 Homotopy함수는  $g(x)$ 로부터  $f(x)$ 로 그 형태가 변화된다. 즉  $t=0$  에서 이미 알고 있는 해로부터 출발하여 서서히  $t$ 를 변화 시킴으로써  $t=1$ 의 원하는 해를 구하는 수학적 기법으로 설명될 수 있다.  $t=0$ 에서  $t=1$ 까지의 해 곡선은 적절한 가정하에서 항상 보장된다.[15]  $g(x)$ 의 형태는 이미 알고 있는 간단한 함수 형태이거나 적절히 선택된 것이어야 하는데 본 연구에서는  $g(x) = f(x) - f(x^0)$ 의 Newton Homotopy를 사용하였다.

Homotopy Continuation 방식에서의 해곡선의 추적은

Homotopy 함수를 해 곡선의 호의 길이로 미분하여 얻은 변형된 형태의 미분방정식을 적절한 방식의 예측 수정 단계를 거침으로써 이루어지며 이러한 계산은 t=1 에 도달할때까지 계속된다.

예측 단계(Euler Prediction)

Newton Homotopy와 해 벡터 w는 (2)와 (3)식과 같이 정의될 수 있다.

$$h(x,t) = f(x) - (1-t)f(x^0) \quad (2)$$

$$w = \begin{bmatrix} x \\ t \end{bmatrix} \in R^{n+1} \quad (3)$$

Homotopy 함수는 n 차원 공간에서 n+1 개의 변수로 정의되며 이를 호의 길이 s에 대하여 미분하면 (4)식과 같은 초기치 미분방정식(IVP)의 형태를 얻을 수 있다.

$$\frac{dh}{ds} = \frac{\partial h}{\partial w} \frac{dw}{ds} = 0 \quad (4)$$

(4)식은 하나의 제약방정식 즉 호의 길이조건식을 더하여 줌으로써 R<sup>n+1</sup>공간에서 증강된 방정식 계로 정의할 수 있다.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial w} (w^k) \\ \frac{dw^T}{ds} (s^k) \end{bmatrix} \frac{dw}{ds} (s^k) = e^{n+1} \quad (5)$$

여기에서 w<sup>k</sup>는 k번째 continuation 단계의 해 벡터이며 s<sup>k</sup>는 k번째 단계의 호의 길이로 정의된다. e<sup>n+1</sup>는 n+1번째 요소 이외에는 모두 0의 요소를 갖는 행벡터로 정의된다. 해 곡선 추적의 방향은 (6)식을 일관성있게 만족할 수 있도록 결정된다.

$$\frac{dw^T}{ds} (s^{k-1}) \frac{dw}{ds} (s^k) > 0 \quad (6)$$

본연구에서는 dw<sup>T</sup>/ds (s<sup>k</sup>) 를 예측의 첫단계에서는 (e<sup>j</sup>)<sup>T</sup> 로 [10]그이외의 단계에서는 dw<sup>T</sup>/ds (s<sup>k-1</sup>)로[14] 대치 함으로써 예측 알고리즘을 구성 하였다.

(5)식에 의해 결정된 기울기 벡터는 (7)식에 의하여 단위 기울기 벡터 (Unit Target Vector)로 표준화된다.

$$\frac{dw}{ds} (s^k) = \frac{\sigma^k \nabla k}{\| \nabla k \|_2} \quad (7)$$

σ<sup>k</sup> = +1 또는 -1을 가지며 k≥1에서 기울기 벡터의 방향은 (6)식과 연관되어 결정된다.

해곡선 추적을 위한 다음 Continuation 단계의 초기해는 (8)식과 같이 정의된다.

$$w_0^{k+1} = w^k + \frac{dw}{ds} (s^k) \Delta s^k \quad (8)$$

여기에서 Δs<sup>k</sup>는 적분간격(Stepsize)이다.

수정 단계(Newton Correction)

해곡선 상에서 예측된 지점으로부터 좀 더 정확한 수렴 지점을 찾기 위하여 Newton 방식의 Correction을 행하였다. 만일 예측된 해가 해곡선에 충분히 가깝다면 수정단계에서 예측해를 해곡선 위에 정확히 일치시킬 수 있다.[1,3]

수렴단계는 (9)식과 같이 Newton 방식으로 행하여 진다.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial w} (w_i^{k+1}) \\ \frac{dw^T}{ds} (s^k) \end{bmatrix} \Delta w_i^{k+1} = \begin{bmatrix} -h(w_i^{k+1}) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (9)$$

(13)식의 마지막 열벡터는 Homotopy 함수에 부가된 방정식으로 수렴단계가 전 단계의 기울기 벡터에 수직으로 행하여 지는 것을 의미한다. 수렴단계는 주어진 수렴 정의식이 만족될 때까지 반복된다.

본연구에서는 한 등이[18] 제안한 알고리즘을 이용하여 t=0 또는 t=1 의 해지점에서는 지역적 변수방식(Local Parameter)으로 (e<sup>j</sup>)<sup>T</sup> 를 j=n+1 로 고정하여 (13) 식의 맨 아래 열에 치환하여 수정자를 계산하였다. 계산된 수정자는 Newton 방식에 의하여 k+1 번째 반복 해를 구한다.

$$w_{i+1}^{k+1} = w_i^{k+1} + \lambda \alpha \Delta w_i^{k+1} \quad (15)$$

w<sub>i+1</sub><sup>k+1</sup> 는 수렴정의가 만족될때 k+1 단계의 해로 받아들이며 w는 다음단계의 예측을 위한 값으로 사용 된다. 여기에서 λ 는 감쇄계수 (Damping Factor)로 정의 되며 Newton 방식에서는 λ = 1 , 수정된 Newton방식에서는 0 < λ < 1 의 값으로 정의 된다. α는 개연계수(Feasibility Factor)로 제약조건을 갖는 변수가 제한영역을 위반하는 것을 방지하기위한 것이다.[13]

적분간격(Stepsize) 제어 및 해곡선 추적 알고리즘

Continuation에 있어서 적분간격(stepsize)의 결정은 그 계산 효율에 상당한 영향을 미친다. 적분 간격이 너무 작게 결정되면 계산상 효율을 상실하게 되며 너무 크면 수정단계의 실패를 유발하게 된다. 그러나 Rheinboldt [3]등이 밝힌

바와 같이 Continuation 의 각 단계에서의 수렴가능 반경은 이전단계의 수렴반경으로 부터 일반적으로 추정하는 것이 불가능하다. 이러한 이유로 아직까지도 적절한 전략은 나오지 못하고 있다. 지금까지 사용된 적분간격 결정법의 유형은 크게 두가지인데 그 하나가 Deuflaud[4], Rheiboldt등[3]이 사용한 방식으로 해곡선을 다항식으로 근사함으로써 적분간격을 결정하는 방식이다. 다른 하나는 Allgower[1], Seader등[8,16]이 사용한 방식으로 해 곡선의 최전각과 수정자의 오차 축소율(Error Contraction)에 기본적인 적분간격 결정 방식이다. 이외에 상당히 간단한 기법들도 소개되었는데 대부분 비효율적인 것으로 지적 되고있다. 최근에는 Rion과 Van Brant[11]가 미분 기하(Differential Geometry)에 기본을 둔 2차 예측단계와 곡률(Curvature)에 기본적인 적분간격 결정법을 사용하였다.

본 연구에서는 한[18]등에 의하여 제안된 곡률의 근사식에 기본적인 적분간격 제어 전략 및 수렴정의를 사용 하여 알고리즘을 구성하였으며 이들이 완성한 해곡선 추적 알고리즘을 적용 하였다. 좀 더 상세한 알고리즘은 한등에 의하여 정리 되어 있다.

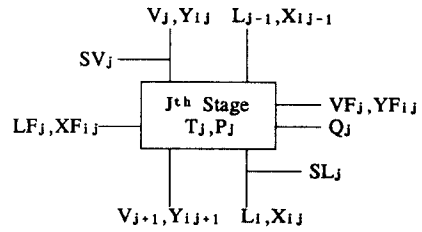
### 3. 다탑 분리 공정의 해를 위한 행렬 알고리즘

Homotopy Continuation방식을 분리 공정에 적용하기 위하여서는 기본적인 계 즉  $f(x)=0$  의 함수의 형태와 독립변수를 설정 하여야한다. 이미 하나의 종류 탑에 대하여서는 Naphtali 와 Snadholm [9]이 표준 행렬 알고리즘을 제시 하고 방정식 동시 해법에 기본적인 독립 변수와 초기 규정변수를 정의 하였다. 이 알고리즘은 Ferrari[6] 등에 의하여 비표준(Non-Standard) 형태에서의 행렬 알고리즘으로 확장 되었다. 그러나 이러한 단순한 표준 형태의 행렬 알고리즘으로는 서로 복잡 하게 연결된 종류 공정들에 적용하기 어렵다 본 연구 에서는 Naphtali 와 Sandholm 의 행렬 형태를 기본으로 하나의 공정은 물론 다 탑 종류 공정에도 효율 적으로 적용될 수 있는 행렬 알고리즘의 표준형(Standard Matrix Form)을 제시 하려한다.

#### 연결 스트림의 모델링

본 연구에서 사용한 평형단 모델을 그림 1. 에 나타내었다. 모델식에서 원료 유입 스트림은 액상과 기상의 연결 스트림을 감안 하여 분리 하여 모델링을 하였다.

다 탑 공정의 수학적 모델은 각 분리탑의 수학적 모델식(MESH Eq'ns) 과 환류 스트림의 연결식(Stream Connection Eq'ns) 그리고 모사의 규정식 (Specification Eq'ns)으로 구성 된다. 연결 스트림은 물질 환류 스트림과 열 환류 스트림으로 구분 할 수 있으며 그림 2.는 이들에 대한 개념도 및 연결 방정식을 도시 한 것이다. 물질 환류 스트림은 액상과 기상으로 구분하여 모델링을 하였으며 특히 최상단(최하단)의 기상(액상) 환류 스트림은 유량 방정식의 연결 변수



#### Model Equations

$$M_{ij} = L_{j-1}X_{ij-1} + V_{j+1}Y_{ij+1} + LF_jXF_{ij} + LF_jYF_{ij} - (L_j + SL_j)X_{ij} - (V_j + SV_j)Y_{ij}$$

$$E_{ij} = Y_{ij} - K_{ij}X_{ij}$$

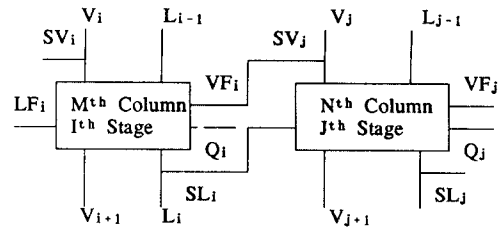
$$S_j = \sum X_{ij} - \sum Y_{ij}$$

$$H_j = L_{j-1}HL_{j-1} + V_{j+1}HV_{j+1} + LF_jHL_{Fj} + VF_jH_{VFj} - (L_j + SL_j)HL_j - (V_j + SV_j)H_{Vj} - Q_j$$

$$OM_j = L_{j-1} + V_{j+1} + LF_j + VF_j - L_j - SL_j - V_j - SV_j$$

그림 1. 평형단 모델

Fig. 1. Equilibrium Stage Model



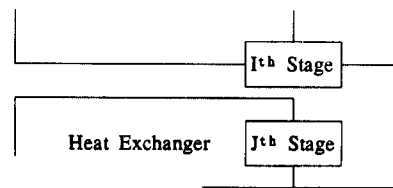
#### Connection Equations

$$\text{Compositons: } X_{mi}(Y_{nj}) - XF_{nj}(YF_{mi}) = 0$$

$$\text{Flowrate: } SL_i(SV_j) - LF_j(VF_i) = 0$$

$$\text{Temperature: } T_i(T_j) - TF_j(TF_i) = 0$$

(a) Material Stream Connection



#### Connection Equation

$$\text{Heat Flow: } Q_i - Q_j = 0$$

(b) Thermal Stream Connection

그림 2. 환류 스트림의 모델링

Fig. 2. Modeling of Interlinked Stream

를 SV(SL)가 아닌 V(L) 로 모델링 하였다. 그러므로 물질 환류 스트림에 대한 연결 방정식의 종류는 4 가지로 규정할 수 있었다. 열 환류 스트림의 경우 각 스트림의 열 교환량을 각 단이 갖는 열 유입량 Q 로 간주함으로써 새로운 변수의 도입 없이도 열 병합 형태의 열교환이 이루어지는 구조를 해석할 수 있게 하였다. 그러나 부가적인 열 유입(유출) 구조를 갖는 이중 효율(Double Effect) 열교환망에 대하여서는 Qex 라는 별도의 변수를 열 환류 스트림식에 부가하여 모델링 하였다.

자유도 해석

표 1. 다탑 분리공정의 행렬 표준형 및 자유도  
Table 1. Standard Form & DOF of Interlinked columns

(1) MESH 방정식의 표준형

$$f_1(x_1) = 0$$

$$f_1 = [CM_j, E_{ij}, S_j, H_j, OM_j]^T$$

$$x_1 = [X_{ij}, Y_{ij}, L, V, T]^T$$

Parameters [P, Q, SL, SV, TF, PF, LF, VF, XF<sub>ij</sub>, YF<sub>ij</sub>]

---

Total Variables	: (2C+3)NM
Equations	: (2C+3)NM
Parameters	: (2C+8)NM
DOF	: 0

---

(2) 물질 환류 스트림 첨가에 대한 표준형

$$f_2(x_2) = 0$$

$$f_2 = \text{Connection Equations}$$

$$x_2 = [XF(YF), LF(VF), TF]^T$$

Parameter [SL(SV)]

---

Total Variables	: (2C+3)NM+(C+2)Nc
Equations	: (2C+3)NM+(C+2)Nc
Parameters	: (2C+8)NM-(C+2)Nc
DOF	: 0

---

(3) 열 환류 스트림 첨가에 대한 표준형

$$f_3(x_3) = 0$$

$$f_3 = \text{Thermal Connection Equations}$$

$$x_3 = [Q_i, Q_j]$$

Parameters None

---

Total Variables	: (2C+3)NM+(C+2)Nc+2Nq
Equations	: (2C+3)NM+(C+2)Nc+Nq
Parameters	: (2C+8)NM-(C+2)Nc-2Nq
DOF	: Nq

---

(4) 설계 규정식 (Design Specifications)

$$S = 0$$

---

Total Variables	: (2C+3)NM+(C+2)Nc+2Nq
Equations	: (2C+3)NM+(C+2)Nc+Nq+Nc
Parameters	: (2C+8)NM-(C+2)Nc-2Nq
DOF	: Nq-Nc

---

(5) 설계 변수 (Design Variables)

$$x_4$$

---

Total Variables	: (2C+3)NM+(C+2)Nc+2Nq+Nc
Equations	: (2C+3)NM+(C+2)Nc+Nq
Parameters	: (2C+8)NM-(C+2)Nc-2Nq
DOF	: Nq-Nc+Nc

구성 방정식 계

$$F(X) = 0$$

$$F = [f_1, f_2, f_3, S]^T$$

$$X = [x_1, x_2, x_3, x_4]^T$$

C개의 물질, N 개의 단 M 개의 탑, Nc 개의 물질 환류 스트림과 Nq 개의 열 환류 스트림, Ns 개의 설계 규정식과 Nd 개의 설계 변수로 이루어 지는 시스템에 대한 다탑 증류 공정의 표준 행렬의 모델링은 표 1.과 같이 결정 된다. 이에서 볼 수 있듯이 다탑의 구조가 물질 환류 스트림 만큼 가질경우는 별도의 규정식이 없이도 자유도를 만족한다. 이때 규정식(Specification)을 첨가 할경우 자유도를 맞추기 위하여 초기 규정변수(Parameters)중 하나를 변수화 시켜야 한다. 본 연구 에서는 이를 설계변수라 정의 하고 열 환류 스트림을 포함하지 않는 계에 대하여서는 규정식이 갯수와 설계변수의 갯수는 동일 하게 주어져야 한다. 그러나 열 환류 스트림을 포함할 경우 Nq(이중효율 구조인 경우는 Nq+1) 만큼의 규정식이 첨가 되어야 한다. 규정식은 변수중 하나 또는 여러개를 초기 규정변수화 시키는 역할을 한다. 설계 규정식은 음 함수적으로 공정의 모델식에 포함되며 초기 규정변수가 아닌 모든 변수는 설계규정식화 될 수 있다.

<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr><td style="padding: 2px;">B C</td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td style="padding: 2px;">A B C</td><td style="padding: 2px;">1<sup>st</sup> Column</td><td></td><td></td></tr> <tr><td style="padding: 2px;">A B C</td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td style="padding: 2px;"> </td><td style="padding: 2px;">A B C</td><td></td><td></td></tr> <tr><td style="padding: 2px;">M<sup>th</sup> Column</td><td style="padding: 2px;">A B C</td><td></td><td></td></tr> <tr><td style="padding: 2px;"> </td><td style="padding: 2px;">A B</td><td></td><td></td></tr> </table>	B C				A B C	1 <sup>st</sup> Column			A B C					A B C			M <sup>th</sup> Column	A B C				A B			$\partial f_1 / \partial x_c$	$\partial f_1 / \partial d$	$f_1(x_1^0)$
B C																											
A B C	1 <sup>st</sup> Column																										
A B C																											
	A B C																										
M <sup>th</sup> Column	A B C																										
	A B																										
$\partial f_c / \partial x_1$	$\partial f_c / \partial x_c$	$\partial f_c / \partial x_4$	$f_c(x_c^0)$																								
$\partial S / \partial x_1$	$\partial S / \partial x_c$	$\partial S / \partial x_4$	$S(x_0)$																								
$\partial x_1 / \partial s$	$\partial x_c / \partial s$	$\partial x_4 / \partial s$	$\partial t / \partial s$																								

where  $x_c$  : Connetion Variables [x2,x3]  
 $t$  : Artificial Continuation Variable  
 $s$  : Arc-Length of Continuation Path

그림 3 증강된 자코비 행렬의 구조

Fig. 3. Structure of Augmented Jacobian Matrix

### 자코비 행렬의 구성

구성된 방정식에 Homotopy Continuation 알고리즘을 적용하기 위하여 자코비 행렬의 구성이 필요 한데 이는 그림 2. 와 같다. 자코비 행렬은 예측과 수정 단계 모두 같은 구조를 가지며 이 행렬은 Harwell MA28을 사용하여 선형식 계산을 행하였다.

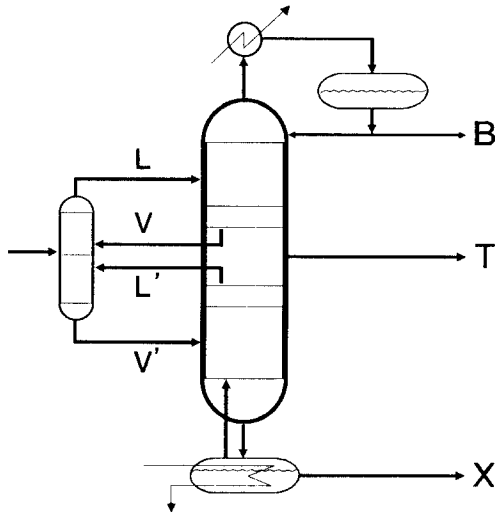


그림 4. Petlyuk 증류공정  
Fig. 4. Petlyuk System

### 4. 사례연구 및 제언

그림 4.에 알고리즘의 성능 시험을 위해 사용된 예제중 Petlyuk시스템을 나타낸 것이다. 2개의 탑으로 구성되는 이 공정은 349 K, 1.15 Bar 의 벤젠,톨루엔 그리고 자일렌을 도입 유량으로 각 성분을 탑상부와 하부 그리고 중간 스트림으로 각각 분리하는 구조를 갖는다. 연결 환류 스트림은 4

개로 각 2개씩의 액상과 기상 연결 스트림을 갖는다. 표 2.는 이들에 대한 모사 결과를 나타낸 것이다. 5개의 예제에 대하여 성공적으로 해를 찾을 수 있었다. 첫번째와 두번째 결과는 연결 스트림중 2개와 탑상부 유량및 환류비를 설계규정으로 모사한 결과로써 이는 비교적 쉬운편의 문제로 본 알고리즘으로 4 단계의 Continuation을 거쳐 풀어 낼수 있었다. 그러나 나머지 문제와 같이 유출 농도가 설계규정으로 주어지는 문제는 해를 얻기가 상당히 어려운 문제로 기존의 사용 모사기로는 해를 얻기가 거의 불가능 하다.

네 번째 문제는 기상의 유량이 음수인것을 나타내고 있다. 그러나 다섯번째 문제는 환류비 대신 두번째 탑의 환류량을 규정한 것으로 네 번째 문제와 비교할때 비슷한 정도의 설계규정을 갖지만 연결 유량에서 많은 차이를 보이고 있다. 본 알고리즘은 각 조성에 대하여서만 음수영역을 침범하는것을 피하기 위한 개연 계수를 사용 하였고 그 이외의 변수들은 제약이 가해지지 않았다. 이로 인해 열수지식을 만족시키기 위해 유량이 음수값을 취하는 것은 충분히 가능 하다. 네 번째 문제에서 기상의 유량이 음수인 것으로 미루어 볼때 같은 설계규정을 만족하는 다른 해가 있는것으로 생각 된다. 그러나 또다른 해를 찾는것은 쉬운일이 아니다. 힌[18]등이 언급한바와 같이 Homotopy 함수의 궤적은 임계점을 전후로 그 모양이 변화 되며 그 임계점을 찾는 것은 상당히 많은양의 계산을 요구 하게된다. 일반적으로 이 지점을 추측하는 것은 불가능하다. 증류 공정의 경우 거대한 방정식의 수로 인해 이러한 일을 체계적으로 수행 하기란 거의 불가능 하다. Seader [16] 등도 다탑증류 공정에 다중해가 존재 한다고 보고 하였지만 이를 체계적으로 행하지는 못하였다.

본 알고리즘에서 제시한 행렬 표준형은 여러가지의 환류 스트림을 갖는 다탑 구조에 보다 손쉽게 적용될 수 있었으며 방정식 중심의 증류 공정 전문 모사기를 개발하는 과정을 통하여 Global Homotopy Continuation 방식의 적용성을 검토한 결과 Global Homotopy Continuation 은 난해한 문제에 성공적으로 적용될수는 있었지만 항상 해를 손 쉽게 찾을 수는 없다는 결론을 얻게 되었다. 그러나 이는 증류공정의 계산에 밀연적으로 도입되는 열역학 계산의 변수에 대한

표 2. Petlyuk 시스템의 설계규정과 결과  
Table 2. Specification and Results of Petlyuk System

L	V	L	V	D	RR	BEN	TOL	XYL
50	27.59	162.4	40	40	6.45	0.9078	0.8104	0.9305
50	28.34	161.7	40	40	9.25	0.9317	0.8642	0.9537
44.33	6.55	152	27.40	37.64	9.94	0.93	0.86	0.95
55.49	-2.78	153.2	12.02	37.74	10.57	0.93	0.86	0.95
71.33	32.51	149.6	44.45	36.68	10.02*	0.93	0.9	0.95

Flow : Kgmol/h  
— : Specifications  
\* : Specify Liquid flow of lth stage

제약성과 Homotopy Path 자체가 비교적 간단한 문제에 비해 상당히 얽혀있음으로 인한 과중한 계산량때문으로 좀더 수학적인 체계화가 요구되는 것으로 생각 된다.

#### 감 사

본 연구는 대림 엔지니어링의 연구비 지원으로 수행된 것입니다. 연구비를 지원 하여 주신 대림 엔지니어링에 감사드립니다.

#### 참고문헌

1. Allgower E. and Georg K.:SIAM Review,22,28(1980)
2. Davidenko D.:Dokl. Akad. Nauk USSR,88,601(1953)
3. Den Heijer C. and Rheinboldt W.C.:SIAM j. Numer. Anal.,18,925(1981)
4. Deuffhand P.:Nmer. Math.,33,115(1979)
5. Ellis M.F.,Koshy R.,Mijares G.,Gomez A. and Holland C.D.:Comp. & Chem. Eng.,10,433(1986)
6. Ferraris G.B. and Tronconi E.: Ind.Eng.Chem.Process Des.Dev.,24,122(1985)
7. Hofeling B.S. and Seader J.D.:AIChE J.,24,1131(1978)
8. Lin W.,Seader J.D. and Wayburn T.L.:AIChE J., 33,886(1987)
9. Naphtali L.M. and Sandholm D.P.:AIChE J., 17,148(1971)
- 10.Rheinboldt W.C.: "Numerical Alaysis of Parameterized Nolinear Equations",Jhon Wiley & Sons, New York(1986)
- 11.Rion W.L.and Brunt V.V.:Comput. Chem. Eng., 14,889(1990)
- 12.Seydel R.and Hlavacek V.: Chem. Eng Sci., 42,1281(1987)
- 13.Shacham M.:Proc.of Conf. on Found. of Computer Aided Process Design 2,891(1984)
- 14.Watson L.T. ,Billup S.C. and Morgan A. P.:ACM Trans. Math. Soft.,13,281(1987)
- 15.Wayburn T.L.: "A Review of Continuation Methods and Their Application to Separation Problems", in CAST Newsletter,Summer(1989)
- 16.Wayburn T.L. and Seader J.D.:Proc.of Conf.on Found. of Computer Aided Process Design 2,765(1984)
- 17.고홍철:박사학위 논문,서울 대학교
- 18.한경택,이강주,윤인섭,김화용:" Global Homotopy Continuation 방식을 이용한 비선형 방정식의 해법", 화학공학,제출중