

정 보 제 공 계 획 서

1. 일반내용		2002년 3월 - 8월	
연구 IP 명	국 문	공정모사기에 사용되는 열역학 모델식의 소개	
	영 문	Introduction to Thermodynamic Models Built-in Process Simulators	
연구책임자	조 정 호 (인)	E-mail	jhcho@phenix.dyu.ac.kr
사업개요	<p>범용성 화학공정 모사기에 내장되어 있는 열역학 모델식을 소개한다. 공정모사기를 사용하여 대상 화학공정을 모사하는 데 있어서 열역학의 중요서의 소개를 시작으로 해서 상태방정식 모델식들의 자세한 소개와 각각의 모델식들의 발전과정과 개개의 수식의 유도 및 사용도와 각 모델식의 장단점의 소개 및 적용 예를 상세하게 소개한다. 액체 활동도 계수 모델식들의 소개에 있어서도 활동도계수의 개념에서 출발하여 과잉량과 부분물 특성 및 혼합에 따른 특성의 변화의 도입과 함께 가장 단순한 모델식인 Margules 식에서 출발하여 van Laar식의 소개 및 Wilson모델식의 중요개념인 국부조성 개념의 소개 및 국부조성 개념 모델식의 장점뿐 아니라 국부조성 개념의 치명적인 단점 2가지를 그 예와 함께 상세하게 소개한다. 또한 상태방정식 모델식의 경우 삼차형 상태방정식과 비삼차형 상태방정식과 순수성분의 증기압을 잘 추산하기 위한 Alpha form과 혼합물의 K-value를 잘 추산하기 위한 Mixing rule을 소개한다. 상태방정식 모델식이나 활동도 계수 모델식 이외에 원유정제공정에 적용할 수 있는 모델식의 소개 및 그 활용 예와 더불어 Special Package를 별도로 소개한다. 또한 회합하는 유체에 적용할 수 있는 모델식들을 소개한다.</p>		

2. 정보 제공 계획

3월: General Thermodynamics for Process Simulation

● General Thermodynamics for Process Simulation

- 화학공정의 모사에 있어서 열역학 모델식의 선정이 왜 중요한가?
 - 예1) Methanol-Water System
 - 예2) Propane-Propylene Splitter
 - 예3) Acetic Acid-Water System
- K-value Calculation Methods
 - 1) Ideal Raoult's Law
 - 2) Equation of State Approach (SRK, PR, BWRS)
 - 3) Liquid Activity Coefficient Method (Wilson, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC)
 - 4) Generalized Correlations (BK10, GS)
 - BK10을 사용한 공정모사의 예 소개
 - GS 모델식을 사용한 공정모사의 예 소개
 - 5) Special Package (AMINE, Sour Water Stripper)
 - AMINE 공정모사의 예 소개
 - Sour Water Stripper 공정모사의 예 소개
 - 6) Electrolytes (OLI)
 - 7) Association Model (HOCV, Hexamer)
- Flash 계산 예제
 - 예1) Raoult의 법칙과 Poynting Correction Factor의 유도
 - 예2) Flash 계산의 유도
 - 예3) Bubble Point Failure Case
 - 예4) C6+ Heavy Cuts Characterization

4월: Equations of State for Gas Processing Plant Simulation

● Equations of State for Gas Processing Plant Simulation

- 상태방정식 모델과 활동도계수 모델식의 비교 및 각각의 장단점 소개
- Henry's Law Option의 소개
- K-value 모델식의 선정을 위한 간략화된 수형도의 소개
- van der Waals식의 소개
- Redlich-Kwong 식의 소개
- Soave-Redlich-Kwong 식의 소개
- Peng-Robinson 식의 소개
- Alpha Function의 소개
- Mixing Rule의 소개
 - 1) van der Waals 혼합규칙의 소개
 - 2) Panagiotopoulos 혼합규칙의 소개
 - 3) SimSci Modified Panagiotopoulos 혼합규칙의 소개
 - 4) Huron-Vidal 혼합규칙의 소개
 - 5) Kabadi-Danner 혼합규칙의 소개
 - 6) 각각의 혼합규칙을 이용해서 기액 평형계에 적용한 예

5월: Simulation of LPG Storage Unit using Propane Refrigerant

● Simulation of LPG Storage Unit using Propane Refrigerant

- 냉동사이클이란 무엇인가?
- 이상적인 냉동사이클과 실제적인 냉동사이클의 구성
- 순수성분 냉매를 이용한 LPG저장을 위한 냉동시스템의 문제 예
 - 1) Step 1: Evaporator의 계산
 - 2) Step 2: Compressor Discharge Pressure의 계산 (Bubble Point Pressure와 관련)
 - 3) Step 3: Control Valve의 계산 (Dew Point Pressure와 관련)
 - 4) Step 4: Refrigerant, C3의 Circulation Rate의 결정
 - 5) Step 5: Compressor Power의 결정
 - 6) Step 6: Condenser의 계산
 - 7) Step 7: 2차 냉매인 Cooling Water의 Consumption량의 결정
 - 8) Step 8: 전체 냉동사이클의 구성

6월: Activity Coefficient Models for Chemical Plant Simulation

● Activity Coefficient Models for Chemical Plant Simulation

- 활동도계수를 이용한 접근방법의 소개
- 이상용액의 거동으로부터 벗어나는 편차의 계산
- 액체 혼합물의 3가지 유형의 소개
 - 1) Completely Miscible System
 - 2) Immiscible System
 - 3) Partially Miscible System
- 액체 혼합물의 안정성에 관한 공준
- 활동도계수 모델의 단점
 - 1) Inconsistence in the Critical Region
 - 2) Supercritical Components (Henry's Law 사용)
- 액체 활동도계수 모델식의 소개
 - 1) One Constant Margules식의 소개
 - 2) van Laar식의 소개
 - 3) Wilson식의 소개
 - 특징: Local Composition Concept
 - 단점: Cannot be applied for liquid phase splitting system
 - Does not come back to ideal Raoult's law when the BIP's are missing
 - 4) UNIQUAC 모델식의 소개
 - 5) NRTL 모델식의 소개
 - 6) UNFAC 모델식의 소개
- BIP에 관한 논고

7월: Thermodynamic Considerations of Ethanol Dehydration Unit using Benzene as an Entrainer

● Thermodynamic Considerations of Ethanol Dehydration Unit using Benzene as an Entrainer

- Ethanol-water System
- 공비증류와 추출증류 사이의 비교
- 공비증류공정의 원리
- 공비점 분리제의 선정 공준 (1)
- 공비점 분리제의 선정 공준 (2)
- 공비증류 공정의 예제
 - 1) Step 1: Selection of Proper Thermo Model & Construction of Binodal Curve
 - 2) Step 2: Finding Binary & Ternary Azeotropic Points
 - 3) Step 3: Construction of Binary & Ternary Residual Curves
 - 4) Step 4: Concentrator Simulation
 - 5) Step 5: Azeotropic Column Simulation
 - 6) Step 6: Azeo + Dryer(Stripper) Column Simulation
 - 7) Step 7: Simulation of Overall Azeotropic Distillation Unit
 - 8) Step 8: Optimization of Ethanol Dehydration Process
 - 9) Step 9: Comparison of Two-columns with Three-columns Configuration

8월: Experimental Equilibrium Data Regression

● Experimental Equilibrium Data Regression

- Pure Component Data Regression(예: Vapor Pressure Data Regression)
- Binary Pxy Data Regression at a Constant Temperature (VLE 1)
- Binary Txy Data Regression at a Constant Pressure (VLE 2)
- Binary Txx Data Regression at a Constant Pressure (LLE 1)
- Ternary Data Regression at a Given Temperature & Pressure (LLE 2)