

상용 Simulator에 개발된 사용자 모듈 추가에 관한 연구

신윤수^{1,2}, 빈영욱¹, 박진아¹, 김권일¹, 조정호², 박종기^{1,*}

¹한국에너지기술연구원; ²공주대학교

(jngkprk@kier.re.kr*)

기액 상평형, 각상의 밀도 및 엔탈피 등의 정확히 예측하는 것으로 알려진 PC-SAFT 모델을 상용의 공정모사기인 ProII에 사용자 모듈로 추가하였다.

기액 상평형 계산을 위한 사용자 모듈은 ProII에서 제공하는 온도(T), 압력(p), 액상의 조성(x), 그리고 기상의 조성(y)을 이용하여 분배계수(K-Factor)를 계산하고 이것을 ProII로 되돌려주는 기능을 한다. 이와 같은 기능을 수행하기 위하여 사용자 모듈에서는 PC-SAFT 상태방정식의 혼합물의 액상과 기상에 대한 모델변수 계산(Mixing rule 적용), 액상과 기상의 근 계산, 그리고 액상과 기상의 Fugacity 계수 계산 등을 수행하여야 한다. 따라서 이와 같은 기능을 수행할 수 있는 FORTRAN 프로그램으로 User.dll 파일을 코딩하여 User-added module로 추가 및 사용할 수 있는 방법에 관하여 연구하였다.