

회분식 흡착공정을 위한 시뮬레이터의 설계 및 구현

최정민*, 임영일**

*한경대학교 화학공학과 화학기술연구소

e-mail : cjm@hknu.ac.kr, limyi@hknu.ac.kr

Design and Implementation of Simulator for Batch adsorption process

Jung-Min Choi*, Young-Il Lim**

*Research Center of Chemical Technology, Dept. of Chemical Engineering, Hankyong University

요 약

본 논문은 화학분리공정 중의 하나인 회분식 흡착공정의 시뮬레이션 방법에 관한 것으로, 편미분 방정식을 이용한 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법에 있어서, 편미분방정식 해석기법인 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)을 사용하여 흡착공정의 모델식을 수치 해석하고, 이를 그래픽 사용자 인터페이스(Graphical User Interface) 방식에 의한 사용자편이성이 구현된 회분식 흡착공정 시뮬레이터의 설계와 구현에 관한 것이다. 본 연구를 통하여 공정모델선택 과정에서부터 시뮬레이션 결과의 시각화를 포함하는 결과 처리 과정까지의 작업을 사용자가 독립된 하나의 통합된 환경에서 회분식 흡착공정을 편리하게 시뮬레이션 할 수 있으며, 빠른 시간 안에 정확한 수치해를 구할 수 있게 되었다.

1. 서론

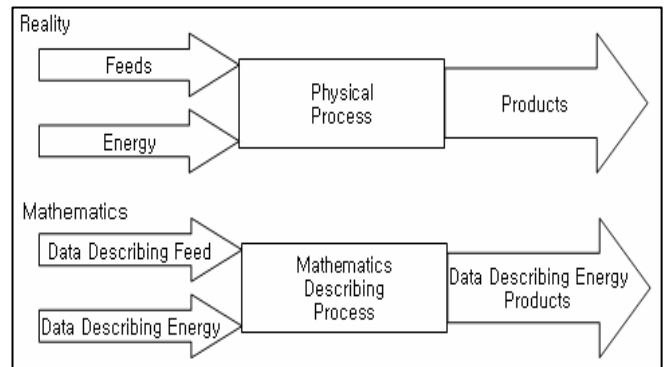
범용 화학공정 시뮬레이터(General Purpose Chemical Process Simulator)는 화학공학 이론을 바탕으로 수학적으로 모델화하고 컴퓨터를 이용하여 실제 화학공장에서 일어나는 현상을 묘사하는 소프트웨어이다. 이러한 화학공정 시뮬레이터에 실제 공정에 투입되는 물질의 물성치, 유량 및 운전조건이 주어지면 실제로 화학공장을 가동하지 않고도 짧은 시간과 비용만으로 실제와 유사한 결과를 얻을 수 있다. 뿐만 아니라 실제 공장에서 쉽게 예측할 수 없거나 실험할 수 없는 변수를 임의로 결정하여 테스트할 수 있으므로 저비용으로 빠르게 결과를 얻을 수 있다. 지난 30 여 년간 미국이나 일본 및 유럽 선진 외국에서는 이러한 화학공정 시뮬레이터를 이용해서 많은 화학 공장들을 설계하거나 개조해 왔다. 우리나라에서도 최근 10 여 년 사이에 많은 엔지니어링 회사 및 화학회사에서 이러한 화학공정 시뮬레이터를 도입하여 화학공장 설계 및 기존 공장의 운전 조건 개선에 이용하려는 시도가 이루어지고 있다[1][2].

본 논문은 그 동안 자연계에서 필수적으로 존재하는 광학이성질체(Chiral chemicals)의 이성분계

분리공정에 대한 모델링, 시뮬레이션 및 최적화를 통합적으로 수행할 수 있는 GUI(Graphic User Interface)기반의 시뮬레이터를 구현하고자 한다.

2. 관련연구

화학공장이나 파일럿 플랜트에서는 실제 화합물질을 다루어서 제품을 생산하지만 화학공정 시뮬레이터에서는 화학물질의 물성이나 단위조작 장치를 다룰 수 있는 연립 방정식을 푸는 것이 차이점이다[1].



(그림 1) 실제 화학공정과 시뮬레이터 비교

This study is supported by Korea Ministry of Environment as "The Eco-technopia 21 project".

(그림 1)은 실제 화학공정과 화학공정 시뮬레이터 사이의 개념적 차이를 도식적으로 표현 하였다. 현재 외국에서 개발되어 세계적으로 사용되고 있는 화학공정 시뮬레이터는 Simulation Science 사의 PRO/II with PROVISION, Aspen Technology 사의 ASPEN PLUS, Chemshare 사의 Design II, Hyprotech 사의 Hysys 등이 있다. 국내에서 주로 사용되고 있는 화학공정 시뮬레이터는 크게 두 가지 종류로서 ASPEN PLUS 와 PRO/II 이다. APSEN PLUS 는 약 1500 개 이상의 순수성분에 대한 데이터베이스가 내장되어 있으며, 60 개의 열역학 모델식과 60 여 개의 단위조작 장치를 시뮬레이션 할 수 있는 모듈이 내장되어 있다. PRO/II with PROVISION 은 약 1750 개 이상의 순수성분에 대한 데이터베이스가 내장되어 있으며, 60 여 개의 열역학 모델식과 30 여 개의 단위조작 장치를 시뮬레이션 할 수 있는 모듈이 내장되어 있다[1][2].

3. 흡착공정 모델링(Modeling of adsorption process)

화학분리공정에서 대표적인 회분식 흡착공정을 시뮬레이션하기 위해서는 먼저 편미분 방정식과 같은 흡착공정의 모델식이 정의되어야 한다. 그리고 수치적 해석기법(numerical method)을 이용하여 이 모델식의 해를 구해야 하며, 이렇게 구해진 해를 분석하여 사용자가 원하는 결과로 이끌어 냄으로써, 공정 시뮬레이션 결과를 실제 공정 설계 및 개발에 응용할 수 있다. 회분식 흡착공정에서 사용되는 흡착 컬럼의 모델식은 다음 (식 1)과 같은 편미분 방정식으로 표현된다[3][4].

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{1-\epsilon_b}{\epsilon_b} \frac{dn_i}{dt} = -v_L \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) \quad (\text{식 1})$$

여기에서 t 는 시간, z 는 컬럼의 축방향 길이, C_i 는 유동상 혼합물내 성분 i 의 농도, n_i 는 고정상의 성분 i 에 대한 농도, ϵ_b 는 컬럼의 총괄공극률, v_L 는 유동상의 실제 흐름속도, 그리고 D_{ax} 는 축방향 분산계수를 의미한다. 특히 C_i 와 n_i 는 독립변수 시간(t)과 길이(z)에 종속되는 변수로서 식 1의 해를 구한다고 하는 것은 시간(t)과 길이(z)에 따른 C_i 와 n_i 값을 구하는 것을 의미한다. 이때, (식 1)은 크게 평형모델과 비평형모델로 구분되며 평형모델은 고정상의 농도가 평형에 도달되었다고 가정하여 다음 (식 2)로 표현된다[3][4].

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{1-\epsilon_b}{\epsilon_b} \frac{dn_i^*}{dt} = -v_L \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) \quad (\text{식 2})$$

$$n_i^* = f(C_i)$$

여기에서 n_i^* 는 성분 i 에 대한 흡착평형농도를 뜻하며, $f(C_i)$ 는 유동상농도 C_i 에 대한 함수로 표현되는 등온흡착식(adsorption isotherm)이다. 이 등온흡착식은 크게 선형과 비선형으로 구분된다. 또한, LDF(linear driving force) 모델에 바탕을 둔 비평형모델은 다음 (식 3)으로 표현된다[3][4].

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{1-\epsilon_b}{\epsilon_b} \frac{dn_i}{dt} = -v_L \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \frac{\partial C_i}{\partial z} \right)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = k_i(n_i^* - n_i)$$

$$n_i^* = f(C_i) \quad (\text{식 3})$$

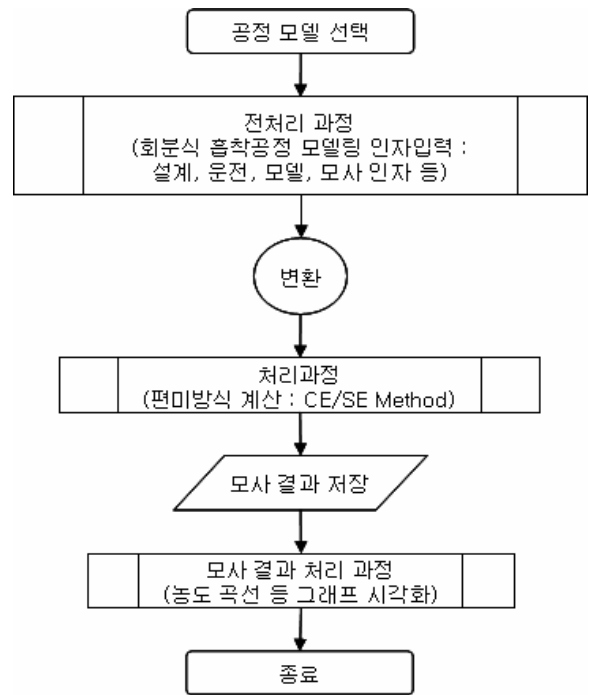
여기에서 k_i 는 성분 i 에 대한 물질전달 속도를 뜻한다. 식 3 에서 첫 번째 식은 시간(t)과 공간(z)방향에 대한 두 가지 이상의 미분형태가 존재하므로 편미분방정식 (PDE; partial differential equation)이라고 하며, 두 번째 식은 시간에 대한 미분형태만 존재하는 상미분방정식(ODE; ordinary differential equation)이라고 하고, 세 번째 식은 미분식이 존재하지 않는 대수식(AE; algebraic equation)이라고 한다. 등온흡착식을 의미하는 이 대수식이 변수 C_i 에 대하여 1 차식으로 표현되면 선형대수식(LAE; linear AE)이라고 하고, 1 차식이 아닌 경우에는 비선형대수식 (NAE; nonlinear AE)이라고 한다. 앞서 기술한 평형모델과 비평형모델은 여러 형태의 등온흡착식을 갖을 수 있으며, 이 등온흡착식은 흡착공정에서 흡착성능을 좌우하는 가장 중요한 식으로 여겨진다. 등온흡착식의 종류로는;

- 선형 (linear; $n_i^* = K_i C_i$),
- normal Langmuir; $n_i^* = \frac{a_i C_i}{1 + b_i C_i}$,
- competitive Langmuir; $n_i^* = \frac{a_i C_i}{1 + \sum_k \frac{b_k C_k}{\text{NumComp}}}$,
- bi-Langmuir; $n_i^* = \frac{a_i K_i C_i}{1 + \sum_k \frac{b_k C_k}{\text{NumComp}}} + \frac{c_i L_i C_i}{1 + \sum_k \frac{d_k C_k}{\text{NumComp}}}$,
- modified Langmuir; $n_i^* = \frac{a_i K_i C_i}{1 + \sum_k \frac{b_k C_k}{\text{NumComp}}} + c_i C_i$,
- Ching model; $n_i^* = K_i C_i + a_i C_i^{(m+1)} + b_j C_j^{m_j} C_i$,
- polynomials; $n_i^* = a_{0i} + \sum_{n=1} a_{ni} C_i^n$,
- user-defined model; $n_i^* = f(C_i)$.

등으로 구분할 수 있다. 위 식에서 K_i , a_i , b_i , c_i , d_i , a_{ij} 그리고 b_{ij} 는 등온흡착식의 계수들이다. 이때, 선형 및 비선형 등온흡착식을 갖는 평형 및 비평형 흡착공정 모델식을 수치적으로 풀기 위하여 입력되어야 할 모델링 인자는 설계인자, 운전인자, 모델인자 그리고 모사인자 등이 있다. 설계인자는 회분식 흡착공정의 물리적, 기하학적 특징을 결정하는 요소로서 컬럼길이, 실린더형 컬럼의 단면적, 총괄공극률 등이 있으며, 회분식 흡착공정의 운전에 관련된 운전인자로는 성분수, 운전시간, 원료유량, 원료농도, 운전온도 등이 있다. 모델인자는 등온흡착식과 평형, 비평형 회분식 흡착공정 모델에 관련된 인자들로서 촉방향확산계수, 물질전달 속도계수, 등온흡착식 인자값 등이 있다. 모사인자는 회분식 흡착공정 모델식을 수치적으로 해석하기 위하여 필요한 수치해석에 관련된 것이다[3][4].

4. 시스템 설계

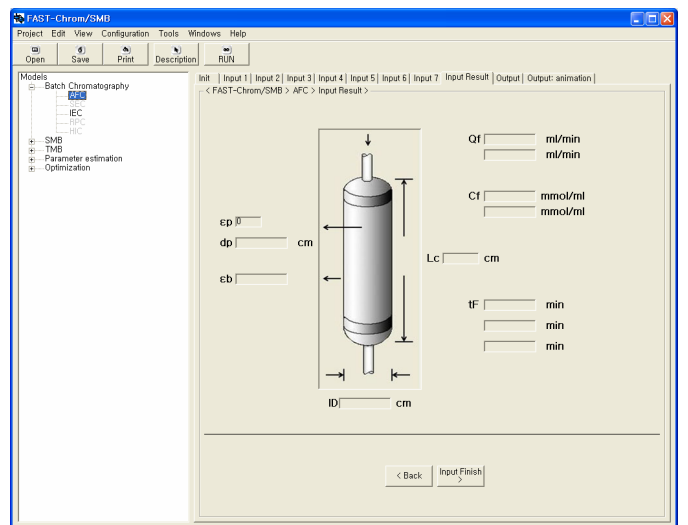
(그림 2)는 시뮬레이션 방법을 순서도로서 나타낸 것으로, 크게 공정 모델 선택과정, 전처리 과정, 변환, 처리과정, 모사결과저장 그리고 모사결과 처리과정으로 구성된다. 먼저 전처리 과정은 회분식 흡착공정 모델링 인자(설계인자, 운전인자, 모델인자 및 모사인자)를 위한 입력부분으로 구성된다. 또한 이 과정에서는 평형 및 비평형 흡착 모델식과 선형 및 비선형 (normal Langmuir, competitive Langmuir, modified Langmuir, bi-Langmuir, Ching model, polynomial 등) 등온흡착 모델식 등을 선택할 수 있다. 다음 변환 과정에서는 전처리 과정에서 작성된 입력정보를 처리과정으로 전달하는데 필요한 자체변환코드로 구성된다. 이 자체변환코드는 처리과정에서 요구되는 입력형식에 맞추어서 입력파일을 생성하고, 저장하는 역할을 담당한다. 그 후 처리 과정은 편미분 방정식 해석기법인 CE/SE(Conservation element and Solution element) 방법을 이용하여 편미분 방정식과 상미분방정식 그리고 대수방정식이 혼재하는 형태의 흡착공정 모델식을 처리할 수 있도록 하였다[4][5]. 마지막으로 모사결과 처리 과정에서는 처리과정에서 계산한 값을 사용자가 사용하기 편리한 파일형태로 제공하는 자체변환코드로 구성된다. 이 자체변환코드는 마이크로 소프트사의 엑셀(Excel)에서도 결과값을 확인할 수 있는 엑셀 파일, 과과곡선 및 동영상을 구현하기 위한 데이터 파일을 생성하는 역할을 담당한다. 모사 결과 처리 과정에서는 시간에 따른 농도곡선과 회분식 흡착공정 컬럼 길이에 따른 농도곡선의 시간변화에 따른 동영상 그래프를 그리게 된다.



(그림 2) 시스템 실행 구조

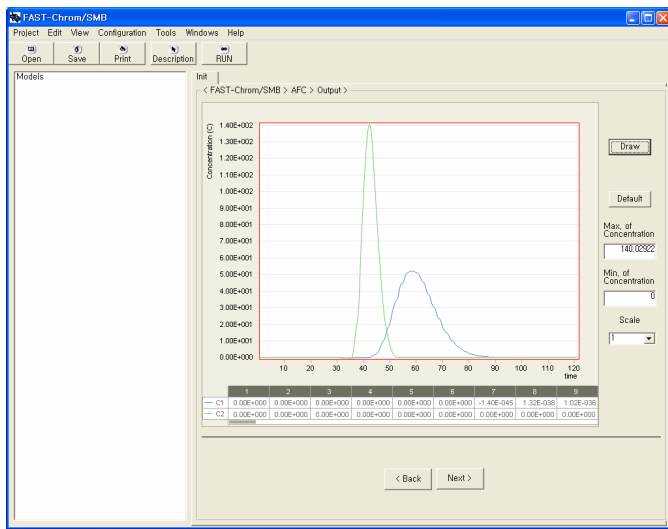
5. 회분식 흡착공정 시뮬레이터 구현

회분식 흡착공정 시뮬레이터의 구현은 편미분방정식 해석기법인 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)을 사용하여 흡착공정의 모델식을 수치 해석하고, 이를 그래픽 사용자 인터페이스(Graphical User Interface) 방식에 의한 사용자편이성이 구현된 통합적 환경을 구현하는 것이다.



(그림 3) 시뮬레이터 실험값 입력화면

소프트웨어를 구현하기 위한 시스템 환경은 Intel Core2 듀오 6400 프로세서, 2G 주기억장치와 Windows XP 환경에서 윈도우용 응용프로그램 개발툴인 마이크로소프트 비주얼 베이직(Microsoft Visual Basic)을 사용하여 윈도우 응용 프로그램 개발방법에 따라 전처리과정, 처리과정 그리고 모사결과 처리과정을 그래픽 사용자 인터페이스(GUI)로 작성하여 회분식 흡착공정 시뮬레이션 프로그램을 구현하였다. (그림 3)은 구현된 회분식 흡착공정 시뮬레이터의 실행화면을 보여준다.



(그림 4) 시뮬레이션 결과 그래프 화면

구현한 시뮬레이터의 구성은 상단에 사용자 선택 메뉴들과 좌측에는 실험 모델을 선택하는 부분이 위치하며 선택된 실험 모델에 따라 우측에 시뮬레이션을 진행하기 위한 실험 값을 입력하는 화면이 나타나게 구성하였다. 회분식 흡착공정 시뮬레이션을 수행하기 위해 실험 값의 입력을 모두 마치면 입력 값은 파일로 저장되어 자체 내장되어 있는 CE/SE Method 에 입력 값이 전달되고 계산을 수행하게 된다. 그 후 계산된 결과값은 하드디스크에 저장되며 저장된 결과값을 시간에 따른 농도곡선과 회분식 흡착공정 컬럼 길이에 따른 농도곡선의 시간변화 동영상 그래프로 시각화한다. 따라서 시뮬레이션의 결과에 대한 시각화를 위한 그래프는 Chart FX 서버/클라이언트 버전(Chart FX server/client version, Software FX, USA)을 이용하여 마이크로소프트 비주얼 베이직의 구성요소(Microsoft Visual Basic component)로 삽입하여 구현하였다. (그림 4)는 회분식 흡착공정 시뮬레이션의 결과값을 그래프로 나타낸 그림이다.

6. 결론

본 연구는 화학분리공정 중의 하나인 회분식 흡착공정 시뮬레이터를 설계 하고 구현하는 것이다. 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법에 있어서, 편미분 방정식 해석기법인 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)을 탑재하여 흡착공정의 모델식을 수치 해석하였고, 이를 그래픽 사용자 인터페이스(Graphical User Interface) 방식에 의한 사용자편이성이 구현된 시뮬레이터를 개발하였다. 이 프로그램의 특징은 회분식 흡착공정 시뮬레이션을 위한 통합된 환경을 제공함으로써 회분식 흡착공정의 모델식 정의, 수치적 해석기법, 시뮬레이션 결과값의 분석 및 사용자가 원하는 결과로의 시각화 등을 모두 수행할 수 있으며, 또한 탑재한 편미분방정식 해석기법인 CS/SE Method 는 시간과 공간방향을 동시에 구간화 하면서, 국부적이고 전체적인 물리적 흐름량을 보전시키는 방법으로 정확한 해를 얻을 수 있었고 매우 빠른 공정 계산 시간을 보여주었다. 본 시뮬레이터의 성능과 효용성을 높이기 위하여 앞으로 시행되어야 할 향후 연구는 흡착공정을 위한 회분식 방법 외에 다양한 화학분리공정에 대한 시뮬레이션이 가능하도록 프로그램을 확장하는 것이다..

참고 문헌

- [1] 조정호, 노상규, 고승태(2001), ASPEN PLUS 를 이용한 화학공정의 모사, 멀티정보사, 11-19.
- [2] 조정호, 박종기, 김성태(2004), 화학공정의 모사, 아진출판사, 3-7.
- [3] Jupke, A., A. Epping & H. Schmidt-Traub (2002), Optimal design of batch and simulated moving bed chromatographic separation processes, J. Chromatog. A, 944, 93- 117.
- [4] Lim, Y. I., C. S. Chang & S. B. Jorgensen (2004), A novel partial differential algebraic equation (PDAE) solver: iterative space-time conservation element/solution element (CE/SE) method, Computers and Chemical Engineering, 28(8), p1309-1324.
- [5] Lim, Y. I. & S. B. Jorgensen (2004), A fast and accurate numerical method for solving simulated moving bed (SMB) chromatographic separation problems, Chemical Engineering Science, 59, 1931-1947.
- [6] Mazzotti, M., Storti, G. and Morbidelli, M. (1997), Optimal operation of simulated moving bed units for nonlinear chromatographic separations, J. Chromatogr. A, 769, 3-24.