

흡착공정 모델링을 위한 시뮬레이션 시스템 설계 및 구현

안병태*

Design and Implementation of Simulation System for Adsorption Process Modeling

Byeong-Tae Ahn *

Division of Liberal Arts, Anyang University, Anyang, Korea

요 약

생물 및 화학공정의 정제과정은 여러 단계의 크로마토그래피 분리공정을 포함할 수 있다. 최근 생명공학의 발전과 더불어 중요시되는 단백질과 같은 생물 분자의 분리를 위하여 크로마토그래피 흡착공정에 많은 관심이 집중되고 있다. 따라서 본 논문에서는 흡착공정 모델링을 위한 시뮬레이션 시스템을 설계 및 구현하였다. 본 시스템은 흡착공정 모델링에 따른 시뮬레이션 결과 값을 시각화하거나 곡선 그래프로 나타나도록 하였다. 본 시스템의 개발은 회분식 흡착공정 모사프로그램에 중점을 두어 국한되어 개발하였다.

ABSTRACT

Biological and chemical processes in the refining process can include several steps of chromatographic separation processes. Recently, with the development of biotechnology is important to a lot of attention has been paid to the process in Adsorption chromatography for the separation of biological molecules such as proteins. Therefore, in this paper, we have designed and implemented a simulation system for adsorption process modeling. This system appear visualization for simulation result or curve graph according to adsorption process modeling. The development of this system has been developed to focus on the batch adsorption process simulation program, is limited.

키워드 : 흡착공정, 시뮬레이션, 모델링, 최적화

Key word : Adsorption process, Simulation, Modeling, Optimization

접수일자 : 2013. 03. 20 심사완료일자 : 2013. 04. 24 게재확정일자 : 2013. 05. 10

* **Corresponding Author** Byeong-Tae Ahn(E-mail : ahnbt@anyang.ac.kr, Tel:+82-31-463-1204)

Division of Liberal Arts, Anyang University, Anyang, Korea

Open Access <http://dx.doi.org/10.6109/jkiice.2013.17.7.1709>

print ISSN: 2234-4772 online ISSN: 2288-4165

©This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License(<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.
Copyright © The Korea Institute of Information and Communication Engineering.

I. 서 론

현재 서울시를 포함한 도심지 대기오염의 심각성이 증가하고 있으며 이를 개선하기 위한 다양한 정책과 기술개발이 진행되고 있다. 대도시의 경우 대부분의 대기 오염이 자동차와 같은 이동오염원으로부터 발생하고 있으며 이를 개선하기 위한 상용차 후처리 기술개발과 함께 배출허용기준의 강화가 추진되고 있다[1]. 또한 도심지 주변의 소각장과 오염원에 대한 배출허용기준 강화와 배출권 거래제 등이 시행될 예정이며 도심지의 경우 향후 정정한 쓰레기 처리기법으로 용융소각이 확대 적용될 것으로 예상되고 있다. 이러한 관점에서 후처리 기술의 개발은 매우 중요한 부분으로 작용할 것으로 예상되며 기술적 대안으로 하이브리드 SNCR-SCR 공정의 적용을 고려할 수 있으며 대기질 개선에 크게 기여할 것으로 판단된다[2].

현재 고정원에서 배출되는 질소산화물을 기준하여 정책평가원에서 제시한 시장규모 1조원을 고려할 때 연간 1000억원 이상의 NOx 저감시설 시장이 형성될 수 있을 것으로 예상된다[3]. 이러한 시장에서는 보다 경제적이고 효율적인 기술 수요가 증가할 것으로 예상되고 선택적 촉매환원기술(SCR)과 선택적 무촉매 환원 기술(SNCR)의 하이브리드를 통하여 투자비 절감과 제거효율 향상을 달성할 것으로 판단된다[4]. 하이브리드 SNCR-SCR 기술 개발의 성공을 통하여 연간 50명 이상의 고급인력 수요를 창출할 것으로 판단되며, 시장규모 1000억 중 10% 정도를 하이브리드 공정으로 적용한다고 가정할 때 연간 100억 규모의 시장을 창출할 것으로 판단된다. 또한 현재 기술적 난점을 극복함으로써 내수 시장의 활성화도 기대된다[5].

현재 국내적으로는 소각장, 중대형 보일러, 화력발전소, 시멘트공장의 소성로, 복합발전소 등 다양한 질소산화물 배출원이 존재하고 있으며, 국내외적으로 향후 질소산화물 배출 허용 기준의 강화로 인한 질소산화물 저감기술 수요가 지속적으로 증가할 것으로 예측되고 있다. 제거 효율면에 있어서는 선택적 촉매 환원법 공정이 가장 우수하지만 귀금속 촉매를 사용함으로써 초기 투자비가 높다는 단점이 있다[6]. 그리고 기존설비의 경우 선택적 촉매 환원법 설비를 설치하기에는 공간이 부족하고 방대한 설비들이 구축되어야 함으로써 비용이 많이 발생한다. 따라서 본 논문에서는 실험실 규모에서

상업적 규모로의 공정 개발을 위한 공정 설계를 가속화할 수 있고 효율적인 실험 계획을 제시할 수 있는 흡착 공정 모델링을 위한 시뮬레이션 시스템을 설계 및 구현하였다. 본 시스템은 용질 농도에 따른 결과 값을 곡선 그래프로 나타내거나 농도 변화 동영상 등으로 시각화되어 나타난다. 기존 시스템에서 구축되어진 엔진 프로그램을 이용하여 시각화 프로그램을 구현하였다. 그리고 기존에는 자체 엔진에 데이터를 각각 변수로 지정하여 사용하였으나 본 시스템은 새로운 인터페이스 시스템을 개발하여 사용하였다. 본 논문의 2장에서는 흡착 공정 모델링 처리를 위한 수식 연산 방법을 알아보고 3장에서는 흡착공정 모델링을 위한 시뮬레이션 시스템을 설계 및 구현하였다. 끝으로 4장에서는 결론 및 향후 과제를 제안한다.

II. 고성능 흡착공정 모델링

흡착공정이란 생물 및 화학공정을 통해 정제과정을 그치는 것이다. 흡착공정 모델은 크게 평형 모델과 비평형 모델로 분류된다. 두 모델은 아래 식에 의해 고성능 흡착공정 모델링으로 구성되며 이러한 식을 통해 용질 농도에 따른 결과 값을 도출한다. 도출된 결과 값을 시스템의 곡선 그래프 및 동영상으로 시각화되어 나타난다.

- 1) linear model(option_flag = 1400 or 1410) :

$$n_i^* = K_i C_i$$

- 2) normal langmuir(option_flag=1310) :

$$n_i^* = \frac{a_i C_i}{1 + b_i C_i}$$

- 3) competitive Lngmuir(option_flag=1320) :

$$n_i^* = \frac{a_i C_i}{1 + \sum_k \frac{b_k C_k}{N_m Comp}}$$

- 4) competitive bi-Langmuir type(option_flag=1330) :

$$n_i^* = \frac{a_i K_i C_i}{1 + \sum_k \frac{b_k C_k}{N_m Comp}} + \frac{c_i L_i C_i}{1 + \sum_k \frac{d_k C_k}{N_m Comp}}$$

5) modified Lngmuir type(option_flag=1340) :

$$n_i^* = \frac{a_i K_i C_i}{1 + \sum_k b_k C_k} + c_i C_i$$

6) polynomials(option_flag=1350) :

$$n_i^* = a_{0i} + \sum_{n=1}^n a_n C_i^n$$

7) Ching-model(option_flag=1360) :

$$n_i^* = K_i C_i + a_i C_i^{(m+1)} + b_{ij} C_j^{m_{ij}} C_i$$

8) mass action kinetic model(option_flag=1370) :

Lim et al.(2005).

9) User-defined model(option_flag=1300)

윗 식에서 ni*는 흡착입자 기공 내 용질의 평형 농도를 의미하며, Ci는 유동상 내 용질의 농도를 나타낸 것이다. 그 외의 기호들은 실험적으로 구해지거나 예측되는 모델상수들이다. 본 논문에서는 각 흡착공정에 따른 고유번호를 지정하여 선택할 수 있도록 제작하였다. 흡착공정의 시뮬레이션 최적화에 있어서 먼저 선행되어야 할 것은 컬럼 공극률과 축분산계수 d 값과 물질전달계수 k 값을 결정해야 한다. 향후 입력되는 데이터를 각 수식에 따라 완성된 엔진을 이용하여 결과 값을 도출한다.

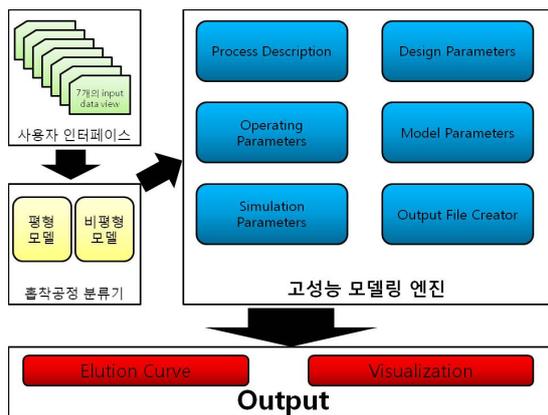


그림 1. 시뮬레이션 시스템 구성도
Fig. 1 Simulation System Structure

그림 1은 고성능 흡착공정 시뮬레이션 시스템의 전체적인 구성도를 나타낸 것이다. 사용자 인터페이스에서는 흡착공정 모델링 시뮬레이션에 필요한 입력 값을 각 단계별로 기입한다. 총 7단계의 데이터 입력이 완료되면 흡착공정 분류기를 통해 입력된 데이터를 토대로 평형 모델인지 비평형 모델인지 분류하여 고성능 모델링 엔진에 보낸다[7]. 고성능 모델링 엔진은 사용자 인터페이스에서 들어온 7단계의 총 데이터를 이용하여 프 로세스 기술 항목으로 전송한다. 프로세스 기술 항목에서는 프로세스 모델을 분류한다. 분류된 모델은 디자인 파라미터로 전송되어 컬럼의 개수, 길이, 내경을 단위에 맞춰 데이터 값을 입력 받도록 한다. 운영 파라미터에서는 사용자 인터페이스 7단계에서 들어온 데이터중 원료의 성분수를 입력받아 자동 정렬시킨다. 모델 파라미터에서는 성분 수에 따른 등온흡착계수를 입력받아 시뮬레이션 파라미터로 결과 값을 전송한다. 시뮬레이션 파라미터는 각 성분에 유도되는 편미분방정식의 수를 입력하여 흡착공정 모델링의 결과 값을 파일로 도출한다. 도출된 값은 출력 파일 생성기를 통해 4개의 결과 파일로 생성되어 제작된다. 각 작성된 파일은 마지막 출력 단계에서 곡선 그래프 또는 시각화된 동영상으로 재생된다[8].

III. 시뮬레이션 플랫폼 시스템 설계 및 구현

3장에서는 흡착공정 모델링을 위한 시뮬레이션 시스템을 구현하였다. 구현 환경은 윈도우 2012 서버에서 비주얼 베이직 2010을 이용하여 시스템을 구축하였다. 2장에서 제안된 수식은 포트란 프로그램을 이용하여 구축하였고 실제 사용자 인터페이스에서 각 단계별 입력된 데이터를 받아 마지막 출력 부분에서 곡선 그래프 및 동영상으로 시각화되어 나타난다.

그림 2는 7단계의 입력 데이터를 적용하여 2장에서 제시된 공식을 이용하여 구현된 포트란 프로그램을 구동시킨 결과 값을 나타낸 것이다. 실제 중앙처리장치가 연산을 하는데 걸리는 시간은 4000ms이 소요되었고 색 층 분석에 대한 결과 값을 각 항목별로 나타내고 있다. 각 항목별 결과 값은 입력 결과 탭에서 4개의 파일로 생성되어 나타난다.

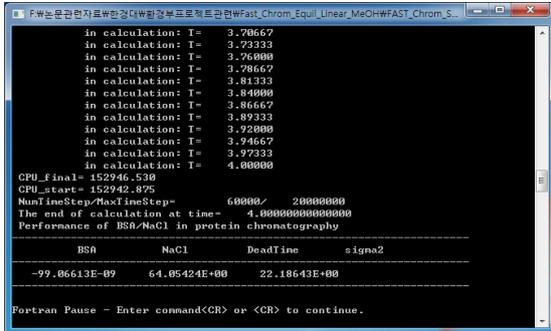


그림 2. 시뮬레이션 수치 결과 값
Fig. 2 Simulation Number Result Value

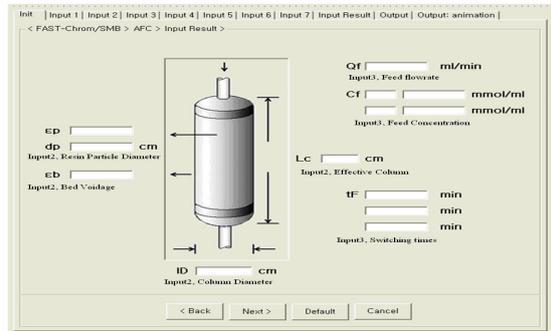


그림 4. 초기 프로젝트 구동
Fig. 4 Initial Project Driving

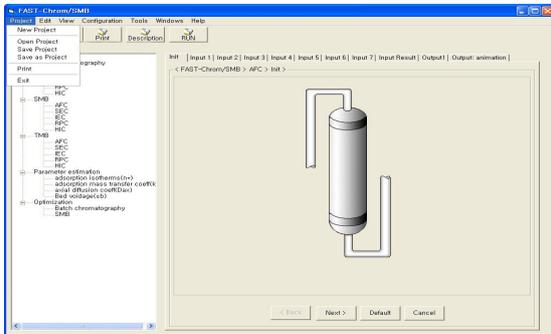


그림 3. 흡착공정 모델링 시스템 초기화면
Fig. 3 Adsorption Modeling System Interface

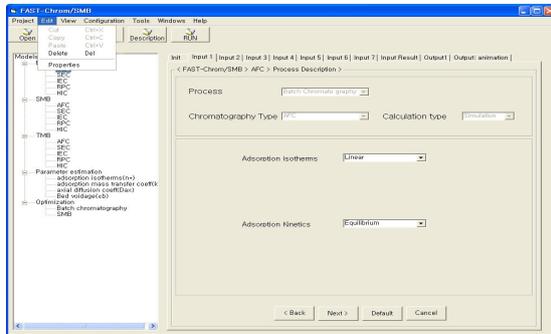


그림 5. 항목별 입력단계
Fig. 5 Itemized Input Step

그림 3은 흡착공정 모델링 시스템의 초기화면을 나타낸 것이다. 메뉴에서는 총 7개의 주메뉴로 구성되며 프로젝트 항목에서 새로운 프로젝트를 클릭 시 시스템이 구동된다. 초기화면에서는 오른쪽 화면에서 보듯이 각 항목에 대한 입력 값을 총 7단계로 분류하여 입력한다. 각 항목별 입력을 완료한 후 다음 항목으로 넘어가면 해당 입력 데이터에 대한 항목을 2장에서 제시한 공식을 적용한 엔진이 구동되어 결과 값을 반환하게 된다.

그림 4는 새 프로젝트 구동 시 초기화면을 나타낸 것이다. 각 항목에는 기본적인 환경 변수에 대한 정보 값을 입력하고 자세한 세부 항목은 총 7단계의 입력단계에서 조건 변수 값들을 기재한다. Default 버튼은 기본적으로 제공되는 환경 변수 값들이 제공된다. Cancel 버튼은 입력된 변수 값을 초기화 하거나 재입력을 위해 사용된다.

그림 5는 프로젝트 구동 시 각 항목별 입력에 대한 첫 번째 단계를 나타낸 것이다. 첫 번째 단계에서는 초기 환경 정보 값을 토대로 각 항목별 요소를 왼쪽 화면의 리스트에서 선택하여 지정한다. 다른 항목들은 미리 정해진 값 항목들 중 사용자가 원하는 항목을 지정하여 다음 단계로 전환한다. 다음 각 단계별 항목을 모두 입력한 후 입력 결과 값을 선택하면 4개의 결과 파일이 생성된다.

그림 6은 각 단계별 입력 자료를 받아 생성된 4개의 결과 파일을 나타낸 것이다. 각 항목에는 고유의 파일 이름을 사용자가 지정할 수 있고 지정된 파일은 출력 시뮬레이션에 결과물로 시각화되어 나타난다. 그 외 항목들은 데이터 빈도수를 사용자가 지정하게 함으로써 파일의 크기를 조절하도록 하였다. 완성된 파일은 시뮬레이션 탭에서 그래프 및 동영상으로 나타난다.

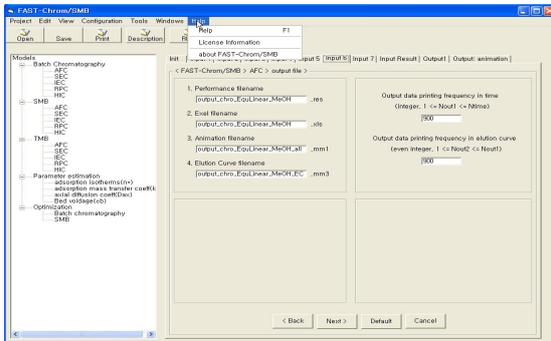


그림 6. 결과 파일 생성 초기화면
Fig. 6 Result File Creation Interface

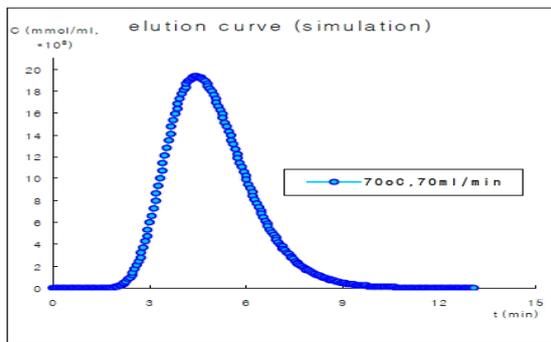


그림 7. 결과 곡선 그래프
Fig. 7 Result Curve Graph

그림 7은 생성된 4개의 파일을 토대로 출력 애니메이션 탭에서 나타날 수 있는 곡선 그래프 및 농도변화 동영상 등 2가지 형태 중 곡선 그래프를 나타내고 있다. 70°C, 70ml/min의 운전 조건하에서 시뮬레이션을 구동시 나타나는 결과를 곡선 그래프로 나타낸 것이다. 본 곡선 그래프의 결과 값은 실제 장비에서의 실험 데이터 값과 매우 흡사하게 나타났다. 전체적인 오차 값은 0.26%로 정확도 99.74%를 유지하였다.

IV. 결론 및 향후과제

본 논문에서는 고성능 흡착 공정에 필요한 실험 데이터를 입력받아 시각화가 가능하도록 시뮬레이션 시스템을 구축하였다. 그리고 시뮬레이션 시스템 구축을 위

해서 내부 엔진은 기존에 구현된 프로그램을 사용하였고 호환성을 위해 매개변수를 전환하여 구동이 되도록 프로그램을 변환하였다. 이로써 실제 실험을 거치지 않고도 시뮬레이션을 통해 결과 값을 시각화하게 되었다. 따라서 공정의 최적화 기능이 추가됨에 따라 시간과 비용을 현저히 절약할 수 있고 수치 결과 값을 시각화함으로써 수행 능력이 향상되었다. 그리고 시각화된 프로그램을 통해 쉽게 식별이 가능하게 되었다. 향후과제로는 현재 개발된 시뮬레이션 시스템은 흡착 공정에 국한되어 있다. 따라서 향후에는 다양한 공정 방식에 적용이 가능하도록 추가 개발이 필요하다. 그리고 현재 개발된 시스템은 입력되는 데이터가 제한된 데이터 영역에서만 결과 값을 시각화한다. 향후에는 광범위하고 대량의 실험 데이터 입력에도 결과 값이 나올 수 있도록 시스템 성능 버전을 향상시켜야 한다.

REFERENCES

- [1] Alain Berthod and Mahmoud Hassoun, "Using the liquid nature of the stationary phase in countercurrent chromatography: IV. The cocurrent CCC method," *Journal of Chromatography A*, Vol. 1116, Issues 1 - 2, pp. 143-148, May 2006.
- [2] Xiaohai Han, Xiaolin Wei, Uwe Schnell, and Klaus R.G. Hein, "Detailed modeling of hybrid reburn/SNCR processes for NOx reduction in coal-fired furnaces," *Combustion and Flame*, Vol. 132, Issue 3, pp. 374-386, February 2003.
- [3] Martin Martinov, Dimiter Hadjiev, and Serafim Vlaev, "Gas - liquid dispersion in a fibrous fixed bed biofilm reactor at growth and non-growth conditions," *Process Biochemistry*, Vol. 45, Issue 7, pp. 1023-1029, July 2010.
- [4] S.S. Daood, M.T. Javed, B.M. Gibbs, and W. Nimmo, "NOx control in coal combustion by combining biomass co-firing, oxygen enrichment and SNCR," *Fuel*, Vol. 105, pp.283-292, March 2013.
- [5] Muhammad Ayoub, Muhammad Faisal Irfan, and Kyung-Seun Yoo, "Surfactants as additives for NOx reduction during SNCR process with urea solution as reducing agent," *Energy Conversion and Management*, Vol. 52, Issue 10, pp. 3083-3088, September 2011.
- [6] Jan Kloppenborg Møller, Henrik Madsen, and Jacob Carstensen, "Parameter estimation in a simple stochastic

- differential equation for phytoplankton modelling," Ecological Modelling, Vol. 222, Issue 11, pp. 1793-1799, June 2011.
- [7] Jake L. Rafferty, J. Ilja Siepmann, and Mark R. Schure, "Mobile phase effects in reversed-phase liquid chromatography: A comparison of acetonitrile/water and methanol/water solvents as studied by molecular simulation," Journal of Chromatography A, Vol. 1218, Issue 16, pp. 2203-2213, April 2011.
- [8] Melissa A. Holstein, Wai Keen Chung, Siddharth Parimal, Alexander S. Freed, Blanca Barquera, Scott A. McCallum, and Steven M. Cramer, "Probing multimodal ligand binding regions on ubiquitin using nuclear magnetic resonance, chromatography, and molecular dynamics simulations," Journal of Chromatography A, Vol. 1229, pp. 113-120, March 2012.



안병태(Byeong-Tae Ahn)

1999년 : 국민대학교
2001년 : 경남대학교(공학석사)
2006년 : 국립경상대학교(공학박사)
현 : 안양대학교 교양학부대학 조교수