



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2008-0066100
(43) 공개일자 2008년07월16일

(51) Int. Cl.

G06F 19/00 (2006.01) G06F 17/13 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2006-0128434

(22) 출원일자 2006년12월15일

심사청구일자 2006년12월15일

(71) 출원인

환경대학교 산학협력단

경기도 안성시 석정동 67

(72) 발명자

임영일

경기 안성시 석정동 환경대학교 N110

최정민

경기 수원시 권선구 서둔동 110번지

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

이중우

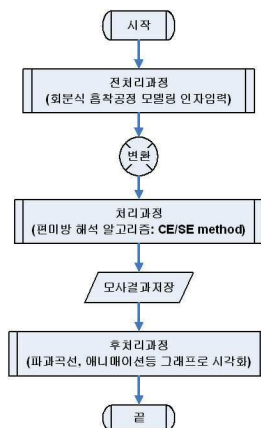
전체 청구항 수 : 총 4 항

(54) 사용자편이성 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법

(57) 요약

본 발명은 분리공정 중의 하나인 회분식 흡착공정의 시뮬레이션 방법에 관한 것으로, 편미분방정식을 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 시뮬레이션 방법을 제공한다. 이에 따라, 본발명을 통하여 전처리과정에서 후처리과정까지의 작업을 사용자가 독립된 하나의 통합된 환경에서 회분식 흡착공정을 편리하게 모사할 수 있으면서 빠른 시간 안에 정확한 해를 구할 수 있게 되었다.

대표도 - 도2



(72) 발명자
이아란
서울 관악구 봉천1동 673-230 적성빌라 가동 306호

손혜정
경기 군포시 군포2동 무지개대림아파트 107동 204호

이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 KRF-2005-202-D00108
부처명 한국학술진흥재단(교육인적자원부)
연구사업명 지역대학 우수과학자 육성 지원연구
연구과제명 우유가공후에 나오는 유장내 고부가가치 단백질의 분리와정제를 위한 공정개발
주관기관 환경대학교
연구기간 2005년 04월 01일 ~ 2007년 03월 31일

특허청구의 범위

청구항 1

편미분방정식을 이용한 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법에 있어서,

그래픽 사용자 인터페이스(Graphical User Interface) 방식의 통합된 환경에서 편미분방정식 해석기법인 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)을 사용하여 흡착공정의 모델식을 수치 해석하고, 이 결과를 시각화할 수 있는 사용자편이성 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

- (a) 설계인자, 운전인자, 모델인자 및 모사인자를 포함하는 회분식 흡착공정 모델링 인자 입력값을 입력하는 전처리 단계;
 - (b) 상기 전처리 단계로부터 입력된 값을 다음의 처리단계에서 요구하는 입력형식에 맞추어서 파일로 생성시키고 이를 저장하는 변환 단계;
 - (c) 상기 파일로부터 빠르고 정확한 편미분방정식 해석기법인 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)를 이용하여 회분식 흡착공정 모델식을 수치적으로 해석하는 알고리즘 처리단계;
 - (d) 상기 처리단계에서 계산된 값을 엑셀(Excel) 파일, 과과곡선 및 동영상으로 구현하기 위한 데이터 파일을 생성하는 모사결과저장단계; 및
 - (e) 상기 저장된 데이터 파일을 시간에 따른 농도곡선과 회분식 흡착공정 컬럼 길이에 따른 농도곡선의 시간변화 애니메이션(또는 동영상)을 그래프로 시각화하는 후처리 단계;
- 를 포함하여 이루어지는 것을 특징으로 하는 사용자편이성 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법.

청구항 3

제 2 항에 있어서,

상기 (a) 단계의 회분식 흡착 공정 모델식은 평형 흡착식, 비평형 흡착식, 선형 등온흡착식 및 비선형 등온흡착식으로 이루어지는 군에서 선택된 모델식을 사용하는 것을 특징으로 하는 사용자편이성 회분식 흡착공정의 시뮬레이션 방법.

청구항 4

제 2 항에 있어서,

상기 (c) 단계는 편미분방정식과 상미분방정식 그리고 대수방정식이 혼재하는 형태의 흡착공정 모델식을 처리하는 것을 특징으로 하는 사용자편이성 회분식 흡착공정의 시뮬레이션 방법.

명세서

발명의 상세한 설명

발명의 목적

발명이 속하는 기술 및 그 분야의 종래기술

- <5> 본 발명은 화학분리공정에서 대표적인 회분식 흡착공정의 시뮬레이션 방법에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 편미분방정식 해석기법인 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)을 이용하여 회분식 흡착공정을 빠르고 정확하게 수치적으로 해석할 수 있고, 그래픽 사용자 인터페이스(Graphic Use Interface; GUI) 방식을 채택하여 사용자편이성 통합환경을 구축할 수 있게 하는 회분식 흡착공정의 시뮬레이션 방법에 관한 것이다.
- <6> 최근 생명공학의 발전과 더불어 중요성을 더해 가는 단백질과 같은 생물분자의 분리를 위하여 크로마토그래피

흡착 분리공정에 많은 관심이 집중되고 있다[임영일, Systems biology and engineering (SBE), 화학공학연구정보센터 (<http://www.cheric.org>), 기술동향보고서, 2004].

- <7> 흡착공정에서의 크로마토그래픽 분리는 컬럼내 고정상 (fixed phase) 의 충전입자와 유동상 (fluid phase)의 여러 성분들 간의 다른 친화력을 이용하여 분리하는 것으로, 친화력이 큰 유동상 분자는 느린 속도로, 친화력이 작은 분자는 빠른 속도로 이동하기 때문에 각 성분은 다른 체류시간을 갖는 특성을 이용하는 것이다.
- <8> 하기 표 1은 종래에 알려진 크로마토그래픽 흡착분리공정의 종류와 각 특성을 보여준다.

표 1

공정 분류	분리 원리	공정 특성
이온교환 공정 (IEC): Ion-exchange chromatography	정전기적 상호작용	분리하고자 하는 물질의 최종정제를 위한 가장 일반적 공정, 목적분자와 다른 전하량을 갖는 불순물 제거, 까다롭지 않은 공정조건에서 사용
상 반전 공정 (RPC): Reversed phase chromatography	소수성 상호작용	펩타이드 등의 분리를 위해 주로 사용되는 매우 강력한 분리공정, 유기용매 사용, 목적분자와 매우 비슷한 불순물제거, 최종정제 단계에서 사용가능
소수성 상호작용 공정 (HIC): Hydrophobic interaction chromatography	소수성 상호작용	상반전공정보다는 분리력이 약한 공정, 수용성 용매 사용, 주로 큰 단백질 정제에 사용, 최종정제 단계에서 사용가능
친화 공정 (AFC): Affinity chromatography	용질과 리간드간의 친화성	매우 가장 강력한 분리공정, 리간드의 선택에서 분리성능에 큰 영향을 줌
분자 크기 분리공정 (SEC): Size exclusion chromatography	크기	주로 최종정제단계에서 사용, 대상분자와 크기가 다른 분자 제거

- <9>
- <10> 크로마토그래피 흡착 분리공정의 시뮬레이션(모사)은 실험실 규모에서 상업적 규모로의 공정 개발을 가속화할 수 있고 효율적인 실험계획을 제시할 수 있는 좋은 방안으로 사용되고 있다.
- <11> 또한, 시뮬레이션 프로그램을 통해 흡착 분리 공정을 모사하고, 이의 운전조건을 최적화하면, 요구되는 실제 실험 횟수와 개발비를 크게 줄일 수 있다 [Takahashi et. al., Computational challenges in cell simulation: a software engineering approach, IEEE intelligent Systems, 2002, 17(5), 64-71].
- <12> 이러한 회분식 흡착공정을 시뮬레이션(모사)하기 위해서는, 먼저 편미분방정식과 같은 흡착공정의 모델식이 정의되어야 하고, 수치적 해석기법(numerical method)을 이용하여 이 모델식의 해(解)를 구해야 하며, 이렇게 구해진 해를 분석하여 사용자가 원하는 결과로 이끌어 냄으로써, 공정시뮬레이션 결과를 실제 공정 설계 및 개발에 응용할 수 있다.

<13> 회분식 흡착공정에서 사용되는 흡착컬럼의 모델식은 다음 식 1과 같은 편미분방정식으로 표현될 수 있다.

<14> [식 1]

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

<16> 여기에서 t 는 시간, z 는 컬럼의 축방향 길이, C_i 는 유동상 혼합물내 성분 i의 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 식1의 해를 구한다고 하는

것은 시간(t)과 길이(z)에 따른 C_i 와 n_i 값을 구하는 것을 의미한다.

<17> 이때, 식 1은 크게 평형모델과 비평형모델로 구분되며[Dunnebler & Klatt, Modeling and simulation of nonlinear chromatographic separation processes: a comparison of different modeling approaches, Chemical Engineering Science, 2000, 55, 373-380], 평형모델은 고정상의 농도가 평형에 도달되었다고 가정하여 다음 식 2로 표현된다.

<18> [식 2]

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

<19> $n_i^* = f(C_i)$

<20> 여기에서 n_i^* 는 성분 i 에 대한 흡착평형농도를 뜻하며, $f(C_i)$ 는 유동상농도 C_i 에 대한 함수로 표현되는 등온흡착식(adsorption isotherms)이다. 이 등온흡착식은 크게 선형과 비선형으로 구분된다.

<21> 또한, LDF(linear driving force) 모델에 바탕을 둔 비평형모델은 다음 식 3으로 표현된다.

<22> [식 3]

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

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

<23> $n_i^* = f(C_i)$

<24> 여기에서 k_i 는 성분 i에 대한 물질전달속도를 뜻한다. 식 3에서 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 1차식으로 표현되면 선형대수식(LAE; linear AE)이라고 하고, 1차식이 아닌 경우에는 비선형대수식 (NAE; nonlinear AE)이라고 한다.

<25> 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; $n_i^* = \frac{a_i C_i}{1 + \frac{NumComp}{\sum_k b_k C_k}}$,

- bi-Langmuir; $n_i^* = \frac{a_i K_i C_i}{1 + \sum_k b_k C_k} + \frac{c_i L_i C_i}{1 + \sum_k d_k C_k}$,

- modified Langmuir; $n_i^* = \frac{a_i K_i C_i}{1 + \sum_k b_k C_k} + c_i C_i$,

- Ching model; $n_i^* = K_i C_i + a_i C_i^{(m_i+1)} + b_{ij} C_j^{m_{ij}} C_i$,

- polynomials; $n_i^* = a_{0i} + \sum_{n=1} a_{ni} C_i^n$,

- user-defined model; $n_i^* = f(C_i)$.

<26>

<27> 등으로 구분할 수 있다. 위 식에서 $K_i, a_i, b_i, c_i, d_i, a_{ij}$ 그리고 b_{ij} 는 등온흡착식의 계수들이다.

<28>

이때, 선형 및 비선형 등온흡착식을 갖는 평형 및 비평형 흡착공정 모델식을 수치적으로 풀기위하여 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 운전과 관련된 운전인자로는 성분수, 운전시간, 원료 유량, 원료농도, 운전온도 등이 있다. 모델인자는 등온흡착식과 평형·비평형 회분식 흡착공정 모델에 관련된 인자들로서 촉방향화산계수, 물질전달속도계수, 등온흡착식 인자값 등이 있다. 모사인자는 회분식 흡착공정 모델식을 수치적으로 해석하기 위하여 필요한 수치해석 알고리즘에 관련된 것이다.

<29>

상술한 연속식 모사이동층 흡착공정의 시뮬레이션을 위하여 상용화된 사용자편이성 프로그램 (ASPEN Chromatography, ASPEN Tech, <http://www.aspentech.com>, USA; gPROMS, Process systems enterprise, <http://www.psenterprise.com>, UK) 에서 사용하는 시뮬레이션 방법에서는 흡착컬럼의 모델식인 편미분방정식을 풀기위하여 Finite difference method (FDM), finite element method (FEM) 또는 finite volume method (FVM) 를 사용하여 상미분방정식으로 변환한 후 모델식을 해석한다. 구체적으로 편미분방정식이 공간방향(z)을 정해진 수만큼 구간화 되어 시간에 대한 미분방정식의 집합으로 변환된 후, 이 미분방정식 집합의 수치해는 시간적분기 (time integrator)를 이용하여 구해진다. 이렇게 공간방향 구간화 후 시간적분기를 사용하여 편미분방정식을 수치적으로 해석하는 방법을 MOL(method of lines)기법이라고 한다[Hoffman, Numerical methods for engineering scientists, McGraw-Hill, 1992].

<30>

회분식 흡착공정모사에 대하여 통합된 환경을 구축하여 독립된 프로그램으로 상용화된 소프트웨어의 대표적인 예는 ASPEN Chromatography (ASPEN Tech., USA) 이다. 이 제품에서는 회분식 흡착공정 모델식을 MOL 방식으로 수치적으로 해석하고, 계산된 결과를 시각화하여 공정에 대한 분석이 용이하도록 만든 소프트웨어이다. 사용자

편이성을 고려하여 만든 이 제품은 대부분의 MS windows 응용프로그램에서 취하는 그래픽 사용자 인터페이스(GUI) 방식으로 개발되었다. 그래픽 사용자 인터페이스방식을 구현하기 위한 시뮬레이션 방법은 일반적으로 도1에서 보듯이 전처리과정(101), 처리과정(103) 및 후처리과정(105)의 순서로 구분할 수 있다.

<31> 그런데, 임영일 등이 2004년도에 발표한 논문[Lim, Y. I., C. S. Chang & S. B. Jørgensen, A novel partial differential algebraic equation (PDAE) solver: iterative space-time conservation element/solution element (CE/SE) method, 2004]에 의하면, 일반적으로 사용하는 편미분방정식 해석기법인 MOL 방식의 FDM, FEM 및 FVM은 정확한 수치해를 얻기 위하여 많은 계산시간을 소요하거나, 공간방향에 따른 농도곡선의 기울기가 클 때 부정확한 해를 줄 수 있는 문제점이 있는 것으로 보고되고 있다.

발명이 이루고자 하는 기술적 과제

<32> 지금까지 상술한 바에 따르면, 회분식 흡착공정 시뮬레이션을 위한 통합적 환경구축방법에 관한 종래의 기술은 모델식을 MOL 방법으로 수치해를 구하면서 사용자편이성을 위하여 그래픽 사용자 인터페이스(Graphical Use Interface; GUI)의 시뮬레이션 방법을 취하고 있지만, CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)으로 수치해를 구하면서 사용자편이성 모사방법을 취하는 기술은 아직 발표되어 있지 않다.

<33> 이에, 본 발명자는 상술한 문제점을 해결하기 위해서 회분식 흡착공정 시뮬레이션을 위한 통합적 환경구축방법에 있어서 모델식을 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)으로 수치해를 구하고자 하였다.

<34> 따라서, 본 발명은 회분식 흡착공정 시뮬레이션을 위한 통합적 환경구축방법에 있어서, 회분식 흡착공정의 모델식을 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element)으로 수치해를 구하면서, 사용자편이성을 위하여 그래픽 사용자 인터페이스(Graphic Use Interface; GUI) 방식을 채택하여 회분식 흡착공정에 대한 시뮬레이션 방법의 제공을 목적으로 한다.

발명의 구성 및 작용

<35> 상기와 같은 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 편미분방정식을 이용한 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법에 있어서, 그래픽 사용자 인터페이스(Graphical User Interface) 방식의 통합된 환경에서 편미분방정식 해석기법인 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)을 사용하여 흡착공정의 모델식을 수치 해석하고, 이 결과를 시각화할 수 있는 사용자편이성 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법을 제공한다.

<36> 이하, 본 발명을 상세히 설명하기로 한다.

<37> 이때, 사용되는 기술 용어 및 과학 용어에 있어서 다른 정의가 없다면, 이 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 통상적으로 이해하고 있는 의미를 가진다.

<38> 또한, 종래와 동일한 기술적 구성 및 작용에 대한 반복되는 설명은 생략하기로 한다.

<39> 본 발명에서 흡착공정이란 크로마토그래픽 흡착공정인 IEC, HIC, RPC, AFC 및 SEC을 말하며(표1 참조), 회분식 흡착공정이란 상기 흡착공정에서 선택된 어느 한 종류를 일정시간동안 회분식으로 운전하는 공정을 말한다.

<40> 본 발명에서 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)은 임영일 등이 2004년도에 발표한 논문[Lim, Y. I., C. S. Chang & S. B. Jørgensen, A novel partial differential algebraic equation (PDAE) solver: iterative space-time conservation element/solution element (CE/SE) method, 2004]에 따른 방법을 말한다. 따라서, 본 발명에서는 CE/SE 방법에 따른 수많은 모델식의 구체적인 기재는 생략하기로 한다.

<41> 다만, 본 발명에 따른 CE/SE 방법[Lim et al., 2004]은 회분식 흡착공정모델과 같이 편미분방정식(PDE; partial differential equation)과 미분방정식(ODE; ordinary differential equation) 그리고 선형 혹은 비선형 대수방정식(AE; algebraic equation)이 혼합된 형태의 모델식을 처리할 수 있는 알고리즘을 의미한다.

<42> 그리고, 본 발명에서 그래픽 사용자 인터페이스(GUI)는 사용자가 그래픽을 통해 컴퓨터와 정보를 교환하는 작업 환경을 말하는 것으로, 전처리과정, 처리과정 및 후처리과정의 순서로 구분할 수 있다.

<43> 또한, 본 발명에서 회분식 흡착공정 시뮬레이션을 위한 통합된 환경이라 함은 회분식 흡착공정의 모델식 정의, 수치적 해석기법, 해(解)의 분석 및 사용자가 원하는 결과로의 시각화 등을 모두 수행할 수 있도록 만든 독립된 하나의 프로그램을 말한다. 따라서, 본 발명에서 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법이란 회분식 흡착공정모사에 대한 통합된 환경구축을 위하여 사용되는 프로그램 개발 순서도, 공정모델식의 정의방법, 수치적 해석기법, 해

의 분석방법 및 결과의 시각화 방법 등을 포함한다.

- <44> 본 발명에 따른 시뮬레이션 방법에서 CE/SE 방법은 MOL(Method of lines)방식과는 다르게 시간과 공간방향을 동시에 구간화하면서, 국부적이고 전체적인 물리적 흐름량을 보존시키기 때문에, 매우 정확한 해를 얻을 수 있으며 매우 빠른 계산시간을 보여준다.
- <45> 또한, 본 발명에서는 상술한 CE/SE 방법에 따라 회분식 흡착 공정 모델식을 수치로 수치적으로 해석하고, 이를 사용자가 원하는 결과로의 시각화를 위하여 그래픽 사용자 인터페이스(Graphical User Interface; 이하 GUI라 함.) 방식에 의해 통합된 환경을 구축할 수 있는 방법을 제시한다. 이때, 본 발명에서는 상기 결과를 시간에 따른 농도곡선과 회분식 흡착공정 컬럼 길이에 따른 농도곡선의 시간변화 애니메이션(또는 동영상)을 그래프로 시각화한다.
- <46> 즉, 본 발명에서는 편미분방정식 해석기법인 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element)을 사용하여 회분식 흡착공정의 모델식을 수치적으로 해석하고, 이를 그래픽 사용자 인터페이스(Graphical User Interface) 방식에 의해 통합된 환경을 구현하기 위하여, 다음과 같은 단계를 포함하여 이루어지는 사용자편이성 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법을 제공하는 것이 바람직하다.
- <47> (a) 설계인자, 운전인자, 모델인자 및 모사인자를 포함하는 회분식 흡착공정 모델링 인자 입력값을 입력하는 전처리 단계;
- <48> (b) 상기 전처리 단계로부터 입력된 값을 다음의 처리단계에서 필요한 입력형식에 맞추어서 파일로 생성시키고 이를 저장하는 변환 단계;
- <49> (c) 상기 파일을 바탕으로 빠르고 정확한 편미분방정식 해석기법인 CE/SE 방법(Conservation element and Solution element method)를 이용하여 회분식 흡착공정 모델식을 수치적으로 해석하는 알고리즘 처리단계;
- <50> (d) 상기 처리단계에서 계산된 값을 엑셀(Excel) 파일과, 파파곡선 및 동영상으로 구현하기 위한 데이터 파일을 생성하는 모사결과저장단계; 및
- <51> (e) 상기 저장된 데이터 파일을 시간에 따른 농도곡선과 회분식 흡착공정 컬럼 길이에 따른 농도곡선의 시간변화 애니메이션(또는 동영상)을 그래프로 시각화하는 후처리 단계.
- <52> 이때, 본 발명에서 선형 또는 비선형 등온흡착식을 갖는 평형 또는 비평형 흡착공정 모델식을 수치적으로 풀기 위하여 입력되어야 할 모델링인자는 설계인자, 운전인자, 모델인자 그리고 모사인자 등이 있다. 이중, 설계인자는 회분식 흡착공정의 물리·기하학적 특징을 결정하는 요소로서 구체적으로 컬럼 길이, 실린더형 컬럼의 단면적, 총괄공극률 등이 있으며, 회분식 흡착공정의 운전에 관련된 운전인자로는 구체적으로 성분수, 운전시간, 원료 유량, 원료농도, 운전온도 등이 있다. 그리고, 모델인자는 등온흡착식과 평형 또는 비평형 회분식 흡착공정 모델에 관련된 인자들로서 구체적으로 축방향확산계수, 물질전달속도계수, 등온흡착식 인자값 등이 있고, 모사인자는 회분식 흡착공정 모델식을 수치적으로 해석하기 위하여 필요한 수치해석 알고리즘에 관련된 것으로서 컬럼 길이의 구간수와 운전시간의 구간수를 포함한다.
- <53> 이하, 첨부된 도면을 참조하여 본 발명을 상세히 설명한다.
- <54> 도 2는 본 발명의 바람직한 실시예를 나타낸 시뮬레이션 방법을 순서도로서 나타낸 것으로, 크게 전처리과정(201), 변환(202), 처리과정(203), 모사결과저장(204) 그리고 후처리과정(205)으로 구성된다.
- <55> 상기 전처리과정(201)은 회분식 흡착공정 모델링 인자(설계인자, 운전인자, 모델인자 및 모사인자) 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.
- <56> 상기 변환(202)에서는 전처리과정에서 작성된 입력정보를 처리과정으로 전달하는데 필요한 자체변환코드로 구성된다. 이 자체변환코드는 처리과정에서 요구되는 입력형식에 맞추어서 파일을 생성시키고, 저장하는 역할을 담당한다.
- <57> 상기 처리과정(203)은 편미분방정식 해석기법인 CE/SE(Conservation element and Solution element) 방법을 포함한다. 따라서 MOL 방식과 비교하여 더 빠르고, 더 정확한 수치해를 얻을 수 있는 알고리즘이 이 처리과정에 포함된다. 특히, 편미분방정식과 상미분방정식 그리고 대수방정식이 혼재하는 형태의 흡착공정 모델식을 처리할 수 있는 CE/SE 방법이 내장된다.

<58> 상기 모사결과저장(204)에서는 처리과정에서 계산한 값을 사용자가 사용하기 편리한 파일형태로 제공하는 자체 변환코드로 구성된다. 이 자체변환코드는 마이크로소프트사의 엑셀(Excel)에서도 결과값을 확인할 수 있는 엑셀 파일, 파과곡선 및 동영상 구현하기 위한 데이터 파일을 생성하는 역할을 담당한다.

<59> 상기 후처리과정(205)에서는 시간에 따른 농도곡선(파과곡선) 과 회분식 흡착공정 컬럼 길이에 따른 농도곡선의 시간변화 애니메이션(또는 동영상) 그래프를 포함한다.

<60> 이하, 본 발명을 구체적인 실시예에 의해 보다 더 상세히 설명하고자 한다. 하지만, 본 발명은 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니며, 본 발명의 사상과 범위 내에서 여러가지 변형 또는 수정할 수 있음은 이 분야에서 당업자에게 명백한 것이다.

<61> [실시예]

<62> 1. 본 발명의 CE/SE 방법의 정확도와 계산 시간

<63> 본 실시예는 선형등온흡착식을 갖는 비평형흡착을 표현하는 식4와 같은 회분식 흡착공정 모델식을 해석하기 위하여, 본 발명에 따른 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법과 종래 MOL 방식을 사용하여 그 정확도와 계산 시간에 대한 효과를 비교하고자 하였다.

<64> [식 4]

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + 1.5 \frac{dn_1}{dt} = -0.1 \frac{\partial C_1}{\partial z}$$

$$\frac{dn_1}{dt} = 0.0129(n_1^* - n_1)$$

$$n_1^* = 0.85C_1$$

<65> 여기서 C_1 과 n_1 은 각각 유동상과 고정상의 성분 1에 대한 농도이다. n_1^* 는 성분 1의 흡착평형농도이다.

<66> 식 4의 모사결과에 대하여, 5가지의 MOL 방식들과 CE/SE 방법의 성능을 비교하여, 하기 표 2에 나타내었다. 이때, 1st-order upwind(1차 상향구간화), 2nd-order central (2차 중심구간화) 및 5th-order upwind (5차 상향구간화)방법들은 일종의 FDM으로 분류되며, 3rd-order WENO (3차 가중치 비진동구간화) 및 5th-order WENO (5차 가중치 비진동구간화) 방법은 FVM으로 분류할 수 있다.

표 2

	정확도 (오차값)**	계산시간 (s)***
1 st -order upwind	0.1307	0.9
2 nd -order central	0.1140*	1.3
MOL 5 th -order upwind	0.0218*	2.3
3 rd -order WENO	0.0426	5.9
5 th -order WENO	0.0252	9.5
CE/SE method	0.0185	1.2

*불안정한 해석해, **시간 t=10s 에서의 오차값, ***10초간의 흡착공정 운전시간에 대한 계산시간.

<67> 상기 표 2에 나타난 바와 같이, 오차값이 가장 작은 방법은 CE/SE 방법임을 알 수 있으며, 이러한 정확도를 성취하기 위하여 가장 빠른 계산시간을 보여준다. MOL의 1st-order upwind 방법은 계산시간으로는 CE/SE방법보다 빠르지만, 정확도는 10분의 1 정도이며, CE/SE 방법과 근접한 정확도를 보여주는 5th-order upwind 는 계산시간도 길고, 실제로는 존재하지 않는 진동해를 보여주므로 불안정한 수치적 기법으로 간주될 수 있다. 안정한 해를 주면서 CE/SE 방법과 근접한 정확도를 보여주는 MOL의 5th-order WENO는 계산시간이 약 10배 더 걸림을 알 수

있었다.

<70> **2. 본 발명에 따른 흡착 분리공정 시뮬레이션의 GUI 구현**

<71> 먼저, 마이크로소프트 스튜디오 비주얼 베이직(Micrisoft Studio Visual Basic)의 윈도우용 응용프로그램 개발 툴(application program development tool) 의 응용프로그램 개발방법에 따라 전처리과정, 처리과정 그리고 후처리과정을 그래픽 사용자 인터페이스(GUI)로 작성하여 회분식 흡착공정 모사프로그램을 개발하였다. 이러한 사용자편이성 프로그램에는 CE/SE 방법이 내장되어 있다.

<72> 이 사용자편이성 프로그램을 이용하여 설계인자, 운전인자, 모델인자 그리고 모사인자를 포함하는 모델링 인자를 입력한 다음, 프로그램을 실행시켰으며, 시간에 따른 농도곡선(파과곡선)과 회분식 흡착공정 컬럼 길이에 따른 농도곡선의 시간변화 애니메이션 그래프(동영상 그래프)를 얻었다.

<73> 이의 결과를 도 3과 4를 통해 나타내었다.

<74> 도 3은 입력부분을 GUI 방식으로 실제로 구현하여 모니터를 통해 보여지는 것을 나타낸 도면이다.

<75> 그리고, 도 4는 애니메이션 그래프에서 시간이 지남에 따라 변화하는 농도곡선의 한 시점에서 캡처한 것을 나타낸 것이다. 이때, 애니메이션 그래프는 차트 FX 서버/클라이언트 버전(Chart FX server/client version, Software FX, USA)을 이용하여 마이크로소프트 스튜디오 비주얼 베이직의 구성요소(MicroSoft Studio Visual Basic component)로 삽입하여 구현한 것이다.

<76> 따라서, 본 발명의 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법은 종래 방법과 비교하여 정확도와 빠른 계산 시간을 가지고 있으면서 사용자편이성을 입증하였다.

발명의 효과

<77> 상술한 바와 같이, 본 발명은 사용자편이성 GUI 기법을 이용하여 전처리과정에서 후처리과정까지의 작업을 사용자가 독립된 하나의 통합된 환경에서 회분식 흡착공정을 편리하게 모사할 수 있는 시뮬레이션 방법을 제공하는 것이다.

<78> 또한, 본 발명에서는 처리과정에서 회분식 흡착공정의 편미분방정식 모델의 수치해석기법으로 CE/SE 방법을 사용하고 있으므로, 빠른 시간 안에 정확한 해를 구할 수 있다.

도면의 간단한 설명

<1> 도 1은 종래의 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법을 나타낸 모식도이다.

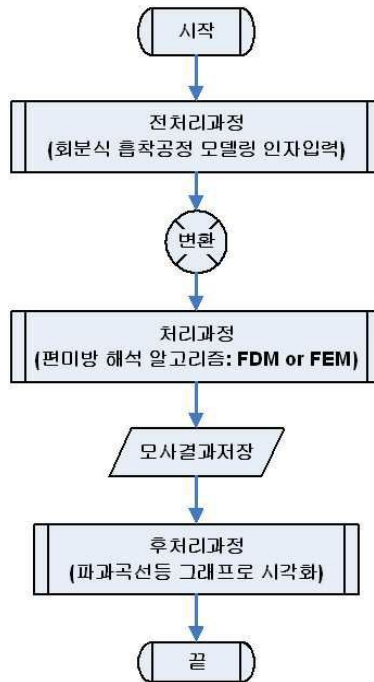
<2> 도 2는 본 발명에 따른 회분식 흡착공정 시뮬레이션 방법을 나타낸 모식도이다.

<3> 도 3은 본 발명에서 구현한 회분식 흡착공정 시뮬레이션의 통합 환경에서 모델링 인자의 입력 과정을 나타낸 도면이다.

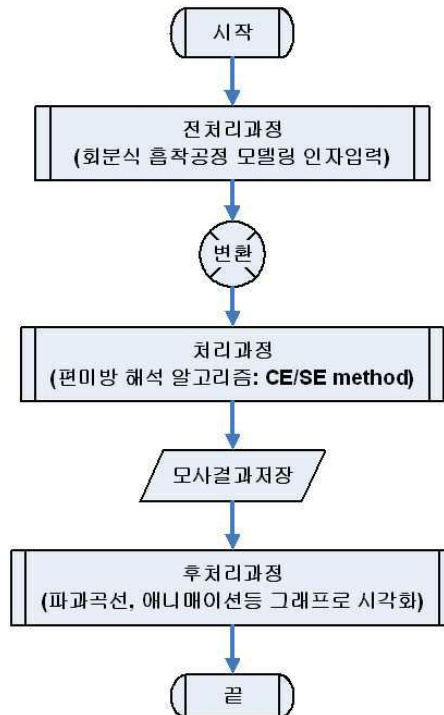
<4> 도 4 는 본 발명에 따라 모사결과를 시각화한 동영상 그래프고서 시간이 지남에 따라 변화하는 농도곡선의 한 시점을 캡처한 결과를 나타낸 도면이다.

도면

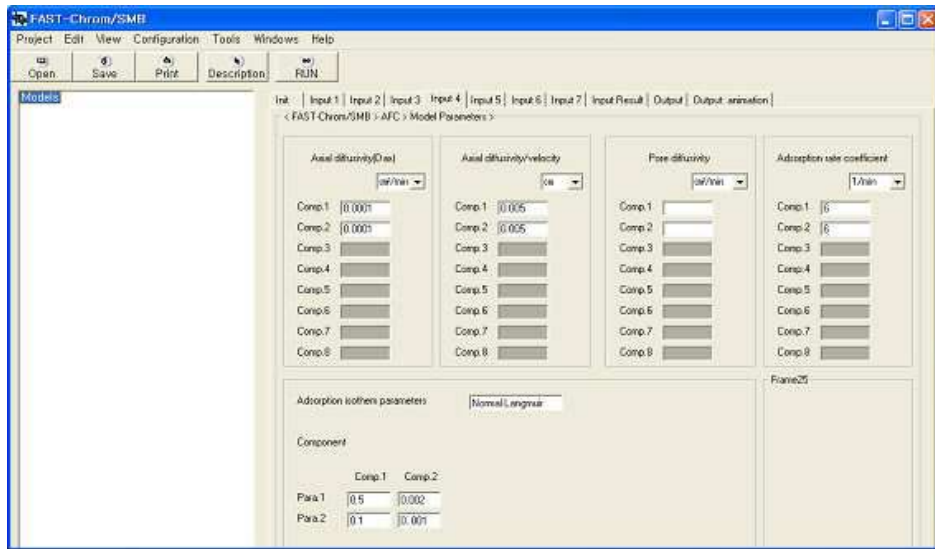
도면1



도면2



도면3



도면4

