



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2012년12월24일
(11) 등록번호 10-1214841
(24) 등록일자 2012년12월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G06F 19/00 (2011.01) G06F 17/10 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2011-0122368
(22) 출원일자 2011년11월22일
심사청구일자 2011년11월22일
(56) 선행기술조사문헌
JP08309140 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
서강대학교산학협력단
서울특별시 마포구 백범로 35 (신수동, 서강대학교)
(72) 발명자
이광순
서울특별시 종로구 삼청로9길 31, 삼청빌라 201호 (삼청동)
원왕연
경기도 수원시 영통구 망포동 동수원엘지빌리지3차 307동 404호
황성준
경기도 안산시 상록구 도매시장로 38 (이동)
(74) 대리인
김일환

전체 청구항 수 : 총 14 항

심사관 : 김동성

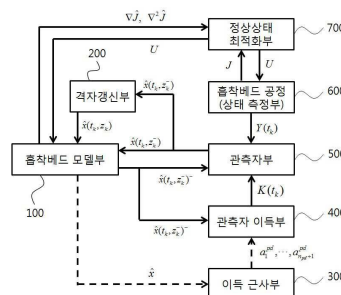
(54) 발명의 명칭 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 시스템 및 그 방법

(57) 요약

본 발명은 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 시스템 및 그 방법에 관한 것으로, 흡착베드에 의한 흡착공정에 사용되는 기체혼합물의 물리적 상태정보를 실시간으로 측정하는 상태 측정부; 수학적 공간 격자에서 일정 시간 간격으로 비선형 상태 공간 모델의 적분을 수행하고, 상기 기체혼합물의 상태분포를 계산하여 흡착베드 모델을 산출하는 흡착베드 모델부; 상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태들의 공간 해를 바탕으로 수학적 모델의 격자의 위치와 수를 업데이트하는 격자갱신부; 상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태를 독립변수로 하여 관측자 이득 행렬의 각 원소를 고차 방정식으로 근사하여 근사식의 계수를 미리 계산하는 이득 근사부; 상기 이득 근사부로부터 미리 계산된 상기 근사식의 계수와 상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태 값을 바탕으로 관측자 이득 행렬의 원소와 크기를 결정하는 관측자 이득부; 및 상기 관측자 이득부로부터 계산된 관측자 이득 행렬과 공정의 측정 정보를 바탕으로 상기 흡착베드 모델부의 상태와 매개변수(parameter) 및 경계조건(boundary condition)을 보정하는 관측자부; 및 흡착베드 공정이 주기적 정상상태에 도달할 때마다, 상기 상태 측정부로부터 산출된 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하도록 최적 운전 조건을 결정하는 정상상태 최적화부를 포함하여 구성한다.

이와 같은 본 발명은, 고정층 흡착 공정을 운전하는데 있어서, 특정 위치에서 실시간으로 측정되는 온도, 압력, 출구유량, 출구농도의 정보를 바탕으로, 실시간으로 측정 불가능한 흡착베드 내 농도 분포 및 측정센서가 설치되어 있지 않은 위치에서의 온도, 압력, 유량 등 흡착베드 내 상태 분포를 정확하게 예측할 수 있고, 이를 바탕으로 흡착베드 공정의 송풍기(또는 압축기) 및 진공펌프에서의 소비 에너지를 최소화하는 최적 운전 조건을 정확하게 결정하는 흡착 공정 최적화 시스템 및 그 방법을 제공할 수 있게 된다.

대 표 도 - 도3



이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	20110000243
부처명	교육과학기술부
연구사업명	중견연구자지원사업
연구과제명	압력변동흡착(PSA) 공정의 운전 최적화와 최적화 제어 기법 개발
주관기관	서강대학교 산학협력단
연구기간	2009.05.01 ~ 2012.02.29

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	20094010100160
부처명	지식경제부
연구사업명	에너지자원 인력양성사업 - 학술진흥(에너지 기술분야)
연구과제명	CO ₂ 회수를 위한 압력온도변동흡착(PTSA) 공정의 운전 최적화
주관기관	서강대학교 산학협력단
연구기간	2009.03.01 ~ 2012.02.28

특허청구의 범위

청구항 1

흡착베드에 의한 흡착공정에 사용되는 기체혼합물의 물리적 상태정보를 실시간으로 측정하는 상태 측정부;

수학적 공간 격자에서 일정 시간 간격으로 비선형 상태 공간 모델의 적분을 수행하고, 상기 기체혼합물의 상태 분포를 계산하여 흡착베드 모델을 산출하는 흡착베드 모델부;

상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태들의 공간 해를 바탕으로 수학적 모델의 격자의 위치와 수를 업데이트 하는 격자갱신부;

상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태를 독립변수로 하여 관측자 이득 행렬의 각 원소를 n 차 칼만 이득 근사식으로 근사하여 상기 근사식의 계수를 미리 계산하는 이득 근사부;

상기 이득 근사부로부터 미리 계산된 상기 근사식의 계수와 상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태 값을 바탕으로 관측자 이득 행렬의 원소와 크기를 결정하는 관측자 이득부;

상기 관측자 이득부로부터 계산된 관측자 이득 행렬과 공정의 측정 정보를 바탕으로 상기 흡착베드 모델부의 상태와 매개변수(parameter) 및 경계조건(boundary condition)을 보정하는 관측자부; 및

흡착베드 공정이 주기에 따라 반응의 입출력 상태가 일정한 주기적 정상상태(steady state)에 도달할 때마다, 상기 상태 측정부로부터 산출된 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하도록 최적 운전 조건을 결정하는 정상상태 최적화부를 포함하는 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 시스템.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 상태 측정부는,

상기 기체혼합물의 온도, 압력, 출구유량 및 출구농도 중 적어도 어느 하나를 측정할 수 있는 센서를 포함하는 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 시스템.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 기체혼합물의 온도 및 압력을 측정하는 센서는 상기 흡착베드의 입구부터 출구까지 일정 간격으로 다수 배치된 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 시스템.

청구항 4

(a) 이득 근사부가 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태를 독립변수로 하고 관측자 이득 행렬의 각 원소를 종속 변수로 하는 근사식의 계수를 미리 계산하는 단계;

(b) 흡착베드 공정이 주기에 따라 반응의 입출력 상태가 일정한 주기적 정상상태(steady state)에 도달하면, 정상상태 최적화부가 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하도록 최적 운전 조건을 결정하는 단계;

(c) 흡착베드 모델부가 수학적 공간 격자에서 일정 샘플링 시간을 주기로 기체혼합물의 상태분포를 나타내는 흡착베드 모델을 계산하는 단계;

(d) 관측자 이득부가 상기 이득 근사부로부터 미리 계산된 상기 근사식의 계수와 상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태 값을 바탕으로 관측자 이득 행렬의 원소와 크기를 결정하는 단계;

- (e) 상태 측정부에서 기체혼합물의 물리적 상태정보를 실시간으로 측정하는 단계;
- (f) 관측자부가 상기 관측자 이득부로부터 계산된 이득 행렬과 상기 상태 측정부에서 측정된 상태정보를 바탕으로, 상기 흡착베드 모델의 상태와 매개변수 및 경계조건을 보정하는 단계; 및
- (g) 격자갱신부가 상기 보정된 상태들의 공간 해를 바탕으로 상기 격자의 위치와 수를 업데이트하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 (b) 단계는,

상기 상태 측정부에서 측정된 상태정보와 상기 흡착베드 모델부에서 산출된 흡착베드 모델을 바탕으로 상기 흡착 공정의 소비에너지를 최소화하도록 운전 조건을 결정하는 단계인 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 6

제5항에 있어서,

상기 상태 측정부로부터 산출된 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지와, 상기 흡착베드 모델부로부터 예측된 소비 에너지의 기울기(gradient)와 헤시안(hessian)을 바탕으로, 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하도록 최적 운전 조건을 결정하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 7

제4항에 있어서,

상기 (b) 단계는 상기 주기적 정상상태(steady state)에 도달할 때마다, 간헐적으로 수행하고, 상기 단계 (c) 내지 (g) 단계는 일정 샘플링 시간을 주기로 계속하여 반복 수행하는 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 8

제4항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 상태분포는 상기 기체 혼합물의 온도, 압력, 출구유량 및 출구농도 중 적어도 어느 하나의 공간적 분포를 나타내는 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 9

제4항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 (c) 단계는,

수학적 공간 격자에서 일정 시간 간격으로 비선형 상태 공간 모델의 적분을 수행하여 상기 흡착베드 모델을 계산하는 단계인 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 10

제4항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 상태정보는 상기 기체혼합물의 온도, 압력, 출구유량 및 출구농도 중 적어도 어느 하나를 측정하는 측정정보인 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 11

제4항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 (a) 단계는,

상기 모든 격자의 위치에서 수학적 모델을 통해 각각의 상태마다 관측자 이득 값을 계산하는 단계; 및

상기 수학적 모델의 상태를 독립변수로 하고 상기 계산된 관측자 이득 값을 종속변수로 하는 근사식의 계수를 추정하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 12

제4항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 (g) 단계는,

상기 흡착베드의 입구부터 출구까지의 공간을 다수의 서브도메인으로 분할하는 단계;

상기 분할된 각 서브도메인에서 상태들의 공간에 대한 기울기를 계산하는 단계; 및

상기 계산된 기울기를 바탕으로 상기 각 서브도메인에 할당할 격자의 수를 결정하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 기울기를 계산하는 단계는,

상기 기체혼합물의 총괄농도, 몰분율, 온도, 흡착량 및 상기 흡착베드의 벽면 온도를 바탕으로 공간에 대한 최대 기울기를 계산하는 단계인 것을 특징으로 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 격자의 수는 일정 시간 간격으로 결정하여 상기 격자의 공간적 위치와 수를 계속 업데이트 하는 것을 특징으로 하는 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법.

명세서

기술분야

[0001]

본 발명은 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 시스템 및 그 방법에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 수치오차 및 계산시간을 최소화하며, 특정 위치에서 실시간으로 측정되는 온도, 압력, 출구유량, 출구농도의 정보와, 실시간으로 측정 불가능한 흡착베드 내 농도 분포 및 측정센서가 설치되어 있지 않은 위치에서의 온도, 압력, 유량 등 흡착베드 내 상태 분포를 예측하는 실시간 관측자 모델을 바탕으로, 지속적인 공정 특성의 변화 및 외란을 수학적 모델에 반영하고, 이를 통해 흡착베드 공정의 송풍기(또는 압축기) 및 진공펌프에서의 소비 에너지를

최소화하는 최적 운전 조건을 결정하는 실시간 최적화 시스템 및 그 방법에 관한 것이다.

배경 기술

- [0002] 흡착 공정은 흡착제에 대한 기체 혹은 액체의 평형 흡착량이 성분마다 다른 것을 이용하여 분리를 행하는 공정으로 특별히 기체의 분리 정제에 많이 응용되어 왔다. 공기 중 산소의 분리 농축, 석유화학 공장에서의 고순도 수소 분리, 노르말 파라핀과 이소 파라핀의 분리, 혐기성 발효 기체 중에 함유된 메탄의 분리, 산업 환경에서 휘발성 유기물 성분의 제거 혹은 분리 등이 대표적인 응용 예에 속한다. 특히 최근에는 지구 온난화의 주범인 이산화탄소를 발전소, 제철소 등 대규모 산업공정의 연소 배출 기체로부터 회수하기 위한 목적으로 흡착 공정이 연구되기도 한다.
- 도 1은 한 기체 성분의 온도, 압력에 따른 흡착량의 변화를 나타내는 그래프로, 흡착 등온선이라 불린다. 도 1에 나타난 바와 같이, 한 기체 성분이 특정 흡착제에 흡착되는 흡착량은 해당 성분의 압력이 높을수록, 온도가 낮을수록 증가하게 된다. 고정층 흡착 공정은 이처럼 압력과 온도의 변화에 따라 기체의 흡착량이 달라지는 원리를 이용함으로써 구성된다. 고정층 흡착 공정에는 크게 TSA (temperature swing adsorption, 온도변동흡착) 공정, PSA (pressure swing adsorption, 압력변동흡착) 공정, PTSA (pressure temperature swing adsorption, 압력온도변동흡착) 공정이 있으며, 이들은 각각 온도, 압력, 온도와 압력의 변화에 따라 흡착량이 달라지는 원리를 이용한 것이다.
- 도 2에서 가장 많이 사용되는 PSA 공정의 운전 순서를 보였다. 첫 번째 단계에서, 흡착베드에 원료기체를 주입함으로써 흡착베드의 압력을 높이게 된다(가압단계). 압력이 충분히 높아지면, 계속하여 원료기체를 주입함과 동시에 베드 출구를 통해 약흡착질(weak adsorbate) 기체를 회수하게 된다(흡착단계). 이때, 베드 내 흡착제에는 주로 강흡착질(strong adsorbate) 기체가 흡착되며, 약흡착질 기체는 베드 출구를 통해 빠져나오게 된다. 세 번째 단계에서, 흡착 베드에 흡착되어 있는 강흡착질 기체를 회수하며 흡착제를 재생시키기 위해, 흡착베드의 압력을 낮추게 된다(감압단계). 네 번째 단계에서, 흡착베드를 완전히 재생시키며 흡착베드에 흡착된 강흡착질 기체를 충분히 회수하기 위해, 계속하여 흡착베드의 압력을 낮춤과 동시에 흡착베드의 반대쪽으로 약흡착질 기체를 입력하게 된다. 도 2의 PSA 공정은 가장 기본적인 PSA 공정의 예로서, 보통 압력균등화 및 세정 단계를 포함한 여러 변형된 형태로 운전된다. TSA 공정과 PTSA 공정은 흡착과 탈착을 위해 변화시키는 조건이 각각 온도, 온도와 압력이라는 점에서 다를 뿐, 도 2에 도시한 PSA 공정의 운전 방법과 크게 다르지 않다. 즉, 흡착과 탈착(흡착베드 재생)을 반복함으로써 강흡착질 기체와 약흡착질 기체를 분리하게 된다.
- 상기 고정층 흡착 공정의 운전에서, “흡착단계와 탈착단계를 각각 얼마나 긴 시간 동안 운전해야 하는가”에 대한 질문은 공정 운전의 최적화와 직결된다. 즉, 흡착단계와 탈착단계의 운전시간에 따라 흡착공정을 통해 분리되어 회수되는 약흡착질 및 강흡착질 기체의 순도와 수율, 가압을 위해 사용되는 송풍기/가압기의 소비 에너지, 감압을 위해 사용되는 진공펌프의 소비 에너지 등이 달라지게 된다.
- [0003] 삭제
- [0004] 삭제
- [0005] 삭제
- [0006] 고정층 흡착 공정을 통한 기체 분리가 경제성을 지니기 위해서는 흡착 공정의 소비 에너지를 최소화해야 한다. 고정층 흡착 공정의 소비 에너지는 대부분 원료 기체의 주입을 위한 송풍기(또는 압축기)와 감압을 위한 진공펌프에 기인하는 것으로 알려져 있다. 따라서, 고정층 흡착 공정의 최적화 문제는 송풍기(또는 압축기)와 진공펌프에서의 소비 에너지를 최소화하는 운전 조건을 결정하는 것으로 표현될 수 있다.
- [0007] 최적화 과정에서 흡착단계와 탈착단계의 운전시간을 결정하는 중요 기준 중 하나는 흡착베드 내 기체 혼합물의 농도 분포이다. 도 2의 두 번째 단계에서, 초기에는 베드 출구에서 약흡착질 기체 성분이 주로 검출되지만, 계속하여 원료기체를 베드에 입력하면 베드의 입구에서부터 출구 방향으로 흡착제가 서서히 평형 흡착량에 도달하여 포화되며 결국 원료 기체와 동일한 조성의 기체 혼합물이 베드 출구를 통해 빠져나오게 된다.
- [0008] 이처럼 베드 출구를 통해 원료 기체와 동일한 조성의 기체 혼합물이 빠져나오기 시작하는 시간을 초과시간

(breakthrough time)이라 하며, 이때 베드 출구에서 검출되는 기체의 조성 변화는 파과곡선(breakthrough curve)이라 한다. 보통 파과곡선이 흡착베드의 출구에서 검출되기 이전에 탈착단계로 넘어가야 흡착단계를 통해 회수되는 약흡착질 기체의 순도를 최대화할 수 있으며, 반대로 파과곡선이 완전히 빠져나올 때까지 흡착단계를 진행하고 탈착단계로 넘어가면 탈착단계에서 회수되는 강흡착질 기체의 순도 및 약흡착질 기체의 수율을 최대화할 수 있다.

[0009] 여기서 중요한 점은 흡착베드를 통해 회수되는 강흡착질 및 약흡착질 기체의 순도와 수율을 최대화하고, 송풍기, 가압기 및 진공펌프를 통해 소비되는 에너지를 최소화하는 최적 운전 조건을 찾고자 하는 경우, 흡착베드 내 기체 혼합물의 농도 분포를 정확하게 예측할 수 있어야 한다는 것이다. 이러한 기체 농도 분포의 예측은 흡착 공정의 제어 및 최적화의 한 부분으로서 수행되기 때문에, 예측 값이 정확할수록 더욱 정확한 제어와 최적화가 가능해진다.

흡착베드 내 기체 혼합물의 농도 분포를 정확하게 예측하기 위해서는 정교한 수학적 모델이 필요하다. 고정층 흡착베드의 정밀한 수학적 모델은 일반적으로 총괄 물질 수지식, 성분 물질 수지식, 기체의 에너지 수지식, 물질 전달 속도식, 흡착베드 벽면의 에너지 수지식으로 구성되며, 이들은 모두 시간과 공간에 대한 분포를 가지는 편미분 방정식(partial differential equation)으로 표현된다.

[0010] 삭제

[0011] 보통 이러한 편미분 방정식들은 유한 차분법(finite difference method), 유한 부피법(finite volume method), 직교 선점법(orthogonal collocation method), 3차 스플라인 선점법(cubic spline collocation method) 등에 의해 상미분 방정식(ordinary differential equation)과 대수식(algebraic equation)들의 집합으로 변환된 후, 룬게 쿠타법(Runge-Kutta method)에 의해 풀어지게 된다.

[0012] 이때, 편미분 방정식을 구성하는 변수들의 공간에 대한 분포가 가파를수록 이를 정확하게 표현하기 위해 많은 요소(element)/선점(collocation point)/격자(grid) (이하 “격자”로 통일함)가 필요하다. 격자의 수가 많을수록 공간에 대한 해를 정확하게 예측 가능하지만, 그만큼 더 많은 계산시간이 요구된다 (격자의 수 = 풀어야 하는 상미분 방정식의 수).

[0013] 본 발명에서 대상으로 하는 고정층 흡착 공정의 경우, 여러 기체 성분들의 경쟁흡착으로 인해 가파른 농도 및 온도 분포가 생성되며, 또한 생성된 농도 및 온도 분포가 기체의 흐름에 따라 베드의 입구와 출구 사이를 이동하는 특성을 지닌다. 이러한 특성으로 인해 고정층 흡착 공정의 수학적 모델을 정확히 풀기 위해서는 베드의 입구부터 출구까지 격자를 조밀하게 배치해야 하며, 상당한 계산시간이 수반된다. 다시 말해, 계산시간을 적절히 조절하기 위해 격자의 수를 감소시킬 경우 정확성이 떨어지는 어려움이 있다. 따라서, 고정층 흡착 공정의 수학적 모델을 빠른 속도로 정확하게 계산하기 위한 새로운 수치해석 기술이 개발될 필요가 있다.

한편, 종래에는 수학적 모델을 실제 공정에 부합하도록 조율하기 위해, 고정층 흡착베드에 농도를 알고 있는 혼합 기체를 입력하여 평형을 유지시킨 뒤, 농도가 다른 기체 혼합물을 주입함으로써 베드 출구에서 파과곡선을 측정하고, 이를 수학적 모델의 예측 값과 비교함으로써 수학적 모델의 중요 매개변수(parameter)를 추정하는 방법을 사용하였다. 하지만, 실제 공정의 운전시 (i) 원료 기체에 포함된 불순물에 의한 흡착제 활성 면적의 감소, (ii) 재생과정에서 발생하는 흡착제의 신터링(sintering), (iii) 흡착제의 마모, (iv) 물 분자의 모세관 응축 등, 여러 현상에 의해 공정의 특성이 계속하여 변화하며, 이에 더하여 다양한 외란(disturbance)이 실시간으로 유입되기 때문에, 종래의 파과곡선 실험을 통해 조율된 수학적 모델은 시간이 지남에 따라 상당한 예측 오차를 보이게 된다.

[0014] 삭제

[0015] 따라서, 계속하여 변화하는 공정의 특성 및 외란을 실시간으로 반영하며 미래의 흡착베드 내 기체 혼합물의 농도 분포를 정밀하게 예측해주는 기술의 개발이 필요하다. 이때, 개발될 기술은 실시간으로 흡착베드 내 기체 혼합물의 농도 분포를 예측할 수 있도록 그 계산시간이 오래 걸리지 말아야 하며, 이를 위해 상기 전술한 새로운 수치해석 기술을 기반으로 적용 가능해야 한다.

요약하자면, 고정층 흡착 공정의 제어 및 최적화를 위해, 흡착베드 내 기체 혼합물의 농도 분포를 실시간으로 정밀하게 예측할 수 있어야 한다. 이때, 기존의 수치 해석 방법 및 모델 조율 방법을 그대로 이용할 수 없으며

로, 편미분 방정식으로 구성된 수학적 모델의 해를 정확하고 빠르게 계산하며 계속하여 변화하는 공정의 특성 및 외란을 실시간으로 수학적 모델에 반영하여, 실시간으로 빠르고 정밀하게 흡착베드 내 기체 혼합물의 농도 분포를 예측하기 위한 기술이 개발될 필요가 있다.

[0016] 삭제

[0017] 또한, 흡착베드 내 흡착현상 및 그 특성을 정확하게 모니터링하고 제어 및 최적화에 반영하기 위해, 측정센서가 설치되어 있지 않은 위치에서의 온도, 압력, 유량 등 흡착베드 내 상태분포를 정확하게 예측할 수 있는 기술이 개발될 필요가 있다.

[0018] 그리고, 흡착 공정의 송풍기(또는 압축기)와 진공펌프에서 주로 많은 에너지가 소비되므로, 고정층 흡착 공정의 에너지 소비를 최소화할 때 이 두 장치에서의 소비 에너지를 최소화하는 최적화 기술이 개발될 필요가 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0019] 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 첫째, 편미분 방정식으로 구성된 고정층 흡착 공정의 수학적 모델을 빠르고 정확하게 계산하기 위한 새로운 수치해석 기술을 개발하는 것이고, 둘째, 계속하여 변화하는 공정의 특성 및 외란을 실시간으로 수학적 모델에 반영하여 미래의 흡착베드 내 상태 분포를 정밀하게 예측할 수 있도록 하고, 셋째, 흡착베드 내 상태 분포를 예측하는 부분이 상기 새로운 수치해석 기술 기반하에 실시간으로 적용 가능하도록 하는 것이고, 넷째, 보정된 수학적 모델을 이용하여 흡착베드 공정의 송풍기(또는 압축기) 및 진공펌프에서의 소비 에너지를 최소화하는 최적 운전 조건을 정확하게 계산하기 위한 흡착 공정의 최적화 시스템 및 방법을 제공하고자 함이다.

과제의 해결 수단

[0020] 상술한 과제를 해결하기 위한 본 발명의 제1 특징은 고정층 흡착공정의 실시간 최적화 시스템으로, 흡착베드에 의한 흡착공정에 사용되는 기체혼합물의 물리적 상태정보를 실시간으로 측정하는 상태 측정부; 수학적 공간 격자에서 일정 시간 간격으로 비선형 상태 공간 모델의 적분을 수행하고, 상기 기체혼합물의 상태분포를 계산하여 흡착베드 모델을 산출하는 흡착베드 모델부; 상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태들의 공간 해를 바탕으로 수학적 모델의 격자의 위치와 수를 업데이트하는 격자갱신부; 상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태를 독립변수로 하여 관측자 이득 행렬의 각 원소를 고차 방정식으로 근사하여 근사식의 계수를 미리 계산하는 이득 근사부; 상기 이득 근사부로부터 미리 계산된 상기 근사식의 계수와 상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태 값을 바탕으로 관측자 이득 행렬의 원소와 크기를 결정하는 관측자 이득부; 및 상기 관측자 이득부로부터 계산된 관측자 이득 행렬과 공정의 측정 정보를 바탕으로 상기 흡착베드 모델부의 상태와 매개변수(parameter) 및 경계조건(boundary condition)을 보정하는 관측자부; 및 흡착베드 공정이 주기적 정상상태에 도달할 때마다, 상기 상태 측정부로부터 산출된 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하도록 최적 운전 조건을 결정하는 정상 상태 최적화부를 포함한다.

[0021] 여기서, 상기 상태 측정부는, 상기 기체혼합물의 온도, 압력, 출구유량 및 출구농도 중 적어도 어느 하나를 측정할 수 있는 센서를 포함하는 것이 바람직하고, 상기 기체혼합물의 온도 및 압력을 측정하는 센서는 상기 흡착베드의 입구부터 출구까지 일정 간격으로 다수 배치된 것이 바람직하다.

[0022] 그리고, 본 발명의 제2 특징은, 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법으로, (a) 이득 근사부가 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태를 독립변수로 하고 관측자 이득 행렬의 각 원소를 종속변수로 하는 근사식의 계수를 미리 계산하는 단계; (b) 흡착베드 공정이 주기적 정상상태에 도달하면, 정상상태 최적화부가 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하도록 최적 운전 조건을 결정하는 단계; (c) 흡착베드 모델부가 수학적 공간 격자에서 일정 샘플링 시간을 주기로 기체혼합물의 상태분포를 나타내는 흡착베드 모델을 계산하는 단계; (d) 관측자 이득부가 상기 이득 근사부로부터 미리 계산된 상기 근사식의 계수와 상기 흡착베드 모델부를 통해 계산된 상태 값을 바탕으로 관측자 이득 행렬의 원소와 크기를 결정하는 단계; (e) 상태 측정부에서 기체혼합물의 물리적 상태정보를 실시간으로 측정하는 단계; (f) 관측자부가 상기 관측자 이득부로부터 계산된 이득 행렬과 상기 상태 측정부에서 측정된 상태정보를 바탕으로, 상기 흡착베드 모델의 상태와 매개변수 및 경계조건을 보정하는 단계;

및 (g) 격자갱신부가 상기 보정된 상태들의 공간 해를 바탕으로 상기 격자의 위치와 수를 업데이트하는 단계를 포함한다.

[0023] 또한, 바람직하게는 상기 (b) 단계는, 상기 상태 측정부에서 측정된 상태정보와 상기 흡착베드 모델부에서 산출된 흡착베드 모델을 바탕으로 상기 흡착 공정의 소비에너지를 최소화하도록 운전 조건을 결정하는 단계인 것일 수 있고, 상기 상태 측정부로부터 산출된 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지와, 상기 흡착베드 모델부로부터 예측된 소비 에너지의 기울기(gradient)와 헤시안(hessian)을 바탕으로, 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하도록 최적 운전 조건을 결정하는 단계를 포함하는 것일 수 있다.

[0024] 더하여, 상기 (b) 단계는 주기적 정상상태에 도달할 때마다, 간헐적으로 수행하고, 상기 단계 (c) 내지 (g) 단계는 일정 샘플링 시간을 주기로 계속하여 반복 수행하는 것이 바람직하고, 상기 상태분포는 상기 기체 혼합물의 온도, 농도, 물분율, 흡착량 중 적어도 어느 하나의 공간적 분포를 나타내는 것이 바람직하다.

[0025] 또한, 상기 (c) 단계는 수학적 공간 격자에서 일정 시간 간격으로 비선형 상태 공간 모델의 적분을 수행하여 상기 흡착베드 모델을 계산하는 단계인 것이 바람직하고, 상기 상태정보는 상기 기체혼합물의 온도, 압력, 출구유량 및 출구농도 중 적어도 어느 하나를 측정하는 측정정보인 것이 바람직하다.

[0026] 한편, 상기 (a) 단계는, 상기 모든 격자의 위치에서 수학적 모델을 통해 각각의 상태마다 관측자 이득 값을 계산하는 단계; 및 상기 수학적 모델의 상태를 독립변수로 하고 상기 계산된 관측자 이득 값을 종속변수로 하는 근사식의 계수를 추정하는 단계를 포함하는 것이 바람직하고, 상기 (g) 단계는, 상기 흡착베드의 입구부터 출구까지의 공간을 다수의 서브도메인으로 분할하는 단계; 상기 분할된 각 서브도메인에서 상태들의 공간에 대한 기울기를 계산하는 단계; 및 상기 계산된 기울기를 바탕으로 상기 각 서브도메인에 할당할 격자의 수를 결정하는 단계를 포함하는 것이 바람직하다.

[0027] 더 나아가, 바람직하게는 상기 기울기를 계산하는 단계는, 상기 기체혼합물의 총괄농도, 물분율, 온도, 흡착량 및 상기 흡착베드의 벽면 온도를 바탕으로 공간에 대한 최대 기울기를 계산하는 단계인 것일 수 있고, 상기 격자의 수는 일정 시간 간격으로 결정하여 상기 격자의 공간적 위치와 수를 계속 업데이트 하는 것일 수 있다.

발명의 효과

[0028] 이와 같은 본 발명을 제공하면, 고정층 흡착 공정을 운전하는데 있어서, 특정 위치에서 실시간으로 측정되는 온도, 압력, 출구유량, 출구농도의 정보를 바탕으로, 실시간으로 측정 불가능한 흡착베드 내 농도 분포 및 측정센서가 설치되어 있지 않은 위치에서의 온도, 압력, 유량 등 흡착베드 내 상태 분포를 정확하게 예측할 수 있다.

또한, 편미분 방정식으로 구성된 고정층 흡착베드의 수학적 모델의 해를 구할 때, 변수들의 공간에 대한 기울기가 가파른 지역에 격자가 조밀하게 배열되며 기울기가 완만한 지역에 격자가 성기게 배열되므로, 정확화면서 빠른 속도로 수학적 모델의 해를 구할 수 있다.

한편, 계속하여 공정의 정보를 측정하고 이를 통해 수학적 모델의 상태와 매개변수 및 경계조건을 보정하므로, 공정의 특성이 변하거나 예기치 않은 외란이 발생하더라도 수학적 모델이 이러한 상황들을 모두 고려하여 미래 흡착베드의 상태 분포를 정확하게 예측할 수 있게 된다.

또한, 계속하여 공정의 정보를 측정하고 이를 통해 수학적 모델의 상태와 매개변수(parameter) 및 경계조건(boundary condition)을 보정하는 특징으로 인해, 흡착베드에 입력되는 기체 혼합물의 조성을 정확하게 모를 경우에도 미래 흡착베드의 상태 분포를 정확하게 예측할 수 있다.

그리고, 미래 흡착베드의 상태 분포를 예측하는 과정에서 사전에 미리 계산된 관측자 이득 근사식을 이용하므로, 실시간으로 오차 공분산 미분 방정식을 풀지 않아도 되며 계산 시간을 현격히 감소시킬 수 있다. 이러한 장점으로 인해, 본 발명의 고정층 흡착 공정의 관측자 시스템은 실시간으로 적용되어 실시간으로 흡착베드 내 상태 분포를 예측할 수 있다. 이로 인해, 본 발명의 최적화 시스템은 실시간으로 흡착베드 내 상태 분포를 예측하여, 실시간으로 정확하고 빠르게 흡착공정 시스템을 최적화할 수 있다.

또한, 관측자 이득 행렬이 관측자 이득 근사식을 통해 흡착베드의 운전조건(상태)에 따라 결정되기 때문에, 편미분 방정식으로 구성된 수학적 모델의 해를 구할 때, 격자의 위치와 수가 계속하여 업데이트 되더라도 그에 부합하도록 새로운 관측자 이득 행렬을 쉽게 계산할 수 있다.

[0029] 삭제

[0030] 삭제

[0031] 삭제

[0032] 삭제

[0033] 삭제

[0034] 한편, 관측자 이득 행렬을 관측자 이득 근사식을 통해 흡착베드의 운전조건(상태)에 따라 계속하여 업데이트하기 때문에, 고정층 흡착 공정이 본래 심각한 비선형 공정임에도 불구하고 흡착베드 내 상태 분포를 매우 정확하게 예측할 수 있다.

[0035] 최종적으로, 정밀한 수학적 모델을 통해 미래 흡착베드 내 상태 분포를 빠르고 정확하게 예측하며, 이를 바탕으로 송풍기(또는 압축기) 및 진공펌프에서의 소비 에너지를 최소화하는 최적 운전 조건을 정확하게 계산하여 결정할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0036] 도 1은 한 기체 성분의 온도, 압력에 따른 흡착량의 변화를 나타내는 그래프이고,

도 2는 일반적으로 가장 많이 사용되는 PSA 공정의 운전 순서를 나타낸 모식도이고,

도 3은 본 발명의 실시예에 따른 고정층 흡착 공정의 실시간 관측자 모델 산출 시스템 구성을 예시한 도면이고,

도 4는 본 발명에 따른 또 다른 실시예로서, 고정층 흡착 공정의 실시간 관측자 모델 산출방법의 흐름을 나타낸 도면이고,

도 5는 제올라이트 13X를 흡착제로 하며, CO₂와 N₂의 혼합 기체를 원료기체로 하는 고정층 흡착 공정을 대상으로, 시간에 따른 흡착베드 내 CO₂ 농도 분포를 나타낸 그래프이고,

도 6은 제올라이트 13X에 대한 CO₂의 흡착 등온선을 도시한 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0037] 이하에서 본 발명의 실시예를 도면을 참조하여 보다 상세히 설명하기로 한다.

[0038] 도 3은 본 발명에 따른 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 시스템의 구성을 예시한 도면이다.

[0039] 도 3에 도시된 바와 같이, 본 발명의 실시예에 따른 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 시스템은 흡착베드에 의한 흡착공정에 사용되는 기체혼합물의 물리적 상태정보를 실시간으로 측정하는 상태 측정부(600); 수학적 공간 격자에서 일정 시간 간격으로 비선형 상태 공간 모델의 적분을 수행하고, 상기 기체혼합물의 상태분포를 계산하여 흡착베드 모델을 산출하는 흡착베드 모델부(100); 상기 흡착베드 모델부(100)를 통해 계산된 상태들의 공간해를 바탕으로 수학적 모델의 격자의 위치와 수를 업데이트하는 격자갱신부(200); 상기 흡착베드 모델부(100)를 통해 계산된 상태를 독립변수로 하여 관측자 이득 행렬의 각 원소를 고차 방정식으로 근사하여 근사식의 계수를 미리 계산하는 이득 근사부(300); 상기 이득 근사부(300)로부터 미리 계산된 상기 근사식의 계수와 상기 흡착베드 모델부(100)를 통해 계산된 상태 값을 바탕으로 관측자 이득 행렬의 원소와 크기를 결정하는 관측자 이득부(400); 및 상기 관측자 이득부(400)로부터 계산된 관측자 이득 행렬과 공정의 측정 정보를 바탕으로 상기 흡착베드 모델부의 상태와 매개변수(parameter) 및 경계조건(boundary condition)을 보정하는 관측자부(500); 및 흡착베드 공정이 주기적 정상상태에 도달할 때마다, 상기 상태 측정부(600)로부터 산출된 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하도록 최적 운전 조건을 결정하는 정상상태 최적화부(700)를 포함하여 구성한다.

- [0040] 여기서, 본 발명에 따른 실시간 최적화 시스템이 적용되는 전체 고정층 흡착 공정 시스템은 흡착베드와, 상기 실시간 최적화 시스템 및 송풍기(또는 압축기), 및 진공펌프를 포함하여 구성한다.
- [0041] 또한, 기체혼합물의 물리적 상태정보는 상기 기체혼합물의 온도, 압력, 출구유량 및 출구농도 중 적어도 어느 하나를 나타내고, 흡착베드 모델부(100)에서 계산되는 '상태'는 기체혼합물의 온도, 농도, 물분율, 흡착량 등을 나타내며, '격자'란 흡착베드 내의 공간적 상태분포를 계산하기 위한 수학적 계산 지점을 나타낸다. 또한, 관측자부(500)에 의해 보정되는 '경계조건'이란 흡착베드 입구에서 기체혼합물의 물분율을 나타낸다.
- [0042] 또한, 상태측정부(600)는 흡착베드 공정에서 나타나는 상기 기체혼합물의 온도, 압력, 출구유량 및 출구농도 중 적어도 어느 하나를 측정할 수 있는 센서로 구성되고, 상기 센서 중 기체혼합물의 온도 및 압력을 측정하는 센서는 상기 흡착베드의 입구부터 출구까지 일정 간격으로 다수 배치된 것이 바람직하다. 이는 흡착베드 내의 온도 및 압력에 대한 공간적 분포를 보다 정확히 측정하기 위해서이다.
- [0043] 또한, 상기 흡착베드 모델부(100)에서 산출되는 흡착베드 모델은 총괄 물질 수지식, 성분 물질 수지식, 기체의 에너지 수지식, 물질 전달 속도식, 흡착베드 벽면의 에너지 수지식과 함께 흡착 등온식, Ergun방정식, Wakao 방정식, 유효 열전도도 방정식 등을 포함하여 구성되며, 이득 근사부(300)는 격자의 위치와 수학적 모델의 상태 값에 따라 관측자 이득 행렬을 계산 가능하도록 하기 위해, 관측자 이득 행렬의 각 원소를 수학적 모델의 상태 값에 대한 함수로 근사한다.
- [0044] 도 3에서 실선은 실시간으로 계속하여 수행되는 흐름을 나타내며, 점선은 관측자 모델 산출 시스템에 의해 미리 계산되어 데이터베이스에 저장되는 흐름을 나타낸다.
- [0045] 도 4는 본 발명에 따른 또 다른 실시예로서, 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법의 흐름을 나타낸 도면이다. 즉, 본 발명에 따른 실시간 최적화 방법은 다성분 기체 혼합물의 경쟁 흡착에 의해 가파른 기울기의 농도 및 온도 분포가 형성되는 고정층 흡착공정에서, 온도, 압력, 출구유량 및 출구농도의 측정값을 바탕으로 흡착베드 내 상태 분포를 정확하고 빠르게 예측하며, 보정된 수학적 모델을 통해 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하는 최적 운전 조건을 결정하는 방법이다.
- [0046] 도 4에 나타난 바와 같이 본 발명의 실시예에 따른, 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 방법은 (a) 이득 근사부(300)가 흡착베드 모델부(100)를 통해 계산된 상태를 독립변수로 하고 관측자 이득 행렬의 각 원소를 종속변수로 하는 근사식의 계수를 미리 계산하는 단계(S100); (b) 흡착베드 공정이 주기적 정상상태에 도달하면(S110), 정상상태 최적화부(700)가 상기 흡착베드 공정의 소비 에너지를 최소화하도록 최적 운전 조건을 결정하는 단계(S120); (c) 흡착베드 모델부(100)가 수학적 공간 격자에서 일정 샘플링 시간을 주기로 기체혼합물의 상태분포를 나타내는 흡착베드 모델을 계산하는 단계(S130); (d) 관측자 이득부(400)가 상기 이득 근사부(300)로부터 미리 계산된 상기 근사식의 계수와 상기 흡착베드 모델부(100)를 통해 계산된 상태 값을 바탕으로 관측자 이득 행렬의 원소와 크기를 결정하는 단계(S140); (e) 상태 측정부(600)에서 기체혼합물의 물리적 상태정보를 실시간으로 측정하는 단계(S150); (f) 관측자부(500)가 상기 관측자 이득부(400)로부터 계산된 이득 행렬과 상기 상태 측정부(600)에서 측정된 상태정보를 바탕으로, 상기 흡착베드 모델의 상태와 매개변수 및 경계조건을 보정하는 단계(S160); 및 (g) 격자갱신부(200)가 상기 보정된 상태들의 공간 해를 바탕으로 상기 격자의 위치와 수를 업데이트하는 단계(S170)를 포함하여 구성된다.
- [0047] 여기서, 상기 (g) 단계(S170)는 업데이트되기 전의 격자 위치에서의 상태 값을 바탕으로 새롭게 업데이트된 격자 위치에서의 상태 값을 재구성하는 단계를 추가로 포함할 수 있다.

[0048] 이하 본 발명의 실시예에 따른 고정층 흡착 공정의 공정특성을 정리하면 다음과 같다.

[0049]

[0050] 1. 지속적인 공정특성 변화

고정층 흡착 공정은 (i) 원료 기체에 포함된 불순물에 의한 흡착제 활성 면적의 감소, (ii) 재생과정에서 발생하는 흡착제의 신터링(sintering), (iii) 흡착제의 마모, (iv) 물 분자의 모세관 응축 등, 여러 현상에 의해 공정의 특성이 계속하여 변화한다. 이에 더하여, (i) 원료 기체 및 주변 환경의 온도 변화, (ii) 원료 기체의 압력 및 유량 변화 등 실시간으로 다양한 외란이 유입될 가능성이 높다. 따라서, 고정층 흡착 공정의 흡착베드 내 상태 분포를 예측함에 있어서, 상기 기술한 지속적인 공정특성의 변화 및 외란의 영향을 적절히 반영하는 것이 바람직하다. 또한, 공정의 특성이 지속적으로 변화함에 따라 공정의 소비 에너지를 최소화하는 최적 운전 조건

도 함께 바뀌게 되므로, 간헐적이지만 필요에 따라 공정의 운전 조건을 최적 알고리즘에 의해 다시 설정해주는 것이 바람직하다.

[0051] 삭제

[0052] **2. 흡착 및 탈착(재생)단계의 반복 운전**

도 2에 보인 것과 같이, 고정층 흡착 공정은 크게 기체혼합물을 분리하는 흡착단계와 흡착제를 재생하는 탈착단계로 구성된다. 흡착단계는 흡착이 잘 일어나는 고압, 저온의 상태로 진행되는데, 흡착제에 주로 강흡착질의 기체 성분이 흡착되고 약흡착질의 기체 성분은 흡착베드를 통과함으로써 두 기체 성분이 분리된다. 이때, 강흡착질의 기체 성분이 흡착제에 빠르게 흡착됨에 따라 흡착이 발생하는 영역을 기준으로 기체상의 조성이 크게 바뀌게 된다. 또한, 초기에는 주로 흡착베드의 입구 부분에서 흡착이 일어나지만, 시간이 지나면 흡착제가 포화되기 때문에 흡착이 발생하는 영역이 흡착베드의 입구 부분에서 출구 부분으로 기체 흐름 방향을 따라 이동하게 된다.

도 5에 제올라이트 13X를 흡착제로 하며, CO₂와 N₂의 혼합 기체를 원료기체로 하는 고정층 흡착 공정을 대상으로, 시간에 따른 흡착베드 내 CO₂ 농도 분포를 도시하였다. 도 5에서 X축은 흡착베드 축 방향으로의 위치를 나타내며, 축 방향 위치(axial position)가 0인 지점이 원료기체가 주입되는 흡착베드 입구를 가리키며, 축 방향 위치가 1인 지점이 흡착베드 출구를 가리킨다. 도 5에서 Y축은 흡착베드 내 기체상의 CO₂ 몰분율을 나타낸다.

[0053] 삭제

[0054] 삭제

[0055] 도 5에서 초기에 흡착베드는 순수한 N₂와 평형을 이룬다고 가정하였으며, 원료 기체 내 CO₂의 몰분율은 0.5로 가정하였다. 제올라이트 13X에 대해 CO₂는 강흡착질 기체이며 N₂는 약흡착질 기체로 작용한다. 도 5에서, 강흡착질 기체인 CO₂가 흡착제에 흡착됨에 따라, 흡착이 일어나기 전과 후를 기준으로 기체 상의 CO₂ 몰분율이 급격하게 변하는 것을 볼 수 있다.

[0056] 다시 말해, CO₂ 몰분율이 급격하게 변하는 영역이 CO₂의 흡착이 활발하게 진행되는 부분이며, 흡착제가 포화됨에 따라 흡착 진행 영역이 흡착베드의 입구에서 출구 부분으로 이동하는 것을 볼 수 있다.

CO₂가 흡착제에 흡착되는 속도가 빠를수록 흡착 진행 영역을 기준으로 CO₂ 몰분율이 더욱 급격하게 변화하게 되며, 도 5에서 CO₂ 몰분율 분포의 기울기가 더욱 가파르게 된다. 수치적인 관점에서 볼 때, 공간에 대해 가파른 기울기를 가지는 변수의 변화를 편미분 방정식으로 표현하고자 할 경우 상당한 수치오차를 유발할 수 있다. (이는 수치해석 분야에서 널리 잘 알려진 개념으로 본 발명의 명세서에서 자세한 설명은 생략한다.) 가파른 공간 분포를 갖는 변수의 수치오차를 최소화하며 그 변화를 정확하게 표현하기 위해서는 가파른 공간 분포 영역에 격자를 조밀하게 배열해야 한다. 이때, 격자의 수가 풀어야 할 상미분 방정식의 수와 동일하므로, 격자의 수가 많아질수록 계산 시간은 급격하게 증가하게 된다.

고정층 흡착 공정의 어려움은 도 5에 도시된 바와 같이, 공간에 대해 가파른 기울기를 갖는 영역이 기체 흐름 방향에 따라 흡착베드의 입구와 출구 사이를 계속하여 이동한다는 것이다. 가파른 기울기를 갖는 영역이 기체 흐름을 따라 이동하기 때문에, 보통의 경우 특정 영역에만 격자를 조밀하게 배열할 수 없으며, 베드의 입구에서부터 출구까지 모든 영역에 격자를 조밀해야 배열해야 한다.

[0057] 삭제

[0058] 삭제

[0059] 하지만, 이처럼 모든 영역에 대해 격자를 조밀하게 배열할 경우, 풀어야 할 상미분 방정식의 수가 너무 많아지며 이는 상당한 계산 시간의 증가로 이어지기 때문에, 수학적 모델을 통한 실시간 농도 분포 예측이 불가능해진다.

따라서, 본 발명에서는 고정층 흡착 공정의 수학적 모델의 해를 계산할 때에, 일정 시간 간격으로 격자의 위치와 수를 업데이트함으로써, 공간에 대한 기울기가 가파른 영역에만 격자가 조밀하게 배열되고, 기울기가 완만한 영역에는 격자가 성기게 배열되도록 하는 것을 제안한다.

[0060] 삭제

[0061] 이렇게 할 경우, 공간 해의 기울기가 가파른 영역에만 격자가 조밀하게 배열되기 때문에, 전체적으로 풀어야 할 상미분 방정식의 수가 작아져서 계산시간을 극적으로 단축할 수 있으며, 동시에 공간 해의 기울기가 가파른 영역에는 격자를 조밀하게 배열할 수 있으므로 정확한 해의 계산이 가능해진다.

[0062] 3. 비선형성

[0063] 도 6은 제올라이트 13X에 대한 CO₂의 흡착 등온선을 도시한 그래프이다. 도 6에 나타난 바와 같이, 세 개 그래프는 각각 온도가 298 K, 323 K, 373 K으로 일정할 때 CO₂ 분압에 따른 평형 흡착량을 나타낸다. 이 그래프에서 X축은 CO₂의 분압(partial pressure)이며, Y축은 제올라이트 13X 단위 그래프 당 CO₂가 흡착된 몰수를 나타낸다.

도 6에서 온도가 일정할 때, CO₂ 분압의 변화에 따라 CO₂ 평형흡착량이 변화하는 정도가 CO₂ 분압 영역에 따라 달라지는 것을 알 수 있다. 예를 들어, CO₂ 분압이 10 kPa → 15 kPa로 증가할 때 CO₂ 평형흡착량이 변화하는 정도가 CO₂ 분압이 95 kPa → 100 kPa로 증가할 때 CO₂ 평형흡착량이 변화하는 정도와 다른 것을 볼 수 있다. 즉, 온도가 일정할 때, CO₂ 분압에 따라 그래프의 기울기가 다르다.

이러한 흡착 등온선의 비선형성은 일반적인 흡착 시스템에서 흔히 볼 수 있는 것으로서, 고정층 흡착 공정의 운전에 있어서 운전 범위에 따라 공정특성이 달라지는 원인으로 작용한다. 따라서, 본 발명에서는 흡착베드 내 상태 분포를 예측하는데 있어서, 운전 조건에 따라 변화하는 공정특성을 고려하여 관측자 이득을 적절히 업데이트해주는 것을 제안한다.

한편, 상기 비선형성을 본 발명에 따른 실시간 최적화 시스템에 반영함에 있어서, 수학적 모델 외에 관측자 방정식에 의한 계산량이 너무 증가하지 않도록 하며, 일정 시간 간격으로 업데이트 되는 격자의 위치와 수를 고려하여 관측자 이득의 크기와 원소를 적절히 업데이트하는 것을 제안한다.

[0064] 삭제

[0065] 삭제

[0066] 삭제

[0067] 한편, 상기 비선형성을 본 발명에 따른 실시간 최적화 시스템에 반영함에 있어서, 수학적 모델 외에 관측자 방정식에 의한 계산량이 너무 증가하지 않도록 하며, 일정 시간 간격으로 업데이트 되는 격자의 위치와 수를 고려하여 관측자 이득의 크기와 원소를 적절히 업데이트하는 것을 제안한다.

[0068] 본 발명의 실시예에 따르면, 흡착베드 공정은 흡착에 의해 기체 혼합물을 분리하는 공정으로서, 그 공정시스템은 흡착베드와, 흡착베드 전체에 걸쳐 일정 간격으로 설치된 온도 측정 센서, 흡착베드 입구와 출구에 설치된

압력 측정 센서, 흡착베드 출구에 설치된 농도 측정 센서, 흡착베드 출구에 설치된 유량 측정 센서를 포함하여 구성되며, 이를 통해 각각 흡착베드 내 온도, 압력, 출구농도 및 출구유량의 정보가 측정된다.

[0069] 그리고, 흡착베드에 원료기체 주입을 위한 송풍기(또는 압축기)와 흡착제 재생을 위한 진공펌프를 추가로 포함하여 구성되며, 흡착베드 공정에서 소비되는 대부분의 에너지는 송풍기(또는 압축기)와 진공펌프의 사용에 기인한다

[0070] 본 발명의 실시예에서는 이상에서 설명한 고정층 흡착 공정의 특성을 토대로, 다음과 같이 고정층 흡착 공정의 실시간 최적화 시스템 및 방법을 제안한다. 흡착베드 모델부(100)는 일정 시간 동안 수학적 모델의 적분을 수행하며 흡착베드 내 기체혼합물의 상태분포를 산출하고 예측하며, 송풍기(또는 압축기)와 진공펌프에서의 소비 에너지의 기울기(gradient)와 헤시안(hessian)을 계산하는 부분이다.

[0071] 이때, 본 발명의 실시예에 따른 수학적 모델은 “반경 방향으로의 농도 및 온도의 분포는 무시할만하며, 이상기체 방정식이 성립하며, 흡착제 및 기체상의 열적 평형이 성립되며, 축 방향을 따른 흡착베드 벽면의 열전도는 무시할만하다” 는 가정 하에 수립되었다.

[0072] 본 발명의 실시예에 따른 수학적 모델은 [수학식 1]의 총괄 물질 수지식, [수학식 2]의 성분 물질 수지식, [수학식 3]의 흡착베드 내 기체의 에너지 수지식, [수학식 4]의 물질 전달 속도식, [수학식 5]의 흡착베드 벽면의 에너지 수지식, [수학식 6]의 흡착 등온식, [수학식 7]의 Ergun 방정식, [수학식 8]의 Wakao 방정식, [수학식 9]의 유효 열전도도 방정식으로 구성된다.

수학식 1

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \rho_s \sum_{j=1}^2 \frac{\partial q_j}{\partial t} + \frac{1}{L} \frac{\partial(uC)}{\partial z} = 0$$

[0073]

수학식 2

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = -\frac{1-\varepsilon}{C\varepsilon} \rho_s \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{D_{ax}}{L^2 C} \left(C \frac{\partial^2 y_i}{\partial z^2} + 2 \frac{\partial C}{\partial z} \frac{\partial y_i}{\partial z} + y_i \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) - \frac{u}{L} \frac{\partial y_i}{\partial z} + \frac{y_i(1-\varepsilon)}{C\varepsilon} \rho_s \sum_{j=1}^N \frac{\partial q_j}{\partial t}$$

[0074]

수학식 3

$$\left(\varepsilon \rho_g c_g + (1-\varepsilon) \rho_s c_s \right) \frac{\partial T}{\partial t} - (1-\varepsilon) \rho_s \sum_{j=1}^2 \left(-\Delta H_j \right) \frac{\partial q_j}{\partial t} - \frac{\lambda_{ax}}{L^2} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\rho_g c_g}{L} \frac{\partial(uT)}{\partial z} + \frac{2h_l}{r_{bl}} (T - T_w) = 0$$

[0075]

수학식 4

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = k_i^L (q_i^* - q_i) + k_i^D |q_i^* - q_i| (q_i^* - q_i) / q_i$$

[0076]

수학식 5

$$\rho_w c_w \pi (r_{bo}^2 - r_{bl}^2) \frac{\partial T_w}{\partial t} = 2\pi r_{bl} h_I (T - T_w) - 2\pi r_{bo} h_O (T_w - T_{amb})$$

수학식 6

$$q_i^* = \bar{g}(T, P, y_i)$$

수학식 7

$$-\frac{\partial P}{\partial z} = 150.0 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^2} \frac{\mu}{d_p^2} u + 1.75 \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{\rho_g}{d_p} u |u|$$

수학식 8

$$\frac{\varepsilon D_{ax}}{D_m} = 20 + 0.5 \text{ReSc}$$

수학식 9

$$\frac{\lambda_{ax}}{k_g} = 7 + 0.5 \text{Pr Re}$$

본 발명의 실시예에 따르면, 흡착베드 모델부(100)는 3차 스플라인 선점법을 이용하여 [수학식 1], [수학식 2], [수학식 3], [수학식 4], [수학식 5]의 편미분 방정식을 [수학식 10], [수학식 11], [수학식 12], [수학식 13], [수학식 14]의 상미분 방정식으로 변환한다. 이와 같은 변환은 당업자라면 쉽게 알 수 있는 사항이므로 구체적인 설명은 생략한다. 3차 스플라인 선점법의 적용 과정에서 경계조건의 설정은 실제 공정의 운전 상황에 따라 결정되며, 이와 같은 경계조건의 설정은 당업자라면 쉽게 알 수 있는 사항이므로 구체적인 설명은 생략한다.

수학식 10

$$\frac{d\mathbf{C}}{dt} = \mathbf{F}_c(\mathbf{T}, \mathbf{y}_i, \mathbf{q}_j) \mathbf{T} + \mathbf{G}_c(\mathbf{T}, \mathbf{y}_i, \mathbf{q}_j) C(0) + \mathbf{Q}_c(\mathbf{T}, \mathbf{y}_i, \mathbf{q}_j)$$

수학식 11

$$\frac{dy_i}{dt} = F_y(C, T, q_j) y_i + G_y(C, T, q_j) y_i(0) + H_y(C, T, q_j)$$

수학식 12

$$\frac{dT}{dt} = F_T(C, y_i, q_j) T + G_T(C, y_i, q_j) T(0) + Q_T(C, y_i, q_j)$$

수학식 13

$$\frac{dq_i}{dt} = K(T, C, y_i, q_j)$$

수학식 14

$$\frac{dT_w}{dt} = H(T, T_w, T_{amb})$$

본 발명의 실시예에 따르면, 흡착베드 모델부(100)의 상기 [수학식 10], [수학식 11], [수학식 12], [수학식 13], [수학식 14] 는 룬게 쿠타법에 의해 일정 시간 간격으로 적분되며, 상기 적분 과정에서 [수학식 6], [수학식 7], [수학식 8], [수학식 9]를 이용하여 각각 평형 흡착량, 기체 유속, 유효 확산도, 및 유효 열전도도를 계산하게 된다.

한편, 본 발명의 실시예에 따르면, 상기 [수학식 10], [수학식 11], [수학식 12], [수학식 13], [수학식 14]에 기초하여, 흡착베드 공정의 비선형 상태 공간 모델(nonlinear state space model)은 다음의 [수학식 15] 및 [수학식 16]과 같이 표현된다.

[수학식 1] 내지 [수학식 14]에서 나타낸 변수의 정의는 다음과 같다.

C	기체상의 농도 (mol/cm^3)
$\mathbf{C}$	흡착베드 내부의 기체상의 농도 벡터
c_g	기체의 비열 ($\text{J}/\text{g}\cdot\text{K}$)
c_s	흡착제의 비열 ($\text{J}/\text{g}\cdot\text{ads}\cdot\text{K}$)
c_w	베드 벽면의 비열 ($\text{J}/\text{g}\cdot\text{K}$)
D_{ax}	축 방향 유효 확산 계수 (cm^2/sec)
D_m	기체의 분자 확산도 (cm^2/sec)
d_p	흡착제 입자의 지름 (cm)
$\mathbf{F}_C$	격자갱신부에 의해 업데이트되어 내부 격자 벡터에 곱해지는 함수
$\mathbf{F}_y$	격자갱신부에 의해 업데이트되어 내부 격자 벡터에 곱해지는 함수
$\mathbf{F}_T$	격자갱신부에 의해 업데이트되어 내부 격자 벡터에 곱해지는 함수
$\bar{g}$	흡착등온식을 나타내는 함수
$\mathbf{G}_C$	격자갱신부에 의해 업데이트되어 경계조건 값에 곱해지는 함수
$\mathbf{G}_y$	격자갱신부에 의해 업데이트되어 경계조건 값에 곱해지는 함수
$\mathbf{G}_T$	격자갱신부에 의해 업데이트되어 경계조건 값에 곱해지는 함수
ΔH_i	성분 i 의 평균 흡착열 (J/mol)
h_I	흡착베드 내부의 열 전달 계수 ($\text{J}/\text{cm}^2\cdot\text{sec}\cdot\text{K}$)
h_O	흡착베드 외부의 열 전달 계수 ($\text{J}/\text{cm}^2\cdot\text{sec}\cdot\text{K}$)
$\mathbf{H}$	격자갱신부에 의해 업데이트되는 $\mathbf{T}, \mathbf{T}_w, T_{amb}$ 의 함수
$\mathbf{H}_y$	격자갱신부에 의해 업데이트되어 미분방정식에 더해지는 함수
k_g	기체의 열전도도 ($\text{J}/\text{cm}\cdot\text{sec}\cdot\text{K}$)
k_i^L	성분 i 에 대한 물질 전달 속도식의 1차항의 계수 ($1/\text{sec}$)

k_i^Q	성분 i 에 대한 물질 전달 속도식의 2차항의 계수 (1/sec)
$\mathbf{K}$	격자갱신부에 의해 업데이트되는 $\mathbf{T}, \mathbf{C}, \mathbf{y}_i, \mathbf{q}_j$ 의 함수
L	흡착제로 충전된 베드의 길이 (cm)
N	기체 성분의 수
P	압력 (kPa)
Pr	프란틀(Prandtl)수= $c_g \mu / k_g$
q_i	성분 i 의 흡착량 (mol/g-ads.)
$\mathbf{q}_i$	흡착베드 내부의 성분 i 의 흡착량 벡터
q_i^*	성분 i 의 평형 흡착량 (mol/g-ads.)
$\mathbf{Q}_C$	격자갱신부에 의해 업데이트되어 미분방정식에 더해지는 함수
$\mathbf{Q}_T$	격자갱신부에 의해 업데이트되어 미분방정식에 더해지는 함수
Re	레이놀즈(Reynolds)수= $\rho_g \epsilon u d_p / \mu$
r_{bi}	흡착베드의 내경 (cm)
r_{bo}	흡착베드의 외경 (cm)
Sc	슈미트(Schmidt)수= $\mu / \rho_g D_m$
t	시간 (sec)
T	기체 온도 (K)
$\mathbf{T}$	흡착베드 내부의 기체 온도 벡터
T_{amb}	주변환경의 온도 (K)
T_w	흡착베드 벽면의 온도 (K)
$\mathbf{T}_w$	흡착베드 벽면의 온도 벡터
u	기체의 틈새속도 (cm/sec)
y_i	기체성분 i 의 몰분율

y_i	흡착베드 내부의 성분 i 의 물분율 벡터
z	축방향 위치
ε	흡착베드의 공극률
λ_{ax}	기체의 유효 열전도도 (J/cm·sec·K)
ρ_g	기체의 밀도 (g/cm ³)
ρ_s	흡착제의 밀도 (g-ads./cm ³)
ρ_w	흡착베드의 밀도 (g/cm ³)
μ	기체의 점도 (kPa·sec)

수학식 15

$$\frac{d}{dt}\bar{x}(t) = \bar{f}(t, \bar{x}(t), m(t), \theta(t)) + \bar{G}_1(t)\bar{w}_1(t)$$

[0090]

수학식 16

$$Y(t_k) = \bar{h}(k, \bar{x}(t_k), m(t_k), \theta(t_k)) + v(t_k)$$

[0091]

[0092]

여기서, $\bar{x}$ 는 상태(state)이며, $\bar{x} = [\mathbf{C} \quad \mathbf{y}_i \quad \mathbf{T} \quad \mathbf{q}_i \quad \mathbf{T}_w]^T$ 로 정의된다. m 은 공정의 입력으로서, 원료 기체의 유속, 원료 기체의 온도, 원료 기체의 농도 등을 포함한다. θ 는 흡착베드 모델의 매개변수 및 경계조건으로서, 흡착베드 입구에서 기체혼합물의 물분율 y_i^{feed} , 흡착열 ΔH , 공극률 ε , 물질 전달 계수 k_i^L 및 k_i^g 등을 포함한다. $\bar{w}_1$ 및 v 는 각각 외란 및 측정 잡음이며, $\bar{G}_1$ 은 외란의 시스템 행렬이다. $\bar{f}$ 는 [수학식 10], [수학식 11], [수학식 12], [수학식 13], [수학식 14]로 구성된 비선형 함수이며, $\bar{h}$ 는 비선형 출력함수이다. Y 는 공정 출력을 나타내며, t 는 시간, t_k 는 k 번째 샘플링 시간에서의 시간이다.

[0093]

본 발명의 실시예에서는 이상에서 설명한 수학적 모델의 공간 해를 바탕으로, 격자갱신부(200)가 격자의 위치와 수를 업데이트 한다. 이를 통해, 공간 해의 기울기가 가파른 영역에 계속하여 격자를 조밀하게 유지하며, 공간 해의 기울기가 완만한 영역에는 계속하여 성긴 격자 분포를 유지하게 된다.

본 발명의 실시예에 따른 격자갱신부(200)는 흡착베드의 입구부터 출구까지의 공간을 다수의 서브도메인(subdomain)으로 분할한 후, 각 서브도메인에서 상태들의 공간에 대한 기울기를 계산한다. 이후, 계산된 서브도메인에서의 상태 기울기를 바탕으로 각 서브도메인에 할당할 격자의 수를 결정하게 된다. 먼저 각 서브도메인에

서 상태들의 기울기는 다음의 [수학식 17]과 같이 계산된다.

[0094] 삭제

수학식 17

$$g_l(t, z) = \max \left(\left| \frac{\partial \bar{C}(t, z)}{\partial z} \right|, \left| \frac{\partial \bar{y}_i(t, z)}{\partial z} \right|, \left| \frac{\partial \bar{T}(t, z)}{\partial z} \right|, \left| \frac{\partial \bar{q}_i(t, z)}{\partial z} \right|, \left| \frac{\partial \bar{T}_w(t, z)}{\partial z} \right| \right)$$

[0095]

[0096] 여기서, g_l 은 시간이 t 일때, l 번째 서브도메인의 상태들의 기울기 중 최대 값이다. $\bar{C}$ 는 [수학식 1]의 총괄 농도 C 를 0 ~ 1 사이로 정규화한 총괄농도이다. 마찬가지로, $\bar{y}_i$, $\bar{T}$, $\bar{q}_i$, $\bar{T}_w$ 는 각각 [수학식 2]의 물분율 y_i , [수학식 3]의 기체 온도 T , [수학식 4]의 기체 흡착량 q_i , [수학식 5]의 흡착베드 벽면의 온도 T_w 를 0에서 1 사이로 정규화한 값이다. 상기 [수학식 17]에서, 각 상태들의 공간에 대한 미분 값은 3차 스플라인 선점법의 적용과정에서 쉽게 계산 가능하다.

[0097] 본 발명의 실시예에 따르면, 격자갱신부(200)는 상기 [수학식 17]에 의해 계산된 g_l 을 바탕으로, [수학식 18] 및 [수학식 19]를 통해 l 번째 서브도메인에 할당할 격자의 수를 결정한다.

수학식 18

$$\zeta_l = \tan^{-1}(g_l(t, z))$$

[0098]

수학식 19

$$\begin{aligned} \zeta^0 = 0 \leq \zeta_l < \zeta^1 &\Rightarrow n_l = n^0 = 0 \\ \zeta^1 \leq \zeta_l < \zeta^2 &\Rightarrow n_l = n^1 \\ &\dots\dots\dots \\ \zeta^M \leq \zeta_l < \zeta^{M+1} = \pi/2 &\Rightarrow n_l = n^M \end{aligned}$$

[0099]

[0100] 여기서, n_l 은 l 번째 서브도메인에 할당할 격자의 수이다. ζ_l 은 [수학식 17]에서 계산된 g_l 의 역탄젠트 (arctangent)로서, g_l 값에 따라 0 이상 $\pi/2$ (radian) 이하의 값을 갖는다. $\zeta^0 = 0$, ζ^1 , ..., $\zeta^{M+1} = \pi/2$ 및 $n^0 = 0$, n^1 , ..., n^M 는 사용자에게 의해 설정된 값이며, [수학식 19]에서 ζ_l 이 어떤

범위에 속하느냐에 따라 l 번째 서브도메인에 할당될 격자의 수 n_l 가 결정된다. 이때, $\zeta^0 = 0 < \zeta^1 < \dots < \zeta^{M+1} = \pi/2$ 와 $n^0 = 0 < n^1 < \dots < n^M$ 이 성립한다.

[0101] [수학식 17]에서 l 번째 서브도메인의 상태들의 기울기가 커질수록 g_l 은 큰 값을 갖게 되며, [수학식 18]에서 ζ_l 값이 커지게 된다. 이로 인해 l 번째 서브도메인에는 [수학식 19]에 의해 많은 격자들이 할당된다. 정리하자면, 상기 [수학식 17], [수학식 18], [수학식 19]에 따라 격자를 업데이트하게 되면, 공간에 대해 가파른 기울기를 갖는 서브도메인에 많은 격자가 할당되며, 공간에 대한 완만한 기울기를 갖는 서브도메인에 적은 격자가 할당된다.

[0102] 한편, 본 발명의 실시예에서는 상기 [수학식 17], [수학식 18], [수학식 19]에 의해 l 번째 서브도메인에 할당할 격자의 수가 결정되면, l 번째 서브도메인에 격자를 배열할 때 균등 분할에 따라 배열된다.

[0103] 또한, 본 발명의 실시예에 따르면, 격자갱신부(200)는 상기 [수학식 17], [수학식 18], [수학식 19]에 의한 격자 업데이트를 일정 시간 간격으로 계속하여 수행함으로써, 흡착베드 내 상태들의 분포가 기체 흐름을 따라 이동하더라도, 공간 해의 기울기가 가파른 영역에 지속적으로 격자를 조밀하게 유지하며, 공간 해의 기울기가 완만한 영역에 계속하여 격자를 성기게 유지하게 된다. 이때, 본 발명의 실시예에서는 격자갱신부(200)에 의한 격자 업데이트 주기를 흡착베드 모델부(100)에 의한 수학적 모델의 적분 주기와 동일하게 설정된다.

도 5에서 본 발명의 실시예에 따른 격자갱신부(200)에 의한 격자의 업데이트 결과를 도시하였다. 도 5는 제올라이트 13X를 흡착제로 하며, CO₂와 N₂의 혼합 기체를 원료기체로 하는 고정층 흡착 공정을 대상으로 한다. X축은 흡착베드 축 방향으로의 위치를 나타내며, 축 방향 위치(axial position)가 0인 지점이 원료기체가 주입되는 흡착베드 입구를 가리키며, 축 방향 위치가 1인 지점이 흡착베드 출구를 가리킨다. 도 5에서 Y축은 흡착베드 내 기체상의 CO₂ 물분율을 나타낸다.

[0104] 삭제

[0105] 도 5에서 초기에 흡착베드는 순수한 N₂와 평형을 이룬다고 가정하였으며, 원료 기체 내 CO₂의 물분율은 0.5로 가정하였다. 제올라이트 13X에 대해 CO₂는 강흡착질 기체이며 N₂는 약흡착질 기체로 작용한다. 도 5에서 0.05의 간격마다 세로로 그려진 얇은 점선은 서브도메인의 경계를 가리키며, 작은 동그라미는 각 시점에서 배정된 격자의 위치를 나타낸다.

[0106] 도 5에서 CO₂ 물분율이 0.5인 원료 기체를 계속하여 흡착베드에 입력하면, 베드의 입구에서부터 흡착제가 포화됨에 따라 CO₂ 물분율의 가파른 변화 구간이 베드의 입구에서부터 출구 부분으로 이동하는 것을 볼 수 있다. 이때, CO₂ 물분율의 분포(profile)가 이동하더라도, 본 발명의 실시예에 따른 격자갱신부(200)에 의해, 공간의 기울기가 가파른 영역에 계속하여 격자가 조밀하게 배열되며, 공간의 기울기가 완만한 영역에는 계속하여 격자가 성기게 배열되는 것을 볼 수 있다.

[0107] 도 3에서 $\bar{z}_k$ 는 격자갱신부(200)에 의해 업데이트 되기 전의 격자 위치를 나타내는 벡터이며, $\bar{z}_k$ 는 격자갱신부(200)에 의해 업데이트 된 새로운 격자 위치를 나타내는 벡터이다. 도 3에서 격자갱신부(200)는 관측자부(500)로부터 보정된 흡착베드 모델의 상태 $\hat{x}(t_k, \bar{z}_k)$ 를 입력 받고, 상기 전술한 과정에 의해 격자의 위치 및 수를 업데이트 한 후, 기존의 격자 위치에서 상태 $\hat{x}(t_k, \bar{z}_k)$ 값을 바탕으로 새로운 격자 위치에서의 상태 $\hat{x}(t_k, z_k)$ 값을 계산한다.

[0108] 이렇게 계산된 새로운 격자 위치에서의 상태 $\hat{x}(t_k, z_k)$ 는 흡착베드 모델부(100)로 입력되며, 흡착베드 모델부(100)는 상태 $\hat{x}(t_k, z_k)$ 를 초기 값으로 하여 다음 적분 동작을 수행한다. 이때, 새로운 격자 위치에서의 상태 $\hat{x}(t_k, z_k)$ 값의 계산은 3차 스플라인 선점법에 의해 쉽게 계산 가능하며, 당업자라면 쉽게 알 수 있는 사항이므로 구체적인 설명은 생략한다.

[0109] 이하에서는 본 발명의 실시예에 따른 이득 근사부(300), 관측자 이득부(400), 관측자부(500), 및 상태 추정부(600)에 의한 흡착베드 모델부(100)의 상태 보정에 관해 자세히 설명한다.

본 발명의 실시예에 따르면, 이득 근사부(300)는 흡착베드 모델부(100)를 통해 계산된 상태를 독립변수로 하고 관측자 이득 행렬의 각 원소를 종속변수로 하는 근사식의 계수를 미리 계산하며, 관측자 이득부(400)는 상기 이득 근사부(300)로부터 미리 계산된 근사식의 계수와 흡착베드 모델부(100)를 통해 계산된 상태 값을 바탕으로 관측자 이득 행렬의 원소와 크기를 결정한다. 관측자부(500)는 상기 관측자 이득부(400)로부터 계산된 관측자 이득 행렬과 흡착베드에 설치된 상태 추정부(600)로부터 측정된 기체혼합물의 온도, 압력, 출구유량 및 출구농도의 정보를 바탕으로, 흡착베드 모델부(100)의 상태와 매개변수 및 경계조건을 보정한다. 이를 통해 시간이 지남에 따라 변화하는 공정의 특성이나 실시간으로 유입되는 외란의 영향을 수학적 모델에 정확히 반영하여, 결과적으로 흡착베드 내 상태 분포를 정확하게 예측할 수 있게 된다.

[0110] 삭제

[0111] 또한, 상기 보정 과정에서, 운전 조건(상태)을 독립변수로 하고 관측자 이득의 각 원소를 종속변수로 하는 근사식을 도입함으로써, 오차 공분산 방정식에 의한 계산량 증가를 막고, 공정의 비선형성을 극복하는 것을 특징으로 한다.

본 발명에 따른 고정층 흡착 공정은 다른 화학공정들과 마찬가지로, 실제 공정은 연속시간(continuous-time)으로 간주될 수 있으며, 공정으로부터 측정되는 정보는 일정 샘플링 시간을 주기로 간헐적으로 측정되므로 이산시간(discrete-time)으로 간주될 수 있다. 이러한 특성을 고려하여, 본 발명의 실시예에서는 연속-이산 확장 칼만 필터 (continuous-discrete extended Kalman filter)에 착안하여, 이득 근사부(300), 관측자 이득부(400), 관측자부(500), 및 상태 추정부(600)를 제안한다.

먼저, [수학식 15] 및 [수학식 16]의 비선형 상태 공간 모델은 수학적 모델의 매개변수 및 경계조건을 '상태'로 포함하도록 하기 위해, 다음의 [수학식 20] 및 [수학식 21]과 같이 변환된다.

[0112] 삭제

[0113] 삭제

수학식 20

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \bar{x}(t) \\ \theta(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{f}(t, \bar{x}(t), m(t), \theta(t)) \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \bar{G}_1(t) & 0 \\ 0 & \bar{G}_2(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{w}_1(t) \\ \bar{w}_2(t) \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} x(t) = f(t, x(t), m(t)) + G(t)w(t)$$

[0114]

수학식 21

$$Y(t_k) = h(k, x(t_k), m(t_k)) + v(t_k)$$

[0115]

여기서 $\bar{w}_1$ 는 상태 $\bar{x}$ 에 대한 외란이며, $\bar{w}_2$ 매개변수 및 경계조건 θ 에 대한 외란이고, v 는 측정 잡음이다. $\bar{G}_1$ 및 $\bar{G}_2$ 는 각각 $\bar{w}_1$ 및 $\bar{w}_2$ 의 시스템 행렬이며, m 은 공정의 입력으로서, 원료 기체의 유속, 원료 기체의 온도, 원료 기체의 농도 등을 포함한다. 상기 비선형 상태 공간 모델의 상태 x 는 [수학식 15]의 상태 $\bar{x}$ 에 수학적 모델의 매개변수 및 경계조건 θ 를 추가로 포함한다. 이때, 수학적 모델의 매개변수 및 경계조건 θ 는 흡착베드 모델을 구성하는 수학식의 매개변수 및 경계조건으로서, 본 발명의 실시예에서는 $\theta = [y_i^{\text{feed}} \quad \varepsilon \quad \Delta H_i \quad k_i^L \quad k_i^Q \quad h_i \quad h_o]^T$ 로 정의된다.

[0117]

상기 [수학식 20] 및 [수학식 21]에서 매개변수 및 경계조건 θ 를 새로운 '상태'로 포함시킴으로써, 공정으로부터 측정되는 정보를 바탕으로 기존의 [수학식 15] 및 [수학식 16]에서의 상태뿐만 아니라 수학적 모델의 매개변수 및 경계조건도 보정할 수 있게 된다.

[0118]

공정의 측정 정보를 바탕으로, 상기 [수학식 20] 및 [수학식 21]의 비선형 상태 공간 모델을 보정하기 위한 연속-이산 확장 칼만 필터는 다음과 같다.

수학식 22

$$\frac{\partial}{\partial t} S(t) = F(t)S(t) + S(t)F^T(t) + G(t)R_w(t)G^T(t)$$

[0119]

수학식 23

$$K(t_k) = S^-(t_k)H^T(t_k)[H(t_k)S^-(t_k)H^T(t_k) + R_v(t_k)]^{-1}$$

$$S(t_k) = [I - K(t_k)H(t_k)]S^-(t_k)$$

[0120]

수학식 24

$$\hat{x}(t_k) = \hat{x}(t_k)^- + K(t_k)[Y(t_k) - h(k, \hat{x}(t_k)^-, m(t_k))]$$

[0121]

상기 [수학식 22]에서, S 는 오차 공분산 행렬(error covariance matrix)이며, K 는 칼만 이득(Kalman gain)이다. R_w 는 [수학식 20]의 외란 w 에 대한 공분산 행렬(covariance matrix)이며, R_v 는 [수학식 21]의

[0122]

측정 값 $\mathbf{v}$ 에 대한 공분산 행렬이다. $\mathbf{I}$ 는 단위행렬이다. 여기서, 윗첨자(superscript) '-'는 공정으로부터 측정 정보를 바탕으로 보정되기 전(a priori)을 뜻한다. $\hat{\mathbf{x}}$ 은 수학적 모델을 통해 추정된 상태로서, [수학식 20]에서 외란에 의한 동특성을 제외하였을 때 계산된 상태를 가리킨다. [수학식 22] 및 [수학식 23]에서 $\mathbf{F}$ 및 $\mathbf{H}$ 는 각각 [수학식 20] 및 [수학식 21]의 비선형 함수 $\mathbf{F}$ 및 $\mathbf{H}$ 의 상태벡터 $\hat{\mathbf{x}}$ 에 대한 미분으로 정의되며, 다음과 같다.

수학식 25

$$F(t) = \frac{\partial f(t, \hat{\mathbf{x}}(t), \hat{\mathbf{m}}(t))}{\partial \hat{\mathbf{x}}}, H(t_k) = \frac{\partial h(k, \hat{\mathbf{x}}(t_k), \hat{\mathbf{m}}(t_k))}{\partial \hat{\mathbf{x}}}$$

[0123]

먼저, 상기 [수학식 22], [수학식 23], [수학식 24], 및 [수학식 25]로 나타난 연속-이산 확장 칼만 필터를 통한 [수학식 20] 및 [수학식 21]의 '상태' 추정의 어려움을 설명하면 다음과 같다 (아래 ①, ②, ③ 참조).

[0124]

① [수학식 22]에 의한 극심한 계산시간 증가

[0125]

상기 [수학식 22]는 [수학식 20]의 비선형 상태 공간 모델 및 [수학식 25]와 함께 룬게쿠타법에 의해 적분되어 풀어진다. 일정 시간 간격으로 공정의 측정 값 $\mathbf{Y}$ 가 입력될 때마다 수학적 모델의 상태는 [수학식 24]에 의해 보정되며, 오차 공분산 행렬 및 칼만 이득 행렬은 [수학식 23]에 의해 업데이트 된다.

[0126]

여기서 주목할 점은 상기 [수학식 22]에서 정사각행렬(square matrix)인 오차 공분산 행렬 $\mathbf{S}$ 의 행(row) 및 열(column)의 수가 [수학식 20]의 상태 $\mathbf{x}$ 의 수와 동일하다는 것이다. 이로 인해, 오차 공분산 행렬 $\mathbf{S}$ 의 원소의 개수는 상태 $\mathbf{x}$ 의 원소의 개수의 제곱이 된다. 만약, 2 성분 혼합 기체를 가정하고 흡착베드 내 격자의 수를 10개로 고정하며 반응기 입구 및 출구에서의 경계조건을 도입한다면, [수학식 15]의 상태 $\bar{\mathbf{x}}$ 의 원소의 개수는 48개($=6 \times (10-2)$)이다.

[0127]

한편, [수학식 20]에서 매개변수 및 경계조건 θ 는

[0128]

$$\theta = [y_i^{\text{feed}} \quad \varepsilon \quad \Delta H_i \quad k_i^L \quad k_i^Q \quad h_i \quad h_o]^T$$

로 정의되며, 기체 성분이 2개인 공정에 대해 10개의 원소를 가지므로, [수학식 20]의 상태 $\mathbf{x}$ 의 원소의 개수는 58개($=48+10$)이다. 따라서, 이 경우 [수학식 22]의 공분산 행렬 $\mathbf{S}$ 의 원소의 개수는 3,364개($=58 \times 58$)가 되며, 결국 풀어야 할 상미분 방정식의 수는 [수학식 20] 및 [수학식 22]의 원소의 개수를 더한 3,422개($=3,364+58$)가 된다. 만약, 실시간으로 3,422개의 상미분 방정식을 풀어야 한다면, 계산시간의 극심한 증가로 인해 관측자 시스템을 실시간으로 적용하는 것이 불가능해진다.

[0129]

② 공정 비선형성으로 인한 정상상태(steady-state) 칼만 이득의 성능 저하

[0130]

정상상태(steady-state) 칼만 이득을 이용할 경우, [수학식 22]의 상미분 방정식을 실시간으로 풀지 않아도 되기 때문에 계산 시간을 크게 단축할 수 있으나, 특정 운전 조건에서 계산된 정상상태 칼만 이득을 적용할 경우, 고정층 흡착 공정의 비선형성으로 인해, 운전 조건의 변화에 따라 극심한 상태 보정 오차를 보이게 되므로 유용하지 않다.

[0131] ③ 격자의 업데이트로 인한 행렬 크기 변화의 어려움

[0132] 본 발명의 실시예에서는 흡착베드 모델의 비선형 상태 공간 모델을 정확하며 빠르게 계산하기 위해, 일정 시간을 주기로 수학적 모델의 격자의 위치와 수를 업데이트하는 것을 특징으로 한다. 격자갱신부(200)에 의해 격자의 위치와 수가 업데이트 될 경우, [수학식 20]에서 상태벡터 $\mathbf{x}$ 의 크기와 원소 값이 새롭게 업데이트 되므로, [수학식 24]의 칼만 이득 행렬도 그에 부합하도록 그 크기와 원소가 업데이트 되어야 한다.

[0133] 따라서, 본 발명의 실시예에서는 상술한 [수학식 22]에 의한 계산시간 문제를 극복하고 공정의 비선형성과 격자의 업데이트 상황을 모두 고려하며, 동시에 비선형 수학적 모델의 상태를 효율적으로 보정하기 위해, 다음과 같이 $\mathbf{q}_i^* - \mathbf{q}_i$ 에 대한 칼만 이득의 근사식을 도입하였다.

수학식 26

$$\hat{K}^{pd} = a_1^{pd} (\mathbf{q}_i^* - \mathbf{q}_i)^{n_{pd}} + a_2^{pd} (\mathbf{q}_i^* - \mathbf{q}_i)^{n_{pd}-1} + \dots + a_{n_{pd}+1}^{pd}$$

[0134]

[0135] 여기서, $\hat{K}^{pd}$ 는 근사된 칼만 이득 행렬의 p행 d열의 원소를 나타내며, n_{pd} 는 근사식의 차수(order)이다.

$a_1^{pd}, a_2^{pd}, \dots, a_{n_{pd}+1}^{pd}$ 는 근사식의 계수(coefficient)를 나타내며, 다음의 [수학식 27]과 같이 최소자승법(least square method)을 통해 계산된다.

수학식 27

$$\begin{bmatrix} a_1^{pd} & a_2^{pd} & \dots & a_{n_{pd}+1}^{pd} \end{bmatrix}^T = \arg \min \sum (K^{pd} - \hat{K}^{pd})^2$$

[0136]

[0137] 본 발명의 실시예에 따르면, K^{pd} 는 특정 운전 조건(상태)에서 [수학식 22] 및 [수학식 23]을 통해 계산된 칼만 이득 행렬의 p행 및 d열의 원소이며, $\hat{K}^{pd}$ 는 [수학식 26]을 통해 계산된 칼만 이득 행렬의 p행 d열의 원소이다. 상기 [수학식 27]에 따르면, [수학식 26]의 계수는 K^{pd} 와 $\hat{K}^{pd}$ 사이의 차이가 최소화 되도록 결정된다.

[0138] 본 발명의 실시예에 따르면, 다양한 운전 조건(상태)에서 $\mathbf{q}_i^* - \mathbf{q}_i$ 및 칼만 이득 행렬 K 를 계산하고, 상기 [수학식 27]을 통해 상기 [수학식 26]의 계수를 결정한다. 이때, 상기 칼만 이득 행렬의 근사는 이득 근사부(300)에 의해 모든 격자의 위치에서 모든 상태 변수에 대해 미리 수행되며, 미리 계산된 [수학식 26]의 계수들은 데이터 베이스에 저장된다. 본 발명에 따른 관측자 시스템의 실시간 적용에 있어서, 격자갱신부(200)에 의해 격자의 위치가 업데이트되면, 관측자 이득부(400)는 미리 계산하여 결정된 [수학식 26]의 근사식을 통해, 해당 격자의 위치에서 필요한 칼만 이득 행렬을 계산한다.

[0139] 본 발명의 실시예에 따르면, [수학식 26]에서 칼만 이득 행렬의 원소는 공정 비선형성에 가장 큰 영향을 미칠 것이라 판단되는 $\mathbf{q}_i^* - \mathbf{q}_i$ 의 함수로 근사 되었다. [수학식 26]에서 독립변수인 $\mathbf{q}_i^* - \mathbf{q}_i$ 는 [수학식 20]으로 주

어진 상태 x 에 의해 쉽게 계산 가능하므로, [수학식 26]을 이용하면 상태변수의 변화에 따라 적절한 칼만 이득 행렬을 쉽게 계산하여 적용할 수 있다.

[0140] 한편, 본 발명의 실시예에 따르면, 관측자 이득부(400)는 흡착베드 모델부(100)로부터 상태가 입력되면, [수학식 26]의 근사식을 통해 칼만 이득 행렬을 계산하고, 이를 관측자부(500)에 전달한다. 관측자부(500)는 관측자 이득부(400)로부터 입력된 칼만 이득 행렬과 상태 측정부(600)로부터 측정된 물리적 상태정보를 바탕으로 [수학식 24]를 통해 흡착베드 모델부(100)에서 계산한 흡착베드 모델의 상태와 매개변수 및 경계조건을 보정한다.

[0141] 이때, 상기 이득 근사부(300), 관측자 이득부(400), 관측자부(500), 및 상태 측정부(600)에 의한 상태 보정 과정에서, [수학식 24]의 칼만 이득 행렬이 격자의 위치 및 운전조건(상태)에 따라 [수학식 26]에 의해 손쉽게 계산되므로, 관측자 시스템의 실시간 적용에 있어서 [수학식 22]의 상미분 방정식을 풀지 않아도 되며, 계산시간을 획기적으로 단축할 수 있다.

[0142] 이하에서는 본 발명의 실시예에 따른 정상상태 최적화부(700)에 의한 흡착베드 공정의 소비 에너지 최소화에 관해 자세히 설명한다.

[0143] 정상상태 최적화부(700)는 흡착베드의 여러 제약조건을 벗어나지 않는 범위 내에서 원료기체의 공급을 위해 사용되는 송풍기(또는 압축기) 및 흡착제 재생을 위해 사용되는 진공펌프의 소비 에너지를 최소화하는 역할을 한다. 이를 수식으로 표현하면 다음의 [수학식 28]과 같다.

수학식 28

$$\begin{aligned} \min J &= E_b + E_v \\ \text{subject to } U_{\min} &\leq U \leq U_{\max} \end{aligned}$$

[0144]

[0145] 여기서, E_b 는 송풍기(또는 압축기)의 소비 에너지이며, E_v 는 진공펌프의 소비 에너지이다. J 는 목적함수로서, 송풍기(또는 압축기)와 진공펌프에서의 소비 에너지의 합으로 정의된다. U 는 흡착베드 공정의 운전 조건으로서, 가압시간, 감압시간, 탈착시간, 원료기체의 유량, 가압압력, 감압압력 등을 포함하는 벡터이다. $U_{\min}$ 와 $U_{\max}$ 는 각각 운전 조건 U 의 최소값과 최대값이다.

[0146] 상기 [수학식 28]에서 정상상태 최적화부(700)는 주어진 제약조건을 만족시키며, 송풍기와 진공펌프에서의 소비 에너지가 최소화되도록 흡착베드 공정의 운전 조건을 계산한다. 이때, 본 발명의 실시예에 따르면, 최적화를 위해 뉴턴 랩슨 방법(Newton Raphson method)을 사용하였다.

[0147] 한편, 본 발명의 실시예에 따르면, 정상상태 최적화부(700)는 [수학식 28]을 계산하기 위해 흡착베드 모델부(100)로부터 송풍기(또는 압축기) 및 진공펌프 소비 에너지의 기울기(gradient) ∇J 와 헤시안(hessian) $\nabla^2 J$ 을 얻으며, 흡착베드 공정으로부터 송풍기 및 진공펌프의 소비 에너지 J 를 얻게 된다.

[0148] 그리고, 본 발명의 실시예에 따르면, 흡착베드 모델부(100)는 ∇J 과 $\nabla^2 J$ 를 계산하기 위해, 송풍기(또는 압축기) 및 진공펌프 제작사에 의해 제공되는 특성곡선(characteristic curve) 및 소비 에너지 곡선 데이터를 이용한다.

[0149] 정상상태 최적화부(700)는 흡착베드 모델부(100)를 통해 계산된 상태 분포가 주기적 정상상태에 도달하였을 때, 간헐적으로 필요에 따라 최적 운전 조건을 업데이트하며, 계산된 최적 운전 조건을 흡착베드 공정과 흡착베드 모델부(100)로 제공한다.

이상에서 본 발명의 실시예에 대해서 설명하였으나, 이 외에도 여러 가지 다양한 변경 및 변형이 가능하다. 예컨대, 본 발명의 실시예에서는 흡착베드 모델부의 상태와 매개변수 및 경계조건을 보정하기 위해 확장 칼만 필터를 사용하였으나 이외의 다른 선형 및 비선형 상태 추정기를 사용할 수 있다. 또한, 수학적 모델의 격자의 위치와 수를 조절하기 위해 수학적 모델의 상태변수의 기울기 정보를 이용하였으나, 이 외에도 페널티 함수 (penalty function)를 통한 격자 위치 업데이트 방법을 사용할 수도 있다.

[0150] 삭제

[0151] 한편, 특정 격자의 위치에서 수학적 모델의 상태에 따른 관측자 이득 값의 변화를 근사하기 위해 다항식을 사용하였으나, 이외에도 지수함수 등의 다른 근사식을 사용할 수도 있다. 또한, 격자의 위치와 수를 갱신하기 위해 역탄젠트 함수를 도입하였으나, 이 외에도 가우스 함수 등의 다른 함수들을 사용할 수도 있다.

한편, 이상에서 설명한 본 발명의 실시예는 장치 및 방법을 통해서만 구현 되는 것은 아니며, 본 발명의 실시예의 구성에 대응하는 기능을 실현하는 프로그램 또는 그 프로그램이 기록된 기록 매체를 통해 구현될 수도 있으며, 이러한 구현은 앞서 설명한 실시예의 기재로부터 본 발명이 속하는 기술분야의 전문가라면 쉽게 구현할 수 있는 것이다.

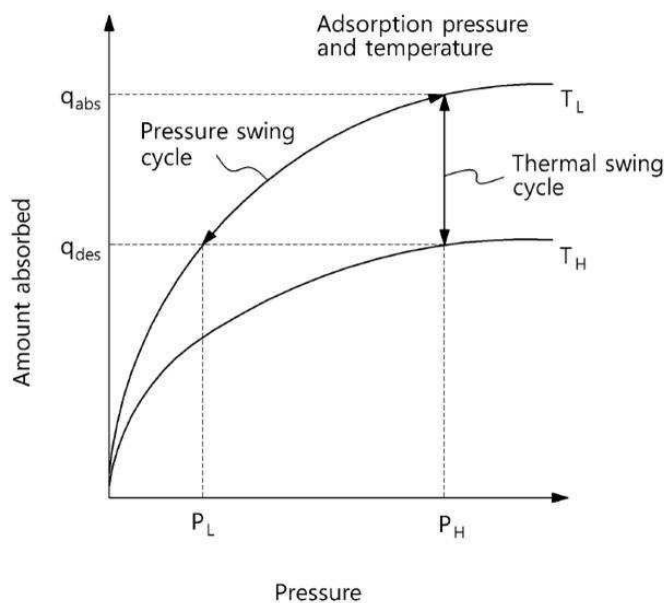
이상에서 본 발명의 실시예에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리 범위는 이에 한정되는 것은 아니고 다음의 청구 범위에서 정의하고 있는 본 발명의 기본 개념을 이용한 당업자의 여러 변형 및 개량 형태 또한 본 발명의 권리범위에 속하는 것이다.

[0152] 삭제

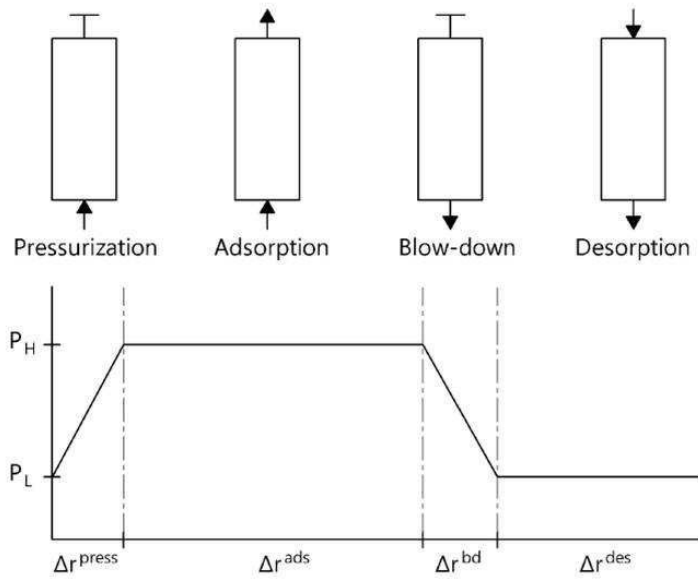
[0153] 삭제

도면

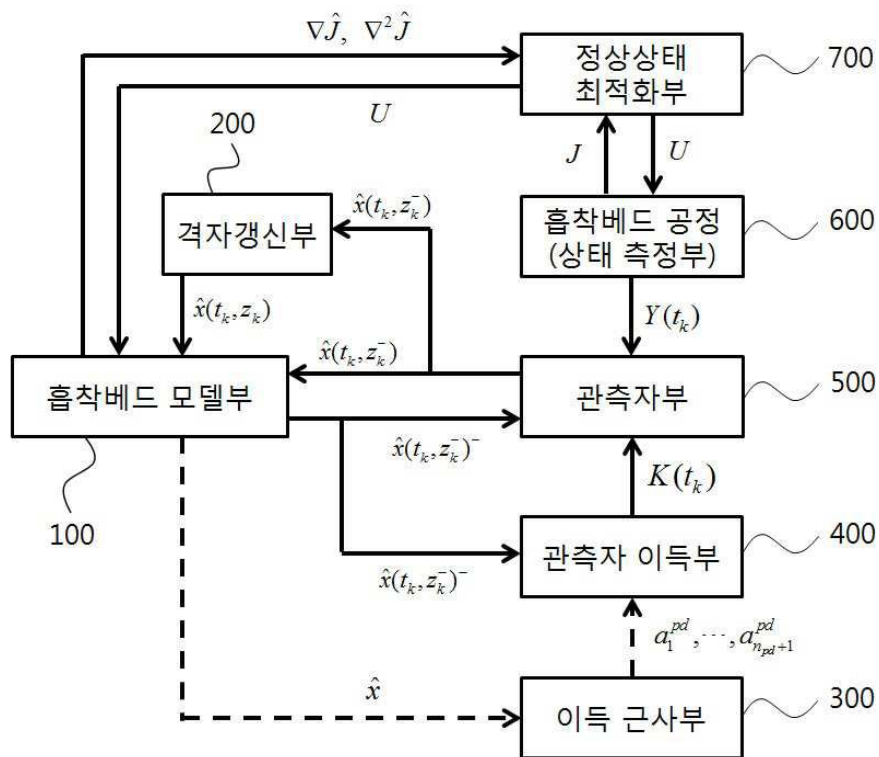
도면1



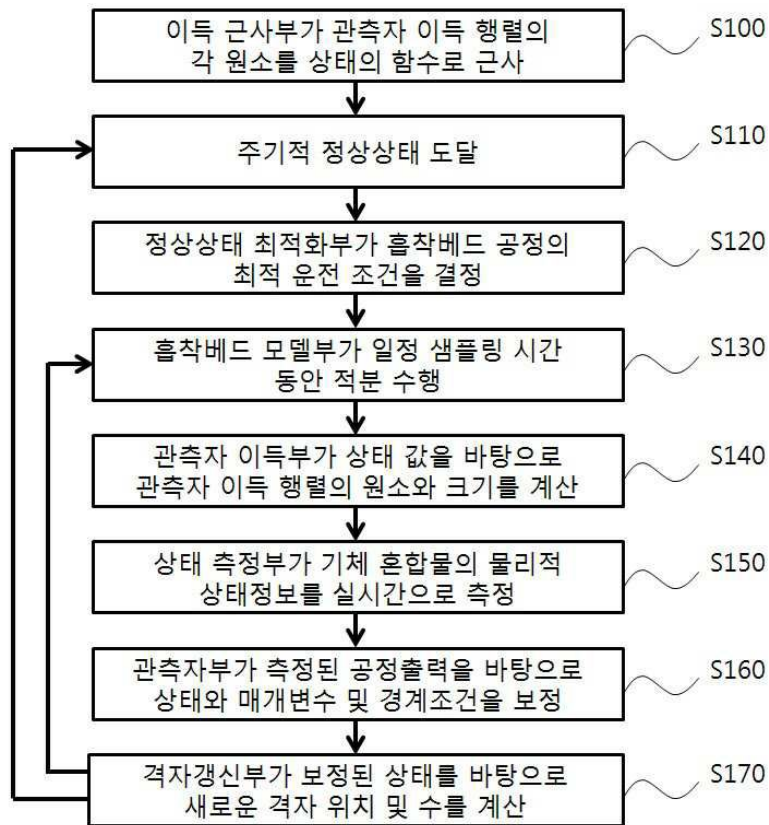
도면2



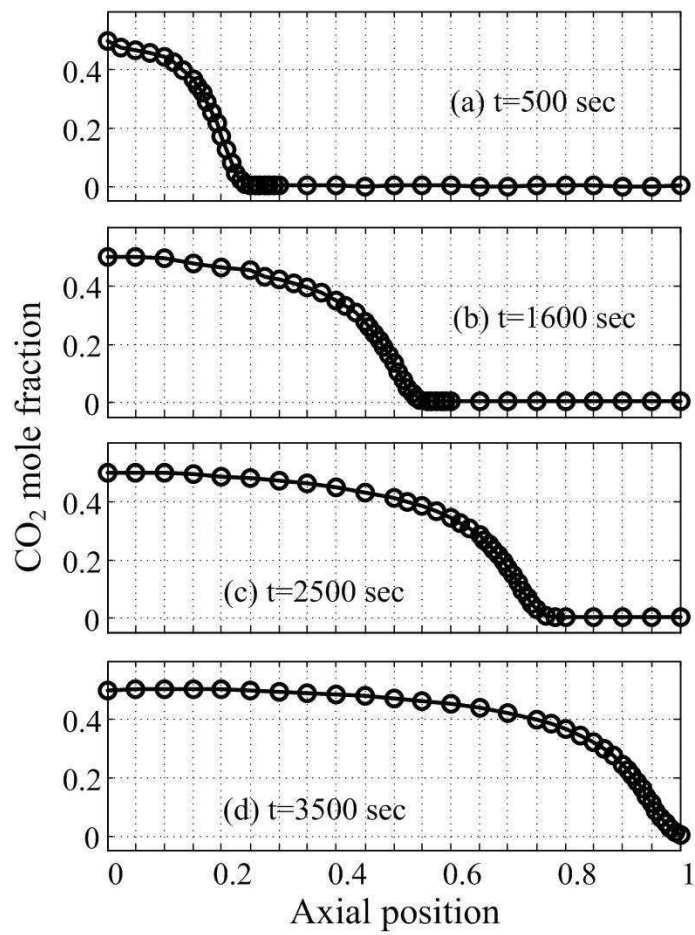
도면3



도면4



도면5



도면6

