

## 회분식공정의 지능형 자동설계 Package를 위한 장입, 반응공정의 동적모사기 모듈 및 Interface 개발

정재학<sup>†</sup> · George Stephanopoulos\*

영남대학교 공과대학 화학공학및공업화학부

\*MIT 공대 화학공학과

(1998년 3월 6일 접수, 1998년 5월 19일 채택)

## Development of Dynamic Simulator Modules of Charge, Reaction Processes and Interface for Intelligent Batch Process Auto-design Package

Jae Hak Jung<sup>†</sup> and George Stephanopoulos\*

School of Chemical Engineering and Technology, Yeungnam University,  
214-1, Dae-Dong, Kyongsan, KB, 712-749, Korea

\*Dept. of Chem. Eng., Massachusetts Institute of Technology,  
77 Massachusetts Ave. Cambridge, MA, 02139, U.S.A.

(Received 6 March 1998; accepted 19 May 1998)

### 요 약

최근 Stephanopoulos[1]는 지능형 회분식공정의 자동설계 및 모사용 소프트웨어 package를 완성하고 *BatchDesign-Kit* (BDK)이라 명명하였다. 여기에 차세대 설계 및 모사용 package로서의 도약을 위한 추가 요구기능 중의 하나가 동적모사기 모듈이었으며, 본 연구는 이러한 목적으로 BDK를 위한 동적모사기 모듈을 개발하였다. BDK를 위한 동적모사기의 전체가 본 연구를 통해 완성된 것은 아니고 그중 범용성 장입공정모듈과 반응공정모듈의 일부를 대상공정으로 하여 회분공정의 동적모사기를 개발하였으며, 이 동적모사기를 위해 첫째 *gPROMS*를 이용한 동적모사기 input code들의 개발이 수행되었으며, 둘째 모체 package와의 결합과 비전문 사용자를 위한 Graphic User Interface(GUI)가 작성되었고, 셋째 외부 program(*gPROMS*, MS-Excel 등)의 구동 및 조작을 위한 program과 BDK내부의 database 접속을 위한 Dynamic Link Library(DLL)가 작성되었다.

**Abstract**—Recently Stephanopoulos[1] developed an automatic intelligent batch process design and simulation tool, named *BatchDesign-Kit*(BDK). For the updated version of BDK, dynamic simulator modules were highly required. At this research we developed dynamic simulator modules for BDK with charge and mixing operation and several reaction operation processes. In this research we accomplished three main achievement. First, we developed *gPROMS* input codes for batch process dynamic simulation. Second, we developed the Graphic User Interface program for non-specialized users and interfaces with main body of BDK. The third achievement was to generate the programs which can access and control the outer executing programs(*gPROMS*, MS-Excel etc.) and to develop the dynamic link library program for accessing database in BDK.

Key words: Intelligent Batch Process Auto-design, BDK, Batch Process Simulator

### 1. 서 론

회분식공정은 연속공정에 비해 조업과 설계측면 모두가 복잡성을 띠고 또한 동적거동이 보다 중요시 되어진다. 그만큼 설계나 조업이 상황에 따라 달라질 수 있는 요소를 지닌다고 할 수도 있다. 이러한 이유로 연속공정에 비해 비교적 그 연구 발전속도가 늦다는 것도 사실이다. 연속공정의 설계나 조업 모사를 위한 공정소프트웨어들이

크게 발전한 반면 회분식공정의 경우 자동설계 및 모사용 공정소프트웨어가 거의 없는 것도 이같은 맥락에서 이해될 수 있을 것이다. 이 분야는 수년 전부터 연구가 진행되어 최근 그 첫 완성을 보게 된 Stephanopoulos[1]의 *BatchDesign-Kit*(BDK)가 초유의 성과이며, 이 BDK는 인공지능형 회분식공정의 자동설계 및 조업모사용 공정소프트웨어 package로서 그 성능의 우수성은 많은 논문[4-6]과 산업체의 적용사례가 증명해 주고 있다. 본 연구는 이러한 회분식공정의 자동설계 package의 등장에도 불구하고 아직 산업체가 요구하는 모든 기능을 보유하지 못했다는 수요자 요구와 이에 따른 개발 모듈의

<sup>†</sup>E-mail: jhjung@yucc.yeungnam.ac.kr

필요성에 의해 수행된 것으로서 그 기능 보완의 가장 시급한 것들 중 하나가 회분공정의 동적모사기 모듈의 추가이다. 회분식공정의 동적 특성이 실제로 설계나 조업모사에서 큰 변수로 작용하고 있어서 설계나 조업모사시에 사용자가 의심스러운 부분에서 언제든지 동적 거동을 볼 수 있게 되어야 하고, 동적 거동에 따른 설계시의 안전성을 위한 설계치여유(margin of design factor)확보 등에 매우 중대한 영향을 미칠 수 있기 때문에 이와 같은 회분공정의 자동설계 및 조업모사 package는 반드시 동적모사 모듈이 있어야 한다는 필요성이 대두되었다.

본 연구는 이러한 지능형 회분식공정의 자동설계 및 조업모사용 package를 위한 동적모사기 모듈의 개발을 주내용으로 하며 여기에는 3가지 영역의 개발내용을 포함하고 있다. 그 첫째 영역은 모체 소프트웨어 package와 관련없이 독립적으로 회분식공정들의 동적모사(dynamic simulation)를 수행하기 위한 소프트웨어의 개발이다. 회분식공정의 동적모사를 위해 공정모사용 프로그래밍 언어로 *gPROMS*가 사용되었으며, 회분공정에 관계한 모듈을 모두 개발하지는 못했으나 회분공정의 모사에 가장 기본이 되는 vessel에의 원료장입 및 혼합모델과 반응모델의 일부를 대상으로 범용성있게 구성하였다. 여기에서는 모든 물질수지식, 에너지 수지식이 고려되었고, 또한 기-액 평형에 의한 시간에 따른 기상, 액상의 조성변화와 이에 따른 물질치 변화의 동적거동이 포함되어졌다. 둘째 영역에서는 모체 소프트웨어와의 결합과 사용자를 위한 Graphic User Interface의 구성으로 독립된 소프트웨어 package형태의 프로그램을 개발하였다. 비전문가 조업자나 설계자들이 쉽게 사용할 수 있는 메뉴들과 대화(dialogue)박스들이 동적모사를 위해 꼭 필요한 항목의 요구나 취사선택적(optional) parameter들을 적절히 프로그램내로 수용될 수 있도록 개발되었다. 이 부분 역시 원료장입과 반응모델을 기준으로 작성되었다. 마지막 영역이 외부 프로그램들과의 연결 및 database 접속을 위한 도구의 개발이다. 앞서 언급한 바와 같이 공정모사를 위해 *gPROMS*라는 외부의 별도의 소프트웨어를 사용하여야 하고, 또한 동적모사 작동시 호출되는 회분식공정의 물질치의 시간에 따른 변화추이 등의 그래프나 data를 확인하기 위해서는 MS-Excel을 interface하여 사용하였다. 이들 외부 프로그램을 어떻게 적절히 구동시킬 것인가 외에도 또한하나의 과제인 BDK내부의 database를 동적모사 구동시 어떻게 연결할 것인가가 마지막 영역의 작업이었으며 이 작업을 위해 기존의 database의 구조를 분석하였으며 그 내용을 토대로 dynamic link library(DLL) 프로그램을 작성하여 접속하였다.

## 2. 동적모사 모듈의 개발

회분공정의 설계와 조업을 모사하기 위해서는 단위시간당 변화하는 공정변수들의 변화추이를 알아보는 동적모사가 필수적이다. 하지만 회분식공정은 그 종류가 매우 다양하고 각 회분식공정의 특성치들은 각각 고유한 특이성을 지니는 관계로 범용성 모사기를 만드는 것은 매우 어려운 일이다. 그러나 회분조업의 공통적 특징별로 그 범주를 나눌 수 있고 상세한 각 개별공정의 특징은 모사시에 취사선택형태의 변수도입으로 표현할 수 있을 것이다. 이를 위해 우선 회분식공정을 대체적 특징별로 나누어 볼 필요가 있다. 본 연구에서는 범용적으로 회분식공정이 가장 빈번하게 사용되는 3가지 큰 범주로 나누어 보게 되었고 그 첫번째 범주가 원료물질도입 및 혼합공정모델(charge and mixing model)이며 둘째 범주가 반응공정모델(reaction model)이며, 마지막으로 분리공정모델(separation model)이다. 본 연구에서는 이들 중 원료물질의 도입 및 혼합공정과 반응공정중 기초반응(elementary reaction)부분만을 대상으로 동적모사모델을 작성하였다. 궁극적인 동적모사기 개발의 목표는 이들 기본적인

3가지 모델들이 1개의 유기적 모델을 구성하는 것이겠으나 복수의 모델들의 결합가능성과 이렇게 개발된 모델의 사용자 편의성 GUI 작성 및 외부 프로그램과 모체 소프트웨어와의 결합성의 가능성을 테스트해 보아야 하는 과제의 목적상 위에서 언급한 두 가지의 모델개발에 그 연구범위를 국한하였다.

회분식공정 동적모사기의 개발을 위해 사용된 프로그래밍언어는 영국 Imperial College의 Pentelides[2, 7], Barton[3] 등이 개발한 *gPROMS*를 사용하였으며, 이 개발용언어는 단속적 이산공정의 시간에 따른 공정 동력학적 변수처리가 가능하도록 고안되어 있어서 화학공정으로서의 가장 이산적 특징을 지니고 있는 회분공정의 공정변수들을 다수의 상미분방정식(ordinary differential equation)으로 연속적(successively)으로 풀이해 주는데 용이한 강점이 있다. *gPROMS*에서의 각 회분공정의 모델링을 위한 변수는 고정변수치의 지정을 위한 고정 parameter지정과 조업진행 상황에 따라 변동하는 변수치의 지정 및 범위설정이 있으며, 하나의 큰 범주의 공정모델링을 위해 많은 세부적 기본 모델들 그리고 그 모델들의 변수를 공동사용함으로 인해 연결지워지는 하위모델(submodel)들, 또 이들 모델들의 유기적 연결성을 위한 모델간의 연결흐름을 나타내는 흐름명 등으로 구성되어진다.

### 2-1. 장입(Charge) 모델

Charge 모델은 여러 개의 하위모델들의 유기적 결합으로 이루어진다. 이를 'charge union of models'라고 하고 그 세부적 하위모델들의 내용은 물질치계산이나 열역학적 평형계산의 모델들로부터 공정으로의 물질도입의 유형을 결정하는 모델과, 시간에 따른 밸브작동에 관계한 흐름유량을 결정해 주는 모델 등이 모여져 있다. 이들 모델들은 계산의 흐름순서에 입각하여 순차적 혹은 분산 또는 규칙적 data의 전달이 필요하고 이들을 변수 흐름정의로 연결 지우게 된다. *gPROMS*의 한 모델은 모델명(MODEL), parameter지정(PARAMETER), 모델간의 계산의 순서에 입각한 계층구조설정(UNIT), 조건변화나 이산 공정상태설정을 위한 선택설정(SELECTOR 혹은 CASE), 이산사건의 스케줄의 설정(SCHEDULE 혹은 SEQUENCE), 초기치 설정(SET), 초기조건 설정(ASSIGN), Variable 지정(VARIABLE), 모델간의 공동변수 사용을 위한 동일 흐름연결 정의(STREAM), 단위모델이 필요한 수식들(EQUATION), 끝마침(END) 등으로 구성되어진다.

Charge 모델의 경우 구성 요소인 하위모델들 중 가장 하부의 모델들은 액체상태의 밀도, 엔탈피 등 물성치를 계산하는 *ThermoIdealLiquid* 모델, 기체의 물성치를 계산하는 *ThermoIdealVapor* 모델, 압력, 온도 기-액 분산계수 등을 계산하는 *ThermoIdealVLE* 모델, 이슬점(dew point) 및 기포점(bubble point)을 계산하는 *ThermoIdealEq* 모델이며, 그 다음 계층(layer)의 모델들은 *ThermoIdealLiquid* 모델로부터 PPL흐름을 통해 연결되는 모델인 액상의 온도, 압력, 부피 물질량 등을 계산하는 *Liquid\_Material* 모델, *ThermoIdealVapor* 모델로부터 PPV흐름을 통해 연결되는 기상의 온도, 압력, 부피, 물질량 등을 계산하는 *Vapor\_Material* 모델이 있다. 여기까지의 모델들이 기초물질치 계산을 위한 하부모델들이다. 여기서 다시 *Liquid\_Material* 모델, *Vapor\_Material* 모델, *ThermoIdealVLE* 모델 및 *ThermoIdealEq* 모델로부터 각각 *Liquid* 흐름, *Vapor* 흐름, *Eq* 흐름, *TEq*흐름을 통해 연결되는 상부 모델인 기-액 평형을 계산하는 *VLEquilibrium* 모델로 연결되어져 하부의 계산된 변수값으로 기-액 평형계산에 의한 기상 및 액상, 온도, 압력, 물질량 그리고 각 상의 각 성분 분율 및 몰수 등을 계산해준다. 흐름 *VLEsys*에 의해 연결되는 *VLEquilibrium* 모델은 vessel 내부에서 완전혼합 형태의 공정으로 가정하고 vessel의 크기, 공정조건을 감안하여 각 상의 몰수, 엔탈피 등의 동적 거동을 알아보는 *VLE container* 모델에 정보를 전달하고 그 결과치가 Charge공정의 동적 거동을 나타내준다. 여기에 charge\_VOCModel 모델은 공정유입, 유출류의

흐름속도와 시간에 따른 공정 event변화, 스케줄 및 조업 순서를 지정하고 그 조업에 따라 위의 모든 모델들이 맡은 바의 임무를 수행하여

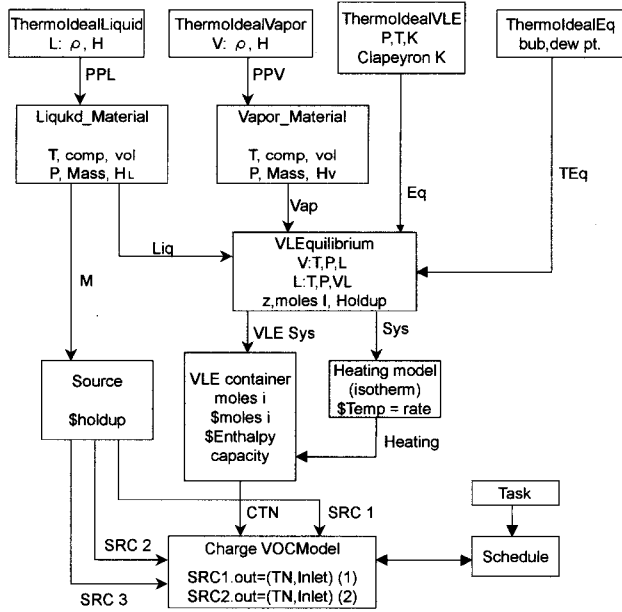


Fig. 1. The structure of charge union of models.

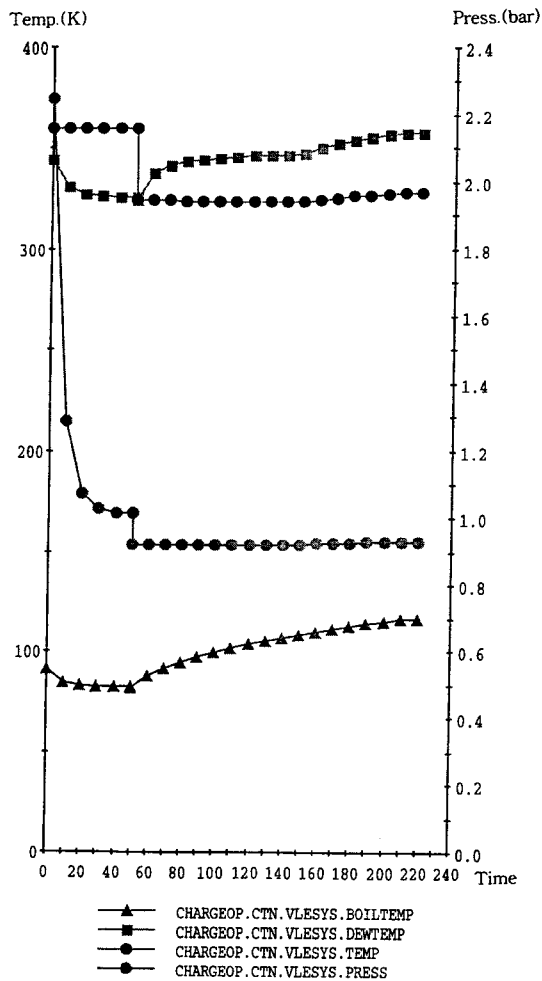


Fig. 2. Dynamics of pressure, temp., dew & boiling temp.

동시에 계산이 이루어진다. 'Charge union of models'의 하부모델들과 그 연결들을 Fig. 1에 나타내었다.

Charge 모델의 동적모사의 예를 보이기 위해 실제공정 data 중 공기(air), ethanol, 물(H<sub>2</sub>O)의 3성분계의 장입 및 혼합을 모사하여 보았다. 초기에 10 m<sup>3</sup>의 반응기에 289 K에서 1.031 pa의 압력으로 들어 있을 때 320 K의 물 500 mol을 0.5 mol/sec의 유량으로 도입후 320 K의 ethanol 150 mol을 0.5 mol/sec로 도입한 경우의 여러 가지 data를 동적모사해 보았다. 그 결과들을 Fig. 2-4에 나타내었다.

## 2-2. 반응(Reaction) 모델

'Reaction union of models'의 구성은 Charge 모델과 유사한 상하부모델 형태로 구성되어진다. 반응에 관계한 하부모델들은 온도의 동적거동을 나타내는 Temp\_rate 모델과 여기서부터 iso흐름과 연결되어 반응속도상수를 계산해 주는 Rxn\_const 모델 그리고 이로부터 나오는 rconst흐름과 연결되어 회분공정의 반응에 의한 시간에 따른 반응 전화율, 성분들의 분율변화, 몰수 변화 등을 계산해 주는 반응의 동적모사모델인 Elem\_rxn\_of\_Batch 모델 등이 추가되어져서 반응의 동적거동을 확인할 수 있다. Elem\_rxn\_of\_Batch모델로부터 도출되는 rxn흐름은 회분공정의 Reaction union of models를 구동시켜주기 위한 초기조건과 흐름순서 등을 지정해주는 Process Cycle\_time 모델로 연결이 되어 전체모델이 동시에 계산 및 모사되어진다. 또 등온과정이 아닌 경우를 위해 반응열을 계산해 주고 그 반응열이 반응기내의 물질 분포에 따라 온도로 계산되어지는 Material 모델이 있고 이는 Elem\_rxn\_of\_Batch 모델로부터 각 성분분율 정보를 Heat 흐름의 연결을 통해 계산된 열량과 변화되는 온도 data를 Temp 흐름으로 Temp\_rate에 전달해 준다. 만약 등온과정이면 Temp\_rate 모델은 이를 무시하고 rate=0으로 둔다. 이렇게 구성된 Reaction union of models의 구성은 Fig. 5에 나타내었다. Reaction 모델의 모사결과는 다음장의

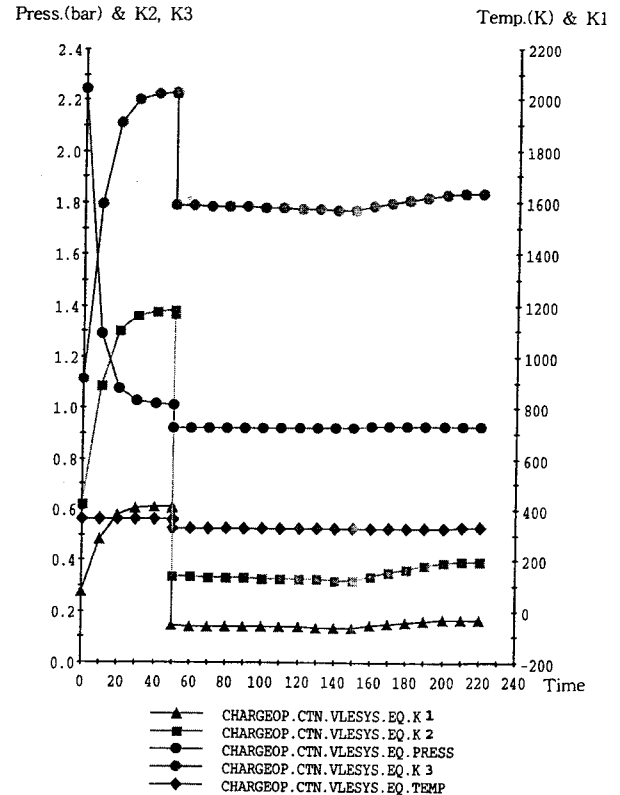


Fig. 3. Dynamics of distribution coeff.(K) of air(K1), water(K2), EtOH (K3) and temp., pressure.

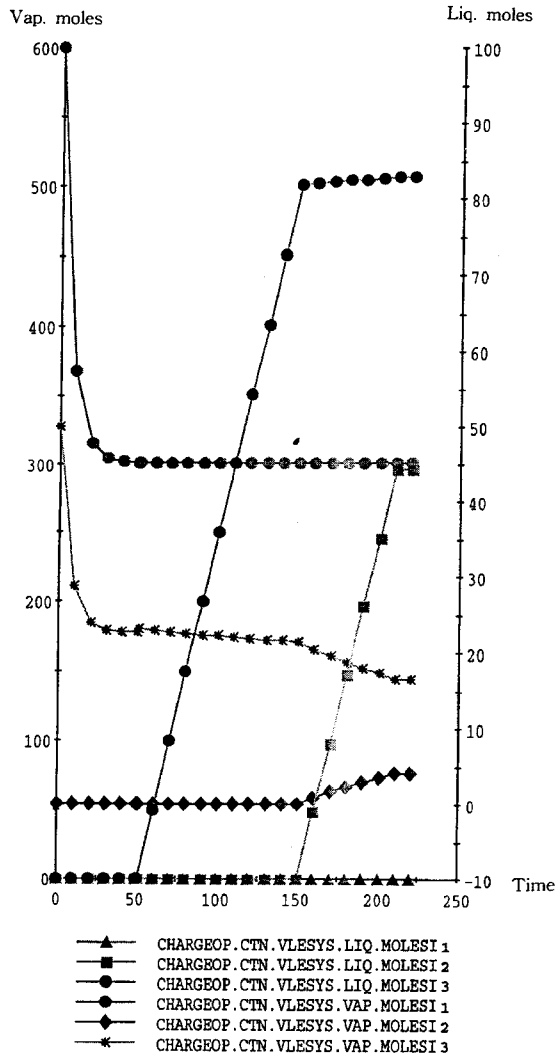


Fig. 4. Dynamics of moles of air(1), water(2), EtOH(3) at liquid and vapor phase.

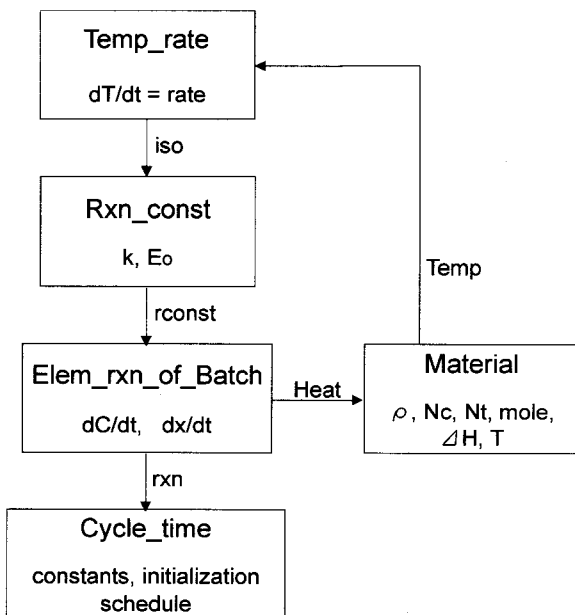


Fig. 5. The structure of reaction union of models.

Graphic User Interface-부분에서 다루도록 하겠다.

### 3. Graphic User Interface(GUI)의 작성

본 연구는 일반적 공통점을 토대로 한 회분공정의 모사용 input

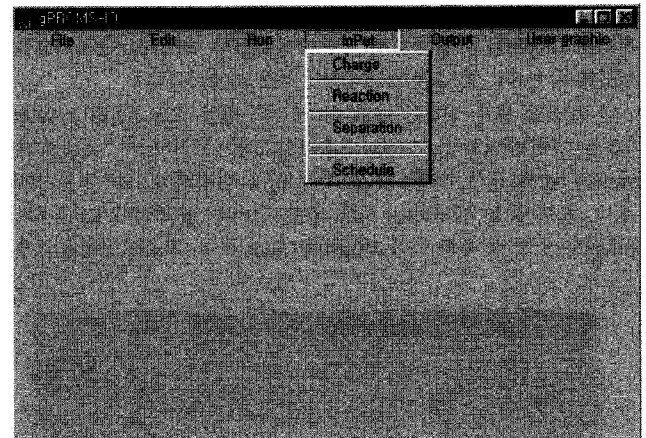


Fig. 6. The base screen of Delphi GUI program.

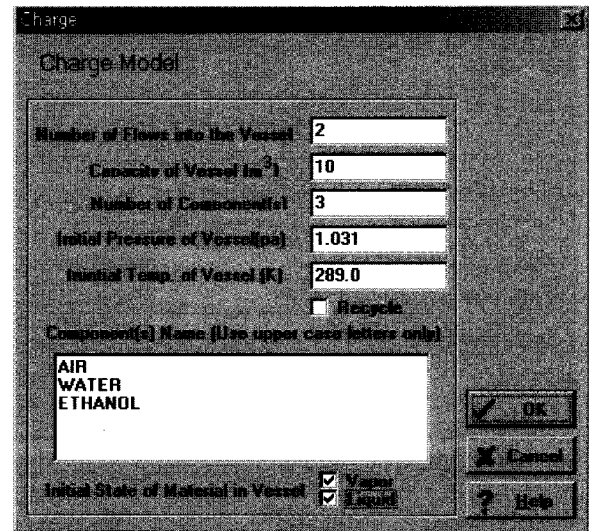


Fig. 7. An example dialogue for charge model.

file를 미리 작성해 두고 사용자가 쉽게 공정을 모사할 수 있도록 몇 가지 선택적 자료들을 취사선택하거나 그 변수값을 조정하여 모사할 수 있도록 하였다. 이러한 작업을 위해서는 기본이 되는 자료들로 구성된 뼈대 input program을 작성해 놓은 후 여기에 사용자가 첨가, 수정하는 data들을 수용하여 gPROMS 문법에 맞는 input file이 생성되도록 대화 형태의 GUI를 개발하는 것이 요구되었다. 본 연구는 선택적 자료들이 자동적으로 gPROMS input file에 적절히 수용되게 하기 위하여 Delphi를 사용하여 GUI를 구성하였다. Delphi는 Borland사가 개발하여 판매하고 있는 객체지향적 파스칼언어이다.

본 연구를 통해 구현된 input file의 자동생성 프로그램을 'gPROMS-ID'로 명명하였고 그 초기화면은 Fig. 6에 나타내었다. 초기화면은 project file의 생성, 저장, 제거, 출력 등을 담당하는 File 메뉴, 수정, 복사, 첨부 등을 담당하는 Edit 메뉴, 준비된 gPROMS input file의 compile 및 모사 수행 등을 담당하는 Run 메뉴, 회분식공정을 3가지

큰 범주의 input file로 작성하기 위한 대화상자들을 활성화시키고 작업의 순서만 따로 수정작업을 하게 하는 Input 메뉴, 수행된 모사결과를 MS-Excel의 data형태나, output report형태로 만들어주고 graph결과를 보여주는 Output 메뉴, User가 지정해 주는 간략한 graphic을 보여주는 User graphic 메뉴가 있다. Charge 모델의 input file을 위해 제공되는 대화상자의 한 작업예를 Fig. 7에 나타내었다. 이 대화상자의 한 예제 수행에는 앞서 살펴본 회분공정의 모사를 위한 공정모델 중 Charge 모델의 예를 대화상자를 통해 다시한번 수행한 결과를 보여주고 있다. Fig. 8에는 앞서 설명한 장에서 그 수행 결과를 생략하였던 반응모델을 위한 대화상자와 입력예를 나타내었다. 여기서는 총 4개의 성분이 관여하는 가역반응으로 초기의 반응기내 각 성분의 잔존량, 속도상수값 및 활성화에너지, 외부가열량과 초기 vessel의 온도 및 초기반응정도, 프로그램 종료조건인 최종전환율 등을 대화상자를 통해 사용자가 쉽게 동적모사를 수행토록 구성되어져 있다. 반응 모델에서 보여주는 예제에서는 화학종의 물성 data가 완벽하게 준비되어 있지 못하여 실제 화학종을 사용하지 않은 실행예를 나타내었다. 반응모델의 경우 특수한 화학종들이 보다 많이 database에 수록되어야 할 것이며 이 부분은 향후 계속 연구되어야 할 부분임을 밝혀둔다. 이렇게 준비된 대화상자 작업을 끝낼 경우 반응공정에 해당되는 input file이 완성되고 이를 초기화면에서 Run 메뉴를 통해 compile하고 run하게 되면 그 결과인 output file이 생성된다. 이 output file은 변수명과 data들이 일렬로 늘어선 형태이어서 data를 분석하기 어려운 구조를 갖는다. 여기서 Output 메뉴를 선택하게 되면 이 data를 재배열하여 MS-Excel형태의 배치를 자동수행하고 output file을 file name으로 Excel file의 확장자인 .xl가 붙게 되어 MS-Excel로 그 결과를 알아 볼 수 있다. 그 결과를 Fig. 9에 나타내었고, 다시 Fig. 10에 그 graphic결과를 나타내었다. 이렇게 하여 외부 프로그램인 gPROMS와 MS-Excel을 사용할 수 있도록 구성하였다. 이렇게 구성된 대화상자 프로그램과 외부 프로그램구동이 가능한 외부프로그램 input형태의 파일들의 생성으로 비전문적 사용자의 편의를 충분히 고려한 회분식공정의 동적거동 모사용 소프트웨어 package형태를 갖추게 되었다.

#### 4. Database의 구성과 사용

공정의 동적모사를 위해 많은 물성치 data들이 필요하다. BDK가 가지고 있는 이들 물성 data는 화학종이름, index, 분자의 고유치(분자량,  $T_c$  등) 및 몇 가지형태의 물성을 계산하는 수식들과 수식들이

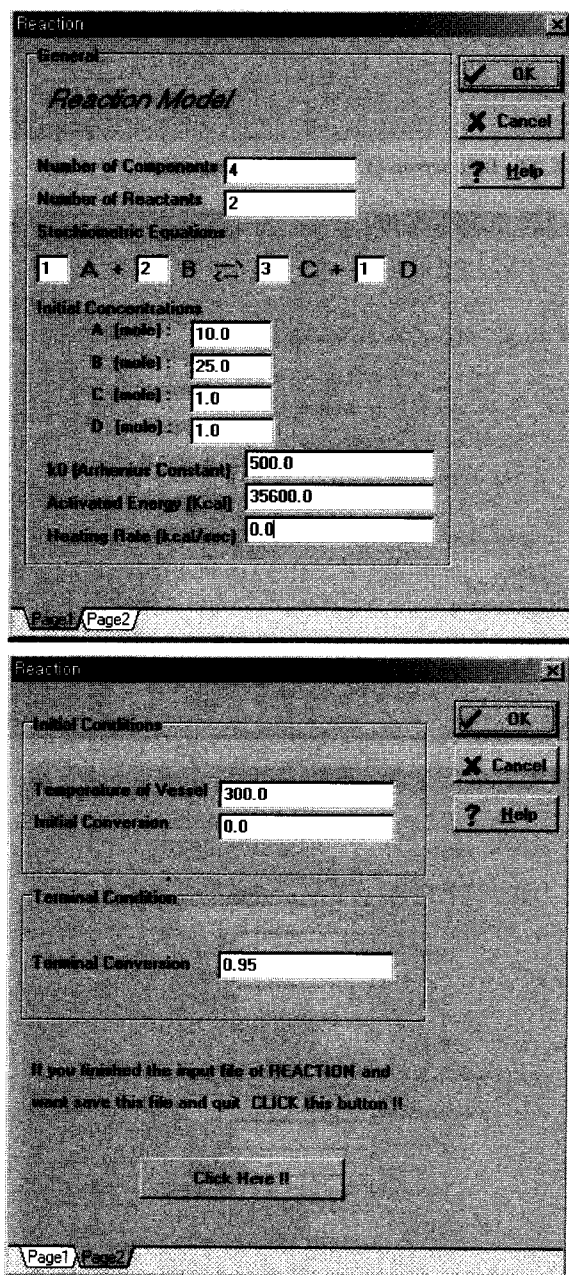


Fig. 8. An example dialogue for reaction model.

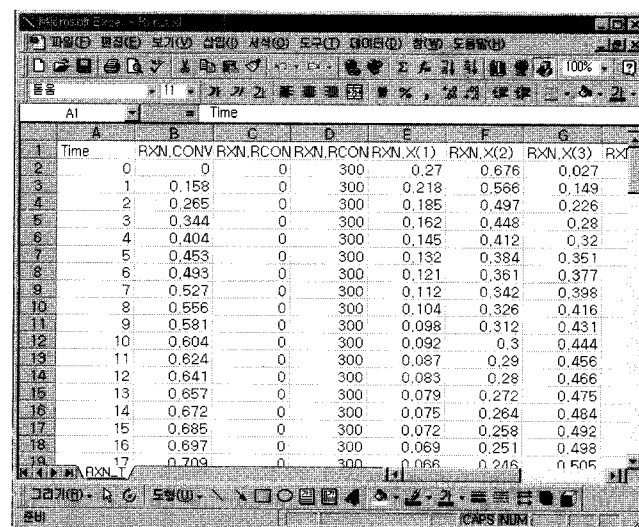


Fig. 9. The result of reaction model.

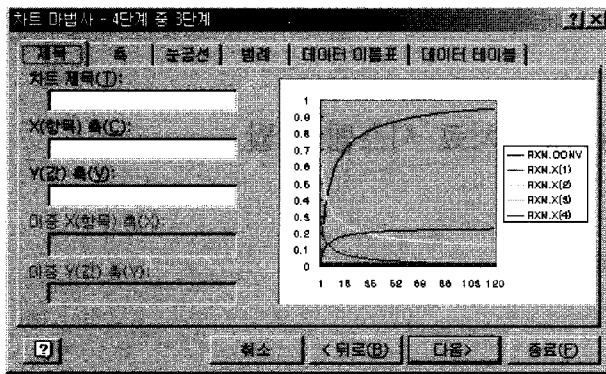


Fig. 10. The graphic output : reaction conversion and composition of components.

사용하는 parameter들로 구성되어 있다. 우선 화학종의 명칭(IUPAC name)과 그 화학종을 나타내는 index(약 6,000여종)가 가장 외부에서 접속가능한 data로 주어진다. 여기에 화학종의 고유치는 모두 그 명칭이든 index든 바로 연결되어 있는 고정치 data로 배열되어 있다. 본 연구에서 필요로 하는 물성치는 15가지로써 Heat of Vaporization, Heat Capacity, Thermal Conductivity Viscosity 등의 계산치이다. 이들 물성치는 온도 압력 등의 함수이기 때문에 고정된 parameter들과 온도, 압력 등의 함수 형태로 존재한다. 이들을 나타내는 수식은 약 10여가지 형태가 있으며 그들은 다음과 같다.

$$Y=A+BT+CT^2+DT^3+ET^4 \quad [100],$$

$$Y=\exp(A+B/T+(\ln T+DT^6)) \quad [101],$$

$$Y=AT^B/(1+C/T+CT^2) \quad [102],$$

$$Y=A+B\exp(-C/T^D) \quad [103],$$

$$Y=A+B/T+C/T^3+D/T^6+E/T^9 \quad [104],$$

$$Y=A/B^{(1+(1-T/C)^D)} \quad [105],$$

$$Y=A(1-\text{Tr})^{(B+CTr+DT^2+ET^3)} \quad [106],$$

$$Y=A+B[(C/T)/\sinh(C/T)]^2+D[(E/T)/\cosh(E/T)]^2 \quad [107],$$

$$Y=A^2/t+B-2ACt^2-\frac{C^2t^3}{3}-\frac{CDt^2}{2}-\frac{D^2t^5}{5}(t-1-\text{Tr}) \quad [114]$$

$$\ln P=A+B/T+C\ln T+DT^2+E/T^2 \quad [115]$$

수식 끝에 붙어있는 번호는 database가 갖고 있는 수식의 고유 index번호이다. 가령 같은 액체의 열용량을 계산하더라도 화학종이 다르면 계산식용 수식이 달라질 수 있다. 즉 methane의 액체 열용량은 [114]식에 의해 구해지고 ethanol의 액체 열용량은 [100]식에 의해 구해진다. 각 화학종의 각종 물성치를 계산하기 위해 필요한 parameter는 A, B, C, D, E로서 모두 고유치를 갖고 있다. 즉 본 연구에 사용된 database는 화학종이름, index, 그 화학종의 고유치 외에 각종 물성치계산을 위한 parameter들과 그 물성치를 계산하기 위한 수식을 나타내는 수식 index 등을 data로 가지고 있다. 여기에 변수값인 온도(t), 압력(P) 등이 공정모사 중에 도출되는 값으로 대치되면 각 iteration마다 물성치가 계산되어진다. 회분식공정의 모사를 위한 input file은 미리 요구되어지는 물성치들에 대한 자료가 수록되어져 있고, 사용자가 모사시에 개입되는 화학종의 이름을 대화상자에 넣어주면 그 index와 고유치값들을 database에서 꺼내어 주고 미리 작성된 input file에서 어떤 물성치를 계산해야 하는지를 지시받아 수식 index와 그 수식, 화학종에 맞는 parameter A, B, C, D, E를 연결시켜 주고 모사 중의 변수값을 읽어 들어 물성치를 계산하고, 여기서 계산된 물성치는 다시 모사에 이용되는 형태로 data의 흐름이 구성된다.

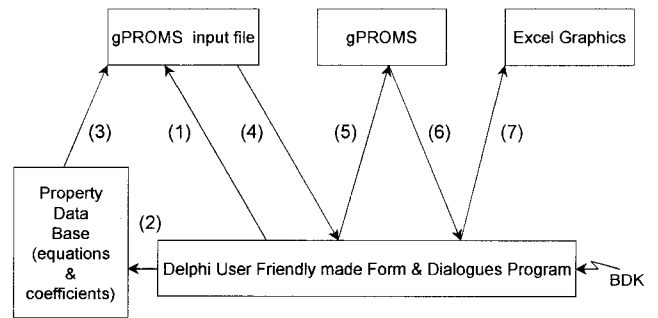


Fig. 11. The relationship of programs involved this work.

## 5. 결 과

본 연구는 회분식공정의 자동설계 및 조업모사를 위한 software를 지원하는 공정모사용 모듈의 개발에 그 목표를 두고 있으며 완전한 형태의 software package로서의 개발보다는 적용가능성과 효율성을 분석해 보는데 있다. 그래서 회분식공정의 범주를 모두 수용하여 작업하지는 못하였으나 다수의 회분공정을 대상으로 하나의 유기적 형태로서의 모사모델들을 완성하였다. 이렇게 완성된 회분공정의 유기적 집합체로는 'charge union of models'와 'reaction union of models'를 완성하였으며 이는 gPROMS를 사용하여 모사하였다. 여기에 비전문인의 사용을 돕는 GUI를 대화박스와 menu driven form에 의해 독립된 package 형태로 만들었으며, 기존의 모체 software에서 사용하는 database를 연결해 사용되도록 하였다. 또 모사결과의 그래프처리를 위해 외부프로그램인 MS-Excel을 사용하였으며 이를 위해 gPROMS output file의 data를 재배열하였다. 본 연구에서 개발되어진 여러 개의 독립된 구동 프로그램들의 관계와 회분공정 동적모사를 위한 작업의 순서도를 Fig. 11에 나타내었다. 본 연구의 결과로서 Fig. 11의 작업흐름과 독립된 프로그램들의 연결을 완성하게 되었고, 이 연구의 결과는 향후 보다 완성도 높은 회분식공정 동적거동모사를 위한 software package를 개발하는데에 중요한 역할을 할 것으로 기대되어진다.

## 감 사

본 연구는 한국과학재단의 96년 전반기 해외 Post-Doc. 연수지원에 의해 수행되었으며 지원에 감사드립니다.

## 참고문헌

- Stephanopoulos, G.: "BatchDesign-Kit User Manual", Version 1.0, LISPE, MIT(1995).
- Pantelides, C. C.: *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **9**, 213(1988).
- Barton, P. I.: Ph. D. Dissertation, Imperial College of Sci. Tech. & Medicine, London, United Kingdom(1992).
- Linninger A. A., Stephanopoulos, E., Ali, S. A., Han, C. and Stephanopoulos, G.: *Computer chem. Engng*, **19**, suppl., s7(1995).
- Stephanopoulos G. and Han, C.: *Computer chem. Engng*, **20**, 743 (1996).
- Han, C., Douglas, T. M. and Stephanopoulos, G.: *Computers chem. Engng*, **19**, suppl., s63(1995).
- Oh, M. and Pantelides, C. C.: *Computer chem. Engng*, **20**, 611(1996).
- Park, S. Y., Oh, M. and Moon, I.: *HWAHAK KONGHAK*, **34**, 585 (1996).