



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0036332
(43) 공개일자 2024년03월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G06F 30/27 (2020.01) B01J 19/00 (2018.01)
G06F 30/12 (2020.01) G06F 30/28 (2020.01)
G06N 3/08 (2023.01)
(52) CPC특허분류
G06F 30/27 (2020.01)
B01J 19/0053 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2022-0115020
(22) 출원일자 2022년09월13일
심사청구일자 2022년09월13일

(71) 출원인
인하대학교 산학협력단
인천광역시 미추홀구 인하로 100(용현동, 인하대학교)
(72) 발명자
황성원
인천광역시 연수구 아카데미로312번길 177, 104동 2002호(송도동, 힐스테이트 레이크 송도)
델라렐메
인천광역시 미추홀구 재념이길123번길 31-15, 103호(학익동)
(74) 대리인
특허법인태백

전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 인공지능 알고리즘을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 시스템 및 그 방법

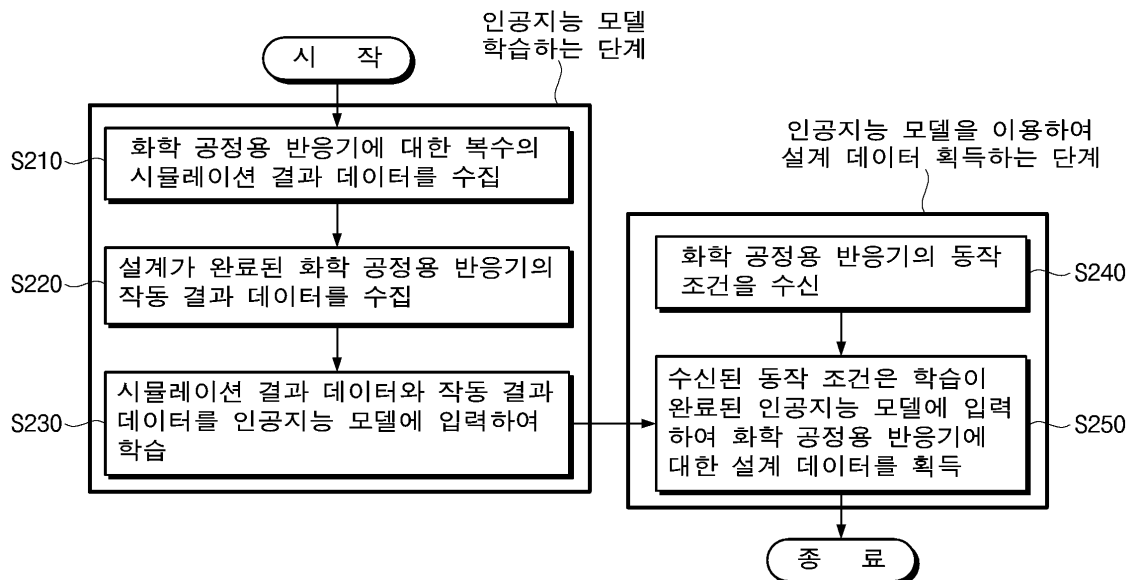
(57) 요약

본 발명은 인공지능 알고리즘을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 시스템 및 그 방법에 관한 것이다.

본 발명에 따르면, 인공지능 알고리즘을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 시스템은 전산유체역학(computational fluid dynamics, CFD) 프로그램을 이용하여 화학 공정용 반응기에 대한 복수의 시뮬레이션 결과 데이터를 수집하

(뒷면에 계속)

대표도 - 도2



는 제1 데이터 수집부, 설계가 완료된 화학 공정용 반응기의 작동 결과 데이터를 수집하는 제2 데이터 수집부, 유전 알고리즘을 이용하여 상기 시뮬레이션 결과 데이터와 작동 결과 데이터로부터 하이퍼파라미터를 추출하는 하이퍼파라미터 추출부, 상기 추출된 하이퍼파라미터를 이용하여 유전 알고리즘을 목적 함수로 하는 인공지능 모델을 구축하는 모델 구축부, 사용자로부터 설계하고자 하는 화학 공정용 반응기의 동작 조건을 입력받는 입력부, 그리고 상기 입력된 동작 조건을 기 구축된 인공지능 모델에 입력하여 화학 공정용 반응기에 대한 설계 데이터를 획득하는 제어부를 포함한다.

(52) CPC특허분류

G06F 30/12 (2020.01)

G06F 30/28 (2020.01)

G06N 3/08 (2023.01)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1415177443
과제번호	P0008475
부처명	산업통상자원부
과제관리(전문)기관명	한국산업기술진흥원
연구사업명	산업혁신인재성장지원(R&D)
연구과제명	스마트디지털엔지니어링전문인력양성
기 여 율	1/1
과제수행기관명	서울대학교산학협력단
연구기간	2021.03.01 ~ 2022.02.28

명세서

청구범위

청구항 1

인공지능 알고리즘을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 시스템에 있어서,

전산유체역학(computational fluid dynamics, CFD) 프로그램을 이용하여 화학 공정용 반응기에 대한 복수의 시뮬레이션 결과 데이터를 수집하는 제1 데이터 수집부,

설계가 완료된 화학 공정용 반응기의 작동 결과 데이터를 수집하는 제2 데이터 수집부,

유전 알고리즘을 이용하여 상기 시뮬레이션 결과 데이터와 작동 결과 데이터로부터 하이퍼파라미터를 추출하는 하이퍼파라미터 추출부,

상기 추출된 하이퍼파라미터를 이용하여 유전 알고리즘을 목적 함수로 하는 인공지능 모델을 구축하는 모델 구축부,

사용자로부터 설계하고자 하는 화학 공정용 반응기의 동작 조건을 입력받는 입력부, 그리고

상기 입력된 동작 조건을 기 구축된 인공지능 모델에 입력하여 화학 공정용 반응기에 대한 설계 데이터를 획득하는 제어부를 포함하는 화학 공정용 반응기 설계 시스템.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 제1 데이터 수집부는,

원자로 구성 변수에 대한 설계 범위를 설정하고, CAD 소프트웨어를 통해 설정된 설계 범위 내에 포함되며 동일한 용량을 갖는 복수의 반응기를 설계한 다음, 전산유체역학(CFD) 프로그램을 통해 설계된 복수의 반응기에 대한 각각의 시뮬레이션 결과 데이터를 획득하는 화학 공정용 반응기 설계 시스템.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 전산유체역학(CFD) 프로그램은,

질량 보존, 운동량 보존, 에너지 보존 및 반응 역학에 대한 조건을 만족하는 시뮬레이션 결과 데이터를 출력하는 화학 공정용 반응기 설계 시스템.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 하이퍼파라미터 추출부는,

상기 시뮬레이션 결과 데이터로부터 관 및 쉘 직경, 배플 수, 튜브 수, 배플 간격, 피치 간격, 튜브 길이 및 냉각재 온도 중에서 적어도 하나의 구성 변수를 추출하고,

상기 작동 결과 데이터로부터 제품 수율, 원자로 장비 비용, 압력 강하 및 온도 조절 효율 중에서 적어도 하나의 결정 변수를 추출하고,

상기 추출된 구성 변수 및 결정 변수에 대한 상관관계를 분석하여 하이퍼파라미터를 추출하는 화학 공정용 반응기 설계 시스템.

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 하이퍼파라미터는,

은닉층의 수, 은닉층 당 뉴런의 수, 학습률, 활성화 함수, 손실 함수, 가중치 및 편향 도출을 위한 기법 및 에폭 수로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상인 것을 특징으로 하는 화학 공정용 반응기 설계 시스템.

청구항 6

화학 공정용 반응기 설계 시스템을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 방법에 있어서,

전산유체역학(computational fluid dynamics, CFD) 프로그램을 이용하여 화학 공정용 반응기에 대한 복수의 시뮬레이션 결과 데이터를 수집하는 단계,

설계가 완료된 화학 공정용 반응기의 작동 결과 데이터를 수집하는 단계,

유전 알고리즘을 이용하여 상기 시뮬레이션 결과 데이터와 작동 결과 데이터로부터 하이퍼파라미터를 추출하는 단계,

상기 추출된 하이퍼파라미터를 이용하여 유전 알고리즘을 목적 함수로 하는 인공지능 모델을 구축하는 단계,

사용자로부터 설계하고자 하는 화학 공정용 반응기의 동작 조건을 입력받는 단계, 그리고

상기 입력된 동작 조건을 기 구축된 인공지능 모델에 입력하여 화학 공정용 반응기에 대한 설계 데이터를 획득하는 단계를 포함하는 화학 공정용 반응기 설계 방법.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 시뮬레이션 결과 데이터를 수집하는 단계는,

원자로 구성 변수에 대한 설계 범위를 설정하고, CAD 소프트웨어를 통해 설정된 설계 범위 내에 포함되며 동일한 용량을 갖는 복수의 반응기를 설계한 다음, 전산유체역학(CFD) 프로그램을 통해 설계된 복수의 반응기에 대한 각각의 시뮬레이션 결과 데이터를 획득하는 화학 공정용 반응기 설계 방법.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 전산유체역학(CFD) 프로그램은,

질량 보존, 운동량 보존, 에너지 보존 및 반응 역학에 대한 조건을 만족하는 시뮬레이션 결과 데이터를 출력하는 화학 공정용 반응기 설계 방법.

청구항 9

제6항에 있어서,

상기 하이퍼파라미터를 추출하는 단계는,

상기 시뮬레이션 결과 데이터로부터 관 및 셸 직경, 배플 수, 튜브 수, 배플 간격, 피치 간격, 튜브 길이 및 냉각재 온도 중에서 적어도 하나의 구성 변수를 추출하고,

상기 작동 결과 데이터로부터 제품 수율, 원자로 장비 비용, 압력 강하 및 온도 조절 효율 중에서 적어도 하나의 결정 변수를 추출하고,

상기 추출된 구성 변수 및 결정 변수에 대한 상관관계를 분석하여 하이퍼파라미터를 추출하는 화학 공정용 반응기 설계 방법.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 하이퍼파라미터는,

은닉층의 수, 은닉층 당 뉴런의 수, 학습률, 활성화 함수, 손실 함수, 가중치 및 편향 도출을 위한 기법 및 에

폭 수로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상인 것을 특징으로 하는 화학 공정용 반응기 설계 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 인공지능 알고리즘을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 시스템 및 그 방법에 관한 것으로서, 더욱 상세하게 설명하면 전산유체역학(computational fluid dynamics, CFD) 및 인공지능 알고리즘을 이용하여 화학 공정용 반응기에 대한 설계 데이터를 획득하는 화학 공정용 반응기 설계 시스템 및 그 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 원자로 설계는 산업 발전소를 실현하고 최적화하는 데 필수적인 공학에서 중요한 활동이다. 성공적인 원자로 설계는 프로세스 개발, 실험실 규모의 실험 설계, 운동 상관 관계 도출, 유체 역학 연구, 수학적 모델링 및 파일럿 산업 발전소의 설계 및 운영의 여러 단계에서 수집된 기술적 지식의 조합에 달려 있다.

[0003] 여러 반응 시스템에 대한 실험 설계 및 운동 데이터에 대한 도출에 있어서 많은 연구가 이루어지고 있다.

[0004] 이러한 유형의 원자로는 견고하고 잘 확립된 기술 개념, 단순한 스케일 업, 균일하게 분산된 촉매, 제품과 촉매의 완전 분리를 제공하여 추가 분리 및 여과 시스템에 대한 필요성을 제거할 수 있으며, 촉매 손실 및 제품 오염을 최소화할 수 있다.

[0005] 또한, 최근 계산 및 기술 자원의 발전을 고려하여, 화학 반응기의 설계 및 스케일 업을 위해 수학적 모델과 시뮬레이션 도구가 채택되고 있다.

[0006] 온도 제어를 해결하기 위하여 종래에는 프로세스 시뮬레이션 소프트웨어, 열교환기 설계 소프트웨어 및 전산 유체 역학 모델링을 결합한 컴퓨터 지원 스케일업 접근방식을 사용하였다.

[0007] 또한, 튜브 직경을 입력 변수로 하고 원자로 비용과 온도를 결정 변수로 하여 관형 반응기의 스케일업하기 위해 컴퓨터 시뮬레이션을 사용하였다. 이는 화학 반응기의 규모를 늘리기 위한 단순한 접근방법이다.

[0008] 원자로 구성 매개변수와 공정 변수 사이의 복잡한 상호작용에도 불구하고, 이전의 연구에서는 일정한 관 길이를 가정하고 배플의 수, 셸 직경, 피치, 배플 간격, 가변 관 길이와 같은 다른 변수들을 무시함으로써 관형 원자로를 스케일업하기 위한 관 지름의 영향만을 고려하였다.

[0009] 비교적 높은 작동 압력 및 가변 작동 온도에 대처하기 위한 셸, 튜브 및 튜브 배열과 같은 기계적 설계의 고려 사항에 대한 문제점이 있었고, 반응기의 운전 및 촉매의 수명에 영향을 미치는 극도로 발열된 반응 공정에서 열적 안정성 문제가 발생하였다. 또한, 원하는 제품의 선택성 및 수율을 개선하기 위해 축 및 반지름 온도 프로파일의 적절한 제어가 필요로 하였다.

[0010] 본 발명의 배경이 되는 기술은 대한민국 국내등록특허 제10-1957061호 (2010.05.13. 공고)에 개시되어 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0011] 이와 같이 본 발명에 따르면, 전산유체역학(CFD) 및 인공지능 알고리즘을 이용하여 화학 공정용 반응기에 대한 설계 데이터를 획득하는 화학 공정용 반응기 설계 방법을 제공하기 위한 것이다.

과제의 해결 수단

[0012] 이러한 기술적 과제를 이루기 위한 본 발명의 실시예에 따르면 인공지능 알고리즘을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 시스템은 전산유체역학(computational fluid dynamics, CFD) 프로그램을 이용하여 화학 공정용 반응기에 대한 복수의 시뮬레이션 결과 데이터를 수집하는 제1 데이터 수집부, 설계가 완료된 화학 공정용 반응기의 작동 결과 데이터를 수집하는 제2 데이터 수집부, 유전 알고리즘을 이용하여 상기 시뮬레이션 결과 데이터와 작동 결과 데이터로부터 하이퍼파라미터를 추출하는 하이퍼파라미터 추출부, 상기 추출된 하이퍼파라미터를 이용하여 유전 알고리즘을 목적 함수로 하는 인공지능 모델을 구축하는 모델 구축부, 사용자로부터 설계하고자 하는 화학 공정용 반응기의 동작 조건을 입력받는 입력부, 그리고 상기 입력된 동작 조건을 기 구축된 인공지능 모델에 입력하여 화학 공정용 반응기에 대한 설계 데이터를 획득하는 제어부를 포함한다. 상기 제1 데이터 수집부는, 원

자로 구성 변수에 대한 설계 범위를 설정하고, CAD 소프트웨어를 통해 설정된 설계 범위 내에 포함되며 동일한 용량을 갖는 복수의 반응기를 설계한 다음, 전산유체역학(CFD) 프로그램을 통해 설계된 복수의 반응기에 대한 각각의 시뮬레이션 결과 데이터를 획득할 수 있다.

[0013] 상기 전산유체역학(CFD) 프로그램은, 질량 보존, 운동량 보존, 에너지 보존 및 반응 역학에 대한 조건을 만족하는 시뮬레이션 결과 데이터를 출력할 수 있다.

[0014] 상기 하이퍼파라미터 추출부는, 상기 시뮬레이션 결과 데이터로부터 관 및 셀 직경, 배플 수, 튜브 수, 배플 간격, 피치 간격, 튜브 길이 및 냉각재 온도 중에서 적어도 하나의 구성 변수를 추출하고, 상기 작동 결과 데이터로부터 제품 수율, 원자로 장비 비용, 압력 강하 및 온도 조절 효율 중에서 적어도 하나의 결정 변수를 추출하고, 상기 추출된 구성 변수 및 결정 변수에 대한 상관관계를 분석하여 하이퍼파라미터를 추출할 수 있다.

[0015] 상기 하이퍼파라미터는, 은닉층의 수, 은닉층 당 뉴런의 수, 학습률, 활성화 함수, 손실 함수, 가중치 및 편향 도출을 위한 기법 및 에폭 수로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상인 것을 특징으로 할 수 있다.

[0016] 또한, 본 발명에 따른 화학 공정용 반응기 설계 시스템을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 방법은 전산유체역학(computational fluid dynamics, CFD) 프로그램을 이용하여 화학 공정용 반응기에 대한 복수의 시뮬레이션 결과 데이터를 수집하는 단계, 설계가 완료된 화학 공정용 반응기의 작동 결과 데이터를 수집하는 단계, 유전 알고리즘을 이용하여 상기 시뮬레이션 결과 데이터와 작동 결과 데이터로부터 하이퍼파라미터를 추출하는 단계, 상기 추출된 하이퍼파라미터를 이용하여 유전 알고리즘을 목적 함수로 하는 인공지능 모델을 구축하는 단계, 사용자로부터 설계하고자 하는 화학 공정용 반응기의 동작 조건을 입력받는 단계, 그리고 상기 입력된 동작 조건을 기 구축된 인공지능 모델에 입력하여 화학 공정용 반응기에 대한 설계 데이터를 획득하는 단계를 포함한다.

발명의 효과

[0017] 이와 같이 본 발명에 따르면, 전산유체역학(CFD) 및 인공지능 알고리즘을 이용하여 실험 단계에서와 실질적 설치 단계 사이에서 유사한 프로세스 장비 성능을 유지할 수 있으며, 기하학적 매개변수와 원자로 성능 지수 사이의 복잡한 상호 작용을 고려한 설계 데이터를 획득할 수 있어 원자로의 설계 및 스케일 업에 최적화를 이룰 수 있다.

[0018] 또한, 본 발명에 따르면 정확성과 적합성을 결정하는 다양한 하이퍼파라미터를 짧은 시간에 최적의 조합을 도출할 수 있는 장점이 있고, 이를 특히 화학 공정에 적용하는 경우, 짧은 시간에 화학 공정을 모델링하고, 최적값을 도출할 수 있는 효과가 있다.

도면의 간단한 설명

[0019] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 화학 공정용 반응기 설계 시스템을 설명하기 위한 구성도이다.

도 2는 본 발명의 실시예에 따른 화학 공정용 반응기 설계 시스템을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 방법을 설명하기 위한 순서도이다.

도 3은 도 2에 도시된 S230단계에서 구축된 인공지능 모델을 설명하기 위한 도면이다.

도 4는 전산유체역학(CFD) 프로그램 및 인공지능 모델에 대한 검증 결과를 나타내는 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0020] 이하 첨부된 도면을 참조하여 본 발명에 따른 바람직한 실시예를 상세히 설명하기로 한다. 이 과정에서 도면에 도시된 선들의 두께나 구성요소의 크기 등은 설명의 명료성과 편의상 과장되게 도시되어 있을 수 있다.

[0021] 또한 후술되는 용어들은 본 발명에서의 기능을 고려하여 정의된 용어들로서, 이는 사용자, 운용자의 의도 또는 관례에 따라 달라질 수 있다. 그러므로 이러한 용어들에 대한 정의는 본 명세서 전반에 걸친 내용을 토대로 내려져야 할 것이다.

[0022] 이하에서는 도 1을 이용하여 본 발명의 실시예에 따른 화학 공정용 반응기 설계 시스템에 대하여 더욱 상세하게 설명한다.

[0023] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 화학 공정용 반응기 설계 시스템을 설명하기 위한 구성도이다.

[0024] 도 1에 도시된 바와 같이, 본 발명의 실시예에 따른 화학 공정용 반응기 설계 시스템(100)은 제1 데이터 수집부

(110), 제2 데이터 수집부(120), 하이퍼파라미터 추출부(130), 모델 구축부(140), 입력부(150) 및 제어부(160)를 포함한다.

- [0025] 먼저, 제1 데이터 수집부(110)는 전산유체역학(computational fluid dynamics, CFD) 프로그램을 통해 화학 공정용 반응기에 대한 시뮬레이션 결과 데이터를 수집한다.
- [0026] 제2 데이터 수집부(120)는 설계가 완료된 화학 공정용 반응기의 작동 결과 데이터를 수집한다.
- [0027] 하이퍼파라미터 추출부(130)는 시뮬레이션 결과 데이터와 작동 결과 데이터 사이의 오차를 분석하고, 분석된 오차를 이용하여 정확도를 높일 수 있는 하이퍼파라미터 조합을 추출한다.
- [0028] 모델 구축부(140)는 추출된 하이퍼파라미터를 이용하여 인공지능 모델을 구축한다. 그 다음, 모델 구축부(140)는 기 구축된 인공지능 모델에 수집된 시뮬레이션 결과 데이터와 작동 결과 데이터를 입력하여 학습시킨다.
- [0029] 입력부(150)는 사용자로부터 설계하고자 하는 화학 공정용 반응기의 동작 조건을 입력받는다.
- [0030] 마지막으로 제어부(160)는 입력된 동작 조건을 학습이 완료된 인공지능 모델에 입력하여 화학 공정용 반응기에 대한 설계 데이터를 획득한다.
- [0031] 이하에서는 도 2 및 도 3을 이용하여 본 발명의 실시예에 따른 화학 공정용 반응기 설계 시스템을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 방법에 대해 더욱 상세하게 설명한다.
- [0032] 도 2는 본 발명의 실시예에 따른 화학 공정용 반응기 설계 시스템을 이용한 화학 공정용 반응기 설계 방법을 설명하기 위한 순서도이다.
- [0033] 도 2에 도시된 바와 같이, 본 발명의 실시예에 따른 화학 공정용 반응기 설계 방법은 인공지능 모델을 학습시키는 단계와 학습이 완료된 인공지능 모델을 통해 화학 공정용 반응기의 설계 데이터를 획득하는 단계를 포함한다.
- [0034] 먼저 인공지능 모델을 학습시키는 단계를 살펴보면, 화학 공정용 반응기 설계 시스템(100)은 전산유체역학(CFD) 프로그램을 이용하여 화학 공정용 반응기에 대한 복수의 시뮬레이션 결과 데이터를 수집한다(S210).
- [0035] 이에 앞서 화학 공정용 반응기 설계 시스템(100)은 화학 공정용 반응기에 대한 시뮬레이션을 수행하기 위해 물리 기반의 전산유체역학(CFD) 프로그램을 통해 화학 공정용 반응기를 설계한다.
- [0036] 부연하자면, 화학 공정용 반응기 설계 시스템(100)은 원자로관 및 셀 측에 대한 질량 보존을 위하여 전산유체역학(CFD) 프로그램에 하기의 수학식 1을 적용한다.

수학식 1

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = \dot{R}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0,$$

- [0037]
- [0038] 여기서, ρ 는 유체 밀도(kg/m^3)를 나타내고, $\mathbf{v}$ 는 속도 벡터(m/s)를 나타내며, $\dot{R}$ 은 화학 반응 원항($\text{kg/m}^3/\text{s}$)을 나타낸다.
- [0039] 화학 공정용 반응기 설계 시스템(100)은 원자로내의 운동량 보존을 위하여 전산유체역학(CFD) 프로그램에 하기의 수학식 2를 적용한다.

수학식 2

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}_t) + \dot{R} \mathbf{u} + \vec{S},$$

[0040]

[0041] 여기서, p 는 압력(Pa)을 나타내고, $\vec{g}$ 는 중력(m/s^2)에 의한 가속도를 나타내며, $\dot{R}$ 은 화학 반응 원항 ($kg/m^3/s$)을 나타내고, $\vec{u}$ 는 점성 계수(Pas)를 나타내고, $\vec{s}$ 는 다공성 저항을 나타내며, τ 및 τ_t 는 점성 및 난류 응력을 나타낸다.

[0042] 또한, 화학 공정용 반응기 설계 시스템(100)은 반응 과정의 에너지 보존을 위하여 전산유체역학(CFD) 프로그램에 하기의 수학식 3을 적용한다.

수학식 3

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} h) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} k) - \frac{\partial p}{\partial t} = \rho \vec{u} \vec{g} + \nabla \cdot (\alpha_{eff} \nabla h) + \dot{Q}_{rxn},$$

[0044] 여기서, h 는 특정 엔탈피, k 는 난류 운동 에너지, Q_{rxn} 은 화학 반응에 의한 열원, α_{eff} 는 층류 및 난류 확산에 의한 유효 열확산 계수를 나타낸다.

[0045] 마지막으로 화학 공정용 반응기 설계 시스템(100)은 질량의 농도를 위하여 전산유체역학(CFD) 프로그램에 하기의 수학식 4를 적용한다.

수학식 4

$$\varepsilon_p \frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \varepsilon_p \nabla \cdot (\rho \vec{u} Y_i) - \varepsilon_p \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) = (1 - \varepsilon_p) \rho_{cat} \dot{R}_i$$

[0047] 여기서, Y 는 각 종의 질량 농도를 나타내고, D 는 확산율을 나타내고, $\dot{R}_i$ 은 화학 반응으로 인한 종의 소비 또는 생성 속도를 나타내며, ρ_{cat} 는 Zn-Cr-Fe에 대한 촉매 밀도를 나타낸다.

[0048] 상기와 같이 전산유체역학(CFD) 프로그램에 대한 수학적 설계가 완료되면, 제1 데이터 수집부(110)는 CAD 소프트웨어를 통해 설계된 데이터를 전산유체역학(CFD) 프로그램에 입력하여 복수의 시뮬레이션 결과 데이터를 수집한다.

[0049] 이를 다시 설명하면, 사용자는 하기의 표 1와 같이 원자로 설계에 대한 경계값을 설정한다.

표 1

Reactor configuration variables	Upper and lower limits
Tube diameter	0.01 m – 0.025 m
Reactor length	0.9 m – 4 m
Number of tubes	77 – 203
Number of baffles	10 – 24
Baffle spacing	0.01135 – 0.028375
Shell diameter	0.173 m – 0.37 m
Pitch spacing	0.011 m – 0.028 m
Coolant temperature	590 K – 680 K

[0050]

- [0051] 그러면, CAD 소프트웨어는 설정된 경계값을 기준으로 복수의 설계된 데이터를 생성하고, 생성된 설계 데이터는 전산유체역학(CFD) 프로그램에 입력되며, 전산유체역학(CFD) 프로그램으로 하여금 생성된 설계 데이터에 대응하는 시뮬레이션 결과 데이터를 출력한다.
- [0052] 여기서, 시뮬레이션 결과 데이터는 반응기 길이, 튜브의 수, 배플의 수, 셀의 직경, 배플 간격으로 구성될 수 있다.
- [0053] S210단계가 완료된 상태에서, 제2 데이터 수집부(120)는 설계가 완료된 화학 공정용 반응기의 작동 결과 데이터를 수집한다(S220).
- [0054] 여기서 작동 결과 데이터는 제품 수율, 원자로 장비 비용, 압력 강하 및 온도 조절 효율로 구성될 수 있다.
- [0055] 그 다음, 모델 구축부(140)는 S210단계에서 수집된 시뮬레이션 결과 데이터와 S220단계에서 수집된 작동 결과 데이터를 인공지능 모델에 입력하여 학습시킨다(S230).
- [0056] 먼저, 하이퍼파라미터 추출부(130)는 시뮬레이션 결과 데이터로부터 관 및 셀 직경, 배플 수, 튜브 수, 배플 간격, 피치 간격, 튜브 길이 및 냉각재 온도 중에서 적어도 하나의 구성 변수를 추출하고, 작동 결과 데이터로부터 제품 수율, 원자로 장비 비용, 압력 강하 및 온도 조절 효율 중에서 적어도 하나의 결정 변수를 추출한다.
- [0057] 그 다음, 하이퍼파라미터 추출부(130)는 추출된 구성 변수 및 결정 변수를 유전 알고리즘에 입력하여 원자로 설계 및 스케일 업에 최적화할 수 있는 하이퍼파라미터를 추출한다.
- [0058] 여기서, 하이퍼파라미터는 은닉층의 수, 은닉층 당 뉴런의 수, 학습률, 활성화 함수, 손실 함수, 가중치 및 편향 도출을 위한 기법 및 에폭 수로 구성될 수 있다.
- [0059] 도 3은 도 2에 도시된 S230단계에서 구축된 인공지능 모델을 설명하기 위한 도면이다.
- [0060] 도 3에 도시된 바와 같이, 모델 구축부(140)는 추출된 하이퍼파라미터를 이용하여 인공지능 모델을 구축한다. 그 다음, 모델 구축부(140)는 시뮬레이션 결과 데이터와 작동 결과 데이터를 인공지능 모델에 입력하여 학습시킨다.
- [0061] S210단계 내지 S230단계를 이용하여 인공지능 모델에 대한 학습이 완료되면, 입력부(150)는 사용자로부터 동작 조건을 입력받는다(S240).
- [0062] 여기서 동작 조건은 장비 비용, 수율, 압력 강하 및 온도 제어에 따른 조건으로 구성될 수 있다.
- [0063] 제어부(160)는 입력된 동작 조건은 학습이 완료된 인공지능 모델에 입력하여 화학 공정용 반응기에 대한 설계 데이터를 획득한다(S250).
- [0064] 부연하자면, 제어부(160)는 입력된 동작 조건을 인공지능 모델에 입력한다. 그러면, 인공지능 모델은 입력된 동작 조건에 대응하는 설계 데이터를 출력한다. 여기서 설계 데이터는 관 및 셀 직경, 배플 수, 튜브 수, 배플 간격, 피치 간격, 튜브 길이 및 냉각재 온도 중에서 적어도 하나를 포함한다.
- [0065] 이하에서는 도 4를 이용하여 전산유체역학(CFD) 프로그램 및 인공지능 모델의 검증 결과에 대해 설명한다.
- [0066] 도 4는 전산유체역학(CFD) 프로그램 및 인공지능 모델에 대한 검증 결과를 나타내는 그래프이다.
- [0067] 도 4의 a는 공간 시간에 대한 중의 물 분율 및 부분 압력을 나타내고, 도 4의 b는 단연 온도 프로필을 나타낸다.
- [0068] 633K의 반응 온도에서 전산유체역학(CFD) 프로그램 및 인공지능 모델을 통해 획득한 결과와 실험 연구에서 얻은 결과를 비교하면, 물 분율과 부분 압력 측면에서 전산유체역학(CFD) 프로그램 및 인공지능 모델과 실험 데이터 간은 밀접한 일치성을 보여준다. 물 분율 및 부분압력에 대해서는 1.2%(98.8% 정확도)의 불일치를, 온도에 대해서는 2.2%(97.8% 정확도)의 다소 높은 불일치를 얻었다. 이러한 최소 오류는 실험 연구에서 작동하는 자연 현상과 이 과정의 화학적 역학을 나타내는 것과 관련하여 전산유체역학(CFD) 프로그램 및 인공지능 모델의 정확성을 보여준다.
- [0069] 이와 같이 본 발명에 따르면, 전산유체역학(CFD) 및 인공지능 알고리즘을 이용하여 실험 단계에서와 실질적 설치 단계 사이에서 유사한 프로세스 장비 성능을 유지할 수 있으며, 기하학적 매개변수와 원자로 성능 지수 사이의 복잡한 상호 작용을 고려한 설계 데이터를 획득할 수 있어 원자로의 설계 및 스케일 업에 최적화를 이룰 수

있다.

[0070] 또한, 본 발명에 따르면 정확성과 적합성을 결정하는 다양한 하이퍼파라미터를 짧은 시간에 최적의 조합을 도출할 수 있는 장점이 있고, 이를 특히 화학 공정에 적용하는 경우, 짧은 시간에 화학 공정을 모델링하고, 최적값을 도출할 수 있는 효과가 있다.

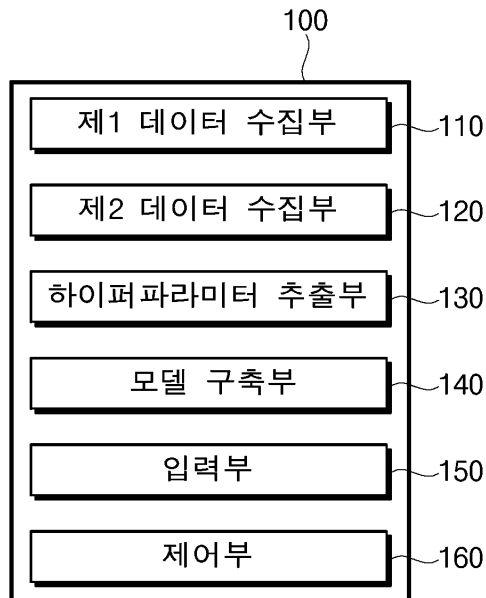
[0072] 본 발명은 도면에 도시된 실시예를 참고로 하여 설명되었으나 이는 예시적인 것에 불과하며, 당해 기술이 속하는 분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 아래의 특허청구범위의 기술적 사상에 의하여 정해져야 할 것이다.

부호의 설명

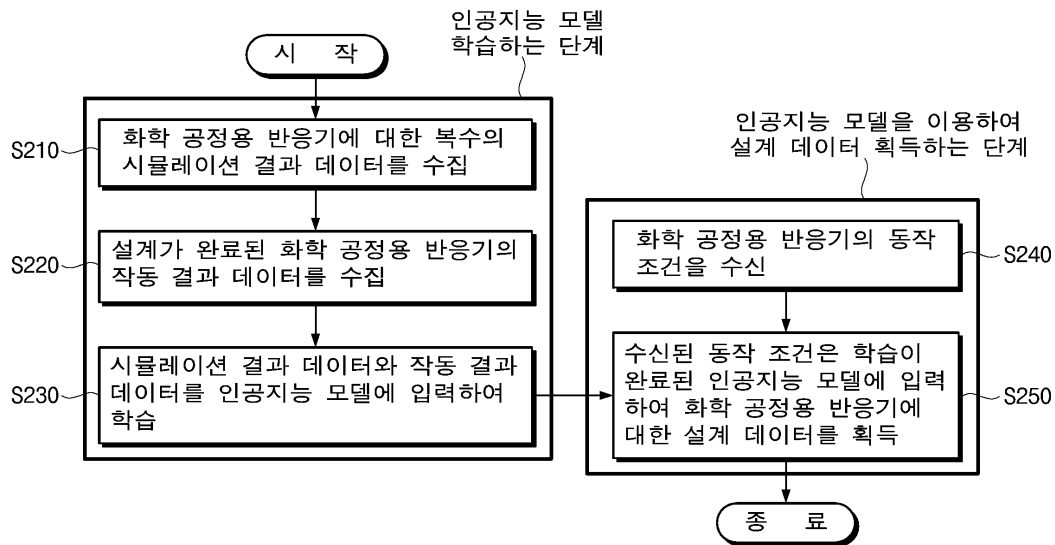
[0073] 100 : 반응기 설계 시스템
110 : 제1 데이터 수집부
120 : 제2 데이터 수집부
130 : 하이퍼파라미터 추출부
140 : 모델 구축부
150 : 입력부
160 : 제어부

도면

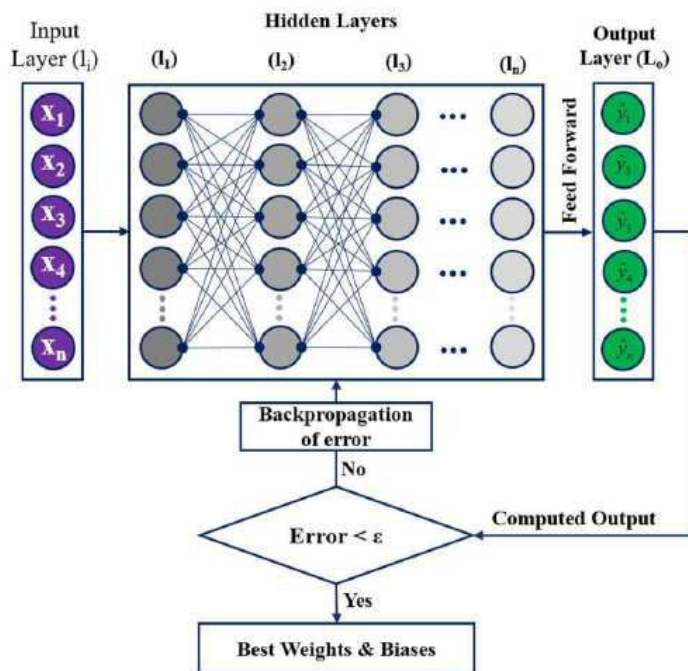
도면1



도면2



도면3



도면4

