

Scale-up Design of a Reactor via Active Learning based on Bayesian Optimization

박성언, 김민준, 나종걸, 안진주, 한종훈[†]

서울대학교

(chhan@snu.ac.kr[†])

화학 공정에서 반응기의 설계는 많은 부분 경험적인 측면에 의존해왔다. 따라서 실험실 규모의 반응기에서 파일럿 규모로, 대량 생산 규모로 Scale-up 하는 과정에서, 이전 규모에서의 반응성을 재현하지 못해 소모되는 시간과 비용이 상당하다. 많은 경우, 이는 작은 규모의 유동(hydrodynamics)을 큰 규모에서 재현하지 못하기 때문이다. 본 연구에서는 실험실 규모 반응기에서의 중요한 유동적 수치-기체 체류시간-를 파일럿 규모에서도 같게 유지할 수 있도록 설계하는 방법론을 제시한다. 먼저 전산유체역학(CFD)적으로 몇 가지의 설계 변수 조합들의 기체 체류 시간을 해석하고, 그 데이터들을 이용해 모델을 만든 후 그 모델을 바탕으로 원하는 값에 가장 가까운 것으로 기대되는 설계 변수 조합을 고를 수 있다. 이 과정에서 베이지안 최적화 기반의 능동 학습을 이용하여, 시간 비용이 많이 드는 CFD 해석의 탐색 횟수를 최대한 줄이는 동시에 전역 최적해를 찾을 수 있었다.