

Superstructure based techno-economic optimization of CO₂ direct hydrogenation process: A MINLP Bayesian Optimization이희원, 이용[†]

KIST

(ulee@kist.re.kr[†])

CO₂ 직접 반응을 통해 메탄올을 생산하는 공정은 지구온난화 문제로 대두되는 CO₂를 줄일 수 있는 효과와 다양한 자원으로 활용하기 쉬운 메탄올을 생산할 수 있는 장점을 갖고 있다. 실제 메탄올 생산 공정을 만들기 위해 경제성 측면에서 공정 최적화를 진행했다. 기존 공정에서 반응기 내 등은 공정을 주로 사용하고 있는데 메탄올 합성 반응에 존재하는 발열 반응과 흡열 반응을 모두 충족할 수 있도록 반응기를 여러 단으로 나눠 반응 온도를 바꾸는 공정에 대해 고안했다. 또한 반응기 사이에 액상 생성물을 분리해서 다음 반응기에서의 반응성을 높이고자 했다. 이러한 여러 공정 대안을 superstructure optimization을 통해 최적화했고, 최적화를 하는데 있어 bayesian optimization 방법을 사용했다. 이는 이전에 사용했던 genetic algorithm보다 적은 iteration으로 최적점을 찾을 수 있었다. Bayesian optimization을 통해 찾은 최적점과 기존 공정을 경제적으로 비교하여 최적점에서 어떤 요소들로 인해 경제적으로 나아졌는지 파악하고 실제 공정으로 개발 할 수 있는 가능성까지 발표하고자 한다.