

## 결정론적인 방법과 확률론적인 방법을 통합한 LDPE 오토클레이브 반응기에서의 분자량 분포 예측 모델

최솔지, 이용규, 조지영, 정혜인, 이종민<sup>†</sup>  
서울대학교  
(jongmin@snu.ac.kr<sup>†</sup>)

저밀도폴리에틸렌(LDPE)은 일상생활에서 많이 사용되는 플라스틱 중 하나로써 전 세계 330억 달러의 시장규모에 달한다. 고분자의 물성은 고분자의 평균 분자량 또는 분자량 분포 형태에 의존하기 때문에 원하는 물성을 얻기 위해서는 정확한 분자량 분포를 예측할 수 있는 모델이 필수적이다. 분자량 분포를 예측하는 모델은 크게 결정론적인 방법(ex. 모멘트 법)과 확률론적인 방법(ex. 키네틱 몬테카를로)으로 나누어진다. 결정론적인 방법은 계산시간이 빠르다는 장점이 있으나 평균값 밖에 계산하지 못하기 때문에 구체적인 분포에 대한 정보를 얻기는 힘든 반면 키네틱 몬테카를로 기법은 분포의 구체적인 형태를 예측할 수 있는 반면 계산시간이 오래 걸린다는 단점이 있다.

본 연구에서는 결정론적인 방법과 확률론적인 방법을 통합하여 LDPE 오토클레이브 반응기에서의 분자량 분포 예측 모델을 개발하였다. 키네틱 몬테카를로 기법을 적용하는 경우 시간에 따른 dynamic한 결과에 초점이 맞추어져 있어 연속공정의 연속 반응기의 정상상태 유무를 보장하기 어렵다는 단점이 있기 때문에 이를 결정론적인 방법과 통합함으로써 보완하였다. 그리고 정상상태 가정에 기반하여 고분자 화 반응의 확률이 독립적임을 이용하여 키네틱 몬테카를로의 계산시간을 효과적으로 줄일 수 있는 기법을 개발하여 적용시켰다.