

## 인공 지능과 Computational Fluid Dynamics (CFD) 모델링을 사용한 반응기의 설계 및 최적화

문지영, 황성원<sup>†</sup>  
인하대학교

(sungwon.hwang@inha.ac.kr<sup>†</sup>)

본 연구에서는 기존 부타디엔 합성 반응에 널리 이용되었던 다관식 반응기보다 효율이 높은 반응기를 설계하였다. 이를 위해서 다양한 종류의 촉매 및 운전 조건 하에서 실험을 진행한 결과를 토대로 수학적 모델을 개발하였다. 그러나 반응기 개발 과정에서 반응 메커니즘이 복잡하고 모델의 정확도가 높아질수록 반응기의 최적화 조건을 구현하기가 어렵다. 따라서 Artificial Neural Network (ANN)을 사용한 surrogate model을 개발하고, 최적화 알고리즘과 연결하여 반응의 전환율과 선택도를 높이기 위한 반응 조건을 탐색하였다. 마지막으로 최적화된 운전 조건 하에서 새로운 형태의 반응기에 대한 CFD 모델링을 진행하여 반응기 수율, 온도 및 조성 분포도를 조사하였다. 그 결과 설계와 운전 조건이 최적화 된 반응기를 구현하였다.

### Acknowledgement:

이 성과는 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임 (No. 60948-01)