

공정 합성을 위한 지능 시스템에 대한 Review

한중훈

지능자동화 연구센터, 포항공과대학교 화학공학과

Intelligent Systems for Process Synthesis: A Review

Chonghun Han

Automation Research Center, Dept. of Chemical Engineering, POSTECH

1. 서론

공정 합성은 Nishida등(1981)이 정의한 것처럼 공정 시스템 내에서 단위 공정들의 최적 연결, 각 단위 공정들의 최적 형태 및 조업 조건들을 결정하는 행위라고 할 수 있다. 따라서 공정 합성은 설계하고자 하는 공정의 performance가 미리 주어졌을 때 그것을 최적으로 만족시키는 공정 시스템의 구조 및 각 단위 공정의 performance를 combinatorial개의 후보 공정들로부터 찾아 내는 문제라고 할 수 있으며 이는 지난 약 25년간 수많은 review 논문들과 500개 이상의 학술 논문들의 주 연구 과제가 되어 왔다 (Han등, 1995).

본 논문에서는 이러한 공정 합성 문제에 대해 주로 지능 시스템쪽으로부터의 접근 방법을 기술하고자 한다. 공정 합성 분야에 있어서의 지능 시스템의 현재 발전 상황 및 그 응용에 대하여 살펴 보고 다양한 지식 표현들과 여러 문제 해결 기술들을 통합하는 기술, 혁신적인 공정 합성 방법 및 다양한 공정 합성 문제들에 대한 지능 시스템의 응용 예들을 고찰해 본다.

2. 지능 시스템의 정의 및 구성

지능 시스템이라 하면 사람에 의하여 비정형적 (informal)으로 수행되어 온 절차들을 수행하는 소프트웨어 시스템이라고 할 수 있다. 이는 예전의 전문가 시스템이나 fuzzy system, 또는 신경망 시스템보다 진일보한 시스템으로서 다양한 지식 표현들을 보유하고 폭 넓은 문제 해결 방식들을 취하여 사용자의 참여를 최소화함으로써 문제 정의에서부터 문제 해결까지 사용자가 신속 정확하고도 창의적으로 문제를 풀 수 있도록 도와 주는 시스템이다. 따라서 과거의 단편적이고 얕은 지식 기반을 이용하던 경향에서 벗어나 여러 관련 기술들 (지식 표현, 탐색, 데이터 베이스, 수치 해법, 최적화)을 통합하는 것이 현대의 지능 시스템의 두드러진 특징이라고 볼 수 있다.

이러한 지능 시스템은 현재 치열한 국제 경쟁에서 살아 남기 위해서 필수적인 지식의 획득, 축적, 배양, 배포, 대량 이전에 필수적인 기술이다. Stephanopoulos와 Han (1995a)은 지능 시스템의 다음과 같은 역할에 관해 보고한 바 있다. (1) 다양한 지식 표현 방식들을 제공함으로써 많은 지식들의 보존 및 개선을 가능하게 한다. (2) 습득 및 검정을 마친 지식들을 복사 배포함으로써 특정 기술의 대규모 이전 및 새로운 아이디어의 도출을 장려 유도할 수 있다. (3) 기술의 사용 기반을 늘림으로써 그 지식이 가졌던 불합리성, 모순성들을 발견할 기회가 높아지고 그 결과 지식을 보다 정확하고 확장 응용이 가능한 지식으로 만들 수 있게 한다. (4)

다양한 형태의 지식들을 집중화 한다. 현재 이러한 지능 시스템 기술은 전산망 기술 및 자동 제어 기술 등과 더불어 급격히 발전하고 있으며 공정 합성, 모니터링, 진단, 제어, CIM 등의 광범위한 분야에서 널리 이용되고 있다.

지능 시스템은 일반적으로 다음의 세 가지 요소들로 구성된다. (1) 지식 표현 방식 (process flowsheet, ternary composition diagram and residue curve map, grand composite curve, grid diagram 등), (2) 문제 해결 방법 (generate-and-test, means-end analysis, problem decomposition, search methods, constraint satisfaction and conflict resolution 등), (3) 사용자 인터페이스 (Britt 등 (1989)이 제시한 7 가지 원칙들).

지능 시스템 개발을 위한 환경으로는 shell로서 Gensym사의 G2, NuronData사의 Nexpert 등, 최근 개발된 객체 지향적 데이터베이스들, C++, SmallTalk, CLOS 등의 객체 지향적 언어들, Windows, Motif 등의 사용자 인터페이스 환경 등이 많이 이용되고 있다.

3. 지능 시스템의 개발 과정

지능 시스템은 예전의 전문가 시스템에 비해 그 규모의 방대함이나 사용 지식들의 다양성으로 인해 기존에 사용되어 온 경험적인 ad hoc 방식으로 설계 할 경우 그 복잡성으로 인하여 시스템의 개발뿐만 아니라 개발된 시스템의 유지 및 보수도 극히 힘들어 진다. 따라서 대형 지능 시스템의 설계를 위해서는 소프트웨어 공학적인 접근이 필수적이다. 최근 급격한 진보를 이룬 객체 지향적 시스템 해석 및 설계 기술에 기반하여 다음과 같은 체계적인 절차를 제시하며 각 단계에서 하는 일에 대하여 살펴 본다.

1. 문제 이해 및 사용자 요구 해석. 가장 중요한 단계로서 개발 목적 및 요구 조건들을 충분히 이해하여 문제를 정확히 정의하고 개발 기간을 설정하며 개발 전략을 정립한다.
2. 관련 지식 획득. 인터뷰, 문헌 조사들을 통하여 필요한 정보들을 입수하고 해석하여 문제 해결에 필요한 지식들을 획득한다.
3. 문제에 대한 object 모델링. 문제 내에 존재하는 object들을 파악하고 그들의 상관 관계를 모델링하여 시스템의 전체적인 구조를 설계한다. GE에서 Rumbaugh 등에 의하여 개발되었고 현재 가장 널리 채택되고 있는 OMT (Object Modeling Technique)을 중심으로 대형이고 복잡한 지능 시스템을 효과적으로 모델링하는 기술들이 많이 이용되고 있다.
4. 논리 추론 과정 및 계산 절차 모델링. 얻어진 지식으로부터 rule 및 task 등의 요소들을 밝혀 내고 추론 과정 및 conflict resolution 전략을 세운다.
5. 검증. 일단 완성된 지능 시스템을 세 가지 기준 (Han 등, 1995)하에서 검증한다.

4. 지능 시스템의 공정 합성에의 응용 분야들

지능 시스템의 공정 개발에의 응용은 다음과 같은 분야들이 있으며 지면 제한으로 인해 본 논문에서는 자세한 내용을 생략하며 관심 있는 독자께서는 Han 등 (1995)을 참조하시기 바란다.

- 반응 시스템, 분리 시스템 등의 공정 부 시스템들을 모두 고려한 공정 전체의 합성

- 생산물에 대한 성질이 주어 질 때 그를 생산하는 최적 반응 순서를 발견하려는 반응 pathway 합성
- 반응 mechanism과 kinetics가 주어질 때 반응기들의 최적 배열, 각 반응기의 형태와 크기 등을 결정하려고 하는 반응기 망 합성
- 다성분 혼합물을 원하는 제품들로 분리하는 분리 시스템 합성
- 회분식 공정 합성
- 환경 오염 방지를 위한 공정 합성 (원천 삭감, 공정 시스템 합성, 경제성 평가, 환경 오염 방지를 위한 전문가 시스템 개발)
- 용매, 장치, 촉매 등의 최적 선택을 위한 지능 시스템 개발 (공정 장치 선택, 공정 물질 선택, 물성치 예측 모델 선택)
- 데이터 베이스, 설계 언어 등을 포함한 통합 설계 환경 개발
- 혁신적인 공정 합성 방법 개발 (innovating through search, cooperating expert systems and concurrent engineering, learning, combining symbolic processing and algorithmic optimization, combining expert systems and neural networks)

5. 결론

공정 합성을 위한 지능 시스템의 개발을 위해 본 논문에서는 지능 시스템의 이론 및 실제적인 응용에 대하여 살펴 보았다. 현재 치열한 국제 경쟁 시대에서 승리하기 위해서는 지식이 최선의 무기이며 (Stephanopoulos and Han, 1995a) 지능 시스템은 그러한 지식을 획득, 축적, 배양, 배포, 대량 이전할 수 있는 수단으로서 각광을 받고 있다. 현재까지 학계, 연구소 및 산업계에서 개발 응용된 지능 시스템들은 다음과 같은 특성들을 공유하고 있으며 이들로부터 앞으로의 지능 시스템의 개발 및 응용 방향등을 유추해 볼 수 있으리라 생각한다. 보다 자세한 정보를 원하는 독자들께서는 Stephanopoulos와 Han (1995a, 1995b, 1995c), Han등 (1995)을 참조하시기 바란다.

1. 지능 시스템은 일반적인 문제보다는 특정 문제에 대하여 그 가치가 있다.
2. 실제로 이용될 수 있는 지능 시스템을 개발하기 위해서는 다른 연관 기술들 - 수치 해법, 고차원 데이터 베이스, 그래픽 사용자 인터페이스 등- 을 효과적으로 통합하는 기술이 필수적이며 많은 연구가 이루어 지고 있다.
3. 대부분의 지능 시스템이 하부 단계에서는 자세한 수치 계산을, 상부 단계에서는 논리적인 해석이나 추론등을 수행하는 계층적 구조를 갖고 있다.
4. 설계 및 공정 개발에 대한 이해 및 모델링 기술 진보에 힘입어 현재 설계 과정중 많은 작업들의 자동화가 진행되고 있으며 가까운 미래에 소수의 고도로 훈련된 설계자들이 공정 전체를 며칠 내에 설계하는 것을 보게 될 것이다.
5. 통합적이며 손쉽게 확장할 수 있는 전산 설계 및 개발 소프트웨어들의 개발은 막대한 시간, 노력, 재정적 지원이 요구되므로 체계적이고 달성 가능한 계획 수립이 필수적이다. 하지만 이러한 시스템들의 파급 효과 또한 막대하므로 지능 시스템에 대한 아이디어와 방법들에 대한 연구가 지속적으로 행해져야 한다.

6. 참고문헌

1. Britt, H. J., J. A. Smith and J. S. Warek (1989). Computer-aided process synthesis and analysis environment. in *Foundations of Computer-Aided Process Design* (J. J. Siirola, I. E. Grossmann and G. Stephanopoulos, Eds.), CACHE-Elsevier, Amsterdam, pp. 281-307.
2. Han, C., G. Stephanopoulos, Y. A. Liu (1995). Knowledge-based approaches in process synthesis. *Preprints Intelligent Systems in Process Engineering*, July 9-14, Snowmass Village, Colorado.
3. Nishida, N., G. Stephanopoulos and A. W. Westerberg (1981). A review of process synthesis. *AIChE J.*, 27, 321-51.
4. Stephanopoulos, G., C. Han (1995a). Intelligent systems in process engineering: A review. *Proc. 5th Int. Symp. Process Systems Engineering* (E. S. Yoon, Ed.), Vol. 1, Kyongju, Korea, pp. 1319-36.
5. Stephanopoulos, G., C. Han (1995b). *Intelligent Systems in Process Engineering*, Adv. Chem. Eng., Vol. 21, Academic Press, San Diego, CA.
6. Stephanopoulos, G., C. Han (1995c). *Intelligent Systems in Process Engineering*, Adv. Chem. Eng., Vol. 22, Academic Press, San Diego, CA.