

기계학습법을 이용한 비수계 CO<sub>2</sub> 흡수공정 최적화이윤<sup>†</sup>, 이희원<sup>1</sup>, 이현주, 안병성, 이상득, 김훈식<sup>2</sup>KIST; <sup>1</sup>UST; <sup>2</sup>경희대학교(ulee@kist.re.kr<sup>†</sup>)

기존의 화학공정 최적화는 열역학, 열 및 물질전달, 화학 반응식 등 제 1법칙에 기반한 복잡한 수리 모델링을 통하여 이루어져 왔다. 이러한 수리모델링에 기반한 최적화는 제한된 영역에서 전역해를 찾을 수 있다는 장점이 있지만 그 계산이 복잡하고 모델의 강인성이 낮을 뿐만 아니라 모델식에 정의된 많은 매개변수들을 물리 화학적 물성 실험을 통하여 도출 해야 하는 문제점이 있었다.

본 연구에서는 복잡한 수리모델링 대신 가우시안 프로세스 회귀분석법을 이용한 비수계 이산화탄소 포집공정 최적화 방법론을 제시하였다. 본 연구에서 제시하는 방법론은 Input-Output 관계를 이용하여 가우시안 프로세스 회귀 분석법에 근거한 기저함수 구축한 후 간단한 Sampling을 통하여 대안모델을 도출한다. 따라서 최적 실험 영역 및 최적운전조건은 대안모델의 최적화를 통하여 비교적 간단하고 Systematic 하게 도출 할 수 있었다. 본 연구에서 제시되는 방법론을 MEA를 사용한 이산화탄소 포집 모델 및 1nm<sup>3</sup>/hr 이산화탄소 포집 공정 파일럿 운전 실험에 적용한 결과 MEA 공정에서는 genetic algorithm 과 동일한 해를 도출하는데 약 5%의 계산 시간을 필요로 하였고 비수계 흡수 공정 파일럿 운전 실험에서는 최적 재생에너지에너지를 가지는 운전조건을 도출하는데 약 20 번의 반복 계산이 필요하였다.