

최적화 기법을 이용한 T-mixer 모델의 최적 파라미터 결정

조규찬, 인상현, 김동운, 문 일*
연세대학교
(saebyuk8@yonsei.ac.kr*)

결정화 기술은 화학 산업에서 결정성 물질의 성질과 형상을 조절하는 핵심 기술이다. 결정화를 통하여 미세 입자 제조시 원하는 크기의 입자를 제조하기 위해서는 핵생성 과정이 중요하다. 이러한 핵생성 단계를 포함하여 결정화 과정 전체를 효율적으로 제어할 수 있는 기기로써 T-mixer가 많이 사용된다. T-mixer는 양쪽관에 유입되는 용액과 비용매를 일정한 유속으로 혼합하는 원리로 미세한 결정을 제조한다. 제조한 실험데이터와 결정화 모델 모사를 비교하여 그 차이를 최소화 한다. 본 연구에서는 최적화 기법을 이용하여 T-mixer 실험 데이터를 바탕으로 T-mixer 모델식의 최적 파라미터를 결정하는 것이 목적이다. 최적화 기법은 실험 데이터에서 최소 자승법의 원리를 이용하여 실제 결정화 모델 공정에 이상적인 파라미터를 결정하는 것이다. 결국 결정화 모델의 모사를 통해 얻어진 예측치와 실제 실험치의 차를 뜻하는 예측오차들로 구성된 목적함수를 이용하여 결정화 모델의 파라미터를 추정하였다. 목적함수를 최소화 함으로써 최적 파라미터를 찾고 결정된 모델식의 모사를 통하여 실제 공정 자료를 잘 표현하는지 확인하였다. 확인 결과 실험치에 가장 근접한 파라미터를 찾아 예측치와 실험치가 거의 유사함을 알 수 있었다. 결과적으로 최적화 기법을 이용하여 실제 실험치와 가장 근접한 파라미터를 찾고 이를 바탕으로 구성된 T-mixer 결정화 모델을 구성하였다.