

폐쇄적 물질순환

- 표면 기술에서의 Modelling과 Simulation

Dr.-Ing. s. Hauser

(독일 Dresden대학)

Institute for Automation Technology, Dresden University

노 병 호

(KIMM 재료공정연구부)



- '78 인하공대 화학공학과(학사)
- '78 - '83 한국과학기술연구소 연구원
- '84 - 현재 한국기계연구원 선임연구원
- '93 - 현재 UNEP Metal Finishing Working Group회원
- '97 - 현재 한국청정기술학회 이사



이 재 도

(KIMM 시험평가부)

- '75 서울대학교 금속공학과(학사)
- '82 - '87 한국과학기술원 금속재료과(석사)
- '90 - '93 EURACA 경영경제(박사)
- '78 - 현재 한국기계연구원 책임연구원

1. 서 론

오늘날의 과학, 기술자들은 computer simulation으로 얻을 수 있는 이점들을 다양하게 이용하고 있다. 수학적 Model을 기초로 하여 제조기술상의 공정, 설비나 장치의 정적, 동적 거동 및 주요 부품의 특성을 설명하고 Simulation을 통하여 여러 가지 업무의 해결책을 찾는 데 도움을 받고 있다. 그러므로 Simulation은 세부적으로 깊숙이 공정을 이해하는데 도움이 됨으로써 장치의 도면 설계시와 가동시의 특정 업무를 대신할 수 있게 된다.

설계 단계에서 Simulation기술은 여러가지 변수를 결정판단할 때와 장치, 구조 선택시에 중요한 보조 수단이며 자동화 방안 초안작성에도 도움이 된다. 설비의 가동 및 작업시에는 Simulation결과가 공정관리와 공정수행에도 도움이 된다.

공정예견과 Simulation결과를 process에서 얻어지는 측정값들과 비교하므로써 공정에 이상 상황을 적시에 감지하고 필요한 대응조치를 취할 수 있게 된다. Simulation은 on-line에서 측정이 불가하거나 어려운 경우의 공정물량을 확인하는데도 도움을 준다. Simulation실험은 연속공정들과 함께 철저한 검토를 해야만 되는 상용하는 Model을 전제로 하는데, 이 Model설정은 일반적으로 매우 세심한 주의가 필요한 어려운 업무로서, 표면처리에서 대표적인 제조기술 공정에서는 복잡한 반응역학과 열역학적으로 수많은 미지수

의 parameter와의 상관성 때문에 특히 어려운 일이다.

저자의 견해로서, 지금까지 표면기술에서는 다른 응용분야에 비하여 simulation 에 의한 가능성이 너무 적게 이용되어 왔다. 이 기고가 이러한 결점들을 극복하는데 필요한 방안을 제시할 것으로 보며, 또한 Model 개발과 이용시의 일반적인 방법절차를 단계적으로 소개한다.

각 단계별로 Model설정을 위한 일반적인 설명을 한 후에 습식공정(Wet Chemical process)에 대한 특수절차와 방법을 기술하고, 이어서 구체적인 process bath(persulfatische Beize)로 전개하고 마지막으로 Model사용의 가능성을 예를 들면서 설명하고자 한다.

이 기고의 여러 곳에서 실험장치(test equipment)에 관하여 설명되는데, 이것은 연방교육과학 기술부의 국책지원과제로 Dresden공과대학 자동화 기술 연구소에서 실현시킨 습식처리장치로 (45~70 l) 연속장치 및 process조 및 수세조와 자동이송 system을 포함하고 있으며, 그 사용 가능성은 다른 논문에서 소개되어 있다.^[1]

2. 기본 과정

다음에는 Model 설정과 개발된 Model의 사용 가능성에 대해 요약 설명한다.(그림 1)

기능 분석에서는 한 process의 기능과 구조에 관한 것으로, 기능 구조는 기능, 부분 기능과 기능 요소로 구성되며 이들은 각각 모두 부가되어야 한다.

이론적 Model 설정의 출발점은 자연과학기술 부분의 구체적 목적에 응용되는 법칙성이다.

개념화를 통해 Model 응용으로 생기는 요구조건을 고려한 실제의 상황이 이상적인 목적으로 묘사된다. 대부분의 경우 이론적인 방법으로는 모든 parameter에서 유도된 상관성을 확인한다는 것은 불가능하므로 실험적 방법으로 수행한다. 실험적 Model 설정은 이론적으로 접근하지

못하거나 어려운 공정에서 광범위한 실험으로 확인할 수 있는 기회를 주게 된다.

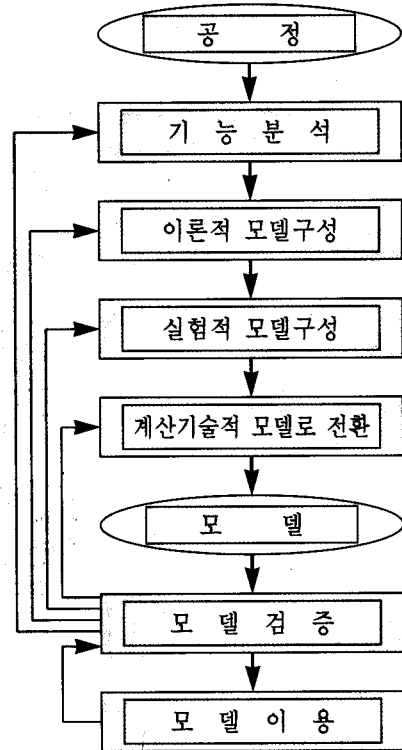


그림 1. 모델설정의 과정

이론적으로 혹은 실험적인 Model 설정을 통하여 얻어진 수학적 Model은 computer 기술상의 Model로 사용전에 반드시 이전되어야 된다. 개발된 Model의 검증을 통하여 구체적 사용목적에 의 유효성이 증명되어야 된다.

이를 위해 Simulation 실험결과는 조사된 process에 대한 다른 유사한 실험결과들과 비교 된다.

Model이 사용목적상 일정요구 조건들을 만족하지 못한다면, 즉

- Computer 기술상 실험 과정을 검토해야 하고
- 추가적인 실험으로 parameter를 확인할 필요가 있으며

- 이론적 Model 설정시의 가정이 자연과학기술법칙에 유효한지를 재검토해야 하며
- 기능분석시의 구조 설정을 고려해야 한다.

위에서 상술한 방법으로 개발된 Model이 현재까지 확립된 기초적인 지식과 다르게 사용하고자 한다면, 이 Model이 다른 수정된 요구조건에서는 만족할 것인지를 반드시 검토해야 한다.

3. 기능분석 과정

기능분석 범주에는 공정을 기초로 하는 작용 mechanism이 설명되어야 되며, process의 기능을 구성 체계화하는 것이다. 이를 위한 첫 단계로 조사 대상 system을 주변과 분리하는 것이다.

후속되는 의문제기 부문은 중요하지 않으므로 후속적인 고려사항은 생략할 필요가 없다.

다음에서는 표면처리·공정을 위한 절차들이 설명된다.

이 때의 목적은 개별 process bath를 개발하는 것으로 그림 2는 습식표면처리를 위한 일반적 장치의 개략도를 보인 것이다. 장치의 주요 부분은 제품(ware)에 맞게 주어진 기술로 통과되는 여러 다른 공정단계와 전체이송 system(투입, 배출을 포함) 및 공정흐름이 시간적으로 정지하는 것을 보장할 수 있게 하는 것이다. 이 복잡한 물류과정이 완전하게 되면, 즉 물건이 정확하게 계획된 시간동안 각각의 공정처리 욕조로 이동되고 배출된다면, 더 이상의 고려는 할 필요가 없어진다. 남은 잔여집단은 계속 구성될 수 있다. 이것은 또 N개의 서로 다른 습식공정 단계로 나눌 수 있다. 이는 모든 공정조에 공정조의 내용물질이 다음 공정조로 옮겨가는 것을 막기 위한 수세조를 연속 연결시킴으로써 공정단계들을 서로 연결시킬 수 있게 된다. 물건의 처리결과와는 무관하게 각 공정조의 성질은 다음 공정단계로 넘어간다. 개개의 공정단계는 그림 3에 나타난 폐쇄적 물질순환의 경우와 같이, 또 앞에 설명한 바와 같이 공정조의 Model 설정을 위한 시작점

이 된다. 공정조에서는 물건이송과 관련하여 수세수반입과 공정액의 반출되는 특징으로 인해, 처리욕(Bath)의 기능을 바로 유지하기 위해 필요한 화학물질의 첨가와 부분적 혹은 전체적으로 사용공정액을 배출하고 반입되는 방해물질을 제거하게 된다.

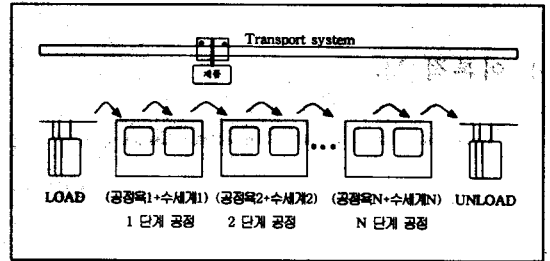


그림 2. 습식 표면처리설비의 전형적 형태

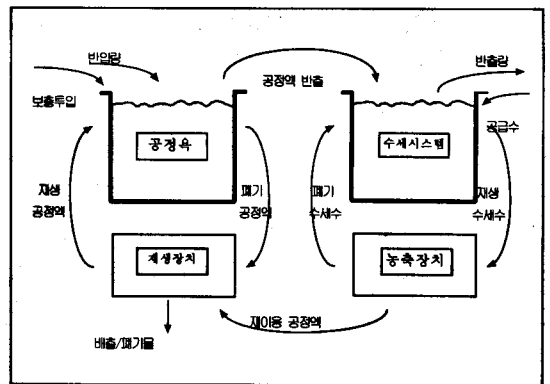


그림 3. 폐쇄적 물질순환의 공정단계

Model 설정을 위해서는 Bath 내용물질의 일부가 사용된 공정액의 재생으로 얻어지든지 배출되어 빠져나간 공정액이 사용된 수세액의 농축으로 공정조로 다시 되돌아갈 수도 있게 되든지 우선은 중요하지 않다. 공정조내에서 진행되고 있는 반응을 고려해 보면, 무엇보다도 물건 처리시의 과정에서 일어난다. 예를 들면 Bath의 내용물질의 자체분해, 그림 4에 습식처리에서의 공정조의 Model 구조에 대해 잘 설명되고 있듯이 Model의 반입량(홀러 들어옴)과 반출량(빠져나감)크기는 물질흐름으로 공정조와 주변과의 물질교환의 특징을 나타내고 있다.^[2]

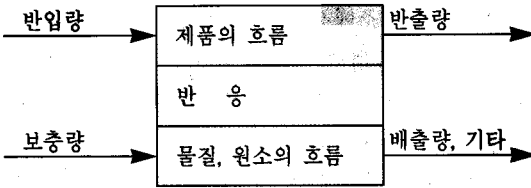


그림 4. 입증 기초가 되는 모델구조

4. 이론적 Model 설정

이론적 Model 설정의 목표는 수학적으로 작업공정에 대해, 정적거동은 대수방정식으로 동적거동은 미분방정식으로 서술하는 것이다. 개념화를 통하여 실제 주어진 조건들을 향후 Model 완성으로 일어나는, 예를 들면 정확도와 같은 요구조건들에 주의하여 이상적인 목표가 만들어진다. 개발된 Model은 추구하고자 하는 의문사항에 관하여 실제 공정의 본질적인 성질을 바르게 묘사할 수 있어야만 하고, 반면 중요하지 않는 공정성질의 문제점에 관해서는 기술되지 않아야 한다.

Model 설정의 시작은 과학기술적으로 법칙성, 여기서 질량, 에너지보존원칙 등 일반적으로 통용되는 법칙들이다. 제조기술상의 공정 Model화를 기도할 때의 기본 원칙은 사전에 설정한 평형공간에서 일어나는 평형식들을 정리 열거하는 것이다. 이 경우는 실제 공정조에서 일어나는 Balance식들이 된다.

습식 표면처리 기술에서의 전형적인 관심 사항은 물질 balance로도 충분한 것이 특징으로, 에너지 balance는 부차적인 사항이며 impulse balance는 별 의미가 없고 중요하지 않다. 그러므로 단지 물질평형(material balance)에 대해서만 취급된다.

공기주입(Air bubbling), 액의 순환(circulation), 제품 진동(stirring agitation)등과 같은 조치로 제품표면의 효과적인 처리에 필요한 유체역학적 관계를 형성하게 함과 동시에 공정액의 균일한 성

분(full mixing)이 되도록 한다. 그렇게 함으로써 공정조는 제조기술상의 기본인 이상적인 교반반응기로서 작용될 수 있게 된다. 회석이나 습식공정시 각각의 공정과 함께 Bath내용물 자체분해 등은 이 경우에서는 고려되지 않는다. 공정조들의 Model화를 위한 시작점은 모든 Bath 내용물질(성분)들의 mass balance 식으로 구성되는데 투입물질, 반응생성물, 분해/배출물, 물 등이 이에 해당되며 식(1)은 한 공정단계에서 i 번째 성분에 대한 balance식을 나타내고 있다.

$$\frac{dmi}{dt} = M_{Ei} + M_{Ri} + M_{Ai} + M_{NDi} + M_{ENi} \text{ ----- (1)}$$

여기서 용어의 정의는

공정조내의 관찰물질 mass의 시간적 변동량은 $\frac{dmi}{dt}$ (g/h)로 표시되고 제품을 공정조로 dipping 시 이전 처리단계에 함유한 Bath 내용물질이 같이 묻어나와 반입되므로 M_{Ei} 는 관찰 대상 성분의 물질 흐름이다. 이는 보통 수세조에서 일어나는 현상이며, 이 경우 i는 수세수를 의미한다. 제품과 함께 반입되는 수세수에 의한 Mass변동은 이전 수세조로 부터의 반입량과 제품투입량에 의존한다.

$$M_{EH2O} = \text{반입량} \cdot A \cdot \rho_{H2O} \text{ ----- (2)}$$

M_{EH2O} : 반입수세수에 의한 mass 변화량

반입량 : 이전 수세조로 부터의 특정 반출량(1/m²)

A : 시간당 제품처리면적(m²/h)

ρ : 물의 밀도(g/l)

공정조에 투입후에는 제품에 요구되는 고유처리가 시작된다. 반응에 기인된 mass변화나 반응에 참여한 물질 i는 물질변동을 야기시키는 반응을 통하여 선정된 물질의 특정반응속도 γ_i 및 factor λ_i 의 화학양론적 관계로 추정될 수 있다.

$$M_{Ri} = \lambda_1 \cdot A \cdot T_B \cdot \gamma_0 \text{ ----- (3)}$$

M_{Ri} : 반응 진행 시간당 공정조에서의 물질변화 (g/h)

λ_1 : 화학양론적 factor

A : 물질투입량 (m³/h)

T_B : 처리시간 (h)

γ_0 : 특정 반응속도 (g/m³/h)

제품처리후의 제품은 공정조에서 떠난다. 제품과 함께 공정액은 공정단계상 곧 이어 설치된 수세 system으로 이동되어 반출되는데, 이때 반출되는 Bath 내용물질의 양은 공정조의 물질농도에 상응하여 감소, 즉 희석되게 된다.

$$M_{Ai} = \text{반출량} \cdot A \cdot C_i \text{ ----- (4)}$$

M_{Ai} : 반출을 통한 물질변화 (g/h)

반출량 : 특정 반출량 (l/h)

A : 물질투입량 (m³/h)

C_i : 공정조내의 물질농도 (g/l)

투입 화학 물질의 첨가와 혹은 폐쇄 물질 순환계 시스템의 경우에 재생공정액으로 부터의 모든 물질변동은 첨가액 용액과 공정조의 Volume 량의 농도로부터 정해진다.

$$M_{NDi} = V_{ND} \cdot C_{NDi} \text{ ----- (5)}$$

M_{NDi} : 첨가조정을 통한 물질변동 (g/h)

V_{ND} : 첨가조정의 부피량 (l/h)

C_{NDi} : 첨가조정용액의 물질농도 (g/l)

공정액 배출로 기인되는 물질(mass)변동은 공정조의 부피와 농도로 계산된다.

$$M_{ENi} = V_{ENi} \cdot C_i \text{ ----- (6)}$$

M_{ENi} : 공정용액의 배출에 의한 물질변동 (g/h)

V_{ENi} : 배출되는 공정용액의 부피량 (l/h)

C_i : 공정조내의 물질농도 (g/l)

공정용액의 부피는 밀도와 모든 성분(Component)의 양으로 부터 얻을 수 있다.

$$V = \frac{\sum m_i}{\rho_0} \text{ ----- (7)}$$

V : 공정용액의 부피량 (l)

m_i : 구성성분의 량 (g)

ρ_0 : 공정용액의 밀도 (g/l)

상기 서술된 식들은 대체로 실험적으로 확인될 수 있는 서로 다른 변수를 포함하고 있다. 예를 들면 각 공정조와 수세조에서의 특정반출량(specific dragout)은 공정용액의 밀도와 반응속도에 관계되는 것이다.

다음에는 persulfate pickling 공정(욕)조에 대한 Model구성의 예를 소개한다.

이 공정에서는 Na₂S₂O₈의 과황산나트륨 공정액에서 제품 표면으로부터 얇은 층의 금속(Cu)을 Etching시키는 것이다. 그림 5에는 공정조 속에서의 중요한 과정을 개략적으로 나타냈다.

그 주요 성분은 1-Na₂S₂O₈, 2-Na₂SO₄, 3-CuSO₄ 그리고 4-H₂O 이다.

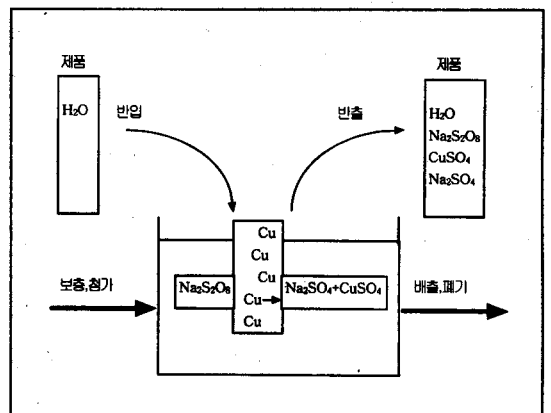


그림 5. 과황산염 에칭 공정욕의 모형

표 1. 에칭액에서의 수식구성

물질성분	물질변동	반입량	반응	반출량	첨가조정	배출량
1-Na ₂ S ₂ O ₈	M ₁ =		- I ₁ , A, T _B , γ _{Cu}	- 반출량, A, C ₁	+V _{ND} , C _{ND1}	-V _{EN} , C ₁
2-Na ₂ SO ₄	M ₂ =		- I ₂ , A, T _B , γ _{Cu}	- 반출량, A, C ₂	+V _{ND} , C _{ND2}	-V _{EN} , C ₂
3-CuSO ₄	M ₃ =		- I ₃ , A, T _B , γ _{Cu}	- 반출량, A, C ₃	+V _{ND} , C _{ND3}	-V _{EN} , C ₃
4-H ₂ O	M ₄ =	반입량, A, ρ _{H2O}		- 반출량, A, C ₄	+V _{ND} , C _{ND4}	-V _{EN} , C ₄

표 1에는 이 과황산나트륨 에칭액 공정욕조에
서의 각성분의 현상을 수식화하여 나타내었다.

표 1의 수식구성 모델은 공정욕조의 본질적이
고 실제적인 과정을 기술하고 있다. 욕조 내용물
질의 농도는 각각의 처리량과 공정용액의 부피
로부터 확인할 수 있다.

$$C_1 = \frac{mi}{V} \text{-----} (9)$$

실험적 Model의 설정

이론적 Model 설정의 결과는 연구하고자 하는
system의 구조를 서술하기 위한 식들이다(시스
템 서술형 Model). 이런 Model들은 보통 지금까
지 관찰되지 않았던 조건들에 대한 정성적이고
구체적인 결과를 제공한다. 개발된 Model의 완
전한 parameter화는 대부분 실험적 방법으로만
가능하다. 여기에 필요한 측정값들을 목적지향
실험(Active experiment) 혹은 정상 작업중에 있
는 장치설비를 관찰하고 조사한 결과로부터 얻
을 수 있다. 필요한 실험수를 줄이고 실험결과를
개선시키기 위해서는 통계적 실험계획 방법의
적용으로 가능해진다. 실험적 Model 설정의 도
움으로 이론적 Model 화로는 거의 불가능하거나
막대한 비용으로만 접근이 가능한 공정거동을
서술하는 것이 가능해진다. 또한 실험적으로 얻
어진 Process 거동에 대한 Data들은 우선 통계처
리 수단의 응용으로 적당한 수학적관계로 바꿀
수 있다. 얻어지는 함수관계는 우선 수학적 적합
성 때문에 사용되지만 일반적으로 실제의 공정

과정에서는 큰 의미가 없다. Parameter 들을 실험적으로 추정 구하는 데의 방법들은 특히 관찰 대상의 습식공정의 특수성에 의해 결정된다.

본 항에서는 이미 앞서 모델로 예를 들었던 Persulfate pickling 공정을 위한 parameter 추정
의 실험적 가능성을 설명한다. 여기에 소개 제안
되는 실험들은 다른 습식 공정에도 적용 가능한
부문들이다.

반입(drag-in, Einschleppung) 과 반출(drag-out, Ausschleppung)(유출)은 제품의 표면조도와
공정용액의 농도 관계에 의존된다. Pickling 공정
단계에서의 상대적으로 작은 물질 농도에서는
반출량을 일정한 값으로 계산할 수 있다.

일정한 표면적의 제품이 공정액중에서 반복적
으로 짧은 시간 처리후 정지수세조에서 세척되
는 경우 여기에서 Cu농도 증가를 Photometry
로 파악할 수 있고, 이로부터 물질반입량과 공정
조내의 농도를 알 경우에는 반출되는 양을 확인
할 수 있게 된다. 수차 반복시험을 통하여 얻어
지는 평균값으로 얻어진 결과를 개선시킬 수 있
게 된다. 공정액의 비중 ρ의 결정은 특수비중계
혹은 공정액의 일정량의 부피와 무게를 측정함
으로써 확인이 가능하다. 이 공정조에서 사용된
농도는 일정하다고 볼 수 있다.

작업량이 많으면 일정한 값의 반응속도를 채
택하는 것도 의미가 있다. 농도 변경이 있는 공
정조의 거동에 대한 정확한 조사를 위해서는 물
론 반응속도를 위한 Model이 개발되어야 한다.

반응속도를 Arrhenius식으로 서술을 시도해 보
았으나 persulfate pickling시에 일어나는 반응의
복잡성 때문에 실패했다. 그래서 반응속도와 실

험적인 방법으로 정해지는 크기의 값들과의 수학적 관계를 조사, 시도해 보았다. 이를 위해 첫 단계로서 모든 주요한 반응속도에 미치는 영향도와 측정기술로 계측 가능성을 확인할 필요가 있다.

공정조에서의 유체역학은 대단히 복잡하고 공정용액의 완전한 혼합, 제품 계면에서의 농도 및 이에 따른 반응속도에도 큰 영향을 주게 된다. 유체역학적 거동은 주로 공정조내에서의 제품의 운동(진동), 공기교반(air bubbling) 및 공정용액의 순환에 의해서 영향을 받게 된다. 수행한 실험에서는 공정처리속도 속에서의 주기적인 제품 진동속도는 주파수를 변화시켜 영향력의 크기 특성을 갖도록 선정되었다. 반응속도는 공정용액 중에서 처리 전후의 제품 무게를 측정함으로써 확인이 가능하다. 무게 차이 즉 여기서는 부식된 Cu량에 해당되는 값과 처리 시간으로부터 반응속도가 계산된다.

표 2에 언급된 5개의 제반요소가 반응속도 관계에서 기대되는 비선형 의존성을 서술하기 위해서는 KNN^[3]으로 불러오는 그림 7의 도표가 사용되었다. 그러한 net형 도표에서는 복잡한 비선형관계가 현실적으로 접근된다는 것이 인정되고 있는 것은 잘 알려져 있다. 그러한 Net형 도표를 실험적으로 확인하기 위해서 약 200여회의 실험을 수행하였다. 공정용액으로 작업하는 동안 농도변동을 충분히 활용하므로써 실험에 요구되는 공정액의 제조에 필요한 화학물질 투입이 감소될 수 있었다.

표 2. 반응속도에 관한 제반요소

제반요소	표시 값	측정기술 검출	범 위
에칭제농도	$\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$	화학분석	15-115 g/l
금속농도	CuSO_4	광도측정법	0-18 g/l
황산염농도	Na_2SO_4	전도도	200-260 g/l
온도	T	저항온도계	24-31 °C
유체역학	f	물질교반주파수	5-17 1/min

모든 실험은 우선 2l 실험조에서 수행되었다.

얻어진 Data로 KNN표 즉, 서로 다른 구조로 서술하였다. 그림 6은 에칭속도 측정을 위한 KNN형식의 구성모습을 나타낸 것이다.

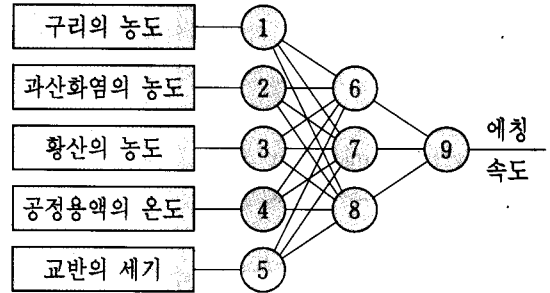


그림 6. 에칭속도 측정을 위한 KNN의 구조

본 실험의 Net형 도표는 추가적으로 수행된 실험으로 만족할만한 결과(max. 비교 오차 5%)임을 검증하였다. 그림 7은 그 한 예로서 net형 도표로 계산 형성된 육조내의 Cu농도와 PS농도와 에칭속도(R_{Cu} , $\mu\text{m}/\text{min}$)간의 상호의존성을 보여주는 결과이다.

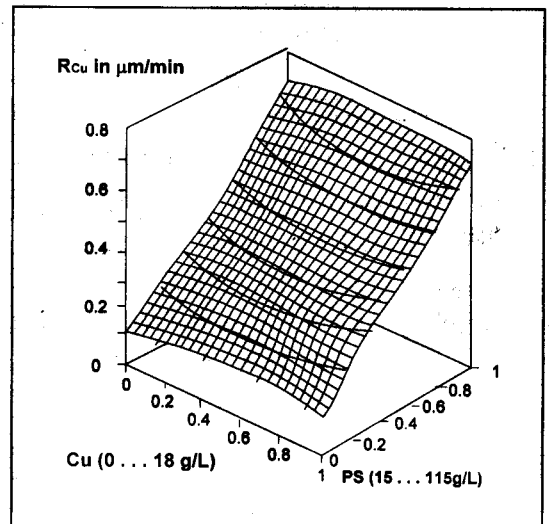


그림 7. 구리 및 과황산염 농도에 따른 에칭속도의 의존성

실험실 육조(2l, 주기적 제품 진동 교반)에서 얻어진 Model을 Test 설비(45l, 주기적 제품 진동교반 및 공정액의 강제 순환)로 전용하기

위해서는 추가적인 실험이 필요하였다.

Cu, persulfate, 황산나트륨의 농도 영향과 공정액의 온도의 영향이 pickling속도에 균형을 이뤄 일정하다는 가정을 한다면, Test 설비와 실험실 육조간에는 제품계면에서의 유체역학적인 관계가 현저히 구별된다. Test 설비에서의 추가적인 시험 결과로는 이 Test 설비에서 비례적으로(scale up 되고, hydrodynamic factor 만 서로 다름) 되어 상기 Model의 전용이 만족할만한 것임을 알았다.

5. 계산기술적 Model로의 수행

개발된 Model의 거동에 대한 설명은 두 가지의 기본적이나 서로 다른 작업과 방법으로 얻어질 수 있다. 즉 분석적 방법으로 개발된 상관성의 해결을 찾고 이로부터 system 거동 결과를 유도하고자하는 시도를 해볼 수 있다. 이 방법은 단지 간단한 system으로서만 가능하다. 부분 system의 변화는 불가능하나 매우 큰 비용으로서만 실현이 가능하다. 두번째 가능 방법으로는 Model 거동의 simulation을 실제 system으로 만드는 것으로, 아래에서는 습식표면처리를 예로 들어 유사한 Model의 개발과 simulation시의 계산기 투입이용에 관하여 설명한다. 여기에 사용된 Software(Simulator, Basic simulation-system)는 간단하고 전체적인 Model 구성 및 graphic과 Table로 결과를 나타낼 수 있도록 하였다. 그 외에도 이 습식공정의 Simulation 처리는 시간적으로 연속 공정 및 단속 공정을 똑같은 한 Model에서 요구할 수 있다.

수학적 Model을 Computer기술로 바꿔 실현시키는데는 기능 분석 범주에서 개발된 Model 구조로부터 시작한다.(그림 4 참조)

여기서 Model영역의 제품흐름은 모든 물질의 무게와 농도 변동을 기술하는 것으로 공정 단계에 기인된 제품 이동에 따른 수세액의 유입과 공정액의 유출 등이다. Model 영역내 반응은 모든 반응이온이 계산기술적으로 묘사되며, 공정조

속에서의 제품의 처리 혹은 Bath 내용물의 자체 분해에 의해 진행되는 것이다. Model 영역내 물질흐름은 물질변동, 농도변동으로 정해지는 것으로 보충첨가 혹은 공정액의 부분 혹은 완전교체, 혹은 화학물질 투입에 기인되는 것이다. 이 Model 범위에서는 물질 순환 계통 폐쇄시에 재생물질이 공정조에 연결됨에 따라 생기는 Mass-stream과 Volume-Stream도 서술할 수 있다.

계층별 모델구성은 모든 공정조 및 세척조들을 그들의 구조에 따라 획일적으로 취급할 수 있게 된다. 이렇게 개발된 Model은 추후 임의로 전체 system으로 통합될 수 있다. 이러한 방법으로 어떤 공정조를 위해 실현된 알고리즘은(예를 들면 화학적 반응 혹은 증발을 설명하는) 해당되는 parameter를 가진 다른 공정에서도 이용이 가능하다. 개발된 Model의 computer기술적 전환은 주로 사용목적에 따라 정해진다. 예를 들어 장시간동안의 거동이 관찰된다면 모든 과정을 한가지 Model 범위(그림 3)내에 유입과 유출 및 물질 흐름과 반응속도를 평균값으로 하여 연속 공정으로 묘사해도 충분하다.

반면에 과정이 짧아 단시간(매우 짧은 연속성 제품처리)에 이루어지고 각각의 처리과정 동안에 나타나는 공정액의 변동을 관찰하려면 모든 Mass흐름과 일어나는 반응을 실제적인 현상으로 묘사하여야 한다. 이러한 세부적인 과정의 관찰은 특히 종합생산방식의 습식표면처리에 알맞을 수 있다. 그러한 공정의 특징은 아주 짧은 처리기간 때문에 아주 많은 물질흐름 밀도, 아주 작은 공정액량과 시간적으로 큰 물질성분의 변동이라 할 수 있다.

제품이송과 관련된 수세수는 인입과 투입 화학 물질의 보충첨가 등이 아주 짧은 시간동안에 처리가 되어야 하는 경우에는 공정액의 항상 균일한 성분(완전 Mixing)이 전제이다. 즉 공정이 일정한 시간내에 일어나고, 이로 인한 각각의 Bath 요소들의 농도와 Mass 변동이 즉각 일어난다는 뜻이다. 공정의 아주 미세 시간적 해석이

필요할 때는 Full Mixing 가정이 더 이상 맞지 못하므로 이미 이론적 Model화 설정 범위에서 공정조내의 dynamic 과정 서술을 Full Mixing으로 확대되어야만 한다.

제품이동과 관련된 공정액의 유출과 의도적으로 사용공정액의 비율 등이 짧은 시간동안에 행해져야 될 경우는 마찬가지로 단속적 결과이다. 제품처리와 관련되어 일어나는 반응은 제품이 공정조내에 있는 동안 완료된다. 이때 반응 진행으로 항상 공정액의 성분과 반응속도는 변하게 된다. 전산기술적 전환은 이러한 시간적 변동을 반드시 고려해야 한다. Simulation을 위해 의문이 제기되는 것들은 예를 들어 공정액의 성질 안정화 혹은 공정단계의 자동화 작업(물질순환 및 폐수가 있거나 없는 경우)을 위한 control 제어에 관한 설계 초안에 관한 것으로, 위의 두가지 방법으로 Model의 계산기술적 전환은 적당치 않은 것으로 보인다. 계산기술 전환시 수행된 공정규모(물질흐름, 반응속도 등)의 정보가 연속적인 Simulation시에 과정의 dynamic상태로 잘되지 않기 때문이다. control 제어 공정의 기본성질은 그렇지만 dynamic에 의해 결정된다. 다른 한편으로는 더 정확한 과정의 Simulation에는 수많은 전산과정을 필요로 하기 때문이다. 그림 8에서도 명확하듯이, Model의 최적정확성(구체성)을 선택하는 것으로도 특정한 실상의 Simulation조사를 위해서 적용된다. 구체성이 부족한 Model은 이미 초기부터 실제과정의 많은 오류를 가지고 부정확하게 기술되기 때문에 Model을 구체화해 나가는

과정에서 불필요하게도 Model 결합으로 유도하게 된다.

다음에 설명되는 습식표면처리의 일반적인 공정단계에서의 Model의 전산기술 전환 방법을 절충한 것으로 서로 다른 긴 시간 동안에 걸쳐(시간, 일, 달) Simulation 실험으로 여러 의문제기에 대하여 적당한 정확도와 허용될만한 전산시간이 소요되도록 하였다. 이 전산기술 Model에서는 Simulation 단계가 제품흐름에 적당하고 각각의 공정속에서 처리된 제품은 차례로 유입과 관련된 물의 Mass 변동, 이에 기인된 부피변동, Bath 내용물의 농도변동과 실제 성분의 반응속도 그리고 모든 공정조에서, 전체 처리기간 동안에 반응속도가 변하지 않는다는 가정하의 진행되는 반응과 이에 따른 Mass, 부피변동 및 공정액의 유출에 따른 공정조내의 Mass, 부피변동을 계산한다. 추가로 투입화학약품의 보충, 조정 혹은 재생공정에 따라 나타나는 Mass 부피, 농도변화 혹은 재생공정액 및 공정액배출에 의한 Mass, 부피변화 등이 계산된다.

습식공정단계 및 persulfate etching을 위한 개발 Model의 전산기술 전환을 위해 Basic Simulation System 은 Simplex II를 이용하였다. 이 Simulation System은 각각 공정조 및 수세조를 복잡한 system으로 종합적으로 연결하는 것을 가능케 하고, 시간 및 확률을 적절히 표현할 수 있어 복잡한 공정의 서술도 가능케 한다.

6. Model의 검증

개발된 Model의 검증은 조사하고자 하는 작업에 대한 유효성을 증명하는 것이다. 기존 방법을 실험하기 위해서는 특별히 수행된 실험 혹은 작업중에서 얻어진 측정값을 Simulation하여 얻어진 Data와 비교한다. 정적 Model에서는 선택된 전형적 작업장에서 수행해도 충분하며 동적 Model을 위해서는 추가로 비교코자하는 Data들의 시간적 과정을 고려하여야 한다. Etching공정

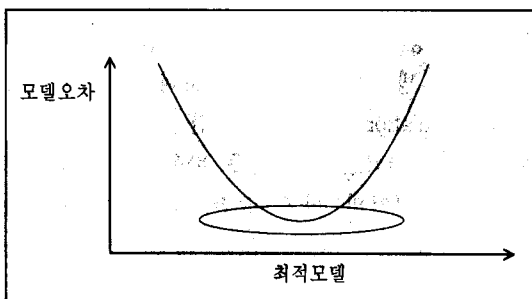


그림 8. 모델정확성에 관한 세부항목의 영향

조의 Model 검증은 Test 설비에서 작업중에 얻어진 측정결과들을 사용하여 수행되었다.

상대적으로 작은 실험시간에서도 분명한 농도 변화가 일어나도록 제품 처리시간을 높이고 공정조속에 있게 하였다. Cu농도는 photometry로 파악되고 공정액의 변색은 Cu이온에 의해 확인되었다. 이렇게 얻은 측정값은 반복적으로 분석하여 비교하였다. 공정액의 persulfate농도는 정적분석으로 결정하였다. 농도하한값 이하로 될 때는(35g/l) 공정액중의 Etching제(persulfate)를 상한값(50g/l)에 이르도록 추가 첨가하였다. 이 추가 보충공정에서 부피에 큰 변화를 주는 영향은 전혀 없었으며 Bath속 Cu농도에도 영향이 없었다. Cu농도가 20g/l에서 공정액은 완전히 교체되었다. 그림 9는 Test 설비에서의 측정값과 Simulation결과를 비교해 보인 것이다.

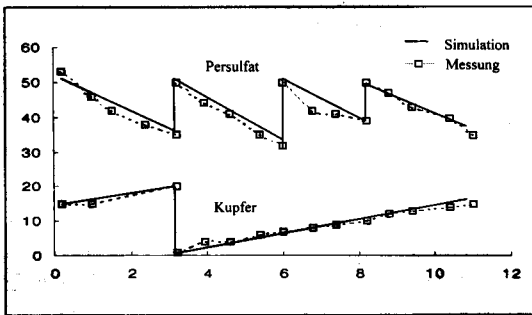


그림 9. 모델의 검증실험

측정 결과와 Simulation 결과간의 차이는 최고 농도의 5% 정도이었다. 이 차이의 원인은 Model의 불충분성과 Cu와 persulfate 농도측정의 오류 및 추가첨가시의 부정확성에 기인된다고 생각된다. Model의 정확도를 높이기 위해서는 기본 과정에 제시되었던 단계들에서 행해진 것과 같다. 이 Model을 사용할 계획인 경우에 정확도는 그래도 충분하다고 본다.

7. Model의 사용

개발 검증된 Model은 표면기술공정의 작업과

설계시에 이용될 수 있을 것이다.

설계단계에서 Simulator는 설계시의 문제점 설명 및 여러 물질의 흐름을 갖는 설비구조의 판단에도 도움을 준다. Simulation 실험으로 장시간 동안의(달, 년) 관찰을 걸쳐 조사된 공정에 대한 예를 들면 필요한 화학물질 투입과 이로 인한 환경오염 등이 추정될 수 있다.

반면 단시간 동안(시간, 일)의 Simulation은 최적 작업방법과 적절한 자동화의 해결방안을 선택하는데 도움을 준다. 어떤 Simulation 기간이 위에 언급한 과제에 의미가 있는가를 선택하는 것은 관찰된 공정의 시간적 변동에 의존한다. 이는 작업영역내에서 공정액 각개 성분의 물질흐름과 육부피에 관한 dynamic지수로 특정 지어진다. 작업중의 Simulation은 공정에서 얻어지는 Data와 Simulation 결과를 비교하여 비정상을 곧바로 인지하고 대응책을 조사 대처토록 함으로써 공정수행과 공정제어를 지원해 준다. 이 simulation은 온라인상에서 모델의 검증과 측정 불가 혹은 곤란한 것까지도 확인이 가능토록 한다.

다음의 예는 persulfate pickling에서 개발된 Model과 함께 두가지 선택된 Simulation 실험에서 얻은 결과를 보이고 있다. 72 시간동안의 장시간 작업시간에 걸쳐 공정단계를 묘사한 것으로 Simulation의 기초 자료는 다음과 같다.

- 제품표면적 : 0.33㎡, -제품통과량 : 1㎡/h, -처리시간 : 2.5 min, -반출량 : 80ml/㎡,
- 욕조부피 : 45 l, -욕온도 : 25℃, -구리농도 : 0g/l ~ 20g/l, -에칭제농도 : 35g/l ~ 50g/l,
- 최소농도의 에칭제 보충첨가량, -최대 구리농도에서의 공정액의 배출 및 교환, 첨가량
- 인위적 방법에 의한 에칭속도의 측정.

이 Simulation의 결과는 연간 pickling약품 소모량이 총 214Kg이며, 이중 반응에서 소비량은 129Kg, 공정액의 반복 교환, 배출에 쓰인 량 73Kg, 반입, 반출량이 12Kg(그림 10)이었다.

이러한 분포는 어디에서 pickling제 소모에 대한 절약 가능성이 있는가를 분명히 해 주고 있

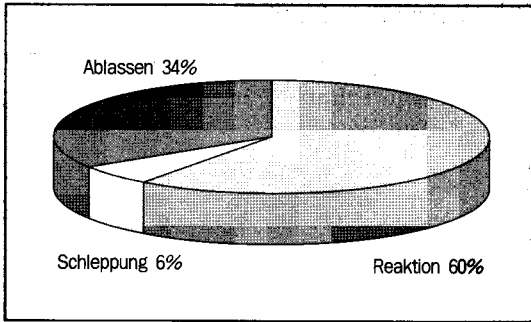


그림 10. 에칭제의 소모량 분포

으며 평균 부식제농도를 낮추고, 특히 공정액의 반복교체시에 소모량을 줄일 수 있는가를 알게 해 준다.

작업기간동안에 Cu 농도와 에칭제의 농도변화 (2차 simulation 실험과 비교)는 에칭속도 변화를 의미하며 일정한 처리기간 시에도 분균일한 재료부식을 일어나게 한다.

재료부식의 불균일성은 실제 부식속도를 줄이고, 처리시간의 적정화를 통해서 반응에 필요한 평균 Etching제 필요량도 줄일 수 있는 가능성을 내포한다. 한편 지금의 경우와 같이 평활한 형태의 제품은 반출량을 줄이는 조치가 Etching제 소모량에 아주 작은 영향만을 가진다. 기본적으로, 폐쇄적 물질순환시스템을 사용하는 공정액의 재생 등의 경우는 관계 비율이 변하게 된다. 또한 사용된 수세액이 농축되면 반출된 공정액

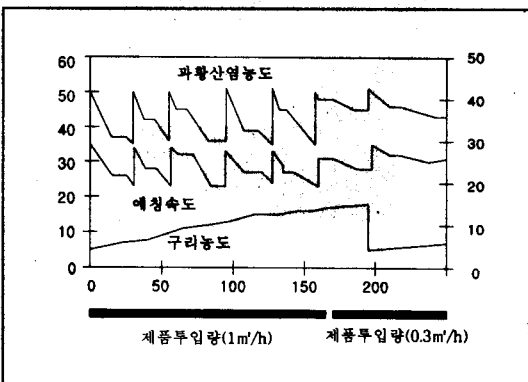


그림 11. 과황산염 에칭공정에서의 에칭속도와 농도변화 상태

으로 보충될 수도 있다.(그림 7)

Persulfate pickling 공정 단계에서의 폐쇄적 물질순환 가능성에 대해서는 추후 논문에서 더 상세히 조사될 것이다.

2번째 Simulation 실험 결과는 그림 8에 나타내었다. 관찰대상의 Pickling bath에 대하여 persulfate와 Cu의 농도 및 Etching 속도를 10일 동안(240hour) 2연속 교대작업할 때의 시간적인 진행 과정을 확인한 것이다.

제품투입량은 처음 7일 동안(168시간) 1m³/h, 그 후에는 단지 0.3m³/h 이었다.

persulfate는 농도가 35g/l 이하인 경우는 추가 첨가 되었다.

Cu 농도가 상한설정값 18g/l을 초과할 때는 공정액을 완전히 새액으로 교체하였다.

이액의 구리함량은 5g/l, 과황산염의 농도는 50g/l 이었다.

Etching속도는 실험적 Model 설정 범위에서 추정된 Model(KNN)로 계산되었으며 주어진 조건하에서 변동폭은 45%이다. persulfate농도 뿐만 아니라 Cu함량은 etching속도에 영향을 주는 것을 알 수 있다.(그림 2와 비교)

8. 결 론

Simulation은 표면처리 분야에도 여러 응용 가능성을 제공하고 있다. 작업기술·설계 특히 자동화 설비와 이들 작업에 효율적으로 지원될 수 있다. Simulation은 Model로서 실험하는 것이나 적합한 Model의 개발을 전제로 한다. 이 기고에서 Model화의 각각 단계 - 기능분석, 이론적, 실험적 Model 설정, 계산 및 전산기술로의 전환, Model 검증 등에 대해 기술하였고 Model 이용에 노력을 기울였다. Model 설정을 위한 일반적인 설명에서부터 습식표면처리 공정에서의 과정을 소개하고 persulfate Pickling 공정에 필요한 Model을 개발하였다. 표면처리 기술분야에서 Modeling과 Simulation의 집중연구는 공정이해를

심화시키는데 기여할 것으로 보인다.

참 고 문 헌

- [1] Hauser, S., Neumann, K., H., ; Stoffkreislaufschliessung Versuchsanlage zu deren Automatisierung, Metalloberflaeche, 51, 9, 670-77, 1997.
- [2] Fischwasser, K., Schwarz, R.,; Grundlage fuer Kosten-Nutzen-Rechnungen in der Galvanotechnik und Metalchemie, Metalloberflaeche, 50, 3, 190-4, 1996.
- [3] Hauser, S., Hoehnel, K. ; Stoffkreislaufschliessung On-line Messung in der Oberflaechentechnik, Metalloberflaeche, 51, 4, 270-7, 1997.