

PSE (Process Systems Engineering) 현황 및 신기술 전망

임 영 일
국립한경대학교 화학공학과

공정시스템공학 (process systems engineering)은 어떤 제품생산을 위한 여러 과정 (또는 공정)을 체계적으로 이해하려는 학문으로서, CAPE(computer-aided process engineering)라고도 알려져 있다. 주로 화학/반도체 공장 등에서의 여러 장치 및 설비들이 어우러져 있는 단위공정을 수학적으로 모델링하고 모사하여 공정을 체계적이고 논리적으로 이해하며, 공정설계, 공정최적화 및 공정제어에 기여한다.

본 기고에서는 PSE 혹은 CAPE에 대한 포괄적인 활동범위에 대하여 설명하고, PSE 신기술의 현황 및 전망을 PSE 2006 (process systems engineering) 및 ESCAPE 16 (European Symposium on Computer-Aided Process Engineering 16) 학회 (<http://events.dechema.de/pseescape06.html>)의 발표주제를 바탕으로 파악하여 본다.

1. PSE/CAPE의 포괄적 정의

CAPE (computer-aided process engineering) 또는 PSE (Process System Engineering)란, Fig. 1 (Perkins, ESCAPE 11, 2001)에서 보듯이, 현실세계를 이해하고 관찰/실험하는 chemical engineering science와 이를 바탕으로 한 모델링/공정모사/설계/합성 등을 통하여 엔지니어링 문제를 해결하는 학문으로 볼 수 있다. 하지만, 이것은 전통적인 정의로 보인다.

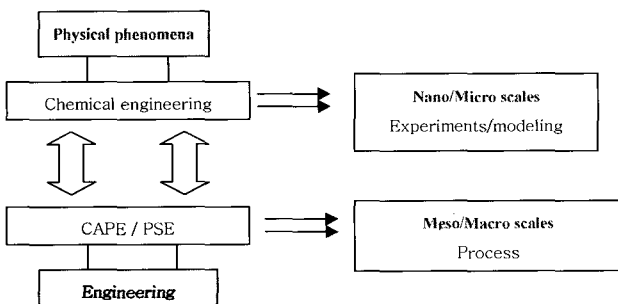


Fig. 1. The role of PSE/CAPE in engineering solutions with a traditional aspect. (Perkins, ESCAPE11, 2001).

이 분야에 대한 좀더 포괄적 정의는 “응용수학, 계산과학, 여러 공학기술의 통합적 기술 또는 방법이며, 여기에서, 응용수학은 주로 수치해석을 위한 대수학 (Linear Algebraic, NLA), ODE/DAE/PDE solution methods, Optimization 등과 수학적 모델링을 위한 것들을 말한다. 계산과학은 이러한 수학적 표현의 컴퓨터를 이용한 구현이라고 볼 수 있으며, 프로그래밍 (Fortran, C/C++), 시각화, 각종 계산소프트웨어 (CFD codes, simulators, Libraries, MatLab) 이용기술을 말한다. 여러 공학기술은 화학공학을 비롯하여, 화학, 생물공학, 기상학, 유체공학, 반도체 공학, 산업공학, 경영경제학 등 다양한 응용분야를 말한다.

결국 PSE/CAPE의 최종 결과물은 시스템 분석, 공정모사, 최적화 등 가상실험을 통한 기술개발과 database 통합에 있으며, 결국 공정의 자동화와 합리화 등에 목적을 둔다. 이러한 학문적 연관 관계를 바탕으로 재조명된 PSE/CAPE의 주요 분야는 Fig. 2에서 보여준다. 이 그림에서는 제품의 개발단계에서 공장 건설, 제품생산, 판매, 시장변화에 이르는 제품의 잉태에서 종말까지의 전반적인 단계를 독립적이지 않고, 서로 유기적으로 연결된 통합된 환경임을 보여주고 있다.

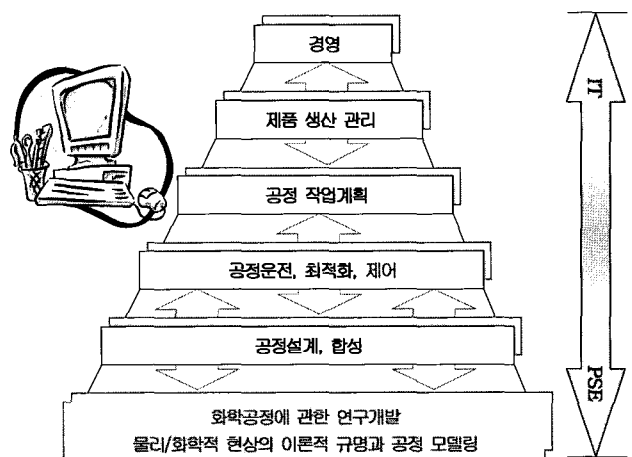


Fig. 2. New definition of CAPE/PSE in the multimode/multiscale (Lim, KOSEN conference report-40453, <http://www.kosen21.org/>, 2001).

2. PSE/CAPE의 신기술 동향

PSE는 3년마다 열리는 국제학회이며, ESCAPE (European Symposium on Computer-Aided Process Engineering)는 매년 유럽에서 열리는 국제 학술회의로서 생물/화학 공학분야를 중심으로 컴퓨터를 이용한 공정기술 및 과학분야 학회이다.

PSE/CAPE 분야에 있어서 학계에서의 중심주제는 물리적 현상세계의 올바른 이해와 좀더 정확한 현상모사, 축적된 기술을 바탕으로 한 진보된 공정 설계와 운전, 컴퓨터 계산에 있어서의 향상된 기술들, 현장과 이론과의 통합, 복잡한 시스템에서의 정보통합 등이다.

2006년 올해 열릴 PSE/ESCAPE 공동학회는 기존의 CAPE/PSE (공정모사/설계/합성/제어, 모델링, 수치해석) 분야를 좀더 섬세하게 다루고 있고, 신기술 분야로 볼 수 있는 systems biology와 supply chain management (SCM) 분야에 대하여 비교적 상세히 파악하려 하고 있다. 다음은 이 학회의 6가지 주요 주제들이다.

- ① Modelling and Numerical Methods (모델링과 수치해석법들)
 - Multiscale modelling: molecules, continua, equipment, process, site
 - Linking experiments to models
 - Hybrid rigorous / data-driven models
 - Rigorous modelling of process equipment
- ② Product and Process Design (제품 및 공정 설계)
 - Materials: polymers, ceramics, fibres, particles, thin films etc.
 - Particulate processing: formulation, grinding, agglomeration
 - Fine chemicals and pharmaceuticals
 - Integration along the lifecycle: from product design to manufacturing
 - Environmentally conscious design
- ③ Operations and Control (공정 계획, 운전과 제어)
 - Data driven diagnosis and supervision
 - Integration of control, real-time optimisation and scheduling
 - Model-based control of distributed systems: crystallisation, polymerisation, reactors, separation equipment
- ④ Biological Systems (생물공정 시스템)
 - Drug delivery systems
 - Modelling: molecular, cells, organs

- Data mining and pattern recognition
- ⑤ Infrastructure Systems
 - Utility networks
 - Energy, water and waste process systems
 - Infrastructure planning
- ⑥ Business decision support (산업 정보 공학)
 - Information and knowledge management
 - Design and operation support systems
 - Supply chain and logistics
 - Investment planning and portfolio management

다음은 상기의 6가지 분야 중에서 최근 생명공학기술의 눈부신 발전과 함께 새롭게 부상하는 Systems biology 분야에서 PSE/CAPE 연구자들이 기여해야 할 부분을 진단해 본다.

3. Systems biology and engineering (SBE)

인간게놈의 서열분석 (genomics), 기능유전자의 해독과 단백질 공학 (proteomics) 에서의 눈부신 진보는 새로운 생물분자의 개발과 생산에 대한 체계적 접근을 가능하도록 만들고 있다. 이러한 가능성은 다음 3가지 분야의 융합을 통하여 이룩할 수 있을 것이다.

- 생물정보학 (bioinformatics)
- 세포 대사/조절/신호 경로의 수학적 모델링에 기초한 체계적 생물학 (systems biology)
- 생물반응기와 분리/정제 기술 (separation/purification technologies)을 포함하는 상류/하류 공정 (upstream/downstream processes)의 설계/최적화/제어에 관한 시스템 공학 (systems engineering)

Systems biology는 생물세포내 대사, 유전자 조절과정 그리고 신호전달 체계를 수학적으로 모델링하여 세포내 또는 세포간 상호관계에 대한 동적거동을 체계적으로 해석하려는 학문이다. 이를 위하여, 세포내 모든 물질들의 구조, 기능에 관한 정보 (bioinformatics)가 필수적이며, 때로는 컴퓨터를 이용한 분자모델링 (molecular simulation)을 통하여 필요한 정보를 예측할 수 있어야 한다.

Systems engineering은 생물분자의 생산에 있어서 공학적/기술적 문제를 체계적으로 다루는 학문으로 주로 공정개발, 설계, 최적화를 수행할 수 있는 방법론/도구 (methodology and tool)의 개발과 이것들의 통합된 환경을 구축하는 것이다. Systems biology가 미시적세계에 초점이 맞춰있다면, Systems engineering는 거시적세계와 현실적/경제적 문제에 중심을 둔다. Systems biology 와 Systems engineering의

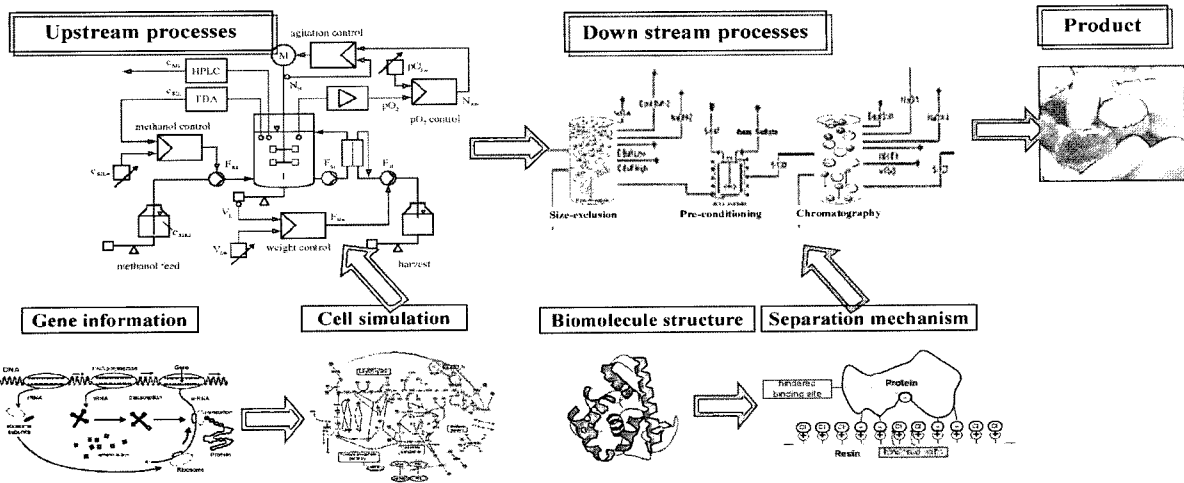


Fig. 3. From gene to product and from molecular-level to process-level (임영일, 화학공학연구정보센터 IP report, <http://www.cheric.org>, 2003).

공통적 특징은 체계적/수학적 모델링을 이용한 현상의 체계화이며, 이를 위해, 응용수학 (applied mathematics), 계산과학 (computational science), 그리고 시각화와 사용 편리성을 위한 software engineering을 도구로서 이용하는 것이다.

Systems biology and engineering (SBE)는 systems biology와 systems engineering을 통합하여 의약적/상업적 가치있는 생물분자의 발견/생산/분리/정제에 이르는 과정/공정을 체계적/수학적으로 모델링하고 컴퓨터를 이용한 통합적 환경을 구축하려는 시도이다 (임영일, Systems biology and engineering, <http://www.cheric.org>, 화학공학연구정보센터 IP report, 2003). Fig. 3은 유전자 정보에서 바이오제품 생산까지 그리고 분자수준에서 공정수준까지의 유기적 연관관계를 설명하는 SBE의 개념도를 보여준다.

전/제어가 요구된다. 과거의 CAPE/PSE는 모사기 개발이나 단위공정의 기본적 이해와 해석 등이었다면, 현재는 전에 개발되었거나 개발되고 있는 모사기/해석기/프로그램 등을 이용한 공정 합성/설계/해석 등이 많이 연구되고 있다. CAPE/PSE 기법은 이제 확고히 자리를 잡아 모든 화학/생물/식품/종이/의약 공정에서 이용되고 있다.

학문의 발전 또한 변증법적 정반합논리에 따른다고 가정할 때, 여러 이론들의 통합과 병합을 통한 새로운 대안 제시는 앞으로 PSE 분야의 발전방향에 대한 철학적 뒷받침이 되고 있음을 직시한다. PSE는 새로운 학문 발전방향에 맞추어 적응해 가면서 해야 할 일이 아직도 많다.

..... 저자약력

5. 결언

현재 PSE/CAPE 분야에서는 연속공정에서 batch/hybrid 공정으로의 이행에 따른 불연속공정의 동적 모사, 그리고 반응 증류탑 (reactive column)에 관하여 많은 연구가 진행되고 있고, food and bio-technology에 관한 관심이 높아가고 있다. 분자수준에서의 이해를 바탕으로 하는 공정모사는 앞으로 많은 연구가 진행되어야 할 분야이다. 또한 생물공학과 분자모델링은 CAPE/PSE에서 좀더 집중해야 할 분야이다.

산학연 협력연구를 통한 실질적 연구의 필요성은 학계/산업체에서 모두 주문하는 문제이고, 현장 중심적 공정의 설계/운



《임영일》

- 1993년 고려대 화학공학과 졸업 (학사).
- 1996년 한국과학기술원 화학공학과 졸업 (석사).
- 2001년 ENSIACET (화학 및 화학공학 대학교, 프랑스 툴루즈) 졸업 (박사).
- 2001년~2004년 덴마크공과대학교 화학공학과 (CAPEC) 연구교수.
- 2004년~현재 국립환경대학교 화학공학과 조교수.
- 관심분야 : Process systems engineering, Functional analysis of complex systems (FACS).