Proceedings of the 12th
KACC, October 1997

연속식 MMA/MA 공중합 반응기의 정상상태 및 동특성 해석

Analysis of Steady-States and Dynamic Characteristics of a Continuous MMA/MA Copolymerization Reactor

°박명준*, 안성모*, 황우현**, 이현구*

*서울대학교 화학공학과(Tel:+82-2-880-7405; Fax:+82-2-888-7295; E-mail:hkrhee@plaza.snu.ac.kr)
**동양공업전문대학 공장자동화과(Tel:+82-2-610-1837; Fax:+82-2-688-5494; E-mail:hwangwh@orient.dytc.ac.kr)

Abstracts The dynamic characteristics of a continuous MMA/MA free-radical solution copolymerization reactor were studied. A mathematical model was developed and kinetic parameters which had been estimated in the previous work were used. With this model, bifurcation diagrams were constructed with various parameters as the bifurcation parameter to predict the region of stable operating conditions and to enhance the controller performance. It was shown that the steady-state multiplicity existed over wide ranges of residence time and jacket inlet temperature. Periodic solution branches were found to emanated from Hopf bifurcation points. Under certain conditions isola was also observed, which would result in poor performance of feedback controllers.

Keywords MMA/MA, Copolymerization, CSTR, Bifurcation analysis, Steady-state multiplicity

1. 서 론

고분자 중합 반응기는 산업현장에서 널리 사용되고 있지만 반응에 의한 열발생속도가 크고 반응기구가 복잡하여 비선형성이 심하며 반응이 진행될수록 점도가 상승하면서 반응물의 교반이 어려워지고 열전달 효율이 떨어지게 된다. 그러나 연속식 고분자 중합 반응기의 경우에는 온도, 압력, 체류시간 및 개시제의 종류와 주입량의 변화를 통하여 중합반응기의 조업조건을 여러 가지로 변화시킴으로써 새로운 수요에 부응할 수 있는 다양한 제품을 생산할 수 있다. 따라서 다양한 조업조건하에서 중합반응기의 거동을 예측할 수 있는 수학적 모델을 개발할 필요가 있으며 이와 같은 수학적 모델을 이용하여 반응기의 정상상태 및 동특성을 분석한 후 그 결과를 바탕으로 제어 및 최적화에 관한 연구를 수행하여야 한다.

Bequette 등[1]은 1차 발열반응이 일어나는 연속류 교반조 반응기에서 자켓에 대한 에너지 수지식을 고려하여 분기해석을 수행함으로써 자켓의 공급온도의 변화에 따라 isola가 형성됨을 보인바 있다. 또한 Pinto와 Ray[2]는 VA/MMA 공중합 반응계를 대상으로 정상상태 다중성 및 주기적 거동이 실제로 존재함을 실험을 통하여 증명하였다.

이와 같은 정상상태 다중성 및 주기적 거동과 같은 현상들은 반응기의 설계 및 조업시에 반드시 고려되어야 할 현상들이므로 정상상태 다중성 분석을 통하여 안정된 조업 영역을 찾는 것은 매우 중요하다고 할 수 있다. 본 연구에서는 연속식 MMA/MA 공중합 반응기를 대상으로 하여 분기해석을 수행함으로써 체류시간과 자켓의 공급온도 등과 같은 여러 가지 변수들이 반응기의 거동에 미치는 영향을 조사하였다.

2. 수학적 모델

2.1. 반응 메카니즘 및 수학적 모델식

자유 라디칼 중합반응은 크게 개시반응, 성장반응, 정지반응 그리고 연쇄이동반응으로 구성되어 있다. 안 등[4, 5]은 단량체, 용매 및 분자량 조절제로의 연쇄이동반응을 모두 고려하여 회분식 MMA/MA 공중합 반응기에 대한 모델식을 확립한 후 실험을 통하여 반응속도상수를 추정한 바 있다. 본 연구에서는 이와 같이 추정된 반응속도상수를 사용하여 연속식 공중합 반응기에 대한 물질수지식을 다음과 같이 유도하였다.

$$\frac{d(IV)}{dt} = q_f I_f - qI + r_I V$$
$$\frac{d(M_1 V)}{dt} = q_f M_{1f} - qM_1 + r_{M_1} V$$
$$\frac{d(M_2 V)}{dt} = q_f M_{2f} - qM_2 + r_{M_2} V$$
$$\frac{d(SV)}{dt} = q_f S_f - qS + r_S V$$
$$\frac{d(DV)}{dt} = q_f D_f - qD + r_D V$$

여기서, I, M_1, M_2, S 및 D는 각각 개시제, MA, MMA, 용매 및 분자량조절제의 농도를 나타내며 r_i ($i = I, M_1, M_2, S, D$)는 반응속도로서 가속도상수법(Pseudo-kinetic rate constants method)을 사용하여 다음과 같이 단중합과 동일한 형태로 나타낼 수 있다[3, 6, 7].

$$r_I = -K_d I, \quad r_S = -\overline{K_{fS}} S Y_0, \quad r_D = -\overline{K_{fD}} D Y_0$$
$$r_{M_1} = -(\overline{K_{p1}} M + \overline{K_{fm1}} M + \overline{K_{f1D}} D + \overline{K_{f1S}} S) Y_0$$
$$r_{M_2} = -(\overline{K_{p2}} M + \overline{K_{fm2}} M + \overline{K_{f2D}} D + \overline{K_{f2S}} S) Y_0$$

여기서 $\overline{K_{pi}} = \sum_{j=1}^{2} K_{ji}\phi_j f_i$, $\overline{K_{fmi}} = \sum_{j=1}^{2} K_{fji}\phi_j f_i$

$\overline{K_{fiD}} = K_{fiD}\phi_i$, $\overline{K_{fiS}} = K_{fiS}\phi_i$ ($i = 1, 2$)

그리고 ϕ_i는 전체 활성고분자의 농도에 대하여 말단기가 단량체 i인 활성고분자가 차지하는 분율을 나타내며, f_i는 전체단량체에서 단량체 i의 분율을 나타낸다.

$$\phi_1 = \frac{[R_1 \cdot]}{[R_1 \cdot] + [R_2 \cdot]} \cong \frac{K_{21} f_1}{K_{21} f_1 + K_{12} f_2}, \qquad \phi_2 = 1 - \phi_1$$
$$f_i = M_i / M \qquad (i = 1, 2)$$

또한, Y_0는 활성고분자의 농도로서 가정상상태를 가정하면 그 결과는 다음과 같다.

$$Y_0 = \sqrt{\frac{2fK_d I}{\overline{K_t}}} \quad (\text{이 때, } \overline{K_t} = \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2} K_{ij}\phi_i f_j)$$

그리고 반응기 온도 및 자켓의 온도에 대하여 각각 다음과 같은 식을 세울 수 있다.

$$V\frac{d(\rho C_p)_{mean} T_r)}{dt} = (\rho C_p)_{mean} q_f T_f - (\rho C_p)_{mean} q T_r + [(-\triangle H_{11})\overline{K}_{11} + (-\triangle H_{12})\overline{K}_{12} + (-\triangle H_{21})\overline{K}_{21} + (-\triangle H_{22})\overline{K}_{22}] V M Y_0 - UA(T_r - T_j)$$

$$V_j\frac{d(\rho_c C_{pc} T_j)}{dt} = \rho_c C_{pc}(T_{jf} - T_j) + UA(T_r - T_j)$$

$$(\rho C_p)_{mean} = \nu_{m1}\rho_{m1}C_{p,m1} + \nu_{m2}\rho_{m2}C_{p,m2} + \nu_s\rho_s C_{p,s} + \nu_p\rho_p C_{p,t}$$

여기서 $\overline{K_{ij}} = K_{ij}\phi_i f_j$ ($i, j = 1, 2$)이며 ν, UA, V_j, C_p, q_f 및 q는 각각 반응물의 부피분율, 총괄 열전달계수, 자켓의 부피, 열용량 그리고 주입구 및 출구에서의 유량을 나타낸다.

2.2. 수학적 모델식의 무차원화

연속식 중합 반응기내의 반응물들의 농도, 반응기의 온도 및 자켓의 온도의 크기 정도를 비슷하게 하기 위하여 물질수지식과 에너지수지식을 무차원화하여 나타낼 필요가 있는데, 일반적으로 연속류 교반조 반응기에서의 전환율을 예측하기 위하여 사용되는 Damkohler 수(Da)를 도입하였으며 또한 농도 및 온도에 대하여 기준점을 정한 후 이를 이용하여 무차원 변수 및 상수들을 다음과 같이 정의하였다.

$$x_1 = \frac{I}{I_{f0}} \qquad x_2 = \frac{M_1}{M_{1f0}} \qquad x_3 = \frac{M_2}{M_{2f0}} \qquad x_4 = \frac{S}{S_{f0}}$$

$$x_5 = \frac{D}{D_{f0}} \qquad x_6 = \frac{T_r - T_{f0}}{T_{f0}}\gamma_{p1} \qquad x_7 = \frac{T_j - T_{f0}}{T_{f0}}\gamma_{p1} \qquad x_{Y0} = \frac{Y_0}{S_{f0}}$$

$$\theta = \frac{V}{q_f} \qquad \gamma_{p1} = \frac{E_{p1}}{RT_{f0}} \qquad \gamma_{p2} = \frac{E_{p2}}{E_{p1}} \qquad \gamma_d = \frac{E_d}{E_{p1}} \qquad \varepsilon = \frac{q}{q_f}$$

$$Da_I = \theta A_d \exp(-\gamma_{p1}\gamma_d)$$

$$Da_{p1} = \theta S_{f0} A_{p1} \exp(-\gamma_{p1}) \qquad Da_{p2} = \theta S_{f0} A_{p2} \exp(-\gamma_{p1}\gamma_{p2})$$

$$Da_{xi} = C_{xi} Da_{pi} \quad (x = M, S, D \quad i = 1, 2)$$

$$\delta = \frac{UA\cdot\theta}{V(\rho C_p)_{mean}} = \frac{UA}{q_f\cdot(\rho C_p)_{mean}} \qquad \beta_{ij} = \frac{(-\Delta H_{ij})M_{1f0}}{(\rho C_p)_{mean} T_{f0}}\gamma_{p1}$$

$$\delta_1 = \frac{V}{V_j} \qquad \delta_2 = \frac{(\rho C_p)_{mean}}{\rho_j C_{pj}} \qquad \varepsilon_j = \frac{q_j}{q_f}$$

$$\phi_1 = \frac{Da_{p2}\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] f_1/r_2}{Da_{p2}\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] f_1/r_2 + Da_{p1}\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] f_2/r_1}$$

$$f_1 = \frac{x_2}{x_2 + x_3 \times M_{2f0}/M_{1f0}} \quad , \quad f_2 = 1 - f_1$$

여기서, 하첨자 0는 기준점에서의 값을 의미하며 A와 E는 각각 반응속도상수의 빈도인자와 활성화에너지를 나타낸다.

이와 같이 정의된 무차원 변수 및 상수들을 도입하면 물질수지식과 에너지 수지식을 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{dx_1}{d\tau} = x_{1f} - \varepsilon x_1 - x_1 Da_I \exp\left[\frac{\gamma_d x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]$$

$$\frac{dx_2}{d\tau} = x_{2f} - \varepsilon x_2 - x_2 x_{Y0}\left\{Da_{p1}\phi_1\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] + \frac{Da_{p2}\phi_2}{r_2}\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] + Da_{M1}\phi_1\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] + \frac{Da_{M2}\phi_2}{r_2}\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\right\}$$
$$- x_4 x_{Y0}\frac{S_{f0}}{M_{1f0}}\left\{Da_{S1}\phi_1\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\right\}$$
$$- x_5 x_{Y0}\frac{D_{f0}}{M_{1f0}}\left\{Da_{D1}\phi_1\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\right\}$$

$$\frac{dx_3}{d\tau} = x_{3f} - \varepsilon x_3 - x_3 x_{Y0}\left\{\frac{Da_{p1}\phi_1}{r_1}\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] + Da_{p2}\phi_2\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] + \frac{Da_{M1}\phi_1}{r_1}\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] + Da_{M2}\phi_2\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\right\}$$
$$- x_4 x_{Y0}\frac{S_{f0}}{M_{2f0}}\frac{M_{1f0}}{M_{2f0}}\left\{Da_{S2}\phi_2\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\right\}$$
$$- x_5 x_{Y0}\frac{D_{f0}}{M_{1f0}}\frac{M_{1f0}}{M_{2f0}}\left\{Da_{D2}\phi_2\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\right\}$$

$$\frac{dx_4}{d\tau} = x_{4f} - \varepsilon x_4 - x_4 x_{Y0}\left\{Da_{S1}\phi_1\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] + Da_{S2}\phi_2\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\right\}$$

$$\frac{dx_5}{d\tau} = x_{5f} - \varepsilon x_5 - x_5 x_{Y0}\left\{Da_{D1}\phi_1\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right] + Da_{D2}\phi_2\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\right\}$$

$$\frac{dx_6}{d\tau} = (1-\varepsilon)\gamma_{p1} + x_{6f} - (\varepsilon+\delta)x_6 + \delta x_7$$
$$+ \left\{Da_{p1}\phi_1\exp\left[\frac{x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\times\left(\beta_{11}x_2 + \frac{\beta_{12}}{r_1}x_3\frac{M_{2f0}}{M_{1f0}}\right)\right.$$
$$\left. + Da_{p2}\phi_2\exp\left[\frac{\gamma_{p2}x_6}{1+x_6/\gamma_{p1}}\right]\times\left(\frac{\beta_{21}}{r_2}x_2 + \beta_{22}x_3\frac{M_{2f0}}{M_{1f0}}\right)\right\}\times x_{Y0}$$

$$\frac{dx_7}{d\tau} = \delta_1\left\{\varepsilon_j(x_{7f} - x_7) + \delta\delta_2(x_6 - x_7)\right\}$$

3. 분기해석

연속식 중합 반응기의 경우 자켓의 공급온도, 용매분율 및 개시제의 주입농도 등의 많은 변수가 있는데 이를 몇 가지 반응조건과 함께 Table 1에 나타내었다.

표 1 연속식 MMA/MA 공중합 반응기의 분기해석을 위한 기준조건

Table 1 Reference conditions for the bifurcation analysis of continuous MMA/MA copolymerization reactor

	case 1	case 2	case 3
x_j	8.0	-	2.0
f_{1f}	0.134	0.134	-
UA	700	700	70.0
x_{5f}	0.0	0.0	0.0
θ	-	1.0	-
x_{1f}	1.0	1.0	2.0
S_{frac}	-	-	0.3
δ_1	3.0	3.0	3.0
q_j	10.0	10.0	10.0

3.1. 반응물 공급유속의 변화에 대한 영향

우선 반응물 공급유속의 변화에 따른 반응기 온도의 변화를 알아보기 위하여 체류시간을 분기변수로 하여 분기해석을 수행하였으며 그 결과를 Fig. 1에 나타내었다. 그림에서 실선은 안정한 정상상태, 점선은 불안정한 정상상태 그리고 채워진 사각형은 Hopf 분기점을 나타내는데 이 점에서부터 주기해의 가지가 자라나기 시작한다. 여기서 채워진 점은 안정한 주기해 그리고 빈점은 불안정한 주기해를 나타낸다.

용매분율이 높은 경우에는 체류시간의 증가에 따라 반응기 온도가 단순히 증가하는 경향을 보이나 용매분율이 낮은 경우에는 안정한 주기해가 나타나며 좀 더 낮은 경우에는 일정구간에서

정상상태 다중성이 나타나는 것을 알 수 있다. 용매분율이 0.4로 작은 경우에는 체류시간이 1~3시간 사이에서 나타나던 안정한 주기해가 사라진다. 결국 용매분율이 낮아질 경우 주기해와 정상상태 다중성을 유발하게 되어 안정한 조업이 어려워지며 용매분율이 매우 낮은 경우에는 주기해가 사라지지만 정상상태 다중성은 여전히 존재한다. 또한 전반적으로 반응기 온도가 높아져서 반응기 온도제어에 어려움을 유발할 수 있다.

Fig. 1의 (c)에서 체류시간이 0.9인 경우(안정한 정상상태 2개와 불안정한 정상상태 1개)에 대하여 모사를 수행하면 Fig. 2와 같은 결과를 얻을 수 있다.

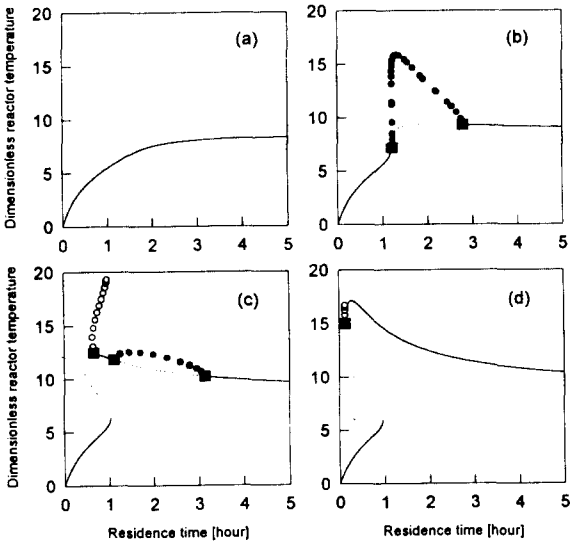

그림 1 체류시간을 분기변수로 한 경우의 반응기 온도의 정상상태값(조건 1). 각각의 용매분율은 (a) 0.8 (b) 0.65 (c) 0.53 및 (d) 0.4.

Fig. 1 Dimensionless reactor temperature at steady-state (case 1) for various values of residence time when solvent fractions are (a) 0.8 (b) 0.65 (c) 0.53 and (d) 0.4.

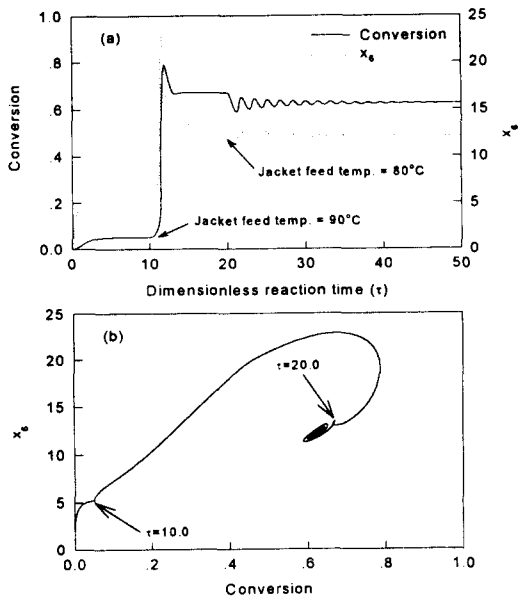

그림 2 시간의 변화에 따른 온도와 전환율의 변화 및 위상평면에서의 반응경로.

Fig. 2 Time evolution and phase plane plot of conversion and dimensionless reactor temperature.

Fig. 2의 (a)는 무차원시간에 대하여 반응기의 온도 및 전환율의 변화를 나타낸 것이다. 우선 쟈켓의 공급온도를 80℃로 설정하고 전환율과 무차원온도가 0인 곳에서 조업을 시작할 경우에는 낮은 곳의 안정한 정상상태로 접어들게 된다. 이 후 무차원 반응시간인 τ가 10인 순간에 쟈켓의 공급온도를 90℃로 증가시키면 새로운 정상상태에 도달한다. 그러나 τ가 20인 순간에 쟈켓의 공급온도를 다시 80℃로 하여도 이전의 정상상태로 돌아오지 않고 새로운 정상상태로 수렴하는 것을 알 수 있다. Fig. 2의 (b)는 전환율과 반응기 온도를 각각 좌표축으로 하여 시간에 따른 변화를 나타낸 것이다.

Fig. 2에서 알 수 있듯이 용매분율이 0.53인 경우에 높은 전환율의 제품을 생산하기 위해서는 먼저 반응초기에는 회분식으로 조업을 하여 반응기 온도와 전환율을 원하는 값에 도달시킨 후에 반응기를 연속식으로 전환하여 주어야 한다.

3.2. 쟈켓 공급온도의 변화에 대한 영향

다음에는 쟈켓의 공급온도의 변화에 따른 반응기 온도의 변화를 살펴보기 위하여 쟈켓의 공급온도를 분기변수로 하여 분기해석을 수행하였으며 그 결과를 Fig. 3에 나타내었다.

체류시간을 분기변수로 하였을 때와 마찬가지로 용매분율이 낮은 경우 정상상태 다중성이 넓은 범위에 걸쳐 나타나는 것을 볼 수 있다. 일반적으로 쟈켓의 공급온도는 0에서 15사이의 값을 갖게 되므로 이외의 영역에서의 값은 의미를 갖지 않는다. Fig. 3의 (d)에서처럼 용매분율이 0.1인 경우 분기변수가 물리적으로 의미를 갖는 영역에서 분기해석을 수행하면 정상상태값을 나타내는 가지가 분리되는 현상을 볼 수 있는데 이를 disjoint 현상이라고 한다. 특히 분기변수의 왼쪽의 끝값에서 나타나는 것을 0-disjoint, 오른쪽의 끝값에서 나타나는 것을 ∞-disjoint라고 한다.

이처럼 쟈켓의 공급온도를 분기변수로 하는 분기선도의 경우 용매분율의 변화에 따라 분기선도는 다른 형태를 보이게 되며 여기에 다시 체류시간을 변화시킬 경우 다시 다양한 형태의 분기선도를 나타내게 된다. 따라서 용매분율과 체류시간을 변화시켜가며 분기선도를 작성하여 그 결과를 Fig. 4에 나타내었다.

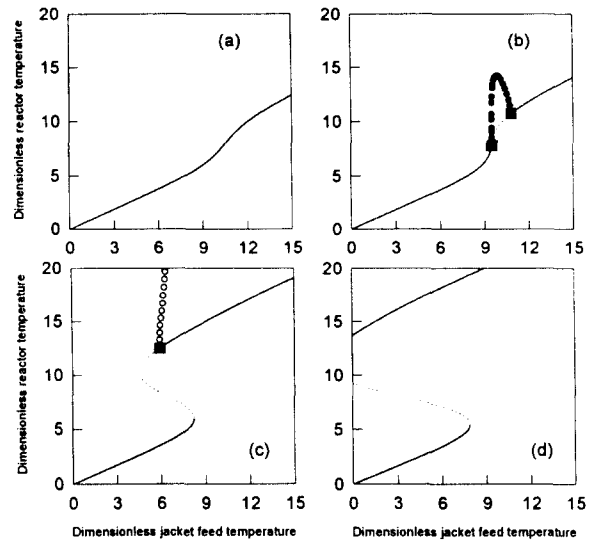

그림 3 쟈켓의 공급온도를 분기변수로 한 경우의 반응기 온도의 정상상태값(조건 2). 각각의 용매분율은 (a) 0.8 (b) 0.7 (c) 0.5 및 (d) 0.1.

Fig. 3 Dimensionless reactor temperature at steady-state (case 2) for various values of jacket feed temp. when solvent fractions are (a) 0.8 (b) 0.7 (c) 0.5 and (d) 0.1.

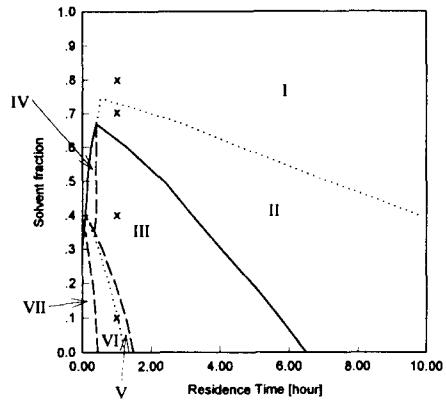

그림 4 (θ, S_{frac})공간에서 서로 다른 분기선도의 특징을 보이는 영역의 구분.

Fig. 4 Division of the (θ, S_{frac}) plane into regions of different multiplicity patterns.

표 2 그림 4의 각 영역에서의 분기선도의 특징

Table 2 Characteristics of bifurcation in each region of Fig. 4

	I	II	III	IV	V	VI	VII
muliplicity			○	○	○	○	○
0-disjoint					○	○	○
∞-disjoint				○			○
periodic solutions		○	○	○	○		

각 영역에서의 용매분율과 체류시간을 취하고 쟈켓의 공급온도를 분기변수로 하여 분기해석을 수행하였을 경우 분기선도가 나타내는 특징을 Table 2에 나타내었다. Fig. 4에서 ×표시에 해당하는 분기선도가 각각 Fig. 3의 (a), (b), (c) 및 (d)에 해당한다.

3.3. Isola의 생성

분기선도 상에서 닫혀있으면서 격리된 형태의 정상상태값의 가지를 볼 수 있는데 이를 isola라 한다. 이러한 isola가 존재할 경우 공정의 입-출력 이득이 0이 되어 공정의 제어가 불가능해지고 피드백제어기의 성능이 현저히 저하된다.

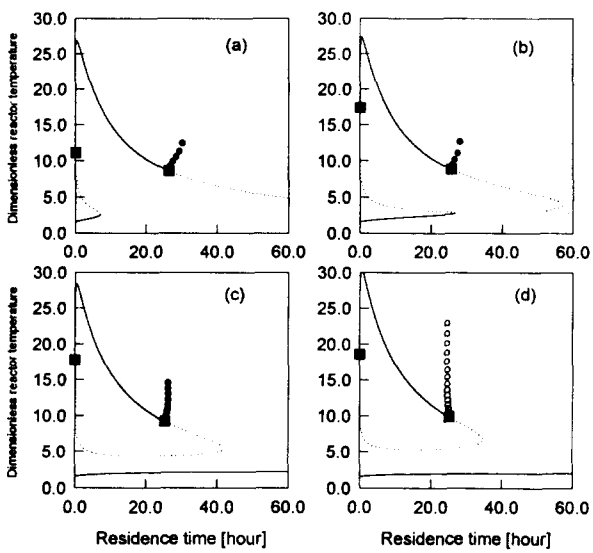

그림 5 체류시간을 분기변수로 한 경우의 무차원 반응기 온도의 정상상태값(조건 3). 각각의 공급되는 단량체의 조성은 (a) 0.05 (b) 0.1 (c) 0.2 및 (d) 0.4.

Fig. 5 Dimensionless reactor temperature at steady-state (case 3) for various values of residence time when monomer feed compositions are (a) 0.05 (b) 0.1 (c) 0.2 and (d) 0.4.

Fig. 5는 체류시간을 분기변수로 하여 case3에서의 조건에서 분기해석을 수행한 결과이다. 공급되는 단량체에서 MA의 양이 많아 질수록 정상상태 다중성이 나타나는 영역이 더 커지는 것을 알 수 있으며 MA의 함유비가 0.1일 때 mushroom형태의 분기선도가 나타나다가 결국 isola가 생성되는 것을 알 수 있다. Isola가 생성된 이후에 계속해서 MA의 함유비가 더 커질 경우 isola의 크기가 점차로 작아지는 것을 볼 수 있다. 그리고, 분기선도에서 주기해가 나타나는 것을 알 수 있는데 처음에 MA의 함유량이 적은 경우에는 주기해가 체류시간이 큰 쪽으로 자라나게 되어 안정한 주기해를 갖게 되지만 MA의 함유량이 증가함에 따라 점차 체류시간이 작은 쪽으로 자라나면서 불안정한 주기해로 바뀌게 됨을 알 수 있다. 결국 MMA 단중합의 경우보다 MA를 사용하여 공중합을 행할 경우 새로운 물성을 얻게 되는 장점이 있지만 반응기의 동특성은 더욱 복잡해져서 안정한 조업 및 제어가 좀 더 어려워짐을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 연속식 MMA/MA 공중합 반응기에 대한 수학적 모델식을 도출한 후 체류시간 및 쟈켓의 공급온도를 분기변수로 하여 분기해석을 수행하여 반응기의 동특성을 조사하였다. 반응기 온도는 변수들의 값에 따라 다양한 동특성을 나타내었으며 특히 단중합의 경우보다 더욱 복잡한 특징을 갖게 됨을 알 수 있었다. 이러한 복잡한 동특성에 대한 엄밀한 해석을 바탕으로 안정한 조업을 위한 변수들의 범위를 추정할 수 있었으며 제어기 성능의 향상에도 크게 기여할 수 있을 것으로 기대된다.

감 사

본 연구는 포항공과대학교 공정산업의 지능자동화연구센터를 통한 한국과학재단 우수연구센터 지원금에 의한 것입니다.

참고문헌

[1] L. P. Russo and B. W. Bequette, "Effect of Process Design on the Open-loop Behavior of a Jacketed Exothermic CSTR," *Computers Chem. Eng.*, **20**(4), pp. 417-426, 1996.

[2] J. C. Pinto and W. H. Ray, "The Dynamic Behavior of Continuous Solution Polymerization Reactors-Ⅶ. Experimental Study of a Copolymerization Reactor," *Chem. Eng. Sci.*, **50**(4), pp. 715-736, 1995.

[3] W.-H. Hwang, K.-Y. Yoo and H.-K. Rhee, "Modeling of Bulk Copolymerization Reactor Using Chain-Length -Dependent Rate Constants," *J. Appl. Polym. Sci.*, **64**, pp. 1015-1027, 1997.

[4] 안성모, 박명준, 이현구, "회분식 MMA/MA 공중합 반응기의 모델링 및 실험연구," *화학공학의 이론과 응용*, **2**(2), pp.2773-2776, 1996.

[5] 안성모, 박명준, 이현구, "회분식 MMA/MA 공중합 반응기의 실험연구 : 매개 변수 추정," *화학공학의 이론과 응용*, **3**(1), pp.1481-1484, 1997.

[6] 유기윤, 황우현, 백종은, 이현구, "공중합에서 확산이 율속하는 반응속도식의 모델링 : Ⅰ. 공중합 속도식의 단순화 및 전환율의 계산," *화학공학*, **33**(6), pp. 684-692, 1995.

[7] 유기윤, 황우현, 백종은, 이현구, "공중합에서 확산이 율속하는 반응속도식의 모델링 : Ⅱ. 공중합체의 조성과 평균 분자량 예측," *화학공학*, **33**(6), pp. 693-699, 1995.