

증류공정 차수감소 모델의 개발과 Extended Kalman

Filter에 의한 실시간대에서의 조정

정 재익^o, 최 상열, 이 광순
서강대학교

Development of a Reduced-Order Distillation Model and
Real-Time Tuning using the Extended Kalman Filter

Jae Ik Jeong^o, Sang Yel choi, Kwang Soon Lee

Dept. of Chem. Eng. Sogang Univ.

ABSTRACT

A tunable reduced-order distillation model is proposed for real-time applications. To develop the model, a binary distillation column with McCabe-Thiele assumptions was considered first and then the governing equations for the column were reduced to a simplified vector differential equations using the collocation method combined with cubic spline interpolation function. The final reduced-order model has four tuning parameters, relative volatilities and liquid holdups for rectifying and stripping sections, respectively. To assess the applicability of the developed model, the real-time adjustment of the model was tried by recursively updating the tuning parameters using the EKF algorithm. As a result, it was found that the reduced-model follows the simulated distillation process very closely as the parameters are improved.

서 본

증류공정은 비점차를 이용하여 물질을 분리, 정제하는 단위공정으로 화학 및 이와 관련된 산업 분야에서 분리공정의 핵심적 역할을 담당하고 있다. 그러나 증류공정은 에너지 소모가 대단히 큰 공정이다. 이에 증류공정의 소비에너지를 극소화하며 생산성을 높이고자하는 연구가 활발히

진행되었으며 실제 많은 성과를 거두고 있다. 그러나 이와 같은 연구는 주로 증류공정의 최적 설계, 폐열회수를 위한 공정변경에 대해 행하여졌으며 운전조건 최적화에 의한 소비에너지 절약 및 생산성향상 연구는 상대적으로 미진한 편이다.

본 연구에서는 증류공정을 보다 효율적으로 운용할 수 있는 on-line 최적화에 관심을 두고 이를 수행하기 위해 필요한 차수감소 동특성 모델의 구성 및 EKF (Extended Kalman Filter) 에 의한 실시간대 모델 조정을 행하였다. 증류공정의 차수감소 모델 구성에 관한 연구는 많은 사람들에 의해 행해졌으나 제어계 구성에 목적을 둔 변이 변수에 대한 동특성 모델에 관한 것이 대부분이었다. 그러던 중 Cho 등 [1] 에 의해 정상상태와 동특성 모델에 공히 적용할 수 있는 직교배열법에 의한 차수감소 모델 방법이 제시되었으며 그 후 Kim 등 [2] 은 Cho 등의 방법이 원료단 부근의 변수예측에 많은 오차를 보이고 있음을 알아 내고 이의 개선을 위해 원료단을 중심으로한 탑상부와 탑하부에 각각 직교배열법을 적용한 PMA (Partitional Modular Approximation) 방법을 제시하였다. 본 연구에서는 차수감소모델의 정밀도를 더욱 향상시키기 위하여 cubic spline 함수를 시도함수로 도입하고 여기서 PMA 를 결합한 근사방법을 개발하였다. 증류공정의 기본 모델로는 McCabe - Thiele 가정을 도입하고 탑상부와 탑하부에서

각각 다른 상대 휘발도 및 액체체류량 (Holdup) 을 갖는 이성분계 모델을 이용하였으며 이 중 상대 휘발도와 액체체류량을 조절용 파라미터로 취하여 BKF 에 의해 실시간대에서 반복적으로 계산 되도록 하여 실제공정의 상황을 잘 예측할 수 있도록 하였다.

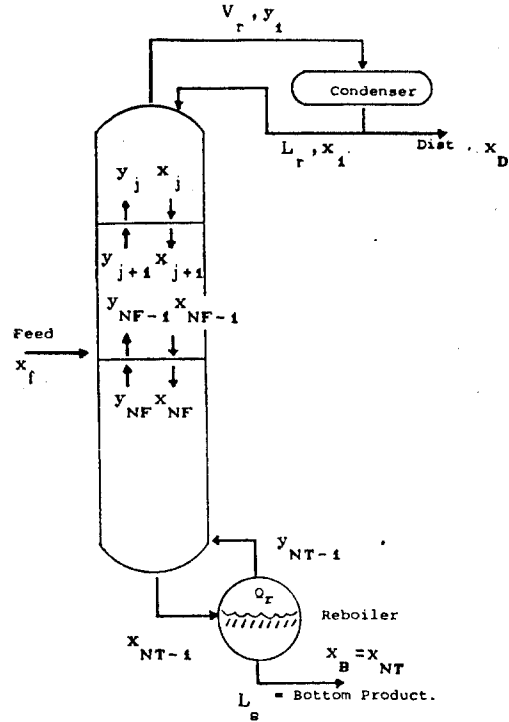
본 본

1) 증류탑 모사를 위한 가정 및 엄밀 모델 수지식
 증류공정 내부의 기체 및 액체 유량은 단마다 다르며 열역학적 기액평형 상수도 각 단마다 다른 값을 갖는다. 이와 같은 모든 관계를 엄밀하게 묘사한 모델은 많은 반복계산을 요구하는 비선형 식을 갖게되어 실시간대 응용이 거의 불가능하다. 그러나 이와 같은 엄밀모델도 단효율 등 이론적으로는 예측하기 어려운 변수들을 포함하고 있어 실제 운전상황의 정확한 예측을 위해서는 이러한 변수들을 실험적으로 다시 구해나가는 모델조정 작업을 행하여야 한다. 따라서 본 연구에서는 실시간대 응용을 위해 아래와 같은 가정을 도입하여 단순화된 증류공정 모델을 기본 수지식으로 택하였으며, 이 중 분리특성을 결정짓는 상대휘발도, 동특성의 시정수를 결정하는데 가장 중요한 역할을 하는 액체체류량을 조절용 파라미터로 취하여 실제공정의 특성을 맞추어 나갈 수 있도록 하였다.

- i) 액체 및 기체의 유량은 탑상부와 탑하부에서 각각 일정한 값을 갖는다.
- ii) 상대휘발도는 탑상부와 탑하부에서 각각 α_r , α_s 로 일정하다.
- iii) 각 단의 액체체류량에 대한 동특성은 무시하며 탑상부와 탑하부에서 각각 H_r , H_s 의 값을 갖는다.
- iv) 탑정조와 재비기에서의 액체체류량은 수위제어에 의해서 항상 일정한 값을 갖는다.

그리고 상대휘발도는 온도와 농도의 함수이고 액체체류량은 액체흐름과 기체흐름의 함수라고 가정한다. 위의 가정은 비이상성이 심하지 않은 이성분 증류

공정에서 합리적으로 채택될 수 있는 것들이다. 이와 같은 가정하에 하나의 원료단과 전용축기를 갖는 이성분 증류공정의 모델화를 위해 구성된 증류탑을 < Fig. 1 > 에 보였다. 여기서 사용된 좌표계는 차수 감소 모델에 적용이 용이하도록 설정되었다.



< Fig. 1 > Distillation tower for rigorous model

각 단에서의 물질 수지식을 세우면 다음과 같다.

응축기 :
$$H_c \frac{dx_1}{dt} = V_r (y_1 - x_1) \quad \text{식(1)}$$

각단에서 :

$$H_p \frac{dx_j}{dt} = V_p (y_j - y_{j-1}) + L_p (x_{j-1} - x_j) + Fx_f$$

$$p = \begin{cases} r, & \text{rectifying section} \\ s, & \text{stripping section} \end{cases} \quad \text{식(2)}$$

$$F = \begin{cases} F, & \text{feed stage} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

재비기 :

$$H_b \frac{dx_{Nt}}{dt} = L_s x_{Nt-1} - V_s y_{Nt-1} - Bx_{Nt} \quad \text{식(3)}$$

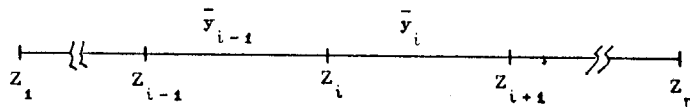
평형식 :
$$Y_1 = \frac{\alpha_p x_{1+1}}{1 + (\alpha_p - 1) x_{1+1}} \quad \text{식(4)}$$

2) Cubic Spline 함수

증류탑 내의 농도 분포는 일반적으로 탑 양쪽 끝단에서 완만한 곡선을 이루나 입력단 부분에서 급격한 변화를 보인다. 그러므로 농도 분포의 근사를 행할때 전 구간을 하나의 연속된 함수로 나타내는 것보다 몇개의 작은 구간으로 나누어 구간별로 근사 함수를 도입하는 것이 더 효율적일 것이다. 본 연구에서는 이러한 조건을 만족시키기 위해서 내삽 함수로 Cubic Spline 함수를 도입하였다.

Cubic Spline 함수는 각 구간에서만 존재하는 3차의 다항식으로 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\bar{y}_i(z) = S_0 + S_1 z + S_2 z^2 + S_3 z^3 \quad z \in [z_1, z_{i+1}] \quad \text{식(5)}$$



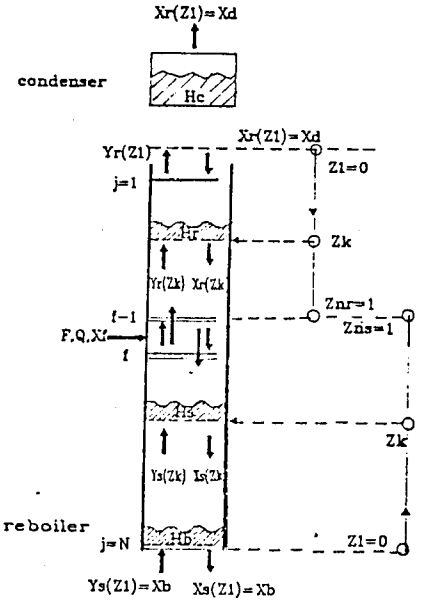
< Fig. 2 > Coordinate for cubic spline function

전 구간에서 <Fig. 2> 와 같이 n 개의 collocation 점을 생각할 때 z_i 에 인접한 두 시도 함수 \bar{y}_{i-1} 와 \bar{y}_i 는 다음과 같은 조건을 만족시켜야 한다.

- i) 이계 도함수가 연속이어야 한다.
- ii) 일계 도함수가 연속이어야 한다.
- iii) 두 시도 함수가 연속이어야 한다.

3) PMA 를 도입한 증류탑 좌표계

PMA 는 증류탑의 탑상부와 탑하부 각각에 대해서 collocation을 적용하는 방법으로 이를 위한 좌표계를 <Fig. 3> 와 같이 설정하였다. 이때 탑하부는 재비기까지를 좌표계에 포함시켜 차수감소 효과를 최대한 얻도록 하였다. 실제로 재비기에서는 탑외부로의 흐름(탑저 생성물) 만이 있을 뿐 외부로부터 들어오는 흐름이 없으므로 탑저의 단들과는 다른 수지식을 갖게 되고 따라서 collocation의 적용에 어려움이 생긴다. 본 연구에서는 <Fig. 3> 와 같이 탑내 기체유량과 같은 흐름이 탑외부로부터 있고 탑저 생산물은 탑내 액체유량과 같다고 가정함으로써 유량의 불연속성을 제거하여 이 문제를 해결하였다.



< Fig. 3 > Distillation tower for reduced-order model

4) 차수 감소 모델의 구성

응축기 :
$$H_c \frac{dx_r}{dt} = V_r (y_1 - x_1) \quad \text{식(6)}$$

Collocation 점 :

$$\frac{dx_r(z_k)}{dt} = \frac{V_r}{H_r} (Y_r(z_k) - Y_r(z_k - \Delta z_r)) - \frac{L_r}{H_r} (X_r(z_k) - X_r(z_k - \Delta z_r)) \quad \text{식(7)}$$

$$\Delta z_r = 1/(Nf-2) \quad k = 2, \dots, n_r$$

$$\frac{dx_s(z_k)}{dt} = \frac{V_s}{H_s} (Y_s(z_k) - Y_s(z_k + \Delta z_s)) - \frac{L_s}{H_s} (X_s(z_k) - X_s(z_k + \Delta z_s)) \quad \text{식(8)}$$

$$\Delta z_s = 1/(Nt - Nf + 1) \quad k = 1, \dots, n_s - 1$$

$$H_s = H_b \quad \text{when } k = 1$$

경계조건 :

$$L_s x_s(z_{n_s}) = L_r x_r(z_{n_r}) + q F x_f \quad \text{식(9)}$$

$$x_s(z_1) = y_s(z_1) \quad \text{식(10)}$$

평형식 :

$$Y_r(z_k - \Delta z_r) = \frac{\alpha_r x_r(z_k)}{1 + (\alpha_r - 1)x_r(z_k)} \quad k = 2, \dots, n_r \quad \text{식(11)}$$

$$Y_s(z_k) = \frac{\alpha_s x_s(z_k - \Delta z_s)}{1 + (\alpha_s - 1)x_s(z_k - \Delta z_s)} \quad k = 2, \dots, n - 1 \quad \text{식(12)}$$

$$\hat{Y}(z) = \sum_{i=1}^n S_i(z) Y(z_i) \quad \text{식(13)}$$

위의 내삽함수를 사용하면 다음 식들을 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} X(z+\Delta z) &= \sum_{k=1}^n S_k(z+\Delta z) X(z_k) \\ Y(z+\Delta z) &= \sum_{k=1}^n S_k(z+\Delta z) Y(z_k) \end{aligned} \quad \text{식(14)}$$

최종적인 차수감소 모델식은 다음과 같다.

$$\frac{dX}{dt} = K(H_r, H_s) X + F(X, x_f, H_r, H_s, \alpha_r, \alpha_s) \quad \text{식(15)}$$

위 식은 차수는 $n_x + n_y - 1$ 이며 $H_r, H_s, \alpha_r, \alpha_s$ 네개의 변수를 조절용 파라미터로 갖는다. 따라서 보통 수십개에서 수백개의 미분식으로 표현되는 증류공정의 모델식이 $n_r = n_s = 3$ 으로 하는 경우 총 5개의 미분식으로 줄게되므로 상당한 차수감소 효과를 얻게됨을 알 수 있다.

5) 이산시간대 모델과 EKF 에 의한 실시간대에서의 모델 조성

앞에서 구성한 차수감소 동특성 모델은 여러가지 가정을 바탕으로 구성된 것이므로 실제 증류공정의 특성을 잘 일치시키기 위해서는 모델조정이 필요하게 된다. 이와 같은 일은 EKF 와 같은 비선형 필터에 의한 파라미터 반복확인법(recursive parameter identification)을 통하여 행할 수 있다. 컴퓨터에 의한 실시간대의 반복 확인법 응용을 위해서는 식(15)으로 부터 이산시간대 모델을 구하는 것이 먼저 필요하다. 식(15)은 상태 X 에 대한 선형항과 비선형항으로 나누어진다. 본연구에서는 이 중 선형항에 대해서는 중심차분을 비선형항에 대해서는 전방차분을 적용하여 가능한한 정밀도가 높고 안정성이 유지되는 이산시간대 모델을 얻고자 하였다. 이와같이 하여 얻은 이산시간대 차수감소 모델의 식은 다음과 같다.

$$X(k+1) = (I - T/2 K) \left((I + T/2 K) X(k) + T F(X(k), x_f) \right) \quad \text{식(16)}$$

식(16)은 K 및 F 항에 액체체류량 H_r, H_s 또 상대휘발도 α_r, α_s 을 조절용 파라미터로 가지고 있다.

이들 값들을 적절히 해 실제 증류공정의 운전특성을

예측할 수 있도록 하기 위해 본 연구에서는 EKF 를 이용한 실시간대의 반복 파라미터 확인을 행하였다.

EKF 는

$$\begin{cases} Y(k+1) = g(Y(k)) + w(k) \\ m(k) = c(Y(k)) + n(k) \end{cases} \quad \text{식(17)}$$

$$\hat{Y}(k+1) = \hat{Y}(k) + P(k+1) (m(k+1) - c(\hat{Y}(k))) \quad \text{식(18)}$$

여기서 $Y(k)$ 는 상태 벡터, $m(k)$ 는 측정치의 벡터,

$w(k), n(k)$ 는 백색잡음 와 같이 표현되는 비선형

추계적 계에서 $m(k)$ 를 이용하여 $y(k)$ 를 반복적으로

개선해 나가며 추정하는 방법이다. 본 연구의 모델

식(16)에서

$$Y^T(k) = [X(k), H_r(k), H_s(k), \alpha_r(k), \alpha_s(k)] \quad \text{식(19)}$$

$$g(Y(k)) = \quad \text{식(20)}$$

$$\left[\begin{aligned} & (I - \frac{T}{2} K)^{-1} \left((I + \frac{T}{2} K) X(k) + T F(X(k), x_f) \right) \\ & H_r(k) \\ & H_s(k) \\ & \alpha_r(k) \\ & \alpha_s(k) \end{aligned} \right]$$

와 같이 취하면 EKF의 적용이 직접 가능해지며 따라

서 식(16)의 모델이 실제 증류공정에서의 측정치 $m(k)$

를 출력으로 내보낼 수 있도록 하는 파라미터 H_r, H_s

α_r, α_s 을 찾을 수 있게 된다.

6) EKF 에 의한 실시간대에서의 모델의 컴퓨터 모사에 의한 평가

조업조건

총 단수 : 13 단

입력 단 : 상부로 부터 7 단

입력 유량 : 3.6 mol/min

유입물 농도 : 50% 물 — 50% 메타놀

유입물 상태 : 포화액체

상대휘발도 : 탑상부 — $\alpha_{r1} : 1.668$

$\alpha_{r2} : 1.728$

탑하부 — $\alpha_{s1} : 2.196$

$\alpha_{s2} : 2.700$

응축기의 액체체류량 : 20 mol
 재비기의 액체체류량 : 155 mol
 탑상부의 각단에서의 액체체류량 : 3 mol
 탑하부의 각단에서의 액체체류량 : 4 mol
 Collocation 점의 수 : 탑상부 — 3개
 탑하부 — 3개

<Fig.4>의 결과를 보면 증류공정의 엄밀 모델의 각 collocation점에서의 농도와 차수감소 모델에 적용된

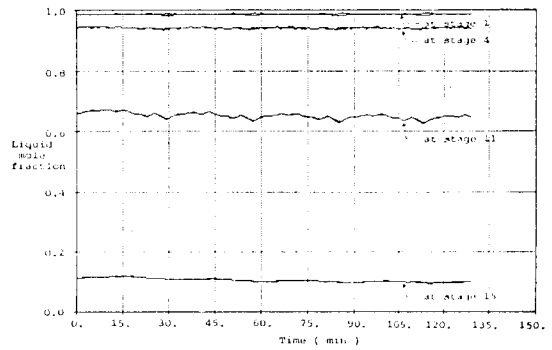
Extended Kalman Filter의 상태벡터의 값이 거의 일치함을 볼 수 있다. 그러므로 EKF에 의해 보정된 차수감소 모델이 엄밀 모델의 특성들을 잘 나타냄을 잘 알 수 있다. <Fig.5>의 결과를 살펴보면 4개의 조절변수들도 잘 수렴함을 볼 수 있다. 이의 모사를 위해 사용된 엄밀 모델은 실제 증류공정의 특성과 유사하게 나타내기 위해서 각각 탑상부와 탑하부의 상대휘발모듈을 2개의 상수로 나타내고 액체체류량은 액체흐름, 각단의 용량 그리고 임의의 비례상수로 표시하여 동적인 성격을 유지하도록 하였다.

결 론

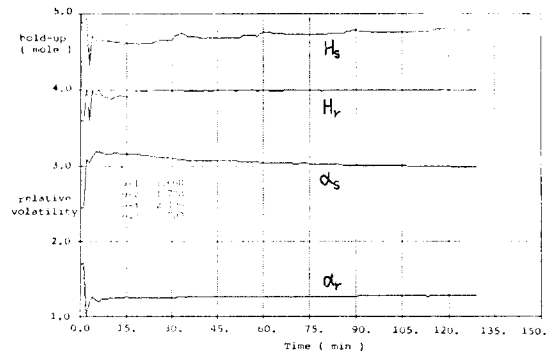
실시간대 최적화를 목적으로 구성된 단순한 구조를 갖는 차수감소 모델은 EKF에 의해서 조정 파라미터 값들이 빨리 수렴하고 증류공정의 동적상태 특성을 잘 표현하므로 증류공정의 해석, 최적화 그리고 제어 등에 이용될 수 있을 것이다.

참고 문헌

1. Cho, Y.S. and B. Joseph, "Reduced-Order Steady-State and Dynamic Model for Separation Processes", *AIChE J.*, 29, 261, 1983.
2. Kim, C. and John C. Friedly, "Approximate Dynamic Modelling of Large Staged System", *I&EC Proc. Des. Dev.*, 13, 177, 1974.



<Fig.4> 엄밀모델과 차수감소모델의 농도 비교



<Fig.5> 조정 파라미터의 수렴성

3. B. Bellingham and F.P. Lees, "The Detection of Malfunction using a process control computer: a Kalman Filtering Technique for General Control Loops", *Trans IChemE*, Vol 55, 1977
4. Lennart Ljung, "Asymptotic Behavior of the Extended Kalman Filter as a Parameter Estimator for Linear Systems", *IEEE Trans. Automat. Contr.*, Vol. ac-24, no. 1, Feb. 1979
5. A.H. Jazwinski, *Stochastic Processes and Filtering Theory*. New York: Academic, 1970
6. Frank L. Lewis, *Optimal Estimation*. 1986
7. Lennart Ljung and Torsten Soderstrom, *Theory and Practice of Recursive Identification*. 1983
8. Peter Young, *Recursive Estimation and Time-Series Analysis*. 1984