

증류공정의 차수감소모델 개발 및 비선형필터기법을 이용한 모델인식에 관한 연구

(A Study on Development of a Reduced-order Distillation Model and Identification Using Nonlinear Filtering Techniques)

김홍식, 이강순
(H. S. Kim, K. S. Lee)

서강대학교 화학공학과
(Sogang Univ., Dept. of Chem. Eng.)

A linear form of reduced-order distillation model is proposed, which contains the physical properties of distillation process and can be used in real time applications. The proposed model is linear in terms of liquid mole fraction and contains some tuning parameters. To verify the applicability of the proposed model, the model identification using nonlinear filtering techniques was applied. As a result, it was found that this model represented the simulated distillation process very closely as the parameters were converged.

1. 서론

증류공정은 화학 및 관련산업분야에서 핵심적 역할을 담당하는 분리정제 공정이나, 대표적인 에너지 다소비형 공정으로 70년대 이후 소비 에너지를 극소화하고 효율을 향상시키기 위한 공정 최적화 연구의 대상이 되어 왔다. 이에 따라 증류공정의 수학적 모델구성, 컴퓨터 모사기법 및 제어계 구성방법 등에 관한 많은 연구 결과가 발표되었다. 최근에는 실시간대에서의 온-라인 최적화가 시도되기도 하고 일부 상업화되어 있다. 온-라인 최적화는 공정 모델 개발, 모델 인식 방법, 그리고 최적화방법들이 조합되어야 하는 기법으로 본 연구에서는 이러한 증류공정의 온-라인 최적화의 구현에 최종 목표를 두고, 먼저 모델의 개발과 모델인식법에 관한 연구를 수행하였다.

증류공정의 경우 엄밀모델은 각 단계에서의 농도, 엔탈피 수치식등으로 구성되며, 단효율과 내부 환류비등을 조절하여 실제 공정을 표현하지만, 식의 방대함과 비선형성등으로 인하여 실시간대에서 이용하는 것은 거의 불가능하다. 따라서 실시간대에서 모델조정이 가능하며, 공정의 물리적현상을 잘 표현할 수 있는 모델이 필요하다. 모델 간략화에 관한 연구는 많이 행해지고 있으나, 대부분 제어계 구성을 위한 선동된 동특성 모델에 관한 것으로, 최적화에 응용할 수 있는 정상상태 모델에 관한 것은 많지 않다. 더우기 동특성 모델인식에 의한 정상상태 최적화를 수행할 수 있도록 정상상태와 동특성에서 모두 모델을 간략화할 수 있어야 하고, 조정 가능한 몇개의 파라메타를 갖고 있어 실제 운전 자료로부터 이 값을 추정해 낼 수 있도록 explicit한 관계를 갖아야 한다. 증류공정의 차수감소모델에 관한 연구는 Espana[1], Caglayan[2] 등의 많은 연구가 행해졌으나, Cho와 Joseph[3]이 제시한 직교 배열법을 이용한 다항식 근사에서의 증류공정모델의 간략화방법이 이전의 다른 근사 모델과는 달리 증류공정의 물리적 관계를 그대로 보존하며 수학적 근사만이 도입되었다는 점에서 매력적이다. Kim등[4]은 이 모델에 원포단 부근의 정확도를 향상시키기 위한 PMA(Partitioned Modular Approximation) 방법을 개발하여 이를 정상상태 모델의 근사에 적용하여 그 성능을 검증하였다. 이후 Choi[5]는 고차다항식이 가지고 있는 근본적인 문제점인 내삽시 배열점 사이에서 잔물결이 심한 특성을

개선하기 위해 cubic spline함수를 PMA에 적용한 방법을 제시하였다. 또한 증류탑의 정류부와 탈거부에서 평형특성이 각각 다른 상대휘발도로 표현된다고 가정함으로써 비이상성혼합물의 평형특성도 고려할 수 있도록 하였으며, 정류부와 탈거부의 액체 단체류량이 서로 다르다고 가정함으로써 탑내 현상을 좀더 정확히 표현할 수 있도록 하였다. 그러나 Choi가 제시한 모델은 평형 관계를 상대휘발도를 이용함으로써 모델식이 비선형적으로 형성되어 정상상태 및 동특성계산시에 복잡하고, 비선형필터를 이용한 모델인식에 있어서도 고차 근사를 해야 하는 어려움이 있다.

본 연구에서는 이러한 문제를 해결 하기 위하여 평형관계식을 각 배열점에서의 평형상수를 이용함으로써 모델식을 역상 물본물에 대하여 선형으로 구성하였다. 이렇게 구성된 모델은 모델인식에 있어서 평형관계를 상대휘발도를 이용한 모델보다 조정 변수의 수가 다소 증가하지만[6], 선형모델의 조정변수예측은 Extended Kalman Filter(EKF)에 약간의 보정을 가함으로써 쉽게 수행할 수 있는 장점을 갖고 있다.

비선형필터를 이용한 변수예측기법은 많은 연구결과가 발표되었으나 선형계에 대해서는 Ljung[8]에 의하여 Extended Kalman Filter(EKF)에 대한 보정이 이루어짐으로써 일단락이 지어졌다. 그러나 이 연구는 Predictive version에 대한 것으로 이후 Ursin[9]은 EKF의 Filterd version이 Predictive version보다 수렴성이 좋다는 것은 보였지만 완전한 보정은 하지 않았다. 최근 정등은[6]은 비선형계에 대하여 Filterd version에 Ljung에 의한 보정과 유사한 보정을 가하여 변수예측을 시도하였으나 계 자체의 비선형성으로 인하여 별 효과는 얻지 못하고, 비선형계에서는 Iterative EKF에 보정을 가한 결과가 우수함을 보였다. 본 연구에서는 구성된 차수감소모델이 선형식임으로 EKF의 두 version을 모두 적용하여 그 성능을 비교하고, 엄밀모델을 이용하여 증류공정의 모델인식을 모사하고자 한다.

2. 본론

2-1. 증류공정의 차수감소 모델의 개발

직교 배열법에 의한 증류단의 근사, PMA 및 cubic spline함수를 이용한 내삽 등에 관한 구체적인 내용은 참고문헌 [3], [4] 및 [5] 등에 있으므로, 여기서는 기

$$\begin{array}{c}
 \left[\begin{array}{c}
 K_{ns-1} \cdot 0 \quad -b_1(z_{ns-1}) \\
 \vdots \\
 0 \quad \quad \quad K_1 = -b_1(z_1)
 \end{array} \right] \\
 (nr+ns-2) \times (nr+ns-1)
 \end{array}$$

$f_2^T = [0, \dots, 0, b_{ns}(z_{ns-1})(1-q)/V_s, \dots, b_{ns}(z_1)(1-q)/V_s], \quad (nr+ns-2) \times 1$
 증류공정의 연속시간대 차수감소모델식(7)은 배열점의 수가 탑상부에서 n_r 개, 탈거부에서 n_s 개 일 때 풀어야 할 최종식의 갯수는 n_r+n_s-1 개이며, 6개의 조정변수 $K_j \times 4, H_r$ 및 H_s 를 갖는다.

2-2. 정상상태 및 동특성 모사

직교배열법과 cubic spline함수를 이용하여 구한 증류공정의 차수감소모델의 모사를 위하여 설정한 분리계는 물-메탄올의 2성분계이다. 모사하려는 증류단에 대한 사양과 모사조건은 표 1.과 같다. 모사에 필요한 평형상수를 구하기 위하여 Professional Distillation이라는 패키지를 이용하였고, 차수감소모델의 정상상태 및 동특성 성능 평가는 단별계산에 의한 단순화한 엄밀모델을 만들어 행하였다.

정상상태 차수감소모델은 식(7)의 좌변항을 0으로 놓으면 쉽게 구할 수 있다. 즉,

$$X = -K_4^{-1} f_4 X_f \quad (8)$$

그림 2.는 내부배열점을 정류부와 탈거부에서 각각 $z=0.5$ 로 취한 경우, 평형 관계식에 의해 분리된 4가지 모델에 대한 엄밀 모델과의 비교로서 네가지 모델 모두 좋은 근사를 나타낸다. 이 모델 역시 평형관계를 상대휘발도를 이용한 기존의 모델[6]과 마찬가지로 분리계나 분리정도에 따라 cubic spline함수의 경계 조건과 내부 배열점의 위치를 조정하면 실제계의 정상 상태를 모사할 수 있는 보편성을 갖는다.

Table 1. Column dimensions and simulation conditions.

Total no. of stage	15	
Type	sieve	
I.D.	3"	
Tray space	6"	
Feed stage	8	
Feed flowrate	3.6 mol/min	
Feed condition	50 : 50 mol%	
	saturated liquid	
Distillate flowrate	1.8 mol/min	
Reflux ratio	1.0	
Normal Holdups	Reflux drum	7.5 mol
	Rectifying sect.	3.5 mol
	Stripping sect.	5.5 mol
	Reboiler	50.0 mol
No. of internal collocation points	$n_r=n_s=3$	

동특성모사를 위한 연속시간대에서의 모델식(7)의 적용은 Hamming's Predictor-Corrector Method를 이용한 적분기를 사용하였다. 그림 3은 단내의 기상유량에 1%의 계단감소함수를 가하고, 탑상조의 수위를 탑상 유출액으로 제어한 경우의 결과로 각 모델들의 응답이 엄밀모델과 유사한 형태를 나타내었다.

실시간 모델인식등을 위해서는 식(7)의 이산시간대 모델로의 변환이 필요한 바 유한차분에 의한 근사를 행하여 구성하였다. Sampling time은 공정을 온라인으로 전산제어하는 경우에 이론적으로[7] 시상수의 1/10-1/

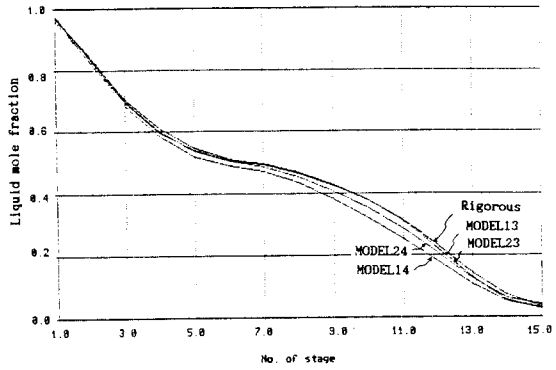


Fig. 2. Steady state concentration profiles of the reduced-order models [$z_r=z_s=(.0, .5, 1.0)$].

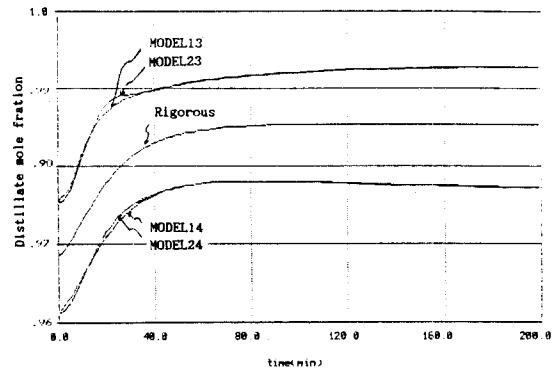


Fig. 3. Comparison of dynamic responses of the top product concentration for the case that reflux drum level is controlled by distillate flow.

20 정도를 취하며, 증류탑의 시상수가 대략 30분 정도 이므로 모사를 위한 sampling time h 는 90초를 취하였다. 유한 차분법에 의한 근사는 전방, 후방 및 중심 차분이 있으며, 이 세가지 방법을 모델에 적용하여 모사한 결과 본 연구에서 취한 sampling interval에서는 모두 좋은 근사결과를 보였다. 따라서 계산의 간편성을 우선하여 역행렬을 구하는 과정이 없는 전방차분을 이용한 이산시간대의 모델을 모델 인식등의 과정에 이용할 수 있으며 이에 의한 근사식은 식(9)와 같다.

$$X_{k+1} = (I + hK_4)X_k + hf_4 X_f \quad (9)$$

이상의 모사결과를 통하여 본 연구에서 고안한 기상과 액상의 평형관계를 각 배열점에서의 평형상수를 이용하여 선형으로 구성된 증류공정의 차수감소모델은 실시간대에서 계산이 가능하고, 증류탑의 물리적 특성을 그대로 유지하는 기존의 차수감소모델의 장점을 갖고 있다.

2-3. 비선형 필터를 이용한 모델인식

앞 절에서 구성된 증류공정의 차수감소모델은 여러 가지 가정에 의한 단순화한 모델식이므로 공정 제어 및 최적화등에 이용하기 위해서는, 모델이 가진 조정변수를 실제 계로부터 얻은 자료를 이용하여 조정함으로써 실제 계를 잘 표현할 수 있는 모델로 만들어 주는 모델 인식과정이 필요하다. 모델식 내의 변수를 인식하기 위하여 비선형 필터를 이용하는 방법은 많은 연구가 행해졌으며, 그 중에서도 Extended Kalman Filter(EKF)를 이용하는 방법이 가장 많이 사용되어 왔다. 특히 Ljung[8]은 선형모델에 대하여 EKF를 이용한 모델인식에 있어서, Predictive Recursive Error Method(PRE)

와의 비교를 통하여 EKF 알고리즘에서 이득행렬의 파라메타에 대한 민감도를 고려해야만 예측된 변수가 오차 없이 수렴한다는 것을 밝힌 바있다. 그 후 Ursin[9]은 EKF의 Filtered version이 Predictive version보다 파라메타 수렴성이 우수하다는 것을 보였으나 수렴값이 바이어스되는것을 완전히 해결하지는 못하였다.

앞 절에서 구성한 증류공정의 이산시간대 차수감소 모델식을 모델인식 과정을 모사하기 위하여 추정식과 함께 다시 써보면 식(10)과 같다.

$$X(k+1) = A(\theta, k) X(k) + b(\theta, k) + w(k) \quad (11)$$

$$m(k) = C(\theta, k) X(k) + n(k)$$

여기서, $\theta^T = [H_r, H_a, K_{1r}, K_{1i}, K_{2r}, K_{2i}]$

$$A = (I + hK_4), \quad b = hf_4 x_r$$

M: 측정치 벡터, w, n: 백색잡음

파라메타 예측을 위하여 식(12)와 같이 상태벡터에 미지의 파라메타 벡터 θ 를 확장시키면 식(11)은 식(13)과 같은 비선형 필터링 문제가 된다. 즉,

$$z(k)^T = [X(k)^T, \theta(k)^T] \quad (12)$$

$$z(k+1) = f(z(k)) + (w(k), 0)^T \quad (13)$$

$$m(k) = h(z(k)) + n(k)$$

여기서, $f(z(k)) = \begin{bmatrix} A(\theta, k)x(k) + b(\theta, k) \\ \theta(k) \end{bmatrix}$

$$h(z(k)) = C(\theta, k)x(k)$$

잘 알려진 바와 같이 식(13)과 같은 비선형식에 EKF를 적용하는 데는 두 가지 방법이 있다[10]. 즉 Predictive version과 Filtered version이 있으며, 구체적인 내용과 알고리즘은 참고문헌 [10] 등에 잘 나와있다.

본 연구에서는 먼저 공정을 차수감소 모델로 두고 각 필터들-Predictive EKF(PEKF), Ljung에 의한 보정이 행해진 Modified PEKF(MPEKF), Filtered EKF(FEKF) 및 FEKF에 보정을 한 Modified FEKF(MFEKF)-의 성능을 비교하였다. 차수감소 모델의 구성에서 분류된 네가지 모델에 대하여 위의 필터들을 모두 적용한 결과, 원료 투입단 부근의 평형상수를 예측하지 않는 모델 23이 가장 우수한 결과를 보여 이 모델을 중심으로 비교를 행하였다. 모사조건은 앞 절에서와 마찬가지로 표 1.과 같으며, 필터링을 이용한 변수예측에는 잡음항만 있으면 되지만 확실하게 계를 여기서켜주기 위하여 기상유량에 1%크기의 PRBS(Pseudo Random Binary Sequence)를 추가하였다. 그림 4에서 6까지는 여섯 개의 예측변수 중에서 정류부와 탈거부의 액체체류량인 H_r 과 H_a 의 수렴성을 PEKF와 MPEKF, FEKF와 MFEKF 및 MPEKF와 MFEKF에 대하여 비교한 것이다. 그림에서 보듯이 MPEKF가 PEKF보다 수렴성과 수렴속도가 좋으며, FEKF가 MPEKF보다, MFEKF가 MPEKF보다 우수하다. 나머지 예측변수인 각 배열점에서의 평형상수 역시 위와 같은 결과를 나타내며 상태벡터-배열점에서의 액상농도들에 대한 필터링은 그림 7.에 MFEKF를 사용하여 탑상 유출액의 농도 X_D 와 탈거부 중간단의 농도 X_4 만을 나타내었으나 나머지 필터들 모두 그림 7.과 유사한 우수한 결과를 보였다. 또한 각 필터들에 대하여 noise covariance의 영향을 살펴본 결과 그 값이 1.에서 1000. 사이에서는 특이할 만한 사항은 발견할 수 없었고, 다만 값이 클수록 약간 수렴성이 좋아질 뿐이었다. 필터링에 있어서 상태벡터와 파라메타 벡터의 초기값의 영향은 합리적으로 주었을 때 나타나지 않았다.

다음은 공정을 좀더 실제계에 근사하게 취한 경우에 차수감소 모델에 비선형 필터를 부착하여 모델인식을 수행함으로써 실제계의 상태를 어느정도 표현 할 수 있는지를 알아보았다. 즉 공정을 단별계산에 의한 엄밀동특성 모델로 취하고, MFEKF로 추정된 평형상수 값들을 차수감소 모델에 적용하여 구한 정상상태 액상농도 분포를 엄밀모델에 의해 구한 것과 함께 그림 8.에 보였다.

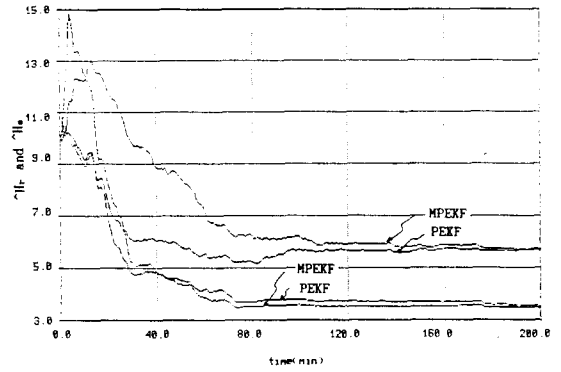


Fig. 4. Trajectory of the tuning parameters by PEKF and MPEKF.

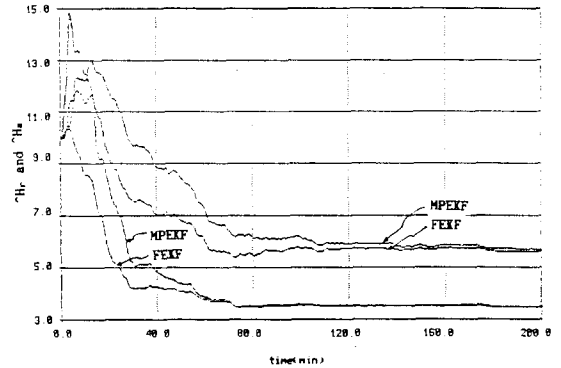


Fig. 5. Trajectory of the tuning parameters by FEKF and MPEKF.

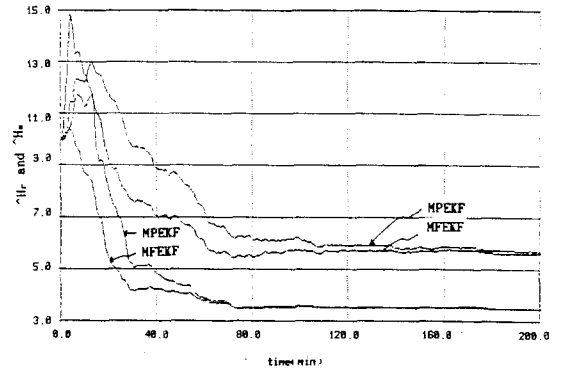


Fig. 6. Trajectory of the tuning parameters by MFEKF and MPEKF.

추정된 파라메타 값들도 조금씩 벗어나며, 따라서 그림에서 보듯이 엄밀모델과 차이를 보인다. 그러나 이것은 차수감소 모델을 단순화하여 구성하였기 때문에 나타나는 당연한 결과로 분리정도를 나타내는 양 끝점이 잘맞고 농도 분포 형상이 유사하므로, 증류 공정을 제어하거나 최적화하는 데 이 모델을 사용할 수 있을 것이다. 실제 공정을 대상으로하는 경우에는 계의 비선형성과 정상상태에서의 비이상성은 추정변수 중에서 평형상수가 그리고 동특성에서는 액체체류량이 각각 중요시라 기대된다.

3. 결론

실시간대에서 이용이 가능하고 증류공정의 물리적 특성을 지닌 차수감소 모델을 선형적으로 구성하였다.

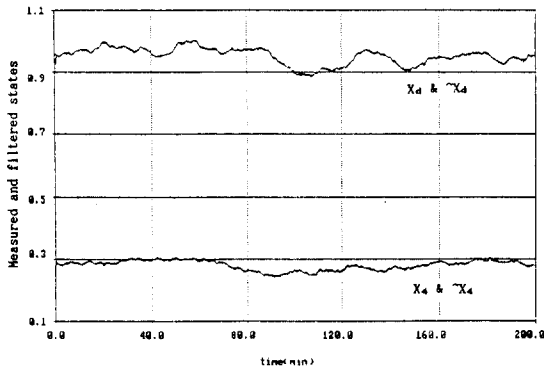


Fig. 7. Measured and estimated state values of the process for MFEKF.

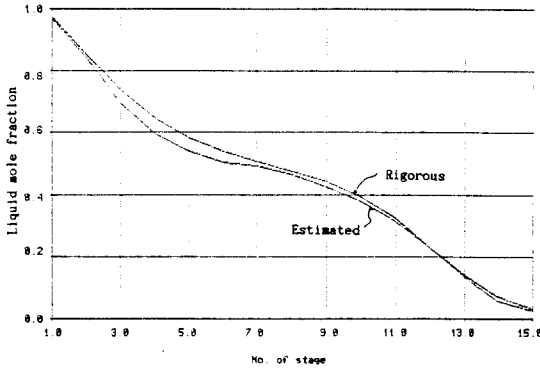


Fig. 8. Comparison of Steady state concentration profiles of rigorous and reduced-order model identified by MFEKF

이 모델과 함께 비선형 필터들 중에서 여러 형태의 EKF를 이용하여 선형 모델에 대한 인식 모사를 행한 결과, 이 모델과 MFEKF를 이용하면 실제 증류공정을 잘 표현할 수 있고 따라서 증류공정의 제어 및 최적화 등에 사용할 수 있으리라 기대된다.

4. 참고 문헌

1. Espana, M. & I.D. Landau, "Reduced-Order Bilinear Models for Distillation Columns", *Automatica*, **14**, 345, 1978.
2. Caglayan, C. & E.H. Chimowitz, "Analytic Reduced-Order Models for Large Equilibrium Staged Cascades", *AIChE J.*, **31**, 12, 1985.
3. Cho, Y.S. & B. Joseph, "Reduced-Order Steady-state and Dynamic Models for Separation Processes", *AIChE J.*, **29**, 261, 1983.
4. H.S. Kim, K.S. Lee, K.P. Yoo, W.H. Lee & H.S. Park, "Two-part Modular Reduced Order Model for Multi component Multistage Distillation Columns", *J. Chem. Eng. Japan*, **22**, 1, 1989.
5. 최 상열, "증류탑의 차수감소 모델에 대한 연구", 석사학위논문, 서강대학교, 1988.
6. 정 재익, 최 상열, 이 광순, "증류공정 차수감소 모델의 개발 및 Extended Kalman Filter에 의한 실시간에서의 조정", *KACC 논문집*, **1**, 466, 1988.
7. Åström, K.J. & Wittenmark, B., *Computer Controlled System*, Prentice-Hall, N.Y., 1984.
8. L. Ljung, "Asymptotic Behavior of the Extended Kalman Filter as a Parameter Estimator for

Linear Systems", *IEEE*, **24**, 1, 36, 1979.

9. B. Ursin, "Asymptotic Convergence Properties of the Extended Kalman Filter Using Filtered State Estimates", *IEEE*, **25**, 6, 1207, 1980.

10. A. H. Jazwinski, *Stochastic Processes and Filtering Theory*, Academic Press, N.Y., 1970.