

## 증류탑의 실시간 최적화

최 용 진, 노 균, 윤 인 섭  
서울대학교 공과대학 화학공학과

### On-line Optimization of a Distillation column

Yong-Jin Choe, Kyun Lo, En-Sup Yoon  
Dept. of Chem. Eng.  
Seoul National University

#### ABSTRACT

A new on-line optimization technique of a distillation column is presented. The equation decoupling method and the simultaneous solution method are combined to simulate the distillation process. The storage requirement is small enough to run on a PC. A improved successive quadratic programming is used to find the optimum operating conditions. The optimizer is intensively tested by using the dynamic simulator, SPEEDUP. After this, the technique is applied to a binary distillation column that treats methanol and water.

#### 1. 서론

실시간 공정최적화는 조업 제약조건을 만족하면서 주어진 목적함수를 최대로 해 줄 수 있는 조업조건을 잘 정의된 모델을 통하여 찾고 이를 연속적으로 실행하여 공정이 최적의 상태로 운전되도록 하는 것을 말한다. 대부분의 공장들은 나름대로의 최적화 기법들을 사용한다. 오랜동안의 조업경험으로부터 얻은 지식과 기술을 통해서 조업자가 직접 값을 결정해서 조작하는 경우에서부터 잘 정의된 목적함수와 제약조건들을 가지고 컴퓨터를 이용하여 체계적으로 최적점을 찾아내어 사람의 손을 거치지 않고 직접 조작되는 경우까지 다양하다. 실시간 최적화가 바로 후자에 속한다 하겠다. 실시간 최적화는 현재의 조업조건들에 대한 정보를 제어계나 센서로부터 받아들이어 공정모사기를 통하여 현재의 조업상태를 파악한 다음 목적함수를 최대로 해 줄 수 있는 최적 조업조건을 계산하여 제어계의 설정치(Set Point)로 제공해 주는 동작을 반복한다.

제어의 계층적 구조에서 보면 실시간 공정 최적화는 제어단계와 생산계획단계의 사이에 위치하며 상위단계인 계획단계로부터 생산할당량과 같은 자료를 받고 하위단계인 제어단계나 공정으로부터 현재 상태를 나타낼 수 있는 데이터를 받게 된다. 이러한 데이터로부터 현재 상태를 계산해 내고 이를 초기점으로 하여 최적화 계산을 실행하여 현재의 제약조건 아래에서 가장 이익이 많은 조업조건을 찾아 하위단계인 제어단계의 설정치를 제공해 준다.

컴퓨터 하드웨어(Hardware)와 최적화 알고리즘의 한계성 때문에 과거의 공정최적화에 대한 노력은 설계부문을 벗어나지 못하였다. 1960년대부터 시작된 최적화는 몇몇의 경우를 제외하고

대부분 실패하였는데 하위단계인 제어단계부터 제대로 동작되지 않았고 최적화 알고리즘도 발달되지 못하여 신뢰할 만한 결과를 얻지 못하였기 때문이다.

장치산업이라 불리는 대부분의 화학공장들은 연속적인 조업을 하고 있으며 대량생산을 하고 있기 때문에 몇 %의 이익도 상당한 양이 될 수 있다. 또한 원료와 제품의 가격 및 품질, 생산량과 그 비율, 원료의 조성, 장치의 유용도, 성능, 환경오염 기준등의 변화가 많기 때문에 실시간 최적화의 필요성은 크다고 하겠다.

#### 2. 본론

실시간 공정최적화를 수행하기 위해서는 제어계가 효과적으로 수행될 수 있어야 하고 공정을 설정치로 잘 유지시켜 줄 수 있어야 한다. 실시간 최적화 기구는 크게 두 부분으로 나눌 수 있다. 하나는 최적화 기구이고 다른 하나는 모사기이다. 모사기는 최적점을 찾아가는데 있어서 독립변수들을 변화 시켰을때 공정상태가 어떻게 변화하는가를 알려주는 역할을 한다. 최적화 기구는 공정의 경제성을 잘 나타내주는 목적함수와 공정의 제약조건, 그리고 최적화 알고리즘으로 이루어져 있다. 목적함수는 일반적으로 변화가능한 효과들만을 고려하며 전형적으로 다음과 같은 형태를 갖는다.

$$\text{목적함수} = \text{생산물가격} - \text{원료가격} - \text{유틸리티비(Utility cost)}$$

실시간 공정최적화의 절차를 순서적으로 나타내면 그림 1과 같다. 먼저 공정이나 제어계로부터 현재의 자료들을 받아들이어야 한다. 이들은 적절한 절차를 거쳐서 믿을수 있는 값으로 계산되어지고 이 값들은 현재의 공정상태를 모사하는 초기값으로 사용된다. 공정모사와 최적화를 통하여 새로운 독립변수들이 계산되어지고 주어진 조건을 만족하게 되면 제어계의 설정치로 보내지게 된다.

#### 2-1. 증류탑 모사기의 개발

실시간 최적화에 사용될 모델은 중속변수의 변화를 나타낼 수 있어야 하며 정밀해야 하고 반복계산 되더라도 안정하여야 하며 수렴이 보장되어야 한다. 또한 매우 효과적인 방법으로 실행되어야 하고 유지보수가 쉬워야 한다. 다만 증류탑의 정상상태 모사는 일반적으로 반복계산을 요구한다. 증류탑 모사 방법은 크게 두가지로 분류된다. 하나가 방정식 분리 (Equation decoupling) 방법이고 다른 하나가 동시수렴법 (Simultaneous solution) 이다. 전자는 반복계산변수를 선택하여 방정식들을 몇

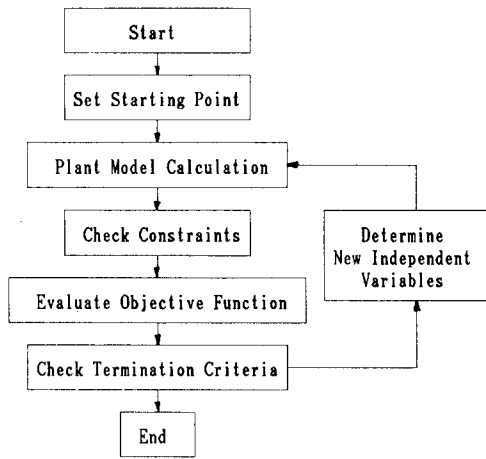


그림 1. 최적화 절차

Fig 1. Optimization Procedure

개의 집단으로 분류한 후 각각을 독립적으로 풀어가는 방법으로 서 단별로 계산해 나가는 방법, ⊕법, 그리고 인사이드-아웃 (Inside-out) 알고리즘이 이 부류에 속한다. 이 방법에 사용되는 기억장소는 일반적으로 작으나 다루는 계가 비이상성을 띠 경우 매우 비선형적이고 상호작용이 크기 때문에 평형상수값이 온도와 조성에 영향을 받게되어 수렴속도가 낮고 안정성의 문제가 발생할 수 있다. 후자에 속하는 방법들은 Newton-Raphson 기법을 사용하는 방법으로서 식들을 선형화하여 모든 변수들에 대하여 풀게 된다. 이 방법으로 증류탑 문제를 풀기 위해서는 일차도함수행렬(Jacobian matrix)을 만들어야 하고 이의 역행렬 계산도 필요하게 된다. 이 단계의 계산상의 노력은 평형상수값과 엔탈피의 온도와 조성에 대한 의존성을 나타내는 식에 의존하게 된다. Naphthali와 Sandholm(1971)의 알고리즘은 각 단의 액상과 기상의 유량과 온도를 반복계산변수로 선택하고 물질수지식과 에너지 수지식을 선형화 하여 이 변수에 대해 동시에 풀게 되어 있다. 일차도함수행렬은 상당한 양의 편미분항들을 갖게 되는데 이 단계가 시간을 많이 소모하는 단계이다. 일차도함수(Jacobian)행렬이 규칙적이기는 하지만 모든 변수들이 반복계산 변수가 되기 때문에 요구되는 기억장소가 매우 크다. 이 논문에서 채택한 알고리즘은 위의 두가지 방법의 장점을 갖고 있으면서 효율적으로 계산될 수 있는 방법이다. 이 방법은 안쪽루프에서 각 단의 온도와 각 성분의 액상의 유량을 반복계산변수로 선택하여 각 성분의 물질수지식과 물분율식을 Newton-Raphson법에 의해 풀었다. 바깥루프에서는 에너지 수지식과 각 단의 물질수지식을 가지고 각 단의 액상과 기상유량을 얻었다. 평형상수값은 온도의존성과 조성의존성, 그리고 휘발도특성의 곱으로 나타내었으며 이는 평형상수의 편미분 계산을 간단하게 해 주었다. 액상의 열역학적 성질은 UNIQUAC 모델을 사용하였으며 기상은 Virial 방정식을 사용하였다. 평형단 모델을 그림 2.에 나타내었으며 모델식들은 식 1)-4)와 같다.

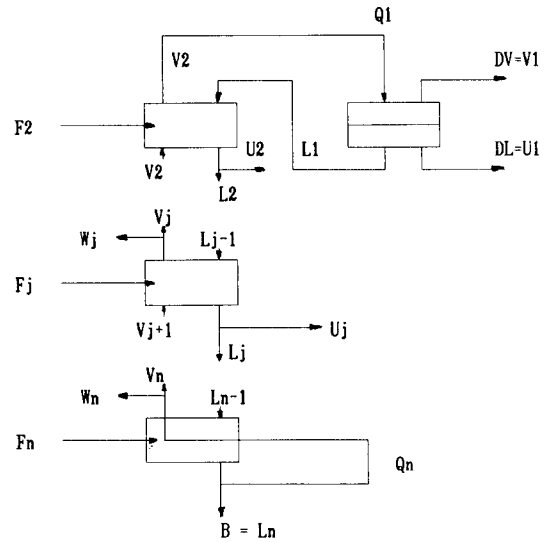


그림 2. 평형단 모델

Fig 2. Equilibrium Stage Model

물질 수지식

$$v_{ij} + w_{ij} + l_{ij} + u_{ij} - v_{ij+1} - l_{ij-1} - f_{ij} = M_{ij} \quad (i=1,c; j=1,n) \quad 1)$$

평형 관계식

$$v_{ij} = \frac{K_{ij} V_j}{L_j} l_{ij} \quad (i=1,c; j=1,n) \quad 2)$$

물분율

$$\sum_{i=1}^c \left( \frac{l_{ij}}{L_j} - \frac{v_{ij}}{V_j} \right) = S_j \quad (j=1,n) \quad 3)$$

에너지 수지식

$$L_{j-1}h_{j-1} + V_{j+1}H_{j+1} + F_jH_{Fj} + Q_j - (L_j + U_j)h_j - (V_j + W_j)H_j = 0 \quad (j=1,n) \quad 4)$$

평형상수의 온도와 조성에의 의존성은 Boston과 Britt(1978)가 제안한 식을 이용하여 구하였다.

$K_{bj}$ 는 온도만의 함수로써 상수  $\beta_{1j}$ ,  $\beta_{2j}$ 를 가지며 식 6)과 같이 표현된다.

휘발도  $\alpha_{ij}$ 는 식 7)과 같이 정의된다. 계산순서를 나타내면

1.  $L_j$ 와  $V_j$ ,  $l_{ij}$ 를 가정한다.
2. 끓는점 계산에 의해  $T_j$ 와  $K_{ij}$ ,  $v_{ij}$ 를 계산한다.
3.  $\beta_{1j}$ 와  $\beta_{2j}$ ,  $\alpha_{ij}$ 를 계산한다.
4.  $M_{ij}$ 와  $S_j$ 를 계산한다. 오차가 허용범위이면 단계 8.로 간다.

$$K_{ij} = \exp[\sum_{i=1}^c (y_{ij} \ln K_{ij})] \quad 5)$$

$$\ln K_{ij} = \beta_{1j} - \beta_{2j} T_j \quad 6)$$

$$\alpha_{ij} = K_{ij} / (K_{ij} \gamma_{ij}) \quad 7)$$

5. 일차도함수(Jacobian)행렬을 계산한다.

6. Newton-Raphson법에 의해 각 변수들의 새로운 값을 계산한다.

7. 단계 4.로 간다.

8.  $L_j$ 와  $V_j$ 를 각 단의 물질수지식과 에너지수지식으로 부터 구한다.

9.  $\alpha_{ij}$ ,  $\beta_{1j}$ ,  $\beta_{2j}$ 를 계산한다.

10. 오차가 허용범위이면 멈추고 아니면 단계 4.로 간다.

희소행렬(Sparse matrix)을 처리하기 위해 Harwell의 MA28 AD를 사용하였다.

사용한 알고리즘은 Naphtali-Sandholm의 방법과 비교해서 4분의 1정도의 기억장소만이 필요하고 안정하였다. 그러나 계가 비이상성이 심하기 때문에 바칼루프에서도 온도의 보정을 해주었다.

### 2-2. 최적화 알고리즘의 개발

최적화 알고리즘은 커다란 크기의 문제도 다룰 수 있어야 하며 대부분의 화학공정이 비선형이고 목적함수나 제약조건까지 비선형인 경우가 많으므로 이들을 다룰 수 있어야 한다. 실시간으로 사용되어야 하므로 계산시간이 적어야 하고 해에 대한 신뢰도가 높아야 한다.

일반적으로 비선형 문제는 다음과 같이 정의된다.

$$\text{Min}_x f(x) \quad 8)$$

$$\text{Subject to } h_j(x) = 0 \quad j=1,2,\dots,m \quad 9)$$

$$g_j(x) \geq 0 \quad j=m+1,\dots,p \quad 10)$$

여기서 8)을 목적함수라 하고 9), 10)을 등식, 부등식 제약 조건이라 한다. 이러한 비선형 계획법의 해법으로는 여러가지가 있으나 이 논문에서는 연속이차계획법(SQP, Successive Quadratic Programming)을 사용하였다. 이 방법은 비교적 커다란지 않은 문제를 다루는 방법중에서 가장 좋은 것이라 알려져 있다. 이 방법은 비선형 문제(Nonlinear Programming)에 최적이 될수 있는 조건을 적용시키면 이차계획문제(QP, Quadratic Programming)를 만들 수 있는데 이를 풀어감으로써 최적점을 구하게 된다. 일반적으로 이차계획문제는 식 11)과 같이 정의된다.

$$\text{Min}_x f(x) = C^T x + 0.5x^T Qx \quad 11)$$

$$\text{Subject to } Ax \geq b \quad 12)$$

$$x \geq 0 \quad 13)$$

여기서 C는 계수벡터이고 A는 MXN의 행렬이며 Q는 대칭행렬이다.

Lagrange 함수를 정의하면

$$L = x^T C + 0.5x^T Qx - v^T(Ax-b) - u^T x \quad 14)$$

최적조건은 L의 미분들이 0이므로

$$\nabla_x^T L = C + Qx - A^T v - u = 0 \quad 15)$$

잉여변수(slack variable) y를 도입하여 Kuhn-Tucker 조건을 적용하면 다음의 연립선형방정식을 얻게 된다.

$$C + Qx - A^T v - u = 0 \quad 16)$$

$$Ax - b - y = 0$$

$$x \geq 0, u \geq 0, v \geq 0, y \geq 0$$

$$u^T x = 0 \quad v^T y = 0$$

결국 위의 연립방정식들을 풀면 된다. 연속이차계획법은 일반적인 비선형 문제를 풀기 위해 Lagrange 함수를 정의하고 Kuhn-Tucker 조건을 적용시키면

$$\nabla L = \nabla f(x) + \sum w_j \nabla h_j(x) = 0 \quad 17)$$

$$h(x) = 0$$

두 식을 선형화 시켜 정리하면

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 L & -J \\ -J^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla L \\ h \end{bmatrix} \quad 18)$$

가 되는데 여기서 J는 등식제약조건의 기울기 행렬이 된다. 그러므로 이 선형방정식들의 해는 다음의 이차계획법의 해와 같게 된다.

$$\text{Min } f(s) = s^T f(x) + 0.5s^T B s \quad 19)$$

$$\text{Subject to } g_j(x) + s^T \nabla g_j(x) \geq 0 \quad j=m+1,\dots,p$$

$$h_j(x) + s^T \nabla h_j(x) = 0 \quad j=1,\dots,m$$

여기서 s는 탐색방향이 되며 B는 Lagrange 함수의 이차도함수(Hessian) 행렬은 아니지만 이차도함수(Hessian)의 positive definite 근사가 된다. B는 이차도함수(Hessian)을 BFGS 식과 같은 update 방식으로 근사되어 사용된다. 실시간 최적화에 사용되기 위해서는 기억장소가 작고 빠른 시간에 풀어야 하고 해가 정확해야 한다. 그래서 연구되고 있는 것이 이차계획문제의 크기를 줄여보고자 하는 것이다. 이는 문제를 독립변수와 종속변수로 분리함으로써 이루어 질 수 있는데 Han(1975)이 이차도함수(Hessian) 행렬을 Quasi-Newton Update 기법으로 근사하였고 Powell(1977)이 Update Hessian 행렬의 positive definiteness를 보장하여 SQP 알고리즘이 초선형 수렴특성을 가짐을 보였다. Berna, Locke, Westerberg(1980)등이 QP의 크기를 독립변수 차원으로 줄일 수 있는 방법을 제시하여 계산량을 줄이고 Hessian Updating 벡터를 이용하여 저장용량을 크게 줄였다. Locke, Westerberg, Edhal(1983)등이 더욱 개선한 이 방법을 최적화 알고리즘으로 채택하였다.

### 2-3. 목적함수, 제약조건, 외란

$$\text{Min } C_1F + C_2Q_c + C_3Q_b - C_4D \quad (20)$$

목적함수는 식 20) 과 같이 전형적인 형태를 갖는 것으로 정하였다. 제약조건으로는 등식제약조건이라 할 수 있는 증류탑 모사기와 기기들(예: 펌프, 재비기의 스팀공급량)의 한계, 품질의 하한등의 생산 사양등이 사용되었고 외란으로 받아들여지는 것으로는 원료의 유량, 조성, 온도, 압력등이었다.

#### 2-4. 최적화 기구의 구조

본 연구에 사용된 최적화 기구는 그림 3.과 같은 몇 개의 부분으로 이루어져 있다. 각각을 이루는 화일을 간단히 소개하면 다음과 같다.

##### 입력 화일

**feed.dat** : 외란이라고 할 수 있는 원료의 성질들을 실시간으로 측정하여 주어진 시간동안 평균된 데이터 화일. 사용자의

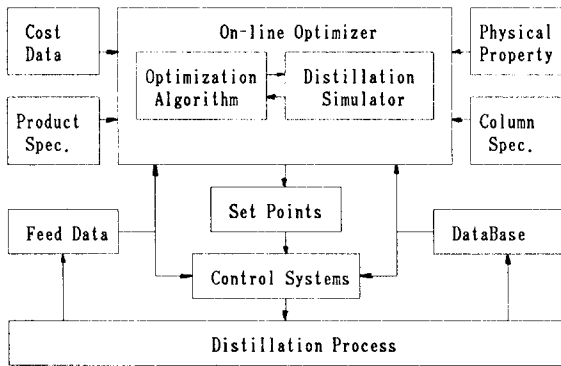


그림 3. 최적화 기구의 구조

Fig 3. Structure of Optimizer

손을 거치지 않고 자동으로 기록된다.

**simu.dat** : 공정의 현재 상태를 나타내는 데이터. 자동으로 기록된다. 이 데이터로부터 공정모델의 여러 매개변수들을 결정한다.

**spec.dat** : 사용자가 줄수 있는 여러가지 사양. 예를 들면 제품의 농도의 하한치

**colm.dat** : 단수, 응축기 형태와 같은 대상으로 하는 증류탑의 사양.

**phys.dat** : 대상으로 하는 물질들의 열역학, 물리화학적 데이터.

**cost.dat** : 목적함수에 사용되는 비용 계수.

출력 화일

**setp.dat** : 계산되어진 최적점을 기록한 화일. 제어계는 이 화일에서 설정치들을 읽어들인다.

**Distil.for** : 증류탑 모사 프로그램

**Optim.for** : 최적화 알고리즘

독립변수로 각 단의 압력과 탑상유량, 그리고 환류비를 선택하였고 종속변수로 응축기와 재비기의 열량, 탑상에서의 액상

유량을 선택하였다.

#### 2-5. 증류실험장치

실험실 규모의 증류탑이 설치되었는데 이 장치는 몰과 메탄올의 이성분계를 다루고 있으며 전응축기(Total condenser)와 재비기(Reboiler)를 포함해서 14단으로 이루어져 있다. 원료는 8단으로 주입되고 7개의 밸브를 조작할 수 있도록 되어 있다. IBM PC AT 호환기종을 사용하였으며 제어제와 동시에 작업을 할 수 있는 QNX를 오퍼레이팅 시스템(Operating system)으로 채용하였다. 측정장치로 각 단에 열전쌍을 설치하여 실시간으로 온도를 읽을 수 있도록 하였다. 원료와 탑상 및 탑저생산물의 농도를 분석하기 위해 기체크로마토그래피를 설치하여 약 3분정도의 시간지연을 두고 컴퓨터로 직접 데이터를 받을 수 있게 하였다.

#### 3. 결론

실제 실험하기에 앞서 동적모사기인 SPEEDUP을 사용하여 Micro VAX 상에서 실행해 보았다. 증류탑의 모사알고리즘으로는 방정식 분해법과 동시해법의 장점을 혼합한 방법을 사용하여 기억장소의 절약과 안정성의 향상을 가져왔으며 최적화 알고리즘은 SOP법에 기본을 두고 독립변수와 종속변수로 분리하여 기억장소의 절약과 계산의 간편함을 도모하였다. 고급제어제와 결합하여 실시간 최적화의 잇점을 최대로 살렸다.

#### 감사

본 연구의 수행을 위하여 연구비를 지원해 준 호남정유(주)에 감사드립니다.

#### 참고문헌

1. J.F.Boston and S.L.Sullivan Jr, "A New Class of Solution Methods for Multicomponent, multistage Separation Processes", *Can. J. Chem. Eng.* **52**, pp.52-63, 1974.
2. L.M.Naphtali and D.P.Sandholm, "Multicomponent Separation Calculations by Linearization", *AIChE J.* **17** (1), pp.148-153, 1971.
3. J.S.Wu and P.R.Bishnoi, "A Method for Steady-state Simulation of Multistage Separation Columns involving Nonideal Systems", *Comp. Chem. Eng.* **10**(4), pp.343-351, 1986.
4. M.L.Darby and D.C.White, "On-line Optimization of Complex Process Units", *Chem. Eng. Prog.* **84**(10), pp.51-59, 1988.
5. R.J.Loжек and B.D.Whitehead, "Integrated Advanced Control and Online Optimization in Olefins Plant", *Comp. Chem. Eng.* **13**(11), pp.1291-1297, 1989.
6. S.S.Jang, B.Joseph and H.Mukai, "On-line Optimization of Constrained Multivariable Chemical Processes", *AIChE J.* **33**(1), pp.26-35, 1987.
7. S.Macchietto, G.Stuart, T.A.Perris and G.R.Dissinger, "Monitoring and On-line optimization of Processes using SpeedUp", *Comp. Chem. Eng.* **13**(4), pp.571-576, 1989.

8. J.F.Boston and H.I.Britt, "A Radically Different Formulation and Solution of the Single-stage Flash Problem", *Comp. Chem. Eng.* **2**,pp.109-122,1978.
9. A.Lucia and J.Xu, "Chemical Process Optimization using Newton-Like Methods", *Comp. Chem. Eng.* **14**(2),pp.119-138,1990.
10. L.T.Biegler,"On the Simultaneous Solution and Optimization of large scale engineering systems", *Comp. Chem. Eng.* **12**(5),pp.357-369,1988.
11. T.J.Berna, M.H.Locke and A.W.Westerberg, "A New Approach To Optimization of Chemical Processes", *AIChE J.* **26**(1),pp.37-43,1980.
12. M.H.Locke, A.W.Westerberg and R.H.Edahl, "Improved Successive Quadratic Programming Optimization Algorithm for Engineering Design Problems", *AIChE J.* **29**(5),pp.871-874,1983.