

비선형 화학공정의 신경망 모델예측제어

송 정준^{*}, 박 선원
한국과학기술원 화학공학과

Neural Model Predictive Control for Nonlinear Chemical Processes

Jeong Jun Song^{*}, Sunwon Park
Process Systems Laboratory, Dept. of Chem. Eng., KAIST
373-1 Kusong-dong, Yuseong-gu, Taejon 305-701, Korea

Abstract

A neural model predictive control strategy combining a neural network for plant identification and a nonlinear programming algorithm for solving nonlinear control problems is proposed. A constrained nonlinear optimization approach using successive quadratic programming cooperates with neural identification network is used to generate the optimum control law for the complicate continuous / batch chemical reactor systems that have inherent nonlinear dynamics.

Based on our approach, we developed a neural model predictive controller (NMPC) which shows excellent performances on nonlinear, model-plant mismatch cases of chemical reactor systems.

I. 개 관

화학공정은 일반 선형 시스템과는 달리 시스템 자체에 대한 수치적 모델링이 난해하고 시스템 거동의 비선형성 (nonlinearity) 및 시변성 (time varying characteristics), 그리고 제어변수간의 강한 상호작용 (interaction)을 그 기본 특징으로 한다. 이러한 화학공정에 대한 제어문제는 공정출력을 우리가 원하는 설정치 (setpoint trajectory)로 따라가게 만드는 servo control과, 공정모델 자체에서 기인하는 disturbance (structure dependent internal disturbances that due to the model-plant mismatch) 및 공정 외부 환경으로 부터의 disturbance (external unmeasurable disturbances)를 제거하는 regulatory control이 동시에 이루어져

야 하는 특징을 갖는다. 현재까지 기존의 여러 제어 기법들은 제어대상 dynamic system을 표현하는 수학적 모델을 기술하고 여기에 해석적 기법을 적용하여 제어법칙 (control law)을 도출해내는 방법을 이용하여 왔으나, 실제 공정 환경에서는 dynamic system model을 얻기가 어렵고 system의 복잡성 및 불확실성으로 인하여, 얻어진 모델이 상당히 부정확하거나 물리적 의미가 없는 가정의 도입으로 인하여 실제 system이 변형되는 경우가 일반적이다.

특히 많은 화학공정들은 강한 비선형성으로 인해 일반적인 모델예측제어기법, 선형 및 다변수제어기법의 적용에 한계가 따르게 된다. 선형제어기의 경우 공정이 steady state 부근에서 운전되거나 상당량의 선형성을 가진 경우 만족할만한 제어성능을 보이게 되나, 많은 경우 화학공정의 동특성은 공정외부로부터의 큰 disturbance나 setpoint change등에 의해서 크게 바뀌게 되며 batch process등의 경우 광범한 운전범위 (operating region)를 가지고 있기 때문에 선형제어기법의 적용에는 한계가 있게되고 이로서, 화학공정에 대한 비선형 제어기법의 개발이 필요하게된다.

지난 수년간 화학공정의 제어를 위한 몇가지 비선형 제어기법들이 연구되었으며 이들 기법은 크게 input/output linearization에 의한 geometric approach 및 nonlinear programming approach로 구분된다. 그 몇가지 예로써는 Kravaris 와 Kantor (1990a,b)에 의한 geometric method 및 Economou 등 (1986)과 Li등(1988,1989,1990a,b)의 선형 IMC (internal model control)의 확장에 의한 Nonlinear IMC (NLIMC), Bequette(1991a,b)과 Sistu(1991)등에 의한 nonlinear predictive control (NLPC)기법 등이 있다.

이 중 nonlinear programming approach의 기본적 장점들은 아래와 같이 요약될 수 있다.

1. 공정의 time delay를 explicit하게 다룰 수 있다.
2. 공정의 상태변수 및 조작변수 (state and manipulative variable)에 대한 constraint를 explicit 하게 다룰 수 있다.
3. 공정출력의 future prediction을 이용하여 nonminimum-phase process를 쉽게 다룰 수 있다.
4. 미래의 setpoint change 정보를 이용함으로써 batch control, schedule 및 coordinated operational change 등에 효과적으로 대응할 수 있다.

그런데 실제로 제어대상공정의 model을 기술하기 난이 하거나 공정상태변수의 미분식으로 표현하기 어려운 경우에는 이러한 predictive control algorithm 적용에 한계가 있게되므로 process model-free한 estimation 기법을 개발하는 것이 필요하게된다.

본 연구에서 제안하고자 하는 nonlinear predictive control 기법은 신경망을 이용하여 process의 동특성을 학습시켜 predictive controller의 model로써 사용하며, 이 신경망에서 얻어지는 제어변수의 미래성향 (future trend)을 가지고 constrained nonlinear optimization algorithm의 하나인 SQP (successive quadratic programming) code를 이용하여 매 step optimum control action을 출력할 수 있게 한다.

개발된 신경망 모델예측제어 체계는 화학공정중 그 경제적 중요성이 높은 반면 고도의 비선형성으로 인해 다른 분야에 비해 우리가 원하는 operating region에서의 정밀한 제어가 어려운 반응기 시스템 (continulus / batch Reactor System)에 적용하였다. 제안하는 neural model predictive control (NMPC) 제어체계는 기존의 제어방법에 비해 시스템이 자체적으로 가지고 있는 비선형성 및 외부 공정환경으로부터의 외란에 대해 강건한 제어 performance를 보였다.

II. 제어시스템 설계

화학공정 제어용 제어시스템 설계의 특성

현재 신경망 제어기법을 robotics 및 mechanics 분야에서 응용한 결과들은 상당히 많은 부분의 진척이 있으나 [1,4,6,13,14], 화학공정에 이를 응용하려는 시도는 여러 가능성들에 대한 실험단계에 머물고 있다.

근본적으로 화학공정은 본 연구에서 다룬 화학반응기 시스템과 같이 장시간 연속적 혹은 batch-wise하게 운전되는 것이 대부분이며, 신경망을 이용한 제어를 개발했음지라도 그 학습을 위하여 공정을 시험 운전한다는 것은 robot 제어를 위해 제어를 몇번이고 학습시킬 수 있는 것에 비해, 비용 및 시간적 측면에서 비현실적이며 그 제어문제는 추치제어 (setpoint control :servo problem)와 병행하여 정치제어 (external disturbance rejection :regulatory problem)가 중요한 부분을 차지하고 있고, 공정자체의 복잡한 동특성 및 비선형성으로 인해 그 모델링이 난해할 뿐만 아니라, adaptive control 기법 및, standard model predictive control을 적용함에 있어 상당히 많은 양의 가정을 도입하여 공정 모델 자체를 선형화 하여 이용하기 때문에, 그 제어 신뢰도 및 제어기의 performance가 저하되는 것이 특성이다.

본 연구에서의 제어 Strategy

화학반응기 시스템의 시간에 따라 변화하는 non-linear dynamics를 identify하기 위하여 random control signal에 대한 process state를 modeling할 수 있는 Neural Identifier Network과 실제 control command를 생성하는 SQP를 이용한 constrained nonlinear optimization module의 조합으로 Identification & Control 기능을 수행 하도록 한다.

III. 결 론

기존의 제어 방법으로 제어하기가 어려운 non-linear하고 unstable한 특성을 가진 화학반응기 시스템에 대해 nonlinear predictive identification / control strategy를 적용함으로써, 우리가 원하는 조업 range에서 process characteristics 및 외부 disturbance에 강건한 신경망 모델예측제어 체계를 설계 하였으며, 만족스러운 제어 성능을 얻었다.

본 연구에서 다루어진 주요 논의는 다음과 같다.

1. 신경망을 이용한 복잡한 비선형성을 지닌 화학공정의 identification
2. neural identification network에 의한 prediction 기능을 가진 가진 신경망 모델예측제어 체계의 개발
3. 실제 화학공정에서의 적용 및 제어성능 평가

IV. 참고 문헌

1. Barto A.G., "Connectionist Learning for Control", *Neural Networks for Control / edited by W. Thomas Miller III et. al.*, pp5-58, The MIT Press, 1990
2. Bequette, B.W., "Nonlinear control of chemical process analysis; A review", *Ind. Eng. Chem. Res.* 1991a, 30, pp1391-1413
3. Bequette, B.W., "Nonlinear predictive control using Multi-rate sampling", *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 1991b, vol69, Feb., pp136-143
4. Chu R., et. al., "Neural Networks for System Identification", *Proc. 1989 ACC*, pp916-921
5. Economou, C.G., M. Morari, and B.O. Palsson, "Internal Model Control. 5. Extension to Nonlinear Systems", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 1986, 25, pp403-411
6. Kawato Mitsuo, et. al., "Hierarchical Neural Network Model for Voluntary Movement with Application to Robotics", *IEEE Control Systems Magazine*, 1988, April, pp8-16
7. Kravaris, C. and J.C. Kantor, "Geometric Method for Nonlinear Process Control; I. Background", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1990a, 29, pp2295-2310
8. Kravaris, C. and J.C. Kantor, "Geometric Method for Nonlinear Process Control; II. Controller Synthesis", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1990b, 29, pp2310-2324
9. Li, W.C. and L.T. Biegler, "Process control strategies for constrained nonlinear systems", *Ind. Eng. Chem. Res. Des.*, 1988, pp1421-14334.
10. Li, W.C. and L.T. Biegler, "Multistep, Newton-type control strategies for constrained, nonlinear processes", *Chem. Eng. Res. Des.*, 1989, 67, pp562-577
11. Li, W.C. and L.T. Biegler, "Newton-type controllers for constrained nonlinear processes with uncertainty", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1990, 29, pp1647-1657
12. Li, W.C., Biegler L.T., Economou C.G., and M. Morari, "A Constrained Pseudo-Newton Control Strategy for Nonlinear systems", *Comp. Chem. Eng.*, 1990, 14, pp451-465
13. Miller, W. Thomas,III, et. al., "Real-Time Dynamic Control of an Industrial Manipulator using a Neural-Network-Based Learning Controller", *IEEE Trans. Robotics and Automation*, Vol.6, No.1, Feb., pp1-9, 1990
14. Psaltis Demetri, et. al., "A Multilayered Neural Network Controller", *IEEE Control Systems Magazine*, 1988, April, pp17-21
15. Sistu P.B. and B.W. Bequette, "Nonlinear predictive control of uncertain processes; Application to a CSTR", *AIChEJ.* Nov., 1991, vol37, No.11, pp1711-1723

Control law synthesis on constrained nonlinear optimization algorithm

$$\min \Phi(u) = \int_{t_k}^{t_k+T_p} e^{2dt} = \sum_{i=k+1}^{k+P} [y_{sp}(i) - y_{pred}(i)]^2$$

$$u(k), \dots, u(k+M-1)$$

subject to

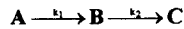
- (1) $x^* = f(x, u, p, l)$
; *dynamic model constraints*
- (2) $y_m = g(x)$
; *the model outputs are a function of the state variables*
- (3) $u_{\min} \leq u(i) \leq u_{\max}$
; *absolute constraints on the manipulate variables*
- (4) $u(i-1) - \Delta u_{\max} \leq u(i) \leq u(i-1) + \Delta u_{\max}$
; *velocity constraints on the manipulate variables*
- (5) $u(i) = u(k+M-1)$ for all $i > k+M-1$
; *after the M time step, it is assumed that the control action is constant*
- (6) $x_{\min} \leq x(i) \leq x_{\max}$
; *state variable constraints*
- (7) $y_{\min} \leq y(i) \leq y_{\max}$
; *output variable constraints*
- (8) $x(t_k) = x_k$
; *initial condition for each prediction horizon*

when a certain model - plant mismatch exists,

$$y_{pred}(k+i) = y_m(k+i) + d(k)$$

$$d(k) = y(k) - y_m(k)$$

Continuous Stirred Tank Reactor for the reaction



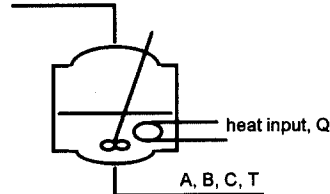
non-isothermal consecutive reaction model

Ref.: Costas Kravaris & Raymond A. Wright,

AICHEJ. September 1989, Vol.35, No.9, pp1535-1542

- Control Objectives :**
1. Maintain the concentration of B
 2. Regulating the Reactor Temperature

Manipulative input : Heat input Q
 A_i, T_i



(a) reactant mass balance

$$\frac{dA}{dt} = \frac{F}{V}(A_i - A) - k_1 A^2$$

(b) product mass balance

$$\frac{dB}{dt} = -\frac{F}{V}(B) + k_1 A^2 - k_2 B$$

(c) energy balance

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V}(T_i - T) + k_1 A^2 \left(\frac{-\Delta H_1}{\rho C_r} \right) + k_2 B \left(\frac{-\Delta H_2}{\rho C_r} \right) + Q(t - \tau d)$$

$$k_1 = A_{10} \exp(-E_1 / RT) \quad , \quad k_2 = A_{20} \exp(-E_2 / RT)$$

Reaction Design :

Constants and Steady-State operating Conditions

$A_i = 1 \text{ kmol} / \text{m}^3$
$A_{10} = 1 \text{ m}^3 / \text{kmol} \cdot \text{s}$
$A_{20} = 172.2 \text{ m}^3 / \text{kmol} \cdot \text{s}$
$E_1 = 4180 \text{ kJ} / \text{kmol} \cdot \text{K}$
$E_2 = 34833 \text{ kJ} / \text{kmol} \cdot \text{K}$
$\rho = 1000 \text{ kg} / \text{m}^3$
$C_p = 1 \text{ kJ} / \text{kg} \cdot \text{C}$
$F = 10 \text{ m}^3 / \text{s}$
$\Delta H_1 = 418000 \text{ kJ} / \text{kmol} \cdot \text{K}$
$\Delta H_2 = 418000 \text{ kJ} / \text{kmol} \cdot \text{K}$
$R = 8.314 \text{ kJ} / \text{kmol} \cdot \text{K}$
$V = 100 \text{ m}^3$
$T_i = 25^\circ \text{C} (298.15^\circ \text{K})$
$T_{ss} = 150^\circ \text{C} (423.15^\circ \text{K})$
$T_{sp} = 160^\circ \text{C} (433.15^\circ \text{K})$
$\tau d = 10 \text{ s}$

Williams-Otto Plant

(Continuous Stirred Tank Reactor)

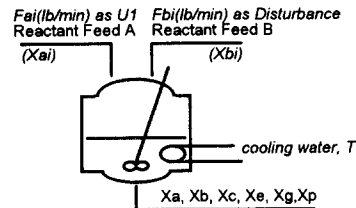
Ref.:

1. Williams T.I. and R.E. Otto, *Trans. Am. Inst. Elect. Engrs.*, 79, 458-473 (Nov., 1960)
2. McFarlane, C.R. & D.W. Bacon, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1989, 28, 1828-1845.

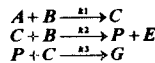
Control Objectives :

1. Maintain the concentration of product P (Xp) at desirable operating level using regulation of two related state variables ;(Xc & Xg as y1 and y2 respectively)
2. Rejecting the feed disturbance (feed B (Fbi))

Manipulative input : Reactant Feed A (Fai) as u1
 Cooling water temperature T as u2



Reaction Design



$$\begin{aligned} \frac{dXa}{dt} &= \frac{Fai}{Fr} - rx1 - Xa \\ \frac{dXb}{dt} &= \frac{Fbi}{Fr} - rx1 - rx2 - Xb \\ \frac{dXc}{dt} &= 2rx1 - 2rx2 - rx3 - Xc \\ \frac{dXe}{dt} &= 2rx2 - Xe \\ \frac{dXg}{dt} &= 1.5rx3 - Xg \\ \frac{dXp}{dt} &= rx2 - 0.5rx3 - Xp \end{aligned}$$

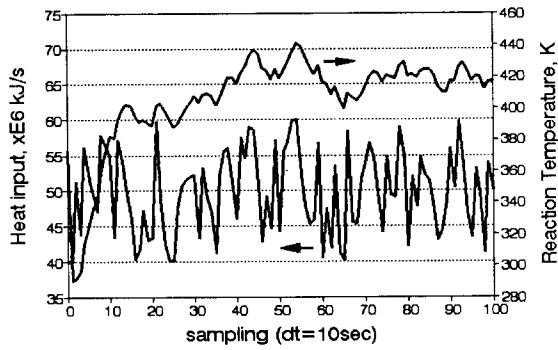
$$\begin{aligned} rx1 &= 5.9755E9 \exp(-12000/T) XaXb \rho V / (60Fr) \\ rx2 &= 2.5962E12 \exp(-15000/T) XbXc \rho V / (60Fr) \\ rx3 &= 9.6283E15 \exp(-20000/T) XcXp \rho V / (60Fr) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Fr &= Fai + Fbi \\ \rho &= 50 \text{ lb} / \text{ft}^3, \quad V = 60 \text{ ft}^3, \quad 580^\circ \text{R} < T < 680^\circ \text{R} \\ Xi &= \text{mass fraction} \end{aligned}$$

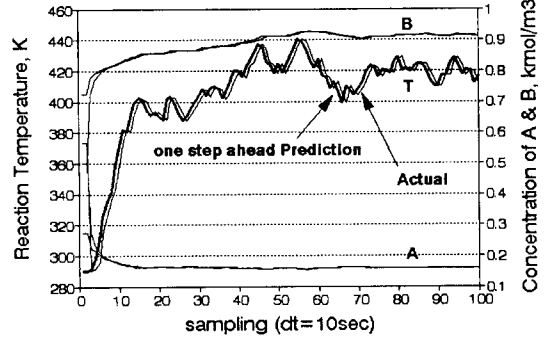
Initial Conditions

$Xa = 0.075$	$Fai = 170 \text{ lb/min}$
$Xb = 0.57$	$Fbi = 679 \text{ lb/min}$
$Xc = 0.015$	$T = 645\text{R}$
$Xe = 0.208$	
$Xg = 0.0398$	
$Xp = 0.091$	

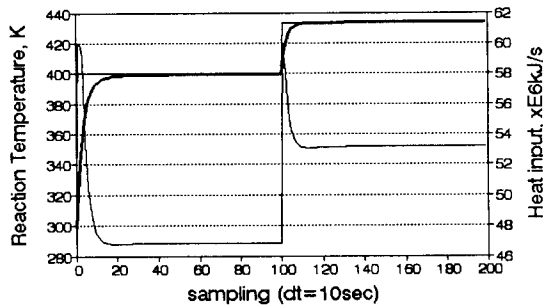
Heat input vs. Reaction Temperature



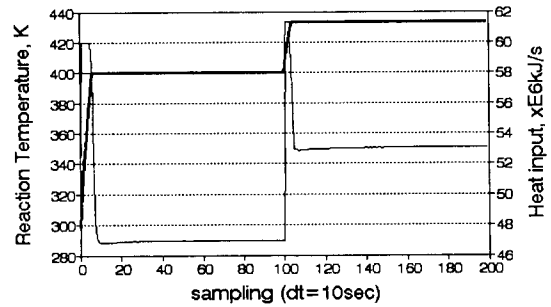
Forward Learning (Identification)



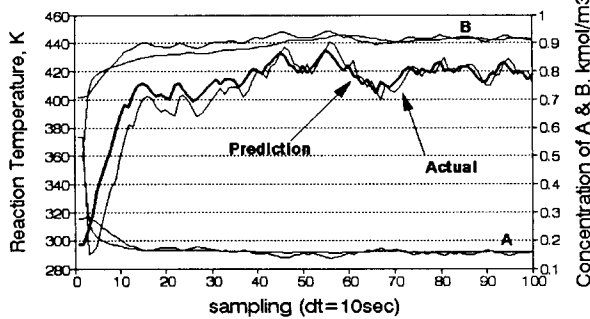
NMPC on Kravaris' CSTR
PH=5 & Perfect Model (Perfect Learning)



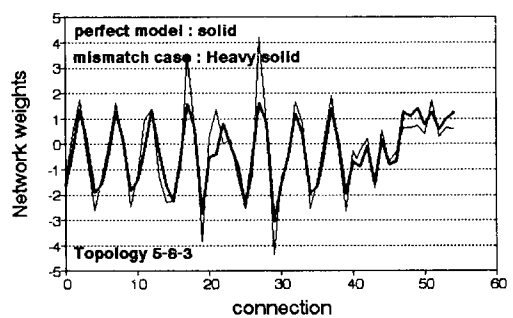
NMPC on Kravaris' CSTR
PH=1 & Perfect Model (Perfect Learning)



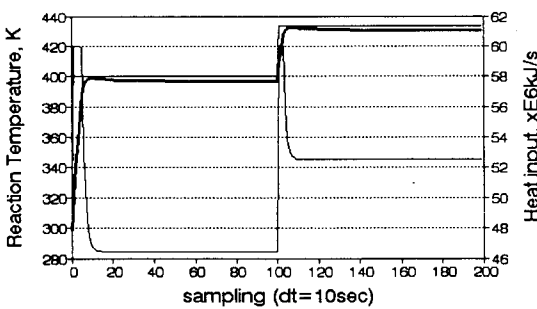
Forward Learning (Identification)
one step ahead pred. (98% mismatch)



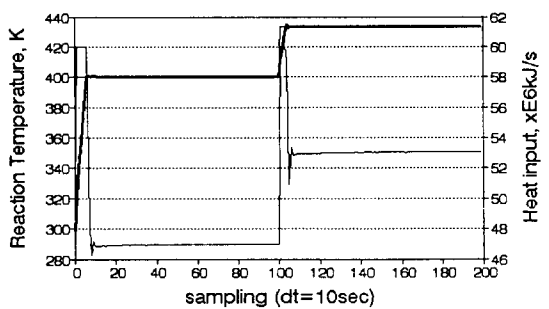
Weight Distribution
Perfect vs. 98% Model-Plant Mismatch



NMPC on Kravaris' CSTR
PH=5 & 98% Model-Plant Mismatch

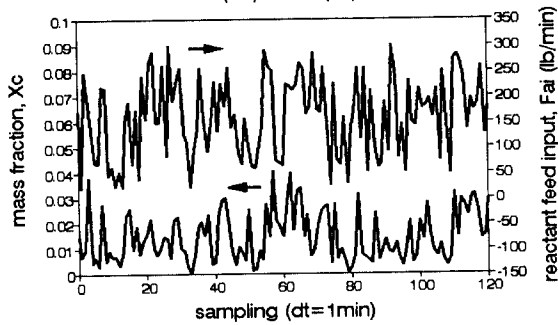


NMPC on Kravaris' CSTR
PH=1 & 98% Model-Plant Mismatch



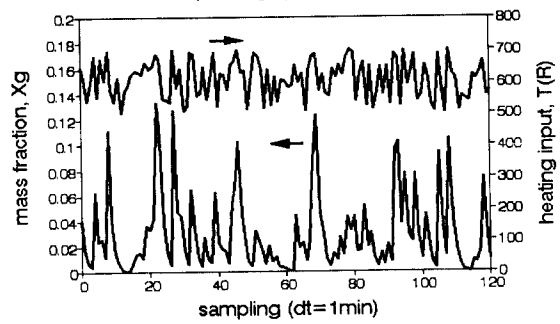
Open-loop Process Trends

U1(Fai) vs. Y1(Xc)



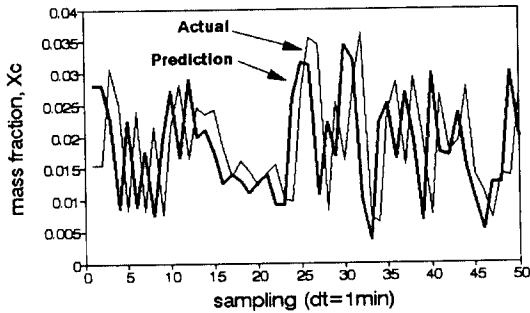
Open-loop Process Trends

U2(Heating, T) vs. Y2(Xg)



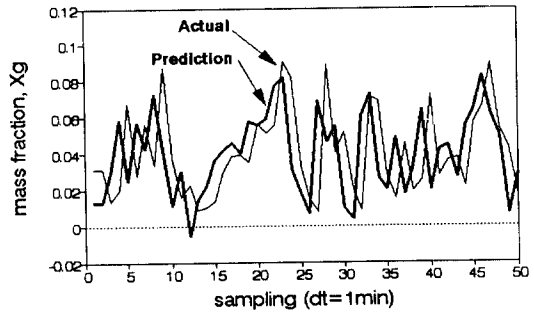
Forward Learning (Identification)

one step ahead prediction



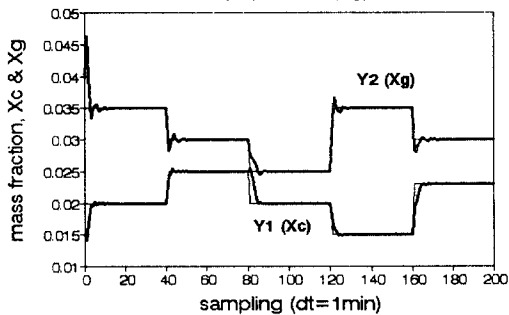
Forward Learning (Identification)

one step ahead prediction



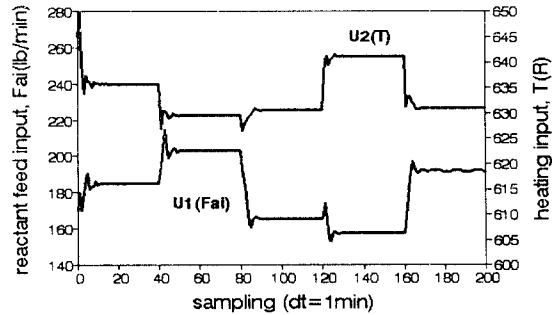
NMPC on Williams-Otto Plant (Reactor)

Y1(Xc) and Y2(Xg)



NMPC on Williams-Otto Plant (Reactor)

U1(Fai) and U2(T)



Mean Square Error in Identification

500 data points w/ Topology 5-8-2

