

## 다성분 공정을 위한 데이터 보정

### Data reconciliation for Multicomposition Processes

이 무 호, 한 중 훈, 장 근 수

포항공과대학교 화학공학과, 지능자동화연구센터

(Tel: (0562) 279-5953; Fax: (0562) 279-3499; E-mail: mhlee@backdu.postech.ac.kr)

**Abstracts** In chemical processes, measurement errors reduce the credibility of information and cause inconsistency in material and energy balances. Because multicomposition flows and temperature measurements make material and energy balances nonlinear equations, data reconciliation becomes a nonlinear constrained optimization problem. In multicomposition processes, if we follow general optimization procedure, the number of measurement variables is so large that data reconciliation requires much computation time. We propose the decomposition procedure to reduce the computation time without the decrease of accuracy of data reconciliation. Decomposition procedure finds global variables, that can reduce the nonlinearity of constraints, and divides two sub-optimization problems. Once we optimize the global variables at upper level, we can easily optimize the remain variables at lower level. We can obtain the short computational time and the same accuracy as SQP optimization method.

**Keywords** Data Reconciliation, Multicomposition Process, Decomposition Optimization

#### 1. 서론

최근 들어 화학 산업에서도 공정의 생산 효율을 극대화 하기 위해 생산 계획, 스케줄링, 제어, 모니터링 등의 작업을 유기적으로 통합하고 있다. 이러한 일련의 작업들은 측정 장치들로부터 전달되는 측정값들을 매개로 하여 이루어진다. 그러나 측정값들은 공정상의 오류나 측정 장치의 오류에 의해 필연적으로 오차를 포함한다. 오차를 포함한 측정 데이터는 물질, 에너지 수지식을 만족시키지 못하게 되고 결과적으로 이러한 수지식과 측정 데이터에 근거한 다음 단계의 작업들에 나쁜 영향을 준다. 그러므로 데이터 보정을 통해 오차를 포함한 측정 데이터들이 물질, 에너지 수지식을 만족하도록 신뢰성을 부여해야 한다.

다성분 공정은 각기 다른 여러 종류의 물질을 다루는 공정으로 화학 공정에서 증류, 혼합, 분리, 반응 등 대부분 공정이 이에 해당된다. 이러한 공정의 특징은 물질, 에너지 수지식을 구성할 경우 수지식의 각 항들은 유량과 조성, 또는 유량, 조성과 온도의 곱으로 나타내지는 비선형 식이 된다.

반응을 고려한 물질 수지식의 데이터 보정 문제에서 crowe[1]는 matrix projection 방법을 사용하여 미측정 변수들을 사전에 제거 후 데이터 보정을 해 주어 계산 시간을 줄였다. 그러나 matrix projection 방법은 선형과 비선형에서도 bilinear 모

델의 경우에만 적용 가능한 제약성을 가지고 있다. Simpson 등 [2]은 변수들을 독립변수와 종속 변수로 구분해 모든 제약 조건을 독립 변수로만 이루어진 무제약 조건 최적화 문제로 전환하여 데이터 보정을 해주었다. Rao 와 Narasimhan[3]은 앞의 두 방법과 일반적인 비선형 최적화 방법인 SQP 의 계산 시간과 정확도를 비교한 결과를 발표하였다. Bilinear 모델인 경우 Schraa 와 Crowe[4]는 lagrange multipliers 를 도입하여 무제약 최적화 문제로 전환하여 풀어 주었고 Meyer 등[5]은 측정변수와 미측정 변수의 개수가 많은 multicomponent 공정에 대한 체계적인 데이터 보정 방법을 제시하였다.

#### 2. 다성분 공정을 위한 데이터 보정 문제

다성분 공정인 c 개의 성분을 갖는 혼합기의 예를 들어 보면 그림 1 과 같이 나타낼 수 있다.



그림 1. 다성분 공정의 예

Fig. 1. Example of multicomposition process

일반적인 다성분 공정은 n 개의 단위 공정과 s 개의 유체 흐름 그리고 c 개의 각기 다른 성분을 갖게 된다. 이러한 다성분 공정의 물질 수지식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\sum_{i=1}^s \alpha_{ki} F_i X_{ij} = 0 \quad (1)$$

$k = 1, \dots, n$   
 $i = 1, \dots, s$   
 $j = 1, \dots, c$

$F_i, X_{ij}$  는 각각 i 번째 유체 흐름에서 유량과 j 성분의 비(ratio)를 나타낸다. i 는 각 단위공정을 나타내는 것이고 i 는 유체 흐름을, j 는 성분을 각각 나타낸다.  $\alpha_{ki}$  는 k 번째 단위 공정에서 i 번째 유체흐름의 상태를 표시하는 것으로 입력의 경우 +1 을 출력의 경우 -1 의 값을 k 번째 단위 공정과 관계가 없는 흐름일 경우는 0 의 값을 갖게 된다. 각 흐름에서 조성비의 합은 1 이 되어야 하는 조건을 식 (2)로 나타내었다.

$$\sum_{j=1}^c X_{ij} = 1 \quad i = 1, \dots, s \quad (2)$$

각 단위 공정에서의 에너지 수지식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\sum_{i=1}^s \left\{ \sum_{j=1}^c \left( \alpha_{ki} F_i X_{ij} \int_{T_i}^T C_{pj} dT \right) \right\} = 0 \quad (3)$$

$k = 1, \dots, n$   
 $i = 1, \dots, s$   
 $j = 1, \dots, c$

$$C_{pj} = a_j + b_j T + c_j T^2 \quad (4)$$

$T_i, C_{pi}$  는 각각 유체 흐름 i 에서의 온도와 물질 j 의 열용량을 나타낸다. 열용량식 (4)에서  $a_j, b_j, c_j$  는 각 성분 물질에 관계되는 열용량 계수가 된다. 식(4)를 식(3)에 대입하여 정리하면 다음과 같은 각 단위 공정에 대한 에너지 수지식을 얻을 수 있다.

$$\sum_{i=1}^s \left\{ \sum_{j=1}^c \left( \alpha_{ki} F_i X_{ij} (a_j (T_i - T) + b_j (T_i^2 - T^2)/2 + c_j (T_i^3 - T^3)/3) \right) \right\} = 0 \quad (5)$$

물질, 에너지 수지식 (1)-(3)에 관계된 측정 변수와 수식의 개수를 표 1 에 정리하였다.

표 1. 측정 변수와 수식의 개수

Table 1. Number of measurement variables and equations

측정 변수의 개수		수식의 개수	
조성 변수	S x C	성분수지	NxC
유량 변수	S	조성수지	S
온도 변수	S	에너지수지	N
총계	S(C+2)	총계	N(C+1)+S

표 1 에서 보면 다성분 공정은 성분의 종류가 많으므로 변수 중에서 조성 변수의 개수가 유량 변수나 온도 변수에 대해 상대적으로 많은 특징을 갖게 된다. 예를 들어 5 종류의 물질을 다루는 경우에는 C=5 가 되어 유량 변수 개수 보다 조성 변수가 5 배나 많게 된다. 데이터 보정 문제는 유량과 조성, 온도를 측정할 경우 다음과 같은 목적 함수를 갖게 된다.

$$\begin{aligned} \underset{x, F, T}{\text{Minimize}} \quad & (x - \bar{x})^T Q_x^{-1} (x - \bar{x}) + (F - \bar{F})^T Q_F^{-1} (F - \bar{F}) \\ & + (T - \bar{T})^T Q_T^{-1} (T - \bar{T}) \end{aligned} \quad (6)$$

$\bar{x}, \bar{F}, \bar{T}$  는 각각 조성과 유량 그리고 온도 측정값의 벡터이며  $Q_x, Q_F, Q_T$  는 각각 조성과 유량, 그리고 온도의 측정값의 공분산 행렬(Covariance matrix)로 최적화의 가중치 역할을 한다.

### 3. Decomposition 최적화를 이용한 다성분 공정의 데이터 보정 방법

앞에서 다성분 공정의 물질, 에너지 수지식과 목적 함수를 수식적으로 나타내었다. 데이터 보정은 수지식을 제약 조건으로 갖는 비선형 최적화 문제가 된다. 이러한 비선형 최적화 문제를 풀기 위해 SQP(Successive Quadratic Programming)방법을 주로 사용하고 있으나 많은 계산 시간을 필요로 하는 단점을 가지고 있어 계산 시간을 줄이는 방법이 연구되어야 한다.

본 연구에서는 다성분 공정의 특성을 이용하여 최적화 문제를 두 단계로 나누어 푸는 decomposition 최적화 방법을 제시하고자 한다. 다성분 공정의 물질, 에너지 수지식을 살펴보면 물질 수지식은 조성 변수와 유량 변수가 서로 곱해져 비선형 방정식이 되었으며 에너지 수지식에서는 조성과 유량, 온도가 서로 곱해져 비선형 방정식이 된 것을 알 수 있다. 그러므로 수식의 비선형성을 없앨 수 있는 측정 변수를 광역 변수로 나머지 변수를 지역 변수로 분리한다. 그러면 측정 변수중 일단 광역 변수값이 정해지면 지역변수로 이루어진 나머지 수지식은 선형 방정식이 된다. 최적화는 두 단계로 나누어 상위 단계에서는 비선형성을 갖게 하는 변수인 광역 변수를 최적화하여 광역 변수값을 결정하면 하위 단계에서는 선형화된 수지식을 이용해 최적화를 한다.

하위 단계의 최적화는 다음의 목적 함수와 선형 제약 조건을 갖는 문제로 정의 할 수 있다.

$$\text{목적 함수 } \underset{x}{\text{Minimize}} (x - \bar{x})^T Q_x^{-1} (x - \bar{x}) \quad (7)$$

$$\text{제약 조건 } Ax = 0 \quad (8)$$

A는 상수 행렬이므로 제약 조건은 x에 대한 선형 방정식이 된다. 위의 최적화의 해는

$$x = \bar{x} - Q_x^{-1} A^T (A Q_x^{-1} A^T)^{-1} A \bar{x} \quad (9)$$

가 된다.

조성과 온도 변수 또는 유량과 온도 변수를 광역 변수로 하면 수지식을 선형화 할 수 있다. 본 연구에서는 조성 변수의 수가 유량과 온도 변수보다 상대적으로 많으므로 상위 단계의 비선형 최적화를 쉽게 하기 위해서 유량과 온도 변수를 광역 변수로 택하였다. 광역 변수에 대한 최적화 알고리즘은 SQP를 사용하였으며 지역 변수에 대한 최적화는 선형 방정식을 제약 조건으로 갖는 최적화이므로 least square 방법을 사용하여 구하였다. 그림 2에 decomposition 최적화 방법의 순서도를 나타내었다.

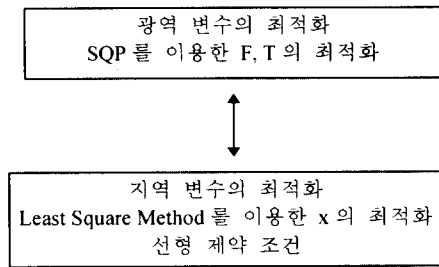


그림 2. 두 단계 최적화를 이용한 다성분 공정의 데이터 보정

Fig. 2. Data reconciliation using decomposition optimization

#### 4. Decomposition 최적화를 이용한 데이터 보정의 결과

조성, 유량, 온도가 각기 다른 두 흐름을 혼합하는 그림 1과 같은 혼합기의 물질, 에너지 수지식에 대한 데이터 보정을 하였다. 물질 종류는 8가지이며 유체 흐름은 입력이 2개, 출력이 1개인 혼합기이다. 필요한 측정 데이터의 참값을 표 2와 같이 정해 주었다.

표 2. 혼합기의 측정 변수의 참값과 Cp의 상수값들

Table 2. True measurement values and coefficients of Cp

Stream	Stream	Stream	a	b*10 <sup>2</sup>	c*10 <sup>5</sup>
--------	--------	--------	---	-------------------	-------------------

	1	2	3		
F	4	6	10		
T	318.15	361.11	348.15		
x <sub>1</sub>	.000	.166	.100	23.27	2.28
x <sub>2</sub>	.150	.017	.070	24.72	2.42
x <sub>3</sub>	.030	.396	.250	23.92	-51
x <sub>4</sub>	.200	.117	.150	26.45	-23
x <sub>5</sub>	.070	.153	.120	24.47	-22
x <sub>6</sub>	.150	.050	.090	22.03	1.26
x <sub>7</sub>	.250	.050	.130	3.40	.70
x <sub>8</sub>	.150	.050	.090	37.30	7.84

SQP 최적화는 Matlab의 optimization toolbox를 사용해 IBM Pentium PC 120MHz에서 시뮬레이션을 하였다. 비교를 위해 decomposition 최적화 방법과 SQP 방법으로 데이터 보정을 해주었다. SQP 방법은 식(1-3)을 제약 조건으로 식(6)을 목적함수로 하여 모든 측정 변수에 대해 최적화를 한 것이다. 두 방법에 의한 데이터 보정 결과를 표 3에 나타내었다. 두 방법으로 구한 보정값들이 큰 차이가 없음을 볼 수 있다.

표 3. Decomposition 방법과 SQP 방법에 의한 데이터 보정 결과

Table 3. Result of data reconciliation by decomposition and SQP methods

	측정 변수	측정값	Decomposition 보정값	SQP 보정값
Stream 1	F	3.0941	2.8024	2.7810
	T	322.29	322.31	322.25
	x <sub>1</sub>	0.0001	0.0001	0.0001
	x <sub>2</sub>	0.1545	0.1275	0.1295
	x <sub>3</sub>	0.0265	0.0260	0.0272
	x <sub>4</sub>	0.2374	0.2150	0.2169
	x <sub>5</sub>	0.0942	0.0926	0.0910
	x <sub>6</sub>	0.1731	0.1457	0.1418
	x <sub>7</sub>	0.3526	0.3563	0.3578
Stream 2	F	6.5366	6.3842	6.4244
	T	359.84	360.90	360.82
	x <sub>1</sub>	0.0891	0.1227	0.1202
	x <sub>2</sub>	0.0196	0.0194	0.0196
	x <sub>3</sub>	0.2249	0.2191	0.2216
	x <sub>4</sub>	0.1271	0.1277	0.1308
	x <sub>5</sub>	0.1574	0.1736	0.1717
	x <sub>6</sub>	0.0458	0.0421	0.0430
	x <sub>7</sub>	0.0631	0.0673	0.0664
Stream 3	F	8.5948	8.8899	8.9388
	T	350.02	349.32	349.32
	x <sub>1</sub>	0.1019	0.0882	0.0865
	x <sub>2</sub>	0.0387	0.0541	0.0544
	x <sub>3</sub>	0.1269	0.1656	0.1677
	x <sub>4</sub>	0.1376	0.1595	0.1615
	x <sub>5</sub>	0.1717	0.1539	0.1517
	x <sub>6</sub>	0.0533	0.0762	0.0750
	x <sub>7</sub>	0.1562	0.1607	0.1591

표 4는 두 가지 최적화 방법으로 데이터 보정을 하였을 때의 성능을 비교한 것으로 각기 다른 5번의 측정 데이터들에 대해 최적화를 행하여 평균을 하여 나타내었다. 목적 함수값은

작을수록 데이터 보정이 잘 된것으로 SQP 방법이 더 좋은 결과를 내었지만 큰 차이가 없음을 볼 수 있다. 목적 함수의 전개 횟수는 최적화 방법의 효율을 나타내는 지표로 횟수가 적을 수록 효율이 좋은 것이다. Decomposition 최적화 방법이 월등하게 좋은 성능을 보였으며 계산 시간 결과도 decomposition 방법이 우수함을 보여주고 있다.

표 4. Decomposition 방법과 SQP 방법의 성능 비교

Table 4. Comparison of Decomposition and SQP methods

	Decomposition 방법	SQP 방법
목적 함수값	12.418	12.119
목적 함수 전개횟수	127.400	4169.200
CPU 시간(sec)	43.866	1635.122

## 5. 결론

본 연구에서는 다성분 공정의 물질 및 에너지 수지에 대한 데이터 보정을 위해 decomposition 최적화 방법을 도입하였다. Decomposition 최적화는 수지식의 비선형성을 없애주는 변수를 광역 변수하고 나머지 변수를 지역 변수로 구분해 두 종류의 변수에 대해 최적화 문제를 나누어 계산 시간을 줄이는 방법이다. Decomposition 방법과 SQP 방법을 다성분 공정에 적용하여 성능을 비교하였다. 두 방법은 비슷한 정도의 데이터 보정 효과를 보였으나 계산 시간에 있어서는 decomposition 방법이 훨씬 우수함을 알 수 있었다.

## 감사의 글

본 연구는 포항공대 공정 산업의 지능자동화 연구센터를 통해 재정적인 지원을 해주신 한국과학재단에 심심한 감사를 드립니다.

## 참고문헌

- [1] O. J. Schraa and C. M. Crowe, "The numerical solution of bilinear data reconciliation problems using unconstrained optimization methods," *Computers Chem. Engng.*, vol. 20, Suppl., pp. S727-S732, 1996.
- [2] M. Meyer, B. Koehret and M. Enjalbert, "Data reconciliation on multicomponent network process," *Computers Chem. Engng.*, vol. 17, No. 8, pp.807-817, 1993.
- [3] C. M. Crowe, "Reconciliation of process flow rates by matrix projection, Part II: The Nonlinear case," *AIChE J.*, vol. 32, pp. 616-623, 1986.
- [4] D. E. Simpson, M. G. Everett, V. R. Voller, "Reducing the number of unknowns in a constrained minimisation problem-an application to material balances," *Appl. Math. Modeling*, vol. 12, pp. 204-212, 1988.
- [5] R. R. Rao and S. Narasimhan, "Comparison of Techniques for Data Reconciliation of Multicomponent Processes," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 35, pp. 1362-1368, 1996.