

Hybrid 신경망을 이용한 산업폐수 공정 모델링

이대성*, 박종문**

포항공과대학교 환경공학부*, 화학공학과**

전화 (0562) 279-5952, FAX (0562)279-8299

Abstract

In recent years, hybrid neural network approaches which combine neural networks and mechanistic models have been gaining considerable interests. These approaches are potentially very efficient to obtain more accurate predictions of process dynamics by combining mechanistic and neural models in such a way that the neural network model properly captures unknown and nonlinear parts of the mechanistic model. In this work, such an approach was applied in the modeling of a full-scale coke wastewater treatment process. First, a simplified mechanistic model was developed based on the Activated Sludge Model No.1 and the specific process knowledge. Then neural network was incorporated with the mechanistic model to compensate the errors between the mechanistic model and the process data. Simulation and actual process data showed that the hybrid modeling approach could predict accurate process dynamics of industrial wastewater treatment plant. The promising results indicated that the hybrid modeling approach could be a useful tool for accurate and cost-effective modeling of biochemical processes.

서론

제철소의 여러 단위공정중 화성공정에서 발생하는 폐수내에는 폐놀, 시안, 황화시안, PAHs(poly-nuclear aromatic hydrocarbons) 등의 다양한 오염물질이 포함되어 있으며, 이러한 오염물질들을 처리하기 위하여 전통적인 생물학적 하·폐수 처리법인 활성오니공정이 도입되었다. 활성오니공정은 유기물질 분해에 관여하는 미생물의 다양성, 관련 반응의 비선형성, 유입부하량의 변동 등으로 인하여 최적인전에 많은 어려움이 따른다. 따라서 공정내에서 일어나는 현상을 이해하고 공정내 주요 변수를 신뢰성 있게 예측할 수 있는 동력학적 모델의 개발은 매우 중요하다. 현재까지 생물학적 하·폐수처리 공정에 관한 모델로서는 1987년 IAWQ에서 보고한 the activated sludge model No. 1(ASM1)이 가장 널리 알려져 있다¹⁾. 하지만 ASM1을 실제공정에 도입할 경우, 관련된 많은 공정변수를 결정해야 하는 문제와 시간에 따라 생물 반응기내의 동적 특성이 변하는 문제 등으로 인하여 모델의 적용성에 한계가 있다.

최근 생물/화학 공정의 제문제를 해결하는 도구로서 신경회로망과 수학적모델을 결합한 hybrid 모델에 관한 연구가 활발히 진행되고 있다²⁻³⁾. 신경회로망은 비선형 mapping 기능을 가지고 있어서 복잡하고 불분명한 시스템의 데이터로부터 유용한

정보를 추출해 낼 수 있다는 강점을 지니고 있지만, 전적으로 공정데이터에만 의존한다는 문제와 외삽능력의 부족이 취약점으로 제기되어져 왔다. 따라서 공정내 미생물 반응의 사전지식과 공정 데이터를 모두 최대한 활용할 수 있는 hybrid 신경망 모델의 하·폐수 처리공정 적용은 큰 기대를 가지게 한다.

본 연구에서는 현장규모의 화성폐수처리공정에 대하여 평형구조의 hybrid 신경망을 적용시켜 보다 효과적으로 신뢰성 있는 모델을 개발하고자 하였다.

화성폐수처리공정

화성폐수처리공정의 개략도는 Fig. 1과 같다. 유입폐수는 생물학적 처리조에 미치는 부하량을 최소화하기 위하여 전단부에서 탈기공정을 거친 후에 공정으로 유입된다. 공정은 유량조정조와 폭기조, 침전조로 이루어져 있으며, 수리학적 체류시간은 대략 2.7일이다. 160일 간의 조업데이터를 score plot으로 나타내면 Fig. 2와 같다. 일부 조업 데이터가 데이터군에서 벗어나는 것을 알 수 있는데 이는 일정기간 동안 독성 물질이 과다하게 공정내로 유입된 것에 기인한다.

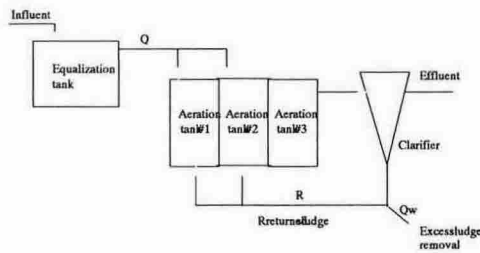


Fig. 1. Schematic diagram of a coke wastewater treatment plant.

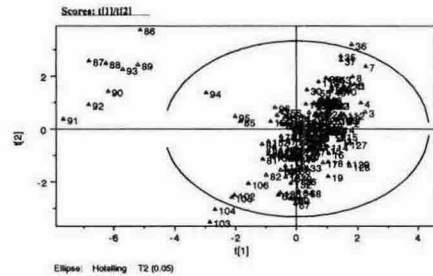


Fig. 2. PC scores of all process variables.

수학적 모델

ASM1과 화성폐수처리에 관련된 공정지식을 바탕으로 다음의 가정과 조건을 사용하여 동력학적 모델을 개발하였다.

- (1) 반응기내 미생물은 크게 유기물질분해에 관여하는 heterotrophs(X_H)와 시안화합물 분해에 관여하는 시안분해 미생물(X_{CN})으로 분류한다.
- (2) 유입수내 폐놀을 상대적으로 쉽게 분해가능한 유기물질로 분류한다.
- (3) 질산화와 탈질반응은 일어나지 않는다.
- (4) 폭기조내 용존산소농도는 항상 유기물질 분해에 충분한 양이 공급된다.
- (5) 시안 화합물의 과다 유입시에는 heterotrophs에 독성을 나타내므로 이를 반응속도식에 반영한다.
- (6) 침전조는 간단한 flux 이론을 바탕으로 유도된 실험식을 적용한다⁴⁾.

$$\begin{aligned} \frac{dS_S}{dt} &= -\frac{\mu_H}{Y_H} \cdot \frac{S_S}{(1 + \frac{K_S}{S_S})(1 + \frac{S_{CN}}{K_I})} \cdot X_H + K_H \cdot \frac{X_S / X_H}{K_X + X_S / X_H} \cdot X_H \\ \frac{dS_{CN}}{dt} &= -\frac{\mu_{CN}}{Y_{CN}} \cdot \frac{S_{CN}}{K_{CN} + S_{CN}} \cdot X_{CN} \\ \frac{dX_S}{dt} &= -K_H \cdot \frac{X_S / X_H}{K_X + X_S / X_H} \cdot X_H + (1 - f_P) \cdot b_H \cdot X_H + (1 - f_{CNP}) \cdot b_{CN} \cdot X_{CN} \\ \frac{dX_H}{dt} &= \mu_H \cdot \frac{S_S}{(1 + \frac{K_S}{S_S})(1 + \frac{S_{CN}}{K_I})} \cdot X_H - b_H \cdot X_H \\ \frac{dX_{CN}}{dt} &= \mu_{CN} \cdot \frac{S_{CN}}{K_{CN} + S_{CN}} \cdot X_{CN} - b_{CN} \cdot X_{CN} \\ \frac{dX_P}{dt} &= f_P \cdot b_H \cdot X_H + f_{CNP} \cdot b_{CN} \cdot X_{CN} \end{aligned}$$

대부분의 공정상수들은 ASM1과 시안분해 미생물 관련 문헌값들을 적용하였으며, sensitivity analysis를 통하여 결정된 민감한 몇 개의 공정상수에 대해서만 보정을 실시 하였다⁵⁾.

평형 구조의 Hybrid 신경망 모델

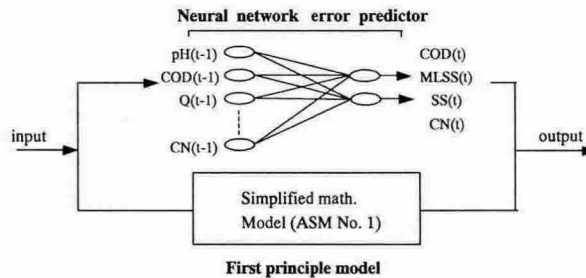


Fig. 3. Structure of hybrid neural network model.

평형형태의 hybrid 신경망의 구조는 Fig. 3와 같다. Hybrid 신경망 모델내의 신경망은 실제 운전 데이터와 모델값과의 차이를 학습하게 된다. 본 연구에서는 생물공정 시스템에 가장 효과적으로 사용되고 있는 오류역전과 신경망을 사용하였다. 신경망의 학습에는 상용 프로그램인 MATLAB®을 사용하였다. 신경망의 구조는 입,출력층과 은닉층수를 변화시키면서 모델의 성능을 평가해 본 결과, 입력 nodes 수는 8개, 은닉층의 nodes 수는 6개, 출력 nodes 수는 4개일 때 가장 좋은 결과를 얻을 수 있었으며, 활성화 함수는 hyperbolic tangent function이 가장 효과적이었다. 학습된 hybrid 신경망을 사용한 모델링 결과는 Fig. 4와 같다. RMS를 기준으로 수학적 모델과 hybrid 모델의 예측 성능을 비교해 보았을 때, hybrid 신경망 모델이 보다 나은 결과를 보여주었다(Table 1).

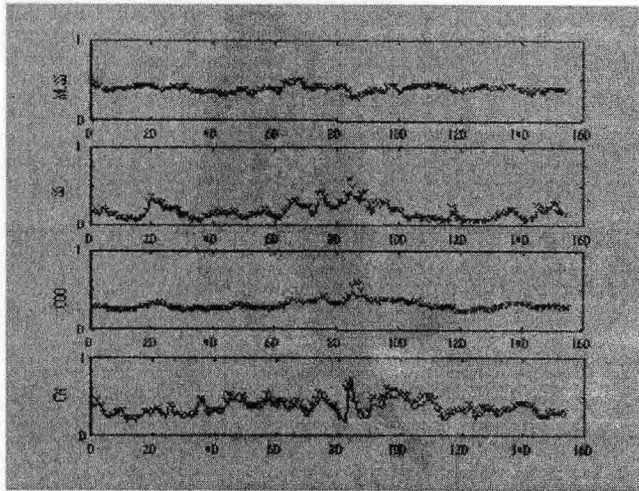


Fig. 4. Simulated and measured concentrations in the coke wastewater treatment plant (-: simulated, x: measured).

Table 1. Comparison of simulated results.

errors variables	RMS (math. model)		RMS (hybrid model)	
	overall data	validation data	overall data	validation data
MLSS (mg/l)	6.35	3.84	2.03	1.53
SS (mg/l)	8.86	5.12	2.37	1.82
COD (mg/l)	13.5	10.1	4.24	3.87
CN (mg/l)	2.98	1.64	0.84	0.56

결론

화성폐수처리를 위한 활성오니공정에 대하여 주요 공정변수를 예측할 수 있는 hybrid 신경망 모델을 개발하였다. 향후, hybrid 신경망 모델링 기법은 보다 적은 노력과 시간으로 생물공정을 모델링할 수 있는 도구로 유용하게 이용될 것으로 기대된다.

참고 문헌

1. Henze, M., Grady, C. P. L., Gujer, W., Marais, G. v. R. and Matsuo, T. (1987) *Activated sludge model No. 1*. Scientific and Technical Reports No. 1, IAWPRC, London.
2. Tompson, M. L. and Kramer, M. A. (1994) Modeling chemical processes using prior knowledge and neural networks. *AIChE*. **40(8)**, 1328-1340.
3. Zhao, H., Hao, O. J., McAvoy, T. J. and Chang, C. (1997) Modeling nutrient dynamics in sequencing batch reactor. *J. Environ. Eng.* **123(4)**, 311-319.
4. Dupont, R. and Henze, M. (1992) Modeling of the secondary clarifier combined with the activated sludge model No. 1. *Wat. Sci. Tech.* **25(6)**, 285-300.
5. Gaudy, A. F., Gaudy, E. T., Feng, Y. J. and Brueggemann, G. (1982) Treatment of cyanide waste by the extended aeration process. *J. WPCE*. **54(2)**, 153-164.