

차수 감소 모델과 EKF를 이용한 공정 모니터링의 응용

Application of Process Monitoring with Reduced Order Model and EKF to Distillation Column

°김태민, 양대록

고려대학교 화학공학과(Tel : +82-02-3290-3298; Fax : +82-02-953-2216; E-mail : dryang@prosys.korea.ac.kr)

Abstracts Fast and accurate distillation design requires a model that significantly reduces the problem size without loss of accuracy is especially suitable for real-time applications. The reduced order model is obtained by use of Principal Component Analysis(PCA). Then the extended Kalman filter and the Recursive Prediction Error(RPE) method. are applied to identify the model parameters and the feed composition from the measurements of the column. As a consequence, it is found that the model reduction technique can account for the dynamics of the rigorous distillation model and not only the model parameters, but also the feed composition can be identified efficiently. This technique is applied to industrial operation data to verify the performance of reduced order model.

Keywords Distillation, Reduced order model, EKF, RPE, PCA

1. 서론

공정의 제어 혹은 최적화를 수행하는 데 있어서 대상공정의 모델링은 필수적인 과정이며, 모델링방법과 이로 부터 구해지는 모델의 종류는 다양하다. 종류공정에 대하여 엄밀모델의 경우에는 일반적으로 복잡한 열역학적 관계식과 함께 방대한 수의 미분방정식으로 표현된다. 이와 같이 구성한 엄밀모델도 평형관계 표현, 단효율, 내부환류량 및 외부로의 열순실 등이 불확실하기 때문에 실제 공정과는 종종 벗어나는 결과를 주며, 수식이 비선형적이고 공정 변수 또한 비선형적으로 포함된 엄밀모델식을 실시간대에서 반복적으로 인식하는 것은 현실성이 회박하다. 따라서 본 연구에서는 엄밀모델과 유사한 정확도를 가지며 계산시간을 단축하기 위한 단순 차수감소모델을 구성하여 실시간대 이용이 가능하고, 선형의 상태공간방정식 형태로 표현할 수 있어서 선형모델이 갖는 장점을 유지할 수 있도록 한다. 차수감소기법들은 bilinear modeling, modal analysis, compartmental model 와 불연속적인 공정 변수들을 연속적인 것으로 가정하여 편미분방정식으로 표현하고, 내삽함수(cubic spline)를 도입하여 공정수식을 배열점에서 재구성하는 배열법(Collocation)등이 있다. 본 연구에서는 주어진 앙상블로부터 신호처리를 통한 최적성분을 찾는 PCA(Principal Component Analysis)을 이용하여 차수감소모델을 구성하고, 지속적인 외란이 유입되는 경우 실제 실제 공정을 표현하는 데 한계가 있는 차수감소모델을 보다 넓은 조업 조건에서 사용하기 위하여 실시간대 모델인식단계(on-line model identification)를 통한 성능조정을 하고자 한다. 실시간대 모델인식방법으로, 선형 상태공간모델의 변수추정에 적용하는 회귀적 예측오차방법(Recursive Prediction Error Method, RPEM)을 이용하여 모델인식을 수행하였다.

2. 본론

2.1 단순모델(Simplified Full Order Model) 구성

모델링의 목적은 결과모델을 보다 단순하게 구성하여 다루기

쉽고 실시간대 모델인식과정을 거치게 하는 것이므로, 본 연구에서는 차수감소기법을 엄밀모델에 적용하지 않고 단순모델에 적용하기로 한다. 단순모델을 구성하기 위한 중류탑 개략도는 Fig. 1과 같고, 모델링에 필요한 기본 가정들은 다음과 같다.

- (1) 액상 및 기상유속은 정류부와 탈거부에 대하여 각각 일정.
- (2) 각 단내의 액체체류량은 일정하고, 기상체류량은 무시.
- (3) 재비기와 환류드럼(reflux drum)의 수위는 완전하게 제어.
- (4) 단에서 hydraulic dynamics가 mixing에 의한 것 보다 빠름.
- (5) 각 단은 평형단임.

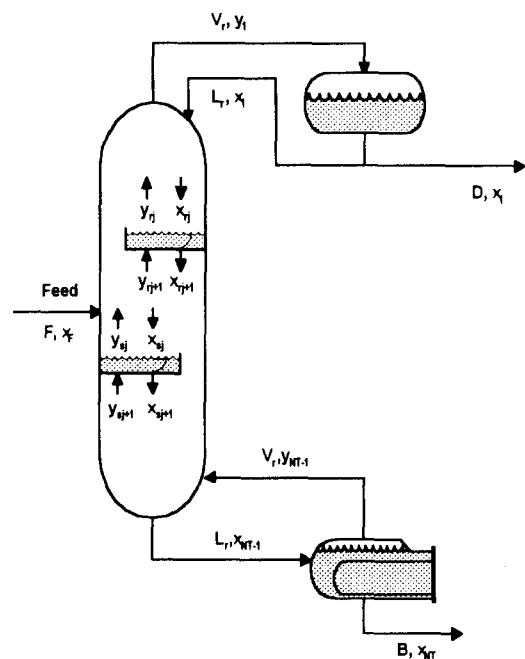


그림 1 이성분 중류탑의 개략도.

Fig. 1 Simplified diagram of a binary distillation column.

이성분계 종류공정의 동특성방정식은 다음과 같다.
옹축기

$$H_c \frac{dx_1}{dt} = V_r(y_1 - x_1) \quad (1)$$

각 단에서,

$$H_m \frac{dx_j}{dt} = V_m(y_j - y_{j-1}) + L_m(x_{j-1} - x_j) + qF_1x_f + (1-q)F_2x_f \quad (2)$$

여기서 $j=NF$ 인 경우 $F_1=F$, $j=NF-1$ 인 경우 $F_2=F$, 다른 모든 경우 0이다.

재비기에서

$$H_b \frac{dx_{NT}}{dt} = L_s x_{NT-1} - V_s y_{NT-1} - B x_{NT} \quad (3)$$

원료입력이 내부흐름에 미치는 영향은

$$\begin{aligned} L_s &= L_r + qF \\ V_s &= V_r - (1-q)F \end{aligned} \quad (4)$$

기-액 평형관계식은

$$y_j = K_j x_{j+1}, \quad j=1,2,\dots,NT-1 \quad (5)$$

행렬형태로 표시하면,

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{X} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{x}_f \quad (6)$$

여기서

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^T &= \{x_1, \dots, x_{NF-1}, x_N, \dots, x_{NT}\}^T \\ \mathbf{b} &= \left\{0, \dots, \frac{(1-q)F}{H_r}, \frac{qF}{H_s}, \dots, 0\right\}^T \\ \mathbf{M} &= \left(\begin{array}{cccccc} \frac{V_1}{H_r} & \frac{K_1 V_1}{H_r} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \frac{L_1}{H_r} & -\frac{V_r K_1 + L_1}{H_r} & \frac{V_r K_2}{H_r} & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \frac{L_N}{H_s} & -\frac{V_r K_{NT-1} + B}{H_s} \end{array} \right) \end{aligned}$$

2.1.1 PCA를 이용한 차수감소모델의 구성.

PCA는 임의변수(Random Variable)의 통계적인 표현에 근거하고 있고, 데이터의 분석 및 압축에 널리 이용되어지고, 데이터들이 선형 부분공간에 밀집한 경우, 데이터의 손실없이 표현식은 간단하게 데이터를 압축할 수 있으며 가장 큰 고유치를 갖는 고유ベ터를 선택함으로써 최소자승 개념에 의해 가능한 적은 정보 손실을 가져온다. PCA는 차수를 감소하여 문제 단순화하고자 하는 것과 원래의 정보를 가능한 많이 포함하고자 하는 두 가지 대립되는 문제를 상호절충하는 가장 편리한 방법을 제공한다.

평균 μ , 공분산행렬(covariance matrix) Σ 인 p 차의 임의변수 $\mathbf{X}^T = [X_1, \dots, X_p]$ 에 대하여, 서로 연관되지 않고(uncorrelated), 분산이 크기 순으로 배열된 새로운 변수들의 집합 Y_1, \dots, Y_p 을 Harold Hotelling에 의해 제시된 PCA방법으로부터 얻을 수 있다. Y_i 는 변수 X 들의 선형결합으로 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} Y_j &= a_{1j} X_1 + a_{2j} X_2 + \cdots + a_{pj} X_p \\ &= \mathbf{a}_j^T \mathbf{X} \end{aligned} \quad (7)$$

여기서, $\mathbf{a}_j^T = [a_{1j}, \dots, a_{pj}]$ 이고, 정직교(orthogonal)이다. 즉, $\mathbf{a}_i^T \mathbf{a}_j = 1$. 행렬형태로 표시하면 다음과 같다.

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}^T \mathbf{X} \quad (8)$$

여기서 $\mathbf{Y}^T = [Y_1, \dots, Y_p]$, $\mathbf{X}^T = [X_1, \dots, X_p]$, $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_p]$

식(8)에서 행렬 \mathbf{A} 가 직교행렬이므로, 실제 변수(\mathbf{X})는 다음과 같이 표현된다.

$$\mathbf{X} = \mathbf{A} \mathbf{Y} \quad (9)$$

여기서 $\mathbf{Y}^T = [Y_1, \dots, Y_p]$, $\mathbf{X}^T = [X_1, \dots, X_p]$, $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_p]$

만약 p 보다 훨씬 적은 m 차($m \ll p$)의 부분공간으로 \mathbf{X} 를 표현할 수 있다면,

$$\mathbf{X} \approx \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots & \mathbf{a}_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_m \end{bmatrix} = \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{Y}} \quad (10)$$

식(10)을 이용하여 단순모델식 식(6)에 적용하면,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{A}} \frac{d\tilde{\mathbf{Y}}}{dt} &= \mathbf{M} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{Y}} + \mathbf{b} \mathbf{x}_f \\ \mathbf{X} &= \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{Y}} \end{aligned} \quad (11)$$

연속시간대의 차수감소모델 식(11)을 실시간대에서 이용하기 위하여, 해의 안정성이 보장되는 샘플링(sampling)간격하에서 후방차분에 근거한 이산시간대의 모델로 바꾸어야 한다.

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{Y}}_{k+1} &= \mathbf{A}_D \tilde{\mathbf{Y}}_k + \mathbf{v} \\ \mathbf{X}_k &= \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{Y}}_k \end{aligned} \quad (12)$$

여기서 $\mathbf{A}_D = I + T \times \tilde{\mathbf{A}}^T \mathbf{M} \tilde{\mathbf{A}}$ 와 $\mathbf{v} = T \times \tilde{\mathbf{A}}^T \mathbf{b} \mathbf{x}_f$ 이고, k 와 T 는 각각 k 번째 샘플링 순간과 간격이다.

2.2 Innovation Model

공정변수 θ 를 가진 일반적인 선형 상태공간모델은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} x(t+1) &= F(\theta)x(t) + G(\theta)u(t) + w(t) \\ y(t) &= H(\theta)x(t) + e(t) \end{aligned} \quad (13)$$

여기서 $w(t)$, $e(t)$ 는 평균이 영이고 독립적인 임의벡터이고 그 공분산행렬은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} Ew(t)w^T(t) &= R_1(\theta) \\ Ee(t)e^T(t) &= R_2(\theta) \\ Ew(t)e^T(t) &= R_{12}(\theta) \end{aligned} \quad (14)$$

초기값 $x(0)$ 에 대한 특성은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} Ex(0) &= x_o(\theta) \\ E[x(0) - x_o(\theta)][x(0) - x_o(\theta)]^T &= \Pi(\theta) \end{aligned} \quad (15)$$

식(13)의 상태공간모델을 Innovation 모델로 바꾸기 위하여 고정된 θ 에 대한 예측자는 다음과 같이 구성된다.

$$\begin{aligned} \hat{x}(t+1, \theta) &= [F(\theta) - K_\theta H(\theta)]\hat{x}(t, \theta) \\ &\quad + G(\theta)u(t) + K_\theta y(t) \\ \hat{y}(t | \theta) &= H(\theta)\hat{x}(t, \theta); \hat{x}(0, \theta) = x_o(\theta) \end{aligned} \quad (16)$$

여기서 $K_\theta(t)$ 는 칼만이득행렬으로, 모델의 전이행렬($F(\theta), G(\theta), H(\theta)$), 노이즈와 예측오차들의 공분산들($R_1(\theta), R_2(\theta), R_{12}(\theta), \Pi(\theta)$)으로 이루어진 Riccati 방정식으로 구해진다.

시간 $t \rightarrow \infty$ 에서의 칼만이득행렬은 \bar{K}_θ 로 수렴하며, 시변예측자(16)은 시불변예측자로 접근하게 된다.

$$\begin{aligned} \hat{x}(t+1, \theta) &= [F(\theta) - \bar{K}_\theta H(\theta)]\hat{x}(t, \theta) \\ &\quad + G(\theta)u(t) + \bar{K}_\theta y(t) \\ \hat{y}(t | \theta) &= H(\theta)\hat{x}(t, \theta) \end{aligned} \quad (17)$$

노이즈 공분산행렬 R_i 는 Riccati 방정식에서 구한 \bar{K}_θ 을 통하여 예측모델에 영향을 준다. 이 행렬의 정보가 충분하지 않는 경우, \bar{K}_θ 을 변수화하는 것이 더 합리적이다.

이로부터 innovation 예측모델을 구성할 수 있다.

$$\begin{aligned} \hat{x}(t+1, \theta) &= F(\theta)\hat{x}(t, \theta) + G(\theta)u(t) \\ &\quad + K(\theta)\varepsilon(t) \\ y(t) &= H(\theta)\hat{x}(t, \theta) + \varepsilon(t) \\ \varepsilon(t) &= y(t) - \hat{y}(t | \theta); \text{innovation} \end{aligned} \quad (18)$$

2.3 Innovation 모델에 회귀적 예측오차방법 적용

회귀적 예측오차방법을 innovation 모델에 적용한 알고리즘은 다음과 같다.

$$\epsilon(t) = y(t) - \hat{y}(t) \quad (19a)$$

$$\hat{\Lambda}(t) = \hat{\Lambda}(t-1) + \gamma(t)[\epsilon(t)\epsilon^T(t) - \hat{\Lambda}(t-1)] \quad (19b)$$

$$R(t) = R(t-1) + \gamma(t)[\Psi(t)\Lambda^{-1}\Psi^T(t) - R(t-1)] \quad (19c)$$

$$\hat{\theta}(t) = \hat{\theta}(t-1) + \gamma(t)R^{-1}(t)\Psi(t)\epsilon(t) \quad (19d)$$

$$\hat{x}(t+1) = F_t \hat{x}(t) + G_t u(t) + K_t \epsilon(t) \quad (19e)$$

$$\hat{y}(t+1) = H_t \hat{x}(t+1) \quad (19f)$$

$$W(t+1) = [F_t - K_t H_t] W(t) + \bar{M}_t - K_t D_t \quad (19g)$$

$$\Psi(t+1) = W^T(t+1) H_t^T + D^T(\hat{\theta}(t), \hat{x}(t+1)) \quad (19h)$$

여기서,

$$F_t = F(\hat{\theta}(t)), \quad G_t = G(\hat{\theta}(t))$$

$$H_t = H(\hat{\theta}(t)), \quad K_t = K(\hat{\theta}(t))$$

$$\bar{M}_t = \bar{M}(\hat{\theta}(t), \hat{x}(t), u(t), \epsilon(t))$$

$$D_t = D(\hat{\theta}(t), \hat{x}(t))$$

행렬 D 와 \bar{M} 는 각각 출력과 상태변수의 민감도(sensitivity)를 의미한다.

$$D(\hat{\theta}, x) = \frac{\partial}{\partial \theta} [H(\theta)x] \mid_{\theta=\hat{\theta}}$$

$$\bar{M}(\theta, x, u, \epsilon) = \frac{\partial}{\partial \theta} [F(\theta)x + G(\theta)u + K(\theta)\epsilon] \mid_{\theta=\hat{\theta}}$$

모델인식과정중 모델파라미터가 불안정영역으로 흐르는 것을 막기위해 successive projection method을 적용한다.(Ljung, 1983)

3. 결과 및 고찰

3.1 사례연구 1

차수감소모델의 근사성능을 검증하기 위하여 모사대상으로 메탄올과 물의 이성분계 분리공정에 대한 모사를 수행하였다. 모사에 필요한 조업조건은 표 1과 같다.

표 1 이성분 분리공정의 조업조건.

TABLE 1 Operating condition for the binary distillation.

No. of trays	13
Feed tray	7th from the condenser
Normal holups	Hc=15 mol, Hr=2.5 mol Hs=3.5 mol HB=23 mol
Feed flow rate	216 mol/hr
Feed condition	xF=0.5, q=1.001
Top product flow rate	108 mol/hr
Reflux flow rae	60 mol/hr

PCA를 이용하여 15차인 단순모델식을 5차인 차수감소모델로 재구성하였다. 평형상수는 내삽함수(cubic spline)를 이용, 정류단 3개(1,6,10단),탈거단 4개(10,12,13,14단)을 설정하여 모든단의 평형상수를 내삽하였다. 모델인식과정에서 모델파라미터는 $K_r(2)$, $K_r(3)$, $K_s(2)$, $K_s(3)$, $1/H_b$, 칼만이득들을 설정하였고, 환류유속(L_r)과 boilup유속(V_r)에 크기가 각각 2%인 Pseudo Random Binary Signal(PRBS)을 이용하여 모델인식과정을 수행하였다.

실제 공정은 상용화된 모사기인 HYSYS dynamic model로 설정하였다. HYSYS 모사기는 정상상태모사뿐아니라, 동적모사까지 가능하고, OLE 지원하므로 Excel을 이용하여 PRBS를 환류유속과 boilup유속에 가할수 있다.

임의의 초기값으로부터 모델파라미터들이 일정한 값들로 수렴

하고(그림 2), 실제 값과 거의 일치함을 알수 있다.(그림 3).

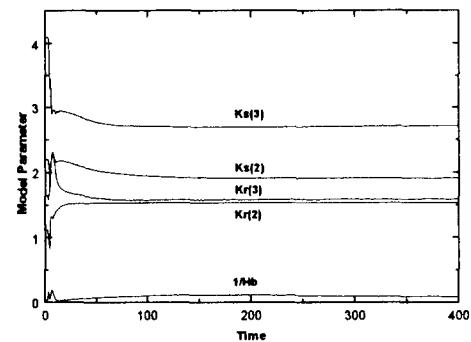


그림 2 모델파라미터들의 수렴값들.

Fig. 2 Converged values of the model parameters.

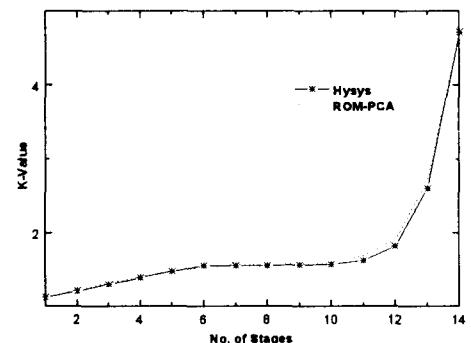


그림 3 평형상수들의 수렴값들.

Fig. 3 Converged values of equilibrium constants.

그림 4는 3, 4단에서 실제조성값들과 추정치들을 비교한것으로 거의 일치함을 알수 있다. 나머지 단에서도 실제값과 추정값은 거의 일치함을 보였다.

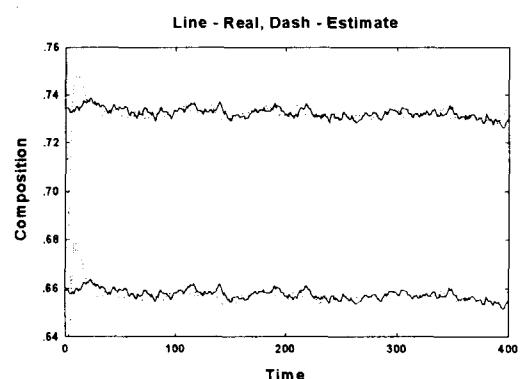


그림 4 중류단 각 단의 조성추정

Fig. 4 Prediction of composition of the distillation column

3.2 사례연구 2

현재 조업중인 모기업의 중류탑은 90단으로 구성된 초산과 물의 유사이성분 분리계로, DCS가 구축되어 있어 1분간격으로 각 단의 온도, 압력과 중류탑내로 유입, 유출되는 유량이 질량유속으로 측정되고 있다. 이 탑의 측정값들과 평균 조업조건은 각각 표 2,3와 같다.

표 2 중류탑의 측정값들.

TABLE 2 Measured values of distillation tower.

온도 측정단	#01 #21 #41 #59 #83 #89 #90 #Btm
압력 측정단	#01 #Btm
Feed	Feed 1. (#83) Feed 2. (#81) Feed 3. (#77) Feed 4. (#89)
Mass Flow rate	Steam, Reflux, Btm, Distillate etc.

표 3 중류탑의 평균 조업조건.

TABLE 3 Average operation condition of distillation tower.

	BTM	TOP
TEMP(°C)	126.9	103.1
PRES(ATM)	1.681	1.115
WT%-HAc	92	0.45

온도와 압력을 평형데이터로부터 조성으로 환산하고, 측정단을 내삽점으로 설정하고 모든 단에서 조성을 내삽하여 구하였다. 모든 단의 조성 데이터로부터 PCA를 적용하여 기저벡터를 계산하였다. 각 질량유속들은 평균조성을 이용하여 물유속으로 바꾸었고, boilup유속은 재비기의 열수지식으로부터 구하였다. 각 측정값들은 exponential filter를 사용하여 노이즈를 제거하였다.

액체 체류량(Liquid Holdup)은 탑의 단, 옹축기, 재비기의 크기로부터 계산하였고, q 는 가정하였다. 공급단을 단순화하여 #83 단에 평균값으로 들어오는 것으로 가정하였다. 평균 초산조성은 대략 70wt% (41.2mol%)이다. 평형상수값은 중류단 3개와 탈거단 4개를 내삽점으로 하여 근사하였고, 모델파라미터는 내삽점에서의 평형상수와 $1/H_b$, 공급물의 조성 X_F , 칼만이득들로 설정하였다.

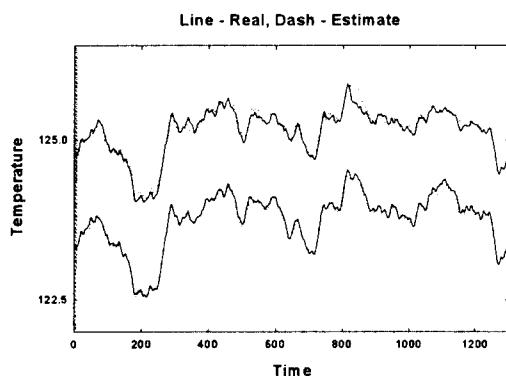


그림 5 중류탑 각 단의 온도추정.

Fig. 5 Prediction of temperatures of the distillation column

그림 5는 83,89단에서의 실제측정온도와 추정온도를 비교한

것으로, 모델인식초기단계에서 innovation모델에 의해 추정한 온도는 큰폭의 거동을 보이다가 곧 실제 온도로 수렴함을 알 수 있다. 그림 6은 공급단의 조성을 추정한 것으로, 평균조성 41.2 mol%근처에 수렴함을 알 수 있다.

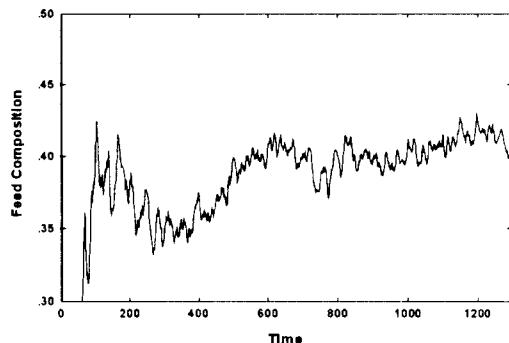


그림 6 공급단의 조성 추정.

Fig. 6 Estimation of feed composition.

4. 결론

본 연구를 통해 PCA를 이용하여 효율적인 차수감소모델을 얻을 수 있음을 보였고, 이 차수감소모델은 염밀모델과 거의 유사한 성능을 보임을 알 수 있었다. 회귀적 예측오차방법(RPE)을 적용해 실제 플랜트의 거동을 예측할 수 있었으며, 모델파라미터(평형상수, 탑액체체류량), 칼만이득, 공급물조성 등을 효율적으로 추정할 수 있었다. 이는 이 기법이 중류탑의 조업조건을 효과적으로 모니터링할 수 있음을 의미하며, 나아가 제어의 목적으로 사용될 수 있는 모델의 기초를 수립했다고 할 수 있다.

이 기법의 문제점으로는 사례연구 1에서 공급물 조성이 일정한 경우 다른 파라미터들(평형상수, 액상, 기상유량)이 변화폭이 작아 공급물 조성추정이 용이하나, 공급물 조성의 크게 변화하는 경우 공정의 비선형적 특성이 크게 달라져 조성변화의 경향은 알 수 있었으나 정확한 값을 추정하지 못하였다. 사례연구 2에서는 실제 공정을 대상으로 각단을 평형단이라 가정하고 온도와 압력으로부터 조성을 유추하였는데, 실제로는 비평형이므로 조성의 측정에 의한 보정이 보완되어야 실제 중류탑의 정확한 상태를 알 수 있으리라 생각된다.

참고문헌

- [1] L. Ljung, "Asymptotic behaviour of the extended Kalman filter as a parameter estimator for linear systems", 1979, *IEEE trans. Auto. Control*, **AC-24**, 36.
- [2] L. Ljung, 1983, *Theory and Practice of Recursive Identification*, The MIT Press., Massachusetts.
- [3] T.W. Mix, and Dweck, J.S., 1982, *Conserving Energy in Distillation*, The MIT Press, Massachusetts.
- [4] Prengle, H.W. et., Crump, J., Fang, C., Frupa, M., Henley E. and Wooley, T., 1974, Report on Project S/D-10, Governor's Energy Advisory Council, Texas
- [5] R. A. Johnson, D. W. Wichern, 1988, *Applied Multivariate Statistical Analysis*, Prentice Hall International, Inc.
- [6] 김홍식, "차수감소모델을 이용한 이성분중류공정의 적용예측 제어 및 온-라인 최적화", 서강대학교, 박사학위 논문, 1990.