

화학공정에 있어서의 대규모공정 해석방법

조인호 . 문장호 . 최수형 . 윤인섭

서울대학교 공과대학 화학공학과

A Study on The Techniques of Large Scale Chemical Process System Analysis

In-Ho Cho . Jang-Ho Moon . Soo-Hyoung Choi and En-Sup Yoon

Department of Chemical Engineering, Seoul National University

Abstract

For the control of chemical process, optimal value of the process should be known at first. And process simulation is the previous step of optimal value calculation. However it is not a simple work to analyze chemical process system. Especially for the large scale chemical process system, many difficulties such as non-linearity and complexity caused by recycle streams should be overcome. In this paper, three strategies of large scale chemical process analysis were explained and discussed with case studies.

1. 서론

화학공정의 최적제어를 위해서는 먼저 그 공정의 최적조업조건을 알아야 하고 또한, 이 보다 먼저 그 공정의 해석이 가능해야 할 것이다. 이러한 관점에서, 화학공정 특히 대규모 화학공정의 해석을 위한 접근방법을 다루고자 한다.

화학공정은 재순환(Recycle)으로 인한 구조상의 복잡성과 그 계를 나타내는 설계방정식의 비선형성을 그 특징으로 한다. 이렇게 비선형방정식을 포함하고 있는 복잡한 공정을 해석하기 위하여는 논리적 방법이 필요하고 해석 후에 생기는 설계방정식의 풀이에도 화학공정의 특성을 잘 이용하여 효율적으로 처리할 수 있는 특별한 방정식풀이기구가 필

요하다는 것은 명확한 일이다.

화학공정을 모사하는 데는 세가지 접근방법을 생각할 수 있는데 첫째, 공정상의 유니트(Unit) 각각에 그 내부의 수학적 관계와 유니트들 사이의 구조상의 관계를 한꺼번에 고려하는 EOA(Equation Oriented Approach), 둘째, 공정상의 유니트들 사이의 구조상의 관계만을 고려한 후에 각각의 유니트에 대해 수학적 관계를 풀이하는 SQA(Sequential Modular Approach)이다. EOA의 경우는 전 공정을 하나의 방정식계로 만들어 처리하게 되므로 한꺼번에 많은 기억용량을 필요로 하고 유니트의 특성을 개별적으로 고려하지 못한다는 단점이 있으나 필요없는 계산량을 줄일 수 있어 최적화에서 서로 상반되는 제약조건들의 설정에 유용하며 SQA는 공정구조와 각 유니트내의 수학적 구조를 따로 생각하므로 필요없는 계산량이 많아지는 단점이 있으며 목적변수들이 고정된 공정모사기에 쓰이고 있다. 셋째, EOA와 SQA의 장점을 혼합한 SMA(Simultaneous Modular Approach)로 전체공정을 두 단계로 모사하게 된다. 즉, 각 모듈(Module)들의 축소모형(Reduced Model)을 EOA개념으로 풀고 그 결과를 SQA의 계산에 적용하여 전체계산량을 대폭 줄이는 방법이다.

본 고에서는 SQA를 기본으로 하는 공정해석방법의 개념과 그 적용예, EOA를 위한 방법과 그 문제점 해결을 위한 개선사항을 검토하고, 이 두 가지를 혼합한 SAM의 효과적 활용방법을 알아보려고 한다.

2. 이 론

SQA, EOA, SMA 의 3부분으로 나누어 그 관심분야에 대해 각각 서술하였다.

(1) SQA 방법

SQA에 있어서 각 유니트들에 대한 모사(Simulation)는 세부적인 문제이므로 재순환으로 인해 얽혀 있는 공정전체를 계산량을 줄이면서 풀어가는 논리적 방법 즉, 공정해석, 에 목적을 두었다.

화학공정은 보통 공정도(Process Flow Diagram)로 주어지게 되며 이 공정도는 각 유니트들의 기능만을 나타낼수 있는 간략한 그래프 형태로 정리할 수 있고 이를 바탕으로 같은 기능을 가지는 행렬(Matrix)를 작성할 수 있는 것은 잘 알려져 있다. 공정도에서 스트림(Stream)을 따라감으로써 루우프(Loop)찾을 수 있는 것 처럼 행렬에서도 루우프를 발견 할 수 있다. 이런 루우프의 의미를 하나의 열이 대신해서 나타낼 수 있고 따라서 공정도를 나타내는 행렬은 단순화 된다. 이와 같은 개념으로 Steward[1], Sargent and Westerberg [2], Himmelblau [3], 등은 복잡한 공정을 훨씬 단순하게 정리시키는 알고리즘(Algorithm)을 개발하였다. Fig.1, Fig.2는 그 예로서 Fig.1이 나타내는 공정은 12개의 유니트들이 모두 하나의 루우프를 형성하고 있는 것 처럼 보이지만 사실은 Fig.2가 보여주는 것 처럼 최대한으로 6개의 유니트들만이 루우프를 이루고 있다는 것이다.

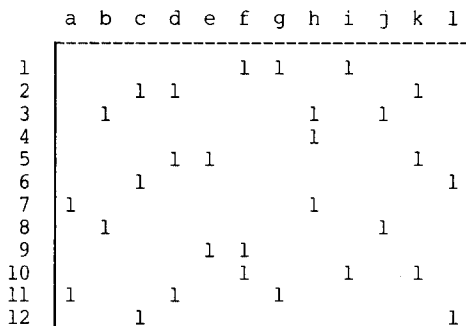


Fig.1 An Example of Structural Matrix.

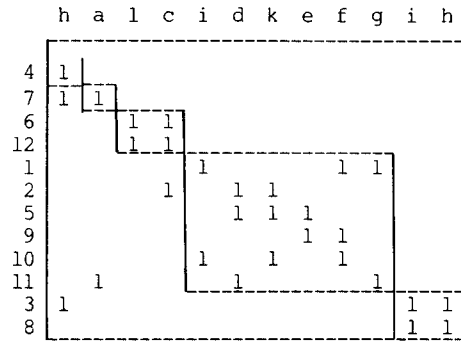


Fig.2 The Result of Partitioning by Steward Algorithm.

이러한 작업을 Partitioning이라 하며 Fig.2가 나타내는 각 블록(Block)들을 더욱 축소 시키는 것을 Tearing이라 하는데 이에선 주어진 계에대한 변형이 요구된다. 그 변형이란 곧 어떤 값에 대한 가정을 의미하며 이는 가정치의 수렴이 뒤따르게되어 계산량을 증가시키게 된다. Steward, Upadye and Grens [4], Motard[5], Westerberg[6] 등 많은 사람들이 Tearing알고리즘을 제시하였다. 본 연구에서는 Tearing에 있어 유니트를 연결하는 스트림의 비중을 똑같이 두는 Steward 알고리즘과 비중인자를 두고 동적계획법(Dynamic Algorithm)을 이용하여 Tearing 되는 전체비중을 최소화하는 Grens 알고리즘을 앞의 Partitioning 과 연계적으로 작용시킬 수 있는 해석기구를 만들어 예를 통하여 그 효율성을 확인하였다.

(2) EOA 방법

EOA는 공정전체가 가진 방정식을 한꺼번에 처리하는 방법이다. 따라서 대규모의 비선형연립방정식이 발생하게되고 이 방정식계를 직접 풀어내든지 아니면 최대한으로 정리하여 ; 공정해석의 개념 이용, 순차적으로 해를 구하게 된다.

(2-1) 직접 계산법

n개의 방정식과 n개의 변수를 가진 비선형 연립 방정식계를 푸는 가장 일반적인 방법이 Newton-Raphson법이며 그 개념은 아래와 같다.

$$J^{(k)} \Delta^{(k)} = -f^{(k)}$$

여기서 상점자 k는 반복계산횟수(Iteration Number),

$J^{(k)}$ 는 $\underline{x}=\underline{x}^{(k)}$ 에서의 Jacobian 행렬, 즉

$$J^{(k)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} \underline{x}=\underline{x}^{(k)}$$

k+1번째의 해의값은 다음과 같다.

$$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} + \underline{t}^{(k)} \underline{p}^{(k)}$$

여기서 $\underline{t}^{(k)}$ 는 수렴을 위한 매개변수이다. 그러나 NR법은 몇 가지 문제점을 가지고 있다.

- Jacobian의 편미분을 매 단계마다 계산해야한다.
- 선형방정식계를 매단계마다 계산하여야한다.
- 초기치의 설정에 따라 발산(Diverge)할 수도 있다

이러한 문제점들중 첫번째를 개선한 것이 Broyden[7]이다. Broyden은 NR법이 매단계마다 Jacobian행렬의 계산에 많은 시간을 쓰는것을 개선하기 위해 근사식을 이용하여 Jacobian행렬을 계산하였다.

$$G^{(k+1)} = G^{(k)} + \frac{\{f^{(k+1)} - (1-t^{(k)})f^{(k)}\} \underline{p}^{(k)T}}{t^{(k)} \underline{p}^{(k)T} \underline{p}^{(k)}}$$

여기서 $G^{(k)}$ 는 Jacobian의 초기계산값 $J^{(0)}$ 이다.

그러나 이 방법은 본래 0인 값을 가지는 요소들이 다시 값을 가지게 되어 큰 효과를 가져오지 못하였다. 나아가서 Schubert[8]는 본래 0인 원소를 그대로 유지시켜 계산량을 감소시켰다. 즉, Jacobian의 각각의 행에대해 다음의 변형된 식을 설정하였다.

$$g_i^{(k+1)} = g_i^{(k)} + \frac{\{f_i^{(k+1)} - (1-t^{(k)})f_i^{(k)}\} \underline{p}_i^{(k)T}}{t^{(k)} \underline{p}_i^{(k)T} \underline{p}_i^{(k)}} \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

여기서 $\underline{g}_i^{(k)}$ 는 Jacobian $G^{(k)}$ 의 i번째 행벡터, $\underline{p}_i^{(k)}$ 는 $\underline{g}_i^{(k)}$ 의 임의의 j번째(j=1,2,...,n)원소가 0일때 $\underline{p}_i^{(k)}$ 의 j번째 원소를 0으로 되게 설정한 열벡터이다. 여기서 중요한 사실은 제일 처음 Jacobian이 0인 원소는 계속 0을 유지하여 0이 아닌 원소만 계산하면 되므로 계산량을 감소시킨다는 것이다. 이 방법은 방정식에 대한 변수의 밀도가 낮으면 더욱 좋은 효과를 가지게 된다. 본 연구에서는 사례연구를 통해 각 방법들의 수렴특성을 비교하였다.

(2-2) 범함수 행렬 (Functional Matrix)이용법

범함수 행렬은 어떤 방정식을 정의된 함수형태 (Table.1)로 나누어 재조립한 방정식계를 나타내는 행렬을 말하며 정해진 함수형태로 재조립함에 따라 조직적 처리가 가능해 지므로 그에 따른 장점들을 가지게

된다. Table.1에서 'P'이하로 나타내어지는 원소는 복수의근을 가지게 된다. Mattione, Meir, and Book [9], Book, Ramirez [10]

등에 의해 범함수 행렬을 이용한 해석 알고리즘이 제시되었다. 이 방법은 방정식계가 방정식의수 보다 더 많은 수의 변수의 수를 가질 때 즉, 자유도가 있는 계에 있어서 효율적으로 적용할수 있으며 이 때는 다음과 같은 순서로 방정식계가 정리될 수 있도록 자유도 만큼의 설계변수를 지정하게 된다.

1. 단일근을 가지고 순차적으로 풀리는 방정식계.
2. 선형연립방정식계 .
3. 복수근을 가지며 순차적으로 풀리는 방정식계 .
4. 비선형연립방정계 .

즉 자유도를 가지는 연립 방정식계가 있다면 우선적으로 비선형방정식을 없앨수 있도록 설계변수를 선정하여 방정식계가 선형화 되게 한다는 개념이다. 본 연구에서 방정식풀이기구의 구조는 Fig.3 과 같고 여기서 점선은 개발되지않은 부분을 나타내며 역행렬은 Harwell Library를 이용하였다.

Table.1 Defined functional forms.

Designation	Functional form	Equation form
A	Linear	$C_1 x_1 + f(\underline{x}) = 0$
B	Product	$C_1 x_1 x_2 \dots x_n + f(\underline{x}) = 0$
D	Reciprocal	$C_1 / (x_1 + C_2) + f(\underline{x}) = 0$
E	Exponential	$C_1 \exp(C_2 x_1) + f(\underline{x}) = 0$
G	Hyperbolic tangent	$C_1 \tanh(x_1 + C_2) + f(\underline{x}) = 0$
H	Hyperbolic sine	$C_1 \sinh(x_1 + C_2) + f(\underline{x}) = 0$
L	Natural logarithm	$C_1 \ln(x_1 + C_2) + f(\underline{x}) = 0$
M	Common logarithm	$C_1 \log(x_1 + C_2) + f(\underline{x}) = 0$
N	Cubic	$C_1 (x_1 + C_2)^3 + f(\underline{x}) = 0$
O	Square root	$C_1 \sqrt{x_1 + C_2} + f(\underline{x}) = 0$
P	Power	$C_1 x_1^C + f(\underline{x}) = 0$
R	Fourth order	$C_1 (x_1 + C_2)^4 + f(\underline{x}) = 0$
S	Square	$C_1 (x_1 + C_2)^2 + f(\underline{x}) = 0$
T	Tangent	$C_1 \tan(x_1 + C_2) + f(\underline{x}) = 0$
U	Sine	$C_1 \sin(x_1 + C_2) + f(\underline{x}) = 0$
V	Cosine	$C_1 \cos(x_1 + C_2) + f(\underline{x}) = 0$
W	Hyperbolic cosine	$C_1 \cosh(x_1 + C_2) + f(\underline{x}) = 0$

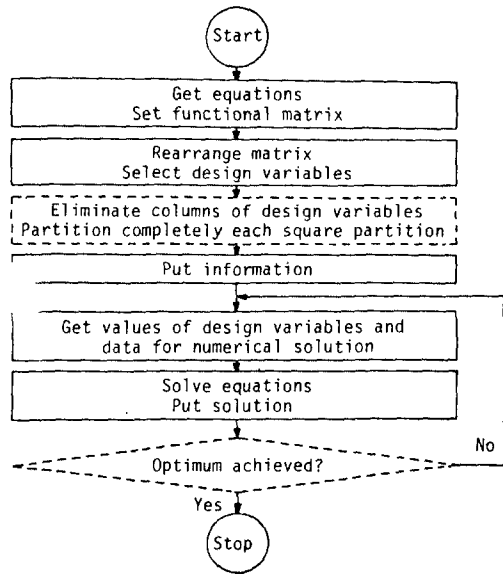


Fig.3 Schematic Diagram of Equation-Solving System.

(3) SMA 방법

수렴특성이 있어서는 EOM의 특성을 갖고, 모듈화에 있어서는 SQM의 특성을 가지는 복합적 방법으로 Fig.4와 같은 구조로 태변할 수 있다.

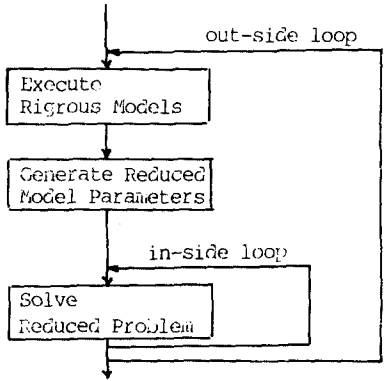


Fig.4 Structure of Simultaneous Modular Approach
전형적인 SQA에 EOA의 가리를 위한 축소모형(Reduced Models)을 함께 가지고 있으며, 내부 루우프인 축소모형의 계산으로 외부루우프인 SQA 루우프의 수렴을 촉진시킨다. Rodrigo and Evans [11], Locke and Westberg [12] 등에 의해 활발히 연구되고 있으며 자유도를 가지는 축소모형에 Powell의 최적화 알고리즘을 적용시켜 강력한 공정최적화 알고리즘이 되고 있다. 그러나 SQA에 의한 구조상의 경직성으로 최적화 에 있어 구조의 변화를 고려할 수 없다.

3. 사례연구 및 검토

(1) 사례연구 1

NR, OB(Original-Broyden Method by Broyden), BS(Broyden-Schubert Method by Schubert)의 세가지 방법을 비교하기 위하여 다음과 같은 방정식계를 예제로 택했다.

$$f_1 = (3 - 0.5x_1)x_1 + 1 - 2x_2$$

$$f_i = (3 - 0.5x_i)x_i - x_{i-1} - 2x_{i+2} \quad (i=2, 3, \dots, n-1)$$

$$f_n = (3 - 0.5x_n)x_n - x_{n-1}$$

시제로 이런 정도의 비선형방정식계는 종류탑 도사와 같은 문제에서 비범하 새기고 있다. Fig.5, Fig.6은 NR, OB, BS 방법에 대해 방정식의 갯수가 각각 20, 30 일때의 결과를 비교한 것이다.

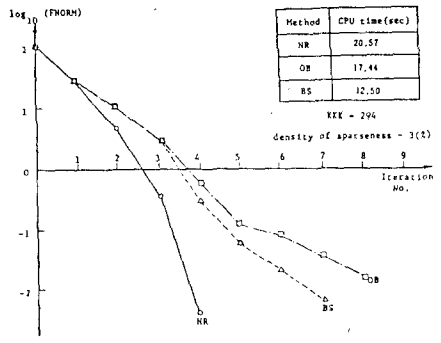


Fig.5 Characteristic curve of convergence n=20

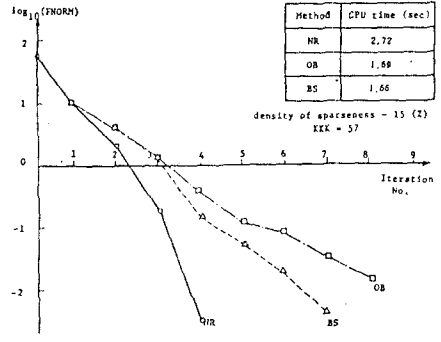


Fig.6 Characteristic curve of convergence n=99

두 경우의 비교는 각각의 방법에 대해 거의 비슷한 수렴 곡선을 나타내고 있는데 반복계산 횟수 면에서는 예견할 수 있는 대로 NR, BS, OB 순으로 증가하며 계산시간에 있어서는 BS, OB, NR 순으로 증가함을 보여주고있다. n=20, 50, 99인 경우에 대한 비교결과를 Table.2 에 나타내었다.

Table.2 The comparison of Residual computer time.

n	Sparsity	CPU Time (sec)		
		NR	OB	BS
20	15(%)	2.44(1.76)	1.41(1.02)	1.38(1.00)
50	6(%)	4.05(1.87)	3.04(1.40)	2.17(1.00)
99	3(%)	13.57(2.47)	10.44(1.90)	5.50(1.00)

() 안은 BS에 대한 비율
여기서 보는 바와 같이 밀도가 낮아질 수록 방법의 우월성이 현저해질 것이다. 그러나 비선형 정도가 매우 큰 방정식계에 대하여는 Broyden 방법과 NR 방법은 수렴특성이 매우 불안하여 실제적용이 곤란함을 알 수 있었다.

(2) 사례연구 2

본 연구에서 개발된 공정해석기구를 문헌에서 발췌한 화학공정에 적용시켰다. Fig.7은 냉동흡수공정으로 이의 기능선도(Functional Block Diagram)은 Fig.8이 된다. 공정해석 결과 Fig.8에 표시된(*) 4개의 스트림(Stream)을 Tear하던 전체공정은 최대한 6개의 유니트들만이 루우프

를 형성하는 시스템으로 분할되며 완전한 Tearing을 위해서는 알고리즘을 계속 적용시킨다. 그러나 여기서 Tearing의 수가 증가하면 계산량이 급속히 늘어나며 만약 제약조건이 주어지면 제약조건들 또한 반복계산을 요하므로 복잡한 대규모공정은 SQA로 풀기에는 많은 어려움이 따르게된다.

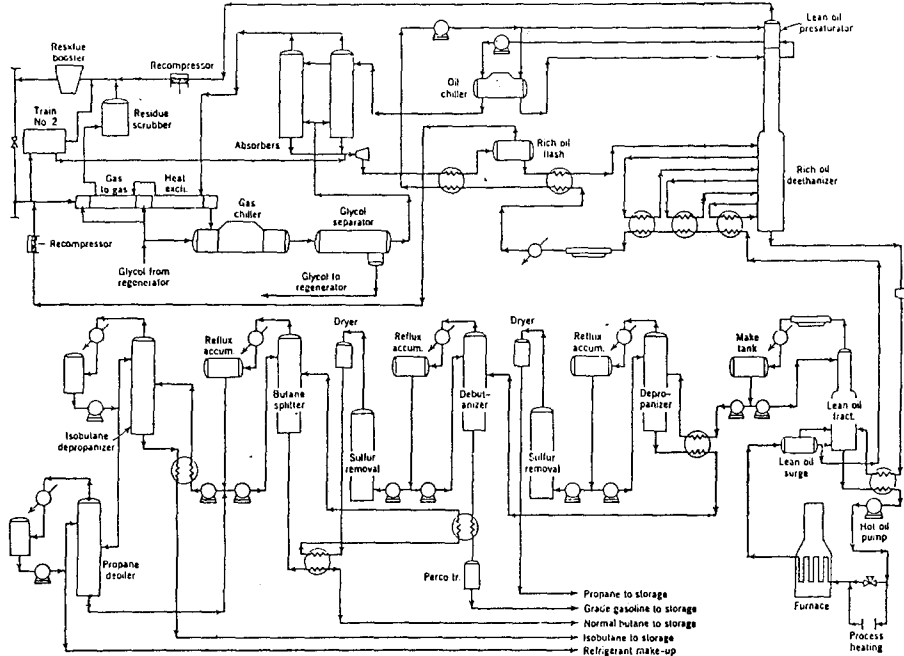


Fig.7 Refrigerated absorption process.

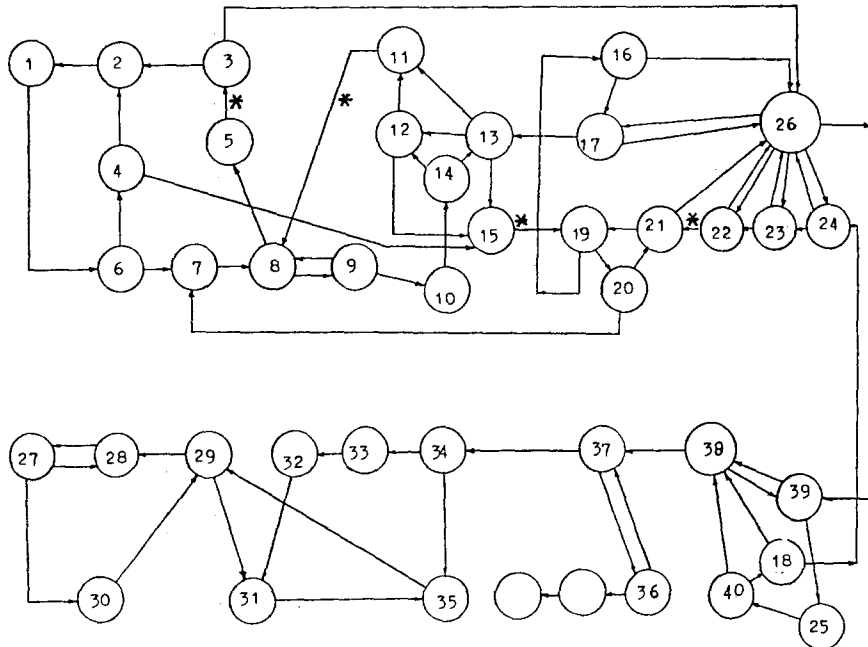


Fig.8 Functional block diagram of Fig.7

본 고에서 제시하지는 않았으나 범함수행렬을 이용한 해석기구도 사례연구를 통하여 그 유용성이 입증되었다. 그러나 여기서 다른 EOA의 두가지 해석기구본은 근본적인 문제를 가지게된다, 그것은 EOA 자체가 가지는 해결하지 못한 문제로서 대규모 공정을 어떻게 방정식만으로 정확히 모사할 것인가 하는 문제와 공정모사상의 불연속성을 어떻게 극복할 것인가의 문제이다[11]. 후자는 결국 정밀한 초기치 작성의 문제로 귀결된다.

이에 결론적으로 SQA와 EOA의 장점을 혼합한 SMA가 바람직하게 보이니 이 또한 근본적인 면에서 SQA의 구조상 경직성을 피할 수 없으므로 공정구조상의 변화에 대처할 수 없는 결함을 가지게 된다. 이를 해결하기 위한 방법으로 인공지능을 이용한 구조의 변화에 따른 초기치 추론능력을 가지고, 각 모듈들의 작성에 있어 물질의 흐름과 정보의 흐름을 분리시켜 공정구조의 변화에도 융통성 있게 적용될 수 있는 시스템이 필요하다고 생각된다.

4. 결 론

사례연구를 통하여 본 연구에서 개발된 공정해석기가 Partitioning과 Tearing의 연속적 수행으로 임의의 공정에 대해 어느정도 효과적인 적용이 가능함을 보았으나 한편, 근본적으로 Tearing이 증가함에 따라 급속히 증가하는 계산량을 고려할 때 SQA의 한계성을 짐작할 수 있었으며, EOA에 있어서 밀도가 낮은 대규모 시스템에 대해서는 BS방법이 2배 이상 우수함을 알 수 있었다. 설계변수를 공정해석과 동시에 설정하는 범함수 행렬을 이용하는 알고리즘도 잘 적용됨을 확인하였다. 그러나 이런 방법들이 시스템의 비선형성이 높아지고 규모가 커짐에 따라 EOA의 근본적 문제점인 수렴의 불안정성과 불연속성을 유발시키는 초기치 설정의 어려움을 해결할 수 있는 방법이 되지는 못했다. 또한 SQA와 EOA의 장점을 혼합한 SMA역시 SQA의 구조상의 경직성과 위의 단점들을 기지므로 이의 해결을 위해 물질의 흐름과 정보전달 방향을 분리시킨 모듈의 개발과 이로인해 다양하게 변할 공정구조의 초기치 설정을 위해 인공지능을 이용한 초기치 추론 능력의 개발이 필요하다고 사료된다.

5. 참 고 문 헌

- [1] D.V. Steward, J. SIAM Numer. Anal. B, 2(1965)
- [2] D.M. Himmelblau, CES, 22(1967), 22.
- [3] R.W.H. Sargent and Westerberg, Trans. Ins. Chem. Eng., 42(1964), 190.
- [4] R.S. Upadye and Grens II, AIChE J., 18(1972) 533.
- [5] R.L. Motard and M. Shacham and E.M. Rosen, AIChE J., 21(1975), 417.
- [6] R.L. Motard and A.W. Westerberg, AIChE J., 27(1981), 725.
- [7] C.G. Broyden, Math. Comp., 25(1971)
- [8] U.K. Schubert, Math. Comp. 25(1970) 27.
- [9] Mattione M.J.K et al., AIChE Symposium Series, NO.214, 78, 29(1982)
- [10] Book N.L., Ramirez W.F., AIChE J., 30(1984), 609.
- [11] Trevino-Lozano R.A., Ph. D. Thesis, MIT.
- [12] Locke M.H. et al., AIChE J., 29(1983), 5.
- [13] Westerberg A.W. et al., 'Process Flowsheeting', Cambridge University Press, London, (1979).