

## 잠재적 폭발 위험성을 고려한 단단 혼합냉매 LNG 공정의 설계 변수 최적화

김익현\* · 단승규\* · 조성현\* · 이기백\*\* · 윤인섭\*\*†

\*서울대학교 화학생명공학부  
151-744 서울시 관악구 관악로 1  
\*\*한국교통대학교 화학생명공학과  
380-702 충청북도 충주시 대학로 50  
(2014년 1월 8일 접수, 2014년 3월 6일 수정본 접수, 2014년 3월 18일 채택)

## Optimization of Single-stage Mixed Refrigerant LNG Process Considering Inherent Explosion Risks

Ik Hyun Kim\*, Seungkyu Dan\*, Seonghyun Cho\*, Gibaek Lee\*\* and En Sup Yoon\*\*†

\*School of chemical and biological engineering, 1 Gwanak-ro., Gwanak-gu, Seoul 151-744, Korea  
\*\*Department of Chemical and Biological Engineering, Korea National University of Transportation,  
50 Daehak-ro, Chungju-si, Chungbuk 380-702, Korea  
(Received 8 January 2014; Received in revised form 6 March 2014; accepted 18 March 2014)

### 요 약

화학공정의 기초설계는 물질수지와 열수지 계산을 기초로 공정의 경제성을 확보하고 주어진 조건 내에서 원하는 제품을 생산 가능하도록 한다. 이 단계를 통해 공정은 사용될 물질과 반응, 설비의 구조와 운전 조건 등이 결정되기 때문에 이후 바뀔 수 없는 고유한 특성을 갖게 된다. 고유한 특성은 뛰어난 경제성일 수도 있지만 다양한 잠재적 위험요인을 내포하는 것일 수도 있다. 따라서 기초설계를 위한 공정모사와 정량적 위험성 평가 기법의 통합을 통해 보다 안전하면서도 경제적인 공정을 설계하는 것이 중요하다. 본 논문에서는 LNG 액화공정을 Aspen HYSYS를 이용하여 모사하고, 폭발 사고에 대한 정량적 위험성 평가를 수행함으로써 잠재적 위험성을 최소화하면서도 경제성을 고려하도록 설계변수를 결정하였다. 이를 위해 확률적 최적화 방법론을 이용하여 Aspen HYSYS의 최적화 한계를 극복하였고, Aspen HYSYS와 Matlab의 연동을 통해 정량적 위험성 평가의 정확성을 높이며 최적화를 용이하게 하였다. 정량적 위험성 평가 결과, 공정 변수 중 안전성 확보를 위해 중요한 변수는 혼합냉매의 압력이었고, 0.5~10%의 운전비용 증가를 통해 잠재적 위험성을 4~18% 줄일 수 있었다. 비용을 크게 증가시킬수록 위험성의 절대적 수치는 낮아지지만 비용 대비 위험성 감소의 효과는 떨어졌다. 이처럼 공정모사와 정량적 위험성 평가 기법의 통합은 태생적으로 보다 안전한 공정의 설계가 가능하게 하고, 기초설계 단계에서부터 공정 내 위험요인을 수치적으로 확인할 수 있어 위험요인적인 특성을 갖도록 공정을 설계하는데 도움이 될 것이다.

**Abstract** – Preliminary design in chemical process furnishes economic feasibility through calculation of both mass balance and energy balance and makes it possible to produce a desired product under the given conditions. Through this design stage, the process possesses unchangeable characteristics, since the materials, reactions, unit configuration, and operating conditions were determined. Unique characteristics could be very economic, but it also implies various potential risk factors as well. Therefore, it becomes extremely important to design process considering both economics and safety by integrating process simulation and quantitative risk analysis during preliminary design stage. The target of this study is LNG liquefaction process. By the simulation using Aspen HYSYS and quantitative risk analysis, the design variables of the process were determined in the way to minimize the inherent explosion risks and operating cost. Instead of the optimization tool of Aspen HYSYS, the optimization was performed by using stochastic optimization algorithm (Covariance Matrix Adaptation-Evolution Strategy, CMA-ES) which was implemented through automation between Aspen HYSYS and Matlab. The research obtained that the important variable to enhance inherent safety was the oper-

†To whom correspondence should be addressed.

E-mail: esyoon@pslab.snu.ac.kr

‡이 논문은 서울대학교 윤인섭 교수님의 정년을 기념하여 투고되었습니다.

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

ation pressure of mixed refrigerant. The inherent risk was able to be reduced about 4~18% by increasing the operating cost about 0.5~10%. As the operating cost increases, the absolute value of risk was decreased as expected, but cost-effectiveness of risk reduction had decreased. Integration of process simulation and quantitative risk analysis made it possible to design inherently safe process, and it is expected to be useful in designing the less risky process since risk factors in the process can be numerically monitored during preliminary process design stage.

Key words: LNG Process, Quantitative Risk Analysis, Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy, Inherent Safety

## 1. 서 론

전통적인 화학공정 설계의 목적은 경제적 관점에서 적절한 이득을 확보하는 것이다. 공정 기본설계는 경제성을 최대한 확보하여 상세설계 또는 안전성 평가를 통해 추가적으로 발생할 비용에 대비하는 것이 일반적이다. 하지만 화학공정은 수많은 장치와 유해물질들로 구성되어 있기 때문에 발생 가능한 여러 불확실성을 사전에 고려하지 못한다면 잠재적인 제어 실패 또는 사고의 발생 확률이 높아지게 된다. 일반적인 화학공정 설계 단계는 Fig. 1의 (a)와 같이 개념설계를 통해 경제성을 확보하고, 이를 바탕으로 상세설계 과정을 통해 P&ID(Piping and Instrument Diagram)와 공장 레이아웃(Layout) 결과를 얻게 된다. 이후 P&ID와 공장 레이아웃 결과는 위험성 평가를 통해 공정의 안전성 확보에 사용된다. 이 때 위험성 평가로 인해 도출 가능한 결과는 위험 요인에 대한 확인, 공장의 레이아웃 변경, 위험성이 높은 특정 설비의 안전거리 분석, 사고 시 대응방안 마련 등 공정의 외형적인 조건을 변경하는 것으로 기본설계를 변경하는 경우는 드물다[1-5].

최근 빈번히 발생하는 화학 산업 내 사고는 다양한 형태로 전 산업에 영향을 미치므로 화학산업의 지속가능성에 대한 평가와 이를 향상하기 위한 노력이 이루어지고 있으며, 특히 설계 단계에서부터 위험성을 정량화하여 고려하는 것이 요구되고 있다[6]. 설계 단계에서 안전을 고려한 공정을 설계하려면 Fig. 1의 (b)와 같이 공정 모사기를 이용한 개념설계 단계에 잠재적 위험성 평가 기법을 통합할 필요가 있다. 이를 위해서는 위험성 평가 기법들 중 정량적 위험성 평가(Quantitative Risk Analysis) 기법을 이용하여 위험성을 수치화하고, 최적화 기법을 적용하여 최적의 설계를 얻어야 한다.

Shariff 등[7]은 폭발에 대한 영향성 평가 방법을 공정모사기와 통합하여 초기 설계 단계에서 잠재적 안전성을 고려하는 방법을 연구하였다. 이 연구에서는 폭발의 영향성 평가를 위해 주로 사용되는 정량적 평가 기법 중 TNT 당량법을 이용하고, 폭발 물질의 양을 연소 한계(Flammability Limit)와 가스 누출 모델을 바탕으로 예측하는 방

법을 제안하여 초기설계를 변경하고 LNG 공장 설비의 초기 배치를 결정하였다. 또한 Shah 등[8]은 LNG 액화공정에 대하여 다목적 최적화(Multi-objective Optimization)를 통한 잠재적 안전성 평가 방법을 발표하였다. 이 연구에서는 잠재적 안전성을 의미하는 공정 내 유체의 유량, 경제성을 의미하는 고정설비 비용 및 운전비용을 목적함수로 두고 최적화를 수행하여 잠재적 안전성을 고려한 공정 설계 연구를 수행하였다. Shariff 등[7]의 논문에서는 잠재적 안전성 고려의 기법으로 정량적 분석 기법을 이용하여 정확도가 높다고 보였지만 반면 초기설계에 적용하기 어려운 방법론적 한계를 보였고, Shah 등[8]의 논문에서는 잠재적 안전성을 고려하기 위한 목적함수를 공정 내부 유량으로 두어 정확성의 한계를 보이지만 최적화를 통해 기 초설계에 반영된다는 장점이 있다.

본 논문에서는 LNG 액화공정을 대상으로 폭발에 의한 잠재적 위험성이 최소화된 공정 변수를 결정하고자 한다. LNG 액화 공정은 메탄(Methane), 에탄(Ethane), 프로판(Propane), 부탄(Butane) 등과 같은 가연성 탄화수소를 주요 물질로 포함하고 있어 재난으로 표현되는 대표적 화학사고 유형인 화재, 폭발, 누출들 중 폭발이 가장 위험한 형태이다. 잠재적 안전성을 평가하기 위해 폭발 사고의 영향을 목적함수로 하였고, 이 때 결정해야 할 설계변수는 혼합냉매(Mixed Refrigerant)의 조성 및 운전압력, 열교환기의 온도 조건 등으로 하였다. 대상 공정은 Aspelund, A. 등[9]과 Venkatarathnam[10]이 소개한 상분리가 없는 단단 혼합냉매 공정(Single-Stage Mixed Refrigerant Process)이며, Aspen HYSYS로 모델링하였다. 대상공정 내 주요 설계 변수 7개를 최적화하기 위해 확률적 최적화(Stochastic Optimization) 기법들 중 하나인 CMA-ES(Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy)를 사용하였다. Matlab을 이용하여 이 기법을 구현하고 Aspen HYSYS와 연동하여 다변수 최적화를 풀어내도록 하였다. 이를 바탕으로 초기설계 단계에서 잠재적 위험성을 고려한 설계변수 결정이 가능함을 보였으며 태생적으로 보다 안전한 화학공정 설계 방법을 제안하였다.

## 2. 잠재적 위험성의 정량적 분석 및 예측

### 2-1. 혼합물 기체의 연소한계 예측

연소한계는 공기 중 연료가 혼합되었을 때 불꽃이 옮겨 붙을 수 있는 최소농도인 연소하한(Lower Flammable Limit, LFL)과 최대농도인 연소상한(Upper Flammable Limit, UFL)으로 구성된다. 순수한 물질의 연료가 아닌 혼합물의 연소한계는 르샤틀리에의 법칙(LeChatelier's Rule)의 개념을 이용하여 예측가능하며 식 (1)에 의해 계산된다[11].

$$LFL = \frac{\sum y_i}{\sum (y_i/LFL_i)}, \quad UFL = \frac{\sum y_i}{\sum (y_i/UFL_i)} \quad (1)$$

본 연구에서 사용하는 순수물질 중 가연성 물질은 메탄, 에탄, 프

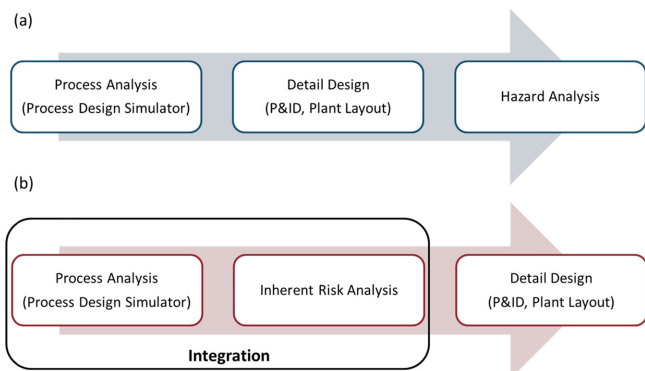


Fig. 1. (a) Conventional process design stages, (b) Integrated analysis activities for inherently safety design.

**Table 1. Lower and upper flammability limit of pure components [12]**

Component	LFL (mol% in air)	UFL (mol% in air)
Methane	5.0	15.0
Ethane	2.9	13.0
Propane	2.0	9.5
Butane	1.5	9.0

로판, 부탄으로 각각의 연소한계 값은 Table 1과 같다[12].

**2-2. 폭발에 참여하는 가스 누출량 예측**

가스 누출 모델은 액상의 물질 누출과 다르게 가스가 좁은 구멍을 통해 빠져나오면서 임계유동(Choked Flow)의 거동을 보이는지 여부에 따라 달라진다. 임계 유동의 여부는 용기의 압력 대비 대기압 및 임계압력의 비율을 비교하여 알 수 있다. 즉, 식 (2)를 만족한다면 임계유동이다.

$$\frac{P_{atm}}{P} < \frac{P_c}{P}, \frac{P_c}{P} = \left(\frac{2}{k+1}\right)^{k/(k-1)} \quad (2)$$

가스 누출 조건이 임계유동이 아니라면 식 (3)의 모델에 따라 누출량을 예측하며, 임계유동이라면 식 (4)의 모델로 예측한다[13].

$$\dot{m} = c_d A_h \sqrt{2\rho P \left(\frac{k}{k-1}\right) \left[ \left(\frac{P_{atm}}{P}\right)^{\frac{2}{k}} - \left(\frac{P_{atm}}{P}\right)^{\frac{k+1}{k}} \right]} \quad (3)$$

$$\dot{m} = c_d A_h \sqrt{k\rho P \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k+1}{k-1}}} \quad (4)$$

이 때 누출량 계수  $c_d$ 는 액상의 경우 약 0.61이고 기상의 경우 약 0.975이며, 기상과 액상이 공존하는 경우 기체물분율(Vapor Fraction)에 따라 비례적으로 0.61과 0.975 사이 값을 갖는다[7,11]. 따라서 0 부터 1사이의 기체물분율 VF에 대하여 누출량 계수는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$c_d = (0.975 - 0.61)VF + 0.61 \quad (5)$$

이렇게 누출된 가스는 모두 폭발에 참여하지 않고 이 중 일부 비율만이 실제 폭발에 참여한다. 이는 대기 자체의 확산에 의한 희석 효과 때문으로 본 논문에서 다루는 폭발성 물질들은 상대적으로 분자량이 낮은 메탄, 에탄, 프로판, 부탄으로 대기 온도가 낮지 않다면 확산 효과를 무시할 수 없다. 가우시안 모델(Gaussian Model)을 이용하여 확산에 의한 실제 누출량 중 폭발에 참여하는 비율은 오차함수(Error function)를 이용한 식 (6)에 의해 계산할 수 있다[11,14].

$$\frac{\dot{m}_f}{\dot{m}} = \text{erf} \left[ \sqrt{\ln \left( \frac{C_s}{C_{LFL}} \right)} \right] - \frac{2C_{LFL}}{C_s \sqrt{\pi}} \left[ \ln \left( \frac{C_s}{C_{LFL}} \right) \right] \quad (6)$$

폭발 참여비율이 최대가 되는  $C_s$  값은 다음의 식 (7)을 이용하여 계산할 수 있다[11].

$$\max. \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}} \Leftrightarrow \ln C_s = \frac{C_{UFL}^2 \ln C_{UFL} - C_{LFL}^2 \ln C_{LFL}}{C_{UFL}^2 - C_{LFL}^2} \quad (7)$$

폭발에 참여하는 가스 누출량 계산에 필요한 정보는 유체의 압력, 조성, 열용량, 밀도, 농도 등으로 모두 Aspen HYSYS의 공정 모사

결과를 이용한다. 이 외 필요한 정보인 대기압은 1atm(101.325 kPa)으로 가정하였고, 사건의 시나리오는 통상적인 작업자의 실수, 플랜지(Flange) 고장에 의해 누출되는 형태를 가정하여, 가장 압력이 높은 혼합냉매 흐름 구간에서 2.5 cm의 구멍을 통해 5분간 누출되는 것으로 하였다[7].

**2-3. 폭발에 의한 과압 영향 예측**

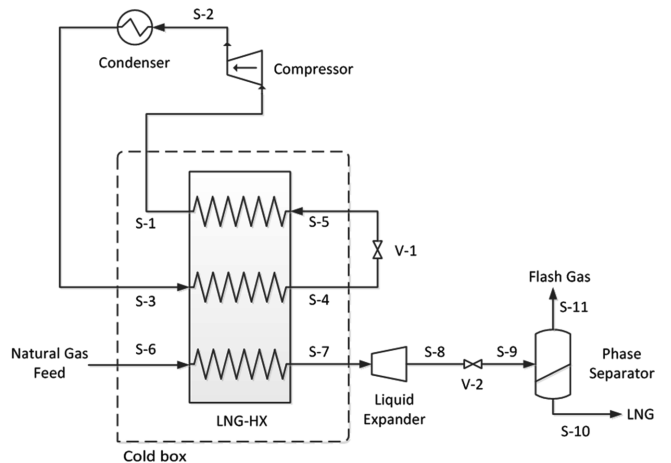
폭발에 의한 과압(Overpressure) 영향을 예측하기 위해 가스 누출량 중 최대 폭발 참여비율을 곱하여 실제 폭발에 참여하는 물질의 양( $\dot{m}_f$ )을 계산하고, 이 양을 이용하여 TNT 당량법 기반으로 과압을 예측하는 기법을 사용하였다. CEPP0[13]에서는 TNT 당량법 기반으로 폭발 발생 시 1 psi 규모의 과압이 도달하는 거리 계산법을 제시하였으며, 이 계산법을 식 (8)과 같이 표현할 수 있다.

$$D = 17 \left( t_{Releas} \dot{m}_f \frac{HC_f}{HC_{TNT}} \right)^{1/3} \quad (8)$$

폭발 과압에 의한 영향 분석을 위한 계산에서는 누출량 외에 연소열 정보가 필요하며, 공정 모사 결과를 통해 Aspen HYSYS가 계산하여 제공하는 값을 이용 하였다.

**3. 단단 혼합냉매 LNG 액화 공정**

PRICO(Poly Refrigerant Integrated Cycle Operation) 공정이라고도 불리는 단단 혼합냉매 LNG 공정(Single-stage Mixed Refrigerant LNG Process)은 Fig. 2와 같으며 메탄, 에탄, 프로판, 부탄, 질소 등으로 구성된 혼합냉매(S-1~S-5)를 1개의 냉각 사이클로 구성하여 기상의 천연가스(S-6)를 액화한다. 때문에 혼합냉매와 천연가스의 열교환은 1개의 LNG 열교환기(LNG-HX)를 통해 이루어지며, 단단 냉각 사이클 내 1번씩의 압축과 응축 단계를 거치는 LNG 액화공정 중 가장 간단한 형태를 갖는다. 이 공정은 Pritchard company에서 최초로 상업화하였다[15]. 상대적으로 낮은 압력에서도 운전이 가능하기 때문에 투자비용이 저렴한 판형핀(Plate-fin) 열교환기를 사용할 수 있으며 공정 제어가 상대적으로 용이하다는 장점이 있으나, 다른 혼합냉매 공정에 비해 운전 비용이 높아 효율이 떨어지고 냉매가 저온에서 얼 수 있다는 단점 때문에 비교적 작은 규모로만 건설된다[10].



**Fig. 2. Single-stage mixed refrigerant LNG process without a phase separator [15].**

**Table 2. Compositions of natural gas feed and refrigerant**

	Total flow (mol/hr)	Composition (mol%)				
		N <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
NG Feed	19286	0.00	88.80	5.60	3.70	1.90
MR	63272	15.23	34.48	23.65	8.94	17.67

**Table 3. Design specification of the single-stage mixed refrigerant LNG process**

Compressor discharge pressure	41 bar
Compressor suction pressure	1.7 bar
Natural gas feed inlet pressure	60 bar
Minimum temperature approach in the cold box(LNG-HX)	3 °C
Minimum temperature approach in the condenser	5 °C
Temperature difference between chilled water inlet and refrigerant outlet in the condenser	5 °C
LNG temperature before expansion	-163.7 °C
Adiabatic efficiency of compressor	80%

Fig. 2는 상분리가 없는 형태의 단단 혼합냉매 LNG 공정이다.

이 공정은 다양한 형태로 수정 보완되어 상용화되었으나, 질소 등의 냉매를 이용하는 방식과 다르게 폭발 및 화재에 취약한 탄소화합물로 구성된 냉매를 이용하기 때문에 인구밀집 지역이나 해양플랜트와 같이 공간제약이 존재하는 공간에서는 안전성의 문제로 적용에 제약이 있다.

Fig. 2의 공정은 Aspen HYSYS를 이용하여 모사하였다. 최적화 전 운전조건에서는 20 °C, 60 bar의 천연가스 흐름(S-6)이 LNG-HX를 통과하면서 -163.7 °C까지 냉각되어 팽창기와 밸브를 거쳐 상압의 LNG가 된다. 등엔탈피 팽창(Isenthalpic throttling)이 일어나는 밸브(V-2)의 역할을 등엔트로피 팽창(Isentropic expansion)이 가능한 팽창기(Liquid Expander)를 이용해 보조하면 전체 LNG 공정의 효율이 높아진다. 냉매가 가장 낮은 압력을 갖는 구간은 S-1으로 1.7 bar이고, 최대 압력은 S-2 구간의 41 bar이다. 천연가스(NG Feed)와 혼합냉매(MR)의 조성은 Table 2와 같다.

Table 2의 천연가스와 혼합냉매의 조성에 포함된 성분들의 물성계산을 위해 PR(Peng-Robinson) 상태방정식이 사용되었다. Aspen HYSYS에서 PR 상태방정식 모델은 최소 -271 °C 이상의 공정 온도와 최대 100,000 kPa 이하의 압력 조건에서 사용하도록 권장하며 LNG 공정 모사에 널리 사용된다. 열교환기의 모델링을 위해서 응축기와 LNG 열교환기 내 최소 온도차이(Minimum temperature approach,  $\Delta T_{min}$ )를 각각 5 °C와 3 °C로 두었고, 응축기 내 필요한 냉각수는 Seider 외[16]가 운전 비용 계산을 위해 제시한 4.44 °C, 1.2 bar 냉수(Chilled water)를 사용하도록 하였다. Aspen HYSYS 내 공정 모델 구성을 위해 사용한 설계 조건은 Table 3과 같다.

#### 4. 최적화 방법

본 논문에서는 잠재적 폭발 위험성을 고려한 공정 변수를 결정하기 위해 확률적 최적화 기법을 이용하였다. Aspen HYSYS와 같은 순차적 모듈 방식의 공정 모사기는 단위 장치들의 모델을 미리 코드화시켜 두어 다양하고 복잡한 공정을 손쉽게 모델링 하거나 풀이가 가능하게 한다. 하지만 이를 최적화에 이용하기 위해서는 코드화된 모델의 수학적 구성을 알 수 없기 때문에 목적함수의 도함수를 필요

로 하는 결정론적 최적화 기법(Deterministic Optimization)의 적용이 불가능하다. 따라서 직접탐색법 중 진화알고리즘 기반의 CMA-ES를 사용하였다[17-20].

##### 4-1. CMA-ES (Covariance Matrix Adaptation-Evolution Strategy)

유전전략(Evolution Strategy) 기반의 최적화 기법은 확률적 직접 탐색 방식인 유전 알고리즘(Evolutionary algorithm)의 주요 분파이고 가우시안 변이(Gaussian Random Mutation)에 기반을 둔다[21]. CMA-ES는 다봉성(Multimodal)의 비볼록(Non-convex)하고, 분리 불가능하며, 목적함수에 대해 도함수가 존재하지 않는 비원활 문제(Non-smooth problem)를 풀기에 적합하다. 비슷한 방법인 유전 알고리즘과는 달리 이진법 변환이 필요한 유전형(Genotype) 수준이 아닌 표현형(Phenotype) 수준의 실수 정의역 내에서 최적화를 수행하기 때문에 유전형과 표현형의 변환을 위한 별도의 매개변수가 필요하지 않다[22].

이 논문에서 CMA-ES를 선택한 이유는 다른 확률론 기반의 최적화 기법들에 비해 사용자가 알고리즘 적용을 위해 설정할 것이 거의 없고, 기존의 진화 알고리즘 기반의 다른 기법들에 비해 성능이 매우 뛰어나 다양한 분야에 이미 적용되어 훌륭한 결과를 내고 있기 때문이다[17,19,23,24]. 게다가 앞서 언급한 대로 유전 알고리즘에서 필요한 유전형과 표현형의 변환, 교차, 변이 등의 고려가 필요 없고, 실수 영역의 정의역에서 최적화가 가능하기 때문에 계산이 간단하다.

본 연구에서 사용한  $(\mu/\mu_{pp}, \lambda)$ -CMA-ES는  $\mu$ 개의 부모해(Parent)로부터 진화한  $\lambda$ 개의 자식해(Offspring) 중 목적값이 작은 순서대로  $\mu$ 개를 선택하여 다음 세대(Generation)의 부모해로 결정하는  $(\mu, \lambda)$  선택법을 이용한다. 이 때 자식해 중 좋은 해의 순서에 따라 가중치( $\mu_{pp}$ )를 주어 다음 세대의 진화 확률을 예측하고 더욱 빠르게 해를 찾아 가는 알고리즘으로 Table 4에 간략히 정리하였다. CMA-ES는 이전

**Table 4. The  $(\mu/\mu_{pp}, \lambda)$ -CMA evolution strategy[25]**

Step 0) Set Parameters
Set parameters to their default values
Step 1) Initialization
Set evolution paths equal zero
Set covariance matrix $C^{(0)}=I$ and number of generation $g=0$
Input distribution mean $m^{(0)} \in R^n$ and step size $\sigma^{(0)} \in R^n$
Step 2) Termination criterion
If termination criterion met, then stop
Step 3) New population sampling
$x_k^{(g+1)} \sim N(m^{(g)}, (\sigma^{(g)})^2 C^{(g)})$ for $k = 1, \dots, \lambda$
Step 4) Recombination and Selection
Recombination of sample point in order of best individual
Step 5) Update parameters
Update weighted mean value $m^{(g+1)}$ of $\mu$ selected offspring
Update step-size $\sigma^{(g+1)}$
Update covariance matrix $C^{(g+1)}$
Go to Step 2

세대에서 우수하여 선택된 해집단의 평균과 공분산행렬(Covariance Matrix), 단계폭(Step-size)을 바탕으로 다음 세대로 진화가 진행된다. 이 때 공분산행렬은 진화 세대별 해집단의 분포 모양으로 더 좋은 해가 있을 곳의 방향을 의미하고, 단계폭은 좋은 분포의 방향으로 얼마만큼 이동하여 다음 세대로 진화할 것인지를 누적하여 알려준다.

CMA-ES는 최적화 문제에 존재하는 제한조건(Constraint)을 다룰 수 없다. 따라서 목적함수 내에 제한조건 값에 따른 벌점함수(Penalty function)를 두어 필요한 제한조건을 만족시키도록 하였다. 이 제한조건은 Aspen HYSYS 모델의 모사 결과가 유효한지 여부를 판단하거나 공정 내 주요 설계조건을 만족시키기 위해 필요하다.

4.2. 최적화의 구성

이 연구의 최적화는 크게 두 가지로 구성된다. 첫째는 공정 내 압축기의 전력소모량과 응축기 내 냉수의 소모량을 바탕으로 한 운전비용의 최적화이고, 둘째는 운전비용 최적화를 바탕으로 운전비용을 최소 운전비용의 약 10%까지 증가시키면서 각 경우마다 폭발의 영향이 최소가 되도록 최적화하는 것이다. 이는 실제 경제성과 안전성이 상충관계에 있기 때문에 최소 운전비용의 결과보다 잠재적 안전성을 고려한 경우 운전비용의 증가가 예상되기 때문이다.

최적화를 위한 공정모사기는 Aspen HYSYS를 사용하였고, 폭발에 의한 영향 평가와 운전비용 계산은 Matlab을 통해 구성하였다. 이들은 Fig. 3과 같이 구성되어 ActiveX 인터페이스 환경에서 연동되며, Matlab에서 Aspen HYSYS의 계산을 제어하거나 필요한 변수값을 주고 받을 수 있다[26]. 최적화를 통해 결정해야 할 7개의 설계변수는 혼합냉매 각 성분 5개의 유량과 냉각 사이클 내 압축기 전단 및 후단의 압력이다. 이 설계변수들의 상하한은 Table 5와 같고, 최적화 전에 설계변수들의 상하한값을 모두 [0, 100] 범위로 아핀변환(Affine transformation)시켜 동일한 평균과 분산을 갖도록 하였다.

최적화 계산 과정은 Fig. 4와 같다. 초기 입력값은 공정 변수의 초기값(Table 2와 3)과 가스 누출량 계산을 위한 구멍의 지름(2.5 cm), 누출 시간(5분) 등이다. 사고 위치는 혼합 냉매의 압력이 가장 높은 구간의 흐름을 선택하여 폭발에 의한 영향성을 평가하였다. Aspen HYSYS 내 모사 결과인 열역학 변수들의 값과 압력, 조성 등의 정보는 Matlab으로 전달되어 운전 비용 계산 및 폭발로 인한 잠재적 과압 계산이 순차적으로 이루어진다.

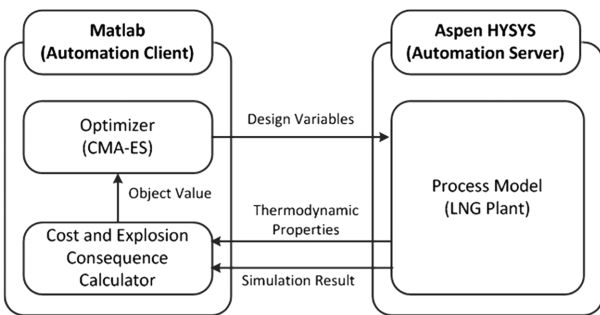


Fig. 3. Aspen HYSYS-Matlab automation framework.

Table 5. Upper and lower bounds of design variables

	Component mass flow of refrigerant (kg/s)					Compressor pressure (bar)	
	N <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	Suction	Discharge
Lower bound	5	5	5	5	5	1.5	10.0
Upper bound	300	300	300	300	300	6.0	75.0

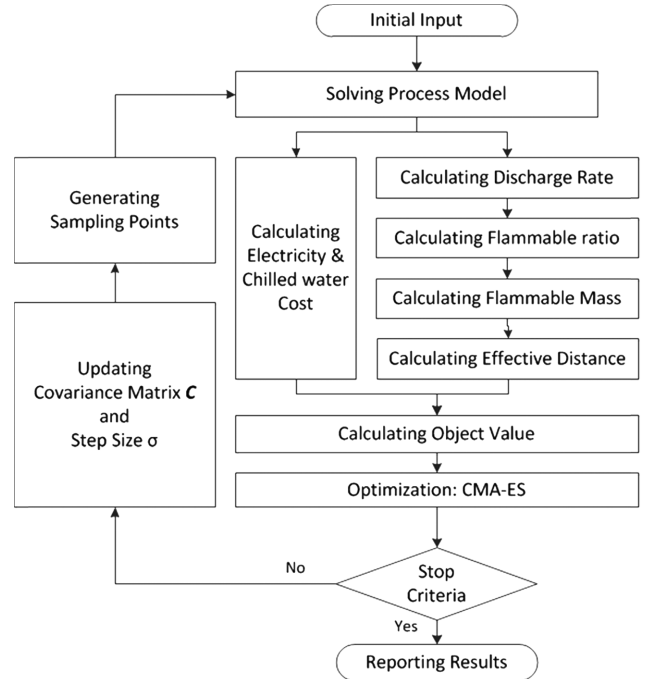


Fig. 4. Optimization procedure using Aspen HYSYS and Matlab automation.

4-2-1. 액화 공정 운전 비용의 최적화

LNG 액화 비용 최적화의 목적함수( $f_{Cost}$ )는 압축기의 전력소모비용과 응축기의 냉수 소모비용이다. 이 두 비용 계산을 위해 Seider 등 [16]이 제시한 전력비용 \$0.06/kWh와 냉수비용 \$4.00/GJ의 값을 이용하였다. 이 때 제한조건은 공정 모델의 결과가 유효한지 여부를 확인하기 위해 필요한 2가지로, LNG 열교환기 내 최소온도차( $\Delta T_{min}$ )가 3°C 이상이 되어야 하고, 압축기 전단의 흐름 내 기체물분율( $VF_{suction}$ )이 1이 되어 액체가 압축기 내에 들어가지 않아야 한다.

$$\begin{aligned} \min. & f_{Cost}(x) \\ \text{s.t.} & \begin{cases} \Delta T_{min} \geq 3^\circ\text{C} \\ VF_{suction} = 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

식 (9)의 제한조건을 벌점함수가 반영된 목적함수로 바꾸면 식 (10)과 같이 표현된다. 벌점함수 내 계수  $\alpha$ 는 제한조건에 따라 큰 값을 갖거나 0을 갖고,  $\beta$ 는 항상 큰 값을 갖도록 하여 등식 또는 부등식 형태의 제한조건을 만족하도록 하였다.

$$\min. f_{obj}(x) = f_{Cost}(x) + \alpha(\Delta T_{min} - 3)^2 + \beta(VF_{suction} - 1)^2$$

$$\text{where } \alpha = \begin{cases} 0 & , \Delta T_{min} \geq 3^\circ\text{C} \\ \text{large value} & , \Delta T_{min} < 3 \end{cases}, \beta = \text{large value}$$

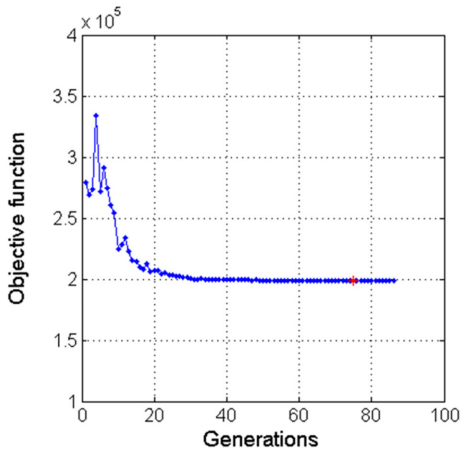
CMA-ES는 해집단 분포의 평균과 공분산행렬을 바탕으로 해가 존

재할 확률이 높은 방향으로 탐색을 진행하고, 진화를 거듭하는 동안 동일한 방향으로 좋은 해의 발생이 반복되면 더욱 큰 단계폭을 주어 수렴을 가속시킨다. 식 (10)의 별점함수는 이러한 특성을 고려하여 구성되었다. 제한조건 밖에서 해를 탐색할 경우 제한조건에 멀어질수록 점점 더 큰 값이 되고 제한조건 경계 근처로 올수록 작은 값이 된다. 따라서 제한조건 밖에서는 목적함수와 관계없이 항상 제한조건의 경계 방향으로 좋은 해가 존재하게 되고 CMA-ES의 공분산행렬과 단계폭에 반영되어 빠르게 경계조건 경계 부근으로 탐색을 진행하게 된다.

4-2-2. 잠재적 위험성의 최적화

잠재적 위험성 최적화에서 목적함수( $f_{Distance}$ )는 폭발에 의한 과압이 1psi 규모로 영향을 미치는 거리이다. 운전비용 최적화를 통해 최저 비용을 확인한 후, 최저 비용에서 일정비율로 비용 증가를 허용하며 잠재적 위험성이 최소가 되는 운전조건을 찾으려 하였다. 이는 비용과 안전성이 서로 상충관계임을 응용하여 잠재적 위험성 최소화 에 어느 정도 비용의 증가가 불가피함을 반영한 것이다.

$$\begin{aligned} & \min. f_{Distance}(x) \\ & \text{s.t.} \begin{cases} \Delta T_{min} \geq 3^{\circ}\text{C} \\ VF_{suction} = 1 \\ f_{Cost} \leq \text{Allowed cost increase} \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$



식 (11)의 허용증가비용(Allowed cost increase)은 최소 운전비용의 약 0.5%, 3%, 5%, 10%이며 이 비용을 넘지 않는 범위 내에서 잠재적 위험성을 최소화하도록 하였다. 식 (11)의 제한조건 역시 비용 최적화에서와 같은 방식으로 별점함수를 도입하여 목적함수를 구성하였다.

5. 결과 및 고찰

5-1. 운전 비용의 최적화

LNG 액화 공정의 운전비용 최적화 결과로부터 하루 \$198,882의 비용이 드는 것을 알 수 있다. Fig. 5는 CMA-ES 과정 중 진화 세대별 좋은 해로 선택된 해집합의 목적함수 평균값 변화와 [0, 100] 사이로 아핀변환된 설계변수 값 중 세대별 가장 좋은 해일 때의 값을 그래프로 표시한 것이다. 약 40세대가 넘어가면서 목적함수와 설계변수가 최적값으로 수렴하는 것을 볼 수 있다. 최적값은 75번째 세대에서 나왔고 이 후 약 10세대가 더 지나면서 CMA-ES 중단 전략(Stop Criteria)에 의해 진화가 중단되었다.

5-2. 폭발에 의한 잠재적 안전성의 최적화

폭발에 의한 잠재적 안전성 최적화는 운전 비용 최적화에서 얻은 최소비용인 하루 \$198,882에서부터 하루 \$200,000(+0.5%), \$205,000(+3%), \$210,000(+5%), \$220,000(+10%)까지 비용이 증가하는 것을 허용하여 폭발로 인한 1psi의 과압이 미치는 거리를 최소화하는 공

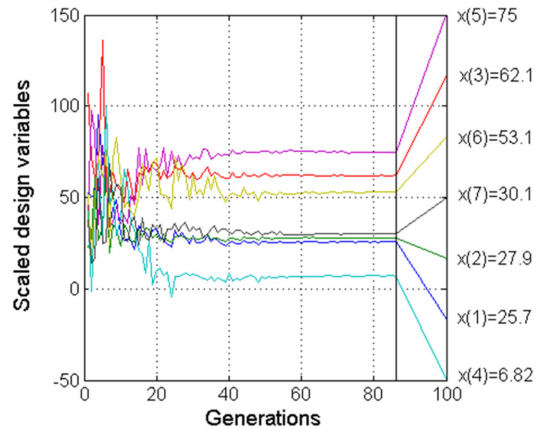


Fig. 5. Optimization results for minimizing utility cost using CMA-ES.

Table 6. Optimization result for minimization operation cost and inherent explosion risk

		Cost opt.		Inherent explosion risk opt.		
Objectives	Cost (\$/day)	198882	200000	205000	210000	220000
	Distance (m)	294.72	281.65	264.50	254.77	241.32
	N <sub>2</sub> (kg/s)	67.32	67.42	58.00	52.49	56.15
	CH <sub>4</sub> (kg/s)	72.93	78.84	79.74	77.65	89.30
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (kg/s)	156.38	165.01	174.63	174.22	188.45
Design variables	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (kg/s)	21.55	21.92	5.00	5.00	12.69
	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (kg/s)	188.45	208.00	247.45	230.17	235.79
	P <sub>suction</sub> (bar)	3.86	3.63	2.79	2.50	2.46
	P <sub>discharge</sub> (bar)	30.66	26.23	20.83	19.19	16.64
Total MR flow (kg/s)		506.63	541.18	564.81	539.55	582.37
Total discharge rate (kg/s)		3.1196	2.6953	2.1673	1.9279	1.6423
Flammable ratio		0.6377	0.6383	0.6423	0.6409	0.6381
Flammable mass (kg/s)		596.82	516.11	417.60	370.70	314.37

정 조건을 결정한다. Table 6은 각 경우의 최적화를 통해 얻은 공정 조건과 주요 결과값을 정리한 것이다.

운전비용의 증가에 따라 확보된 안전성을 확인해 본 결과 최소 운전비용인 \$198,882/day에서 최대 10%의 비용 증가를 허용함에 따라 잠재적 폭발에 의한 영향거리는 약 18%까지 감소하였다. 또한 안전성 확보에 가장 큰 영향을 준 공정 변수를 Table 6의 결과로부터 찾아보면, 혼합냉매의 총 유량은 허용 운전비용이 증가할수록 약 6~15% 증가하지만 하루 \$210,000의 경우 오히려 낮아지는 경향을 보여 폭발 영향거리 감소와 관계가 있다고 볼 수 없다. 혼합냉매의 조성도 ‘메탄+에탄’, ‘프로판+부탄’의 질량조성을 계산하면 26%와 74%으로 모든 경우 일정하고, 개별 물질의 유량도 일정한 경향성을 보이지 않아 폭발 영향거리 감소에 영향을 주었다고 볼 수 없다. 반면 혼합냉매의 운전압력 중 압축기 출구압력( $P_{discharge}$ )은 지속적으로 14~46%까지 감소하는 경향을 보인다. 따라서 폭발에 의한 잠재적 위험성 감소를 위해서는 혼합냉매의 최고 운전압력을 낮춰, 사고로 인한 가스 누출량을 줄이는 것이 가장 효과적인 방법이라고 할 수 있다.

가스 누출량 중 실제 폭발에 참여하는 비율은 모든 경우에서 큰 차이가 없다. 이 비율의 계산은 식 (6)과 (7)을 이용하며, 혼합냉매의 연소한계 값에 의해 결정된다. Table 1에서 순수 물질의 연소한계 값을 비교해보면 메탄과 에탄, 프로판과 부탄이 서로 비슷한 값을 갖는 것을 알 수 있다. 따라서 실제 혼합냉매의 연소한계 값은 ‘메탄+에탄’, ‘프로판+부탄’ 사이의 비율에 의해 결정된다고 볼 수 있으며, 최적화 결과(Table 6)의 설계변수 값을 보면 이들 비율이 거의 비슷하기 때문에 폭발 참여 비율 역시 크게 차이가 없는 것으로 해석할 수 있다. 이는 폭발 참여 비율을 고려하는 것이 적절하지 못했기 보다 본 연구의 결과에서는 큰 영향을 미치지 못하였다고 보는 것이 합리적이고, 연소한계 차이가 큰 물질들의 혼합물에 대해서는 중요한 값이 될 수 있다.

허용된 운전비용과 폭발에 의한 영향거리의 관계는 Fig. 6에 나타내었다. 운전비용 증가 허용에 따라 폭발 과압 영향거리가 줄어드는 것을 알 수 있고, 안전성과 운전비용 사이의 상충효과를 확인할 수 있다. 이는 안전성 확보를 위해서 일정 수준 비용 증가가 필요하다는 것을 의미한다. 하지만 Fig. 6의 그래프는 선형이라고 보기 힘들다. 이는 운전비용 증가의 규모에 따른 안전성 증가의 효용이 다르다는 것을 의미한다.

운전비용을 최적화한 경우 폭발에 의한 잠재적 영향거리가 294.72m이다. 최소 운전비용의 약 0.5%인 하루 \$1,118의 비용 증가를 허용하며 안전성을 최적화하면 폭발영향거리는 281.65m로 13.07m

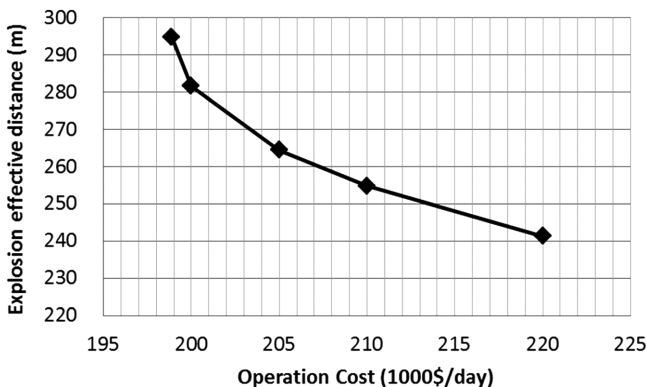


Fig. 6. Decrease in inherent explosion effective distance coupled with increase in operation cost.

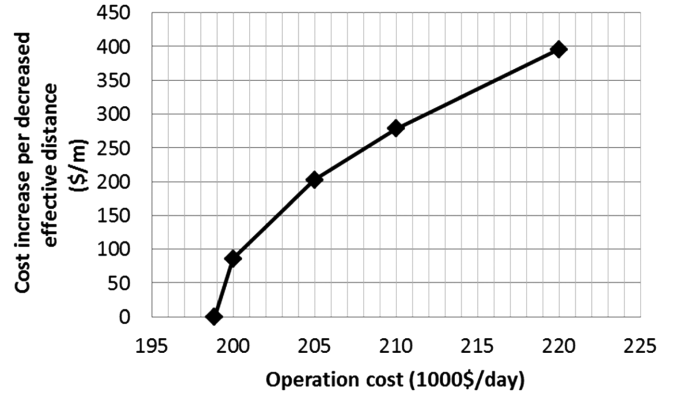


Fig. 7. Increase amount of operation cost per 1 m of the effective distance decreases.

줄어든다. 이는 1m 폭발 영향거리 감소를 위해 하루 약 \$86의 비용이 증가한다고 해석 가능하다. 하지만 약 10% 운전비용 증가를 허용하였을 경우, 하루 \$21,094의 비용이 증가하고 53.4m의 폭발영향거리가 줄어들어 1m의 폭발 영향거리 감소를 위해 하루 \$395 비용이 추가적으로 요구된다. 결과적으로 운전 비용을 더 크게 늘리면 절대적 기준의 안정성은 확보할 수 있지만 안전성 확보를 위해 지불한 비용의 효용은 낮아진다.

Fig. 7은 각 최적화 경우 별로 최소 운전비용을 기준으로 잠재적 폭발 영향거리를 1m 줄이는데 추가된 운전비용을 나타낸 것이다. 최소 운전비용인 \$198,882/일 근방에서는 1m의 폭발영향거리를 줄이기 위한 추가 운전비용이 크지 않지만, 폭발 영향거리를 크게 줄여야 할 경우 점점 더 많은 비용이 추가된다. 설계된 공정의 잠재적 안전성에 대해 정량적으로 수치화하였기 때문에 추후 상세설계 시 새로운 경제성 분석과 확보해야 할 안전성 기준을 바탕으로 합리적인 타협점을 찾는 데 도움을 줄 수 있을 것이다.

## 6. 결 론

본 논문에서는 공정의 기초설계 시 정확하고 신뢰할만한 공정 모사 기법과 정량화된 위험성 평가 기법을 통합하여 잠재적으로 안전한 운전조건 결정이 가능한 방법을 제시하여 LNG 액화 공정의 설계변수 결정에 적용하였다. 상용 모사기는 일반적으로 다양한 최적화를 수행하는데 한계가 존재하지만, 상용 모사기를 확률론적 최적화 기법과 연동시켜 공정 운전조건을 최적화할 수 있었다. 또한 경제성 기반의 설계 최적화를 정량적 위험성 최적화와 함께 수행하여 비용과 안전성 사이의 상충적 관계를 수치화할 수 있었다.

단단 혼합냉매 LNG 액화공정의 경우 공정 변수 중 안전성에 크게 영향을 주는 요소가 냉매의 운전 압력임을 알 수 있었고, 비용의 임의적 증가가 동일한 수준의 추가적 안전성 확보로 이어지지 않는다는 점도 확인할 수 있었다.

이 방법을 확장하면 누출, 화재와 같은 다른 형태의 사고로 인한 잠재적 안전성도 수치화할 수 있을 것이다. 또한 하나의 공정 내 다양한 사고 시나리오를 선정하고 그 결과들을 비교하여 최악의 영향을 최소화하는 등의 연구도 가능할 것이다. 이 연구 결과가 기초설계 단계에서 잠재적으로 더욱 안전한 특성을 갖는 공정을 설계하는데 기여할 것으로 기대한다.

## Nomenclatures

$A_h$	: Opening area [ $m^2$ ]
$C^{(g)}$	: Covariance matrix at generation $g$
$c_d$	: Discharge coefficient
$C_s$	: Concentration of system [ $kg/m^3$ ]
$C_{LFL}, C_{UFL}$	: Concentration of lower and upper flammable limits [ $kg/m^3$ ]
$erf(x)$	: Error function
$f_{Cost}$	: Function of operating cost
$f_{Distance}$	: Function of distance to an overpressure level of 1 psi
$f_{obj}$	: Objective function
$HC_f, HC_{TNT}$	: Heat of combustion of fuel and TNT [ $kJ/kg$ ]
$I$	: Unit matrix
$k$	: Ratio of specific heats, $C_p/C_v$
$LFL_i, UFL_i$	: Lower and upper flammable limits of component $i$ [ $mol\%$ ]
$\dot{m}$	: Discharge rate [ $kg/sec$ ]
$\dot{m}_f$	: Actual flammable mass [ $kg/sec$ ]
$m^{(g)}$	: Mean value at generation $g$
$P, P_{atm}, P_c$	: System pressure, atmospheric pressure, critical pressure [ $kPa$ ]
$P_{suction}, P_{discharge}$	: Suction and discharge pressure [ $bar$ ]
$t_{Release}$	: Releasing time [ $sec$ ]
$\Delta T_{min}$	: Minimum temperature approach [ $^{\circ}C$ ]
$VF$	: Vapor fraction
$x_k^{(g)}$	: $k$ -th offspring from generation $g$
$y_i$	: Vapor phase mole fraction of flammable component $i$ [ $mol\%$ ]
$\lambda$	: Population size, sample size, number of offspring
$\mu$	: Number of selected search point in the population
$\mu_W$	: Weighted recombination of all $\mu$ parents selected
$\rho$	: Density [ $kg/m^3$ ]
$\sigma^{(g)}$	: Step size at generation $g$

## References

- Koo, J., Kim, S., Kim, H., Kim, Y. and Yoon, E. S., "A Systematic Approach Towards Accident Analysis and Prevention," *Korean J. Chem. Eng.*, **26**(6), 1476-1483 (2009).
- So, W., Kim, Y. H., Lee, C. J., Shin, D. and Yoon, E. S., "Optimal Layout of Additional Facilities for Minimization of Domino Effects Based on Worst-case Scenarios," *Korean J. Chem. Eng.*, **28**(3), 656-666(2011).
- Kim, Y., So, W., Shin, D. and Yoon, E. S., "Safety Distance Analysis of Dimethylether Filling Stations Using a Modified Individual Risk Assessment Method," *Korean J. Chem. Eng.*, **28**(6), 1322-1330(2011).
- Park, K., Koo, J., Shin, D., Lee, C. J. and Yoon, E. S., "Optimal Multi-floor Plant Layout with Consideration of Safety Distance Based on Mathematical Programming and Modified Consequence Analysis," *Korean J. Chem. Eng.*, **28**(4), 1009-1018(2011).
- Park, J., Lee, Y., Yoon, Y., Kim, S. and Moon, I., "Development of a Web-based Emergency Preparedness Plan System in Korea," *Korean J. Chem. Eng.*, **28**(11), 2110-2115(2011).
- Jang, N., Dan, S., Shin, D., Lee, G. and Yoon, E., "The Role of Process Systems Engineering for Sustainability in the Chemical Industries," *Korean Chem. Eng. Res.*, **51**(2), 221-225(2013).
- Shariff, A. M., Rusli, R., Leong, C. T., Radhakrishnan, V. R. and Buang, A., "Inherent Safety Tool for Explosion Consequences Study," *J. Loss Prevent. Proc.*, **19**, 409-418(2006).
- Shah, N. M., Hoadley, A. F. A. and Rangaiah, G. P., "Inherent Safety Analysis of a Propane Precooled Gas-phase Liquefied Natural Gas Process," *Ind. Eng. Chem. Res.*, **48**, 4917-4927(2009).
- Aspelund, A., Gundersen, T., Myklebust, J., Nowak, M. P. and Tomasgard, A., "An Optimization-simulation Model for a Simple LNG Process," *Comput. Chem. Eng.*, **34**, 1606-1617(2010).
- Venkatarathnam, G., *Cryogenic mixed refrigerant processes*, Springer(2008).
- Woodward, J. L., *Estimating the flammable mass of a vapor cloud*, CCPS of the AIChE(1998).
- GPSA, *GPSA Engineering data book*, 12<sup>th</sup> ed., Volume II, Gas Processors Suppliers Association(2004).
- CEPPO, *Risk management program guidance for offsite consequence analysis*, United States Environmental Protection Agency(1999).
- TNO, *Method for the calculation of physical effects (Yellow Book)*, Committee for the Prevention of Disasters(1997).
- Swenson, L. K., Single mixed refrigerant, closed loop process for liquefying natural gas, U.S. Patent 4,033,735(1997).
- Seider, W. D., Seader, J. D., Lewin, D. R. and Widagdo, S., *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Design*, 3<sup>rd</sup> ed., Wiley(2009).
- Hansen, N. and Ostermeier, A., "Completely Derandomized Self-Adaptation in Evolution Strategies," *Evol. Comput.*, **9**(2), 159-195 (2001).
- Hansen, N. and Ostermeier, A., "Adapting Arbitrary Normal Mutation Distributions in Evolution Strategies: the Covariance Matrix Adaptation," Proceedings of IEEE International Conference on Evolutionary Computation, 312-317(1996).
- Hansen, N., Müller, S. D. and Koumoutsakos, P., "Reducing the Time Complexity of the Derandomized Evolution Strategy with Covariance Matrix Adaptation (CMA-ES)," *Evol. Comput.*, **11**(1), 1-18(2003).
- Hansen, N. and Kern, S., "Evaluating the CMA Evolution Strategy on Multimodal Test Functions," *Lect. Notes Comput. SC.*, 282-291(2004).
- Beyer, H. G. and Schwefel, H. P., "Evolution Strategies - A Comprehensive Introduction," *Nat. Comp.*, **1**(1), 3-52(2002).
- Hoffmeister, F. and XBäck, T., "Genetic Algorithms and Evolution Strategies: Similarities and Differences," *Lect. Notes Comput. SC.*, Springer, 455-469(1991).
- Hansen, N., Auger, A., Ros, R., Finck, S. and Posik, P., "Comparing Results of 31 Algorithms from the Black-Box Optimization Benchmarking BBOB-2009," Workshop Proceedings of the GECCO Genetic and Evolutionary Computation Conference 2010(2010).
- <https://www.lri.fr/~hansen/cmaapplications.pdf>.
- N. Hansen, "The CMA Evolution Strategy: A Tutorial," <https://www.lri.fr/~hansen/cmatutorial.pdf> (2011).
- AspenTech, *Aspen HYSYS Customization Guide*, Aspen Technology, Inc.(2011).