

**화학 공정 모델을 이용한 데이터 보정 및 gross error의 감지**

장대석, 장광식\*, 윤인섭  
 서울대학교 화학공학과, 삼성엔지니어링(주)\*

**Data Reconciliation and Gross Error Detection by Using Steady State Models in Chemical Processes**

Taesuk Chang, Gwangsik Jang\*, En Sup Yoon  
 Department of Chemical Engineering, Seoul National University,  
 Samsung Engineering Co.\*

**서론**

공정 전반에 걸친 측정치에는 개개의 측정 장치의 정확도에 따라 크고 작은 오차가 존재하며, 이러한 오차는 때로 계기의 고장, 눈금 조정 잘못, 파이프 누수 등의 원인으로 상대적으로 큰 gross error를 보일 수 있다. 이러한 측정치(raw data)들은 공장 전체에 대한 수지를 만족시키지 못하는 비일관성을 보이며, 데이터 상호간에도 서로 상반되는 경향을 보이기도 한다. 또한 기술적 어려움, 경제적 이유 때문에 직접 측정되지 못한 변수들과 각 단위 장치의 성능을 나타내는 매개 변수 등을 추정해야 할 필요성이 있다. 이와 같은 데이터들의 처리 수단을 제공하는 것이 데이터 보정 기법이다.

지금까지의 데이터 보정에 관한 연구는 대부분 물질 수지만을 고려하여 수행되었고, 때로 공정 모델에 에너지 수지를 추가하여 이용하였는데, 선형 모델만으로는 얻을 수 있는 정보가 상당히 제한되고, 복잡한 공장의 특성을 효과적으로 표현하기 어렵다. 공정 모델을 나타내는 방정식들과 공정 측정치들을 통계적으로 처리함으로써 우리가 원하는 정도의 정보를 추출해 낼 수 있다. 이를 통해 한편으로는 공정 모델을 실제 공장과 일치하도록 개선해 나갈 수 있으며, 한편으로는 공정 모델을 측정 상의 문제점을 파악하는 기준으로 사용할 수 있다. 이러한 두 작업, 즉 공정의 특성을 최대한 반영하는 모델 구축과 측정 오차 감지의 수행을 위해서는 상세한 공정 모델 (rigorous process model)이 필요하다.

**제안된 알고리즘****데이터 보정**

제안된 알고리즘은 Stephson과 Shewchuck이 제안한 방정식 중심 기법을 기본으로 한다. 데이터 보정 작업은 최적화 문제와 유사한 성격을 갖게 되므로, 상용 모사기에서 주로 채택되는 순차적 모듈 방식으로 처리하는 데는 많은 계산 시간과 반복계산이 필요하다. 그러나, 방정식 중심법에서는 공정의 모사와 최적화 작업이 동시에 이루어지므로 계산 효율 면에서 매우 유리하고, 프로그램의 구현에 있어서도 그 확장성이 용이하다. 데이터 보정 문제는 다음과 같이 정의한다.

$$\text{Min } Q(x) = \sum_{j=1}^n w_j (x^+ - x)^2 / V_x^2 \quad (1)$$

$$\text{subject to } f(z) = f(x, y) = 0$$

변수에 대한 가중치  $w_j$  를 도입하여, 각각의 변수에 대한 공정 데이터의 신뢰성 경험치를 반영할 수 있도록 하였다. 제약 조건  $f(z)$  는 화학 공정을 표현하는 모델 방정식들의 집합이며, 일반적인 물질 및 열 수지, 평형 관계식, 열역학적 상관식 등으로 표현된다. 위의 식에 대해 Lagrangian을 구성하고, 이로부터 정지

점 조건을 구해 보면 비선형 제약 조건 때문에 (1+m+n)차원의 비선형 방정식계가 된다. 제약 조건을 Taylor series에 의한 선형 근사식을 이용하였고, 각 식들을 정리하여 행렬 형태로 나타내면 다음의 식을 얻는다.

$$\begin{bmatrix} J(z_0) & 0 \\ G & J^T(z_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta z \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -f(z_0) \\ h \end{bmatrix}$$

where,  $G_{kk} = 2w_k / V_{x_k}^2$  : if k is measured variable  
 $= 0$  : otherwise (2)

$h_k = 2w_k x_k^+ / V_{x_k}^2$  : if k is measured variable  
 $= 0$  : otherwise

$$J(z_0) = \left[ \frac{\partial L}{\partial z} \right]_{z_0} = \left[ \frac{\partial L}{\partial x} \mid \frac{\partial L}{\partial y} \right]_{z_0}$$

위 식의 수렴 조건은 다음과 같이 설정하였다.

$$\sum_{k=1}^{m+n} |\Delta z_k / \hat{z}_k| < \text{TOL}_{\text{rel}} \quad (3)$$

$$f(\hat{z})^T f(\hat{z}) < \text{TOL}_{\text{res}}$$

우선 주어진 입력으로부터 Jacobian 계산을 통해 각 단위 장치간의 연결 관계를 결정하고, 식 (2)로 표현되는 normal equation을 구성한다. 수렴 조건이 만족될 때까지 계산을 반복하게 되며, 수렴해를 얻은 후에는 gross error 감지를 수행한다. 만일 gross error가 존재하면 이 변수를 미측정 변수로 소거하고, 각 변수들의 관찰 가능성을 확인하여 전체 계산을 반복하도록 구성되어 있다. 최종적으로 gross error가 없는 해를 얻으면, 각 측정 변수 및 그 보정치, 미측정 변수들의 분산을 계산하는 후처리 단계를 거쳐 결과를 출력한다.

**Gross Error 감지 - 교차점 테스트 (Point Test)**

측정치와 데이터 보정을 통해 얻은 추정치가 정규 분포를 따른다고 가정하여 두 분포 사이에 두 개의 교차점이 존재하게 되는 데 이 교차점 사이의 영역은 무작위 오차의 영역으로, 그 밖의 영역은 gross error의 존재에 의한 영역으로 생각할 수 있다. 그러나, 수치 실험 결과 대규모 방정식계에서는 위의 기준값들이 너무 작아 지나치게 많은 gross error가 감지되는 결과를 보였으므로 공정 변수의 수에 따라 위의 기준 조건을 적절히 완화시킬 수 있는 매개 변수를 도입하여 조건식을 구성하였다.

$$z_p = \frac{|\epsilon|}{\sigma_{\hat{x}}} \leq k_p u_{1-\alpha/2} \sqrt{\frac{2 \ln \gamma}{\gamma^2 - 1}} \quad \text{: variable i is not a gross error} \quad (4)$$

$$z_p = \frac{|\epsilon|}{\sigma_{\hat{x}}} > k_p u_{1-\alpha/2} \sqrt{\frac{2 \ln \gamma}{\gamma^2 - 1}} \quad \text{: variable i is a gross error}$$

$k_p$ 는 교차점 테스트에 대해 임의로 설정한 가중치이며, 이에 따라 감지 성능이 크게 좌우될 수 있다. 최적의  $k_p$  값은 변수의 수, 각 변수의 측정치 분산 등 대상 시스템의 특성에 따라 달라진다.  $k_p$ 는 다음과 같이 설정하였다.

$$k_p = \sqrt{\frac{1-\gamma^2}{\gamma^2}} \quad (5)$$

## 시스템 구현

화학 공정의 정상상태 모델을 이용한 데이터 보정을 수행하기 위해 전체 프로그램을 구현하였다. 구현된 시스템은 FORTRAN으로 작성되었으며, 화학 공정의 단위 장치들에 대한 정상상태 모델 및 열역학적 물성치 계산을 위한 데이터 베이스를 갖추고 있다. 그림 1에 시스템의 구성도를 나타내었다.

화학 공정의 특성 중 하나는 그 Jacobian 행렬의 희소성이 매우 크다는 점이다. 행렬의 희소성을 이용하여 필요한 메모리의 양을 줄이도록 고안되었으며, 계산의 효율성을 높이기 위해 희소 행렬 알고리즘을 적용하였다. 구현된 시스템의 또 한가지 특징은 공정 모사가 가능하다는 점이다. 데이터 보정 성능을 분석하기 위해 위의 예제에 대해 Monte Carlo Simulation 을 수행하였으며 gross error를 나타내는 항의 크기는 참값의  $\pm 10\% \sim \pm 100\%$  로 가정하였다. 즉,

$$\pm 0.1 |\tilde{x}| \leq |e_G| \leq \pm 1.0 |\tilde{x}| \quad (6)$$

## 결과

### 비평형 플래쉬 공정의 데이터 보정

비평형 단일 플래쉬 증류 공정에 대하여 본 연구에서 제안한 데이터 보정 알고리즘을 적용하여 보았다.

온도 및 압력은 MacDonal 와 Howat의 방법이, 조성은 본 연구에서 제안된 방법의 보정 효과가 좋게 나타났으며 유량의 보정 효과는 두 방법이 비슷하였다. 매개 변수 추정에 있어서는 평균은 같고, 그 추정 범위는 제안된 알고리즘이, 표준 편차는 MacDonal과 Howat의 결과가 좋다. 이 결과의 차이는 사용한 모델이 다르기 때문인 것으로 설명할 수 있다. 본 연구에서는 vaporization efficiency를 이용하여 모델을 구성하였고, MacDonal과 Howat은 Murphree efficiency를 이용하였다. Murphree efficiency를 사용하는 경우는 (C-1)개의 평형 관계식만이 독립적이므로 데이터 보정에 이용할 수 있는 하나의 관계식을 잃게 되고, 전체 시스템의 자유도가 하나 증가한다. 이 문제를 해결하기 위해 MacDonal과 Howat은 비평형 플래쉬 온도가 평형 플래쉬 온도와 같다는 가정을 하나 더 도입하였으며, 그 결과로 입력 스트림의 압력에 대한 보정이 없이 값이 고정된다. 그러나, 추가로 설정된 이러한 가정은 상당히 임의적이며, 실제 공정의 상태를 잘 표현한다고 보기는 어렵다.

이상에서 보는 바와 같이 본 연구에서 이용한 vaporization efficiency 모델은 이용 가능한 모델식을 최대한 활용하며, 불필요한 가정의 도입이 필요 없으므로 실제 공정의 물리적 의미를 그대로 유지할 수 있다는 장점이 있다. 또한 평형 관계식의 Jacobian을 계산하는 데 있어서도 vaporization efficiency를 이용하는 것이 훨씬 효율적이다.

### 교차점 테스트 (Point Test)

앞의 예제를 대상으로 측정치 테스트와 교차점 테스트의 gross error 감지 성능을 비교해 보았다. 여기서 가설 검증의 신뢰도 값에 의한 영향을 알아보기 위해  $\alpha = 0.005 \sim 0.2$  사이에서 반복 실험을 하였으며, 각각의 경우에 대해 150번의 Monte Carlo simulation을 수행하였다. 같은 유의 수준  $\alpha$ 에 대해 교차점 테스트의 감지 성능이 측정치 테스트보다 전반적으로 좋은 결과를 보였다. 교차점 테스트는 감지의 성능은 측정치 테스트보다 우수하고, 잘못된 gross error의 예측 수도 감소하는 바람직한 경향을 보였다. 여기서 한가지 특기할 사항은 각 테스트 성능의  $\alpha$ 에 따른 변화이다. 일반적으로 주어진  $\alpha$ 의 값이 커질수록 감지의 power는 증가하지만, 잘못된 예측의 수도 함께 커지므로, 정상적인 변수를 gross

error로 감지할 가능성이 커진다.

**결론**

비선형 방정식계로 표현되는 화학 공정 모델을 이용한 데이터 보정 및 gross error 감지 기법을 제안하였고 이를 대상 공정에 적용하여 그 효용성을 입증하였다.

제안된 데이터 보정 및 gross error 감지 기법을 통합하여 하나의 시스템으로 구축하였다. 이 시스템은 기본적인 단위 공정의 모델, 물성치 루틴 등을 갖추고 있으므로, 하나의 독립된 시스템으로 사용이 가능하다. 또한 구현된 시스템은 공정 모델의 추가 및 수정이 자유로우므로 따라서 대규모 화학 공정에도 효율적인 적용이 가능할 것으로 기대 된다.

본 연구에서 제안한 교차점 테스트는 기존의 측정치 테스트가 갖는 공선형성의 문제를 부분적으로 해결하였으며, 단일 감지 기법으로서 측정치 테스트보다 우수한 감지 성능을 보였다.

**참고문헌**

1. Yang,S.F., F.B.Canfield, Case History: On-Line Data Reconciliation and Economic Optimization Using Complete and Rigorous Process Models, Proceedings of PSE'91, II.22., 1991
2. Stephenson,G.R., C.F.Shewchuk, reconciliation of Process Data with Process Simulation, AIChE J., 32, 2, 247, 1986
3. Tjoa,I.B., L.T.Biegler, Simultaneous Strategies for Data Reconciliation and Gross Detection of Nonlinear Systems, Comp.Chem.Eng., 15, 10, 679, 1991

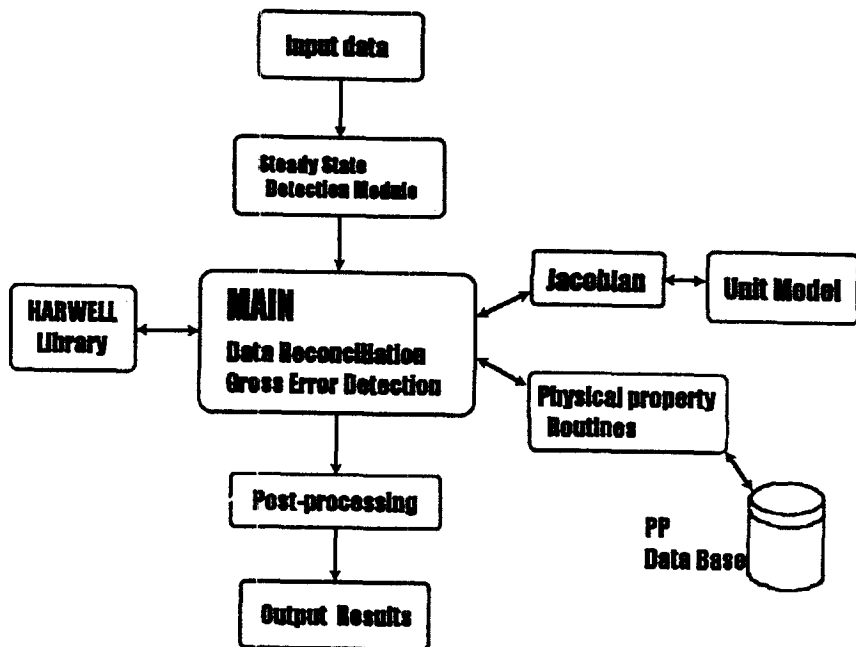


그림1. 시스템 구성도