

파라미터 추정기법을 이용한 산업용 회분식 반응기의 모델링

이대욱, 이광순, 정찬목*, 이석호**, 손종성***, 윤상철***
서강대학교 화학공학과,
두산 종합기술원*
삼성엔지니어링 주식회사**,
제일모직 주식회사***

A Modeling of Industrial Batch Reactors using Parameter Estimation

D. W. Lee, K. S. Lee, C. M. Jeong*, S. H. Rhee**, J. S. Son***, S. C. Yoon***
Dept. of Chemical Engineering, Sogang University
Doosan Technical Center*
Samsung Engineering Co., Ltd.**
Cheil Industries Inc.***

서론

회분식 반응기는 연속공정과 달리 반응이 일어나서 종료될때까지 정상상태가 존재하지 않고 시간에 따라 계속 변한다는 특징을 가지고 있다. 이런 이유로 정상상태를 기준으로한 모델링 기법들을(예를 들면 계단응답법) 회분식 공정에 적용하기에는 어려움이 많다. 또한, 많은 연구가 수행되어 정립된 경험모델을 이용한 제어기 조율법을 적용할 수 없게 된다. 게다가, 회분식 공정의 제어를 어렵게 만드는 가장 큰 원인인 반응열 때문에, 현재 널리 상업화되어 현장에서 사용되고 있는 PID 형태의 고정이득 제어기를 사용해서는 원하는 제어성능을 기대하기 어렵게 된다. 이와 같은 어려움은 정상상태가 존재하지 않는 공정을 정상상태를 기준으로한 모델로 근사하여 제어기를 조율하기 때문에 발생한다고 볼 수 있다.

이런 어려움을 극복하는 한가지 좋은 방법은 회분식 반응기의 동특성을 잘 표현하는 물리적인 모델을 이용하는 것인데, 정확한 물리적인 모델을 구성하기 위해서는 반응속도론적인 정보가 필요하기 때문에 실용성이 없다. 이런 관점에서 차선책으로 이용가능한 정보를 이용하며 측정할 수 없거나 알 수 없는 정보를 파라미터로 갖는 물리적인 모델을 구성한다. 이렇게 구성된 모델은 적용범위가 한정되지만 온도제어계를 설계하거나 개선하는 목적에는 적합하다.[2-3]

본 연구에서는 여러 종류의 자켓을 가진 산업용 회분식 반응기의 열적 동특성을 정확하게 예측하기 위한 일반적인 동적 열수지 모델을 제안하였다. 산업용 회분식 반응기의 기존의 모델링 접근방법에서 등한시 되었던 자켓쪽의 모델 표현 방법에 중점을 두었고 반응기의 벽의 동특성을 포함하였다.

제안한 자켓모델은 반응기 온도와 자켓 입구온도를 이용하여 자켓 출구온도를 추정하도록 구성되었다. 본 모델을 이용하여 측정된 자켓 출구온도와 추정된 자켓 출구온도의 차(예측 오차) 최소화 되도록 반응기쪽과 자켓쪽의 개별 열전달 계수를 동시에 추정하였다. 이렇게 자켓 모델이 완성되면 반응기쪽 열수지식과 이미 추정된 열전달계수를 이용하여 반응열을 추정할 수 있게 된다.

열전달 계수의 추정과 반응열 추정이 수행되면 대상 산업용 회분식 반응기의 거동을 예측할 수 있는 완전한 모델이 구성된다. 개발된 모델링 방법을 산업용 회분식 반응기인 ABS, PBL, EPS공정에 각각 적용하였다.

열수지 모델링

대부분의 산업용 회분식 반응기는 승온 또는 강온을 위하여 자켓을 설치한다. 자켓을 흐르는 유체와 반응물간의 열전달을 통하여 온도제어가 이루어지는데 산업용 회분식 반응기는 부피가 큰관계로 자켓 입/출구에 무시할 수 없는 온도차이가 존재한다. 이는 자켓 내부에 온도분포가 있음을 의미한다. 이 점에 착안하여 정 등[2]은 자켓내부의 흐름을 N개의 완전혼합탱크의 직렬연결로 고려하여 자켓 내부의 온도분포를 고려하였다. 본 모델은 정 등[2]의 모델에서 고려하지 않았던 반응물 높이에 따른 영향을 포함하도록 자켓모델과 반응기 내벽의 모델을 수정하였다. 반응기 내/외벽의 동특성은 반응기벽을 자켓과 같은 갯수로 나누고 각각 반경방향으로의 온도 분포만 고려하여 Hyperbolic 형태의 편미분방정식으로 구성하였다. 식(1)은 반응기 내용물에 대한 열수지식이고 식(2)와 (3)은 자켓의 열수지식이다.

$$M_j C_{pr} \frac{dT_r(t)}{dt} = 2\pi R_r h_r \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} l_i (T_{iw}^i(t,0) - T_r(t)) + \left[L_e - \sum_{i=1}^{n-1} l_i \right] (T_{iw}^n(t,0) - T_r(t)) \right\} + Q_r(t) + Q_{add}(t) \quad (1)$$

< $i \neq n$ >

$$\rho_j C_{pj} l_i S \frac{dT_j^i(t)}{dt} = 2\pi h_j l_i [(R_r + t_{iw})(T_{iw}^i(t,1) - T_j^i(t)) - R_j (T_j^i(t) - T_{ow}^i(t,0))] + \dot{m}_j \rho_j C_{pj} (T_j^{i-1}(t) - T_j^i(t)) \quad (2)$$

< $i = n$ >

$$\rho_j C_{pj} l_n S \frac{dT_j^n(t)}{dt} = 2\pi h_j \left[\left(L_e - \sum_{k=1}^{n-1} l_k \right) (R_r + t_{iw})(T_{iw}^n(t,1) - T_j^n(t)) + \left(\sum_{k=1}^{n-1} l_k - L_e \right) (R_r + t_{iw})(T_{iw}^n(t,1) - T_j^n(t)) \right] - R_j l_n (T_j^n(t) - T_{ow}^n(t,0)) + \dot{m}_j \rho_j C_{pj} (T_j^{n-1}(t) - T_j^n(t)) \quad (3)$$

식(1)에서 l 은 나누어진 자켓의 높이를 각각 나타낸다. i 는 나누어진 자켓의 번호이며 $i=n$ 은 반응물의 액면을 포함하고 있는 자켓의 번호를 나타낸다. $\bar{\quad}$ 와 $\underline{\quad}$ 는 n 번째 자켓에서 반응물이 닿아있지 않는 부분과 닿아있는 부분의 온도를 각각 나타낸다. 반응기 내/외벽은 각각 1-point collocation하여 상미분 방정식과 대수방정식으로 바꾸었다. 식(1),(2),(3)과 반응기 벽의 열수지식을 종합하여 상태공간 모델식으로 나타내면 식(4)와 같다.

$$\dot{x}(t) = F(t, \theta(t)) x(t) + G(t, \theta(t)) u(t) + w(t) \quad (4)$$

$$y(t) = C x(t) + v(t)$$

$$x = [T_j^1 \cdots T_j^N \ T_{iw}^1 \cdots T_{iw}^{n-1} \ \underline{T_{iw}^n} \ \overline{T_{iw}^n} \ T_{iw}^{n+1} \cdots T_{iw}^N \ T_{ow}^1 \cdots T_{ow}^N]^T \quad \underline{(3N+1) \times 1 \text{ vector}}$$

$$u = [T_r \ T_{ii} \ T_{\infty}]^T \quad \underline{(3 \times 1) \text{ vector}}$$

$$y = T_j^N, \quad \theta(t) = [h_r(t) \ h_j(t)]^T$$

파라미터 추정

구성된 반응기 모델인 식(1),(2)(3)에서 찾아야 하는 변수는 반응기쪽과 자켓쪽의 열전달계수들과 반응열이다. 추정 파라미터인 열전달 계수들은 현장 운전 자료를 이용하여 다음과 같이 구하였다. 열전달 계수들은 자켓의 열수지 모델을 이용하여 자켓 출구온도를 예측하고[8-9] 식(5)와 같은 목적함수를 최소화도록 예측 오차법을 이용하여 구하였다.[6-7] 정 등[2]은 자켓쪽 열전달계수를 문헌에 보고되어 있는 상관관계를[4-5] 이용하여 계산하고 반응기쪽 열전달계수만을 추정하였기 때문에 반응기의 열적 거동에 미치는 자켓쪽 열전달계수의 영향을 정확히 고려할 수 없었지만 본 연구에서는 자켓쪽 열전달계수를 파라미터화 하여 두 열전달 계수를 동시에 추정하도록 하였다.

$$V_N(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon^T(t, \theta) \Lambda \varepsilon(t, \theta) \quad (5)$$

여기서, $\varepsilon(t, \theta)$ 는 자켓 출구온도의 예측오차이다. 또한, 최적화 방법은 식(6)과 같은 Newton-Raphson 형태를 취하였다.

$$\hat{\theta}^{(k+1)} = \hat{\theta}^{(k)} - \alpha_k [V''_N(\hat{\theta}^{(k)})]^{-1} V'_N(\hat{\theta}^{(k)})^T \quad (6)$$

Step length인 α_k 는 정해진 window에서 파라미터가 수렴할 때까지 line search하여 구하였다.

반응열 추정 및 모사기 구성

식(6)을 이용하여 구한 두 열전달 계수를 이용하여 자켓 모델, 반응기 내/외벽 모델과 식(1)을 함께 풀면 시간에 따른 반응열을 구할 수 있다. 구해진 반응열과 반응기 내용물의 온도와의 지역적 상관관계를 찾으면[2] 식(7)로 구성되는 산업용 회분식 반응기의 모사기를 얻는다.

$$\dot{x}(t) = F(t, \theta(t)) x(t) + G(t, \theta(t)) u(t) + w(t) \quad (7)$$

$$y(t) = C x(t) + v(t)$$

$$x = [T_r, T_j^1 \dots T_j^N, T_{iw}^1 \dots T_{iw}^{n-1}, \underline{T_{iw}^n}, \overline{T_{iw}^n}, T_{iw}^{n+1} \dots T_{iw}^N, T_{ow}^1 \dots T_{ow}^N]^T \quad (3N+2) \times 1 \text{ vector}$$

$$u = [T_{ji}, T_{\infty}]^T, \quad y = [T_r, T_j^N]^T$$

식(7)로 표현되는 회분식 반응기 모사기는 현장자료를 이용하여 반응기의 거동을 잘 표현하도록 구성되었기 때문에 현장 반응기를 대신하여 반응기의 거동을 분석하고 제어계 개선을 위하여 사용될 수 있다. 정 등[2]은 반응기쪽 열전달 계수만을 파라미터로 같은 모사기를 구성하여 현장 반응기의 거동을 정확하게 예측하였고 불안정한 온도제어계를 안정화시킨 바 있다. 본 연구에서 개발한 모사기는 정 등[2]이 모사기를 현장 자료에 조율하는 과정에서 가장 어려웠던 자켓쪽 열전달 계수의 계산을 반응기쪽 열전달 계수와 동시에 추정하기 때문에 보다 정확한 모사기라고 할 수 있으며 현장자료에 보다 쉽게 조율할 수 있을 것으로 생각된다.

결론

산업용 회분식 반응기의 공정을 분석하고 제어계 개선을 위한 모사기 개발을 위하여 자켓내부의 온도 분포와 반응기 벽의 동특성을 고려한 반응기 모델을 개

발하였다. 개발된 모델은 현장자료를 이용하여 반응기/자켓쪽 열전달계수를 동시에 추정할 수 있도록 구성되었고, 추정된 열전달 계수를 이용하여 시간에 따른 반응열을 추정할 수 있다.

산업용 회분식 반응기인 ABS, PBL, EPS 반응기에 개발된 모델링 방법을 각각 적용하였다. 구성된 모사기는 산업용 회분식 반응기들의 열적 거동을 매우 잘 예측하였다. 결과적으로, 본 모델링 방법이 반응기 거동분석이나 제어계 개선에 유용함을 확인할 수 있었다.

참고문헌

1. 방성호, 이대욱, 이광순, 이석호, 손종성, 윤상철 : '93 한국 자동제어 학술회의 논문집, 595(1993)
2. 정찬목, 이대욱, 이광순, 이석호, 손종성, 윤상철 : '94 한국 자동제어 학술회의 논문집, 708(1994)
3. 정찬목 : 석사학위 논문, 서강대학교 화학공학과(1994)
4. W. L. McCabe, J. C. Smith and P. Harriott : "Unit Operations of Chemical Engineering", 4th ed., McGraw-Hill(1985)
5. R. H. Perry and D. Green : "Chemical Engineers' Handbook", 6th ed., McGraw-Hill(1984)
6. L. Ljung : "System Identification : Theory for the User", Prentice Hall Inc.(1987)
7. T. Söderström and P. Stoica : "System Identification", Prentice Hall Inc.(1989)
8. J. S. Meditch : "Stochastic Optimal Linear Estimation and Control", McGraw-Hill, (1969)
9. A. H. Jawinski : "Stochastic Process and Filtering Theory", Academic Press(1970)
10. K. J. Åström and B. Wittenmark : "Computer Controlled Systems : Theory and Design", Prentice Hall Inc.(1989)
11. L. Ljung : IEEE Trans. Automat. Contr., AC, **24**, No. 1, 36(1979)
12. W. W. Zhou and M. Blanke : IEEE Trans. Automat. Contr., AC, **34**, No. 3, 312(1989)
13. L. Ljung : Automatica, Vol. 17, No. 1, 89(1981)
14. T. Söderström, L. Ljung and I. Gustavsson : Automatica, **14**, 231(1978)
15. L. Ljung : IEEE Trans. Automat. Contr., AC, **22**, No. 4, 551(1977)