

변형된 부호유향그래프와 부호 토큰을 이용한 화학공정의 정성적 모사

박중복, 윤인섭
서울대학교 화학공학과

Qualitative Simulation of Chemical Processes Based On Modified Signed DiGraph And Signed Tokens

Jong Bok Park, En Sup Yoon
Dept. of Chemical Engineering, Seoul National University

1. 서론

정성적 추론(Qualitative Reasoning)기법은 어떤 문제에 대해 사람이 사고하고 추론하는 방식을 이해하도록 하는 틀/framework을 제공하는 방법이며, 이와 같은 방식으로 정성적모사는 어떠한 공정변수의 수치적인 값(numerical value) 보다는 공정거동에 있어서의 근본적인 특징(essential feature)을 파악한다. 화학공정의 대부분은 연속공정으로서 공정변수의 거동은 일반적으로 연속적으로 이루어진다. 반면에 공정변수의 거동을 인간의 직관적이고도 정성적인 측면에서 접근하여 살펴보면 공정변수의 미시적인 변이(variation)는 무시될 수 있으며 이산적인 사건의 발생으로 간주할 수 있다. 이렇게 이산적으로 발생하는 각 공정변수의 변이 거동은 token 이라는 정성적 크기를 나타내는 기본단위를 사용하여 나타낼 수 있으며 그 종류에는 각각 공정변수의 증가, 감소를 나타내는 \oplus token 과 \ominus token 이 있고 각 공정변수에 할당된 \oplus token 과 \ominus token 의 개수에 따라 그 공정변수의 정성적 상태를 알 수 있다. 이와 같은 가정 하에서 부호유향그래프(SDG)를 변형하여 화학공정을 모델링을 하고 Petri net이론에서 사용되는 활성화·발화(enabled and fired)개념을 도입하여 동적인 거동을 모사하고자 한다.

2. 화학공정의 그래프 구조

2.1 SDG 방법론

SDG는 Iri 등에 의해 1979년 제안된 모델로 유향그래프를 이용해서 공정변수들간의 미시적인 인과관계를 표현한 모델이다. SDG는 노드와 가지, 그리고 가지상에 표시된 부호로 구성되며, 이때 노드는 공정변수를 나타내고 가지는 공정변수들간의 인과관계가 존재함을 나타내며 부호는 인과관계의 영향의 방향을 표시한다. SDG는 다른 방법들에 비해 상대적으로 적은 정보로 모델을 구성하고 진단을 수행할 수 있으며 이상의 전파를 시각적으로 보여줄 수 있다는 점에서 널리 이용되고 있다.

2.2 변형된 부호유향그래프와 부호 토큰을 이용한 방법론

화학공정의 인과관계를 모델링하기 위한 변형된 부호유향그래프 구조는 바로 다음과 같다.

$$C = (P, T, I, O, \theta, \Omega, S)$$

$$P = \{ p_1, p_2, \dots, p_n \} \quad n \geq 1$$

$$T = \{ t_1, t_2, \dots, t_m \} \quad m \geq 1$$

$$P \cap T = \emptyset$$

$$\theta = \{ \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m \}$$

$$\Omega = \{ \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_m \}$$

$$S = \{ s_1, s_2, \dots, s_m \}$$

$$I: T \rightarrow P \quad (\text{단, } \#(p_i, I(t_j)) = 1)$$

$$O: T \rightarrow P \quad (\text{단, } I(t_j) = p_i \text{ 일때 } O(t_j) = \{p_i, p_k\})$$

변형된 부호유향그래프는 공정변수를 의미하는 장소노드(node of places)의 집합 P와 공정변수간의 부호 Token 이동을 담당하는 천이노드(node of transition)의 집합 T, 노드 간의 인과관계를 나타내는 간선으로 구성된다. 이러한 간선은 천이노드 t_j 로 들어오는 장소노드들을 나타내는 입력함수 $I(t_j)$ 와 천이노드 t_j 에서 나가는 장소노드들을 나타내는 출력함수 $O(t_j)$ 로 구성된다. 또한 각 천이노드에는 발화시간과 이상전파계인과 인과관계 부호가 부여되는 데, 위 식에서 θ 는 각 천이노드 t_j 의 발화시간을 나타내며, Ω 는 각 천이노드 t_j 의 이상전파 계인(즉, $p_i \rightarrow p_k$ 로의 계인)을 의미한다. 또한 S는 각 천이노드 t_j 를 통한 $p_i \rightarrow p_k$ 로의 인과관계를 나타내는 방향을 부호(+ 또는 -)로 나타낸다. 단서조건 $\#(p_i, I(t_j)) = 1$ 은 천이노드 t_j 로 이르는 간선이 1 개임을 나타내며, $I(t_j) = p_i$ 일때 $O(t_j) = \{p_i, p_k\}$ 는 발화(firing)시에 p_i 의 상태는 보존되며 p_i 에서 \oplus 또는 \ominus token이 p_k 로 생성·전파됨을 나타낸다.

3. 변형된 부호유향그래프의 작성 및 모사 수행

화학공정은 보통 상미분방정식과 대수방정식으로 모델링되며, 상미분방정식은 다음과 같은 형태로 기술되어진다.

$$\frac{dx_k}{dt} = f_k(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n)$$

이때, 위의 식은 선형 또는 비선형을 나타낼 수 있으며 정상상태를 기준으로 하여 선형화(linearization)를 하고 이를 편차변수 X_i 로 구성된 식으로 전환하면 다음과 같다.

$$\frac{dX_k}{dt} = c_{k1}X_1 + c_{k2}X_2 + \dots + c_{ki}X_i + \dots + c_{kn}X_n$$

$$(\text{단, } X_i = x_i - x_{is}, c_{ki} = c_{ki}(x_1, x_2, \dots, x_n))$$

위식에서 x_{is} 는 변수 x_i 의 정상상태 값을 의미하고, c_{ki} 는 선형화한 후의 X_i 의 계수이다. 그리고 $\partial(dX_k/dt)/\partial X_i$ 를 취하면 다음과 같다.

$$\frac{\partial(dX_k/dt)}{\partial X_i} = c_{ki}(t) = c_{ki}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n, t)$$

X_k 가 τ_I 에서 계단변화(S_{step})를 일으키는 경우, 위식은 적분하여 다음과 같이 된다.

$$X_k = c_{ki} \times S_{step} \times t$$

이때, 천이노드 t_j 를 통한 $p_i \rightarrow p_k$ 로의 인과관계에서 $s_j = +$ 이고 $S_{step} = n \times \oplus$ 이면, X_k 가 1개의 token \oplus 만큼 변이를 일으키기 위해서 소요되는 시간은 $1/n \cdot c_{ki}$ 가 되며, 이를 발화시간(fired time)이라고 한다. 일반적으로 어떤 시각 τ_I 에서, 천이노드 t_j 를 통한 $p_i \rightarrow p_k$ 로의 인과관계에서 장소노드(또는 공정변수) p_i 로 전파되거나 생성된 token 수를 n 이라 하면, 이로 인하여 천이노드 t_j 가 활성화되어 발화되는 시간 θ_j 는 다음과 같다.

$$\theta_j = \frac{1}{n \times |c_{ki}|}$$

시각 τ_I 에 장소노드(즉, 공정변수) p_i 에 생성되거나 전파된 token 들은 다른 시각 τ_j 에 생성되거나 전파된 token 들과는 독립적으로 천이노드 t_j 를 활성화·발화시키며 다음의 조건을 만족할 때 발화가 일어난다.

$$\frac{\tau - \tau_I}{\theta_j} = \text{정수} \geq 1$$

시각 τ_I 에 장소노드(즉, 공정변수) p_i 에 생성되거나 전파된 token 들은 제한된 발화하게 되는 데, 그 제한값은 ω_j 이며 천이노드 t_j 의 이상전파 개인(즉, $p_i \rightarrow p_k$ 로의 개인)을 의미한다. 따라서, 시각 τ_I 에 장소노드(즉, 공정변수) p_i 에 생성되거나 전파된 n 개의 token 들이 천이노드 t_j 를 활성화·발화시키는 지속조건은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$n \times \omega_j - \frac{\tau - \tau_I}{\theta_j} \geq 0$$

이상의 논의로부터 변형된 부호유향그래프의 수행규칙(즉, 모사진행방법)을 이

끌어낼 수 있다. 먼저 2가지 종류의 incidence matrix \widehat{N}^+ , \widehat{N}^- 를 정의하며 각각의 행은 장소노드 p_i 를 나타내고 각각의 열은 천이노드 t_j 를 나타낸다. \widehat{N}^+ 의 각 원소 (p_i, t_j) 는 어떤 시각 τ_1 에서 t_j 가 발화하여 p_i 에 \oplus token을 추가시켜 주면 그 값은 1이 되며 그렇지 않은 경우는 0이 된다. 마찬가지로 \widehat{N}^- 의 각 원소 (p_i, t_j) 도 어떤 시각 τ_1 에서 t_j 가 발화하여 p_i 에 \ominus token을 추가시켜 주면 그 값은 1이 되고 그렇지 않은 경우는 0이 된다. 모든 천이노드에 걸쳐 발화가 발생한 시각들을 $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \dots, \tau_n, \dots$ 라 하고, 각 장소노드에 할당되어 있는 \oplus token의 할당상태(marking)를 열벡터 $M^+(\tau_k)$, \ominus token의 할당상태(marking)를 열벡터 $M^-(\tau_k)$ 라 하고 $\widehat{N}^+(\tau_k)$ 의 열벡터를 \widehat{t}_j^{+k} , $\widehat{N}^-(\tau_k)$ 의 열벡터를 \widehat{t}_j^{-k} 라 하면 시간의 진행에 따라 수행되는 규칙은 다음과 같다.

$$M^+(\tau_k) = M^+(\tau_0) + \sum_{l=1}^k \left(\sum_{j=1}^m \widehat{t}_j^{+l} \right)$$

$$M^-(\tau_k) = M^-(\tau_0) + \sum_{l=1}^k \left(\sum_{j=1}^m \widehat{t}_j^{-l} \right)$$

그러므로, 장소노드(즉, 공정변수)들의 정성적인 상태(Qualitative State)를 나타내는 마킹(marking) $M(\tau_k)$ 은 다음과 같다.

$$M(\tau_k) = M^+(\tau_k) - M^-(\tau_k)$$

4. 사례연구

1차 비가역반응이 일어나고 있으며 액위제어기 및 온도제어기가 설치되어 있는 비선형성이 심한 CSTR을 대상공정으로 하여 적용해 보았으며 MATLAB으로 모사한 것과 비교해 보았을 때 만족할 만 하였다.

5. 참고문헌

1. Peterson, J.L., "Petri Net Theory and the Modeling of Systems," Englewood Cliffs, NJ, Prentice Hall, 1981.
2. M.Iri, K.Aoki, E. O'Shima, and H.Matsuyama, "An Alogrithm for Diagnosis of System Failures in the Chemical Process," Comput. Chem. Eng.,3,489, 1979.
3. Prock, J., "A New Technique for Fault Detection Using Petri Nets," Automatica, Vol.27, No.2, pp. 239~245,1991.
4. Vianna, R.F. and McGreavy, "Qualitative Modeling of Chemical Processes -WDG Approach," Comput. Chem. Eng., Vol.19, Suppl.,pp. S375~380,1995.
5. Luyben,W.L., "Process Modeling,Simulation and Control for Chemical Enginerrrs," 2nd Ed., McGraw Hill, 1990.