



# 화학공정의 추론제어를 위한 추정기 설계

이문용

영남대학교 화학공학과

## 1. 서론

화학공정 운전에서 궁극적 목적은 주어진 규격(specification)의 제품을 안정적이고도 경제적으로 생산해 내는데 있다. 규격은 제품이 가져야할 주요 물리·화학적 성상으로 표현되는데 가장 일반적으로 사용되고 있는 순도(purity) 및 조성(composition)을 비롯하여 분자량, 점도, 밀도, 색도, 종비점, 시비점, 옥탄가, 세탄가, 침입도, cloud-point, smoke-point, flash-point, TBP cut-point, Reid 증기압 등과 같이 매우 다양한 규격들이 공정과 제품에 따라 사용되고 있다. 그러나 화학공정에서의 종전의 제어형태는 독과점적이고 정체적인 시장환경과 on-line 측정기술 및 고급제어기술의 미발달로 인하여 주로 유량, 액위, 온도 및 압력 등의 공정의 안정성과 관련된 일차적 운전변수들에 대한 제어에 한정되어 왔으며 제품의 규격은 정기적 혹은 비정기적으로 제품시료를 채취하여 실험실에서 분석하고 그 결과를 근거로 관련된 일차적 제어변수들의 설정점을 경험에 의거 적절히 재 조정해 줌으로써 관리되었다. 이러한 방법은 시료채취에서 분석결과가 나올때까지는 사실상 규격제어가 정지되는 개루프 상태가 되어 외란유입이나 운전조건 변화 등이 일어나는 경우 곧바로 제품규격 미달로 이어질 가능성이 매우 크기 때문에 원료성상 및 운전조건을 되도록 일정하게 유지시키는데 생산관리의 초점이 맞추어 졌었다. 또한 규격미달 방지를 위해 실제보다 높게 운전목표치를 설정함에 따른 운전비용 상승과 후처리 공정의 추가에 따른 투자비용 상승 등을 감수할 수밖에 없었다.

이러한 이유로 on-line 측정기기를 이용한 규격의 직접적인 제어에 대한 필요성이 일찍이 대두되어 왔으나 아직까지도 높은 가격과 낮은 측정신뢰성, 긴 채취·분석시간, 잦은

고장 및 높은 보수비용 등으로 인하여 on-line 측정기기가 규격제어에 페루프 형태로 사용되는 경우는 별로 없는 실정이다. On-line 측정기기의 이러한 문제점들을 극복하기 위한 시도로서 일차적 운전변수들의 정보로부터 제품규격을 간접적으로 알아내고자 하는 추정기(estimator)와 이를 이용한 추론제어(inferential control)에 대한 연구가 산업체와 학계에서 활발히 이루어져 왔다. 그림 1은 추정기와 추론제어에 대한 개념도를 보여주고 있다. 이러한 추정기를 제품규격을 on-line 으로 직접 측정하는 hard sensor 와 구분하여 “soft sensor”라 부르기도 하는데 특히 현대 화학공정 운전에서 있어서의 computer 활용의 보편화는 공정의 운전데이터에 대한 자동수집 및 가공을 용이하게 하여 과거에는 불가능 했던 여러가지 복잡한 soft sensor 의 구현을 가능하게 해주고 있다. 본고에서는 이러한 추정기 설계방법 일반에 대해서 간단히 언급하고 산업체에서 널리 사용되고 있는 추정방법과 학계에서의 최근 연구동향 등에 대하여 현

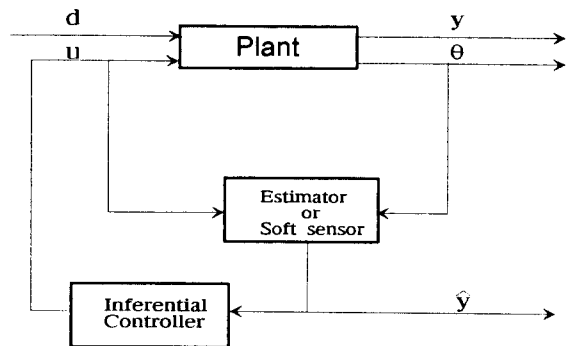


그림 1. 추정기와 추론제어시스템 구성도.

$y$  = 측정변수;  $\hat{y}$  = 추정값;  $\theta$  = 측정변수;  $d$  = 비측정외란;  
 $u$  = 조작변수 및 측정외란

재 이러한 추정기가 가장 많이 적용되고 있는 증류공정을 중심으로 개괄적인 소개를 하고자 한다.

## 2. 추정기 설계 일반

추정기의 설계는 추정변수(즉 추정하고자 규격 혹은 운전 변수)를 최적으로 추정해 줄수 있는 측정변수와 이들간의 구체적 함수관계를 찾는 문제로서 아래와 같이 서로 연관된 두단계로 이루어져 있다.

- (1) 측정변수의 최적선정
- (2) 추정기 모델 및 parameter 선정

만약 추정 대상시스템에 대한 지배방정식 파악이 가능하고 그 형태가 비교적 단순하다면 측정변수는 쉽게 선정될 수 있으며 수학적 모델을 이용한 정교한 추정기의 구성이 가능하게 된다. 한편지배방정식이 매우 복잡하여 real-time 해를 구하기가 어려운 경우에는 단순화한 수학적 모델이나 수학적 모델에 근거한 통계적 모델로 추정기를 구성하게 되는데 이 경우에도 지배방정식으로부터 측정변수 선정에 대한 유용한 정보를 얻을수 있다. 지배방정식을 파악할수 없는 경우는 순수한 통계적 모델에 의존하여 추정기를 설계해야 하며 측정변수의 선정도 매우 어려워진다.

### 2-1 측정변수 선정

측정변수 선정시 고려해야 할 사항은 아래와 같다.

- (1) 측정 신뢰성 및 경제성
- (2) 추정변수와의 연관성(correlation)
- (3) 추정변수에 대한 민감도(sensitivity)
- (4) 외란에 대한 강건성(robustness)
- (5) 선형성 및 동적반응성

측정신뢰성과 경제성은 측정변수가 되기 위한 기본적인 전제조건이므로 무엇보다도 우선이 되는 사항이라 할 수 있으며 일차적 운전변수라면 대개 만족된다고 볼수 있다. 또한 측정변수는 기본적으로 추정변수와 명확한 함수관계 즉 연관성을 가져야 하며 이러한 연관성 정도는 지배방정식이나 simulator를 통한 case study, 운전데이터의 corelation coefficient 분석등을 통해 알수 있다. 한편 민감도도 매우 중요한 조건으로서 추정변수 변화에 대한 측정변수 변화량이 충분하여야 한다. 민감도가 충분하지 못할 경우 sensor noise나 모델오차에 대해 급격히 추정성능이 저하되게 된다. 단순히 추정성능만을 고려하는 경우 측정변수는 외란에 대해 영향을 받지 않거나 영향을 받더라도 그 함수관계 파악이 용이한 것이 바람직하다. 다만 측정변수가 제어변수인 경우는 외란효과가 적절히 반영됨으로서 feedforward적인 역할을 하여 결과적으로 제어성능이 향상될 수도 있으나 이런 경우라도 외란에 대한 과도한 반응은 오히려 제어시스템을 불안정화시킬 수 있음에 유의해야 한다. 선형성은 모델

의 파악과 구현을 용이하게 해주며 여러가지 선형이론들을 활용할 수 있게 해주기 때문에 중요하며 가능한한 선형성이 확보되도록 측정변수를 선정하는 것이 바람직하다. 추정변수와 측정변수간의 동적반응성은 dynamic simulation이나 실제운전 데이터를 통해 알 수 있는데 가능한한 dynamic 효과가 무시될 수 있도록 측정변수를 선정해야 한다. 측정변수가 제어변수로서 작용하는 경우에는 조작변수에 대한 동적반응성도 제어성능에 직접적인 영향을 주게 되므로 중요한 의미를 갖게 된다.

일반적으로 상기 조건들은 서로 상반되며 따라서 위의 모든 조건을 동시에 만족하는 측정변수는 존재하기 어렵기 때문에 많은 경우 결국 적절한 절충점을 가지는 측정변수를 찾는 문제로 귀착된다. 이와같은 이유로 최근에는 이러한 측정변수 선정에 영향이 적은 강건한 추정기의 설계가 주요 이슈로 대두되고 있기도 하다.

### 2-2 추정기 모델 및 parameter 선정

일단 측정변수 선정이 끝나면 추정기 구조 및 모델의 구체적인 설계에 들어가게 된다. 추정기는 분류관점에 따라 여러 가지로 구분될 수 있는데 우선 접근방식에 따라 이론적 모델과 경험적 모델로 구분된다. 이론적 모델은 chemical engineering principle 에 근거한 수학적 모델을 기본으로 하며 단순한 형태의 관계식이 정확하게 찾아질 경우 넓은 범위에서 정교한 추정이 가능하다. 지배 방정식을 찾기가 어렵고 설사 찾았다 하더라도 구해야 할 parameter가 너무 많거나 real-time 으로 계산하기에는 식이 너무 복잡한 경우에는 운전데이터를 이용한 경험적모델로 추정기를 구성하게 되며 실제로 가장 많이 사용되고 있는 방법이기도 하다. 이때 사용되는 운전 데이터는 실제운전 데이터를 사용할 수도 있고, 정교한 simulator 로부터 생성된 simulation 데이터를 이용할 수도 있다. 실제운전 데이터는 정확한 반면 그 범위가 한정되어 있어 extrapolation 의 소지가 크며 통계적 분석이 어렵다는 단점이 있으며 simulation 데이터는 광범위한 범위의 데이터를 임의로 생성시킬수 있는 반면 실제 시스템과의 차이가 존재한다는 단점이 있다. 따라서 가능하다면 두 종류의 데이터를 복합해 사용하는 것이 바람직한데

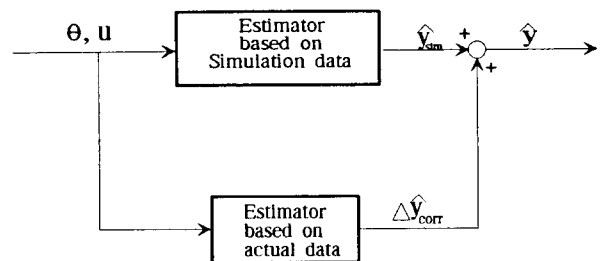


그림 2. Simulation 데이터와 실제운전 데이터를 복합적으로 사용하는 추정기 구조.

그림 2와 같이 simulation 데이터를 이용한 기본모델과 실제 운전 데이터를 이용한 bias 보상 모델을 병행하는 구조가 많이 적용되고 있다. 경험적 모델에 근거한 추정기는 calibration set 을 어떻게 구성하느냐에 그 성능이 크게 좌우되는데 예상 외란의 종류 및 범위, 예상 규격 및 운전 범위가 다 포함되어야하며 mean centering, variable transformation, scaling 등의 전처리 과정과 cross validation 등의 확인과정을 거치게 된다.

또한 추정기 모델은 dynamic 효과가 모델에 포함되는 경우와 안되는 경우에 따라 동적추정기(dynamic estimator)와 정적추정기(static estimator) 로도 구분된다. 본고에서는 제어변수의 시계열 예측에 쓰이는 control-relevant dynamic 모델은 일단 추정기 범주에서 제외하였다. 동적추정기는 측정변수의 dynamics 가 추정변수에 영향이 큰 경우에 적용되는데 미분방정식이나 Laplace 방정식 형태로 표현되며 측정변수의 위치가 추정변수로부터 멀리 떨어져 있는 경우나 비정상상태 시스템의 경우 주로 적용된다. 그러나 dynamic 모델의 파악이 어려울뿐더러 많은 경우 측정변수를 적절히 선정함으로써 dynamic 영향을 배제할수 있기 때문에 현재까지는 정적추정기가 많이 사용되고 있다.

또한 추정기를 구성하는 함수형태에 따라 선형추정기(linear estimator)와 비선형추정기(nonlinear estimator)로도 구분된다. 경험적 모델의 비선형 추정기의 경우에 함수구조는 함수 fitting에 의한 일반 다항식 구조 및 특정함수 구조, 인공신경망 등을 이용한 black-box 구조 등이 많이 적용되고 있다. 그러나 실제로는 공정의 운전범위가 어느정도 한정되어 있고 더불어 변수전환을 적절히 수행함으로써 추정변수와 측정변수 간의 관계가 선형적인 관계로 모사될수 있기 때문에 선형추정기가 많이 적용되고 있다.

### 3. 증류공정에서의 추정기 설계방법

증류공정은 화학공정 중에서 가장 일찍부터 규격추정에 의한 제어가 이루어졌고 현재까지도 추정기가 가장 많이 적용되고 있는 공정이다. 증류탑 시스템의 경우 추정하고자 하는 규격은 주로 탑정(혹은 탑저) 생산물에서의 key 성분의 조성이 되며 주요 외란은 탑내의 압력, 원료의 성상, 재비기 및 응축기의 열용량 등의 변동이 된다. 한편 측정가능한 일차적 운전변수들로는 단간의 온도, 환류량, 탑정/탑저 유량, 탑내 압력, 원료의 온도 및 유량, 재비기와 응축기의 열용량 등을 꼽을수 있다. 그림 3에서 볼수 있듯이 증류탑에서의 추정기 설계문제는 측정 가능한 운전변수들을 이용하여 외란하에서도 제품의 조성을 정확하게 추정해 줄수 있는 방법을 찾는 것으로 귀착된다. 산업체의 증류공정에서 제품조성 추정을 위해 널리 사용되고 있는 기존방법들은 주로 증류공정에 한정된 특징적 현상과 원리를 이용하는 방법

들로서 analog 환경에서도 구현이 용이하도록 단순한 형태를 가지는 것이 공통적인 특징이다. 반면 근래에 들어서는 특정대상에 한정되지 않는 보다 일반적인 방법론을 이용하여 추정기를 설계하고자 하는 시도가 활발히 이루어지고 있는데 이를 본고에서는 편의상 현대적 추정방법으로 분류하였다. 본 장에서는 이러한 고전적 방법들과 현대적 방법들의 설계방법과 기본특성과 장단점 등을 살펴보도록 한다.

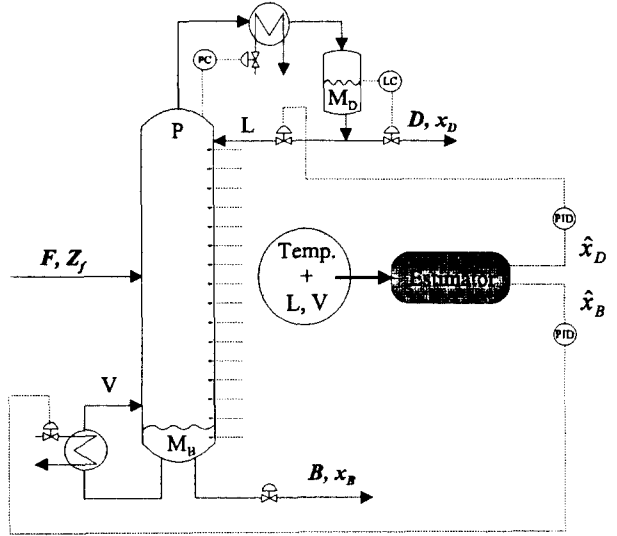


그림 3. 증류탑에서의 추정기 예.

#### 3-1 고전적 추정방법

##### 3-1-1 단일온도를 이용하는 방법

증류탑에서의 제품조성 추정을 위해 가장 오래전부터 사용되어 왔고 현재까지도 가장 널리 사용되고 있는 방법으로서 아래식과 같이 제품조성이 특정단의 온도로 추정될 수 있다고 가정한다.

$$x_D \text{ or } x_B = f(T_i) \quad (1)$$

이 방법은 구현이 매우 용이할 뿐만 아니라 끓는점 차이가 매우 작거나 제품조성의 엄밀한 제어를 요구하는 경우를 제외하고는 추정성능 면에서도 대체로 만족스러운 결과를 얻을 수 있는 것으로 알려져 있다. 이 방법에 있어서의 실제적 설계문제는 최적의 온도 측정단을 선정하는 것인데 이는 앞서 기술된 여러 가지 조건들을 모두 고려하여 결정하게 된다[1,2,3,4] 탑정제품의 조성을 추정하는 경우를 예를 들어보자.

탑정제품 조성과 가장 밀접한 연관성을 가지는 온도는 탑정단의 온도이며 연관성 정도는 탑정에서 멀어질수록 줄어들게 되어 원료유입단 부근에서는 탑정조성보다는 원료조성에 온도가 좌우되게 된다. 다성분계 증류탑에서는 nonkey 성분으로 인하여 온도와 key 성분 조성 간의 연관성은 더욱

낮아지게 된다.

한편 탐정조성에 대한 민감도는 탐정단에서 제일 낮으며 원료단 근처로 내려올수록 증가하게 된다. 특히 고순도 증류탑이나 끓는점차가 매우 작은 물질을 분리하는 증류탑의 경우 조성변화에 대한 온도의 민감도는 극히 낮아서 심한 경우는 적절한 민감도를 가지는 지점이 전단을 통해 없을 수도 있다. 낮은 민감도를 가지는 단의 온도를 제어에 이용하는 경우는 부정확한 조성추정 뿐만 아니라 flooding 등의 운전 불안정이 야기될 수 있다. 이러한 민감도는 상대적 민감도도 중요한데 예를들면 다성분계 증류탑에서는 key 성분에 대한 측정단 온도의 민감도가 nonkey 성분에 대한 민감도보다 커야하며 감압 증류탑의 경우는 key 성분에 대한 측정단 온도의 민감도가 예상되는 압력변동에 대한 민감도보다 커야한다.

탐정조성과 온도 간의 동적반응성은 탐정에서 멀어질수록 저하되는 반면 주요 외란인 원료조성 변화에 대한 동적반응성은 좋아진다. 따라서 만약 Reflux를 조작변수로 사용하는 경우 탐정에서 멀리 떨어진 온도를 제어변수로 하여 제어시스템을 구성하였을 경우는 조작변수와 제어변수 간의 시간 지연으로 인하여 제어능력이 저하되게 되며 반면 원료성상 변동에 대한 어느 정도의 Feedforward 제어동작을 수행하게 해준다. 물론 원료유입단에 너무 근접해 있는 경우는 원료 조성변화에 대해 너무 민감하게 작용하여 제어시스템의 불안정을 야기시키게 된다. 응답선형성은 탐 양단으로 갈수록 저하되며 특히 고순도 증류탑일수록 탐 양단에서의 비선형성 효과가 심각해지며 이 경우 적절한 변수전환이 필요하다.

대부분의 증류탑의 경우 상기의 선정 조건들을 동시에 만족하는 측정단은 존재하지 않는 경우가 대부분이므로 결국 이들 사항을 적절히 절충해 주는 단을 찾는 것이 설계에서의 주안점이 된다.

이 밖에도 아래와 같은 선정기준 과 방법들이 제시된 바 있다.

- 온도와 조성구배 방향의 일관성[2] : 측정단 부근에서는 온도와 조성구배 방향이 일정해야 하며 따라서 온도나 조성의 최대 구배지점 부근의 단은 피해야 한다.
- 물질수지 변화에 대한 탐내온도 profile 변화의 민감도 [5,6] : 재비량과 환류량을 고정한 상태에서 탐정유량/원료유량을 양방향으로 perturbation 시켰을때 온도 변화폭이 가장 크면서 대칭인 지점을 선택한다. 그러나 이 선정방법은 탐정제품 조성이 중요한 경우에도 stripping section 에서의 온도단을 이용하도록 하는 등의 비현실적인 결과가 나오기도 하므로 유의하여야 한다.
- 이득행렬의 left singular vector 크기[7] : 조작변수에 대한 각단의 이득행렬을 singular value decomposition 했을때 left singular vector 의 원소가 가장 큰

단을 선택하도록 한다.

단일온도를 이용하는 추정방법에서의 문제점은 앞서 예시한 사항들 외에도 nonkey 성분 및 운전압력 변동에 의한 추정성능 저하 등이 있다. 이성분계 증류탑의 경우는 압력이 일정한 경우 임의의 단에서의 온도가 결정되면 그 단에서의 조성도 unique 하게 결정되므로 탐정 온도와 조성 간에는 명확한 연관성이 존재하며 이론적으로는 조성을 정확하게 추정할 수 있는 반면 다성분계 증류탑의 경우는 임의의 단에서의 조성은 더 이상 온도만의 함수가 아니며 nonkey 성분의 함수이기도 하므로 단일 온도만으로는 정확한 추정이 근본적으로 불가능해 진다. Nonkey 성분의 탐 내에서의 변화 profile 은 탐 양단과 원료단 근처로 갈수록 심각해 지며 그외의 부분에서는 상대적으로 일정하게 되므로 이에 맞게 측정단을 선정해 준다면 nonkey 성분에 의한 부효과를 최소화할 수 있다. 압력변동에 의한 추정성능 저하는 끓는점차가 작은 물질을 분리하는 증류탑이나 감압증류탑의 경우에 더욱 심각해 진다. 이를 개선하는 방법으로는 온도단 선정을 조성변화에 의한 온도 민감도가 압력에 의한 것보다 충분히 우세한 지점을 선택하는 방법, 압력변동에 대해 온도를 간단한 선형식으로 보상하여 사용하는 방법[2,8], 차분온도(differential temperature)를 이용하는 방법등이 있다.

### 3-1-2 차분온도를 이용하는 방법

단일온도 방법이 갖는 압력변동에 대한 취약점을 개선하기 위한 방법으로서 압력변동은 각단의 온도에 같은 영향을 주기 때문에 각 지점의 온도 차이는 일정하게 유지된다는 사실에 기인하여 조성에 대해 둔감한 단(대개는 탐정 혹은 탐저단이 됨)과 민감한 단의 온도를 각각 측정하여 이들의 차이값으로 조성을 추정하는 방법이다.

$$x_D \text{ or } x_B = f(\Delta T) \text{ where } \Delta T = T_i - T_{ref} \quad (2)$$

이 방법에서의 설계 주안점은 단일온도 방법과 같으나 이에 더하여 얼마나 적절한 기준단을 찾을수 있느냐 하는 점이 또하나의 주안점이다[9]. 만약 추정하고자 하는 제품의 순도가 충분하지 않는 경우나 nonkey 성분이 포함되어 있는 경우에는 적절한 기준단을 찾지 못할 가능성이 크며 따라서 이 방법은 이성분계 고순도 증류탑의 경우에 한정되어 사용되고 있다. 그밖의 단점으로는 재비기나 응축기에서의 급격한 열용량 변동시의 오지시와 시운전시나 원료조성의 변화에 취약하다는 점이다.

### 3-1-3 평균온도 및 이중차분온도를 이용하는 방법

종종 한지점의 온도로 탐정과 탐저 제품의 조성을 동시에 최대한으로 제어해야 하는 경우가 있는데 heavy key 와 light key 간의 끓는점 차이가 크고 intermediate 성분이 없는 경우에는 heavy key 와 light key 간의 sharp split 현상

으로 인해 이러한 조건을 만족하는 단일 측정단이 대개 존재하지 않게 된다. 이러한 시스템의 특징은 민감도가 과도하게 커서 조작변수의 작은 변화에도 온도가 포화되며 그 break point 이하에서는 더이상 변화하지 않게 된다. 이 경우 break point 부근에서의 몇몇단의 온도를 평균한 온도 profile 정보를 이용하는 평균온도(average temperature) 방법[8,10]을 적용하여 개선할 수 있다.

$$x_D \text{ or } x_B = f(\sum T_i) \quad (3)$$

공비점을 형성하는 증류탑의 경우에도 sharp split 현상에 의한 break point 가 존재하게 되며 이 방법이 된다[11].

온도 profile 을 이용한다는 점에서는 평균온도 방법과 동일하나 압력변동에 대한 자동보상 장점을 가지는 방법으로 차분온도의 차이를 이용하는 이중차분온도(double differential temperature) 방법[11]이 있다.

$$x_D \text{ or } x_B = f(\Delta^2 T) \quad \text{where } \Delta^2 T = \Delta T_i - \Delta T_j \quad (4)$$

이들 방법들은 모두 이성분계 증류탑 중에서도 PPM 단위의 초고순도 증류탑 경우에 한해 주로 적용되고 있다.

### 3-1-4 차분증기압 기기를 이용하는 방법

압력자동보상을 위한 또 다른 방법으로 차분증기압(Differential Vapor Pressure) 기기를 이용하는 방법[8,12]이 있다. 이 장치는 제어하고자 하는 단의 조성과 같은 증기압을 가지는 기준물질을 넣은 DVP 기기, 그림 4를 그 단에 설치하고 단의 압력과 기준물질 증기압 간의 차이를 잴 것으로서 실제 단에서의 조성을 압력을 자동보상하면서 추정해주는 것이다. 이 방법은 감압증류탑이나 끓는점이 비슷한 혼합물 분리탑 등과 같이 압력보상이 어려운 시스템이나 조성에 대한 온도 민감도가 작은 경우에 적합하다. DVP 기기의 설치시 nonkey 성분의 영향이 최소가 되는 지점에 설치되어야 하므로 대부분 탑정이나 탑저로부터 어느정도 떨어진

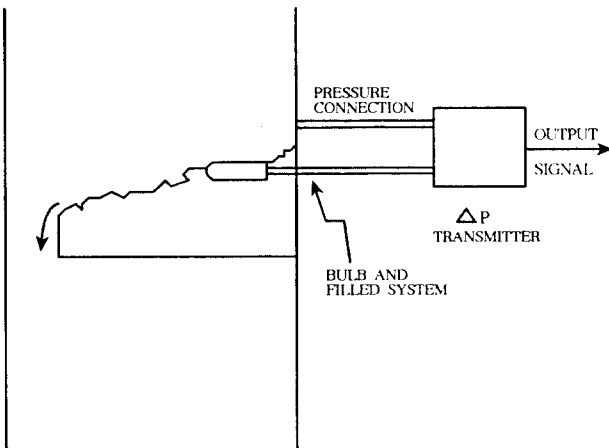


그림 4. DVP 기기 예.

단에 설치된다. 오랜시간 사용시 기준물질의 화학적 안정성 저하소지가 있으며 다른 기준물질로의 대체작업이 현장에서 불가능하다는 문제가 있다. Nonkey 성분에 대한 부영향과 압력변동에 대한 과민한 반응등이 이 방법의 단점이다.

### 3-1-5 내부환류량 제어방법

탑정제품의 조성제어에 한하여 적용되는 방법으로서 탑정 조성이 주로 탑내의 실제환류량에 의해서 결정된다는 사실을 이용하여 외부환류량을 조절하는 대신 내부환류량을 조절해 준다[8].

$$x_D = f(L_{i, \text{internal}}) \quad \text{where } L_{i, \text{internal}} = L_{\text{external}} \quad \text{where } [(1 + (C_p / \Delta H_{\text{vap}})(T_{\text{top}} - T_{\text{reflux}}))] \quad (5)$$

환류에서의 온도변화가 주요외란으로 작용하는 증류탑의 경우에 많이 적용되고 있다.

### 3-2 현대적 추정방법

#### 3-2-1 Kalman filter 를 이용한 조성추정[13]

변수간의 dynamics 와 input 에서의 noise 영향을 고려하는 선형추정기로서는 가장 rigorous 한 방법으로서 증류공정에 대한 dynamic 상태공간모델의 출력과 실제 출력과의 차이를 filter gain을 통하여 모델에 feedback 시키는 방법이다[그림 5]. 즉 증류공정을 다음과 같은 선형공간모델로 표현할 때

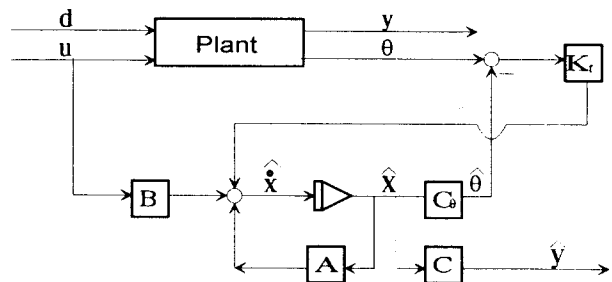


그림 5. Kalman Filter를 이용한 추정기 구조도.

$$x = Ax + Bu + Ev \quad (6)$$

$$y = Cx \quad (7)$$

$$\theta = C_{\theta}x + W \quad (8)$$

이때 x는 각단에서의 조성이 되며 u는 환류량과 재비량, v는 환류량, 재비량, 원료량 및 조성임. Kalman 추정기는 아래와 같이 구성되는데

$$y(s) = C(sI - A + K_f C_{\theta})^{-1} (K_f \theta(s) + Bu(s)) \quad (9)$$

이때 filter gain  $K_f$ 는

$$K_f = XC_0^t W^{-1} \quad (10)$$

와 같이 구해지며 여기서  $x$ 의 공분산 행렬인  $X$ 는 Riccati 방정식을 풀어 구해지며  $W$ 는  $w$ 의 공분산 행렬을 의미한다. Kalman filter에 의한 추정 은 전기·기계 분야에서의 활발한 응용과는 달리 화학공정에서는 상태변수모델에 대한 파악 및 분석이 어려워 아직 실제로 적용되고 있는된 예는 거의 없는 실정이다.

### 3-2-2 Brosilow에 의한 추정기[14,15]

추론제어에 대한 체계적 연구의 효시로서 추정변수에 영향을 주는 비측정 외란을 추정하고 이렇게 추정된 비측정 외란과 측정변수로부터 추정변수를 구하는 원리이다[그림 6]. 즉

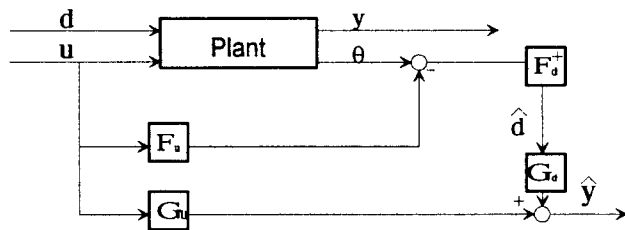


그림 6. Brosilow 추정기 구조도.

$$y = G_u u + G_d d \quad (11)$$

$$\theta = F_u u + F_d d \quad (12)$$

이때  $G_u$ ,  $G_d$ ,  $F_u$ ,  $F_d$ 는 해당 변수간의 정상상태 이득행렬을 의미하며 정상상태에서의 perturbation에 의해 구한다. 위의 관계로부터 비측정외란은

$$d = F_d^+ (\theta - F_u u) \quad (13)$$

와 같이 측정변수와 조작변수로부터 추정되고 따라서 추정 변수는

$$y = G_d F_d^+ \theta + (G_u - G_d F_d^+ F_u) u \quad (14)$$

와 같이 측정변수와 조작변수로부터 구해지게 된다. 이때  $F_d^+$ 는  $F_d$ 의 pseudoinverse를 의미한다. 결국 이 방법은 dynamic 효과를 배제하면 Kalman 추정기와 근본적으로 같은 개념이며 단지 측정변수 및 외란, 조작변수에서의 noise 효과가 무시된 것이 다른점이다. 증류공정에서는 측정변수 간에 강한 collinearity가 존재하기 때문에  $F_d$ 는 높은 condition number를 갖게되며 결국 추정기를 noise와 모델오차에 매우 민감하게 만드는 문제를 야기시킨다. 따라서 이 방법을 이용한 추정기 설계에서의 주안점은 추정성과 강건성 간의 trade-offs를 고려한 측정변수군의 최적선정에 있으며 이를 위해 Brosilow 등은 projection error와  $G_d$ 의

condition number가 최소가 되도록 하는 선정기준을 제시한 바 있다. 또한 변수선정에 따라 변수간의 선형성이 크게 좌우될수 있는데 실제로 증류탑의 경우 조작변수에 대한 조성의 변화가 일반적으로 강한 비선형성을 보이는 경우가 많기 때문에 이로인한 추정성능저하도 이 방법이 가지는 또다른 단점으로 남아있다.

### 3-2-3 Regression 추정기

선형통계기법을 이용하는 일련의 추정기 설계기법 중 가장 단순한 방법이며 비측정 외란의 영향을 multivariate regression 방법을 이용하여 간접적으로 resolution하는 방법이다. 추정변수군과 측정변수군이 다음과 같은 선형관계식으로 표현될 때

$$y = K\theta \quad (15)$$

추정기에 해당되는 이득행렬  $K$ 는 calibration run으로부터 얻어진 추정변수와 측정변수의 sample data 행렬들로부터 다음과 같이 multivariate regression 방법을 적용하여 얻어진다.

$$K = Y^t (\theta^+)^t \quad (16)$$

이 방법은 시스템이 완전히 선형시스템이라면 Brosilow 추정기와 동일한 결과를 가져다 준다. 마찬가지로 측정변수 간의 collinearity가 큰 경우  $\theta$ 의 condition number가 커져서 모델오차나 noise에 대해 추정성능이 크게 저하되는 문제점을 가지고 있다.

### 3-2-4 PCR or PLS 추정기[13,16,17]

Collinearity를 가지는 많은 측정변수를 이용하여 경험적 모델을 구성할 때 발생하는 대표적인 문제는 모델의 dimension이 과도하게 커짐으로서 생기는 over-parameterization 현상이다. 이렇게 구성된 모델은 calibration set 자체에 대해서는 좋은 추정 재현성을 보여주지만 미지의 운전 pattern에 대한 추정성능은 크게 저하되게 된다[그림 7]. 이러한 점을 개선한 추정기가 PCR (Principal Component Regression)과 PLS (Partial Least Square) 방법을 이용한 추정기이며 모든 가용한 측정변수들을 다 포함하면서도 모델의 실제 dimension을 나타내 주는 서로 직교되는 몇 개의 latent 변수군만을 이용하게 된다[그림 8]. 그림 9에 PCR을 이용한 추정기 구조를 나타내었으며 이론을 간단히 살펴보면 다음과 같다. 측정변수의 sample data 행렬  $\theta$ 를 singular value decomposition 하면

$$\theta = U \Sigma V^t = u_1 \sigma_1 v_1^t + u_2 \sigma_2 v_2^t + \dots + u_m \sigma_m v_m^t \quad (17)$$

이때  $\theta$ 는  $\sigma_1/\sigma_k$ 가 충분히 작도록

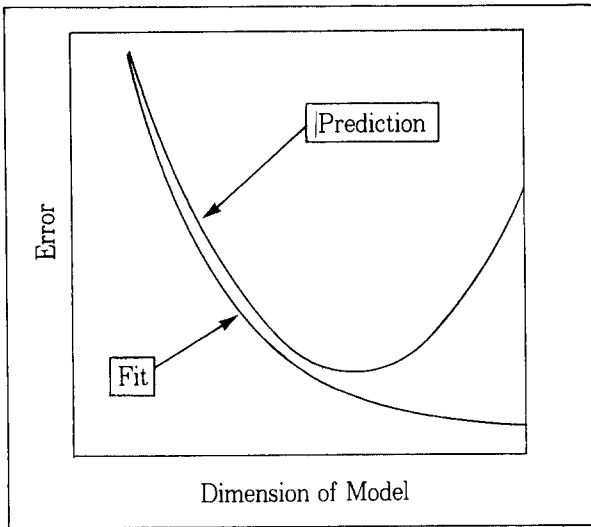


그림 7. 모델 dimension에 따른 재현성 및 추정성능 특성.

$$\hat{\theta} \cong \theta_k = u_1 \sigma_1 v_1^t + u_2 \sigma_2 v_2^t + \dots + u_k \sigma_k v_k^t = t_1 p_1^t + t_2 p_2^t + \dots + t_k p_k^t \quad (18)$$

와 같이 간략화할수 있고 이는 결국 data 행렬의 condition number 를 줄여주는 효과를 가져온다. 위의 식에서 PCR 추정기에 해당되는 이득행렬  $K_{PCR}$ 은

$$K_{PCR} = Y^t (\theta_k^+)^t = Y^t T (T^t T)^{-1} P^t \quad (19)$$

와 같이 구해진다.

PLS 방법은 PCR 방법이 변형 개선된 것으로서 PCR 이 측정변수간의 direction 만 고려한 것에 반해 PLS 는 측정 변수 data 행렬의 direction 들이 추정변수와 가장 큰 covariance 를 갖도록 재배열하는 방법이다. PLS나 PCR 추정기는 증류공정과 같이 측정변수 간에 강한 collinearity가 존재하는 경우에 더욱 효과적이며 비측정 외란에 의한 효과를 잘 resolution 해주고 noise 나 어느정도의 비선형성에 매우 강건하다는 장점이 있다. 이 방법에 의한 추정기 설계시의 주안점은 선형성과 강건성을 최대로 확보해 주는 변수전환과 scaling 방법을 찾는 문제와 최적 factor 갯수를 선정하는 것이다.

### 3-2-5 비선형 추정기

시스템의 비선형성이 매우크고 적절한 변수전환에 의해 제거되지 못하는 경우에는 선형 추정기는 더 이상 적용할 수 없게 되며 적절한 비선형 추정기를 적용해야 한다. 비선형 추정기에 대한 현재까지의 대표적 접근방식은 지배방정식에 의한 이론적모델을 이용하여 추정기를 구성하는 방식과 인공신경망을 이용한 경험적모델을 구성하는 방식으로

Large dimension of Measured variables

Reduced dimension of Latent variables

Inferential models

$$\begin{Bmatrix} T_1, T_2, \dots, T_n \\ L_1, V_n, R_1, \dots \end{Bmatrix} \Rightarrow \begin{Bmatrix} t_1 = \alpha_1 T_1 + \alpha_2 T_2 + \dots \\ t_2 = \beta_1 T_1 + \dots \\ t_3 = \dots \end{Bmatrix} \Rightarrow \begin{aligned} \hat{x}_D &= f_1(t_1, t_2, t_3) = k_1 T_1 + k_2 T_2 + \dots \\ \hat{x}_B &= f_1(t_1, t_2, t_3) = \dots \end{aligned}$$

그림 8. PCR 혹은 PLS를 이용한 추정 원리.

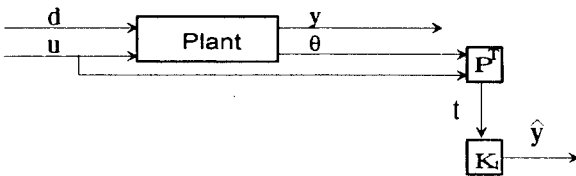


그림 9. PCR을 이용한 추정기 구조도.

나눌수 있다. 현재 매우 보편화 되어있는 설계를 위한 정상 상태 simulator 에서는 원료의 성상이 주요 입력변수이기 때문에 지배방정식의 해를 상대적으로 용이하게 구할수 있는 반면 rigorous 비선형 추정기를 설계하기 위해서는 주요 입력변수가 각단의 온도와 조작변수로 바뀌게 되어 지배방정식의 해를 구하는 것이 매우 어려워진다. 따라서 이에 대한 효율적 풀이기법을 개발하는 것이 rigorous 비선형 추정기의 설계에서의 주요 이슈이며 이에 대한 몇몇 연구결과가

나온바 있다[18,19]. 경험적모델로 비선형 추정기를 구성하는 경우의 문제점은 강하게 연관된 많은 양의 측정변수를 다루어야 한다는 점이다. 또한 동시에 변하고 있는 많은 양의 운전 데이터로부터 변수간의 함수관계 유무를 확인할 수 있는 적절한 통계기법이 없다는 것도 장애요인으로 작용하고 있다. 적절한 기본함수 형태를 예측할 수 있는 경우는 이를 변수전환하여 선형통계기법을 이용하는 것이 가장 일반적인 접근방법이다. 반면 함수형태의 파악이 불가능한 경우에 가장 많이 적용되고 있는 방법은 인공신경망 등을 이용한 black-box 형태의 모델을 구성하는 것이라 하겠다. 인공신경망을 이용하여 추정기를 설계할 때의 주안점의 하나는 신경망 구조의 최적선정이라 할 수 있는데 아직까지는 경험에 의존하고 있는 실정이다. 인공신경망을 이용한 추정기의 산업체 적용연구[20,21]에 더하여 최근에는 인공신경망과 PCR 등의 선형통계 기법을 복합하여 사용하는 방법[22]이

나 인공신경망 대신 general rational function[23]이나 multivariate adaptive regression spline[24] 등을 사용하는 방법도 시도되고 있다.

#### 4. 맺는말

화학공업 분야에서의 근래의 급속한 시장환경의 개방은 화학공정의 제어형태를 안정성만을 위한 소극적 제어에서 제품의 규격을 보다 정밀하고도 다양하게 제어하고자 하는 적극적 방향으로 급속히 발전시키고 있다. 즉 공정의 경쟁력을 유지하기 위하여는 보다 값싼 원료 사용을 위한 원료 다변화, 보다 경제적인 운전을 위한 운전조건 다양화, 유동적 시장조건을 위한 제품 규격의 다양화 및 엄밀화 등이 필수조건이 되고 있으며 이는 규격의 직접적인 제어를 위한 추정기의 중요성을 더욱 높여주고 있다. 실제로 최근 국내에서도 그 적용이 급속히 확산되고 있는 여러 가지 고급 제어 기법들도 궁극적으로는 제품의 규격을 보다 직접적으로 제어하고자 하는데 그 목적이 있으며 결국 얼마나 정교하고 강건한 추정기를 설계하느냐가 project 의 성공여부에 중요한 인자로 작용하고 있는 실정이다. 비록 단순한 고전적 방법일지라도 완전한 이해를 바탕으로 적절히 적용할 수만 있다면 규격추정에서의 상당부분의 문제가 개선될 수 있을 것이며 아울러 최근 활발히 연구되고 있는 여러 가지 현대적 방법들도 설계상에서의 몇몇 실제적 문제점만 해결된다면 멀지않아 산업체로의 실제 적용이 가능하리라 보여진다. 이러한 추정기들은 제품규격의 추정이라는 본래의 목적 이외에도 on-line sensor나 실험실 결과와의 이종비교 및 확인, 주요 외란추정에 의한 feedforward 보상에의 응용, 공정이상의 조기진단 등에 다양하게 적용될 수 있기 때문에 산업체에서의 중요성이 더욱 커지리라 기대된다.

#### 감사의 글

※ 한국학술진흥재단과 공정산업의 지능자동화 연구센터의 지원에 감사드립니다.

#### 참 고 문 헌

[1] Nisenfeld, A.E. and Seeman, R.C. "Distillation Columns", *ISA*, 1981.  
 [2] Rademaker, O., Rijnsdorp, J.E., and Maarleveld, A., "Dynamics and Control of Continuous Distillation Units", Elsevier, 1975.  
 [3] Thurston, C.W., "Computer Aided Design of Distillation Column Controls", *Hydrocarbon Proc.*, 60(7), 1981.

[4] Kister, H.Z., "Distillation Operation", McGraw-Hill, 1990  
 [5] Tolliver, T.L., and McCune, L.C., "Distillation Control Design Based on Steady State Simulation", *ISA Trans.* 17(3), 8, 1978.  
 [6] Tolliver, T.L., and McCune, L.C., "Finding the Optimum Temperature Control Trays for Distillation Columns", *InTech.*, 27(9), 75, 1980.  
 [7] Moore, C.F., et al., "Selecting Sensor Location and Type for Multivariable Processes", Shell Process Control Workshop, Boston, Butterworths, 1986.  
 [8] Buckley, P.S., Luyben, W.L., and Shunta, J.P., "Design of Distillation Column Control Systems", ISA, 1985.  
 [9] Webber, W.O., "Control by Temperature Difference?", *Pet. Ref.*, 38(5), 187, 1959.  
 [10] Luyben, W.L., "Profile Position Control of Distillation Columns with Sharp Temperature Profiles", *AIChE J.*, 18, 238, 1972.  
 [11] Boyd, D.M., "Fractionation Column Control", *Chem. Eng. Prog.*, 71(6), 1975.  
 [12] Shinsky, F.G., "Distillation Control", McGraw-Hill, 2nd ed., 1984.  
 [13] Mejdell, T. and Skogestad, S., "Output Estimation Using Multiple Secondary Measurements: High-Purity Distillation", *AIChE J.*, 39(10), Oct., 1993.  
 [14] Weber R. and Brosilow, C.B., "The Use of Secondary Measurements to Improve Control", *AIChE J.*, 18, 1972.  
 [15] Joseph B. and Brosilow C.B., "Inferential Control of Processes", *AIChE J.*, 24, 1978.  
 [16] Mejdell, T. and Skogestad, S., "Estimation of Distillation Compositions from Multiple Temperature Measurements Using Partial-Least-Square Regression", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 30, 1991.  
 [17] Kresta, J.V., et al., "Development of Inferential Process Models Using PLS", *Comp. Chem. Engng.*, 18(7), 1994.  
 [18] Yu, C.C. and Luyben, W.L., "Control of Multicomponent Distillation Columns Using Rigorous Composition Estimators", *Chem. Engng. Symp. Ser.*, 104, A29-69, 1987.  
 [19] Marmol, E.Q. and Luyben, W.L., "Inferential Model-based Control of Multicomponent Batch Distillation", *Chem. Eng. Sci.*, 47(4), 1992.  
 [20] Wang, J.C. and Wang, S.Q., "Neural Soft-sensor



for the RFCCUs' Fractionator Naphth Endpoint",  
*95 IFAC Proceedings*, 1028, 1995.

[21] Lee, M.Y., et al., 'Application of an Artificial Neural Network to Product End-point Estimation of a Vacuum Distillation Column', *Theo. App. Chem. Engng.*, 1(2), 1995.

[22] Piovoso, M.J., and Owens, A.J., "Sensor Data Analysis Using Artificial Neural Networks", *CPC*

IV, 1991.

[23] Ponton, J.W. and Klemes, J., "Alternative to Neural Network for Inferential Measurement", *Comp. Chem. Engng.*, 17(10), 1993.

[24] Veaux, R.D., et al., "A Comparison of Two Nonparametric Estimation Schemes: Mars and Neural Networks", *Comp. Chem. Engng.*, 17(8), 1993.

## 저 자 소 개



### 이 문 용

1982 서울대학교 화학공학과 학사.

1984 한국과학기술원 화학공학과 석사.

1991 한국과학기술원 화학공학과 박사.

1984~94 주)유공 공정연구실 선임연구원.

1994~현재 영남대학교 화학공학과 전임강사.

관심분야: 공정제어, 공정설계 및 해석.

(712-749)경북 경산시 대동 214-1.

TEL. 053)810-2512 / FAX. 053)814-8790.