

순차적 모듈 접근법과 이중 모델 접근법을 혼합한 공정최적화전략

조인호·윤인섭

서울대학교 공과대학 화학공학과
(1989년 4월 18일 접수, 1989년 8월 8일 채택)

A New Optimization Strategy of Chemical Processing System by the Combined Sequential Modular and Two-Tier Approach

In Ho Cho and En Sup Yoon

Department of Chemical Engineering, College of Engineering, Seoul National University, Seoul 151-742, Korea

(Received 18 April 1989; accepted 8 August 1989)

요 약

현재 사용되고 있는 동시 모듈 접근법에 의한 공정최적화전략들의 비교 연구를 통하여 전체 최적화전략을 순차적 모듈 중심 접근법(Sequential Module Based Approach)과 이중 모델 접근법(Two-Tier Approach)의 두 가지 주류로 나누어 볼 수 있었다. 순차적 모듈 중심 접근법은 모든 최적화계산에서 정밀모델을 기본으로 하므로 구해진 해의 정확성이 보장되지만 그에 따른 계산량의 증가가 문제점으로 대두된다. 한편 정밀모델(Rigorous Model) 및 근사모델(Simplified Model)의 두 가지 모델을 동시에 보유하는 이중 모델 접근법은 최적화계산을 위해서는 근사모델을 사용한다. 따라서 계산량은 줄어 들게 되지만 구해진 해의 정확성이 보장되지 않는다. 이와 같이 장단점을 가지는 각 전략은, 두 가지 전략을 혼합하여 순차적으로 사용하는 방향으로 개선되어져 왔다.

본 연구에서는 두 전략의 특성을 함께 가지는 수정 Jacobian 행렬(Modified Jacobian Matrix)을 구성함으로써 두 방향의 장점을 동시에 포함하는 최적화전략을 개발하였다. 개발된 공정최적화전략을 공정최적화기구에 구현하여 검증문제에 적용시킨 결과, 보다 적은 계산량으로 정확한 해에 수렴하는 결과를 얻음으로써 다른 공정최적화전략에 비해 상대적으로 우수한 성능을 가짐을 확인하였다.

Abstract—By structural comparison of process optimization strategies based on Simultaneous Modular Approach, they can be classified into two groups: the Sequential Module Based Approach and the Two-Tier Approach. The Sequential Module Based Approach needs rigorous models and a set of accurate solutions are guaranteed. However it requires a large amount of computation time. In the Two-Tier Approach composed of rigorous and simplified models, optimization calculation uses simplified models, therefore comparatively smaller amount of computation time is required but the obtained solutions may not be accurate. These optimization problems were somewhat improved by the alternate application of the two strategies. In this study improved optimization strategy is suggested, in which Jacobian Matrix is modified to accomodate the strong points of above-mentioned strategies. The results of case study show that this approach is superior to the other strategies.

1. 서 론

화학공정의 설계 및 공정개선을 위해서는 공정모사 및 공정최적화가 필수적이다. 공정모사가 오래 전부터 널리 이용된 데 비해, 계산 구조상 공정모사에 중첩 계산 루우프를 가지는 공정최적화는 그 방대한 계산량으로 인하여 실제적인 활용이 거의 불가능하였다. 그러나 1970년대 후반에 들어서면서 첫째, 비등질성의 대규모 비선형방정식 시스템으로 특징지어지는 화학공정의 최적화를 효과적으로 수행할 수 있는 공정최적화전략(Process Optimization Strategy)의 연구에서, 둘째, 공정최적화전략에 의해 구성되는 최적화문제를 풀어내는 비선형계획법(Nonlinear Programming Technique) 연구에서 획기적인 발전이 이루어짐으로써 공정최적화는 새로운 국면을 맞게 되었다[1-5]. 이와 같은 발전의 결과로 1970년대 중반까지의 최적화전략으로는 화학공정의 최적화에서 100STE(Simulation Time Equivalence) 이상이 소요되던 것이 1980년대에 와서는, 최적화기법 및 공정최적화전략의 발전으로 인하여 보통 1-5STE 정도만이 필요하게 되었다[6-10].

본 연구의 목적은, 현재까지 개발된 공정최적화전략들을 비교 연구하여 보다 개선된 공정최적화전략을 제시하고, 제시된 전략을 구현하여 Benchmark Problem을 통하여 그 성능을 확인하는 데 있다.

공정최적화는 순차적 모듈 중심 접근법(Sequential Module Based Approach)과 이중 모델 접근법(Two-Tier Approach)의 두 방향에서 나름대로 뛰어난 성능을 가지는 전략이 제시되어 왔다. 최근에 와서는 이들 두 방향의 장점을 혼합하려는 경향이 있다. 이제까지의 연구에서는, 계산의 어느 부분까지는 한 가지 방법을 쓰고, 그 이후부터는 다른 방법을 쓰는 구조로 두 방향을 혼합하려 하였다[10-12]. 본 연구에서는 두 가지 특성을 함께 가지는 Jacobian을 구성함으로써 두 방향을 동시에 고려하는 전략을 제시한다. 즉 참 최적치를 보장하기 위하여 설계변수(Design Variables)에 대해서는 정밀모델(Rigorous Model)을, 계산의 효율성을 위하여 상태변수(State Variables)에 대하여는 축소모델(Simplified Model or Reduced Model)을 사용하여 최적화계산의 기본이 되는 Jacobian Matrix를 구성하는 수정 Jacobian 전략(Modified Jacobian Strategy)을 제시한다.

본 연구를 통하여 제시된 공정최적화전략의 성능을 검토하기 위하여 Benchmark Problem에 대해 다른

전략들과 비교해 볼 필요가 있다. 그러나 모든 전략들에 대한 비교는 너무 많은 노력과 시간을 필요로 하므로, 각 전략들이 공통적으로 그들의 비교 대상으로 삼고 있는 순차적 모듈 중심 접근법과의 비교를 통하여 제시된 전략의 성능을 검토하려 한다.

2. 공정최적화전략

공정최적화문제는 일반적으로 이익의 최대화 또는 조업경비의 최소화 등의 형태로 주어지므로 이에 대해 최적화기법을 적용하기 위해서는 전처리가 필요하게 되는데 이 전처리 단계를 공정최적화전략이라고 볼 수 있다. 즉, 공정최적화전략이란 공정상에서 추상적으로 주어진 최적화문제를 체계적으로 유도하여 수학적 기법을 적용시킬 수 있는 수식형태로 만들어 가는 과정이라고 볼 수 있다. 물론 이러한 공정최적화전략은 선택되는 최적화기법과도 밀접한 연관성을 가질 수 밖에 없다. 공정최적화전략은 크게 순차적 모듈식 접근법(Sequential Modular Approach), 방정식 중심 접근법(Equation Based Approach), 동시 모듈식 접근법(Simultaneous Modular Approach)의 세 가지로 볼 수 있다. 이들 중 세번째 방법은 첫번째와 두번째 방법의 장점을 혼합한 형태로서 현재 가장 타당한 것으로 인정받고 있으며[6] 본 연구에서도 이를 선택하였다. 동시 모듈식 접근법은 다시 여러 가지로 나누어지는 데 Fig. 1과 같이 구분할 수 있으며 각각의 차이점을 Table 1과 Fig. 2를 통하여 설명하였다. Fig. 2에서 매 최적화 단계를 수행하기 전에 공정모사를 완전히 수렴시킨 점 c' 에서 점 d' 를 찾아갈 때 Feasible Path Strategy, 공정모사를 거의 수렴시키지 않은 점 c'' 에서 d'' 를 찾는 전략을 Infeasible Path Strategy, 이 두 가지의 중간 개념으로써 공정모사를 어느 정도 수렴시킨 점 c 에서 d 를 찾는 방법을 Partial Convergence Strategy라 한다[11, 13, 14]. Table 1에 나타난 단점들을 보완하기 위해 순차적으로 모듈 접근법과 이중 모델 접근법(Two-Tier Approach)을 혼합함으로써(Hybrid Approach)보다 나은 성능을 얻고자 하는 R/S Method[12], Restart Method[10] 등이 개발되었다.

3. 개선된 공정최적화전략

본 연구에서도 순차적 모듈 중심 접근법과 이중 모델 접근법의 장점을 조합하는 Hybrid Approach를 선택

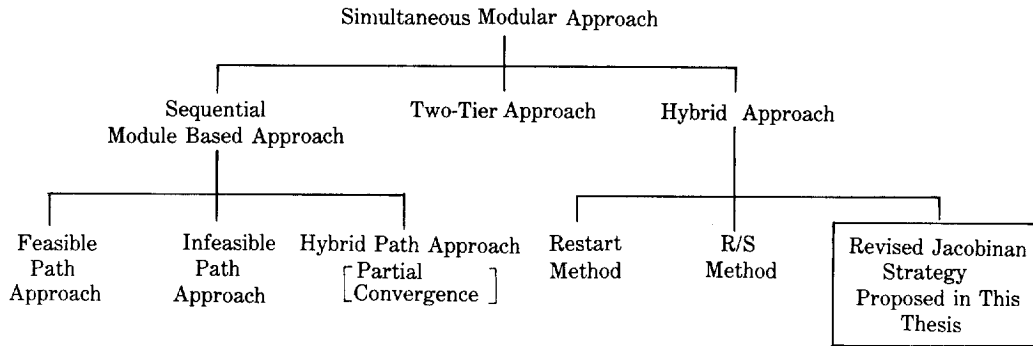


Fig. 1. Classification of strategies based of simultaneous modular approach.

Table 1. Comparison between sequential module based approach and two-tier approach

	Sequential Module Based App.	Two-Tier Approach
최적화 문제 구성	목적함수+Tear Stream의 연결방 사정식+등식 설계 사양 계 사양	목적함수+근사 모델 방정식+등식 설계 사양+부등식 설계 사양
기존 공정 모사기의 활용성	기존의 공정 모사기를 거의 수정없 이 활용한다.	기존의 공정 모사기 외에 좋은 근사 모델 필요.
등식 제약 조건의 Jacobian 구성	각 Unit의 Perturbation 계산에 의 하므로 과대한 계산량 필요	해석적 방정식을 가지는 방정식 중심 근사 모델에 의해 간단히 구할 수 있다.
QP 구성	Tear Stream의 연결방정식만 고 려하므로 상대적으로 작은 크기의 QP 발생.	근사 모델의 전 방정식을 고려하므로 상대적 으로 큰 크기의 QP 발생.
계산된 최적화 해의 정확성	정밀 모델에 의해 Jacobian 구성하 므로 정확.	근사 모델에 의한 Jacobian이 정밀 모델에 의 한 Jacobian과 정확히 일치하지 않으므로 근 사 해를 구할 가능성이 있다. 부가적 조치가 필요하다.

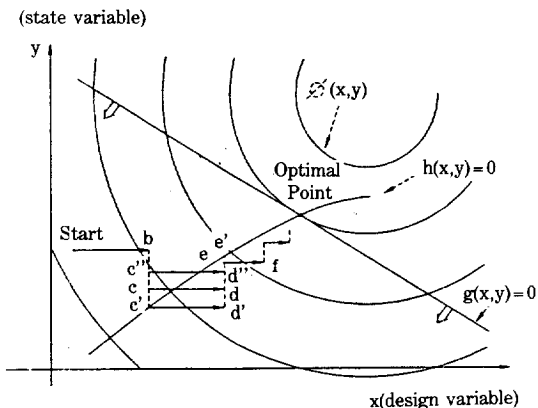


Fig. 2. Strategy of process optimization.

하여 보다 나은 전략을 제시하고자 한다.

3-1. 수정 Jacobian 전략(Modified Jacobian Strategy)

근사모델(Simplified Model)이 공정모사 및 최적화에 사용된 이래로, 공정모사 분야에 있어서는 근사모델이 아주 잘 적용되고 있는 것으로 보고되고 있다[10, 16-19]. 그것은 방향성을 요구하는 최적화문제와는 달리 공정모사 문제에서는 두 모델이 같은 값을 가지기만 하면 되기 때문이고, 각 기준점에서 두 모델이 같은 값을 가지도록 근사모델의 매개변수값을 지정하기 때문이다. 다음과 같은 최적화문제를 풀기 위해서는

Min $\phi(x, y)$

x

s. t. $h(x, y) = y - W(x, y) = 0$

$g(x, y) \leq 0$

여기서

x : decision variable vector

y : tear variable vector

W : calculated tear stream variable

Hessian 행렬 H를 먼저 구성해야 한다. 그리고 H를 구하기 위해서는 먼저 Fig. 3과 같은 Jacobian 행렬을 만들어야 한다[4]. 이와 같은 Jacobian 행렬은 물론 이대로 쓰이지는 않지만, 등식 및 부등식 제약조건을 나타내는 방정식과 전체 변수 사이의 편미분으로 구성되므로 한꺼번에 생각하는 것이며 실제로는 나누어진 부분별로 H를 구하는 데 사용되어 진다.

그런데 정밀모델을 사용하여 Tear Stream 연결방정식을 구하고 또 모든 변수들의 범위를 나타내는 부등식을 구하여 이들의 전체 변수에 대한 편미분을 구한 Fig. 3a와 같은 Jacobian 행렬을 사용하여 최적화에 필요한 H를 구하면 순차적 모듈 중심 접근법이 되고, 공정을 나타내는 축소모델 식들과 이에 따른 모든 변수들의 범위를 나타내는 식들의 모든 변수들에 대한 편미분으로 만들어지는 Fig. 3b와 같은 Jacobian 행렬을

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial h_r}{\partial y} & \frac{\partial h_r}{\partial x} \\ \frac{\partial g}{\partial y} & \frac{\partial g}{\partial x} \end{pmatrix}$$

(a) Jacobian Matrix by Rigorous Model

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial h_s}{\partial y} & \frac{\partial h_s}{\partial x} \\ \frac{\partial g}{\partial y} & \frac{\partial g}{\partial x} \end{pmatrix}$$

(b) Jacobian Matrix by Simplified Model

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial h_s}{\partial y} & \frac{\partial h_r}{\partial x} \\ \frac{\partial g}{\partial y} & \frac{\partial g}{\partial x} \end{pmatrix}$$

(c) Modified Jacobian Matrix

Fig. 3. Three types of Jacobian matrix.

- (a) Jacobian matrix by rigorous model
(b) Jacobian matrix by simplified model
(c) Modified Jacobian matrix
where s: simplified, r: rigorous

사용하여 H를 구하면 이중 모델 접근법이 된다. 이들에 대한 장단점은 이미 앞의 비교 연구 부분에서 밝힌 바 있다.

이와 같은 Jacobian 행렬에서 등식 제약조건 대 상태변수 부분은 전체 공정을 수렴시키는 데 주로 관계되며, 등식 제약조건 대 독립변수 부분은 목적함수 대 독립변수의 편미분 값과 함께 최적화문제를 푸는 데 주로 관계된다. 한편 목적함수는 항상 정밀(Rigorous)하고 부등식 제약조건은 변수들의 범위를 나타내는 부등식들이므로[설계 사양을 나타내는 부등식은 Slack 변수를 사용하여 등식으로 전환되어 $h(x, y) = 0$ 에 포함된다] 두 전략에서 달라지지 않는다. 그런데 공정모사에 있어서는 이중 모델 접근법이 잘 적용되며, 최적화계산에서 정확한 해를 구하기 위해서는 정확한 기울기값이 필요하므로 정밀모델을 써야 한다고 알려져 있다. 따라서 위의 내용을 종합하여 등식 제약조건 대 상태변수의 편미분값을 구하기 위해서는 축소모델을 사용하고 등식 제약조건 대 독립변수의 편미분값을 위해서는 정밀모델을 쓰는 방법이 생각될 수 있다. 이와 같이 구성되는 Jacobian 행렬을 수정 Jacobian 행렬이라 부르기로 하며, Fig. 3c와 같이 나타낼 수 있다. 이와 같은 수정 Jacobian 행렬은 $\partial h_s / \partial y$ 로 의해 최적해의 정확성을 거의 잃지 않으면서 시간이 가장 많이 걸리는 부분을 축소모델을 사용하여 $\partial h_x / \partial y$ 로 구하기 때문에 계산량을 줄이는 효과를 가져오게 됨을 쉽게 알 수 있을 것이다. 여기서 h는 각 단위공정의 근사모델(Simplified Model)을 조합한 공정 전체의 모델링 식들을 의미하는 데 여러 가지 단위화학공정들에 대한 근사모델들은 Boston 등[16], Jirapongphan[15], Trevino-Rozano[10] 등에 의해 제시되어 있다. 그 형태에서 잘 나타나 있는 것처럼 수정 Jacobian은 전체 변수에서 Tear 변수들이 차지하는 비가 커질수록, 즉 Tear Stream이 많은 복잡한 공정일수록 상대적으로 더 좋은 효과를 보일 수 있을 것이다. 이와 같은 수정 Jacobian 행렬을 이용하는 전략을 수정 Jacobian 전략(MJS: Modified Jacobian Strategy)이라 부르기로 한다.

3-2. 수정 Jacobian 전략의 적용 타당성 검토

앞 부분에서 이미 이야기된 것과 같이 해의 정확성과 계산량의 감소를 동시에 달성한다는 것은 쉬운 일이 아니다. 또한 정밀모델을 기본으로 구한 해를 정확한 해라고 인정할 때, 정확한 해를 얻기 위해서는 이와 똑같은 정밀모델을 사용할 수 밖에 없다. 화학공정에 대해

이와 같은 상황을 살펴보기로 한다. 먼저 K-value 나 엔탈피와 같이 독립적인 정밀모델로부터 구해지는 값들을 α 로 표시하고 그 정밀모델을 $P(x, y, \alpha, \gamma)$ 로 나타내기로 한다. 이때

x : 독립변수(예; 반응기의 압력)

y : 종속변수(예; 성분별 유량)

γ : 순수성분의 물성치나 원가계수와 같이 자료베이스에 의한 값을 나타낸다.

(P1) Min $\phi(x, y, \alpha)$

s. t. $g(x, y, \alpha) \leq 0$

$h(x, y, \alpha) = 0$

$\alpha - P(x, y, \alpha, \gamma) = 0$

여기서 공정의 모델링 식을 나타내는 $h(x, y, \alpha) = 0$ 와 $\alpha - P(x, y, \alpha, \gamma) = 0$ 을 합하여 공정 전체를 표현하게 되는 데, (P1)에 KKT(Karush-Kuhn-Tucker) 조건을 적용하면

$$\begin{bmatrix} \nabla_x \phi \\ \nabla_y \phi \\ \nabla_\alpha \phi \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \nabla_x g & \nabla_x h & -\nabla_x P \\ \nabla_y g & \nabla_y h & -\nabla_y P \\ \nabla_\alpha g & \nabla_\alpha h & I - \nabla_\alpha P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ V \\ t \end{bmatrix} = 0 \quad (1)$$

$g(x, y, \alpha) \leq 0$

$h(x, y, \alpha) = 0$

$\alpha - P(x, y, \alpha, \gamma) = 0$

$U \geq 0$

$U g(x, y, \alpha) = 0$

여기서 U, V, t 는 multipliers이다. 이 최적화문제에서 inside-out 개념을 적용하기 위하여 정밀모델 $P(x, y, \alpha, \gamma)$ 와 함께 사용될 근사모델 $K(x, y, \alpha, \beta)$ 를 도입하면 아래와 같다. 이때 β 는 inside-out의 바깥 루우프에서 다음과 같은 관계를 만족하도록 결정된다.

$\alpha = P(x, y, \alpha, \gamma) = K(x, y, \alpha, \beta)$

기술상 inside-out에 대한 자세한 설명을 생략하였으며 상세한 내용을 알기 위해서는 Boston 등[16]을 참고할 수 있다. 정밀모델 대신 근사모델 $K(x, y, \alpha, \beta)$ 를 도입하여 (P1)에 대해 KKT 조건을 적용시켜 보면 아래와 같다.

$$\begin{bmatrix} \nabla_x \phi \\ \nabla_y \phi \\ \nabla_\alpha \phi \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \nabla_x g & \nabla_x h & -\nabla_x K \\ \nabla_y g & \nabla_y h & -\nabla_y K \\ \nabla_\alpha g & \nabla_\alpha h & I - \nabla_\alpha K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ V \\ t \end{bmatrix} = 0 \quad (2)$$

$g(x, y, \alpha) \leq 0$

$h(x, y, \alpha) = 0$

$\alpha - K(x, y, \alpha, \beta) = 0$

$U g(x, y, \alpha) = 0$

(1)은 정밀모델을 기본으로 구성된 최적화문제의 해의 조건이며 (2)는 근사모델을 기본으로 하는(즉 Two-Tier Approach에서의) 해의 조건이다. (1)과 (2)에서 ϕ, g, h 에 대해서는 모두 같으므로 2 가지 방법이 정확히 동일한 해를 갖기 위해서는

$$\begin{cases} \nabla_x K = \nabla_x P \\ \nabla_y K = \nabla_y P \\ \nabla_\alpha K = \nabla_\alpha P \end{cases}$$

이어야 한다. 그러나 이것을 완전히 만족시켜 주는 근사모델은 없으며, 있다면 그것은 곧 정밀모델과 동일하게 된다. 따라서 근사모델을 이용하여 최적화전략은 항상 근사해에 도달할 가능성을 가질 수 밖에 없게 된다. 그런데 α 로 나타내어 지는 값들을 독립적인 정밀모델로부터 계산해 오는 경우(현재 널리 쓰이고 있는 Sequential Modular Approach에서는 모두 그렇게 하고 있다) $\nabla_\alpha K = \nabla_\alpha P$ 가 항상 성립하고 있으므로 수정 Jacobian 행렬을 쓴다는 것은 곧 $\nabla_x P$ 대신 $\nabla_x K$ 를 쓴다는 것이다. 이의 효과를 보기 위해 위의 문제를 실제 공정최적화문제를 풀 때의 상황으로 표시해 보면

(P2) Min $\phi(x, y)$

s. t. $g(x, y) \leq 0$

$h(x, y) = y - W(x, y) = 0$

여기서

x : decision variable vector

y : tear variable vector

W : calculated tear stream variable vector

즉 순차적 모듈 중심 접근법이나 이중 모듈 접근법에서 실제로 공정최적화문제를 다룰 때에는 모든 등식 제약 조건(공정의 모델링 방정식)을 대표해서 Tear Stream 연결방정식이 사용된다(Two-Tier Approach에서는 다르게 생각할 수도 있다). 목적함수 또한 x, y 의 음함수로 나타내게 된다. 따라서 근사모델 방정식을 쓸 경우에는 이에 따른 목적함수의 값도 정확하지 못하게 된다.

(P2)에 대해 정밀모델을 쓴 경우, 근사모델을 쓸 경우, 이 두 가지를 적절히 혼합할 경우(독립변수에 대해서만 정밀모델을 쓸 경우)에 대해 KKT Condition을 나타내 보면 정밀모델을 쓸 경우,

$$\begin{bmatrix} \nabla_x \phi_r \\ \nabla_y \phi_r \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \nabla_x g & \nabla_x h_r \\ \nabla_y g & \nabla_y h_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ V \end{bmatrix} = 0 \quad (3)$$

근사모델을 쓸 경우

$$\begin{pmatrix} \nabla_x \phi_s \\ \nabla_y \phi_s \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \nabla_x g & \nabla_x h_s \\ \nabla_y g & \nabla_y h_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = 0 \quad (4)$$

독립변수에 대해서만 정밀모델을 쓸 경우

$$\begin{pmatrix} \nabla_x \phi_r \\ \nabla_y \phi_s \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \nabla_x g & \nabla_x h_r \\ \nabla_y g & \nabla_y h_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = 0 \quad (5)$$

이다. (3)에 대해 (4), (5)가 정확하게 일치하지 않음은 명확한 일이다. 그러나 화학공정에 있어서 독립변수(혹은 설계변수)로 지정되는 변수들의 특성에 의해 $\nabla_x \phi$ 의 변화가 훨씬 더 크다는 사실은 잘 알려져 있다. 수정 Jacobian 전략을 쓸 경우 $\nabla_x \phi_r$, $\nabla_x h_r$ 를 사용하므로 $\nabla_y \phi_s$, $\nabla_y h_s$ 만이 문제가 되는 데, 목적함수의 경우 Tear Stream 변수에 대한 변화($\nabla_y \phi$)의 영향이 아주 미미하고 또한 상태변수 y 는 공정수렴($h=0$)을 위한 Tear Stream 변수이므로 해에 가까워질수록 $h=0$ 에 얼마이게 되어 $\nabla_y \phi$ 가 실제적인 영향력을 거의 미치지 못하게 된다. 공정의 수렴을 대표하기 위한 Tear Stream 연결방정식 h 의 경우, 본 연구에서 사용된 근사모델을 제시하고 또 이를 이중 모델 접근법에 사용한 Boston 등[18], Jiraphongphan[15], Trevino-Rozano[10] 등에 의해, 근사모델에 의한 h 의 구성이 공정수렴에 충분히 정확한 $\nabla_y h$ 를 제공할 수 있음이 밝혀져 있다. 이러한 사실을 근거로 하여 상대적으로 적은 숫자인 독립변수만을 정밀모델로부터 구해함으로써 해의 정확성을 거의 잃지 않으면서 많은 계산량의 감소를 가져올 수 있을 것으로 기대되어 진다. 또한 최적화에 있어서 독립변수의 중요성은 최적화문제를 푸는 기법인 SQP 법에 의해서도 나타난다. 이를 보면, (P2)를 어떤 시작점에서 2차 근사(Quadratic Approximation)하고 등식 제약조건 $h(\delta x, \delta y)$ 를 소거하면 다음의 형태가 된다.

$$(P3) \text{ Min } q^T \delta x + 1/2 \delta x^T H \delta x$$

$$\text{s.t. } g(\delta x) \leq 0$$

여기서 물론 q 와 H 에는 $\nabla_x \phi_r$, $\nabla_y \phi_s$, $\nabla_x h_r$, $\nabla_y h_s$ 의 영향이 모두 포함되어 있다. (P3)를 QP Solver로 풀어 구한 x 로부터, 등식 제약조건(Modeling Equations)을 선형화한 식에서 y 를 구하게 된다. 즉, 다른 영향들이 함께 고려되긴 하지만 독립변수들이 먼저 결정되고 Tear Stream 변수가 결정되어 지는 것이다. 이러한 현상은 상당히 중요한 결과를 가져오게 된다. Trevino-Rozano[10]는 Biegler[22] 등에 의해 먼저 제시된 Flash 문제를 푸는 데 있어서 이중 모델

접근법으로 근사해에 도달하게 됨을 확인하였다. 이때 독립변수는 Flash Unit의 압력이었다. 한편 Jiraphongphan[15]의 연구결과에 의하면 이와 유사한 문제에 대해 같은 근사모델을 사용한 이중 모델 접근법을 적용하여 실제 해와 거의 일치하는 해를 얻었다. 이때 독립변수는 2개의 Flash Unit의 온도였다. 한편 Boston 등[16], Jiraphongphan[15], Trevino-Rozano[18] 등에 의해 개발된 근사모델들은(본 연구에서도 이것을 사용하고 있음) 온도에 대해 훨씬 정확히 표현되고 있어, 압력에 대해서는 상대적으로 부정확한 것으로 알려져 있다. 이러한 상황들을 한꺼번에 고려해 볼 때, 공정최적화에 있어서는 독립변수들에 대한 정보가 정확할수록 보다 정확한 해를 구할 수 있음을 알 수 있다. 따라서 여기서 제안한 바와 같이 독립변수(설계변수)에 대해서만은 정밀모델을 사용함으로써 적은 계산량으로 해의 정확성을 향상시킬 수 있을 것으로 기대되어 지며, 이는 사례 연구를 통하여 확인되었다. 수정 Jacobian 전략의 구조를 Fig. 4에 나타내었다.

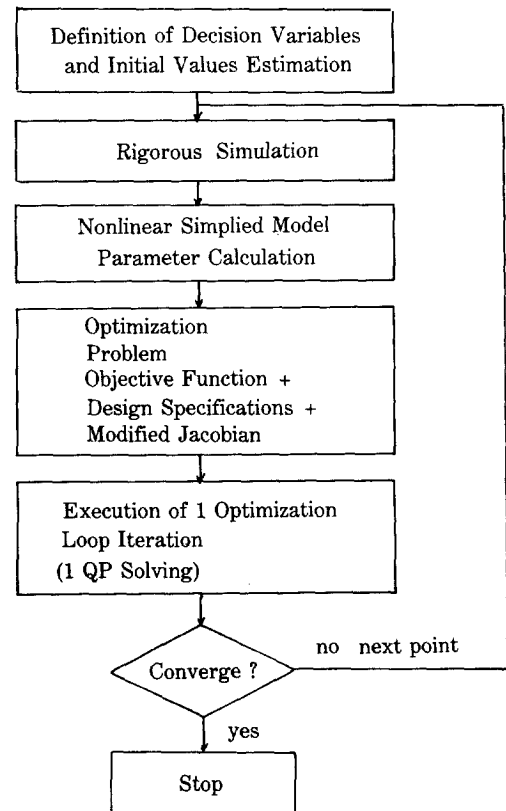


Fig. 4. Algorithm structure of proposed strategy.

4. 수정 Jacobian 전략의 성능 예측

앞 절에서 구성된 수정 Jacobian 행렬을 사용하는 최적화전략이 가질 것으로 보이는 성능을 다음과 같이 예측할 수 있다.

어떤 최적화전략의 성능을 총 Rigorous Flowsheet Iteration 수로써 판단할 때 (타당한 판단기준으로 평가되고 있음.)

○ SMIPA (Sequential Modular Infeasible Path Approach : 순차적 모듈 중심 접근법의 한가지)의 경우

총 Rigorous Flowsheet Iteration 수 = $N_{init} + (N_1 + N_2 + N_3 + N_4) \times N_5$

여기서, N_{init} : 최적화 루우틴에 들어가기 전의 Rigorous Flowsheet Iteration 수

N_1 : 최적화 루우틴 사이의 Rigorous Flowsheet Iteration 수

N_2 : Tear Variable 수 (Component 수 + 1)

N_3 : Decision Variable 수

N_4 : Line Search를 위한 Rigorous Flowsheet Iteration 수

N_5 : 총 최적화 반복계산 수

○ 수정 Jacobian 전략의 경우

총 Rigorous Flowsheet Iteration 수 = $N_{init} + (N_1 + N_3 + N_4) \times N_5$

축소모델로 Line Search 할 경우 N_4 를 포함시키지 않을 수도 있다. 그러나 이 식에는 축소모델을 이용한 Tear Stream 연결방정식 vs. State 변수의 Jacobian을 구하는 데 필요한 계산량은 빠져 있다. 이 양은 무시할 수 있다.

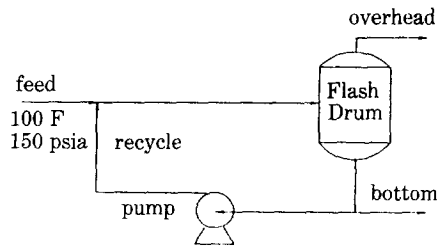
그런데 보통 독립변수의 수보다 Tear Variable의 수가 많으므로 수정 Jacobian 전략의 성능이 훨씬 뛰어남을 알 수 있다. 한 예로써 독립변수 5개, 성분 수 5개, 최적화계산 루우프가 10번인 경우라면

$$\frac{\text{SMIPA}}{\text{MJS}} = \frac{2 + (1 + 6 + 5 + 1) \times 10}{2 + (1 + 5 + 1) \times 10} = \frac{132}{72}$$

즉, 수정 Jacobian 전략이 132/72배 뛰어난 것을 알 수 있다. 또한 여기서 한 가지 더 고려할 것은 Line Search에 필요한 Flowsheet Iteration 수는 최소한 1번이라는 점이다.

5. 사례 연구

Biegler 등[20]이 사용하였고 이후로 공정최적화전



Components	Average Flow Rate (lb mol/hr)
Propane	10
1-Butene	15
N-Butene	20
T-2-Butene	20
C-2-Butene	20
Pentane	10

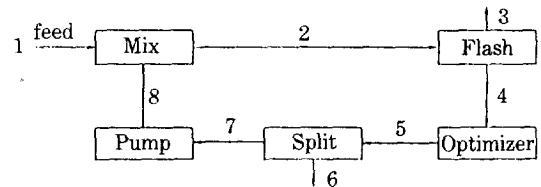


Fig. 5. A simple flash problem.

략을 평가하는 문제로써 많은 사람들이 활용해 온 Fig. 5의 공정을 사례로 채택하였다. 아래쪽 그림은 본래의 공정을 FBD(Functional Block Diagram)로 나타내고 Tear Stream을 선택하여 최적화기구를 위치시킨 것이다. 이 공정에 대한 최적화문제를 아래와 같이 구성하였다.

$$\text{Max } \{f_1 f_2 - f_1^2 - f_3^2 + f_4 - \sqrt{f_5}\}$$

p

$$\text{s. t. } 10 \leq p \leq 50$$

$$0 \leq x_i \leq 100 \quad (i=1, 6)$$

$$0 \leq x_7 \leq 1E7$$

여기서 f_i : component flow rate of flash unit vapor stream (lbmol/hr)

x_i : component flow rate of stream 5 (lbmol/hr)

x_7 : stream enthalpy of stream 5 (btu)

p : pressure of flash unit (psia)

여기서 사용된 목적함수는 물리적 의미를 가지지 않으며 임의의 비선형식으로 구성한 것이다.

Table 2는 원료의 조성을 약간씩 변화시켜서 세 가지 경우에 대해 순차적 모듈 중심 접근법(여기서는 SMIPA)과 수정 Jacobian 법을 적용하여 계산한 결과

Table 2. The results of three cases

	Strategy	Iteration	Pressure (psia)	Obj. Function
Case 1	Sequential	1	18.00	-1.595
	Modular Approach	2	20.69	-0.8042
		3	21.69	-0.7018
		4	22.21	-0.6824
		5	22.29	-0.6808
		6	22.28	-0.6810
	7	22.28	-0.6809	
	Modified Jacobian Approach	1	18.00	-1.595
		2	20.67	-0.8705
		3	21.56	-0.7092
		4	22.24	-0.6820
		5	22.39	-0.6797
		6	22.36	-0.6799
		7	22.36	-0.6799
Case 2	Sequential	1	18.00	15.742
	Modular Approach	2	11.68	19.167
		3	13.83	19.364
		4	12.65	19.620
		5	12.44	19.602
		6	12.46	19.605
		7	12.49	19.608
		8	12.48	19.607
		9	12.46	19.605
		10	12.44	12.603
	Modified Jacobian Approach	1	18.00	15.742
		2	11.66	19.159
		3	13.84	19.362
		4	12.66	19.621
5		12.43	19.600	
6	12.46	19.604		
7	12.47	12.606		
Case 3	Sequential	1	20.00	-2.338
	Modular Approach	2	21.93	-1.878
		3	23.62	-1.704
		4	24.62	-1.668
		5	25.01	-1.664
		6	24.95	-1.664
		7	24.99	-1.664
		8	24.97	-1.664
		9	24.95	-1.664
		10	24.95	-1.664
		11	24.95	-1.664
	Modified Jacobian Approach	1	20.00	-2.338
		2	21.93	-1.879
		3	23.38	-1.719
4		24.61	-1.669	
5		25.14	-1.664	
6		25.01	-1.664	
7		25.13	-1.664	

Table 2. Continued

	Strategy	Iteration	Pressure (psia)	Obj. Function
Case 3		8	24.98	-1.664
		9	25.04	-1.664
		10	25.07	-1.664
		11	25.01	-1.664
		12	25.08	-1.664
		13	25.03	-1.664
		14	25.03	-1.664
		15	25.05	-1.664
		16	25.05	-1.664

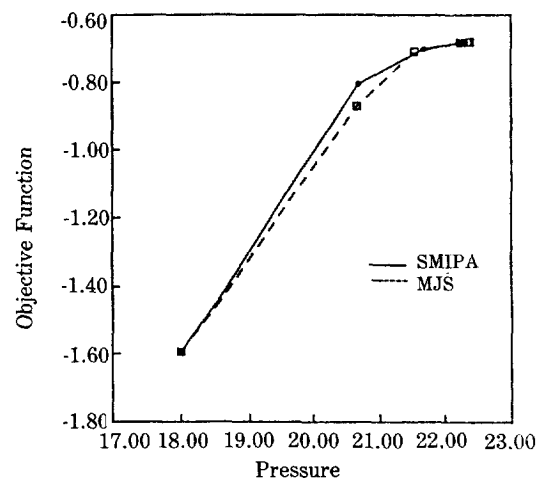


Fig. 6a. The comparison of convergences between sequential module based approach and modified Jacobian strategy -- case1.

이며 Fig. 6a-c는 이 결과를 도식한 것이다. 사례 1은 Fig. 5에 주어진 경우이며 사례 2는 원료의 조성이 11, 16, 21, 19, 19, 14(1bmol/hr)일 때, 사례 3은 원료의 조성이 9.8, 14.8, 19.8, 19.5, 19.5, 14.5(1bmol/hr)인 경우이다. 이들 세 가지 사례는 비록 소량의 원료 조건 변화에 의한 것이지만 목적함수의 형태에 의해 상당한 차이점을 가지게 된다.

Table 2와 Fig. 6으로부터 본 연구를 통하여 제시된 수정 Jacobian 전략이 거의 완전히 정확한 값에 수렴함을 알 수 있다. 아울러 거의 같은 경로를 따라 감을 알았다. Fig. 7은 사례 3의 경우에서 목적함수의 형태를 보여주고 있는데, 사례 1, 2는 어느 정도의 구배가 있으며 사례 3의 경우는 거의 평탄함을 알 수 있다. 이는 제시된 전략이 사례 1, 2에서 완벽한 성능을 보여주

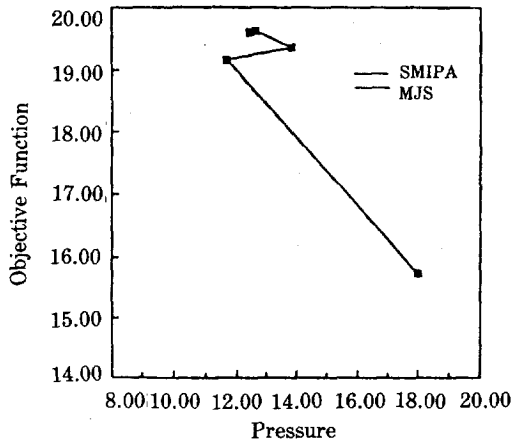


Fig. 6b. The comparison of convergences between sequential module based approach and modified Jacobian strategy -- case2.

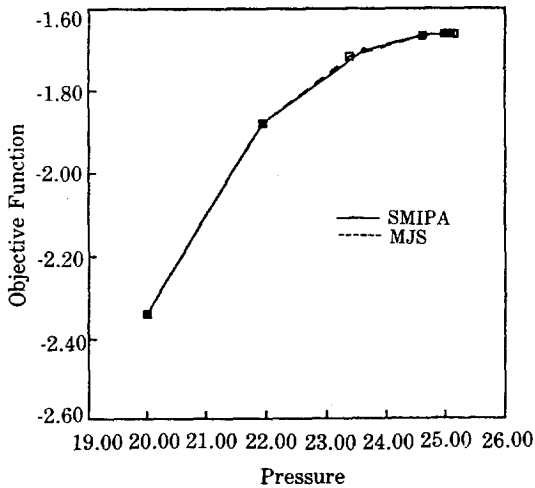


Fig. 6c. The comparison of convergences between sequential module based approach and modified Jacobian strategy -- case3.

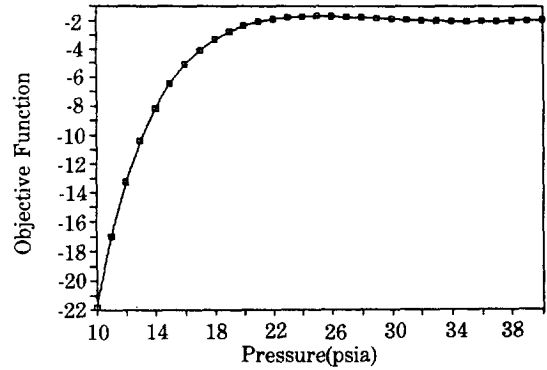


Fig. 7. Variation of objective function -- case3.

고 있는 데 반하여 사례 3이 약간 떨어지는 성능을 보이는 이유를 설명하고 있다. 그러나 이 경우에는 정밀모델에 의한 최적화의 수렴성도 역시 떨어짐에 유의해야 하며 두 가지 전략 모두가 사례 1, 2에서와 비슷한 반복 계산으로 Err. Tol. 1/1000에 도달하였다(수렴은 1/10000).

Table 3은 SMIPA(Sequential Modular Infeasible Path Approach)와 MJS(Modified Jacobian Strategy)의 성능의 상대 비교를 보인 것이다. Table 4는 사례 1의 경우에 대하여 Ganesh[12] 등이 기존의 전략인 SMIPA와 그들에 의해 개발된 R/S법과, Trevino 등에 의한 Restart 법 등의 계산에 소요된 CPU Time을 기준으로 비교한 것이다(Complete Rigorous Model은 SMIPA를 나타낸다). SMIPA를 중심으로 한 상대 비교에서, 즉 Table 3과 Table 4의 비교에서 본 연구를 통하여 개발된 MJS가 월등히 뛰어난 것을 알 수 있다. 그런데 수렴된 값에 차이가 있는 것은 사용된 열역학 물성치 계산 방법이 다르기 때문으로, Ganesh 등은 이상 열역학 물성치 계산법을 사용하였고 본 연구에서는 보다 정밀한 RKS 식을 사용하였다. 그러나 원료 및 운전상태가 동일하므로 이 차이는 성능의 상대 비교에 영향을 미치지 않는다.

Table 3. Comparison between SMIPA and MJS

Case	Optimization Strategy	Number of Optimization Iteration	Number of Flowsheet Iteration	Value of Decision Variable (psia)	Value of Objective Function
1	SMIPA	7	73	22.28	-0.6809
	MJS	7	31	22.36	-0.6799
2	SMIPA	10	103	12.44	12.603
	MJS	7	31	12.47	12.606
3	SMIPA	11	113	24.95	-1.664
	MJS	16	67	25.05	-1.664

Table 4. The results reported Ganesh et al. [73]

Procedure	CPU (sec)	Decision Variable	Objective function
Complete rigorous model	232	18.96	3.66289
Complete simplified model	29	23.79	4.87575
R/S algorithm	184	18.99	3.66308
Restart method	193	19.02	3.66337

6. 결 론

해의 정확성과 계산량의 단축 모두를 만족시키기 위하여 정밀모델과 근사모델을 동시에 이용하는, 본 연구에서 개발된 수정 Jacobian 행렬을 이용하는 전략이 예제를 통하여 정밀모델만을 이용하는 순차적 모듈 중심 접근법에 의한 해와 거의 동일한 해에 수렴함으로써 정확성이 확인되었다. 또한 수정 Jacobian 전략이 Jacobian 행렬의 상당부분을 근사모델에 의해 구성함에도 불구하고 현격히 적은 계산량으로 해에 수렴하였다. 이와 같은 사례연구를 통하여 본 연구에서 개발된 수정 Jacobian 전략이 해의 정확성을 보장하면서 계산량의 감축을 가져올 수 있음이 확인되었다. 수정 Jacobian 전략의 또 다른 특징은 문제가 주어짐에 따라 다른 전략에 대한 상대적인 성능을 어느 정도 정확히 예측할 수 있다는 것이다. 따라서 주어진 문제에 따라 이 전략의 선택 여부를 미리 결정하기 쉽고, 경우에 따라서는 문제를 조금 변형시킴으로써 이 전략이 우수한 성능을 발휘할 수 있는 문제가 되도록 유도할 수 있다.

감 사

본 연구를 위하여 연구비를 지원하여 준 주식회사 유공에 깊은 감사를 드립니다.

NOMENCLATURE

g	: inequality constraint
h	: equality constraint
K	: simplified model
Ninit	: number of initial rigorous flowsheet iteration
N1	: number of rigorous flowsheet iteration for each optimization iteration

N2	: number of tear variables (number of components + 1)
N3	: number of decision variables
N4	: number of rigorous flowsheet iteration for line search
N5	: number of total optimization iteration
P	: pressure
U, V, t	: multipliers
W	: calculated tear stream variable
x	: decision variable vector
y	: tear variable (state variable) vector
α	: values calculated by independent routine
β	: parameters of simplified model
γ	: variables based on data base
ϕ	: objective function

REFERENCES

1. Westerberg, A.W. and Debrosse, C.J.: *AIChE J.*, **19**(2), 335 (1973).
2. Powell, M.J.D.: Technical Report, Presented at Dundee Conference on Numerical Analysis (1977).
3. Han, S.P.: "Superlinear Convergent Variable Matric Algorithm for General Nonlinear Programming Problems", Repot No. JR 75-233, Dept. of Computer Science, Cornell University, Ithaca, N.Y. (1975).
4. Berna, T.J., Locke, M.H., and Westerberg, A.W.: *AIChE J.*, **26**(1), 37 (1980).
5. Locke, M. H., Westerberg, A.W., and Edhal, R.H.: *AIChE J.*, **29**(5), 871 (1983).
6. Westerberg, A.W., Hutchison, H.P., Motard, R.L., and Winter, P.: "Process Flowsheeting", Cambridge University Press, Cambridge, England (1979).
7. Chen, H.S. and Stadther, M.A.: *AIChE J.*, **31**(11), 1843 (1985).
8. Chen, H.S. and Stadther, M.A.: *AIChE J.*, **31**(11), 1857 (1985).
9. Chen, H.S. and Stadther, M.A.: *AIChE J.*, **31**(11), 1868 (1985).
10. Trevino-Rozano, R.A.: Ph.D. Dissertation, MIT, (1985).
11. Lang, Y.-D., and Biegler, L.T.: *Comput. Chem. Eng.*, **11**(2), 148 (1987).
12. Ganesh, N. and Biegler, L.T.: *Comput. Chem. Eng.*, **11**(6), 553 (1987).
13. Kisala, T.P., Trevino-Rozano, R.A., Boston, J.F., Britt, H.I., and Evans, L.B.: *Comput. Chem. Eng.*, **11**(6), 567 (1987).
14. Biegler, L.T.: Foundations of Computer-Aided

- Process Design, 369 (1983).
15. Jirapongphan, S.: Ph.D. Dissertation, MIT, (1980).
 16. Boston, J.F. and Britt, H.I.: *Comput. Chem. Eng.*, **2**, 109 (1978).
 17. Chen, H.S.: Ph.D. Dissertation, University of Illinois, Urbana (1982).
 18. Trevino-Rozano, R.A., Kisala, T.K., and Boston, J.F.: *Comput. Chem. Eng.*, **8**(2), 105 (1984).
 19. Biegler, L.T., Grossmann, I.E., and Westerberg, A.W.: *Comput. Chem. Eng.*, **9**, 201 (1985).
 20. Biegler, L.T. and Hughes, R.R.: *AIChE J.*, **28**(6), 914 (1982).