

화학공정의 확률적 동적모사를 위한 몬테카를로 시뮬레이션 기법

정우상 · 최수형[†] · 김재연* · 윤인섭**

전북대학교 화학공학부

*한화그룹 종합연구소

**서울대학교 화학공학과

(1998년 11월 10일 접수, 1998년 12월 31일 채택)

A Monte Carlo Method for Stochastic Dynamic Simulation of Chemical Processes

Woo Sang Jeong, Soo Hyung Choi[†], Jae Youn Kim* and En Sup Yoon**

School of Chemical Engineering and Technology, Chonbuk National University

**Hanwha Group Research & Engineering Center*

***Department of Chemical Engineering, Seoul National University*

(Received 10 November 1998; accepted 31 December 1998)

요 약

화학공정에는 설계 및 운전 단계에서 여러 가지 불확실성이 복합적으로 존재한다. 이를 정량적으로 해석하기 위하여서는 화학공정의 확률적 동적모사 기술이 요구된다. 확률적 동적 모사기능을 갖춘 범용 화학공정 모사기 개발을 위한 기존의 몬테카를로 시뮬레이션 연구에서는 변수에 대한 불확실성의 크기만 다루었으나, 본 연구에서는 변화발생시점의 불확실성까지 함께 다루기 위하여 새로운 매개변수 MTBD(Mean Time Between Disturbances)를 제안한다. 또한 제안된 방법을 수행하기 위한 시스템 구축 방법을 제시한다. 사례연구결과는 제안된 방법론이 화학공정의 불확실성을 다루는데 효과적으로 활용될 수 있음을 보여준다.

Abstract—Chemical processes involve various and complicated uncertainties in the design and operation stages. Quantitative analysis of these uncertainties requires a method for stochastic dynamic simulation of chemical processes. In the previous work for the development of a general purpose chemical process simulator capable of stochastic dynamic simulation, only the extent of the uncertainty of a variable was considered. In this work, however, a new parameter MTBD (Mean Time Between Disturbances) is proposed in order to consider the uncertainty on when a change is to occur also. A method for construction of a system which implements the proposed method is also presented. The results of case studies indicate that the proposed methodology can be effectively applied to dealing with uncertainties in chemical processes.

Key words: Monte Carlo Method, Stochastic, Dynamic, Simulation, Chemical Process

1. 서 론

최근의 화학공정모사는 컴퓨터 기술의 발전에 힘입어 단순한 정상 상태모사를 벗어나 공정의 동특성을 해석할 수 있는 동적모사기의 응용이 일반화되고 있다. 현재 사용되고 있는 상용 소프트웨어는 대부분 동적모사 과정 중 매개변수나 입력변수가 고정된 값 또는 미리 정해진 시간의 함수에 의하여 주어지는 값을 갖게 되므로 모사의 결과가 결정론적이다. 그러나 실제 화학공정을 모사하는 과정에는 모델의 불확실성, 입력변수의 불확실성, 노이즈, 고장 등 많은 불확실성이 복합적으로 존재한다. 이를 정량적으로 해석하기 위하여서는 화학공정의 확률적 동적모사 기술이 요구된다. 화학공정모사 분야에서 결정론적(deterministic) 문제를 확률적(stochastic) 문제로 전환시키는 연구는 정상상태 모사[1]에서부터 시작하여 동적모사에까지

확장되었다[2-4].

일반적으로 불확실성을 고려한 모사를 수행하기 위하여서는 변수를 확률분포함수로 나타내는 방법이 사용된다. 그러나 엄밀한 수학적 해석방법은 기존 모델의 과도한 변형을 요구하므로 실용화되려면 오랜 시간이 소요될 것으로 판단된다. 몬테카를로 시뮬레이션(Monte Carlo simulation)은 값이 불확실한 독립변수에 확률분포함수를 할당하고, 그 확률분포함수를 근거로 표본을 발생시켜 모델에 적용함으로써 실제 상황에서 발생할 가능성이 있는 사건을 그 확률대로 일으키는 모사방법이다. 이를 통한 통계적 해석을 위해서는 많은 반복모사가 이루어져야 하지만 기존의 결정론적 모델 및 모사기를 그대로 이용하여 확률적 동적모사를 수행할 수 있는 장점이 있다.

기존의 몬테카를로 시뮬레이션 기법은 주로 화학반응[5], 결정성장[6], 증착[7], 식각[8, 9], 유체[10-12], 분체[13, 14], 콜로이드[15] 등 특정 시스템에 대하여 각각 개별적으로 적용되어 왔다. 일반적 화학공정의 불확실성을 다루기 위한 범용 확률적 동적모사기[2, 3]는 아

[†]E-mail: soochoi@che.chonbuk.ac.kr

직 널리 활용되지 못하고 있다. 본 연구의 목적은 기존의 결정론적 동적모사기를 이용하여 확률적 동적모사를 가능하게 하는 몬테카를로 시뮬레이션 기법[2,3]을 개선하고 이를 수행하기 위한 시스템 구축 방법을 제시하는 것이다. 이는 화학공정 설계 및 운전단계에서 사용될 수 있으며 공정안전 기술향상에 기여할 것으로 기대된다.

2. 확률적 동적모사 기법

2-1. 불확실변수 선택

일반적으로 화학공정은 다음과 같은 DAE(Differential Algebraic Equations) 모델식으로 표현된다.

$$f(y', y, x, t, \alpha) = 0 \quad (1)$$

여기서 y 는 상태변수(state variables), x 는 입력변수(input variables), t 는 시간(time), α 는 모델 파라미터(model parameters)를 의미한다. 확률적 동적모사에서 고려해야 할 불확실성은 일반적으로 입력흐름의 유속, 온도 같은 입력변수나 전달계수, 반응상수, 물성 같은 모델 파라미터에 존재한다. 이들 중 불확실성이 크다고 판단되는 변수들을 선택하여 다음과 같이 정의한다.

$$x(t) = \bar{x}(t) + \varepsilon(t) \quad (2)$$

여기에서 \bar{x} 는 평균값, ε 는 편차이다. 즉 \bar{x} 는 결정론적 모사에 사용되는 입력값이고 ε 는 불확실성을 나타낸다. 본 연구에서는 이들의 불확실성을 일종의 외란(disturbance)으로 간주하여 동적모사를 수행한다.

2-2. 확률분포함수 설정

선택된 변수의 불확실성을 수학적으로 표현하기 위해 균일확률분포함수, 표준확률분포함수, 삼각확률분포함수, 사용자정의함수 등과 같은 확률분포함수가 이용 가능하다. 확률분포함수는 변수의 특성에 따라 불확실성을 잘 나타낼 수 있는 확률분포함수를 선택한다. 본 논문에서는 변수값의 평균 및 표준편차가 주어지면 정의되는 정규분포함수(normal probability distribution function)를 사용하여 변수의 불확실성을 표현한다(Fig. 1).

2-3. 표본생성

표본의 생성은 모사과정에서 외란의 발생을 의미한다. 확률분포함수로부터 표본을 생성하는 방법에는 inverse method, acceptance/rejection method, composition method, convolution method 등이 있다[2]. 본 논문에서는 역함수를 이용하여 표본을 생성할 수 있는 inverse method를 사용하였다. Inverse method는 먼저 확률분포함수를 적분하여 누적분포함수를 구한 다음 그 역함수를 이용하여 표본을 생성하는 방법이다(Fig. 2). 이때 독립변수는 random함수를 이용하여 컴퓨터로부터 얻은 0에서 1사이의 난수가 되고 종속변수가 원하는 표본

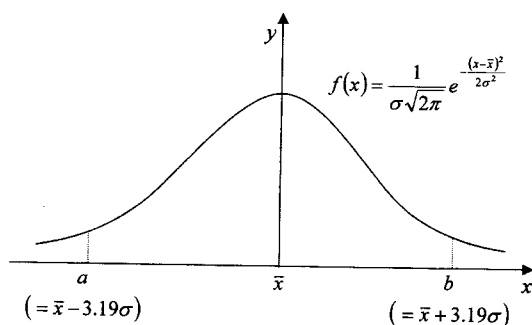


Fig. 1. Normal probability distribution function.

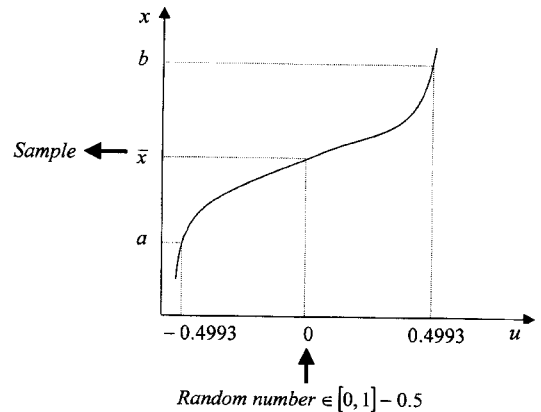


Fig. 2. Sample generation by inverse method.

값이 된다. 정규분포함수는 이론상 확률변수의 범위가 무한대이고 누적분포함수를 구하기 위해서는 수치해석적인 방법을 이용해야 한다. 본 연구에서는 누적분포함수와 그 역함수를 구하지 않고 표준정규분포표[16]로부터 내삽법을 이용하여 표본값을 구하는 비교적 간단한 방법을 이용하였다. 이때 불확실 변수의 범위를 최소값은 $x = \bar{x} - 3.19\sigma$, 최대값은 $x = \bar{x} + 3.19\sigma$ 로 제한하였으며, 이 경우 전체 범위에 대한 확률은 0.9986으로 1에 충분히 가까운 것으로 판단된다.

기존의 몬테카를로 시뮬레이션 기법[2,3]에서는 일정시간 간격으로 표본을 생성한다. 그러나 실제 공정에서는 외란의 크기뿐만 아니라 발생시점 역시 불확실하다. 따라서 본 연구에서는 실제 공정에서 불규칙한 시간 간격으로 발생하는 외란의 가상적인 평균빈도를 나타내기 위해 MTBD(Mean Time Between Disturbances)라는 새로운 매개변수를 도입하고 이것을 δ 로 나타내었다. 이것은 하드디스크 등과 같은 기기의 고장 발생 빈도를 나타낼 때 쓰이는 MTBF(Mean Time Between Failure)와 같이 외란의 발생 빈도를 나타낸다. 주어진 δ 값은 시간단위를 갖고 평균적으로 그 시간에 한번 표준편차 σ 의 외란이 발생할 것이라고 추정할 것이다. 이 값은 해당 변수의 동특성을 나타내며 다음과 같이 정의한다.

$$\delta = \text{해당변수가 평균값에서 표준편차만큼 변하는데 걸리는 평균시간} \quad (3)$$

이는 실제 공정데이터가 있으면 시계열분석(time series analysis)[16]을 통하여 정확히 결정할 수 있으며, 데이터가 없는 경우 해당변수에 대한 동적모델로부터 추정할 수 있다.

각 변수에 대한 δ 값은 미리 정해진 검사주기 Δt (time step size)의 n 배수로 주고, 모사 중 매 검사주기마다 해당변수에 외란이 발생할 확률 즉 새로운 표본이 생성될 확률은 $1/n$ 로 한다. 이를 실현하기 위하여 표본생성기는 매 검사주기마다 각 불확실 변수에 대하여 각각 0에서 1사이의 난수를 발생시키고 이를 각 변수의 외란발생확률 $1/n$ 과 비교하여 난수가 외란발생확률보다 작거나 같은 경우에만 새로운 표본을 생성한다. 따라서 평균적으로 n 번에 한번 즉 평균시간 δ 마다 표본이 발생하게 된다.

기존의 몬테카를로 시뮬레이션 방법[2,3]에서는 표본생성간격이 사용자에 의하여 임의로 주어지므로 이 간격이 너무 작으면 짧은 시간간격 동안 변수값이 급격하게 변하는 물리적으로 불가능한 표본이 자주 생성될 수 있었다. 본 논문에서 제안하는 방법에서는 그러한 표본이 생성될 확률이 낮으므로 보다 실제 상황에 가까운 동적모사가 수행된다.

2-4. 동적모사

생성된 표본은 결정론적 모사기에 전달되어 동적모사가 수행된다. 표본생성기는 시간 Δt 동안에 대한 동적모사를 진행시킨 뒤 다시 표본생성 여부를 검사하여 표본 생성이 결정되면 새로운 표본을 생성하여 그 값을 모사기에 전달한다. 만약 표본이 생성되지 않으면 기존값을 그대로 전달한다. 따라서 불확실 변수는 계단식으로 변화하게 된다. 그러나 사용하는 결정론적 모사기가 허용한다면 연속변수의 경우 이전 표본값에서 새로운 표본값으로 연속적으로, 예를 들면 선형적으로, 변화하도록 하면 더욱 실제상황에 가까운 동적모사를 수행할 수 있다. 확률적 동적모사에서 한번의 주기는 표본생성여부검사 → 표본생성 → 동적모사 → 결과저장으로 이루어진다. 이 과정은 시간 Δt 마다 반복하여 진행된다.

2-5. 결과분석

모사가 진행되는 동안 모사기의 출력변수값들은 통계처리에 되돌려져 저장된다. 정해진 시간동안에 대한 확률적 동적모사가 끝난 뒤 같은 과정을 다른 난수체계를 가지고 여러 차례 반복한다. 이로 부터 얻어진 데이터를 가지고 여러 가지 통계처리 함수들을 이용하여 변수들의 불확실성 및 민감도 등을 분석할 수 있다.

3. 시스템 구성

본 논문에서는 Microsoft Windows 환경에서 OLE(Object Linking and Embedding) Automation을 이용하여 기존의 결정론적 동적모사기와 spreadsheet를 결합함으로써 확률적 동적모사 및 결과분석을 수행할 수 있는 방법을 제시하고자 한다. 결정론적 동적모사기로는 HYSYS를 사용하고 spreadsheet로는 Microsoft Excel을 사용하였다. Excel은 내장된 random함수와 통계처리함수를 이용하여 난수발생과 결과의 수학적 분석이 가능하고, 또 그래프를 그릴 수 있는 능력과 편리한 인터페이스를 제공함으로써 기존 모사기를 더욱 강력하게 만들어 준다. 결정론적 동적모사기로 사용한 HYSYS는 OLE Automa-

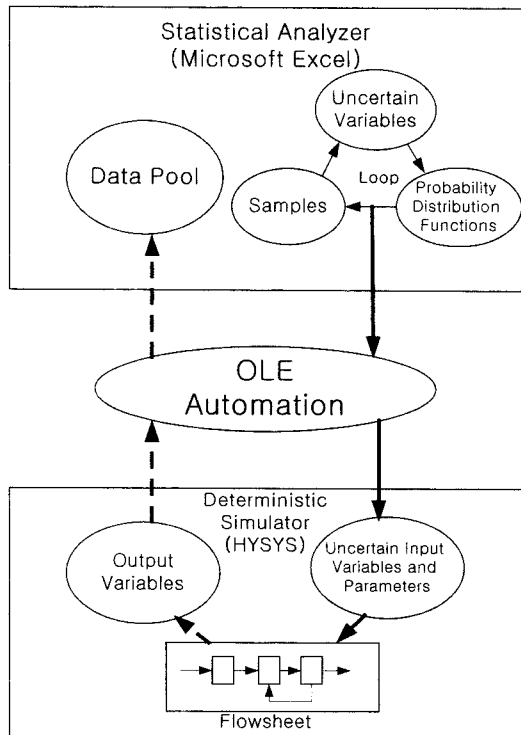


Fig. 3. Structure of a stochastic dynamic simulator.

```

Public hyApp As Object '-----HYSYS program
Public hySimcase As Object '-----HYSYS simulation case
Public hyFlowsheet As Object '-----HYSYS Flowsheet
Public hySolver As Object '-----HYSYS solver
Public hyOperation As Object '-----Mixer, Reactor, etc.
Public hyIntegrator As Object '-----HYSYS integrator
  
```

Fig. 4. Declaration of HYSYS variables in Excel.

```

Public Sub Objects()
    Set hyApp = CreateObject("HYSYS.application")
    Set hySimcase = hyApp.activedocument
    Set hyFlowsheet = hySimcase.flowsheet
    Set hySolver = hySimcase.solver
    Set hyIntegrator = hySolver.integrator
End Sub
  
```

Fig. 5. Specification of HYSYS objects in Excel.

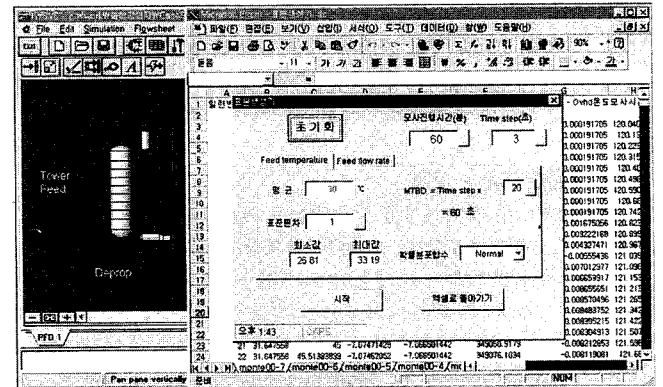


Fig. 6. Stochastic simulation interface for HYSYS.

tion Server 기능을 제공하므로 Excel에서 OLE제어 언어인 VBA (Visual Basic for Application)를 이용하여 접근하고 제어할 수 있다.

본 논문에서 제안하는 확률적 동적모사기의 구조를 Fig. 3에 나타내었다. 여기서 표본생성기에서 생성된 표본을 동적모사기 HYSYS에 전달하기 위해서는 표본생성기에서 HYSYS의 변수를 직접 제어할 수 있어야 한다. 이것은 Fig. 4 및 5의 예와 같이 Excel내부 VBA code에서 HYSYS의 객체를 선언해줌으로써 가능해진다. 개발된 확률적 동적모사 시스템의 사용자 인터페이스는 Fig. 6과 같으며 Intel Pentium® II 컴퓨터 및 Windows NT 환경에서 시험되었다.

4. 사례연구

제안된 방법론을 평가하기 위한 예제의 하나로 Fig. 7과 같은 C1-C8 가스혼합물로부터 C1-C3 가스를 분리해내는 증류탑[17]의 제어 시스템에 대한 확률적 동적모사를 수행하였다. 이 증류탑에는 condenser와 reboiler의 액위 조절을 위한 제어기와 탑의 온도와 압력 조절을 위한 제어기가 설치되어 있다. 본 예제에서는 처음 2시간 동안의 동적거동에 대하여서는 결정론적 동적모사를 수행하고 이후 1시간 동안에 대하여서는 확률적 동적모사를 수행하였다. 결정론적 동적모사가 진행되는 동안 공정의 변수들은 정상상태(steady state)가

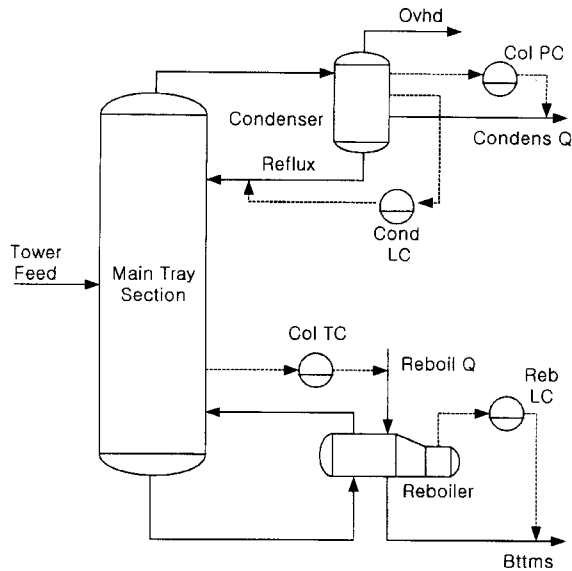


Fig. 7. Operations of a depropanization column[17].

Table 1. Input data for stochastic simulation

Variables	Feed temperature	Feed flow rate
Steady state value	30 °C	45 kmol/h
Distribution function	Normal	Normal
Range	$\pm 3.19\sigma$	$\pm 3.19\sigma$
Δt (time step size)	3 sec	3 sec
δ (MTBD)	60 sec	30 sec
σ (standard deviation)	1.0 °C	1.2 kmol/h

되어 일정하게 유지된다. 확률적 동적모사가 시작되면 표본생성기

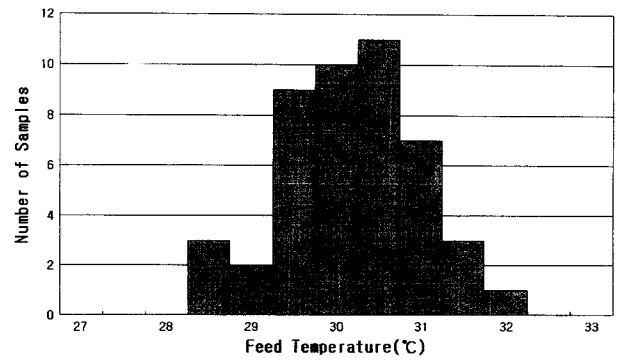


Fig. 9. Distribution of feed temperature samples.

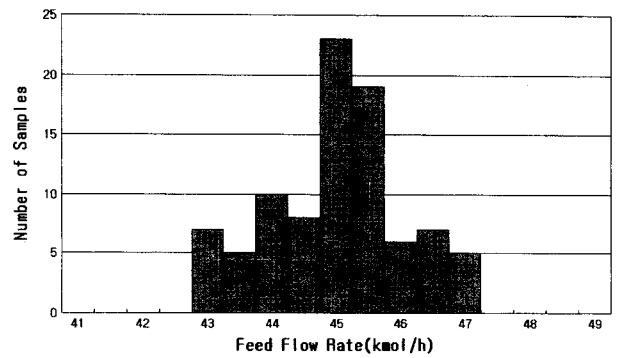


Fig. 10. Distribution of feed flow rate samples.

이였으며 모사결과는 Fig. 8과 같다. 1시간 동안에 대한 모사이프로 전체 step수는 1,200이 되어야 하지만 실제로는 891이었다. 이것은 동적모사 프로그램 HYSYS가 주어진 Δt 를 정확히 지키지 못하기 때문

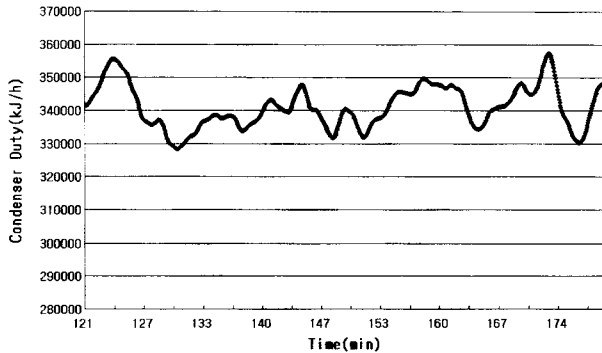


Fig. 12. Time series of condenser duty with $M=10$.

본 예제는 결정론적 동적모사만 가지고는 알 수 없는 불확실한 외란에 대한 공정의 거동을 확률적 동적모사를 통해서 알아보기 위한 것이었다. 따라서 불확실 변수의 평균값이 일정하였다. 그러나 이는 원래 시간의 함수이므로 시간에 따라 변화시킬 수 있다. 이 경우 많은 반복모사를 하면 확률적 민감도 해석이 가능해진다. 즉 입력변수의 변화에 따른 상태변수의 변화를 수치가 아닌 확률분포로 얻을 수 있다.

5. 결 론

결정론적 모델을 사용하는 기존 동적모사기에 표본생성기 및 통계처리를 결합하여 화학공정의 확률적 동적모사가 가능한 시스템을 구축하였다. 변수들의 동적 불확실성을 나타내기 위하여 기존의 정적 확률분포함수에 새로운 매개변수 MTBD(Mean Time Between Disturbances)를 도입하였으며, 이를 토대로 한 몬테카를로 시뮬레이션은 보다 실제상황에 가까운 동적거동을 나타낼 수 있었다. 본 논문에서 제안된 방법론은 엄밀한 수학적 접근방법이 실용화되기 어려운 현재상황에서 화학공정의 불확실성을 다루는데 효과적으로 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

감 사

본 연구는 과학기술정책관리연구소(STEPI)의 엔지니어링 핵심공통기반기술개발사업으로 지원되었습니다. 또한 포항공대 지능자동화연구센터(한국과학재단 ERC)의 부분적 지원에 감사드립니다.

참고문헌

1. Diwekar, U. M. and Rubin, E. S.: *Comp. & Chem. Eng.*, **15**, 105 (1991).
2. Lee, K. W.: Ph.D. Thesis, Seoul National University(1995).
3. Lee, K. W., Lee, K. J., Choi, S. H. and Yoon, E. S.: *Comp. & Chem. Eng.*, **20**, S557(1996).
4. Törvi, H. and Hertzberg, T.: *Comp. & Chem. Eng.*, **21**, S181(1997).
5. Vlachos, D. G.: *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 157(1998).
6. Smith, M. and Matsoukas, T.: *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 1777(1998).
7. Park, S. K., Yun, J. H. and Rhee, S. W.: *HWAHAK KONGHAK*, **32**, 121(1994).
8. Han, J. H., Cho, B. O., Chung, C. H. and Moon, S. H.: *HWAHAK KONGHAK*, **32**, 431(1994).
9. Cho, B. O., Han, J. H., Kim, Y. W. and Moon, S. H.: *HWAHAK KONGHAK*, **34**, 502(1996).
10. Suh, S. H. and Park, H. K.: *Korean J. Chem. Eng.*, **11**, 198(1994).
11. Suh, S. H.: *Korean J. Chem. Eng.*, **12**, 491(1995).
12. Suh, S. H., Kim, B. H. and Kim S. C.: *Korean J. Chem. Eng.*, **13**, 30(1996).
13. Kim, H. and Rajagopalan, R.: *HWAHAK KONGHAK*, **32**, 659(1994).
14. Kim, H. and Pyun, M. S.: *Korean J. Chem. Eng.*, **12**, 488(1995).
15. Chun, M. S.: *HWAHAK KONGHAK*, **36**, 241(1998).
16. Yoon, I. H. and Lee, S. Y.: "Modern Statistics", Samyoung, Seoul, Korea(1997).
17. Pongo, J., Boras, W., Schacter, R., Hanson, K., Lowe, C. and Forrest, J.: "HYSYS Applications", Hyprotech, Alberta, Canada(1996).