HWAHAK KONGHAK Vol. 40, No. 4, August, 2002, pp. 431-435

연속성 확률함수를 이용한 상압증류공정의 제품과 원료의 성상예측

이덕형 · 이의수 · 박상진†

동국대학교 화학공학과
(2001년 9월 3일 접수, 2002년 6월 4일 채택)

Prediction of Products and Feed by Using Continuous Probability Functions in Crude Fractionator

Doug Hyung Lee, Euy Soo Lee and Sang Jin Park†

Department of Chemical Engineering, Dongguk University, Seoul 100-715, Korea
(Received 3 September 2001, accepted 4 June 2002)

요 약

상압증류공정은 정유공정의 대표적인 공정으로 에너지를 많이 소비하고 생산성에 큰 영향을 미치는 공정중의 하나이다. 일반적으로 상압증류공정의 분석 장비는 얻고자하는 제품의 성상에 대한 정보를 얻기 위해 부분적으로 사용되고는 있으나 장비자체가 고가이며 유지 또한 쉽지가 않을 뿐 만 아니라 현재까지 기술에 제한을 받고 있다. 본 연구는 최적의 운전조건을 설정하고 경제적인 운전을 위해 반드시 필요한 분석 장비들의 단점을 보완하고 대체하는 방법으로 통계기법을 활용하여 상압증류공정에서의 운전조건을 통해 실시간적으로 제품의 물성과 원유의 물성을 예측하여 운전조건을 개선하고 안정된 운전을 위한 정보를 제공하고자 한다. 이를 위해 상압증류공정에서 제품의 물성은 특정 확률함수에 따른다는 것과 확률함수의 변수들은 운전조건에 의해 결정되어 진다는 두 단계의 접근방법을 사용하여 원하는 제품 및 원료의 물성을 예측할 수 있었으며 보다 효율적인 운전에 대한 정보를 제공할 수가 있었다. 운전조건으로부터 확률함수의 변수와 상관관계에 대한 관계식은 PLS 기법을 사용하였다.

Abstract – This paper provides the information of the products and the feed for crude fractionator, hard to get from hardware system, by using the inferential model of real-time operating conditions. By adopting two steps, the characteristic of each product follows the probability function and the variables of the function depend on operating system and conditions. The characteristic of products and feed was obtained to do more efficient operation. PLS method was used to make the inferential model.

Key words: PLS, Inferential Model, CDU, Probability Function

1. 서 론

상압증류공정은 정유공정의 대표적인 공정으로 에너지를 많이 소비하고 생산성에 큰 영향을 미치는 공정중의 하나이기 때문에 처리되는 원료의 성상을 정확히 알아야만 운전계획에 반영하며, 제품의 성상에 대한 분석이 실시간으로 이뤄져야만 효율적인 운전을 할 수 있다. 일반적 상압증류공정의 분석 장비는 제품의 성상에 대한 정보를 얻기 위해 부분적으로 활용되고는 있으나 장비자체가 고가이며 유지 또한 쉽지가 않을 뿐만 아니라 가장 핵심이 되는 원유에 대한 물성을 실시간으로 얻는 것은 현재까지 기술에 제한을 받고 있다.

본 논문에서는 최적의 운전조건을 설정하고 경제적인 운전을 위해 반드시 필요한 분석 장비들의 단점을 보완하고 대체하는 방법으로 통계기법을 활용하여 상압증류공정에서의 운전조건을 통해 실시간적인 제품의 물성과 원유의 물성을 예측하여 운전조건을 개선하고 안정된 운전을 위한 정보를 제공하고자 하였다. 이와 유사한 간접적인 접근 방법으로 Friedman[1]은 원유의 특성 중 가장 중요한 물성인 TBP를 예측하기 위해 단순화된 에너지 수지식을 사용한 예가 있으나 실제보다 5%정도를 낮게 예측된 바 있다.

본 논문에서는 컴퓨터의 발달로 유용성이 커진 자료 분석 기법을 활용하여 실시간의 운전변수들과 운전조건 등을 통하여 제품 및 원유의 물성에 대한 보다 나은 결과를 얻을 수 있었다. 이에 사용된 상압증류공정에서의 제품의 물성은 특정 확률함수에 따른다는 것과 확률함수의 변수들은 운전조건에 의해 결정되어 진다는 두 단계의 접근방법을 사용함으로써 원하는 제품 및 원료의 물성을 예측할 수 있었으며, 이는 효율적인 운전에 대한 정보를 제공한다. 운전조건으로부터 확률함수의 변수와 상관관계에 대한 관계식은 PLS 기법을 사용하였다. 본 논문에 사용된 데이터는 국내 모 정유회사 제품 및 상압증류탑의 원료오일의 분석데이터이며 일부는 상관관계식 및 논리의 타당성 입증을 위해 crude oil의 assay 데이터를 이용한 공정모사 데이터를 사용하였다.

†To whom correspondence should be addressed.
E-mail: sjpark@dgu.edu

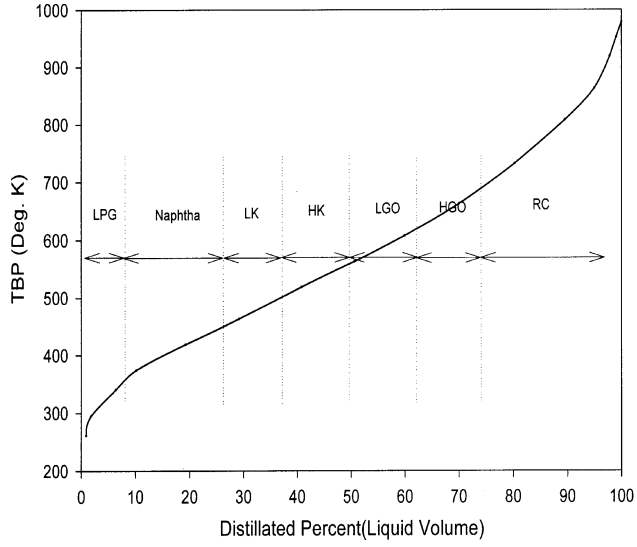

Fig. 1. TBP data of crude oil and product range.

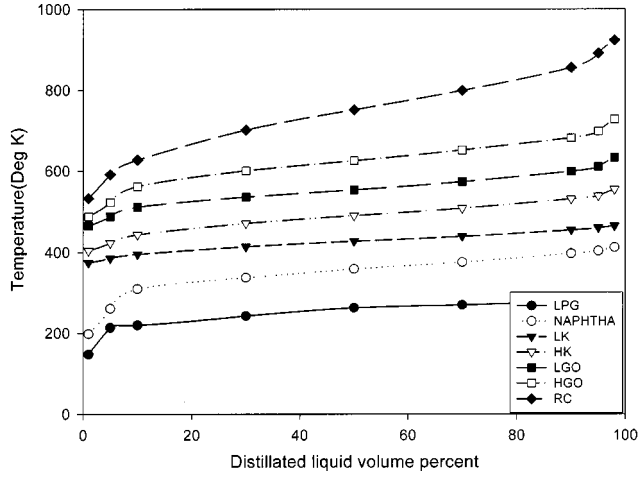

Fig. 2. TBP data of CDU products.

2. 제품의 TBP와 확률함수와의 관계

일반적으로 상압증류공정의 제품은, LPG gas, naphtha, light kerosene (LK), heavy kerosene(HK), light gas oil(LGO), heavy gas oil(HGO), residue crude(RC) 등으로 각각의 제품들은 제품의 규격으로 특정의 끓는점(TBP) 영역을 지니고 있다. 이들 제품의 규격은 운전조건 조절로서 결정이 되며, 원료와 제품의 끓는점 자료는 상압증류공정의 원료와 제품을 특성화시키는 중요한 인자이다.

제품의 끓는점들에 대한 자료를 온도에 따른 확률밀도의 형태로 변경시키면, 각 제품들은 특정 확률밀도함수의 형태를 보임을 알 수가 있다. 제품의 TBP 자료는 확률밀도함수와 서로 유사점을 갖고 있다는 점에 착안하여, 제품의 TBP 자료를 표현할 수 있는 두 종류의 확률함수를 도입하게 되었다. 이 중 하나는 식 (1)(확률함수 A)과 같이 Hill의 확률함수를 사용하였으며, 다른 하나는 식 (2)(확률함수 B)로 새롭게 만들어졌다. 각각 평균과 분산을 나타내는, T_H(또는 T_L) 과 B_H(또는 B_L), 변수들에 의해 표현된다. 또한 이들 함수들은 확률밀도함수의 적분된 형태를 지닌다. Fig. 5에 Hill의 확률함수의 변수값 변경에 따른 그래프를 나타내었다.

$$D(\text{Distillate, \%}) = 100/((T_H/T)^{B_H}+1) \quad (1)$$

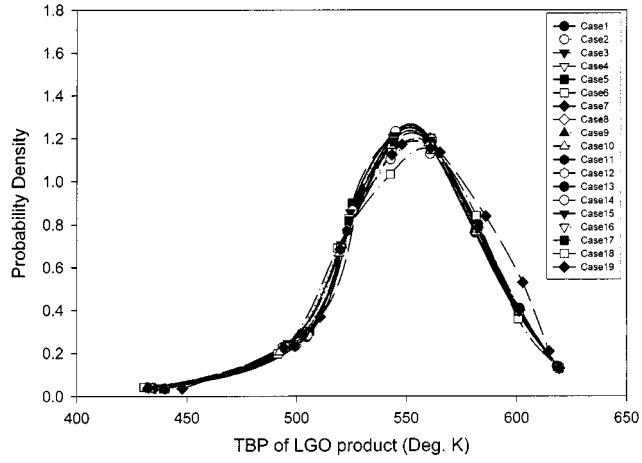

Fig. 3. Probability temperature density of LGO product.
*Data source: Simulation results by using commercial simulator

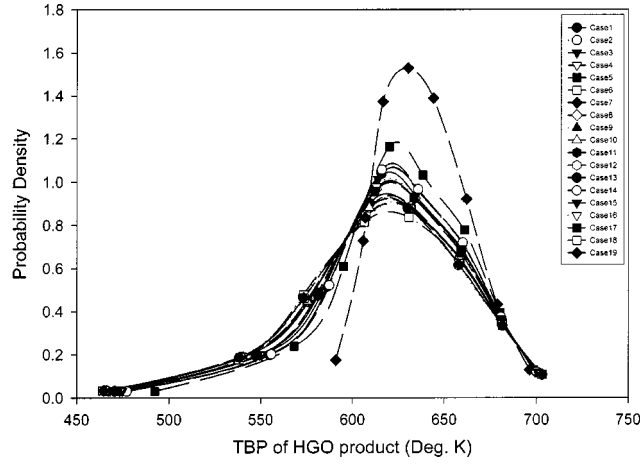

Fig. 4. Probability temperature density of HGO product.
*Data source: Simulation results by using commercial simulator

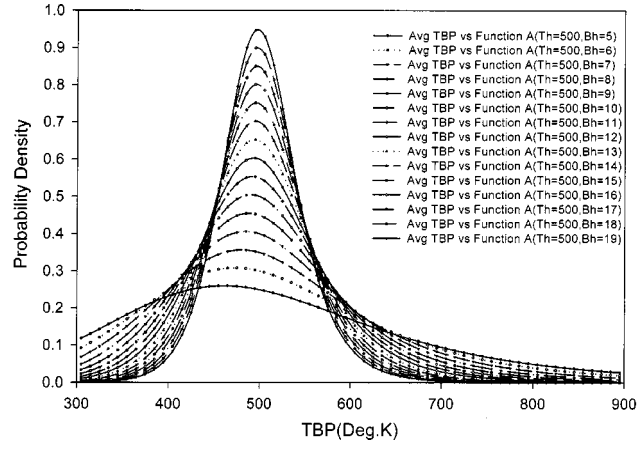

Fig. 5. Probability density function A.

여기서 T_H과 B_H는 확률함수의 변수값이고 T는 true boiling point를 말한다.

$$D(\text{Distillate, \%}) = 100/\exp((T_L - T)/B_L)^2, \text{ (단 } T_L > T) \quad (2)$$

여기서 T_L과 B_L는 확률함수의 변수이고 T는 true boiling point를 말한다.

한편, 원하는 제품의 규격에 대한 두 점에 대한 TBP를 구할 경우 확

률함수를 적용하여 제품전체에 대한 TBP 자료를 유도할 수 있다. 즉 제품의 일부 성상을 통하여 확률함수에 적용되는 변수의 계산은 수식 (1, 2)와 같이 적용되는 확률함수에 따라 확률함수가 제품의 TBP 50% 지점과 TBP 90%의 지점을 지나도록 유도된 식[(3, 4)]이다.

수식 (1)의 변수는 다음 식 (3)와 같이 나타내어질 수 있다.

$$T_H = TBP_{50}$$

$$B_H = \frac{\ln(1/9)}{\ln(TBP_{50}/TBP_{90})} \quad (3)$$

where, TBP_{50} is temperature at 50% distillate
TBP_{90} is temperature at 90% distillate
T_H, B_H are parameters for probability function A

또한 수식 (2)의 변수는 다음 식 (4)와 같이 나타내어질 수 있다.

$$T_L = \frac{\sqrt{\ln(2)}*TBP_{90} - \sqrt{\ln(10/9)}*TBP_{50}}{\sqrt{\ln 2} - \sqrt{\ln(10/9)}}$$

$$B_L = \frac{T_L - TBP_{50}}{\sqrt{\ln 2}} \quad (4)$$

where, T_L, B_L are parameters for probability function B
TBP_{50} is temperature at 50% distillate
TBP_{90} is temperature at 90% distillate

식 (3, 4)는 제품의 50%와 90%에 대한 TBP 값을 알 경우에 수식 (1, 2)에 해당하는 확률함수의 변수를 구하는 식이다.

Table 1과 2는 10개의 다른 제품(제품별 다른 규격과 성상)에 대해 회귀기법을 사용하여, TBP 자료로 이들 확률함수를 적용한 결과 각 제품별 확률함수 A, B의 평균값과 분산을 나타내었고, Table 3, 4에 따른 예측값과 실제값의 절대 오차를 나타내었다.

확률함수 A를 사용한 제품별 예측값과 실제값의 TBP 결과는 Table 3과 같이 대체적으로 양호한 결과를 나타내었으며, 오차는 제품의 종류에 따라 많은 변화가 없다. 확률함수 B를 사용한 제품별 예측값과 실제값의 TBP의 결과는 Table 4와 같이 LPG와 RC제품을 제외한 다른 제품에서는 보다 확률함수 A보다 정확하게 제품의 성상에 대하여 표현할 수 있음을 알 수 있다.

이와 같이 확률함수의 선택은 현재까지 알려진 수많은 함수 중 제품의 성상과 목적에 따라 다소 임의적으로 사용할 수가 있고 경우에 따라 한 제품에 2개 이상의 확률함수를 함께 적용할 수도 있다. 각 제품을 확률함수를 통해 특성화함으로서 다루기 힘든 연속성 가상성분(continuous pseudocomponent or petroleum fractions)에 대한 접근을 용이하게 함으로써 상압증류공정 및 후속공정에서의 제품생산계획을 수립할 수 있고 물성을 예측하여 운전조건을 개선하고 경제성 평가 등의 정보를 제공할 수 있다.

본 논문에서는 상압증류공정에 대한 각 제품에 연속확률함수를 적용하여 각 제품마다 2개의 변수값으로 특성화함으로써 불확실한 제품 및

Table 1. Parameter of probability function A for each product

Parameter	LPG	Naphtha	LK	HK	LGO	HGO	RC
B_H	5.3016	17.4541	36.4592	32.4062	27.3499	23.6067	12.2731
T_H	262.8636	373.3009	441.9055	494.6851	550.5835	619.354	749.7262

Table 2. Parameter of probability function B for each product

Parameter	LPG	Naphtha	LK	HK	LGO	HGO	RC
B_L	148.198	79.269	46.9499	58.367	76.866	100.985	194.103
T_L	391.268	442.278	481.8223	544.615	616.630	705.908	914.873

Table 3. Difference between actual data and predicted data by using probability A

Distillate(%)	LPG	Naphtha	LK	HK	LGO	HGO	RC
5	1.88	–3.25	–12.45	–14.60	–13.32	–20.06	10.78
10	18.15	–4.16	–9.13	–6.75	–3.00	–10.98	9.22
30	1.62	–1.40	0.31	0.35	0.48	0.91	–1.27
50	–14.48	1.60	0.74	0.64	0.66	1.23	–2.44
70	12.75	3.64	1.03	1.63	0.15	1.28	–1.56
90	23.11	–6.05	–3.15	–3.95	–2.35	–5.66	23.84
95	–30.93	–16.87	–7.57	–9.19	–5.63	–13.06	13.56
Abs. avg. error	14.70	5.28	4.91	5.30	3.66	7.60	8.95

Table 4. Difference between actual data and predicted data by using probability B

Distillate(%)	LPG	Naphtha	LK	HK	LGO	HGO	RC
5	17.96	7.02	–5.39	–6.47	–2.52	–4.46	21.67
10	25.43	3.00	–3.65	–0.55	5.10	0.66	15.72
30	–3.00	–1.09	1.76	1.70	1.98	3.33	–3.45
50	–19.50	–1.38	–0.09	–0.69	–1.39	–1.25	–5.98
70	18.41	0.58	–0.46	–0.33	–2.66	–2.33	2.80
90	77.81	0.78	–0.37	–0.23	2.61	0.98	68.68
95	69.45	0.71	0.32	1.15	8.31	5.53	95.65
Abs. avg. error	33.08	2.08	1.72	1.59	3.51	2.65	30.57

원료의 규명을 통해 제품생산의 수급 및 조절에 대한 기여를 하고자 하였다. 또한 제품 및 원료의 TBP 데이터 및 수율은 원유와 공정조건에 따라 결정될 수 있기 때문에 운전조건으로부터 제품과 원료의 성상을 예측할 수 있다는 것이다. 이에 대한 방법으로 다음에 공정모사 소프트웨어와 PLS(partial least square, projection to latent structure) 기법을 도입 운전조건과 확률함수의 변수값들 상관관계를 규명하고자 하였다.

3. PLS 기법을 사용한 운전조건과 확률함수 변수와의 상관관계

상압증류공정에 있어서 제품의 성상과 양은 장치들의 환경에 따라 영향을 받는다. 이들 운전 변수들은 다음과 같다.

1) 각 제품간의 단 수
2) 스팀의 양
3) 제품의 생산량
4) 히터와 응축기의 용량
5) Pump-around의 용량

확률함수의 변수는 이들 운전 변수들에 영향을 받으며, 또한 각 단의 온도, over flash 비율, 히터의 온도, 환류비 등 제품의 물성에 영향을 미치는 변수들에 의해 결정이 된다. 본 논문에서는 PLS 기법을 사용하여 제품의 물성에 영향을 주는 변수들로부터 확률함수의 변수를 예측하였다. PLS 기법은 각 변수들 간에 상관관계가 많은 환경에서 독립변수와 종속변수와의 관계식을 유도함에 있어 기존의 least square 방식을 대신하고 있다.

각 제품의 물성을 표현하는 수식 (1, 2)에 사용되는 확률함수의 변수들은 PLS 기법을 통하여 얻어진 운전 변수들과의 상관관계식인 수식 (5)에 의해 결정이 되며, 한 예로, LGO 제품의 물성을 예측하는데 사용되는 수식 (5)의 함수는 Table 5와 같다.

$$T_L = \sum_{i=1}^{n} C_{L,i} * f_{T_L,i}(X),\ B_L = \sum_{i=1}^{m} C_{B,i} * f_{B,i}(X) \qquad (5)$$

여기서 $C_{L,i}$와 $C_{B,i}$는 상수값이고 f(X)값은 독립변수 값이다. 함수의 형태는 각 독립변수별로 Table 5에 나타내었다.

이들 방정식들은 상압증류공정의 변수들인 장치의 단수, 장치의 구조, 각 단의 효율 등에 의해 결정되는 것이기 때문에 본 논문에서 사용된 환경과 다른 환경에서는 모델의 수정이 필요하다. 즉 사용된 원유 및 제품의 성상, 생산계획 및 수급에 따라 상관관계를 나타내는 독립변수의 선정 및 함수식은 유동적으로 조절이 가능하다.

PLS 기법을 통하여 얻어진 각 제품에 대한 확률변수 값들로써 각 제품에 대한 전체적인 TBP를 얻어낼 수 있다. 원료에 대한 TBP 자료는

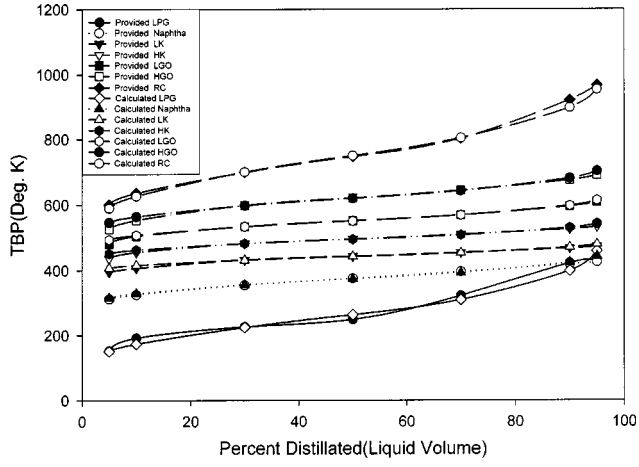

Fig. 6. Comparison between predicted and operated TBP values by using probability function A.

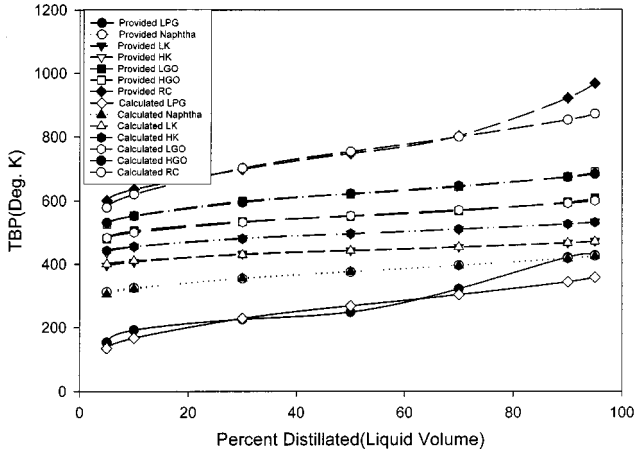

Fig. 7. Comparison between predicted and operated TBP values by using probability function B.

수식 (6)와 같이 예측된 제품의 TBP 자료에 각 제품의 유량을 반영하여 얻어지게 된다.

$$D(T, L_1, L_2, L_3, L_4, L_5, L_6, L_7, \cdots) = \frac{\sum_{i=1}^{7} L_i * D_i(T)}{\sum_{i=1}^{7} L_i} \qquad (6)$$

where, D is distillated liquid volume percent at temperature T

Table 5. Optimized parameters of the probability function B with operating variables for LGO product

$f_{T_L,i}(x),\ f_{B,i}(x)$	$C_{B,i}$	$C_{L,i}$	Description
1	5489.8	5924.8	Constant
X	–0.02487	–0.10585	LK product tray temp.
X	0.12229	–0.18639	HK product tray temp.
X	7.0784	8.3702	LGO product tray temp.
X	–14.279	–15.158	HGO product tray temp.
Log(x/(100–x))	28.211	21.812	LK flow rate/feed flow rate*100
Log(x/(100–x))	21.776	30.258	HK flow rate/feed flow rate*100
Log(x/(100–x))	186.76	161.9	LGO flow rate/feed flow rate*100
Log(x/(100–x))	–47.734	–44.636	HGO flow rate/feed flow rate*100
Log(x/(100–x))	–26.644	–14.599	Overflash flow rate/feed flow rate*100
X	3.6998	83.896	LK specific gravity
X	–169.06	–34.318	HK specific gravity
X	–1197.4	–1270.8	LGO specific gravity

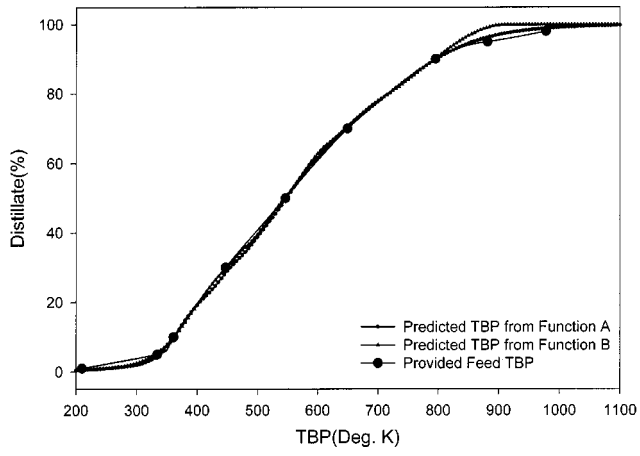

Fig. 8. Comparison of predicted TBP's of feed for using different probability equations.

$D_i(T)$ is distillated liquid volume percent at temperature T
L_i is Std. Liquid volume of i product

원료의 TPB 자료는 모든 제품의 TBP 값을 합산함으로써 Fig. 8과 같은 결과를 얻을 수가 있다.

4. 결 론

상압증류공정의 제품들의 중요 특성인 TBP 값은 온도에 따른 확률함수에 따른다는 것을 확인함에 따라 부분적인 제품의 정보를 통해 전체적인 제품의 성상을 예측할 수 있었다. 또한 확률함수를 적용함에 따라 PLS 기법을 사용하여 운전 변수들과 제품의 성상에 대한 관계식을 단순화 시킬 수가 있었으며, 각 제품의 주요 성상인 TBP를 예측함으로써 제품의 규격을 실시간으로 측정하는 소프트웨어 센서를 얻을 수가 있었으며, 이를 통하여 실시간으로 분석이 어려운 원유에 대한 정보를 얻을 수가 있었다.

본 논문에서 사용된 확률함수는 임의적으로 선정된 것으로써 이들 확률함수와 유사한 정규분포도 등도 활용될 수가 있으며, 각각의 제품을 잘 표현하는 확률함수를 조합하여 사용함으로써 예측에 대한 정확도를 더 높일 수가 있다. 실 공정에 적용을 위해서 확률함수의 변수 및 제품 성상의 예측에 사용된 PLS 기법 사용의 신뢰성을 얻기 위해서는 해당 공정의 많은 실험 자료가 요구되며, 새로운 변수식이 구해져야 할 것으로 본다.

본 논문은 일련의 과정을 통하여 상압증류공정의 제품 규격을 얻어낼 수 있기 때문에 최적화 운전에 대한 정보를 제공할 수 있으며, 또한 하부공정의 원료에 대한 수율 향상 정보를 제공할 수 있다.

사용기호

T_H : parameter for probability function A
B_H : parameter for probability function A
T_L : parameter for probability function B
B_L : parameter for probability function B
TBP_{50} : temperature at 50% distillate
TBP_{90} : temperature at 90% distillate
$D_i(T)$: distillated liquid volume of i at temperature T
L_i : standard liquid volume of i

참고문헌

1. Pandya, A. S. and Szabo, R. R.: *SPIE*, **3390**, 197(1998).
2. Berglund, A.: "Some Extensions of PCA and PLS," Solfjadern Offset AB, Umea(1998).
3. Jiang, B.-N.: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **152**, 239(1998).
4. Alsberg, B. K., Kell, D. B. and Goodacre, R.: *Anal. Chem.*, **70**, 4126 (1992).
5. Twu, C. H.: *Fluid phase equilibria*, **16**, 137(1984).
6. Tester, J. W. and Modell, M.: "Thermodynamics and its Applications," Prentice Hall PTR, 3rd edition.
7. Cooper, J. B., Wise, K. L., Groves, J. and Welch, W. T.: *Analytical Chemistry*, **67**, 4096(1995).
8. Messick, N. J., Kalvas, J. H. and Lang, P. M.: *Microchemical, Journal*, **55**, 200(1997).
9. Voorakaranam, S. and Joseph, *Chem. Res.*, **38**, 433(1999).
10. Zhu, Y., van Wijck, M., Janssen, E., Graaf, T., van Aalst, K. and Kieviet, L.: "Grude Unit Identification for MPC using ASYM Method," Proceedings of the American Control Conference, Albuquerque, New Mexico, June(1997).
11. Friedman, Y. Z.: "Model-based Control of Grude Product Qualities," Hydrocarbon Processing, 97(1994).