

해수 이용 LNG 재기화 공정의 딥러닝과 AutoML을 이용한 동적모델링

신용범* · 유상우** · 곽동호* · 이나경* · 신동일*,**,*†

*명지대학교 화학공학과
 17058 경기도 용인시 처인구 명지로 116
 **명지대학교 재난안전학과
 17058 경기도 용인시 처인구 명지로 116

(2020년 12월 29일 접수, 2021년 2월 18일 수정본 접수, 2021년 2월 23일 채택)

AutoML and Artificial Neural Network Modeling of Process Dynamics of LNG Regasification Using Seawater

Yongbeom Shin*, Sangwoo Yoo**, Dongho Kwak*, Nagyeong Lee* and Dongil Shin*,**,*†

*Department of Chemical Engineering, Myongji University, Yongin, Gyeonggi-do, 17058, Korea

**Department of Disaster and Safety, Myongji University, Yongin, Gyeonggi-do, 17058, Korea

(Received 29 December 2020; Received in revised from 18 February 2021; Accepted 23 February 2021)

요 약

ORV의 열교환 효율 향상 및 운전 최적화를 위한, first principle 기반 모델링 연구들이 수행되어왔지만, ORV의 열 전달 계수는 시간, 위치에 따라 불규칙한 시스템으로, 복잡한 모델링 과정을 거친다. 본 연구는 복잡한 시스템에 대한 데이터 기반 모델링의 실효성을 확인하고자, LNG 재기화 공정의 실제 운전데이터를 이용해, ORV의 해수 유량, 해수 온도, LNG 유량 변화에 따른 토출 NG 온도 및 토출 해수 온도의 동적 변화 예측이 가능한, FNN, LSTM 및 AutoML 기반 모델링을 진행하였다. 예측 정확도는 MSE 기준 LSTM > AutoML > FNN 순으로 좋은 성능을 보였다. 기계학습 모델의 자동설계 방법인 AutoML의 성능은 개발된 FNN보다 뛰어났으며, 모델 개발 전체소요시간은 복잡한 모델인 LSTM 대비 1/15로 크게 차이를 보여 AutoML의 활용 가능성을 보였다. LSTM과 AutoML을 이용한 토출 NG 및 토출 해수 온도의 예측은 0.5 K 미만의 오차를 보였다. 예측모델을 활용해, 겨울철 ORV를 이용해 처리 가능한 LNG 기화량의 실시간 최적화를 수행하여, 기존 대비 최대 23.5%의 LNG를 추가 처리 가능함을 확인하였고, 개발된 동적 예측모델 기반의 ORV 최적 운전 가이드라인을 제시하였다.

Abstract – First principle-based modeling studies have been performed to improve the heat exchange efficiency of ORV and optimize operation, but the heat transfer coefficient of ORV is an irregular system according to time and location, and it undergoes a complex modeling process. In this study, FNN, LSTM, and AutoML-based modeling were performed to confirm the effectiveness of data-based modeling for complex systems. The prediction accuracy indicated high performance in the order of LSTM > AutoML > FNN in MSE. The performance of AutoML, an automatic design method for machine learning models, was superior to developed FNN, and the total time required for model development was 1/15 compared to LSTM, showing the possibility of using AutoML. The prediction of NG and seawater discharged temperatures using LSTM and AutoML showed an error of less than 0.5K. Using the predictive model, real-time optimization of the amount of LNG vaporized that can be processed using ORV in winter is performed, confirming that up to 23.5% of LNG can be additionally processed, and an ORV optimal operation guideline based on the developed dynamic prediction model was presented.

Key words: Machine learning, Dynamic modeling, Operations decision support, AutoML

1. 서 론

액화천연가스(Liquefied natural gas, LNG) 재기화 공정에서 LNG를 NG로 기화시키는 기화기는 핵심 장치이며, 기화기의 한 종류인 해수식 기화기(open rack vaporizer, ORV)는 해수를 열원으로 사용하며, 낮은 운전 비용, 유지보수의 용이성, 안전성 등의 장점들로

†To whom correspondence should be addressed.

E-mail: dongil@mju.ac.kr

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

인해 가장 널리 사용된다[1]. 하지만 겨울철 해수의 온도가 ORV 운영 최소 요구조건인 5 °C 이하의 경우, 목표 NG 생산량 달성을 위해 운영비용이 높은 연소식 기화기(submerged combustion vaporizer, SCV)를 더불어 사용한다. 해수의 온도가 5 °C 이하인 겨울철 현재 기상 및 공정 조건하에서 해수 에너지를 활용하는 ORV를 통해 기화시킬 수 있는 LNG양의 실시간 최적화가 가능하다면, SCV 사용을 최소화함으로써, 공정 운전 비용 절감이 가능할 수 있다.

ORV의 열교환 효율 향상 및 운전 파라미터 최적화를 위한 first principle 기반 모델링 및 시뮬레이션 연구들이 수행되었으며, Table 1은 기존 수행된 연구들의 목적 및 결론을 나타낸 표이다. Su 등[2]은 ORV의 rib-tube 내부 유체의 흐름과 온도, 압력을 분석하기 위한 모델링을 진행하였으며, Wang 등[3]과 Jin 등[4]은 SuperORV 설계 기준 제시와 운전을 위해, 튜브 표면의 icing 현상을 반영한 설계 변수에 따른 열교환 모델링을 수행하였다. Deng 등[5]은 45°의 나선 각도를 가진 십자 모양 튜브를 가지는 SuperORV의 열교환 효율을 분석하기 위하여 모델링 및 시뮬레이션을 수행하였다. Cheng 등[6]은 ORV 설계의 기준을 제시하기 위하여 튜브 내부와 외부의 열교환 현상을 모델링 하였으며, 운전 파라미터들이 열교환에 미치는 영향을 분석하였다. 하지만, ORV의 수식 기반 열교환 모델링은 기화기 튜브 내부에 흐르는 -160 °C LNG에 의해 튜브 표면에 해수가 얼어붙는 현상과 튜브 표면에 흐르는 해수가 불규칙한 막을 형성하는 등의 이유로 시간, 위치에 따라 열전달 계수가 불규칙하여 복잡한 모델링 과정을 거친다[7]. ORV의 정상 운영 최소 요구조건인 해수 온도 5 °C 보다 낮은 온도를 보이는 겨울철 복잡한 열교환 모델을 통해 운전 파라미터에 따른 ORV의 열교환 성능을 분석할 수 있으며[8], 실시간 공정상태에 따른 열교환 효율 예측이 가능하다면, 공정의 제약조건을 만족하는 범위에서 ORV의 사용량을 최대화하고, SCV의 사용량을 최소화하여 공정 운전 비용을 절감할 수 있다.

복잡한 시스템의 first principle 기반 모델의 시뮬레이션 결과는 실제 데이터에 대해 높은 예측률을 보이지만, 많은 수식을 포함하고 있어 매우 복잡하며, 실시간 최적해를 계산하기 위해서는 계산의

부담이 큰 단점을 가지고 있다. 반면에 인공지능망 기반 모델은 실시간 계산이 가능하며, 동일 시스템에 대해 first principle 기반 모델의 성능과 비슷한 높은 예측률을 보인다[9].

최근 화학공학 분야에서 딥러닝을 활용한 기술을 화학 공정에 적용하려는 연구가 활발히 진행 중에 있다[10-12]. 본 연구에서는 ORV의 실제 운전데이터를 활용해 해수 유량, LNG 유량, 해수 온도 변화에 따른 토출 NG 온도 및 토출 해수 온도의 동적 변화 예측이 가능한 순방향 신경망(feed-forward neural network, FNN), 장단기 메모리(long short-term memory, LSTM) 및 automated machine learning (AutoML) 기반 예측모델링을 수행하였다. 구축된 모델의 성능 비교를 통해 시계열 데이터 처리에 적합한 알고리즘 선정 및 데이터 비전문가인 공정 엔지니어를 위해 자동으로 최적 기계학습 모델을 설계하는 AutoML의 활용 가능성도 평가하고자 하였다. 인공지능망 기반 예측모델을 활용하여, ORV의 최소 운전조건을 만족하지 못하는 겨울철 ORV로 처리 가능한 최대 LNG 기화량의 실시간 최적화를 통해 LNG 재기화 공정의 운전 비용 절감 효과를 확인하고, 공정 운전 중 동적 예측모델을 통해 최적 운전지침 제공의 가능성을 확인하고자 하였다.

2. 배경이론

2-1. LNG 재기화 공정

Onshore LNG 재기화 공정은 LNG 운반선으로부터 LNG를 받아 극저온 액체 상태로 저장 탱크에 저장 후, 기화기를 통해 LNG를 기화시켜 최종 제품인 NG를 생산 및 공급하는 공정으로, Fig. 1은 LNG 재기화 공정의 흐름도이다. LNG 재기화 터미널에서 기화되는 LNG 총량의 70%가 ORV를 통과하고 있으며, 20%가 SCV, 나머지 10%가 ambient air vaporizer (AAV), intermediate fluid vaporizer (IFV) 등 플랜트의 환경적 조건에 알맞게 운영되고 있으며, 본 연구에서는 가장 널리 사용되는 ORV의 인공지능망 기반 동적 모델링을 수행하였다.

Table 1. Studies on first-principle based modeling of ORV and SuperORV

Study	Equipment	Objective	Calculated Parameters	Conclusion	Prediction Error
Su, H., et al. [2]	ORV	Evaluate the thermal performance of rib-tube	LNG/NG temperature, velocity, pressure	Rib-tube was conducive to improve the efficiency	0-6 K
Wang, M., et al. [3]	Super ORV	Provide a reference for the design and operation management	LNG/NG temperature, tube wall temperature, heat transfer coefficient	Operating parameters distribution curves would be helpful for the description of performance of the tube	-
Jin, T., et al. [4]	Super ORV	Analyze the tube length with the influence of ice	LNG/NG temperature, tube wall temperature	The required minimum tube length is growing with the increased ice thickness	-
Deng, Z., et al. [5]	Super ORV	Propose the new super ORV model	LNG/NG temperature, heat transfer coefficient	The cross-shaped twisted tape insert has a significant effect on enhancing heat transfer performance.	-
Cheng, H., et al. [6]	ORV	Guidance for the design of ORV	LNG/NG temperature, heat transfer coefficient	The effects of different parameters on heat transfer of the tube are investigated to meet the design requirement	<10% (FLUENT simulation)
Pan, J., et al. [7]	Super ORV	Analyze the thermal performance of Super ORV and effects of operating parameters	LNG/NG temperature, tube wall temperature	The operating parameters have important effects on the thermal performance	-
Qi, C., et al. [8]	Super ORV	Analyze the thermal performance under off-design conditions	Heat transfer coefficient, LNG/NG/seawater temperature	The reduction of the LNG mass flow rate is an efficient method for Super ORV to operate with cold seawater.	1-10 K

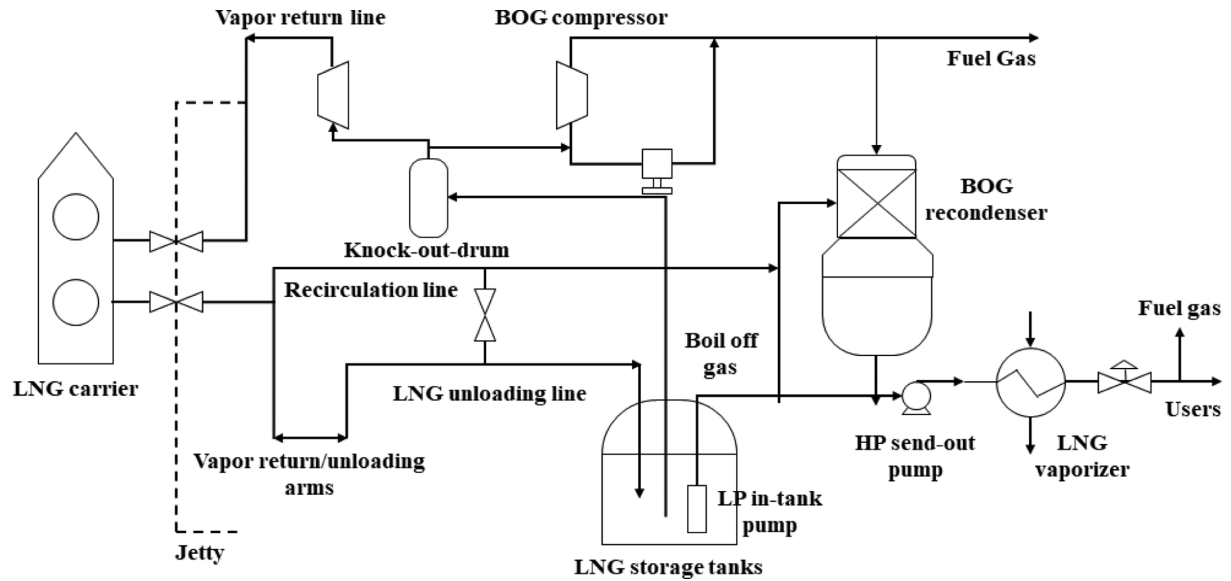


Fig. 1. Process flow diagram of onshore LNG regasification process (adapted from [13]).

2-2. 해수식 기화기

ORV는 해수를 열원으로 사용하는 열교환기로서 타 장치 대비 운전 비용이 저렴하며, 아연-알루미늄 합금으로 코팅되어 극저온인 LNG에 의한 배관 손상과 해수에 의한 부식이 적은 높은 신뢰성을 가지는 것이 장점이다.

ORV 내부는 여러 개의 튜브로 구성되어 있으며, LNG의 흐름이 튜브 하단으로부터 상단으로 수직 방향으로 흐르며, 상단에서부터 내려오는 해수에 의해 열교환 현상이 일어나 NG를 생성한다[14].

2-3. 순방향 신경망

FNN은 인공신경망의 한 종류로 데이터가 순방향으로 전달되는 네트워크이다. Fig. 2는 2개의 은닉층을 가지는 FNN 구조이다. 입력층, 은닉층, 출력층이 존재하며, 각 층의 뉴런은 각각의 가중치로 연결되어 있다. 입력데이터($X=[x_1, x_2, \dots, x_n]$)가 입력 신호로 주어졌을 때, FNN은 다음의 계산과정을 거친다.

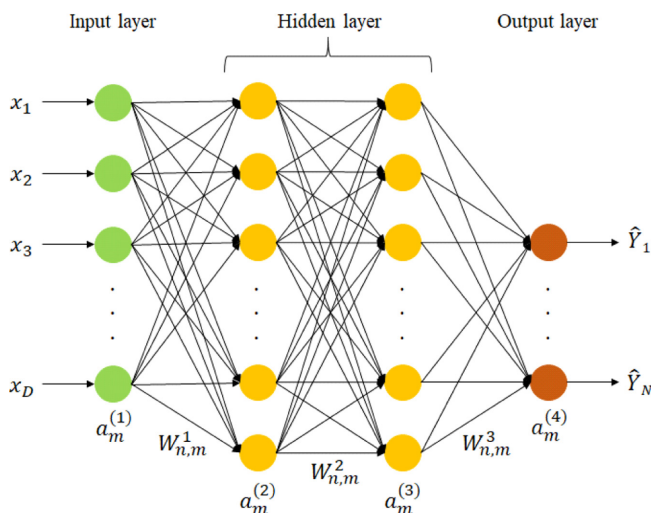


Fig. 2. Example of FNN structure.

$$a_m^{(k+1)} = \sum W_{n,m}^{(k)} \cdot x_n^{(k)} + b^{(k)} \quad (1)$$

$$\text{for } n = 1, \dots, D, m = 1, \dots, J^{(k+1)}, k = 1, 2, 3$$

식 (1)을 통해 얻은 $a_j^{(k+1)}$ 를 활성화 함수의 입력으로 받아 각 층의 뉴런의 출력값이 도출되며, 계산식은 식 (2)와 같다.

$$X_m^{(k+1)} = h(a_m^{(k+1)}) \text{ for } k = 1, 2, 3 \quad (2)$$

회귀분석의 경우 출력층의 활성화 함수는 입력값을 출력값으로 그대로 반환하는 항등 함수(identity function)를 사용하므로 출력층의 항등 함수에서 출력되는 값이 순방향 신경망의 최종 출력값이다. 계산식은 식 (3)과 같다.

$$\hat{Y}_m = X_m^A = h'(a_m^A) \text{ for } m = 1, \dots, N \quad (3)$$

$$L(W) = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N (Y_m - \hat{Y}_m)^2 \quad (4)$$

식 (3)의 출력값인 \hat{Y}_m 과 실제 데이터($Y=[Y_1, Y_2, \dots, Y_m]$)와의 손실 함수(cost function)는 mean squared error(MSE)를 주로 사용하며, 식 (4)와 같이 나타낼 수 있다. 손실 함수값이 최소화되도록 가중치와 편향을 찾는 것이 순방향 신경망의 학습이다.

2-4. 순환 신경망

순환 신경망은 순방향 신경망과 달리 과거 상태와 현재 입력 모두에 영향을 받는 반복셀로 구성된 은닉층을 가지는 구조이다.

2-5. 장단기 메모리

LSTM은 순환신경망의 기울기 소실(vanishing gradient) 문제를 완화하기 위하여 제안된 방법으로 input gate, output gate, forget gate, memory cell로 구성된다[15].

Input gate (i_t)는 현재의 데이터(x_t)를 기억하는 과정으로 식 (5)와 같이 나타낼 수 있다.

$$i_t = \sigma(W_i h_{t-1} + W_i x_t + b_i)$$

$$\tilde{C}_t = \tanh(W_c h_{t-1} + W_c x_t + b_c) \quad (5)$$

Output gate (o_t)는 출력값을 결정하는 역할을 하며 식 (6)과 같이 나타낼 수 있다.

$$o_t = \sigma(W_o h_{t-1} + W_o x_t + b_o) \quad (6)$$

Forget gate (f_t)는 과거의 정보(h_{t-1})의 기억 여부를 결정하는 단계이며 식 (7)과 같이 나타낼 수 있다.

$$f_t = \sigma(W_f h_{t-1} + W_f x_t + b_f) \quad (7)$$

Memory cell (C_t)은 과거 상태(C_{t-1})에 현재의 상태를 업데이트하는 과정으로 식 (8)과 같다.

$$C_t = (f_t \times C_{t-1}) + (i_t \times \tilde{C}_t) \quad (8)$$

Fig. 3는 과정별 LSTM의 흐름을 나타낸 그림이다.

2-6. AutoML

기계학습에 대한 도메인 지식이 부족한 엔지니어들이 쉽게 기계 학습 모델을 활용할 수 있도록 모델을 자동으로 구성하는 방법인 AutoML에 관한 연구가 활발히 진행 중이다. Neural architecture search (NAS)는 데이터셋에 알맞은 인공신경망 구조를 찾는 방법으로, deep reinforcement learning, gradient-based methods, evolutionary algorithms 기반의 방법이 있지만, 유료로 이용 가능한 서비스이거나, 매우 긴 계산 시간과 높은 컴퓨터 성능을 요구한다. 이러한 단점을 극복하기 위하여, Texas A&M 대학교에서 개발한 AutoKeras는 무료로 이용 가능한 open-source로, 기계학습모델 구조의 성능을 예측하는 surrogate model로 Gaussian process가 사용되며, 다음 탐색할 구조를 생성하는 함수인 acquisition function으로 이루어져 자동적으로 모델 구조를 탐색하므로 기계학습 비전문가가 쉽게 활용

가능하다. 또한, Network morphism과 Bayesian optimization을 활용하여 기존 방법 대비 적은 계산 시간으로 높은 성능을 가지는 자동화된 모델 설계가 가능하다[16].

2-7. 활용된 인공신경망 모델의 장단점

본 연구에서 LNG 재기화 공정의 동적 모델링에 사용된 인공신경망은 FNN, LSTM, AutoML이다. FNN의 경우 인공신경망 중 가장 간단한 구조로 학습 시간이 짧고 구현이 비교적 간단하지만, 모델의 hyperparameter의 최적값을 찾기 위해 탐색해야 하는 공간이 매우 크므로 전역 최적해에 도달하기 어렵다는 문제를 가지고 있어 모델링 수행 시 초기 탐색 공간의 설정이 매우 중요하다. AutoML은 FNN과 같은 구조를 가지며, bayesian optimization을 활용해 최적의 hyperparameter를 찾는 과정을 포함하여 FNN 모델의 단점을 일부 보완할 수 있지만, 최적 구조 탐색 과정에 소요되는 시간이 모델 학습에 포함되어 학습 시간이 매우 길다. LSTM은 매우 복잡한 구조를 가진 순환 신경망의 일종으로 학습 시간이 비교적 길지만, LSTM의 특성상 미래의 경향이 이전 시간에 영향을 받는 시계열 데이터 처리에 적합한 모델이며, 모델링 과정에서 특정 step 이후의 미래를 예측하기 위해 필요한 과거 데이터의 step 수를 적절히 설정하는 것이 중요하다.

3. LNG 재기화 공정 모델링

3-1. LNG 재기화 공정데이터

해수를 이용한 LNG 재기화 공정에 대해 8가지 변수의 실제 운전데이터를 확보하였다. Table 2는 LNG 재기화 공정의 데이터 기반 모델링을 위해 사용한 데이터이다. 해수 유량, LNG 유량, 인입 해수 온도, 토출 해수 온도, LNG 온도, NG 온도, 해수압력, NG 압력 등 총 8개의 feature를 가진 데이터셋을 이용하여 동적 예측모델링을 수행하였다.

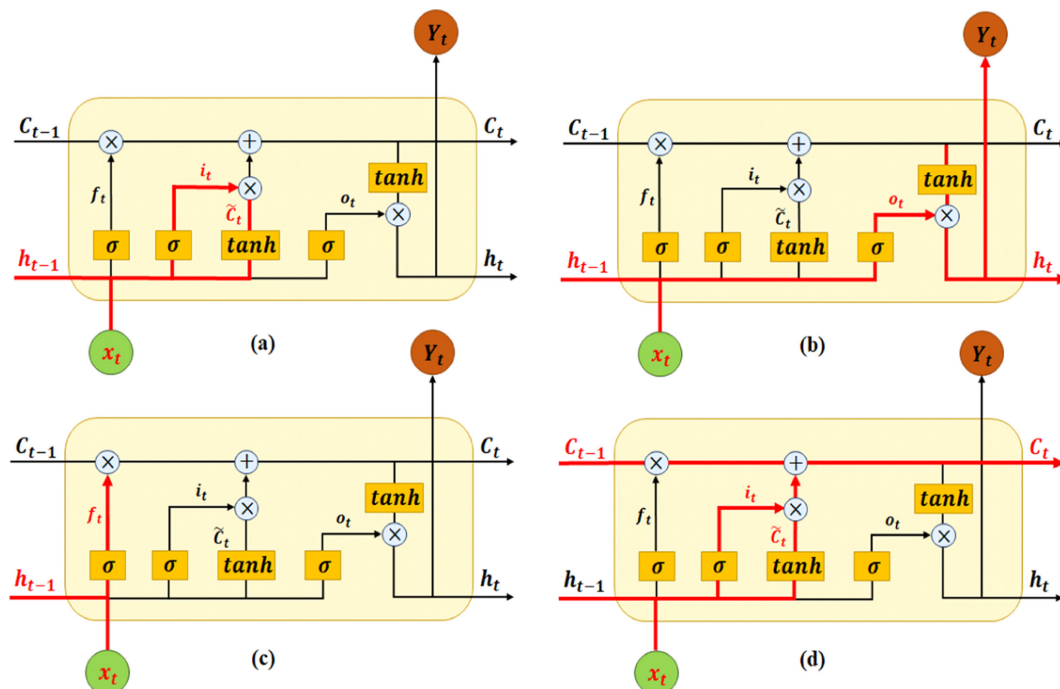


Fig. 3. Diagram of LSTM structure. (a) input flow, (b) output flow, (c) forget flow, (d) memory flow.

Table 2. Inputs and outputs for ORV in regasification process

Data	Units	Time step	Type
Flow rate of seawater	m ³ /h	1-3101	Input
Flow rate of LNG	m ³ /h	1-3101	Input
Temperature of inlet seawater	°C	1-3101	Input
Temperature of outlet seawater	°C	1-3101	Input / output
Temperature of LNG	°C	1-3101	Input
Temperature of NG	°C	1-3101	Input / output
Pressure of seawater	MPa	1-3101	Input
Pressure of NG	MPa	1-3101	Input

3-2. LNG 재기화 공정 동특성 예측모델

제안한 ORV 동특성 예측모델은 8개의 입력변수와 2개의 출력변수로 구성된다. 과거($t=-39$)부터 현재($t=0$)까지 40개의 time step에서의 8개 공정데이터로부터, 공정 운전 중 환경적인 요인과 공정적인 요인에 의해 제약조건을 가지는 토출 해수 온도와 토출 NG 온도의 미래 5개 time step ($t=1, \dots, 5$)의 동적 변화를 예측하는 모델을 설계하였다.

인공신경망 기반 ORV 동특성 예측모델 설계를 위하여 Python 3.6 환경에서 Python의 딥러닝 라이브러리인 Pytorch 1.5.0을 이용하여 네트워크를 구성하였고, GPU를 이용하여 데이터를 학습시켰다. 가장 많이 사용되는 알고리즘인 FNN과 시계열 데이터 처리에 적합하다고 알려진 LSTM을 사용하였고, 모델의 최적 구조를 찾기 위해 Fig. 4와 같이 grid search 방법을 사용하여 hyperparameter의 최적값을 결정하였으며, 자동화된 기계학습모델 개발 방법인 AutoML을 통해 모델링을 수행하여, 기존 개발자가 직접 설계하는 기계학습모델과의 성능 비교를 통해 대체 가능성을 검증하고자 하였다.

3-3. 데이터 전처리

데이터 기반 학습의 모델 성능 향상을 위해 최대-최소 정규화 및

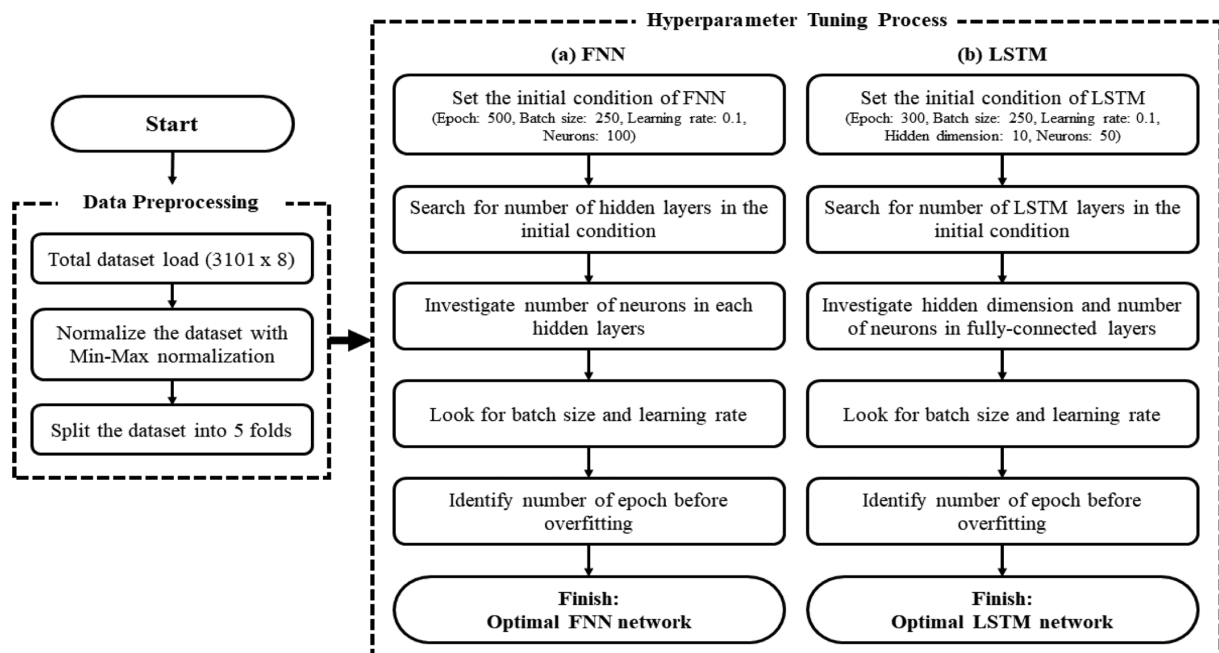
k-겹 교차검증을 수행하였으며, 네트워크 구조별 적합한 데이터 배열에 맞게, FNN과 LSTM에 대해 각각 데이터를(3057, 320), (3057, 40, 8)로 재배열하였다.

3-3-1. 최소-최대 정규화

데이터 정규화는 모델 예측 에러와 학습시간의 감소 효과를 얻을 수 있다[17]. 정규화 기법은 최소-최대 정규화(Min-Max normalization), Z-점수 정규화(Z-score normalization)등이 있으며, 본 논문에서는 데이터의 크기를 0과 1 사이로 변환하는 최소-최대 정규화를 사용하였다.

3-3-2. k-겹 교차검증

k-겹 교차검증은 전체 데이터셋을 동일한 크기로 분할 하며, k 번으로 분할의 수가 정의된다. k개로 분할된 데이터셋 중 하나의 데이터셋이 검증 데이터로 사용되며, 나머지 데이터셋이 학습 데이터로 사용되는 과정이 k번 반복되어 모든 데이터셋에 대해서 검증 및 학습을 수행한다[18]. 본 연구의 LNG 재기화 시스템 모델링에서는 전체 데이터의 80%는 학습데이터로 나머지 20%는 검증데이터로 사용하여, 학습과 검증을 총 5번 수행하는 k가 5인 교차검증을 통해 모델의 객관적인 성능을 검증하였다.


Fig. 4. Flowchart of data preprocessing and hyperparameter tuning.

3-4. FNN

FNN의 최적 네트워크 구조를 찾기 위해 초기 구조는 epoch=500, 배치 크기=250, 학습률=0.1, 뉴런 수=100으로 설정하였다. 각 hyperparameter 값의 범위를 은닉층 수(1-8), 각 층의 뉴런 수(10-100), 배치 크기(50-1000), 학습률(0.001-1.2), epoch(1-100000)와 같이 설정하고, 해당 space를 탐색하는 grid search를 이용하여, Fig. 4의 (a) 순으로 FNN 모델의 test MSE가 가장 작은 값을 최적의 값으로 선정하였다.

FNN의 모델링 결과 각 30개의 뉴런을 가지는 2개의 은닉층과 각 층에서 batch normalization layer로 연결되어있는 구조가 최적의 구조로 선정되었다. 이때, 각 데이터셋에 대하여 최소-최대 정규화된 데이터의 test MSE는 0.000315, 0.000485, 0.000263, 0.000315, 0.000624이며, 평균 test MSE는 0.0004이다. Fig. 5에 FNN의 최적 구조를 나타내었다.

3-5. LSTM

LSTM의 경우 초기 구조는 epoch=300, 배치 크기=250, 학습률=0.1, hidden dimension=10, 뉴런 수=50으로 설정하였다. 각

hyperparameter 값의 범위를 LSTM layer 수(1-5), hidden dimension (1-10), 뉴런 수(10-100), 배치 크기(100-1500), 학습률(0.0001-1), epoch (1-100000) 와 같이 설정하고, 해당 space를 탐색하는 grid search를 이용하여, Fig. 4의 (b) 순으로 LSTM 모델의 test MSE가 가장 작은 값을 최적의 값으로 선정하였다.

LSTM의 모델링 결과 4개의 LSTM layer를 가지며, 50개의 뉴런을 가지는 fully connected layer로 연결되는 구조가 최적의 구조로 선정되었다. 이때, 각 데이터셋에 대하여 최소-최대 정규화된 test MSE는 0.000187, 0.000183, 0.000211, 0.000218, 0.000236이며, 평균 test MSE는 0.000207이다. Fig. 6에 LSTM의 최적 구조를 나타내었다.

3-6. AutoML

AutoML을 사용한 기계학습 모델의 자동설계를 수행하였다. AutoKeras Python 라이브러리를 사용하여 생성된 모델의 평균 파라미터수는 기존 FNN 대비 16배 많지만, 은닉층의 개수가 2-3개로 직접 개발한 모델과 동일한 깊이의 모델이 생성되었다. 또한, Bayesian optimization을 통해 최적의 구조를 찾는 과정이 데이터

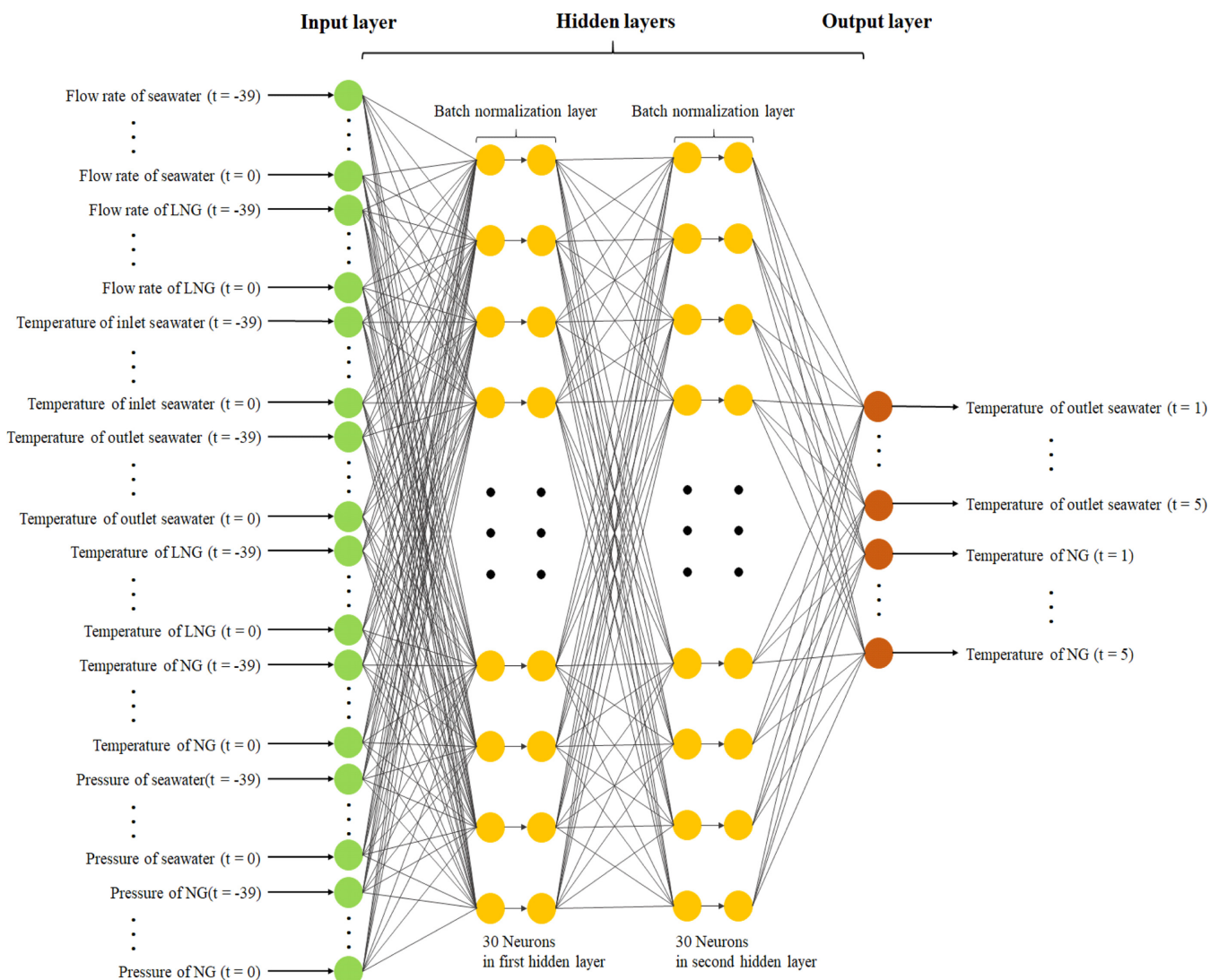


Fig. 5. Structure of the suggested FNN network.

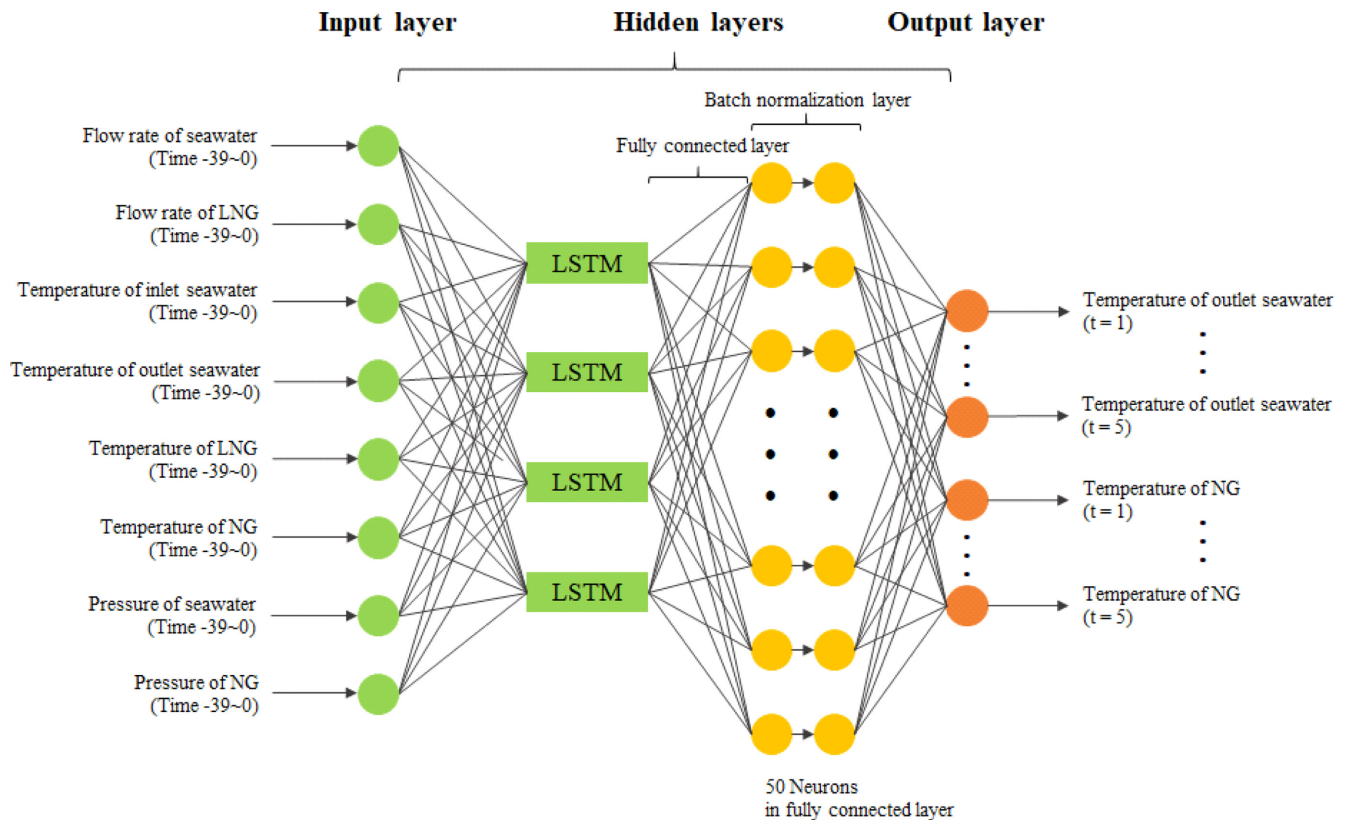


Fig. 6. Structure of the suggested LSTM network.

Table 3. Dynamic modeling results of FNN, LSTM and AutoML according to five datasets

	Number of datasets	Network structure (L: LSTM layer, B: batch normalization layer)	Number of parameters	Test MSE	Training time (s)
FNN	1	320(input)-30-B-30-B-10(output)	10,990	0.000315	117
	2	320(input)-30-B-30-B-10(output)	10,990	0.000485	109
	3	320(input)-30-B-30-B-10(output)	10,990	0.000263	111
	4	320(input)-30-B-30-B-10(output)	10,990	0.000315	108
	5	320(input)-30-B-30-B-10(output)	10,990	0.000624	111
	Average		10,990	0.000400	111
LSTM	1	8(input)-4L-50-B-10(output)	1,068	0.000187	296
	2	8(input)-4L-50-B-10(output)	1,068	0.000183	300
	3	8(input)-4L-50-B-10(output)	1,068	0.000211	299
	4	8(input)-4L-50-B-10(output)	1,068	0.000218	283
	5	8(input)-4L-50-B-10(output)	1,068	0.000236	273
	Average		1,068	0.000207	290
AutoML	1	320(input)-512-1024-10(output)	700,555	0.000254	20,012
	2	320(input)-16-32-256-10(output)	17,339	0.000268	22,316
	3	320(input)-16-32-1024-10(output)	50,363	0.000168	6,317
	4	320(input)-64-B-64-B-10(output)	26,507	0.000247	13,426
	5	320(input)-256-32-64-10(output)	93,803	0.000253	7,918
	Average		177,713	0.000238	13,998

학습에 포함되어있어, 훈련에 평균 13,998초가 소요되어 복잡한 모델인 LSTM보다 48배 더 길었지만, 평균 test MSE는 0.000238로 FNN 대비 절반 수준이었고, 공정데이터와 같은 시계열 데이터 처리에 적합한 LSTM과 비슷한 성능을 보였다. Table 3에 FNN, LSTM, AutoML의 최적 구조 및 성능을 나타내었다.

4. 동적 예측모델링 결과

4-1. FNN, LSTM, AutoML 성능비교

Fig. 7에 FNN, LSTM, AutoML에 대한 test MSE, training time을 그래프로 나타내었다. FNN, LSTM, AutoML의 평균 test MSE는 0.0004, 0.000207, 0.000238로 LSTM-AutoML-FNN순의 낮은 예

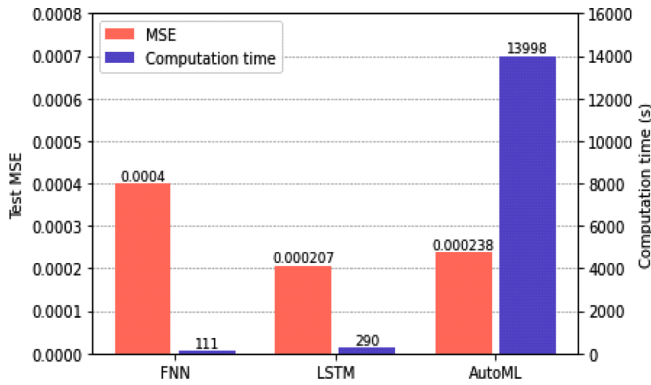


Fig. 7. Model performance comparison of FNN, LSTM and AutoML.

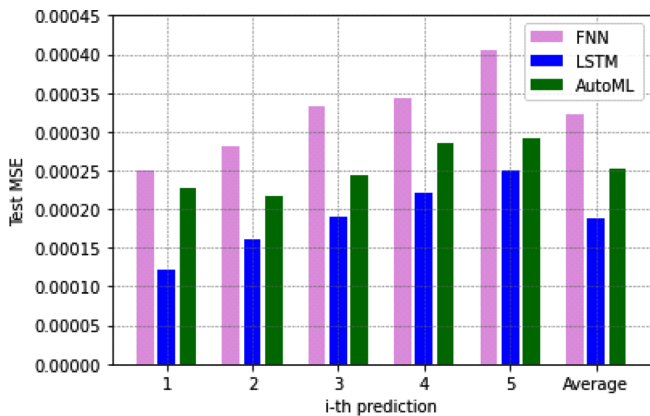


Fig. 8. Model prediction error according to the output sequence (data-set 1).

측오차를 보였으며, 학습시간은 각각 111, 290, 13,998초로 복잡한 모델인 LSTM 대비 48배 더 소요되었다. 미래 time step에 따른 예측성능을 나타낸 Fig. 8에서, FNN, LSTM, AutoML 모두 예측 시간이 현재와 멀어질수록 비슷한 수준의 성능감소를 보였지만, LSTM이 모든 예측에서 성능이 가장 우수하여, 시계열인 공정데이터 예측에 가장 효과적임을 확인하였다. AutoML은 Bayesian optimization을 통한 최적 모델 탐색이 학습에 포함되어 13998초로 가장 긴 학습시간을 보였지만, 직접 설계된 FNN 모델과 비교하였을 때, 예측 성능이 뛰어났고, 일주일 이상 작업이 필요한 복잡한 구조의 LSTM 모델과 전체 개발 소요시간을 비교했을 때, 1/15로 줄어든 시간만을 요구하였다. AutoML을 활용한 예측모델 개발은 공정을

운전하는 현장 엔지니어가 설계 가능한 수준의 도메인 지식만을 요구하였으며, 전문가가 설계한 모델과 비슷한 성능을 보여, AutoML을 활용한 기계학습 모델 개발이 실효성이 있음을 확인하였다.

4-2. FNN, LSTM, AutoML 예측 결과

실제 데이터를 FNN, LSTM, AutoML 모델에 적용해 예측 결과 비교를 수행하였다. Fig. 9는 각 모델을 통해 time step 2400-3100에 대한 예측 결과를 나타낸 그림이다. 비교 결과 FNN은 해수 온도에 대해 0-1.5 K, NG 온도는 0-2.5 K의 오차를 보였으며, LSTM은 해수 온도 0-0.42 K, NG 온도 0-0.33 K의 오차를 보였고, AutoML은 해수 온도 0-0.38 K, NG 온도에 대해 0-0.36 K의 오차를 보였다. FNN은 예측 에러는 작았지만, FNN과 같은 종류의 인공신경망인 AutoML의 결과를 보았을 때, grid search를 이용한 모델 구조 최적화의 search space에 최적 구조가 포함되지 않아 전역 최적해를 찾지 못하여 실제 데이터의 경향을 반영하지 못하였다. LSTM과 AutoML을 통해 제안된 모델은 실제 데이터의 경향성을 잘 반영하였으며, 이는 LSTM 모델이 시계열 데이터인 공정데이터에 적합하며, AutoML에서 최적화에 쓰이는 bayesian optimization이 모델 hyperparameter tuning에서 전역 최적해를 찾을 가능성이 높은 것을 보여주고 있다. 또한, 두 모델의 예측오차가 1K 미만으로 Su 등[2]이 제안한 first principle 기반 ORV 모델의 예측오차(0-6K)보다 작아 복잡한 시스템에 대해 데이터 기반 모델링이 우수함을 확인하였다.

5. 동적모델의 활용

5-1. 목적

기존 공정에서는 목표 NG 생산량을 달성하기 위하여 LNG 및 해수의 유량을 수동 제어하였는데, ORV의 최소 운전조건인 해수 온도 5 °C 이하에서 토출 NG 온도와 토출 해수 온도의 제약조건 만족을 위한 보수적 운전을 하고 있다. 해수 온도 5 °C 이하인 겨울철 수동 운전의 가이드를 제시하고자, 현재 운전조건에서 LNG 양의 변화 시 해수와 NG 토출 온도의 미래 5 step을 예측할 수 있는 예측모델을 통해, 제약조건을 충분히 만족하면서 ORV를 이용해 처리할 수 있는 최대 LNG량을 실시간 적용하여 달성 가능한 운전 비용 절감 효과를 확인하고자 하였다.

5-2. 예측모델을 이용한 실시간 최적화

현재의 공정 조건하에서 ORV를 통해 처리할 수 있는 최대 LNG 양에 대한 실시간 최적화를 수행하였다.

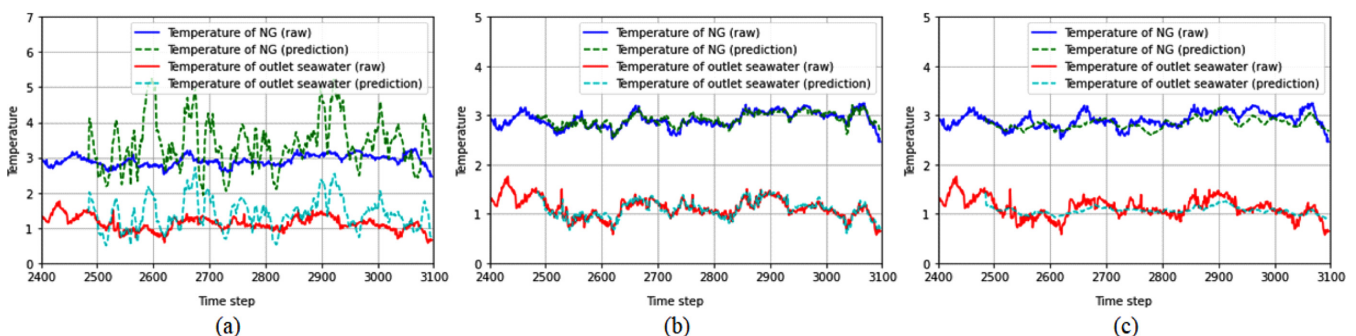


Fig. 9. Prediction results of NG and seawater temperatures. (a) FNN, (b) LSTM, (c) AutoML.

$$\max L(x) = \left(\sum_{i=0}^n \hat{x}_i \right) / n \quad (9)$$

$$\text{s.t. } F_{NN(NG)}(\hat{x}_i) \geq 2 \quad (10)$$

$$F_{NN(SW)}(\hat{x}_i) \geq 0.5 \quad (11)$$

$$T_{SW(in)} - F_{NN(SW)}(\hat{x}_i) \leq 5 \quad (12)$$

여기서, \hat{x}_i 는 시간 i 에서 ORV를 통해 처리할 수 있는 LNG 유량, n 은 총 운전 시간, T_{SW} 는 해수 온도, $L(x)$ 는 목적함수로서 ORV를 통해 처리할 수 있는 LNG의 평균 유량이며, $F_{NN}(x)$ 는 예측모델을 통해 얻은 현재 공정 조건에서 미래의 NG 및 토출 해수 온도이다.

기화기 후단 공정을 위해 토출 NG 온도는 항상 1 °C 이상이어야 하며, 사용 후 다시 바다로 방류하는 토출 해수의 경우 해양 생태계의 영향으로 인해 지역에 알맞은 취수와 배수의 온도 차이에 대한 제약조건이 필요하다. 제약조건을 만족하면서 시간 i 에서 ORV를 통해 처리 가능한 LNG 평균 유량을 최대화하는 것이 목적함수로서, Eq. (9)에 표현하였다. 본 연구는 기존 운전과의 비교를 위해, 동일한 제약조건을 사용하여, Eqs. (10)-(13)와 같이 토출 NG 온도는 2 °C 이상, 토출 해수 온도는 0.5 °C 이상이면서, 취수와 온도 차 5 °C 이하로 설정하였다.

5-3. Case study: LNG 유량의 과도한 감소

최소 운전조건인 해수 온도 5 °C 이하가 되어 ORV에 최대 허용 가능한 해수 유량으로 해수가 공급되고 있다. 이때, 해수의 온도가 감소하면, 현재의 운전방식은 제약조건 만족을 위해 LNG 유량에 과도한 감소를 주게 되고, 그 결과로 토출 NG 온도와 토출 해수 온도가 급격히 증가하며, 이후 NG와 해수의 토출 온도가 제약조건을 만족하는 범위에서 최적의 값에 수렴하도록 LNG 유량을 다시 증가시킨다. 실시간 ORV를 통해 처리하는 LNG 유량에 대해 제한한 방법을 적용하여 제약조건 범위 내에서 LSTM과 AutoML을 통해 찾은 최적의 값을 나타낸 결과를 비교해 Fig. 10에 나타내었다. ORV를 통해 처리 가능한 LNG 유량이 기존 평균 282.81 m³/h에서 LSTM은 349.38 m³/h, AutoML은 321.29 m³/h로 각각 시간당

23.5%, 13.6% 증가하였다. LSTM 모델과 AutoML 모델 모두 LNG 유량이 급격히 감소하는 구간에서 LNG가 추가로 기화될 수 있음을 보였고, 모델의 output인 NG와 해수의 토출 온도의 예측이 비슷한 수준을 보였다. 하지만 추가 기화 가능한 LNG 양에 대해서는 평균 28 m³/h의 오차를 보였는데, 이는 인공신경망 모델의 가중치 학습 과정에서 LNG 유량이 변화할 때 공정의 상태변화 정도에 대한 가중치의 차이로 인해 값의 오차가 발생한 것으로 해석할 수 있다. 실시간 LNG 기화량 계산을 통해 본 공정에서 시간당 27 ton, 16 ton의 추가 LNG를 기화시킬 수 있으며, ORV의 LNG 기화량에 따른 경제성을 분석한 Kim과 Yun[19]의 연구 결과를 활용하여 계산하였을 때, 본 연구를 통해 겨울철 ORV 운전에 인공신경망 기반 동적 예측모델을 적용할 경우, ORV의 활용을 최대화하고, SCV 사용량 절감을 통해 시간당 \$243, \$144의 운전 비용을 절감할 수 있음을 확인하였다.

5. 결 론

LNG 재기화 공정의 핵심 장치인 ORV의 모델링 과정이 복잡하여 많은 시간이 요구되는 단점 극복을 위하여, 본 연구에서는 실제 운전데이터를 활용한 FNN, LSTM, AutoML 기반 예측모델을 개발하였다. LSTM 모델의 test MSE가 0.000207로 가장 좋은 성능을 보였으며, AutoML 기반 자동으로 설계된 모델은 0.000238의 test MSE를 보여 설계자가 직접 설계한 FNN 모델의 test MSE인 0.0004보다 높은 성능을 보였다. 또한, Bayesian optimization을 통해 최적의 모델을 찾는 과정이 학습에 포함되어, 학습에 평균 13,998 초가 소요되었지만, 일주일 이상 작업이 필요한 복잡한 구조의 LSTM 모델과 전체 개발 소요시간을 비교했을 때, 1/15수준으로 크게 차이를 보였다. AutoML을 활용한 기계학습 모델 개발은 공정을 운영하는 현장 엔지니어가 개발 가능한 수준의 도메인 지식만을 요구하며, 전문가가 개발한 모델과 비슷한 성능을 보여, 실제 적용에 있어 실효성이 있음을 확인할 수 있었다.

실제 데이터 예측에 있어서 FNN은 오차 3K 이하로 높은 예측률을 보였지만, 데이터의 경향성을 잘 반영하지 못하였다. LSTM과

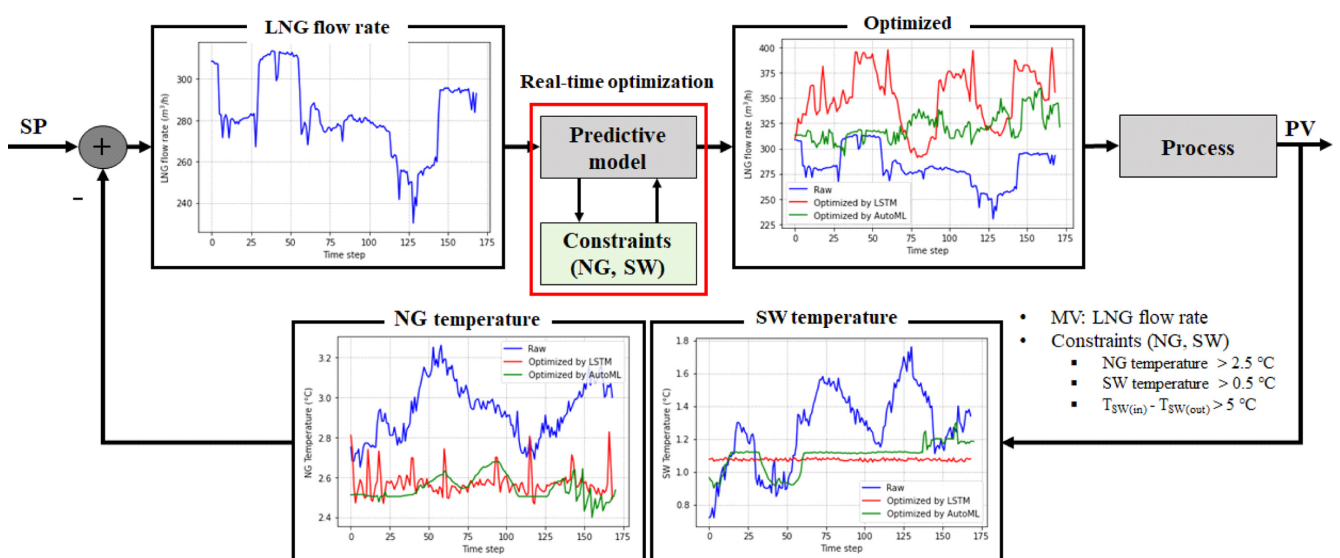


Fig. 10. Real-time optimization results of NG and seawater temperatures according to optimized LNG flow rate.

AutoML 기반 모델은 오차 0.5K 미만으로 높은 정확도와 데이터의 경향성을 잘 반영하는 것을 확인하였으며, 기존 first principle 기반 모델 대비 데이터 기반 모델이 우수한 예측 정확도를 보였다. 겨울철 토출 NG 온도와 토출 해수 온도의 제약조건 만족 범위 내에서 ORV를 통해 처리할 수 있는 최대 LNG 기화량의 실시간 예측을 위해, 개발 LSTM, AutoML 모델을 활용하여, 현재 공정 조건에서 ORV가 처리 가능한 LNG 유량에 대한 실시간 최적화를 수행한 결과, 각각 기존 대비 23.5%, 13.6% 향상과 운전 비용 절감이 가능함을 확인하였다. 또한, 예측모델을 통해 실시간으로 운전자에게 LNG 유량에 대한 최적의 값을 제시해줌으로써 ORV의 최소 운전조건을 만족하지 못하는 환경에 선제적으로 대응하는 운전 지원 시스템으로의 가능성을 확인하였다.

감 사

이 연구는 2020년도 정부(산업통상자원부)의 재원으로 한국산업기술진흥원의 지원(P0008475, 2020년 스마트디지털엔지니어링 전문인력양성사업)과 2020년도 정부(산업통상자원부)의 재원으로 한국에너지기술평가원의 지원을 받아 수행된 연구임(20207200000070, 디지털 트윈을 활용한 재생에너지 연계 알칼라인 수소생산 시스템 성능 표준화 및 운영 안전성 평가 기술 개발).

사용기호

$a_m^{(k+1)}$: Input value to activation function of a m-th neuron in the (k+1)-th layer
$W_{n,m}^{(k)}$: Weight of the connection between n-th neuron in the k-th layer and m-th neuron in the (k+1)-th layer
$x_n^{(k)}$: Input value of a n-th neuron in the k-th layer
$b^{(k)}$: Bias term of the k-th layer
$J^{(k+1)}$: Number of neurons in (k+1)-th layer
$X_m^{(k+1)}$: Output value of m-th neuron in the (k+1)-th layer
$h(x)$: Activation function
$h'(x)$: Identity function
\hat{Y}	: Output value of a neural network
$L(W)$: Cost function
$\sigma(x)$: Sigmoid function
\hat{x}_i	: LNG flow rate of ORV in time i
n	: Total operating time
T_{SW}	: Temperature of seawater
$L(x)$: Objective function
$F_{NN}(x)$: Output value of the prediction model

References

- Mokhatab, S., Mak, J. Y., Valappil, J. V. and Wood, D. A., "Handbook of Liquefied Natural Gas," *Gulf Professional Publishing*, 90-93(2014).
- Su, H., Yu, S., Fan, J. and Ling, X., "Numerical Simulation of Gasification Process on Rib-tube of Open Rack Vaporizer," *J. Comput.*, **9**(2), (2014).
- Wang, M., Jin, T., Tang, K. and Chen, G., "Numerical Simulation Analysis of a Heat Transfer Tube in SuperORV," *Natural Gas Industry*, **33**, 102-107(2013).
- Jin, T., Wang, M. and Tang, K., "Simulation and Performance Analysis of a Heat Transfer Tube in SuperORV," *Cryogenics*, **61**, 127-132(2014).
- Deng, Z., Hui, K., Zhang, Y. and Cao, Y., "Numerical Simulation Analysis of the Flow Field and Convective Heat Transfer in New Super Open Rack Vaporizer," *Appl. Therm. Eng.*, **106**, 721-730 (2016).
- Cheng, H., Ju, Y. and Fu, Y., "Thermal Performance Calculation with Heat Transfer Correlations and Numerical Simulation Analysis for Typical LNG Open Rack Vaporizer," *Appl. Therm. Eng.*, **149**, 1069-1079(2018).
- Pan, J., Li, R., Lv, T., Wu, G. and Deng, Z., "Thermal Performance Calculation and Analysis of Heat Transfer Tube in Super Open Rack Vaporizer," *Appl. Therm. Eng.*, **93**, 27-35(2016).
- Qi, C., Yi, C., Wang, B., Wang, W. and Xu, J., "Thermal Performance Analysis and the Operation Method with Low Temperature Seawater of Super Open Rack Vaporizer for Liquefied Natural Gas," *Appl. Therm. Eng.*, **150**, 61-69(2019).
- Singh, A. K., Tyagi, B. and Kumar, V., "First Principle Modeling and Neural Network-Based Empirical Modeling with Experimental Validation of Binary Distillation Column," *Chem. Prod. Process. Model.*, **8**(1) 53-70(2013).
- Gupta, A., "Introduction to Deep Learning: Part1," *CEP*, Jun, 22-29(2018).
- Venkatasubramanian, V., "The Promise of Artificial Intelligence in Chemical Engineering: Is It Here, Finally?," *AIChE Journal*, **65**(2), 466-478(2018).
- Zhang, Z., Wu, Z., Rincon, D. and Christofides, P. D., "Real-Time Optimization and Control of Nonlinear Processes Using Machine Learning," *Mathematics*, **7**(10), 890-914(2019).
- D'Alessandro, A., Izurieta, E. and Tonelli, S., "Decision-making tools for a LNG Regasification Plant Siting," *J. Loss. Prev. Process Ind.*, **43**, 255-262(2016).
- Houde, S., Shurong, Y., Jianling, F. and Xing, W., "Numerical Analysis on Rib-Tubes of Seawater Open Rack Vaporizer With the Spoiler Lever," *Polish Marit. Res.*, **24**(S2), 14-21(2017).
- Kim, H., Park, M., Kim, C. W. and Shin, D., "Source Localization for Hazardous Material Release in an Outdoor Chemical Plant via a Combination of LSTM-RNN and CFD Simulation," *Comput. Chem. Eng.*, **125**, 476-489(2019).
- Jin, H., Song, Q. and Hu, X., "Auto-Keras: An Efficient Neural Architecture Search System," *KDD'19*, Aug, Anchorage, AK, USA(2019).
- Sola, J. and Sevilla, J., "Importance of Input Data Normalization for the Application of Neural Networks to Complex Industrial Problems," *IEEE Trans Nucl Sci.*, **44**(3), 1464-1468(1997).
- Wainwright, R. and Shenfield, A., "Human Activity Recognition Making Use of Long Short-Term Memory Techniques," *Athens J. Sci.*, **6**(1), 19-34(2019).
- Kim, N.-K. and Yun, S.-K., "Study on the LNG Vaporization Characteristics of Open Rack Vaporizer(ORV) with Two-way Seawater Supplying System," *J. KIGAS*, **23**(1), 41-46(2019).