

공중합 고분자 반응기의 최적 시간 제어

장 근수(정), 이 무호(학)
지능자동화 연구센터, 화학공학과 포항공과대학교

Time-Optimal Control of Copolymer Reactor

Kun-Soo Chang, Moo-Ho Lee
Automation Research Center, Dept. of Chemical Engineering
Pohang university of Science and Technology

서론

최근 들어 다양한 사양과 고품질의 고분자 제품의 수요 급증에 대한 대처와 생산성 향상을 위해 고분자 반응기 제어에 관한 연구가 활발히 수행되고 있다 [1]. 좋은 품질의 제품을 경제적으로 얻기 위해서는 가능한 짧은 시간안에 공정이 원하는 목표상태에 도달하도록 하는 최적 시간 제어를 해 주어야 한다. 개시 조업(start-up operation)시 원하는 상태로의 정확한 도달과 도달시간의 최소화는 중요한 문제며 조업 조건(grade-change operation)을 바꿀 경우에 조업 전환 시간을 최소화 하는 최적제어는 과도기 조업에서 생산되는 불량품을 줄일 수 있는 중요한 연구가 된다.

지금까지 고분자 반응기의 최적 시간 제어 문제는 주로 두 가지 방법 즉 Pontryagin의 maximum principle과 multiobjective dynamic optimization을 사용하여 왔다. Maximum principle의 경우는 비교적 수식이 간단한 batch나 semi-batch공정에서의 homopolymerization에서 원하는 분자량 또는 분자량 분포와 전환율을 얻기 위한 온도의 최적 시간 제어가 주로 이루어 졌다[2, 3]. Multiobjective dynamic optimization방법은 복잡한 공중합 반응 공정에도 적용할 수 있고 궤적을 구하는 과정이 간단하다는 장점이 있다[4].

본 연구에서는 복잡한 공중합 고분자 공정에 최적 제어 기법으로 기존에 많이 연구된 maximum principle과 새로운 적용 방법으로 IDP(Iterative Dynamic Programming)과 유전 알고리즘(Genetic Algorithm)을 사용하였다.

본론

본 연구에서는 두가지 공중합 공정에 대해 최적 제어가 목적이다. 연속교반 반응기에서의 MMA-MA의 최적 제어로 Lee, M. H.[5]의 수식모델에 maximum principle을 적용하였다. MMA-VA공중합 모델은 W. H. Ray[6]의 것을 사용하였고 이에 IDP와 유전 알고리즘을 이용하여 최적 제어를 얻었다.

Pontryagin의 maximum principle

Maximum principle을 연속 교반 반응기에서의 MMA-MA공중합 반응의 최

적 시간 제어 문제에 적용하기 위해 먼저 최소화될 제어 함수 J를 다음과 같이 정의한다.

$$J = w_1(X(t_f) - X_d)^2 + w_2(Y_{MA}(t_f) - Y_{MA_d})^2 + \int_{t_0}^{t_f} dt, \text{ 원하는 전화를 } X_d=0.6,$$

고분자 내에서 MA의 조성 $Y_{MA_d} = 0.07$ 로 잡는다. 개시제의 농도를 제어변수로 하였다. 두 종류의 monomer와 chain transfer agent 그리고 고분자내에서의 두 monomer의 농도에 대한 5개의 상태 방정식들을 이용하여 Hamiltonian H를 정의하면 $H = 1 + \sum_{k=1}^5 P_k (\frac{C_k - C_{k'}}{r} - R_k)$ 이고 k는 5개의 상태방정식 변수에 해당된다. costate P_k 와 그의 말기값은 다음과 같다.

$$\frac{\partial P_k}{\partial t} = - \frac{\partial H}{\partial C_k}, \quad P_k(t_f) = \frac{\partial (w_1(X_{t_f} - X_d)^2 + w_2(Y_{MA, t_f} - Y_{MA_d})^2)}{\partial C_k} \text{ 이러한 } 10$$

개의 미분 방정식들을 steepest descent method[7]를 이용하여 풀었다. 결과를 그림1에서 보면 iteration이 증가되면서 전환율과 조성이 원하는 값들에 수렴하는 것을 볼 수 있다. 그러나 공중합 반응에서 고분자 분자량까지 고려해 줄 경우 고려해 주어야 할 수식이 복잡해져 적용이 불가능하였다.

Iterative Dynamic Programing

Dynamic programing에서의 계산량의 증가는 광역의 최적의 궤적을 찾기 위해 모든 상태, 제어변수의 grid points의 조합을 각각의 시간에서 고려해 주기 때문에 발생한다. 이러한 계산량의 증가는 결국 dynamic programing의 적용 범위를 한정하여 고분자 공정처럼 복잡한 데에는 적용이 불가능하였지만 IDP의 경우는 광역의 최적을 주지는 않지만 확률적 변수값의 선택과 반복계산을 통해 계산량을 상당히 줄여 주었다. IDP의 원리를 보면 간단하게 다음과 같이 설명할 수 있다. 나누어진 각각의 시간에서 제어 변수의 grid를 일정한 간격으로 나누어 주는 대신에 random함수를 사용하여 n개 만큼 만들어 각각의 제어 변수값들 중 제어 목적을 최소로 해 주는 제어값을 선택하게 된다[8,9]. 이 경우에 구한 상태 궤적과 제어궤적을 토대로 하여 최적의 제어궤적을 구하는 과정을 반복하게 된다. 반복을 함에 따라 광역의 제어궤적에 접근하게 된다. IDP의 다른 특징들로는 상태값들의 근사를 위해 interpolation을 사용하는 대신에 상태값들과 가장 가까운 값을 다음 시간에서의 상태값으로 취하는 것과 반복 계산을 하면서 제어변수의 탐색 범위를 줄여주어 정밀한 탐색이 가능하게 하였다.

연속교반 반응기에서의 MMA-VA의 공중합 반응은 5개의 물질과 온도에 대한 6개의 미분방정식과 VA조성에 관한 2개, 무게 평균 분자량계산을 위한 2개의 총 10개의 미분방정식으로 표현된 보텔이다. 제어변수를 반응기온도와 VA의 feed flowrate잡고 각각 값들의 범위에 제한을 주었다. 제어목적은 가능한 가장

짧은 시간에 원하는 분자량 60000과 고분자에서 VA의 무게조성이 0.2에 도달하도록 제어케적을 구하는 것이다. 시간 간격은 25개로 나누었으며 제어 변수는 각 시간에서 25개를 무작위로 만들어 최적의 것을 선택하였다. 결과 그림2에 구한 온도케적과 VA의 flowrate케적을 보여 주고 있다. 그림3에 보면 분자량과 조성이 원하는 상태에 정확히 도달하는 것을 볼 수 있다.

유전 알고리즘(Genetic Algorithm)

Holland와 그의 동료들에 의해 개발된 유전 알고리즘은 자연선택과 유전학을 기초로 한 것으로 광역적 탐색에 강하고 병렬 탐색을 하므로 강건하고 속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 무엇보다도 간단한 구조와 제어케적을 최적화 하는 과정에서 공정의 대한 많은 수식적 처리를 요구하지 않고 단순히 제어목적함수값만을 이용하므로 복잡한 고분자 공정에 적합하다. 알고리즘은 병렬 탐색을 위해 여러개의 인자열로부터 시작된다. 이러한 인자열들간에 무작위 선택에 의한 다음세대의 재생산(reproduction), 교배(crossover) 그리고 지역적 극소값에 수렴하는 것을 막아주기 위한 돌연변이(mutation)의 세 단계를 반복하며 탐색을 하게 된다[10]. IDP와 마찬가지로 유전 알고리즘을 최적 시간 제어에 적용할 때 시간 간격을 얼마나 세밀하게 나누는가에 따라 탐색의 범위가 결정되어 수렴이 속도를 결정하게 된다. 그러므로 정교한 제어 케적을 구하는데는 많은 시간이 걸리는 단점이 있다. IDP와 같이 유전 알고리즘을 MMA-VA 공중합공정에 적용하였다. 시간 간격을 20개로 나누고 제어 변수와 제어목적을 같게 하여 최적 제어한 결과를 그림4에 나타내었다.

결론

본 연구에서는 고분자 반응기 특히 동특성과 모델의 복잡성으로 해석과 제어가 힘든 공중합 반응기에 3가지의 다른 방법으로 최적 시간 제어를 해 보았다. Maximum principle을 MMA-MA공정에서 전환율과 MA의 조성의 최적 제어를 하여 정확히 원하는 상태에 도달하는 결과를 얻었다. MMA-VA공중합 반응기의 최적제어는 IDP와 유전 알고리즘을 적용하여 풀었다. 두 경우 모두 복잡한 공정에도 적용이 비교적 쉬워 두개의 제어변수를 선택할 수 있었으며 최적의 케적은 아니지만 제어목적을 달성할 수 있는 제어 케적을 구하였다. 결론적으로 IDP나 유전알고리즘은 기존의 방법으로 풀기 힘든 공중합 고분자의 최적 제어 문제에 적용하여 만족할 만한 suboptimal을 얻을 수 있는 방법이다.

참고문헌

1. Han, I. S.:M.S. Dissertation, Pohang univ. of Sci. & Tech.,Korea(1994)
2. J.S.Chang and J.L.Lai: Ind. Eng. Chem. Res., 31, 861(1992)
3. S.R.Ponnuswamy,S.L.Shah and C.A.Kiparissides: Ind. Eng.Chem. Res., 26, 2229(1987)
4. K.Y.Choi and D.N.Butala: Polymer Eng. and Sci., 31, 353(1991)
5. Lee, M. H.:M.S. Dissertation, Pohang univ. of Sci. & Tech.,Korea(1995)

6. W.H. Ray, J. P. Congalidis, J. R. Richards: AIChE Journal, 35, 891(1989)
7. D. E. Kirk: "Optimal Control Theory", Prentice-Hall, NJ(1970)
8. R. Luus: I&EC Research, 32, 859(1993)
9. R. Luus: Int. J. Control, 52, 239(1990)
10. D. E. Goldberg: "Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning", Addison-Wesley Pub., (1989)

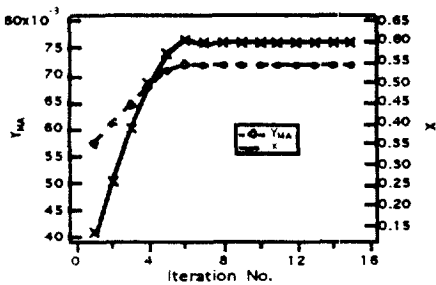


그림1. 전환율과 MA조성의 최적제어

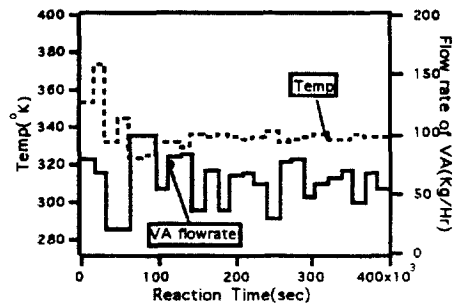


그림2. IDP로구한 최적의 제어 궤적

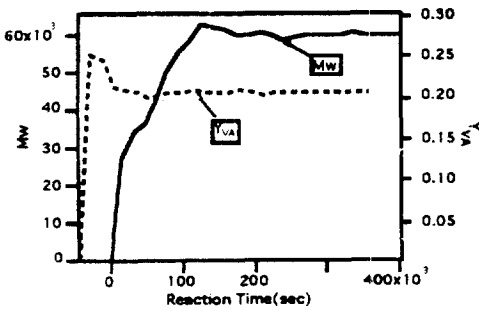


그림3. IDP로구한 분자량과 VA의 조성

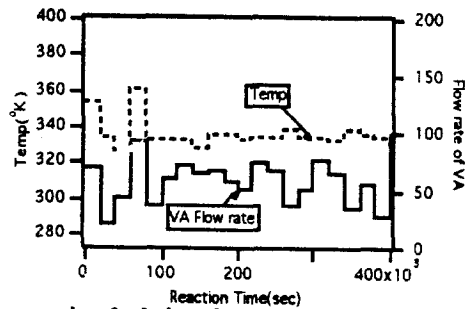


그림4. 유전알고리즘으로구한 제어 궤적