

VCM 공정에서 다변량 통계처리 기법을 이용한 oxychlorination reactor 의 모니터링 및 제어

이상화, 주은정, 이호경, 이종구
LG 화학 기술연구원, 공정기술센터

Multivariate statistical process monitoring and control of oxychlorination reactor in vinyl chloride monomer process

Sang Hwa Lee, Eun Jung Joo, Ho Kyung Lee, Jong Ku Lee

Process Technology Research & Development, LG Chemical Ltd./Research Park

1. 서론

석유화학 산업에 있어서 범용으로 가장 수요를 많이 가지고 있는 제품 중에 하나가 polyvinyl chloride (PVC)이다. PVC의 monomer는 여러 가지 방법으로 제조될 수 있는 vinyl chloride monomer(VCM)가 사용된다. 현재 PVC 가격이 상승하고 수요가 증가함에 따라 PVC 수급 조절을 위해 그 생산량을 늘리고 있는 실정인바, PVC의 monomer인 VCM의 수요도 늘고 있는 상황이다. 하지만, oxychlorination 방법을 이용하는 VCM 공정의 경우 산소, ethylene, inert gas의 농도 등에 따라 flammable region을 고려해야 하며, 또한 공정의 반응 조건에 따라서도 safety를 고려해야 하는 어려움이 있다. 이에 따라, 공정의 정상 조업 상태 유지와 생산량 증가를 위하여 공정에 대한 monitoring과 반응기에 대한 modeling을 수행해야 될 필요성이 있다.

공정을 monitoring하는 방법에는 지식 기반 모델을 사용하는 방법, 통계 공정 제어 도표들을 사용하는 방법 등이 있으나, 근래에는 다변량 통계 기법들을 여러 가지 공정에 적용함으로써 monitoring하고 그 유용성을 입증하려는 사례들이 많이 보고되고 있다[2, 3]. 다변량 통계 기법은 상관관계가 있는 여러 가지 변수들을 손쉽게 처리함으로써 공정을 monitoring할 수 있다는 장점이 있다. 본 연구에서는 VCM 공정에서의 oxychlorination reactor에 다변량 통계 기법 중에 하나인 principal component analysis(PCA)를 적용하여 monitoring을 실시하였으며, partial least squares(PLS) 기법을 이용하여 modeling을 수행함으로써 그 유용성을 입증하였다.

2. 이론

2.1. PCA와 monitoring

임의의 자료 행렬 X 에 대하여 mean-centering과 unit variance로 scaling을 수행한 뒤, PCA를 행하면 다음과 같은 형태로 차원 reduction을 할 수 있으므로, 화학 공정처럼 변수가 여러 개인 경우 간소화시켜 data를 처리할 수 있다.

$$X = T * P' + E$$

여기서, T 는 score matrix 이고, P'는 loading matrix, E 는 residual matrix 이다. 또한, PC 들이 구해지면, 모니터링을 위해 statistical process control(SPC) 도표를 사용하게 되는데, 이 때 monitoring 하는 변수의 값이 어느 정도의 한계를 벗어나면 이상으로 간주할 것인지, 그 한계를 정해주는 기준이 필요하다. 즉, 제어 선의 값을 정해 주어야 하는데 이 때 사용되는 것이 Hotelling's T² statistic 과 Q statistic 이다. T² statistic 은 model space 와 관련된 통계량 이고, Q statistic 은 residual space 와 관련된 통계량으로서, 계산을 통하여 설정된 각각의 한계 값을 monitoring 하는 변수의 값이 벗어날 경우 이상으로 판단을 하게 된다.

2.2. PLS model

PLS 는 predictor 변수 값들과 response 변수 값들 사이에 관계를 맺어주는 regression 방법이다. 따라서, PLS 을 이용하면 공정의 변수들과 반응 변수 사이의 관계를 나타내어 주는 model 식을 구할 수 있다. PLS 는 다음과 같은 형태로 구성되어 진다.

$$X = T * P' + E$$

$$Y = U * Q' + F$$

$$U = T * B + G$$

$$B = (T' * T)^{-1} * T' * U$$

여기서, T 와 U 는 score matrix 이고, P'와 Q'는 loading matrix, E, F, G 는 residual matrix 이다. 또한, B 는 X 와 Y 의 내적 관계를 표현하는 diagonal matrix 이다.

3. 사례연구

VCM 공정은 oxychlorination 반응 공정과 EDC 정제 공정, EDC 열분해 공정, 그리고 생산된 VCM 을 정제하는 공정으로 크게 나눌 수 있다. 본 연구에서 대상으로 하는 공정은 C₂H₄ 와 HCl 을 O₂ 환경에서 반응시켜 ethylene dichloride (EDC)를 만드는 oxychlorination 반응 공정이다. 대략적인 공정도는 그림 1 과 같다. 반응기는 fluidization 반응기로서 steam drum 과 연결된 cooling tube 에서 oxychlorination 반응으로 발생된 열을 제거하도록 되어 있다. Feed 로는 C₂H₄ 과 HCl, O₂ 가 들어가며, recycle gas 가 mixer 에서

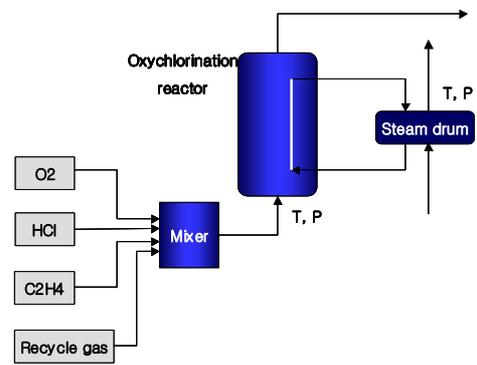


그림 1. Oxychlorination reactor 의 개략도

함께 섞여 반응기 내로 들어가게 되어 있다. Feed 의 혼합과정에서 발생하는 safety 문제는 O₂, C₂H₄, inert gas 의 조성에 따라 좌우된다. Oxychlorination reactor 에서의 주요 변수들로는 Feed 인 O₂, HCl, C₂H₄, 그리고 recycle gas 의 flow rate 과 반응기에서의 온도(15 개)와 압력(4 개), steam drum 에서의 steam flow rate(2 개), 온도, 압력이 있다. 또한, safety 가 중요하므로 mixer 에서의 O₂ vol.%와 steam drum 에서의 pH 를 추가하여 총 29 개로 구성하였다. 실제

공정 data 는 공장에 설치되어 있는 plant information system(PIS)로부터 얻을 수가 있다. PCA 에 의한 monitoring 의 적용 사례의 경우, 2001 년 5 월부터 2002 년 3 월까지의 data 를 사용하여 모델을 구성하고 monitoring 을 실시하였고, PLS 에 의한 공정 모델링 및 최적화의 적용 사례의 경우, 2001 년 5 월부터 2002 년 4 월까지의 data 를 사용하여 반응기를 분석 최적의 운전 조업 조건 방향을 제시하였다. PCA 와 PLS 분석에 사용된 software 는 SIMCA-P[1] 상용 software 이며, 분석 전에 data 를 전처리하여 모델을 구성하였다.

4. 결과 및 토론

4.1. PCA 에 의한 oxychlorination reactor 의 monitoring

Oxychlorination 반응 공정 monitoring 을 위해 설정된 29 개의 변수를 가지고 monitoring 을 실시한 결과는 그림 2 와 같다. Observation number 는 시간에 따라 차례대로 얻은 data 에 일괄적으로 순서를 부여한 것이다. T^2 통계량은 모델이 설명할 수 있는 부분과 관련된 통계량이고, Q 통계량은 residuals 과 관련된 통계량으로서 data 가 control limit 을 벗어날 경우, 정상적인 조업 조건과 다르다는 것을 알려 준다. 그림 2 는 기존의 운전 data 로 구성된 PCA 모델을 가지고, 운전 조건이 바뀐 data set 에 monitoring 을 적용한 결과로서, 대략 observation number 1200 근처에서부터 발생한 운전 조건의 변화를 잘 감지하고 있음을 알 수 있다. 그림 3 은 observation number 1200 의 data 의 경우 운전 조건의 변화에 가장 크게 기여한 변수를 나타내어 주는 contribution plot 을 도시한 것이다. 그림에서 알 수 있듯이, var. 3 과 var. 4 가 가장 큰 영향을 주고 있음을 알 수 있는데, 이는 각각 HCl 과 C_2H_4 flow rate 에 해당되는 공정 변수로서 2 가지 공정 변수에 의해 조업 조건이 변화되었음을 나타내어 주고 있다.

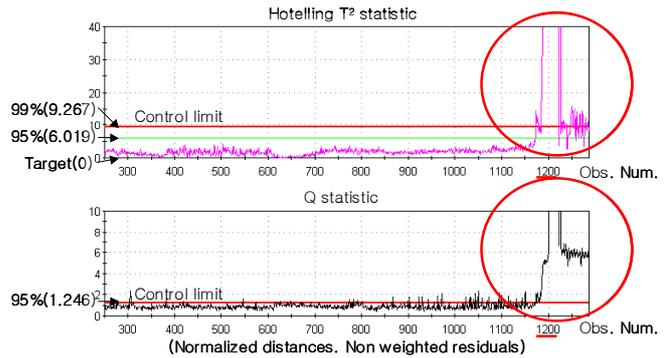


그림 2. Oxychlorination monitoring

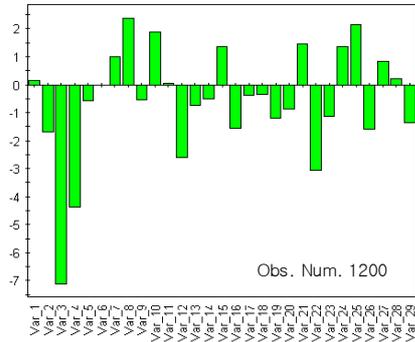


그림 3. Obs. 1200 에 대한 contribution plot

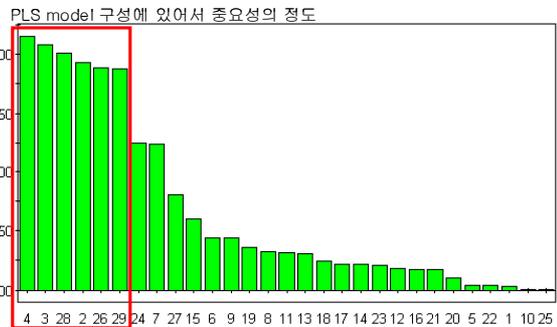


그림 4. 각 변수들에 대한 중요도 분석

4.2. PLS 에 의한 oxychlorination reactor 의 모델링 및 최적화

Oxychlorination reactor 에 대한 PLS 분석을 통

하여 최적의 운전 조건 방향을 제시하였다. 먼저, 반응기 주변의 변수로서 선정된 29 개의 변수에 대해 PLS 분석을 통하여 target variable 인 EDC 생산량과 관계를 계산하고, 가장 큰 상관관계를 가지는 6 개의 주요 변수를 추출하였다. 계산 결과는 그림 4 와 같으며, 각각의 주요 변수로는 C₂H₄, HCl, O₂ flow rate 과 steam drum 에서의 온도, 압력, 그리고 증발량이였다. 주요 변수와 EDC 생산량과의 관계를 PLS 분석을 통해 re-modeling 하였다. 그림 5 는 PLS 분석을 통하여 만들어진 모델의 분석 결과로서, 왼쪽은 training data 를 통하여 만들어진 모델의 설명도를 나타내는 것이고 오른쪽은 cross validation 을 통하여 test 된 결과를 나타내는 것이다. 각각의 값은 대략 0.736 와 0.734 정도로서 신뢰성 있는 모델이 만들어 졌음을 의미한다. 그림 6 은 구성된 PLS 모델에서 각각의 변수-순서대로, O₂, HCl, C₂H₄ flow rate 과 steam drum 에서의 온도, 증발량, 압력에 해당되는 변수-에 대한 모델 계수, 즉 상관 정도를 나타내는 계수를 도시한 그림으로서, autoscaling 된 값들이다. 그림에서 보면, HCl 과 C₂H₄, O₂ flow rate 이 EDC 생산량 증대에 가장 큰 영향을 미치고 있음을 알 수 있다. 따라서, 세가지 물질에 대한 safety 을 고려하고, 반응기의 최대 용량을 파악하여 각각의 flow rate 을 조정해 줌으로써 실제 공정에서 4.5% 정도의 생산량 증대를 확인할 수 있었다.

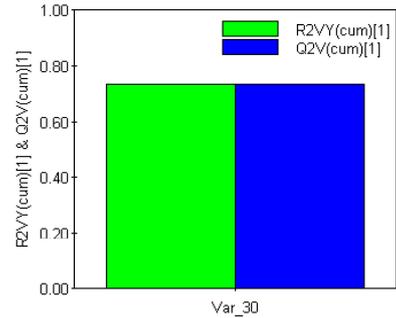


그림 5. EDC 생산량에 대한 모델링 결과

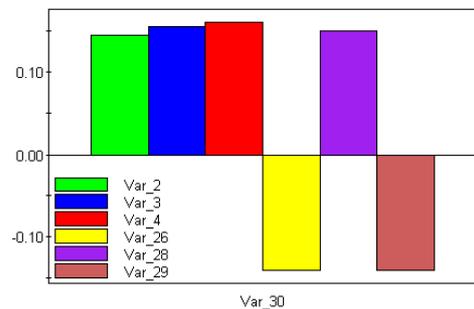


그림 6. EDC 생산량에 대한 상관도 분석

5. 결론

본 논문에서는 다변량 통계처리 기법을 VCM 공정에서의 oxychlorination reactor 에 적용함으로써, 대상 공정에서 수많은 공정 변수들을 파악해야 하는 수고를 덜어주고, 신속하게 조업 조건의 변화를 감시할 수 있었다. 또한, 반응기에 대한 modeling 과 분석을 통하여 생산성을 증대 시킴으로써 그 유용성을 입증하였다.

6. 참고문헌

1. SIMCA-P 7.0 User's Guide, Umetri AB(1998)
2. Simoglou, A., Martin, E. B., and Morris, A. J., " Multivariate Statistical Process Control of an Industrial Fluidized-Bed Reactor" , *Control Engineering Practice*, **8**, 893 (2000)
3. Yun, K. U., Lee, Y. H., and Han, C. H., "Monitoring and Fault Diagnosis of Effluent NOx Composition from Common Stack Heaters Using PLS Model Decomposition", *Theories and Applications of Chem. Eng*, **8**, 429 (2002)