

#4

화학공정 산업에서의 디지털 트윈 구축 및 활용사례



글. 장남진 한화솔루션 중앙연구소 책임연구원

한국의 화학산업은 70년대부터 주력 산업으로 성장해왔다. 석유화학산업은 국가 생산, 수출의 핵심을 담당하는 기반 산업으로 대한민국 전체 제조업 생산의 6.1%, 부가가치의 4.4%, 수출의 8.2%를 차지하고 있는 대표적인 주력 산업이며, 무역수지 흑자 달성에도 크게 기여하고 있다.

한화솔루션 케미칼 부문은 1965년 설립된 후 국내 최초로 PVC를 생산한 데 이어 폴리올레핀, 클로로-알칼리 등 산업의 기반이 되는 기초 화학제품뿐만 아니라, 범용이 아닌 차별화된 특화제품을 개발하기 위해서 석유화학 핵심 기술인 촉매, 공정 기술, 폴리머 중합 등 핵심역량을 육성하고 있다. 또한, 급격히 변화하는 국제 정세 및 사업, 제조 환경의 변화에 대응하고자 디지털 전환(Digital Transformation)을 일하는 방식에서부터 스마트팩토리 등 조업, 안전 관리 등에 적용하여, 빠르게 변화하는 비즈니스 환경에서 디지털 경쟁력을 강화하기 위한 노력을 하고 있다.

디지털 경쟁력을 강화하기 위해서 한화솔루션에서는 스마트공장 구축과 운영에 필요한 디지털 트윈(Digital Twin) 모델을 SIMACRO 사와 공동 개발하여 제조 공장의 설비와 공정을 모사할 수 있는 시스템을 개발하였다.

디지털 트윈은 물리적인 설비와 공정을 수학적 모델 또는 기존 운전데이터를 이용한 실증(empirical) 모델 등으로 설계한 가상의 모델이다.

디지털 트윈 모델은 물리적인 현상을 디지털 모델을 이용해서 다양한 케이스에 대해서 적용한다는 점에서 일반 시뮬레이

션 모델과 같지만, 디지털 트윈은 제조공정에서 측정 또는 관리되는 데이터를 가상 환경에 지속적으로 업데이트하여 시뮬레이션보다 훨씬 더 다양한 문제를 연구할 수 있으며, 제품과 프로세스를 개선할 수 있는 잠재력을 가지고 있다.

한화솔루션에서는 이러한 디지털 트윈 모델을 통해서 가상 환경에서의 공정 구축 및 운전을 통해 신규 공정 설계 완성도를 향상시키고, 기존 공정 운영을 최적화하여 조업 안정성과 제

그림 1. 디지털 트윈 모델을 이용한 현실 세계와 가상 세계의 연결

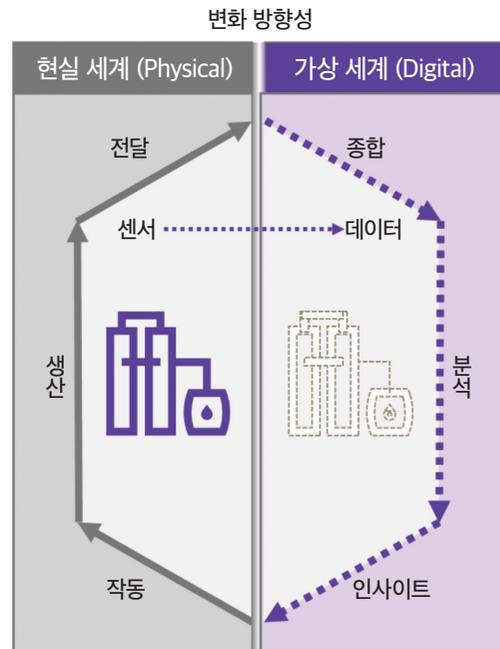
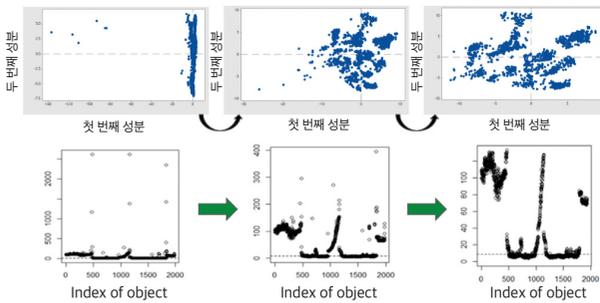


그림 2. Black Box 모델 구축을 위한 데이터 전처리 사례



조공정의 경쟁력을 향상시키기 위한 연구개발을 수행하였다.

화학공정에서 디지털 트윈은 제조공정에서 생성되는 운전 데이터를 이용하여, 물리적 환경에서의 운전 상황 및 결과(생산성 등)가 실시간으로 업데이트되고, 디지털 환경에서 모델을 통해 가공 및 분석을 수행하여 개선 또는 최적 운전 조건을 제안하는 방법으로 사용된다(그림1).

한화솔루션은 최근 10년간 독자적인 연구개발을 통해서 친환경 가소제, C-PVC, 석유수지, XDI, 고순도 크레졸 등을 개발하여 상업화를 진행하고 있다.

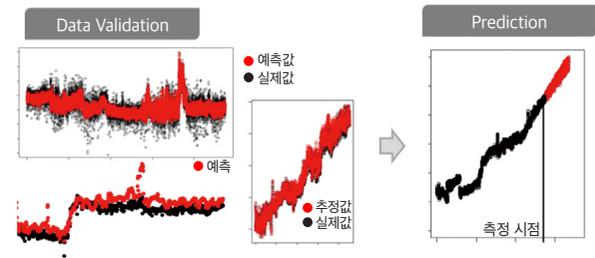
본고에서는 한화솔루션 중앙연구소에서 상업화 공정의 디지털 전환을 위해 개발한 디지털 트윈 모델의 구축 과정을 소개하고, 디지털 트윈을 이용해서 현실 세계와 가상 세계를 연결하는 사례를 소개하고자 한다.

사례 1. EDC Cracking Process

PVC의 원료인 VCM(Vinyl Chloride Monomer)은 EDC(Ethylene Dichloride)의 열분해(Thermal Cracking) 방법으로 주로 생산한다. 상업공정에서의 Thermal Cracking은 773K~823K의 온도 범위와 25~30bar 조건에서 진행된다. 작업안정성 및 생산성을 향상시키기 위해서 Thermal Cracking 공정의 반응경로를 이해하고, 이를 기반으로 공정 최적화를 통해서 부산물의 발생을 억제하고, 이익을 극대화하고자 하는 연구는 오랫동안 진행되었다.

반응경로에 대한 연구를 통해서 EDC의 분해반응을 통해 VCM이 생산되는 반응공학뿐만 아니라 Coke 등 공정의 운전 안전성에 영향을 주는 다양한 부산물의 발생에 대해서도 예측할 수 있게 되었다. 하지만, Coke는 파이프 형태의 Thermal

그림 3. Black Box 모델을 이용한 DT 모델 개발 사례



Cracking 공정의 반응기에서 발생될 경우에 Fouling(오염물질이 쌓이는 현상)을 유발하여 공정 압력을 증가시키는 원인이 될 뿐만 아니라 세정을 위해서 공장의 조업을 중단해야 한다.

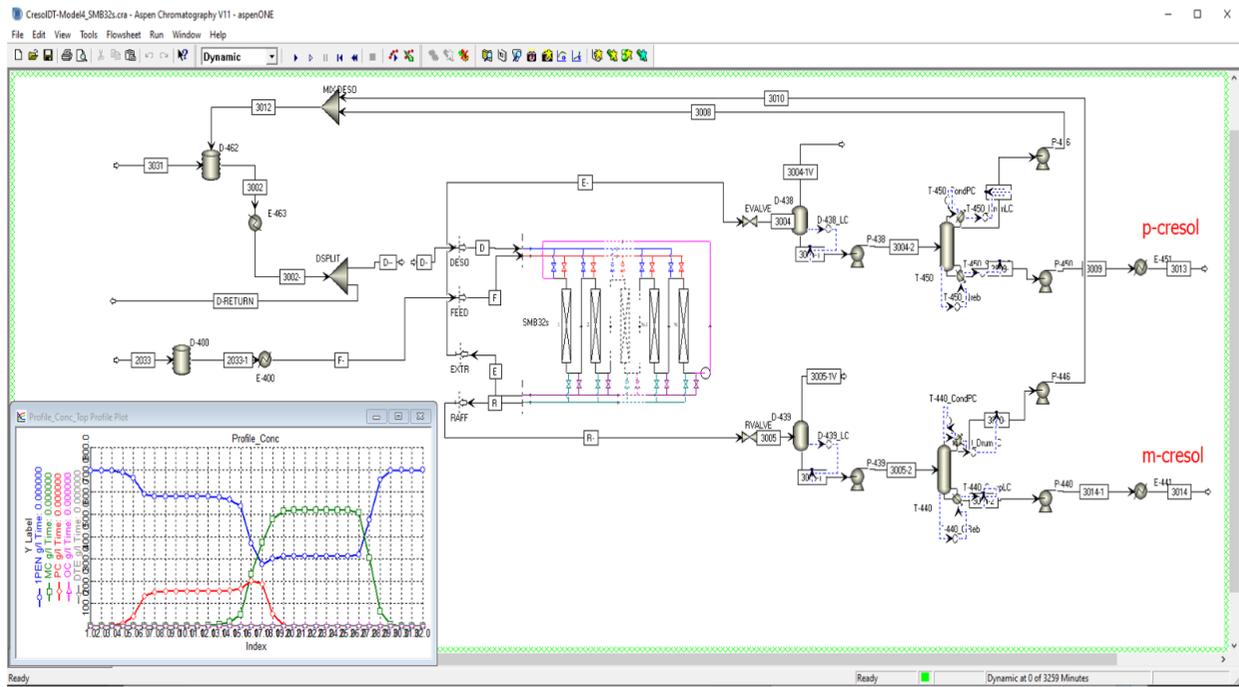
당사에서는 이러한 Coke의 발생을 예측하고, 작업기간을 연장할 수 있는 Black Box 모델을 기 운전데이터를 기반으로 개발하였다. Black Box 모델은 물리/화학적 이론에 기반한 First Principle Model의 개발이 어려운 경우에 Data 분석 및 해석을 통해서 물리적 현상을 해석할 수 있는 모델이다. EDC Thermal Cracking 공정의 Black Box 모델 개발을 위해서 지난 10년의 운전데이터를 기반으로 Coke 발생에 따른 압력증가 패턴을 모델링을 하였다. Black Box 모델을 개발하기 위해서 운전데이터의 신뢰도 향상을 위해서 결측값(missing value)과 특이치(Outlier)를 제거하고, distance based clustering를 통해서 이상치 분석을 수행하였다(그림2).

개발된 Black Box 모델을 기 운전데이터 중 일부를 이용하여 데이터 검증을 수행하고, 실제 실시간으로 측정되고 있는 데이터를 이용해서 예측을 수행하였다(그림 3). 개발된 모델을 이용해서 압력증가의 상한까지 걸리는 시간을 예측하고, 정기 보수 기간을 늘려 생산성 향상에 기여하였다.

사례 2. Simulated Moving Bed DT 모델 구축

화학공정에서 혼합물의 분리 방법의 90% 이상은 비점차이에 의한 증류공정이다. 하지만, 비점의 차이가 작거나, 온도에 민감한 물질일 경우에는 결정화 방법, 막분리법 등을 이용한다. 당사에서는 비점의 차이가 나지 않는 m-cresol과 p-cresol을 분리하기 위해서 Simulated Moving Bed (이하, SMB) 공정을 개발하였다. SMB 공정은 분리하고자 하는 성분과 흡착제와의

그림 4. SMB 시스템의 DT를 위한 Off-Line 모델



친화력을 이용한 크로마토그래피(용질 분리기술) 방법을 이용한 것으로 화학공장에서는 p-xylene을 분리하는 방법으로 잘 알려진 PAREX가 대표적이다. 이외에 정밀화학 및 의학 분야에서 주로 사용된다.

SMB 공정은 흡/탈착에 의해서 성분을 분리하는 방법이기 때문에, 운전 조작 변수 및 실제 물리적인 설비의 제약사항에 영향을 받는다. 따라서, 일반적인 흡착상수 뿐만 아니라 물질 전달에 따른 수학적 모델을 개발하고, 동적모델을 개발하여 고리형 일정상태(Cyclic Steady State)를 해석할 수 있어야 한다.

또한, 공정 운전 시간에 따라서 흡착제의 성능의 변화가 수반되기 때문에, SMB 공정의 분리 수율이 시간에 따라서 변화가 예상된다. 이 경우 변화되는 흡착제의 성능에 대한 운전조건 최적화가 필요하다.

당사에서는 SMB DT 모델 구축을 위해서 Aspen Chromatography 환경에서 SMB 공정뿐만 아니라 탈착제 분리를 위한 증류공정을 포함하는 전 공정에 대해서 오프라인 모델을 구축하였다(그림4).

오프라인 모델과 실제 공장의 분산제어시스템(DCS, Distributed Control System) 시스템과 연결하기 위해서 그림

그림 5. SMB DT System Structure

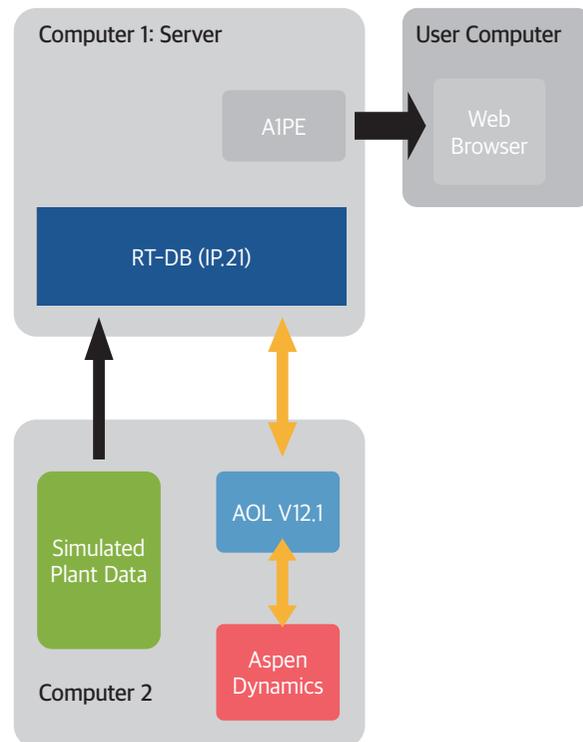
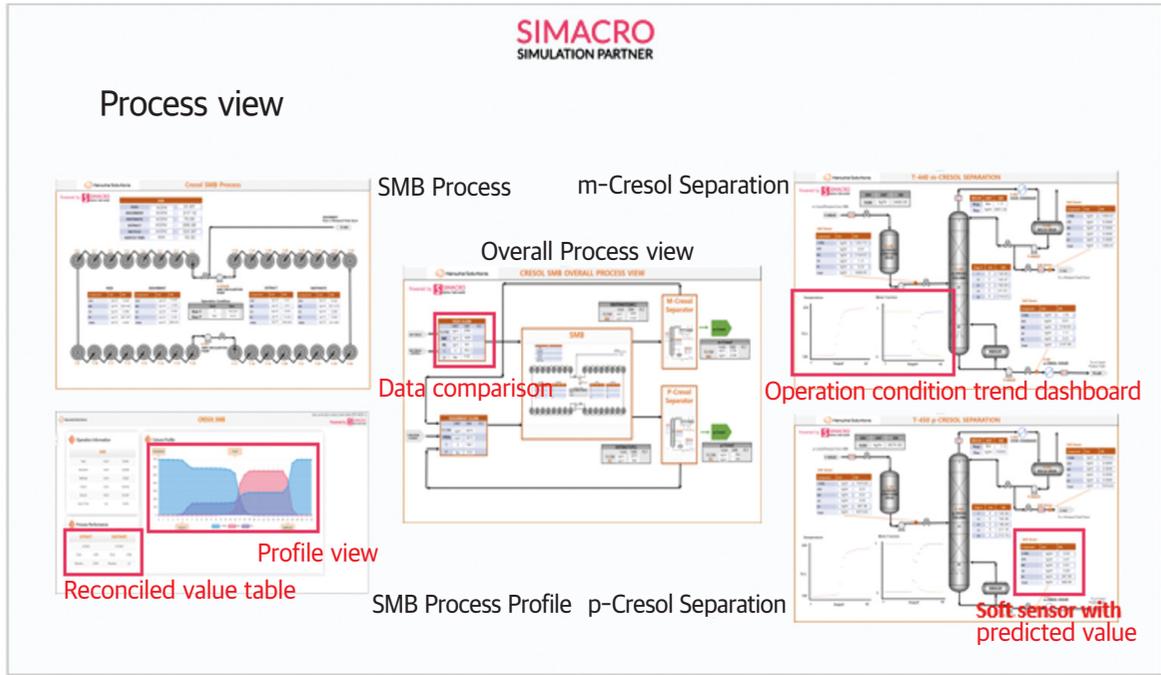


그림 6. SMB DT System Implementation



5와 같이 DT 시스템 구조를 제안하였다(그림 5). 제안된 DT 시스템 구조는 Aspen One 환경에서 개발되었고, DCS를 통한 실시간 데이터는 다른 오프라인 DB 환경의 플랫폼에서도 사용이 가능하다.

SMB DT System은 실시간으로 측정되는 공정 데이터와 모델에서 계산되는 데이터를 비교하여 현재 공정의 운전 상태를 평가하고, 이를 개선하기 위한 방법을 동시에 찾는 최적화 모델을 수행한다(그림 6).

디지털 트윈 구축을 위한 제언

화학공장의 디지털 트윈 시스템 구축을 프로세스 시스템 관점에서 운전 조건 최적화를 통한 이익의 최대화를 위해서 수행하였다. 디지털 트윈 시스템 구축 및 활용도를 높이기 위해서는 현장에서 생산되고 있는 다양한 데이터를 양질의 활용 가능한 데이터로 수집하고 이를 사용하는 방법을 구체화하는 것이 중요하다 판단된다. 필요한 데이터를 충분히 확보하기 어려울 경우에는 Soft Sensor(측정이 불가능한 데이터의 인과관계가 있는 다른 데이터를 이용하여 실제 값을 추정하는 방법)를 통해서 예측 가능한 데이터를 활용하는 방법이 있다.

최근 IT 기술의 발달로 인해서 다양한 공정 시뮬레이션 방법이 제안되고, 실제 현장에 적용되고 있다. 디지털 트윈 시스템과 Off-line 시뮬레이션 방법의 가장 큰 차이는 실시간 공장 데이터의 활용 여부에 있다. 실제에서 이산량(discrete) 데이터로 DT 모델을 지속적으로 훈련시키고, 훈련된 DT로 지속적인 정보를 얻어내어 실시간 데이터베이스에 저장하여, 널리 활용케 하는 방향으로 나아가야 한다. 또한, 검증된 DT 모델로 확보되고 축적된 Simulated Data는 측정된 데이터와 혼용하여 컴퓨터, 태블릿, 휴대폰, VR/AR 헤드셋 등과 같은 여러 가지 형태의 액세스 포인트 방법을 통해, 모니터링, 예측 및 예지, 안전, 최적화, 환경 등을 위한 끝없는 응용과 효율성을 만들어 낼 수 있어야 할 것이다.

...	저자소개	↗
장남진 한화솔루션 책임 연구원은 2012년 서울대학교 화학생물공학부 박사를 졸업했다. 이후부터 현재까지 한화솔루션 중앙연구소에서 근무하고 있다.		