



# 아세틸렌 컨버터 공정의 선택도 예측 모델 개발

Development of machine learning-based predictive model considering operating time point to improve the model prediction performance for acetylene hydrogenation

권혁원<sup>1,2</sup>, 주종호<sup>1,2</sup>, 김정환<sup>2</sup>, 조형태<sup>1</sup>, 이재원<sup>1,†</sup>

<sup>1</sup> 한국생산기술연구원 친환경재료공정연구그룹, <sup>2</sup> 연세대학교 화공생명공학과, <sup>3</sup> 경희대학교 화공생명공학과

(kjh31@kitech.re.kr)



## Abstract

The acetylene hydrogenation process in the naphtha cracking center is crucial for removing acetylene from ethylene, a catalyst poison that hampers optimal operation. This process converts acetylene to ethylene using hydrogen.

Our study introduces a novel machine learning-based predictive model that incorporates the concept of the operating time point (OTP). The proposed OTP-DNN model, integrating OTP into the DNN architecture, demonstrated notable superiority in prediction accuracy. It achieved nRMSE values of 0.058 and 0.206 for selectivity and acetylene leak, respectively. In contrast, the traditional DNN model exhibited higher nRMSE values of 0.134 and 0.424. The incorporation of OTP as an input variable resulted in a substantial improvement, with a 56% and 51% increase in prediction accuracy for outputs, respectively.

The OTP-DNN can predict target variables in real-time, highlighting its potential utility for process optimization in the acetylene hydrogenation process.

Keywords: Acetylene hydrogenation, Naphtha Cracking Center, Machine learning, Predictive model, Deep neural network

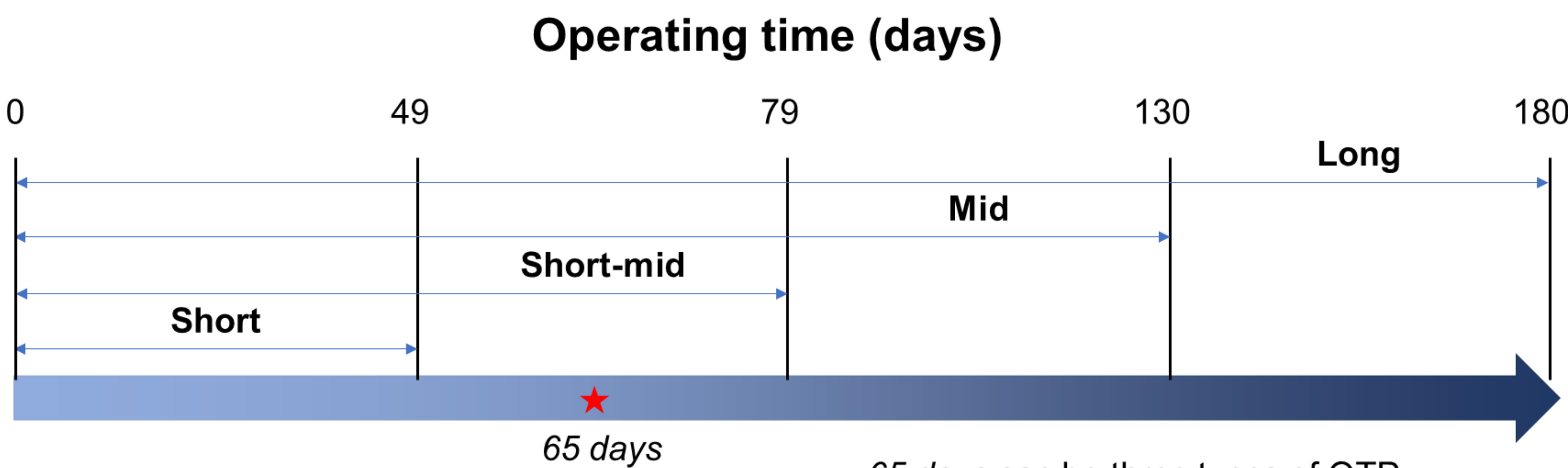
## Method and Results

### 서론

- 화학공정은 다양한 산업에서 사용되는 기초 원료 및 제품을 생산하는 중요한 공정임
- 대부분의 화학공정에서는 효율적인 운전을 위해 촉매가 사용되고 있음
- 그러나 촉매의 성능은 시간이 지남에 따라 poisoning, cocking, fouling 등에 의해 감소되는 문제가 있음
- 촉매의 성능이 크게 감소하면 공정을 멈추고 촉매 재생을 해야 하지만 공정 운전 중에 촉매의 성능을 실시간으로 직접 측정하는 것이 어려움
- 촉매의 성능은 선택도 등을 통해 간접적으로 알 수 있으므로 정확한 선택도를 예측하는 것이 중요함
- 그러나 선택도는 공정의 운전 조건, 운전 시간, 과거 운전 상태 등과 복잡한 관계를 가지고 있어 예측하는 것이 쉽지 않음
- 정확한 선택도 예측을 위해 본 연구에서는 머신 러닝 기반 신경망 모델을 개발하였음
- 모델의 정확도 향상을 위해 Operating time point (OTP) 라는 변수를 제안하고 모델의 입력 변수로 활용하였음

### Operating Time Point

- 촉매 공정은 운전 시작-운전 종료-촉매 재생 의 순으로 운전되는 사이클을 가지고 있음
- 촉매의 성능은 각 사이클 내에서의 운전 시간에 영향을 받음
- 그러나 서로 다른 사이클에서 운전 시간을 동일하게 하더라도 촉매의 성능이 다름
- 한 사이클 내에서 운전 조건이 같더라도 운전 시점에 따라 촉매의 성능이 다름
- 따라서 촉매의 성능은 공정 운전 시간에 영향을 받지만 운전시간 자체를 모델 학습에 이용할 수 없음
- 운전시간을 나타내면서도 모델학습에 이용할 수 있는 새로운 변수가 필요하며 이를 위해 Operation time point (OTP)를 제안하였음
- OTP는 정수부, 소수부로 이루어져 있음
- 정수부는 사이클의 길이에 따라 0~3의 값을 가짐
- 소수부는 각 사이클 내에서 운전 진행이 어느 정도로 이루어졌는지를 나타냄



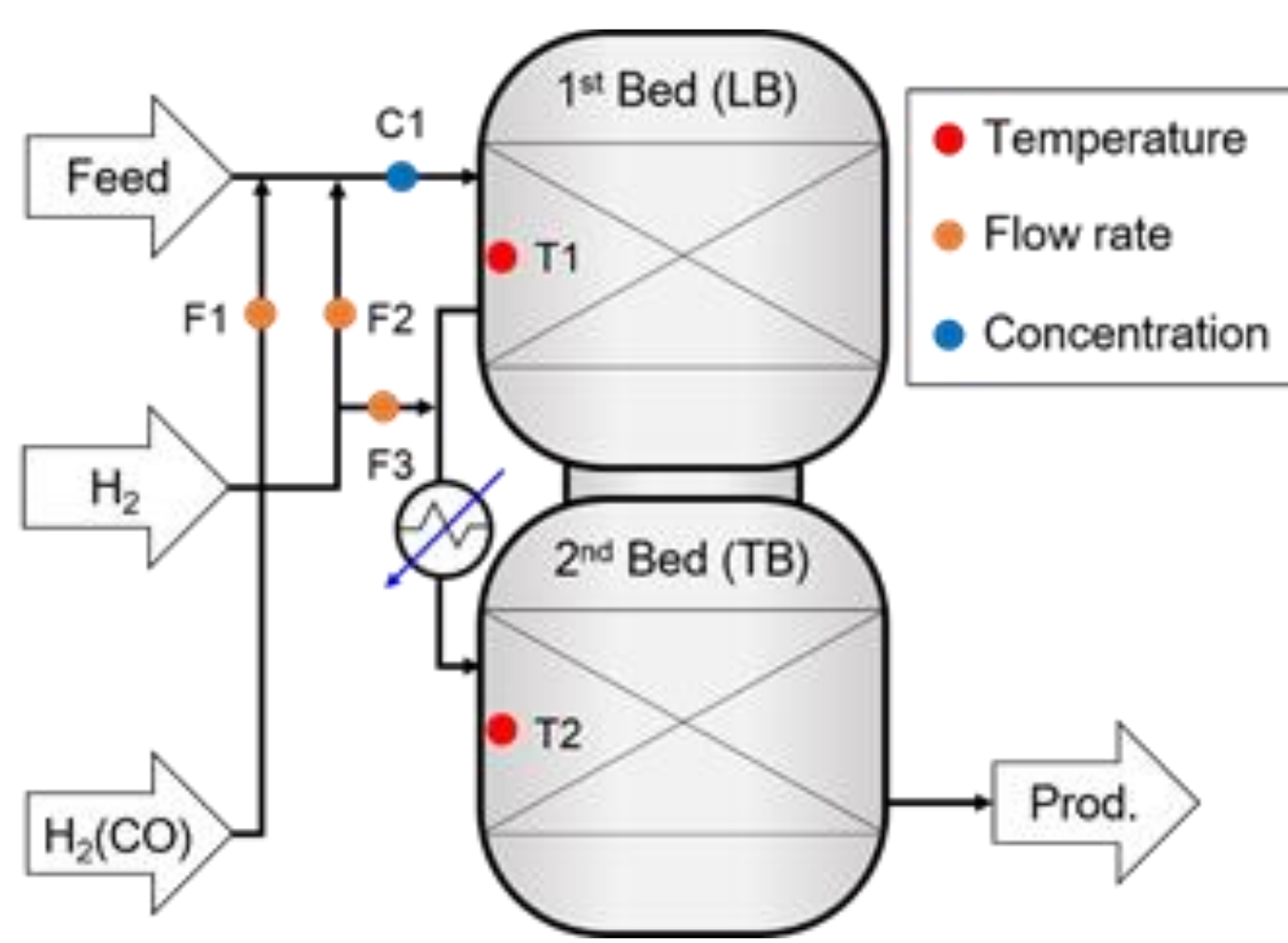
65 days can be three types of OTP

1. Short-mid cycle :  $1 + 65/79 = 1.823$
2. Mid cycle :  $2 + 65/130 = 2.500$
3. Long cycle :  $3 + 65/180 = 3.361$

### 결론

- 촉매를 사용하는 공정에서 촉매의 성능을 예측하기 위해 머신 러닝 기반 DNN 모델을 개발하였음
- 예측 모델의 성능을 향상시키기 위해 Operation time point (OTP) 라는 새로운 변수를 제안하고 입력 변수로 활용하였음
- OTP는 해당 운전의 사이클 유형 및 운전 진행 상황을 나타내기 위해 정수부, 소수부로 이루어져 있음
- 개발된 OTP-DNN 모델은 일반적인 DNN, LSTM 모델에 비해 nRMSE가 56, 63% 더 낮음을 확인하였음
- 이를 통해 촉매를 사용하는 공정에서는 일반적인 DNN 보다 OTP를 변수로 도입하는 것이 효과적임을 입증함
- 추후 개발된 모델을 활용하여 높은 선택도를 유지하면서 공정을 운전할 수 있는 최적의 운전 조건을 찾기 위한 연구를 수행할 예정임

### 대상공정 및 데이터



[Fig. Configuration of the commercial acetylene hydrogenation reactor]

### 예측 모델 개발

- 대상 공정은 두 개의 베드로 구성되어 있음
- Ethylene이 포함되어 있는 Feed는 Lead bed (LB)로 들어가며, H2 또한 acetylene의 dehydrogenation을 통해 ethylene으로 전환하기 위해 주입됨
- 반응을 빠르게 하기 위해 CO를 함께 주입함
- 두 개의 Bed를 통해 생산된 product는 acetylene 농도 2 ppm 이하의 농도를 유지하며 생산됨
- 모델을 개발하기 위한 데이터는 실제 NCC acetylene hydrogenation 공정으로부터 수집하였음
- 수집되는 데이터의 종류는 공정의 주요 부위에서 측정된 온도, 유량, 농도 등이 있음
- 데이터 수집 기간은 총 2018. 02 ~ 2022. 05이며 1시간 간격으로 수집되었음.

- 선택도를 예측하기 위해 DNN algorithm을 활용하였음

- 모델 입력 변수는 두 Bed의 온도 (T1, T2), H2 유량 (F1, F2, F3) 이며 예측 대상은 selectivity 및 acetylene leak 농도임

- OTP의 필요성을 입증하기 위해 OTP를 입력 변수로 사용하지 않는 DNN를 함께 개발하였으며, 또한 공정 모델링에 널리 사용되는 시계열 알고리즘인 Long short-term memory를 개발하여 비교하였음

[Table. Hyperparameters of prediction model]

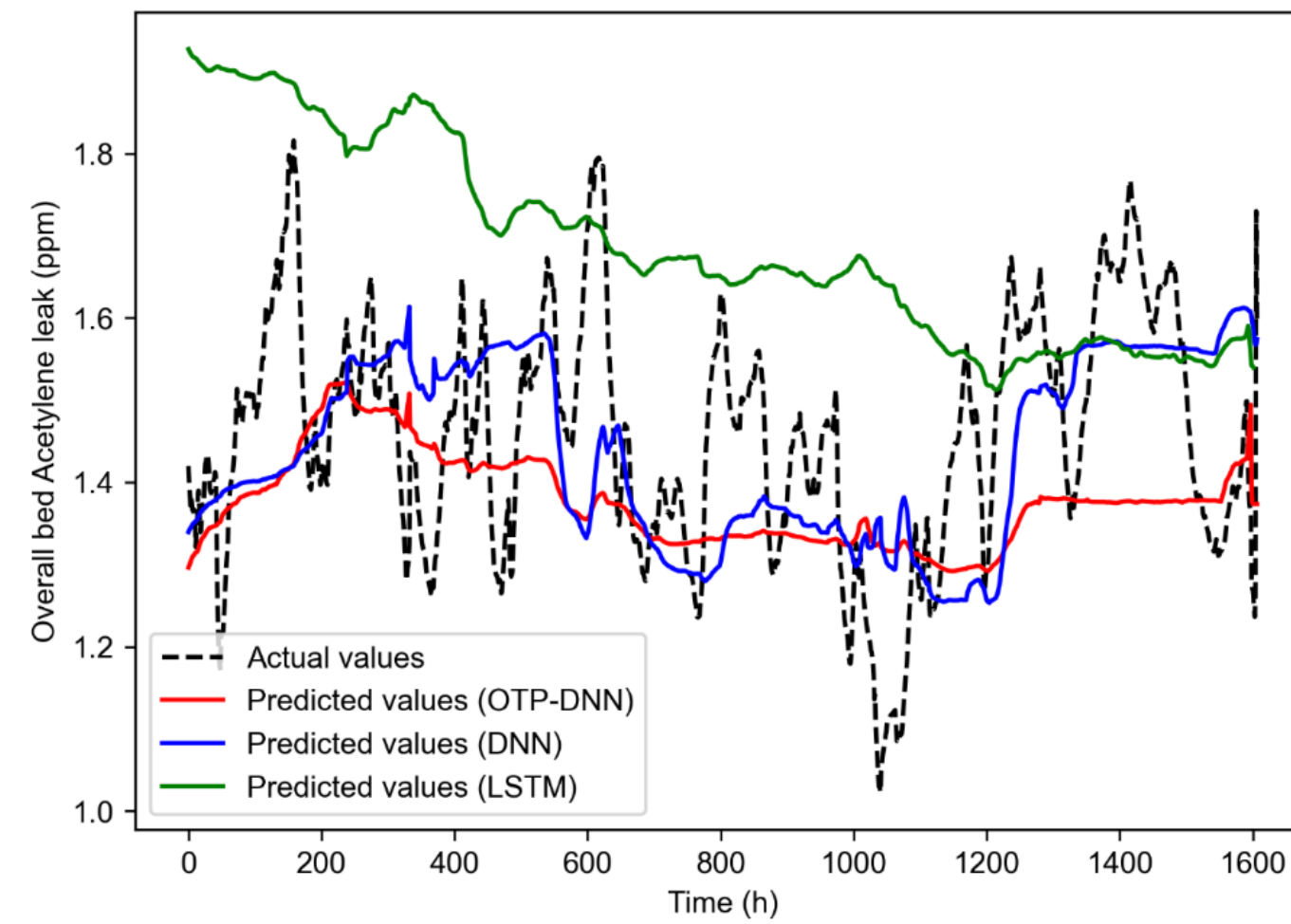
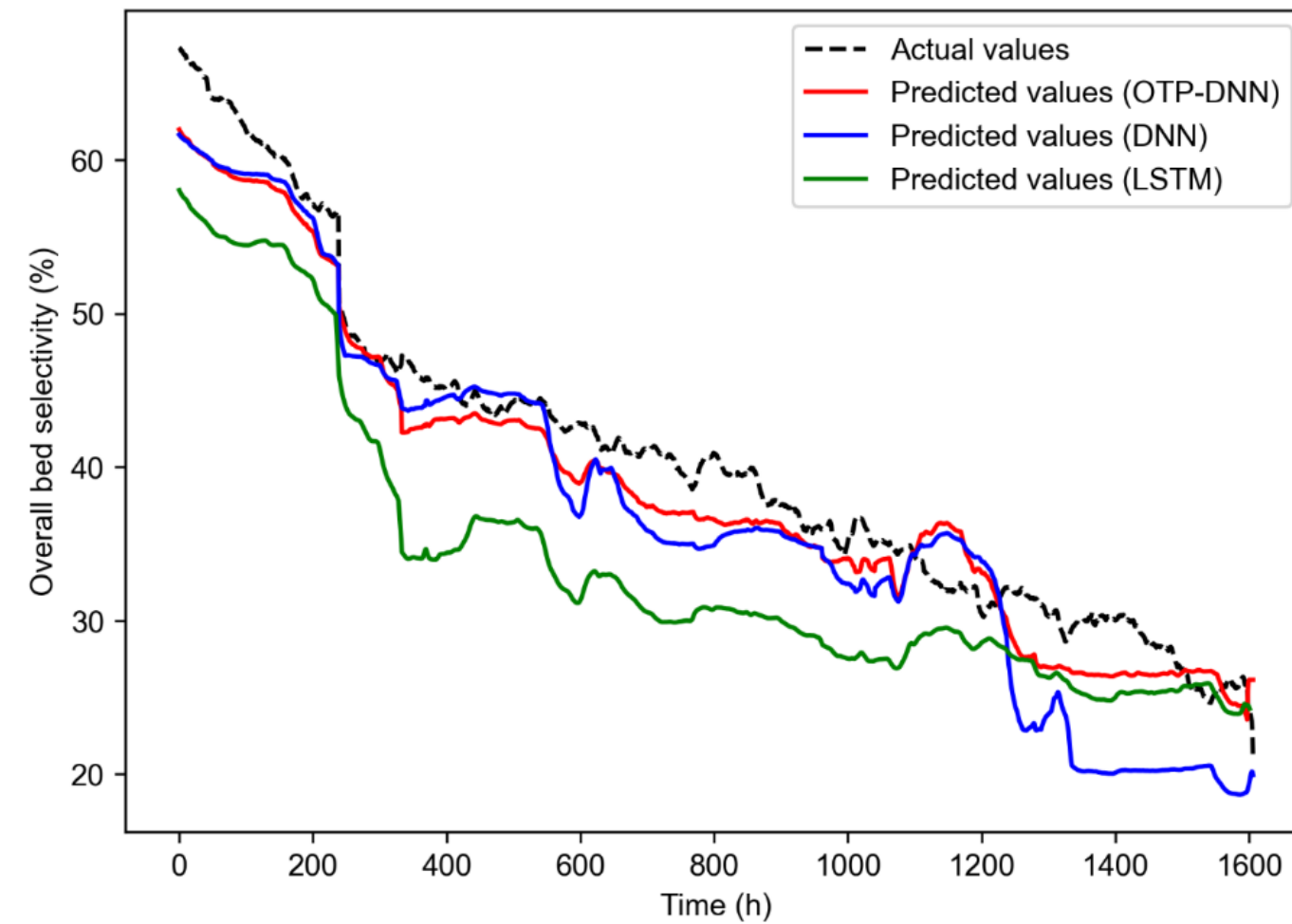
Hyperparameter	DNN	LSTM
Hidden layer	3	-
Hidden units per each layer	20	-
Activation function	ReLU	ReLU
Optimizer	Adam	Adam
Learning rate	0.001	0.001
Train / test ratio	70/30	70/30
Batch size	2	2
Loss function	Mean squared error	Mean squared error

### 결과

- 모델의 성능 평가는 nRMSE를 활용하였음
- 모델 평가 결과, OTP-DNN의 선택도 예측 성능이 0.059로 다른 두 모델에 비해 56%, 63% 가량 더 좋은 것을 확인할 수 있었음
- LSTM 모델의 경우 운전 시간에 따른 실제 선택도 변화의 경향성을 잘 따라가지 못하는 것으로 보여 촉매 공정에서는 시계열 모델이 부적합함을 알 수 있었음
- 이를 통해 촉매가 사용되는 공정에서는 시계열 알고리즘을 사용하기 보다는 OTP를 도입하여 입력 변수로 활용하는 것이 더 효과적임을 알 수 있음

[Table. Evaluation result of model performance]

Model	nRMSE	
	Selectivity	Acetylene leak
OTP-DNN	0.059	0.206
DNN	0.134	0.424
LSTM	0.157	0.375



[Fig. Model prediction result]

## Reference

- [1] O. Dehghani Khod, M. Parhoudeh, M.R. Rahimpour, S. Raeissi, A new configuration in the tail-end acetylene hydrogenation reactor to enhance catalyst lifetime and performance, J Taiwan Inst Chem Eng. 65 (2016) 8–21. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2016.04.027>.
- [2] J. Kim, C. Joo, M. Kim, N. An, H. Cho, I. Moon, J. Kim, Multi-objective robust optimization of profit for a naphtha cracking furnace considering uncertainties in the feed composition, Expert Syst Appl. 216 (2023) 119464. <https://doi.org/10.1016/J.ESWA.2022.119464>.