

생물가스생산공정에서 최량실험계획법에 의하여 파라미터동정의 정확성을 높이기 위한 한가지 방법

길호일, 전재경

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《과학자, 기술자들은 현실에 튼튼히 발을 붙이고 사회주의건설의 실천이 제기하는 문제들을 연구대상으로 삼고 과학연구사업을 진행하여야 하며 연구성과를 생산에 도입하는 데서 나서는 과학기술적문제들을 책임적으로 풀어야 합니다.》(《김정일선집》 증보판 제15권 492페이지)

유기물질의 혐기성분해[1]는 수많은 미생물들에 의하여 이루어지는 복잡한 생화학공정으로서 비선형성과 불확정성의 특징을 가지며 따라서 그것의 파라미터동정의 가능성과 질은 실험계획에 크게 의존한다.

론문에서는 최량실험계획(OED : Optimal Experimental Design)수법을 리용하여 혐기성소화공정의 대표적인 수학적모형의 하나인 ADM1의 파라미터를 정확하게 추정하기 위한 실험계획을 얻어내는 한가지 방법에 대하여 제안하였다.

1. 유전알고리즘을 리용한 최량실험계획작성

비선형체제인 경우 파라미터동정을 위한 실험계획은 일반적으로 그것의 정보량(파라미터에 관한 정보량(FIM : Fisher Information Matrix))을 최대화하는것[1]을 목표로 하여 결정한다.

파라미터들의 단위가 서로 다른것을 고려하여 우리는 OED의 D-기준을 리용하여 목적함수를 다음과 같이 설정하였다.

$$\max_D \det F = \det \left\{ \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^m w_i \left(\frac{\partial y_i}{\partial \theta}(t_k) \right)^T Q_{i,k} \frac{\partial y_i}{\partial \theta}(t_k) \right\} \quad (1)$$

여기서 F 는 FIM행렬로서 실험계획의 정보량을 나타내며 θ 는 파라미터벡토르, y 는 관측벡토르, $w_i, Q_{i,k}$ 는 무게파라미터들로서 관측량의 중요도와 매 시각에서 그것의 측정오차에 의하여 결정된다. 또한 D 는 실험계획벡토르로서 매 시각에서의 회석률로 구성된다. 즉 $D=[D_1, \dots, D_N]^T$ 이다.

ADM1모형의 복잡성으로부터 식 (1)에서 출력 y 의 파라미터 θ 에 관한 도함수를 얻어내는것은 비교적 곤란하므로 다음과 같은 수값미분으로 그것의 근사값을 구한다.

$$\frac{\partial y_j}{\partial \theta}(t_k) = \left[\frac{\partial y_j}{\partial \theta_1}(t_k) \dots \frac{\partial y_j}{\partial \theta_n}(t_k) \right]$$
$$\frac{\partial y_j}{\partial \theta_i}(t_k) = \frac{y_j(\theta^{+\Delta i}, k) - y_j(\theta^{-\Delta i}, k)}{2\Delta \theta_i}$$

여기서 $y_j(\theta, k)$ 는 k 시각에 파라미터가 θ 인 모형의 j 째 출력을 의미한다. 또한

$$\theta^{-\Delta i} = [\theta_1, \dots, \theta_i - \Delta\theta_i, \dots, \theta_n]^T, \quad \theta^{+\Delta i} = [\theta_1, \dots, \theta_i + \Delta\theta_i, \dots, \theta_n]^T$$

이다.

ADM1의 모의시간이 비교적 길기때문에 최량화문제 (1)을 푸는데 많은 시간이 소모될수 있으므로 희석률 D 를 실현하는 현실적조건을 고려하여 다음과 같은 가정을 한다.

① D 는 일정한 시간구간동안에 불변이다.(구간상수) 즉

$$D(N_p \cdot i + k) = D(N_p \cdot i), \quad i = 0, \dots, N/N_p, \quad k = 1, \dots, N_p - 1$$

이다. 여기서 N_p 는 변화주기를 의미한다.

② D 는 유한개의 상수값만을 취한다. 즉

$$D(k) \in \{D^1, \dots, D^{N_l}\}, \quad D^i \in [D_{\min}, D_{\max}]$$

이다. 여기서 D^{N_l} 은 D 가 취할수 있는 수값의 개수이다.

실례로 D^i 를 평등분포값으로 설정할수 있다.

$$D^i = D_{\min} + \frac{(D_{\max} - D_{\min})}{N_l - 1} \cdot (i - 1), \quad i = 1, \dots, N_l \quad (2)$$

그러면 D 의 탐색공간은 $(N_l)^{\frac{N}{N_p}}$ 으로 축소되며 계산시간을 훨씬 단축하게 된다.

한편 최량화문제 (1)의 풀이를 구하기 위하여 우리는 대역적탐색방법인 유전알고리즘(GA)을 리용하였다.

그림 1에 후보풀이의 염색체표현실례를 보여주었다.

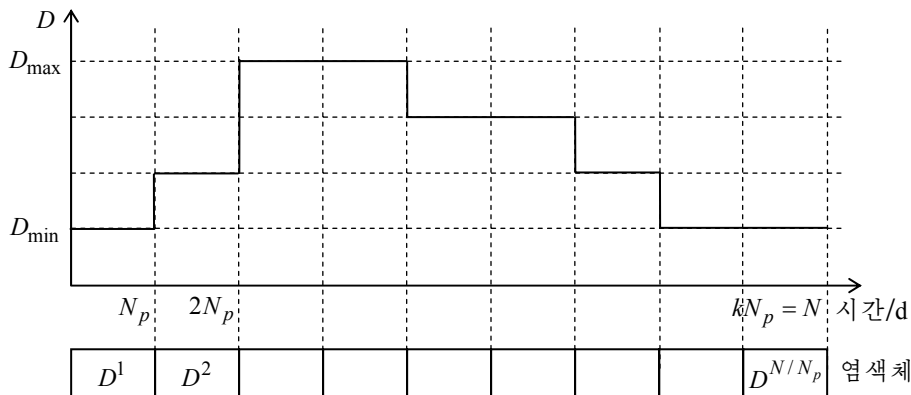


그림 1. 후보풀이의 염색체표현실례

또한 식 (1)을 리용하여 매개의 개체들의 적응도를 계산한다. 유전알고리즘의 기본연산들 즉 초기화, 선택, 교차, 변이조작들은 Matlab의 GA ToolBox의 기정값을 리용하였는데 구체적으로는 다음과 같다.

① 초기화 : 우연적으로 초기개체군을 생성한다.

② 선택 : 비례선택법을 리용한다.

③ 교차 : 우연교차법을 리용한다.

④ 변이 : 우연변이조작을 리용한다.

전체 파라미터 동정 흐름도를 그림 2에 보여주었다.

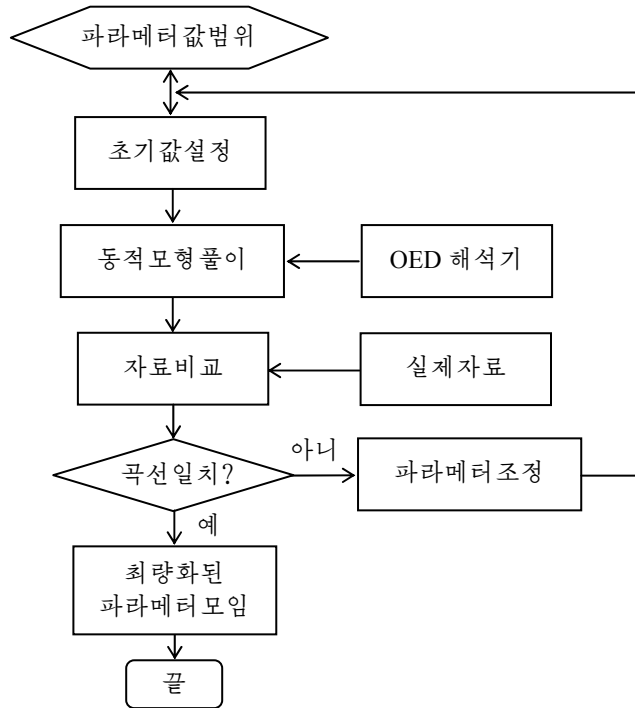


그림 2. 전체 파라미터 동정 흐름도

2. 모 의 실험

모의실험을 통하여 제안된 방법의 효과성을 검증하였다.

1) 민감도분석

우선 선행방법[2]에 기초하여 ADM1의 초기파라미터들과 입력성분의 농도를 설정하였다.

미생물의 초기농도가 공정의 동적특성에 미치는 영향을 고려하여 두가지 정황 즉 미생물초기농도가 높은 경우(C1: 1.0kgCODm^{-3})와 낮은 경우(C2: 0.1kgCODm^{-3})를 설정하고 실험을 진행하였다.

다음으로 모의시간은 40d, 희석률은 다음과 같이 설정하였다.

$$D(t) = \begin{cases} 0.05, & 0 \leq t \leq 10 \\ 0, & 10 < t \leq 40 \end{cases}$$

위의 두가지 정황하에서 얻어진 파라미터민감도분석결과에 기초하여 관건적인 파라미터로서 다음의 파라미터들을 선택하였다.

분해속도상수 : k_{dis}

초산과 기름질분해균의 최대기질소모상수 : $k_{m,ac}, k_{m,fa}$

기름질과 수소분해균의 반포화속도상수 : $K_{S,fa}, K_{S,h_2}$

분석결과 C2의 경우에 $k_{m,ac}, k_{m,fa}$ 의 민감도가 C1보다 높다는것 즉 C2인 경우 파라

미터에 관한 정보함량이 더 높다는것을 알수 있다.

2) 최량실험설계

OED의 D-기준과 목적함수 (1)에 기초하여 유전알고리즘을 리용하여 최량인 실험방안을 얻어내었다. 유전알고리즘의 초기개체군수를 40개로, 희석률변화주기는 2d로, 희석률은 0, 0.025, 0.05, 0.075, 0.1중의 한값을 취하는것으로 설정하였다. 얻어진 ADM1파라미터동정을 위한 최량실험계획을 그림 3에 보여주었다.

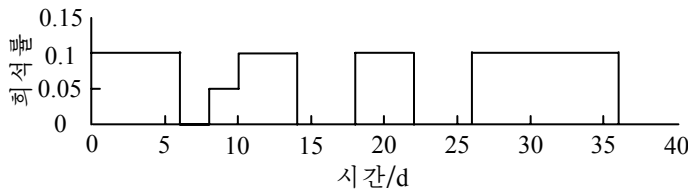


그림 3. ADM1파라미터동정을 위한 최량실험계획

3) 파라미터최량화

ADM1의 동력학적모형의 파라미터들가운데서 k_{dis} , $k_{S,fa}$, $k_{m,ac}$ 를 각각 0.3, 0.6, 0.4로 설정하고 기타 파라미터들은 선행방법[3]의 값으로 설정한다. 다음 우의 실험계획에 따라 모의실험자료를 얻어내었다. 다음 실험자료에 가장 부합되는 파라미터들을 곡선근사화의 방법으로 구하였다. 파라미터들의 초기값과 변화구간은 그것의 물리적의미와 선행방법[2, 3]에 근거하여 다음과 같이 결정하였다.

$$0.1 \leq k_{dis} \leq 1.0$$

$$0.1 \leq k_{S,fa} \leq 1.2$$

$$0.1 \leq k_{m,ac} \leq 1.5$$

표. ADM1파라미터추정결과

파라미터	실제값	추정값
k_{dis}	0.3	0.29
$K_{S,fa}$	0.6	0.64
$k_{m,ac}$	4	4.81

ADM1파라미터추정결과를 표와 그림 4에 보여주었다. 표와 그림 4에서 볼수 있는것처럼 얻어진 파라미터들은 실험자료와 비교적 잘 일치된다.

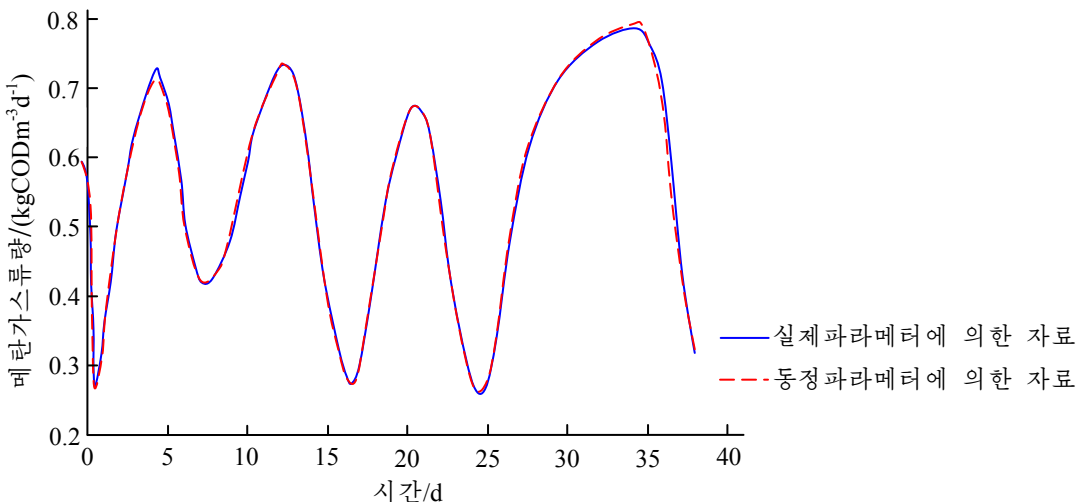


그림 4. ADM1파라미터추정결과

맺 는 말

대역적최량화수법의 하나인 유전알고리즘을 리용하여 혐기성소화공정의 파라메터동정을 위한 최량실험계획을 작성하고 그에 의하여 보다 유효하고 정확한 파라메터를 결정하는 한가지 방법을 제안하였다. 제안된 방법의 효과성을 모의실험을 통하여 검증하였다.

참 고 문 헌

- [1] A. Donoso-Bravo et al.; Water Research, 45, 17, 5347, 2011.
- [2] S. Hassam et al.; Biochemical Engineering Journal, 99, 193, 2015.
- [3] U. Jeppsson et al.; Water Science and Technology, 53, 1, 287, 2006.

주체107(2018)년 8월 5일 원고접수

A Method for Improving the Accuracy of Parameter Estimation by OED in the Biogas Production Process

Kil Ho Il, Jon Jae Gyong

In this paper, we proposed a method to obtain the experimental design for estimating the parameters of ADM1, which were the typical mathematical model of anaerobic digestion, by OED.

Key words: parameter estimation, anaerobic digestion process, experimental design