하수처리공정 모의시간 단축을 위한 개선된 뉴턴-랩슨 방법 개발 및 평가

Modified Newton-Raphson Method to Minimize Calculation Time for Wastewater Treatment Plant Simulation

김종락* · 유광태** · 표우원화*** · 김예진****

Kim, Jongrack*, You, Kwangtae**, Piao, Wenhua***, and Kim, Yejin****

Abstract

In order to optimize the process operation against fluctuating influent water quality, it is essential to apply process control and simulate the process for deriving the optimal operation method. To simulate the process, the ASM2d model and ADM model of the IWA have been widely used for the simulation of the nitrogen and phosphorus removal process and biogas production process, which consist of ordinary differential equations. In order to simulate a sewage treatment plant, it is essential to simulate the steady state of a process under a given set of disturbances and operating conditions. However, the disadvantage is that the calculation time is long when analyzing the ordinary differential equations. In order to shorten the computation time, we propose an improved Newton-Raphson method. As a result, the ASM2d and the ADM1 were able to simulate the processes 32.3 times and 8 times faster than ordinary differential equation analysis, respectively.

Key words : ASM2d, ADM1, Process Simulation, Steady-state, ODE, Newton-Raphson

요 지

유입수질 변동은 하수처리공정의 성능을 좌우하는 대표적 외란으로, 유입수질 변동에 따른 공정의 최적운전을 위해서는 공정 제어의 적용이나 최적운전방안 도출을 위한 공정 모의가 필수적이다. 공정 모의를 위해 현재 전 세계적으로 널리 사용되는 질소·인 제거공정 모델에는 IWA의 ASM2d 모델이 있고, 바이오가스 생산공정의 모의를 위해서는 ADM1 모델이 사용되며, 이들 모델은 상미분방정식으로 이루어져 있다. 하나의 하수처리장을 모의하는 데 있어 주어진 일련의 외란 조건과 운전 조건 하에서 공정의 정상상태를 모사하는 단계는 필수적인데, 이 때 상미분방정식을 해석하는 단계에서 연산시간이 오래 걸리는 단점이 존재한다. 연산시간을 단축하기 위해 본 연구에서는 상미분방정식 해석과 뉴턴-랩슨 알고리즘을 결합한 개선된 뉴턴-랩슨 방법을 제안하였다. 제안된 방법으로 공정을 모의한 결과, 상미분방정식 해석만을 적용하는 것과 비교할 때 ASM2d는 32.3배, ADM1은 8배 빠른 속도로 연산을 수행할 수 있었다.

핵심용어 : ASM2d, ADM1, 공정 모의, 정상상태, 상미분방정식, 뉴턴-랩슨

*정회원, (주)유엔유 연구소장(E-mail: jrkim.unu@gmail.com)
Member, General Manager, UnU Inc.

**정회원, (주)유엔유 대표(E-mail: kty.unu@gmail.com)
Member, CEO, UnU Inc.

***연변대학교 농학원 전임강사(E-mail: whpiao@ybu.edu.cn)
Lecturer, College of Agriculture, Yanbian University

****교신저자, 정회원, 부산가톨릭대학교 환경공학과 조교수(Tel: +82-51-510-0621, Fax: +82-51-510-0628, E-mail: yjkim@cup.ac.kr)
Corresponding Author, Member, Assistant Professor, Department of Environmental Engineering, Catholic University of Pusan

1. 서 론

1.1 연구배경 및 필요성

하수처리공정은 생물학적 질소·인 제거공정, 물리·화학적 처리공정 및 생물학적 슬러지처리공정이 상호 연계되어 구성된다. 각 단위 공정의 처리 성능은 전 단계의 처리수 특성에 영향을 받거나 후 단계의 처리 성능에 영향을 미치게 된다. 이러한 특성으로 인해 하수처리공정에서 가장 일반적이나 큰 중요성을 가지는 외란이 유입수질 변동이라고 할 수 있다. 유입수질 변동에 의해 공정의 유출수가 어떻게 변화할지를 예측하고 필요한 경우 적절한 제어동작을 수행하는 것은 하수처리장 운전에 있어 매우 중요하다.

현재의 하수처리시설은 대부분 활성슬러지를 이용하는 생물학적 처리공정을 주된 공정으로 채택하고 있으며, 생물학적 불확실성으로 인해 공정의 유출수질을 예측하는 일은 쉽지 않다. 또한 온도, pH 등 다양한 환경조건과 유입수질의 변동 등이 복합적 외란으로 유출수질에 영향을 미치게 되는데, 이와 같은 복잡한 하수처리공정의 성능 평가 및 안정적인 설계를 위해서는 다양한 조건에서의 공정거동을 모사할 수 있는 수학적 모델을 이용하는 것이 필수적이다.

수학적 모델을 이용하여 하수처리공정을 모의하기 위해서는 단위 공정별로 적합한 모델을 사용해야 한다. 현재 생물학적 질소·인 제거 공정을 모의하기 위해서는 IWA ASMs (ASM1, ASM2, ASM2d, ASM3) 모델(Henze et al., 2000) 등이 가장 보편적으로 사용되고 있고, 물리적 처리공정인 침전공정은 1차원 침전모델(Takacs et al., 1991) 등이 사용되고 있으며, 슬러지처리 공정은 바이오가스 생산 반응을 모사하는 혐기소화공정에 대해 IWA ADM1 모델(Batstone et al., 2002)을 사용하고 있다.

미생물을 이용한 수처리시설의 공정 성능은 유입수질 변화, 수온 감소 등 비정상적인 운전조건을 포함한 다양한 운전환경에 영향을 받는다. 특히, 과부하 조건 등과 같이 비정상적인 운전 상태에서 장기간 운전시 정상상태로 회복하기 위해서는 오랜 시간이 요구된다. 따라서 지속적인 공정 모니터링을 통해 안정적인 운전조건을 유지하는 것이 중요하다.

이와 같은 비정상적인 운전환경에 효과적으로 대응하기 위해서는 최적 제어방안을 찾아야 한다(Jeppsson et al., 2006). 최적 제어방안은 최적화알고리즘을 적용하여 도출할 수 있으며, 이는 반응조 크기, 내부반송유량, 슬러지반송유량, 온도, 약품투입량, 공기송풍량 등 공정의 설계 인자 및 운전 인자에 해당하는 항목의 값을 변경한 후 모델에 의한 정상상태 시뮬레이션으로 공정 변화를 예측하여 최적의 운전상태가 되는 조건을 찾는 과정이다.

IWA ASMs, ADM1, 1차원 침전모델은 물질수지기반의 미분방정식 형태의 수식으로 구성되어 있으며, 공정의 정상상태 조건을 구하기 위해서는 미분방정식 해석에 의한 상태 변수 수렴 조건까지 계산을 해야 한다. 단위 공정별로 정상상

태 값을 순차적으로 계산하여야 하지만, 후단의 공정 유출수가 전단의 공정에 유입되면, 먼저 계산된 공정의 정상상태 조건이 변경되므로, 반복 계산을 통해 전체 공정이 정상상태에 수렴할 때까지 계산을 수행해야 한다.

또한, 하수처리공정 설계 및 운영시 최적화 알고리즘을 적용하는 방법에 있어, 설계인자 및 운전인자의 다양한 조합에 따른 수많은 횟수의 시뮬레이션을 수행하게 되는데, 시뮬레이션 연산 시간에 비례하여 최적화 알고리즘의 연산 시간이 증가하게 된다. 예를 들어 공정 시뮬레이션에 소요되는 시간이 1분이고, 최적조건 탐색에 소요되는 운전 조건의 조합 회수가 14,400회일 경우, 최적화 수행 시간은 10일(14,400분)이 소요되므로, 이 기간 동안은 효과적인 운전 제어를 수행할 수가 없을 것이다.

따라서 모델에 의한 공정 최적화 수행 시 공정 시뮬레이션 시간과 최적화 탐색 회수를 모두 최소화하는 것이 매우 중요하다. Reiger et al. (2013)은 IWA Task Group on Good Modelling Practice 보고서를 통해, ASMs 정상상태 해 탐색 기법으로 상미분해석 및 뉴턴-랩슨(Newton-Raphson) 알고리즘이 일반적이라고 하였다. Mauritsson (2103)은 ASMs 표준해석기법인 상미분해석 알고리즘을 비교하였으며, 그 중 Euler 방법이 가장 좋은 연산 성능을 나타내었고, 뉴턴-랩슨 방법 및 고차원 상미분해석 알고리즘은 시나리오에 따라 빠르거나 느린 연산시간을 가지는 한계를 보였다.

Flores-Alsina et al. (2015)은 Simulated Annealing(SA)과 뉴턴-랩슨 방법을 조합하여 정상상태 해석을 시도하였다. SA 방법은 전역탐색 최적화방법이지만 시행착오를 통하여 뉴턴-랩슨의 초기값을 찾으므로 어느 시점에 유효한 초기값을 찾을 수 있는지 알 수 없다는 단점이 있다.

하수처리공정의 운전 최적화를 위한 정상상태 모의와 현장 적용결과는 쉽게 찾아볼 수 있으나(Kim et al., 2012; Kim et al., 2013; Kim et al., 2016; Piao et al., 2016), 정상상태 조건을 도출하는 데 걸리는 연산시간에 대해서는 문제의식을 가지지 않는다. 하수처리시설의 정상상태 모의에 걸리는 연산 시간이 단축될 수 있다면 좀 더 신속한 최적운전조건 탐색이 가능해질 것이며, 더 나아가 외란에 대한 보다 신속한 대응으로 하수처리장의 안정적 운영에 기여할 것으로 사료된다.

1.2 연구목표

미분방정식 해석 방법은 초기 시뮬레이션 시간에는 상태 변수의 변화가 크고, 빠르게 일정한 값으로 수렴해 가지지만, 시뮬레이션 시간이 지날수록 변화 폭이 작아지고 낮은 허용 오차값을 만족하기 위해 많은 시뮬레이션 시간을 요구하게 된다.

방정식의 근을 구하는 알고리즘으로 널리 사용되는 뉴턴-랩슨 방법(Press et al., 1992)은 초기값이 근과 유사한 값으로 설정할 때, 빠르게 수렴하는 특징을 가지고 있다. 이러한 특징은 미분방정식 해석의 단점을 해결할 수 있을 것으로

판단된다. 또한 뉴턴-랩슨 알고리즘의 유효한 초기값 설정의 문제는 미분방정식 해석으로 해결할 수 있으므로, 미분방정식 해석과 뉴턴-랩슨 알고리즘을 조합한 하이브리드 수치해석 방법은 상호 단점을 보완할 수 있는 것으로 판단된다.

본 연구에서는, 미분방정식 형태의 수식으로 구성된 수처리공정 모델에 대하여, 정상상태 해석에 소요되는 시간을 최소화할 수 있는 수치해석 기법을 제안하고자 한다. 또한 본 연구에서 제안된 방법을 활용하여 질소·인 제거 공정과 바이오가스 생산 공정을 대상으로 정상상태 모의를 수행하여, 연산 시간 단축 가능성을 검토하였다.

2. 모델 및 해석 기법

2.1 대상 공정

다음 두 가지 대상 공정을 대상으로 정상상태 해석 방법을 적용 및 검토하였다. 첫 번째는 내부 반송 흐름 1개를 가지는 반응조 5개와 슬러지 반송 흐름을 가지는 침전조를 조합한 질소·인 제거공정(case A)이며, 두 번째는 음식물 또는 슬러지처리에 적용되는 혐기소화 반응조 1개로 구성되는 바이오가스 생산 공정(case B)이다.

질소·인 제거 공정(case A)은 혐기, 무산소, 호기조건이 연속으로 조성되는 A2O공정으로 구성하였으며, 이에 대한 시뮬레이션 조건이 Table 1에, 바이오가스 생산 공정(case B)에 대한 시뮬레이션 조건은 Table 2에 제시되어 있다.

Table 1. Configuration of Nutrient Removal Process (case A)

Unit process	Item	Value	Unit
Reactor #1	Influent	18,446	m ³ /d
	Volume	10,00	m ³
	k _{La}	0	1/d
Reactor #2	Volume	1,000	m ³
	k _{La}	0	1/d
Reactor #3	Volume	1,333	m ³
	k _{La}	300	1/d
Reactor #4	Volume	1,333	m ³
	k _{La}	200	1/d
Reactor #5	Volume	1,333	m ³
	k _{La}	80	1/d
	Internal flow to Reactor #2	55,338	m ³ /d
Settler	Surface area	1,500	m ²
	Depth	4	m
	feed height	2.2	m
	Waste flow	385	m ³ /d
	Return flow to Reactor #1	18,446	m ³ /d

* k_{La}: oxygen transfer rate

Table 2. Configuration of Biogas Generation Process (case B)

Unit process	Item	Value	Unit
Anaerobic Reactor	Influent	166	m ³ /d
	Liquid phase volume	3,400	m ³
	Gas phase volume	300	m ³
	Temperature	35	°C

2.2 적용 모델

질소·인 제거 공정 시뮬레이션을 위해 세계적으로 널리 사용되는 IWA ASM2d 모델을 적용하였으며, 시뮬레이션에 사용된 유입수의 상태변수 값은 Table 3과 같다. 매개변수는 Henze et al. (2000)의 값을 사용하였다.

Table 3. Concentrations of State Variables in ASM2d for Influent Flow (case A)

State variables	Value	Unit
Dissolved oxygen, S _{O2}	0	mg/L
Readily biodegradable substrates, S _F	86	mg/L
Fermentable product (acetate), S _A	0	mg/L
Ammonium, S _{NH4}	25.5	mg/L
Nitrate (plus nitrite), S _{NO3}	0	mg/L
Phosphate, S _{PO4}	5.9	mg/L
Inert, non-biodegradable organics, S _I	21.5	mg/L
Alkalinity, S _{ALK}	7	mole/L
Dinitrogen, S _{N2}	0	mg/L
Inert, non-biodegradable organics, X _I	58.1	mg/L
Slowly biodegradable substrates, X _S	264	mg/L
Heterotrophic biomass, X _H	0	mg/L
Phosphorus-accumulating organisms, X _{PAO}	0	mg/L
Stored poly-phosphate of PAO, X _{PP}	0	mg/L
Organic storage products of PAO, X _{PHA}	0	mg/L
Autotrophic, nitrifying biomass, X _{AUT}	0	mg/L
Ferric-hydroxide(Fe(OH) ₃), X _{MeOH}	0	mg/L
Ferric-phosphate(FePO ₄), X _{MeP}	0	mg/L

침전공정 시뮬레이션에 사용된 모델은 Takacs et al. (1991)의 1차원 침전모델(Takacs model)과 매개변수 값을 사용하였다. 바이오가스 생산 공정 시뮬레이션을 위해서는 Batstone et al. (2002)의 IWA ADM1 모델과 매개변수 값을 사용하였으며, 시뮬레이션에 사용된 유입수의 상태변수 값은 Table 4와 같다.

Table 4. Concentrations of State Variables in ADM1 for Influent Flow (case B)

State variables	Value	Unit
Monosaccharides, S_{su}	0	kg/m ³
Amino acids, S_{aa}	0.05	kg/m ³
Total LCFA, S_{fa}	0	kg/m ³
Total valerate, S_{va}	0	kg/m ³
Total butyrate, S_{bu}	0	kg/m ³
Total propionate, S_{pro}	0	kg/m ³
Total acetate, S_{ac}	0	kg/m ³
Hydrogen, S_{h2}	0	kg/m ³
Methane, S_{ch4}	0	kg/m ³
Inorganic carbon, S_{ic}	0.006	kmole/m ³
Inorganic nitrogen, S_{in}	0.07	kmole/m ³
Soluble inerts, S_i	0.06	kg/m ³
Composite, X_c	37	kg/m ³
Carbohydrates, X_{ch}	0	kg/m ³
Proteins, X_{pr}	0	kg/m ³
Lipids, X_{li}	0	kg/m ³
Sugar degraders, X_{su}	0	kg/m ³
Amino acid degraders, X_{aa}	0	kg/m ³
LCFA degraders, X_{fa}	0	kg/m ³
Valerate and butyrate degraders, X_{c4}	0	kg/m ³
Propionate degraders, X_{pro}	0	kg/m ³
Acetate degraders, X_{ac}	0	kg/m ³
Hydrogen degraders, X_{h2}	0	kg/m ³
Particulate inerts, X_i	12	kg/m ³
Cations, S_{cat}	0.006	kmole/m ³
Anions, S_{an}	0.07	kmole/m ³

2.3 상미분방정식 해석

상미분방정식(Ordinary Differential Equation, ODE)은 테일러급수를 이용하여 풀 수 있으며, 다음의 식으로 기술할 수 있다.

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + y'(t_i)\Delta t + \frac{1}{2} y''(t_i) \Delta t^2 + \dots \quad (1)$$

$$\text{where } y'(t_i) = f(t_i, y_i) \\ \Delta t = t_{i+1} - t_i$$

여기서, Δt 를 충분히 작은 값으로 사용하면 $\frac{1}{2} y''(t_i) \Delta t^2 + \dots$ 의 값은 0으로 무시할 수 있으므로, 다음 식으로 근사할 수 있으며, 이를 Euler Method라고 한다.

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + y'(t_i)\Delta t \quad (2)$$

Euler Method는 2차 미분계수를 포함한 이후 항을 고려하지 않으므로, 상대적으로 큰 Δt 에 대해 오차가 크게 발생하게 되므로, 가능한 작은 Δt 를 사용해야 하며, 본 연구에서는 0.1분(0.00006944일)을 사용하였으며, 0.1일 간격으로 시물레이션 자료를 출력하여 분석에 사용하였다.

시물레이션 t 에서 $y'(t_i) = f(t_i, y_i)$ 를 계산하여 상태변수 미분계수, 즉 단위시간(1일) 당 상태변수 변화량 $|y'|$ 의 최대값이 허용오차(10^{-6})이내가 될 때까지 계산하도록 하였다.

2.4 뉴턴-랩슨 방법

미분방정식을 계산하여 정상상태 값을 찾는 것은 1차 도함수 $y'(t_i) = f(t_i, y_i) = 0$ 을 만족하는 y_i 를 찾는 문제로 풀 수 있다. 뉴턴-랩슨 방법은 이러한 비선형 방정식의 해를 찾는 방법으로 널리 사용되는 알고리즘이다.

ASM2d, ADM1에 대한 다변수 방정식의 1차 도함수 $y'(t_i) = f(t_i, y_i)$ 는 시간 변수 t_i 가 미분방정식 내 변수가 아니므로 다음과 같이 근사할 수 있다.

$$f'(t_i, y_i) = \frac{df(t_i, y_i)}{dy_i} \approx \frac{f(t_i, y_{i+1}) - f(t_i, y_i)}{y_{i+1} - y_i} \quad (3)$$

정상상태 $f(t_i, y_{i+1}) = 0$ 을 만족시키는 y_{i+1} 을 구하는 식을 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$y_{i+1} = y_i - \frac{f(t_i, y_i)}{f'(t_i, y_i)} \quad (4)$$

위 식은 2차 도함수 $f'(t_i, y_i)$ 를 계산하여야 하며, 다음과 같이 수학적 방법에 의해 간단히 계산할 수 있다.

$$f'(t_i, y_i) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f(t_i, y_i)}{\partial y_i} \right) = J_i \quad (5)$$

$$y_{i+1} = y_i - J_i^{-1} \cdot f(t_i, y_i) \quad (6)$$

J_i 는 Jacobian 행렬이며, J_i^{-1} 은 Jacobian 행렬의 역행렬이다. 위 식을 이용하여 $f(t_i, y_i) \approx 0$ 을 만족시키는 상태변수 y_i 를 반복적으로 추정할 수 있으며, 상미분방정식 해석과 동일하게 단위시간(1일) 당 상태변수 변화량 $|y'|$ 의 최대값이 허용오차(10^{-6})이내가 될 때까지 계산하도록 하였다.

2.5 개선된 뉴턴-랩슨 방법

최적화 알고리즘(SA 등)은 추정할 변수의 수가 증가할수록 탐색의 범위는 지수 승으로 증가하며, 무작위로 생성된 변수 간의 물질수지 관계가 맞지 않을 가능성이 매우 높다. 하지만 상미분방정식 해석으로 계산하는 경우에는 변수간 물질수지 관계를 유지하고 있기 때문에, 추정할 변수가 많은

경우, 최적화 알고리즘보다 상미분방정식 해석으로 초기값을 찾는 것이 효과적이다.

본 연구에서는 상미분방정식 해석으로 계산된 상태변수 값을 뉴턴-랩슨의 초기값으로 설정 후 뉴턴-랩슨 방법으로 정상상태값을 도출하고자 하였다. 상미분방정식 해석의 허용오차를 다르게 설정한 후 뉴턴-랩슨 수렴 정도와 연산시간을 비교하였다.

3. 연구 결과

3.1 질소·인 제거 공정

우선 질소·인 제거 공정을 대상으로 미분방정식 해석에 의해 상태변수 수렴 정도를 확인하였다. Fig. 1은 5번째 반응기 내 용존성 성분(S_O , S_F , S_{NH4})과 입자성 성분(X_I , X_{PAO} , X_H)의 농도 변화를 나타내고 있다. 용존성 성분 농도는 시뮬레이션시간 30일 이내, 용존성 성분 농도는 80일 이내에 빠르게 수렴하고 있다. 하지만 Y축을 로그단위로 표시한 아래쪽 그래프에서 보면 모든 상태변수의 값이 지속적으로 감소하고 있어, 80일 이후 천천히 수렴하고 있으며, 목표한 허용오차(10^{-6})에 도달하기 위해서는 약 200일의 시뮬레이션 시간이 필요하다.

Fig. 1. Difference Values of State Variables of ASM2d in 5th Reactor using ODE Method (case A1)

가장 늦게 수렴되는 상태변수(X_I)의 편차가 10^1 이 되는 시뮬레이션 시간 이후 모든 상태변수의 편차 변동이 적어지고, 완만한 변화의 수렴상태로 변경되는 것을 확인할 수 있다.

미분방정식 해석에 의해 상태변수의 편차 최대값이 10^5 , 10^4 , 10^3 , 10^2 , 10^1 , 10^0 이 되었을 값을 초기값으로 하여 뉴턴-랩슨 방법을 적용하여 정상상태값을 도출하였다. 각 방법에 의한 연산시간은 Table 5와 같다.

Table 5. Calculation Time of Each Method for ASM2d + Takacs Model

Case	Tolerance		Calculation time (sec.)			Improved speed (times)
	ODE	NR	ODE	NR	Total	
A1	10^{-6}	-	29.245	-	29.245	1.0
A2	10^4	10^{-6}	0.056	0.896	0.952	30.7
A3	10^3	10^{-6}	0.024	0.882	0.906	32.3
A4	10^2	10^{-6}	0.943	0.923	1.866	15.7
A5	10^1	10^{-6}	6.263	0.716	6.979	4.2
A6	10^0	10^{-6}	10.115	0.688	10.803	2.7

※ Test PC: Intel Core i7-770 CPU @ 3.6GHz

편차가 10^5 일 경우에 뉴턴-랩슨 방법으로 전환시 수렴하지 못하고 발산하였으며, 10^4 보다 작은 값을 설정하였을 경우, 뉴턴-랩슨 방법으로 수렴된 정상상태 값을 도출하였다.

뉴턴-랩슨 알고리즘 연산에 소요된 시간은 0.6~1.0초로 유사하게 측정되었으며, 미분방정식 해석에 소요되는 시간에 비례하여 전체 연산시간이 증가하였다. 편차 10^3 , 10^4 에서 뉴턴-랩슨 방법으로 전환시 미분방정식 해석만을 사용했을 때보다 연산속도가 30배 이상 증가하였으며, 이는 3.3%의 시간만으로 정상상태 값을 계산할 수 있음을 의미한다. 또한 만약 최적화 알고리즘에 소요되는 연산시간이 1일일 경우, 이를 1시간 이내로 감소시킬 수 있음을 의미한다.

Table 6은 6가지 경우에 대하여 계산된 주요 상태변수의 정상상태 값으로, ASM2d 모델 표준 해석방법의 정상상태 결과(A1)와 모두 동일한 값을 얻을 수 있었다.

Table 6. Steady-state Values of State Variables of ASM2d in 5th Reactor

Case	S_{O2} (mg/L)	S_F (mg/L)	S_{NH4} (mg/L)	S_{NO3} (mg/L)	X_{PAO} (mg/L)	X_H (mg/L)
A1	0.253946101	0.489357329	2.223863428	4.084648927	461.2880798	74.09103681
A2	0.253946101	0.489357329	2.223863428	4.084648927	461.2880798	74.09103681
A3	0.253946101	0.489357329	2.223863428	4.084648927	461.2880798	74.09103681
A4	0.253946101	0.489357329	2.223863428	4.084648927	461.2880798	74.09103681
A5	0.253946101	0.489357329	2.223863428	4.084648927	461.2880798	74.09103681
A6	0.253946101	0.489357329	2.223863428	4.084648927	461.2880798	74.09103681

Fig. 2는 case A4의 시뮬레이션 결과이며, 시간 7.2일에 편차 최대값이 10^2 이 되어 뉴턴-랩슨 방법으로 전환되고, 시뮬레이션 시간 7.4일(뉴턴-랩슨 연산 횟수 2269회를 ODE 계산 시간으로 환산한 값)에 편차가 10^6 가 되는 것을 보여주고 있다.

Fig. 2. Difference Values of State Variables of ASM2d in 5th Reactor using ODE(10^2)+NR Method (case A4)

3.2 바이오가스 생산 공정

바이오가스 생산 공정도 질소·인 제거 공정과 동일한 방법으로 알고리즘을 적용하였다. ADM1 모델의 상태변수의 단위(kg/m^3)는 ASM2d 모델의 상태변수의 단위(mg/L)보다 1/1000 작은 값을 가지므로, 목표 허용오차를 10^{-9} 로 설정하였다.

Fig. 3. Difference Values of State Variables of ADM1 in Reactor using ODE Method (case B1)

Fig. 3에서 대부분의 상태변수는 10일 이내에 빠르게 수렴하고 있으며, 가장 늦게 수렴하는 상태변수(X_I)를 기준

으로 약 50일 이후 천천히 수렴하고 있으며, 목표한 허용오차(10^{-9})에 도달하기 위해서는 약 350일의 시뮬레이션 시간이 필요하다.

미분방정식 해석에 의해 상태변수의 편차 최대값이 10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} , 10^{-6} 이 되었을 값을 초기값으로 하여 뉴턴-랩슨 방법을 적용하여 정상상태값을 도출하였다. 각 방법에 의한 연산시간을 Table 7에 나타내었다.

Table 7. Calculation Time of Each Method for ADM1 Model

Case	Tolerance		Calculation time (sec.)			Improved speed (times)
	ODE	NR	ODE	NR	Total	
B1	10^{-9}	-	26.627	-	29.245	1.0
B2	10^{-2}	10^{-9}	2.744	0.588	3.332	8.0
B3	10^{-3}	10^{-9}	6.152	0.268	6.420	4.1
B4	10^{-4}	10^{-9}	9.407	0.288	9.735	2.7
B5	10^{-5}	10^{-9}	12.831	0.226	13.057	2.0
B6	10^{-6}	10^{-9}	16.212	0.365	16.577	1.6

※ Test PC: Intel Core i7-770 CPU @ 3.6GHz

편차가 10^{-1} 일 경우에 뉴턴-랩슨 방법으로 전환시 수렴하지 못하고 발산하였으며, 10^{-2} 보다 작은 값을 설정하였을 경우, 뉴턴-랩슨 방법으로 수렴된 정상상태 값을 도출하였다. 뉴턴-랩슨 알고리즘 연산에 소요된 시간은 0.2~0.6초로 미분방정식 연산시간에 관계없이 유사하게 소요되었다.

질소·인 제거 공정과 동일하게 미분방정식 해석에 소요되는 시간에 비례하여 전체 연산시간이 증가하였으며, 편차 10^{-2} 에서 뉴턴-랩슨 방법으로 전환시 미분방정식 해석만을 사용했을 때보다 연산속도가 8배 이상 증가하였다.

Table 8은 6가지 경우에 대하여 계산된 주요 상태변수의 정상상태 값으로, ADM1 모델 표준 해석방법의 정상상태 결과(A1)와 모두 동일한 값을 얻을 수 있었으며, S_{cat} 는 모든 경우에 값이 차이가 발생하지만, 이는 상태변수의 값이 허용오차 이내의 값을 가지기 때문으로 판단되며, 발생한 오차 또한 허용 오차 이내인 것으로 확인되었다.

4. 결 론

본 연구에서는 미분방정식 해석과 뉴턴-랩슨 방법을 조합한 하이브리드 수치해석 기법을 통해 미분방정식으로 구성되는 모델의 정상상태 조건을 빠르게 도출하는 방법을 제안하였으며, 적용 결과 다음과 같은 결론을 도출하였다.

Table 8. Steady-state Values of State Variables of ADM1 in Reactor

Case	S_{H_2} (kg/m ³)	S_{CH_4} (kg/m ³)	S_{cat} (kmole/m ³)	S_{an} (kmole/m ³)	X_c (kg/m ³)	X_l (kg/m ³)
B1	2.37361E-07	0.056762498	8.06010E-11	0.003094311	0.179773327	24.27691043
B2	2.37362E-07	0.056762498	1.60582E-09	0.003094311	0.179773327	24.27691043
B3	2.37362E-07	0.056762498	1.80624E-09	0.003094311	0.179773327	24.27691043
B4	2.37362E-07	0.056762498	1.56576E-09	0.003094311	0.179773327	24.27691043
B5	2.37362E-07	0.056762498	1.62626E-09	0.003094311	0.179773327	24.27691043
B6	2.37362E-07	0.056762498	1.54415E-09	0.003094311	0.179773327	24.27691043

- (1) 미분방정식 해석 방법의 후반부 수렴속도가 느려지는 것을 뉴턴-랩슨 방법을 적용하여 수렴 속도를 개선할 수 있으며, 뉴턴-랩슨 방법의 단점인 유효한 초기값 설정 문제를 미분방정식 해석 값을 사용함으로써 해결 가능하다.
- (2) 제한한 수치해석 기법은 미분방정식 해석만을 사용할 경우와 비교하여 질소·인 제거 공정 모델에 대해서는 최대 32.3배, 바이오가스 생산 공정에 대해서는 8배의 연산 시간을 감소시킬 수 있었다.
- (3) 본 연구에서 제시한 수치해석 기법을 적용하여 단위 공정모델의 연산시간 감소를 통해 공정 최적화 연산 시간을 감소시킬 수 있을 것으로 판단된다.
- (4) 본 연구에서 설정한 최적 연산 조건은 특정한 운전조건에서 도출된 값으로, 다양한 조건에서의 평가하여 범용적으로 적용 가능한 설정값을 도출하여야 한다.

감사의 글

본 연구는 2015년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구과제입니다(No.20153010091980).

References

- Batstone, D.J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S.V., Pavlostathis, S.G., Rozzi, A., et al. (2002). Anaerobic digestion model No.1 (ADM1). *Water Sci. Technol.*, Vol. 45, No. 10, pp. 65-73.
- Flores-Alsina, X., Kazadi Mbamba, C., Solon, K., Vrecko, D., Tait, S., Batstone, D., et al. (2015). A plant-wide aqueous phase chemistry module describing pH variations and ion speciation/pairing in wastewater treatment process models. *Water Res.*, Vol. 85, pp. 255-265.
- Henze, M., Gujer, W., Mino, T. and van Loosdrecht, M.C.M. (2000). *Activated sludge models: ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. IAWPRC Scientific and Technical Report No. 9. IWA Publishing, London, UK.
- Jeppsson, U., Rosen, C., Alex, J., Copp, J., Gernaey, K.V., Pons, M.-N., et al. (2006). Towards a benchmark simulation model for plant-wide control strategy performance evaluation of WWTPs. *Water Sci. Technol.*, Vol. 53, No. 1, pp. 287-295.
- Kim, H., Kim, Y., Hoang, T.Q., Baek, G., Kim, S., and Kim, C. (2013). Application of real-time feedback control strategies based on effluent NH_4-N and NO_3-N concentrations in an A^2/O process. *Korean J. Chem. Eng.*, Vol. 30, No. 8, pp. 1578-1587.
- Kim, H.S., Kim, Y.J., Cheon, S.P., Baek, G.D., Kim, S.S., and Kim, C.W. (2012). Evaluation of model-based control strategy based on generated setpoint schedules for NH_4-N removal in a pilot-scale A^2/O process. *Chem. Eng. J.*, Vol. 203, pp. 387-397.
- Kim, M., Kim, Y., Kim, H., Piao, W., and Kim, C. (2016). Operator decision support system for integrated wastewater management including wastewater treatment plants and receiving water bodies. *Environ. Sci. Pollut. Res. Int.*, Vol. 23, No. 11, pp. 10785-10798.
- Mauritsson, G. (2013). *Simulation of Wastewater treatment plants modeled by a system of nonlinear ordinary and partial differential equations*. Master's thesis, Lund University, Lund, Sweden.
- Piao, W., Kim, C., Cho, S., Kim, H., Kim, M., and Kim, Y. (2016). Development of a protocol to optimize electric power consumption and life cycle environmental impacts for operation of wastewater treatment plant. *Environ. Sci. Pollut. Res. Int.*, Vol. 23, No. 24, pp. 25451-25466.

Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A., and Vetterling, W.T. (1992). *Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing* (2nd ed). Cambridge University Press, New York, USA.

Reiger, L., Gillot, S., Langergraber, G., Ohtsuki, T., Shaw, A., Takács, I., et al. (2013). *Guidelines for using activated sludge models*. Scientific and Technical Report No. 22, IWA Publishing, London, UK.

Takács, I., Patry, G.G., and Nolasco, D. (1991). A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Res.*, Vol. 25, No. 10, pp. 1263-1271.

Received	■	May 4, 2018
Revised	■	May 8, 2018
Accepted	■	May 23, 2018