

미세조류 생물반응기 시스템의 민감도분석을 위한 최적입력설계 및 모델예측제어

유성진 · 오세규 · 이종민[†]

서울대학교 화학생명공학부, 화학공정 신기술 연구소
151-744 서울시 관악구 관악로 1
(2012년 9월 19일 접수, 2012년 10월 22일 채택)

Sensitivity Analysis with Optimal Input Design and Model Predictive Control for Microalgal Bioreactor Systems

Sung Jin Yoo, Se-Kyu Oh and Jong Min Lee[†]

*School of Chemical and Biological Engineering, Institute of Chemical Processes, Seoul National University,
1 Gwanak-ro, Gwanak-gu, Seoul 151-744, Korea
(Received 19 September 2012; accepted 22 October 2012)*

요 약

미세조류는 바이오연료를 생산하기 위해 필요한 성분인 지방질의 생산성이 우수하기 때문에 바이오연료의 유망한 원료로서 최근 많은 주목을 받고 있다. 본 연구에서는, 이러한 미세조류의 성장 속도와 미세조류 내부의 지방의 함량이 최대가 되도록 하기 위한 목적으로, 미세조류의 성장과 지방의 생성을 설명하는 제일원리(first principle)에 근거한 상미분방정식(ODE) 모델에 대하여 조사하였다. 모델은 6개의 상태변수와 12개의 파라미터로 이루어져 있으며, 미세조류의 성장을 영양분의 흡수와 흡수된 영양분에 의한 성장으로 두 단계로 나누어 설명한 Droop 모델의 가정을 따른다. 본 연구에서는 민감도 분석(Sensitivity analysis)을 위한 최대의 정보를 줄 수 있는 입력 신호를 결정하기 위해 D-optimality criterion을 이용한 최적 입력 설계(Optimal input design)를 수행하였으며, 구하여진 입력 신호를 적용하여 민감도 분석을 수행하여 모델에 좀 더 중요한 파라미터를 결정하였다. 또한 미세조류의 성장속도와 지방의 함량이 최대가 되도록 하기 위하여 모델 예측 제어(MPC)를 수행하였다.

Abstract – Microalgae have been suggested as a promising feedstock for producing biofuel because of their potential of lipid production. In this study, a first principles ODE model for microalgae growth and neutral lipid synthesis proposed by Surisetty et al. (2010) is investigated for the purpose of maximizing the rate of microalgae growth and the amount of neutral lipid. The model has 6 states and 12 parameters and follows the assumption of Droop model which explains the growth as a two-step phenomenon; the uptake of nutrients is first occurred in the cell, and then use of intracellular nutrient to support cells growth. In this study, optimal input design using D-optimality criterion is performed to compute the system input profile and sensitivity analysis is also performed to determine which parameters have a negligible effect on the model predictions. Furthermore, model predictive control based on successive linearization is implemented to maximize the amount of neutral lipid contents.

Key words: Microalgae, Optimal Input Design, Droop Model, Sensitivity Analysis, Model Predictive Control

1. 서 론

미세조류(Microalgae)는 식물성 플랑크톤으로서 빛을 에너지원으로 이산화탄소를 고정화하는 광합성 특성을 가지고 있으며, 지방 생산성이 높아서 바이오디젤의 원료로서 이용이 가능하다. 미세조류 내의 지방의 함량은 종에 따라 15%에서 77%까지 다양하며 주변 환경의 영향을 받아서 다양한 분포를 가진다[1]. 비록 미세조류의 지방

생산성이 좋이나 환경에 따라 다양한 분포를 갖지만, 일반적으로 미세조류는 성장속도가 빠르고 많은 지방을 함유할 수 있기 때문에 바이오디젤의 원료로서 장점을 가진다[2,3]. 그러나 이러한 장점에도 불구하고 미세조류로부터 얻어진 바이오디젤의 상업화에는 아직 문제점이 남아 있는데, 이는 다른 식물자원으로부터 얻은 바이오디젤이나 기존의 석유자원에 비해서 경제성이 떨어지기 때문이다. 이러한 미세조류 유래 바이오디젤이 가격 경쟁력을 갖기 위해서는 미세조류의 성장속도를 증가시키거나 미세조류 내 지방의 함량을 증가시키는 등 배양 생산성을 높이는 방향으로의 연구가 필요하며, 모델에 기반한 최적 제어 시스템 개발이 경제성을 높이기 위한 한가지 대안

[†]To whom correspondence should be addressed.
E-mail: jongmin@snu.ac.kr

[‡]이 논문은 KAIST 박선원 교수님의 정년을 기념하여 투고되었습니다.

이 될 수 있다[1].

하지만 이러한 모델 기반 제어 기법을 생물반응기 시스템에 적용하는 데에는 몇 가지 어려움이 있는데, 생물반응기 시스템의 경우 모델이 매우 비선형적이며 구조가 불확실하고, 복잡한 모델의 파라미터나 상태를 측정하거나 추정하기가 쉽지 않으며, 또한 세포 내부의 대사과정을 거쳐야 하므로 이에 따른 공정의 응답이 느리고, 대사과정이 공정에 미치는 영향을 이해하기가 쉽지 않다.

생물반응기 내의 세포의 성장을 설명하기 위해 50개가 넘는 모델들이 여러 문헌을 통해 제시되어 왔으며, 미생물의 성장을 설명해주는 최초의 모델은 Monod에 의해 처음 제안이 되었다[4]. 이 모델은 세포의 성장이 세포 밖 배양액의 영양분의 소비속도에 비례한다는 가정에 바탕을 두고 있으나, 이 모델은 광합성 해조류의 실험 데이터와는 잘 맞지 않았고 이에 Droop은 해조류의 성장을 두 단계로 설명한 새로운 접근법을 제시하였다[5]. 첫 단계에서는 영양분이 세포 내로 흡수되고, 두 번째 단계에서 흡수된 양분을 이용한 세포의 성장을 가정하였다. Caperon-Meyer가 제시한 모델은 Droop 모델을 조금 확장시켜 영양분이 세포 내로 흡수되기 위한 세포외부의 최소 농도 개념을 도입하였으며[6], 최근에 Surisetty는 Caperon-Meyer 모델을 좀 더 발전시켜 성장속도가 탄소와 질소 성분의 농도에 동시에 영향을 받는 형태의 모델을 제안하였는데 이 모델은 세포의 성장을 더 정확하게 설명할 수 있지만 확인해야 하는 파라미터의 수가 많다[7].

따라서 본 연구에서는 Surisetty의 모델을 대상으로 중요 파라미터를 찾기 위한 가장 많은 정보를 줄 수 있는 입력 신호를 최적 입력 설계 (Optimal input design)를 통해 구하였고, 구하여진 입력량을 적용하여 민감도 분석(Sensitivity analysis)을 통해 중요 파라미터를 결정하였다. 또한 미세조류의 성장속도와 미세조류로부터 생성되는 지방의 양을 제어하고 최적화하기 위하여 successive linearization에 기반한 모델 예측 제어(MPC)를 수행하였다. 대부분의 모델에 기반한 제어 알고리즘은 선형 모델에 기반하고 있는데 이는 최적화나 제어에 필요한 여러 가지 기법들을 이용할 수 있기 때문이다[8]. 그러나 대부분의 화학공정들은 매우 비선형적이며 넓은 범위의 운전 범위를 가지고 있고, 따라서 비선형 모델을 이용하는 비선형 MPC(NLMPC) 기법의 개발이 필요하게 되었다. 이러한 기법들 중에서, 비선형 모델의 successive linearization (nonlinear quadratic dynamic matrix control (NLQDMC))기법은 상대적으로 계산요구량이 적어서 산업계에서 많은 응용이 되어 왔다[9]. 본 연구에서는, NLQDMC 기법의 미세조류 배양 생물반응기 시스템에 적용 가능성을 알아보았다.

2. 미세조류 생물반응기 모델

본 연구에서 사용된 미세조류 생물반응기 모델을 Table 1에 나타내었다. 미세조류의 성장을 설명하기 위한 모델은 그 동안 많이 제안되어 왔지만 주로 미세조류 자체의 성장에 관한 모델이 많았으며, 바이오디젤로 변환 가능한 지방 성분까지 포함 한 모델은 많지 않았다. 최근 들어 미세조류가 바이오디젤의 원료로 주목을 받기 시작하면서 지방성분까지 포함하는 모델에 대한 연구도 많이 진행이 되고 있으며, 본 연구에서 사용된 Surisetty의 모델의 경우 이러한 지방의 생성을 설명해 주는 항을 포함하며, 미세조류의 성장을 위해 탄소 성분과 질소성분을 영양분으로 공급해 주는 시스템을 설명해 주는 모델이다. 이렇게 미세조류를 영양분을 공급해주어 heterotrophic하게 배양할 경우 미세조류 내 지방의 함량을 높일 수 있다는 연구가 있다[2].

Table 1. Microalgal bioreactor model

$\mu = \mu_m \left(\frac{q - q_m}{K_q + q} \right) \left(\frac{S_2}{K_s + S_2} \right)$	(1)
$\rho = \rho_m \left(1 - \frac{S_0}{S_1} \right)^{1+\varepsilon}$	(2)
$\pi = \pi_m \frac{S_2}{K_\pi + S_2} \left(1 - \frac{I_p}{X} \right)$	(3)
$\frac{dx}{dt} = \mu x - x \frac{f_0}{V} - x(f_1^i + f_2^i - f_0) \frac{1}{V}$	(f ₁)
$\frac{dS_1}{dt} = -\rho x + S_1 \frac{f_1^i}{V} - S_1 \frac{f_0}{V} - S_1(f_1^i + f_2^i - f_0) \frac{1}{V}$	(f ₂)
$\frac{dS_2}{dt} = -\frac{1}{Y_{xs}} \mu x - S_2 \frac{f_2^i}{V} - S_2 \frac{f_0}{V} - k_m x - \frac{1}{Y_{ps}} \pi x - S_2(f_1^i + f_2^i - f_0)$	(f ₃)
$\frac{dQ}{dt} = \rho x - \frac{1}{Y_{xq}} \mu x - Q \frac{f_0}{V} - Q(f_1^i + f_2^i - f_0) \frac{1}{V}$	(f ₄)
$\frac{dI_p}{dt} = \pi x - I_p \frac{f_0}{V} - I_p(f_1^i + f_2^i - f_0) \frac{1}{V}$	(f ₅)
$\frac{dV}{dt} = f_1^i + f_2^i - f_0$	(f ₆)
$Y(t) = \begin{bmatrix} X & S_1 & S_2 & \frac{I_p}{X} \end{bmatrix}^T$	(y)

Table 1의 모델은 6개의 상태변수와 12개의 파라미터로 구성되어 있으며 식 f₁-f₆는 각각 연속 생물반응기 시스템의 물질 수지식을 나타낸다. 6개의 상태변수는 각각 1) x: 활성 바이오매스의 농도(g/ml), 2) S₁: 배양액 내의 질소 성분의 농도(g/ml), 3) S₂: 배양액 내의 탄소 성분의 농도(g/ml), 4) Q: 세포 내에 흡수된 질소 성분의 농도(g/ml), 5) I_p: 세포 내에 저장된 지방질의 농도(g/ml), 6) V: 총 부피(ml)를 나타낸다.

이 모델에서 Table 1의 미세조류 성장속도(μ)는 세포 내의 질소분율($q=Q/X$)과 배양액 내의 탄소 성분의 농도(S₂)에 영향을 받으며 탄소 성분의 경우 Michaelis-Menten 관계를 따르고, 배양액 내 질소 성분은 Droop의 가정을 따라서 질소 성분이 먼저 세포 내에 흡수되고, 흡수된 질소 성분에 의한 성장을 가정하였다. 질소 성분의 세포 내

Table 2. Nominal parameter values and known quantities

Parameters			
Parameter	Name	Value	Unit
μ_m	Maximum growth rate	0.15	1/h
q_m	Minimum cell quota for supporting growth	0.027	g/g
K_q	Half saturation constant of nitrogen quota	0.5	g/g
ρ_m	Maximum uptake rate	0.08	1/h
K_s	Half saturation constant of glucose for growth	0.014	g/ml
S_0	Threshold substrate concentration	1.8e-5	g/ml
$1/Y_{xs}$	Inverse of biomass to substrate yield	1.8	
k_m	Maintenance constant	0	
$1/Y_{ps}$	Inverse of product to substrate yield	2.5	
π_m	Maximum oil production rate	0.05	1/h
K_π	Half saturation constant for oil production	0.01	g/ml
$1/Y_{xq}$	Inverse of biomass to substrate quota yield	0.03	
Known quantities			
S_1^i	Nitrogen source concentration in inlet feed 1	0.01	g/ml
S_2^i	Carbon source concentration in inlet feed 2	0.2	g/ml
ε	Perturbation factor	0.001	

부로의 흡수속도(ρ)는 배양액 내의 질소 성분의 농도(S_1)에 영향을 받으며 영양분의 흡수가 일어나는 최소 질소 농도(S_0)와 관계 있다 [6]. 미세조류의 지방 생성이 질소가 부족한 조건에서 증가하는 경향이 있기 때문에, 지방의 생성 속도(π)는 배양액 내의 탄소성분에만 영향을 받는다고 가정하였다. 생물 반응기 내의 입력변수는 질소성분 공급유량(f_1^i)과 탄소성분 공급유량(f_2^i), 배출량(f_0)이며, fed-batch 운전을 가정하여 $f_0=0$ 로 설정하였다. 파라미터들의 nominal 값들은 Table 2에 나타내었다[7].

3. 최적 입력 설계(Optimal input design)

공정결과에 중요한 영향을 미치는 키 파라미터를 찾기 위하여 파라미터 민감도 분석을 수행 시, 가장 많은 정보를 줄 수 있는 입력 신호를 결정하기 위하여 최적 입력 설계를 수행하였다. 본 연구에서는 최적의 입력 신호를 계산하기 위하여 D-optimality criterion 방법을 적용하였으며, 구하는 방법은 다음과 같다[10,11].

다음 식 (1)의 각 항들을 살펴보면, 각각의 항들은 $\partial z_i / \partial P_{i,k}$ 로서 각 상태변수들이 샘플링 시간(t_k)에 파라미터에 얼마나 영향을 받는지를 나타내는 sensitivity 식들이며, 본 연구에서의 샘플링 시간은 4시간으로 설정하였다.

$$\tilde{Z} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial z_1}{\partial P_1} \right)_{t_1} \cdots \left(\frac{\partial z_1}{\partial P_{12}} \right)_{t_1} \\ \left(\frac{\partial z_6}{\partial P_1} \right)_{t_1} \cdots \left(\frac{\partial z_6}{\partial P_{12}} \right)_{t_1} \\ \vdots \\ \left(\frac{\partial z_1}{\partial P_1} \right)_{t_f} \cdots \left(\frac{\partial z_1}{\partial P_{12}} \right)_{t_f} \\ \vdots \\ \left(\frac{\partial z_6}{\partial P_1} \right)_{t_f} \cdots \left(\frac{\partial z_6}{\partial P_{12}} \right)_{t_f} \end{bmatrix} \quad (1)$$

여기서 $\tilde{Z}$ 행렬의 각각의 항들($\partial z / \partial P$)은 chain rule을 이용하여 구한 식 (2)를 적분함으로써 계산할 수 있다. 여기서 t 는 Table 1에 제시

되어 있는 함수를 나타낸다.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial z}{\partial P} \right) = \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial P} + \frac{\partial f}{\partial P} \quad (2)$$

이러한 과정을 통해 $\partial z / \partial P$ 항을 구하면, $\partial y / \partial P$ 항도 chain rule을 이용하여 식 (3)을 이용해 계산 할 수 있다.

$$\frac{\partial y}{\partial P} = \frac{\partial g}{\partial P} + \frac{\partial g}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial P} \quad (3)$$

$\partial z / \partial P$ 항을 계산함으로써, 출력변수의 sensitivity 행렬(Z)는 다음 식 (4)와 같이 표현 할 수 있고,

$$Z = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial y_1}{\partial P_1} \right)_{t_1} \cdots \left(\frac{\partial y_1}{\partial P_{12}} \right)_{t_1} \\ \left(\frac{\partial y_4}{\partial P_1} \right)_{t_1} \cdots \left(\frac{\partial y_4}{\partial P_{12}} \right)_{t_1} \\ \vdots \\ \left(\frac{\partial y_1}{\partial P_1} \right)_{t_f} \cdots \left(\frac{\partial y_1}{\partial P_{12}} \right)_{t_f} \\ \vdots \\ \left(\frac{\partial y_4}{\partial P_1} \right)_{t_f} \cdots \left(\frac{\partial y_4}{\partial P_{12}} \right)_{t_f} \end{bmatrix} \quad (4)$$

각 항들은 각각 샘플링 타임 t_k 에 시스템 결과에 미치는 파라미터의 영향을 나타낸다. 샘플링 타임을 4시간마다 총 360시간 동안 배양한다고 하였을 때, Z 행렬은 360×12 크기의 행렬이 된다.

최적의 입력 신호(u^*)는 다음 식 (5)와 같이($Z^T Z$)의 행렬식(Determinant)이 최대가 되도록 최적화 문제를 계산 함으로써 구할 수 있다.

$$u^* = \arg \max_{u_1 \dots u_f} |Z^T Z| \quad (5)$$

여기서($Z^T Z$)는 12×12 크기의 information 행렬을 의미하는데, 각각의 항들은 각 파라미터가 t_1 부터 t_f 까지 전 시간 범위에서 모든 출

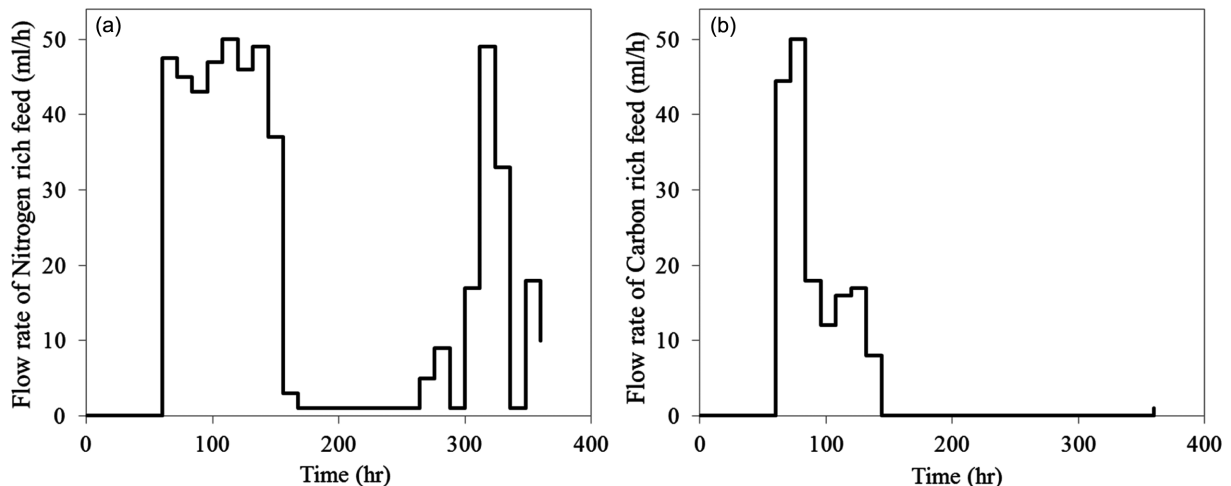


Fig. 1. Designed optimal input signals. ((a) flow rate of nitrogen rich feed; (b) flow rate of carbon rich feed).

력변수 $y_1 \sim y_4$ 에 미치는 영향에 관한 정보를 포함하고 있다. 이러한 information 행렬을 최대화해야 하는데, 이러한 행렬의 최대값을 계산하기 위하여 사용하는 통계적인 방법으로 A-optimality ("average" or trace), D-optimality (determinant), E-optimality (eigenvalue), V-optimality (variance) 등 여러 가지 방법들이 있다. 이 중 가장 많이 사용되는 방법이 D-optimality criteria로서 information 행렬의 행렬식이 최대가 되는 값을 구하는 것이다[12]. 입력의 변화주기는 12시간마다 변화하도록 설정을 하였고, 따라서 최적화 계산을 통해 구하는 입력변수($u_1, \dots, u_p$)의 수는 52개 이고, 최적화 문제는 Matlab의 "Pattern search tool" 방법을 이용하여 계산을 하였다. 계산된 최적의 입력 신호는 Fig. 1과 같다.

4. 파라미터 민감도 분석(Sensitivity analysis)

일반적으로 모델의 모든 파라미터들이 모델의 예측에 중요한 영향을 주는 것은 아니며, 따라서 미세조류 배양 생물반응기 시스템의 최적의 모델 기반 제어를 위해서는 추정해야 하는 파라미터의 수를 줄이는 것이 중요하다[10]. 본 연구에서는 미세조류 배양 시스템에 어떤 파라미터가 중요 파라미터로 작용하는지 결정하기 위하여 민감도 분석을 수행하였다. 일반적으로 사용되는 민감도 분석 방법은 gradient-based 방법으로 식 (6)과 같다. 이 방법은 파라미터의 nominal 값(P^*)에서 계산되기 때문에 local 민감도 분석법이라고도 부른다[13].

$$S_{ij} = \frac{\partial y_i / y_i}{\partial P_j / P_j} \bigg|_{P^*} \quad (6)$$

그러나 실제에서는 파라미터 값이 불확실하거나 알려지지 않은 경우가 많고, 오직 파라미터 값의 범위만을 이용할 수 있는 경우가 많기 때문에, 이러한 경우에 local 민감도 분석을 통해서 모델의 중요 파라미터를 확인하는 것은 충분하지 않으며, 따라서 파라미터 값에

영향을 받지 않는 Global 민감도 분석 기술이 주목을 받고 있다 [13,14]. Global 민감도 값의 계산을 위한 한 가지 방법은 파라미터 값의 범위 내에서 무작위로 여러 파라미터 값을 선택한 후, 모든 경우에 대하여 local 민감도 분석을 수행한 후 평균을 하는 것이며 식 (7)과 같다.

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sample}} S_{ij}(k)}{N_{sample}} \quad (7)$$

본 연구에서는 파라미터의 범위 내에서 1,000개의 무작위로 선택된 파라미터 값들에 대하여 global 민감도 분석을 수행하였다. Fig. 2와 Table 3에 그 결과를 나타내었으며, 각각의 값들은 파라미터가 공정결과에 미치는 영향을 나타내주는 global 민감도 분석 결과로서 1,000번의 선택된 파라미터에 대해서 평균한 결과이다. 그래프에서 확인 가능하듯이 u_m , K_q , ρ_m , K_s , S_0 5개의 파라미터가 공정 결과에 좀 더 중요한 영향을 미치는 것을 확인할 수 있었고, 따라서 이 5개의 파라미터를 모델의 키 파라미터로 결정하였다. 이렇게 구하여진 중요 파라미터는 파라미터 추정 시 추정해야 하는 파라미터의 수를 줄여 줌으로써 계산상의 이점을 줄 수 있다.

5. 모델 예측 제어(Model Predictive Control)

미세조류의 성장속도와 미세조류로부터 생성되는 오일의 양을 제어하고 최적화하기 위하여 successive linearization에 기반한 모델 예측 제어(MPC)를 Table 2에 제시된 미세조류 생물반응기 모델에 대하여 수행하였다. 모델 예측 제어를 이용하여 최대화 하고자 하는 출력(Output) 값은 바이오매스의 양(X)과 지방의 함량(I_p/X)이며, 질소 성분의 유량과 탄소성분의 유량을 조절하여 제어하고자 하였다. 목적함수는 식 (8)에서와 같이 바이오매스의 양과 지방 함량의 설정값과 예측된 출력 값의 차이가 최소가 되도록, 그리고 입력변수의 변화량이 최소가 되도록 계산하는데, 본 연구에서는 바이오매스의 양과 지방의 함량이 최대가 되도록 하는 것이므로 설정값은 두지 않고, 바이오매스의 양과 지방의 함량이 최대가 되도록 설정하였다.

$$\begin{aligned} \min_{\Delta u} A+B \\ A = \sum_{i=1}^p \begin{bmatrix} r(k+1|k)-y(k+1|k) \\ r(k+2|k)-y(k+2|k) \\ \vdots \\ r(k+p|k)-y(k+p|k) \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} Q & & \\ & Q & \\ & & \ddots \\ & & & Q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r(k+1|k)-y(k+1|k) \\ r(k+2|k)-y(k+2|k) \\ \vdots \\ r(k+p|k)-y(k+p|k) \end{bmatrix} \\ B = \sum_{l=0}^{m-1} \begin{bmatrix} \Delta u(k|k) \\ \Delta u(k+1|k) \\ \vdots \\ \Delta u(k+m-1|k) \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} R & & \\ & R & \\ & & \ddots \\ & & & R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u(k|k) \\ \Delta u(k+1|k) \\ \vdots \\ \Delta u(k+m-1|k) \end{bmatrix} \quad (8) \end{aligned}$$

식 (8)에서 $y(k+i|k)$ 는 k 시간에 이용 가능한 정보로부터 계산된 바

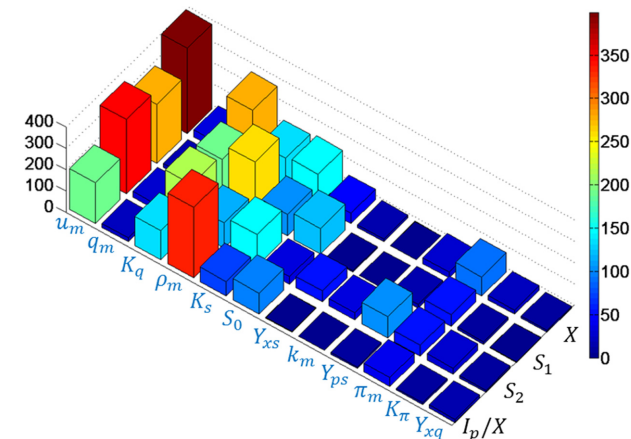


Fig. 2. Results of global sensitivity analysis.

Table 3. Results of global sensitivity analysis

90.35	μ_m	q_m	K_q	ρ_m	K_s	S_0	Y_{xs}	k_m	Y_{ps}	π_m	K_π	Y_{xq}
X	399.49	32.82	278.32	136.73	147.35	48.40	12.83	0.55	27.69	89.23	19.66	7.43
S_1	278.21	16.97	187.82	260.43	101.59	118.98	4.47	0.16	16.14	54.76	11.73	3.02
S_2	347.21	27.52	212.84	116.20	146.51	34.37	52.40	33.49	101.56	52.45	28.82	10.36
I_p/X	191.12	18.96	136.91	330.85	68.77	98.69	2.02	0.10	6.88	40.57	8.38	15.03

이오매스의 양과 지방의 함량이며, $u(k+1|k)$ 는 k 시간에 이용 가능한 정보로부터 계산된 질소와 탄소성분의 유량(input)이고, $\Delta u(k+1|k) = u(k+1|k) - u(k+1-1|k)$ 이다. Q와 R은 목적함수의 weighting 행렬로서, 예측된 바이오매스의 양과 지방의 함량이 최대가 되는 것에 중요도를 더 주기 위하여 5로 설정을 하였고, 입력변수의 변화량을 줄이는 것에는 상대적으로 적은 중요도를 주기 위하여 1로 설정하였다. 모델예측제어를 수행함에 있어서 예측 범위 P와 제어 범위 M을 어떻게 설정하느냐는 중요한 문제이며, 예측범위 P와 제어범위 M을 크게 잡을수록 정확한 예측을 할 수 있지만 계산시간이 길어진다는 문제점이 있으며, 예측범위 P를 작게 잡으면 계산상의 이점은 있지만 시스템의 dynamics를 제대로 반영하지 못한다는 문제점이 있다. 일반적으로 계산의 수월성을 위해 제어범위 M은 예측범위 P보다 작게 설정을 하며, 예측범위 P는 시스템이 정상상태에 도달하는 시점 정도로 크게 설정을 한다. 본 연구에서는 이러한 점들을 고려하여 예측범위 P와 제어범위 M을 각각 15와 6으로 설정하였다.

5-1. 다단계(multi-step) 예측 방정식

식 (8)에서 예측된 출력(바이오매스의 양, 지방 함량)값 $y(k+i|k)$ 는 다음 식 (9)로부터 계산할 수 있다. 본 연구에서는 식 (9)의 feedback 항은 무시하였는데 이는 모델로부터 계산한 바이오매스의 양과 지방 함량 ($\hat{y}(k|k)$)이 실제 측정 장치로부터 측정된 값($y_m(k)$)과 같다고 가정하였기 때문이며, 외란의 영향도 거의 드물게 영향을 받는다고 가정하여서 feedforward 항도 역시 무시하였다.

$$\begin{bmatrix} y(k+1|k) \\ y(k+2|k) \\ \vdots \\ y(k+p|k) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \hat{y}(k+1|k) \\ \hat{y}(k+2|k) \\ \vdots \\ \hat{y}(k+p|k) \end{bmatrix}}_{\text{effect of past input}} + \underbrace{\begin{bmatrix} S_1^d \\ S_2^d \\ \vdots \\ S_n^d \end{bmatrix} \Delta d(k)}_{\text{feedforward term}} + \underbrace{\begin{bmatrix} y_m(k) - \hat{y}(k|k) \\ y_m(k) - \hat{y}(k|k) \\ \vdots \\ y_m(k) - \hat{y}(k|k) \end{bmatrix}}_{\text{feedback term}} + \underbrace{\begin{bmatrix} S_1^u & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \\ S_m^u & S_{m-1}^u & \cdots & S_1^u \\ \vdots & \vdots & & \\ S_p^u & S_{p-1}^u & \cdots & S_{p-m+1}^u \end{bmatrix}}_{\text{dynamic matrix}(S_u)} \underbrace{\begin{bmatrix} \Delta u(k|k) \\ \Delta u(k+1|k) \\ \vdots \\ \Delta u(k+m-1|k) \end{bmatrix}}_{\text{future input moves}} \quad (9)$$

Table 2의 미세조류 배양 생물반응기 모델은 간단하게 식 (10)과 같이 표현할 수 있으며,

$$\begin{aligned} \dot{z} &= f(z, u) \\ y &= g(z) \end{aligned} \quad (10)$$

이 미분방정식을 매 샘플 시간마다 1차 근사에 의해 선형화하면 식 (11)과 같이 상태공간 방정식(state-space equation)으로 표현이 가능하다.

$$\begin{aligned} \dot{z} &= A^c z + B^c u \\ y &= C^c z \end{aligned} \quad (11)$$

$$A^c = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial z_1} & \frac{\partial f_1}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_6} \\ \frac{\partial f_2}{\partial z_1} & \frac{\partial f_2}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_6} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_6}{\partial z_1} & \frac{\partial f_6}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial f_6}{\partial z_6} \end{bmatrix}, B^c = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1} & \frac{\partial f_1}{\partial u_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial u_1} & \frac{\partial f_2}{\partial u_2} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_6}{\partial u_1} & \frac{\partial f_6}{\partial u_2} \end{bmatrix}, C^c = \begin{bmatrix} \frac{\partial g}{\partial z_1} & \frac{\partial g}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial g}{\partial z_6} \end{bmatrix} \quad (12)$$

이 연속시간 상태공간 시스템을 이산시간 상태공간 시스템으로 변환을 하면 식 (13)이 얻어진다.

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= Ax_k + Bu_k \\ y_k &= Cx_k \end{aligned} \quad (13)$$

이를 이용하여, dynamic matrix (S_u)는 매 샘플 시간마다 중첩의 원리(principle of superposition)에 의하여 계산될 수 있다. 개루프 예측 벡터 $\hat{y}(k+i|k)$ 는 미분방정식을 매 샘플 시간마다 적분하여 계산할 수 있으며, Matlab의 ODE Solver (ODE23s)를 이용하여 계산하였다.

5-2. 모델 예측 제어 결과

5.1장에서부터 예측된 바이오매스 양과 지방의 함량에 관한 식을 얻을 수 있으며 이를 식 (8)에 대입함으로써 최적화 문제에 관한 식으로 표현할 수 있다. 이 최적화 문제를 풀기 위하여 식 (8)의 목적함수를 식 (14)의 quadratic program의 형태로 변화시켜 주면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \min_{\Delta u} & \{ \epsilon^T(k) \bar{Q} \epsilon(k) - \underbrace{2\epsilon^T(k) \bar{Q} S^u}_{g^T} \Delta u(k) \\ & + \Delta u^T(k) \underbrace{(S^{uT} \bar{Q} S^u + \bar{R})}_H \Delta u(k) \end{aligned} \quad (14)$$

(H: Hessian matrix, g: gradient vector, Δu : decision variable, $\epsilon(k) = R(k+1|k) - Y(k+1|k) - S^d \Delta d(k) - I_p(y(k) - \hat{y}(k|k))$)

여기에서 Hessian H는 constant한 행렬인 반면 gradient vector g(k)는 매시간마다 업데이트 되어야 하며, 입력변수의 제약조건은 다음 식 (15)와 같이 추가하였다. 본 연구에서 u_{min} , u_{max} , Δu_{max} 는 각각 0, 50, 10으로 설정하였다.

$$\begin{aligned} u_{min} &\leq u(k+1|k) \leq u_{max} \\ |\Delta u(k+1|k)| &\leq \Delta u_{max}, \quad 1=0, \dots, m-1 \end{aligned} \quad (15)$$

이렇게 계산되는 제어 이동은 다음과 같은 receding horizon 방법에 따라 수행된다. 먼저, 시간 k에서 예측 범위의 시간 단계 P까지의 최적화 문제를 계산한다. 다음으로, 계산된 입력변수 변화량 중에서 첫 번째 변화 Δu_k 만 실제로 수행하여 다음 단계의 출력 값을 계산하게 된다. 다음 샘플 시간에서는 k+1 시간이 현재 시간이 되어 앞의 과정을 다시 반복하여 최적화 문제를 계산한다. 이와 같이 수행한 모델 예측 제어 결과는 Fig. 3과 같다. 미세조류 배양 공정의 반응 응답이 매우 느리기 때문에 샘플링 타임은 12시간으로 설정하였다. Fig. 3에서 점선(빨간색) 그래프는 각각 질소성분의 유량을 5로 고정하고 탄소성분 유량을 7로 고정했을 때의 바이오매스의 양과

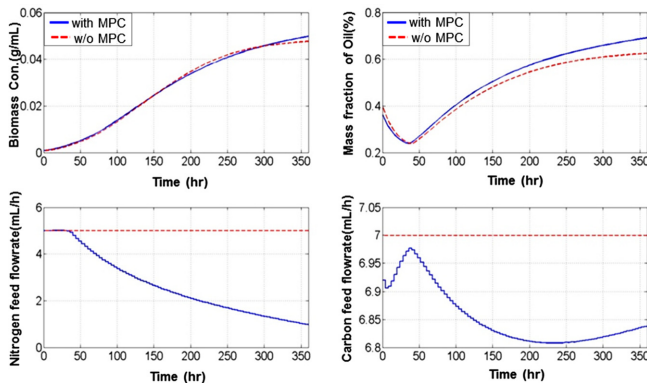


Fig. 3. Results of model predictive control.

지방의 함량의 변화 그래프이고, 실선(파란색) 그래프는 질소와 탄소 성분 유량을 각각 5와 7에서 시작하여 MPC를 통해 바이오매스의 양과 지방의 함량이 최대가 되도록 계산하여 얻어진 입력(input)과 이 입력을 적용하여 얻어진 출력을 나타낸다. 그래프에서 보는 바와 같이 MPC를 이용하여 계산된 입력량을 적용하였을 경우 바이오매스의 양과 지방의 함량을 좀 더 높일 수 있었다.

6. 결 론

본 연구에서는 바이오 에너지의 원료로서 경쟁력 있는 원료를 얻기 위하여 미세조류 생물반응기 시스템에 관하여 연구를 수행하였다. 6개의 상태변수와 12개의 파라미터로 이루어진 ODE 모델을 이용하여, 모델 기반 제어 기법을 적용하기 위하여 기본이 되는 여러 가지 테스트를 수행하였다. 먼저, 민감도 분석을 위한 최대의 정보를 줄 수 있는 입력 신호를 최적 입력 설계를 통해 구하였고, 구하여진 입력신호를 적용하여 Global 민감도 분석을 통해 5개의 중요 파라미터를 결정하였다. 또한 successive linearization에 기반한 MPC를 미세조류 배양 모델에 적용하였고, 이를 통해 계산된 입력을 사용 시 바이오매스의 양과 지방의 함량이 증가됨을 확인할 수 있었다.

감 사

이 논문은 2012년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 기초연구사업 지원을 받아 수행된 것입니다(과제번호 2012011022).

참고문헌

1. Yusuf, C., "Biodiesel from Microalgae," *Biotechnology Advances*, **25**, 294-306(2007).
2. Miao, X. and Wu, Q., "Biodiesel Production from Heterotrophic Microalgal Oil," *Bioresour. Technol.*, **97**, 841-846(2006).
3. Minowa, T., Yokoyama, S.-Y., Kishimoto, M. and Okakura, T., "Oil Production from Algal Cells of *Dunaliella Tertiolecta* by Direct Thermochemical Liquefaction," *Fuel*, **74**, 1735-1738(1995).
4. Monod, J., "La Technique de la Culture Continue, Théorie et Applications," *Annales de l'Institut Pasteur Paris*, **79**, 390-410 (1950).
5. Droop, M., "Vitamin B12 and Marine Ecology. IV. The Kinetics of Uptake, Growth and Inhibition in *Monochrysis Lutheri*," *Journal of the Marine Biological Association of the United Kingdom*, **48**, 689-733(1968).
6. Caperon, J. and Meyer, J., "Nitrogen-limited Growth of Marine Phytoplankton-II. Uptake Kinetics and Their Role in Nutrient Limited Growth of Phytoplankton," *Deep Sea Research and Oceanographic Abstracts*, **19**, 619-632(1972).
7. Surisetty, K., Hoz Siegler, H. D. L., McCaffrey, W. C. and Ben-Zvi, A., "Model Re-parameterization and Output Prediction for a Bioreactor System," *Chem. Eng. Sci.*, **65**, 4535-4547(2010).
8. Zoltan Kalman, N., "Model Based Control of a Yeast Fermentation Bioreactor Using Optimally Designed Artificial Neural Networks," *Chem. Eng. J.*, **127**, 95-109(2007).
9. Lee, J. H. and Ricker, N. L., "Extended Kalman Filter Based Nonlinear Model Predictive Control," *Ind. Eng. Chem. Res.*, **33**, 1530-1541(1994).
10. Yao, K. Z., Shaw, B. M., Kou, B., McAuley, K. B. and Bacon, D. W., "Modeling Ethylene/Butene Copolymerization with Multi-site Catalysts: Parameter Estimability and Experimental Design," *Polym. React. Eng.*, **11**, 563-588(2003).
11. Lee, C. J., Prasad, V. and Lee, J. M., "Stochastic Nonlinear Optimization for Robust Design of Catalysts," *Ind. Eng. Chem. Res.*, **50**, 3938-3946(2011).
12. Mitchell, T. J., "An Algorithm for the Construction of "D-Optimal" Experimental Designs," *Technometrics*, **16**, 203-210(1974).
13. Kim, K. A., Spencer, S., Albeck, J., Burke, J., Sorger, P., Gaudet, S. and Kim, D. H., "Systematic Calibration of a Cell Signaling Network Model," *BMC Bioinformatics*, **11**, 202(2010).
14. Saltelli, A., Tarantola, S. and Chan, K. P. S., "A Quantitative Model-Independent Method for Global Sensitivity Analysis of Model Output," *Technometrics*, **41**, 39-56(1999).