

## 화학공장의 실시간 위험성 감시시스템의 구축

김기수\*, 김민섭\*, 노용해\*, 고재욱\*  
(주)에이드 부설 기술연구소\*, 광운대학교 화학공학과\*

### Development of the Real-time Risk Monitoring System for Chemical Plants

Ky-Soo Kim\*, Min-Seup Kim\*\*, Yong-Hae Noh\*, Jae-Wook Ko\*  
Technical Research Center of AID Corporation\*\*,  
Dept. of Chemical Engineering, Kwangwoon University\*

#### 1. 서론

본 연구에서는 온라인으로 공정정보를 분석, 관리하고 공정의 상태를 감시하여 이상이 발생하였을 때 이상의 원인을 진단하기 위한 방법으로 다변량 통계적 분석 방법 중 PCA(principal component analysis)와 PLS(partial least square)의 방법을 채택하였다. 이들의 기본 개념은 변수의 일련의 결합 즉, 주 변량과 운전 데이터의 경향을 나타내는 주요 성분을 찾는 것이다. 고전적인 다변량 통계적 분석 방법과는 달리, PCA 및 PLS는 공정을 감시할 때 변수들의 차원을 감소시킬 수 있다. 따라서, 공장 내에서 발생하는 수많은 차원의 대량의 데이터를 처리하는데 적합한 방법으로 알려져 있다.

#### 2. PCA

원래 Pearson<sup>88)</sup>에 의해 개발된 PCA는 Hotelling<sup>59)</sup>이 다변량 문제들에 있어서 변수들의 상호 관련 구조들을 분석하기 위하여 많이 사용하였다. 이 방법은 다변량 통계 기법에 관한 많은 책들에서 설명되고 있으며 Wold<sup>116),117)</sup>의 Review에도 자세히 설명되어 있다.

데이터의 유형 분석은 공정 특성의 인식, 자동제어, 지식기반 원인추정 등의 많은 응용분야에서 널리 쓰이고 중요한 역할을 한다. 입력 데이터의 유형은 불확실한 많은 데이터를 모델화하기 위해 일련의 범주로 나누어져야 한다. 따라서, 이러한 응용분야 사이에 PCA는 좀더 특징적인 능력을 갖는 특성을 선별하기 위해 사용된다. 이러한 특성 선별 과정은 특히 입력 변수의 상관관계를 결정할 때 중요하며 그래서 PCA는 이러한 데이터의 분류 및 분석에 적합하다.

### 3. Partial Least Squares (Projection to Latent Structures, PLS)

PLS를 실제 적용할 때는 PCA에서 사용했던 NIPALS 알고리즘과 비슷한 다음과 같은 알고리즘을 이용한다. 먼저 다음과 같은 Outer Relation을 PCA를 적용해 구한 다음 알고리즘을 적용한다.

알고리즘에 사용된  $X, Y, U, B$  는 다음과 같다.

$$X = TP^T - E \quad (2-4-1)$$

$$Y = UC^T + F \quad (2-4-2)$$

$$U = TB + G \quad (2-4-3)$$

$$B = (T^T T)^{-1} T^T U \quad (2-4-4)$$

- ① Y의 임의의 한 컬럼을  $u$ 라 놓고 시작한다.
- ②  $w^T = u^T X / u^T u$  ( $u$ 상에서 X의 컬럼을 Regression한다.)
- ③  $w$ 를 단위 크기로 Normalize 한다.
- ④  $t = Xw / w^T w$  (Scores  $t$ 를 계산한다.)
- ⑤  $q^T = t^T Y / t^T t$  ( $t$  상에서 Y를 Regression한다.)
- ⑥  $q$ 를 단위 크기로 Normalize 한다.
- ⑦  $u = Yq / q^T q$  (새로운  $u$  벡터를 계산한다.)
- ⑧ 수렴여부를 확인하여 수렴이 되었으면 ⑨로 수렴되지 않았으면 ②로 돌아간다.
- ⑨ X의 Loading Vector를 구한다.:  $p = X^T t / t^T t$
- ⑩ Regression:  $b = u^T t / t^T t$
- ⑪ 잔차행렬(Residual matrix)을 계산한다. :  $E = X - tp^T$  and  $F = Y - btq^T$
- ⑫ 다음 단계를 위하여 X와 Y를 E와 F로 대체하고 처음으로 돌아간다.

이 알고리즘을 잘 보면  $t$ 가 ①~⑧번 과정에도 나타나고 ⑨번 과정에서도 나타나는 것을 알 수 있다. ①~⑧번 과정에서의  $t$ 는 서로 정보를 교환함으로써 PCA의 NIPALS에서와 달리 직교하지 않는  $t$ 이지만 ⑨번 과정에서의  $t$ 는 이들을 다시 직교하도록 만들어 준 것이다. 직교하는  $t$ 는 꼭 있어야 하는 것은 아니지만, PCR과의 비교를 용이하게 하며 PCA와의 연결이 쉽다는 장점이 있으므로 이 과정을 알고리즘에 포함시키는 것이 일반적이다. 또한 위 알고리즘은 선형 회귀법(⑩번 과정)을 사용한 것이므로 원래 변수들을 변형시키거나 ⑩번 과정에 알고 있는 비선형 관계를 집어넣음으로써 PLS 모델에 비선형성을 줄 수도 있다.

### 4. 위험성 감시 시스템의 구축

본 연구에서 개발된 시스템의 구조는 그 기능에 따라 공장정보시스템(PIS,

Plant Information System), 데이터 전처리 시스템(Data Preprocessing System), 공정 감시 및 진단 시스템(Process Monitoring & Diagnosis System)의 모듈로 구성되어 있으며 전체 구조는 그림 3-1 과 같다. 본 연구에 필요한 데이터를 공급받기 위하여 최근 현장에서 널리 쓰이는 미국 OSI사의 PI™을 사용하였으며 본 시스템과의 연결구조는 API 기법 및 ActiveX 기술을 이용한 PI Data Link를 사용하였다.

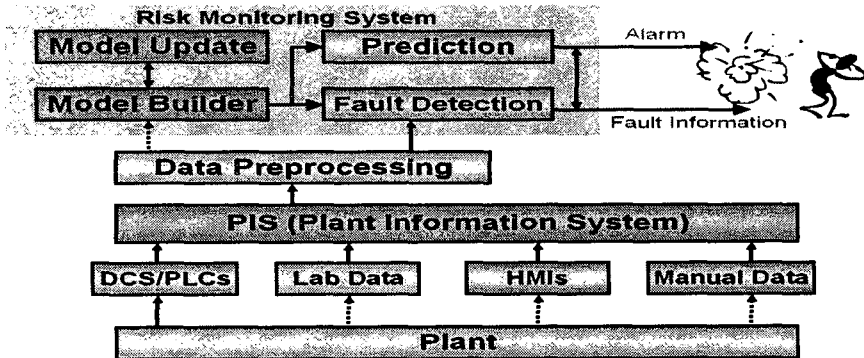


그림 4-1 시스템의 전체 구조

#### 4.1 Principal Component Analysis (PCA)

PCA 에서는 우선 연결된 데이터베이스에서 공정의 측정변수(입력변수) 자료를 입력받아서 기본적인 Matrix X를 구성하게 된다. 여기서 얻어진 Matrix X의 각각의 데이터를 Centering 과 Scaling의 과정을 거쳐서 최종적으로 Covariance Matrix를 구하게 된다.

이 Covariance Matrix를 사용하여 고유값(Eigenvalue)과 고유벡터(Eigenvector)를 구하고, 유효 PC 개수 선정을 위한 SCREE 혹은 Average root 방식에 의해서 적절한 PC의 개수를 구한 후 이를 바탕으로 Score Vector와 Loading Vector를 구하게 된다. 이렇게 구해진 결과들을 사용하여  $T^2$  statistics 또는 Q-Statistics를 활용한 그래프에서 데이터의 이상유무를 확인하는 Fault Detection의 과정을 수행하게 된다.  $T^2$  statistics 또는 Q-Statistics에서 이상 현상이 도출되면 Contribution Plot을 통해 가장 기여도가 큰 측정변수를 찾게 되며 그에 따른 적절한 조치를 행할 수 있도록 경보를 발하게 된다. 이상의 내용을 Flow Chart로 표현한 것이 그림 4-1 이다. 아울러 PCA 수행 과정을 본 연구에서 개발한 화학공정의 위험성 감시시스템으로 수행하는 과정을 보인 것이 그림 4-2이다.

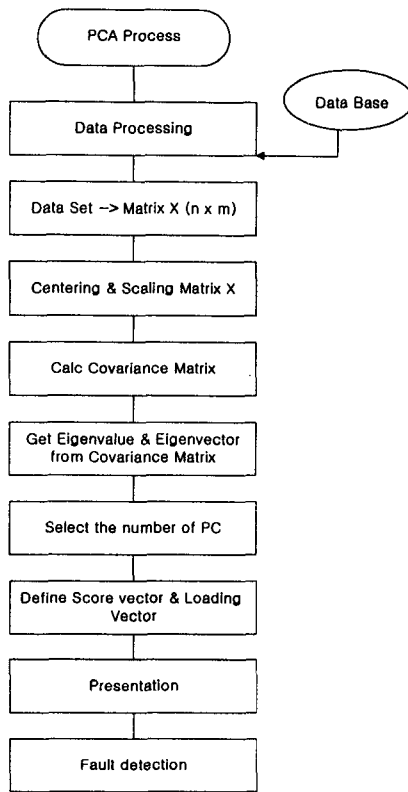


그림 4-2 PCA 순서도

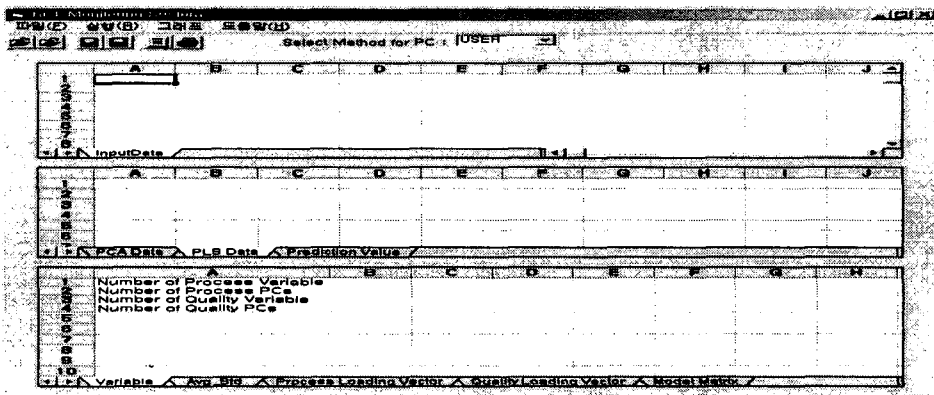


그림 4-3 위험성 감시시스템의 초기화면

그림 4-3 은 본 연구에서 개발한 위험성 감시시스템의 초기 시행 화면으로서 그림에서 보는 바와 같이 3개의 Work Sheet를 볼 수가 있는데, 처음의 Work Sheet는 초기에 입력되어진 데이터가 출력되는 부분이며, 중간은 각 PCA나 PLS의 계산을 수행한 결과값들을 볼 수 있는 부분이며, 마지막 Work Sheet에서는 계산 수행 중간 과정의 결과값을 출력하는 부분이다.

## 4.2 Fault Detection

Fault Detection 과정에서는 모니터하는 어떤 변수가 어느 정도의 한계를 벗어나야 이를 이상 또는 오류라고 판단 내릴 수 있을까 하는 것이 주요 관점이다. 그 한계를 나타내기 위해 본 연구에서는  $T^2$  statistic와  $Q$ -Statistic을 활용하여 구해진 모델이 오류 혹은 이상을 일으키는지 확인한 후, Contribution Plot을 통해 가장 기여도가 큰 변수를 추적하게 된다.

그림 4-4 는  $T^2$  statistic,  $Q$ -Statistic 및 Contribution Plot을 구현하는 과정을 표현한 Flow Chart이다.

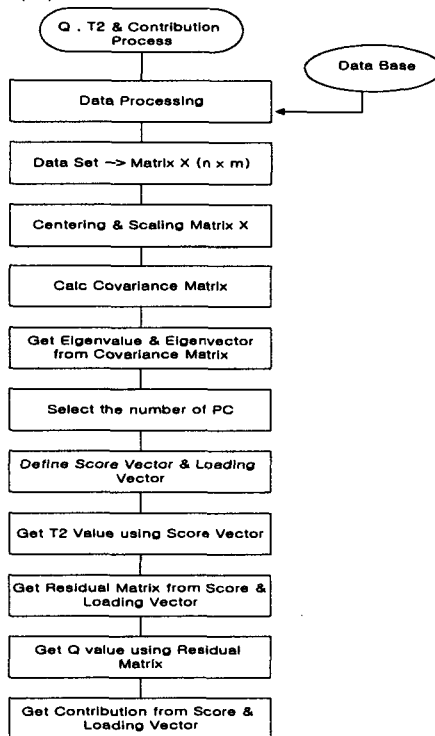


그림 4-4  $T^2$  statistic,  $Q$ -Statistic 및 Contribution Plot의 순서도

### 4.3 Partial Least Squares (PLS)

PCA에 이론적 바탕을 두고 X와 Y의 관계를 찾는 방법이 바로 PLS이다. PLS는 X의 Score Vector( $t_h$ )와 Y의 Score Vector( $u_h$ ) 사이에  $u_h = b_h t_h$ 와 같은 Inner Relation을 만드는 것으로부터 시작된다. 그런 다음 X의 Score Vector들에 대해 Weight ( $w_h$ )를 주어 그들 각각이 Y의 데이터 공간을 설명하는 정도를 정해준다. 이런 PLS를 이용하면 Score Vector들로 Regression하므로 Collinearity와 Singularity 문제도 발생하지 않을 뿐더러 X와 Y에게 서로 정보를 공유하고 Contribution의 정도를 Weight를 주어 조정하게 된다. 수학적으로 PCA에서의 Loading Vector들은 Covariance 행렬( $S = X^T X$ )의 고유 벡터들이듯이 PLS의 Loading Vector들은  $(X^T Y)(Y^T X)$ 의 고유 벡터들이다.

그림 4-5는 본 연구에서 사용한 PLS 계산 수행을 표현해주는 Flow Chart이며, 그림 4-6은 PLS에서의 Input Data 및 Output Data에 대한 PC 개수 선정을 보여주는 화면이다.

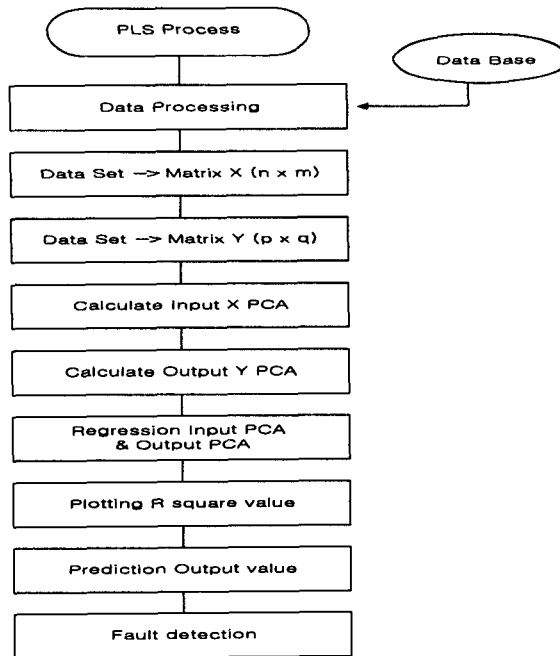


그림 4-5 PLS 순서도

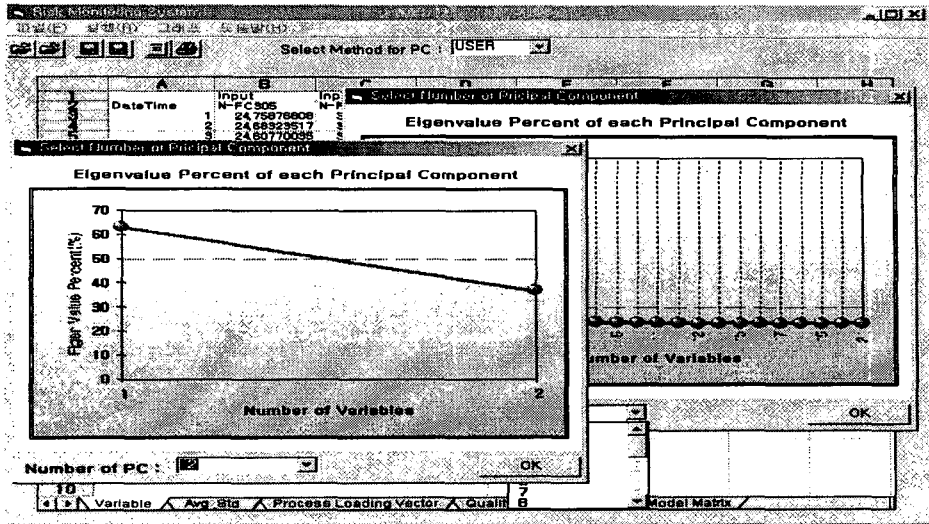


그림 4-6 PLS에서의 PC 개수 선정 화면

그림 4-6 은 PLS 모델 구현시 적절한 PC의 개수를 선정하는 과정을 보여 주는 화면으로 PCA와는 달리 Input과 Output변수에 대해 각각 구해준다.

## 5. 결론

본 연구에서 개발된 시스템은 제어시스템으로부터 실시간으로 전해지는 다양한 경보(Warning)와 측정치로부터 공장의 상태를 파악하고, 얻어진 정보로부터 공정변화의 원인을 추적하고 공정이 제어시스템의 제어범위를 벗어나게 될지를 판단한다. 만약 공정이 비정상적인(Abnormal) 조업상태로 발전할 가능성이 있거나 이미 발전하였을 경우에 본 시스템은 이를 조업자가 쉽게 발견하여 대처할 수 있도록 도움을 줄 수 있다. 이러한 연구는 기존의 Off-Line 위험성 분석 시스템이 갖는 지루하고 반복적인 작업에서 탈피하여, 실존하는 공정의 이상 여부에 대한 위험성 평가를 수행할 수 있다는 장점을 지닌다.

본 연구를 통해서 얻은 결론은 다음과 같다.

1. 현장에서의 중대사고 발생의 예방과 사고 발생시 비상조치 방법에 대한 새로운 방향을 제시할 수 있다.
2. 외국 비상조치계획 프로그램의 국내 적용상의 문제점을 상당 부분 극복할 수 있으며, 향후 국내의 안전관련 프로그램 개발의 기초가 될 수 있는 기반

을 제공하였다.

3. 화학물질 사고 발생시 파생되는 주변지역의 인적·물적 피해 및 환경 피해를 사전에 예측할 수 있는 모델을 제시할 수 있다.

#### 참고문헌

1. Abkowitz, M. and Galarraga, J., "Tanker Accident Rates and Expected Consequences in US Ports and High Seas Regions", *Conference on Recent Advances in Hazardous Materials Transportation Research: An International Exchange, sponsored by Research and Special Programs Administration DOT*, Washington, D.C.(1985).
2. ACMH, "The Control of Major Hazards. Advisory Commission on Major Hazards", 3rd Report, *Health and Safety Commission*, pp, 66, London(1984).
3. AIChE/CCPS, *International Conference on Vapor Cloud Modeling, Cambridge*, American Institute of Chemical Engineers, New York(1987).
4. AIChE/CCPS, *International Symposium on Preventing Major Chemical Accidents, Washington*, American Institute of Chemical Engineers, New York(1987).
5. AIChE/CCPS, *International Symposium on Preventing Major Chemical Accidents. London*, Center for Chemical Process Safety, American Institute of Chemical Engineers, New York(1988).