

## 화학공정 감시를 위한 함수연결연상 신경망 시스템 구현

조 재 규 · 이 동 언 · 김 용 하 · 안 성 준 · †윤 인 섭

서울대학교 응용화학부

(2003년 7월 24일 접수, 2003년 8월 30일 채택)

### The Analysis of a Process Monitoring system based on Functional Link Associative Network

Jae Kyu Cho · Dong Eon Lee · Yong Ha Kim · Sung Jun Ahn and En Sup Yoon

School of Chemical Engineering, Seoul National University

(Received 24 July 2003 ; Accepted 30 August 2003)

#### 요 약

화학공장은 수많은 장치들로 구성되어 있고 매우 복잡한 구조를 가지고 있다. 특히 분산 제어 시스템(Distributed Control System, DCS)이나 공정 정보 시스템(Process Information System, PIS) 등을 설치하여 매분 또는 매초 단위로 공정 데이터를 얻고 있다. 화학공장의 경우, 데이터들의 방대한 양 뿐 만 아니라 데이터들간의 상호 연관성이 크고 재순환이나 화학 반응 등으로 인하여 막대한 계산량 및 비선형성을 지니기 때문에 효과적 분석에 곤란한 점이 있다. 따라서 본 연구에서는 함수연결연상 신경망을 이용하여 입력변수들을 확장함으로써 신경망의 비선형성 표현능력과 학습능력이 뛰어난 프로그램의 개발에 주안점을 두고 있다. REFA (RealTime Fault Analyzer)는 실시간으로 공정정보를 입력받은 후 입력값을 PC로 매핑하고, 이를 다시 역으로 매핑하여 입력값을 예측하여 공정을 감시하는 시스템으로 개발되었으며, Tennessee Eastman 공정에 적용해 우수성을 입증하였다.

**Abstract** - To operate process plant safely and economically, process monitoring is very important. There are a great number of data acquired through distributed control system and process information system. Fault monitoring is the task with difficulties owing to not only the huge amount of data, but also nonlinearity of chemical processes. In this research, the program, REFA, based on PCA and functional link associative neural network has developed. REFA has better learning capabilities, generalization abilities, and shorter learning time than existing neural network programs. In this work its usefulness has proven by application to Tennessee Eastman process.

**Key words** : Process monitoring, Principal Component Analysis, Functional Link Associative Neural Network, Artificial Neural Network, Fault Detection

#### 1. 서 론

화학공정은 대량 생산을 목적으로 수많은 기계 장치, 압력 또는 비압력 용기, 배관, 센서, 작동기(actuator), 제어장치(controller), 전

기 장치, 그리고 감시 및 제어 시스템 등으로 구성되어 있으며, 재순환 흐름(recycle flow)과 반응으로 인한 비선형성(non-linearity)을 가지고 있다[1]. 또한, 안전과 환경에 대한 사회적인 관심의 고조와 에너지와 물질의 절약

에 대한 요구의 증가로 인하여 공정의 운전 조건은 더욱 엄격해 지고 있다. 자동제어 시스템은 화학공정의 조업 중에 발생하는 다양한 외란(external disturbance)에 대하여 공정을 정상적인 조업 범위 내로 유지하는 역할을 담당한다.

조업 중에 나타나는 외란의 원인으로는 크게 물리적인 고장(physical failure), 외부 교란 그리고 조업자의 오류(human error)의 세 가지로 나누어 볼 수 있다. 이상과 같은 원인으로 인하여 공정의 운전 조건이 정해진 상태를 벗어나 비정상(abnormal) 상태가 되었을 경우, 공정에 이상이 발생하였다고 판단하게 된다[2].

공정 감시란 센서 데이터로부터 공정의 상태를 파악하여 공정의 거동을 감시하고 특이 이벤트를 제거함으로써 공정을 향상시키는 작업을 가리킨다. 공정감시를 위해서 사용되는 접근법으로는 크게 데이터 유도형(data-driven), 분석형(analytical), 지식기반형(knowledge-based)의 세 가지 방법이 사용되고 있다. 데이터 유도형(data-driven)은 공정 데이터로부터 직접 유도되어 고차원 데이터(high-dimensional data)를 저차원 데이터(low-dimensional data)로 변환시켜 중요한 정보들을 얻어낼 수 있다는 장점이 있다. 분석형은 수학적 모델을 이용하여 접근하며, 작은 공정에는 효과적으로 이용될 수 있으나 큰 공정에는 변수의 증가로 인하여 효과적인 적용이 곤란하다는 단점이 있다. 지식기반형은 대부분 사고 조사, 전문가 시스템 또는 패턴 인식에 기반을 두고 있으며, 분석형과 마찬가지로 큰 공정에는 한계점을 보이고 있다[3]. 데이터 유도형의 경우 최근에는 Chemometrics 방법인 PCA (Principal Component Analysis)나 PLS (Partial Least Squares)와 같은 다변량 통계기법을 사용하여 공정을 감시하고 데이터를 보정하는 방법에 대한 연구가 활발하게 진행되고 있다.

본 연구에서는 화학공정의 비선형성을 고려하여 비선형성을 효과적으로 표현할 수 있도록 자동연상 신경망 (Autoassociative Neural Network; ANN)에 Pao에 의해 제안된 함수 연결 (functional link)개념을 도입하여 입력공간을 확장시킨 함수연결연상 신경망(Functional-Link- Associative Neural Network; FLAN)을 이용하여 비선형 PCA를

구축하고[3] 이를 이용하여 이상감지를 수행하는 알고리즘을 개발하여 화학공정의 실시간 감시 시스템을 구축하고자 한다.

## 2. 이론 및 제안된 방법론

### 2.1. PCA (Principal Component Analysis)

DCS등을 통해 실시간으로 많은 양의 상호연관성이 큰 공정 데이터들이 얻어지는 화학공정의 특성상 측정변수들의 차원을 효과적으로 줄일 수 있고 변수들 간의 상호연관성을 잘 표현할 수 있는 PCA, PLS와 같은 다변량 통계기법들이 화학공정 감시를 위해 많이 사용되고 있다. 특히, PCA는 상호연관성이 큰 변수들을 새로운 축을 정의하여 기존 변수들보다 적은 수의 변수들(Principal Component; PC)로 mapping시키기 때문에, 공정 정보를 거의 그대로 유지하면서 시스템의 차원을 줄일 수 있는 방법이다.

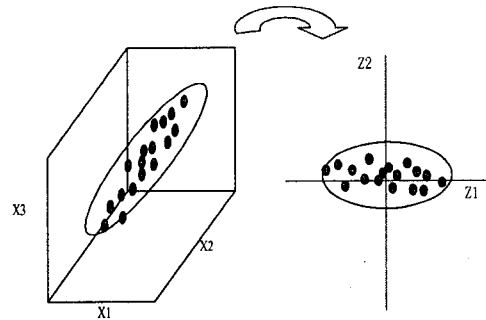


Fig. 1 Conceptual representation of PCA.

예를 들어, Fig. 1.와 같은 3차원의 변수 X1, X2, X3를 PCA를 사용하면 2차원 (Z1×Z2)으로 나타낼 수 있다. PCA는 이와 같은 mapping과정과 demapping과정을 거쳐 입력된 측정변수의 값을 그대로 예측할 수 있기 때문에 정상상태의 공정 데이터를 학습시켜 놓으면 실제 공정 입력값에 대해서도 정상상태의 데이터와 유사한 값을 예측하게 된다.

공정변수를  $n \times m$  행렬 X로 표시하면, PCA는 다음과 같이 X를 scores 행렬 T와 loadings 행렬 P, residual 행렬 E로 표시하는 방법이다.

$$[X]_{n \times m} = [T]_{n \times f} [P^T]_{f \times m} + [E]_{n \times m} \quad (1)$$

- n : 측정 횟수
- m : 측정변수의 수
- f : PC(Principal Component)의 수

PC를 구할 때는, Residual 행렬 E의 거리 (Euclidean norm, E)  $\|E\|$ 를 최소화하도록 P행렬의 행을 covariance 행렬의 eigen value 중에서 큰 순서로 f개 만큼 택하여 이에 해당하는 eigen vector로 구성하게 된다. 이때 f는 PCA의 eigen vector의 수가 된다. eigen value는 PC로부터 데이터를 다시 복원할 때 해당하는 데이터에 대한 가중치의 역할을 하게 된다. 해당하는 PC를 구하는 방법으로는 SVD (Singular value decomposition) 방법과 NIPALS (Nonlinear iterative partial least squares) 방법이 사용된다.

이러한 방법을 사용하면 공정 데이터는 Fig. 2.과 같이 저차원의 score space로 투영 될 수 있다.

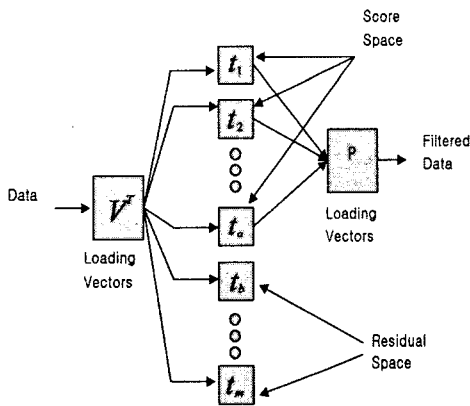


Fig. 2 The Projection of the observation data into the score and residual spaces, and the computation of the filtered data.

### 3.2. NonlinearPCA using neural network

PCA는 선형 mapping에 기반한 방법으로 그 구조가 신경망의 활성화함수를 학습시키는 방법과 유사하다. 따라서 화학공정과 같은 비선형 공정에 직접 적용하기에는 어려움이 따른다. 현실적인 대안은 정상상태 부근의 조업 점을 선형화하여 PCA를 적용하는 방법을 사

용하거나 비선형 PCA를 적용하는 것이다. 비선형 PCA 방법으로는 Hastie와 Stuetzle (1989)에 의해 제안된 principal curve가 주로 사용되고 있다. 기존의 선형에 기반한 PCA에서는 데이터를 지나는 1차원의 직선을 구하는데 비하여, m 차원의 데이터에 대하여 평균값을 지나는 1차원의 부드러운 곡선을 구하는 것이다. Principal curve의 계산은 투사(projection) 단계와 곡선화(smoothing) 단계의 두 단계로 이루어는데, 초기의 곡선을 가정하고 커널 스무더(kernel smoother)나 국부 가중치 회귀 스무더(locally weighted regression smoother)와 같이 곡선화(smoothing) 할 수 있는 방법을 적용하여 곡선을 계속적으로 매끈하게 만들어 가는 방법이다. PCA는 선형 mapping에 기반한 방법으로 그 구조가 신경망의 활성화함수를 학습시키는 방법과 유사하다.

화학공학 분야에서도 PCA를 신경망을 이용하여 비선형으로 확장하여 적용하려는 연구가 활발하게 진행되었다. Kramer는 5개의 층을 가지는 자동연상 신경망(auto-associative neural network; ANN)을 이용하여 비선형 PCA를 구현하였다. ANN의 구조는 Fig. 3.와 같다.

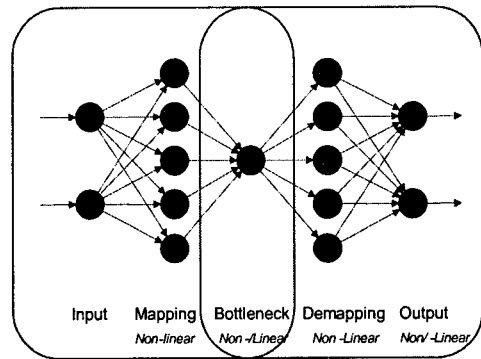


Fig. 3 Conceptual representation of Auto associative neural network.

ANN에서는 신경망의 전반부 3개 층을 입력력을 PC로 매핑(mapping)하는 매핑 함수로, 후반부를 PC값을 출력값으로 매핑하는 역매핑(demapping) 함수로 사용하여 비선형 PCA를 구현하였다. ANN에서는 5층의 신경망을 학습시키기 때문에 매핑의 정확성이 떨어지

는데, 이를 극복하기 위하여 Tan과 Mavrovouniotis는 5층의 신경망을 3개의 층으로 표현하고 입력값을 학습시키는 Fig. 4와 같은 입력 데이터 학습 방법(input data training) IT-net를 제안하였다. 또한, Dong과 McAvoy는 앞서 제안된 5층의 자동연상 신경망을 두 개의 3층 구조의 신경망으로 나누고, 처음 신경망에서 출력과 다음 신경망의 입력을 principal curve를 사용하여 연결시키는 방법을 제안하였다.

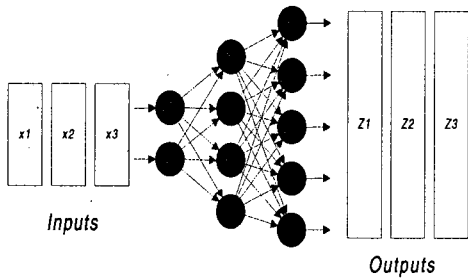


Fig. 4 Conceptual representation of input training.

본 연구에서는 Kramer가 제안한 자동연상 신경망을 바탕으로 신경망을 이용하여 비선형 PCA 혹은 비선형 PLS 구현하고 이를 화학공정에 적용하였다. 즉, 신경망을 이용한 입력-입력 모델, 입력-출력 모델을 통해 매개변수나 미측정 변수를 추정하고 이를 통하여 이상의 감지를 수행하였다. 매개변수나 미측정 변수의 추정은 앞서 살펴본 바와 같이 다양한 추정자를 통해서도 수행될 수 있는데, 여기서 사용하는 비선형 PCA는 추정자의 관점에서는 전역적인 방법이다.

본 연구에서 사용한 함수연결연상 신경망에서는 입력층(input layer)과 출력층(output layer)중에서 입력층만을 확장시키는 방법을 사용하였다. 하나의 예를 들어 다음과 같은 관계를 갖는 3개의 입력  $x_1, x_2, x_3$ 을 생각해 보자.

$$x_3 = k \cdot x_1^2 \cdot x_2^2 \quad (2)$$

$k$  : 상수

위와 같은 입력에 대해서 공정데이터를 그대

로 사용하면 비선형성을 효과적으로 표현하기가 어렵다. 따라서  $x_1, x_2$ 에 대하여 제공의로 추가적인 입력을 주게 되면 입력변수들간의 상관관계를 효과적으로 표현할 수 있는 이점이 있다.

자동연상 신경망과 동일하게 mapping layer과 demapping layer에서는 비선형 활성화 함수(Nonlinear activation function)를 사용하였고, 병목층(bottle neck)과 출력층에서는 비선형 혹은 선형 활성화 함수를 사용하였다. 이때, 중간의 병목층이 바로 PC에 해당한다. 본 연구에서 사용된 신경망의 구조는 Fig. 5와 같다.

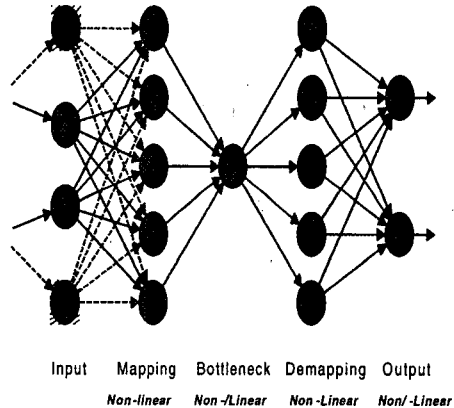


Fig. 5 Functional Link Associative neural network.

### 3. 실시간 이상감지 분석기 REFA (RealTime Fault Analyzer)

#### 3.1. REFA의 구조

본 연구에서 개발한 실시간 이상감지 분석기 REFA (RealTime Fault Analyzer)의 개념적인 구조는 Fig. 6과 같다.

본 시스템은 화학공정의 DCS(Distributed Control System)를 통해 얻어지는 많은 양의 데이터를 전송받아 저장하는 Data Transfer module과 데이터를 확장을 통하여 비선형성을 효과적으로 표현하기 위한 Functional Link Associative Network Module 및 공정 이상 유무를 판단하는 Detection Module로 이루어져 있다. [5]

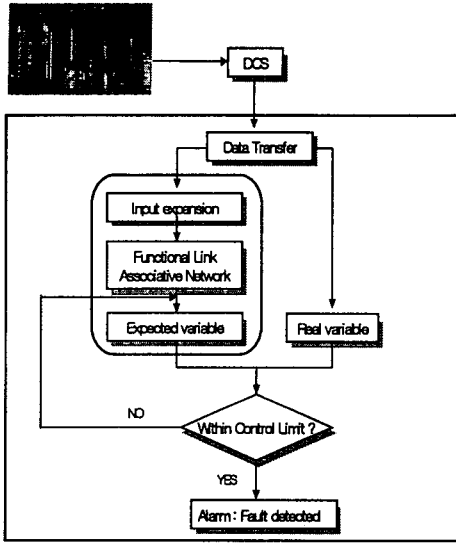


Fig. 6 Architecture of REFA.

본 시스템은 Ram 256Mb의 Pentium III 1.2GHz, Windows 2000에서 Visual C++ v. 6.0을 이용하여 구현하였다. Fig. 7은 REFA의 초기 시행화면이다. 구현된 시스템은 서버로부터 데이터를 실시간으로 입력받고 이를 통하여 함수연결연상 신경망을 구성한 후 공정 감시를 실시한다.



Fig. 7 Initial Screen of REFA.

REFA는 외부로부터 데이터를 실시간으로 전송받아 진행되므로 DCS 등에 접속하여 적절한 구성요소들을 선택하여 연결이 되어야 한다. REFA는 실시간 정보 시스템이며, 네트워크

(LAN, WAN 및 Internet) 상에서 운영 되는 소프트웨어 PI System™ 으로부터 데이터를 전송받아 운영된다. PI system상의 Tag를 찾아 원하는 데이터를 전송받게 된다. 아래의 Fig. 8은 PI system과 데이터를 전송받는 그림이다.

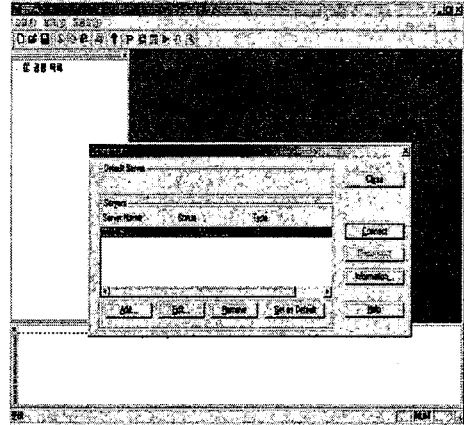


Fig. 8 Data Transfer Module.

PI System으로부터 전송받은 데이터들 중에 FLAN을 구성하는 데 필요한 데이터들은 Fig. 9와 같이 적절한 정보를 입력한 후 공정 감시가 진행이 된다.

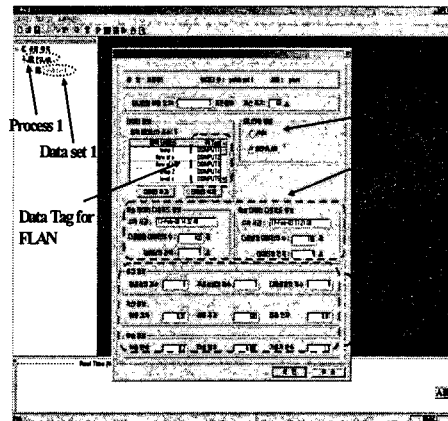


Fig. 9 Information Window of REFA.

정보가 완전히 입력된 경우 REFA는 PI system으로부터 전송받은 데이터들을 변수별로 나타내고 main window로 진행되게 된다. 아래의 Fig. 10은 PI system으로부터 전송받은 데이터들을 나타내는 장면이다.

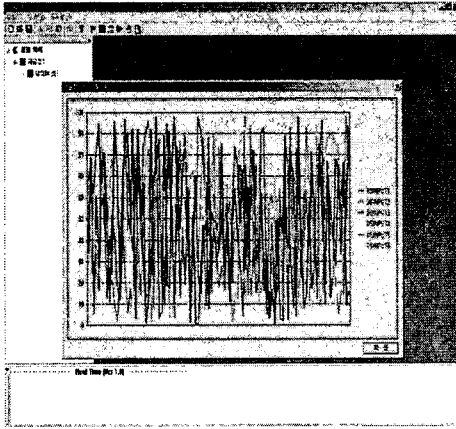


Fig. 10 Display of variable of REFA.

REFA의 main window는 크게 세 부분으로 나뉜다. Fig. 11을 살펴보면, 왼편에 나타나는 창은 공정목록화면으로 여러 개의 공정을 동시에 감시할 때 해당공정의 목록들이 나타나게 된다.

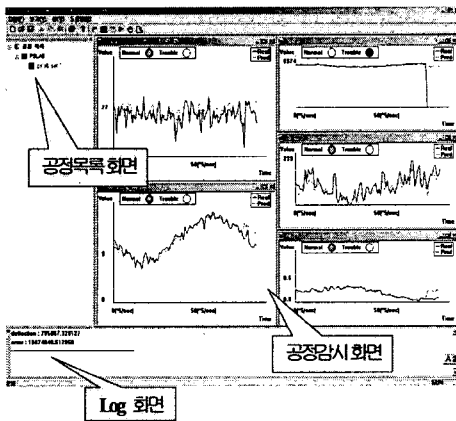


Fig. 11 Main Window of REFA.

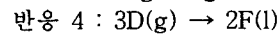
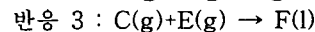
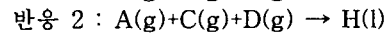
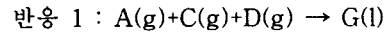
각 공정별로 원하는 변수들을 선정하여 하나의 data set으로 지정하여 감시를 수행할 수 있다. 오른쪽에 나타나는 창은 선정된 변수별로 공정감시를 수행하는 진행을 나타내고 있다. 공정 이상이 감지된 변수의 경우 적색 경고등이 켜지게 된다. 정상적인 변수의 경우에는 녹색등이 켜진다. 아래 창은 Log화면으로서, 특정 변수에 이상이 감지될 경우 해당 변

수의 이상유무와 발생 시간을 기록하게 된다.

#### 4. 사례연구

##### 4.1. 대상공정

본 연구의 대상공정은 공정 제어 기법이나 최적화, 이상 진단 등의 평가를 위하여 Downs와 Vogel에 의하여 제시된 Eastman사의 Tennessee Eastman공정(Fig. 12)을 실제적으로 모사한 공정을 대상으로 연구를 수행하였다. Tennessee Eastman 공정은 41개의 측정변수와 12개의 조작변수를 가지고 있는 비교적 복잡한 공정으로 A, C, D, E의 4가지의 반응물로부터 G, H의 두 가지가 생성된다. 반응기에서는 액상에 녹아있는 촉매에 의하여 다음과 같은 비가역 발열 반응들이 일어난다.



A, C, D, E : Reactant

G, H : Product

F : Byproduct

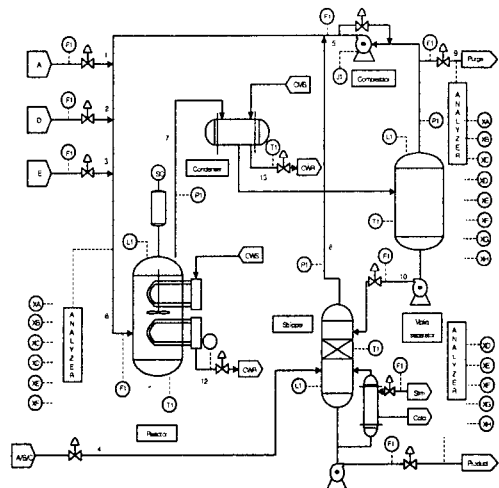


Fig. 12 Flowsheet of Eastman Process.

Table 1은 열 및 물질 수지 데이터를 나타내고 있다.

Table 1. Heat and material balance data.

Process stream data						
Stream name	A feed	D feed	E feed	C feed	Strip Dribd	Reactor feed
Stream number	1	2	3	4	5	6
Molar flow(kgmol/h)	11.2	114.5	98.0	417.5	463.7	1890.8
Mass flow(kg/h)	22.4	3664.0	4509.3	6419.4	8979.6	48015.4
Temp.(°C)	45.0	45.0	45.0	45.0	65.7	86.1
More fraction A	0.99990	0.00000	0.00000	0.48500	0.43263	0.32188
B	0.00010	0.00010	0.00000	0.00500	0.00444	0.08893
C	0.00000	0.00000	0.00000	0.51000	0.45264	0.26383
D	0.00000	0.99990	0.00000	0.00000	0.01116	0.06882
E	0.00000	0.00000	0.99990	0.00000	0.07256	0.18776
F	0.00000	0.00000	0.00010	0.00000	0.00285	0.01657
G	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.01964	0.03361
H	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00808	0.01659

Stream name	Reactor	Pft	Recycle	Purge	Sep. lig	Product
Stream number	7	8	9	10	11	
Molar flow(kgmol/h)	1476.0	1201.5	15.1	259.5	211.3	
Mass flow(kg/h)	48,015.4	30,840.0	386.5	16,788.9	14,288.6	
Temp.(°C)	120.4	102.9	80.1	80.1	65.7	
More fraction A	0.27164	0.32958	0.32958	0.00000	0.00479	
B	0.11393	0.13823	0.13823	0.00000	0.00009	
C	0.19763	0.23978	0.23978	0.00000	0.01008	
D	0.01075	0.01257	0.01257	0.00222	0.00018	
E	0.17722	0.18579	0.18579	0.13704	0.00836	
F	0.02159	0.02263	0.02263	0.01669	0.00099	
G	0.12302	0.04844	0.04844	0.47269	0.53724	
H	0.08423	0.02299	0.02299	0.37136	0.43828	

Unit operation data			
	Reactor	Separator	Condenser Stripper
Temp. (°C)	120.4	80.1	65.7
Pres (kPa gauge)	2705.0	2633.7	3102.2
Heat duty (kW)	-6468.7	-	-2140. 1430.0
Liquid volume (m <sup>3</sup> )	16.55	4.88	- 4.43

Utilities	
Reactor cooling water flow (m <sup>3</sup> /h)	93.37
Condenser cooling water flow (m <sup>3</sup> /h)	49.37
Stripper steam flow (kg/h)	230.31

4.2. A공급량 감소

4번 흐름의 압력이 감소하여 A와 C 그리고 비활성 물질 B가 정상보다 적게 공급되는 경우이다. 이때의 공정 변수의 거동은 Fig. 13과 같다.

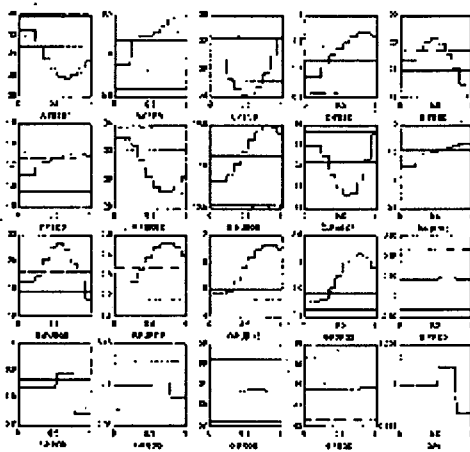


Fig. 13 Compositions under C header pressure loss.

이와 같은 이상이 발생하게 되면 4번 흐름

의 유량이 줄어들게 되고 A와 C가 적게 공급되므로 반응이 정상보다 적게 일어나게 된다. 본 공정에서 다루는 반응은 발열반응이므로 반응이 정상보다 적게 일어나게 되면 반응기의 온도가 하강하게 되고 온도의 영향으로 일시적으로 압력은 하강하고 액위는 감소하게 된다. 반응기의 압력이 감소하게 되면 제어기에 의하여 A의 공급량을 늘려서 압력을 보상하도록 한다. 또한, 반응기에서의 압력과 온도의 변화는 하부의 흐름들과 기액분리기, 스트리퍼 등의 온도와 압력에도 영향을 주게 된다. 결과적으로 반응이 적게 일어나게 되면 생산량이 줄어들게 되므로 생산물 유량을 제어하는 제어기의 작동에 의하여 A와 C를 공급하는 4번 흐름의 밸브를 조절하여 공급량을 늘려가게 된다. 이에 따라 반응이 다시 활발하게 일어나게 되므로, 앞서와는 반대로 반응기의 온도가 상승하고 압력도 회복된다. 이때에는 A, C와 함께 비활성 성분인 B가 계속적으로 축적이 되므로 이는 다시 제어기의 작용에 의하여 방출 흐름(purge stream)에서 더 많은 양을 방출시키는 작용으로 나타나게 된다. 이때 각 흐름에서의 각종 성분들의 농도 변화는 Fig. 14와 같이 나타난다.

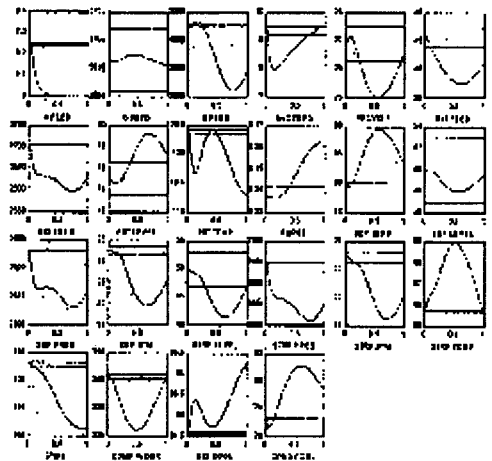


Fig. 14 Measurements under C header pressure loss.

Fig. 14를 통하여 B의 농도가 증가하고 있으며 A와 C의 농도가 감소하였다가 A+C의 공급량이 증가하게 되면 그 농도가 회복되는

것을 확인할 수 있다.

이 사례의 경우 제어기들이 전 공정에 걸쳐 제어 작용을 주고받으므로 이상이 한 부분에 국한되어 나타나지 않고 전체 공정에 퍼지게 된다. REFA의 적용결과는 Fig. 15와 같다.

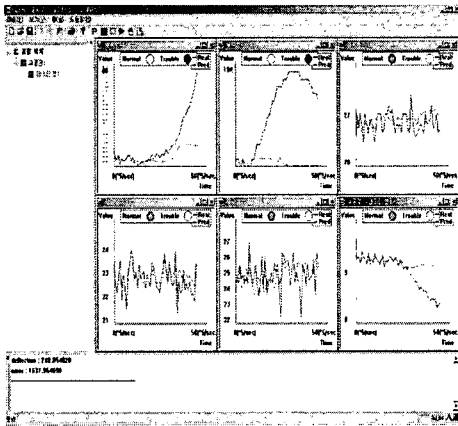


Fig. 15 REFA's result under C header pressure loss.

공정 이상의 한계는 30로 정하였고, 적용결과를 살펴보면 4번 변수와 6번 변수의 이상이 감지되었다. 이는 반응이 적게 일어나게 되면 생산량이 줄어들게 되므로 생산물 유량을 제어하는 제어기의 작동에 의하여 A와 C를 공급하는 4번 흐름의 밸브를 조절하여 공급량을 늘려가게 되고 이로 인하여 비정상적으로 스트리퍼의 압력과 stream flow를 증가시킴으로써 해서 이상이 발생한 결과이다. A+C의 공급량 증가로 인한 공정 변수들의 이상을 효과적으로 잡아낼 수 있었다.

### 5. 결 론

본 연구는 기존의 자동연상 신경망의 경우 5단의 구성을 가지고 있어서 학습시 곤란한 점을 극복하기 위하여 지식 표현 능력을 확장시킨 함수 연결의 개념을 도입하여, 입력

변수를 확장시킨 함수연결연상 신경망을 구현하였다. 입력변수의 내적을 통하여 추가적인 입력을 생성하여 입력 공간을 확장시킴으로 신경망의 표현 능력을 향상시킬 수 있었다. 본 연구에서 구현된 시스템을 Tennessee Eastman 공정에 적용해본 결과 이상 변수들을 효과적으로 감지 할 수 있었다. 따라서 기존의 자동연상 신경망에 비하여 학습능력이나 일반화 능력을 향상시킨 시스템을 구현할 수 있었다.

### 감 사

본 연구는 서울대학교 화학공정신기술연구소와 자동화시스템 공동연구소 및 Brain Korea 21의 지원에 의한 것입니다.

### 참 고 문 헌

- [1] Himmelblau, D. M., "Fault Decton and Diagnosis in Chemical and Petrochemical Processes", Elsevier, Amsterdam (1978).
- [2] O'shima, E., Matsuyama H., "Practical Problems in Application of Failure Diagnostic System", *Proceedings of 5th International Symposium on Process Systems Engineering*, (Kyoungju, Korea), 925-930 (1994).
- [3] Chiang L. H., Russell E. L. and Braatz R. D. "Fault Detection and Diagnosis in Industrial Systems", Springer, UK(2001).
- [4] 모경주, "클러스터링 기법과 함수연결연상 신경망을 이용한 실시간 화학공정 감시에 관한 연구", 박사학위논문, 서울대학교 화학공학과 (1998).
- [5] 조재규, 이동연, 김용하, 김구희, 윤인섭, "REFA: 함수연결연상 신경망을 이용한 화학공정 감시 프로그램 개발", *Proceedings of 2003 KICHe Spring Meeting*, Vol. 9, 243-246(2003).