

## 공정 모니터링 기술의 최근 연구 동향

유창규<sup>†</sup> · 최상욱\* · 이인범\*\*

경희대학교 환경응용화학대학 그린에너지센터

446-701 경기도 용인시 기흥구 서천동 1

\*삼성전자 반도체사업 메모리부

445-701 경기도 화성시 반월동 산16

\*\*포항공과대학교 화학공학과

794-784 경북 포항시 남구 효자동 산31

(2007년 7월 5일 접수, 2007년 10월 10일 채택)

### Recent Research Trends of Process Monitoring Technology: State-of-the Art

ChangKyo Yoo<sup>†</sup>, Sang Wook Choi\* and In-Beum Lee\*\*

*College of Environmental and Applied Chemistry Green Energy Center, Kyung Hee University, 1 Seocheon-dong,*

*Giheung-gu, Yongin, Gyeonggi 446-701, Korea*

*\*Memory Division, Semiconductor Business, Samsung Electronics Co., LTD., San 16, Banwol-dong, Hwasung, Gyeonggi 445-701, Korea*

*\*\*Department of Chemical Engineering, POSTECH, San 31, Hyoja-dong, Nam-gu, Pohang, Gyeongbuk 790-784, Korea*

(Received 5 July 2007; accepted 10 October 2007)

### 요 약

공정 모니터링 기술은 공정 내에서 일어나는 예상치 못한 조업변화 및 이상을 조기에 감지하고 조업 이상에 영향을 끼친 근본 원인을 밝혀내어 제거해 줌으로써 공정의 안정적인 조업과 양질의 제품생산의 기반을 제공하여 준다. 데이터에 기반한 통계적 공정 모니터링 방법은 양질의 공정 데이터만 주어진다면 통계적 처리를 접목하여 비교적 쉽게 모니터링을 할 수 있고 공정의 데이터 분석에 이용할 수 있는 도구를 얻을 수 있다는 장점이 있다. 그러나 실제 공정에서는 비선형성, non-Gaussianity, 다중 운전모드, 공정상태변화로 인해 기존의 다변량 통계적 방법을 이용한 공정 모니터링 기법은 비효율적이거나, 공정 감시 성능의 저하, 종종 신뢰할 수 없는 결과를 야기한다. 이러한 경우 기존의 방법으로는 더 이상 공정을 정확히 감시할 수 없기 때문에 최근에 많은 새로운 방법들이 개발 되었다. 본 총설에서는 이러한 단점을 보완하기 위해 최근 주목할 만한 연구결과인 공정 비선형성을 고려한 커널주성분분석(kernel principle component analysis) 모니터링 기법, 주성분분석 모델 조합을 이용한 다중모형(mixture model) 모니터링 기법, 공정 변화를 고려한 적응모델(adaptive model) 모니터링 기법, 그리고 센서 이상진단과 보정의 이론과 응용결과에 대하여 소개한다.

**Abstract** – Process monitoring technology is able to detect the faults and the process changes which occur in a process unpredictably, which makes it possible to find the reasons of the faults and get rid of them, resulting in a stable process operation, high-quality product. Statistical process monitoring method based on data set has a main merit to be a tool which can easily supervise a process with the statistics and can be used in the analysis of process data if a high quality of data is given. Because a real process has the inherent characteristics of nonlinearity, non-Gaussianity, multiple operation modes, sensor faults and process changes, however, the conventional multivariate statistical process monitoring method results in inefficient results, the degradation of the supervision performances, or often unreliable monitoring results. Because the conventional methods are not easy to properly supervise the process due to their disadvantages, several advanced monitoring methods are developed recently. This review introduces the theories and application results of several remarkable monitoring methods, which are a nonlinear monitoring with kernel principle component analysis (KPCA), an adaptive model for process change, a mixture model for multiple operation modes and a sensor fault detection and reconstruction, in order to tackle the weak points of the conventional methods.

Key words: Adaptive Model, Fault Detection And Diagnosis, Gaussian Mixture Model, Kernel Principle Component Analysis (KPCA), Process Monitoring, Nonlinear Model, Sensor Fault Detection and Validation, Statistical Monitoring, Principal Component Analysis (PCA)

<sup>†</sup>To whom correspondence should be addressed.  
E-mail: ckyoo@khu.ac.kr

### 1. 서 론

공정의 성능을 감시하는 기술로는 크게 3가지로 나눌 수 있는데 수식적 모델에 의한 방법, 지식기반 접근 방법, 공정데이터에 기반한 통계적 방법이 있다. 수식적 모델에 의한 방법은 정확한 세부 모델들이 요구되고 변수들이 불확실하며 실시간으로 개선되어야 한다는 단점이 있다. 지식기반 접근 방법은 자세한 수식적인 모델을 필요로 하지 않는다는 장점이 있으나 오랜 시간을 토대로 축적된 경험이 있어야 하고 전문가나 작업자의 경험적 지식이 주관적일 가능성이 많으며 데이터를 해석하기 위한 통계적인 기반이 부족하다는 단점이 있다. 이에 반하여 공정데이터에 기반한 통계적 방법은 양질의 공정 데이터만 주어진다면 통계적 처리를 접목하여 비교적 쉽게 모니터링을 할 수 있고 공정의 데이터 분석에 이용할 수 있는 도구를 얻을 수 있다는 장점이 있다[1-4].

화학 공정은 그 특성상 수많은 단위 공정의 조합으로 이루어진 거대 장치 산업이며, 공정의 운전상에 있어서 유량, 온도, 압력, 농도 및 조성 등의 수많은 공정 변수들은 변수간의 강한 선형적 또는 비선형적인 상관관계를 가지고 있다. 이러한 고차원적인 상관관계를 분석하기 위하여 기존의 화학적 반응식을 기반으로 한 물질 및 에너지 수지를 이용하여 화학 공정 또는 단지를 모델링하고 모니터링 한다는 것은 사실상 불가능하다. 한편 센서기술의 발달과 통신기술의 발달로 인해 많은 공장에서 데이터 양의 증가가 운전자에게 더 많은 센서값을 제공하여왔다. 따라서 반응식 기반 모니터링의 제를 해결하기 위해 각 공정 변수의 실시간 데이터를 이용하여 통계적인 유의 구간을 설정하여 데이터의 이상 유무를 판단하고 진단하는 통계 기반 공정 모니터링 시스템이 제안되었다. 초기의 통계 모니터링 시스템은 각각의 공정 변수마다의 유의 구간을 설정하고 실시간으로 측정되는 변수가 유의 구간을 벗어나게 되는 경우를 공정 이상이라고 판단하는 단변수 모니터링 시스템을 사용하였다. 반면 더 많은 데이터가 운전자들에게는 반드시 더 가치 있는 정보를 제공해주진 않는다. 최근 이러한 공정 데이터를 이용하여 운전을 성공적으로 수행하고 공정 생산성을 향상시키기 위해 통계학적 공정 모니터링 기술이 산업현장에서 많이 사용되고 또한 새로운 고급 모니터링 기술이 요구되고 있다. 그러나 이러한 모니터링 시스템은 화학 공정으로부터 측정되는 공정 변수 모두를 일일이 감시해야 한다는 단점과 함께 공정 변수간의 상관관계를 고려하지 못하는 한계성을 드러내면서 다변량 통계 분석을 통한 공정 모니터링 시스템의 개발이 활기를 띠게 되었다[1, 2].

이런 장점으로 인해 공정데이터에 기반한 통계적 방법이 많이 연구되어 왔는데 그 중 전통적으로 Shewhart, CUSUM 및 EWMA 같은 통계 공정 제어(statistical process control, SPC) 차트들이 공정을 모니터링하고 제품의 품질을 향상시키기 위해 사용되어 왔다[1]. 그러나 이러한 단변량 제어 차트는 다변량 공정에 적용 했을 때 변수간의 상관성을 전혀 고려하지 않기 때문에 비정상적인 상태를 잘 감지하지 못하는 단점을 가지고 있다[2]. Fig. 1은 2개 변수를 각각 모니터링 하는 단변량 모니터링의 단점을 설명하는 그림이다. 여기서 두 변수( $y_1$ 과  $y_2$ )는 각각 그림의 수평축( $y_1$ )과 수직축( $y_2$ )에 표시되어 있고 모니터링 상한/하한 설정치가 표시되어 있다. 단변량 모니터링 기법은 상한/하한을 가진 직사각형 모니터링 지역을 가지고 있고 실제로는 두 개의 변수가 연관이 되어서 그림의 타원형의 모니터링 지역을 가지게 된다. 그러나 점⊗에 해당하는 운전은 실제 공

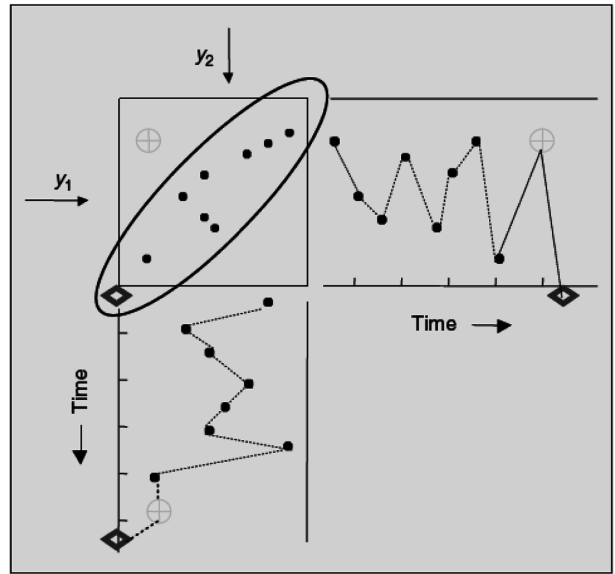


Fig. 1. The problems with using univariate control charts per one variable [2].

정에서는 비정상이나 어떤 단변량 차트도 효과적으로 비정상 운전(⊗)을 탐지하지 못한다. 또한 점⊙ 해당하는 운전은 실제로는 정상이나 단변량 모니터링 차트에서는 변수들 사이의 관계 때문에 비정상으로 탐지하게 된다. 이러한 문제는 변수의 수가 많아질수록 더 심해져서 각각의 변수를 동시에 고려하는 다변량 모니터링 기법이 필요하다는 것을 알 수 있다.

이러한 단점을 해결 하기 위해 최근 들어 데이터 투영법을 이용한 다변량 통계 공정 모니터링(multivariate statistical process monitoring, MSPM) 기법이 개발되었다. 공정데이터에 기반한 방법 중 다변량 통계적 기법에 의한 공정 모니터링 방법은 1990년 초에 John F. MacGregor 교수에 의해 제시되어 그 동안 많은 연구가 진행되어 왔다[2-15]. 그 중 대표적인 것이 주성분분석(principal component analysis, PCA)인데 이는 변수간의 상관성이 큰 다차원 데이터로부터 상관성이 없는 소수의 축을 뽑아내고 이 축에 데이터를 투영시킴으로써 다차원의 데이터를 2차원이나 3차원 같은 저차원 데이터로 해석할 수 있는 방법이다[5-7]. 주성분분석을 이용한 공정모니터링 방법은 다른 방법들과 결합되어 발전되어 왔으며 여러 산업체에 적용되어 그 성능이 입증되었고[4-10] 국내에서도 현재 통계학적 공정모니터링 기술에 대한 원천기술과 그 응용에 대한 많은 예가 보고되고 있다[11-19].

### 2. 최신 공정 모니터링 이론과 응용

Venkatasubramanian 등[20-22]은 공정이상 탐지와 진단에 관한 연구결과를 분류 및 소개하였다. Fig. 2는 지금까지 공정 이상 감시 및 진단 기술을 각 방법대로 정리한 결과이다. 공정이상진단은 크게 공정의 기존 모델에 기반한 quantitative model-based method, 공정의 정성적인 정보를 기초로 하는 quantitative model-based method, 공정의 상태를 나타내기 위해 공정 데이터의 통계학적 모델을 이용한 process history based- model로 나누어진다. 다시 quantitative model-based method는 사용하는 모델링 방법에 따라 observers, parity space, extended kalman filter로 분류된다. Quantitative model-based

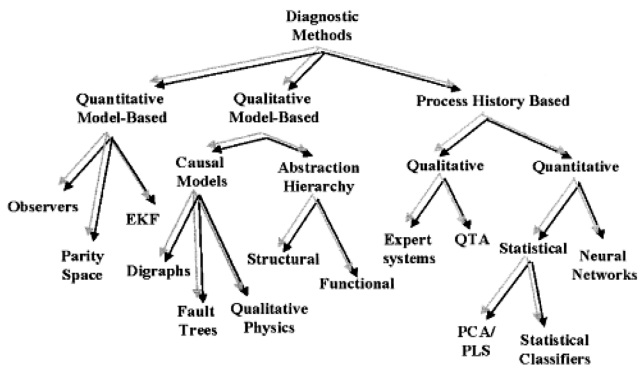


Fig. 2. Classification of diagnostic algorithms of process fault detection and diagnosis [33].

method는 각각 인과관계모델(diagraphs, fault tree, qualitative physics)과 abstraction hierarchy 방법(structural, functional abstraction)으로 나누어진다. Process history based- model은 각각 qualitative method(expert system, QTA)와 quantitative method인 통계학적 방법(PCA/PLS, 통계학적 분류기)과 soft-computing(인공신경망, 퍼지)로 각각 분류될 수 있다. 본 총설에서는 process-history based-model에 대한 최근 10년간의 최신 연구 경향을 소개하고자 한다.

2-1. 주성분분석을 이용한 공정 모니터링 이론

주성분분석(principal component analysis)은 원래 데이터 압축과 정보추출을 목적으로 chemometrics 분야에서 개발된 것으로 고차원의 데이터로부터 공분산을 최대화 하는 방향으로 하는 변수들이 조합으로 된 주요 직교성분을 찾는 방법이다. Fig. 3(a)는 주성분분석의 개념을 설명한 그림으로 3차원 상의 데이터를 주성분분석에 의해 직교하는 2차원의 주성분으로 변환하여 데이터의 정보 손실은 최소화하면서 2차원 상에서 정보처리와 해석을 용이하게 한다. MacGregor는 이러한 주성분분석에 기초하여  $T^2$  chart 기반 통계모

니터링 방법을 개발하였다[2]. 이러한 다변량 통계분석은 여러 개의 변수들이 서로 높은 상관관계를 가지고 있을 경우, 효과적으로 이를 다룰 수 있는 분석 방법이다. 따라서 다변량 통계분석을 이용할 경우 공정변수와 최종 품질변수를 함께 이용하여 공정을 보다 정확하게 모니터링 할 수 있게 된다.

상관관계가 강한 공정데이터의 특성을 이용하여, 공정데이터의 정보 손실을 최소화하면서 공정데이터 차원을 줄이는 축소모델공간을 찾고 이 공간으로 데이터를 투영시킴으로서 줄어든 변수를 가지고 공정을 감시하게 된다. 즉, m개의 센서를 통해 얻은 n개의 샘플로 이루어진 데이터 행렬  $X \in R^{n \times m}$  는 주성분분석에 의해 다음과 같이 모델 추정치와 잔차로 분해된다.

$$X = TP^T + E \tag{1}$$

여기서,  $T \in R^{n \times p}$  는 스코어(score) 행렬,  $P \in R^{m \times p}$  는 로딩(loading) 행렬,  $E \in R^{n \times m}$  는 잔차(residual) 행렬을 나타내며, p는 축소모델 공간의 차원을 나타낸다. 새로운 공정측정치 x에 대하여 새로운 주성분(principal component)은  $t = P^T x$  이고  $N(0, \Lambda)$ 인 정규분포를 따르며, 잔차는  $e = (I - PP^T)x$ 로 나타난다. 일반적으로 공정이상 감지를 위하여 가장 스코어 제곱합  $T^2 = t^T \Lambda^{-1} t$  와 잔차 제곱합  $Q = e^T e$  두 값을 관찰하게 된다.  $T^2$ 에 대하여 공정의 정상 상태에서 나타날 수 있는 100(1- $\alpha$ )%의 신뢰도를 갖는 통계적 상한치(upper limit)는

$$T^2_{lim} = \frac{p(n-1)}{n-p} F(p, n-1; \alpha) \tag{2}$$

로 표시되며, Q에 대한 100(1- $\alpha$ )%의 신뢰도를 갖는 통계적 상한치(upper limit)는

$$Q_{lim} = \theta_1 \left[ \frac{c_{\alpha} \sqrt{2\theta_2 h_o^2} + 1 + \frac{\theta_2 h_o (h_o - 1)}{\theta_1^2}}{\theta_1} \right] \tag{3}$$

로 표현된다. 여기서,  $\theta_j = \sum_{p+1}^m (\Sigma_{ii})^j, j = 1, 2, 3$ 이며  $\Sigma_{ii}$ 는 샘플 공분

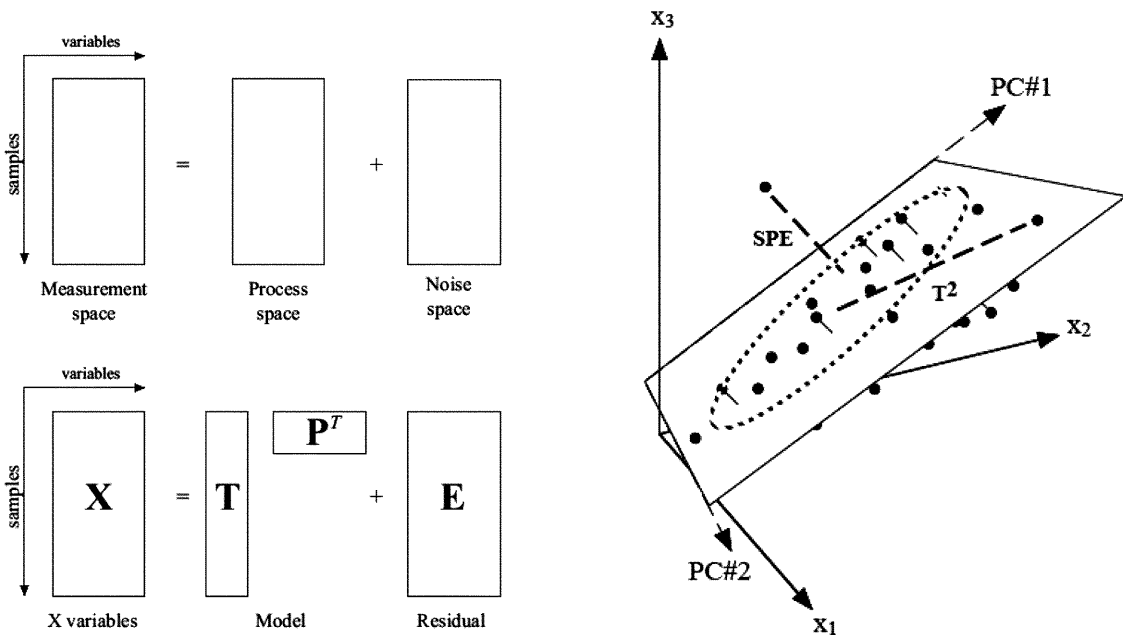


Fig. 3. (a) Decomposition of X into a process subspace and a noise subspace, (b) The geometrical interpretation of PCA with the concept of SPE and  $T^2$  measures, respectively [3].

산 행렬의  $i$ 번째 대각원소,  $h_o = 1 - 2\theta_1\theta_3\sqrt{3\theta_2^2}$ ,  $c_\alpha$ 는  $n$ 이 매우 큰 값을 가질 경우  $p$ 값이  $\alpha$ 일때의  $t$  값이다. 따라서, 새로운 공정 측정값  $x$ 에 대하여,  $T_x^2 < T_{lim}^2$ 이고  $Q_x^2 < Q_{lim}^2$ 이면  $100(1-\alpha)\%$ 의 신뢰수준에서 현재의 공정이 정상상태라는 것을 확인할 수 있다. Fig. 3(b)는 주성분분석에 기반하여 공정모니터링 차트를 이용한 공정진단 방법을 표현한 것이다.  $T^2$ 와  $Q$  plot을 통해 둘 중 하나의 통계량이 한계선(control limit, UCL)을 넘을 경우는 공정 이상상태로 간주되며, 이때 각각의 변수들이  $T^2$ 나  $SPE$ 에 기여하는 정도를 기여도 분석(contribution plot)으로 나타냄으로써 어떤 변수들에 이상이 생겼는지 쉽게 관찰할 수 있다. 따라서 기여도 분석을 통해 그 기여도가 가장 큰 변수들을 선정하고 공정상황의 변화 추이를 살펴 보면서 이를 정상적인 상태와 비교하여 결론을 도출하는 과정을 거치게 된다. 비록 기여도 분석이 공정 이상상태에 대한 정확한 결과를 직접적으로 보여주지는 않지만 가능한 원인들에 대한 정보를 제공하기 때문에 공정을 진단하는데 드는 시간과 노력을 크게 줄일 수 있는 장점을 가진다.

**2-2. 비선형 주성분분석을 이용한 비선형 공정 모니터링**

화학, 환경 및 생물공정의 공정의 가장 큰 특징이라고 할 수 있는 것은 비선형성이 매우 강하다는 것이다. 이에 반해 기존에 연구되어 왔던 모니터링 기술 중 하나인 주성분 분석은 데이터의 선형성을 기반으로 한 방법이다. 따라서 비선형성을 확실히 제거하지 않은 채 주성분분석을 그대로 사용하는 것은 공정데이터 내에 있는 정보를 제대로 뽑아내지 못하여 빠르고 정확한 이상감지를 하는데 제약을 주게 된다. 비선형성이 강한 데이터를 제대로 처리하기 위해 Kramer[23]는 auto-associative 신경망을 기반으로 한 비선형 주성분분석법을 개발하였다. 하지만 이 방법은 총 5개의 layer를 학습하여야 하고 각 layer의 노드수를 결정하는데 어려움을 가지고 있다. Dong과 McAvoy[24]는 principal curve와 신경망을 이용한 비선형 주성분분석법을 제안하였는데 이 방법 또한 비선형 최적화 문제를 풀어야 하고 신경망을 학습하기 전에 미리 주성분 수를 결정해야 하는 단점을 가지고 있다. 그 이외에도 Hiden 등[25]이 유전알고리즘을 이용한 방법을 제시하였으나 이들 방법 모두 신경망에 기반한 방법으로 학습하는데 시간이 걸리고 이상의 감지에는 좋은 성능을 보이거나 이상의 원인을 진단하는 데는 수식적인 접근이 어려운 단점을 가지고 있다.

한편, 1998년 Scholkopf[26-27] 등이 새로운 커널주성분분석(kernel principal component analysis, KPCA)이라는 비선형 주성분 분석법을 발표하였다. 이 방법은 커널 함수라는 무한 차수의 비선형 함수를 이용하여 비선형데이터를 매핑시키는데 이 과정에 의해 비선형 데이터가 보다 선형 데이터를 이루게 된다. 선형화된 데이터에 기존의 주성분분석을 적용함으로써 비선형성을 고려할 수 있게 된다. 커널 함수로 매핑 시키고 주성분분석을 이용하여 데이터 차수를 떨어뜨리는 과정을 커널 함수를 미리 정의함으로써 아주 간단하게 수식화 할 수 있게 된다(Fig. 4 참조). KPCA의 이러한 장점을 이용하여 공정 모니터링, 분류, 이미지 분석등에 적용하여 좋은 결과를 보여주었다. 커널주성분분석은 커널 함수만 정의해주면 계산절차가 매우 간단하고 주성분 개수를 미리 정해줄 필요없이 나중에 선택할 수 있기 때문에 기존의 방법보다 많은 장점을 가지고 있다.

주성분분석이 일반적인 변수들의 선형 상관관계만을 얻는데 그 한계가 있다면, 커널주성분분석은 공정변수들의 비선형 관계를 모

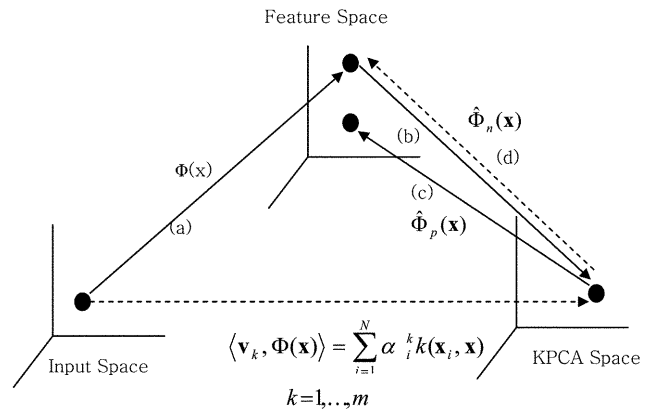


Fig. 4. Conceptual diagram of KPCA [27].

사하기 위한 확장된 형태이다.  $n$ 개 샘플로 구성된 공정데이터에 대하여 우선 비선형 함수를 통해 특성공간(feature space)으로 데이터가 확장된다. 이 특성공간 상에서 데이터의 공분산 행렬은

$$C = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^k \Phi(x_j)\Phi(x_j)^T \tag{4}$$

으로 나타나고, 주성분분석과 같은 방법으로 주성분 행렬  $V$ 는 고유치 문제

$$\lambda V = CV = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^k (\Phi(x_j) \cdot V)\Phi(x_j) \tag{5}$$

를 해결함으로써 얻어진다. 식 (5)를 통해 알 수 있듯이 모든 고유벡터(eigenvector)는 확장공간으로 확장된 데이터의 가중합으로 나타나게 된다. 즉,  $V = \sum \alpha_i \Phi(x_i)$ 가 된다. 식 (5)의 양변에  $\Phi(x_k)$ 를 곱하게 되면,

$$\lambda(\Phi(x_k) \cdot V) = \Phi(x_k) \cdot CV \tag{6}$$

과 같이 되고,  $n \times n$  커널 행렬을

$$K_{ij} = \Phi(x_i) \cdot \Phi(x_j) = k(x_i, x_j) \tag{7}$$

로 정의하게 되면, 식 (5)는 다음의 특성치 문제를 해결하는 문제로 간단히 나타난다.

$$\lambda \alpha = K \alpha \tag{8}$$

여기서  $\alpha = [\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n]^T$ 이고, 위의 문제를 풀면, 고유치-고유벡터  $\alpha = [\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n]^T$ 를 얻게 된다. 이 값들을  $\lambda_k (\alpha^k \cdot \alpha^k) = 1$ 을 만족시키기 위해 표준화된 값으로 스케일링한다. 또한, 선형 주성분분석과 마찬가지로 데이터 공간에서 평균을 0으로 맞추어주어야 하는데, 커널 주성분분석에서는 확장공간에서의 데이터의 값의 평균을 0으로 맞추게 된다. 평균이 0으로 보정된 커널행렬은

$$\hat{K} = K - \frac{1}{n} [K - K]_n + \frac{1}{n} [K]_n \tag{9}$$

을 이용하여 쉽게 구할 수 있다. 여기서  $(1_n)_{ii} = 1/n$ 이다. 한편, 새로운 샘플  $x$ 에 대하여, 특성공간에서의  $\Phi(x)$ 의  $k$ 번째 주성분은

$$t_k = (V^k \cdot \Phi_k) = \sum_{i=1}^k \alpha_i^k k(x_i, x) \tag{10}$$

이다.

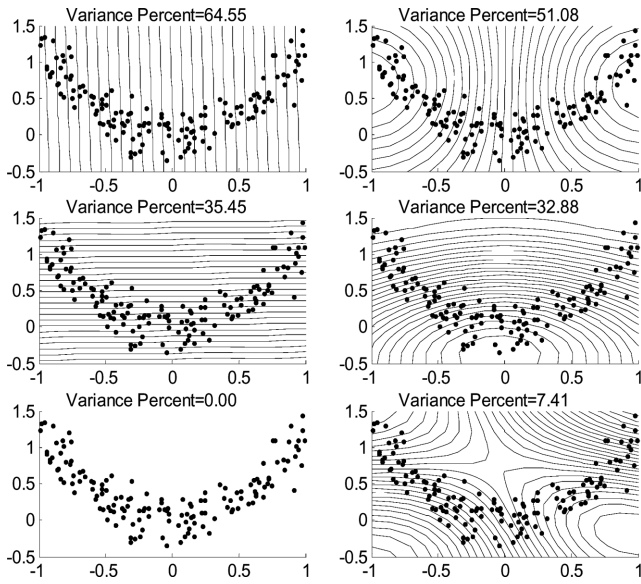


Fig. 5. Motivational example of KPCA (Left Column: linear PCA, Right Column: KPCA) [26].

센서, 조절기, 공정의 이상 유무를 판단하기 위하여 일반적인 주 성분분석에서는 데이터의 원래 공간상에서의 변동을 감시하는 반면, 커널 주 성분분석에서는 데이터가 확장된 특성공간에서의 데이터의 변동을 추적하게 된다[28]. 주 성분분석 모니터링 방법과 마찬가지로 두 가지 감시지표  $T^2$ 와  $Q$  값을 이용하게 된다. 두 가지 감시지표는 각각

$$T^2_{\phi} = t^T \Lambda^{-1} t \quad (11)$$

와

$$Q_{\phi} = e^T e = \Phi(x)^T (1 - VV^T) \Phi(x) = \text{trace}(K(x, x)) - t^T t \quad (12)$$

을 통해 구할 수 있으며, 감시지표의 정상공정에서의 상한치는 주 성분분석과 유사한 방법으로 구해진다[28-30]. Fig. 5에서 보는 바와 같이 데이터의 분포가 비선형성을 나타낼 때 기존의 주 성분분석은 선형성을 나타내는 축을 뽑아내는 반면 커널주 성분분석은 비선형성을 효과적으로 고려하는 성능을 보여주고 있다.

2-2-1. 사례연구

제시한 커널 주 성분분석의 성능을 검증하기 위하여 다음과 같은 간단한 2개의 입력과 2개의 출력을 갖는 2차 시스템을 고려하였다 [29].

$$\begin{aligned} y_1(t) &= (u_1(t) + u_2(t))^2 \\ y_2(t) &= (u_1(t) + k u_2(t))^2 \end{aligned} \quad (13)$$

여기서,  $y_1$ 과  $y_2$ 는 출력,  $u_1$ 과  $u_2$ 는 입력이며,  $k$ 는  $t=1-100$  구간에서 2이고  $t=101-200$  구간에서는 2.5로 증가한다. 두 종류의 입력은 모두 평균이 0이고 분산이 0.1인 정규분포를 통해 얻어진 랜덤변수라 가정한다. 두 개의 입력과 출력이 공정 모니터링을 위해 사용되었고, 처음 100개의 공정변수 샘플이 모델구성에 나머지 200개의 샘플이 온라인 모니터링을 위해 사용되었다. 아래의 Fig. 6은 이 2차 공정의 모니터링 결과를 나타낸다. 앞서 언급한 바와 같이 모델을 구성한 후 모델 안에서의 패턴의 움직임에 대한 이상 유무를

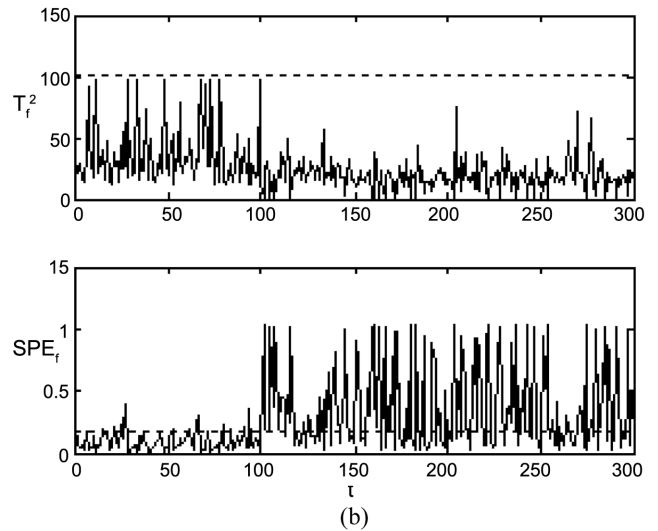
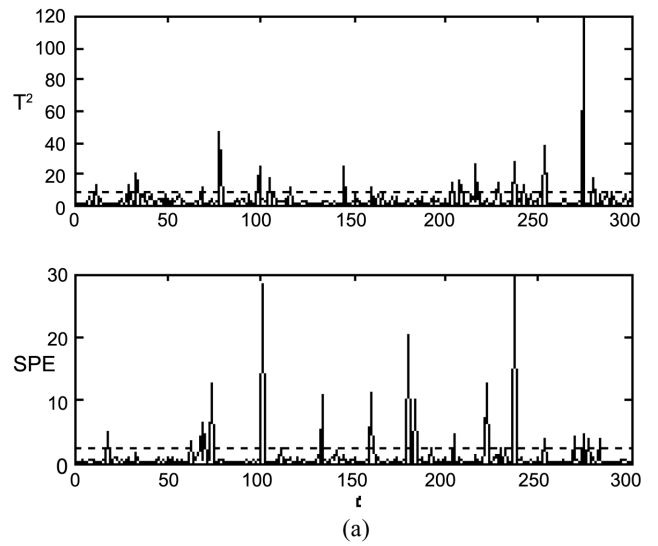


Fig. 6. Monitoring results using (a) PCA, (b) Kernel PCA [28].

$T^2$  통계량을 통해 확인하고, 모델로부터의 잔차의 움직임에 대한 이상 유무를  $Q$  통계량을 통해 확인하였다. Fig. 6(a)는 일반적인 주 성분분석법을 사용했을 때의 결과이다.  $t=100$  이후에도  $Q$  통계량에서 간헐적으로 이상을 감지할 뿐 이상 감지율이 매우 떨어지는 것을 확인할 수 있다. 반면, 커널주 성분분석법을 사용하였을 경우 잔차공간에서 공정의 이상을 매우 잘 감지함을 알 수 있다(Fig. 6(b) 참조). 이 결과로부터 커널주 성분분석을 이용한 공정 모니터링 방법이 비선형 공정에 잘 적용될 수 있음을 확인하였다. 또한, 비선형 동적 공정을 모니터링하기 위해 동적 커널 주 성분분석을 제안하였다. 다음과 같은 다변량 비선형 동적 공정 시스템을 고려하자[29-30].

$$\begin{aligned} x(t+1) &= Ax(t) + Bf(u(t)) \\ y(t) &= x(t) + v(t) \end{aligned} \quad (14)$$

여기서  $u$ ,  $y$ ,  $x$ 는 각각 입력, 출력, 상태변수이고  $v$ 는 평균 0, 분산 0.5의 정규분포를 가지는 랜덤 출력 노이즈 항이다. 시스템 행렬  $A$ 와  $B$ 는 각각

**Table 1. Type I and Type II error using four monitoring methods**

	Type I error	Type II error
PCA	5.8	72.3
Dynamic PCA	5.2	61.5
Kernel PCA	17.4	55.2
Dynamic kernel PCA	5.1	53.2

$$A = \begin{bmatrix} 0.118 & -0.191 & 0 \\ 0.847 & 0.264 & 0.9 \\ 0.214 & -0.11 & 0 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 0.05 & 0.1 \\ 0.05 & 0.05 \\ 0 & 0.05 \end{bmatrix} \quad (15)$$

이다. 시스템 입력  $u$ 는 다음과 같은 관계를 가지고 생성된다.

$$u(t) = \begin{bmatrix} 0.811 & -0.226 \\ 0.477 & 0.415 \end{bmatrix} u(t-1) + \begin{bmatrix} 0.193 & 0.689 \\ -0.320 & -0.749 \end{bmatrix} w(t-1) \quad (16)$$

여기서  $w$ 는 평균 0, 분산 5의 정규분포를 가지는 랜덤 입력노이즈이다. 비선형 함수  $f$ 는  $[u_1^2(t)u_2^2(t)]^T$ 이다.

전체 모사 시간은 560이고  $t=501-560$ 에서 공정이상이 발생한다. 즉, 이 기간에 시스템 행렬의 2 1 원소가 -0.5로 바뀐다. 총 100번의 반복을 통해 평균적인 타입 I 과 II 에러를 구한 결과를 Table 1에 나타내었다. 여기서 타입 I 에러는 실제 정상인데 이상으로 판단한 경우를 의미하고, 타입 II 에러는 실제 이상인데 정상으로 판단한 경우를 의미한다. Table 1에서 보는 바와 같이 동적 커널주성분 분석 모니터링 기법이 두 종류의 에러에서 모두 다른 모니터링 기법들(주성분 분석, 동적주성분 분석, 커널주성분 분석)보다 가장 낮은 값을 가져서 동특성을 가진 비선형 공정의 경우 훨씬 좋은 모니터링 성능을 보임을 확인할 수 있다.

**2-3. 다중모델(multiple model)을 이용한 공정감시**

주성분 분석(PCA: principal component analysis)과 같은 다변량 통계적 방법을 이용한 공정감시기법은 비선형 공정(nonlinear process)에 적용되었을 때 종종 비효율적이거나 신뢰할 수 없는 결과를 야기한다. 게다가 PCA 모델은 비선형 공정을 모사하기 위하여 더 많은 주성분을 모델에 포함하기 때문에 Hotelling's  $T^2$  통계치(statistic)에서 거짓경보(false alarm)가 발생할 확률이 높아지게 된다. 비선형 공정의 효율적인 감시를 위해서 비선형 PCA가 제안되었다. 이 분석법은 선형 대신 비선형 함수를 이용하여 공정을 좀더 정확히 모사함으로써 공정감시의 신뢰성을 높인다.

다른 접근 방식으로서 전체적으로 비선형성을 보이는 공정을 부분적으로 나누어 각각의 국소 패턴을 선형모델로 모사하는 방법이 있다. 이러한 방법은 공정감시의 관점에서 기존의 선형 PCA 기반의 감시 통계치(monitoring statistic)를 그대로 적용할 수 있는 장점이 있다. 또한, 비선형 공정의 모사에만 국한되는 것이 아니라 동적 공정(dynamic process)이나 공정상태의 변화 등으로 인해 공정데이터의 패턴이 정상분포를 따르지 않는 경우에도 유용하게 사용될 수 있다. 전체적으로 복잡한 패턴을 보이는 데이터를 몇 개의 단순한 패턴으로 나누어 각각의 단순 패턴을 국소 모델로 모사하게 된다.

위에서 언급한 다중모델을 이용한 접근방식으로서 Whiteley[31]은 동적 공정으로부터 얻어진 데이터의 분포를 추정하는데 적응 군집(adaptive clustering) 알고리즘 형태의 하나인 adaptive resonance theory(ART) 네트워크를 이용하였다. Chen과 Liu[32]은 heuristic smoothing clustering을 이용하여 데이터의 패턴을 가장 적절히 모

사하는 군집의 개수를 정한 후 각 군집을 PCA를 이용하여 공정을 감시하였다. Choi[33] 등은 가우시안 조합 모델(Gaussian Mixture model)을 이용한 공정 이상 감지 및 진단 방법을 제시하였다. 여기서는 앞서 언급한 Chen과 Liu가 제시한 방법과 달리 데이터의 패턴을 군집화하고 모사하는 단계가 expectation-maximization(EM) 알고리즘을 이용하여 동시에 자동적으로 이루어졌다. 또한 최근에 Choi[34] 등은 최대가능도 주성분분석 모델(maximum likelihood PCA)의 조합을 이용하여 복잡한 공정을 감시하고 진단하는데 확률 모델이 기존의 PCA 모델의 조합보다 더욱 정확한 정보를 제시함을 보였다. 이 장에서는 마지막 최대가능도 주성분분석 모델 조합에 대하여 좀더 자세히 살펴보기로 한다.

**2-3-1. 최대가능도 주성분분석 모델의 조합**

K개의 국소 모델을 가진 조합 모델의 확률분포(statistical distribution)는 다음과 같이 나타난다[33, 35, 36].

$$p(x) = \sum_{k=1}^K \alpha_k p(x|k) = \sum_{k=1}^K \int p(x|t, k) p(t|k) \alpha_k dt \quad (17)$$

여기서  $x \in \mathbb{R}^m$  와  $x \in \mathbb{R}^{p_k}$  은 각각 측정 벡터와 스코어(score) 벡터이다. 스코어 벡터가 표준정규분포(standard normal distribution), 즉  $N(0, I)$ 을 따른다는 가정하에 각 국소모델의 확률분포는 다음과 같이 표현된다.

$$p(x|t, k) = \mathcal{N}(P_k t + \mu_k, \sigma_k^2 I) \quad (18)$$

모델구성을 위하여 측정치 벡터  $D = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ 를 이용하여 모델 계수  $\Theta = \{\theta_k, \alpha_k\}_{k=1, K}$ 를 구해야 한다. 여기서  $\alpha_k$ 는 각 국소 모델의 상대적인 가중치를 나타내며  $\sum_k \alpha_k = 1$ 을 만족한다. 또한,  $\theta_k = \{P_k, \mu_k, \sigma_k^2\}$ 은 각각 k번째 국소 주성분분석 모델의 로딩(loading) 행렬, 평균 벡터, 노이즈의 분산을 의미한다. 모든 모델 계수들이 모두 상수(constant)이고 어떠한 전제 정보(prior knowledge)도 없다는 가정 하에서 모델 계수는 가능도 함수를 최대로 하는 값들로 결정이 된다. 결정해야 하는 계수가 많아지고 가능도 함수의 비선형성이 증가할수록 이 최적화 문제는 더욱 복잡해지며 해를 얻는데 오랜 시간이 소요된다. 이럴 경우 EM 알고리즘이 최적화 문제를 푸는 효율적인 방법이 될 수 있다[34].

EM 알고리즘의 가장 큰 장점은 모델 계수를 결정하는데 있어서 복잡한 최적화 문제를 간단한 반복 알고리즘으로 변환시켜 최적해를 결정하는 것이다. 불완전 데이터(incomplete data)로부터 데이터 분포를 결정하는 모델 계수의 최대 가능도 추정치를 구하는 것이 일반적인 EM 알고리즘의 문제 형태이다. 로그가능도(log-likelihood)를 최대화하는 대신에 EM 알고리즘에서는 기대 완전데이터 로그가능도(expected complete data log-likelihood)를 최대화한다. 이를 통해서 계산되는 로그가능도는 반복 과정을 통하여 계속 그 값이 단조 증가하는 바람직한 성질을 가지게 된다.

EM 알고리즘은 크게 E-단계와 M-단계로 나누어진다. E-단계에서는 전제 측정치 샘플과 전 M-단계에서 얻어진 모델 계수를 이용하여 은닉변수(hidden variable)들(여기서는 스코어 벡터를 일컬음)의 확률 분포를 얻는다. M-단계에서는 기대 완전데이터 로그가능도를 최대가 되도록 모델 계수들이 새로운 값으로 갱신된다. 여기서 모델 계수라 함은 각 국소 PCA 모델의 평균과 분산, 로딩행렬, 그리

고 국소모델의 상대가중치를 모두 일컫는다.

앞서 언급한 바와 같이 PCA 모델 조합의 모델 계수들은 EM 알고리즘에 의해 가능도를 최대로 하는 값으로 수렴하게 된다. 모델 계수 학습과정에서 우리는 모델의 구조가 이미 결정되어 있다는 가정에서 출발하였다. 이번에는 모델의 구조를 결정하는 문제에 대해 생각해본다.

공정감시를 위한 PCA 모델 조합을 만들기 위하여 국소 모델의 개수와 국소 모델의 주성분의 개수를 정해야 한다. 그러나 최적해를 찾기 위하여 모든 가능한 해를 탐색하는 방법은 오랜 학습 시간을 필요로 한다. M개의 측정변수와 K개의 가능한 국소 모델이 존재할 경우  $m(m^k-1)/(m-1)$ 개의 해가 존재한다. 따라서 통상적으로 사용되는 cross-validation 방법[37]은 이 경우에 적용될 경우 매우 시간이 오래 걸리고 비효율적이다. 학습시간을 줄이고 탐색구간을 줄이기 위하여 종종 모델의 구조에 제약을 준다. 예컨대 Tipping과 Bishop[35]은 모든 국소 모델이 같은 수의 주성분 개수를 가진다고 가정하였다. 그러나 일반적으로 모든 국소 모델은 서로 다른 데이터 분포를 추정하는 것이므로 같은 주성분 개수를 가질 가능성은 적다. 기존의 방법들이 각 모델의 주성분 개수를 가정하고 최적의 노이즈 분산(variance of noise)을 추정하는 방식이었다면, Meincke와 Ritter[36]가 제시한 방법은 노이즈 분산을 점차적으로 줄여가면서 최적의 주성분 개수를 추정하는 방식으로 각 국소 모델들이 자연스럽게 서로 다른 주성분 개수를 가지게 된다. 한편, 제시된 방법에서 국소 모델의 수는 기존의 방법들에서 미리 주어진 값으로 가정하였다. 그러므로 국소 모델의 주성분 개수와 모델 계수들은 국소 모델의 개수와 연관을 갖지 않는다. 그러나 국소 모델의 구조와 계수들은 서로 연관을 가지고 있으므로 최대가능성을 가지는 모델을 구성한다는 관점에서 구조와 계수들을 동시에 고려하여 모델을 결정하는 것이 바람직하다. Choi 등[34]은 국소 모델의 개수를 결정하기 위해 아래와 같은 목적함수를 이용하였다.

$$K^o = \arg \min_K \left[ J(k) \equiv -\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K p(k|\mathbf{x}_n, \Theta) \ln(p(\mathbf{x}_n|k)) - \sum_{k=1}^K \alpha_k \ln \alpha_k \right] \quad (19)$$

위 식은 Xu[38]가 제안한 베이시안 음양시스템(bayesian ying-yang system)의 복잡도 측정(complexity measure)의 한 형태이다. 목적함수  $J(k)$ 는 모델 계수들에 관한 함수이므로 국소 모델의 개수  $k$ 에 대하여 모델 계수들이 결정된 후에  $J(k)$  값을 구하게 된다. 종종 국소 모델의 개수는 과추정(overestimation)되기도 하는데 이는 학습 샘플의 개수가 불충분하여 모델 계수가 부정확하게 추정되었을 때 일어난다. 따라서 이러한 경우  $J(k)$ 의 값이 감소하여 수렴하는 시점의  $k$ 를 국소 모델의 개수로 정하게 되면 과추정을 피할 수 있다.

2-3-2. 주성분분석 모델 조합을 이용한 공정감시

정상 공정에서 얻어진 데이터를 이용하여 최대가능도 주성분분석 조합 모델이 얻어진 후, 두 종류의 감지 통계치(monitored statistics)가 공정에서 발생하는 다양한 이상을 감지하는데 이용된다. Hotelling's  $T^2$  통계치는 모델축소공간(model subspace) 내부에서의 샘플과 평균의 mahalanobis 거리를 나타내며, 예측에러제곱(squared prediction error) 통계치는 모델축소공간으로부터 샘플까지의 euclidean 거리를 나타낸다. 일반적인 PCA는 달리 최대가능도 PCA에서는 스코어 벡

터가 확률밀도함수의 형태, 즉  $p(\mathbf{t}|\mathbf{k}, \mathbf{x})$ 로 나타나게 된다. 따라서 다음과 같이 대표값으로 평균값을 취한다.

$$\hat{\mathbf{t}}_k = E(\mathbf{t}|\mathbf{k}, \mathbf{x}) = \mathbf{H}_k^{-1} \mathbf{P}_k^T \bar{\mathbf{x}}_k \quad (20)$$

여기서  $\mathbf{H}_k = \sigma^2 \mathbf{I} + \mathbf{P}_k^T \mathbf{P}_k$ 이다.  $\hat{\mathbf{t}}_k$ 의 평균과 공분산은 각각 0과  $\mathbf{P}_k^T \mathbf{G}_k^{-1} \mathbf{P}_k$ 으로 표현된다. 또한  $\mathbf{x}_k$ 의 추정치는  $\hat{\mathbf{x}}_k = \mathbf{W}_k \hat{\mathbf{t}}_k + \boldsymbol{\mu}_k$ 으로 나타낼 수 있다. 여기서  $\mathbf{W}_k = \mathbf{P}_k (\mathbf{P}_k^T \mathbf{P}_k)^{-1} \mathbf{H}_k$ 이다. 결론적으로  $\hat{\mathbf{t}}_k$ 를 이용하여 하면 k번째 국소 모델의 Hotelling's  $T^2$  통계치는 다음과 같이 주어진다[34].

$$T_k^2 = \hat{\mathbf{t}}_k^T (\mathbf{P}_k^T \mathbf{G}_k^{-1} \mathbf{P}_k)^{-1} \hat{\mathbf{t}}_k \quad (21)$$

여기서  $\mathbf{G}_k = \mathbf{P}_k \mathbf{P}_k^T + \sigma_k^2 \mathbf{I}$ 이다. 한편, 국소 모델의 잔차공간(residual space)에서의 예측에러제곱 통계치는 다음과 같이 나타난다.

$$Q_k = \bar{\mathbf{x}}_k^T [\mathbf{I} - \mathbf{P}_k (\mathbf{P}_k^T \mathbf{P}_k)^{-1} \mathbf{P}_k^T] \bar{\mathbf{x}}_k \quad (22)$$

국소 PCA 모델의 수가 증가함에 따라 관리도의 개수도 증가하게 되어 여러 개의 차트를 감시해야 하는 어려움이 따른다. 그러나 실제로는 현재 샘플이 속해있는 국소 모델에 관한 모니터링 차트만을 감시하면 되므로 우리는 군집에 대한 후확률(posterior probability)을 먼저 관찰함으로써 현재 샘플이 어떠한 국소 모델에 속해 있는지를 확인한다. 그 후 해당하는 국소 모델에 해당하는 관리도만을 확인함으로써 현재 공정의 상태를 판단하게 된다.

2-3-3. 적용사례

2-3-3-1. 비선형 공정

주성분분석 조합의 비선형 공정으로의 적용가능성을 확인해보기 위하여 Dong과 McAvoy[24]의 논문에서 사용되었던 데이터를 재현하였고, 이 데이터를 기반으로 PCA, 주곡선(principal curve) 비선형 PCA, 그리고 PCA 조합모델의 성능을 비교하였다. 세 가지 변수를 가진 다음과 같은 시스템을 고려하였다.

$$\mathbf{x} = [t|t^2 - 3t| -t^3 + 3t^2]^T, \quad t \in [0.01, 2] \quad (23)$$

측정변수의 측정에러를 고려하기 위하여  $N(0, 0.1^2)$ 의 확률분포를 따르는 가우시안 노이즈를 첨가하였다. 정상 공정데이터는 200개의 샘플로 이루어져 있고, 테스트를 위한 데이터는 두부분으로 구성되어 있다. 처음 200개의 샘플(1-200)은 정상공정과 동일한 상태에서 얻어졌고 나중 200개의 샘플(201-400)에서는 세번째 변수가  $x_3 = -1t^3 + 3t^2$ 대신에  $x_3 = -1.1t^3 + 3.2t^2$  식으로부터 얻어졌다. 세 가지 종류의 주성분분석 방법에 기반한 이상 감지 결과를 다음의 Table 2에 요약하였다.

거짓경보비율(false alarm rate)은 샘플의  $T^2$  통계치 나 예측잔차

Table 2. Comparisons of three monitoring performances using the multiple model

	Confidence limits	False alarm rate (%)	Missed alarm rate (%)
Linear PCA	0.022	1.5	98.5
Nonlinear PCA	0.01	1	74
	0.05	5	68
Multiple PCA	0.022	5	47.5

제품 통계치가 일반 정상 상태에서 관리상한(UCL: upper control limit)을 넘어선 개수의 비율을 나타낸다. 한편, 감지실패비율(missed alarm rate)은 샘플의 통계치가 비정상 상태에서 관리상한을 넘어가지 않은 비율을 나타낸다. 따라서 두 비율이 작을수록 감지 모델의 성능이 뛰어나다고 판단할 수 있다. 모든 방법들이 허용 가능한 거짓경보비율을 보여준 반면 PCA 조합 모델의 감지실패비율이 다른 두 가지 방법들에 비해 가장 적은 값을 보여주었다[34].

공정의 정상 상태와 비정상 상태에서 얻어진 데이터의 비선형 패턴이 매우 유사하기 때문에 선형 PCA에 기반한 관리도는 거의 이상을 감지하지 못한다. 반면, PCA 조합에 기반한 예측에러제곱 통계치의 관리도는 이상을 뚜렷하게 감지하였다. 여기서 비선형 패턴은 총 6개의 국소 모델로 구성된 PCA 조합 모델로 추정되었다. 이 적용 사례에서는 제한한 방법이 비선형 공정을 감시하는데 있어서 차후 분석이 까다롭고 어려운 비선형 PCA 방법을 대신할 수 있는 하나의 훌륭한 대안이 될 수 있음을 보여주었다.

2-3-3-2. 동적 공정 모니터링

동적 공정에서의 입력 패턴이 사인파(sinusoidal) 신호처럼 비가우시안(non-Gaussian) 일 경우 정상(steady state) 공정 상태에서 얻어진 샘플 또한 비가우시안 형태를 보이게 된다. 이번 적용 사례에서는 다음의 공정[39]을 고려하였다.

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t+1) &= \mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}[\mathbf{u}(t) - \mathbf{v}(t)] + \mathbf{p}(t) \\ \mathbf{y}(t) &= \mathbf{C}\mathbf{x}(t) + \mathbf{D}[\mathbf{u}(t) - \mathbf{v}(t)] + \mathbf{o}(t) \end{aligned} \quad (24)$$

여기서  $\mathbf{u}(t)$ ,  $\mathbf{y}(t)$ ,  $\mathbf{x}(t)$ 는 각각 입력, 출력, 상태(state) 벡터이고,  $\mathbf{v}(t)$ ,  $\mathbf{o}(t)$ ,  $\mathbf{p}(t)$ 는 입력, 출력, 공정 노이즈를 의미한다. 시스템 행렬  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{D}$ 는 다음과 같이 주어진다.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0.67 & 0.67 \\ -0.67 & 0.67 \end{bmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -0.4236 & 0.1253 & -1.1465 & 1.1892 \\ -1.6656 & 0.2877 & 1.1909 & -0.0376 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0.3273 & -0.5883 \\ 0.1746 & 2.1832 \\ -0.1867 & -0.1364 \\ 0.7258 & 0.1139 \end{bmatrix} \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} 1.0668 & 0.2944 & -0.6918 & -1.4410 \\ 0.0593 & -1.3362 & 0.8580 & 0.5711 \\ -0.0956 & 0.7143 & 1.2540 & -0.3999 \\ -0.8323 & 1.6236 & -1.5937 & 0.6900 \end{bmatrix} \quad (25)$$

여기서 공정 입력은  $\mathbf{u}(t) = [10\sin(t) \ 10\sin(2t) \ 10\sin(3t) \ 10\sin(4t)]^T$ 으로 나타낸다. 모든 노이즈는  $N(0,1)$ 의 정규분포를 따른다고 가정한다. 모델 구성을 위한 샘플 및 테스트 샘플은 각각 200개로 구성된다. 모델 구성을 위한 공정 데이터는 정상 공정으로부터 얻어졌다. 테스트 공정에서는 시간에 따라 센서 이상의 값이 선형적으로 증가하는 형태의 센서 이상(sensor fault)이  $t=100$ 에서 두 번째 센서에 나타난다. 센서 이상의 형태는  $\tilde{\mathbf{u}}_2(t) = \mathbf{u}_2(t) + s(t-100)$ 의 수식으로 표현된다. 여기서  $s$ 는 0.1부터 0.8 사이에서 변한다. 서로 다른  $s$  값에 대하여 100번의 반복 실험(monte carlo simulation)이 이루어졌고 평균런길이(ARL: average run length)가 비교 지표로서 사용되었다. 여기서 런 길이는 공정에 이상이 발생한 후 관리도에 의해 공정이상이 판명될 때까지 걸리는 시간이라 정의한다. 통계적으로 관리도에서 신호가 최소한 연속적으로 3회 이상 관리상한을 넘어설 경우 공정에 이상이 있다고 판단한다[40].

PCA, 동적 PCA, 그리고 PCA 조합에 의해 얻어진 모니터링 결과가 Table 3에 주어져있다. PCA 조합 모델은 가장 적은 감지실패비율과 가장 적은 평균런길이를 모든 경우의 센서이상에 대해 보여주고 있다. 특히 PCA 조합의 성능의 우수성은 천천히 표류하는 센서이상에 대해서 잘 나타난다.  $s=0.1$  일 경우의 센서 이상에 대하여 PCA와 동적 PCA는 100개의 반복 실험 중 각각 19개와 2개의 실험에 대해 센서이상을 감지하는데 실패하였다. 반면 PCA 조합모델 기반의 예측에러제곱 통계치의 관리도는 100번의 모든 경우에 대해서 센서이상을 감지하였다. 게다가 센서표류속도가 작아질수록 PCA 조합 모델과 다른 모델간의 감지 속도의 차이는 더욱 커졌다[42].

Table 3. Monitoring results of sensor faults in dynamic process

Sensor fault size	False alarm rate (%)	Missed alarm rate (%)	Empirical average run length <sup>a</sup>		
			T <sup>2</sup>	SPE	Overall
s = 0.8					
PCA	1.2	9.6	39.4	11.3	11.3
Dynamic PCA	2.5	8.5	32.0	9.9	9.9
Multiple PCA	2.1	7.3	39.7	9.9	9.9
s = 0.5					
PCA	1.5	15.7	62.4	17.4	17.4
Dynamic PCA	2.1	13.5	41.1	14.3	14.3
Multiple PCA	3.0	9.3	47.6	11.4	11.4
s = 0.3					
PCA	1.4	73.4	-	28.2	28.2
Dynamic PCA	2.56	21.9	76.2	23.0	23.0
Multiple PCA	2.27	14.4	72.5	16.8	16.8
s = 0.1					
PCA	1.8	73.3	ND <sup>b</sup>	69.7 [81]	69.7 [81]
Dynamic PCA	2.4	65.4	ND <sup>b</sup>	60.9 [98]	60.9 [98]
Multiple PCA	2.85	34.1	77 [31]	37.1	37.1

<sup>a</sup>The number in square brackets ([[âââ]]) represents the number of simulations out of 100 realizations in which fault detection using the T<sup>2</sup>- or Q-statistic was successful.

<sup>b</sup>ND indicates that the fault is not detected by the monitoring chart in any of 100 realizations.



2-4. 적응모델(adaptive model)을 이용한 공정감시

최근 10여 년간 PCA나 부분최소자승법(PLS: partial least squares) 등의 다변량 통계적 투영방법(multivariate statistical projection method)과 공정관리도를 이용한 다변량 통계적 공정관리(MSPC: multivariate statistical process control)는 실시간 연속 및 회분식 공정감시에 널리 사용되어 왔다. 일반적 MSPC에서는 공정변수들이 서로 독립적이고(independent), 동일한 분포를 가지며(identically distributed), 선형 상관관계(linear correlation)를 가진다고 가정한다. 그러나 이러한 가정은 종종 비선형, 동적, 비정상(nonstationary), 시변(time-varying) 공정을 다루게 될 경우 성립하지 않게 되며, 따라서 이로 인한 공정감시 성능의 저하 및 신뢰성 상실 등을 야기한다. 예컨대, 설정점(set-point)의 변화라든지 장치의 노후, 촉매의 활성 저하와 같은 현상은 공정의 상태가 시간이 흐름에 따라 변하는 경우에 해당한다. 이러한 경우에는 기존에 구하였던 통계모델이 더 이상 공정을 정확히 묘사할 수 없기 때문에 새로 모델을 갱신해야만 한다. 즉, 고정된 하나의 모델을 사용하는 것이 아니라 모델을 시간에 따라 갱신하는 적응모델을 필요로 하게 된다.

Wold[41]는 PCA와 PLS 모델을 갱신하기 위하여 지수가중치 이동(exponentially weighted moving) 개념을 사용하였다. 즉, 공정의 변화에 따른 모델의 교환을 위해서 가장 최근에 얻어진 특정 크기의 샘플 군집을 이용하여 모델을 다시 만드는 방식이다. 그러나 이 방법은 새로운 샘플을 얻고 모델을 구성할 때마다 과거의 모든 데이터를 사용하기 때문에 모델링 시간이 오래 걸리는 단점이 있다. Dayal과 MacGregor[42]는 PLS 커널(kernel) 알고리즘을 이용한 반복 지수가중치(recursive exponentially weighted) PLS를 제안하였다. 여기서 공분산 행렬은 새로운 샘플이 얻어질 때마다 실시간으로 반복 갱신된다. Qin[43]은 샘플방식(sample-wise)과 블록방식(block-wise)의 반복적 PLS 알고리즘을 제시하였다. 연속적 갱신을 위하여 공분산 행렬이 아니라 로딩행렬 및 입력력 스코어벡터의 회귀계수(regression coefficient)만을 이용하는 방식을 제시함으로써 모델 갱신 시간을 단축시켰다. 또한, Li[44] 등은 시변공정을 감시하기 위한 반복 PCA의 두가지 효율적인 갱신 알고리즘을 제안하였다. 한편 최 등[45]은 평균과 분산을 새롭게 정의하고 PCA 모델을 갱신하기 위하여 평균, 분산 및 공분산을 갱신하기 위한 샘플방식과 블록방식의 알고리즘을 제안하였다. 그리고 갱신된 모델을 이용하여 공정을 감시하는 적응 공정감시 기법을 보여주었다. 특히, 공정의 정상적인 변화가 아닌 이상치(outlier)로 인해 모델을 갱신하게 되는 위험을 막기 위하여 강건(robust) 모델 갱신 기법을 제시하였다.

2.4.1. 적응모델을 이용한 공정감시

공정감시를 위한 적응 PCA 모델의 갱신은 일반적으로 다음과 같은 순서를 따른다.

- (1) 평균 및 공분산 행렬의 갱신
- (2) 상관행렬(correlation matrix)의 갱신
- (3) 로딩(loading) 행렬의 계산: 새로 계산하거나 혹은 전단계의 로딩행렬과 새로운 샘플(블록)을 이용하여 갱신
- (4) Hotelling's T<sup>2</sup> 통계치 및 예측에러제곱 통계치의 관리상한 계산
- (5) 현재 샘플에 해당하는 두가지 통계치의 계산을 통한 공정이상 발생 유무 확인

일반적으로 평균이나 분산을 갱신하기 위하여 최근 데이터일수록 더 큰 가중치를 주고 과거 데이터일수록 가중치를 적게 주는 가중

합(weighted sum)을 사용하게 된다. 예컨대, 가중 평균의 경우 다음과 같은 식으로 계산되어진다[45, 46].

$$m_t = \frac{x_t + \alpha x_{t-1} + \Lambda \alpha^{t-1} x_1}{1 + \alpha + \Lambda \alpha^{t-1}} \approx (1 - \alpha) \tilde{x}_t + \alpha m_{t-1} \quad (26)$$

여기서 m은 가중평균이고 x는 측정치벡터를 나타낸다. α는 평균을 계산하는데 있어서 얼마나 빠르게 과거 샘플들의 영향을 감소시킬 것인지를 결정하는 망각상수(forggetting factor)이다. 가중 분산의 경우도 유사한 방식으로 계산 되어 진다. 평균과 분산의 계산 과정에서 망각상수는 같은 값을 가질 필요는 없다.

망각상수의 값이 1일 경우 계산 되어지는 평균과 분산은 각각 모든 데이터를 이용하였을 때의 가능도(likelihood)를 최대로 하는 통계치가 된다. 망각상수의 값이 1보다 적을 경우 과거에 얻어진 샘플들은 모델에서 임의로 데이터를 제거하지 않아도 자동적으로 가중치가 적용되어 그 영향이 사라지게 된다. 망각상수의 값이 1에 가까워질수록 현재 모델에 영향을 주는 과거 데이터의 개수는 증가한다. 즉, 현재 시점에서 모델의 갱신에 과거 데이터의 영향이 점점 더 커지게 된다. 현재까지 대부분의 적응모델은 경험적 고정상수를 망각계수로 사용하였다. 따라서 공정변화의 속도에 관계없이 항상 일정한 속도로 모델의 갱신하게 되어있었다. 그러나 모델의 정확도를 유지하기 위하여 망각계수의 최적값은 공정변화의 속도에 따라 적절하게 변해야 한다. 설정점의 변화와 같이 공정이 빠르게 변하는 경우 갱신속도가 빨라야 하고, 반면 변화속도가 느려서 필수적인 공정정보가 오랜 시간 유지될 경우 갱신속도는 느려야 한다. 또한, 공정이 충분히 흔들리지 않을 경우 샘플이 충분한 공정정보를 가지지 않기 때문에 망각계수의 값이 커야 공분산행렬이 부정확하게 계산 되어지는 것을 방지할 수 있다[42]. 일반적으로 공정변화가 일정한 속도를 가지고 일어나지는 않으므로 따라서 망각계수의 값은 공정감시의 목적에 따라서 다르게 설정되어야 한다.

공정의 변화에 따라 모델 갱신 속도를 다르게 하기 위하여 망각계수를 고정시키는 것이 아니라 공정의 상태에 따라 조절하는 기법이 제시되기도 하였다. Dayal과 MacGregor[42]는 적응 PLS 알고리즘에서 망각계수를 조절하기 위하여 Fortescue 등[47]이 제안한 갱신식을 이용하였다. Lane[48] 등은 같은 갱신식을 반복 PCA에 적용되기도 하였다. 최근에 Choi[45] 등은 반복 PCA에 적용하기 위하여 망각계수 조절을 위한 경험적 수식을 제안하였다. 제안된 수식은 두가지 측면에 종전의 갱신식과 차이가 있다. 첫째, 샘플 평균과 공분산행렬을 갱신하기 위해 각각 다른 변동망각계수를 사용하였다. 둘째, 종전의 방법들이 공정감시 통계치의 변화에 따라 망각계수의 값을 변화시켰다면, 제안된 방법은 평균 및 공분산행렬의 변화에 직접적으로 영향을 받아 그 값이 설정되는 방식이다.

한편 적응모델에서 고려해야 할 또 하나의 중요한 요소는 이상치(outlier)의 처리 문제이다. 이상치는 정상상태의 공정에서 일시적인 센서의 고장이나 기록상의 문제 등으로 비정상적인 수치로 기록된 샘플을 의미한다. 적응 모델에서 이상치 처리는 크게 두가지로 생각해 볼 수 있다. 첫째, 이상치를 무시하고 다음 샘플 혹은 블록이 고려될 시점까지 모델을 갱신하지 않고 종전의 모델을 사용할 수 있다. 한편, 강건한 계수 추정(robust parameter estimation) 방법을 도입하여 모델을 갱신하는데 이상치의 영향을 최소화하는 방안을 고려해 볼 수 있다. 일반적으로 평균 및 분산의 강건추정을 위해 사용되는 방법은 Huber[49]에 의해 제안된 M-추정자(estimator)이다.

대부분의 강건추정방법들은 이미 이상치를 포함한 데이터를 이용하여 신뢰성 있는 모델을 확인하는데 사용된다. 따라서, 이상치의 존재가 미리 알려져 있지 않으므로 모델링과 이상치 확인의 두 단계가 강건모델이 구성될 때까지 반복적으로 실행된다. 그러나, 적응모델링의 경우에는 신뢰할만한 PCA 모델이 이미 전 단계에서 구축이 되었기 때문에 새로운 샘플이 얻어졌을 때 관리도를 확인함으로써 이상 여부를 확인 가능하다. 샘플이 이상치로 판명나게 되면 샘플의 값이 강건추정치로 대체되어 모델을 갱신하는데 사용된다.

이상치는 관리도에서 공정이상과 마찬가지로 경보신호를 유발한다. 그러므로 현재 모델은 이상치 뿐만 아니라 공정이상도 발생할 경우에도 모델을 갱신할 위험이 있다. 따라서 공정이상과 이상치를 구분하는 일이 매우 중요하다. 이상치는 일시적으로 발생하는 반면 공정이상은 특정 기간 동안 계속 지속되는 경향이 있다. 이러한 상이성을 이용하여 관리도에서 연속적으로(예를 들어 다섯 개의 연속 통계치) 경보신호를 보이게 되면 공정에 이상이 생긴 것으로 판명하고 모델 갱신을 멈추게 된다. 그렇지 않을 경우 모델은 계속해서 현재 샘플의 강건추정치를 이용하여 갱신된다.

2-4-2. 적용사례

공정이 적응모델에 기반한 공정감시를 위해 비등온 연속교반탱크 반응기(CSTR: continuous stirred tank reactor)를 고려해본다. 반응물 A는 용매와 혼합되어 반응기로 유입되어 생산물 B로 전환된다. 출력온도와 출력반응물농도는 각각 냉각수유량과 입력반응물유량을 조절함으로써 제어된다. 모든 입력과 왜란(disturbance)은 1차 autoregressive(AR) 모델 혹은 사인과 신호에 의해 형성된다. 또한, 측정노이즈를 모사하기 위하여 모든 측정값에 가우시안 노이즈를 더하였다. 공정에 대한 더 자세한 설명과 모델계수 및 모사조건에 대한 설명은 최[45] 등을 참고한다.

위 연속 교반 탱크 반응기 모델을 이용하여 반응속도의 점진적 감소를 모사하였다. 공정은 500분 동안 실행되었고, 반응속도의 변화는 301분 되는 시점에서 시작되었다. 총 9개의 공정변수들이 매 분마다 측정되었다. 100분에서 300분 사이에 얻어진 샘플은 초기 PCA 모델을 만드는데 사용되었고 301분 후부터는 샘플이 측정될 때마다 실시간으로 모델을 갱신하였다.

반응속도의 감소는 출력반응물농도를 일정하게 유지하기 위하여 입력반응물유량의 감소를 야기하고 출력온도를 일정하게 유지하기 위하여 냉각수유량 또한 감소하게 된다.

Fig. 7은 일반적 정적(static) PCA, 적응 PCA 모델, 이상치 보정을 고려한 강건적응 PCA 모델의 공정감시 결과를 보여준다. 정적 PCA 모델은 Fig. 7(a)와 (d)에서 보는 바와 같이 공정의 변화가 일어나자마자 유효하지 않게 된다. 반면에 Fig. 7(b)와 (e)에서처럼 적응 PCA 모델에서 Hotelling's T<sup>2</sup>와 예측에러제곱 통계치는 반복적으로 갱신되어 적응모델 기반의 공정감시는 지속적으로 유효하게 된다. 그러나 측정치에러에 의한 수개의 이상치가 존재한다. 이상치의 존재는 모델 갱신의 신뢰성을 저하시키기 때문에 이를 완화시키기 위하여 앞서 언급한 강건 적응 방법을 적용하였을 때 관리도에서 거짓경보비율이 현저하게 줄어든 것을 확인할 수 있다(Fig. 7(c)와 (f) 참고).

2-5. 센서 이상 진단과 보정

화학 공정의 운전상에서 발생하는 비정상상의 원인으로는 작동기  
화학공학 제46권 제2호 2008년 4월

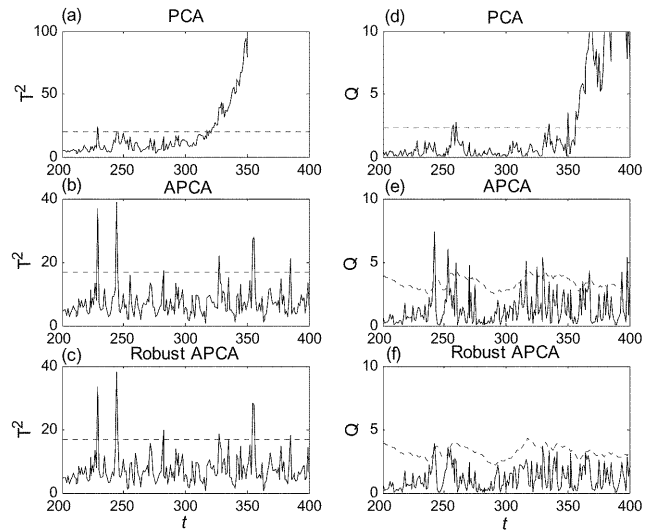


Fig. 7. Monitoring results using static PCA, adaptive PCA and robust adaptive PCA [45].

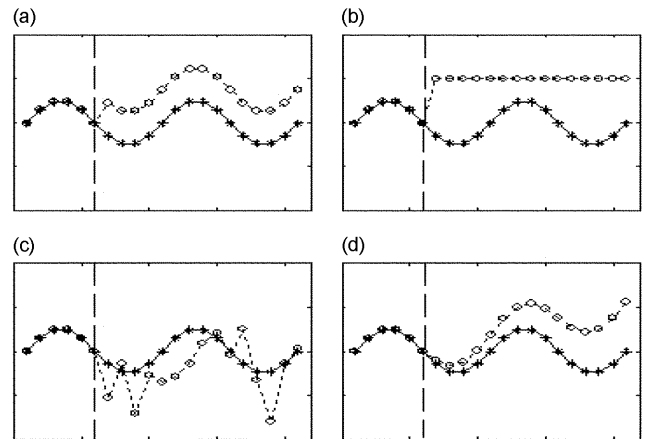


Fig. 8. Sensor faults (a) bias type, (b) drifting type, (c) precision degraded type, (d) completely failed type [50].

(actuator)나 센서, 입출력 신호의 외란 등 여러 가지가 있다. 공정 모니터링 시스템에서는 공정의 이상을 빠르게 감지하는 것도 중요한 문제이지만 이러한 이상이 어디서 발생하는지 판단하는 과정 또한 중요한 문제이다. 산업체 공정에서 센서 오작동은 각 공정(화학, 생물, 환경) 특유의 복잡성 때문에 여러 가지 원인이 있을 수 있다. 이런 원인들로 나타나는 센서 오작동의 형태를 구분해 보면 크게 Fig. 8 같이 4가지의 형태로 나눌 수 있다[39, 50-54].

- 측정치 편중화 형태(bias type): 측정 장치의 순간적인 왜곡으로 인해 생기는 형태의 센서 오작동으로써 측정장치로부터 수집되는 데이터가 순간적으로 실제 공정변수보다 일정하게 보다 높거나 낮은 값으로 측정되는 것을 말한다. 이 센서 오작동의 형태는 Fig. 8의 (a)에 도식화 되어있다.

- 측정치 표류화 형태(drifting type): Fig. 8(b)에서 보여주는 형태의 센서 오작동으로써, 주로 측정장치의 노후화가 주원인인 센서 오작동의 형태이며, 시간이 지날수록 측정되는 데이터가 실제 공정변수와는 많은 차이를 나타낸다.

- 측정장치의 정확도가 저하되는 형태(precision degraded type): 측정장치가 정확한 공정변수를 측정하지 못하는 형태의 오작동으로

써 이물질로 인해 센서가 제대로 측정을 하지 못하는 경우가 이 경우에 속한다. Fig. 8(c)에서 이러한 형태의 오작동을 보여주고 있다.

- 측정장치가 완전파손으로 형태(completely failed type): 어떤 외 내부적인 요인으로 측정장치가 완전히 파손되어 더 이상의 측정이 불가능한 상태에 이르렀을 때 나타나는 형태의 오작동으로 Fig. 8(d)에서 보여주는 형태의 오작동이 이에 해당한다.

2-5-1. 센서 이상 진단

다변량 데이터 분석법에 기반한 센서 보정과 이상 진단 시스템의 일반적인 접근방법은 수치적 통계 방법 중의 하나인 EM(expectation-maximization)의 연산 과정 중 expectation step의 개념을 도입하여 측정 장치의 감지시스템을 구축할 수 있다[54]. 이 접근 방법은 알고리즘상 실시간상에 발생하는 미측정변수를 추정하기 위해 제안된 방법을 응용한 것이다. 미측정치의 추정방법은 크게 두 가지로 나눌 수 있는데 하나는 미측정값을 다른 측정된 값을 기반으로 하여 조건부 기대치로 추정하는 방법과 구성된 모델에서 벗어나는 정도를 최소화하는 추정치로 미측정값을 예측할 수 있다. 특히 다변량 통계 기법 중 일반적으로 많이 사용되고 있는 주성분분석과 부분최소자승법을 이용한 예측치의 추정 방법에 대한 연구는 Nelson[55] 등에 의해 제안되었다. 제안한 방법으로 추정된 예측치와 실시간 공정으로부터 측정되는 실측치와의 차이에 대한 통계적인 유의수준을 설정하거나 센서의 오작동여부를 판단하는 지표로 제안하여 실시간 상에서의 센서 진단이나 센서 이상 보정이 가능한 방법들이 제안되었다. 이러한 접근법은 최초 PLS를 이용하여 Wise와 Ricker[56]에 의해 제안이 되었고, 이후 PCA를 이용하여 측정 장치의 오작동을 판단하는 방법이 Dunia[50]에 의해 제안되었다. 이러한 연구들을 기반으로 실제 공정에 적합한 방법들을 모색하여 동특성을 가진 공정의 센서이상 진단에 적용한 방법들이 제안되었다[57-61].

본 총설에서는 센서 유효지수(sensor validation index, SVI)를 이용하여 센서 오작동을 감지하는 방법을 소개하고자 한다. 센서 유효지수는 공정의 변수를 순차적으로 재건(reconstruction)함으로써 실시간으로 측정된 값과 재건된 값의 공정감지지수를 비율을 비교하여 오작동하고 있는 센서를 찾아내는 방법이다[39,50]. 공정감지 시스템에서와 마찬가지로 센서 유효지수를 이용한 공정 이상 확인 시스템 또한 공정데이터의 특성에 따라 설계방법이 달라진다. 센서 유효지수를 계산하기 위해 우선적으로 행하여져야 할 것이 공정변수의 재건과정이다. 공정변수의 재건방법은 예측오차의 최소화방법(minimization of the SPE), 측정값의 회귀법(known data regression), 조건부평균치를 사용하는 방법(conditional mean replacement) 등이 있다[55, 57].

2-5-1-1. 예측오차 최소화를 이용한 공정변수재건법

정변수의 재건이란 측정된 특정공정변수를 다른 측정된 변수들을 이용하여 다시 계산하는 것을 말한다. 계산하는 과정에서 예측오차를 최소화하는 방법으로 변수를 재건하는 방법이 예측오차 최소화를 이용한 공정변수재건법이다. 재건될 공정변수와 이를 제외한 나머지 공정변수와의 관계를 다음과 같이 표현할 수 있다[55].

$$SPE = [z^o T z^T] \left( I - \begin{bmatrix} P \\ P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^T P^T \\ P \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} z \\ z \end{bmatrix} \quad (27)$$

여기서 Zo는 재건할 공정변수를 의미하고, Z\*는 재건할 공정변수를 제외한 나머지 공정변수들을 의미한다. Po는 재건할 공정변수,

Zo와 연관된 로딩행렬의 요소들을 모은 행렬을 나타내고, P\*는 Z\*와 연관되는 로딩행렬의 요소들을 모은 행렬을 나타낸다. SPE를 최소화하는 Zo를 구하기 위해 식 (27)을 Zo 대해 미분하여 0가 되는 값을 구해보면 SPE를 최소화하는 Zo값을 다음과 같은 관계식으로 구할 수 있다[55].

$$\hat{z}' = (I - P^* P'^T)^{-1} P^* P'^T z' \quad (28)$$

재건된 공정변수를 이용하면 이상이 생긴 센서의 위치를 파악할 수 있는 실마리를 제공해준다.

2-5-1-2. 재건된 공정변수를 이용한 센서오작동 확인시스템

식 (28)에서 공정변수의 재건에 필요한 Po와 P\*는 공정 모니터링 시스템의 구축과정에서 구해지는 행렬들이다. 각 공정변수를 순차적으로 재건하게 되면 공정변수의 수만큼의 재건행렬(reconstruction matrix)을 식 (28)을 이용하여 구할 수 있다. k번째 공정변수를 재건하는 재건행렬을 Yk 라고 하고, 실시간으로 측정되어진 데이터벡터 중 k번째 공정변수만을 제외한 데이터벡터를 zk, 재건된 공정변수를 zk-hat, 그리고 k번째 공정변수가 재건된 데이터벡터를 zk-hat 라고 하자. 퍼뮤테이션(permutation)을 사용하여 재건되는 값을 데이터벡터의 첫 번째 자리에 위치시키면 실시간으로 측정되어지는 데이터벡터의 재건벡터는 다음과 같이 표현할 수 있다[57].

$$\hat{z}_k = \begin{bmatrix} \hat{z}_k \\ z_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi_k \\ I \end{bmatrix} z_k \quad (29)$$

재건된 데이터벡터 zk-hat을 이용하여 새로운 SPE 값을 구할 수 있는데, 재건된 SPE 값을 SPEk라고 정의하도록 한다. 만약 i번째 공정변수의 센서의 오작동이 생겼다고 한다면 i번째 공정변수가 재건될 때는 센서 오작동의 영향이 사라지게 되고 i번째를 제외한 나머지 공정변수들은 센서 오작동의 영향을 받아 정상상태에서 벗어나는 다른 값으로 재건될 것이다. 이를 이용하여 센서 오작동을 확인할 수 있는 센서 유효지수를 다음과 같이 정의 할 수 있다[50].

$$SVI_k = \sqrt{\frac{SPE_k}{SPE}} \quad (30)$$

센서 오작동으로 인한 공정의 이상이 발생한다면 식 (30)의 분모 값은 정상적인 센서값인 경우보다 크게 증가하게 될 것이다. 재건된 공정변수가 오작동된 센서로부터 측정된 값이라며 나머지 정상적으로 측정된 값에 의해 값은 정상적인 운전하의 값처럼 작은 값을 가질 것이다. 하지만 오작동된 센서로부터 측정된 공정변수를 제외한 나머지 공정변수들은 오작동되고 있는 센서의 영향을 그대로 받고 있을 뿐 아니라 그 영향력이 공정변수 재건에도 이용되고 있으므로 값이 큰 값을 가질 것이다. 따라서 센서의 오작동이 일어나고 있는 부분의 센서유효지수의 값을 다른 센서 유효지수의 값보다 상대적으로 작은 값을 가지게 되고 이를 이용하여 센서 오작동을 확인할 수 있게 된다.

2-5-2. 적용 사례

2-5-2-1. 단순 센서 이상 진단

센서 이상 감지 및 보정 시스템의 성능을 알아보기 위해 사용된 환경공정시스템은 5개의 반응기와 1개의 침전조로 이루어진 폐수 처리공정을 모델링한 것으로 폭기조는 활성슬러지공정(activated sludge model No.1, ASM1)과 침전조는 takacs의 이중침전속도 모

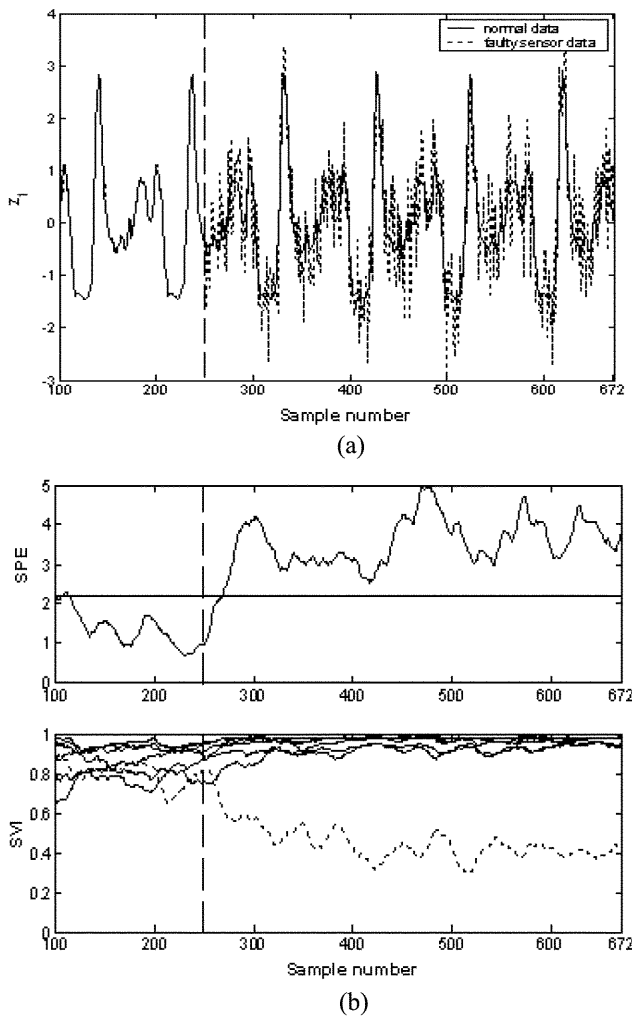


Fig. 9. Sensor fault detection and identification result, (a) faulty sensor in an ammonia influent sensor, (b) sensor validation index[57].

델을 사용하였다. 폐수처리공정모사를 통해 2주간의 정상운전데이터를 수집한 뒤 이를 이용하여 센서 이상 감지 및 이상 진단 시스템을 테스트 하였다. 폐수처리공정은 주기적인 효과(일일 변동, 일

주일 변동)가 강하게 나타나는 공정이므로 동적 특성을 가지는 주 성분분석법을 이용하여 수집한 정상운전 데이터를 분석하였다. 또한 센서 오작동으로 인한 하나의 공정이상 시나리오를 설정하여, 구축된 공정 모니터링 시스템의 성능을 평가하였다. 센서 오작동으로 인한 센서 이상 데이터는 Fig. 9(a)에서 보여주고 있다[57, 60]. Fig. 9(a)에서 실선은 정상적으로 운전되었을 때 측정된 공정변수를 나타내고 점선은 센서의 정확도가 250 샘플 이후에 급격히 저하되어 잘못 측정되고 있는 상태를 보여주고 있다. Fig. 9(a)에서 나타나고 있는 공정의 이상을 주성분분석법과 이를 기반으로 한 공정 이상 확인법을 적용한 결과를 보여주고 있다. Fig. 9(b)의 위쪽 그림은 잔차공간의 모니터링 지수, SPE가 폐수처리공정에서 발생한 센서 이상을 잘 감지하고 있음을 확인할 수 있다. Fig. 9(b)의 아래쪽 그림은 각 공정변수의 실시간 측정치를 바탕으로 센서 유효지수를 구한 그림이다. 실선으로 나타난 센서 유효지수값은 정상적으로 측정되어지고 있는 공정변수를 나타내고, 점선으로 표현되는 값은 이상이 발생한 센서로부터 얻어지는 공정변수 값을 의미한다. 그림에서 보듯이 센서 유효지수가 오작동하고 있는 센서의 위치를 잘 파악하고 있음을 알 수 있다. 센서 이상감지 및 확인시스템의 구축은 데이터의 특성, 즉 정적이나 동적이나 비선형이냐의 판단을 통해 구축해야만 Fig. 9에서처럼 좋은 성능을 보일 수 있다. 만약 이러한 판단을 기반으로 하지 않고 모니터링 시스템을 구축하게 된다면, 구축된 시스템이 공정감시자에게 잘못된 정보를 제공할 수 있다.

2-5-2-2. 다중 센서 이상 진단

실제 화학 및 환경 공정에서 하나 이상의 센서 이상이 일어나는 경우가 있기 때문에 이때 센서이상 진단의 성능을 테스트 하기 위해 다중센서이상의 경우를 모사하였다. 실제적인 적용을 위해 실험실 규모(10리터)의 SHARON(high activity ammonia removal over nitrite) 반응기의 센서 이상을 진단하였다[53]. Sharon 반응기는 혐기조의 상등액, 매립장의 침출수나 축산폐수 같은 고농도 질소를 포함하는 하폐수처리에 적합한 공정이다[62]. 센서 이상 진단에 사용된 데이터는 정상상태에서 운전된 Sharon 반응기의 다음과 같은 10개 변수를 사용하였다: (1) 수력학적 체류시간, (2) 유입 암모니아 농도, (3) 유입 bicarbonate:ammonium ratio, (4) 용존산소농도, (5) pH, (6-7) 산염기의 적정량, (8-10) 암모니아, 아질산, 질산염 유출 농도. 특별히 논 총설에서는 sharon 반응은 3가지 암모니아관련 유

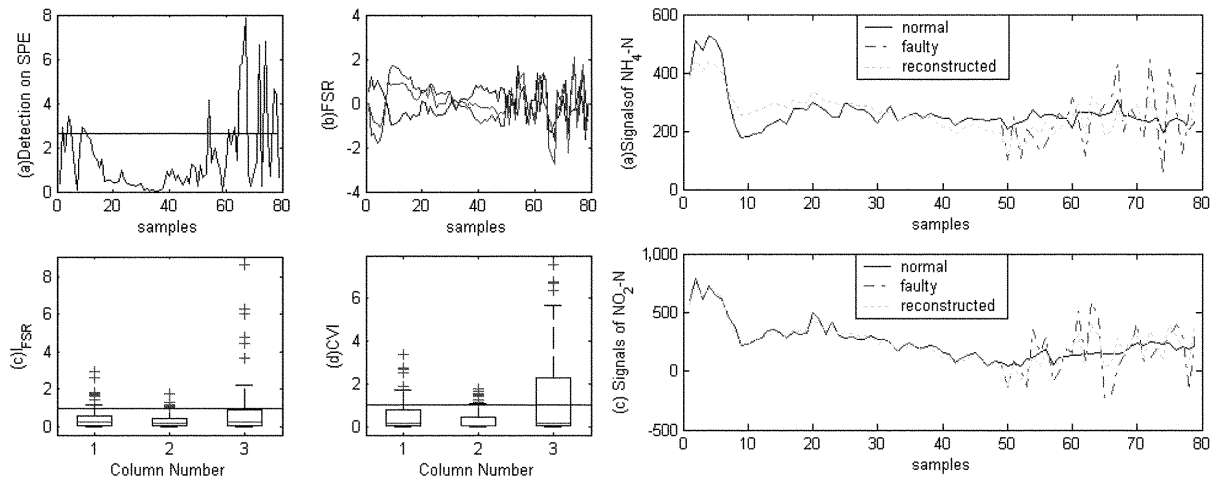


Fig. 10. (Left) Sensor fault detection and identification of multiple faults, the precision degradation of NH<sub>4</sub> and NO<sub>2</sub> sensors (a) SPE plot, (b) FSR, (c) I<sub>FSR</sub> (d) CVI, (Right) Sensor reconstruction of the precision degradation (a) NH<sub>4</sub>, (b)NO<sub>2</sub> [53].

출 변수인 ammonium nitrogen(NH<sub>4</sub>-N), nitrite(NO<sub>2</sub>-N), nitrate (NO<sub>3</sub>-N)의 센서이상에 관심을 두었다. 왜냐하면 3가지 변수들은 반응 기작상 양론적으로 반응하여 서로 redundancy가 존재하기 때문이다. 센서 이상은 시간 t=50에서 NH<sub>4</sub>와 NO<sub>2</sub> 센서에 precision degradation을 인위적으로 도입하였다. Fig. 10의 좌측은 센서 이상진단 및 보정을 위한 SPE와 filtered structural residual(FSR) 값을 그리고 우측 그림은 측정의 정확도가 떨어진 NH<sub>4</sub>와 NO<sub>2</sub>의 센서값을 변수복원을 통한 복원한 센서 값을 나타낸다. Fig. 10에서 보듯이 정상적으로 측정하고 있는 센서(실선)와 오작동되는 센서(점선)가 명확하게 구분되고 있고 센서 이상이 일어난 위치 2, 3번째 센서의 감지 역시 성공적으로 이루어 지고 있음을 보여 주고 있다. IFSR은 세번째 센서(NO<sub>3</sub>-N)의 이상 진단을 감지할 수 있고 더 나아가 센서들의 redundancy를 이용하여 원래 값과 복원할 수 있음을 보여주고 있다. 이 결과로부터 공정의 센서가 비이상적으로 작동시 변수 복원을 통한 공정의 이상 감지가 기존의 제안된 방법보다 센서 이상 확인 성능이 보다 좋음을 확인 할 수 있다. 통계학적 센서 이상 진단 접근법이 여러 가지의 센서 이상에 대해서 탁월한 센서 이상 감지 성능을 보이고 있음을 이전 연구를 통해 알 수 있다[53].

### 3. 결 언

본 총설에서는 공정 모니터링기술의 최신 기술들인 커널주성분분석 기반 비선형 모니터링, 주성분분석 모델 조합을 이용한 다중모델 모니터링, 공정 변화를 고려한 적응모델 모니터링, 그리고 센서 이상 진단과 보정에 대하여 소개하였다. 이러한 최신 기술을 바탕으로 현실적인 모니터링 방법이 제시되어 진다면 기존 주성분분석의 통계학적 기술에 기반하여 발전되어왔던 모니터링 기법들을 모두 대체할 수 있기 때문에 산업체의 응용으로 효과적으로 이어질 수 있어서 연구의 파생효과는 막대하다고 볼 수 있다. 본 연구실에서 현재 연구가 진행 중인 품질예측을 정확히 하고 공정이상 변수를 효과적으로 찾는 방법을 바탕으로 공정 모니터링 정보의 제어와 최적화로의 적용 기술이 가미된다면 모니터링, 제어 그리고 최적화의 통합기술이 개발되어서 공정 산업계의 기술을 근본적으로 체계화할 수 있는 계기가 될 것이다. 소개한 방법들은 화학 산업 뿐 만 아니라 회분 공정까지 적용 가능하고 더 나아가 환경 및 에너지 산업, 반도체를 비롯한 여타 산업에도 그 활용범위가 커질 것이라 기대된다. 궁극적으로 최근 대부분의 산업체에서 관심을 쏟고 있는 6시그마 운동과 병행되어 불량품이 거의 없는 제품을 생산할 수 있는 하나의 방안이 될 것이다.

### 감 사

본 연구는 2007년 정부(교육인적자원부)의 재원으로 한국학술진흥재단(KRF-2007-331-D00089), 서울시정개발연구원의 산학협력과제(CS070160), 그리고 BK21 2단계 사업의 지원을 받아 수행되었으며 이에 감사드립니다.

### 참고문헌

1. Montgomery, D. C., *Introduction to statistical quality control*, 3<sup>th</sup> Ed., Johan Wiley and Sons, Inc., New York, USA(1996).

- Kourti, T. and MacGregor, J. F., "Process Analysis, Monitoring and Diagnosis Using Multivariate Projection Methods," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **28**(1), 3-21(1995).
- Wise, B. M. and Gallagher, N. B., "The Process Chemometrics Approach to Process Monitoring and Fault Detection," *J. Process Control*, **6**(6), 329-348(1996).
- Kourti, T., "Process Analysis, and Abnormal Situation Detection: From Theory to Practice," *IEEE Control System Magazine*, **10**(1), 10-25(2002).
- Nomikos, P. and MacGregor, J. F., "Monitoring Batch Processes Using Multiway Principal Component Analysis," *AIChE J.*, **40**(8), 1361-1375(1994).
- Nomikos, P. and MacGregor, J. F., "Multi-Way Partial Least Square in Monitoring Batch Processes," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **30**(1), 97-108(1995).
- Nomikos, P. and MacGregor, J. F., "Multivariate SPC Charts for Monitoring Batch Processes," *Technometrics*, **37**(1), 41-59(1995).
- Chen, Q., Wynne, R. J., Goulding, P. and Sandoz, D., "The Application of Principal Component Analysis and Kernel Density Estimation to Enhance Process Monitoring," *Control Engineering Practice*, **8**(5), 531-543(2000).
- Rosen, C. and Olsson, G., "Disturbance Detection in Wastewater Treatment Plants," *Water Science and Technology*, **37**(12), 197-205(1998).
- Gallagher, N. B. and Wise, B. M., "Application of Multi-Way Principal Components Analysis to Nuclear Waste Storage Tank Monitoring," *Computers & Chemical Engineering*, **20**(S1), S739-S744(1996).
- Hwang, D. H., Cho, H. W., Han C. H. and Kim J. H., "On-Line Monitoring Methods Using Multivariate Statistical Method," *Chemical Industry and Technology*, **15**(3), 247-255(1997).
- Lee, H. D., Lee, M. H., Cho, H. W., Han, C. H. and Chang, K. S., "Online Quality Monitoring Using Multivariate Statistical Methods in Continuous-Stirred MMA-VA Copolymerization Process," *Korean Chem. Eng. Res.*, **35**(5), 605-612(1997).
- Hong, S. J. and Han, C. H., "Data-Driven Software Sensor Design for Monitoring, Diagnosis and Control," *Chemical Industry and Technology*, **17**(2), 172-181(1999).
- Hong, S. J., Heo, C. K. and Han, C. H., "Local Composition Soft Sensor in a Distillation Column Using PLS," *Korean Chem. Eng. Res.*, **37**(3), 445-452(1999).
- Lee, Y. H., Han, C. H. and Lee, J. K., "Real-Time Monitoring for a Batch PVC Polymerization Process Based on Multivariate Data Compression Methods," *Korean Chem. Eng. Res.*, **37**(2), 319-329(1999).
- Yoon, K. H., Lee, Y. H. and Han, C. H., "Adaptive Block-Wise RPLS Considering Similarity of Blocks," *Korean Chem. Eng. Res.*, **41**(5), 592-597(2003).
- Yoon, D. M., Lee, Y. H., Han, C. H., Ah, H. S. and Chang, S. H., "Fault Detection and Diagnosis in Film Processing Plants," *Korean Chem. Eng. Res.*, **41**(5), 585-591(2003).
- Lee, S., Yeom, S. and Lee, K. S., "Methods for Performance Monitoring and Diagnosis of Multivariable Model-Based Control Systems," *Korean J. Chemical Engineering*, **21**(3), 575-581(2004).
- Lee, C. J., Song, S. O. and Yoon, I. S., "The Monitoring of Chemical Process Using the Support Vector Machine," *Korean*

- Chemical Engineering Research*, **42**(5), 538-544(2007).
20. Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Yin, K. and Kavuri, S. N., "A Review of Process Fault Detection and Diagnosis: Part I: Quantitative Model-Based Methods," *Computers & Chemical Engineering*, **27**(3), 293-311(2003).
  21. Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Yin, K. and Kavuri, S. N., "A Review of Process Fault Detection and Diagnosis: Part II: Qualitative Models and Search Strategies," *Computers & Chemical Engineering*, **27**(3), 313-326(2003).
  22. Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Yin, K. and Kavuri, S. N., "A Review of Process Fault Detection and Diagnosis: Part III: Process History Based Methods," *Computers & Chemical Engineering*, **27**(3), 327-346(2003).
  23. Kramer, M. A., "Nonlinear Principal Component Analysis Using Autoassociative Neural Networks," *AIChE J.*, **37**(2), 233-243(1991).
  24. Dong, D. and McAvoy, T. J., "Nonlinear Principal Component Analysis-Based on Principal Curves and Neural Networks," *Computers & Chemical Engineering*, **20**(1), 65-78(1996).
  25. Hiden, H. G., Willis, M. J., Tham, M. T. and Montague, G. A., "Non-Linear Principal Components Analysis Using Genetic Programming," *Computers & Chemical Engineering*, **23**(3), 413-425(1999).
  26. Schölkopf, B., Smola, A. J. and Müller, K., "Nonlinear Component Analysis as a Kernel Eigenvalue Problem," *Neural Computation*, **10**(5), 1299-1399(1998).
  27. Mika, S., Schölkopf, B., Smola, A. J., Müller, K.-R., Scholz, M. and Rätsch, G., "Kernel PCA and De-Noising in Feature Spaces," in *Advances in Neural Information Processing Systems* **11**(1), 536-542(1999).
  28. Lee, J. M., Yoo, C. K., Choi, S. W., Vanrolleghem, P. and Lee, I. B., "Nonlinear Process Monitoring Using Kernel Principal Component Analysis," *Chemical Engineering Science*, **59**(1), 223-234(2004).
  29. Choi, S. W., Lee, C. K., Lee, J. M., Park, J. H. and Lee, I. B., "Fault Detection and Identification of Nonlinear Processes Based on Kernel PCA," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **75**(1), 55-67(2005).
  30. Cho, J. H., Lee, J. M., Choi, S. W., Lee, D. K. and Lee, D. K., "Fault Identification for Process Monitoring Using Kernel Principal Component Analysis," *Chemical Engineering Science*, **60**(1), 279-288(2005).
  31. Whiteley, J. R. and Davis, J. F., "Observations and Problems Applying ART2 for Dynamic Sensor Pattern Interpretation," *IEEE Trans. Systems, Man, and Cybernetics - Part A: Systems and Humans*, **26**(4), 423-437(1996).
  32. Chen, J. and Liu, J., "Mixture Principal Component Analysis Models for Process Monitoring," *Industrial Engineering and Chemistry Research*, **38**(4), 1478-1488(1999).
  33. Eastment, H. T. and Krzanowski, W. J., "Cross-Validatory Choice of the Number of Components from a Principal Component Analysis," *Technometrics*, **24**(2), 73-77(1982).
  34. Tipping, M. E. and Bishop, C. M., "Mixture of Probabilistic Principal Component Analysis," *Neural Computation*, **11**(2), 443-482(1999).
  35. Meinicke, P. and Ritter, H., "Resolution-Based Complexity Control for Gaussian Mixture Models," *Technical Report*, Faculty of Technology, University of Bielefeld, Germany, <http://www.tech-fak.uni-bielefeld.de/gk/papers>(1999).
  36. Xu, L., "Bayesian Ying-Yang Machine, Clustering and Number of Clusters," *Pattern Recognition Letters*, **18**(1), 1167-1178(1997).
  37. Choi, S. W., Park, J. H. and Lee, I., "Process Monitoring Using a Gaussian Mixture Model Via Principal Component Analysis and Discriminant Analysis," *Computers and Chemical Engineering*, **28**(8), 1377-1387(2004).
  38. Choi, S. W., Martin, E. B., Morris, A. J. and Lee, I., "Fault Detection Based on a Maximum-Likelihood Principal Component Analysis (PCA) Mixture," *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **44**(7), 2316-2327(2005).
  39. van Sprang, E. N. M., Ramaker, H.-J., Westerhuis, J. A., Gurden, S. P. and Smilde, A. K., "Critical Evaluation of Approaches for On-Line Batch Process Monitoring," *Chemical Engineering Science*, **57**(10), 3979-3991(2002).
  40. Wold, S., "Exponentially Weighted Moving Principal Components Analysis and Projections to Latent Structures," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **23**(1), 149-161(1994).
  41. Dayal, B. S. and MacGregor, J. F., "Recursive Exponentially Weighted PLS and Its Applications to Adaptive Control and Prediction," *J. Process Control*, **7**(3), 169-179(1997).
  42. Qin, S. J., "Recursive PLS Algorithms for Adaptive Data Monitoring," *Computers & Chemical Engineering*, **22**(4-5), 503-514(1998).
  43. Li, W., Yue, H. H., Cervantes, S. V. and Qin, S. J., "Recursive PCA for Adaptive Process Monitoring," *J. Process Control*, **10**(5), 471-486(2000).
  44. Choi, S. W., Martin, E. B., Morris, A. J. and Lee, I., "Adaptive Multivariate Statistical Process Control for Monitoring Time-varying Processes," *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **45**(9), 3108-3118(2006).
  45. Feltz, C. J. and Shiau, J.-J. H., "Statistical Process Monitoring Using an Empirical Bayes Multivariate Process Control Chart," *Quality and Reliability Engineering International*, **17**(3), 119-124(2001).
  46. Fortescue, T. R., Kershenbaum, L. S. and Ydstie, B. E., "Implementation of Self-Tuning Regulators with Variable Forgetting Factors," *Automatica*, **17**(6), 831-835(1981).
  47. Lane, S., Martin, E. B., Morris, A. J. and Gower, P., "Application of Exponentially Weighted Principal Component Analysis for the Monitoring of a Polymer Film Manufacturing Process," *Trans. the Institute of Measurement and Control*, **25**(1), 17-35(2003).
  48. Huber, P. J., *Robust statistics*, John Wiley & Sons: New York (1981).
  49. Dunia, R., Qin, S. J., Edgar, T. F. and McAvoy, T. J., "Identification of Faulty Sensors Using Principal Component Analysis," *AIChE J.*, **42**(10), 2797-2812(1996).
  50. Qin, S. J. and Li, W., "Detection and Identification of Faulty Sensors in Dynamic Processes," *AIChE J.*, **47**(9), 1581-1593(2001).
  51. Rieger, L., Alex, J., Winkler, S., Boehler, M., Thomann, M. and Siegrist, H., "Progress in Sensor Technology - Progress in Process Control? Part I: Sensor Property Investigation and Classification," *Wat. Sci. Tech.*, **47**(2), 103-112(2003).
  52. Rieger, L., Thomann, M., Joss, A., Gujer, W. and Siegrist, H., "Computer Aided Monitoring and Operation of Continuously Measuring Devices," *Wat. Sci. Tech.*, **50**(11), 31-39(2004).
  53. Yoo, C. K., Villez, K., Lee, I. B., Van Hulle, S., Vanrolleghem, P. A., "Sensor Validation and Reconciliation for a Partial Nitrifica-

- tion Process," *Wat. Sci. Tech.*, **53**(4-5), 513-521(2006).
54. Lee, C. and Lee, I.-B., "Missing Value Estimation and Sensor Fault Identification Using Multivariate Statistical Analysis," *Korean Chemical Engineering Research*, **45**(1), 87-92(2007).
55. Nelson, P. R. C., Taylor, P. A. and MacGregor, J. F., "Missing Data Methods in PCA and PLS; Score Calculations with Incomplete Observations," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **35**(1), 45-65(1996).
56. Wise, B. M. and Ricker, N. L., "Recent Advances in Multivariate Statistical Process Control: Improving Robustness and Sensitivity," Proceedings of the IFAC ADCHEM Symposium, 125-130 (1991).
57. Lee, C., Choi, S. W. and Lee, I.-B., "Sensor Fault Identification Based on Time-Lagged PCA in Dynamic Processes," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **70**(2), 165-178(2004).
58. Choi, S. W., Lee, C., Lee, J.-M., Park, J. H. and Lee, I.-B., "Fault Detection and Identification of Nonlinear Processes Based on Kernel PCA," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **75**(1), 55-67(2005).
59. Cho, J.-H., Choi, S. W., Lee, D. and Lee, I.-B., "Fault Identification for Process Monitoring Using Kernel Principal Component Analysis," *Chemical Engineering Science*, **60**(1), 279-288(2005).
60. Lee, C., Choi, S. W., Lee, J.-M. and Lee, I.-B., "Sensor Fault Identification in MSPM Using Reconstructed Monitoring Statistics," *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **43**(15), 4293-4304(2004).
61. Lee, C., Choi, S. W. and Lee, I.-B., "Variable Reconstruction and Sensor Fault Identification Using Canonical Variate Analysis," *J. Process Control*, **16**(7), 747-761(2006).
62. van Dongen, L. G. J. M., Jetten, M. S. M. and van Loosdrecht, M. C. M., *The combined SHARON/Anammox process*, IWA Publishing, London, UK(2001).