

커널 부분최소자승법을 이용한 화학공정의 모니터링

송상옥, 이동언, 김구회, 윤인섭
서울대학교 응용화학부

Process Monitoring Using Kernel Partial Least Squares

Sang-Oak Song, Dong Eon Lee, Kuhwoi Kim, En Sup Yoon
School of Chemical Engineering, Seoul National University

서론

대부분의 현대 화학공정에는 수많은 제어 시스템을 기반으로 생산 제품의 효율을 위한 경제적인 목적과 사고로부터의 안전과 환경 규제 등의 사회적인 이유로 공정 조업시 발생하는 원하지 않는 변화에 대응하고자 한다. 공정 모니터링은 안전하고 효율적인 조업을 목적으로 제어 시스템만으로 해결할 수 없는 공정의 이상 (fault)을 감지하고, 진단하며, 이상의 원인을 제거하고자하는 일련의 작업이라고 정의할 수 있다. 공정 모니터링은 통계 이론, 패턴인식, 정보이론, 시스템 이론 등 다양한 분야에서 많은 연구가 진행되고 있으며, 크게 data-driven, analytical, knowledge-based 접근방법으로 분류할 수 있다[1].

본 연구에서는 data-driven 방법 중 다변량 통계기법의 하나로서 추론모델 개발에 많이 이용되고 있는 부분최소자승법 (partial least squares)의 기본 개념을 바탕으로 커널 (kernel) 함수를 이용하여 비선형으로 확장한 kernel partial least squares 방법을 이용하여 공정 모니터링을 수행할 수 있는 기법을 설명하고, 공정 모니터링 방법의 테스트에 널리 이용되는 Tennessee Eastman 공정의 시뮬레이션 데이터를 이용해 본 기법의 유용성을 검증하였다.

본론

1. 부분최소자승법 (Partial Least Squares)

부분최소자승법(이하 PLS)은 출력변수와 입력변수 사이의 선형관계를 모델링하고자 하는 회귀기법이다. PLS의 단계는 우선 초기 입력변수들의 선형 조합으로 이루어진 잠재변수 (latent variables)를 생성한다. 이 잠재변수는 입력변수와는 달리 변수간의 상관관계 (correlation)가 제거된 변수이다. 입력변수들의 선형조합은 입력변수와 출력변수의 공분산 (covariance)에 비례하여 결정된다는 점이 PLS의 기본 개념이 된다. 이렇게 추출된 잠재변수들로 하여금 최소자승회귀 (least squares regression)를 수행한다.

PLS에서 제로평균과 표준편차 1로 전처리된 입력변수 $X \in R^N$ 와 $Y \in R^L$ 에 대해서 다음과 같이 정리된다.

$$X = TP^T + E = \sum_{i=1}^p t_i p_i^T + E \quad (1)$$

$$Y = UC^T + F = \sum_{i=1}^p u_i c_i^T + F \quad (2)$$

PLS 모델의 파라미터를 구하는 방법은 PCA를 수행하는 알고리즘인 NIPALS (Non-iterative Partial Least Squares) 알고리즘을 PLS에 적용하여 X 와 Y 행렬로부터 순차적으로 잠재벡터인 t, u 와 가중치 (weight) 벡터 w, c 를 구한다.

- ① u 를 초기화 한다.
- ② $w = X^T u$
- ③ $t = Xw, t \leftarrow t / \|t\|$
- ④ $c = Y^T t$
- ⑤ $u = Yc, u \leftarrow u / \|u\|$
- ⑥ 수렴할 때 까지 ②~⑤단계를 반복한다.
- ⑦ X, Y 행렬을 수축시킨다 (deflate). : $X \leftarrow X - tt^T X, Y \leftarrow Y - tt^T Y$

NIPALS-PLS 알고리즘은 순차적인 과정으로 한 성분의 추출이 끝나면 수축된 행렬 X, Y 를 이용하여 X 의 rank가 도달할 때까지 계산을 반복한다. 그러나 실제 적용시에는 p 개의 성분까지 추출하여 $(n \times p)$ 행렬 $T, U, (N \times p)$ 행렬 $W, (L \times p)$ 행렬 C 를 구하여 다음과 같은 형태로 쓰여질 수 있다.

$$Y = XB + F \quad (3)$$

여기서 B 는 $(N \times L)$ 행렬로서 회귀계수가 되고 F 는 $(n \times L)$ 행렬로서 잔차 (residual)가 된다. 따라서 행렬 B 는 다음과 같은 형태를 갖게 된다.

$$B = W(P^T w)^{-1} C^T \quad (4)$$

여기서 P 는 로딩벡터 $\{p_i = X^T t_i / (t_i^T t_i)\}_{i=1}^p$ 로 구성된 $(N \times p)$ 행렬이며, $p_i^T w_j = 0 (i > j), p_i^T w_j \neq 0 (i < j)$ 와 $t_i^T t_j = 0 (i \neq j), t_i^T u_j = 0 (i > j)$ 를 이용하여 다음과 같은 등식이 성립한다.

$$W = X^T U \quad (5)$$

$$P = X^T T (T^T T)^{-1} \quad (6)$$

$$C = Y^T T (T^T T)^{-1} \quad (7)$$

위 식들을 조합하고 행렬 T 열의 직교성 (orthogonality)을 이용하여 행렬 B 는 다음과 같이 표현된다.

$$B = X^T U (T^T X X^T U)^{-1} T^T Y \quad (8)$$

2. 커널 부분최소자승법 (Kernel Partial Least Squares)

PLS는 선형기법으로써 비선형성이 큰 시스템에서는 만족할 만한 성능이 나오지 않기 때문에 비선형으로 확장하고자 하는 연구가 많이 진행되었다. 기존 연구들은 대부분 추출된 잠재변수들의 관계를 비선형 함수로 대신하는 내적관계를 비선형화하는 방법을 도입하였다. 예를 들면 잠재변수들의 내적관계를 이차함수나 인공신경망 또는 radial basis 함수를 사용하여 회귀함수를 구하였다. 또한 외적관계를 principal curve와 같은 PCA의 비선형 확장 이론 등을 사용하여 비선형으로 매핑되는 잠재변수를 추출하는 방법을 사용하기도 하였다.

커널 부분최소자승법 (이하 KPLS)은 기존 연구의 개념과는 달리 입력변수를 커널 함수

를 사용하여 선형 이론이 적용 가능한 고차원의 특성공간 (feature space)으로 매핑하고, 특성변수 (feature variables)에 선형 PLS를 적용한다. 결과적으로 비선형 사상함수를 통해 얻어진 특성변수의 선형 PLS 적용을 통해 원래 입력변수공간에서는 효과적인 비선형 모델을 얻을 수 있다. 이를 위해 입력공간에서의 커널 함수를 통해 특성공간에서의 내적을 계산한다. 변수자체의 명시적인 (explicit) 관계를 표현하는 함수를 사용하지 않더라도 내적으로 표현될 수 있는 알고리즘이 있다면 커널 방법을 통해서 비선형 확장 알고리즘을 만들어 낼 수 있다.

입력변수 $\{x_i\}_{i=1}^n$ 을 특성공간 F 로 매핑하는 비선형 매핑함수 $\Phi: x_i \in R^N \rightarrow \Phi(x_i) \in F$ 를 사용하여 NIPALS-PLS 알고리즘을 적용하여 KPLS를 수행하는 과정은 다음과 같다.

⑧ u 를 초기화 한다.

$$\textcircled{9} \quad t = \Phi \Phi^T u, \quad t \leftarrow t / \|t\|$$

$$\textcircled{10} \quad c = Y^T t$$

$$\textcircled{11} \quad u = Yc, \quad u \leftarrow u / \|u\|$$

⑫ 수렴할 때 까지 ②~⑤단계를 반복한다.

⑬ $\Phi \Phi^T, Y$ 행렬을 수축시킨다 (deflate). : $\Phi \Phi^T \leftarrow (\Phi - tt^T \Phi)(\Phi - tt^T \Phi)^T, Y \leftarrow Y - tt^T Y$
 $\Phi(x_i)^T \Phi(x_j) = K(x_i, x_j)$ 라는 커널 속임수 (kernel trick)를 적용함으로써 명시적인 비선형 매핑을 사용하는 대신 커널 함수를 사용할 수 있다. t 성분을 한번 추출하고 나면 $\Phi \Phi^T = K$ 행렬은 다음과 같이 수축되어 순차적으로 계산이 수행된다.

$$K \leftarrow (I - tt^T)K(I - tt^T) = K - tt^T K - Ktt^T + tt^T Ktt^T \quad (9)$$

여기서, I 는 n 차원의 단위행렬이다.

선형 PLS와 비슷한 방식으로 식 (8)의 행렬 B 와 학습 데이터에 대한 예측값은 다음 형태가 될 것이다.

$$B = \Phi^T U (T^T K U)^{-1} T^T Y \quad (10)$$

$$\hat{Y} = \Phi B = k U (T^T K U)^{-1} T^T Y = T T^T Y \quad (11)$$

위 식의 마지막 등식은 행렬 $T = \Phi_t R, R = \Phi^T U (T^T K U)^{-1}$ 의 결과로부터 표현되었으며 테스트 데이터에 대한 예측값은 다음과 같다.

$$\hat{Y}_t = \Phi_t B = K_t U (T^T K U)^{-1} T^T Y \quad (12)$$

여기서 Φ_t 매핑된 테스트 데이터이며, K_t 는 테스트 데이터와 학습 데이터의 커널함수 $K_{ij} = K(x_i, x_j)$ 의 성분으로 구성된 행렬이다. 또한 특성공간에 매핑된 데이터를 중심값으로 모으기 위해 다음과 같은 식을 적용한다.

$$K = \left(I - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T\right) K \left(I - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T\right) \quad (13)$$

$$K_t = \left(K_t - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{nt} \mathbf{1}_n^T K\right) \left(I - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T\right) \quad (14)$$

3. Tennessee Eastman 공정의 모니터링 전략

TE 공정은 모니터링 방법의 비교를 목적으로 공정 모니터링을 연구하는 사람들에 의해 가장 널리 이용되고 있는 시뮬레이션 공정으로써 조성, 동역학, 운전조건 등이 고려되어 실제 공정의 시뮬레이션에 바탕을 두고 있다. 반응기, 콘덴서, 압축기, 분리기, 스트리퍼 등 5개의 주요 단위장치와 8개의 물질성분을 포함하고 있다. 공정은 41개의 측정변수와 12개의 조작변수를 가지고 있다. 측정변수는 3분마다 측정되는 22개의 측정변수와 6분 또는 15분마다 측정되어 시간지연이 있는 조성변수 19개로 구성되어 있다. 본 연구에서는 3분마다 측정되는 22개의 측정변수를 입력변수로 사용하고 시간지연을 가지는 19개의 조성변수를 출력변수로 사용하여 커널 부분최소자승법 모델을 구성하였다.

학습데이터는 정상조업상태의 500 (25시간)개 데이터를 이용하였으며, 테스트 데이터는 각 이상조건 마다 980 (48시간)개의 데이터를 사용하여 총 21개의 이상상황에 대한 모니터링을 수행하였다.

모니터링을 위한 통계량으로는 Q 통계량 (Q -statistic), T^2 통계량 (T^2 -statistic)을 사용하여 이상감지를 수행하였고, contribution plot을 통해 이상이 발생한 변수를 추정하고자 하였다. 본 연구 결과는 같은 조건하에서 수행된 선형 PLS와 비교하였으며, 같은 데이터를 가지고 문헌에 보고된 PCA, CVA 등의 방법을 통한 모니터링 결과와 비교하여 보았다.

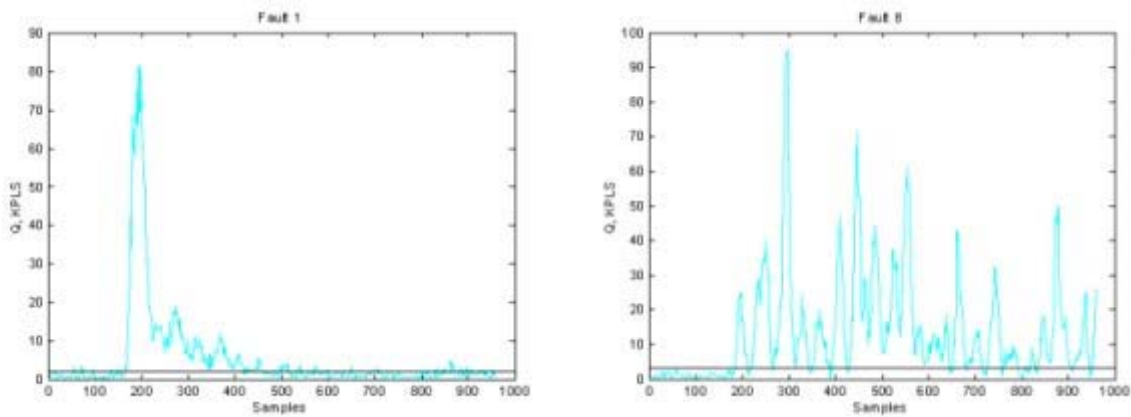


그림 1. 이상상황에 대한 KPLS의 Q-statistic

결론

본 연구는 화학공정의 추론모델 개발에 널리 이용되고 있는 다변량 통계기법인 부분최소자승법을 비선형으로 확장한 커널 부분최소자승법을 이용하여 Tennessee Eastman 공정의 모니터링에 적용하였다. 기본적으로 선형 PLS 방법에 비해 적은 수의 잠재변수 만으로도 우수한 모니터링 성능을 보여주었으며, 다른 다변량통계기법을 이용한 방법들과의 결과 비교에 대해서도 만족할 만한 결과를 얻을 수 있었다.

참고문헌

1. Chiang, L.H., Russell, E.L. and Braatz, R.D.: "Fault Detection and Diagnosis in Industrial Systems", Springer, UK(2001).
2. Scholkopf, B., Burges, C.J.C. and Smola, A.: "Advances in Kernel Methods", The MIT Press, Cambridge, Massachusetts(1999).
3. Rosipal, R. and Trejo, L.J.: *Journal of Machine Learning Research*, **2**, 97(2001).
4. Wise, B.M. and Gallaher, N.B: *Journal of Process Control*, **6**(6), 329(1996).