

커널주성분분석을 이용한 회분 공정모니터링 기술

II. 오프라인 해석 결과

제안된 방법은 반회분식 페니실린 생산공정의 시뮬레이션 벤치마크의 공정 모니터링에 응용되었다. 표1은 회분식 발효공정으로 이루어진 페니실린 공정에서 공정모니터링에 사용된 11개의 공정변수들을 나타내며 그림 2는 공정모니터링에 사용된 11개 측정 변수의 전형적인 trajectory profile을 나타낸다. 전체 55 배치가 MPCA/MICA 정상상태 모델 구축을 위해 사용되었다. 각 배치의 시간은 400시간이며 그 중 45시간은 pre-culture stage이고 나머지 355시간은 fed-batch stage이다. Reference data set은 three-way $\underline{X}(I \times J \times K)$ 로서 I 는 55 batches, J 는 11 process variables 그리고 K 는 400 time points이다. NOC models 위해서, reference batch data \underline{X} 는 Nomikos and MacGregor's unfolding method을 사용하여 a matrix $\mathbf{X}(I \times JK)$ 로 펼쳐진다. 그 후에 \mathbf{X} 는 발효공정의 average trajectory를 제거하기 위해 mean-centered and scaled 된다. 이러한 배치데이터가 통계적으로 정상인지 아닌지 판단하기 위해 MPCA와 MKPCA를 이용한 방법이 이용되었다.

Off-line Analysis of MPCA and MKPCA

MPCA모델은 crossvalidation방법을 사용하여 4개의 주성분을 선택했으며 전체 변화의 63%를 설명한다. MPCA의 온라인 모니터링을 위해 Macgregor가 제시한 PCA를 이용하여 missing data를 다루는 두번째 filling method를 사용하였다. MKPCA에서는, 공정의 비선형성의 정도가 the selection of kernel function선택과 주성분 갯수에 중요하다. 본 연구에서는

two-order polynomial kernel이 고차원 feature space로의 매핑에 사용되었고 7개의 주성분이 broken-stick rule을 사용하여 선택되었다. MPCA/MKPCA 모델 둘 다 99% control limit를 사용하여 테스트 하였다. MKPCA은 7개의 주성분으로 feature space에서 전체 데이터변수의 47.5 %를 설명할 수 있다. 그러나 MPCA와 MKPCA의 데이터의 설명은 각각 measurement space와 feature space에서 데이터의 설명을 각각 나타내므로 기준이 다르기 때문에 같은 기준으로 설명될 수 없다.

그림 3과 4는 55 reference batches에 대해 MPCA/MKPCA를 사용한 an end-of-batch analysis결과를 설명한다. 그림 3에서 MPCA의 f^2 chart 에서 모든 배치는 the 95% confidence limit아래 있어 모든 배치가 NOC모델에 기반함을 알 수 있다. 그러나, 그림 4의 MKPCA의 f^2 와 Q chart는 off-line analysis batches에서 18, 23, 26, 28, 40, and 50의 6개 배치는 99% control limit초과하는 outliers로 판정되어서 이 배치들은 outside of in-control model임을 알 수 있다. 이러한 결과는 MKPCA는 선형관계에 기반한 MPCA보다 배치들 사이의 비선형 관계를 더 잘 효율적으로 capture하는 것을 보여준다. 따라서 MKPCA는 비록 선형MPCA에서는 정상으로 간주될 지라도 실제로는 비선형 비정상 배치 데이터를 더 잘 모사할 수 있다. 그림 5는 MKPCA에서 통계적으로 비선형으로 판정된 6개의 배치를 제외한 남아있는 49개의 배치를 가지고 MKPCA model을 구축한 결과를 보여준다. Broken-stick rule에 의해 8개의 주성분이 선택되었으며 feature space에서 전체 변이의 47.5 %를 포현한다. 그림 5에서 보듯이 이 새로운 MKPCA 모델은 정상 배치데이터 만을 포함하는 모델임을 알 수 있다.

⌘ 1. Variables used in the monitoring of the benchmark model

No.	Variables
1	Aeration rate(L/h)
2	Agitator power(W)
3	Substrate feed rate(L/h)
4	Substrate Feed Temperature (K)
5	Dissolved Oxygen Concentration (g/L)
6	Culture Volume (L)
7	Carbon Dioxide Concentration (g/L)
8	pH
9	Fermentor Temperature (K)
10	Generated Heat (kcal)
11	Cooling Water Flow Rate (L/h)

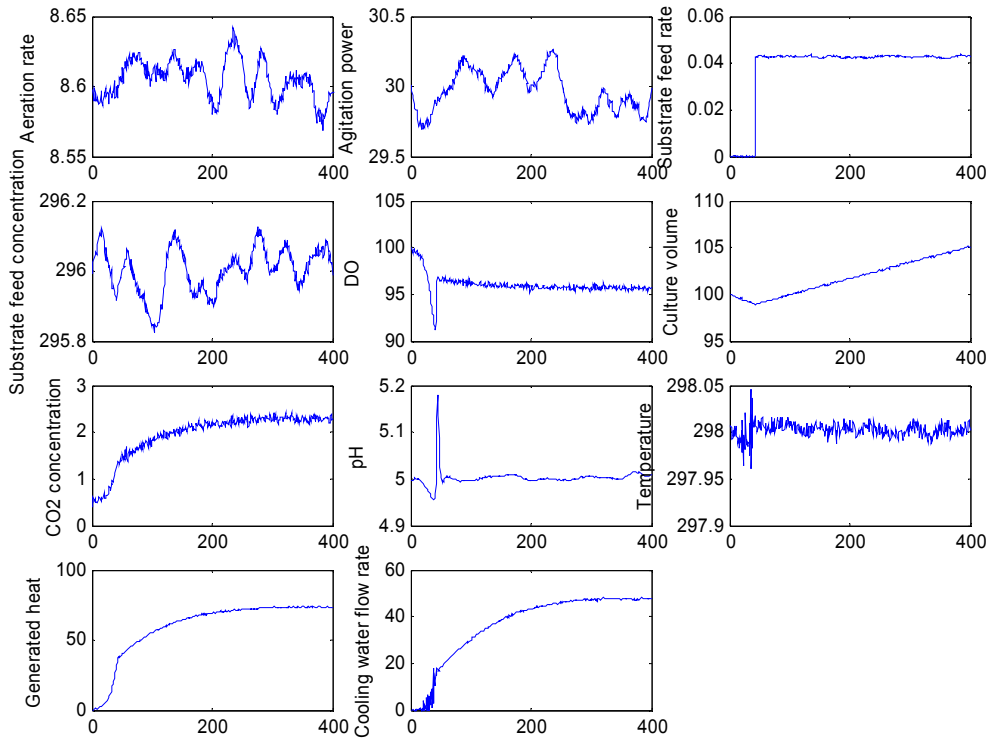


그림 2. Typical batch profiles of 11 variables during penicillin fermentation.

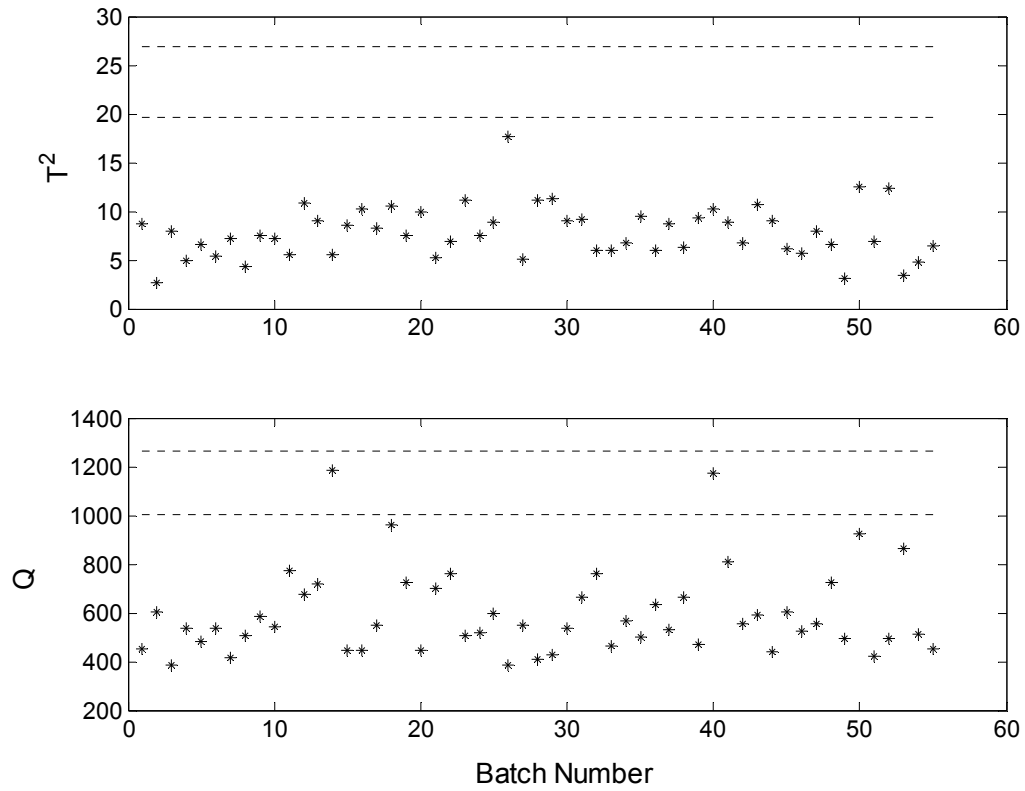


그림 3. T^2 and SPE charts of an end-of-batch analysis based on MPCA for 55 reference batches. The dotted lines correspond to 95 and 99% confidence limits.

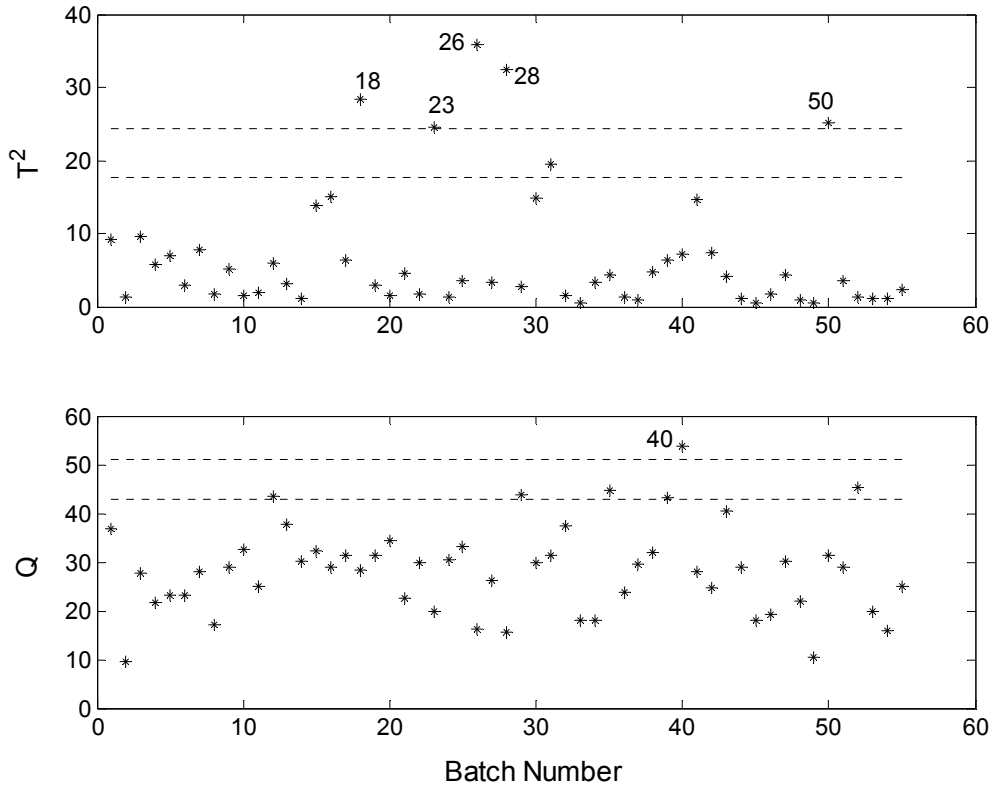


그림 4. T^2 and SPE charts of an end-of-batch analysis based on MKPCA for 55 reference batches. The dotted lines correspond to 95 and 99% confidence limits.

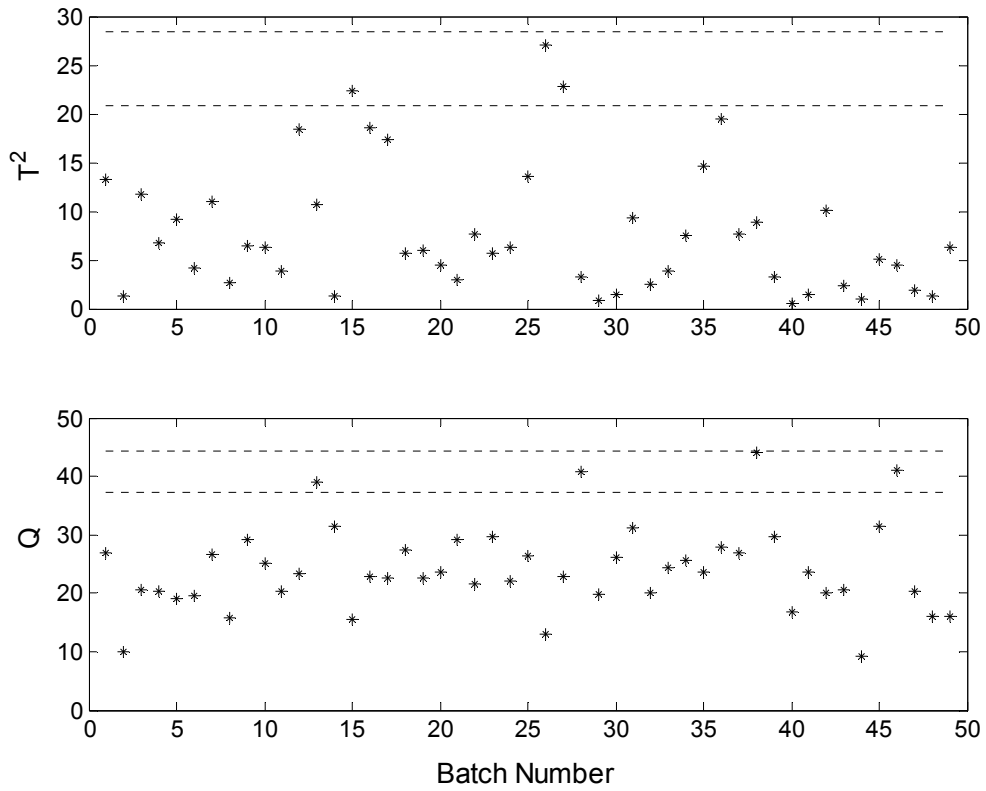


그림 5. T^2 and SPE charts for off-line analysis based on MKPCA for 49 reference batches excluding batches 18, 23, 26, 28, 40, and 50. The dotted lines correspond to 95 and 99% confidence limits.