

#4

화학산업에서 AI를 활용한 수율 예측 및 Simulator 개발 사례



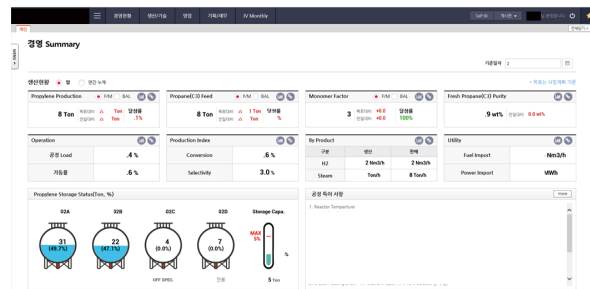
글. 여성주 SK디스커버리 팀장

화학회사인 A 사는 AI/DT(Digital Transformation)를 적용해 스마트 팩토리를 구축함으로써 일하는 방식을 변화시키고 회사의 경쟁력을 강화하고자 노력해 왔다. 또한, A사의 운영 노하우를 자산화하여 신규 비즈니스모델로 연결하기 위한 노력도 지속적으로 진행하고 있는 모범적인 회사이다.

A사는 2020년 3년간의 DT Journey를 기획하고 먼저, 전사의 데이터를 하나로 모아 주요 지표를 모니터링하는 BI(Business Intelligence) 시스템을 구축함으로써 데이터 생성자의 업무수행 방식에서 데이터 사용자로서의 업무수행 방식으로 변화를 시도하였다. 둘째, BI를 기반으로 지금까지 복잡한 화학 공식과 미적분 방정식을 통해 촉매의 수명과 수율을 예측하던 방식을 개선하여 AI를 통해 수율을 추정할 수 있는 시스템을 적용함으로써 D-1일까지의 공정 조건을 유지할 경우 수율이 어떻게 변화될지를 예측하는 업무를 즉시 조회할 수 있는 환경을 마련하였다. 셋째, 미래의 시장 상황에 따라 공정 조건을 변경시켜 촉매의 수명 변화와 수율 변화를 추정할 수 있게 함으로써 동일한 생산 공정과 공정 생산능력(CAPA) 조건에서 시장의 변화에 대응하며 매출을 극대화할 수 있는 시도를 하였다. 마지막으로 수율의 급격한 변화가 발생하였을 때 근본적인 원인 분석을 위해 XAI를 적용하였다.

본고에서는 최근 수행한 Yield Forecasting & Simulator 프로젝트의 준비 과정, 접근 방향성, 성공 노하우에 대해 소개하고자 한다.

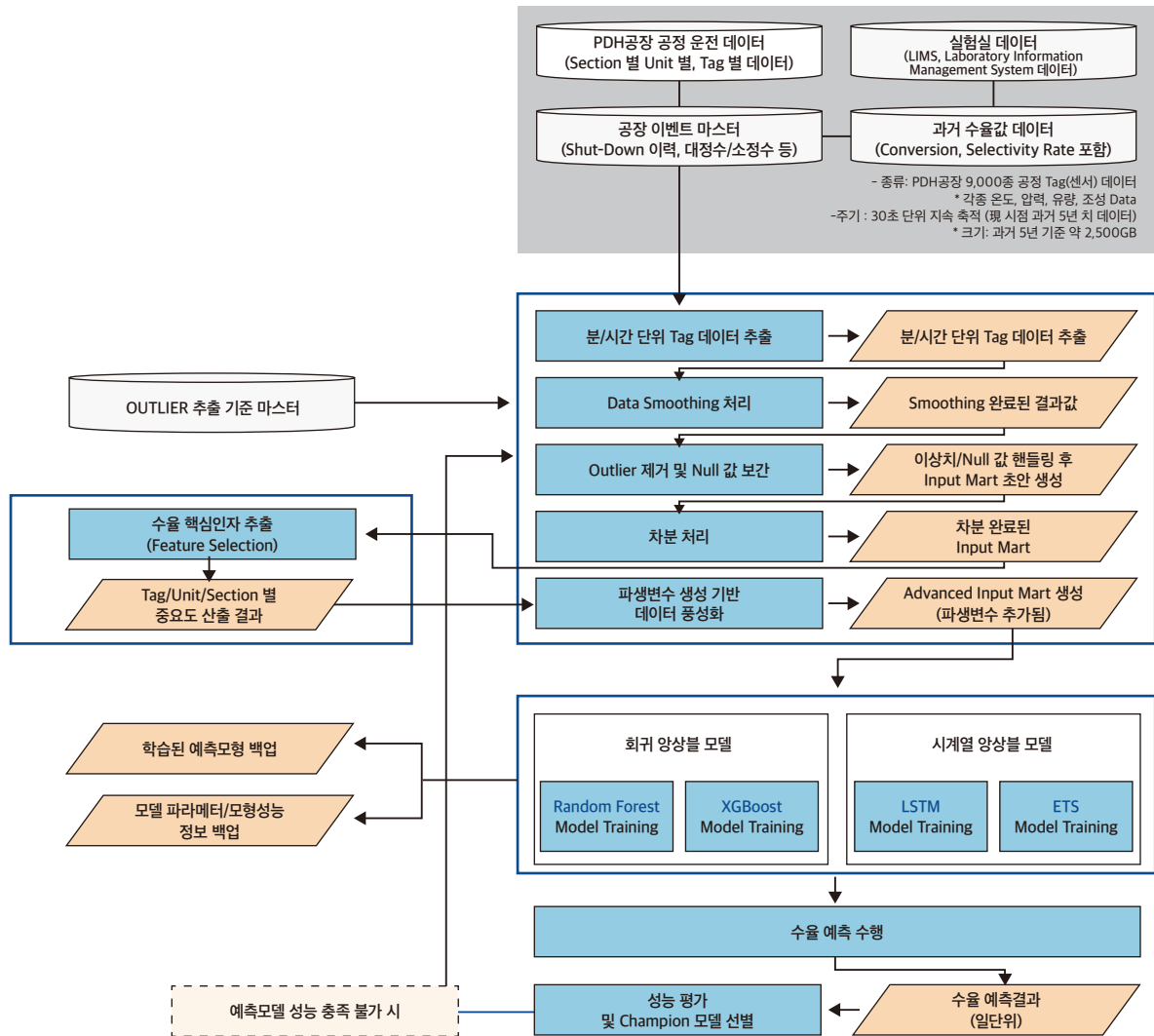
그림 1. BIS(Business Intelligence System)



BIS 구축

일반적인 화학 공정은 공정을 컨트롤하고 모니터링 하기 위해 데이터 공정제어시스템(DCS : Distributed Control System)과 실시간 분석시스템(RTDB)를 활용한다. DCS를 통해 공정 센서에서 감지되는 모든 정보를 실시간 모니터링하고 RTDB로 Snapshot 정보를 취득하여 다양한 분석 활동에 활용한다. BIS가 도입되기 전 A사는 RTDB 정보를 수작업으로 확보하여 Excel을 통해 다양한 집계와 분석으로 공정을 관리하기 위해 노력하였다. 매일 반복되는 공정 엔지니어의 수작업을 자동화하고 RTDB 정보뿐 아니라 ERP 등 A사가 보유하고 있는 모든 경영 데이터를 하나로 모아 함께 모니터링 하고 분석할 수 있는 시스템을 구축하였으며 이를 통해 공정 엔지니어들은 데이터 수집, 집계, 계산의 업무보다 '그림 1'과 같이 BIS가 제공하는 분석된 데이터를 모니터링 하면서 문제의 원인을 도출하고 해결하기 위한 업무에 집중할 수 있게 되었다.

그림 2. BIS(Business Intelligence System)



수율 예측 시스템 구축

A사는 높은 에너지 효율로 제품을 생산하기 위해 촉매를 사용하고 있으며 이는 상업 화학 공정에서 필수적으로 사용되고 있다. 원료의 공간 속도, 반응 온도, 반응 압력 등 다양한 조건들에 영향을 받기 때문에 원하는 제품 수율을 위해 반응 조건을 관리하고 최적화하는 것이 매우 중요하다. 그러나, 이러한 반응 조건의 관리만으로 제품 수율을 관리하는 것에는 어려움이 있는데 이는 반응 중에 불규칙적으로 진행되는 촉매의 비활성화 때문이다. 촉매 비활성화로 인해, 동일한 반응 조건 하에서도 촉매의 반응성은 감소하게 되며, 상업 화학 공정에서의 촉매

의 비활성화는 결국 생산량 감소, 즉 경제적 이익의 감소로 이어진다. 특히 지속적인 비활성화로 인해 일정 수준 이하로 촉매의 수율이 감소하는 경우, 불가피하게 촉매 교체가 필요하며 촉매 교체 기간동안 제품을 생산할 수 없는 상황에 놓이게 된다. 따라서 경제적 이익이 가장 중요한 요소 중 하나로 간주되는 상업 공장에서는 촉매 비활성화로 인한 수율 변화를 관리하고 예측하는 것이 생산 및 안정적인 플랜트 운영을 위해 매우 중요한 문제이다. 수율을 예측하기 위해 1만여 개의 센서 정보/설비정보를 모두 수집하여 Data Lake에 저장하였으며 '그림 2'와 같은 접근을 통해 수율에 영향을 주는 주요 요인을 도출하고

여러 AI 모델의 성능검토를 통해 최종적으로 몇 가지 모델 결과를 앙상블(Ensemble) 하여 수율 예측의 오차를 최소화하도록 하였다.

Category	Algorithm
Time series analysis algorithms	ARIMA, ETS, Facebook Prophet
Machine Learning based regressions (Regression analysis algorithms)	Linear Regression, Random Forest, XGBoost
Deep Learning based algorithms (RNN family algorithm)	LSTM, GRU

특히 위의 방법론 중, Linear Regression, ARIMA, Facebook Prophet은 중/장기 예측뿐만 아니라, 단기 예측(향후 3개월 예측)에서도 부진한 성능이 지속되어 초기 검토에서 일차적으로 제외되었으며, 최종적으로 ETS, LSTM, Random Forest, XGBoost가 후보군으로 채택되어 활용되었다.

최종 사용자는 '그림 3'과 같이 BIS를 통해 일별로 변하는 공정 조건하에서 예측된 수율을 모니터링 하며 수율 예측 변화에 따라 공정을 케미칼 엔지니어 입장에서 최적화 할 수 있는 방법을 모색할 수 있게 되었다.

그림 3. BIS를 통한 수율 예측 모니터링



수율 예측 Simulator 개발

화학 공정은 단순히 '원료를 구매하여 화학적인 반응을 통해 제품을 만드는 것'으로 정의할 수 있다. 경영관점에서는 원료의 비용이 가장 저렴하고 제품의 가격이 가장 높을 때 최대의 생산을 하여 판매하는 것이 가장 효율적이다. 그러나 촉매를 활용하는 생산공정은 수율이 높도록 공정을 운전하면 촉매의 수명이 짧아지기 때문에 그 최적점을 찾는 것이 무엇보다 중요하다. A사는 이 과정을 AI를 통해 추정해 보기 위해 수

그림 4. Simulator를 위한 AI 모델 개발 절차

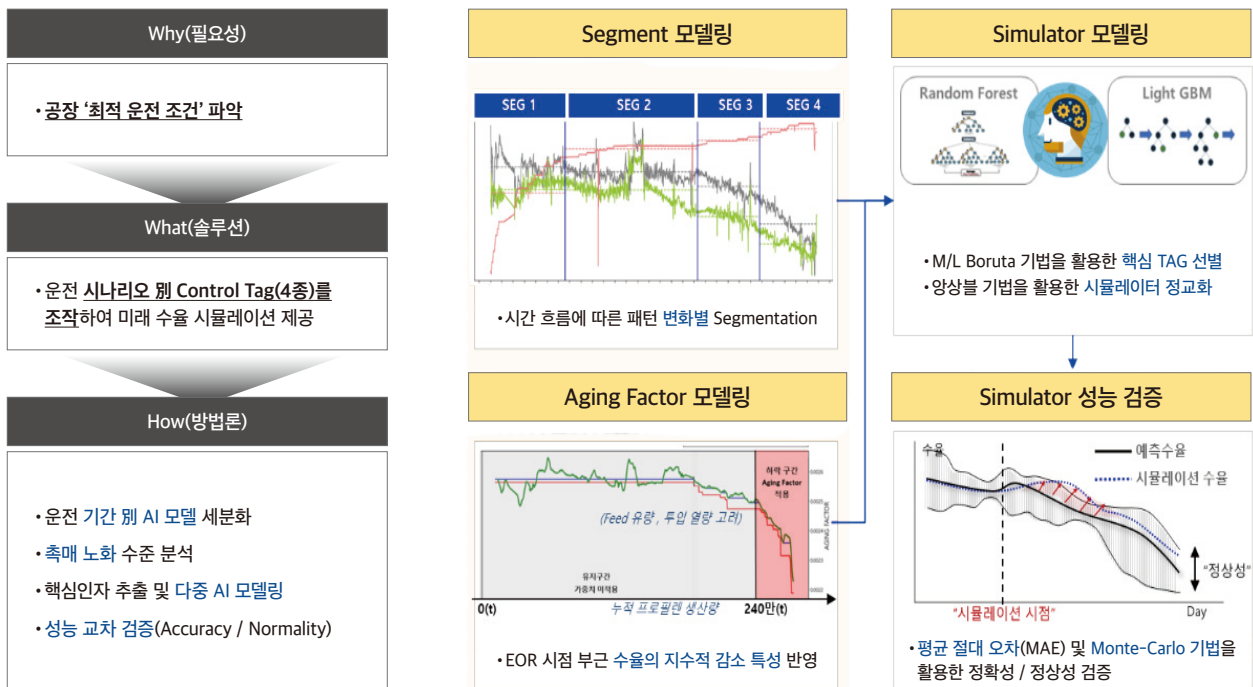
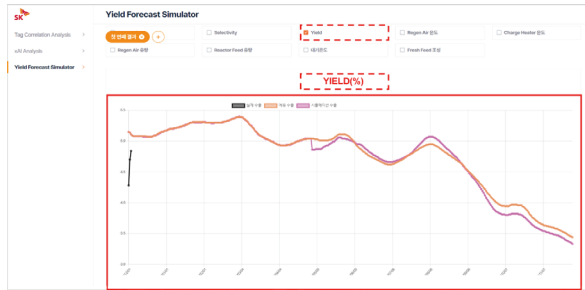


그림 5. Yield Simulator 결과조회



율 예측 시뮬레이터를 개발하게 되었다. BIS를 근간으로 하고, 수율 예측시스템의 AI 모델을 바탕으로 두고 추가적인 AI 모델을 개발하여 미래의 공정 조건 즉 원료비와 제품가격의 Spread가 최대가 될 것으로 예측되는 시점에 생산을 극대화하기 위한 공정 조건을 변화시킬 때(예: 반응기 온도 상승 등)의 1 Cycle에서의 총생산량(추정)의 변화, 촉매의 수명을 추정함으로써 최적 공정 조건을 설계할 수 있게 되었다.

‘그림 4’는 Yield Simulator의 핵심 모듈인 AI 모델을 개발하기 위해 A사가 진행한 접근방법이다.

‘그림 5’는 특정 미래 기간의 공정 조건을 바꾸었을 때 기존 수율 예측에서 어떻게 변하는지를 확인하는 화면의 예시이다

XAI(Explainable AI)

갑작스러운 수율의 급격한 변화가 발생하였을 때 그 원인을 찾는 과정은 케미칼 엔지니어에게 매우 중요한 업무이다. A사는 공정에서 발생하는 데이터를 활용하여 최대한 케미칼 엔지니어가 빠르게 문제를 찾아갈 수 있도록 지원하기 위해 XAI를 통해 수율의 급격한 변화에 가장 영향을 많이 미친 Tag(Sensor 정보)를 조회할 수 있도록 ‘그림6’과 같이 개발하였다.

자동차 및 반도체 생산에서의 수율 예측 모델과 달리, 연속 생산 공정인 화학산업에서 발생하는 공정 정보와 설비 운영 정보를 활용해서 수율을 예측하고 시뮬레이션 하기 위한 AI 모델을 개발하는 것은 국내/외 사례에서 찾아보기 힘든 사례라 할 수 있다. 반응이 되지 않은 원료가 다시 재활용 되고 모든 공정에서의 화학적 반응과 조건을 AI 모델로 설명하기 어려운 문제가 있기 때문이다. A사는 지난 3년간의 여정을 통해 수많은 시

그림 6. XAI 분석을 통한 Root Cause 분석



행착오와 실수를 통해 배웠으며, 우리가 세계 최초로 연속 생산 공정인 화학산업에서 수율을 예측하고 시뮬레이션 할 수 있는 AI 환경을 만들겠다는 신념으로 진행해 왔다. 특히 경영층의 전폭적인 지지가 3년간 프로젝트를 지속시키는 큰 원동력이 있었고 SK디스커버리가 지주사로서 DX.Lab이라는 조직을 통해 Data Science를 확보하고 계열사 비즈니스를 지원 하게 함으로 내재화된 인력이 지속적으로 A사의 문제를 함께 공감하고 문제를 함께 풀어갈 수 있는 환경이 된 것이 프로젝트의 성공 요소라고 할 수 있다. A사는 향후 지금까지 개발한 모델을 고도화하고 자산화하여 신규 비즈니스 모델로 연결할 계획을 하고 있다.

...	저자소개	↗
<p>여성주 SK디스커버리 팀장은 Data Engineering & Data 분석 영역에서 오랜 컨설팅 및 현장 적용 경험을 보유하고 있다. Data Mining 전문가로서 Fujitsu에서 CRM/DW 전문가로 커리어를 시작한 후 IBM GBS 및 SK&C를 거쳐 현재는 SK디스커버리(지주사)의 DX.Lab에서 AI/DT 분야의 리더로서, AI 관련 변화 관리와 현장 적용을 리딩하고 있다. 특히, SK디스커버리의 에너지/화학/바이오 분야 및 부동산 분야에서 AI를 어떻게 적용해야 하는지에 대해 매우 선도적인 사례를 만들어 가고 있다.</p>		