

PLS를 이용한 고분자 중합 공정 다변량 데이터의 분석 및 물성 추정

김성영, 이범석*
경희대학교

(bslee@khu.ac.kr*)

화학공정에서 다변량 통계 분석법은 실험 계획법에 의해 만들어진 데이터나 공정으로부터 얻어진 데이터를 이용하여 모델을 구성하는데 있어 매우 유용하다. 다변량 통계 분석법의 주된 목적은 품질 변수와 품질에 영향을 미치는 가능한 모든 변수들과의 상관관계를 설정하는 것이다. 그러나 이를 사용함에 따라 변수들 간의 높은 상관성에 의해 기인하는 multi-collinearity 문제, 데이터 측정 회수보다 데이터를 이루는 변수가 많은 상황에 기인하는 dimensionality 문제, 변수들 간의 비선형에서 기인하는 non-linearity 문제 등의 문제점이 존재한다. 이런 문제점을 극복하기 위해서는 데이터간의 의존성이나 상관구조와 같은 유용한 정보를 찾아내어야 하고 나아가 공정에 대한 해석을 쉽게 하고 획득한 데이터로부터 미지의 값을 추정함에 있어 보다 향상된 예측성능을 가져야 한다. 이러한 문제점들을 극복하고 보다 정확한 물성추정을 위해 다변량 통계 기법의 하나로서 추론모델 개발에 많이 이용되는 방법 중의 하나가 바로 Partial Least Squares(PLS)이다. 본 연구에서는 화학공정의 비선형성을 고려하기 위해 비선형 PLS를 적용하여 비선형성이 강하고 입력 변수의 변화에 따른 출력변수의 변화가 심한 고분자 중합공정의 운전 데이터와 제품 품질의 다변량 데이터를 분석하고 이를 이용하여 품질 예측에 적용하여 보았다. 적용된 비선형 PLS와 기존의 PCA방법을 비교하여 보았고, 성능 개선을 위해 데이터에 가중치를 부여하는 개선된 비선형 PLS를 적용해 보았다.