

## 비선형 공학문제에 대한 인공신경망 이론의 내삽특성에 관한 연구

정상현 · 이광순

서강대학교 화학공학과  
(1992년 5월 22일 접수, 1992년 11월 30일 채택)

## A Study on Interpolating Behavior of Neural Networks for Nonlinear Engineering Problems

Sang Hun Jeong and Kwang Soon Lee

Department of Chemical Engineering, Sogang University  
(Received 22 May 1992; accepted 30 November 1992)

### 요 약

인공신경망 이론의 내삽특성을 기존의 회귀모델과 비교하기 위하여 임의로 선정한 세 가지 공학문제에 대해 수치모사를 행하였다. 이산시간대 비선형 공정의 동특성 모델을 찾는 두 가지 사례에서는 재귀최소자승법(recursive least-squares estimation)에 의한 회귀모델이 수렴속도나 내삽정확성 면에서 월등하게 우수한 결과를 보였다. 과열증기 PVT-diagram의 mapping 문제에서는 인공신경망을 이용한 방법으로는 수렴된 결과를 얻을 수 없었다. 비선형 공정의 모델링 문제에 관한 한 전통적인 회귀모델이 아직 더 나은 결과를 보이고 있으며, 인공신경망이 일반적인 자가학습 모델링방법으로 쓰이기에는 더 많은 개선이 필요하다.

**Abstract**—Numerical studies have been conducted for three arbitrarily chosen engineering problems to compare the interpolating performance of the artificial neural networks with that of the existing regression models. In two example problems modeling nonlinear dynamic processes, the regression models combined with the recursive least-squares estimation showed much better performance in interpolating accuracy as well as convergence rate. In the mapping problem of a PVT-diagram of superheated steam, the neural networks failed to converge. As far as nonlinear modeling problems are concerned, the conventional regression models still seem to work better, whereas the artificial neural networks have to be improved more before they can play as generic self-learning modelers.

### 1. 서 론

1980년대에 들어와 다시 활발히 연구가 진행되고 있는 인공신경망 이론(artificial neural networks)은 여러 분야에 걸쳐 그 적용 가능성이 검토되고 있으며, 이미 robot공정 등에서는 좋은 결과를 보이고 있다. 인공신

경망은 처리대상에 대한 구체적인 정보가 없어도 학습 알고리듬으로 대상에 대한 모델링이 가능하고 비교적 적용이 용이하다는 장점이 있어서, 화학공정과 같이 비선형성이 심하고 공정이 복잡하여 공정모델을 얻기 어려운 공정에 대해서도 적용 가능성이 검토되고 있다. 인공신경망 이론의 학습 알고리듬 중 가장 많이 쓰이는

것은 Rumelhart가 제안한 역전파법(back-propagation)인데[1-6], 현재 대다수의 연구들에서 이 방법이 사용되고 있으며, 화학공학 분야에서도 화학공정의 고장진단 시스템에 응용하는 방법과 신경체어기를 이용한 제어 방법 등에 대한 많은 연구가 진행중에 있다[2, 3, 5, 6]. 그러나 현재 인공신경망은 기존의 방식들에 비해 어떤 면에서 더 좋은 효과를 나타내고 있는지에 대한 기초 연구가 부족한 상태에서 가능한 모든 적용이 시도되고 있다.

본 연구에서는 인공신경망 이론의 화학공학 문제에 대한 적용 가능성을 검증하기 위한 몇 가지 사례문제에 대하여 연구하였다. 사례연구의 대상은 임의로 선정하였는데, 먼저 비선형 공정의 이산시간대 모델을 구하는 두 가지의 사례에 대해 인공신경망 이론을 이용하여 모델을 구하고, 이와 비교하기 위하여 기존에 많이 사용하고 있는 비선형 회귀모델링(nonlinear regression modeling) 방법에 의해 모델을 구해 비교하여 보았다. 이 두 가지 사례연구는 비선형 화학공학 문제에서 공정의 동특성 모델을 구하는 것이 중요하기 때문에 선정하였다. 또한 가지 사례는 PVT-diagram에 나타나는 데이터들간의 상호관계를 모델링하는 것으로, 인공신경망 이론을 이용한 모델링과 최소자승법에 의한 모델링을 비교하였다. 이상 세 가지의 사례연구를 통하여 실시간 제어문제 및 비선형 화학공학 문제에 인공신경망 이론의 적용 타당성을 살펴보고 적용시의 문제점과 개선할 점을 찾는데 연구의 목적을 두었다.

## 2. 인공신경망

### 2-1. 다층 인공신경망

인공신경망을 구조면에서 크게 분류하면 상호결합형 신경망과 계층형 신경망으로 나눌 수 있는데, 상호결합형 신경망으로는 연상기억 등에 응용되고 있는 Hopfield 신경망과 이의 동작규칙을 확률론적으로 확장시킨 Boltzmann machine 등이 대표적이며, 계층형 신경망으로는 Rosenblatt가 제안한 perceptron model이 대표적이다. 학습 알고리듬으로는 역전파법(back-propagation)이 압도적으로 많다[1].

본 연구에서는 다층 인공신경망을 역전파법으로 학습시킴으로써 인공신경망 모델을 구성하였다. 다층 인공신경망의 일반적인 구조는 Fig. 1과 같다. r번째 층의 j번째 노드의 입력은 r-1번쨰 층의 모든 노드들의 출력  $Y_{i-1}^r$  ( $i=1, 2, \dots$ )과 결합가중치  $W_{ji}^r$  ( $i=1, 2, \dots$ )과의 합의 합으로 표시되고 이 합과 j노드의 옵셋  $\theta_j^r$ 을 더 해서 sigmoid 함수에 의해 변형되어 출력된 값이 j노드의 출력  $Y_j^r$ 이 된다. 이를 수식으로 표현하면 식 (1)과

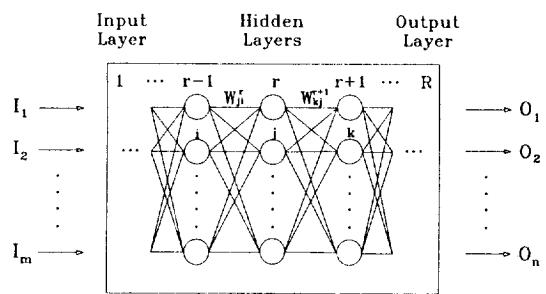
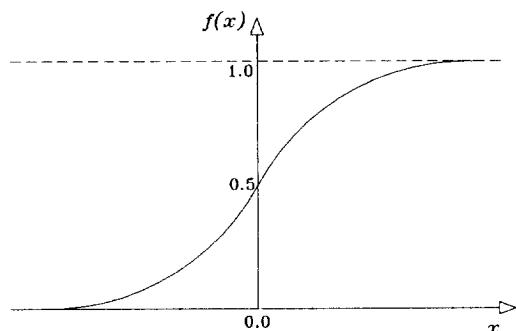


Fig. 1. Multilayer neural networks.



$$f(x) = 1 / [1 + \exp(-x/U_0)]$$

Fig. 2. Sigmoid function.

같고 sigmoid 함수의 응답특성은 Fig. 2와 같다.

$$Y_j^r = f\left(\sum_{i=1}^{N_{j-1}} W_{ji}^r Y_{i-1}^r + \theta_j^r\right) \quad (1)$$

Sigmoid 함수  $f$ 의  $U_0$ 는  $f$ 의 경사도를 결정하는 인자로 이 값의 조정으로 학습의 수렴성을 높일 수 있다.

### 2-2. 오류 역전파법(Error Back-propagation)

역전파법은 인공신경망의 학습 알고리듬 중 가장 많이 쓰이는 것으로 최급강하법을 사용하고 있으며 GDR(generalized delta rule)이라고도 한다. 이 알고리듬의 기본개념은 출력오차의 제곱의 합을 최소화하는 것으로 이 값을 감소시키기 위한 결합 가중치의 변화  $\Delta W$ 를 최급강하법을 사용하여 구하는 것이다. 이 때 학습의 overshoot를 억제하기 위하여 momentum 항을 첨가시키는 것이 일반적이다. 역전파법의 알고리듬을 정리하면 다음과 같다.

$$W_{ji}^r(t+1) = W_{ji}^r(t) + \Delta W_{ji}^r(t) + \gamma(t) \Delta W_{ji}^r(t-1) \quad (2a)$$

$$\theta_j^r(t+1) = \theta_j^r(t) + \Delta \theta_j^r(t) + \gamma(t) \Delta \theta_j^r(t-1) \quad (2b)$$

$$\text{where } \Delta W_{ji}^r(t) = \alpha \delta_j^r Y_{i-1}^r \quad (2c)$$

$$\Delta\theta'_j(t) = \beta\delta'_j \quad (2d)$$

$$\text{if } r = R, \delta'_j = (Y'_j - T_j)Y'_j(1 - Y'_j) \text{ (output layer)} \quad (2e)$$

$$\text{otherwise } \delta'_j = Y'_j(1 - Y'_j) \sum_{k=1}^{N_{r+1}} \delta_k W_{kj}^{r+1} \quad (\text{hidden layer}) \quad (2f)$$

여기에서  $\alpha$ 는 결합 가중치의 수정계수이고,  $\beta$ 는 읍세트의 수정계수,  $\gamma$ 는 momentum 계수이다.

### 2-3. 사용한 인공신경망의 구조와 방법

본 연구에서 사례연구에 사용한 인공신경망의 구조는 3층 인공신경망과 4층 인공신경망이었으며, 학습 알고리듬으로는 오류 역전파 알고리듬을 사용하였다. 가중치와 읍세트를 수정하는 방법으로는 일괄 수정법을 사용하였는데, 이것은 학습패턴 각각에 대한 오차로부터 구한 가중치와 읍세트의 수정량을 가산하고 학습패턴 전체에 대해서 가산된 수정량으로 가중치와 읍세트를 수정하는 것으로, 매 입력마다 수정하는 순차 수정법에 비해 학습시간을 단축시키는 효과가 있다[1]. 또한 momentum 항의 계수  $\gamma$ 를 상수로 주지 않고 학습의 진행에 따라  $\gamma$ 의 값을 증가시킴으로써 학습이 진행된 후에는 전회의 수정방향에 가까운 방향으로 수정이 되도록 고려하였다.

$$\gamma(t) = \gamma(t-1) + \Delta\gamma, \gamma_0 = 0.6, \gamma_{\text{limit}} = 0.9 \quad (3)$$

## 3. 비교 방법

인공신경망 이론을 화학공정 분야에 적용하는 연구가 많이 진행되고 있는데, 특히 인공신경망 이론을 이용한 공정모델링과 신경제어기에 의한 공정제어 문제에 대하여 3가지 사례를 대상으로 먼저 인공신경망을 이용하여 적용하여 보고 이와 비교하기 위하여 비선형 다항식 모델을 최소자승법으로 구하는 기존의 방법을 사용해 문제를 풀어 보았다. 사례 4-1에서는 공정의 모델을 구하는 문제에 대해 미지수의 갯수, 즉 조절가능 인자의 수를 서로 같게 하여 비교하여 보았고, 이 때 더 나은 결과를 보이는 쪽의 인자수를 줄여서 사례 4-2에서 비교하였다. 사례 4-3에서는 PVT-diagram mapping 문제에서 어느 쪽이 더 나은 성능을 보이는지 비교하여 보았다.

## 4. 사례 연구

### 4-1. 비선형 공정 동특성 모델링(I)

공정을 제어하는 문제에 있어 제일 중요한 것 중의

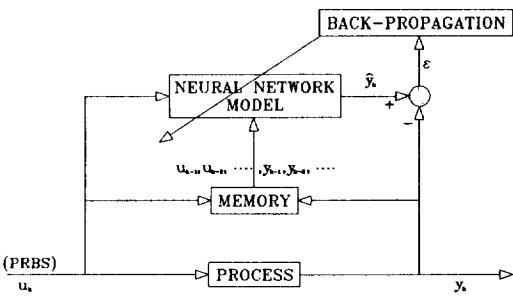


Fig. 3. Block diagram of a process estimator using neural networks.

하나는 실제 공정의 특성을 잘 나타낼 수 있는 공정모델을 찾는 것이다. 실제 공정의 동특성을 거의 그대로 모사해 내는 모델을 얻을 수 있으면 공정을 제어하는 것이 용이해지는데, 화학공정은 대부분 비선형성이 심하고 공정이 복잡하여 공정모델을 얻는 것이 쉽지 않다. 공정모델을 얻기 위하여 사용하는 방법중에 가장 많이 쓰이는 것은 최소자승법에 의한 비선형 회귀모델링(non-linear regression modeling) 방법인데, 이 방법은 공정에 대한 여러 번의 운전 자료만 있으면 적용할 수 있기 때문에 많이 사용되고 있고 정확도도 상당히 높다. 반면 최근의 연구들에서는 인공신경망을 이용한 공정모델링에 대한 연구가 시도되고 있는데[2, 3], 인공신경망은 처리대상에 대한 구체적인 정보가 없어도 학습 알고리듬으로 대상에 대한 모델링이 가능하다는 장점이 있고, 신경제어기를 이용한 공정제어 방법들의 대부분이 공정의 모델링에도 역시 인공신경망을 사용하고 있다[3, 5].

본 연구에서는 인공신경망을 이용한 공정의 모델링과 기존의 방법인 비선형 회귀적 모델링에 의한 두 가지 결과를 비교하고 실용 가능성에 대해 고찰하였다.

#### 4-1-1. 인공신경망에 의한 모델링

먼저 다음과 같은 간단한 비선형 이산공정에 대하여 비교하여 보았다.

$$Y_{k+1} = 0.8 \sin(3 Y_k) + 1.2 U_k \quad (4)$$

인공신경망을 이용한 공정모델링 방법의 구조도를 Fig. 3에 보였다. 공정의 입력력과 이들의 과거값들을 인공신경망 모델의 입력으로 하여 모델 출력력을 얻고 이 출력력과 실제 공정출력과의 차이로 역전파법에 의한 모델 학습을 한다. 사용한 인공신경망 모델은 다음과 같다.

Input nodes :  $Y_k, Y_{k-1}, Y_{k-2}, U_k, U_{k-1}, U_{k-2}$

Hidden nodes : 3

Coefficients :  $\alpha=0.4, \beta=0.3, \gamma_0=0.6$

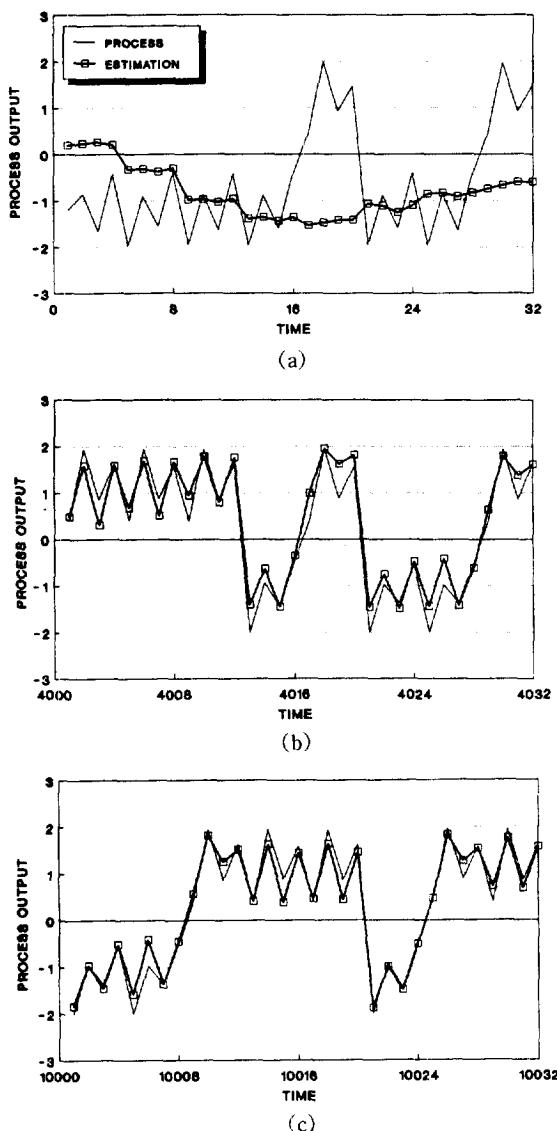


Fig. 4. Output of process model using neural networks (I).

1개의 은닉층(hidden layer)을 가지고 있는 3층 인공신경망을 사용하였는데, 계수  $\alpha$ 와  $\beta$ 는 여러 번 수행하여 본 결과 제일 좋은 결과를 보여주는 값들이고, 계수  $Y_i$ 는 여러 연구들에서 사용하고 있는 값이다[1, 2, 3, 5]. 이 인공신경망 모델의 미지수는 가중치 21개, 웜세트 4개로 조절 가능한 인자가 총 25개이며, 이 인자들은 임의의 난수로 초기화하였다. 운전을 하면서 공정모델을 얻기 위하여 공정입력으로 PRBS(pseudo-random binary sequence)를 넣어주면서 학습을 진행하였다. Fig. 4에

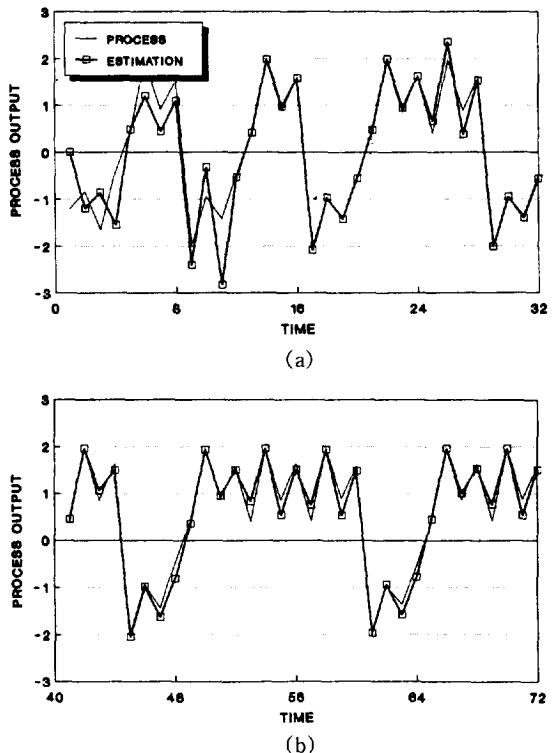


Fig. 5. Output of process model using RLS (I).

PRBS에 대한 공정 출력과 인공신경망 모델 출력을 보였다. Fig. 4(a)는 학습초기의 결과인데 전혀 모델링이 이루어지지 않은 상태이고, Fig. 4(b)는 4,000번 학습이 진행된 후의 결과인데 실제 공정과 유사한 동특성을 보이고 있으며, Fig. 4(c)는 10,000번 학습이 진행된 후이며 이 이후로는 더 이상 모델이 개선되지 않았다. 어느 정도 실제 공정과 비슷한 응답을 보이고 있는데 아직 약간의 오차가 있다.

#### 4-1-2. RLS(Recursive Least Squares)에 의한 모델링

인공신경망에 의한 모델링과 비교하기 위하여, 식(5)와 같은 비선형 다항식 모델을 구성하고 RLS에 의해 계수들을 조정하는 비선형 회귀적 모델링 방법을 사용하였다. 이 때 비교대상의 조건을 맞추기 위하여 입력 정보로는 인공신경망 모델의 입력으로 사용한 6개의 값을 사용하였고 다항식의 항수를 인공신경망 모델의 가중치 갯수인 21개로 구성하였다.

$$\begin{aligned}
 Y_{k+1} = & a_0 Y_k + a_1 Y_{k-1} + a_2 Y_{k-2} + b_0 U_k + b_1 U_{k-1} + b_2 U_{k-2} \\
 & + c_0 U_k^2 + c_1 U_{k-1}^2 + c_2 U_{k-2}^2 + d_0 U_k^3 + d_1 U_{k-1}^3 \\
 & + d_2 U_{k-2}^3 + e_0 U_k U_{k-1} + e_1 U_{k-1} U_{k-2} \\
 & + e_2 U_{k-2} U_k + f_0 U_k^2 U_{k-1} + f_1 U_{k-1}^2 U_{k-2} + f_2 U_{k-2}^2 U_k \\
 & + f_3 U_k U_{k-1}^2 + f_4 U_{k-1} U_{k-2}^2 + f_5 U_{k-2} U_k^2
 \end{aligned} \quad (5)$$

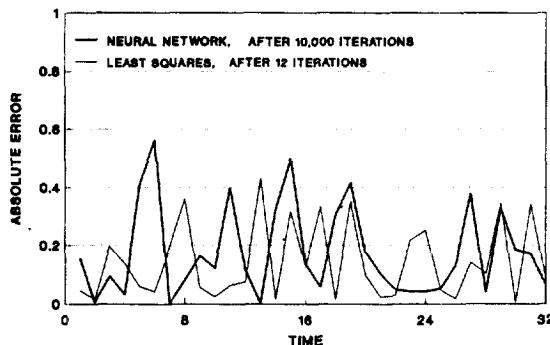


Fig. 6. Comparison of absolute errors by two methods (I).

공정입력으로는 역시 PRBS를 사용하였고 이 때의 공정출력과 모델출력을 Fig. 5에 보였다. 12번의 반복 이후부터는 실제 공정과 거의 같은 응답을 보이면서 모델링이 이루어졌음을 알 수 있다.

두 가지 모델링 방법의 정확성을 비교하기 위하여 각각의 모델출력과 실제 공정출력과의 차이를 나타낸 것이 Fig. 6이다. 인공신경망 모델은 10,000번 학습이 진행된 후의 오차이고, RLS에 의한 모델은 12번 반복한 후의 오차이다. 이 결과로 보면 두 가지 방법이 거의 비슷한 정도의 오차를 나타내고 있는데, RLS에 의한 모델링이 약간 더 적은 오차를 보이고 있다.

#### 4-2. 비선형 공정 동특성 모델링(II)

사례 4-1에서는 같은 수의 조절 인자를 가지고 있는 두 가지 방식의 모델에 대한 비교였는데, RLS에 의한 모델링 방법이 훨씬 빠르게 공정모델을 찾아 냈다. 이번에는 RLS에 의한 모델링 방법의 조절 인자수를 인공신경망을 이용하는 방법보다 훨씬 줄여 비교하여 보았다.

##### 4-2-1. 인공신경망에 의한 모델링

대상 공정은 다음과 같은 비선형 이산공정이다.

$$Y_{k+1} = 1 - \exp(-0.3 Y_k) + U_k^2 \quad (6)$$

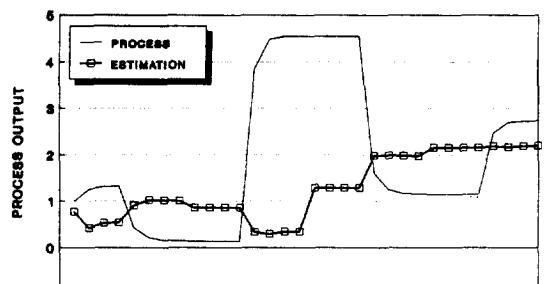
사용한 인공신경망 모델은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \text{Input nodes : } & (\text{Set 1}) Y_k, Y_{k-1}, U_k, U_{k-1} \\ & (\text{Set 2}) Y_k, Y_{k-1}, U_k, U_{k-1}, U_k^2, U_{k-1}^2 \\ & U_k U_{k-1} \end{aligned}$$

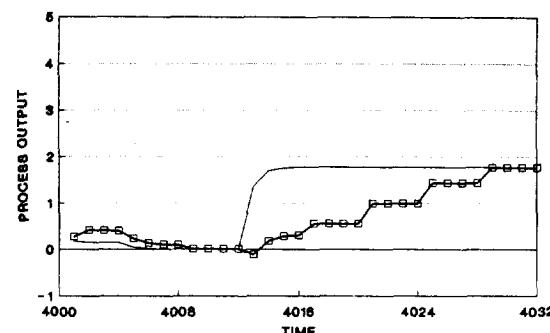
Hidden nodes : 4

$$\text{Coefficients : } \alpha = 0.4, \beta = 0.3, Y_0 = 0.6$$

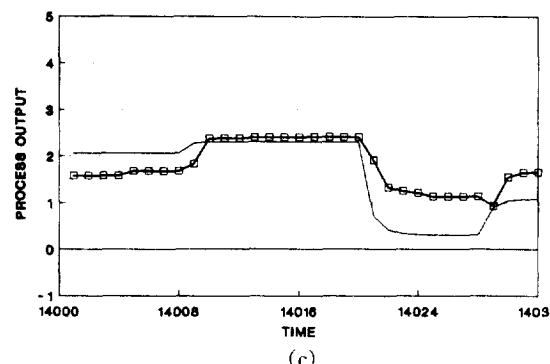
이 3층 인공신경망의 입력으로 4개의 입력노드로 된 Set 1을 사용한 결과 거의 모델을 찾아내지 못하여 7개의



(a)



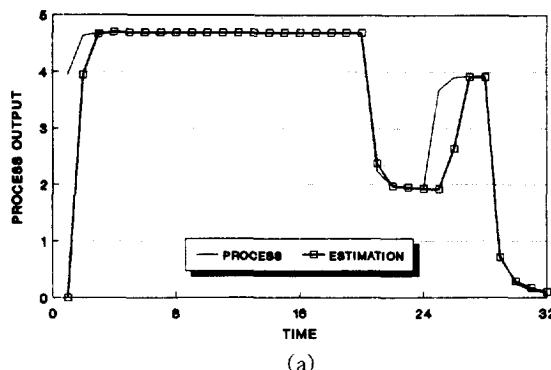
(b)



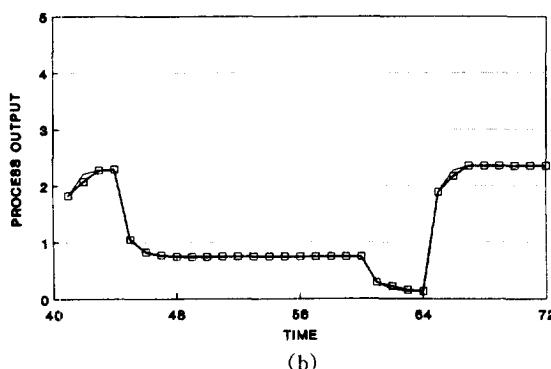
(c)

Fig. 7. Output of process model using neural networks (II).

입력노드로 된 Set 2를 사용하였다. 이 때 모델의 조절 가능 인자는 가중치 32개, 음세트 5개로 총 37개가 된다. 이 인자들을 임의의 난수로 초기화 하고 공정입력으로 PRBS(이 PRBS는 크기도 -2에서 2 사이의 난수로 주었다)를 넣어주었을 때의 실제 공정출력과 인공신경망 모델출력을 Fig. 7에 보였다. Fig. 7(c)에서 보면 14,000 번의 학습후에도 공정의 경향만 쫓아가고 있고 상당한 오차를 보이고 있으며, 더 이상의 학습이 되지 않았다.



(a)



(b)

Fig. 8. Output of process model using RLS (II).

Set 2는 공정의 quadratic한 특성을 감안해서 여러 가지 시도한 것 중 가장 좋은 경우였다.

#### 4-2-2. RLS에 의한 모델링

사례 4-1에서 같은 수의 조절인자에 대해서는 RLS에 의한 모델링이 훨씬 빠르게 모델을 찾는 결과가 나왔으므로, 여기서는 RLS에 의한 모델링의 조절가능 인자수를 줄였을 경우에 대하여 비교하기 위하여, 인공신경망 모델에서 사용한 37개의 조절가능 인자 대신에 Set 2의 입력노드수와 같은 7개의 항으로 구성된 비선형 다항식에 대해 RLS로 모델링하였다. 이 경우 모델의 미지수는 단지 7개이다.

$$Y_{k+1} = a_0 Y_k + a_1 Y_{k-1} + b_0 U_k + b_1 U_{k-1} + c_0 U_k^2 + c_1 U_{k-1}^2 + c_2 U_k U_{k-1} \quad (7)$$

공정입력으로는 역시 PRBS를 사용하였으며 이 때의 공정출력과 모델출력을 Fig. 8에 보였다. Fig. 8(a)에서 보면 27번의 반복 이후부터의 실제 공정출력과 모델출력이 거의 일치하고 있다.

정확성을 비교하기 위하여 인공신경망 모델의 출력과 RLS에 의한 모델출력 각각과 실제 공정출력과의 오차를 Fig. 9에 보였다. 인공신경망 모델은 14,000번 학습이

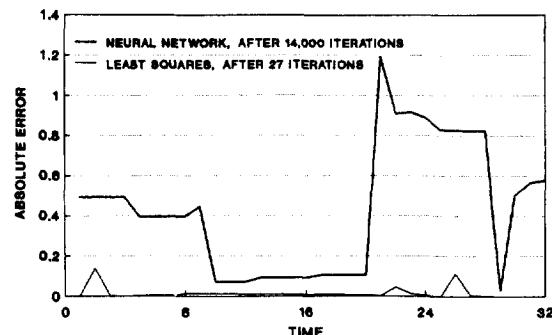


Fig. 9. Comparison of absolute errors by two methods (II).

진행된 후의 오차이고, RLS에 의한 모델은 27번 반복의 오차이다. 모델을 찾는 속도에 있어서나 정확성 면에 있어서나 RLS에 의한 모델링 방법이 훨씬 더 나은 결과를 나타내었다.

#### 4-3. PVT-Diagram Mapping

세 번째 사례로는 PVT-diagram mapping에 대해 인공신경망에 의한 mapping과 최소자승법을 사용하여 mapping한 것을 비교하였다. 대상은 superheated steam table[7]을 사용하였는데, 이 자료의 압력 범위는 0.01-20.0 MPa이고 온도 범위는 50-1300°C이며 총 자료의 개수는 425개이다. 각 자료의 압력 P와 온도 T를 입력으로 하여 부피 V를 출력으로 얻는 모델을 인공신경망을 이용하여 구하는 방법과 비선형 다항식에 대해 최소자승법으로 구하는 방법을 서로 비교하였다.

##### 4-3-1. 인공신경망에 의한 Mapping

사용한 인공신경망은 3층 구조이고 입력노드로는 두 가지 Set를 사용하였다. 사용한 인공신경망 모델은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \text{Input nodes : } & (\text{Set 1}) 1, T, T^2, (1/P), (1/P)^2, T(1/P) \\ & (\text{Set 2}) 1, T, T^2, (1/P), (1/P)^2, \\ & T(1/P), T^3, (1/P)^3, T^2(1/P), \\ & T(1/P)^2 \end{aligned}$$

$$\text{Hidden nodes : 9}$$

$$\text{Coefficients : } \alpha=0.4, \beta=0.3, \gamma_0=0.6$$

입력노드의 변수는 열역학적 이론에 근거하여 T의 제곱항과  $(1/P)$ 의 제곱항까지 포함시켜 조합하여 선정하였다. 각 자료를 입력으로 사용하여 425개의 자료를 반복해서 입력하여 인공신경망 모델을 학습시켰다. 이 때 이 3층 인공신경망의 입력으로 6개의 입력노드로 된 Set 1으로는 전혀 학습이 이루어지지 않았고, 10개의

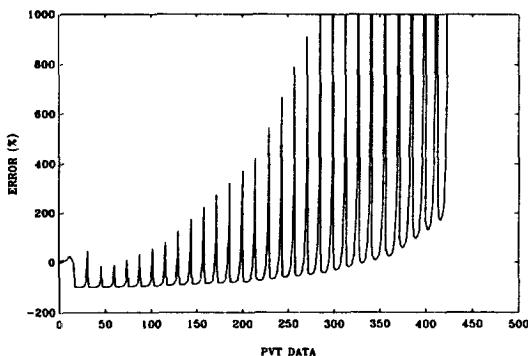


Fig. 10. Mapping error defined by  $(V_{NN} - V_{real})/V_{real}$  in neural networks.

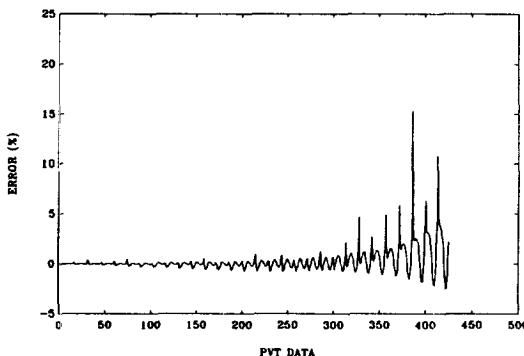


Fig. 11. Mapping error defined by  $(V_{LS} - V_{real})/V_{real}$  in LS.

입력노드로 된 Set 2를 사용하여 10,000번 학습시킨 후의 결과가 Fig. 10이다. 모델의 미지수는 가중치 99개, 음세트 10개로 총 109개의 조절 가능한 인자를 가지고 있는데 결과에서 보듯이 전혀 학습이 되지 않았다. 은닉층을 하나 더 두어 4층 인공신경망으로 구성하고 각 은닉층의 노드수를 9개씩 두어 전체 은닉노드(hidden nodes)를 18개로 하여 학습시킨 결과도 전혀 모델을 찾아내지 못하였다. 이 경우 모델의 미지수는 가중치 180개, 음세트 19개로 총 199개의 조절 가능한 인자를 가지고 있는데도 전혀 학습이 되지 않았다.

#### 4-3-2. 최소자승법에 의한 Mapping

모델로 사용한 비선형 다항식은 다음과 같다.

$$V = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 (1/P) + a_4 (1/P)^2 + a_5 T (1/P) \quad (8)$$

이 때 이용한 정보는 인공신경망 모델에서 사용한 입력노드 Set 1이고 단지 이를 개수만큼의 항으로 구성하였다. 425개의 PVT 자료를 사용하여 최소자승법에 의해 한번의 계산으로 구한 모델의 출력  $V$ 값과 실제

자료의  $V$ 값과의 오차를 Fig. 11에 보였다. 이 결과의 평균오차는 0.6%이고 최대오차가 15%로 상당히 정확한 출력치를 보여준다. 이 때 상대적으로 오차가 큰 부분들은 임계점에 가까운 자료들이다.

## 5. 결 론

이상 비선형 공정의 동특성 모델링 사례와 PVT-diagram mapping 사례에 대해 수치모사를 행하여 인공신경망 이론의 성능을 검증한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 인공신경망을 이용한 공정모델링이 좋은 결과를 보이고 있지 않다. 사례 4-1과 4-2와 같은 비선형 공정의 동특성 모델링에는 재귀최소자승법에 의한 회귀모델이 인공신경망 이론에 의한 모델링보다 좋은 결과를 보이고 있고, 사례 4-3의 PVT-diagram mapping 문제에 있어서는 본 연구에서 사용한 인공신경망의 방법으로는 내삽모사가 되지 않는 반면, 최소자승법으로는 한번의 계산으로 평균오차 0.6%의 모사를 하였다. 또한 기존의 회귀모델이 인공신경망에서 보다 적은 수의 조절 인자로도 훨씬 높은 정확성과 빠른 속도로 공정을 모델링하였다.

(2) 은닉층의 수와 은닉 노드의 수가 학습에 미치는 효과가 상당히 크므로 이를 결정할 수 있는 지침이 필요하다.

(3) 학습계수  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ 를 최적화시키는 연구가 필요하다.  $\gamma$ 에 대해서는 경험적인 수치라도 제시되어 있지 만[1, 2, 3, 5],  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ 를 정하는데 있어 적합한 이론이나 기준이 없어서 시행착오를 거듭하였다. 이를 학습계수의 변화가 학습속도에 많은 영향을 미쳤으므로, 이들 계수를 최적화함으로써 학습 속도를 올릴 수 있다.

(4) 현재까지 대다수의 연구들에서 사용해온 학습 알고리듬인 역전파법은 학습 속도가 실시간 문제에 적용하기에는 너무 느리다. 인공신경망 이론을 화학공정 분야에 활용하기 위해서는 학습 알고리듬의 최적화를 통한 빠른 수렴속도가 요구된다.

## 사용기호

$a_i$	: coefficients of nonlinear polynomial
$f(x)$	: sigmoid function
$R$	: output layer index
$N_r$	: number of nodes in $r^{th}$ layer
$P$	: pressure
$T$	: temperature
$T_t$	: target value of neural networks
$t$	: learning iteration number

$V$	: volume
$V_{LS}$	: estimated volume by least-squares method
$V_{NN}$	: estimated volume by neural networks
$V_{real}$	: real volume in table
$W_{ji}$	: weight between $j^{th}$ node in $r^{th}$ layer and $i^{th}$ node in $(r-1)^{th}$ layer
$Y_j$	: output of $j^{th}$ node in $r^{th}$ layer
PRBS	: pseudo-random binary sequence
RLS	: recursive least-squares estimation
LS	: least-squares estimation

#### 그리아스 문자

$\alpha$	: learning rate of weight
$\beta$	: learning rate of offset
$\gamma$	: momentum rate
$\gamma_0$	: initial momentum rate
$\gamma_{limt}$	: limit of momentum rate
$\delta_j$	: variation ratio of error
$\theta_j$	: offset of $j^{th}$ node in $r^{th}$ layer

#### 참고문헌

- 中野馨, 飯沼一元, ニュ-ロン ネットグル-プ, 桐谷滋: “뉴로 컴퓨터” (박민용, 최항식 번역), 대영사, 서울 (1991).
- Bhat, N. and McAvoy, T. J.: *Comput. Chem. Engng.*, **14**(4/5), 573(1990).
- Chen, F.: *IEEE Contr. Syst. Mag.*, Apr., 44(1990).
- Lippmann, R. P.: *IEEE ASSP Mag.*, Apr., 4(1987).
- Miller, T., Sutton, R. S. and Werbos, P. J.: “Neural Networks for Control”, MIT Press, Cambridge, Massachusetts(1990).
- Psaltis, D., Sideris, A. and Yamamura, A. A.: *IEEE Contr. Syst. Mag.*, Apr., 17(1988).
- Sandler, S. I.: “Chemical and Engineering Thermodynamics”, 2nd ed., John Wiley & Sons, Inc., NY, pp. 589-594(1989).