

신경망을 이용한 PET 필름의 연신 공정의 해석

김효대, 김상용*

(주)코오롱 기술연구소, * 서울대학교 섬유고분지공학과

1. 서론

고분자 공정에서 모든 재료 물성은 화학 조성, 분자구조, 결정화도, 분자배향등과 같은 재료의 구조에 의하여 결정된다. 반면, 구조 특성은 공정조건에 의하여 결정된다. 고분자 과학이나 기술에 관련된 대부분의 연구자들은 공정조건과 물질 구조와의 관계(이하 CS 관계라 함.)를 이용하여 공정조건으로부터 물질 구조를 예측하고 물질구조와 성질 간의 관계(이하 SP 관계라 함)에서 구조로부터 성질을 예측하기 위하여 CS, SP 관계 등을 구하려고 한다. 또한 바람직한 물성을 얻기 위한 구조특성이나 공정조건 등을 설계하기 위하여 그 역방향의 정보의 흐름도 알기를 원한다. 연신 공정은 PET 필름이나 섬유 생산공정에서 요구물성을 얻기위하여 절대적으로 필요하다. 그래서 PET 생산공정의 초기부터 공정조건, 재료구조, 재료물성 간의 관계의 연구라는 주제로 많은 연구가 이미 정성적으로 이루어져왔다(1-5). 그런데 재료특성의 제어와 최적화를 위해서는 최종제품의 물성과 공정조건 간의 정량적인 관계가 필요하다. 그러나 고분자는 잘 정의되지 않은 조성방정식을 갖는 고체상태에서 연신되며 그 미캐니즘도 분자배향, 완화, 결정화를 동반함으로써 매우 복잡하기 때문에 해석적으로 수치해석적으로 나타내는 것은 거의 불가능하다. 그러므로 공정조건, 재료구조, 물성 간의 관계를 정량화하기 위하여 주로 회귀분석을 통한 경험식을 구한 것이 몇 편이 있다(6,7). 그러나 거기에도 적절한 함수형태나 변수를 갖는 모형을 찾는 것이 거의 불가능하다는 단점이 있다. 즉 실제 문제에서의 비정상상태, 비등온, 비선형, 지배방정식의 결합상태 및 결정화 같은 물리적 특성 등을 만족시키는 조건-구조-물성 간의 정량적 관계는 없었다. 본연구에서는 모형이 필요 없는 추정자인 신경망을 사용하여 연신공정에서의 정량적인 관계를 나타내고자 한다. 신경망은 입력, 출력자료의 쌍들로부터 내재된 정보를 추출함으로써 학습이 되는데 최근에 화학 공업 관련분야에서 폭발적인 인기 상승을 누리고 있다(8-13). 여기서는 오차 후방전파법(error backpropagation algorithm)으로 다층 전진 신경망(multilayer feedforward networks)을 학습시켰다. 공정조건과 물성간의 관계인 CP 관계와, CS 관계, SP 관계 등을 각각 모사 하는 신경망들을 학습시킨 후, 학습된 신경망을 이용하여 조건, 구조, 물성 간의 관계에서 구조가 매개 역할을 한다는 것을 정량적으로 보여 준다. 또한 정성적인 연구에서는 예측하기 어려운 구조와 물성에 미치는 공정조건들의 교호작용의 효과도 예측한다.

2. 신경망

포유동물의 뇌세포의 조직과 기능을 모사한 수학적 모형인 인공의 신경망은 50년 이상의 역사를 지니고 있으며 그 조직과 학습방법에 따라 분류가 되며 현재에도 새로운 패러다임(paradigm)이 개발되고 있다. 일반적으로 신경망은 그 작용을 정의하는 몇 개의 필수 구성요소가 있다. 즉 신경단위(neuron,node), 전달함수, 연결가중치 및 학습방법이다. 하나의

신경단위의 배열방법중에 Fig. 1과 같은 다층 전진 신경망조직을 생각할 수 있다. 즉, 입력층이 하나 있으며 하나 또는 그 이상의, 소위 은닉층(hidden layer)이라 하는, 중간층과 하나의 출력층이 있다. 여기서 전진이라는 말은 각 층의 신경단위에 들어오는 입력은 반드시 그 전의 층의 출력으로부터 들어와야 하며 이들 신경단위에서의 출력은 출력층에 있는 신경단위로 전해져야 한다는 것을 의미한다. 신경망에서의 각 신경단위는 많은 수의 다른 개개의 신경단위로의 가중치가 있는 연결상태에 있으며 입력된 신호는 신경망의 출력으로 나올 때까지 전파된다. 이 과정에서 각 신경단위에서는 다음의 세 가지 기본 작용이 일어난다. 우선 각 신경단위는 그 전 층에 있는 다른 신경단위의 출력과 연결가중치와의 곱을 입력받는다. 다음으로 그 각각의 곱들을 합하고 그 합을 전달함수를 이용하여 변환시킨다. 전달함수는 보통 비선형이며 미분가능하며 유한한 함수이며 예로써 Fig. 2와 같은 S자 형태의 함수가 많이 사용된다. 후방전파법은 경사법으로서 최소자승의 오차최소화 법이며 다층 전진 신경망의 학습법으로써 최초의 실질적인 방법이며 현재 가장 널리 사용되는 학습방법이다(14).

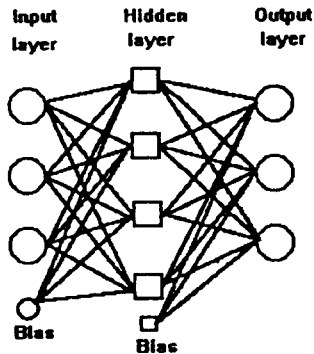


Fig. 1. Typical architecture of multilayer feedforward neural networks.

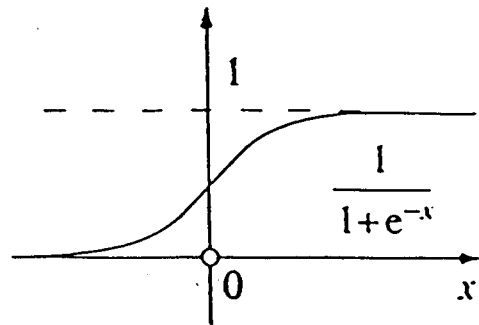


Fig. 2. The shape of a binary sigmoidal function.

학습하는 동안 각 신경단위를 잇는 연결가중치들이 입력, 출력의 자료 쌍으로 된 각 학습자료에 대하여 식 (1)에 따라 조정이 된다.

$$\Delta w(t) = \alpha \delta(t) I(t) + \eta \Delta w(t-1) \quad (1)$$

여기서, $\Delta w(t)$ 는 가중치 변화량, t 는 학습시간, α 는 학습율, $\delta(t)$ 는 오차항, $I(t)$ 는 연결로부터 신경단위로 들어오는 입력, η 는 모멘텀(momentum) 상수이며 $\Delta w(t-1)$ 는 그 연결에서 그 전 시간의 가중치 변화량이다. $\eta \Delta w(t-1)$ 는 모멘텀항으로서 학습을 부드럽게하고 높은 학습율에 의하여 야기된 오차최소의 과잉초과(overshooting)를 줄여준다. $\delta(t)$ 는 각 신경단위의 출력에서의 오차량인데 출력층의 신경단위에서는 식 (2)와 같이 표현된다.

$$\delta(t) = (T-y)y(1-y) \quad (2)$$

여기서 T 는 각 입력 자료에 대한 신경단위의 목표 출력치이며 y 는 계산된 출력치이다. 은닉

층의 신경단위의 오차항은 목표출력치가 없기 때문에 식 (3)과 같이 표현된다.

$$\delta(t) = y(1-y) \sum (\delta_k w_k) \quad (3)$$

출력층의 신경단위의 오차량이 은닉층으로 후방전파되어 그 층의 신경단위의 입력으로 연결된 가중치의 조정에 이용된다. 합산은 뒤 층에 있는 k개의 신경단위에 대하여 행하여진다. δ_k 는 뒤 층에서 k번째의 신경단위의 오차량이며 w_k 은 뒷층의 k번째의 신경단위와 현재 고려되고 있는 신경단위와의 연결 가중치이다. 가중치들은 각 입출력 자료 쌍들에 대하여 조정될 수도 있고 전체 자료 쌍들의 오차량의 합에 대하여 조정될 수도 있으나 본 연구에서는 후자의 방법을 택하였다. 가중치 조정 즉 학습은 신경망의 오차량이 만족할 정도로 작아질 때까지 계속적으로 순환 반복된다. 또한 학습에 사용되지 않은 다른 자료 쌍들의 집합들이 신경망의 일반화를 검증하고 신경망이 단지 학습에 사용된 자료를 기억하고 있는 것이 아니라라는 것을 확인하기 위하여 이용되고 있다. 일반화가 좋지 않은 것은 가끔 과잉학습(overtraining) 혹은 너무 많은 신경단위들을 가진 신경망이라는 징표이다.

3. 실험

고상중합으로 만들어진 네 종류의 PET 수지를 배향정도가 다른 무배향의 필름이 만들어지도록 같은 토출량으로 여러 가지의 압출속도로 압출하였다. 필름의 고유점도(I. V.)는 상온의 60/40의 phenol/tetrachloroethane으로 측정되었다. 압출속도에 따른 여러 가지 두께의 91 mm의 정방형의 필름이 폭을 일정하게 유지한 상태로 여러 가지의 온도, 속도 및 비로 연신되었다. 연신이 끝난 후 연신된 상태에서 여러 가지 시간동안 열처리 된 후 상온으로 급냉하였다. 전체 285개의 시료가 I. V., 연신온도, 속도, 비, 열처리시간, 압출속도등 여섯 가지의 변수의 여러 가지 수준의 조건에서 만들어 졌으며 Table 1과 같이 G1, G2의 두 개의 자료그룹으로 구분하였다.

Table 1. Specifications of Process Conditions and Samples

	199 samples (G1)	86 samples (G2)
Polymer I.V.	0.517-0.726	0.517-0.726
Casting speed (arbitrary)	0.8 - 2.2	0.8 - 1.75
Drawing temperature (°C)	75 - 99	77 - 93
Drawing rate (m/min)	1 - 9	1 - 9
Draw ratio	3.3 - 5.2	3.3 - 4.5
Annealing time (s)	0 - 220	20 - 220

결정화도는 carbon tetrachloride와 n-heptane의 혼합액을 사용한 밀도구배관법에 의하여 구해졌으며 사용된 식은 다음과 같다.

$$X_c = \frac{dc}{d} \cdot \frac{(d-d_a)}{(dc-d_a)} \quad (4)$$

여기서 X_c 는 결정화도, d 는 시료의 측정된 밀도, d_c 는 PET의 결정밀도로서 1455 kg/m^3 이며 d_a 는 PET의 무정형 밀도로서 1335 kg/m^3 의 값을 갖는다. 복굴절율은 편광자가 있는 대물렌즈를 갖는 Abbe 굴절계를 사용하여 세 방향의 주굴절율을 측정하여 계산하였다(15). 연신된 필름을 180°C 의 공기에서 15분간 자유 상태로 방치한 후 길이를 측정하여 원래 길이와의 차이를 원래 길이로 나눈 값으로 열수축율로 하였으며 열수축 용력은 Kanebo 사의 열수축 용력 측정기로 측정하였다. 역학적 성질 즉 최대강도, 절단신도, 초기모듈러스, 항복강도등을 Instron 사의 만능 재료 시험기로 측정하였다.

4. 결과 및 고찰

4.1 신경망 학습 결과

PET film의 연신 공정에서의 공정조건, 재료구조, 물성 간의 관계를 모사하기 위하여 CS관계, SP관계, CP관계를 모사하는 신경망들이 형성되었다. 신경망들은 여섯 가지의 공정조건, 네 가지의 구조요소, 여섯 가지의 물성요소들에 대응하는 입력, 출력의 신경단위를 갖고 있도록 하였다. 결과적으로 본 연구에서는 NN-CS, NN-SP, NN-CP로 불리는 세종류의 신경망을 만들었는데 각각 CS관계, SP관계, CP관계를 모사하도록 한 것이다. 실제로 모든 입,출력 자료들은 각각 -1과 1사이, 0.1과 0.9사이로 실제 자료를 이용하여 보간법으로 환산하였다. 그 이유는 전달함수로 사용된 함수의 영역 특성과 작은 초기 연결가중치, 신경단위들 간의 자료들의 차이 즉, 연신온도의 높은 값, 작은 값의 I. V. 및 복굴절율등에서의 불균형으로 인한 학습 능을 저하등으로 부터 기인되었다. 신뢰성이 있고 안정된 신경망을 얻기 위하여는 신경망의 조직과 학습에 사용되는 변수의 선정이 중요하고, 그리고 학습에 사용된 자료의 영역이 균일하여야 하고 오차정도가 작아야 좋다. 본연구에서는 다음과 같은 방법으로 구조와 변수 및 자료들이 정하여졌다. NN-CS는 여섯 개의 신경단위로 된 입력층과 네 개의 신경단위로 된 출력층을 가지며 하나의 은닉층으로는 3, 4, 6, 8, 9 개의 신경단위를 각각 개별적으로 시험되었다. NN-SP는 네 개의 입력 신경단위와 여섯 개의 출력 신경단위 및 2, 4, 5, 6, 8 개의 은닉 신경단위들을, NN-CP는 여섯 개의 입력 신경단위와 네 개의 출력 신경단위 및 3, 4, 6, 8, 9 개의 은닉 신경단위들을 각각 시험하였다. 한편 모든 신경망 조직에서 학습을 α 는 0.1, 0.2, 0.3, 0.4의 값으로 모멘텀 상수 η 는 0.3, 0.5, 0.7, 0.9의 값으로 각각 시험하였다. 우선 NN-CS, NN-SP, NN-CP는 각각 다섯 가지의 신경망 조직과 네 가지의 α 와 네 가지의 η 의 모든 조합의 조건으로 자료 조합 G1을 이용하여 일정 순환 횟수 만큼 학습하는 동시에 G1과 다른 자료 조합 G2를 이용하여 검증하였다. 그 결과로써 학습 오차와 검증 오차를 작게 하도록 α 와 η 를 결정하였다. 본 연구에서는 α 는 0.1, η 는 0.5가 가장 안정되고 효율이 좋았다. 또한 고정된 α 와 η 에서 검증 오차가 가장 작아지는 시점까지 학습이 된 후 정지하게 하였다. 더 이상의 학습은 학습 오차는 감소하지만 검증 오차는 증가하는 현상을 보여 과잉 학습이 된다는 것을 보여준다. 또한 은닉 신경단위의 수가 많을수록 학습 오차는 감소한다. 그러나 검증 오차에서의 경향은 그렇지 않다. 검증 오차는 주로 사다리꼴을 이루는 조직일 때가 가장 작은 경향을 나타내고 있다. 이 결과는 다른 연구에서도 나타나고 있다(11,16). 너무 많은 신경단위와 너무 오랜 시간의 학습은 학습에 사용된 자료의 일반화 없이 기억만 하는 과잉 학습을 초래한다, Fig. 3에 학습 오차를 그래프로 나타냈다. 최대 강도, 초기 모듈러스등

은 다른 물성들 보다 더 큰 오차를 보이고 있는데 이는 원래 자료의 변동이 컸기 때문인 것으로 사료된다.

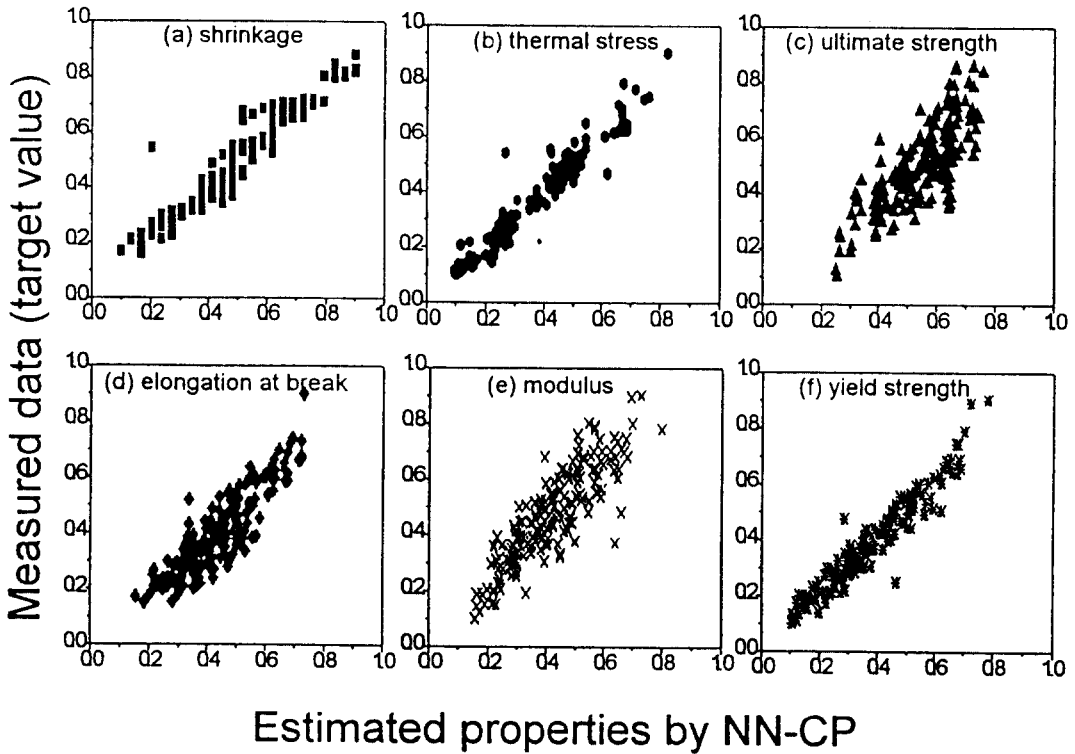


Fig. 3. Comparisons of various measured properties with estimated values by NN-CP for training data set. : ordinates and abscissas of all graphs represent the rescaled values of measured and estimated properties by NN-CP, respectively.

4.2 신경망의 응용

학습된 신경망을 이용하여 공정조건, 재료구조, 재료물성 간의 관계에서 재료 구조가 중간 매개의 역할을 한다는 것을 정량적으로 보여주었다. 또한 학습된 신경망을 추정자로서 사용한 결과 공정조건으로부터 구조 및 물성을 잘 예측할 수있으며 특히 정성적인 연구에서는 어려웠던 공정조건외 교호작용의 구조 및 물성에 대한 효과 등을 기존의 회귀 분석의 결과보다 더 잘 예측할 수 있었다.

5. 참고문헌

1. Ziabicki, A.: Fundamentals of fiber formation, John Wiley & Sons, London, New York, Sydney, Toronto (1976)
2. Hinrichsen, G., Adam, H. G., Krebs, H., Springer, H.: Colloid & Polymer Sci. 258, p. 232 (1980)
3. Ward, I.M.: Polym. Eng. and Sci. 24, p. 724 (1984)
4. Jabarin, S.A.: Polym. Eng. and Sci. 32, p. 1341 (1992)
5. Gordon, D.H., Duckett, R.A., Ward, I.M.: Polymer 35, p. 2554 (1994)
6. Broderick, T.E.: Textile Res. J. 55, p. 277 (1985)
7. Salem, D.R.: Polymer 35, p. 771 (1994)
8. Darsey, J.A., Noid, D.W., Wunderlich, B., Tsoukalas, L.: Makromol. Chem. Rapid Commun. 12, p. 325 (1991)
9. Weijer, A.P., Buydens, L., Kateman, G., Heuvel, H.M.: Chemometrics and Intell. Lab. Sys. 16, p. 77 (1992)
10. Zupan, J., Gasteiger, J.: Neural networks for chemists, VCH Publishers, Weinheim, New York, Basel, Cambridge, Tokyo (1993)
11. Chan, W.M., Nascimento, C.A.O.: J. Appl. Polym. Sci. 53, p. 1277 (1994)
12. Keshavaraj, R., Tock, R.W., Nusholtz, G.S.: J. Appl. Polym. Sci. 57, p. 1127 (1995)
13. Joyce, S.J., Osguthorpe, D.J., Padgett, J.A., Price, G.J.: J. Chem. Soc. Faraday Trans. 91, p. 2491 (1995)
14. Rumelhart, D.E., Hinton, G.E., Williams, R.J., in: Parallel Distributed Processing. Rumelhart, D.E., McClelland, J. (Eds.), MIT press, Cambridge, p. 319 (1986)
15. Okajima, S., Koizumi, Y., Kogyo Kagaku: Zusshi 42, p. 810 (1939)
16. Cheng, L., Adams, D.L.: Textile Res. J. 65, p. 495 (1995)