

## A Study on the Optimal Design of Polynomial Neural Networks Structure

吳 聖 權\* · 金 東 源\*\* · 朴 炳 俊\*\*\*  
 (Sung-Kwun Oh · Dong-Won Kim · Byoung-Jun Park)

**Abstract** - In this paper, we propose a new methodology which includes the optimal design procedure of Polynomial Neural Networks(PNN) structure for model identification of complex and nonlinear system. The proposed PNN algorithm is based on GMDH(Group Method of Data handling) method and its structure is similar to Neural Networks. But the structure of PNN is not fixed like in conventional Neural Networks and can be generated. The each node of PNN structure uses several types of high-order polynomial such as linear, quadratic and cubic, and is connected as various kinds of multi-variable inputs. In other words, the PNN uses high-order polynomial as extended type besides quadratic polynomial used in GMDH, and the number of input of its node in each layer depends on that of variables used in the polynomial. The design procedure to obtain an optimal model structure utilizing PNN algorithm is shown in each stage. The study is illustrated with the aid of pH neutralization process data besides representative time series data for gas furnace process used widely for performance comparison, and shows that the proposed PNN algorithm can produce the model with higher accuracy than previous other works. And performance index related to approximation and prediction capabilities of model is evaluated and also discussed.

**Key Words** : PNN(Polynomial Neural Networks), GMDH(Group Method of Data Handling), high-order polynomial, multi-variable inputs, time series data, approximation and prediction capabilities

### 1. 서 론

근래에는 많은 연구자들이 시스템 모델링 방법을 다양한 방법으로 연구하고 있다. 그 중 기본이 되는 것이 입출력 데이터에 의한 선형계의 동정과 예측문제에 관한 회귀분석 모델링 기법과 같은 수학적 모델링이 유용하게 사용되고 있다. 그러나 모델링을 하고자 하는 시스템이 복잡하고, 대규모 구조인 경우에는 함수식으로 모델의 표현이 한정되지 않기 때문에 회귀분석을 적용할 수 없는 경우가 있다. 일반적으로 복잡한 다변수계의 모델링은 많은 입출력 변수 중에서 모델을 구성하는 변수를 선택하여 모델의 구조를 결정하는데 어려움이 있으며, 추정방법의 계수가 많으면 추정에 필요한 데이터 양이 방대해지는 문제점을 지니고 있다. 그러므로 시스템에 대하여 파악하기 힘든 변수들에 대한 경험적 지식을 갖춘 모델설계자를 필요로 한다. 그러나 모델설계자가 이런 변수들을 추측과 경험에 의존하여 시스템을 설계한다면, 좋은 예측 신뢰도를 가진 모델을 만들거란 거의 불가능하게 된다. 이러한 단점을 극복하기 위하여, 모델 설계시 설계자의 선입견을 첨가하지 않는 순수한 객관적 모델구축이 필요하게 되었다. A. G. Ivakhnenko는 이런 문제점을 해결하기 위한 방법으로 GMDH(Group Method of Data Handling) 알고리즘을 제안했다[1]. GMDH 알고리즘은 입력변수의 선택

과 입출력 데이터의 분할, 부분표현식을 정의하여 시스템 방정식을 예측한다. 그러므로 입출력 관계나 모델의 함수형이 특정하지 않은 비선형관계의 경우에 2변수 2차식에 의한 부분표현식을 계층적으로 조합하여 비선형 모델 추정식을 얻을 수 있다. 각 계층은 부분표현식에 의한 회귀분석을 적용하므로써, 입출력 관계의 비선형 함수를 용이하게 얻을 수 있고, 매우 적은 데이터로 복잡하고 다변수인 비선형계의 동정과 예측이 가능했다. 그러나 자연계의 다양한 시스템을 예측하는데 있어 2변수로 국한을 하여 다양한 입력변수들끼리의 상호의존적인 면을 약하게 하였으며, 2차식으로는 다소 복잡한 시스템을 표현하기에는 역부족이다. 또한 간단히 표현될 수 있는 경우에는 간략화된 구조로 나타내는 것이 효과적이지만 모든 경우를 2차식으로 표현하므로 시스템에 맞는 적용력이 떨어지는 것이 단점이다. 본 논문에서는 최적의 모델설계를 위하여 2변수 2차식 GMDH 알고리즘의 한계를 극복하고 기존의 신경회로망 구조와 같이 고정되지 않고 새로운 구조를 생성하는 네트워크 구조를 가지는 PNN(Polynomial Neural Networks) 알고리즘과 그 구조의 설계절차를 제안한다. 2변수 2차식만으로 고정되어 한계가 드러난 GMDH 알고리즘을 다변수에 의해 변수의 개수를 확장하고, 2차식은 1차(linear), 2차(quadratic), 3차(cubic) 등으로 차수 또한 확장한다. 뿐만 아니라 네트워크 각 세대의 입력변수 수 및 노드의 다항식 차수가 서로 다른 구조설계를 통하여 주어진 시스템특성에 맞는 구조로 적응능력을 향상시킨다. 최적의 추정모델은 수 세대를 거친 계층의 부분표현식에 의하여 얻어지며, 각 계층의 다항식은 차수와 입력변수 수에 따라 기본형태와 변형된 형태로 나누어 최적 설계를 행한다. 1 세대와 그 이후 세대(2 세대이상)에서 서로 다른 다항식구조를 가지므로써 계층구조

\* 正 會 員 : 圓 光 大 電 氣 電 子 工 學 部 副 教 授 · 工 博  
 \*\* 準 會 員 : 圓 光 大 電 氣 電 子 工 學 部 碩 士 課 程  
 \*\*\* 正 會 員 : 圓 光 大 電 氣 電 子 工 學 部 博 士 課 程  
 接 受 日 字 : 1999 年 11 月 30 日  
 最 終 完 了 : 2000 年 1 月 11 日

의 간략성 및 상호 연계성을 고려하여 설계하였다. 따라서 복잡한 고차 회귀다항식 사용이 용이하고 간편한 구조로 이루어짐을 알 수 있다. 또한 기존의 학습용 데이터뿐만 아니라 평가용 데이터를 고려한 모델의 성능, 즉 예측능력과 일반화 능력 모두를 고려하여 실 공정 적용의 유용성을 검토한다. 두 공정의 수치예제를 통하여 PNN 알고리즘에 의한 최적설계 과정을 알아보고, 모델링 방법의 타당성과 성능결과의 정확성으로부터 기존 모델링과 동정오차 관점으로부터 비교된다.

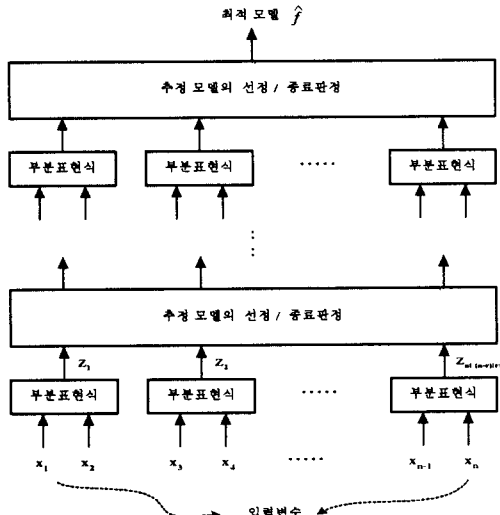


그림 1 PNN 구조의 전체 개요도  
Fig. 1 Overall scheme of PNN structure

2. GMDH 알고리즘

모델링 하고자 하는 대상 시스템의 입력변수  $x_i$ 와  $x_j$ , 그리고 출력  $y$ 의 쌍에 대해서 식 (1)과 같은 회귀방정식을 계산함으로써 이 알고리즘은 시작된다.

$$y = A + Bx_i + Cx_j + Dx_i^2 + Ex_j^2 + Fx_ix_j \quad (1)$$

이 방정식을 사용하여 기존의  $n$ 개의 입력  $x_1, x_2, \dots, x_n$ 과 이에 대한  $m$ 개의 출력  $y$ 를 예측하는  $n(n-1)/2$ 개의 변수를 얻을 수 있다. 여기서 얻은 입출력 집합으로부터 회귀다항식을 찾은 후 어느 다항식이 살아남아야 하는지 판단 기준을 통해 결정된다. 이 과정에서  $y$ 를 가장 잘 예측하는 2차 회귀 모델들의 집합을 얻을 수 있다. 이제 계산이 끝난 각각의 이차 다항식을 이용하여 새로운 독립적 관찰결과를 얻는다. 즉  $x_1, x_2, \dots, x_n$ 의 기존관찰결과를 새로이 얻은 관찰결과로 대체한다. 이 새로운 독립적 변수를 앞에 했던 것처럼 똑같은 방식으로 그 변수들을 조합시킨다. 즉 이런 2차 회귀다항식들 모두를 계산한다. 이것을 통해서 새로운 변수로부터  $y$ 를 예측하는  $n(n-1)/2$ 개의 회귀다항식들의 새로운 결과를 얻고, 이런 변수들은 그 이전의 방정식으로부터 얻은  $y$ 값이다. 이제 새로운 계산식 가운데 가장 좋은 것을 선택하고, 선택된 다항식으로 새로운 독립변수를 만들어 과거의 다항식을 대체하고, 새로운 변수들의 쌍을 조합한다. 이 회귀다항식들이 이전의 것보다 예측능력이 떨어지기 시작하면 새로운 회귀다항식을 얻는 과정을 중지하게 된다. 이런 일련의 과정이 끝난 후, 가장 마지막 단계에서 얻어진 다항식들 중에서 가장 좋은 이차

다항식을 선택한다. 우리가 얻은 다항식은 두 개의 변수로 이루어진 이차다항식의 계산결과이다. 이 변수들은 두 개 이상의 변수들의 2차식으로 구성되어 있다. 다시 말하면, 대수적 대입 법칙을 사용하면, 아래 식 (2)와 같은 매우 복잡한 형태의 다항식을 얻을 수 있다.

$$y = a + \sum_{i=1}^m b_i x_i + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m c_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m d_{ijk} x_i x_j x_k + \dots \quad (2)$$

이 식을 Ivakhnenko 다항식이라 한다.

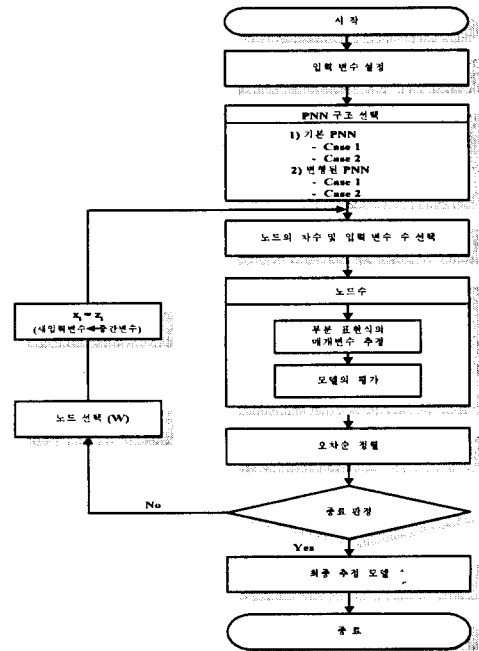


그림 2 PNN 알고리즘의 흐름도  
Fig. 2 Flowchart of PNN algorithm

3. PNN 알고리즘과 구조

3.1 PNN 알고리즘

GMDH 알고리즘에 기초한 PNN 알고리즘은 고계다항식과 다변수 입력에 의하여 차수 및 입력변수의 선택과 알고리즘의 최종종료판정 기준에 의하여, 파라미터 동정에 의한 모델을 선정하게 되고, 계층적 모델추정에 의하여 최종적으로 최적의 모델추정식을 얻는다. 입출력 데이터  $(x_i, y_i) = (x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{ni}, y_i), i=1, 2, \dots, n$ 까지 주어져 있다. PNN 알고리즘은 이 데이터의 입출력 관계가 다음의 종속관계  $f$ 를 만족한다고 생각한다.

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (3)$$

관계식  $f$ 의 추정 모델  $\hat{f}$ 를 다항식으로 판정하고, 출력  $y$ 의 추정치  $\hat{y}$ 는 다음의 관계식

$$\hat{y} = \hat{f}(x_1, x_2, \dots, x_n) = c_0 + \sum_{k1} c_{k1} x_{k1} + \sum_{k1, k2} c_{k1, k2} x_{k1} x_{k2} + \sum_{k1, k2, k3} c_{k1, k2, k3} x_{k1} x_{k2} x_{k3} + \dots \quad (4)$$

으로 표시된다. 단,  $c_k$ 는 계수이다. 연속 세대별 계층구조에 의한 PNN 알고리즘의 전체 개요도를 그림 1에 나타내었다. PNN에서 추정모델  $\hat{f}$ 를 얻기 위해, 먼저 부분표현식을 구성한다. 부분표현식으로 표 2와 같은 회귀다항식을 사용한다.

다음에, 선형회귀분석으로 부분표현식의 계수를 구하고, 중간 변수  $z_k$ 를 구한다. 중간변수에 의한 입력력 데이터를 구성하여, 다음 계층에서도 이와 같은 형태의 연산을 되풀이하며, 알고리즘의 종료 판정식을 만족할 때까지 계속 반복된다. 알고리즘을 종료한 후 얻어지는 부분표현식은 계층적으로 조합하고, 최종 추정모델  $\hat{f}$ 를 얻는다. PNN알고리즘의 단계를 그림 2의 흐름도에 의해 살펴보면 다음과 같다.

[단계 1] 입력변수 설정

출력변수  $y$ 에 관련된  $n$ 개의 입력변수를 설정한다. 필요하면 데이터를 정규화 한다. 이 입력변수를  $x_1, x_2, \dots, x_n$ 이라고 하자.

[단계 2] 데이터 분할

$N$ 개의 입력력 데이터  $(x_i, y_i)=(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{ni}, y_i), i=1, 2, \dots, N$ 을 학습용 데이터와 평가용 데이터로 분할한다. 학습용 데이터는 모델을 동정하기 위해 사용하는 데이터이고, 평가용 데이터는 모델을 평가하기 위해 사용된다. 학습용 데이터와 평가용 데이터의 개수를 각각  $N_l$ 개와  $N_c$ 개로 한다. 여기서,  $N = N_l + N_c$ 이다. 데이터를 학습용과 평가용으로 분할하는 방법으로는, 입력력 데이터의 최초 데이터로부터 학습용 데이터와 평가용 데이터로 상호 분배하는 방법, 데이터 번호의 난수를 이용하여 분할하는 방법, 출력 데이터의 분산이 큰 데이터를 학습 데이터로, 작은 쪽을 평가용 데이터로 분할하는 방법, 그 역의 방법 등이 있다.

[단계 3] PNN 구조 선택

PNN 구조는 1 세대와 그 이후세대의 부분표현식을 구성하는 방법에 따라 모델의 구조가 정해지는데, 1 세대와 그 이후 세대가 각각 서로 동일 입력변수 수를 가지는 경우와 서로 다른 입력변수 수를 가지는 경우의 두 구조로 분류되며 이를 기본 PNN 구조, 변형된 PNN 구조라 한다.

(a) 기본 PNN 구조 - 동일 입력변수 수

- Case 1. 동일 차수를 가지는 구조.
- Case 2. 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수를 가지는 구조.

(b) 변형된 PNN 구조 - 서로 다른 입력변수 수

- Case 1. 동일 차수를 가지는 구조.
- Case 2. 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수를 가지는 구조.

[단계 4] 노드의 차수 및 입력변수 수 선택

$n$ 개의 입력변수  $x_1, x_2, \dots, x_n$ 중 노드의 입력변수를 선택한다. 입력변수의 개수에 따라 여러 가지 형태의 부분 표현식이 구성된다.  $r$ 개의 변수 선택시 입력변수의 개수는  $k = \frac{n!}{(n-r)!r!}$ 가 되며  $n$ 은 전체 입력변수의 수이고,  $r$ 은 선택된 입력변수의 수이다. 노드의 차수 및 입력변수 수 선택은 표 2에 나타난 것처럼 시스템의 특성, 모델 설계방법, 비선형성 및 예측성능등을 고려함으로써 제기된 문제에 대해 가장 좋은 선택구조를 결정하는데 도움을 준다.

PNN 각 노드의 부분 표현식을 2변수 2차식이라 하자.  $n$ 개의 입력변수 중에서 두 개의 입력변수  $x_p, x_q$ 를 선택하고, 다음과 같은 2변수 2차식의 부분표현식을 구성한다.

$$z_k = c_0 + c_1x_p + c_2x_q + c_3x_p^2 + c_4x_q^2 + c_5x_px_q$$

$$k = 1, 2, \dots, n(n-1)/2 \tag{5}$$

여기서,  $c_0, c_1, \dots, c_5$ 는 계수이며,  $z_k$ 는 중간변수이다.

[단계 5] 매개변수 추정

선형 회귀분석에 의해 학습용 데이터를 사용하여, 식(6)을 최소화하는 최적의 계수  $c_0, c_1, \dots, c_5$ 를 구한다

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (y_i - z_{ki})^2 \tag{6}$$

PNN 구조의 계수들은 파라미터  $c_i$ 로써, 입력력 데이터가 주어졌을 때 최소자승법에 의해 구해진다. 표 2에 보여진 PNN 구조의 최소자승법에 의한 최적 매개변수 추정을 행한다. 최소자승법에 의하여 모델구조의 계수 동정은 식 (7)에 의해 구해진다. 각 층에서,

$$Y = X_i C_i$$

$$\text{여기서, } C_i = (X_i^T X_i)^{-1} X_i^T Y \tag{7}$$

$$Y = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_n]^T, \ X_i = [X_{1i} \ X_{2i} \ \dots \ X_{ni}]$$

$$X_{ki} = [1 \ x_{k1} \ x_{k2} \ \dots \ x_{kin} \ x_{k1}^m \ x_{k2}^m \ \dots \ x_{kin}^m \ \dots]$$

$$C_i = [c_{1i} \ c_{2i} \ \dots \ c_{ni}]^T$$

$i$ : 노드,  $n_i$ : Training data의 수,  $n$ : 선택된 변수 수,  $m$ : 최고차수,  $n'$ : 매개변수의 수

[단계 6] 평가후 노드의 선택

계수  $c_0, c_1, \dots, c_5$ 를 추정된 식 (5)의 부분표현식에 평가용 데이터를 대입하고, 평가용 데이터에 대한 식 (6)의 2층 오차  $E$ 를 계산한다. 노드선택 방법은 다음과 같이 두 가지 방법으로 구분할 수 있다.

(a) 방법 1

문턱값  $\theta_m$ 보다 값이 작은 것들을 선택하여 작은 순으로 나란히 정렬하는 방법으로 일반적인 GMDH 알고리즘에서는 데이터를 취사선택하는 기준으로서 미리 정한 일정한 값  $R$ 을 각 세대의 오차와 비교하여 오차가  $R$ 보다 작으면 그 노드의 출력을 취하고, 크면 노드의 출력을 버리는 방식을 사용하였다. 그러나 이러한 방식을 사용하면, 세대가 증가함에 따라 노드의 출력이 실제의 출력에 점점 가까워지기 때문에 잔존하는 노드의 수가 점점 증가한다. 따라서 알고리즘의 계산량이 증가하는 단점이 발생하게 된다. 이 방법은 기준  $R$ 을 순차적으로 감소시킴으로써 계산량의 과다를 방지하는 방법이다. 각 세대에서의 최소의 오차값  $E_m$ 을 구하여 이  $E_m$ 가 최소가 되는 세대에서 알고리즘을 종료하는 것이 기존 GMDH 방법에서 많이 사용되는 방법이다. 그러므로 세대가 증가할수록 오차가  $R$ 보다 작은 노드들이 모두 선택되어  $E_m$ 와  $R$ 사이의 간격이 커지므로 노드의 수가 크게 증가한다. 따라서 노드의 수가 크게 증가하는 것을 막기 위해 문턱값  $\theta_m$ 을 설정하는 것이다.

$$\theta_m = E_m + \delta \quad (E_m \text{는 전세대의 2층 오차 } E_1 \text{이다}) \tag{8}$$

여기서  $\delta$ 는 미리 정한 일정한 값이다. 선택 기준을  $\theta_m$ 으로 정함으로써 노드의 수가 크게 증가하는 것을 막을 뿐만 아니라 데이터를  $E_m$ 에 대하여 균등하게 선택할 수 있는 것이 이 방법의 장점이다.

(a) 방법 2

얻어진  $\frac{n!}{(n-r)!r!}$  개의  $E_1, E_2, \dots, E_{n!/(n-r)!r!}$  에 대하여, 값이 작은 순으로 나란히 정렬하고 이들 중 값이 작은 순으로 다시  $w$ 개를 선택하여,  $E_1, E_2, \dots, E_{n!/(n-r)!r!}$ 로 재배열하고,  $w$ 개를 제외한 나머지 값들은 버린다.

- $\frac{n!}{(n-r)!r!} < W$  일 경우 다음세대 노드의 개수는  $\frac{n!}{(n-r)!r!}$  가 됨
- $\frac{n!}{(n-r)!r!} \geq W$  일 경우 다음세대 노드의 개수는  $W$ 가 됨

본 논문의 경우 방법 2를 택하여 모델을 추정해 간다. 방법 1의 경우 실제적으로 노드수의 증가를 효과적으로 감소시키지 못하며, 이에 따른 계산량 또한 증가한다. 그러므로 방법 2를 선택하여 다음세대의 노드 수를 정하였다. 1 세대 노드의 개수는  $\frac{n!}{(n-r)!r!}$ 로 정의하였고, 2 세대에서 최종 출력세대까지는 각 노드의 개수를 일정개수  $W$ 로 정의하였다, 그러므로 모델링 작업에서 오는 많은 계산량과 과대한 연산 시간을 방지하였다.

[단계 7] 종료 판정

알고리즘을 종료하는 방법에는 다음의 2가지 방법이 사용된다.

(a) 방법 1

[단계 6]에서 얻어진  $E_i$ 이 다음의 부등식을 만족하는 경우에 알고리즘을 종료한다.

$$E_i \geq E. \quad (E. \text{는 전세대의 2승 오차 } E_1 \text{이다}) \quad (9)$$

(b) 방법 2

종료 판정을 세대로 결정하여 종료하는 경우로 방법 1의 경우에서 현재의 오차가 앞 세대의 오차보다 크다고 하여 종료를 하면, 실제적으로는 종료된 이후 세대에서의 좋은 결과값을 가진 것들을 무시하게 된다. 또한 너무 많은 세대를 모델링 하는 경우에는 결과값의 큰 차이를 보지 못하며, 또한 많은 실행 시간과 계산량을 요구하게 된다. 따라서 이러한 약점을 보완하기 위하여 본 논문에서는 방법 2의 경우를 택하여 5세대까지 알고리즘을 실행한 후 종료하는 방법을 사용한다.

[단계 8] 새로운 입력변수 선택

식 (9)를 만족하지 않을 경우,  $x_{1i}=z_{1i}, x_{2i}=z_{2i}, \dots, x_{wi}=z_{wi}$ 가 되어 새로운 입력력 데이터를 구성하고, 단계 4로 다시 돌아간다. 이후, 단계 4부터 단계 8까지를 반복한다.

알고리즘이 종료할 경우, 2승 오차  $E.$ 를 얻은 부분표현식인 식 (5)에 전 세대에서의 중간변수를 대입하고, 동일한 조작을 되풀이하여 최종 추정 모델  $\hat{f}$ 를 얻는다.

3.1 PNN 구조

3.1.1 기본 PNN 구조

PNN 구조는 표 2에서 보여진 것과 같이 1, 2, 3차 회귀 다항식에 의한 계층의 부분표현식에 의하여 수 세대를 걸쳐

최적 추정 모델을 얻는 구조이다. 각 세대의 부분표현식으로서의 다항식은 다음과 같이 두 종류로 구분할 수 있다.

- Case 1. 동일 차수와 동일 입력변수 수를 가지는 구조
- Case 2. 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수를 가지고, 동일 입력변수 수를 가지는 구조

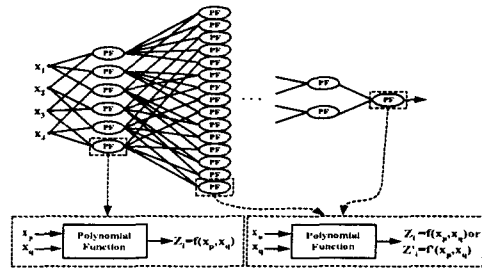


그림 3 기본 PNN 구조

Fig. 3 Basic PNN structure

Case 1. 동일 차수와 동일 입력변수 수를 가지는 구조

그림 3에서 2 세대 이상의 부분표현식이 1세대와 동일한  $Z_i=f(x_p, x_q)$ 의 경우로써 1 세대에서 2변수 2차식으로 입력변수와 차수가 정해진다면, 다음 세대에서도 전 세대에서도 같은 동일 변수와 차수로 수 세대를 걸친 계층의 부분표현식으로 최적의 추정모델을 얻는 구조이다. 즉, 1 세대에서의 부분표현식을 2변수 2차식으로 설정하면 그 형태는  $z=c_0+c_1x_1+c_2x_2+c_3x_1^2+c_4x_2^2+c_5x_1x_2$ 가 되며, 2 세대 이상에서도 이와 같은 형태의 다항식이 세대를 걸쳐 연속해서 사용된다.

Case 2. 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수를 가지고, 동일 입력변수 수를 가지는 구조

그림 3에서 2 세대 이상의 부분표현식이  $Z'_i=f'(x_p, x_q)$ 의 경우로써 1 세대에서 2변수 1차식으로 입력변수와 차수를 정한다면, 다음 세대에서는 변수의 수를 2변수로 동일하게 설정하고, 차수를 변화시킴으로써 계층끼리의 상호 연계성을 고려한 구조로 최적의 추정 모델은 수 세대를 거친 엄선된 모델이다. 그림 3에서 각 세대의 부분표현식인 다항식 함수의 출력  $z_i, z'_i$ 표시는 상호간 서로 다른차수 혹은 변형된 형태의 차수를 의미한다. 즉 1 세대에서 2 입력 1차식의 다항식을 부분표현식으로 사용하였다면 그 구조는  $z=c_0+c_1x_1+c_2x_2$ 가 되며, 1 세대 이후에서는 동일한 수의 입력변수지만 차수를 달리하는 다항식을 사용하는 것으로 3차식을 사용한다면 형태는  $z=c_0+c_1x_1+c_2x_2+c_3x_1^2+c_4x_2^2+c_5x_1x_2+c_6x_1^3+c_7x_2^3$ 가 된다.

3.2.2 변형된 PNN 구조

이는 1 세대와 그 이후세대의 다항식이 서로 다른 구조를 가짐으로써 계층구조의 간략성과 상호연계성이 고려된 구조이다. 그러므로 복잡한 고차 회귀다항식에 사용이 용이하며, 간편한 구조의 구성이라고 할 수 있다. 또한 각 세대의 부분표현식으로서의 다항식은 다음과 같이 두 종류로 구분할 수 있다.

- Case 1. 동일 차수와 서로 다른 입력변수 수를 가지는 구조
- Case 2. 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수를 가지고, 서로 다른 입력변수 수를 가지는 구조

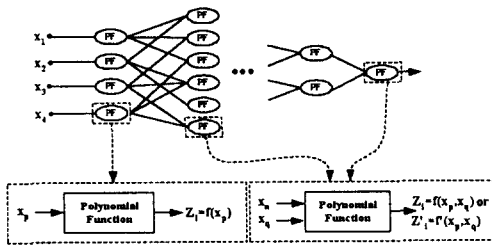


그림 4 변형된 PNN 구조  
Fig. 4 Modified PNN structure

**Case 1.** 동일 차수와 서로 다른 입력변수 수를 가지는 구조  
그림 4에서 1 세대에서의 부분표현식은  $Z_1=f(x_p)$ 이고, 2 세대 이상에서의 부분표현식은  $Z_1=f(x_p, x_q)$ 인 경우로써 1 세대에서의 부분표현식과 2 세대 이상에서의 부분표현식이 서로 다른 구조를 띄고 있는 모델로 1 세대를 1변수 2차식으로 설정을 했다면, 2 세대 이상에서는 2변수 2차식 구조를 형성하며 복잡한 고계 회귀다항식까지 사용할 수 있다. 최종 추론된 모델은 여러 세대를 거친 최적화 모델이다. 1 세대에서 1변수 2차식  $z=c_0+c_1x_1+c_2x_1^2$ 의 형태가 사용되었다면, 2 세대 이상에서는 1 세대와 같은 차수 2차식을 사용하며 입력변수 수를 달리하여 다항식을 구성하는 것이다. 즉 2변수 2차식으로 다항식을 나타내면  $z=c_0+c_1x_1+c_2x_2+c_3x_1^2+c_4x_2^2+c_5x_1x_2$ 가 된다.

**Case 2.** 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수를 가지고, 서로 다른 입력변수 수를 가지는 구조  
그림 4에서 1 세대에서의 부분표현식은  $Z_1=f(x_p)$ 이고, 2 세대 이상에서의 부분표현식은  $Z_1=f'(x_p, x_q)$ 인 경우로써 1 세대에서의 부분표현식과 2 세대 이상에서의 부분표현식의 구조가 서로 다른 형태를 띄고 있을 뿐만 아니라, 입력변수 수와 부분표현식의 차수를 서로 다르게 설정할 수 있는 구조이다. 다항식 차수 또는 입력변수 수 증가에 따른 구조의 상호연계성을 보다 고려한 구조로 구성할 수 있을 뿐 아니라, 차수 또는 입력변수 수 감소에 따른 계층구조를 간략화하여 설계할 수 있는 장점을 가진다. 그림 4에서 각 세대의 부분 표현식인 다항식함수의 출력  $z_1, z_1'$ 표시는 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수를 의미한다. 1 세대에 1변수 1차식의 다항식 구조  $z=c_0+c_1x_1$ 가 설정되면, 2 세대 이상에서 2변수 2차식의 다항식구조  $z=c_0+c_1x_1+c_2x_2+c_3x_1^2+c_4x_2^2+c_5x_1x_2$ 가 선택될 수 있다.

4. 시뮬레이션 및 결과 고찰

본 논문에서 제안한 PNN 알고리즘에 의한 단계별 설계 절차에 따라 다음 두 공정시스템에 대해 모델링을 행한다.

4.1 가스로 공정

Box와 Jenkin이 사용한 가스로 시계열 데이터[5]를 이용하여 입력력 데이터인 가스흐름율과 연소된 이산화탄소 농도의 가스로 공정을 이용한다. 이 공정데이터는 기존의 모델성능 평가[7-17]를 위해 많이 적용된 표준데이터로써, 본 논문에서 제안한 PNN 구조와 그 알고리즘에 대한 타당성과 유용성 평가를 위해 이용된다.

[단계 1] - 입력변수의 설정  
가스로 공정 시계열 데이터[5]에서 입력변수로는  $u(t-3), u(t-2), u(t-1), y(t-3), y(t-2), y(t-1)$  중에서 4입력변수 ( $u(t-2), u(t-1), y(t-2), y(t-1)$ ) 혹은 전체 6입력변수를 선택하고 출력변수로는  $y(t)$ 를 이용한다. 4개 입력 혹은 전체 6개 입력변수를 이용하여 생성된 PNN 구조를 각각 구조 1, 구조 2로 하고 단계별 설계절차는 구조 2만을 보인다. 표 3에 구조 1과 구조 2의 성능결과를 나타낸다. 여기서  $u(t)$ 는 가스 흐름율이고,  $y(t)$ 는 연소된 이산화탄소의 농도이다.

[단계 2] - 데이터 분할  
총 296개의 데이터 중 처음 148개의 데이터는 학습에 이용하고 나머지 148개의 데이터는 테스트에 이용한다.

[단계 3] - PNN 구조의 선택  
PNN 구조를 기본 형태와 변형된 형태로 나눈다. 1 세대와 2 세대 이상의 부분표현식을 동일 입력변수로 구성한다면 기본 PNN 구조가 되며 서로 다른 입력변수로 구성한다면 변형된 PNN 구조가 된다. 기본 PNN 구조에서도 1 세대와 2 세대 이상의 차수를 동일하게 구성하는 경우는 Case 1이 되고 다르게 구성하는 경우는 Case 2가 된다, 변형된 PNN 구조에서도 마찬가지로 Case 1과 Case 2 모두를 고려한다. 본 논문에서 모델링을 행한 기본 PNN 구조의 Case 1과 Case 2, 변형된 PNN 구조의 Case 1과 Case 2의 다양한 구조를 표 1에서 보여진다.

표 1 기본 PNN 구조와 변형된 PNN 구조  
Table 1 Basic PNN structure and Modified PNN structure  
(a) Case 1

입력변수 수				회귀다항식 구조	
기본 PNN		변형된 PNN		1 세대	2-5 세대
1세대	2-5세대	1세대	2-5세대		
2 입력	2 입력	3 입력	2 입력	Type 1	Type 1
				Type 2	Type 2
				Type 3	Type 3
3 입력	3 입력	4 입력	2 입력	Type 1	Type 1
				Type 2	Type 2
				Type 3	Type 3
4 입력	4 입력	2 입력	3 입력	Type 1	Type 1
				Type 2	Type 2
				Type 3	Type 3

(b) Case 2

입력변수 수				회귀다항식 구조	
기본 PNN		변형된 PNN		1 세대	2-5 세대
1세대	2-5세대	1세대	2-5세대		
2 입력	2 입력	3 입력	2 입력	Type 2	Type 1
				Type 3	Type 1
				Type 1	Type 2
3 입력	3 입력	4 입력	2 입력	Type 2	Type 1
				Type 3	Type 1
				Type 1	Type 2
4 입력	4 입력	2 입력	3 입력	Type 2	Type 1
				Type 3	Type 1
				Type 1	Type 2

[단계 4] - 노드의 차수 및 입력변수 수의 선택  
[단계 1]에서 설정한 입력변수중 노드의 입력변수를 선택

한다. 이에 따라 여러 가지 형태의 부분표현식이 구성되며, 노드의 차수를 정할 수 있다. 표 2는 모델링에서 사용한 입력변수 수와 노드의 차수를 보여준다. Type 1과 Type 2는 각변수에 해당하는 1차, 2차 다항식을 나타내고, Type 3은 변형된 2차 다항식을 나타낸다.

표 2 PNN 구조  
Table 2 PNN structure

변수 수	차수	다항식 구조
2 변수	Type 1	$C_0 + C_1X_1 + C_2X_2$
	Type 2	$C_0 + C_1X_1 + C_2X_2 + C_3X_1^2 + C_4X_2^2 + C_5X_1X_2$
	Type 3	$C_0 + C_1X_1 + C_2X_2 + C_3X_1X_2$
3 변수	Type 1	$C_0 + C_1X_1 + C_2X_2 + C_3X_3$
	Type 2	$C_0 + C_1X_1 + C_2X_2 + C_3X_3 + C_4X_1^2 + C_5X_2^2 + C_6X_3^2 + C_7X_1X_2 + C_8X_1X_3 + C_9X_2X_3$
	Type 3	$C_0 + C_1X_1 + C_2X_2 + C_3X_3 + C_4X_1X_2 + C_5X_1X_3 + C_6X_2X_3$
4 변수	Type 1	$C_0 + C_1X_1 + C_2X_2 + C_3X_3 + C_4X_4$
	Type 2	$C_0 + C_1X_1 + C_2X_2 + C_3X_3 + C_4X_4 + C_5X_1^2 + C_6X_2^2 + C_7X_3^2 + C_8X_4^2 + C_9X_1X_2 + C_{10}X_1X_3 + C_{11}X_1X_4 + C_{12}X_2X_3 + C_{13}X_2X_4 + C_{14}X_3X_4$
	Type 3	$C_0 + C_1X_1 + C_2X_2 + C_3X_3 + C_4X_4 + C_5X_1X_2 + C_6X_1X_3 + C_7X_1X_4 + C_8X_2X_3 + C_9X_2X_4 + C_{10}X_3X_4$

[단계 5] - 매개변수의 추정

[단계 2]에서 분할한 학습용 데이터를 사용하여 최소자승법에 의한 PNN 구조의 파라미터  $c_i$ 를 구한다.

[단계 6] - 평가후 노드의 선택

[단계 5]에서 추정한 계수  $c_0, c_1, c_2, \dots, c_n$ 을 표 2에서 선택한 부분표현식에 대입하고 [단계 2]에서 분할한 평가용 데이터를 사용하여 PI(Performance Index)를 최소화하는 노드를 선택한다. PI는 실제 시스템의 출력 데이터와 모델링 데이터간의 차이를 의미하는 성능지수로 모델의 정밀도를 평가할 수 있으며 식(10)으로 정의된다.

$$PI = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - y_i')^2 \quad (m : \text{데이터 수}) \quad (10)$$

[단계 7] - 새로운 입력변수 선택

1 세대의 출력값은 2 세대의 입력값이 되어 새로운 입출력 데이터를 구성하며, 5 세대까지 [단계 4]에서 [단계 7]까지의 동일한 조작을 반복하여 최종 추정모델을 얻는다.

[단계 8] - 종료판정

본 논문에서 제안한 PNN 알고리즘은 실제적인 실행 시간과 계산량을 고려하여 5 세대까지 실행한 후 종료한다. 그러므로 많은 실행시간과 계산량을 줄일 수 있으며, 기존 GMDH알고리즘의 종료판정처럼 현재의 오차가 앞 세대의 오차보다 크다고 하여 알고리즘이 종료되면 종료 이후세대에서 생성될 우수한 노드의 최적값이 무시되는 것을 어느 정도 보완한다. PNN 구조에 따른 각 모델의 성능지수를 아래의 그림에서 보였으며, 학습 데이터만을 고려한 결과로 기존모델 방법의 동정오차와 비교하여 앞선 다른 연구에서보다도 더 높은 정확도를 가짐을 보이고, 학습 데이터뿐만 아니라 평가용 데이터도 함께 고려하여 이에 따른 결과도 더 높은 정밀도를 가짐을 보인다.

(a) 기본 PNN 구조

Case 1. 동일차수와 동일 입력변수 수를 가지는 구조

기본 PNN 구조에서 각 세대의 부분표현식이 동일차수와 동일입력변수 수로 구성된 경우이다. 그림 5-7의 각 세대에서의 PI, EPI는 각 세대에 해당되는 노드번호(Node No.)로 들어오는 입력변수들과 해당 Type에 의한 차수로 구성된 다항식으로 PNN 구조에 의해 구해지는 가장 우수한 평가용 성능지수를 표시한다. 그림 5에서는 Type 1으로 구성된 2 입력, 3 입력 그리고 4 입력에 대한 성능지수를 보인다. 학습데이터와 테스트데이터 모두를 고려한 경우이다. 학습 결과는 4 입력이 3층에서 약간 우수하고, 테스트 결과는 서로 비슷한 결과를 나타낸다. 2 입력과 3 입력, 4 입력의 Type 2의 성능지수는 그림 6에서 보여진다. 학습결과는 4 입력에서 우수하고 테스트결과는 3 입력이 좋은 결과를 보인다. 그러나 전반적으로 학습데이터와 테스트데이터 모두를 고려할 때 2 입력과 4 입력보다는 3 입력일 때 대체로 학습(PI=0.016341) 및 테스트결과(EPI=0.086459)가 가장 양호한 것으로 나타난다. 그림 7에서는 Type 3으로 구성된 2 입력, 3 입력 그리고 4 입력 PNN 구조의 학습 및 평가 동정오차를 나타낸다. 4 입력인 경우 Case 1의 경우중 가장 좋은 값(PI=0.012458, EPI=0.084911)을 보인다.

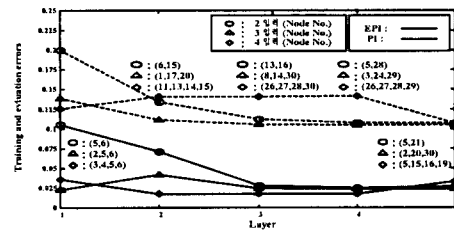


그림 5 학습 및 평가동정오차(각 층: Type 1)  
Fig. 5 Identification errors for training and evaluation (each layer: Type 1)

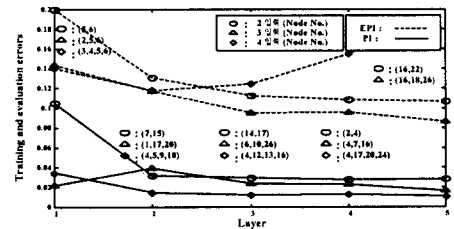


그림 6 학습 및 평가동정 오차(각 층: Type 2)  
Fig. 6 Identification errors for training and evaluation (each layer: Type 2)

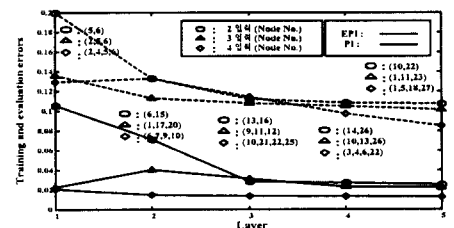


그림 7 학습 및 평가 동정 오차(각 층: Type 3)  
Fig. 7 Identification errors for training and evaluation (each layer: Type 3)

그림 8은 4 입력을 가지며 Type 3의 PNN 구조로 최적의 다항식 뉴럴네트워크 생성 과정을 각 세대(혹은 각 층)에서 선택되는 노드로 나타낸다. 점선으로 표시된 각 층의 노드는

최적의 PNN 네트워크를 생성하는 과정에서는 제외될 수도 있지만 각 세대에서 가장 우수한 평가 성능지수를 가진 노드이다.

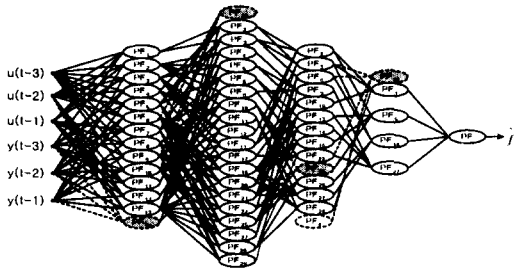


그림 8 PNN 구조(4 입력, Type 3)  
Fig. 8 PNN structure(4 inputs, Type 3)

Case 2. 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수를 가지고, 동일 입력변수 수를 가지는 구조

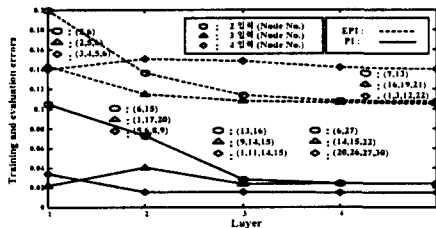


그림 9 학습 및 평가 동정오차(1층: Type 2, 2층 이상: Type 1)  
Fig. 9 Identification errors for training and evaluation(1st layer: Type 2, over 2nd layer: Type 1)

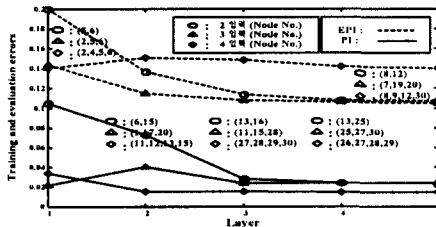


그림 10 학습 및 평가 동정오차(1층: Type 3, 2층 이상: Type 1)  
Fig. 10 Identification errors for training and evaluation(1st layer: Type 3, over 2nd layer: Type 1)

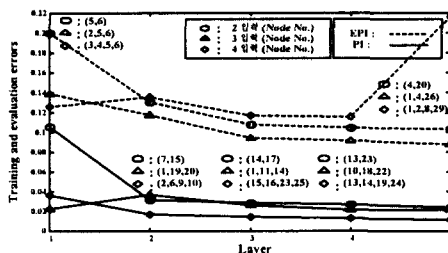


그림 11 학습 및 평가 동정오차(1층: Type 1, 2층 이상: Type 2)  
Fig. 11 Identification errors for training and evaluation(1st layer: Type 1, over 2nd layer: Type 2)

기본 PNN 구조에서 1 세대와 2 세대 이상의 부분표현식 차수를 서로 다르게 구성하거나 혹은 변형된 형태로 구성하고 입력 변수의 수는 동일한 구조의 성능지수가 그림 9-11에서 보여진다. 그림 9는 PNN 구조가 1 세대에서 Type 2, 2 세대 이상에서 Type 1으로 부분표현식 차수가 변화될 때 2, 3, 4 입력 다항식 뉴럴네트워크 각 층의 최적 결과값을 보여

주며, 그림 10은 Type 3에서 Type 1으로 부분표현식 차수가 변화될 때 2, 3, 4 입력 다항식 뉴럴네트워크 각 층의 최적 결과값이며, 그림 11은 Type 1에서 Type 2로 PNN 구조의 부분표현식 차수가 변할 때 2, 3, 4 입력 다항식 뉴럴네트워크 각 층의 최적 결과값을 보여준다. 2 입력과 3 입력 PNN 구조에서는 서로 다른 구조에 대한 PI 및 EPI 결과가 서로 비슷하지만, 2 세대이상에서의 차수가 Type 2인 2, 3, 4 입력 PNN 구조에서 전반적으로 우수한 PI 및 EPI 결과값을 얻는다. 특히 4 입력의 Type 1 -> Type 2 구조가 4 세대에서 우수한 성능결과(PI=0.013203, EPI=0.115333)를 얻었다. 3 입력 Type 1 -> Type 2의 PNN 구조에서 Case 2의 가장 우수한 성능결과(PI =0.0211 43, EPI=0.084973)를 얻었다. 여기서 각 Type 1, 2, 3은 표 2와 같고, Type a -> Type b(a, b=1, 2, 3)의 의미는, Type a는 1 세대에서의 각 노드 다항식차수의 구조를 나타내고, Type b는 2 세대이상의 각 노드 다항식차수의 구조를 나타낸다.

그림 12는 3 입력 PNN 구조로 1 세대와 2 세대이상의 부분표현식의 차수를 각각 Type 1과 Type 2로 설정하고 최적의 다항식 뉴럴네트워크 생성과정을 각 세대에서 선택되는 노드로 표시된다. 점선으로 표시된 각 층의 노드는 최적의 PNN 네트워크를 생성하는 과정에서는 제외될 수도 있지만 각 세대에서 가장 우수한 평가 성능지수를 가진 각 층의 노드이다.

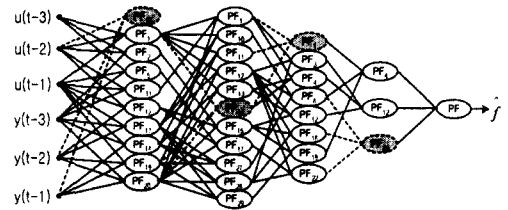


그림 12 PNN 구조(3 입력, 1층: Type 1, 2층 이상: Type 2)  
Fig. 12 PNN structure(3 inputs, 1st layer: Type 1, over 2nd layer: Type 2)

(b) 변형된 PNN 구조

Case 1. 동일 차수와 서로 다른 입력변수 수를 가지는 구조 변형된 PNN 구조에서 각 세대의 부분표현식이 동일차수와 서로 다른 입력변수의 수로 구성된 경우로 그림 13은 1 세대와 2 세대이상의 입력변수가, 3 입력에서 2 입력으로 변하거나 4 입력에서 2 입력 혹은 2 입력에서 3 입력으로 변하는 3가지 입력변수 구조의 경우에 각 세대의 차수가 Type 1으로 구성된 PNN 구조의 각 층에서의 학습 및 평가 동정오차를 보여준다. 그림 14는 3가지 입력변수 구조의 경우에 Type 2로 구성된 PNN 구조의 각 층에서의 학습 및 평가 동정오차를 보여주며, 마찬가지로 3가지 입력변수 구조의 경우에 Type 3으로 구성된 PNN 구조의 각 층에서의 결과값은 그림 15에서 보인다. PNN 구조가 Type 2일 때 다른 Type에 비하여 학습 및 평가 동정오차가 좋아지는 것을 알 수 있다. 2 -> 3 입력 Type 2의 PNN 구조에서 Case 1의 가장 우수한 성능결과(PI=0.017316, EPI=0.094628)를 얻었다. 여기서, 그림 13-15에서 a->b 입력(a, b=2,3,4)이 나타내는 것은 1세대에서 각 노드의 입력변수 수는 a가 되며, 2세대 이상에서 각 노드 다항식의 입력변수 수는 b가 된다는 것을 나타낸다.

그림 16은 1 세대와 2 세대이상의 부분표현식의 입력변수

를 각각 2 입력과 3 입력으로 설정하고 Type 2의 차수로 최적의 다항식 뉴럴네트워크 생성 과정을 각 세대(층)에서 선택되는 노드로 보여준다.

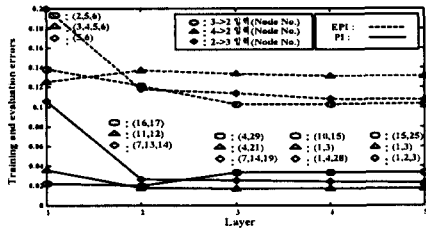


그림 13 학습 및 평가 동정오차(각 층: Type 1)  
Fig. 13 Identification errors for training and evaluation (each layer: Type 1)

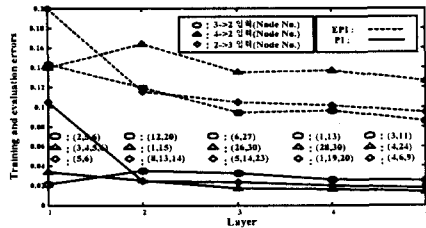


그림 14 학습 및 평가 동정오차(각 층: Type 2)  
Fig. 14 Identification errors for training and evaluation (each layer: Type 2)

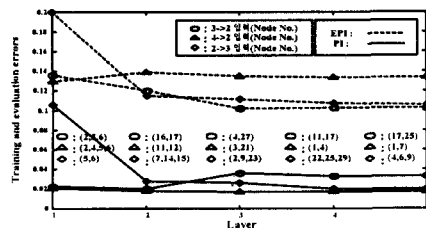


그림 15 학습 및 평가 동정오차(각 층: Type 3)  
Fig. 15 Identification errors for training and evaluation (each layer: Type 3)

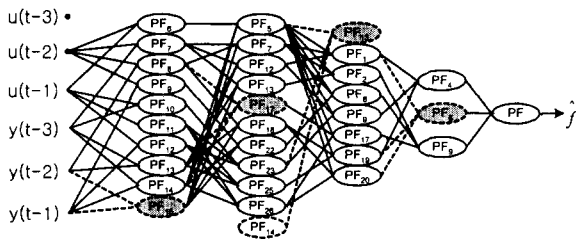


그림 16 PNN 구조(Type 2, 1층: 2 입력, 2층 이상: 3 입력)  
Fig. 16 PNN structure(Type 2, 1st layer: 2 inputs, over 2nd layer: 3 inputs)

**Case 2.** 서로 다른 차수 및 변형된 형태의 차수를 가지고, 서로 다른 입력변수 수를 가지는 구조

변형된 PNN 구조에서 1 세대와 2 세대 이상의 부분표현식이 각각 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수로 구성되며 또한 서로 다른 입력변수의 수를 가지는 경우이다. 그림 17은 각 세대(층)에서 입력변수가 3 입력에서 2 입력, 4 입력에서 2 입력 그리고 2 입력에서 3 입력으로 변할 때 1 세대와 2 세대 이상에서 각각 Type 2와 Type 1으로 구성된 PNN 구조 각 층에서 가장 우수한 학습 및 평가지수를 보인다. 그림 18

에서는 그림 17과 같이 각 층에서 서로 다른 입력변수 수를 가질 때 1세대와 2세대 이상에서 각각 Type 3과 Type 1로 구성된 PNN 구조의 학습 및 평가지수를 보이고, 그림 19에서는 부분표현식의 차수가 1 세대와 2 세대 이상에서 각각 Type 1과 Type 2로 변하면서 입력 변수의 수가 3 입력에서 2 입력, 4 입력에서 2 입력 그리고 2 입력에서 3입력으로 변할 때 각 층에서 가장 우수한 학습 및 평가 동정오차를 보인다. 학습결과와 테스트결과로 부분표현식이 Type 1에서 Type 2로 변하는 경우의 PNN 구조가 다른 Type으로 구성된 구조보다 전반적으로 우수하며 Case 2에서 가장 좋은 학습 및 평가 동정오차(PI=0.01691, EPI=0.1012)를 가진다.

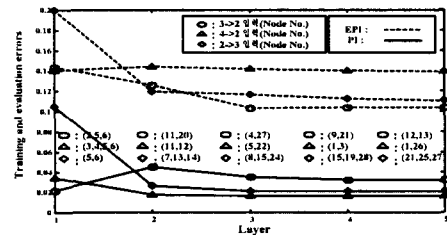


그림 17 학습 및 평가 동정오차(1 층: Type 2, 2 층 이상: Type 1)  
Fig. 17 Identification errors for training and evaluation (1st layer: Type 2, over 2nd layer: Type 1)

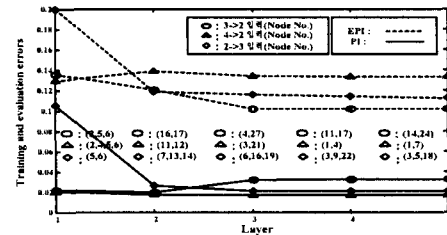


그림 18 학습 및 평가 동정오차(1 층: Type 3, 2 층 이상: Type 1)  
Fig. 18 Identification errors for training and evaluation (1st layer: Type 3, over 2nd layer: Type 1)

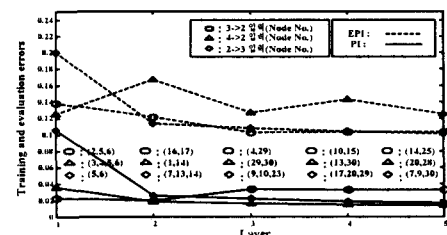


그림 19 학습 및 평가 동정오차(1 층: Type 1, 2 층 이상: Type 2)  
Fig. 19 Identification errors for training and evaluation (1st layer: Type 1, over 2nd layer: Type 2)

그림 20은 1 세대와 2 세대 이상의 부분표현식의 입력변수 수를 각각 2 입력과 3 입력으로 설정하고 Type 1에서 Type 2로 차수가 바뀌는 PNN 구조로 최적의 다항식 뉴럴네트워크 생성 과정을 각 세대(층)에서 선택되는 노드로 보여준다.

표 3은 기존의 모델링 방법들과 제안된 모델링 방법의 성능지수를 보여준다. 표에서 알 수 있듯이 제안된 모델은 시스템의 비선형성, 입력변수에 따른 복잡성 등 데이터의 특징을 모델에 반영하여 모델구조 및 입력변수의 수 그리고 시스템 방정식의 차수를 선택하여 수 세대를 거친 최적의 모델을 선정하므로 모델의 정밀도가 높다. 그러므로 기존의 모델들보다 훨씬 좋은 학습 성능결과를 얻었다. 본 논문에서 제안한



PNN 구조는 기존 모델들의 학습 성능오차보다 우수할 뿐만 아니라, 테스트 데이터를 고려한 평가성능 즉 예측성능 면에서도 우수한 특성을 보임을 알 수 있다.

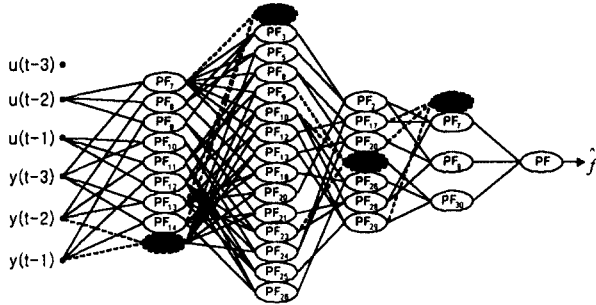


그림 20 PNN 구조(1층: 2 입력 Type 1, 2층 이상: 3 입력 Type 2)  
 Fig. 20 PNN structure(1st layer: 2 inputs Type 1, over 2nd layer: 3 inputs Type 2)

표 3 기존 모델방법과의 동정 오차비교  
 Table 3 Comparison of identification error with previous modeling methods

Model		Performance Index				
		PI	PI	EPI		
Tong's model[7]		0.469				
Sugeno's model[8]		0.355				
Xu's model[9]		0.328				
Pedrycz's model[10]		0.320				
Kim's model[11]		0.108				
Oh's model I [12]		0.128	0.021	0.332		
Oh's model II [13][14]		0.123	0.020	0.271		
퍼지GMDH[15]		0.062				
Park's model[16]		0.055				
Our Model	Structure	Type	Scheme	PI	PI	EPI
	구조 1	기본 PNN	Case 1	0.057	0.021	0.110
			Case 2	0.057	0.024	0.112
		변형된 PNN	Case 1	0.046	0.015	0.103
			Case 2	0.045	0.016	0.111
	구조 2	기본 PNN	Case 1	0.029	0.012	0.085
			Case 2	0.027	0.021	0.085
		변형된 PNN	Case 1	0.035	0.017	0.095
			Case 2	0.039	0.017	0.101

제안된 모델에서 구조1의 기본 PNN과 변형된 PNN의 각각 Case 1과 Case 2는 5세대까지의 모델링 결과로 기본 PNN Case 1은 2 입력 Type 2의 학습 및 평가 동정오차이며, 학습 동정오차는 3입력의 Type 2 모델의 결과이다. Case 2는 1층과 2층 이상에서 Type 3과 Type 2로 구성된 2 입력 PNN 구조의 학습오차와 학습 및 평가 동정오차이다. 변형된 PNN Case 1은 1층과 2층 이상에서 2 입력과 3 입력을 가지며 Type 2로 구성된 PNN 구조의 학습 동정오차와 학습 및 평가 동정오차이며 Case 2는 1층과 2층 이상에서 2입력과 3입력을 가지며 Type 1과 Type 2로 구성된 PNN 구조의 학습 동정오차와 학습 및 평가 동정오차를 보인다.

4.2 pH 중화 공정

앞 절에서 제안된 다항식 뉴럴네트워크 구조의 우수성을

보이기 위해 화학공정이나 오·폐수처리, 생물공학 등 많은 분야에서 널리 사용되는 pH중화 공정[20]에 적용하여 모델링을 행한다. pH중화 공정은 비선형성과 불확실성이 강하고, 중화점 근처에서 매우 민감하게 반응하여 제어가 매우 어려운 것으로 알려져 있다[21]. pH는 물에 용해된 산성과 염기성의 농도를 나타내는 것이다. 회석을 위해 수치적으로 수소이온[H+]농도의 식으로 정의되었다. pH는 식(11)로 정의된다.

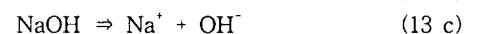
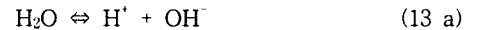
$$pH = -\log_{10}[H^+] \tag{11}$$

pH공정은 유입물질과 반응물질, 그리고 혼합용기의 선택에서 이들의 변동에 매우 민감한 경향이 있다. CSTR (continuously stirred tank reactor)[22]에서 pH공정의 주요특성을 설명하는 잘 알려진 수학적 동적방정식이 있다. 이 모델은 구성물질의 균형과 화학적인 평형상태와 같은 원칙에 기본을 두고 발전되었다. 본 논문에서는 출력 pH에 관하여 다룬다. CSTR은 완전혼합이라는 가정하에 모델링은 수행된다. pH공정은 두 개의 유입량을 가진다고 가정한다. 전체크기가  $v(t)$ 인 Tank안으로  $F_a, F_b$ 가 흘러 들어간다.  $F_a$ 는 농도가  $C_1$ 인 산의 흐름율이고,  $F_b$ 는 농도가  $C_2$ 인 염기의 흐름율이다. CSTR의 동적 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{Vdw_a}{dt} = F_a C_a - (F_a + F_b) W_a \tag{12 a}$$

$$\frac{Vdw_b}{dt} = F_b C_b - (F_a + F_b) W_b \tag{12 b}$$

식 (12)는 입력의 흐름율  $F_a, F_b$ 에 의하여 시간에 따른  $w_a, w_b$ 의 농도변화를 보여준다. 출력으로 pH를 얻기 위해,  $w_a, w_b$  그리고 pH값 사이의 관계를 알아야 한다. 이 관계는 적정곡선 혹은 특성곡선으로 알려진 비선형 대수방정식에 의하여 묘사된다. 반응메카니즘은 다음과 같다.



전기적 중성조건에 따라 이온의 전하합은 용액 내에서 0이 되어야한다.

$$[Na^+] + [H^+] = [OH^-] + [AC^-] \tag{14}$$

[X]: X 이온의 농도

물과 아세트산의 평형관계는 다음과 같다.

$$K_a = [AC^-][H^+] / [HAC] \tag{15a}$$

$$K_w = [H^+][OH^-] \tag{15b}$$

$w_a = [HAC] + [AC^-], w_b = [Na^+]$ 을  $K_a, K_w$ 에 대하여 대입하고 정리하면 다음과 같다.

$$[H^+]^3 + [H^+]^2(K_a + w_b) + [H^+](K_a(w_b - w_a) - K_w) - K_a K_w = 0 \tag{16}$$

여기서 식 (11)을 이용하면, 식 (16)은 다음과 같이 식 (17)이 된다.

$$w_b + 10^{-pH} - 10^{pH - pK_a} - \frac{w_a}{1 + 10^{pK_a - pH}} = 0 \tag{17}$$

여기서,  $pK_a = -\log_{10} K_a$

$w_a, w_b$  그리고 pH사이의 관계는 식 (17)에 의하여 정의되며, 그림 21은 염기의 흐름율에 의하여 pH가 산정되는 것을 보여준다.

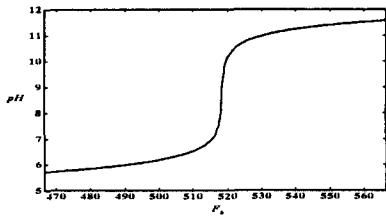


그림 21 pH 중화 적정곡선  
Fig. 21 Titration curve for pH neutralization

본 논문에서는 식 (12 a), (12 b), (17)에 의하여 전개된 약산 - 강염기 중화공정에 대하여 모델링을 수행한다. 약한 입력물질이 강한 반응 물질에 의하여 중화되는 것으로 산으로는 아세트산(HAC), 염기로는 수산화나트륨(NaOH)을 사용한 모델을 이용한다. “약”, “강”은 수용액에서 이온해리의 정도를 의미한다. 데이터 쌍( $F_b, Y_{pH}$ )은 표 4의 변수들과 실질적인 공정을 통하여 얻어진다. 본 논문은 산의 흐름을  $F_a$ 를 81(l/min)로 고정하고 변화되는 염기의 흐름을  $F_b$ 와 pH값을 입력변수와 출력변수로 정의하였다. 식 (18)로 얻어진  $F_b$ 를 식 (19)와 같은 Newton-Raphson Method를 이용하여 구한 출력값 pH로 데이터 쌍을 구성하여 PNN 구조의 네트워크를 형성하는 입력력 데이터로 사용하였다.

$$F_b = 515 + 51.5 \sin(2\pi t/25) \quad \text{for } t \leq 150 \quad (18)$$

$$F_b = 515 + 25.75 \sin(2\pi t/25) + 25.75 \sin(2\pi t/10) \quad \text{for } t > 150$$

$$pH_{i+1} = pH_i - \frac{f(pH_i)}{f'(pH_i)} \quad (19)$$

PNN 구조의 입력은 공정의 과거입력과 출력값으로 구성되었다.

$$\hat{y}_{pH}(t) = \psi(F_b(t-1), y_{pH}(t-1)) \quad (20)$$

여기서  $\hat{y}_{pH}(t)$ 는 PNN 구조의 출력값을,  $y_{pH}$ 는 실제공정의 출력값을 나타낸다. pH 공정을 위한 변수들과 이에 대한 초기값을 표 4에서 보여준다.

표 4 pH공정을 위한 변수들과 초기값

Table 4 Parameters and initial values for pH process

변수	의미	초기값	단위
V	탱크의 부피	1000	l
$F_a$	산의 흐름율	81	l/min
$F_b$	염기의 흐름율	515	l/min
$C_a$	$F_a$ 의 산 농도	0.32	moles/l
$C_b$	$F_b$ 의 염기 농도	0.05	moles/l
$K_a$	산의 해리농도	$1.76 \times 10^{-5}$	
$K_w$	물의 해리농도	$1.0 \times 10^{-14}$	
$W_a(0)$	산 성분의 농도	0.0435	moles/l
$W_b(0)$	염기 성분의 농도	0.0432	moles/l

화학공정이나 수처리, 생물공학등에서 많이 사용하는 pH 중화공정 데이터를 이용하여 입력력 데이터인 염기의 흐름율과 중화된 pH에 대하여 모델링을 행한다. 입력변수는  $F_b(t-3), F_b(t-2), F_b(t-1), Y_{pH}(t-3), Y_{pH}(t-2), Y_{pH}(t-1)$ 이고 출력변수는  $Y_{pH}(t)$ 이다. 500개의 입력력 데이터 쌍이 PNN 네트워크를 구성하는데 사용되었다. PNN 구조는 앞 절에서 제안된 가스로 공정과 같은 기본 PNN 구조와 변형된 PNN 구

조로 이루어졌다.

(a) 기본 PNN 구조

Case 1. 동일차수와 동일 입력변수 수를 가지는 구조

기본 PNN 구조에서 각 세대의 부분표현식이 동일차수와 동일 입력변수 수로 구성된 경우로 그림 22는 Type 2로 구성된 2 입력, 3 입력 그리고 4 입력으로 구성된 PNN 구조의 학습 동정오차를 보인다. 학습 결과는 4 입력에서 오차 감소 속도도 빠르고 가장 우수한 결과( 0.0015 )를 나타낸다.

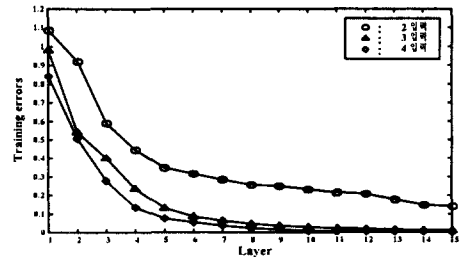


그림 22 학습 동정오차(각 층: Type 2)  
Fig. 22 Identification errors for training(each layer: Type 2)

Case 2. 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수를 가지고, 동일 입력변수 수를 가지는 구조

기본 PNN 구조에서 1 세대와 2 세대 이상의 부분표현식의 차수를 서로 다르게 구성하거나 혹은 변형된 형태로 구성하고 입력 변수의 수는 동일한 구조의 성능지수가 아래의 그림 23에서 보여진다. 그림 23은 1 세대에서 Type 1, 2 세대 이상에서는 Type 2로 차수가 변화될 때 2 입력, 3 입력, 4 입력의 결과값을 보여준다. Case 1에서와 마찬가지로 4 입력의 PNN 구조가 오차감속속도도 빠르고 성능이 우수하며 가장 좋은 결과값( 0.0052 )을 가진다.

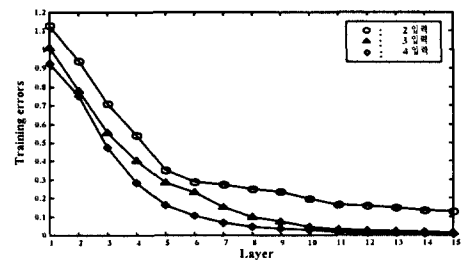


그림 23 학습 동정오차(1층: Type 1, 2층 이상: Type 2)  
Fig. 23 Identification errors for training  
(1st layer: Type 1, over 2nd layer: Type 2)

(b) 변형된 PNN 구조

Case 1. 동일 차수와 서로 다른 입력변수 수를 가지는 경우

변형된 PNN 구조에서 각 세대의 부분표현식이 동일차수와 서로 다른 입력변수 수로 구성된 경우로 그림 24는 1 세대와 2 세대 이상의 입력변수 수가, 2 입력에서 4 입력으로 변하거나 3 입력에서 4 입력 혹은 4 입력에서 3 입력으로 변하면서 각 세대의 차수가 Type 2로 구성된 PNN 구조의 학습 동정오차를 보여준다. 그림 24-25에서  $a > b$  입력( $a, b=2,3,4$ )이 나타내는 것은 1세대에서 각 노드의 입력 변수 수가  $a$ 가 되며, 2세대 이상에서 각 노드 다항식의 입력 변수 수는  $b$ 가 된다는 것을 나타낸다. 3 입력에서 4 입력으로 변하는 구조에서 오차감속속도도 빠르고 성능지수가 좋아지는 것을 알

수 있다. 이때 가장 좋은 결과값(PI=0.0039)을 가진다.

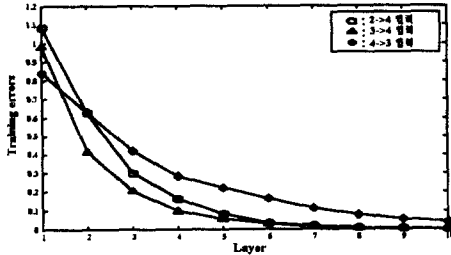


그림 24 학습 동정오차(각 층: Type 2)  
Fig. 24 Identification errors for training(each layer: Type 2)

Case 2. 서로 다른 차수 및 변형된 형태의 차수를 가지고, 서로 다른 입력변수 수를 가지는 구조

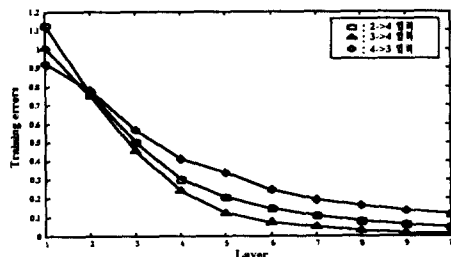


그림 25 학습 동정오차(1 층: Type 1, 2 층 이상: Type 2)  
Fig. 25 Identification errors for training  
(1st layer: Type 1, over 2nd layer: Type 2)

변형된 PNN 구조에서 1 세대와 2 세대 이상의 부분표현식이 서로 다른 차수 혹은 변형된 형태의 차수로 구성되고 서로 다른 입력변수 수를 가지는 경우로 그림 25는 각 세대에서의 입력 변수 수로 2 입력에서 4 입력, 3 입력에서 4 입력 그리고 4 입력에서 3 입력으로 변할 때 1 세대와 2 세대 이상에서 Type 1과 Type 2로 구성된 PNN 구조의 학습 동정 오차를 나타낸 것이다. 1 세대에서는 4 입력에서 3 입력으로 변하는 네트워크 구조의 결과값이 좋으나, 전반적으로 3 입력에서 4 입력으로 변하는 PNN 구조가 우수한 성능지수를 보이며 가장 좋은 결과값 (0.0124)을 가진다.

표 5 기존 모델방법과의 오차비교  
Table 5 Comparison identification error with previous modeling methods

Model		Performance Index	
Nie's model[23]	USOCPN	0.230	
	SSOCPN	0.012	
Our model	기본 PNN	Case 1	0.0015
		Case 2	0.0052
	변형된 PNN	Case 1	0.0039
		Case 2	0.0124

표 5는 기존의 모델링 방법과 제안된 모델링 방법의 성능 지수를 보여준다. Nie's model[23]중 USOCPN은 Counter-Propagation Network(CPN)에 기반을 둔 Unsupervised Self-Organizing CPN 알고리즘이며 31개의 rule을 사용하여 0.230을 얻었고, SSOCPN은 Supervised Self - Organizing CPN 알고리즘으로 34개의 rule을 사용하여 0.012를 얻었다. 제안된 모델은 구조 2를 기반으로 기본 PNN은 15층까지 최

적 모델추정 과정을 수행하여 얻은 결과이며, 변형된 PNN은 10층까지 최적 모델을 추정한 결과를 표 5에 나타내었다.

### 5. 결론

본 논문에서는 복잡한 비선형 시스템의 최적모델동정을 위하여 PNN(Polynomial Neural Network)구조의 설계절차와 관련된 새로운 방법론을 제안하였다. 제안된 PNN 구조의 특징은 복잡한 비선형계의 근사 동정과 예측이 가능하고, 입력 변수의 선택방법, 다항식 차수와 입력변수 수에 의한 부분표현식의 표현방법, 각 네트워크 구조의 선택방법 등에 따른 최적구조 설계를 통하여 주어진 시스템 특성에 맞는 구조로 적응능력을 향상시킨 모델 구조를 생성할 수 있다. 그 구조는 기존의 뉴럴네트워크 구조에서와 같이 각 층의 노드가 고정되지 않고 생성될 수 있다. 제안된 PNN 구조의 각 노드는 1차, 2차, 3차 다항식과 같은 여러 가지 형태의 고계다항식을 사용하였고, 노드의 입력 수는 다항식에서 사용되는 입력변수 수에 의존하였다. 이런 다양성에 의하여 여러 가지 고계 다변수 구조를 만들 수 있기에 PNN의 다층구조에 의한 모델의 표현능력과 적응능력으로 부터 복잡한 다변수와 비선형계의 시스템에 대해서도 우수한 동정 및 예측능력이 가능하였다. 또한 제안된 고계 다변수 PNN구조의 근사화와 일반화 사이의 상호 연계를 통한 체계적이고 상세한 설계절차에 의하여 최적화 향상을 꾀하였음은 물론, 우수한 예측성능향상에 따른 실 공정 적용 가능성 및 용이함을 보였다.

### 감사의 글

이 논문은 1998년도 한국학술진흥재단의 연구비에 의하여 지원되었음(KRF-98-001-01048).

### 참 고 문 헌

- [1] A. G. Ivahnenko, "The group method of data handling; a rival of method of stochastic approximation", *Soviet Automatic Control*, 1-3, pp. 43-55, 1968.
- [2] Hideo Tanaka, Katsunori and Hisao Ishibuchi, "GMDH by If-Then Rules with Certainty Factors", *Fifth IFSA World Conference*, pp. 802-805, 1993.
- [3] I. Hayashi and H. Tanaka, "The Fuzzy GMDH algorithm by possibility models and its application", *Fuzzy Sets and Systems*, 36, pp. 245-258, 1990.
- [4] H. R. Madala and A. G. Ivakhnenko, *Inductive Learning Algorithms for Complex Systems Modeling*, CRC Press, London, 1994.
- [5] G. E. P. Box and F. M. Jenkins, *Time Series Analysis : Forecasting and Control*, 2nd ed. Holden-day, 1976.
- [6] A. G. Ivakhnenko, G. A. Ivakhnenko, and J. A. Muller, "self-organization of Neural Networks with Active

Neurons", *published in pattern Recognition and Image Anlysis*, Vol. 4, No. 2, pp. 185-196.

[7] R. M. Tong, "The evaluation of fuzzy models derived from experimental data", *Fuzzy Sets and Systems*, Vol. 13, pp. 1-12, 1980.

[8] M. Sugeno and T. Yasukawa, "Linguistic Modeling Based on Numerical Data", *IFSA'91 Brussels, Computer, Management & Systems Science*, pp. 264-267, 1991

[9] C. W. Xu, and Y. Zailu, "Fuzzy model identification self-learning for dynamic system," *IEEE Trans on Systems, Man, Cybernetics*, Vol. SMC-17, No. 4, pp. 683-689, 1987.

[10] W. Pedrycz, "An identification algorithm in fuzzy relational system", *Fuzzy Sets Syst*, Vol. 13, pp. 153-167, 1984.

[11] S. S. Kim, "A Neuro-fuzzy Approach to Integration and Control of Industrial Processes: Part I", *한국 퍼지 및 지능 시스템 학회 논문집 제 8권 제 6호*, pp. 58-69, 1998년 11월.

[12] S. K. Oh, B. J. Park, C. S. Park, "적용퍼지- 뉴럴네트 워크를 이용한 비선형 공정의 온-라인 모델링", *The Transaction of The Korean Institute of Electrical Engineers(KIEE)*, Vol. 48, No. 10, Oct., 1999.

[13] C. S. Park, S. K. Oh, and W. Pedrycz, "Fuzzy Identification by means of Auto - Tuning Algorithm and Weighting Factor", *The Third Asian Fuzzy Systems Symposium(AFSS)*, pp. 701-706, 1998.

[14] S. K. Oh, and W. Pedrycz, "Identification of Fuzzy Systems by means of an Auto-Tuning Algorithm and Its Application to Nonlinear Systems", *Fuzzy Sets and Syst*, 2000.(To appear)

[15] 오성권, 노석범, 황형수, "퍼지 GMDH 모델과 하수처리공정에서의 응용", *한국 퍼지 및 지능 시스템 학회 추계학술대회 논문집 제 5권 제 2호*, pp. 153-158, 1995년 11월.

[16] E. T. Kim, M. K. Park, S. H. Ji, M. Park, "A New Approach to Fuzzy Modeling", *IEEE Trans. on Fuzzy Systems*, Vol. 5, No. 3, pp. 328-337, 1997.

[17] 김동원, 박병준, 오성권, 김현기, "확장된 GMDH 알고리즘에 의한 비선형 시스템의 동정", *대한 전기학회 추계학술대회 논문집 B*, pp. 827-829, 1999년 11월.

[18] 林 勳, "GMDH", *日本 ファジィ 學會誌*, Vol.7, No.2, pp.270-274, 1995.

[19] 横出 勝則, 田中 英夫, "GMDH의 多層構造의 用いた 確信度付き의 ファジィ if-then 룰", *日本 ファジィ 學會誌*, Vol. 7, No. 1, pp. 131-141, 1995.

[20] F. G. Shinsky, "*pH and pION Control in Process and Waste Streams*", (Wiley, New York, 1973)

[21] R. C. Hall, D. E. Seberg, "Modeling and Self-Tuning Control of a Multivariable pH Neutralization Process", *Proc. ACC*, pp. 1822-1827, 1989.

[22] T. J. McAvoy, E. Hsu and S. Lowenthal, "Dynamics

of pH in controlled stirred tank reactor", *Ind. Engrg. Chem. Process Des. Develop.* 11(1972), pp. 68-70.

[23] J. Nie, A. P. Loh, C. C. Hang, "Modeling pH neutralization processes using fuzzy-neural approaches", *Fuzzy Sets and Systems*, pp. 5-22, 78 (1996)

[24] R. S. Sang, S. K. Oh, T. C. Ahn and K. Hur, "A Fuzzy Model on the PNN Structure", *The Third Asian Fuzzy Systems Symposium(AFSS)*, pp. 83-86, June, 18-21, 1998.

[25] 오성권, *퍼지모델 및 제어이론과 프로그램*, 기다리출판사, 1999년 3월.

## 저 자 소 개



오 성 권 (吳 聖 權)

1957년 2월 13일생. 1981년 연세대 전기공학과 졸업. 1983-89년 금성산전연구소(선임연구원). 1993년 연세대 대학원 전기공학과 졸업(공학박). 1996-97 캐나다 Manitoba 대학 전기 및 컴퓨터공학과 Post-Doc. 1993-현재 원광대 제어계측공학과 부교수. 주관심분야 : 시스템자동화, 퍼지이론 및 신경회로망 응용, 지능형 모델링 및 제어 등  
Tel : 0653-850-6342, Fax : 0653-853-2196  
E-mail : ohsk@wonms.wonkwang.ac.kr



김 동 원 (金 東 源)

1974년 3월 13일 생. 2000년 원광대 제어계측공학과 졸업. 현재 동 대학원 제어계측공학과 석사과정. 주관심분야 : 퍼지이론, 신경망이론, 뉴로-퍼지등의 지능시스템과 제어  
Tel : 0653-850-6342, Fax : 0653-853-2196  
E-mail : upground@gaebok.wonkwang.ac.kr



박 병 준 (朴 炳 俊)

1972년 12월 1일 생. 1998년 원광대 제어계측공학과 졸업. 2000년 동 대학원 졸업(석사). 2000~현재 동 대학원 제어계측공학과 박사과정. 주관심 분야 : 시스템자동화, 퍼지이론 및 신경회로망 응용, 지능형 모델링 및 제어 등

Tel : 0653-850-6342, Fax : 0653-853-2196  
E-mail : lcap@autosys.wonkwang.ac.kr