제조공정에서 제품품질에 영향을 미치는 변수의 탐색 및 제품품질 회귀모델

Studying the variables that affect product quality and Creating Regression model on the Manufacturing process

고가연,국명준,김지호,김하영,성현우

중앙대학교 CUAI DA 2 팀

0. 초록

DACON 의 **<스마트 공장 제품 품질 상태분류>**에서 제공되는 비식별화된 공정변수 데이터를 기반으로 제품 품질을 예측하는 ML 모델을 만들기 위한 탐색적 데이터분석(EDA)를 진행한다. 해당 과정에서는 각 제품군별로 제조되는 Line 을 분석하여 공정 process 를 나타내는 비식별화된 변수인 X_featur 에 집중하여 결측치를 최대한 정확하게 채우는 EDA 를 진행했다. 또한 VIF, PLS-VIP 및 피어슨 상관계수 등을 활용하여 공정변수들의 다중공선성을 개선함과 동시에 2800 여개에 달하는 설비변수들중 품질에 결정적인 영향을 주는 혐의설비를 찾아내고자 하였고 최종적으로 분류 (Classification) 모델 중 XGBoost 및 GradientBoosting 모델을 적용하여 완성한 머신러닝 모델을 DACON 에 제출하였다.

1. 서론

최근 코로나 펜데믹과 AI 기술의 발전으로 제조운영과 공급망에서의 디지털 혁신이 중요한 화두로 떠오르고 있다. 대표적으로 스마트 공장을 통한 공정 데이터에서의 인사이트 발견 및 해석의 중요성이 강조되고 있으며 특히 스마트폰 등 복잡한 정밀기기의 경우에는 제조공정에서 사소한 불량설비 및 요인을 찾아 내는 것 만으로 전반적인 수율개선 및 수익 증가에 큰 영향을 줄 수 있다. 연구의 2 장에서는 LG 사에서 제공한 각종 공정변수 및 품질수준에 관한 데이터를 EDA 로 분석함으로써 데이터의 특성을 파악하고 knn 방식을 통해 결측치를 보간하며 3 장에서는 머신러닝 모델을 통하여 해당 데이터에서 공정변수에 따른 품질을 예측한다. 4 장에서는 해당 데이터세트의 다중 공선성을 제거하고 변수를 대폭 축소한 모델을 추가 예측에 활용하며 5 장에서는 2~4 장에서 소개된 모델의 예측 결과를 DACON 의 PRIVATE SCORE 기준으로 비교한다. 마지막 6 장에서는 유의설비의 후보 변수를 파악하여 공정개선에 도움이 되고자 한다.

2. 탐색적 데이터 분석(EDA)

2.1 이상 피처 제거

주어진 Dataset 의 핵심 feature 는 'LINE', 'PRODUCT_CODE', 'X_1~X_2870'이다.
매우 많은 피처가 있는 만큼, 최대한 유효한 데이터를 우선적으로 선별하는 것을 우선으로 수행하였다. 각 피처에서 유효 데이터가 40 개 미만인 피처를 제거했으며, 해당 피처는 총 데이터의 10%를 차지했다. 또한 분산이 1 인 피처도 Classification 모델에 도움이 되지 않으니 372 개의 피처를 제거했다.
이렇게 보정한 데이터의 피처는 trainset 에서 2337 개, testset 에서는 2335 개였다.

.

2.2 결측치관련 통계량 파악

trainset 에서는 2 개의 PRODUCT_CODE 인 A_31 과 T_31 이 있었으며, A_31 제품은 T010305, T010306, T050304, T050307 4 개의 LINE 에서만, T_31 제품은 T100304, T100306 2 개의 LINE 에서만 제조된다는 것을 확인 했다. 결측치보간 측면에서 비식별화된 변수인 X_feature 는 공정 Process 를 나타내며 이들의 배열이 공정 순서를 나타내는 것은 아니지만, 연관이 없는 값들끼리 이웃한 관계는 아니라는 점은 중요한 정보이다. 따라서 제품별로 특정 LINE 을 거쳐 공정이 이루어지는데, LINE 별로 모든 X_feature 를 거치는 것이 아니며 특정 스크림에서만 공정이 이루어진다고 가정을 했다. 즉 각 피처별로 분포하는 결측치가 단순한 Missing 값이 아닌 공정이 이루어지지 않는다는 의미일 수 도 있다는 의미이다.
이를 확인하기 위해 LINE 별로 진행되는 공정 X_feature 들을 결측치의 분포에 따라 추정하였다. (표 1)은 'LINE' 피처별로 그룹화 하였을때 X_feature 중 그 값이 아예 존재하지 않는 것의 개수를 세어 나타낸 도표이다.

LINE	Missing Value
T010305	1577
T010306	1579
T050304	641
T050307	643
T100304	1783
T100306	1784

(표 1) 값이 아예 존재하지 않는 X_피처의 개수

LINE1	LINE2	결측치 분포 차이
T010305	T010306	14
T050304	T050307	3
T100304	T100306	369

(표 2) 각 LINE 별 결측치 분포의 차이가 나는 피처의 개수

표에서 확인할 수 있는 것처럼 A_31 에 관여하는 LINE 인 "T010305" &"T010306" 과 "T050304" & "T050307", T_31 에 관여하는 LINE 인 "T100304" & "T100306"는 각각 X_feature 가 결측되어 있는 개수가 매우 비슷하다.
또한 이를 통해 각 LINE 별로 그룹화하여 결측치분포 차이를 확인한 결과 (표 2)는 결측치 분포가 매우 유사한 양상을 보인다는 것이다.
이를 통해 앞서 진행한 가정인 "제품별로 특정 LINE 을 거쳐 공정이 이루어지는데, LINE 별로 모든 X_feature 를 거치는 것이 아니며 특정 스크림에서만 공정이 이루어 진다"를 증명 할 수 있다. 다만, Missing Value 의 개수가 비슷하지만 일부 차이가 존재하며 각 그룹별, 총 3 개의 그룹에 대해서 다시 한 번 그룹화하여 최종적으로 결측치를 채우는 과정을 진행한다.

2.3 결측치 채우기

결측치를 채우는 핵심은 2 가지이다. 첫번째는 LINE 별로 line_groups 라는 3 개의 그룹을 형성해 각각의 LINE 별로 존재하는 피처끼리 결측치를 채운다. 이때 KNN Imputer 알고리즘을 사용한다. 이는 NA 값 가장 가까운 주변 k 개의 평균을 NA 값으로 대체하는 알고리즘이다. X_feature 의 순서에 의미가 없는 것이 아니기 때문에, 상관관계가 높은 피처 들 사이에서 KNN Imputer 를 적용한다면 결측치를 효과적으로 채울 수 있다. LINE 별로 그룹화된 피처들 중 서로간의 상관계수가 0.6 이상인 피처들을 필터링하여 해당 피처들의 결측치를 KNN imputer(n_neighbors=5)로 채운다. 그리고, 앞서 말한 것과 같이 나머지 피처들의 결측치들은 해당 스크림에서 공정이 진행되지 않았음으로 판단하고, 모두 0 으로 채우면서 최종적으로 EDA 를 마무리한다.

3. ML 모델

DACON 에 제출하기 위한 머신러닝 모델은 Classification 중 XGBoost 를 적용한다. 해당 모델은 트리 기반 학습이므로 일반적으로 별도의 정규화, 피처 스케일링이 필요없기에 수치형 데이터간 차이가 심한 본 데이터 세트에서는 효율적일 것으로 예상된다. 본 EDA 방식은 다중 피처들에 대해서 모두 고려한 학습 방식이며 2,000 개가 넘는 피처를 학습하는 것은 과적합(Overfitting) 가능성이 높아진다. 따라서 이후에는 다중공선성을 이용한 데이터 선별 과정 후 동일 ML 모델을 적용하며 학습을 수행하는 모델과 대조하는 연구를 진행한다.

4. 다중공선성 개선

4.1 Background

4.1.1 VIF

다중 공선성은 하나의 피쳐가 다른 피쳐의 조합으로 표현될 수 있는 경우를 의미한다. 머신러닝 모델을 사용할 때 사용자는 피처 간에는 서로 독립인 상태라고 예상한다. 반면 상관관계가 존재하는 피처로 회귀모델을 만들면 그 피처에 과대적합된 결과를 예측하고, 이는 예측 결과의 부정확성을 높인다. 따라서, 많은 연구자들은 다중 공선성을 줄이기 위해 주로 VIF 알고리즘을 사용하여 피처들간의 상관관계를 높이는 피처를 찾아 제거하는 방법을 사용한다.

$$\mathrm{VIF} = \frac{1}{1-R_i^2} \qquad (1)$$

식 (1)에서 R_i 값은 독립변수 X_i 를 다른 변수로 선형 회귀하는 성능을 의미한다. 즉, X_i 와 다른 변수 간의 상관관계가 높다면 R_i 값은 높아지고, 결과적으로 VIF 의 값도 커지게 된다. 단순하게 목표 값과 상관관계가 높은 변수만을 선택한다면 그 변수끼리 VIF 값이 클 가능성이 높으므로 이 값이 일정 수준 이상 크다면 그 변수는 제외하는 것이 바람직하다.

4.1.2 PLS-VIP

Partial least squares (PLS) 회귀는 변수 추출법의 하나로, 다중 선형 회귀 모델을 통해 독립변수인 X 와 종속변수인 Y 의 상관관계를 반영하여 회귀 모형을 추정하는 방법이다. 독립변수와 종속을 변수를 잘 설명할 수 있는 새로운 잠재변수를 도출하여 의미 있는 분석을 가능하게 한다. 전통적 다중 회귀와는 다르게

다중공선성, 노이즈를 갖는 대량의 독립변수 데이터도 분석이 가능하다.Variable importance in projection (VIP) 값은 독립변수 X 가 PLS 모델에 미치는 영향을 정리한 것으로, 잠재변수가 종속변수인 Y 의 분산에 미치는 영향을 고려한 PLS 가중치의 제곱의 가중합으로 계산할 수 있다. VIP score 는 종속변수 Y 의 분산에 영향력을 미치는 독립변수의 중요도를 평가하는 지표로 사용할 수 있다.

4.2 다중공선성 개선 및 피처 줄이기

2 장과 3 장에서 학습한 데이터세트로 품질 예측이 가능하지만 2300 여개의 X 피처를 사용한다는 점이 실제 상황에서 설비의 점검을 부담스럽게 만든다고 생각하여 해당 피처 중 품질을 나타내는 Y_CLASS 피처와 피어슨 상관계수가 0.6 이상인 176 개 X 피처 를 선별하여 다중공선성 개선을 진행하였다.

$$\text{Condition number} = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}} \qquad (2)$$

한편 식 (2)는 최대 Eigen Value 와 최소 Eigen Value 의 비를 나타내는 Condition number 로 해당 값이 클수록 높은 다중공선성을 지닌 모형일 가능성이 높고 회귀에서 과적합을 유발할 수 있다. 따라서 VIF 를 적용하기 전에 X 피처들을 정규화하여 condition number 를 줄여 다중공선성을 1 차로 개선시킨다. 이후 해당 데이터세트를 Kmeans clustering 을 통하여 176 개의 X 피처를 4 개의 집합으로 구분하였고 그 중 대부분인 162 개의 피처가 하나의 그룹으로 분류되었다. 따라서 나머지 그룹의 피처들은 제거하지 않고 162 개의 피처를 포함한그룹에서 VIF 값이 높은 피처들 중 내림차순으로 나열했을 때 홀수번째 위치한 피처들을 제거해 99 개의 피처를 선별하였다.

	VIF Factor	features
0	845524.636596	X_2282
1	845524.636596	X_2285
2	845524.636596	X_2284
3	845524.636596	X_2283
4	760136.339384	X_2400
...	...	...
157	306.467854	X_2320
158	210.322983	X_2329
159	210.322983	X_2328
160	61.999786	X_2119
161	61.999786	X_2118

162 rows × 2 columns

	VIF Factor	features
0	1.610930e+07	X_2342
1	1.159979e+06	X_2282
2	1.159979e+06	X_2284
3	3.748427e+05	X_2274
4	3.748427e+05	X_2277
...	...	...
94	1.594588e+02	X_2584
95	9.856063e+01	X_2227
96	9.856063e+01	X_2229
97	9.856063e+01	X_2226
98	9.856063e+01	X_2228

99 rows × 2 columns

(그림 1) 공정변수들의 VIF

마지막으로, 선별된 99 개의 X 피처 중 테스트 세트에서 대부분이 결측치로 존재하는 피처를 제거하고 LINE 피처와 PRODUCT_CODE 피처를 추가하여 총 16 개 피처만으로 Xgboost 회귀를 진행하였으며 해당 피처는 아래와 같다.

[선별된 X 피처 14 개]

X_318 X_367 X_368 X_372 X_373
X_374 X_240 X_1833 X_2466 X_2779
X_2787 X_2841 X_130 X_131

5. 예측 결과

각 실험은 DACON 의 <스마트 공정 제품 품질 분류 데이터>에서 train set (598 rows, 2881 columns), test set (310 rows, 2879 columns; Y_quality, Y_Class feature 제외)를 기준

데이터로 사용하였다. 모든 실험은 2~4 장에서 각각 언급한 결측치 처리를 적용하여 진행하였고 후술할 조건 외에는 모두 같은 조건 내에서 진행하였다.

2 장에서는 전처리한 데이터를 XGBC 와 GBC 모델을 통한 앙상블로 예측하는 Raw test 모델을 만들었다. Train set 에서 NULL 값이 유의미하게 존재하는 feature 를 선별하여 약 20 %의 feature 를 제외한 2347 개의 feature 를 가지고 예측 모델을 만든것으로 DACON 의 m1 score(Private score)를 측정하였다.
(그림 2. Raw test)

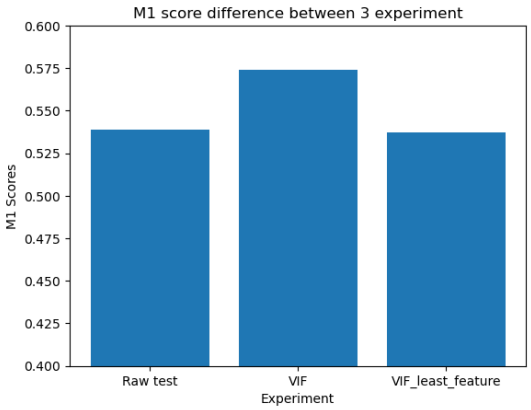
다음으로, 전처리한 데이터를 VIF 를 통해 다중 공선성을 제거하고 XGBC 와 GBC 모델을 이용해 예측 모델을 만들었다. 상기 과정을 통해 남은 2347 개의 feature 에서 VIF 값을 측정하여 가장 상관관계가 높은 feature 를 제거했다. 이때, VIF 가 높은 모든 feature 를 제거하면 예측 모델에 사용할 feature 가 너무 적어질 수 있으니 전체 feature 중에서 절반만 선택하여 VIF 가 높은 feature 를 제거하여 m1 score 를 측정했다. (그림 2. VIF)

마지막으로 4 장에서 다루었던 모델로 앞선 VIF 모델과 달리 Y_quality (목표 값)와의 피어슨 상관계수가 높은 피처에 한하여 VIF 까지 고려한 모델을 활용하였다. 이는 최소한의 feature 16 개만을 이용한 예측 모델로, 역시 m1 score 를 측정했다.
(그림 2. VIF_least_feature)

측정 결과는 그림(3)에서 확인할 수 있다 대조군으로 사용한 Raw test 실험에 비해서 VIF 실험은 m1 score 의 개선이 크게 이루어진 것을 통해 다중 공선성을 제거하면 예측 결과 향상에 도움이 된다는 것을 확인할 수 있다.

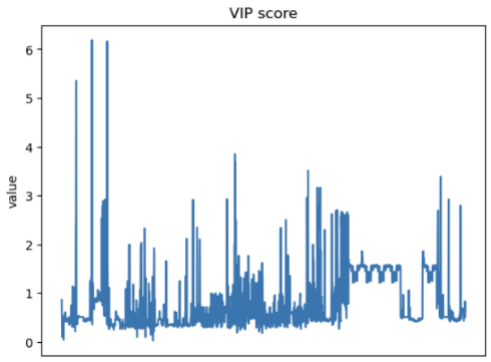
	Raw test	VIF	VIF_least_feature
Number of used features	2347	1910	16

(그림 2) 실험에서 사용한 차원 크기 (feature 개수) (上)



(그림 3) 실험에서 test set 를 이용해 얻은 m1 score (下)

또한, VIF_least_feature 실험의 결과를 보면 Raw test 실험과 비슷한 m1 score 를 보이는 것을 확인할 수 있다. 그런데, 사용한 feature 의 수가 146 배이므로 VIF_least_feature 의 결과는 생성된 예측 모델이 가벼우면서 예측 성능은 유지한다는 의미이다. 이 결과는 추후 실험을 통해 Y_quality 와 상관관계가 높은 독립변수의 수를 늘린다면 현재 얻은 m1 score 보다도 더 많이 향상될 가능성이 있다는 것을 시사한다.

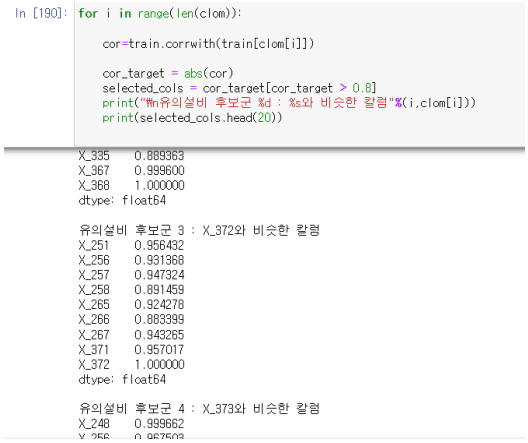


(그림 4) 실험에서 사용한 차원 크기

추가로 데이터 세트 中 각 feature 의 VIP 방식을 통해서도 측정해본 결과 <그림 4>와 같이 나타났다. VIP 값이 0.83 이상인 피처는 719 개로, 해당 피처 를 통해 학습시켜 얻은 m1 score 는 0.4944 이다. 앞서 VIF 를 통해 다중공선성을 제거한 실험들과 비교했을 때 m1 score 가 낮은 수치임을 확인할 수 있다. 하지만 앞서서 VIF 알고리즘을 통한 다중공선성 제거 후의 score 가 Raw test 의 score 보다 더욱 높았던 것으로 보아, 공정 데이터의 피쳐는 다중 공선성 문제를 가지고 있음을 알 수 있고 해당 719 개의 피쳐 역시 다중공선성을 추가로 줄이는 방식을 통해 예측 성능을 향상시킬 수 있음을 기대한다.

6. 유의설비

5 장에서 다룬 VIF_least_feature 모델에서 다중공선성과 상관계수를 고려하여 14 개의 핵심적인 X feature 를 선별하였는데 해당 X feature 와 높은 유의성을 가지는 feature 를 선별한 후 '유의설비집합' 이라고 이름붙혔다. 높은 유의성의 기준은 피어슨 상관계수로, 2800 여개의 모든 X feature 中 해당 14 개 설비와 피어슨상관계수 0.8 이상인 총 50 개의 feature 들이 선별되었다. 유의 설비집합은 불량률에 큰 영향을 미치는 대표적인 피처를 선별한 것이므로 엔지니어의 입장에서 불량률이 높다면 유의설비 집합에 속하는 X 피처의 점검을 우선시하는 것을 권한다.



```
In [190]: for i in range(len(clom)):

              cor=train.corrwith(train[clom[i]])

              cor_target = abs(cor)
              selected_cols = cor_target[cor_target > 0.8]
              print("₩n유의설비 후보군 %d : %s와 비슷한 칼럼"%(i,clom[i]))
              print(selected_cols.head(20))
```

```
X_335    0.889363
X_367    0.999600
X_368    1.000000
dtype: float64

유의설비 후보군 3 : X_372와 비슷한 칼럼
X_251    0.956432
X_256    0.931368
X_257    0.947324
X_258    0.891459
X_265    0.924278
X_266    0.883399
X_267    0.943265
X_371    0.957017
X_372    1.000000
dtype: float64

유의설비 후보군 4 : X_373와 비슷한 칼럼
X_248    0.999662
```

(그림 5) 유의 설비 집합 선정

7. 결론

본 연구는 DACON 이 제공하는 <스마트 공장 제품 품질 상태분류> data set 를 활용한 연구로 공정의 결과인 '품질변수' 및 이와 관련된 2800 여개의 설비 변수를 다양한 방식을 통해 전처리 및 회귀분석하고 그 결과를 비교하는 내용을 담고있다.

전처리 과정에서 EDA 방식을 통하여 데이터의 독특한 분포 특성을 발견할 수 있었고 이를 결측치 보간에 활용할 수 있었다. 한 편으로는 다중공선성을 개선함과 동시에 품질에 영향을 크게 미치는 설비변수들을 선정하여 품질의 회귀 예측성능을 향상시켰다. 특히 다중공선성의 개선은 회귀예측성능에 중요한 영향을 미치는 것으로 확인 되었고 이는 독립변수간 상관관계가 높은 다른 데이터 세트의 회귀 분석에도 활용될 수 있을 것 으로 보인다.

또한, 이 과정에서 2800 여개의 설비 변수 중 품질에 핵심적 인 영향을 미치는 몇 가지 설비변수들을 찾아 낼 수 있었는데 이를 활용하여, 방대한 종류의 설비변수 데이터를 해석 및 점검 해야 하는 엔지니어들이 부담을 덜 수 있기를 기대한다.

참고문헌

최두원 외 2 인(2013),Discovery of Process Equipments Causing Product faults in a Nano-Scale Manufacturing Line, 한국경영과학회

Gi-Sung Lee1 , Jong-Chan Lee(2022),Data Analysis and AI Model for Defect Prediction in the Injection Process, Journal of the Korea Academia-Industrial cooperation Society

Il-Gyo Chong, Chi-Hyuck Jun (2005), Performance of some variable selection methods when multicollinearity is present, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, Volume 78, Issues 1–2

Svante Wold, Michael Sjöström, Lennart Eriksson(2001), PLS-regression: a basic tool of chemometrics, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, Volume 58, Issue 2