

(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0135098

(43) 공개일자 2019년12월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

G06N 3/12 (2006.01)

(52) CPC특허분류

G06N 3/126 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0060116

(22) 출원일자 2018년05월28일

심사청구일자 2018년05월28일

(71) 출원인

한국기술교육대학교 산학협력단

충청남도 천안시 동남구 병천면 충절로 1600 (한국기술교육대학교내)

(72) 발명자

김영철

충청남도 천안시 서북구 한들2로 88 (백석푸르지오 105동 1503호)

김재선

경상북도 포항시 남구 지곡로 20 (승리아파트 5동 2304호)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인(유한) 대아

전체 청구항 수 : 총 5 항

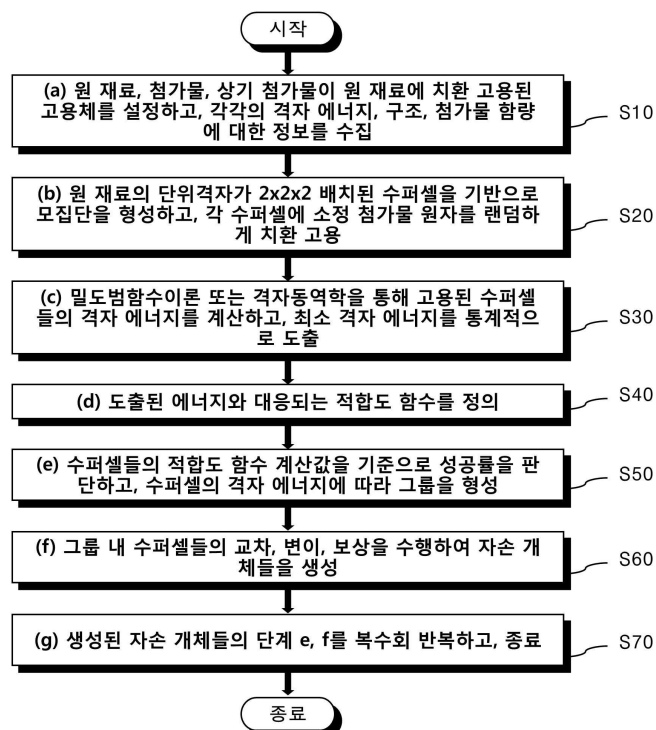
(54) 발명의 명칭 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법

(57) 요약

본 발명의 일 실시예는 (a) 원 재료, 첨가물, 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가물 함량에 대한 정보를 수집; (b) 상기 원 재료의 단위격자가 2x2x2 배치된 수퍼셀을 기반으로 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 첨가물 원자를 랜덤하게 치환 고용; (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학을 통해 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



함수이론을 통해 상기 고용된 슈퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계; (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계; (e) 상기 슈퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 슈퍼셀의 격자 에너지에 따라 그룹을 형성하는 단계; (f) 상기 그룹 내 슈퍼셀들의 교차, 변이, 보상을 수행하여 자손 개체들을 생성하는 단계; 및 (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f를 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하는, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법을 제공한다.

(72) 발명자

김유리

경상북도 포항시 남구 지곡로 20 (승리아파트 5동 2304호)

김기영

충청남도 청양군 대치면 청산로 671-34

신동궁

강원도 강릉시 노암길 42번길 한라1차아파트 104동 1104호

조준영

광주광역시 광산구 운남동 주공아파트 513동 804호

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1415153895

부처명 산업통상자원부

연구관리전문기관 한국산업기술평가관리원

연구사업명 신재생에너지핵심기술개발

연구과제명 프로톤전도성 고체전해질기반 저온용 SOFC 요소기술개발

기 여 율 1/1

주관기관 전남대학교 산학협력단

연구기간 2017.12.01 ~ 2018.06.30

명세서

청구범위

청구항 1

- (a) 원 재료, 첨가물, 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가물 함량에 대한 정보를 수집하는 단계;
- (b) 상기 원 재료의 단위격자가 $2 \times 2 \times 2$ 배치된 슈퍼셀을 기반으로 모집단을 형성하고, 각 슈퍼셀에 소정 첨가물 원자를 랜덤하게 치환 고용하는 단계;
- (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학을 통해 상기 고용된 슈퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계;
- (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계;
- (e) 상기 슈퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 슈퍼셀의 격자 에너지에 따라 그룹을 형성하는 단계;
- (f) 상기 그룹 내 슈퍼셀들의 교차, 변이, 보상을 수행하여 자손 개체들을 생성하는 단계; 및
- (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f를 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하는, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법.

청구항 2

- (a) 원 재료, 첨가물, 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가물 함량에 대한 정보를 수집하는 단계;
- (b) 상기 원 재료의 단위격자가 $2 \times 2 \times 2$ 배치된 슈퍼셀이 10 내지 100 개 구비된 모집단을 형성하고, 각 슈퍼셀에 소정 첨가물 원자를 상기 첨가물 함량에 따라 랜덤하게 치환 고용하는 단계;
- (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학을 통해 상기 고용된 슈퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계;
- (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계;
- (e) 상기 슈퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 슈퍼셀의 볼츠만 인자값에 따라 그룹을 형성하는 단계;
- (f) 상기 그룹 내 슈퍼셀들의 교차, 변이, 보상을 수행하여 자손 개체들을 생성하는 단계; 및
- (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f를 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하며,
상기 볼츠만 인자는 $\exp(-E/kT)$ 이고, 상기 E는 격자 에너지, k는 볼츠만 상수, T는 절대온도이고, 상기 교차율은 0.1 내지 1이고, 변이율은 0.001 내지 0.1인, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법.

청구항 3

- (a) 원 재료, 첨가물, 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가물 함량에 대한 정보를 수집하는 단계;
- (b) 상기 원 재료의 단위격자가 $2 \times 2 \times 2$ 배치된 슈퍼셀이 10 내지 100 개 구비된 모집단을 형성하고, 각 슈퍼셀에 소정 첨가물 원자를 상기 첨가물 함량에 따라 랜덤하게 치환 고용하는 단계;
- (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학을 통해 상기 고용된 슈퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너

지를 통계적으로 도출하는 단계;

(d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계;

(e) 상기 수퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 수퍼셀의 볼츠만 인자값에 따라 그룹을 형성하는 단계;

(f-1) 상기 그룹 내 수퍼셀 간 원자를 교차율에 따라 교차시키는 단계;

(f-2) 상기 교차된 그룹 내 수퍼셀의 원자를 변이율에 따라 변이시키는 단계;

(f-3) 상기 변이된 그룹 내 수퍼셀의 첨가물 원자 개수가 상기 (a) 단계의 첨가물 함량에 만족하도록 보상하여, 자손 개체들을 생성하는 단계; 및

(g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f-1, f-2, f-3을 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하며,

상기 볼츠만 인자는 $\exp(-E/kT)$ 이고, 상기 E는 격자 에너지, k는 볼츠만 상수, T는 절대온도이고, 상기 교차율은 0.1 내지 1이고, 변이율은 0.001 내지 0.1인, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법.

청구항 4

(a) 금속 산화물, 첨가 금속, 상기 첨가 금속이 상기 금속 산화물에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가 금속 함량에 대한 정보를 수집하는 단계;

(b) 상기 금속 산화물의 단위격자가 2x2x2 배치된 수퍼셀이 10 내지 100 개 구비된 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 첨가 금속 원자를 상기 첨가물 함량에 따라 랜덤하게 치환 고용하는 단계;

(c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학을 통해 상기 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계;

(d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계;

(e) 상기 수퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 수퍼셀의 볼츠만 인자값에 따라 그룹을 형성하는 단계;

(f-1) 상기 그룹 내 수퍼셀 간 원자를 교차율에 따라 교차시키는 단계;

(f-2) 상기 교차된 그룹 내 수퍼셀의 원자를 변이율에 따라 변이시키는 단계;

(f-3) 상기 변이된 그룹 내 수퍼셀의 첨가물 원자 개수가 상기 (a) 단계의 첨가물 함량에 만족하도록 보상하여, 자손 개체들을 생성하는 단계; 및

(g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f-1, f-2, f-3을 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하며,

상기 볼츠만 인자는 $\exp(-E/kT)$ 이고, 상기 E는 격자 에너지, k는 볼츠만 상수, T는 절대온도이고, 상기 교차율은 0.1 내지 1이고, 변이율은 0.001 내지 0.1인, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법.

청구항 5

(a) CeO_2 , Zr, 상기 Zr이 상기 CeO_2 에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, Zr 함량에 대한 정보를 수집하는 단계;

(b) 상기 CeO_2 의 단위격자가 2x2x2 배치된 수퍼셀이 10 내지 100 개 구비된 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 개수의 Zr 원자를 상기 Zr 함량에 따라 랜덤하게 치환 고용하는 단계;

(c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학을 통해 상기 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계;

- (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계;
- (e) 상기 수퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 수퍼셀의 볼츠만 인자값을 토대로 상기 수퍼셀이 2 개 포함된 그룹들을 형성하는 단계;
- (f-1) 상기 그룹 내 수퍼셀 간 원자를 교차율에 따라 교차시키는 단계;
- (f-2) 상기 교차된 그룹 내 수퍼셀의 원자를 변이율에 따라 변이시키는 단계;
- (f-3) 상기 변이된 그룹 내 수퍼셀의 첨가물 원자 개수가 상기 (a) 단계의 첨가물 함량에 만족하도록 보상하여, 자손 개체들을 생성하는 단계; 및
- (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f-1, f-2, f-3을 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하며,
- 상기 볼츠만 인자는 $\exp(-E/kT)$ 이고, 상기 E는 격자 에너지, k는 볼츠만 상수, T는 절대온도이고, 상기 교차율은 0.1 내지 1이고, 변이율은 0.001 내지 0.1인, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법.

발명의 설명

기술 분야

- [0001] 본 발명은 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법에 관한 것으로, 더욱 상세하게는 원재료가 첨가물 원자에 의해 고용된 고용체의 정보를 수집하고, 적합도 함수 검증, 교차, 변이 및 보상 단계를 포함하는 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법에 관한 것이다.

배경 기술

- [0003] 안정한 에너지를 갖는 고용체의 결정구조를 규명하는 것은 쉽지 않다. 다양한 원자 위치에서 첨가물 원자가 원재료 원자로 치환 고용되는 경우의 수 때문에, 밀도범함수이론(DFT)을 사용하여 안정한 에너지의 고용체 구조를 찾는 것은 수많은 시간이 소요된다.
- [0005] 한편, 유전 알고리즘은 자연 선택 과정에서 영감을 얻은 이론으로서, 초기 인구, 적합도 함수, 자연 선택, 교차 및 돌연변이의 순서로 진행될 수 있다.
- [0006] 유전 알고리즘은 자연계의 생물 유전학에 기본 이론을 두며, 병렬적이고 전역적인 탐색 알고리즘으로서, 다윈의 적자생존 이론을 기본 개념으로 한다. 유전 알고리즘은 풀고자 하는 문제에 대한 가능한 해들을 정해진 형태의 자료구조로 표현한 다음, 이들을 점차적으로 변형함으로써 점점 더 좋은 해들을 만들어 낸다. 여기에서 해들을 나타내는 자료구조는 유전자, 이들을 변형함으로써 점점 더 좋은 해를 만들어 내는 과정은 진화로 표현할 수 있다.
- [0007] 달리 표현하면, 유전 알고리즘은 어떤 미지의 함수 $Y = f(x)$ 를 최적화하는 해 x를 찾기 위해, 진화를 모방한 (Simulated evolution) 탐색 알고리즘이라고 말할 수 있다.
- [0008] 유전 알고리즘은 특정한 문제를 풀기 위한 알고리즘이라기보다는 문제를 풀기 위한 접근방법에 가까우며, 유전 알고리즘에서 사용할 수 있는 형식으로 바꾸어 표현할 수 있는 모든 문제에 대해서 적용할 수 있다. 일반적으로 문제가 계산 불가능할 정도로 지나치게 복잡할 경우 유전 알고리즘을 통하여, 실제 최적해를 구하지는 못하더라도 최적해에 가까운 답을 얻기 위한 방안으로써 접근할 수 있다. 이 경우 해당 문제를 푸는 데 최적화되어 있는 알고리즘보다 좋은 성능을 보여주지는 못하지만, 대부분 받아들일 수 있는 수준의 해를 보여줄 수 있다.
- [0009] 이러한 생물의 진화 과정, 즉 자연 선택과 유전 법칙 등을 모방한 알고리즘들로 진화 전략(Evolutionary strategies), 유전 프로그래밍(Genetic programming) 등 여러 형태의 이론과 기법들이 최근에 활발히 연구되고 있다. 유전 알고리즘은 이 중에서 가장 기본이 되고 대표적인 알고리즘으로, 자연과학/공학 및 인문 사회 과학 분야에서 비선형 또는 계산 불가능한 복잡한 문제를 해결하는 데 널리 응용되고 있다.

- [0010] 유전 알고리즘을 어떤 문제에 적용하기 위해서는 해를 유전자의 형식으로 표현할 수 있어야 하며, 이 해가 얼마나 적합한지를 적합도 함수를 통해 계산할 수 있어야 한다. 일반 생명체의 특성이 유전체의 집합인 유전자로 나타나는 것과 같이, 유전 알고리즘에서는 해의 특성을 숫자의 배열이나 문자열과 같은 자료 구조를 통해서 표시하게 된다. 적합도 함수는 이렇게 나타내어진 해가 얼마나 문제의 답으로 적합한지를 평가하기 위한 함수이다. 이는 실세계의 생명체가 유전적 특성에 따라 환경에 얼마나 잘 적응할 수 있는지가 결정되는 것과 비교할 수 있다.
- [0011] 어떤 문제에 대해 유전자 형식이 정의되었다면, 어떤 해들의 유전자들을 서로 조합함으로써 기존의 해로부터 새로운 해를 만들어낼 수 있다. 이런 조합 연산은 교차(Crossover)에 비유할 수 있다. 우수한 해들을 선택하여 이들을 교차하면, 만들어진 해는 우수한 해들이 가지는 특성을 물려받을 가능성이 높게 된다. 우수한 해의 선택에는 앞에서 정의한 적합도 함수를 이용할 수 있으며, 적합도가 높은 해가 선택될 확률을 높게 만들면, 보다 나은 유전자를 가진 해가 다음 세대에 자신의 유전자를 넘겨줄 확률이 높게 되고, 따라서 다음 세대의 해들은 최적해에 점차 가까워지게 된다. 또 비록 교차를 통해 후손을 남기지 못하더라도, 변이를 통해 새로운 유전자를 형성하여 다음 세대로 넘겨주도록 할 수 있으며, 이는 지역 최적점에 빠지지 않도록 하는 주요한 기법이다.
- [0012] 해들을 교차하기 위해서는 아담과 하와처럼 초기 해의 집단이 필요하다. 초기해 집단은 단지 이후의 해를 구하는 데 있어 필요한 초기 개체로서의 역할만을 위한 것이므로, 우수한 해들로 이루어질 필요는 없다. 일반적으로 유전자를 랜덤하게 생성하여 초기 해 집단을 구성한다. 초기해 집단이 구성되면, 이들 내부의 해의 교차를 통해 다음 세대의 해의 집합을 생성하게 되며, 이를 세대를 거듭하면서 반복해 가면, 해들은 점점 정답에 가까워지게 된다.
- [0013] 유전 알고리즘이 전역 최적해를 구하려면, 많은 인구를 유지하면서 많은 세대를 내려갈 필요가 있다. 따라서, 대부분의 경우는 세대가 일정 수준 진행되었거나, 해가 특정 범위에 들게 되면 알고리즘을 종료하게 된다.
- [0014] 한 세대에서 다음 세대로 전해지는 해의 후보가 되는 해들을 선택한다. 선택 방법에는 균등 비례 룰렛 휠 선택, 토너먼트 선택, 순위 기반 선택 등이 있다.
- [0015] 해의 선택은 유전 알고리즘의 성능에 큰 영향을 미친다. 어떤 방법을 쓰느냐에 따라 최적해로 다가가는 속도가 더디게 되거나, 아니면 지역 최적해에 빠지는 경우가 생길 수도 있기 때문이다. 또는 우수한 해가 보유한 나쁜 인자가 전체 인구에 퍼지거나, 반대로 나쁜 해가 보유한 우수한 인자가 영구히 사장될 수도 있다. 따라서 어떤 해를 선택하는지는 유전 알고리즘의 성능을 위해서 중요한 요소라고 할 수 있다.
- [0016] 일반적으로는 가장 좋은 해의 순으로 선택될 확률을 높게 부여하는 방법이 많이 사용된다. 이는 반대로 말하면, 나쁜 해라 할지라도 그 해에 포함된 좋은 인자를 퍼뜨릴 기회를 준다고 볼 수 있다. 현 세대에서 가장 좋은 해라 할지라도 실제로는 지역 최적해에 가까운 해일 수도 있고, 반대로 좋지 않은 해라 할지라도 전역 최적해에는 더 가까울 수도 있기 때문이다. 실제로 전역 최적해가 어디에 있는지는 알 수 없는 일이므로, 가능한 해들의 평균적인 적합도를 높여 가면서도 유전자의 다양성을 유지하는 것이 지역 최적해에 빠지는 것을 가능한 한 방지하는 방법이며, 이는 실세계의 생명체들 역시 유전적 다양성을 유지하는 종이 장기적인 생존 가능성이 높은 것과 비견할 수 있다.
- [0017] 생명체는 세대 내에서의 교배를 통해 다음 세대를 생성한다. 이와 마찬가지로 유전 알고리즘에서 자연 선택된 해들은 교차를 통하여 다음 세대의 해들을 생성하게 된다. 일반적으로 두 개의 해를 선택한 후 둘 간에 교차 연산을 수행하게 되며, 이를 통해 생성된 해는 각각의 부모 해의 교차 연산을 통해서 서로 겹치지 않는 위치의 유전인자를 받아 새로운 유전자를 구성하게 된다.
- [0018] 실제 생명체의 염색체가 재조합되는 과정에서 부모 염색체의 일부분이 특정 위치를 기준으로 서로 바뀌어 결합되는 경우가 있는데, 이 현상을 교차라고 한다. 유전 알고리즘의 교차 연산은 이 현상을 본떠, 부모 해의 유전자들을 서로 교차시켜서 자식해를 만들어낸다. 교차 연산의 실제 수행 방법은 비트 단위 교차에서부터 블록 단위 교차까지 다양한 방법으로 구현할 수 있으며, 교차를 한 번만 수행할지 전 영역에 대해서 교차시킬지 역시 결정할 수 있다.
- [0019] 또한 모든 해에 대해 교차연산을 수행할 경우 우수한 해가 다른 해와의 교배를 통해서 우수성을 잃어버림에 따라 세대의 최고 우수해가 보존되지 않는 상황이 발생할 수 있다. 이런 경우를 방지하기 위하여 교차를 확률적으로 수행하여 우수한 해가 변형되지 않고 그대로 다음 세대에 전해질 확률을 부여하는 방법도 사용된다.
- [0020] 일반 생명체에서, 유전자의 교차뿐 아니라, 하나의 유전자가 직접적으로 변이를 일으켜서 주어진 환경에서 살아

남을 확률 역시 존재한다. 변이 연산은 주어진 해의 유전자 내의 유전 인자의 순서 혹은 값이 임의로 변경되어 다른 해로 변형되는 연산이다. 해의 유전자들을 가상의 공간에 맵핑할 경우 교배 연산은 부모해들 사이의 어떤 지점에 자식해를 생성하는 것이라고 볼 수 있다면, 변이 연산은 임의의 위치로 점프하는 것에 비견할 수 있다. 따라서 약간의 확률로 변이 연산을 수행시켜 주는 것은 전체 세대가 함께 지역 최적해에 빠져드는 경우를 방지하기 위한 주요한 기법이 될 수 있으며, 해집단의 다양성을 높여준다.

[0021] 대치는 교차·변이 등을 거쳐서 만들어진 새로운 해를 해집단에 추가하고, 기존 해 중 열등한 해를 가려내서 제외시키는 연산이다. 가장 품질이 나쁜 해를 대치하는 방법, 새로운 해의 부모해 중에서 새로운 해와 가장 비슷한 해를 대치시키는 방법(해집단의 다양성을 유지하기 위함) 등이 있다.

[0023] 다만, 유전 알고리즘을 통해 안정한 에너지의 고용체 구조를 찾는 과정은 그 연구가 활발히 이루어지지 않고 있다.

[0025] 관련 선행기술로, 한국 등록특허공보 제10-1709893호에 개시된 "유전 알고리즘 기반 3차원 나노 구조를 가지는 광소재의 설계 방법"이 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0027] (특허문헌 0001) 한국 등록특허공보 제10-1709893호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0028] 본 발명은 전술한 종래기술의 문제점을 해결하기 위한 것으로, 본 발명의 목적은 유전 알고리즘을 통하여 안정한 에너지를 갖는 고용체 구조를 찾는 데 그 목적이 있다.

과제의 해결 수단

[0030] 상기와 같은 목적을 달성하기 위해, 본 발명의 일 양태는 (a) 원 재료, 첨가물, 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가물 함량에 대한 정보를 수집하는 단계; (b) 상기 원 재료의 단위격자가 $2 \times 2 \times 2$ 배치된 수퍼셀을 기반으로 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 첨가물 원자를 랜덤하게 치환 고용하는 단계; (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학(lattice dynamics)을 통해 상기 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계; (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계; (e) 상기 수퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 수퍼셀의 격자 에너지에 따라 그룹을 형성하는 단계; (f) 상기 그룹 내 수퍼셀들의 교차, 변이, 보상을 수행하여 자손 개체들을 생성하는 단계; 및 (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f를 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하는, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법을 제공한다.

[0032] 본 발명의 다른 일 양태는 (a) 원 재료, 첨가물, 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가물 함량에 대한 정보를 수집하는 단계; (b) 상기 원 재료의 단위격자가 $2 \times 2 \times 2$ 배치된 수퍼셀이 10 내지 100 개 구비된 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 첨가물 원자를 상기 첨가물 함량에 따라 랜덤하게 치환 고용하는 단계; (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학(lattice dynamics)을 통해 상기 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계; (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계; (e) 상기 수퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공

를을 판단하고, 상기 수퍼셀의 볼츠만 인자값에 따라 그룹을 형성하는 단계; (f) 상기 그룹 내 수퍼셀들의 교차, 변이, 보상을 수행하여 자손 개체들을 생성하는 단계; 및 (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f를 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하는, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법을 제공한다. (상기 볼츠만 인자는 $\exp(-E/kT)$ 이고, 상기 E는 격자 에너지, k는 볼츠만 상수, T는 절대온도이고, 상기 교차율은 0.1 내지 1이고, 변이율은 0.001 내지 0.1이다.)

[0034]

본 발명의 또 다른 일 양태는 (a) 원 재료, 첨가물, 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가물 함량에 대한 정보를 수집하는 단계; (b) 상기 원 재료의 단위격자가 2x2x2 배치된 수퍼셀이 10 내지 100 개 구비된 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 첨가물 원자를 상기 첨가물 함량에 따라 랜덤하게 치환 고용하는 단계; (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학(lattice dynamics)을 통해 상기 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계; (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계; (e) 상기 수퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 수퍼셀의 볼츠만 인자값에 따라 그룹을 형성하는 단계; (f-1) 상기 그룹 내 수퍼셀 간 원자를 교차율에 따라 교차시키는 단계; (f-2) 상기 교차된 그룹 내 수퍼셀의 원자를 변이율에 따라 변이시키는 단계; (f-3) 상기 변이된 그룹 내 수퍼셀의 첨가물 원자 개수가 상기 (a) 단계의 첨가물 함량에 만족하도록 보상하여, 자손 개체들을 생성하는 단계; 및 (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f-1, f-2, f-3을 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하는, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법을 제공한다. (상기 볼츠만 인자는 $\exp(-E/kT)$ 이고, 상기 E는 격자 에너지, k는 볼츠만 상수, T는 절대온도이고, 상기 교차율은 0.1 내지 1이고, 변이율은 0.001 내지 0.1이다.)

[0036]

본 발명의 또 다른 일 양태는 (a) 금속 산화물, 첨가 금속, 상기 첨가 금속이 상기 금속 산화물에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가 금속 함량에 대한 정보를 수집하는 단계; (b) 상기 금속 산화물의 단위격자가 2x2x2 배치된 수퍼셀이 10 내지 100 개 구비된 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 첨가 금속 원자를 상기 첨가물 함량에 따라 랜덤하게 치환 고용하는 단계; (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학(lattice dynamics)을 통해 상기 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계; (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계; (e) 상기 수퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 수퍼셀의 볼츠만 인자값에 따라 그룹을 형성하는 단계; (f-1) 상기 그룹 내 수퍼셀 간 원자를 교차율에 따라 교차시키는 단계; (f-2) 상기 교차된 그룹 내 수퍼셀의 원자를 변이율에 따라 변이시키는 단계; (f-3) 상기 변이된 그룹 내 수퍼셀의 첨가물 원자 개수가 상기 (a) 단계의 첨가물 함량에 만족하도록 보상하여, 자손 개체들을 생성하는 단계; 및 (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f-1, f-2, f-3을 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하는, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법을 제공한다. (상기 볼츠만 인자는 $\exp(-E/kT)$ 이고, 상기 E는 격자 에너지, k는 볼츠만 상수, T는 절대온도이고, 상기 교차율은 0.1 내지 1이고, 변이율은 0.001 내지 0.1이다.)

[0038]

본 발명의 또 다른 일 양태는 (a) CeO_2 , Zr, 상기 Zr이 상기 CeO_2 에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, Zr 함량에 대한 정보를 수집하는 단계; (b) 상기 CeO_2 의 단위격자가 2x2x2 배치된 수퍼셀이 10 내지 100 개 구비된 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 개수의 Zr 원자를 상기 Zr 함량에 따라 랜덤하게 치환 고용하는 단계; (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학(lattice dynamics)을 통해 상기 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출하는 단계; (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계; (e) 상기 수퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 수퍼셀의 볼츠만 인자값을 토대로 상기 수퍼셀이 2 개 포함된 그룹들을 형성하는 단계; (f-1) 상기 그룹 내 수퍼셀 간 원자를 교차율에 따라 교차시키는 단계; (f-2) 상기 교차된 그룹 내 수퍼셀의 원자를 변이율에 따라 변이시키는 단계; (f-3) 상기 변이된 그룹 내 수퍼셀의 첨가물 원자 개수가 상기 (a) 단계의 첨가물 함량에 만족하도록 보상하여, 자손 개체들을 생성하는 단계; 및 (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f-1, f-2, f-3을 복수회 반복하고, 종료하는 단계;를 포함하는, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법을 제공한다. (상기 볼츠만 인자는 $\exp(-E/kT)$ 이고, 상기 E는 격자 에너지, k는 볼츠만 상수, T는 절대온도이고, 상기 교차율은 0.1 내지 1이고, 변이율은 0.001 내지 0.1이다.)

발명의 효과

- [0040] 본 발명의 일 양태에 따르면, 수퍼셀이 첨가물에 의해 치환 고용될 수 있는 구조의 모든 경우의 수를 고려하지 않고, 일일이 밀도범함수이론 또는 격자동역학 등을 통해 격자 에너지를 계산하지 않고도, 유전 알고리즘을 통해 보다 간소화된 연산량으로 최소 에너지를 갖는 결정구조를 규명할 수 있는 이점이 있다.
- [0041] 본 발명의 효과는 상기한 효과로 한정되는 것은 아니며, 본 발명의 상세한 설명 또는 특허청구범위에 기재된 발명의 구성으로부터 추론 가능한 모든 효과를 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

도면의 간단한 설명

- [0043] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 의한 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법의 일례를 나타낸 순서도이다.
- 도 2는 안정한 에너지의 $2 \times 2 \times 2$ 입방 $\text{Ce}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_2$ 고용체를 찾기 위해 사용된 유전자 알고리즘을 개략적으로 나타낸 흐름도이다.
- 도 3은 4 개의 변수를 통해 $2 \times 2 \times 2$ $\text{Ce}_{0.875}\text{Zr}_{0.125}\text{O}_2$ 수퍼셀의 최소 에너지 구조를 찾는 성공율을 도시한 그래프이다.
- 도 4 (a)는 세대 함수로서 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 구조의 계산된 상대 에너지를 나타낸 그래프이다.
- 도 4 (b)는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 수퍼셀의 상대 에너지를 체적의 함수로 나타낸 그래프이다.
- 도 4 (c)는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물 수퍼셀 및 가장 낮은 에너지를 갖는 고용체 수퍼셀을 나타낸 그림이다.
- 도 5 (a) 는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물 수퍼셀과 고용체 수퍼셀에서 Ce-O와 Zr-O 결합 길이에 대한 결합 수를 나타낸 그래프이다.
- 도 5 (b)는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물 수퍼셀과 고용체 수퍼셀에서 Ce와 Zr 원자의 유효 배위수를 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0044] 이하, 첨부된 도면을 참조하면서 본 발명에 따른 바람직한 실시예를 상세히 설명하기로 한다.
- [0045] 본 발명의 이점 및 특징, 그리고 그것을 달성하는 방법은 첨부된 도면과 함께 상세하게 후술되어 있는 실시예들을 참조하면 명확해질 것이다.
- [0046] 그러나, 본 발명은 이하에 개시되는 실시예들에 의해 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 구현될 수 있고, 단지 본 실시예들은 본 발명의 개시가 완전하도록 하며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 발명의 범주를 완전하게 알려주기 위해 제공되는 것이다. 또한, 본 발명은 청구항의 범주에 의해 정의될 뿐이다.
- [0047] 나아가, 본 발명을 설명함에 있어 관련된 공지 기술 등이 본 발명의 요지를 흐리게 할 수 있다고 판단되는 경우 그에 관한 자세한 설명은 생략하기로 한다.
- [0049] 본 발명의 일 양태는,
- [0050] (a) 원 재료, 첨가물, 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가물 함량에 대한 정보를 수집하는 단계(S10);
- [0051] (b) 상기 원 재료의 단위격자가 $2 \times 2 \times 2$ 배치된 수퍼셀을 기반으로 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 첨가물 원자를 랜덤하게 치환 고용하는 단계(S20);
- [0052] (c) 밀도범함수이론 또는 격자동역학을 통해 상기 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지

지를 통계적으로 도출하는 단계(S30);

[0053] (d) 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의하는 단계(S40);

[0054] (e) 상기 수퍼셀들의 상기 적합도 함수 계산값을 기준으로 성공률을 판단하고, 상기 수퍼셀의 격자 에너지에 따라 그룹을 형성하는 단계(S50);

[0055] (f) 상기 그룹 내 수퍼셀들의 교차, 변이, 보상을 수행하여 자손 개체들을 생성하는 단계(S70); 및

[0056] (g) 상기 생성된 자손 개체들의 단계 e, f를 복수회 반복하고, 종료하는 단계(S80);를 포함하는, 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법을 제공한다.

[0058] 이하, 본 발명의 일 양태에 따른 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법에 대하여, 각 단계별로 설명한다

[0060] 본 발명의 일 양태에 따른 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법에 있어서, 상기 (a) 단계(S10)는 원 재료, 첨가물, 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체를 설정하고, 각각의 격자 에너지, 구조, 첨가물 함량에 대한 정보를 수집한다.

[0061] 상기 (a) 단계는 원 재료가 금속 산화물일 수 있고, 구체적으로는 CeO₂일 수 있으며, 이때 상기 금속 산화물의 구조, 원자간 결합 에너지, 격자 에너지 등을 수집할 수 있다.

[0062] 상기 (a) 단계에서 첨가물은 상기 금속 산화물에 치환 고용될 수 있는 원소일 수 있고, 일례로 붕소, 탄소 질소, 및 금속일 수 있으며, 상기 금속 산화물이 CeO₂일 경우, Zr일 수 있다.

[0063] 상기 (a) 단계에서 상기 첨가물이 원 재료에 치환 고용된 고용체에 있어서, 고용된 비율(at.%)을 수집할 수 있다.

[0064] 상기 (a) 단계는 후속 단계에서 고용체의 격자 에너지를 밀도범함수이론(Density Functional Theory) 또는 격자 동역학(lattice dynamics) 등을 통해 계산하기 위한 정보를 사전에 수집하도록 한다.

[0066] 본 발명의 일 양태에 따른 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법에 있어서, (b) 단계(S20)는 상기 원 재료의 단위격자가 2x2x2 배치된 수퍼셀을 기반으로 모집단을 형성하고, 각 수퍼셀에 소정 첨가물 원자를 랜덤하게 치환 고용한다.

[0067] 상기 (b) 단계의 수퍼셀은 상기 원 재료의 단위격자(unit cell)가 x축, y축 및 z축으로 각각 2배로 확장된 격자를 의미할 수 있다.

[0068] 상기 (b) 단계의 수퍼셀은 상기 수퍼셀 내 원소 일부가 제외된 공공(vacancy)이 형성되도록 할 수도 있다.

[0069] 상기 (b) 단계는 상기 (a) 단계에서 설정된 고용체 및 첨가물 함량을 토대로 상기 수퍼셀의 반복단위 내에서 치환될 첨가물 원자의 개수를 정하고, 첨가물 원자가 수퍼셀의 반복단위 내에서 랜덤하게 치환 고용되도록 한다.

[0070] 상기 (b) 단계는 구체적으로, 형석(fluorite) 구조인 CeO₂를 일례로 들면, 도 2에 도시한 바와 같이 수퍼셀 내에 32 개의 Ce 원자를 대상으로 Zr 원자가 치환 고용되도록 할 수 있다. 상기 CeO₂ 수퍼셀의 Ce 원자 수는 63 개이지만, 수퍼셀이 반복되는 것을 고려하면 중복되는 부분을 제외하고 32 개의 Ce 원자를 대상으로 하고, Ce 대비 25 vol%가 Zr으로 치환되는 것이면, 8 개의 Zr 원자가 치환되도록 랜덤 배치할 수 있다.

[0071] 상기 (b) 단계의 모집단은 n 개의 수퍼셀을 포함할 수 있고, 상기 n 은 10 내지 100의 정수일 수 있다. 일례로, n이 10이라면 각각 랜덤하게 상기 첨가물들의 치환 고용이 이루어진 10 개의 수퍼셀을 마련할 수 있다.

[0073] 본 발명의 일 양태에 따른 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소 에너지 결정구조 규명방법에 있어서, 상기 (c) 단계(S30)는 밀도범함수이론을 통해 상기 고용된 수퍼셀들의 격자 에너지를 계산하고, 최소 격자 에너지를 통계적으로 도출한다.

- [0074] 상기 (c) 단계의 격자 에너지 계산은 상기 (a) 단계에서 수집된 정보를 토대로, 밀도범함수이론 또는 격자동역학(lattice dynamics) 이외의 공지된 수단 등을 통해서도 수행될 수 있다.
- [0075] 상기 (c) 단계의 격자에너지 계산은 Vienna Ab-initio Simulation Package(VASP) 코드, Generalized Gradient Approximation(GGA)을 통해 계산될 수 있다.
- [0076] 상기 (c) 단계의 최소 격자 에너지 도출은 상기 모집단의 각 수퍼셀들의 계산된 에너지 값 중 가장 최소의 값을 선정하여 도출될 수 있다.
- [0077] 상기 (c) 단계의 최소 격자 에너지는 후속 단계의 적합도 함수를 정의하는 데 사용될 수 있다.
- [0079] 본 발명의 일 양태에 따른 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소 에너지 결정구조 규명방법에 있어서, 상기 (d) 단계(S40)는 상기 도출된 에너지와 대응되는 적합도 함수를 정의한다.
- [0080] 상기 (d) 단계의 적합도 함수는 각 수퍼셀 개체들의 격자 에너지 계산값과, 상기 (c) 단계의 최소 격자 에너지를 비교하고, 이를 성공률(success rate)(최소 격자 에너지/해당 수퍼셀의 격자 에너지)와 같은 수치로 나타낼 수 있도록 한다.
- [0081] 상기 (d) 단계의 각 수퍼셀 개체들의 격자 에너지 계산은, 상기 수퍼셀 개체들이 후속 단계를 거쳐 생성된 자손 개체일 경우, 상기 (c) 단계에서 수행했던 방법과 마찬가지로 밀도범함수이론 또는 격자동역학, (a) 단계의 정보 등을 토대로 계산이 이루어질 수 있다.
- [0082] 상기 (d) 단계에서 정의된 적합도 함수는 후속 단계에서 생성되는 자손 개체들이 최소 에너지에 얼마만큼 도달하였는지 판가름할 수 있다.
- [0084] 본 발명의 일 양태에 따른 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소 에너지 결정구조 규명방법에 있어서, 상기 (e) 단계(S50)는 상기 개체들의 격자 에너지 계산값을 기준으로 그룹을 형성하도록 한다.
- [0085] 상기 (e) 단계에서 형성되는 그룹은 두 수퍼셀 개체를 포함하도록 하는 것이 바람직하다.
- [0086] 상기 (e) 단계의 그룹 형성은 볼츠만 인자($\exp(-E/kT)$, E는 격자 에너지, k는 볼츠만 상수, T는 절대 온도)를 사용하여 결정될 수 있다. 상기 그룹 형성은 상기 수퍼셀 개체들의 격자 에너지, 온도 조건을 고려하여 볼츠만 인자값을 구하고, 계산된 볼츠만 인자값을 기준으로 정렬하고, 순차적으로 모집단 내 최대값과 최소값을 선택하여 그룹을 형성시킬 수 있다. 구체적으로, 모집단 내 최소의 볼츠만 인자값을 갖는 수퍼셀 개체, 최대의 볼츠만 인자값을 갖는 수퍼셀 개체를 선택하여 한 그룹으로 포함되도록 그룹을 생성할 수 있다. 그 다음 그룹 생성은 나머지 모집단 내 개체 중 최소의 볼츠만 인자값을 갖는 수퍼셀 개체, 최대의 볼츠만 인자값을 갖는 수퍼셀 개체를 선택하여 한 그룹으로 포함되도록 할 수 있으며, 이를 반복하여 모든 개체가 그룹을 이룰 때까지 수행할 수 있다.
- [0088] 본 발명의 일 양태에 따른 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소 에너지 결정구조 규명방법에 있어서, 상기 (f) 단계(S60)는 상기 그룹 내 수퍼셀들의 교차, 변이, 보상을 수행하여 자손 개체를 생성한다.
- [0089] 상기 (f) 단계의 교차는 상기 (e) 단계에서 형성된 그룹 내 수퍼셀 개체들 간 원자의 교차를 의미하는 것으로, 구체적으로 상기 그룹 내 수퍼셀들 간에, 일 수퍼셀 개체의 원자와 다른 일 수퍼셀 개체의 원자가 교차율에 따라서 교차될 수 있다. 상기 교차율은 그룹 내 일 개체와 다른 일 개체가 교차가 이루어질 확률을 나타낸 것으로, 0.1 내지 1일 수 있다. 일례로 교차율이 0.1이라면, 10 %의 확률로 그룹 내 일 개체의 원자가 다른 일 개체의 원자와 10 % 확률로 교차될 수 있다.
- [0090] 상기 (f) 단계의 변이는 상기 (f) 단계의 교차가 수행되거나 수행되지 아니한 개체의 원 재료 원자가 첨가물 원자로 변이되는 것을 의미한다. 일례로, 원 재료가 CeO_2 이고 첨가물 원자가 Zr인 수퍼셀의 경우, 고용된 Zr 원자가 변이에 따라 Ce 원자가 될 수 있고, Ce 원자가 변이에 따라 Zr 원자가 될 수도 있다. 상기 변이는 변이율에 따라서 변이될 수 있다. 상기 변이율은 그룹 내 각 수퍼셀 개체의 원 재료 원자 또는 첨가물 원자가 다른 원자로 변이될 확률을 나타낸 것으로, 0.001 내지 0.1일 수 있다. 일례로 변이율이 0.001이라면, 0.1 %의 확률로 개체의 원 재료 원자들이 첨가물 원자로 변이되거나, 첨가물 원자들이 원 재료 원자로 변이될 수 있다.

- [0091] 상기 (f) 단계의 보상은 상기 (f) 단계의 교차 및 변이 단계를 거친 수퍼셀 개체의 총 첨가물 원자 수가, 상기 (a) 단계의 첨가물 함량에 근사하도록 조정한다. 구체적으로, 상기 교차 및 변이 단계를 거친 그룹 내 수퍼셀 개체의 총 첨가물 원자 수가 (a) 단계의 첨가물 함량보다 많다면, (a) 단계의 첨가물 함량에 근사하도록 첨가물 원자들 중 일부를 랜덤하게 원 재료 원자로 변경시키고, 그룹 내 수퍼셀 개체의 총 첨가물 원자 수가 (a) 단계의 첨가물 함량보다 적다면, (a) 단계의 첨가물 함량에 근사하도록 원 재료 원자들 중 일부를 랜덤하게 첨가물 원자로 변경시킨다. 일례로 원 재료가 CeO_2 이고, 첨가물이 Zr이고, Ce:Zr 원자비가 3:1이 되도록 할 경우, 개체의 32 개 원자 중 8 개의 원자가 Zr이 되도록 보상 단계에서 조정할 수 있다.
- [0092] 상기 (f) 단계의 보상이 수행된 개체는 자손 개체로 취급하고, 자손 개체의 적합도 함수 검증, 그룹 형성, 교차, 변이, 보상이 다시 수행될 수 있다. 상기 과정들은 목적 세대수가 도달할 때까지 반복될 수 있고, 세대수는 10 내지 100일 수 있다. 즉, 상기 자손 개체 생성과정이 10 내지 100 회 반복될 수 있다. 구체적으로, 상기 (f) 단계의 보상으로 생성된 자손 개체는 상기 (d) 단계에서 격자 에너지를 계산하여 적합도 함수 검증을 거치고, (e) 단계에서 볼츠만 인자값에 따라 그룹화되고, (f) 단계에서 교차, 변이, 보상이 수행되어 다음 세대의 자손 개체를 생성할 수 있다.
- [0093] 상기의 방법을 통해, 수퍼셀이 첨가물에 의해 치환 고용될 수 있는 구조의 모든 경우의 수를 고려하지 않고, 모든 경우의 수의 격자 에너지를 일일이 밀도범함수이론 등을 통해 계산하지 않고도, 유전 알고리즘을 통해 보다 간소화된 연산량으로 최소 에너지를 갖는 결정구조를 규명할 수 있는 이점이 있다.
- [0095] 이하, 실시예 및 실험예에 의하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명하고자 한다. 단, 하기 실시예 및 실험예는 본 발명을 예시하기 위한 것일 뿐 본 발명의 범위가 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [0097] 본 실시예에서는 원 재료를 CeO_2 , 첨가물을 Zr로 설정하고, 고용체에 대한 소결 온도 조건을 참고하였으며, 산소가 없는 상황은 고려하지 않았다.
- [0099] <계산 방법>
- [0100] 도 2의 우측 상단에서 볼 수 있듯, 단위격자가 x, y, z축으로 각각 $2 \times 2 \times 2$ 배치된 입방 CeO_2 수퍼셀에서 고려되는 세륨(Ce) 원자의 수는 32, O 원자의 수는 64이다. CeO_2 수퍼셀의 구조 분석 및 시각화는 VESTA(Visualization for Electronic and Structural Analysis)를 통해 수행되었다. Zr 원자는 CeO_2 수퍼셀의 일부 Ce 원자를 대체하여 $2 \times 2 \times 2$ 입방 $\text{Ce}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_2$ 고용체를 형성할 수 있으며, 하기 표 1은 CeO_2 수퍼셀의 Zr 원자 수에 따른 $\text{Ce}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_2$ 고용체 구조의 경우의 수를 나타낸다. CeO_2 수퍼셀의 Zr 원자 1 개 치환에 대한 조합 수는 32 개이다. 주기적으로 $\text{Ce}_{0.97}\text{Zr}_{0.03}\text{O}_2$ 수퍼셀이 공간에서 반복되기 때문에 비 등가 구조물의 수는 1로 감소한다. Zr 원자 수가 4일 때, A. Borisov, M. Dickinson, and S. Hastings, A congruence problem for polyhedra, Am. Math. Mon. 117 (2010) 232-249에서 제안된 다면체에 대한 합동 조건을 사용하였다. 비 등가 구조물의 수는 주기 경계를 가지고 35,960에서 71로 감소하였다. CeO_2 수퍼셀에서 치환되는 Zr 원자 수가 5 이상인 경우, 볼록 다면체에만 적용할 수 있는 합동 조건은 사용할 수 없다. 5 개의 Zr 원자가 치환된 일부 구조는 오목 다면체일 수 있다. 따라서 CeO_2 수퍼셀에서 등가 구조를 확인하는 것은 매우 어려울 수 있다. 실험적으로 중요한 고용체는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 이기 때문에, 이 고용체를 다루기 위해서는 $\text{Ce}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_2$ 수퍼셀에 적어도 8 개의 Zr 원자가 필요하다. 따라서, 8 개의 Zr 원자를 갖는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체에서 안정한 에너지 구조를 갖는 고용체를 찾기에는 그 수가 너무 많고, 이 문제를 해결하기 위해 유전 알고리즘이 필요하게 되었다.

표 1

Table 1
Number of solid solutions with number of Zr atoms in the $2 \times 2 \times 2$ cubic $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ supercell.

Number of Zr atoms	Number of solid solutions	
	Combinations	Combinations with periodic boundary
1	32	1
2	496	5
3	4960	14
4	35,960	71
5	201,376	-
6	906,192	-
7	3,365,856	-
8	10,518,300	-

[0102]

[0104] <유전 알고리즘>

[0105] 도 2는 안정한 에너지의 $2 \times 2 \times 2$ 수퍼셀 $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ 고용체를 찾기 위해 사용된 유전자 알고리즘의 흐름도를 나타낸다. (1) 시작, (2) 매개 변수 설정, (3) 초기 모집단, (4) 적합도 함수, (5) 구조 선택, (6) 교차, (7) 변이, (8) 보상, (9) 자손 생성 및 (10) 종료로 구성된다.

[0106] Ce 원자를 Zr 원자로 무작위로 대체하여 $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ 고용체를 생성하기 위해, 도 2의 우측 상단에 표시된 $2 \times 2 \times 2$ CeO_2 수퍼셀을 사용하였다. Ce 원자는 CeO_2 수퍼셀의 좌측 하단으로부터 수퍼셀 반복단위 내에서 1 내지 32의 번호가 부여된다.

[0107] 매개변수 설정 단계에서 Zr 원자 수($2 \times 2 \times 2$ $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ 수퍼셀에서 x), $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ 구조 수(모집단, n) 및 세대수를 결정하였다. n 은 일반적으로 짝수인 것이 바람직하다. 32 개의 Ce 원자 중 Zr 원자는 무작위로 치환되어 초기 단계에서 n 개의 $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ 구조를 생성한다. 상기 수퍼셀 모집단은 유전 알고리즘의 초기 생성물이다. n 개의 $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ 구조는 도 2에서 각 원자에 번호가 매겨진 막대로 표시된다. 상기 수퍼셀의 에너지는 밀도범함수이론(DFT)을 사용하여 계산되고, 이들의 선택 확률은 볼츠만 인자인 $\exp(-E/kT)$ 를 사용하여 결정된다. k 는 볼츠만 상수이고 T 는 절대 온도를 나타낸다.

[0108] 구조 선택 단계에서, n 개의 $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ 구조 중 두 개의 구조가 선택 확률에 따라 선택되었고, 이 선택은 다음 n 개의 모집단을 생성하기 위해 $n/2$ 만큼 반복되었다.

[0109] Ce 및 Zr 원자 위치는 교차 단계에서 두 개의 선택된 $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ 구조 사이에서 변경될 수 있다. 예를 들어, 도 2의 교차(Crossover)에서 도시한 바와 같이 구조 선택 단계에서 선택된 모집단 'n-1'과 '2'는 16 및 17 번째 금속 원자에서 교차된다.

[0110] 금속 원자는 변이 단계에서 다른 금속 원자로 바뀔 수 있다. 예를 들어, 도 2의 우측 변이(Mutation)를 참조하면, Ce 원자는 변이에 의해 Zr 원자로 변한다.

[0111] 변이 단계 이후에 Zr 원자 수가 초기 단계에서 설정한 값보다 크거나 작으면 설정한 값이 되도록 보상이 수행되어야 한다. 보상이 수행된 n 구조는 다음 세대가 된다. 자손 생성 단계에서, 유전 알고리즘 흐름은 해당 세대가 초기에 설정된 세대 값에 도달하면 종료된다. 그렇지 않으면, 흐름은 다음 세대를 위한 적합도 함수 단계로 돌아간다.

[0112] 개체수, 교차율, 변이율 및 온도는 유전 알고리즘에 사용된 변수였다. 적절한 값을 찾기 위해 28 Ce, 4 Zr 및 64 O 원자를 포함하는 $2 \times 2 \times 2$ $Ce_{0.875}Zr_{0.125}O_2$ 수퍼셀을 사용하였다. 수퍼셀 공간에서의 주기성을 고려하면, $Ce_{0.875}Zr_{0.125}O_2$ 수퍼셀에서는 71 개의 비등가 고용체가 있었다(표 1 참조). 71 개 구조의 계산된 에너지 목록에

기초하여, 4 개의 변수 조절과 유전 알고리즘을 통해 최소 에너지 구조를 찾도록 하였다.

[0113] 매개변수에 대한 자세한 내용을 하기 표 2에 나타내었다. 유전 알고리즘에 설정된 변수 개수는 4 개체수(6, 10, 20, 50), 9 교차율(0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9), 7 변이율(0.001, 0.002, 0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1) 및 5 온도(100, 500, 1000, 1500, 2000 K)였다. 이 유전 알고리즘 과정은 반복성을 확인하기 위해 7 번 반복되었다. 각 과정은 40 세대까지 수행되었다. 총 계산 수는 7,585,200 이었다. 이는 설정된 매개 변수 개수를 곱하여 결정된다. 86(개체수)* 9(교차율)*7(변이율)*5(온도)*40(세대)*7(반복).

표 2

Table 2
Variation of population, crossover rate, mutation rate, and temperature to find the minimum energy structure of the $2 \times 2 \times 2$ cubic $\text{Ce}_{0.875}\text{Zr}_{0.125}\text{O}_2$ supercell using the genetic algorithm.

Parameters	Set values	Generation	Repetition	Total number of calculations
Population	6, 10, 20, 50	40	7	7,585,200
Crossover rate	0.1-0.9 by 0.1			
Mutation rate	0.001, 0.002, 0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1			
Temperature	100, 500, 1000, 1500, 2000			

[0115]

[0117] 도 3은 4 개의 변수를 통해 $2 \times 2 \times 2$ $\text{Ce}_{0.875}\text{Zr}_{0.125}\text{O}_2$ 수퍼셀의 최소 에너지 구조를 찾는 성공률을 나타낸다. 개체수와 변이율이 증가함에 따라 성공률 또한 증가하였다. 그러나 개체수가 많아지면 계산 시간도 빠르게 증가하기 때문에 적절한 개체수를 선택해야 한다.

[0118] 높은 변이율은 안정한 에너지 값을 갖는 구조를 방해하기 때문에 낮은 변이율을 선택해야 한다. 교차율의 경우 낮은 값은 현재 구조를 유지하는 반면, 높은 값은 안정한 에너지를 나타내는 구조를 방해하는 경향이 있다. 고 온은 또한 안정한 에너지를 나타내는 구조를 방해한다. 이 계산에 근거하여 네 개의 매개 변수에 대한 최적 값을 선택하였다. 개체수, 교차율, 변이율 및 온도 값은 각각 20, 0.6, 0.002 및 500 K였다.

[0120] <밀도범함수이론, Density Functional Theory>

[0121] 모든 밀도범함수이론(DFT) 계산은 Vienna Ab initio 시뮬레이션 패키지 (VASP)(The Vienna Ab initio Simulation Package)를 사용하여 수행되었다. 전자 파동함수는 Kresse and Joubert에 의해 VASP에서 구현된 Blochl의 프로젝터 증강파(Projector Augmented Wave, PAW) 방법을 사용하여 표현되었다. 교환 상관 에너지는 Perdew, Burke, Ernzerhof의 GGA(generalized gradient approximation)에 의해 표현되었다. 5 eV의 유효 $U(U_{\text{eff}} = U - J)$ 를 Ce 원자에 가하였다. 파동함수는 500 eV의 컷오프 에너지의 평면파로 확장되었다. 부분 파동은 Gaussian smearing 방법으로 계산하였고, 스미어링의 폭은 0.05 eV였다. 스핀 분극은 모든 수퍼셀 계산에 채택되었다. 순차적 계산 단계 사이의 총 에너지 차이가 각각 10⁻⁵ 및 10⁻⁴ eV 미만에서 전자 및 기하학적 최적화가 수행되었다.

[0123] <평가>

[0124] 24 개의 Ce, 8 개의 Zr 및 64 개의 O 원자를 함유한 $2 \times 2 \times 2$ $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 수퍼셀을 조사하여 네 가지 매개변수 조절과 유전 알고리즘을 사용하여 안정한 에너지의 고용체를 규명하였다.

[0125] 도 4의 (a)는 세대 함수로서 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 구조의 계산된 상대 에너지를 보여준다. 에너지 값 중 최소 에너지는 0으로 설정되었다. 세대가 증가함에 따라 각 세대의 가장 낮은 에너지가 감소하고 22 세대 이후에 거의 포화된 것을 알 수 있다. 후속 반복 계산에서 유사한 결과가 얻어졌다.

[0126] 도 4의 (b)는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 수퍼셀의 상대 에너지를 체적의 함수로 나타낸 것이다. 청색 원으로 채색된 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체의 부피는 초록색 원으로 채색된 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물의 부피와 유사하다. Zr 원자는 화합물 수퍼셀에서 규칙적으로 이격되어 있다. $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물 (1259 Å³)의 체적은 $2 \times 2 \times 2$ CeO_2 수퍼셀(1322 Å³),

도 4에 표시되지 않음)의 체적보다 낮다. 주황색 원으로 채색된 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체의 부피는 증가했고, 에너지는 감소한 경향을 나타냈다. 이러한 결과는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체가 체적 팽창에 의해 안정되었음을 나타낸다.

[0127] 도 4의 (c)는 화합물의 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 수퍼셀 및 가장 낮은 에너지를 갖는 고용체를 도시한다. 중심에 Zr 원자를 갖는 다면체는 화합물에서 입방체인 반면, 고용체에서 심하게 왜곡되었다.

[0129] 도 5의 (a)는 $2 \times 2 \times 2$ $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물과 고용체에서 Ce-O와 Zr-O 결합 길이에 대한 결합 수를 보여준다. 입방체 CeO_2 및 단사정계 ZrO_2 는 Ce-O 및 Zr-O 결합 길이에 대한 기준으로 포함되었다. $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물의 Ce-O 및 Zr-O 결합 길이는 각각 2.38 및 2.28 Å이고, 이의 Ce-O 결합 길이는 입방체 CeO_2 의 길이와 유사하다. 체적 변화가 적은 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체의 Ce-O 및 Zr-O 결합 길이의 분포는 약간 넓어졌다. 체적 변화가 큰 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체의 평균 Zr-O 결합 길이는 2.28 Å에서 2.23 Å로 감소하였다. Ce-O 및 Zr-O 결합 길이의 분포는 현저하게 넓어졌지만 평균 Ce-O 결합 길이는 변하지 않았다. 2.23 Å의 감소된 Zr-O 결합 길이는 단사정계 ZrO_2 (2.18 Å)의 것과 유사하게 되었고, 이는 단사정계 ZrO_2 다면체가 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체에서 체적 팽창 및 에너지 이점을 가지고 형성되었음을 나타낸다. 최소 에너지를 갖는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체의 경우, Ce-O 및 Zr-O 결합 길이가 조금 더 넓어졌다.

[0130] 도 5의 (b)는 $2 \times 2 \times 2$ 입방 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물과 고용체에서 Ce와 Zr 원자의 유효 배위수(effective coordination number)를 보여준다. CeO_2 및 단사정계 ZrO_2 도 참고 자료로 포함되었다. 입방 CeO_2 와 화합물의 유효 배위수는 8이었다. 작은 체적 변화를 갖는 고용체의 유효 배위수는 화합물의 유효 배위수와 유사하였다. 큰 체적변화를 갖는 고용체의 Zr 원자의 유효 배위수는 감소하고 단사정계 ZrO_2 의 유효 배위수(6.63)에 가까워졌다. 유효 배위수의 경향은 도 5의 (a)에 나타난 결합 길이의 변화와 잘 대응되는 것을 알 수 있다.

[0132] <결론>

[0133] 유전 알고리즘과 밀도범함수이론을 사용하여 안정한 에너지의 입방 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체를 연구하였다. 28 개의 Ce, 4 개의 Zr 및 64 개의 O 원자를 포함하는 $2 \times 2 \times 2$ $\text{Ce}_{0.875}\text{Zr}_{0.125}\text{O}_2$ 수퍼셀을 사용하여 유전 알고리즘의 매개변수 (개체수, 교차율, 변이율, 온도)의 최적 값을 구하였다. 이 값을 $2 \times 2 \times 2$ $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 수퍼셀에 적용하여 안정한 에너지의 고용체를 규명하였다. $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 고용체는 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물과 비교하여 일부 체적 팽창을 갖는 단사정계 ZrO_2 와 유사한 다면체를 함유하였다. 상기 고용체는 또한 순수 CeO_2 , ZrO_2 및 $\text{Ce}_{0.75}\text{Zr}_{0.25}\text{O}_2$ 화합물과 비교하여 Ce-O 및 Zr-O 결합 길이의 확장을 나타내었다.

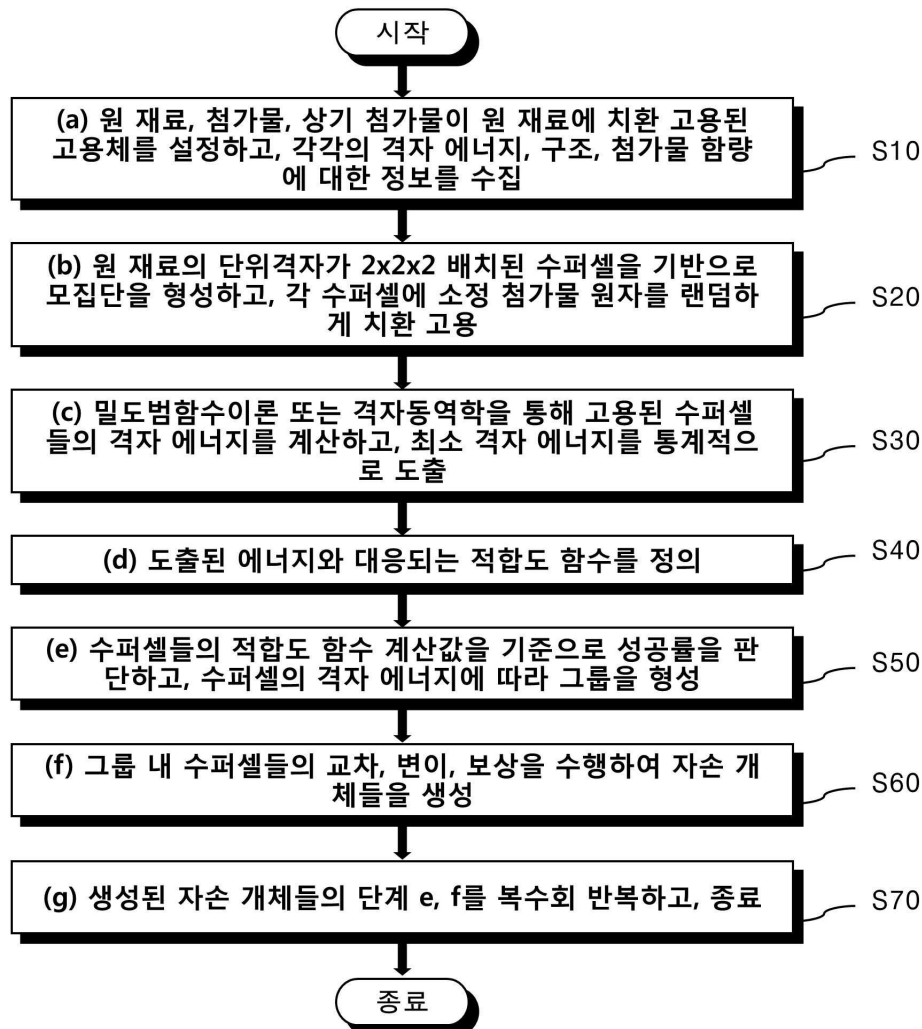
[0135] 지금까지 본 발명의 일 양태에 따른 유전 알고리즘을 통한 고용체의 최소에너지 결정구조 규명방법에 관한 구체적인 실시예에 관하여 설명하였으나, 본 발명의 범위에서 벗어나지 않는 한도 내에서는 여러 가지 실시 변형이 가능함을 자명하다.

[0136] 그러므로 본 발명의 범위에는 설명된 실시예에 국한되어 정해져서는 안 되며, 후술하는 특허청구범위뿐만 아니라 이 특허청구범위와 균등한 것들에 의해 정해져야 한다.

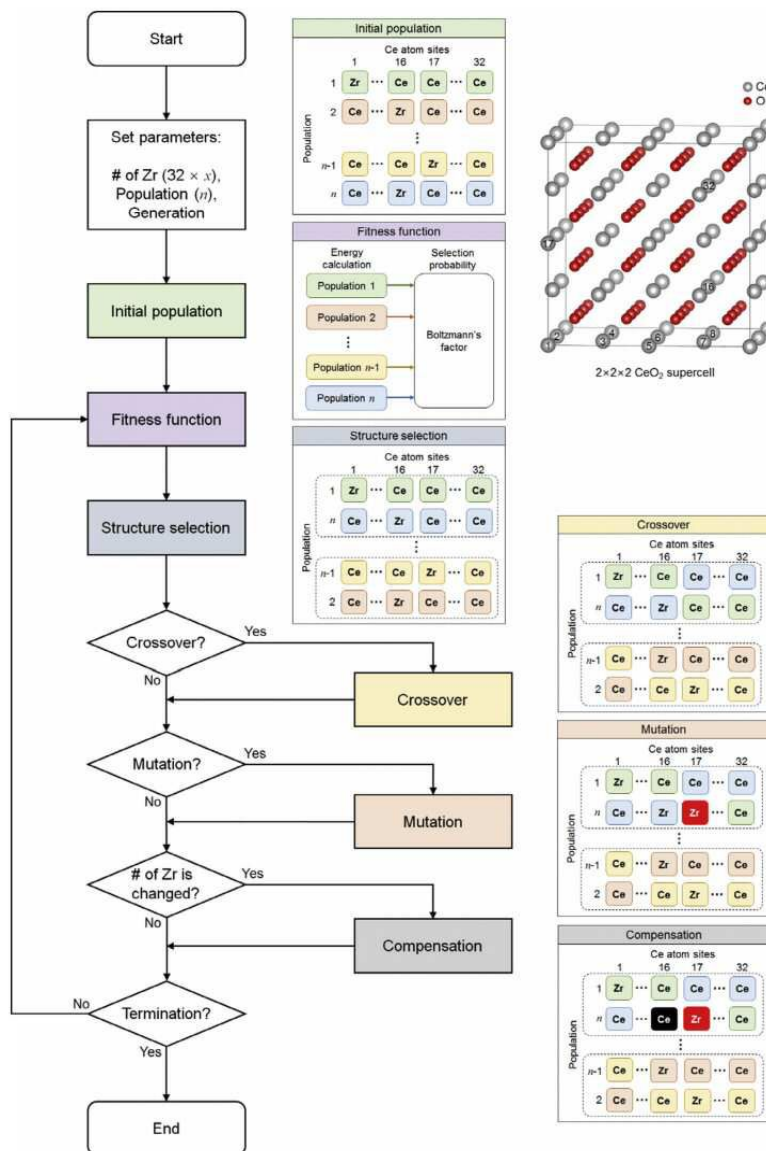
[0137] 즉, 전술된 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며, 한정적인 것이 아닌 것으로 이해되어야 하며, 본 발명의 범위는 상세한 설명보다는 후술될 특허청구범위에 의하여 나타내어지며, 그 특허청구범위의 의미 및 범위 그리고 그 등가 개념으로부터 도출되는 모든 변경 또는 변형된 형태가 본 발명의 범위에 포함되는 것으로 해석되어야 한다.

도면

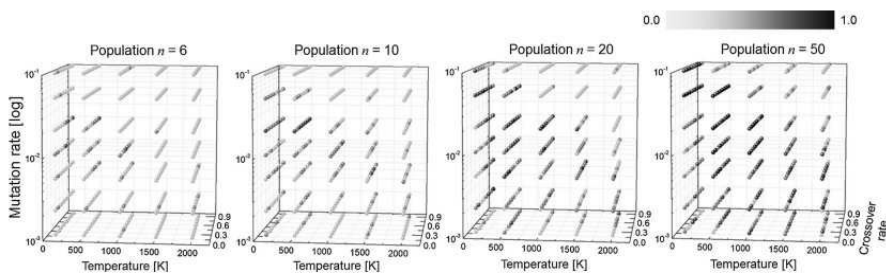
도면1



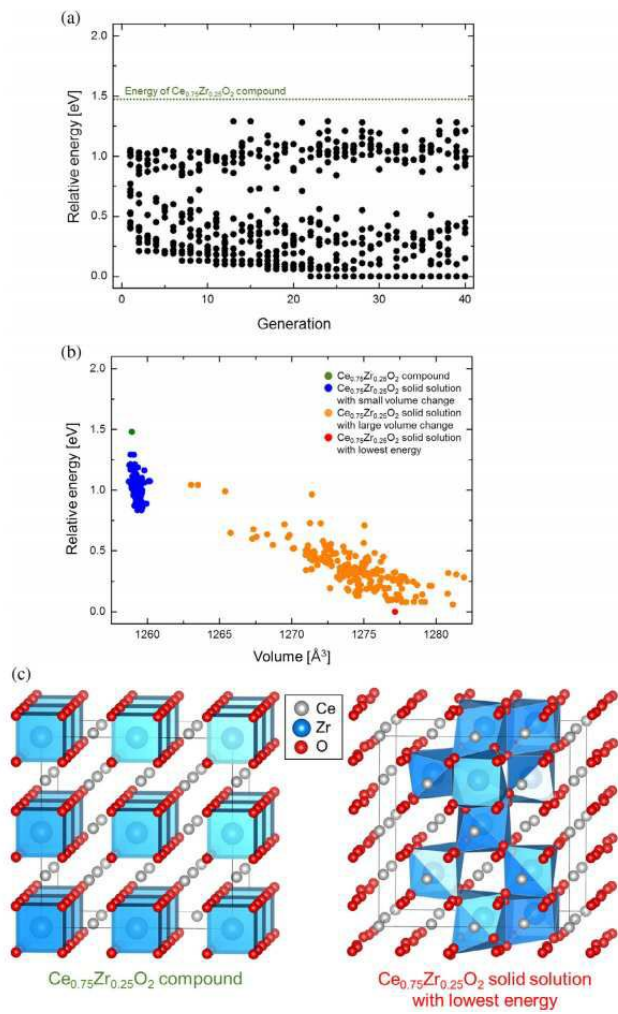
도면2



도면3



도면4



도면5

