



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0127488
(43) 공개일자 2022년09월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

G16C 20/30 (2019.01) G06N 20/00 (2019.01)
G06N 3/08 (2006.01) G16C 20/10 (2019.01)
G16C 20/60 (2019.01) G16C 20/70 (2019.01)
G16C 20/80 (2019.01)

(52) CPC특허분류

G16C 20/30 (2019.02)
G06N 20/00 (2021.08)

(21) 출원번호 10-2021-0031827

(22) 출원일자 2021년03월11일

심사청구일자 2021년03월11일

(71) 출원인

한국과학기술연구원

서울특별시 성북구 화랑로14길 5 (하월곡동)

고려대학교 산학협력단

서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 (안암동5가)

(72) 발명자

김동훈

서울특별시 성북구 화랑로14길 5

티웅, 레슬리 청 오우

서울특별시 성북구 화랑로14길 5

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

이인행, 김한, 김남식

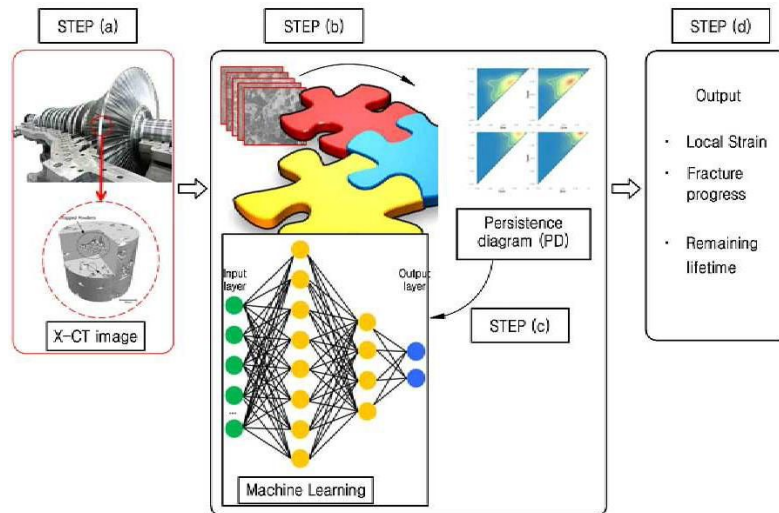
전체 청구항 수 : 총 8 항

(54) 발명의 명칭 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법

(57) 요약

본 발명은 컴퓨터에 탑재된 인공지능을 통해 재료의 물성을 예측하는 방법으로서, 시편의 파괴 시험을 통해 상기 시편의 물성을 측정하고, 상기 물성이 도출된 시편의 미세조직을 컴퓨터 단층 촬영(X-CT)을 이용하여 이미지 형태의 제 1 정보로 획득하는 단계와, 상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)를 이용하여 정량화된 제 2 정보로 변환시키는 단계와, 상기 물성 및 상기 제 2 정보를 상기 인공지능에 투입하여 상기 인공지능의 기계적 학습을 수행하는 단계와, 상기 인공지능이 상기 기계적 학습 결과를 기반으로 임의의 재료에 대한 물성을 예측하여 출력하는 단계를 포함하는 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법을 제공한다.

대표도



(52) CPC특허분류

G06N 3/08 (2013.01)

G16C 20/10 (2019.02)

G16C 20/60 (2019.02)

G16C 20/70 (2019.02)

G16C 20/80 (2019.02)

(72) 발명자

손석수

서울특별시 동대문구 서울시립대로 19, 102동 100
4호

이건직

경상남도 진주시 강남로189번길 7-3, 1층

명세서

청구범위

청구항 1

컴퓨터에 탑재된 인공지능을 통해 재료의 물성을 예측하는 방법으로서,

(a)시편의 파괴 시험을 통해 상기 시편의 물성을 측정하고, 상기 물성이 도출된 시편의 미세조직을 컴퓨터 단층 촬영(X-CT)을 이용하여 이미지 형태의 제 1 정보로 획득하는 단계;

(b)상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)를 이용하여 정량화된 제 2 정보로 변환시키는 단계;

(c)상기 물성 및 상기 제 2 정보를 상기 인공지능에 투입하여 상기 인공지능의 기계적 학습을 수행하는 단계; 및

(d)상기 인공지능이 상기 기계적 학습 결과를 기반으로 임의의 재료에 대한 물성을 예측하여 출력하는 단계; 를 포함하는,

인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 (d) 단계는,

상기 임의의 재료의 미세조직을 컴퓨터 단층 촬영(X-CT)을 이용하여 이미지 형태의 제 1 정보로 획득하는 단계;

상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)를 이용하여 정량화된 제 2 정보로 변환시키는 단계; 및

상기 제2 정보를 상기 인공지능에 투입하고, 상기 인공지능이 상기 임의의 재료에 대한 물성을 예측하여 출력하는 단계; 를 포함하는,

인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 제 1 정보는 재료 내부에 포함된 기공(void)에 대한 이미지를 포함하는,

인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법.

청구항 4

제 3 항에 있어서,

상기 제 2 정보는 상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 이용하여 변환한 기공의 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지인,

인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

상기 인공지능은 CNN(Convolution Neural Network)인,

인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법.

청구항 6

제 3 항에 있어서,

상기 제 2 정보는 상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 이용하여 변환한 기공의 지속 다이어그램(persistence diagram)을 분석하여 도출한 정량적 기공정보인,

인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법.

청구항 7

제 6 항에 있어서,

상기 정량적 기공정보는 기공의 크기, 개수, 밀도, 평균거리 및 기공 분포의 비균일성 중 어느 하나 이상을 포함하는,

인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법.

청구항 8

제 7 항에 있어서,

상기 인공지능은 DNN(Deep Neural Network)인,

인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법.

발명의 설명

기술 분야

- [0001] 본 발명은 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 관한 것으로서, 더 상세하게는 컴퓨터 시뮬레이션을 활용하여 컴퓨터에 탑재된 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측하는 방법에 관한 것이다.

배경 기술

- [0002] 재료의 물성은 재료가 외력에 노출되었을 때 나타나는 강도, 연성, 강성 등과 같은 고유한 역학적 성질을 포함한다. 예를 들어, 재료 중에 구조용으로 널리 사용되는 금속재료를 구조금속재료에 사용하기 위해서는 적용 환경에 적합한 기준 이상의 물성을 가져야 하기 때문에, 재료의 물성을 검토할 필요가 존재한다.
- [0003] 재료가 일정량 이상의 외력을 받아 변형 및 파괴가 발생하기 위해서는 재료 내부의 기공이 형성되고 성장이 일어나야 한다. 그렇기에 재료 내부의 기공 분포, 크기, 밀도를 계산함으로써 재료의 물성을 예측할 수 있다.
- [0004] 하지만, 계산을 통해 얻을 수 있는 환경은 1축 외력과 같은 단순화된 외력 상태에 국한되어 있어, 실제 복잡한 사용환경을 반영하여 계산 및 예측하기는 매우 어렵다는 문제점이 존재한다.
- [0005] 따라서, 다양한 종류의 외력이 적용되는 실사용 환경에서 실시간으로 재료의 물성을 정확하게 예측할 수 있는 방법이 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0006] 본 발명은 인공지능을 기반으로 하는 컴퓨터 시뮬레이션을 통하여 재료의 파단 또는 파괴와 관련된 물성을 실시간으로 정확하게 예측할 수 있는 재료의 물성 예측 방법을 제공하고자 한다. 본 실시예가 이루고자 하는 기술적 과제는 상기된 바와 같은 기술적 과제들로 한정되지 않으며, 이하의 실시예들로부터 또 다른 기술적 과제들이 유추될 수 있다.

과제의 해결 수단

- [0007] 본 발명의 일 관점에 따르면, 컴퓨터에 탑재된 인공지능을 통해 재료의 물성을 예측하는 방법으로서, (a)시편의 파괴 시험을 통해 상기 시편의 물성을 측정하고, 상기 물성이 도출된 시편의 미세조직을 컴퓨터 단층 촬영(X-

CT)을 이용하여 이미지 형태의 제 1 정보로 획득하는 단계; (b)상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)를 이용하여 정량화된 제 2 정보로 변환시키는 단계; (c)상기 물성 및 상기 제 2 정보를 상기 인공지능에 투입하여 상기 인공지능의 기계적 학습을 수행하는 단계; 및 (d)상기 인공지능이 상기 기계적 학습 결과를 기반으로 임의의 재료에 대한 물성을 예측하여 출력하는 단계; 를 포함하는, 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법이 제공된다.

[0008] 상기 (d) 단계는, 상기 임의의 재료의 미세조직을 컴퓨터 단층 촬영(X-CT)을 이용하여 이미지 형태의 제 1 정보로 획득하는 단계; 상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)를 이용하여 정량화된 제 2 정보로 변환시키는 단계; 및 상기 제2 정보를 상기 인공지능에 투입하고, 상기 인공지능이 상기 임의의 재료에 대한 물성을 예측하여 출력하는 단계; 를 포함할 수 있다.

[0009] 상기 제 1 정보는 재료 내부에 포함된 기공(void)에 대한 이미지를 포함할 수 있다.

[0010] 상기 제 2 정보는 상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 이용하여 변환한 기공의 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지일 수 있다.

[0011] 상기 인공지능은 CNN(Convolution Neural Network)일 수 있다.

[0012] 상기 제 2 정보는 상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 이용하여 변환한 기공의 지속 다이어그램(persistence diagram)을 분석하여 도출한 정량적 기공정보일 수 있다.

[0013] 상기 정량적 기공정보는 기공의 크기, 개수, 밀도, 평균거리 및 기공 분포의 비균일성 중 어느 하나 이상을 포함할 수 있다.

[0014] 상기 인공지능은 DNN(Deep Neural Network)일 수 있다.

발명의 효과

[0015] 상기한 바와 같이 이루어진 본 발명의 일 실시예에 따르면, 재료 내부의 기공 분포, 크기, 밀도를 계산함으로써 재료의 물성을 신속하고 정확하게 예측할 수 있는 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법을 구현할 수 있다. 물론 이러한 효과에 의해 본 발명의 범위가 한정되는 것은 아니다.

도면의 간단한 설명

[0016] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법을 개략적으로 도시한 것이다.

도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 있어서 제1 정보를 획득하는 과정을 나타낸 것이다.

도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 있어서 제1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 이용하여 기공의 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지로 변환하는 것을 나타낸 것이다.

도 4는 도 3에서 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 통해 변환된 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지와 재료 내의 기공정보의 상관관계를 나타낸 것이다.

도 5는 도 3에서 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 통해 변환된 다이어그램(persistence diagram)의 이미지를 바탕으로 정량적 기공정보를 도출하는 것을 나타낸 것이다.

도 6은 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 관한 것으로서, 파단 시험을 진행한 임의의 재료로부터 취득된 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지를 나타낸 것이다.

도 7은 본 발명의 다른 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 관한 것으로서, 도 6에서 취득된 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지로부터 도출된 기공의 크기 및 개수와, 기공 간의 밀도 및 평균거리와, 기공 분포의 비균일성을 나타낸 것이다.

도 8은 본 발명의 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 관한 것으로서, 인공지능의 분류 정확도를 포함한 예측 결과를 나타낸 표를 도시한 것이다.

도 9는 본 발명의 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 관한 것으로서, 인공지능의 예측 오차에 관한 평균 절대 오차를 포함한 예측 결과를 나타낸 표와, 이러한 예측 결과를 나타낸 그래프를 도시한

것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0017] 아래에서는 첨부한 도면을 참조하여 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게 실시할 수 있도록 본 발명의 실시예를 상세히 설명한다. 그러나 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명하는 실시예에 한정되지 않는다. 그리고 도면에서 본 발명을 명확하게 설명하기 위해서 설명과 관계없는 부분은 생략하였으며, 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 유사한 도면 부호를 붙였다.
- [0018] 본 개시의 일부 실시예는 기능적인 블록 구성 및 다양한 처리 단계들로 나타내어질 수 있다. 이러한 기능 블록들의 일부 또는 전부는, 특정 기능들을 실행하는 다양한 개수의 하드웨어 및/또는 소프트웨어 구성들로 구현될 수 있다. 예를 들어, 본 개시의 기능 블록들은 하나 이상의 마이크로프로세서들에 의해 구현되거나, 소정의 기능을 위한 회로 구성들에 의해 구현될 수 있다. 또한, 예를 들어, 본 개시의 기능 블록들은 다양한 프로그래밍 또는 스크립팅 언어로 구현될 수 있다. 기능 블록들은 하나 이상의 프로세서들에서 실행되는 알고리즘으로 구현될 수 있다. 또한, 본 개시는 전자적인 환경 설정, 신호 처리, 및/또는 데이터 처리 등을 위하여 종래 기술을 채용할 수 있다. “매커니즘”, “요소”, “수단” 및 “구성” 등과 같은 용어는 넓게 사용될 수 있으며, 기계적이고 물리적인 구성들로서 한정되는 것은 아니다.
- [0019] 또한, 본 명세서에서 사용되는 “제1” 또는 “제2” 등과 같이 서수를 포함하는 용어는 다양한 구성 요소들을 설명하는데 사용할 수 있지만, 상기 구성 요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다.
- [0020] 이하 첨부된 도면을 참고하여 본 발명을 상세히 설명하기로 한다.
- [0021] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법을 개략적으로 도시한 것이다.
- [0022] 도 1을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법은 컴퓨터에 탑재된 인공지능을 통해 재료의 물성을 예측하는 방법으로서, (a)시편의 파괴 시험을 통해 상기 시편의 물성을 측정하고, 상기 물성이 도출된 시편의 미세조직을 컴퓨터 단층 촬영(X-CT)을 이용하여 이미지 형태의 제 1 정보로 획득하는 단계; (b)상기 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)를 이용하여 정량화된 제 2 정보로 변환시키는 단계; (c)상기 물성 및 상기 제 2 정보를 상기 인공지능에 투입하여 상기 인공지능의 기계적 학습을 수행하는 단계; 및 (d)상기 인공지능이 상기 기계적 학습 결과를 기반으로 임의의 재료에 대한 물성을 예측하여 출력하는 단계;를 포함한다.
- [0023] 보다 구체적으로, 여러개의 재료 시편에 대하여 반복적 파단 시험을 진행하여 금속 내부의 존재할 수 있는 기공들에 대한 위상적 변화를 일으켜, X-CT을 통해 금속 내부의 위상적 정보를 측정하여 제1 정보를 습득할 수 있다. 습득된 제1 정보를 다량 축적하여 데이터 베이스를 구축한 후, 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 통해 제1 정보를 정량화된 제2 정보로 변환시켜, 재료 내부의 위상적 정보를 분석할 수 있다. 인공지능에 투입되는 값은 제2 정보를 사용하고, 최종적인 출력 값은 재료의 물성에 해당한다. 여기서, 물성은 국부 변형율, 파괴인성율, 잔여수명을 포함할 수 있다. 인공지능은 투입되는 값과 출력되는 값 사이의 상관관계를 학습하여, 이를 바탕으로 재료의 물성을 예측하고 예측결과를 출력할 수 있다.
- [0024] 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 있어서 제1 정보를 획득하는 과정을 나타낸 것이다.
- [0025] 도 2를 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법은 제1 정보로서 재료에 대한 X-CT 측정결과 이미지를 250장씩 묶어서 하나의 데이터로 인식하며, 재료의 다른 외력 조건에 의해 다른 물성을 가질 때, 이를 X-CT로 측정한다. 여기서, 제 1 정보는, 예를 들어, 재료 내부에 포함된 기공(void)을 촬영한 이미지일 수 있다. 한편, 제1 정보에서 얻을 수 있는 재료 내부의 정보는 매우 불규칙적이고 복잡한 형태를 띠고 있어 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능에 적용하기에 부적합하여, 제1 정보에 대한 정량화가 필요하다. 이를 위해, 서로 다른 물성을 가질 때 재료 내부의 정보를 분석함으로써, 재료 내부 정보와 물성의 상관관계를 도출해낼 수 있다.
- [0026] 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 있어서 제1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 이용하여 기공의 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지로 변환하는 것을 나타낸 것이다.
- [0027] 도 3을 참조하면, 제1 정보인 X-CT 이미지 데이터 내에 존재할 수 있는 기공정보를 위상적 데이터 분석법

(topological data analysis)을 활용하여 지속 다이어그램(persistence diagram) 형태의 정량화된 제2 정보로 변환한다. 위상적 데이터분석법은 데이터 내에 존재할 수 있는 위상적 특징을 추출하는 접근 방식이며, 데이터 내의 복잡한 관계를 수학적으로 표현할 수 있다. 이 순서도는 크게 3단계로 나뉜다. 첫번째 과정은 픽셀화(pixelation) 과정이며, 제1 정보인 X-CT 이미지에서 관찰된 기공에 대하여 픽셀로 구분하여 수학적 공간으로 변환시키는 과정이다. 두번째 과정은 필터레이션(filtration)과정이며, 픽셀화된 수학적 공간에서 역치(threshold)값을 서서히 변화시켜가면서 기공들의 출생(birth)과 탄생(death) 시점을 기록하는 과정이다. 마지막 과정으로서, 상기 기록된 출생과 탄생 시점을 지속 다이어그램(persistence diagram) 형태로 변환하는 과정이다.

[0028] 도 3에 도시된 픽셀화(pixelation) 과정에 있어서, 상단은 기공의 원래 이미지이며, 하단은 상기 원래 이미지에 픽셀을 형성하여 픽셀화한 것이다. 또한 t_0 내지 t_4 는 기공의 성장 과정을 시간대별로 구분하기 위한 설정한 시간이다.

[0029] 도 3에 도시된 필터레이션(filtration)과정을 보면, t_1 , t_2 , t_3 , t_4 를 역치값으로 하여 각 시간 별로 기공의 크기를 나타낸 것이다. 예를 들어 t_1 의 경우에는 붉은 색으로 표시되어 있는 부분이 t_1 시간에서의 기공의 크기를 나타낸다. 필터레이션 중 t_1 에 나타낸 birth는 해당 기공이 t_1 에 탄생되었음을 의미한다. 한편 성장하는 기공들이 서로 접촉(contact)하게 되는 순간 기공이 사망(death) 시점에 해당되게 된다. 예를 들어 t_1 에 탄생된 기공은 시간이 경과되어 t_4 에 이르게 되면 인접한 기공과 접촉되며 사망하게 된다.

[0030] 도 3에 도시된 지속 다이어그램(persistence diagram)은 픽셀화된 각 기공의 탄생 시점과 사망 시점을 x-y 좌표로 그래프화 한 지속 다이어그램으로서, 상술한 기공의 경우에는 t_1 에 형성되어 t_4 에 사망하므로 (t_1 , t_4) 좌표가 그래프에 표시되게 된다.

[0031] 도 4는 도 3에서 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)에 의해 3차원 X-CT 이미지로부터 변환된 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지와 재료 내의 기공정보의 상관관계를 나타낸 것이다.

[0032] 도 4를 참조하면, X-CT로 촬영한 실제 기공에 대한 정보를 기반으로 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)에 의해 지속 다이어그램(persistence diagram)을 도출해낼 수 있다. 도 4(a)에는 X-CT로 촬영한 실제 기공에 대한 정보가 나타나 있으며, 도 4(b)에는 이를 기반으로 위상적 데이터분석법으로 도출한 지속 다이어그램(persistence diagram)이 나타나 있다. 도 4에 도시된 지속 다이어그램(persistence diagram)은 도 3의 t_2 시간대의 기공 크기를 0으로 설정하였을 경우, 그 이전에 탄생된 기공들의 탄생 및 사망 시점의 기공 크기를 상대적으로 나타낸 것이다. 여기서 음의 값은 해당 기공이 t_2 이전에 탄생 혹은 사망된 것을 의미하며, 양의 값은 t_2 로부터 소정 시간 경과된 후 탄생 혹은 사망된 것을 의미한다. 본 그래프에서 t_2 이후에 탄생된 것은 배제하여 나타나 있지는 않았다. 도 4에 나타난 지속 다이어그램(persistence diagram)에서 네 영역으로 구분하여 기공들의 크기, 개수, 그리고 분포도에서 유의미한 차이가 관측된다. 좌측(즉 탄생시점이 상대적으로 빠른 영역)은 기공들의 크기가 크며, 우측(즉 탄생시점이 상대적으로 늦은 영역)은 기공들의 크기가 작다. 상단(즉, 사망시점이 상대적으로 늦은 영역)은 기공들의 평균거리가 멀고, 하단(즉, 사망시점이 상대적으로 빠른 영역)은 기공들의 평균거리가 짧다. 즉, 좌측 하단은 기공들이 일찍 탄생되어 그 만큼 크기가 크나 탄생 후 빠르게 접촉되어 응집되면서 사망하게 되는 영역이다. 좌측 상단은 기공들이 이른 시간에 탄생되어 크기가 크나 서로 접촉되기까지 시간이 많이 경과되어 그 만큼 기공 간에 서로 이격거리가 큰 분산된 형태를 나타내게 된다. 우측 상단은 늦은 시간에 형성되어 기공의 크기가 작으며 사망까지 이르는 시간도 길어 넓게 분산된 기공 구조를 나타낸다. 우측 하단은 늦은 시간에 형성되어 기공의 크기가 작고 반면 탄생 후 빠르게 접촉되어 사망이 이르러 응집된 기공구조를 나타내게 된다.

[0033] 도 4(b)에 도시된 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지는 인공지능에 입력되는 제2 정보로서 활용될 수 있다. 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지를 입력 데이터로 활용하여 인공지능의 기계적 학습을 수행할 수 있으며, 이렇게 학습된 인공지능은 임의의 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지가 입력될 경우에 그 이미지에 해당되는 재료의 물성을 예측하여 출력할 수 있다.

[0034] 다른 예로서, 상기 지속 다이어그램을 분석하여 이로부터 해당 재료의 정량적인 기공정보를 도출하여 이를 제2 정보로 활용할 수 있다.

[0035] 도 5는 도 3에서 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 통해 변환된 다이어그램(persistence

diagram)의 이미지를 바탕으로 정량적 기공정보를 도출하는 것을 나타낸 것이다. 즉, 기계적 학습이 수행된 인공지능에 투입되는 입력 값의 일 예로서, 지속 다이어그램(persistence diagram)으로부터 정량적인 기공정보를 도출하는 과정을 개념적으로 보여준다.

[0036] 도 5를 참조하면, 지속 다이어그램(persistence diagram)으로부터 기공의 크기(size) 및 개수(number), 밀도(density) 및 평균거리(void-pair distances), 기공 분포의 비균일성(heterogeneity)을 수학적으로 출생 및 탄생 기록값들을 이용하여 정의한다.

[0037] 도 5(a)에는 지속 다이어그램(persistence diagram)으로부터 도출한 시편 내에 기공의 크기 및 개수에 따른 기공의 탄생 히스토그램(birth(b) histogram)이 나타나 있다. 상기 히스토그램의 x축 값인 b는 특정 시간대에 탄생된 기공을 크기로 나타낸 것으로 우측으로 갈수록 기공의 크기가 커짐을 의미한다. [수학식1]에 있어서 S는 기공들의 산술평균 크기로 정의한다. 여기서 N은 기공의 총 개수를 의미하고, b는 출생 시점을 의미한다.

$$S = \frac{\sum_{i=1}^N b_i}{N} \quad [\text{수학식 1}]$$

[0041] 도 5(b)에는 기공의 크기 및 개수가 동일한 경우의 기공의 사망시간에서 탄생시간을 뺀 값인 수명(lifetime, d-b) 히스토그램을 나타낸다. 본 히스토그램을 참조하면, 기공의 수명이 짧다는 것은 그 만큼 기공이 서로 접촉하는 데까지 소요되는 시간이 짧다는 것을 의미하며, 이는 기공들 간 밀도가 크고 서로 응집하는 구조를 나타냄을 의미한다(close void-pairs). 반대로 기공의 수명이 길다라는 것은 그 만큼 기공이 서로 접촉하는 데까지 소요되는 시간이 길다는 것을 의미하며, 이는 기공들이 서로 분산되어 있는 구조를 나타냄을 의미한다(distant void-pairs).

[0042] [수학식2]에 있어서 D는 인접한 기공쌍들(void-pairs)의 평균거리(기하평균)로 정의한다. 여기서 N은 기공의 총 개수를 의미하고, b와 d는 각각 출생과 사망 시점을 의미한다.

$$D = \sqrt[N]{\prod_{i=1}^N d_i - b_i}, \quad [\text{수학식 2}]$$

[0046] 도 5(c)에는 기공의 크기와 개수가 동일한 경우 기공 분포의 비균일성을 나타낸다. 기공분포의 비균일성이 작을수록 기공 수명의 분산(혹은 표준편차)이 작은 값을 나타내어 기공이 시편 내에서 균일하게 퍼져있는 균일한 분포(homogeneous distribution)을 나타내며, 반대로 비균일성이 클수록 기공 수명의 분산(혹은 표준편차)이 큰 값을 나타내어 기공이 시편 내에서 특정한 영역에만 집중적으로 분포하는 비균일한 분포(heterogeneous distribution)가 나타나게 된다.

[0047] [수학식3]에 있어서 V는 기공들의 분포 비균일성(heterogeneity)로 정의한다. 여기서 N은 기공의 총 개수를 의미하고, b와 d는 각각 출생과 사망 시점을 의미한다. D는 상기 수학식2에서 정의되어 있다.

$$V = \sqrt[N]{\left| \prod_{i=1}^N (d_i - b_i) - D \right|}, \quad [\text{수학식 3}]$$

[0051] 이하에서는, 본 발명의 이해를 돕기 위한 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법의 실시예들을 설명한다. 다만, 하기의 실시예들은 본 발명의 이해를 돕기 위한 것일 뿐, 본 발명이 아래의 실시예만으로 한정되는 것은 아니다.

[0052] <실시예 1> 인공지능으로서 콘볼루션신경망네트워크(Convolution Neural Network, 이하 CNN)을 이용한 재료의 물성 예측 방법

[0053] 본 발명의 일 실시예에 따른 재료의 물성 예측 방법은 기계적 학습을 수행하는 인공지능으로서 CNN(Convolution

Neural Network) 알고리즘을 사용한 것을 포함한다. 이 때, CNN 인공지능에 투입되는 제2 정보는 시편의 미세조직을 컴퓨터 단층 촬영(X-CT)을 이용하여 얻은 제 1 정보 이미지를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 이용하여 변환한 기공의 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지 자체일 수 있다.

[0054] 도 6은 본 발명의 일 실시예에 따라 인공지능으로서 CNN(Convolution Neural Network)을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 관한 것으로서, 파단 시험을 진행한 임의의 재료로부터 취득된 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지를 나타낸 것이다.

[0055] 도 6을 참조하면, 페라이트 강 시편을 인장 파단 시험 완료 후 시편의 영역별(part 1 내지 part 4)로 X-CT 촬영을 통해 제 1 정보로서 기공 이미지를 획득한 후, 이를 기반으로 위상적 데이터분석법을 통해 제 2 정보인 지속 다이어그램(persistence diagram)을 도출한 결과를 확인할 수 있다. 도 6에 도시되어 있듯이, 제 1 부분(part 1)이 시편의 파단면으로부터 가장 멀리있는 영역이며, 제 4 부분(part 4)이 시편의 파단면으로부터 가장 가까운 영역이다. 제 1 부분 내지 제 4 부분의 국부 변형률(local strain)은 각각 0.17, 0.23, 0.40 및 0.82 이다. 각 영역별로 도출된 지속 다이어그램(persistence diagram)이 서로 상이한 형태를 보임을 알 수 있다. 이러한 지속 다이어그램(persistence diagram)을 통해 금속재료 내부에 존재하는 정보에 대한 분포, 크기, 밀도 등을 용이하게 파악하고 분석할 수 있다.

[0056] <실시예 2> 인공지능으로서 딥신경망네트워크(Deep Neural Network, 이하 DNN)을 이용한 재료의 물성 예측 방법

[0057] 본 발명의 다른 실시예에 따른 재료의 물성 예측 방법은 기계적 학습을 수행하는 인공지능으로서 DNN(Deep Neural Network) 알고리즘을 사용한 것을 포함한다. 이 때, DNN 인공지능에 투입되는 제2 정보는 상술한 제 1 정보를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)을 이용하여 변환한 기공의 지속 다이어그램(persistence diagram)을 분석하여 도출한 정량적인 기공정보로서, 전술한 수학식 1, 수학식 2 및 수학식 3으로부터 도출된 기공의 크기와 개수, 밀도와 평균거리 및 기공 분포의 비균일성 중 어느 하나 이상을 포함할 수 있다.

[0058] 도 7은 본 발명의 다른 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 관한 것으로서, 도 6에서 취득된 지속 다이어그램(persistence diagram)의 이미지로부터 도출된 기공의 크기 및 개수와, 기공간의 밀도 및 평균거리와, 기공 분포의 비균일성을 나타낸 것이다.

[0059] 도 7(a)를 참조하면, 도 6에서 도출한 제 1 부분 내지 제 4 부분에 해당되는 지속 다이어그램(persistence diagram)으로부터 기공의 탄생 히스토그램(birth histogram)을 도출한 것을 나타낸다. 도 7(a)의 탄생 히스토그램에서 기공의 크기가 0~3 μ m 범위인 경우 y축(기공의 개수)은 좌측값이며, 그 외 범위의 y축은 우측값이다. 도 7(a)의 탄생 히스토그램을 참조하면, 국부 변형률이 가장 작은 제 1 부분은 기공의 크기가 0~3 μ m인 미세한 기공이 상대적으로 다수 분포하고 그 보다 큰 기공의 개수는 상대적으로 작은 값을 나타낸다. 반면, 국부 변형률이 가장 높은 제 4 부분은 크기가 0~3 μ m인 미세한 기공이 상대적으로 적게 분포하고 그 보다 큰 기공의 개수는 상대적으로 큰 값을 나타낸다. 이는 재료의 변형이 심하게 진행될 수록 기공들의 응집이 활발하게 일어나서 기공의 크기가 커짐을 의미한다.

[0060] 도 7(b)는 도 6에서 도출한 제 1 부분 내지 제 4 부분에 해당되는 지속 다이어그램(persistence diagram)으로부터 기공의 수명 히스토그램(lifetime histogram)을 도출한 것을 나타낸다. 수명 히스토그램은 기공의 분포도, 즉 기공 쌍들간의 평균 거리 또는 기공분포의 이질도의 정보를 내포하는 그래프이다. 도 7(b)의 수명 히스토그램을 참조하면, 국부 변형률이 가장 큰 제 4 부분은 기공간의 이격거리는 상대적으로 크고 분포 비균일성이 상대적으로 높게 나타나며 반면 국부 변형률이 가장 작은 제 1 부분은 기공간의 이격거리가 상대적으로 작고 분포 비균일성이 상대적으로 낮게 나타남을 알 수 있다. 이는 재료의 변형이 심하게 진행될수록 응집된 기공들의 분포 비균일성이 증가됨을 의미한다.

[0061] 도 8은 본 발명의 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 관한 것으로서, 인공지능의 분류 정확도를 포함한 예측 결과를 나타낸 표를 도시한 것이다.

[0062] 도 8을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능으로서 CNN(Convolution Neural Network)을 활용하였을 때, 테스트 데이터셋에 대한 분류정확도는 최대 80.8%까지 취득하였다. 여기서 분류정확도란, 미지의 샘플들 중에서 얼마나 많은 샘플이 해당 알고리즘이 기계적 학습에 의해 정답이라고 판단한 값의 범주에 분류되는지에 대한 비율을 의미하는 것으로서, 임의의 재료에 대한 출력 결과를 분류하는 분류문제에 있어서 예측력의 정확성을 판단하는 지표이다. 또한, 도 8을 참조하면, 제1 정보인 재료의 X-CT 촬영이미지를 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)에 의해 지속 다이어그램(persistence diagram) 이미지 형태의 제2 정보로 변환하

지 않고, 상술한 제1 정보 자체로 CNN(Convolution Neural Network)에 곧바로 적용하여 테스트한 결과를 확인할 수 있다. 제 2정보가 아닌 제1정보를 바로 투입할 경우, 최대 분류정확도는 31.3%에 불과하였다. 결과적으로, 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법은 위상적 데이터 분석법(topological data analysis)에 의해 변환된 정보를 인공지능에 투입함으로써 우수한 예측력을 도모할 수 있음을 확인할 수 있다.

[0063] 아울러, 도 8을 참조하면, 본 발명의 다른 실시예에 따른 인공지능으로서 DNN(Deep Neural Network)을 활용하였을 때, 인공지능에 정량적 기공정보에 관한 제2 정보를 투입하는 방법으로서 표준화된(normalized) 인풋 방식 및 원-핫 인코딩(one-hot encoding) 방식을 사용할 경우 분류정확도는 73.1% 및 69.2%를 취득하였고, CNN(Convolution Neural Network)을 활용하였을 때 대비 상대적으로 저조한 값을 나타냈다. 결과적으로, 전술한 분류문제의 경우에는 인공지능에 투입되는 제2 정보가 지속 다이어그램(persistence diagram) 이미지 형태를 포함하는 CNN(Convolution Neural Network) 알고리즘을 활용하였을 때, 우수한 예측력을 나타낼 수 있음을 확인할 수 있다.

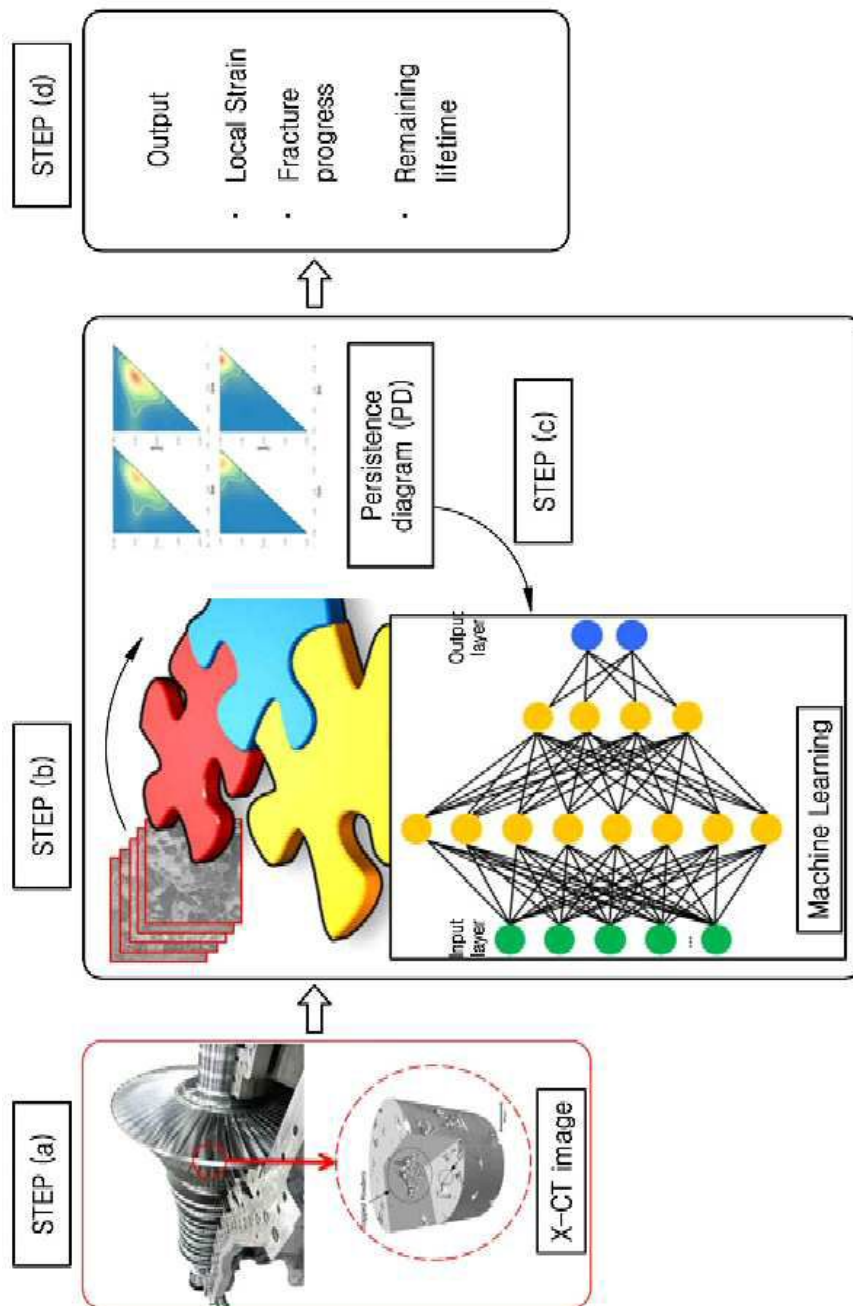
[0064] 도 9는 본 발명의 실시예에 따른 인공지능을 이용한 재료의 물성 예측 방법에 관한 것으로서, 인공지능의 예측 오차에 관한 평균 절대 오차를 포함한 예측 결과를 나타낸 표와, 이러한 예측 결과를 나타낸 그래프를 도시한 것이다.

[0065] 도 9(a) 참조하면, 본 발명의 다른 실시예에 따른 인공지능으로서 DNN(Deep Neural Network)을 활용하였을 때, 테스트 데이터셋에 대한 평균 절대 오차(mean absolute error, 이하 MAE)값은 0.08에 불과하여 매우 낮은 오차 범위를 나타낸다. 여기서 MAE(mean absolute error)란, 해당 인공지능 알고리즘이 기계적 학습에 의해 정답이라고 판단한 실제 값과 미지의 재료에 대한 최종적인 예측 값의 차이를 의미하는 것으로서, 임의의 재료에 대한 출력 결과를 정량적인 값으로 측정해야 하는 예측문제에 있어서 예측력의 정확성을 판단하는 지표이다. 또한 도 9(a)를 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 인공지능으로서 CNN(Convolution Neural Network)을 활용하였을 때, MAE(mean absolute error)에 대해 0.33이라는 값을 취득하였고 DNN(Deep Neural Network)을 활용하였을 때 대비 상대적으로 큰 오차범위를 나타냈다. 결과적으로, 전술한 예측문제의 경우에는 인공지능에 투입되는 제2 정보가 지속 다이어그램(persistence diagram) 이미지를 기공정보에 대한 정량적인 값의 형태로 변환한 것인 DNN(Deep Neural Network) 알고리즘을 활용하였을 때, 우수한 예측력을 나타낼 수 있음을 확인할 수 있다.

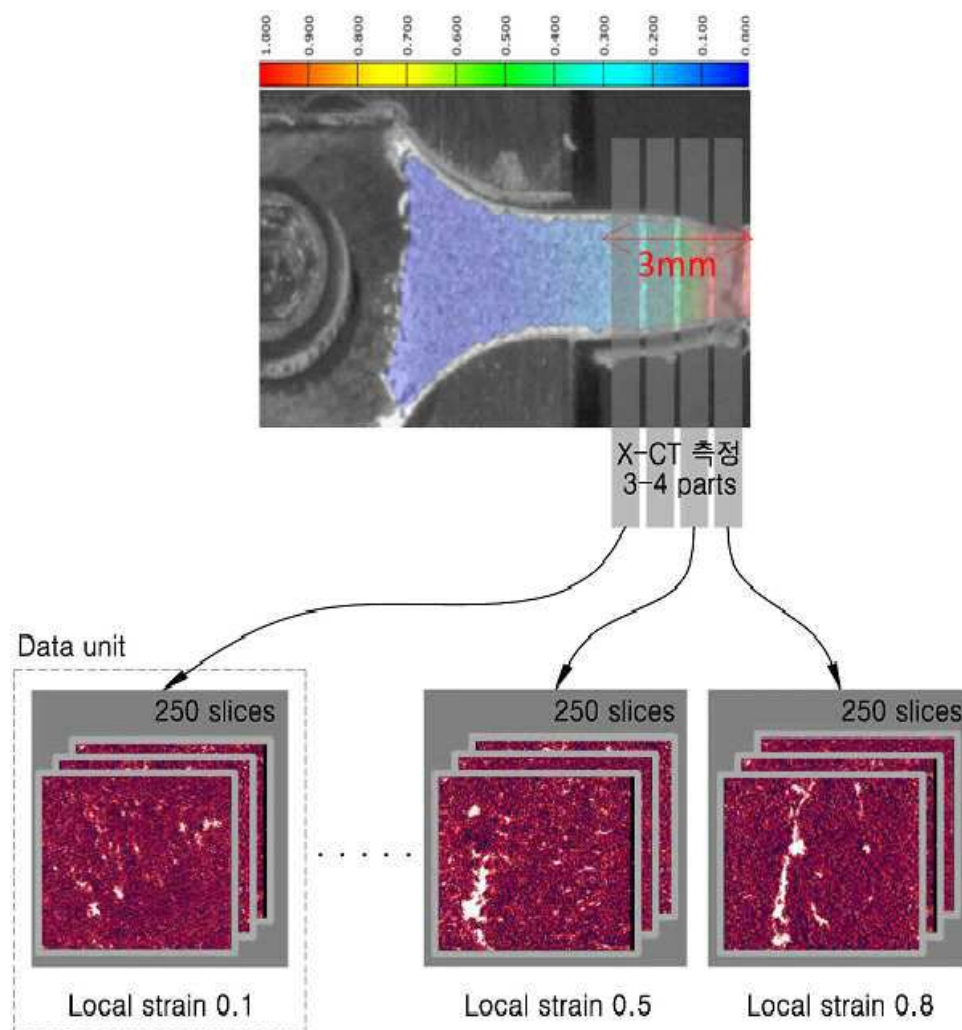
[0066] 아울러 도 9(b)를 참조하면, 본 발명의 다른 실시예에 따른 인공지능으로서 DNN(Deep Neural Network)을 활용하였을 때, 테스트 데이터셋에 대한 예측의 결과를 그래프로 도시한 것이며, x축은 실제 값을 나타내고 y축은 DNN(Deep Neural Network)에 의한 예측 값이다. 이 때, 실제 값을 나타내는 대각선 라인에 예측 값의 대부분이 인접하여 정렬되어 있는 것으로 보아, DNN(Deep Neural Network)에 의해 최종적으로 출력된 값이 실제 값에 거의 근접하다는 결과를 확인할 수 있다.

도면

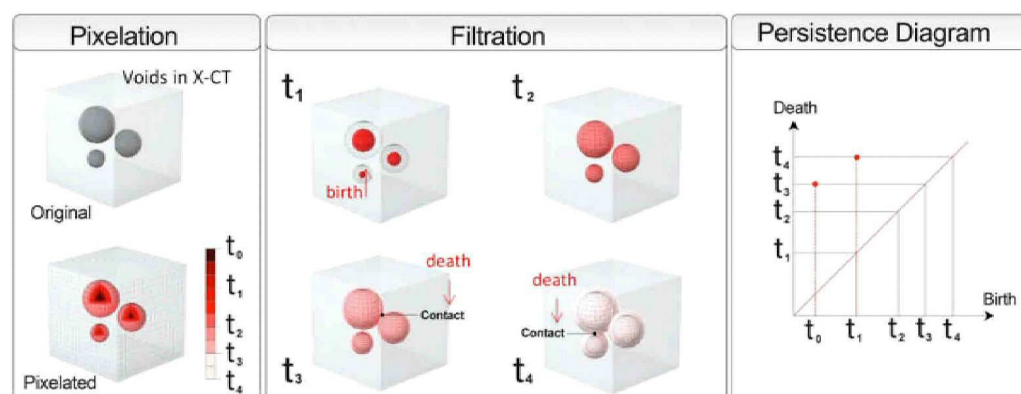
도면1



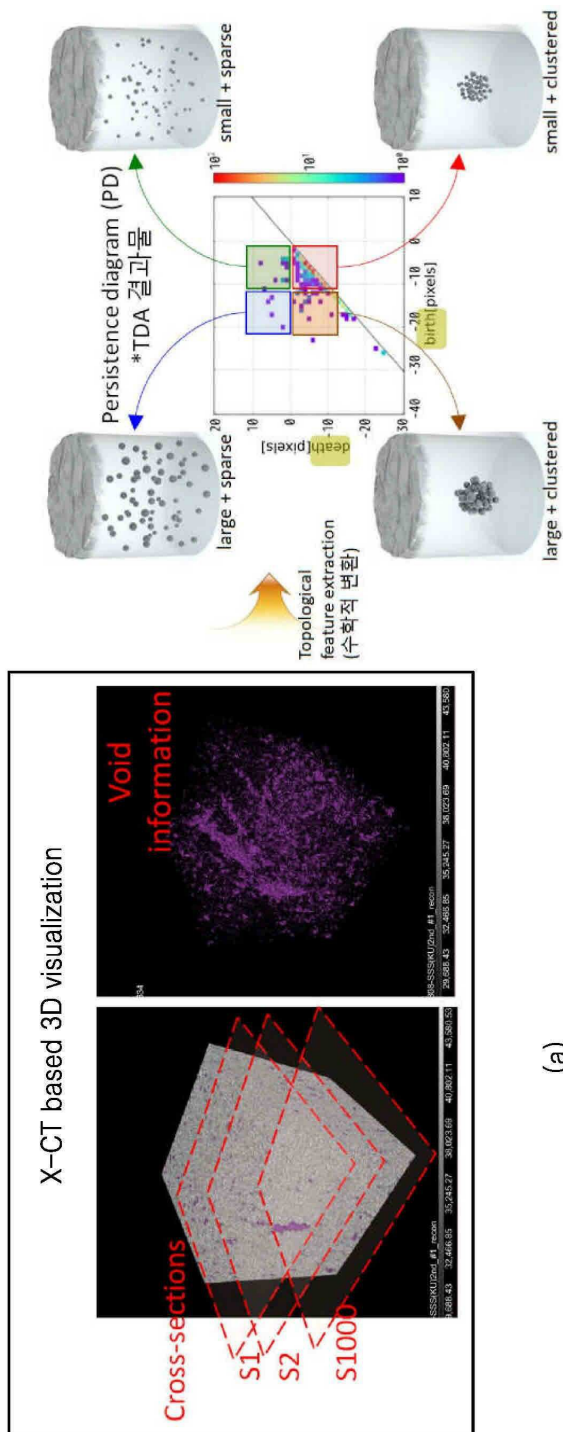
도면2



도면3



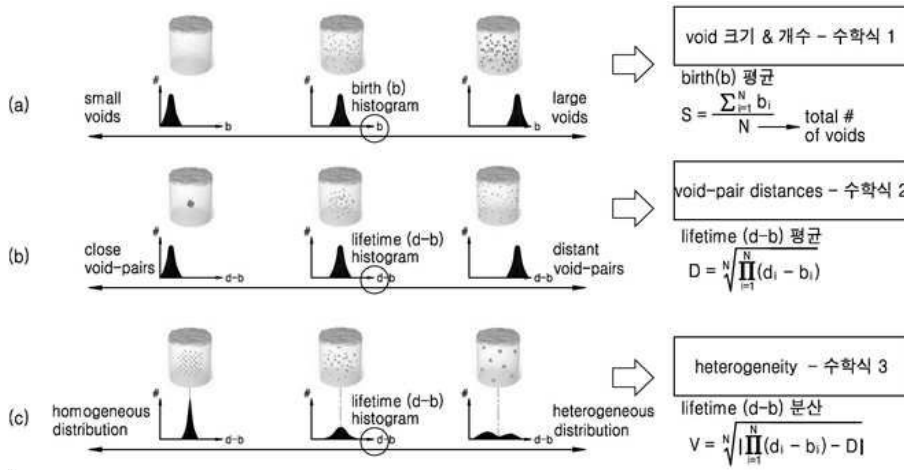
도면4



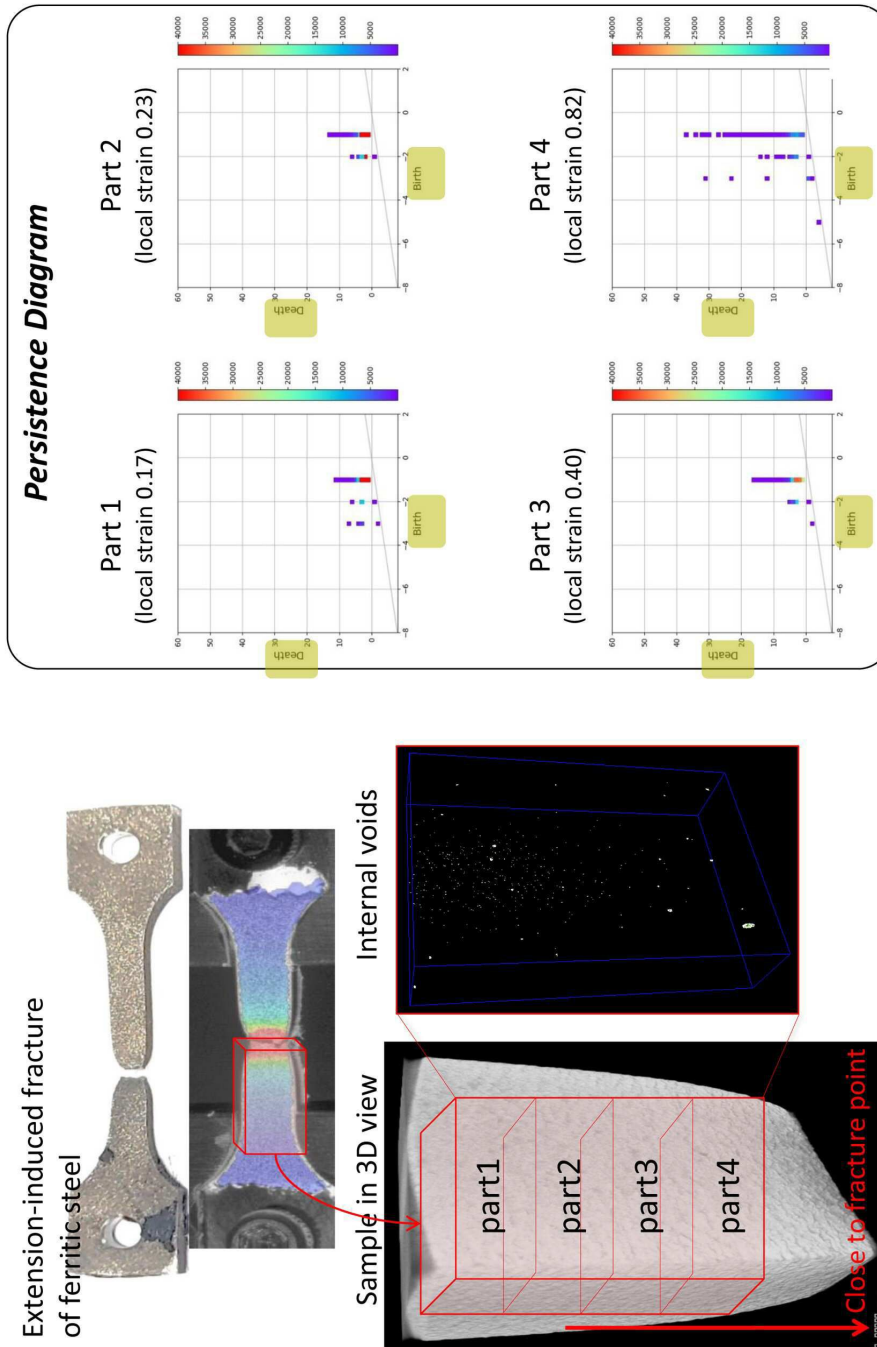
(a)

(b)

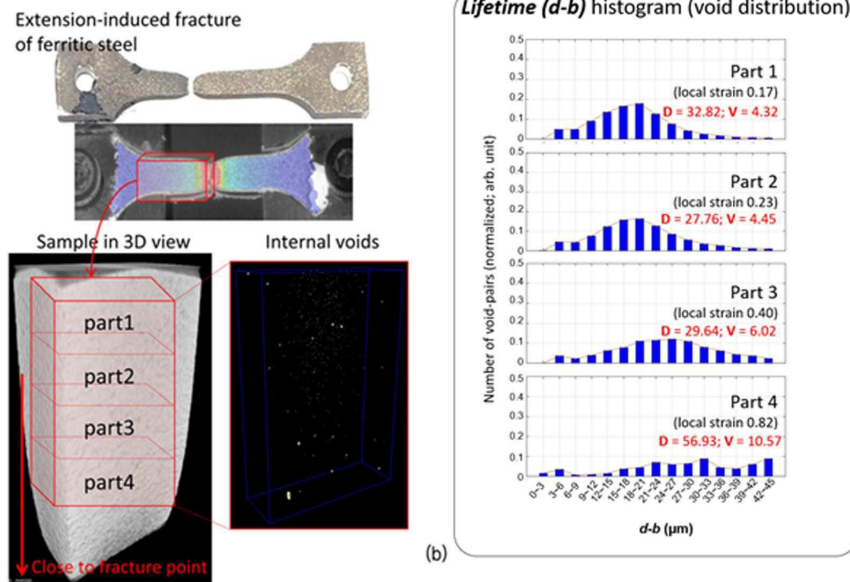
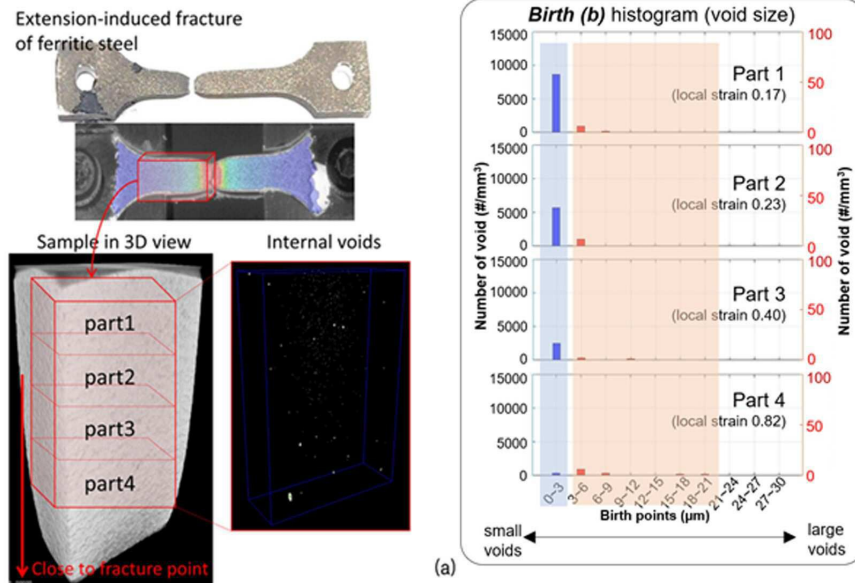
도면5



도면6



도면7



도면8

$$R^2 = \left(1 - \frac{\text{MSE of regression line}}{\text{MSE of the average of the data}}\right)$$

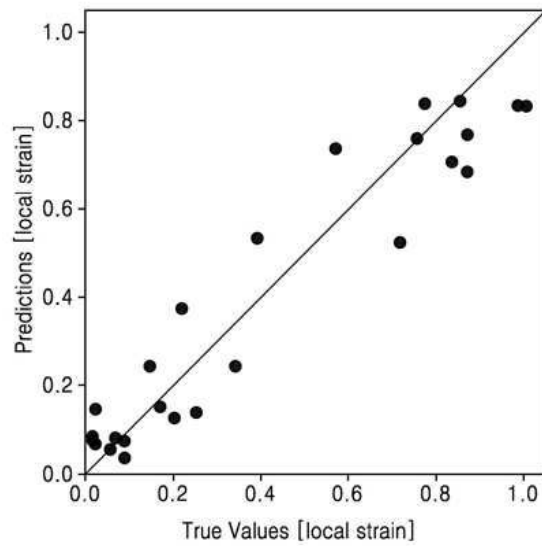
ML test 진행
 training : test = 107(80%) : 27(20%)

ML models		Input으로 사용된 정보	상관계수, R ²	분류정확도(%)
Multivariate linear regression		5 PD-extracted metrics: Void # (0-3μm, >3μm, >6μm) Void distribution metric (D, V)	0.91-training (0.3-test)	73.1
DNN	Normalized input		0.91 (0.3)	73.1
	One-hot encoded input		0.92 (0.3)	69.2
CNN			PD images 	0.99 (0.8)
CNN		Non-TDA results CT images 	-	31.3

도면9

ML models		Input으로 사용된 정보		MAE
Multivariate linear regression		TDA results	5 PD-extracted metrics: Void # (0-3um, >3um, >6um) Void distribution metric (D, V)	0.3255
DNN	Normalized input			0.0872
	One-hot encoded input			0.2824
CNN			PD images 	0.3302
CNN		Non-TDA results	CT images 	-

(a)



(b)