



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0074097
(43) 공개일자 2024년05월28일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G05B 13/02 (2006.01) G06N 3/12 (2023.01)
G06V 20/20 (2022.01)
(52) CPC특허분류
G05B 13/0265 (2013.01)
G06N 3/126 (2023.01)
(21) 출원번호 10-2022-0155518
(22) 출원일자 2022년11월18일
심사청구일자 2022년11월18일

(71) 출원인
세종대학교산학협력단
서울특별시 광진구 능동로 209 (군자동, 세종대학교)
(72) 발명자
손기선
서울특별시 성동구 행당로 82 한진해모로 113동 1801호
이진웅
부산광역시 해운대구 운봉길 77-7 2층
이병도
서울특별시 강동구 진항도로 61길 25-32 3층
(74) 대리인
특허법인아이엠

전체 청구항 수 : 총 8 항

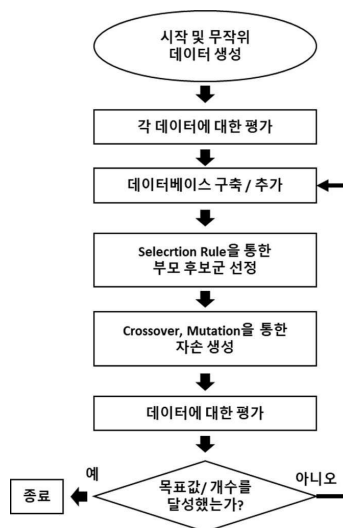
(54) 발명의 명칭 능동 학습에 의한 소재 및 공정 최적화 방법

(57) 요약

본 발명은 메타휴리스틱 알고리즘, 베이지안 알고리즘과 같은 능동학습법을 이용하여 소재 및 공정을 최적화하는 방법에 관한 것이다.

본 발명에 따른 최적화 방법은, (a) 소정 수의 데이터를 준비하는 단계; (b) 상기 데이터를 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘에 사용하여, n 개 군의 출력 데이터를 산출하는 단계; (c) 상기 (b) 단계에서 얻은 n 개군의 출력 데이터를 혼합하여 다음 세대의 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘용 입력 데이터를 만드는 단계; 및 (d) 상기 (c) 단계에서 만들어진 입력 데이터를 상기 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘에 사용하여, n 개군의 출력 데이터를 산출하는 단계;를 포함하고, 상기 (c)단계와 (d) 단계를 소정 횟수 반복하여 최적화를 하는 것을 특징으로 한다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

G06V 20/20 (2023.08)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1415180672
과제번호	20012196
부처명	산업통상자원부
과제관리(전문)기관명	한국산업기술평가관리원
연구사업명	산업기술알키미스트프로젝트사업
연구과제명	AI 기반 초임계 소재
기 여 율	1/1
과제수행기관명	연세대학교 산학협력단
연구기간	2022.04.01 ~ 2022.12.31

명세서

청구범위

청구항 1

- (a) 소정 수의 데이터를 준비하는 단계;
 - (b) 상기 데이터를 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘에 사용하여, n 개 군의 출력 데이터를 산출하는 단계;
 - (c) 상기 (b) 단계에서 얻은 n 개군의 출력 데이터를 혼합하여 다음 세대의 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘용 입력 데이터를 만드는 단계; 및
 - (d) 상기 (c) 단계에서 만들어진 입력 데이터를 상기 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘에 사용하여, n 개군의 출력 데이터를 산출하는 단계;를 포함하고,
- 상기 (c)단계와 (d) 단계를 소정 횟수 반복하여 최적화를 하는, 소재 및 공정 최적화 방법.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 능동학습 알고리즘은, 공지된 모든 능동학습 알고리즘 중의 일부 또는 전부가 앙상블 형태로 사용되는 것인, 소재 및 공정 최적화 방법.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 능동학습 알고리즘은, 유전자 알고리즘, 입자 군집 최적화(particle swarm optimization), 쿠쿠 서치(cuckoo search), 하모니 서치(harmony search), 및 베이지안 최적화(Bayesian optimization) 중에서 선택된 2 이상인, 소재 및 공정 최적화 방법.

청구항 4

(a) n 개(n 은 자연수)의 1세대 데이터를 준비하는 단계;

(b) 상기 n 개의 1세대 데이터를 유전자 알고리즘에 입력하여 $n-a$ 개(a 는 n 보다 작은 자연수)의 2세대 데이터를 출력하고, 이와 병행하여 상기 n 개의 1세대 데이터를 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 a 개의 2세대 데이터를 출력하는 단계; 및

(c) 직전 세대 데이터들을 합하여 n 개의 데이터를 만든 후 유전자 알고리즘에 입력하여 $n-a$ 개의 다음 세대 데이터를 출력하고, 이와 병행하여 모든 세대의 데이터들을 합하여 $x \times n$ (x 는 직전 단계의 세대수)개의 데이터를 만든 후 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 a 개의 다음 세대 데이터를 출력하는 단계;를 포함하고,

상기 (c) 단계를 소정 횟수 반복 수행하여 n 개의 최적화 데이터를 얻는, 소재 및 공정 최적화 방법.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

1세대 데이터는 소정 범위 내에서 무작위로 선정되는 것인, 소재 및 공정 최적화 방법.

청구항 6

제 4 항에 있어서,

상기 1세대 데이터 수(n)는 20 ~ 1000인, 소재 및 공정 최적화 방법.

청구항 7

제 4 항에 있어서,

상기 a 는 1세대 데이터 수(n)의 $1/5 \sim 1/20$ 인, 소재 및 공정 최적화 방법.

청구항 8

제 1 항 또는 제 4 항에 있어서,

상기 최적화 방법은 물질의 결정구조 최적화에 사용되는 것인, 소재 및 공정 최적화 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 메타휴리스틱 알고리즘, 베이지안 알고리즘과 같은 능동학습법을 이용하여 소재 및 공정을 최적화하는 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0003] 새로운 소재를 개발 및 최적화하기 위해서는 다양한 조성과 공정변수등 여러 가지를 변수를 고려해야 한다. 그러나 종래의 이루어진 대부분의 소재 및 공정 개발 및 최적화 방법은 시행착오(Trial & Error) 방법에 기초를 둔 비효율적인 과정을 통하여 이루어져 왔으며 궁극적으로 소재 개발에 대한 정보의 부족과 자본, 시간 제약으로 완벽한 소재 개발을 할 수 없었다.

[0004] 이에 따라, 소재 분야에도 종래의 시행착오법에서 벗어나 기계학습을 이용하여 소재 개발의 시간과 비용을 줄이고자 하는 연구가 활발하게 이루어지고 있다.

[0005] 최근 대부분 공학분야에서 라벨링이 있는 데이터 확보에 대한 어려움 있어 데이터의 질과 양에 성능이 큰 영향을 받는 딥러닝 모델을 사용할 수 없는 경우가 많아 능동학습법이 주목을 받고 있다.

[0006] 능동 학습(Active Learning)은, 존재하는 데이터를 이용하여 기계학습 모델을 정립하는 기존의 인공지능 접근법과는 완전히 다른 개념으로 인공지능 스스로 다음 단계에 필요하거나 다음 단계에 보다 유리한 데이터를 단계적으로 생성하여 기계학습 모델을 정립하는 것을 말한다.

[0007] 한편, 능동학습 방법은 주로 기계학습 데이터를 제공하는 용도로 사용되어 왔다. 그러나 소재 분야에서는 많은 학습 데이터가 요구되는 기계학습 방법을 적용하기 어려운 문제점이 있다.

[0008] 최근에는 기계학습을 필요로 하지 않는 능동학습 방법으로, 실제 실험 데이터를 적용하며 메타휴리스틱스 알고리즘과 베이지안 최적화 알고리즘을 조합한 최적화 방법론이 주목받고 있다.

[0009] 이중, 메타휴리스틱스 알고리즘인 유전알고리즘은 기본적으로 최적화에 필요한 목적 함수의 일차미분값과 같은 번거로운 미분 연산이 필요로 하지 않고 자연 세계의 진화 현상에 기반한 교배와 돌연변이 연산을 이용하기 때문에 알고리즘의 하이퍼파라미터가 간단하고 직관적이며 짧은 계산시간, 불연속-연속적인 문제에 모두 적용가능하여 최적해를 찾을 수 있는 수렴가능성이 높다는 장점이 있는 반면, 최적화하기 위한 데이터 양(실험량)이 베이지안 최적화 알고리즘보다 많이 필요하다는 단점이 있다.

[0010] 베이지안 최적화 알고리즘은 사전에 얻어낸 지식을 통해 알려지지 않는 목적 함수를 최대 또는 최소로 하는 최

적해를 찾는 기법이다. 베이지안 최적화 알고리즘은 Surrogate 모델과 Acquisition 함수로 구성되어 있는데 Surrogate 모델은 현재까지 조사된 입력값과 함수값을 바탕으로 목적 함수의 형태에 대한 확률적 추정을 수행하고, Acquisition 함수는 Surrogate 모델의 결과를 이용해 최적해를 찾는 데 유용한 후보를 추천한다. Surrogate 모델로는 GPR(Gaussian Process regression), XGboost 등 여러 모델이 사용되고 있는데 어떤 모델을 선택할지, 각각의 모델안의 하이퍼파라미터는 어떤 값을 사용해야 하는지와 같이 수많은 하이퍼파라미터를 조정해야 하고 사전 지식을 통해 순차적으로 최적화가 이루어지는 알고리즘으로 병렬처리가 불가능한 점 때문에 모델의 계산시간이 상당히 많이 걸리고 연속적인 문제에서만 사용이 가능하다는 단점이 있는 반면, 최적화하기 위한 데이터 양이 메타휴리스틱스 알고리즘보다 적다는 장점이 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0012]

(특허문헌 0001) 등록특허공보 제10-0610240호

(특허문헌 0002) 공개특허공보 제10-2020-0113392호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0013]

본 발명은 서로 트레이드-오프(Trade-off) 관계에 있는 메타휴리스틱스 알고리즘(GA)과 베이지안 최적화 알고리즘을 적절하게 적용함으로써, 최적화에 소요되는 노력을 줄이면서도 메타휴리스틱스 알고리즘과 베이지안 알고리즘에 비해 효율적인 최적화가 가능한 소재 및 공정 최적화 방법을 제공하는데 있다.

과제의 해결 수단

[0015]

본 발명의 제 1 측면은, (a) 소정 수의 데이터를 준비하는 단계; (b) 상기 데이터를 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘에 사용하여, n 개 군의 출력 데이터를 산출하는 단계; (c) 상기 (b) 단계에서 얻은 n 개군의 출력 데이터를 혼합하여 다음 세대의 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘용 입력 데이터를 만드는 단계; 및 (d) 상기 (c) 단계에서 만들어진 입력 데이터를 상기 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘에 사용하여, n 개군의 출력 데이터를 산출하는 단계;를 포함하고, 상기 (c)단계와 (d) 단계를 소정 횟수 반복하여 최적화를 하는, 소재 및 공정 최적화 방법을 제공하는 것이다.

[0016]

본 발명의 제 2 측면은, (a) n 개(n 은 자연수)의 1세대 데이터를 준비하는 단계; (b) 상기 n 개의 1세대 데이터를 유전자 알고리즘에 입력하여 $n-a$ 개(a 는 n 보다 작은 자연수)의 2세대 데이터를 출력하고, 이와 병행하여 상기 n 개의 1세대 데이터를 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 a 개의 2세대 데이터를 출력하는 단계; 및 (c) 직전 세대 데이터들을 합하여 n 개의 데이터를 만든 후 유전자 알고리즘에 입력하여 $n-a$ 개의 다음 세대 데이터를 출력하고, 이와 병행하여 모든 세대의 데이터들을 합하여 $x \times n$ (x 는 직전 단계의 세대수)개의 데이터를 만든 후 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 a 개의 다음 세대 데이터를 출력하는 단계;를 포함하고, 상기 (c) 단계를 소정 횟수 반복 수행하여 n 개의 최적화 데이터를 얻는, 소재 및 공정 최적화 방법을 제공하는 것이다.

발명의 효과

[0018]

본 발명은 종래의 능동학습 알고리즘들을 하이브리드화하여, 각각의 능동학습 알고리즘에 비해 더 나은 최적화 성능을 구현할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0020] 도 1은 실시예 1과 2에서 사용한 유전자 알고리즘을 설명하기 위한 개략도이다.
- 도 2는 실시예 1과 2에서 사용한 베이지안 최적화 알고리즘을 설명하기 위한 개략도이다.
- 도 3은 실시예 1에 따른 최적화 방법을 설명하기 위한 개략도이다.
- 도 4는 비교예 1의 유전자 알고리즘에 따른 최적화 방법을 설명하기 위한 개략도이다.
- 도 5는 비교예 2의 베이지안 최적화 알고리즘에 따른 최적화 방법을 설명하기 위한 개략도이다.
- 도 6은 본 발명의 실시예 1, 비교예 1 및 비교예 2를 기준함수인 Ackley와 Rosenbrock를 사용하여 비교 평가한 결과이다.
- 도 7은 아지로드이트(argyrodite)형 결정구조에 적용할 때 조합가지를 설명하기 위한 개략도이다.
- 도 8은 본 발명의 실시예, 유전자 알고리즘, 베이지안 최적화 방법을 전고체 전해질 조성물인 아지로드이트(argyrodite)형 결정구조에 적용하였을 때의 비교 평가 결과이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0021] 아래에서는 첨부한 도면을 참조하여 본원이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게 실시할 수 있도록 본원의 실시예를 상세히 설명한다. 그러나 본원은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명하는 실시예에 한정되지 않는다.
- [0022] 또한, 도면에서 본원을 명확하게 설명하기 위해서 설명과 관계없는 부분은 생략하였으며, 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 유사한 도면 부호를 붙였다.
- [0023] 본원 명세서 전체에서, 어떤 부분이 다른 부분과 "연결"되어 있다고 할 때, 이는 "직접적으로 연결"되어 있는 경우뿐 아니라, 그 중간에 다른 소자를 사이에 두고 "전기적으로 연결"되어 있는 경우도 포함한다.
- [0024] 본원 명세서 전체에서, 어떤 부재가 다른 부재 "상에", "상부에", "상단에", "하에", "하부에", "하단에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.
- [0025] 본원 명세서 전체에서, 어떤 부분이 어떤 구성 요소를 "포함"한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성 요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.
- [0026] 본 명세서에서 사용되는 정도의 용어 "약", "실질적으로" 등은 언급된 의미에 고유한 제조 및 물질 허용오차가 제시될 때 그 수치에서 또는 그 수치에 근접한 의미로 사용되고, 본원의 이해를 돕기 위해 정확하거나 절대적인 수치가 언급된 개시 내용을 비양심적인 침해자가 부당하게 이용하는 것을 방지하기 위해 사용된다. 또한, 본원 명세서 전체에서, "~ 하는 단계" 또는 "~의 단계"는 "~를 위한 단계"를 의미하지 않는다.
- [0027] 본원 명세서 전체에서, 마쿠시 형식의 표현에 포함된 "이들의 조합"의 용어는 마쿠시 형식의 표현에 기재된 구성 요소들로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 혼합 또는 조합을 의미하는 것으로서, 상기 구성 요소들로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상을 포함하는 것을 의미한다.
- [0028] 본원 명세서 전체에서, "A 및/또는 B"의 기재는, "A 또는 B, 또는, A 및 B"를 의미한다.
- [0029] 본 발명에 따른 소재 및 공정 최적화 방법은, (a) 소정 수의 데이터를 준비하는 단계; (b) 상기 데이터를 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘에 사용하여, n 개 군의 출력 데이터를 산출하는 단계; (c) 상기 (b) 단계에서 얻은 n 개군의 출력 데이터를 혼합하여 다음 세대의 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘용 입력 데이터를 만드는 단계; 및 (d) 상기 (c) 단계에서 만들어진 입력 데이터를 상기 n 개(n 은 2 이상)의 능동학습 알고리즘에 사용하여, n 개군의 출력 데이터를 산출하는 단계;를 포함하고, 상기 (c)단계와 (d) 단계를 소정 횟수 반복하여 최적화를 하는 것을 특징으로 한다.
- [0030] 본 발명에 따른 방법은 기존의 최적화 방법과 달리 서로 다른 종류의 최적화 알고리즘을 병행하여 사용하면서, 각각의 알고리즘으로부터 도출된 결과를 혼합하여 입력 데이터로 사용함으로써, 최적화 효율을 향상시키는 것을 특징으로 한다.
- [0031] 본 발명에 따른 방법에서 서로 다른 능동학습 알고리즘 2개를 하이브리드화할 수도 있고, 3개의 서로 다른 능동학습 알고리즘을 하이브리드화 할 수도 있고, 4개 이상의 서로 다른 능동학습 알고리즘을 하이브리드화할 수 있

다. 나아가 알려진 모든 능동학습 알고리즘들을 동시에 사용하는 앙상블 개념으로 능동학습 알고리즘을 운용하는 것도 본 발명의 기술적 사상에 포함된다.

- [0032] 본 발명에 있어서, 상기 능동학습 알고리즘은, 예를 들어, 유전자 알고리즘, 입자 군집 최적화(particle swarm optimization), 쿠쿠 서치(cuckoo search), 하모니 서치(harmony search), 및 베이지안 최적화(Bayesian optimization) 중에서 선택된 2 이상일 수 있다.
- [0033] 본 발명에 있어서, 소재 및 공정 최적화 방법은, (a) n 개(n 은 자연수)의 1세대 데이터를 준비하는 단계; (b) 상기 n 개의 1세대 데이터를 유전자 알고리즘에 입력하여 $n-a$ 개(a 는 n 보다 작은 자연수)의 2세대 데이터를 출력하고, 이와 병행하여 상기 n 개의 1세대 데이터를 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 a 개의 2세대 데이터를 출력하는 단계; 및 (c) 직전 세대 데이터들을 합하여 n 개의 데이터를 만든 후 유전자 알고리즘에 입력하여 $n-a$ 개의 다음 세대 데이터를 출력하고, 이와 병행하여 모든 세대의 데이터들을 합하여 $x \times n$ (x 는 직전 단계의 세대 수)개의 데이터를 만든 후 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 a 개의 다음 세대 데이터를 출력하는 단계;를 포함하고, 상기 (c) 단계를 소정 횟수 반복 수행하여 n 개의 최적화 데이터를 얻는 것일 수 있다.
- [0034] 본 발명에 있어서, 상기 1세대 데이터는 소정 범위 내에서 무작위로 선택되는 것일 수 있으나, 반드시 이에 제한되는 것은 아니며, 1세 데이터는 필요에 맞추어 다양한 방법으로 선택될 수 있다.
- [0035] 본 발명에 있어서, 1세대 데이터 수(n)는 20 ~ 1000개일 수 있다. 데이터 수가 너무 적으면 최적화가 어렵고, 데이터 수가 너무 많으면 계산량이 많아지므로, 20 ~ 1000개, 25 ~ 500개, 30 ~ 250개, 40 ~ 200개, 또는 50 ~ 150개 정도가 바람직할 수 있다.
- [0036] 본 발명에 있어서, 상기 a 는 1세대 데이터 수(n)의 1/5 ~ 1/20 범위로 선정될 수 있다. a 가 너무 작으면 베이지안 최적화 알고리즘의 유전자 알고리즘에 대한 영향이 줄어들어 효율이 떨어지고, a 가 너무 크면 베이지안 최적화가 적절하게 이루어지지 않을 수 있기 때문에, 상기 범위가 바람직할 수 있다.
- [0037] 본 발명에 따른 최적화 방법은 바람직하게 물질의 결정구조 최적화에 사용되는 것일 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니며 능동학습법으로 최적화가 가능한 모든 용도의 최적화에 적용될 수 있다.
- [0039] <실시예 1>
- [0040] 본 발명의 실시예에 따른 최적화 방법은 유전자 알고리즘과 베이지안 최적화 알고리즘을 하이브리드화한 방법을 사용하였다.
- [0041] 이중 유전자 알고리즘과 베이지안 최적화 알고리즘은 각각 도 1과 도 2에 도시된 개략도의 알고리즘을 Python 프로그래밍 언어로 구축한 것이다.
- [0042] 유전자 알고리즘은 재생산, 교배, 돌연변이 같은 연산자를 통해 해를 도출하는 것인데, 이때 재생산은 룰렛 휠 선택, 교배는 균등 교배, 돌연변이는 랜덤 값을 더하거나 빼는 방식을 사용하였다.
- [0043] 도 1을 참조하면, 먼저 무작위로 데이터를 생성한 후, 각 데이터에 대한 평가를 실시한다. 평가를 기반으로 데이터베이스를 구축하고, 선택 룰을 통한 부모 후보군을 선정하고, 교배, 돌연변이를 통한 자손 생성을 한 후 데이터에 대한 평가를 하여, 평가 결과가 목표값/개수를 달성했는지를 확인하여 달성하였으면 종료하고, 달성하지 못했으면 데이터베이스 구축/추가 단계로 돌아가 동일한 과정을 반복하였다.
- [0044] 상기 베이지안 최적화 알고리즘은 서로게이트 모델(Surrogate Model)과 애크지션 함수(Acquisition Function)를 통해 해를 도출한다. 이때, 서로게이트 모델(Surrogate Model)로는 GPR를 사용하였으며, 애크지션 함수(Acquisition Function)으로는 Expected Improvement 방식을 사용하였다.
- [0045] 도 2를 참조하면, 먼저 무작위로 데이터를 생성한 후, 각 데이터에 대한 평가를 실시한다. 평가를 기반으로 데이터베이스를 구축하고, 데이터베이스로 GPR 모델을 구축한다. 다음으로 GPR 모델과 애크지션 함수를 사용하여 새로운 후보군을 추천한 후, 데이터에 대한 평가를 한다. 평가 결과가 목표값/개수를 달성했는지를 확인하여 달성하였으면 종료하고, 달성하지 못했으면 데이터베이스 구축/추가 단계로 돌아가 동일한 과정을 반복하였다.
- [0046] 도 3은 실시예 1에 따른 유전자 알고리즘과 베이지안 최적화 알고리즘을 하이브리드화하여 최적화하는 방법을 설명하기 위한 개략도이다.
- [0047] 도 3을 참조하면, 먼저 30개에서의 결과값(1세대 결과값)을 무작위로 준비한다. 상기 결과값의 수는 다양하게

설정될 수 있으며, 바람직하게는 20개 이상이다.

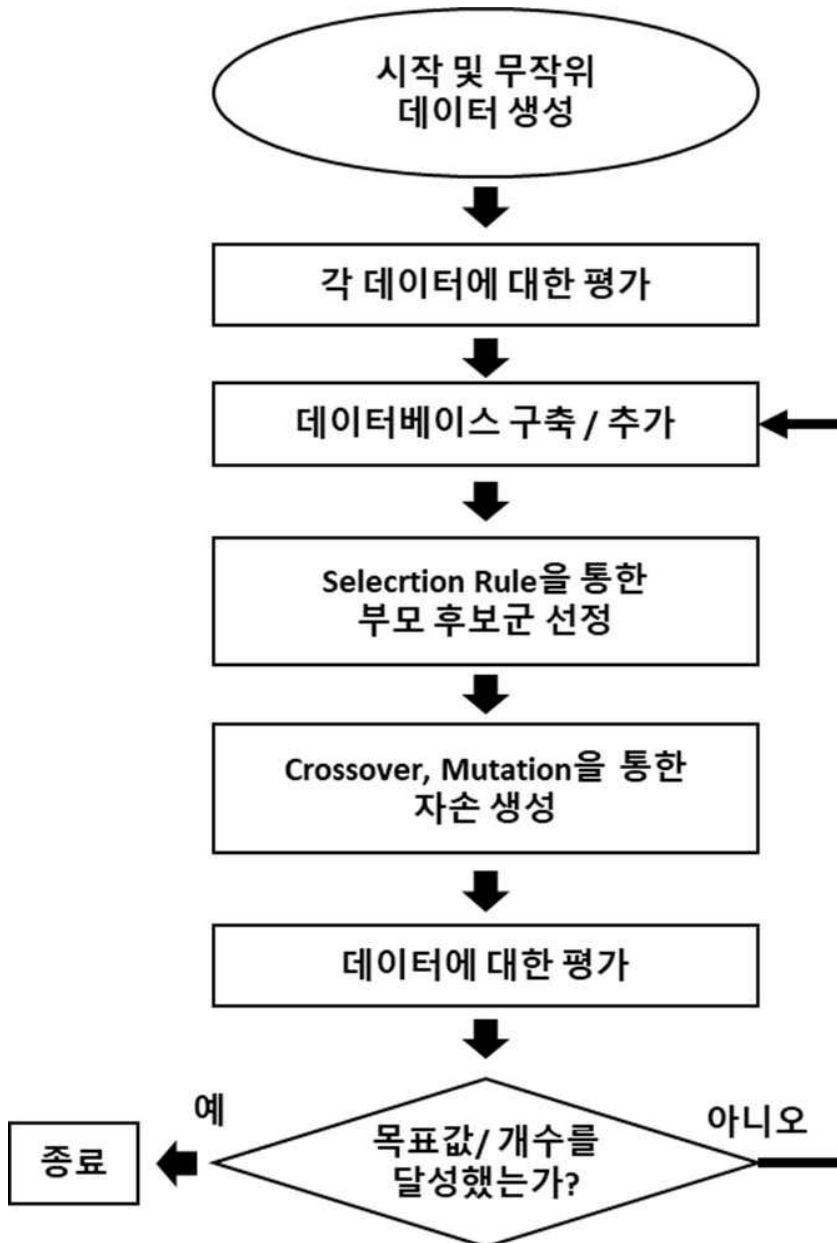
- [0048] 다음으로, 30개의 1세대 결과값을 유전자 알고리즘에 입력하여 28개의 2세대 결과값을 도출한다. 이와 병행하여 30개의 1세대 결과값을 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 2개의 2세대 결과값을 도출한다. 이때, 베이지안 최적화 알고리즘의 2개의 2세대 결과값은 알고리즘 특성 상 가장 특성이 우수한 것으로 예측되는 값이다.
- [0049] 다음으로, 유전 알고리즘으로 도출된 28개의 2세대 결과값과 베이지안 최적화 알고리즘으로 도출된 2개의 2세대 결과값을 합한 30개의 2세대 결과값을 유전 알고리즘에 입력하여 28개의 3세대 결과값을 도출한다. 이와 병행하여 30개의 1세대 결과값과 30개의 2세대 결과값을 합한 60개의 결과값을 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 2개의 3세대 결과값을 도출한다.
- [0050] 다음으로, 유전 알고리즘으로 도출된 28개의 3세대 결과값과 베이지안 최적화 알고리즘으로 도출된 2개의 3세대 결과값을 합한 30개의 3세대 결과값을 유전 알고리즘에 입력하여 28개의 4세대 결과값을 도출한다. 이와 병행하여 30개의 1세대 결과값, 30개의 2세대 결과값 및 30개의 3세대 결과값을 합한 90개의 결과값을 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 2개의 3세대 결과값을 도출한다.
- [0051] 이와 같은 방식으로 최적화가 될 때까지 반복적으로 수행하여, 최종적으로 유전 알고리즘으로부터 28개의 최적화 결과값을 얻고 베이지안 최적화 알고리즘으로부터 2개의 최적화 결과값을 얻어, 총 30개의 최적화 결과값을 얻는다.
- [0053] <비교예 1>
- [0054] 비교예 1에서는 실시예 1에서 사용된 유전자 알고리즘만으로 최적화를 진행한다.
- [0055] 도 4를 참조하면, 유전자 알고리즘의 최적화 방법은 다음과 같다.
- [0056] 먼저, 30개에서의 결과값(1세대 결과값)을 준비한다.
- [0057] 다음으로, 30개의 1세대 결과값을 유전자 알고리즘에 입력하여 30개의 2세대 결과값을 얻고, 얻어진 2세대 결과값을 유전자 알고리즘에 입력하여 30개의 3세대 결과값을 얻고, 얻어진 3세대 결과값을 유전자 알고리즘에 입력하여 30개의 4세대 결과값을 얻는다.
- [0058] 이와 같은 단계를 반복적으로 수행하여 30개의 최적화된 결과값을 얻는다.
- [0060] <비교예 2>
- [0061] 비교예 2에서는 실시예 1에서 사용된 베이지안 최적화 알고리즘만으로 최적화를 진행한다.
- [0062] 도 5를 참조하면, 베이지안 최적화 알고리즘의 최적화 방법은 다음과 같다.
- [0063] 먼저, 30개의 결과값(1세대 결과값)을 준비한다.
- [0064] 다음으로, 30개의 1세대 결과값을 베이지안 최적화 알고리즘에 입력하여 2개씩 데이터를 선정하고, 선정된 데이터를 다음 데이터 출력에 사용하여 2개를 선정하는 과정을 15번 반복(30개 입력 -> 2개 출력, 32개 입력 -> 2개 출력, 34개 입력 -> 2개 출력…… 60개 입력 -> 2개 출력)을 통해 30개의 2세대 결과값을 얻는다.
- [0065] 다음으로, 30개 1세대 결과값과 30개의 2세대 결과값을 합하여 60개의 결과값을 만든 후, 이로부터 2개를 선정하는 과정을 15번 반복하여 30개의 3세대 결과값을 얻는다.
- [0066] 다음으로, 30개 1세대 결과값, 30개의 2세대 결과값 및 30개의 3세대 결과값을 합하여 90개의 결과값을 만든 후, 이로부터 2개를 선정하는 과정을 15번 반복하여 30개의 4세대 결과값을 얻는다.
- [0067] 이와 같은 단계를 반복적으로 수행하여 30개의 최적화된 결과값을 얻는다.
- [0069] <평가예 1>
- [0070] 실시예 1, 비교예 1 및 비교예 2에 따른 최적화 방법의 성능을 기준함수를 활용하여 평가하였다. 사용된 기준함수는 도 6에 도시된 바와 같이, Ackley 함수와, Rosenbrock 함수이다.

- [0071] 도 6B에서 확인되는 바와 같이, 본 발명의 실시예에 따른 방법("hybridized GA + BO"로 표시된 녹색 선)은 비교예 1("genetic algorithm"으로 표시된 청색 선)과 비교예 2("baysian optimization"으로 표시된 주황색)에 비해 목표 함수값이 0에 가까워 훨씬 우수한 성능을 나타냄을 알 수 있다.
- [0072] 또한, 도 6D에서 확인되는 바와 같이, 본 발명의 실시예에 따른 방법("hybridized GA + BO"로 표시된 녹색 선)은 비교예 1("genetic algorithm"으로 표시된 청색 선)에 비해서는 상당히 우수한 성능을 나타내었고, 비교예 2("baysian optimization"으로 표시된 주황색)에 비해서도 더 나은 성능을 나타냄을 알 수 있다.
- [0073] 이로부터, 본 발명의 실시예 1과 같이 유전자 알고리즘과 베이지안 최적화 알고리즘을 하이브리드한 방법이 각각의 알고리즘으로 최적화하는 것에 비해 더 나은 성능을 나타낼 수 있음을 알 수 있다.
- [0075] <실시예 2>
- [0076] 실시예 2에서는 실제 전고체 전해질로 사용되는 아지로드ایت(Argyrodite)형 결정구조에 유전자 알고리즘과 베이지안 최적화 알고리즘을 하이브리드한 알고리즘을 적용한 것이다.
- [0077] 도 7에 나타난 바와 같이, 아지로드ایت형 결정구조에는 24개의 리튬(Li)이 위치할 수 있는 4개의 케이지가 있고, 각 케이지별로 리튬(Li)이 자리할 수 있는 12개 위치 중에서 6개의 리튬(Li)이 어디에 위치하는지에 따라 쿨롱 에너지가 달라지므로, ${}_{12}\text{C}_6^4$ 의 조합이 생성된다. 또한 황(S) 또는 염소(Cl)이 들어갈 수 있는 자리의 조합의 수는 ${}_4\text{C}_2 \times {}_4\text{C}_2$ 이다.
- [0078] 이에 따라, 가장 낮은 쿨롱 에너지 값을 갖는 최적의 결정구조를 찾기 위해 조사되어야 할 조합의 수는 ${}_{12}\text{C}_6^4 \times {}_4\text{C}_2 \times {}_4\text{C}_2$ 로 너무 많아 전수조사를 통해 조사하는 것은 계산량이 너무 많아 실질적으로 불가능하므로, 최적화 방법론이 필요하다.
- [0079] 실시예 2, 비교예 3, 비교예 4에서 사용되는 초기 30개의 아지로드ایت형 결정구조는 각 알고리즘의 성능 비교를 위해 공통적으로 사용되었다.
- [0080] 초기 30개의 구조는 슈퍼셀 프로그램을 실시예 1의 파이선 프로그램과 연동하여 쿨롱 에너지를 평가하였다.
- [0081] 실시예 2에서는 다음과 같은 방법으로 아지로드ایت(Argyrodite)형 결정구조의 최적화를 하였다.
- [0082] 도 3을 참조하면, 30개 아지로드ایت형 구조 데이터로 구축된 데이터베이스로부터 알고리즘 최적화 과정을 거친다. 하이브리드한 최적화 과정을 위해 우선 유전 알고리즘의 재생산(룰렛 휠 방식), 교배(균등교배), 돌연변이 연산을 통해 28개의 자손 후보군 데이터를 생성하며 동시에 베이지안 최적화 알고리즘의 서로게이트 모델 연산(가우시안 회귀모델)과 애크지션 함수(Expected Improvement 방식) 연산 과정을 통해 2개의 다음 세대 후보군을 선출한다.
- [0083] 선출된 총 30개의 후보군(2세대)에 대해 슈퍼셀 프로그램을 사용하여 쿨롱 에너지가 계산된다.
- [0084] 다음으로 다시 유전 알고리즘으로부터의 28개의 후보군과 베이지안 알고리즘으로부터의 2개의 후보군을 도출하고 쿨롱 에너지를 평가하는 과정을 반복한다.
- [0085] 이와 같은 방식으로 목표값을 달성하거나 목표 데이터베이스 수를 달성할 때까지 반복하여 총 30개의 최적화 결과값을 얻는다.
- [0087] <비교예 3>
- [0088] 비교예 3에서는 유전자 알고리즘만을 사용하여 다음과 같은 방법으로 아지로드ایت(Argyrodite)형 결정구조의 최적화를 하였다.
- [0089] 실시예 1의 하이브리드 최적화 방법론과의 공평한 비교를 위해 실시예 1에서 사용한 초기 30개 데이터베이스로부터 실시예 1에서 사용한 유전 알고리즘을 사용하여 최적화를 시작하였다.
- [0090] 도 4를 참조하면, 30개 아지로드ایت형 구조 데이터베이스로부터 30개의 2세대 후보군을 얻어내고 실시예 1에서 사용한 동일한 슈퍼셀 프로그램으로부터 쿨롱 에너지 계산을 수행한다.

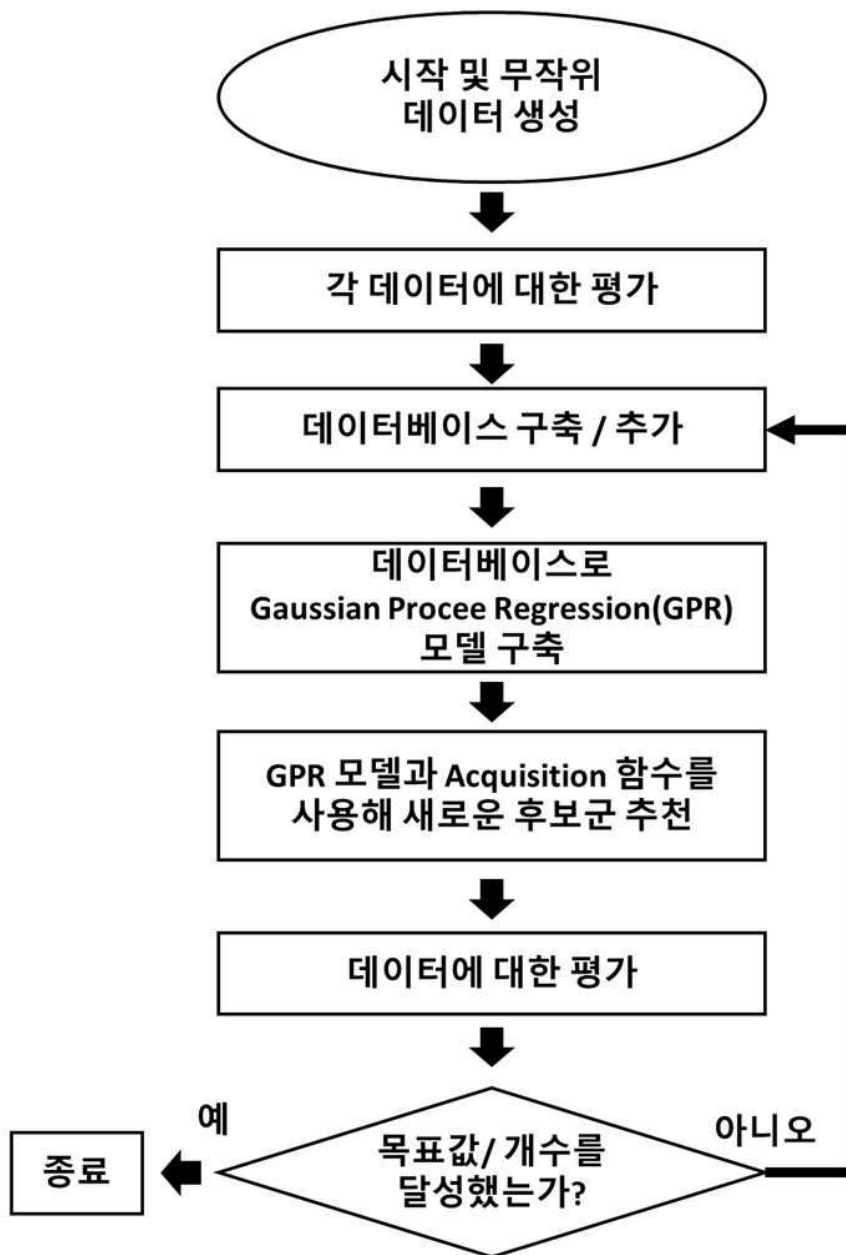
- [0091] 이와 같은 단계를 반복적으로 수행하여 최적화를 진행한다. 목표한 수치 달성 및/또는 수렴이 이루어지거나 원하는 수의 데이터베이스를 확보하였으면 최적화를 중단한다.
- [0093] <비교예 4>
- [0094] 비교예 4에서는 베이지안 최적화 알고리즘만을 사용하여 다음과 같은 방법으로 아지로드ایت(Argyrodite)형 결정구조의 최적화를 하였다.
- [0095] 실시예 2와 비교예 3과 마찬가지로 공평한 최적화 알고리즘 비교를 위하여 동일한 초기 30개 데이터베이스를 사용하였다.
- [0096] 도5를 참조하면 30개 초기 데이터베이스로부터 실시예 1에서 사용한 동일한 베이지안 최적화 알고리즘 연산을 적용하여 2개의 아지로드ایت형 결정구조 후보군을 얻어낸다.
- [0097] 2개의 결정 후보군에 대해 실시예2와 비교예3에서 사용된 수퍼셀 프로그램을 사용하여 쿨롱에너지를 계산한다.
- [0098] 2개의 후보군을 데이터베이스에 추가하여 32개의 데이터로 다시 베이지안 최적화 알고리즘을 통해 2개의 후보군을 도출, 평가한다. 2개의 후보군을 얻어내는 과정을 15회 반복하여 유전 알고리즘의 한 세대와 같은 30개의 후보군이 도출, 평가되도록 하고 이를 한 세대로 본다. 이러한 과정을 반복하여 한 세대에 30개의 후보군이 있는 베이지안 최적화 알고리즘을 진행한다.
- [0099] 베이지안 최적화 알고리즘을 목표값을 달성하거나 목표 데이터베이스 수를 축적할 때까지 반복한다. 최종적으로 30개의 최적화된 결과값을 얻는다.
- [0101] <평가예 2>
- [0102] 실시예 1, 비교예 1 및 비교예 2에 따른 최적화 방법의 성능을 DFT 계산을 통해 도출된 결과값의 쿨롱 에너지를 평가하였으며, 도 8은 그 결과를 나타낸 것이다.
- [0103] 비교예 4의 베이지안 최적화 알고리즘의 경우 최적화는 빨리 이루어졌으나, 최적화를 통해 도출된 결정구조의 쿨롱 에너지는 가장 높았다.
- [0104] 비교예 3의 유전자 알고리즘의 경우 6세대 정도에서 최적화가 이루어졌고 도출된 결정구조의 쿨롱 에너지는 비교예 4에 비해서는 낮은 결과를 보였다.
- [0105] 실시예 2의 유전자 알고리즘과 베이지안 최적화 알고리즘을 하이브리드화하여 적용한 경우, 9세대 정도에서 최적화가 이루어졌고, 도출된 결정구조의 쿨롱 에너지는 비교예 2 및 4에 비해 낮았다.
- [0106] 이로부터, 본 발명에 따른 최적화 방법은 기준함수는 물론 실제 소재의 최적화에 적용할 때도, 유전자 알고리즘과 베이지안 최적화 알고리즘을 단독으로 적용한 결과에 비해 더 나은 성능을 나타내었다.
- [0108] 전술한 본원의 설명은 예시를 위한 것이며, 본원이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자는 본원의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 쉽게 변형이 가능하다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다. 예를 들어, 단일형으로 설명되어 있는 각 구성 요소는 분산되어 실시될 수도 있으며, 마찬가지로 분산된 것으로 설명되어 있는 구성 요소들도 결합된 형태로 실시될 수 있다.
- [0109] 본원의 범위는 상기 상세한 설명보다는 후술하는 특허청구범위에 의하여 나타내어지며, 특허청구범위의 의미 및 범위 그리고 그 균등 개념으로부터 도출되는 모든 변경 또는 변형된 형태가 본원의 범위에 포함되는 것으로 해석되어야 한다.

도면

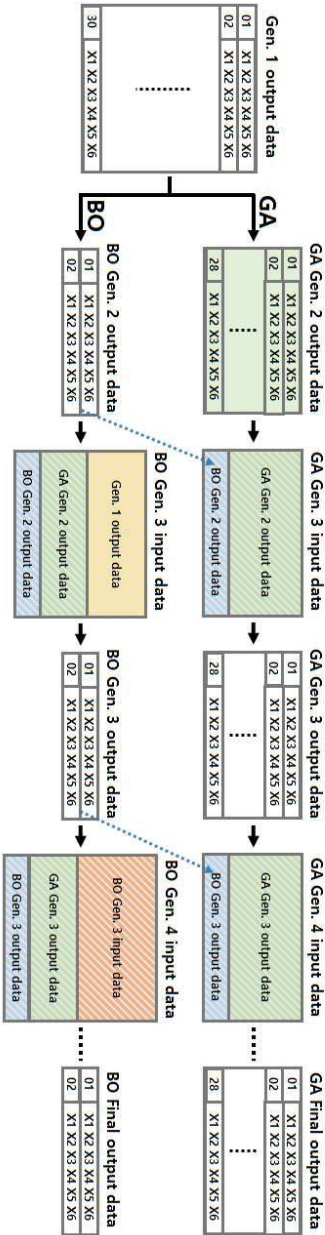
도면1



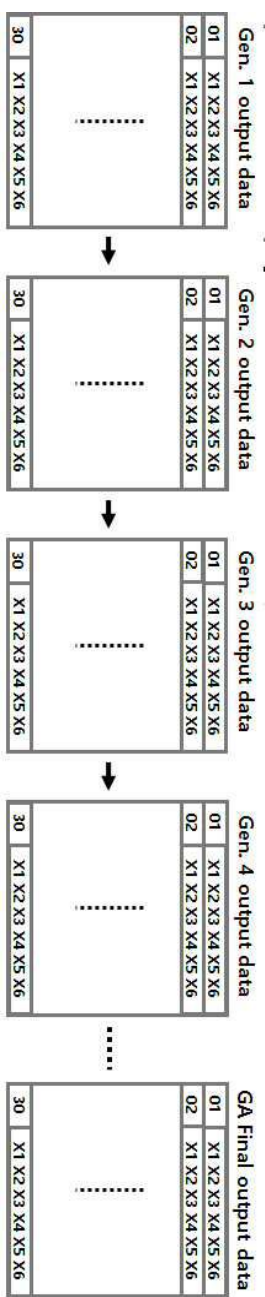
도면2



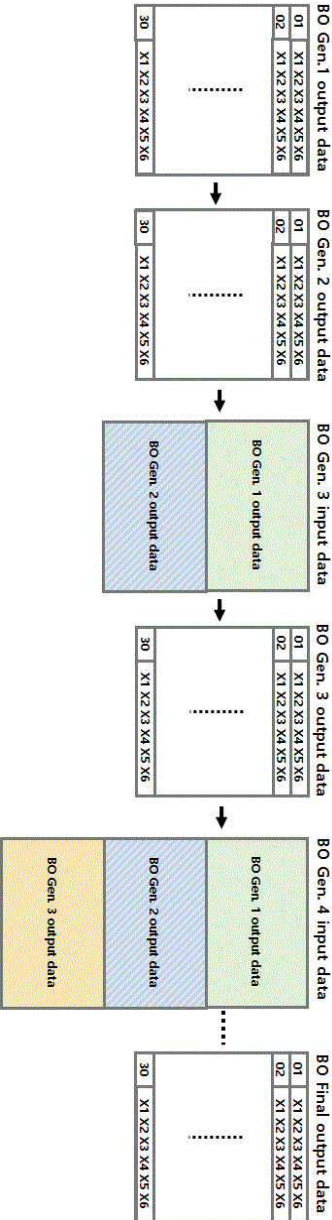
도면3



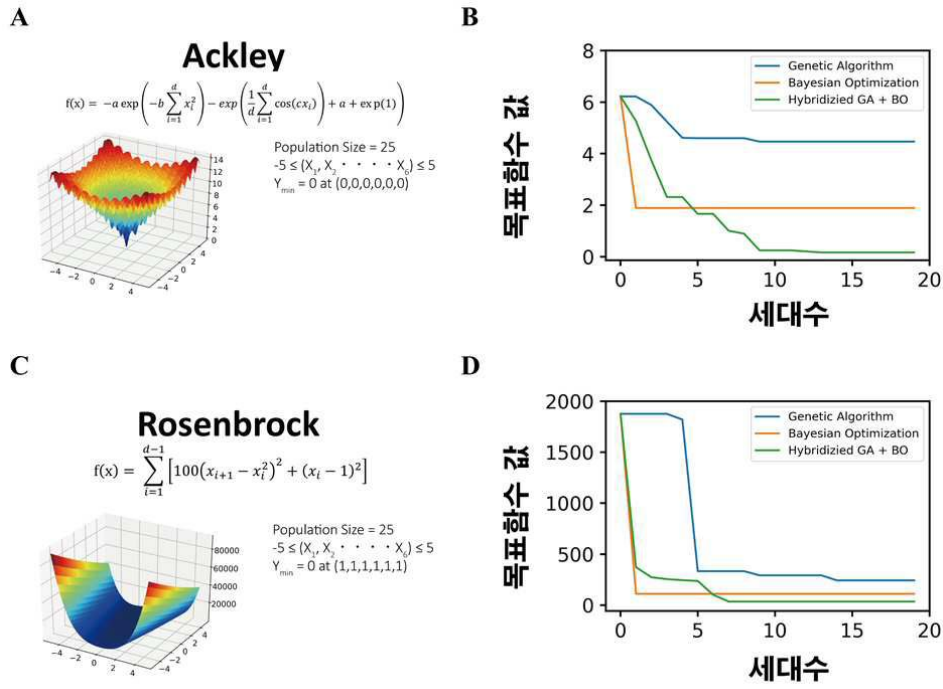
도면4



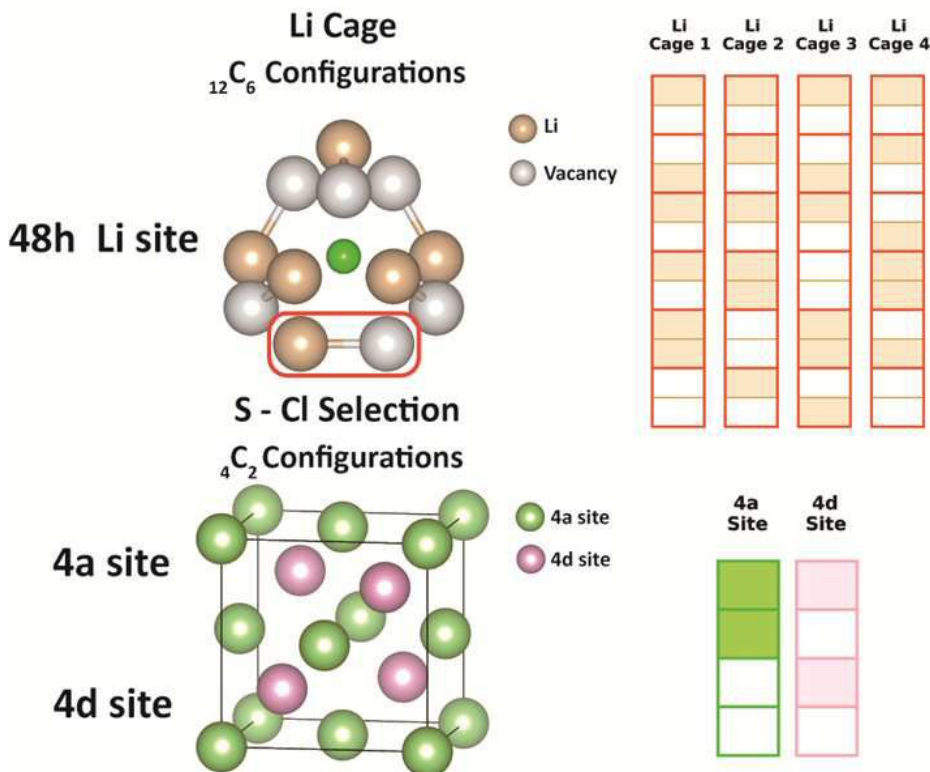
도면5



도면6



도면7



도면8

