



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0084376
(43) 공개일자 2020년07월13일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G16C 10/00 (2019.01)

(52) CPC특허분류
G16C 20/70 (2019.02)
G06N 3/08 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0165227

(22) 출원일자 2018년12월19일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

세종대학교산학협력단

서울특별시 광진구 능동로 209 (군자동, 세종대학교)

(72) 발명자

손기선

서울특별시 강남구 언주로146길 18, 4동 302호

이진웅

부산광역시 해운대구 운봉길 77-7

(74) 대리인

특허법인아이엠

전체 청구항 수 : 총 4 항

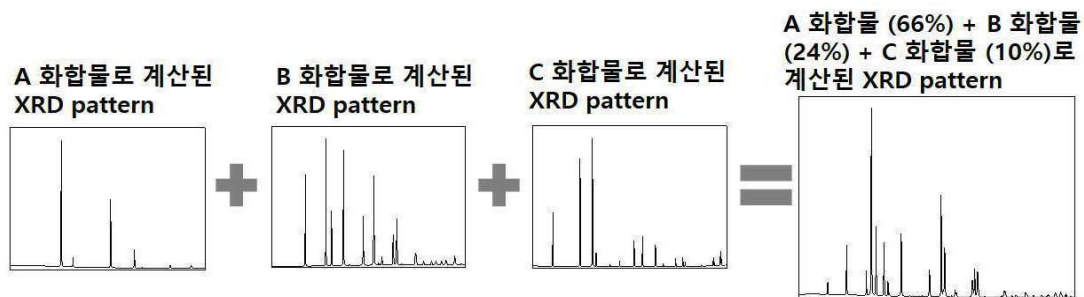
(54) 발명의 명칭 물질의 판별 및 분석 방법

(57) 요약

본 발명은 무기물 및 유기물 등 다양한 물질에 포함된 원소, 상(phase), 조성 등의 판별 및 분석이 용이한 방법에 관한 것이다.

본 발명에 따른 방법은, (a) 2 이상의 원소를 선택하는 단계, (b) 상기 2 이상의 원소로 생성 가능한 것으로 분석된 복수의 화합물의 데이터를 획득하는 단계, (c) 상기 복수의 화합물에 관하여 각각의 이미지 또는 스펙트럼 형태의 분석 데이터를 준비하는 단계, (d) 상기 복수의 화합물 중에서, 2종 이상의 화합물을 선택하여 소정의 비율로 혼합하고, 상기 각각 이미지 또는 스펙트럼 데이터를 상기 소정의 혼합 비율에 맞추어 혼합 가공하는 단계, (e) 상기 혼합 가공된 데이터를 사용하여 기계 학습을 수행하는 단계 및 (f) 상기 기계 학습을 통해 수득한 피팅 결과를 사용하여, 실제 물질을 판별 및/또는 분석하는 단계를 포함한다.

대표도



(52) CPC특허분류

G16C 20/30 (2019.02)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1711065337

부처명 과학기술정보통신부

연구관리전문기관 한국연구재단

연구사업명 미래소재디스커버리지원

연구과제명 휴리스틱스 전산기반 기능성 무기소재 창제 연구

기 여 율 1/1

주관기관 세종대학교 산학협력단

연구기간 2018.02.04 ~ 2019.02.03

명세서

청구범위

청구항 1

- (a) 2 이상의 원소를 선택하는 단계,
- (b) 상기 2 이상의 원소로 생성 가능한 것으로 분석된 복수의 화합물의 데이터를 획득하는 단계,
- (c) 상기 복수의 화합물에 관하여 각각의 이미지 또는 스펙트럼 형태의 분석 데이터를 준비하는 단계,
- (d) 상기 복수의 화합물 중에서, 2종 이상의 화합물을 선택하여 소정의 비율로 혼합하고, 상기 각각 이미지 또는 스펙트럼 데이터를 상기 소정의 혼합 비율에 맞추어 혼합 가공하는 단계,
- (e) 상기 혼합 가공된 데이터를 사용하여 기계 학습을 수행하는 단계 및
- (f) 상기 기계 학습을 통해 수득한 피팅 결과를 사용하여, 실제 물질을 판별 및/또는 분석하는 단계를 포함하는, 물질의 판별 및 분석방법.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 복수의 화합물의 데이터는 기존에 분석되어 있는 화학분석, 물질분석 데이터를 이용하는, 물질의 판별 및 분석방법.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 복수의 화합물에 관하여 각각의 이미지 또는 스펙트럼 형태의 분석 데이터를 준비하는 단계는, 실제 분석된 결과를 사용하거나, 각각의 화합물에 관한 물질 정보를 이용하여 프로그램을 사용하여 해당 분석 이미지 또는 스펙트럼을 계산하는, 물질의 판별 및 분석방법.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 이미지 또는 스펙트럼 형태의 분석 데이터는 XRD 데이터, XPS 데이터, 또는 IR 데이터인, 물질의 판별 및 분석방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 무기물 및 유기물 등 다양한 물질에 포함된 원소, 상(phase), 조성 등의 판별 및 분석이 용이한 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0003] 물질에 포함된 원소, 상(phase), 성분 등의 분석에는, XRD, XPS, EDS 등의 다양한 분석장비가 사용되고 있다. 그런데, 상기 분석장비를 통해 수득한 분석결과는 전문적인 지식을 가진 사람이 상당한 시간을 소요해야만 정확한 분석결과를 얻는 경우가 많다.

[0004] 또한, 물질별로 개발되어 있는 다양한 분석 소프트웨어를 사용하더라도, 공정 라인에서 실시간으로 사용할 수 있는 정보를 도출할 수 있는 것은 거의 없다고 할 수 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허공보 제10-2018-0073819호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명의 과제는 무기물 및 유기물 등 다양한 물질에 포함된 원소, 상(phase), 조성 등의 판별과 분석이 단시간 내에 이루어질 수 있도록 하는, 물질의 판별 및 분석 방법을 제공하는데 있다.

과제의 해결 수단

[0009] 상기 과제를 해결하기 위해 본 발명은, 다음과 같은 (a) ~ (f) 단계를 포함하는 방법을 제공한다.

[0010] (a) 2 이상의 원소를 선택하는 단계

[0011] (b) 상기 2 이상의 원소로 생성 가능한 것으로 분석된 복수의 화합물의 데이터를 획득하는 단계

[0012] (c) 상기 복수의 화합물에 관하여 각각의 이미지 또는 스펙트럼 형태의 분석 데이터를 준비하는 단계

[0013] (d) 상기 복수의 화합물 중에서, 2종 이상의 화합물을 선택하여 소정의 비율로 혼합하고, 상기 각각 이미지 또는 스펙트럼 데이터를 상기 소정의 혼합 비율에 맞추어 혼합 가공하는 단계

[0014] (e) 상기 혼합 가공된 데이터를 사용하여 기계 학습을 수행하는 단계

[0015] (f) 상기 기계 학습을 통해 수득한 피팅 결과를 사용하여, 실제 물질을 판별 및/또는 분석하는 단계

[0016] 상기 방법에 있어서, 상기 2 이상의 원소를 선택하는 단계에 있어서, 바람직한 원소의 수는 2 ~ 10이고, 보다 바람직한 원소의 수는 3 ~ 8일 수 있다.

[0017] 상기 방법에 있어서, 상기 복수의 화합물의 데이터는 현재까지 수행되어 있는 화학분석, 물질분석 데이터를 이용할 수 있다. 예를 들어, 무기물의 경우, ICSD에 등록된 화합물을 사용할 수 있다.

[0018] 상기 방법에 있어서, 상기 복수의 화합물에 관하여 각각의 이미지 또는 스펙트럼 형태의 분석 데이터를 준비하는 단계는, 실제 분석된 결과를 사용하거나, 각각의 화합물에 관한 물질 정보를 이용하여 프로그램을 사용하여 해당 분석 이미지 또는 스펙트럼을 계산할 수도 있다.

[0019] 상기 방법에 있어서, 상기 소정의 비율은 예를 들어, A 화합물, B 화합물, C 화합물이 3종이 존재할 경우, 상기 3종의 화합물의 함량이 질량%로 0.5% 단위로 변경되도록 하고, 그에 맞추어 이미지 또는 스펙트럼 데이터를 가공하는 형태일 수 있으나, 분석할 물질의 특성 및 구비되는 데이터의 사정에 맞추어 조절될 수 있으며, 반드시 이에 제한되는 것은 아니다.

[0020] 상기 방법에 있어서, 상기 이미지 또는 스펙트럼 형태의 분석 데이터는 기계 학습이 가능한 형태라면 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, XRD 데이터, XPS 데이터, IR 데이터 등이 사용될 수 있다.

[0021] 상기 방법에 있어서, 상기 기계 학습은 다양한 형태의 알고리즘이 적용될 수 있으며, 바람직하게 합성곱 신경망(Convolutional Neural Network, CNN)과 같은 딥러닝(deep learning) 방법이 사용될 수 있다.

발명의 효과

[0023] 본 발명에 따르면, 임의의 원소로 이루어진 성분 시스템을 설정하고, 이 시스템으로 가능하며 알려진 모든 화합물의 분석 데이터를 이용하여, 상기 모든 화합물의 혼합비율을 미리 상정하여 이미지 또는 스펙트럼 데이터를 가공하여 기계학습을 한 후, 기계학습의 결과물인 예측모델을 통해서, 실제 물질의 판별 및/또는 분석이 이루어

지므로, 단시간 내에 정확한 분석 결과를 도출할 수 있다. 예를 들어, 철강 공장 라인에서, XRD 데이터 결과를 본 발명에서 수득한 피팅 결과를 사용할 경우 실시간으로 상(phase) 분석이 가능하여 불량 발생 여부를 확인할 수 있게 된다.

도면의 간단한 설명

- [0025] 도 1은 본 발명의 일 실시형태에 따른 분석하고자 하는 원소의 시스템과 관련 화합물 데이터를 획득하는 과정을 설명하는 도면이다.
- 도 2는 본 발명의 일 실시형태에 따라, ICSD 결정구조 데이터로부터 XRD 구성 파라미터를 이용하여 특정 화합물의 XRD 데이터를 계산하여 도출하는 단계를 설명하는 도면이다.
- 도 3은 도 2에서 도출된 각각의 화합물의 XRD 데이터를 사용하여, 혼합비율에 맞추어 가공하는 단계를 설명하는 도면이다.
- 도 4는 도 3의 가공된 데이터를 사용하여 딥 러닝 수행하는 과정을 설명하기 위한 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

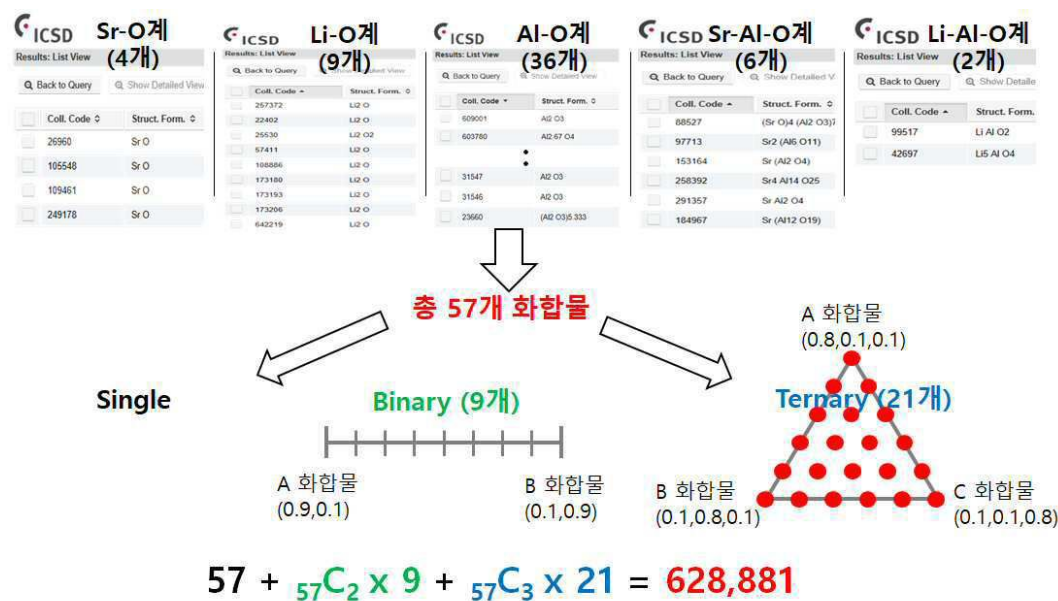
- [0026] 이하 본 발명의 실시예에 대하여 첨부된 도면을 참고로 그 구성 및 작용을 설명하기로 한다. 하기에 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 기능 또는 구성에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 불필요하게 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명을 생략할 것이다. 또한, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 '포함'한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.
- [0027] 도 1은 본 발명의 일 실시형태에 따른 분석하고자 하는 원소의 시스템과 관련 화합물 데이터를 획득하는 과정을 설명하는 도면이다.
- [0028] 도 1에 도시된 바와 같이, 분석하고자 하는 물질을 구성하는 원소 시스템을 Sr, Al, Li, O의 4가지 원소로 선택한 경우, ICSD에 등재된 무기화합물 데이터를 이용하여, 상기 4종의 원소로 이루어진 현재까지 분석된 모든 화합물에 관한 정보를 얻을 수 있다. 한편, 본 발명의 실시예에서는 분석하고자 하는 물질을 무기물로 선정하여 ICSD 데이터를 이용하였으나, 다른 형태의 물질의 경우, 다른 데이터를 사용할 수 있다.
- [0029] 상기 Sr, Li, Al, O의 4가지 원소로 가능한 화합물로 총 57개의 화합물에 관한 정보를 ICSD로부터 얻었다.
- [0030] 얻어진 57개의 화합물을 통해, 단일 화합물, 2원 화합물(binary), 3원 화합물(ternary)을 질량비율로 10% 단위로 변경하여 혼합 화합물을 생성할 경우, 총 628,881개($57 + {}_{57}C_2 \times 9 + {}_{57}C_3 \times 21 = 628,881$)의 혼합비율을 갖는 혼합 물질을 얻을 수 있다. 한편, 본 발명의 실시예에서는 10% 단위로 혼합물을 준비하였으나, 혼합비율의 구분은 다양하게 조절될 수 있다.
- [0031] 도 2는 본 발명의 일 실시형태에 따라, ICSD 결정구조 데이터로부터 XRD 구성 파라미터를 이용하여 특정 화합물의 XRD 데이터를 계산하여 도출하는 단계를 설명하는 도면이다.
- [0032] 도 2에 도시된 바와 같이, ICSD에 등재된 총 57개 화합물의 결정구조 데이터를 통해, XRD 구성 파라미터를 선정한다. 본 발명의 실시예에서는 백그라운드 파라미터로 총 6개의 데이터를 선택하고, 피크 파라미터 데이터로 총 5개의 데이터를 사용하고, 랜덤 노이즈 데이터를 부여하여 계산된 XRD 패턴 데이터를 도출하였다. 또한, ICSD 결정 정보 데이터로부터 XRD 패턴 데이터를 도출할 때 격자상수를 무작위로 변형시켜 보다 많은 수의 XRD 패턴을 도출할 수도 있다.
- [0033] 도 3은 도 2에서 도출된 각각의 화합물의 XRD 데이터를 사용하여, 혼합비율에 맞추어 가공하는 단계를 설명하는 도면이다.
- [0034] 도 3에 도시된 바와 같이, A 화합물로 계산된 XRD 패턴과 B 화합물로 계산된 XRD 패턴과 C 화합물로 계산된 XRD 패턴을, 상기 질량비율로 10% 단위로 변경하여 얻은 총 628,881개 혼합물의 비율에 맞추어 XRD 패턴을 혼합 가공하여, 총 628,881개의 계산된 XRD 패턴을 얻는다.
- [0035] 도 4는 도 3의 가공된 데이터를 사용하여 딥러닝 수행하는 과정을 설명하기 위한 도면이다.

[0036] 도 4에 도시된 바와 같이, 상기와 같이 얻은 총 628,881개 XRD 패턴을 훈련 데이터(training dataset)로 사용하여, 일차원 convolution kernel을 이용한 CNN 방법으로 딥러닝을 수행하여, 최종적으로 피팅 결과를 얻는다. 이때 사용되는 CNN의 구조(Architecture)는 다양하게 전할 수 있고 본 실시예에서 제시한 구조로 국한하지 않는다. 더 나아가 반드시 CNN만을 이용할 필요도 없고, 예를 들어 순환 신경망(Recurrent Neural Network, RNN)등도 사용할 수 있고, 특히 계산되어 도출된 XRD 패턴의 실측 XRD 패턴과의 차이를 보완하기 위해서는 생성적 적대 신경망 (Generative Adversarial Network, GAN) 기술을 접목할 수도 있다.

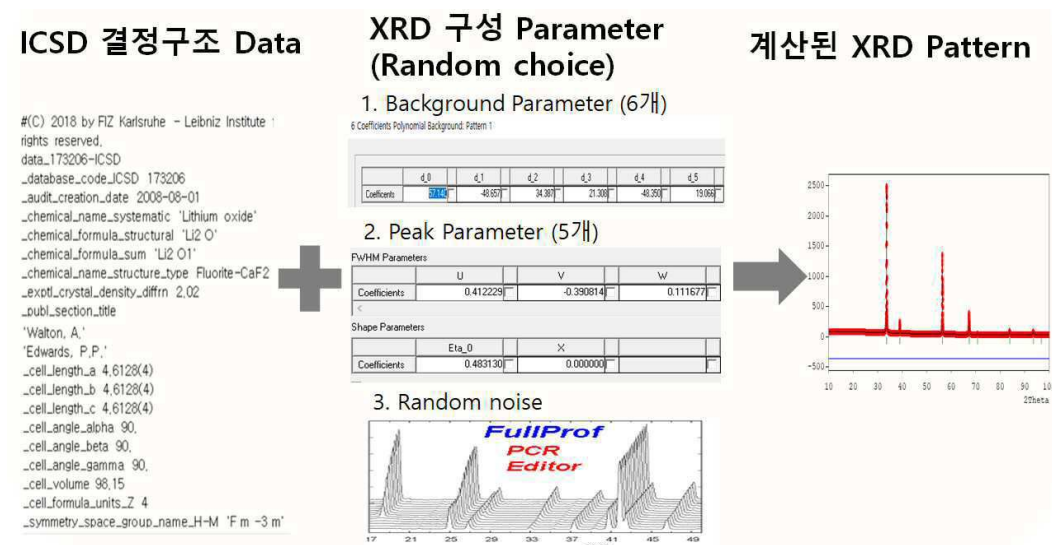
[0037] 이와 같이 얻은 피팅 결과로 얻은 예측모델을 사용하여, 실제 Sr, Al, Li, O의 4가지 원소로 합성한 임의의 물질의 XRD 분석 피크를 분석할 경우, 상기 A 화합물, B 화합물, C 화합물의 존재 여부(즉, 상 판별)과, 각각의 화합물의 조성까지도 신속하고 정확하게 분석이 가능하게 된다.

도면

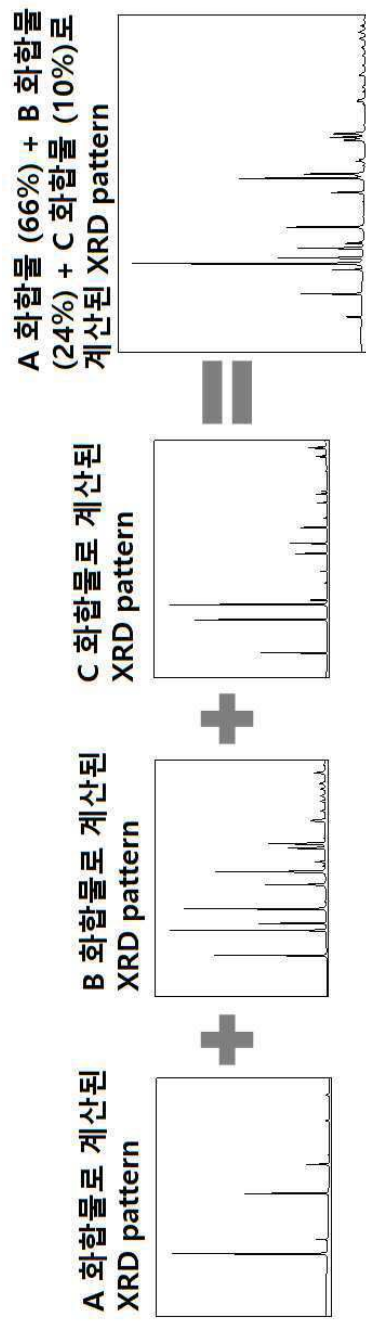
도면1



도면2



도면3



도면4

