

# Artificial Intelligence in Advanced Materials Science and Engineering

## 신소재AI

신소재공학부

담당교수: 김윤석, 정경재

# 교과목 개요

- ▶ 대상: 학부 2-3학년 대상
- ▶ 과목 구분: 2025학번부터 전공코어 (3학점) (2024학번까지는 전공심화)
- ▶ 권장 선이수 과목: 공학컴퓨터프로그래밍
- ▶ 강의 목표: 인공지능(AI)의 기초를 이해하고 이 지식을 신소재공학에 적용할 수 있도록 함.
- ▶ 진행방법:
  - 1) 머신러닝과 딥러닝을 비롯한 다양한 AI 알고리즘과 데이터 처리 및 분석 기법 학습
  - 2) 기 학습한 이론 및 방법론을 실제 신소재공학 분야의 실험 결과에 적용하고 고찰함.
- ▶ 평가: 출석 10%, 과제/토론 40%, 기말시험 50%

- 2025년 2학기: 1과목 개설 정경재
- 2026년 2학기: 2과목 개설 김윤석, 정경재

“신소재AI”가 전공코어로 인정되는 2025학번이 2학년이 되는  
2026년부터 2과목 이상 개설 예정

# 강의 내용 구성

## 인공지능 기초 (9월)

- 교과목 소개
- 코랩 설치
- 파이썬 기초
- 선형대수
- 최적화 이론 기초

## 머신러닝 (10월)

- 지도/비지도 학습
  - 회귀
  - 분류
  - 군집화
- 차원축소법

## 딥러닝 (11월)

- 인공 신경망 (ANN)
  - 오토인코더
- 합성곱 신경망 (CNN)
- 순환 신경망 (RNN)
- 최신 신경망 모델  
e.g. 적대적 신경망 (GAN)

## 인공지능의 응용 (12월)

신소재공학 분야에서의  
인공지능 활용 사례 소개



### Colab 실행 예제

python의 print 함수를 이용하여 Hello world를 출력합니다.

```
[1] 1 print("Hello world")
```

```
Hello world
```

## 구글 코랩을 활용한 실습 병행

# 기초 선형대수 및 최적화

## ➤ 선형대수

- ✓ Linear equations
- ✓ Vector and Matrix
- ✓ Linear transformation
- ✓ Eigenvector and eigenvalue
- ✓ System of linear equations

예시)  $4x_1 - 5x_2 = -13$   
 $-2x_1 + 3x_2 = 9$      $A = \begin{bmatrix} 4 & -5 \\ -2 & 3 \end{bmatrix}$ ,     $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ ,     $b = \begin{bmatrix} -13 \\ 9 \end{bmatrix}$

```
import numpy as np
```

```
A = np.array([[4, -5],  
              [-2, 3]])  
b = np.array([[ -13],  
              [ 9]])  
  
x = np.linalg.inv(A).dot(b)  
print(x)
```

```
[[ 3.]  
 [ 5.]]
```

```
A = np.asmatrix(A)  
b = np.asmatrix(b)
```

```
x = A.I*b  
print(x)
```

```
[[ 3.]  
 [ 5.]]
```

## ➤ 최적화

- ✓ Convex optimization
- ✓ Least-square method
- ✓ Gradient descent algorithm

예시) 
$$\min (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 3)^2$$
$$= \min \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 6 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + 18$$

```
H = np.matrix([[2, 0],[0, 2]])  
g = -np.matrix([[6],[6]])
```

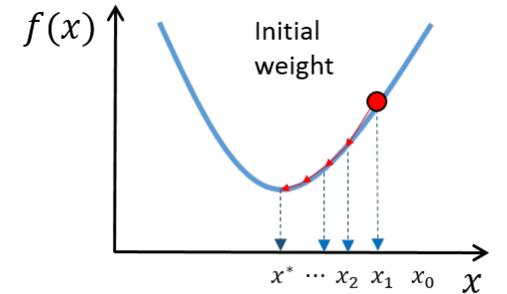
```
x = np.zeros((2,1))  
alpha = 0.2
```

```
for i in range(25):  
    df = H*x + g  
    x = x - alpha*df
```

```
print(x)
```

```
[[ 2.99999147]  
 [ 2.99999147]]
```

Repeat:  $x \leftarrow x - \alpha \nabla_x f(x)$   
Gradient



Global cost minimum  $J_{\min}(\omega)$

# 머신 러닝

수업 범위

기계학습  
(Machine Learning)

지도학습  
(Supervised Learning)

- 레이블된 데이터로 학습
- 미래 데이터 예측
- $y = f(x)$

비지도학습  
(Unsupervised Learning)

- 레이블 없이 학습
- 데이터의 숨겨진 구조/특징 발견
- $x \sim p(x), x = f(x)$

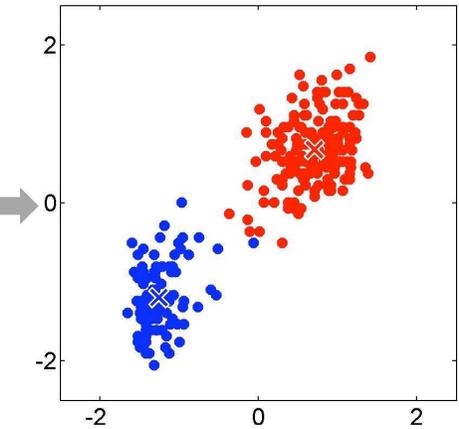
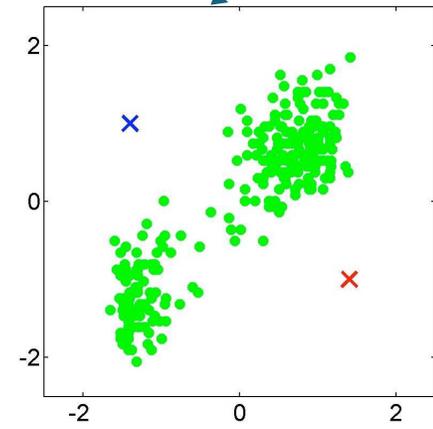
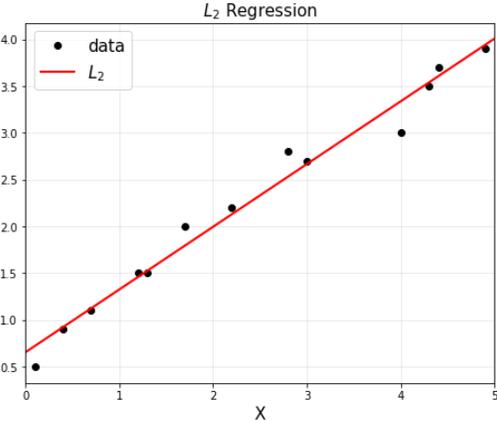
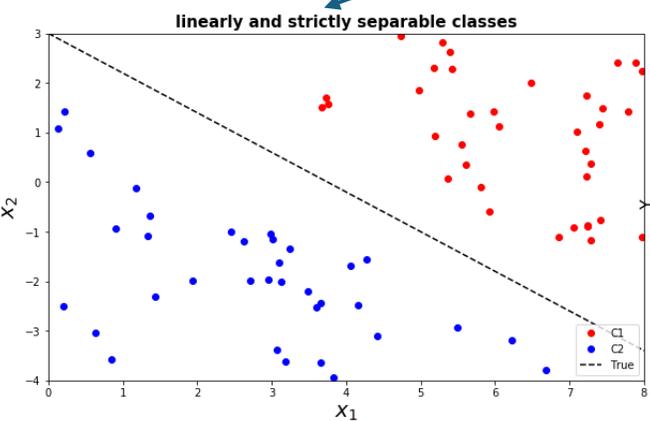
강화학습  
(Reinforcement Learning)

- 보상 시스템으로 학습
- 의사결정을 위한 최적의 액션 선택

분류  
(classification)

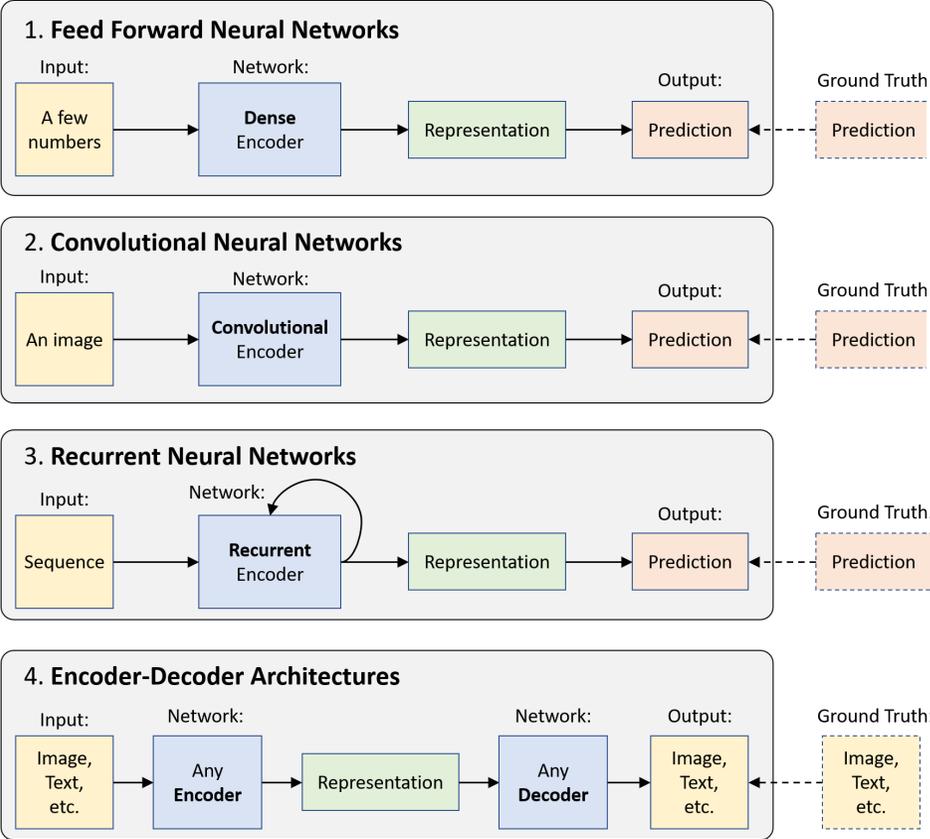
회귀  
(regression)

클러스터링  
(clustering)

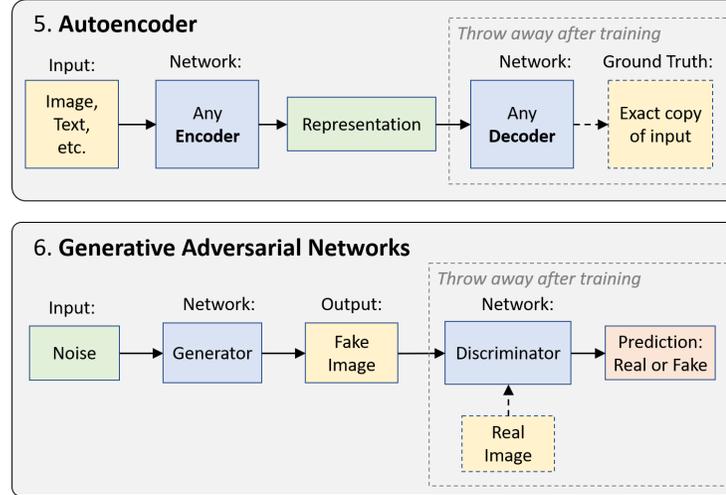


# 딥러닝

## Supervised Learning



## Unsupervised Learning



## 딥러닝 라이브러리 및 데이터베이스를 활용한 코딩

deeplearning.mit.edu  
[https://github.com/lexfridman/mit-deep-learning/blob/master/tutorial\\_deep\\_learning\\_basics/deep\\_learning\\_basics.ipynb](https://github.com/lexfridman/mit-deep-learning/blob/master/tutorial_deep_learning_basics/deep_learning_basics.ipynb)

**예시)**

Input image (28 X 28) → flattened → Input layer (784) → hidden layer (100) → output layer (10) → Digit

```

mnist = tf.keras.datasets.mnist
(train_x, train_y), (test_x, test_y) = mnist.load_data()
train_x, test_x = train_x/255.0, test_x/255.0

test_loss, test_acc = model.evaluate(test_x, test_y)

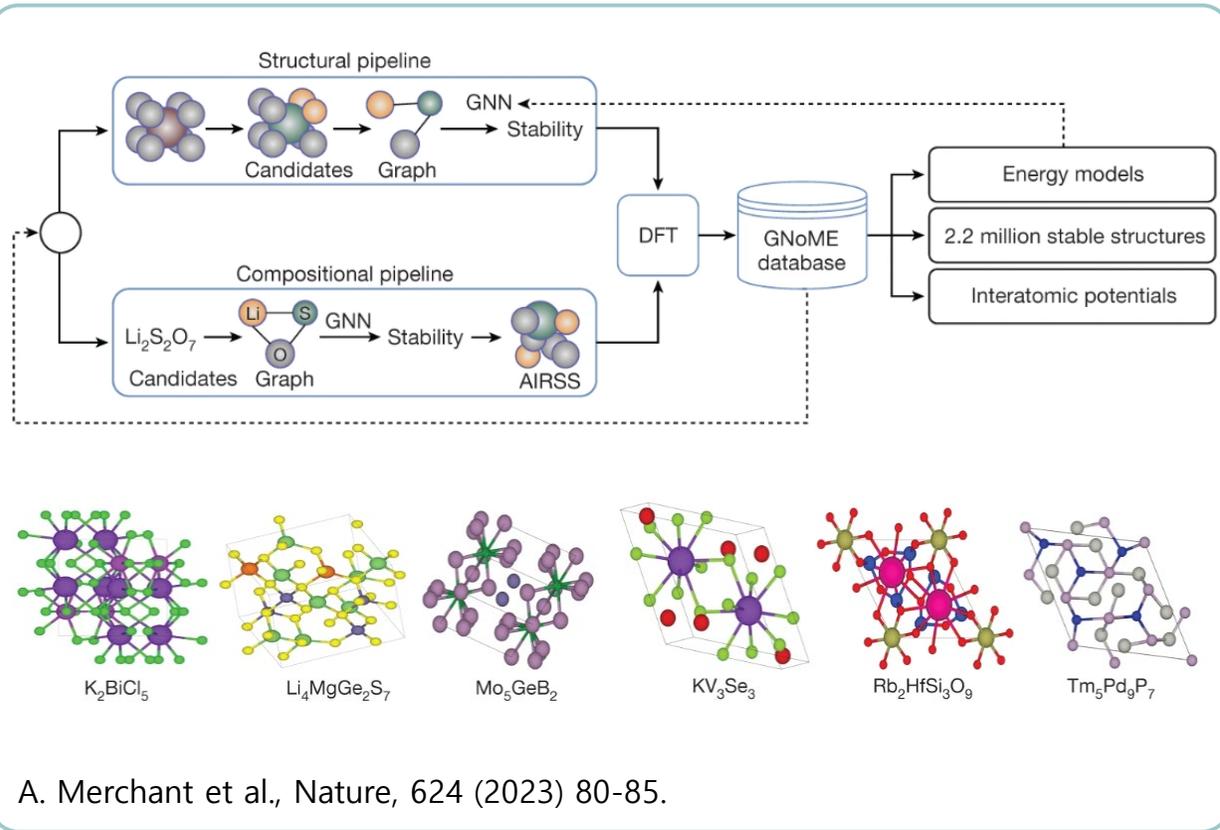
test_img = test_x[np.random.choice(test_x.shape[0], 1)]

predict = model.predict_on_batch(test_img)
mypred = np.argmax(predict, axis = 1)
    
```

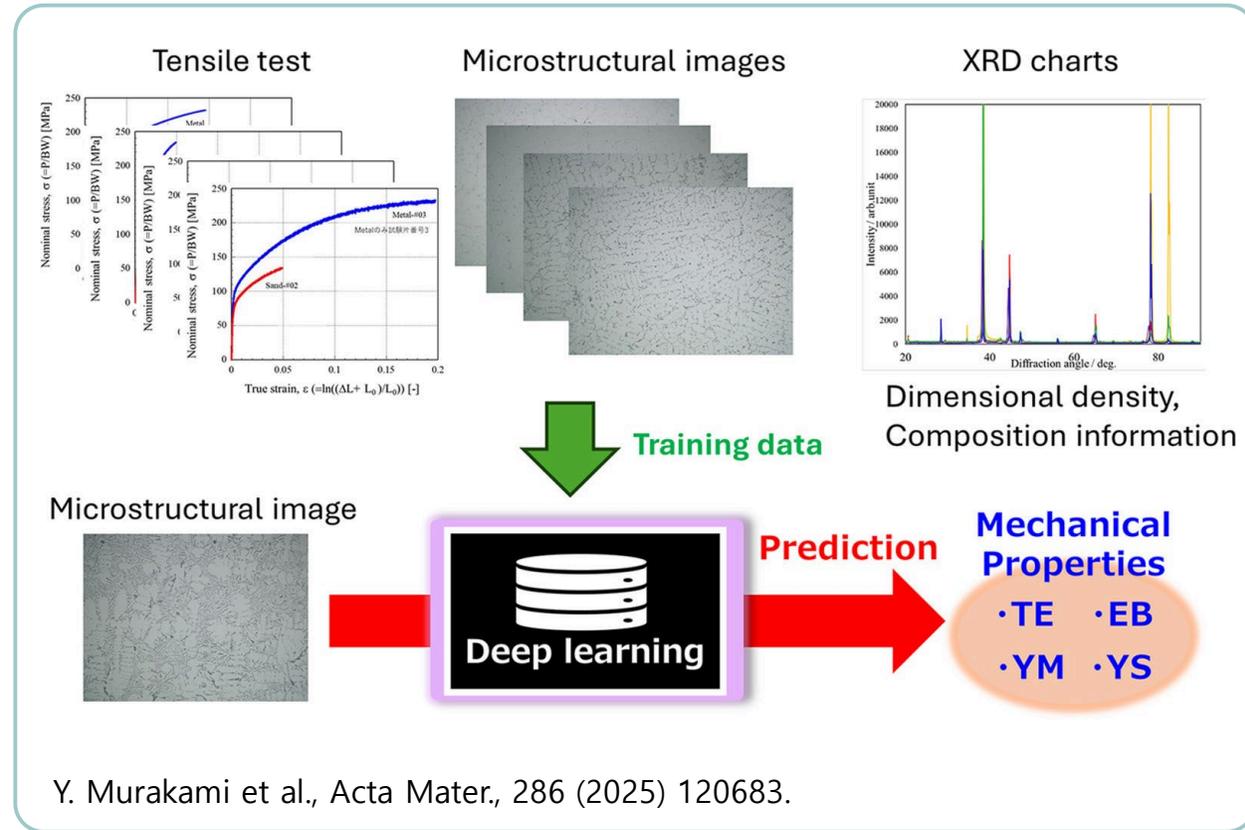
**Prediction**

Input Image: 5 → Neural Network → Prediction: 5 (91% confidence), 0 (1%), 1 (1%), 2 (1%), 3 (1%), 4 (1%), 6 (1%), 7 (1%), 8 (1%), 9 (1%)

## New Materials Discovery



## Materials Property Prediction



소재 개발, 물성 분석, 물성 예측 등 다양한 재료 분야 응용 사례 제시

## ➤ 김윤석

사무실: 제2공학관 25121호, 이메일: [yunseokkim@skku.edu](mailto:yunseokkim@skku.edu)

홈페이지: <https://spm.skku.edu>

## ➤ 정경재

사무실: 제2공학관 25133호, 이메일: [k.jeong@skku.edu](mailto:k.jeong@skku.edu)

홈페이지: <https://sites.google.com/view/kj-midlab>