

소재 설계 및 공정 최적화를 위한 능동학습

Active Learning for Materials Design and Process Optimization

조기섭

국민대학교 신소재공학부

초록

4차산업혁명 시대가 도래하면서 인공지능(Artificial Intelligence, AI) 기술은 금융, 의료, 자동차 등 다양한 산업 분야에서 핵심 기술로 인식되고 있다. 재료과학 분야에서도 기존 시행착오법에서 벗어나, 데이터 기반 인공지능 기술을 소재 설계에 활용하기 위한 다양한 시도가 진행되고 있다. 일반적으로 인공 신경망기반 기계학습은 다량의 데이터를 학습함으로써 데이터의 상관관계를 파악하고 이를 통해 특성 및 패턴을 예측하는데 효과적이다. 그러나 실험의 경우 충분한 데이터 확보가 어려우며, 오픈 소스를 통해 수집이 가능한 경우라도 대부분 편향되어 있어 양질의 데이터 확보에 일정한 한계가 있는 것으로 보고되고 있다. 최근 이러한 문제를 극복하기 위한 방안으로 능동학습(active learning) 기법에 대한 연구가 활발히 수행되고 있다. 능동학습은 베이저안 주의(Bayesian theorem)에 따라 초기 적은 양의 데이터를 시작으로 선별된 쿼리에 대한 레이블링(labeling) 및 재학습을 반복하는 과정을 통해 모델의 성능 향상 또는 해결하고자 하는 문제를 최적화하는 학습 기법이다.

본 발표에서는 소재 설계 및 공정 최적화를 위한 기본적인 인공지능 알고리즘 및 가용데이터가 제한적인 경우에 활용할 수 있는 GPR, MonteCarlo Dropout, Ensemble Learning, Bayesian Neural Network 등 확률모델을 활용한 능동학습 기법에 대해 소개하고자 한다.