



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

2024년 2월

석사학위논문

미세조직 결정립 크기  
측정에 대한 기계학습

조선대학교 대학원

신소재공학과

정 준 호

# 미세조직 결정립 크기 측정에 대한 기계학습

Machine learning for grain size  
measurement from microstructure images

2024년 2월 23일

조선대학교 대학원

신소재공학과

정 준 호

미세조직 결정립 크기  
측정에 대한 기계학습

지도교수 김 희 수

이 논문을 공학 석사학위신청 논문으로 제출함.

2023년 10월

조선대학교 대학원

신소재공학과

정 준 호

# 정준호의 석사학위 논문을 인준함

위원장 장희진 (인)

위 원 김선중 (인)

위 원 김희수 (인)

2023년 12월

조선대학교 대 학 원

## 목 차

LIST OF TABLES .....	iv
LIST OF FIGURES .....	iv
ABSTRACT .....	vii
제 1 장 서 론 .....	1
제 2 장 이론적 배경 .....	3
제 1 절 미세조직 .....	3
1. 미세조직의 결정립 .....	3
2. 미세조직의 측정 .....	5
제 2 절 인공 지능 .....	7
제 3 절 기계학습 .....	8
1. 지도학습 .....	8
2. 비지도학습 .....	8
3. 강화학습 .....	9
제 4 절 퍼셉트론 .....	10
제 5 절 인공신경망 .....	12

1. 활성화 함수 .....	13
제 6 절 합성곱 신경망 .....	14
1. 합성곱 레이어 .....	15
2. 풀링 레이어 .....	15
3. 완전연결 레이어 .....	17
4. 손실 함수와 옵티마이저 .....	17
5. 합성곱 신경망 예시 .....	18
6. 재료공학에 기계학습을 적용한 사례 .....	22
제 3 장 실험방법 .....	24
제 1 절 미세조직 이미지데이터 준비 .....	24
1. 훈련용, 테스트용 데이터 구축 .....	24
2. 테스트용 전용 데이터 구축 .....	25
제 2 절 최적 합성곱 신경망 모델 구축 .....	26
제 4 장 결과 및 고찰 .....	30
제 1 절 합성곱 신경망 성능 .....	30
제 2 절 합성곱 신경망의 추가 테스트 .....	32
제 3 절 중간층 이미지 분석 .....	35

제 5 장 결 론 .....	47
참 고 문 헌 .....	48



## LIST OF TABLES

Table 3.1 Distribution of image dataset .....	21
Table 3.2 CNN structure in this study .....	23

## LIST OF FIGURES

Fig. 2.1 Effect of annealing temperature of brass alloy .....	3
Fig. 2.2 Applying the linear intersection method .....	3
Fig. 2.3 AI(Artificial Intelligence) inclusion relation .....	3
Fig. 2.4 Monolayer perceptron .....	7
Fig. 2.5 Examples of perceptron .....	7
Fig. 2.6 Schematic of artificial neural network .....	8
Fig. 2.7 Activation functions .....	10
Fig. 2.8 Convolution filter .....	11
Fig. 2.9 Maxpooling layer .....	12
Fig. 2.10 Fully connected layer .....	13
Fig. 2.11 LeNet structure .....	14

Fig. 2.12 LeNet classification example .....	15
Fig. 2.13 AlexNet structure .....	16
Fig. 2.14 VGG16 structure .....	17
Fig. 3.1 Simulated grain structure image .....	21
Fig. 3.2 Experimental grain structure image .....	22
Fig. 3.3 Image size change in CP layer .....	24
Fig. 3.4 Convolution neural network structure used in this study .....	24
Fig. 4.1 Changes of losses for training progress .....	26
Fig. 4.2 Comparison of measured and predicted average grain area .....	27
Fig. 4.3 Comparison of measured and predicted average grain area with 50 to 3200 pixel .....	29
Fig. 4.4 Comparison of measured and predicted average grain area with experimental image .....	30
Fig. 4.5 Input image(GB type, 256 by 256 pixel) .....	31
Fig. 4.6 After Convolution1 and Maxpooling1 images .....	32
Fig. 4.7 After Convolution2 and Maxpooling2 layer images .....	33

Fig. 4.8 After Convolution2 layer images ..... 33

Fig. 4.9 After Maxpooling2 layer images ..... 34

Fig. 4.10 After Convolution3 and Maxpooling3 layer images ..... 35

Fig. 4.11 After Convolution3 layer images ..... 35

Fig. 4.12 After Maxpooling3 layer images ..... 36

Fig. 4.13 After Convolution4 and Maxpooling4 layer images ..... 37

Fig. 4.14 After Convolution4 layer images ..... 38

Fig. 4.15 After Maxpooling4 layer images ..... 39

Fig. 4.16 Middle layer images of CL type test ..... 40

Fig. 4.17 Collection of shrink images ..... 41

Fig. 4.18 Enlarged image After Maxpooling4 ..... 42

# Abstract

## Machine learning for grain size measurement from microstructure images

Jun ho Jung

Advisor: Prof. Heesoo Kim, Ph. D.

Dept. of Advanced Materials Engineering

Graduate School of Chosun University

Observing microstructure is the most basic way to determine the properties of materials. The mechanical and electrical properties of metallic materials vary depending on their microstructure. The microstructure of a material is not only deeply related to physical properties and mechanical behavior, but can also help optimize the manufacturing process or prevent damage to material, so observing the microstructure of material can be said to be a fundamental step in materials engineering. The method of observing microstructure generally involves grinding a target specimen, etching it with a solution, and observing it with an optical microscope. This work requires a lot of time and effort, and there is a possibility that subjective judgment may be involved. However, the average grain size can be accurately obtained by dividing the entire microstructure image by the number of grains. Unlike the mechanical properties or composition of the material, the grain size of the microstructure is information that can be obtained directly from the image, so it is suitable for using convolutional neural networks.

A convolutional neural network is an artificial neural network that performs an image operation called convolution. It is also used in materials engineering. Studies were conducted with the expectation that it would be possible to measure the grain size of the microstructure. The goal of this study was to evaluate the performance of convolutional neural networks applied to materials engineering and to understand how convolutional neural networks recognize the characteristics of microstructure.

## 제 1 장 서론

미세조직 관찰은 재료의 특성을 알아보기 위한 방법 중 가장 기초적인 것이다. 미세조직은 재료의 조성과 제조 공정의 영향을 받게 되는데 일반적으로 금속재료는 주조 및 응고를 통해 제조되어 열처리와 소성가공 공정과 같은 열가공 공정(thermo-mechanical processing)으로써 제품으로 완성된다. 열가공 공정을 거친 금속은 다양한 성질의 변화가 발생하는데, 결정립 크기와 방향에 따라 강도, 경도, 인성, 가공성 등이 변화하게 된다[1]. 단일상을 이루는 재료에선 결정립의 평균 크기와 분포가 재료의 물성을 결정하는 주된 요소이며, 다상 조직에서는 각 상의 분율 및 모양에 의해 그 재료의 특성이 결정된다. 따라서 미세조직은 원하는 재료의 합금 성분과 공정 조건 설계에 있어서 필수적으로 고려해야하는 핵심 인자이다[2].

재료의 기계적 및 전기적 특성은 미세조직에 의해 달라지게 된다. Hall-Petch 관계식에 따르면 결정립 크기가 작아질수록 금속의 항복강도가 증가한다고 알려져 있으며, 미세한 결정립을 갖는 재료는 1 차원적 결함인 전위(dislocation)의 이동을 방해하는 결정립계의 면적이 더 크므로 작은 결정립은 높은 강도를 가지게 된다. 결정립이 미세해지는 것은 소재의 기계적 물성인 강도(strength)와 경도(hardness)의 향상에 큰 영향을 끼친다[3]. 이러한 결정립의 크기는 면저항에 영향을 미치고 미세한 결정립일 때 많은 결정립계에 의해 높은 전기저항값(electrical resistance)을 가지게 되는 전기화학적 거동과도 연관이 있다[4,5]. 또한, 결정립 간 격자 방위 차이로 발생하는 결정립계는 결정립 내부보다 높은 에너지 상태에 존재하므로, 합금원소 및 이종원자 혹은 이물질이 축적되는 편석이 일어나기 쉬워진다. 미세구조는 재료의 성질과 연관이 있을 뿐만 아니라 제조공정의 최적화[6]나 재료 손상의 예방을 도모할 수 때문에 재료의 미세조직 관찰은 재료공학의 기본이 되는 단계라고 할 수 있다.

미세조직을 관찰하는 방법은 일반적으로 대상 시편을 연마한 후, 재료에 맞는 용액으로 식각시켜 광학현미경으로 관찰하게 된다. 미세조직을 이루고 있는 결정립 크기는 측정하기 위해 대표적으로 선형교차법[7]을 사용하는데, 이는 미세구조 이미지에 임의의 선을 그리고, 모든 선에 대해 결정립계와 교차하는 개수를 집계하는

방법이다. 이 작업은 많은 시간과 노력이 필요하며, 디지털 현미경과 분석기를 통해 자동적으로 분석[8]한다고 하더라도 주관적인 판단이 개입될 가능성이 존재한다. 하지만 평균 결정립 크기는 전체 미세조직 이미지를 결정립의 수로 나눈다면 정확하게 구할 수 있으며, 재료의 기계적 특성이나 조성과는 달리 미세조직의 결정립 크기는 이미지로부터 직접적으로 얻을 수 있는 정보이기 때문에 이미지 인식에 적합한 합성곱 신경망을 채택하여 연구를 진행하였다.

합성곱 신경망이란 합성곱이라는 이미지 연산 작업을 수행하는 인공신경망으로 손글씨 인식[9], 자동차 번호판 인식[10], 베어링의 진동 그래프로써 고장진단[11], 암 진단[12] 등 이미지를 인식하는 연구들이 다양한 분야에서 사용되고 있으며 이는 재료공학에서도 많이 응용되고 있다. 미세조직 이미지를 분류[13]하거나 X선 회절 이미지 패턴을 분류[14]하며, 미세조직 이미지 데이터 증대를 위한 생성 기법[15], 섬유 복합재료의 적층 각도 예측[16], 스피노달 분해 이미지로부터 화학 성분과 공정 온도를 예측하는 연구[17]들이 진행되었다. 이러한 연구들은 특정 재료의 이미지 또는 미세조직 이미지를 입력으로 받아 합성곱 신경망으로써 분류, 생성, 예측한 것으로 미세구조의 결정립 크기 또한 측정이 가능할 것으로 예상하여 연구를 진행하였다.

본 연구는 미세구조의 결정립 크기 측정에 적용된 합성곱 신경망의 성능을 평가하는 것과 합성곱 신경망이 미세구조의 어떠한 특징을 인지하는지에 대해 파악하는 것을 목표로 하였다. 이를 위해 여러 미세조직 이미지에 각각 대응하는 평균 결정립 크기를 회귀로써 예측하여 정확도를 비교하였고, 합성곱 신경망에서 이미지의 특징이 추출되는 과정을 보여주는 중간층 이미지를 단계별로 추출하여 고찰해보았다.

## 제 2 장 이론적 배경

### 제 1 절 미세조직

#### 1. 미세조직의 결정립

결정질 고체의 대부분은 다른 결정 방향의 결정립으로 구성된 다결정이다. 결정립계는 두 결정립의 불합치가 존재하는 분리된 계면을 말한다. 금속 내에서 서로 다른 상(phase)이 공존할 수 있는데 이러한 상들은 물리적, 화학적 특성이 균일한 계(system)의 균질한 부분으로 정의하며 각각의 물성을 가진다. 단일상을 이루는 재료에선 결정립의 평균 크기와 분포가 재료의 물성에 지배적으로 작용하며, 다상 조직에서는 각 상의 분율 및 모양에 의해 그 재료의 특성이 결정된다. 합금에서 미세조직을 이루고 있는 결정립 또는 상의 수, 비율, 분포에 따라 다양한 성질이 나타나며, 이를 합금 원소의 종류와 농도, 여러 열처리(온도, 가열 시간, 냉각 속도) 등의 변수로써 조절할 수 있다. 결정립 크기 또는 결정립계가 재료의 성질에 미치는 대표적인 영향은 다음과 같다.

##### 1) 기계적 성질

Hall-etch 관계식에 따르면 결정립 크기가 작아질수록 금속의 항복강도가 증가한다고 알려져 있으며, 미세한 결정립을 갖는 재료는 1 차원적 결함인 전위(dislocation)의 이동을 방해하는 결정립계의 면적이 더 크므로 작은 결정립은 높은 강도를 가지게 된다. 강도 뿐만 아니라 경도, 연성-취성 전이 온도와 같은 재료의 기계적 성질 중 상당수는 결정립 크기를 미세화함으로써 향상될 수 있다[18]. 이러한 결정립 크기는 전단변형을 이용한 강소성 가공법으로 결정립을 마이크로 이하의 크기로 만들어 미세조직을 제어하기도 한다[3]. Fig. 2.1 은 황동 합금의 열처리에 따른 인장강도와 연성, 결정립 크기의 변화를 나타낸다. 열처리가 진행되며 온도가 상승함에 따라 결정립의 크기는 연성과 함께 증가하고, 인장강도는 감소하는 모습을 보인다. 하지만 결정립의 크기를 나노 수준으로 줄일 경우 강도가 증가하지만 연신율은 낮은 가공경화로 인해 감소하며, 제조에 있어 문제가 발생할 수

있다. 이를 해결하기 위해 상변태를 이용하여 결정립 생성체를 급격히 늘리는 방식으로 초미세 결정립을 만드는 연구가 진행되기도 하였다[19].

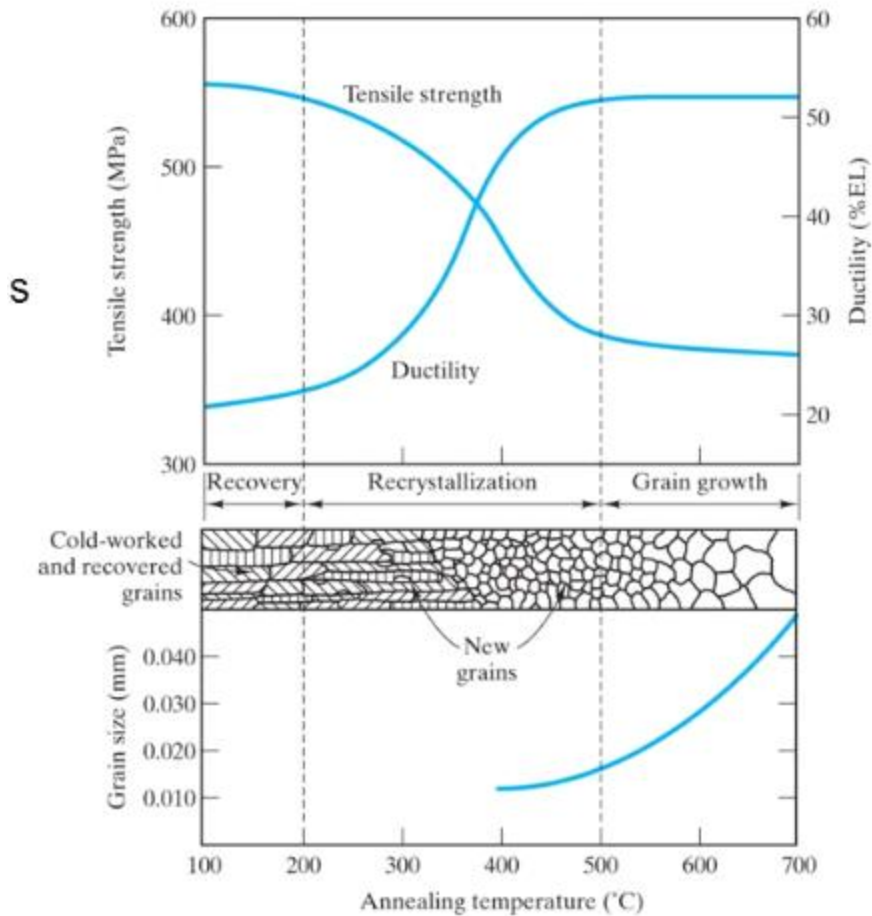


Fig. 2.1 : Effect of annealing temperature of brass alloy [20].

## 2) 전기화학적 성질

결정립계는 결정립 내부와 다른 성질을 띤다. 결정립 간 격자 방위 차이에 의한 계면에너지, 응고나 상변태 중에 발생하는 불순물의 편석, 그리고 스테인리스강에서 흔하게 발생하는 입계에서의 석출물 등이 재료의 물성에 큰 역할을 미친다. 일반적인 부식이론에 의하면 결정립계의 면적이 클수록 부식이 잘 일어나는 것으로 알려져 있다. 이는 결정립 내부보다 결정립계가 높은 에너지 상태여서 불안정하기 때문이다[21]. 하지만 염수 분위기 마그네슘 합금의 경우 결정립 미세화에 의해 부식



속도가 감소했으며, 이는 결정립계를 따라 분포되는 석출상들에 의해 결정립 크기와 부식속도가 관련있을 것이라는 연구 또한 진행됐다[4]. 재료 부식의 경우, 합금의 종류나 분율, 부식 환경, 결정립의 형태 등 다양한 인자에 의해 결정되는 것이라 판단된다. 금속으로 이루어진 박막의 경우 미세조직을 구성하는 결정립 크기에 따라 전기 회로의 신뢰성에 영향을 주기도 하며, 이러한 박막의 미세조직은 박막을 형성할 때의 전류밀도, 용액의 조성, 용액 온도 등의 도금 조건에 따라 다르게 나타난다. 결정립의 크기는 면저항에 영향을 미치고 미세한 결정립일 때 많은 결정립계에 의해 높은 저항값을 가지게 된다[5].

이외에도 열적 성질인 열전도도는 결정립의 크기가 증가함에 따라 약해짐을[22], 산화야연 필름의 결정립 크기가 증가함에 따라 광발광 강도와 감쇠(decay) 시간이 증가하는 연구를 통해 광학적 성질 또한 결정립 크기와 연관이 있음을[23], 자기적 성질인 투자율(permeability) [magnetic]은 전기강판(electrical steel sheet)의 자기 유도 및 투자율은 약한 자기장 분위기에선 결정립 크기가 클 때, 강한 자기장에서는 결정립 크기가 작을 때가 최적인 것을 밝힌 연구[24]가 진행되었다.

## 2. 미세조직의 측정

금속조직학(metallography)의 과제는 금속재료의 조직을 현미경 사진을 이용하여 정성적, 정량적으로 설명하는 것으로 재료의 특성과 파괴거동에 대한 기초적인 관계를 파악하기 위해 수행한다. 19세기 말부터 광학현미경이 미세조직을 관찰하는 가장 중요한 도구로서 그 역할을 담당했으며 근래에 들어서는 높은 해상도와 깊은 초점심도를 갖는 투과전자현미경 및 주사전자현미경의 사용이 점점 더 많아지며 공초점 레이저현미경과 초음파현미경 등 성능이 뛰어난 관찰 시스템의 이용이 증가하고 있지만, 적절한 방법으로 처리된 시편은 기초적인 광학현미경만으로도 중요한 재료의 조직정보를 얻을 수 있다[25]. 미세조직을 관찰하기 위해선 시편을 적절하게 고정시킨 뒤 조연마와 미세연마 이후 시편에 맞는 용액으로 식각시켜 관찰을 용이하게 한 뒤, 거울면을 광학현미경으로써 관찰하는 것이 일반적인 방법이다. 결정립 크기의 경우 관찰된 미세조직에 선형교차법을 사용하여 측정된다. 이를

위해 동일한 길이의 직선들을 현미경 사진에 그린 뒤, 선과 결정립계가 교차하는 개수를 집계하여 평균 결정립 크기를 구할 수 있다. 교차의 총개수가 P 라고 하고 모든 선의 총길이가  $L_T$ , 미세조직 이미지의 배율이 M 이라 하면, 교차 길이의 평균은 결정립 크기가 되어 Eq. (1)로 표현할 수 있다.

$$\bar{l} = \frac{L_T}{PM} \dots\dots (1)$$

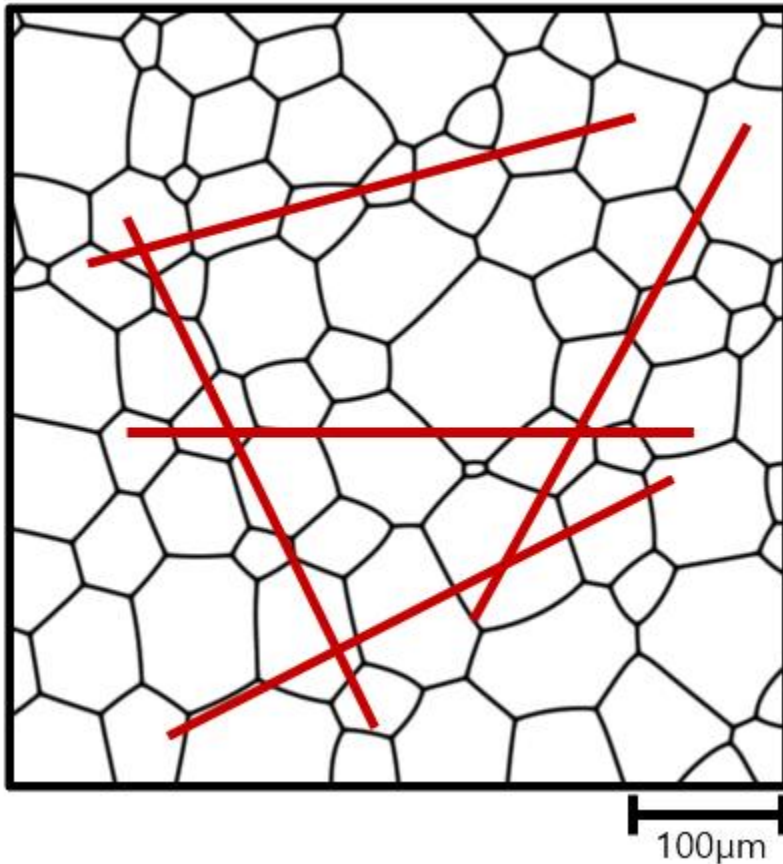


Fig. 2.2 : Applying the linear intersection method.

Fig. 2.2 는 가상의 미세구조에 선형교차법을 적용한 예시이다. 스케일 바의 길이는 25mm 일 때 이는 25,000 $\mu$ m 이다. 스케일 바의 표시 숫자는 100 $\mu$ m 이므로 배율 M 은 25,000 $\mu$ m / 100 $\mu$ m 으로 250 X이다. 각 선의 길이는 100mm 이므로

총 선의 길이는 500mm, 총 교차 수는 34 개로 위 식에 따라 평균 결정립 크기를 구하면,  $500\text{mm}/(34 \times 250) = 0.059\text{mm}$  이다.

## 제 2 절 인공지능

인공 지능이라는 용어를 만든 존 매카시(John McCarthy)는 인공 지능(Artificial intelligence, AI)을 “지능형 기계를 만드는 과학과 공학(The science and engineering of making intelligent machine)” 이라고 정의했고, 1990년대부터 인공 지능을 연구한 조지 루거(George F. Luger)는 인공 지능을 “지능적 행동의 자동화에 관한 컴퓨터 과학(The branch of computer science that is concerned with the automatic of intelligent behavior)” 이라고 정의했다[26]. 오늘날 인공 지능은 많은 응용과 활발한 연구가 진행 중인 분야다. 인공 지능을 통해 일상적인 업무를 자동화하고[27], 음성과 이미지를 이해하고 분석하려 한다[28-30]. 인공 지능을 개발하는 기술은 다양하다. 그중에서도 기계학습은 '기계가 스스로 학습하여 지능을 획득하는 기술'을 말한다. 기계학습은 학습 알고리즘을 이용하여 데이터에 숨겨진 정보와 규칙을 기계가 스스로 학습하고, 그 결과를 활용하여 새로운 것을 예측하고 추론하는 기술이다[31]. 딥러닝(deep learning)은 생체 신경망을 모방하여 개발된 인공신경망으로 복잡한 데이터 관계를 발견하는 기계학습 기법이다. 딥러닝은 입력과 출력을 처리하는 계층뿐만 아니라, 수많은 숨겨진 계층이 존재하기 때문에 딥러닝이라고 불리운다[32]. Fig. 2.3은 본 연구에 사용되는 인공신경망이 어떤 학습에 속하는지, 인공 지능이 어떻게 구성되어 있는지 나타낸 그림이다.

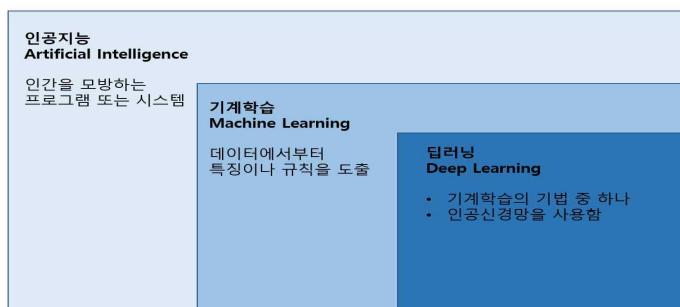


Fig 2.3 : AI(Artificial Intelligence) inclusion relation[33].

## 제 3 절 기계학습

저장된 지식에 의존하는 전통적인 인공 지능 시스템은 원시 데이터에서 패턴을 추출한 뒤 자체적으로 지식을 습득하는 능력이 필요하게 되었고, 이 과정을 기계학습이라 표현한다[34]. 기계학습은 데이터를 기반으로 컴퓨터를 학습시키는 것이며, 학습된 데이터의 경향을 요약하여 새로운 입력 데이터의 출력을 예측하는 알고리즘이다. 기계학습의 도입으로 컴퓨터는 실제 세계에 대한 지식과 관련된 문제를 해결하고 주관적으로 보이는 결정을 내릴 수 있게 되었다. 기계학습에는 정확한 계산으로 문제에 최적화되어 가는 지도 학습(supervised learning)과 데이터의 특징을 이해하여 내제된 정보를 추출하는 비지도 학습(unsupervised learning), 강화학습(reinforcement learning)이 있다[35].

### 1. 지도학습

지도학습은 회귀(regression)과 분류(classification)두가지로 나눌 수 있다. 회귀분석은 종속변수가 다른 독립변수들에 의해 어떻게 설명되는지를 적절한 함수로 표현하여 데이터를 분석하는 기법이며, 결과값이 연속적이다[36]. 회귀분석은 모수 추정을 포함한 관계의 기술이나 새로운 것에 대한 예측, 그리고 통계적 제어 등에 널리 이용되고 있다[37,38]. 예를 들어 학생들의 학습 시간별 시험 점수를 예측하거나, 아파트의 주변 환경 요소인 교육, 교통, 생활 등의 정보를 바탕으로 집 값을 예측하는 모델을 만들 수 있다. 예측 결과값이 이산적인 값, 즉 레이블(label)이 구분되는 것이면 분류를 사용한다. 그리고 분류 알고리즘으로는 의사결정나무(decision tree)[39], 서포트 벡터 머신(support vector machine)[40], K-최근접 이웃(K-nearest neighbor)등이 있다[41].

### 2. 비지도학습

비지도학습은 데이터에 대한 레이블 없이 모델을 학습시키는 방법이다. 데이터가 무작위로 분포되어 있을 때 K-평균(K-means)과 같이 유사한 데이터를 그룹화하는 클러스터링 알고리즘이 일반적이다. K-평균 알고리즘은 K값이 주어져 있을

때, 주어진 데이터들을  $K$  개의 클러스터로 묶는 알고리즘으로 대표적인 클러스터링 기법 중 하나이다. 구별되지 않은 데이터들의 특징이나 패턴으로 군집을 만든 후, 새로운 데이터가 어떤 군집에 속하는지를 추론할 수 있다. 비지도학습은 데이터에 대한 사전 지식이 없어도 사용할 수 있고 데이터의 패턴이나 특징을 쉽게 발견할 수 있다는 장점이 있지만, 레이블이 존재하지 않기 때문에 모델의 성능을 정량적으로 평가하기 힘들고 이 때문에 결과의 해석이 모호하다는 단점이 있다[42].

### 3. 강화학습

강화학습에서는 자율 시스템이 인간 운영자의 안내 없이 시행착오를 통해 작업을 수행하는 방법이다. 강화학습의 목표는 행동에 대한 보상을 사용하여 미래 보상의 평균을 최대화하는 것이다[43]. 시스템은 환경과 상호작용하며, 현재의 상태에서 할 수 있는 행동을 취한다. 선택한 행동에 따라 보상이 주어지게 되고 시스템은 더 높은 보상을 받을 수 있는 행동을 선택하도록 학습하게 된다. 딥마인드(DeepMind)는 딥러닝을 기반으로 한 강화학습 시스템을 이용하여 아타리(Atari) 벽돌깨기 비디오 게임을 학습해 시스템을 인간 수준의 성능에 도달할 수 있음을 입증하였다[44].

### 제 4 절 퍼셉트론(perceptron)

퍼셉트론이란 인공지능망에서 사용되는 뉴런으로 신경망의 기본 단위를 의미한다. 퍼셉트론은 1958년 프랑크 로젠블랫(Frank Rosenblatt)이 이진 분류 문제를 해결하기 위해 발명했다[45]. 이진 분류를 수행하는 단층 퍼셉트론은 입력값을 받아 0 또는 1의 출력을 하는데, 이는 Eq. (2)처럼 나타낼 수 있다.

$$y \begin{cases} 0 & (w_1 x_1 + w_2 x_2 + b) \leq 0 \\ 1 & (w_1 x_1 + w_2 x_2 + b) > 0 \end{cases} \dots\dots (2)$$

퍼셉트론이 입력 신호와 가중치를 가질 때의 입력 신호 S는 아래 식 Eq. (3)로 구할 수 있다. S는 와 편향(bias) b의 합으로 주어지고, 뉴런의 출력값 O는 입력 신호 S에 활성화 함수를 적용한 값으로 주어진다. 활성화 함수는 2. 4. 1에서 설명하도록 하겠다.

$$O = f(S), S = \sum_i w_i x_i + b \dots\dots (3)$$

아래 Fig. 2.4 는 입력이 2개인 단층 퍼셉트론을 나타낸다. 단층 퍼셉트론으로써 단순 논리 회로인 Fig 2.5의 (a), (b), (c)의 AND, NAND, OR gate 문제를 해결할 수 있다. 하지만 한계값 함수(threshold function)가 선형이기 때문에 XOR의 문제는 해결할 수 없는데, 이를 해결하기 위해 층을 늘린 다층 퍼셉트론을 사용한다. Fig. 2.5 (d)는 AND, NAND, OR gate의 조합으로 XOR gate를 해결하는 모습이며, XOR gate를 사용해 비선형적인 영역도 계산할 수 있다[46].

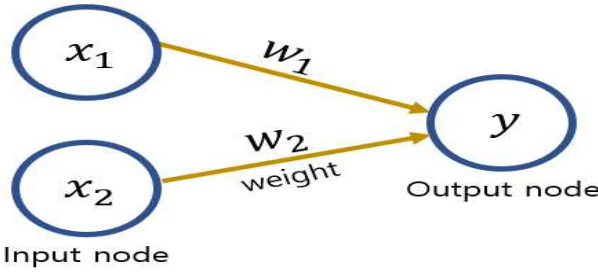


Fig. 2.4 Monolayer perceptron[47].

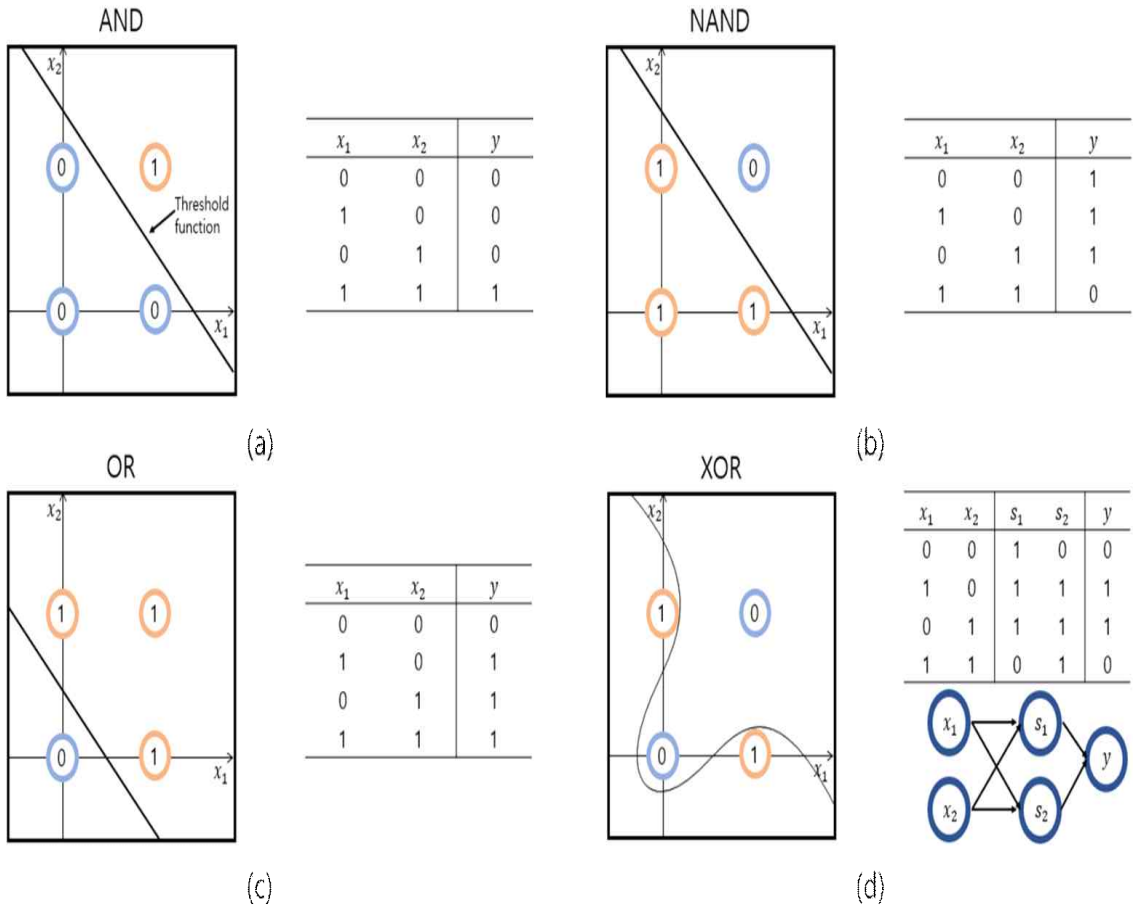


Fig. 2.5 Examples of perceptron. (a) AND gate, (b) NAND gate, (c) OR gate, and (d) XOR gate [33].

## 제 5 절 인공신경망(artificial neural network, ANN)

사람의 뇌는 출생 시 600억~1000억개의 뉴런이 만들어져 있고, 신경전달물질이 오가는 뉴런과 뉴런 사이에 존재하는 시냅스는 수 백조개 이상이다[48]. 인공신경망은 퍼셉트론을 여러 층으로 쌓은 구조로써 단층 퍼셉트론보다 복잡한 계산을 수행할 수 있다. 인공신경망은 동물의 중추신경계인 뇌에서 일어나는 정보처리와 전달과정을 모방한 수학 모델의 일종이며, 데이터의 패턴을 학습하고 예측하는데에 사용된다[49].

인공신경망은 일반적으로 여러 층의 레이어(층, layer)를 겹겹이 쌓아서 만든다. 각 레이어는 여러 개의 처리 단위인 노드(node)로 구성되고, 입력층(input layer)과 출력층(Output layer)이 신경망의 끝에 위치하고 그 사이에 여러 층의 은닉층(hidden layer)을 배치한다. 서로 다른 레이어에 존재한 노드들은 서로 연결되어 있으며(fully connected), 연결의 강도는 가중치(weight)로써 조절되어 계산된다[50,51]. Fig. 2.6은 인공신경망의 개략적인 구조를 나타낸다.

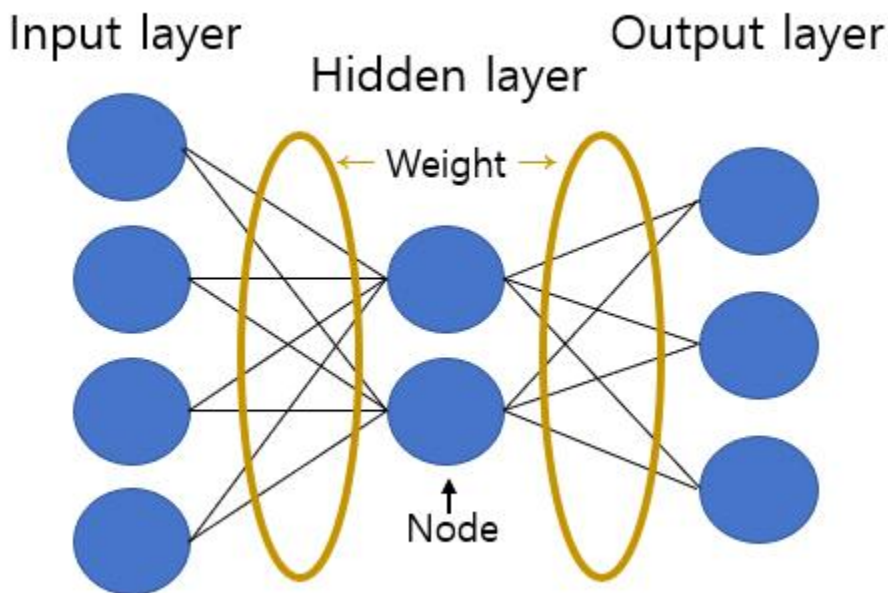


Fig. 2.6 : Schematic of artificial neural network[52].



## 1. 활성화 함수(activation function)

활성화 함수는 인공신경망이 복잡한 데이터의 패턴을 해석할 수 있도록 조절하는 기본 단위이므로 인공신경망의 필수적인 부분으로 간주된다. 입력의 가중치는 활성화 함수를 사용하여 노드에서 노드 또는 노드에서 출력으로 변환된다. 뇌에서 볼 수 있는 신경 세포 모델과 비교할 때 활성화 함수는 다음 뉴런으로 무엇을 전달할지 조절하여 결정하는 역할을 한다. 활성화 함수는 비선형적 변환을 수행하여 데이터가 신경망의 층을 지날수록 더욱 복잡한 패턴을 파악할 수 있게 한다[53].

오늘날 인공신경망의 효능을 개선하기 위해 많은 활성화 함수들이 개발되었으며 Fig. 2.7는 시그모이드(sigmoid) [54], 쌍곡 탄젠트 함수(tanh) [55], 정류 선형 단위(ReLU) [56]로 대표적인 활성화 함수다. 각 함수의 식은 Eq. (4), (5), (6)로 나타낼 수 있다.

$$S(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \dots\dots (4)$$

$$H(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \dots\dots (5)$$

$$R(x) = \max(0, x) \dots\dots (6)$$

시그모이드 함수는  $x$ 값이 0일 때 기울기가 1/4로 최댓값이지만, 입력값의 절댓값이 클수록 함수의 기울기가 매우 작아진다. 이러한 이유로 딥러닝 학습에 사용시 거듭하여 곱할수록 기울기가 작아져 소실하는 문제점이 존재하며, 식을 계산할 때의 비용이 높다는 문제가 있었다. 쌍곡 탄젠트 함수의 경우도 시그모이드 함수와 유사하게 신경망이 깊어질수록 기울기 소실 문제가 발생한다. 이 문제점을 보완한 ReLU 함수가 딥러닝 모델에서 많이 사용된다. ReLU 함수는 비선형의 형태로 입력값이 음수라면 0을 출력하는 형태를 띤다. 비선형성 덕분에 기울기가 소실되지 않고 멀리 있는 층(layer)까지 전달될 수 있으며 식이 간단해 시그모이드 함수보다 계산에 필요한 비용이 적다는 장점이 있다.

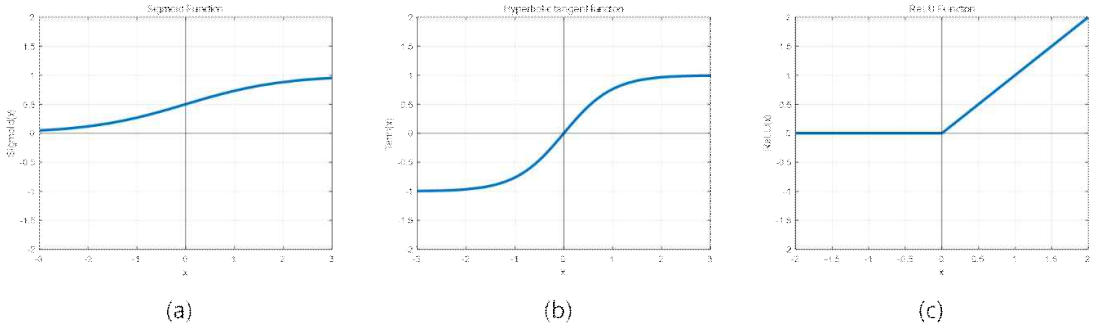


Fig. 2.7 Activation functions. (a) Sigmoid, (b) Hyperbolic Tangent, (c) ReLU(Rectified linear unit).

## 제 6 절 합성곱 신경망(convolutional neural network)

주로 이미지나 영상 데이터를 처리할 때 쓰이며 합성곱(convolution)이라는 전처리 작업이 들어가는 신경망 모델이며, 이미지 및 비디오 데이터 인식에서 좋은 성능을 보이고 있다[57]. 합성곱 신경망을 학습시키기 전에 입력 이미지의 크기를 조정하고 신경망을 학습시키고 테스트할 데이터를 나누는 데이터 전처리가 진행된다. 합성곱 신경망은 앞뒤에 입력과 출력 레이어가 존재하며 그 사이에 합성곱, 풀링(pooling layer), 완전연결 레이어(fully connected layer)로 구성된다. 각 레이어의 매개변수인 크기, 필터의 크기, 활성화 함수 등을 정하고 손실 함수(loss function)와 옵티마이저(optimizer)를 선택해 신경망을 학습시킨다. 전처리된 이미지 데이터는 합성곱과 풀링 연산이 진행되어 특징이 추출되며 완전연결 레이어를 통과한 뒤 출력값이 나오게 된다. 출력값과 실제 데이터의 값(회귀가 목표라면 연속적인 값, 분류가 목표라면 정답 레이블)을 비교하여 손실 함수를 계산하며, 손실 함수로 모델의 성능을 평가할 수 있다[58].

## 1. 합성곱 레이어(convolutional layer)

이미지는 빛의 삼원색인 RGB(red, green, blue)로 이루어진 3차원 데이터이다. 3차원 데이터는 (높이×너비× 채널)로 표현되며 RGB 색상은 채널이 3으로 표현된다. 합성곱 필터는 입력 이미지의 특징을 추출하게 되는데, 단일 채널의 이미지에 합성곱 필터가 적용되는 예시를 Fig. 2.8에 나타내었다.

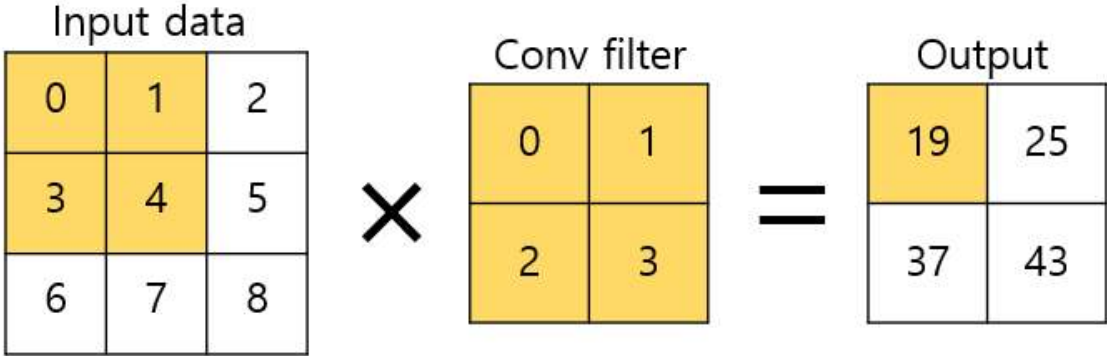


Fig. 2.8 Convolution filter.

입력 이미지에 2×2의 합성곱 필터가 적용될 경우, 필터에 겹친 영역의 값과 필터의 값을 곱한 뒤 모두 더하게 된다.  $(0 \times 0) + (1 \times 1) + (3 \times 2) + (4 \times 3) = 19$ 로 출력되는 것이다. 필터가 적용되면 일반적으로 이미지가 축소되며 특징이 추출된 출력값을 얻을 수 있다.

## 2. 5. 2 풀링 레이어(pooling layer)

합성곱 필터를 통과한 이미지는 풀링작업을 거치게 되는데 일반적으로 최대풀링(maxpooling)을 사용하게 된다. 최대풀링은 이미지의 크기를 줄이는 방법으로, 빠른 학습을 위해 이미지 정보를 요약하기 위해 사용된다[59]. 풀링이 적용되는 정도를 조절하기 위해서 스트라이드(stride)를 조정하게 되는데, 스트라이드는 필터의 이동 간격 정도를 의미한다. 최대풀링이 적용되는 예시를 Fig. 2.9에 나타내었다.

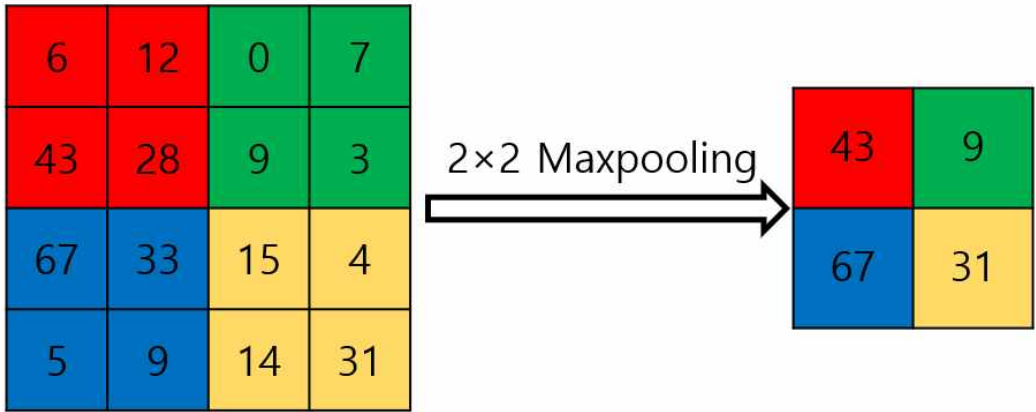


Fig. 2.9 Maxpooling layer (stride = 2).

4×4인 데이터에 2×2 필터로 최대풀링, 스트라이드는 2를 적용하면 데이터를 2×2로 요약할 수 있다. 처음 최대풀링이 적용되는 칸에서 가장 큰 값은 (6, 12, 43, 28)중에 43이며, 스트라이드를 2만큼 적용했을 때 다음 최대풀링은 (0, 7, 9, 3)에서 적용되므로 9가 출력되는 모습을 볼 수 있다.

여러 합성곱 필터가 적용되며 이미지의 크기는 축소하게 되는데, 이때 가장자리의 정보들이 사라지게 된다. 이러한 문제가 발생해 가장자리를 채워주는 패딩(padding) 기법을 사용한다. 주로 합성곱 계층을 지나는 이미지의 공간적 크기를 동일하게 맞추기 위해 사용된다. 패딩과 스트라이드를 적용하고, 입력 데이터와 필터의 크기를 정한다면 Eq. (7)를 통해 출력 데이터의 크기를 구할 수 있다.

$$(OH, OW) = \left( \frac{H+2P-FH}{S} + 1, \frac{W+2P-FW}{S} + 1 \right) \dots \dots (7)$$

H, W : 입력 크기 (input size)

FH, FW : 필터 크기 (filter/kernel size)

S : 스트라이드 (stride)

P : 패딩 (padding)

OH, OW : 출력 크기 (output size)

### 3. 완전연결 레이어(fully connected layer)

합성곱과 풀링을 거치며 점점 작아진 데이터는 완전연결 레이어를 통해 3차원에서 1차원 데이터로 변환된다. Fig. 2.10은  $4 \times 4 \times 3$ 으로 이루어진 이미지 데이터가 완전연결 레이어를 지났을 때 채널이 1개(흑백)인  $48 \times 1$  데이터로 처리된 그림이다.

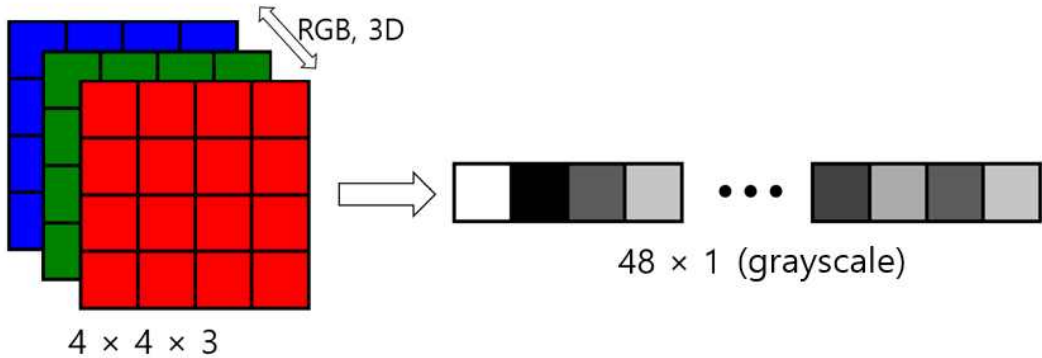


Fig. 2.10 : Fully connected layer.

### 4. 손실 함수(loss function)와 옵티마이저(optimizer)

손실 함수는 정답과 인공신경망이 출력하는 값과의 차이를 뜻하며, 반복되는 학습을 통해 신경망의 출력값과 실제값을 비교하여 그 차이를 줄여나가는 역할을 한다. 손실 함수를 통해 모델의 예측 성능을 평가하고, 이를 최소화하는 방향으로 모델을 업데이트하기 때문에 안정적이고 효율적인 학습을 위해 사용한다[60,61]. 회귀 예측에서는 평균제곱오차(mean squared error)를 적용하고, 분류 문제에서는 교차 엔트로피류의 손실함수를 적용한다[62]. 하지만 손실 함수의 형태는 복잡하기 때문에 계산에 소모되는 자원이 커지고, 미분이 0이 되는 값이 여러 개 존재할 수 있기 때문에 단순한 미분만으로 최소값을 찾기 어렵다. 이런 경우 경사하강법과 같은 최적화 방법을 이용한다. 경사하강법은 손실 함수의 현재 위치에서 조금씩 손실이 낮아지는 쪽으로 가중치를 이동하면서 최소값을 찾는 방법이다. 손실 함수를 최소화하는 방향으로 가중치를 갱신하는 알고리즘을 옵티마이저라고 부른다. 옵티마이저를 통해 모델의 매개변수를 조정하여 최적의 학습 속도를 찾거나 최적화

를 할 수 있다[63].

## 5. 합성곱 신경망 예시

합성곱 신경망은 원하는 결과를 얻기 위해 많은 매개변수들이 조정되어 만들어진다. 대표적인 합성곱 신경망 모델로는 손글씨 숫자를 인식한 최초의 LeNet[9], 딥러닝 분야 이미지 인식 대회에서 우수한 성적을 기록한 AlexNet[59], VGGNet[64] 등이 있다.

LeNet은 얀 르쿤(Yann Lecun)의 이름을 딴 합성곱 신경망이며 Fig. 2.11과 같은 구조로 이루어져 있다. 이미지의 특징을 찾는 3개의 합성곱 레이어와 크기를 줄이는 2개의 서브샘플링 레이어, 이후 1층의 완전연결 레이어가 입력층과 출력층 사이에 존재한다. LeNet의 합성곱 필터는  $5 \times 5$ , 스트라이드는 1, 풀링은 평균 풀링을 사용했으며 완전연결 레이어에선 쌍곡 탄젠트 함수를 사용했으며 이를 제외한 곳에서의 활성화 함수는 시그모이드를 선택했다. Fig. 2.12은 LeNet이 손글씨 이미지를 분류하는 모습을 보여준다. LeNet은 최초의 합성곱 신경망으로 손글씨 숫자 분류에서 좋은 성능을 보였으며 단순하지만 효과적인 구조로 합성곱 신경망의 발전 가능성을 충분히 보여줬다.

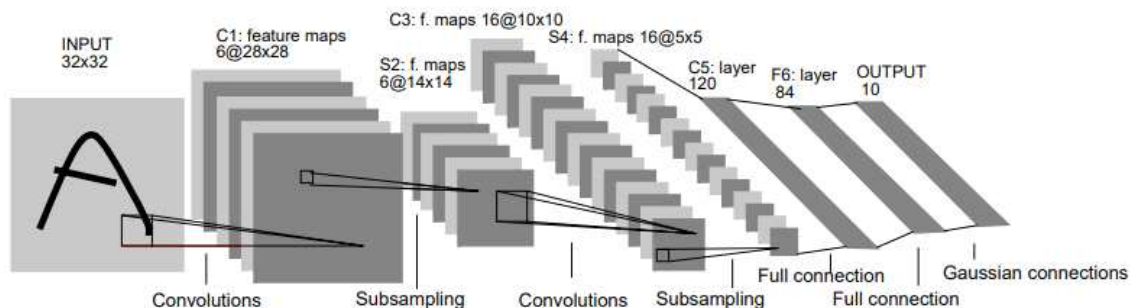


Fig. 2.11 LeNet structure[9].

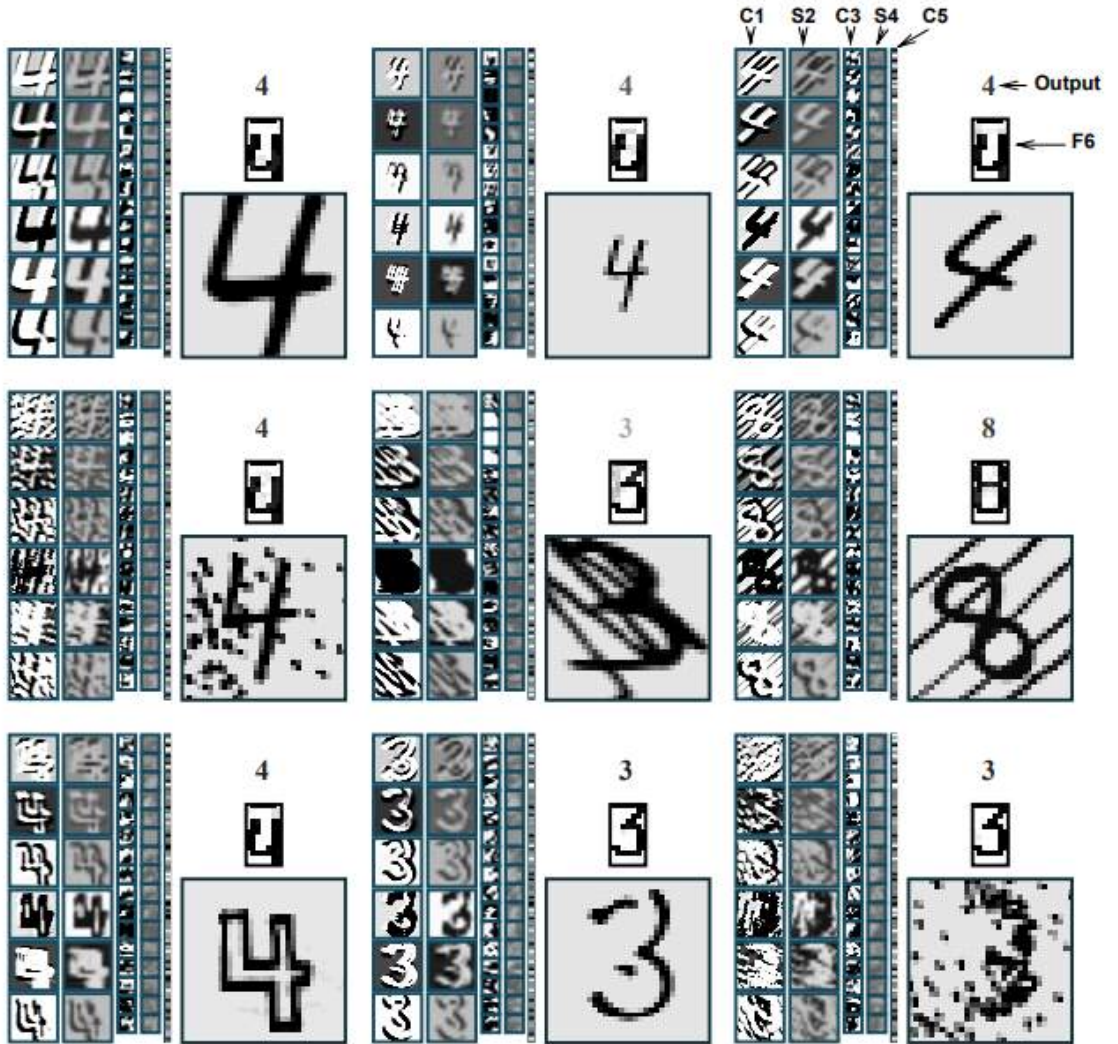


Fig. 2.12 LeNet classification example [9].

AlexNet은 2012년 Alex Krizhevsky 연구진이 제시한 합성곱 신경망으로 2012년 ILSVRC (ImageNet Large Scale Visual Recognition Challenge) 대회에서 압도적인 성능으로 우승하였다. 기본적인 구조는 LeNet과 비슷하지만 2개의 GPU로 병렬연산을 수행하기 위해서 신경망의 구조가 병렬 구조로 설계되었다. AlexNet은 5개의 합성곱 레이어와 3개의 완전연결 레이어로 구성되어 있으며 구조는 Fi



g. 2.13과 같다. AlexNet은 LeNet보다 학습에 걸리는 연산량이 천 배 가량 많아졌지만, 활성화 함수로써 ReLU를 사용하여 시그모이드나 쌍곡 탄젠트 함수보다 빠르게 학습을 시킬 수 있었다. 또한 과적합(over-fitting)을 막기 위한 몇 가지 방법을 사용했는데, 과적합이란 신경망 모델이 훈련 데이터에 과적합되어 새로운 데이터를 잘 받아들이지 못하는 것이다. 드롭아웃(dropout)은 규제 기술의 일종으로 과적합을 방지하기 위해 신경망 모델 훈련 중 일부의 뉴런 계산을 생략하는 것이다. 데이터 증가(data augmentation)는 이미지 데이터를 좌우반전, 임의의 자르기(random crop) 등으로 개수를 늘리는 방법이다. 적은 양의 데이터로 모델을 학습시키면 과적합될 가능성이 크기 때문이다. AlexNet은 합성곱 신경망이 대규모 이미지 분류 문제에서 뛰어난 성능을 보인다는 것을 입증했으며 신경망의 깊은 구조뿐만 아니라 효과적인 학습을 위한 다양한 방법을 제시하여 합성곱 신경망의 발전을 이끄는 기점이 되었다고 할 수 있다.

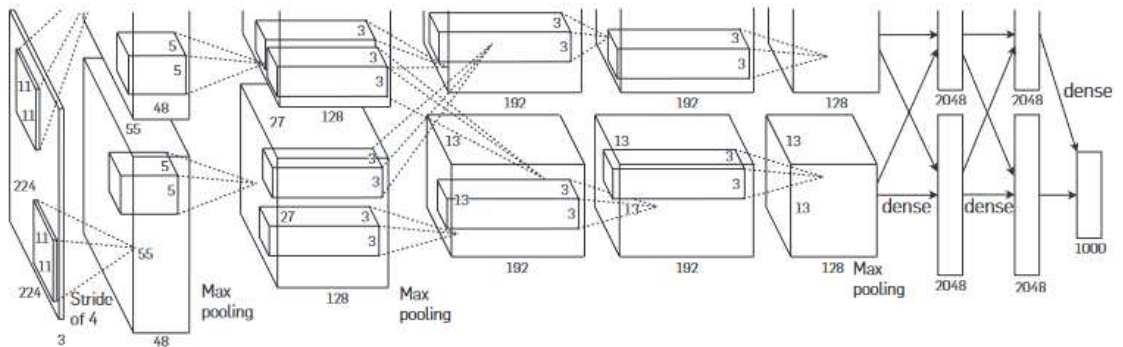


Fig. 2.13 AlexNet structure [59].

이미지 인식 분야에서 높은 성능을 보인 VGGNet은 동물, 식물, 사람, 건축물, 자동차 등 1000개의 레이블로 이루어진 120만개의 이미지를 오차율 7.3%로 분류했다. VGGNet을 16층으로 만든 VGG16은 깊은 모델임에도 불구하고 대회에 나온 다른 모델들과 비교하여 상대적으로 적은 매개변수로 이루어졌으면서도 높은 성능을 보여 대회에서 큰 활약을 했다. VGGNet의 학습 과정은 우선 입력 이미지 전처리부터 시작한다. VGGNet에서는 입력 이미지를 244x244로 바꾸고 RGB 채널을 정규화했는데, 이는 모델의 안정성과 높은 성능을 얻으려는 방법이다. 이후 조정된 이미지의 특징을 얻기 위해 3x3 합성곱 필터를 사용하고, 활성화 함수로



ReLU를 사용해 비선형성을 추가해 모델의 정확도를 높였다. 이후 최대풀링 기법을 통해 이미지의 크기를 줄이고, 합성곱과 풀링이 반복되어 적용되고, 마지막으로 완전연결 레이어를 거친 결과값으로 분류를 진행한다. Fig. 2.14은 VGG16의 구조를 나타낸 자료이다.

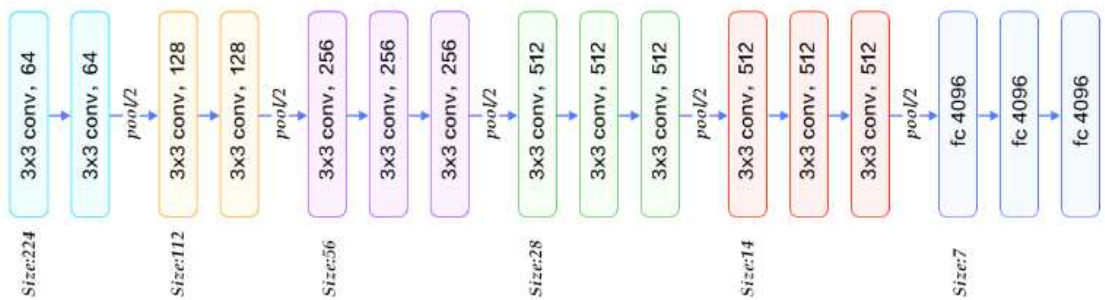
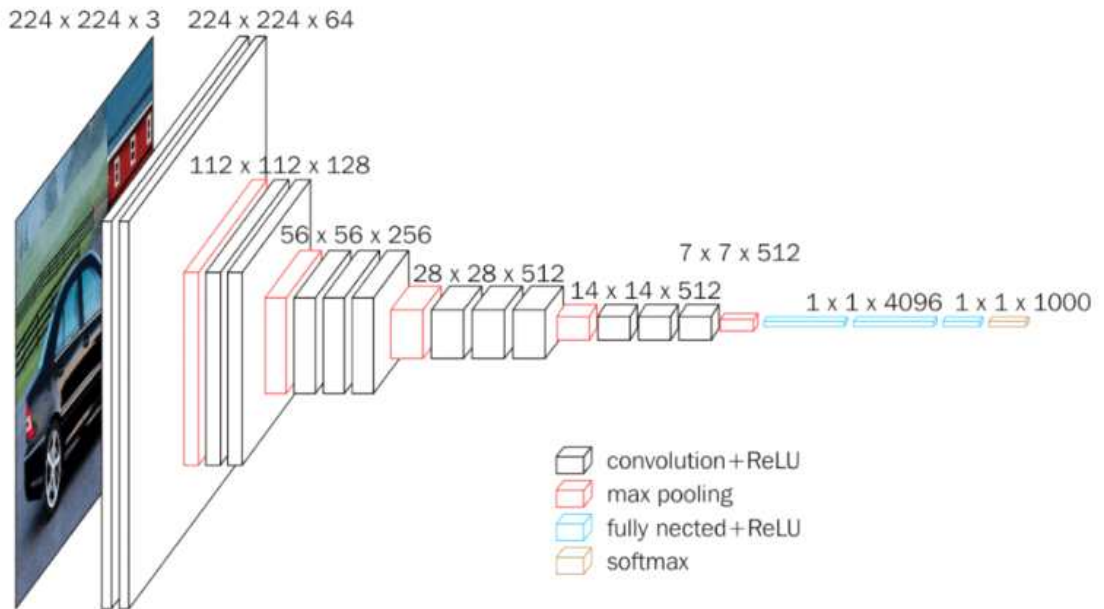


Fig. 2.14 VGG16 structure [64].

## 6. 재료공학에 기계학습을 적용한 사례

재료의 특성과 성능을 이해하고 조작하는 방법으로 재료공학 분야에서는 다양한 연구가 활발하게 진행되고 있으며 최근에는 기계학습과 같은 인공지능 기술이 재료 연구에도 널리 활용되고 있다. 아래는 미세구조 이미지를 입력으로 합성곱 신경망을 사용해 재료의 특성을 분석한 연구 사례들이다.

Hong 등[16]은 섬유 강화 복합재료의 실제 단면 이미지에서 적층 각도를 합성곱 신경망을 이용하여 예측하였다. 섬유 강화 복합재료는 방향성을 가지므로, 적층 순서에 따라 구조물의 기계적 특성이 크게 달라질 수 있다. 따라서, 상황과 용도에 따른 복합재료 구조물의 적층 설계는 필수적이다. 그러나 제작된 복합재료 구조물의 적층 각도는 제작 환경이나 구조물 형상에 따라 설계값과 차이가 있을 수 있으며, 이는 구조적 성능에 영향을 미칠 수 있다. 이에 따라 구조물의 신뢰성을 확보하기 위해서는 적층 설계뿐만 아니라 제작된 복합재료의 적층 각도에 대한 분석도 필요하다. 연구진들은 다양한 적층 각도에 따른 복합재료 시편의 단면 이미지 데이터를 이용하여 합성곱 신경망 기반의 딥러닝 모델을 학습시켰고, 실제 섬유 강화 복합재료 단면 이미지에서 적층 각도를 높은 정확도로 예측할 수 있었다고 한다.

이중소재는 항공우주, 자동차, 건설 등 다양한 산업 분야에서 폭넓게 활용되며 이러한 재료의 특성은 화학 조성 및 미세구조에 크게 의존한다. 새로운 재료 설계 공정을 가속하려면 공정-구조-속성 연결의 구축이 필요하고 재료의 구조와 특성을 연구하기 위해 컴퓨터를 사용한 방법이 많이 사용된다. 지난 20년 동안 상장(Phase field) 방법은 재료의 미세구조를 연구하기 위한 방법으로 점점 더 많이 사용되고 있으며 입자 성장 및 조대화, 응고, 박막 증착, 전위 역학, 생물학적 막의 소포 형성 및 균열 전파를 포함한 현상들을 설명하는 도구로 널리 사용된다. 상장 방정식을 푸는 것은 여러 편미분방정식을 동시에 해결해야 하므로 계산 비용이 많이 들고, 따라서 특히 복합재료에 대한 공정-구조-속성 구성은 상장 방법에만 기반하는 것은 비효율적이다. Farizhandi 등[17]은 이러한 문제를 해결하기 위한 대안으로 기계학습을 채택했다. 스피노달 분해가 일어나는 3원계 영구자석의 미세구조를 합성곱 신경망을 사용하여 정량화했다. 이미지를 통해 온도와 화학 성분을 예측, 이후 실제 투과전자현미경의 이미지로써 모델의 정확도를 검증하였다. 제안된 모델은 실험 TEM 이미지의 조성 및 처리 온도를 합리적으로 잘 예측하였고, 실험적 미세구조의 이면에 있는 공정 이력을 찾는 데 적합함을 보여줬다고 한다.

미세구조 이미지뿐만 아니라 X선 회절(x-ray diffraction) 이미지를 입력으로 진행된 연구도 존재한다. Park 등[14]은 합성곱 신경망 기반의 기계학습 기법으로 분말 X선 회절 패턴의 분류를 진행했다. 분말 XRD 패턴 분류를 위한 합성곱 신경망은 입력 레이어, 3쌍의 합성곱 및 풀링 레이어, 2개의 완전연결 레이어 및 출력 레이어로 구성되며 활성화 함수는 ReLU를 사용했다. 결과로 공간군, 흡광군, 결정계 분류에서 각각 81.14%, 83.83%, 94.99%의 정확도를 보였다. 합성곱 신경망은 전체 원본 X선 회절 데이터를 사진으로 읽어냈고, 회절 패턴에 대한 이론적인 분석 없이 결정계를 인식했다.

이외에도 전자현미경 사진 합성곱 신경망을 통해 미세구조를 분할하는 연구들이 진행되었다. Azimi 등[65]은 저탄소강의 특정 미세구조 성분에서 미세구조 분류를 위한 딥러닝 방법을 제안했다. 입력 데이터는 페라이트, 펄라이트, 마르텐사이트, 베이나이트를 포함한 미세구조 이미지다. 이미지는 합성곱 필터와 풀링 레이어를 지나고, 활성화 함수로 ReLU가 적용되어 이미지 분할이 진행되었다. 합성곱 신경망 기반 모델을 통해 픽셀 단위 분할을 진행했고, 93.94% 분류 정확도를 달성했다. 이 연구는 딥러닝 방법을 사용하여 효과적인 철강 미세구조 분류의 가능성을 보여줬다. Durmaz 등[67]은 광학현미경과 주사전자현미경의 이미지로 합성곱 신경망 기반 모델과 VGG16 기반 모델을 학습시켜 이미지 분할을 진행했다. 이 연구에서 사용된 재료는 저탄소 CP 강으로, CP강에는 라스 베이나이트뿐만 아니라 입상 탄소가 풍부한 2차 상이 분산된 다각형 및 불규칙 페라이트가 존재한다. 두 모델 모두 90%에 달하는 정확도로 분할을 달성했으며, CP 강재의 세분화를 위한 딥러닝 기술의 보편적 적용 가능성을 확인했다고 한다. DeCost 등[68]은 일반적으로 수동 및 주관적으로 평가되는 복잡한 미세 구조에 대한 세분화를 가능하게 하기 위해 합성곱 신경망 모델을 적용했다. 입력 데이터는 초고탄소강 미세 구조 데이터베이스를 합성곱 연산 모델로써 미세 구조 분할 작업을 진행했고, 모델은 기지 조직과 스페로이드이트와, 위드만스새튼 조직을 92.6%의 정확도로 구분했다. 위 연구들로부터 복잡한 수식 계산 대신 재료의 미세구조 이미지 데이터 자체를 읽어 내어 데이터의 조성이나 열처리 온도를 예측하였고, 학습된 합성곱 신경망이 입력 데이터의 규칙이나 패턴을 좋은 성능으로 예측하는 모습을 볼 수 있었다. 사례들을 바탕으로, 미세구조 결정립 크기 또한 측정이 가능할 것이라 판단된다.

## 3장 실험방법

### 제 1 절 미세조직 이미지데이터 준비

#### 1. 훈련용, 테스트용 데이터 구축

미세조직의 형성과정을 전산모사하는 상장모델(Phase field model)을 사용해 가상의 미세조직 이미지를 생성하였다. 상장모델은 본 연구의 범위에서 벗어나므로, 자세한 설명은 생략한다. 상장모델의 설명은 문헌[69,70]을 참고한다. 각 이미지는  $512 \times 512 \times 3$ 의 크기로 3개의 채널엔 RGB 색상 정보를 가지고 있다. Fig. 3.1은 생성된 이미지로써 두 종류의 데이터가 존재하는데 하나는 EBSD 이미지와 유사하게 결정립마다 다른 색상이지만 결정립계를 강조하지 않은 데이터(CoLored, CL형)이며, 다른 하나는 광학현미경으로 관찰한 미세조직과 유사하게 결정립을 백색, 결정립계를 흑색으로 나타낸 데이터(Grain Boundary, GB)다.

결정립의 크기는 결정립 한 개 영역을 차지하는 픽셀의 수로써 정의하였으며, 이미지의 경계에 존재하여 절단된 결정립도 한 개의 결정립으로 취급하였다. 총 4,000개의 GB형 이미지를 생성, 그중 3,000개를 훈련용으로 사용했고, 훈련에 사용되지 않은 1,000개의 데이터는 테스트용으로 남겨두었다. 데이터셋의 평균 결정립 크기는 1200~2400픽셀이며 결정립의 수로 환산하면 대략 110~220개의 범위이다.

추가적으로 평균 결정립 크기가 50~3200픽셀인 CL, GB형 데이터 각각 300개도 생성하였다. 이는 학습범위인 평균 결정립 크기 1,200~2,400픽셀 밖의 데이터로, 훈련 범위 밖에서의 모델 성능을 평가하기 위해 준비했다. Table 3.1은 생성한 이미지 데이터의 수를 정리한 표다.

Table 3.1 Distribution of image dataset.

	Train	Test	Extra test	Total
Type GB	3,000	1,000	–	4,000
CL for extrapolation	–	–	300	300
GB for extrapolation	–	–	300	300

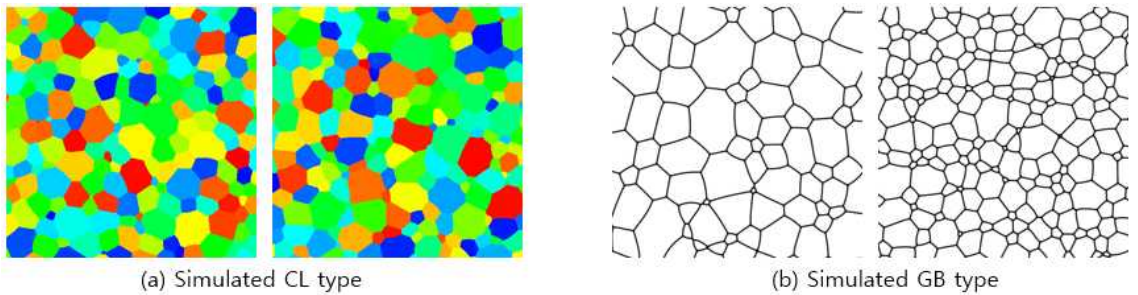


Fig. 3.1 Simulated grain structure image. (a) : Colored type, (b) : Grain boundary type.

## 2. 테스트 전용 데이터 구축

훈련된 신경망이 실제 미세조직 이미지를 잘 인식하고 계산하는지에 대한 경향성을 확인하기 위해 실험적으로 얻어진 미세구조 이미지를 인터넷에서 수집하여 테스트하였다. 연구에 사용된 합성곱 신경망은  $512 \times 512$  크기의 미세구조를 입력으로 받는 모델이기 때문에, 이미지가  $512 \times 512$ 보다 작으면 정사각형으로 잘라낸 뒤 확대하였고, 큰 경우에는 부분적인  $512 \times 512$  크기의 정사각형 이미지를 추출하여 사용했다. CL형 이미지는 모두 EBSD(후방 산란 전자 회절)이미지로, GB형 이미지는 광학현미경으로 얻어진 것으로 판단된다. 원활한 학습을 위하여 축적이 표시되지 않고, 결정립의 형태가 유사하게 분포하는 이미지를 수집하였다. 이미지

의 평균 결정립 크기는 결정립의 개수를 센 다음 이미지 크기에서 나누어 추정하였다. Fig. 3.2는 테스트에 사용된 이미지 데이터이다.

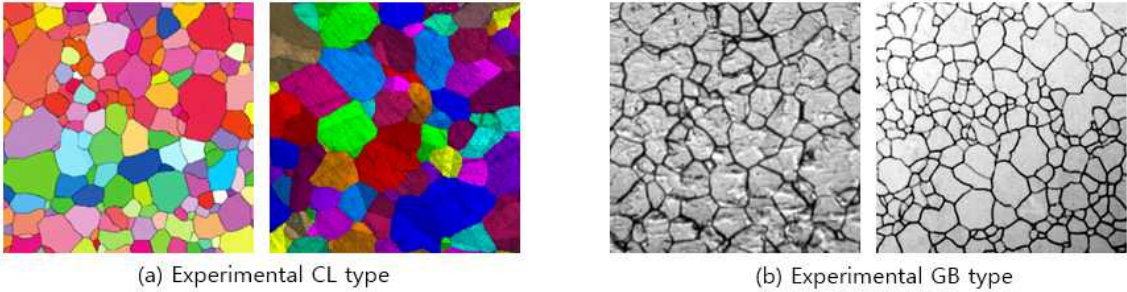


Fig. 3.2 Experimental grain structure image. (a) : Colored type, (b) : Grain boundary type [8, 71-76].

### 제 2 절 최적 합성곱 신경망 모델 구축

합성곱 신경망 알고리즘이 미세구조 이미지의 어떤 부분을 인식하여 결정립 크기를 측정하는지 알기 위해 시각화와 회귀를 통해 분석하고자 한다. Table 3.2은 본 연구에 사용된 합성곱 신경망의 구성이다. 초기 입력 미세구조 이미지는  $512 \times 512 \times 3$ 의 크기지만 컴퓨터 연산 자원을 줄이기 위해  $256 \times 256 \times 3$ 으로 축소하여 학습을 진행했다. 은닉층은 합성곱, 활성화 함수, 풀링 연산이 진행되는 CP계층(Convolution-activation function-Pooling, CP)과 완전연결계층(Fully-Connected layer, FC)으로 구성되어있다. CP계층의 채널의 4개부터 각각의 층마다 2배씩 32까지 증가하며, 합성곱 필터의 크기는  $3 \times 3$ , 풀링 필터의 크기는  $2 \times 2$ 로 서로 다르다. CP계층을 지날수록 이미지의 크기가 작아지는데, CP1에 입력된  $256 \times 256$  이미지는 합성곱 연산과 풀링 연산을 거쳐  $128 \times 128$  이미지로 출력된다. 이후 CP2를 지나면  $64 \times 64$ , CP3을 지나면  $32 \times 32$ 가 되며, 이는 Fig. 3.3처럼 진행된다. 최종적으로 CP4를 지나 특징이 추출되고 작아진 이미지는 평탄화(flatten) 작업을 거치고 과적합을 방지할 목적인 드롭아웃(dropout)이 적용된 후 회귀값으로 최종 출력된다. Fig. 3.4에 합성곱 신경망 모델의 개략도를 나타냈다.

활성화 함수는 CP계층과 FC계층에서 ReLU함수를 사용하였으며, 최종 회귀값으로 평균 결정립 크기를 출력할 때는 활성화 함수를 적용하지 않고 산출하였다. 연구에

사용된 합성곱 신경망 모델의 은닉층 수와 채널 및 노드의 개수는 손실을 최소화하면서도 빠른 학습을 진행할 수 있도록 시행착오를 거쳐 결정하였다. 학습은 에포크(epoch) 단위로 진행되었으며, 에포크는 준비된 데이터를 전부 사용하여 한 번 훈련된 상태를 뜻한다. 에포크가 증가하며 변화하는 손실을 계산하기 위해 평균 제곱 오차(mean squared error)를 사용하였으며, 최적화 방법으로는 Adam을 사용하였다. 훈련 결과는 모델이 측정한 결정립 크기로 만들어진 회귀선과 결정계수( $R^2$ )로써 분석하였다. 결정계수란 모델의 설명력을 나타내는 수치로, 1에 가까울수록 모델의 설명력이 높다고 할 수 있다. 연구에 사용된 합성곱 신경망은 오픈 소스 프로그래밍 언어 파이썬(python) [77]과 케라스(keras) [78] 라이브러리를 사용하여 개발하였다.

Table 3.2 CNN structure in this study.

Layer.	Sublayer	Input Shape	Channels /Nodes	Filter	Padding	Stride	Activation	Output Shape
Input	-	-	3	-	-	-	-	$512 \times 512 \times 3$
Resize	-	$512 \times 512 \times 3$	3	-	-	-	-	$256 \times 256 \times 3$
CP1	Convolution	$256 \times 256 \times 3$	4	$3 \times 3$	$1 \times 1$	$1 \times 1$	ReLU	$256 \times 256 \times 4$
	Max pooling	$256 \times 256 \times 4$	-	$2 \times 2$	$0 \times 0$	$2 \times 2$	-	$128 \times 128 \times 4$
CP2	Convolution	$128 \times 128 \times 4$	8	$3 \times 3$	$1 \times 1$	$1 \times 1$	ReLU	$128 \times 128 \times 8$
	Max pooling	$128 \times 128 \times 8$	-	$2 \times 2$	$0 \times 0$	$2 \times 2$	-	$64 \times 64 \times 8$
CP3	Convolution	$64 \times 64 \times 8$	16	$3 \times 3$	$1 \times 1$	$1 \times 1$	ReLU	$64 \times 64 \times 16$
	Max pooling	$64 \times 64 \times 16$	-	$2 \times 2$	$0 \times 0$	$2 \times 2$	-	$32 \times 32 \times 16$
CP4	Convolution	$32 \times 32 \times 16$	32	$3 \times 3$	$1 \times 1$	$1 \times 1$	ReLU	$32 \times 32 \times 32$
	Max pooling	$32 \times 32 \times 32$	-	$2 \times 2$	$0 \times 0$	$2 \times 2$	-	$16 \times 16 \times 32$
Flatten	-	$16 \times 16 \times 32$	8192	-	-	-	-	$8192 \times 1$
Dropout	(0.5)	$8192 \times 1$	8192	-	-	-	-	$8192 \times 1$
FC	-	$8192 \times 1$	128	-	-	-	ReLU	1
Output	-	-	1	-	-	-	Linear	Regressed value

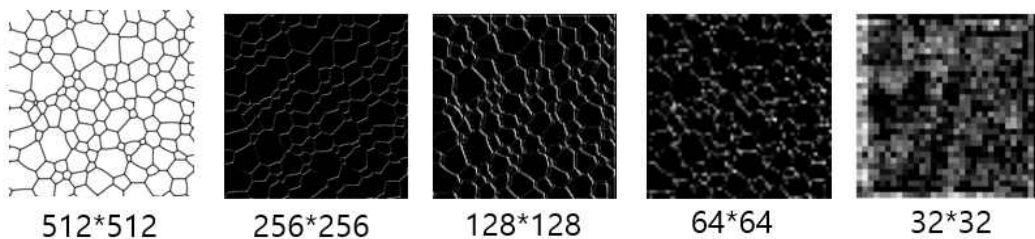


Fig. 3.3 Image size change in CP layer.

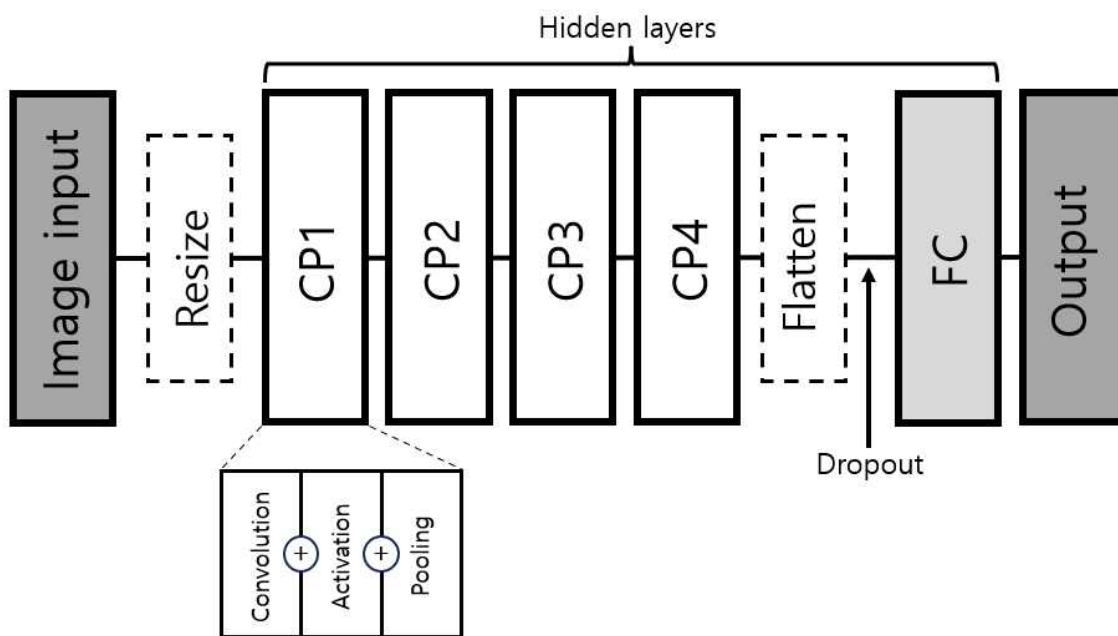


Fig. 3.4 Convolution neural network structure used in this study. CP layer consists of convolution, activation function and pooling.



연구는 아래와 같은 순서로 진행되었으며, Fig. 3.5는 이해를 돕기 위한 개략도이다.

1. Phase field model 을 사용해 이미지 생성(GB, CL)
2. 최적 합성곱 신경망 구축
3. 신경망을 생성한 GB 이미지로써 학습
4. 다양한 데이터들의 입력으로 합성곱 신경망 테스트(출력:평균 결정립 크기)
5. 결과를 중간층 이미지와 비교, 고찰(미세조직 인식 근거, 성능 부진 근거)

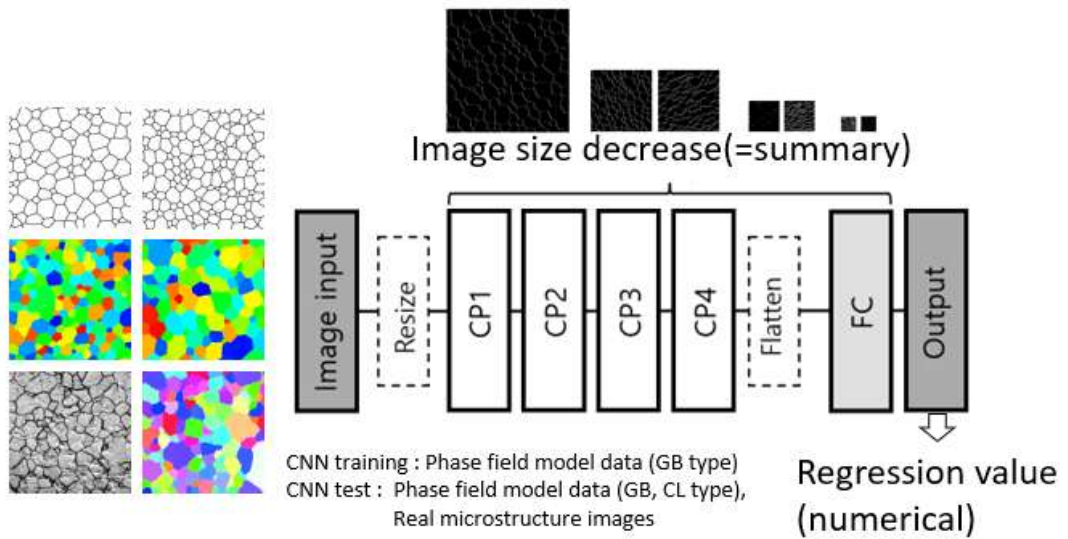


Fig. 3.5 Schematic diagram of the study

## 4. 결과 및 고찰

### 1. 합성곱 신경망 성능

상장모델로써 생성한 이미지 데이터 4,000장 중 75%의 이미지 3,000장을 합성곱 신경망의 훈련용 데이터(training data)으로 사용하였으며, 나머지 25%의 이미지 1,000장을 테스트용 데이터(test data)로 사용하였다. 총 100,000 에포크를 훈련하는 과정의 손실(loss)을 Fig. 4.1에 나타내었다. Y축에 나타나는 손실(loss)이 작을수록 학습이 잘 수행되었다고 판단할 수 있으며, 학습이 진행되어 에포크가 늘어남에 따라 손실이 줄어드는 모습을 관찰할 수 있다. 훈련용 데이터의 손실은 대략 20,000 에포크까지 크게 감소하였고, 학습이 진행됨에 따라 느리게 감소하였다. 대략 84,000 에포크까지 손실이 감소하였고 이후 과적합을 보이며 손실이 증가하는 것을 관찰하였다. 최솟값 이후 손실이 증가하는 과적합이 나타났기 때문에 본 연구에서는 미세조직 이미지에 대한 합성곱 신경망의 학습은 80,000 에포크까지 훈련하였다.

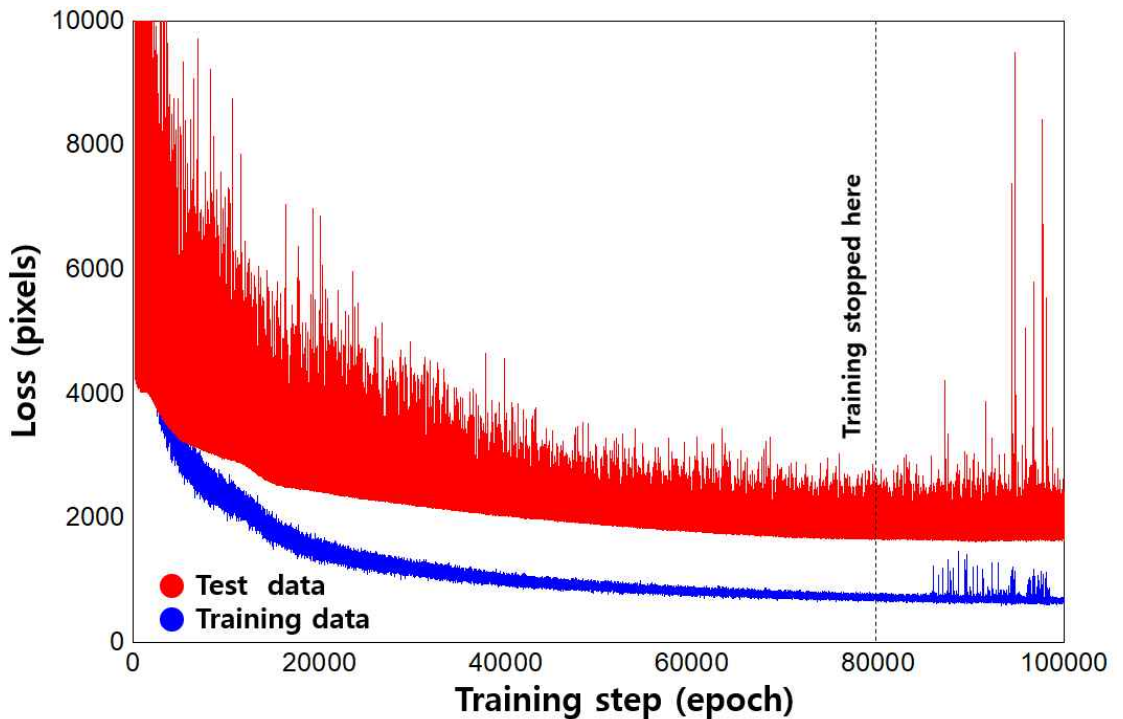


Fig. 4.1 Changes of losses for training progress.

훈련 및 테스트 데이터를 실제 데이터와 비교한 그래프를 Fig. 4.2 (a), (b)에 각각 나타내었다. X축은 데이터의 실제 평균 결정립 크기이며, Y축은 합성곱 신경망이 예측한 결정립 크기다. 훈련 데이터 3,000개의 경우, 기울기는 약 0.993이며  $R^2$ 는 약 0.999로 실제 데이터와 거의 완벽하게 일치하였다.  $R^2$ 는 결정계수로 회귀모델의 성능을 나타내는 지표이며, 1에 가까울수록 모델의 설명력이 높다는 것을 의미한다. 테스트 데이터 1,000개의 경우 기울기는 약 0.954이고  $R^2$ 는 약 0.979의 높은 일치를 보였으나, 훈련 데이터의 정확도에 비해서 큰 편차를 나타냈다. 평균 결정립 크기가 커질수록 데이터의 분산이 조금씩 증가했는데, 원래의 결정립 크기보다 작게 예측하는 경향을 보였다. 학습 범위를 넘어간 범위에서도 이러한 경향을 보이는지 알기 위해 추가 테스트의 결과와 함께 확인해보았다.

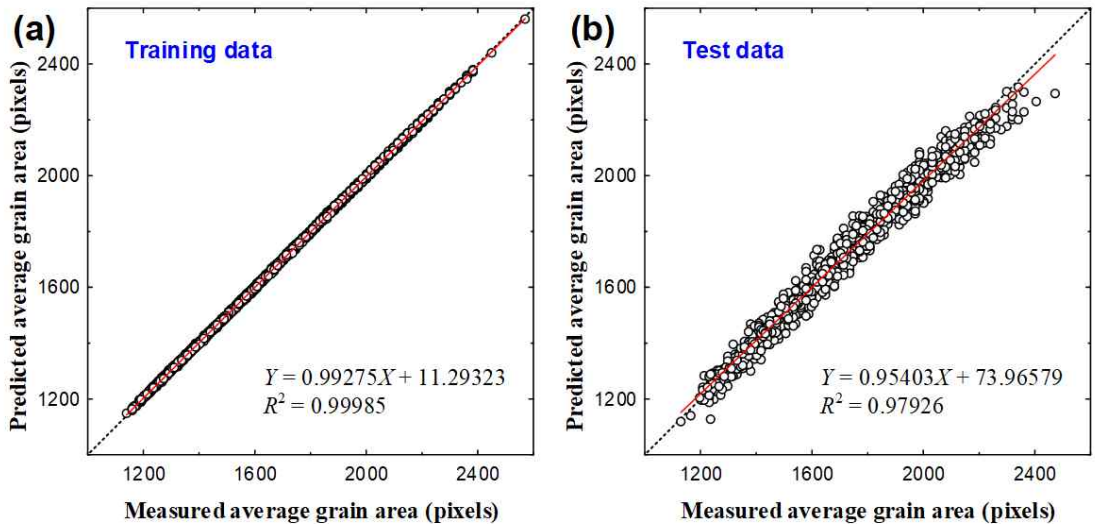


Fig. 4.2 Comparison of measured and predicted average grain area. (a) is training data, (b) is test data.

## 2. 합성곱 신경망의 추가 테스트

훈련 및 테스트 데이터에 포함되지 않은 미세조직 이미지를 이용하여 본 연구에서 구축한 합성곱 신경망을 추가로 테스트하였다. 합성곱 신경망의 훈련과 테스트에 사용된 데이터는 상술한 바와 같이 평균 결정립 크기가 1,200~2,400 픽셀의 범위를 갖는다. 추가 테스트를 위해서 평균 결정립 크기의 범위가 50~3,200 픽셀의 범위를 갖는 이미지 데이터를 준비하였다. 추가 테스트 데이터의 평균 결정립 크기는 훈련 데이터의 범위를 벗어나는데, 훈련 범위 바깥에서도 기계학습 알고리즘이 잘 작동하는지 확인하기 위해 사용하였다. 합성곱 신경망 학습은 GB형 데이터만을 사용하였는데, 이 합성곱 신경망이 CL형을 적절하게 인식할 수 있는지 확인하고자 CL형 이미지의 테스트도 진행하였다.

추가적인 GB형과 CL형 데이터로 분석한 결과에 대하여 Fig. 4.3에 나타내었다. Fig. 4.3 (a)는 GB형의 결과로 학습범위인 약 1,200~2,400 픽셀 내에서는 훈련 및 테스트 데이터와 같은 수준의 높은 정확도를 보였다. 학습범위보다 결정립 크기가 작은 범위인 400~1,200 픽셀의 경우에는 역시 실제 데이터와의 일치율이 높았다. 400 픽셀 이하에선 정확한 예측을 의미하는  $Y=X$  점선 그래프에서 많이 벗어났으며, 학습범위 보다 높은 범위, 즉 결정립의 면적이 2,400 픽셀보다 큰 경우에는 평균 결정립 크기가 실제 값보다 작게 평가되는 현상이 나타났다.

학습범위 내에서도 평균 결정립 크기가 큰 경우에 이런 현상이 일어났는데, 더욱 큰 결정립에서는 이러한 오차를 많이 발견할 수 있었다. 이는 결정립이 원형이라 가정했을 때, 결정립의 크기는 곡률에 반비례한다. 결정립이 커질수록 곡률이 줄어드는 정도가 작아지기 때문에, 평균 결정립 크기가 커질수록 이러한 오차가 증가하는 것으로 판단된다.

GB형 이미지로 테스트 했을 경우에는 결정립이 매우 작을 때의 오차가 크게 나타났다. 결정립은 일정 폭을 가진 영역으로 나타나는데, 평균 결정립이 작아질수록 결정립계가 전체 이미지에서 차지하는 면적이 늘어나게 된다. 이후 합성곱과 풀링 연산을 거치며 결정립계의 폭보다 작은 결정립은 가려지게 되어 이러한 오차가 발생한 것으로 보인다.

CL형 데이터로 분석한 결과는 Fig. 4.3(b)에 나타내었다. 이 경우에는 전 구간에 걸쳐 평균 결정립 크기의 예측이 적절하게 이루어지지 않았는데, 대부분 이미지의 평균 결정립 크기를 2,000~3,000 픽셀로 계산하는 것을 확인했다. 이러한 이

유를 확인하기 위해 뒤에서 중간층 이미지와 함께 비교해보았다.

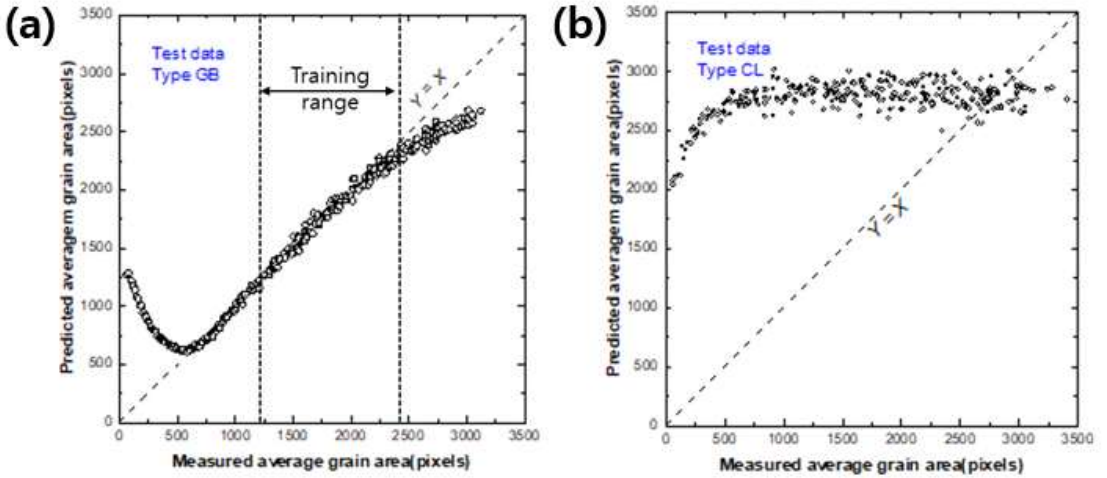


Fig. 4.3 Comparison of measured and predicted average grain area with 50 to 3200 pixel. (a) is result of type GB, (b) is result of type CL.

인터넷에서 수집한 실제 미세조직 이미지로 테스트한 결과는 Fig. 4.4에 나타내었다. 이때 GB형 실험 이미지는 비교적 측정값과 예측값이 잘 일치하였다. GB형 실험 이미지는 GB형 시뮬레이션 이미지를 테스트했던 Fig. 4.3(a)와 같이, 학습범위 안뿐만 아니라 바깥쪽까지도 어느 정도 평균 결정립의 크기를 예측하였다. 일부 CL형 데이터를 CL형 실험 이미지와 비교하기 위하여 삽입했다. CL형 실험 이미지는 일부 데이터를 제외하고는 결정립 크기가 약 3,500 픽셀 정도로 일정하게 예측되었다. CL형의 결과값을 실제 평균 결정립보다 과대평가하며 모든 입력 데이터를 비슷한 출력값으로 나타내는 양상은 Fig. 4.3(b)와 유사하였다. 이와 같은 결과로 볼 때, GL형 이미지와 GB형 이미지는 본 연구에서 구축한 합성곱 신경망으로써는 서로 간에 정확한 예측을 할 수 없다는 결론을 얻었다. 그러므로, 미세조직 이미지에서 결정립 크기를 적절하게 예측하기 위해서는 같은 종류의 이미지, 즉, CL형 이미지 훈련 - CL형 이미지 예측, GB형 이미지 훈련 - GB형 이미지 예측처럼 같은 종류의 이미지 기계학습이 필요하다. 혹은 CL형과 GB형을 결합한 많은 양의 데이터셋을 학습해야 만족할 만한 결과를 얻을 수 있을 것이다.

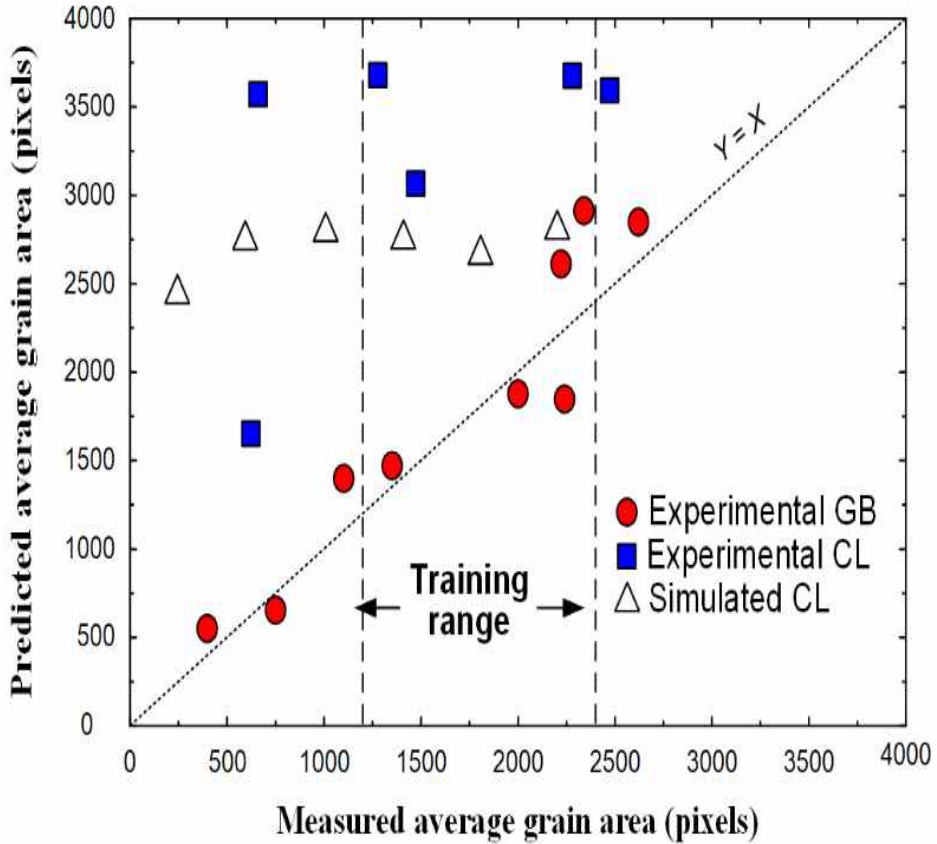


Fig. 4.4 Comparison of measured and predicted average grain area with experimental images.

### 3. 중간층 이미지 분석

합성곱 신경망이 미세조직 이미지로부터 평균 결정립 크기를 측정하는 과정을 알기 위하여 중간층 이미지를 생성하여 관찰하였다. 중간층 이미지를 통해 입력 데이터가 합성곱 신경망 내에서 처리될 때의 대략적인 변환과정을 확인할 수 있다. GB형 이미지로 훈련된 기계학습 신경망에 Fig. 4.5를 입력하여 각각의 합성곱 층과 풀링 층을 통과할 때 마다의 중간층 이미지를 생성하여 출력하였다. 중간층 이미지의 픽셀의 정보는 합성곱 과정에서 회색톤 이미지(0~255)의 범위를 벗어날 가능성이 있기 때문에 각각의 픽셀은 모든 픽셀의 평균값과 표준 편차를 이용하여 표준화(standardization)하여 0~255의 값을 갖도록 조정하였다.

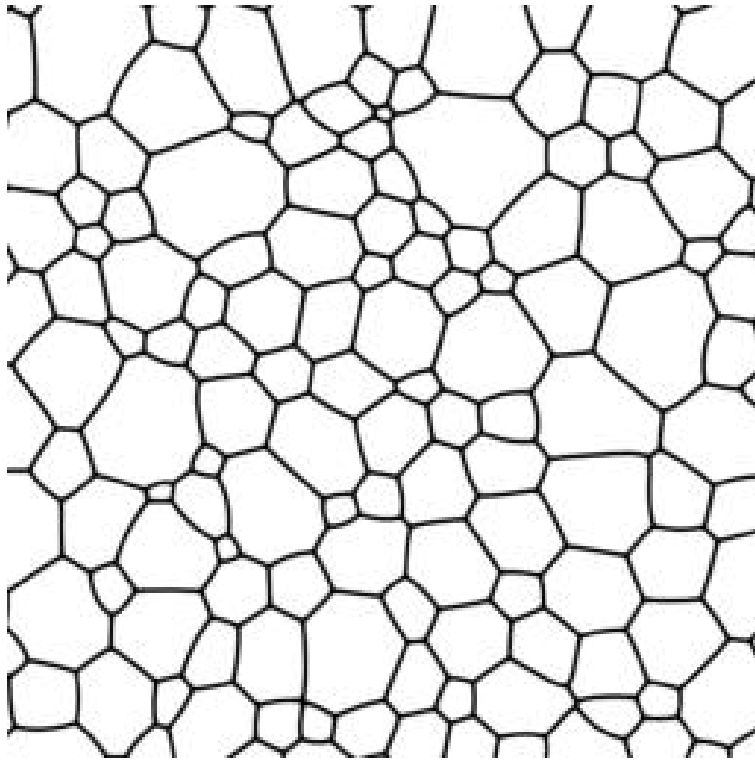


Fig. 4.5 Input image(GB type, 256 by 256 pixel).

Fig. 4.6은 원본인  $256 \times 256$ 픽셀 이미지에 합성곱 연산(Conv1)만을 적용하여 크기 변화 없이 특징만을 추출한 것이고, 아래 그림은 Conv1 이후 풀링(Maxp1)까지 적용하여 크기가  $128 \times 128$ 로 작아진 것이다. 해당 층에서 사용된 필터 및 채널의 개수는 Table 3.2와 같기에 4개의 중간층 이미지가 생성되었다. 합성곱 연산을 거친 이미지는 특정 방향이나 각도의 결정립계를 인식하여 부각시키거나, 색을 대비시키거나 바꾸는 작업을 통하여 특징이 추출되는 것으로 파악된다. 입력 이미지는 결정립계가 흑색, 결정립이 흰색으로 표현된 것인데 Fig. 4.6의 중간층 이미지 중 첫 번째와 네 번째의 경우 색을 반전시킨 뒤 결정립계를 강조시키는 방향으로 특징을 추출하였고, 두 번째의 경우 색을 반전시키진 않았지만, 결정립을 어둡게 만든 뒤, 결정립계와 결정립 사이를 표현하는 회색 조의 픽셀들을 가장 밝게 바꾸므로써 특정 방향에서 빛을 비춘 듯한 결정립계를 추출하는 모습을 보였다. 세 번째는 색을 반전시킨 뒤 가로 방향의 결정립계를 특징으로 삼았는데, 이는 풀링계층에서 더욱 심화된 모습을 관찰할 수 있었다.

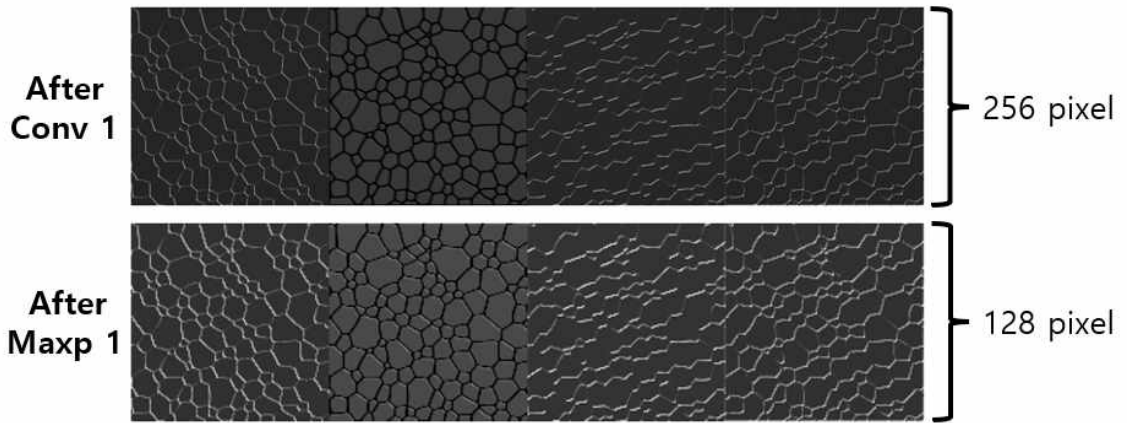


Fig. 4.6 After Convolution1 and Maxpooling1 images.

Convolution2와 Maxpooling2에서는 총 채널 8개가 존재하므로, 중간층 이미지 8개가 생성되었다. Fig. 4.8과 Fig. 4.9는 각 층에서 생성된 중간층 이미지이며, Fig. 4.7은 중간층 이미지의 변화를 파악하기 위해 상위 4개의 이미지를 모으고 크기를 같게 만들어 둔 것이다. 이때 이미지 크기는  $128 \times 128$  픽셀이며, 풀링이 적용된 아래 이미지는  $128 \times 128$ 에서  $64 \times 64$  픽셀로 축소되었다. Conv1에서 결정립계를 추출하려는 시도가 Conv2에서 심화된 것으로 판단되는데, 합성곱 연산을 통해 대부분의 이미지가 어두워졌으며 결정립은 흑색, 결정립계는 백색으로 뚜렷하게 강조되는 현상이 나타났다. 이후 Maxp2층을 지난 후의 이미지는 대체적으로 균일화된 색을 나타내고 있었으며 첫 번째와 네 번째 이미지의 상대적으로 옅은 결정립계는 더욱 강조되어 밝고 두꺼워졌으며, 두 번째와 세 번째 이미지처럼 진하고 두꺼운 결정립계는 옅어지고 폭이 줄어들 것을 관찰할 수 있었다. Fig 4.8의 두 번째 이미지는 가로 방향의 중 결정립의 아래쪽 결정립계를 특징으로 추출한 것으로, 네 번째 이미지는 세로 방향의 결정립계를 추출한 것으로 파악된다. 이를 통해 합성곱 신경망은 미세조직의 결정립을 인식할 때 다양한 요소들로부터 결정립 구분을 시도했음을 확인할 수 있었다.



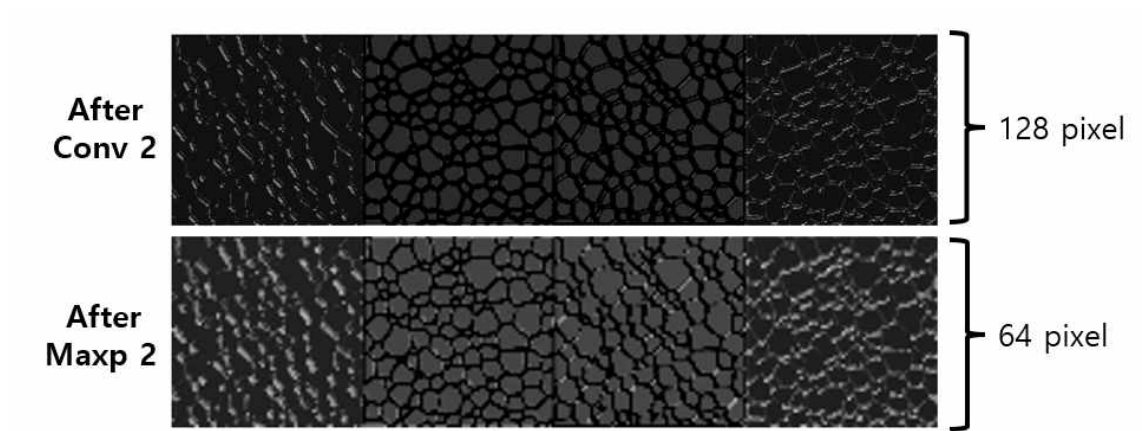


Fig. 4.7 After Convolution2 and Maxpooling2 layer images.

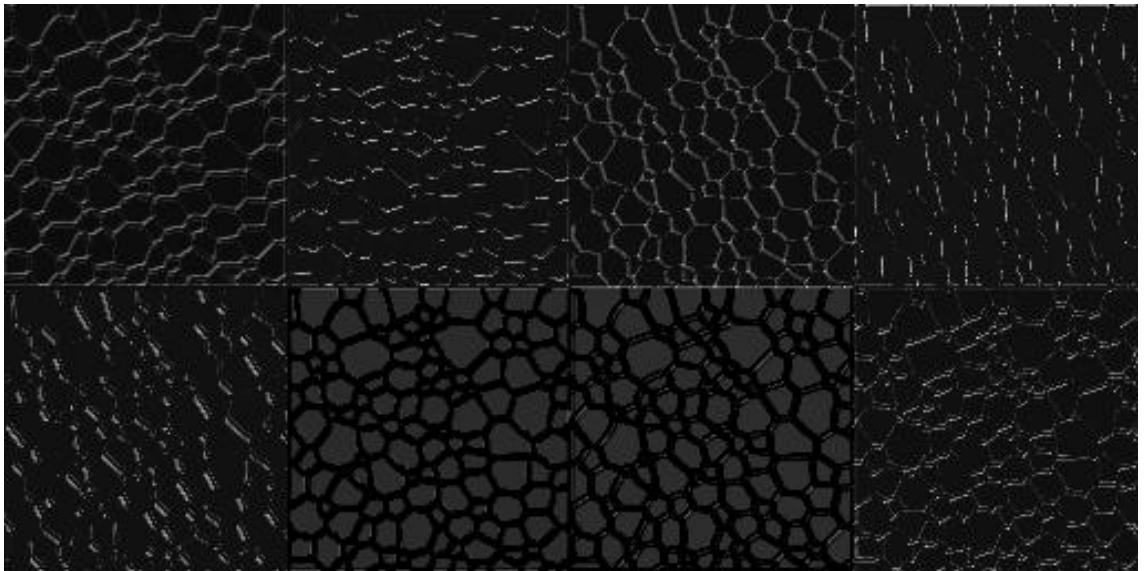


Fig. 4.8 After Convolution2 layer images.

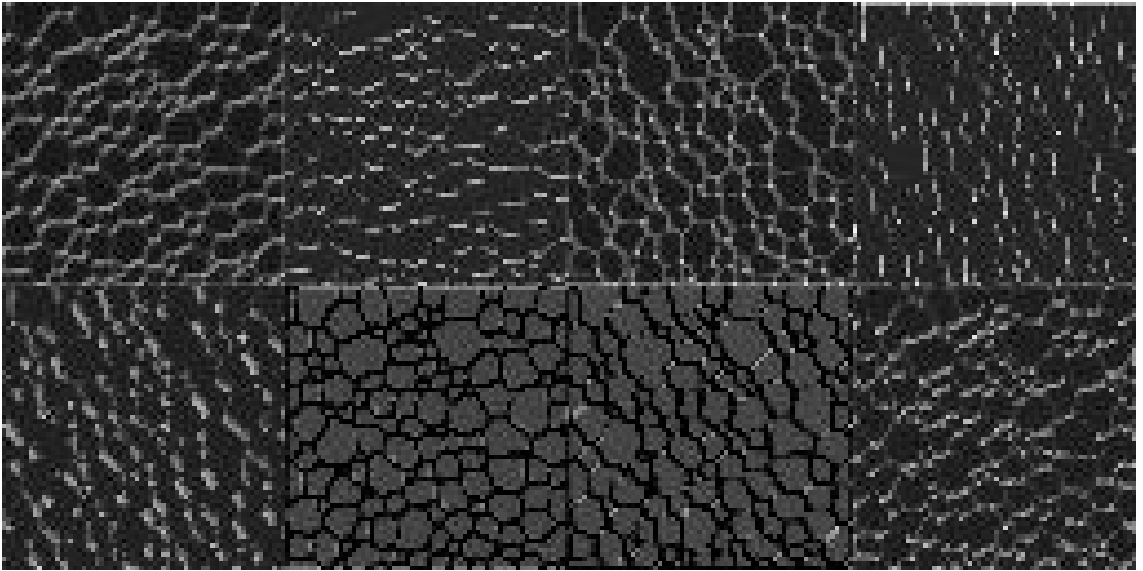


Fig. 4.9 After Maxpooling2 layer images.

Conv3 이후의 이미지는  $64 \times 64$ , 풀링이 적용된 이미지는  $32 \times 32$ 의 크기를 가지게 되었다. 해당 층의 채널은 16으로써 중간층 이미지 또한 16개가 생성되었다. 몇몇 이미지는 결정립을 육안으로 구분할 수 있지만, 경계가 모호한 이미지들이 많아졌으며 풀링이 진행되며 이미지에 포함된 정보는 더욱 요약되어 사람으로선 확인하기 힘든 정도의 크기로 축소되었다. Fig 4.11은 Conv3, Fig. 4.12은 Maxp3을 지난 중간층 이미지로 각각 16개 존재한다. Fig 4.10의 첫 번째와 세 번째 이미지에선 크기는 축소되지만, 결정립계 일부를 특징으로 추출하여 결정립의 크기를 측정하려는 시도를, 두 번째 이미지에선 결정립으로 추측되는 비슷한 색상의 픽셀 군집을 인식하는 것을 확인했다. 그리고 네 번째 이미지는 가로 방향의 결정립계를 다른 중간층들보다 상대적으로 잘 추출하는 경향을 보였다.

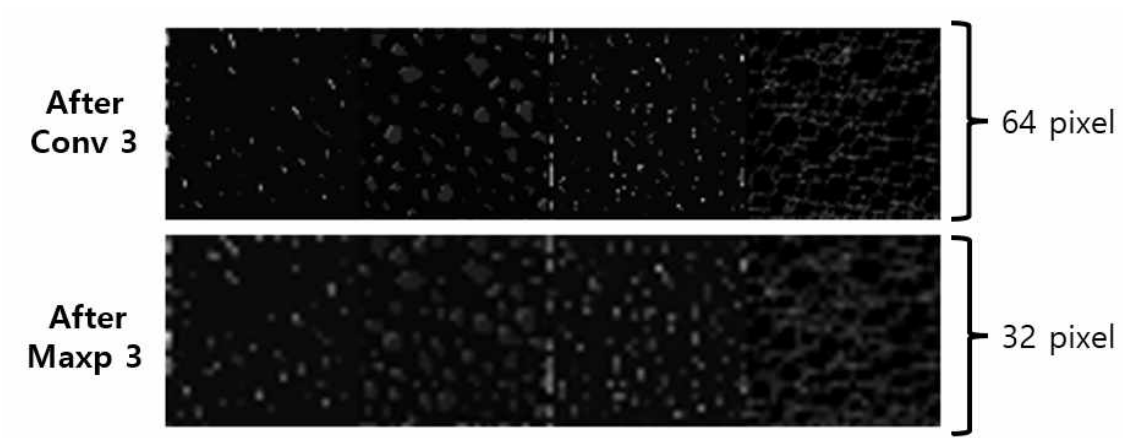


Fig. 4.10 After Convolution3 and Maxpooling3 layer images.

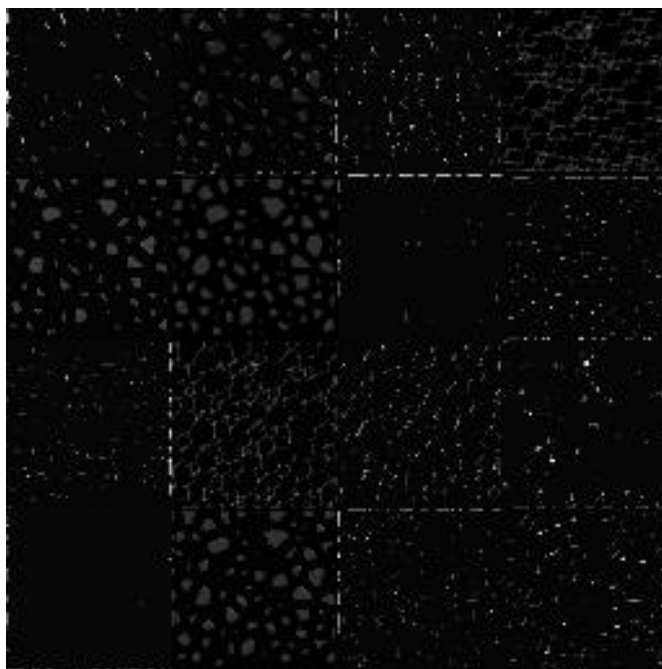


Fig. 4.11 After Convolution3 layer images.

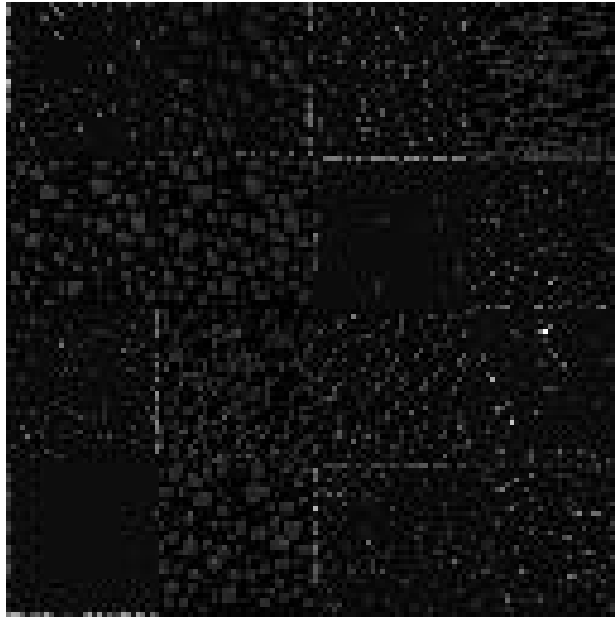


Fig. 4.12 After Maxpooling3 layer images.

마지막 계층인 Conv4 이후부터 이미지 크기가 지나치게 작아서 원본 이미지를 포함하여 상위의 계층에서 요약된 정보들을 육안으로 확인하기 아주 어려웠다. 최종적인 이미지의 크기는  $16 \times 16$ 이었으며, Fig. 4.13에서 확인할 수 있듯이 더 이상 육안으로는 어떠한 미세구조의 특징이나 결정립, 결정립계를 찾아볼 수 없을 정도로 축소되었다. Fig. 4.14, Fig. 4.15는 각각 Conv4, Maxp4 층을 통과한 중간층 이미지이다.

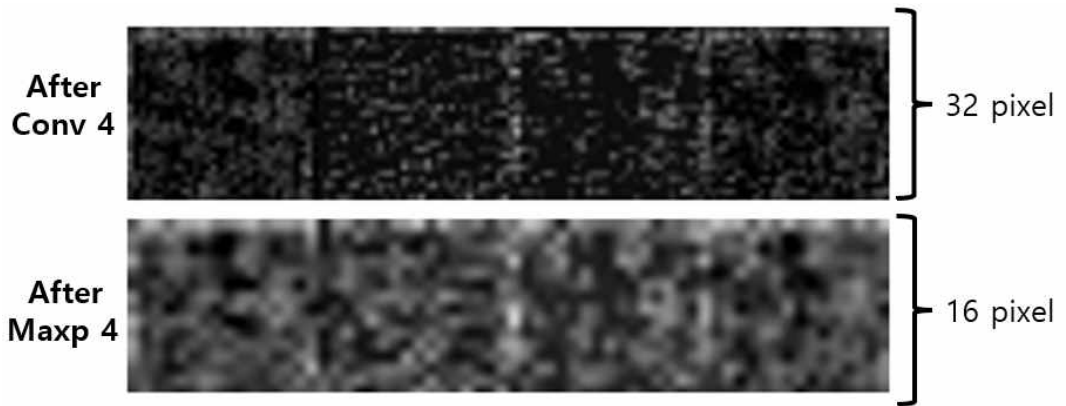


Fig. 4.13 After Convolution4 and Maxpooling4 layer images.

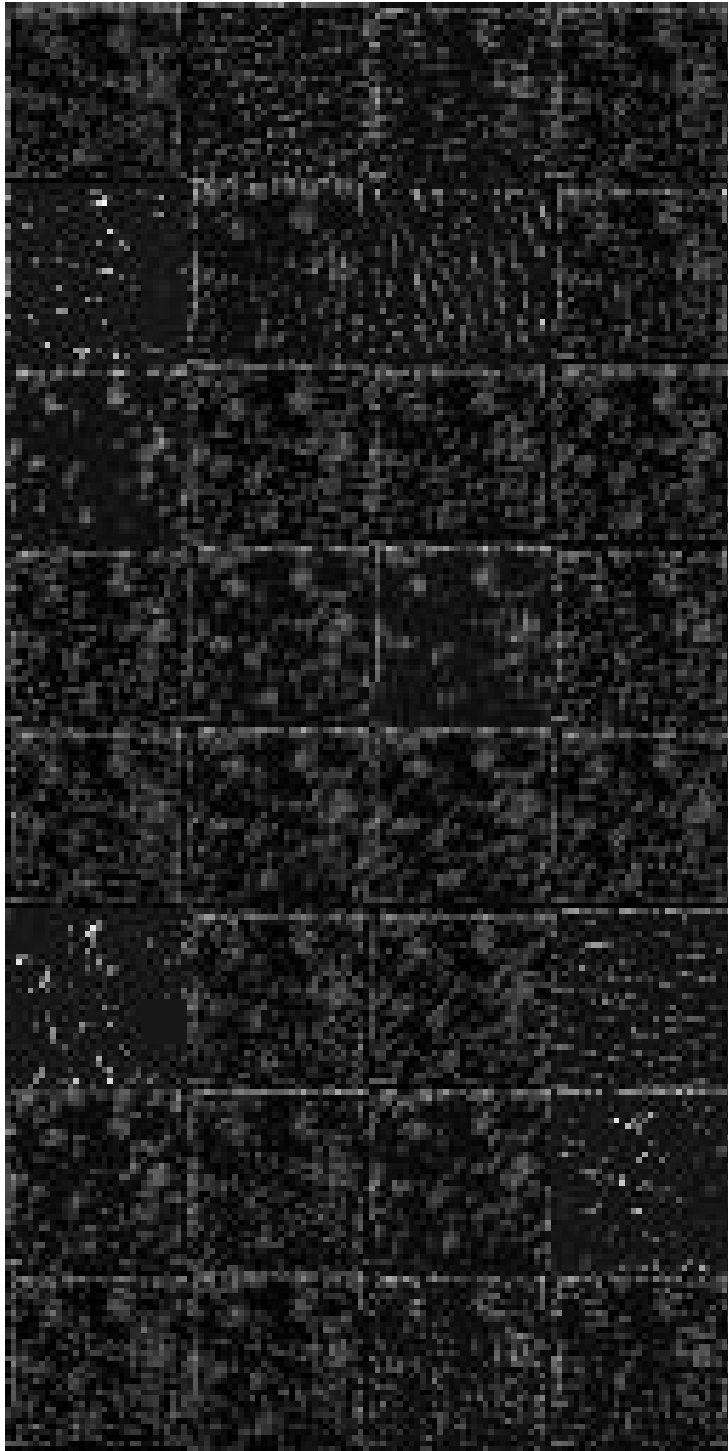


Fig. 4.14 After Convolution4 layer images.

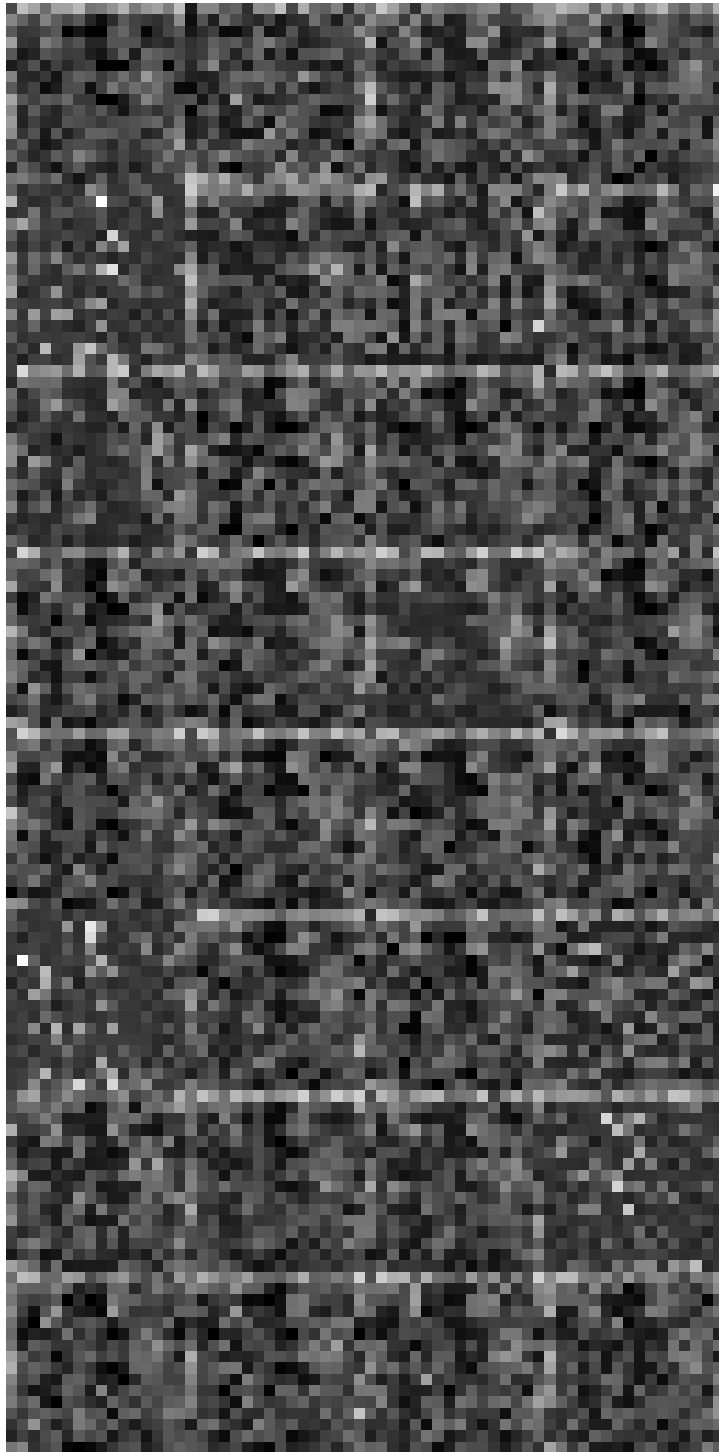


Fig. 4.15 After Maxpooling4 layer images.

GB형으로 학습시킨 합성곱 신경망 모델에 CL형으로 테스트를 한 결과에 관한 도표를 Fig 4.3과 함께 설명했었다. Fig 4.16은 CL형 이미지를 입력으로 한 Conv 1이 진행된 중간층 이미지다. GB형의 중간층 이미지는 Fig. 4.8과 Fig. 4.9처럼 Conv 3, 4층까지 진행된 이후부터 결정립과 결정립계를 구분하기 힘들어지며 정보가 요약됐었다. CL형 이미지의 경우는 크기 변함없이 특징만을 추출했지만, 첫 단계부터 결정립이 잘 구분되지 않거나 대부분의 정보가 소실된 것 같은 중간층 이미지를 출력했다. CL형 이미지는 결정립의 색상이 서로 다른 것으로 표현된 것으로, 중간층 이미지에선 결정립 간 높낮이가 있는 것처럼 명도 차이를 둔 결정립으로써 특징을 추출했다. 이 과정에 있어서 CL형 이미지는 학습된 GB형과는 크게 다른 입력 이미지였기 때문에, 결정립을 원활하게 인식하지 못하는 것으로 판단된다.

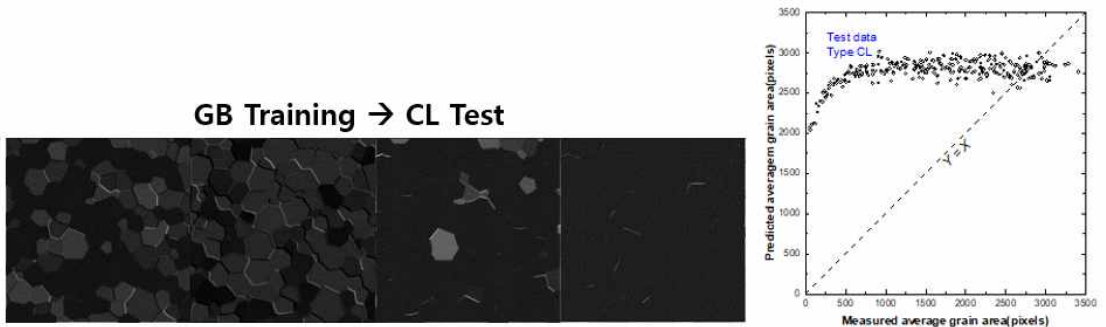


Fig. 4.16 Middle layer images of CL type test.



Fig. 4.17은  $256 \times 256$ 픽셀에서부터 한 면이 128, 64, 32, 16픽셀 순서로 합성곱 계층을 통과할 때마다 작아지는 미세조직 이미지를 나타내며, Fig. 4.18은  $16 \times 16$ 픽셀로 작아진 이미지를 확대해 놓은 것이다. 입력 이미지는 합성곱과 풀링 연산을 거치며 점점 작아지는데, 고화질의 정보를 제한된 작은 픽셀에 담게 된다. 해당 연구에서 확인할 수 있는 마지막 중간층 이미지는 사람이 보았을 때 미세구조에 대한 정보를 알기 굉장히 어려울 정도로 요약된 것이지만, 학습된 합성곱 신경망은 평균 결정립 크기를 높은 정확도로 예측할 수 있다는 것을 확인했다.

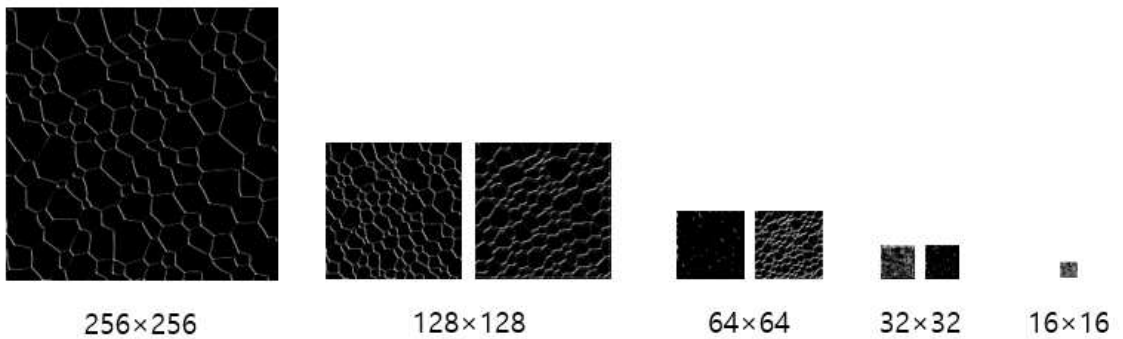
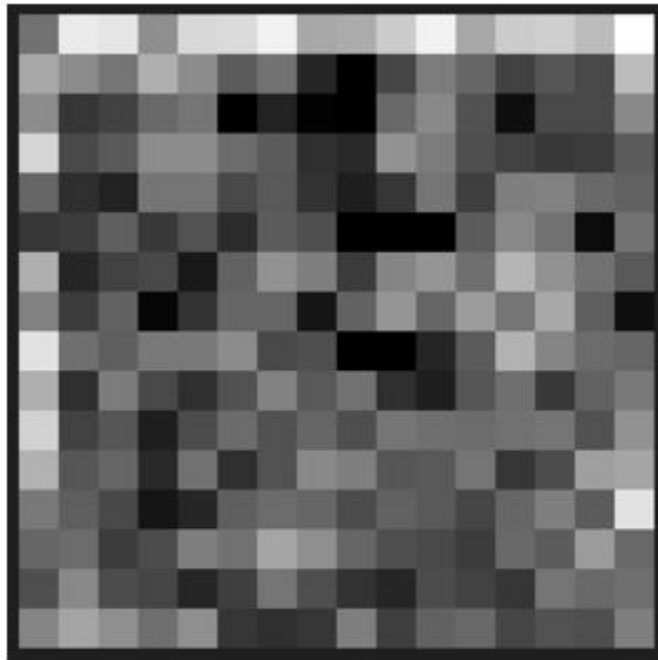


Fig. 4.17 Collection of shrink images.



$16 \times 16$

Fig. 4.18 Enlarged image After Maxpooling4.

## 5. 결론

본 연구에서는 합성곱 신경망을 이용하여 정상 결정립 성장에 대한 미세조직 이미지 데이터로부터 평균 결정립 크기를 평가했다. 미세조직 이미지 데이터는 상장모델을 통해 생성하였고, 흑색의 선분을 가진 결정립계와 백색의 결정립으로 나타내었다. 합성곱 신경망은 파이썬(Python) 언어를 사용하여 기계학습을 진행하였다.

본 연구의 결론은 다음과 같다.

1. 이미지 데이터 처리에 사용되는 합성곱 신경망을 이용하여 미세조직의 평균 결정립 크기 평가에 대한 기계학습 결과, 학습용 데이터셋 3000 개에 대해선 99.9%의 정확도, 테스트용 데이터셋에 대해선 97.9%의 정확도로 학습범위 내에서 높은 정확도로 평균 결정립 크기를 예측하였다.
2. 합성곱 신경망의 처리 과정을 보여주는 중간층 이미지로 미루어보아, 연구에 사용한 합성곱 신경망은 주로 결정립계의 밀도, 길이, 곡률을 특징으로 추출하여 결정립을 인식한다고 판단된다. 요약된 중간층 이미지는 육안으로 알아보기 힘들지만 작은 이미지에 충분한 정보가 존재한다고 판단할 수 있다.
3. GB 형 훈련 모델은 GB 형 입력 데이터의 흑색 결정립계로써 구분되는 백색 결정립 중 결정립계를 추출하였고, CL 형 입력 데이터는 결정립의 색상을 구분하여 특정 결정립 자체를 특징으로 추출하는 모습을 보였다. 입력 데이터의 정보 표현 방법에 따라 합성곱 신경망의 성능이 크게 달라지기 때문에 교차 이미지 검증을 위해선 균일한 전처리(색조 처리, 결정립계 강조 정도)가 필요할 것이다.
4. 다양한 상이 분포하는 재료에 활용할 수 있는 미세조직 분석용 합성곱 신경망을 만들기 위해선 상의 형태, 분포, 크기가 다양한 데이터베이스를 구축하여 학습시켜야 할 것이다.

## 참고문헌

- [1]김민수, 냉간압연한 Ni-Cu 합금의 재결정 및 결정립 성장 거동에 관한 연구, 인하대학교, 2010.
- [2]구남훈, 기계학습을 활용한 철강 미세 조직 분석 기법, 대한금속재료학회 재료마당 33 권 1 호 23-35, 2020.
- [3]양해웅, 나노 결정립 알루미늄 합금의 미세조직 변화 및 소성 이방성, 영남대학교, 2018.
- [4]이충도, 염수분무환경에서 AZ91D 마그네슘 합금의 부식거동에 미치는 결정립 크기의 영향, 대한금속재료학회, vol. 38, No.9, 2000
- [5]신한균, 플렉서블 기관용 구리 도금박막의 나노결정립화 재결정 거동 관찰, 동아대학교, 2015.
- [6]이희창, SPS 공정 변수의 최적화에 의한 Pure Cu 와 Cu-3vol%CNT composite 의 미세구조와 소재특성, 부산대학교, 2020.
- [7]ASTM E112-13, Standard Test Methods for Determining Average Grain Size.
- [8]Olympus-<https://www.olympus-ims.com/ko/applications/grain-size-analysis/>
- [9]Y. LeCun, B. Boser, J.S. Denker, D. Henderson, R.E. Howard, W. Hubbard, L.D. Jackel, Backpropagation Applied to Handwritten Zip Code Recognition, Neural Computation. 541-551, 1989.
- [10]Lee, Real-Time License Plate Detection Based on Faster R-CNN, KIPS Transactions on Software and Data Engineering, vol. 5, no. 11, pp. 511-520, 2016.
- [11]Kim, A Comparison Study of Ball Bearing Fault Diagnosis and Classification Analysis Using XAI Grad-CAM. The Korean Institute of Electrical E

ngineers. 2022, vol.71, no.9, pp. 1315–1325, 2022.

[12] 박재순, 중요 특징 추출과 합성곱 신경망을 이용한 암 진단 모델 연구. Proceedings of KIIT Conference (2021): 364–367, 2021

[13] Lee, Mid-layer visualization for microstructural images cast irons using convolutional neural network. 조선대학교, 2021

[14] Park, Classification of crystal structure using a convolutional neural network, IUCrJ. 486-494, 2017.

[15] Hwang, Generation and Analysis of Microstructure of Al-Si Casting Alloy Using Deep Learning Model. 조선대학교, 2021.

[16] H. Hong, Prediction of Stacking Angles of Fiber-reinforced Composite Materials Using Deep Learning Based on Convolutional Neural Networks, 48-52, 2023.

[17] K. Farizhandi, Deep learning approach for chemistry and processing history prediction from materials microstructure, Scientific Reports. 4552, 2022.

[18] Jr. Morris, The influence of grain size on the mechanical properties of steel, 10.2172/861397, 2001.

[19] 서노근, 초세립 오스테나이트강에서 결정립 크기가 균일 연신구간에 미치는 영향, 연세대학교, 2006.

[20] G. Sachs, Practical Metallurgy: Applied Physical Metallurgy and the Industrial Processing of Ferrous and Nonferrous Metals and Alloys, American Society for Metals, Cleveland, OH, 1940.

[21] Y.H. Kim, Effect of grain size on the intergranular corrosion property of type 304 stainless steel. J. Corros Sci. Soc. of Korea, vol. 21, No. 2, 1992.

[22] Dong, Relative importance of grain boundaries and size effects in ther

mal conductivity of nanocrystalline materials, Scientific Reports, 2014.

[23]T. Matsumoto, Correlation between grain size and optical properties in zinc oxide thin films, AIP publishing, 2002.

[24]M. Shiozaki, The effects of grain size on the magnetic properties of nonoriented electrical steel sheets, J. Mater, 1989

[25]Hermann, Schumann : Metallographie, 김정근, 박노진 공역, 노드미디어, 2005

[26]G.F. Luger, Artificial Intelligence, ISBN 9780132090018 (0132090015), 2009

[27]K. Ki-Bong, A Study of Convergence Technology in Robotic Process Automation for Task Automation, J. Convergence for Information Technology. 9, 8-13, 2019

[28]O. Abdel-Hamid, A. Mohamed, H. Jiang, G. Penn, Applying Convolutional Neural Networks concepts to hybrid NN-HMM model for speech recognition, in: 2012 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP): pp. 4277-4280, 2012

[29]A. Graves, A. Mohamed, G. Hinton, Speech Recognition with Deep Recurrent Neural Networks, 2013.

[30]N.-Y. Lee, C. Hyugyun, H.-T. Ceong, Development of Image Defect Detection Model Using Machine Learning, The Journal of The Korea Institute of Electronic Communication Sciences. 513-520, 2020.

[31]A. Santoro, S. Bartunov, M. Botvinick, D. Wierstra, T. Lillicrap, One-shot Learning with Memory-Augmented Neural Networks, 2016.

[32]Y. Bengio, A. Courville, P. Vincent, Representation Learning: A Review and New Perspectives, 2014.

[33]윤성진, Do it! 딥러닝 교과서, 교보문고, 2023.

- [34]P. Domingos, A few useful things to know about machine learning, Commun. ACM. 55, 78-87, 2012
- [35]S. Cho, D. Jung, S. Lee, M.-K. Shin, H. Park, Survey on Machine Learning Algorithms for SDN/NFV Automation, The Journal of Korean Institute of Communications and Information Sciences. 44, 92-105, 2019
- [36]G. James, An Introduction to Statistical Learning, An Introduction to Statistical Learning, 2023.
- [37]조용현, 신경망을 이용한 고신뢰성의 회귀분석 모델, 정보처리학회논문지. The KIPS transactions. Part B. b8, 327-334, 2001
- [38]J.H. Stock, M.W. Watson, Introduction to Econometrics, Pearson/Addison-Wesley, 2008.
- [39]J.R. Quinlan, Induction of decision trees, Mach Learn. 1, 81-106, 1986.
- [40]An Introduction to Support Vector Machines and Other Kernel-based Learning Methods, Cambridge University Press, 2013.
- [41]J.A. Hartigan, M.A. Wong, Algorithm AS 136: A K-Means Clustering Algorithm, Journal of the Royal Statistical Society. Series C (Applied Statistics). 28, 100-108, 1979.
- [42]이신원, K-Means 클러스터링에서 초기 중심 선정 방법 비교, Journal of Korean Society for Internet Information. 13, 1-8, 2012.
- [43]K. Arulkumaran, A Brief Survey of Deep Reinforcement Learning, IEEE Signal Process. Mag. 34, 26-38, 2017
- [44]V. Mnih, Human-level control through deep reinforcement learning, Nature. 518, 529-533, 2015.
- [45]F. Rosenblatt, The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain, Psych. Review. 65, 386-408, 1958.

- [46] 오창환, 디지털 논리회로 이해, 2023.
- [47] 사이토고키, 밑바닥부터 시작하는 딥러닝, 2023.
- [48] 시냅스 | 인체정보 | 서울아산병원, (n.d.). <https://www.amc.seoul.kr/asan/healthinfo/body/bodyDetail.do?bodyId=76>
- [49] C.F. Cadieu, Deep Neural Networks Rival the Representation of Primate IT Cortex for Core Visual Object Recognition, PLoS Comput Biol. 10, 2014.
- [50] J.A. Freeman, Neural Networks: Algorithms, Applications, and Programming Techniques, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1991.
- [51] R. Lippmann, An introduction to computing with neural nets, IEEE ASSP Magazine. 4,4-22, 1987.
- [52] M.-H. Jun, B.-W. Kim, A Study on Numerical Recognition Using Artificial Neural Network, Proceedings of the Korea Information Processing Society Conference. 511-514, 2019.
- [53] K. He, Delving Deep into Rectifiers: Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification, 2015.
- [54] J. Han, C. Moraga, The influence of the sigmoid function parameters on the speed of backpropagation learning, in: J. Mira, F. Sandoval (Eds.), From Natural to Artificial Neural Computation, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 195-201, 1995
- [55] C. Nwankpa, W. Ijomah, A. Gachagan, S. Marshall, Activation Functions: Comparison of trends in Practice and Research for Deep Learning, 2018.
- [56] V. Nair, G.E. Hinton, Rectified linear units improve restricted boltzmann machines, in: Conference on International Conference on Machine Learning, Omnipress, Madison, WI, USA, 807-814, 2010.



- [57]M.D. Zeiler, Visualizing and Understanding Convolutional Networks, 2013.
- [58]Y. Lecun, L. Bottou, Y. Bengio, P. Haffner, Gradient-based learning applied to document recognition, Proceedings of the IEEE. 86, 1998.
- [59]A. Krizhevsky, ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks, 2012.
- [60]J.T. Barron, A General and Adaptive Robust Loss Function, 4331-4339, 2019.
- [61]C. Li, X. Yuan, C. Lin, M. Guo, W. Wu, J. Yan, W. Ouyang, AM-LFS: AutoML for Loss Function Search, 8410-8419, 2019.
- [62]I.-J. Jeong, A Weighted Mean Squared Error Approach Based on the Tchebycheff Metric in Multiresponse Optimization, J. Korea Academia-Industrial cooperation Society. 16, 97-105, 2015.
- [63]D.P. Kingma, J. Ba, Adam: A Method for Stochastic Optimization, 2017.
- [64]K. Simonyan, A. Zisserman, Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition, 2015.
- [65]VGGNet-16 Architecture: A Complete Guide, <https://kaggle.com/code/blurredmachine/vggnet-16-architecture-a-complete-guide>
- [66]S.M. Azimi, D. Britz, M. Engstler, M. Fritz, F. Mücklich, Advanced Steel Microstructural Classification by Deep Learning Methods, Sci Rep. 8, 2128, 2018.
- [67]A.R. Durmaz, A deep learning approach for complex microstructure inference, Nat Commun. 12, 6272, 2021.
- [68]B.L. DeCost, High throughput quantitative metallography for complex microstructures using deep learning: A case study in ultrahigh carbon steel

l, *Microsc Microanal.* 25, 21–29, 2019.

[69]Kim, S.G.; Kim, D.I.; Kim, W.T.; Park, Y.B. Computer Simulations of Two-Dimensional and Three-Dimensional Ideal Grain Growth. *Phys. Rev. E* 2006, 74, 061605. [CrossRef] [PubMed]

[70]Darvishi Kamachali, R.; Steinbach, I. 3-D Phase-Field Simulation of Grain Growth: Topological Analysis versus Mean-Field Approximations. *Acta Mater.* 2012, 60, 2719–2728. [CrossRef]

[71]<https://www.ebsd.com/ebsd-techniques/displaying-ebsd-data>

[72]<https://www.edax.com/resources/interactive-periodic-table/zirconium>

[73]Dimokrati, Ahmed & Benyoucef, Mustafa & Le Bouar, Yann & Helbert, Anne-Laure & Baudin, T.. Phase Field Simulation of Normal Grain Growth, 2016.

[74]Chen Y, Ultrasonic Transducer Fabricated Using Lead-Free BFO-BT O+Mn Piezoelectric 1–3 Composite. *Actuators*, 4(2):127–134, 2015.

[75]Filipe L. Braga, 2D ceramic grains images manipulations: A simple geometrical characterization and grain domain recreation algorithm, *Applied Computing and Informatics*, Volume 14, Issue 2, 159–165, 2018.

[76]Bertini, Microstructure and Fatigue Behavior of a Ni-Cu-Sn Alloy. *Metals – Open Access Metallurgy Journal*, 2018

[77>Welcome to Python.org, Python.Org. <https://www.python.org/psf-landing/>

[78]Keras: Deep Learning for humans, <https://keras.io/>