

머신러닝을 활용한 국내산 플라이애시 비정질량 예측

The Prediction of Amorphous Contents of Domestic Fly Ashes
using Machine Learning

박 우 영* 문 주 혁**
Wooyoung Park Juhyuk Moon

ABSTRACT

In this study, domestic fly ashes' chemical compositions(wt%) and amorphous contents(wt%) calculated by X-ray fluorescence analysis and Rietveld method, respectively, were used as machine learning data. Artificial neural network using Keras, an open source library, was constructed to predict the amorphous content through the chemical composition of fly ash. The accuracy of the model indicates that prediction is reliable. A coefficient of determination of train dataset is 0.884 and a coefficient of determination of test dataset is 0.771.

요 약

본 연구는 X선 형광 분석법(XRF)와 내부표준물질 혼합법을 적용한 Rietveld 방법을 사용하여 계산한 국내산 플라이애시 화학 조성(wt%)과 비정질 함량(wt%)을 머신러닝 학습 데이터로 사용하였다. 오픈 소스 라이브러리인 Keras를 사용한 인공 신경망을 구축하여 플라이애시의 화학 조성을 통해 비정질 함량을 예측하였다. 모델의 정확도는 학습 데이터의 결정계수 0.884, 시험 데이터의 결정계수 0.771로 신뢰성 있는 예측임을 나타냈다.

1. 서 론

본 연구는 국내산 플라이애시의 화학 조성을 통해 비정질량을 예측하고자 인공 신경망 머신러닝 모델을 설계하였다. 해당 모델은 시험 데이터의 결정계수가 0.771인 성능을 보였다.

2. 사용 재료 및 실험 방법

본 연구에서 사용된 샘플은 25종의 국내산 플라이애시로, 국내 논문의 자료를 활용하였다. 국내 8개의 화력 발전소에서 생산되는 8종의 플라이애시와 서울, 경기, 충청 지역 레미콘 업체에서 사용하고 있는 13종의 플라이애시로 구성된다.

플라이애시 비정질량을 예측하기 위해 머신러닝 모델은 RMSProp 최적화 알고리즘을 사용한 인공 신경망을 사용하였다. 인공 신경망의 입력특성은 XRF로 얻은 화학 조성값으로, 6개 주요 산화물의 질량 백분율로 하였다. 결과특성은 Rietveld 방법을 사용하여 계산한 비결정질 함량으로 설정하였다.

적은 양의 데이터로 인한 모델의 분산 및 편향 문제를 보완하기 위해 계층적 샘플링 기법을 사용하였다.

* 정회원, 서울대학교, 멀티스케일구조재료연구실, 석사과정

** 정회원, 서울대학교, 멀티스케일구조재료연구실, 부교수, juhyukmoon@snu.ac.kr

아래 그림 1은 계층적 샘플링 시, 훈련 데이터와 시험 데이터의 분포를 나타내는 커널밀도추정(KDE) 그래프를 나타낸다. 데이터 양의 차이는 있지만, 훈련 데이터와 시험 데이터 그래프 모두 비교적 고르게 분포하는 확률밀도함수를 보였다.

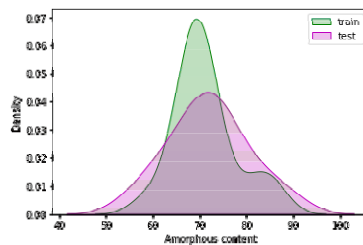


그림 1. 전체 데이터의 계층적 샘플링

3. 실험결과 및 고찰

그림 2는 머신러닝 모델이 예측한 비정질량과 실제 비정질량과의 관계를 나타낸다. 실제 값-예측 값이 $y=x$ 선에 동일하게 겹칠 때 완벽한 모델이 학습되었음을 의미한다. 해당 모델의 샘플이 $y=x$ 선을 따라 분포하므로 의미있는 학습이 이루어졌음을 나타냈다.

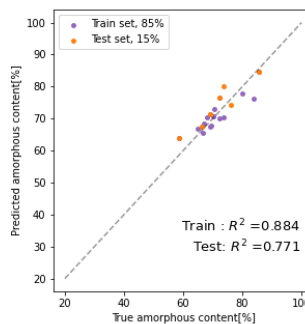


그림 2. 플라이애시의 실제 비정질량값과 머신러닝 모델을 통해 예측한 값간의 분포 그래프

4. 결 론

인공 신경망 모델을 통해 플라이애시의 화학 조성과 비정질량의 상관관계를 파악하였다. 국내산 플라이애시의 비정질 성분 및 함량에 대한 연구가 많이 진행되지 않아, 데이터가 충분하지 않았음에도 의미있는 예측 성능을 보였다. 후에 데이터를 보강하여, 예측 성능을 높이고 플라이애시의 비정질 성분을 예측하는 모델을 구축할 계획이다.

감사의 글

본 연구는 국토교통부/국토교통과학기술진흥원의 지원으로 수행되었습니다.(과제번호 21SCIP-C159063-02)

참고문헌

1. 조영근 (2018) 플라이애시 화학적 성질에 따른 지오폴리머의 압축강도 특성, 성균관대학교 박사학위 논문.