

KAIST 산학협동강좌 2024 Feb. 19th (Mon), 2024

Ryu Part 1/4: AI 작동 원리 요약 및 AI 활용 시 유의점

Seunghwa Ryu Professor of Mechanical Engineering

Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST)

Feb 19th Afternoon Contents

01 강의1: AI작동원리 요약 및 AI 활용 시 주의점

○2 강의2: 도메인 지식과 AI를 결합한 Data-efficient 설계 개괄

03 실습1: 전산유체(CFD) 모델링 데이터를 활용한 딥러닝 모델 학습

04 실습2: 학습된 딥러닝 모델를 활용한 유체장치 설계 실습

AI 작동원리 요약

인공지능 활용 시 유의점?

인공지능은 무엇을 하는가?

예측과 분류

인공지능시스템 = AI모델 + Data

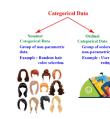
DNN, CNN, RNN, Support Vector Machine, Decision Tree, Random Forest,

→ PyCaret 오픈소스로 20개 이상 알고리즘 동시 학습 및 테스트 가능 숫자데이터, 시계열데이터, 그림데이터, 카테고리데이터

TEM	PRE	PER
24	3	40
46	4	35
43	6	26
33	1	50

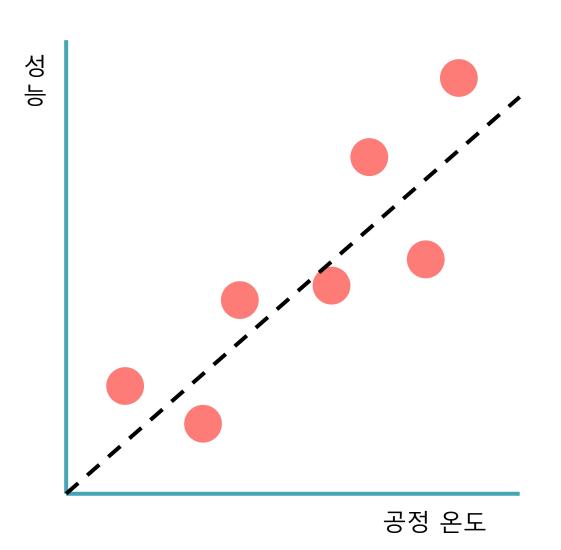






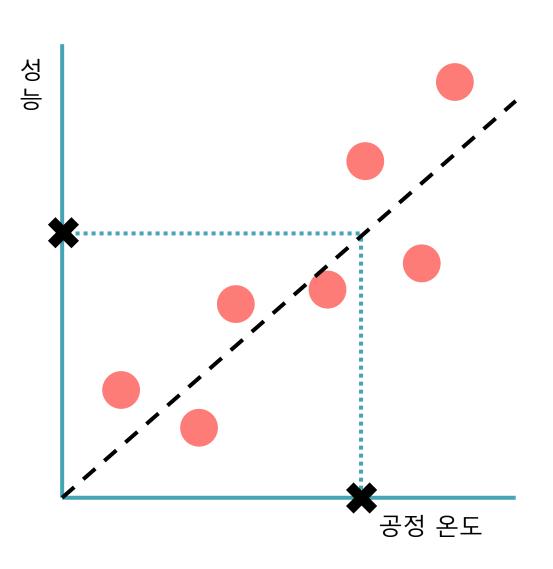
→ 데이터 오픈하는 기업 없음

AI의 역할 I. 예측, 회귀분석



데이터 경향선 추출 전반적인 제품 품질과 공정 온도의 인과관계를 예측

AI의 역할 I. 예측, 회귀분석

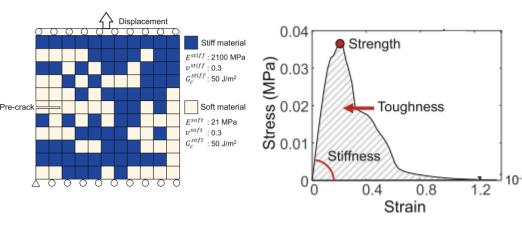


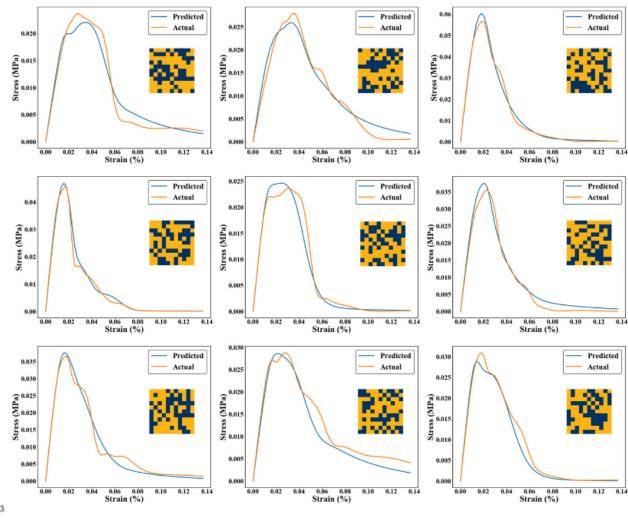
데이터 경향선 활용하여 원래 데이터에 없던 새로운 데이터에 대한 "예측" 가능

AI의 역할 I. 예측, 회귀분석

Input & Output이 형상/패턴/이미지라도 딥러닝 회귀분석 가능

Input / Output





Mater. Des 189, 108509 (2020)

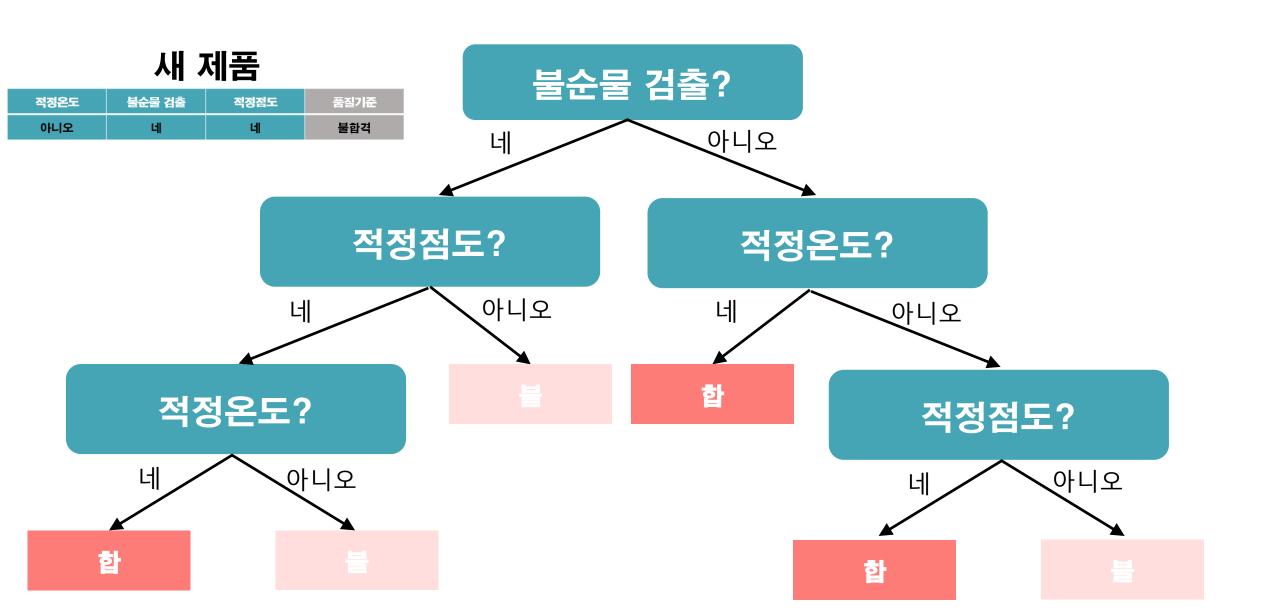
AI의 역할 II. 분류

수 백 개의 제품 데이터

적정온도	불순물 검출	적정점도	품질기준
아니오	아니오	아니오	불합격
네	네	네	합격
네	네	아니오	불합격
네	아니오	아니오	합격
•••	•••	•••	***

3가지 적정 공정조건으로 품질기준 통과 예측 및 분류

AI의 역할 II. 분류



AI의 역할 II. 분류

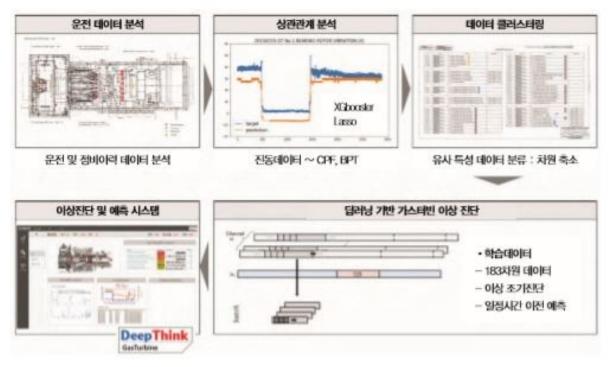


그림 31 딥러닝 기반 가스터빈 이상전단 및 예측 개요도

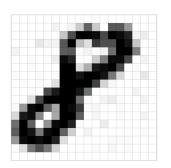
<출처: 한전전력연구원, http://www.keaj.kr/news/articleView.html?idxno=2789>

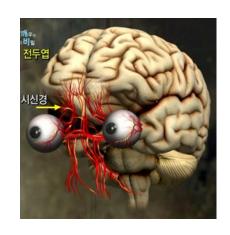
- Q. 압력, 진동, 온도 시계열 데이터에서 이상 진단?
 - Q. 시스템 수명에 무리를 안 주는 운영 조건?

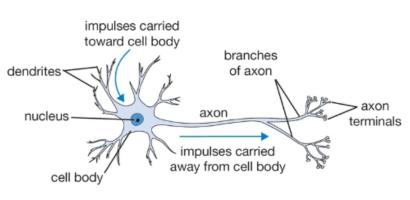
회귀분석 알고리즘 작동원리

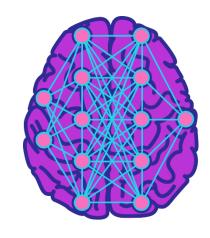
심층신경망 – 유연한 비선형 회귀

인공 신경망?!



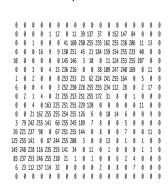


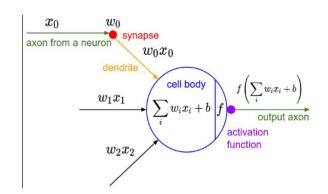


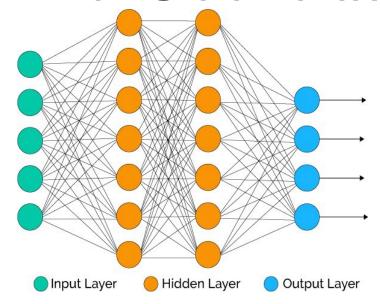




이를 모사하여 신경망(퍼셉트론)이 활성화되면서 학습하는 모델!

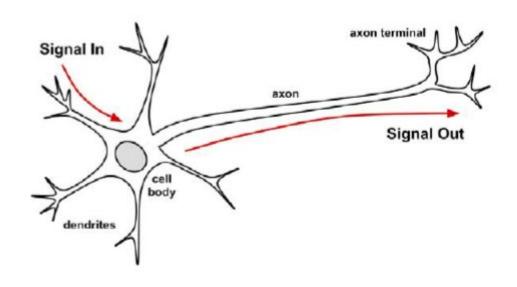




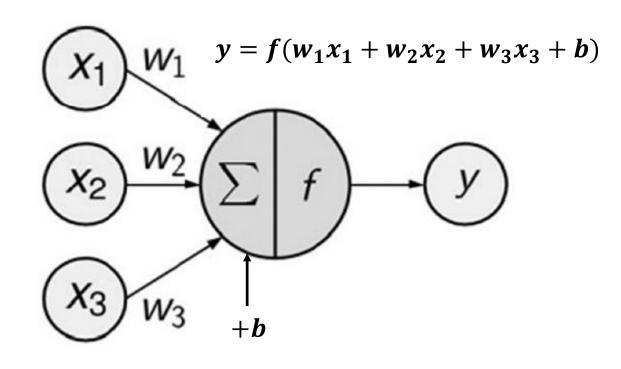


신경망이란?

사람의 뉴런



인공 신경망의 퍼셉트론 (Perceptron)



입력값 X₁, X₂, X₃ 에 대한 출력값 Y

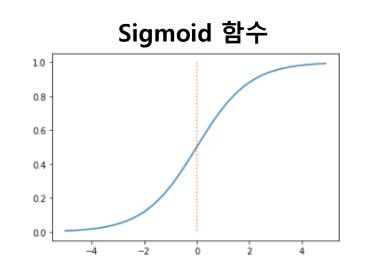
신경망이란?

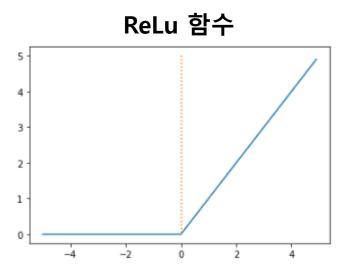
인공지능 퍼셉트론

 (x_1) w_1 $y = f(w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + b)$

 (x_2) w_2 (x_2) (x_3) (x_3) (x_3) (x_3) (x_3) (x_3) (x_3) (x_4) (x_4) (x_5) (x_5)

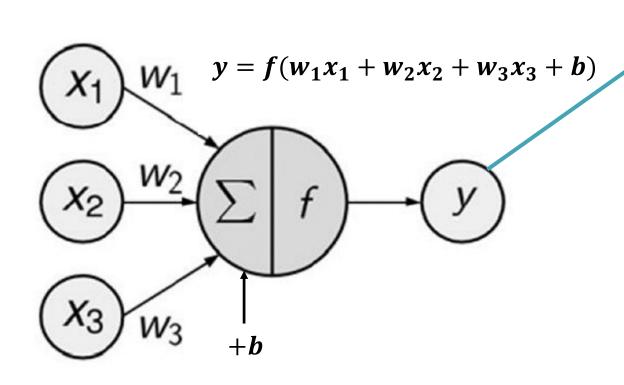
f: 활성 함수 (activation function)
 Sigmoid / Hyperbolic tangent / ReLu ···
 → 활성함수가 선형이면 선형회귀와 동일해짐.





신경망이란?

인공지능 퍼셉트론



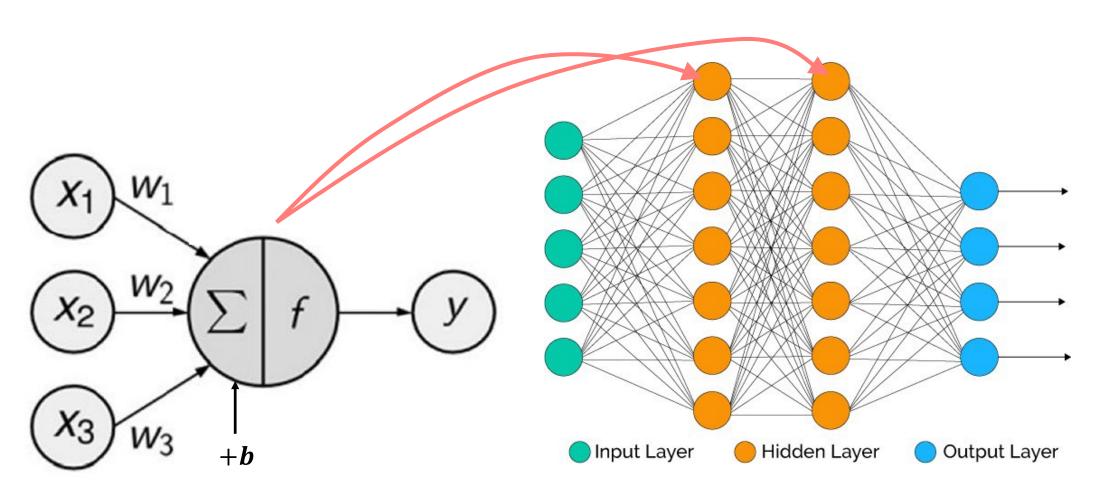
실제 y 와 f(wx + b)의 차이

= 신경망의 오차 = 손실 함수(loss)

→ 신경망을 훈련한다는 것은, y값을 잘 예측하는 w, b 를 찾는다는 것!

→ 결국 손실 함수의 값을 줄이는 것이 신경망학습의 목표 방향!!

다층 신경망(Multilayer Perceptron)

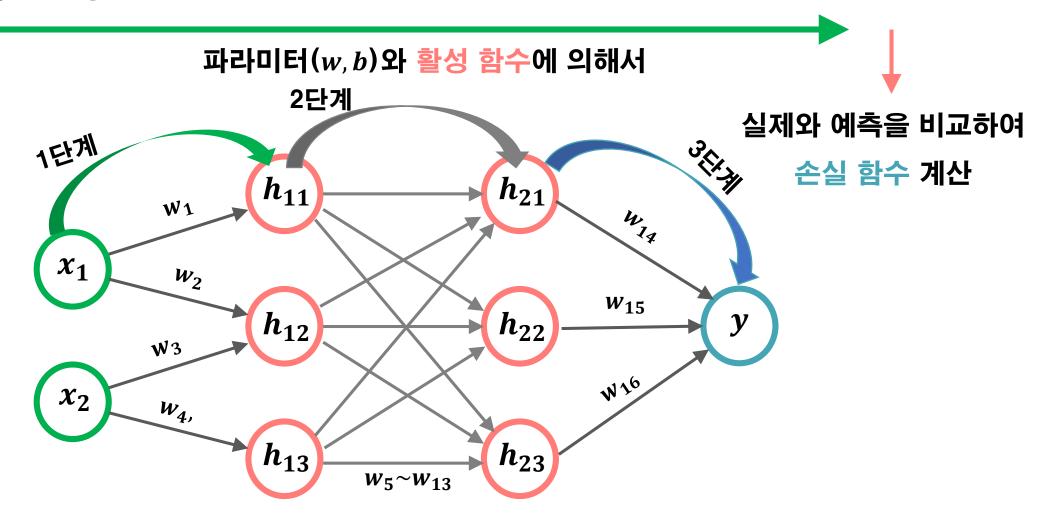


여러 층의 신경망으로 이루어진 다층 신경망 → 심층신경망, 딥 러닝

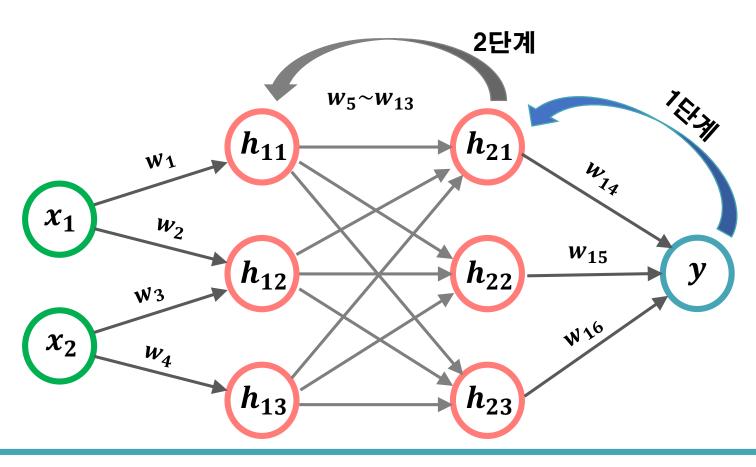
순전파(Forward Propagation)

입력값 x_1, x_2, \cdots 을 넣으면

예측되는 출력 y가 계산



역전파(Back Propagation)



손실 함수 최소화를 목표로 출력 값에 가까운 순서로 파라미터(w, b) 조정

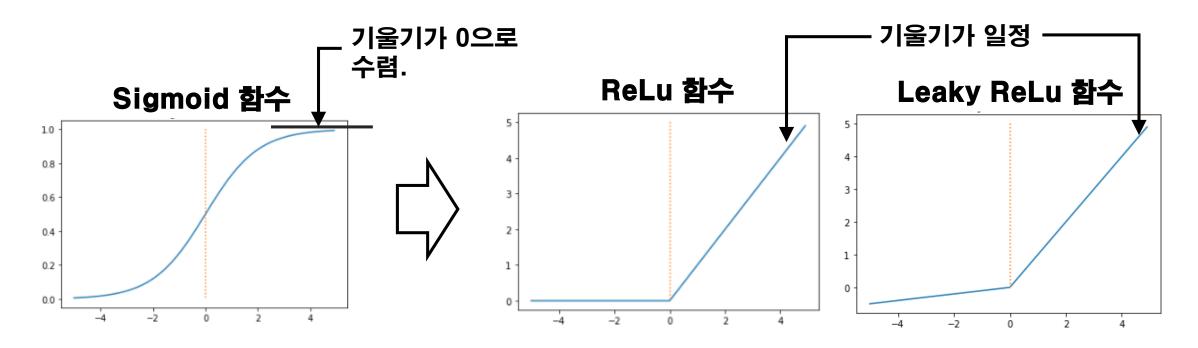
How? \rightarrow 경사 하강법(Gradient descent): $\frac{\partial Loss}{\partial w}$ 를 계산하여 퍼셉트론 학습

활성 함수(activation function)

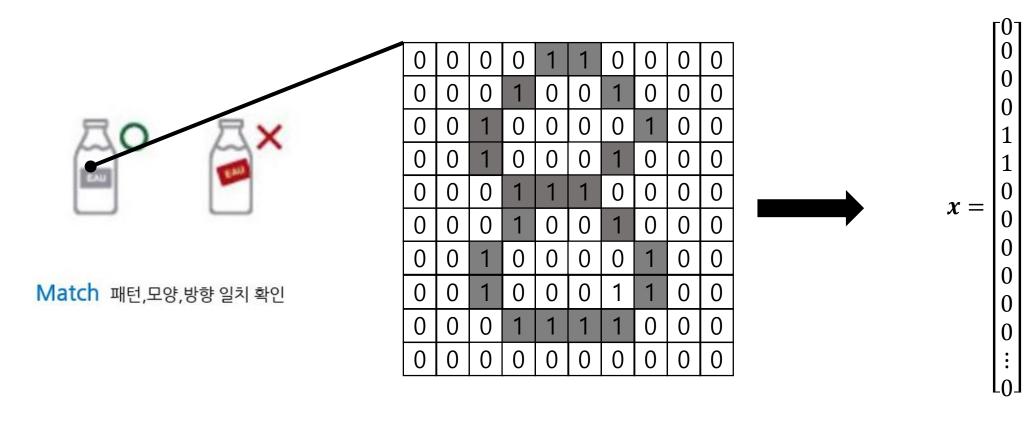
→ 은닉층(hidden layer)이 두꺼울수록 역전파 과정에서 기울기가 잘 전달되지 않음

$$\frac{df}{dx_1} = \frac{df}{df_1} \frac{df_1}{df_2} \frac{df_2}{df_3} \frac{df_3}{df_4} \frac{df_4}{df_5} \dots$$
 : 하나만 0에 가까워져도 곱은 0에 수렴함.

→ ReLu 함수 기반의 활성 함수 사용

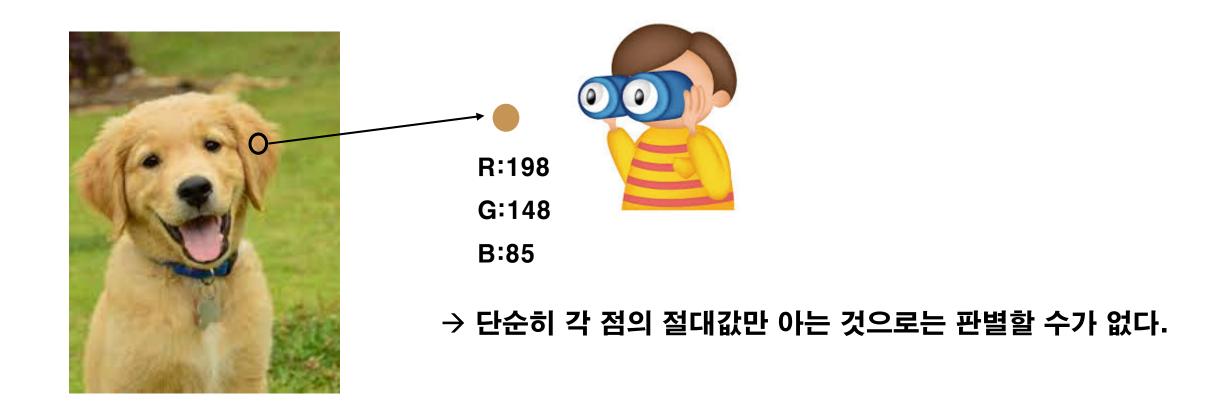


이미지 제조데이터의 분석



100차원

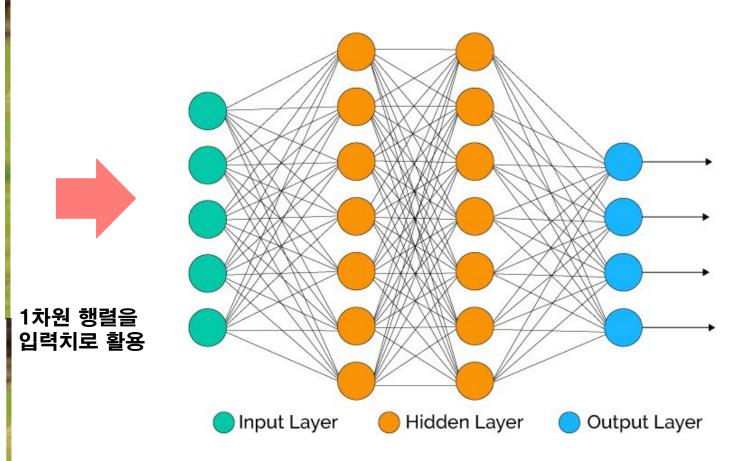
→ 합성곱 신경망을 활용하면, 단순한 숫자 나열 이상의 분석이 가능함.





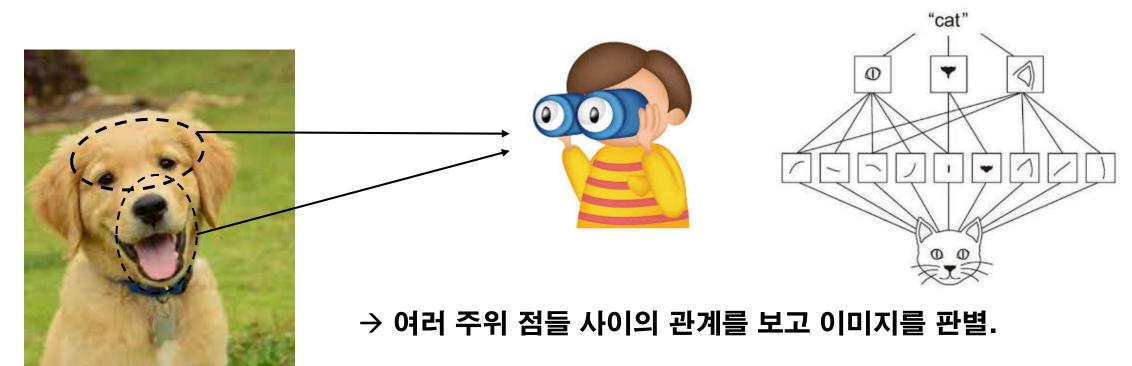


2차원 이미지를 1차원으로 변경



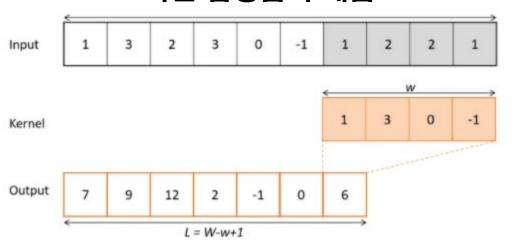
일반적인 신경망은 주위 픽셀의 정보를 고려하기 어려움

또다른 예시



→ 인공지능 신경망도 이렇게 주변과의 관계를 학습하면 더 좋지 않을까?

1차원 합성곱의 개념



1차원 합성곱의 예



Input: 매일의 주식 가격

Kernel → 5일 이동평균: 5칸에 모두 1/5

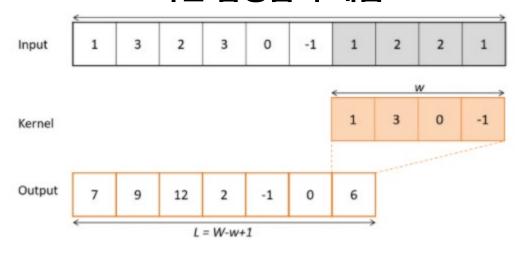
→ 20일 이동평균: 20칸에 모두 1/20

→ 60일 이동평균: 60칸에 모두 1/60

Output: 5일, 20일, 60일 이동평균

각 Kernel 합성곱 후 단순한 숫자 나열 이상의 정보를 표시

1차원 합성곱의 개념



Statistics

New cases Deaths Vaccinations Tests From JHU CSSE COVID-19 Data · Last updated: 7 hours ago South Korea 3 months 21 May 2022 New cases: 19,298 7-day avg: 25,091 New cases — 7-day average

Feedback

Each day shows new cases reported since the previous day . About this data

1차원 합성곱의 예

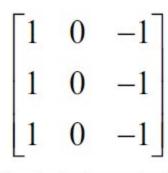
Input: 매일의 코로나 확진자

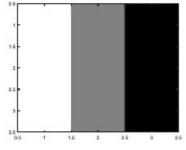
Kernel → 7일 이동평균: 7칸에 모두 1/7

Output: 7일씩 이동평균데이터

요일 별로 검사받는 사람수가 다른 걸 보정하여 패턴 파악





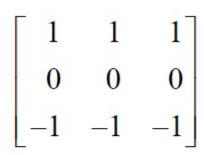


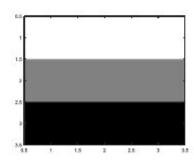
Kernel



Output



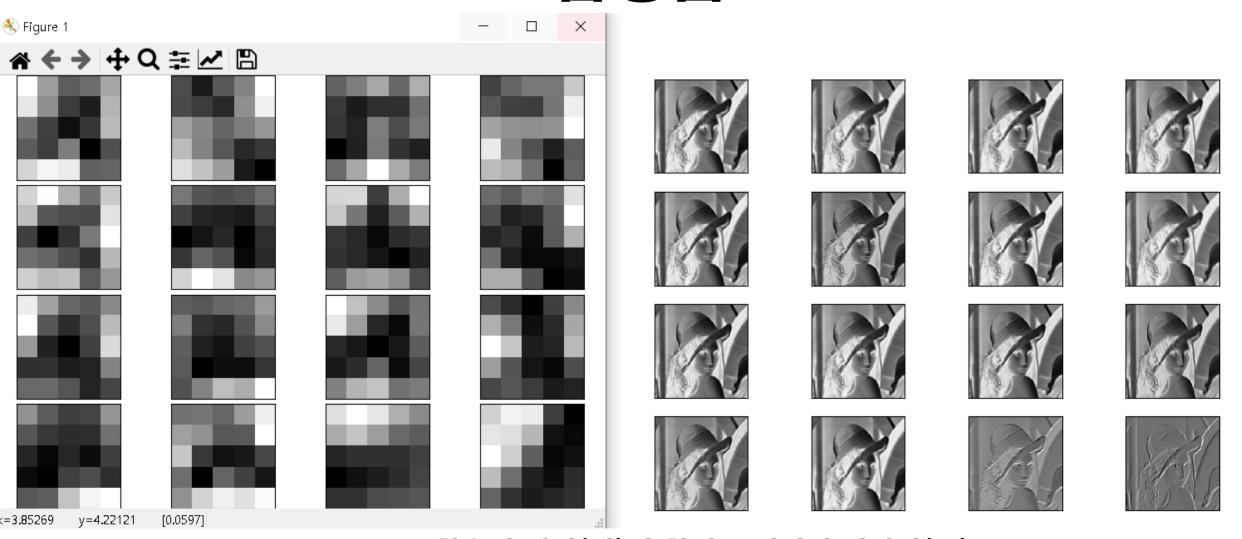




Kernel



Output

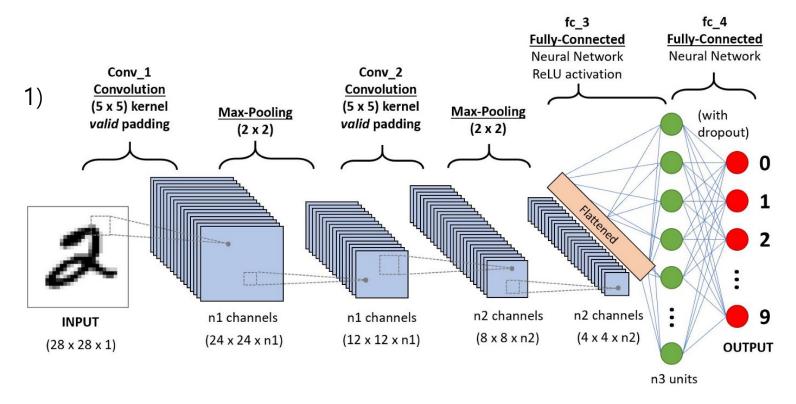


CNN으로 학습된 커널(좌)과 합성곱 처리된 이미지(우)

출처: https://huangdi.tistory.com/36

입력 값(Input feature)들 사이의 관계가 있을 때

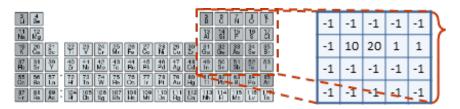
- → 합성곱 신경망 사용.
- → 특히 이미지 학습에 적합함.



합성곱 신경망 활용 예시



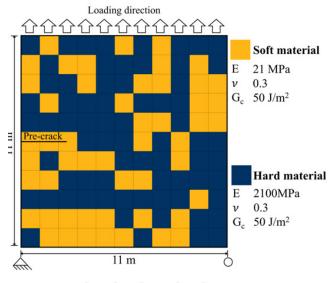
이미지 -> RGB값으로 분리



Periodic table

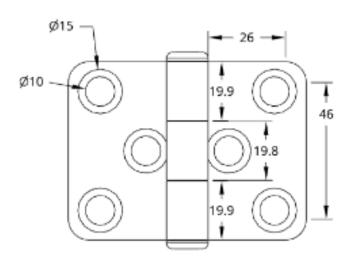
Image

화합물의 조성비



복합재의 패턴

합성곱 신경망 활용 예시



1. 수치 기반 DNN

- 입력:

 L_1, L_2, L_3, \dots

 $\phi_1, \phi_2, \phi_3, ...$

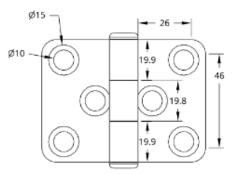
- 출력:

제품 성능

2. 이미지 기반 CNN

입력:

출력:



제품성능

분류 알고리즘 작동원리

의사 결정 나무

정보 불순도(Impurity)



항아리1 & 항아리 3 → 순도 100% 항아리2 → 불순도 높다.

Q. 정보 불순도를 숫자로 측정할 수 있을까? 정보 엔트로피, 지니 지수 Q. 항아리2의 불순도를 낮추는 좋은 기준? 색깔, 크기, 모양

정보 엔트로피?

정보 엔트로피(무질서도)= $\sum_{i=1}^{c} p_i \times I(x_i)$

c: 사건의 개수

 p_i : x_i 라는 사건이 발생할 확률

 $I(x_i)$: x_i 라는 사건의 정보량

$$I(x_i) = \log(\frac{1}{p_i}). \quad I(x_i)$$

확률이 낮은 사건일수록 정보량이 높다. 혹은, 흔한 사건은 정보량이 없다.

정보 엔트로피?



항아리 2.

붉은 색 뽑을 확률=1/2 붉은 색 뽑는 사건 정보량 = log(2)

파란 색 뽑을 확률=1/2 파란 색 뽑는 사건 정보량 = log(2)

정보엔트로피= $1/2 \times log(2) + 1/2 \times log(2) = log(2)$



항아리 1.

붉은 색 뽑을 확률=0

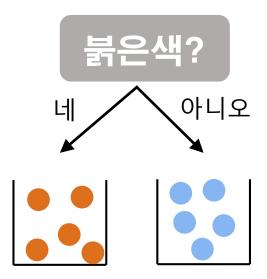
파란 색 뽑을 확률=1 파란 색 뽑는 사건 정보량 = log(1)=0

정보엔트로피= $0 + 1 \times \log(1) = 0$

정보 엔트로피?



붉은 색 뽑을 확률=1/2 붉은 색 뽑는 사건 정보량 = log(2) 파란 색 뽑을 확률=1/2 파란 색 뽑는 사건 정보량 = log(2) 정보엔트로피=1/2 x log(2) + 1/2xlog(2) = log(2)



정보엔트로피(좌)=1 x log(1)=0

정보엔트로피(우)=1 x log(1)=0

정보엔트로피(Φ +우)=0+0=0 \rightarrow 무질서도를 낮추는 기준

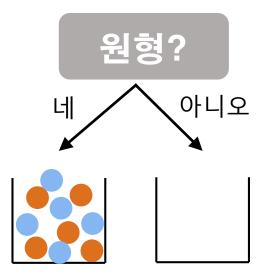
정보 엔트로피?



붉은 색 뽑을 확률=1/2 붉은 색 뽑는 사건 정보량 = log(2)

파란 색 뽑을 확률=1/2 파란 색 뽑는 사건 정보량 = log(2)

정보엔트로피= $1/2 \times log(2) + 1/2xlog(2) = log(2)$



정보엔트로피(좌)=log(2)

정보엔트로피(우)=0

정보엔트로피(좌+우)= $log(2)+0=log(2) \rightarrow 무질서도 변화없음$

지니지수?

지니 지수= $1-\sum_{i=1}^{c} p_i^2$

c: 사건의 개수

 p_i : x_i 라는 사건이 발생할 확률

지니지수가 높을수록 무질서도가 크다.

지니지수?



붉은 색 뽑을 확률=1/2

파란 색 뽑을 확률=1/2

지니지수 = $1-(1/2)^2 - (1/2)^2 = 1-0.25-0.25 = 0.5$



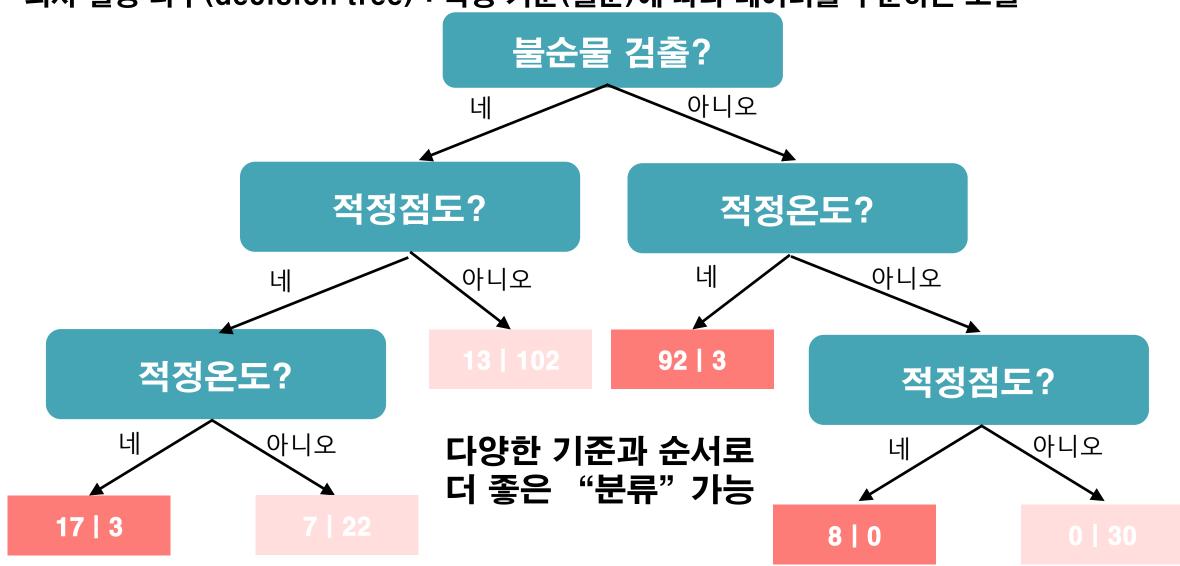
붉은 색 뽑을 확률=0

파란 색 뽑을 확률=1

지니지수 = $1 - 0^2 - 1^2 = 1 - 0 - 1 = 0$

정보엔트로피, 지니지수 모두 무질서도가 크면 커지는 수치!

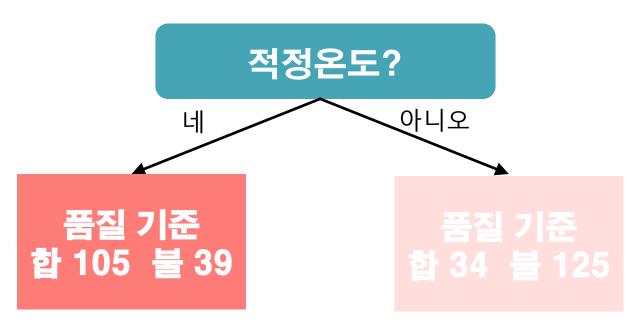
-의사 결정 나무(decision tree): 특정 기준(질문)에 따라 데이터를 구분하는 모델



공정 조건에 따른 제품 품질 기준 통과 여부 예시

적정온도	불순물 검출	적정점도	품질기준
아니오	아니오	아니오	불합격
네	네	네	합격
네	네	아니오	불합격
네	아니오	?	합격
•••	•••	•••	•••

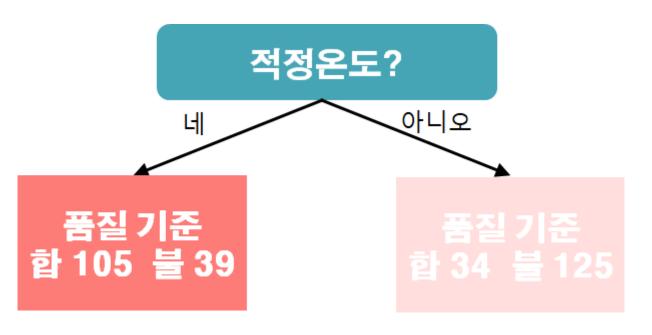
적정온도에 따른 제품 품질 기준 통과 여부



적정온도가 품질 조건을 만족시키는데 얼마나 중요한 요인인지 궁금함.

정보 엔트로피 혹은 지니 지수(Gini index)로 불순도를 최소화하는 기준 탐색!

☞ 본 강의는 지니 지수 기준으로 구성하였으나, 정보 엔트로피를 사용해도 유사한 결과 나옴.



지니 지수(Gini index) 계산법

지니 지수(Gini index)=1-(Yes의 확률)2-(No의 확률)2

지니 지수= 그룹1의 비율×그룹1의 지니 지수+ 그룹2의 비율×그룹2의 지니 지수

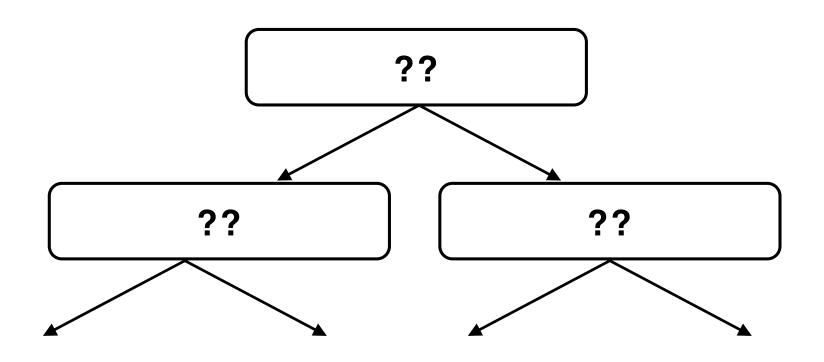
→ 지니 지수가 낮을수록 불순도를 낮추는 중요한 구분 기준!

지니 지수(Gini index) 계산 예시

적정온도 지니 지수=0.364

불순물 검출 지니 지수=0.360

적정점도 지니 지수=0.381

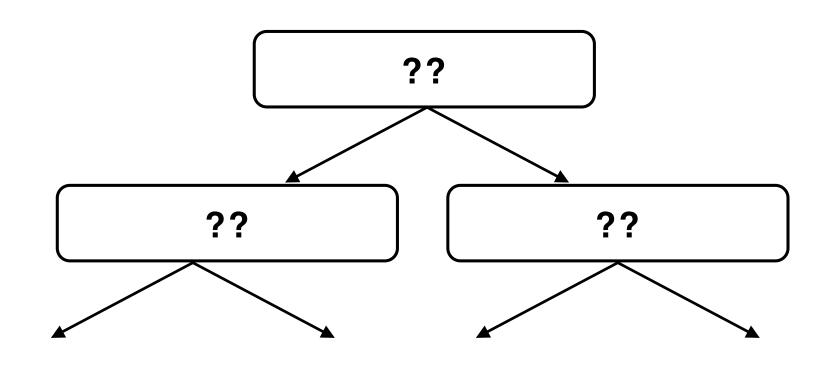


지니 지수(Gini index) 계산 예시

적정온도 지니 지수=0.364

불순물 검출 지니 지수=0.360 → 지니 지수가 가장 낮은 불순물 검출을 의사 결정 나무 상단에 배치

적정점도 지니 지수=0.381

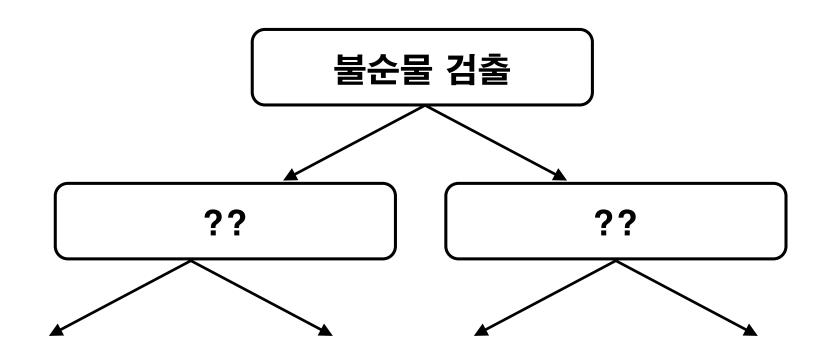


지니 지수(Gini index) 계산 예시

적정온도 지니 지수=0.364

불순물 검출 지니 지수=0.360 → 지니 지수가 가장 낮은 불순물 검출을 의사 결정 나무 상단에 배치

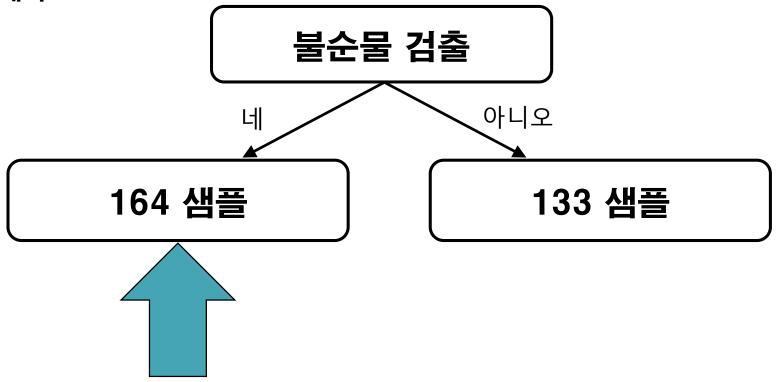
적정점도 지니 지수=0.381



의사 결정 나무 예시 불순물 검출 네 아니오 164 샘플 133 샘플

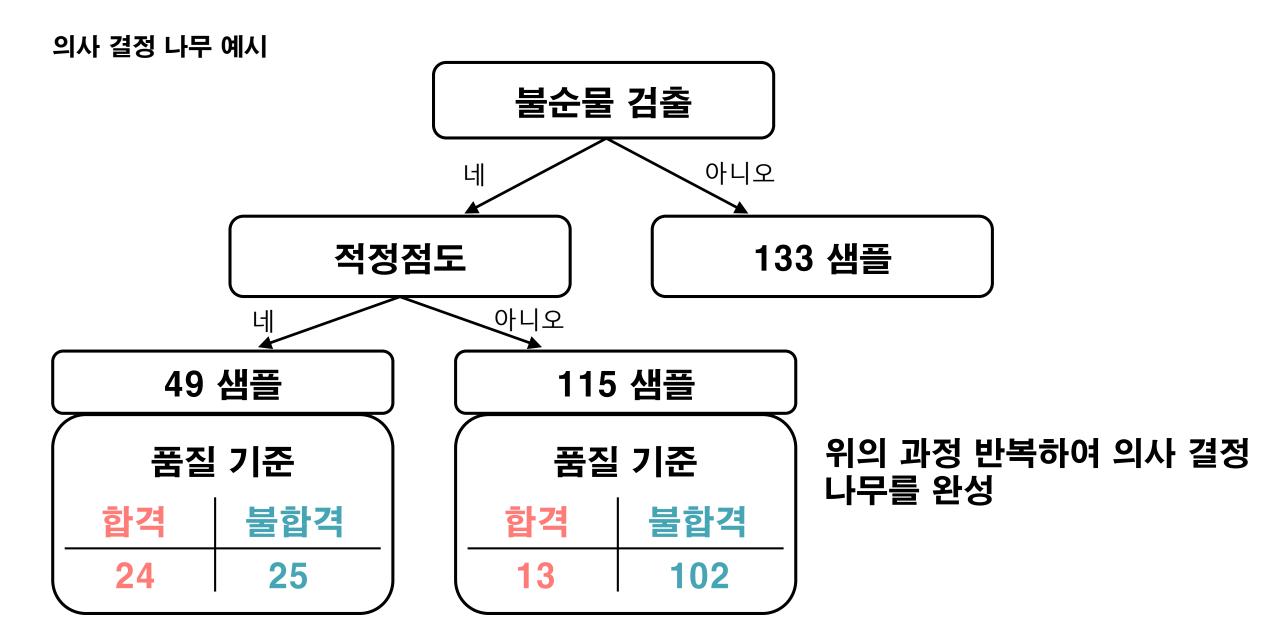
의사 결정 나무 예시 불순물 검출 아니오 네 164 샘플 133 샘플 품질 기준 품질 기준 불합격 불합격 합격 합격 37 127 33 100

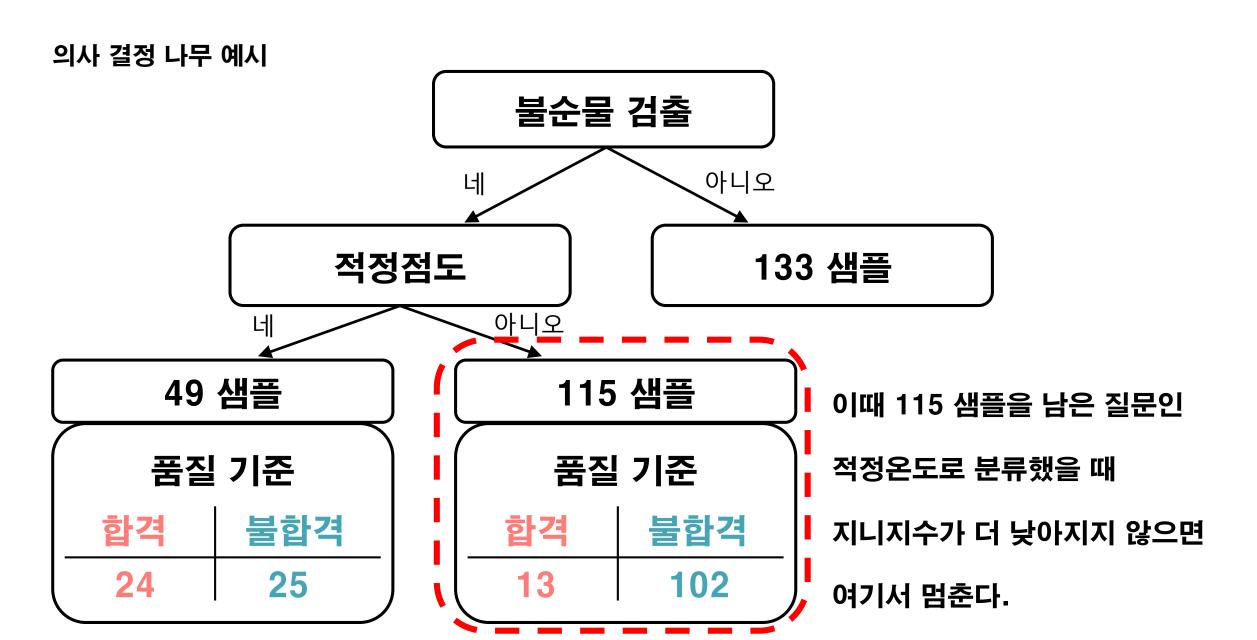
의사 결정 나무 예시



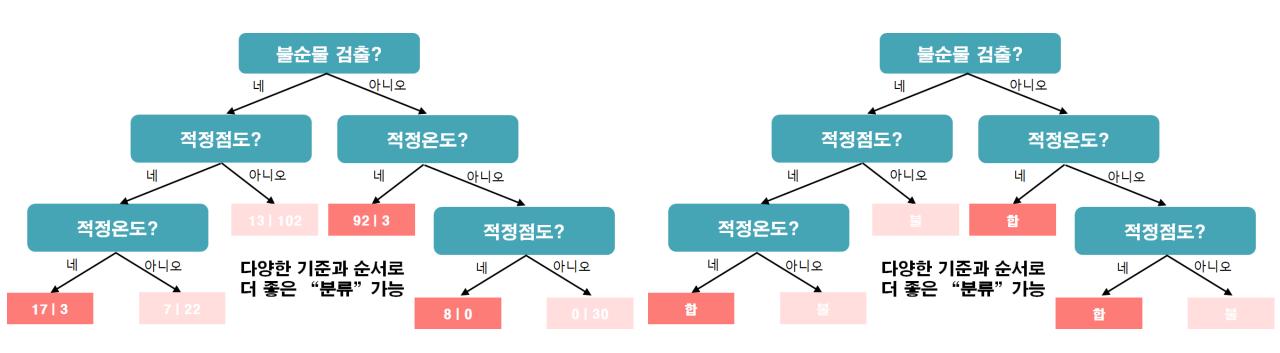
위의 샘플을 대상으로 다시 적정온도와 적정점도의 지니 지수를 계산

예시 적정온도 지니 지수=0.3 적정점도 지니 지수=0.29 〈- 지니 지수가 낮은 항목 선택



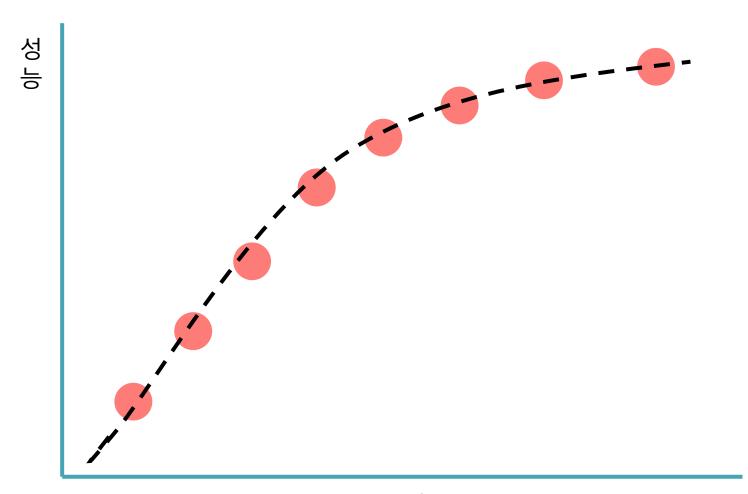


의사 결정 나무 예시



인공지능 활용 시 유의점?

적은 오차 데이터 확보 데이터 불균형 유의



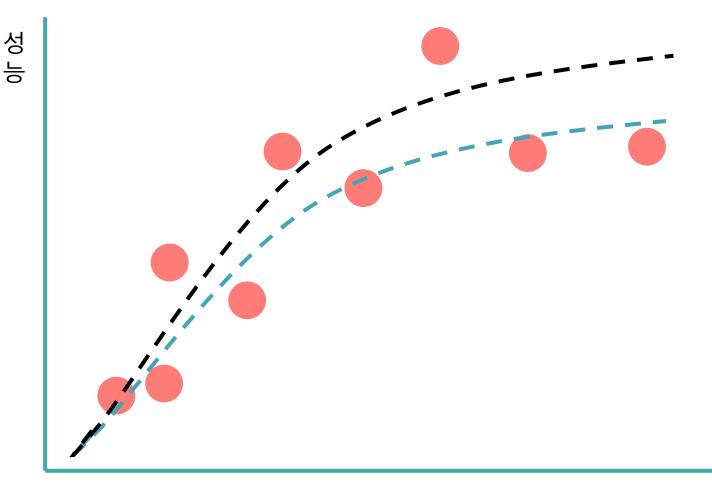
노이즈 없는

좋은 데이터:

학습된 모델의

예측력 우수

공정 온도

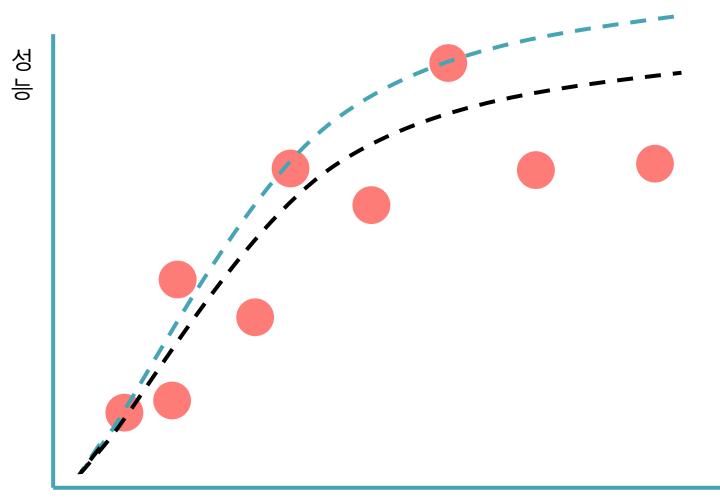


노이즈 많은 경우

학습 어려움

예측 어려움

공정 온도

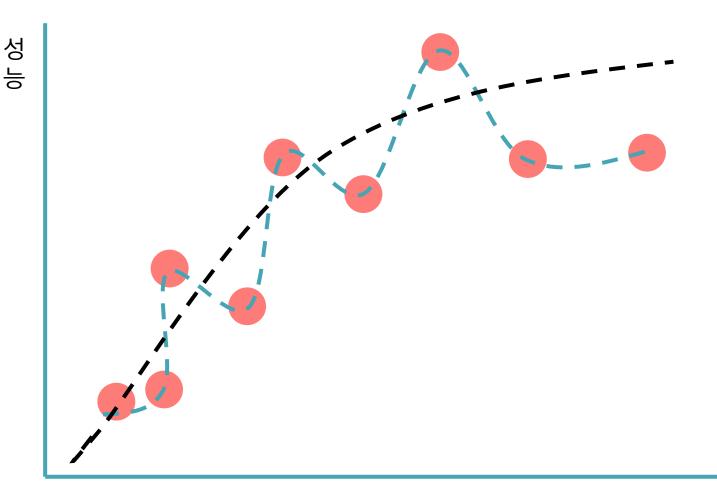


노이즈 많은 경우

학습 어려움

예측 어려움

공정 온도



노이즈 많은 경우

학습 어려움

예측 어려움

공정 온도

Andrew Ng 교수님 Comments

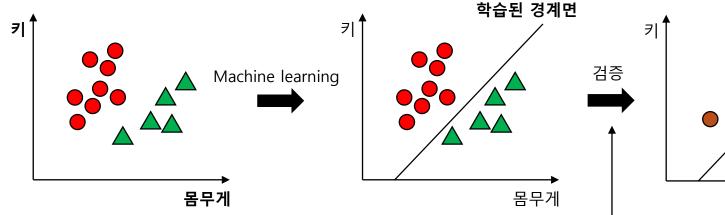


	Steel defect detection	Solar panel	Surface inspection
Baseline	76.2%	75.68%	85.05%
Model-centric	+0%	+0.04%	+0.00%
	(76.2%)	(75.72%)	(85.05%)
Data-centric	+16.9%	+3.06%	+0.4%
	(93.1%)	(78.74%)	(85.45%)

https://www.youtube.com/watch?v=06-AZXmwHjo&t=1536s Google에서 Andrew Ng MLOPS 검색

데이터 균형의 중요성

학습데이터 활용 분류



● : 건강(Train) ▲ : 고혈압(Train)

- 학습되지 않은 검증 데이터

Data #	7	몸무게	상태
1	163cm	89kg	고혈압 🛆
:	i.	÷	:
100	182cm	67kg	건강 🔵

● : 건강(Test) ▲ : 고혈압(Test)

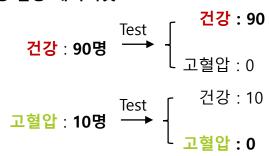
몸무게

학습된 경계면

균형 잡힌 검증 데이터셋

Accuracy =
$$\frac{40+40}{40+10+40+10}$$
 = 80%

불균형 검증 데이터셋



Accuracy =
$$\frac{90}{90+10}$$
 = 90% Better ?

분류 성능 판단

- 혼동행렬

True Positive(TP) = 1을 1로 잘 예측함

False Negative(FN) = 1을 0으로 잘못 예측함

False Positive(FP) = 0을 1로 잘못 예측함

True Negative(TN) = 0을 0으로 잘 예측함

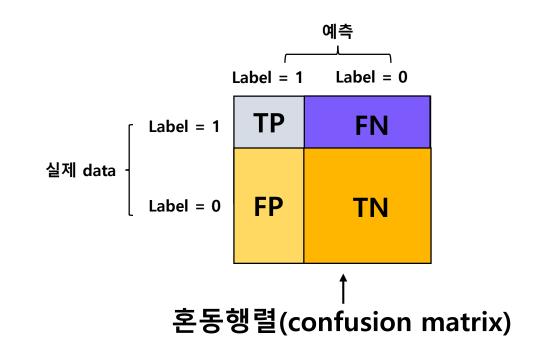
1 : Positive

예측을 뭐로 했나?

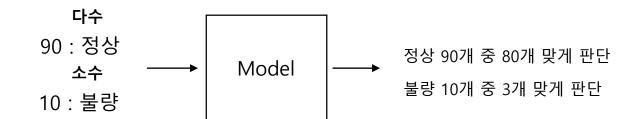
0 : Negative

False Positive

실제와 예측이 같나?



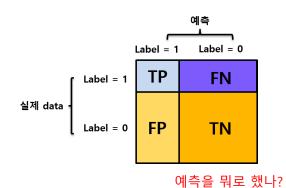
Ex) 100개의 공정데이터



혼동행렬

예측 예측 청상 실제 불량 $\begin{bmatrix} 3 & 7 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$ 실제 정상 $\begin{bmatrix} 3 & 7 \\ 10 & 80 \end{bmatrix}$

- 혼동행렬



False Positive

실제와 예측이 같나?

인공지능 예측 불량 예측 정상 모델 1번 실제 불량 실제 정상 [10 80]

정확도 =
$$\frac{83}{100}$$
 = **83**%

민감도 =
$$\frac{3}{10}$$
 = **30**%

특이도 =
$$\frac{80}{90}$$
 = 88.9%

인공지능 모델 2번 예측 불량 예측 정상 실제 불량 [10] 실제 정상

정확도 =
$$\frac{83}{100}$$
 = **83**%

민감도 =
$$\frac{3}{10}$$
 = 30% 민감도 = $\frac{10}{10}$ = 100%

특이도 =
$$\frac{80}{90}$$
 = 88.9% 특이도 = $\frac{73}{90}$ = 81.1%

정확도 =
$$\frac{91}{100}$$
 = **91**%

민감도 =
$$\frac{1}{10}$$
 = 10%

특이도 =
$$\frac{90}{90}$$
 = 100%

- 민감도(Sensitivity) or 재현율(Recall)

Sensitivity =
$$\frac{TP}{TP+FN}$$
 : 실제 1중에 1이라 예측한 비율 Specificity = $\frac{TN}{FP+TN}$: 실제 0중에 0이라 예측한 비율

- 특이도(specificity)

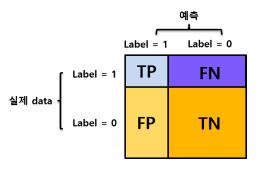
Specificity =
$$\frac{TN}{FP+TN}$$
 : 실제 0중에 0이라 예측한 비율

- 정확도 : weighted average of recall & Specificity

0의 개수 : 1의 개수
= 9 : 1
$$p = \frac{1}{9+1} = 0.1$$

분류 성능 판단

- 혼동행렬



예측을 뭐로 했나? False Positive

실제와 예측이 같나?

인공지능 계측 예측 성상 보래 보량 $\begin{bmatrix} 3 & 7 \\ \end{bmatrix}$ 실제 정상 $\begin{bmatrix} 10 & 80 \end{bmatrix}$

정확도 =
$$\frac{83}{100}$$
 = **83**%

민감도 =
$$\frac{3}{10}$$
 = 30%

특이도 =
$$\frac{80}{90}$$
 = **88.9**%

정밀도 =
$$\frac{3}{13}$$
 = **23.1**%

정확도 =
$$\frac{83}{100}$$
 = **83**%

민감도 =
$$\frac{10}{10}$$
 = **100**%

특이도 =
$$\frac{73}{90}$$
 = **81.1**%

정밀도 =
$$\frac{10}{27}$$
 = **37.0**%

$$\begin{array}{cccc} \textbf{인공지능} & \text{예측} & \text{예측} \\ \textbf{모델 3번} & \text{불량} & \text{정상} \\ & \text{실제 불량} & \begin{bmatrix} 1 & 9 \\ 0 & 90 \end{bmatrix} \end{array}$$

정확도 =
$$\frac{91}{100}$$
 = **91**%

민감도 =
$$\frac{1}{10}$$
 = 10%

특이도 =
$$\frac{90}{90}$$
 = 100%

정밀도 =
$$\frac{1}{1}$$
 = **100**%

- 민감도(Sensitivity) or 재현율(Recall)

Sensitivity = $\frac{TP}{TP+FN}$: 실제 1중에 1이라 예측한 비율

- 정밀도(precision)

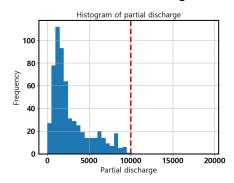
precision =
$$\frac{TP}{TP+FP}$$
 : 예측으로 1중에 실제 1인 비율

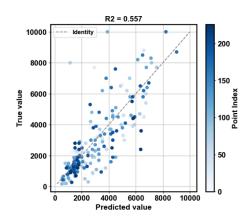
 $F1 \ Art = 2 \frac{정밀도 * 민감도}{정밀도 * 민감도}$

회귀 분석 시 데이터 불균형 보완 사례

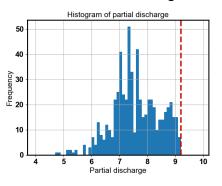


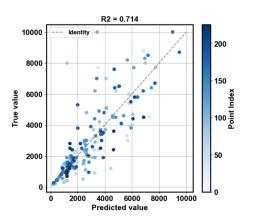
학습 데이터셋의 histogram





학습 데이터셋의 histogram





간단한 **log** 처리만으로도 데이터 분포가 더 균일해짐.

학습 성능 R² 상승!

좋은 데이터셋 구성을 위한 요소

도메인 전문가와 주요 입력변수 선정

표준화된 포맷

적은 노이즈

성공/실패 사례 모두 포함한 균형 데이터