인공신경망과 베이지안 최적화 모델을 이용한 고효율 페로브스카이트 구조 제안 방법

*김산 **김재광
성균관대학교
**saankim@skku.edu **linux@skku.edu

A Vibration Signal-based Deep Learning Model for Bearing Diagnosis

*Kim, San **Kim, Jaekwang
Sungkyunkwan University

요약

재료공학에서 머신러닝을 이용해 목적 성능에 부합하는 물질의 조성을 탐색하는 연구가 있다. 물질의 성능은 밀도범함수 계산을 통해 시뮬레이션 할 수 있지만, 계산량이 많은 문제가 있다. 본 연구를 통해 우리는 고효율 페로브스카이트 태양광전지를 만들기 위한 페로브스카이트 조성을 추천하는 심층신경망과 베이지안 최적화 모델을 제안했다. 본 연구에서 높은 전력효율이 예상되는 페로브스카이트 조성을 심층신경망과 베이지안 최적화 방법을 통해 추천하는 모델을 구현하였다. 심층신경망 모델은 주어진 조성과 실험조건에서 예상되는 전력효율을 예측해 베이지안 최적화를 통한 탐색과정에서 소요되는 실험비용을 줄인다. 베이지안 최적화 모델은 실험공간을 입력으로 받아 고효율이 예상되는 실험조건을 출력하는데, 미리 설정한 실험공간만을 탐색하기 때문에 실험적으로 가능한 출력값만을 제시할 수 있다. 본 연구는 심층신경망과 베이지안 최적화 방법을 조합해 주어진 실험공간을 탐색하는 시간과 비용을 최소화하는 방법을 제시한다.

1. 서론

태양광전지의 상용화를 위해서는 높은 가격대 전력비을 달성할 필요가 있다. 페로브스카이트 태양광전지는 기존의 실리콘 태양광전지에 비해 높은 생산효율과 낮은 단가로 주목받고 있다. 하지만 현재 연구된 대부분의 페로브스카이트 태양광전지는 실리콘 태양광전지에 비해 낮은 전력효율을 가진다[1]. 따라서 페로브스카이트 태양광전지의 효율을 높이기 위한 연구가 이어지고 있다.

페로브스카이트 태양광전지의 구성은 크게 두 가지 부분으로 나누어 볼 수 있는데, 물리적 구조와 화학적 조성이다. 물리적 구조에서는 소자의 층위 구조가 소자의 성능을 결정하는 가장 중요한 변수 중 하나다. 화학적 조성은 페로브스카이트 구성하는 물질의 조성이다. 페로브스카이트 화학식으로 보통 ABX_3 로 표현된다. A, B, X 세 종류 물질의 성분과 배합 비율이 화학적 조성이다. 이때 결정구조상의 A 위치는 적절한 크기의 유기분자로 채워질 수 있는데, 유기분자의 종류와 조성비가 다양하다.

페로브스카이트 태양광전지는 물리적 구조와 화학적 조성의 조합으로 이루어지는데, 이때 물리적 구조의 층위 구조와 종류가 다양하고, 화학적 조성의 구성 성분과 배합비율이 다양하기 때문에 페로브스카이트를 만들 수 있는 실험공간의 넓이가 대단히 넓다. 넓은 실험 공간 때문에 실험적 방법으로 고효율 페로브스카이트 조성을 탐색하는데 어려움이 따른다.

본 연구에서는 페로브스카이트 실험공간을 인공신경망과 베이지안 최적화 방법을 통해 탐색한다. 특히 심층신경망의 예상효율에 대한 베이지안 최적화 과정에서 예상효율이 실험의 목적에 부합하는 구간은 실험적으로 탐색하고, 기준에 미달하는 구간은 인공신경망을 통한 추정치로 탐색한다. 이를 통해 요구를 충족하는 실험조건의 탐색 속도를 높이고 실험 효율을 높이고자 한다.

2. 관련 연구

페로브스카이트 태양광전지에 대한 42,495 논문들과 그 연구결과를 데이터의 종류와 속성에 따라 형식화하여 제공하는 데이터베이스[2]가 있다. 페로브스카이트 태양광전지 관련 논문 데이터베이스를 통해 자연과학적이고 연속적인 실험공간을 계산가능하고 탐색가능하게 만들 수 있다.

베이지안 최적화 방법을 통해 화학 실험공간에서 최적점을 빠르게 탐색하는 연구[3]가 있다. 베이지안 최적화 방법을 통해 화학 실험과정을 최적화 할 수 있음을 실제 데이터와 화학 실험으로 보였다.

페로브스카이트의 최적 조성을 예측하기 위해 머신러닝을 활용한 연구[4]가 있다. 인공신경망이 최적 성능이 예측되는 페로브스카이트 조성을 추천해주도록 학습할 수 있다. 따라서 페로브스카이트 조성을 입력받아 성능을 예측할 수 있을 것으로 생각된다.

3. 제안 방법

본 연구에서는 높은 전력효율을 가지리라 예상되는 페로브스카이트 태양광전지의 조성을 추천한다. 이를 위해 조성에 따른 효율을 예측하는 인공신경망 모델과 인공신경망이 학습한 실험공간을 탐색하는 베이지안 최적화 모델을 조합하였다. 본 연구에서 구성한 모델을 통해 아래의 두 가지 목표를 달성하고자 했다.

첫째로, 인공신경망 회귀모델에 실험데이터를 학습시켜 효율 값을 예측한다. 인공신경망 모델을 통해 베이지안 최적화 과정에서 실제 실험에 소요되는 물리적인 비용과 시간을 줄인다. 이러한 첫 번째 목표를 위해 페로브스카이트 태양광전지의 조성에 따른 효율을 예측하는 인공신경망 모델을 구성하였다.

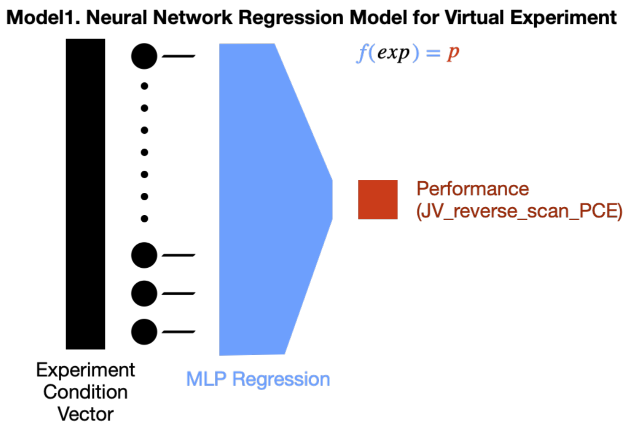

그림 1. 인공신경망 회귀 모델. 검은 색으로 표현된 실험 조건을 벡터 입력으로 받아 푸른 색으로 표현된 인공신경망 회귀모델이 붉은 색으로 표현된 효율을 예측한다.

둘째로, 인공신경망 모델이 실험 불가능한 값을 추천하는 문제를 방지한다. 데이터기반 모델에서 고려되지 못한 요인이나, 실험적 한계로 인해 모델의 계산결과에 따라 추천된 값을 실험할 수 없을 수 있다. 예를 들어, 페로브스카이트 실험에서는 다음과 같은 한계가 있을 수 있다. 추천된 조성에서 조합하는 물질이 수십가지 이상인 경우 비용과 시간적 한계로 인해 실험을 수행하지 못할 수 있다. 따라서 이러한 실험조건을 추천과정에서 배제할 필요가 있다. 베이지안 최적화 모델에서 탐색할 실험공간을 미리 설정하여 이 문제를 해결할 수 있다. 이러한 두 번째 목표를 위해, 실험 가능한 실험조건만을 탐색하는 베이지안 최적화 모델을 구성하였다.

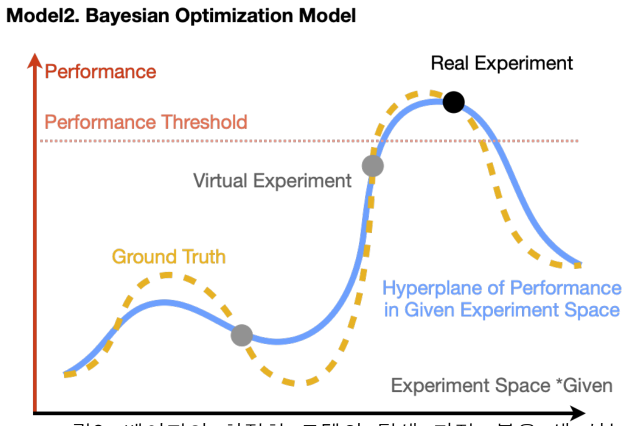

그림2. 베이지안 최적화 모델의 탐색 과정. 붉은 색 성능과 검은 색 선으로 표현된 실험 공간에서 회색과 검은색 점으로 표현된 베이지안 최적화 모델이 제안하여 탐색하는 과정이다. 노란 점선으로 표현된 실제 실험공간을 파란 실선으로 표현된 인공신경망 회귀모델이 잘 학습했다면, 베이지안 최적화가 성능 기준치를 넘는 실험을 제안할 수 있다.

목적을 달성하는 과정에는 각각 아래와 같은 효용이 있다.

첫째로, 더 단순하고 단순한 인공신경망 모델로 계산량을 줄일 수 있다. 실험조건에 따른 효율 데이터가 존재한다. 이때 고효율의 실험조건을 제안하는 추천 모델보다 주어진 실험조건에서 효율을 예상하는 회귀 모델이 더 좋은 성능을 보여줄 수 있다.

둘째로, 베이지안 최적화 모델이 과적합되기 쉬운 인공신경망 모델을 일반화 하는데 도움을 줄 수 있다. 인공신경망 모델이 학습한 실험조건-효율 초평면을 베이지안 최적화 모델이 다시 탐색하는 과정에서 관측되지 않은 영역을 가우시안 프로세스에 따라 추측하는 과정에서 인공신경망 초평면의 과적합을 완화하는 효과가 기대된다.

4. 실험 및 결과

4.1. 인공신경망 회귀

이 모델에는 실험조건의 벡터가 입력된다. 실험조건은 확률 또는 분율은 값을 그대로 사용하였으며, 불리언 0 또는 1로 인코딩, 카테고리는 원-핫 인코딩, 그리고 연속된 실수값은 노멀라이즈 하여 벡터에 포함시켰다. 벡터는 전체 실험공간을 반영하는 정해진 길이를 가지도록 하여 입력단의 각각의 노드들이 한 가지 실험조건에 대해 파악할 수 있도록 하였다. 인코딩 결과 실험조건은 1×522 차원의 벡터로 표현되었다.

이 모델의 출력으로는 소자의 효율을 의미하는 JVE_reverse_PCE 값이 설정되었다. 이 모델은 총 2층의 다층 퍼셉트론으로 구성해 학습시켰다. 각 층은 각각 37, 48 의 노드를 가진다. 입력차원이 일정하고 출력차원이 0차원의 스칼라 값이기 때문에 단순하고 기본적인 모델을 선택 했다.

4.2. 베이지안 최적화

이 모델에는 가능한 실험조건들이 입력된다 실험가능한 변수들의 조합으로 실험조건을 출력하여 실험가능한 실험변수만을 탐색하고, 불가능한 실험을 제안하지 못하도록 방지하였다. 추천의 목표함수는 첫 번째 모델과 같은 값이다 JV_reverse_PCE .

4.3. 조합

베이지안 최적화 모델의 출력으로 제안된 실험조건을 인공신경망 회귀 모델에 입력으로 사용해 페로브스카이트의 전력 효율을 예측하였다. 베이지안 최적화 과정을 반복하여 최적의 실험조건을 찾아나갔다. 이는 곧 인공신경망이 학습한 실험공간상의 초평면을 베이지안 최적화 방법을 통해 탐색하는 것과 같다.

5. 결과

인공신경망 회귀 모델이 실험조건-효율로 이뤄진 실험공간을 학습하여 실험조건에 따른 효율을 표현하는 초평면으로 회귀한다. 테스트 데이터에 대해 평균 절대값 오차 3.770%p의 성능으로 효율을 예측하였다.

베이지안 최적화 모델이 실험공간을 탐색하여 최고의 효율성이 예측되는 실험 조건을 제안한다. 이때 한 배치에 다섯 개의 실험조건을 추천한다. 실제 페로브스카이트 태양광전지를 합성하여 실험을 진행하기 위한 문턱값으로 전력효율 26%을 설정하였다. 베이지안 최적화를 통한 제안 7배치를 진행한 결과를 아래 그림에서 확인할 수 있다. 각 배치별로 다섯 개의 실험 조건이 회색 점으로 제안되었다. 각 실험 조건을 인공신경망 회귀 모델에 입력해 예상되는 효율을 얻었다. 각 배치에서 예상되는 효율이 최대인 점을 붉은 실선으로 이어 표시하였다. 7번째 배치에서 제안된 값 중 하나가 문턱값인 26%을 넘어서는 28.2%의 효율을 보여줄 것으로 예상되었다.

본 실험과정을 통해 높은 효율이 예상되는 페로브스카이트 조성을 추천할 수 있었다. 또한 그 과정에서 실제 실험과 도메인 지식의 활용을 최소화하여 효율성은 높일 수 있었다.

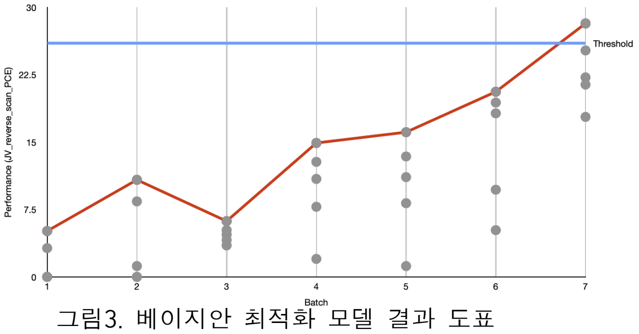

그림3. 베이지안 최적화 모델 결과 도표

Batch	1	2	3	4	5	6	7
exp. 1	**5.1**	1.2	**6.2**	12.8	1.2	5.2	17.8
exp. 2	3.2	**10.8**	3.5	7.8	8.2	9.7	21.4
exp. 3	0.0	0.2	5.2	**14.9**	13.4	18.2	22.2
exp. 4	0.0	0.1	4.1	10.9	**16.1**	**20.6**	**28.2**
exp. 5	0.0	8.4	4.7	2.0	11.1	19.4	25.2

표1. 베이지안 최적화 모델 결과 도표. 각 배치별 최대 효율이 예상되는 값을 강조해서 표시하였다

6. 결론

본 논문에서는 높은 전력효율이 예상되는 페로브스카이트 조성을 데이터 분석을 통해 추천하는 방법을 제안하였다. 특히 실제 실험데이터를 최대한 활용하는 동시에 현실적으로 불가능한 실험조건을 제안하지 않도록 모델을 구성하였다. 이를 위해서 모델을 두 부분으로 분리했다. 첫째는 실제 실험데이터를 학습해 입력된 실험조건에서 예상 전력효율을 출력하는 인공신경망 회귀모델이다. 둘째는 인공신경망 모델이 회귀학습한 실험공간에서 가능한 실험조건만을 탐색하는 베이지안 최적화 모델이다. 이상의 두 모델의 조합을 통해 베이지안 최적화 모델의 탐색과정을 위한 실험 비용을 줄여 가능한 실험조건 내에서 높은 전력효율이 기대되는 지점을 빠르게 탐색할 수 있다.

앞으로 인공신경망 모델에 입력되는 물리적, 화학적 데이터를 계산가능한 물리, 화학 모델을 통해 풍부하게 덧붙임으로서 모델의 성능을 높일 수 있다. 더 나아가서 실험 데이터가 존재하는 물질들 외의 후보물질에 대해서도 전력효율을 예측하고 조성을 제안할 수 있을 것으로 기대된다.

감사의 글

본 연구는 과학기술정보통신부 및 정보통신기획평가원의 ICT 명품인재양성 사업의 연구결과로 수행되었음 (IITP-2022-0-01821).

참고문헌

1. CHEN, Yichuan, et al. Large-area perovskite solar cells–a review of recent progress and issues. RSC advances, 2018, 8.19: 10489-10508.
2. JACOBSSON, T. Jesper, et al. An open-access database and analysis tool for perovskite solar cells based on the FAIR data principles. Nature Energy, 2022, 7.1: 107-115.
3. SHIELDS, Benjamin J., et al. Bayesian reaction optimization as a tool for chemical synthesis. Nature, 2021, 590.7844: 89-96.
4. SHE, Chenglong, et al. Machine learning-guided search for high-efficiency perovskite solar cells with doped electron transport layers. Journal of Materials Chemistry A, 2021, 9.44: 25168-25177.