J. Korean Soc. Precis. Eng., Vol. 41, No. 11, pp. 897-903

(Check for updates

인공신경망을 활용한 재료 및 설계 변수에 따른 다공성 구조체의 탄성계수 예측

Prediction of Elastic Modulus in Porous Structures Considering Materials and Design Variables Using Artificial Neural Network

함민지^{1,2}, 문인용^{1,#} Min Ji Ham^{1,2} and In Yong Moon^{1,#}

1 한국생산기술연구원 기능성소재부품그룹 (Functional Materials and Components Group, Korea Institute of Industrial Technology) 2 숭실대학교 기계공학부 (School of Mechanical Engineering, Soongsil University) # Corresponding Author / E-mail: mooniy085@kitech.re.kr, TEL: +82-33-649-4044 ORCID: 0000-0002-2279-1144

> KEYWORDS: Additive manufacturing (적층제조), Lattice structures (격자구조), Elastic modulus (탄성계수), Artificial neural network (인공신경망), Porous structures (다공성 구조)

Predicting elastic modulus of a porous structure is essential for applications in aerospace, biomedical, and structural engineering. Traditional methods often struggle to capture complex relationships between material properties, design variables, and mechanical behavior. This study employed artificial neural networks (ANNs) to predict the elastic modulus of a porous structure based on various material and design parameters. An ANN model was trained on a dataset generated via finite element analysis (FEA) simulations, covering diverse combinations of material properties and design variables (e.g., porosity, structure types). The model demonstrated high accuracy in predicting the elastic modulus on a separate test dataset. Key findings included identification of significant design variables influencing the elastic modulus and the ANN model's ability to generalize predictions to new data. This approach showcases that ANN is a powerful tool for designing and optimizing porous structures, providing reliable mechanical property predictions without extensive experimental testing or complex simulations. The proposed method can enhance design efficiency and pave the way for developing advanced materials with tailored mechanical properties. Future research will extend the model to predict other mechanical properties and incorporate experimental validation to verify ANN predictions.

Manuscript received: August 13, 2024 / Revised: September 5, 2024 / Accepted: September 6, 2024

1. 서론

다공성 구조체는 가법고 높은 에너지 흡수 능력과 같은 특성 으로 인해 항공우주, 의료, 구조 공학 등 다양한 분야에서 중요 한 역할을 하고 있다[1,2]. 이러한 다공성 구조체의 기계적 성능, 특히 탄성계수는 재료의 특성과 설계 변수에 따라 크게 달라진 다[3]. 따라서 다공성 구조의 설계 변수에 따른 기계적 물성을 계산 및 예측하고자 하는 많은 시도가 이루어져 왔다[4-7]. 하지 만 전통적인 방법으로는 재료 특성과 설계 변수 간의 복잡한 상 관관계를 완전히 해석하는 데 한계가 있으며, 이는 정확한 탄성 계수 예측을 어렵게 만드는 요인으로 작용하고 있다.

최근 인공신경망(Artificial Neural Networks, ANNs)이 복잡 한 비선형 시스템의 예측 및 분석에 있어 강력한 도구로 부상하 고 있다. 인공신경망은 대규모 데이터로부터 학습하여 다양한 변수 간의 복잡한 관계를 모델링할 수 있으며, 이를 통해 전통 적인 방법보다 더 높은 예측 정확도를 제공할 수 있음이 여러 연구 결과를 통해 검증되어 왔다[8-11].

본 연구에서는 재료의 종류 및 설계 변수(예: 체적 분율, 구조 의 종류)를 바탕으로 다공성 구조체의 탄성계수를 예측하기 위한 인공신경망 모델을 개발하고자 하였다. 공학 분야에서의

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (http://creativecommons.org/licenses/ by-nc/3.0) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Copyright © The Korean Society for Precision Engineering

인공지능 연구에서 지속적으로 문제시되는 데이터 부족 문제를 해결하기 위해 유한요소해석(Finite Element Analysis, FEA) 시 뮬레이션을 통하여 설계 변수-탄성계수 간의 커플링 된 대량의 데이터셋을 확보하였으며, 이를 활용하여 ANN 모델을 학습시 키고, 별도의 테스트 데이터셋을 통해 모델의 성능을 평가하였 다. 그 결과, 재료 종류와 설계 변수가 탄성계수에 미치는 영향 을 면밀히 분석할 수 있었으며, 인공신경망 모델의 예측 능력을 검증하여 실제 설계에 적용 가능한 수준의 예측 정확도를 확보 할 수 있음을 확인하였다.

2. 실험방법

2.1 유한요소해석 기반 탄성계수 데이터 구축

인공신경망 학습에 필요한 설계 변수-탄성계수 데이터 구축 을 위해 유한요소해석을 기반으로 설계 변수에 따른 탄성계수 를 계산하였다. 유한요소해석은 ANSYS Workbench의 Material Designer 모듈을 통해 수행하였다. 연구에 적용된 다공성 구조 체는 Fig. 1과 같이 격자(Lattice) 및 TPMS (Triply Periodic Minimal Surfaces)로 이루어진 6가지 종류를 사용하였으며, 각 각의 다공성 구조체는 5 mm 크기의 단위 셀(Unit Cell)로 설계 및 메쉬화를 수행한 뒤 탄성계수 계산에 적용되었다. 각 구조체 의 체적분율(Volume Fraction, VF)은 0.2-0.8(0.1 간격)로 다양 하게 하여 유한요소해석을 수행하였다. 다만, TPMS SchwarzP 형상의 경우, 다른 구조에 비해 체적 분율이 증가할수록 표면적 과 곡률이 기하학적으로 복잡하게 변하면서 해석 도중 수렴문 제를 유발하여 0.2-0.6으로 해석을 진행하였다. 6가지의 구조체 와 체적분율 범위, 6종류의 재료를 조합하여 총 240개의 데이터 를 유한요소해석을 통해 생성하였다. 이후 인공신경망 학습을 위한 충분한 데이터셋을 확보하기 위해 주어진 데이터로부터 2 차 다항식 적합(Polynomial Fitting)을 수행한 뒤 체적 분율 범위 에서 100개의 데이터를 추출하여 총 3,636개의 데이터를 얻을 수 있었다.

준비된 데이터는 학습, 테스트, 검증 데이터로 각각 70, 15, 15%씩 배분하여 인공신경망 최적화를 위한 훈련 및 검증에 사용하였다.

유한요소해석에 적용된 재료물성은 ANSYS Material Library 에서 제공하는 6개의 대표적인 적층 제조 재료의 물성을 사용 하였으며 사용된 재료 및 이에 대한 탄성계수 값을 Table 1에 나타내었다.

2.2 인공신경망 모델 및 평가 방법

Fig. 2(a)는 본 연구에 사용된 인공신경망의 구조를 나타내고 있다. 인공신경망은 크게 입력층(Input Layer), 은닉층(Hidden Layers), 그리고 출력층(Output Layer)으로 구분되어 있다. 입력층 은 총 8개의 노드(Nodes)로 이루어져 있으며, 이 중 6개는 다공성 구조체의 종류를 구분하는 원-핫 인코딩(One-hot Encoding) 값이



Fig. 1 Schematic of porous structures for (a) octet, (b) double pyramid, (c) cubic with enter supports, (d) diamond, (e) TPMS Gyroid, and (f) TPMS SchwarzP

Table 1 Materials and their elastic modulus

Materials	Elastic modulus			
316 Stainless steels	195			
AlSi10Mg	70			
Co-Cr	200			
Inconel 625	1,262			
Inconel 718	165			
Ti-6Al-4V	107			



Fig. 2 Schematic depicting (a) architecture of the ANN and (b) onehot encoding for porous structures



Fig. 3 Results of elastic modulus calculation using FE-simulation

(Fig. 2(b)), 나머지 2개는 체적 분율과 재료의 탄성계수 값이 입 력되도록 구성하였다.

은닉층의 경우 다양한 층수(3-8 Layers) 및 노드 수(4-128 Nodes)를 적용하여 학습을 수행하였으며, 그 결과를 분석하여 최 적의 인공신경망 구조를 얻고자 하였다. 여기서 모든 은닉층은 동 일한 노드 수를 갖도록 설계하였음을 알려 둔다. 출력층은 다공성 구조체의 탄성계수 값에 대응하는 하나의 노드로 구성되어 있다.

인공신경망에 적용되는 재료 및 다공성 구조체의 탄성계수 값 은 아래 수식을 통해 0.1에서 0.9 사이의 정규화(Normalization)된 값으로 변환하여 사용하였다. 이는 모든 데이터의 범위를 균일 하게 하여 일부 데이터가 모델 학습에 과도한 중요도를 갖게 하 는 것을 방지하기 위함이다.

$$x' = 0.1 + 0.8 \left(\frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}} \right)$$
(1)

여기서, x', X, X_{min}, 및 X_{max}는 각각 정규화된 값, 실제값, 데이 터 최솟값 및 데이터 최댓값을 의미한다.

각각의 모든 완전 연결층(Fully Connected Layer) 뒤에는 Batch Normalization과 ReLu 활성화 함수를 추가하고, Huber 손실 함수 및 Adam Optimizer을 사용하여 최적화를 수행하였 다. ReLu 활성화 함수 이후 Batch Normalization을 적용함으로 써, 활성화된 데이터의 분포를 정규화하여 과도한 가중치 변동 을 방지하고 학습 안정성을 높일 수 있었으며, 이 방식은 모델 이 비선형성을 효과적으로 학습하면서도 데이터의 분포를 일 정하게 유지하도록 하여, 기울기 소실 문제를 완화하였다. 또한 학습의 반복적 수행에도 더 이상의 손실함수의 향상이 없을 때 학습을 중지시키는 조기 종료 콜백 함수를 추가하여 모델 학습 의 과적합(Over Fitting)을 방지하였다. 학습은 32 미니배치 (Mini-Batch)로 10,000번의 Epoch동안 반복 수행되게 설정하였 으며, GEFORCE RTX A6000 GPU (NVIDIA, Santa Clara, CA, USA)을 사용하여 훈련을 수행하였다.

학습이 완료된 인공신경망은 아래의 AE (Average Error)와 AARE (Average Absolute Relative Error)값을 계산하여 예측 성 능을 평가하였다.

$$AE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |E_i - P_i| \quad (2)$$
$$AARE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{E_i - P_i}{E_i} \right| \times 100 \quad (3)$$

여기서 *E_i*, *P_i*, 및 *n*은 각각 다항식 적합 곡선으로부터 얻은 탄성계수, 인공신경망 모델의 예측 탄성계수, 그리고 평가에 사 용된 데이터의 수를 의미한다. AE와 AARE는 각각 모델의 예 측값과 실제값 간의 평균 및 상대오차를 나타내며, 이를 통해 모델의 성능을 객관적으로 평가하고자 하였다.

3. 결과 및 고찰

3.1 유한요소해석 결과

6가지 다공성 구조체의 재료 및 체적 분율에 따른 탄성계수에 대한 유한요소해석 결과를 Fig. 3에 나타내었다. 그림에서 알 수 있듯이, 모든 구조와 재료의 탄성계수는 체적 분율이 증가함에

Cases	No. layers	No. nodes	AE [GPa]	AARE [%]	Cases	No. layers	No. nodes	AE [GPa]	AARE [%]
1	3	4	4.35	21.50	19	- 6	4	2.01	12.16
2		8	2.63	10.28	20		8	4.53	23.18
3		16	3.10	14.00	21		16	2.84	11.18
4		32	3.29	21.88	22		32	2.83	15.83
5		64	2.96	16.11	23		64	3.97	22.23
6		128	7.75	44.96	24		128	5.39	28.15
7	 4 	4	3.31	14.40	25	- - - 7 -	4	5.68	26.25
8		8	2.26	12.27	26		8	1.66	8.64
9		16	2.64	11.25	27		16	2.07	12.23
10		32	3.26	17.90	28		32	2.82	15.17
11		64	3.12	17.47	29		64	2.70	18.40
12		128	6.07	34.09	30		128	7.96	43.96
13	5 5	4	1.39	6.69	31	- - - 8 -	4	3.72	21.48
14		8	3.77	17.16	32		8	3.44	15.54
15		16	2.57	13.65	33		16	1.93	7.61
16		32	3.74	22.89	34		32	2.84	17.90
17		64	3.15	13.31	35		64	3.53	18.58
18		128	6.14	34.02	36		128	5.82	32.51

Table 2 Results of ANN prediction with respect to the number of layers and nodes



Fig. 4 Graphs showing the results of AE and AARE calculation according to (a) the number of hidden layers and (b) the number of nodes

따라 비선형 적으로 증가하는 경향을 보였으며, 재료의 탄성계 수가 높아짐에 따라 다공성 구조체의 탄성계수 또한 높아지는 것을 확인할 수 있다. 또한 다항식 적합 곡선이 FEA결과 (Symbol 데이터)와 정확히 교차하는 것을 확인할 수 있으며, 이 를 통해 다항식 적합이 해석결과를 충분히 반영하는 곡선을 얻 을 수 있음을 확인하였다. 2.1장에서 언급한 바와 같이 인공신 경망 학습에 사용되는 데이터는 위 다항식 적합 곡선으로부터 얻은 값임을 알려 둔다.

3.2 ANN 학습 결과

인공신경망 모델의 구조 최적화를 위해 다양한 층수와 노드 수의 은닉층을 갖는 여러 모델을 학습시켰으며, 그 전체 결과를 Table 2에 나타내었다. 모델 성능에 대한 검토 결과, 5개의 층수 와 4개의 노드를 갖는 모델이 가장 높은 정확도를 보임을 확인 하였다. (AE: 1.39 GPa, AARE: 6.69%).

은닉층의 층수와 노드 수가 인공신경망 예측 성능에 미치는 영향을 직관적으로 분석하기 위해 인공신경망 구조에 따른 예 측 성능 변화 추이를 Fig. 4에 나타내었다. 층수에 따른 예측 성 능의 경우, 유의미한 경향성은 나타나지 않았으며 AE는 6개의 층수에서, AARE는 5개의 층수에서 가장 좋은 성능을 보였다.

노드 수는 층수에 비해 모델의 예측 성능에 보다 많은 영향 을 미치는 것으로 나타났다. 초기 4 노드에서 16 노드까지는 비 교적 균일한 성능을 보였지만, 이후 노드가 128까지 증가됨에 따라 AARE가 급격히 악화됨이 확인되었다. 이는 과도한 노드 수가 입력데이터의 중요도를 지나치게 희석시켜 예측 능력을

0.8

0.8

0.8



Fig. 5 Comparison between ANN prediction and training data

저하시킨 것으로 판단된다.

Fig. 5는 인공신경망으로부터 예측된 탄성계수 값을 다항식 적합 곡선으로부터 얻은 학습 데이터와 비교한 결과를 나타내 고 있다. 전반적으로 인공신경망 모델이 모든 구조체 종류 및 재료에서의 체적 분율에 따른 탄성계수 변화 경향을 잘 모사하 고 있음을 확인할 수 있다. 이는 해당 모델이 재료 특성 및 설계 변수와 탄성계수 간의 상관관계를 정확히 학습하였음을 의미한 다. 하지만 TMPS Gyroid의 경우, 모든 재료 종류에서 학습 데 이터에 비해 높은 탄성계수를 보이며 다른 다공성 구조에 비하 여 예측 정확도가 낮았다. 이러한 특징은 TPMS Gyroid 구조 가 다른 5가지 구조와는 다른 설계 변수-탄성계수 상관관계 특 성을 갖고 있으며 이에 따라 일반화된 인공신경망이 정확한 예 측을 하지 못한 것이라 판단된다. 실제로 TPMS Gyroid구조는



Fig. 6 Correlation relationship between the expected and predicted values using optimized ANN model



Fig. 7 Results of elastic modulus prediction for virtual material according to structure types and volume fraction

반복되는 곡면과 높은 표면적 대비 낮은 부피 분율을 가지는 구 조이기 때문에 복잡성이 높으며 이로 인해 다른 구조체와는 다 른 상관관계 특성을 가질 가능성이 있다고 판단된다[12].

Fig. 6은 탄성계수의 수준에 따른 기댓값과 예측값 사이의 연 관성 그래프를 나타내고 있다. 전체 범위에서 인공신경망은 기댓 값 대비 높은 예측값을 나타냈지만 기준선(적색선)에서 크게 벗 어나지 않는 결과를 보여주었다. 또한 탄성계수의 수준에 따른 예측 성능의 차이는 존재하지 않았다. 따라서 훈련된 인공신경망 은 탄성계수 예측에 효과적으로 활용할 수 있음을 알 수 있다.

본 연구를 통해 개발된 탄성계수 예측을 위한 인공신경망을 새 로운 재료에 대해 설계 변수에 따른 탄성계수 예측에 사용할 수 있다면 활용성 측면에서의 강점이 되리라는 것은 의문의 여지가 없다. 따라서 이러한 기능을 확인하기 위하여 탄성계수 138.3 GPa을 갖는 가상의 재료에 대해 구조체의 종류 및 체적 분율에 따른 탄성계수 예측을 수행하였으며 그 결과를 Fig. 7에 나타내 었다. 그림에서 알 수 있듯이 가상의 재료에 대한 예측값(적색 별표)은 Inconel 625(162 GPa)과 Ti-6AI-4V(107 GPa) 사이에 위치함을 알 수 있다. 가상 재료의 탄성계수가 138.3 GPa이라는 것을 감안하였을 때 충분히 합리적인 결과라고 판단되며, 체적 분율의 증가에 따른 탄성계수 증가 추세도 다른 재료와 같이 비 선형적으로 증가되는 경향을 모사함을 확인할 수 있다. 따라서 본 연구를 통해 개발된 인공신경망은 훈련에 적용된 재료뿐만 아니라 새로운 재료에 대한 다공성 구조 설계에도 유용하게 활 용될 수 있는 도구임을 확인할 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 인공신경망을 활용하여 다양한 재료 및 설계 변수를 고려한 다공성 구조체의 탄성계수를 예측하는 모델을 개발하였다. 유한요소해석 시뮬레이션을 통해 생성된 대규모의 데이터셋을 바탕으로 인공신경망 모델을 학습시키고, 그 과정에 서 최적의 모델 구조를 제안하였으며, 이를 통해 전통적인 방법 에 비해 더욱 정확하고 신뢰성 있는 예측이 가능함을 확인하였 다. 학습된 인공신경망은 학습에 사용되지 않은 새로운 데이터 에 대해서도 일반화된 예측 능력을 보여주었으며, 이는 다양한 다공성 구조 설계에 적용 가능함을 시사한다. 모델의 활용성 측 면에서는 새로운 재료에 대해서도 추가적인 유한요소해석이나 인공신경망의 학습 없이도 구조체의 탄성계수를 신뢰성 있게 예측 가능함을 보였으며 이를 통해 설계 효율성을 크게 향상시 킬 수 있음을 확인하였다.

ACKNOWLEDGEMENT

본 논문은 한국생산기술연구원 기업수요기반생산기술 실용 화사업(No. JA240011)의 지원을 받아 수행된 연구 결과입니다

REFERENCES

- Wang, X., Xu, S., Zhou, S., Xu, W., Leary, M., Choong, P., Qian, M., Brandt, M., Xie, Y. M., (2016), Topological design and additive manufacturing of porous metals for bone scaffolds and orthopaedic implants: A review, Biomaterials, 83, 127-141.
- Egan, P. F., Gonella, V. C., Engensperger, M., Ferguson, S. J., Shea, K., (2017), Computationally designed lattices with tuned properties for tissue engineering using 3D printing, PloS one, 12(8), e0182902.
- Moon, I. Y., Song, Y., (2023), Design of lattice structure for controlling elastic modulus in metal additive manufacturing, Journal of the Korean Crystal Growth and Crystal Technology, 33(6), 276-281.
- Karamooz Ravari, M. R., Kadkhodaei, M., (2015), A computationally efficient modeling approach for predicting mechanical behavior of cellular lattice structures, Journal of Materials Engineering and Performance, 24, 245-252.
- Alwattar, T. A., Mian, A., (2019), Development of an elastic material model for BCC lattice cell structures using finite element analysis and neural networks approaches, Journal of Composites Science, 3(2), 33.
- Peng, C., Tran, P., Nguyen-Xuan, H., Ferreira, A. J. M., (2020), Mechanical performance and fatigue life prediction of lattice structures: Parametric computational approach, Composite Structures, 235, 111821.

November 2024 / 903

- Ravari, M. K., Kadkhodaei, M., Badrossamay, M., Rezaei, R., (2014), Numerical investigation on mechanical properties of cellular lattice structures fabricated by fused deposition modeling, International Journal of Mechanical Sciences, 88, 154-161.
- Moon, I. Y., Jeong, H. W., Lee, H. W., Kim, S.-J., Oh, Y.-S., Jung, J., Oh, S., Kang, S.-H., (2022), Predicting high temperature flow stress of nickel alloy A230 based on an artificial neural network, Metals, 12(2), 223
- Kim, B., Ha, S. H., (2023), Simulation-based material property analysis of 3D woven materials using artificial neural network, Journal of the Computational Structural Engineering Institute of Korea, 36(4), 259-264.
- Liu, X., Yan, Z., Zhong, Z., (2021), Predicting elastic modulus of porous La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O_{3-δ} cathodes from microstructures via FEM and deep learning, International Journal of Hydrogen Energy, 46(42), 22079-22091.
- 11. Maurizi, M., Gao, C., Berto, F., (2022), Predicting stress, strain and deformation fields in materials and structures with graph neural networks, Scientific Reports, 12(1), 21834.
- Zhang, J., Zhao, J., Rong, Q., Yu, W., Li, X., Misra, R. D. K., (2022), Machine learning guided prediction of mechanical properties of TPMS structures based on finite element simulation for biomedical titanium, Materials Technology, 37(1), 1-8.



Min Ji Ham

Researcher in the Functional Materials and Component Group, Korea Institute of Industrial Technology. Her research interest is DfAM (Design for Additive Manufacturing) and AI (artificial intelligence) modeling. E-mail: ham9081@kitech.re.kr



In Yong Moon

Senior researcher in the Functional Materials and Component Group, Korea Institute of Industrial Technology. His research interest is process design related with FE-simulation and industrial AI (artificial intelligence) application.

E-mail: mooniy085@kitech.re.kr