

굳지 않은 시멘트 페이스트의 물-시멘트비 예측을 위한 ANN을 활용한 EIS 기법 해석

Analysis of EIS Method using ANN for Estimating Water-cement Ratio of Unhardened Cementitious Materials

박주혜*, 송호민**, 최하진***†

Joohye Park*, Homin Song** and Hajin Choi***†

초 록 건설현장에 가장 많이 사용되는 시멘트계 재료에 있어서 물-시멘트비는 강도에 가장 큰 영향을 미치는 중요변수로서 그 확인이 필수적이다. 본 연구에서는 굳지 않은 시멘트 재료의 물-시멘트비 측정을 목적으로, 전기화학적 임피던스 분광법을 사용하였다. 또한 임피던스 분광법의 분석에 있어서 주관적인 등가회로의 설정을 통한 임의적 해석의 단점을 보완하기 위하여 인공신경망을 통하여 학습하였다. 구체적으로 2전극, 3전극의 두 가지 시스템을 구성하여 실험 방법 및 측정 결과를 비교 분석하였다. 총 620개의 데이터가 계속되었으며 측정된 임피던스 데이터와 배합된 물-시멘트비를 입력 파라미터로 인공신경망을 학습한 결과, 3전극, 2전극에서 각각 77%, 75%의 정확도로 물-시멘트비를 예측할 수 있었다. 해당 결과를 통하여 임피던스 분광법 실험데이터 해석에 있어서 주관성을 배제한 정량적인 결과를 얻을 수 있음을 확인하였다. 또한 추후 연구를 통하여 시멘트계 재료의 물-시멘트비를 현장에서 확인할 수 있는 최적 실험 셋업을 연구하고자 한다.

주요용어: 시멘트계 재료, 물-시멘트비, 전기화학적 임피던스 분광법, 인공신경망

Abstract Water-cement ratio is the most important parameter in cementitious materials because it plays a critical role in their strength. In this study, the water-cement ratio of fresh cement paste was estimated using electrochemical impedance spectroscopy (EIS) and an artificial neural network (ANN). The ANN was used to overcome the subjective EIS-based analysis in terms of, for instance, the assumption of equivalent circuits. Different testing set-ups, including 2- and 3-electrode configurations, were compared in terms of accuracy and efficiency. A total of 620 data items were employed for training. The water-cement ratio was estimated with an accuracy of 77% and 75% for the 3- and 2-electrode systems, respectively. The results demonstrate that the ANN significantly improves EIS-based analysis without subjective decision by operators and results in quantitative evaluation. Efficient testing set-ups will be investigated for field applications in future research.

Keywords: Cementitious Material, Water-cement Ratio, Electrochemical Impedance Spectroscopy, Artificial Neural Network

1. 서 론

콘크리트는 가장 많이 사용되는 대표적인 건설 재료로써 현장에 굳지 않은 상태로 도착하여 거푸집에 타설과정을 거쳐 목표 강도에 도달하게

된다. 콘크리트는 물, 시멘트, 다양한 크기의 골재뿐만 아니라 여러 가지 산업부산물이 첨가된 복합재료이다. 이 중 물은 시멘트와의 수화반응을 통해 화학적으로 결합하고, 응결, 경화 과정을 거쳐 하중을 견딜 수 있는 일정 강도를 확보하게

[Received: August 20, 2022, Revised: August 26, 2022, Accepted: August 29, 2022] *승실대학교 건축학과 석사과정 (Master's Course, School of architecture, Soongsil University), **가천대학교 토목환경공학과 교수(Professor, Department of Civil and Environmental Engineering, Gachon University), ***승실대학교 건축학부 교수(Professor, School of architecture, Soongsil University),

† Corresponding Author: hjchoi@ssu.ac.kr

© 2022, The Korean Society for Nondestructive Testing

된다. 대부분의 골재들은 물과 시멘트의 혼합물인 시멘트 페이스트 안에서 체적을 높이는 효과를 담당하며, 산업부산물인 혼화재 및 화학첨가물들은 수화반응에 영향을 주어 상황에 맞게 반응성을 조절하도록 사용된다. 건설현장에서 가장 중요한 강도의 발현은 여러 영향을 받지만 물과 시멘트의 결합이 그 기초가 되며, 배합비에서 물-시멘트비는 강도를 예측하는 매우 중요한 지표이다. 하지만 모든 재료가 배합된 상태로 배달되는 건설현장의 특징상 물-시멘트비에 대한 정보는 공급자가 제공하는 정보에 의존하는 실정이다. 재료의 물성을 측정하기 위한 한 방법으로 전자기파 기반 반사 신호 해석 기술(time domain reflectometer, frequency domain reflectometer)을 예로 들 수 있는데 이는 계측된 유전율로부터 수분함량을 도출한다. 그러나 경우에 따라 적절한 보정이 요구되며, 수분 함량을 최종 도출하므로 물-시멘트비 계측을 위한 추가 계산이 필요하다.

따라서, 당초 설계된 배합 비율을 준수하였는지 파악할 수 있는 기술이 필요하다. 전기화학적 임피던스 분광법(electrochemical impedance spectroscopy, EIS)은 교류전압을 인가하여 대상의 전도성 이온에 기반한 전도성 흐름을 통해 응답된 신호를 해석하는 기술로써, 재료의 성분과 내부 반응을 확인할 수 있다. 관련된 선행연구 중, McCARTER (1994)는 응답된 EIS 반응을 분석하여 시멘트 페이스트에서부터 콘크리트의 다양한 배합과 수화반응에 대해 분석하였다[1]. 또한 Song (2000)은 콘크리트를 미세구조 관점으로 분석하여 전기적 흐름을 구분하여 등가회로를 이론적으로 모델링하였다[2]. Shin et al.(2014)는 콘크리트의 응결에 따른 EIS를 측정하고, 시멘트 페이스트에 대한 기존 등가회로 모델을 바탕으로 콘크리트에 대한 등가회로를 모델링하였다[3]. 이렇듯 시멘트계 재료 분야에서 EIS 기술은 초기 상태의 콘크리트 정보를 알 수 있는 기술로 활용되어 왔다.

EIS를 통하여 계측한 응답 신호는 교류 전압 혹은 전류로써 일반적으로 주파수를 변화하면서 발생하는 신호의 진폭, 위상각의 기초 정보로 이루어져 있다. EIS 분석에 있어서 응답 신호를 해석하는 가장 대표적인 방법은 등가회로를 피팅(fitting)하는 것이다. 구체적으로 대상 재료의 특성 및 임피던스 스펙트럼을 모사한 등가의 회로를 모델링하고, 계측된 응답신호와 동일하게 회

로를 구성하는 저항 등의 회로 파라미터 값을 추출하는 과정이다. 등가회로를 통한 해석은 계측한 전기 신호를 재료의 특성에 입각한 물리적 해석이 가능하다는 장점이 있는 반면, 회로 설정에 연구자의 주관적 견해가 들어가는 단점이 존재한다. 특히 가정된 등가회로와 계측신호간의 피팅과정은 일종의 최적화(optimization)과정으로 연구자의 주관적 판단에 의거하여 그 적합도가 판단된다.

시멘트계 재료에 대한 EIS 연구에도 다양한 등가회로 모델이 제안되었다[4]. 예를 들어 가장 간단한 시멘트 재료인 시멘트 페이스트를 벌크(bulk)와 전극 반응만으로 구분하는, 간단하지만 핵심적인 거동을 설명하는 Randles 모델이 있다. 이외에 골재가 추가된 모르타르 이상의 재료를 설명하거나, 수화 등 시간 변화에 대한 시멘트 재료 거동을 설명하기 위해 회로 요소를 더하고 연결을 다르게 하여 회로를 구체화할 수 있다. 이와 같이 시멘트계 재료에 대하여 제안된 등가회로는 총 20가지가 있으며, 각 연구의 목적에 따라 연구자의 주관적 견해가 포함되어 있다[4].

본 논문에서는 이러한 EIS 해석의 주관적 견해를 극복하기 위하여 등가회로 적용 없이, 응답신호 기반의 데이터 추출을 진행하고 인공신경망(artificial neural network, ANN)을 통하여 물-시멘트비와의 상관관계를 도출하고자 하였다. 이와 같은 새로운 해석은 대상 재료에 대한 연구자의 가정으로 인한 회로 요소가 아닌 계측된 데이터 중심 분석을 통해, 주관적 해석으로 인한 오류를 방지할 수 있다. 제안된 분석기법을 검증하기 위하여 다양한 물-시멘트비를 갖는 시멘트 페이스트를 대상으로 EIS 실험을 진행하였으며, 추가적으로 계측 시스템의 효율화를 위하여 전극의 개수를 주요 변수로 두었다. 기존 전극을 사용하는 3전극 기법 대비 작업과 대응 전극만을 사용하는 2전극 기법을 비교하여 계측 시스템의 효율성을 확인하고자 하였다. 추가적으로 기존 분석 방법인 등가회로와의 비교를 통하여 제안 기법의 우수성을 입증하고자 하였다.

2. 실험방법

2.1 실험계획 및 재료

굳지 않은 상태의 시멘트 페이스트를 대상으로

Table 1 Chemical composition of cement

Components	CaO	SiO_2	Fe_2O_3	Al_2O_3	SO_3	MgO	Na_2O	K_2O	LOI
Mass %	61.09	21.26	3.25	5.38	2.55	2.27	0.15	1.18	2.87

Table 2 Specification of EIS equipment

Applied E Range	± 11 volts
Accuracy	± 2 mV, $\pm 0.3\%$ of setting
DC Bias	± 8 V
Scan Ranges	± 6.4 V, ± 1.6 V, and ± 0.4 V
Drift	<30 $\mu\text{V}/^\circ\text{C}$
Nipple and Ripple	< 20 μV rms (1 Hz - 10 kHz)

Table 3 EIS measurement set-up

Frequency range		0.2 Hz-100 kHz
Points / decade		10
AC voltage		10 mV
Stability condition	3-electrode	after 100 seconds delay
	2-electrode	until potential drift of 0.05 mV/s

EIS를 측정하고 분석하고자 시험체를 제작하였다. 사용된 배합수는 수돗물이며, 시멘트는 보통 포틀랜드 시멘트 1종으로 시멘트의 자세한 화학적 물성은 Table 1과 같다. 전극을 변수로 하는 두 가지 시스템에서 3전극은 물-시멘트비 30~45%, 2전극은 물-시멘트비 31~45%에서 1% 간격으로 배합하였으며, 실험으로 인한 변동을 고려하여 1개의 배합당 20개의 시험체를 제작하였다. 총 제작된 시험체는 620개이다. 각 배합에 따라 계량된 시멘트와 물은 직경 7 cm, 높이 9 cm의 PP재질 원통형 몰드에 약 300 ml 부피로 담아 3분간 고르게 배합하였으며, EIS 실험 전 10분간 안정화하였다.

2.2 임피던스 분광법

2.2.1 실험 환경 구성

시멘트 페이스트의 임피던스를 측정하기 위한 도구로 Gamry사의 PCI4/300 장비와 Framework 소프트웨어를 사용하였다. 해당 장비는 PC 내 보드 형태로 설치되며, 악어클립 케이블로 시험체와 연결된다. PC에서 소프트웨어를 통해 실시간 측정과 취득 신호를 모니터링하였다. Table 2와 Table 3에 사용된 장비의 자세한 사양과 측정 설정을 나타내었다.

본 연구에서는 두 종류의 전극법을 적용하여 Fig. 1과 같이 2전극법과 3전극법에 따른 실험 시스템을 구성하였다. 작업 전극(working electrode, WE)과 기준 전극(reference electrode, RE)이 공통적으로 구성되며, 2전극 시스템은 이러한 두 전극 사이의 전위차를 측정한다. 3전극 시스템은

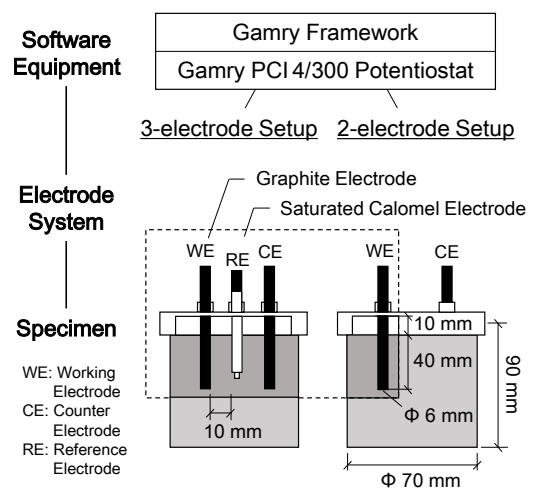


Fig. 1 EIS experiment setup for 3- and 2-electrode systems

상대 전극(counter electrode, CE)이 추가되어 작업 전극과 상대 전극 사이의 전위차가 오가는 동시에 기준 전극이 제공하는 전위값으로 세밀한 분석이 가능하다. 직경 6 mm의 흑연 막대(graphite rod)를 공통 전극으로 사용하였으며, 기준 전극의 경우 포화 칼로멜 전극(saturated calomel electrode, SCE)을 사용하였다. 각 전극은 10 mm 간격으로 시험체에 40 mm 삽입한 후 악어클립 케이블을 통해 측정 장비와 연결하였다.

2.2.2 개방회로 전위 시험

임피던스를 측정하기 위해 앞서 전압 상태의 안정성을 확인하고자 개방회로 전위(open circuit potential, OCP)를 측정하였다. 개방회로 전위는 대상에 전류가 흐르지 않은 상태의 전압을 의미

하며 측정된 값은 본 시험의 기준으로 적용된다. 셀을 구성한 직후 불안정한 측정 초기에 전압의 급격한 변화가 발생하는 현상에서 유효한 데이터를 얻을 수 있는 전압 강하 비율(potential drifting rate)을 확인하게 된다. Fig. 2는 개방회로 측정에 대한 예시로서, 물-시멘트비 45%의 시멘트 페이스트 샘플을 측정한 결과 측정 초기 급격하게 진행되는 전압 변화율이 100초 이후 안정되어 ± 0.05 mV/s 범위에 수렴하였다. 결과를 바탕으로 안정화 범위로 판단할 수 있는 '100초 이후'와 '전압 변화율 ± 0.05 mV/s 도달'조건을 본 측정인 EIS 실험의 시작 조건으로 적용하였다.

2.2.3 임피던스 측정

실험 환경 구성이 완료되고 임피던스를 약 3~4분

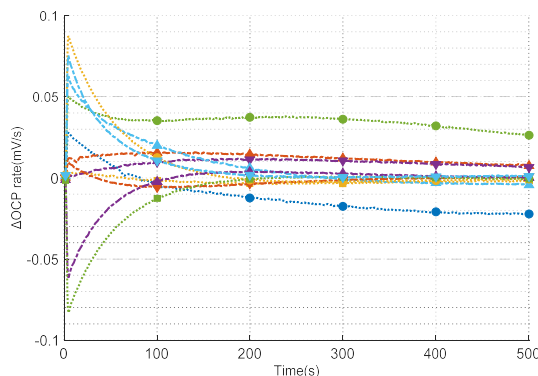
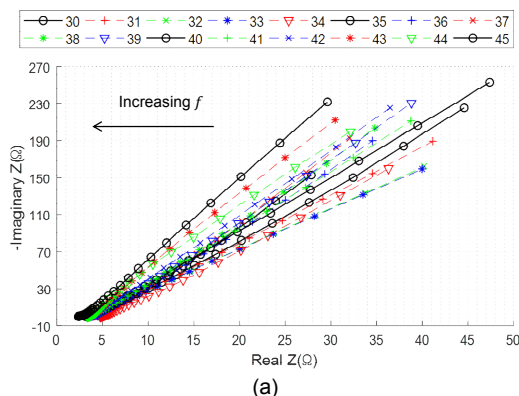


Fig. 2 Open circuit test of w/c 45% as representative of cement paste specimens before EIS measurements



동안 측정하였다. 주파수 Sweep을 통해 100 kHz 부터 0.1 Hz까지 58개 데이터 포인트를 기록하였으며, 측정된 임피던스는 주파수별 복소수 형태로 저장하였다. 시멘트 페이스트의 임피던스 측정을 통해 구축한 전체 데이터베이스는 3전극 시스템에서 측정된 320개 데이터와 2전극 시스템에서 측정된 300개 데이터로 구성된다.

2.3 임피던스 측정 결과

Fig. 3에 각 전극 시스템에서 측정된 시멘트 페이스트의 임피던스를 물-시멘트비별로 평균하여 나이퀴스트 선도로 도시하였다. 나이퀴스트 선도에서 임피던스는 주파수 함수로서 실수축과 허수축으로 모든 시멘트 페이스트 시험체에서 고주파에서 저주파로 진행할 동안 직선에 가까운 그래프가 관찰되었으며 이는 일반적으로 시멘트 페이스트에서 관찰되는 EIS 응답과 동일하다[5]. Fig. 3과 Fig. 4에서 두 전극 시스템의 그래프 개형은 유사하게 전개되었으며, 3전극 시스템에서 관찰되는 상대적으로 넓은 변화 폭은 기준 전극으로 인한 계측 정밀도의 향상으로 추정된다. 고주파 범위에서 실수축과의 접점으로 나타나는 대상(bulk)의 저항은 2전극 시스템에서 2.5~5.0 Ω 범위와 3전극 시스템에서 4.5~6.5 Ω 범위로 상대적으로 유사하게 관찰되었다. 그에 반해 전체 임피던스의 크기(magnitude)는 2전극 시스템이 3전극 시스템의 2~3배로 측정되었다. 이는 저주파 구간에 긴 꼬리 형태로 나타나는 전극 반응에 의한 것이다. 3전극 시스템의 경우, 기준 전극을 통해

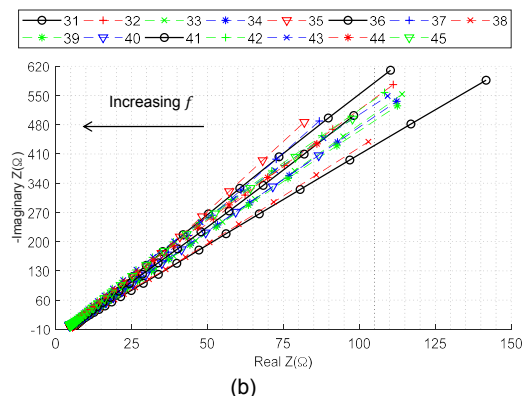


Fig. 3 Nyquist plot of the impedance averaged by w/c ratio measured from (a) 3-electrode system and (b) 2-electrode system

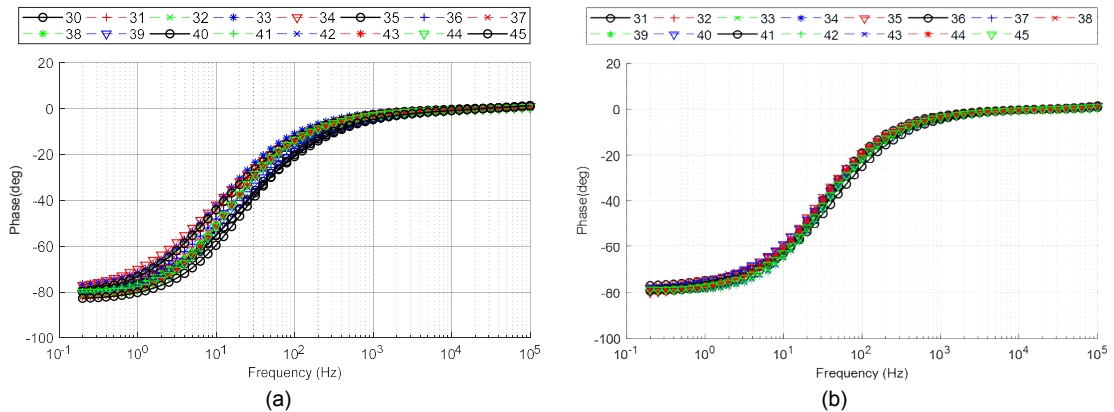


Fig. 4 The phase of impedance averaged by w/c ratio in low-frequency range(0.1~10 Hz) measured from (a) 3-electrode system and (b) 2-electrode system

전위값을 제공하므로 두 전극 사이에서 측정된 매질의 임피던스 보다 그 크기가 감소한다[6].

한편, EIS 실험이 다양한 물-시멘트비 범위에서 수행되었으므로 반응에 포함된 메커니즘을 해석하여 측정된 임피던스 결과와 물-시멘트비의 연관성을 평가할 수 있다. 이론적으로 물-시멘트비는 시멘트 재료 내부의 공극률(porosity)에 영향을 미치며 물-시멘트비가 증가할수록 공극률이 증가한다. 그러나 시멘트 배합물은 다공성 물질로서 내부의 시멘트 입자와 공극의 분포 및 연결 정도는 여러 가지 요인, 예를 들어 균치 않은 시멘트 페이스트의 경우 불규칙한 미세 공극의 모양과 크기 등이 복합적으로 작용하여 공극률에 영향 미치게 된다. 이러한 이유 등으로 인해 그래프의 경향성은 확인되나 물-시멘트비에 대한 임피던스의 변화 폭이 발생하므로 임피던스와 물-시멘트비의 구체적인 상관관계를 파악하기 위하여 보다 정량적 분석이 필요하다.

3. 인공신경망 학습

3.1 학습 방법

3.1.1 입력데이터

기계학습 알고리즘 학습에 사용된 입력데이터는 EIS 직접 실험을 통해 측정된 임피던스 원 데이터에서 분류된다. 손 배합 등의 이유로 실험 오차가 발생한 상대적으로 낮은 물-시멘트비 30~31%를 전체 데이터베이스에서 제외하여, 물-

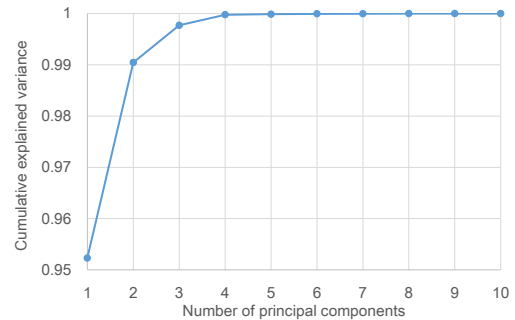


Fig. 5 Example of Cumulative explained variance according to number of principal components

시멘트비 32~45% 범위를 두 전극 시스템에서 공통으로 채택하였다. 한 개의 데이터는 58×2 크기의 행렬을 가지며, 한 물-시멘트비는 20개의 데이터로 28개의 물-시멘트비 범위로 구성된다. 총 560개의 raw data는 7:3으로 분할하여 각각 알고리즘 훈련과 검증에 활용하였다.

3.1.2 주성분 분석법

한 개의 데이터가 58×2 행렬로 구성되는데 이는 연속적인 주파수 함수의 임피던스 스펙트럼이다. 이처럼 많은 특성이 포함된 데이터를 효율적으로 분석하기 위해 주성분 분석법(principle component analysis, PCA)을 적용할 수 있다. 주성분 분석법은 차원 축소법 중 하나이며 고차원 데이터에서 데이터 고유의 특성을 유지하는 동시에 전체 데이터 분포를 설명할 수 있는 적은 수의 새로운 변수를 생성하는 방법이다. Fig. 5와 같이

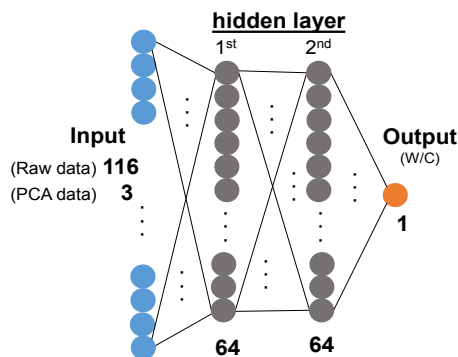


Fig. 6 The Training and validation MSE loss per each epoch in ANN model

데이터 분포의 최대 분산 방향으로 주성분을 추출해 나가며 누적 분산이 1에 가까워 전체 데이터를 충분히 설명할 수 있는 주성분 개수를 채택하게 된다. 따라서 116개 데이터 차원으로 구성된 임피던스 raw data를 주성분 분석하여 두 전극 시스템에서 10개의 주성분을 추출하였다. 즉, 원 데이터의 데이터 차원을 주성분 분석을 통해 116개에서 10개로 재구성하였으며 PCA data로서 raw data와 함께 인공신경망 훈련의 입력데이터로 활용하였다.

3.2 인공신경망 학습

인공신경망(artificial neural network, ANN)은 입력값에 적절한 가중치를 곱한 값을 전달하고 계산하기를 반복하여 최종 목표값을 도출하는 데이터 기반의 기계학습 알고리즘이다[7]. 인공신경망 구조는 크게 입력층과 은닉층, 출력층으로 구성된다. 데이터 크기에 따라 입력층에서의 최소 계산 단위인 노드 개수가 정해지며 하나의 노드에서 계산된 결과는 취합되어 다음 층 노드의 새로운 입력값으로 전달된다. 본 연구에서는 학습할 데이터의 특성(feature)을 고려하여 입력층의 크기를 원 데이터의 경우 116개, 주성분 분석으로 추출된 주성분 데이터의 경우 3개로 설정하였다. 또한, 전체 데이터베이스의 크기가 크지 않으므로 한 층의 64개의 노드로 구성된 2개의 은닉층을 갖는 간단한 ANN 모델을 Fig. 6과 같이 구성하였다. 데이터의 연산을 수행하는 배치 크기(batch size)는 16이며, 전체 학습은 5000번 반복 수행되었다. 초기 학습률(learning rate)은 0.001에

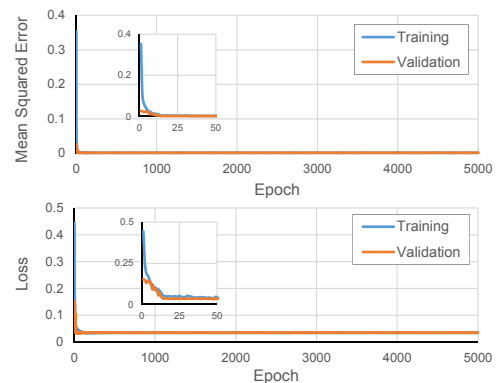


Fig. 7 The Training and validation MSE loss per each epoch in ANN model

서 출발하여 학습을 반복하는 동안 반복 횟수(epoch)와 성능의 피드백을 받아 조절되었다. 활성화 함수는 ReLU이며, 옵티마이저는 Adam을 사용하였다. 모델을 학습하기 위한 손실함수로 식 (1)의 평균 절대 오차(mean absolute error, MAE)을 설정하였다.

$$MAE = |Y_{pred} - Y_{true}| \quad (1)$$

여기서 Y_{pred} 와 Y_{true} 는 알고리즘을 통해 예측한 w/c와 실제 w/c이므로 MAE가 0에 수렴할수록 높은 정확도로 평가할 수 있다. 학습이 진행되며 Fig. 7과 같이 훈련 세트와 검증 세트에 대해 손실 곡선이 감소하였다. 여기에 조건을 충족할 경우 조기 종료(early stopping)하는 기법을 적용함으로써 적절한 시간까지 학습하여 과소적합과 과적합을 방지하고자 하였다.

3.3 예측 결과

3.3.1 물-시멘트비 예측

각 전극 시스템에서 예측된 임피던스 데이터를 바탕으로 raw data와 도출된 주성분 데이터를 입력데이터로 사용하여 학습한 결과는 Fig. 8과 같다. 그래프에서 Y_{true} 와 Y_{pred} 는 배합한 물-시멘트비 실험값과 알고리즘을 통해 학습한 물-시멘트비 추정값이며, 기울기 1로 대응하는 직선($Y_{true} = Y_{pred}$)에 가깝게 대응할수록 정확한 물-시멘트비 예측이 가능함을 의미한다.

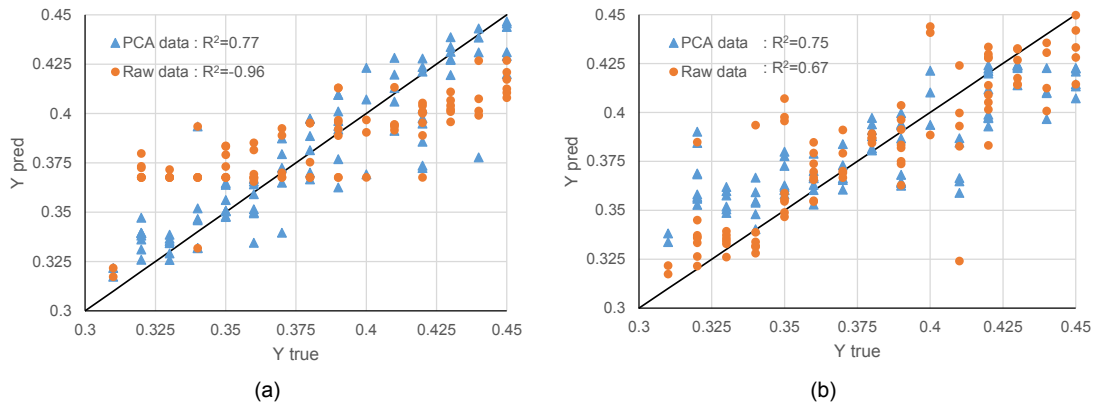


Fig. 8 The predicted results of w/c ratio measured on (a) 3-electrode system and (b) 2-electrode system

3.3.2 정확도 검증

훈련된 ANN 모델의 물-시멘트비 예측 성능을 정량적으로 비교하기 위해 결정계수(coefficient of determination, R^2)와 MAE를 비교하였으며 R^2 는 식 (2)과 같이 계산된다.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_{pred}^i - Y_{true}^i)^2}{\sum_{i=1}^n (Y_{pred}^i - \bar{Y}_{true})^2} \quad (2)$$

여기서, n 은 예측된 물-시멘트비 데이터의 개수이며, Y_{pred}^i 와 Y_{true}^i 는 i 번째에서 예측되고 그에 대응하여 실제 예측된 물-시멘트비, $\bar{Y}_{true}$ 는 실제 물-시멘트비의 평균이다. 결정계수 기반 해석 결과, 인공지능망을 활용하여 시멘트 페이스트에서 측정된 임피던스 신호 자체로(raw data) 물-시멘트비를 정확도 67%(2전극)로 예측할 수 있으며, 임피던스 신호에서 특성 데이터를 추출하여 학습하면(PCA) 해당 성능이 최대 77%(3전극)까지 향상됨을 확인할 수 있다. 마찬가지로 MAE를 해석한 결과는 Fig. 9와 같으며, 여기서 MAE가 0에 가까울수록 높은 예측 성능을 의미한다. 3전극 시스템에서 임피던스 신호 자체 해석으로 저조한 성능(MAE=0.025)은 PCA를 통해 크게 향상하였으며(MAE=0.013), 2전극 시스템 또한 상대적으로 우수한 임피던스 신호 자체의 성능(MAE=0.015)에서 출발하여 약간의 성능 개선 효과(MAE=0.014)가 있었다.

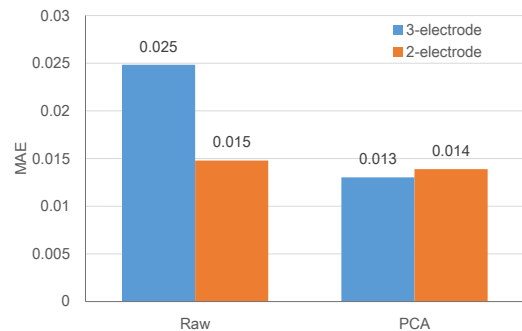


Fig. 9 Comparison of estimating performance by MAE with predicted results trained by impedance raw data and PCA data from each electrode system

4. 토의

4.1 등가회로 피팅을 통한 유효성 검증

추가적으로 고전적인 EIS 해석 방법인 등가회로를 피팅하고, 도출된 회로 파라미터로 ANN을 수행하여 raw data 기반으로 수행한 결과와 비교 분석을 수행하였다. 등가회로란 등가의 임피던스를 도출할 수 있는 전기적 회로로써 연속적인 임피던스 스펙트럼을 설명하는 것으로, 피팅 과정을 통해 실제 측정값과 모델 간의 오차를 줄일 수 있으며 피팅된 파라미터로 임피던스의 반응을 단계적으로 해석할 수 있다. Matlab Zfit 오픈소스 코드를 활용하여 등가회로 모델을 피팅하였으며 Nelder-Mead simplex 기반의 식 (3)을 최적화 알고리즘으로 적용하였다.

$$\sum_{i=1}^n \frac{[(Zre_{meas}(i) - Zre_{fit}(i))^2 - (Zim_{meas}(i) - Zim_{fit}(i))^2]}{Zre_{meas}(i)^2 + Zim_{meas}(i)^2} \quad (3)$$

여기서 Zre_{meas} 와 Zim_{meas} 는 임피던스 측정값의 실수부와 허수부이며, Zre_{fit} 와 Zim_{fit} 은 피팅된 회로로 표현되는 임피던스의 실수부와 허수부이다. 1부터 n 개까지 i 번째 데이터 포인트에서의 피팅 오차가 계산되어 누적된다. 계산된 오차는 회로 모델이 임피던스 데이터에 잘 맞는 정도를 나타내는 적합도(goodness)로 불리어 평가된다.

피팅에 적용된 회로 모델은 시멘트 재료에서 제안된 두 가지 회로 모델로서 $R_0 - (R_1 : C_1)$, $R_0 - (R_1 : CPE_1) - (R_2 : CPE_2)$ 을 적용하였다. 회로1($R_0 - (R_1 : C_1)$)에서 R_0 는 측정 대상의 벌크 반응을 의미하며 뒤이어 병렬 연결된 ($R_1 : C_1$)은 대상에 이형 재료인 전극이 만남으로 인한 전위차로 계면에서 발생하는 전기 이중층 효과(electrical double layer effect)를 나타낸다[1]. 회로2($R_0 - (R_1 : CPE_1) - (R_2 : CPE_2)$)는 회로 1에서의 벌크 반응을 나타내는 R_0 를 $R_0 - (R_1 : CPE_1)$ 로 세분화하여 시멘트 재료 내부에서의 계면 반응을 포함할 뿐 아니라, 정전용량의 각도를 반영하는 위상 상수 요소(constant phase element, CPE)를 적용하여 실제적인 EIS 거동을 고려한다[8]. 여기서 재료 내부의 계면 반응은 전극 계면의 전기 이중층 효과와 유사하게, 시멘트 재료 내부에서 고체(solid)와 공극 용액(solution) 계면에서의 미세한 전기 이중층 효과를 나타낸다.

회로 1과 회로 2에 대해 임피던스 실험 데이터

를 피팅한 결과는 Fig. 10과 같다. 여기서 적합도는 피팅 오차이므로 0에 가까울수록 피팅이 잘 되었음을 나타내며, 피팅된 데이터의 분포가 산재하지 않고 일정할수록 대상을 설명하기 적절한 등가회로임을 나타낸다. 회로1의 경우 최대 적합도 5 이하에서 상대적으로 일정한 데이터 분포를 보였으며, 회로 2의 경우 3전극과 2전극 데이터의 절반 정도가 적합도 0에 매우 가까웠지만 동시에 나머지 2전극 데이터 절반이 적합도 18에 이르기까지 넓게 분포하였다. 즉, 상대적으로 간단한 모델(회로1)은 간단한 거동을 다루어 모든 데이터를 포괄하여 설명하는 반면, 복잡한 모델(회로2)은 회로 요소 개수가 증가한 만큼 물리적 거동을 세밀하게 설명하는 동시에 개별 데이터에 대한 적합도가 크게 달라진다.

두 가지 회로 모델에서 도출된 파라미터를 입력데이터로 ANN을 구성하고 학습하였다. 해당

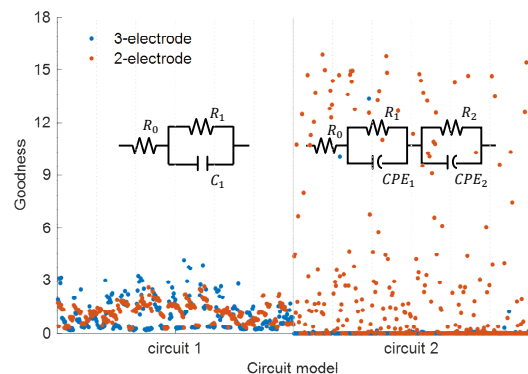
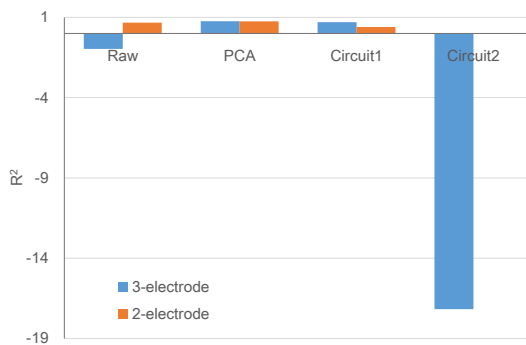
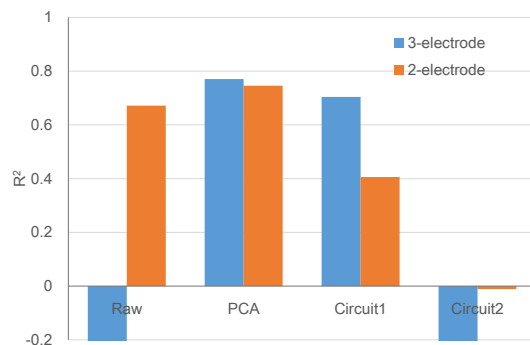


Fig. 10 The fitting results expressed as goodness value by using equivalent circuit models



(a)



(b)

Fig. 11 Comparison of estimating performance with predicted results by using equivalent circuit fitting parameters as input data : (a) R^2 and (b) the positive parts of R^2

결과를 포함하여 전극 시스템별, 입력데이터별로 구성된 각 ANN 모델에 대한 물-시멘트비 예측 성능은 Fig. 11과 같이 비교할 수 있다. Fig. 11(b)에서 회로1의 경우 R^2 가 3전극 시스템에서 0.70과 2전극 시스템에서 0.41로 나타난 반면, 회로 2의 경우 두 전극 시스템 모두 R^2 가 음수로 나타나 유의미한 성능을 보이지 못하였다. 즉, 동일한 임피던스 데이터에 대해 회로 모델에 따라 적합도와 물-시멘트비 예측 성능이 달라지므로 적절한 모델을 주의하여 선정해야 한다. 본 연구에서 제안하는 임피던스 raw data 기반 분석 방법은 이러한 주관적인 등가회로 피팅 과정을 배제하며 좋지 않은 성능을 보이는 raw data라도 유효한 특성을 추출하고 학습하여 3전극 시스템의 경우 R^2 가 0.77로, 2전극 시스템의 경우 R^2 가 0.74로 물-시멘트비 예측이 가능하다.

4.2 임피던스 실험 관련 제한사항과 보완

한편 3전극 시스템의 raw data를 그대로 학습하여 관찰되는 낮은 성능은 기준 전극의 영향으로 보인다. 3전극 시스템의 경우 기준 전극을 적용함으로써 세밀한 측정이 가능하나, 기준 전극의 상태의 영향이 크므로 실험과 관리에 유의해야 한다. 두 가지 전극 시스템에서 측정된 임피던스 raw data의 학습 결과가 상이하였음에도 PCA를 수행하여 약 70% 대의 비슷한 예측 성능을 보였으므로, 동일한 추후 실험에 대해 전극 변수를 최소화하는 간단한 2전극 시스템을 채택하는 것이 데이터 분석에 있어 효과적일 것으로 보인다. 그 외 발생하는 실험 환경적 요인을 통제하고 오차를 최소화하여 결과를 개선할 수 있다.

최종 개발한 알고리즘(약 70% 정확도)에 대해 입력데이터와 분석 알고리즘 차원의 보완이 가능하다. 직접 실험 데이터를 바탕으로 알고리즘이 설계되었으므로 반복 실험을 통해 데이터베이스를 확장하고, ANN을 포함한 서포트 벡터 회귀(support vector regression), 가우시안 프로세스 회귀(gaussian process regression) 등 다양한 머신러닝 알고리즘 기법을 활용하여 알고리즘 안정성 확보와 성능 향상이 가능하다.

시멘트 페이스트를 대상으로 본 연구가 수행되었으므로, 추후 현장 적용을 고려할 때 모르타르 및 콘크리트에 대한 검증이 요구된다. 추가된 골

재로 인한 시멘트 재료 내부 변화 및 이와 밀접한 EIS 거동 변화가 예상되므로, 이러한 EIS 응답과 물-시멘트비를 포함한 시멘트-잔골재비, 잔골재율 등 보다 복합적인 배합 요소에 대한 상관도 분석 및 학습을 단계적으로 수행할 계획이다.

5. 결 론

본 연구는 전기화학적 임피던스 분광법을 활용하여 시멘트 재료의 임피던스를 측정하고 인공신경망을 활용하여 물-시멘트비를 추정하였다. 두 가지 전극 시스템에 대해 시멘트 페이스트를 대상으로 수행하였으며 등가회로를 피팅한 결과와 비교하여 성능을 검증하였다. 본 연구의 결론은 다음과 같다.

- (1) 임피던스 raw data에 주성분 분석을 수행하여 10개의 특성 데이터를 추출할 수 있으며, 인공신경망 모델을 구축하여 주성분 데이터를 학습한 결과, 물-시멘트비를 3전극 시스템에서 정확도 77%로 예측 가능하며 2전극 시스템에서 정확도 74%로 예측 가능하였다.
- (2) 동일한 임피던스 데이터에서 피팅된 등가회로에 따라 적합도와 물-시멘트비 예측 성능이 달라지며, 이는 본 연구에서 제안하는 raw data 기반 분석 방법의 유효성을 검증한다.
- (3) 두 전극 시스템은 PCA를 수행하여 유사한 예측 성능을 보이므로 추후 연구에서는 간단한 2전극 시스템 구성을 채택할 수 있다.

추가적으로 위의 결과로부터 개발된 알고리즘의 성능 향상을 위하여 다양한 배합에 대한 학습과 알고리즘 반복 학습 및 검증이 요구된다. 추후 연구를 통하여 물-시멘트비 외 다른 배합 요소를 대상으로 연구를 단계적으로 확장할 계획이다.

후 기

본 연구는 국토교통부/국토교통과학기술진흥원의 지원으로 수행되었음(No.22CTAP-C163773-02).

References

- [1] W. J. McCarter, "A parametric study of the impedance characteristics of cement-aggregate

- systems during early hydration,” *Cem. Concr. Res.*, Vol. 24, No. 6, pp. 1097-1110 (1994)
- [2] P. Gu, P. Xie, J. J. Beaudoin and R. Brousseau, “AC impedance spectroscopy (I): A new equivalent circuit model for hydrated Portland cement paste,” *Cem. Concr. Res.*, Vol. 22, No. 5, pp. 833-840 (1992)
- [3] S. W. Shin, G. Hwang and C. J. Lee, “Electrical impedance response model of concrete in setting process,” *J. Korean Soc. Safety*, Vol. 29, No. 5, pp. 116-122 (2014) (In Korean)
- [4] X. Hu, C. Shi, X. Liu, J. Zhang and G. de Schutter, “A review on microstructural characterization of cement-based materials by AC impedance spectroscopy,” *Cem. Concr. Compos.*, Vol. 100, pp. 1-14 (2019)
- [5] J. Sercombe, R. Vidal, C. Gallé and F. Adenot, “Experimental study of gas diffusion in cement paste,” *Cem. Concr. Res.*, Vol. 37, No. 4, pp. 579-588 (2007)
- [6] A. J. Bard and L. R. Faulkner, “*Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*,” 2nd ed, Wiley, New York pp. 1-864 (2001)
- [7] C. M. Bishop and N. M. Nasrabadi, “*Pattern recognition and machine learning*,” Springer New York pp. 1-738 (2006)
- [8] B. J. Christensen, T. Coverdale, R. A. Olson, S. J. Ford, E. J. Garboczi, H. M. Jennings and T. O. Mason, “Impedance spectroscopy of hydrating cement-based materials: measurement, interpretation, and application,” *J. Am. Ceram. Soc.*, Vol. 77, No. 11, pp. 2789-2804 (1994)