

# 데이터평가의 이론과 실제

- 재료·금속 분야 -

2007. 11



# 목 차

1. 데이터평가의 개요	1
가. 데이터평가의 의미	1
나. 재료금속 데이터평가의 원칙	2
다. 데이터 수집	3
2. 재료금속데이터의 특성	5
가. 재료측정학	6
나. 재료측정학의 분류	8
3. 미국립표준기술연구원(NIST)의 재료금속 데이터평가 현황	12
4. 재료금속데이터의 평가	15
가. 일반 고려사항	15
나. 데이터평가 관련규정	16
1) 참조표준의 정의	16
2) 참조표준의 분류	17
3) 참조데이터의 기술평가기준	17
4) 참조표준의 등급부여 기준	17
5) 참조데이터의 종류	18
다. 데이터평가 절차	19
1) 재료규격	21
2) 측정방법	22
3) 정확도	23
4) 재현성	24
5) 일관성	27
6) 예측성	31
7) 전문가 평가	37

## 1. 데이터평가의 개요

### 가. 데이터평가의 의미

현대 산업사회에서는 매일매일 엄청난 양의 데이터가 생산되고 소멸된다. 데이터는 모두 필요에 의해 생산되지만 그 중에는 1회용으로만 사용되고 폐기되는 경우도 있고 지속적으로 사용되는 경우도 있다. 또한 극히 일부 계층에서만 사용하는 데이터가 있는 반면 일반 대중 모두가 사용하는 데이터도 있다.

분명한 것은 사용기간이 길수록 또 사용범위가 넓을수록 데이터의 신뢰도가 좋아야 한다는 것이다. 이에 따라 우리나라 국가표준기본법에서는 널리 지속적으로 사용될 수 있는 데이터는 특별히 참조표준으로 구분하되 반드시 그 신뢰도를 공인 받도록 하고 있다.

예를 들어서 우리가 병원에서 검진을 할 때 혈압이나, 키, 몸무게 등을 측정하여 기록으로 남겨두게 된다. 이러한 데이터들이 한 개인에 국한하여 사용될 때에는 일반 데이터로서 1회용으로 사용되고 끝나지만, 데이터들을 축적하여 권위 있는 기관의 평가를 거치게 되면 고혈압의 기준이 되는 참조표준이 될 수도 있고 각종 의복이나 사무용 비품들을 설계하는데 도움이 되는 인체치수 참조표준이 될 수도 있다.

이와 같은 점은 과학기술 연구나 산업생산에서도 마찬가지로 물리적 특성의 거동(behavior) 예측이나 엔지니어링 설계 등은 모두 데이터에 근거하여 이루어진다. 예측되지 않은 거동이 연구과정에서 발생하는 경우에는 과학적 발견으로 이어질 수 있으나 엔지니어링 설계에서 나타난다면 엄청난 손실을 가져올 수 있다. 전자의 경우는 데이터의 신뢰성이 좋더라도 양이 부족하여 발생할 수 있으나 데이터의 신뢰성이 좋지 않으면 연구나 엔지니어링 설계 모두 믿을 수 없는 결과를 초래하게 될 것이다.

이와 같은 관점에서 본다면 데이터는 그 신뢰성이 생명이라 할 수 있으며 데이터평가는 데이터의 신뢰성을 확인하는 작업이라는 점에서 매우 중요하다 할 수 있다. 데이터평가의 요체는 데이터 해석능력이며 데이터 해석 능력은 우리가 데이터에 대해 얼마나 알고 있는가 하는 문제와 밀접한 관련이 있다. 특수한 경우 관측(observation) 결과는 이전 경험에 비추어 해석하여야 하는 경우도 있으나 일상적인 관측결과는 일반적인 지식과의 부합성을 검토하여야 하는 경우가 대부분이다. 어떤 경우든 데이터의 평가는 이론이나 실험에 관계없이 관측 값이나 기술설계를 승인하는 기초가 되며 데이터평가의 최종결과는 이론과 실험, 나아가서는 과학과 기술이 조화를 이룰 수 있도록

록 하며 삶의 질 향상에 기여하는 것이라고 할 수 있다.

#### 나. 재료금속 데이터평가의 원칙

첨단 소재와 설계 응용의 복잡성으로 인해 과학 및 엔지니어링 종사자 모두 어려움을 겪고 있다. 보고된 특성 값과 관련된 모든 측정의 세부사항을 이해하는 데 필요한 전문화의 수준은 일반 종사자의 지식 범위를 넘는 경우가 많다. 따라서 업계 종사자는 권장 값에 의존하거나 다른 평가 가이드라인을 따라야 한다. 아울러 측정이나 평가경험이 없는 과학자와 엔지니어도 사용할 수 있는 재료특성데이터에 관한 폭 넓은 기술문서의 필요성이 제기되고 있다. 새로운 기술문서는 수치형태의 재료특성에 대하여 확신을 가지고 이용할 수 있도록 체계적인 접근 방식을 제공하여야 한다.

현재 우리나라에서는 신뢰할 수 있는 데이터의 중요성이 크에도 불구하고 면밀하게 평가된 재료금속특성 데이터를 집대성하고 보급하려는 노력이 부족한 상황이다. 이는 폭 넓은 재료금속데이터에 관한 기술문서가 제품요건에 초점을 맞출 수밖에 없는 사기업이나 당면한 핵심사업에 우선적인 노력을 기울여야 하는 국가의 입장에서 당장 필요로 하는 사업영역이 아닐 수 있기 때문이다. 따라서 데이터베이스에 관련된 대부분의 연구는 작지만 명확히 규정되는 범위로 제한될 수밖에 없는 것이 현실이다. 그럼에도 불구하고 이러한 제한적 노력이 다양하게 진행되고 있기 때문에 각각의 개발 과정에서 해결해야 하는 수많은 공통된 문제들이 생겨나고 있다. 이러한 점을 고려하여 본 기술문서에서는 몇 가지 기본적인 원칙을 수립하고 이 원칙을 적용하여 공통된 문제에 대한 해결책을 제시하고자 노력하였다.

또한 이러한 기본원칙을 수립함에 있어서 재료금속 과학의 발전 과정에서 크게 무시되거나 인식되지 못한 개념을 가능한 포함시키도록 노력하였다. 본 기술서의 이러한 원칙이 여러 특성 사이의 상호관계나 예상된 관계가 없음으로 생기는 논쟁을 보다 잘 해결할 수 있는 기준이 될 수 있기를 기대한다.

본 기술서는 재료측정학에 대한 전반적인 이해를 먼저 제공하고 난 후 데이터평가를 다루었다. 여기서 제시된 모든 예는 재료특성 데이터평가에서 실제 이루어진 작업 결과를 인용하였다. 이러한 예는 예시만을 위한 것으로, 데이터평가와 같이 방대한 주제에 모두 적용될 수 있는 것이 아니라는 점을 분명히 하여 둔다. 그러나 정량적 관찰의 해석과 응용에 대하여 수치형태의 특성데이터에 대한 고찰과 원칙 및 실험이 재료금속데이터의 평가를 효율적으로 실시하는데 기여할 수 있기를 바란다.

#### 다. 데이터 수집

데이터의 모든 설계 및 분석응용은 데이터특성 값이 상당히 수집되어 있을 때 가능하다. 크기 순서를 추정하는 피상적 응용의 경우에도 일정 범위의 대표 값을 정립하기에 충분한 수집 데이터가 필요하다. 따라서 최고 신뢰성의 데이터가 필요한 경우는 물론 최저 신뢰성의 데이터가 필요한 경우에도 데이터를 축적하는 작업은 데이터가 필요한 모든 연구에서 기본이 된다.

아마도 데이터 수집을 저해하는 가장 위협적이고 귀찮은 걸림돌은 적합한 데이터 출처를 즉시 확인해야 한다는 것일 것이다. 전산화된 정보시스템의 등장으로 이러한 작업은 대부분의 경우에 적합한 검색전략을 수립하는 수준으로 간소화 시킬 수 있게 되었다. 문헌검색에 사용되는 전산화된 정보시스템은 내용적인 측면에서 인쇄본과 유사하다. 그러나 전산화된 시스템은 두 가지 중요한 측면에서 인쇄된 형태와 다르다. 먼저, 검색에 필요한 시간과 처리과정 동안 기다려야 하는 지루함을 줄여준다. 두 번째, 대부분의 전산 시스템에서는 해당분야에 일반적으로 사용되는 단어를 통해 내용을 검색할 수 있다.

과거에는 실용적 및 경제적인 이유로 인쇄된 검색문서를 가능한 작게 유지해야 했기 때문에 암호 같은 약어나 코드 문자열을 사용하는 경우가 많았다. 사용자는 이러한 코드와 약어를 해독하기 위해 많은 시간을 들여 어떤 검색 결과가 자신에게 관련되는지 결정해야 했다. 이와 대조적으로 오늘날 전산화된 검색결과에는 저자의 이름, 전체 학회지 인용문과 함께 일반적으로 전체 논문제목이 포함된다. 논문의 키워드와 발췌도 함께 제공되는 경우가 많다. 이러한 정보는 보통 논문이 자신의 특정한 분야에 관련이 있는 것인지 판별하기에 충분하다.

사용할 수 있는 도구에 관계없이, 검색의 성공여부는 검색할 때 사용하는 전략의 논리적 측면에 따라 결정된다. 미국국립표준기술연구원(NIST) 데이터베이스의 경우, 3단계로 전개되는 전략을 사용하여 집중적이고 포괄적으로 검색을 수행하고 있다.

첫 단계는 기본적 키워드 검색을 사용하여 문헌에서 해당 하위집합을 찾아냄으로써 문헌을 “임의 샘플링”하는 것이다. 예를 들어, 알루미늄(alumina)의 탄성계수(elastic modulus)에 대한 데이터를 검색하고 싶다면, “alumina”를 키워드(key word)로 지정하여 시작할 수 있다. 공개된 문헌에서 이 하나의 키워드로 검색하면 이 키워드가 포함된 약 3만 여개의 논문이 검색된다. 이 하위 집합의 논문에는 탄성계수 이외에도 대단히 많은 주제들이 다루어져 있다. 그러나 대부분의 검색 시스템에서는 다수의 용어로 구성된 복합검

색을 지정할 수 있다. 알루미나의 탄성계수에 관련된 논문만 찾으려면 검색 조건으로 “alumina AND elastic AND modulus”를 지정할 수 있다. 동일 문헌 데이터베이스에 이 복합 조건을 적용하면 잠재적으로 관련이 있는 논문의 수가 약 200여개로 줄어든다. “alumina AND elastic AND modulus AND porosity”로 더욱 구체화하면 검색수가 약 20여개로 줄어들어 직접 확인할 수 있는 수준이 된다.

검색 전략의 두 번째 단계는 “전방가지치기(progressive branching)”라고 하는 기법을 사용하여 참조군을 확장하는 것이다. 이 단계에서는 첫 단계에서 찾은 논문이 참조의 시발점(seed reference) 역할을 한다(여기서부터 참조군이 커지므로). 전방가지치기는 기술문서를 작성할 때 필수적으로 이전 연구에 대한 언급이 포함된다는 점에 착안한 것이다. 기술문서 작성에는 이러한 특징이 있기 때문에 첫 검색단계에서 확인한 논문의 일부는 이미 다른 저자가 보고한 연구에서 참조로 사용되었을 것으로 예상할 수 있다. 이러한 상황에서 “인용된 참조(cited reference)” 검색이라고 하는 기법이 자연스럽게 등장한다. 이 기법에서는 특정 논문을 인용한 모든 논문을 검색한다. 이러한 논문은 반드시 인용한 연구가 끝난 후에 제출되기 때문에 인용된 문서로부터 시간적으로 전방으로 가지치기를 하게 된다.

검색 전략의 세 번째 단계는 이미 2단계에서 검색된 논문의 참조를 역추적 하는 것이다. 이 기법을 “후방 가지치기(regressive branching)”라고 한다. 간단히 말해서, 필요에 따라 수집한 각 논문에는 고유한 참고문헌 목록이 있으며 그 중 일부는 현재 수집한 내용과 다를 수 있기 때문에 검색집합을 확장할 수 있는 대상이 된다. 이러한 참조는 필연적으로 현재의 논문보다 시기적으로 앞서있기 때문에 시간적으로 후방으로 가지치기를 하게 된다.

결론적으로 새롭게 수집한 각 참조는 전방가지치기 및 후방가지치기 모두에 사용할 수 있다. 따라서 이 두 검색 기법을 반복적으로 적용하면 문헌 데이터베이스에 상호 관련되어 문서화된 모든 논문을 포괄하는 참조군을 얻을 수 있다.

## 2. 재료금속데이터의 특성

과거에서든 현재든 간에 측정 프로세스가 모든 문명에서 필수 불가결한 부분이었던 사실은 부인할 수 없을 것이며, 따라서 모든 문명은 어떤 식으로든 측정학의 영향을 받았다고 할 수 있다. 재료의 특성분석, 이해 및 개발에 적용되는 측정과학이라는 측면에서 “재료측정학”은 측정학 자체만큼이나 오래된 역사를 가지고 있다. 그러나 자세히 들여다보면 공통된 근원에도 불구하고 이러한 두 학문 분야를 갈라놓는 지적 단절이 있다는 것을 알게 된다.

우리의 가까운 조상들은 바위의 모양과 색깔에 신기해하기도 했고, 그 크기와 무게를 이용하는 방법을 찾기도 하였으며, 부드러운 재료가 딱딱한 재료보다 더 다양한 용도로 사용될 수 있다는 것을 깨달았다. 오늘날 재료측정학 분야에서는 초창기의 원시적 응용방안을 벗어나 재료의 성질을 이해하고 이러한 이해를 바탕으로 특성을 개선시키거나, 완전히 새로운 재료를 개발하려는 노력을 기울이고 있다.

기술이 급속하게 진보하고 천연 자원이 엄청난 속도로 소비되면서 재료를 더욱 현명하고 효과적이며 전략적으로 사용해야 하는 급박한 상황에 처하게 되었다는 점은 주목할 필요가 있다. 또한, 세계가 뚜렷한 지리적 영역으로 분할되어 각 나라가 주권을 행사하고는 있지만, 초고속 통신, 단축된 이동시간 및 글로벌경제 덕분에 국가들이 경제적으로는 사실상 통일되고 있다고 할 수 있다. 원활하게 조정된 국제적 노력을 통해 재료측정학의 발전을 꾀해야 할 요구와 의무는 이러한 기술적 통일에서 비롯되었다.

다행히도 표준기구의 주도하에 이러한 국제적 노력들이 자연스럽게 진행되고 있다. 각 국가는 자국의 표준에 대해 책임을 져야 하겠지만 이러한 표준이 시장의 보편적 표준과 대립된다면 국가경제와 안녕은 위협을 받게 된다. 그 결과, 원활한 표준제정을 촉진하기 위해 많은 국제기구들이 생겨났으며 이미 많은 표준화 작업이 성과를 거두고 있다.

국제표준을 촉진하는 가장 중요한 협약으로 1875년 체결된 미터협약(Convention du Mètre)을 들 수 있다. 이 협약을 통해 국제적 노력을 관장하기 위해 회원국가의 대표자들로 구성된 국제도량형총회(CGPM, Conférence Générale des Poids et Mesures)이 조직되었다. 약 4년마다 모임을 갖는 CGPM은 국제도량형위원회(CIPM, Comité International des Poids et Mesures) 회원을 선출하며 선출된 CIPM 위원은 국제도량형국(BIPM, Bureau International des Poids et Mesures)을 감독한다.

최근 들어 도량형의 기본단위를 개발하고 관리하기 위한 노력이 관련된 기구들 간에 적극적으로 펼쳐지고 있다. 국제표준화기구(ISO)는 물리학, 화학 및 재료의 모든 측면에 관련된 측정표준을 보다 적극적으로 관리하고 있으며 홍보도 하고 있다. 국제순수응용화학연맹(IUPAC) 및 국제순수응용물리연맹(IUPAP)과 같은 기구들도 표준화를 지원하고 홍보한다. 이러한 노력과 더불어 VAMAS(Versailles Project on Advanced Materials and Standards)는 첨단 소재 및 관련 하이테크 제품을 지원하기 위한 새로운 표준을 후속적으로 개발하는 예비단계로서 국제적 회람방식의 표준화 연구를 활발하게 수행하고 있다.

이러한 모든 노력이 성공을 거둘 수 있었던 데는 측정과학의 모든 측면에서 일반적으로 사용되는 기본적 용어의 의미를 통일한 것이 중요하게 작용했다. 이 중요한 작업에는 BIPM, 국제전기기술위원회(IEC, International Electrotechnical Commission), 국제임상화학연합(IFCC, International Federation of Clinical Chemistry), ISO, IUPAC, IUPAP 및 국제법정계량기구(OIML, Organisation Internationale de Métrologie Légale)의 7개 독립 국제기구가 참여했다. 국제표준기구들의 이와 같은 노력으로 국제도량형용어집(VIM, Vocabulaire International des Termes Fondamentaux and Généraux de Métrologie)이 탄생했다. 그럼에도 어떤 기구도 VIM을 재료측정학에 적용하여 확장하려는 시도를 하지 않았다는 사실은 주목할 만하다. 본 기준서에서는 VIM에 부합하면서 재료측정학에 적용될 수 있는 새로운 재료측정학의 분류법을 개발하고자 한다.

### 가. 재료측정학

모든 과학적 노력과 마찬가지로 측정학은 기본단위와 유도단위를 기본으로 하는 패러다임이다. 재료측정학을 VIM과 조화시키는 작업도 그에 못지않게 간절해야 하는데, 물론 VIM을 전면적으로 채택하면 많은 요구가 해결될 수 있으나 전면적인 채택은 현실상 불가능한 문제이다. 따라서 재료측정학에서는 기존의 측정학에서 다루지 않은 즉, 현재 VIM에서 다루지 않은 용어에 만 집중하면 된다.

VIM에서는 재료측정학까지 고려하는 것이 아니기 때문에 본 기술서에서는 재료측정학의 정의부터 시작하였다. 언어적 해석만 따지자면 재료측정학이란 단순히 재료와 관련된 측정학을 의미하지만, 실제 현실에 적용하기에는 그리 적합하지 않다. 이 학문분야의 범위를 더욱 적합하게 정의하기 위해 다음 두 가지 용어를 제시하기로 한다.



**재료(material): 공간적으로 범위가 제한된 사물의 집합**

**재료측정학(material metrology): 재료의 특성 분석, 이해 및 개발에 적용되는 측정 과학**

후자의 정의는 측정과학의 역할 뿐만 아니라 재료에 대한 측정이 어떤 특정 목적을 가지고 수행될 수 있다는 것을 의미한다. 따라서 재료에서 “목적”의 역할은 대단히 중요하며 의도한 목적이 측정표준을 규정하는데 영향을 미칠 수 있음을 의미하게 된다. 재료의 특성을 분석하기 위해 측정을 사용할 수 있다는 개념은 재료측정학의 핵심이며 이에 따라 재료특성에 대해서도 마찬가지로 다음과 같이 중요한 정의를 내릴 수 있다.

**재료특성(material property): 외부에서 인가된 자극에 대한 재료의 정량적 반응**

이 정의는 재료가 외부환경과 어떻게 상호작용하는가를 나타내는 것이 특성이며 재료가 외부 자극에 나타내는 반응을 숫자로 나타낼 수 있는 프로세스가 있다는 것을 의미한다. 재료측정학과 기존 측정학을 서로 연결하기 시작하는 것은 숫자를 부여하는 프로세스인 것이다. 재료특성의 정의는 VIM의 측정가능한 양의 정의와 다음과 같이 뚜렷이 구분된다.

**(측정 가능한) 양((measurable) Quality): [VIM 1.1] 정성적으로 구분되고 정량적으로 측정될 수 있는 현상, 물체, 또는 물질의 속성**

이 정의에서 중요한 점은 측정가능한 양이 물체의 속성이라는 점이다. 이 정의가 재료측정학에서 불러일으키는 딜레마는 재료측정학의 영역에는 물체의 속성은 아니지만 또 다른 중요한 재료특성이 있다는 것이다. 예를 들어, 어떤 재료가 다른 재료보다 단단하다는 것을 정성적으로 알 수 있는 경우라도 경도라고 하는 기술적 재료특성은 절차가 규정된 경우에만(즉, 숫자를 할당하는 프로세스로 특성이 정의된 경우) 정의된다. 따라서 Knoop 경도, Vickers 경도 및 Rockwell 경도는 서로 다른 양이다. 이러한 상황은 길이라고 하는 양의 측정과 대비될 수 있다. 길이의 경우는 측정하기 위해 여러 가지 다른 절차를 사용할 경우 절차에 따라 서로 다른 불확도를 야기하지만 양의 본질은 절차가 다르다고 해서 바뀌지 않는다. 이러한 개념적 차이로 인해 경도(hardness), 파괴인성(fracture toughness), 3점 굽힘강도(three-point

bend strength), 4점 굽힘강도(four-point bend strength) 및 크립(creep)과 같은 중요한 재료특성은 측정 가능한 양으로 인정될 수가 없다.

이러한 논리적 및 실험적 딜레마를 해결하기 위해서는 부득이 VIM에서 정의되지 않은 새로운 용어를 도입해야 한다.

**절차적 양(Procedural Quantity):** 정성적으로 구별되며, 정량적으로 결정될 수 있는 현상, 물체 또는 물질의 속성이며 동시에 측정절차의 속성으로 결정될 수 있는 양

※ VIM 개정이 진행 중에 있다. “측정 가능한 양”을 더 넓은 의미를 가진 용어인 “양”으로 대체하여 하나 이상의 값(숫자 또는 비 숫자)을 할당할 수 있는 모든 속성(attribute)을 수용하자는 의견이 나오고 있다. 또한 속성(attribute)도 특성(property)으로 바꾸자는 의견이 있다. 개정된 용어는 추가 용어인 “양의 종류”로 보완할 수 있을 것이며, 양의 종류로는 공칭(예: 성별 즉, 남성 또는 여성과 같이 숫자가 아닌 값), 순서(크기의 순서로 구분 가능한 것), 차이(예: 중력 위치에너지) 및 비율(예: 이전에 원자량으로 알려진 상대 원자량) 등 4가지 양으로 구분된다. 이러한 일반화가 현재의 용어보다 더 포괄적이기는 하지만 재료측정학에서 직면하고 있는 논리적 딜레마는 해결하지 못한다.

이 새로운 용어가 측정과학의 공식적 영역에서 배제된 모든 재료특성을 포용하기는 하지만 기존의 측정학 범위에는 변함이 없기 때문에, 이 용어와 그전에 있었던 용어를 기초로 재료측정학을 다시 분류할 수 있다.

#### 나. 재료측정학의 분류

재료측정학을 측정가능한 양과 절차적 양의 두 부분으로 세분할 수 있다는 것을 앞서 검토한 바 있다. 기존 측정학의 범주에서 측정가능한 양은 분명 전자에 속하지만 일부 재료특성은 이전 유형에 속하고 일부는 후자 유형에 속한다. 두 부분에 속하는 재료특성을 구분하기 위해 2개의 용어를 추가로 도입한다.

**고유재료특성(inherent material property):** 측정 가능한 양인 재료특성

**절차적 재료특성(procedural material property):** 절차적 양인 재료특성

또한 재료측정학에서 상당히 중요성을 가지고 있는 구조(structure)라고 하는 측정 가능한 양을 또 하나의 추가 분류로 구분하는 것이 편리하다. 예를 들어, 이상적인 단원자결정(monatomic crystal)은 공간에서 평형 위치가

주기적격자(periodic lattice)에 분산되어 있는 동일 원자들의 집합으로 구성된다. 이 주기적 격자에서 각 위치는 잘 정의된 대칭동작 그룹으로 서로 관련된다.

이러한 격자의 부피는 셀이라고 하는 동일 형태의 작은 부피로 더욱 세분할 수 있는데 이러한 셀 중 어느 하나를 대칭 이동시키면 전체 부피를 만들어낼 수 있게 된다. 이러한 부피 생성에서 스스로 선택한 셀을 단위 셀이라고 하고 이러한 셀 중 가장 작은 셀을 원시 셀이라고 한다.

일반적으로 기호  $a$ ,  $b$  및  $c$ 로 표기하는 단위 셀의 주축 길이는 측정 가능한 양이며, 각 축 사이의 길이와 각도는 전체적으로 격자 상수를 구성한다. 또한 단위 셀 내에서 원자의 위치는  $a$ ,  $b$  및  $c$ 에 상대적으로 측정하고 표현할 수 있다. 대칭 그룹, 격자 상수 및 원자의 상대 원자 좌표로 결정구조(crystal structure)가 규정된다. 따라서 결정구조는 재료의 특성을 분석하는데 이용되는 특별한 구성개념이며 양립성과 편리성을 위해 이 특별한 구성개념을 측정 가능한 양의 특별한 분류로 생각하는 것이 바람직하다.

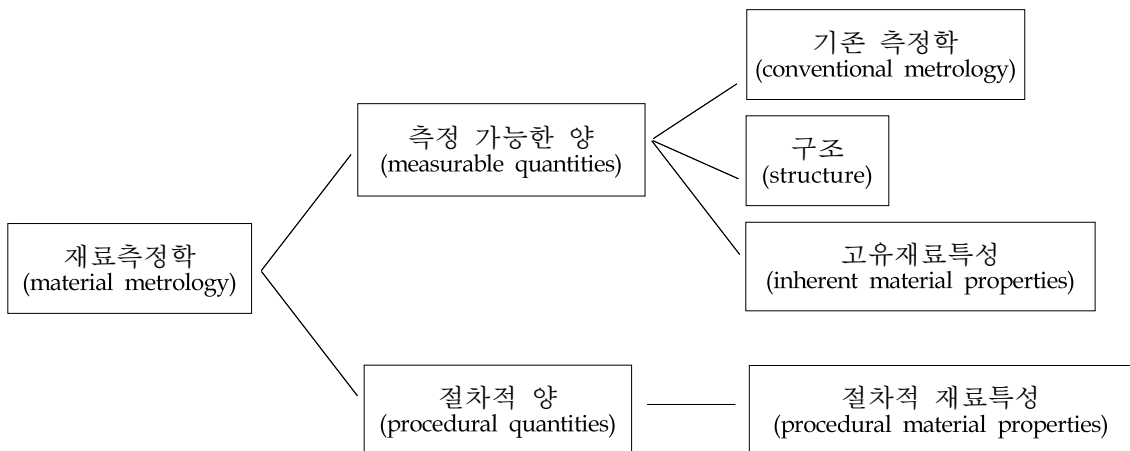


그림 1. 재료측정학의 분류표

이상에서 검토한 재료측정학의 기본적 분류 체계를 그림 1로 나타냈다. 이 분류 체계는 재료측정학에 관련된 모든 측정의 전체 분류로 쉽게 확장할 수 있다. 표 1 ~ 표 4에는 이러한 분류법으로부터 분류 체계를 어떻게 도출할 수 있는지를 나타냈다. 본 기술서에는 재료과학 및 엔지니어링과 관련된 약 130가지의 측정 가능한 양과 절차적 양을 재료측정학에 대한 새로운 분류법에 따라 분류하여 보았다.

표 1. 기존 측정학에서 측정 가능한 양의 예

구 분	양
기본량 (base quantities)	길이, 질량, 시간, 전류, 온도, 물질의 양, 광도
유도량 (derived quantities)	변형, 면적, 부피, 농도, 속도, 가속도, 힘, 압력, 응력, 전압, 전하, 정전용량, 전류밀도, 저항

표 2. 재료측정학에서 측정 가능한 구조의 양을 나타낸 예

구 분	세구분	양
단위구조 (unit structure)	결정학	격자상수, 원자좌표
	비정질학	방사분포 함수
미세구조 (micro structure)	입자 및 기공	입도분포, 평균크기, 종횡비, 조직
	수지상	평균크기, 방향, 분기밀도
	상평형	상변태 온도, 상변태 압력, 유리전이 온도, 큐리 온도, 널 온도, 삼중점 온도
	상계면 영역	두께
	자구 (magnetic domain)	평균크기, 종횡비, 방향
표 면 (surface)	표면 형태	거칠기 평균크기, 종횡비, 방향, 표면 거칠기, 균열크기, 방향, 깊이
	박막 및 증착	두께
전 자 기 (electromagnetic)	전하 분포	원자가, 이온성, 공유 결합, 스핀, 공간 전하밀도

표 3. 고유재료특성에서 측정 가능한 양을 나타낸 예

구 분	세구분	양
기 계 (mechanical)	탄성	영률, 층밀리기 탄성율, 부피탄성율, 압축률, 포아송비, 탄성텐서, 순응텐서, 음속, Debye 온도
열 (thermal)	용량	비열, Gruneisen 파라미터
	전도	열전도도, 열확산도, 방출률, 경계면저항
	안정성	열팽창, 잔류변형력
전자기 (electromagnetic)	전기	저항, 전도도, 열기전력, Hall 상수, 임계전류 밀도
	자성	감수율, 보자력, 임계자기장강도
	광학	유전강도, 굴절률, 유전율, 투과도, 반사도, 흡수도

표 4. 절차적 재료특성에서 절차적 양을 나타낸 예

구분	세구분	양
기계 (mechanical)	소성	연성, 연성취성전이점, 경도, 크립속도, 크립활성화 에너지, 크립응력지수
	강도	항복강도, 비례한계, 인장강도, 굽힘강도, 층밀리기 강도, 압축강도, 극한강도, 파괴인성, 파괴에너지, 피로강도, Weibull 계수, Weibull 특성 강도
열 (thermal)	안정성	가연성
내구성 (durability)	열기계적	열충격 저항
	접착	접착 강도
	마찰학	마찰계수, 마모율, 마모계수, 감마력, 가공속도
화학적 노화 (chemical aging)	부식	부식속도, 활성화에너지
	수화	수화속도
	상호확산	확산속도
물리적 노화 (physical aging)	박리	박리속도

재료측정학에 대한 이러한 분류체계를 잘 이해하면 측정기술을 보다 깊이 있게 활용할 수 있으며, 측정과학의 모든 분야에서 측정의 재현성은 다른 어떤 고려사항보다 중요하기 때문에 측정기술에서 가장 중요한 요소가 된다. 이러한 기본적 중요성 때문에 측정절차를 표준화하려는 움직임이 활발히 전개되어 왔다. 이러한 과정에서 대안적 절차를 모색하거나 같은 측정량에 대한 여러 측정방안을 비교해보는 일이 드물지 않다. 한 측정량에 대한 두 가지 측정방안이 상당히 다른 경우, 두 측정방안의 상대적 장점에 대한 논의가 과도하게 이어질 수 있다.

측정 가능한 양과 절차적 양 사이의 차이를 이해한다면 이러한 논쟁에서 비생산적인 측면을 어느 정도 줄일 수 있을 것이다. 절차적 재료특성에 관련된 측정일 경우 개별 측정이 작은 불확도를 갖고 높은 재현성을 보이더라도 정량적 결과는 상당히 다를 수 있다. 따라서 절차적 재료특성의 경우 이러한 두 측정의 차이를 해결한다는 것은 이론적으로도 불가능할 수 있으며 이러한 노력에 자원을 들이는 것은 비생산적이고 쓸모없는 행동일 수 있다.

재료측정학과 기존 측정학의 관계를 다시 한번 살펴보면, 기존 측정학은 재료과학 및 엔지니어링의 세부적 내용과 기술적 필요성에 맞춰 측정과학을 합리적으로 연장하기 위한 기반으로 역할을 하는 반면, 재료측정학은 기존의 측정학과 직접적으로 부합되지 않는 측정 부분을 포함시킴으로써 이러한 기초를 확장하는 것이다. 측정과학의 한 요소로 도입된 절차적 양이라는 개념을 통해 이러한 차이를 해결하고 재료측정학이라는 학문 분야가 기존의 측정학과 형식적, 논리적으로 일관되고 부합되도록 하게 된다.

### 3. 미국립표준기술연구원(NIST)의 재료·금속 데이터평가 현황

NIST에서는 재료금속 데이터의 등급을 분류하는 준거 시스템이 발행 기술문서에서 발췌한 데이터로 구성한다. 이 경우, 실험실에서 데이터베이스로의 데이터 계승은 NIST가 데이터를 받아들이는 상황과 관련이 있다. 대부분의 경우, 데이터의 계승은 재료 및 측정 장비의 제작이나 조달로부터 시작한다. 이어서 테스트를 위한 시편을 준비하고 측정기와 환경적 파라미터를 설정한 후 측정을 수행한다. 원시데이터를 수집 또는 처리하거나 분석한 후, 측정과 결과를 설명하는 보고서를 작성한다. 보고서는 프로젝트 후원 기관, 컨퍼런스 또는 학회지로 보내질 수 있으며 검토 후 해당 매체에 논문으로 게재되게 된다.

이 기본적 시나리오에서 자연스럽게 몇 가지 고려해야 할 사항이 생기게 된다. 제일 먼저 고려해야 할 부분은 프로젝트의 성질에 관한 것이다. 즉, 프로젝트가 일반적 연구로 진행되었는지, 아니면 어떤 특별한 방식으로 다루어졌는지에 대한 것이다. 예를 들어, 재료특성 측정을 위한 표준물질(reference material) 제공을 목적으로 기존의 표준환경 실험실에서 이루어지는 프로젝트는 특별한 것으로 취급할 수 있다. 이러한 연구에 규정된 엄격한 요건은 보통 완전히 정의되어 문서화된 경우가 많으며 일반적으로 측정실험실에서 결과로 얻은 특성 값을 명시적으로 인증한다. 측정교정에서 표준물질이 갖는 중요성을 감안하면 **인증 값(certified value)**은 사용자 커뮤니티에서 사실상 수용된 것이며 특별한 등급으로 인정을 받는다.

기술의 최첨단에서 이루어지는 측정으로 프로젝트를 구분할 수도 있다. 이 경우, 재료나 실험은 최초로 보고되는 혁신적 성과를 나타낼 수 있다. 그 결과는 초보적이거나 잠정적일 수 있지만 결과가 매우 바람직하기 때문에 시급히 발표할만한 근거가 된다. 이러한 연구를 일반적으로 **진행 중인 연구(research in progress)**라고 말할 수 있는데 이러한 등급의 명칭을 사용하면 결과가 최근의 것이며 그 값은 잠정적이라는 것을 사용자에게 주의를 환기시키는 것이다.

NIST의 측정환경에서 다소 자연스럽게 다루는 세 번째 등급은 **상용데이터(commercial data)** 등급이다. 이 등급은 일반적으로 고객에게 자사의 제품에 대해 알려주어야 하는 재료 제조업체에서 가장 큰 관심사이다. 따라서 상용 재료를 제조하는 업체는 일반적으로 주요 특성에 대한 특성 데이터를 제공할 때 매우 세심한 주의를 기울이게 된다. 이러한 데이터는 재료를 유용하게 사용하기 위한 지침으로 활용된다는 견해가 많다. 이와 관련하여 제조업체는 보고된 값이 생산 배치(batch)의 몇몇 재료 시편을 사용하여 얻은 결과를 대변한다고 주장할 수 있다. 따라서 제조업체는 표 형식으로 특성 값을 표시하여 측정 조건에 대한 명목상 정보를 제공할 수 있다. 일반적으로 사용자의 후속적인 논의나 평가 없이 간행물에 이러한 값을 보고하여 기술 문헌에 데이터를 보급시키는 일은 흔하다.

NIST내에서는 모든 형태의 재료특성을 분석하고 파악하여 특성을 개선시키려는 목적으로 진행되는 광범위한 독립적 재료연구 프로그램을 통해 재료 특성을 밝히려는 노력들이 지속적으로 이루어지고 있다. 측정을 수행하는 실험실은 일반적으로 측정 장비를 획득, 개발 또는 개선시키기 위해 상당한 자원을 투자하고 있으며 이러한 연구에 투입된 인력은 측정 기법에서 상당한 경험과 전문지식을 쌓는 경우가 많다. 따라서 이러한 노력은 실험실이 가진

능력과 기술력에 적합한 하나 또는 그 이상의 재료특성에 중점을 두는 경향이 있다. 이러한 프로그램에서 발행한 보고서는 전통적 연구관행을 따르고 있다. 즉, 연구의 배경과 현재의 목표를 설명하는 전반적 소개가 있는 후 재료와 측정기법을 세부적으로 논의한다. 이 부분에서는 일반적으로 다른 숙련된 연구팀이 대등한 장비를 가지고 실험을 재현할 수 있도록 충분히 자세하게 보고하라는 일반적 가이드라인이 사용된다. 이렇게 세부 사항과 조건규정에 대한 설명이 있어야 독자가 측정의 결과, 분석 및 논의를 받아들일 수 있는 개념정립 단계로 넘어갈 수 있게 된다. 이런 식으로 실행되고 보고된 연구는 평가 데이터베이스의 상징적 근간으로 작용한다. 이러한 근본적 역할에 비추어 이러한 형태인 것으로 확정된 데이터를 NIST에서는 **유효데이터(validated data)**로 분류하고 있다.

유효데이터 등급의 중요한 특징은 많은 실험연구 결과가 독립적으로 확인되어 보고된다는 것이다. 그러나 NIST에서는 때로는 일정 범위의 조건이나 일정 범위의 재료에 걸쳐 특성이 어떻게 변하는지를 개괄적으로 고찰하는 연구도 수행한다. 개괄적 고찰에 일반적으로 이용되는 방법은 문헌에서 유사한 연구를 조사하고 결과를 종합하는 것이다. 이런 식으로, 여러 관측 결과로 얻은 값을 일반적 재료나 측정 조건별로 구분할 수 있는데 NIST에서는 이를 **상징 값(typical value)**이라고 한다. 이와 같이 어떤 명시된 조건에서 문헌 조사방법으로 도출한 상징 값은 관측된 값의 경향만을 일반적으로 대표할 뿐이지 특정한 시편에 반드시 적합하다고는 할 수 없다. 상징 값을 이용할 수 있는 경우로는 우선, 어떤 재료 등급에 대표적인 크기를 유용한 순서로 예측할 수 있고 두 번째, 거듭제공 범칙이나 특정 형태의 화학 도핑에 대한 의존성 등의 함수적 경향을 확인할 수 있는 것 등을 들 수 있다.

유효 데이터와 문헌 조사로 자료를 수집하면 신뢰할 수 있는 모델이나 특성 사이의 상관관계를 설정하기 위한 좀 더 깊이 있는 심층 분석의 기초를 마련할 수 있다. NIST에서는 이러한 모델과 상관관계를 특정 재료에 대한 특성 값을 더욱 최적화하거나 정확하게 수정하여 예측함으로써 평가 데이터의 신뢰성을 강화하는데 이용하고 있다. NIST에서는 이러한 데이터를 **검증데이터(validated data)**로 등급분류하고 있으며 검증데이터는 동일 재료에 대한 다른 특성과의 상호 일관성을 기준으로 평가하고 있다.

NIST에서는 유효성이 검증되거나 유효하다고 할 수 없지만 측정을 수행하면서 문서화된 기타 데이터도 다른 특성에 관련 상황을 제공하는 보완적 정보로 유용하게 사용하고 있다. 예를 들어, 밀도는 측정된 방법에 대한 언급이나 보고된 값의 출처에 대한 어떠한 언급도 없이 보고하는 경우가 많다.



이러한 경우 데이터를 유용한 평가에 쉽게 이용할 수는 없으나, 동일 보고서에 포함된 다른 특성 측정의 상황을 이해하는데 필수적으로 이용하는 경우가 많다. 따라서 상황적 정보를 기록하는 동시에 보고된 값을 어떤 식으로도 평가할 수 없다는 것을 분명하게 나타내기 위해 NIST에서는 이를 **미평가데이터(unevaluated data)**로 분류하고 있다.

데이터베이스가 제공하는 서비스의 형태에 따라 다른 등급도 얼마든지 정의할 수 있으나 NIST에서는 재료특성 데이터베이스에 포함된 데이터를 표 5에 요약한 7가지 등급으로 분류하고 있다.

**표 5. NIST의 데이터평가 등급**

등 급	내 용
인증(certified)	알려진 생산배치에 특정한 표준참조 값
검증(validated)	상호 관계와 모델을 통해 확인
유효(qualified)	기본적 수용 기준을 만족
상용(commercial)	특정 상용재료에 대한 제조업체 데이터
상징(typical)	명목상 유사한 재료를 조사하여 도출
연구(research)	진행 중인 연구에서 얻은 예비 값
미평가(unevaluated)	기타 모든 데이터

## 4. 재료금속 데이터의 평가

### 가. 일반 고려사항

데이터를 편집하는 작업은 언제나 하나의 최우선적 고려사항인 “값을 신뢰할 수 있는가?”라는 문제 때문에 어려움을 겪고 있다. 이러한 우려는 데이터평가의 중요성을 부각시키고 평가절차에 세심한 주의를 기울여 일관되게 수행해야 한다는 것을 강조하고 있다. 더 강조하여 말하면, 첨단 기술에서 데이터는 매우 중요한 역할을 하기 때문에 데이터품질은 반드시 최고 수준이어야 하기 때문에 데이터평가는 매우 중요하다는 것이다. 최고수준의 데이터 품질을 얻기 위해서는 데이터에 적용하는 평가기준은 신뢰성에 가장 높은 우선순위를 두어야 한다.

그러나 데이터를 얻기까지는 상당히 많은 자원이 투입된다는 것을 고려해야 한다. 적합한 장비, 측정절차, 재료 및 전문지식을 구하기 위해 들어간 비용은 특정한 데이터 집합을 측정하는데 소비된 직접비용을 크게 웃돌며

후자의 지출만도 상당히 클 수 있다. 따라서 데이터평가는 모든 데이터를 잠재적으로 유용한 것으로 전제해야 하며 전혀 쓸모가 없는 것으로 여겨지는 경우에만 데이터를 폐기해야 한다. 결론적으로 데이터평가 패러다임은 (1) 데이터의 신뢰성을 보장한다 (2)이유 없이 데이터를 폐기하지 않는다는 두 가지 원칙이 균형과 조화를 이루도록 하여야 한다.

실험데이터에서 가장 우선적으로 고려해야 할 신뢰성 증명방법은 재현성 있는 결과를 만드는 것이다. 다시 말하면, 독립된 여러 연구 또는 실험에서 상호일관성 있는 결과를 얻어야 한다는 것이다. 이러한 재현성 개념은 한번 관측한 것을 되풀이 한다는데 초점을 두고 있기 때문에 데이터의 1차원적 평가로 생각할 수 있다.

다른 측정과의 상호 관계 및 이론적 모델을 사용하면 더 높은 차원의 평가가 가능하여 더 높은 신뢰도를 얻을 수도 있다. 이 접근방식은 관련속성에 대한 다수의 독립된 관측 결과를 함께 사용하여 이들 중 어느 하나에 대한 신뢰도를 평가하는 것을 의미한다.

각 특성은 서로 다른 관점에서 측정되고 여러 특성에 걸친 관측결과가 일관성이 있을 경우 개별특성 중 어느 하나가 더 신뢰도가 높다고 할 수는 없고 데이터 전체의 신뢰도가 높다고 할 수 있다. 이러한 고찰은 데이터평가의 근간을 형성하는 독립성, 반복성 및 다중성에 대한 일반적 주제를 부각시키는 동시에 데이터평가규정을 제정하는 기초를 제공한다.

## 나. 데이터평가 관련 규정

2006년 7월 31일 산업자원부에서 고시한 “참조표준 제정 및 보급에 관한 운영요령(산업자원부 고시 제2006-86호)”에서는 참조표준의 정의와 분류 및 평가기준으로 다음과 같이 명시하고 있다.

### 1) 참조표준의 정의

요령 제2조에 참조데이터와 참조표준을 다음 정의에 따라 구분하고 있다.

- 참조데이터 : 참조표준으로 등록되기 전의 수치데이터 또는 과학기술적 통계를 말한다.
- 참조표준 : 측정데이터 및 정보의 정확도와 신뢰도를 과학적으로 분석·평가하여 공인함으로써 국가사회의 모든 분야에서 널리 지속적으로 사용되거나 반복사용이 가능하도록 마련된 자료로서 유효참조표준, 검증참조표준, 인증참조표준으로 분류한다.

## 2) 참조표준의 분류

요령 제10조에서 참조표준의 등급을 유효참조표준, 검증참조표준 및 인증참조표준 등 3가지로 구분하고 등급부여 기준을 다음과 같이 정하고 있다.

- 유효참조표준 : 참조데이터 중에서 참조표준의 기본요구조건을 만족시키는 참조표준
- 검증참조표준 : 유효참조표준 중에서 잘 알려진 연관식과 모델링을 통한 예측 가능성이 검증된 참조표준
- 인증참조표준 : 검증참조표준 중에서 관련 전문가의 최종종합평가를 거쳐 인증된 최 상위 참조표준

## 3) 참조데이터의 기술평가기준

요령 제9조에서 참조데이터를 평가하여 참조표준으로 등급부여하기 위한 기준을 다음과 같이 정하고 있다.

- 측정대상이 명확하게 명시되어 있는지 여부
- 측정방법 및 이론계산에 대한 설명 내용 명시 여부
- 측정방법의 불확도 평가 및 소급성 유지 여부
- 측정방법의 적절성 및 한계 명기 여부
- 측정결과에 영향을 줄 수 있는 변수의 적절한 제어 여부
- 데이터의 오차율 및 정확도 등의 제시 근거
- 제3자에 의해 측정방법의 재현이 가능하도록 측정방법과 절차가 자세히 명기되었는지의 여부
- 다른 방법에 의해 얻어진 결과와 측정결과의 일관성 여부
- 잘 알려진 법칙과 일치하는지 여부
- 잘 알려진 연관식과 모델링을 통한 데이터의 예측가능성 검증
- 관련분야 제3의 전문가 종합검토를 받았는지 여부

## 4) 참조표준의 등급부여 기준

참조데이터의 기술평가기준 중 참조표준의 기본요건인 제1호 내지 제7호를 만족하는 참조데이터는 “유효참조표준”으로 등급부여하며, 제8호에서 제10호까지의 일관성과 예측가능성 기준을 만족시키는 유효참조표준은 검증참조표준으로 등급부여 하여 전문가의 종합검토를 받아서 모든 기술평가기준을 만족시키는 검증참조표준은 인증참조표준으로 등급부여 한다.

## 5) 참조데이터의 종류

미국국립표준기술원(NIST)에서는 데이터는 많은 비용을 들여 생산한 것이기 때문에 함부로 폐기하여서 안 된다는 전제하에 데이터를 7개 등급으로 분류하여 사용하고 있다. 우리나라의 경우 7개 등급 중 유효, 검증 및 인증 데이터는 참조표준으로 분류하고, 나머지는 참조표준의 기본 자료가 되는 참조데이터로 분류하고 있는데 대표적인 참조데이터로는 다음과 같은 것이 있다.

### 가) 생산자데이터

재료의 제조업체 및 공급업체는 일반적으로 고객에게 제품에 관한 특성 데이터를 제공할 때 세심한 주의를 기울이게 된다. 그러나 때에 따라서는 명목 값 또는 간략한 표시 값으로만 보고하는 경우도 있는데, 이러한 데이터는 여러 재료 생산 배치에서 준비한 시편을 사용하여 얻은 결과의 상징 값(typical)으로 제시된다. 이러한 상징 값은 많은 경우 추가적인 논의나 평가 없이 발간물에서 인용되기도 한다.

### 나) 문헌조사데이터

일정 범위의 조건이나 재료의 범위에 걸쳐 특성이 어떻게 변하는지에 대해 개관하는 것이 필요한 경우가 있다. 이러한 경우 사용되는 일반적인 방법은 문헌에서 유사한 연구를 검토하고 그 결과를 종합하여 보는 것이다. 문헌 조사에서 도출한 값은 관측된 값의 경향만을 일반적으로 대표할 뿐이지 특정한 시편에 반드시 적합하다고 할 수는 없다. 상징값(typical value)은 크기 순서를 추정하는 경우와 온도에 대한 거듭제곱 의존성 등 함수적 경향을 나타낼 때 유용하다.

### 다) 보충데이터

논문에서 하나의 특성에 상대적으로 많은 비중을 두어 이 특성을 측정 한 부분은 상당히 세부적으로 논의하는 반면 기타 특성은 간략하게만 언급하는 경우가 적지 않다. 이러한 추가적 데이터는 주요 측정 상황을 쉽게 정의하기 위한 보충적 정보를 제공하려는 목적인 경우가 많다. 이러한 성질의 보충 데이터는 보통 측정 세부 사항에 대한 논의 없이 보고된다. 밀도가 대표적 예이다.

## 라) 연구데이터

컨퍼런스 발표 자료, 후원 기관에 제출하는 중간보고서 또는 기타 상황 보고서에서 예비 결과를 보고하는 경우가 가끔 있다. 관련 분야에서 최초로 얻은 결과도 연구가 종결되기 전에 간략한 의사 교류로 보고될 수 있다. 이 경우, 보고된 값은 추가적 연구가 필요하고 최종 연구 보고서에서 달라질 수도 있으나 적시성과 현재 상황에 대한 관심이 크다면 예비 값을 보고해야 할 경우도 있다.

## 다. 데이터평가 절차

데이터평가는 데이터가 “수용”될 수 있는 기준의 부여를 의미한다. 또한, 이 기준은 데이터가 사용될 목적이나 기능에 따라 결정되게 된다. 그 결과, 어떤 상황에서는 다른 상황보다 더 엄격한 조건이 필요하다는 것을 쉽게 짐작할 수 있으며 따라서 수용기준이 서로 다른 다수의 등급을 가진 평가 체계를 구성해야 한다.

수용등급의 수에 관계없이 데이터평가의 최종적 결과는 일단의 데이터가 수용되거나 거부되는 것이다. 수용되지 않은 데이터는 허용되는 모든 수용범주의 기준을 만족시킬 수 없는 데이터이며 이러한 모든 데이터는 간단히 “수용불가”라고 분류된다.

“수용불가”라는 결론을 얻으면 데이터베이스에서 해당 데이터를 즉시 배제시키거나 데이터베이스에 등록시켜서는 안 된다. 이 경우, 데이터평가는 주어진 데이터베이스에서 데이터의 활용분야가 없다는 것이 인지될 때 까지 데이터 또는 이와 관련된 메타데이터의 중대한 결함을 밝혀야 한다. 이러한 의미에서 “수용불가”가 곧 “잘못된” 데이터로 폐기하여서는 안 된다.

예: 어떤 논문에 두 재료의 경도에 관한 보고서가 있다고 하고 보고서에 “재료 A의 경도 값은 31이고 재료 B의 경도 값은 17이며 각각 포함인자  $k=2$ 에서 확장불확도가 1이다”고 나와 있다고 하자. 이 값으로부터 재료 A가 재료 B보다 더 단단하다는 것을 쉽게 이해할 수 있으며 이러한 상황이 자신의 목적에 관련되는 경우, 이 정보를 보완적 메타데이터로 받아들일 수는 있으나 이 보고서에 어떤 경도 측정방법이 사용되었는지에 관한 정보가 없으며 수치 값의 단위가 어떤지도 알지 못한다. 그 결과, 보고된 값은 독립적으로 해석할 수 없기 때문에 데이터베이스에 “등록불가”로 평가되어야 한다.

수용 가능한 데이터는 데이터가 수용될 수 있는 어떤 등급 기준을 만족시키는 데이터를 의미한다. 등급을 결정하는 기준은 데이터의 목적이나 특성에 따라 달라질 수 있기 때문에 모든 유형의 기준에 대해 평가체계를 자동화하기는 불가능하다. 이러한 경우, 연역적이고 계층적인 규정의 형태로 동등한 대안적 접근방식을 고려해 보는 것이 좋다. 보통의 등급기준에서는 수용 또는 불가의 두 가지 반응만 있기 때문에 단순한 이진 필터로 볼 수 있다. 이러한 관점에서, 데이터집합을 특정한 등급으로 받아들이는 것은 이러한 일련의 필터에 데이터를 성공적으로 통과시킨 것으로 볼 수 있다. 어떤 필터에서라도 기준이 만족되지 못하면, 데이터 집합은 다른 일련의 필터로 전달되거나 아니면 수용불가로 종결된다. 따라서 평가 규정은 분기를 통해 대안적 체인으로 상호 연결된 선형적 필터체인의 집합으로 볼 수 있다. 이러한 분기 체인의 집합은 의사결정 트리의 전통적 모델이다.

평가 프로세스를 나타내는 의사결정 트리를 구성하기 위해서는 개별 필터의 성질을 고찰해야 한다. 필터의 정성적 결과의 측면에서, 일단의 허용된 최종결과 즉, 의사 결정 프로세스를 종결하는 의사 결정이 있어야 한다. 필터작용으로 다른 결과가 나온다면 의사 결정 프로세스는 계속된다.

따라서 형태적으로 결정적(이중으로 종결), 반 결정적(단일하게 종결) 및 분기(비 종결)의 세 가지 이진필터 유형만 고려하면 된다. 필터가 결정적 결과를 갖는다면 의사 결정 프로세스는 완결된다. 반 결정적 필터는 체인을 종결하거나 체인을 다른 필터로 연장시킬 수 있다. 분기 필터는 트리에서 분기 지점을 나타내고 초기체인이 분할되어 두 개의 분기로 연장되도록 한다.

이러한 세 가지 유형의 필터만 사용하면 데이터평가를 위한 의사결정 트리를 완벽하게 구현할 수 있다. 데이터평가에 둘 이상의 수용 등급이 있어야 하는 근본적 이유는 없다. 그러나 논리 정연한 분류체계의 편리성과 그렇게 하려는 욕구 때문에 다수의 등급을 사용하기로 결정을 내리거나 그러기를 바라는 경우가 종종 있다. 이러한 다소 임의적인 선택이 받아들여지면 마찬가지로 임의적 작업인 사용할 등급의 선택 과정이 뒤따르게 된다. 이러한 후속작업 또한 임의적이기는 하지만 데이터 시스템에서 서비스를 제공하는 목적에 입각하여 등급이 결정되도록 한다면 상당히 합리적으로 접근해 볼 수 있다.

우리나라 참조표준제정 및 보급에 관한 운영요령에 명시된 참조표준 등급부여를 위한 기술평가기준에 따른 데이터 평가절차를 필터를 사용한 의사결정트리로 나타내면 그림 2와 같다.

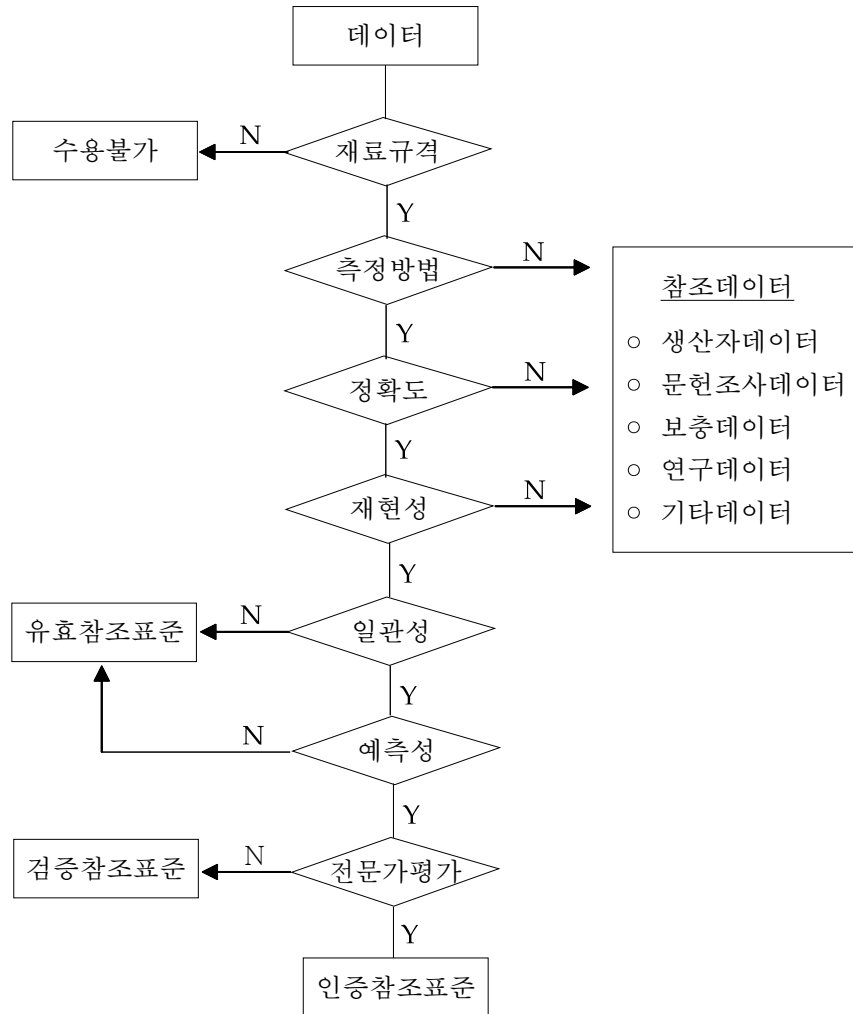


그림 2. 데이터평가 절차

### 1) 재료규격

운영요령 제9조의 기술평가기준의 첫 번째 항목은 측정대상이 명확하게 명시되었는지 여부를 묻고 있다. 이것은 재료에 대한 명시가 목적에 부합하지 않으면 재료특성데이터가 아무 소용이 없다는 관점에서 비롯된다.

미국의 경우 재료를 명시하고 목적에 부합여부를 판단하기 위한 구체적인 가이드라인이 ASTM에 광범위하게 명시되어 있다. ASTM 체계는 7가지 명확한 명세화 정보항목과 보완적 정보를 위한 일반항목을 제시하고 있다. 이러한 항목에는 식별자(예: 금속 등급), 폭 넓게 수용된 규격 코드(예: M-52 강), 재료의 특성화 분석(예: 화학 조성 측면에서), 재료의 원료 및 처리 내역, 측정에 사용된 시편의 세부형태, 그리고 측정에 사용된 시편을 사용하여 제공

한 서비스 내역과 제조처리(예: 열처리) 등이 있다.

그러나 재료명세화의 적합성은 데이터의 목적에 따라 좁게 또는 넓게 해석할 수 있다는 것이 일반적 인식이다. 대부분의 특성데이터의 경우, 재료명세화의 기본적 목적은 독립적으로 연구하는 사람이 최초 연구와 유사한 시편을 준비하거나 얻을 수 있도록 충분한 정보를 제공하는 것이다. 따라서, 재료규격에 관한 질문은 데이터군의 목적과 명세화 정보가 제공되는 범위에 관한 것이어야 한다.

## 2) 측정방법

측정 방법을 설명하는 기본적 목적은 독립적으로 연구하는 사람이 같은 측정을 수행할 수 있을만한 충분한 정보를 제시하는 것이다. 모든 측정 기법은 그에 관련된 측정 불확도가 있고 사용범위가 제한되어 있어 다른 방법을 대신하여 사용할 수 없다. 이를 고려하여 운영요령 제 9조의 기술평가기준에서는 측정방법과 관련하여 측정방법 및 이론계산에 대한 설명내용 명시여부와 측정방법의 적절성 및 한계여부를 평가하도록 되어 있다. 때로는 다른 재료등급이 제공하지 않는 특성을 활용하면 특정한 재료등급이나 하위등급에 대한 측정 기법을 개발할 수 있다. 더욱이, 절차적 특성의 측정결과는 측정을 수행할 때 적용되는 특정한 절차에 따라 달라진다.

Vickers 경도와 Knoop 경도 사이의 차이가 바로 그러한 경우이다. 이 두 방법은 기계적 과정에서 매우 유사한 경도측정방법이다. 각 방법은 정상적 부하의 압흔기를 사용하여 재료표면에 압흔을 만들고, 인가된 힘과 남겨진 압흔의 면적비율로부터 재료의 경도측정값을 계산한다. 그러나 이 두 경도측정값은 다음과 같은 두 가지 이유 때문에 필연적으로 다를 수밖에 없다. (1) 두 방법에 사용된 압흔기의 모양이 서로 다르다. (2) 하나의 방법은 압흔의 실제 표면적을 사용하고 다른 방법은 투영된 표면적을 사용한다.

대부분의 경우 측정방법을 분명히 밝혀야 하나, 보충데이터를 보고할 때는 측정방법을 밝히지 않는 경우가 많다. 예를 들어, “밀도는  $3.21 \text{ g/cm}^3$ 이다.”는 식으로 시편의 밀도를 간략하게만 보고하는 경우가 많다. 이러한 보충데이터는 동일 보고서의 다른 특성데이터를 이해하거나 사용하는데 매우 중요할 수 있기 때문에 측정절차에 대한 정보가 부족하다고 곧바로 데이터군을 폐기하는 것은 바람직하지 않고 참조표준은 되지 못하나 참조데이터로는 활용이 가능하다는 점을 고려해야 한다.



### 3) 정확도

참조데이터의 정확도는 재현성과 더불어 데이터의 신뢰성평가에 가장 기본이 되는 요건이다. 데이터가 나타내는 수치가 정확하지 않다면 데이터의 재현성이 아무리 좋아도 그 데이터는 신뢰할 수 없게 된다. 데이터의 정확도와 관련된 요건으로서는 크게 불확도 요인의 관리여부와 불확도 추정여부가 있을 수 있다. 불확도 요인으로는 다음과 같은 것이 있다.

- 측정량에 대한 불완전한 정의
- 측정량의 정의에 대한 불완전한 실현
- 대표성이 없는 표본 추출
- 측정환경의 효과에 대한 지식부족 및 환경조건에 대한 불완전한 측정
- 아날로그 기기에서의 개인적인 판독 차이
- 기기의 분해능과 검출 한계
- 측정표준과 표준물질의 부정확한 값
- 측정방법과 측정과정에서 사용되는 근삿값과 여러가지 가정
- 외관상 같은 조건이지만 반복적인 측정에서 나타나는 변동

데이터의 신뢰도를 향상시키기 위해서는 이러한 요인들 중 어떤 요인들이 데이터의 불확도에 영향을 주고 있는지를 파악해서 관리할 필요가 있다. 불확도 요인을 효율적으로 관리하고 그 증빙자료를 남기기 위해 많은 경우 데이터생산과 관련된 불확도추정절차를 제정하고 실제 이를 적용하고 있다. 불확도 추정과 관련하여서는 다음의 2가지 항목을 확인할 필요가 있다.

- 불확도 추정 절차를 제정하고 적용하고 있는지 여부
- 불확도 추정의 타당성과 근거

불확도와 데이터의 신뢰도와와의 관련성을 나타내는 좋은 사례로는 기본 물리·화학상수의 불확도 변천을 들 수 있다. 기본 물리·화학상수는 세계적으로 공인된 인증참조표준으로서 현재 사용되고 있는 참조표준 중에서 가장 정확한 참조표준이라고 할 수 있다. 이와 같이 가장 정확한 참조표준도 불확도를 갖고 있는데 그 불확도는 점차 감소되고 있다. 이는 과학기술의 발전과 더불어 참조표준에 요구되는 정확도수준이 높아지고 있기 때문에 불확도 요인을 잘 파악하고 관리한 결과라 할 수 있다.

표6. 기본 물리상수의 불확도 변화추이

상수	정밀도 parts per million(ppm) in:			
	1929	1963	1973	1983
$c$ (진공중 빛의 속도)	20	0.3	0.004	-
$e$ (전기소량)	1660	15	2.9	1.8
$h$ (플랑크상수)	1800	25	5.4	3.6
$N_A$ (아보가드로상수)	1000	15	5.1	3.6
$k$ (볼츠만상수)	279	43	32	25
$G$ (중력가속도)	1140	750	615	86
$\bar{a}^{-1}$ (미세구조상수)	175	5	0.8	0.2

#### 4) 재현성

재료분야 데이터의 재현성은 측정대상과 측정방법이 서로 독립된 실험이나 생산에서 얼마나 똑같이 재현될 수 있는가와 관련된 문제로서 측정방법이나 측정대상이 다르면 데이터도 달라질 수밖에 없기 때문에 데이터 신뢰성에 가장 기본이 되는 요건이다.

재현성은 측정대상과 측정방법의 명세화(identification), 설명(description) 및 대체가능성(comparability)과 관련된 것으로 이미 본 평가절차의 1)항과 2)항에서 설명한 바 있다. 동일한 특성을 여러 방법을 사용하여 측정할 때 데이터 평가자는 각 방법이 가진 한계를 잘 알아야 한다. 재현성 평가의 실례로서 세라믹 분말의 순회시험(round robin test) 사례를 알아보기로 한다. 세라믹 분말의 평균 입도를 여러 시험소에서 각각 다른 방법을 사용하여 측정한 경우를 검토하기로 한다.

다결정 세라믹을 제작하는 처리절차는 일반적으로 분말로 시작하여 일련의 혼합, 압축, 소결 및 기타 열처리 과정을 거치게 된다. 완성된 재료의 기계적, 열적 및 전기적 특성은 최종 미세구조 특히, 재료의 입도(grain size)와 다공도(porosity)에 의해 결정되는 경우가 많다. 원료분말의 특성분석은 처리 과정을 이해하고 처리과정의 재현성을 보장하는데 매우 중요하다.

분말의 특성분석과 관련된 많은 문제들을 해결하기 위해 국제에너지기구(IEA)는 여러 국가의 시험소들이 참여하는 순회시험(round robin test)을 주관하여 수행했다. 이 연구는 예비조사의 성질을 가졌으며 국제측정표준에 영향을 미칠 수 있는 잠재적 문제를 찾아 해결하기 위한 단서를 얻는 것이 주된 목표였다.

이 시험에 참가한 시험소들은 세라믹 분말의 특성을 분석하기 위한 다양한 측정을 실시했다. 독일, 스웨덴 및 미국에 소재한 25개 시험소가 이 시험

에 참여하였다. 미국 국립표준기술연구원(NIST)에서 이 프로그램을 위해 특별히 개발한 기본 원료를 5가지 분말로 나누어 각 시험소에 공급했다. 이전에 세라믹 분말특성연구를 수행한 결과 이러한 분말세트 준비에 이용하는 샘플링 절차가 매우 중요하다는 사실을 나타내고 있었다. 이에 따라, NIST에서는 각 분말의 기본 원료를 매우 세심하게 검사, 취급 및 포장하여 샘플의 내용이 균질하도록 했다. 각 시험소에는 자체적으로 실시하는 절차에 따라 제공된 재료로 시험시편을 준비하라고 지시했으며 각 시험소는 자신들의 방식과 절차에 따라 측정을 수행하였다.

각 시험소들이 사용한 측정방법에는 두 가지 침강분석(sedigraph) 기법, 두 가지 빛 산란 방법(light scattering method) 및 두 가지 전자현미경절차가 포함되었다. 모든 시험방법의 입도탐지한계는 이 시험에 사용된 분말에 적절한 것으로 판단되었다. 그러나 시편준비절차는 각 방법과 주어진 방법 내에서도 크게 달라질 수 있으며 실제로 차이를 보였다. 시편준비에서 입자를 분산(deagglomeration)시키는 것이 가장 큰 문제였다. 분산재의 선택, 덩어리를 깨기 위해 사용된 초음파의 파워레벨 및 초음파 적용시간 등의 인자가 분산효과에 큰 영향을 미칠 수 있었다.

표 7. YSZ(yttria-stabilized zirconia) 분말 측정 방법에 따른 평균 입도 결과

테스트 방법*	실험실 수	평균 값 [ $\mu\text{m}$ ]	편차 [ $\mu\text{m}$ ]
GS	6	0.21	0.03
CS	4	1.32	0.52
FMLS	5	2.33	1.29
PCLS	2	0.19	0.01
SEM(WD)	1	2.02	-
SEM(MD)	1	1.65	-

\* 약어 설명:

GS = 중력 침강법(Gravitational Sedimentation)

CS = 원심력 침강법(Centrifugal Sedimentation)

FMLS = Fraunhofer-Mie 빛산란(Light Scattering)

PCLS = 광자상관 빛산란(Photon Correlation Light Scattering)

SEM(WD) = 주사전자현미경(Scanning Electron Microscopy, Waddel 직경)

SEM(MD) = 주사전자현미경(Scanning Electron Microscopy, 최대 직경)

표 7에 나타낸 지르코니아 분말측정 결과는 매우 놀라울 정도이다. 두 개의 침강분석은 6배까지 차이가 났으며 두 개의 빛 산란 방법은 10배 이상의 차이를 나타냈다. 전자현미경 결과는 위의 두 방법에 비해 차이는 작았으나 만족할만한 정도로 일치하지는 않았다. 99%의 신뢰수준에서 Student's t-test 를 사용하면 중력 침강법(GS)과 광자상관 빛 산란(PCLS) 방법은 다른 4가지 방법과 뚜렷이 다르다는 것을 쉽게 알 수 있었으며 원심력 침강법(CS), Fraunhofer - Mie 빛 산란(FMLS) 및 두 개의 주사전자현미경(SEM) 방법인 SEM(WD) 및 SEM(MD)은 차이가 크다고 판단할 수 없었다.

PCLS 방법을 사용한 두 시험소에서만 큰 차이를 보인 결과가 나왔다면 충분히 이러한 결과가 비 적출 특성(spurious nature) 때문이라고 말할 수 있을 것이나 GS 방법도 같은 결과를 나타냈고, 이 방법을 사용한 6개 시험소에서 일관된 결과를 보였기 때문에 분명 이를 비적출문제로 단정할 수는 없었다.

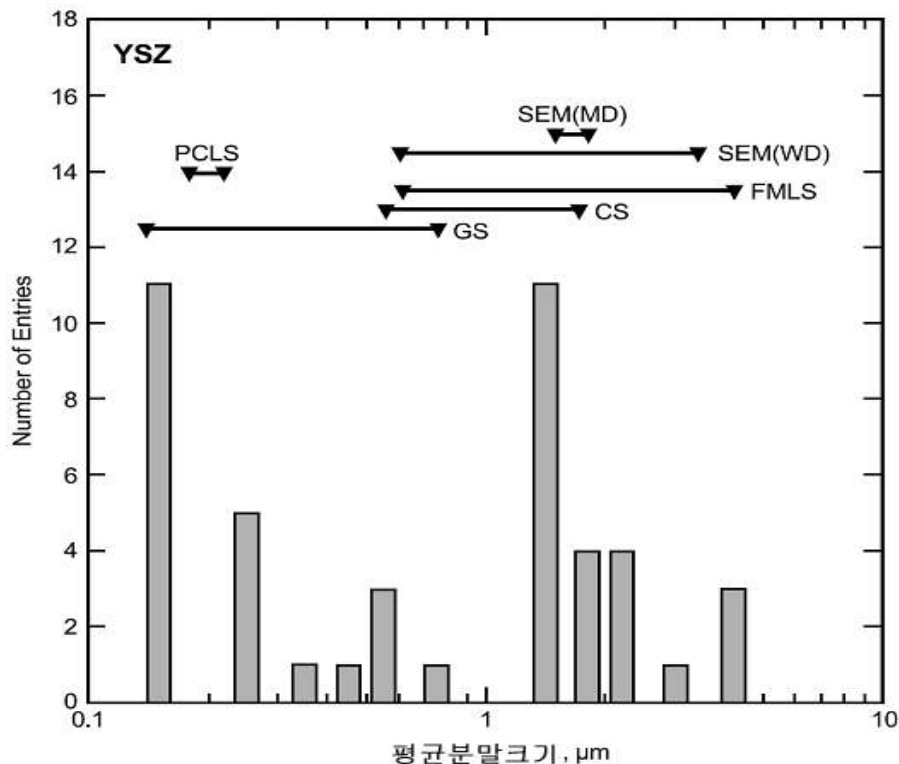


그림 3. YSZ 분말에 대한 입도 분포 히스토그램

이 퍼즐을 풀기 위한 힌트는 지르코니아 재료의 평균입도를 관찰하여 개별적으로 보고된 모든 결과로부터 작성된 그림 3의 히스토그램에서 얻을 수 있었다. 이 그림을 보면 재료가 이중적 입도분포를 갖는다는 것을 알 수 있

다. 히스토그램에 함께 나타낸 수평막대는 각 측정방법으로 보고된 실제 입도 범위를 나타낸다. 각 방법은 이중적분포에서 상당히 다른 부분을 샘플링했기 때문에 상당히 다른 결과를 보고했다. 각 방법의 이론적 탐지 한계가 실제 관측한 범위보다 훨씬 넓다는 것을 감안하면 불일치는 시편 준비 절차가 달랐기 때문에 야기된 결과라고 결론지어야 한다. 따라서 측정의 제약요소를 확인할 때는 장치의 탐지 한계뿐만 아니라 장치에 사용된 준비절차도 고려해야 한다.

이러한 성질을 알고 나면 측정절차의 세부적 깊이가 결과해석과 측정방법의 일반적 적용과 관련하여 이로부터 얻어지는 결론에 어떻게 영향을 미칠 수 있는지 명확해지며, 해당 데이터를 평가할 때에는 이러한 모든 문제를 주요사안으로 검토해야 한다.

### 5) 일관성(consistency)

일관성은 다른 방법으로 얻은 결과와 부합하는지 여부와 잘 알려진 법칙과 일치하는지 여부와 관련된 문제로서 다음 3가지 항목을 만족시키면 일관성이 있다고 평가할 수 있다.

가) 데이터 값이 동일한 특성을 가진 재료에 대한 다른 실험결과와 부합하는가?

재현성은 특성 값이 올바르게 결정되었다는 가장 설득력 있는 증거이다. 독립된 측정을 수행하고 그 결과 측정된 값이 합리적인 측정불확도 내에서 서로 일치하는 것으로 밝혀질 때 재현성이 있는 것으로 취급될 수 있다.

나) 데이터의 값이 동일한 재료에 대해 알려진 관련특성을 사용하여 별도로 추정된 값과 부합하는가?

재료특성은 독립적으로 확인할 수 있는 하나 이상의 다른 특성과 이론적 관계를 갖는 경우가 있다. 예를 들어, 탄성계수(영률), 충밀리기 탄성율, 부피탄성율 및 포아송비는 등방성 재료의 탄성특성을 분석할 때 많이 사용된다. 그러나 등방성 재료의 경우 이러한 물리량 중 두 개만이 서로 독립적이다. 그 결과 탄성특성의 어느 두 가지 물리량이 주어지면 나머지를 계산할 수 있다. 따라서 한 논문에서 탄성계수가 보고되고, 다른 논문에서 충밀리기 탄성율이 보고되고, 또 다른 논문에서 포아송비가 보고되었다면 이러한 값의

상호 일관성이 적절한 측정 불확도의 한계 내에 있는지 이론적으로 검증할 수 있다.

다) 데이터의 값이 동일한 재료에 대해 지금까지 보고된 기타 특성 또는 경향과 상충되는 부분이 없는가?

특성 값을 직접적으로 확증할 수 없는 경우, 현재의 결과가 같은 타입의 재료에 대한 일반적 지식 기반과 상충되지 않는다는 것을 검증하는 것이 바람직하다. 이러한 평가에는 이 특성에 대한 독립된 다른 측정 결과 중에 현재 데이터와 상당히 상충되는 결과가 있을 가능성이 포함된다. 발견적 방법(heuristic) 또는 “경험에 의한 지식”도 이 고려사항에 적용할 수 있을 것이다. 예를 들어, 벌크 재료의 경도가 증가하면 벌크 재료의 탄성계수도 증가한다는 것은 일반적인 실험 결과이다. 이와 반대되는 실험 결과가 있다면 명백히 보고서를 재평가해야 할 것이다.

이상과 같이 일관성의 문제는 현재의 데이터 값을 다른 데이터의 값 또는 경향이나 상관관계 또는 잘 알려진 재료의 특성관계 등을 통해 검토하는 것이다.

일관성을 검토할 경우 어떤 용어에 대한 측정결과와 이들 용어에서 파생된 용어를 사용하여 별도로 측정한 결과의 일관성을 평가하는 경우가 있다. 그러나 기술문헌에 나오는 일부 용어는 너무 일반적으로 사용되어 어떤 용어가 기본용어이고 어떤 용어가 파생된 것인지 혼란스러울 때가 종종 있다. 이러한 혼란의 소지를 없애기 위해 기본용어와 파생된 용어에 대해 간략한 사례를 보기로 한다.

### 질량분율(mass fraction), 몰분율(mole fraction), 부피분율(volume fraction)

연구 결과를 보고할 때는 원소, 분자, 상 및 미세구조를 기준으로 조성을 설명할 때가 많다. 원료분말의 혼합, 안정제 또는 소결촉진제의 첨가, 가공, 열처리 또는 환경적 반응 후 재료조성의 평가, 그리고 재료의 미세구조에 대한 정량적 측정 등은 조성을 정량적으로 표현해야 하는 몇 가지 일반적 상황을 나타낸 것이다. 이러한 표현을 위한 규격은 현재 도량형총회에서 채택하여 사용하고 있는 국제단위계(International System of Units)의 일부로 제공된다. 규정은 매우 간단하다. 예를 들어, 물질에  $n$ 개의 성분이 있고 각각의 질량  $m_i$  는  $i=1$ 에서  $n$ 까지 표기된다면 총 질량  $M = m_1+m_2+...+m_n$ 가 되며,

M에서 i번째 성분의 질량 분율  $\mu_i$ 는 간단히 다음과 같다.

$$\mu_i = \frac{m_i}{M}$$

여기서 ( $\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n$ ) = 1이다. 몰분율과 부피분율에도 이와 비슷한 정의가 가능하다. 질량분율은 분율 단위인 %를 사용하여 보고되는 경우가 자주 있다. 예를 들어, 혼합물에서 분말 A의 질량 분율  $\mu_A$ 가 0.98인 경우, 이 값은 98 % A로 보고할 수 있다. 문헌에는 아직도 양(A의 질량 분율)과 그 값(98 %)을 약식표현(98 wt % A)으로 나타내는 오래된 관례가 널리 통용되고 있다. 몰분율(mol %)과 부피분율(vol %)의 경우에도 마찬가지로 축약된 표현이 사용된다. SI에서는 이러한 표현을 사용하지 않도록 장려하고 있지만 많은 학회지, 심지어 SI에서 공인한 일부 학회에서 아직도 약식 표현을 선호하고 있다.

이러한 공통된 표기를 사용하면 SI 용어인 질량 분율과 일반적으로 사용되는 또 다른 용어인 분율 밀도를 혼동하는 일이 거의 없다는 좋은 점이 있다. 다결정 재료를 가공하는 경우, 종종 최종 제품의 밀도를 동일한 이상적 단결정 재료로 얻을 수 있는 밀도와 비교한다.

최대밀도에 대한 실제 밀도의 비율이 분율 밀도이며 상대밀도라고도 한다. 문헌에서는 널리 이용되는 용어인 퍼센트이론 밀도(percent theoretical density)도 볼 수 있다. 질량분율과 분율 밀도의 두 용어는 분명하게 구분된다. 질량 분율은 조성과 관련되고 분율 밀도는 압축이나 용합의 정도와 관련된다. 용어 “질량 분율”에서 “질량”이란 단어를 사용할 때 잠재적으로 혼동의 소지가 있다. 밀도는 질량에도 관련되기 때문에 “질량분율”을 밀도 분율로 잘못 해석하여 “분율밀도”로 잘못 생각할 수도 있다. 두 용어가 사용된 문맥에서 보면 의미가 분명하게 드러나겠지만 혼동의 가능성을 염두에 두는 것이 좋다.

### 밀도(density), 이론밀도(theoretical density), 다공도(porosity)

고체 재료의 기본적 물리적 특성 중에 시편의 질량을 시편의 부피로 나눈 값으로 정의되는 질량밀도가 있다. 대부분의 다결정 재료에는 재료입자 사이에 공공(void space)이 있기 때문에 실제 밀도는 완벽한 동일 단결정 재료에서 얻어지는 밀도보다 낮게 된다. 완벽한 단결정의 밀도는 주어진 재료의 구조적 상에서 얻을 수 있는 최대밀도이며 보통 이론밀도라고도 부른다.

이 물리량에 종종 사용되는 다른 용어로는 재료의 결정밀도 및 X-레이밀도가 있다. 재료의 화학식으로 계산한 물질량은  $M_W$ 이고 측정된 격자상수로부터 계산한 결정구조의 단위셀 부피는  $V$ 인 경우, 재료의 이론밀도  $\rho_{\text{theo}}$ 는 다음과 같다.

$$\rho_{\text{theo}} = \frac{M_W z}{N_A V}$$

여기서  $z$ 는 단위 셀에 있는 화학식단위의 수이며  $N_A$ 는 아보가드로상수 ( $6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ )이다. 단위 셀의 부피는 결정계의 대칭에 따라 결정된다. 7가지 고유한 결정계에 적합한 표현을 표 8에 나타내었다.

표 8. 7가지 결정계에 대한 단위 셀 격자상수 및 단위 셀 부피

결정계 (crystal system)	셀 축(cell axes)	셀 각도(cell angles)	부피(volume)
입방정계 (cubic system)	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	$V=a^3$
정방정계 (tetragonal system)	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	$V=a^2 c$
육방정계 (hexagonal system)	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2,$ $\gamma=2\pi/3$	$V=(3/4)^{1/2} a^2 c$
능사정계 (rhombohedral system)	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma < 2\pi/3 \neq \pi/2$	$V=a^3 \{1-3\cos^2(\alpha)+2\cos^3(\alpha)\}^{1/2}$
사방정계 (orthorhombic system)	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	$V=abc$
단사정계 (monoclinic system)	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\gamma=\pi/2 \neq \beta$	$V=abc \sin(\beta)$
삼사정계 (triclinic system)	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$V=abc \{1-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma)$ $+2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)\}^{1/2}$

다결정 재료의 경우, 시편의 부피  $V_s$ 는 부분적으로 공공(void space)이 채우고 있기 때문에 측정된 밀도  $\rho$ 는  $\rho_{\text{theo}}$ 보다 작다.  $M$ 이 시편의 총질량인 경우, 측정된 밀도는  $\rho = M/V_s = M/(V_m+V_v) = \rho_{\text{theo}} V_m/(V_m+V_v)$ 이다. 여기서  $V_m$ 는  $M$  질량의 이상적 재료성분으로 채워진 공공이 없는 이상적 부피이고  $V_v$ 는 실제 시편에 있는 총 공공의 부피이다. 그러면 시편 부피에서 재료성분의 부피분율은 분율밀도  $\rho/\rho_{\text{theo}}$ 가 된다. 일반적으로 다공도  $\phi = V_v/(V_v+V_m)$ 로 알려진 보완적 물리량인 공공의 부피분율은 다음과 같이 계산된다.



$$\phi = 1 - \frac{\rho}{\rho_{\text{theo}}}$$

이 다공도 계산식은 다성분 재료로 쉽게 확장할 수 있다. 재료가  $n$ 개의 재료 성분으로 구성된 경우,

$$\phi = 1 - \left[ \mu_1 \left( \frac{\rho}{\rho_1} \right) + \mu_2 \left( \frac{\rho}{\rho_2} \right) + \dots + \mu_n \left( \frac{\rho}{\rho_n} \right) \right]$$

여기서  $\rho_i$ 는  $i$ 번째 성분의 이론밀도이고  $\mu_i$ 는 재료에서  $i$ 번째 성분의 질량 분율이다. 이렇게 계산한 다공도는 입자 내 공공뿐만 아니라 입자간 공공까지 포함한 전체 다공도를 나타낸다. 다공도를 침수(immersion) 또는 비중기법(pycnometry technique)을 사용하여 실험적으로 측정하는 경우, 전체 공공의 일부인 “열린 공공”만이 확산성분에 접근할 수 있다. 일부 공공은 “닫혀”있어서 확산성분에 접근할 수 없기 때문에 이러한 기법으로 탐지되는 공공에 포함되지 않는다. 그 결과, 측정된 열린 다공도는 항상 전체 다공도와 같거나 그 이하이다. 독립된 연구 결과를 비교하거나 특성 값에 미치는 다공도의 영향을 조사할 때 이러한 구분이 중요할 수 있다.

## 6) 예측성(predictability)

### 가) 상관관계

재료의 특성은 재료의 다른 특성과 밀접한 상관관계를 가질 수 있으며 이러한 상관관계를 통하여 데이터 값을 검증할 수 있는 경우가 있다. 예를 들어, 사방정계(orthorhombic) 결정구조에서 고온초전도체 Y:123의 산소 함량은  $c$ -축 격자상수와 상호 관련되는 것으로 알려져 있다. 이 경우, 상관관계가 있는 특성의 데이터가 제공되면 상관관계를 통하거나 잘 설정된 모델계산을 통해 데이터의 정당성을 확인할 수 있다.

재료과학은 근본적으로 관측에 입각한 학문분야이며 가장 중요한 목적은 관측으로부터 재료거동에 대한 이해를 얻는 것이다. 재료에 다양한 자극을 가하고 그 반응을 관측하는 과정을 통해 자연스럽게 이러한 재료의 거동에 대한 정량적 척도로 속성이나 특성이 얻어진다. 이런 식으로 얻을 수 있는 속성의 수는 원칙적으로 관측자의 능력에 따라 많아질 수도 적어질 수도 있다. 이와 대조적으로, 벌크 시편에 유효한 자유도의 수는 상대적으로 제한된

다. 따라서 확인된 모든 속성 및 특성이 서로 독립적이지는 않으며 상호 관련된 하위 집합이 있다고 예상할 수 있다.

이러한 관계는 일관성을 대단히 설득력 있게 증명하기 때문에 데이터평가에서 상당히 큰 중요성을 갖는다. 서로 다른 특성 사이의 관계를 독립적으로 수행된 측정에서 얻은 데이터에 성공적으로 적용할 수 있는 경우, 이 결과로 두 결과를 상호 검증할 수 있게 된다. 더욱이, 이러한 관계가 타당하고 신뢰할 수 있는 것으로 판명되면 직접적 측정결과를 얻을 수 없을 때 이러한 관계를 사용하여 특성 값을 추정하는 것이 가능해진다.

일반적으로 상관관계는 다양한 목적으로 사용되는데 가장 강력하게 사용할 수 있는 기능은 특성 값을 추정할 때 신뢰할 수 있는 내삽 기능을 제공하는 것일 것이다. 또한 제한된 조건에서는 실험적으로 관측된 범위 이상에서 특성을 추정하기 위해 외삽하는 수단으로도 사용될 수 있다. 더욱이, 재료가 유사한 자극에서 유사한 방식으로 거동하는 경우, 그 특성이 기능적으로 유사한 상관관계를 보일 것으로 기대할 수 있기 때문에, 상관 관계를 분석하면 재료거동을 분류하는 수단이 될 수 있다. 반 경험적(semiempirical) 모델을 상관관계나 분석의 일부로 적용하는 경우, 모델의 파라미터는 특정한 물리적특성과 관련되거나 파라미터가 물리적으로 의미있는 해석을 가질 수 있다. 두 경우 모두, 모델을 관측된 데이터에 피팅시켜 유용한 정량적 추정을 이끌어낼 수 있다. 상관관계와 반 경험적 모델은 절차적 특성, 기본변수 및 물리적 프로세스메커니즘의 범위를 평가할 때도 대단히 유용하다.

#### 측정되지 않은 양의 추정 {예: 임계 온도, 산소 함량 및 결정학}

이행성(transitivity)의 수학적 개념을 적용하면 상관관계를 정량적으로 활용하는 것이 편리하여진다. 여기서 이행성은 물리량  $A$ 가  $A(C)$  관계에서 변수  $C$ 와 관련되고, 물리량  $B$ 는  $B(C)$  관계로  $C$ 와 관련되는 경우,  $A$ 의 변화량  $dA$ 는  $B$ 의 변화량  $dB$ 를 의미하여  $dA$  값이 주어졌을 때 다음 식으로부터  $dB$ 를 추정할 수 있다는 것을 나타낸다.

$$dB = \frac{(dB/dC)}{(dA/dC)} dA$$

이러한 상황의 대표적인 예로서는 산화물 초전도체를 들 수 있다. 초전도체는 재료의 온도가 초전도 임계온도( $T_C$ )라고 하는 특정값 이하로 내려가면 재료의 전기저항이 사라지는 특성을 갖는 물체이다. 1957년 초전도성의 BCS

이론이 등장하면서 기존의 초전도체에 대한 이론적 개념이 정립되었다. 1987년 초전도성 산화물 세라믹이 발견되었을 때, 이 소재가 BCS 이론과는 매우 상이한 특성을 보인다는 것을 알게 되었다. 전 세계적으로 이 신소재의 특성을 밝히려는 광범위한 연구가 곧바로 진행되었으며 첫 발견 이후 15년도 안 되는 기간동안 이 현상을 연구한 논문만 5만편 이상 발표된 바 있다. 이후 많은 재료들이 기존과 다른 이러한 초전도성을 가진 것으로 밝혀진 가운데  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ 에 많은 연구노력이 집중되었다.

이 재료는 곧 Y: 123 또는 YBCO로 불리게 되었고, Y: 123과 기타 산화물 초전도체의 초전도특성이 재료의 산소함량에 크게 의존한다는 사실을 알게 되었다. Y: 123의 경우 그림 4에 나타낸 것처럼 산소 함량에 대한  $T_c$ 의 의존도는 비선형적이며 평탄한 영역을 일관되게 나타냈다.  $6.4 \leq x \leq 6.95$  구간에서 평탄한 영역에 적용되는 다음과 같은 내삽수식이 경험적으로 얻어졌다. 이 내삽수식은  $x \geq 6.5$ 의 경우 합성표준불확도가 3K이고,  $x < 6.5$ 의 경우 5K인 임계 온도를 그림 6.4에서 실선으로 나타낸 곡선으로 나타낸다.

$$T_c / K = 89.5 + 4.37(x - 6.73) - \frac{30.57}{1 + \exp[331.65(x - 6.73)]} - \frac{35.79}{1 + \exp[27.84(x - 6.45)]}$$

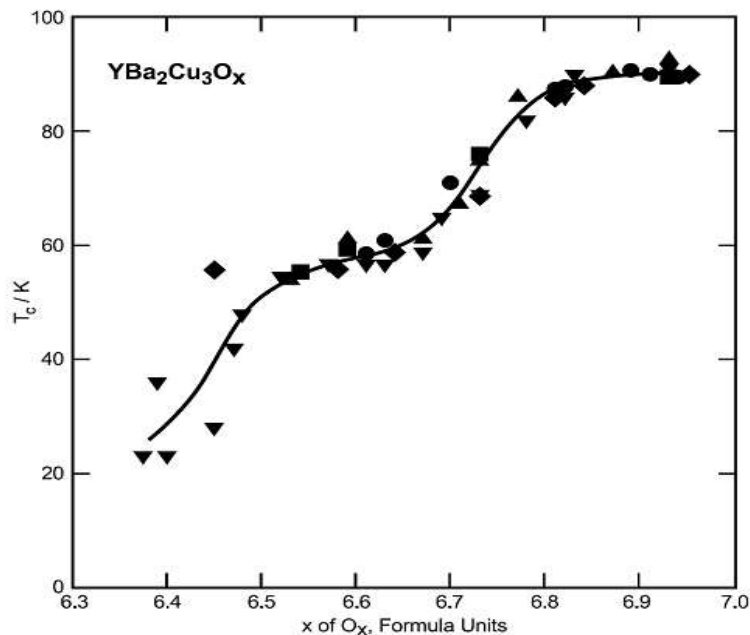


그림 4.  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  초전도 임계 온도  $T_c$ 의 산소 함량 의존성

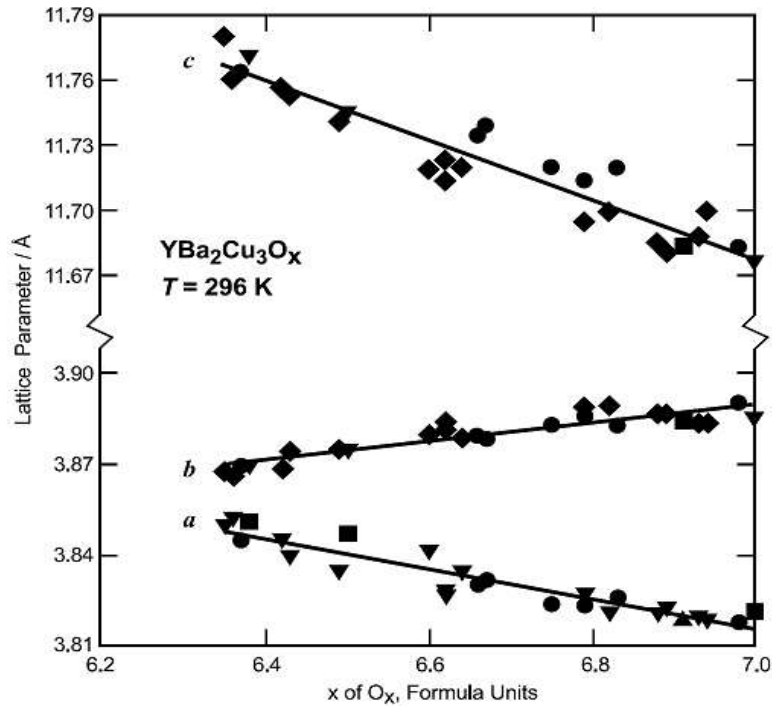


그림 5. 격자 상수  $a$ ,  $b$  및  $c$ 의 산소 함량에 따른 선형 변화추이

이와 동시에, 결정학연구에서도 산소함량에 대해 매우 재현성 있는 의존성이 밝혀졌다.  $6.35 \leq x \leq 7.0$  범위에서 Y:123의 사방정계구조에 대한 격자상수  $a$ ,  $b$  및  $c$ 는 산소 함량에 따라 그림 5에 나타난 것처럼 선형적으로 변했다. 여러 출처에서 얻은 데이터를 선형제곱법으로 피팅하여 다음과 같은 관계를 얻었다.

$$a/\text{\AA} = 4.1696 - 0.0506x$$

$$b/\text{\AA} = 3.6830 + 0.0294x$$

$$c/\text{\AA} = 12.641 - 0.1378x$$

이 때 상대표준 불확도는 각각 0.13 %, 0.15 % 및 0.16 % 이다. 산소 함량에 대한 의존도가 크다는 점을 감안하면 이러한 경험적 상관관계는 별도로 수행된 여러 개의 연구를 비교할 때 특히 유용하다. 예를 들어, 한 연구에  $T_c$  값이 포함되고 또 다른 연구에 격자상수가 보고되었다면 이러한 관계를 사용하여 두 연구가 유사한 조성에 관련된 것인지, 또는 상당히 다른 조성에 관련된 것인지 여부를 확인할 수 있다. 특히 격자 상수  $c$ 는 Y:123 시편의 산소함량을 추정하는데 사용된다.

## 나) 모델링

주어진 재료에 대한 특성 데이터 군이 해당 재료의 거동을 나타낸다고 말할 수도 있으나, 수치적 표현만으로는 재료과학의 근본적 본질인 개념적 이해를 얻을 수는 없다. 관측된 재료거동의 개념적 이해를 표현한 것을 보통 모델이라고 한다. 수학적으로 표현할 수 있는 모델은 별도로 측정된 여러 특성 값의 일관성 확인, 일반적 경향을 따라가는지 여부 및 예외적 거동의 식별을 위한 기초가 되기 때문에 데이터평가에 특히 중요하다.

### 유도된 상관관계(derived correlation) {예: 인성 대 강도}

대부분의 재료 거동이론은 관측된 현상이라는 하나의 특정한 측면에 중점을 두며 이러한 관측과 그 현상을 설명하는 하나 이상의 다른 특성 사이의 관계를 설명하게 된다. 이러한 관계는 이후 더욱 쉽게 측정할 수 있는 물리량 사이의 상관관계를 밝히는 기초를 형성하거나 경험적으로 관측된 상관관계를 해석하는데 도움이 될 수 있다.

예를 들어, 선형파괴 메커니즘은 취성재료(brittle material)에서 균열(crack)의 발생과 전파에 중점을 둔다. 이상적인 취성재료는 균열이 급작스럽게 큰 규모로 전파되어 파괴되는 재료이다. 균열의 전파를 지배하는 인자에는 균열선단에서의 응력과 균열전파를 위해 끊어져야 하는 결합력을 포함시켜야 한다. 선형파괴 메커니즘의 이론으로부터 임계응력강도 인자(critical stress intensity factor, 보통 파괴인성이라고 함)  $K_{Ic}$  재료의 파괴강도  $\sigma_f$  및 균열크기(또는 더 일반적으로는 임계결함)  $c_o$ 의 세 가지 인자 사이에 다음과 같은 일반적 관계가 성립된다.

$$K_{Ic} = Y \sigma_f c_o^{1/2}$$

여기서  $Y$ 는 결함의 위치와 모양에 종속적인 차원이 없는 숫자 인자이다. 이 관계는 취성재료의 파괴 거동을 이해하는데 중심적 역할을 한다. 그러나 이 관계를 응용할 때 고려해야 하는 세부 항목들이 있다.

경험적으로, 인성에 대한 파괴강도의 그래프는 직선으로 피팅할 수 있는 경우가 많다고 되어 있으며 이로부터 결함크기는 일정하다는 결론이 내려질 수 있다. 이러한 결론은 일반적으로 맞지 않는다. 파괴 인성 및 강도와 같은 특성은 재료시스템에서 기본적인 독립적인 변수에 속하지 않으며, 이러한 재료시스템의 구성입자 사이의 상호 작용이 만들어낸 결과이기 때문에 그 자체가 조성, 결합력 및 미세구조와 같은 다른 변수들의 함수이다.

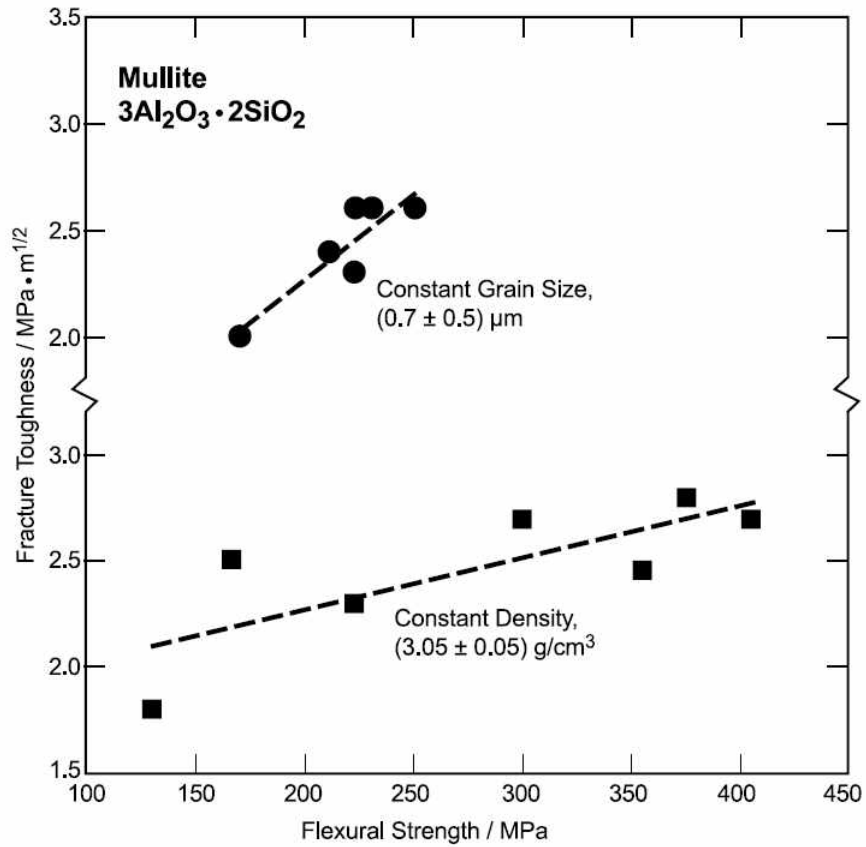


그림 6. 파괴인성과 굽힘강도의 상관관계

형식적으로,  $K_{Ic}$ ,  $\sigma_f$  또는  $c_o$ 를 포함하지 않는 완전한 독립변수  $\{x_j\}$  집합이 있다고 가정할 수 있다. 그리고 독립 변수 집합과 관련하여  $K_{Ic}$ ,  $\sigma_f$  및  $c_o$ 의 변화를 고려한다면, 집합  $\{x_j\}$ 의 각  $x_k$ 에 대해 다음과 같은 관계를 나타낼 수 있다.

$$\left( \frac{\partial K_{Ic}}{\partial \sigma_f} \right)_{[x \neq x_k]} = Y c_o^{1/2} \left[ 1 + \frac{\sigma_f}{2 c_o} \left( \frac{\partial c_o}{\partial \sigma_f} \right)_{[x \neq x_k]} \right]$$

여기서 아래첨자  $[x \neq x_k]$ 는  $x_k$ 를 제외한 모든 독립변수가 일정하게 유지된다는 것을 나타낸다. 이렇게 유도된 관계는 두 배의 중요성을 갖는다. 먼저, 강도에 따른 인성의 변화는 결함크기의 변화에 따라 명시적으로 달라진다. 두 번째, 강도에 따른 인성의 변화는 특성의 변화를 일으키는 독립변수에 따라 달라진다. 따라서 예를 들어, 일정 입도와 일정밀도조건에서의 변화는 그림 6에서와 같이 반드시 같지는 않다. 더욱이,  $K_{Ic}$  그래프는  $\sigma_f$ 에 따라

선형적으로 변한다는 경험적 관측을 적용한다면 결함 크기가 일정하지 않으며 다음과 같이 변한다는 것을 명시적으로 알 수 있다.

$$c_o = \left( \Lambda_1 + \frac{\Lambda_2}{\sigma_f} \right)^2$$

여기서  $\Lambda_1$  및  $\Lambda_2$ 는 상수이다. 따라서 파괴인성 및 강도와 관련된 데이터를 평가할 때는 데이터가 얻어진 조건을 구별하고 일정 결함크기를 가정한 결론을 경계해야 한다.

### 7) 전문가 평가

학회지 및 기타 발행 기관은 논문이 해당 분야의 지식을 가지고 있는 것으로 판단되는 한 사람 이상의 사람이 논문을 독립적으로 검토하도록 엄격히 요구한다. 이러한 경우, 보고된 값은 검토자의 학식과 경력 내에서 타당한 것으로 받아들여진다. 검토자가 어떤 논리적 근거로 논문내용을 평가하는지는 알지 못하여도 논문내용이 게재를 거부할 만큼 부실하지 않으며 더 중요한 것으로, 최소한 논문내용에 발간을 뒷받침할 수 있는 특출난 점이 있다는 것으로 볼 수 있다.

이와 마찬가지로 데이터평가에서도 관련분야의 제3의 전문가가 각자 나름대로 논리적 근거를 가지고 평가절차에 따라 데이터를 평가하였다면 데이터가 참조표준으로서의 가치를 가지고 있다는 증명이 될 수 있다.