

구성 소재 물질 정보를 활용한 고분자 복합수지의 기계적 성질 거동 예측

이나경¹, 신동일^{2,3,†}, 이재욱²¹명지대학교; ²명지대학교 화학공학과; ³명지대학교 재난안전학과
(dongil@mju.ac.kr[†])

효율적인 에너지 전환 달성을 위해서는 소재 개발이 동행되어야 한다. 소재 개발 시, 구성소재의 기본 성질과 조합뿐만 아니라 공정, 시편제조 과정에서 영향을 받아, 예측이 어려워 작업자의 직관에 따라 설계되고 있다. 소재 설계의 경쟁력을 위해서는, 구성소재의 조합과 조성을 제공하는 AI 기반 소재 설계시스템을 통한 시행착오 최소화가 이루어져야 한다. 본 연구는 AI 기반 소재 역설계 시스템의 첫 단계로써, 고분자 복합수지의 기계적 성질 거동을 예측한다. 소재의 기계적 성질 거동은 응력-변형률 곡선으로부터 파악할 수 있으며, 고분자 복합수지의 응력-변형률 곡선은 비선형성이 커, 기존 수치적 방법이나 유한요소법을 통한 예측은 탄성구간에서 한하거나 정확도가 낮았다. 이에, 본 연구는 딥러닝 방법론을 기반으로 최소한의 인장시험 데이터와 구성소재의 화학적/기계적 성질을 활용하여, 고분자 복합수지의 응력-변형률 곡선을 예측하고자 한다. 데이터는 특정 조성에서 이성분 고분자 복합수지의 인장시험데이터와 구성소재 각각의 구조적 특성을 반영하기 위해, SMILES를 사용하였다. 그 결과, 축적된 인장시험 빅데이터 및 구성소재 정보를 사용한 딥러닝을 통해 복합재의 기계적 성질을 예측하였으며, 구조정보를 활용한 모델이 기존 모델보다 성능이 우수하였다. 기존 실험적인 부분의 의존에서 벗어나 보다 적은 비용으로 소재설계 가능할 것이라 기대된다.