



기계학습에 기반한 고분자 복합수지의 기계적 물성 거동 예측

이나경 · 신용범 · †신동일*,**

명지대학교 화학공학과 석사과정, *명지대학교 화학공학과 교수,
**명지대학교 재난안전학과 교수
(2021년 4월 1일 접수, 2021년 4월 23일 수정, 2021년 4월 26일 채택)

Prediction of Mechanical Properties and Behavior of Polymer Matrix Composites Based on Machine Learning

Nagyeong Lee* · Yongbeom Shin* · †Dongil Shin*,**

*Dept. of Chemical Engineering, Myongji University, Yongin, Gyeonggi-do 17058, Korea

**Dept. of Disaster and Safety, Myongji University, Yongin, Gyeonggi-do 17058, Korea

(Received April 1, 2021; Revised April 23, 2021; Accepted April 26, 2021)

요약

수소연료전지자동차를 비롯한 자동차 분야에서 성형 가공성과 기계적 특성이 우수한 고분자 복합수지에 대한 연구는 특정 기계적 특성을 갖춘 재료의 설계지원을 위한 Computer-Aided Engineering (CAE)으로 확대되고 있다. CAE 자동화는 소재의 기계적 특성 및 거동 예측이 선행되어야 하는데, 고분자 복합수지의 기계적 물성 예측은 단일물질과 달리, 바탕재와 보강재 간의 관계로만 설명하기에는 물성 거동이 복잡하기에, 수식으로 설명하기 어렵다. 본 연구에서는 큰 조성 구간과 조성에 예민하여 예측이 어려웠던 고분자 복합수지의 조성에 따른 응력-변형률 선도를 데이터의 기계학습을 기반으로 예측하였다. 개발모델은 바탕재, 보강재 종류 및 조성간의 복잡한 상관관계를 찾아, 학습한 시험 데이터가 없는 조건에서도 전체 응력-변형률 곡선을 의미 있게 예측한다. 학습하지 않은 조성과 구성에 대해서도 고분자 복합수지의 기계적 특성을 예측하는 개발 모델을 기반으로 향후 소재 설계 AI 시스템을 완성할 수 있을 것으로 기대한다.

Abstract - Research on polymer matrix composites with excellent molding processability and mechanical properties in the automotive field including hydrogen fuel cell electric vehicles is expanding to Computer-Aided Engineering (CAE) to support the design of materials with specific mechanical properties. CAE automation requires the prediction of the mechanical properties and behavior of materials. Unlike single materials, the mechanical properties prediction of polymer matrix composites is difficult to explain with formulas because the mechanical behavior is complicated to be explained only by the relationship between the matrix and the filler. In this study, the stress-strain curve according to the composition of polymer matrix composites, which was difficult to predict due to its sensitivity to large plastic deformation and composition, was predicted based on machine learning of the test data. The developed model finds a complex correlation between matrix and filler types and compositions, and predicts the total stress-strain curve meaningfully even in the absence of learned test data. It is expected that the material design AI system can be completed in the future based on the developed model that predicts the mechanical properties of polymer matrix composites even for the combination and composition that have not been learned.

Key words : machine learning, mechanical behavior, polymer matrix composite, prediction model

†Corresponding author: dongil@mju.ac.kr

Copyright © 2021 by The Korean Institute of Gas

I. 서론

지속 가능한 에너지 사용을 목표로 한 미래형 수송기기의 발전에 따라, 수송기기의 연비 개선을 위한 경량화된 내/외장재 소재개발은 중요하다. 공차중량 1,500kg의 5인승 승용 차량을 10kg 경량화할 경우, 연비는 2.8% 향상되고, 배기가스인 이산화탄소와 질소산화물은 각각 4.3%, 8.8% 감소하는 결과를 보여, 미래형 수송기기 발전에서 경량화된 소재 개발은 중요한 이슈이다 [1]. 특히, 기존의 단일물질과 비교하여, 기계적 특성 및 성형 가공성이 우수한 고분자 복합수지가 주목받고 있으며, 이의 내/외장재 활용을 위한 내열성과 내강성을 갖춘 소재 개발이 활발하다.

특정 기계적 특성을 갖춘 재료의 설계의 시행착오를 최소화하기 위해서는 Computer-Aided Engineering (CAE)를 통한 기계적 물성 거동 분석이 요구된다. 이에 필요한 기계적 물성 및 거동에는 인장강도, 탄성계수, 최대하중, 최대 응력, 파단점 응력 등이 있고, 이는 인장시험으로부터 얻은 응력-변형률 선도로부터 쉽게 도출될 수 있다. 따라서 응력-변형률 선도의 예측은 기계적 물성 거동의 핵심이고, 해당 예측모델이 개발되면 CAE 전체가 자동화 시스템이 완성될 수 있을 것이라 기대된다.

고분자 복합수지의 기계적 물성 예측은 단일물질에서의 기계적 물성 거동과 달리, 조성 조건에 영향을 많이 받을 뿐만 아니라 소성 구간과 항복점의 유/무, 탄성계수, 파단점 등에서 바탕재와 보강재 간의 관계로만 설명하기에는 거동이 너무 복잡하여, 관련 수식만으로는 정확한 설명이 어렵다. 대표적으로 Polyacrylonitrile (PAN)과 Nanofiber (NF)의 고분자 복합수지 조합에서 조성에서 보강재의 조성 따라 응력-변형률 선도를 비교하여 보았을 때, 조성에 따른 경향성은 확인할 수 있었지만, 앞서 말한 기계적 물성 및 거동에 대한 각 단일물질의 물성과 관련된 높은 정확도를 보이는 표현은 찾기 어려웠다 [2].

대표적인 유한요소 프로그램 ABAQUS에서는 고분자 복합수지의 비선형 이방성 거동을 구하기 위해 다양한 변수들로 구성된 재료 모델을 제시하고 있으나, 순수물질의 기계적 물성이나 실험값을 요구하는 등, 구성하는 변수를 정의하기 위한 노력과 시간 그리고 비용이 필요하다.

본 연구에서는 소성 구간이 크고 반응이 복잡하여 예측이 어려웠던 소재의 전 구간에 걸친 응력-변형률 선도 문제를, Deep neural network (DNN)를 기반으로 예측하였다. 모델은 방대한 실험 데이터

간의 복잡한 상관관계를 이용하여, 시험 데이터가 없는 조건에서도 전체 응력-변형률 곡선을 예측한다. 본 논문에서는 수송기기의 소재로 자주 쓰이는 비결정성 고분자와 부분 결정성 고분자를 바탕재로 하고, 세라믹 파우더, 유리 섬유, 탄소섬유 등을 보강재로 사용하는 2성분 조합에 대해 다양한 조성에서의 인장시험 데이터를 사용하여 데이터 기반의 예측모델을 구축하였다.

II. 기계적 물성 거동

기계적 물성은 재료가 외력에 대응하여 나타내는 고유의 역학적 성질을 의미하며, 그 종류에는 강도(strength), 경도(hardness), 강성도(stiffness), 연성(ductility) 등이 있다. 이를 시간 혹은 재료에 가하는 힘이나 재료의 변형된 길이에 따라 특성의 거동을 표현하는 선도로 표현한 것을 기계적 거동이라고 칭한다.

다음의 물성값들은 재료를 누르거나 늘리고, 굽히는 등의 실험을 통해, 재료의 압축, 굽힘, 늘림에 대한 저항성을 판단하는 시험으로부터 구할 수 있으며, 대표적으로 인장시험, 압축시험, 전단시험 등의 시험 방법을 통해서 얻을 수 있다.

본 연구에서는 대표적인 기계적 물성 측정 실험 중 인장시험을 통해 응력-변형률 선도를 얻었으며, 이를 기계적 물성 거동 예측에 input data로 활용하였다.

2.1. 응력-변형률 선도

응력-변형률 선도는 인장시험으로부터 얻는 하중-변형률(%) 그래프를 변형하여 얻는 선도로, 일반적으로 기계적 물성 거동을 이해하기 위해 많이

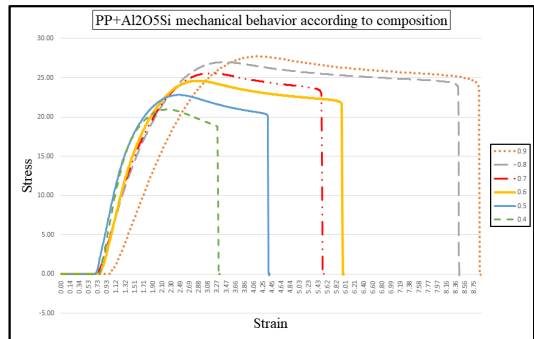


Fig. 1. Stress-strain curve of polymer matrix composites.

사용한다.

인장시험 방법은 일정한 속도로 시편을 양쪽에서 잡아당겨 변형량을 증가시키고, 이에 필요한 하

중을 측정하여 얻으며, 이때 얻은 하중-변형률(%)을 변환하여 응력-변형률 선도를 얻는다.

다음은 하중-변형률 값을 응력-변형률 값으로 변환하는 식이며, 응력은 식 (1)을 통해 하중으로부터 변환되고, 변형률은 식 (2)를 통해 시편의 늘어난 길이로부터 측정된다.

Table 1. Combination of matrix and filler used in tensile test

Matrix	Filler
HIPS/PPE	CNT/GF
	CNT/Talc
	CNT/Talc/GF
PA6	Al2O3
	Al2O5Si
	BN
	Si3N4
PA66	Al2O3
	Al2O5Si
	BN
	Si3N4
PC	-
	Al2O3
	Al2O5Si
	BN
	Si3N4
	CB
	CF
	CNT
	PC/PBT
CNT	
PC/PET	CB
	CNT
PCABS	Al2O3
	Al2O5Si
	BN
	Si3N4
PP	Al2O3
	Al2O5Si
	BN
	Si3N4

$$\sigma = \frac{P}{A_0} (MPa) \tag{1}$$

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L_0} \times 100(\%) \tag{2}$$

σ 는 응력, A_0 는 시편의 단면적, P 는 측정된 하중이고, L 은 기본 시편의 길이, ΔL 은 늘어난 시편의 편차 길이이다 [3].

2.2. 학습데이터 확보를 위한 실험 시나리오

2.2.1. 시험 대상

본 논문에서는 수송기기 등 넓은 분야에서 활용할 수 있는 고분자 복합수지의 기계적 물성 거동 데이터를 얻기 위해, 자동차의 소재로 자주 쓰이는 비결정성 고분자와 부분 결정성 고분자를 바탕으로 하고, 세라믹 파우더, 유리 섬유, 탄소섬유, 탄소 나노튜브를 보강재로 사용하는 2~5 성분 조합에 대해 바탕재의 조성(90, 80, 70, 60, 50, 40wt%)에 따라 실험을 각 5회씩 진행하였으며, 구체적인 바탕재-보강재 조합은 다음 Table 1과 같다.

2.2.2. 시험 조건

동일한 장치에서 동일한 온도 아래, Table 2와 같은 시험 조건에서 30종류의 고분자 복합수지 조합과 6가지의 조성에 대해 시험을 진행하였다. 인장시험 결과, 응력-변형률 선도는 조성에 따라 경향성은 보였지만, 소성구간과 항복점의 유/무, 탄성

Table 2. Tensile test conditions

	Test condition
Test speed	50 m/s
Test mode	Single mode
Strength	10
Type	Plate
Gauge length	115
Plate scale	Thickness : 4±0.07 mm
	Width : 10.13±0.03 mm

계수, 파단점 등에서 바탕재와 보강재 조성으로 설명하기 어려움이 있었다. 뿐만 아니라 같은 종류의 소재와 조성 조건에서 진행한 인장시험에서, 실험적인 오차가 크기 때문에, 단일물질의 조성과 기계적 물성의 관계를 파악하기 어려웠다.

III. 적용 기계학습 모델

3.1. Deep Neural Networks

Deep Neural Networks (DNN)은 입력층과 출력층 사이에 3개 이상의 은닉층으로 이뤄진 인공신경망이다. 심층신경망의 종류에는 이미지, 영상 처리에 유리한 Convolutional Neural Network (CNN), 자연어 처리와 시계열 학습에 유리한 Recurrent Neural Network (RNN) 등이 있으며, 본 연구에서는 범용적으로 적용할 수 있는 Fully Connected Neural Network (FNN)를 통해 기계학습을 진행하였다 [4].

3.2. Bayesian Optimization

Hyperparameter tuning에 사용되는 방법론으로, 사용자가 어떠한 범위 안에서 일정한 간격을 설정해주어, 설정값에 맞춰 변수를 바꿔 최적의 hyperparameter를 갖춘 모델을 찾는 방법이다 [5].

$$x^* = \operatorname{argmax}_{x \in X} f(x) \quad (3)$$

여기서, x 는 설정된 영역이고, $f(x)$ 는 계산비용이 크면서 형태를 모르는 블랙박스 모델이라고 가정한다.

Bayesian optimization은 사전지식을 반영해가며 hyperparameter를 탐색하는 방법으로써, 현재 시점까지 조사된 데이터를 토대로 목적함수를 추정하는 모델은 surrogate model과 추가적인 실험정보(likelihood)를 통해 추정된 모델을 바탕으로 input data를 추천하는 acquisition function으로 구성된다. 즉, random search와 Gaussian distribution을 기반으로, 실제 data와 surrogate model을 이용하여 실제 model을 찾지 않아도 maximum value를 도출해낼 수 있다.

본 연구에서는 각각의 개별/통합모델에서 예측 성능을 높이기 위해 Bayesian optimization 기계학습 기법을 사용하였으며, 이를 통해 hyperparameter의 최적값을 도출했다.

3.3. Python기반 TensorFlow와 Keras

TensorFlow는 2015년도 구글 브레인 팀이 공개한 두 번째 기계학습 시스템으로, 오픈소스 소프트

웨어 라이브러리이다. TensorFlow는 그래프 구조로 표현된 정보를 이용해서 transaction간의 의존성을 인식하고, 노드에 input data로 들어올 tensor가 준비될 때 병렬적으로 연산을 할당한다. 추가적으로, CPU, GPU의 디바이스에 맞춘 연산처리를 구현한 커널을 가지고 모두 이용할 수 있을 뿐만 아니라 간단한 API를 활용하여 복잡한 기계학습 파이프라인을 구축할 수 있다. 그 결과 계산비용이 큰 복잡한 알고리즘에 대해 빠른 실행능력을 갖췄다는 장점을 가진다 [6].

본 논문에서는 이러한 TensorFlow를 백엔드 엔진으로 사용하고 있는 Keras를 통해 구현되었다. 본 논문의 모델은 layer를 층층이 쌓아 올린 네트워크 구조인, sequential 클래스로부터 정의되었고, 해당 모델에서는 모델 구조, dense, 활성화 함수 등을 설정한다.

IV. 예측 모델링

4.1. 예측 모델 개요

본 논문에서는 고분자 수지와 필러의 이성분 조합에서 서로 다른 두 가지 조성에 대해 인장시험 데이터를 학습하여, DNN 방법론으로 이성분 고분자 복합수지의 기계적 물성 거동 예측 시스템을 개발하였다.

4.2. 데이터 전처리

본 연구에서는 인장시험 결과를 데이터베이스로 구축하고, 보유한 DB에서 데이터 추출 및 전처리를 진행하였다

4.2.1. 고분자 복합수지 인장시험 빅데이터 DB

화학소재정보은행 및 여러 연구소 데이터를 수집하여 2,366개의 인장시험으로부터 구한 응력-변형률 선도를 raw data로 사용한다.

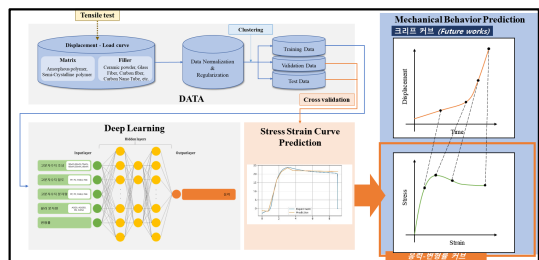


Fig. 2. Overview of the proposed modeling system.

Table 3. Prediction range of the proposed model

Matrix	Polypropylene (PP), Polycarbonate (PC), Polyamide 6 (PA6), Polyamide 6,6 (PA6,6)
Filler	Al2O3, Al2O5Si, Boron Nitride (BN), Si3N4
Matrix wt%	90 ~ 40

데이터베이스에는 2~5성분의 고분자 수지-필러 총 30종류의 고분자 복합수지 조합에 대해 569개의 각기 다른 배합 ID의 인장시험 데이터가 존재한다.

다음의 구축한 데이터베이스에서 4가지 이상의 조성에서 하나의 시험 조건당 5회 이상의 시험 데이터가 존재하는 조합을 선별하였고, 그 결과 총 16가지 조합으로 예측범위를 선정하였다.

4.2.2. 데이터 추출 및 정규화

얻어진 시험데이터에서 물리적으로 응력<0의 값은 불가하기에, 인장시험의 오차로 인한 음수값의 데이터들을 모두 0으로 변환하는 전처리 과정을 거쳤다. 또한, input 벡터 크기가 거대하여(0.001sec 간격 기준 110만 개의 데이터) 학습에 어려움이 있어, 0.008sec 간격으로 데이터를 조정해, 학습데이터 양을 1/10수준으로 압축하였다.

각각의 고분자 수지와 보강재에서 밀도, 분자량, 탄성계수, 조성을 input값으로 사용하기 위해 데이터 전처리를 진행하였다. 해당하는 값들은 값의 편차가 작아, 학습의 성능을 높이기 위해 최소값 0으로, 최대값 1로 변환하고 0과 1사이로 min-max normalization을 적용하고, 이는 식 (4)로 표현된다.

$$z_i^k = \frac{x_i^k - \min(X)}{\max(X) - \min(X)} \quad i \in (1, \dots, n) \quad (4)$$

식 (4) 여기서 X는 각각의 전체 밀도, 분자량, 조성에서의 모음을 의미하며, x_i^k 와 n은 고분자 복합수지 수를 나타낸다.

4.3. DL 모델링

제안한 모델은 이성분 고분자 복합수지 16가지 조합에 대해, 원하는 고분자 복합수지 조합과 조성에 따른 기계적 물성 거동 예측의 단일모델과 통합 모델을 각기 학습시켜 비교하였다.

본 단일/통합 모델은 Keras의 sequential 클래스를 사용하여 구축되었다. 5개 layer의 모델로, 활성화

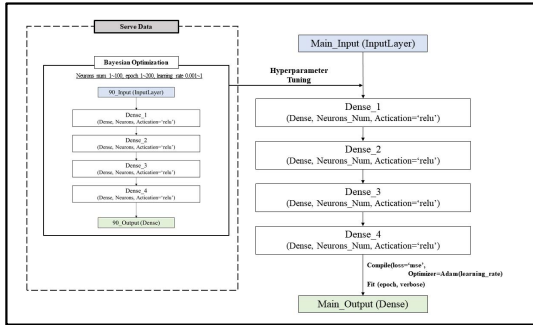


Fig. 3. Flowchart of the proposed modeling.

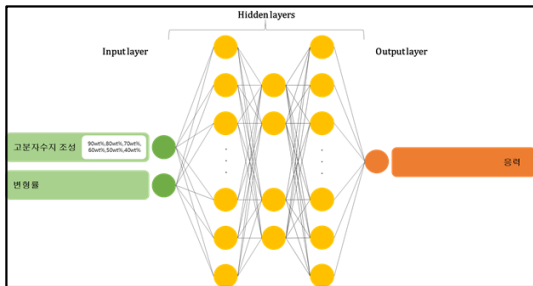


Fig. 4. Individual model of polymer matrix composites stress-strain curve prediction model.

함수로는 ReLu, dense층 4개가 연속으로 되어있다. Compile 단계에서는 학습 과정이 설정되는데, 최적화 함수로는 Adam [7], 손실 함수로는 Mean Square Error (MSE) [8], 학습률은 0.001~1로 설정하였다.

가지고 있는 모든 조성에 대한 방대한 데이터 전체를 다 학습하기 시간적, 비용적 어려움이 있기에 서버데이터를 선정해, 네트워크 구조의 hyperparameter tuning을 진행하였다. 본 모델의 hyperparameter는 Bayesian optimizer를 통해 최적의 값이 자동으로 산출되게 하였으며, 탐색 범위는 각 층의 뉴런 수 1~100, epoch 1~200, 학습률 0.001~1로 설정하였다. 16가지 모든 고분자 복합수지 종류에서 수지-보강재 조성이 90:10인 경우를 서버데이터로 선정하여 진행하였다.

산출된 hyperparameter 값을 이용해, DNN구조를 설계하고, 학습하지 않은 조성을 포함해 모든 가능한 조성에서 고분자 복합수지 응력-변형률 선도 예측 모델을 완성하였다. 모델 학습은 cross validation을 기반으로 진행하였으며, random하게 학습 데이터 세트와 테스트 데이터 세트를 6:1 분할로 나누어 학습을 진행하였다.

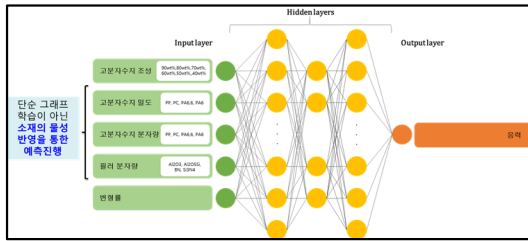


Fig. 5. Integrated model for predicting stress-strain curves according to the composition of 16 kinds of polymer matrix composites.

4.3.1. 고분자 복합수지 개별모델 16가지

개별모델은 데이터 기반의 기계학습 모델 사용으로, 한 가지 소재에 주어진 조성에 대한 고분자 복합수지 응력-변형을 선도 예측을 진행했다. Input 값으로는 한 가지 고분자 복합수지 조합에서의 조성 과 인장시험으로부터 얻은 변형률이 사용되었고, output 값으로는 응력인 구조를 만들었다.

4.3.2. 고분자 복합수지 16가지 조합에 대한 통합 모델

통합모델은 고분자 4가지(PP, PC, PA6, PA6,6) 와 필러 4가지(Al_2O_3 , Al_2O_5Si , BN, Si_3N_4) 조합 모두에 대해 원하는 조성에 따른 응력-변형을 선도 예측모델이다. 통합모델은 개별모델과 달리, 소재 구성물질별 화학적 성질도 반영해, 보다 일반적이고 확장성을 갖는 복합수지의 기계적 물성 거동 예측모델을 구축하고자 하였다.

Input 값으로는 Open DB인 PubChem을 통해 각 8가지 재료에 대한 분자량과 화학소재정보은행으로부터 얻은 고분자 수지에 대한 밀도와 고분자 복합수지에서 고분자 수지의 조성 과 그에 따른 인장 시험으로부터 구한 변형률값을 넣었다. 응력을 output으로 하여, 결과적으로 응력-변형률 그래프를 도출하였다.

V. 결 과

5.1. 모델 성능평가

결정계수 R^2 을 사용하여, 각 모델의 정확도를 비교하였다. R^2 는 독립변수가 종속변수를 얼마나 잘 설명하는지를 나타내는 값으로 1에 가까울수록 설명력이 높고 0에 가까울수록 설명력이 낮음을 보여준다.

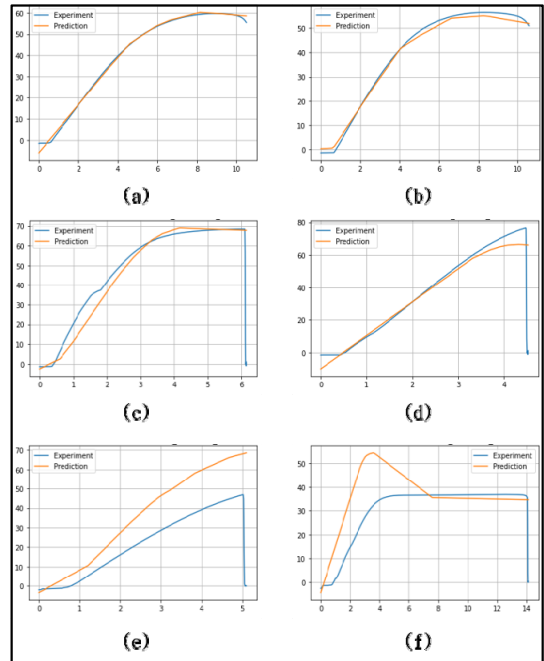


Fig. 6. Results of individual prediction models:

- a) PC 80 wt%/Al₂O₅Si 20 wt%;
- b) PC 85wt%/Si₃N₄, 15wt%;
- c) PA6,6 50wt%/Al₂O₅Si 50wt%;
- d) PA6 90wt%/Al₂O₃ 10wt%;
- e) PA6,6 80wt%/Al₂O₃, 20wt%;
- f) PA6 60wt%/Al₂O₃, 40wt%

5.2. 고분자 복합수지 개별모델 16가지 예측모델 결과 및 성능

데이터 기반 모델을 사용한 고분자 복합수지 기계적 물성 거동 예측 모델의 예측 성능은 결정계수 R^2 를 통해 평가되었으며, 16가지 모델의 예측 성능 평균은 $R^2 \approx 0.78$ 수준이다.

최고 성능을 보인 모델은 PC+Al₂O₅Si, PC+Al₂O₃, PC+Si₃N₄ PC+BN이며, 바탕재를 PC로 적용한 조합에서 예측 성능이 가장 높았다. PC를 사용한 조합에서 모든 개별모델의 평균 성능은 $R^2 \approx 0.94$ 수준으로 높은 정확도를 보였다. PC의 조합이 예측 정확도가 높은 이유는, 사용할 수 있는 데이터 수가 다른 모델에 비해 많아, 데이터 기반 예측 모델에서 장점을 보였다.

개별모델 평균 대비 낮은 수준의 정확도를 보인 모델은 PA66+ Al₂O₅Si, PA66+ Al₂O₃, PA6+ Al₂O₅Si, PA6+ Al₂O₃이고, $R^2 \approx 0.89$ 수준의 높은 정확도를

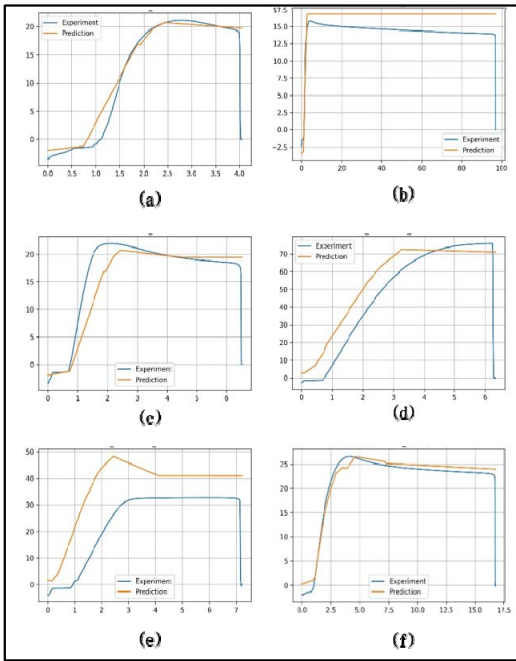


Fig. 7. Prediction of integrated model for predicting stress-strain curves according to the composition of 16 kinds of polymer matrix composites:

- a) PP 40wt%/Al₂O₃Si 60wt%;
- b) PP 90wt%/Al₂O₃, 10wt%;
- c) PP 90wt%/Al₂O₃Si 10wt%;
- d) PA6,6 90wt%/Al₂O₃Si 10wt%;
- e) PA6,6 90wt%/Al₂O₃ 10wt%;
- f) PP 90wt%/Al₂O₃Si 10wt%

보여줬지만, 조성에 따라 $R^2 \approx 0.33$ 수준으로 편차가 큰 과적합 현상을 보였다. 이는 모델에서 같은 소재이지만 분자량이 다른 소재를 구분해주는 feature가 없었기 때문이다. 고분자는 반복횟수에 따라 물성값에 차이가 있는데, PC의 경우, 같은 재료를 사용하였으나, PA6,6의 경우 반복횟수가 다른 물질이 섞여 있어 정확도의 편차가 컸다.

5.3. 고분자 복합수지 16가지 조합에 대한 통합 예측 모델 결과 및 성능

16가지 고분자 복합수지 기계적 물성 거동 예측 모델은 4가지 조합에서 scale up한 모델로, 고분자 4가지(PP, PC, PA6, PA6,6)와 필러 4가지(Al₂O₃, Al₂O₃Si, BN, Si₃N₄) 조합의 16가지 소재의 응력-변형률 선도 예측을 진행하였으며, 예측성능 평균은

$R^2 \approx 0.80$ 수준이다.

통합모델에서 최고 성능을 보인 조합은 PP+Al₂O₃Si 조합이며, 주어진 조성에서의 예측 성능이 $R^2 \approx 0.91$ 수준으로 가장 우수했다.

Fig. 5, 6, 7의 응력-변형률 선도 예측 결과에서, prediction의 경우 예측 모델 전처리과정에서 응력 < 0값을 0으로 변환하였고, 이와 비교하여 실제 실험 선도는 음수 값을 그대로 사용했다.

VI. 결론

AI기반 소재설계 시스템이 요구하는 고분자 복합소재의 기계적 성질 및 거동 예측을 목표로, 고분자 복합수지 구성 물질의 화학적/기계적 물성과 거동 및 시험데이터 기계학습기반의 예측모델을 개발하였다. 개발모델은 DNN을 기반으로, 인장시험 데이터를 학습시켜, 비결정성 고분자와 부분 결정성 고분자를 바탕재로, 세라믹 파우더, 유리 섬유, 탄소섬유 등을 보강재로 하는 고분자 복합수지에 대한 변형률에 따른 응력값을 예측한다. DNN은 5개의 은닉층을 갖고 있으며, 고분자와 필러의 화학적 성질(밀도, 분자량)과 조성 정보를 입력으로 받아, 입력 변형률에 대한 응력값을 출력한다.

학습하지 않은 조성에 대한 바탕재-보강재 조합별 개별모델의 정확도는 $R^2 \approx 0.33 \sim 0.94$, 4가지 바탕재와 4가지 보강재 모든 조합에 대한 통합모델의 정확도 수준은 $R^2 \approx 0.26 \sim 0.95$ 을 보였다. 개별 모델은 PC의 조합에서 특히 정확도가 높았으며, 예측 정확도가 높은 이유는 사용할 수 있는 데이터 수가 다른 모델에 비해 많아, 데이터 기반 예측 모델링에서 장점을 보였기 때문이다. 반면, 개별/통합 모델 모두 PA6,6의 경우 상대적으로 정확도가 낮았는데, 이는 반복 시험의 결과 자체가 높은 변동성을 가져, 동일 입력값에 대해, 결과값의 분포가 아닌 단일 값을 예측해주는 현재 모델로써는 학습의 어려움이 있었기 때문이다.

본 연구를 통해, 충분한 시험 데이터가 확보된 경우, 이의 기계학습을 통해, 일정 수준의 정확도를 갖는 기계적 거동 예측모델의 개발이 가능함을 알 수 있었다. 그러나, 모든 바탕재와 보강재에 대해 고비용의 시험데이터가 항상 존재하는 것은 아니기에, 자동화된 설계 시스템에서 실질적인 활용을 위해서는 향후 고분자 복합수지 구성물질 각각의 화학적/기계적 물성과 최소한의 거동 데이터만을 기반으로, 2~5성분의 조합에 대한 예측을 가능하게 하는 보다 범용적인 모델의 개발이 요구된다.

감사의 글

본 연구는 산업통상자원부와 한국산업기술진흥원의 가상공학플랫폼구축사업(N0002600)의 연구비지원과 스마트디지털엔지니어링전문인력양성사업(P0008475-G02P04570001903)의 연구비지원에 의해 수행되었습니다. 이에 감사드립니다.

REFERENCES

- [1] 삼성KPMG 경제연구원, “자동차 경량화 트렌드의 중심이동, 소재의 경량화”, *Issue monitor*, **96**, (2018)
- [2] Liu, S., Li, D., Yang, Y., and Jiang, L., “Fabrication, mechanical properties and failure mechanism of random and aligned nanofiber membrane with different parameters”, *Nanotechnology Reviews*, **8**, 218-226, (2019)
- [3] Abadi, M. et al., “TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Distributed Systems”, *arXiv preprint*, (2015)
- [4] Messler, R. W., *The Essence of Materials for Engineers*, Jones & Bartlett Learning, (2011)
- [5] LeCun, Y., Bengio, Y., and Hinton, G., “Deep learning”, *Nature*, **521**, (2015)
- [6] Sneek, J., Larochelle, H., and Adams, R. P., “Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms”, *Advances in Neural Information Processing Systems*, **25**, 2960-2968, (2012)
- [7] Kingma, D. P., and Ba, J., “ADAM: A method for stochastic optimization”, *International Conference for Learning Representations*, (2015)
- [8] Botchkarev, A., “Performance Metrics (Error Measures) in Machine Learning Regression, Forecasting and Prognostics: Properties and Typology”, *Interdisciplinary Journal of Information*, **14**, 45-79, (2019)