

화학소재데이터베이스 구축과 데이터 활용기술

이재홍[†], 최우진¹, 박재성¹, 조남정¹, 김수진¹한국화학연구원; ¹화학소재솔루션센터(jahlee@kRICT.re.kr[†])

최근 소재 R&D 패러다임이 실험과 계산으로 수행되던 전통적인 방법에서 그동안 축적된 데이터와 인공지능 기술을 활용하여 컴퓨터 상에서 결과를 예측하는 방법으로 전환되고 있다. 이와 같은 연구방법은 기간과 예산을 절감할 뿐 아니라 위험물 취급을 줄일 수 있으므로 화학소재 개발연구에 매우 도움이 된다.

화학소재솔루션센터는 2007년부터 플라스틱, 고무, 정밀화학 소재의 데이터를 수집, 가공, 생성을 통해 데이터베이스를 구축해 오고 있다. 상업적으로 판매되고 있는 화학소재 제품은 대부분 여러 조성이 혼합되어 있으므로 배합데이터는 기술개발에 매우 중요하다. 화학소재솔루션센터는 플라스틱, 고무, 코팅제의 배합데이터 수집과 데이터베이스 구축에 힘을 쏟고 있다.

최근 인공지능에 대한 국민의 관심이 매우 커졌으며 국가에서도 인공지능 기술개발에 많은 투자를 하고 있다. 화학소재솔루션센터는 그동안 구축한 화학소재데이터를 인공지능기술과 접목하여 소재특성을 예측하는 기술을 개발하고 있다.

본 발표에서는 플라스틱, 고무 등 고분자계 소재의 조성/물성 데이터를 중심으로한 화학소재데이터베이스 구축 현황과 조성변화에 따른 물성 예측에 있어서 머신러닝기술의 활용에 대해서 이야기 하고자 한다.