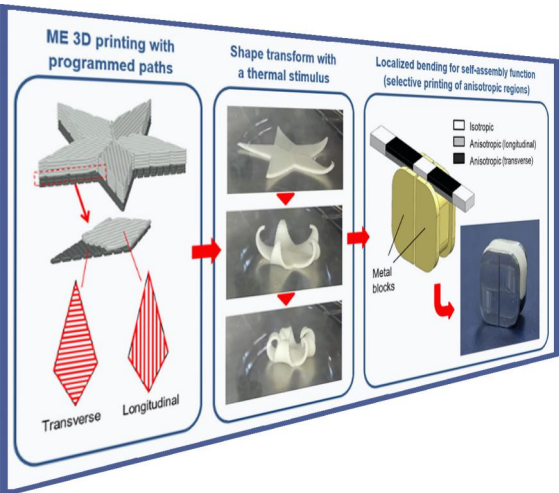


혁신적 메타물질 개발을 위한 인공지능 기반 설계 기술 개발

Development of AI-based Design Methodology for Innovative Metamaterials



1. 서론

메타물질이란 자연계에 존재하지 않는 특별한 특성을 갖도록 인위적으로 만든 물질을 일컫는다. 최근 적층 성형 기술의 빠른 발전은 자연계에 존재하지 않는 기계적, 전자기적, 광학적 특성을 갖는 다양한 구조체를 개발을 가속화하였다. 이러한 발전은 단위 구조의 반복을 통하여 얻어낸 다차원 격자구조를 통하여 가능하게 되었고, 개발된 메타물질은 항공, 토목, 해양, 국방 등 다양한 분야에 폭 넓게 사용되고 있다.

메타물질의 다양한 산업적 활용을 위해서는 체계적인 설계 기법이 확보되어야 한다. 지금까지 개발된 효과적 메타물질을 위한 설계 기법은 크게 세 가지로 구분될 수 있다: 형상 최적화 기반, 경험 기반, 그리고 자연모사 기반. 형상 최적화 기법은 최적화 알고리즘을 활용하여 소재, 형상, 경계조건을 입력 후 최적의 구조체를 얻는 방법이다. 이 방법은 기술적으로 성숙한 최적화 알고리즘을 활용하여 기존의 상식을 넘어선 다양한 구조체를 제작할 수 있음을 보여주었다. 자연 모사는 오랜 기간 환경에 적응한 자연계의 구조를 공학적 문제에 적용하여 개선을 얻고자 하는 방식이다. 마지막으로 설계자의 경험과 지식에 의존하는 방법이 있다. 설계자의 직관과 경험에서 얻은 구조체로 공학적 문제의 해결책을 제시하는 방식이다.

위에 서술한 방법에 추가하여 최근 빠르게 발전하고 있는 인공지능 기술은 메타물질의 가능성을 한단계 끌어올릴 수 있는 설계 기법으로 평가받고 있다. 적층 성형이 갖는 무한에 가까운 설계 자유도는 큰 장점으로 생각되지만, 수많은 설계 변수를 설계자의 직관으로 다루기엔 어려움이 존재한다. 즉, 적층 성형이 가져온 방대한 설계 공간을 체계적으로 다룰 수 있는 범용적 설계 기법이 요구된다. 최근 개발되고 있는 인공지능 기술은 데이터에 기반하여 입력과 출력 간의 불연속적, 비선형적 관계 예측에 뛰어난 성과를 입증하였으므로, 이를 메타물질의 설계에 적용하고자 하는 연구가 활발히 진행되고 있다(그림 1 참고).

이에 본 글은 현재 개발되고 있는 인공지능 기술에 기반한 다양한 메타물질 설계 기법을 이야기하고, 이러한 인공지능 기술의 학습을 위한 데이터베이스를 소개하고자 한다. 추가로 이러한 인공지능 기반 설계 기술을 활용한 다양한 사례들을 소개하고 향후 발전 방향에 대하여 서술하고자 한다.



이 재 훈

가천대학교 기계공학과 학부연구생



김 남 중

가천대학교 기계공학과 교수

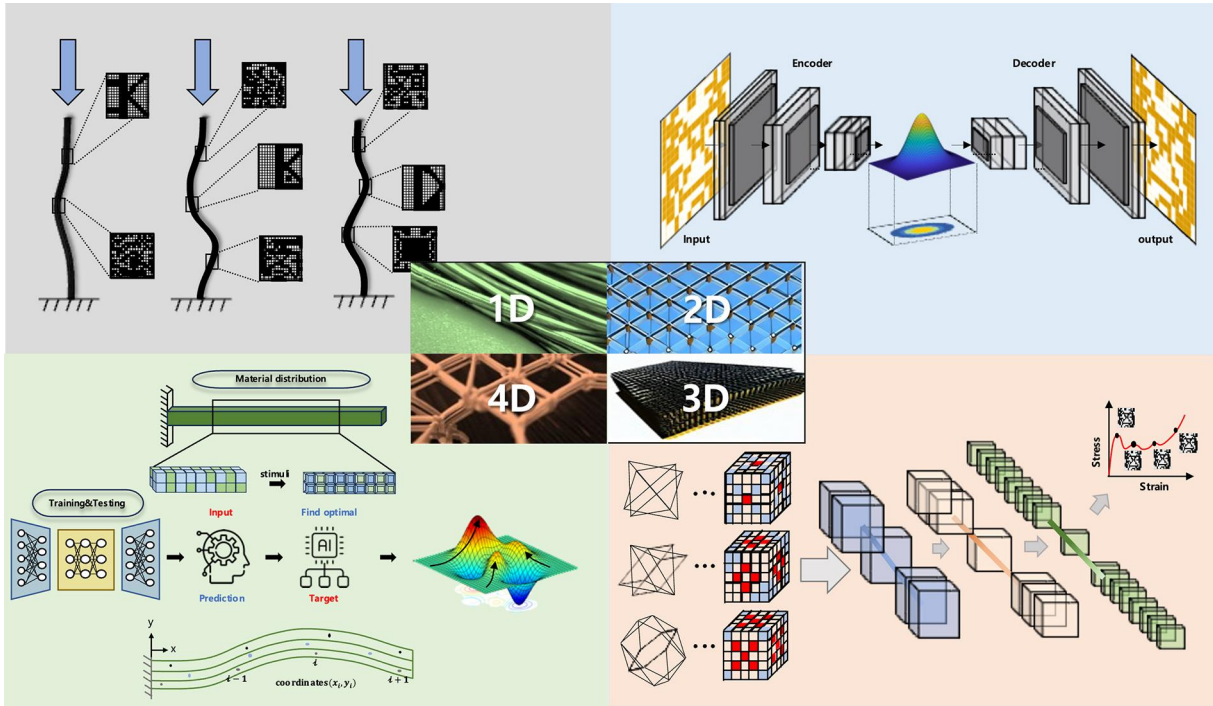


그림 1 인공지능을 활용한 메타물질 설계 예시[1]

2. 설계를 위한 인공지능 알고리즘

메타물질 설계를 위한 인공지능 기술은 다양한 머신러닝 기술에 기반하고 있다. 머신러닝 알고리즘은 크게 지도학습, 비지도학습, 강화학습 세 가지로 구분될 수 있다. 지도학습은 레이블된(입력과 출력의 관계가 알려진) 데이터를 이용하여 알고리즘을 학습시키고, 새로운 데이터에 대한 레이블을 예측하는 알고리즘이다. 기존의 입·출력 데이터를 그대로 이용할 수 있고 폭넓은 분야에서 높은 정확도의 모델을 선보여서 활용도가 높다. 비지도학습은 레이블된 데이터없이 알고리즘 자체가 데이터의 경향을 분석하여 예측을 진행하는 알고리즘이다. 일반적으로 데이터 레이블링 과정에 많은 시간과 노력이 요구되므로 비지도학습에 대한 선호가 늘어나는 경향이다. 하지만 정답을 제시하지 않고 알고리즘 독자적으로 예측을 진행하기 때문에 정확도를 확보하는데 종종 어려움이 따른다. 강화학습은 에이전트라 부르는 인자가 주어진 행위를 했을 때 보상과 패널티를 부여 받으면서 보다 나은 결과를 얻도록 하는 알고리즘이다. 이 때 에이전트의 목적은 목표 함수를 최대화하는 쪽으로 진행되며, 이를 통하여 최적의 결과를 얻는 방법을 찾는다.

메타물질 설계 분야에서는 설계안과 설계안이 가지는 기계적, 전자기적, 광학적 특성 값을 알고리즘에게 알려주는

지도학습이 주를 이루고, 최근 다른 나머지 두 분야의 알고리즘도 활발히 연구되고 있다. 표 1은 다양한 인공지능 기술을 활용한 기계적 메타물질 설계와 관련된 연구를 소개한다.

3. 활용 가능한 데이터베이스

앞서 설명한 지도학습을 통한 메타물질 설계를 위해서는 알고리즘 학습을 위한 데이터베이스가 요구된다. 인공지능 알고리즘의 효과적인 학습을 위해서는 많은 수의 양질의 데이터가 요구되며, 이를 위한 데이터 수집 방법도 세심히 고려되어야 한다. 이 때 해당 분야의 사전 지식이 도움이 되기도 하는데, 데이터의 수집 범위, 데이터의 양, 적절한 입력 조건, 비정상 데이터의 제외 등의 과정에서 해당 분야 지식이 효과적 활용될 수 있다.

메타물질의 특성 데이터베이스 구축을 위해서는 실험과 시뮬레이션이 대표적으로 활용된다. 양질의 많은 양의 데이터를 실험으로 얻기에는 한계가 있기 때문에 최근에는 다양한 시뮬레이션을 활용한 데이터베이스 구축이 활발히 진행되고 있다. 다양한 스케일의 메타물질의 특성 데이터베이스 구축을 위해 대표적으로 활용되는 시뮬레이션

표 1 메타물질 설계에 활용된 인공지능 기술과 활용 범위[1]

Algorithms	Description	Applications/Properties
LASSO	A linear regression algorithm that uses L1 normalization to reduce coefficients to zero and select the most important features in a high-dimensional dataset.	Feasible combination ratio of wavy fibers
Gaussian process regression (GPR)	A nonparametric regression algorithm that learns smooth function approximations and estimates the associated uncertainty using Gaussian processes.	Compression strength, mass
Gradient boosting regression (GBR)	An ensemble learning algorithm that combines several weak predictive models (typically decision trees) to create stronger and more accurate models.	Bulk and shear modulus, thermal properties, auxeticity]
DNN model	A deep neural network model consisting of multiple layers of neurons capable of learning complex and hierarchical representations of input data.	Elastic modulus, Poisson's ratio
Convolutional neural networks (CNNs)	A type of neural network commonly used for image classification and computer vision tasks, which applies convolutional filters to extract relevant features from input images.	Dispersion relation, toughness, auxeticity, bulk and shear modulus
Variational autoencoders (VAEs)	A type of neural network architecture that can learn compressed representations of input data and generate new data samples from this learned representation.	Microstructure design, composite-solid design
Generative adversarial networks (GANs)	A deep learning framework consisting of two neural networks (generators and discriminators) trained in an adversarial manner to generate realistic data samples.	Lattice structures design, material design
conditional generative adversarial networks (cGANs)	A variant of GAN that can generate data samples based on some additional input, such as class labels or attribute vectors.	Elastic and auxetic metamaterials design
Generative networks (Unet & patch GAN)	A type of neural network architecture that can generate new data samples from input images, often used for image-to-image conversion tasks, such as image segmentation or style transfer.	Elastic metamaterial design
Generative inverse design network	A neural network architecture that can generate new designs that meet the desired specification or set of constraints, is often used in engineering and design applications.	Composite design

기법은 밀도함수이론(density function theory), 분자동역학 (molecular dynamics), 유한요소해석법(finite element method) 세 가지이다.

밀도함수이론은 전체 시스템의 슈뢰딩거 방정식을 풀지 않고 전자적, 구조적 특성을 얻을 수 있는 양자역학 모델링 기법이다. 이 방법은 분자 단위의 물질 특성을 이해하고 예측하는데 효과적인 도구로써 작은 크기의 시스템을 이해하는데 각광받고 있다. 밀도함수이론을 활용한 데이터베이스로는 Materials Project[2]와 MATDAT[3]이 있다. Materials Project는 각 소재의 구조정보, 특성값을 포함한 방대한 양의 정보를 제공한다. MATDAT은 금속, 폴리머, 세라믹과 복합재에 대한 물질 강도, 탄성, 경도, 밀도를 포함한 다양한 특성을 제공한다. 이러한 데이터베이스는 최근 배터리와 항공, 우주와 같은 분야의 신소재를 개발하는데 활용되고 있다.

분자동역학은 원자와 분자 수준의 물질 특성을 시뮬레이션하는데 효과적인 도구이다. 분자동역학은 물질의 기계적 특성, 열적 특성, 상변이, 화학적 특성 등을 효과적으

로 예측할 수 있어, 다양한 분야에서 활발히 사용되고 있다. 분자동역학을 이용한 데이터베이스로는 NOMAD[4]와 MoSDef[5]를 들 수 있다. NOMAD 저장소는 원자 또는 분자 궤도함수, 전자 구조, 시뮬레이션 변수와 조건을 포함한 데이터베이스를 제공한다. MoSDef는 고분자, 나노입자, 생체분자 등 다양한 소재의 정보를 제공하고, 분자동역학 시뮬레이션을 위한 분자간 포텐셜 정보 또한 제공한다.

유한요소해석법은 거시적 규모의 물질 특성을 예측하는데 효과적인 방식이다. 앞선 두 방식에 비하여 크기가 큰 구조에 적용되며, 연속체 가정이 성립하는 물질에 대하여 효과적인 예측 방법으로 평가받고 있다. 표 2는 대표적 활용 가능한 데이터베이스에 대한 정보를 제공한다.

4. 사례

본 장에서는 위에서 소개한 인공지능 기술을 활용하여 제작된 메타물질의 사례를 소개하고자 한다. 다양한 메타

표 2 인공지능 기술의 학습을 위한 대표적 데이터 베이스 예시[1]

Database	Material categories	Method	Mechanical features
AFLOW	Alloys; inorganic compounds	DFT	Elastic properties
Materials Project (MP)	Inorganic compounds; nanoporous materials	DFT	Elastic properties
MATDAT	Steels; aluminum and titanium alloys; weld metals	DFT	Static properties; nonlinear stress-strain behaviors; cyclic stress-strain behaviors; fatigue behaviors
MatWeb	Polymers; metals; ceramics; semiconductors; fibers	DFT	Elastic properties; strength; toughness; hardness; etc.
MatMatch	Metals; composites; ceramics; polymers; glasses	DFT	Elastic properties; strength; toughness; hardness; etc.
MakeitForm	Metals; polymers; ceramics	DFT	Elastic properties; strength; toughness; hardness; etc.
NIMS materials database (MatNavi)	Polymers; inorganic materials; metals	DFT	Elastic properties; strength; hardness; etc.
Materialsweb	Any material (2D or 3D mode)	DFT	Structural; electronic; thermodynamic
ASM International	Alloy	DFT	Mechanical, physical and chemical properties

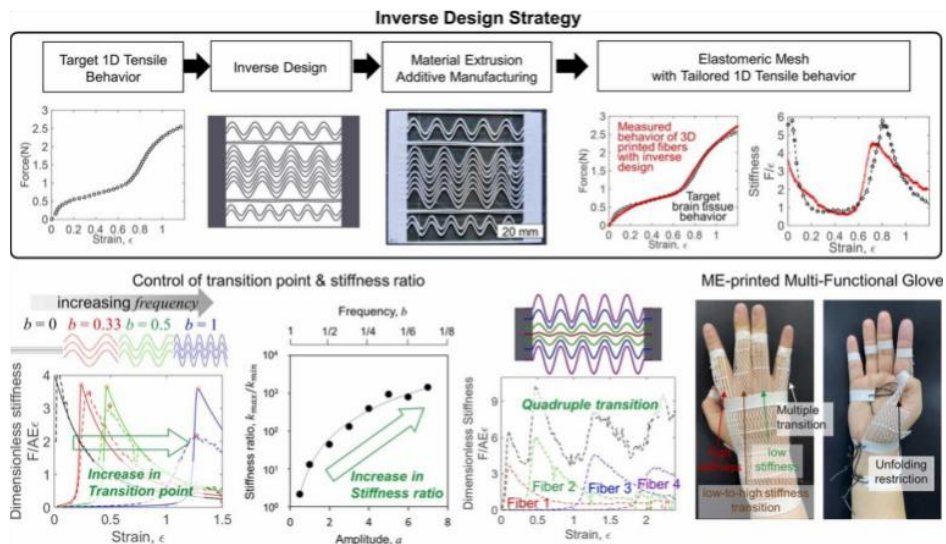
물질 연구들을 최종 결과물의 공간상의 차원에 따라서 구분하고, 각 차원에서 대표적인 연구성과를 나열하였다.

4.1 1차원 구조체

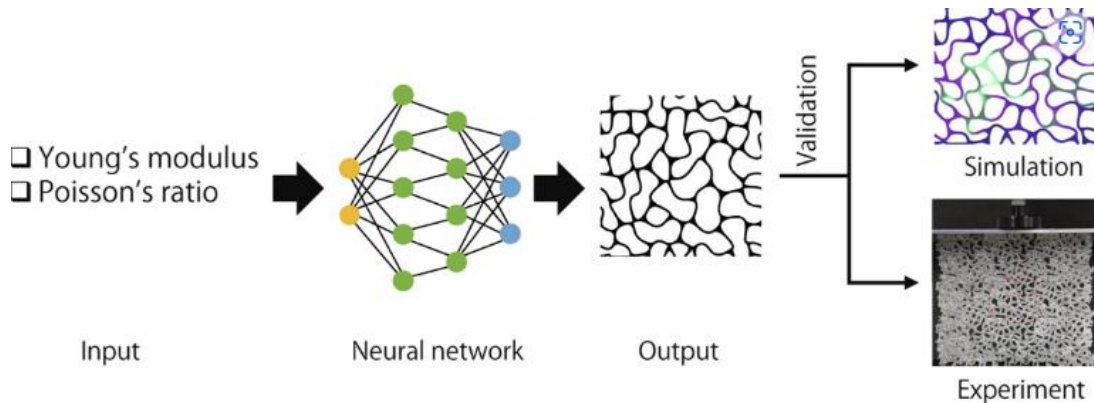
보의 1차원 주기 좌굴 상황에서의 위상 최적화 문제를 다루는 연구가 진행되었다. 이 연구를 통하여 개발된 새로

운 알고리즘은 보의 구조적 특성을 개선하고 특정 주파수 범위에서의 성능을 최대화하기 위해 활용된다. 수치 모델링과 기계학습을 결합하여 최적의 위상 구성을 탐색함으로써 혁신적인 보의 구조 및 기능 설계가 가능해졌다[6].

기계학습 알고리즘(least absolute shrinkage and selection operator, Lasso)에 기반한 탄성섬유의 거동을 활용한 메타물질 설계 전략이 제안되었다. 본 연구는 실험 데이터를 수집 및 분석하여 탄성섬유의 물리적 특성을 이해하고,



(Yun et al. 2022) [7]



(Zheng et al. 2021) [8]

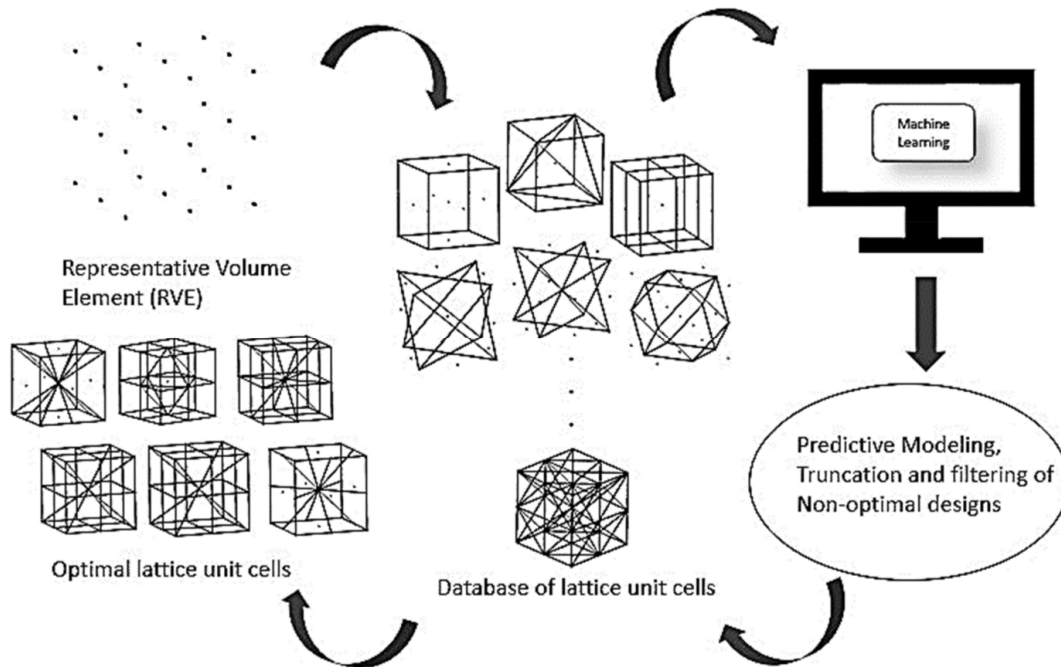
LASSO 알고리즘을 적용하여 중요한 변수를 식별하였다. 이는 최적 설계 조건 도출을 용이하도록 하며 혁신적 메타물질 개발을 위한 기초를 마련한다[7].

4.2 2차원 구조체

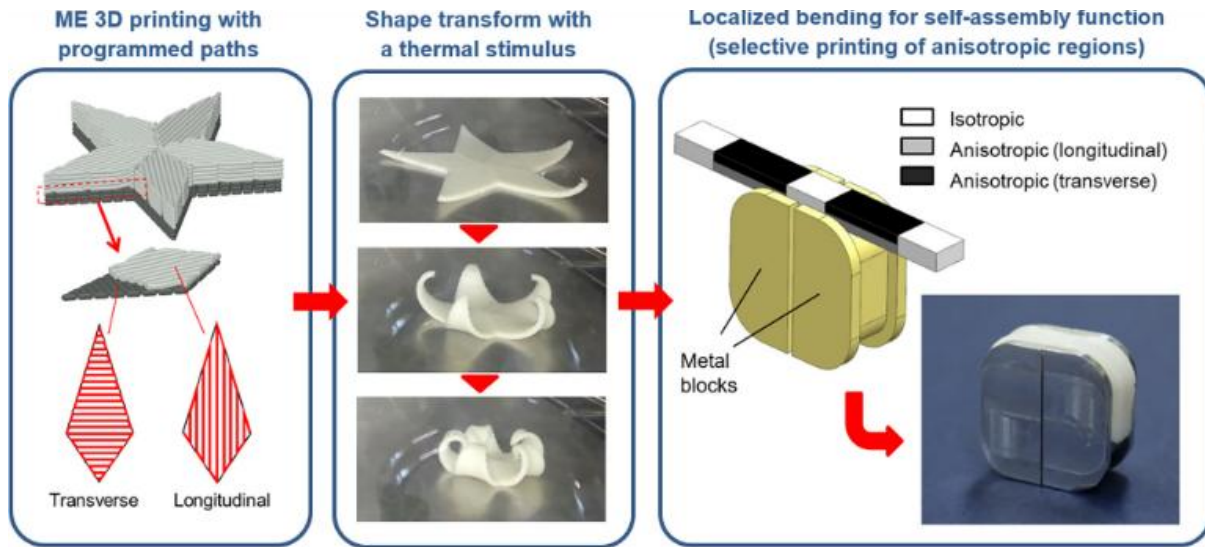
Convolution Generative Adversarial Network(CGAN)을 이용한 Voronoi 기반 픽셀 데이터 생성 방법 및 이를 통한 이차원 메타물질 설계 모델이 제안되었다. 이 모델은 인공지능 생성 모델을 활용하여 특정 광학적 특성 및 포아송비 등을 만족하는 이미지 기반 구조체를 생성할 수 있다.

이로써 다양한 파장대에서의 굴절률 및 투과율뿐만 아니라 물질의 탄성 특성까지 조절하는 메타물질 설계가 실현되었다[8].

Convolutional Neural Network(CNN) 기술을 활용하여 최대 부피 탄성률, 최대 전단률 또는 최소 포아송 비율과 같은 제약을 고려하여 2D 메타물질을 설계한다. CNN은 메타물질을 이미지 형태로 인식하여 공간적 특징을 추출하고, 이를 최적의 구조를 찾는데 사용한다. 해당 연구를 통하여 데이터 기반 딥러닝 기술이 메타물질 설계 분야에 혁신적인 기여를 할 수 있음을 보였다[9].



(Challapalli et al. 2021) [11]



(Goo et al. 2020) [13]

4.3 3차원 구조체

제올라이트의 기하학적 특성을 기반으로 인공지능 기계 학습을 활용하여 열적 특성을 예측하는 연구가 진행되었다. 이 접근 방식은 분자 구조와 분자 간 화학적 상호작용을 바탕으로 한 데이터를 통해 제올라이트의 열 전도성, 열 팽창률 등을 정확하게 예측할 수 있게 해주어, 더 효율적인 열 관리 및 열 전달 솔루션의 개발에 기여하였다[10].

대표체적요소(Representative Volume Element: RVE)를 활용하여 미시구조를 대표하는 작은 부분을 정의하고, 이를 기반으로 머신러닝 기술 중 하나인 Gaussian Process Regression(GPR)을 활용하여 압축응력 및 기계적 특성을 예측하는 연구가 진행되었다. 이러한 접근법을 통해 RVE와 격자구조를 기반으로 한 데이터 수집, 특성 추출, 머신러닝 기술 적용 및 모델 검증을 통해 소재의 물성치를 예측 수행함으로써 소재 설계와 엔지니어링 분야에서 혁신적인 발전을 이끌어냈다[11].

4.4 4차원 구조체

4D 프린팅 기술은 3D 프린팅 된 구조체가 외부 자극에 노출되면 형상이 변하는 능력을 활용하는 기술이다. 본 기술은 재생 의학 및 체내이식형 장치의 발전에 가능성을 보이고 있다. 4D 프린팅 후 목표 형상으로 변형되거나 복합 기능을 수행하는 구조를 제작하고, 최적화하는 연구는 바이오 메디컬 분야에서 혁신적인 진전을 이루고 있다[12].

4D 프린팅 기술은 프린팅 된 소재의 등방성 및 이방성 영역을 선택적으로 조절하여 자가조립 능력을 가능하게 한다. 이 방식은 외부 자극에 의하여 자연스럽게 원하는 구조나 형태로 변형되므로 미세한 부품 영역부터 복잡한 구조체까지 다양한 스케일에서의 자가조립을 가능하게 한다. 이러한 기술은 의료 분야에서 인공 장기 및 조직 구조물의 제작과 개선을 포함한 재생 의학 분야에서의 활용 가능성을 제시하며, 재료 과학, 나노 기술, 생체 공학 등 다양한 분야에서 혁신적인 발전을 불러올 것으로 기대된다. 해당 연구는 기존의 재료 제조 및 조립 방법에 비해 효율적이고 정교한 제조 방식을 제공하여, 새로운 제품의 설계와 개발에 긍정적인 영향을 미친다[13].

5. 결론

본 글에서는 인공지능 기술을 활용한 메타 물질 설계에 관하여 서술하였다. 해당 기술은 적층 성형을 통하여 제작 가능한 구조체의 체계적인 설계 방법론을 제시하고, 이를 통하여 제작된 제품의 다양한 활용 가능성을 높이고 있다. 하지만 활발히 개발 중인 메타 물질의 더 넓은 활용을 위해서는 아래의 몇 가지 해결해야 할 문제들이 남아있다.

1) 메타 물질의 다차원 구조와 특성 간의 비선형, 불연속적 관계 예측을 위한 정교한 모델의 개발: 메타 물질의 독특한 특성 구현을 위해서는 종종 미시적·거시적 구조적 특성을 모두 고려해야 하는 경우가 발생한다. 인공지능 기

술의 예측 및 설계 정확도는 데이터베이스의 정확도에 종속되고, 해석 모델 기반 데이터베이스를 구성한다면, 이러한 멀티 스케일 구조체의 특성을 정확히 예측할 수 있고 신뢰성있는 모델의 개발이 요구된다.

2) 방대한 데이터를 다루는 효과적인 기법 개발: 고려하는 시스템의 복잡도가 증가함에 따라서 이를 예측하는 모델의 복잡도도 함께 증가되어야 한다. 이는 인공지능 모델이 더 많은 데이터를 요구함을 의미한다. 따라서 이러한 방대한 데이터를 효과적으로 저장하고 활용하는 것과 관련된 기술 개발이 요구된다.

3) 인공지능 모델의 최적의 구조 파악: 현재 활용되는 인공지능 기반 알고리즘의 최적의 구조에 관련된 연구는 아직 미흡하다고 판단된다. 향후 인공지능 알고리즘의 성능 뿐만 아니라 구조의 최적화도 수반되어야 할 것이다.

4) 일반화된 인공지능 기술 개발: 현재의 인공지능 기반 설계 기법은 하나의 경우 잘 동작하지만 상이한 형태 및 조건에서는 동작하지 않는 경우가 존재한다. 이는 반복된 새로운 모델의 개발, 최적화, 학습의 과정을 요구하므로 인공지능 기반 설계에 걸림돌로 작용할 수 있다. 다양한 경우에 공통적으로 적용 가능한 범용적이고 전달 가능한 알고리즘이 개발된다면 다양한 시나리오의 메타 물질의 개발이 가속화될 것으로 판단된다.

현재 이러한 문제점을 포함한 다양한 연구 방향이 제시되고 있으며, 이를 통하여 메타 물질의 효과적인 설계 기법 고도화와 다양한 분야에서의 활용을 기대한다.

참고문헌

1. Song, JunHo, et al. "Artificial Intelligence in the Design of Innovative Metamaterials: A Comprehensive Review." *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing* (2023): 1-20.
2. "Materials Project - Home." <https://materialsproject.org/> (accessed Apr. 03, 2023).
3. "MATDAT.com." <https://www.matdat.com/> (accessed Apr. 03, 2023).
4. "NOMAD Repository & Archive - NOMAD Lab." <https://cms.nomad-lab.eu/services/repo-arch> (accessed Apr. 04, 2023).
5. "MoSDeF." <https://mosdef.org/> (accessed Apr. 03, 2023).
6. Oliveri, G., & Overvelde, J. T. B. (2020). Inverse design of mechanical metamaterials that undergo buckling. *Advanced Functional Materials*, 30(12), 1909033. <https://doi.org/10.1002/ADFM.201909033>
7. Yun, S., Ahn, Y., & Kim, S. (2022). Tailoring elastomeric meshes with desired 1D tensile behavior using an inverse design algorithm and material extrusion printing. *Additive Manufacturing*, 60, 2214-8604. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2022.103254>
8. Zheng, X., Te Chen, T., Guo, X., Samitsu, S., & Watanabe, I. (2021). Controllable inverse design of auxetic metamaterials using deep learning. *Materials and Design*. <https://doi.org/10.1016/J.MATDES.2021.110178>
9. Kollmann, H. T., Abueidda, D. W., Koric, S., Guleryuz, E., & Sobh, N. A. (2020). Deep learning for topology optimization of 2D metamaterials. *Materials and Design*. <https://doi.org/10.1016/J.MATDES.2020.109098>
10. Ducamp, M., & Coudert, F.-X. (2022). Prediction of thermal properties of zeolites through machine learning. *The Journal of Physical Chemistry C*. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c09737>
11. Challapalli, A., & Li, G. (2021). Machine learning assisted design of new lattice core for sandwich structures with superior load carrying capacity. *Scientific Reports*, 11, 18552. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-98015-7>
12. Hansen, A., Renner, M., Griesbeck, A. G., & Büsgen, T. (2020). From 3D to 4D printing: a reactor for photochemical experiments using hybrid polyurethane acrylates for vat-based polymerization and surface functionalization. *Chemical Communications*, 56(96), 15161-15164. <https://doi.org/10.1039/D0CC06512A>
13. Goo, B., Hong, C. H., & Park, K. (2020). 4D printing using anisotropic thermal deformation of 3D-printed thermoplastic parts. *Materials and Design*, 188, 108485. <https://doi.org/10.1016/J.MATDES.2020.108485> 