

Predicting Carbon Paper GDL Permeability with 3D CNN and Performance-Based Microstructure Design using Generative AI model

유한길

본 학위 논문은 삼차원 합성곱 신경망을 이용해 탄소종이 기체확산층의 투과도를 예측하고 생성형 인공지능 모델인 Diffusion Probabilistic Model (DDPM)을 사용해 주어진 투과도를 가지는 미세구조 이미지를 도출하는 방법론을 제안한다.

제안된 방법론은 X-선 단층 촬영을 통해 얻은 실제 탄소종이 기체확산층 이미지에서 형태학적 특징을 추출해 공극률, 섬유 배향, 섬유 직경의 통계적 분포를 얻고, 이를 활용해 탄소종이 기체확산층의 대표 체적요소 인공 이미지 데이터셋을 생성한다. 생성된 이미지 데이터셋에 대해 Lattice Boltzmann Method를 통해 투과도를 분석하며 총 100,800개의 대표체적요소에 대해 투과도를 도출하여 이를 3차원 합성곱 신경망에 학습시켰다. 이에 대한 결과로, 인공 데이터 세트로 학습시킨 3차원 합성곱 신경망이 학습시킨 데이터 뿐 아니라, 학습하지 않은 데이터인 실제 탄소종이 기체확산층 미소구조에 대해서도 효과적으로 투과도를 예측하는 것을 확인하였다.

이어서 생성형 인공지능 모델인 DDPM을 활용해 주어진 투과도에서 역으로 미세구조를 설계하는 방법론을 제안하였다. 이 방법론을 이용해 원하는 목표 성능 (특정 투과도 및 부피분율)을 가지는 2차원 탄소종이 기체확산층의 미세구조를 생성할 수 있다. 본 연구에서 DDPM은 이미지, 성능 데이터 쌍으로 구성된 2차원 탄소종이 기체확산층 미세구조 데이터셋을 이용해 훈련시켰다. 이때 “성능”은 투과도와 부피분율을 포함하는 레이블 벡터이며 격차 볼츠만 방법을 통해 얻은 투과도와 이미지 처리를 통해 얻은 부피분율을 의미한다. 훈련과정에서 투과도와 부피분율 및 이미지 데이터를 인풋 값으로 받는 Conditional-DDPM 방법론을 이용해 모델을 학습시켰으며 U-Net 아키텍처를 사용해 부피분율과 투과도를 효과적으로 학습시켰다. 제안된 방법론과 같이 학습이 완료된 DDPM 모델을 통해 원하는 성능을 가지는 미세 구조를 생성할 수 있으며, 이는 DDPM 모델을 통해 생성한 미세 구조의 성능과 목표로 했던 성능 간의 오차를 얻어 검증하였다. 제안된 두가지 방법론을 통해 기체확산층의 구조-투과도의 관계를 얻을 수 있다. 즉, 미세구조 이미지를 통해 기체확산층의 투과도를 예측할 수 있으며 역으로 특정 투과도와 부피분율을 가지는 미세구조 이미지를 생성해낼 수 있다. 본 연구에서는 기체확산층과 투과도 관계에 대한 방법론을 제시하였지만, 다른 응용분야에서 목표 성능 향상을 위해 구조를 예측하고 설계하도록 제안된 방법론을 확장할 수 있다. 마지막으로, 제안된 생성 모델과 제조공정 변수와의 결합을 통해 원하는 성능을 갖는 물질을 설계하기 위한 제조공정변수를 도출하는 연구로 확장될 수 있다.