

데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축·활용방안

2020. 10. 14

관계부처 합동

순 서

[요 약]	i
I. 추진배경	1
II. 현황분석 및 시사점	2
III. 비전 및 목표	5
IV. 추진과제	6
1. 데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축	6
2. 데이터·AI 활용 3대 서비스 제공	10
3. 소재연구 가속화 선도 프로젝트 추진	17
V. 기대효과	19
VI. 추진일정	19

요약

데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축·활용방안 [요약]

I. 추진배경

- 소재는 부품 및 제품의 성능과 부가가치를 좌우하는 핵심요인으로, 첨단산업 주도권 선점을 위해서는 혁신적 新소재 조기 확보 필요
 - * 첨단산업에서 소재 기여도 : IT 70%, 에너지 60%, 바이오 50%(‘16, Advanced Materials Revolution)
- 디지털 뉴딜과 연계, 소재 연구데이터 수집·공유·활용을 통해 연구 시행착오를 최소화하고 新소재 개발 기간·비용 획기적 절감 추진
 - * 소재 게놈 이니셔티브(美), 머터리얼 혁신전략(日) 등 해외에서도 관련 움직임 확산

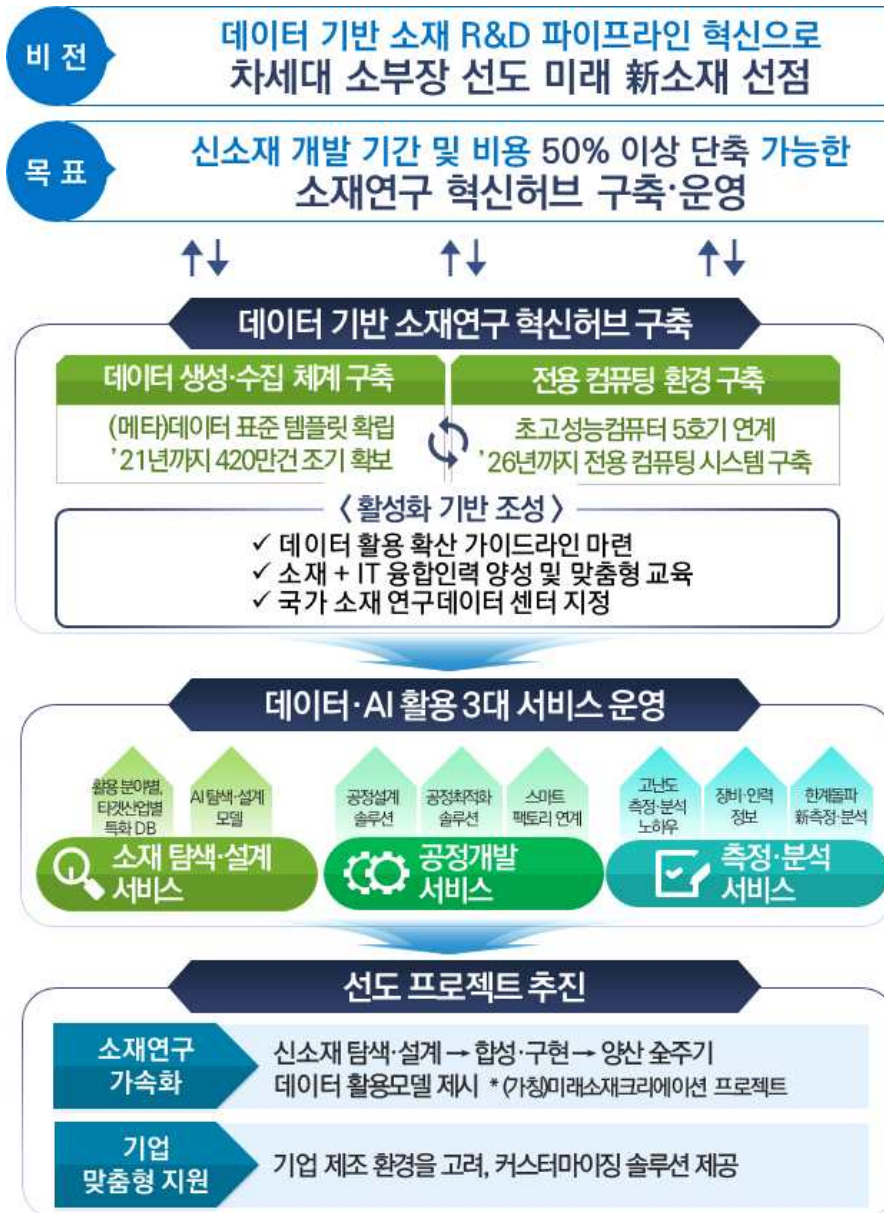
☞ **소재 연구데이터 집적화**를 위한 ‘혁신허브’를 구축하고, 탐색·설계 → 공정개발 → 양산의 ‘**소재 R&D 전주기 가속화**’ 성과 창출

II. 현황분석 및 시사점

- (해외동향) 美, 日을 중심으로 소재데이터가 꾸준히 수집되었으며, 최근에는 축적된 데이터를 소재연구에 활용하는 프로젝트에 착수
 - * (예 : Battery 2030+) 이차전지 新소재 설계부터 공정 최적화까지 R&D 전과정에 데이터 접목
- (국내동향) 시범사업(‘17~), 데이터관리계획* 도입(‘19~) 등 기반조성 노력이 시작됐으나, 체계적이고 지속가능한 데이터 인프라는 부재
 - * 정부 R&D를 통해 생산할 데이터의 종류·형태, 공유여부, 재사용·배포·보관 계획 등

시 사 점	<p>① 산발되어 있는 기존 소재 연구데이터(물성, 조성, 공정 등)를 체계적으로 수집·공유·활용할 수 있는 ‘혁신허브 구축’ 필요</p> <p>② 데이터·AI를 연구개발 수단계로 확대 적용, 新소재 개발 기간·비용을 획기적으로 단축하는 ‘소재혁신 가속화’ 추진</p>
-------------	--

Ⅲ. 비전 및 목표



Ⅳ. 추진과제

1 데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축

가. 소재 연구데이터 수집·관리·활용 체계 구축

- **(수집)** 데이터 확보를 위한 표준템플릿(구조·규격)을 확립(~'21)하고, '21년까지 AI 학습 가능한 메타데이터 420만건 확보

* (대상) R&D로 생성되는 모든 데이터로 측정·분석, 이미지, 공정, 계산 등 포함
(방식) 기존 DB 재규격화, 논문·특허 추출, 정부 R&D 연계, 신규 생성 등 다양화

< 데이터 수집대상 확대 예시 >

'20년	'21년	'22년
<ul style="list-style-type: none"> 과기정통부 소재 R&D 논문·특허 추출(30만건) KISTI 보유데이터(204만건) 소재정보은행(150만건) 및 참조표준센터(4,000건) 	<ul style="list-style-type: none"> 산업·중기부 등 소재 R&D 데이터 공개 기업동의 요 논문·특허 추출(40만건) 기초연구사업 (집단) 소재데이터팩토리(MDF) 	<ul style="list-style-type: none"> 기초연구사업 (개인) 소부장 테스트베드 기업데이터

- **(관리·활용)** 소재 연구데이터 전용 초고성능컴퓨팅* 환경 구축(~'26) 및 데이터·AI 접목한 소재연구 활성화를 위한 3대** 서비스 제공('22~)

* (~'21) 슈퍼컴 5호기 부분사용 → (~'26) 전용시스템 구축(3,000코어, 8PB 스토리지, 100GPU)

** △탐색·설계(개발기간 단축) △공정개발(Lab-to-Market 간극해소) △측정·분석(신뢰성 제고)

나. 데이터 기반 소재연구 활성화 기반 조성

- **(지원체계)** 대용량 데이터의 안정적·체계적 관리를 위해 '국가 소재 연구데이터 센터'를 지정·운영하고, 소재정보은행과 연계
- **(제도정비)** 정부 R&D 과제에 대한 데이터 등록 의무화, 데이터 계층에 따른 접근자격·보안체계, 활용규범 등 가이드라인 마련

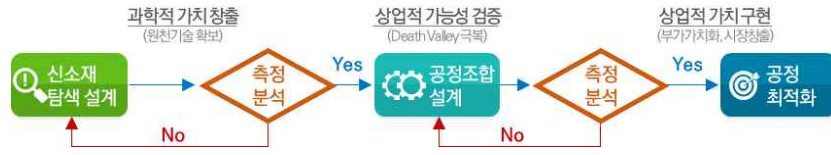
< 소재 연구데이터 공유·활용 가이드라인(안) >

- ▶ **(수익자 부담원칙)** 공적 데이터는 무료, 민간 자체 데이터는 당사자간 협의를 통해 유료화 가능, R&D 및 교육목적은 무료, 상업적 활용시 유료화 가능
- ▶ **(데이터 접근 자격)** 데이터 등록실적이 많은 연구자에게 데이터 접근성·개방성 확대, 보안체계를 강화하여 중요 데이터에 대한 해외 유출 방지

2

데이터·AI 활용 3대 서비스 제공

◆ 탐색·설계(실험실) → 합성·구현(실험실/기업) → 양산(기업) 순과정에 데이터·AI 접목을 위해 '혁신허브' 내 ①탐색·설계, ②공정개발, ③측정·분석 서비스 제공



- (탐색·설계) 조성 - 구조 - 특성 상관관계의 신속한 예측(순방향) 및 원하는 특성을 갖는 소재 조성설계(역방향)를 위한 AI 개발·제공
 - * 후보물질 고속 스크리닝, 신소재 역설계, 소재 물성예측, 물성목표 맞춤 조성설계 등
- (공정개발) 실험실에서 구현된 소재 특성을 양산(Scale-up) 공정에서 구현하기 위한 데이터 기반 공정설계(공정레시피), 최적화 모델링 지원
- (측정·분석) 일부 연구자만이 보유하고 있는 고난도 측정·분석 노하우 수집·공유를 통해 소재 연구데이터 신뢰성 제고
 - * 실험데이터 해석 가이드라인 제시, 핵심장비 보유기관 네트워크 구축 등도 병행

3

소재연구 가속화 선도 프로젝트 추진

- 소재연구 혁신허브의 3대 서비스를 활용, 신소재 탐색·설계 → 합성·구현 → 양산까지 R&D 전주기에 데이터·AI 활용모델 제시
 - 소부장 품목(338개+a)과 연계한 대형 R&D(중장기) 및 시범사업(단기)을 병행하여 조기에 성공모델을 창출하고, 기업 맞춤형 솔루션도 지원(22~)

V. 기대효과

- 전통적 연구방식(실험, 이론, 모델링 등) 대비 데이터·AI 활용으로 혁신적 특성을 갖는 신소재 개발 기간 및 비용 50% 이상 절감

본 문

I. 추진배경

◇ 소부장 2.0, 미래 공급망 창출로 GVC 재편에 선제적·공세적 대응

- 日 수출규제 이후 코로나19, 美·中 무역갈등 등으로 촉발된 **글로벌 분업구조의 균열**은 교역의존도가 큰 우리나라에 **중대한 위협**
 - * GVC 의존도('19, 무역협회) : **韓 55%**, 佛 53%, 獨 51%, 日 45%, 美 44%, 加 43%
- 근본적 소부장 기술력 확보만이 '위기를 기회로' 바꿀 수 있는 무기로, 핵심품목 기술자립을 넘어 **신시장·신산업 창출 미래기술 확보** 추진

◇ 차세대 소부장의 원천, 혁신적 미래 新소재 선점 필요

- **소재**는 부품 및 제품의 성능과 부가가치를 좌우하는 **핵심요인**으로, 특히 첨단산업의 경우 **소재혁신을 통해 산업의 주도권 선점** 가능
 - * 첨단산업에서 소재 기여도('16, The Advanced Materials Revolution) : IT 70%, 에너지 60%, 바이오 50%
- 혁신적 특성을 갖는 **新소재를 조기에, 경제적으로 확보**하여 차세대 소부장 수요를 창출하고, **글로벌 시장 선도역량을 축적**할 필요
 - * 신소재 개발에서 상용화까지 20년 이상 소요(예시 : LED의 경우 '90년대 최초개발 → '05년 상용화)되고 성공 가능성은 낮으나, 개발 성공시 장기간 시장 독점 가능

◇ 데이터 수집·공유·활용 플랫폼을 통한 소재 R&D 파이프라인 혁신

- 최근 **데이터 활용**을 통해 실험·이론에 의한 시행착오를 **최소화**하고, **첨단소재 개발기간을 단축**시키려는 움직임이 빠르게 확산
 - * 美 소재 게놈 이니셔티브(MGI), 日 머티리얼 DX 플랫폼, EU Battery 2030+ 등
- '디지털 뉴딜'을 기회로, 체계적인 데이터 수집·공유·활용과 개방·협력 생태계를 조성하고, **소재 R&D 비용·시간 획기적 절감** 추진

☞ **소재 연구데이터 집적화**를 위한 '허브'를 구축하고, 탐색·설계 → 공정개발 → 양산의 '**소재 R&D 전주기 가속화**' 성과 창출

II. 현황분석 및 시사점

1 해외동향

◇ 美, 日 중심으로, 데이터·AI 기반 소재연구로 패러다임 전환 중
 ⇨ 최근에는 소재 연구데이터 '수집'에 그치지 않고, **축적된 데이터를 '신소재 탐색' 및 '공정설계·최적화'에 활용**하는 프로젝트 추진

- (미국) '11년 '소재 게놈 이니셔티브(MGI)' 선언 후 국립표준과학기술원 내 세계 최초 **소재 연구데이터 저장소**(3억건 이상) 구축·운영
 - * Materials Genome Initiative : 첨단소재 개발 → 상용화의 기간비용 획기적 단축을 목표로 제시
 - '17년부터 데이터·AI를 통한 '**소재 R&D 가속 플랫폼**' 개념을 도입, 데이터를 활용하여 **新소재 설계에 성공**한 가시적 성과도 창출
 - * 5만개 산화물 데이터를 활용, PbTiO₃계열의 새로운 태양전지 소재 개발 성공('16, UNC)
- (일본) 세계 최대 규모 **소재 연구데이터**를 보유 중이며, 최근 **소재연구의 디지털 전환**을 골자로 한 **국가전략 발표**('20.6)
 - * 국립물질재료연구기구(NIMS) 내 소재·IT 통합조직 신설('16~)하여 관련 정책 체계적 지원
- (EU) 5억건 이상의 **물성데이터**를 보유 중이며, '20년 데이터·AI를 활용한 이차전지 소재·공정 실증 프로젝트 '**Battery 2030+**' 착수
 - * 신소재 탐색·설계 → 공정 설계 및 최적화까지 연구개발 소과정에 데이터를 활용
- (중국) **자국 고유 데이터 수집 네트워크** 구축·운영(70만건 DB 보유)

< 참고 : 해외기업 동향 >

◇ **제조기업 중심으로 물성·공정 데이터와 AI를 활용**
 ⇒ **산업소재 개발 시간·비용 획기적 절감** 및 **공정최적화 본격** 추진

BASF(獨, '18)	JSR(日, '19)	랑세스(獨, '19)
▶ 소재DB 기반 AI 개발 착수 → 환경촉매용 신소재 개발 적용	▶ 연구소 데이터 DB화 70% 달성 → 디스플레이 소재개발 적용	▶ 고분자용 AI 개발(기간 50%↓) → 고성능 플라스틱 개발 적용

2 국내동향

◇ 소재 연구데이터 수집·공유 중요성 인식 및 기반조성 노력 확대

* 데이터 기반 소재연구 시범사업('18~), 소재 연구데이터 플랫폼 구축방안('20.4) 등

⇒ 체계적이고 지속가능한 '데이터 수집·공유 인프라 구축'과 병행하여 '데이터·AI를 활용한 소재연구 활성화' 여건 개선 시급

○ (데이터 수집) AI 학습용으로 활용 가능한 메타데이터가 부족하고, 국가 차원의 체계적인 데이터 수집체계 및 통합 저장소 부재

* 既 구축 DB(소재정보은행 150만건, 표준참조물질 4천건 등)는 선진국 대비 양적으로도 부족

- 국가 R&D에 데이터관리계획*(DMP)을 도입('19)했으나 데이터 표준구조, 저장소 등 체계가 미비하고, 소재별·기관별로 개별** 수집

* 연구를 통해 생산할 데이터의 종류·형태, 공유여부, 재사용·배포·보관 계획 등을 의미

** 소재정보은행의 경우, 금속(재료연), 화학(화학연), 세라믹(세기원), 섬유(다이텍연)

○ (데이터 활용) 소재 R&D에 데이터·AI가 도입('15~) 되었으나 일 부단계(탐색·설계 등)에 한정적, 중단계로의 확대·연계·활용 저조

* 탐색·설계(실험실) → 합성·구현(실험실/기업) → 공정설계·최적화(기업) 연구단계별 우수성과 및 데이터 후속연계 부족 ⇒ 실험실 수준 우수소재 상용화 지연

- 데이터의 양적·질적 부족으로 고차원적 AI 개발·서비스에 한계가 존재하고, 데이터 접근성·신뢰성 부족으로 활용도도 아직은 미흡

3 시사점

❶ 산발되어 있는 기존 소재 연구데이터(물성, 조성, 공정, 제조 등)를 체계적으로 수집·공유·활용할 수 있는 '혁신허브 구축'

➡ 소재 및 IT 전문가, 연구자와 기업의 개방·협업의場

❷ 데이터·AI를 R&D 중단계로 확대 적용, 단계간 병목 해소하고, 개발 기간·비용을 획기적으로 단축하는 '소재혁신 가속화' 추진

➡ 데이터 기반 소재연구 혁신의 선도적 모델 창출 및 확산

참고1

데이터 기반 소재연구 혁신 사례 (미국)

항공기 랜딩기어용 혁신 소재

◇ 연구데이터를 활용, 소재 설계부터 공정 최적화 및 양산화全过程 혁신
→ (개발기간) 약 9년 단축 → (개발비용) 약 350억원 절감

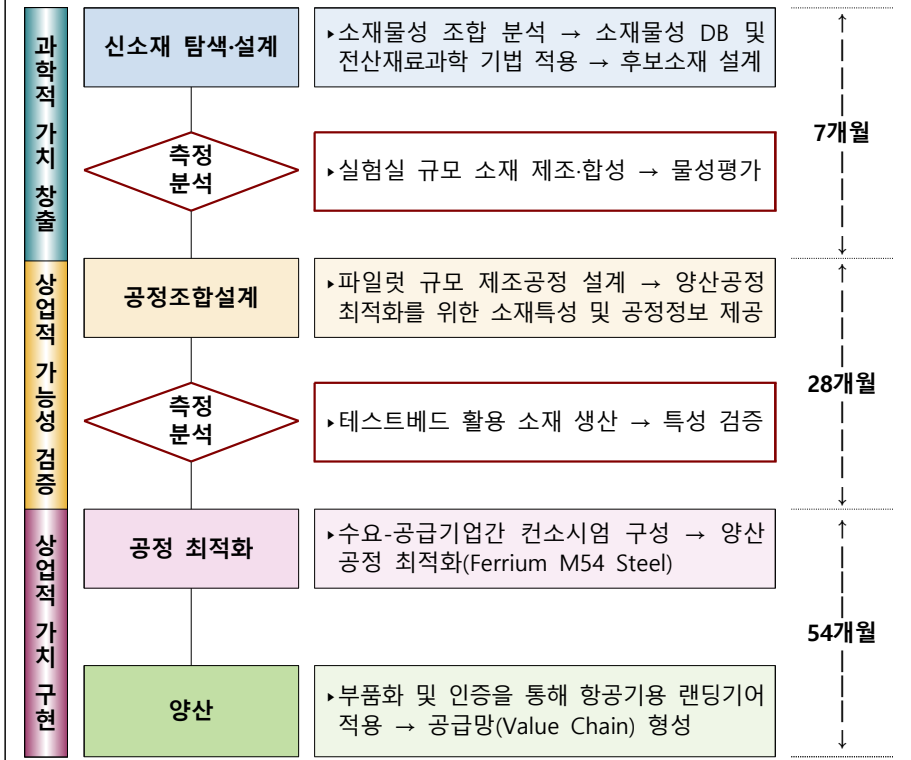


T-45 Hook Shank(Ferrium M54 강재 적용)

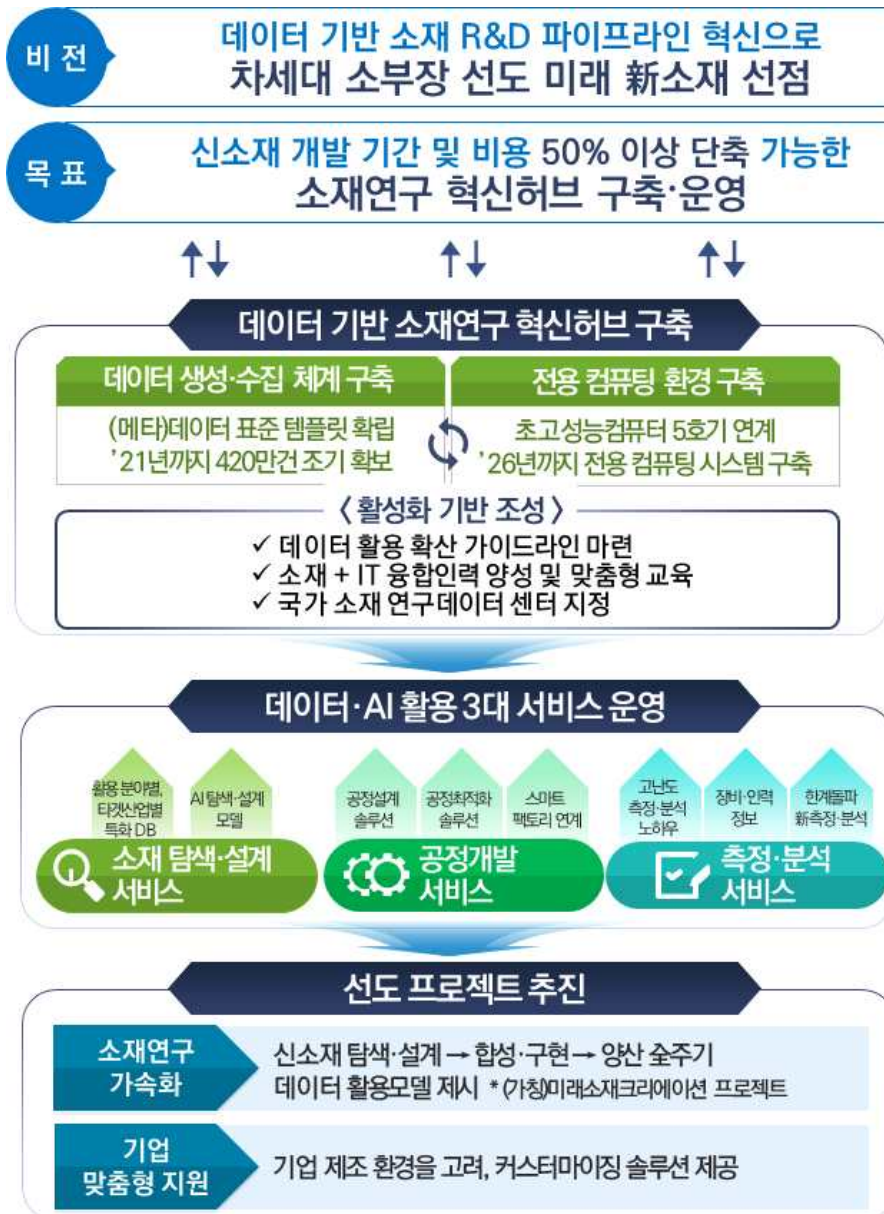


T-45 Hook Shank 적용(항공기 랜딩기어)

< 데이터 기반 소재개발 프로세스 >



III. 비전 및 목표



IV. 추진과제

1 데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축

가. 소재 연구데이터 수집·관리·활용 체계 구축

① (데이터 수집) AI 학습 가능한 데이터 420만건 조기 확보(~'21)

- (대상) 소재 R&D 전과정에서 수집·생성되는 모든 데이터로, 측정·분석, 이미지, 공정, 계산, 해석 등 다양한 데이터를 포함

< 데이터 수집대상 확대방안 예시 >

'20년	'21년	'22년
<ul style="list-style-type: none"> 과기정통부 소재 R&D 논문·특허 추출(30만건) KISTI 보유데이터(204만건) 소재정보은행(150만건) 및 참조표준센터(4,000건) 	<ul style="list-style-type: none"> 산업중기부 등 소재 R&D 데이터 공개 기업동의 요청 논문·특허 추출(40만건) 기초연구사업 (집단) 소재데이터팩토리(MDF) 	<ul style="list-style-type: none"> 기초연구사업 (개인) 소부장 테스트베드 기업데이터

- (방식) 기존 DB 전처리·재규격화*, 문헌 추출, 신규 데이터 생성, 정부 R&D 과제 연계 등록, 장비·테스트베드 등 수집원 다양화

* 소재정보은행, 참조표준센터 등 기존데이터는 관련 전문가 검토를 거친 후 전처리 (정제, 통합, 변환 등)를 통해 양질의 데이터로 재규격화

- 과기정통부(신소재 개발), 산업부(상용소재 고도화) 등 부처간 역할 분담을 통해 데이터 수집 및 활용 범위 극대화

기존 DB 재규격화	<ul style="list-style-type: none"> ▶(KISTI) 다공성 물질, 전자재료 등 계산 및 실험 데이터 204만건 ▶(참조표준센터) 금속 3,235건, 재료 375건 등 표준참조데이터 4,000건 ▶(소재정보은행) 금속, 화학, 섬유, 세라믹 물성데이터 150만건
문헌추출	<ul style="list-style-type: none"> ▶(논문) 총 70만건('20 30만건, '21 40만건) 조기 수집(디지털 뉴딜) ▶(특허) 소재정보, 물성, 공정조건 등 추출(특허빅데이터센터 연계)
데이터 생성	▶소재 연구개발데이터를 직접 생산하는 데이터 공장(MDF) 운영
정부 R&D 연계	▶정부 R&D 과제를 통해 창출된 데이터 등록 및 공유
측정분석 장비 테스트베드	▶센서, IoT 등 계측장치를 활용한 실시간 데이터 자동 수집·라벨링

② (데이터 표준화) 메타데이터 확보 표준 템플릿(구조·규격) 확립(~'21)

- (표준화위원회) 소재, DB 설계, SW 등 전문가로 구성된 표준화위원회 구성 및 정례운동을 통해 데이터 특성에 따른 표준화 추진
- (표준체계) 소재 '구성-공정-물성'이 연계된 데이터셋을 기준으로 '데이터 입력 표준 템플릿' 및 'DB 구조' 마련
- * 각각의 데이터는 코드화하여 관리, 소재별·활용분야별 연계성 및 일관성 유지

< 소재 연구데이터 표준체계(안) >

구분	프로젝트정보	구성	공정	물성측정	거동정보	AI 모델
구성 요소	기관명 작성자 과제정보	소재배합비 원료 물성 화학구조	공정장비 공정조건 환경조건	물성장비 물성측정 환경정보	해석용 물성 파라미터	물성 및 거동 구성 설계 및 공정 최적화
데이터 타입	텍스트	단일/시계열 숫자 이미지 문자형	텍스트 단일 숫자 시계열 숫자	텍스트 단일/시계열 숫자 이미지	단일 숫자 시계열숫자 이미지	단일/시계열 숫자 이미지 모델파일

③ (데이터 저장·관리) 소재 연구데이터 전용 컴퓨팅 환경 구축(~'26)

- (데이터 저장) 우선 초고성능컴퓨터 5호기를 부분 활용(~'20.9~)하고, 중장기적으로 소재 전용 초고성능컴퓨팅 시스템 구축(~'26, 110억원)
- * (5호기) 1,360코어, 3PB 스토리지 → (전용 시스템) 3,000코어, 8PB 스토리지, GPU 탑재
- ** 엣지컴퓨팅(실시간 데이터 수집)과 클라우드(서비스 제공) 연계가 가능한 시스템으로 고도화
- 상용소재의 경우, 퍼블릭 클라우드를 활용한 산업소재데이터 서버 구축·운영(~'22~)하고, 향후 전용 시스템과 연계하여 서비스 지원

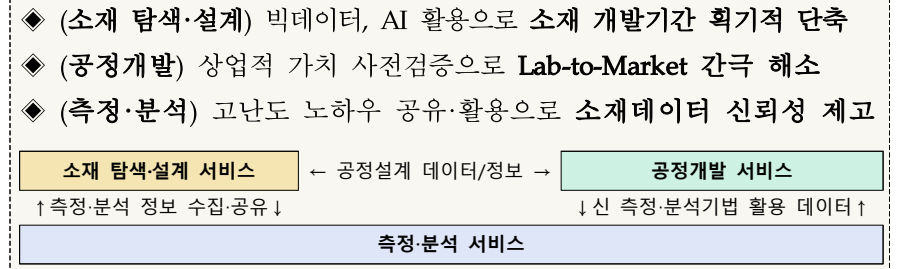
< 소재 연구데이터 저장·관리체계 >

	'20~'21	'22~'26	'27~
신소재	초고성능컴퓨터 5호기 1,360코어, 3PB 스토리지	전용 초고성능컴퓨팅 시스템 3,000코어, 8PB, 100GPU	엣지컴퓨팅·클라우드 연계 초고성능 컴퓨팅
상용소재	퍼블릭 클라우드	상용소재데이터 전용 통합서버 구축	

- (데이터 관리) 디지털객체인식자* 부여, DB 연동 API, 유통이력 관리, 위·변조 방지 등 수집데이터 품질관리기술 개발·적용(~'20~)
- * ISO가 표준화한 것으로, 고유하게 객체를 식별하는데 사용하는 영구 식별자

④ (데이터 활용) 사용자 친화적 데이터·AI 활용 서비스 제공(~'21~)

- (활용환경) 수집 데이터의 손쉬운 분석, 특화 AI 개발 등을 위해 시각화 도구, 큐레이션 시스템* 등 데이터 활용툴 개발·탑재·제공(~'21~)
- * 의미 있는 정보를 추출하기 위한 데이터 전처리 및 정제 기술, 규격화 기술 등
- (지원 서비스) 소재 탐색·설계, 공정개발, 측정·분석 등 소재연구 단계별로 특화된 활용 서비스 지원(~'22~)



나. 데이터 기반 소재연구 활성화 기반 조성

① (지원체계) 소재 연구데이터 수집·공유·활용을 체계적으로 지원

- (전문센터) 대용량 데이터의 체계적 관리를 위해 '국가 소재 연구 데이터 센터'를 지정·운영하고, 소재정보은행과 연계 운영
- * 표준연 중심으로 데이터 센터 구축하고 3대(에너지/IT/안전) 분야별 특화센터 배치
- (정보협의회) 정부, 연구기관, 기업 등이 참여하는 협의회를 구성, 주요 사업·정책 연계 및 조정(데이터 관리·제도 정비, 사업평가·환류 등)



② (제도정비) 상호 호혜적 데이터 활용 확산을 위한 제도적 기반 마련

- (수집·공개 촉진) 소재 분야 정부 R&D 과제는 데이터 등록을 의무화하고, 연구데이터를 R&D 성과로 인정(성과평가법령 개정 추진)

* (예시) ①과제 선정시 웹기반으로 데이터 관리계획(DMP) 제출 → ②데이터 입력 표준 템플릿 제공 → ③연차점검 및 평가시 데이터 등록 증빙자료 제출 의무화

- (공유·활용 확산) 데이터 제공에 따른 권리보호, 보상체계, 접근자격, 보안체계, 활용규범 등을 포함한 공유·활용 가이드라인 마련

< 소재 연구데이터 공유·활용 가이드라인(안) >

- ▶ (공유) 데이터 생성주체, 활용목적에 고려, 수익자 부담원칙 제도화
 - 공적 데이터는 무료, 민간 자체 데이터는 당사자간 협의를 통해 유료화 가능
 - 연구개발 및 교육목적 활용시 무료, 상업용 목적 활용시 유료화 가능
- ▶ (활용) 출처 표시, 위·변조 방지 등 의무부여, 데이터 접근 자격 체계화
 - 데이터 등록실적이 많은 연구자에게 데이터 접근성·개방성을 보다 확대
 - 보안체계를 강화하여 중요 데이터에 대한 해외 유출 방지

③ (인력양성) 데이터 기반 소재연구개발 패러다임 전환 전문인력 양성

- (융합교육) 대학내 소재 및 ICT 관련 학과가 연계하여 소재 연구 개발데이터 및 컴퓨팅 활용 인력 양성을 위한 융합 교육 확대('20~)

* 혁신성장 선도 고급연구인재 성장 지원(KIURI) 사업 소재연구단(2개) 既출범('20.5)

- (맞춤형 교육) KISTI, UST, KIRD(연구개발인력교육원) 등과 연계하여 기존 소재 연구개발 인력의 데이터 역량강화 병행('21~)

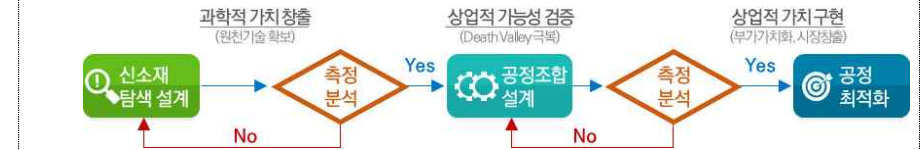
* (교육과정 예시) 파이썬 등 프로그래밍 언어, 인공지능 기초이론, 역설계 기법 등

- (현장교육) 업종별 협·단체 및 데이터·AI 기업·기관간 협업을 통해 재직자 대상 업종특성을 반영한 전문 교육 프로그램 개발·확산

* 국가인적자원개발 컨소시엄 지원사업(고용노동부, 한국산업인력공단) 등 활용

2 데이터·AI 활용 3대 서비스 제공

- ◆ 탐색·설계 → 합성·구현 → 양산的全过程에 데이터·AI 접목을 위해 '혁신허브' 내 ①탐색·설계, ②공정개발, ③측정·분석 '3대 서비스' 제공



가. 소재 탐색·설계 서비스 → 신소재 발굴 및 고도화 시간↓

- ◇ 데이터·AI를 활용, 조성-구조-특성 관계의 신속한 구현(순방향 설계) 및 원하는 특성을 갖는 소재의 조성 설계·고도화(역방향 설계) 지원

- ① (특화DB 구축) 실험, 계산과학 등을 통해 소재 활용분야별, 타겟 산업별 특성화 데이터(성분, 합성조건 등) 생성 및 수집

- (신소재 발굴) 논문, 특허 등 기존 문헌분석을 통해 에너지·환경, 스마트·IT, 구조(안전) 등 3대 분야별 데이터 확보

- (상용소재 고도화) 타겟목표(BM모델)를 설정하고 연구기관에 대표 공정라인을 구축, 소재설계·공정(X인자) → 물성(Y인자) 데이터 수집

< 타겟목표 : 미래형 자동차 >

- ◆ (재료원) 경량판재 (전기차용 배터리 하우징 및 차체용 경량판재)
- ◆ (화학원) 고분자 복합수지 (프런트 모듈 등 고강도, 고내열성 플라스틱)
- ◆ (다이텍) 고성능·친환경 섬유 (자동차 천장재, 바닥재 등 내장재)
- ◆ (세라믹원) 에너지 저장용 세라믹 (전기차용 배터리 양극재)

- 소재설계, 공정 및 물성 데이터셋 확보를 위해 4대 소재기관(재료원, 화학원, 다이텍, 세기원)에 미니어쳐 데이터 팩토리 구축('20~'21, 300억원)

- ② (소재 설계 및 검증) 조성-공정-구조-특성간 상관관계를 분석·예측할 수 있는 AI 탐색·설계 모델 개발 및 서비스* 제공('22~)

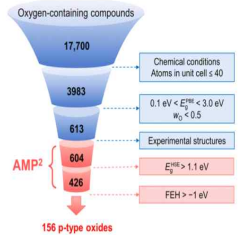
* 후보물질 고속 스크리닝, 신소재 역설계, 소재 물성예측, 물성목표 맞춤 조성설계 등

- 핵심소재(광촉매, 반도체소재, 극한환경용 신합금 등)를 선정, AI 모델을 활용한 탐색·설계 결과와 실험결과 교차 검증도 지원

참고2 데이터 활용 신소재 탐색·설계 가속화 사례

데이터 고속 스크리닝

반도체 후보물질 탐색



■ P-타입 반도체에 적합한 특성을 보유한 소재 후보물질 고속 탐색 (Chem. Mater. '19)

- 반도체 소자 분야에 특화된 특성지표 설정 후 자동화된 시뮬레이션 도구를 활용하여 DB 분석
- 전체 DB 17,700개 중 156개의 후보물질 제시 (既보고된 모든 산화물 소재 중 상위 0.8% 소재)

→ 소재 탐색 소요시간 97% 절감

알루미늄 합금 설계



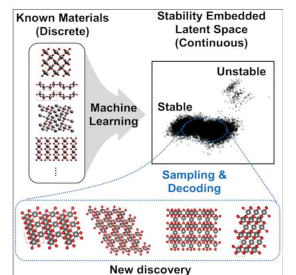
■ 우주·항공 부품 적층제조용 알루미늄합금 설계 및 상용화 성공 (HRL Laboratory, Boeing-GM 합작회사)

- 美 Citrine社 데이터베이스-인공지능 플랫폼 활용, 1,150만개 분말·나노소재 중 100개 후보 도출
- 적층제조용 상용합금 개발 및 상용화 성공
- 美 알루미늄협회에 최초의 상용 3DP 전용 합금 분말로 등록, NASA에서 부품 제작에 활용

→ '17년 Nature에 발표된 기초단계 연구결과를 2년만에 상용화 성공

역설계를 통한 신소재 발굴

새로운 V_xO_y 물질 구조 설계



■ 기존 DB에 없으나 실험으로 합성 가능한 새로운 바나듐 산화물 신물질 설계 (Matter, '19)

- 물질의 '구조'와 '생성에너지' 동시 학습을 통해 구조 안정성 및 합성 가능성 판단 가능한 AI 개발
- * 가능한 물질구조 자체 생성을 위해 이미지 방식 적용
- 10,981개 산화물 데이터로부터 합성이 가능한 4개의 신물질 제시 (상위 0.03% 소재)

→ 소재 탐색·설계 소요시간 99.97% 절감

나. 공정개발 서비스 → Lab to Market 간극 해소

◇ 실험실에서 설계된 소재의 특성이 스케일업(Scale-up) 공정에서 구현되어 상업적 활용 가능성을 가지는지 빠르게 검증

① (공정설계) 新연구방법론 활용 공정설계 솔루션 개발

- 계산과학·조합실험·집적계산 등 활용, 최적의 공정설계를 위한 조건 탐색범위 최소화 및 검증 솔루션 개발 및 서비스 제공('21~)

(1단계) Lab-scale 실험 검증	(2단계) Scale-up 공정 실현	(3단계) 테스트베드 검증
▶ 계산과학 기반 가상공정 실행 ▶ Lab-scale 공정 파라미터 제공	▶ Scale-up 방향성 탐색 ▶ 최적 공정조건 설정	▶ AI 기반 Scale-up 공정 최적화 ▶ 테스트베드 검증 및 시제품 제작

- 핵심품목을 중심으로 기존 소재연구 우수 성과를 발굴(연 5개 내외), 공정설계 솔루션을 적용, 공정레시피 확립 및 상용화 가능성 검증

② (공정최적화) 가상 시뮬레이션 활용 공정최적화 솔루션 개발

- 타겟제품 물성 구현에 적합한 공정 조건 최적화 솔루션 개발·구축('17~'21) 및 시범 서비스 제공중('17~)
- 가상공간*에서 수행한 공정 시뮬레이션 결과와 기업의 공정설비와 연동 가능한 공정최적화 솔루션 제공('22~)

* 컴퓨터 기반 모델링 해석(구조열유체극한해석 등), 공정 예측 분석 평가가 가능한 전산상의 환경

- 소재부품DB, 소재혁신 AI 플랫폼, 가상공학 플랫폼을 상호 연계하고, 공정최적화 모델링 생성 및 테스트베드 검증을 통한 기업 기술지원 추진

소재혁신 AI 플랫폼	가상공학 플랫폼	실증 및 상용화
▶ 가상공학 해석용 물성 예측	▶ 공정 최적화 (열·유동해석) ▶ 부품 모듈 최적화 (구조해석)	▶ 테스트베드 검증 및 시제품 제작 ▶ 기업 기술지원

③ (스마트팩토리 연계) 소재설계 → 공정설계 및 최적화 → 상용제품 양산(제조)의 데이터 및 성과 “이어달리기” 추진

* 중기부 AI 제조 플랫폼(KAMP, Korea AI Manufacturing Platform) 활용

참고3

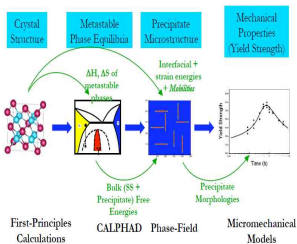
신연구방법론을 활용한 공정개발 사례

친환경·고효율 타이어 개발



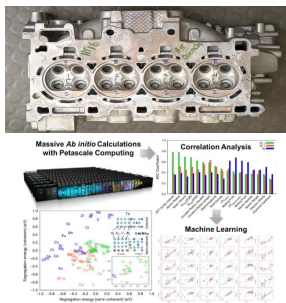
- 소재 특성 예측 시뮬레이션 SW 플랫폼을 활용, 친환경·고에너지효율 타이어 제조(日 Bridgestone)
- 타이어 복합소재 분포도 조절을 통한 성능향상 매커니즘 규명에 성공
- 메커니즘에 기반, 타이어 미세조직을 조절할 수 있는 최적공정 개발·적용 ⇒ 타이어 新제품 출시
- 연구기간(3년) 단축, 개발비(3억달러) 절감

자동차 엔진블럭 제조공정 개발



- 가상 알루미늄 주조 플랫폼 개발·활용을 통한 자동차 엔진블럭 알루미늄 합금 개발(美 Ford)
- 계산과학 기반 기업 자체적인 알루미늄 주조 (Virtual Aluminum Casting) 플랫폼 개발
- 개발한 플랫폼을 활용하여 단기간 내 특정 합금조성(Al-Si-Cu-Mg)의 미세조직-물성 연계로 자동차 엔진블럭 합금 개발 성공
- 연구기간(25%) 단축, 개발비(1억달러) 절감

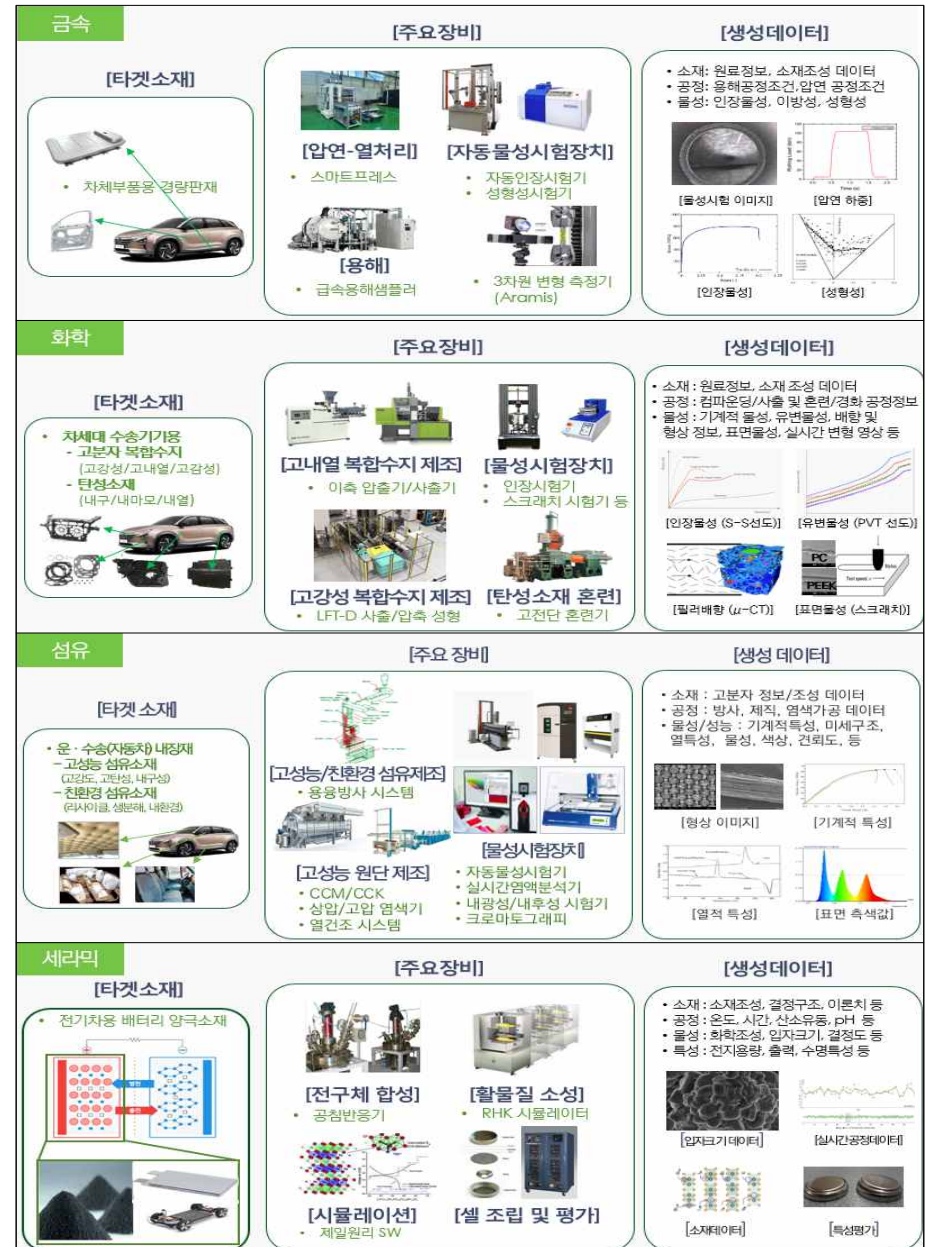
새로운 알루미늄 합금 개발



- 새로운 알루미늄-구리 합금 조합법 활용, 자동차 엔진 실린더 헤드용 알루미늄 합금 개발(美 OCNL)
- 원자단위 시뮬레이션과 인공지능을 통해 냉각시 크랙이 발생하지 않으며 고온에서 강도가 유지되는 50개의 새로운 합금 조합법 발견
- Al-Cu-Mn-Zr(ACMZ) 합금군을 채택, 저비용·고강도 알루미늄 합금 주조기술 개발
- 차세대 4기통 엔진 프로토타입 제작 성공

참고4

소재별 주요 타겟 및 데이터팩토리 구성(안)



다. 측정·분석 서비스 → 소재연구역신 신뢰성 ↑

◇ 데이터·AI를 활용하여 설계한 소재와 공정을 측정·분석 기술을 통해 실제로 특성과 성능이 구현되는지 검증

- (노하우 수집·축적) 일부 연구자가 습득·보유하고 있는 고난도 측정·분석 노하우를 프로토크라하여 축적하고, 공유·활용체계 구축
 - 소재의 나노화 및 융복합화에 따라 적합한 측정·분석 기술 발굴에만 6개월 이상 소요
 - 탐색·설계 → 공정·설계 연구개발 단계별, 소재 활용 분야별로 생성되는 측정·분석 노하우 확보를 위한 표준정보항목 구축

< 표준정보항목 예시 : 단결정 X선 회절분석법 >

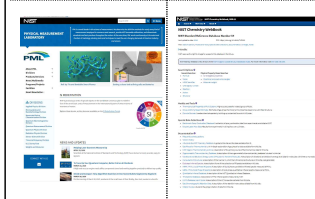
표준정보	대분류	표준정보	대분류
측정·분석 조건	시료 크기/모양	측정·분석 대상범위	무기물
	전처리 조건		유기물
	오퍼레이팅 조건		유무기복합물
데이터 해석	사용 프로그램/수식	분석기법 장단점	장점/단점
	관련 논문/특허	관련 시설 및 전문가	장비/시스템 현황
	전문가 해석 노하우		기관명/성명/연락처

- 프로토크라화된 측정·분석 노하우 수집하고, 실시간 활용 및 업데이트 (위키피디아식)가 가능하도록 플랫폼에 탑재·확산
 - (초기) 논문·특허 분석 → (확산) DOI, R&D 가점 등 인센티브로 자발적 등록 활성화
- (네트워크 구축) 측정·분석 서비스 플랫폼 중심으로 소재별·물성별 인적·물적 네트워크 구성·운영, 측정·분석 저변 확대
 - 측정·분석 전문가와 소재 전문가가 한 팀이 되어, 실험데이터 해석 가이드라인 제시, 기술애로에 관한 자문 수행(시설·장비·기법 제시 등)
 - 소재 응용분야별(예시 : 정보·전자, 에너지·환경, 구조(안전) 등) 핵심 측정 분석 장비 보유 기관 간 네트워크를 구축, one-stop 활용 지원
 - 선도기관 및 핵심 장비에 대해서는 실시간 데이터 수집 및 활용 지원 병행
- (신기술개발) 한계를 뛰어넘는 새로운 측정·분석 기술을 개발하고, 표준화 연계(KS, ASTM, ISO 등)를 통해 특성검증 정확도 향상
 - (예시) 기판이 필요없는 반도체 및 디스플레이 박막 소재 검사기술 ⇨ 조기 상용화 가능

참고5 측정·분석 기술 공유 및 개발 성공사례

측정·분석 기법 공유

美 NIST 측정·분석 플랫폼



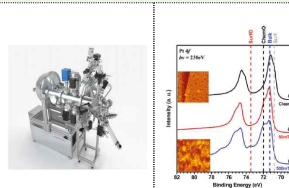
측정·분석 정보 제공

화학소재 표준물질 DB

- 소재 계능 이니셔티브(MGI)의 일환, 소재 측정·분석 정보 공유 플랫폼 운영(美 표준기술연구소)
 - 소재 측정데이터 분석·해석 결과 및 관련 연구 기관(장비·시설 등)에 대한 정보 제공
 - 소재 및 측정·분석 연구자간 네트워크 구성을 통해 신소재 측정·분석 표준 가이드라인 제공
- 연구기간(30%) 단축, 개발비(2억달러) 절감

新측정·분석 기술개발

촉매반응 메커니즘 규명

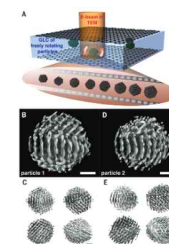


상압광전자 분광기

상압 실시간 산화환원 측정

- 극한환경(초고진공)이 아닌 일반환경에서 전자구조 측정기술 개발로 백금촉매 실시간 관찰(JACS, '11)
 - 백금촉매가 실제로 구동하는 상압(일반환경)에서 전자구조 및 물성 변화를 관찰(상압광전자분광기)
 - 백금표면에 존재하는 산화물 확인, 촉매반응 메커니즘에서 산화물의 역할을 규명
- 공정·설계 단계별 검증에 적용 가능

나노입자 합성과정 실시간 관찰

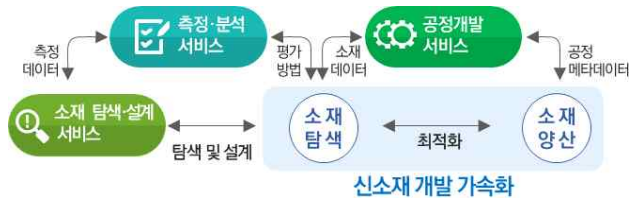


- 투과전자현미경에 물을 담을 수 있는 신기술 개발로 액상에서의 나노입자 3차원 구조 관찰(Science, '20)
 - 그래핀 액체셀을 활용, 기존의 초고진공 환경이 아닌 액상에서의 나노입자 응집과정을 분석
 - 더 높은 해상도를 가지면서도 더 낮은 원자레벨 수준의 3차원 결정구조 분석이 가능
- 소재 물성 탐색영역 확장, 신소재 개발 가속화

3 소재연구 가속화 선도 프로젝트 추진

가. 소재연구 전주기 가속화 선도

- 소재연구 혁신허브를 활용, 첨단산업 소재 탐색·설계 → 합성·구현 → 양산까지 전주기 데이터 활용 모델 제시
 - '탐색·설계'에만 데이터·AI를 주로 활용하던 기존 R&D 사업*과 차별화하여 소재개발에 소요되는 시간·비용의 획기적(1/2수준) 절감 목표
 - * (미래소재디스커버리) '15 ~ '24, 3,066억원(28개 신소재 발굴 연구단 지원)
 - 설계·구현된 新소재에 대해서는 소재+공정+시스템 패키지 개발 및 부처간 “함께달리기형” 협력모델 지원을 통해 공급망까지 연계
 - * (과기부) 연구기관 & 공급기업 협업 ⇨ (산업부) 공급기업 & 수요기업 협업
- ⇒ 확대된 소부장 품목(100개 ⇨ 338개+a) 등과 연계, 대형 R&D 사업*을 기획·추진(중장기)하되, 시범사업을 통해 조기 성공모델 창출 병행(단기)
 - * (가칭) 미래소재크리에이션 : 現 미래소재디스커버리 후속사업으로, 소재 R&D 전주기에 데이터·AI를 활용하여 획기적 특성을 갖는 신소재를 조기에 구현



나. 기업 소재개발 맞춤형 지원

- AI 제조 플랫폼(KAMP) 등을 통해 기업이 개별적으로 구축하기 어려운 데이터 활용 인프라 제공 및 기업 요구에 최적화된 솔루션 지원(22~)
 - ①기업이 소재 DB·AI를 편리하게 활용하도록 데이터 저장공간·분석 도구·AI 엔진 등 개발 환경 제공, ② 개별 수요기업의 제조환경에 적합하도록 빅데이터·AI 시스템을 커스터마이징하여 제공

참고6 플러그십 프로젝트 예시

(해외사례, EU) Battery 2030+

- 데이터·AI 기반으로 소재탐색 ⇨ 셀 디자인 ⇨ 전지제조의 순환식 피드백을 수행, 차세대 전지 개발속도 10배 이상 향상이 목표
 - * 덴마크 공대(DTU)를 중심으로 15개국 34개 기관 참여 예정('20.9~, €20M/3년)
- 소재 개발·합성에서 시스템 구현까지 모든 과정에 AI를 접목하고, 머신러닝, DB 구조, 제조·검증, 인터페이스 등 소재+IT 과제 융합



(예시과제) 전고체 전지 개발

- 데이터 플랫폼 기반 차세대 전고체 전지 개발 가속화 프로젝트
 - (목적) 5년 내 상용 리튬전지의 용량과 안전성을 2배 이상 향상시킬 수 있는 차세대 전고체 전지 시스템 확보
 - (기간/규모) 6년, 총 100억원
 - * (1단계, 3년) 핵심소재 확보 및 공정확립 → (2단계, 2년) 신소재-시스템 연계
 - (참여기관) 출연연 + 대학 + 3대 서비스 플랫폼 + 전지기업

기관	역할분담
출연연/대학	전고체 전해질, 칼코제 기반 양극소재, 리튬 금속 음극 등 소재 개발
3대 플랫폼	데이터 기반의 신속한 소재 탐색·설계 및 공정설계 지원 신소재 특성 검증을 위한 측정·분석 기법 및 네트워크 제공
전지기업	신소재를 적용한 전고체 전지 시스템 공정 최적화 및 상용화

V. 기대효과

◇ (정량적) 전통적 연구방식(실험, 이론 등) 대비 데이터·AI 활용으로 개발 기간 및 비용 50% 이상 절감

	전통적 방식	→	소재연구혁신허브 방식
연구방법	실험·이론·모델링		데이터·AI
개발기간	10~20년		5~7년
개발비용	100(기준)		50

◇ (정성적) 新소재 특성 분석(검증)을 위한 측정·분석 기법 접근성·정확도 향상 및 lab-scale 우수성과 제품적용 촉진

연구자	▶ 기존 방식으로는 특성 분석이 불가능한 융복합 소재의 측정·분석 장비 및 전문가 정보의 신속한 획득 ⇒ 연구정확도 및 소재 신뢰성 향상
기업	▶ 상업적 가능성이 검증된 新소재 공정레시피 확보를 통해 신제품 및 신공정에 대한 투자 리스크 경감 ⇒ 소재혁신으로 산업선점 기회 확보

VI. 추진일정

주요 정책과제	추진일정	소관부처
① 데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축		
가. 소재 연구데이터 수집·관리·활용 체계 구축	'20.下~	과기·산업
나. 데이터 기반 소재연구 활성화 기반 조성	'20.下~	과기·산업
② 데이터·AI 활용 3대 서비스 제공		
가. 소재 탐색·설계 서비스	'20.下~	과기·산업
나. 공정개발 서비스	'21~	과기·산업·중기
다. 측정·분석 서비스	'21~	과기
③ 소재연구 가속화 선도 프로젝트 추진		
가. 소재연구 전주기 가속화 선도	'21~	과기
나. 기업 소재개발 맞춤형 지원	'21~	산업·중기