

# POLYMER SCIENCE and TECHNOLOGY

## 인공지능·계산과학 기반 고분자 소재 연구 동향

(Recent Trends in Computation and AI-driven Research on Polymeric Materials)



하민영(Min Young Ha)

2016 서울대학교 화학생물공학부 (학사)  
 2022 서울대학교 화학생물공학부 (박사)  
 2025 삼성전자 SAIT 전문연구원  
 현재 경희대학교 화학공학과 조교수



한구희(Koohee Han)

2011 서울시립대학교 화학공학과 (학사)  
 2018 NC State Univ. 화공생명공학과 (박사)  
 2021 아르곤국립연구소 (Post-Doc.)  
 현재 경북대학교 응용화학공학과 조교수



서범준(Bumjoon Seo)

2011 서울대학교 화학생물공학부 (학사)  
 2018 서울대학교 화학생물공학부 (박사)  
 2022 Purdue Univ. (Post-Doc.)  
 현재 서울과학기술대학교 화공생명공학과 조교수

인공지능(artificial intelligence, AI) 및 기계학습(machine learning, ML) 기법의 비약적 발전과 컴퓨터 성능의 지속적 향상에 힘입어, 데이터과학과 계산과학의 융합은 소재과학 전반에 걸쳐 연구 패러다임의 전환을 이끌고 있습니다. 특히 고분자 소재는 단량체 구조, 중합 메커니즘, 사슬 아키텍처, 분자량 분포, 가공 조건 등 다차원적 설계 변수가 복잡적으로 얽혀 있어 전통적인 실험적 접근만으로는 방대한 화학적 공간을 효율적으로 탐색하기 어려웠습니다. 이에 따라 대규모 데이터베이스 구축과 이를 기반으로 한 ML 물성예측, 멀티스케일 계산과학을 통한 분자 수준의 거동 규명, 그리고 AI 기법을 활용한 소재의 기능 고도화 등 다양한 방향에서 고분자 연구의 새로운 가능성이 확장되고 있습니다.

본 특집에서는 이러한 흐름을 반영하여 고분자 소재 연구에서 AI와 계산과학이 활용되는 최근 동향을 소개하고자 합니다. 먼저 방법론적 관점에서, 고분자 정보학(polymer informatics)의 현황과 당면 과제를 데이터베이스·표현학습·역설계의 틀로 조망하였고, 조립자 분자동역학(coarse-grained molecular dynamics) 시뮬레이션을 활용한 멀티스케일 고분자 모델링 방법론을 소개하였습니다. 이와 더불어, AI 기법이 고분자 소재의 실용적 응용에 직접 기여하는 사례로서 기계학습 기반의 선택적 감지 특성을 구현한 섬유 고분자 웨어러블 센서 연구를 함께 소개하고 있습니다.

본 특집이 인공지능과 계산과학을 활용한 고분자 소재 연구에 관심이 높은 연구자들에게 유용한 자료가 될 수 있기를 바랍니다. 마지막으로, 바쁜 일정에도 본 특집을 위해 귀중한 원고를 집필해주신 저자분들께 깊은 감사의 마음을 전합니다.

