

연수 제안서

연구 분야	인공지능 활용한 신소재 개발
연구 과제명	
연수 제안 업무	인공지능 활용한 신소재 개발

(연수 내용)

연구의 배경:

새로운 촉매를 개발하기 위해 인공지능이 도입되고 있다. 특히나, 후보군들을 직접 실험에 옮기기 전에 성능이 높을 것으로 판단되는 촉매 물성의 인디케이터 (indicator)로 흡착에너지가 가장 주목을 받고 있다. 흡착에너지는 기존의 범밀도함수론 등의 양자화학 방식의 계산법을 바탕으로 계산이 가능하나 이는 시간이나 자원이 꽤 많이 소요된다. 최근 머신러닝 기술을 활용하여 흡착에너지를 빠르고 정확하게 예측하는 시도가 늘어나고 있다. 본 연구팀에서는 그래프 신경망 기반의 머신러닝 기술을 기보유하고 있으며, 데이터베이스 확장 및 머신러닝 모델 정확도와 신뢰도 개선 등의 고도화 작업을 연수를 통해 경험할 수 있을 것이다.

연수 내용:

연수의 내용은 크게 2가지로 나뉜다.

- 첫째, 촉매 흡착에너지 데이터베이스 확장 작업이다. 현재 본 연구팀에서는 약 20,000건의 흡착에너지 데이터베이스를 이미 구축했으나, 연수 과정을 통해 약 50,000여건 수준으로 확장이 가능할 것으로 예상된다. (예상)을 진행한다.
- 둘째, 수집된 흡착에너지 데이터베이스를 바탕으로 이를 정확하고 빠르게 예측할 수 있는 머신러닝 모델 (그래프 신경망 모델)을 개발한다. 궁극적으로, 이 모델을 웹플랫폼의 형태로 이식하여 landscape 모듈 (흡착위치에 따른 에너지 등고선 생성 모듈)과 reaction pathway 모듈(촉매반응 full energetics 생성자동화 모듈)을 개발한다.

- 연수기간 : 2021년 11월 1일 - 2022년 10월 31일 (추후 평가를 거쳐, 연장 가능)

※ 연구 정보의 기밀 유지

소속 부 서 : 계산과학연구센터

연수 책임자 : 김동훈