

연수 제안서

연구 분야	기계학습 포텐셜 개발 연구
연구 과제명	AI 기반 에너지 및 환경소재 데이터 수집 및 활용기술 개발
연수 제안 업무	다공소재용 기계학습 포텐셜 개발
<div>(연수 내용)</div> <ul style="list-style-type: none">● 일반적으로 다공성 구조의 unit cell이 크기 때문에 현재 가장 많이 사용되는 계산과학 방법론(DFT, MD)으로 다공소재의 기초 물성을 정확하게 예측하기 쉽지 않음.● 하지만 기계학습 기반의 포텐셜을 사용했을 경우에 DFT 계산과 비슷한 정확도를 가지면서 MD와 비슷한 속도로 다공소재의 물성을 예측할 수 있음.● 이에 본 연수를 통해 기계학습 기반의 다공소재용 포텐셜을 개발하고 기존의 계산과학 방법론이 예측할 수 없었던 다공소재의 기초 물성을 예측하고자 함.● 구체적으로 긴 시간동안 다공소재 기공 안에서 가스 분자들이 어떻게 확산되는지 기계학습으로 예측하고자 함. <div>- 연수기간 : 2022년 11월 1일 – 2023년 10월 31일</div> <div>※ 연구 정보의 기밀 유지</div>	
<div>소속 부 서 : 계산과학연구센터</div> <div>연수 책임자 : 선임연구원 이 정 훈</div>	