

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 수행할 것이다. 이를 통해, 궁극적으로 인공지능 기반 신촉매 개발의 가속화를 실현한다.

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 예상)을 진행한다.
- 둘째, 수집된 흡착에너지 데이터베이스를 바탕으로 이를 정확하고 빠르게 예측할 수 있는 머신러닝 모델 (그래프 신경망 모델)을 개발한다. 궁극적으로, 개발된 머신러닝 모델들을 이용하여 신규 촉매의 성능 및 안정성을 제고할 수 있는 연구를 수행한다.

- 연수기간 : 2022년 3월 1일 – 2023년 2월 28일 (추후 평가를 거쳐, 연장 가능)

※ 연구 정보의 기밀 유지

소속 부 서 : 계산과학연구센터

연수 책임자 : 김동훈