

머신 러닝 모델링을 통한 촉매 활성 예측

함형철[†], 조진원, 김승훈, 김민경
한국과학기술연구원 연료전지연구센터
(hchahm@kist.re.kr[†])

기존의 촉매 개발은 입자 단위에서의 설계, 합성, 평가를 반복하며 trial-and-error를 통해 실험적으로 진행되어왔다. 이러한 접근 방식은 시간과 비용이 많이 소모되어, 단기간 내에 선진 기술을 추월하는 것이 어려우며, 혁신적인 촉매 디스커버리에도 한계가 있다. 최근에는 컴퓨팅 파워 및 용량의 발달로 예측의 정확도가 높은 양자역학 기반 계산(DFT: density functional theory)을 활용하여 촉매 탐색을 진행하여 왔다. 기존 실험적인 접근 방법에 비해서 빠른 신물질 탐색이 가능하나 구조와 조성과 관계된 방대한 후보 소재의 가능성을 고려하면 여전히 time-consuming 방법이다. 또한 이러한 접근 방법에서는 후보 소재 구조와 소재의 특성을 나타내는 descriptor와 상관 관계를 단순한 선형식으로 표현 된다. 그러나 소재의 섭동(perturbation)이 크면 정확도가 크게 떨어져서 촉매의 물성을 예측할 수 없다. 본 발표에서는 이러한 기존의 descriptor 기반 소재 탐색의 단점들을 극복하는 동시에 초고속으로 촉매의 탐색을 가능하게 머신 러닝(machine learning) 기법을 다룰 것이다.