

## 딥러닝 기반의 최소 에너지 경로 계산을 위한 초기 추측

박현수, 이상원, 김지한<sup>†</sup>

KAIST

(jihankim@kaist.ac.kr<sup>†</sup>)

최소 에너지 경로 (MEP, minimum energy path) 계산을 위한 초기 추측을 자동으로 생성하는 오토인코더를 개발했다. 우리의 오토인코더는 분자 동역학(molecular dynamics) 시뮬레이션 데이터를 인풋으로 사용해서 잠재공간에서 적절한 분자들을 생성한다. 훈련된 오토인코더의 잠재공간에서 선형보간법을 사용하여 최고 에너지 경로의 초기추측을 생성했다. Acetonitrile과 Alanine dipeptide를 사용하여 테스트했고, 기존의 선형보간법과 image dependent pair potential 방법보다 NEB(nudged elastic band) 계산에서 SCF 횟수가 줄어든 것을 확인했다. 이를 통해서 최소 에너지 경로를 찾기 위해서 오토인코더를 활용할 수 있음을 확인했다.