

효과적인 촉매 소재 설계를 위한 머신러닝 모델
개발과 전망

김정환^{1,†}, 노지원^{1,2}, 권혁원¹, 박현도¹, 주종효¹, 조형태¹,
노인수³

¹한국생산기술연구원; ²연세대학교; ³서울과학기술대학교
(kjh31@kitech.re.kr[†])

머신러닝은 데이터에 기반한 경향성 파악과 의사결정에 요구되는 통찰력을 빠르게 제공함으로써 바이오, 신소재, 공정 개발 등 다양한 분야에서 널리 사용되어 왔다. 촉매 분야에서도 소재 개발 가속화를 위해 머신러닝을 활용한 연구의 필요성이 커지고 있지만, 조성 및 반응 조건이 정밀하게 제어된 환경에서 얻어진 데이터의 부족으로 인해 실제 촉매 설계에 사용가능한 정확한 머신러닝 모델 개발에 한계가 있어 왔다. 따라서 촉매분야 머신러닝 모델 개발에 사용가능한 데이터를 얻기 위해서는 정밀하게 제어된 반응 조건에서 방대한 양의 소재들의 스크리닝을 통해 원하는 물성을 만족하는 소재를 찾아내는 High Throughput Screening (HTS) 반응 시스템 구축이 필수적이다. 본 발표에서는 HTS장치로부터 얻어진 정밀한 데이터를 기반으로 개발된 머신러닝 모델을 사용하여 촉매 스크리닝 방법론을 제시하고 최근 연구성과 및 신뢰도가 높은 머신러닝 기반 모델을 개발하기 위한 연구 방향성을 소개하고자 한다.

Keywords: Predictive model, Catalyst design, High Throughput Screening (HTS), Catalyst screen