

3 밀도범함수 이론과 머신러닝을 이용한 신물질 디자인 탐색

글_윤홍기 박사후 연구원·이형근 석·박사통합과정·강윤구 석·박사통합과정·한명준 교수 | KAIST 물리학과

1. 서론

원하는 물성을 가지는 물질을 마음대로 설계할 수 있다면? 인류의 역사를 석기, 청동기, 철기 시대 등으로 구분하곤 하듯이 인간의 삶은 그것을 구성하는 물품들, 그리고 그 소재/재료와 밀접하게 연관될 수 밖에 없다. 현대의 정보통신 혁명도 그 기반에는 대용량 저장장치와 고속 연산장치를 가능하게 했던 신소재의 발견이 있었다. 오늘날 최신의 물성 이론/시뮬레이션 연구는 원하는 특성을 갖는 소재를 디자인해 구현하는, 얼핏 무모해 보이기까지 하는 대담한 목표를 향해 힘차게 나아가고 있다. 지난 수십 년 간 눈부시게 발전해 온 수학/물리/화학적 이론 체계와 계산 방법론, 그리고 이를 구체적으로 구현해 낸 소프트웨어와 강력한 슈퍼 컴퓨터의 등장으로 인해, 현대의 이론 물성 과학 연구는 이전 세대에는 상상하기 어려웠던 높은 수준의 정확도와 예측력을

자랑한다. 그리고 이에 기반한 신물질 디자인 연구 역시 많은 성공 사례들을 낳으며 비약적으로 발전하고 있다. 보다 최근에는 기계학습과 같은 새로운 전산 기법들이 결합되면서 점점 더 많은 주목을 받고 있다.

기계학습 기법이 이미지 인식 분야에서 기존의 알고리즘들을 압도하기 시작한 것은 10여 년 전 즈음이다. 이 새로운 방법은 점점 더 다양한 분야에 영향을 끼치고 있으며 이론/계산 재료 연구 분야도 예외가 아니다. 본 글에서는 전통적인 이론 물성 예측 방법의 원리를 소개하고 최근 기계학습과 결합하여 진행되고 있는 연구법들을 간략히 살펴보고자 한다.

2. 밀도범함수 이론과 제일원리 계산

원하는 물성을 갖는 재료를 이론적으로 예측-제안하기 위해서는, 우선 주어진 물질의 특성을 정확하게 계산하고 재현할 수 있어야 한다. 여기서 ‘주어진 물질’이란 원소의 종류(화학 조성)와 그 배열(구조)을 가리키는데, 이와 같은 가장 기초적인 정보만을 이용해서 물질의 다양한 성질들을 직접 계산해 낼 수 있게 된 것은 현대 양자 물리학의 위대한 성취 가운데 하나이다. 그러나 원자나 간단한 분자의 수준을 넘어서는 일반적인 물질들에 대해서 정확한 양자역학 계산을 수행하는 것은 전자의 개수가 많아지고 그들 간의 상호작용이 중요해짐에 따라 매우 어려운 과제가 된다. 특히 파동함수를 계산하고 이를 조합하는 방식의 직접적인 접근은 전자의 개수가 조금만 많아져도 계산량이 급격히 커지면서 최신의 슈퍼 컴퓨터로도 계산할 수 없는 정도에 이르게 된다.

이러한 난점을 획기적인 방식으로 해결한 것이 현대 물성과학 분야에서 가장 널리 사용되고 있는 밀도범함수 이론(density functional theory; DFT)이다. DFT는 파동함수 대신 전자 밀도 함수를 이용하여 물질의 총에너지와 다양한 물성들을 기술하는 방식으로서, 1960년대 중반 Hohenberg, Kohn, Sham 등에 의하여 이론적 정립되었다 [1,2]. 특히 실험에 의존하는 파라미터가 없는 (parameter-free) 소위 ‘제일원리 계산 방법론 (first-principles calculation

method)’이라는 점에서 단순 이해를 넘어 예측과 디자인을 가능하게 해 준다.

DFT 기반 제일원리 계산은 지난 반세기 동안 빠르게 발전하며 눈부신 성공을 거두었다. 특히 컴퓨터 하드웨어 및 소프트웨어 기술의 발전과 결합되어 이제는 물성 과학의 주요 분야로 자리 잡았다. 주어진 물질에 대한 제일원리 계산은 바닥상태 총에너지, 전자 밴드구조, 전자 준위 등을 준다. 그리고 이로부터 다양한 이차적인 물리량들 또한 계산할 수 있는데, 예를 들어 원자 위치에 따른 총에너지로부터 힘(force)을 계산할 수 있기 때문에 기본적으로 분자 동역학 시뮬레이션이 가능하다. 또한 다양한 화학 반응들 역시 주어진 상태들의 에너지 상관관계로부터 얻어지기 때문에 이에 대한 이해와 예측도 가능해진다.

현대의 제일원리 계산은 매우 다양한 예측과 시뮬레이션을 제공한다. 포논 성질과 라만 분광학등 관련 실험 결과를 예측하고, 다양한 X-선 스펙트럼을 시뮬레이션하며, 일반적인 (conventional) 초전도체의 경우 초전도 임계 온도까지 직접 구할 수 있다. 이 모든 결과가 파라미터 없이 제일원리로부터 직접 제공된다는 점에서 단순히 실험을 해석-이해하는 것을 넘어 예측과 디자인에까지 이르는 새로운 물성 연구 패러다임이 되고 있는 것이다.

3. 알고리즘 기반 역방향 물질설계

물질의 구조로부터 물성을 계산 또는 예측하는 것이 통상적인 제일원리 연구 방식이었다면, 최근에는 원하는 물성을 가지는 소재의 구조를 탐색·발견하는 ‘역방향 물질 설계(inverse material design)’가 활발하게 시도되고 있다. 이는 관련 이론과 알고리즘의 발전, 계산 신뢰도의 향상, 그리고 계산 자원의 증가 등이 함께 어우러져 가능해졌다. 역방향 물질 설계는 주어진 조성비에서 가능한 구조를 탐색하는 과정과, 관심 있는 물성을 정의하고 원자 배열과 조성비를 역으로 찾는 과정을 포함한다. 이러한 연구는 통상적인 밀도범함수 계산 위에 원자들의 배열과 조성비를 효율적으로 탐색하는 ‘광역 최적화 알고리즘’이 덧붙여지는 방식으로 진행된다. 따라서 무수히 많은 구조와 조성의 가능성을 우수한 최적화 알고리즘과 적절히 결합하는 것이 중요하다.

그림 1은 역차원 물질 설계의 과정을 보여주고 있다. 기본적으로 두 가지 최적화 계산에 기반하고 있는데, 첫째는 ‘광역 최적화’로서 ‘목적함수(objective function)’ 값을 최적화시키는 과정이며, 둘째는 ‘국소 최적화’로서 광역 최적화 과정에서 생성되는 구조들을 기존 밀도범함수 이론을 통해 준 안정한 구조들로 최적화 하는 것이다. 이를 통해 주어진 조성에 대해서 목적함수 값을 만족시키는 원자들의 구조를 찾는 것이 가능하게 된다. 나아가 조성

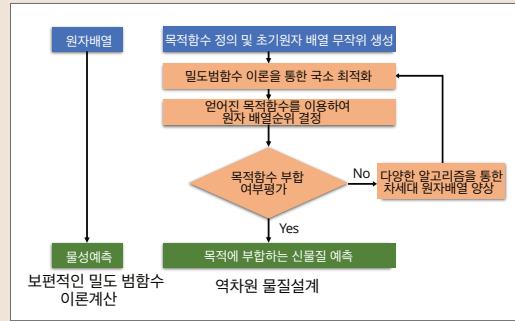


그림 1 ▶ 밀도범함수 이론과 광역최적화 알고리즘을 결합한 역방향 신물질 탐색 계산 과정의 모식도.

비를 변화시키고 이 과정을 반복함으로써 새로운 물질을 탐색하고 비교할 수도 있다.

이러한 역방향 신물질-구조 탐색 작업은 광역 최적화 알고리즘이 그 효율성과 정확성을 상당 부분 결정하게 된다. 따라서 다양한 알고리즘이 제안되고 코드화되어 활용되고 있는데, 대표적인 소프트웨어로는 미국의 XtalOpt [3], 유럽의 USPEX [4], 중국의 CALYPSO [5] 등이 있으며, 국내에서는 KAIST와 KRISS가 공동으로 개발한 AMADEUS [6]가 대표적이라 할 수 있다. XtalOpt와 USPEX의 경우 진화 알고리즘, CALYPSO의 경우 입자 군집 최적화 알고리즘, AMADEUS의 경우 conformal space annealing (CSA) 알고리즘을 광역 최적화를 위해 채택하고 있다. 국소 최적화는 다양한 개별 밀도범함수 코드들에 의해 제공된다.

원칙적으로 역차원 물질 설계는 밀도범함수 이론으로 계산 가능한 어떤 값이든 목적함수로 취할 수 있기 때문에 다양한 분야에서 폭넓게 사용될 수 있다. 총 에너지 값 자체 뿐

아니라, 밴드 갭의 크기나 양상 등으로 목적함수를 확대하여 다양한 신소재 탐색이 가능하다. 최근의 대표적인 성과로는 CALYPSO 그룹이 보여 준 고압-고온 초전도 물질 예측을 들 수 있을 것이다 [7]. 그 외에도 초전도 상을 갖는 NaSi_6 , Si_6 구조 예측 [8], 고압에서 이온성을 갖는 보론 구조 예측 [9] 등이 있다.

4. 기계학습을 이용한 신물질 탐색

최근 인공지능-기계학습의 발전은 여러 인접 과학 기술 영역과 사회 전반에 걸쳐 큰 영향을 끼치고 있다. 이는 제일원리 물성 계산 분야 역시 예외가 아니어서, 전형적인 계산 방식을 어떻게 개선할 수 있는지에 대한 다양한 연구들이 시도되고 있다. 이 가운데에서도 물질 설계와 물성 예측은 대표적인 주제라 할 수 있다.

역방향 물질 탐색의 경우에는 다양한 조성비의 효과적인 탐색과 원자 개수가 많아질 때 DFT 계산 자체의 계산량이 과도하게 커지는 단점을 극복하기 위한 시도들이 활발하다. 기계학습은 최근의 알파고의 예에서 보듯이, 수많은 경우의 수를 모두 직접 검사해보는 대신에 효과적인 ‘추상화’ 작업을 통해 접근하게 해준다. 즉 인간의 추상화 능력을 기계가 모사하는 것으로서, 간단한 체스게임에서부터 이미지를 분석하여 텍스트를 생성하는 최근의 예

시에 이르기까지 그 응용 가능성은 무궁무진하다 [10].

많이 알려져 있듯이, 이러한 문제의 ‘추상화’와 ‘추론’의 이면에는 ‘인공신경망 (artificial neural network)’이 있다. 역사적으로 보면 이 개념 자체는 이미 80~90년대에 제안되었으나, 당시에는 연산능력의 한계로 인해 실제 문제에 활용하는 데에 어려움이 많았다. 하지만 대규모 행렬연산에 최적화된 그래픽 카드의 발전 등으로 2012년 경 부터 의미있는 알고리즘 실현이 가능해 졌고, 특히 이미지 처리 분야에서 두각을 나타내기 시작하였다 [11]. 이후 학계뿐만 아니라 구글, 마이크로소프트, 페이스북, IBM 등 대기업들의 참여로 활발한 연구가 계속되고 있으며 비약적 발전이 이어지고 있다. ‘ImageNet’이라는 콘테스트에서는 해마다 유수의 기업과 학교들이 새로운 인공신경망 알고리즘을 내놓으며 경쟁하고 있는 것을 볼 수 있다.

신물질 탐색 연구에 있어서는, 원하는 물성을 적절히 정의하고 이를 구현해 주는 물질의 구조와 조성비를 효과적으로 탐색하는 방법, 제일원리 계산의 기능을 일부라도 대체할 수 있는 새로운 접근 등이 집중적으로 시도되고 있다.

4.1 기계학습을 통한 거대구조 최적화

일반적인 연구에서 널리 수행되는 현대 밀도범함수 계산의 현실적인 원자 개수 한계는 대

략 수백~수천 정도로 볼 수 있을 것이다. 광역 최적화 알고리즘 기반의 계산 한계를 원자 개수 수십~수백 개 정도로 본다면 만족스러운 시뮬레이션 결과를 기대하기 어려운 여러 상황들이 존재하게 된다. 따라서 밀도범함수 계산에서 가장 많은 시간을 소비하게 되는 구조 최적화를 보다 효율적으로 수행하기 위한 여러 계산법들이 시도되어 왔는데 대표적인 것으로 force-field 기법이 있다 [12-14]. 이 방법은 원자 간의 상호작용 힘을 상황별 퍼텐셜로 만들어 내는 것으로서, 정확도가 담보되고 일반성을 잃지 않는다면 거대 규모 계산에 매우 유용한 방법론이 될 수 있다. 그러나 신뢰할 만한 force-field 퍼텐셜을 만들어 내는 작업은 학계의 오랜 숙제로서 수십 년 간의 연구에도 불구하고 아직까지 다양한 원소들에 대해 믿을 만한 퍼텐셜을 일반적으로 제시하는 것은 매우 어려운 것으로 알려져 있다.

이러한 맥락에서 인공지능망 기법과 결합하는 새로운 방식의 force-field 퍼텐셜 생성 알고리즘들이 활발하게 연구되고 있다. Behler와 Parrinello의 선구적인 2007년 연구 이래로 [15], 최근에는 확장된 다양한 퍼텐셜들이 제안되고 있으며 [16-19], 이를 쉽게 사용할 수 있도록 개발된 소프트웨어들도 등장하였다 [20,21]. 이러한 연구들은 오래된 학계의 난제에 기계학습이라는 새로운 전산기법을 통해 재도전하는 시도라는 점에서도 주목할 만하며, 앞으로 정확하면서도 범용성을 갖춘 force-field 퍼텐셜 구축이 가능해 진다면 물질 디자인과 물질

예측, 나아가 물성 과학 전반에 매우 큰 영향을 끼치게 될 것이다.

4.2 기계학습을 통한 구조 생성

일반적으로 기계학습 기법의 성패는 양질의 거대규모 데이터의 존재 유무에 상당부분 좌우된다. 재료 설계에서 이러한 빅데이터는 다양한 물질들에 대한 원자 구조와 이에 대응되는 구체적인 계산 결과 자료를 의미한다. 물질의 구조 정보 자체가 하나의 거대한 데이터 베이스를 이루고 있는 상황에서 제일원리 등 각종 계산 자료까지 포함하는 정보 구축은 그 자체로 큰 프로젝트가 된다. 이러한 노력의 대표적인 사례로는 미국의 material genome project와 유럽의 NOMAD (novel materials discovery) 등이 있는데, 이들은 여러 고체물질들에 대한 DFT 계산 결과를 데이터 베이스로 구축-제공하여 신 물질 탐색에 활용하는 것을 목표로 한다. 예를 들어 데이터 마이닝(data mining) 등을 통해서 새로운 물질 후보군을 탐색할 때 다양하게 사용될 수 있다는 점에서 재료 설계 연구에서 갖는 의미가 크다.

이 밖에도 직접적인 DFT 계산에 의존하지 않고 기계학습을 활용하여 물질의 구조를 생성하려는 좀 더 과감한 시도들도 있다. 이는 최근 기계학습 분야에서 주목 받고 있는 ‘생성 모델 (generative model)’과 관련이 깊은데, ‘VAE (variational autoencoder)’ [22], ‘GAN (generative adversarial networks)’ [23] 등으로 대표되는 생성 모델은, 있음직한 데이터를

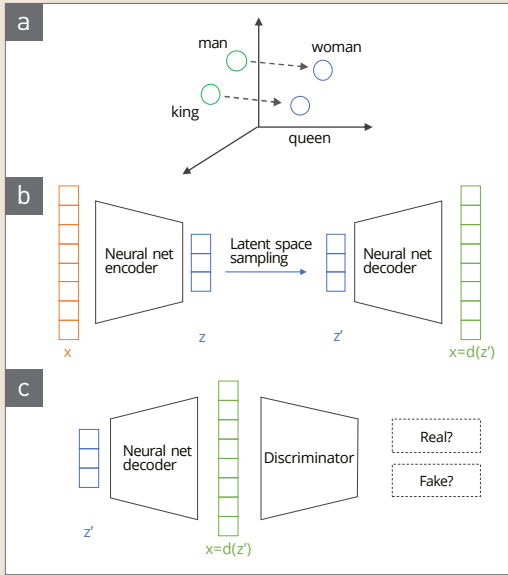


그림 2 ▶ (a) 기계학습을 통해 단어를 벡터공간에 프로젝션. (b), (c) VAE와 GAN의 모식도. 잠재벡터공간(z)을 정의하고 그 변이를 통해 새로운 구조를 생성할 수 있다.

프로그램 또는 알고리즘이 생성해 내도록 하는 것이 목표이다. 구체적인 예로서, 사람의 얼굴 이미지를 생성하는 모델이 유명하다 [23,24]. 인간의 관점에서 보자면 이미지 인식은 비교적 쉬운 문제로 생각될 수도 있겠으나, 가로, 세로 픽셀과 RGB 색상으로 이루어진 고차원 공간상에서 인간의 얼굴로 인식될만한 데이터만 자유자재로 생성해 내야 한다는 점에서 도전적인 전산학 문제가 된다.

VAE이나 GAN 모두에서 중요한 개념은 소위 ‘잠재공간 (latent space)’이라는 것이다. VAE를 예로 들어 보자. 어떤 공간 A에 있는 원소를 공간 B로 보내는 것을 인코딩, B 공간에 있는 원소를 A 공간으로 보내는 것을 디코딩이라고 한다. 이 때 A와 B가 일대일로 대응 된다

면, 공간 A에 있는 어떤 데이터를 인코더와 디코더를 거쳐 다시 A 공간으로 가져와도 똑같은 데이터를 얻게 될 것이다. 하지만 일대일 대응이 잘 성립하지 않는다면 인코딩/디코딩 과정에서 정보의 손실이 일어나 본래의 데이터와 다른 데이터가 나올 수 있다. 이 과정을 기계학습 관점에서 보면, 우리가 원하는 데이터 집합에 대해 인코더와 디코더를 거쳤을 때 본래의 데이터와 가장 유사한 데이터가 생성되도록 인코더와 디코더 자체를 학습시킬 수 있다. 이와 같은 기계학습 방식을 ‘오토인코더’라 하고, 인코더를 통해 데이터를 보내는 공간을 ‘잠재 공간(latent space)’이라 한다. 보통 잠재공간의 차원은 A, B 공간보다 낮게 설정하여 필요한 정보만 압축적으로 담기도록 한다. GAN은 여기에 덧붙여 생성된 데이터가 믿을 만한지 여부를 판단하는 과정이 추가된 형태이다.

이와 같은 생성 모델을 물질의 설계 및 디자인에 적용하는 시도는 매우 흥미로운 연구 주제가 될 수 있다. 예를 들어 실제 존재하는 물질들을 직접 학습에 이용하여, 인코더와 디코더에 물리적 조건 및 특성들 (예를 들어 원자 간의 거리, 결합 각도, 주변 원자들의 분포 등)이 담기도록 할 수 있다. 이미 알려진 물질의 데이터 베이스를 통해 학습된 인공지능이 우리가 원하는 물성을 갖는 물질을 ‘생성’해 주도록 하는 것이다. 이와 같은 구조생성 모델은 분자 화학 분야나 원자수가 많아서 직접 밀도범함수 계산을 수행하기 어려운 물질들에 유용하게 적용될 수 있을 것이다. 단백질 접힘과 같이 거대

분자의 거동을 묘사하기 위하여 이러한 모델을 도입-적용하는 시도가 최근에 실제 일부 성공적으로 이루어지기도 하였다 [25,26]. 아직은 초기 단계의 연구 사례들이기는 하지만 다양한 방식의 추가 확장 연구가 기대된다.

4.3 기계학습을 통한 기능성 물질 생성

이러한 일련의 연구들은 원하는 물성을 가지는 신소재를 예측-디자인하는 알고리즘 또는 인공지능을 생각하게 한다. 생성 모델에 특정한 의미를 가지는 집합을 만들도록 할 수도 있기 때문이다. 잠재공간은 통상적으로 벡터공간인데 이 때 벡터공간의 각각의 축이 유의미한 정보를 대표할 수 있다면, 다른 벡터공간의 잠재공간 이동을 통해 원하는 특성을 가지는 물질을 생성할 수도 있을 것이라 기대하는 것이다.

기계학습 분야에서 벡터공간 매핑의 대표적인 예시로는 ‘Word2vec [27]과 같이 단어를 의미공간에 프로젝션 하는 시도를 들 수 있다. Word2vec을 통해 단어를 50~200여 차원의 공간에 매핑(mapping) 했을 때 그림 2와 같이 ‘여자-남자’의 잠재 공간상의 벡터가 ‘여왕-왕’의 벡터와 유사한 것을 보게 된다. 이는 우리가 추상적으로 생각하던 의미 공간을 수치로 표현하는 사례로 볼 수 있을 것이다. 더 나아가 최근에는 ‘안경 쓴 남성’ 이미지를 ‘안경 쓴 여성 - 안경 쓰지 않은 여성 + 안경 쓰지 않은 남성’의 방식으로 생성하는 고차원 공간 벡터 연산이 보고되기도 하였다 [28]. 그렇

다면 ‘독성없는 감기약’(독성있는 감기약 + [독성있는 심장약])의 연산을 통해 ‘독성없는 심장약’을 디자인 하는 것도 상상해 볼 수 있지 않을까? 아직은 초보적 단계이지만 신약개발 등에서 우리가 원하는 특성을 갖는 후보 물질을 찾는 시도가 활발히 진행되고 있으며 [25, 29-31], 관련 연구들도 다양한 방식으로 계속 될 것이다.

5. 맺음말

지금까지 제일원리 물성 계산의 예측성과 이에 기반한 역방향 물질 설계의 원리, 그리고 최근의 기계학습과 결합된 방법론까지를 개략적으로 살펴보았다. 컴퓨터를 이용하여 새로운 물질을 체계적으로 디자인-탐색하는 연구는 비교적 최근에 시작된 신생 분야이며, 최근 각종 인공지능 기법과 컴퓨터의 발전으로 활발한 연구가 계속되고 있다. 그 가능성이 무궁무진한 만큼 이 주제에 관심이 있는 학생들이라면 열정적으로 도전해 볼 만한 좋은 연구 분야가 될 것이다.

앞으로도 새로운 물성 예측과 탐색 연구는 활발하게 이어질 것이다. 또한 점점 더 많은 사례들이 쌓여감에 따라 정확도가 개선되고 의미있는 발견들도 이어질 것이다. 그러나 동시에 이 분야는 학문적으로 개척해야 할 영역이 많은 신생 분야라는 점을 강조하고 싶

다. 많은 성공 사례들에도 불구하고 여전히 신뢰할만한 예측성이 담보된 물질군은 매우 제한적이다. 예를 들어 자성체나 강상관 물질들 (strongly correlated electron materials)의 경우, DFT 계산 방법론 자체의 개선과 개발이 근본적인 차원에서 계속적으로 요구되고 있다. 산업 및 공학적 차원에서는 꾸준히 신물질 탐색을 해 나가는 한편 기초 학문적 연구도 병행되어야 하는 이유이다. 이뿐만 아니라 전산학의

영역이라 할 수 있는 병렬화, 데이터 구조, 각종 알고리즘 관련 연구들이 매우 중요하다는 것 역시 자명하다. 이 도전적이면서도 매력적인 학제 간 협력/융합 연구가 지금과 같이 꾸준히 이어진다면, 멀지 않은 미래에는 전혀 새로운 방식으로 전자재료를 발견하고 디자인-합성하는 새로운 시대가 열리게 될 것으로 전망한다. 🌐

참/고/문/헌

- [1] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* 136, B864 (1964).
- [2] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* 140, A1133 (1965).
- [3] D. C. Lonie and E. Zurek, *Comput. Phys. Commun.* 182, 372 (2011).
- [4] C. W. Glass, A. R. Oganov, and N. Hansen, *Comput. Phys. Commun.* 175, 713 (2006).
- [5] Y. Wang, J. Lv, L. Zhu, and Y. Ma, *Comput. Phys. Commun.* 183, 2063 (2012).
- [6] I. H. Lee, Y. J. Oh, S. Kim, J. Lee, and K. J. Chang, *Comput. Phys. Commun.* 203, 110 (2016).
- [7] Y. Li, J. Hao, H. Liu, Y. Li, and Y. Ma, *J. Chem. Phys.* 140, 174712 (2014).
- [8] H. J. Sung, W. H. Han, I. H. Lee, and K. J. Chang, *Phys. Rev. Lett.* 120, 157001 (2018).
- [9] A. R. Oganov, J. Chen, C. Gatti, Y. Ma, Y. Ma, C. W. Glass, Z. Liu, T. Yu, O. O. Kurakevych, and V. L. Solozhenko, *Nature* 457, 863 (2009).
- [10] Y. LeCun, Y. Bengio, and G. Hinton, *Nature* 521, 436 (2015).
- [11] A. Krizhevsky, I. Sutskever, and G. E. Hinton, *NIPS* 25, 1097-1105 (2012).
- [12] W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, and J. Tirado-Rives, *J. Am. Chem. Soc.* 118, 11225 (1996).
- [13] J. Wang, R. M. Wolf, J. W. Caldwell, P. A. Kollman, and D. A. Case, *Journal of Computational Chemistry* 25, 1157 (2004).
- [14] K. Vanommeslaeghe, E. Hatcher, C. Acharya, S. Kundu, S. Zhong, J. Shim, E. Darian, O. Guvench, P. Lopes, I. Vorobyov, and A. D. Mackerell, *Journal of Computational Chemistry* 31, 671 (2010).
- [15] J. Behler and M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* 98, 146401 (2007).
- [16] A. P. Bartók, M. C. Payne, R. Kondor, and G. Csányi, *Phys. Rev. Lett.* 104, 136403 (2010).
- [17] L. Zhang, J. Han, H. Wang, R. Car, and W. E, *Phys. Rev. Lett.* 120, 143001 (2018).

-
- [18] S. Chmiela, A. Tkatchenko, H. E. Sauceda, I. Poltavsky, K. T. Schütt, and K. R. Müller, *Science Advances* 3, e1603015 (2017).
- [19] K. Lee, D. Yoo, W. Jeong, and S. Han, *Computer Physics Communications* 242, 95 (2019).
- [20] V. Botu and R. Ramprasad, *Phys. Rev. B* 92, 094306 (2015).
- [21] J. S. Smith, O. Isayev, and A. E. Roitberg, *Chem. Sci.* 8, 3192 (2017).
- [22] D. P. Kingma and M. Welling, *ArXiv:1312.6114 [Cs, Stat]* (2013).
- [23] I. J. Goodfellow, J. Pouget-Abadie, M. Mirza, B. Xu, D. Warde-Farley, S. Ozair, A. Courville, and Y. Bengio, *ArXiv:1406.2661 [Cs, Stat]* (2014).
- [24] T. Karras, T. Aila, S. Laine, and J. Lehtinen, *ArXiv:1710.10196 [Cs, Stat]* (2017).
- [25] F. Noé, S. Olsson, J. Köhler, and H. Wu, *Science* 365, eaaw1147 (2019).
- [26] A. W. Senior, R. Evans, J. Jumper, J. Kirkpatrick, L. Sifre, T. Green, C. Qin, A. Židek, A. W. R. Nelson, A. Bridgland, H. Penedones, S. Petersen, K. Simonyan, S. Crossan, P. Kohli, D. T. Jones, D. Silver, K. Kavukcuoglu, and D. Hassabis, *Nature* 1 (2020).
- [27] Y. Goldberg and O. Levy, *ArXiv:1402.3722 [Cs, Stat]* (2014).
- [28] A. Radford, L. Metz, and S. Chintala, *ArXiv:1511.06434 [Cs]* (2015).
- [29] B. Sanchez-Lengeling and A. Aspuru-Guzik, *Science* 361, 360 (2018).
- [30] R. Gómez-Bombarelli, J. N. Wei, D. Duvenaud, J. M. Hernández-Lobato, B. Sánchez-Lengeling, D. Sheberla, J. Aguilera-Iparraguirre, T. D. Hirzel, R. P. Adams, and A. Aspuru-Guzik, *ACS Cent. Sci.* 4, 268 (2018).
- [31] D. K. Duvenaud, D. Maclaurin, J. Iparraguirre, R. Bombarell, T. Hirzel, A. Aspuru-Guzik, and R. P. Adams, *NIPS* 28, 2224-2232 (2015).

저/자/약/력



성명 윤 홍 기

학력 2008년 KAIST 물리학과, 전산학과 이학사
 2011년 KAIST 물리학과, 이학석사
 2018년 KAIST 물리학과, 이학박사

경력 2018년 ~ 현재 KAIST 물리학과 박사후 연구원



성명 이 형 군

학력 2014년 UNIST 전기전자컴퓨터공학과, 공학사



성명 강 윤 구

학력 2018년 한양대학교 물리학과, 이학사



성명 한 명 준

학력 2001년 서울대학교 물리학과 이학사
 2007년 서울대학교 물리천문학부 이학박사

경력 2007년 ~ 2012년 미국 캘리포니아 대학교, 컬럼비아 대학교, 아르곤 국립 연구소 등에서 박사 후 연구원
 2012년 ~ 현재 KAIST 물리학과 조교수, 부교수