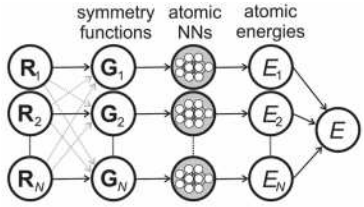
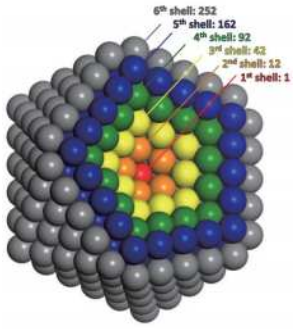
제1원리 전산소재기술에 의한 빅데이터 구축 및 다성분계 이종계면구조 예측 기술

Materials Computation | 연세대 한병찬

기술 개요

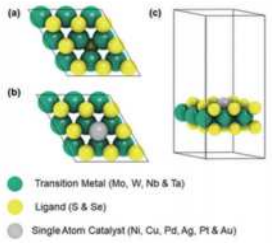
- 제1원리 전산 소재과학으로 빅 데이터베이스 구축 》 데이터 마이닝 및 머신러닝 기법 적용 》 다성분계 하이브리드 계면 구조의 고속 정밀 예측 》 멀티스케일 전산 플랫폼 완성
- 고성능 신소재 후보군 발굴 및 최적화 디자인 컨셉 제안 》 실험적 검증 및 합성 촉진 》 개발 비용/시간 획기적 감축

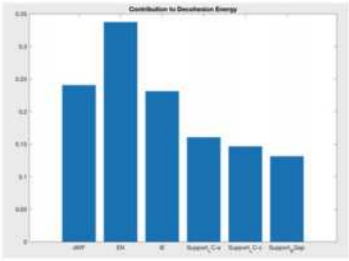




적용분야

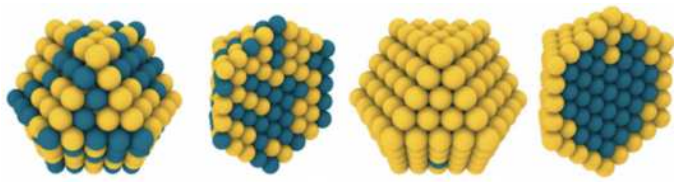
- 4차 산업혁명과 빅 데이터 제어 등 관련기술을 활용하여 소재 성능 최적화에 적용, 신소재 개발 비용 획기적 감축
- 데이터베이스를 바탕으로 촉매, 흡착제, 생체소재 등에 대한 신규 소재 예측 플랫폼을 구축 가능
- 스마트 팩토리 공정의 효율화 극대화





기술 특징

- 다성분 복잡 계면 구조 예측용 머신러닝 기법 개발 : 제1원리 계산 》 빅데이터베이스 구축 》 에너지 레벨 결정인자 데이터 마이닝 》 임의 조성을 가진 계면에 대한 구조적 특성을 고속으로(기존 방법 대비 100배 이상) 예측할 수 있음.
- 데이터베이스를 기반으로 한 물성 예측 : 새로운 물질에 대한 빠른 물성 예측과 핵심 인자를 발견하기 위해 머신러닝 방법 중 AI(Artificial Intelligence), 인공 신경망 기법을 병합함.



활용사례

- 플랫폼 구축

