

High Performance Computing for Nanomaterials and Artificial Intelligence Driven Materials Data Platform

염민선[†], 안선일, 이정철, 이식
한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅본부 계산과학공학센터
(msyeom@kisti.re.kr[†])

분자동역학 방법, 범밀도함수 및 비평형 그린함수 방법을 활용한 나노소재 계산 연구를 소개한다. 아울러 인공지능을 활용하여 새로운 나노 소재를 찾고 원하는 특성을 지닌 새로운 물질을 설계하기 위해 개발된 인공지능 기반 소재데이터 플랫폼을 소개한다. 웹기반 나노 소재 플랫폼은 수정 편집기, 위상 다이어그램, 배터리 탐색기 및 반응 계산기의 네가지 분석 도구를 제공한다. 또한 이 플랫폼은 새로운 소재의 특성을 예측할 수 있는 인공지능 예측 툴을 제공한다.