

실험 데이터에 적용 가능한 머신러닝 기반 온도별
흡착등온선 예측 알고리즘 개발

김서율, 김승익, 김아름, 윤태웅, 배윤상[†]
연세대학교
(mowbae@yonsei.ac.kr[†])

Grand Canonical Monte Carlo (GCMC)은 분자모사 기법으로 제올라이트나 MOF (Metal-organic framework)와 같은 결정성 흡착 소재의 개발에 중요하게 활용되어 왔다. 하지만 실험적으로 합성되는 샘플 중 defect, 리간드 잔유물, 부분적인 구조 붕괴, 불균일 결정상 등을 다량 함유하는 경우, 미시 구조를 정확히 알기 어려워 GCMC에 의해 정확한 흡착 성질의 예측이 어렵다. 최근에는 defect 등의 불균일적인 요소들을 활용해 오히려 소재의 성능을 향상시킨 사례들이 보고되고 있기 때문에, 이런 실험적 상황에 활용할 수 있는 전산 도구의 개발이 필요하다. 본 연구에서는 GCMC와 기계학습을 결합하여 다양한 온도의 흡착등온선을 예측하는 알고리즘을 개발하였다. GCMC를 활용하여 수천 개의 구조의 특성들을 계산하고 이에 기계학습을 적용하여 온도 변화 시 흡착등온선의 이동을 예측하는 모델을 제시하였다. 개발된 모델은 다양한 실험 데이터에서 잘 작동하는 것이 확인되었다.

Acknowledgments

This work was supported by “Next Generation Carbon Upcycling Project” (Project No. 2017M1A2A2043449) through the National Research Foundation (NRF) funded by the Ministry of Science and ICT, Republic of Korea.