

Active learning based on Autoencoders for efficient prediction of binding energies in CO<sub>2</sub> reduction reaction곽승재, 이원보<sup>†</sup>, 나종걸<sup>1</sup>서울대학교; <sup>1</sup>이화여자대학교(wblee@snu.ac.kr<sup>†</sup>)

최근 효과적인 비균질계 촉매 스크리닝을 위해 밀도범함수이론(DFT)과 다양한 머신러닝 기법을 함께 활용하는 방법들이 주목을 받고있다. 특히 합성곱 신경망 기법이 인기를 끌고있지만 수백가지에 이르는 화학물질과 수천가지 반응경로를 정확도 있게 분석하기 위해서는 사전에 매우 큰 데이터셋의 구축이 필요하다는 단점을 안고있다. 이 포스터에서는 비균질계 촉매상 이산화탄소 환원반응을 최적화된 계산량만을 이용해 분석해낼 수 있는 능동 기계학습(Active Learning) 방법을 제시한다. 보다 구체적으로, 촉매 흡착 정보를 그래프 형태로 가공하고, 이에 대한 학습이 가능한 Variational Autoencoder(VAE)를 이용해 촉매 흡착 정보를 압축하고, Gaussian Process Regression(GPR)과 Integrated Variance (IVAR) 최적화 기법을 사용해 모델정확도를 반복적으로 갱신하는 모델을 선보이고 기존 모델들에 비한 장단점을 소개할 것이다.