Gleap X Stem 조인발표

김유빈 X 문현지

1. 강의 주제

물질 합성의 새로운 패러다임 : Molecular Representation and Machine Learning for Inverse Molecular Design

2. 주제 상술

새로운 물질의 합성은 지속적으로 요구된다. 우리는 현재 한계에 이른 물질 합성을 'Machine Learning을 이용한 Inverse Design'의 관점에서 바라볼 것이다. 기존 물질 합성은 물질을 먼저 만든 후 결과물이 목표 성질(desired properties)을 달성했는지 여부를 확인하는 방식으로 진행되었다. 즉, 화학적 공간(chemical space)의 탐색을 바탕으로 기능적 공간(function space)을 탐색했다. 반면에 Inverse Design은 이를 역방향으로 시도함으로써 물질 합성의 새로운 패러다임을 제시한다. 또한 이 과정에서 필수적인 물질 고유 성질의 데이터적 표현방식도 설명한다.

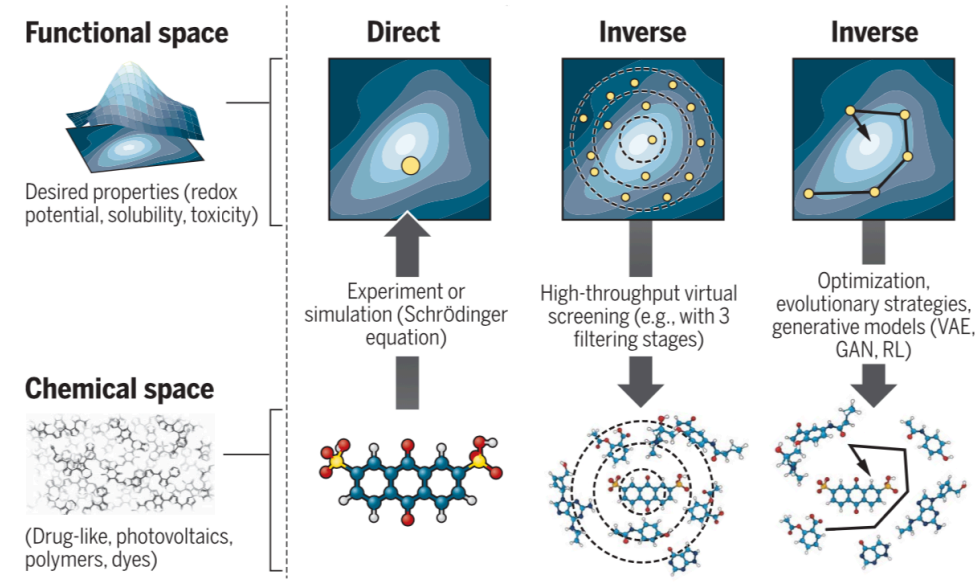

Fig. 2. Schematic of the different approaches toward molecular design. Inverse design starts from desired properties and ends in chemical space, unlike the direct approach that leads from chemical space to the properties.

3. 소개 방식

핵심이 되는 논문의 내용과, 그 이외의 논문에 없는 부가적인 내용들에 대해 발표한다. PPT 발표 형식으로 전반 20분, 후반 20분으로 나누어 진행한다.

4. 본 주제와 Gleap x Stem 교류 의의

화학적 지식을 바탕으로 머신러닝을 적용한다는 점에서 Gleap x Stem 교류 주제로 적합하다. 또한, '데이터 학습을 이용한 기존 방식의 개선'을 사례를 통해 제시함으로써 많은 학문분야에 응용가능한 주제다.