

빅데이터 분석을 이용한 분자 및 소재설계

유준[†], 이경범, 홍성수, 주창식

부경대학교

(jayliu@pknu.ac.kr[†])

본 발표에서는 빅데이터 분석을 이용한 분자 및 소재설계의 방법론을 제시하고 몇가지 예시들을 통해 이를 설명하고자 한다. 방법론은 크게 두 단계로 구성되는데, 첫번째는 분자(또는 제품)의 물성(또는 품질 특성)을 예측하는 모델링 단계와, 두 번째는 최적화를 통해 물성 예측 모델을 반전하여 원하는 분자의 구조 또는 소재의 조성 등을 구하는 단계이다. 각 단계를 설명할 때 데이터의 준비, 변수의 선택, 잠재공간 실험계획법 등 핵심적인 요소들은 다음의 예시들을 통해 강조될 것이다: (1) 표적신약 개발 (2) 기능성 고분자 설계.

이 논문은 산업통상자원부의 재원으로 엔지니어링개발연구센터의 지원을 받아 수행된 연구임. (과제번호 : N0000990)