

Explainable Catalyst Performance Prediction for Electrochemical CO₂RR신다운, Hakan Karasu¹, 장교진², 문일², 이용¹, 나종걸[†]이화여자대학교; ¹Korea Institute of Science and technology; ²연세대학교(jgna@ewha.ac.kr[†])

기존 촉매특성 및 성능분석 연구는 다양한 분광학장비에서 얻어진 결과를 연구자의 사전 지식을 활용해 해석하는 방식이 일반적이다. 최근 주목받고 있는 소재 수명 극대화연구나, 장시간 사용에도 안정한 상태를 유지하게 하는 운전조건 최적화 연구는 대량의 촉매 성능을 실시간으로 측정해야 하기에 기존 분석법은 장비 구축 및 시간적 문제로 적합하지 않다. 이에, 높은 선택도와 안정성을 동시에 달성하는 최적의 촉매를 개발하기 위해서는 특성분석을 빠르게 수행할 수 있는 기술이 필요하다. 본 연구에서는 self-attention 기반의 Convolutional Neural Network (CNN)와 설명 가능한 인공지능(Explainable AI (XAI))을 연동하여 간단한 전기화학적 특성곡선 실험만으로 분광학장비를 통해 얻어야 하는 성능(선택도 및 전환율)을 높은 정확도로 빠르게 예측할 수 있는 딥러닝 모델을 구축했다. 본 모델은 단순 예측을 넘어 전기화학적 특성곡선상에서 인공지능이 집중하는 동적특성변화를 포착하여 성능이 변화함에 따라 달라지는 물리적 변화에 대한 연역적 추론이 가능하다. 이는 실제 촉매 표면 원자의 상태를 TEM과 XRF로 확인하여 검증할 수 있었다. 본 연구에서 제안한 촉매 성능 실시간 예측 모델은 다양한 소재의 수명예측 및 최적화 연구에 응용될 수 있을 것으로 기대된다.