

**1. 교육 프로그램 개요**

○ 초급 교육 프로그램

재료과학을 위한 파이썬 언어와 인공지능				
	2월 6일(월)	2월 7일(화)	2월 8일(수)	2월 9일(목)
9:00 ~ 12:00	<b>파이썬 기초</b>  주기형 교수 (고등과학원)	<b>딥러닝과 분자 그래프</b>  김현우 교수 (광주과학기술원)	<b>결정구조 기초 및 제일원리 전자구조 I</b>  박지상 교수 (성균관대학교)	<b>소재 데이터베이스 I</b>  신정호 박사 (한국화학연구원)
14:00 ~ 17:00	<b>기계학습 기초</b>  김현우 교수 (광주과학기술원)	<b>기계학습과 재료 I</b>  장승훈 박사 (한국화학연구원)	<b>기계학습과 재료 II</b>  장승훈 박사 (한국화학연구원)	<b>소재 정보학 I</b>  이에리 박사 (한국화학연구원)

○ 중급 교육 프로그램

소재정보학 응용				
	2월 13일(월)	2월 14일(화)	2월 15일(수)	2월 16일(목)
9:00 ~ 12:00	<b>파이썬 중급</b>  주기형 교수 (고등과학원)	<b>소재 데이터베이스 II</b>  신정호 박사 (한국화학연구원)	<b>결정구조 기초 및 제일원리 전자구조 II</b>  박지상 교수 (성균관대학교)	<b>소재 설계 I</b>  김지한 교수 (한국과학기술원)
14:00 ~ 17:00	<b>소재 정보학 II</b>  이에리 박사 (한국화학연구원)	<b>딥러닝과 소재 설계 I</b>  이주형 교수 (광주과학기술원)	<b>딥러닝과 소재 설계 II</b>  이주형 교수 (광주과학기술원)	<b>소재 설계 II</b>  김지한 교수 (한국과학기술원)

## 2. 교육 프로그램 세부 내용

### ○ 초급 교육 프로그램

강의명	상세 내용
파이썬 기초	(이론) 입문 연구자를 위한 파이썬 기초 (실습) Python 기초, 수치계산, 그래프, 학습 알고리즘
기계학습 기초	(이론) 기계학습 기초와 알고리즘 소개 (실습) Scikit-learn을 활용한 기계학습 방법 실습
딥러닝과 분자 그래프	(이론) 딥러닝 기초와 분자 그래프를 이용한 딥러닝 방법 소개 (실습) 분자를 그래프로 표현하는 방법과 분자 특성을 예측하는 프로그램 실습
기계학습과 재료 I	(이론) 비지도 학습 알고리즘 방법론 소개 (차원축소법 및 오토인코더 포함) (실습) K-means를 활용한 준지도학습 및 DBSCAN 실습
결정구조 기초 및 제일원리 전자구조 I	(이론) 결정구조 및 전자구조 (실습) 결정구조 시각화 및 물성 데이터베이스 사용 방법
기계학습과 재료 II	(이론) 열전소재, 유기형광소재, 무기형광소재, 유기태양전지 문헌데이터를 이용한 다양한 물성 예측 사례 소개. 인공지능 플랫폼, ChemAI 소개 (실습) 문헌 데이터 및 인공지능 플랫폼을 활용한 물성예측 모델생성 실습
소재 데이터베이스 I	(이론) 해외 유명 소재 데이터베이스 (NOMAD 등) 소개 (실습) API를 활용한 데이터 처리 실습
소재 정보학 I	(이론) 연구데이터 수집과 열전소재에서의 인공지능 연구 소개 (실습) 파이썬으로 연구데이터 정리하기, K-MDS 플랫폼 사용법, 소재 데이터에 인공지능 모델하여 예측모델 생성하기

※ 실습 시 개인 컴퓨터 지참

### ○ 중급 교육 프로그램

강의명	상세 내용
파이썬 중급	(이론) 연구자를 위한 파이썬 중급 (실습) Python 중급, 학습 알고리즘, 병렬처리, GPU 사용
소재 정보학 II	(이론) 결정구조, 이미지, 스펙트럼 등의 다양한 형태의 연구데이터를 인공지능에 적용하기 (실습) 결정구조의 그래프 표현과 이미지 데이터에서의 기계학습 방법론 연습
소재 데이터베이스 II	(이론) 소재 데이터베이스 및 온톨로지 활용, 자율화 기술 (배터리 분야 등) (실습) ASE-DB를 활용한 유전 알고리즘 (Genetic Algorithms) 실습
결정구조 기초 및 제일원리 전자구조 II	(이론) 제일원리 전자구조 계산 방법론 (실습) ASE와 GPAW를 활용한 제일원리 계산

<p><b>딥러닝과 소재 설계 I, II</b></p>	<p>(이론) 딥러닝 기초 이론 강의 및 소재 적용 사례 소개 (실습) 공개 프레임워크를 활용한 딥러닝 기초 실습</p>
<p><b>소재 설계 I</b></p>	<p>(이론) 결정구조의 그래프 표현을 이용한 인공지능 연구. 실험 이미지 데이터 분석 및 응용 (실습) CGCNN, TGNN과 같은 그래프를 이용한 인공지능 방법론 실습. 이미지 데이터를 분석하는 PCA, NMF 등 실습 (* 파이썬, 아나콘다 활용)</p>
<p><b>소재 설계 II</b></p>	<p>(이론) 다공성 물질의 종류와 응용, 다공성 물질의 가스 흡착 계산: GCMC 시뮬레이션과 머신러닝 방법론 (실습) 해당 연구 컴퓨터 실습 진행</p>

※ 실습 시 개인 컴퓨터 지참