한국과학기술정보연구원 Korea Institute of Science and Technology Information	보 도 자 료	http://www.kisti.re.kr
배포 즉시 보도 가능합니다.		
대전(본원): 대외협력실 이종성 042-869-0976 / 이해준 0676 / 손영주 0997 문의: 최성환 선임연구원 042-869-0717		
배포번호 : 2019-59 배포일자 : 2019.09.03.(화)	매수 : 보도자료 4매 (첨부자료 포함)	배포처 : 대외협력실

산 · 학 · 연 연합팀, 세계 인공지능 경진대회 3위 입상

- 분자의 분광학적 특성을 시뮬레이션이 아닌 데이터를 통한 예측기술 확보 -

구글의 자회사 *Kaggle이 주관하고 영국의 CHAMPS(Chemistry and Mathematics in Phase Space)에서 주최한 **「Predicting Molecular Properties」 대회(총상금 30,000$)에서 한국의 산・학・연 연합팀이 전 세계에서 참여한 2,749개 팀 중 3위에 올랐다.

이번 대회에서는 인공지능 기반 신약후보물질 연구를 위해 널리 사용되는 화합물 데이터베이스(QM9)에서 *스핀-스핀 갈라짐(spin-spin splitting)의 양을 예측하는 기술력을 겨루었다.

* Kaggle은 194개국에서 백만명 이상의 회원을 둔 인공지능 경진대회 플랫폼으로 다양한 인공지능 대회 주관.

** Predicting Molecular Properties 대회는 유기화학을 포함한 화학 전반에서 널리 활용되는 핵자기공명(Nuclear Magnetic Resonance, NMR)을 이용한 유기물의 분석에 핵심적인 스핀-스핀 갈라짐을 더 정밀하게 예측하는 팀이 우승을 차지하는 대회.

*** 스핀-스핀 갈라짐: 핵스핀(nulcear spin)을 가지는 원자들이 분자 내에서 느끼는 가리움 효과(shielding effect)에 따라서 결정되는 값으로 분자의 구조를 결정하는 중요한 정보임

5명의 서로 다른 산・학・연 소속의 <Solve chem. together>팀은 기존에 자연어처리 분야에 널리 사용되는 Deep Learning 모델인 Transformer모델을 화합물에 적용하여 사용하여 본 대회 3위에 올랐다.

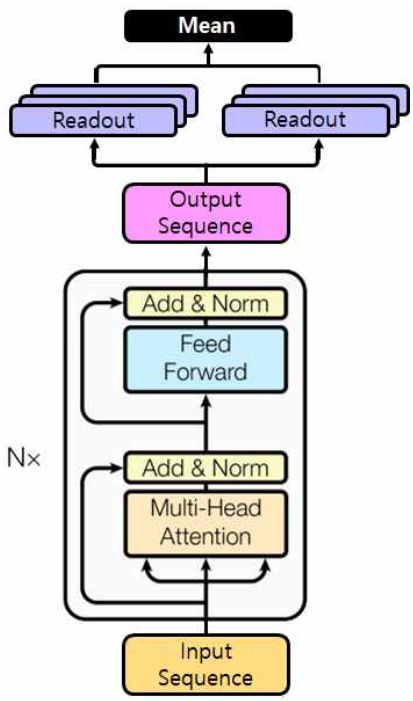
※ 팀원 이름 및 소속 (이름순): 김상훈(Ebay), 송원호(중앙대학교), 이영수(마인즈앤컴퍼니), 이유한(KAIST), 최성환(KISTI)

본 대회를 통해 얻어진 기술은 기존 슈퍼컴퓨터를 활용한 양자화학 시뮬레이션을 계산비용이 적은 인공지능 기술로 대체 할 수 있을 뿐만 아니라 다양한 분광분석기술에 활용이 기대된다.

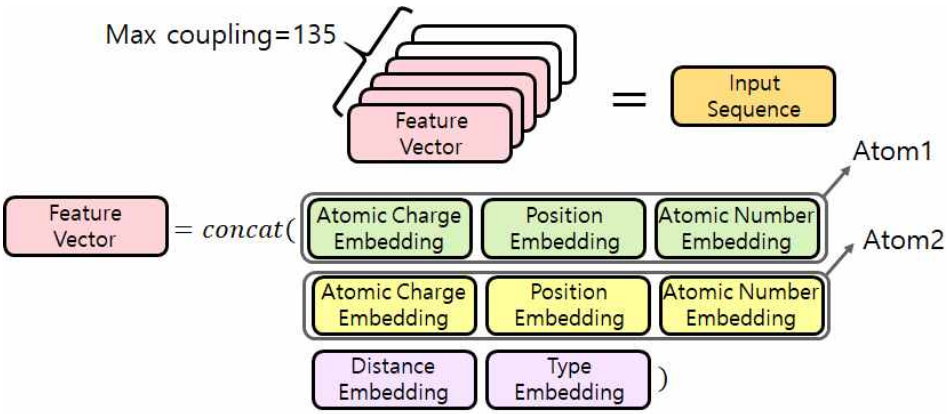
별첨 : 관련 그림

[참고자료: 관련 그림]

<인공지능 경진대회에서 수상한 모델의 구성도>



<인공지능 경진대회에서 수상한 모델의 인풋 구성도>



<인공지능 경진대회 1위부터 10위까지의 순위표>

In the money | Gold | Silver | Bronze

#	△pub	Team Name	Notebook	Team Members	Score	Entries	Last
1	—	hybrid			-3.23968	73	1d
2	—	Quantum Uncertainty			-3.22349	167	1d
3	—	[ka.kr] Solve chem. together			-3.19498	151	1d
4	—	Hyperspatial Engineers			-3.18085	37	1d
5	—	DL guys			-3.14969	53	1d
6	—	Robin N			-3.04456	21	2d
7	—	Pinkman Chemistry Lab			-3.03280	144	1d
8	—	4 GM and the brain			-3.00189	296	1d
9	—	Jaechang Lim			-2.97389	43	7d
10	—	Kha Zidmie Josh Kyle Akira			-2.95233	195	1d