

한국과학기술정보연구원 <small>Korea Institute of Science and Technology Information</small>	<b>보도자료</b>	http://www.kisti.re.kr
	2016.06.01.(수) 조간(온라인은 5.31. 12:00) 이후 보도해주시기 바랍니다.	
대전(본원): 대외협력실 이석 042 - 869 - 0960 / 강동기 0967 <b>문의: 조금원 슈퍼컴퓨팅융합연구센터장(042-869-0550)</b>		
배포번호 : 2016-11 배포일자 : 2016.05.31.(화)	매수 : 보도자료 4매	배포처 : 대외협력실

### 출연(연) 연구에 슈퍼컴퓨터 가상실험 활용한다

- KISTI-에너지(연)-원자력(연)-화학(연) 계산과학 통한 R&D 효율성 향상 협력 추진 -  
 - 공동연구 통해 계산과학 적용 시범과제 운영하며 활성화 유도 -

- 출연(연)이 연구개발 효율성을 높이기 위해 앞으로 슈퍼컴퓨팅 기반의 가상실험을 적극 활용한다.
- 한국과학기술정보연구원(원장 한선화, 이하 KISTI) · 한국에너지기술연구원(원장 이기우, 이하 에너지(연)) · 한국원자력연구원(원장 김종경, 이하 원자력(연)) · 한국화학연구원(원장 이규호, 이하 화학(연))이 5월 31일 화요일 정오 KISTI 대전 본원에서 슈퍼컴퓨팅 기반의 계산과학\* 활용을 위한 업무협약을 체결했다.  
 \*계산과학: “계산(computational)”은 고성능의 컴퓨터를 활용한다는 의미로 기존 학문의 문제를 컴퓨터 계산을 이용해 해결하는 분야로, 대표적인 사례로 2013년 노벨화학상을 수상한 카를루스-레빗-아르셀 팀이 개발한 분자의 화학적 성질을 예측하는 소프트웨어인 “CHARMM”을 들 수 있다.
- 그간 출연(연)이 KISTI의 슈퍼컴퓨팅 인프라를 계산속도 향상 목적의 병렬처리 위주로 사용하던 것을 넘어 가상실험까지 더해 연구생산성을 높이는 것이 목적이다.
- 업무협약의 주요 협력 내용으로 ▲계산과학 활용 R&D 선진화 및 효율화를 위한 공동연구 및 기술협력 ▲계산과학 데이터 공유 · 플랫폼 개발 · 교육 및 기술 지원 등 계산과학 활용 활성화 공동 추진 등을 포함한다.

- KISTI의 슈퍼컴퓨팅 및 계산과학 인프라를 중심으로 KISTI와 각 기관은 공동 R&D 시범과제를 수행한다.
- KISTI-에너지(연)은 전지에 쓰이는 리튬박막을 대체할 수 있는 고에너지밀도 소재의 핵심 요소 및 원리를 계산과학으로 규명할 예정이다.
- KISTI-원자력(연)은 원자로의 안정성 향상과 밀접한 연관이 있는 고정밀 열수력 실험에 계산과학을 접목해 비용 및 실험 횟수를 절감할 계획이다.
- KISTI-화학(연)은 태양전지 효율 증진에 필요한 구조 설계를 가상실험으로 진행하며 신소재 개발 기술 확보를 노린다.
- 이날 업무협약과 함께 출연(연) 계산과학 활성화 워크숍도 개최되었다.
- 각 출연(연)의 정책 관계자 및 계산과학 연구자 약 60명이 참여한 가운데, 계산과학을 적용한 시범과제 및 사례를 공유하며 슈퍼컴퓨팅이 연구개발 효율성 향상에 미칠 영향을 살펴보았다.
- 한편, 이번 업무 협약은 국가과학기술연구회(이사장 이상천, 이하 국과연)가 지난 4월 11일 R&D 생산성 향상의 방안으로 출연(연)의 계산과학 활용 활성화를 추진하면서 이루어졌다.
- 향후 출연(연) 연구자 대상 수요조사 및 세미나를 지속적으로 추진해 계산과학을 활용한 연구를 늘려갈 계획이다.
- 이상천 국과연 이사장은 “계산과학은 출연(연)이 선도형 R&D 체계로 나아가기 위한 획기적인 수단이 될 것으로 기대”한다며 “앞으로 출연(연)이 고성능컴퓨팅 인프라를 적극적으로 활용할 수 있도록 지원을 아끼지 않겠다”고 밝혔다.
- 또한 한선화 KISTI 원장은 “슈퍼컴퓨터가 R&D 비용과 시간을 줄이는 데에 큰 도움이 될 것”이며, “이번 공동연구들을 기점으로 KISTI가 융합연구의 핵심 파트너가 되도록 노력하겠다”고 말했다.
- 이규호 화학(연) 원장은 “최근 계산과학을 이용한 데이터베이스 구축이 소재개발의 중요한 패러다임으로 떠오르고 있다”며, “화학(연)의 소재개발 연구에 KISTI의 IT 기술을 접목하여, 신소재개발에 획기적인 전기를 마련할 수 있을 것으로 기대한다”고 밝혔다.(끝)(이어서 참고자료)

**[참고자료: KISTI 계산과학 공동연구 수행 내용]**

**□ KISTI-한국에너지기술연구원 (담당: 에너지(연) 이찬우 박사/860-3656)**

- 차세대 에너지기술 플랫폼 구축을 위한 계산과학-실험 융합연구
  - 주요 연구내용: 마이크로-슈퍼커패시터\* 전극물질의 고용량 발현 주요 물성인자 및 에너지 저장 메커니즘 규명
    - \*얇은 판상의 초소형 대량 고성능 전기 저장장치
  - 예상성과
    - 전산재료과학 기반 물성 설계법칙 도출을 통한 마이크로-커패시터 소재 탐색 고속화로 비용 및 시간 절감
    - 마이크로-슈퍼커패시터 전극의 고용량 발현 주요인자 및 반응기구 규명을 통한 에너지 저장 성능 극대화 기여

**□ KISTI-한국원자력연구원 (담당: 원자력(연) 이승준 박사/868-4560)**

- 원자로 성능/안전 평가를 위한 고정밀 열수력 계산과학 적용성 향상 연구
  - 주요 연구 내용: 원자로 고정밀 열수력 해석 코드의 대용량 전산해석 성능 고속화를 통한 원자로 성능/안전 평가 적용성 향상
  - 예상성과
    - 원자로 안전성 향상을 위한 핵심 기술 확보
    - 자체 해석 코드인 CUPID코드 도입으로 인해 상용코드 비용 절감 및 실험 횟수 절감

**□ KISTI-한국화학연구원 (담당: 화학(연) 임진오 박사/860-7978)**

- 태양전지 효율 증진을 위한 밴드구조 엔지니어링 계산과학 활용 가상 실험 연구
  - 주요 연구 내용: 태양전지 소재의 밴드구조를 제어하는 계산과학 기반 가상실험 수행
  - 예상성과
    - 계산과학 기반의 스크리닝 기술 연구로 신소재 개발 기술 확보 및 실험 횟수 절감

**[참고자료2: 출연(연) 계산과학 활성화 워크숍]**

**□ 개 요**

- 목적 : KISTI 슈퍼컴을 활용한 계산과학 적용 시범과제 운영 및 기술 협력 사례 공유를 통해 출연(연)의 계산과학 활용 활성화 유도
- 주최/주관 : 국가과학기술연구회/한국과학기술정보연구원
- 일시 : '16. 5. 31(화) 14:00~18:00
- 장소 : KISTI 본관 1층 국제회의실(대전 유성구)
- 참석대상 : 출연(연) 정책 부서장 및 계산과학 연구자

**□ 세부일정**

시 간	내 용	발표자
14:00~14:10 (10분)	인사말	NST 정책지원본부장 KISTI 슈퍼컴본부장
14:10~14:40 (30분)	Applications of Computational Mechanics in LG Chem	LG화학 임예훈 부장
14:40~14:55 (15분)	에너지 분야에서의 계산과학-실험 융합연구: 에너지저장 연구의 예	에너지(연) 이찬우 박사
14:55~15:10 (15분)	계산과학 기반 원전 안전 및 성능 해석	원자력(연) 윤한영 박사
15:10~15:30 (20분)	휴식	-
15:30~15:45 (15분)	컴퓨터 스크리닝에 의한 친환경 태양전지소재 개발	화학(연) 장현주 박사
15:45~16:15 (30분)	KISTI 계산과학 연구 및 지원프로그램	KISTI 조금원 센터장
16:15~17:00 (45분)	토론 및 질의·응답	참석자 전체
17:00~18:00 (60분)	KISTI 슈퍼컴퓨터 견학	-