

# Hexaton Class Orientation

---

Presented by Hyuk Jun Yoo 2020-12-27

Korea **Institute** of Science  
and **Technology**

한국과학기술연구원

# Hexaton



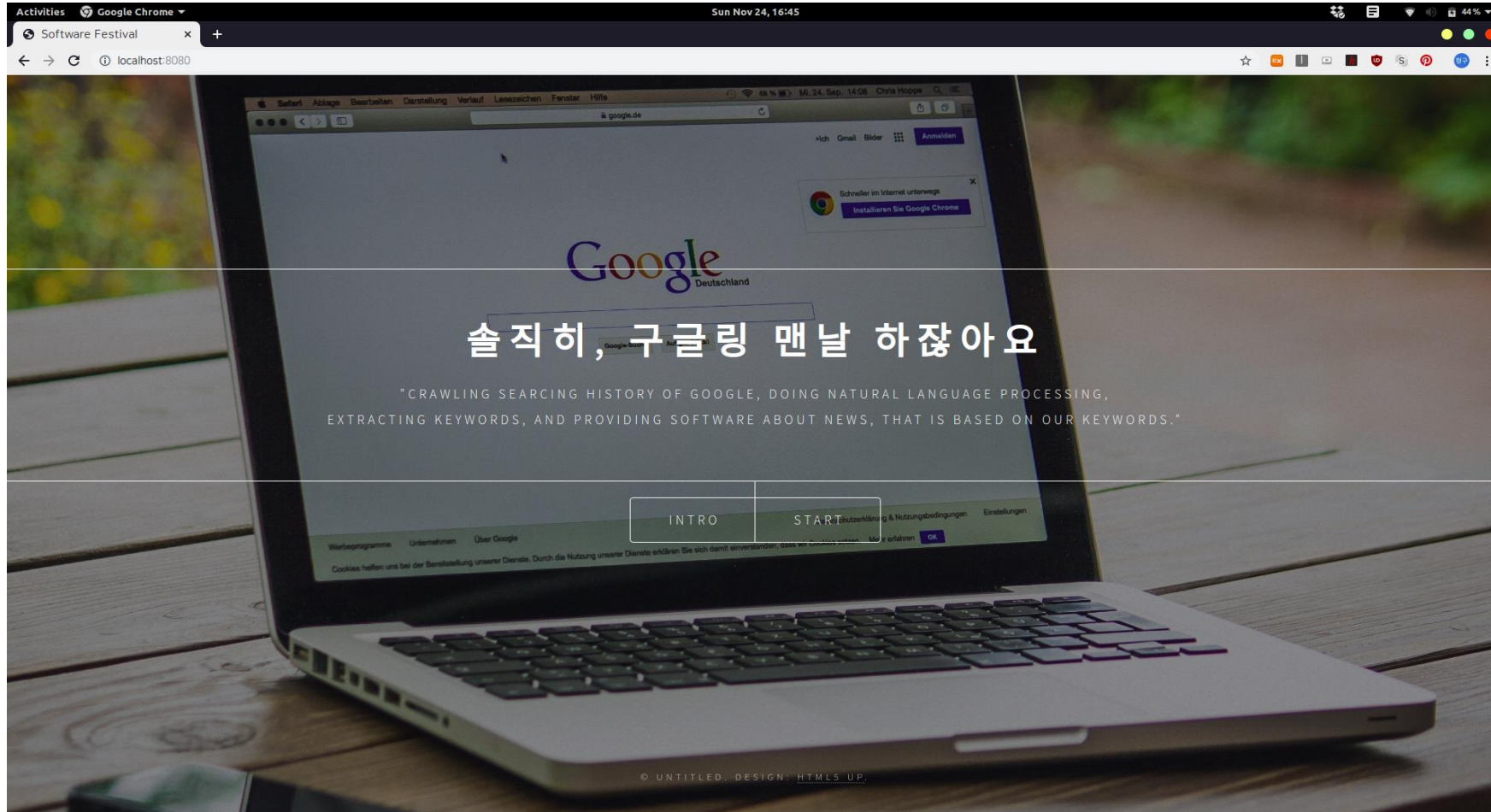
Hexaton

# Resume



- 유혁준 (과제 및 프로젝트 담당)
- 경희대학교 응용화학과 학부 졸업
- 고려대학교 화공생명공학과 석,박사 통합과정 재학
- KIST 계산과학연구센터 학생연구원 소재머신러닝 담당
- 2019년도 SW대학 SW festival 참가 - google search helper
- Python, C++
- Robot Engineering & Chemical Engineering, Machine Learning & Deep Learning, Natural Language Processing
- Github 주소 : <https://github.com/yoomambo>
- 블로그 주소 : <https://mambo-coding-note.tistory.com>

# Resume

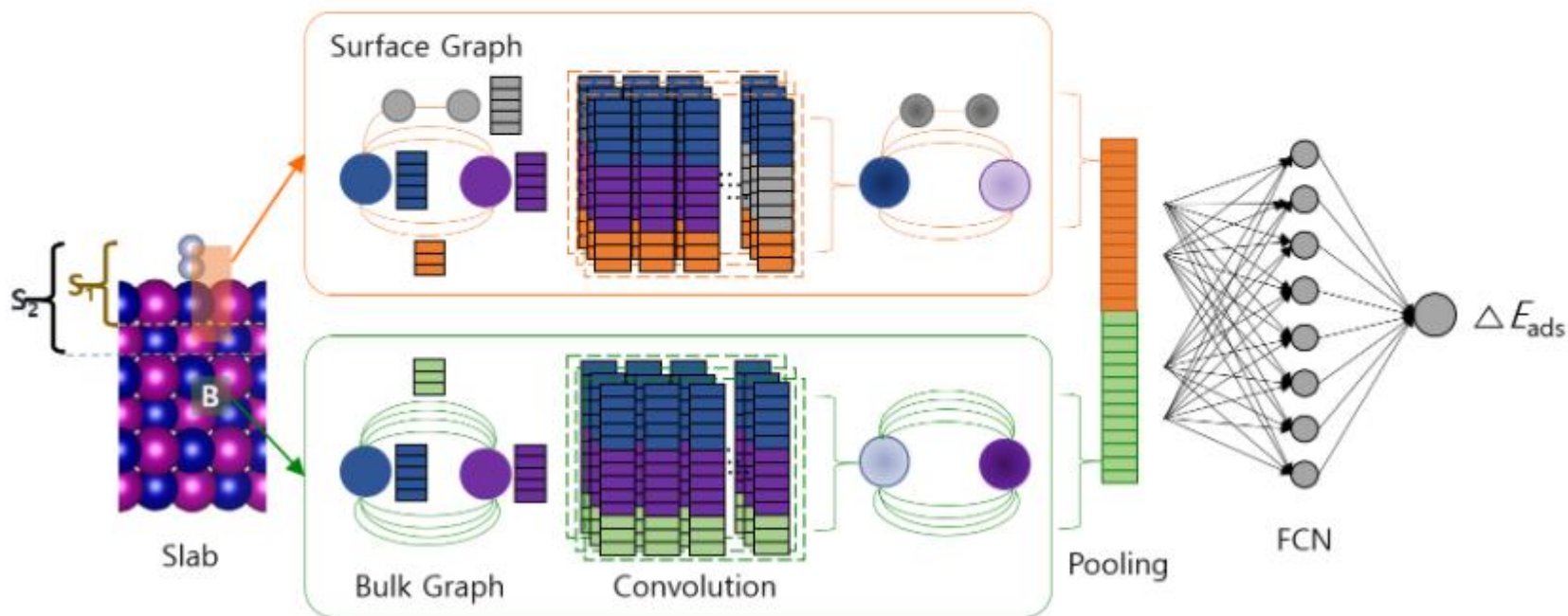


# Resume

## SGCNN

This repository contains an implementation of the `SGCNN` (Slab Graph Convolutional Neural Network) that predicts surface-related properties of crystal structures.

It provides 1) training a `SGCNN` model 2) an easy use to prediction of an adsorption energy using pretrained model.



# Resume



## 저작권 등록증

1. 저작물의 제호(명칭)      그래프 기반 콘볼루션 신경망 알고리즘을 활용한 촉매 흡착에너지 기계학습 모델
2. 저작물의 종류              컴퓨터프로그램저작물>응용프로그램>과학기술>수치계산용 S/W
3. 저작자 성명(법인명)       유혁준  
   서울특별시 성북구 회랑로
4. 생년월일(법인등록번호)   1994년11월12일

# Resume



- 강형구 (문법 및 과제)
- 경희대학교 컴퓨터공학과 학부 졸업
- 고려대학교 컴퓨터학과 대학원생 입학 예정
- 2018년 07월 ~ 9월, 소프트파워 컴퓨터 학원, C++, 알고리즘 수업 조교
- 2018년 08월 ~ 10월, 경희대학교 전자공학과 학생, C++ 기초 과외
- 2019년 01월 ~ 2월, 경희대학교 컴퓨터공학과 학생, C++ 및 자료구조 과외
- 2019년 01월 ~ 2월, 경희대학교 응용화학과 학생, Python 기초 과외
- 2019년 07월, 경희고등학교 대상 아두이노 특강 수업 조교
- 2019년 07월 ~ 11월, 소프트웨어코딩학원, 30명 가량의 학생들의 개인 과외 수업, Python, 아두이노, C++ 수업 진행
- 2019년 10월, 국민대학교 경제학과 학생 Python 기초 개인 과외
- 2019년 10월 ~ 12월, 경희고등학교 대상, JAVA 기초 및 자료구조 수업
- 2020년 07월 ~ 09월, 경희대학교 응용화학과 학생, Python 기초 과외
- 2020년 07월 ~ 09월, 경희대학교 유전공학과 학생, Python 기초 및 응용 과외
- Github 주소 : <https://github.com/4Moyede>
- 블로그 주소 : <https://4moyede.duckdns.org>



# Why



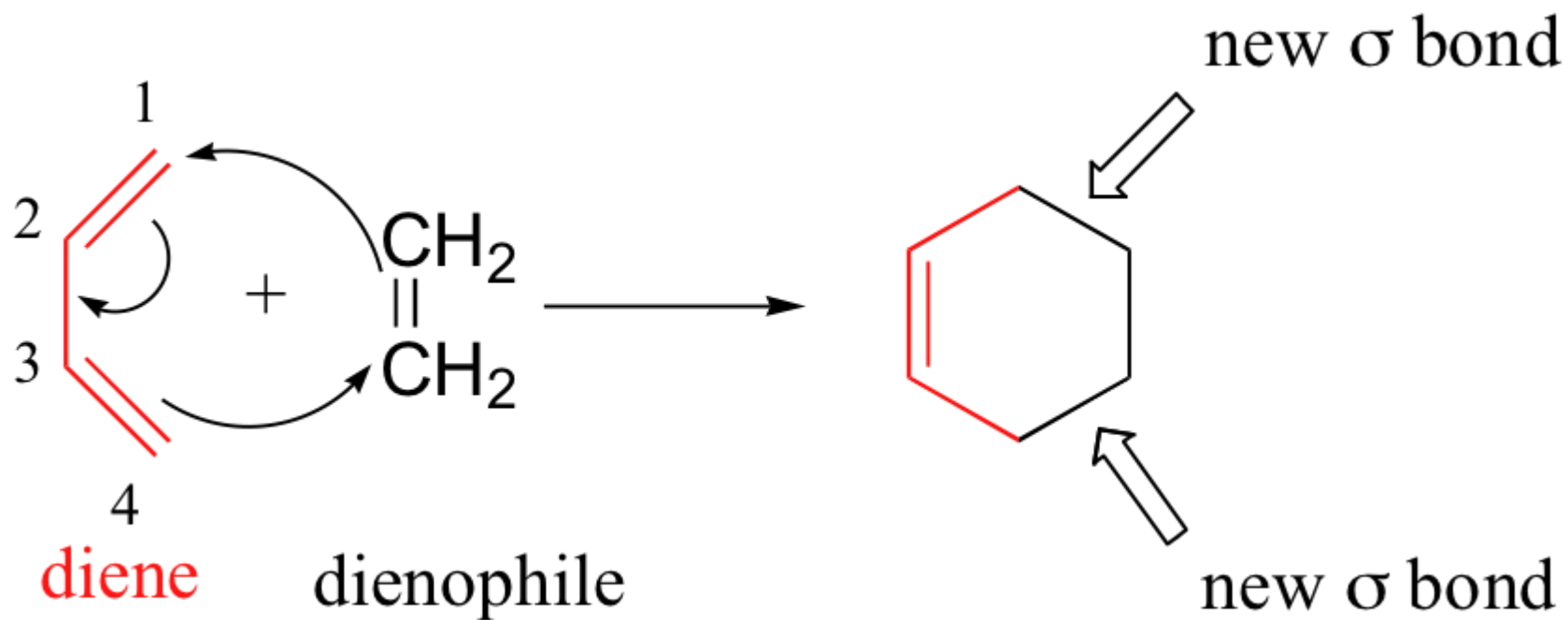


# Why

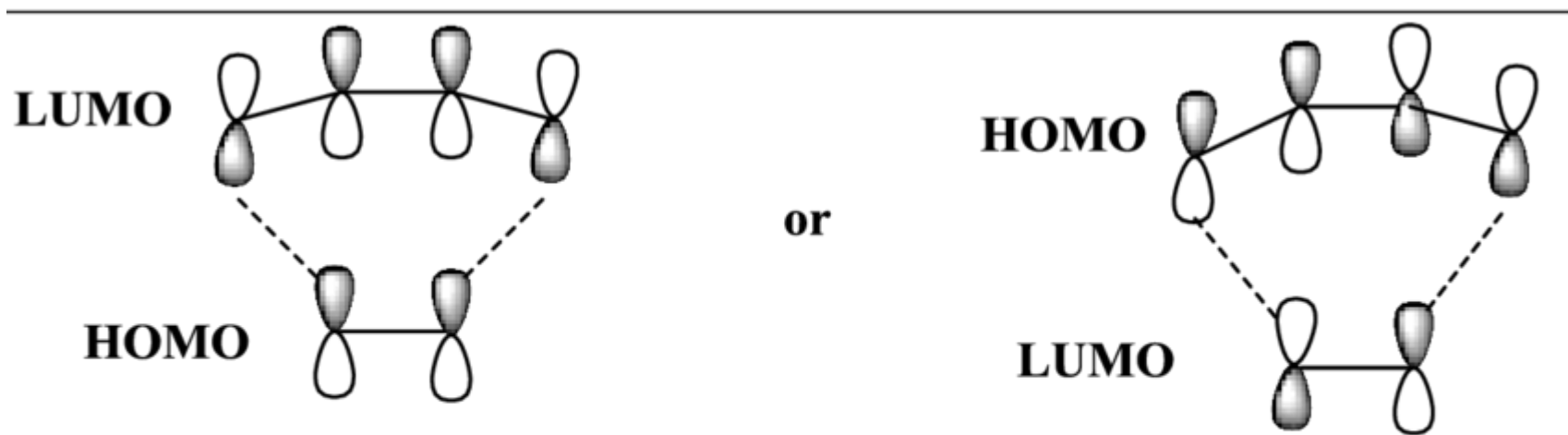
학년	이수학기	교과목명
1학년	1학기	화학및실험1, 물리학및실험1, 미적분학및연습1, 생물학및실험1
	2학기	화학및실험2, 물리학및실험2, 미적분학및연습2, 생물학및실험2
2학년	1학기	물리화학1, 물리화학연습1, 분석화학1, 분석화학실험, 유기화학1, 유기화학개론(다전공자를 위한 과목임),
	2학기	무기화학1, 물리화학2, 물리화학연습2, 물리화학실험1, 분석화학2, 유기화학2, 유기화학실험1
3학년	1학기	기기분석1, 무기화학2, 무기화학실험, 물리화학3, 물리화학연습3, 물리화학실험2, 생화학1, 유기화학3,
	2학기	유기및고분자합성실험, 환경화학
4학년	1학기	공업화학, 기기분석2, 기능성고분자화학1, 생화학2, 생화학실험, 유기이론, 유기금속화학, 화학반응속도론
	2학기	기능성고분자화학2, 계산화학의 이해, 유기합성, 전기분석화학, 화학특수연구1
	1학기	유기정성, 화학특수연구2
	2학기	

2	미분적분학 1	3	소프트웨어화학 및 실습
2	미분적분학 2	3	분자분광학
2	화학 및 실험 1	3	무기화학 II
2	화학 및 실험 2	3	기기분석
2	물리학 및 실험 1	3	생화학 II
2	물리학 및 실험 2	3	합성유기화학
2	생물학 및 실험 1	3	생화학실험
2	생물학 및 실험 2	3	무기소재과학
2	일반생물	3	응용고분자화학
2	분석화학실험	3	물리 및 고분자화학연구
2	물리화학 II	3	유기 및 생화학연구
2	물리화학실험	3	나노융합소재연구
2	유기화학실험	3	촉매화학
3	무기화학 I	3	나노화학
3	졸업논문	3	분석화학특론
2	물리화학 I	3	나노바이오물리화학
2	기초유기화학	3	물리유기화학
2	분석화학입문	3	분석 및 무기화학연구
2	기초물리화학	3	응용화학캡스톤디자인
2	유기화학 I	3	의약 및 나노융합소재특강
2	무기화학입문	3	독립심화학습 1(응용화학과)
2	응용분석화학	3	독립심화학습 2(응용화학과)
2	응용화학개론	3	교과교육론(화학)
3	유기화학 II	3	교과교수법(화학)
	유기화학III		
3	반응속도론		
3	유기분광분석		
3	신소재과학실험		
3	생화학 I		

# 4+2 reaction

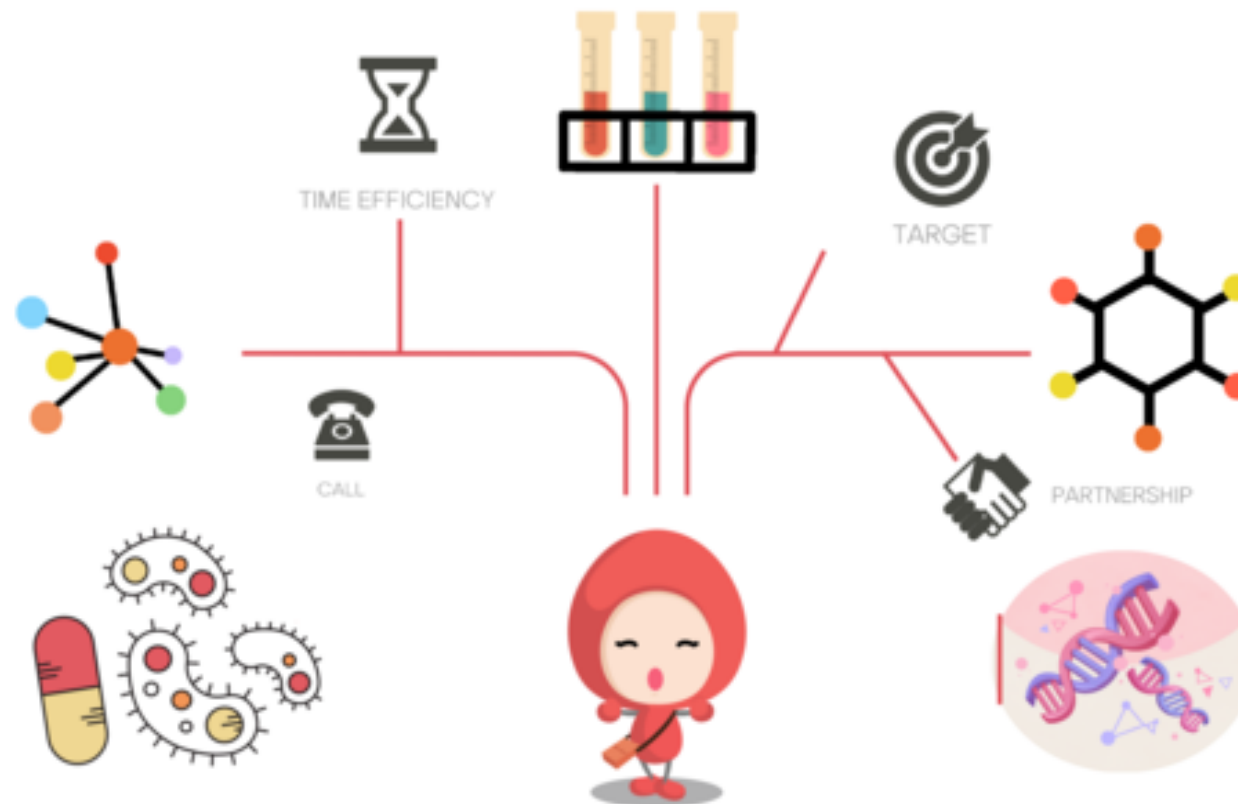


# 4+2 reaction



[4 + 2] cycloaddition reaction

# Why



# Why

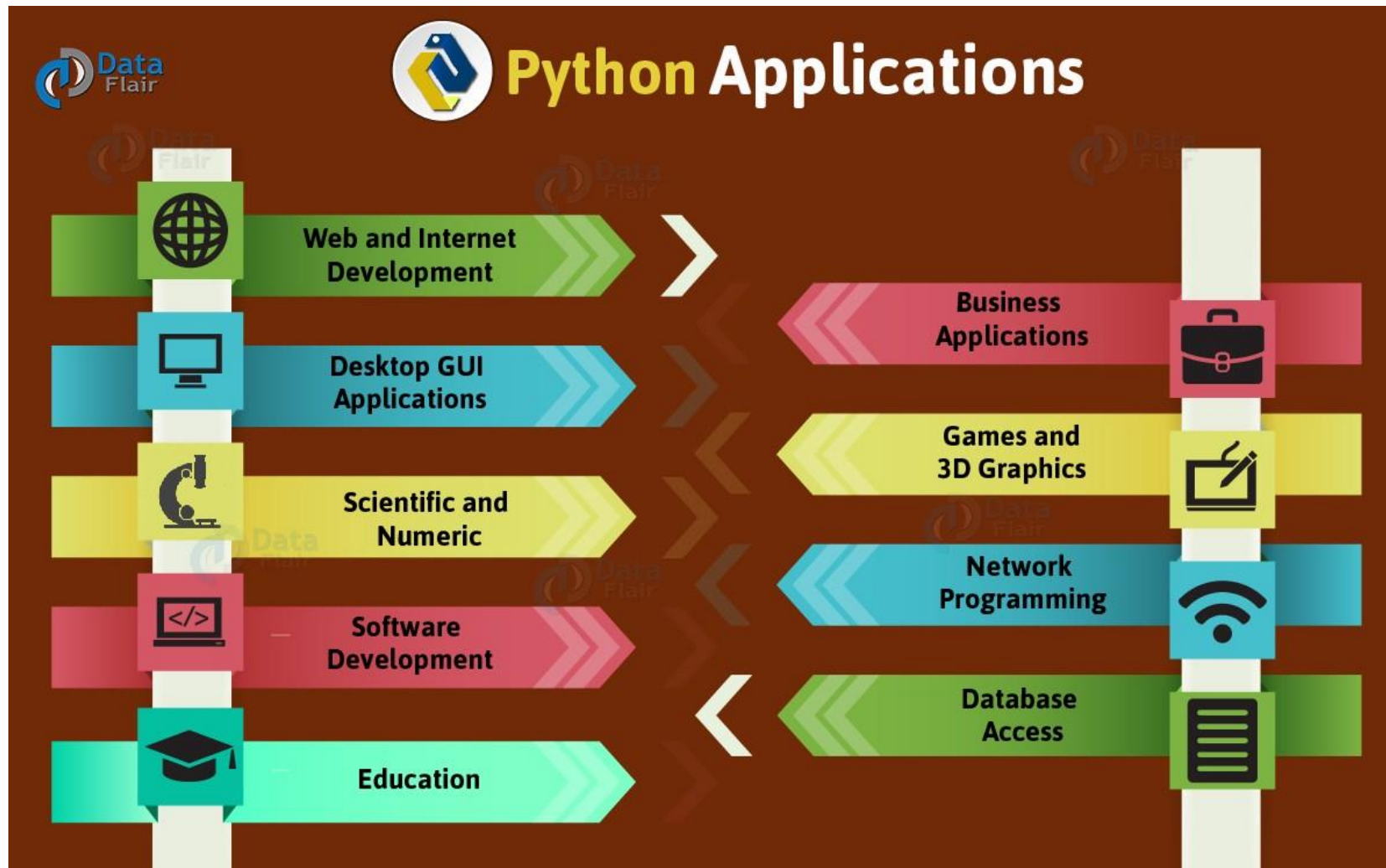
Sep 2020	Sep 2019	Change	Programming Language	Ratings	Change
1	2	▲	C	15.95%	+0.74%
2	1	▼	Java	13.48%	-3.18%
3	3		Python	10.47%	+0.59%
4	4		C++	7.11%	+1.48%
5	5		C#	4.58%	+1.18%
6	6		Visual Basic	4.12%	+0.83%
7	7		JavaScript	2.54%	+0.41%
8	9	▲	PHP	2.49%	+0.62%
9	19	▲▲	R	2.37%	+1.33%
10	8	▼	SQL	1.76%	-0.19%
11	14	▲	Go	1.46%	+0.24%
12	16	▲▲	Swift	1.38%	+0.28%
13	20	▲▲	Perl	1.30%	+0.26%
14	12	▼	Assembly language	1.30%	-0.08%

# Why





# Why

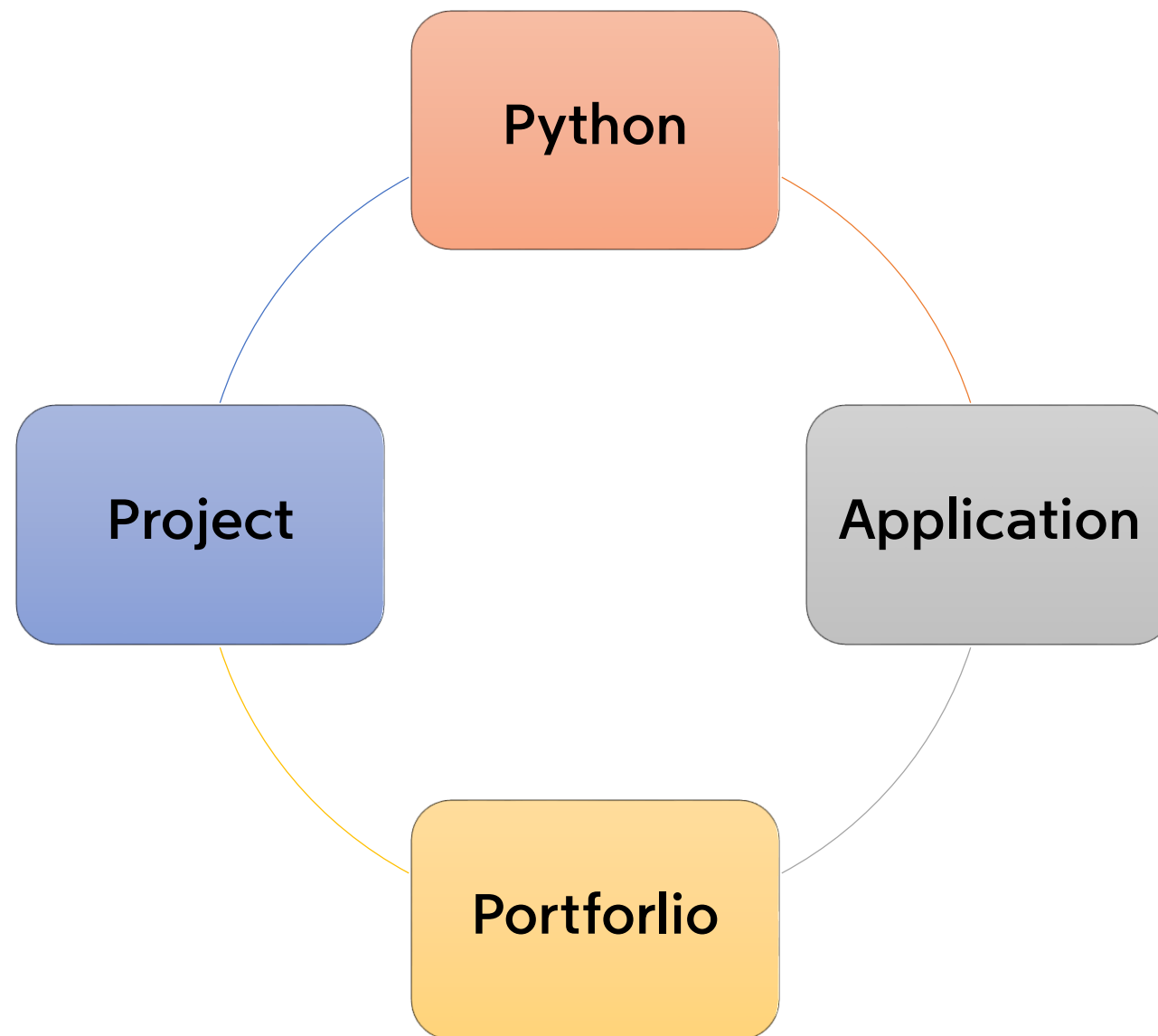


# Why?

## 왜 들어야 하는가??

- 응용화학과를 나왔지만 다른 분야에 적용하지 못했다.  
→ Python만 배워도 적용 가능한 분야가 무궁무진하다.
- Python 문법만 배운다고 절대 적용 못한다. → 실습이 중요
- 어디든 화학과의 시각에서 Python을 배울 수 없었다.
- 주위에 자신만의 포트폴리오를 만들 수 있는 기회가 없었다.

# What?



# Who?

눈높이

코딩을 어느정도 해봤다.  
컴퓨터에 관련해서 관심이 조금이라도 있었다.

# Who?

## 누가 들어야 하는가??

- 코딩이 궁금하고, Python을 배워서 원하는 것을 만들어 볼 사람
- 화학에 Python을 접목 시켜보고 싶은 사람
- 방학 8주동안 코딩에 미쳐서 살 사람 (강도는 Hard)
- 하드트레이닝만큼 힘들어도 버틸 사람

# 수업 시간

토요일

13:00 - 15:00

(12/27 ~ 2/20, 1+8주차)



수업 방식	날짜	내용
Python	12/27 (OT : 유혁준)	// 수업의 목표 // 강의에 필요할 Tool들 소개 (github, notion) // 구글링 하는 법 // 개발환경설정
	1/2 (Python-1 : 강형구)	1. Python이란 무엇인가 2. 변수, 자료형, 연산 3. If 문 4. While 문 5. For 문 6. Function
	1/9 (Python-2 : 강형구)	1. Class 개념 2. Class 구성 3. 패키지 쓰는 법 4. 분야에 맞는 package, Framework 소개
Project	1/16 (Project - 1 : 유혁준)	1. Project Team 및 Project Proposal
	1/23 (Project - 2 : 유혁준)	1. Project 진행 2. Project 문제 해결
	1/30 (Project - 3 : 유혁준)	1. Project 진행 2. Project 문제 해결
	2/6 (Project - 3 : 유혁준)	1. Project 중간 발표 2. Project feedback
	2/14 (Project - 4 : 유혁준)	1. Project 진행 2. Project 문제 해결
	2/20 (Project - 5 : 유혁준)	Project Final Presentation (대면)

# 수업 방식

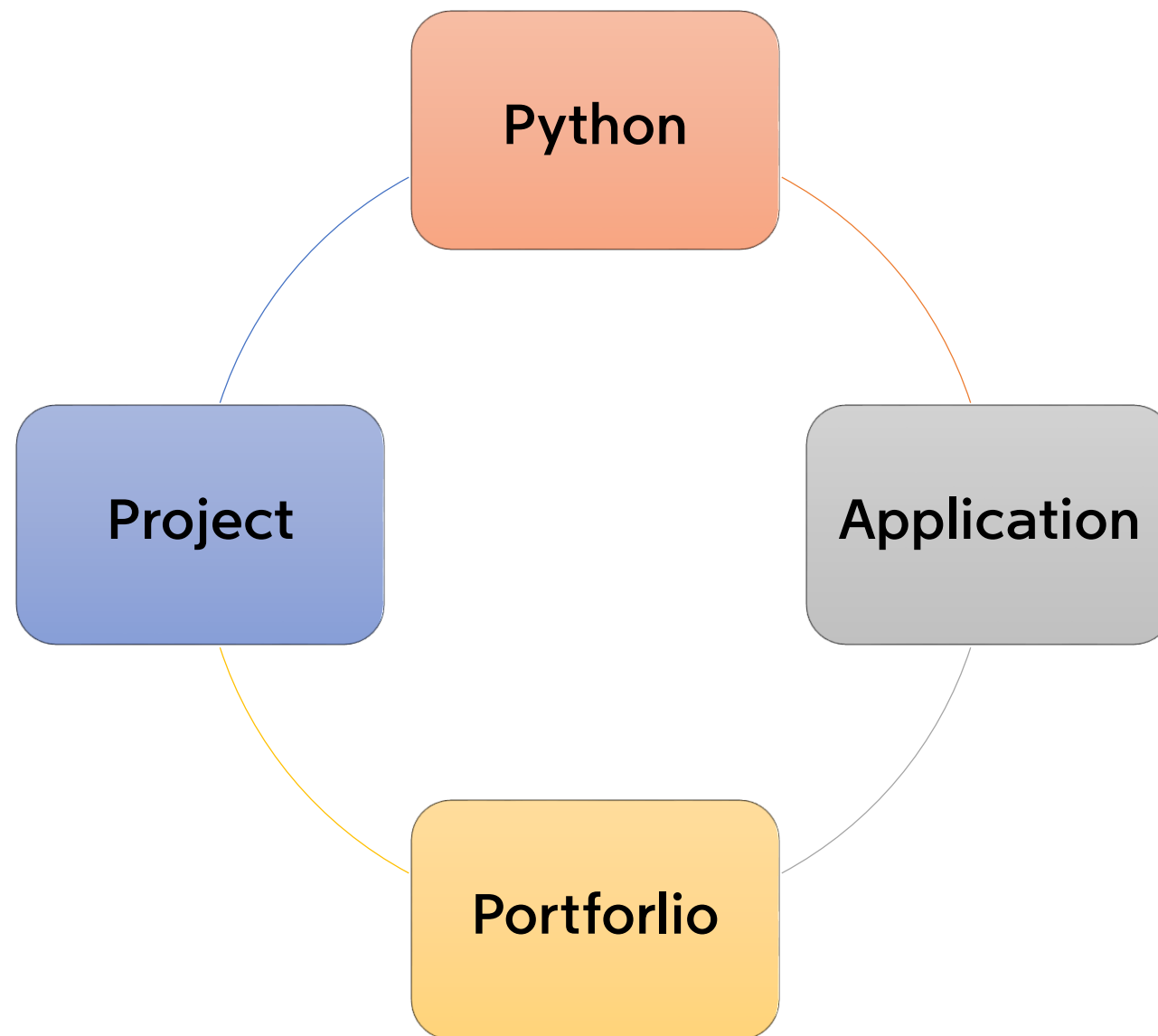
- **문법**

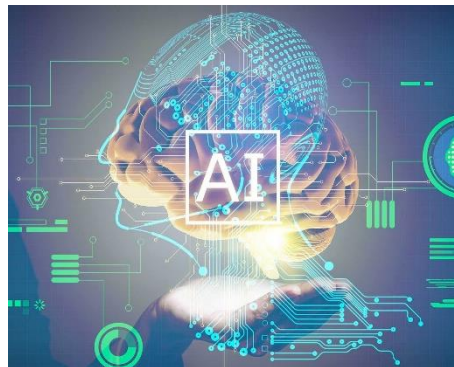
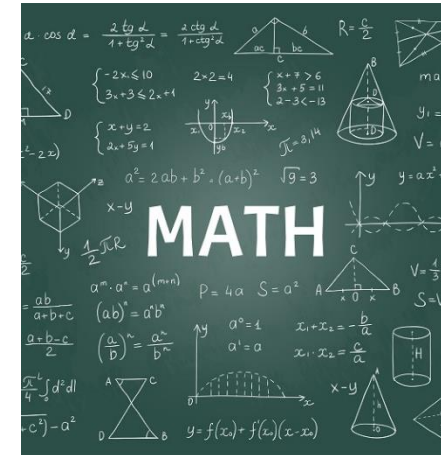
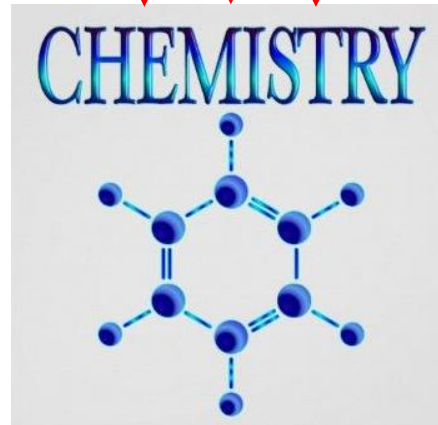
- Zoom or Google Meeting (화면은 송출, 녹화로 복습 가능)
- 질문과 과제 제출은 Slack을 이용 (12:00 ~ 13:00, 18:00 ~ )

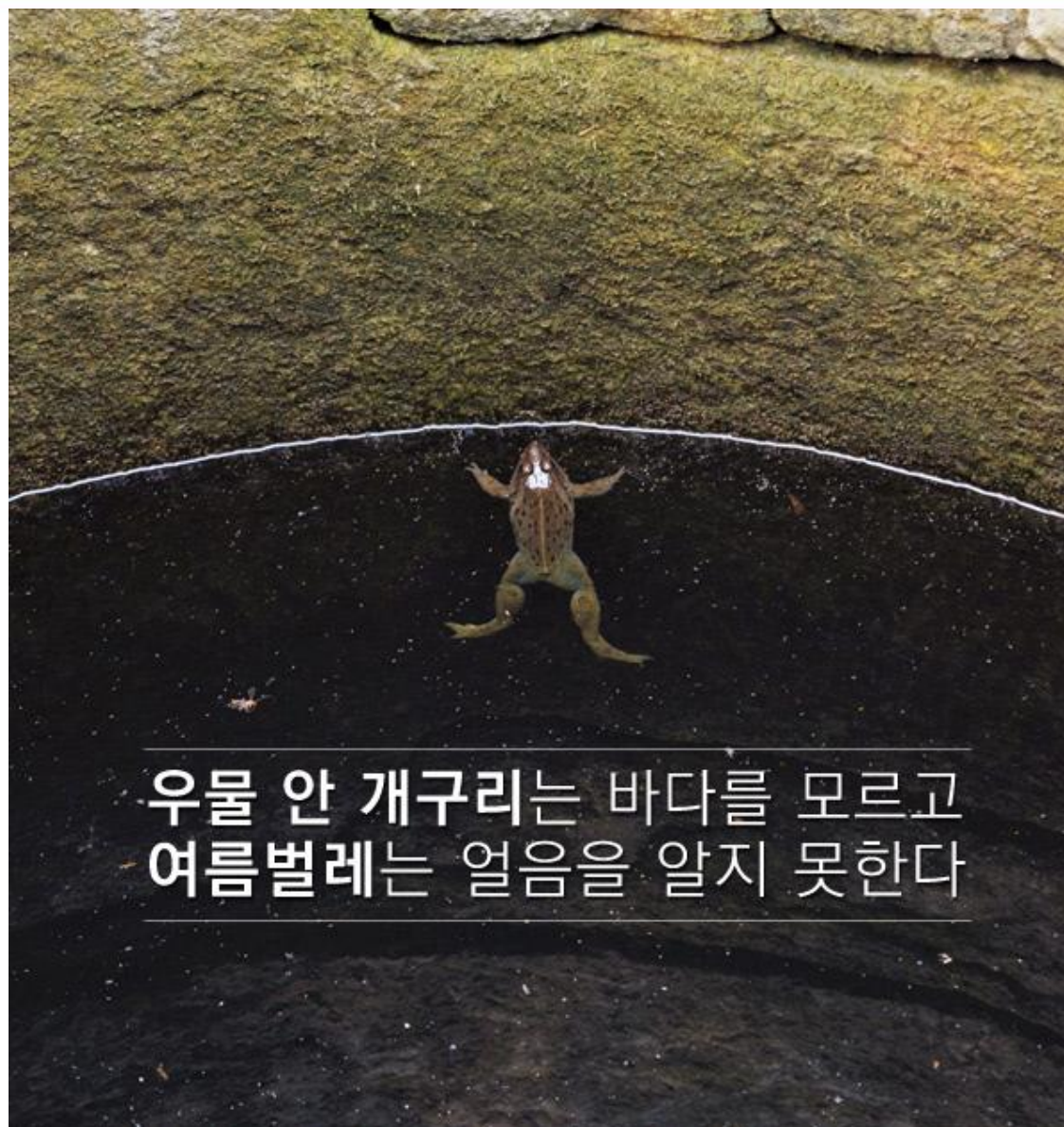
- **프로젝트**

- 프로젝트 proposal, result는 Notion에 정리
- Proposal, 중간 발표(ppt 약식 발표), 기말 발표(ppt 발표)
- 과제 & 프로젝트 정리는 Notion, Github 을 이용
- 마지막에 프로젝트 완성본 url 제출해야함

# What?







우물 안 개구리는 바다를 모르고  
여름벌레는 얼음을 알지 못한다