## 연구 현장의 생성 AI 활용 현황

Current Applications and Integration of Generative AI in Research Environments

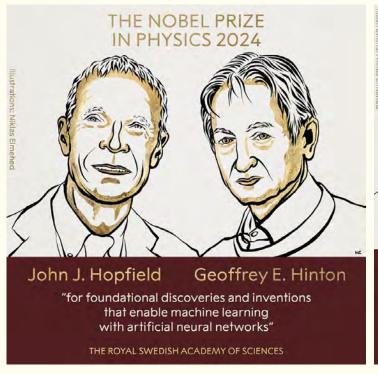
이제현

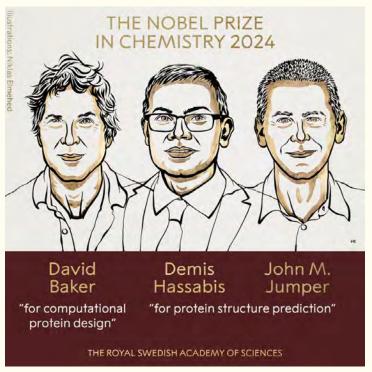
Korea Institute of Energy Research



## 01 인공지능 관련 언론보도

• 2024 노벨 물리학상, 화학상







# 01 인공지능에 대한 오해

• 생성 AI를 사용해서 우리 연구를 효율화 할 수 있다.

• 생성 AI를 쓰면 연구자의 역량이 향상된다.



# 01 현장에서 인공지능이라 불리는 것들

한국에너지기술연구원 에너지AI·계산과학실 이제현 jehyun.lee@gmail.com



	특징 & 활용 예시	행정/사무	과학공학연구	프로그램	단점 or 주의사항
. 자동화 RPA	<ul> <li>사람의 노동을 자동으로 처리하여 대체</li> <li>데이터 수집, 처리</li> <li>뉴스, 논문 등 관심 소식 알림</li> </ul>	업무 효율화	실험 자동화 데이터 수집 ***	자체 개발	<ul> <li>다품종 소량: 개발자 부족</li> <li>개발 난이도 높음</li> <li>실험실 공간, 유지 보수 이슈</li> </ul>
2. 데이터 분석	<ul> <li>데이터 패턴 인식을 통한 인사이트 발굴</li> <li>통계 분석, 시각화, 데이터 결합/분리를 통한 분석 수행</li> <li>데이터 적재, 관리, 변환 등 전처리 업무 포함</li> </ul>	통계분석 시각화	통계분석 시각화		<ul> <li>노동 집약적 전처리</li> <li>데이터 양/품질 낮음</li> <li>무결성, 결합성 부족</li> <li>결측, 중복, 이상치</li> </ul>
3. 계산 모델	<ul> <li>학습데이터: 없음</li> <li>모델 제작: 물리/화학등 이론 모델 기반 전문가 제작</li> <li>설명력 높은 예측 가능</li> <li>자연과학 시뮬레이션 활용</li> </ul>		시뮬레이션	/\nsys	<ul> <li>고가의 도입/유지비용</li> <li>모델에 내재된 가정의 한계</li> <li>Al 대비 연산이 오래 걸림</li> <li>Al 도입을 통한 단축 활발</li> </ul>
4. 특화 AI	<ul> <li>학습데이터: 내부 데이터 + 공개 데이터</li> <li>모델 제작: 누구나 가능 (오픈 소스 활용)</li> <li>수치, 분류 등 새로운 입력값에 대한 예측값 출력</li> </ul>		특성 예측 실험 설계	earn () 활용 사안별 개발	다품종 소량: 개발자 부족     딥러닝 모델 개발시 GPU 필요     고가, 수급 기간 이슈     GPU 서버 운영 인력 필요
5. 생성 Al	학습데이터 : 공개 데이터 기반     모델 제작 : 대형 기업/기관, 국가 주도     소규모 업체, 개인은 소형 공개 모델 조정에 한해 가능	정보 수집 보고서 이해	정보 수집 논문 이해	Genspark  NotebookLM	<ul> <li>부정확한 사실 답변 가능 hallucination</li> <li>확률적 답변을 하여 재현성 낮음</li> <li>상용모델: 기밀 데이터 활용 불가</li> </ul>
	<ul> <li>글/그림/음악/영상생성</li> <li>보편 이상 수준의 지식에 대한 답변 가능</li> <li>추론 능력 활용 일부 의사결정 가능</li> </ul>	보고서작성	논문 작성 보고서 작성 코딩	<b>\$ * ♦</b>	• 공개모델: 고가 GPU & 운영인력 필수



## • 업무관련 뉴스 메일링 서비스

#### ■ [자동발송] 에너지기술 최신동향 □

■ 보낸사람: ■ "김덕환" <thekan@kier,re,kr> 주소록에 저장 | 수신차단하기 받는사람: jehyunlee@kier,re,kr

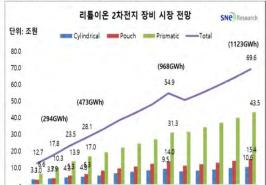
### 에너지 기술 관련 최신 뉴스

2024-10-14~2024-10-15

Data	

순번	기사명	출처
1	대체에너지 저장 가능한 극저온 터보 팽창기, 국내최초 개발	헬로디디
2	<프리즘> 2024 친환경 에너지 페스티벌 개최	동양일보
3	생산량 75배 괴물 촉매·휘는 태양전지반전 노린 에너지 新기술	머니투데이
4	한양대 방진호 교수 연구팀, 수소 생산 촉매 기술 새로운 들파구 제시	경기일보
5	[C테크나우]철강업계 탄소중립 숙제, '수소'에서 해답 찾는다	아시아경제
6	리창 중국 총리, '90조원' 베트남 고속철 프로젝트 참여 의지	아주경제
7	부산녹색환경지원센터, 탄소 중립 관련 설문 조사 진행	메트로경제
8	[MT시평]기후변화에 대응하는 모습	머니투데이
9	韓 연구팀, '이산화탄소→에틸렌 전환' 촉매 매커니즘 규명생성 효율 3배↑	이데일리
10	[정수종의 기후변화 이야기]기후위기시대, 인공지능의 빛과 그림자	경향신문

### [SNE Press] 리튬이차전지 장비시장 2023년 20조원에서 2035년 83조원 육박 예상



#### ■ [자동발송] 에너지기술 최신동향 📮

■ 보낸사람: □ "김덕환" 〈thekan@kier,re,kr〉 주소록에 저장 │ 수신차단하기

받는사람: jehyunlee@kier,re,kr

#### 에너지 기술 관련 최신 뉴스

2024-10-02~2024-10-03

Data from bigkinds.or.kr

		Duta Irom biginius.o
순번	기사명	출처
1	전남, 재생에너지 특화 '70kV급 신송전 시스템' 선점 나선다.	서울경제
2	韓해상풍력 투자한 비그림 "해외자본 많다? 기술력 높일 기회"	중앙일보
3	"굴착기 회사가 왜? 반드시 개발해야 하니까요" HD현대 '수소엔진' 벌써 러브콜 [히든 스팟]	헤럴드경제
4	전남도, 솔라시도 발전 방안 모색	남도일보
5	에너지기업 '그린미네랄', 초격차 스타트업 1000+ 프로젝트 선정	서울경제
6	지앤지테크놀러지, 지열시스템 '지오썸 하이브리드' 美 특허 취득	머니투데이
7	울산시, '암모니아 벙커링 규제자유특구' 후보특구 선정	메트로경제
8	한미 연구팀, 안정성 높고 수명 3배 향상 리튬금속전지 기능성 첨가제 개발	전자신문
9	[기후위기 대응, 북유럽 흐름을 읽다] 지구를 지키는 '그린 어게인' 재활용에서 답을 찾다	강원도민일보
10	11차 전력수급기본계획에 결박된 '기후정의' [왜냐면]	한겨레

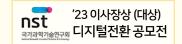
### [IEA Report] Global Hydrogen Review 2024

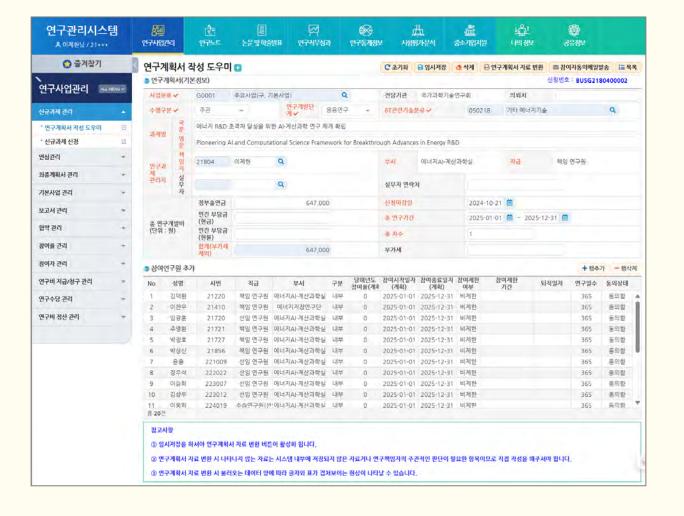


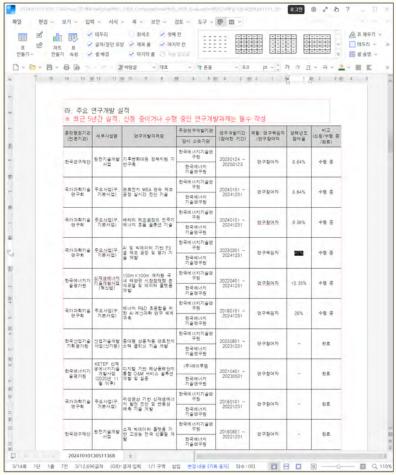
국제 에너지 기구(IEA)의 연례 간행물인 '글로벌 수소 리뷰'는 전 세계 수소 생산 및 수요, 인프라 개발, 무역, 정책, 규제, 투자 및 혁신 등 주요 분야의 진행 상황을 추적합니다. 이 보고서는 청정 에너지 장관 회의 수소 이니셔티브의 결과물로, 에너지 부문 이해관계자들에게 수소의 현황과 미래 전망을 알리는 데 목적이 있습니다. 수소가국제 에너지 및 기후 목표 달성에 기여할 수 있는 잠재력에 중점을 두고, 의사 결정자들이 투자 유치 및 수소 기술 배치를 촉진하는 전략을 조정할 수 있도록 돕습니다. 올해 보고서는 라틴 아메리카에 특별히 초점을 맞추고, 해당 지역의 저탄소 수소 프로젝트의 최근 발전과 수요 창출 및 프로젝트 실행을 위한 방안을 분석합니다. 또한, 다양한 수소 공급망과 관련된 온실가스 배출량을 상세히 평가합니다.

# 02 자동화

• 연구책임자 역량증빙, 참여연구원 정보 취합

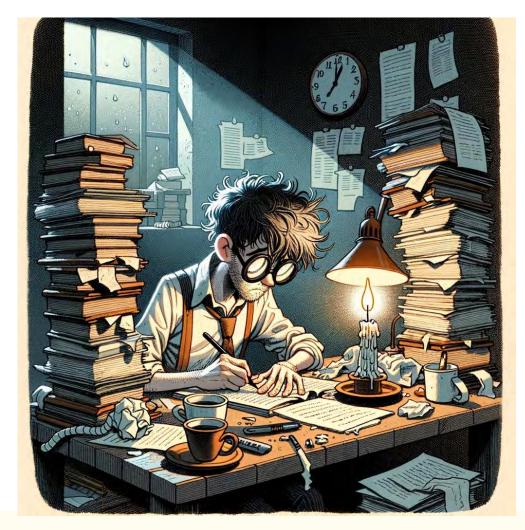


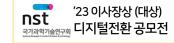






## • 작년 이맘때







2023년 10월 31일 . @

• 연구계획서를 쓰다가

- 왜 일일이 생년월일, 이메일을 넣어야 하지?
- 왜 일일이 내가 출판한 논문, 발표한 학회, 출원하고 등록된 특허를 넣어야 하지?
- 왜 내가 수행했고 수행하고 있는 과제 이름, 금액, 참여율, 연구기간을 찾아다녀야 하지?
- 이름만 클릭하면 자동으로 시스템에서 가져와서 붙여주는 시스템이 왜 없지?
- 누가 만들고 계실까?
- 연구계에는 20년 전이랑 똑같은 상황이 한 두 개가 아니다.
- 이런 시스템을 만드는 게 자기 일이 아니라고 생각하시는 분들.
- 이래서 안되고 저래서 안되는 규정으로 덧칠하시는 분들.
- 가끔 헐크나 슈렉같은 사람이 나와서 좀 찢어주면 좋을텐데.
- 밤은 샐 수 있는데 쓸데없이 밤새는 건 싫다.



진심 공감합니다. ㅜㅠ 구글스칼라는 알아서 제가 출판한 논문인지도 묻고 찾아주던 데...;; 웹에 있는 내용은 좀 긁어와주면 좋을 것 같아요!

48주 슬퍼요 답글 달기 😥



#### Jehyun Lee

Yeji Choi 이 시스템이 아직까지 없다는게 너무 이상해요 ㅠ.ㅠ

48주 좋아요 답글달기



유럽쪽에서는 ORCID 만들고 거기다 입력하게 하고, 연구자 ID만 받아서 관리하더라 구요. 여기서 필드값 받아오는 것만 잘 관리해서 쓰면 복잡한 시스템 없이도 잘 쓸텐 데 아쉽습니다. 모든 자료를 hwp로 문서화하면서 정보를 뭉개는 현상이 사라져야겠 죠..

48주 좋아요 답글달기 3🗘



전태균 하던 대로 하는 게 문제라는 생각을 하기 어려운 게 사실이죠...

48주 좋아요 답글 달기

# 계산 모델

• 소재 물성, 유체 계산 – DFT, Molecular Dynamics, CFD, ···

에너지연, 세계 최고 효율 차세대 태양전지 개발 24.02.21. "혹한에도 끄떡없다"이차전지용 하이브리드 전극 소재 개발 24.08.13



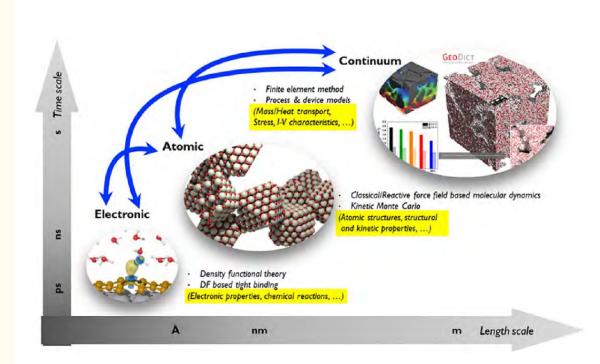
https://zdnet.co.kr/view/?no=20240221132238

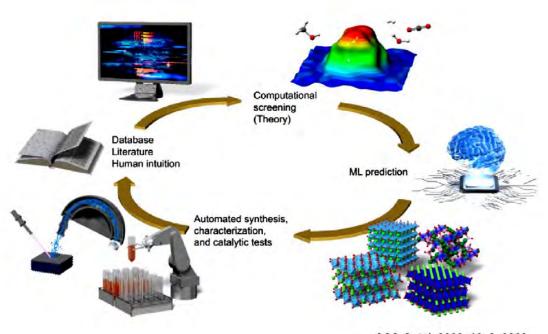


https://news.heraldcorp.com/view.php?ud=20240813050075

# 02 에너지연 Al 활용 현황

• 소재 물성, 유체 계산 – DFT, Molecular Dynamics, CFD, ···







• 촉매 개발

에너지연, 무인·로봇 촉매 평가 실험실 문 연다 22.12.01.



온실가스 처리 2배 증가한 고안정성 나노 촉매 개발 23.02.27.



https://news.bbsi.co.kr/news/articleView.html?idxno=3101035

https://www.hellodd.com/news/articleView.html?idxno=98852



가설 생성 & 검증 → 지식 생산

Sparkes et al: Automated Experimentation 2010, 2:1 http://www.aejournal.net/content/2/1/1



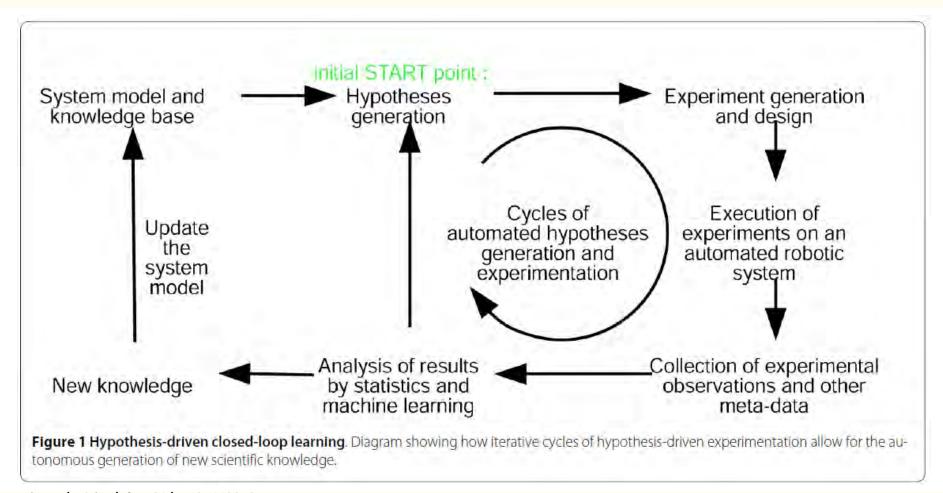
REVIEW Open Access

# Towards Robot Scientists for autonomous scientific discovery

Andrew Sparkes\*<sup>1</sup>, Wayne Aubrey<sup>1</sup>, Emma Byrne<sup>3</sup>, Amanda Clare<sup>1</sup>, Muhammed N Khan<sup>1</sup>, Maria Liakata<sup>1</sup>, Magdalena Markham<sup>2</sup>, Jem Rowland<sup>1</sup>, Larisa N Soldatova<sup>1</sup>, Kenneth E Whelan<sup>1</sup>, Michael Young<sup>2</sup> and Ross D King<sup>1</sup>

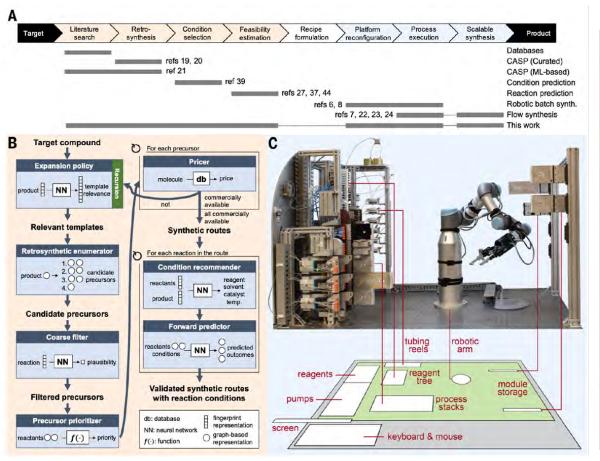
# 02 자율화 실험실

가설 생성 & 검증 → 지식 생산



# 02 자율화 실험실

• 특화 AI = 다품종 소량 전문 제품



이름	기능	유형
ASKOS @CASP	AI 기반 합성 경로 설계 SW	Open Source Github
Reaxys	화학반응 DB	Commercial Elsevier
Reaxys API	화학반응 데이터 수집 인터페이스	Commercial Elsevier
RDKit	화학반응 템플릿 추출 및 적용	Open Source Github
Robotic Flow Chemistry Platform	연속 흐름 합성 실험 가동화 플랫폼	자체 개발
Continuous Flow Piston Pumps	화학 물질의 연속적 공급 을 위한 펌프	Commercial

# 02 자율화 실험실

## • 특화 AI = 다품종 소량 전문 제품

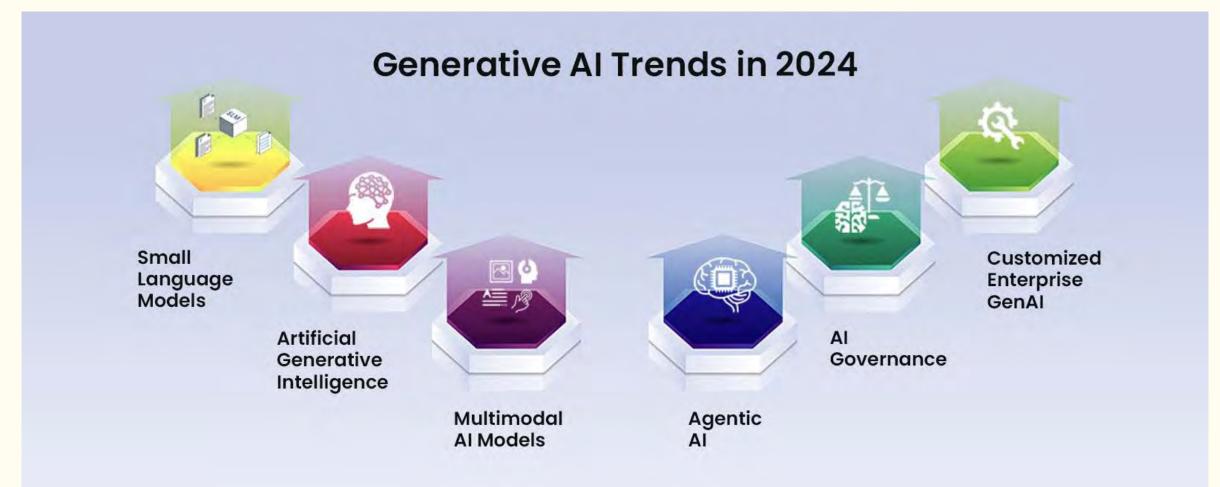
비용 cost: lack of interim options	<ul> <li>상용 자동화 장비의 가격이 매우 높음 ex. 세포 배양 자동화 &gt; \$1M</li> <li>연구는 산업/임상 환경에 비해 타당성 입증이 어려움</li> <li>중간급 자동화 솔루션이 부족함: 비싼 자동화 vs 저렴한 노동집약 양자택일</li> </ul>
연구 자동화 정당화 justifying automation in research	- 성공 여부 측정이 어려워 투자를 받기 어려움 - 자동화가 연구 성과에 미치는 영향이 명확하지 않음
연구실 공간 laboratory space	<ul> <li>적지 않은 공간을 차지함.</li> <li>기존 장비와 함께 사용시 훨씬 큰 공간 부족 문제 유발</li> <li>장비 사용 및 공간 문제로 인한 연구원 간 갈등 발생 가능</li> </ul>
과정 변동성 process variability	<ul> <li>실험 프로토콜 변동이 잦아 표준화된 자동화 솔루션 개발이 어려움</li> <li>맞춤형 시스템 필요시 비용 및 시간 소요가 큼</li> </ul>
혁신 저해 innovation inhabitation	- 한 번 세팅된 장비는 설정 변경이 어려움 - 프로토콜 수정이나 신규 아이디어 반영이 어려워 탐구 유연성이 제한됨
오용 및 숨겨진 오류 incorrect application & hidden errors	- 잘못 적용될 경우 효율성 감소 및 오류 확산 가능성 존재
고용 불안 야기 및 숙련도 저해 workforce impact	<ul> <li>반복적 수작업 연구자들에게 일자리에 대한 영향을 유발함.</li> <li>신입 인력의 업무 숙달이 저해될 수 있음.</li> </ul>
자동화 이점 과장에 따른 실망 overstating the benefits of automation	- 신기술의 이점이 과장되어, 비현실적인 기대와 실망을 초래할 수 있음.

## 경험자의 솔루션 제안

- 저비용, 모듈식 자동화 솔루션 개발
- 과학자와 엔지니어 간 협력 증진
- 인간의 창의성과 자동화를 함께 수용할 수 있는 혁신 문화 조성
- 연구원들에게 자동화 활용에 필요한자원 및 교육 제공

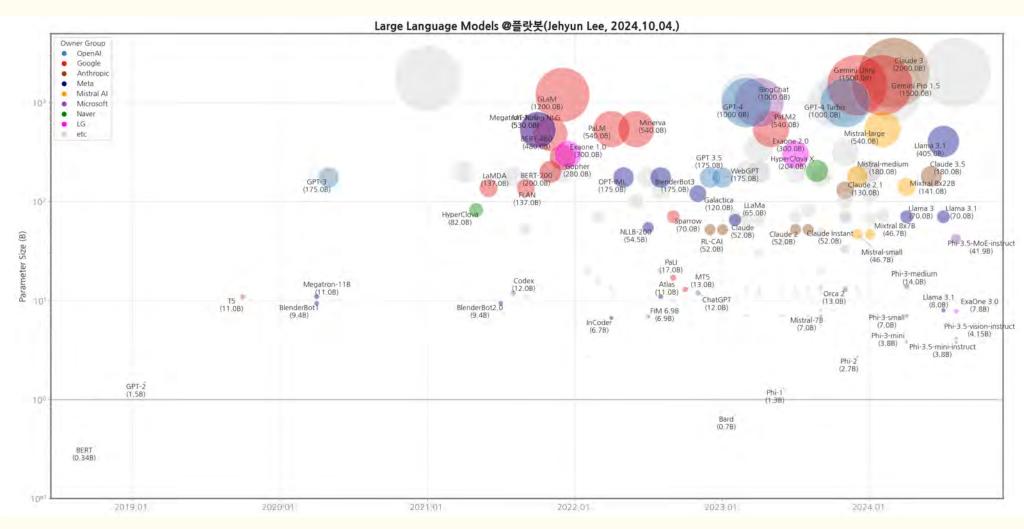
# 03 생성 Al 현황

• 말만 잘 하는 ChatGPT → 다중 감각으로 추론하는 설치형 LLM

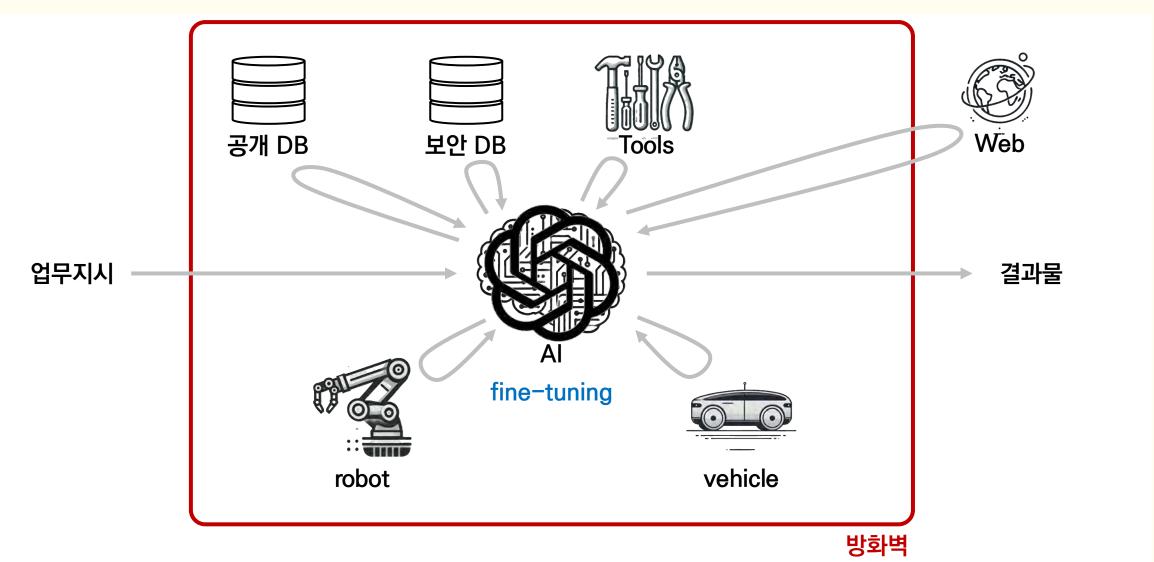


# 03 생성 AI 현황

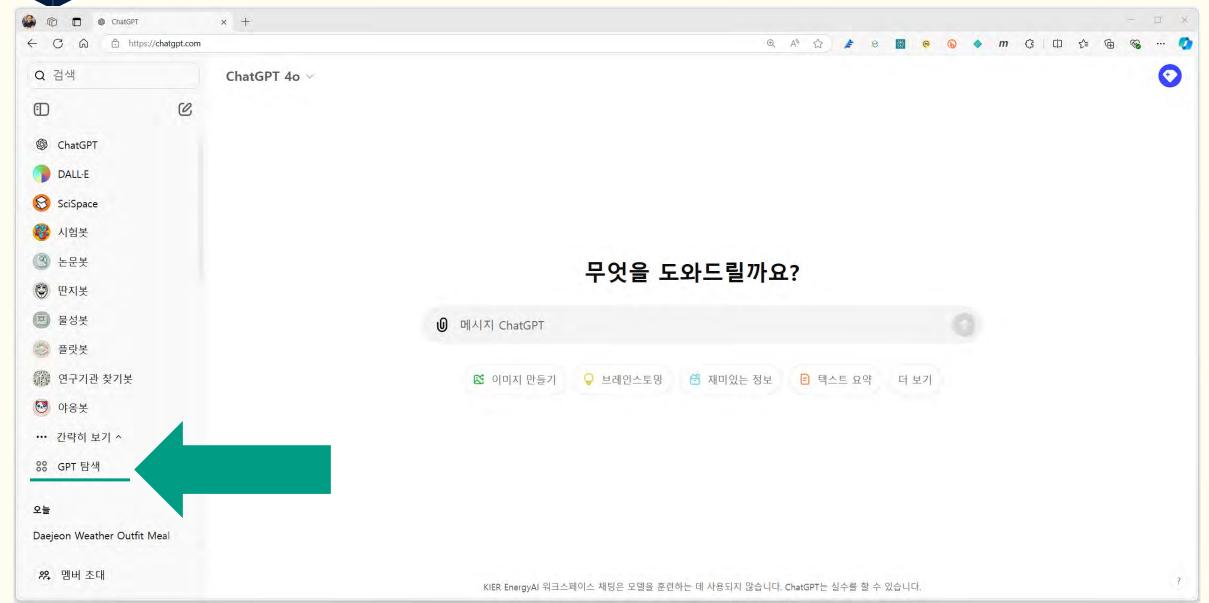
• 말만 잘 하는 ChatGPT → 다중 감각으로 추론하는 설치형 LLM



## 04 내가쓸수있는생성AI

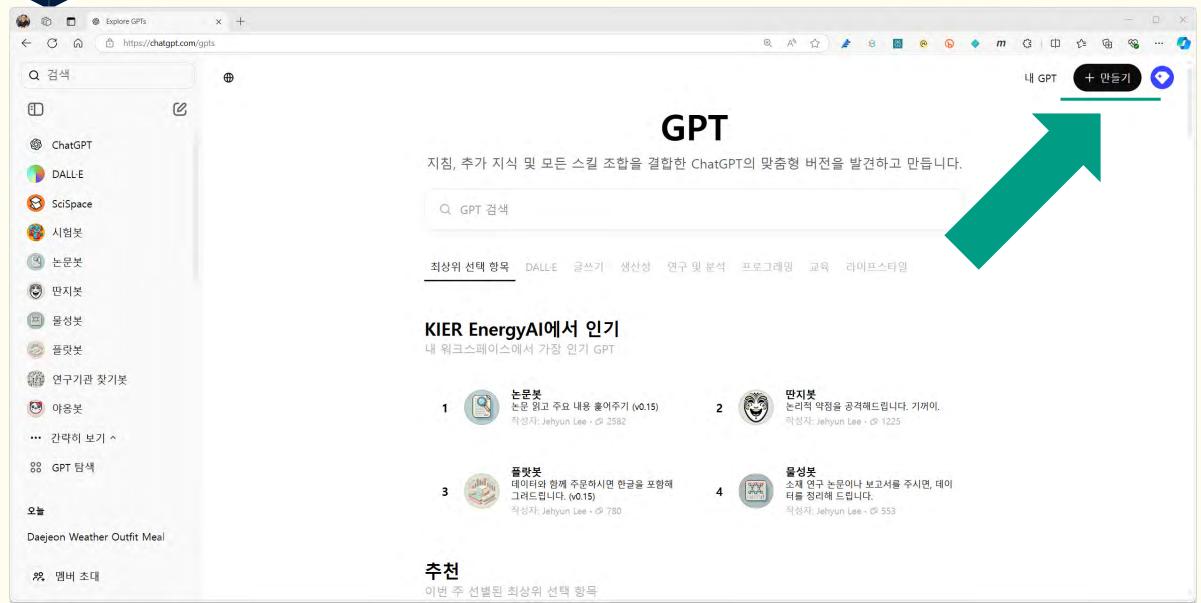


## 04 custom GPT



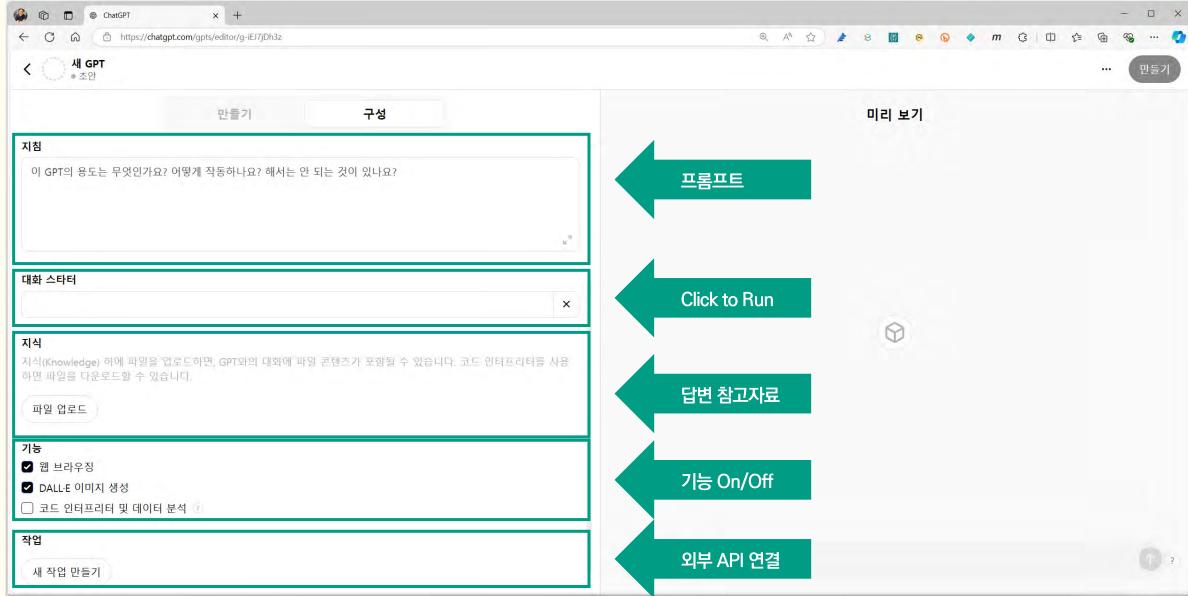
# 04

## custom GPT



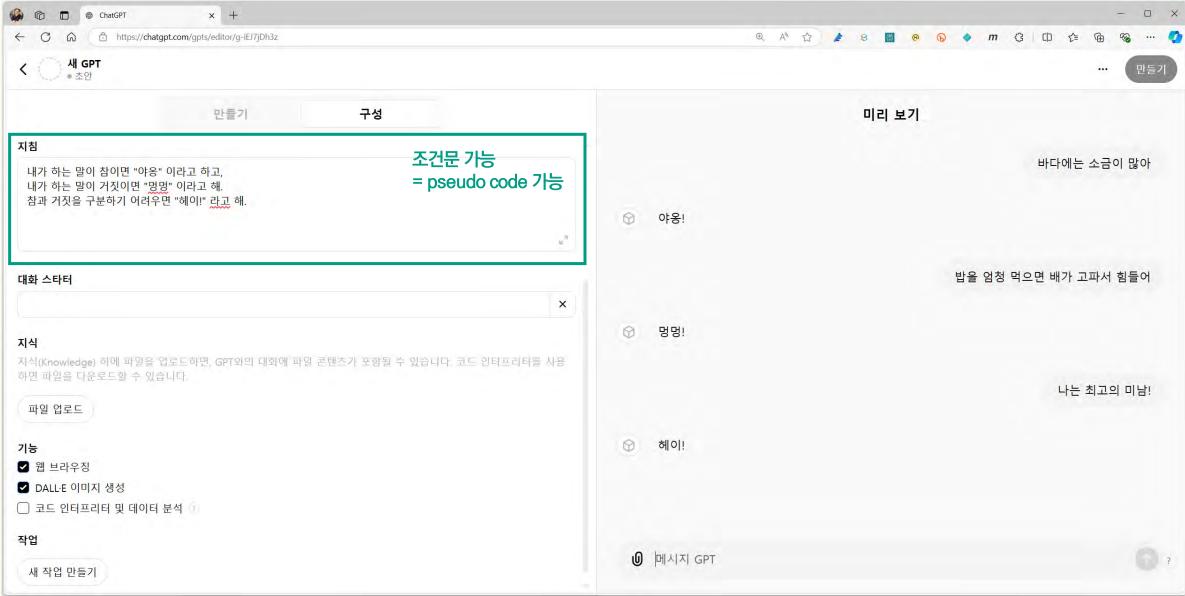


## 04 custom GPT



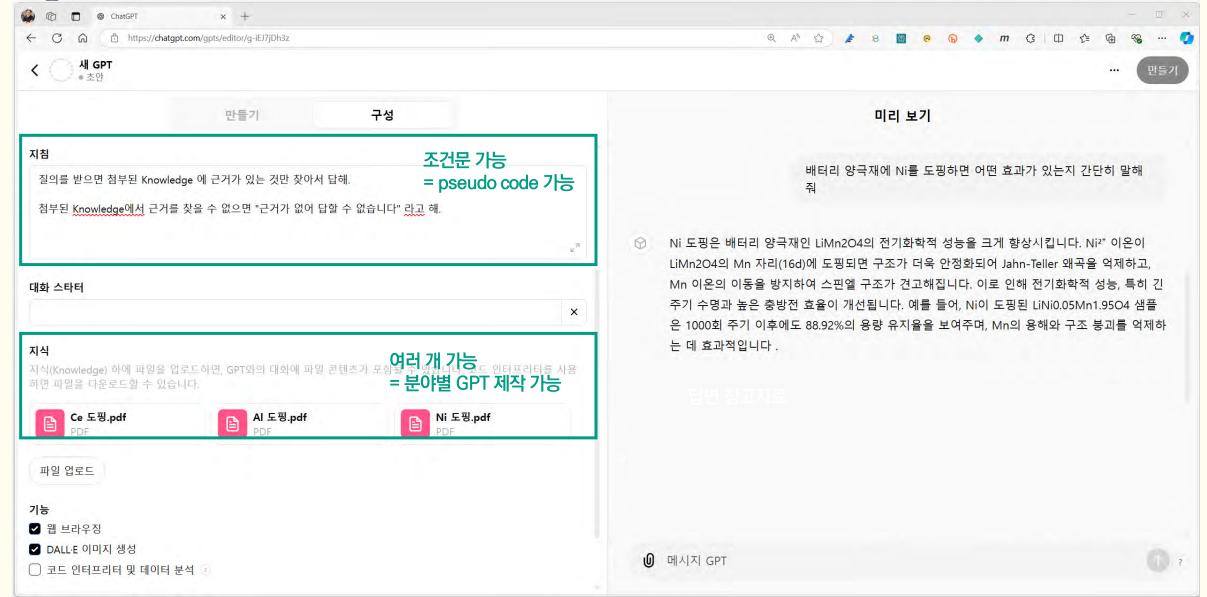


## custom GPT 만들기 1. 조건문 Instruction



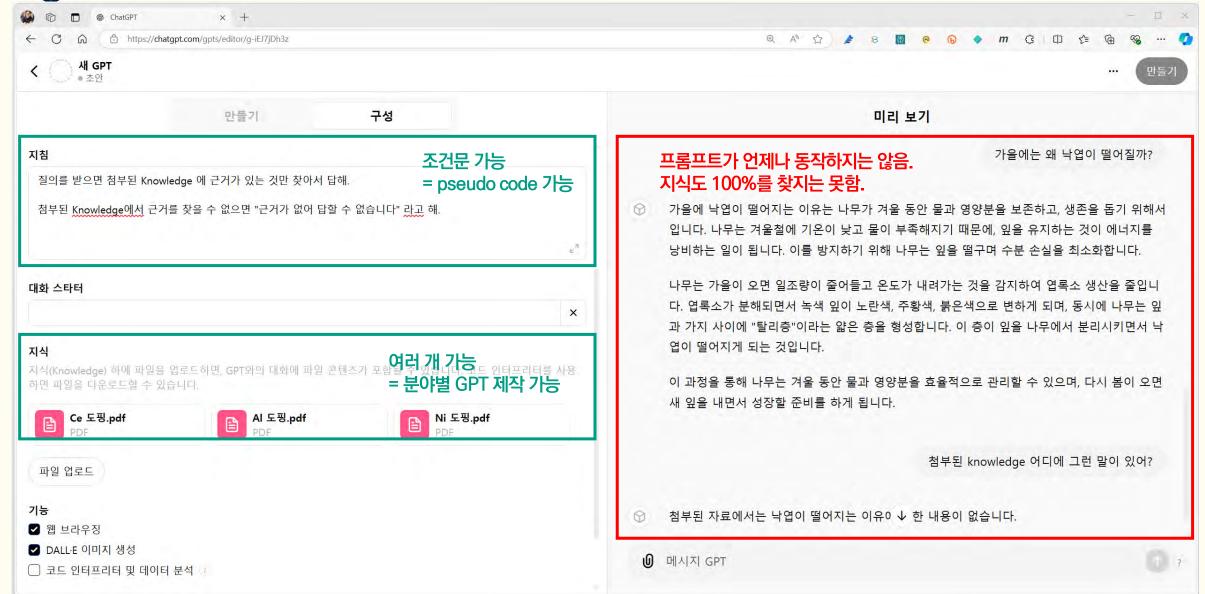


## custom GPT 2. Knowledge



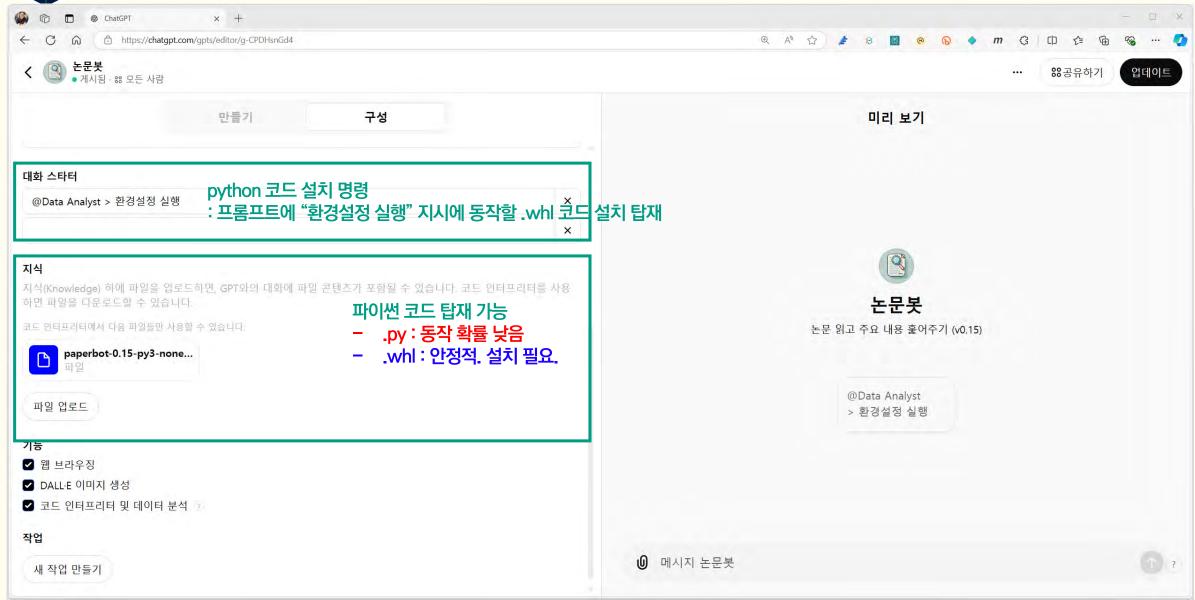


## custom GPT 2. Knowledge



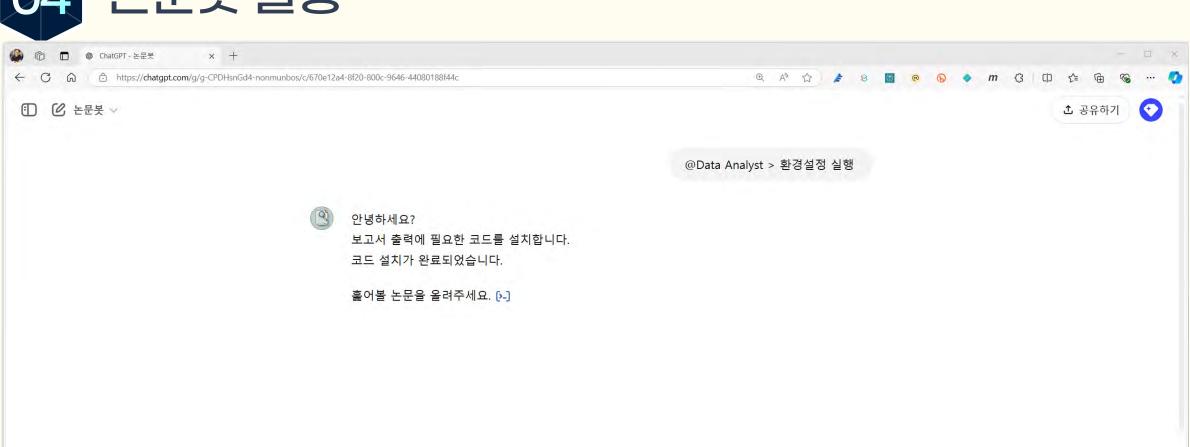


## custom GPT 3. Knowledge에 Code 탑재



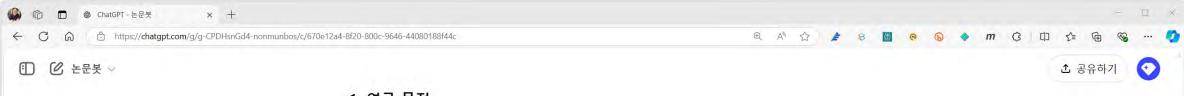








## 논문봇 실행



### 1. 연구 목적

• Research Purpose: 니켈 함량이 높은 NMC(니켈, 망간, 코발트) 계열 양극재의 공침 합성 과정에서의 주요 매개변수 및 입자 특성 제어 방법을 연구하여 고성능 리튬 이온 배터리 양극재를 개발하는 것입니다.

### 2. 학문적 및 산업적 기여

- Academic Contribution: 리튬 이온 배터리용 양극재의 합성에 있어 중요한 매개변수를 구체적으로 분석하고 공침법을 통한 최적화를 제시함으로써 배터리 성능 향상에 기여합니다.
- Industrial Contribution: 니켈이 풍부한 양극재를 대량 생산할 때 필요한 합성 조건을 명확히 제시하여 고에너지 밀도 배터리의 상업적 생산에 중요한 정보를 제공합니다.

### 3. 사용된 방법론

- Co-precipitation: 공침법을 이용하여 니켈, 망간, 코발트 기반 금속 수산화물 전구체를 합성하는 방법입니다. 주로 pH, 반응 시간, 반응 온도 등의 조건을 제어합니다.
- Calcination: 리튬 소스와 금속 수산화물 전구체를 함께 소성하여 NMC 산화물을 형성하는 방법입니다.

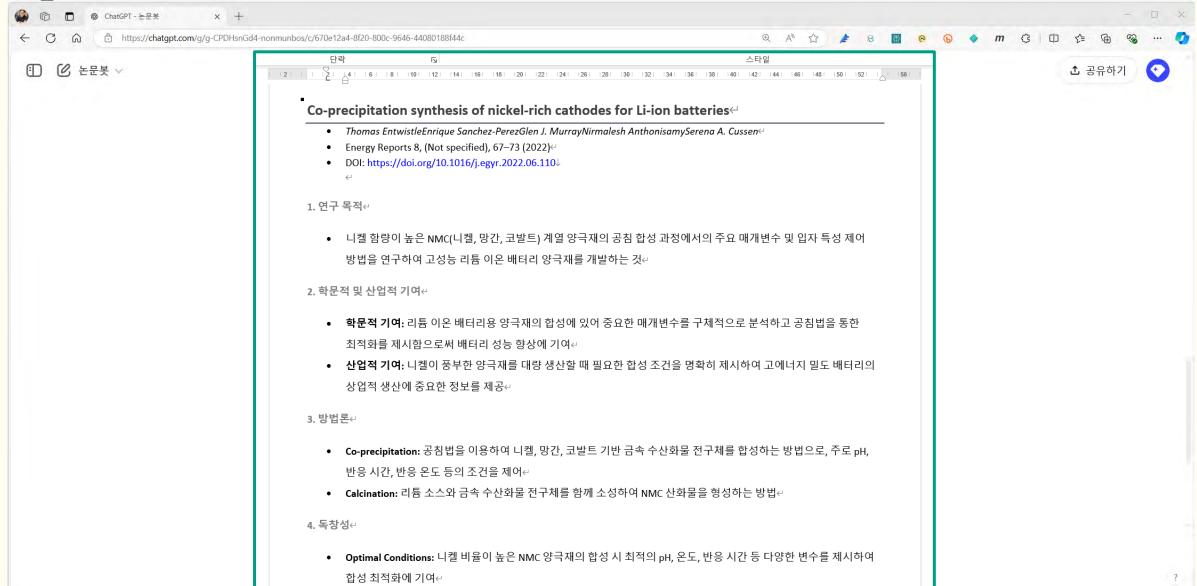
### 4. 연구의 독창성

• Optimal Conditions: 니켈 비율이 높은 ♪ '` 'C 양극재의 합성 시 최적의 pH, 온도, 반응 시간 등 다양한 변수를 제시함으로써 합성 최적화에 기여.

## ● 메시지 논문봇



## 논문봇 실행





• 논문봇, 물성봇, 플랏봇, 딴지봇

## KIER EnergyAI에서 인기

내 워크스페이스에서 가장 인기 GPT

1

**논문봇** 논문 읽고 주요 내용 훑어주기 (v0.15) 작성자: Jehyun Lee • ② 2582

**딴지봇** 논리적 약점을 공격해드립니다. 기꺼이. 작성자: Jehyun Lee • Ø 1225

3

플랏봇

데이터와 함께 주문하시면 한글을 포함해 그려드립니다. (v0.15)

작성자: Jehyun Lee · @ 780



물성봇

소재 연구 논문이나 보고서를 주시면, 데이 터를 정리해 드립니다.

작성자: Jehyun Lee · 여 553



## 에너지연에서는 왜 이런 일이 벌어질까?

• 괴로워하는 실무자가 있음

분야에 무관하게

고통을 감각하고

동료에게 지지받는

의지와 능력 약간

• 경영진의 의지와 제도적, 물질적 지원이 있음













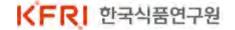








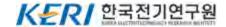






















# 감사합니다