과학기술/03/발표논문/

양자화학분야 기계학습 활용연구가 가지는 자연법칙 성질에 대한 함의

최성환 (한국과학기술정보 연구원, KAIST Ph.D, 화학)

Ⅰ 서론

기계학습 – 특정 작업을 통계적 모델링에 기반을 두어 효율적으로 수행하도록 하는 방법 - 분야의 성장은 영상처리, 자율주행과 같이 공학적인 문제들에 대한 성공적인 해결책을 제시할 뿐만 아니라 과학연구에 있어서도 새로운 패러다임을 만들어 나가고 있다. 기계학습에 뼈대가 되는 통계학적 접근법은 이전부터 연성과학에서 다양하게 활용되어 왔지만, 최근의 기계학습의 발전은 통계학적 모델이 연성과학 뿐만이 아니라 경성과학에서도 활용성을 빠르게 늘어나고 있다.[1] 통계적 방법이 사용되는 방식도 단순 과학 데이터의 전·후처리하는 수준에서 머무는 것이 아니라 화합물 메커니즘이나 재료추천과 같이 고도로 훈련된 과학자들을 필요로 하던 영역까지 도전하고 있다.

본 발표에서는 최근 출판된 양자화학 분야 연구에서 다양한 기계학습을 활용한 연구 흐름 중 바닥상태 에너지를 빠르게 예측하기 위한 연구들의 흐름을 파악하고 이러한 연구들이 가지는 과학철학적 함의에 대해서 살펴볼 것이다.

양자화학은 양자역학의 발전을 화학적 관심의 대상(화합물의 물성, 반응의 메커니즘 등)에 적용하는 물리화학의 하나의 분야이다. 대부분의 화학에서의 관심사가 되는 다전자계에 대한 운동방정식은 해석적 해를 찾는 것이 불가능하기 때문에 초기 양자화학 연구에서부터 컴퓨터의 활용한 수치적인 방법들이 핵심적인 역할을 해왔다. 양자화학 방법론은 컴퓨터의 막강한 계산능력을 통해 계의 파동함수를 수치적으로 계산하고 이를 바탕으로 다양한 물성을 예측할 수 있다. 지난 반세기동안의 컴퓨터의 엄청난 발전과 알고리즘의 축적은 양자화학 방법론을 더 이상 화학 내부만의 도구가 아니라 약학/지질학/분자생물학과 같은 인접분야에서 높은 활용성을 가지는 도구로 성장시켰다.

본격적인 논의에 앞서 기본적인 양자화학의 방법론에 대해 살펴볼 필요가 있다. 양자화학 내부엔 수많은 방법들이 있지만, 물성을 얼마나 정확하게 구하느냐[2]에 따라서 여러 방법론으로 구분될 수 있다.

---

1) 과학과 비과학을 나누는 것이 어려운 일이듯 엄밀한 경성과학과 연성과학의 분류 역시 쉬운 일이 아니다. 경성과학과 연성과학에 대한 좀 더 깊은 설명은 Nonsense on Stilts: How to Tell Science from Bunk

2) 대부분의 경우에서 얼마나 정확하냐는 질문은 정확하게 얼마나 빠르게 혹은 큰 계를 계산할 것인가와 동일한 질문이다.

1. 제일원리계산

제일원리계산은 사전에 얻어진 정보 없이 처음부터 (ab inito, From beginning) 계의 양자적 효과를 계산한다는 의미로 붙여진 이름이다. 다전자 파동함수에 대한 근사를 통해 헤밀토니안(Hamiltonian)을 구하는 방식으로. 50년대 Hartree-Fock 방법론을 시작으로 섭동이론(perturbation theory), 짝진뭉치이론(coupled cluster theory)등 지금까지 수많은 방법론들이 도입되었고 또한 지금도 활발하게 연구 중이다. 제일원리 계산이라는 이름과 달리 실제 연산에서 단 하나의 파라메터도 사용되지 않는 것은 아니다. 최근에 사용되는 방법일수록 오히려 더 수의 파라메터를 필요하기도 하다. 이러한 변화에는 밀도범함수이론(Density Functional Theory)의 도입이 있다. 밀도범함수이론은 다전자계의 양자적 효과를 고려해주는 교환상관범함수(exchange-correlation functional)의 존재성와 유일성을 해석적 증명했다. 하지만 실제 그 범함수의 해석적 형태가 알려지지 않았기에 이를 다양한 방식으로 근사하면서 수많은 파라메터들을 필요하게 되기도 하였다. 그렇기에 밀도범함수이론을 제일원리 방법론으로 구분하지 않고 제일원리방법과 대등한 또 하나의 범주로 보기도 하지만 밀도범함수이론과 기존의 양자화학적 방법론을 함께 사용하는 형태의 방법론들도 많이 나오고 있기 때문에 본 발표에서는 하나의 범주로 분류하였다.

2. 반경험적방법

반경험적방법은 제일원리와 다르게 양자역학적 계산의 일부를 경험적, 즉 사전에 얻어진 정보를 활용해 푼다는 의미로 붙은 이름이다. 주어진 계산능력으로 제일원리 계산이 어려운 계에 대해서 일부 많은 계산량을 요하는 항(주로 이전자적분값)들을 사전에 얻어진 숫자로 대신하는 방식으로 계의 양자적 정보를 얻어내는 방법이다. 사전에 정해진 파라메터를 사용하긴 하지만 양자역학적 수식을 만족하는 해를 찾기에 제일원리계산이 예측할 수 있는 대부분의 물성들이 계산 가능하다. 따라서 고전적인 상호작용만으로는 설명하기 어려우면서도 많은 원자를 포함하는 계의 물성을 예측하는데 사용되고 있다.

3. 분자역학

엄밀하게 이야기해서 분자역학의 방법은 계의 양자적 정보를 다루지 않기 때문에 양자화학 방법론으로 구분하기는 어렵다. 하지만 주로 양자화학적 방법론으로 다루기 어려운 단백질과 같이 큰 생물학적 계를 다루기 위해서 널리 사용된다. 원자들의 상대적 위치에 따른 원자들 사이의 상호작용을 사전에 정의한 역장(force field)에 의해서 결정하여 계의 양자적인 정보를 직접적으로 풀지 않고 양자수준의 상호작용까지 포함한 역장을 계산함으로서 간접적으로 양자적 효과를 보게 된다.

양자화학에서 다루는 주로 다루는 물성은 전자구조에 영향을 받는 경우와 전자기적 에너지에 영향을 받는 경우로 크게 나뉜다. 기계학습 연구를 통해서 HOMO-LUOMO 차이와 같이 오비탈의 에너지 분포에 대한 정보를 학습하려고 하는 시도들도 꾸준하게 진

행되고 있다. 하지만 본 발표에서는 에너지에 관련된 물성을 예측하는 연구들에 초점을 맞추려고 한다.

다음 장에서는 제일원리 네 가지 연구흐름에 대해서 각각 연구흐름과 함의를 살펴볼 것이다. 함의에서는 각 연구들이 가지는 과학철학적 함의를 자연법칙의 성질과 연관 지어 논할 것이다. 본 발표에서는 자연 법칙이라는 용어가 가지는 과학 철학적 깊이 있는 성찰들에 대해서 많은 부분 건너뛰게 될 것이다. 이것은 필자의 연구적 역량의 한계이기도 하지만 일부는 논의를 좀 더 단순화해서 본 발표에서 말하고자 하는 바에 집중하기 위함이다. 그럼에도 불구하고 본 발표의 핵심적인 논의가 될 자연 법칙의 성질에 대해 살펴볼 필요가 있다.

과학철학 내에서 자연 법칙에 대한 논의는 과학적 실재론, 과학적 설명과 같은 많은 다른 논의들에서도 주요한 개념으로 다뤄지고 있다. (Okasha 2002) Hempel이 제시한 DN 모델(Deductive-Nomological Model)에서는 과학적 설명의 궁극적 뿌리를 자연 법칙에 두기도 했다. 이와 같이 자연 법칙은 단순히 경험을 통해 도출된 자연 현상의 규칙성에서 그치지 않고 과학을 어떻게 이해할지에 대해 많은 것들을 결정해주는 개념으로 발전하게 되었다.

과학법칙은 자연법칙과 엄밀한 의미에서 구분 가능한 개념이다. 과학 법칙은 과학자들이 실재로 만들어가고 때로는 공격받기도 하는 개별 명제들에 대한 개념이라면 자연법칙은 변하지 않는 궁극의 법칙을 의미하는 용어이다. 그렇기에 과학자들이 말하는 개별 과학법칙들(만유인력의 법칙)과 같은 법칙들이 모두다 자연법칙인지에 대해서는 여전히 확답할 수 없을 뿐만 아니라 궁극적으로 우리가 자연법칙을 알아낼 수 있는지에 대한 인식적 문제도 포함하고 있다. 하지만 이런 인식의 문제를 가져올 경우 현재 진행되고 있는 연구에서 찾아지는 과학적 성과들에 대한 철학적 함의를 끌어내기 이전에 최신의 과학적 성과들이 자연법칙일 수 있는가에 대한 인식적 문제에 부딪히게 된다. 이 때문에 본 발표에서는 이러한 인식론적 문제를 다루지 않기 때문에 자연법칙이란 용어를 과학법칙과 동일한 용어로 놓고 풀어갈 것이다.

과학에서는 법칙, 원리, 규칙과 같이 여러 형태의 경험적 규칙성을 설명하는 단어들을 혼용해서 사용한다. 이러한 용어들 사이에도 미묘한 용례의 차이가 존재하지만 과학 철학적으로 이들이 엄격하게 구별가능 하지 않기에 본 논의에서는 구분 없이 자연에서 관찰되는 경험적 규칙이라는 넓은 의미에서 규칙, 원리를 포함하는 의미로서 법칙이란 용어를 사용할 것이다.

이런 느슨한 자연법칙의 정의는 많은 철학적인 논점들을 건너뛰고 본 발표에서 주목하고자 하는 최근 기계학습 연구의 철학적 함의로 우리를 이끌 것이다. 하지만 건너뛰어지는 논점들 역시 본 논의와 무관하지 않기에 발표의 마지막 부분에서 짧게나마 다룰 것이다.

Ⅱ 기계학습 활용 연구의 사례

1. 오류보정을 위한 기계학습 모델

(1) 연구 설명

낮은 수준의 제일원리계산 결과를 조합하여 높은 수준의 제일원리 계산 값을 얻어내려는 시도는 합성방법(Composite Method)라는 이름으로 양자화학에서 하나의 주요한 방법으로 사용되어 왔다. (Curtiss et al, 1991;Curtiss et al, 1998;Curtiss et al, 2007) 제일원리 계산에서 오는 오차의 원인은 크게 두가지이다. 첫 번째는 물리적인 요인으로 제일원리계산의 기본이 되는 하트리-폭(Hartree-Fock) 방법이 기반하고 있는 일전자 표현(one-electron picture)에서 계산하지 못하는 상관에너지(correlation)를 정확하게 계산하지 못하는 데서 오는 오차이다. 이는 완전한 상관에너지를 구하기 위해서는 NP완전 문제를 풀어야 한다는 것이 알려져 있다. 다른 한편 유한한 컴퓨터 자원으로 미분방정식을 풀기위해서 유한한 기저함수집합(basis set)을 구성하게 되는데 이 때문에 변분원리를 통해 얻어지는 해가 기저함수가 생성하는 공간 내부에 존재하게 되는 제약이 발생한다. 이 두 가지 오차를 동시에 해결하기 위해서는 많은 컴퓨팅 자원을 필요로 하기 때문에 각 오차에 해당하는 보정값 들을 계산하는 접근방법으로 제한된 계산 자원으로 더 높은 정확도를 얻었다. 언급한 두 가지 오차 외에도 spin-orbit coupling과 같은 다른 종류의 오차에 대한 보정항들을 추가시켜가면서 더 높은 에너지를 얻는 방법들도 제안된바 있다.

이러한 연구의 연장선상에서 기존의 낮은 수준의 계산결과의 오차값을 기계학습 모델을 통해 보정하기 위한 시도들은 2000년대 중반서부터 종종 있어왔다. (Balabin et al 2009; Sun et al 2014; Ramarkrishnan et al 2015) 기저함수에 따른 에너지변화 외삽처럼 이론적 엄밀성을 가지고 만들어 졌던 오류보정 방법이 신경망의 학습을 통해 얻어지게 된다. 원하는 정확도의 에너지와의 차이를 학습하는지 혹은 덜 정확한 제일원리결과를 인풋으로 넣는지에 따라 서로 다른 모델들이 보고되었지만, 두 형태 모두 낮은 수준의 계산결과를 활용해 높은 수준의 계산결과를 이끌어낸다는 점에서 차이가 없다.

초기 기계학습 활용연구에서 이와 같은 형태가 나타난 것은 화합물이 가지는 에너지의 스케일은 수~수백 Hartree 수준의 에너지인 반면 오류의 크기는 수~수십 kcal/mol수준으로 수 백배 작게 된다. 즉 대부분의 에너지 개형은 낮은 수준의 계산정확도라 하더라도 충분히 표현할 수 있다.[3] 따라서 낮은 수준의 계산결과를 활용하면 최종적으로 원하는 정확도 (보통은 1kcal/mol)수준의 정확도를 손쉽게 달성할 수 있기에 이런 방식의 연구가 많이 진행되었다.

(2) 해석

기존의 오차보정을 위한 방법은 어떤 요인들이 오차에 영향을 주고 있는지 파악하고 각 요소별로 교정하는 방식을 사용하였다면 기계학습을 통해서 오차의 원인이 아닌 전

3) 보통 상관에너지가 10%이상인 경우에는 highly correlated material이라고 따로 부를 정도로 일반적인 유기 화합물에서 등장하지 않기 때문에 상관에너지를 적게 포함하거나 아예 포함하고 있지 않다 하더라도 이미 충분히 좋은 수준의 시작점을 제공하고 있는 것이다.

체적인 에너지개형을 맞추기 위해 선택된 모델을 통해 모든 종류의 오차를 동시에 보정하는 함수를 모델을 통해 설정하게 된다. 이때 기존에 알려진 형태의 오차보정 함수를 사용하는 것이 아닌 오차의 통계적 분포를 고려하여 나타내는 방식으로 오류보정 값을 예측한다. 따라서 과거 연구들과 달리 어떤 물리적 근거에 의해서 오류보정 값이 계산되었는지 해석하는 것은 난해해진다.

2. Coulomb matrix를 활용한 연구

(1) 연구설명

2012년 기계학습을 활용한 양자화학 연구에 기념비적인 논문이 <Physical Review Letters>에 출판된다. (Rupp et al 2012) 논문에서는 화합물의 선형대수적 표현[4]으로 쿨롬행렬(Coulomb matrix)을 제안하고 화합물간의 거리를 쿨롬행렬의 차의 노름(norm)로 산정한다. 각 화합물간의 거리를 산정할 수 있게 되면 학습데이터와의 거리를 분석해 가까운 분자의 물성이 더 많은 비율의 유사도를 가지도록 하는 커널리지회기분석(kernel ridge regression)을 통해 분자의 물성(여기서는 원자화에너지)를 성공적으로 예측한 결과를 보고했다. 1절에서 소개한 논문들과 다른 점은 제일원리방법들 간의 차이가 아닌 간단한 방식으로 계의 에너지로 환원가능한 원자화에너지를 직접적으로 학습하는 것에 성공하였다는 점이다.[5] 논문에서는 깊은 인공신경망과 같은 최신 기계학습모델 없이도 분자의 원자화에너지를 반경험적 방법과 같은 기존의 방법에 비해 제일원리계산의 정확도에 가깝게 예측하는 것을 성공적으로 보여주었다.

과거에 사용하였던 분자 표현자가 아닌 새롭게 제안된 표현자인 쿨롬행렬은 요소값(M_{IJ})으로 아래와 같이 계산된 값을 가진다.

$$M_{IJ} = \begin{cases} \dfrac{Z_I^{2.4}}{2} & \text{for } I = J \\ \dfrac{Z_I Z_J}{\left|\overrightarrow{R_{IJ}}\right|} & otherwise \end{cases}$$

I, J는 계를 이루는 원자의 순서를 나타내는 수이며, Z_I는 I번째 원자의 원자번호 R_{IJ}는 I와 J번째 원자사이의 거리를 나타낸다. 쿨롬행렬의 각 요소들은 원자 혹은 원자 쌍이 가지는 에너지를 나타낸다. 대각항이 아닌 요소들은 단순한 원자핵들의 정전기전 반발력을 나타내며 대각항의 경우에는 원자가 가지는 에너지를 원자번호(Z)로 추세하여

4) 선형대수적 표현이란 표현하고자 하는 것을 컴퓨터가 인식할 수 있는 벡터 혹은 행렬형태로 나타내는 것을 말한다. 표현자(descriptor)라는 단어로 많이 사용된다.

5) 원자화에너지(atomization energy)를 알면 원자에 대한 제일원리계산 결과만 있으면 계의 내부에너지(internal energy)를 알아낼 수 있기 때문에 원자화에너지를 안다는 것은 계의 내부에너지를 안다는 것과 거의 유사한 표현으로 이해할 수 있다. 내부에너지는 진공상태의 전자가 가지는 에너지를 기준 에너지로 잡는 반면 원자화 에너지는 원자상태에 비해 얼만큼 안정화 되었는지를 나타내기 때문에 상대적으로 값의 분포가 더 좁게 나타난다.

얻은 결과이다. 이러한 형태는 화합물이 가지는 거리와 원자번호라는 이종정보(heterogenous information)을 에너지라는 하나의 단위로 통일 시켰을 뿐만 아니라 최종적으로 예측하고자 하는 물성(계의 원자화에너지)와 같은 물리적 단위를 가지게 함으로서 분자지문(molecular fingerprint)와 같이 화학 결합의 유무를 기반으로 해서 생성되는 표현자를 뛰어넘어 화합물을 표현하는 새로운 방법을 개척하였다. 이후 쿨롬행렬은 에너지뿐만 아니라 다른 물성을 예측하기 위한 기계학습 모델에서도 널리 사용되게 되었다.

하지만 쿨롬행렬은 화합물의 몇 가지 특성을 표현하지 못했다.

1) 크기확장성(size extensivity)

화합물이 가지는 물성은 화합물이 몇 개의 원자로 이루어져있는 지와 별개로 하나의 값을 가지게 된다. 하지만 쿨롬행렬의 차이는 같은 크기의 분자일 때만 정의할 수 있다. 이런 한계를 극복하기 위해서 모든 화합물을 가장 많은 원자를 포함한 화합물과 같은 크기로 만들어주기 위해 행렬에 0을 추가한다. 주어진 (최대 크기가 알려진) 데이터베이스의 경우 이런 방식의 학습이 가능하지만 학습한 데이터베이스보다 더 많은 원자로 구성된 화합물에 대해서 학습이 불가능해지게 된다.

2) 순서비의존성(permutation invariance)

분자를 행렬로 표현하기 위해서는 분자가 가지는 가상의 순서(I,J)가 존재하게 된다. 이 가상의 순서를 바꾸더라도(permutation) 화합물이 실제 바뀌는 것이 아니기 때문에 해당하는 물성은 바뀌지 않는다.(invariance) 반면 두 화합물 사이의 쿨롬행렬의 차이의 노름은 두 화합물중 하나의 순서가 바뀌면 다른 값을 가지게 된다. 특히 작은 분자일수록 의미 없이 추가된 값들(0)이 많이 생기게 되고 이 값들에 의해서 차이가 크게 바뀔 수 있다.

이러한 문제를 해결하기 위해서 여러 후속 연구들이 진행되게 되었다.(Montavon et al 2013) 특히 순서비의존성를 얻기 위해서 임의섞기, 고유값 계산등과 같은 기법들이 연구되면서 각 특성들이 가지는 통계적인 특징들에 대한 연구도 진척되었다.

(2) 해석

쿨롬행렬은 이후 연구에서도 분자를 표현하는 방식으로 널리 채택되게 된다. 분자 표현자로서의 쿨롬행렬을 설계하는데 있어서 고전적 상호작용(원자들간의 정전기적 반발력)이 사용되었지만 그렇다고 쿨롬행렬이 가지는 물리적 의미를 명확하게 정의할 수 있는 것도 아니다. 논문에서도 원자들이 느끼는 에너지를 나타내기 위해 선택된 표현자라는 점을 말하고 있지만 쿨롬행렬이 어떤 물리적 개념과 연결되는지에 대한 설명 없이 표현자로서 성공적인 역할을 수행했다는 점을 강조하고 있다. 즉 에너지를 어떤 함수로 나타내는데 성공했지만, 함수의 인자가 어떤 물리량인지는 명확하지 않은 채로 남아있는 것이다.

2. Deep Tensor Neural Network(DTNN)

(1) 연구설명

Deep Tensor Neural Network(DTNN)는 화합물이 가지는 정보의 본래적 형태인 그래프 형태를 활용해 크기확장성 및 순서비의존성을 성공적으로 확보한 모델이다.(Schütt et al 2017) DTNN 모델의 값을 구하는 과정은 제일원리계산 과정과 상당히 유사한 과정을 거치게 된다. 각 원자들은 난수를 기본값으로 하여 상호작용 패스(interaction pass)라는 과정을 거치면서 난수가 수정되어나간다. 이 과정에서는 원자들이 가진 값들(c)을 수정하는 값을 계산하게 되는데 수정 값은 모든 원자쌍으로부터 값의 합으로 정의된다.

$$\sum_{j \neq i} v_{ij} = \sum_{i \neq j} \tanh[W^{fc}((W^{cf} c_j + b^{f_1}) \circ (W^{df} d_{ij} + b^{f2}))]$$

v_{ij}는 i번째 원자에 j번째 원자가 미치는 상호작용을 나타내며 이는 $W^{fc}, W^{cf}, W^{df}, b^{f_1}, b^{f_2}$의 파라메터와 j번째 원자가 가지는 값(c_j)과 i번째 원자와 j번째 원자 사이의 거리를 나타내는 값(d_{ij})에 의해 결정된다.[6] 상호작용 패스를 거침에 따라서 난수들로 시작한 원자들이 가진 값들이 보정될 뿐만아니라 이에 상응하는 상호작용의 크기도 위 식에 의해 변하게 된다. 상호작용 패스라고 불리는 과정을 일정수 만큼 거치고 난후 각 원자들이 가지는 값들의 합에 의해 최종적인 에너지 값이 결정된다.

학습데이터베이스 내의 최다원자 화합물보다 더 큰 화합물이 들어온다 하더라도 결국 에너지는 각 원자의 기여도를 합한 값을 통해 얻어지기 때문에 기존 쿨롬행렬 기반의 연구보다 체계적으로 크기확장성을 확보했다. 뿐만 아니라 원자들이 가지는 순서를 임의로 바꾼다 하더라도 결국 모든 원자 쌍으로부터 오는 상호작용의 합($\sum_{j \neq i} v_{ij}$)만을 고려하기 때문에 몇 개의 순서에 상관없이 같은 값을 가지게 된다. 이전에도 그래프 형태의 데이터를 처리하기 위한 기계학습 알고리즘이 알려져 있었다. 하지만 화학분야에서 널리 사용되지 않고 있었으나 DTNN 제안 이후 많은 연구들이 그래프를 기반 해서 화합물의 물성을 예측하려는 시도들이 이뤄졌다.

(2) 해석

DTNN 모델에서 에너지를 예측하는 과정은 동일한 연산을 반복적으로 수행해 수렴된 값을 사용한다는 점에서 자기모순없는장(self-consistent field, SCF)을 찾아가는 일반적인 양자화학 계산과 유사하다. SCF 방법은 다전자계의 파동함수를 얻기 위한 전략으로 계의 헤밀토니안을 직접적으로 알 수 없기 때문에 낮은 수준에서 얻어진 파동함수를 이용해 헤밀토니안을 만들고 만들어진 헤밀토니안을 통해서 다시 파동함수를 구하는 방식의

---

6) $W^{fc}, W^{cf}, W^{df}, b^{f_1}, b^{f_2}$ 의 위 첨자는 각 파라메터가 가지는 차원에 연관이 있다. W^{fc}는 $f \times c$의 차원을 가지는 식이다. 학습과정을 통해서 $W^{fc}, W^{cf}, W^{df}, b^{f_1}, b^{f_2}$을 결정한다. 여기서 d_{ij}은 단순 거리가 아닌 거리의 가우시안커널을 취해서 얻은 값이다. (DTNN 논문의 식5를 참고)

반복을 계속하면서 더 이상 헤밀토니안 또는 파동함수가 변하지 않는 지점을 찾아가는 과정이다. 하트리-폭(Hartree-Fock)방법이나 밀도범함수이론에서 사용되는 방법이다. 그럼에도 불구하고 상호작용 패스가 어떤 방식으로 원자화에너지를 예측하기 위한 물리적 상호작용을 반영하는지 명확하지 않다.

DTNN의 모델에서는 기존 연구와 다르게 화합물의 에너지를 예측하는데 있어서 크기확장성을 확보하기 위해서 각 원자들이 가지는 기여도를 계산하고 이를 합해서 에너지를 예측하게 된다. 양자화학에서도 이론적인 접근을 통해서 화합물 내부의 원자가 가지는 에너지를 얻어내기 위해 수십년동안 노력해왔다. 이러한 접근을 하려는 주된 이유는 화학적으로 중요하다고 알려진 부분에 대해서만 높은 수준의 계산을 수행하여 전체적인 계산량을 크게 늘리지 않으면서도 계의 화학적 변화를 높은 수준의 정확도로 알아내고자 하는 시도들이다. 이런 작업들이 이론적으로 어려운 이유는 부분의 (혹은 원자가 가지는) 에너지라는 값이 관측 가능한 변수가 아니기 때문이다. 양자수준의 상호작용은 비국소적(non-local)하며 이러한 상호작용으로 인해 일정 부분이 주는 영향력을 따로 떼어내어 계량하는 것은 어려운 일이다. 하지만 DTNN에서는 원자들이 가지는 기여도를 계산해 합하는 방식으로 원자화 에너지를 말하게 되는데 이 값들의 물리적 의미를 해석할 수 있는지에 대해서 여전히 확답을 내릴 수 없다. 원자들의 기여도를 계산해 합하는 방식은 이후 연구에서도 널리 사용되며 크기확장성을 확보하기 위한 기본적인 전략으로 널리 사용되고 있지만, 물리적인 단단한 기반을 확보한 것은 아니다.

4. 기계학습을 통한 역장학습

(1) 연구 설명

플로리다 대학 연구진들에 의해 개발된 ANI-1 역장은 기존의 역장이 가지는 정확도를 뛰어넘어 제일원리방법론이 가지는 정확도 수준을 분자역할을 통해 성공적으로 얻어내었다. (Smith, Isayev, & Roitberg, 2017a) ANI-1이 나오기 이전부터 역장을 제일원리에서 주는 수준의 정확도를 확보하기 위한 여러 노력들이 있었다.(Lorenz, et al, 2006; No, et al, 1997) 특히 결합해리(bond dissociation)과 같이 기존의 역장이 설명할 수 없던 양자수준의 현상을 모사하기 위해 이러한 방법을 사용하였으나 파라메터를 구하는 과정에서 사용되는 제일원리계산이 화학환경에서만 구해졌기 때문에 다른 시스템에서 사용 가능하기 어려웠다. 특히나 분자역학의 가장 큰 활용처인 고분자, 단백질과 같은 시스템을 계산하기 위해서는 화학종이 다르거나 다른 수의 원자수를 가지는 시스템에 대한 계산이 되어야 한다. 이를 위해서는 주어진 화학환경 상에서의 개별 원자의 에너지를 추론할 수 있어야 한다. 이를 위해서는 시스템의 전체 에너지로부터 각 개별 원자의 에너지를 얻어내는 과정이 필요한데, 이러한 과정 없이 시스템의 전체 에너지를 추론하는 방식의 기계학습 모델은 학습에 사용된 계의 구조 이성질체의 에너지만 계산할 수 있다는 한계를 가지고 있었기에 널리 사용되지 못했다.

2007년 출판된 Behler 와 Parrinello는 의 연구는 ANI-1의 연구의 초석과 같은 역할을 했다. (Behler, & Parrinello 2007) 여기서는 다루는 화합물이 고체물리에서 많이 사용하

는 벌크 실리콘 (bulk silicon)이라는 점이 달랐지만 기본적인 기계학습 모델은 ANI-1에서 사용되는 모델과 유사하다. 원자들의 상대적인 거리와 각도를 표현하는 함수를 이용해 각 원자의 화학환경을 표현하는 벡터를 구하고 이를 인공신경망의 인풋으로 사용해서 해당 원자의 에너지를 구한다. 구해진 원자 에너지의 합을 계의 에너지로 다루어 제일원리계산에서 나온 에너지와의 차이를 최소화 하는 방식으로 인공신경망의 파라메터를 최적화 했다.

이러한 연구방법론을 따라서 ANI-1은 기존에 출판되어있던 QM9 데이터베이스 외에도 normal mode sampling을 통해 자체적으로 구축해 출판한 데이터베이스에 포함된 대량의 제일원리계산(~17.2M)을 학습에 사용하였다. (Smith, Isayev, & Roitberg, 2017a) 새로운 방식으로 얻어진 다양한 유기물의 구조를 통해서 분자동력학에 사용할 수 있는 PES(Potential energy surface)까지 성공적으로 예측하는데 성공하였다. 논문이 나온 시점까지 제일원리계산에 대해서 1M개 이상의 데이터베이스를 보고된 바가 없다는 사실을 고려한다면 파격적인 수의 제일원리계산 결과를 활용한 사례이다.

기존의 분자역학에서 사용하는 역장을 사용하기 때문에 1절에서 살펴본 것과 같은 순서비의존성(permutation invariance)이나 크기확장성(size extensivity)을 동시에 만족할 수 있다. 하지만 역장이 가지는 표현의 한계를 그대로 가지고 있어서 학습에 사용되지 않은 원소에 대한 예측이 불가능 하다는 단점을 가지고 있다.

(2) 해석

역장을 구성할 때 사용되는 각각의 항들은 원자간 상호작용중 하나의 형태를 표현하기 위해서 얻어진 수식으로 표현된다. 원자간의 반발력 분극도(polarizability)와 같이 물리적으로 이해되는 각각의 항들을 표현하기 위해서 각 힘이 어떠한 경향성을 가지는지를 모델링 하여 표현하게 된다. 따라서 각각의 효과들이 어떤 물리적 특성을 만들어내는지에 대한 의미를 해석할 수 있게 된다. 반면 기계학습을 통해 얻어진 역장의 경우 어떤 물리적 힘들이 얼마만큼 작용하고 있는지 명확하게 규명하는 것이 불가능하다. 기계학습으로 얻어진 역장은 기존의 화학환경과 비슷한 화학환경 상에 존재하는 원자는 기존의 얻어진 포텐셜과 힘을 닮을 것이라는 전재에 기반 해서 구해진다.

Ⅲ 철학적 함의

앞에서 기계학습을 활용해 제일원리 계산의 정확도의 예측을 얻으려고 하는 네가지 형태의 연구에 대해서 살펴보았다. 기계학습의 여러 기술적인 방법들을 관통하는 하나의 기본적인 전략은 파라메터에 따라서 다양한 상관관계를 표현할 수 있는 비선형함수를 설정하고 학습데이터를 통해 적합한 파라메터를 학습함으로서 주어진 화합물과 물성과의 상관관계를 잘 표현할 수 있도록 하는 것이다. 이는 철저히 경험적으로 화합물의 구조와 물성들간의 관계(법칙)을 얻어낸다는 점에서 기존의 과학연구와 흡사한 점이 존재한다. 얻어진 결과(모델을 통해 얻어진 경험법칙)은 컴퓨터가 아니고서는 절대로 계산

할 수 없을 정도로 복잡한 형태를 가지게 되고 이는 각 인자에 대한 해석을 거의 불가능하게 만들고 있다. 기계학습에서 사용되는 작게는 수만 많게는 수십만개의 경험적으로 얻은 파라메터들이 각각 어떤 효과 혹은 상호작용을 나타내고 있는지에 대해서 이해하기는 사실상 불가능에 가깝다.

과학이 발전함에 따라서 과거에 우리가 신봉했던 과학법칙이 가지는 특징들이 변하기도 한다. 한가지 예로 통계역학과 양자역학의 법칙은 과학법칙이 모든 개별자들에 대해 모두 적용가능하지 않고 통계적인 형태로 된다는 사실을 우리에게 알려주었다. 이 과정에서 과학에 대한 자연에 대한 우리의 이해는 과거와는 분명하게 달라졌다. 이와 같이 물리적으로 해석불가능한 형태를 지니는 법칙이 존재할 수 있다는 사실은 우리에게 새로운 도전을 준다.

예측능력에만 초점을 맞추어 생각해본다면 물리적으로 해석불가능한(혹은 난해한) 형태를 지니는 법칙 역시 기존 자연 법칙들과 큰 차이가 없을 수 있다. 과학법칙은 예측뿐만 아니라 과학자체를 구성하는 주요한 요소로서 가지는 의미가 있기 때문에 이 점에 대해 살펴볼 필요가 있다. 과학법칙은 예측을 위한 수단일 뿐만 아니라 과학법칙들은 서로 다른 영역에서 얻어진 서로 다른 형태의 지식체계를 연결해주어 관념의 실재를 지지하는 탄탄한 기반이 된다. 한 가지 예로 역학에서의 가속도의 법칙 (F=ma)에서의 질량(m)은 전혀 다른 과학영역인 화학의 기본 법칙인 질량 보존법칙과 연결된다. 이렇게 그물망처럼 얽혀있는 과학법칙들이 만들어 주는 정합성과 예측능력은 no miracle argument로 알려진 철학적 명제에 따라 과학체계의 실재성을 지지하게 된다.[7)]

케플러 법칙이 발견된 이후 뉴턴역학을 통해서 완전히 설명되기까지 상당한 시일이 걸렸다는 것을 기억하는 사람들은 경험을 토대로 얻어진 기계학습 모델들이 더 많은 과학적 지식들을 통해서 차후에 과학적으로 설명되어질 수 있다고 믿을 수도 있다. 또는 과학법칙은 자연법칙의 근사일 뿐이라는 것에 주목하고 있는 사람들은 기계학습 모델의 꾸준한 발전을 통해서 언젠가 과학적인 방식으로 이해될 수 있는 모델이 등장할 것이라는 믿음을 가지고 있을 수도 있다. 기계학습 활용연구를 포함한 데이터기반 연구패러다임은 안타깝게도 앞서 언급한 두 가지 믿음에 대해서 불가지론적 입장을 넘어 무관심한 태도를 취하고 있다는 사실을 주목해야한다. DTNN 모델을 제안한 논문을 리뷰한 3명의 리뷰어중 아무도 원자들의 기여도가 가지는 물리적인 함의에 대해서 지적하지 않았다는 점을 상기해 볼 필요가 있다.[8)] 현상을 설명하기 위한 인과의 사슬 중간에 전재되거나 나타나는 관념들에 대한 관심이 줄어들고 있다.

많은 과학적 현상에 대해서 인과의 사슬을 규명하는 것은 과학의 근본적인 동인이었다. 하지만 데이터기반 과학 연구가 가지는 특징은 물리적으로 규명할 수 없는 형태를 지닌 요소들 (모델 혹은 모델 안의 파라메터 혹은 모델의 인풋값들)을 가지고 있음에도

7) no miracle argument 는 높은 정합성과 예측능력을 가지는 과학이론이 사실이거나 적어도 사실에 가깝다는 것을 부정하기 위한 유일한 방법은 기적을 믿는 일이라고 비꼬며 과학적 실재론을 지지하는 명제이다.

8) 본 발표에서 언급한 논문 중 DTNN모델을 다룬 논문만 리뷰과정이 공개 되어있다.

그것의 통계적인 상관관계에만 관심을 가질뿐 인과적 해석에 대해서 (상대적으로) 무관심하다는 점이다. 이러한 과학자들의 태도는 과학적 실재론의 가장 큰 지지자이었으며 가장 큰 증거를 제시하던 과학 그 자체가 과학적 실재론과 거리가 생기고 있음을 보여준다.

IV 결론

기계학습을 활용한 연구로 대표되는 데이터기반 연구방법론은 과학에서 더 이상 특이한 몇몇 방식이 아닌 하나의 연구패러다임으로 자리잡아가고 있다. 특히나 과거와 달리 경성과학으로 불리는 분야에서도 몇몇 탁월한 성과들을 보여주고 있다. 본 발표에서 살펴본 양자화학 분야의 최신 기계학습 모델은 철저하게 양자물리학에 기반하여 수행되던 제일원리계산을 모든 부분은 아닐지라도 상당히 많은 부분에 대한 대체 가능성에 대해서 긍정적인 답변을 주고 있다. 이에 따라 물리적인 기반을 가지지 못하지만 높은 예측성을 보여주고 있는 이 기계학습 모델에 대한 철학적인 해석을 더 이상 유보할 수 없게 되고 있다.

본 발표에서는 최근 제안된 제일원리수준의 에너지를 계산해주는 여러 기계학습 모델들을 살펴보면서 이들이 가지는 공통적인 특징 – 기존의 물리학으로 해석될 수 없는 항들의 존재 – 가 공통적으로 나타나고 있음을 파악하였다. 이러한 현상은 기계학습 활용 연구를 통해 생성되는 과학법칙을 기존의 과학법칙들의 그물망으로부터 다소 벗어나는 형태로 만들게 된다. 이러한 연구는 궁극적으로 과학적 실재에 대한 지지를 약화시킬 수 있는 함의를 가지고 있다는 점에 대해서 살펴보았다.

기계학습을 포함한 인공지능 분야의 혁신은 점점 더 빨라지고 있다. 그렇기에 우리는 여기서 모든 결론을 내릴 수 있지 않다는 점을 인정해야만 한다. 앞으로 인공지능은 연구를 포함한 사회 전반에 새로운 영향력을 끼치게 될 것이다. 인류는 경제, 환경, 국방 등 전 사회적 이슈들에 있어서 인공지능이 어떤 영향력을 가지게 될지 끊임없이 고민해나가고 있다. 이러한 고민가운데 과학연구 분야에 있어서도 향후 어떤 변화가 있을지 꾸준하게 주목하고 철학적 함의에 대해서 생각해보는 것이 필요하리라 생각한다.

참고문헌

Balabin, R. M., Lomakina, E. I., Balabin, R. M., & Lomakina, E. I. (2009). Neural network approach to quantum-chemistry data : Accurate prediction of density functional theory energies Neural network approach to quantum-chemistry data : Accurate prediction. The Journal of Chemical Physics, 131(7), 074104.

Behler, J., & Parrinello M. (2007) Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces. Physical Review Letters, 98, 146401

Curtiss, L. A., Raghavachari, K., Trucks, G. W., & Pople, J. A. (1991). Gaussian-2 theory for molecular energies of first- and second-row compounds. The Journal

of Chemical Physics, 94(11), 7221

Curtiss, L. A., Raghavachari, K., Redfern, P. C., Rassolov, V., & Pople, J. A. (1998). Gaussian-3 (G3) theory for molecules containing first and second-row atoms. The Journal of Chemical Physics, 109(18), 7764.

Curtiss, L. A., Redfern, P. C., & Raghavachari, K. (2007). Gaussian-4 theory. Journal of Chemical Physics, 126(8). 084108

Lorenz, S., Scheffler, M., &Gross, A. (2006). Descriptions of surface chemical reactions using a neural network representation of the potential-energy surface. Physical Review B, 73(11), 115431.

Montavon, G., Rupp, M., Gobre, V., Vazquez-Mayagoitia, A., Hansen, K., Tkatchenko, A., Müller, K.-R., & von Lilienfeld, O. A. (2013). Machine learning of molecular electronic properties in chemical compound space. New Journal of Physics, 15(9), 095003.

No, K. T., Chang, B. H., &Kim, S. Y., Jhon, M. S., & Scheraga, H.A. (1997). Description of the potential energy surface of the water dimer with an artificial neural network. Chemical Physics Letters, 2614, 152–156.

Okasha, S. (2002). Philosophy of science: A very short introduction. Oxford: Oxford University Press.

Pigliucci M., (2010) Nonsense on Stilts: How to Tell Science from Bunk 노태복 역 (2012)『이것은 과학이 아니다』서울: 부키

Schütt, K. T., Arbabzadah, F., Chmiela, S., Müller, K. R., &Tkatchenko, A. (2017). Quantum-chemical insights from deep tensor neural networks. Nature Communications, 8, 6–13.

Smith, J. S., Isayev, O., &Roitberg, A. E. (2017). ANI-1: an extensible neural network potential with DFT accuracy at force field computational cost. Chemical Science, 8(4), 3192–3203.

Smith, J. S., Isayev, O., &Roitberg, A. E. (2017). Data Descriptor: ANI-1, A data set of 20 million calculated off-equilibrium conformations for organic molecules. Scientific Data, 4, 1–8.

Sun, J., Wu, J., Song, T., Hu, L., Shan, K., & Chen, G. (2014). Alternative Approach to Chemical Accuracy: A Neural Networks- Based First-Principles Method for Heat of Formation of Molecules Made of H, C, N, O, F, S, and Cl. Journal of Physical Chemistry A, 118(39), 9120–9131.

Ramakrishnan, R., Dral, P. O., Rupp, M., &Von Lilienfeld, O. A. (2015). Big data meets quantum chemistry approximations: The Δ-machine learning approach. Journal of Chemical Theory and Computation, 11(5), 2087–2096.

Rupp, M., Tkatchenko, A., Müller, K.-R., &von Lilienfeld, O. A. (2012). Fast and Accurate Modeling of Molecular Atomization Energies with Machine Learning. Physical Review Letters, 108(5), 058301.