



Agentic AI for Materials Discovery: From Models to Closed-Loop Experimentation

박찬영

Associate Professor, KAIST

Industrial and Systems Engineering
Graduate School of Data Science
Graduate School of AI

cy.park@kaist.ac.kr

Outline

- 1. AI for Science 동향
 - AlphaFold 이후의 방향 전환, 투자, 정부 정책
- 2. 자율 실험실의 부상
 - 근본적 소재 병목 현상과 AI for Materials 스타트업
- 3. LLM 활용의 3가지 패러다임
 - Agentic Orchestration / LLM-guided Evolution / Post-training
- 4. 핵심 Takeaways

AI for Science: 병목이 아이디어에서 검증으로 이동

- 예전에는 좋은 가설이 희소 자원이었음. 실험은 느렸지만 검증할 아이디어도 적었음
- 지금은 생성 모델이 하루에 수백만 개의 후보를 뽑아내지만, 합성해서 확인하는 속도는 그대로
 - 쌓이는 것은 검증되지 않은 후보 목록
 - 논문에 실리는 수치는 대부분 예측값이지 측정값이 아님
- 즉, 병목이 아이디어에서 검증으로 이동
- 경쟁의 무대도 '더 좋은 모델'에서 '더 빠른 실험 루프'로 이동하는 중

왜 소재인가: 소재는 반도체·에너지·방산의 공통 병목이다

- 오늘의 큰 기술 문제들은 대부분 소재 문제로 환원됨
 - 반도체 — 발열과 미세화의 한계. 새로운 유전체, 배선, 패키징 소재가 없으면 다음 노드가 없음
 - 에너지 — 배터리, 고체 전해질, 촉매, 태양광 흡수체. 성능의 상한이 소재에서 결정됨
 - 항공 / 방산 — 극초음속 비행에 견디는 고엔트로피 합금, 경량 구조재
 - 탄소 / 환경 — CO₂를 선택적으로 붙잡는 흡착 소재, PFAS 처리
- 공통점: 문제를 푸는 방법을 모르는 게 아니라, 그 성능을 내는 소재가 존재하지 않음
- 그런데 새 소재 하나를 개발하는 데는 여전히 10~20년이 걸림

그렇다면 AI는 이 10~20년의 소재 개발 주기를 어떻게 줄일 수 있을까?

신호 1: 전용 과학 모델에서 범용 scientific agent로 이동 중

- Google DeepMind가 AlphaFold 전담팀을 사실상 해체
 - 연구 인력을 Gemini, AI 코딩, 효소 설계, 유전체학 등으로 재배치
 - 노벨상을 받은 간판 프로젝트조차 독립 조직으로 유지하지 않는 선택
- AI for Science의 중심이 개별 전용 모델에서 범용 scientific agent로 이동
 - AlphaFold, GNoME 같은 성과는 '완성'이 아니라 부품이 됨
 - 소재 분야도 같은 경로를 밟는 중

Google DeepMind dismantles Nobel-winning AlphaFold team in strategy shift

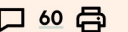
Landmark project that solved protein folding gives way to a wider race to build AI systems for scientific discovery



DeepMind chief executive Demis Hassabis, left, and director John Jumper won a Nobel Prize in 2024 for their work using AI to predict the three-dimensional structure of proteins © Alastair Grant/AP

Madhumita Murgia in London

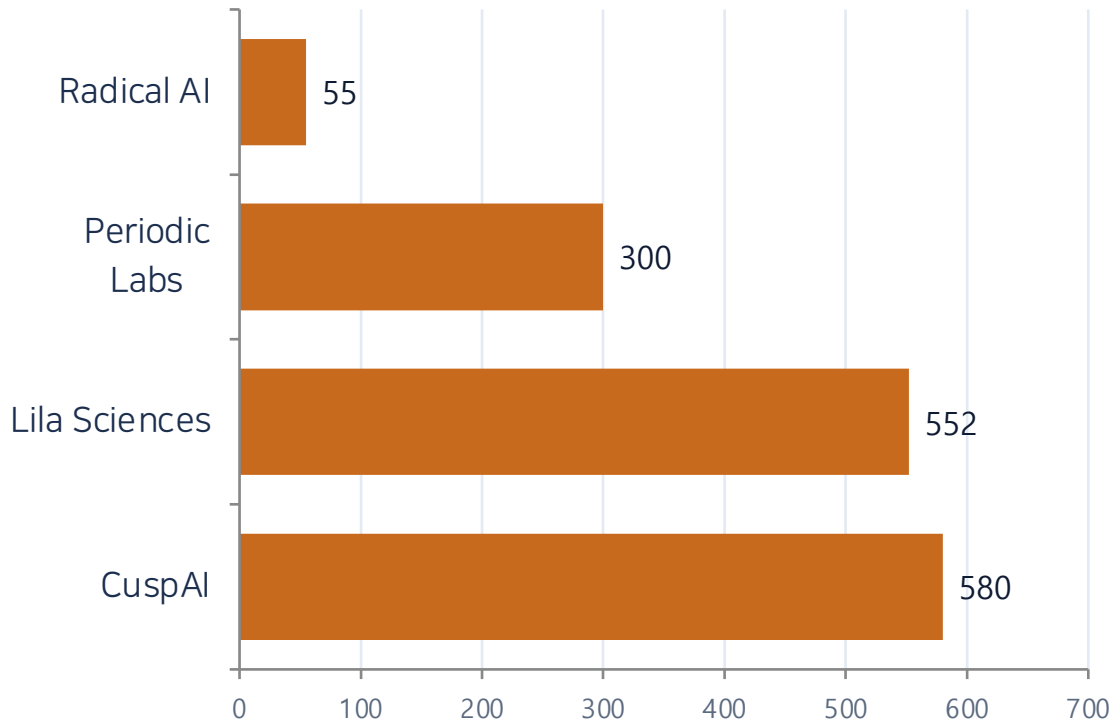
Published JUL 29 2026



출처: <https://www.ft.com/content/61b2953d-ee0d-45de-af6e-a9c1cf524b33?syn-25a6b1a6=1>

신호 2: 자본은 '모델'에서 '실험·검증 루프'로 확장되고 있다

AI for Materials 스타트업 누적 조달액 (백만 달러)



- 2년 사이에 소재 스타트업 네 곳이 약 \$15억을 조달
- CuspAI — 계산·시뮬레이션 + 파트너 검증
- Lila Sciences — 범용 자율 실험실
- Periodic Labs — 모델 + 자체 자율 실험실
- Radical AI — 금속 소재 자율 실험실
- 공통 방향 → 실험·검증·데이터 생성 루프까지 확보

출처: TechCrunch, Forbes, SiliconANGLE, Tracxn (2026년 8월). 진행 중인 라운드는 보도 기준.

신호 3: 정부도 자율 실험실을 인프라로 취급

- 미국: DOE Genesis Mission (2026, Department of Energy)
 - 10년 내 미국 과학의 생산성 두 배
 - 슈퍼컴퓨터 / AI / 양자 / 국립연구소 장비를 하나의 발견 플랫폼으로 통합
 - 자율 실험실이 핵심 과제 중 하나이며, Lila Sciences와 Radical AI가 파트너로 참여
- 영국: AI for Science 전략
 - CuspAI를 frontier AI 기업으로 지정하고 국가 컴퓨팅 인프라 접근권 부여
- 한국: K-문샷 프로젝트 (2026, 과기정통부)
 - AI로 2030년까지 연구 생산성 2배, 2035년까지 8대 분야 12대 국가 미션 해결
 - 12대 미션에 소재(희토류 리스크 제로화)와 AI 과학자(2035년 완전 자율형 과학적 발견)가 나란히 포함
 - 바이오 · 소재를 우선으로 24시간 자율실험실 구축, 슈퍼컴 6호기 등에서 GPU 8천 장 이상을 과학기술 AI 전용으로 배정
- 자율 실험실은 원래 국립연구소(LBNL / Argonne / ORNL)가 개척한 영역
 - 이제 스타트업이 대규모 자본을 들고 그 영역을 이어받는 구도
 - 민간 자본이 들어오면 다음 병목은 데이터 소유권이 됨



DOE Genesis Mission

Energy Department Announces 26 Genesis Mission Science and Technology Challenges to Accelerate AI-Enabled American Innovation and Leadership

The U.S. Department of Energy today announced 26 science and technology challenges of national importance to advance the Genesis

WASHINGTON—The U.S. Department of Energy (DOE) today announced 26 science and technology challenges of national importance to advance the Genesis Mission and accelerate innovation and discovery through artificial intelligence (AI).

Building on President Trump's Executive Orders [Launching The Genesis Mission](#) and [Removing Barriers to American Leadership In Artificial Intelligence](#), the challenges span DOE's discovery science, energy, and national security missions. Each was selected for its potential to deliver measurable benefits for the American people and to accelerate advancements through the Genesis Mission's AI platforms, world-class facilities, and public-private partnerships.

"These challenges represent a bold step toward a future where science moves at the speed of imagination because of AI. It's a game-changer for science, energy, and national security," said DOE Under Secretary for Science and Genesis Mission Lead Dr. Dario Gil. "By uniting the U.S. Government's unparalleled data resources and DOE's experimental facilities with cutting-edge AI, we can unlock

"AI 덕분에 과학이 상상하는 속도만큼 빠르게 발전하는 미래로 나아가는 과감한 첫걸음이다. 과학과 에너지, 국가안보 분야의 판을 뒤바꿀 것"

deliver science and technology breakthroughs that will benefit the American people," said Assistant to the President and Director of The White House Office of Science and Technology Policy Michael Kratsios. "We look forward to expanding the list of challenges across Federal agencies to bring even greater impact to the Mission."



Dario Gil
(과학 담당 차관 및 제네시스 미션 총괄책임자)

번호	주요 도전 과제 (Challenge Area)
1	첨단 제조 및 산업 생산성 재구상
2	건물 건설 및 운영의 재창조
3	생명공학 혁신의 확장
4	미국 핵심 광물 공급망 확보
5	더 빠르고 안전하며 저렴한 원자력 에너지 공급
6	핵융합 에너지 공급 가속화
7	핵 폐기물 정화 및 복구 혁신
8	AI를 활용한 양자 알고리즘 발견
9	발견을 위한 양자 시스템 실현
10	미국 내 마이크로일렉트로닉스 재중심화
11	데이터 센터 부문 미국의 리더십 확보
12	전략적 억제력을 위한 재료 발견·생산·검증 가속화
13	AI 기반 자율 연구소 실현
14	예측 가능한 기능을 갖춘 재료 설계
15	발견을 위한 입자 가속기 성능 향상
16	쿼크에서 우주까지의 물리학 통합
17	에너지 생산을 위한 수자원 예측
18	미국 경제 동력을 위한 전력망 확장
19	지하 전략 에너지 자원의 활용
20	위험 평가, 대비 및 대응 가속화
21	미국의 역사적 핵 데이터 및 연구 활용
22	핵 연구 시설의 실험 역량 증대
23	핵 억제력을 위한 설계 및 생산 운영 통합
24	확산 위협으로부터 핵물질 보호
25	핵 기업의 생산 간소화, 규제 철폐 및 안전 확보
26	핵 및 방사능 서명 귀속을 통한 억제력 강화

美 제네시스 미션에 맞서 'K-문샷'

국가 과학난제 미션 도출

AI로 과학난제 해결, 과학기술로 AI 한계를 돌파



신약 x AI

AI 융합으로 신약개발속도
10배 이상 증가



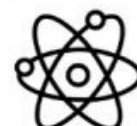
BCI x AI

사람의 신체·인지능력 증강을
위한 뇌 임플란트 상용화



원자력 x AI

2050년 해양수송 탈탄소화를 위한
친환경 SMR 선박 조기 실현



핵융합 x AI

한국형 핵융합 소형 실증로
개발 및 전력생산 실증



태양전지 x AI

보급형 초고효율 다중접합 태양광
모듈 개발로 글로벌 시장 선점



휴머노이드

미래의 동반자, 휴머노이드와 함께
성장하는 공존사회



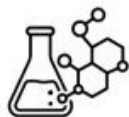
피지컬AI 범용모델

범용 피지컬 AI 모델·컴퓨팅
플랫폼 내재화



우주 x AI

우주 데이터센터 핵심·
원천기술 확보



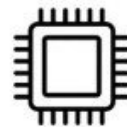
소재 x AI

희토류 완전 안심국가 실현



AI과학자

세계 최고 수준의 AI 과학자 개발



반도체 x AI

초지능 인공지능(ASI)을 위한
초고성능·저전력 AI 가속기 구현



양자 x AI

오류정정 양자컴퓨터 개발 및
산업 난제 해결

Outline

- 1. AI for Science 동향

- AlphaFold 이후의 방향 전환, 투자, 정부 정책

- 2. 자율 실험실의 부상

- 근본적 소재 병목 현상과 AI for Materials 스타트업

- 3. LLM 활용의 3가지 패러다임

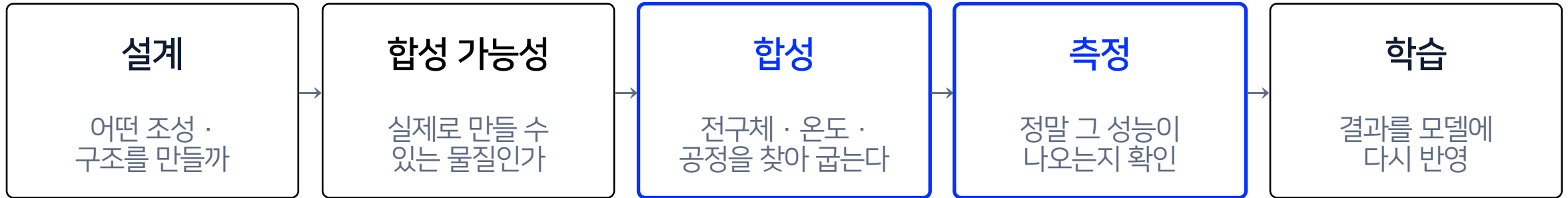
- Agentic Orchestration / LLM-guided Evolution / Post-training

- 4. 핵심 Takeaways

소재 개발 파이프라인과 병목의 이동

후보 생성 이후가 병목이다

느리고, 비싸고, 데이터가 거의 남지 않는 구간



속도 병목

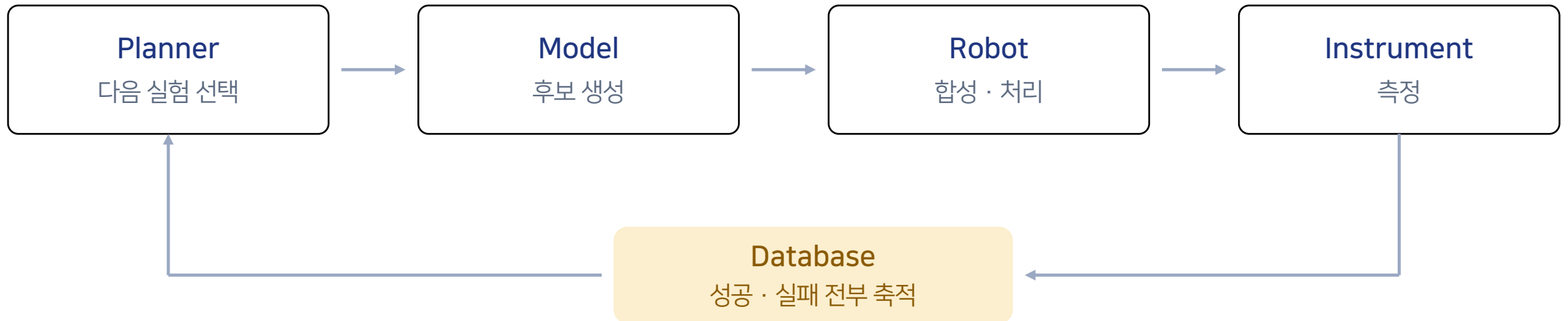
- 3,4단계가 사람 손에 묶여 있어, 후보를 아무리 많이 만들어도 확인할 수가 없음

데이터 병목

- 논문에는 성공한 합성만 실림. 실패 데이터가 없으니 모델이 '안 되는 이유'를 배우지 못함

실험이 데이터를 만들고, 데이터가 다음 실험을 정한다

- 실험 결과가 다시 학습 데이터가 되는 **선순환 구조**



루프가 한 바퀴 돌 때마다 다음 실험이 더 좋아진다 — 데이터는 남고, 모델은 갱신된다

실패 데이터가 더 희소하다

논문에는 성공한 합성만 실린다.
안 되는 이유는 어디에도 남지 않는다.

실험 조건과 결과가 구조화되어야 한다

공정 조건과 측정 결과가 연결된 형태로
저장되어야 모델이 바로 학습할 수 있다.

throughput이 곧 데이터 생성 속도

하루에 몇 번 도느냐가
선순환의 회전 속도를 결정한다.

주요 기업 개관



- CuspAI만 계산 쪽에서 출발했고, 검증은 파트너 실험실에 의존
- 출발점은 다르지만 결국 같은 곳으로 수렴. 자기 실험 데이터를 만들어내는 닫힌 루프

CuspAI (2024, 케임브리지)



■ "소재를 위한 검색 엔진" — 계산 · 시뮬레이션 플랫폼, 검증은 파트너 실험실

■ 사람

- 창업자는 Chad Edwards와 Max Welling (전 Microsoft Research VP, 암스테르담대 교수, GCN, VAE 창시자)
- 자문진에 Geoffrey Hinton, Materials Project를 이끄는 Kristin Persson 등

■ 루프

- 플랫폼 MIRA — Meta가 공개한 UMA와 자체 개발 kUPS를 결합한 계산 파이프라인
- 네 기업 중 유일하게 물리 실험실을 갖지 않음 — 검증은 파트너 실험실에 의존
- 대신 일부 학계 데이터셋의 AI 학습 독점권을 매입해 학습 데이터를 확보

■ 첫 타깃과 검증 상태

- 반도체 소재 — 2026년 연구 역량의 약 80%를 투입
- AI Materials Foundry — Nvidia, Meta, 현대차그룹 등 48개 이상이 참여, 고객사가 곧 검증 채널



Welling / Edwards

Periodic Labs (2025, 샌프란시스코)



■ "AI 과학자를 만들고, 그 과학자가 쓸 실험실을 함께 짓는다"

■ 사람

- Liam Fedus — 전 OpenAI 연구 부사장, ChatGPT 핵심 개발자
- Ekin Doğuş Çubuk — 전 Google Brain / DeepMind, 신규 결정 구조 200만 개를 발견한 GNoME 주도



Çubuk / Fedus

■ 루프

- 모델이 제안 → 로봇이 합성 → 장비가 측정 → 플래너가 개선되는 전 구간을 자체 구축
- 하루 수천 건 실험을 목표로, 그 과정에서 나오는 데이터를 전부 소유
- 특히 논문에 실리지 않는 실패 실험 데이터를 해자로 봄

■ 첫 타깃과 검증 상태

- 기존보다 성능이 좋고 에너지를 덜 쓰는 신규 초전도체
- 설립 1년차 — 실험 루프가 아직 구축 단계이며 공개된 소재 성과는 없음

이들 기업의 공통 패턴

- 선순환 구조를 산업 규모로: 제안 → 합성 → 측정 → 학습을 사람 손을 거치지 않고 하루 수십~수천 번
- 핵심은 알고리즘이 아니라 처리량(throughput)
- 실험 데이터가 회사 밖으로 나가지 않음 — 모델은 따라잡혀도 이 데이터는 아님
 - 특히 아무도 논문에 쓰지 않는 실패 데이터
- 범용을 표방하되 좁게 시작: 초전도체, 반도체 소재, 구조용 합금
 - 검증 가능하고 비용을 지불할 고객이 분명한 한 곳을 먼저 타깃

AI for Materials의 승자는 가장 큰 모델을 가진 조직이 아니라
가장 빠르게 실험하고 가장 많이 학습하는 조직일 가능성이 높음

속도가 해결되면, 그다음 병목

- 자율 실험실은 “얼마나 빨리 검증할 것인가”를 해결. 하지만 “무엇을 다음에 검증할 것인가”는 누가정하나?

학습 속도 = 처리량(throughput) × 실험 하나가 주는 정보량

탐색 공간이 너무 크다

- 원소의 구성과 비율에 결정 구조, 결합, 공정 조건까지 곱해진다
- brute-force 탐색은 사실상 불가능

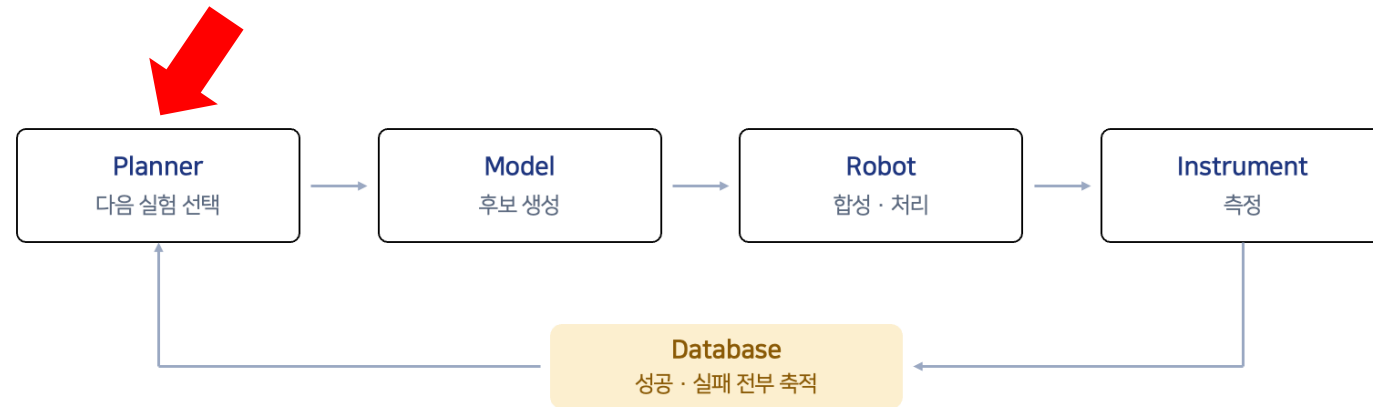
요구는 깔끔한 objective로 오지 않는다

- 성능 · 독성 · 원가 · 공정 조건이 자연어로 한꺼번에 들어오며, 이를 실험 설계에 반영해야 함

“코발트는 제외해 주세요”, “독성 원소는 사용할 수 없습니다”, “현재 설비로는 900 °C 이상 올릴 수 없습니다”

LLM의 자리: 자율 실험실의 decision layer

- 자연어로 들어온 목표와 제약을 해석한다
 - 후보 공간을 좁힌다 — 조 단위 조합에서 실제로 시도할 만한 것으로
 - 필요한 모델과 도구를 호출해 다음 실험 계획으로 변환한다
 - 왜 그 후보를 골랐는지 설명한다 — 사람이 검토하고 개입할 수 있는 형태로
-
- 자율 실험실: 얼마나 빠르게 검증할 것인가
 - LLM: 무엇을 다음에 검증할 것인가



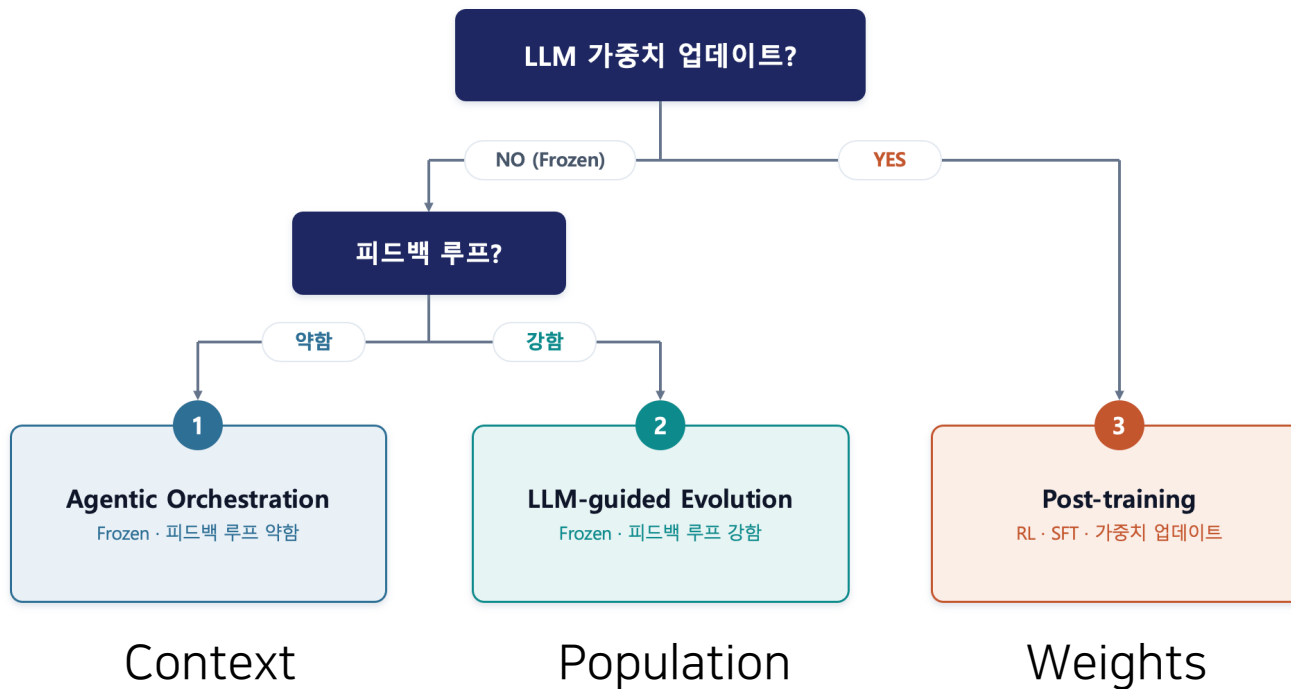
결국 빠른 실험 루프의 병목은 “다음 실험을 설계하는 지능”이며, 이것이 LLM의 역할

Outline

- 1. AI for Science 동향
 - AlphaFold 이후의 방향 전환, 투자, 정부 정책
- 2. 자율 실험실의 부상
 - 근본적 소재 병목 현상과 AI for Materials 스타트업
- 3. LLM 활용의 3가지 패러다임
 - Agentic Orchestration / LLM-guided Evolution / Post-training
- 4. 핵심 Takeaways

LLM은 피드백을 어디에 축적하는가?

- 새로운 실험 결과 (feedback)가 들어왔을 때,
 - 그 지식이 프롬프트(context)에 남는가, population에 남는가, 아니면 모델 weights 자체에 남는가?

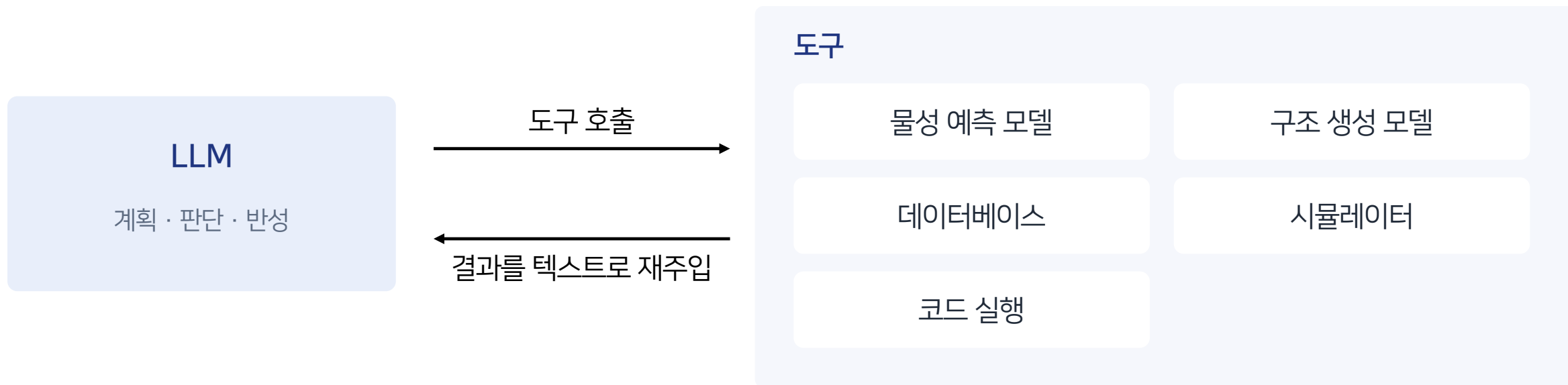


- **Context:** Agentic Orchestration
 - 도구 호출 결과와 반성 → 다음 추론 context
- **Population:** LLM-guided Evolution
 - 좋은 후보가 선택되어 다음 세대 prompt
- **Weights:** Post-training
 - reward가 gradient를 통해 모델 parameter에 축적

패러다임 1: Agentic Orchestration

피드백 → Context

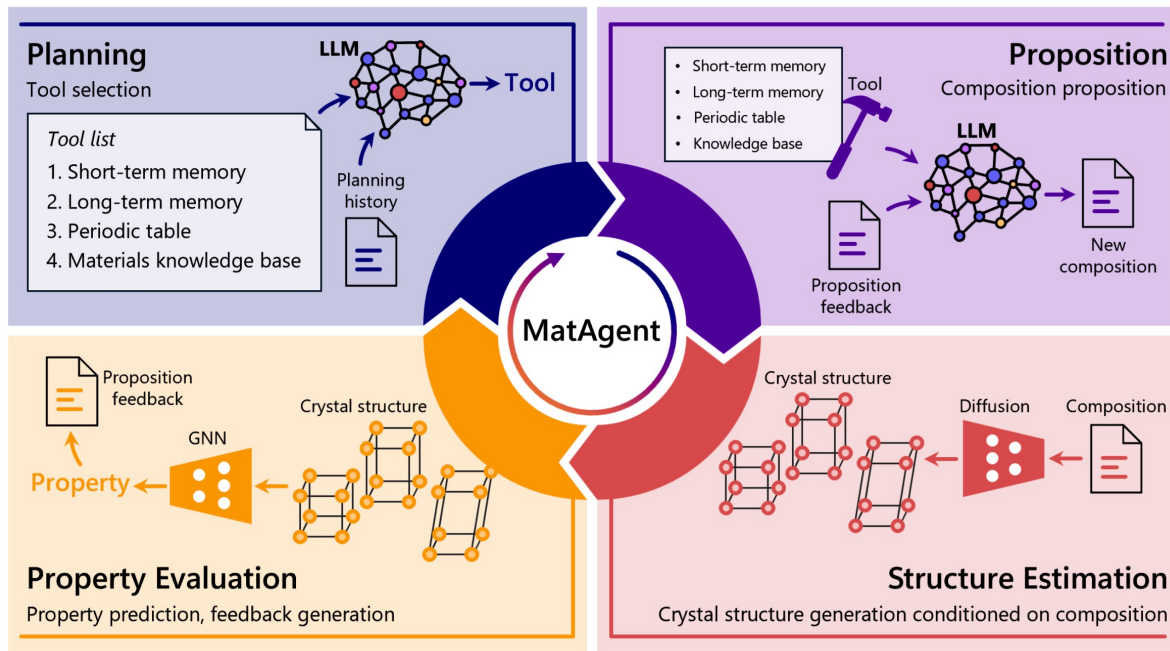
- LLM은 답을 만들지 않는다 — 어떤 도구를 언제 부를지 정한다
 - LLM의 Weights는 frozen



모든 걸 아는 연구원이 아니라, 계산기 · DB · 시뮬레이터를 어떤 순서로 부릴지 아는 관리자

MatAgent (NeurIPS 25 AI4Mat)

- 도구 없이 쓰면 LLM은 이미 아는 물질을 되풀이함 (Memorization)



문제

- tool-free LLM은 corpus 안의 잘 알려진 화합물로 붕괴
- o3-mini는 성공률은 높지만 제안의 상당 부분이 HfO_2 로 수렴

처방: 외부 도구 4종 + 되먹임

- 단기 · 장기 기억, 주기율표, 지식베이스
- 구조 생성기와 물성 평가기의 결과를 텍스트로 재주입

Materealize (arxiv 26)

- 설계에서 합성 레시피까지 잇는 end-to-end multi-agent 시스템

입력

- "밴드갭 1.34 eV 소재" 같은 자연어 한 줄

출력

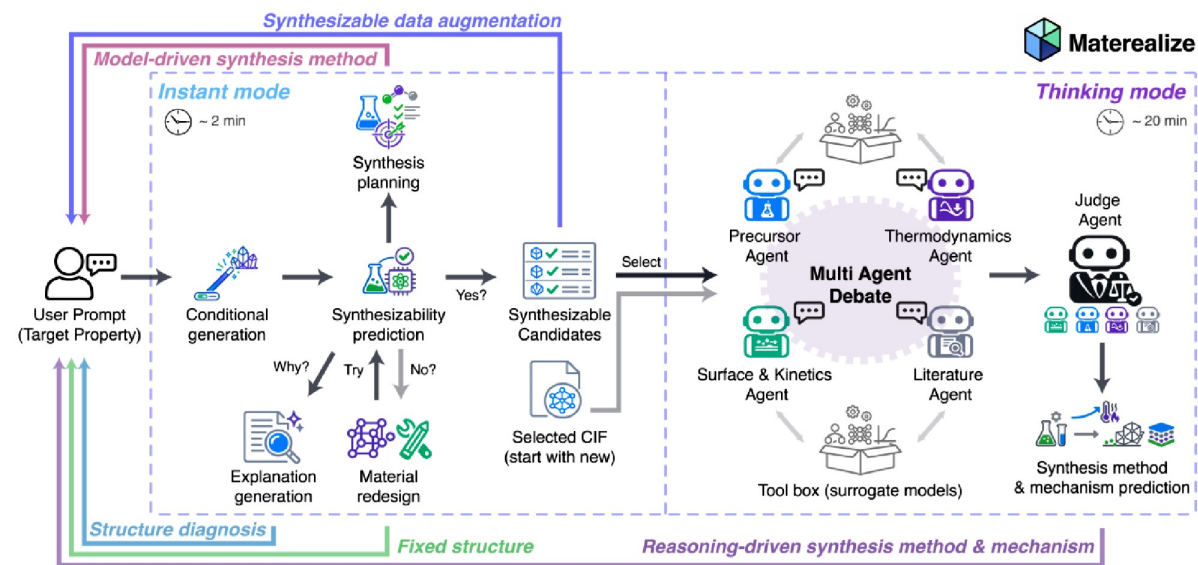
- 구조 후보 + 합성 가능성 + 전구체/소성 온도 + 메커니즘 설명
 - 예: $\text{KCa}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{K}_2\text{CO}_3 + \text{CaCO}_3, 885^\circ\text{C}$

방식

- Instant mode 약 2분 — ML 도구 12종 직렬 호출
- Thinking mode 약 20분 — 4개 전문 에이전트 + Judge의 토론

의의

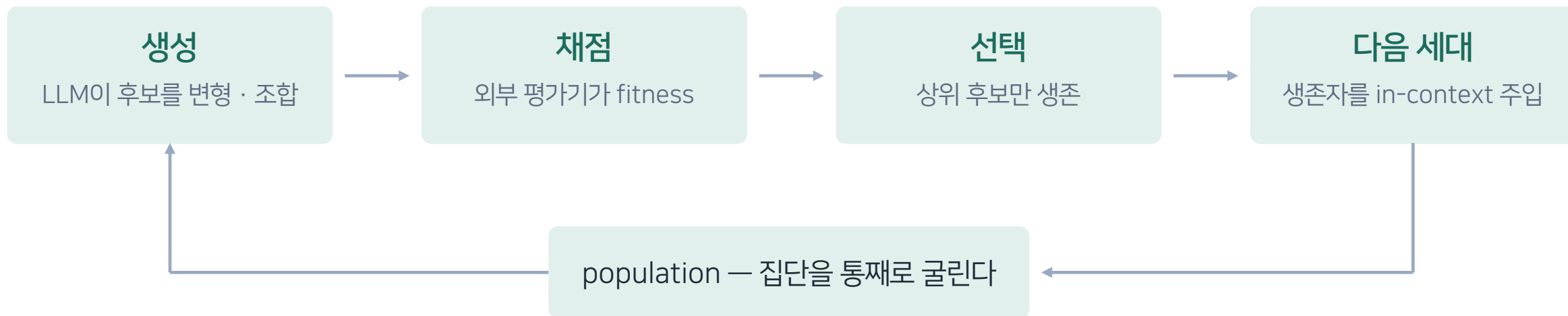
- 비전문가가 자연어로 접근할 수 있게 만든 첫 시도
- 설계와 합성 레시피를 한 파이프라인에 넣은 사례



패러다임 2: LLM-guided Evolution

피드백 → Population

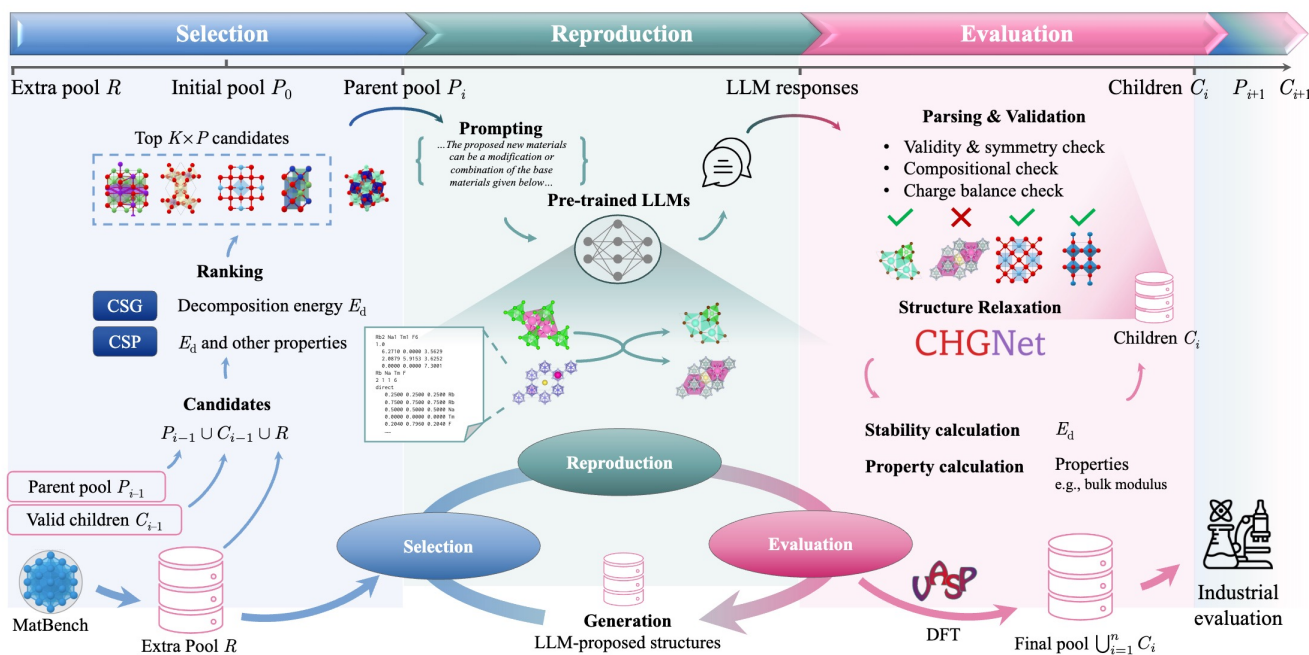
- LLM을 진화 알고리즘의 변이 연산자로 쓴다
 - 알고리즘이 점수로 selection을 결정



집단을 굴리기 때문에 한 물질에 갇히는 일이 구조적으로 억제됨

MatLLMSearch (ICLR 25 AI4Mat)

- 사전학습 LLM을 추가 fine-tuning 없이 진화 연산자로 사용



아이디어

- Llama 3.1-70B를 그대로 사용
- 기존 구조를 변형하거나 조합하라"고 지시
- 명시적 화학 연산자 없이 implicit prior 활용

검증

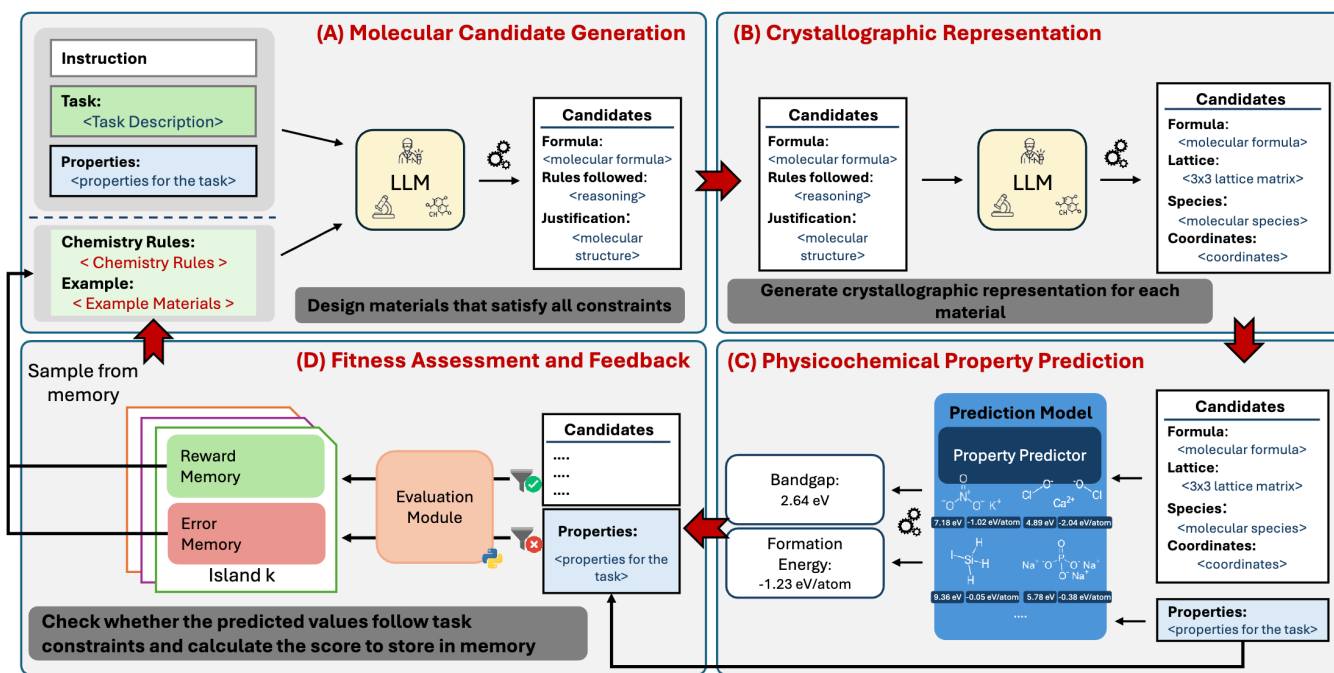
- MLIP가 fitness, DFT가 최종 검증
- 생성 구조의 상당 부분이 metastable/일부 DFT-stable
- Fine-tuning 기반 모델 대비 큰 성능 향상

의의

- 대규모 fine-tuning이 필수가 아닐수도 있겠다

LLEMA (ICLR 2026)

- 암기를 줄이고, 탐색을 구조화 한다



아이디어

- LLM + 진화 탐색으로 소재 후보 생성
- 성공/실패 결과를 memory로 활용해 반복 개선

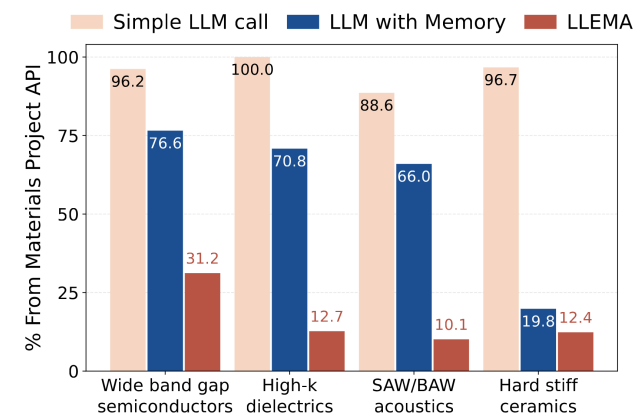
검증

- 14개 multi-objective 소재 설계 과제에서 평가
- MP 재생산율을 크게 낮추고 hit-rate 향상

의의

- LLM을 단순 생성기가 아닌 feedback-driven search agent로 확장
- LLM만 쓰면 아는 것을 되풀이하지만, 화학 연산자와 population 구조를 주면 탐색기가 된다.

MP 재생산율



패러다임 3: Post-training (RL / SFT)

피드백 → Weights

- 점수가 프롬프트가 아니라 gradient로 모델 안에 남는다

학습 루프

후보 생성

모델이 제안



reward 채점

sparse냐 dense냐 · 화학 규칙 반영



가중치 업데이트

gradient로 모델에 축적

어디서 되는가는 데이터가 정한다

분자 · 신약

SMILES 수십억 개 (Enamine REAL 96억)

→ Post-training이 돌아감

무기 결정

CIF 수십만 개 — 학습이 안 됨

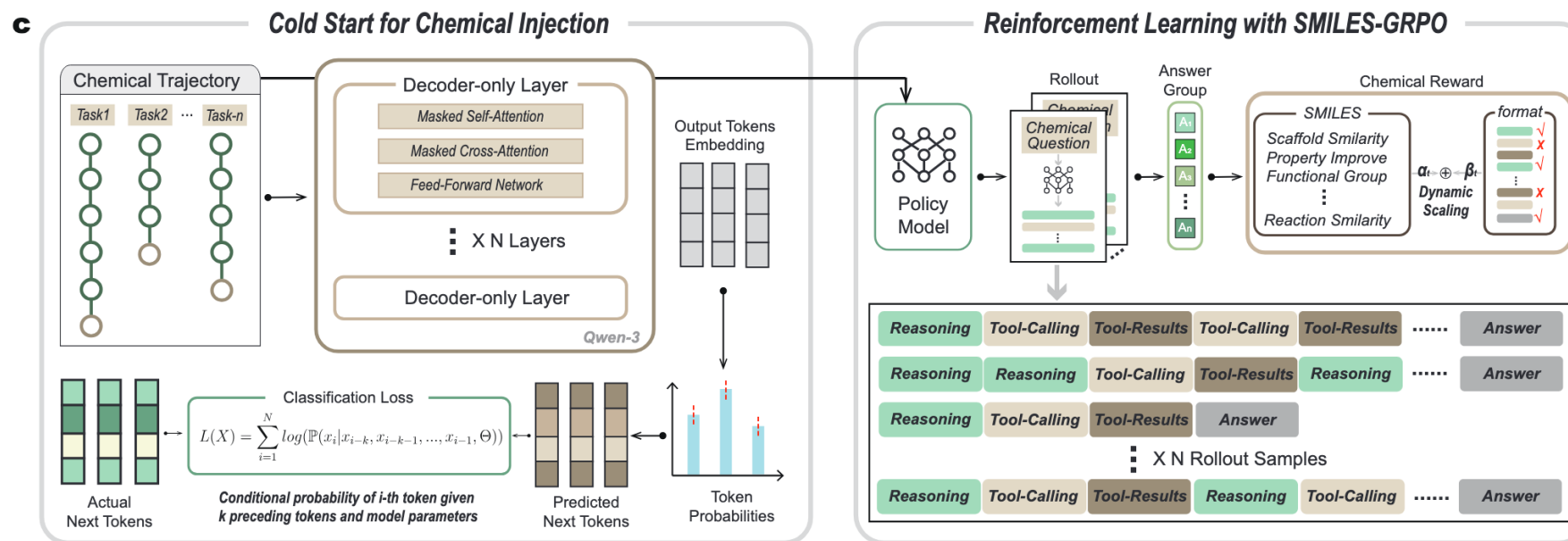
→ 1 · 2번으로 우회

학습은 비싸지만, 이후 추론은 단일 forward pass

어떤 패러다임이 우월한가보다, 그 도메인에 데이터와 oracle이 있느냐가 결정적

ChemCRAFT (arxiv 26)

- 화학 지식을 외우게 하는 대신, 도구를 언제 부를지를 학습시킨다



학습 절차

- Cold-start SFT: "생각 → 도구 호출 → 관찰" 패턴 학습
- SMILES-GRPO: 화학 규칙을 반영한 dense reward로 RL
- **결과:** 7B-14B 로컬 모델이 frontier API급 화학 능력에 접근

의의

- inference 비용과 데이터 유출 문제를 함께 줄일 수 있음

세 패러다임의 장단점

1. Agentic Orchestration

피드백 → Context

장점

- 학습 비용 0 — 프로토타이핑이 빠름
- 해석성 — reasoning이 전부 텍스트로 남음

단점

- LLM prior에 갇힘 — memorization
- 도구 품질이 곧 성능 상한

2. LLM-guided Evolution

피드백 → Population

장점

- memorization을 구조적으로 억제
- 학습 없이도 새로운 발견이 나옴

단점

- 비용이 반복 횟수에 그대로 비례
- 개선이 다음 task로 전이 불가

3. Post-training (RL / SFT)

피드백 → Weights

장점

- 개선이 가중치에 축적 — 셋 중 유일
- 추론 비용 최소, 로컬 배포 가능

단점

- 학습 비용 + reward 설계 부담
- 데이터 없으면 불가 (CIF 수십만은 부족)

세 패러다임을 관통하는 관찰

- 1. 방법론이 데이터에 의존적
 - 도메인별 패러다임 편중이 뚜렷 — 데이터를 대량 생성할 수 있게 되면 소재에도 post-training이 적용 가능
 - synthetic data의 중요성
- 2. 대부분 실험적 검증이 부재
 - 대부분 surrogate ML 모델을 oracle로 활용
 - 일부 DFT 검증을 하지만, 실제 합성 검증은 사실상 전무
 - 합성된 hit을 5~10개만 보고해도 분야 신뢰도가 크게 오를 것
- 3. 다음은 Agentic RL + wet-lab
 - wet-lab 측정 결과를 agent의 학습 신호로 활용
 - 실험실은 검증 시설을 넘어 grounded feedback을 생성
 - 앞의 기업들이 실험실을 짓는 진짜 이유가 여기에 있음

Outline

- 1. AI for Science 동향
 - AlphaFold 이후의 방향 전환, 투자, 정부 정책
- 2. 자율 실험실의 부상
 - 근본적 소재 병목 현상과 AI for Materials 스타트업
- 3. LLM 활용의 3가지 패러다임
 - Agentic Orchestration / LLM-guided Evolution / Post-training
- 4. 핵심 Takeaways

핵심 Takeaways

1

병목은 생성이 아니라 검증

- 후보는 하루 수백만 개씩 나오지만, 합성 · 측정 속도는 그대로
- 경쟁 측은 모델 성능이 아니라 closed-loop throughput

2

해자는 모델이 아니라 데이터다

- 모델은 몇 달이면 따라잡을 수 있지만, 자체 실험실에서 축적한 데이터는 쉽게 복제할 수 없음
- 특히 논문에 실리지 않는 실패 데이터가 복제되지 않는 자산

3

LLM은 루프의 decision layer

- 세 패러다임의 차이는 성능이 아니라 피드백이 어디에 쌓이느냐
- Context · Population · Weights — 무엇을 고를지는 도메인의 데이터와 oracle이 정함

경청해 주셔서 감사합니다