

MS Skala AI 모델, CP2K 합류해 양자역학 시뮬레이션 성능 향상

(2026.10.02., 양자정보연구지원센터)

□ Microsoft Skala AI 모델, CP2K에 합류해 양자역학 시뮬레이션 성능 향상

- Microsoft Skala AI 모델, CP2K 통합을 통해 양자역학 시뮬레이션의 정확도 · 효율성 향상
 - Microsoft Research AI for Science가 개발한 Skala AI 모델이 CP2K 소프트웨어 생태계에 통합됨에 따라, 연구자들은 기존보다 더 큰 분자 시스템을 대상으로 높은 정확도의 양자역학 시뮬레이션을 수행할 수 있게 됨
 - 2026년 초 Microsoft 연구진과 독일 Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf 산하 Center for Advanced Systems Understanding(CASUS)의 CP2K 연구팀이 Skala를 CP2K에 통합하기 위한 공동 연구를 시작했으며, 2026년 8월 협력 연구의 초기 결과를 발표함
 - 이번 통합을 통해 전 세계 CP2K 연구자들이 Skala의 적용 가능성을 화학 · 물리학 · 재료과학 · 공학 등 다양한 분야에서 검증할 수 있을 것으로 기대됨
- DFT의 한계를 보완하는 AI 기반 교환-상관 범함수(exchange-correlation functional) 개발
 - 밀도범함수이론(DFT)은 다양한 시뮬레이션 분야에서 핵심적인 양자역학 계산 방법으로 활용되고 있으나, 정확한 계산을 위해서는 적절한 교환-상관 범함수를 선택해야 한다는 한계가 존재함
 - 기존의 교환-상관 범함수는 지속적으로 정교해지고 있지만, 높은 정확도를 제공하는 범함수일수록 막대한 계산량이 요구되어 입자수가 적은 소규모 시스템에만 적용하기 어려운 문제가 있음

- Skala는 이러한 한계를 해결하기 위해 Microsoft Research AI for Science가 개발한 새로운 AI 기반 교환-상관 범함수로, 기존처럼 복잡한 수학적 수식을 추가하는 대신 신경망을 활용해 서로 다른 공간 영역의 전자 밀도가 상호 영향을 미치는 방식을 학습함
- 이를 통해 Skala는 AI를 활용해 전자 구조를 근사하는 초기 단계의 AI 기반 교환-상관 범함수 가운데 하나로 평가되며, 정확도와 계산 효율을 동시에 확보하는 것을 목표로 함

○ CASUS와 Microsoft의 공동 검증에서 정확도 향상 가능성 확인

- Microsoft가 2025년 발표한 Skala 연구 결과에서는 특정 DFT 계산에서 높은 정확도와 계산 효율성을 동시에 달성할 가능성이 확인되었으며, CASUS 연구진은 이를 CP2K 환경에서 추가적으로 검증함
- CASUS와 Microsoft Research가 2026년 8월 발표한 초기 공동 연구 결과에 따르면, 특정 테스트 사례에서 Skala를 적용했을 때 기존 계산 대비 시뮬레이션 정확도가 눈에 띄게 향상된 것으로 나타남
- CASUS 연구진은 Skala의 실제 적용 가능성을 확인하는 동시에, 다양한 연구 문제에 대한 성능과 활용 범위를 CP2K 커뮤니티와 함께 검증해 나갈 계획임

○ 대규모 양자역학 계산에 적합한 CP2K와의 결합

- CP2K는 DFT를 비롯한 양자역학적 방법과 고전적 분자동역학을 활용해 분자·액체·고체·생체 시스템 등을 시뮬레이션할 수 있는 오픈소스 소프트웨어 생태계임
- 특히 효율적인 알고리즘과 병렬 컴퓨팅 기술을 활용해 수천~수만 개 원자로 구성된 대규모 시스템을 계산할 수 있어, 배터리 소재·촉매·반도체·단백질 등 복잡한 물질 연구에 적합함
- CP2K는 대규모 시스템의 장시간 동적 시뮬레이션에 강점을 갖고 있어, Skala의 높은 정확도와 결합할 경우 계산 규모를 유지하면서 양자역학적 예측의 정확도를 높일 수 있는 기반을 제공할 것

으로 기대됨

- 또한 CP2K에는 최근 AI 기반 모델을 활용할 수 있는 기능이 추가되어, CP2K로 생성한 학습 데이터를 이용해 분자의 에너지와 힘을 높은 정확도로 예측하고 시뮬레이션의 시간·공간 규모를 확대할 수 있음
- CP2K 생태계를 통한 Skala의 확산 및 지속적인 기능 확대
 - Skala의 CP2K 통합은 2026년 봄 학술회의에서 예고된 이후 CP2K 커뮤니티의 높은 관심을 받아왔으며, 이번 공개를 통해 연구자들이 실제 분자 시스템 시뮬레이션에 Skala를 활용할 수 있게 됨
 - Microsoft 측은 Skala의 활용도를 높이기 위해 연구자들이 이미 사용하는 대표적인 계산화학 플랫폼에 모델을 제공하는 것이 중요하다고 설명했으며, 오랜 기간 계산화학 연구의 핵심 플랫폼으로 활용된 CP2K를 우선적인 통합 대상으로 선정함
 - 통합 과정에서는 수치적으로 정확한 결과를 보장하기 위해 Microsoft와 CASUS가 공동으로 통합 테스트 체계를 구축하고 다양한 프로그램 및 설정에서 Skala의 정확도와 계산 속도를 검증함
 - Skala는 고정된 근사 모델이 아니라 지속적으로 개선되는 AI 모델로, 향후 금속·반도체 등 주기적 고체와 액체 시스템까지 시뮬레이션 대상이 확대될 예정임
 - CP2K와의 연계는 향후 업데이트되는 Skala 버전을 CP2K 환경에 신속하게 적용할 수 있도록 해, AI 기반 양자역학 계산 기술의 연구 현장 확산과 대규모 물질 시뮬레이션의 정확도 향상에 기여할 것으로 전망됨

(원문)

1. <https://thequantuminsider.com/2026/08/24/microsofts-skala-ai-model-joins-cp2k-to-improve-quantum-mechanical-simulations/>