

제6회 전자구조계산 여름학교 + 물리학회 계산분과 설립

Yong-Hoon Kim

School of Electrical Engineering
Korea Advanced Institute of Science & Technology
y.h.kim@kaist.ac.kr

2025. 2. 12.

2025 APCTP 학술프로그램 조직자 간담회

행사 소개: (1) 연혁

- 제목: 제6회 전자구조계산 여름학교
- 연혁:
 - 2021.6 제1회 여름학교: on + off @평창, 참석자 475명
 - 2022.1 제2회 겨울학교
 - 2023.1 제3회 겨울학교: 참석자 243명
 - 2024.1 제4회 겨울학교: 참석자 227명
 - 2024.8 제5회 여름학교: on + off @무주
- Key missing ingredient:
 - 학생 실습!



**2024 제5회
전자구조계산 여름학교**

2024년 8월 20일 (화) ~ 8월 23일 (금)
<https://escschool.edison.re.kr/>

조직위원회	프로그램
조직위원장 김용훈 교수(KAIST)	8/20 (화) 13:30 ~ 15:30 : 김용훈 교수(KAIST) Density functional calculations for semiconductor device simulations 16:00 ~ 18:00 : 임득택 박사(UNIST) An introduction to scientific computing
	8/21 (수) 09:30 ~ 11:30 : 김용휘 박사(KISTI) An Introduction to Adaptive Mesh Refinement (AMR) and Parallel Algorithms for Physical Applications 13:30 ~ 15:30 : 김후성 박사(KISTI) EDISON 2.0 플랫폼을 활용한 웹 기반 제1원리 시뮬레이션 소개 및 실습 16:00 ~ 18:00 : EDISON 학생 발표
	8/22 (목) 09:30 ~ 11:30 : 신동빈 교수(GIST) Introduction of Quantum espresso package code for beginners 13:30 ~ 15:30 : 홍성민 교수(GIST) Process simulation, device simulation, and compact modeling: Basic principles 16:00 ~ 18:00 : WCN 학생 발표
	8/23 (금) 09:30 ~ 11:30 : 이재현 교수(부산대학교) Design Technology Co-Optimization (DTCO): TCAD-to-SPICE

APC KAIST KIAS 고등과학원

행사 소개: (2) 2025년 계획

- 제목: 제6회 전자구조계산 여름학교
- 주제: 제1원리 기반 **멀티스케일** 물리 및 시뮬레이션
- 형태, 장소, 날짜: 하이브리드, 대전, 여름방학 중
 - 오프라인 참석자: 강사 + 학생 ~ 40명 (지원 연구실 별 1인+)
 - 온라인 참석자: 모든 지원 학생들
- 예산
 - APCTP: ~ 1천만원
 - 슈퍼컴활용 과제 (UNIST 박노정) + EDISON 과제 (KAIST 김용훈): ~1천만원
 - 등록비: 학생들 실비(숙박비 등) + 우수 포스터상

필요성: 한국 제1원리 계산 커뮤니티의 위상?



$|\Psi_k$ Scientific Highlight Of The Month
<http://psi-k.net/highlights/>

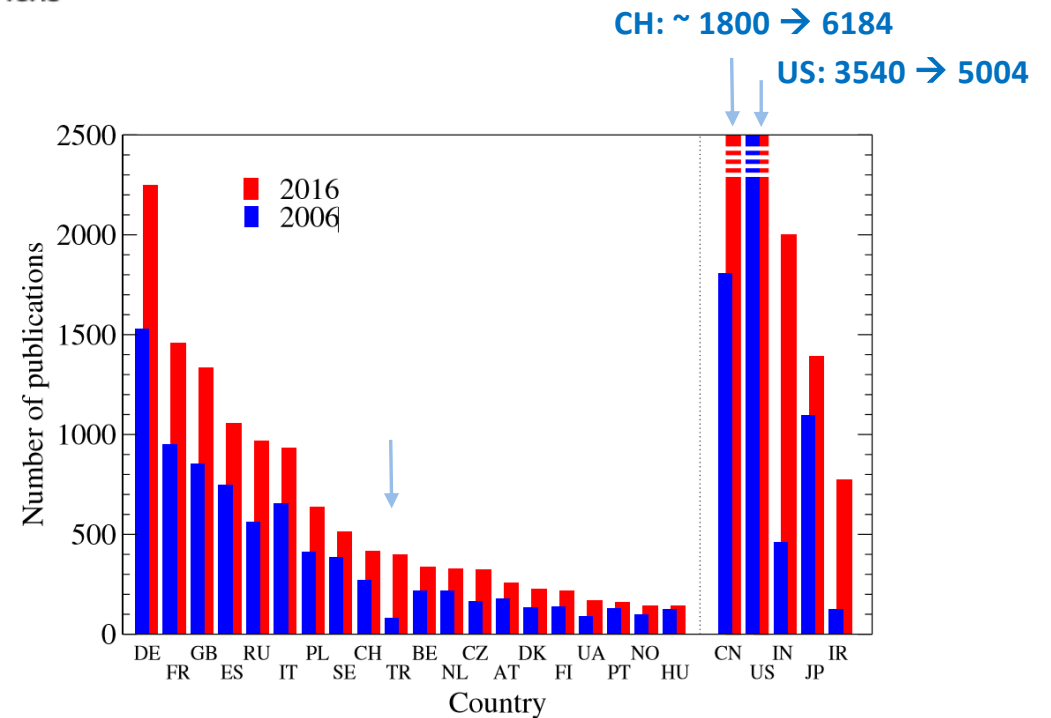
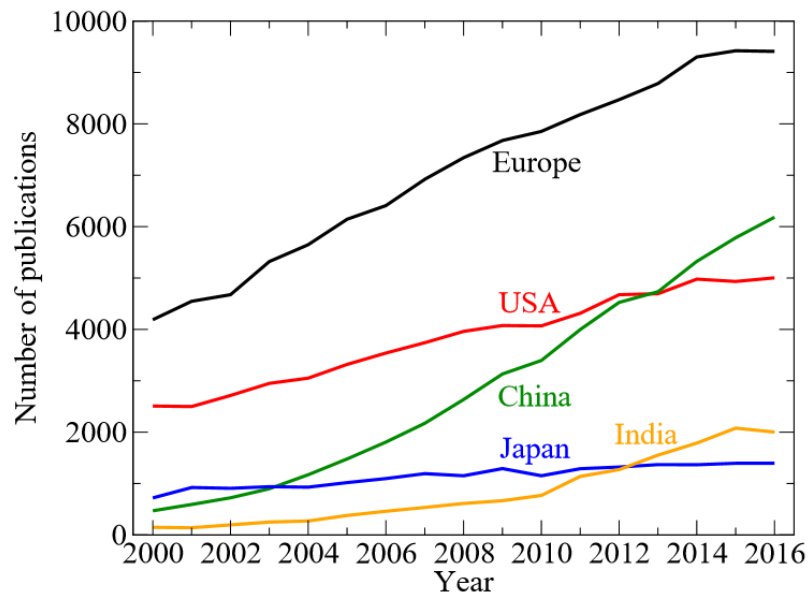
No. 135

April 2017

Statistical Data about Density Functional Calculations

by Phivos Mavropoulos and Peter Dederichs

Number of publications per year



“Here, we consider the strong growth of the “newcomers” India, Iran and Turkey, as most surprising.” (한국 언급 없음 😞)

목표: 한국 제1원리 계산 커뮤니티의 질적 도약



$|\Psi_k$ Scientific Highlight Of The Month
<http://psi-k.net/highlights/>

No. 135

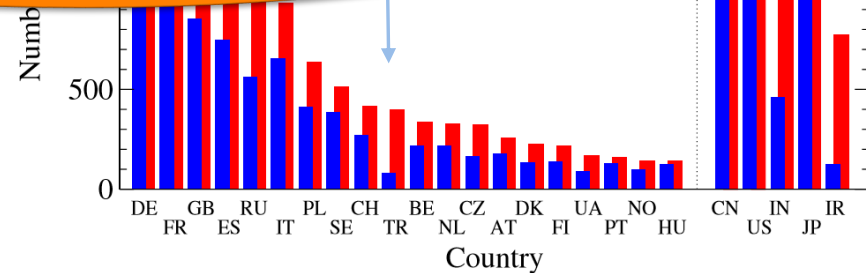
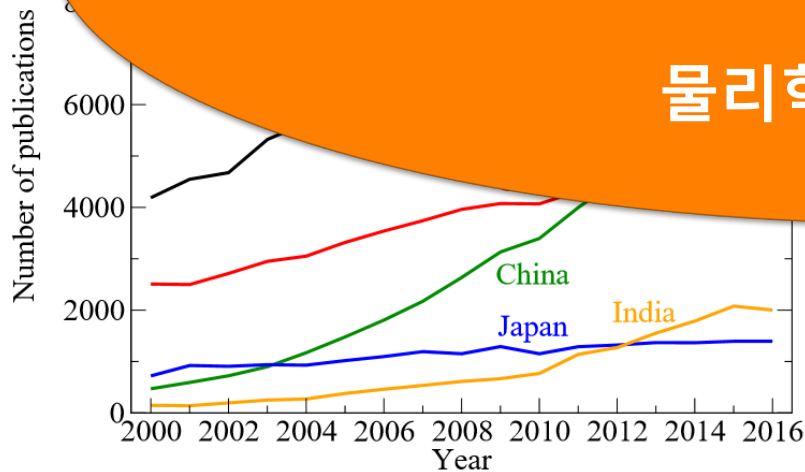
April 2017

Statistical Data about Publications in Computational Calculations

- 개별/단발적 행사를 조율/포괄하는 체계적인 시스템 구축?
- 학생/신진인력의 체계적 교육 → 경쟁력 강화?



물리학회 계산 분과!

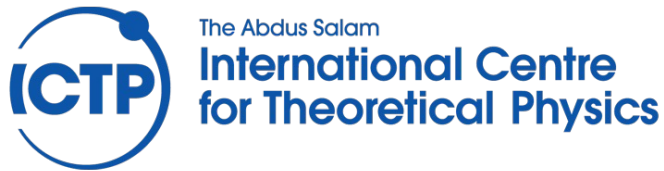


“Here, we consider the strong growth of the “newcomers” India, Iran and Turkey, as most surprising.” (한국 언급 없음 😞)

참고 모델 (1)

- ❑ ICTP - International Centre for Theoretical Physics (이탈리아 Trieste)

<https://www.ictp.it/>



- 1964년 노벨상 수상자 Abdus Salam 주도로 설립
- 이탈리아 정부, UNESCO, IAEA 지원
- 목표: “Foster the growth of advanced studies and research in physical and mathematical sciences” (특히 개발 도상 국가)
- SISSA (International School for Advanced Studies) 등과 공동으로 석박사 프로그램 운영
- 매년 60개 이상 국제학회/워크숍 및 세미나 개최

- ❑ CECAM - Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire

<https://www.cecaml.org>

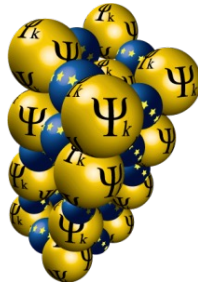


- 1969년 개원
- 목표: “*promotion of fundamental research on advanced computational methods and to their application to important problems in frontier areas of science and technology*”
- 본부: 스위스 EPF-Lausanne
- 노드: 유럽 18 + 이스라엘 1
- 활동: 연중 워크숍, 스쿨, 학회 개최

참고 모델 (2)

❑ Psi-k network (1994~)

<http://psi-k.net>



Psi-k WORKSHOPS 2021

For more information and to register for events please visit www.psi-k.net/workshops

9-11 February, ONLINE - Correlated synthetic quantum matter: theory meets experiment

23-25 February, ONLINE - International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods

2-5 March, ONLINE - Materials Design for Energy Storage and Conversion: Theory and Experiment

12-16 April, ONLINE - All electron DFT with Fleur - a Hands-on Tutorial

16-17 May, Addis Ababa, Ethiopia - Ethiopian School on Electronic Structure Methods and Applications for Emerging Energy Technologies

31 May-4 June, Clermont-Ferrand, France - 10th ABINIT developer workshop: from developers to users

May/June, ONLINE - Principles of light-induced charge transfer for photogenetics

1-4 June, ONLINE - GPAW2021: Users and Developers Meeting

7-11 June, Stockholm, Sweden - Conference on defects in solids for quantum technologies

7-16 June, Genova, Italy - Bridging first-principles calculations and effective Hamiltonians

9-17 June, Benasque, Spain - 9th School and Workshop on Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications

14-18 June, Lausanne, Switzerland - Path Integral Quantum Mechanics: From the Basics to the Latest Developments

18-23 June, Riga, Latvia - HiW exciting! Hands-on Workshop on Excitations in Solids 2021

16-21 June, Riga, Latvia - Towards exascale solutions in Green function methods and advanced DFT

21-23 June, Lausanne, Switzerland - Excitonic and competing orders in two-dimensional materials

12-23 July, Trieste, Italy - Summer School on Quantum Monte Carlo methods for ab initio electronic simulations

26 July-6 August, Berlin, Germany - Hands-on Workshop: Density Functional Theory and Beyond - Foundations to Frontiers

September, Jena, Germany - 5th Octopus Developers Workshop

September, Cagliari, Italy - The 17th ETSF Young Researchers' Meeting

9 September, ONLINE - Volker Heine Young Researcher Award Symposium

20-22 September, London, UK - CECAM / Psi-k Research Conference - New Horizons in Nucleation: a playground for classical and ab initio simulation methods

5-7 October, Linköping, Sweden - Ontologies for materials-databases interoperability

11-13 October, Denton, USA - Environ and eQE: Modelling Complex Environments in Quantum Espresso

11-14 October, Leoben, Austria - GreenALM hands-on tutorial 2021

11-22 October, Lausanne, Switzerland - Extended Software Development Workshop: Improving bundle libraries

22-22 October, Rome, Italy - Recent developments in quantum Monte Carlo

15-19 November, Lyngby, Denmark - High-throughput workflows for materials science with the Atomic Simulation Environment and Fireworks

15-19 November, ONLINE - Machine learning interatomic potentials: Young researchers' tutorial

6-9 December, Lausanne, Switzerland - Capturing Anharmonic Vibrational Motion in First-Principles Simulations

13-16 December, Lausanne, Switzerland - Exciton Dynamics in Functional Materials: New Theoretical Frontiers

7-11 February 2022, Kigali, Rwanda - Joint School / Workshop on Application of Machine Learning in Electronic Structure and Molecular Dynamics

TBC 2021, Daresbury, UK - 4th Daresbury QUESTAAL school

TBC 2021, London, UK - Hermes Summer School

21-25 March 2022, Lausanne, Switzerland - Theoretical Spectroscopy Lectures

22-25 August 2022, Lausanne - Psi-k Conference 2022 (www.psi-k.net)

CECAM / Psi-k Research Conference 20-22 September, London, UK

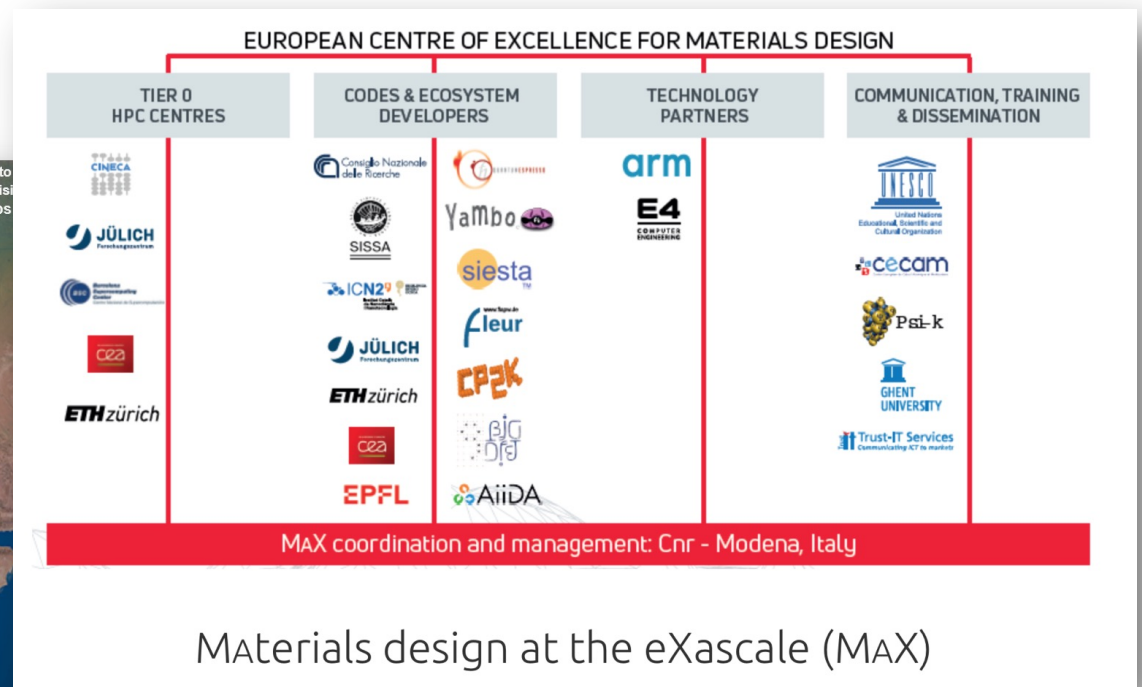
Psi-k Conference 22-25 August 2022, Lausanne, Switzerland www.psi-k.net

Registered charity number 1126308
Registered company number 0640198

<http://psi-k.net/workshops/>

❑ MaX center (2015~)

<http://www.max-centre.eu>



<http://www.max-centre.eu/max-nutshell>

물리학회 계산분과 설립: 취지 및 필요성

- 취지: 전자구조 계산뿐만 아니라 AI 계산을 포함한 전체 물리 커뮤니티의 질적 향상 + 양적 확대
- 필요성(위기 및 기회):
 - 유럽 제1원리 전자구조 계산 커뮤니티의 활성화 참고 (CECAM, Psi-k 등)
 - AI 기술의 과학/기술 전분야로의 파급
 - 물리학 내 (+ 다른 학문의) 다양한 분야에서 이론-실험 연구를 연계하면 융합을 가능하게 하는 제1원리 전자구조 계산 연구의 특성
 - 국내 타 학회(재료학회, 화학회, 화공학회, 반도체학회 등) 내 제1원리 계산 연구자 수 증가 및 체계적 신진인력 육성 노력 진행 중

2025 수석상대론 및 중력파 겨울학교

2024 계산화학 여름학교

- Linux/DFT(VASP) 입문/초급 과정 -

Density Functional Theory

$$F = m \frac{dv}{dt} \quad H\Psi = E\Psi$$

Molecular Dynamics
Electronic Structure Monte Carlo
Computational Chemistry

2024. 7. 22 (월) - 7.24 (수)

장 소: 한양대학교 제2공학관 402호
(주소) 서울특별시 성동구 왕십리로 222

주 최: 한국화학공학회 교육 인재양성위원회
에너지 환경부문위원회, 열역학분자모사부문위원회, 촉매부문위원회

주 관: BK21 한양대학교 첨단에너지소재 교육연구단
아주대학교 수소연료전지 창의융합형 인력양성사업단
강원대학교 에너지·생체 소재 및 소자 공정 융합 교육연구단

후 원: 충북대학교 기업수요 대응 차세대 이차전지 소재 선도연구센터
한양대학교 탈플라스틱 특성화 대학원
두산퓨얼셀(주)

 한국화학공학회
THE KOREAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS

(우) 02856 서울특별시 성북구 안암로 119 한국화학회관 5층
Tel: (02)458-3078~9 E-mail: kiche@kiche.or.kr
Homepage: www.kiche.or.kr

물리학회 계산분과 설립: 활용 및 기대효과

- 물리학회 학술대회, ICAMD, ISPSA 등을 통한 타학회
계산 연구자들의 물리학회 흡입
 - 물리학회 회원수 증대
- 물리학회 내 계산 분야 연구자들의 외연 확장
 - 물리학회 여러 분과와의 체계적 협업(물리 전분야
실험-이론 연구자들 간의 협업)을 통한 동반 성장
- 전자구조계산 여름학교 및 계산 관련 행사들 운영 조율
 - 대학원생의 R&D 능력의 체계적 배양
- 온라인 R&D 프로젝트 제공 (cf. KAIST Pre-URP
(Undergraduate Research Program))
 - 물리학과 및 관련 학과 학부생 수 증대

