

D₃Square

지식 기반 AI 연구 개발 플랫폼



Why D₃Square

소재 연구개발은 여전히 파편화된 데이터, 개인의 경험, 반복적인 시행착오에 의존하고 있습니다

01

파편화된 연구 데이터

실험 결과, 문헌, 재고 기록, 공정 데이터가
서로 다른 파일과 시스템에 흩어져 있음

파일 및 시스템
→ 연결된 연구 데이터

02

개인에게 묶인 인사이트

연구 인사이트와 기술 노하우가
연구자개인에게귀속되어 쉽게 사라짐

개인의 전문성
→ 조직의 지식

03

소재 설계가 지향하는 이상

반복 실험으로 최적의 소재와 공정 조건을 찾는
방식은 시간과 비용, 불확실성을 높임

시행착오
→ AI 기반 탐색

D₃Square at a Glance

소재 연구개발 전 과정을 하나의 클라우드 플랫폼에서

핵심 파이프라인

수 집

실험 · 문헌 · 실험실 설정
재고 · 데이터를 하나의 플랫폼에서

통계 · 상관관계 · 변수 중요도
SHAP 자동 데이터 인사이트

전 처리

학 습

노코드 머신러닝 · 자연어 해석
모델 배포 · 예측 · 역설계

독립 기능

지식 그래프 · 온톨로지

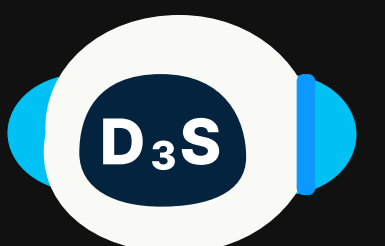
키워드를 추출해 지식 그래프를 구축하고 AI 어시스턴트로 활용

역설계

모델을 활용해 소재 설계를 위한 조성과 공정 조건을 도출

◆ AI 어시스턴트

모든 페이지의 맥락을 이해하고 필요한 순간에 응답합니다.



The Core Strengths of D₃Square

다음 페이지에서는 각 강점 뒤에 있는 논리와 실제 제품 화면을 설명합니다

데이터 수집 & 분석

축적 → 자산

실험, 문헌, 데이터를 한곳에 모아
자동으로 분석하고, 데이터 간 관계를 발견해
학습 가능한 자산으로 전환합니다.

- 실험실 · 재고 · 실험 · 문헌
- SHAP · 변수 중요도
- 권한 기반 데이터 버킷

지식 그래프 & 온톨로지

우리만의 지식 자산 구축

문헌에서 핵심 키워드를 자동으로 추출해
지식 그래프를 만들고, AI Assistant를 통해
필요한 지식을 즉시 탐색하고 활용할 수 있습니다.

- 문헌 → 자동 키워드 추출
- 지식 그래프 시각화
- AI 어시스턴트를 통한 지식 탐색 및 활용

AI 모델 & 역설계

소재 설계의 이상적인 접근

코딩 없이 AI 모델을 구축하고,
목표 물성을 기준으로 역설계하여
최적의 구성과 공정 조건을 찾을 수 있습니다.

- 노코드 머신러닝 · XAI 해석
- 모델 배포 → 예측 및 역설계
- 목표 물성 → 구성 및 공정 조건

Data Collection

모든 연구 자료를 한 곳에

① 실험실 설정

위치, 장비 및 템플릿 표준화

② 재고 관리

소재 및 혼합물의 수량과 이력 관리

③ 실험 · 문헌

실험을 노드로 설계하고 SI를 통한 문헌 수집

④ 버킷 · 데이터

실험 데이터를 버킷으로 묶어 자산화

실험

Experiment Design Process Analysis

Experiment Design

4th Week of June Experiment 4th Week of June Experiment

Design Progress

Raw Material A Material 2 items

Mixing Process 3 items

Calcination Process 3 items

Characterization Analysis 2 items

Particle Size Property 5 items

Record Data 10 items

Raw Material C Material 2 items

Mixing Process 3 items

Sintering Process 3 items

Characterization Analysis 2 items

Density Property 5 items

Record Data 10 items

Raw Material E Material 2 items

Ball Milling Process 3 items

Drying Process 3 items

Characterization Analysis 3 items

Phase Property 5 items

Record Data 10 items

실험실 설정

Location Visibility Owner Registered Actions

PERM_20260722_180327_LOC_public_489	Public	Master Admin	2026-07-22	
PERM_20260722_180327_LOC_public_4843	Public	Master Admin	2026-07-22	
PERM_20260722_184003_LOC_public	Public	Master Admin	2026-07-22	
PERM_20260722_183850_LOC_public_489	Public	Master Admin	2026-07-22	
PERM_20260722_183850_LOC_public_4895	Public	Master Admin	2026-07-22	
공평도_2022_2728	Public	Master Admin	2026-07-22	
세 정도 18.08 - 202703	Public	Minhyun Park	2026-07-22	
정도 18.08	Public	Minhyun Park	2026-07-22	
New_Laboratory	Public	Public	2026-08-23	
비밀정보 시스템	Public	Public	2026-08-23	

재고

Name Acquisition Date Acquisition Method Mass (g) Volume (cc) Amount (mol) Visibility Owner Registered Actions

PERM_20260722_180327_LOC_public	2026-07-22	-	0.0	0.0	0.0	Public	Master Admin	2026-07-22	
PERM_20260722_184003_LOC_public	2026-07-22	-	-200.0	0.0	0.0	Public	Master Admin	2026-07-22	
STK_20260722_173826_819	2026-02-26	-	-100.0	0.0	0.0	Public	Master Admin	2026-07-22	
Al Powder	2026-09-23	-	95.0	0.0	0.0	Public	YH H	2026-09-23	
AlN	2026-09-08	-	982.0	0.0	0.0	Public	Choi So Min	2026-09-08	
SiO2 Powder	2026-04-10	STP	378.0	0.0	0.0	Private	Minhyun Park	2026-04-10	
AD03 Powder	2026-04-10	STP	438.0	0.0	0.0	Private	Minhyun Park	2026-04-10	
PERM_20260401_141226_STK_public	2026-04-01	-	0.0	0.0	0.0	Public	Master Admin	2026-04-01	

문헌

Structure stability, electronic structure, and magnetism of the SrTiO₃ double infinite-layer La_{0.5}Sr_{0.5}BiO₃ under chemical pressure and optical strain

Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold

AI Would you like me to suggest the optimal experimental conditions?

Preprocess · Train

관계를 드러내고, 코드 없이 모델 구축

The screenshot displays the D3Square web application. The top section shows a list of training runs for '260629 - Test2'. Below this, a detailed view of a specific run is shown, including 'AI Interpretation', 'Training Result Report', and 'Recommended Diagnostics'. The interface is dark-themed with a sidebar on the left containing navigation options like 'RESEARCH', 'LABORATORY', and 'DATA'.

하나의 연속적인 흐름

자동화된 데이터 분석

데이터 통계 · 상관관계 · SHAP · 변수 중요도 및 XAI

코드 없는 AI 모델 학습

고전 머신러닝 · 딥러닝 기반 모델

언어모델 기반 결과 요약

주요 결과에 대한 자동 분석, 발견 및 제안

Knowledge Graph

지식 그래프 및 온톨로지 → 우리만의 지식 자산 구축

NEW · 우리만의 지식 자산

문헌을 구조로, 구조를 인사이트로

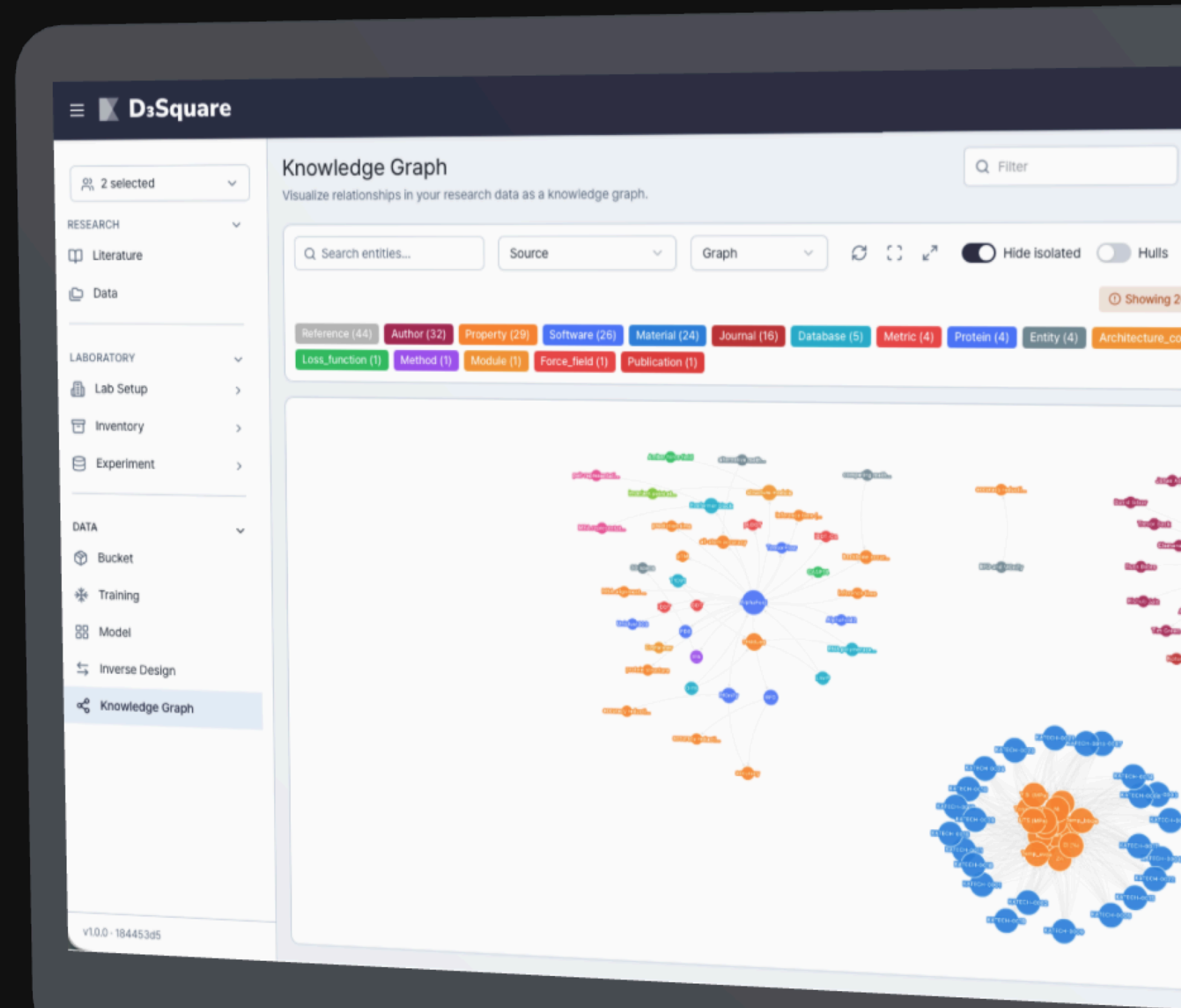
- 문헌에서 키워드 자동 추출
- 그래프 시각화 및 검증
- AI 어시스턴트로 지식 활용
- 버킷으로 내보내기

1. 문헌 수집

2. 키워드 추출

3. 그래프 구축

4. AI 어시스턴트 질의



Knowledge Graph

지식 그래프 및 온톨로지 → 우리만의 지식 자산 구축

문헌이 우리의 자산이 됩니다

혼자 구축하지 않아도 되는 지식 그래프

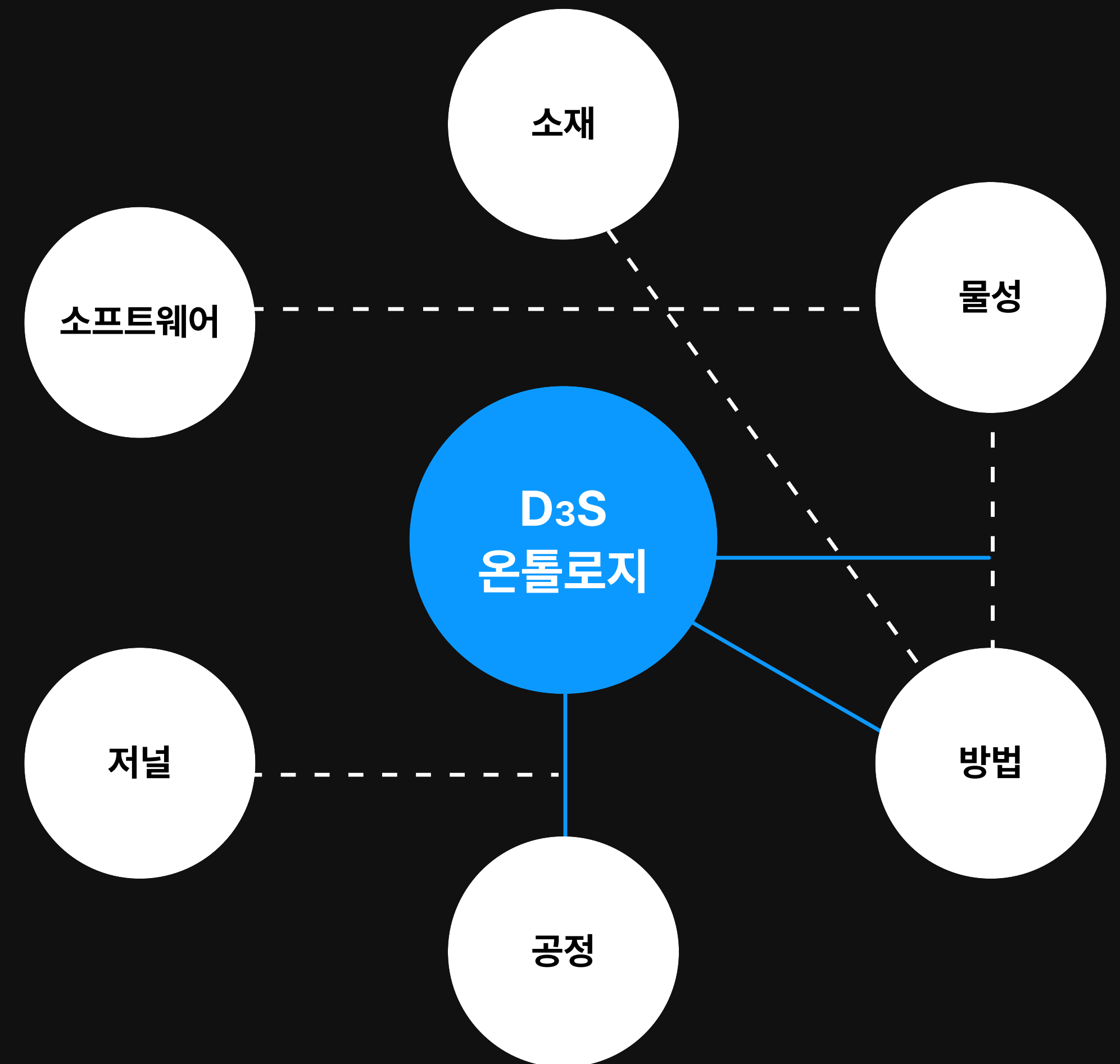
문헌을 업로드하기만 하면
D3Square가 개체와 관계를 자동으로 추출

온톨로지로 구조화된 지식

도메인 용어를 소재, 물성, 방법 등
표준화된 관계로 정리

AI 어시스턴트를 통한 빠른 작업 실행

“이 소재의 물성은 무엇인가요?”
지식 그래프에 근거한 맥락 기반 답변



[우리의 지식 그래프]

Inverse Design

AI 모델 및 역설계 → 소재 설계의 이상

목표 → 조건

소재 설계의 이상적인 접근

목표 물성을 먼저 정의하고 학습된 AI 모델이 조건을 제안.
실험주기를 획기적으로 줄이면서,
지금까지 도달할 수 없었던 설계 공간까지 탐색.

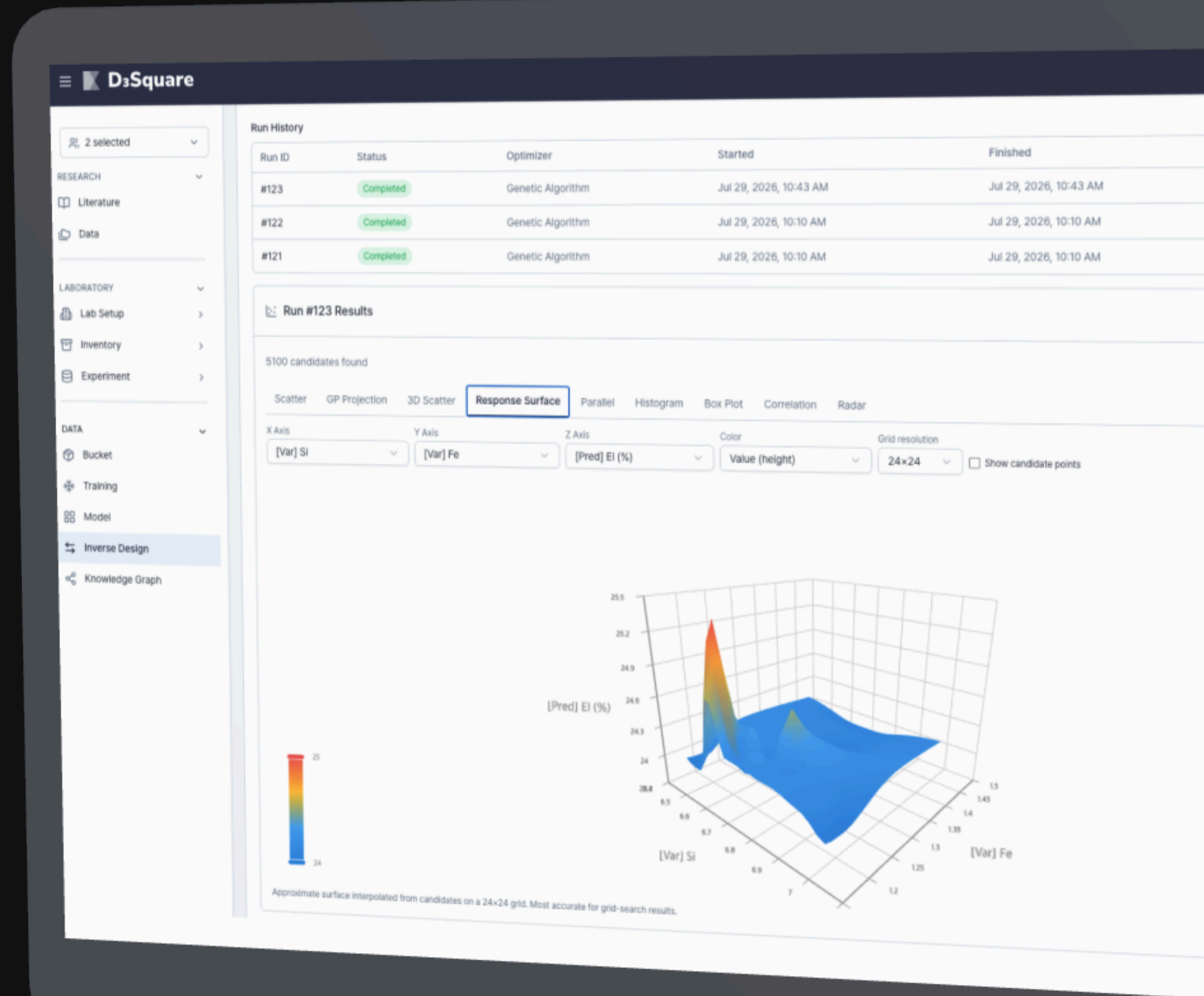
1. 모델 불러오기

2. 역할 매핑

3. 설계 변수

4. 탐색

5. 실행



→ 학습된 모델을 불러와 목적함수 / 제약조건을 정의하면 파레토 프론트가 최적 후보를 자동으로 제안합니다.

Inverse Design

AI 모델 및 역설계 → 소재 설계의 이상

학습

모델 학습 및 검증

여러 모델을 학습하고,
가장 성능이 좋은 모델을 선택합니다.

배포

예측 기능으로 배포

학습된 모델을 예측과 최적화에
바로 활용할 수 있게 합니다.

역설계

목표 설정 → 최적 후보 도출

목표 물성을 정의하면
추천 조성을 제공합니다.

여러 목표를 동시에 최적화하고 파레토 최적 설계 후보를 탐색합니다.

① 목표 선택하기

② 트레이드오프 비교하기

③ 추천 후보 검토하기

조성 · 공정 · 예측 물성

다중 목적 선택

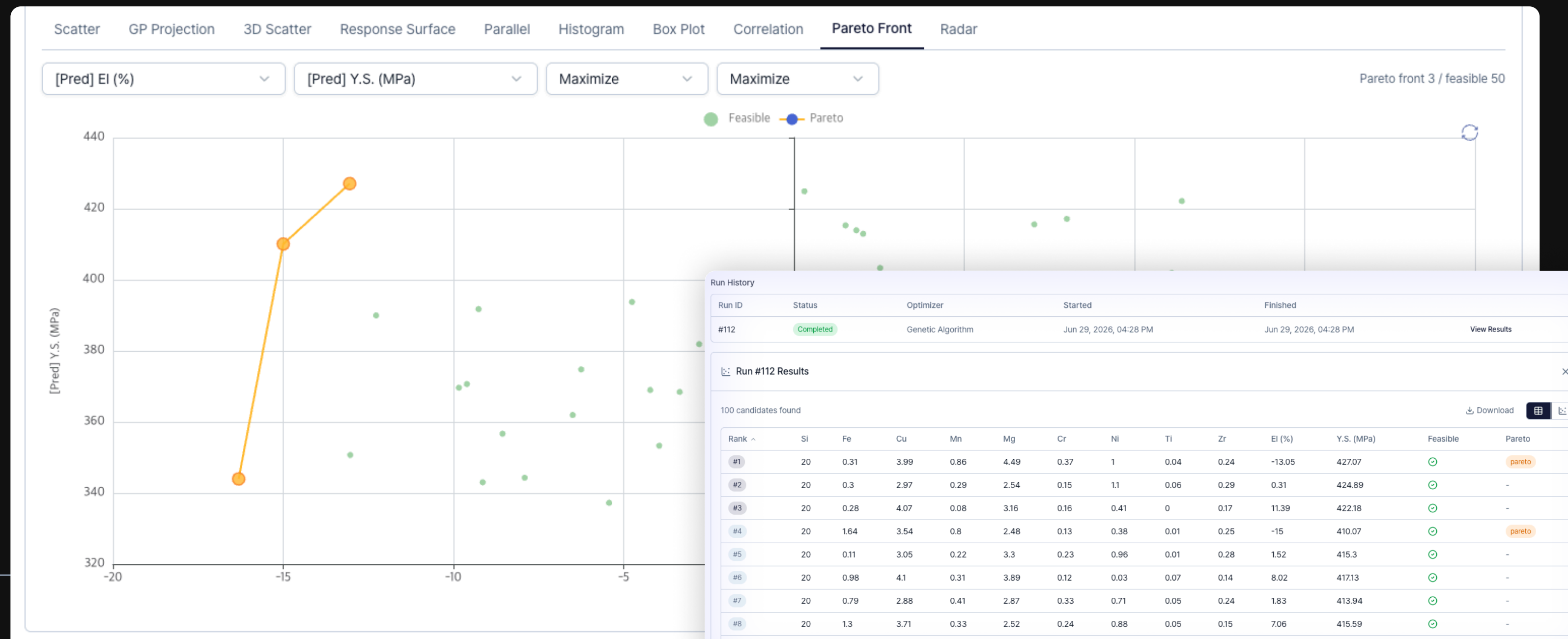
목표 물성과 방향 설정

트레이드오프 비교

균형 잡힌 파레토 후보를 우선 검토

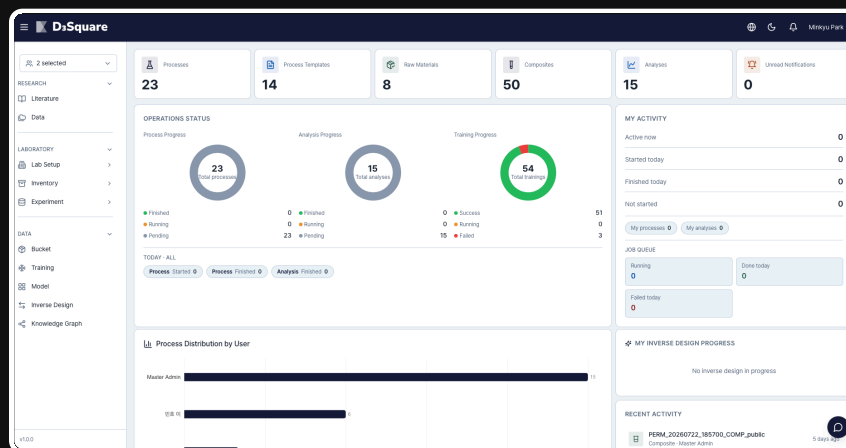
조건으로 되짚기

조성, 공정, 예측결과를 제공



연구 AI 어시스턴트

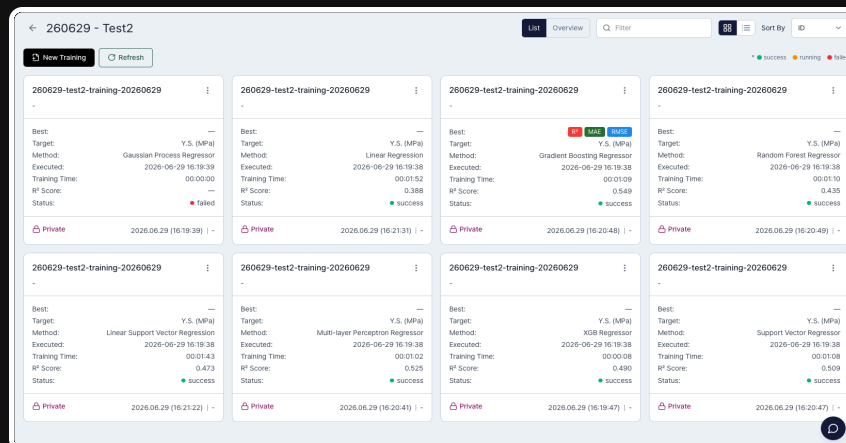
맥락을 이해하는 AI 어시스턴트 - 언제나 상황에 맞게



대시보드 페이지

◆ AI

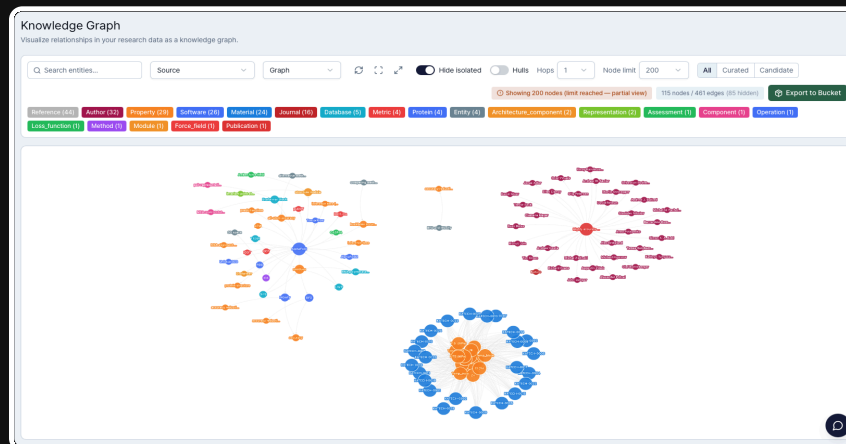
오늘의 연구 브리핑을 확인하시겠어요?



학습 페이지

◆ AI

학습 성능을 비교해 드릴까요?



지식 그래프 페이지

◆ AI

반도체에 활용되는 이차전지 소재와 공정을 추천해 드릴까요?

◆ 페이지 맥락 인식 AI 어시스턴트는 지금 보고 있는 화면을 이해하고 다음에 필요한 단계를 먼저 제안합니다.

D₃S

연구의 새로운 패러다임

데이터와 지식, AI를 연결해 연구 워크플로를 새롭게 정의

기존

파일, 개인 PC, 분리된 시스템에 산재

프로젝트가 끝나면 인사이트도 사라짐

전문가가 별도 환경에서 직접코딩

반복 실험을 통해 조건을 탐색

데이터 관리



문헌 활용



모델 학습



후보 탐색



D3Square 도입 후

실험 · 문헌 · 분석 기록이 하나의 플랫폼에 축적

도메인 온톨로지로 구조화된 지식 그래프

노코드 학습과 자연어 해석으로 팀 전체가 활용

목표 물성 기반 역설계가 조건을 제안

연구 데이터가 곧 전략 자산

연구 데이터를 모으고 연결해 그 가치를 극대화

기존

분리된 파일 및 도구

데이터가 개인 PC, 스프레드시트, 레거시 시스템, 흩어진 프로젝트 폴더에 존재합니다.



D3Square

통합 수집 워크플로우

실험실 설정, 재고, 실험, 문헌, 데이터셋을 하나의 연결된 환경에 담습니다.



결과

재사용 가능한 연구 자산

권한 기반 버킷에 실험 데이터를 추적·버전 관리·공유해 이후 분석과 모델 학습에 활용합니다.

1

통합 수집 UI

실험실 설정, 재고, 실험 설계를 하나의 워크플로우로 연결합니다.

2

자동 데이터 분석

정량·정성 분석, 산점도, 상관관계, SHAP까지 모두 자동화합니다.

3

데이터를 자산으로 만드는 버킷

데이터를 버킷으로 묶어 버전 관리하고 팀 단위로 공유합니다.

4

API 기반 외부 연동

실험실 시스템 및 LIMS와 연동해 수집을 자동화하고 확장합니다.

더 스마트한 연구를 위한 설계

더 빠르고, 더 연결되고, 설명 가능한 연구를 위한 도구

VALUE 1

≡ 엔드투엔드 연결

수집, 분석, 학습, 예측 및 역설계가 하나의 플랫폼에서 연결됩니다.

VALUE 2

📖 소재 연구개발 특화

실험, 재고, 문헌, 물성 및 공정 조건을 맥락에 맞게 다룹니다.

VALUE 3

🧠 설명 가능한 AI

성능 지표, 주요 변수 및 유의 사항을 쉬운 언어로 해석합니다.

VALUE 4

📦 재사용 가능한 지식과 모델

구조화된 문헌 지식과 학습된 모델이 다음 프로젝트의 출발점이 됩니다.

D3Square의 핵심 가치

도입효과 - 연구 데이터 자산화와 데이터 기반 AI 연구를 하나의 연결된 플랫폼으로 실현

도입 후 연구 프로세스

데이터 수집

표준화

AI 분석

역설계

하나의 플랫폼에서

D3Square는 온톨로지 기반 지식 그래프와 AI 조건 추천으로 파편화된 연구 데이터를 연결하고, 자체 데이터 기반의 연구 워크플로우를 실현합니다.

1

연구 데이터의
자산화

조직의 모든 연구 데이터가 유실 없이 구조화되어 축적됩니다.

2

자동화된
AI 분석

값비싼 AI 컨설팅 없이 몇 번의 클릭만으로 AI 모델을 구축합니다.

3

후보 및
조건 검색

자체 데이터와 AI 모델로 역설계를 통해 최적 조건을 탐색합니다.

4

고급 의사 결정

데이터 기반 R&D 전략과 의사결정, 성과를 이후 프로젝트에 재활용합니다.

효율적인 데이터 관리 → 분석 리드타임 단축 → 실험 비용 절감 → 개발 성공 확률 향상

주요 도입 기관

소재 연구개발 활용 사례와 관련된 기업, 연구기관, 대학 레퍼런스

D3Square

기업

NDA

대기업 1
에너지

NDA

대기업 2
이차전지

NDA

대기업 3
금속

연구기관

KATECH
KOREA AUTOMOTIVE TECHNOLOGY INSTITUTE
한국자동차연구원

KIMS 한국재료연구원
Korea Institute of Materials Science

대학

KAIST

KMU KOOKMIN UNIVERSITY

KGU KYONGGI UNIVERSITY
1947

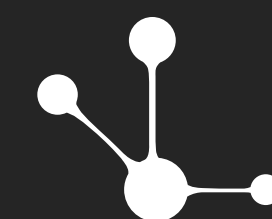
SEOULTECH SEOUL NATIONAL UNIVERSITY OF
SCIENCE & TECHNOLOGY

Chungnam
National
University

KONKUK
UNIVERSITY

SUNCHON
NATIONAL UNIVERSITY

국립공주대학교
KONGJU NATIONAL UNIVERSITY



Virtual Lab

Materials Research on the Cloud

박민규 · Minkyu.park@matsq.com · 010-9164-7073

www.virtuallab.co.kr