

클래스구분에 의한 유기물의 인화점 예측성능 향상에 대한 연구

이기백*

충주대학교 화공생물공학과

(glee@cjnu.ac.kr*)

액체의 화재 및 폭발위험을 나타내는 가장 중요한 물성의 하나인 인화점의 실험 데이터는 그 필요에도 불구하고 실제로 데이터를 확보하는 것이 가능하지 않은 경우가 많다. 이 연구에서는 DIPPR 801에서 얻은 792개 유기물의 인화점 실험데이터로부터 인화점을 예측하는 support vector regression (SVR) 모델을 만들었으며, 예측모델의 독립변수로는 65개 작용기, 분자량의 로그값, 끓는점의 67개를 사용하였다. SVM모델의 3개 매개변수는 particle swarm optimization (PSO)을 이용한 최적화를 이용하여 결정되었다.

이 연구에서는 앞서의 연구에서 제안된 예측방법(한국화학공학회 2010년도 가을 학술대회)을 개선하여 유기물을 비고리(non-ring), 지방족 고리(aliphatic ring), 방향족 고리(aromatic ring)의 3개 클래스로 구분하여 각각 별도의 예측 모델을 구성하였다. 792개 성분 중 비고리는 475개, 지방족 고리는 110개, 방향족 고리는 207개였다. 테스트 데이터에 대해 계산된 평균절대오차는 각 클래스에 대해 각각 5.31-10.02 K, 5.17-19.68 K, 6.73-13.03 K이다. 3개 클래스의 결과를 모두 합하면 훈련데이터, 테스트 데이터, 전체 데이터에 대해 3.97-7.14 K, 4.86-10.71 K, 4.76-7.15 K의 평균절대오차를 얻을 수 있었다. 이는 792개 유기물에 대해 하나의 모델로 추정모델을 구성하였을 때보다 더 향상된 결과이다. 또한, 실험에 의한 오차 범위인 5-8 K와 유사한 수준이었다.