

온도 의존성이 큰 물성 예측을 위한 SVRC-QSPR
모델 개발 및 이를 활용한 liquid viscosity의 추정

양대륙[†]

고려대학교

(dryang@korea.ac.kr[†])

Liquid viscosity를 예측하기 위한 노력은 예전부터 진행되어왔지만 다양한 물질의 특성을 반영할 수 있으면서 높은 정확도를 갖는 모델 개발은 많은 시행착오를 거쳐왔다. 최근에는 분자의 3-D structure를 molecular descriptor로 변환해서 이를 활용하여 물성을 예측하는 QSPR 방법을 도입하였으나 이러한 방법은 온도의 변화에 따라 물성이 바뀔 경우 각 온도에 대해 일일이 QSPR을 새로 수행해야 하는 번거로움이 있었다. 본 연구에서는 SVRC-QSPR 기법을 도입해서 온도 의존성을 해결하고 동시에 분자 구조 정보를 활용해 물질의 liquid viscosity를 추정하는 모델을 제안한다. 기존의 SVRC-QSPR 방법에서는 triple point의 정보가 필수적이었지만 본 연구에서는 triple point가 존재하지 않는 물질에도 적용시키기 위해 최저점을 298.15 K로 대체하고 이에 대한 파라미터 추정을 수행했다. 또한 다양한 통계적인 방법을 이용하여 다중공선성 문제를 해결해서 독립변수간의 상관관계 및 descriptor를 최적화함으로써 기존 모델보다 간단하면서 보다 높은 예측 성능을 갖는 모델을 만들 수 있었다. 기존 모델에서 약 20%의 MAPE 값을 갖는데 비해 본 연구에서는 약 절반 정도의 수준으로 error값을 줄일 수 있었다.