

## Small Data 상황에서의 Deep Neural Network을 이용한 합성 고무의 기계적 물성 예측

김창완, 신동일<sup>†</sup>

명지대학교

(dongil@mju.ac.kr<sup>†</sup>)

빅데이터 시대에 맞추어 재료 소재 분야에도 공개/비공개 실험 데이터를 이용하여 불필요한 실험을 줄이고 소재의 특성 및 기계적 물성을 예측하는 연구가 요구되고 있다. 고무 합성의 경우 설계 실험을 위한 소재 가공 공정에 소요되는 시간이 오래 걸리고, 비용이 크다는 점에서 기계적 물성의 예측이 크게 요구된다. 하지만 합성에 사용되는 화합물의 다양성과 반응의 복잡성으로 인해 이론적 예측은 불가능에 가깝다. 본 연구에서는 공개/비공개 고무 합성 데이터를 통합한 비균일 데이터를 대상으로, Deep Neural Network(DNN)를 이용한 합성 고무의 기계적 물성 예측을 진행하였다. 단일 DNN과 기본 원료의 물성 예측+ 합성 조건으로부터 고무의 물성을 예측하는 복합 DNN을 이용해 대표적으로 측정되는 기계적 물성치인 인장력을 최종 결과값으로 예측하였으며, 예측 네트워크의 최적화를 위하여 네트워크 구조 비교 실험을 진행하였고, 이를 통해 높은 예측도를 도출하고자 하였다. 제안된 모델은 재료 소재 설계 단계에서 시행 오차 횟수를 줄임으로써 많은 비용과 시간을 단축시킬 수 있으며, 나아가 재료 소재 설계 전과정의 지능자동화에 기여할 수 있을 것으로 판단된다.