

그룹기여법과 SVM에 의한 유기물의 인화점 예측법에 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 machine(SVM) 모델을 만들었다. 분자를 구성하는 각 구성요소들이 분자의 물성에 일정한 기여를 한다는 가정을 이용하여 분자의 물성을 예측하는 방법인 그룹기여법을 이용하여 65개 작용기가 이 예측모델의 독립변수가 되었고 분자량, 분자량의 로그값, 끓는점이 추가되었다. SVM모델에서 결정해야 할 3개의 매개변수를 구하기 위해 particle warm optimization을 이용한 최적화를 이용하였다. 훈련데이터의 선택이 예측성능에 영향을 줄 수 있어 임의로 100개의 데이터 세트를 생성하여 테스트하였다. 훈련 데이터, 테스트 데이터, 전체 데이터에 대해 계산된 평균절대오차는 각각 5.20-7.37, 5.88-10.22, 5.71-7.50의 범위를 나타내었으며 그 평균은 각각 6.35, 8.05, 6.69였다. 이는 인화점 예측에 관한 기존 연구들에서 발표된 어떤 연구결과보다도 정확한 예측성능이었다. 다만 각 연구에서 사용된 성분들이 다르고 입력변수가 달라 예측방법의 우수성을 명확히 보였다고 할 수는 없다.