

Application of Machine Learning Techniques to Predict Chemical Leakage

김민수, 홍석영, 최지원, 장교진, 문 일[†]

연세대학교

(minsu77@yonsei.ac.kr[†])

최근 화학 산업의 발전에 따라 현장에서 다루는 화학물질의 종류 또한 급격하게 증가하였다. 위험성을 갖는 화학물질은 소량의 누출만으로도 막대한 영향을 끼친다. 따라서 누출 시에 독성물질의 확산에 관한 연구는 필수적이다. 하지만 실제적인 예측에는 몇 가지 어려움이 존재한다. 우선 화학공장에는 수백 가지 이상의 화학물질이 존재할 뿐만 아니라 풍속, 온도 등의 예측하기 어려운 인자들이 존재하기 때문에 모델의 복잡성이 증가하며, 물질의 확산에 가장 많은 영향을 끼치는 인자를 찾는 것은 쉽지 않은 과정이다. 본 연구에서는 분자량 같은 물질의 성질, 풍속과 같은 주변 환경 등을 포함한 열 가지 변수에 딥러닝 기법을 적용하여 누출 범위를 예측하는 데이터 기반 모델을 수립하였다. 사용한 데이터는 ALOHA 프로그램을 이용한 약 십만 개의 시뮬레이션 데이터로 학습 데이터와 시험 데이터로 나누어 사용하였다. 학습 데이터로는 톨루엔, 벤젠, 아닐린 등 독성이 있는 방향족 화합물을 사용하였고 시험 데이터로는 파라자일렌을 사용하였다. 더 나아가 데이터 변수의 상관관계 분석을 통해 변수 분석을 하지 않았던 연구보다 모델의 복잡성을 감소시켰으며 새로운 데이터에 대한 예측 정확도를 증가시켰다. 본 연구는 화학물질 누출 범위 예측을 함으로써 물질 누출시 대처방안 설계에 유용하게 활용 될 것이다.