

화학반응 빅데이터 분석을 위한  
다변량분석 및 딥러닝 연구와 교육

채희엽<sup>†</sup>

성균관대학교

(hchae@skku.edu<sup>†</sup>)

수많은 반응들이 동시에 일어나는 복잡한 화학반응은 수치모델링이 한계가 있어 실제 반응을 해석하고 예측하기가 어렵다. 이러한 복잡한 반응계중에는 해석하기는 어렵지만 반응의 정보를 포함하는 데이터는 얻을 수 있는 경우가 많다. 반응의 특성을 나타내는 광학적 데이터등을 얻을 수 있는 경우는 다양한 다변량 분석법과 딥러닝 기법을 적용하여 반응 결과를 예측할 수 있다. 본 발표에서는 플라즈마에서 발생하는 광학적 신호를 다변량분석법을 이용하여 신호의 민감도를 높이고, 광학적 신호와 플라즈마의 표면 식각반응 또는 박막 증착 반응의 상관관계를 나타내는 딥러닝 모델로 반응결과를 예측하는 예를 살펴본다. 이러한 예를 바탕으로 화학반응의 빅데이터 분석을 위해서 필요한 교육과정에 대하여 생각해본다.