

## 기계학습을 이용한 화학소재 개발

이재홍<sup>†</sup>, 최우진, 박재성, 조남정, 김수진

한국화학연구원

(jahlee@kriect.re.kr<sup>†</sup>)

신소재 개발은 기간과 비용이 많이 소요되는 것이 일반적이다. 최근에 장기간 쌓아온 다량의 데이터를 이용하여 이를 개선하기 위한 시도가 미국, 일본을 중심으로 활발히 이루어지고 있다. 기계학습(Machine Learning, ML)은 컴퓨터상에서 데이터를 분석하여 패턴, 추세를 찾아내고 이를 개발에 활용하는 방법이다. 화학소재 ML 연구에서는 고품질 데이터의 다량 확보하는 것이 중요하다. 그러나 ML 연구에 필요한 데이터는 양과 품질 면에서 부족한 경우가 많다. 따라서 고품질 데이터 생성, 데이터 전처리, 특성에 영향을 미치는 인자(feature) 발굴 및 적합한 알고리즘을 선정하여 최적의 프로세스를 확립하는 것이 ML 연구의 주요 내용이 된다. 본 강연에서는 화학소재 개발에 ML 적용방법과 사례를 발표할 예정이다. 특히화학소재솔루션센터에서 개발 중인 인공지능기술을 이용한 화학소재 개발 중에서 전기전도성, 열전도성등의 기능성 플라스틱 컴파운드를 중심으로 데이터 확보, 전처리기술, 알고리즘 적용기술에 대하여 발표하고자 한다.