

## Group Contribution Method 및 Support Vector Regression 을 이용한 방향족 화합물 물성치 모델 개발

이창준<sup>†</sup>, 강하영, 이경범<sup>1</sup>

부경대학교 안전공학과; <sup>1</sup>부경대학교 화학공학과

(changjunlee@pknu.ac.kr<sup>†</sup>)

새로운 공정을 설계하거나 기존 공정의 안전한 운영을 위해서는 공정 내에 존재하는 물질의 물성치를 파악하는 것이 매우 중요하다 하지만, 물성치를 파악하기 위해서 직접 실험을 수행하는 경우 잠재적인 위험과 비용 문제로 인해 모든 물질의 실제 데이터를 확보하기는 쉽지 않은 일이다. 본 연구에서는 이러한 어려움을 해결하기 위해 방향족 화합물에 대한 Group Contribution Method를 이용하여 물질의 데이터를 생성하였다. 방향족은 벤젠고리를 포함한 물질을 의미하며, 이 벤젠고리는 물질의 특성에 큰 영향을 주는 특성이다. 모델 수립을 위해 42개의 작용기를 설정하고 147개 방향족 화합물이 가지고 있는 작용기의 개수를 데이터로 생성하였다. 데이터의 특성이 Sparse data 이기 때문에 이에 가장 적합한 Support Vector Machine을 이용하여 물성을 예측하는 모델을 개발하였다. 예측값과 실제값을 비교한 결과 오차는 대략 5% 이내였으며, 이를 통해 방향족 화합물의 물리적 특성이 없는 경우 본 연구에서 개발한 예측 모델을 이용하면 근사값의 물리적 특성치를 얻을 수 있음을 확인하였다. 이 연구 결과는 새로운 방향족 화합물의 물성치를 실험하는 경우 혹은 시뮬레이션을 이용하는 경우 활용이 가능하다.