능동학습 기반 실험 계획법 탐색 성능 향상 방법론: OCM 촉매 실험 사례

오종환, 이장근, 정동인, 김지용†

성균관대학교

(jiyongkim@skku.edu†)

최근 촉매 실험을 수행할 때 인공지능을 활용하여 시간과 비용의 소모를 줄이고 높은 성능의 실험 조건을 탐구하는 실험계획법이 크게 주목받고 있다. 이전에 관찰되지 않았던 새로운 현상이나 최적 조건의 발견을 위해 외삽의 필요성이 대두되고 있다. 그러나 학습 데이터의 범위를 벗어나는 외삽 데이터에 대한 예측의 저하로 탐색의 신뢰성이 떨어진다는 한계점이 있다. 이 문제를 해결하기 위해 본 연구는 능동학습을 활용하여 탐색 성능을 향상시키는 실험 지점을 순차적으로 추천하는 방법론을 제시한다. OCM 촉매 중 하나인 Mn-Na2WO4/SiO2를 예시로 하여 온도, 반응물 비율, 접촉 시간의 변수들로 C2 탄화수소 (에테인, 에틸렌) 수율을 예측하는 모델 2개(데이터 증강 모델, 탐색 모델)를 개발하였다. 데이터 증강 모델은 실험 데이터 학습 후 보간을 수행하여 데이터를 증강시킨다. 탐색 모델은 증강된 데이터 내 데이터 수가 많은 구간을 학습 데이터로 지정 후 탐색 데이터 중 하나의 지점을 추가하여 학습 후 예측을 수행한다. 탐색 모델의 정확도가 높아지게 하는 지점을 찾는 과정을 반복하여 순차적인 실험 지점을 추천한다. 이를 통해 탐색 모델의 성능을 향상시킴으로써 실험계획법에서 탐색의 신뢰성을 향상시킬 수 있을 것이다.