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

오종환, 이장근, 정동인, 김지용†

성균관대학교

(jiyongkim@skku.edu†)

최근 촉매 실험을 수행할 때 인공지능을 활용하여 시간과 비용의 소모를 줄이고 높은 성능의 실험 조건을 탐구하는 연구가 주목받고 있다. 특히 실험계획법을 수행할 때 외삽은 이전에 관찰되지 않았던 새로운 현상이나 최적 조건의 발견을 위해 필요성이 대두되고 있다. 그러나 학습 데이터의 범위를 벗어나는 외삽 데이터에 대한 예측의 저하로 탐색의 신뢰성이 떨어진다는 한계점이 있다. 본 연구에서는 능동학습을 활용하여 탐색 성능을 향상시키는 실험 지점을 순차적으로 제시하는 방법론으로 탐색의 신뢰성을 향상시킨다. OCM 촉매 중 하나인 Mn-Na2WO4/SiO2를 예시로 하여 온도, 반응물 비율, 접촉 시간의 변수들로 C2 탄화수소 (에테인, 에틸렌) 수율을 예측하는 데이터 증강 모델과 탐색 모델을 개발하였다. 데이터 증강 모델은 실험 데이터 학습 후 보간을 수행하여 데이터를 증강시킨다. 탐색 모델은 증강된 데이터 내 일정 데이터 구간을 지정하여 탐색 데이터 중 하나의 지점을 추가 학습 후 예측한다. 능동학습을 통해 탐색 모델의 성능을 향상시킴으로써 실험계획법을 수행할 때 탐색의 신뢰성을 향상시킬 수 있을 것이다.