화학 데이터 활용 머신러닝을 위한 파이썬 프로그래밍

화학데이터기반연구센터

장 승 훈

스터디 그룹 과제

과제명 : (Study Group) 화학데이터 활용 머신러닝을 위한 파이썬 프로그래밍 Study Group

사업구분 : 자체 사업

사업기간 : 2022-03-01 ~ 2022-12-31

참여연구원 : 내부(12), 내부2/학생(8)

스터디 그룹 운영 목표

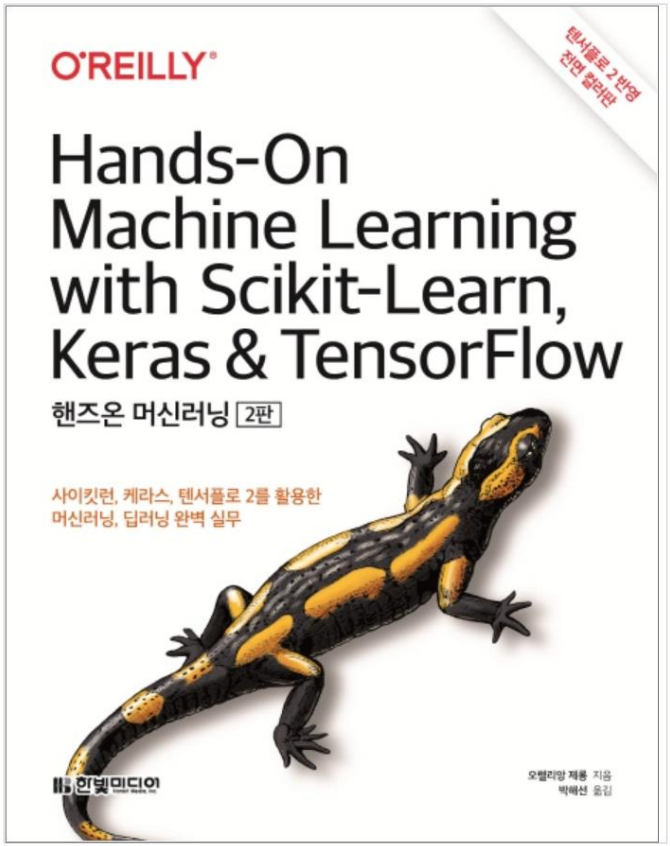
- 인공지능 알고리즘의 원리를 이해하고 실습.
- 파이썬 언어를 통한 자신의 연구데이터를 인공지능 알고리즘에 적용하고 결과를 분석.

스터디 시간 & 장소

- 스터디 시간
  - **매주 수요일 오후 3시 – 4시 반** (1시간 30분)

- 스터디 장소
  - 오프라인 : **W6 연구동 3층 세미나실**
  - 온라인 미팅 정보 : 스터디 시작 전, **메일 또는 카톡을 통해서 공유.**

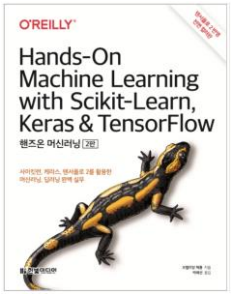
스터디 교재



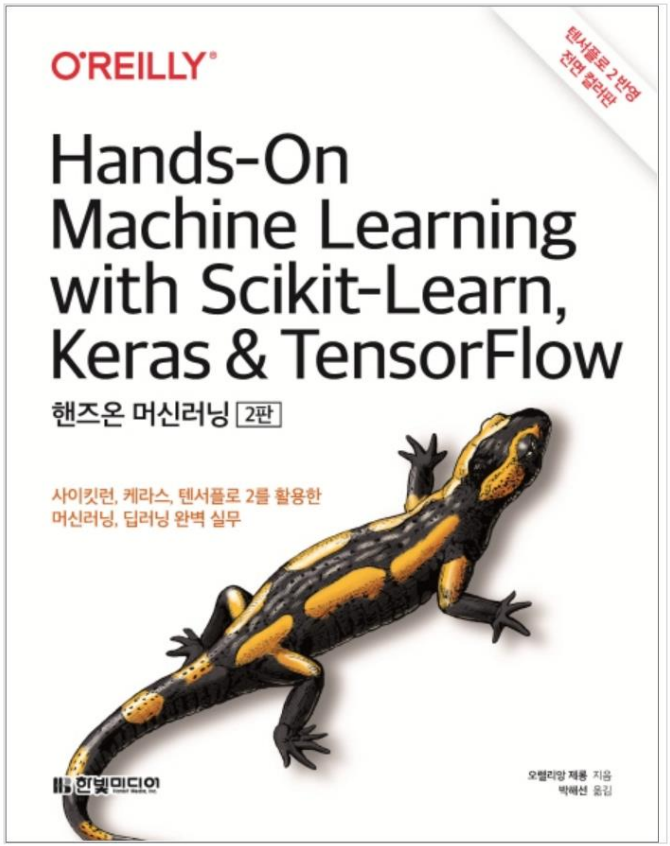
Hands- On
Machine Learning
with Scikit-Learn,
Keras & TensorFlow
(한빛미디어, 오렐리앙 제롱 지음)

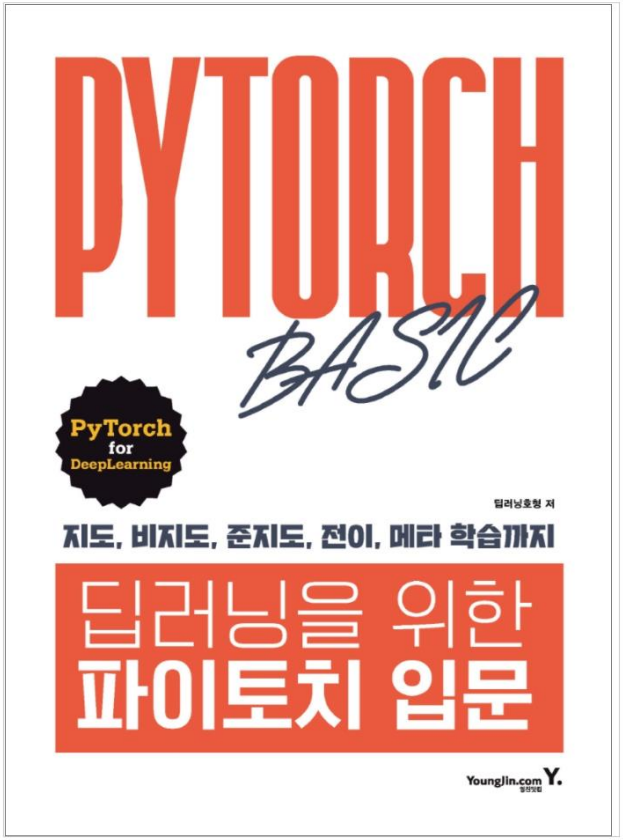
파이썬으로 작성된 오픈 소스 라이브러리
https://scikit-learn.org/stable/
https://keras.io/
https://www.tensorflow.org/

스터디 교재 목차



스터디 교재


O'REILLY
텐서플로 2 반영
전면 컬러판
Hands-On
Machine Learning
with Scikit-Learn,
Keras & TensorFlow
핸즈온 머신러닝 2판
사이킷런, 케라스, 텐서플로 2를 활용한
머신러닝, 딥러닝 완벽 실무
한빛미디어
오렐리앙 제롱 지음
박해선 옮김


PYTORCH
BASIC
PyTorch
for
DeepLearning
딥러닝호형 저
지도, 비지도, 준지도, 전이, 메타 학습까지
딥러닝을 위한
파이토치 입문
YoungJin.com

스터디 참여 연구원

번호	이름	소속	발표	참여방식
1	김동욱	화학데이터기반연구센터	예	오프
2	김민근	화학소재솔루션센터	예	온-오프
3	김영철	환경자원연구센터	예	온-오프
4	김윤호	고기능고분자연구센터	예	온-오프
5	김인	화학소재솔루션센터	아니오	온-오프
6	김진수	화학데이터기반연구센터	예	오프
7	나민주	화학안전연구센터	예	온-오프
8	문상진	에너지소재연구센터	아니오	온-오프
9	안현정	화학소재솔루션센터	예	온-오프
10	양진훈	화학데이터기반연구센터	예	온-오프
11	우미혜	에너지소재연구센터	아니오	온-오프
12	이수현	환경자원연구센터	아니오	온-오프
13	이주현	화학데이터기반연구센터	예	오프
14	장소민	화학데이터기반연구센터	예	오프
15	장승훈	화학데이터기반연구센터	예	오프
16	정지안	화학데이터기반연구센터	아니오	온-오프
17	조남정	화학소재솔루션센터	아니오	온-오프
18	최지원	화학안전연구센터	예	오프
19	한요셉	화학소재솔루션센터	예	온-오프

스터디 진행 일정(매주 2-3명씩 발표)

순서	Chapter	스터디 내용	발표자 (호칭 생략)
1	0	머신러닝 스터디 소개 및 안내 사항 공유	장승훈
2	1	1.1 머신러닝이란? ~ 1.3 애플리케이션 사례 (29~35 p)	김동욱
3	1	1.4.1 지도학습과 비지도학습 (35~43 p)	김민근
4	1	1.4.2 배치/온라인 학습 ~ 1.4.3 사례기반/모델기반 학습 (43~53 p)	김영철
5	1	1.5 머신러닝의 주요도전과제 ~ 1.6 테스트와 검증 (53~64 p)	김윤호
6	2	2.1 실제 데이터로 작업하기 ~ 2.2 큰 그림 보기 (67~75 p)	김진수
7	2	2.3.1 작업환경 만들기 ~ 2.3.3 데이터 구조 훑어보기 (75~85 p)	나민주
8	2	2.3.4 테스트 세트 만들기 (85~90 p)	안현정
9	2	2.4 데이터 이해를 위한 탐색과 시각화 (91~98 p)	양진훈
10	2	2.5 머신러닝 알고리즘을 위한 데이터 준비 (99~110 p)	이주현
11	2	2.6 모델 선택과 훈련 ~2.8 론칭, 모니터링, 시스템 유지보수 (110~124 p)	장소민
12	3	3.1 MNIST ~3.3 성능측정 (127~145 p)	장승훈
13	3	3.4 다중분류 ~ 3.7 다중출력분류 (145~154 p)	최지원
14	4	4.1 선형회귀 ~ 4.2 경사하강법 (157~176 p)	한요셉

스터디 발표 준비 관련 사항

- 온라인 오프라인 자유롭게 참석 가능.
- 순서(이름순 정렬) 대로 발표 진행.
- 향후 발표 순서는 늦어도 발표 1달 전에는 미리 공지 예정.
- 30분 내외로 발표 내용 준비.
- 온라인 참석 발표자는 자신의 PC 환경(마이크,스피커,주변) 미리 체크.
- 별도의 PT 자료 없이 발표해도 전혀 무방.
- 발표 내용은 녹화될 예정, 녹화 파일은 유튜브 비공개 업로드 예정. (비번 공유)
- 메일 외에 공지 및 자료 공유를 위한 단톡방 개설? (의견수렴 후 결정)
- 스터디 진행 중간에 외부 연사 초청 예정. (실험1, 계산1, 인공지능1)
- 자유롭게 스터디에 대한 건의사항 제안.