# 목차

**Part 1. 지능형 화학 공정**

Chapter 1. 화학공정의 지능화

Chapter 2. 지능형 화학공정 변화 트렌드

**Part 2. 인공지능 기초**

Chapter 1. 인공지능 개발 환경

Chapter 2. 데이터 수집

Chapter 3. 데이터 관리 및 가시화

Chapter 4. 데이터 전처리

Chapter 5. 기계학습 기반 예측 및 분석

**Part 3. 화학공정에의 적용**

Chapter 1. 인공지능 기반 물질 개발 및 거동 분석

1. 수성가스 전이 반응 촉매 분석

2. 이온성 액체의 무한 희석 활성도 계수 추정

3. 유기용매 막 분리 소재 분석

Chapter 2. 인공지능 기반 공정 설계 및 최적화

1. 전 과정 평가

2. 탈 실험 단원자 증착 공정 설계

3. 접착용 에폭시 고분자 개발

Chapter 3. 인공지능 기반 공정 운전 및 최적화

1. 수증기 개질 수소 생산 공정 운전조건 최적화

2. 친환경적 폭발성 폐기물 처리 공정 운전 최적화

Chapter 4. 인공지능 기반 공정 제어

1. PID 제어 시스템을 이용한 공정 제어

2. 신경망 모델 기반 예측 제어

3. 강화학습기반 공정제어

Chapter 5. 인공지능 기반 예지보전 및 안전

1. 화학 공정 이상 감지 및 진단

Chapter 6. 지능형 화학 공정의 미래

1. 현장 적용 및 디지털 트윈

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 파 트 | | 챕 터 | | 번 호 | 제목 | 저 작 권 | 대 체 가 능 |
|
| **1** | | **1** | | 1 | 4차산업과 화학산업의 융합: 스마트 화학공정  (Source: https://blogs.nvidia.co.kr/2019/03/19/jetson-and-aws-greengrass/) | O | O |
|  | |  | | 2 | 스마트 팩토리의 요소 기술  (Source: https://iot-analytics.com/industrial-internet-disrupt-smart-factory/) | O | O |
|  | |  | | 3 | 스마트 팩토리 설계를 위한 기술 단계  (Source: https://iot-analytics.com/industrial-internet-disrupt-smart-factory/) | O | O |
|  | |  | | 4 | 미래 스마트 팩토리의 주역: CPS  (Source: https://ieeexplore.ieee.org/document/8701932) | O | O |
|  | |  | | 5 | 미래 화학산업 트랜드  (Source: https://medium.com/@pinpoolsgmbh/the-upcoming-trends-that-will-define-the-chemical-industrys-future-55b44e3267da) | O | O |
|  | |  | | 6 | 높은 시장 대응성을 위한 공정 모듈화  (Source: https://www.chemengonline.com/artificial-intelligence-new-reality-chemical-engineers/) | O | O |
|  | |  | | 7 | 인공지능 기반 화공소재 설계 절차  (Source: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025621000859) | O | O |
|  | |  | | 8 | 인공지능 기반 사고 대응 전략  (Source: https://dorsa.fyi/cs521/) | O | O |
| **1** | | **2** | | 1 | Rstudio.com의 프론트 페이지  (Source: https://www.rstudio.com/) | O | X |
|  | |  | | 2 | Rstudio 어플리케이션 다운로드 페이지  (Source: https://www.rstudio.com/) | O | X |
|  | |  | | 3 | Rstudio의 실행 화면  (Source: https://www.rstudio.com/) | X |  |
| **2** | | **1** | | 1 | Colab 시작 화면  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 2 | Colab 최근 사용 파일  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 3 | Colab 새 노트 생성  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 4 | Colab 새 노트  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 5 | Google Drive 마운트  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 6 | Google Drive 연결  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 7 | Google Drive 마운트 명령어  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 8 | Google Drive 연결 authorization code 입력  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 9 | Matlab 홈페이지  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 10 | Matlab 다운로드 페이지  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 11 | Matlab 라이선스 입력  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 12 | Matlab 실행 화면  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 13 | Matlab 도움말  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 14 | Rstudio 홈페이지  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 15 | Rstudio 다운로드 페이지  (캡처본) | X |  |
|  | |  | | 16 | Rstudio 실행 화면  (캡처본) | X |  |
| **2** | | **2** | | 1 | DIKW 피라미드  (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 2 | 빅데이터의 4V (Source: https://www.ibm.com/blogs/journey-to-ai/) | O | O |
|  | |  | | 3 | 데이터의 형태: 정형, 비정성, 준정형 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 4 | 정형 데이터의 예시 (Source: https://k21academy.com/microsoft-azure/dp-900/structured-data-vs-unstructured-data-vs-semi-structured-data/) | O | O |
|  | |  | | 5 | 비정형 데이터 예시: 사진, 동영상 등 (Source: https://panzura.com/blog/unstructured-data-hard-manage/) | O | O |
|  | |  | | 6 | 준정형 데이터의 예시: 이메일 (Source: https://kinsta.com/knowledgebase/devkinsta/email-inbox/) | O | O |
|  | |  | | 7 | 공정 흐름도 (Source: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236120300880) | O | O |
|  | |  | | 8 | 촉매 반응 데이터 (Source: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319914002407) | X |  |
|  | |  | | 9 | 공정 경제성 데이터 (Source: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236120300880) | X |  |
|  | |  | | 10 | 전산 유체역학 이미지 (Source: https://www.simscale.com/blog/2019/04/cfd-analysis-for-beginners/) | O | O |
|  | |  | | 11 | 공정 block-diagram (Source: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236120300880) | O | O |
|  | |  | | 12 | 공정 개요도 (Source: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1875510019302057) | O | O |
|  | |  | | 13 | 화합물의 구조 (Source: https://www.istockphoto.com/kr/%EB%B2%A1%ED%84%B0/%ED%83%84%ED%99%94%EC%88%98%EC%86%8C-%EB%B6%84%EC%9E%90-%EC%84%A4%EC%A0%95-gm520944898-91167441) | O | O |
|  | |  | | 14 | 수치적 의미에 따른 데이터 분류 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 15 | 질적 데이터 예시 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 16 | 양적 데이터 예시 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 17 | 질적 데이터와 양적데이터를 포함한 공정 정보 (Source: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236120300880) | O | O |
|  | |  | | 18 | 계산 형식에 따른 데이터 구조 (Source: http://venus.ifca.unican.es/Rintro/dataStruct.html) | X |  |
|  | |  | | 19 | 센서 이미지 (Source: https://www.shutterstock.com/ko/image-photo/measurement-sensors-chemical-plant-498295708) | X |  |
|  | |  | | 20 | 문헌 수집 조사 이미지 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 21 | Web of science 웹페이지 (Source: www.webofscience.com) | X |  |
|  | |  | | 22 | Science Direct 웹페이지 (Source: www.sciencedirect.com) | X |  |
|  | |  | | 23 | SCOPUS 웹페이지 (Source: www.scopus.com) | X |  |
|  | |  | | 24 | 촉매의 물리적 특성 데이터 및 이미지 (Source: DOI:10.7316/KHNES.2019.30.2.95) | O | O |
|  | |  | | 25 | WebPlotDigitizer 소프트웨어 홈페이지 (Source: WebPlotDigitizer) | O | O |
|  | |  | | 26 | WebPlotDigitizer 사용 방법 (Source: ) | X |  |
| **2** | | **3** | | 1 | 데이터 확보, 처리 및 저장의 순서도 (Source: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-21569-3\_6 ) | O | O |
|  | |  | | 2 | 효과적 데이터 저장을 위한 데이트베이스 구조 (Source: https://www.boldbi.com/blog/data-warehouse-and-data-mart-recommendations-and-uses) | O | O |
|  | |  | | 3 | 주요 대용량 데이터 자장 플랫폼 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 4 | 데이터 시각화 시 주요 확인 사항 (Source: 한국전자통신연구원) | O | O |
|  | |  | | 5 | 데이터 및 정보 구조화 과정 (Source: 한국전자통신연구원) | O | O |
|  | |  | | 6 | 시간, 관계, 공간 등 데이터 및 정보 시각화 방법 (Source: 한국전자통신연구원) | O | O |
|  | |  | | 7 | 전통적인 데이터 및 정보 시각화 그래프 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 8 | 공간 구조 표현을 위한 데이터 및 정보 시각화: 예, 미국의 주요 토지 사용처 (Source: https://www.bloomberg.com/graphics/2018-us-land-use/) | O | O |
|  | |  | | 9 | 효과적 데이터 및 정보 시각화를 위한 단계 (Source: https://seebear.tistory.com/32) | X |  |
|  | |  | | 10 | 인포그래픽를 이용한 데이터 및 정보 시각화: 예, 바이오매스를 이용한 연료 생산 전략 최적화 프레임워크 설계 개요도 (DOI: https://doi.org/10.1039/C3EE24243A) | O | X |
|  | |  | | 11 | 인포그래픽를 이용한 데이터 및 정보 시각화: 예, CO2를 이용한 액체연료 생산 경로 분석 설계 개요도 (DOI: https://doi.org/10.1039/D1EE01444G) | O | X |
|  | |  | | 12 | 인포그래픽를 이용한 데이터 및 정보 시각화: 예 CO2 저감 및 활용을 위한 전기적 촉매 및 바이오 촉매 제작 개요도 (DOI: https://doi.org/10.1039/D1EE03753F) | O | X |
|  | |  | | 13 | 인포그래픽를 이용한 데이터 및 정보 시각화: 예, 리튬이온 배터리의 저온 활용을 위한 액체 전해질 개발 개요도 (DOI: https://doi.org/10.1039/D1EE01789F) | O | X |
|  | |  | | 14 | 인포그래픽를 이용한 데이터 및 정보 시각화: 예, 석유 시추와 활용에 대한 통계적인 수치 표현 (“Microvector” from Freepik.com) | O | X |
|  | |  | | 15 | 인포그래픽를 이용한 데이터 및 정보 시각화: 예, 수소 생산 및 활용에 관한 기술과 사용처 및 예상 생산 단가 수치 표현 (“Infographics: Sustainable hydrogen: blue and green pathway to decarbonization” from Spgobal.com) | O | X |
| **2** | | **4** | | 1 | 데이터 분석 과정별 소모 시간 (Source: https://www.forbes.com/sites/gilpress/2016/03/23/data-preparation-most-time-consuming-least-enjoyable-data-science-task-survey-says/?sh=20fb99756f63) | O | O |
|  | |  | | 2 | 계층적 데이터 세분화의 예시 (좌) 응집형 세분화, (우) 분리형 세분화. (Source: https://rfriend.tistory.com/198) | O | O |
|  | |  | | 3 | 빠진 퍼즐과 같은 데이터 결측치 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 4 | 이상치의 예시 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 5 | 정규화/표준화를 통한 데이터 품질 향상 예시 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 6 | 필터 기법의 예시 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 7 | 래퍼 기법의 예시 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 8 | 임베디드 기법의 예시 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 9 | 차원 축소 방법론을 통한 데이터 압축 예시 (Source: ) | X |  |
|  | |  | | 10 | 차원 축소의 예시 (Source: ) | X |  |
| **2** | | **5** | | 1 | 기계학습 문제 분류  (출처: https://data-flair.training/blogs/machine-learning-tutorial/) | O | O |
|  | |  | | 2 | 지도학습, 비지도학습, 강화학습 | X |  |
|  | |  | | 3 | 선형 SVM  (출처: https://data-flair.training/blogs/svm-support-vector-machine-tutorial/) | O | O |
|  | |  | | 4 | ANN의 구조  (출처: https://data-flair.training/blogs/artificial-neural-networks-for-machine-learning/) | O | O |
|  | |  | | 5 | 주성분 선택 방법과 시각화  (출처: http://www.nlpca.org/pca\_principal\_component\_analysis.html) | O | O |
|  | |  | | 6 | 오토인코더 구조  (출처: http://solarisailab.com/archives/113) | O | O |
|  | |  | | 7 | 다양한 머신러닝 알고리즘  (출처: A Tour of Machine Learning Algorithms, Jason Brownlee, 2013. (machinelearningmastery)) | O | O |
|  | |  | | 8 | 머신러닝 알고리즘 선택 방법 (출처: https://scikit-learn.org/stable/tutorial/machine\_learning\_map/index.html) | O | O |
| **2** | | **6** | | 1 | 탐험-탐사 간의 균형을 맞춘 기계학습 방법론 (Source: 직접 그림)  탐험과 탐사의 균형을 맞춘 부분에서 가지가 뻗어나와서 베이지안 최적화와 강화학습이 나오는 그림이면 좋겠습니다. | X |  |
|  | |  | | 2 | 간단한 마르코프 결정 과정의 예시 (직접 그림)  각 상태 (S0, S1, S2, S3)가 서로 특정한 확률로 그 다음 상태로 전이된다는 것이 잘 드러나면 좋겠습니다. | X |  |
|  | |  | | 3 | 가우시안 프로세스 예시  (Source: 직접그림 + 일부는 논문에서 발췌)  2차원 좌표계에 점을 3개 찍고, 그 3개 점을 통과할 수 있는 그래프를 무수히 그린다음(희미하게) 그 무수한 그래프를 평균낸 그래프를 빨간색, 80% 의 무수한 그래프가 존재하는 보라색 범위로 그려주세요 | X |  |
|  | |  | | 4 | 베이지안 최적화의 전체 프로세스 (Source: 직접그림)  현재 그림에 써진 모든 말들이 다 들어나게끔 잘 그려주시길 부탁드립니다. | X |  |
|  | |  | | 5 | 스케이트 타는 아이와 강화학습 (Source: 직접그림)  스케이트를 타는 아이가 환경과 상호작용을 하는 그림을 부탁드립니다. | X |  |
| **3** | | **2.1** | | 1 | 전 과정 평가 방법론 개요 | X |  |
|  | |  | | 2 | 시스템 경계 설정 예시 | X |  |
|  | |  | | 3 | 전 과정 영향 평가 결과 예시 | X |  |
|  | |  | | 4 | 전 과정 해석 예시 | X |  |
|  | |  | | 5 | 문제 요약 | X |  |
|  | |  | | 6 | 회귀 분석을 위한 회귀 학습기 | X |  |
|  | |  | | 7 | 샘플 운전데이터 불러오기 | X |  |
|  | |  | | 8 | 불러온 샘플 운전데이터의 항목 설정 | X |  |
|  | |  | | 9 | 응답 변수 및 검증 방법 설정 | X |  |
|  | |  | | 10 | SVM 회귀 모델 설정 및 훈련 | X |  |
|  | |  | | 11 | 훈련된 모델의 함수 생성 | X |  |
|  | |  | | 12 | 모델을 통해 예측한 새로운 운전데이터의 이산화탄소 발생량 | X |  |
| **3** | | **3.1** | | 1 | 수증기 개질 공정의 흐름도 | X |  |
| **3** | | **3.2** | | 1 | 폭발성 폐기물 처리를 위한 유동층 반응기 구조 | X |  |
|  | |  | | 2 | 변수가 선언된 workspace | O |  |
|  | |  | | 3 | 전처리 이후 변수가 저장된 workspace | O |  |
|  | |  | | 4 | 훈련 결과(좌)와 훈련 기록(우) | O |  |
|  | |  | | 5 | 신경망 구조 | O |  |
|  | |  | | 6 | Parity plot을 통한 모델 결과 확인 | O |  |
|  | |  | | 7 | 유전알고리즘 수행 과정 | O |  |
| **3** | | **4.1** | | 1 | 피드백 제어 시스템의 블록 흐름도 예시 | X |  |
|  | |  | | 2 | PID 제어 시스템의 블록 흐름도 | X |  |
|  | |  | | 3 | 문제 요약 | X |  |
|  | |  | | 4 | 공정 출력의 지속적인 진동 현상 | X |  |
|  | |  | | 5 | (a) 1차 함수와 (b) 고차 함수의 반응응답곡선 | X |  |
|  | |  | | 6 | Matplotlib.pyplot 설치하기 | X |  |
|  | |  | | 7 | 조율 인자 최적화 결과 | X |  |
|  | |  | | 8 | 조율 인자 도식화 결과 | X |  |
| **3** | | **4.2** | | 1 | PID 제어를 이용한 다변수 공정의 제어 | X |  |
|  | |  | | 2 | 모델 예측 제어를 이용한 다변수 공정의 제어 | X |  |
|  | |  | | 3 | 모델 예측 제어기의 동작 원리 | X |  |
|  | |  | | 4 | 신경망 모델 훈련 개요 | X |  |
|  | |  | | 5 | 신경망 모델 개요 | X |  |
|  | |  | | 6 | 모델 예측 제어 과정의 블록 흐름도 | X |  |
|  | |  | | 7 | 도식화한 CSTR | X |  |
|  | |  | | 8 | 실행된 Simulink 모델 | X |  |
|  | |  | | 9 | 모델 예측 제어기 설정창 | X |  |
|  | |  | | 10 | 신경망 모델 설정창 | X |  |
|  | |  | | 11 | 신경망 모델 훈련 결과 | X |  |
|  | |  | | 12 | 신경망 모델의 응답 | X |  |
|  | |  | | 13 | 플랜트 출력값과 기준 신호의 비교 | X |  |
| **3** | | **5.1** | | 1 | 테네시 이스트만 공정의 흐름도  (Source: Downs, James J., and Ernest F. Vogel. "A plant-wide industrial process control problem." Computers & chemical engineering 17.3 (1993): 245-255.) | O | X |
|  |  | |  | |  |  |  |