

**『울산·경남지역혁신플랫폼 저탄소그린에너지사업단』**  
**지역기업 애로기술 해결 과제 계획서**

접수 번호	미기재		과제분야	저탄소그린에너지		
과제명	국문	AI기반 그린수소 흡착 데이터 학습 기술 및 기업용 AI 학습 시스템 구축				
	영문	AI-Based Green Hydrogen Adsorption Data Training Method and Industrial AI Training System				
주관기관	울산대학교					
과제 책임자	학과/전공	화학공학부	직 위	조교수		
	성명	가성빈	사무실번호	052-250-2248		
	E-mail	sgasga@ulsan.ac.kr	핸드폰번호	010-4069-8570		
대표 연구원	학과/전공	화학공학부	과정(학기)	5학기		
	성명	정우진	사무실번호	-		
	E-mail	skwn1018@naver.com	핸드폰번호	010-6265-7956		
참여 기업	기업명	책임자	전화	유형		
	문수산업기술(주)	이민규	010-2694-4477	<input checked="" type="checkbox"/> 중소기업 <input type="checkbox"/> 대기업		
프로젝트 시작일	프로젝트 종료일	신청 연구비 (단위:원)	참여 연구원 수			
			공동 연구원	학사	석사	박사
2024. 5. 1.	2025. 1. 31	50,000,000	0	1	0	1
<p>「울산·경상남도지역혁신플랫폼」의 관련 규정 및 제반 사항을 준수하면서 본 저탄소그린에너지 지역기업 애로기술 해결을 위한 기술과제를 성실히 수행하고자 아래와 같이 계획서를 제출합니다.</p> <p style="text-align: center;">2024년 04 월 29 일</p> <p style="text-align: right;">과제책임자 소속 : 울산대학교 성명 : 가 성 빈 (인)</p>						
<p>울산·경남지역혁신플랫폼 저탄소그린에너지사업단장 귀하</p>						

## 지역기업 애로기술 해결을 위한 기술과제 요약서

구분	관련 내용
필요성 및 목표	<ol style="list-style-type: none"> <li><b>그린수소의 중요성:</b> 지속가능한 에너지원으로서 그린수소는 탄소중립 목표 달성에 핵심적인 역할을 함. 특히, 수소 생산 공정에서 수소 부닐 정제는 필수적이며, 이를 위한 효율적인 흡착 공정이 중요함.</li> <li><b>다양한 흡착제 개발 중:</b> 최근 수소 분리를 위한 흡착제의 개발이 활발하게 이루어지고 있으나, 각각의 흡착제마다 특성이 다양하여 적합한 예측 모델의 개발이 요구됨.</li> <li><b>유연한 예측 모델 필요:</b> 기업 입장에서 다양한 흡착제에 대응할 수 있는 유연한 예측 모델이 필요하며, 이는 공정 최적화와 효율성 향상을 위해 중요함.</li> </ol>
과제 수행 내용 (기술 개발/ 인력양성)	<p>다양한 수소 흡착제 데이터에 대한 분석 및 처리방법론 개발 수소 흡착제에 대해 범용으로 적용할 수 있는 AI 모델 학습 알고리즘 개발 소프트웨어를 통해 플</p> <ol style="list-style-type: none"> <li><b>수소 흡착에 대한 데이터 기반 인공지능 모델 개발:</b> 다양한 흡착제에 대한 데이터를 기반으로 유연하게 적용 가능한 예측 모델을 개발</li> <li><b>수소 흡착제에 범용으로 적용할 수 있는 인공지능 학습 자동화 시스템 개발:</b> 위의 인공지능 모델의 학습을 진행시킬 수 있는 자동화 시스템을 개발하여 어떠한 흡착제가 적용되더라도 인공지능 모델을 만들 수 있도록 체계화.</li> <li><b>PSA 공정 시뮬레이션 적용:</b> 개발된 흡착 특성 예측 모델을 PSA 공정 시뮬레이션에 적용하여, 공정 성능을 예측 및 이를 통해 산업적으로 의미 있는 정보를 제공</li> <li><b>웹 어플리케이션 구축:</b> 모델들을 웹 어플리케이션 형태로 구성하여, 산업계 및 학계에서 흡착 데이터를 해석 및 활용 기능 제공</li> <li><b>인력 양성:</b> 울산지역에 수소흡착분리, 머신러닝 기술, 웹 어플리케이션 개발, 클러스터 서버 운영 등 다양한 분야에 대한 전문 인력 양성</li> </ol>
기대효과 및 활용계획	<p><b>기대효과:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 그린수소 흡착제 개발 가속화를 통한 그린수소 기술 선점</li> <li>- 암모니아 기반의 수소생산 공정의 효율성 및 경제성 향상을 통한 국내 수소 에너지산업의 기술적 자립 및 국제 경쟁력</li> <li>- AI 기술을 통한 기술 혁신 및 산업 경쟁력 강화</li> </ul> <p><b>활용계획:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 개발된 AI기반 플랫폼은 산업 현장에서 다양한 수소 분리 공정의 최적화 및 비용 절감에 활용될 예정</li> <li>- 양성된 전문 인력은 수소에너지 분야 뿐만 아니라, 다양한 산업 분야에서 데이터 분석 및 인공지능 모델 개발 전문가로 활동 가능.</li> </ul>
연구성과	SCI 논문 1건

# I. 배경 및 필요성

## 1. 연구 배경

- 고효율적인 흡착제의 선택과 적용은 공정의 효율성을 극대화하는 핵심 요소로 자리 잡고 있음.
- 현재 이러한 기업들은 수소 분리 공정을 최적화하기 위해 다양한 흡착제에 대한 데이터를 지속적으로 수집하고 분석함.
- 이 데이터는 수소 분리의 효율을 높이는 데 중요한 역할을 할 수 있음.
- 문수산업기술을 비롯한 다양한 기업들은 그린수소 생산 공정에 필수적인 계측 장비의 개발과 적용에 지속적인 관심을 갖고 있음

## 2. 필요성

### [당면 문제]

- 기업에서 수집하는 다양한 흡착제 데이터는 방대하나, 각 흡착제마다 적용해야 하는 예측 모델이 다름.
- 수소 분리를 위한 흡착 공정에 대해 분석하기 위해서는 데이터 분석을 통해 적합한 흡착 거동 예측 모델을 선정해야 하나, 이는 매우 복잡한 과정임.
- 흡착제의 성질이 변경될 때 마다 새롭게 분석을 수행해야 하며, 이는 기업 입장에서 많은 시간과 자원을 요구하는 작업임.
- 따라서, 새로운 흡착제 데이터가 제공될 때마다 자동으로 적합한 예측 모델을 생성할 수 있는 시스템의 필요성이 대두됨.

### [국내외 연구 기술 수준 및 현황]

- 국내외 연구 동향을 살펴볼 때, AI 기반의 흡착 공정 최적화 연구는 활발히 진행되고 있음. 특히, 딥러닝 기술을 활용하여 흡착제의 성능을 예측하고 최적의 공정 조건을 도출하거나 [1], 흡착제의 구조적 특성을 흡착 거동으로 연결시키려는 연구가 진행되어 왔음.
- 그러나 현재 진행되고 있는 다양한 흡착제와 변화하는 환경에 범용적으로 적용 가능한 모델은 아직 초기 단계에 머무르고 있음 [2].
- 세계적으로 수소 에너지에 대한 관심이 증가함에 따라 [3], 흡착 공정을 포함한 수소 생산 및 저장 기술 개발에 대한 연구가 가속화되고 있음 [4].
- 이 중, 그린수소의 생산과 관련된 기술은 탄소 배출을 최소화하는 지속 가능한 에너지 시스템 구축을 목표하고 있으나, 현재까지 개발된 흡착제 예측 모델은 주로 물리화학적 분석에 의존한 수학적 표현에 의존하고 있기 때문에 [5], 대규모 데이터를 효율적으로 처리하고 다양한 조건에 신속하게 적용할 수 있는 유연한 인공지능(AI)기반 모델의 필요성이 점점 부각되고 있음.
- 국내에서도 수소 에너지 및 관련 기술 개발에 대한 연구가 활발히 이루어지고 있으나, AI를 활용한 흡착제 데이터 분석 및 예측 모델 개발에는 아직 국제적인 연구 선두국가들에 비해 상대적으로 연구 개발이 활발히 이루어지지 못하고 있음 [6].

- 따라서, 이러한 분야에서의 기술 격차를 줄이고, 국내 산업의 경쟁력을 강화하기 위한 연구가 절실하며, 더 구체적으로는 다양한 흡착제에 대해 범용적으로 적용 가능하며 신속하고 정확한 예측을 제공할 수 있는 AI 기반 플랫폼 개발이 국내외 연구 기술 수준을 한 단계 끌어올릴 수 있는 기회가 될 것임.
- 또한, 이는 국내 수소 에너지 및 관련 산업의 기술적 자립과 국제 경쟁력 강화에 크게 기여할 것으로 기대됨

### 3. 과제의 목표 및 내용

#### 3-1. 연구 목표

- AI 기반의 예측 모델을 개발하여, 다양한 흡착제에 대한 데이터가 입력될 때 유연하게 적응하고 정확한 예측 결과를 제공할 수 있는 모델 구축
- AI 기반 흡착 거동 예측 모델을 개발하여, 수소 분리를 위한 다양한 흡착제에 대하여 데이터가 입력될 때 유연하게 대응하고, 정확한 예측 결과를 제공할 수 있는 모델 구축
- 구축된 모델을 다양한 데이터에 범용적으로 활용할 수 있도록 AI기반 예측모델을 학습시킬 수 있는 플랫폼 구축
- 구축된 플랫폼을 기업 및 다른 연구자와 쉽게 공유하기 위한 웹 어플리케이션 개발

#### 3-2. 연구개발 내용

##### [수소 흡착 거동 예측 AI 모델 구축]

- **데이터 수집 및 전처리 과정:**  
데이터의 질이 모델의 정확도에 결정적인 영향을 미침. 다양한 출처에서 수집된 수소 흡착제 데이터를 정제하고, 일관된 형식으로 통합하는 작업의 필요.
- **모델 설계 및 알고리즘 선택:**  
머신러닝 기술을 활용하여 흡착제의 특성과 흡착 거동 간의 복잡한 관계를 모델링. 주요 변수와 특성을 식별하고, 다양한 알고리즘 (e.g. 회귀 분석, 신경망, 결정 트리 등)의 성능 비교를 통한 최적 모델의 선택
- **모델 훈련 및 검증:**  
대규모 데이터셋을 활용한 모델의 훈련 과정과 교차 검증 절차를 통해 예측 정확도와 일반화 능력 강화. 실험적 흡착 데이터와 시뮬레이션 결과를 사용하여 모델의 신뢰성 평가.
- **성능 최적화 및 업데이트:**  
모델의 지속적인 업데이트와 최적화를 통해 새로운 흡착제 데이터에 대한 예측 성능 개선. 사용자 피드백과 새로운 연구 결과를 반영한 모델의 정기적인 재학습

##### [수소 흡착 거동 예측 AI 모델 구축]

- **플랫폼의 아키텍처 설계:**  
기존 C랩에서 구입한 컴퓨터 클러스터 서버를 통해 고성능 컴퓨팅 리소스와 대규모 데이터 스토리지를 확보. 사용자가 쉽게 접근할 수 있는 인터페이스와 안정적인 데이터 처리 기능의 구현.
- **범용성과 확장성의 증점:**  
다양한 흡착제 데이터에 적용 가능하며, 새로운 흡착제나 흡착 조건이 추가될 경우에도 유

연하게 대응할 수 있는 플랫폼 설계. 사용자가 자체 데이터를 업로드하고 모델을 학습시킬 수 있는 기능의 제공.

- **자동화된 모델 학습 및 최적화 프로세스:**

사용자의 입력을 기반으로 자동화된 데이터 전처리, 모델 선택, 훈련, 검증 및 최적화 과정을 수행. 최적의 예측 성능을 달성하기 위한 하이퍼파라미터 튜닝의 자동화.

- **성능 모니터링 및 사용자 지원:**

플랫폼의 성능 모니터링 도구를 통해 학습 프로세스와 예측 결과의 실시간 추적 및 분석 제공. 사용자 문의와 피드백에 대응하기 위한 지원 체계의 마련.

#### [AI학습 플랫폼을 웹 어플리케이션으로 연결]

- **웹어플리케이션의 개발:** 사용자 친화적인 인터페이스를 통해 연구자와 산업계 사용자가 쉽게 AI 모델을 학습시키고, 흡착 데이터를 분석할 수 있는 웹 기반 플랫폼의 구축.
- **다기능 웹 플랫폼:** 데이터 업로드, 모델 학습, 예측 결과의 시각화, 공정 시뮬레이션 결과 분석 등 다양한 기능을 제공. 사용자가 손쉽게 데이터를 관리하고, 결과를 해석할 수 있는 도구 포함.
- **사용자 경험과 접근성의 최적화:** 직관적인 사용자 인터페이스(UI) 설계를 통해, 비전문가도 쉽게 사용할 수 있도록 함.

#### [인재양성]

- 위의 내용에 USG 학생인 정우진 학생이 핵심 인력으로 투입됨.
- 현재 AI 기반의 데이터 처리 및 AI 학습에 대한 교육은 완료된 상태.
- 이를 수소 분리를 위한 흡착 데이터에 적용하여, 수소 에너지 및 분리·정제 분야로 전문 분야를 점차 확대할 예정.
- 웹 어플리케이션 개발에 대해 본 과제를 진행하며, USG 정우진 학생을 계획 할 예정.
- 학생의 교육 과정에서 만든 설명 자료, 프로그래밍 코드 및 과제 결과물을 바탕으로 다른 학생들에게 전파할 수 있는 종합적인 교육 자료를 만들 수 있음
- USG 에 참여하고 있는 정우진 학생이 다른 학부생들 대상으로 교육을 진행할 수 있도록 계획

### 3-3. 주요결과물 및 정량적 목표

- 수소 흡착 데이터를 잘 설명할 수 있는 AI 모델 개발
- 이를 학습시켜 계속 모델을 만들 수 있는 AI모델 학습 플랫폼 개발
- 플랫폼을 통해 얻은 모델에 대하여, 10 종의 서로 다른 수소 분리용 흡착제에 대해 95% 이상의 정확도를 갖는 모델 개발
- 위의 AI 학습 플랫폼을 웹어플리케이션과 연결하여 웹페이지 운영
- 최소 30일 이상 안정적인 웹페이지 운영

### 3-3-1. 5C LAB 및 연구센터 장비활용 계획

- 2023년도 5C LAB에서 구매한 컴퓨터 클러스터(그림 1)을 활용할 예정.
- 위의 장비를 활용하여 분자 시뮬레이션을 이용하여, 다양한 흡착제에 대한 수소 흡착 평형 데이터를 얻을 수 있음.
- 이러한 흡착 평형 데이터를 학습 데이터로 활용하여, 흡착 평형을 예측하는 테스트 모델을 개발할 수 있음.
- 위의 테스트 모델을 학습시키기 위한 계산 자원으로 활용 가능.
- 인공지능 모델을 학습시키는 알고리즘을 개발하고, 이를 컴퓨터 클러스터에서 활용하여 AI 학습 플랫폼 운영을 위한 계산자원으로 활용 가능

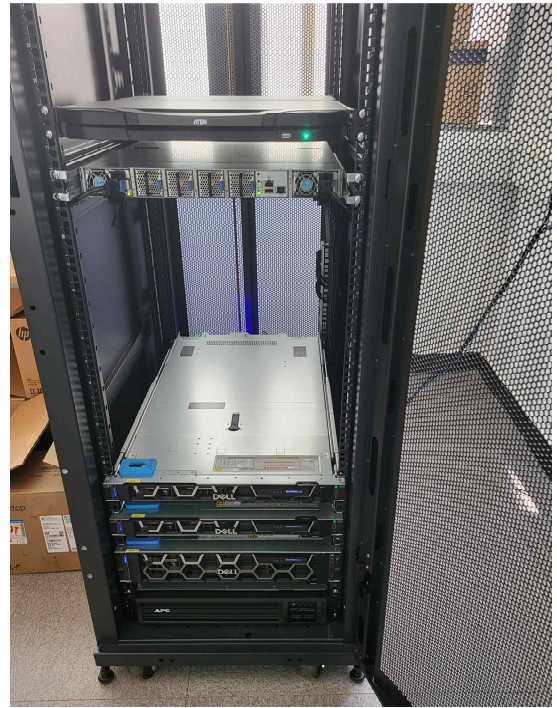


그림 1. 본 과제에서 활용하게 될 컴퓨터 클러스터 서버 (5C LAB 사업에서 구매)

## 4. 산학협력 및 인력양성 방안

### 4-1. 참여 연구원 역할 및 참여방안

울산대학교 가성빈 교수와 USG에 참여하는 정우진 학생이 과제의 목표인 흡착 데이터의 인공지능 학습을 위한 플랫폼 및 웹 어플리케이션 개발을 주도적으로 진행할 예정임. **정우진 학생**의 주요 역할은 다음과 같음

- **흡착 데이터 수집 및 데이터 처리:** 산업계 및 문헌을 통해 수소 분리를 위한 흡착제의 pressure-uptake간의 isotherm 데이터를 수집하며, 다양한 온도에 대한 데이터도 함께 수집함. 이러한 데이터를 AI 학습을 위한 형태로 처리하기 위해 outlier 탐지 및 제거, 표준화, 정규화, Principle component analysis (PCA) 등을 활용함.
- **테스트 AI 모델 제작:** 테스트 흡착 데이터에 대해, 데이터를 정확하게 예측할 수 있는 AI 모델을 구성하고, 그 과정을 일반화함.
- **흡착제에 대한 범용 AI학습 플랫폼 개발:** 위의 테스트 AI모델을 제작하는 과정을 일반화하고, 더 다양한 흡착제 데이터에 적용할 수 있도록,
- **웹어플리케이션 개발:** 테스트 AI 모델을 제작하며 활용했던 분석 방법 및 인공지능 데이터 학습 방법을 체계화·자동화 하며, GUI를 웹의 형태로 입혀 웹어플리케이션으로 개발.
- **교육자료 개발 및 전파:** 과제를 진행하며 정우진 학생의 학습 과정에서 사용된 설명자료, 프로그래밍 코드 및 과제결과물들을 바탕으로, 다른 학부생들에게 AI와 웹 개발에 대한 지식을 전파할 수 있는 종합적인 교육 자료를 개발함. 이 자료는 향후 다른 학부생 및 대학원생에 대한 교육자료로 활용 가능.

### 4-2. 산학협력 활성화 방안

본 과제는 문수산업기술(주)과 긴밀한 산학협력을 통해 진행됨. 특히, 개발되는 웹 어플리케이션의 성공적인 검수 및 피드백 과정은 프로젝트의 핵심적인 부분을 차지함.

- **웹 어플리케이션 검수 및 산업적 관점에서의 피드백 제공:** 문수산업기술은 본 과제의 최종 결과물인 웹 어플리케이션의 기술적 성능 및 산업에서의 적용 가능성에 대한 심도있는 검

수를 진행함. 이 과정에서 실제 산업 현장에서 요구되는 다양한 사항과 인터페이스의 직관성 등 여러 관점에서 피드백을 제공함.

- **현장 적용 및 평가:** 완성된 웹어플리케이션을 실제 산업 데이터에 적용하며 이 과정에서 발견되는 문제점 또는 개선사항에 대해 구체적이고 실질적인 개선안을 통해 웹어플리케이션을 개선함.
- **교육자료 개발 참여:** 대학 및 연구 기관과의 협력을 통해 교육 자료를 개발하고 실행하여, 필요한 인력을 양성함. 이 프로그램은 흡착 기술, 인공지능, 데이터 과학, 웹 개발 등 다양한 분야를 포괄할 예정. 추후 회사에서도 직원 교육에 사용할 수 있음.

## 5. 기대효과

- **범용 AI기반 흡착 예측 모델 제공:** 구체적으로는 다양한 흡착제에 대해 범용적으로 적용 가능하며 신속하고 정확한 예측을 제공할 수 있는 AI 기반 플랫폼 개발이 국내외 연구 기술 수준을 한 단계 끌어올릴 수 있는 기회가 될 것임.
- **그린수소 흡착제 개발 가속화를 통한 그린수소 기술 선점:** 최근 새롭게 개발되는 그린수소 기술을 위해 여러 새로운 흡착제들에 대해 AI 기술을 적용하여 정확하고 효율적으로 예측할 수 있는 모델을 제공함. 이러한 AI 기술 통해 흡착제 선별 및 공정 최적화 과정을 가능하게 함. 이를 통해 효율적인 분리기술을 제공함으로써 공정의 효율성을 높이고 기술의 수준을 높이는 데에 기여함.
- **암모니아 기반의 수소생산 공정의 효율성 및 경제성 향상을 통한 국내 수소 에너지산업의 기술적 자립 및 국제 경쟁력:** 암모니아를 기반으로 한 수소 생산 공정의 효율성 및 경제성 향상은 국내 수소 에너지 산업의 기술적 자립과 국제 경쟁력 강화에 결정적인 역할을 함. 본 과제에서 개발된 AI 모델과 플랫폼은 암모니아 분해 및 수소 흡착 공정의 최적화를 가능하게 하여, 수소 생산 비용을 현저히 감소시킬 수 있음. 이는 수소 에너지의 경제성을 크게 향상시키며, 국내외 시장에서의 경쟁 우위를 확보하는 데 기여. 또한, 고도화된 AI 기술의 적용은 수소 생산 공정의 자동화 및 지능화를 추진하며, 이는 산업 전반에 걸쳐 기술 혁신을 촉진하고 수소 에너지 산업의 지속 가능한 성장을 지원할 것으로 기대됨.
- **AI 기술을 통한 기업의 기술 혁신 및 산업 경쟁력 강화 지원:** 본 과제에서 개발된 AI 기술과 웹 어플리케이션은 기업의 기술 혁신 및 산업 경쟁력 강화를 지원. AI 모델을 활용한 데이터 분석 및 예측 능력은 기업이 빠르게 변화하는 시장 환경에 효과적으로 대응하고, 새로운 기회를 발견하는 데 도움. 특히, 수소 에너지 분야에서는 AI 기술의 적용이 생산 공정의 최적화, 비용 절감, 제품 품질 개선 등에 기여하여 기업의 경쟁력 제고. 이러한 기술 혁신은 기업의 지속 가능한 성장을 가능하게 하며, 국내 산업의 국제 경쟁력을 강화하는 데 중요한 역할을 할 것으로 기대.
- **AI 및 수소 에너지 기술 전문 인력 양성:** 과제를 통해 AI 및 수소 에너지 기술에 대한 전문 인력을 양성하는 것은 산업의 지속 가능한 발전을 위해 필수적임. 정우진 학생과 같은 핵심 인력의 참여와 교육은 후속 세대의 연구원 및 기술자들에게 지식과 경험을 전달하는 데 중요한 역할을 함. 이 과정에서 개발된 교육 자료와 프로그램은 교육 기관과 기업의 인재 개발에 활용될 수 있으며, 이는 국내 수소 에너지 산업 및 AI 기술 분야의 전문 인력 풀을 확대하는 데 기여할 것임. 더불어, 이러한 인력 양성은 산업의 기술 혁신을 촉진하고, 국제 경쟁력을 강화하는 기반을 마련함.

## II. 추진전략 및 추진체계

### 1. 연구개발의 추진전략 및 방법

본 과제는 그린수소 기술 선점, 암모니아 기반 수소생산 공정의 효율성 및 경제성 향상, 기업의 기술 혁신 및 산업 경쟁력 강화, 그리고 AI 및 수소 에너지 기술 전문 인력 양성을 목표로 함. 이를 달성하기 위한 추진 전략 및 방법은 다음과 같음.

- **다학제적 접근:** 수소 흡착제의 개발 및 최적화를 위해 화학공학, 컴퓨터 과학, 데이터 과학의 다학제적 접근을 채택함. 이러한 접근 방식은 흡착제의 효과적인 선별 및 개선 과정을 가속화하고, AI 기반 모델의 정확성과 신뢰성을 높이는 데 기여함.
- **고성능 컴퓨팅 및 데이터 분석:** 대규모 흡착제 데이터의 효과적인 처리 및 분석을 위해 고성능 컴퓨팅 자원을 활용. AI 모델 학습과 테스트를 위한 복잡한 계산 과정은 클라우드 기반 인프라에서 수행되며, 이는 연구의 효율성과 속도를 대폭 향상시킴.
- **개방형 협력 및 산학연계:** 연구의 성공적인 진행과 결과물의 실용화를 위해 산업계, 학계, 연구 기관 간의 개방형 협력을 추진. 특히, 문수산업기술과의 긴밀한 산학협력을 통해 개발되는 웹 어플리케이션의 실질적인 검수 및 피드백 과정이 중요한 역할을 함. 이를 통해 기술의 실용화 가능성을 높이고, 산업 현장에서의 직접적인 적용을 도모.
- **인력 양성 및 지식 공유:** USG(대학생 연구 그룹) 소속의 핵심 인력인 정우진 학생을 비롯한 참여 연구원들에게 실무 중심의 교육과 프로젝트 참여 기회를 제공. 이는 참여 연구원들의 전문성 강화와 함께, 연구 결과의 학계 및 산업계 전반으로의 확산에 기여. 특히, 교육 과정에서 개발된 자료와 코드는 후속 세대의 교육 자료로 활용되어 지속적인 지식 공유 및 인력 양성을 중점으로 활용됨.

### 2. 참여기업 역량

회 사 명	문수산업기술(주)
설 립 연 도	2019
사 업 장	울산시 울주군 범서읍 굴화길 39
매 출	490,256,545 원
품 목	면진테이블



### 3. 기술개발의 추진체계

주관 기관	참여 연구원	담당 내용
울산대학교	가성빈 교수 정우진 학생	수소 흡착 데이터 수집 데이터 처리 테스트 AI 모델 제작 흡착제에 대한 범용 AI 학습 플랫폼 개발 웹어플리케이션 개발 교육자료 개발 및 전파
참여 기업	참여 연구원	담당 내용
문수산업기술(주)	이민규 대표	웹어플리케이션 검수 산업적 관점의 피드백 제공 현장 적용 및 평가 교육자료 개발 참여

### 4. 추진일정

연도	연구 내용	추진 일정(월)											비고
		4	5	6	7	8	9	10	11	12	1		
2024	수소 흡착 데이터 수집												
	데이터 처리												
	테스트 AI 모델 제작												
	범용 AI 학습 플랫폼 개발												
	웹 어플리케이션 개발												
	웹 어플리케이션 적용 및 피드백												
	웹어플리케이션 개선												
	연구내용 정리 및 교육자료 개발												

## Ⅲ. 과제 추진계획

### 1. 과제책임자(주관기관)

#### 1-1. 인적 사항

성명	국 문	가 성 빈	휴대전화	010-4069-8570
	영 문	SEONGBIN GA	E-mail	sgasga@ulsan.ac.kr
직장	기관명	울산대학교	전 화	052-259-2248
	전 공 / 부 서	화학공학전공/ 화학공학부	F A X	-
	주 소	울산시 남구 대학로 93, 울산대학교	직 위	조교수
		1호관 (화학공학관) 410호		

## 1-2. 학력(대학교 이상)

기 간		학 력		학 위 명
부터	까지	대학교	전공명	
209.03	2013.02	연세대학교	화공생명공학	학사
2014.03	2016.02	한국과학기술원	생명화학공학	석사
2014.03	2020.08	한국과학기술원	화공생명공학	박사
최종 학위 논문 제목		Process-level evaluation methodologies and parameter library for CO2 capture adsorbents		

## 1-3. 경력

근무기간		근무처	직위(직명)	직무 내용
부터	까지			
2016.12	2017.06	PSE (런던 본사)	Intern	gPROMS 소프트웨어 라이브러리 개발
2020.09	2022.02	부산대학교	Post-doc	분자 시뮬레이션 기반 흡착제 선별
2022.03	2023.02	한국생산기술연구원	Post-doc	수소 생산 공정 및 분리공정 시뮬레이션

## 1-4. 수상 경력

연도	수상명	수상 내용
2021	논문발표 최우수상	청정기술학회 우수 구두발표상
2016	Excellent Student-paper Award	PSE Asia 2016 우수 구두 발표

## 1-5. 대표적 논문/특허 실적(생애 업적)

구 분 (논문/특허)	논문/특허명	게재지 (권,쪽)	게재 연도 (등록 연도)	역할	Impact Factor	비고
논문	Multidisciplinary high-throughput screening of metal-organic framework for ammonia-based green hydrogen production	Renewable and Sustainable Energy Reviews	2024	주저자 (제1저자)	15.9	
논문	Economic analysis with multiscale high-throughput screening for covalent organic framework adsorbents in ammonia-based green hydrogen separation	Renewable and Sustainable Energy Reviews	2024	주저자 (제1저자)	15.9	
논문	New model for S-shaped isotherm data and its application to process modeling using IAST	Chemical Engineering Journal	2021	주저자 (제1저자)	16.744	
논문	High-Throughput Discovery of Ni(IN)2 for Ethane/Ethylene Separation	Advanced Science	2021	주저자 (제1저자)	17.52	
특허	Advantaged adsorption contactors	U.S. Patent	2022			

## 1-6. 최근 3년간의 연구 업적

구 분 (논문/특허)	논문/특허명	게재지 (권,쪽)	게재 연도 (등록 연도)	역할	Impact Factor	비고
논문	Multidisciplinary high-throughput screening of metal-organic framework for ammonia-based green hydrogen production	Renewable and Sustainable Energy Reviews	2024	주저자 (제1저자)	15.9	
논문	Economic analysis with multiscale high-throughput screening for covalent organic framework adsorbents in ammonia-based green hydrogen separation	Renewable and Sustainable Energy Reviews	2024	주저자 (제1저자)	15.9	
논문	pyAPEM: An all-in-one software package for the automated preparation of adsorption process simulations	Computer Physics Communications	2023	주저자 (제1저자)	6.2	
논문	Carbon-free green hydrogen production process with induction heating-based ammonia decomposition reactor	Chemical Engineering Journal	2023	주저자 (교신저자)	16.74	
논문	Computational fluid dynamics-based optimal installation strategy of air purification system to minimize NOX exposure inside a public bus stop	Environment International	2022	공동저자	13.35	
논문	Design of multistage fixed bed reactors for SMR hydrogen production based on the intrinsic kinetics of Ru-based catalysts	Energy Conversion and Management	2022	주저자 (제1저자)	11.53	
논문	Integrated material and process evaluation of metal-organic frameworks database for energy-efficient SF6/N2 separation	Chemical Engineering Journal	2021	주저자 (제1저자)	16.744	
논문	New model for S-shaped isotherm data and its application to process modeling using IAST	Chemical Engineering Journal	2021	주저자 (제1저자)	16.744	
논문	High-Throughput Discovery of Ni(IN)2 for Ethane/Ethylene Separation	Advanced Science	2021	주저자 (제1저자)	17.52	
특허	Advantaged adsorption contactors	U.S. Patent	2022			

1-7. 최근에 종료된 국가 R&D 과제의 수행 현황

성명	과제명	수행기관	참여 시작일	참여 개월 수	참여율
연구자 번호	부처명/ 사업명	참여유형	참여 종료일	당해연도 과제비	

2. 과제 관련 주요 기자재 보유현황

기자재명	규격	수량	용도	활용도 및 시기
컴퓨터 클러스터	CPU core 80 개	1	계산자원	2023년 취득 후 지속적으로 분자 및 공정 시뮬레이션을 위 해 활용중

### 3. 주요 실적

#### 3-1. 주관기관 및 참여 기업의 주요 실적

구분		내 용	지원기관
주관 기관	관련 분야 연구 수행 실적	관련 연구재단 과제 수행중: [세종과학펠로우십] 암모니아 기반 그린수소를 위한 소재 및 공정 디지털 트윈 연구	과학기술 정보통신부
	주요 성과 (사업화, 특성화 등)	미국 특허: Weston, Simon C., et al. "Advantaged adsorption contactors." U.S. Patent Application No. 17/749,573.	
참여 기업	연구 실적 (지식재산권 포함)	1. 창업성장기술개발사업 _과제명: PTFE 소재를 활용한 시스템반도체 장비의 먼진확보를 위한 소재마찰방식의 지진 가속도 저감장치 개발 2. 구매조건부신제품개발사업(구매연계형) _과제명: 지능형 재난물품(방사능방호 약품, 방호장구)저장·관리·배포 시스템 장치 개발 3. 특허증_먼진장치 4. 특허증_먼진장치의 제조 방법 및 이에 의한 제조된 먼진장치 5. 디자인등록증-정보통신시설비용 먼진기구	1. 중소기업 기술정보 진흥원 2. 중소기업 기술정보 진흥원 3. 특허청 4. 특허청 5. 특허청
	사업화 실적	-	

#### 4. 참여인력 DB

##### 4-1. 주관기관(과제책임자 및 공동연구원)

구분	성명	소속	직위	연락처	이메일
과제 책임자	가성빈	울산대학교	조교수	010-4069-8570	sgasga@ulsan.ac.kr
공동 연구원	-				

##### 4-2. 학생연구원

성명	소속	전공	참여기간	담당업무
USG여부	학위과정	현학년/학기 (22년 9월 기준)	수료 및 졸업예정일	연락처 및 이메일
정우진	울산대학교	화학공학부	'24. 5. ~ '25. 1.	장비운용
○	학사	3학년 1학기	'26년 졸업예정	010-6265-7956 skwn1018@naver.com

## IV. 과제비 집행계획

### 1-1. 당해년도 총괄 내역

(단위 : 원)

구 분		신청 금액
정부 출연금	현금	50,000,000
합 계		50,000,000

### 1-2. 비목별 총괄 내역

(단위 : 원)

항목	비목 \ 구분	정부 출연금	비율(%)
교육·연구 프로그램 개발·운영비	재료비	16,500,000	33
	연구시설·장비비	12,000,000	24
	연구 활동비	12,800,000	25.6
	혁신인재지원금	2,700,000	5.4
성과활용· 확산지원비	성과활용· 확산지원비	6,000,000	12
합 계		50,000,000	100%

- 연구활동비: 회의비, 출장비, 정보 수집비, 사무용품비, 소모품 등
- 성과확산활용지원비: 논문게재료, 세미나 개최비, 홍보비, 시제품 제작비 등

## 2. 비목별 과제비 소요 명세

### 2-1. 재료비

(단위 : 원)

구분	내용	금액	비고
재료비	케이블, 클러스터 약세사리 등 전산소모품	9,000,000	
	전압, 온도, 농도 등 센서류	7,500,000	
합 계		16,500,000	

### 2-2. 연구시설·장비비

(단위 : 원)

구분	내용	금액	비고
연구시설·장비비	워크스테이션, 계산노드, cooling system 등	12,000,000	
합 계		12,000,000	

\* 기자재의 소유권은 총괄대학 또는 중심대학(울산대학교)에 있음

### 2-3. 연구 활동비

(단위 : 원)

구분	내용	금액	비 고
회의비	내부 및 외부 초청 회의	1,500,000	
출장비	국내외 출장 여비, 학회참가비	1,400,000	
정보 수집비			
사무용품비	프린트 용지, 토너, 필기구 등	6,300,000	
소모품			
전문가활용비	자문료	3,600,000	
기타			
합 계		12,800,000	

\* 저탄소그린에너지사업단 사업비 집행지침에 따름



### 2-3. 혁신인재지원금

(단위 : 천원)

과정	성명	월 지원금(A)	참여기간(B)	총액(A×B)
학사	정우진	300	'24. 5. 1. ~ '25. 1. 31.	2,700
합계				2,700

### 2-4. 성과활용·확산지원비

구분	내용	금액	비 고
논문게재료	논문게재료	6,000,000	
세미나 개최비			
홍보비			
시제품 제작비			
기타			
합 계		6,000,000	

### 3. 참여(협력)기업 현황

기업명		문수산업기술(주)	대표자(성명)	이민규
법인등록번호		230111-0307255	사업자등록번호	294-88-01276
설립연월일		2019.02.13.	주업종	면진테이블 제조
기업 유형		소기업	상시 종업원 수	6
재무	총 자산	318,0798,538	주요생산제품	
	자 기 자 본	103,561,722		
	매출액 (2023년)	490,256,545		
	당기순이익	72,121		
주소	본 사	울산시 울주군 범서읍 굴화길 39		052-222-9300
	공 장	울산시 울주군 범서읍 굴화길 39		052-222-9300
실무담당자	소 속	문수산업기술(주)	성 명	이민규
	직 위	대표	전화번호	010-2694-4477
	E- Mail	sgasga@ulsan.ac.kr	FAX	052-222-1808

## V. 참고문헌

- [1] Wang, S., Li, Y., Dai, S., & Jiang, D. E. (2020). Prediction by convolutional neural networks of CO<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> selectivity in porous carbons from N<sub>2</sub> adsorption isotherm at 77 K. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(44), 19645–19648.
- [2] Leperi, K. T., Yancy-Caballero, D., Snurr, R. Q., & You, F. (2019). 110th anniversary: surrogate models based on artificial neural networks to simulate and optimize pressure swing adsorption cycles for CO<sub>2</sub> capture. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(39), 18241–18252.
- [3] Yue, M., Lambert, H., Pahon, E., Roche, R., Jemei, S., & Hissel, D. (2021). Hydrogen energy systems: A critical review of technologies, applications, trends and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 146, 111180.
- [4] Pareek, A., Dom, R., Gupta, J., Chandran, J., Adepu, V., & Borse, P. H. (2020). Insights into renewable hydrogen energy: Recent advances and prospects. *Materials Science for Energy Technologies*, 3, 319–327.
- [5] Al-Ghouti, M. A., & Da'ana, D. A. (2020). Guidelines for the use and interpretation of adsorption isotherm models: A review. *Journal of hazardous materials*, 393, 122383.
- [6] Kim, J. H., Han, S. M., & Yoo, S. H. (2023). Price premium for green hydrogen in South Korea: Evidence from a stated preference study. *Renewable Energy*, 211, 647–655.

## 장비구입요구서 (300만원이상 ~ 3,000만원 미만)

구입 장비명	국문	시뮬레이션용 및 웹서버용 워크스테이션		
	영문	Workstations for simulations and web server		
구입 가격(예상)	480 만원		제조회사(국명)	DELL (미국)
장비 활용 용도 및 사용계획	<div>○ 학생들의 교육용으로 활용</div> <div>○ 자체 개발한 소프트웨어를 이용하여 시뮬레이션을 진행</div> <div>○ 효율적인 계산을 위해 자체 개발한 소프트웨어를 개선 및 보완</div> <div>○ 웹 어플리케이션을 개발</div> <div>○ 웹 어플리케이션의 계제를 위해 서버용으로 사용</div> <div>○ 추후 웹어플리케이션의 유지보수 용도로 활용</div>			
본 사업에서 지원되어야 할 필요성	<div>○ 각 연구 참여 인원마다의 독립된 기기 필요</div> <div>- 각 공정 시뮬레이션을 독립적으로 수행할 수 있는 기기 필요</div> <div>- 여러 데이터에 대해</div> <div>- 시뮬레이션의 경우 다수의 CPU를 장시간 사용하는 일이 많음</div> <div>- 시뮬레이션 수행 시 다른 용도로 사용하기 어려움</div> <div>○ 웹 어플리케이션에서의 워크스테이션 활용 필요</div> <div>- 1개의 웹 서버를 위한 장비가 추가로 필요</div> <div>- 웹사이트에서 오는 계산 요청을 24시간 소화할 수 있는 기기 필요</div> <div>- 계산 요청을 빠르게 처리하여 보여줄 수 있는 고성능의 기기 필요</div> <div>- 장시간의 작동이 필요하므로 예러 및 고장에 강한 기기 필요</div>			
타 교수와의 공동활용 가능성	<div>○ 시뮬레이션 연구에 활용가능</div> <div>- 소프트웨어만 바꾸어 잘 설치하면 본 기기의 높은 CPU 성능을 다른 교수의 시뮬레이션 관련 연구에서 활용 가능</div>			

참여 의사 확인서(기업 및 기관용)																					
과 제 명	AI기반 그린수소 흡착 데이터 학습 기술 및 기업용 AI 학습 시스템 구축																				
주관기관	울산대학교	총괄책임자	가성빈																		
참여기업 책임자	문수산업기술(주)(이민규)																				
<p>위의 기술개발 과제수행을 위하여 제출한 『울산·경남지역혁신플랫폼사업』 기술개발 과제 계획서의 사업내용 및 기관 간 상호 신뢰를 통한 공동 기술개발 수행에 동의하며, 본 과제가 심의를 거쳐 지원대상으로 선정될 시 『울산·경남 지역혁신플랫폼사업』 관련 규정의 제반 사항을 준수하면서 울산·경남 소재 대학, 기업, 공공기관(연구원)이 상호 연계하여 지역 우수인재를 양성하고 취업으로 연결할 수 있도록 노력하겠습니다.</p> <p style="text-align: right;">2024    04월    01일</p> <table style="width: 100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 33%;">(주관기관명)</td> <td style="width: 33%;">(사업단장)</td> <td style="width: 33%;">(총괄책임자)</td> </tr> <tr> <td><u>울산대학교</u></td> <td><u>오 은 석</u> (관인)</td> <td><u>오 은 석</u> (서명/인)</td> </tr> <tr> <td>(참여기관명)</td> <td>(대표자)</td> <td>(참여기관책임자)</td> </tr> <tr> <td><u>울산대학교</u></td> <td><u>오 연 천</u> (관인)</td> <td><u>가 성 빈</u> (서명/인)</td> </tr> <tr> <td>(참여기관명)</td> <td>(대표자)</td> <td>(참여기관책임자)</td> </tr> <tr> <td><u>문수산업기술(주)</u></td> <td><u>이 민 규</u> (관인)</td> <td><u>이 민 규</u> (서명/인)</td> </tr> </table>				(주관기관명)	(사업단장)	(총괄책임자)	<u>울산대학교</u>	<u>오 은 석</u> (관인)	<u>오 은 석</u> (서명/인)	(참여기관명)	(대표자)	(참여기관책임자)	<u>울산대학교</u>	<u>오 연 천</u> (관인)	<u>가 성 빈</u> (서명/인)	(참여기관명)	(대표자)	(참여기관책임자)	<u>문수산업기술(주)</u>	<u>이 민 규</u> (관인)	<u>이 민 규</u> (서명/인)
(주관기관명)	(사업단장)	(총괄책임자)																			
<u>울산대학교</u>	<u>오 은 석</u> (관인)	<u>오 은 석</u> (서명/인)																			
(참여기관명)	(대표자)	(참여기관책임자)																			
<u>울산대학교</u>	<u>오 연 천</u> (관인)	<u>가 성 빈</u> (서명/인)																			
(참여기관명)	(대표자)	(참여기관책임자)																			
<u>문수산업기술(주)</u>	<u>이 민 규</u> (관인)	<u>이 민 규</u> (서명/인)																			

※ 공공기관의 경우 부서장급 서명/인으로 가능