

제 1 부

지능형 화학 공정

제 1 장 ▶ 화학공정의 지능화

제 2 장 ▶ 지능형 화학 공정 변화 트렌드





화공인공지능

제 1 장

ARTIFICIAL INTELLIGENCE
FOR CHEMICAL ENGINEERING

화학공정의 지능화

1. 4차 산업 시대에서 화학공학의 현재와 미래

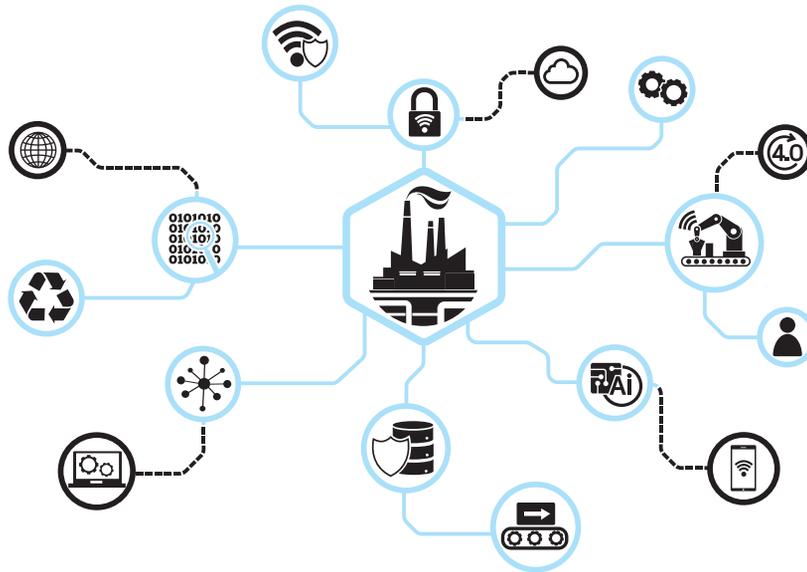


그림 1.1 ▶ 4차 산업과 화학산업의 융합: 스마트 화학공장.

데이터 및 지능정보화 기반 융합 기술은 미래 화학산업의 핵심 가치이다. 지능정보기술의 고도화로 정보통신기술 인프라를 통해 생성·수집·축적된 빅데이터와 인공지능, IoT, 클라우드 등의 융합기술이 화학산업 전반에 활용될 경우, 그 효과는 매우 크다.¹

특히, 대규모 투자설비, 많은 에너지 사용, 복잡한 글로벌 가치 사슬 등 전통적인 화학산업의 특징을 본다면 화학산업의 스마트화는 생산성 향상, 민첩한 시장 대응, 에너지 효율 향상 및 환경 유해 물질 유출 감소, 안전한 환경 구축 등 산업 전반에 혁신을 가져올 수 있다. 특히, ESG (Environmental, Social and Governance) 등 기업의 비재무적 요소의 강화는 물론 효율적 경영 관리,

¹ 이러한 이유로 4차 산업 기술을 파괴적 기술(disruptive technology)로 불리운다.

신규 사업 관리, 전사적자원관리(Enterprise Resource Planning, ERP) 및 원천기술 확보 등 화공 기업의 지속 가능한 발전에 핵심적 기여를 할 수 있다. 따라서 전사(全社)적 통합 및 의사 결정 등 개별 기업의 혁신은 물론 화공산업 생태계 패러다임 변화를 불러올 유도 기술이자 4차 산업혁명의 완성 기술인 핵심 기저 가치이다.

특히, 심화되는 화학산업 시장의 격동성과 친환경 및 안전 등 높은 사회적 요구 환경에서 화학산업의 지속 가능한 성장을 위하여 화학소재 개발의 빠른 생애주기, 화학 플랜트 운전의 자동화, 시장 변화에 유연 대응 가능한 모듈화된 공정개발, 사고 위험 없는 안전한 공정 관리 등의 혁신 기술 도입은 더 이상 미룰 수 없는 절실한 미래형 화공산업의 기술적 요구이다.

2. 스마트 팩토리 및 화공 디지털화를 위한 PSE의 전망과 역할

스마트 팩토리는 전통 제조산업에 사물인터넷(Internet of Things, IoT), Machine Learning (ML), 센서, 클라우드, 빅데이터 등 혁신적인 정보통신기술(Information and Communications Technology, ICT)을 결합하여 제조 설비·공정의 지능화 및 자동화를 가능하게 하며, 이러한 제조 설비의 생산 및 운영 정보가 실시간으로 공유 활용되는 생산 체계를 일컫는다.

스마트 팩토리의 실현을 위해서는 스스로 이상 현상 및 변화 등의 감지 및 자기복구가 가능한 자동화 플랜트 설계와 더불어 가동 진단·복구·유지를 기반으로 하는 종합적인 위기대응 정보기술의 통합이 필요하다. 이는 화학플랜트의 전통적 안전 기법인 모니터링과 샘플링에 IoT를 접목 시켜서 빅데이터 분석을 통한 사고 예측 및 회피 적용 가능하다.

이처럼 스마트 팩토리의 실현을 위한 연구개발은 산업에서 매우 중요하게 여겨지고 있다. 대



그림 1.2 스마트 팩토리의 요소 기술.

표적인 사례는 SAP의 predictive maintenance platform과 augmented reality on the shopfloor가 있다. 이밖에도 Simens의 Amberg plant와 Microsoft의 Jeep Wrangler plant 등이 존재한다.

기존 공정의 자동화 기술은 그림 1.3의 왼쪽과 같이 5단계로 표현된다.

1) I/O (Input/Output signals)

입력된 정보로 지정된 함수에 따라 결과를 출력하는 간단한 입출력 모델. 보통 한 가지 대상을 제어하기 위해 여러 개의 입출력 모델을 함께 사용함.

2) 프로그램 논리 제어기(Programmable Logic Controller, PLC)

산업현장에서 자동 제어 및 감시를 하기 위한 제어 장치. 공정에서의 환경(온도, 압력, 습도 등)을 입력하여 저장된 논리 체계를 따라 환경에 필요한 제어 시그널(온도 제어, 압력 제어, 습도 제어)을 출력.

3) SCADA (Supervisory Control and Data Acquisition)

PLC와 원격 단말 장치와 같은 소프트웨어와 하드웨어의 조합. 유저와 장비 사이의 소통(Human-Machine Interface, HMI)을 위한 장치 제어.

4) 생산관리시스템(Manufacturing Execution System, MES)

제품 주문부터 완성품 출하까지 전생산활동을 관리하는 시스템. 실시간 공정 모니터링을 통한 공정 제어를 가능하게 하는 통합 생산관리시스템.

5) 전사적관리시스템(Enterprise Resource Planning, ERP)

화학 제품 제조와 유통은 물론 인사관리·재무 등 기업 운영 전반의 비즈니스 자동화 관리 시스템.

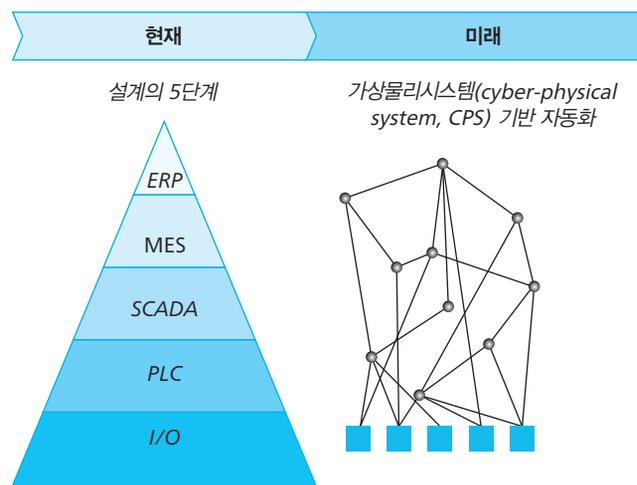


그림 1.3 ▶ 스마트 팩토리 설계를 위한 기술 단계.

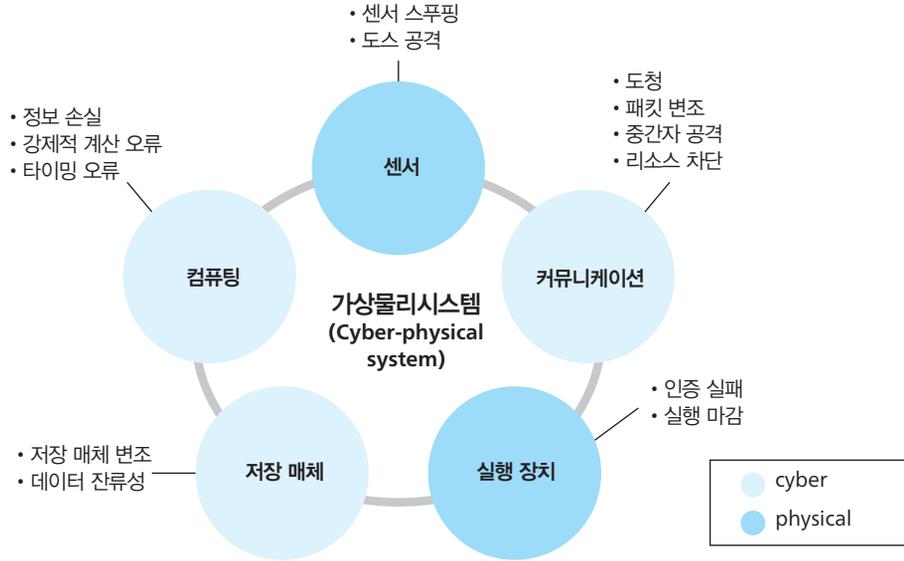


그림 1.4 ▶ 미래 스마트 팩토리의 주역: CPS.

미래에는 그림 1.3과 같이 현재의 경직된 5단계에서 우측의 상호 작용이 있는 CPS (Cyber-Physical System)로 바뀌어야 한다. CPS는 사물 인터넷 기술을 통해 모든 제어·모니터링·예측 시스템들이 서로 유기적으로 융합되어 정보를 교환하고 자동적·지능적으로 장치를 제어하는 시스템이다. 기존 공정 자동화 기술에서 진보된 개념으로, 기존 화학산업과 혁신적인 정보통신 기술의 적용 및 융합을 위한 핵심 기술이다.

CPS는 컴퓨팅 장치와 사람·기계장치를 통합하기 위한 사이버 시스템(cyber system)-물리 시스템(physical system) 네트워크 기반 자율제어 시스템이다. 따라서 CPS는 적응형·지능형·실시간·분산기술이 융합된 제어 시스템이라는 특징이 있다. 핵심 필요 기술로서 하이브리드 모델링 기술, 시뮬레이션 및 검증 기술, 자율제어 기술, 사이버보안, 통신 및 연동 기술, 무선센싱 등이 있다.

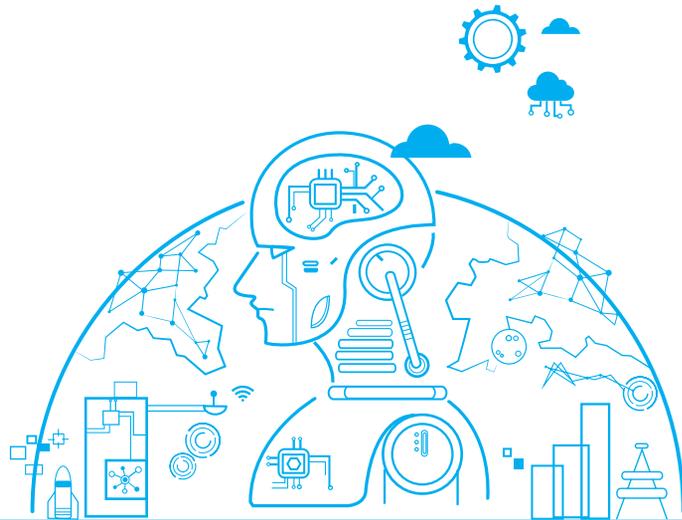
스마트 제조 CPPS (Cyber Physical Product System)는 제조를 위한 공정 기술로, 제품 기획/수요조사·공정 설계·생산·출시·유통의 과정을 가능하게 하는 발전된 CPS이다. 여기에는, 제조 공정에 핵심적인 인터넷 기술들(사물인터넷 산업보안강화 기술·cyber 제품 설계 기술·대량 생산 공정시스템 기술·지능화된 자율 제어)이 포함된다. 스마트 생산 및 스마트 유통 기술을 가능하게 하는 고신뢰성의 산업네트워크 기술이라고 할 수 있다.

CPS는 각 산업에서 가치 사슬에 존재하는 시스템들 간 연동을 가능하게 하여 조기 가치사슬 통합·신사업 발굴·산업생태계 창출 효과가 있다. 그러므로 4차 산업혁명의 가속화와 함께 세계 주요 국가의 정부, 주요 기업들의 참여로 CPS 기술은 향후 가파른 수요가 예상된다.

제 3 부

화학산업에서의 인공지능

- 제 1 장 ▶ 인공지능 기반 물질 개발 및 거동 분석
- 제 2 장 ▶ 인공지능 기반 공정 설계 및 최적화
- 제 3 장 ▶ 인공지능 기반 공정 운전 및 최적화
- 제 4 장 ▶ 인공지능 기반 공정 제어
- 제 5 장 ▶ 인공지능 기반 예지보전 및 안전





화공인공지능

인공지능 기반 물질 개발 및 거동 분석

1. 수성 가스 전이 반응 촉매 분석

학습 내용

- [문제] 수성 가스 전이 반응을 이용한 촉매 반응 이해
- [방법] 예제 풀이를 통한 인공 신경망 방법론 학습
- [응용] 인공 신경망 방법론 기반 촉매 성능 예측
- [요약]
 - 수성 가스 전이 반응 개념 및 촉매 설계 설명
 - 데이터 전처리를 위한 데이터 편집 및 변환
 - 인공 신경망 기반 촉매 성능 예측 모델 개발

최근 수소가 환경 친화적인 차세대 에너지 전달체로 부각됨에 따라 화학산업에서도 다양한 수소 생산 기술에 관한 연구가 진행되고 있다. 특히, 수소 생산을 위한 대표적인 반응인 수성 가스 전이 반응(Water Gas Shift Reaction, WGS)은 고순도 수소를 생산하는 기술로, 수소 대량 생산 기술로서 그 역할이 매우 중요하다. WGS는 합성가스 내의 일산화탄소와 수증기가 반응하여 수소와 이산화탄소를 생성하는 반응으로, 다음과 같은 반응식을 따른다.



고효율 WGS 공정의 핵심은 상기 평형 반응을 열역학적 평형 전환율의 한계까지 끌어올리기 위한 고성능 WGS 촉매 개발이다. 이때, 촉매의 성능은 활성(전환율, 선택도) 및 안정성(기계적 내구성, 열적 안정성)으로 대표된다. 현재 촉매 성능 개선을 위한 연구가 활발히 진행되고 있으나, 촉매 재료와 반응 운전 조건 간의 복잡한 상호관계로 인해 실험을 통한 시행착오법으로 최적의 촉매를 도출하는 데 어려움이 있다. 만약, 수치적으로 촉매 재료와 운전 조건의 변화에 따른 촉매의 성능 변화를 정확히 예측 가능하다면, 기술 개발에 필요한 시간을 효과적으로 단축할 수 있을 것이다. 인공지능은 고차원 데이터를 처리할 수 있는 알고리즘으로, 복잡계 해석을 위한 유용한 방법론이다. 본 실습에서는 인공지능 알고리즘을 이용하여 고성능 WGS 촉매의 성능을 예측하고 분석하는 방법을 익힌다.

[문제]

촉매 물질 조건(금속 함량, 가공 환경)과 운전 조건(반응물 조성, 온도, 압력 등)을 이용하여 촉매 성능 예측 모델을 개발하고 모델의 정확도를 평가하라.

- “코드 및 데이터/4-1. WGR.csv” 데이터를 활용하라.
- 학습 및 평가 데이터는 7:3 비율로 분리하라.
- 95% 이상의 정확도를 갖는 모델을 개발하라.

[방법] 인공지능예제

Q1. 인공지능을 활용하기 위한 라이브러리를 조사하라.

A1. 인공지능 학습을 위한 다양한 라이브러리가 존재한다.

```
Library('neuralnet')
Library('H2O')
Library('keras')
```

Q2. 인공지능 학습에는 다양한 하이퍼파라미터가 선행적으로 결정되어야 한다. 이들 중 모델 정확도와 직접적으로 연관 있는 하이퍼파라미터 중 활성화 함수에 대해 설명하라.

A2. Activation function은 인공지능의 node를 활성화시키는 활성화 함수로, input된 가중치 합을 출력 신호로 변환하는 함수이다. 인공지능에서 이전 레이어에 대한 가중 합의 크기에 따라 활성 여부가 결정된다. 목적 및 역할에 따라 선택적으로 사용된다.

[응용] 인공지능 기반 촉매 반응 예측

예제는 R4.0.2 프로그래밍 언어를 기준으로 Rstudio 개발 환경에서 작성되었다. 예제 실습을 위해 Anaconda 프로그램을 다음 URL로부터 다운로드할 수 있다.

- <https://www.anaconda.com/>

Q3. 데이터를 Jupyter 환경으로부터 불러오고 데이터를 확인하라.

A3. 다음과 같은 code를 사용하여 불러올 수 있다.

```
WGR <- read.csv(file.choose(), header = T)
```

‘read.csv’ 함수를 사용하여 데이터 파일이 저장된 장소를 직접 찾아 ‘WGR’ 이름으로 데이터를 불러온다. 해당 데이터는 column 이름이 이미 존재하는 데이터로 ‘header = T’ arg를 통해 이를 밝힌다.

```
View(WGR)
```

‘view()’ 함수를 사용하여 데이터를 확인할 수 있다.

```
WGSR_re <- WGSR
```

‘WGSR’ 데이터의 손상을 막기 위해 ‘WGSR_re’ 데이터를 생성하여 사용한다.

Q4. 인공지능 학습을 위해서 데이터의 단위를 무시한 상대적 영향력을 파악할 필요가 있다. 촉매 반응 데이터를 표준화. 또한, 데이터의 결측치를 제거하라.

A4. 다음과 같은 절차를 통해 표준화 및 결측치 제거가 가능하다.

```
WGSR_scale <- scale(WGSR_re)
```

‘scale()’ 함수를 사용하여 ‘WGSR_re’ 데이터를 전처리한다.

```
WGSR_scale <- data.frame(replace(WGSR_scale, is.na(WGSR_scale), 0))
```

‘replace()’ 함수를 사용하여 ‘WGSR_scale’ 데이터의 공백값 (‘NA’)를 제거하도록 한다. 이때, ‘is.na’ arg를 활용해 해당 데이터의 공백값만을 인식시킬 수 있다.

Q5. 인공지능 기반 예측 모델의 정확도를 검증하기 위해 데이터를 모델 학습 데이터와 모델 검증 데이터로 분할하라.

A5. 다음과 같은 절차를 통해 데이터의 분할이 가능하다.

```
smp_size <- floor(0.7 * nrow(WGSR_scale))
train_ind <- sample(seq_len(nrow(WGSR_scale)), size = smp_size)
```

‘floor()’ 함수를 사용하여 ‘WGSR_scale’ 데이터의 행 개수의 70%에 해당되는 값을 생성한다. 이 값은 ‘smp_size’로 명명하여, 후에 무작위 데이터 추출에 사용한다. ‘sample()’ 함수를 사용해서 ‘WGSR_scale’ 데이터로부터 행 번호를 무작위 추출을 진행한다. ‘size’ arg를 ‘smp_size’로 설정하여 총 70% 데이터를 추출한다. ‘seq_len()’ 함수를 통해 1부터 임의의 지정된 숫자까지 순차 데이터를 생성할 수 있다.

```
neural_train <- WGSR_scale[train_ind,]
neural_test <- WGSR_scale[-train_ind,]
```

임의로 추출된 행 번호(‘train_ind’)를 사용해서 ‘WGSR_scale’ 데이터의 행들을 추출한다. 70%가 학습에 사용할 데이터로 ‘neural_train’으로 명명한다. ‘train_ind’ 행 번호를 제외한 데이터는 검증에 사용될 데이터이므로 ‘neural_test’로 명명한다.

```
name_col <- c(colnames(WGSR_scale))
name_col <- name_col[1:38]
```

인공신경망 학습을 위해 변수 이름을 지정하는 과정이 필요하다. ‘WGSR_scale’ 데이터의 열

이름을 추출하여 'name_col'로 명명한다. 해당 'name_col'의 38번까지가 독립변수이므로 해당 부분을 추출하여 'name_col'을 재정의한다.

Q6. 인공 신경망 학습을 시도하고 정확도를 검증하라.

A6. 다음과 같은 절차를 통해 인공 신경망 학습을 시도할 수 있다.

```
vari_name <- as.formula(paste('CO.Conversion ~',
                             paste(name_col,
                                     collapse = '+')))
```

'CO.conversion'은 데이터의 종속변수에 해당한다. 'paste()' 함수를 사용해서 'name_col'의 변수들을 '+' 기호로 연결된 일련의 문장으로 만든다. 그리고 'CO.conversion~'과 결합한다. 해당 문자열을 'as.formula' 함수를 통해 수식으로 인식시키고, 'vari_name'으로 명명한다.

```
set.seed(7)
WGSR_scale_neural <- neuralnet(vari_name, neural_train,
                               hidden = c(34, 10, 8, 8, 1))
```

'set.seed()'를 '7'로 지정하여 계산의 무작위성을 고정한다. 'neuralnet()' 함수를 사용해서 인공신경망 모델을 구축한다. Arg로 'vari_name'을 사용해 데이터의 독립 변수 및 종속 변수 관계를 지정하고, 'neural_train' 데이터를 사용한다는 것을 명시한다. 'hidden' arg를 통해 인공신경망의 구조를 설정한다. 구조는 다섯개의 은닉층과 각 층에 해당하는 node인 34-10-8-8-1로 구성된다. 해당 인공신경망을 'WGSR_scale_neural'로 명명한다.

```
WGSR_scale_neural$result.matrix
```

'\$result.matrix'를 사용하면 'WGSR_scale_neural'의 weight, bias, 그리고 학습 결과를 확인할 수 있다.

```
pred_result <- data.frame(compute(WGSR_scale_neural, neural_test[,1:38]))
pred_result_train <- data.frame(compute(
    WGSR_scale_neural, neural_train[,1:38]))
```

'compute' 함수를 통해 'WGSR_scale_neural' 모델을 사용할 수 있다. 'neural_test' 데이터의 독립변수 부분을 지정하여 예측해 보도록 한다. 마찬가지로 'neural_train'도 예측하여 학습 정확도를 확인해보도록 한다.

```
Pred_train_unscaled <- data.frame(mean(WGSR$CO.Conversion) +
                                   pred_result_train$net.result * sd(WGSR$CO.Conversion))
neural_train_unscaled <- data.frame(mean(WGSR$CO.Conversion) +
                                    neural_train$net.result * sd(WGSR$CO.Conversion))
Pred_result_unscaled <- data.frame(mean(WGSR$CO.Conversion) +
```

```

pred_result$net.result * sd(WGSR$CO.Conversion))
neural_test_unscaled <- data.frame(mean(WGSR$CO.Conversion) +
  neural_test$net.result * sd(WGSR$CO.Conversion))

```

예측된 데이터는 scale된 값이므로 unscale할 필요가 있다. 따라서 수식을 역전시켜 예측된 학습 데이터와 검증 데이터의 원본 값을 추출하도록 한다.

```

rsq(neural_train_unscaled[,1], pred_train_unscaled[,1])
Metrics::mse(neural_train_unscaled[,1], pred_train_unscaled[,1])
Metrics::rmse(neural_train_unscaled[,1], pred_train_unscaled[,1])
rsq(neural_test_unscaled[,1], pred_test_unscaled[,1])
Metrics::mse(neural_test_unscaled[,1], pred_test_unscaled[,1])
Metrics::rmse(neural_test_unscaled[,1], pred_test_unscaled[,1])

```

정확도 파악을 위해 각 unscale된 데이터의 R^2 , MSE, RMSE 값을 확인한다.

결론

이 장에서는 인공신경망 기법에 기반한 WGSR 촉매 성능 예측 모델을 개발하고, 정확도를 평가하였다. 또한, 모델 개발을 위한 데이터 전처리 과정으로 데이터 표준화를 진행하였으며, 인공신경망의 하이퍼파라미터를 조절하여 모델 정확도 개선 방법을 학습하였다. 이를 통해 높은 모델 정확도를 확보하기 위한 과정으로, 데이터 전처리와 모델 하이퍼파라미터 튜닝의 중요성을 이해하였다.

학습 결과

- **학습 내용**
고성능 수성화 전이 반응 촉매 개발을 위한 인공 신경망 기반 예측 방법론 익히기.
- **학습 결과 확인하기**
인공 신경망 알고리즘의 활용 방법 및 예측 모델 학습을 위한 데이터 구조화 익히기.
- **학습 결과 응용하기**
이 장의 학습 내용에 기반하여 촉매 성능의 예측과 예측 알고리즘의 정확도 향상시키기