

반응위험성을 고려한 지식그래프 추론과 역합성 예측 융합기반의 최적 합성경로 생성

이나경, 정준수, 신동일[†]

명지대학교

(dongil@mju.ac.kr[†])

최적 합성경로 설계는 적은 비용으로 새로운 화학물질 및 반응을 발견하여 공정의 고도화를 좌우하는 중요한 문제이다. 이에 따라, 화학 빅데이터를 활용한, 미탐색 신규반응의 예측 및 생성을 지원하는 AI 시스템 연구는 활발하다. 그러나 공정 설계의 주요 문제인 안전과 비용 모두를 고려한 반응경로 최적화 지원시스템은 미흡한 실정이다. 본 연구는 빅데이터 반응 지식 그래프 탐색과 기계학습 기반 retrosynthetic 예측 융합하여, 반응 위험성을 기준으로 최적화된 합성경로를 제공하는 AI 시스템을 제안한다. 본 시스템은 반응경로 위험성 분석을 포함한 제약조건(금지물질)이 포함된 경로 탐색이 가능하다. 그룹기여도 방식의 계산법을 통해 물리적 물성을 예측하여 물리적 위험성을 분석했고, 합성경로 상의 물질에 대한 반응 작용기 그룹을 인식하여 반응 위험성을 분석했다. 결과적으로 기존 한 가지 평가에 집중된 시스템과 달리, 위험성과 경제성 분석 모두를 통합하여 합성경로를 제안한다. 또한 기존 위험성 분석 시스템과 비교했을 때, 더 많은 물질에 대한 반응 작용기 그룹의 인식이 가능함을 보였고, 반응 작용기 그룹 쌍의 반응 위험성 정보로부터 물질 쌍에 대한 반응 위험성 분석이 가능함을 보였다.