

## 반응 위험성 분석 및 사고방지를 위한 AI기반 합성경로 탐색 시스템

정준수, 신은지, 신동일†

명지대학교

(dongil@mju.ac.kr†)

연구실 실험, pilot plant 및 반응기 운전 중 화학물질에 의한 안전사고가 발생한다. 합성 실험을 시작하기 전 사고 예방을 위해 관련 정보들을 찾아볼 필요가 있으며, 공정설계 단계에서도 반응 폭주 예방을 위한 반응정보는 필수적이다. 합성 관련 정보는 인터넷을 포함해 다양한 source가 존재하지만, 검색에 오랜 시간이 걸리고, 합성법마다 사용되는 물질도 달라 적정 경로 선택의 어려움이 있다. 이러한 문제를 해결하기 위해 연구자들의 합성 경로 검색 시간 단축과 합성 시 존재할 수 있는 위험성 및 중간생성물질들을 확인하는 데 도움을 주고자 합성 경로 탐색 시스템을 제안하였다. 본 연구에서 제안한 탐색 시스템은 Python 패키지인 Selenium을 사용한 Web scraping으로 인터넷에 존재하는 정보를 수집하여 DB를 자동으로 갱신한다. 경로 탐색은 Depth-First Search에 기반하여 목표 물질을 기준으로 탐색을 진행하면서, 유해화학물질 등급, 수율 등으로 가중치를 설정하여, 정해진 경로 제한 수치내에 있는 모든 합성 경로를 제안한다. 본 패키지는 open source로 공개하여 무료 사용이 가능하며, 각자의 연구 목적에 맞게 비공개 데이터를 추가하여 확장 할 수 있다. 개발시스템은 연구자들이 제안된 경로를 참고하여 더 안전한 방법을 찾고, 사고 예방에 도움을 줄 것으로 기대된다.