

《 화학 임의세특 보고서 》

하이에듀

주제	ai를 이용한 화학합성
관련 단원	
요약	탄소화합물에 대해 공부한 뒤, ai가 화학 분야에서 어떻게 사용되고 있는지 알아보는 보고서를 작성하면 좋을 것 같습니다. 서론 : 탄소화합물에 대한 정의, 예시, 활용 분야 본론 : ai를 활용한 화학합성의 소개 (자료 참고) 결론 : 앞으로 ai가 화학에서 어떤 식으로 쓰이게 될지 예상하고, 느낀점 작성

자료 1. 케미티카의 탄생

구글이 개발한 인공지능 바둑선수 알파고가 세계바둑 랭킹 1위1)를 기록했다. 지난 3월 이 세돌 9단과 세기의 대결을 펼친 알파고가 평점에서 중국 커제(柯洁) 9단을 누른 것이다. 이로써 바둑 제왕의 자리는 사람이 아닌 인공지능 알파고의 차지가 됐다. 알파고의 등장 이후, 기술의 진보에 대한 찬사들과 아울러 인공지능이 머지않아 인류를 위협할 것이라는 디스토피아적 전망도 함께 쏟아졌다. 이제 인류는 인공지능 시대를 체감하고 있다. 인공지능이 대체할 일자리를 예측하는 기사도 나왔다. 과연 인공지능은 과학자의 역할마저 대체할 수 있을까?

UNIST에 있는 IBS 첨단연성물질 연구단(단장 스티브 그래닉)의 바르토즈 그쥐보프스키 (Bartosz Grzybowski) 그룹리더는 "화학자의 자리는 그 무엇도 대체할 수 없다"고 답했다. 사실 그쥐보프스키 그룹리더는 지난 2012년 '화학계의 알파고'라 할 인공지능 화학 프로그램 '케마티카(Chematica)'를 개발했다. 케마티카는 화학적 합성법을 스스로 알려주는 프로그램으로 당시 세계적으로 크게 주목을 받았다. 그 후 5년이 흐른 지금, 그쥐보프스키 그룹리더는 "케마티카는 지금도 더욱 빠르게 학습하며 혁신하는 중"이라고 말했다.

케마티카는 화학자들을 위한 최고의 조력자

화학을 위한 정보처리 기계를 만드는 것은 화학자들의 오랜 꿈이었다. 케마티카 발표 당시 외신들은 '불멸의 화학계 네트워크', '화학을 위한 인터넷'이라며 높이 평가했다. 그쥐보프스키 그룹리더는 "위대한 화학자들이 축적해놓은 지식이 저서들 속에 저장될 수 있지만, 세대를 이어 전수되는 경우가 드물었다. 케마티카는 전 세계 화학계가 지난 250여 년간 끊임없는 연구를 통해 축적한 모든 지식의 집합체와 같다"고 말했다.

케마티카를 쉽게 설명하자면, 컴퓨터 스스로 화학적 합성 모델을 만들고 계획을 세우도록 설계된 소프트웨어다. 케마티카는 화학계에 알려진 합성법과 화학 반응을 광범위하게 수

집, 총망라해 기억하고 학습한다. 엄청난 양의 화학 지식들로 네트워크를 조직하는 셈이다. 이로써 케마티카는 짧은 시간에 엄청난 양의 계산을 수행, 연구원이 직접 실험을 통해 찾던 것보다 훨씬 빨리 화합물의 적절한 합성 방법을 알려준다. 소중한 시간을 단축함은 물론 시약과 노동력도 아낄 수 있어 훨씬 경제적이다.

2012년 초창기에 개발된 케마티카는 기존에 존재하는 합성물들의 최적 합성법을 알려주었다. **최근 케마티카는 기존 방식에서 더 나아가 새로운 화합물을 합성하는데 성공해** 결과를 6월 세계적인 저널 안게반테 케미(Angewandte Chemi)에 게재했다. 단순 알고리즘 형태의 프로그램에서 더 나아가 스스로 합성법을 찾는 방향으로 진화하는 가능성을 본 것이다. 그뤼보프스키 그룹리더는 **"케마티카는 유기화학의 최적화 합성경로를 산출하는 계산화학보다 더 넓은 분야를 아우른다"**고 강조한다. 유용한 촉매 물질을 예측해 시뮬레이션하는 계산화학에서 한 발 더 나아가, 케마티카는 밝혀지지 않는 합성 경로를 알려주고, 신약이나 항생제의 새로운 합성법을 예측할 수 있도록 발전하고 있기 때문이다.

그는 "어찌 보면 컴퓨터에 바둑을 가르치는 것만큼이나 어려운 일일텐데, 오랜 기간 매진하다 보니 가능하게 됐다. 예술만큼 심오하고 복잡한 화학의 세계를 탐험하는데 불가능하다고 여겼던 분야를 포기하지 않고 케마티카의 가능성을 증명하고 있다"고 말했다. 그는 "케마티카는 화학자들이 더욱 빠르고 효과적인 경로의 합성법을 발견하는데 큰 도움을 줄 것"이라며 "전 세계의 화학자들이 케마티카를 이용하도록 만드는 것이 나의 목표"이라고 전했다.

창의적인 생각, 나노입자에 적용...새로운 발견으로 이어져

그뤼보프스키 그룹리더는 다양한 영역에 걸친 창의적인 생각들을 직접 실험에 적용하는데 남다르다. 그의 연구실에서는 신소재에서 암세포, 생물학에 이르기까지 다양한 주제를 다루는 20여 개의 프로젝트가 진행 중이다.

그는 지난 3월 금 나노입자를 활용, 실리콘 등 반도체소재 없이도 작동 가능한 논리소자를 개발하는데 성공했다. 모든 전자기기에는 반도체가 필요하다고 여기는 기존의 생각에 반기를 든 것이다. 그는 금속 입자의 전하를 화학적으로 활성화해 전류가 흐를 수 있도록 소자를 설계했다. 반도체소재가 아니지만 마치 반도체처럼 전류를 흘려줄 수 있을 뿐 아니라, 염분이나 습기가 있는 환경에서도 구동 가능하다. 수중용 기기나 웨어러블 기기, 인체 내에서 작동해야 하는 의료기기 등에 적용이 유리할 전망이다.

최근에는 나노입자 표면에서 움직이는 전하들을 항생제로 활용해 박테리아를 공격하는 기법을 소개하기도 했다. 무수히 많은 전하들이 모여 상대적으로 큰 박테리아를 공격하는 형태로 마치 작은 용병들이 힘을 합쳐 덩치가 큰 적을 물리치는 것과 같다. 그뤼보프스키 그룹리더는 "전하의 방향과 상호작용에 따라 균을 선택적으로 공격할 수 있다"라며 "이전에는 항생제를 만든 뒤 그람양성균2)에 항균력이 있는지, 음성균에 항균력이 있는지 알 수 있었다. 이번 연구는 표적 박테리아용 항생제를 만들 수 있는 원리를 발견했다는데 의의가 있다"고 설명했다. 나노입자 항생제는 기존의 화학약물과 달리 전하로 세균을 공격하기 때

문에, 세균들이 항생제 내성이 없는 것이 특징이다. 연구진은 생쥐 대상의 동물실험으로 나노입자 항생제에 독성이 없다는 것도 확인했다.

특히 그쥐보프스키의 이번 연구는 연구단에서 같이 근무하고 있는 부인 크리스티아나 그쥐보프스카(Kristiana Grzybowska) 연구위원과 함께 진행, 부부의 이름을 논문에 함께 올려 더욱 뜻깊다. 그쥐보프스카 연구위원은 세포 생물학자로 이번 나노입자를 활용한 항생제 개발 연구에 참여해 큰 역할을 했다.

"과학자가 된다는 것은 언제나 배운다는 것"

최근 그쥐보프스키 그룹리더는 구글이 개최하는 '사이언스 푸 캠프(Science Foo Camp, 사이푸 Sci Foo)'에 참가했다. 이 캠프는 구글과 오렐리(O'Reilly) 미디어 그룹, 디지털 사이언스(Digital Science)가 주관하고 네이처가 지원하는 세계 지식인들의 모임이다. 과학과 기술 분야에서 흥미로운 발견을 한 사람들만을 초청해 진행하는 것이 특징이다. 250여 명만 참석하는 명단에 그쥐보프스키 그룹리더도 이름을 올려 초대장을 받은 것이다.

올해 11회를 맞은 사이푸는 캘리포니아에 있는 구글플렉스에서 지난 7월 22일부터 3일간 진행됐다. 과학자뿐만 아니라 작가, 교육자, 예술가, 투자자, 정책 결정자 등 세계 다양한 오피니언 리더들이 참석하는 자리다. 그는 사이푸 참석을 앞두고 "구글의 CEO를 만나고 그의 비전을 듣고 싶다"며 "과학의 미래가 결정되고 세상의 흐름이 만들어지는 곳에서 영향력 있는 사람들과 만나 그들의 생각들을 공유하고 싶다. 새로우면서 의미 있는 연구 주제를 사이푸를 통해 찾고 싶다"며 기대감을 표현했다. 자유로운 분위기 속에서 자신의 분야에 완전히 몰입된 전문가들을 만난다는 설렘이 가득했다.

사이푸 초대와 연구에 대한 열정에 대해 그쥐보프스키 그룹리더는 "나의 유전자 속에는 '흥미'를 따라가는 녀석이 있는 것 같다"고 말했다. 평소에도 그는 연구원들에게 취미처럼 재미있게 흥미롭게 일하는 사람들과 함께 연구하라고 강조한다. 과학을 이해하고 공부하기는 어렵지만 사랑하는 마음을 갖는다면 재미가 따라온다는 설명이다. 그는 "할아버지, 아버지가 모두 과학자였다"며 "자연스럽게 과학을 접하는 분위기에서 자연계를 관찰하고 거기에서 영감을 받는 경우가 많았다. 과학자가 된다는 것은 언제나 배운다는 것과 같다고 생각한다"고 말했다. 연구그룹 내 자유로운 연구 분위기를 만들고 자연스럽게 과학에 친화적인 마음을 키울 수 있도록 하는 그의 철학이 엿보이는 대목이다. 사이푸에 다녀온 그가, 또 어떤 창의적인 연구로 어떤 난제에 도전하게 될지 기대된다.

https://www.ibs.re.kr/cop/bbs/BBSMSTR_00000000737/selectBoardArticle.do?nttId=13267

자료 2. 신소재 개발과 머신러닝

물질의 성질·구성·구조의 변화를 다루는 학문이 화학(chemistry)이다. 이 학문을 통해 인간의 몸이 어떻게 형성돼 있는지, 대기 중에 얼마나 많은 수소와 탄소가 섞여 있는지, 어떤 의약품을 섭취해야 하는지 등에 대한 분석이 가능하다.

현대 화학이 성립된 것은 18세기 이후다. 라부아지에의 질량보존의 법칙, 돌턴의 원자설, 아보가드로의 분자설, 멘델레예프의 주기율표 등을 거쳐 양자역학으로 발전하면서 나노세계를 넘나드는 연구 틀이 마련할 수 있었다.

그리고 지금 화학이 새로운 국면을 맞고 있다. 인공지능이 등장했기 때문이다. 31일 과학 기술 매체 'Phys.Org'는 머신러닝(machine learning)과 결합한 새로운 연구 틀이 화학연구 전반에 걸쳐 혁신을 가져오고 있다고 보도했다.

“다양한 분야의 화학데이터 학습 중”

이 같은 사실은 영국 러더퍼드 애플톤 연구소의 키스 버틀러(Keith T. Butler) 박사, 배스 대학의 다니엘 데이비스(Daniel W. Davies) 교수, 옥스퍼드 대학 휴 카트라이트(Hugh Cartwright) 교수 등 5명의 화학자가 작성한 논문을 통해 보고된 것이다.

이들은 지난 25일 '네이처' 지에 게재된 'Machine learning for molecular and materials science'이란 제목의 논문을 통해 머신러닝이 최근 화학연구 패턴을 어떻게 바꾸어놓고 있는지 연구자 입장에서 상세히 기술하고 있다. 논문은 화학이 인류 역사를 어떻게 바꾸어놓았는지 기술하고 있다. 고대 인류가 구리와 아연을 결합해 청동기 시대를 열었던 점, 실리콘 마이크로 칩을 통해 디지털 시대를 꽃피우고 있는 점 등을 예로 들었다. 이들은 향후 화학자들을 통해 예상치 못한 새로운 물질이 탄생할 경우 미래 인류 역사에 '기절초풍할' 일이 벌어질 수도 있다고 밝혔다. 현재 많은 화학자들이 다양한 원자들을 무작위로 결합해 새로운 물질을 만들고 있다. 새로운 합성물을 만들어내는 과정은 직관(intuition)과 우연(chance) 그리고 무수한 시행착오(trial & error)가 발생하는 과정이다. 이로 인해 많은 화학자들이 많은 어려움을 겪어왔다. 그런데 이 어려운 일을 머신러닝 인공지능이 수행하면서 변화가 일어나고 있다. 데이비스 교수는 'Phys.Org'와의 인터뷰를 통해 “많은 화학연구실에서 머신러닝이 다양한 분야의 화학데이터를 학습하고 있다”고 밝혔다. 데이비스 교수는 “머신러닝 기술은 그동안 광고, 번역, 스팸 차단, 무인운전 등에 주로 적용돼 왔다”면서 “최근 수많은 화학기호를 익힌 머신러닝 인공지능이 새로운 설계에 의해 신물질을 만들어내는 일에 활용되고 있다”고 말했다.

“금광을 캐듯 인공지능이 신물질 개발”

데이비스 교수는 이어 “향후 인공지능이 결합된 화학연구를 통해 새로운 신물질 개발 시대가 도래 할 것”이라고 주장했다.

실제로 머신 러닝은 컴퓨터 과학을 포함한 대부분의 모든 분야에서 활용되고 있는 중이다. 음성 및 문자 인식, 얼굴 및 물체 인식, 텍스트마이닝 등의 검색 엔진, 유전자분석 등의 생물 정보학, 애니메이션, 로봇틱스 등 수많은 분야에서 쓰임새가 늘어나고 있다. 화학 분야에 머신러닝이 도입된 것은 오히려 늦은 편이다. 데이비스 교수는 “머신러닝 기술이 업그

레이드되고, 컴퓨터에 정통한 신세대가 화학연구에 뛰어들 경우 시너지 효과로 신물질 개발에 엄청난 잠재력을 발휘할 수 있을 것”으로 내다봤다.

물론 인공지능이 만능은 아니다. 머신러닝은 사람처럼 생각하지 못하고 기호만 인식하기 때문에 한계점을 노출하고 있다는 지적이다. 데이비스 교수는 “그러나 과학자들이 이를 극복할 방법을 찾고 있다”고 말했다. 그에 따르면 화학자들은 컴퓨터 스스로 원자들을 결합해 신물질을 만들어낼 수 있는 방안을 모색하고 있다. 데이비스 교수는 “사람처럼 화학연구가 가능한 기술이 개발될 경우 화학계는 물론 과학계 전반에 혁명적인 변화가 예상된다”고 전망했다. 이는 논문 주저자인 버틀러 박사도 동의하는 바이다. 그는 “스스로 학습이 가능한 머신러닝을 통해 새로운 물질을 탐색하고 구성해 나갈 수 있는 길이 열리고 있다”며 화학연구에 있어 새로운 시대를 예고했다. 버틀러 박사는 현재 머신러닝의 수준이 화학자들이 놓치고 있는 것을 보완하고, 연구 속도를 빠르게 하는 정도라고 분석했다. 그러나 이 작업이 마무리되면 머신러닝 스스로 사람을 뛰어넘는 능력을 발휘할 수 있을 것으로 보고 있다. 버틀러 박사는 또 향후 오픈소스 데이터베이스가 화학연구 전반에 매우 중요한 역할을 하게 될 것으로 예상했다. 그는 머신러닝이 데이터망을 통해 금광을 캐듯 신물질을 발굴하고, 새로운 화학시대를 열 수 있을 것으로 전망했다.

한편 지난해 5월 ‘네이처’ 지에 유사한 논문이 발표된 바 있다. 하버포드대 알렉산더 노퀴스트(Alexander Norquist) 교수 연구팀은 머신러닝 기법을 활용해 실패한 연구 결과에서 유용한 화학반응을 찾아낸 사례를 발표한 바 있다. 이런 최근의 연구들은 머신러닝이 화학 연구를 보조하는 단계에서 주도적인 위치로 전환될 수 있음을 시사하고 있다. 사람대신 인공지능이 신물질을 개발하는 시대가 곧 다가올 전망이다.

<https://www.sciencetimes.co.kr/news/%EC%8B%A0%EC%86%8C%EC%9E%AC-%EA%B0%9C%EB%B0%9C%EB%8F%84-%EB%A8%B8%EC%8B%A0%EB%9F%AC%EB%8B%9D%EC%9C%BC%EB%A1%9C/>

자료 3. 딥러닝을 이용한 약물 화학 구조 예측

신약 개발에는 많은 시간과 비용이 필요하며, 이를 줄이기 위하여 많은 컴퓨터 기반 방법들이 연구되어 왔다. 특히, 실험 기술이 발전했음에도 불구하고 원하는 속성을 갖는 새로운 약물을 개발하기에 어려움이 있다. 화학 물질의 공간이 매우 방대하고 불연속적이기 때문에 실험에서 제한적인 요소들이 있어 이를 해결하기 위해 컴퓨터를 활용하는 Computer Aided Drug Discovery (CADD)를 적용한다. CADD는 신약 개발에 실패할 가능성이 높은 화학 물질들을 사전에 제거해 실험해야 하는 화학 물질의 후보군을 줄여주는 가상 탐색(virtual screening)을 통해서 신약 개발에서 실패할 확률을 줄일 수 있고 시간과 비용도 줄일 수 있다는 장점이 있다

기존의 방법들은 화학 물질의 화학적인 특성만을 고려하여 새로운 화학 물질을 생성한다. 본 연구에서는 화학적인 특성뿐만 아니라 새로운 화학 물질과 표적 하고자 하는 단

백질 사이의 상호작용도 고려한다. 이를 위해 강화학습을 사용하며 강화학습에서의 정책을 생성 모델인 Stack-RNN로 사용한다. 보상은 생성된 화학 물질의 화학적인 특성과 표적 단백질간의 결합 친화력을 사용해 측정하며 이 값이 커지도록 훈련을 진행한다. 강화학습이 끝난 Stack-RNN은 초기의 tack-RNN에 비해 유효한 SMILES를 많이 생성했으며 원하는 화학적인 특성을 가지고 표적 단백질과 높은 결합 친화력을 가지는 SMILES들을 생성했다. 생성된 SMILES들은 표적으로 하는 단백질을 제외한 다른 단백질과의 결합 친화력을 확인했을 때 상위의 결합 친화력을 가진 단백질 중 항암치료를 위해 도움이 되는 단백질이 있다는 것을 확인할 수 있었다. 제안하는 방법은 생성된 화학 물질이 원하는 logP와 표적 단백질을 가질 수 있도록 설계했지만, 향후 연구로 약물의 독성 및 부작용도 고려하는 방법의 연구를 계획하고 있다.

[딥러닝을 이용한 약물 화학 구조 예측.pdf 파일 참고 부탁드립니다.](#)