

## 專題演講 新穎技術與環境鑑識

### 智慧環境檢驗:化學品毒性 AI 預測與自動化分析流程

## Intelligent environmental examination: AI prediction for chemical toxicity and automation analysis process for green chemistry.

曾宇鳳，國立臺灣大學生醫電資所 yjtseng@csie.ntu.edu.tw

### 摘要

團隊承接國家環境研究院研究計畫，建立一套綠色消費化學品毒性預測技術與自動化分析流程，綠色化學存在於一個化學產品生命週期的各個階段，包括設計、製造、使用和處置。在化學產品的生產過程中，若不加以監管則容易背離綠色消費主義之概念，使環境造成不可逆之浩劫。因此，綠色化學之概念必須被高度重視，以利整體的永續經營發展。

首先，此計畫收集大量關於化學品毒性的相關資料，包括跨國組織（如聯合國、歐盟與 OECD）高關注清單，或各國（如美國、加拿大、德國、日本、台灣等）監管清單、研究報告和相關文獻。團隊基於化學品結構將化學品資訊包含 CAS No.與結構資訊統整，去除重複資訊，整合為工作資料庫以便第二階段提供 AI 預測模型所需訓練資料集。

團隊利用這些整合資料，透過 AI 建立一個可靠的致癌性定量結構活性關係 (Quantitative Structure- Activity Relationship, QSAR) 毒性預測模型，此 QSAR 模型依照 OECD 準則建構而成，用於識別和分析化學品的關鍵特徵和相關性。這些化學品結構特徵將成為 AI 預測模型的基礎，依據相同的結構特徵並用於預測新的化學品的毒性可能性。為了驗證我們的預測模型的準確性和可靠性，我們將使用已有測試資料進行驗證。這些資料將與我們的預測結果進行比較，以評估模型的準確度。

團隊同時亦建立了一套儀器自動化分析流程，可串接分析儀器，由液態層析串聯質譜儀 (LC-MS/MS) 原始資料輸入分析流程為起點，自動化進行最佳化參數調整，波峰偵測與 MS2 質譜識別，最終可連接至化學品工作資料庫檢閱目前國際化學品毒性資訊以及毒性 AI 預測結果。

此研究計畫透過國內外資訊庫蒐集整合為資料庫，結合建立定量結構活性關係 (QSAR) 模型，串接分析儀器，以建立綠色消費化學品毒性預測作業流程，裨益永續發展與綠色化學推廣。