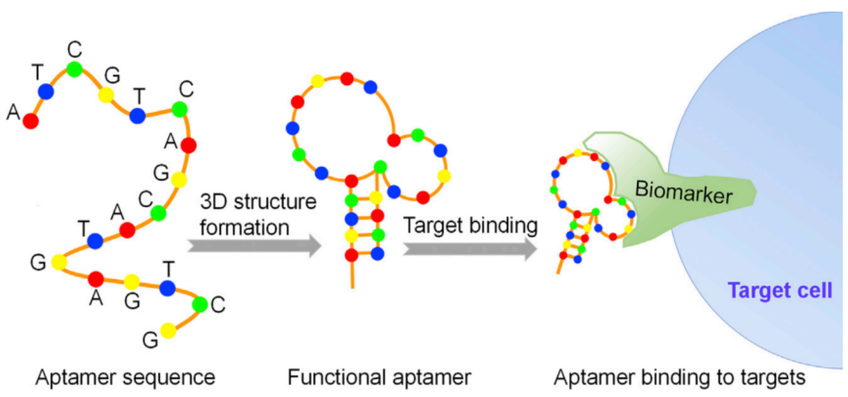
09 신약 개발 후보 물질 추천을 위한 머신러닝 모델 설계

소속 정보컴퓨터공학부 분과 A 팀명 ML깎는 컴공 참여학생 허수민, 유경민 지도교수 송길태

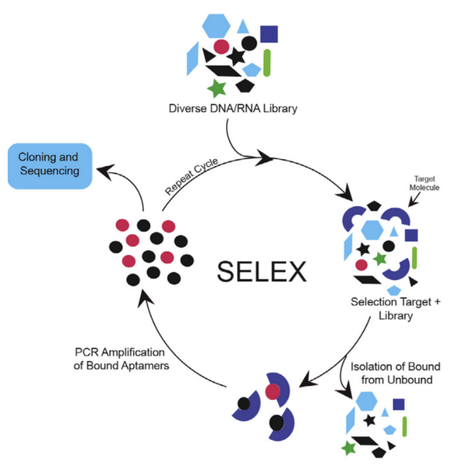
개발 배경

압타머(Aptamer)란?



- RNA / DNA와 유사한 구조를 가지는 핵산 물질
- 항체와 비교될 수 있을 정도의 높은 결합 친화도
- 표적 단백질에 다양한 형태로 결합 가능
- 암 치료제 분야에서 사용

SELEX 란?

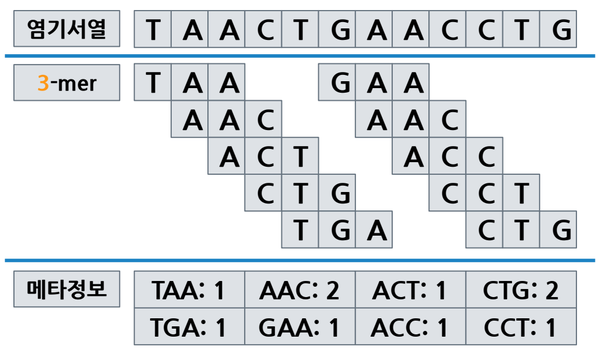


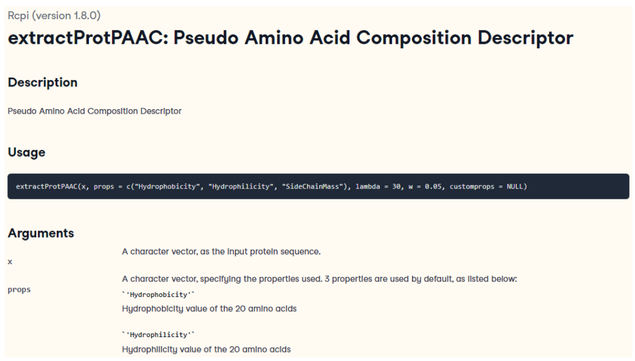
- 다양한 후보의 압타머 중 결합 친화도가 높은 물질을 선별하는 대표적인 과정
- 유전 물질을 합성 & 분리하는 작업을 반복적으로 수행
- 시간이 오래 소요

알고리즘 기반 예측 모델 등장

개발 내용

데이터 전처리

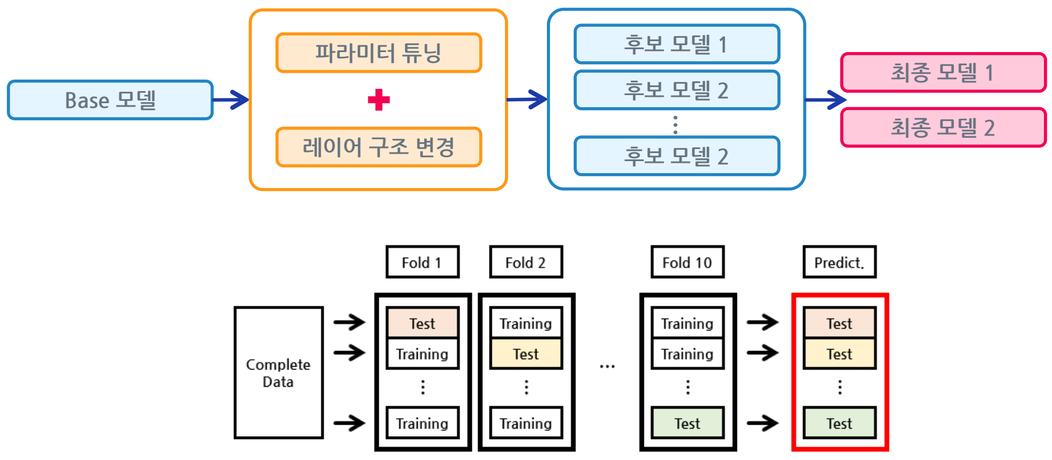




- k = 1,2,3,4인 경우의 메타정보 추출 (k-mer 지표)
- 각 k값을 기준으로 상대적인 비율(합 1)의 형태로 염기서열 전처리 수행
- AAC기법과 PseAAC 기법을 이용해 단백질 구성 형태를 고려하여 일반적인 모델 제작
- k-mer 지표와 PseAAC 정보를 합쳐서 각 API별 학습용 데이터 구축

PseAAC: 2001년 Kuo-Chen Chou에 의해 등장한 결합 정보를 고려한 단백질 표현 기법

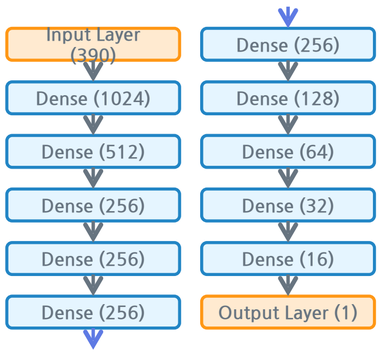
모델 구축



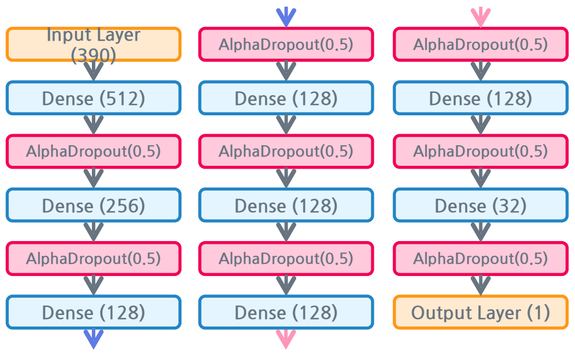
- 구조적으로 변형이 용이한 AptaNet 모델을 기반으로 튜닝 수행
- Grid Search를 이용해 최적의 batch_size와 epochs, Learning Rate, Rho 값을 찾음
- 10-fold validation을 이용해 객관적인 성능 측정
- 불균형 데이터에도 효과적인 성능 지표인 F1-score를 기준으로 성능 비교
- 약 20가지의 Layer 변형 모델을 비교해 가장 성능이 높은 2가지 모델 선정

연구 성과

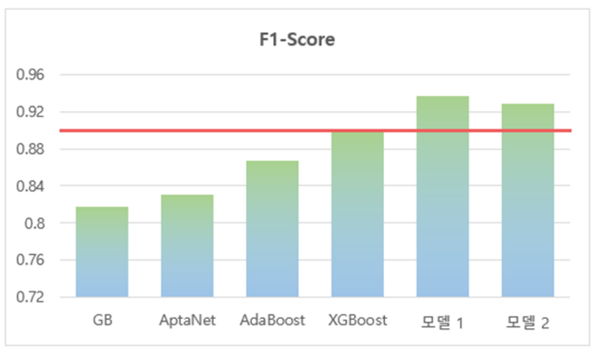
모델1 구조



모델2 구조



기존 여러 모델들과 성능 비교



- 기존 모델들은 0.9 미만의 성능을 보임
- 모델 1의 F1-Score : 0.937
- 모델 2의 F1-Score : 0.929

	GradientBoost	AptaNet	AdaBoost	XGBoost
F1-Score (CV)	0.817	0.831	0.867	0.898

기존 모델 중에 가장 성능이 좋은 XGBoost에 비해 약 3~4% 성능 개선