1. **7개의 AI 패턴 중 하나 선택**

   목표 달성 시스템 패턴을 개인맞춤 신약 설계 분야에 적용한다. 환자의 유전자 정보(돌연변이 등)와 마이크로바이옴 구성에 따라 약물 반응이 달라질 수 있으므로, 특정 질병에 대해 효과는 높고 부작용은 최소화되는 약물 구조를 생성하는 것을 목표로 한다. AI는 주어진 생물학적 조건과 제약을 만족하는 후보 약물을 탐색하는 역할을 수행한다.

2. **모델 입력과 출력**

   모델의 입력은 환자의 유전자 변이 정보, 마이크로바이옴 구성 데이터, 질병 정보(or 타겟 정보), 그리고 약물이 만족해야 할 제약조약이다.
   출력은 해당 조건에 적합한 신규 약물 후보 분자 구조로 분자 그래프 형태로 생성해낸다. 각 후보 약물에 대해 예상 효능이나 안정성 점수를 함께 제공할 수 있다면 더 좋을 것이라고 생각한다.

※ 참고자료

Zhavoronkov et al., Deep learning enables rapid identification of potent DDR1 kinase inhibitors, Nature Biotechnology, 2019

Jumper et al., Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold, Nature, 2021

Sanchez-Lengeling & Aspuru-Guzik, Inverse molecular design using machine learning, Science, 2018