
분자구조 이미지 SMILES 변환 AI 경진대회

2020.10.15

조 승 제



목 차

I. 모델 소개

- I) Seq to Seq 응용 Model
- II) Baseline Code Model
- III) Proposed Model

II. 실험

III. 다른 문제 응용 가능성

IV. 결론

- I) 요약
- II) 추후 연구 가능성

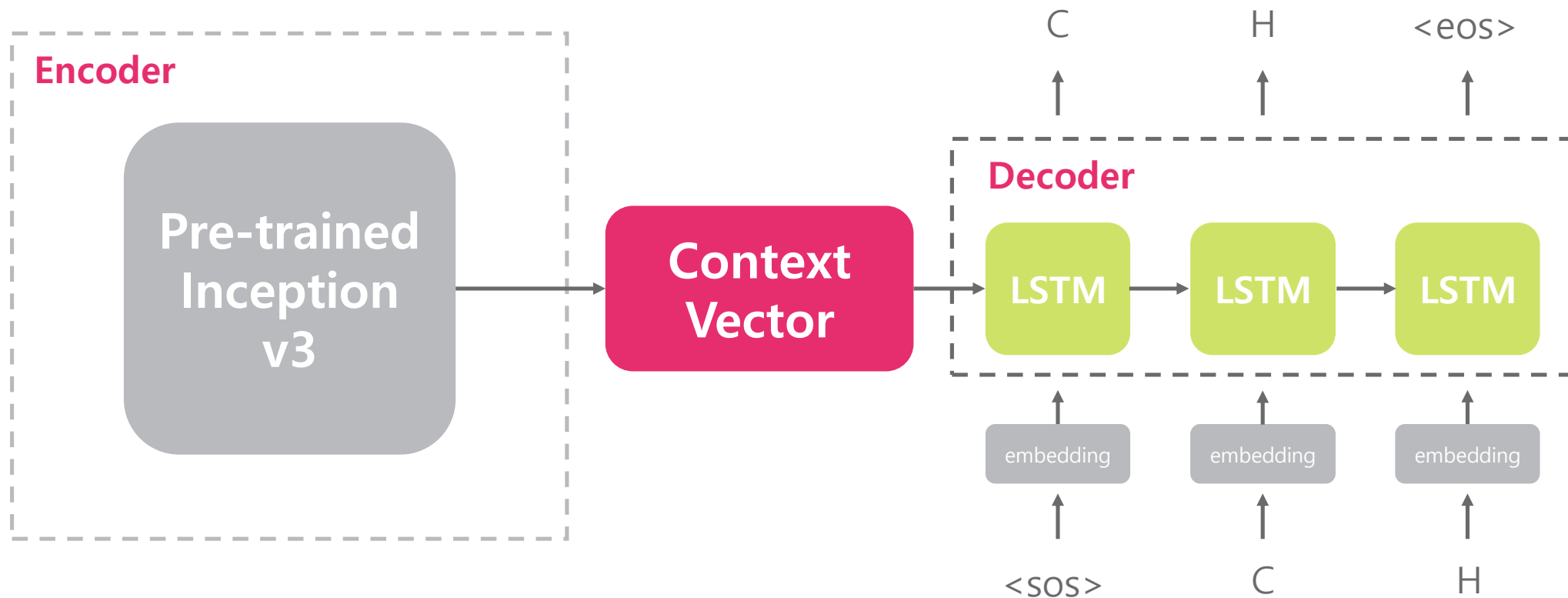
V. 대회에 참여하며

- I) 좋았던 점
- II) 아쉬웠던 점

Seq-to-Seq 응용 Model

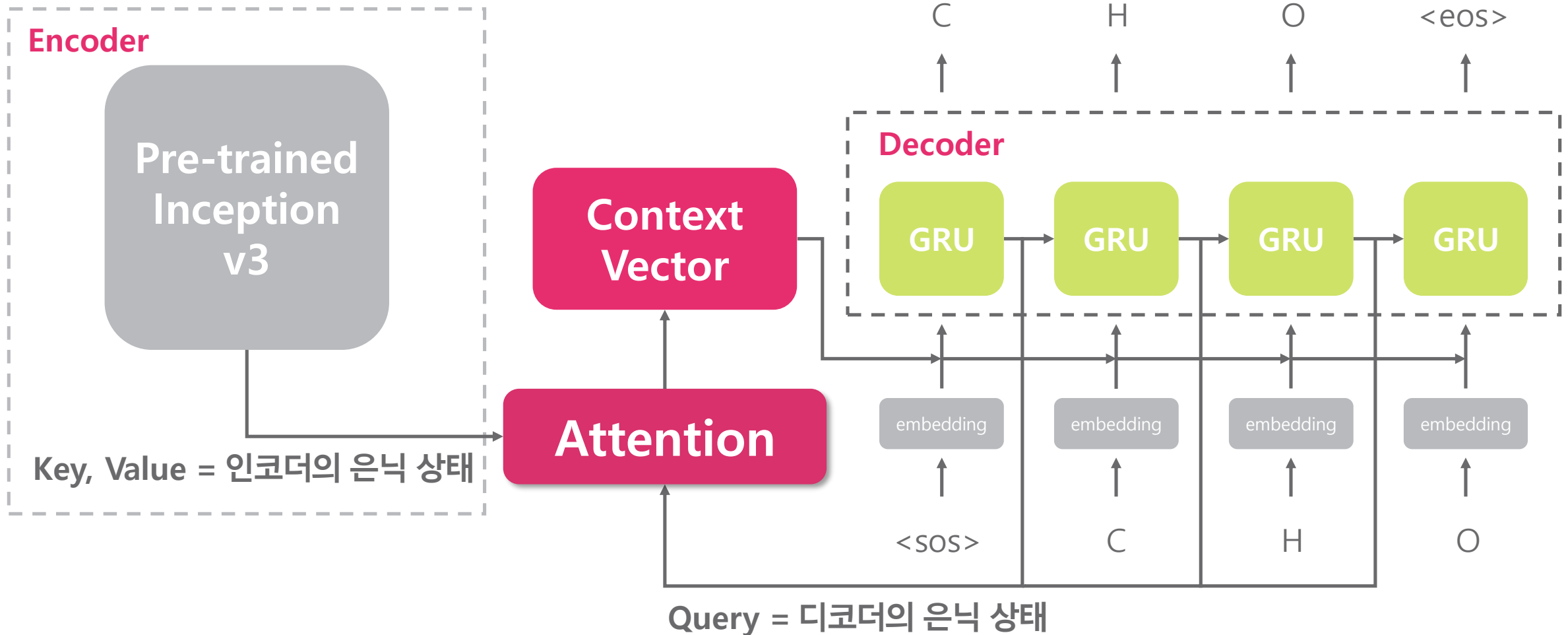
모델 설계: Seq-to-Seq Model의 Encoder를 Inception v3 모델로 재구성하여 **Context Vector**를 생성

한계점 : 회귀 모델의 단점인 **Gradient Vanishing**이 발생



Baseline Code Model

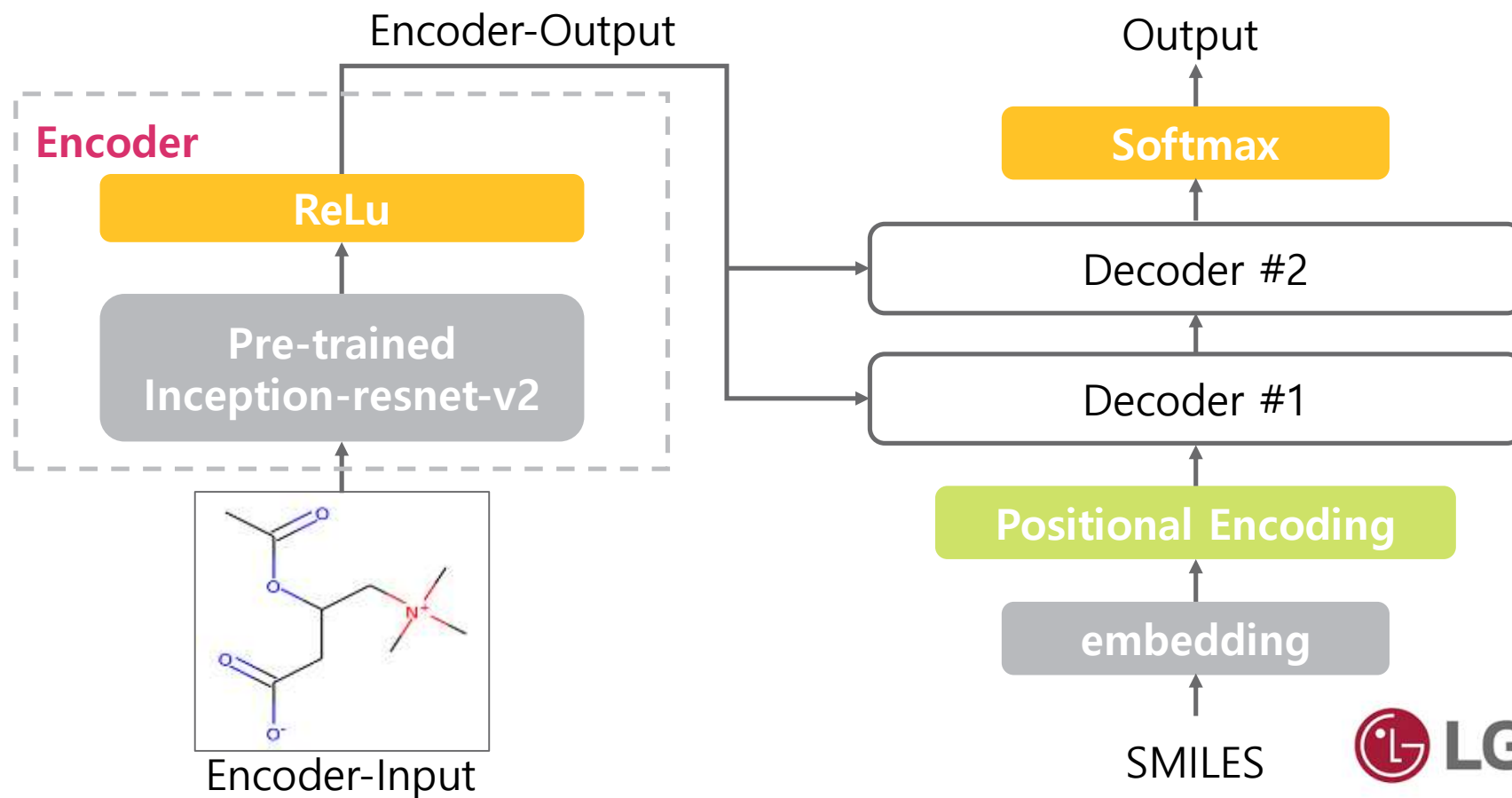
모델 설계 : **Attention Mechanism**을 이용하여 Decoder에서 매 시점마다 **Context Vector**를 참고



Proposed Model

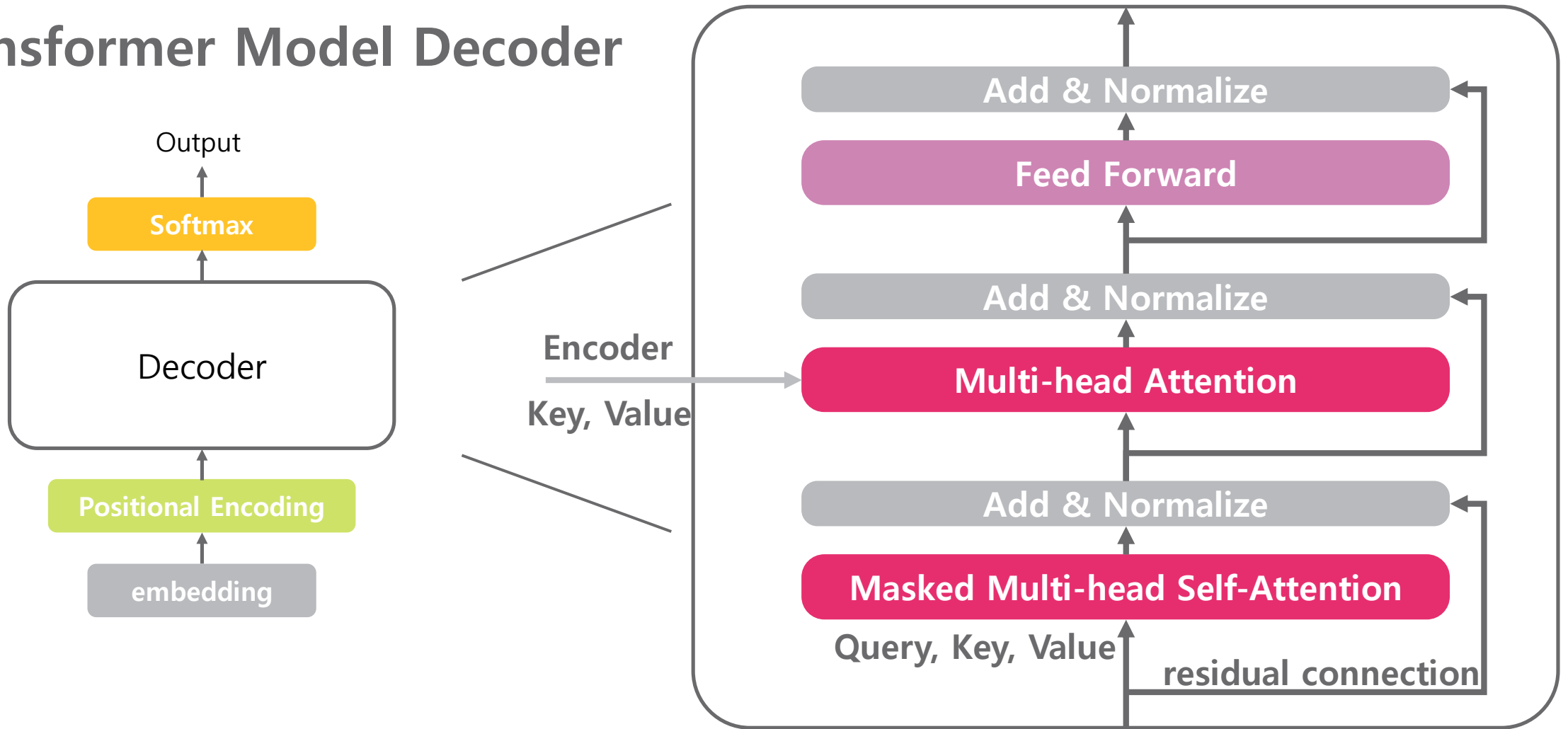
모델 설계 : Transformer Model의 Encoder를 Inception-resnet-v2 모델로 구성

장점 : **Gradient Vanishing** 해결, **Classification** 성능 향상, **Attention Mechanism** 의 사용으로 연관 있는 단어에 집중



Proposed Model

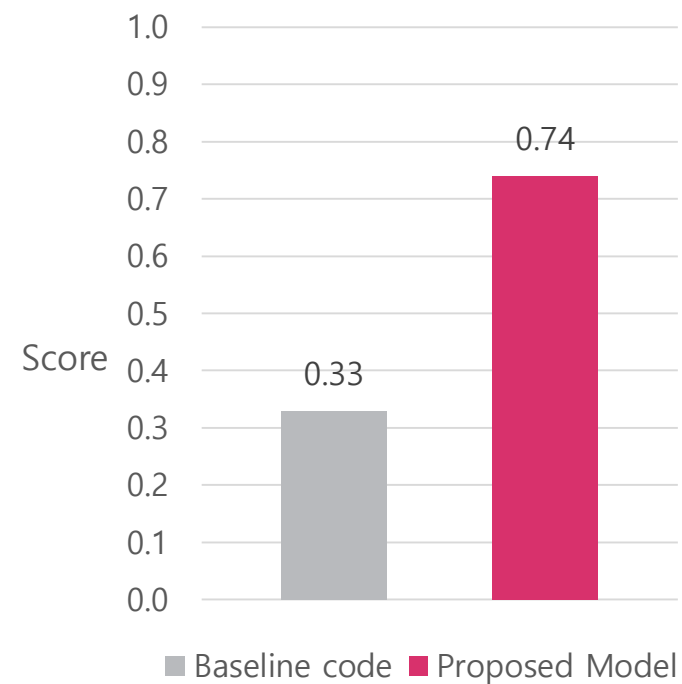
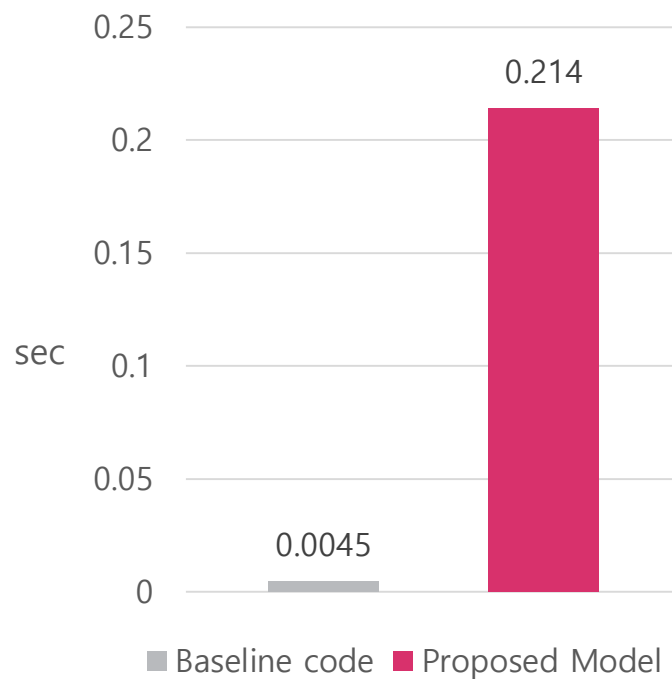
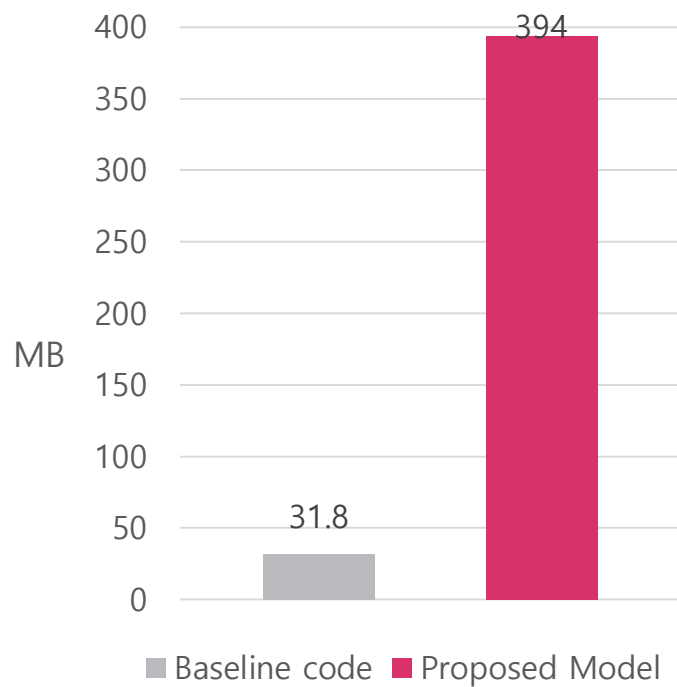
Transformer Model Decoder



실 험

❖ 저장된 모델 크기, 동작 시간, Test Set Score

- GTX 2070 기준
- Image feature 생성 후 test



다른 문제 응용 가능성

➤ 의료 이미지 진단

정상



Proposed
Model

There is no
suspected disease

코로나바이러스-19



Proposed
Model

Symptoms of infection
with Covid-19 appear

다른 문제 응용 가능성

➤ 해시태그 추천



Proposed
Model

공스타그램
노트필기



Proposed
Model

먹스타그램
돈까스
맛스타그램
맛집추천

결론

✓ 요약

- Proposed Model은 Transformer 구조를 응용하여 **the problem of Long-Term Dependencies** 을 해결
- RNN을 사용한 모델들보다 **성능이 향상**
- SMILES 변환 뿐만 아닌 여러 Image captioning 주제에서 사용 가능한 모델

✓ 추후 연구 가능성

- IMAGEBERT⁽¹⁾ 에서 소개한 사전 훈련 모델을 적용
- Pre-train inception-resnet-v2 모델의 **Fine-Tuning**
- Encoder에서 **EfficientNet**의 사용

(1) <https://arxiv.org/abs/2001.07966>

대회에 참여하며

✓ 발전 과정

- 학과 교육과정을 벗어난 LSTM, GRU, Encoder-Decoder 구조의 이해
- Seq-to-Seq 모델의 train 방법인 **Teacher Forcing**의 이해
- Baseline code에서 제공한 **Attention** 기법의 이해
- Attention 기법을 사용한 **Transformer** 모델과 **Masking** 기법의 이해

감사합니다 !

