

05 PLaNet-X 단백질 리간드 결합 부위 및 결합 친화도 예측 모델 개발

소속 정보컴퓨터공학부

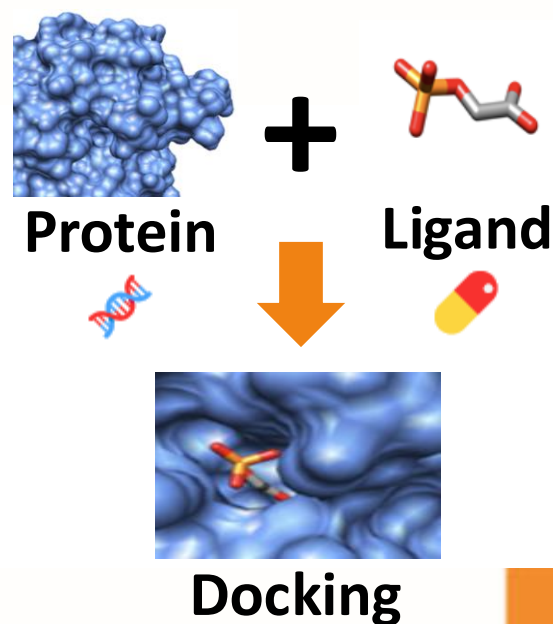
분과 A

팀명 으쌔으쌔♥

참여학생 김다현, 박주은, 안수현

지도교수 송길태

연구 배경 및 목표



현재 단백질-리간드 결합 부위 및 친화도 예측은 각광 받고 있음
그러나 기존 연구는 3D 구조 데이터 의존성이라는 한계 존재

단백질 구조 확보 어려움
구조 정보가 없는 단백질 적용 불가

활용 가능한 데이터 제한
신약 후보 탐색 속도 저하
실제 신약 개발 단계에서
효율성 감소

- 단백질 서열 + 리간드 구조(2D/SMILES)만으로 결합 부위와 친화도 예측
- 3D 구조 의존성을 줄이고, 빠르고 효율적인 스크리닝을 가능하게 함
- 신약 개발 초기 단계에서 실질적 활용성을 높임

WHERE?

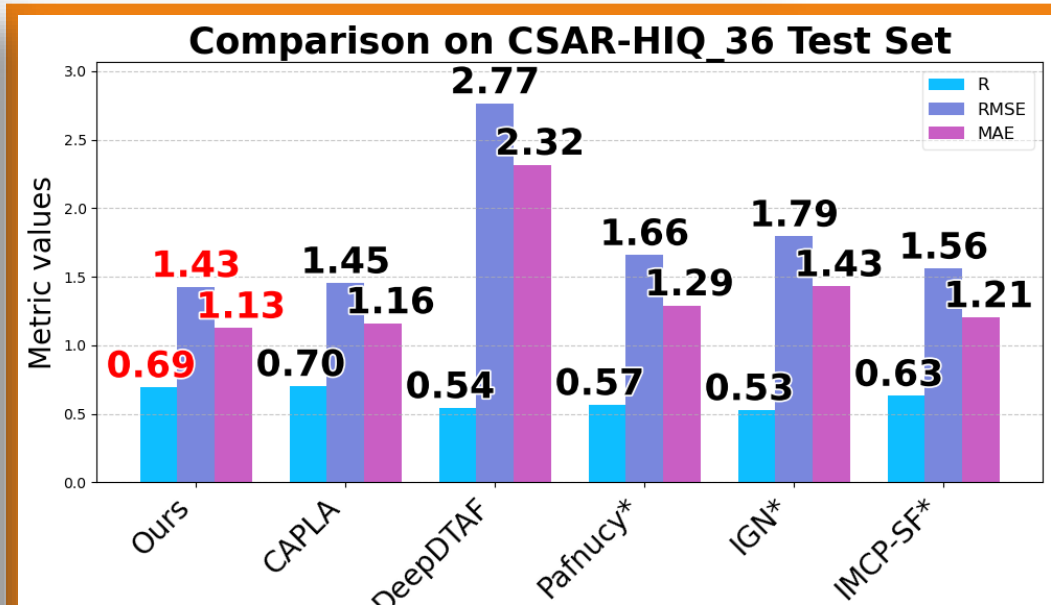
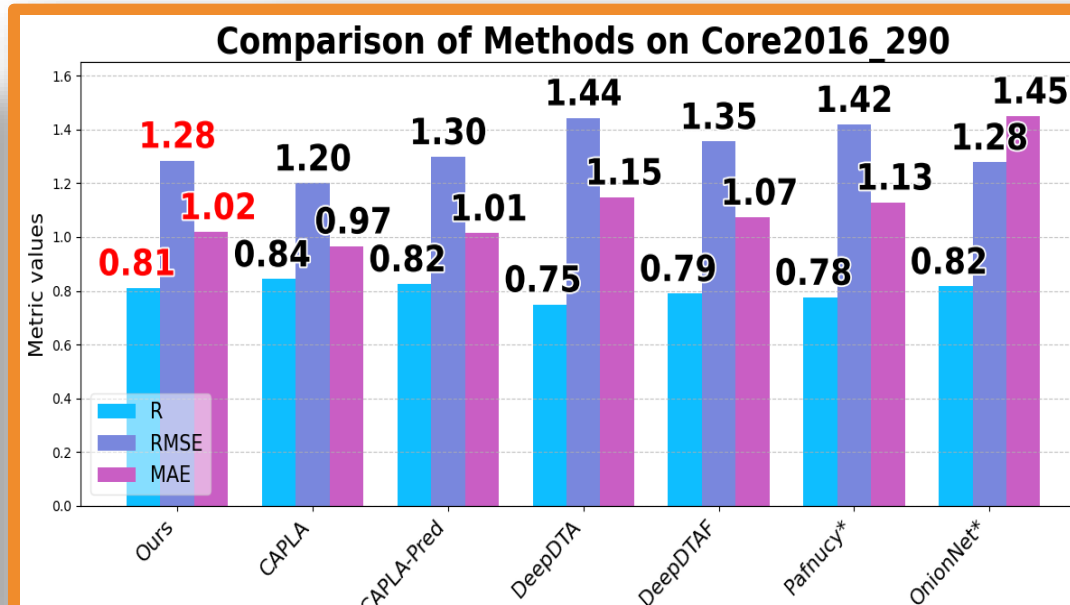
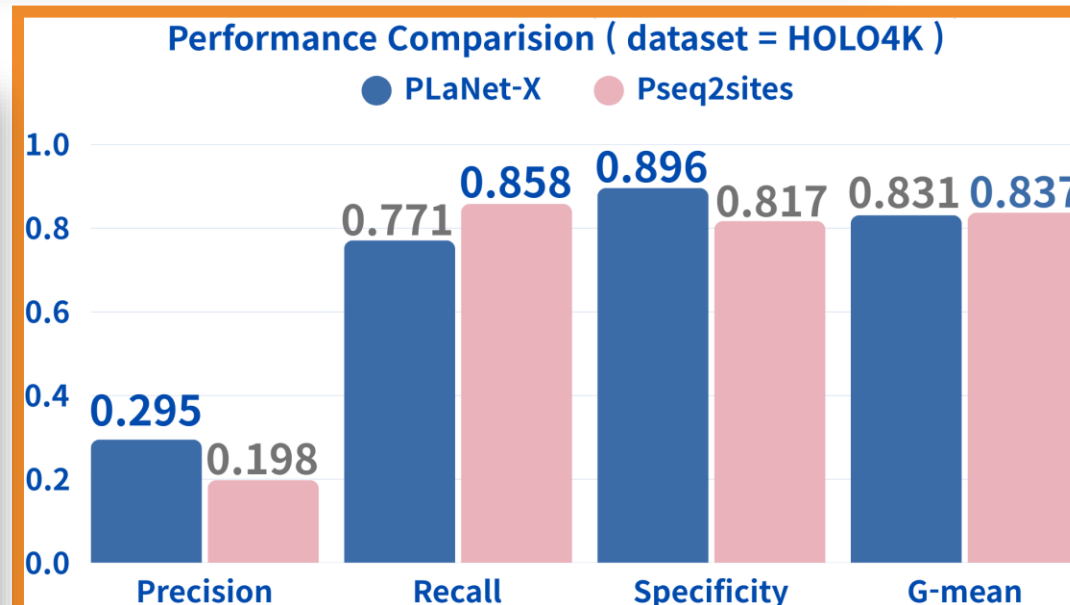
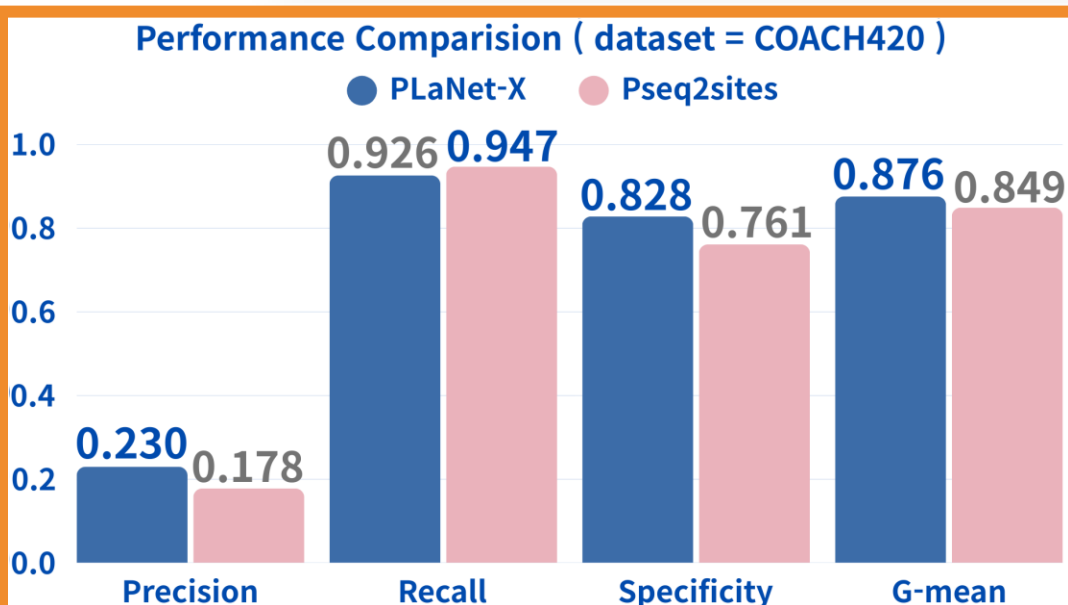
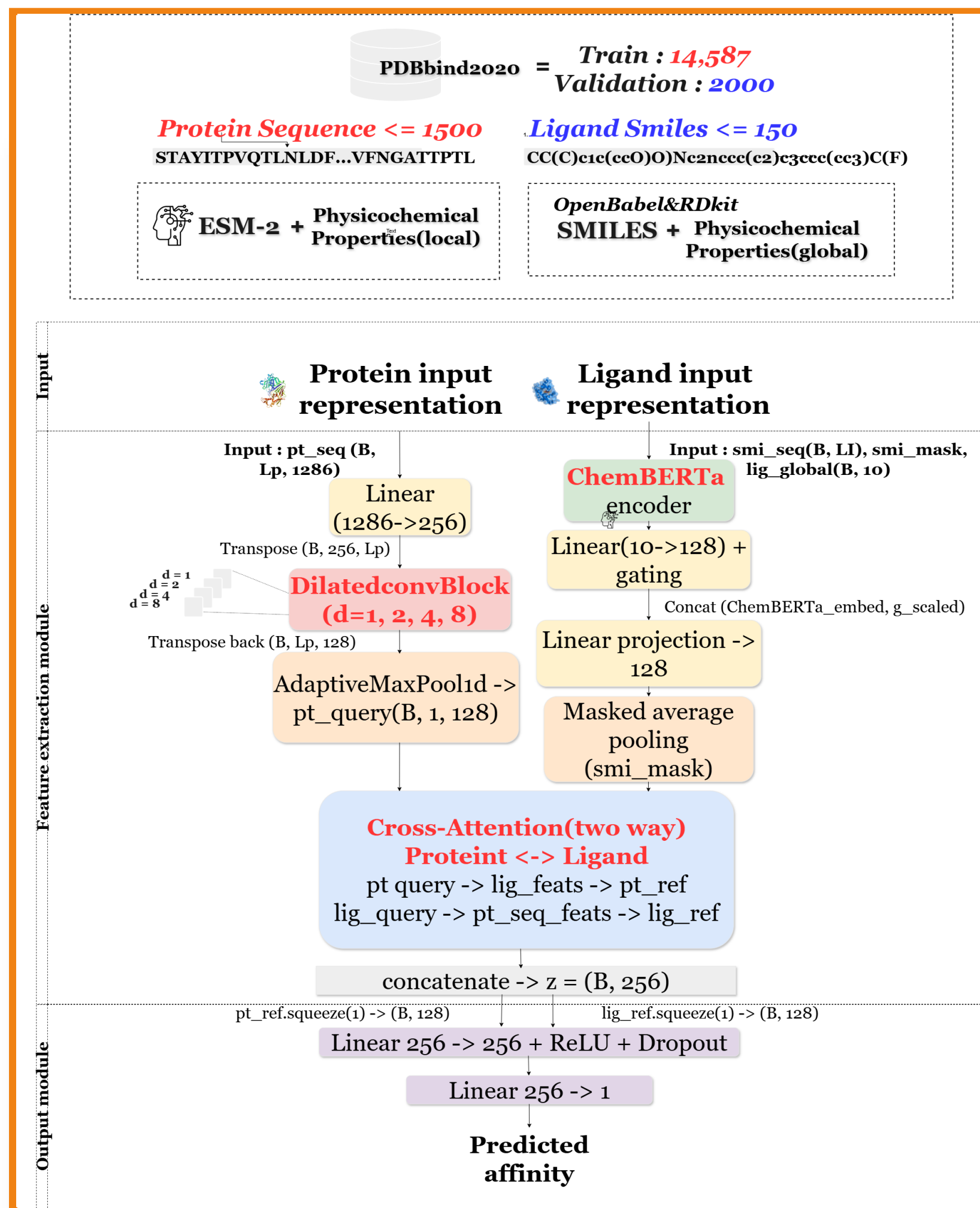
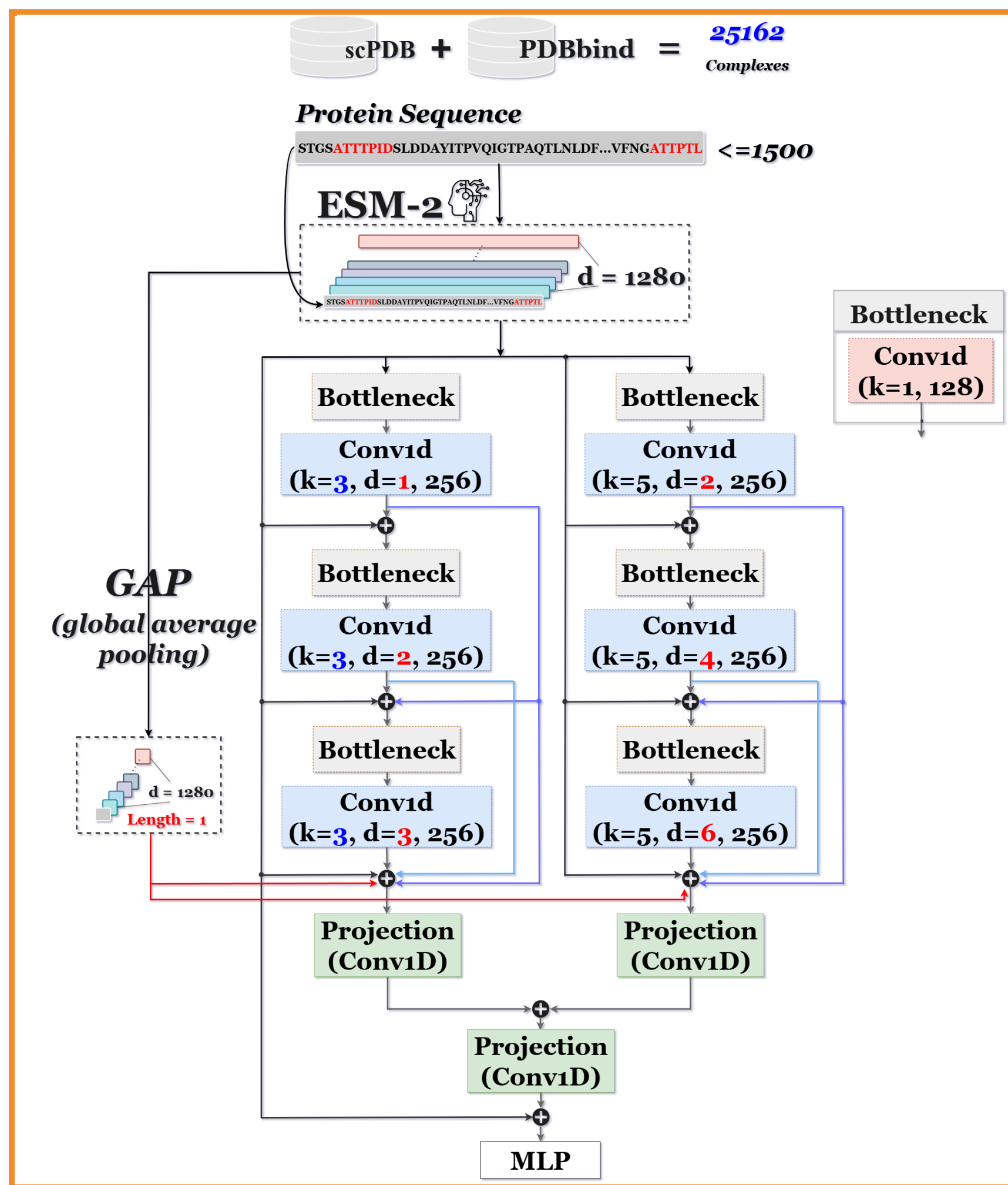
Binding Site

Then..
How STRONG?

Binding Affinity

결합 부위 예측 모델

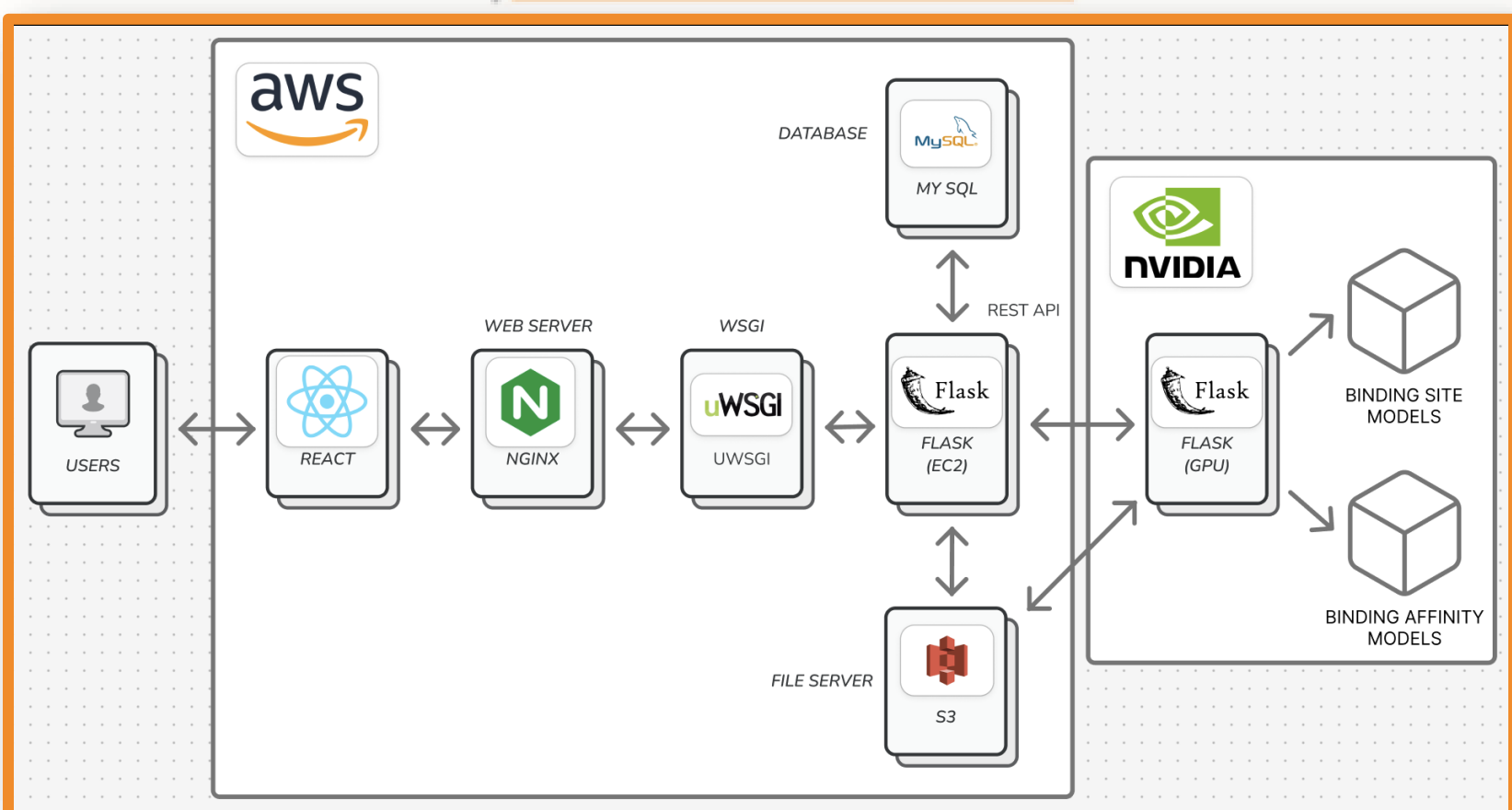
결합 친화도 예측 모델



PLaNet-X 단백질 리간드 결합 부위 예측 모델은 CNN을 이용한 서열 기반의 모델로, 다른 우수한 성능의 모델(CNN+Transformer)과 비교하여 준수한 성능을 보임 (더 낮은 쪽의 성능 수치를 회색으로 표시)

PLaNet-X 단백질 리간드 결합 친화도 예측 모델은 CNN+Transformer를 이용한 서열 기반의 친화도 모델로 타 모델(구조 기반 및 입력 정보 多)들과 비교하여 준수한 성능을 보임

서비스 구조



사용자 입력 및 시각화

Protein Name

Protein Sequence (FASTA)

Ligand SMILES

RUN PREDICTION

