



Smiles

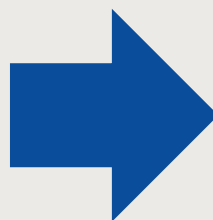
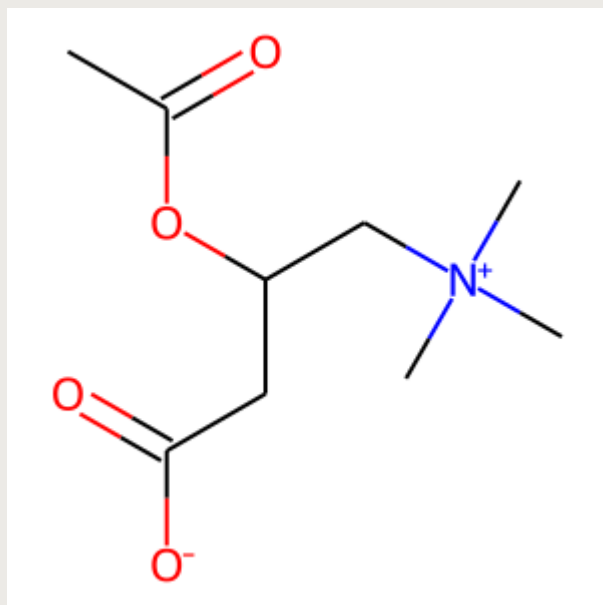
도시빅데이터융합학과 지능형빅데이터연구실
석사과정 이은경

목차

1. 분석목표
2. 자료설명
3. CNN Backbone
4. Encoder-Decoder

1. 분석목표

- SMILES : 단순화된 분자입력 라인입력 시스템(영어: simplified molecular-input line-entry system, SMILES)은 짧은 ASCII 문자열을 사용하여 화학종의 구조를 설명하기 위한 선 표기법 형식의 사양.
- SMILES 문자열은 분자의 2차원 도면 또는 3차원 모델로 다시 변환하기 위해 대부분의 분자 편집기에서 가져올 수 있음.



CC(=O)OC(CC(=O)[O-])C[N+](C)(C)C

2. 자료설명

[Identifier Exchange Service \(nih.gov\)](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1)

- 6.55GB

CID-SMILES

2021-11-30 오후 4:38

파일

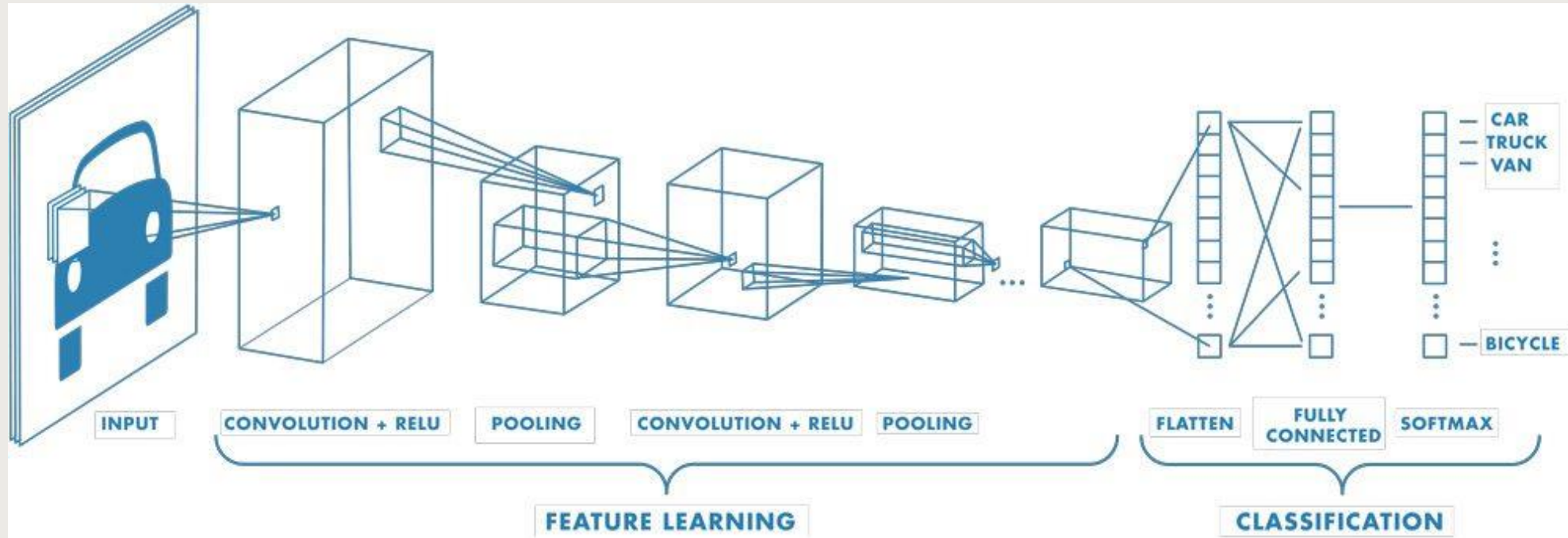
6,877,425KB

```
[ '1\tCC(=O)OC(CC(=O)[O-])C[N+](C)(C)C',  
  '2\tCC(=O)OC(CC(=O)O)C[N+](C)(C)C',  
  '3\tC1=CC(C(C(=C1)C(=O)O)O)O',  
  '4\tCC(CN)O',  
  '5\tC(C(=O)COP(=O)(O)O)N' ]
```

<과정>

- 1) 텍스트로 구성되어 있는 데이터를 SMILES 형식에 맞는 그래프 이미지 형태로 변환
- 2) 모델(CNN Encoder RNN Decoder / backbone model : InceptionV3 등)
- 3) 학습
- 4) 예측
- 5) 예측 결과가 SMILES 규칙에 맞는지 검사
- 6) Accuracy, similarity 지표 계산

3. CNN Backbone



- Convolutional neural network은 수십 또는 수백 개의 layer를 가질 수 있음
- 각 layer는 이미지의 서로 다른 특징을 검출.
- 각 layer에 서로 다른 해상도의 필터가 적용되고, convolution된 output은 다음 layer의 입력으로 사용.
- 필터는 밝기, 경계와 같이 매우 간단한 특징으로 시작하여 객체를 고유하게 정의하는 특징으로 복잡도를 늘려갈 수 있음.

3. CNN Backbone

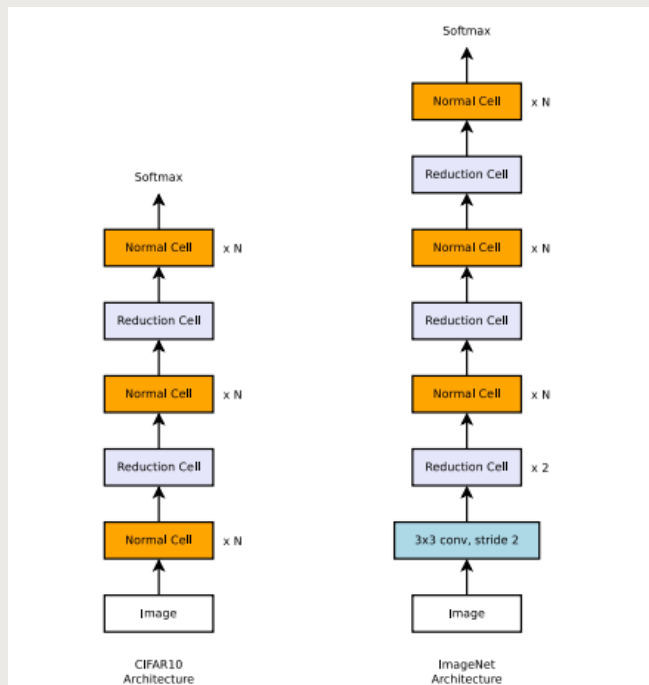


Figure 2. Scalable architectures for image classification consist of two repeated motifs termed *Normal Cell* and *Reduction Cell*. This diagram highlights the model architecture for CIFAR-10 and ImageNet. The choice for the number of times the Normal Cells that gets stacked between reduction cells, N , can vary in our experiments.

- 실습 사용 Backbone : Nasnet
- 대표적 Backbone : ResNet 50, Inception v3, VGG16, Xception 등

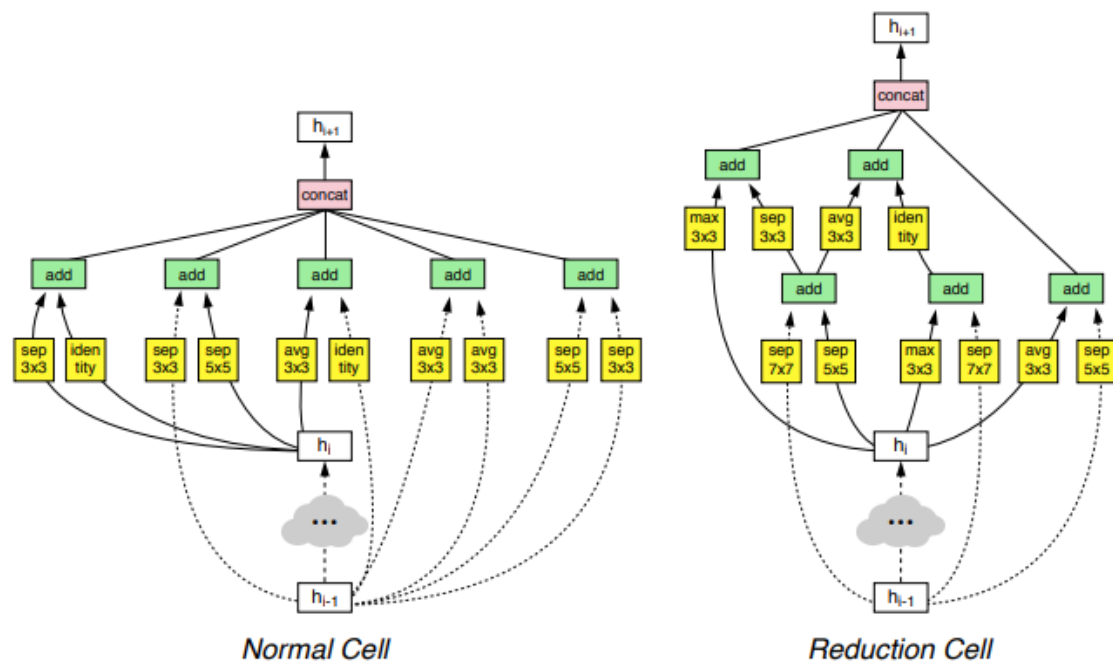


Figure 4. Architecture of the best convolutional cells (NASNet-A) with $B = 5$ blocks identified with CIFAR-10. The input (white) is the hidden state from previous activations (or input image). The output (pink) is the result of a concatenation operation across all resulting branches. Each convolutional cell is the result of B blocks. A single block corresponds to two primitive operations (yellow) and a combination operation (green). Note that colors correspond to operations in Figure 3.

4. Encoder-Decoder

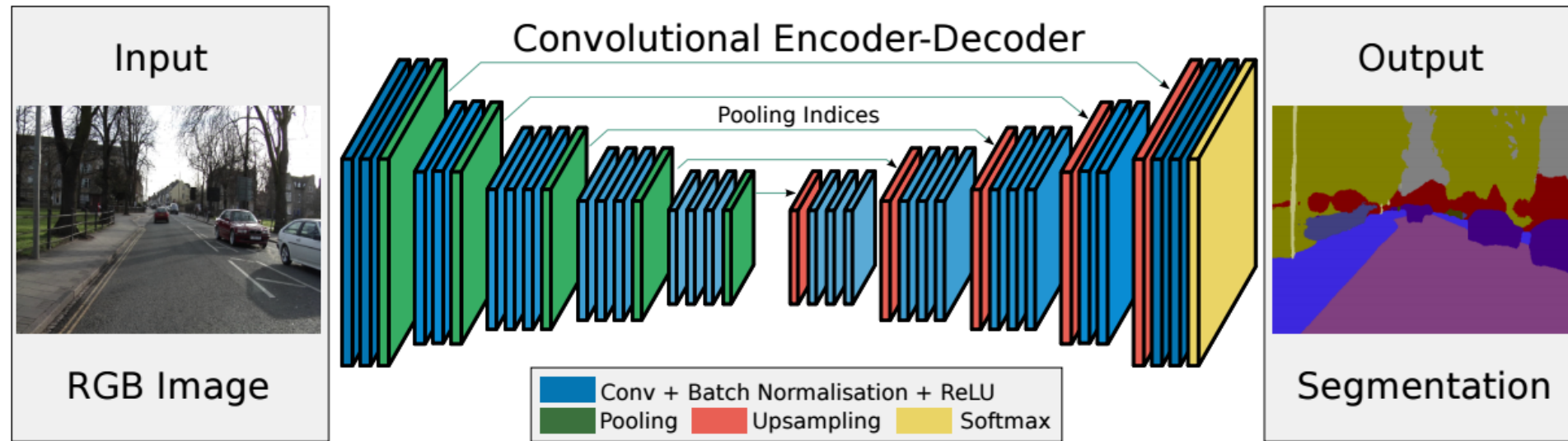
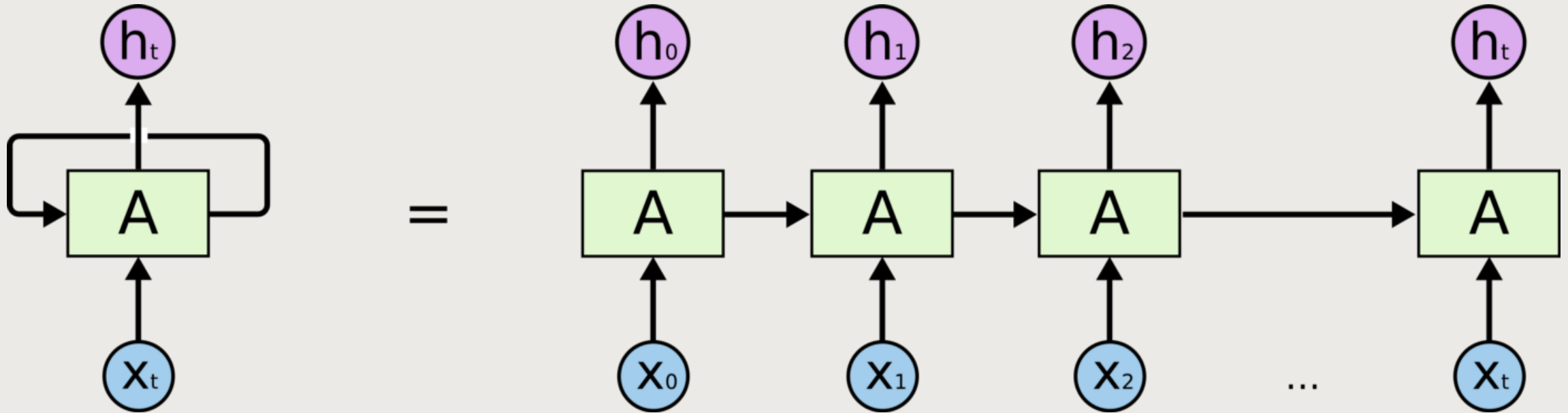


Fig. 2. An illustration of the SegNet architecture. There are no fully connected layers and hence it is only convolutional. A decoder upsamples its input using the transferred pool indices from its encoder to produce a sparse feature map(s). It then performs convolution with a trainable filter bank to densify the feature map. The final decoder output feature maps are fed to a soft-max classifier for pixel-wise classification.

- 이미지가 input 으로 들어오게 되면, 인코더는 입력 데이터를 인코딩(부호화)하고, 디코더는 인코딩 된 데이터를 디코딩(복호화)합니다. 즉, 인코더는 입력을 처리하고 디코더는 결과를 생성하는 역할
- 실습 : CNN encoder / RNN decoder

4. Encoder-Decoder



- 실습 : CNN encoder / RNN decoder
- RNN : Sequence data 를 반영하기 위해 Recurrent 구조를 사용하는 Neural Network



서울시립대학교
UNIVERSITY OF SEOUL

Q&A

감사합니다