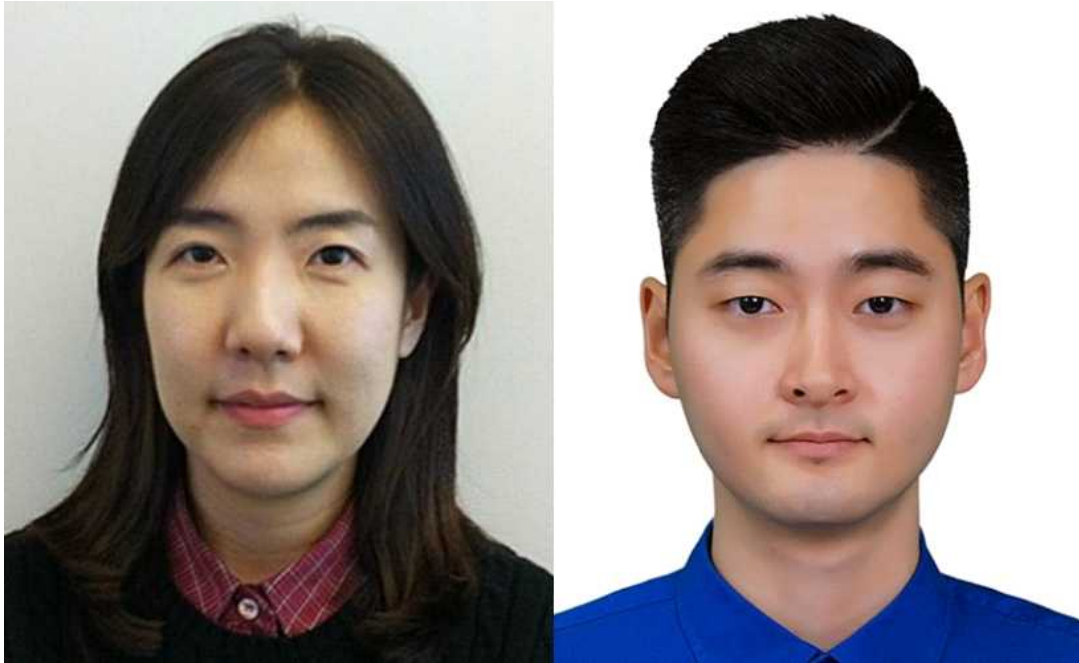


# 항균 펩타이드, 이젠 인공지능으로 발굴한다!

- 항균 효과 예측 정확도 최고 13% 향상 가능, 항생제 개발 시간 단축에도 기여
- 남호정 교수팀, 단백질 분야 저명 학술지 「Protein Science」에 논문 게재



▲ (왼쪽부터) 남호정 교수, 이한솔 석박통합과정생

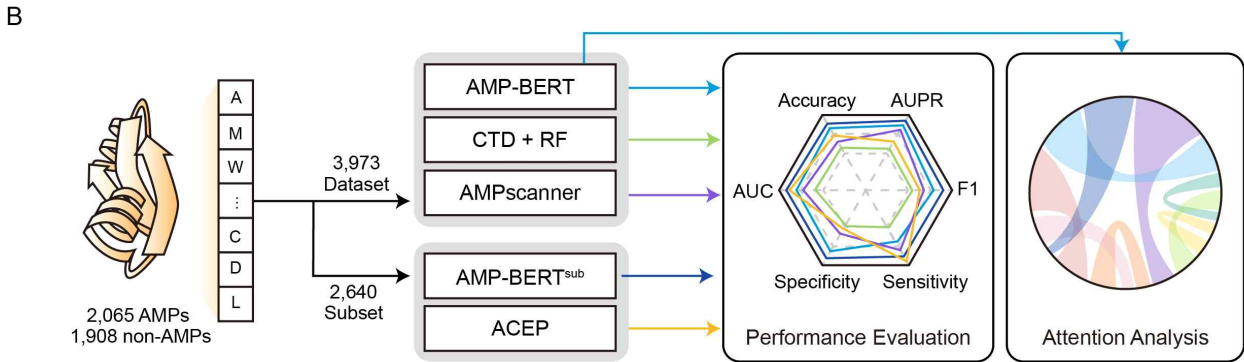
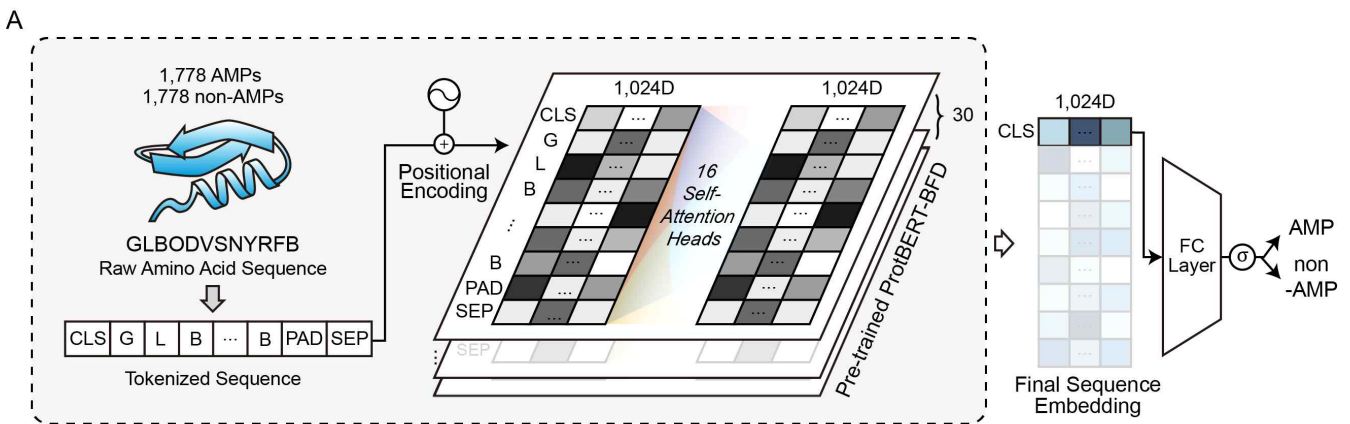
지스트(광주과학기술원, 총장 김기선) 연구진이 **항균 기능을 갖는 펩타이드 분자를 빠르게 발굴해주는 인공지능 모델을 개발했다.**

다가오는 항생제 내성균 대유행 시대를 대비하기 위한 신약 개발 인공지능 플랫폼으로, **펩타이드 분자 기반의 항생제 개발 초기 단계에서 활용돼 신약 개발 시간을 단축하는 데 기여할 것으로 기대된다.**

최초의 항생제인 페니실린은 인간과 동물의 다양한 질병을 치료하는 데 새로운 지평을 열었지만 무분별한 항생제 오남용으로 인해 항생제 내성균이 출현하게 되었고, 이에 따라 **새로운 항생제 플랫폼인 항균 펩타이드(Antimicrobial peptide, AMP)에 대한 연구가 주목받고 있다.**

항균 펩타이드(AMP)는 생명체의 모든 영역에서 자연적으로 발생하는 작은 단백질로, **기존 항생제에 내성이 있는 균에서도 뛰어난 항균력을 가지며 새로운 내성균의 출현도 거의 유발하지 않아 차세대 항생물질로 각광받고 있다.** 또한 박테리아, 바이러스 및 곰팡이에 의한 감염자나 암 환자 치료를 위한 **실효성 있는 대안 치료제로 주목받고 있다.**

일반적인 항균제 신약 개발은 실험실에서 배양한 미생물에 직접 항균제를 스크리닝하여 활성을 검증하기 때문에 시간과 비용이 많이 소요되는데, 이러한 문제를 해결하기 위해 최근에는 **컴퓨터를 이용한 계산 모델 연구가 활발히 진행되고 있다.**



▲ **AMP-BERT 연구 개요.** 연구에 사용된 데이터, 모델의 상세 구조, 평가 및 분석 방법을 종합적으로 보여주고 있다.

전기전자컴퓨터공학부 남호정 교수 연구팀(이한솔 석박통합과정생, 이송연 박사과정생, 이인구 박사)은 항균 펩타이드 치료제 개발을 위한 펩타이드 분자의 항균 효과를 기존보다 정확하게 판별할 수 있는 인공지능 예측 기술(AMP-BERT: Prediction of Antimicrobial Peptide Function Based on a BERT Model)을 개발했다.

이번 연구는 현재까지 공개된 다양한 예측 모델들과 비교해 실험 조건에 따라 최소 2% 최대 13% 더 높은 항균성 예측 정확도를 보였다. 또한, 기존 연구들에서는 불가능했던 항균성 연관 주요 펩타이드 부분 서열 정보를 제공해 예측 결과의 해석성 기능을 더했다.

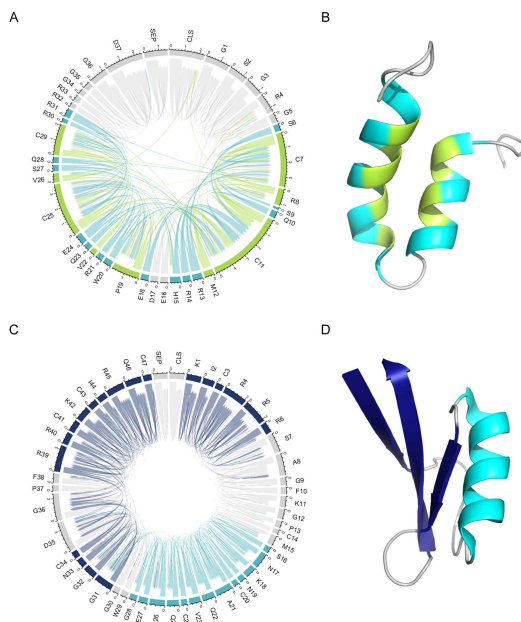
연구팀은 대규모 단백질 서열로 사전 학습된 BERT 신경망 모델\*에 셀프 어텐션 기술을 적용함으로써 앞선 연구들의 한계점을 보완하는 항균 펩타이드 활성 예측 모델을 개발했다.

\* **BERT(Bidirectional Encoder Representation from Transformers) 신경망 모델** : 대용량의 데이터로 사전 학습(pre-train)한 후, 신경망을 추가해 특정 과업을 위한 데이터로 미세 조정(fine-tuning)하는 자연 언어 처리 모델

\* **셀프 어텐션(self-attention) 기술**: 입력한 문장 내의 각 단어를 학습하면서, 다른 위치에 있는 단어들의 맥락을 참고해 현재 단어의 문장 내 상대적 속성을 학습하는 과정이다.

특히 기존 항균 펩타이드 활성 예측 연구들에서는 사용되지 않던 대용량 단백질 데이터로 사전 학습된 모델을 항균 펩타이드 관련 서열 데이터로 미세 조정(fine-tuning)을 실행한 결과, 기존 관련 연구들보다 우수한 예측 정확도를 보였다.

또한 단백질 서열의 주요 특성을 탐지하는 어텐션 기술을 사용해 항균 효과와 연관된 아미노산 서열의 경향성을 찾았다. 이를 통해 제안된 모델이 **항균 펩타이드 활성화**와 관련된 주요 부분 구조를 올바르게 탐지하고 있다는 사실을 확인함으로써 모델의 신뢰성과 해석성을 검증했다.



▲ **모델의 예측 결과와 해석 결과.** 모델이 예측을 정확히 할 뿐 아니라, 실제 항균 활성을 일으키는 아미노산 부분 구조들이 강조되어 예측하고 있는 것을 확인할 수 있다.

남호정 교수는 “이번 성과는 단백질 서열의 일반적인 특성과 항균 펩타이드의 특이적인 정보를 함께 훈련해 펩타이드 분자에 대한 항균 효과 예측의 정확도를 높이고, **항균 효과에 관여하는 주요 펩타이드 부분 서열을 제공해 주는 기술**”이라며 “인공지능 모델로 다양한 항생제 후보 물질을 단기간에 발굴해 결과적으로 **항생제 신약 개발 성공 가능성을 제고하는 데 기여하기를 바란다**”고 말했다.

이번 연구는 한국연구재단 ‘중견연구자지원사업’의 지원을 받아 수행되었으며, 단백질 분야 저명 학술지 「**Protein Science**」에 2022년 12월 3일 온라인 게재되었다.

## 논문의 주요 정보

### 1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Protein Science (IF 6.993, 21년 기준)
- 논문명 : AMP-BERT: Prediction of Antimicrobial Peptide Function Based on a BERT Model.
- 저자 정보 : 이한솔 (제1저자, 전기전자컴퓨터공학부), 이송연 (제2저자, 전기전자컴퓨터공학부), 이인구 (제3저자, 전기전자컴퓨터공학부), 남호정 (교신저자, 전기전자컴퓨터공학부, AI대학원)