

보도일시	배포 즉시 보도
	2024. 3. 19.(화)
문의	연구책임자: 기계공학부 김도년 교수(02-880-1647, dnkim@snu.ac.kr) / 교신저자
	책임연구원: 트링콕치엔 박사과정, 이재영 박사 / 공동 제1저자

DNA 종이접기 나노구조체의 형상을 1초 이내에 예측할 수 있는 AI 기술 개발 - 역학적 원리를 이용하여 데이터 부족의 한계를 극복하는 학습 방법 제안 -

■ 요약

연구 필요성	최근 DNA 종이접기 기술을 기반으로 나노스케일 구조체를 제작하여 첨단바이오 융합 분야에 활용하는 연구가 활발히 진행되고 있다. 원하는 형상을 가지는 DNA 나노구조체의 효과적인 설계를 위해 그동안 다양한 모델링 및 컴퓨터 시뮬레이션 기술이 개발되어 왔으나, 여전히 긴 해석 시간으로 인해 많은 수의 반복 계산이 필요한 설계 단계에서는 적극적으로 활용되지 못하는 한계가 있었다. 다양한 구조체의 개발을 위해서는 주어진 형상을 만드는데 필요한 DNA 염기서열들을 자동으로 설계해 주는 기술의 개발이 필수적이며, 이를 위해서는 형상 예측에 걸리는 시간을 획기적으로 단축할 수 있는 방법에 대한 연구가 반드시 필요하다.
연구성과/ 기대효과	김도년 교수 연구팀은 그래프 신경망 모델을 기반으로 DNA 종이접기 나노구조체의 3차원 형상을 1초 이내에 거의 실시간으로 예측할 수 있는 AI 기술을 개발 하는데 성공하였다. 이를 기반으로, 원하는 형상의 구조체를 만드는데 필요한 DNA 종이접기 설계도를 자동으로 도출할 수 있는 역설계 기술도 함께 개발하고 이를 실험적으로 검증하였다. 개발된 기술을 이용하여 누구나 쉽게 원하는 모양의 DNA 구조체를 나노스케일에서 제작할 수 있어, DNA 나노기술 및 이를 활용한 첨단바이오 융합 연구의 발전에 크게 기여할 것으로 기대된다.

■ 본문

서울대학교(총장 유희림)는 공과대학 기계공학부 소속 김도년 교수 연구팀이 DNA 종이접기 나노구조체의 형상을 1초 이내에 거의 실시간으로 예측할 수 있는 AI 기술을 개발했다고 밝혔다.

DNA 종이접기 기술은 DNA의 자가조립 특성을 활용해 원하는 형상의 구조체를 나노스케일 정밀도로 설계하고 제작할 수 있는 기술로 그 활용성이 높아 첨단바이오 융합 분야에서 활발히 연구되고 있다. 효과적인 설계를 위해 그 동안 다양한 모델링 및 컴퓨터 시뮬레이션 기술이 개발되어 왔으나, 하나의 구조체를 해석하는데 수십 분에서 수 시간의 긴 시간이 소요되어 많은 수의 반복 계산이 필요한 설계 단계에서는 크게 활용되지 못하는 한계가 있었다.

이에, 단백질 구조 예측 분야의 패러다임을 완전히 바꾼 알파폴드(AlphaFold)와 같이 AI 기술을 이용한 예측 기술 개발의 필요성이 DNA 나노기술 분야에서도 크게 대두되고 있다. 하지만, 자연에서 매우 다양한 크기와 모양으로 존재하여 수십만 개 이상의 구조 데이터가 확보되어 있는 단백질과 다르게 DNA 종이접기 나노구조체는 인공적인 구조체로 그 기술 개발의 역사도 짧아 수백 개 수준의 구조만이 보고되어 있다. 이처럼 매우 부족한 데이터로 인해 DNA 종이접기 나노구조체에 대한 정확한 AI 모델의 개발은 매우 힘든 것으로 여겨지고 있었다.

김도년 교수 연구팀은 이러한 데이터 부족을 한계를 근본적으로 극복하기 위해, 알려진 구조 정보와 함께 역학적 원리를 AI 모델 학습에 복합적으로 활용하는 방법을 개발하였다. 즉, 실험을 통해 알려진 구조와 예측된 구조 간의 차이를 최소화함과 동시에, 구조체가 가지는 역학적인 에너지를 계산하여 이를 함께 최소화하는 방향으로 AI 모델을 학습하는 것이다. 이를 통해, DNA 종이접기 나노구조체의 형상을 높은 정확도로 1초 이내에 빠르게 예측할 수 있음을 보여 주었다. 또한, 여러 개의 구조체가 결합되어 100만 개 이상의 염기쌍으로 구성된 초분자 거대 DNA 구조체의 형상도 예측할 수 있음을 함께 보여 주었다.

이러한 결과를 바탕으로 해당 연구팀은 개발한 AI 모델을 유전 알고리즘 기반의 설계 최적화 기술에 접목하여 원하는 형상의 DNA 종이접기 나노구조체를 만드는데 필요한 설계도를 자동으로 도출할 수 있는 역설계 기술을 개발하고, 실제 실험을 통해 개발된 기술을 검증하였다. 이번 연구 결과는 DNA를 이용하여 누구나 쉽게 원하는 모양의 나노구조체를 만들 수 있도록 하는 중요한 기반 기술로 DNA 나노기술 뿐만 아니라 이를 활용한 다양한 응용 연구의 발전에 크게 기여할 것으로 기대된다.

이번 연구는 서울대학교 기계공학부 김도년 교수가 지도하고 트렁콕치엔 박사과정생과 김경수 박사과정 및 이재영 연구교수가 진행하였으며, 해당 연구 결과는 세계적인 학술지인 Nature Materials에 3월 14일자로 게재되었다. 본 연구는 과학기술정보통신부 과학난제도전 융합연구개발사업(인공모포제네시스 연구단)과 농심그룹 울촌재단의 지원을 받아 수행되었다.

□ 연구결과

Prediction of DNA origami shape using graph neural network

Chien Truong-Quoc+, Jae Young Lee+, Kyung Soo Kim, and Do-Nyun Kim*

(*Nature Materials*, <https://www.nature.com/articles/s41563-024-01846-8>)

본 연구팀은 DNA 종이접기 나노구조체의 3차원 형상을 신속하고 정확하게 예측하는 그래프 신경망 기반의 AI 모델을 개발하였다. 구조체의 역학적 모델링을 통해 데이터 부족의 한계를 극복할 수 있는 기술을 개발하여, 1초 이내에 거의 실시간으로 정확한 형상 예측이 가능함을 보여주었으며, 100만개 이상의 초분자 DNA 거대구조체도 성공적으로 해석할 수 있었다. 개발된 AI 모델을 바탕으로 원하는 형상을 갖는 DNA 종이접기 나노구조체의 설계도를 자동으로 도출하는 역설계 기술을 개발하고 그 효용성을 실험적으로 입증하였다.

□ 용어설명

- DNA 종이접기(origami) 나노기술: DNA의 자가조립 성질을 이용하여 원하는 모양의 구조체를 나노 스케일 정밀도로 설계하고 제작할 수 있는 나노기술. 수천 개의 염기로 구성된 긴 단일 DNA 가닥의 특정 부분에 상보적으로 결합하는 수백 개의 짧은 DNA 가닥들의 염기서열을 공학적으로 설계하여 원하는 형상과 특성을 구현함.