

도메인 전이를 이용한 고속스캔순환전압전류법(FSCV) 기반 신경전달물질 농도 추정 모델

정운호, 김은호, 최지웅*
대구경북과학기술원

wjddbshg4152@dgist.ac.kr, hunho0111@dgist.ac.kr, jwchoi@dgist.ac.kr*

Fast Scan Cyclic Voltammetry (FSCV) Based Neurotransmitter Concentration Estimation Model with Domain Adaptation

Yunho Jeong, Eunho Kim, Ji-woong Choi*
DGIST, DGIST, *DGIST

요약

신경전달물질의 역학을 빠르게 측정할 수 있는 고속스캔순환전압전류법(FSCV)은 전극, 측정환경 및 측정시간에 따라 데이터 분포가 크게 달라져 일반적인 딥러닝 방법을 통해 농도 추정모델을 구축하는 것은 데이터에 따른 일반화 성능이 떨어졌다. 본 논문은 FSCV 데이터 기반의 신경전달물질 농도 추정의 일반화 성능을 향상시키기 위하여 도메인 적대적 학습을 사용하여 다양한 전극, 측정 시간, 환경에 따른 데이터 분포의 변화를 최소화하였다. 도메인 적대적 학습의 효과를 평가하기 위해 도메인 분류기가 포함되지 않은 기존 FSCV 데이터 기반의 딥러닝 모델과 일반화 성능을 비교하였다. 제안한 모델은 기존의 모델보다 뛰어난 일반화 성능을 보였으며, 특징 공간에서 전극에 따른 분포 변화를 상대적으로 줄임을 확인하였다. 이러한 발견은 FSCV 기술의 실제 활용 가능성을 높임으로써 신경과학 및 의학 분야에 기여할 것으로 기대된다.

I. 서론

신경전달물질은 뇌 신경세포 간 정보 전달에서 핵심적인 역할을 한다 [1]. 신경전달물질의 역동적인 방출, 확산, 재흡수 과정은 뇌의 인지 및 행동 조절 기능에 밀접하게 관여한다. 따라서 정확한 신경전달물질 농도 측정은 뇌-컴퓨터 인터페이스, 신경 장애 진단, 신경과학 연구 등 다양한 분야에서 필수적이다.

고속스캔순환전압전류법(fast-scan cyclic voltammetry; FSCV)은 높은 시간 해상도를 바탕으로 생체 내 신경전달물질의 빠른 변화를 실시간으로 측정할 수 있는 대표적인 전기화학적 기술이다. FSCV 는 voltammogram 파형을 통해 각 신경전달물질의 종류와 농도에 대한 정보를 제공한다. 따라서 FSCV 의 파형을 기반으로 신경전달물질의 농도와 종류를 기계학습을 통해 추정하는 연구가 활발하다 [2]. 특히 딥러닝 기반 기법들이 고전적인 통계 기반 기법에 비해 높은 성능을 보였다 [2].

하지만 FSCV 데이터는 측정에 사용된 전극의 종류, 측정 시간, 환경 등에 따라 데이터 분포가 크게 변화하는, 즉, 도메인이 변화하는 문제점이 있다. 기존 딥러닝 모델은 학습 데이터와 다른 분포를 가진 새로운 도메인의 데이터의 특징 추출이 어렵기 때문에 일반적인 딥러닝 기반 학습 방법은 전극 종류에 따른 추정 정확도가 크게 달랐다.

이를 극복하기 위해 본 연구에서는 도메인 적응(domain adaptation) 기법을 FSCV 데이터 특징 추출에 적용하였다. 도메인 적응은 딥러닝 전이학습의 한 종류로, 서로 다른 데이터 분포 간의 차이를 최소화하여 모델의 일반화 성능을 높이는 방법이다. 본 연구에서는 FSCV 데이터의 도메인

변화 문제를 해결하고, 학습 데이터에 포함되지 않은 새로운 도메인의 데이터에 대해서도 일반화할 수 있는 신경전달물질 농도 추정 모델을 제안한다. 이를 통해 FSCV 기술의 활용도를 높이고 신경과학 및 의학 분야에서 유용하게 사용할 수 있을 것으로 기대한다.

II. 본론

i. 딥러닝 네트워크 및 알고리즘

본 연구에서 제안하는 딥러닝 네트워크 및 알고리즘은 도메인 적대적 신경망 학습(domain adversarial training of neural network)에 기반한다 [3]. 네트워크의 구성은 아래의 그림과 같다.

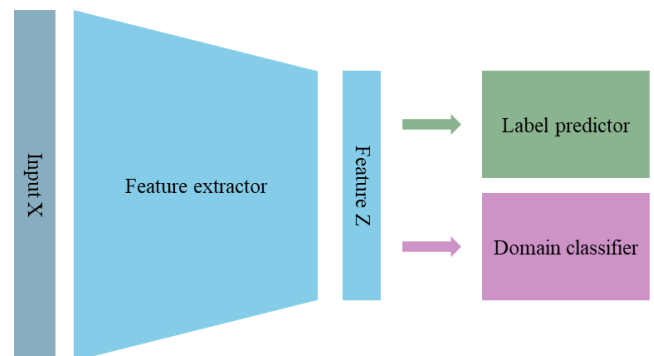


그림 1 딥러닝 네트워크 구조

도메인(target domain) 간의 데이터 분포 차이를 최소화하여 모델의 일반화 성능을 향상시킨다. 이 방법은 기존 신경망 모델에 도메인 분류기(domain classifier)를

추가하였다. 도메인 분류기는 입력 데이터가 소스 도메인인지 타겟 도메인인지를 구분하도록 구성되었다. 이때 기존 모델의 특징 추출기(feature extractor)는 그라디언트 역전 계층을 통해 도메인 분류기에 연결되어 도메인 손실을 증가시킨다. 이를 통해, 특징 벡터 z 는 도메인에 불변적인 특징을 추출하게 된다. 이러한 적대적 학습 과정을 통해 특징 추출기는 도메인 차이에 강건한 특징을 학습하게 되므로, 타겟 도메인의 데이터에 대해서도 일반화 성능이 향상된다. 도메인 분류기와 특징 추출기는 서로 대립하는 방향으로 학습되며, 이 과정에서 특징 추출기가 도메인에 불변적인 특징을 잘 추출하도록 유도한다.

제안한 네트워크에서 특징 추출기는 temporal convolutional network(TCN)을 사용했으며 라벨 예측기와 도메인 분류기는 모두 선형 변환 레이어를 사용했다. 그라디언트 역전 계층의 손실 가중치 λ 는 0.1 로 구성하였다.

ii. 데이터 수집

본 연구에서 사용된 데이터는 FSCV 를 활용하여 도파민 용액을 분석하였다. 신경전달물질의 농도를 0, 100, 200, 300, 400, 500 nM 로 다양하게 변화시켜 데이터를 수집하였다. 각각의 용액에 대해 10 분 동안 초당 10 회의 샘플링 속도로 데이터를 수집하였다. FSCV 에 사용된 입력 파형은 -0.4V 에서 1.3V 범위의 삼각파 형태로, 스캔 속도는 400V/s 였다. 이를 통해 얻어진 voltammogram 은 8.5msec 동안 850 포인트의 데이터로 구성되었다. 신경전달물질 용액 주입 전 10 초 동안의 배경 전류를 측정하여 FSCV 반응에 포함된 용량성 전하 성분을 제거하였다. 이를 총 5 개의 전극을 사용해 측정하였다. 이 중에서 4 개의 전극의 데이터를 학습 데이터로 사용하였으며 나머지 1 개의 전극의 데이터를 테스트 데이터로 사용하였다.

iii. 성능 평가

그림 2 는 도메인 전이를 적용한 모델과 그렇지 않은 모델의 잠재 특징 공간 임베딩을 나타낸 것이다. 그림 2 의 왼쪽 그림이 도메인 전이 기법을 적용한 모델의 잠재 특징 공간 임베딩이며 오른쪽 그림이 도메인 전이 기법을 적용하지 않은 모델의 잠재 특징 공간 임베딩이다. 도메인 전이 기법을 적용한 모델이 학습 데이터와 테스트 데이터 사이의 도메인 분포를 유사하게 임베딩하는 것을 알 수 있다.

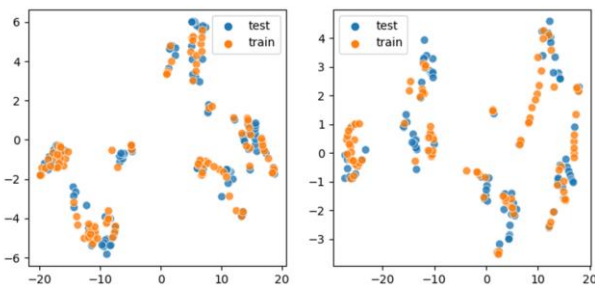


그림 2 잠재 특징 공간 임베딩

본 연구에서 제안한 모델의 성능은 그림 3 과 같다. 도메인 전이 기법을 사용한 모델의 경우 학습 데이터에 포함되지 않은 새로운 전극 데이터에 대해 90.48 퍼센트의 정확도로 예측하였고 도메인 전이 기법을 사용하지 않은 모델의 경우 83.33 퍼센트의 정확도로 예측하였다. 도메인

전이 기법을 동일한 딥러닝 네트워크 구조에 적용하였을 때, 7.15 퍼센트의 예측 성능이 향상됨을 보였다.

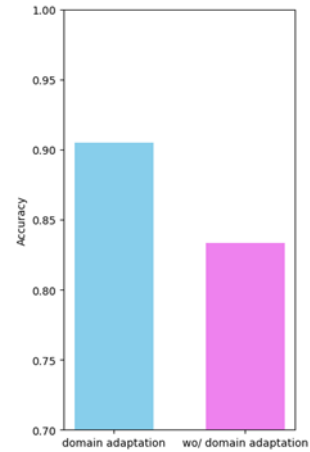


그림 3 모델 성능 평가

III. 결론

본 논문에서는 적대적 학습을 통한 도메인 적응 기법을 적용해 데이터 분포의 변화에 강건한 신경전달물질 농도 추정 모델을 제안하고 도메인 적응 기법을 적용하지 않은 모델과 비교를 통해 성능이 향상되는 것을 보였다. 제안한 모델은 그라디언트 역전 계층을 통해 도메인 분류기와 특징 추출기 간의 적대적 학습을 수행하였다. 이를 통해 특징 추출기가 도메인 불변적인 특징을 학습하여 새로운 도메인의 데이터에 대해서도 강건한 신경전달물질 농도 추정이 가능하게 되었다. 다양한 실험을 통해 제안 모델이 기존 모델 대비 높은 일반화 성능을 보이는 것을 확인하였다.

본 연구 결과는 FSCV 기술의 실제 활용도를 크게 높일 수 있을 것으로 기대된다. 향후 다양한 전극, 측정 환경에서의 추가 실험을 통해 모델의 성능을 더욱 높이고, 최종적으로는 실시간 신경전달물질 모니터링 시스템 구축에 활용할 수 있을 것이다.

ACKNOWLEDGMENT

이 논문은 한국연구재단 뇌과학 선도융합기술 개발사업 (RS-2023-00266171) 및 과학기술정보통신부가 지원하는 한국뇌연구원(KBRI)을 통한 KBRI 기초연구 프로그램 (24-BR-04-04)의 지원을 받아 수행되었습니다.

참고 문헌

- [1] Kavalali, Ege T. "The mechanisms and functions of spontaneous neurotransmitter release," *Nature Reviews Neuroscience*, 16(1), pp. 5-16, Jan. 2015
- [2] Choi, H., et al. "Neurochemical concentration prediction using deep learning vs principal component regression in fast scan cyclic voltammetry: a comparison study," *ACS Chemical Neuroscience*, 13(15), pp. 2288-2297, Jul. 2022
- [3] Ganin, Y., et al. "Domain-adversarial training of neural networks," *Journal of Machine Learning Research*, 17(59) pp. 1-35, Jan. 2016