

ISSN 2636-0403

발표논문집

2025
Digital
Contents
Society

(사)한국디지털콘텐츠학회
하계종합학술대회 및 대학생논문경진대회



디지털 라이프,
융합 기술과 콘텐츠

주최 | 한국디지털콘텐츠학회 Digital Contents Society 주관 | SW중심대학사업단 SKIAC MOKWON UNIVERSITY

후원 | JININFRA 위상인프라 GNSOFT 지에프티 GFT 지에프티 SJ정보통신 아이씨티웨이(주) ICTWAY 아이씨티웨이(주) CODABLE JWATS JWATS OSKO SIGONGtech (주)하이게이컨설팅 OPENLINKSYSTEM (주)에이저투테크 BonC Innovators 대진정보통신(주) NEOBRIX (주)그린텍아이앤씨 PINTEL 지엔미래교육 D PARTNERS (주)에이저투테크

사단법인 한국디지털콘텐츠학회
Digital Contents Society

☐ 논문발표 세션 WE1 (14:00~14:50)		☐ 장소 : 카멜리아 홀
좌장	유선용 교수(전남대학교)	
WE1-01. 프레스 성형 공정 데이터를 활용한 모빌리티 부품 불량 예측 알고리즘 연구 박순, 김진술, 이천환(전남대학교) 443		
WE1-02. RGB카메라 기반 딥러닝 모델을 활용한 비정형 용접관 위치 인식 기법 류창훈, 김진술(전남대학교), 김유진(한국생산기술연구원), 김찬수(전남대학교) 446		
WE1-03. 감정 분석 기반 음악 추천 시스템 서가연, 신형환, 강세이, 정재준, 이윤수, 서보경, 김승원(전남대학교) 449		
WE1-04. 마이크로서비스 환경에서 gRPC Deadlines의 동적 설정 및 Circuit Breaker 연계 전략 연구 옥상경, 남현주, 김진술, 김경백(전남대학교) 451		
WE1-05. 스마트디밍 기능이 적용된 IoT 보안등 제어기의 에너지 절감효과 분석 진정인, 김진술(전남대학교) 453		
WE1-06. UWB 채널 데이터 기반 NLOS 식별을 위한 FCN 모델의 특성 조합별 성능 분석 문종민, 김진술, 김경백(전남대학교) 455		
WE1-07. YOLOv11 기반의 영역 분할을 이용한 해캄 실시간 탐지 시스템 주성도, 김진술,(전남대학교) 이후영(에코피스주식회사), 김찬수(전남대학교) 457		
WE1-08. 고효율 산화갈륨 광촉매 VOC제거 필터 모듈 개발 정지영, 김진술(전남대학교) 459		
WE1-09. 그래프 트랜스포머를 이용한 항암제 조합의 시너지 효과 예측 김상민, 이도현, 유선용(전남대학교) 461		
WE1-10. 지식 그래프 임베딩 기반 약물-식품 상호작용 예측 연구 강민기, 송윤주, 유선용(전남대학교) 463		

지식 그래프 임베딩 기반 약물-식품 상호작용 예측 연구

강민기(*), 송윤주(*), 유선용(*)

(*) 전남대학교 지능전자컴퓨터공학과, {kmg_0216, syunju0814, syyoo}@jnu.ac.kr

Predicting drug-food interactions based on knowledge graph embedding

Kang Min-gi(*), Song Yun-ju(*), Yoo Sun-yong(*)

(*) Chonnam National University, Department of Electronics and Computer Engineering

요약

식품-약물 상호작용(FDI)은 환자 안전에 중요한 위험 요소이지만, 기존 예측 방법들은 복잡한 생화학적 관계를 충분히 고려하지 못한다. 본 논문에서는 지식 그래프 신경망과 cross-attention 메커니즘을 결합하여 약물별 맥락에서 관련성 높은 식품 특성을 강조함으로써 FDI를 예측하는 모델을 제안한다. 다중 생의학 데이터베이스를 통합한 지식 그래프 기반으로 식품의 복합적 생화학 효과를 모델링한 결과, 기존 방법들 대비 우수한 예측 성능을 달성하여 임상 환경에서의 FDI 위험 관리에 기여할 수 있을 것으로 기대된다.

1. 연구 배경

약물-식품 상호작용은 식품 성분이 약물의 흡수, 분포, 대사, 배설에 영향을 미쳐 치료 효과를 감소시키거나 부작용을 증가시키는 현상이다. 와파린과 자몽주스의 상호작용, MAOI와 와인 또는 치즈의 상호작용 등이 잘 알려진 사례이다. 그러나 현재까지 발견된 FDI는 전체의 극히 일부에 불과하며, 새로운 약물과 식품 조합에 대한 체계적 예측이 어려운 상황이다.

기존의 FDI 예측 연구들은 주로 개별 사례 보고나 제한적인 임상 연구에 의존하여 확장성에 한계가 있었다. 전통적인 기계학습 접근법들은 복잡한 생물학적 관계를 충분히 모델링하지 못하며, 최근 그래프 신경망 기반 연구들도 개별 식품 성분과 약물 분자 간의 직접적 상호작용 예측에 집중하여 식품에 포함된 다양한 성분들의 종합적 효과를 고려하지 못한다. 실제 식품은 수백 가지 생화학적 성분들의 복합체이므로, 전체 식품 수준에서 지식 그래프를 통한 종합적 모델링이 필요하다.

2. 연구 내용

2.1 데이터 수집과 전처리

본 논문에서는 FDI 예측을 위해 다중 생의학 데이터베이스를 통합한 지식 그래프를 구축하였다. FooDB로부터 938개 식품과 11,580개 화합물 데이터를 수집하고, DRKG 지식 그래프에서 식품, 화합물, 약물과 연관된 생물학적 관계 triplet을 선별적으로 추출하여 서브그래프를 생성하였다 [1]. 구축된 통합 지식 그래프는 총 41,698개 엔티티와 1,362,957개 triplet으로 구성되며, 51가지 관계 유형을 포함한다.

FDI 예측 데이터셋은 FDA 부작용 보고서, PubMed 등에서 수집 및 정리한 데이터베이스인 DDID에서 1,764개의 검증된 식품-약물 쌍을 사용하였다 [2]. 수집된 식품-약물 쌍과 1:1 비율로 랜덤하게 네거티브 샘플을 생성하여 총 3,528개의 식품-약물 쌍을 가지는 데이터셋으로 구성하였다.

2.2 모델 아키텍처

본 논문에서 제안한 모델은 지식 그래프 임베딩, 맥락적 특성 강화, 상호작용 예측의 3단계로 구성된다. 첫 번째 단계에서는 3층 관계형 그래프 합성곱 네트워크(R-GCN)를

사용하여 지식 그래프의 모든 엔티티를 256차원 벡터 공간으로 임베딩한다. R-GCN은 관계별로 서로 다른 가중치를 학습하여 각 관계 유형의 의미를 구별한다.

두 번째 단계에서는 cross-attention 메커니즘을 적용한다. 이 과정에서 약물 임베딩 벡터를 key와 value로, 식품 임베딩 벡터를 query로 사용하여 특정 약물 맥락에서 중요한 식품 특성들을 동적으로 강조한다. Cross-attention을 통해 약물의 대사 경로, 표적 단백질, 약리학적 특성과 관련성이 높은 식품 성분들이 선별적으로 가중되어 맥락적 식품 표현이 생성된다.

최종 단계에서는 cross-attention 메커니즘을 통해 업데이트된 식품 임베딩 벡터와 약물 임베딩 벡터를 연결하여 MLP layer에 입력하여 상호작용 확률을 계산한다. 모델 훈련에는 클래스 불균형 문제를 해결하기 위한 Focal Loss를 적용하여 어려운 샘플에 더 높은 가중치를 부여함으로써 예측 성능을 향상시키도록 손실 함수를 설정하였다. Optimizer는 Adam을 사용하였고, 학습률은 0.001을 설정하여 훈련과 검증을 진행하였다.

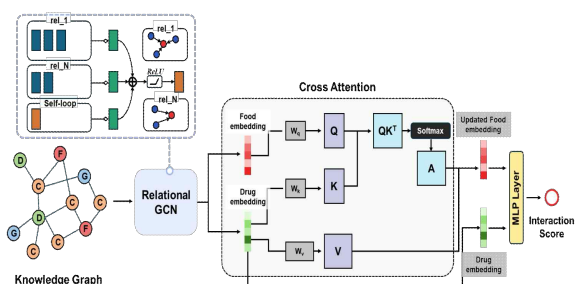


Figure 1. The framework of our proposed model
그림 1. 모델 전체 프레임워크

3. 실험 및 결과

제안된 모델의 성능을 평가하기 위해 Random Forest(RF)와 R-GCN을 기준 모델로 설정해 비교 실험을 수행하였다. 표 1에 나타난 바와 같이, 제안 모델은 정확도 0.8895, F1-Score 0.8863, AUROC 0.9443, AUPR 0.9511을 달성하였다. 이는 기준 모델보다 향상된 결과이다. Cross-attention 메커니즘을 통한 약물별 맥락 고려가 FDI 예측 성능 개선에 효과적임을 확인할 수 있다.

Table 1. Performance evaluation metrics

표 1. 모델 성능평가지표

Model \ Metrics	Accuracy	F1-Score	AUROC	AUPR
RF	0.7677	0.75	0.8681	0.8751
R-GCN	0.8782	0.8782	0.9270	0.9087
Our Model	0.8895	0.8863	0.9443	0.9511

4. 결론

본 연구는 지식 그래프 기반 구조적 정보와 cross-attention 메커니즘을 결합한 새로운 FDI 예측 모델을 제시하였다. 실험 결과 제안된 방법은 기존 방법들보다 우수한 예측 성능을 달성하였으며, cross-attention을 통한 약물별 맥락 고려가 식품 성분의 상대적 중요도를 반영하여 예측 정확도를 향상시킴을 확인하였다. 본 연구의 결과는 FDI 식별과 맞춤형 약물 처방에 기여할 수 있을 것으로 기대된다.

감사의 글

이 논문은 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 정보통신기획평가원-지역지능화혁신인재양성사업 (IITP-2025-RS-2022-00156287) 및 식품의약품안전처 연구개발비(RS-2024-00332003, RS-2025-02215961)로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

참고 문헌 (참고자료)

- [1] V. N. Ioannidis, "DRKG - Drug repurposing knowledge graph for COVID-19," 2020. [Online]. Available: <https://github.com/gnn4dr/DRKG/>
- [2] Hong, Y., et al. (2024). "DDID: a comprehensive resource for visualization and analysis of diet - drug interactions." Briefings in bioinformatics 25(3): bbae212.