

발표논문집

2025
Digital
Contents
Society

(사)한국디지털콘텐츠학회
하계종합학술대회 및 대학생논문경진대회



 사단
법인 **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		

그래프 트랜스포머를 이용한 항암제 조합의 시너지 효과 예측

김상민(*), 이도현(*), 유선용(*)

(*) 전남대학교 지능전자컴퓨터공학과, {ksm980226, dlehgus7222, syyoo}@jnu.ac.kr

Predicting synergistic drug combination using graph transformer

Kim Sang-min(*), Lee Do-hyeon (*), Yoo Sun-yong (*)

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

요약

약물 조합 치료는 암 치료에 있어 유망한 치료 전략으로 떠오르고 있다. 그러나 약물의 수가 증가함에 따라 효과적인 약물 조합을 식별하는 것은 여전히 어려운 과제이다. 기존 연구들은 분자 그래프의 구조적 특징을 충분히 반영하지 못하고, 시너지 효과에 중요한 유전자에 대한 분석이 부족하다는 한계가 존재한다. 본 논문에서는 이를 해결하기 위해 그래프 트랜스포머와 게이팅 메커니즘을 결합한 모델을 제안한다. 제안된 모델은 기존 방법들 보다 우수한 성능을 보였고, 게이팅 메커니즘을 통해 시너지 효과에 중요한 유전자들을 식별함으로써 해석 가능성을 확보하였다. 이를 통해 약물 조합 식별을 위한 유망한 도구로 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

1. 서론

암은 전 세계 사망 원인 2위를 차지하는 질병으로 의학 연구의 발전에도 불구하고 암 치료는 복잡한 특성으로 인해 여전히 어려운 과제이다. 암 치료 전략으로 최근에는 단일 약물이 아닌 여러 약물을 동시에 사용하는 약물 조합치료가 주목받고 있으며, 치료 효과를 높일 수 있어 시너지 효과를 내는 약물 조합 식별이 중요한 전략이 되고 있다. 그러나 기존의 약물 조합 식별은 주로 임상실험에 의존하고 있으며, 가능한 조합의 수가 방대하여 시간과 비용이 많이 드는 한계가 있다. 따라서 실험적 방법을 보완하기 위해 그래프 신경망과 같은 딥러닝 기반 방법을 통해 약물의 분자 그래프를 활용하여 시너지 효과를 예측하는 연구가 진행되고 있으나, 기존 연구들은 그래프의 구조적 특징을 충분히 반영하지 못하고, 시너지 효과에 중요한 유전자에 대한 분석이 부족하다는 한계가 존재한다. 이를 극복하기 위해 본 논문에서는 그래프의 구조적 특징을 반영할 수 있는 그래프 트랜스포머를 활용하고, 시너지 효과에 중요한 유전자를 분석하기 위한 게이팅 메커니즘을 도입한 모델을 제안한다.

2. 본론

2.1 실험 데이터

본 연구에서는 데이터는 13개의 암세포주와 48개의 약물로 구성된 3,014개의 약물 조합 데이터를 활용하였으며, 각 조합에 대한 시너지 효과를 나타내는 S score를 포함한다. 각 약물의 분자 구조 정보는 PubChem 데이터베이스에서 SMILES(Simplified Molecular Input Line Entry System) 형식으로 수집하였으며, RDKit 라이브러리를 통해 분자 그래프로 변환하여 24차원의 원자 특징 벡터와 10차원의 결합 특징 벡터로 구성하였다. 각 약물을 처리했을 때의 유전자 발현 데이터는 LINCS(Library of Integrated Network-Based Cellular Signatures) L1000 데이터셋에서 978개의 랜드마크 유전자의 발현 변화 정보를 수집하였다.

2.2 모델

본 연구에서는 항암제 조합의 시너지 효과를 예측하기 위한 모델을 제안한다.

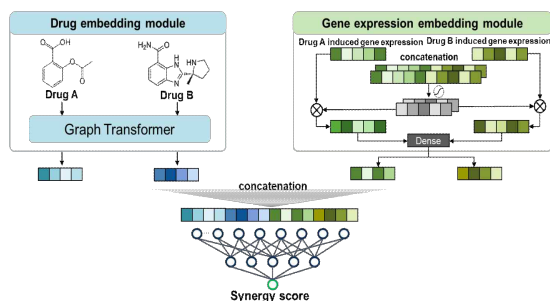


Figure 1. Model architecture

그림 1. 모델 아키텍처

모델은 두 약물의 분자 그래프와 각 약물을 처리했을 때 유전자 발현 정보를 입력으로 받는다. 각 약물의 분자 구조는 그래프 트랜스포머를 통해 위치 인코딩을 활용하여 구조적 정보가 반영된 임베딩 벡터를 생성한다. 유전자 발현 데이터는 게이팅메커니즘을 통해 시너지 효과에 중요한 유전자를 선별하여 임베딩 벡터를 생성한다. 생성된 벡터들은 모두 연결하여 fully connected layer를 거쳐 약물 조합의 시너지 점수를 예측한다.

2.3 실험 및 평가

본 연구에서 개발된 모델의 성능은 교차검증을 통해 기존 모델과 비교하였으며, MSE(Mean Squared Error), MAE(Mean Absolute Error), R^2 , PCC(Pearson Correlation Coefficient)를 사용하여 성능을 측정하였다.

Table 1. Model performance comparison

표 1. 모델 성능 비교

Method	MSE ($\pm$ std)	MAE ($\pm$ std)	R^2 ($\pm$ std)	PCC ($\pm$ std)
DeepDDS[1]	72.85 $\pm$ 12.87	6.05 $\pm$ 0.77	0.41 $\pm$ 0.09	0.63 $\pm$ 0.69
EC-DFR[2]	64.19 $\pm$ 9.34	5.64 $\pm$ 0.23	0.48 $\pm$ 0.04	0.69 $\pm$ 0.03
Ours	58.75 $\pm$ 10.76	5.33 $\pm$ 0.27	0.52 $\pm$ 0.06	0.72 $\pm$ 0.04

추가로 모델의 해석가능성을 검증하기 위해 학습 과정에서 선별된 중요 유전자를 분석한 결과, 문헌에서 확인된 시너지 효과에 영향을 미치는 핵심 유전자들과 일치함을 확인하였다 [3].

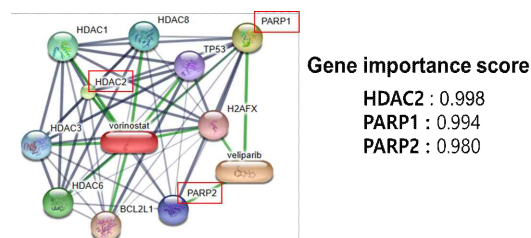


Figure 2. Important gene analysis result

그림 2. 중요 유전자 분석 결과

3. 결론

본 연구에서는 그래프 트랜스포머와 게이팅 메커니즘을 결합하여 항암제 조합의 시너지 효과를 예측하는 모델을 제안하였다. 그래프 트랜스포머로 구조적 특징을 반영하고, 게이팅 메커니즘으로 중요 유전자를 선별하여 예측 성능을 향상시켰다. 선별된 유전자들이 실제 약물 경로 핵심 유전자와 일치하여 해석가능성을 검증하였다.

감사의 글

이 논문은 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 정보통신기 획평 가원 - 지역 지능화 혁신인재 양성 사업(IITP-2025-RS-2022-00156287) 및 식품의약품안전처 연구개발비(RS-2024-00332003, RS-2025-02215961)로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

참고 문헌 (참고자료)

- [1] Wang, Jinxian, et al. "DeepDDS: deep graph neural network with attention mechanism to predict synergistic drug combinations." Briefings in Bioinformatics 23.1 (2022): bbab390.
- [2] Lin, Weiping, et al. "An enhanced cascade-based deep forest model for drug combination prediction." Briefings in Bioinformatics 23.2 (2022): bbab562.
- [3] Yin, Linglong, et al. "PARP inhibitor veliparib and HDAC inhibitor SAHA synergistically co-target the UHRF1/BRCA1 DNA damage repair complex in prostate cancer cells." Journal of Experimental & Clinical Cancer Research 37 (2018): 1-14.