

# 딥 앙상블 그래프 신경망을 이용한 생태 독성 관계 예측

남홍철, 전영우, 육태경, 신재모, 권현\*

육군사관학교

hg19970301@gmail.com, \*hkwon@kma.ac.kr(교신저자)

## Deep Ensemble Graph Neural Networks for Ecotoxicological Relation Prediction

Hong Chul Nam, Youngwoo Jeon, Taekyung Yuk, Jae Mo Shin, Hyun Kwon\*

Korea Military Academy

### 요약

군사 작전 환경에서 화학물질의 유출, 화학전, 오염 등으로 인한 화학 위협에 대한 신속하고 신뢰성 있는 평가는 작전 성공과 부대 생존성 확보에 핵심적이다. 본 연구에서는 화학물질과 생물종 간의 생태 독성 관계를 예측하기 위해, 그래프 신경망(Graph Neural Network, GNN)을 기반으로 한 딥 앙상블 학습 프레임워크를 제안한다. 독립적으로 학습된 다수의 GNN 모델로 구성된 앙상블은, 특히 데이터가 제한된 환경에서 예측 성능과 불확실성 정량화 측면에서 기존 단일 모델보다 우수한 결과를 보였다. 실험은 공공 생태독성 데이터셋(eToxIQ)을 기반으로 수행되었으며, GNN 앙상블은 AUROC, F1 점수, 예측 신뢰도에서 일관되게 향상된 성능을 나타냈다. 본 프레임워크는 고비용의 실험 없이도 화학 위협을 조기 탐지할 수 있어, 군수 지원, 생물 방어, 환경 감시 등 다양한 분야에서 활용 가능성이 높다. 또한 기존 군사 시스템에 유연하게 통합될 수 있어, 실전 환경에서의 확장성과 실효성을 겸비한 기술적 대안을 제시한다.

### 1. 서론

화학적 위협(예: 유출 사고, 산업유해물질(TICs/TIMs), 화학작용제(CWAs))에 대한 신속한 평가는 군사 작전의 효율성과 부대 방호 측면에서 매우 중요하다 [1]. 기존의 독성 평가 방식은 속도가 느리거나 대규모 실험 비용이 수반되며, 종종 포괄적인 데이터 부족에 직면한다.

최근 그래프 신경망(GNN)은 화학물질과 생물 종 간의 독성 상호 작용을 모델링하는 데 유용하다는 점이 입증되었지만, 단일 모델은 일반적으로 예측 신뢰도나 불확실성 추정치를 제공하지 못한다. 이는 군사적 의사결정 상황에서 제한적으로 활용할 수 있다. 이에 본 연구에서는 불확실성 정량화가 가능하고, 고신뢰의 독성 예측을 수행할 수 있는 딥 앙상블 GNN 프레임워크를 제안한다. 제안된 프레임워크는 독립적으로 학습된 여러 GNN의 예측값을 집계함으로써 정확도, 강건성, 신뢰도 모두를 개선하며, 군사 환경에서 실시간으로 운용 가능한 생태 독성 평가 도구로 활용될 수 있다.

### 2. 제안하는 딥 앙상블 GNN 프레임워크 및 데이터

2.1 데이터셋 및 실험적 근거 (Dataset and Experimental Basis)  
본 연구에서 사용된 모델은 주로 eToxIQ 벤치마크 데이터셋으로 학습 및 평가되었다. 이 데이터셋은 EnviroTox 등 공공 데이터베이스에서 집계한 수생 생물에 대한 화학물질 독성 데이터를 포함한다. 데이터의 핵심은 표준 급성 수생 독성 시험(acute aquatic toxicity tests)에서 과생된 LC50(반수치사농도) 값이다. 이러한 실험은 일반적으로 시험 생물(예: 어류) 그룹을 다양한 농도의 화학물질에 정해진 기간(대개 96시간) 동안 노출시킨다. 시험 기간 종

료 시 각 농도에서의 사망률을 관찰하여, 시험 개체군의 50%를 치사시키는 농도(LC50)를 통계적으로 추정한다. 본 프레임워크는 이러한 실험적으로 결정된 LC50 값을 사용하여, 특정 농도 임계값(예: 10 mg/L)을 기준으로 '고독성'(LC50 낮음) 또는 '저독성'(LC50 높음) 관계를 이진 분류 문제로 예측한다.

### 2.2 프레임워크 구성 (Framework Architecture)

본 프레임워크는 화학물질과 생물종의 이분 그래프(bipartite graph) 상에서 작동하는 GNN 앙상블을 사용하여 독성 관계를 예측한다.

기반 GNN 모델 (Base GNN Model): 앙상블 내 각 개별 모델은 GNN 계층(예: GraphSAGE 유사[2])을 사용하여 화학적 특징( $x_v$ )과 생물종 특징( $x_u$ )으로부터 노드 임베딩(node embedding)을 학습한다. 초기 임베딩

$(h_u^{(0)}, h_v^{(0)})$  으로부터 시작하여, k번째 GNN 계층은 다음과 같이 이웃 노드의 정보를 집계하고 노드 표현을 이웃 집계:

$h_{N(u)}^{(k)} = \text{AGGREGATE}(h_v^{(k-1)} | v \in N(u)),$  노드 갱신:

$h_u^{(k)} = \sigma(W^{(k)} \cdot \text{CONCAT}(h_u^{(k-1)}, h_{N(u)}^{(k)})).$  최종 예측기는 최

종 임베딩  $(h_u^{(L)}, h_v^{(L)})$ 을 입력받아 독성 효과 확률  $y_{uv}$ 를 출력한다:

$y_{uv} = \text{sigmoid}(\text{MLP}_{pred}(\text{CONCAT}(h_u^{(L)}, h_v^{(L)}))).$

딥 앙상블 (Deep Ensemble): N개의 동일한 GNN 모델  $M_1, \dots, M_N$ 을 독립적으로 (서로 다른 초기화/데이터 셔플링 사용) 학습시킨다.

예측 (Prediction): 개별 모델 예측  $y_i = M_i(u, v)$ 을 구하고, 최종

Table 1. AUROC, F1 점수, 정밀도, 재현율 지표를 기준으로 다양한 모델(LR, MLP, GNN, GNN-DE)의 성능을 비교한 결과. GNN-DE는 AUROC(0.94 ± 0.00)와 F1 점수(0.90 ± 0.01)에서 가장 높은 성능을 기록하며, 다른 모델들에 비해 일관되게 우수한 예측 능력을 보여주었다.

Model	AUROC	F1 Score	Precision	Recall
LR	0.88 ± 0.02	0.75 ± 0.03	0.93 ± 0.01	0.65 ± 0.01
MLP	0.89 ± 0.00	0.84 ± 0.01	0.91 ± 0.01	0.82 ± 0.01
GNN	0.91 ± 0.01	0.87 ± 0.01	0.92 ± 0.01	0.85 ± 0.01
GNN-DE (ours)	<b>0.94 ± 0.00</b>	<b>0.90 ± 0.01</b>	<b>0.93 ± 0.01</b>	<b>0.86 ± 0.01</b>

독성 확률 ( $y_{agg}$ )은 이들의 평균으로 계산된다.

2.3 성능 평가 요약 (Performance Evaluation Summary)  
제안된 딥 앙상블 GNN(GNN-DE) 프레임워크는 다양한 분류 성능 지표에서 기존 모델(LR, MLP, 단일 GNN) 대비 일관되게 우수한 성능을 보였다. AUROC 지표에서 GNN-DE는 0.94로 가장 높은 값을 기록하였고, F1 점수 또한 0.90으로 GNN(0.87), MLP(0.84), LR(0.75) 대비 뚜렷한 향상을 보였다. 이는 제안된 앙상블 방식이 단일 모델 대비 더 나은 분류 경계와 일반화 능력을 확보했음을 시사한다.

Precision(정밀도)과 Recall(재현율) 지표에서도 GNN-DE는 각각 0.93과 0.86으로 높은 수준의 균형을 유지하며, 과소예측 또는 과대 예측에 편향되지 않는 안정적인 성능을 보여주었다. 특히 Recall 지표가 높은 것은 고독성 물질을 놓치지 않고 탐지하는 데 있어 중요한 특성으로, 실제 군사 작전 환경에서의 활용 가능성을 높인다. 이러한 결과는 제안된 프레임워크가 소량의 학습 데이터나 불균형 한 클래스 분포가 존재하는 현실적인 생태 독성 평가 시나리오에서도 높은 분류 성능을 유지할 수 있음을 보여준다. 앙상블 학습을 통해 모델 간의 편향을 상호 보완하고, 학습된 표현의 다양성을 확보함으로써 예측의 강건성과 신뢰도를 동시에 향상시킨 것으로 판단된다.

### 3. 결론

본 연구는 군사적 화학 위협 평가에 맞춰진 향상된 생태 독성 예측을 위한 딥 앙상블 GNN 프레임워크를 제시했다. 여러 GNN을 활용함으로써, 제안된 접근 방식은 단일 모델 대비 향상된 정확도와 강건성을 제공하며, 결정적으로 정량적 불확실성 추정치를 제공한다. 이를 통해 부대 방호, 위험 관리 및 작전 기획 시 신속하고 신뢰도 기반의 의사결정을 지원할 수 있다. 본 프레임워크는 기존 능력을 보강하는 확장 가능한 계산 도구를 제공하며, 복잡한 환경에서 화학 작용제의 잠재적 영향에 대한 더 신뢰할 수 있는 통찰력을 제공한다. 향후 연구는 운용 지원 시스템으로의 통합을 포함한다.

### References

- [1] K. Coleman, A history of chemical warfare, Palgrave Macmillan, London, United Kingdom, pp. 1-198, 2005.

- [2] W. Hamilton, et al., "Inductive representation learning on large graphs." NIPS'17: Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems, pp. 1025-1035, 2017.
- [3] G. Anand, et al., "Graph neural networks-enhanced relation prediction for ecotoxicology (GRAPE)." Journal of Hazardous Materials, Vol. 472, Article 134456, 2024.
- [4] M.A. Ganaie, et al., "Ensemble deep learning: A review." Engineering Applications of Artificial Intelligence, Vol. 115, Article 105151, 2022.