

GAT 기반 멀티-모달 특징 융합(Feature-Fusion)을 통한 냄새 예측

김도희, 곽채령, 신연주, 최하진

{20231322, 20231310, 20231378, 20231435}@sungshin.ac.kr

A Multi-Modal Feature Fusion Framework for Olfaction Prediction Using Graph Attention Networks

DoHee Kim, ChaeRyoung Kwak, YeonJu Shin, HaJin Choi

Sungshin W. Univ.

요약

본 연구는 냄새 예측 모델 개선 및 성능을 높이고자, 분자 구조와 수용체 결합 확률 정보를 딥러닝 기반으로 지능적으로 통합하는 멀티-모달 특징 융합 프레임워크를 제안한다.

I. 서론

화학 분자의 구조적 특성을 활용하여 냄새 속성을 예측하는 인공지능 모델 개발은 신약 개발 및 향료 산업 응용에 있어 그 중요성이 증대되고 있다. 기존 연구들은 주로 분자 구조만을 활용하거나^[1], 수용체 결합 정보와의 단순 융합 방식^[2]을 채택한다는 한계가 있다. 본 연구에서는 이를 개선한 멀티-모달 특징 융합 프레임워크를 제안한다.

II. 본론

1. 데이터셋

본 연구에서는 분자 구조와 후각적 인식 사이의 관계를 학습하기 위해, 대규모 다중 레이블(Multi-label) 후각 데이터셋^[3]을 활용하였다. 데이터셋은 총 4,983개의 분자로 이루어져 있으며, 하나의 분자가 복수의 냄새 특성을 가질 수 있는 다중 레이블 형태를 띤다. 본 연구는 이 138개의 냄새 클래스에 대한 이진 분류 과제를 수행하여 모델의 성능을 평가하였다.

2. 모델 구조

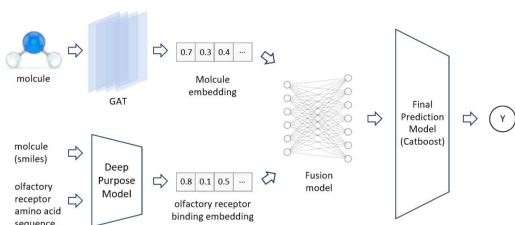


그림 1. 냄새 예측을 위한 멀티 모달 특징 융합 모델의 프레임워크 아키텍처

전체 파이프라인은 크게 세 부분으로 구성된다. 첫째, 냄새 분자의 구조 정보와 후각 수용체의 서열 정보를 각각 GAT와 DeepPurpose 모델을 통해 독립적인 임베딩 벡터로 추출한다. 둘째, 추출된 두 종류의 특징 벡터를 결합하여 Fusion Model을 통해 고차원의 통합 임베딩을 생성한다. 셋째, 최종적으로 CatBoost Classifier가 이 통합 임베딩을 입력받아 특정 냄새의 유무를 예측한다.

2.1. GAT

본 연구에서 사용한 GAT(Graph Attention Network)^[4]는 그래프 내 각 노드가 이웃 노드들과의 상호작용 중요도를 어텐션 메커니즘을 통해 학습하는 모델이다. 각 원자는 주변 이웃 원자들이 자신의 표현을 형성하는 데 기여하는 정도를 어텐션 스코어로 계산하며, 이를 통해 분자 구조 내에서 상대적으로 중요한 원자 및 결합에 더 큰 가중치를 부여한다. 이러한 특성으로 인해 GAT는 구조 정보뿐만 아니라 원자 간 상호작용의 중요도까지 효과적으로 반영할 수 있으며, 어텐션 가중치가 모델의 판단 근거를 해석하는 데 활용될 수 있다.

2.2. DeepPurpose

DeepPurpose^[5]는 본래 약물-타겟 상호작용(Drug-Target Interaction, DTI) 예측을 목적으로 설계된 모델이지만, 분자와 단백질 간 결합을 학습한다는 점에서 냄새 분자와 후각 수용체 간의 상호작용을 모델링하는 데에도 적합하다. 이에 본 연구에서는 DeepPurpose를 후각 예측 문제에 적용하여, 냄새 인지를 결정하는 핵심 요소인 후각 수용체 결합 정보를 추출한다.

DeepPurpose 모델은 냄새 분자의 화학적 정보와 후각 수용체의 아미노산 서열을 동시에 입력으로 받아, 각각을 벡터 표현으로 인코딩한다. 이후 두 입력 간의 상호작용을 학습하여 분자-수용체 간 결합 가능성을 확률값으로 예측한다. 이 결합 정보는 분자의 구조적 특징과 생물학적 메커니즘을 연결하는 역할을 수행하며, 최종적인 냄새 인지 예측의 판별력을 향상시키는 데 기여한다.

2.3. Fusion Model

본 연구는 앞서 추출된 분자 구조 임베딩과 수용체 결합 확률 임베딩 벡터를 저차원의 특징 공간으로 변환함으로써 모델의 과적합을 방지하고 서로 다른 도메인의 정보를 통합하여 일반화 성능을 확보했다.

일반적으로 냄새 데이터셋은 특정 냄새 라벨이 존재하는 양성 샘플(Positive)에 비해, 존재하지 않는 음성 샘플(Negative)이 압도적으로 많은 심각한 클래스 불균형 문제를 가진다. 따라서, 본 연구에서는 BCEWithLogitsLoss를 기반으로 Gamma와 Alpha 파라미터를 적용한 손실 함수를 도입하였다. 이를 통해 쉽게 예측되는 다수의 음성 샘플에 대한 가중치를 낮추고, 학습이 어려운 소수 클래스에 모델이 집중하도록 유도함으로써 불균형 데이터 환경에서도 냄새 예측 성능을 최적화하였다.

3. 실험 결과

3.1. 수용체 결합 정보의 유효성 검증

본 연구의 핵심 가설인 ‘분자-후각 수용체 결합 정보의 통합이 냄새 예측 성능을 향상시키는가’를 검증하기 위해, 분자 구조 정보만을 입력으로 사용하는 Baseline 모델과 분자 구조 및 수용체 결합 정보를 융합한 제안 모델 간의 성능을 비교 분석하였다. 두 모델은 동일한 GAT 백본 구조를 사용하였으며, 수용체 결합 정보의 포함 여부만을 차이로 두어 공정한 비교가 이루어지도록 설계하였다. 평가지표로는 다양한 분류 임계값에 대해 모델의 변별력을 종합적으로 평가할 수 있는 AUROC(Area Under the ROC Curve)를 채택하였다.

표 1. GAT 기반 Baseline와 GAT와 수용체 결합 확률을 융합한 제안 모델 간 성능 비교

Method	입력 특징	AUROC
Baseline	Molecular Graph	0.8645
Ours	Molecular Graph + Receptor Binding Probability	0.8958

분석 결과, Baseline 모델은 AUROC 0.8645를 기록한 반면, 제안 모델은 0.8985를 달성하였다. 이는 후각 수용체 결합 정보가 분자 구조 정보만으로는 포착하기 어려운 화학적-생물학적 상호작용을 보완하여 모델의 일반화 능력을 유의미하게 개선했음을 입증한다. 이 결과는 후각 인지 예측에 있어 분자 구조 정보뿐만 아니라 생물학적 표적인 수용체 결합 정보가 필수적이며 핵심적인 역할을 수행하는 특징임을 시사한다.

3.2. 기존 연구와의 성능 비교

제안 모델의 성능 검증을 위해 전통적인 머신러닝 기법부터 최신 딥러닝 프레임워크까지 포괄적인 성능 비교를 수행하였다.

표 2. 최신 딥러닝 프레임워크 및 기존 기법들과의 성능 비교

Method	발표 연도	AUROC
Multi-Feature GAT	2025	0.9356
HMFNet	2025	0.9316
Ours	2025	0.8958
POM	2025	0.894
Saini et al.	2022	0.830
Suh et al.	2025	0.828
Mol-PECO	2024	0.813
SMILES to Smell	2021	0.760

비교 결과, 본 연구에서 제안한 모델은 AUROC 0.8958을 기록하며 비교 대상 모델들 가운데 상위 수준의 예측 성능을 보였다. 초기 딥러닝 기반 접근법^[6,7]과 비교하여 뚜렷한 성능 향상을 확인하였으며, 최근 제안된 고성능 모델들^[8,9,10]과 비교하였을 때에도 일관되게 높은 예측 정확도를 유지함으로써 분자 구조 정보와 수용체 결합 정보를 결합한 본 프레임워크의 경쟁력을 입증하였다.

한편, Multi-Feature GAT^[11]은 본 연구 모델 대비 수치적으로 높은 예측 성능을 보였으나, 이 모델은 데이터 패턴 학습 극대화에 초점을 맞춘 블랙박스적 접근법의 특성을 가진다. 이에 반해 본 연구의 모델은 예측 결과를 수용체 결합 확률이라는 생물학적으로 해석 가능한 변수와 직접 연결하였다는 점에서 학술적 및 해석적 차별성을 가진다.

III. 결론

본 연구에서는 기존 분자 구조 기반 냄새 예측 모델들이 가지는 표현적 및 구조적 한계를 분석하고, 이미 선행 연구에서 활용되어 온 분자-후각 수용체 결합 정보를 보다 효과적으로 활용할 수 있는 모델 설계 개선 방향을 제시한다.

향후 단일 분자를 넘어 실제 환경의 혼합물 냄새 예측으로 범위를 확장할 필요가 있으며, 제안된 융합 프레임워크는 디지털 후각 및 로봇 인지 시스템 등 다양한 응용 분야의 기반 기술로 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

참 고 문 헌

[1] Kushagra Saini and Venkatnarayan Ramanathan, "Predicting odor from molecular structure: a multi-label classification approach," Scientific Reports, vol. 12, 13863, 2022.
<https://doi.org/10.1038/s41598-022-18086-y>

[2] Seyone Chithrananda, Judith Amores, and Kevin K. Yang, "Mapping the combinatorial coding between olfactory receptors and perception with deep learning," bioRxiv preprint, 2024.
<https://doi.org/10.1101/2024.09.16.613334>

[3] Aryan Amit Barsainyan, "Multi-Labelled SMILES - Odors Dataset," 2024,
(<https://www.kaggle.com/datasets/aryanamitbarsainyan/multi-labelled-smiles-odors-dataset>).

[4] P. Veličković et al., "Graph Attention Networks," in International Conference on Learning Representations (ICLR), 2018.

[5] K. Huang et al., "DeepPurpose: a deep learning library for drug - target interaction prediction," Bioinformatics, vol. 36, no. 22-23, pp. 5545 - 5547, Dec. 2020, doi: 10.1093/bioinformatics/btaa1005.

[6] A. Sharma et al., "SMILES to Smell: Decoding the structure - odor relationship of chemical compounds using the deep neural network approach," Journal of Chemical Information and Modeling, vol. 61, no. 2, pp. 676 - 688, 2021.

[7] Saini, K., & Ramanathan, V. (2022). Predicting odor from molecular structure: a multi-label classification approach. Scientific Reports, 12.
<https://doi.org/10.1038/s41598-022-18086-y>

[8] M. Zhang et al., "A deep position-encoding model for predicting olfactory perception from molecular structures and electrostatics," npj Systems Biology and Applications, vol. 10, 2024.

[9] J. Suh et al., "A comparative study of machine learning models on molecular fingerprints for odor decoding," Communications Chemistry, 2025.

[10] B. K. Lee et al., "A principal odor map unifies diverse tasks in olfactory perception," Science, vol. 381, no. 6661, 2023.

[11] H. Xie et al., "Molecular Odor Prediction Based on Multi-Feature Graph Attention Networks," arXiv, vol. abs/2502.01430, 2025. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2502.01430>