

멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 기반
고정밀 ADMET 예측 기술 개발

주관기관: **승실대학교**

공동기관1: 한국화학연구원
공동기관2: (주)온코크로스

주 관 책 임 자

류 재 용 (승실대학교)

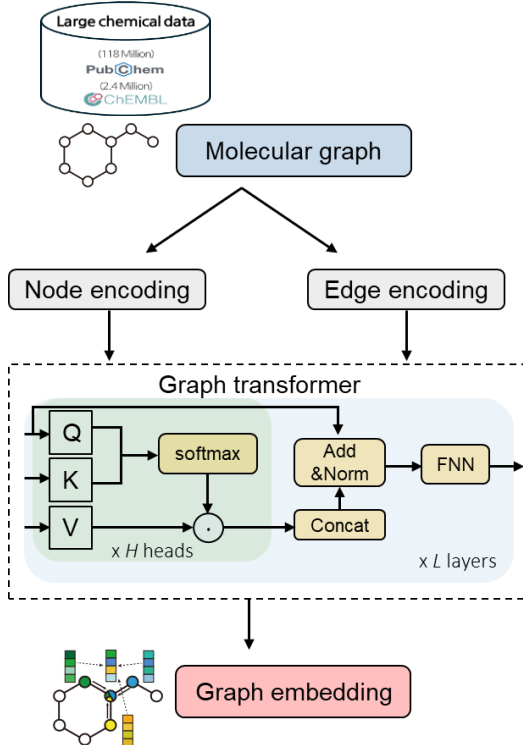
공 동 책 임 자

장 우 대 (한국화학연구원)

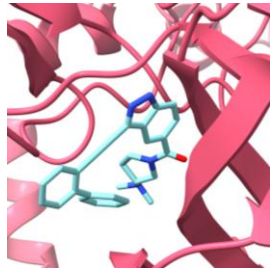
공 동 책 임 자

김 이 랑 ((주)온코크로스)

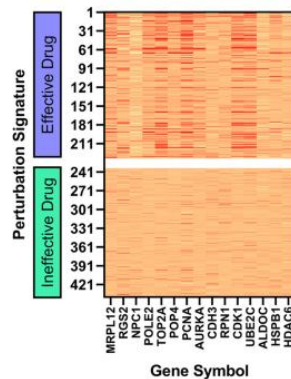
화합물 구조 기반 단일 모달리티 파운데이션 모델의 한계



1. 단백질 상호작용 정보 부재



2. 유전자 발현 정보 부재



멀티 모달리티 기반 고정밀 ADMET 예측 전략

1. 화학 구조 기반 파운데이션 모델

- 화학 구조 기반 파운데이션 모델 구축
- *In vivo* PK 특화 모델 구축

2. 단백질 상호작용 기반 파운데이션 모델

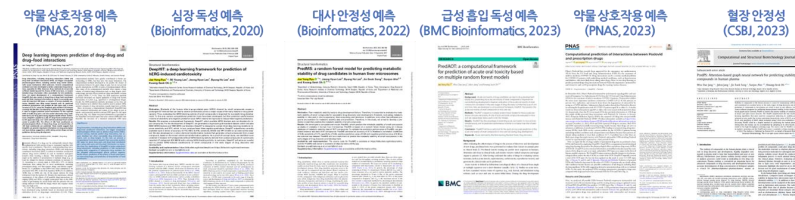
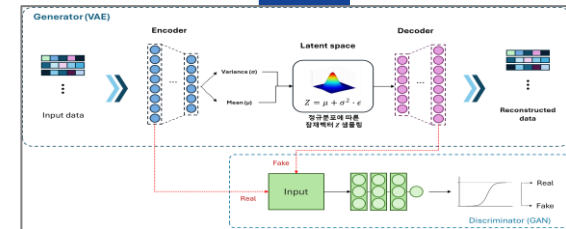
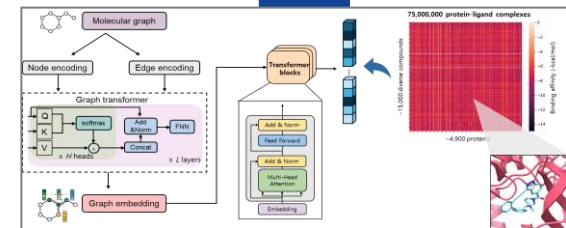
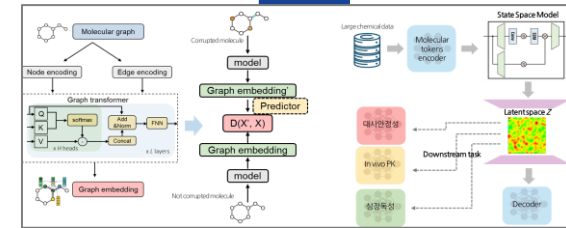
- 단백질-리간드 결합 데이터 분석
- 단백질-리간드 결합 파운데이션 모델 구축

3. 전사체 데이터 기반 파운데이션 모델

- 전사체 파운데이션 모델 구축
- 약물-구조 전사체 기반 파운데이션 모델 구축

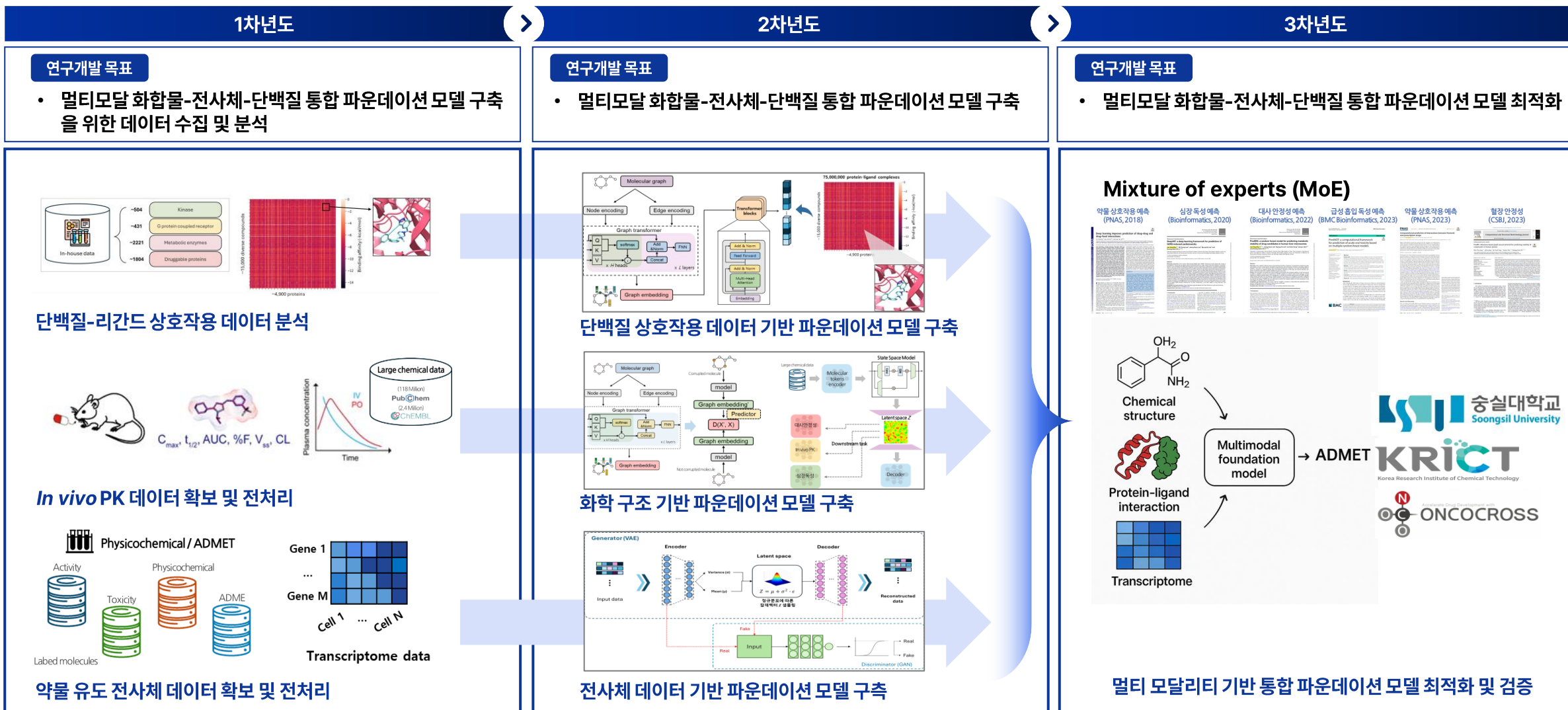
4. 선행 연구 결과 기반 모델 고도화

- 선행 ADMET 전문 모델을 활용한 pseudo labelling

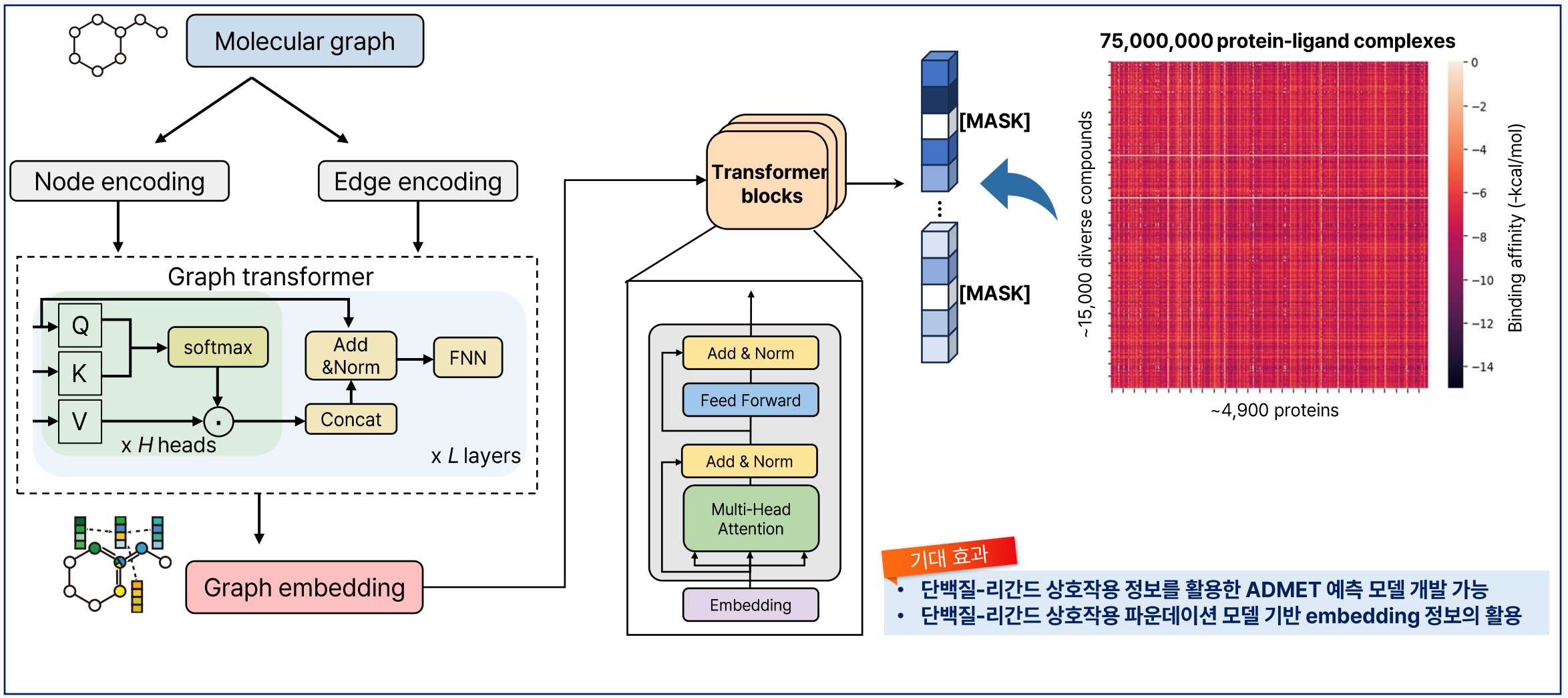


멀티모달 파운데이션
모델 기반 ADMET 예측

· 최종 목표 : 멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 기반 고정밀 ADMET 예측 기술 개발



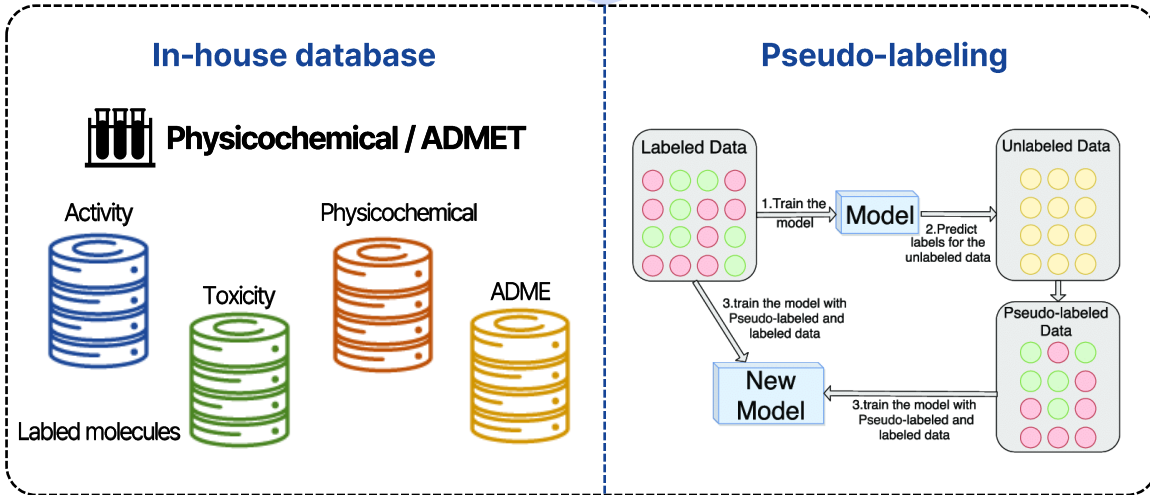
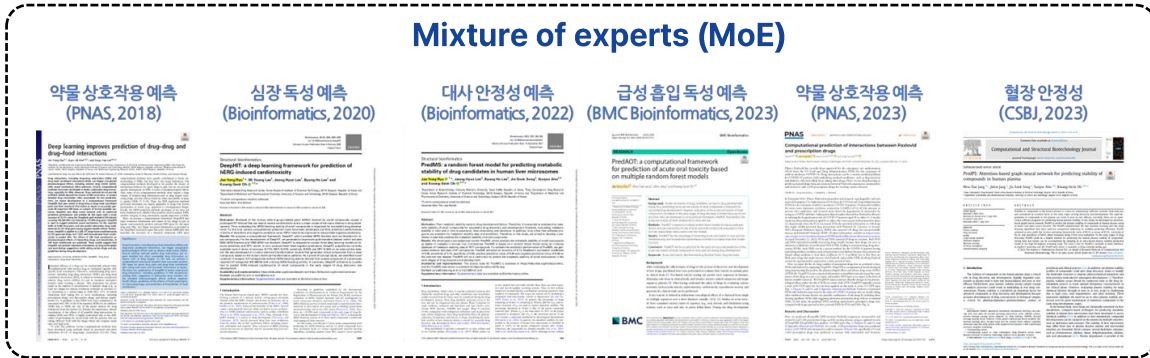
단백질-리간드 복합체 파운데이션 모델 구축



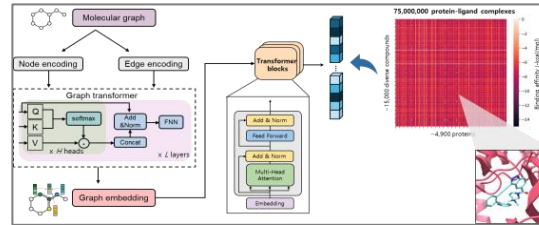
멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 기반 ADMET 예측 모델 구축

선행 연구 결과 기반 모델 고도화

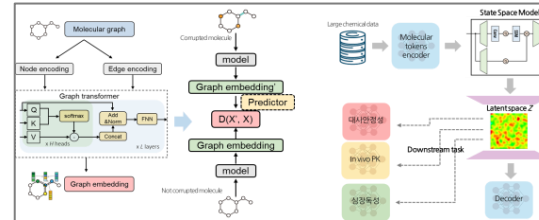
Mixture of experts (MoE)



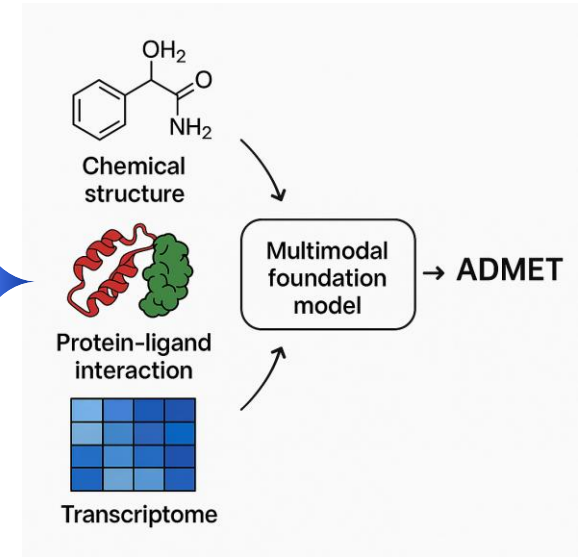
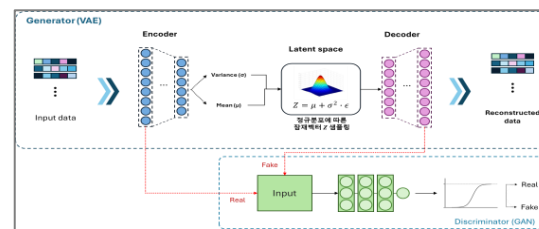
화학 구조 기반 파운데이션 모델



단백질 상호작용 기반 파운데이션 모델



전사체 데이터 기반 파운데이션 모델



시스템생물학 박사, 인공지능 기반 신약개발 분야 전문가

주요 약력

- 숭실대학교 의생명시스템학부 조교수
- (前) 덕성여자대학교 바이오공학과 조교수
- (前) 한국화학연구원 정보융합신약연구센터 선임연구원
- (前) KAIST 생물정보연구센터 연구원
- KAIST 생명화학공학과 공학박사

류 재 용

- 숭실대학교 조교수



약물 상호작용 예측 (PNAS, 2018)

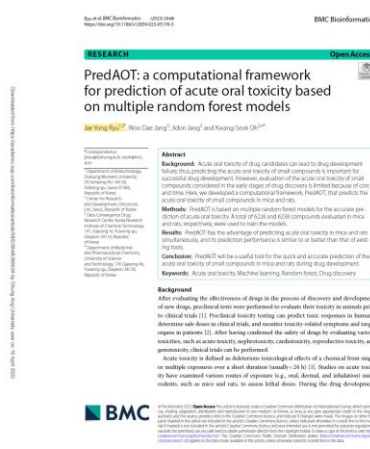
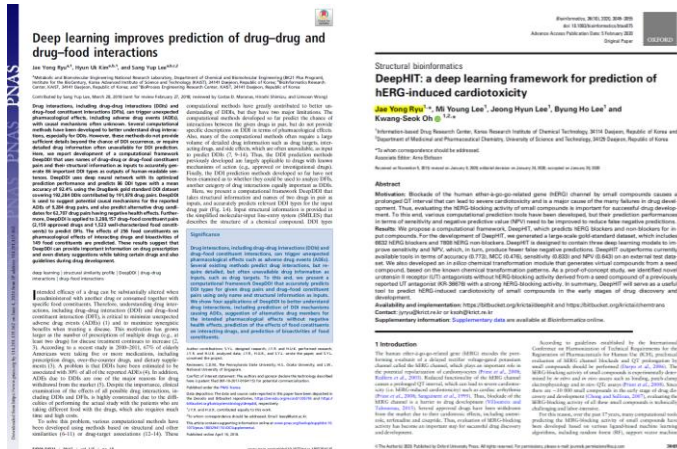
심장 독성 예측 (Bioinformatics, 2020)

대사안정성 예측 (Bioinformatics, 2022)

급성 흡입 독성 예측 (BMC Bioinformatics, 2023)

약물 상호작용 예측 (PNAS, 2023)

약물 상호작용 예측 방법론 (국내특허, 2023)



멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 기반 고정밀 ADMET 예측 기술 개발

단백질 상호작용 기반 모델



마일스톤

1차년도: 파운데이션 모델용 데이터셋 준비 및 태스크 맞춤형 전처리 도구 개발

- 파운데이션 모델용 데이터셋 확보
- 태스크에 따른 맞춤형 전처리 도구 개발

2차년도: 멀티 모달리티 기반 파운데이션 모델 개발

- 멀티 모달리티 기반 파운데이션 모델 데이터 확보
- ADMET 태스크 모델 개발에 활용 가능한 멀티 모달리티 기반 파운데이션 모델 구축

3차년도: FAM 기본 모델 개발 및 성능 검증

- AI 기반 ADMET 예측 모델(FAM) 개발
- 멀티태스크 전략 기반 성능 고도화
- 연합학습 기반 모델 고도화

정성/정량 목표

성과지표 및 목표치

- ADMET 및 PK 예측 기본 모델 개발 3건 이상
- ADMET 태스크 성능 개선 모델 확보 2건 이상
- SCI(E) 학술지 등록 건수: JCR 10% 이내 포함 3편
- 특허 출원 건수: 3건
- 데이터 전처리 도구를 포함한 SW 등록 2건 및 인증 2건 이상
- 추가 공개 데이터 공급 보고서 1건 이상 제작
- FAM 솔루션 사용자 매뉴얼 1건 이상 제작
- FAM 솔루션 활용 선도 물질 최적화 성공 사례 2건 이상 달성

성능지표 및 측정방법

- 분류 모델: AUROC 기본 모델 대비 5% 이상 증가
- 회귀 모델: RMSE 기본 모델 대비 5% 이상 감소