

2025년 연합학습 기반 신약개발 가속화 프로젝트 (K-MELLODDY)

연합 메타학습 기반의 확장 가능한 모듈형 융합 프레임워크 및 질량 분석 모듈 개발



고려대학교 인공지능학과 감태의

01

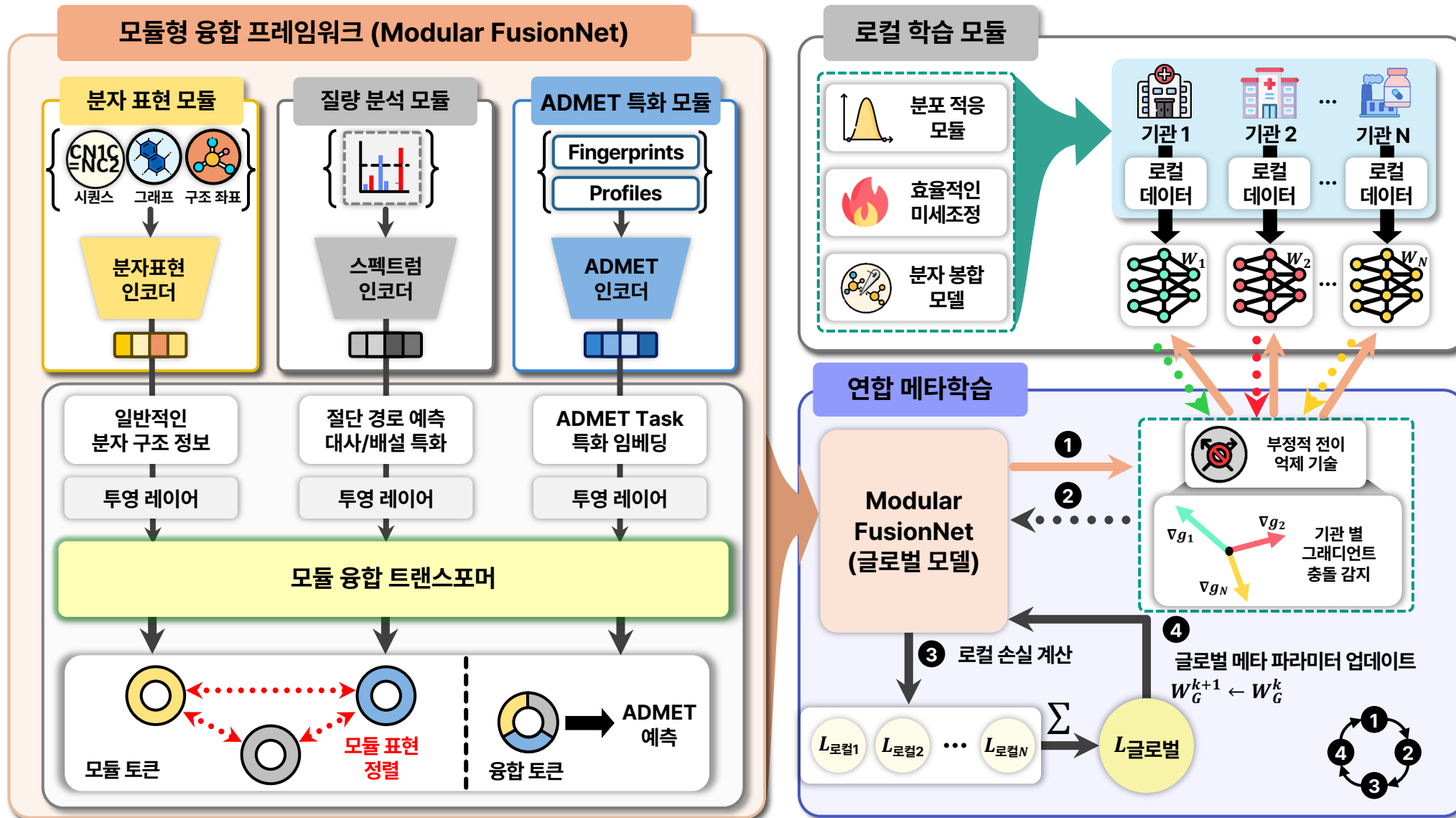
제안 연구 핵심 개요

연합 메타학습 기반의 확장 가능한 모듈형 융합 프레임워크 및 질량 분석 특화 모듈 기술 개발



02

연구 내용 통합 개요

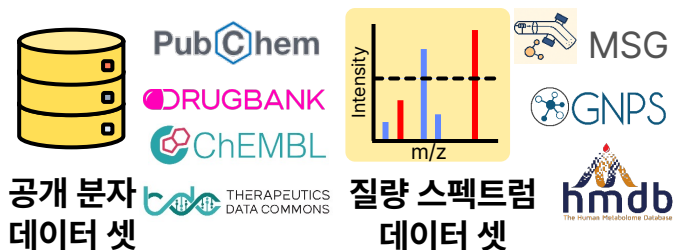


02

1차년도 연구 내용

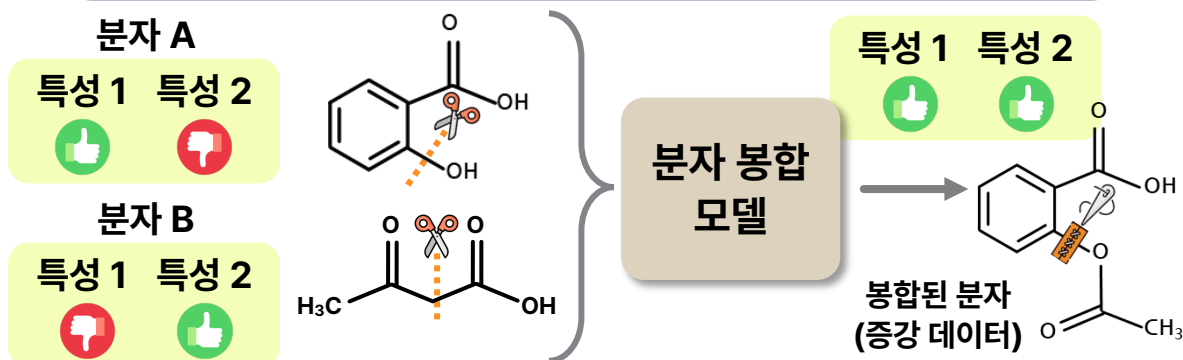
공개 데이터 통합 전처리 및 분자 봉합 기술 개발 확장 가능한 모듈형 융합 프레임워크 구축

데이터 통합 파이프라인 구축

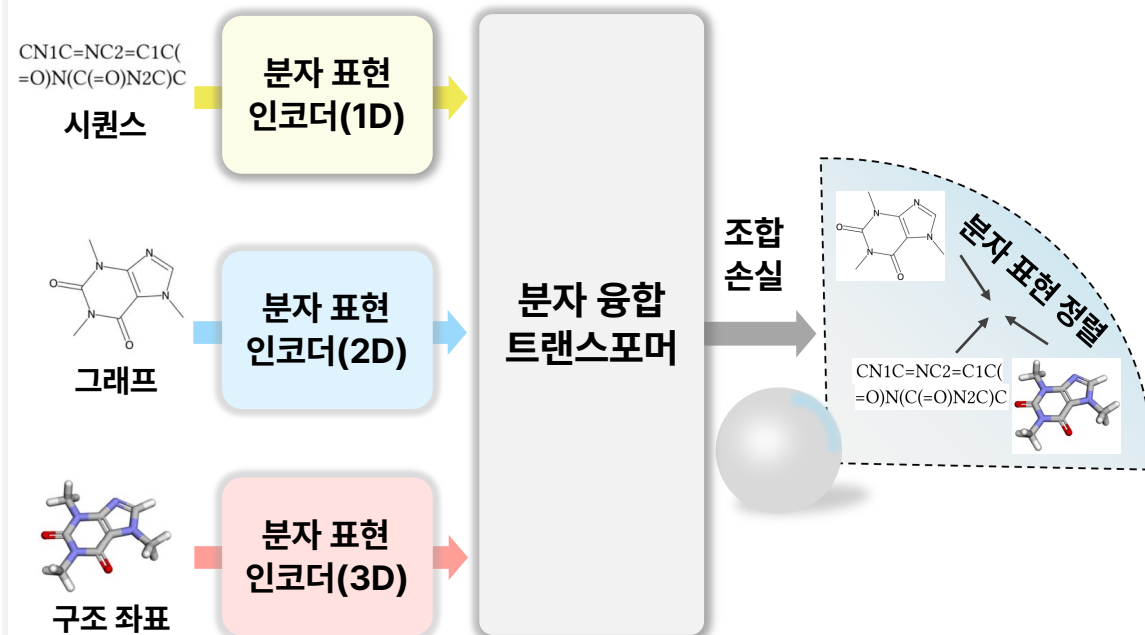


- 결측치 처리
- 중복 제거
- 레이블링
- 정규화

데이터 증강을 위한 분자 봉합 기술



모듈형 융합 프레임워크 사전학습

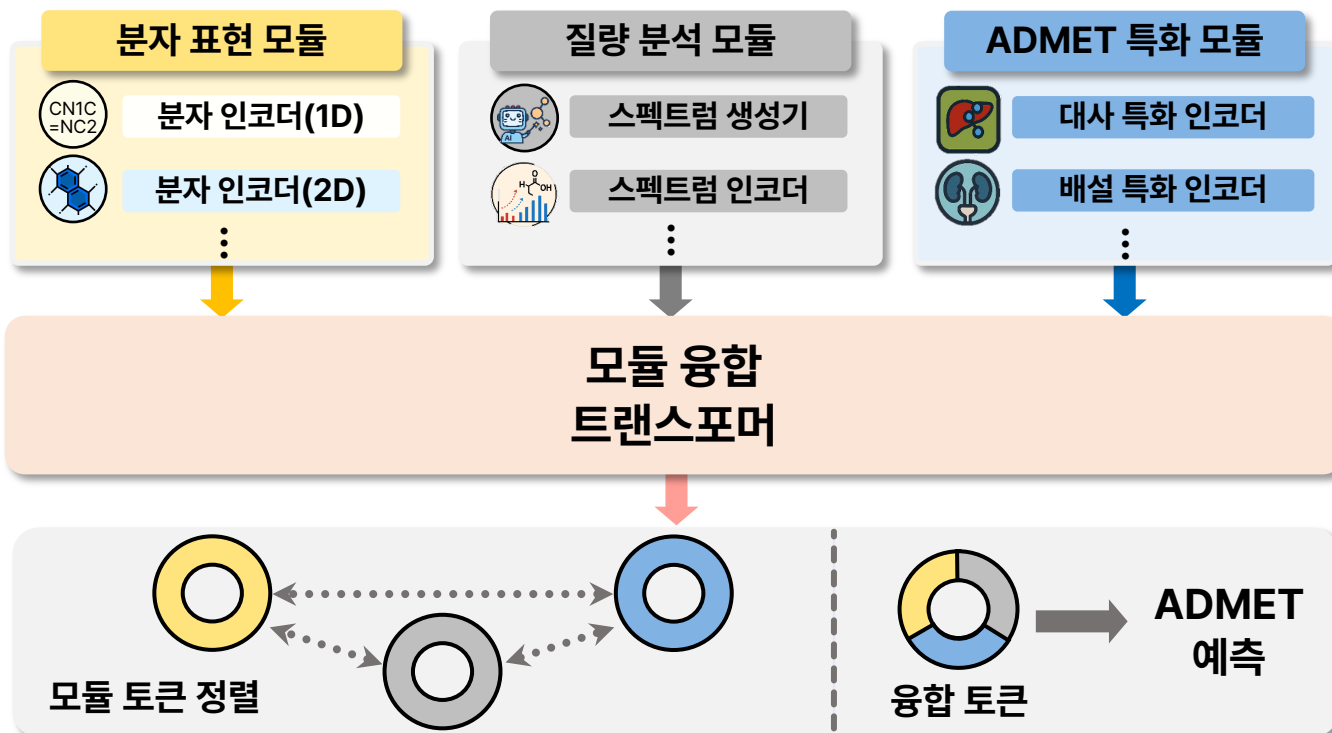


02

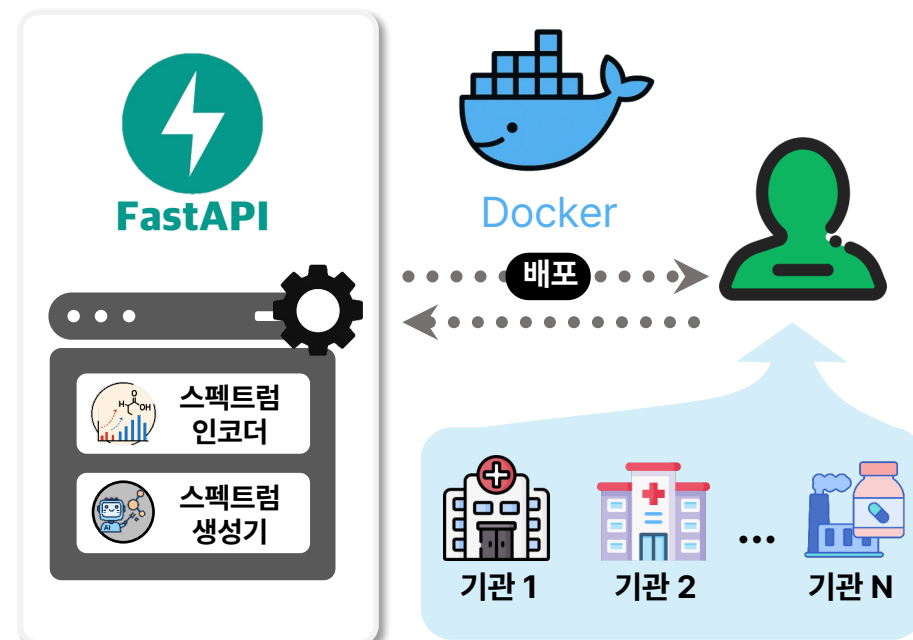
2차년도 연구 내용

다양한 모달리티의 모듈들을 입력으로 받는 모듈형 융합 프레임워크 고도화 및 질량 분석 모듈 배포

모듈형 융합 프레임워크 고도화



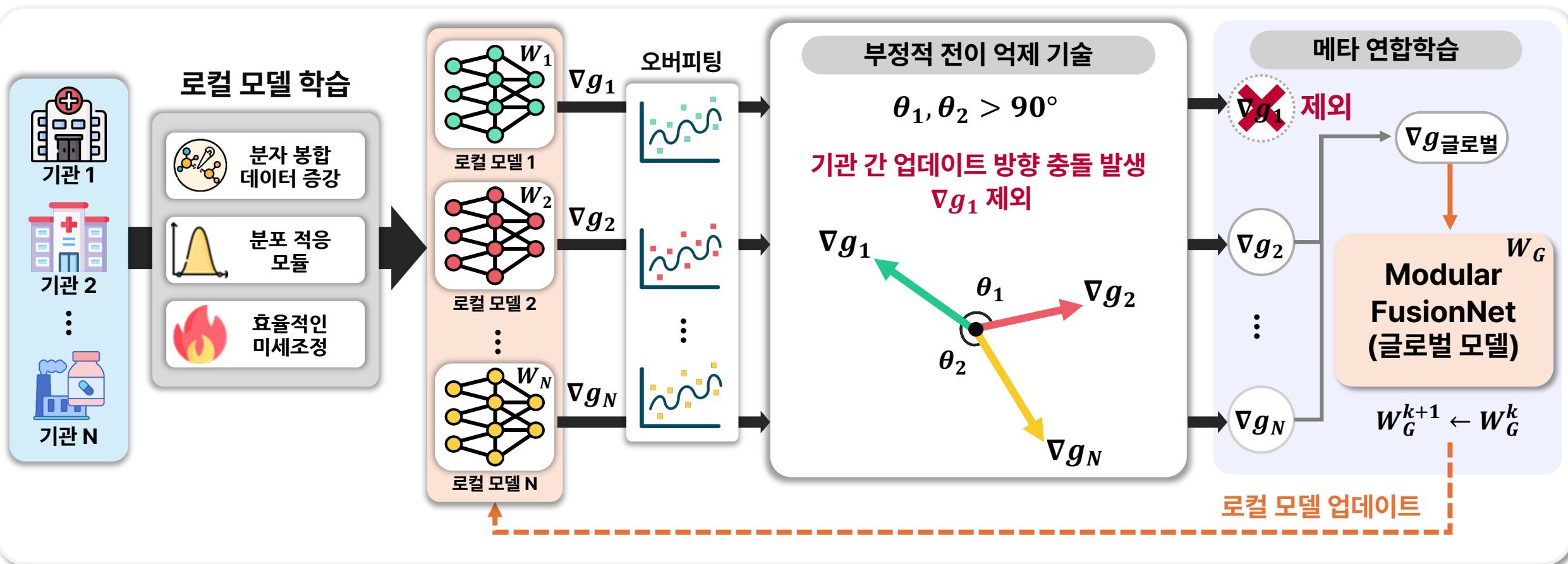
질량 분석 모듈 API 배포



02

3차년도 연구 내용

새로운 데이터에 빠르게 적응 가능한 연합 메타학습 기반 범용 글로벌 모델 구축



03

연구 기대 효과 및 활용 방안



연합 메타 학습을 통한 신약 후보 탐색 가속화

- 다양한 기관의 데이터 활용 극대화 및 양질의 데이터를 연합 학습으로 활용, 신약 후보 물질 탐색을 가속화
- 메타 학습과 연합 학습의 융합을 통해 기관별 데이터 편차를 극복하고, 다양한 환경에서도 일관된 성능으로 신약개발 가속화 가능
- 질량 분석 기반 해석 모듈을 통해 약물 후보 물질에 대한 과학적 근거를 제시, 신뢰도 높은 후보를 선별하여 탐색 단계를 효율화



정밀 ADMET 예측 및 분자 설계를 통한 개발 리스크 최소화

- ADMET 특화 모듈을 활용해 목표 특성을 갖춘 후보물질을 조기에 발굴, 초기 성공률을 높이고 개발 기간을 단축
- 질량 분석 데이터를 기반으로 복잡한 대사 경로를 정밀하게 예측하여, 후보물질의 탈락률을 감소시키고 리스크를 최소화
- 기존 분자의 구조를 보존하는 분자 봉합 기술을 통해, 약리 정보를 유지한 효율적 후보 물질 설계와 반복 실험 최소화 실현



AI를 통한 글로벌 신약개발 가속화

- AI 신약개발 기술은 FDA가 인정한 New Approach Methodologies로 동물 실험을 대체할 수 있는 새로운 비임상 방안 제공
- AI 기반 예측 전임상 실험을 통해, 기존 동물 실험 없이도 임상 단계로의 신속한 진입 가능
- AI 기반 플랫폼을 통해 글로벌 동물 실험 규제 강화에 대응하고, 국제 기준을 충족하는 신약개발을 신속하게 추진 가능

04

연구책임자



감 태 의 (인공지능학과 의료인공지능 연구실, 2019.09 ~ 현재)



중점연구분야

- 분자 생성 모델 및 신약 개발
- 인공지능 모델 최적화 기술 연구
- 멀티 모달리티 의료데이터 융합 및 헬스케어 플랫폼
- 메타러닝 기반 도메인 일반화 모델 개발

주요경력 및 기타활동

- 고려대학교 인공지능학과 부교수 (2024.08~현재)
- 고려대학교 인공지능학과 조교수 (2019.09~2024.08)
- University of North Carolina at Chapel Hill, BRIC 연구원 (2017.04~2019.08)
- 국제학술지 편집위원 및 국제학술대회 조직위원:
Co-Topic editor, Frontiers in Human Neuroscience (2023)
IEEE International Winter Conference on Brain-Computer Interface (2020-2025)
6th Asian Conference on Pattern Recognition (2021)
- 수상 실적:
MICCAI BraTS Cluster of Challenge 2024 (멀티 모달리티 융합)
MICCAI CrossMoDA Challenge 2022 (도메인 일반화)
- 국제 공동연구:
(미국) University of North Carolina at Chapel Hill
(중국) ShanghaiTech University

연구실적

- 총 56편의 학술논문 게재 (SCIE 저널: 20편, 국제학술대회 37편)
- **JCR-IF 상위 10% 이내 저널: 14편** (주저자 논문 11편, NeuroImage, IEEE-JBHI, SMC-Sys. 포함)
- **BK21 인정 최우수/우수 국제학술대회 논문 9편** (주저자 논문 6편, ICML, CVPR, IJCAI, MICCAI 포함)
- 의료인공지능 특허 총 24건 출원 및 등록

R&D 연구개발과제 수행 실적

- **한국연구재단 우수신진과제** (연구책임자, 2023~2027, 수행중):
교차 모달리티 이미지 변환 및 **자가학습 기반 도메인 일반화**를 통한 고신뢰도 청신경초종 분할 및 진단 기술 개발
- **IITP 사람중심인공지능 핵심원천기술개발** (공동참여기관 책임자, 2022~2026, 수행중):
인공지능 **에이전트 협업기반 신경망 변이 및 지능 강화** 기술 개발
- **한국연구재단 기초연구실** (참여연구자, 2024~2026, 수행중):
인간 수준의 상식과 윤리 추론능력을 갖춘 **포인트언어모델(pointLM)** 개발
- **한국연구재단 우수신진과제** (연구책임자, 2020~2022, 수행완료):
딥러닝/강화학습 기반 영유아 개인 맞춤형 뇌질환 진단 및 바이오마커 검출/시각화 기술 개발
- **한국연구재단 기초연구실** (참여연구자, 2020~2022, 수행완료):
뉴럴상식추론을 위한 벤치마크와 추론엔진 개발
- 한국산업기술기획평가원 지식서비스산업핵심기술개발사업 (공동참여기관 책임자, 2022~2023, 수행완료):
재택 공간용 인공지능 영상 기반 골프 퍼팅 분석 장치 및 코칭서비스 개발
- IITP 인공지능대학원 (참여연구자, 2019~2028, 수행중) / AI연구거점프로젝트 (참여연구자, 2025~2028, 수행중)
- IITP 대학ICT연구센터 (참여연구자, 2024~2031, 수행중) / 인공지능 혁신 허브 (참여연구자, 2024~2025, 수행중)

감사합니다.