

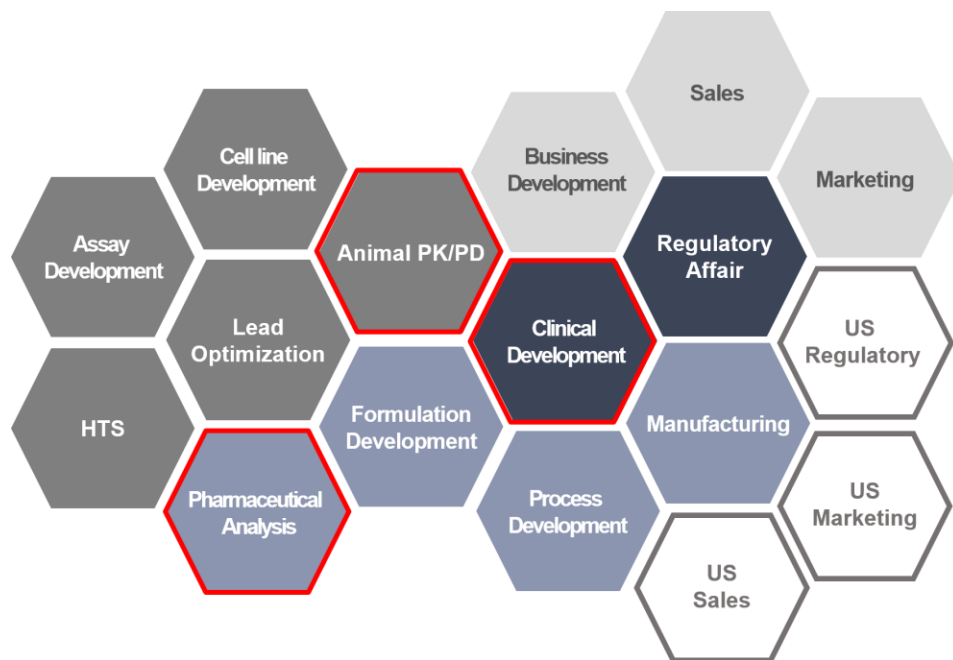
SECRET

연합학습 플랫폼 활용 활성화



수행기관 역량 – LG화학 Value Chain

글로벌 시장에서의 Full Value chain 구축을 통해 R&D / 사업화 성공률 제고



- 1 Integrated R&D Capability**
Development of cell line, Bioprocess optimization technology, Candidate discovery
- 2 Global Experience in All Phases of Clinical Trials**
FDA(US) / EMA(EU) / PMDA(Japan) / NMPA(China) approved
WHO pre-qualified vaccines
- 3 Expertise in Manufacturing and Quality Control**
FDA cGMP & WHO PQ certified manufacturing facilities
- 4 Commercialization in Korea / Emerging Markets**
Launching Zemiglo®, Eutropin®, Yvoire®
- 5 Business Growth & Expansion in the US Market with Open Innovations**
Acquiring assets and sales capability in the US

수행기관 역량 - LG화학 Open Innovation

글로벌 네트워크를 통한 Open Innovation 구축

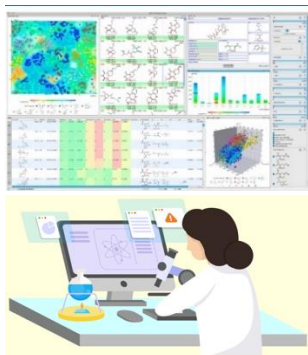


>40 
Active
Collaborations

26 
Deals
Since 2017

차별화 전략 - LG화학 저분자 화합물 데이터 관리 체계

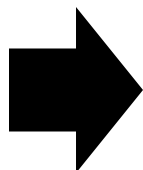
체계적 디지털 연구 관리를 통한 연구 효율성 및 데이터 자산화



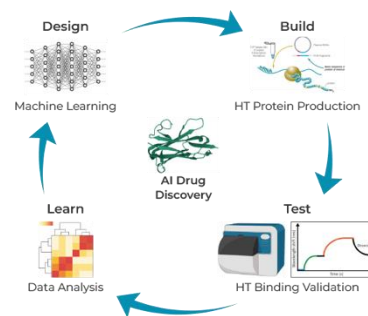
End-User



실험데이터 DB



Wet lab/Dry lab 선순환



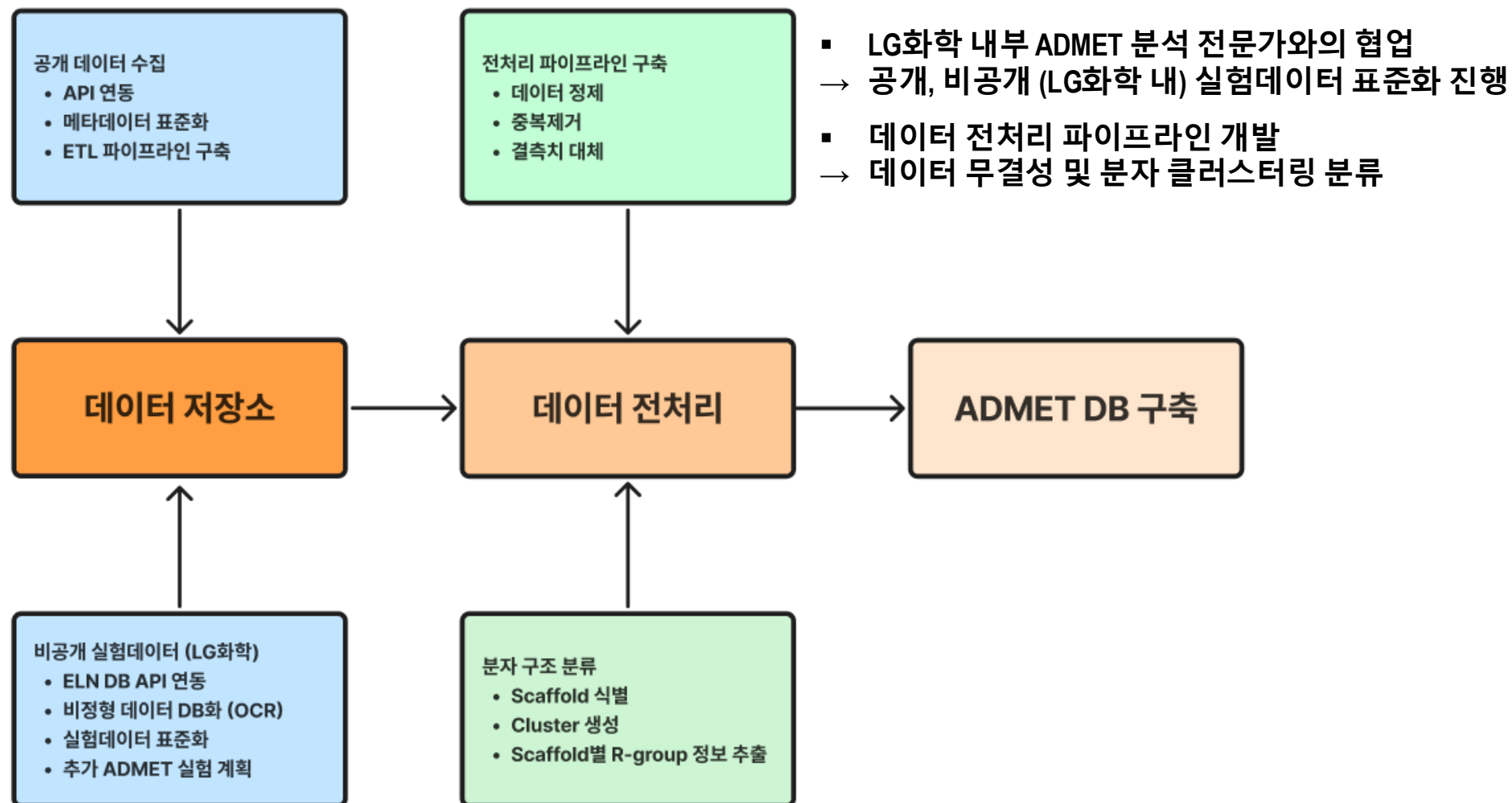
저분자 화합물 $\approx$ 5만여종+ α (HTS compounds)

분류	End Point
활성	IC50, EC50
약물 흡수, 분포	PAMPA, 혈장 및 혈장단백질 결합 예측, BBB Transporter 결합친화도 및 기질성 예측
약물 대사, 배설	마이크로솜 안정성 (mouse, human, rat)
약물 독성	CYP450 저해 예측, Ames Test, hERG 채널 저해 예측, Cytotoxicity

데이터 품질 관리, 표준화, 검증 프로세스를 통한 신뢰성 높은 ADMET 학습 데이터 제공

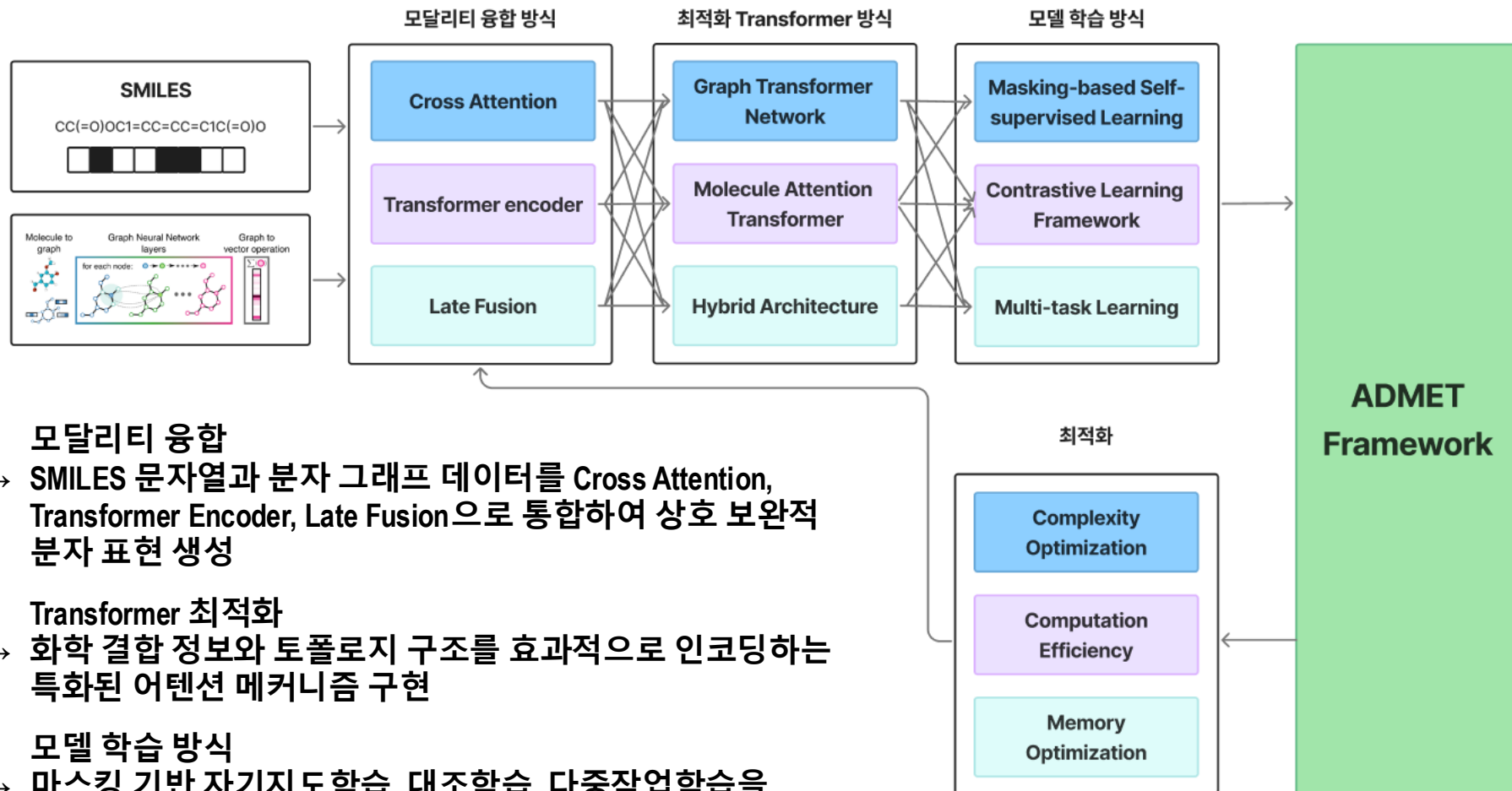
연구 개발 계획 - 1단계

ADMET 데이터베이스 구축 및 전처리 파이프라인 개발



연구 개발 계획 - 2단계

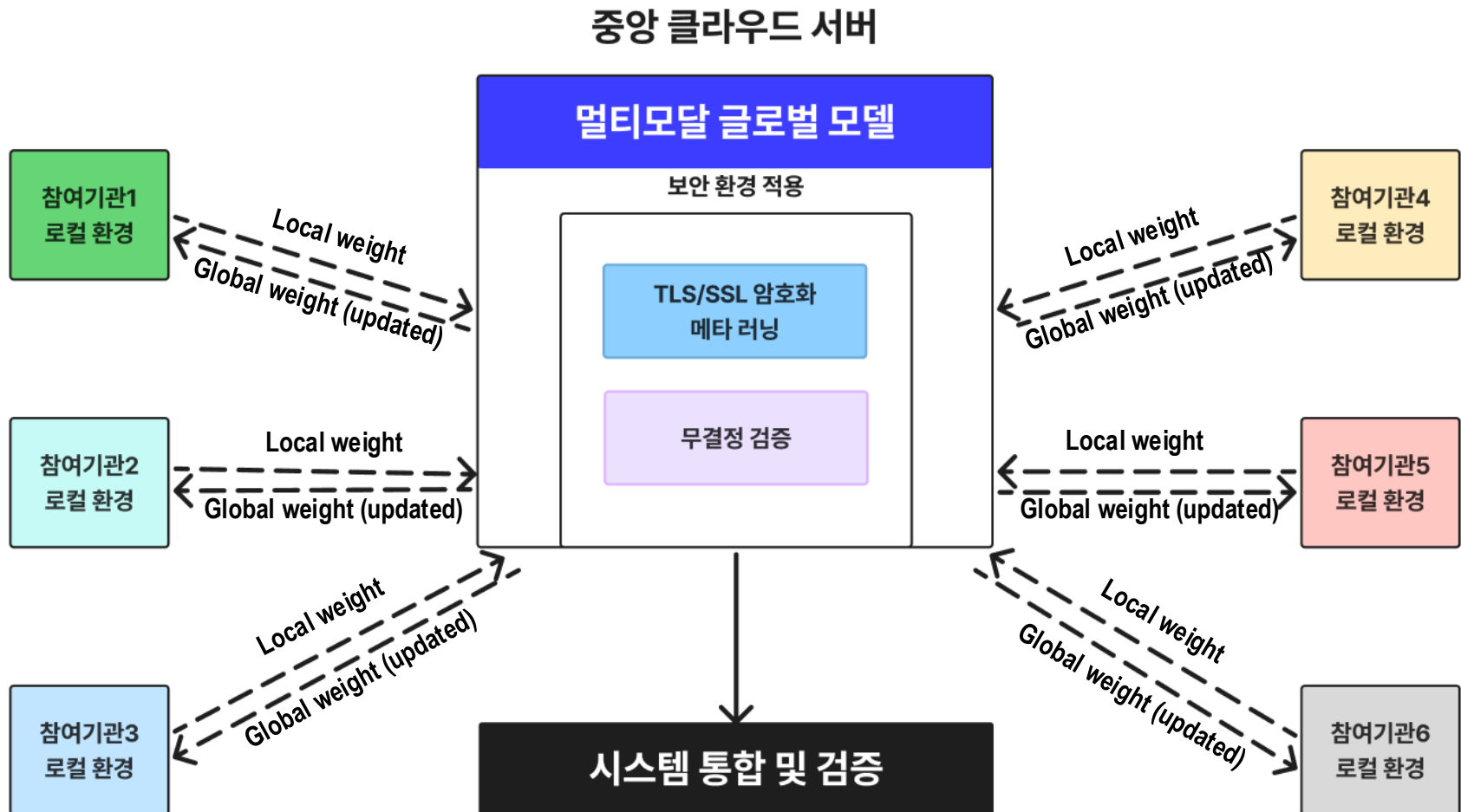
멀티모달 글로벌 모델 개발



- 모달리티 융합**
 → SMILES 문자열과 분자 그래프 데이터를 Cross Attention, Transformer Encoder, Late Fusion으로 통합하여 상호 보완적 분자 표현 생성
- Transformer 최적화**
 → 화학 결합 정보와 토폴로지 구조를 효과적으로 인코딩하는 특화된 어텐션 메커니즘 구현
- 모델 학습 방식**
 → 마스킹 기반 자기지도학습, 대조학습, 다중작업학습을 결합하여 명시적 레이블 없이도 포괄적인 분자 특성 표현 학습

연구 개발 계획 - 3단계

연합학습 모델 구현 및 배포



- 연합학습 모델 구현 및 배포
 - 다층 보안 정책과 모델 경량화 기법을 결합하여 안전하고 실용적인 분산 학습 시스템

완성