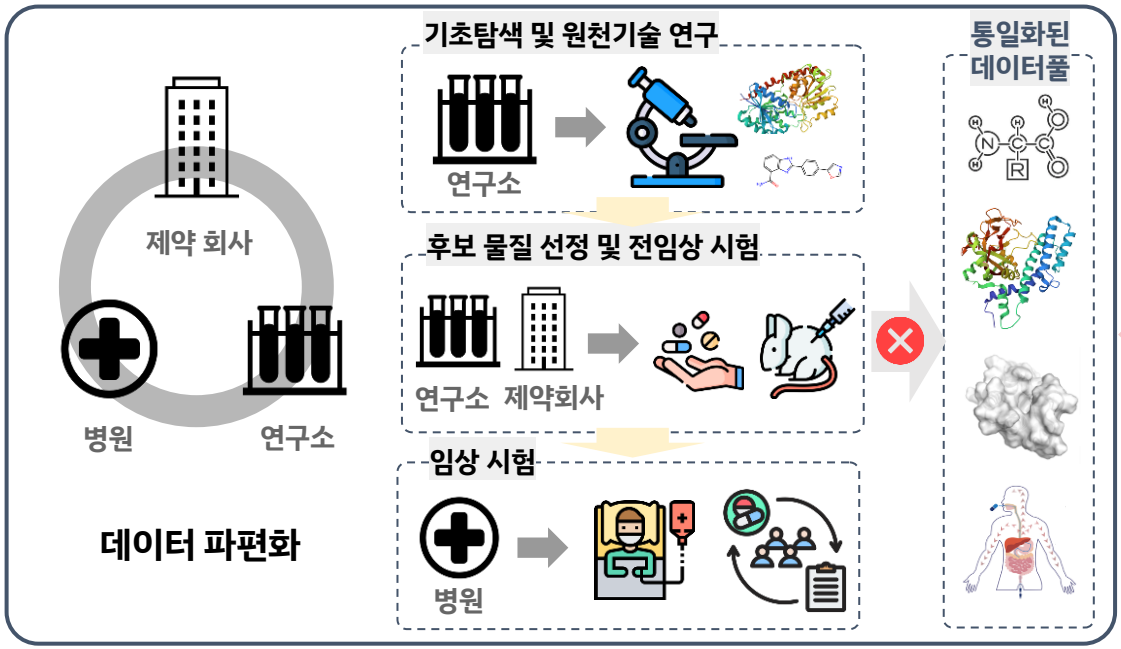
연합학습 기반 설명가능한 임상 결과 예측 분자-단백질-언어 삼중모달리티 파운데이션 모델

한국과학기술원 인공지능대학원

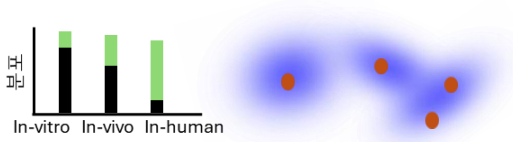
황성주 교수

문제제기 및 연구필요성

신약 개발을 위한 신약후보물질 검증 및 임상실험은 천문학적인 비용과 시간을 요구한다. 따라서 이를 해결하기 위한 인공지능 기반의 방법론이 활발히 연구되고 있으나, 학습을 위한 데이터 확보 등 여러 문제가 존재한다.



레이블 불균형 및 희소성



레이블이 불균형하여 **모델의 학습을 편향**시키며, 신약물질의 탐색 공간에 비해, 데이터화된 물질은 극소수

설명가능성

인공지능의 **추론 과정이나 이유**에 대해 검증이 불가능, 모델의 **예측 결과 신뢰** 불가능

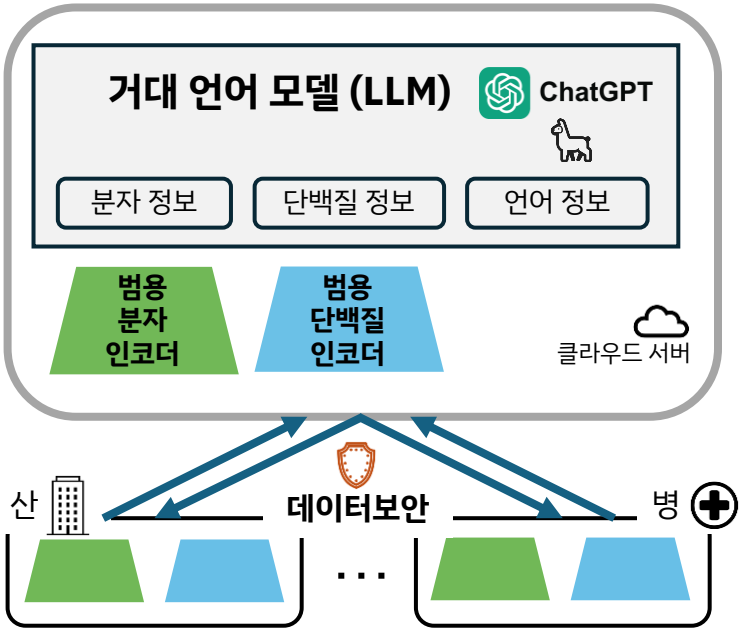
약학 특화 거대모델의 필요성

기존의 모델은 **이미지 또는 자연어**에 특화되어 있으며, **분자 및 단백질** 등에 대한 데이터를 모델링하지 못함

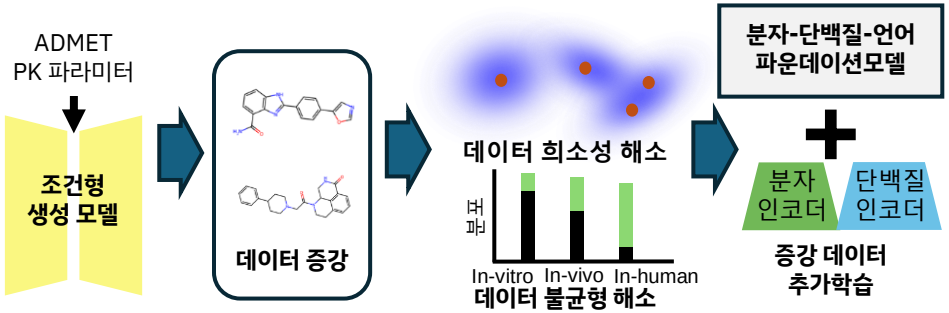
제안 해결 방법

우리는 이 문제를 멀티모달 파운데이션 모델을 이용하여 해결하고자 하며, 이를 위한 연합학습, 데이터 증강 기법, 신약개발 태스크 특화 추론 및 설명 제시 기법을 연구/개발할 예정이다.

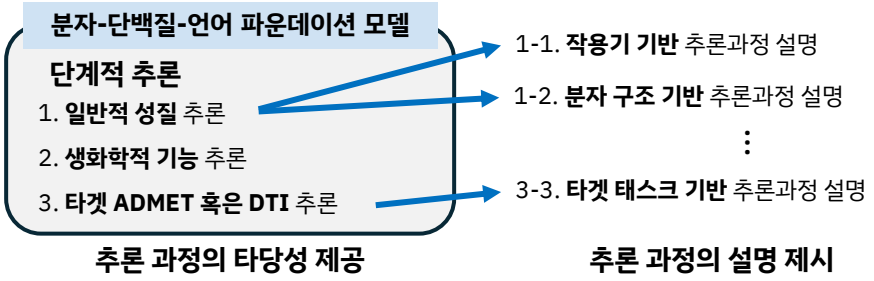
1단계: 연합학습 기반 분자-단백질-언어 삼중모달리티 파운데이션 모델



2단계: 조건형 생성 모델 기반 데이터 증강을 통한 학습데이터 희소성 및 불균형 해결



3단계: 신약 개발 태스크 특화 추론 기법 및 추론 과정 설명 제시

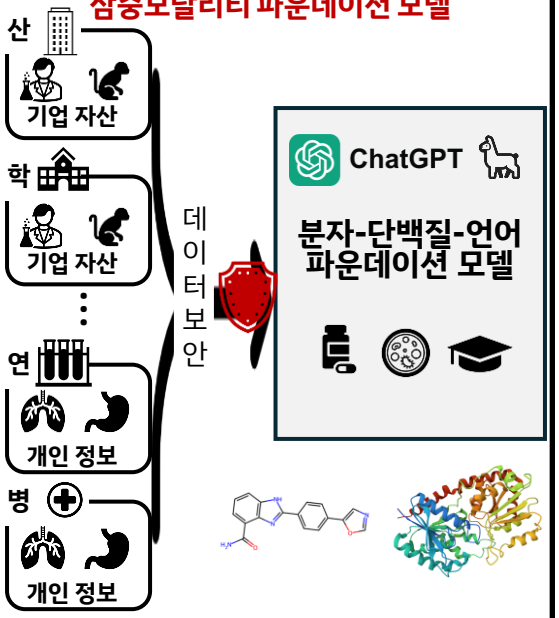


단계별 및 연차별 연구 목표

제안 연구의 단계별 및 연차별 세부 목표는 다음과 같다.

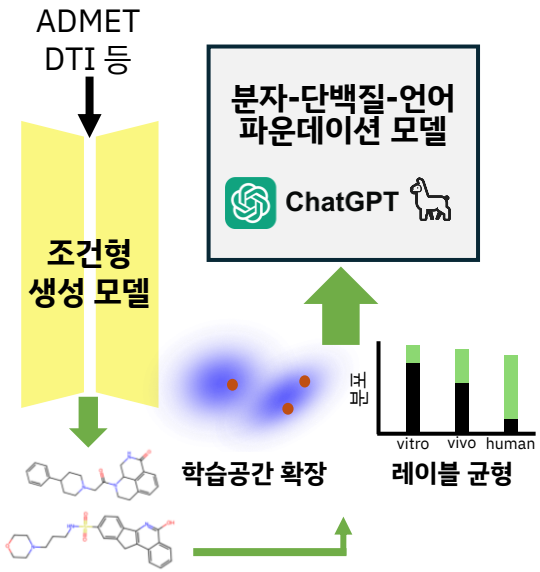
과제 전체 목표: 연합학습 기반 설명가능한 임상 결과 예측 모델 : 분자-단백질-언어 삼중모달리티 파운데이션 모델

1단계: 연합학습 기반 분자-단백질-언어 삼중모달리티 파운데이션 모델



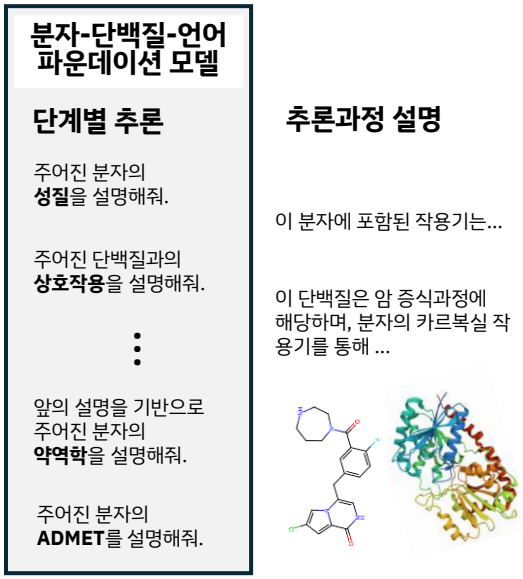
1차 목표	• 데이터 암기 방지 기법 및 암기 정도 정량화 • 핵심 파라미터 학습을 통한 효율적 연합학습
2차 목표	• 범용적 분자 및 단백질 인코더 학습 • 분자-단백질-언어 삼중모달리티 파운데이션 모델

2단계: 조건형 생성 모델 기반 데이터 증강을 통한 학습데이터 희소성 및 불균형 해결



1차 목표	• 약물질 관련 조건형 생성모델 학습 • 생성 모델을 활용한 데이터 증강
2차 목표	• 증강된 데이터 기반 파운데이션 모델 추가학습 • 학습 데이터 불균형 및 희소성 문제 해소

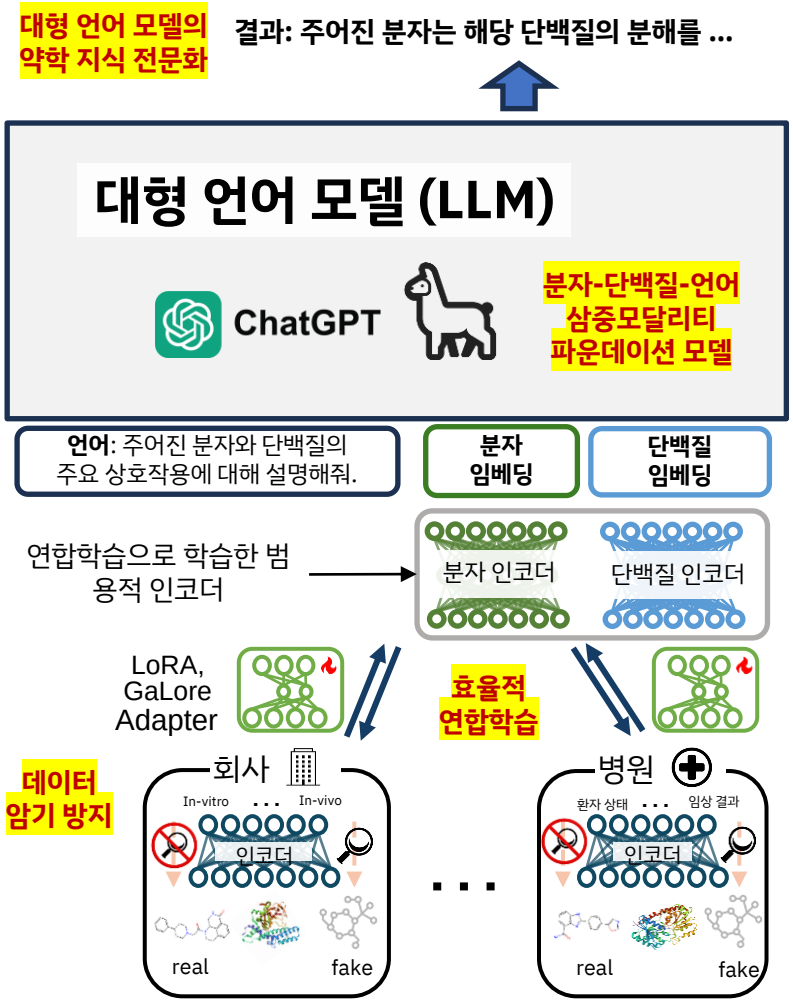
3단계: 신약 개발 태스크 특화 추론 기법 및 추론 과정 설명 제시

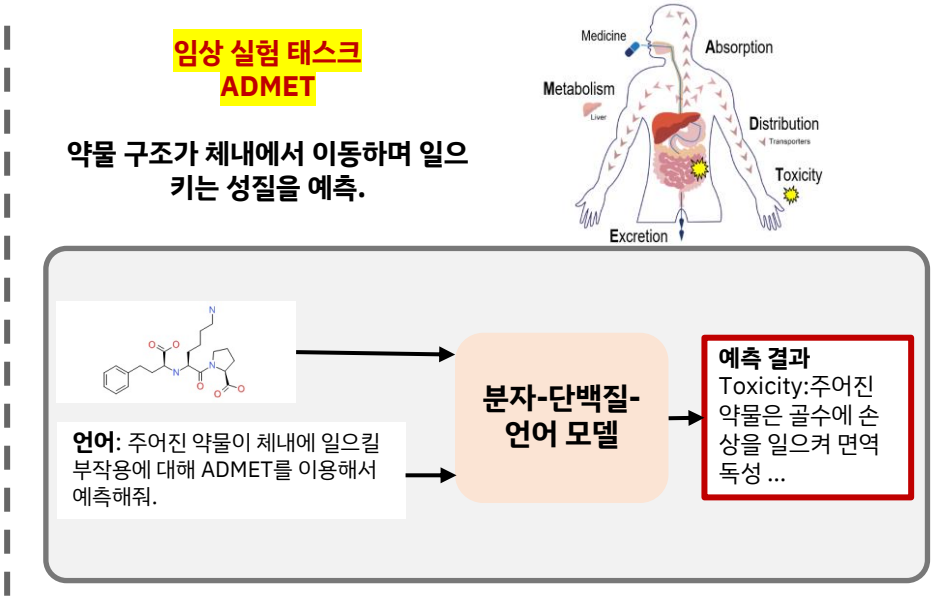


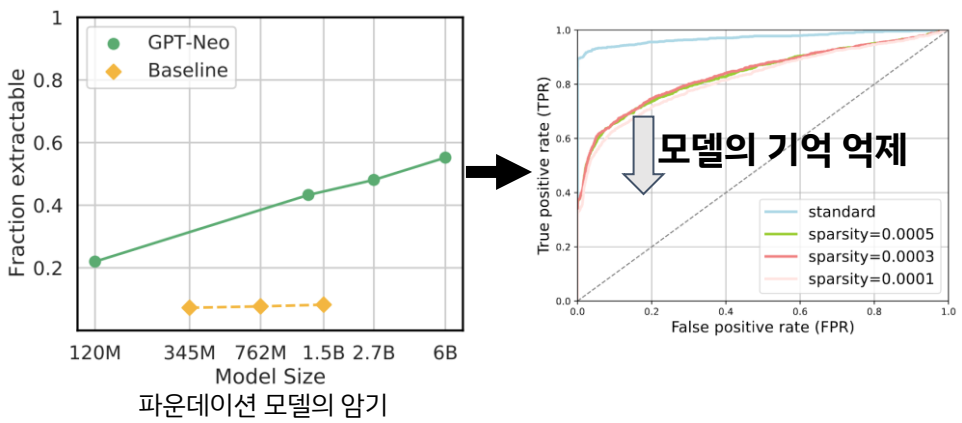
1차 목표	• 신약 개발 태스크에 특화된 프롬프트기법 개발 • LLM기반 Chain-of-Thought 기법 개발
2차 목표	• 예측 결과 및 추론 과정에 대한 설명 기법 개발

1단계: LLM 기반 약학 지식 특화 파운데이션 모델

연합학습으로 학습한 범용적 분자 및 단백질 표현을 활용하여, 분자 및 단백질의 정보 및 상호작용 설명을 생성하는 대형 분자-단백질-언어 기초모델을 학습시키고 (왼쪽), 이를 통하여 임의의 약물에 대한 임상 실험 결과를 예측한다 (오른쪽).

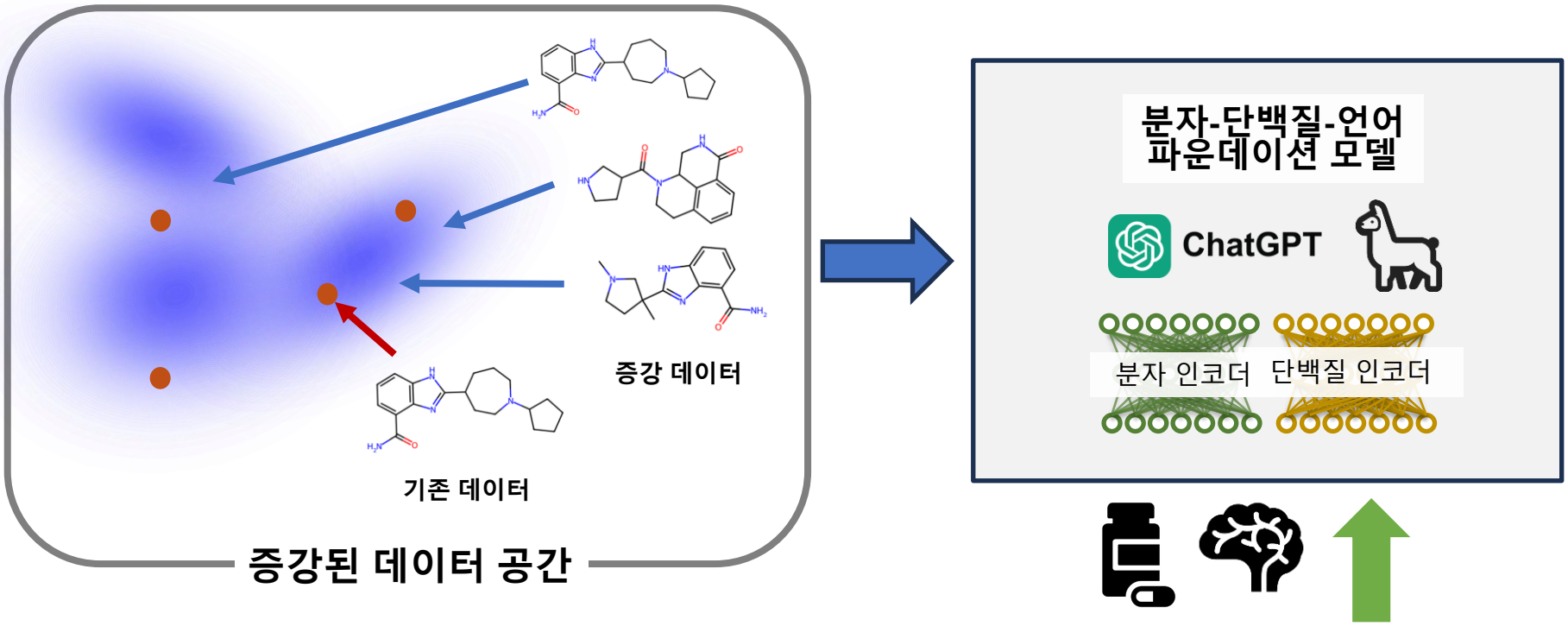






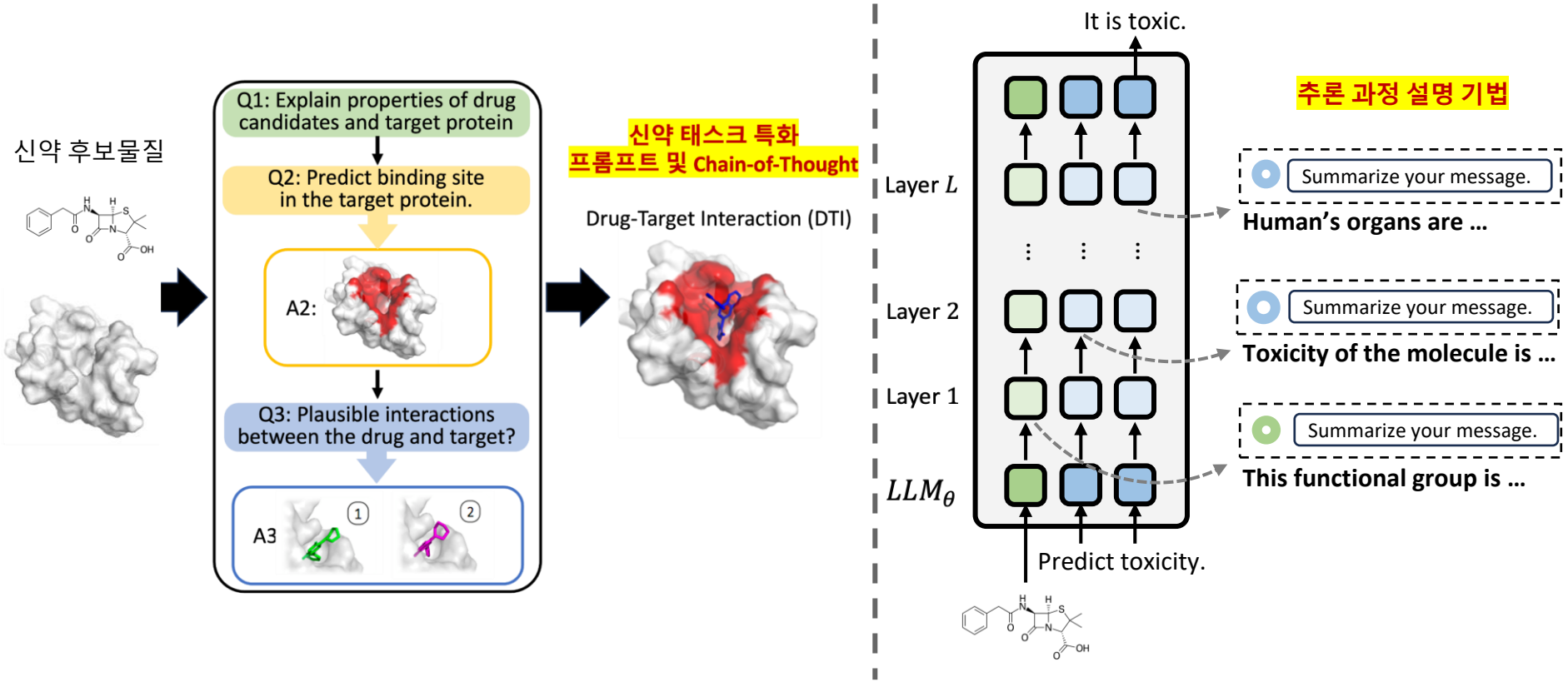
2단계: 증강 데이터셋 기반 파운데이션 모델 추가학습

증강된 데이터셋에 기반하여 파운데이션 모델을 추가학습시켜 학습 공간을 확장시킨다. 이를 통해 보다 일반적인 지식을 학습하는 것을 가능하게하며, 레이블이 편향되더라고 올바르게 주어진 태스크 수행이 가능하다.



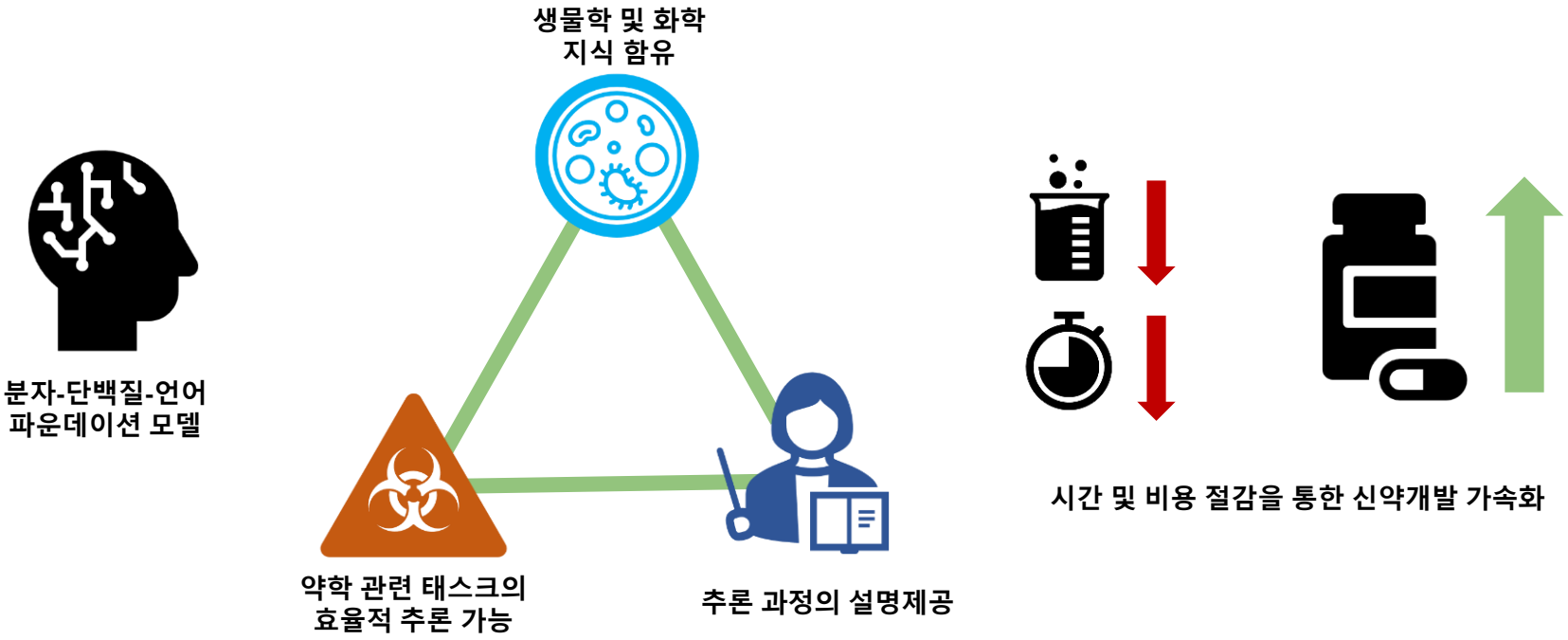
3단계: 신약개발 특화 추론 기법 및 추론 과정 설명 기법

멀티모달 신약개발 모델을 이용하여 분자와 단백질의 성질 및 상호작용을 단계별로 추론하는 멀티모달 Chain-of-Thought 프롬프트를 개발한다. 또한, 모델의 결과에 대한 신뢰성과 제어를 보장하기 위해서 도출된 추론에 대한 설명을 제공하는 기법을 개발한다.



최종 목표: 연합학습 기반 설명가능한 임상 결과 예측 분자-단백질-언어 삼중모달리티 파운데이션 모델

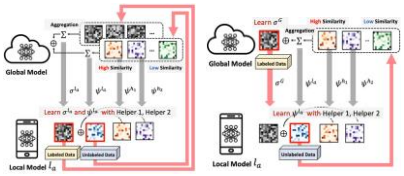
분자-단백질-언어 삼중모달리티 파운데이션 모델을 개발하여, ADMET 및 DTI 등 신약에 필수적인 태스크를 효율적으로 추론가능하며 추론 과정 설명을 통한 신뢰성을 갖춰 신약개발을 가속화한다.



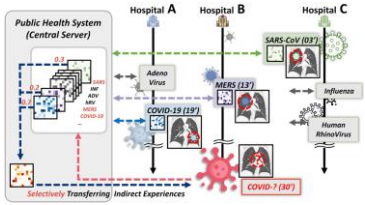
황성주 교수 연구팀

총 132편 논문을 발표했으며, 연합 학습 논문 11편, 신약 개발 및 생성 모델 논문 21편, 멀티모달 학습 논문 5편, 언어 모델 논문 18편을 발표했다.

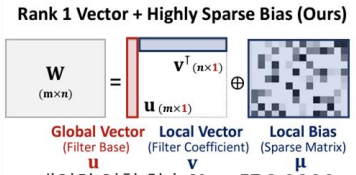
연합학습



준지도 연합 학습 **ICML 2021**

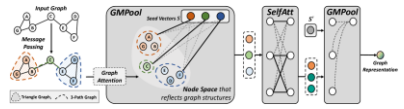


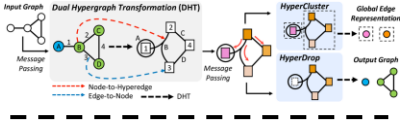
계속적 연합 학습 **ICML 2021**

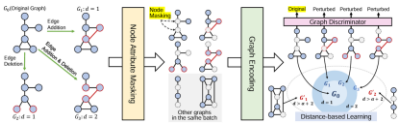


개인화 연합 학습 **NeurIPS 2022**

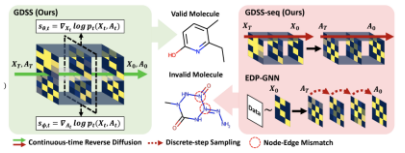
신약개발





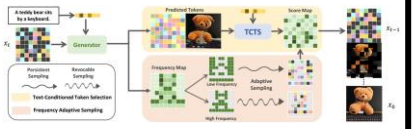


그래프 표현 학습 **ICLR 2021, NeurIPS 2021, 2022**

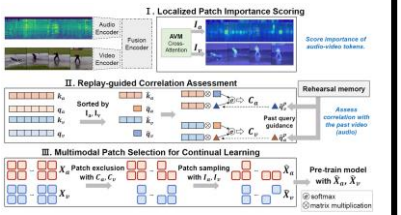


그래프 디퓨전 생성 **ICML 2022, 2024**

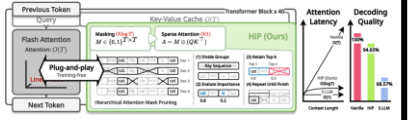
멀티모달 학습



텍스트-이미지 멀티모달 **ICCV 2023**

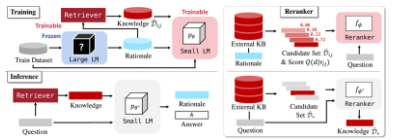


오디오-비디오 멀티모달 **ICML 2024**

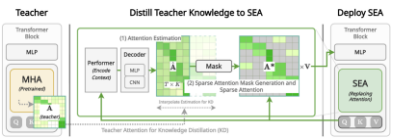


멀티모달 대형언어모델 **Under review**

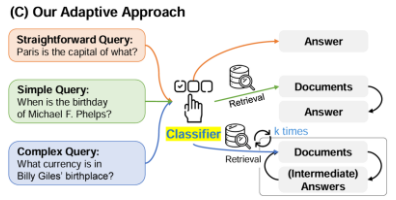
언어모델



지식 기반 언어모델 **NeurIPS 2023**



언어모델 경량화 **ICLR 2023, 2024**



검색 증강 생성 **NAACL 2024**

18번
최우수 학회
Area Chair

132편
최우수 학회
논문

NeurIPS, ICML, ICLR, CVPR, ACL 등

24개
연구 과제

IITP, 삼성, LG, NRF,
ADD 등

30명
AI 연구진

19 박사과정,
11 석사과정