

임상 1상 예측 모델과 동적 앙상블 기반 연합학습 플랫폼 개발

주관연구책임: 삼성서울병원 서성욱

공동연구책임: 주식회사 스파이더코어 강민근

(주)스파이더코어 역량 — 신약개발 AX 전환 전문기업

ACADEMY



3건 SCI(E) 게재

세계 최고 권위 학회·저널 연속 게재

AI	ICML 2024
바이오	MTNA IF 8.8 · 2024
	NAR IF 16.6 · 2025

GOVERNMENT



8위 / 전체 630팀

2025 과기부 AI Champion 경진대회

선정	정보통신기획평가원장상
유일	Top 8 중 바이오 분야 유일
방영	Netflix 다큐멘터리 공개 netflix.com/title/82639286

INDUSTRY

3+1

상장사 도입 / 협의 중

코스닥·나스닥 상장 바이오 도입

코스닥	상장 바이오 3개사 도입 확정
나스닥	상장사 1곳 계약 완료

인력 구성 및 역할

AI·생명과학 분야 KAIST 출신 핵심 인재 — 박사 5명·석사 6명·학사 4명



사업 총괄

- KAIST 전자공학 박사(AI 전공)
- 10년 이상의 AI/ML 경력
- Forbes Korea AI 영리더 20

이 기 원
Ph.D.
CEO



전략·기획

- 창업학 석사
- Building and Exiting Startups (over 10 years)
- Co-founding AI Tech-based Startups

양 수 희
MS
CSO



연구·개발

- KAIST 전자공학 박사(AI 전공)
- 10년 이상의 AI/ML 경력
- AI 분야의 탑 티어 학회지 (ECCV, ICML)
- 바이오 저널 게재 (NAR, MTNA)

강 민 근
Ph.D.
CTO



AI Agent

- KAIST 전자공학 석사
- 8년 이상의 AI/ML 경력
- AI/ML 분야의 탑 티어 논문 (NeurIPS, AAAI, IEEE ISIT)

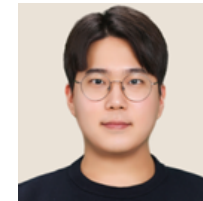
황 경 조
MS
Team leader



Physical AI

- KAIST 전자공학 석사
- 8년 이상의 AI 경력

우 인 희
MS
Team leader



연합학습

- KAIST 전자공학 박사
- 6년 이상의 AI/ML 경력
- AI 분야 탑티어 논문 (ICML, ICLR 등)

김 도 연
Ph.D.

+ 9명의 팀원 (박사 3명, 석사 4명, 학사 2명)

K-MELLODDY 추진체계 및 기관별 역할



프라이버시 보존 연합학습(LoRA)

원본 데이터를 외부로 보내지 않고 극소수 LoRA 파라미터만 공유 → 데이터 주권 보장



LoRA 연합학습 예시 — 한 라운드 동작

실제 예시 — 기관별 로컬 데이터로 학습한 어댑터만 전송 → 서버 통합 → 글로벌+개인화 모델

① 입력 · 기관별 로컬 데이터 (외부 비전송)

삼성서울병원 오가노이드 시계열 **320건**

제약사 A 사내 화합물 PK **4,800건**

기관 N 로컬 보유 데이터 **1,200건**

② 처리 · 로컬 학습 → 전송 → 통합

각 기관 LoRA 어댑터 **21M** 학습

= 전체 7B의 **0.3%**만 전송

서버: 업데이트 충돌 조정·기여도 가중 통합

(원본·gradient 미수신)

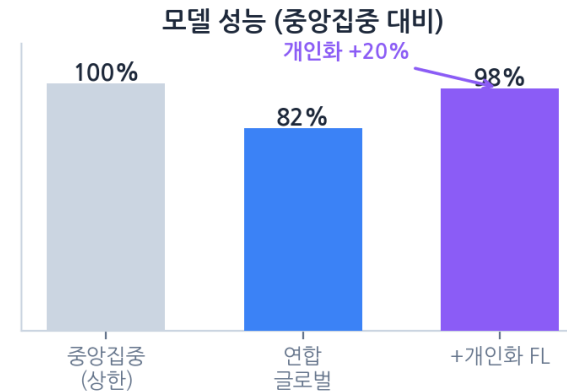
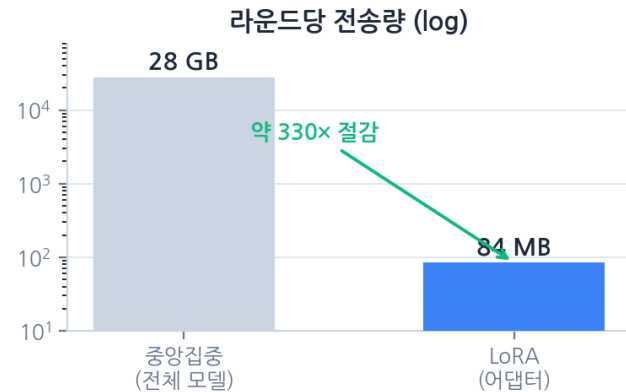
기관 자원에 맞춰 학습량 차등 · 취합 정확도 개선

③ 결과

통신량 **28GB → 84MB (약 330×↓)**

글로벌 성능 중앙집중 대비 **82%**

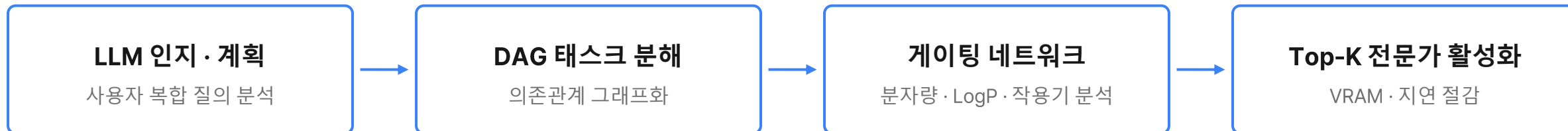
개인화 적용 시 **+20%** (≈98%)



원본 · gradient 비전송 · 극소수 어댑터만 공유 → 데이터 복원 공격 구조적 차단 · 데이터 주권 보장

다중 AI 자동 연계(오케스트레이션) — 입력→처리→결과

게이팅 네트워크가 화합물 특성별 최적 전문가 모델을 동적 선택



전문가 모델 풀 (선택적 활성화)

PK 예측 모델 1

PK 예측 모델 2

PDO surrogate

약물 흡수 예측 알고리즘 1

약물 흡수 예측 알고리즘 2

약물 대사 예측 알고리즘 1

독성 예측 알고리즘 1

독성 예측 알고리즘 2

약물 대사 예측 알고리즘 2

게이팅이 선택한 상위 K개 전문가만 추론 시 활성화

MoE 동작 예시 — 입력 화합물에서 통합 예측까지

실제 예시 — 화합물·질의 입력 → 게이팅이 적합한 전문가 모델 선택 → 통합 예측 리포트 산출

① 입력: 화합물 질의

화합물 X

SMILES CC(=O)Nc1ccc(S(N)(=O)=O)cc1

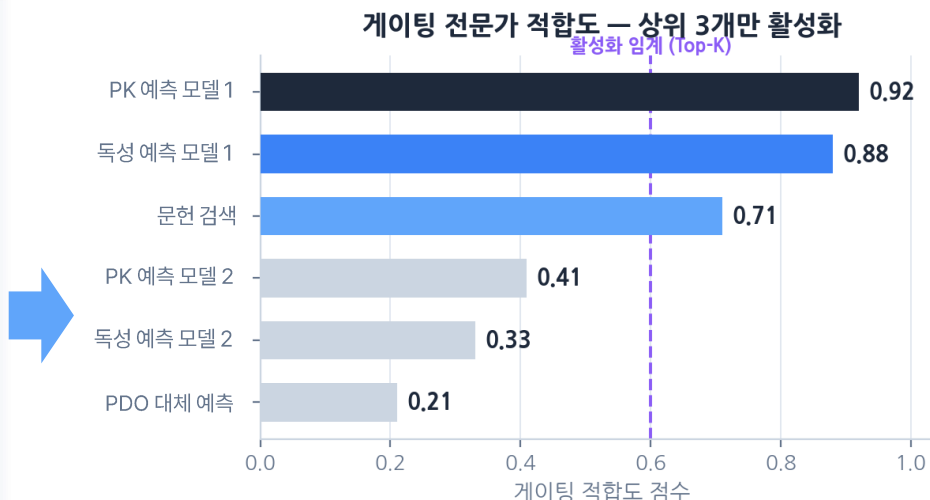
분자량 **412.5** · LogP **3.2**

작용기 설폰아마이드

질의

“이 화합물의 임상 1상 PK와
독성 위험을 예측하고
근거를 제시하라”

② 처리 · 게이팅 전문가 선택



→ 상위 PK 예측 · ADMET-A I · 문헌 RAG 3개만 활성화 (VRAM · 지연 절감)

③ 결과

통합 예측 결과

PK · AUC **118** $\mu\text{g}\cdot\text{h/mL}$
(95% CI 96–142)

Cmax **8.4** · T_{1/2} **6.2h**

안전성 위험 **중간** (DLT ~18%)

DDI 위험 **낮음**

근거 문헌 3건 (RAG)

동일 입력 재실행 시 전이 화합물 일치율(재현성) 관리 · MCP · JSON 상태 제어로 도구 간 입출력 자동 정렬

선행 연구성과 ① — 검증된 신약 AI · 연합학습 원천기술

기검증된 신약개발 AI + 연합학습 기반기술을 임상 1상 예측 및 K-MELLODDY 환경으로 확장



Top 8

전체 630팀 중

2025 과기정통부
AI 챔피언 경진대회

바이오 · 신약개발 분야 **유일**

DynAgent-AI · 삼성서울병원 × (주)스파이더코어



Pharos · LLM 신약 에이전트

자연어 질의 기반 자율 도구 호출 · 온톨로지, RAG · 11종 예측모델 전주기 통합 · 국내 제약사 R&D 현장 도입 · 검증



자원 효율적 연합학습

무손실 gradient sparsification으로 통신량 절감 및 수렴성 수학적 증명 (ICML 2024)



개인화·일반화 균형 연합학습

SplitGP 분할학습 기반 개인화-일반화 동시 확보 (INFOCOM 2023 · IEEE TMC, IF 7.7)

선행 연구성과 ② — Pharos · LLM 신약 에이전트

국내 제약사 상용 운용을 통해 검증된 오케스트레이션 기술을 K-MELLODDY 표준 환경으로 확장 및 적용

