



Agentic AI 및 연합학습 기반 ADMET·PK 통합 예측 플랫폼 개발

주관 부산대학교 이해승

공동 강원대학교 권정민



1. 연구개발기관 및 연구자 소개



부산대학교 (주관)

생물정보학팀



이해승 교수(책임)
외 참여연구원 9명

PBPK 입력값/
모델 검증



데이터수집 및 정제



ADMET 예측모델 개발



PBPK 융합 AI 모델 개발



API/플랫폼 개발

표준화 기준/
실험 지식

약동학팀



윤인수 교수(참여)
외 참여연구원 3명



약동학데이터 표준화



내부데이터 확보



함수 baseline 구축



약리학적 타당성 검토

담당 기술 개발 내용

- ADMET/PBPK 예측 AI 모델 개발
- PBPK 모델링 및 약리학적 결과 검증



강원대학교 (공동)

SI팀



권정민 교수(참여)
외 참여연구원 2명



개인화 연합학습 개발



Agentic AI 오케스트레이션 개발



Agentic Federated AI 검증



경량화 기반 FL 고도화

담당 기술 개발 내용

- FAM 개발 및 성능 검증
- ADMET 특화 Agentic FL 개발



- ✓ AI-ready data
- ✓ Model zoo



- ✓ Agentic AI 설계
- ✓ AI 모델 성능 피드백

최종 산출물



ADMET/PK
통합 예측 프레임워크



Agentic
FL

성능 개선 및
모델 고도화 피드백

성능 개선 및
모델 고도화 피드백

1. 연구개발기관 및 연구자 소개

1-1 주관연구개발기관: 부산대학교

1 주관(책임)



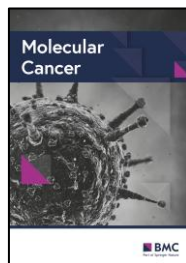
부산대학교
이해승

전공분야

- 빅데이터기반 약물가상탐색 모델개발
- 오믹스기반 치료 표적 및 작용기전 발굴

정량적 연구 실적

- SCIE 논문: 54편 (주교신 23편)
- 약물 빅데이터 기반 신규 약물 표적/적응증 발굴 연구 논문: 23편
- 약물가상탐색법 기술이전 (정액료 1.5억원)



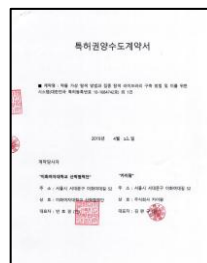
Mol Cancer 2018
(IF: 33.9, JCR: 1.1%)



Nat Comm 2025
(IF: 15.7, JCR: 7%)

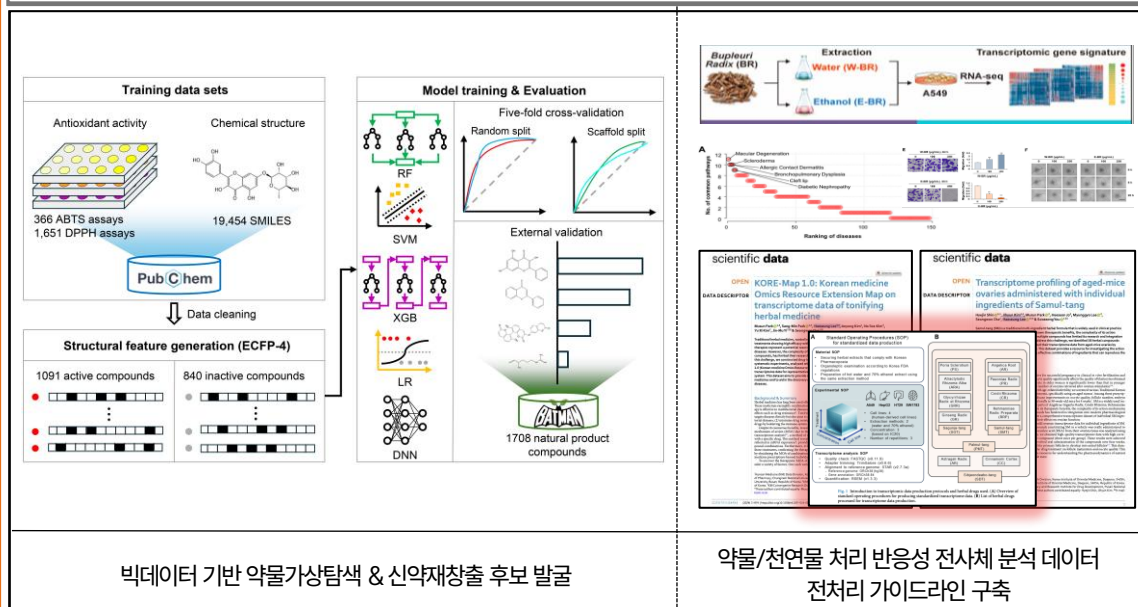


Redox Biol 2020
(IF: 11.9, JCR: 4.5%)



약물가상탐색법
기술이전 (1.5억원)

빅데이터 생명정보 분석을 통한 약물가상탐색 연구



1. 연구개발기관 및 연구자 소개

1-2 주관연구개발기관: 부산대학교

1 주관(참여)



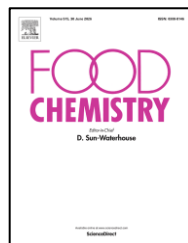
부산대학교
윤인수

전공분야

- PBPK/PD 모델링 연구
- 약물/유해물질 ADME기전 연구

정량적 연구 실적

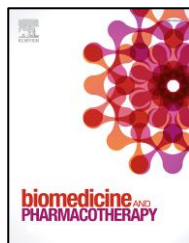
- SCIE 논문: 130편 (주교신 65편)
- 약동학 모델링 관련 연구 논문: 교신 15편
- 식약처 PBPK 모델 구축 과제 다수 수행



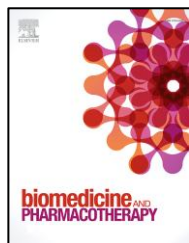
Food Chem 2026
(IF: 9.8, JCR: 3.5%)



Med Comm 2025
(IF: 10.7, JCR: 7.2%)



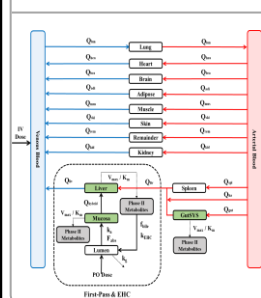
Biomed Pharmacother
2023
(IF: 7.5, JCR: 5.4%)



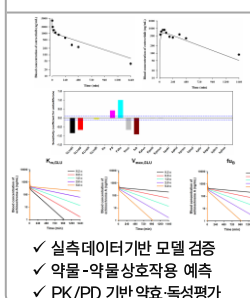
Biomed Pharmacother
2022
(IF: 7.5, JCR: 5.4%)

약물 체내동태기전 및 모델링 연구

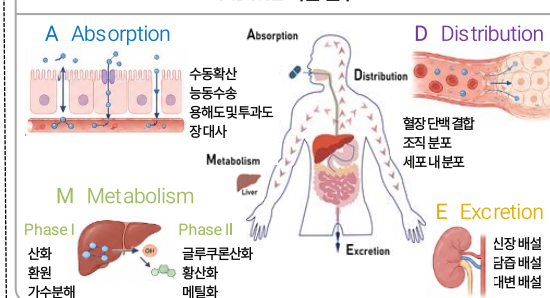
PBPK 모델 구축



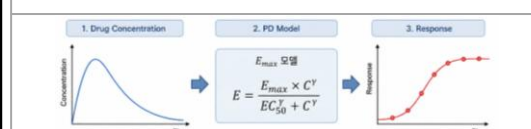
모델 검증 및 평가



ADME 기전 연구



PD 모델 구축



활용 분야



PBPK/PD 모델링 연구

약물/유해물질 ADME 기전 연구

1. 연구개발기관 및 연구자 소개

1-3 공동연구개발기관: 강원대학교

2 공동(참여)



강원대학교
권정민

전공분야

- 연합학습기반분산시시스템연구
- 시기반지능형시스템최적화연구

정량적연구실적

- 연합학습·분산시기반SCIE논문: 5편
- 시기반분산시스템최적화특허: 국제4/3건, 국내 2/13건
- 강화학습기반분산환경시스템공인인증수행



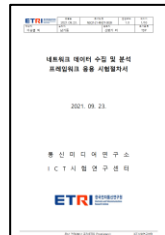
IEEE TMC
(IF: 9.2, JCR: 3.5%)



국제 특허 등록증



국내 특허 등록증



ETRI ICT 시험 연구센터
공인인증

xHaul 네트워크의 인공지능형 제어기술 개발

Challenges

[연구 목적]
6G Open RAN의
지능적 최적화 및
분산 제어

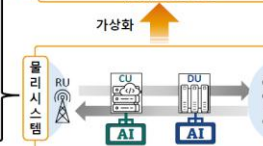
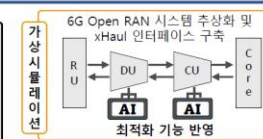
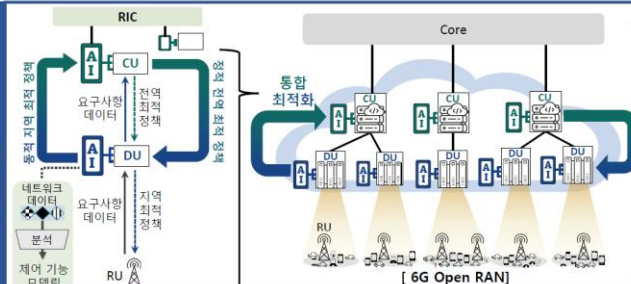
인공지능 기술이 통합된
Open RAN 아키텍처의 부재
하드웨어-소프트웨어
통합 설계의 복잡성

유닛의 기능에 따른 개별 최적화
분산 유닛 간의 상호작용 부족

현실성 높은 검증 도구의 부족
실제 데이터 기반 검증 부족

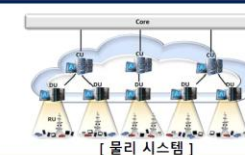
Proposed

6G Open RAN의
공동 설계를 위한
xHaul 네트워크의
인공지능형 제어
기술 개발



Results (PoC)

모바일 단말 기반
6G Open RAN
인공지능형
분산 제어



공동설계
기반 고도화
모바일 단말 운용 메타 데이터 고려
모델 동적 업데이트
퍼드백 시스템 연계



2. 연구의 목표

2-1 최종 목표 및 연차별 내용

최종 목표



약동학 지식, Agentic AI, 연합학습 기반 ADMET 및 PK 통합 예측 프레임워크 개발

연차별 목표

1차년도

AI-ready dataset 확립 및 연합학습 구조 설계

2차년도

ADMET/PK 예측 Agentic AI 및 연합학습 AI 모델 개발

3차년도

연합학습 기반 ADMET/PK 예측 프레임워크 확립

1차년도

AI-ready dataset의 확립
및 연합학습 구조 설계

(주관)

- 학습을 위한 데이터 확보 및 표준화
- PBPK/IVIVE 모델 baseline 구축

(공동)

- 개인화 연합학습 기반 협업학습 구조 설계

2차년도

ADMET/PK 예측 Agentic AI
및 연합학습 AI 모델 개발

(주관)

- ADMET AI model zoo 구축·최적화
- PK 파라미터 예측 프레임워크 구축

(공동)

- FAM 및 Agentic AI 초기모델 개발

3차년도

연합학습 기반 ADMET/PK
예측 프레임워크 확립

(주관)

- ADMET/PK 예측 모델 경량화 및 최적화

(공동)

- Agentic AI 기반 ADMET 특화 연합학습 모델 최적화 및 고도화

ADMET/PK
통합 예측 플랫폼

2. 연구의 목표

2-2 핵심 예측 Task 설정 및 평가항목

▶ 핵심 예측 ADMET (16)/PK (9) 파라미터 설정

예측 전략	구분	핵심 Task 유형
AI-only 모델	Physicochem	logP, pKa
	Solubility	Solubility
	Permeability	Caco-2
	Plasma protein binding	PPB/Fu,p
	Efflux transporter	P-gp
	Plasma stability	Plasma stability
	Metabolic stability	Liver microsomes, Hepatocytes
	CYP inhibition	CYP1A2, CYP2C9, CYP2C19, CYP2D6, CYP3A4
	Toxicity	hERG, Ames
PK 융합 AI 모델	Animal PK	PK 프로파일(F, AUC _{last} , CL, V _d , V _{ss} , C _{max} , T _{max} , t _{1/2})
	Human PK	PK 프로파일(F, AUC _{last} , CL, V _d , V _{ss} , C _{max} , T _{max} , t _{1/2})

▶ 연구성과의 평가 항목 설정

평가항목	단위	최종목표	평가 내용
ADMET/PK 예측 모델 구현 여부	개	> 10	Agentic AI가 관리하는 model zoo내에 탑재된 모델의 개수
ADMET 예측 성능	개	> 5	TDC ADMET benchmark 예측 task 대상 최소 5개 이상의 task에서 기존 SOTA 모델 대비 동등 또는 우수한 성능 달성
PK 프로파일 예측 2-fold error이내 달성률	%	> 60	2-fold error 달성률 = $0.5 \leq \text{predicted PK value} / \text{observed PK value} \leq 2.0$ 을 만족하는 샘플 수 / 전체 샘플 수 × 100
Agentic AI 기반 Top-k 최적 모델 선택 성공률	%	> 30	최적 모델 선택 성공률(%) = (ai가 선택한 모델이 실제 상위 성능을 보이는 task 수) / (전체 평가 task 수) × 100

3. 연구 내용

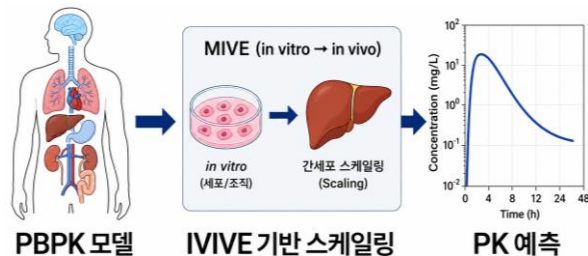
[1차년도]

데이터 기반 및 Baseline 구축

(1) 전처리 도구 개발 및 데이터 정제



(2) PBPK/IVIVE 기반 모델링



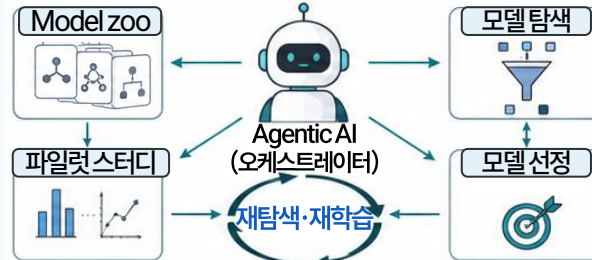
[주요 산출물]

- AI-ready dataset
- Task Ontology
- PBPK/IVIVE baseline 모델
- 초기 인화 연합학습 구조

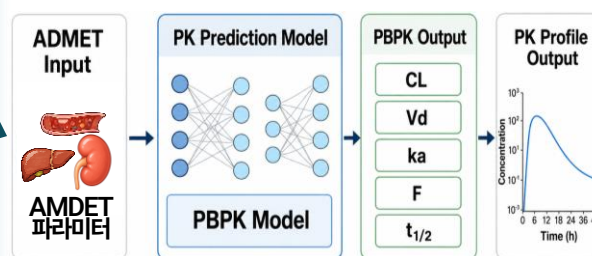
[2차년도]

Agentic AI 기반 예측 모델 개발

(3) Agentic AI 기반 ADMET 예측 모델 개발



(4) PK 예측 모델 개발



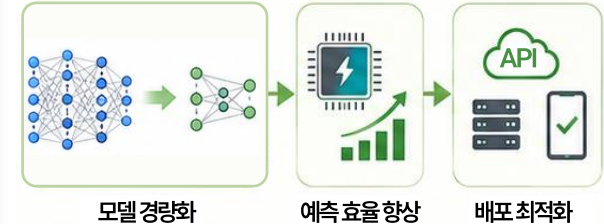
[주요 산출물]

- 10종 이상의 SOTA Model zoo
- End-to-End PK 예측 프레임워크
- Hybrid Neural ODE 모델
- Agentic AI 기반 FAM 초기 모델

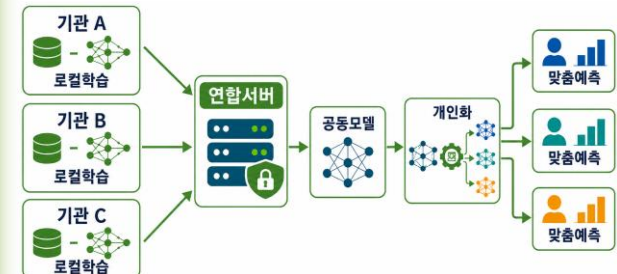
[3차년도]

경량화 기반 예측 플랫폼 고도화

(5) 모델 경량화



(6) 개인화된 연합학습 수행



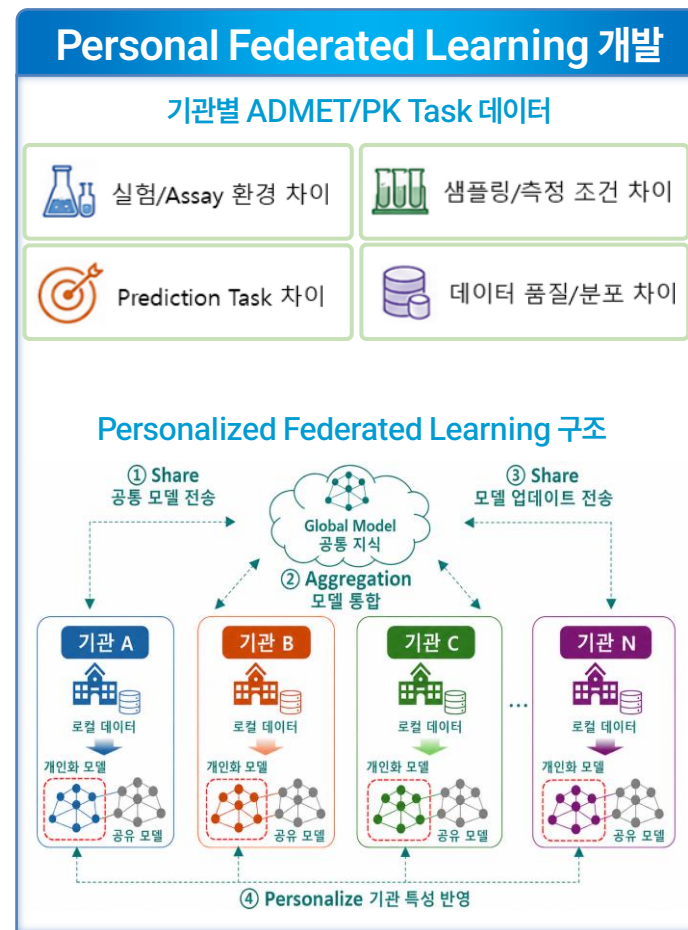
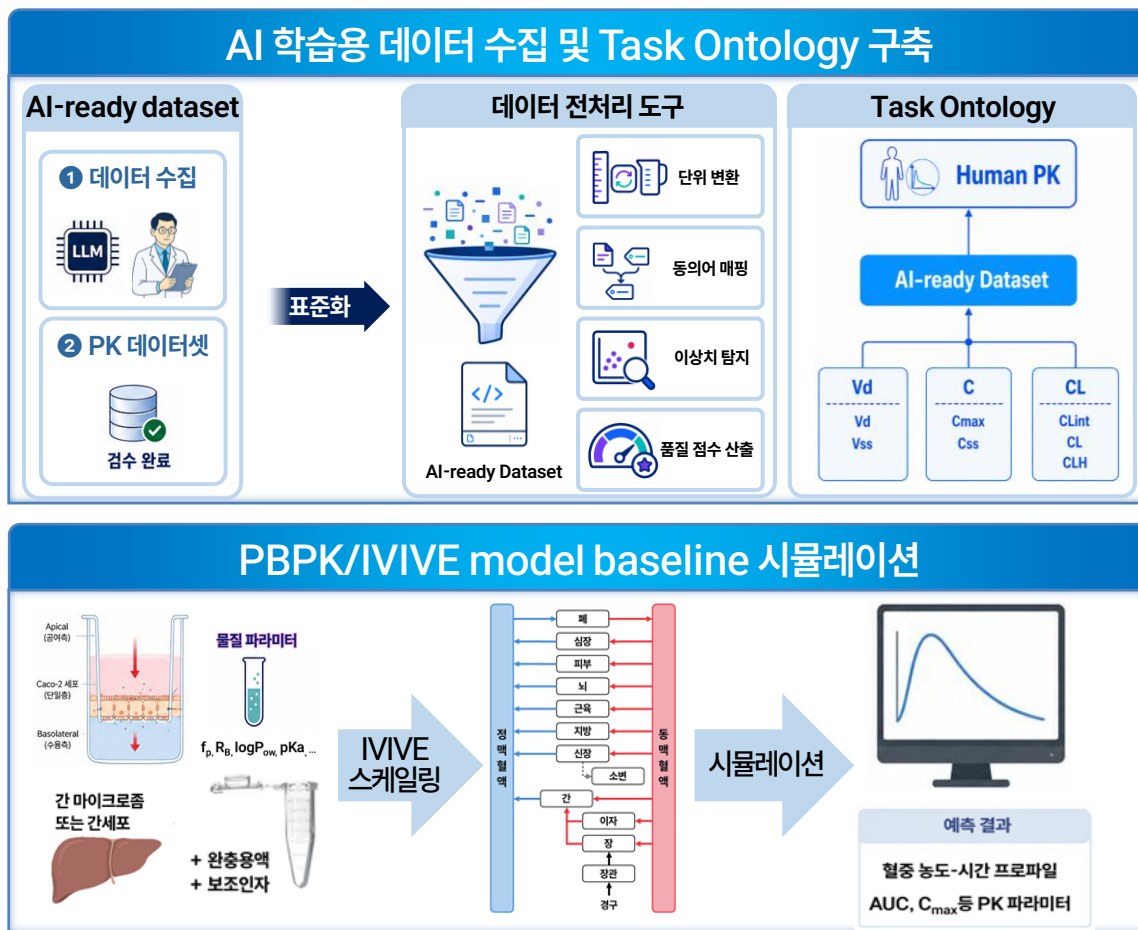
[주요 산출물]

- 경량화된 ADMET/PK 통합 예측 모델
- 최적화된 Agentic FL 구조
- 다기관 ADMET/PK 예측 플랫폼
- ADMET/PK 예측 API 및 사용자 매뉴얼

평가·피드백·재학습을 통한 지속적 모델 고도화

3. 연구내용

3-1 1차년도: AI-ready 데이터 구축 및 개인화된 연합학습 구조 설계



- ✓ AI-ready dataset 및 데이터 전처리 도구 개발
- ✓ PBPK/IVIVE baseline 모델 개발
- ✓ 개인화 연합학습 모델 구조 설계

3. 연구내용

3-2 2차년도: Agentic AI 기반 adaptive learning 통한 ADMET 파라미터 예측

Agentic AI 기반 ADMET 예측 프레임워크 구축

1. 입력



Public PK dataset
(autoPK 기반 수집)



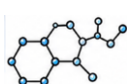
In-house PK dataset
(비공개 데이터)



약동학 전문가
검증 & 최적화

화합물 구조 & 농도

구조 정보



Molecular graph



Physiochemical
Descriptor

농도 정보

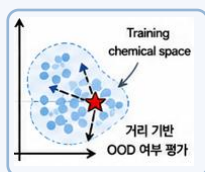


2. Agentic AI 기반 ADMET 파라미터 예측

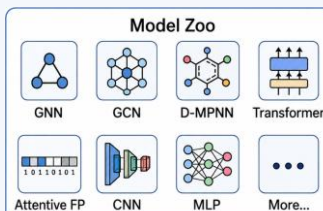
Agentic AI 기반 adaptive learning 으로 ADMET 파라미터 예측



AI agent
(LLM Planner)



OOD 평가



AMDET endpoint 예측

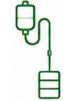


농도-시간 프로파일 및 PK 파라미터 예측

3. Hybrid Neural ODE 기반 혈중농도-시간 프로파일 예측



투여 방식

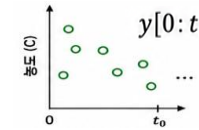


IV Bolus IV Infusion Oral (PO)

예측된 ADMET 파라미



과거 농도 측정값



Hybrid Neural ODE 기반 dynamics 모델링

사전지식 기반 기전적 PK(ODE)

$$\frac{dA}{dt} = -k_{el}A$$

$$C = \frac{A}{V}$$

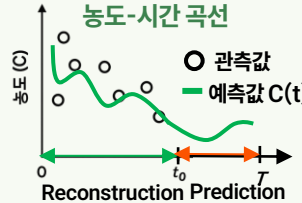
- A: 체내 약물량 (mg)
- C: 혈중 농도 (mg/L)
- k_{el} : 제거 속도 상수 (1/h)
- V: 분포 용적 (L)

신경망 컴포넌트



ODE로 설명되지 않는
비선형성 보완

PK endpoint 예측 및 해석 가능성



PK 파라미터(예측값)

C_{max} , T_{max} ,
AUC, CL, V_{d0} ,
 $T_{1/2}$, ...

모델 해석 가능성

- 기전적 부분 (f_{PK})
- CL, V 등 알려진 기전으로 해석 가능
- 신경망 부분 (f_{NN})



마일스톤

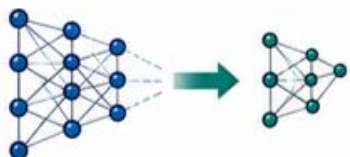
- 10종 이상의 SOTA model zoo 구현
- End-to-End PK 예측 프레임워크 개발
- Agentic AI 기반 FAM 초기 모델 구축

3. 연구내용

3-3 3차년도: 모델의 경량화 및 안정화 & Agentic Federated AI 기반 다기관 ADMET/PK 예측 플랫폼 구축

1. 모델 경량화 및 안정화

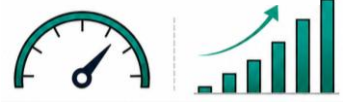
신경망 압축



GPU, memory 최적화

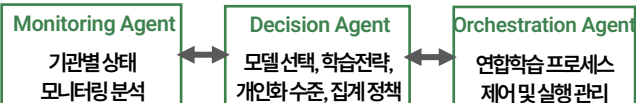


추론 속도 향상



2. 연합학습 구조 구축

Agentic Federated AI Orchestration (다중 Agent 협업)



Agent Communication Bus

상태 / 성능 / 자원 / 통신 정보 공유

통합 제어 항목

Model Zoo 선택 개인화 수준 결정 집계 정책 결정 통신 전략 결정

결과 서버에 연합 모델 업로드



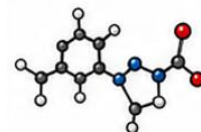
3. 통합 ADMET/PK 예측 플랫폼 FDD

입력

SMILES

CC(=O)Nc1ccccc1C(=O)O

Molecular Graph



Agentic AI

Confidence 기반 task별 모델선택

Ka	GNN-1 (0.92)	0.92
CL	Transformer (0.88)	0.88
pgp	GNN-2 (0.91)	0.91
Solubility	RF (0.87)	0.87
BBB	DeepTox (0.93)	0.93

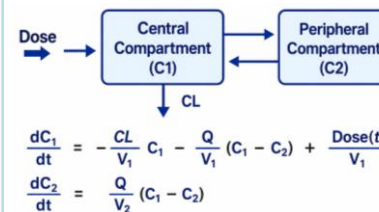
Model zoo

GNN Transformer
RF SVM XGBoost

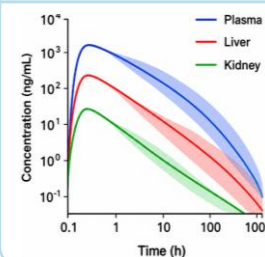
PK 예측

AUC (ng·h/mL)	2450
Cmax (ng/mL)	1250
Tmax (h)	2.1
Half-life (h)	7.8
Clearance (L/h/kg)	0.35
Vd (L/kg)	2.8

기전 기반 PK 해석



C_t profile 시뮬레이션



마일스톤

- ✓ 경량화된 ADMET/PK 통합 예측 모델 최적화
- ✓ 최적화된 Agentic FL 구조 개발
- ✓ ADMET/PK 예측 API 및 사용자 매뉴얼