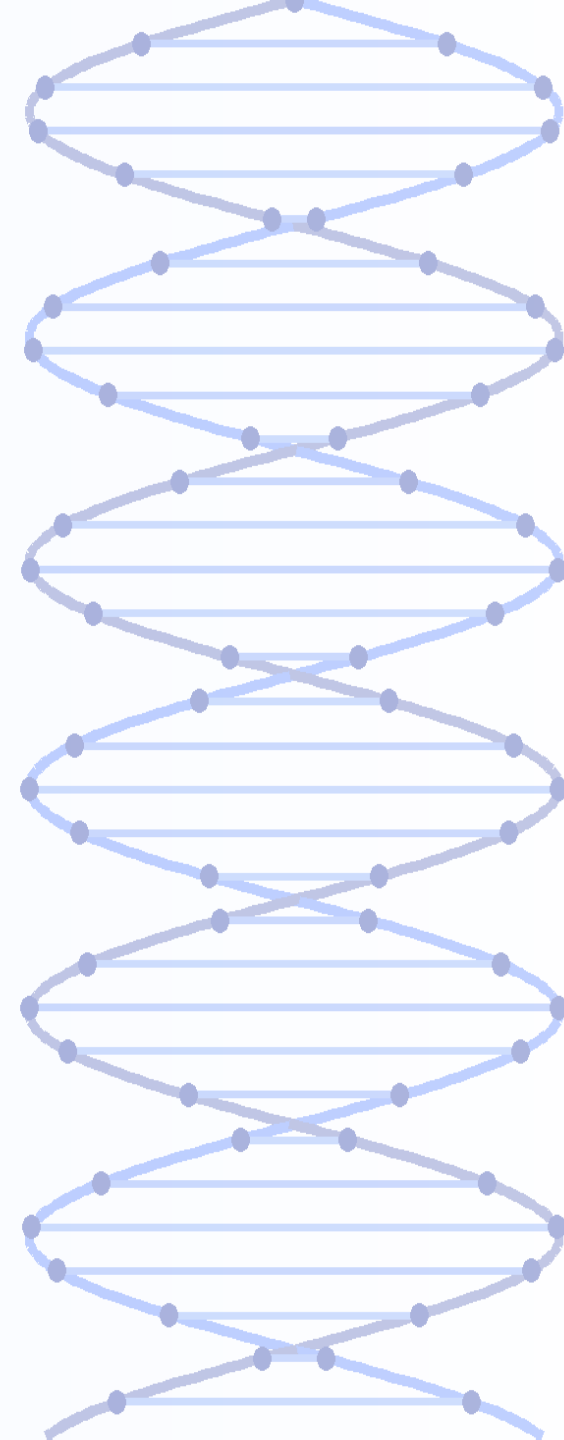


# 임상 1상 예측 모델과 동적 앙상블 기반 연합학습 플랫폼 개발

FDA 동물실험 대체(NAM) 로드맵 대응 · 파편화된 신약 R&D AI 극복을 위한  
에이전틱 오케스트레이션 및 프라이버시 보존 연합학습 환경 구축

주관연구개발기관 **삼성서울병원**  
연구책임자 서성욱 교수

공동연구개발기관 **(주)스파이더코어**  
연구책임자 강민근 이사





## 삼성서울병원 - 주관연구개발기관

- ✓ 오픈소스 기반 자체 개발 End-to-End 신약개발 플랫폼 SilicoWorks 개발
- ✓ 임상 · 유전체 연계 암 오가노이드 기반 자동화 실증 인프라인 유전자종합연구소 운영



## 연구책임자 서성욱

삼성서울병원 정형외과 교수 · 성균관대학교 의학과 교수

삼성융합의과학원 의료인공지능연구소(BMAI) 책임

신약개발센터 AI신약디자인랩 장

암병원 희귀암센터 장

결정하는 마음:현명한 선택을 위한 알고리즘 쉽게 이해하기 (글항아리) 저자

## 주요 연구개발 실적

AI 신약개발 플랫폼(SilicoWorks) 구축

융합 의학에 관련한 다양한 연구/국책과제 수행: 최근 5년 5건

특허등록 : 7건 (출원 12건, 국외 2건)

SCI 논문 : 30편, 지난 3년간 8편 (Academic Medicine등)

2025 과기부 AI Champion 경진대회 최종 8등 (Netflix 방영)

## 삼성서울병원

주관연구 책임 서성욱 외 6명

임상약학 · 정형외과 · 근골격계 중앙

## 활발한 공동 성과

## (주)스파이더코어

공동연구 책임 강민근 이사 외 4명

AI 엔지니어링 팀



## 2025 과기정통부 AI 챔피언

전체 630팀 중 Top 8  
최종경연 바이오 · 신약개발 분야 유일



## Top-tier 학술 성과

ICML 2024 · INFOCOM 2023 ·  
IEEE TMC(IF 7.7)



## 산업 검증 레퍼런스

나스닥 상장 글로벌 제약사와 공동연구  
개발 계약 진행 중

## 삼성서울병원 역량 ① — AI 신약개발 플랫폼(SilicoWorks)

혁신신약 개발센터 · AI 신약 디자인랩 — 오픈소스 기반 자체 개발 End-to-End 신약개발 플랫폼

### SilicoWorks

AI Drug Design Lab · 삼성서울병원 자체 개발

① Target Discovery

② Molecular Design

③ Lead Optimization

④ Clinical Validation

4M+

고유 분자  
(화합물 DB 9.3M)

10~100×

GPU 가상  
스크리닝 가속

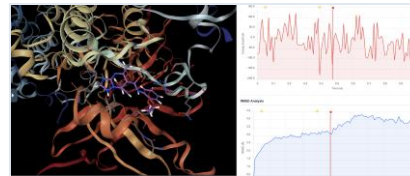
3,381명

TCGA 환자  
(8개 암종)

핵심 기술: GPU 도킹 · 생성형 분자설계 · MD · AlphaFold3 · Antibody Generator

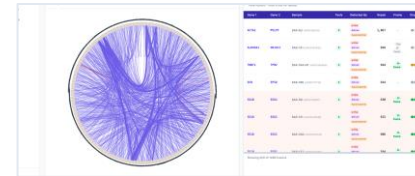
### 3대 모듈 (실제 화면)

플랫폼 기반 오픈소스 기반 정규화 파이프라인 ·  
화합물 및 단백질 생성 모듈 탑재 · Peptide &  
Antibody Sequence Gen 기술 개발 · 웹기반 플랫폼  
자체 구축 · 국내 제약사 R&D 도입·검증



#### DiscoveryWorks

구조기반 신약설계 · 도킹 · MD ·  
분자생성



#### OmicsWorks

환자 유전체 · 약물타겟 ·  
4-Layer 스코어링

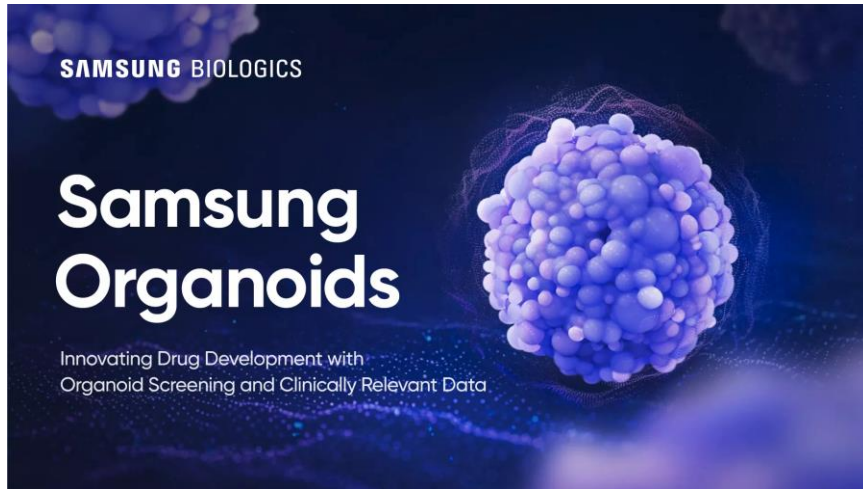


#### Clinical · PGx

PGx 코호트 · 약물 위험군 분석 ·  
임상 의사결정

## 삼성서울병원 역량 ② — 환자 유래 오가노이드 · 유전체 인프라

유전자종합연구소 · TumoroidSTATION™ — 임상 · 유전체 연계 암 오가노이드 기반 자동화 실증 인프라



국내 최대 환자 유래 오가노이드 라이브러리 (Samsung Organoids)

1만 건+

환자 유래 오가노이드  
(국내 최대)

연 500+

신규 구축

연 1만 명

유전체 분석 목표

암종 커버리지 위암 · 대장암 · 폐암 · 간암 · 췌장암 등 주요 고형암 ~ 희귀암 포괄

### 에이전트 기반 자동화 랩 핵심 장비



검체 · 배양 자동화

Hamilton 혈액분리 · NGS 분주 ·  
YuMi 로봇 · ASFA SPOTTER 자동배  
양



고해상도 시퀀싱

Revio long-read ·  
AVITI24 (연 1만 명 목표)



이미징 · 정량 분석

Incucyte 이미징 · Orbitrap Astral  
MS · Vanquish UHPLC

**핵심 차별 자산** 환자 유래 오가노이드를 ADMET 예측 입력으로 직접 결합한 사례는 K-MELLODDY 세부3 10개 과제에 부재

# SPIDERCORE 스파이더코어 - 공동연구개발기관

✓ 바이오·의료 산업의 AX 전환을 선도하는 전문기업

✓ KAIST 인공지능 전공 딥테크 연구진으로 구성된 AI 에이전트 개발 기업

## 연구 책임자: 강민근

- (주) 스파이더코어 연구소장
- (주) 스파이더코어 CTO
- 카이스트 전기 및 전자공학부 (EE) 박사



## 수상 내역



- (2025.11) 2025 과기부 AI Champion 경진대회 Finalist (8/630, 신약개발 의사결정 지원)
  - (2024.05) Amgen Gold Ticket Finalist **AMGEN**
  - (2024.04) NVIDIA N-up Program **NVIDIA**
  - (2024.04) Novo Nordisk Partnering Day **novo nordisk**
  - (2020.11) AI 챔피언십 우승 (Ministry of SMEs and Startups)
- \*Minister award in 2020 AI Championship

## 연합학습 핵심 연구인력

자원 효율적

연합학습  
- 무손실 gradient

sparsification으로 통

신량 절감 및 수렴성

수학적 증명 (ICML24)

개인화·일반화 균형 연합  
학습

- SplitGP 분할학습

기본 개인화-일반화

동시 확보

(INFOCOM 23 ·

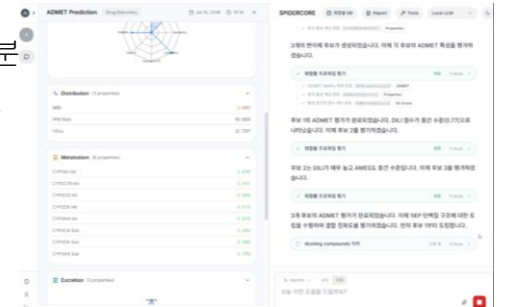
IEEE TMC, IF 7.7)



김도연 박사 (KAIST EE)  
연합학습 전문가

## Pharos · LLM 신약 에이전트

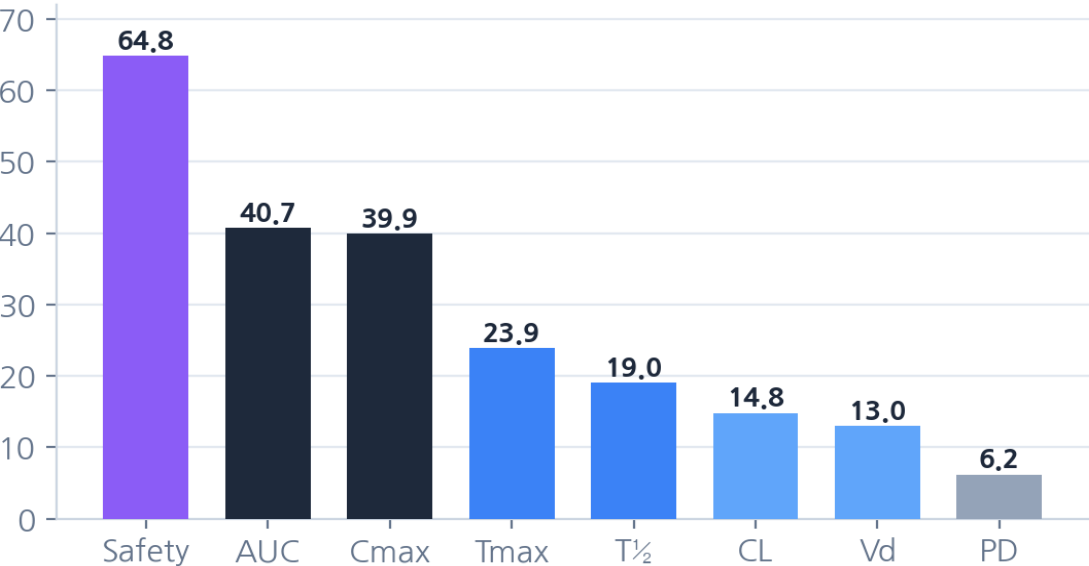
- 연구자의 자연어 질의를 분석하여 단백질 구조분석, 후보물질 설계, 분자 도킹 등 필요한 도구를 자동으로 식별하고 실행 하는 대화형 AI 에이전트 구현
- 국내 코스닥 **상장사 3곳**의 상용 운용: K-MELLODDY 표준 환경으로 확장 및 적용



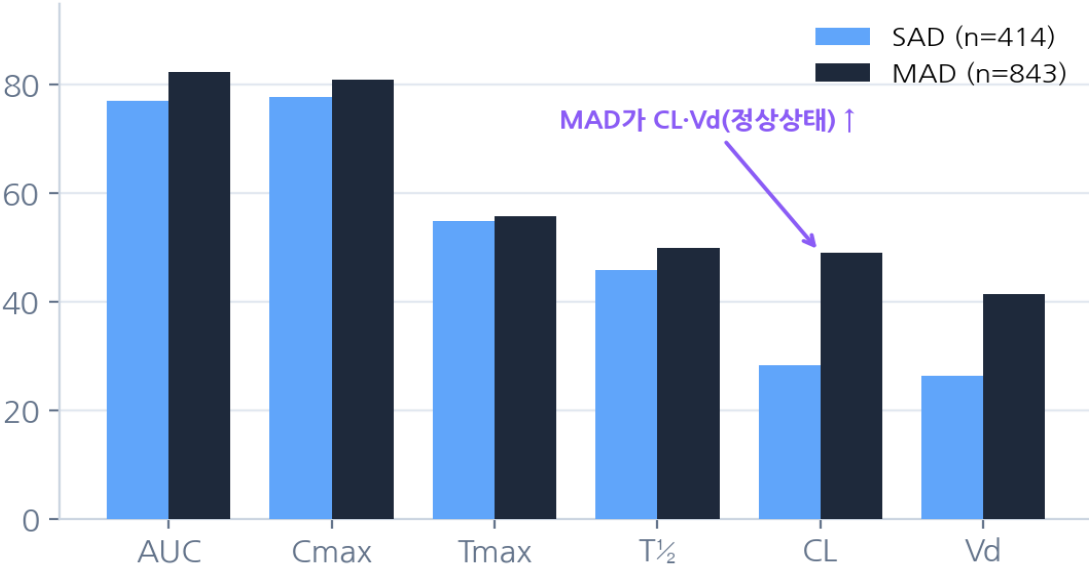
# 연구개발: 임상 1상 공개데이터 분석

protocol outcome 94,156건을 키워드로 분류 → 예측 모델 5종 출력(5-head)의 라벨 정의 근거 확보

측정값 임상 단위 커버리지 (% , N=9,576)



SAD vs MAD · PK 파라미터 측정 비율



SAD 414건 · Phase 1a

MAD 843건 · Phase 1b

DDI 158건

→ 5-head(PK · 안전성 · PD · DDI · SAD/MAD)를 실제 측정 분포 기반으로 정의 · Safety 64.8%·AUC 40.7% 최우선 학습  
→ 임상 1상 통과 확률을 예측해 진행/중단(Go-No-Go) 판단

# 연구개발: 오가노이드 데이터 수집 (공개 데이터+ 문헌 GraphRAG + Samsung organoid)

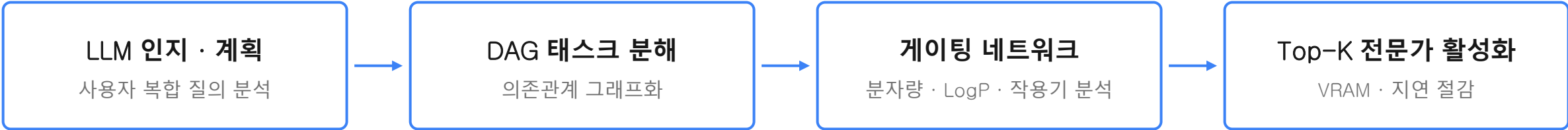
전략 — 고품질 오가노이드 PK 데이터는 공개 DB에 희소 · 논문 Supplementary에 분산 → 공개 DB + 문헌 자동수집 + 내부 환자유래 PDO를 결합해 모듈 A 학습 데이터 확보



추출 트리플 예시 <Sorafenib — liver organoid(PDO) — Cmax 4.2 μM · t½ 7.8 h · AUC<sub>0-24</sub> 38 μM · h> (형식 예시) → 지식그래프 노드로 자동 축적

# 연구개발: 다중 AI 자동 연계(오케스트레이션)

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

## 연구개발: 프라이버시 보존 연합학습(LoRA)

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

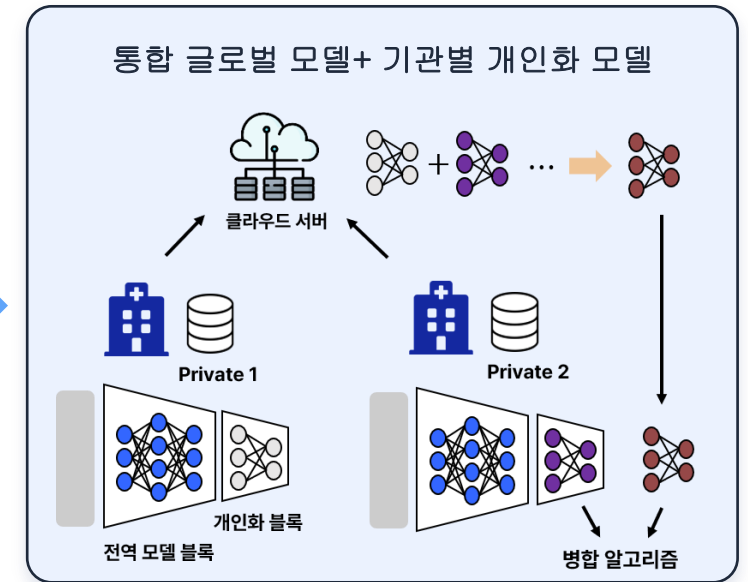
### ① 로컬 기관별 데이터 학습



### ② 글로벌 집계



### ③ 로컬 기관별 개인화 모델



#### 통신량 수집 배 절감

극소수 LoRA 파라미터만 전송

#### 기관 자원별 rank 차등

고사양↑ · 저사양↓ rank 적용(통합)

#### 개인화 연합학습

글로벌 · 로컬 모델 병합 비율 조정

## 최종 목표



### In vivo PK 예측 알고리즘

공개 데이터 기반 in vivo PK 예측 모델 개발



### Human PK 예측 알고리즘 개발

In-vivo PK/PD transfer learning  
임상 1상 데이터, human organoid data 활용  
측정값 (PK·PD·Safety·SAD/MAD/DDI)



### 다중 AI 오케스트레이션

의도 인지 · 이종 AI 자율 연계 · 제어 에이전틱 컨트롤 타워



### MoE 융합 + 연합 전처리

전문가 혼합 동적 라우팅 + 연합학습 로컬 전처리 도구

삼성서울병원 데이터·전처리(ctgov+PDO+PGx) · 임상 1상 측정값 예측 모델 · PDO PK/PD surrogate · 외부 검증·실증

(주)스파이더코어 메타 앙상블+연합 집계(LoRA) · LLM 에이전트 오케스트레이션(MoE) · 연합 전처리 도구 · FDD 플랫폼 패키지화