

2026년도 연합학습 기반 신약개발 가속화 프로젝트 (K-MELLODDY)

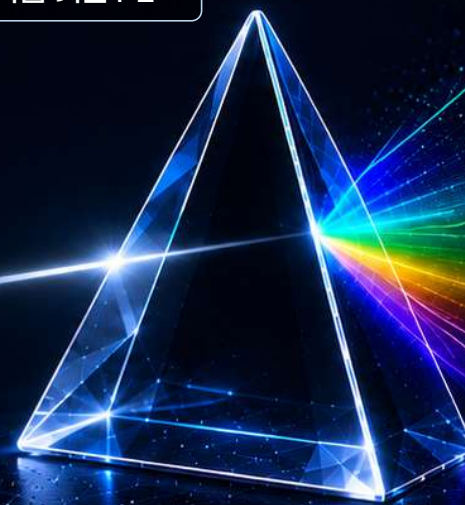
PRISM-PK 멀티 모달·멀티 에이전트 기반 자기 진화형 AI 시스템 ADMET · 전임상 · 임상 PK 통합 예측 플랫폼

Static → Dynamic

자기진화형 Self-Evolving

연합학습 기반 FL

- 주관기관 - 나무아이씨티(주)
- 공동기관 - 일동제약(주)
- 연구책임자 - 이진희 연구소장



ADMET



In vivo PK



Human PK

01. 연구 배경 및 필요성 - 왜 PRISM-PK인가?

기존 Static AI를 넘어, 추론 시점에 스스로 판단하는 Dynamic AI 플랫폼

What | 기존 AI 신약개발의 한계

- FAM 10개 과제 전반에 걸쳐 학습 시점에 모델 구조가 고정됨
- OOD 화합물에 대한 낮은 신뢰도의 백본 예측값이 동등하게 반영되는 문제
- 특허·오믹스 등 추론 시 외부 지식을 활용하는 메커니즘 부재
- 단편적 ADMET 예측과 Human PK 시뮬레이션 간 연계 부재



해결 | PRISM-PK의 해법

- 추론 시점 동적 오케스트레이션 (ReAct 에이전트 기반)
- 3계층 하이브리드 앙상블(L1 멀티백본 → L2 스택킹 → L3 동적 결합)
- 특허DB & 오믹스 실시간 조회 기반 지식 확장
- ADMET 불확실성의 PK 파라미터 전파를 통한 크로스 도메인 연결



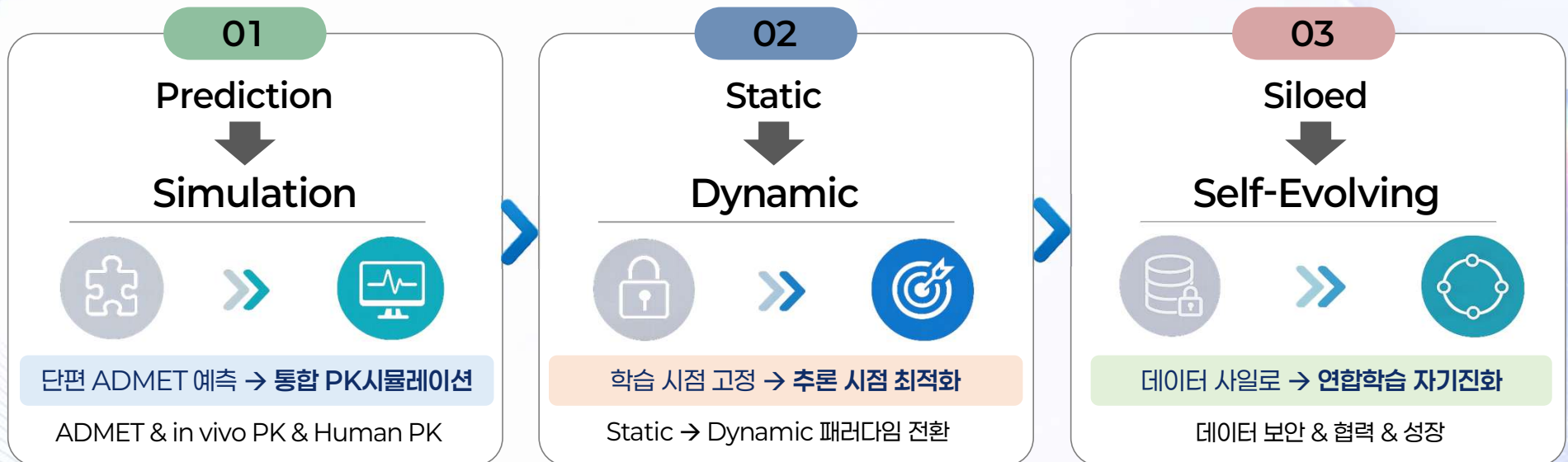
실현 기반 | 실현 가능성 확보

- 기보유 NEXION 플랫폼 (XAI & AL 모듈 TRL 4 선행 달성)
- HELIX MLOps 플랫폼 기반 연합학습 운영 인프라 보유
- 일동제약 ADMET/PK 데이터 & Wet-lab 표준 프로토콜 즉시 투입
- AI 신약개발 특허 15건 이상 보유 (국내외 출원·등록)

본 과제는 기존 10개 FAM 과제 전체와 구별되는 유일한 "추론 시점 Dynamic 시스템"입니다

PRISM-PK VISION

PRISM-PK는 일회성 학습에 그치는 기존의 정적 AI 모델과 달리,
특히 DB · 최신 실험 결과 · 다기관 연합학습 데이터를 기반으로
시스템이 자율적으로 성능을 고도화하는 자기 진화형 동적 시스템



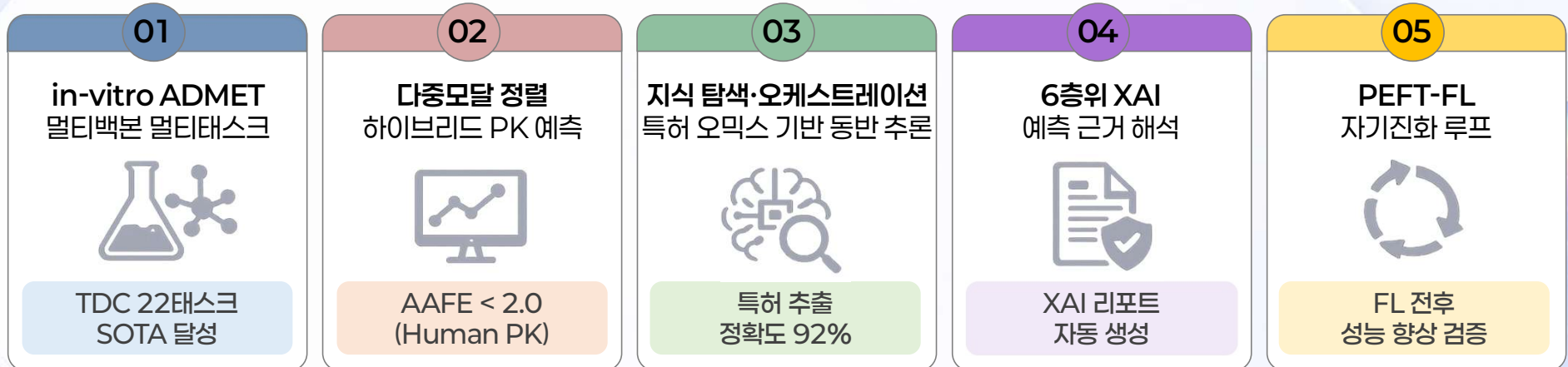
Simcyp · GastroPlus를 넘어, 대한민국 AI 신약개발의 새로운 기준을 세우겠습니다

03. 최종 개발 목표 및 핵심 성과지표 (KPI)

국산 자기진화형 통합 PK 플랫폼 (TRL 8)

최종 목표

PRISM-PK- 멀티모달 · 멀티에이전트 기반 자기진화형
ADMET · 전임상 · 임상 PK 통합 예측 플랫폼



정량 성과 목표

FAM 개발	1건	SW 등록	1건	SW 공인시험인증	1건	특허 출원	3건	SCI(E) 논문	2건
-----------	----	----------	----	--------------	----	----------	----	--------------	----

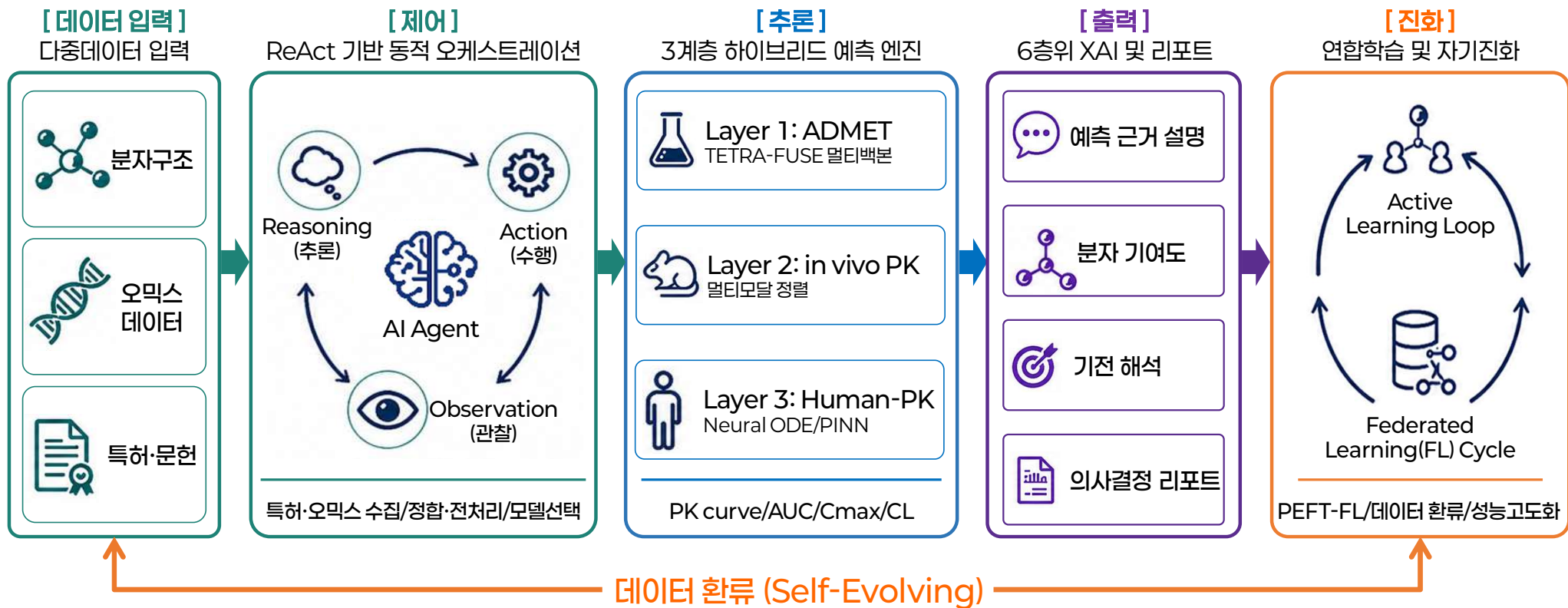
04. PRISM-PK 통합 로드맵 : 5개 세부목표의 3개년 단계적 고도화

기보유 프로토타입(DeiNoN·NEXION·단일 백본 ADMET) 위에서 출발 → 매년 검증된 모듈을 다음 해 입력으로 재사용하는 단계적 발전 구조

세부목표	1차년도 · 기반 구축	2차년도 · 지능화·통합	3차년도 · 자기진화·실증
1 멀티백본 ADMET TETRA-FUSE 엔진	TDC 22태스크 파이프라인 & 4백본 기초 구현	Optuna 최적화 & Task-Specific Stacking 완성	Meta-Stacking · TDC 리더보드 제출 (SOTA)
2 다중모달·하이브리드 PK 통합 예측 모델	오믹스 인코더 기초 · 분자-오믹스 정합 스키마	3-Way Cross-Modal Alignment · Omics Ingestor	Neural ODE·PINN 인체 PK 튜닝
3 지식탐색·오케스트레이션 ReAct 에이전트	ReAct MVP(11종 도구) · Patent Crawler (USPTO 등)	Patent Mining 자율운영 · Auto Validator	sLLM Fine-tuning · 특허 추출 정확도 92%
4 다층적 XAI·리포팅 6층위 설명	분자 XAI 1~3층위 · LLM Narrator 연동	오믹스 XAI 4~5층위 · 보고서 1차	6층위 통합 XAI · 리포트 자동 생성
5 연합학습·데이터 환류 자기진화 루프	PEFT-FL 통신 프로토콜 (Flower·LoRA)	CAA 기여도 · Gradient Matching 데이터 응축	Active Learning 자기진화 루프 · DMR 배포
단계별 성과	검증된 모듈·MVP (기반 완성)	SOTA 달성·자율운영 (지능화 완성)	TRL 8 실증 (자기진화 완성)

05. PRISM-PK 통합 아키텍처 (데이터 흐름·패러다임)

PRedictive Integrated System for Multi-modal PK



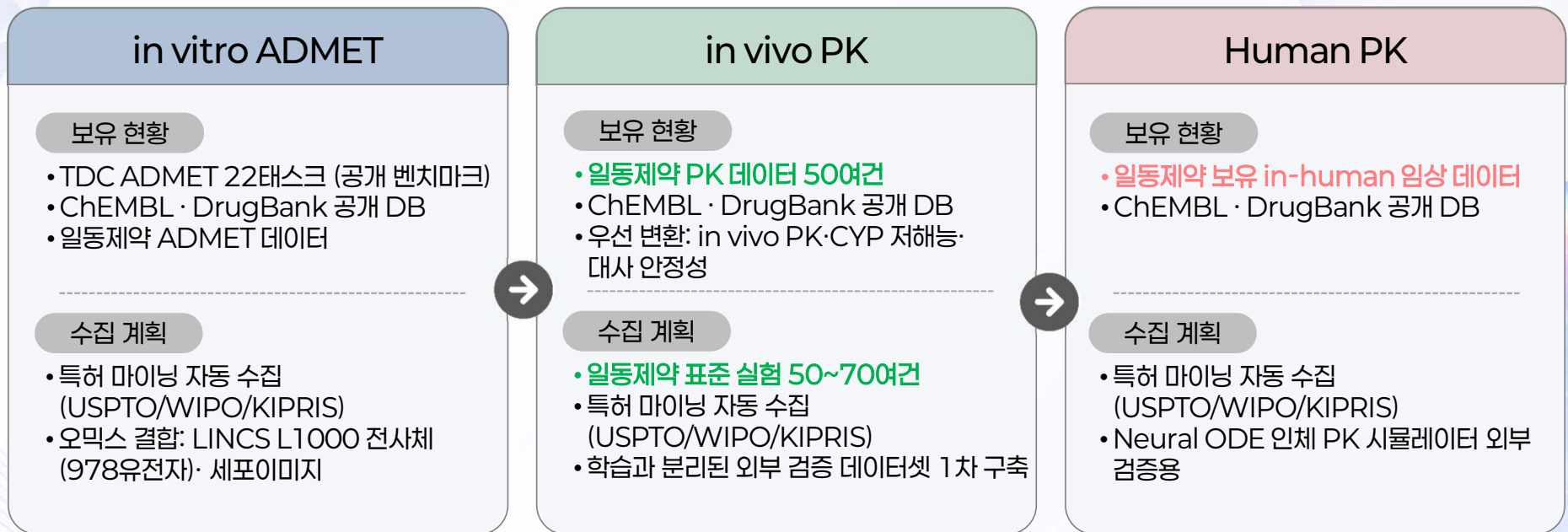
06. 5대 세부목표 = 하나의 자기진화 시스템

무엇을 예측하고 → 어떻게 효율적으로 구축하며 → 결과를 어떻게 설명하고 → 어떻게 스스로 진화하는가



07. ADMET → in vivo PK → Human PK 예측 모델 데이터 현황 및 수집계획

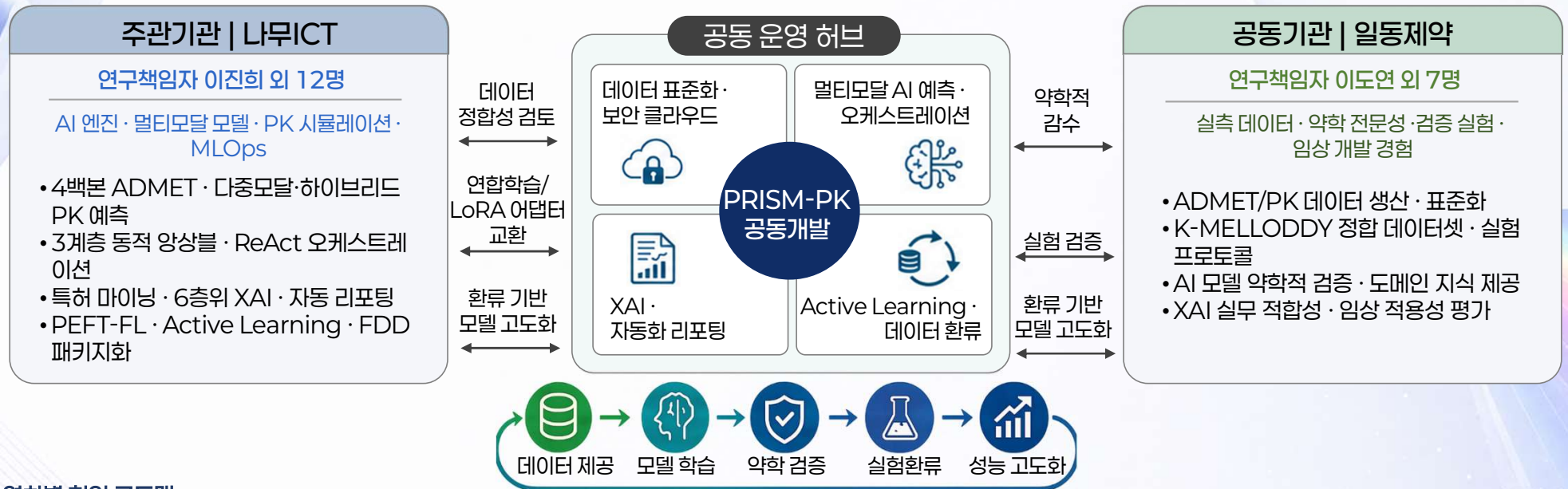
공개 데이터 + 일동제약 실측 + 특허·오믹스를 K-MELLODDY 표준으로 통합 — 학습부터 외부 검증까지



전 데이터 K-MELLODDY 표준 포맷 변환 · 스키마 정합성 합의 · 독립 홀드아웃 데이터셋으로 외부 검증

08. 나무ICT-일동제약 협업 추진체계

나무아이씨티(AI 엔진) & 일동제약(실증·Wet-lab) - 실무데이터와 AI 엔진을 결합



연차별 협업 로드맵

1차년도	2차년도	3차년도
나무ICT 멀티모달 인코더·예측모델 고도화 일동제약 실무 데이터 표준화·클라우드 구축 Synergy 데이터 정합성 검토·학습 기반 마련	나무ICT 연합학습 프레임워크·지능형 에이전트 일동제약 FL 노드 운영·AI 추론 로직 약학 감수 Synergy 제약 특화 개인화·지식 추출 검증	나무ICT 자기진화 루프 완성·다층 XAI 고도화 일동제약 Active Learning 실험·실측 데이터 환류 Synergy 예측 정확도·현업 효용성 실증