

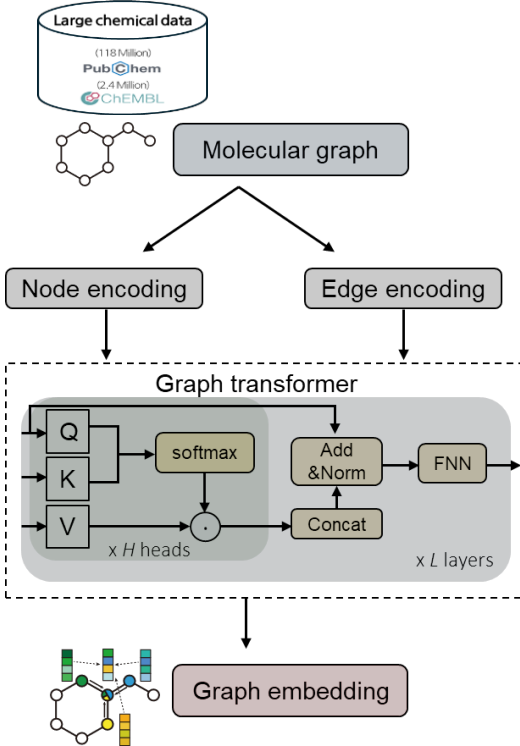
멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 기반 고정밀 ADMET 예측 기술 개발

주관기관: 송실대학교

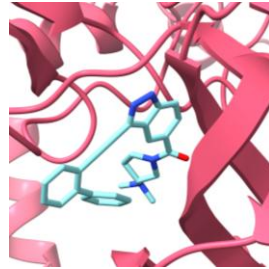
공동기관1: 한국화학연구원
공동기관2: (주)온코크로스

- 주관 책임자**
류재용 (송실대학교)
- 공동 책임자**
장우대 (한국화학연구원)
- 공동 책임자**
김이랑 ((주)온코크로스)

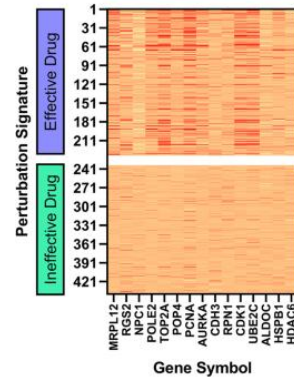
화합물 구조 기반 단일 모달리티 파운데이션 모델의 한계



1. 단백질 상호작용 정보 부재



2. 유전자 발현 정보 부재



멀티 모달리티 기반 고정밀 ADMET 예측 전략

1. 화학 구조 기반 파운데이션 모델

- 화학 구조 기반 파운데이션 모델 구축
- *In vivo* PK 특화 모델 구축

2. 단백질 상호작용 기반 파운데이션 모델

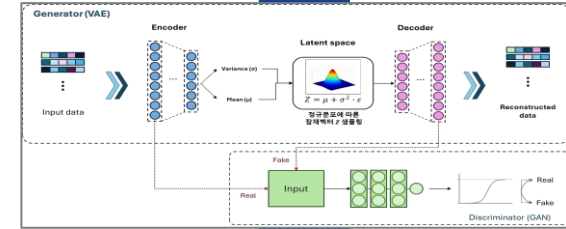
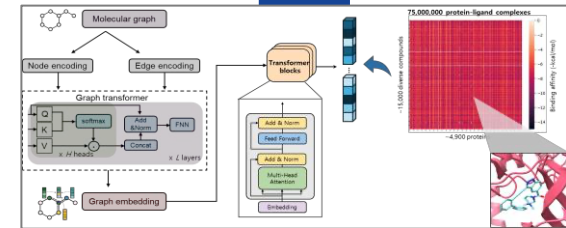
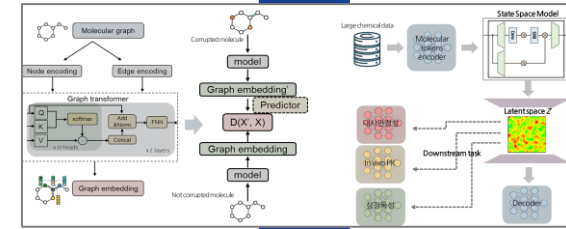
- 단백질-리간드 결합 데이터 분석
- 단백질-리간드 결합 파운데이션 모델 구축

3. 전사체 데이터 기반 파운데이션 모델

- 전사체 파운데이션 모델 구축
- 약물-구조 전사체 기반 파운데이션 모델 구축

4. 선행 연구 결과 기반 모델 고도화

- 선행 ADMET 전문 모델을 활용한 pseudo labelling



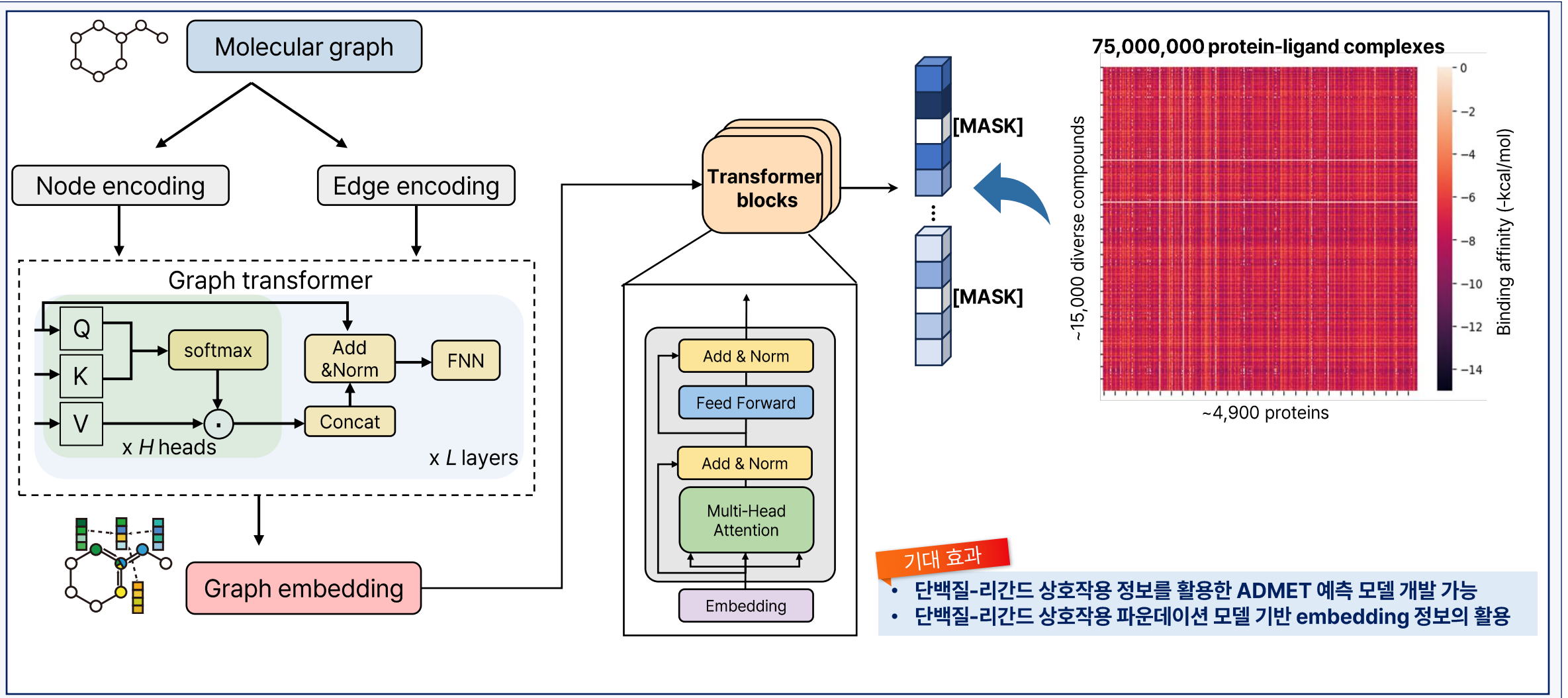
약물 상호작용 예측 (PNAS, 2018) | 심장 독성 예측 (Bioinformatics, 2020) | 대사 안정성 예측 (Bioinformatics, 2022) | 급성 흡입 독성 예측 (BMC Bioinformatics, 2023) | 약물 상호작용 예측 (PNAS, 2023) | 혈장 안정성 (CSB, 2023)

멀티모달 파운데이션 모델 기반 ADMET 예측

· 최종 목표 : 멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 기반 고정밀 ADMET 예측 기술 개발

1차년도	2차년도	3차년도
>	>	
연구개발 목표	연구개발 목표	연구개발 목표
<ul style="list-style-type: none"> 멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 구축을 위한 데이터 수집 및 분석 	<ul style="list-style-type: none"> 멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 구축 	<ul style="list-style-type: none"> 멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 최적화
<p>단백질-리간드 상호작용 데이터 분석</p> <p>In vivo PK 데이터 확보 및 전처리</p> <p>약물 유도 전사체 데이터 확보 및 전처리</p>	<p>단백질 상호작용 데이터 기반 파운데이션 모델 구축</p> <p>화학 구조 기반 파운데이션 모델 구축</p> <p>전사체 데이터 기반 파운데이션 모델 구축</p>	<p>Mixture of experts (MoE)</p> <p>멀티 모달리티 기반 통합 파운데이션 모델 최적화 및 검증</p>
		<p>Soongsil University KRICT Korea Research Institute of Chemical Technology ONCOCROSS</p>

단백질-리간드 복합체 파운데이션 모델 구축



멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 기반 ADMET 예측 모델 구축

선행 연구 결과 기반 모델 고도화

Mixture of experts (MoE)

약물 상호작용 예측
(PNAS, 2018)

심장 독성 예측
(Bioinformatics, 2020)

대사 안정성 예측
(Bioinformatics, 2022)

급성 흡입 독성 예측
(BMC Bioinformatics, 2023)

약물 상호작용 예측
(PNAS, 2023)

혈장 안정성
(CSBJ, 2023)

In-house database

Physicochemical / ADMET

Activity

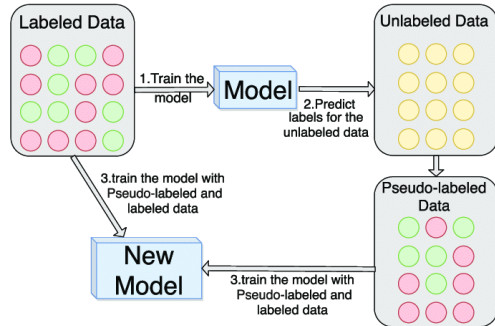
Toxicity

Physicochemical

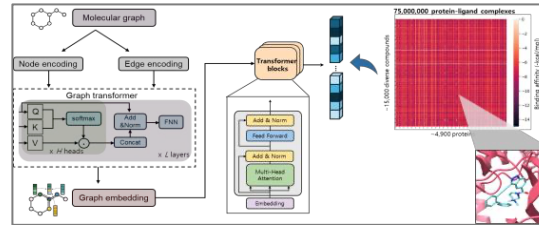
ADME

Labeled molecules

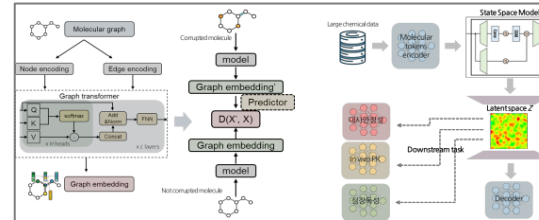
Pseudo-labeling



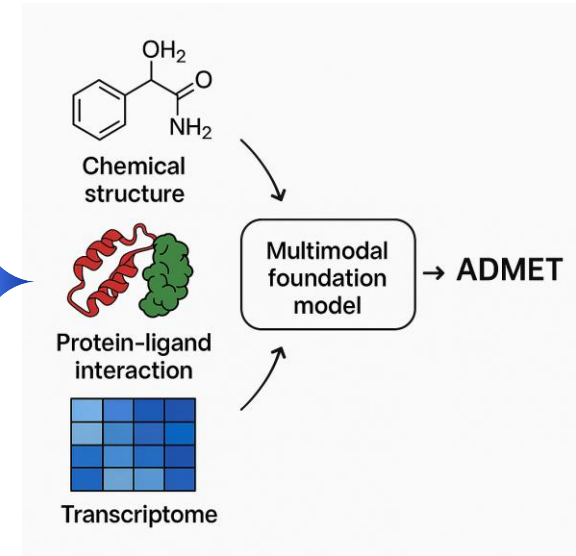
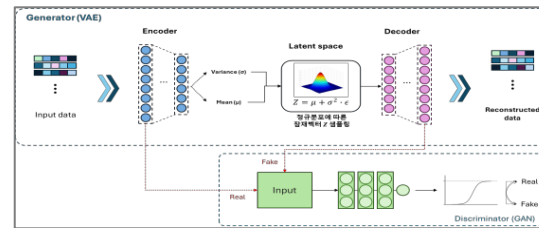
화학 구조 기반 파운데이션 모델



단백질 상호작용 기반 파운데이션 모델



전사체 데이터 기반 파운데이션 모델



인공지능 기반 신규 적응증 발굴 및 신약개발 분야 전문가

김 이 랑

• (주)온코크로스 대표이사



주요 약력

- AI신약개발협의회 회장
- 혈액종양내과 분과 전문의
- KAIST 의과대학원 의학박사
- AI 신약개발협의회 회장
- 경희대학교 규제과학과 외래교수
- 서울아산병원 종양내과 전임의
- 서울아산병원 내과 진료
- 하버드대학 Wellman 광의학센터 연구원
- 유성선병원/혈액종양내과 과장

연구 실적 및 주요 성과

- RAPTOR AI™ 신약개발 플랫폼 기술 개발
- 국내 최초 AI 기반 근감소증 치료제 (OC501/504) - 한국파마에 국내 판권 기술이전
- 제일약품과 JPI-289의 신규 적응증 발굴 계약
- 에스티팜과 감염병 치료제 공동연구개발 계약
- 대웅제약과 신규 적응증 발굴 공동연구개발 계약
- 동화약품과 암 신규 적응증 발굴 공동연구개발 계약
- JW중외제약, 신약후보물질 신규적응증 발굴 공동연구계약 체결
- 보령(구: 보령제약)과 신규 적응증 발굴 계약
- 카인사이언스와 신규 적응증 발굴 계약
- 화합물과 단백질의 상호작용 예측 방법, 장치 및 컴퓨터 프로그램의 특허
42건 등록/PCT포함 112건 출원, 논문 20건 이상 게재
- 2024.12 코스닥 상장



온코크로스는 현재 AI 기업부설연구소 및 바이오 기업부설연구소 (소동물 실험시설)를 함께 운영
 다양한 학문적 배경을 가진 연구인력들의 협력이 상시적으로 이뤄질 수 있는 시스템을 확립

바이오연구소



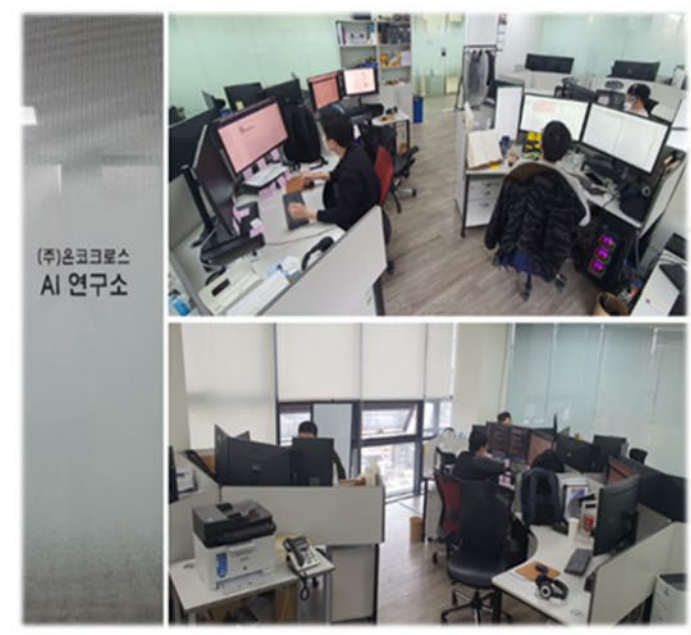
- 총 10명의 연구원
(박사 4명, 석사 6명으로 의과학, 생명과학, 분자생물학, 응용생물학 등 전공)
- 실험공간, 세포배양실, 동물 실험실, 사무실로 구성
- 실험 및 검증, 데이터 생산, 약물의 효능 비교 평가, 검토

본사



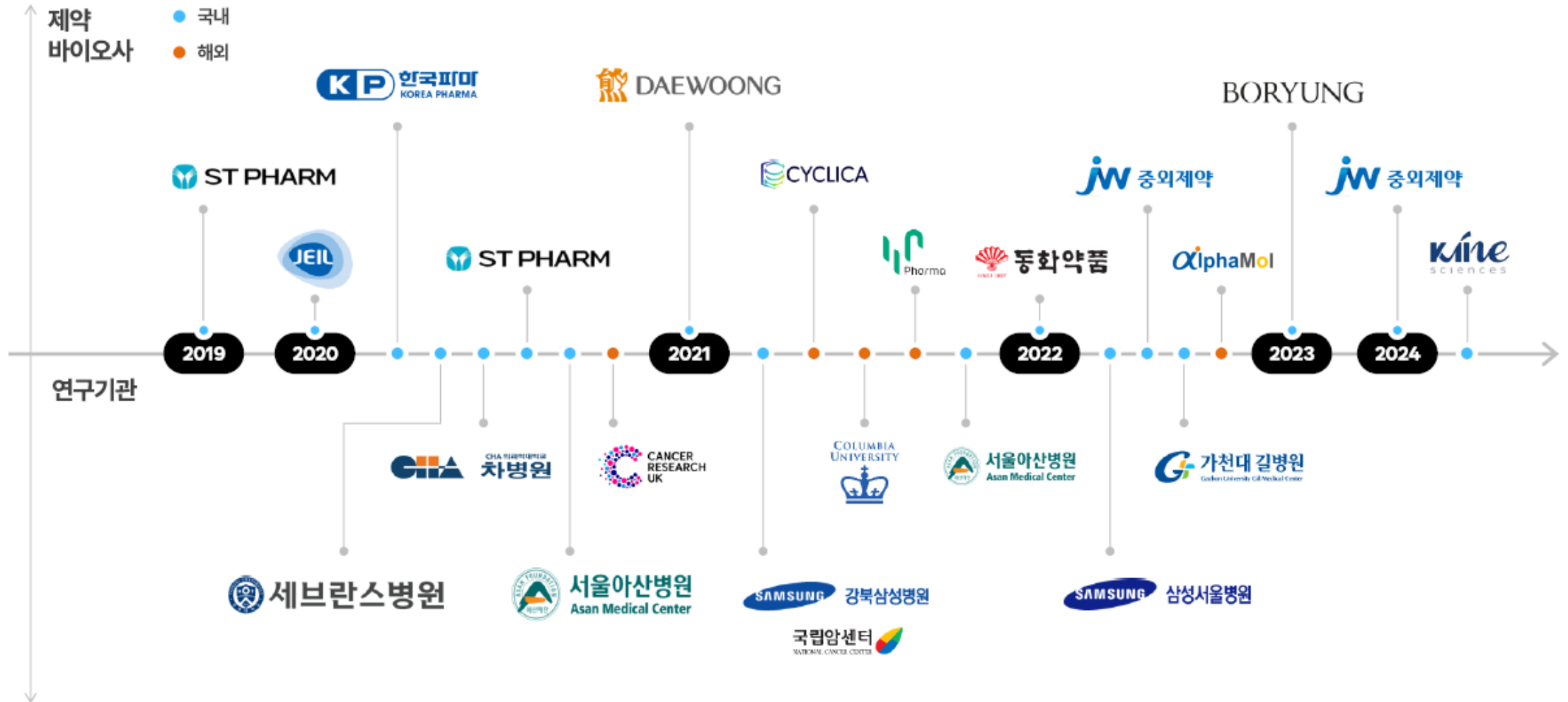
- 각자 대표이사 포함 경영총괄본부, 사업개발본부, AI연구소 및 임상개발팀 포진
- 문정현대지식산업센터 C동의 일부구역을 활용함으로써 업무의 집중도 향상
- 2025년 2월에 사무실을 새롭게 단장함으로써 쾌적한 사무 및 회의 공간 확보

AI 연구소



- 총 7명의 연구원
(박사 4명, 석사 3명으로 AI, 생물정보학, 데이터사이언스 등 전공)
- 자유로운 협업과 높은 효율의 연구가 가능한 환경 조성
- 상호간의 자유로운 토의가 가능한 자리 배치

국내외 다양한 기관들과의 협업을 통해 RAPTOR AI 우수성 입증



멀티모달 화합물-전사체-단백질 통합 파운데이션 모델 기반 고정밀 ADMET 예측 기술 개발

단백질 상호작용 기반 모델



마일스톤

1차년도: 파운데이션 모델용 데이터셋 준비 및 태스크 맞춤형 전처리 도구 개발

- 파운데이션 모델용 데이터셋 확보
- 태스크에 따른 맞춤형 전처리 도구 개발

2차년도: 멀티 모달리티 기반 파운데이션 모델 개발

- 멀티 모달리티 기반 파운데이션 모델 데이터 확보
- ADMET 태스크 모델 개발에 활용 가능한 멀티 모달리티 기반 파운데이션 모델 구축

3차년도: FAM 기본 모델 개발 및 성능 검증

- AI 기반 ADMET 예측 모델(FAM) 개발
- 멀티태스크 전략 기반 성능 고도화
- 연합학습 기반 모델 고도화

정성/정량 목표

성과지표 및 목표치

- ADMET 및 PK 예측 기본 모델 개발 3건 이상
- ADMET 태스크 성능 개선 모델 확보 2건 이상
- SCI(E) 학술지 등록 건수: JCR 10% 이내 포함 3편
- 특허 출원 건수: 3건
- 데이터 전처리 도구를 포함한 SW 등록 2건 및 인증 2건 이상
- 추가 공개 데이터 공급 보고서 1건 이상 제작
- FAM 솔루션 사용자 매뉴얼 1건 이상 제작
- FAM 솔루션 활용 선도 물질 최적화 성공 사례 2건 이상 달성

성능지표 및 측정방법

- 분류 모델: AUROC 기본 모델 대비 5% 이상 증가
- 회귀 모델: RMSE 기본 모델 대비 5% 이상 감소