

연합학습 기반 신약개발 가속화 프로젝트 (K-MELLODDY)

사업개요 K-MELLODDY(Korea Machine Learning Ledger Orchestration for Drug Discovery)는 제약사, 병원, 대학, 정부 연구기관 등이 보유한 민감한 실험 데이터의 프라이버시를 보호하면서 신약개발에 필요한 AI 모델을 공동으로 구축하는 것을 목표로 함

☑ EU에서 추진한 MELLODDY 프로젝트는 Merck, Janssen, Novartis, AstraZeneca, Bayer 등 10개 제약사가 연합학습(Federated Learning, FL) 기반으로 AI 모델을 공동 구축하는 프로젝트

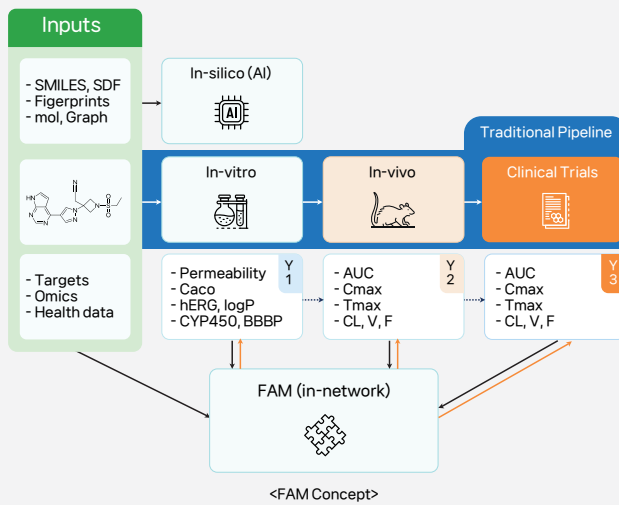
예산 348억원 (보건복지부 : 199억원 / 과학기술정보통신부 : 149억원)

사업기간 2024.4 ~ 2028.12 (5년)

사업목표

- 연합학습 기반 신약개발(FDD, Federated Drug Discovery) 플랫폼 구축
- FDD 플랫폼 기반 ADMET/PK 파라미터 예측 모델(FAM, Federated ADMET Model) 개발

- ☑ 연합학습: 데이터를 기관 외부로 이동하지 않고 AI 모델 파라미터만 공유하여 참여 기관들이 성능이 우수한 AI 모델을 공동으로 만드는 기술
- ☑ FAM: 연합학습을 통해 in-vitro, in-vivo 및 임상시험(in-human) 데이터를 연계하여 endpoint로 ADMET 및 임상시험 PK 파라미터까지 예측하는 AI 모델로 데이터가 추가되면서 성능이 연속적으로 개선됨



세부과제

1세부 : 플랫폼 구축 (1개 과제)

연합학습 기반 신약개발 플랫폼 FDD를 구축하고 FAM 솔루션을 운영



2세부 : 데이터 공급-활용 (20개 과제)

제약사, 병원, 연구소 등 각 기관이 보유한 실험 데이터 공급 및 FAM 활용



3세부 : AI 모델 개발 (15개 과제)

FAM 솔루션 소프트웨어 개발 (1차년부터 3차년도까지 매년 5개 선정)



기대효과

- 데이터 기반 오픈 이노베이션 생태계 구축
 - 경쟁 관계의 기관들도 각자 보유한 데이터를 기반으로 협력할 수 있는 오픈 이노베이션 생태계 구축
 - AI 모델 개발자는 기존 데이터 제공자와의 1:1 매칭 방식과 달리 플랫폼 기반의 1:N 매칭이 가능해지므로 빠른 모델 검증 및 배포 가능
- AI 기반 신약개발 선도국 진입
 - ADMET/PK의 전 주기적인 통합 예측 모델 확보로 신약개발 R&D 비용과 시간 절감
 - FAM을 기반으로 신약개발 파이프라인의 다양한 AI 모델 확장 개발 가능
 - FDD 플랫폼 및 FAM을 통한 글로벌 협력 확대

