

구조 다양성을 고려한 연합학습용 ADMET 데이터 확보 및 검증

AI

이 연구개발의 차별성 참여연구진의 우수성



이지영 부장
분자설계 및 AI 신약개발 전문가

- 분자설계 및 인공지능 활용 신약개발 전문가
- In silico 기반 신약개발 컨설팅 전문가
- 과거주 주관 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 총괄책임자 수행
- 현 케이메디허브 신약개발지원센터 기반기술부 부장



주요경력

기관명	기간	직책
케이메디허브	2017.04 - 현재	기반기술부 부장
(주)처마	2014.01 - 2017.04	대표
(사)분자설계연구소	2011.09 - 2014.01	신약개발실장

최근5년간 대표성과

성과내역	내용	성과발생시기	비고
연구비 수혜	인공지능 신약개발 플랫폼 구축 사업 총괄책임자	2019. ~ 2021	총 연구비 38억
PCT 출원	항암제 및 항바이러스제 개발 관련 특허	20221 ~ 2023	PCT/KR2022/006850 PCT/KR2022/020802
기술이전	항노화 및 이도치 치료용 약물 기술이전	2021 ~ 2023	10-1520037 10-1573420 10-1648739

분자설계 및 AI 신약개발 논문(40편) 및 국내·외 특허 등록(20건)



차은주 선임연구원
약물동태 분석 전문가

- 분석화학 전공
- 약물동태 및 대사체 분석 전문가
- 약물 in vitro ADME, in vivo PK 산학연 지원 경험 다수
- 현 케이메디허브 신약개발지원센터 의약품가부 DMPK팀 선임연구원



주요경력

기관명	기간	직책
케이메디허브	2018.02 - 현재	선임연구원
KIST 도평 컨트롤 센터	2016.03 - 2017.12	박사후 연구원
고려대학교 화학과	2010.09 - 2016.02	박사과정

최근5년간 대표성과

성과내역	내용	성과발생시기	비고
연구비 수혜	콜레스테롤 대사체 분석 및 바이오마커 발굴	2020 ~ 2023	기초과제지원연구 개인기초
논문	주요 신약개발 저널에 단백질 구조분석 주저자 논문 기고 (8편)	2021 ~ 2023	J. Of Med. Chem. Eur. J. of Med. Chem.
기술이전	저분자량항체 치료제 개발 기술이전 1건	2021 ~ 2023	

약물동태 및 대사체 분석 연구지원 다수 (연 100건 이상)



한민우 팀장
분자설계 및 AI 신약개발 전문가

- 분자동역학 기반 단백질 구조분석 전문가
- GPCR 리간드 분류 모델 인공지능 모델 개발
- PROTAC 약물개발 및 Linker 설계 전문가
- 현 케이메디허브 신약개발지원센터 기반기술부 AI분자설계팀 팀장



주요경력

기관명	기간	직책
케이메디허브	2018.10 - 현재	선임연구원
(주)대용제약	2017.09 ~ 2018.09	연구원
University of Southern Denmark	2015.05 - 2017.04	박사후연구원

최근5년간 대표성과

성과내역	내용	성과발생시기	비고
연구비 수혜	PROTAC 개발 관련 민간수탁 과제 외 5건	2018-2023	총 연구비 10억
AI 논문	GPCR 리간드 분류 예측 인공지능 모델 개발	2022	Comput. Struct. Biotechnol. J. 20 6360-6374 (2022)
MD 논문	단백질-이온 결합 에너지 및 분자동역학 궤도 분석 논문 다수	2015 ~ 2020	Angew. Chem. Int. Ed. 54, 1-6 (2015) 외 14건

인공지능 및 분자동역학 관련 논문(17편) 및 수탁 과제 책임(5건)



권오빈 책임연구원
약물독성 분석 전문가

- 신경생리학 전공
- 신경독성, 심독성 분석 전문가
- Ames, hERG 등 다양한 실험 기반 산학연병 연구 지원 다수
- 현 케이메디허브 신약개발지원센터 의약품가부 약리안전성팀 책임연구원



주요경력

기관명	기간	직책
케이메디허브	2014.11 - 현재	책임연구원
(주)비보존	2007.09 - 2008.10	책임연구원
NIH	2003.09 - 2007.08	방문연구원

최근5년간 대표성과

성과내역	내용	성과발생시기	비고
연구비 수혜	백신 및 면역증강제 개발 지원사업	2022-2024	총 연구비 18억
논문	Cardiomyocyte 이용한 심독성 평가	2024	Int. J. Mol. Sci. 2024 (제1)
	Dopaminergic Cell protection	2023	Pharmacol. Res. & Persp. 2023 (교신)

신경독성, 심독성 기술서비스 연 100건 이상 및 수탁 과제 책임(3건)

기관 고유데이터 활용/생산 및 인공지능 모델 개발/검증 가능

빅데이터 통합 플랫폼 활용



- ✓ 케이메디허브 신약개발지원센터는 신약개발 전주기 지원 기관
- ✓ 분자설계, 합성, 약효, 안전성 데이터 확보, 생산 가능
- ✓ '13년도 부터 전자연구노트 활용 → 연구데이터 체계적 관리
- ✓ '18년 신약개발 빅데이터 플랫폼 MiChEM™ 구축 → 공개데이터, 기관데이터 통합, 표준화 를 통해 데이터 활용

신규 in vitro 데이터 생산



- ✓ 신약개발지원센터 안전성평가부는 안전성, 약동학, 비임상 평가 수행 → in vitro ADMET 데이터 생산
- ✓ 유효성평가부는 BaF3 세포주 및 GPCR panel assay 시스템 보유
- ✓ 균질한 ADMET 데이터 확보를 위한 SOP 구축 가능
- ✓ 공동연구수행, 기술서비스 지원 등을 통해 해마다 500건 이상의 신규 데이터 생산, 확보 및 구축 플랫폼 실험 검증 가능

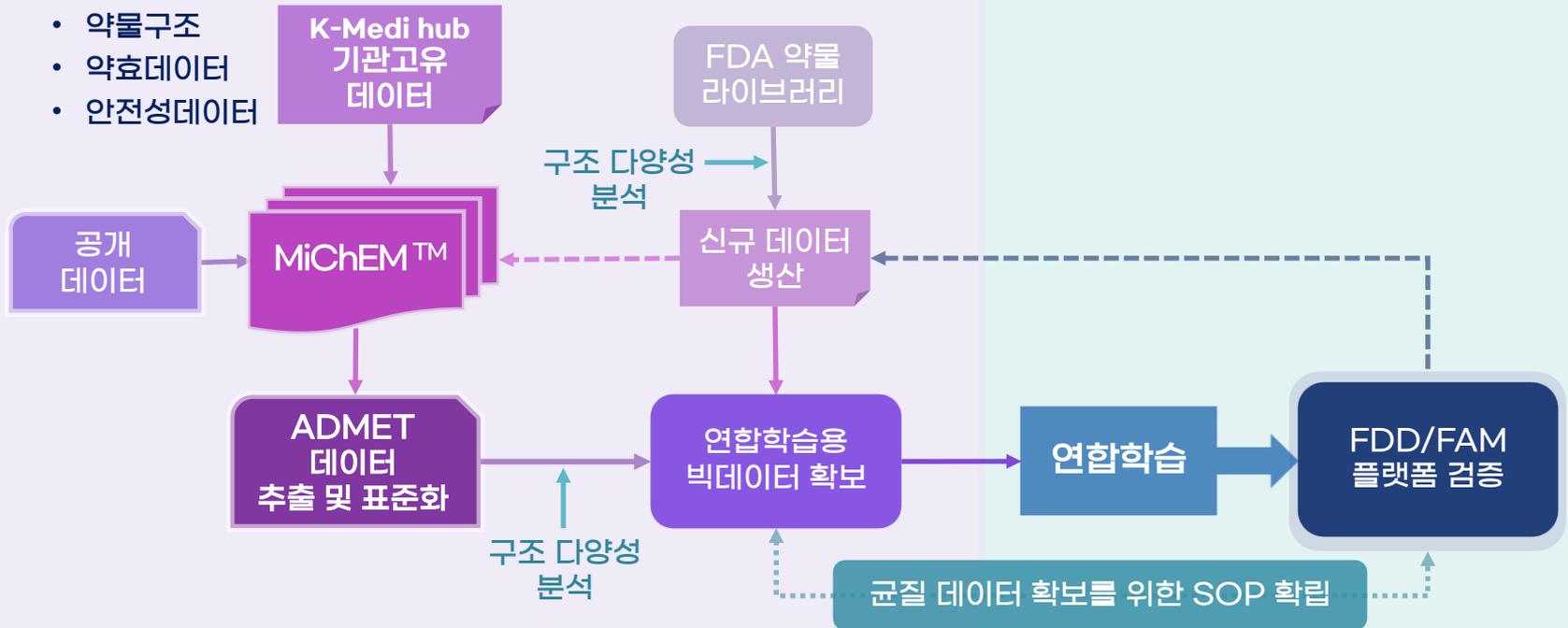
인공지능 모델 개발/검증



- ✓ '18년 인공지능 신약개발 플랫폼 MiLearn™ 구축
- ✓ '19년도 인공지능 신약개발 플랫폼 구축 사업 수행
- ✓ 빅데이터 라이브러리 구축, 단백질-약물결합, 신장독성 예측 모델 개발 경험
- ✓ 본 연구에서는 연합학습을 위한 데이터 표준화, 데이터 검증, FDD/FAM 플랫폼 in silico 검증

약물의 구조적 다양성 확보된 양질의 데이터 생산/제공 및 구축 플랫폼 검증

- 약물구조
- 약효데이터
- 안전성데이터



데이터 확보

플랫폼 검증

공개, 기관 데이터 통합 ADMET 데이터 현황

Property			Number of Data	
			K-Medi hub	Public Data*
GPCR Assay	GPCR (Orexin Receptor)	Ca ⁺⁺ Agonism Assay	1,000	2,300
Absorption(A)	Permeability	GIT-PAMPA	360	5,473
		BBB-PAMPA	370	2,000
Metabolism(M)	Metabolic Stability	Human	322	455
		Mouse	306	3,000
		Rat	316	24,000
Cytotoxicity(T)	CYP inhibition	%of control activity	5,277	13,000
	HK-2 Cell inhibition	%inhibition	389	~700
	hERG Inhibition	%inhibition (10uM)	271	12,800
		IC ₅₀ (uM)	177	10,500

* from PubChem, ChEMBL, TOXNET, DrugBank, Swiss ADMET etc.

케이메디허브 보유 in vitro ADMET 서비스 목록

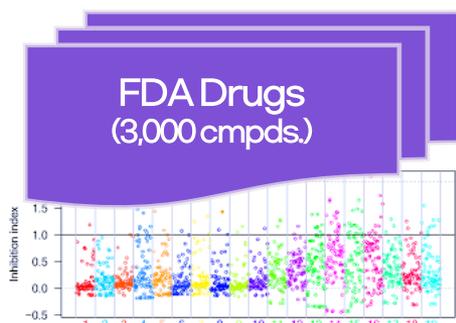
항목	대분류	중분류	소분류(예시) 중 케이메디허브 실험 서비스 가능 목록
ADME	약물 흡수	물성	<ul style="list-style-type: none"> ● 용해도 예측 (Water) ● 이온화 상수(pKa) 예측 ● 분배계수 예측 (logP)
		ADME약물 흡수투과도	<ul style="list-style-type: none"> ● 소장 상피세포 투과도 예측 (Caco-2, MDCK) ● 인공지질막 투과도 예측(PAMPA) ● 뇌장벽투과도 예측 (BBB-PAMPA)
	ADME약물 분포	분포 용적	● Plasma Protein Binding (Mouse, human, rat)
		ADME약물 분포수송체 약물 분포 영향력	● BBB Transporter(P-gp 등) 결합친화도 예측
	ADME약물 대사 및 배설	버퍼 안정성	● Plasma Stability (mouse, human, rat)
		ADME약물 대사 및 배설대사 안정성	<ul style="list-style-type: none"> ● Microsomal (mouse, human, rat) ● Hepatocyte Stability (mouse, human, rat)
독성	Toxicity	심장 독성	● hERG 채널 저해 예측
		독성Toxicity간 독성	● CYP450 저해 예측(CYP1A2, CYP2C9, CYP2C19, CYP2D6, CYP3A4.. 등)
		독성Toxicity발암성	<ul style="list-style-type: none"> ● Ames Test 결과 예측 ● 발암성 예측
		독성Toxicity	
		독성Toxicity세포 독성	● 정상세포 독성 (MTT)
약효	약효	인산화효소 (단순 약효)	● 약효 측정 (BaF3 Cell line)
		약효GPCR	● GPCR 선택성 예측 (60종 panel assay 가능)
약동학	약동학	약동학 파라미터	<ul style="list-style-type: none"> ● AUC : Area under plasma concentration-time curve ● Cmax : Maximum plasma concentration ● Tmax : Time to maximum plasma concentration ● T1/2 : Elimination half-life ● CL : Clearance ● V : Volume of distribution ● F : Bioavailability

구조 다양성 확보된 FDA 약물 기반 데이터 생산 및 데이터 검증

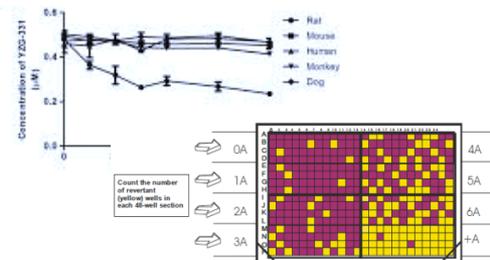
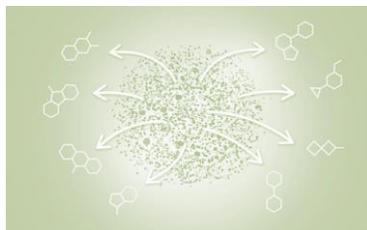
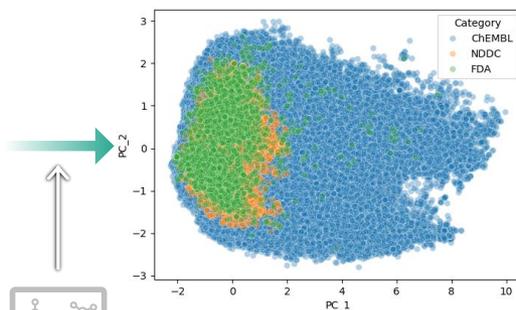
FDA 약물 라이브러리

구조다양성 분석

데이터 생산 및 검증



- ✓ 현재 약 3,000여 종의 FDA 약물 Stock 확보
- ✓ PCA 분석 등을 이용하여 구조 다양성 확보 예정
- ✓ 구조 다양성 분석 결과 필요할 경우 약물 추가 확보 예정



- ✓ CYP 저해능 예측 모델
- ✓ hERG 예측 모델



- ✓ Tanimoto 계수를 사용하여 화합물 간 유사도를 측정 하고 데이터셋 내 화합물 간 평균 유사도를 계산하여 다양성 평가 후 유사 구조 화합물 분류
- ✓ 생산된 데이터 기반 데이터 검증용 모델 2종 자체 개발
→ 모델 성능 제고를 위한 데이터 검증 및 균질 데이터 확보 SOP 구축

FDD/FAM 검증 (in silico 검증, 실험 검증)

in silico 검증

검증용 데이터셋 확보

데이터별 전처리

- 운영위원회가이드 준수
- 필요 데이터 추가 확보

모델 예측률 검증

각 FAM 별 예측률 검증 및 데이터 고도화

실험 검증

Blind 화합물 Stock 확보 (~200종)

FDD 활용 예측 수행

- 케이메디허브에서 실험 가능한 모델 중심 예측 수행
- 예측결과 기반 각 모델별 10~20종 화합물 선정
- 실제 실험검증을 통한 FDD/FAM 활용도 검증

FDD/FAM 활용 및 검증 보고서 작성

추진체계

● 약물의 구조적 다양성 확보한 양질의 데이터 생산/제공 및 구축 플랫폼 검증

기관 고유데이터 표준화

- 기관 고유 데이터 통합/정리
- ADMET 데이터 추출
- 표준화 (운영위원회 논의)
- 연합학습 훈련 준비

분자설계팀



약동학평가팀
안전성평가팀



신규 데이터 생산

- ADMET 관련 신규 데이터 생성
- 매년 100종의 FDA 약물에 대해 4종의 실험 데이터 생성
- 모델 검증 기반 추가 데이터 생성
- 모델 검증을 위한 Blind data 생성

FDD / FAM 검증

- FDD/FAM 예측률 in silico 검증
- FDD/FAM 활용 결과 실험 검증
- 검증 결과보고서 제출



분자설계팀
약동학평가팀
안전성평가팀

데이터 및 모델 검증

- 데이터 생산을 위한 FDA 약물 분석
- 구조적 다양성 고려 약물 선정
- 생산 데이터 검증을 위한 모델 구축
- 검증 결과 기반 데이터 고도화



분자설계팀
약동학평가팀
안전성평가팀



05 참여기관의 우수성

“신약개발 전주기 지원 기관, **KMEDHub**”

대구경북첨단의료산업진흥재단

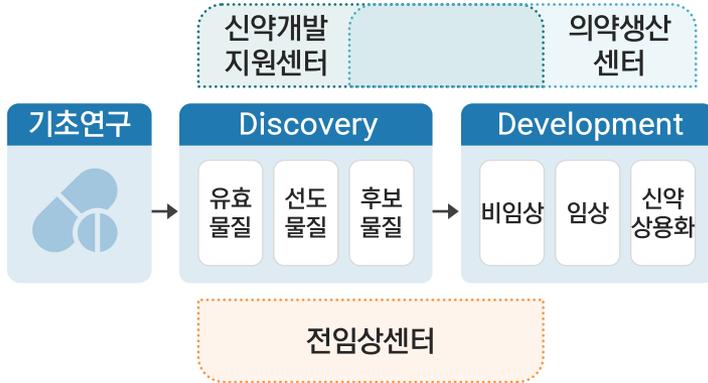
대구경북첨단의료산업진흥재단

- ✓ 국내 유일의 신약 개발 관계부처합동 지원기관
- ✓ 국내 유일의 정부주도 설립 의료분야 R&D 지원기관
- ✓ '23년 디지털헬스케어사업단 발족
- ✓ '25년 케이메디허브 데이터 센터 개소 준비
- ✓ 전임상, 의약생산 센터 협력을 통한 신약개발 가속화

신약개발지원센터

- ✓ 국내 신약개발 후보물질 최적화 연구 지원
- ✓ 분자설계부터 독성평가까지 후보물질 발굴 인프라 구축
- ✓ 인프라 활용 → 산·학·연·병의 후보물질 발굴 지원
- ✓ 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 총괄책임 수행
- ✓ 인공지능 신약개발 포털 KAIDD 운영 (www.kaidd.re.kr)

합성 신약 개발



화합물 신약 최적화

