



hu

연합학습 기반 데이터활  
용  
신약개발 협력 체계 구축

2024. 08. 20

(주) 휴온스

## 연구 책임자 및 연구 개발기관의 역량



### 주관연구기관

(주)휴온스

- 김현준 수석연구원
- (주) 휴온스 비임상연구팀 팀장
- (주) 휴온스 약효평가팀 책임
- 삼성생명과학연구소 연구원(前)

✓ PROTAC 간질환 치료제, 심부전 치료제, 안구건조증 치료제 외

다수 신약과제 비임상 연구 총괄

✓ 2023년 제 30호 IR52 장영실상 수상

✓ 인공지능 기반 신약 개발 플랫폼 고도화 및 활용 사업

< 국가연구개발 실적 및 현황 >

중앙행정기관 (전문기관)	세부사업	연구개발기간	역할
과학기술정보통신부 (한국연구재단)	인공지능 활용 혁신 신약발굴사업	22. 6. 1~ 25. 12. 31	참여연구자
산업통상자원부 (한국산업기술기획평가원)	3D생체조직칩기반 신약개발플랫폼구축 기술개발사업	20. 4. 1~ 23. 12. 31	연구책임자

### < 지식재산권 출원 및 등록 >

구분	지식재산권명	출원·등록일	출원·등록 번호	비고
특허	Miki 결합 또는 분해용 화합물 및 이들의 의약 용도	2021-09-28	10-2021-0128363	출원
특허	플루오로메틀론 아세테이트 및 올로파타딘 염산염을 포함하는 투명한 안과용 조성물	2020-12-23	10-2020-0181533	출원
특허	효소 처리된 비단풀 추출물의 비만 예방 또는 치료용 조성물	2020-10-30	10-2020-0143063	출원
특허	사군자 초임계 추출물을 함유하는 전립선 비대증 예방 또는 치료용 조성물	2018-12-06	10-2293358	등록

## ▶ 전문/일반의약품 · 웰빙의약품 등 다양한 사업 분야



## ▶ 토털 헬스케어 포트폴리오 통한 지속 성장

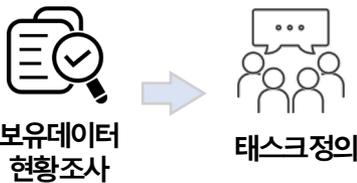


## ■ 연구개발과제의 최종목표

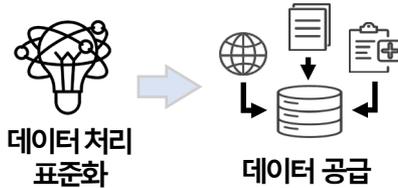
데이터 활용 신약개발 협력 체계 구축을 위한 데이터 수집·전처리·공급 지원 및 FAM 솔루션의 성능 검증이며, ① 연합학습 플랫폼 개발을 위한 데이터를 공급하고, ② 연합 학습에 참여하여 학습 모델의 활용성을 검증 하고자 함.

### 1단계 ('24-'26)

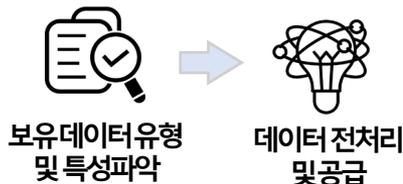
#### ① 보유 데이터 현황 조사



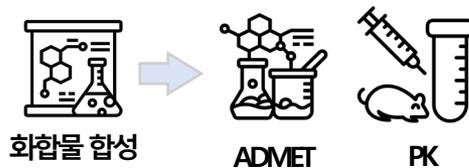
#### ② 데이터 전처리 작업 및 공급



#### ③ 데이터 공급 체계 구축

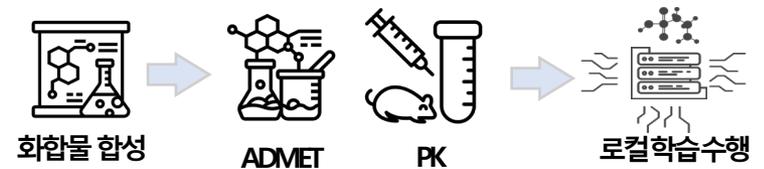


#### 연구개발 과정 중 신규 데이터 생성

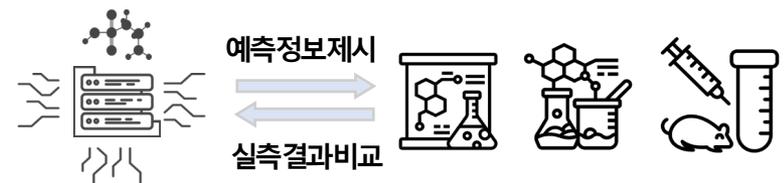


### 2단계 ('27-'28)

#### ④ 데이터 공급 지속성 확보



#### ⑤ FDD 플랫폼 및 FAM 솔루션 활용 검증



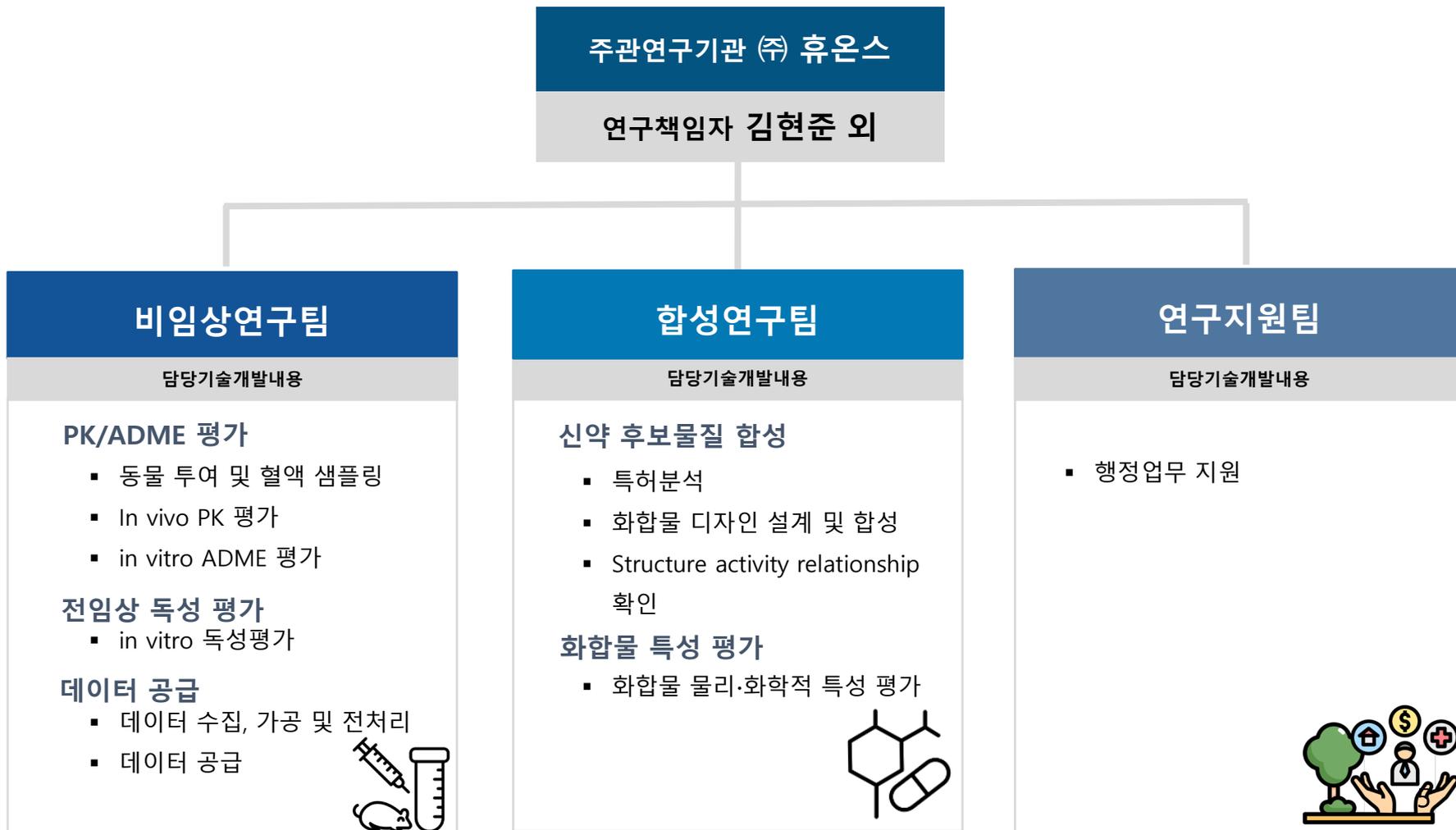
## ■ 연차별 목표 및 내용

		1단계 ('24-'26) 플랫폼 구축을 위한 데이터 공급 및 타 세부 과제와의 연계 협력			2단계 ('27-'28) 연합학습 참여 및 학습 모델 검증	
		1차년도	2차년도	3차년도	1차년도	2차년도
단계별 목표		데이터 보유 현황 조사 데이터 전처리 및 공급	기본 데이터 구축	추가 데이터 공급	데이터 공급 지속성 확보 및 FAM 고도화를 위한 데이터 설계	FDD 플랫폼 및 FAM 활용 검증
연구내용		<ul style="list-style-type: none"> <li>보유데이터 파악</li> <li>타세부 과제와의 협력 및 태스크 정의</li> <li>비식별 데이터 제공</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>보유 데이터 유형 및 특성 파악</li> <li>연합학습 데이터 공급</li> <li>신규 데이터 확보</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>연합학습 추가 데이터 공급</li> <li>신규 데이터 확보</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>데이터 공급 지속성 확보</li> <li>FAM 로컬 학습</li> <li>신규 데이터 확보</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>신규 데이터 확보</li> <li>FAM 솔루션 성능 검증</li> <li>FDD 플랫폼 및 FAM 솔루션 활용 방안 마련</li> </ul>

↓

**데이터 활용 협력 체계 구축 및 FAM 성능 검증**

## ■ 연구개발과제 추진 체계



(주)휴온스는 신약 개발 연구 경험이 있으며, **전문 연구원, 시험 시설 및 LC-MS/MS 등의 분석 기기**를 보유하고 있음. 현재에도 **다양한 질환의 신약 개발을 위해 활발히 연구 중.**

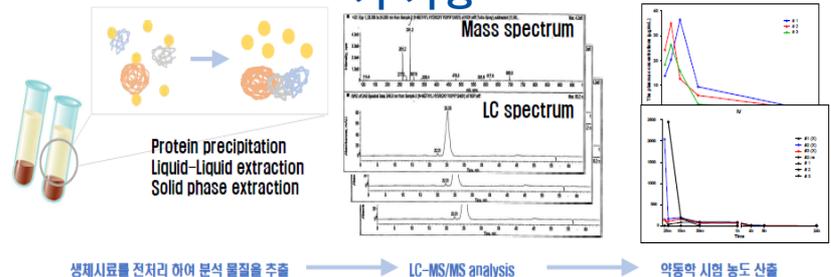
## [휴온스 R&D 파이프라인]

구분	과제코드	적응증	개발단계						
			Discovery	Preclinical	Phase I	Phase II	Phase III	Registration	
NCE	합성신약	HUC1-394	안구건조증	[Progress bar]					
		HUC1-505	비알콜성 지방간염	[Progress bar]					
		HUC1-557	위식도 역류질환	[Progress bar]					
		HUC1-589	국소지방분해	[Progress bar]					
		HUC1-622	비만	[Progress bar]					
		HUC1-626	희귀/난치 질환	[Progress bar]					
IMD	개량신약	HUC2-007	안구건조증	[Progress bar]					
		HUC2-364	위식도역류질환	[Progress bar]					
		HUC2-517	안구건조증	[Progress bar]					
		HUC3-487	녹내장 치료	[Progress bar]					

### ▶ 허가 및 연구 중인 품목

- 2020년~2023년간 허가받은 의약품은 총 39품목  
**전문약 37품목, 일반약 단 2품목**
- 현재 **2제/3제 복합제, 'PPI + 제산제' 유핵정 복합제** 및 다양한 **합성신약**에 대한 연구를 활발히 진행 중

### ADMET 평가 전문 인력 및 장비 보유로 자체 평가 가능



## ■ 데이터 지속 확보 및 공급 방안

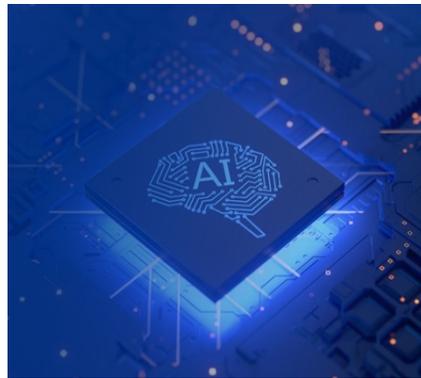
항목	연구개발 역량
합성	합성 전문인력 확보
약효/독성	약효/독성 평가 전문인력 확보, 자체 in vitro/in vivo 평가 + 외부위탁 협업
PK	DMPK 전문가 보유
시설 및 장비	자체 동물 실험 시설 및 LC-MS/MS 보유로 <i>in vitro/in vivo</i> ADME 자체 평가 가능.
기타	타 부서 CMC 전문가 다수 보유 분석법 개발, Method validation 및 기술이전준비 경험 다수 보유하여 신약개발 역량 보유



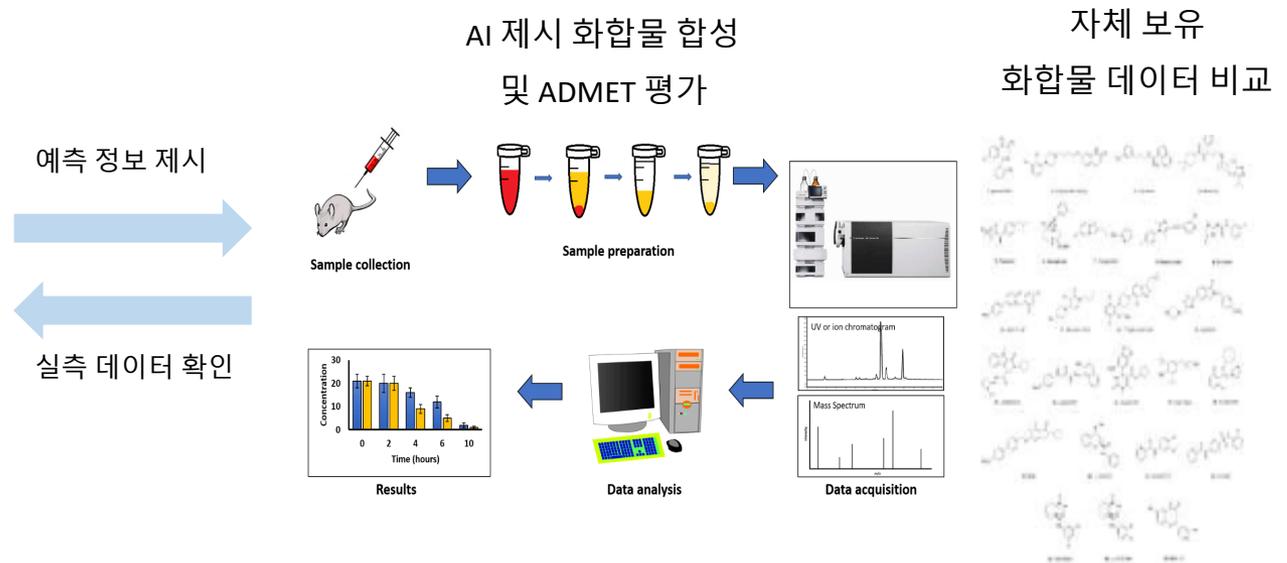
고품질 ADMET  
데이터 확보 및  
제공 가능

## ■ FAM 솔루션 성능 시험을 통한 검증

- **AI 예측 결과의 기존 보유 데이터 기반 검증**
  - 대조화합물 또는 자체 보유 화합물에 대한 **FAM 예측 결과와 상용 SW 결과 비교**
  - FAM 예측 결과를 자체 또는 CRO를 통해 확보한 **실측 결과와 비교**
- **AI 예측 결과와 AI 제시 화합물 합성 및 평가를 수행하여 획득된 신규 데이터와의 비교를 통한 검증연구**
  - FAM 솔루션에서 제안한 예측 결과와 **신규 합성 및 평가를 통해 확보한 신규 데이터 간의 비교**를 통한 성능 검증



FAM 솔루션



## ■ 내부 시험 리스트 (ADMET)

항목	대분류	중분류	소분류	산출 파라미터
합성	저분자 합성	QSAR	화합물 디자인 설계 및 모구조 획득	-
		합성	저분자 합성	-
		물성평가	Solubility, 안정성 평가	-
ADME	약물 흡수	투과도	소장 상피세포 투과도 예측 (Caco-2, PAMPA)	$P_{app}$ , Efflux Ratio, % recovery
	약물대사	안정성	혈장(mouse, rat, dog, monkey, rabbit, human), 인공장액	remaining%, $T_{1/2}$
		대사 안정성	Liver microsomes, UGT	$Cl_{int}$ (mL/min/kg), $T_{1/2}$ , remaining%
	약물분포	in vitro	Rapid Equilibrium Dialysis (혈장, 조직 등)	$F_u$ , % recovery
		in vivo	조직분포	Tissue to plasma ratio, $T_{1/2}$
	DDI	CYP inhibition	liver microsome (CYP 1A2, 2D6, 2B6, 2C8, 2C9, 2C19, 3A4)	$IC_{50}$ , $K_i$ , inhibition %
		CYP induction	hepatocyte (CYP 1A2, 2B6, 3A4)	Fold induction (mRNA expression)
	In vivo ADME	설치류 PK	mouse, rat (PO, IV, SC)	NCA parameters
Tox	유전독성	In silico	Derek, Sarah	-
	일반독성	단회, 반복독성	설치류 DRF	-

Thank you

Huons Co., Ltd