

부담 없이 시작하는 AI 신약개발

AI 활용 신약개발 데이터 가공 서비스

(주) HITS

서울특별시 강남구 테헤란로 124 삼원타워 902호

Tel : 02-6953-0317

E-mail : ljk@hits.ai

Web : <https://hits.ai/>



INDEX.

01

신약개발 데이터 가공 서비스

- 약물-단백질 3차원 결합 구조
 - 약물-단백질 결합 에너지
 - 약물-단백질 시뮬레이션
-

02

서비스 비용 및 절차

- 데이터 바우처 지원사업 소개
 - 서비스 비용 안내
 - 서비스 진행 절차
-

03

HITS 소개

- 기업 개요
 - 주요 연구진
 - 핵심 역량
-

1. 신약개발 데이터 가공 서비스

- 약물-단백질 3차원 결합 구조
- 약물-단백질 결합 에너지
- 약물-단백질 시뮬레이션

신약개발 데이터 가공 서비스란?

신약개발 데이터 가공 서비스는 약물-단백질 3차원 결합 구조, 약물-단백질 결합 에너지 등 초기 신약개발 단계에 필요한 데이터를 인공지능 및 시뮬레이션 기술을 이용해 생산 및 가공하여 수요 기업에 제공하는 서비스입니다.

후보물질의
약물 가능성
우선 순위를 정할 수
있습니다.

약물의 작용기전을
파악할 수 있습니다.

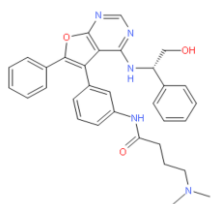
직관적인
시각화 데이터를
함께 제공합니다.

데이터 바우처 지원사업을 통해
5000만 원 상당의 신약개발 데이터 가공 서비스를 최소 2%의 비용으로 만나보세요.

서비스 결과 1 : 약물-단백질 3차원 결합 구조

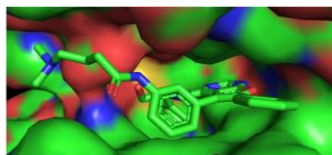
- ✓ Docking과 AI를 이용하여 **약물-단백질 3차원 구조**를 생성합니다.
- ✓ 약물의 **작용 메커니즘** 및 **약물 구조 개선 방향**을 알 수 있습니다.
- ✓ 실험 대비 많은 분자의 결합 구조를 **빠르게** 계산할 수 있습니다.
- ✓ 생성된 3차원 구조에 대한 **원본 데이터** 및 **시각화 결과**를 함께 제공합니다.

약물-단백질 3차원 구조 생성



2차원 약물 구조

Docking
& AI

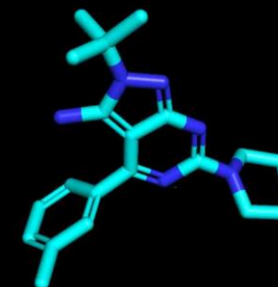


약물-단백질 3차원 구조

Sdf 파일 예시

```
UNNAMED
RDKit      3D
34 37 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
-35.0470 -68.1970 42.2660 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-34.3560 -67.7380 41.2170 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-32.9810 -66.5020 39.9430 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-32.0910 -65.5280 39.4960 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-31.6650 -65.5740 38.1460 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-32.1220 -66.6140 37.3040 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-33.0180 -67.5850 37.7790 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-33.4320 -67.4970 39.1050 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-34.3280 -68.3320 39.8800 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-34.3780 -67.5610 45.9590 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-35.0880 -66.3590 46.1400 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-35.7720 -65.7700 45.0810 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-35.7560 -66.3610 43.8220 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-35.0390 -67.5490 43.6010 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-34.3570 -68.1680 44.6730 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-34.3080 -68.9280 48.0620 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-34.1160 -70.6900 44.6880 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
```

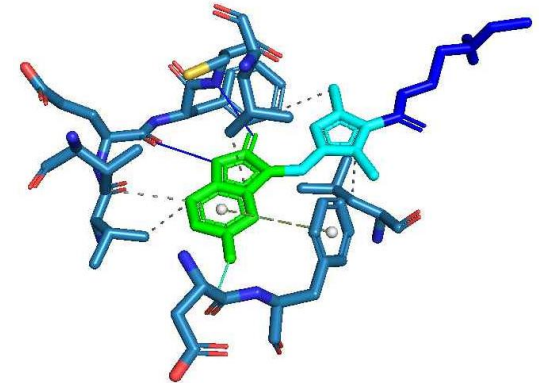
시각화 소프트웨어 사용 예시



서비스 결과 2 : 약물-단백질 결합 에너지

- ✓ 잠재적 약효를 나타내는 **약물-단백질 결합 에너지** 데이터를 생산합니다.
- ✓ Docking, AI, 시뮬레이션으로 계산한 결합 에너지 데이터를 모두 제공합니다.
- ✓ 결합 에너지 데이터를 활용하여 **Potency가 높은 유효물질을 선별**할 수 있습니다.

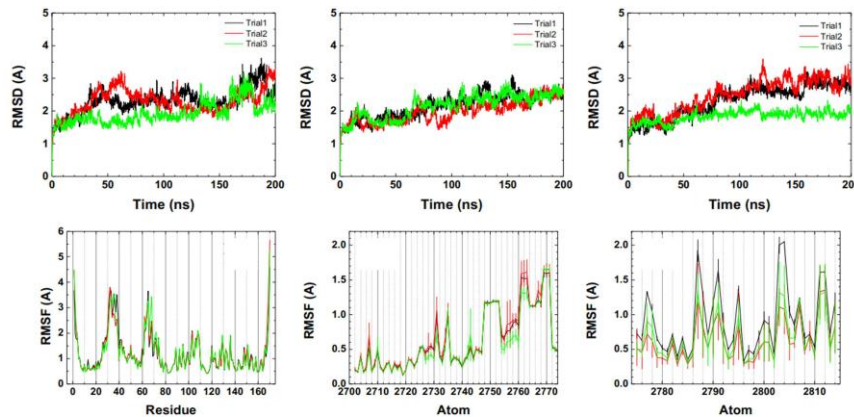
약물-단백질 상호작용 분석 및 시각화 예시



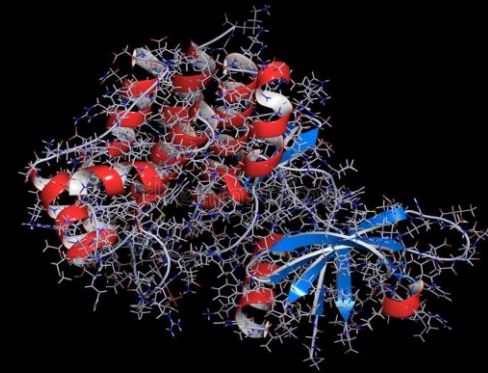
서비스 결과 3 : 약물-단백질 시뮬레이션

- ✓ 시뮬레이션을 통해 **약물-단백질 결합 메커니즘**을 정확하게 분석합니다.
- ✓ 시간에 따른 **약물의 빠른 움직임**을 정밀하게 측정합니다.
- ✓ 약물 결합에 의한 **단백질의 구조적 변화**를 분석할 수 있습니다.
- ✓ 시뮬레이션 원본 데이터와 시각화 데이터를 함께 제공하여 **비전문가도 쉽게 데이터를 이해**할 수 있습니다.

약물-단백질 시뮬레이션 시각화 데이터 예시



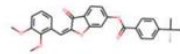
약물-단백질 시뮬레이션 시각화 데이터 예시



데이터 요약 리포트 제공

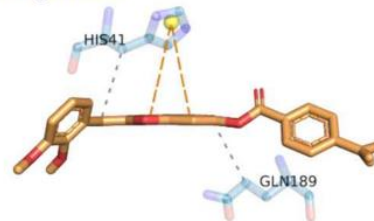
가공 데이터를 한눈에 파악할 수 있는 **요약 리포트**를 함께 제공합니다.

2D 리간드 이미지

01.
2D structure03.
Interactions between the ligand and protein

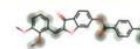
hydrophobic_interactions		
Residue number	Residue type	dist
41	HIS	3.96
189	GLN	3.75

약물-단백질 상호작용 세부 정보

약물-단백질 3차원 구조
주요 상호작용02.
3D binding structure04.
Ligand properties

Binding energy (MMPBSA)	-12.682 +/- 100.000 kcal/mol
Ligand efficiency	-0.373 kcal/mol
MW	458.2
LogP	5.84
TPSA	71.1
QED	0.27
FusedRingSize	2
PassLipinski	False
ChiralCenter	False
ClusterIdx	3

리간드 약물 물성 요약

05.
Key atoms interacting with the protein단백질과 상호작용하는
주요 리간드 원자

HITS 신약개발 데이터 가공 서비스의 차별성

1

정확한 가공 방법을 바탕으로 정밀한 데이터 제공

HITS 데이터의 정확성은 다양한 협업 사례를 통해 검증되었습니다.
HITS가 제공하는 데이터를 활용하면 기존 방법 대비 신약 유효물질 발굴 확률을 7배 이상 높일 수 있습니다.

2

신약개발에 도움되는 풍부한 데이터 제공

인공지능, 시뮬레이션, 다양한 시각화 도구를 활용하여
신약개발에 직접적으로 도움되는 분석 및 시각화 데이터를 풍부하게 제공합니다.

3

비전문가도 이해하고 분석할 수 있는 쉬운 데이터

원본 데이터와 직관적인 시각화 데이터를 함께 제공하여 비전문가들도 결과 데이터를 쉽게 이해할 수 있습니다.

4

서비스 전담 인력 배정

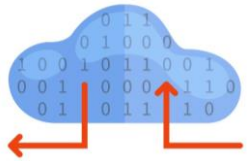
서비스 안내부터 결과 데이터 전달까지 최고의 전문가가 배정되어 어려움 없이 진행할 수 있습니다.

2. 서비스 비용 및 절차

- 데이터 바우처 지원사업 소개
- 서비스 비용 안내
- 서비스 진행 절차

데이터 바우처 지원사업 소개

초기 중견기업, 중소기업이라면 데이터 바우처 지원사업을 통해
5000만 원 상당의 신약개발 데이터 가공 서비스를 최소 2%의 비용으로 만나보세요.



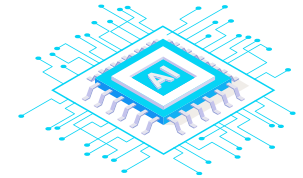
데이터 바우처 지원사업은 데이터 기반 신제품·서비스 개발을 원하는 기업에게 바우처 형식의 데이터 구매·가공서비스를 지원하는 사업입니다.



데이터 바우처 지원사업 수요기업 선정 시 **최대 7천만 원 상당의 정부지원금 혜택**을 받을 수 있습니다.

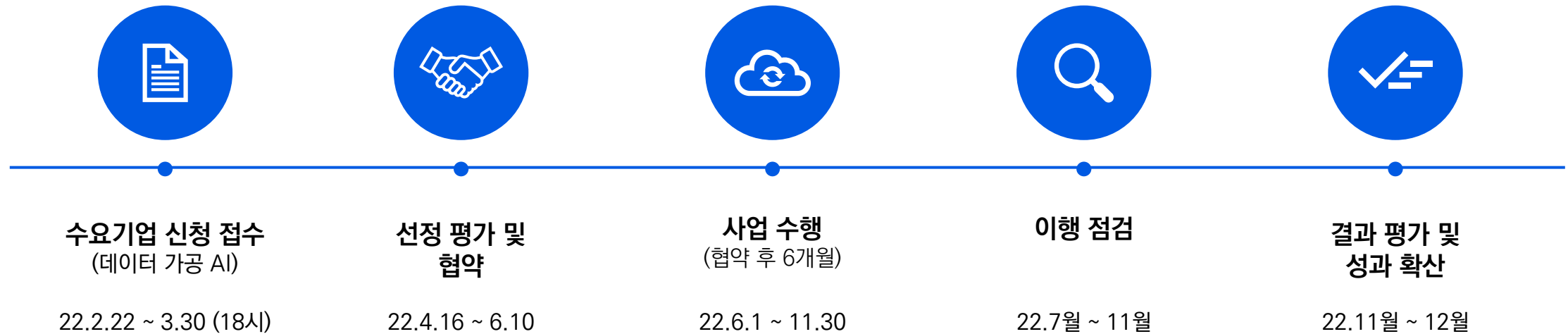


HITS는 창사 이래 다수의 제약사 및 바이오테크와 협업하며 **독보적인 인공지능 기반 신약개발 데이터 가공 서비스** 성과를 쌓아왔습니다.



HITS의 우수한 연구진들이 검증된 인공지능 및 시뮬레이션 기술을 이용하여 **신약개발에 필요한 데이터**를 풍부하게 제공합니다.

수요기업 선정 프로세스 (데이터 AI 가공 부문)



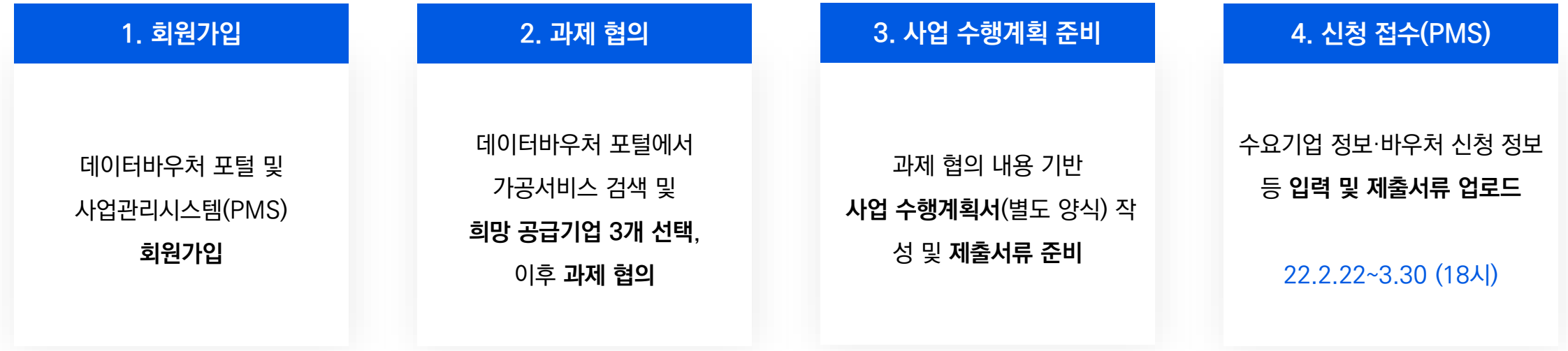
※ 상기 일정은 변동될 수 있음

데이터바우처 지원사업 대표번호
1833-2246

데이터바우처 포털
<https://kdata.or.kr/datavoucher/index.do>

데이터바우처 사업관리시스템(PMS)
<https://www.kdata.or.kr/pms/index.do>

수요기업 신청 접수 절차 (데이터 AI 가공 부문)



* 신청 접수 준비를 위한 PMS 회원가입, 수행계획서 등 관련 양식 다운로드, 과제 협의 등은 22.2.14부터 가능

※ 데이터바우처 포털 <https://kdata.or.kr/datavoucher/index.do>

※ 데이터바우처 사업관리시스템(PMS) <https://www.kdata.or.kr/pms/index.do>

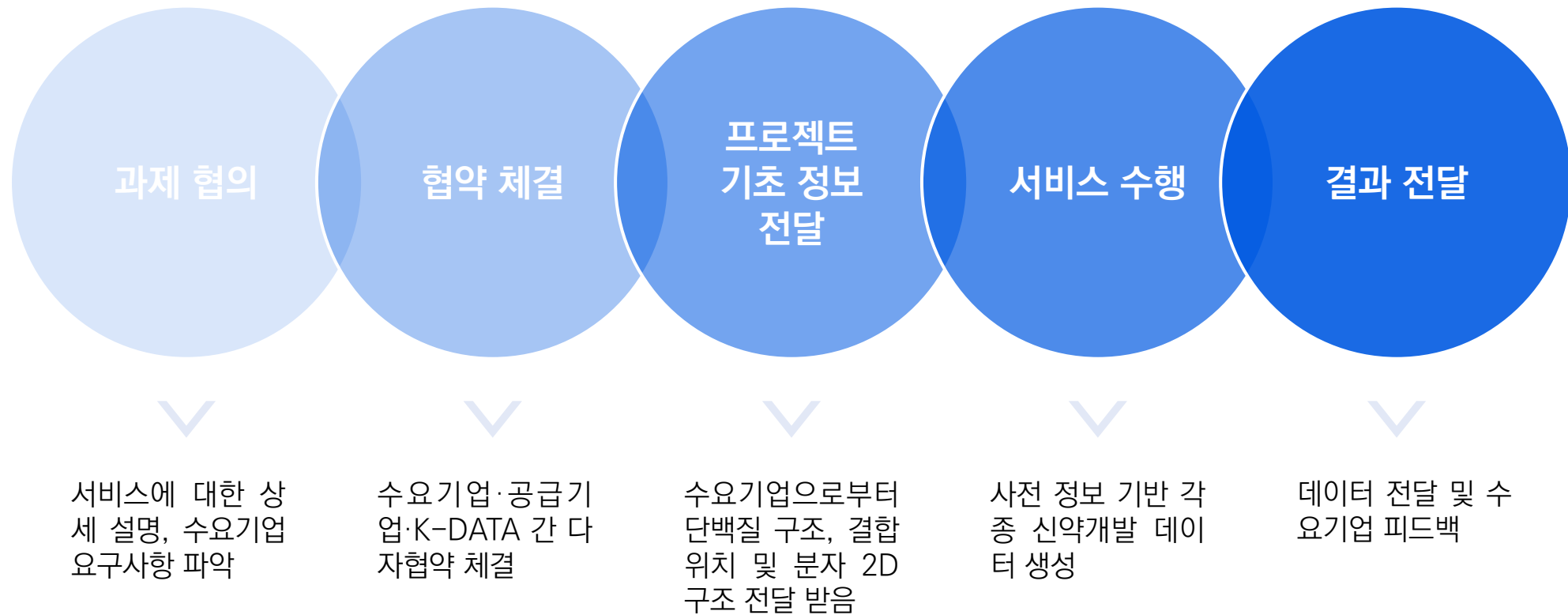
서비스 비용 안내

HITS 신약개발 데이터 가공 서비스			
서비스 비용	5천만 원	초기 중견기업 ¹	정부지원금 4천만 원 + 민간 부담금(현금) 1천만 원
		중소기업 ²	정부지원금 48,780,488원 + 민간 부담금(현금) 1,219,512원 ³ + 민간 부담금(현물) 10,975,610원
서비스 기간	1~2개월 (단백질 구조 및 결합 위치 등에 따라 편차 있을 수 있음)		
서비스 결과	약물-단백질 3차원 결합구조 생성 약물-단백질 결합 에너지 예측 약물-단백질 시뮬레이션		
제공 혜택	원본 데이터+요약 리포트 제공 데이터 가공 서비스 지원 1:1 전담 인력 배정		

- 1) 초기 중견기업 : 평균 매출액 등이 3천억 원 미만인 중견기업에 한함. 중견기업확인서 발행 및 확인서 상 특례 대상 중견기업 확인이 가능한 기업
- 2) 중소기업 : 「중소기업기본법 시행령」 제3조(중소기업의 범위)에 해당하는 기업, 「중소기업기본법」 제2조(중소기업자의 범위) 3항에 해당하는 기업
- 3) 자세한 사항은 '2022 데이터바우처 민간부담금 계산기(중소기업)' 확인

서비스 진행 절차

과제 협의부터 결과 전달까지 **전문 인력이** 배정되어 어려움 없이 진행됩니다.



데이터 가공 절차



3. HITS 소개

- 기업 개요
- 주요 연구진
- 핵심 역량

회사 개요

‘신약 개발의 디지털 전환’ HITS가 그리는 미래입니다.

HITS는 인공지능, 클라우드 등 첨단 디지털 기술을 활용해 기존의 비효율적인 신약개발 패러다임을 혁신합니다. 이를 위해 딥러닝 기반 신약개발 플랫폼을 자체 개발하였으며 핵심 세부 기술로는 유효물질 발굴(hit discovery), 선도물질 도출(hit to lead), 선도물질 최적화(lead optimization) 등이 있습니다. 현재 국내외 제약사, 연구기관 등과 협업을 지속하며 다수의 성과를 거두고 있습니다.

회사명	(주) HITS
대표이사	김우연
설립일	2020.05.18
사업 분야	인공지능 신약개발 플랫폼 개발 및 이를 이용한 신약 파이프라인 개발
임직원 수	20명 (박사 6명, 석사 4명)
주소	서울특별시 강남구 테헤란로 124, 삼원타워 902호
전화번호	02-6953-0317

주요 연혁

- 20.05 HITS 설립
- 20.08 LG 사이언스파크 오픈랩 입주
- 20.09 Seed 투자 유치
- 20.10 중기부 TIPS 기업 선정
- 21.06 사무실 강남 이전
기업 부설 연구소 설립
- 21.10 제약바이오협회 회원사 가입
- 21.11 도전! K-스타트업 2021 특허청장상 수상
- 21.12 시리즈A 투자 유치

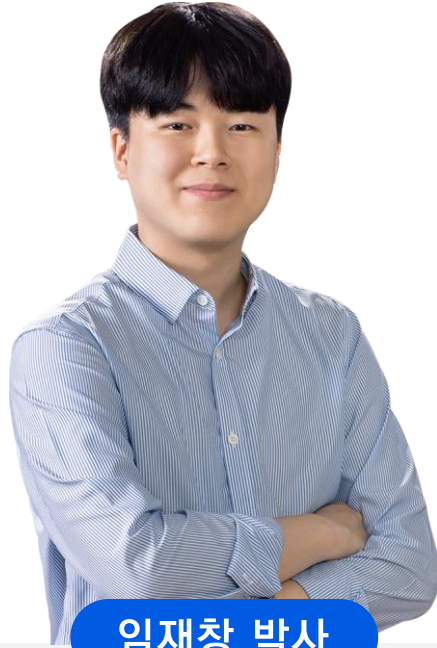
주요 연구진



김우연 박사

대표이사

- 포스텍 물리화학 박사
- 독일 막스프랑크연구소 연구원
- (현) 카이스트 화학과 교수
- 젊은물리화학자상(2020)



임재창 박사

기술담당이사

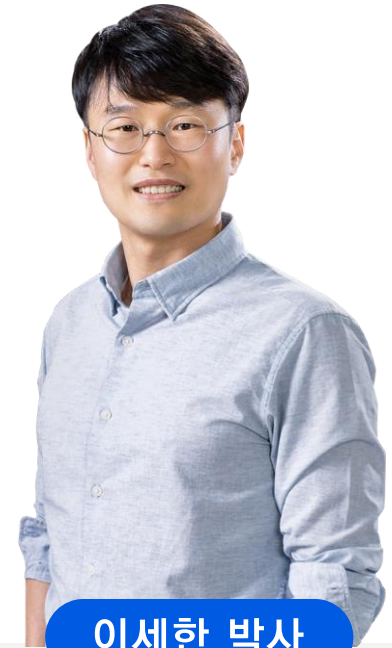
- 카이스트 화학과 박사
- 인공지능 신약개발 논문 6편 (주저자 4편, 국내 최다)



나인성 박사

사업개발이사

- Univ. South Florida 의과대학 의과학 박사
- 보스턴 칠드런즈 병원/하버드 의대 연구원



이세한 박사

시니어연구원

- 연세대학교 생명공학과 박사
- 대구경북첨단의료산업진흥재단 선임연구원

핵심 역량

1

물리-딥러닝 융합 Hit discovery 기술

물리-딥러닝 기반 약물-단백질 상호작용 예측 모델을 독자적으로 개발하였습니다. 물리적으로 해석 가능한 예측을 통해 의약화학자와의 합동 연구가 용이합니다.

2

합성 및 특허 가능성 높은 Hit to lead 기술

국내 대기업과의 협업을 통해 Lead 발굴에 성공한 바 있으며 국내 제약사가 제공한 Scaffold를 바탕으로 분자를 설계하여 특허성 있는 신규 신약후보물질을 발굴하였습니다.

3

물리-딥러닝 융합 열역학적 성질 예측

물리화학적 의미를 반영한 특징을 추출하고 물리 기반 분자-환경 상호작용을 분석합니다. 대량의 학습 데이터를 이용한 Multi-task learning으로 Lead 발굴 성공률을 높입니다.

4

CYP·hERG 예측 모델 개발

CYP inhibition, hERG 독성 예측 모델을 개발하였으며 문헌값 기준 최고치에 근접한 성능을 확보하였습니다.

5

합성 및 특허 가능성 높은 거대 Digital library

구매 가능한 빌딩블록 화합물과 반응 템플레이트를 기반으로 합성 가능한 분자를 생성합니다. 가상탐색을 통해 특허성 높은 유효물질을 확보할 수 있으며 Lead 발굴 확률을 높입니다.

실험 검증 사례 요약

Hit Discovery (총 6건)

과제별 평균 성능 수치

라이브러리	가상탐색	실험검증	수행기간
41만종	127종 후보도출	9종 활성물질 (hit ratio ~7.1%)	1~2개월 가상탐색 (1주) 실험검증 (4~6주)
Hit 기준: 40% inhibition @ 1uM ~ 80% inhibition @ 5uM			

Hit-to-Lead (총 3건)

과제별 평균 성능 수치

유도체설계	유도체합성	실험검증	수행기간
70~200종	10~40종	1~15종 (hit ratio 10~38%)	3~4개월 모델링 (3주) 실험검증 (2개월)
Potency 향상, 선택성 향상, Novel Hinge Binder 설계			

지금 데이터바우처 수요기업 신청하고
5천만 원의 가치를 최소 2%의 비용으로 누리보세요.

신약개발 데이터 가공 서비스

- 약물-단백질 3차원 결합 구조 생성
- 약물-단백질 결합 에너지 예측
- 약물-단백질 시뮬레이션



데이터바우처
수요기업 선정 시

중소기업

122만 원

*중소기업의 경우 추가 현물 부담 필요. 자세한 사항은
'2022 데이터바우처 민간부담금 계산기(중소기업)' 확인

초기 중견기업

1000만 원

문의 : ljik@hits.ai / 02-6953-0317

(주) HITS

서울특별시 강남구 테헤란로 124 삼원타워 902호

Tel : 02-6953-0317

E-mail : lj@hits.ai

Web : <https://hits.ai/>

