

RS-2024-00459727

연합학습 기반 신약개발 가속화 프로젝트

지속가능한 연합학습 데이터 공급 및 감염병 대응 융합 플랫폼 구축

(주관) 한국생명공학연구원(정현철)

(공동) 우석대학교(채윤지)

연구팀 소개

주관연구개발기관



연구책임자: 정현철

- 한국생명공학연구원 전임연구원
 - 실험동물자원센터
약물동태학연구팀
 - 국가전임상시험지원센터
디지털전임상팀

연구역량

- 생리학적 기반 약동학 모델링 및 질량분석 기반 중개 연구
다수 수행

비임상 약동력학 평가 기술

- In vitro-in vivo-in silico 기반 약동력학 평가/예측
- 질량분석 기반 생체시료분석

디지털전임상 플랫폼 구축

- 디지털전임상 플랫폼을 활용한 초고속 약동력·학독성 예측
- 신규 치료제 후보물질 개발 가속화

공동연구개발기관



연구책임자: 채윤지

- 우석대학교 약학대학 조교수
- 산업약학/약물동태학 연구실

연구역량

- 약물동태학 연구 논문 최근 3년 25건 (주저자/교신저자
17건)

제약회사 경력 보유

- 종근당/삼성바이오에피스 7년
- 의약품개발을 위한 전임상/임상 약물동태학 평가 수행

비임상시험 플랫폼 구축

- 제약회사/CRO 수준의 약물동태학 평가 표준시험법 확립
- ADME 평가시스템 구축
- 약물상호작용 평가 및 활용 사례 多

연구팀 역량

실험동물자원센터- 국가전임상시험지원센터와 연계를 통한 감염병 특화 데이터 확보

신·변종 감염병 대응 치료제 및 백신 개발 가속화를 위한 국가 전임상 지원 생태계 고도화



- 전임상시험 평가 수요 기반 데이터 생산 및 수집 시스템 보유
- 모델 동물을 활용한 약동력학 평가 플랫폼 보유
- 지속적인 데이터 생산 및 활용 체계를 통한 FAM 플랫폼 활성화 기대

높은 수준의 약동력학 평가 역량 보유

제약, 생명공학연구원과 산학협력으로 신약개발 성과

임상단계 체계적인 모델링 연구 진행... 특수용량 500mg 연구논문 게재

Biomedicine & Pharmacotherapy

Interactions of bosutinib with drug transporters: In vitro and in vivo inhibition of organic cation transporter 2, multidrug and toxin extrusion protein 1, and breast cancer resistance protein by bosutinib

Min-Ji Kang^{1,2}, Min Ju Kim^{3,4}, Yunjin Seol¹, Ji-Eun Chang¹, Kyong-Ryoon Lee^{1,5,6}, Yoon-Jee Chae^{1,7}

Chromatographic optimization for quantifying ponatinib in plasma by AQD approach

Application in pharmacokinetic study

Seven-factor eight-run Taguchi design

Three-factor Box-Behnken design

- 산·학·연 협력을 통한 학술연구 및 공공인프라 역할 수행
- 기 보유중인 in vitro-in vivo-in silico 약동력학 평가 기반 신약 개발 지원(국내 신약 품목허가 2건 기여)
- 오가노이드, 조직칩 등 첨단대체시험법 기반 약동력학 평가 연구 수행

연구개발목표

최종목표: 연합학습을 위한 약동학 데이터 공급
및
신변종 감염병 대응 치료제 개발 가속화



한국생명공학연구원
Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology

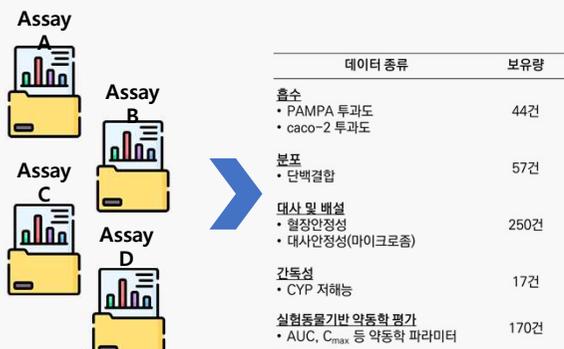
- 실험동물 기반 비임상 약동학 데이터 생산 및 공급
- 국가전임상시험지원센터 협력을 통한 플랫폼 실용화 지원



- 약물상호작용 평가 데이터 생산 및 공급
- 인공지능 기반 약물상호작용 예측 플랫폼 구축

연구내용: 1단계('24 - '26)

기본 데이터 전처리 및 공급



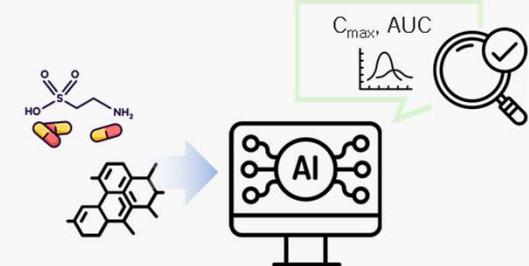
- 기 보유중인 전임상 약동학/약물상호작용 평가 데이터 공급
 - 주관 및 공동 합계 500건 가량 보유
- FAM 태스크 정의 및 데이터 전처리 도구 개발 지원
 - 데이터 비식별화, 품질 평가 기준 마련

데이터 공급 체계 구축



- 약동학 평가 수요 기반의 지속 가능한 데이터 공급 체계 구축
- ADME 및 약물상호작용 데이터 생산
 - In vitro 및 설치류 약동학/약물상호작용 평가
- 확보 데이터에 대한 전처리 및 학습 데이터 제공

공급 체계 최적화 및 FAM 활용/검증



- FAM 태스크 별 맞춤 데이터 공급 체계 확립
 - (주관) 분포/대사/배설/설치류 약동학
 - (공동) 흡수/분포/약물상호작용
- 외부 데이터를 이용한 FAM 플랫폼 모델 검증 및 피드백
 - 국가전임상시험지원센터와 연계를 통한 모델 검증 데이터 확보

연구내용: 2단계('27 - '28)

성능 모니터링/데이터 공급체계 고도화

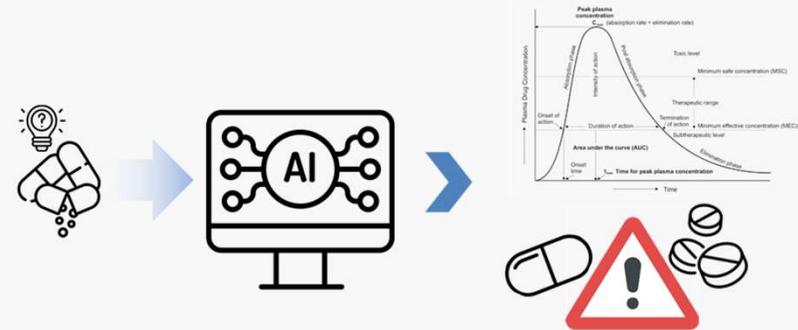


모델 비교 평가

디지털전임상
시범 서비스

- 상용 소프트웨어(2종 이상)와의 모델 예측력 비교평가 및 피드백
 - 모델 학습 데이터 및 신규 약물을 이용한 검증
- 국가전임상시험지원센터의 평가 수요에 대한 시범 서비스 및 데이터 수집, 피드백 제공

FAM 활용체계 마련



FAM 플랫폼 기반 신약개발 가속화/약물상호작용 예측 서비스

- FAM 플랫폼 기반 신약개발 지원 및 신변종 감염병 치료제 약물상호작용 예측 서비스 운용
 - 국가전임상시험지원센터와 연계를 통한 모델 검증 데이터 확보
- 신규 데이터 및 플랫폼 개선 피드백 지속

추진전략

1단계 ('24 - '26)

연합학습 지원을 위한 약동학
데이터 생산 및 공급

2단계 ('27 - '28)

KPEC&K-MELLODDY 연계
신변종 감염병 대응 체계 구축



한국생명공학연구원
Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology



- 비임상 약동학/약물상호작용
평가데이터 생산 및 공급
- FAM 태스크 정의 및 데이터
전처리 도구 개발 지원
- 기관 별 학습에 대한 성능
모니터링 및 결과 분석 지원
- 상용 소프트웨어와의 비교
평가를 통한 모델 검증 및
피드백
- FAM 플랫폼 기반 신변종
감염병 치료제 개발 가속화
지원

성과물 활용방안

