

2024년도 제1차 연합학습 기반 신약개발 가속화 프로젝트 사업
(2-1) 데이터 활용 신약개발 협력 체계 구축

신약개발 협력 체계 구축을 위한 약물유전체 정보 융합 약동학 자료 생성 및 제공

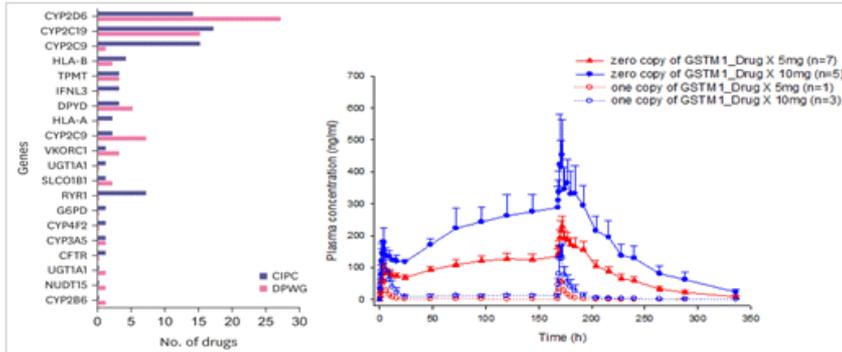
Generation & provision of pharmacokinetic data converged with
pharmacogenomic information for orchestration for drug discovery

에이페이스(주) 대표이사
장 인 진, M.D., Ph.D.

연구의 필요성

약물유전형과 상호작용 평가의 중요성

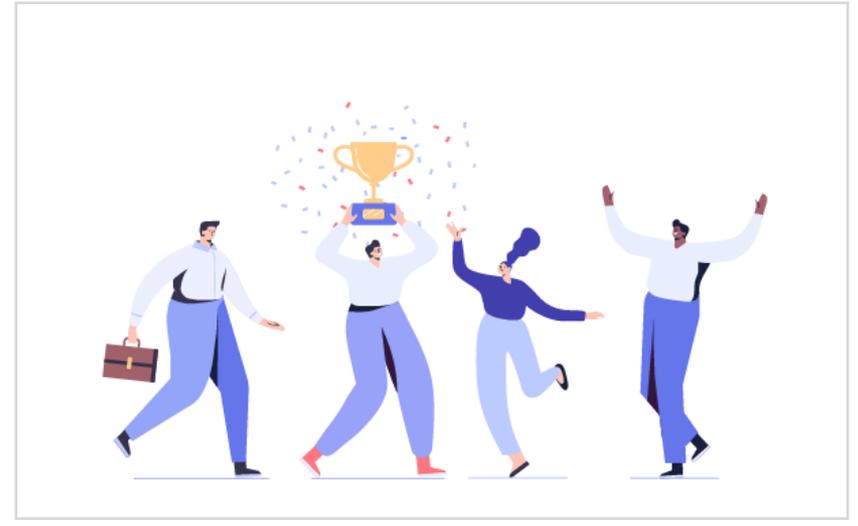
- **In vitro** 및 동물실험 자료로 **ADMET**의 개인간 차이를 확인하기 어려움
- 약물유전체 정보와 약물상호작용이 개인별 변이의 확인 가능한 주 원인
- 개인별 변이는 의약품의 질적 우수성의 핵심 요인



ADMET에 영향을 주는 대표적 유전자 목록 및 유전형에 따른 약동학 차이 예시
(*Transl Clin Pharmacol.* 2020 Dec;28(4):189-198)

연합학습을 통한 안전한 의약품 개발

- 연합 학습으로 각 제약사가 보유한 자료의 누출 없이 개인별 변이 모델 고도화 가능
- 이를 통해 임상시험 비용 절감 및 효과적인 임상개발 전략 수립 가능



연구자 및 연구개발기관 소개



임상약리학 및 신약개발 전문가

장인진 MD, PhD

대표이사 | 에이페이스(주)

- ❖ 신약개발 과정 전문가로 국내 허가 신약 임상개발에 다수 참여
- ❖ 임상약리 전문가로 *in silico-in vivo* 중개 임상시험 경험 풍부
- ❖ 약물농도 분석 및 약물유전체 연구 전문가



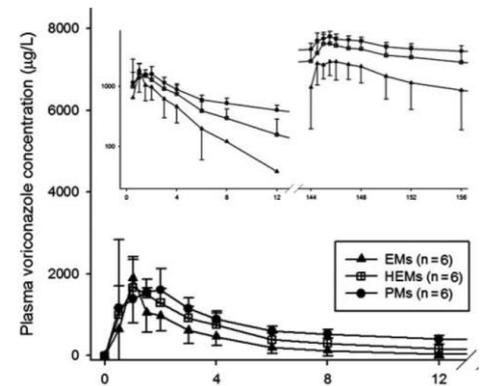
약물 농도 분석 역량

최신 분석 장비 보유 및 GCLP 인증 기관



약물유전형에 따른 PK 차이 분석 역량

유전체학 연구 및 임상시험 연계를 통한 PK 분석



데이터 표준화 및 FAM 태스크 정의

1단계

1차년도

2차년도

3차년도

2단계

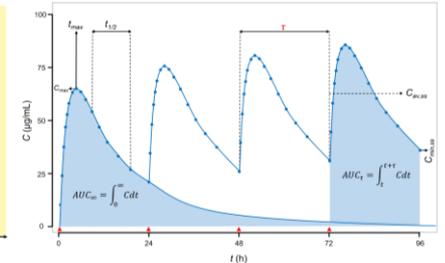
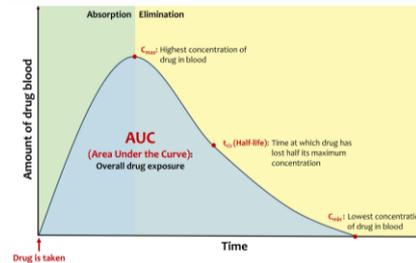
1차년도

2차년도

신약개발 전략에 부합하는 FAM 태스크 정의

산출물: FAM 태스크 정의서

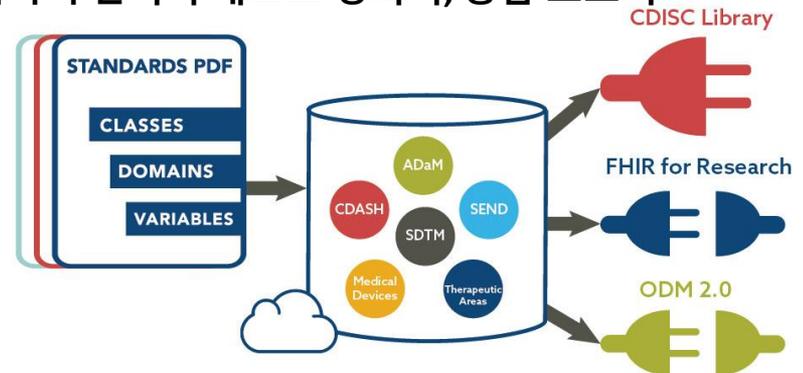
- **약동학 파라미터** 예측
 - 임상 해석 용이
- **시점별 약물 농도** 예측
 - 개별 ADMET 과정 총합



연구자주도 임상시험 데이터 표준화 및 전처리 테스트

산출물: 보유 데이터 현황 조사 분석서, 데이터 전처리 태스크 정의서, 공급 보고서

- 80여 건의 **수행 연구자주도 임상시험** 중 유효한 약동학/안전성 예비데이터 제공
- 국제 임상시험 데이터 표준 **CDISC**를 활용한 표준화 전략



데이터 공급 및 추가 데이터 확보 계획 수립

1단계

약물농도·유전형 분석법 확립 및 연구자주도 임상시험 기획

산출물: 임상시험계획서, 농도분석계획서, 유전체분석계획서

- 연구자주도 임상시험 설계를 통해 추가 데이터를 확보
- 플랫폼 및 모델 개발팀과 데이터 확보가 필요한 약물을 협의



1차년도

2차년도

3차년도

2단계

데이터 공급 및 추가 데이터 필요 영역 식별 및 확보 계획 수립

산출물: 연합학습데이터공급계획서, 연합학습데이터공급보고서(부족데이터보충방안)

- 전체 연구데이터를 FDD 플랫폼에서 제공한 도구를 활용하여 AI 모델 구축에 적합하게 전처리
- 예측모델이 전체적으로 성능이 떨어지는 영역을 확인하고 추가 데이터 필요 여부를 확인

약물명: (가)	모델 A	모델 B	모델 C	모델 D	데이터 평가
평가지표 1	우수	매우우수	우수	보통	
평가지표 2	매우우수	우수	보통	매우우수	
평가지표 3	보통	보완필요	보완필요	보완필요	추가데이터 필요
평가지표 4	매우우수	매우우수	매우우수	매우우수	
모델 간 비교	평가 보고서: 모델 자체의 특성 평가 및 모델 간 비교				

1차년도

2차년도

추가 데이터 확보 및 신규 FAM 태스크 발굴

1단계

데이터 품질 관리 매뉴얼 개발 및 상용 소프트웨어와 비교

산출물: 연합학습데이터공급보고서, 품질관리 매뉴얼, FDD/FAM 활용 중간보고서

- 데이터들이 일관된 형식과 품질을 보유할 수 있도록 **품질 관리 절차 문서화**
- **상용 소프트웨어**(예, WinNonlin) 결과와 모델에서 예측된 결과를 비교



1차년도

2차년도

3차년도

약물농도·유전형 분석·공급 및 약물유전형 분포 고려 신규 FAM 태스크 발굴

산출물: 임상시험수행1건, 농도·유전체분석1건, 공급 보고서

- 국내 **약물유전형 분포**를 고려하여 가상 환자집단을 생성
- 해당 집단에서의 ADMET을 예측하는 태스크 정의



2단계

1차년도

2차년도

약물상호작용 태스크 제안 및 검증

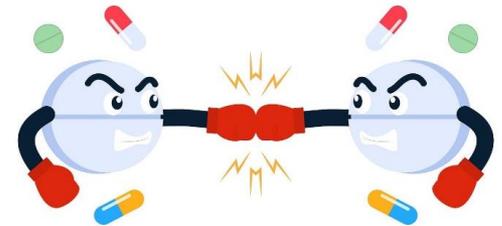
1단계

약물상호작용 관련 FAM 태스크 제안 및 임상시험 자료 공급

산출물: 지속데이터공급계획서, FAM태스크 정의서, 임상시험 계획서 및 수행, 농도·유전체분석 결과

1차년도

- 약물상호작용 탐색을 위한 **연구자주도 임상시험 수행 및 데이터 확보**



2차년도

- 품질 관리 매뉴얼에 따른 약물상호작용 **데이터 공급**

3차년도

확장된 FAM 솔루션의 활용성 검증

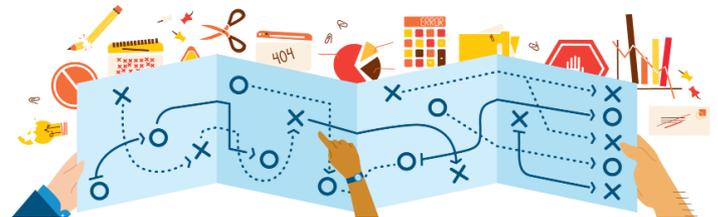
산출물: 지속데이터공급보고서, FAM 예측 성능 분석서, FDD 플랫폼 및 FAM 활용 보고서

2단계

- **전향적 임상시험 수행** 및 이를 통한 확장된 FAM 솔루션의 **활용성 검증**

1차년도

- 신약개발 전주기에 플랫폼 활용 방식을 구체적으로 설명하는 **플레이북(playbook)** 마련



2차년도

추진전략 · 방법

신약개발 전주기 활용 가능 데이터 공급 및 플랫폼 지원

