

RFP 2-1: 데이터 활용 신약개발 협력 체계구축

2024. 8. 20

주관기관

제일약품주식회사

책임자

신약연구실장 김 종 엽

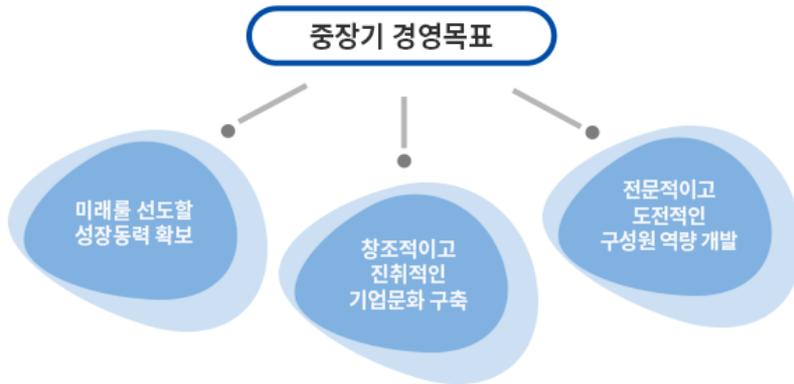
■ Better Way, Jeil Way

- 우수한 헬스케어솔루션을 제공함으로써 행복하고 건강한 삶을 실현한다.

VISION

VISION

혁신적 헬스케어솔루션(HEALTH CARE SOLUTION)을 제공하는 글로벌 기업으로의 성장

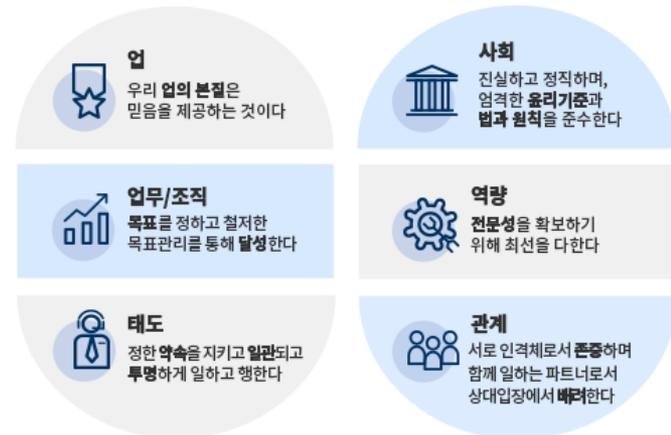


✓ 핵심역량

- Medicinal Chemistry: CADD (Computer-Aided Drug Discovery)를 이용한 분자 설계 및 합성
- 약물 타깃 검증, 신규 평가법 고안, 바이오마커 개발
- 작용 기전, 약효평가/약물동태 연구
- 비임상 유효성/안전성 연구 및 비임상시험 전략수립, 동물실험실 운영, 마약류 취급/관리

핵심가치

Build-up Trust



■ FDD 플랫폼 구축을 위한 보유 데이터 현황

✓ 연구단계 및 질환군, 항목분류에 따른 데이터 현황 조사 진행 중

<표 1. 후기 비임상 및 임상 1상 데이터 현황표>

프로젝트	Ames	hERG	단회투여			반복투여						임상1상	Total
						2주			4주				
			Rat	Dog	Minipig	Rat	Dog	Minipig	Rat	Dog	Minipig		
JPI-289	1	1	1	1		1	1		1	1		1	9
JPI-547	1	1	1	1		1	1		1	1		1	9
JP-1366	1	1	1	1		1	1		1	1		1	9
JP-2266	1	1	1		1	1		1		1		1	9
JRI-365	1	1	1	1		1	1		1	1			8
JPC-089	1	1	1	1		1	1		1	1			8
Total	6	6	6	5	1	6	5	1	6	5	1	4	52

<표 2. 질환에 따른 데이터 현황표>

질환군	In-vivo				In-vitro							Total
	Mouse	Rat	Dog	Monkey	MS	PPB	PS	hERG	CYP reaction	P-gp S	P-gp I	
Anti inflammation	68	31	1	7	18	5	4	8	200	1	1	344
Cancer	147	116	12	2	23	31		183	249	2	2	767
CNS	5	65		2	13	1	1		20			107
Metabolic disorder	20	11	3	1	5	5			3	1	1	50
Total	240	223	16	12	59	42	5	191	472	4	4	1268

<표 3. 항목에 따른 데이터 현황표>

항목	대분류	중분류	소분류	데이터 보유량
ADME	약물 분포	분포 용적	- Plasma Protein Binding (Mouse, human, rat)	42
		수송체 약물 분포 영향력	- BBB Transporter(P-gp 등) 결합친화도 및 기질성 예측	8
	약물 대사 및 배설	버퍼 안정성	- Plasma Stability (mouse, human, rat, dog)	5
		대사 안정성	- Metabolic Stability (mouse, human, rat, dog) monkey, minipig	59
독성	Toxicity	심장 독성	- hERG 채널 저해 예측	191
		간 독성	- CYP450 저해 예측	468
		발암성	- Ames Test 결과 예측 - 발암성 예측	6
약효	약효	인산화효소 (단순 약효)	- 약효 측정(JAK1,EGFR, 등)	1544
약동학	약동학	약동학 파라미터	- 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	491

■ 최종 목표 및 단계별 목표

구분	목표	주요 연구 내용
최종 목표	<ul style="list-style-type: none"> FDD 플랫폼 구축 및 FAM 솔루션의 활용을 통한 신약후보물질 도출 가속화 	
마일스톤 목표 (1단계) 2024.07.01. ~ 2026.12.31	<ul style="list-style-type: none"> 보유 데이터 현황 파악 및 공급 체계 구축 ADMET 핵심 태스크 선정 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 자체 보유 데이터 현황 조사 및 현황표 작성 ✓ 데이터 전처리를 위한 태스크 정의 ✓ 데이터 수집 및 가공 (1200건) ✓ 활성 검증과 data 비교 분석의 적절성 및 유효성 평가 ✓ 데이터 공급 보고서 1건 이상 제출 (년 1회 이상)
마일스톤 목표 (2단계) 2027.01.01. ~ 2028.12.31	<ul style="list-style-type: none"> FAM 솔루션 활용 검증 및 적용 범위 확대 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 지속 데이터 공급 계획 수립 (500건) ✓ 솔루션 설계의 적절성 및 유효성 검증 ✓ FDD 플랫폼 활용 보고서 1건 이상 제출 ✓ FAM 솔루션 성능 분석서 1건 이상 제출 ✓ FAM 솔루션 확장성 검토

■ 연차별 연구 개발 목표 및 내용

- 1~3차년도(1단계): 데이터 전처리 도구 개발 지원 및 추가 데이터 공급 계획 수립, FAM 솔루션 신뢰성 검증
 - ✓ ADMET 및 PK 보유 데이터 분석 및 가공, ADMET 핵심 태스크 선정
 - ✓ 지속적인 데이터 포맷 정의 및 데이터 전처리 도구 개발 지원
 - ✓ FDD 플랫폼 구축을 위한 ADMET 추가 데이터 생성 및 수정 / ADMET 예측 모델 FAM 솔루션 신뢰성 검증

구분	목표	주요 연구 내용
1차 년도 2024.07.01. ~ 2024.12.31	• 보유 데이터 현황 파악	✓ 자체 데이터 현황 조사 및 현황표 작성 (500건)
	• 태스크 정의 및 범위 설정	✓ 플랫폼 구축을 위한 ADMET 관련 핵심 지표 설정
	• 공통 CRO 지정	✓ 데이터의 균질성 및 신뢰성 확보를 위한 공통 CRO 지정
2차 년도 2025.01.01. ~ 2025.12.31	• 데이터 전처리 지원	✓ 데이터 포맷 구성 및 사용할 데이터의 수집 또는 가공 (700건) ✓ 데이터 공급 보고서 작성
	• ADMET 태스크 검토 및 수정	✓ ADMET 관련 핵심 지표 검토 및 데이터 가공
3차 년도 2026.01.01. ~ 2026.12.31	• 데이터 전처리 지원	✓ 데이터 포맷 구성 및 사용할 데이터의 수집 또는 가공 ✓ 데이터 공급 보고서 작성
	• ADMET 및 PK 관련 태스크 검토 및 수정	✓ ADMET/PK 관련 핵심 지표 검토 및 추가 데이터 수집 ✓ 추가 데이터의 수집 및 가공, 필수 태스크에 대한 시험 계획 수립
	• FAM 솔루션 활용 및 검증	✓ FAM 솔루션 동작 및 성능에 대한 검증 ✓ 상용 SW와의 비교 분석 수행 후 개선안 제시

■ 연차별 연구 개발 목표 및 내용

- 4~5차년도(2단계): 지속 데이터 공급 계획 수립 및 FAM 솔루션 성능 검증
 - ✓ 지속적인 데이터 공급을 위한 공급 계획 수립 및 계획서 작성 (1건 이상)
 - ✓ FDD 플랫폼 및 FAM 솔루션에 대한 활용성 검증 및 활용 결과보고서 작성 (1건 이상)
 - ✓ FDD 플랫폼 및 FAM 솔루션 확장성 검토

구분	목표	주요 연구 내용
4차 년도 2027.01.01. ~ 2027.12.31	• 데이터 공급 지속성 확보 계획 수립	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 지속적인 데이터 공급 계획 수립 및 공급계획서 작성 (500건)
	• FAM 솔루션 활용 및 검증	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 내부 프로젝트 적용 및 검증, 개선안 제시 ✓ FAM 솔루션 동작 및 성능에 대한 검증 후 개선안 제시 ✓ 상용 SW와의 비교 분석 수행 후 개선안 제시
5차 년도 2028.01.01. ~ 2028.12.31	• FAM 솔루션 활용 및 검증	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 내부 프로젝트 적용 및 검증, 개선안 제시 ✓ FAM 솔루션 동작 및 성능에 대한 검증 후 개선안 제시 ✓ FAM 솔루션 예측 성능 분석서 작성
	• FDD 플랫폼 및 FAM 솔루션 확장성 검토	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Target 발굴: 약물-단백질 상호작용 (DTA) 예측 모델 가능성 검토 ✓ 생성형 AI를 활용한 약물 디자인 가능성 검토 ✓ 신규 모달리티(PROTAC, Molecular Glue, ADC) 적용 가능성 검토

■ 연구개발과제 수행일정 및 주요 결과물

- 1단계 주요 결과물:
 - ✓ 보유 데이터 현황표
 - ✓ 보유 데이터 공급 보고서 (1건 이상/년)
 - ✓ 주요 태스크 선정 결과 유무
 - ✓ 추가 데이터 시험 계획서 및 결과 유무

- 2단계 주요 결과물:
 - ✓ FAM 솔루션 활용 보고서 (1건 이상/년)
 - ✓ 데이터 지속 공급 계획서 및 결과 유무
 - ✓ 보유 데이터 공급 보고서 (1건 이상/년)

1차 년도													
추진내용	추진 일정												결과물
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
데이터 전처리 지원													• 데이터 공급 보고서 작성
ADMET 보유 데이터 파악													• 데이터 보유 현황표 작성
ADMET 핵심 태스크 선정													• 태스크 선정 결과 유무
2차 년도													
데이터 전처리 지원													• 데이터 공급 보고서 작성
추가 데이터 공급 계획 수립													• 추가 데이터 시험 계획서 작성
공통 CRO 지정													• CRO 선정 결과 유무
추가 데이터 수집 및 가공													• 추가시험 결과 유무
3차 년도													
데이터 전처리 지원													• 데이터 공급 보고서 작성
추가 데이터 수집 및 가공													• 추가시험 결과 유무
FAM 솔루션 신뢰성 검증													• FAM 솔루션 활용 보고서 작성
4차 년도													
FAM 솔루션 신뢰성 검증													• FAM 솔루션 활용 보고서 작성
데이터 지속 공급 계획 수립													• 데이터 지속 공급 계획서 작성
추가 공급 데이터 수집 및 가공													• 추가 시험 결과 유무
5차 년도													
FAM 솔루션 신뢰성 검증													• FAM 솔루션 활용 보고서 작성
FDD 플랫폼 적용 확대													• FDD 플랫폼 활용 보고서 작성

■ 연구개발 성과의 활용방안

- 제일약품은 최근 국산 37호 신약 '자큐보' 약물의 신약처 승인 경험 뿐만 아니라 다수의 임상 후보물질 도출 및 신약 개발과제들에 대한 수행 경험을 바탕으로 현재 활발한 연구를 진행 중이다.
- 제일약품은 타깃 발굴, 분자 설계, 화합물 합성, 약효평가시험 및 독성시험 등의 단계적/체계적인 경험이 풍부하고, 해당 직무에 대한 전문적인 역량을 갖추고 있다.
- 제일약품은 FAM 솔루션 구축 완료 또는 성능 점검이 필요한 시점이 도래하였을 경우 자체 신약 파이프라인 과제들에 대하여 적극적으로 활용하여 성능 점검 또는 신뢰도 검증을 진행할 계획을 가지고 있다.

■ 연구개발 성과의 기대효과

- FAM 솔루션은 약물의 ADMET 와 관련된 수 많은 데이터를 AI 기반 연합학습 알고리즘을 활용한 신약후보물질 도출 가속화 프로젝트로, FAM 솔루션 도입 시 경제적인 측면에서 신약후보물질 도출의 평균 소요 기간과 비용을 대폭 줄일 수 있을 것으로 기대하고 있다.
- 또한, 기술적인 측면에서 FAM 솔루션을 활용한 신약 후보물질 도출의 기반 기술 구축이 가능하며, 구축된 물적/인적 연구 인프라를 통해 다양한 분야의 기초 및 응용 연구의 활성화에 기여할 수 있을 것으로 예상된다.