

샤페론, AI 기술 주목도를 위한 "AIDEN의 정확도 향상"

- ▶ AI 세포독성 알고리즘 정확도 92% 달성, 신약 개발 효율성 극대화
- ▶ 샤페론, 염증성 질환 특화 AI 알고리즘 개발을 위한 학계 협력 강화

[2024-06-26] 샤페론이 AI 세포독성 알고리즘의 정확도를 92%까지 향상시켜 후보물질 탐색 효율이 극대화될 전망이다.

면역 혁신신약개발 바이오기업 샤페론(378800, 대표이사 성승용)은 자체 신약 후보물질 스크리닝 알고리즘의 정확도가 92%를 달성했다고 26일 밝혔다. 자체 개발에 성공한 인공지능(AI) 기반 신약 개발 플랫폼 '에이든(AIDEN)'을 통해 효율적인 후보물질 발굴이 가능할 전망이다.

에이든은 대규모 데이터 딥러닝 후 약물을 탐색, 스크리닝을 거쳐 후보물질을 발굴하는 역할을 하는 AI 플랫폼이다. 샤페론은 지난해부터 약 2억 4천만 개의 저분자 화합물·단백질 구조·생물학적 활동 데이터 등을 수집해 이를 기반으로 신약 후보물질 발굴에 AI 기술을 적용해오고 있다.

이번 정확도 향상은 약물 후보물질 분야 전문 인력을 바탕으로 AI 학습 데이터를 정제해 수집 데이터의 효율성을 극대화하는 과정을 통해 이뤄졌다. 수집 데이터를 기반으로 머신러닝을 통해 'AI 세포독성 알고리즘'의 정확도를 92%까지 향상시켰다.

AI 알고리즘의 정확도가 높아지면 부적합 후보물질을 효과적으로 스크리닝 할 수 있게 된다. 화합물의 생물학적 활동과 잠재적 독성 예측 과정의 신뢰도가 높아지기 때문이다. 통상 신약 개발 과정에서 약물 후보물질 탐색 과정에만 4~5년이 소요된다. 에이든을 활용할 경우 후보물질의 탐색에 소요되는 기간과 비용을 50% 이상 절감할 수 있을 것이라는 게 회사 측 설명이다.

샤페론 관계자는 "기존 AI 신약 개발 알고리즘의 정확도가 70~80%인 것을 고려할 때, 에이든의 세포독성 알고리즘 정확도는 상당히 높은 수준을 보인 것"이라며 "세포독성뿐 아니라 약물 흡수성 등 다양한 AI 알고리즘을 고도화해 후보물질 발굴 기간을 획기적으로 단축시킬 것"이라고 말했다.

지난달 샤페론은 다양한 염증복합체의 신호전달체계에 대한 연구결과를 확보하기 위해 '라젠드라 카르키' 서울대 교수와 업무협약을 체결했다. 카르키 교수는 선천 면역 및 염증복합체 분야 글로벌 최고 전문가 중 한 사람이다.

샤페론은 획득한 연구결과를 토대로 염증복합체에 특화된 AI 알고리즘을 고도화할 방침이다. 이를 통해 염증성 질환에 최적화된 치료제 개발을 목표로 하고 있다. 샤페론은 이번 협약을 기점으로 외부기관과 보다 적극적인 협력관계 구축을 통해 자체 AI 플랫폼을 고도화해 나갈 방침이다.