

샤페론, 신규 후보물질 발굴 AI 알고리즘 10종으로 확대 “신약개발 속도 ↑”

- ▶ 신약 후보물질 최종 설계에 필요한 주요 스크리닝 알고리즘 대부분 확보
- ▶ 주요 파이프라인 연구개발에 에이든 적극 활용해 신약 개발 성과 가속화할 것

[2024-06-28] 샤페론이 AI 신약개발 플랫폼 '에이든'의 스크리닝 알고리즘 확장 및 베타 테스트 완료로 신약 개발 속도를 가속화할 전망이다.

면역 혁신신약개발 바이오기업 샤페론(378800, 대표이사 성승용)은 인공지능(AI) 신약 개발 플랫폼 '에이든(AIDEN)'의 신규 후보물질 발굴 알고리즘을 10종 이상으로 확장하고 베타 테스트를 성공적으로 완료했다고 28일 밝혔다. 이번 확장으로 샤페론은 신약 후보물질 최종 설계에 필요한 주요 스크리닝 알고리즘 대부분을 갖추게 됐다.

스크리닝 알고리즘은 물질의 효능 및 독성, 체내에서의 약물동태를 예측해 후보물질을 발굴하는 기술이다. 샤페론은 연구 효율화 달성을 목표로 지속적인 고도화를 진행해 에이든의 알고리즘 종류를 ▲효능 ▲세포독성 ▲약물 흡수 ▲약물 분포 ▲약물 대사 ▲약물 배설 ▲약물 독성 등 10종 이상으로 늘렸다.

샤페론은 에이든의 스크리닝 알고리즘을 추가 확장해 기존 연구 중인 'NLRP3' 염증복합체를 포함해 다양한 염증복합체의 연구를 수행할 계획이다. 염증복합체는 'NLRP3' 외에도 'NLRP1', 'NLRC4', 'AIM2' 등이 존재하며 각 질환 별로 각기 다른 염증복합체가 작용한다. 다양한 종류의 염증복합체에 작용하는 최적화된 약물을 개발한다면 효과적인 치료가 가능할 것으로 회사 측은 예상하고 있다.

샤페론은 내년까지 AI 기술을 통한 약물 분자구조 설계가 가능하도록 에이든을 고도화할 계획이다. 최종적으로 AI 기술에 기반한 분자 동역학 시뮬레이션을 통해 에이든이 특정 표적 분자와 상호작용할 가능성이 높은 후보물질을 발굴할 수 있도록 고도화하는 것을 목표로 하고 있다.

샤페론 관계자는 “꾸준한 알고리즘 추가 확보로 선도물질 탐색 과정에서 발생하는 다양한 변수와 실험 횟수를 획기적으로 단축시킬 수 있을 것”이라며 “이는 연구개발의 효율성을 높일 뿐 아니라 다수의 신약 후보물질 발굴 가능성을 높일 것이다”라고 설명했다. 이어, “지속적인 데이터 학습을 통해 에이든을 고도화하는 한편 주요 파이프라인 연구개발 과정에도 에이든을 적극 활용해 신약 개발 성과를 가속화할 것”이라고 덧붙였다.

업계에 따르면 전세계 항염증 치료제 시장은 2023년 약 1,204억 달러에 이르며, 2033년까지 2,723억 달러 이상으로 성장할 전망이다. 항염증 치료제 시장에서 단 1%의 점유율만 확보하더라도 연간 13억 달러 (한화 약 1조 8천억원)에 이르는 매출이 발생할 것으로 예상하고 있다.