

인실리코(IN SILICO) 솔루션을 이용한 항체 개발의 효율성 및 안전성 촉진 사례 Use Case



도전과제:

전통적인 방법으로는 이종특이 항체 후보물질을 최적화하고 면역원성을 줄이는 데 많은 시간과 리소스가 소요되는 것으로 나타남

해결방안:

인실리코 모델링 및 시뮬레이션을 지원하는 BIOVIA Biotherapeutics Design 솔루션을 도입하여 탐색 프로세스를 간소화

결과:

상당한 양의 리소스 절감을 통한 후보물질 품질 개선, 후기 단계 실패 감소 및 개발 일정 가속화

고객사

혁신적인 글로벌 바이오의약품 회사

중국에 위치한 이 임상 단계 생명공학 기업은 면역계를 활용하는 혁신적인 치료용 항체를 통해 암 치료 결과를 개선하는 데 모든 노력을 집중하고 있습니다.

이 기업은 항암 분야를 중심으로 R&D를 가속화하고 차세대 항체 기반 치료제를 보다 신속하게 출시하기 위해 선도적인 글로벌 바이오제약 회사들과 협력하고 있습니다.

또한 항체 개발에 대한 전문성과 첨단 기술을 활용하여 암 치료의 발전을 위한 선도적인 역할을 수행하고 있습니다. 전담 연구팀은 혁신의 최전선에서 암 환자의 결과를 지속적으로 개선하고 있습니다.

도전과제

항체 개발 병목현상 해결

이 회사는 종양 세포를 타겟으로 하여 파괴하는 세포 인게이저로 설계된 이종특이 항체를 개발합니다. 하지만 이러한 후보물질의 최적화 및 검증 과정에서 상당한 어려움이 있었습니다. 기존의 스크리닝 방식은 노동력과 리소스가 많이 소요되어 장기간의 일정이 필요했습니다. 또한 인간화 프로토콜을 통한 면역원성 감소가 추가적인 복잡성을 야기하면서 개발 속도 저하와 비용 증가가 발생했습니다.

이러한 문제를 해결하기 위해 회사는 컴퓨터 모델링 및 시뮬레이션을 활용하여 최적의 유효성과 안전성을 지닌 고품질 항체 변이를 식별할 수 있는 고급 인실리코 솔루션이 필요했습니다. 이를 위해 구체적으로 다음과 같은 기능을 제공하는 플랫폼을 탐색했습니다.

- 결합 상호작용 예측
- 항체 변이 최적화
- 초기 개발 단계에서 면역원성 위험 평가

회사는 이러한 솔루션의 도입을 통해 개발을 간소화하고, 후보물질의 품질을 개선하며, 비용을 절감하는 동시에 일정을 가속화하고자 했습니다.

해결방안

BIOVIA BIOTHERAPEUTICS DESIGN 솔루션을 이용한 인실리코 모델링 및 시뮬레이션

BIOVIA의 종합 바이오의약품 설계 솔루션은 연구자들이 개발 워크플로를 가속화하고 출시 기간을 단축할 수 있도록 지원합니다. 이러한 솔루션은 가장 적합한 바이오의약품 후보물질을 식별하는 동시에 규제, 비즈니스 및 시장 요건을 충족합니다.

BIOVIA의 플랫폼은 컴퓨터 구조 생물학자들이 다음을 수행할 수 있도록 합니다.

- AlphaFold2, OpenFold 및 상동 모델링을 이용하여 서열을 바탕으로 3D 단백질 모델을 구축 및 정제
- RFDiffusion 및 ProteinMPNN과 같은 새로운 단백질 툴을 설계
- 단백질 구조 유연성을 시뮬레이션하고 분자 상호작용을 분석
- 응집, 점성, 용해성, 개발가능성과 같은 제형 특성을 예측
- 인간화를 통해 면역원성을 줄이고 안전성 프로파일을 개선

3DEXPERIENCE® 클라우드를 기반으로 구축된 BIOVIA 솔루션은 복잡한 모델링 및 시뮬레이션을 위한 확장 가능한 고성능 컴퓨팅을 제공합니다. 연구자들은 가상 설계를 등록하고 실험 상세 정보를 기록하여 원활한 워크플로 통합을 실현할 수 있습니다.

결과

인실리코 혁신을 통한 발전된 바이오의약품 개발

BIOVIA의 개발 플랫폼을 도입한 후 회사는 면역 및 종양 세포를 타겟으로 하는 이종특이 항체의 개발 워크플로를 간소화할 수 있었습니다.

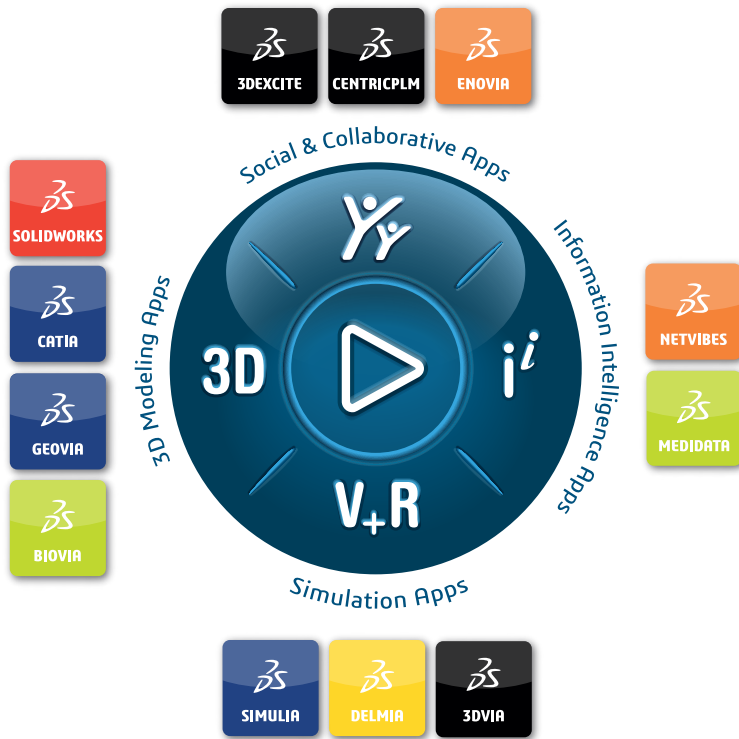
주요 결과는 다음과 같습니다.

- **효율성 향상:** 인실리코 설계를 통해 물리적 실험을 줄여 시간과 리소스를 절감
- **안전성 개선:** 면역원성 위험을 초기에 식별하여 유효성 저하 없이 항체 안전성을 개선
- **일정 단축:** 가상 예측을 통해 가능성이 낮은 후보물질을 초기에 식별하고 후기 단계 실패를 줄이며 개발가능성을 개선

회사는 제형 문제를 초기에 해결하여 차세대 바이오의약품을 보다 빠르고 효과적으로 개발하고 암 환자를 위한 결과를 개선할 수 있습니다.

“BIOVIA Biotherapeutics Design 포트폴리오는 예측 가능성이 높은 결과를 빠르고 쉽게 달성할 수 있도록 지원합니다. 이를 통해 생산 및 실험적 테스트에 필요한 샘플 수를 줄여 시간과 비용을 모두 절감할 수 있습니다. 이는 궁극적으로 환자를 위한 향상된 결과와 효과적인 항체를 도출할 수 있도록 합니다.”

— 임상단계 생명공학 기업 R&D 책임자



12개 산업부문을 지원하는 **3DEXPERIENCE®** 플랫폼은 당사의 주력 브랜드 애플리케이션으로 다양한 산업솔루션 경험을 제공하고 있습니다.

3D익스피리언스(3DEXPERIENCE) 기업인 다쏘시스템은 인류의 진보를 위한 촉매 역할을 하고 있으며, 지속가능한 혁신을 위한 종합적인 가상 환경을 기업과 사람들에게 제공합니다. 다쏘시스템은 **3D익스피리언스** 플랫폼 및 애플리케이션을 통해 현실 세계와 유사한 가상 경험을 제공하며 고객들이 자사 제품의 제작, 생산 및 수명 주기 관리 프로세스를 재정의하여 보다 지속 가능한 세상을 만드는 데 의미 있는 영향력을 발휘할 수 있도록 합니다. 또한 소비자, 환자, 시민 모두에게 이익이 되는 인간 중심의 경험 경제(Experience Economy)를 촉진합니다.

다쏘시스템은 150여 개 국가에서 규모와 상관없이 다양한 산업에 종사하는 30만 명 이상의 고객에게 가치를 제공하고 있습니다. 보다 자세한 사항은 www.3ds.com에서 확인할 수 있습니다.

유럽/중동/아프리카
Dassault Systèmes
10, rue Marcel Dassault
CS 40501
78946 Vélizy-Villacoublay Cedex
France

아시아-태평양
Dassault Systèmes K.K.
ThinkPark Tower
2-1-1 Osaki, Shinagawa-ku,
Tokyo 141-6020
Japan

미주
Dassault Systèmes
175 Wyman Street
Waltham, Massachusetts
02451-1223
USA

DASSAULT SYSTEMES | The **3DEXPERIENCE®** Company