

타겟에서 후보물질까지:

인실리코(*In Silico*) 모델링을 이용한
보다 스마트하고 빠른 바이오의약품 개발



©2025 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, the Compass icon and the 3DS logo, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALEAD, 3D VIA, BIOVIA and NETVIBES are commercial trademarks or registered trademarks of Dassault Systèmes or its subsidiaries in the U.S. and/or other countries. All other trademarks are owned by their respective owners. Use of any Dassault Systèmes or its subsidiaries trademarks is subject to their express written approval.



서론: 직관적 접근에서 AI를 활용한 더욱 가속화된 개발까지

바이오의약품 개발은 전통적으로 시행착오가 반복되는 실험, 높은 비용, 낮은 성공률이 수반되는 길고 복잡한 과정이었습니다. 지난 수십 년간 제약 R&D 분야는 주로 직관, 우연한 발견, 그리고 시간 집약적인 실험 작업을 기반으로 치료제 후보물질을 식별, 테스트, 최적화해 왔습니다. 그러나 업계가 새로운 방식과 맞춤형 의료로 전환하면서, 일정 단축, 실패율 감소, 바이오의약품 제조의 복잡성 해소 등 새로운 과제가 등장하고 있습니다.

본 E-Book에서는 랩 디지털화와 AI 기반 *인실리코*(*in silico*) 모델링이 신약 개발을 어떻게 혁신하며, 바이오제약 기업이 출시 시간 단축, 후보물질 품질 개선, 바이오 프로세스 개발 최적화, 규제 표준 준수를 실현하는 데 어떻게 기여하는지 탐색합니다. 이러한 고급 기술을 통해 BIOVIA는 연구자들이 고품질 바이오의약품을 설계 및 개발하는 데 필요한 포괄적인 애플리케이션 제품군을 제공하여 이들이 생명을 구하는 치료제 개발 경쟁에서 앞서 나갈 수 있도록 지원합니다.



목차

바이오의약품 개발의 복잡성	3
타겟에서 후보물질까지: 보다 스마트한 신약 개발 접근법	4
1단계 질병 관련 생물학적 타겟의 모델 생성	5
2단계 웨트 랩(Wet Lab) 실험 및 주기 감소	6
3단계 안전하고 효과적인 바이오의약품을 위한 바이오 프로세스 개발 및 최적화	7
4단계 약물 후보물질의 안전성 프로파일 개선	8
인실리코 모델링 및 시뮬레이션의 효과	9

바이오의약품 개발의 복잡성

신약 개발은 종종 건초 더미에서 바늘을 찾는 것에 비유됩니다. 수백만 개의 잠재적 치료 분자를 스크리닝하여 타겟에 대한 친화성이 있는 소수를 찾아내지만, 대부분은 원하는 임상 결과를 달성하는 데 실패합니다. 이러한 비효율성으로 인해 신약 개발에는 막대한 비용과 시간이 소요되며, 높은 위험이 따릅니다.

핵심 도전과제

1. 올바른 타겟 식별 및 검증

신약 개발에서 올바른 생물학적 타겟을 식별하는 것은 기본적인 단계지만, 매우 반복적인 과정이 수반됩니다. 적합성을 확인하기 위해 정밀한 실험이 필요하며, 이 단계에서의 실수가 전체 프로세스를 좌초시킬 수 있습니다.

2. 치료제 후보물질 스크리닝 및 최적화

항체 또는 펩타이드와 같은 바이오의약품은 유효성, 안전성, 제조가능성에 대한 철저한 테스트가 반드시 필요합니다. 이러한 테스트에는 엄격한 규제 표준을 충족하기 위한 여러 평가 주기가 동반되는 경우가 많고, 결국 바이오의약품 개발의 복잡성과 일정 지연을 가중시킵니다.

3. 확장성 있는 프로세스 개발

유망한 후보물질을 발견하더라도 생산의 안정성과 확장성을 확보하는 것은 쉬운 일이 아닙니다. 바이오의약품은 품질과 유효성의 유지관리를 위한 정교한 제조 프로세스를 요구합니다.

초기 실패(Fail Early)를 통한 빠른 성공

“초기 실패” 접근법은 바이오의약품 개발의 핵심 전략입니다. 분자 모델링과 AI/머신러닝은 연구자들이 많은 비용이 소요되는 랩 및 임상 테스트에 앞서 부적합한 후보물질을 초기에 걸러낼 수 있도록 지원합니다. 이를 통해 R&D팀은 가장 유망한 후보물질에 리소스를 집중하여 시간과 비용을 절감하고 성공 확률을 높일 수 있습니다.

분자 모델링 및 AI/머신러닝의 가능성

BIOVIA의 biotherapeutics design solutions은 이와 같은 도전과제를 해결하여 연구자들이 다음을 통해 광범위한 랩 실험의 필요성을 줄일 수 있도록 합니다.

- **결과 조기 예측:** 잠재력이 높은 후보물질을 우선순위로 지정
- **워크플로 간소화:** 낭비를 최소화하고 일정을 단축
- **비용 절감:** 고품질 후보물질에 리소스를 집중



수치로 보는 신약 개발의 어려움

20억 달러¹

하나의 약물이 시장에 출시되기까지 소요되는
평균 비용

10+년¹

신약 개발에 소요되는 일반적인 기간

임상시험에서의 승인율 10%²

최근 임상 시험에서 성공한 후보물질 수의 감소

¹DiMasi, 2014; DiMasi et al., 2016

²Clinical Development Success Rates and Contributing Factors 2011-2020

타겟에서 후보물질까지: 보다 스마트한 신약 개발 접근법

새로운 바이오의약품 후보물질 발굴에는 정밀성과 속도, 그리고 규제, 비즈니스 및 시장 요구 사항에 대한 부합이 요구됩니다. BIOVIA는 업계 최고 수준의 분자 모델링 및 시뮬레이션 기법을 최신 AI 및 머신러닝 모델과 결합하여 이러한 프로세스를 혁신합니다.

연구자들은 *인실리코* 환경에서 분자 행동에 대한 인사이트를 확보하고, 결과를 예측하며, 후보물질을 보다 신속하게 식별 및 정제할 수 있어 많은 비용과 시간이 소요되는 실험의 필요성이 줄어듭니다.

BIOVIA는 신약 개발 프로세스의 모든 단계에 설계기반 품질 고도화(QbD) 원칙을 적용하여 워크플로를 가속화하는 동시에 후보물질이 임상 및 시장 성공을 위한 최고 수준의 표준을 충족하도록 보장합니다.

이 접근법의 핵심은 다음과 같은 바이오의약품의 핵심적인 특성을 예측하고 최적화하는 능력입니다.

- **친화성:** 후보물질이 타겟에 얼마나 잘 결합하는가?
- **유효성:** 후보물질이 원하는 치료 결과를 제공하는가?
- **안전성:** 이상반응 또는 독성의 위험이 있는가?
- **확장성:** 바이오 프로세스의 수율이 대량 생산을 지원할 수 있는가?

이러한 요인을 초기에 해결하면 연구자들은 가장 유망한 후보물질에 리소스를 집중하고, 후기 단계 실패를 최소화하고, 생물 프로세스 개발을 개선하며, 출시 시간을 단축할 수 있습니다.

바이오의약품 개발 여정



이러한 단계는 바이오의약품 개발을 간소화함으로써 연구자들이 성공에 대한 높은 확신을 바탕으로 혁신적인 치료제를 보다 빠르고 효율적으로 제공할 수 있도록 합니다.

인실리코 타겟 모델링 핵심 내용

3D 단백질 모델을 생성하여 구조 및 기능적 인사이트 획득

가상 실험을 수행하여 약물 개발이 가능한 타겟을 우선순위로 지정

단백질 및 유전자 서열을 분석하여 새로운 타겟을 식별

지원 기술

BIOVIA Discovery Studio

BIOVIA Pipeline Pilot

1 단계

질병 관련 생물학적 타겟의 모델 생성

바이오의약품 개발은 질병 관련 생물학적 타겟의 모델을 생성하는 것부터 시작됩니다. 이 필수 단계는 전통적으로 광범위한 실험에 의존해 왔던 질병 치료를 위한 새로운 타겟 식별이라는 과제를 해결합니다.

BIOVIA Biotherapeutics Design 포트폴리오는 *인실리코* 모델링 및 시뮬레이션을 통해 이러한 프로세스를 간소화할 수 있도록 지원하므로 연구자들은 불필요한 웨트 랩(Wet Lab) 주기를 줄이고 올바른 약물 타겟에 초점을 맞출 수 있습니다.

BIOVIA의 *인실리코* 모델링이 타겟 식별을 지원하는 방법

- 생물학적 타겟의 상세 3D 모델을 생성하여 약물 개발이 가능한 결합 부위를 식별합니다.
- 유전자 및 단백질 서열을 분석합니다.
- 타겟의 구조, 행동 및 기능에 영향을 미치는 분자 역학 및 번역 후(post-translational) 돌연변이를 시뮬레이션합니다.

이 접근법은 약물 타겟의 보다 신속한 식별을 통해 새로운 바이오의약품을 개발하는 과정에서 시간과 리소스를 절약할 수 있도록 합니다.



2단계

웨트 랩(Wet Lab) 실험 및 주기 감소

바이오의약품 개발의 두 번째 단계에서는 설계-제조-테스트 주기의 횟수를 줄이는 데 중점을 둡니다.

BIOVIA Biotherapeutics Design 포트폴리오를 활용하면 연구자들이 *인실리코* 방식을 통해 가상 환경에서 잠재적인 바이오의약품 후보물질을 평가할 수 있어 물리적 테스트에 대한 의존을 최소화하고 치료제의 가능성을 보다 효율적으로 탐색할 수 있습니다.

BIOVIA의 *인실리코* 모델링 및 시뮬레이션이 후보물질 테스트를 최적화하는 방법

- homology modeling 또는 AI를 이용해 타겟 단백질의 3D 모델을 생성하여 새로운 후보물질의 스크리닝을 위한 단백질-단백질 도킹의 강력한 출발점을 제공합니다.
- AI 및 물리학 기반 모델링을 활용하여 결합 친화성, 유효성 및 안전성을 예측 및 최적화합니다.
- 분자 역학 시뮬레이션을 통해 분자 행동을 탐색하고 작용 기전에 대한 인사이트를 도출합니다.
- bispecifics, scFv(single-chain variable fragments), ADC(antibody-drug conjugates)같은 고급 모달리티를 탐색하여 가장 유망한 후보물질을 식별합니다.

가능성이 낮은 후보물질의 실험 사이클 횟수를 줄임으로써 연구자들은 높은 가능성을 지닌 후보물질에 리소스를 집중하고 개발 간소화 및 전반적 결과 개선을 실현할 수 있습니다.

인실리코 타겟 모델링 핵심 내용

가상 환경에서 다양한 치료제 후보물질을 신속히 평가하여 랩 내 시행착오를 최소화

핵심 특성을 초기에 예측하여 후보물질 선정을 개선

고급 분자 모델링 및 AI를 사용하여 바이오의약품의 품질을 강화

지원 기술

BIOVIA Discovery Studio

BIOVIA Biological Registration



바이오 프로세스 최적화 핵심 내용

가상 환경에서 바이오 프로세스 매개변수를 최적화하여
시행착오를 최소화

검증된 지식을 재사용하여 생산 효율성을 개선하고 위험을
완화

비즈니스 목표에 부합하도록 바이오 프로세스 개발을
조정하여 확장성 및 지속가능성에 중점

3단계

안전하고 효과적인 바이오의약품을 위한 바이오 프로세스 개발 및 최적화

바이오의약품 개발의 세 번째 단계는 잠재적인 바이오의약품 후보물질을
인실리코 환경에서 정제하여 해당 물질의 생물학적 무결성을 유지하는 동시에
생산을 위한 확장성을 보장하는 데 초점을 맞춥니다.

BIOVIA Biologics Process Development 포트폴리오는 연구자들이 실험
데이터를 디지털화하여 품질과 수율 요건을 모두 충족하는 안전하고 효과적인
치료를 효율적으로 생산하는 바이오 프로세스 개발이라는 과제를 해결할 수
있도록 합니다.

BIOVIA의 랩 인포매틱스 솔루션이 바이오 프로세스 개발을 혁신하는 방법

- 업스트림 및 다운스트림 바이오 프로세스 개발에서 세포주, 세포 배지 및
프로세스 매개변수를 설계, 수집 및 최적화합니다.
- 유사한 세포주 및 프로세스 조건의 데이터 등 이전 작업에서 얻은 지식을
재사용하여 개발 작업을 처음부터 다시 시작하는 일이 없도록 합니다.
- 실험계획법(DoE) 및 예측 모델링과 같은 툴을 사용하여 개발 초기에 마주하는
잠재적인 함정을 식별 및 완화합니다.
- 친화성, 유효성 및 안전성에 대한 예측과 바이오 프로세스 개발 수율을
결합하여 생산 전략을 개선합니다.

이 접근법은 과거의 전문지식과 컴퓨터 모델링 모두를 활용하여 바이오 프로세스
개발을 간소화함으로써 확장성 및 안정성을 갖춘 생산 프로세스를 구축하는 데
필요한 시간과 리소스를 절감합니다.

지원 기술

BIOVIA ONE Lab

Procedure Execution

Sample Management

Equipment Management

Inventory & Materials Management

ELN



4단계

약물 후보물질의 안전성 프로파일 개선

바이오의약품 개발의 마지막 단계는 약물 후보물질의 제형 특성과 안전성 프로파일을 향상시키는 데 초점을 맞춥니다. 높은 성공 및 확장성 가능성을 가진 분자를 식별하면 *인실리코* 모델링이 이러한 후보물질의 최적화에 도움을 줄 수 있습니다.

연구자들은 BIOVIA Biotherapeutics Design 포트폴리오를 활용하여 후보 물질의 안전성과 제형 특성을 모두 개선할 수 있습니다.

BIOVIA의 *인실리코* 모델링 및 시뮬레이션이 안전성과 안정성을 보장하는 방법

- 안전한 치료제를 개발할 수 있도록 잠재적인 면역원성 문제를 예측하고 항체를 인간화하여 많은 비용이 소요되는 제1상 임상시험의 실패를 방지합니다.
- 용해성, 점성, 응집 경향과 같은 생물물리학적 특성을 평가하여 안정성 문제를 초기에 최소화합니다.
- 가상 테스트를 통해 후보물질을 정제하고, 수정 또는 고유한 제형 접근법을 통해 안전성 및 안정성을 강화합니다.

이 접근법은 후기 단계에서 발생하는 예상치 못한 상황을 최소화하고 많은 비용이 소요되는 조정 작업을 줄여 바이오의약품이 임상 성공 및 환자 안전을 위해 최적화되도록 보장합니다.

선도물질 최적화 핵심 내용

공개된 인간화 프로토콜을 이용하여 면역원성을 감소

용해성 및 응집을 포함한 안정성 문제를 식별하여 임상 개발의 성공률을 개선

유연한 제조, 추가적인 약물 전달 옵션, 보관 및 유효기간 연장을 위해 제형 속성을 최적화

지원 기술

BIOVIA Discovery Studio

BIOVIA Biological Registration

인실리코 모델링 및 시뮬레이션의 효과

BIOVIA의 종합 모델링 및 시뮬레이션 솔루션 제품군은 AI와 머신러닝 모델을 통합하여 개발 속도를 높입니다. BIOVIA의 프로세스 개발 역량과 결합된 이러한 솔루션은 바이오제약 회사가 품질과 확장성을 보장하는 동시에 바이오의약품 개발을 가속화하는 데 도움이 됩니다.

타겟 식별부터 후보물질 개발까지 BIOVIA는 신약 개발 프로세스의 모든 단계를 지원 및 개선하여 연구자들이 새로운 바이오의약품을 개발하는 데 있어 경쟁 우위를 제공합니다.

주요 이점

- **타겟 식별 가속화:** 생물학적으로 관련된 타겟을 빠르게 발견하여 가장 유망한 후보물질에 개발 노력을 집중합니다.
- **원하는 약물 타겟에 대한 친화성 강화:** 친화성이 높은 후보물질을 식별하여 치료 결과를 개선합니다.
- **높은 생물학적 유효성:** 임상 성공 가능성이 높은 바이오의약품을 개발합니다.
- **최적의 안전성 프로파일:** 면역원성 등의 안전성 우려를 초기에 해결하여 후기 단계에서 문제 발생 가능성을 낮춥니다.
- **바이오 프로세스 수율 향상:** 최적화된 확장성 및 안정성을 바탕으로 제조 요구 사항을 효율적으로 충족합니다.

바이오의약품 개발에 미치는 영향

개발 범위 확장

수천 개의 분자를 단 몇 시간 내에 가상으로 스크리닝

성공 확률 증가

가상 설계된 항체 후보물질을 통해 성공률 75~80%

정확성 개선

최대 90%의 후보물질에서 타겟 상호작용 개선

시간 절약

초기 개발 단계 기간 최대 60% 감소

비용 절감

초기 R&D 비용 40~60% 감소

지표 출처: BIOVIA 내부 분석



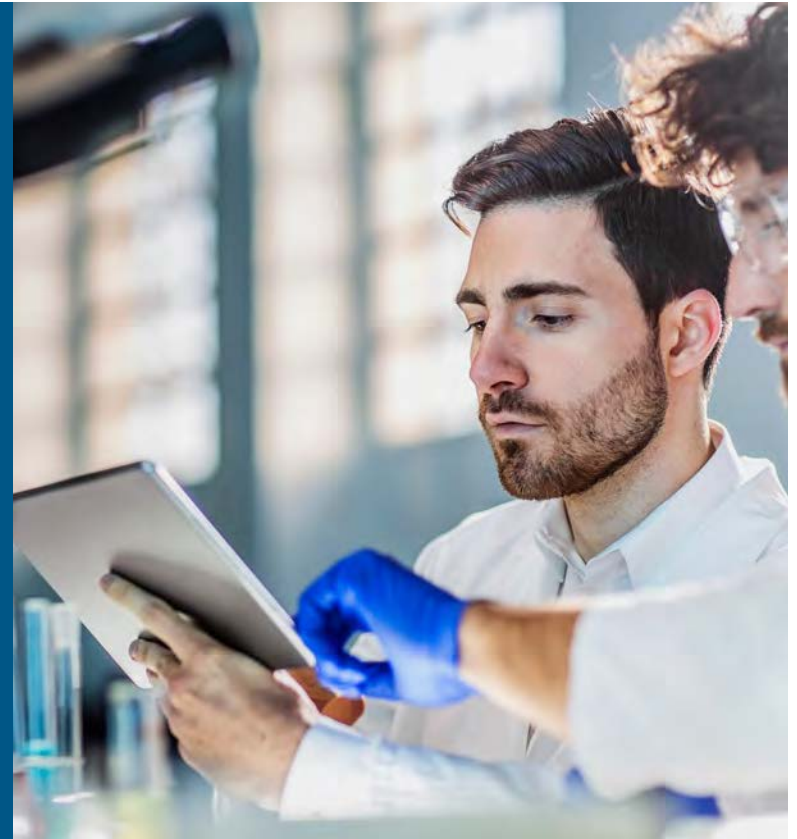
타겟에서 후보물질까지

지난 20년 동안 제약 산업은 급격한 혁신을 경험했습니다. 오늘날 생명과학 분야의 선도 기업들은 다쏘시스템의 브랜드인 BIOVIA와 협력하여 신약 개발을 가속화하고 있습니다. BIOVIA의 종합 분자 모델링 및 시뮬레이션 제품군인 Discovery Studio는 타겟 식별부터 선도물질 최적화 전반에 걸쳐 연구자들을 지원합니다.

Discovery Studio는 광범위하고 강력한 툴을 제공하여 컴퓨터 화학자와 컴퓨터 구조 생물학자가 안정적이고 최적화된 새로운 바이오의약품을 설계할 수 있도록 합니다.

발견에서 개발, 임상 제조, 상업 운전 단계로 진행되는 과정에서 데이터 추적성의 중요성은 더욱 커집니다. BIOVIA ONE Lab 솔루션은 바이오제약 회사가 혁신적인 바이오의약품을 개발하는 데 필요한 모든 과학적 워크플로와 프로세스를 지원합니다.

자세한 정보는 www.3ds.com/products/biovia/biotherapeutics-design-and-optimization에서 확인할 수 있습니다.



11개 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 혁신, 교육 및 생산의 한계를 뛰어넘을 수 있도록 하고 있습니다.

다쏘시스템은 140여 개 국가에서 규모와 상관없이 다양한 산업에 종사하는 27만 명 이상의 고객에게 가치를 제공하고 있습니다. 보다 자세한 사항은 www.3ds.com에서 확인할 수 있습니다.

