

Patent Information

- 발명자
황태욱
- Patent number
10-2022-0184890
(2022.12.26.)

Keyword

- 신약 후보물질
- 자연어 처리 모델
- 스크리닝
- 약리학 성질 시험

Applications

- 후보물질 스크리닝
- 신약 개발

Patentee & contact point



충남대학교
Chungnam National University

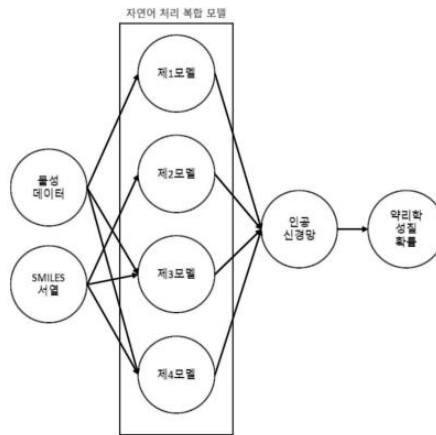
충남대학교
기술가치센터
042-821-7174
cnutlo@cnu.ac.kr

Technology Overview

신약 후보물질의 약리학적 성질 예측 기술

- 1) 물성 데이터 및 화합물 서열을 자연어 처리 복합 모델에 입력하고, 하나 이상의 벡터를 출력하는 단계 및
- 2) 벡터를 인공 신경망 모델에 입력하고 약리학적 성질 확률을 출력하는 단계를 포함함
- 후보물질의 복합적인 약리학적 성질을 다차원의 확률로 예측하여 보다 정밀하게 후보물질의 약리학적 성질 파악이 가능함
- 따라서 후보물질에 대한 스크리닝 과정을 빠르고 정확하게 진행할 수 있음

본 발명에 따른 약리학적 성질 예측 방법



Technology Highlights

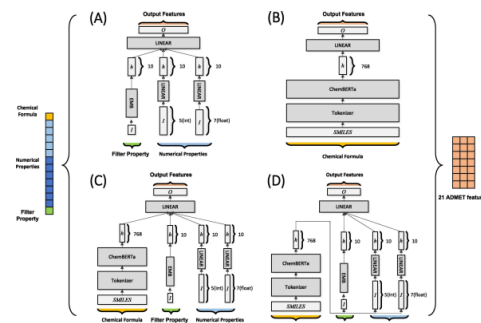
1) 벡터 출력 단계



<SMILES 포맷 화합물 서열을 입력 받는 제2모델>

- 본 발명의 자연어 처리 복합 모델은 물성 데이터와 화합물 서열을 모두 입력받으나, 제1모델 내지 제4모델마다 입력받는 데이터가 서로 다르며, 이에 따라 출력되는 화합물 특성 벡터도 서로 다른 속성을 가짐
- 물성 데이터는 정수형, 실수형 및 논리형을 포함하는 13개의 변수를 포함함
- 화합물 서열은 SMILES(Simplified Molecular-Input Line-Entry System) 포맷의 서열로, 이를 토큰화*하여 자연어 처리 복합 모델에 입력함
- 물성 데이터 및 화합물 서열 중에서 선택되는 하나 이상의 조합을 자연어 처리 복합 모델에 입력하면 화합물 특성 벡터를 출력함

2) 약리학적 성질 확률 출력 단계



<본 발명에 따른 약리학적 성질 예측 방법의 모델 구성>

- 제1모델 내지 제4모델에서 출력된 각각의 화합물 특성 벡터를 인공 신경망 모델에 입력하면 이를 소프트 보팅 방식에 따라 하나의 확률값으로 합산함
- 따라서 제1모델 내지 제4모델의 예측 결과를 모두 활용하여 모델의 성능을 대폭적으로 향상시킬 수 있음

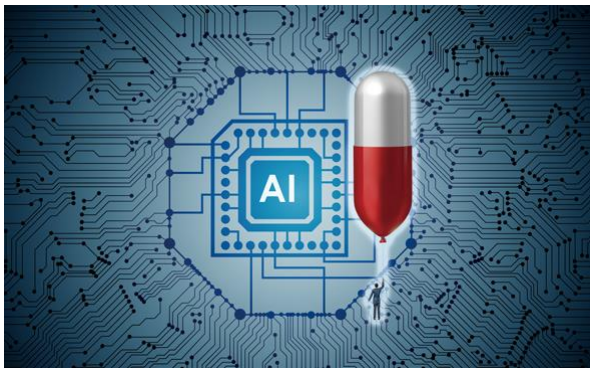
- 인공신경망은 심층학습(Deep Learning) 모델, 완전 연결 신경망(Fully Connected Network; FCN) 또는 적어도 완전 연결 레이어(Fully Connected Layer; FCL)를 가진 신경망일 수 있음
- 약리학 성질 확률은 각각 0 내지 1 사이의 실숫값을 가지는 다차원의 벡터로, 21차원의 벡터일 경우 각각 화합물의 21가지 약리학적 성질을 가질 확률과 대응함

Technology Readiness Level(TRL)



Technology Applications

후보물질 스크리닝



신약 개발



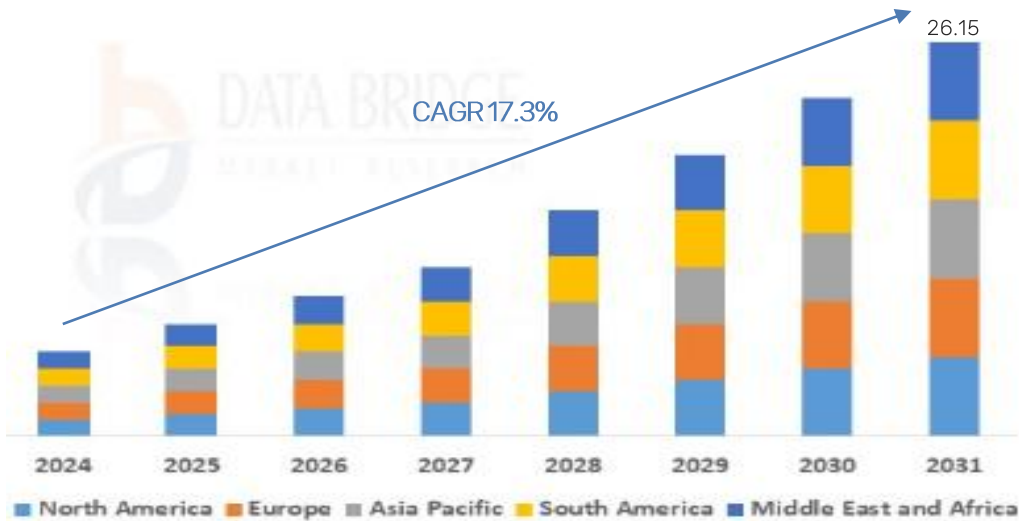
Market Trends

기술의 주요 적용 시장: 약물 스크리닝 시장

약물 스크리닝 시장규모

- 세계 약물 스크리닝 시장 규모는 2023년 73억 달러에서 2031년 261억 5천만 달러로 성장하여 예측 기간 동안 연평균 성장률(CAGR) 17.3%를 나타낼 것으로 예상됨

(단위 : 십억 달러)



[글로벌 약물 스크리닝 시장규모]

(출처: Global Drug Screening Market, Data Bridge Market Research)

- 최근에는 인공지능(AI)을 활용하여 수만 가지의 화학물질을 탐색 및 조합하여 후보물질을 찾아내고 신약 개발의 평균 소요 기간과 비용을 줄일 수 있는 'AI 기반 신약개발'이 주목받고 있음
- 대부분의 글로벌 빅파마들이 시업체와 협업하여 신약을 개발하고 있는 만큼 관련 기술의 수요가 꾸준히 증가할 것으로 전망됨