

엔비디아, 신약개발 가속화를 위한 생성형 AI 모델 공개

한국바이오협회 바이오경제연구센터

□ 엔비디아, 신약 개발을 가속화 할 수 있는 확장형 AI 모델 공개(3. 18)

- 엔비디아는 엔비디아가 매년 개최하는 GTC 컨퍼런스에서 단백질 구조 및 분자도킹 예측을 가속화 할 수 있는 새로운 '바이오네모(BioNeMo)' 모델을 공개함.
- 새로운 AI 프로그램에는 유전자 코드의 여러 영역의 기능과 돌연변이의 영향을 예측하는 것을 목표로 하는 유전체 서열에 대해 학습된 모델을 포함하고 있음. 또한, DNA 서열을 분석하고, 약물 분자에 반응하여 단백질의 모양이 어떻게 변하는지 예측하고, RNA를 기반으로 세포의 기능을 결정할 수 있음.
- 엔비디아는 잠재적인 약물후보와 3차원 구조를 예측하는 DiffDock, 단일 아미노산 서열을 기반으로 단백질 구조를 예측할 수 있는 ESMFold 등 20개 이상의 모델을 보유하고 있음.

□ 엔비디아의 BioNeMo에서 사용할 수 있는 모델

- △ (DNABERT) 방대한 양의 DNA 서열 데이터에 대해 학습되었으며 게놈의 특정 영역의 기능을 예측하고 유전자 돌연변이 및 변이의 영향을 분석할 수 있음.
- △ (scBERT) 단일 세포 RNA서열분석 데이터에 대해 학습된 모델로 유전자 녹아웃(knockout)의 영향을 예측하고 신경, 혈액 세포 또는 근육 세포와 같은 특정 세포 유형을 식별 가능
- △ (EquiDock) 단백질 상호 작용의 3D 구조를 예측해 가장 유망한 약물-단백질 조합을 식별하여 약물 발견 프로세스를 간소화할 수 있도록 지원

□ 글로벌 빅파마, 엔비디아 프로그램 활용해 워크플로우 효율성 제고 중

- Amgen, Astellas Pharma, Cadence, Iambic, Insilico Medicine, Recursion 및 Tarray Therapeutics를 포함하여 100개 이상의 바이오제약 및 AI 기반 신약개발 회사가 이미 BioNeMo 플랫폼을 사용 중
- Amgen은 항체에 대한 자체 보유 데이터를 사용해 BioNeMo의 ESM 모델을 사전에 학습시켜 물질 스크리닝 및 최적화를 5개 모델에 훈련시키는 시간을 3개월에서 몇 주로 단축
- Cadence는 BioNeMo 마이크로서비스를 Orion 플랫폼과 통합해 분자 시뮬레이션 가속화
- Insilico Medicine은 BioNeMo를 AI 가속 약물 발견 워크플로우에 통합하여 임상 단계 6개를 포함해 30개 이상의 치료제 파이프라인을 개발 중

□ 생성형 AI는 신약개발 가속화 시대를 열어주고, 디지털 수술, 디지털 생물학, 디지털 헬스에 이르기까지 다양한 영역에서 획기적인 기능을 제공할 수 있을 것으로 기대됨

<참고자료>

1. NVIDIA BioNeMo Expands Computer-Aided Drug Discovery With New Foundation Models, nvidia, 2024.3.18
2. Nvidia unveils generative AI programs for drug molecule design, protein predictions, fiercebiotech, 2024.3.20.
3. NVIDIA expands BioNeMo platform with new foundation models and microservices for AI-powered Drug Discovery, drugdiscoverytrends, 2024.3.19