발 간 등 록 번 호 | 11-1471057-000450-08
www.nifds.go.kr

R&D 웹진 통권 21호

식의약 R&D 이슈 보고서

ISSUE REPORT

2023.11

AI 기반 신약 개발



식품의약품안전처
식품의약품안전평가원

대한민국 대전환 한국판뉴딜

정책브리핑

CONTENTS

1장. AI 활용 신약 개발에 대한 이해 ····· 01

1.1 개념 ····· 01

1.2 AI 활용 신약 개발 R&D의 필요성 ····· 03

2장. AI 활용 신약 개발 최근 동향 ····· 04

2.1 AI 활용 신약 개발 산업 동향 ····· 04

2.2 AI 활용 신약 개발 제품·서비스 동향 ····· 08

3장. AI 활용 신약 개발 기술개발 현황 ····· 15

3.1 AI 활용 신약 개발 특허 동향 ····· 15

3.2 AI 활용 신약 개발 연구 동향 ····· 21

4장. AI 활용 신약 개발 정책 동향 ····· 25

4.1 국외 ····· 25

4.2 국내 ····· 32

5장. AI 활용 신약 개발 관련 이슈 ····· 35

6장. 고찰 및 시사점 ····· 37

7장. 전문가 기고문 ····· 38

7.1 AI 활용 신약 개발과 전략적 발전방향 ····· 38

7.2 신약 개발에서 인공지능 도입의 기술 활용의 전환 ····· 44



01 AI 활용 신약 개발에 대한 이해

1.1 개념

[AI를 활용한 신약 개발이란]

■ AI* 기술이 발전함에 따라 기존 전통적인 신약 개발 프로세스에 AI 기술을 접목하여 새로운 약을 개발하는 것

* AI(Artificial Intelligence, 인공지능)란 인지, 학습 등 인간의 지적능력(지능)을 '컴퓨터를 이용해 구현하는 지능'을 의미(ETRI, 2019)

- 신약 개발은 대표적인 고위험 고수익(high risk high return) 분야로, 비용과 시간이 많이 소요되나, 성공률이 낮고 노동집약적임
  - 한 제품을 출시하기까지 평균적으로 10~12년이 소요되고 연구개발 비용은 21억 6,800만 달러로 추산되었음(글로벌 상위 12개 제약사 기준)
- 신약 개발에 AI 기술을 활용할 시 후보물질 도출과 임상시험 등의 과정에서 시행착오를 줄여 시간이나 비용을 크게 감축할 수 있어 개발의 효율성 및 정확성이 확대될 것으로 예상
  - 전체 신약 개발의 비용 중 33% 이상이 소요되는 후보물질 발굴 단계에 AI 기술 적용 시 신약 개발 기간은 평균 7년으로, 개발 비용은 약 6,000억 원으로 축소[1)]

<신약 개발 단계별 AI 활용 및 소요기간>



*출처: 인공지능(AI)을 활용한 신약 개발 국내외 현황과 과제, 한국보건산업진흥원, 2020.09

1) 인공지능(AI)을 활용한 신약 개발 국내외 현황과 과제, 한국보건산업진흥원, 2020.09

<신약 개발에서 AI 활용 분야>

타켓 식별	질병의 생물학적 메커니즘을 이해하고 질병에 대응하기 위한 타켓이 되는 새로운 단백질이나 유전자를 식별하기 위해 오믹스 데이터 셋, 발현 데이터, 질병 연관성을 분석하는 데 활용
분자 시뮬레이션	분자 시뮬레이션을 가상으로 실행함으로써 후보물질 화합물의 물리적 테스트의 필요성을 절감
약물 특성 예측	독성, 생체 활성, 분자의 물리화학적 특성 등 핵심 특성을 예측하여 약물 후보물질에 대한 모의실험을 실행
후보물질 우선순위 설정	선도적인 신약 화합물이 식별되면 이러한 분자에 순위를 매기고 우선순위를 지정할 수 있음
구조 설계	가상의 약물 화합물을 생산하기 위한 구조 설계가 가능하고, 제조가 더욱 쉽도록 화합물 설계 수정을 제안하기도 함

*출처: How Artificial Intelligence is Revolutionizing Drug Discovery, BILL OF HEALTH, 2023.03

[신약 개발 적용 AI 모델]

• 신약 개발의 주기별로 AI는 다양한 활용 모델로 적용됨

<신약 개발 주기별 인공지능 활용 모델>

주기	주요 모델	내용
정보탐색 단계	대규모 정보 수집 및 종합화	▪ 수천 개의 데이터 소스로부터 데이터를 검색하여 신약탐색의 통찰력 확보 ▪ 논문 등의 데이터에서 의미 추출하여 신약탐색 효율성 증대
	기존 약물을 다른 질환에 이용	▪ 기존 약물에 대한 반응이 좋은 환자군을 대상으로 새로운 적응증 발견
후보물질 단계	약물 디자인	▪ 단백질 특성을 예측해 새로운 의약품 개발 ▪ 기존 치료제 효능을 넘는 최적화 치료제 개발
	새로운 신약후보 창출	▪ 새로운 바이오마커를 찾거나 치료제를 개발 ▪ 신약 개발의 속도와 성공률을 높이고 비용을 절감
	신약 후보물질 검증	▪ 신약 후보물질을 도출하는 시간과 부작용 개선
비임상단계	비임상시험 설계	▪ 자료를 이용해 시험설계에 시간, 비용, 불확실성 감소
	독성 예측	▪ 기존 화학구조, 독성자료를 기반으로 독성 예측
	비임상 실험 수행	▪ 어디서나 실험이 가능하도록 실험의 자동화 수행
임상시험단계	임상시험 설계	▪ 다양한 데이터에서 환자들의 대표성을 띠는 데이터를 컴퓨터 모델로 변환
	임상시험 피험자 모집	▪ 환자들의 기록 분석, 적합한 환자 모집
	임상시험 최적화	▪ 환자 데이터 분석 및 임상 실험 참여도 제고
	계량약리학	▪ 모델링 및 시뮬레이션을 통한 약효와 독성 평가

*출처: 한국생명공학연구원, 2019

1.2 AI 활용 신약 개발 R&D의 필요성

■ 세계적으로 제약산업은 핵심산업으로 자리매김하고 있으며, 그에 따라 매년 투자가 증대

- 건강에 대한 세계인의 관심이 증가하고 감염병, 급성질환 등 현대인들에게 위험을 미치는 요소에 대한 대응 마련 등을 원인으로 제약산업에 대한 투자는 증대되고 있음
  - 제약산업은 타산업 대비 연구개발 투자비 비중이 매우 높은 기술집약적 산업으로, 주요국의 제약산업 연구개발 투자금액은 매년 증가하고 있음
  - 코로나19의 영향으로 임상 및 비임상 활동이 증가하며 `21년 제약 관련 연구개발 지출은 9.8%의 높은 성장률을 나타냈으며, `27년까지 3~5%대의 성장률을 나타낼 것으로 전망됨[2)]

■ AI, 머신러닝*, 딥러닝** 등 ICT 기술이 발전함에 따라 신약 개발의 패러다임이 전환

* 머신러닝(Machine Learning, ML)이란 인간의 능력 중 학습 능력을 컴퓨터로 구현하는 기술(ETRI, 2019)

* 딥러닝(Deep Learning, DL)이란 머신러닝 영역 중 깊은 인공신경망을 토대로 학습방식을 구현하는 기술(ETRI, 2019)

- 보다 효율적이고 신속한 신약 개발을 위해서 AI, 딥러닝 등 ICT 기반의 기술력 확보 여부가 제약회사의 주요 역량으로 자리 잡고 있음
  - AI를 활용한 신약 개발은 전통적인 방식에 비해 비용·소요시간이 절감되고 효율적으로 결과 도출 가능
  - 현재 제약산업의 주요 트렌드는 기업, 대학, 연구소 간 공조하는 오픈 이노베이션으로, 신약 개발 투자 비용 절감 및 효율화를 위해 제약기업-AI기업의 협업이 점차 가속화되고 있음
  - AI의 도입으로 신약 출시 후 시장에 신속하게 진입할 수 있는 환경이 마련됨에 따라 혁신 신약을 개발한 기업의 높은 수익 창출로 인해 연구개발에 대한 투자금을 높이는 선순환 체계 구축 가능

■ AI 신약 개발 R&D를 통해 국민 복지 제고 및 사회·경제적 비용 절감 가능

- 희귀병, 감염병, 만성질환 등 국민의 건강을 위협하는 질환에 대한 즉각적인 신약 개발을 가능하게 함으로써 국민 건강을 증진할 수 있음
  - AI의 도입으로 신속하고 정확한 신약 개발이 가능해짐으로써 환자는 안전성이 보장된 신약에 빠르게 접근할 수 있고, 환자 개개별에 맞춘 환자 맞춤형 신약 개발도 가능
  - 새로운 감염병의 도래 시 빠르게 치료제를 제공할 수 있는 환경을 미리 구축하여 팬데믹의 도래에 대응할 수 있는 방편을 마련
- 의약품 데이터의 디지털 전환으로 인해 균등한 의료서비스를 제공할 수 있고, 합리적인 비용으로 제공되어 의료비 절감에 기여

2) '22년 기준 글로벌 제약산업 현황 및 전망, 한국바이오산업정보서비스, 2023.05

02 AI 활용 신약 개발 최근 동향

2.1 AI 활용 신약 개발 산업 동향

■ **글로벌 AI 활용 신약 개발 시장은 2021년 4억 1,320만 달러를 형성하였으며 2027년까지 46.0%의 연평균성장률을 기록할 것으로 전망[3)]**

- `22년 글로벌 AI 활용 신약 개발 시장은 6억 980만 달러를 형성할 것으로 추산되었으며, `27년에는 40억 350만 달러의 시장 규모를 형성할 것으로 전망됨
  - 4차 산업혁명의 핵심기술인 인공지능의 기술개발이 가속화됨에 따라 다양한 산업 분야에 적용되어 고부가가치화되는 추세임
  - 많은 시간·비용이 소요되고 성공률이 낮은 신약 개발 분야에서 AI 활용은 신약 개발의 정확성, 예측성, 속도를 향상하여 수십억 달러의 비용을 절감할 수 있도록 함
  - 만성질환 및 전염병 발병률의 증가, 소득 수준의 증가, 의료 인프라 개선 등으로 인해 의약품의 수요가 늘어날 것으로 전망
  - 하지만 AI 관련 전문인력과 데이터가 부족하고 신약 개발 소프트웨어, AI 활용 신약 개발과 관련한 규제기관의 지침이 제대로 마련되어 있지 않은 점이 성장을 저해하는 요인으로 드러남

<글로벌 AI 활용 신약 개발 시장 규모>



*출처: Marketandmarkets, 2022

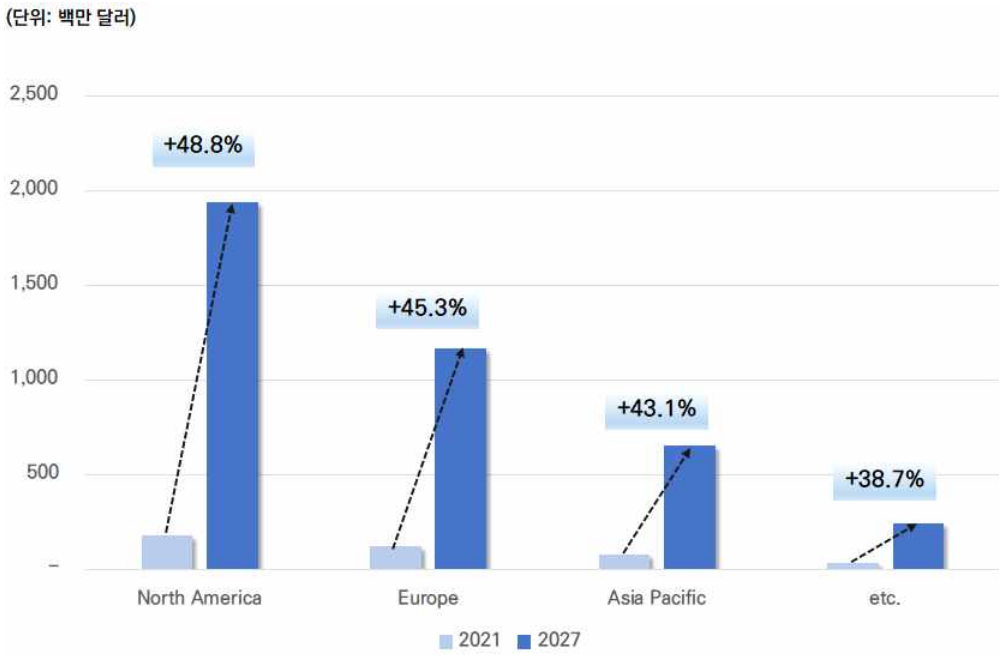
3) Marketandmarkets, 2022

■ 북미 지역은 AI 신약 개발 시장에서 가장 큰 규모를 차지하고 있으며 유럽, 아시아 순으로 나타남

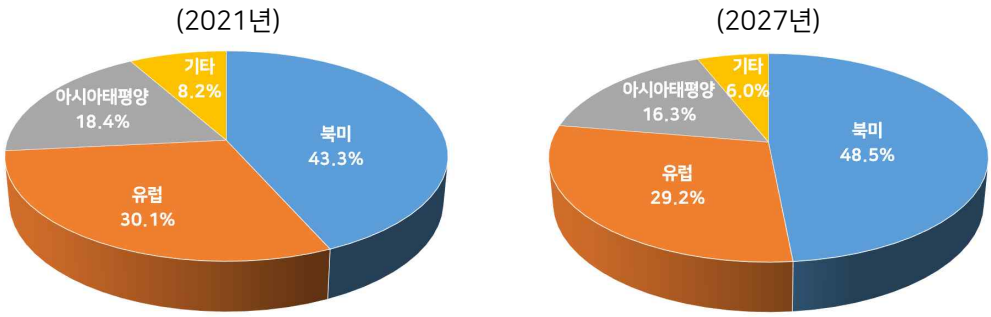
• 북미는 2021년 1억 7,890만 달러를 기록하여 전체의 43.3%를 차지했으며, 연평균 48.8% 성장률을 보이며 2027년에는 19억 4,050만 달러의 시장을 형성할 것으로 전망

- 북미는 모든 지역 중 가장 높은 성장률이 전망되었으며(48.8%), 2027년 시장 점유율에서 북미는 모든 지역 중 유일하게 증가한 시장 점유율을 나타내며 시장 내 선두자리를 유지할 것으로 예측됨

<지역별 AI 신약 개발 시장 성장률>



<지역별 AI 신약 개발 시장 점유율>



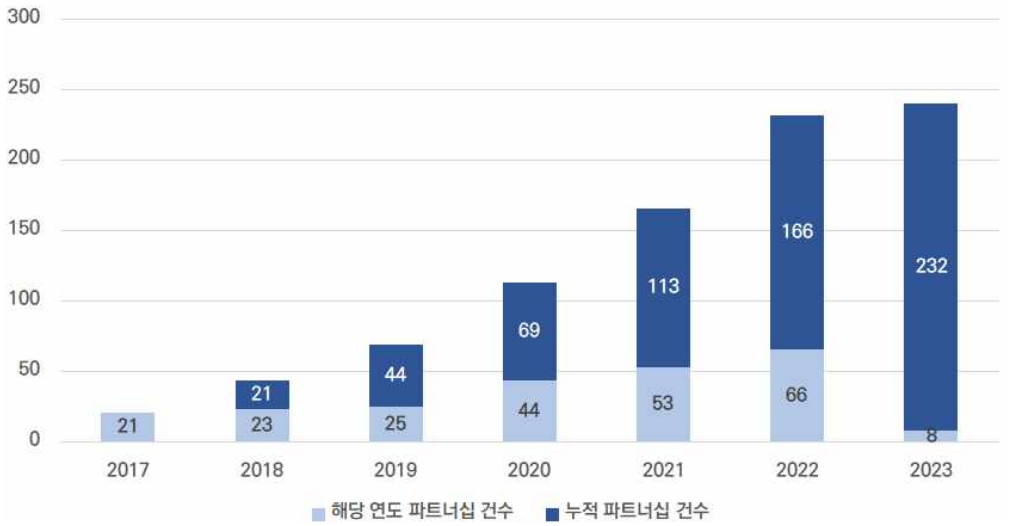
*출처: Marketandmarkets, 2022

- 특히 미국은 제약산업의 기반이 탄탄하고 많은 R&D 투자, AI 기술을 보유한 기업들과 선도적인 스타트업을 다수 보유하여 AI 신약 개발 시장 내 주요국으로 자리매김하고 있음

■ 기존 제약바이오기업과 AI 기반 기술업체의 파트너십을 통해 AI 기반의 신약 연구개발이 빠르게 증가하고 있음[4)]

• 자체 파이프라인을 보유한 AI 기반 기업의 수는 상대적으로 적은 비중을 차지했고(약 15%), 2017년부터 누적된 AI 신약 개발 글로벌 파트너십 건수는 총 232건으로 나타남

<글로벌 AI신약 개발 파트너십 건수>

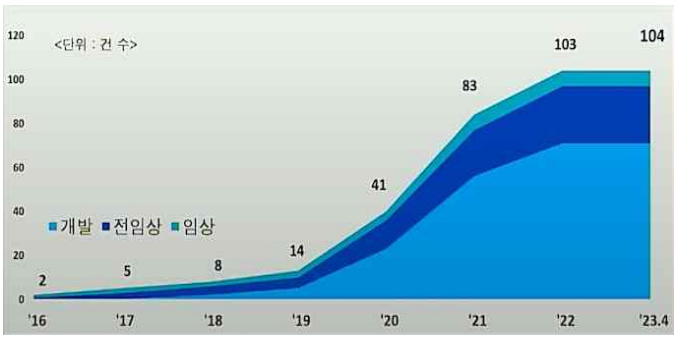


*출처: 제약바이오 AI혁신포럼 발표자료 참고, 재구성

■ 국내 AI 활용 신약 개발 시장은 지난 5년간 빠르게 성장하고 있고, `22년 기준 시가총액 포함 1조 2천억 원의 누적 투자금이 집계[5)]

• AI신약 개발지원센터*에서 조사한 국내 AI 신약 개발 기업(29개사 대상)의 누적 투자금액은 약 6천억 원이었으며, 플랫폼은 타켓 및 후보물질 도출 단계에 집중한 것으로 나타남

* 한국제약바이오협회와 한국보건산업진흥원이 공동으로 설립한 센터로 인공지능 활용기술 지원, 전문인력 양성, 조사연구, 글로벌 협력을 통한 신약 개발을 가속화하기 위해 설립



- AI 신약 개발 기업의 신약 파이프라인은 높은 상승세를 보이며 성장하였고, `22년, `23년의 완만한 성장세는 국제 정세에 따른 경기 침체에 기인한 것으로 예측됨

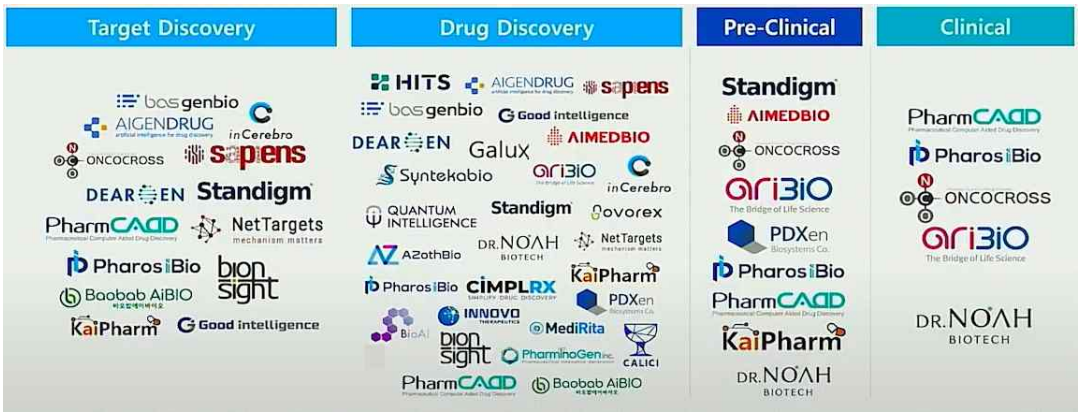
4) AI in biopharma research: A time to focus and scale), Mckinsey, 2022.10
5) 제약바이오 AI 혁신 포럼 발표자료 참고, 2023.05

- 제약바이오기업과 AI 개발사 간 협업도 활발해지는 추세로 약물 재창출 협업 10건, 타켓 발굴 10건, 후보 물질 발굴 17건 등 총 88건에 달하는 협력 건수를 기록을 나타내며 국제적인 오픈이노베이션* 추세와 비슷한 흐름을 나타냄

  * 오픈이노베이션(Open Innovation)이란 하버드 헨리체스브로 교수가 2003년 처음 소개한 개념으로, 외부조직 및 관계자와 협업하여 새로운 제품, 서비스, 비즈니스모델 등을 창출하는 것을 뜻함

- AI 신약 개발 관련 기업 수와 협업 사례는 증가하였으나, 가시적인 성과는 부재한 상황

<국내 AI 신약 개발 기업>



*출처: 제약바이오 AI혁신포럼 발표자료

- 한국보건산업진흥원이 발표한 '2022년 보건의료·산업기술수준 평가 결과를 살펴보면, 국내 AI 기반 신약 개발 알고리즘 기술은 최고 선도국 대비 74.0% 수준인 것으로 나타남[6)]

  - 의료산업 분야 내 우리나라의 평균 기술 수준은 77.3%로, 평균 기술 수준 대비 낮은 값을 나타냈으며, 기술 선도국은 미국, 뒤이어 유럽, 중국, 한국, 일본 순으로 나타남

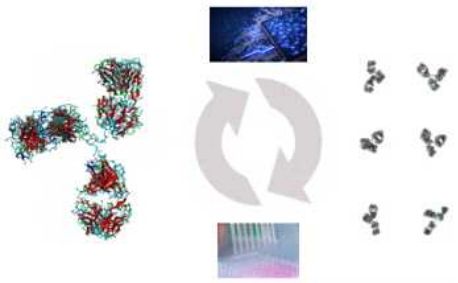
6) 2022년 보건의료·산업기술수준 평가 결과 발표, 한국보건산업진흥원, 보도자료 참고, 2023.03

2.2 AI 활용 신약 개발 제품·서비스 동향

[국외]

■ AI 기술을 특화한 바이오벤처 기업을 중심으로 기술개발이 선도되는 양상

• 중국의 펀즈즈신(分子之心)은 딥러닝 기술을 이용한 AI 유전자 단백질 최적화 및 설계 플랫폼인 'MoleculeOS'를 구축

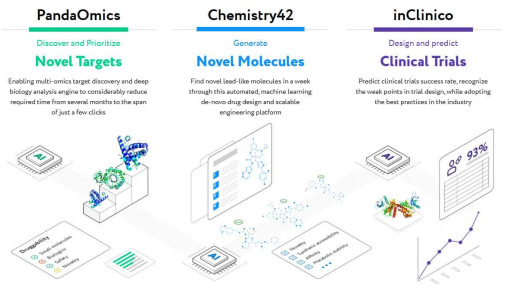


- 독자적인 기술플랫폼과 단백질 신약 개발, 고처리량 스크리닝, 약물 최적화, 비임상 효능 분석 등 높은 수준의 AI 알고리즘을 개발하여 예측·프로그래밍 가능한 신약 개발 시스템

*출처: 펀즈즈신 홈페이지 참고, http://moleculemind.com/

• 홍콩의 Insilico Medicine은 신약의 후보 물질 표적을 식별하고 저분자 구조를 설계 가능한 파마.AI(PHARMA.AI)' 플랫폼을 개발[7)]

- 플랫폼은 판다오믹스(Pandaomics), 케미스트리42(Chemistry42), 인클리니코(inClinico)로 구성되어 있으며, 이를 통해 특발성 폐섬유증(IPF) 치료를 위한 후보물질 'ISM001-055'를 30개월 만에 발견하여 임상 2상 단계에서 첫 환자 투약을 완료하였음

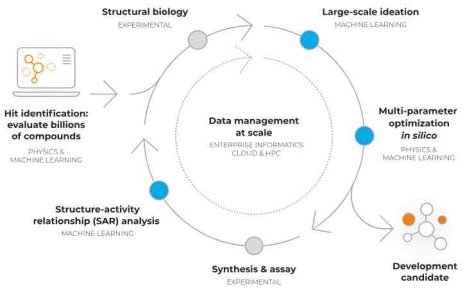


- (판다오믹스) 생체정보 및 AI도구를 활용해 오믹스 데이터를 분석하고 적합한 약물 후보의 물질 표적을 파악
- (케미스트리42) 40개 이상의 AI 모델을 활용해 새로운 화학구조를 생성
- (인클리니코) 임상 2상 시험의 약물 후보 성공률을 예측

* 출처: 인실리코 메디신 홈페이지 참고, https://insilico.com/platform

• 미국의 슈뢰딩거(Schrodinger)는 해당 분야 선두에 있는 기업으로, 분자동역학을 기반으로 한 'FEP+(Free Energy Pertubation)' 플랫폼을 개발

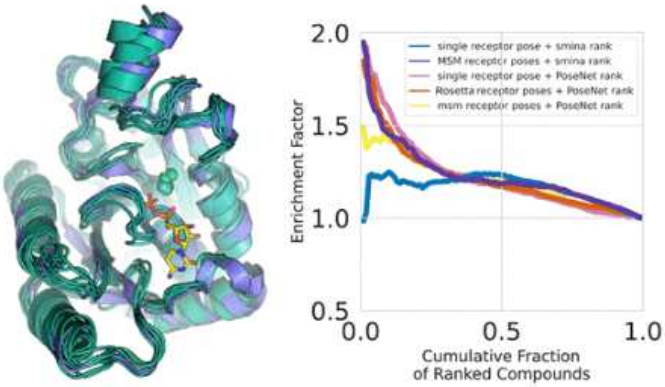
7) "AI 기반의 신약 발견은 얼마나 발전했나? – 인실리코 메디신 인터뷰", MIT Technology Review, https://www.technologyreview.kr/insilico-medicine-interview/, 2023.01



- 10개월 만에 후보 물질(SGR-155)을 확보하여 R/R 비호지킨림프종을 대상으로 한 MALT1 억제제를 개발하고 있고 현재 임상 1상으로 `23년 4월 첫 환자에게 투약을 완료하였음

* 홈페이지 참고, https://www.schrodinger.com/platform/drug-discovery

• 아톰와이즈(Atomwise)는 딥러닝 기반 접근을 통해 신약 화합물과 단백질-리간드 상호작용에 대한 우선순위 평가 기술을 향상하기 위한 ANPR(AtomNetPoseRanker)을 개발[8)]



* Kate, Brandon, et al. "AtomNet PoseRanker: Enriching Ligand Pose Quality for Dynamic Proteins in Virtual High-Throughput Screens", *Journal of Chemical information and Modeling*, 2022, pp.1178-1189

• 벤치사이언스(BenchSci)는 과학자들이 비임상단계에서 효율적으로 시약을 선택할 수 있도록 생물학 매핑을 위한 AI 소프트웨어 'ASCEND' 출시[9)]



- 머신러닝 기술을 이용해 내외부 소스에서 생물학적 연관성을 발견하여 불필요한 실험을 줄이고 시험 초기 단계에서 위험 요소를 발견할 수 있도록 함

* 홈페이지 참고, https://www.benchsci.com/platform/selector

■ 글로벌 거대 제약사는 AI 기술을 보유한 기업과 적극적인 파트너십을 통해 선도적인 제약 연구를 수행하고 있음

• 사노피(Sanofi)는 AI 신약 개발 분야에 꾸준히 투자를 진행해왔으며, 저분자화합물을 넘어 단백질 분야로 범위를 확장하고 있음

8) 아톰와이즈 홈페이지 참고(Behind the AI: Identifying Physically Realistic Interactions Between Drug Molecules and Dynamic Proteins), 2022.07
9) "BenchSci Launches AI Tool to Map Disease Biology for Preclinical Drug Discovery", GEN, https://www.genengnews.com/news/benchsci-launches-ai-tool-to-map-disease-biology-for-preclinical-drug-discovery/, 2023.02

- 최근 바이오맵(BioMap)*과 바이오의약품 발굴을 위한 인공지능 모듈 공동개발을 위해 계약을 체결하였으며 타켓과 적응증은 비공개로 진행되었음[10)]

  * 바이오맵은 60억 개 이상의 단백질, 1000억 개 이상의 단백질-단백질 상호작용(PPI), 수조 개의 단일세포 유전자 발현 측정값을 포함한 독자적 데이터 셋을 이용해 구축한 대규모 언어모델(LLM) 기반 AI 플랫폼 보유

- `22년에는 엑센티아(Exscientia), 아톰와이즈(AtomWise), 인실리코메디슨(Insilico Medicine) 등 AI 신약 개발 기업과 공격적인 파트너십을 체결하여 종양학, 면역학 등을 타켓으로 하는 저분자화합물을 개발하고 있음

• 노바티스는 `19년 마이크로소프트와의 협업을 시초로 신약 개발 과정에 AI를 활용하는 다양한 방법을 모색하였음[11)]

- 마이크로소프트와 공동으로 '인공지능 혁신 연구소(AI innovation lab)'를 설치하여 인공지능 솔루션 기반의 치료제 개발 및 상용화, 머신러닝 모델을 통한 개인화된 스마트 투약(Personalized Smart Dosing)을 계획하였다고 발표
- 인공지능 스타트업인 'Path AI'와 협업을 통해 병변 구조를 쉽게 인식하고 분석할 수 있는 시스템을 개발하여 신약 개발의 가속화를 도모

• 로슈(Roche)는 리커전(Recursion)과 10년간의 신약 발굴 파트너십을 체결하여 장기적 관점에서 신경과학, 종양학의 적응증에서 신규 타켓을 규명하고자 하였음[12)]

- 로슈는 리커전의 후보물질 발굴 플랫폼과 로슈의 광범위한 데이터·머신러닝 기술을 결합하여 신약 타켓에 대한 광범위하고 포괄적인 네트워크를 구축하고자 하였음
- 로슈는 AI 활용 종양 데이터 분석 스타트업인 플랫아이언(Flatiron Health), 빅데이터 기업 Viewics를 인수하는 등 적극적인 데이터 수집 및 오픈 이노베이션을 추진하였음

• 일라이릴리(Eli Lily)는 AI를 통한 혁신 가능성을 높게 전망하여 관련 기술을 확보한 기업과 꾸준히 제휴를 체결

- 일라이릴리는 제네시스, 아톰와이즈, 슈뢰딩거, 바이오로직 디자인, 버지 지노믹스 등 주요 AI 기업과의 신약 발굴 업무협약을 통해 파이프라인을 다양화하고 있음

• 아스트라제네카(AstraZeneca)는 베네볼런트AI(BenevolentAI)와 기존 파트너십을 3년 연장하여 베네볼런트 플랫폼을 통해 5개의 신규 표적을 발굴 중[13)]

- 기존 파트너십은 만성신장질환(CKD), 특발성폐섬유증(IPF)에 대한 신규 표적을 발굴을 목표로 하였고, 연장을 통해 전신홍반성루푸스(SLE), 심부전(HF)에 대한 신규 표적 발굴 계획을 추가

10) "사노피, 'AI' 바이오맵과 10.1억弗 딜.."단백질신약 개발"", 바이오스펙테이터, http://m.biospectator.com/view/news_view.php?varAtcId=20002, 2023.10
11) "노바티스, 인공지능 활용 신약 개발을 위한 마이크로소프트와의 협업", BIOTIMES, https://www.biotimes.co.kr/news/articleView.html?idxno=1667, 2019.10
12) 로슈 홈페이지 참고(Scaling up Drug Discovery)
13) "AZ, 베네볼런트AI와 확장계약 "SLE·HF 신규타켓 발굴"", BIOSPECTATOR, http://m.biospectator.com/view/news_view.php?varAtcId=15281, 2023.04

<AI 신약 개발 주요 파트너십>

AI 신약 개발사	파트너사	시기	내용
XtalPi	Eli Lily	`23.05	비공개 타켓에 대한 후보물질 공동개발
Insilico Medicine	Sanofi	`22.11	6개 타켓에 대한 후보물질 공동개발
Schrodinger	Eli Lily	`22.10	비공개 타켓에 대한 후보물질 공동개발
Atomwise	Sanofi	`22.08	5개 타켓에 대한 후보물질 공동개발
Generate Biomedicines	Amgen	`22.01	최대 10개 타켓의 단백질 치료제 후보물질 발굴
Recursion	Roche/Genentech	`21.12	10년간 최대 40개 뇌질환/항암 후보물질 발굴
Relay Therapeutics	Genentech	`20.12	RLY-1971과 GDC-6036 병용요법 공동개발
Schrodinger	BMS	`21.05	항암제, 자가면역질환 후보물질 발굴
Insitro	Gilead Science	`19.04	3년 계약 NASH 후보물질 발굴

*출처: 글로벌 의료 AI 동향, 미래에셋증권, 2023.06, 재구성

[국내]

■ AI 기술을 기반으로 IT기술을 결합한 신약 개발을 위해 벤처기업들의 연구개발이 활발

- S사는 자체 AI 신약 개발 플랫폼 딥매처(DeepMatcher)에 초거대 언어모델(LLM, Large Language Model) GPT 기술을 적용[14)]



- 선행 스크리닝, 심층학습 포즈 생성, 분자동역학 시뮬레이션의 3단계 과정을 거쳐 신약 유효물질을 도출하고 최적화를 통한 선도물질 발굴, 2차 타켓 및 오프 타켓 분석 등을 수행하는 플랫폼에 GPT 기술을 적용하여 선행 스크리닝 중 후보 물질 발굴 성능을 향상

* 출처: 보도자료 참고, http://www.medipharmhealth.co.kr/news/article.html?no=85106

  - 이외에 NEO-ARS(신생항원 예측 자동보고 시스템), GBL-ARS(유전적 바이오마커 자동보고 시스템)을 보유하고 5000만 개에 달하는 3D단백질-화학 결합 정보 등의 데이터를 확보하였음

- AI 플랫폼 개발을 주력으로 하는 S사는 신약재창출 및 타켓 발굴 플랫폼인 '스탠다임 애스크(Standigm ASK)'와 신약 후보물질 도출을 위한 '스탠다임 베스트(Standigm BEST)'구축[15)]

14) 보도자료 참고, 헬로디디, 2023.06
15) 보도자료 참고, 더벨 https://www.thebell.co.kr/free/content/ArticleView.asp?key=202306221604292960101966, 2023.06





*출처: 홈페이지 참고(사업 워크플로우)

• C사는 'CEEK-CURE(Create ExplainablE Knowledge-Collect and Uncover RElationships)' 플랫폼을 구축하여 신약 개발뿐만 아니라 결과 해석을 제시하는 서비스 제공[16)]



- 적응증과 관계없는 영역에서도 리간드 2종 구조 정보로 유효물질을 발굴한 사례가 있어 여타 플랫폼과의 차별성을 지님

*출처: 보도자료 참고, http://www.monews.co.kr/news/articleView.html?idxno=314719

• O사는 랩터 AI(RAPTOR AI), 온코 랩터 AI(ONCO RAPTOR AI), 온코파인드 AI(ONCOfind AI), BRONTTI 등 신약 개발 예측을 위한 AI 기반의 다양한 플랫폼을 보유하고 있음



- (랩터 AI) 전사체 기반의 질병 및 약물 탐색 플랫폼 모델
- (온코 랩터 AI) 전사체 기반으로 항암제의 암종 특이성과 동반진단마커를 예측하는 모델
- (온코 파인드 AI) 원인발부위불명암(CUP)의 발생 원인이 되는 부위를 예측하는 모델
- (BRONTTI) 알려지지 않은 약물 기전을 예측하는 모델
- (UTIRANES) 세포 및 조직의 특이성을 예측하는 모델

*출처: 홈페이지 참고, https://www.oncocross.com/overview,

■ 규모가 있는 전통제약사는 자회사 연구소와 협업하여 연구개발 및 자체 플랫폼을 구축하는 추세

• S사는 자체 관계사와 협업하여 AI 모델(약물특성예측 및 약물 설계), 화합물 데이터 보관소, AI 모델 보관소로 구성된 'AI 기반 약물 설계 플랫폼'을 개발[17)]

- (AI 모델) 머신러닝, 딥러닝 기법을 통해 개발되었으며 화합물의 ADMET(흡수, 분포, 대사, 배설, 독성) 프로파일 및 약물작용 기전을 확인할 수 있는 '약물특성 예측' 모델, 예측값을 토대로 새로운 화합물을 설계하는 '약물 설계' 모델로 구성

16) 보도자료 참고, HITNEWS, http://www.hitnews.co.kr/news/articleView.html?idxno=41883, 2022.10
17) 홈페이지 참고

- (화합물 데이터 보관소) 데이터(화합물의 실험 정보, 특허 정보 등)를 수집하고 이를 AI 학습데이터로 가공해 활용할 수 있도록 정제
- (AI 모델 보관소) 새로 학습하는 데이터를 탑재하여 AI 모델을 고도화

• J사는 자회사로 편입한 연구소를 통해 화학·생물정보학 기반 데이터 사이언스 플랫폼 '주얼리(JWELRY)'와 '클로버(CLOVER)'를 개발[18)]

- (주얼리(JWELRY)) Wnt* 신호 활성과 저해를 구별하는 플랫폼으로, 각종 질환 관련 세포주, 조직 유전체 데이터베이스, 화합물 라이브러리, Wnt 신호 조절 약물 스크리닝계로 구성되어 약물평가 및 기전연구가 가능

  * Wnt 신호전달경로는 세포의 증식·분화, 각 기관 발생 및 형태 형성에 필수적인 역할을 수행

- (클로버(CLOVER)) 암환자에게서 유래한 세포주를 비롯해 다양한 면역질환 모델 기반의 빅데이터 플랫폼으로, 자체 개발한 화학 분자 모델링 개발 프로그램을 포함시킴
- 플랫폼을 통해 발굴한 대표적 혁신 신약 후보물질은 통풍치료제 '에파미뉴라드(코드명 URC102)', 아토피 피부염 치료제 'JW1601', 항암제 'JW2286' 등이 있으며, 히스타민 H4 수용체 타켓의 'JW1601'은 임상 2b상 진행 중

■ 제약기업은 AI 기술 도입을 위해 국내외 벤처기업과 업무협약을 통한 신약 개발 추진

• 중견 제약기업인 D사는 국내외 기술 전문기업과의 협약을 통해 연구개발·오픈 콜라보레이션을 활발하게 진행 중[19)]

- 국내 AI 전문기업인 O사의 유전자 발현 패턴 기반의 AI 플랫폼을 접목하여 D사의 개발 중인 신약 '이나보글리플로진'과 'DWN12088'의 적응증을 확대할 계획
- 미국 XtalPi와 합성 치사(synthetic lethality)* 원리에 기반한 항암 신약 개발 연구를 위해 'AI 기반 신약 개발 플랫폼을 이용한 항암 신약 공동 연구 및 개발' 계약을 체결

  * 1개 유전자 이상으로는 세포사멸을 일으키지 않지만, 2개 이상의 유전자가 변이, 억제, 발현되어 그 복합적 결과로 세포사멸이 유도되는 현상

- 미국 A2A Pharma의 자체 AI 신약 설계 플랫폼인 'SCULPT'를 활용해 신규 화합물을 설계하고, 이를 통해 D사는 물질 합성 및 평가를 수행하여 항암 신약 후보 물질을 도출

• Y사는 공동연구 및 기술이전을 통해 자사가 개발 중인 신약 후보물질을 도출하는 등 오픈이노베이션 전략을 사용

- 캐나다의 바이오 스타트업인 Cyclica의 종합 약리학 특화 AI 약물 발굴 플랫폼(Ligand DesignTM, Ligand Express)을 통해 2개의 후보물질을 발굴하는 것을 목표로 공동연구개발을 진행

18) 보도자료 참고, 팜마데일리 https://mpharmedaily.co.kr/news/read?newsId=01128326635737824&mediaCodeNo=257, 2023.09
19) 보도자료 참고, medipana, https://www.medipana.com/article/view.php?news_idx=315702, 2023.08

- AI를 활용해 항체 치료제를 발굴하는 국내 바이오기업 A사와 공동연구 계약을 체결하였으며, 신약 개발 플랫폼으로 항체를 디자인한 후 Y사에서 항체를 평가하여 신약의 후보물질을 발굴하는 프로세스로 연구를 진행[20)]
- AI 기반 항암신약 작용기전 규명을 위해 국내 AI 기업 A사와 연구 협력을 맺었고, A사는 전사체 데이터 기반의 AI 플랫폼을 활용해 Y사가 개발 중인 항암신약 후보물질의 작용기전 예측 및 표적을 도출[21)]
- 바이오벤처 P사와 초기 KRAS 저해제에 대한 공동연구·기술이전(L/O) 계약을 체결하여 신약 개발 플랫폼 '케미버스(Chemiverse)'를 활용한 KRAS 저해 선도물질 및 후보물질 발굴 후 비임상, 임상개발 등의 사업화를 진행할 예정

• S사는 신약 후보물질의 발굴, 검증, 최적화 단계에 따른 각각의 AI 기업과 공동연구를 진행하며 기술을 고도화[22)]

- 캐나다 기업 Cyclica의 기술을 통해 후보물질의 특성을 고려한 약물을 발굴하고 국내 C사의 기술로 약물 구조를 분석·유효물질을 도출하여 약물 설계를 진행한 후 I사와 협업하여 신약의 후보물질을 도출
- 최근 국내 AI 신약 개발 기업인 A사와 공동연구 계약을 체결하여 신약 개발 플랫폼 AD3 기술을 적용해 개발 가능성이 높은 후보물질을 확보하기 위한 'AI 기반의 면역항암제 신약 개발 연구'에 돌입하였음[23)]

20) 보도자료 참고, BIOSPECTATOR, http://m.biospectator.com/view/news_view.php?varAtcId=19470, 2023.07
21) 보도자료 참고, BIOSPECTATOR, http://m.biospectator.com/view/news_view.php?varAtcId=18090, 2023.01
22) 보도자료 참고, 뉴스핌, https://www.newspim.com/news/view/20230602000791, 2023.06
23) 보도자료 참고, MEDICAL Observer, http://www.monews.co.kr/news/articleView.html?idxno=327411, 2023.10

03 AI 활용 신약 개발 기술개발 현황

3.1 AI 활용 신약 개발 특허 동향

가. 분석개요

■ AI 활용 신약 개발 ① 후보물질 발굴, ② 비임상 개발, ③ 임상시험 관련 특허를 기반으로 기술개발 동향을 분석함

- (분석기술) ① 후보물질 발굴, ② 비임상 개발, ③ 임상시험
- (분석특허) 주요국 특허청 5곳(한국, 미국, 일본, 중국, 유럽) 공개·등록 특허
- (분석기간) 2000년 1월 ~ 2023년 11월*

* 2022~2023년 미공개 특허 문헌 존재 연도

<AI 활용 신약 개발 분류 및 키워드>

분야	분류	핵심 키워드
AI 기반 신약 개발	후보물질 발굴	Drug Screening, Drug Discovery, Drug Design, Candidate Drug Compound, Virtual Screening, Data set
	비임상 개발	약동학 모델링, 약력학 모델링, 독성 평가, 독성 예측
	임상시험	임상시험 참가자, 복약 순응도, 모니터링, 알고리즘, 참가자 선정, 용량 최적화, 챗봇, 데이터 수집, 데이터 분석, 데이터 관리

- 총 1,203건의 특허를 대상으로 특허 분석을 수행함
  - (기술별 건수) ① 후보물질 발굴 704건, ② 비임상 개발 183건, ③ 임상시험 316건

<분석특허 현황>

분류	분석특허	분석기간	한국	미국	일본	EU	중국	총합계
① 후보물질 발굴	공개·등록 특허	2000. 1 ~ 2023.11	79	190	46	47	342	704
② 비임상 개발			15	38	9	14	107	183
③ 임상시험			22	83	14	25	172	316
합계			116	311	69	86	621	1,203

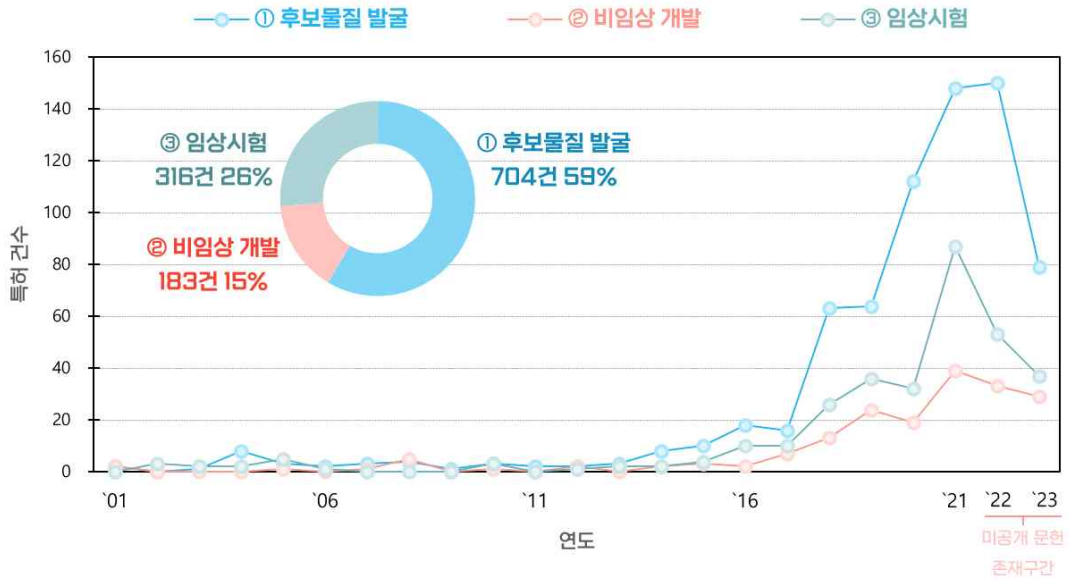
나. 국내·외 특허출원 동향

- (글로벌 동향) 2017년 이후 특허출원이 급속하게 증가하는 추세

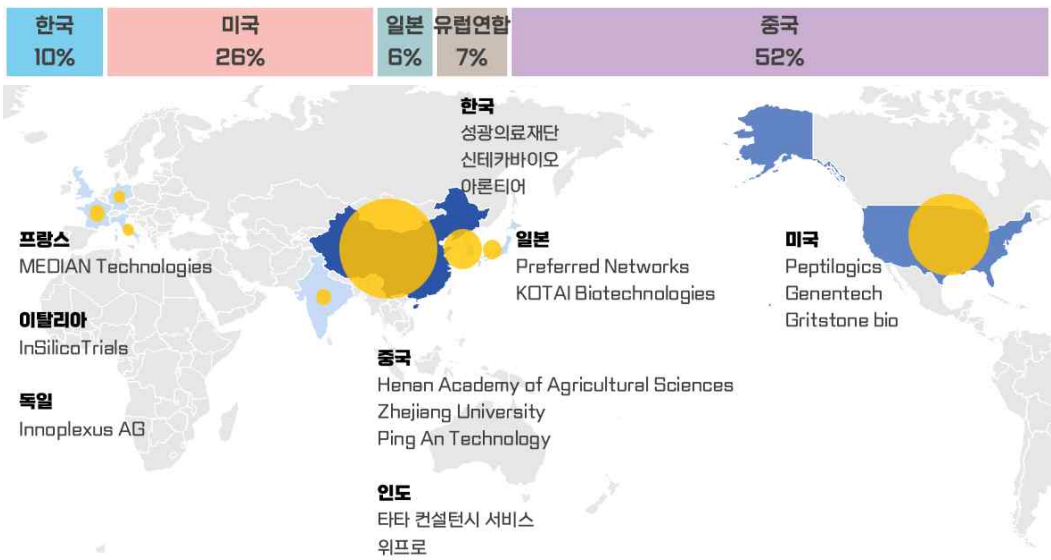
  * 2022~2023년 미공개된 특허 문헌이 존재하는 기간으로 특허 건수가 일시적으로 낮게 보임

- (기술별 점유율) ① 후보물질 발굴(59%), ② 비임상 개발(15%), ③ 임상시험(26%)
- (국가별 점유율) 중국(52%), 미국(26%), 한국(10%), 일본(6%), 유럽연합(7%)
- (최근 주요 출원인) Peptilogics(미국), Genentech(미국), Gritstone bio(미국), The Regents of the University of Michigan(미국), Henan Academy of Agricultural Sciences(중국) 등

<글로벌 특허출원 동향과 기술별 특허점유율>

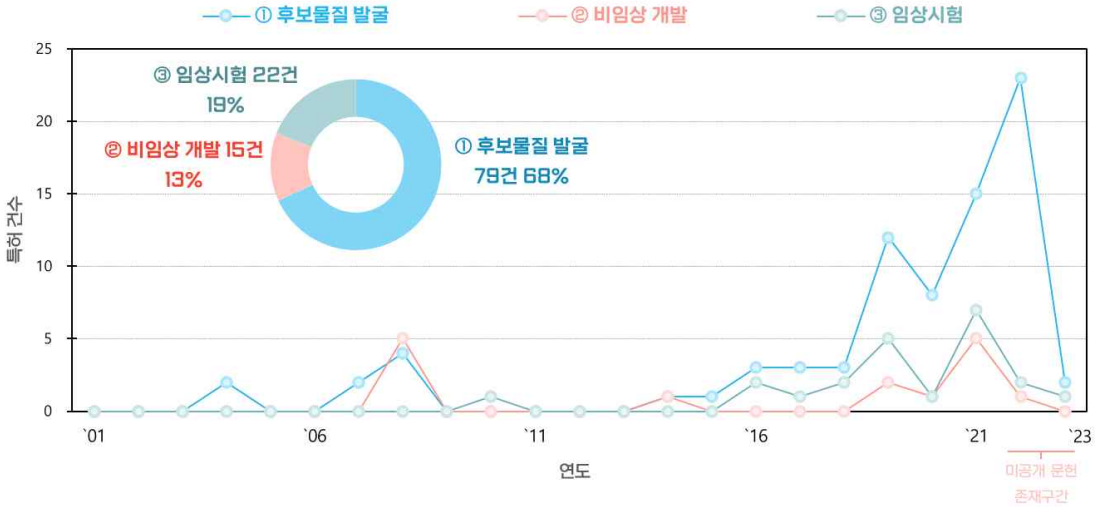


<글로벌 주요 출원인 분포도>



- (국내 동향) 2017년~2019년간 신테카바이오에서 「③ 임상시험」 관련 특허를 출원하였으며, 2019년 이후에는 성광의료재단, 아론티어, 메디리타 등에서 「① 후보물질 발굴」 특허를 출원하고 있음
- (기술별 점유율) ① 후보물질 발굴(68%), ② 비임상 개발(13%), ③ 임상시험(19%)

<국내 특허출원 동향과 기술별 특허점유율>



- (국내 내·외국인 특허점유율) 내국인(72%), 외국인(28%)으로 AI 기반 신약 개발은 내국인의 특허점유율이 높은 기술 분야로 보임
  - (내국인 점유율) ① 후보물질 발굴(76%), ② 비임상 개발(60%), ③ 임상시험(68%)
  - (외국인 점유율) ① 후보물질 발굴(24%), ② 비임상 개발(40%), ③ 임상시험(32%)

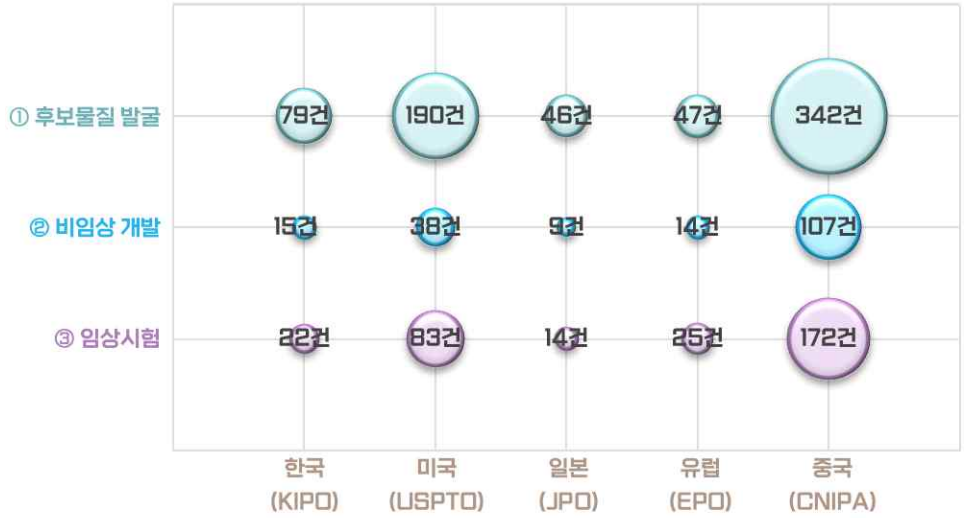
<국내 특허출원현황>

분류	특허 수	점유율	내국인 점유율	외국인 점유율	최근(`16년 이후) 주요 외국 출원인
① 후보물질 발굴	79	68%	76%	24%	Genentech(미국), Endogena Therapeutics(미국) F. HOFFMANN-LA ROCHE(스위스)
② 비임상 개발	15	13%	60%	40%	Genentech(미국)
③ 임상시험	22	19%	68%	32%	NantOmics(미국)
합계	116	100%	72%	28%	-

다. 기술별 특허출원 동향

■ 세부기술별 주요시장국 동향

• AI 활용 신약 개발의 ① 후보물질 발굴은 중국과 미국, ② 비임상 개발은 중국, ③ 임상시험에서는 중국과 미국에서 출원이 많았으며, 한국, 일본, 유럽연합은 특허출원이 상대적으로 미약한 수준을 나타냄



■ ① 후보물질 발굴 관련 기술

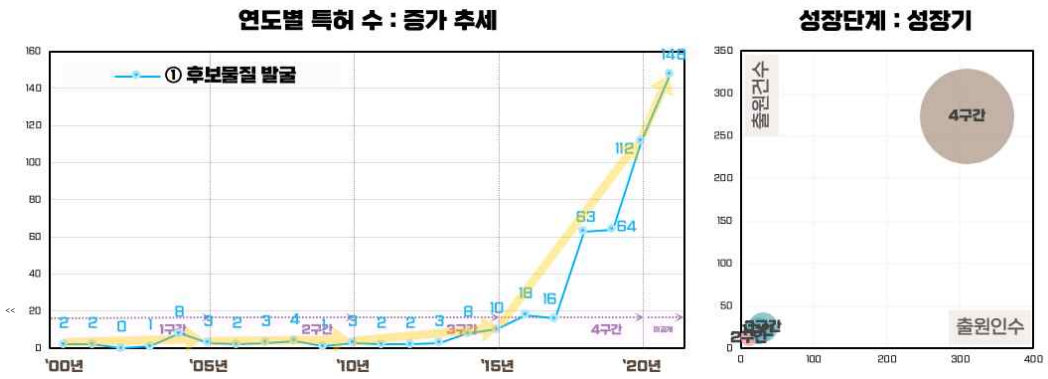
• 특허출원 활동이 활발해지는 성장기의 기술분야로 판단되며, 2016년 이후 Peptilogics(미국), Gritstone bio(미국), 성광의료재단(한국), Henan Academy of Agricultural Sciences(중국) 등 한국, 미국, 중국 기업·대학이 주요 출원인으로 나타남

• (기술 성장단계) 특허출원 수와 연구기관 수가 모두 성장하는 성장기의 시장

• (주요 연구기관) 2016년 이후 Peptilogics(미국) 20건, Gritstone bio(미국) 18건, 성광의료재단(한국) 11건

* (1구간) 2000~2005년, (2구간) 2006~2010년, (3구간) 2011~2015년, (4구간) 2016~2020년

<① 후보물질 발굴 특허출원 동향>



■ ② 비임상 개발 관련 기술

- 성장기의 기술분야로 2016년 이후 Genentech(미국)가 특허출원을 주도하고 있음
- (기술 성장단계) 특허출원 수와 연구기관 수가 모두 성장하는 성장기의 시장
- (주요 연구기관) 2016년 이후 Genentech(미국) 14건

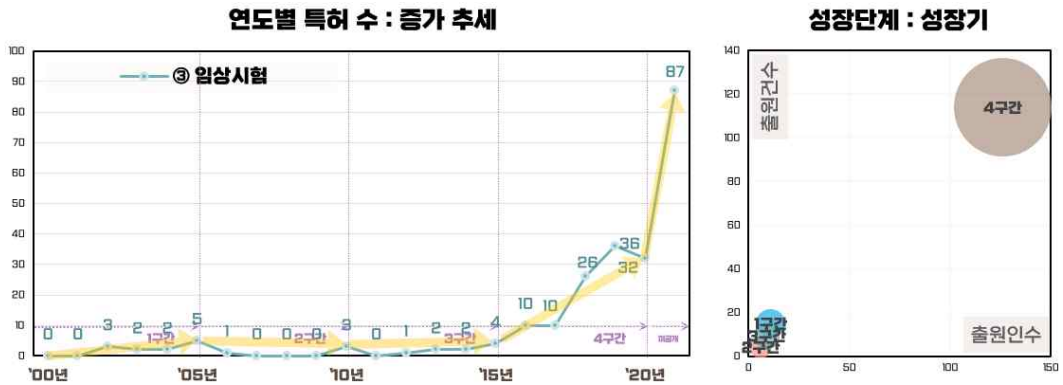
<② 비임상 개발 특허출원 동향>



■ ③ 임상시험 관련 기술

- 최근 급속히 성장하는 성장기의 기술 분야로 판단되며, 2016년 이후 The Regents of the University of Michigan(미국), Zhejiang University(중국), 신테카바이오(한국) 등 한국, 미국, 중국 대학과 기업이 주요 특허 확보 기관으로 나타남
- (기술 성장단계) 특허출원 수와 연구기관 수가 모두 성장하는 성장기의 시장
- (주요 연구기관) 2016년 이후 The Regents of the University of Michigan(미국), Zhejiang University(중국), 신테카바이오(한국) 각각 7건씩 출원

<③ 임상시험 특허출원 동향>



• 최근 주요 특허리스트

기술분류	발명의 명칭 (출원번호)	연구기관 (출원연도)
① 후보물질 발굴	다양한 펩타이드 및 펩티도미메틱스(모방 펩타이드)를 합성하기 위한 통합 인공 지능 플랫폼을 위한 방법과 장치 (US18/171574)	Peptilogics (미국)
	약물 후보를 선택하기 위한 안티 감염 디자인 공간의 프리젠테이션을 위한 향상된 그래픽 사용자 인터페이스 생성 (US17/902438)	Peptilogics (미국)
	신생 항원의 특정, 제조 및 사용 (JP2023-108111)	Gritstone bio (미국)
	세포 노화 바이오 마커 RRM2B, DUSP6, GSAP, AKAP6 또는 C2orf92, 및 이를 이용한 세놀리틱 약물*을 스크리닝 하는 방법 (KR10-2022-0155747) * 노화세포만 선별적으로 파괴하는 약물(senolytic drug)	성광의료재단 (한국)
② 비임상 개발	딥러닝을 사용하는 시험관 내 조직 샘플의 피부 독성 평가 (JP2023-506191)	Genentech (미국)
	딥러닝을 이용한 약동학 파라미터 추정 (US17/950966)	Genentech (미국)
	약물 평가 방법과 장치 (US17/528309)	DIGIST (한국)
③ 임상시험	약물 반응 및 질병 네트워크의 재구성을 위한 방법과 시스템 그리고 이의 사용 (US17/482135)	The Regents of the University of Michigan(미국)
	약물 감수성 데이터에 기초한 여러 그룹의 학생 마커 스크리닝 방법 및 장치 (CN2023-10447492)	Zhejiang University (중국)
	인간백혈구항원 하플로타입* 기반 다중 분류 인공지능 모델을 이용한 면역항암제 적응증 및 반응 예측 시스템 및 방법 (KR10-2021-0027731) * 유전되는 유전자 중 복제 오류로 생겨난 대립유전자의 집단	신테카바이오 (한국)

3.2 AI 활용 신약 개발 연구 동향

가. 분석개요

■ 정부의 AI 활용 신약 개발 관련 연구개발사업 동향 및 투자 현황을 파악하기 위해 국가과학기술지식정보서비스(NTIS)를 통한 분석 실시

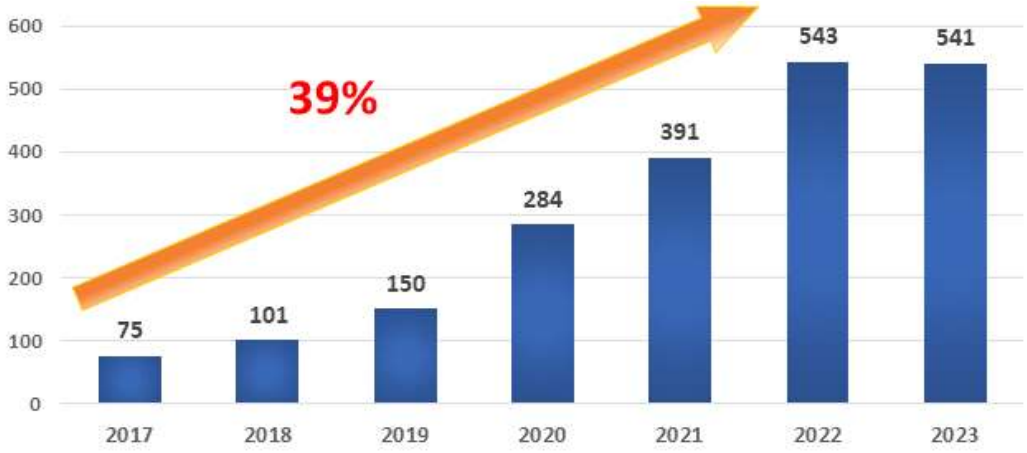
- 'AI(인공지능)'와 '신약(치료제, 의약품)' 키워드를 중심으로 연차별 사업 리스트 도출 및 이를 기반으로 한 분석을 실시하였으며, 관련성이 없거나 중복되는 사업은 배제하였음
  - **(분석 기간)** 2017년 ~ 2023년 11월, 최근 7개년
  - **(분석 대상)** 2,085건

나. 분석내용

■ 국내에서 최근 7년 동안('17~'23년 11월) 수행된 AI 활용 신약 개발 관련 R&D 과제 수 추이를 살펴본 결과, 매년 꾸준히 증가하며 2023년까지 연평균 증가율 39%를 기록

- 2020년에는 전년 대비 38% 증가하여 2022년 543건, 2023년에는 541건이 수행됐으며, 2023년 경우 현재 추이를 계속 유지한다고 가정하면 전년 대비 소폭 증가할 것으로 추정됨
- AI 기술을 융·복합하여 신약후보물질을 발굴하고 정밀의료 시스템을 개발하는 R&D에 대한 정부투자가 2020년 들어서 급증한 것으로 나타남

<국내 AI 활용 신약 개발 관련 과제 수 현황>



*출처: NTIS 재가공

< 국내 AI 활용 신약 개발 R&D 연도별 증가율 >

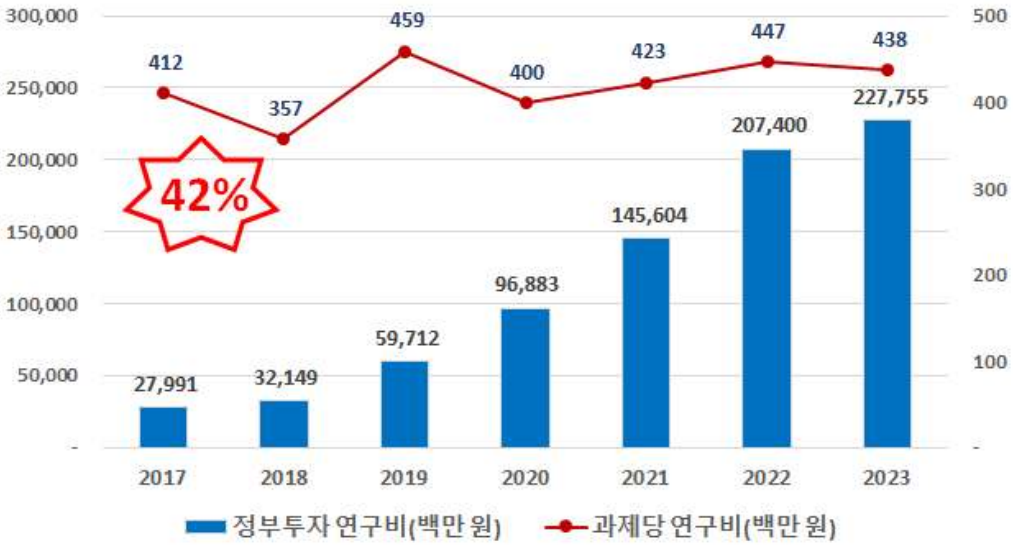
(단위: 건수, %)

구 분	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	총합계
과제 수	75	101	150	284	391	543	541	**2,085**
CAGR	-	16%	22%	38%	17%	18%	0%	**39%**

■ AI 활용 신약 개발 관련한 정부의 R&D 총 투자비는 분석 기간('17~'23.11) 내 약 7,975억 원, 과제당 평균 연구비는 4.3억 원으로 매우 높은 수준을 기록

- **(연구비 합계)** 정부투자 연구비는 2017년부터 2023년까지 전년 성장세를 이어가며 약 42% 증가했으며, 2019년은 약 36%로 가장 높은 연평균을 증가율을 보였음
  - 2023년의 경우, 당해 연도가 끝나가는 시점인 것을 고려하면, 역대 가장 높은 R&D 비용(2,278억 원)이 투입될 것으로 전망
- **(연구비 평균)** 과제당 평균 연구비는 2019년도에 전년 대비 13% 증가하며 4억 원을 넘어섰으며(459백만 원), 2020년에 소폭 감소한 이후 최근까지 상승곡선을 이어가며 2023년도는 438백만 원으로 조사
  - 최근 5년 간('19~23.08) 항암제 관련 평균 연구비가 2억 원 내외인 것을 감안하면[24], 인공지능 기반 신약 개발 원천기술 확보 및 플랫폼 구축에 많은 연구비가 소요되는 것으로 추정

<국내 AI 활용 신약 개발 관련 연구비 현황>



*출처: NTIS 재가공

■ AI 활용 신약 개발 관련 연구개발 지원현황을 부처별로 세분화하여 분석한 결과, 과학기술정보통신부가 절반 가까이(50.3%) 수행하고 있는 것으로 조사

- 과제 건수와 다르게 정부투자 연구비는 상위 부처는 과기부 4,656억 원, 보건복지부 994억 원, 산자부 566억 원, 중소벤처기업부 443억 원으로 조사
- 정부투자 연구비가 50억 원을 초과하는 12개의 과제 모두 과기부에서 지원하고 있으며, 이 중 의료데이터의 통합적 활용을 위한 지능형 SW 개발에 183억 원이 투자되었음

24) 식의약 R&D 이야기: 항암제, 식품의약품안전평가원(2023.08)

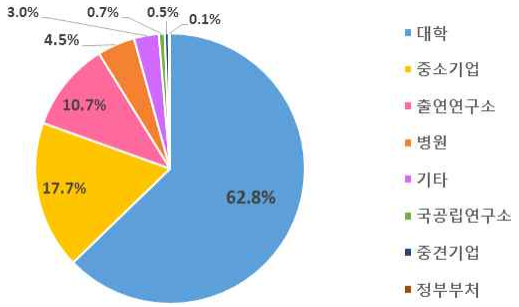
< 부처별 과제 건수 비율 >



- 부처별 과제 건수 비율은 과기부 다음으로 교육부 12%, 보건복지부 11%, 중기부 10%, 나머지 10개 부처는 모두 5% 미만인 것으로 나타남

■ AI 활용 신약 개발 관련 국가연구개발은 대학이 62.8%로 가장 높은 비율을 차지

< 연구수행 주체별 과제건수 비율 >



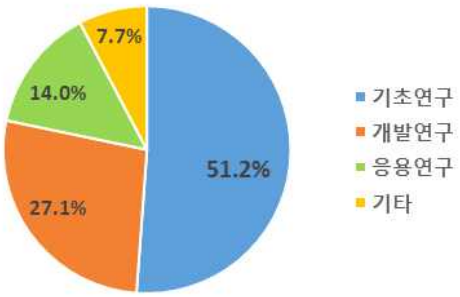
- 대학 다음으로 중소기업(17.7%), 출연연구소(10.7%), 병원(4.5%), 기타(3.0%) 순으로 나타났고, 대기업에서는 전혀 수행하고 있지 않음
- 기타 부문에서는 오송첨단의료산업진흥재단 및 대구경북첨단의료산업진흥재단 등 과반수 이상 공공법인에서 수행

■ AI 활용 신약 개발 관련 연구개발은 관련 시장이 산업화 수준은 아직 미약한 만큼 신약 후보물질 도출, 새로운 타켓 발굴 등 기초연구 단계에서 절반 이상(51.2%) 수행

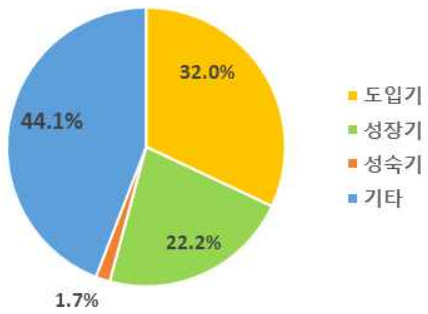
• 기초연구 다음으로 개발연구(27.1%), 응용연구(14.0%), 기타(7.7%) 순으로 조사

* 기술수명주기는 공백값(457건)은 제외하였음

< 연구개발단계별 과제건수 비율 >



< 기술수명주기별 과제건수 비율 >



■ AI 활용 신약 개발 관련 연구개발의 기술수명주기는 기타 44.1%, 도입기 32.0%, 성장기 22.2%로 나타났으며, 성숙기는 1.7%로 분석

■ AI 활용 신약 개발 관련 연구개발과제의 한글키워드를 분석하여 빈도수가 높은 핵심 키워드 도출한 결과, 딥러닝 기법 기반으로 선도물질을 탐색하고 약물 설계를 검증하는 시스템을 개발하는 연구가 높은 분포를 나타냄

< AI 활용 신약 개발 관련 연구개발 핵심키워드 분포 >



- (AI 기술 키워드) 머신러닝, 기계학습, 딥러닝 등을 활용하여 임상시험 결과를 분석하고 약물 반응을 예측하여 신약의 효과성을 평가하는 연구가 많이 수행
- (신약 개발 타켓) 근감소증, 면역항암제, 알츠하이머병 등 현재 치료제가 거의 전무한 희귀/난치성 질환에 제어 기작을 규명하고 임상시험 모델을 설계/고도화하기 위한 연구 다수 수행

■ AI 활용 신약 개발 관련 연구개발의 약 48%는 아래의 3개의 사업을 포함한 5개의 사업 하에 진행되었으며, 과기정통부 주관의 개인기초연구가 약 27% 가장 높은 비율을 차지

< 국내 AI 활용 신약 개발 관련 연구개발 주요 정부 투자비 상위 과제 내용 >

사업명	주관부처	과제명
개인기초연구	과학기술 정보통신부	▪ 차세대 유전자교정 도구를 이용한 유전적 변이의 기능 대량 규명 및 정밀 유전자 치료 기초 기술 개발 ▪ 지능형 미세유체 기반 정밀의약 합성공정 및 응용연구 ▪ 딥러닝 기반 조직이미지, 임상, 유전체 데이터 통합분석을 통한 면역항암치료 저항성 기전 연구 및 맞춤치료 모델 개발
이공학학술연구기반구축	교육부	▪ 융합과학연구소(광학이미징-인공지능-나노구조체 기술의 융합적 접근을 통한 암의 영상 및 치료제 개발) ▪ 세포 및 유전자 치료 연구소(BT·IT·NT 융합연구를 통한 미래세대 세포 및 유전자 치료제 개발 및 산업화)
창업성장기술개발	중소벤처기업부	▪ 난치성 삼중음성유방암 치료를 위한 Anti-CD96 약물 개발 ▪ 멀티 모달 인공지능 기반의 항암제 내성 예측 약물 디자인 기술 개발 및 이를 활용한 항암제 개발

04 AI 활용 신약 개발 정책 동향

4.1 국외

■ (미국) 식품의약품청(FDA)은 AI에 대한 의견서인 '신약 개발을 위한 AI&ML 활용'과 '의약품 제조에서의 AI'를 발표[25)]

• FDA는 신약 개발 수명주기와 다양한 치료 영역에서 AI/ML 사용이 증가하고 있음을 인식하며 관련 의견서를 발표하였음

- AI/ML의 현재·잠재적 사용 환경(용도), 활용에 대한 고려사항, 이해관계자 참여 및 협력에 대한 주제를 중점으로 논의를 전개

- (신약 개발을 위한 AI&ML 활용)

<신약 개발 과정에서 AI/ML의 용도>

구분	내용
후보물질 발굴	▪ 약물 표적 식별, 선택 및 우선순위 설정 ▪ 화합물 스크리닝 및 설계
비임상 연구	▪ 다중장기 칩 시스템, 독성 평가, 생체 내 예측 모델 개발을 위해 AI/ML 기술을 사용한 세포 분석 플랫폼 활용 가능 ▪ 약동학/약력학 모델링 독성 평가
임상연구	▪ 참가자 모집 ▪ 참가자 선택 및 계층화 ▪ 용량/투여 요법 최적화 ▪ 순응도 측정 ▪ 잠재성 있는 장소 선정 ▪ 임상시험 데이터 수집·관리 및 분석 ▪ 임상 엔드포인트 평가
시판 후 안전 관리	▪ 사례 식별 및 분류·검증 ▪ 사례 평가 ▪ 사례 제출
첨단의약품 제조	▪ 공정 설계 최적화 ▪ 고급 공정 제어 ▪ 스마트 모니터링 및 유지 관리 ▪ 트렌드 모니터링

*출처: FDA, Using Artificial Intelligence&Machine Learning in the Development of Drug&Biological Products

- (활용 시 고려사항) ①인간 주도의 거버넌스·책임성·투명성, ②데이터의 품질·신뢰성·대표성, ③모델 개발·성능·모니터링 및 검증

25) FDA, Artificial Intelligence and Machine Learning (AI/ML) for Drug Development

- (참여 및 협력) 참여 기회를 제공하기 위해 이해관계자와의 워크숍을 계획하고 있으며, 진행된 논의를 바탕으로 추후 프레임워크·지침 수립에 참고할 예정

• 약물평가 및 연구센터(CDER)는 의약품 제조에서 인공지능에 대한 이해관계자의 이해를 돕기 위해 논의 목적의 의견서를 발표

- 인더스트리 4.0의 초연결, 디지털화된 생태계와 제약 가치사슬을 AI로 인해 구현할 수 있다는 관점에서 의약품 분야의 AI 고려사항을 제시
- 의약품 제조 측면에서 AI의 사용 분야를 프로세스 설계 및 확장, 제조공정 제어, 프로세스 모니터링 및 결함 감지, 동향 모니터링(소비자 요구사항 식별 등)으로 구분했으며, AI의 잠재적인 적용은 확대될 것이라고 전망하였음
- AI와 관련된 고려사항

① 클라우드는 의약품 제조 데이터 및 기록 감독에 영향을 미칠 수 있음: 클라우드, 엣지 컴퓨팅의 발전에 따라 의약품 제조와 관련한 소프트웨어의 위치가 변경될 수 있으므로 데이터 무결성 제고 및 데이터 품질관리 필요

② IoT는 의약품 제조과정에서 발생하는 데이터 양을 증가시켜 기존 데이터 관리 관행에 영향을 미칠 수 있음: 원시 데이터 수집 시 의약품 제조과정에서 데이터 양이 크게 증가할 수 있어 균형이 필요함

③ 의약품 제조에 AI를 적용하는 것에 대한 규제 감독 대상 여부, 방법에 대한 명확성이 필요: 의약품 제조에 AI를 활용하길 원하는 이해관계자는 규제 감독 대상인 제조 작업(CGMP 컴플라이언스, 신약·바이오의약품 허가 신청 등)에서 AI 적용을 이해해야 함

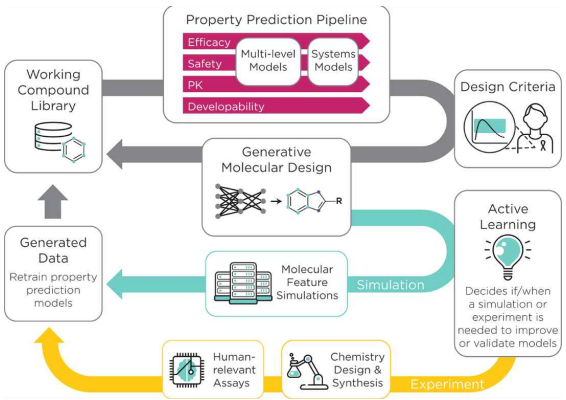
④ AI 모델 개발 및 검증, 시판을 위한 표준이 필요할 수 있음: AI는 실시간 데이터를 기반으로 매개변수 조정을 통해 프로세스 제어에 사용될 수 있으며, 품질 특성 예측, 제품 분석 절차 지원 등에 사용될 수 있음. 그 외 AI 고도화에 따라 그 영향에 대해 설명하는 것은 더욱 어려워질 것이며, 이러한 경우 AI 적용 신청자는 검증·출력 및 영향에 대한 설명을 추가적으로 제시해야 할 수 있음

⑤ 실시간 데이터에 적응하는 AI시스템을 지속적으로 학습할 시 규제 평가·감독에 어려움을 겪을 수 있음: 머신러닝 기반 AI 모델은 지속적인 학습을 통해 데이터가 진화하므로 규제 기준 결정이 어려울 수 있음. 제품 라이프사이클 전략 검증 및 계속적으로 업데이트되는 AI 통제모델에 대한 FDA 심사 접근법, 생물학적 제품에 대한 제조 조건 변경 후 제품의 비교 가능성 확립 등에 대한 명확성을 필요로 할 수 있음

■ (미국) ATOM(Accelerating Therapeutics for Opportunities in Medicine) 컨소시엄을 구축하여 AI, 머신러닝 기반의 신약 개발 연구 및 협력(`17.10)[26]

- AI, 시뮬레이션을 활용한 신약 개발에 대한 관심이 높아지고, 약물 개발에서의 패러다임 전환 필요성을 인식하여 민관 협력의 컨소시엄을 설립
  - 국립 암 연구소, 로렌스 리버모어 국립 연구소, GSK, 캘리포니아 대학교는 환자에게 이로운 혜택을 제공한다는 공동의 목적을 위해 협업하여 컨소시엄을 설립하는 데 동의
  - ATOM 포트폴리오를 확장하여 미국 내 과학계가 후보물질을 식별, 정제하고 새로운 물질을 탐색할 수 있도록 하며 AI, 머신러닝, 예측 데이터 기반 모델 등 다양한 접근법을 발전시켜 신약 후보물질 개발 및 최적화를 목표로 함
- 새로운 비임상 약물 발굴 및 개발 플랫폼 개발을 위해 슈퍼 컴퓨터, 데이터 기반 및 머신 모델링, 약리학 데이터 큐레이션 등 통합적인 접근방식을 취하고 있음
  - 오픈이노베이션, 오픈소스 전략을 통해 조직 전반에 노하우를 활용할 수 있도록 하였으며, AI 기술을 보유한 정부 출연 연구기관, 제약기업, 의료기관, 학교가 참여하는 항암제 개발 AI 플랫폼 개발사업 추진

<ATOM 비임상 약물 발굴 작업흐름도>



- 머신러닝 기반 모델을 훈련하기 위한 복합 라이브러리에서 수집된 이력 데이터를 통해 특성 예측을 진행
- 개발 가능성, 효능, 안전성, 약동학, 시스템 모델을 통합하여 일련의 약물 설계 기준 생성 및 최적화
- 실험 결과 데이터는 특성 예측 모델을 다시 훈련하는 데 사용

*출처: Accelerating Therapeutics for Opportunities in Medicine: A Paradigm Shift in Drug Discovery, frontiers, 2020.06

- `21년 3월 미국 에너지부의 3개 연구소가 AI 기반 신약 개발 플랫폼 개발을 위해 합류[27]
  - 3개의 국립연구소(아르곤 연구소, 브룩헤이븐 연구소, 오크리지 연구소)는 경험 및 전문성을 컨소시엄에 제공함으로써 연구 자원을 확대하고 AI 기반의 효과적인 치료법을 찾기 위한 협력 체결
- 암 치료를 위한 CENP-E 억제제를 개발하는 데 자체 개발한 AI 기반 예측 플랫폼을 활용[28]
  - `23년 4월 개최된 미국 암 연구 협회 컨퍼런스에서 연구 결과를 발표하였고 긍정적인 피드백을 얻어, 연구진은 올해 말까지 연구를 완성할 수 있을 것으로 예측하고 있음

26) Accelerating Therapeutics for Opportunities in Medicine: A Paradigm Shift in Drug Discovery, frontiers, 2020.06
27) Argonne NATIONAL LABORATORY, ATOM consortium welcomes three DOE national laboratories to accelerate drug discovery, 2021.03
28) Seizing Opportunities in the Air Case in Point: US-Japan Cancer Research, LINK-J. 2023.07

■ (유럽) 유럽의약품청(EMA)은 의약품 수명주기에서의 AI 활용에 대한 의견서를 발표(`23.07)[29]

• 의약품 개발, 허가, 사후 허가를 포함한 의약품 수명주기에서 인공지능과 머신러닝을 활용하는 것에 대한 고려사항을 제시

- 신약 개발, 비임상 개발, 임상시험, 정밀의료, 제품 정보, 제조, 의약품 허가 후 지원 등 의약품 수명주기 전반에서 AI의 활용이 데이터 수집·변환·분석·해석을 효과적으로 지원할 수 있음을 명시

<논의사항(Discussion) 주요 내용>

구분	내용
일반적 고려사항	▪ AI 기술의 활용도와 영향력, 위험성은 상황에 따라 달라질 수 있고 시스템의 수명주기 전반에 걸쳐 다양하므로, 초기 개발부터 폐기까지 관련 위험을 고려하고 체계적으로 관리해야 함 ▪ 모든 알고리즘, 모델, 데이터셋, 데이터 처리 파이프라인이 목적에 적합하고 윤리적, 기술적, 과학적 표준 및 EMA의 지침의 표준에 부합해야 함
규제 상호작용	▪ AI/머신러닝의 활용이 규제 의사결정에 미치는 영향이 높은 경우 규제기관과의 상호작용이 권장됨
거버넌스	▪ AI 활용과 관련한 모든 구성 요소 관리, 데이터 보호, 데이터 보호법 및 윤리 표준 준수와 관련한 모든 측면을 문서화하고 정기적으로 검토해야 함
데이터 보호	▪ 모든 데이터 처리 활동은 적법성, 공정성·투명성, 데이터 최소화, 정확성, 무결성·기밀성, 책임성, 데이터 주체의 권리 보호 원칙을 준수해야 함

*출처: Refliction paper on the use of Artificial Intelligence(AI) in the medicinal product lifecycle, 2023.07

• 의약품 수명주기에 AI를 활용 시 발생하는 새로운 위험을 방지하고 AI의 신뢰성을 높이기 위한 적극적인 조치를 권고

- 빠르게 발전하는 AI 및 머신러닝 기술은 의약품 수명주기의 모든 단계를 향상하는 데 큰 가능성을 보여주고 있으므로, 인간 중심의 접근법을 채택하여 AI·머신러닝 기술을 개발하고 배포해야 함을 강조

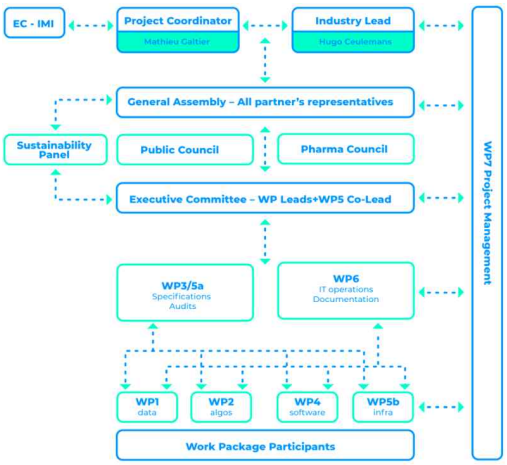
■ (유럽) 신약 개발의 효율성을 높이기 위한 AI 신약 개발 프로젝트 'MELLODDY' 구축(`19)

• 머신러닝 기반 신약 개발 프로젝트인 MELLODDY(Machine Learning Ledger Orchestration for Drug Discovery)는 제약사 간 협력모델을 제시해 신약 개발 가속화 및 효율화 도모

29) EMA, The use of Artificial Intelligence (AI) in the medicinal product lifecycle

- 신약 개발 관련 예측 모델을 훈련하고 평가할 수 있는 연합 체계를 구축하고 유연하고 확장 가능하며 안전한 AI 신약 개발 프레임워크를 수립하는 것을 목표로 함
- 유럽 혁신의약품 이니셔티브인 IMI(Innovative Medicines Initiative)로부터 3년간 1,800만 유로의 규모로 투자받음

• 전체 마일스톤과 결과물 달성을 위해 상호 의존적인 작업 패키지(WP)를 7개로 분류하여 전문성을 고도화하고 긴밀한 협업체계 구축



- (WP1) 필요하고 충분한 표준화 수준만큼 데이터 전처리 작업
- (WP2) 개인정보가 보호되는 연합 머신러닝 알고리즘 구축
- (WP3) 알고리즘 옵션 전반에 걸친 중재 및 플랫폼 운영에서의 예측 이득 평가
- (WP4) 기업 지원(감사 등) 소프트웨어 구현
- (WP5) 안전한 인프라 및 소프트웨어 배포, 산업용 IT 기술 범위 지정
- (WP6) 플랫폼 운영, 모니터링, 지속가능성 및 서비스 관련 보급
- (WP7) 전반적인 프로젝트 관리 및 커뮤니케이션

*출처: MELLODDY 홈페이지 참고

• 대규모 AI 플랫폼 운영이 단일 파트너 모델에 비해 예측 성능에서 뛰어난 성과를 나타냈으며, 후보 약물 분자 설계 및 의사결정 프로세스 지원이 더욱 우월하다는 결과 발표[30)]

- 4,000개 이상의 생물학적 분석을 기반으로 대규모의 연합학습을 통해 민감한 데이터를 보호하고 이로 인한 상업적 이득을 취할 수 있는 플랫폼을 성공적으로 개발하고 운영함으로써 새로운 모델 및 접근법을 공개

■ (영국) 향후 10년간 AI 산업에 대한 비전을 제시한 '국가 인공지능 전략(National AI Strategy)' 발표(`21.09)

• 연구, 혁신, 인재 등 AI 분야의 강대국으로서 영국은 민간·공공 부문 전반에 걸쳐 역량을 높이고 글로벌 입지를 강화하기 위한 국가 AI 전략을 제시

- AI 강대국으로서 리더십 지속을 위한 장기적 요구사항 투자·계획, AI를 통해 영국 전역에 경제적 혜택을 줄 수 있도록 보장, 혁신·투자를 장려하여 AI 기술에 대한 국내·국제 거버넌스 확보하기 위한 전략 수립

30) MELLODDY 홈페이지, Largest-ever pharma industry artificial intelligence collaboration utilizing a federated model holds potential benefits for drug discovery without compromising IP, landmark project finds, 2022.07

- 공공의 이익을 위해 코로나19 치료제 판별에 AI를 활용한 것을 예로 들며 전 세계가 당면한 주요 과제를 해결하기 위한 AI 기술개발을 해야 함을 명시
- NHS AI 연구소는 의료 부문에서 AI 기술 테스트, 평가 및 기술 확장을 지원하기 위한 기관으로, 안전하고 효과적이며 윤리적인 AI 기술의 개발을 장려

• 잇따라 AI 실행계획(AI Action Plan)을 발표하며 각 정부에서 취하고 있는 구체적인 조치를 요약하여 제시(`22.07)

- 국제 AI 활동에 대한 범정부적 접근법을 개발하기 위해 정부 부처 간 AI 협업 이니셔티브 확대, AI 전문가 인력 양성, AI 규제 생태계 조성 등 국가 AI 전략에 제시된 내용이 많은 진전을 나타냄

<영국 국가 AI 전략>



*출처: National AI Strategy, 2021.09

■ (일본) 이화학연구소(RIKEN)는 AI, 빅데이터를 활용한 신약 개발을 위한 컨소시엄 및 사업부를 설립[31)]

- 일본 이화학연구소는 일본 최대의 종합연구기관으로, 민관 협력 차원의 컨소시엄인 '라이프 인텔리전스 컨소시엄(LINC)'을 설립(`16.11)
  - 생명과학 분야의 AI 개발을 고도화하기 위한 제약, 의료, 헬스케어 등 IT기업·생명과학 기업을 포함한 100여 개의 기업과 조직을 대상으로 민관 협력 체계 구축
  - 생명과학 분야에서 AI, 빅데이터를 개발하고 사회에 원활한 적용을 위해 인적자원 개발 및 기술개발, 디지털 전환을 촉진함으로써 경제를 부흥시키는 것을 목표로 함
  - (주요 업무 내용)AI/DB 플랫폼 개발, 디지털 건강 및 의학/RWD 분석, 표적 탐사 및 생물정보학, 생물학적 제제, 분자 시뮬레이션, 의약화학, 제형 및 재료 정보학, ADMET 및 중개 연구, 임상시험/시판 후 의료 업무, 인적 자원 개발
  - (연구 성과) AI를 이용한 단백질 결정 구조 평가 기술개발, 화학 구조식을 사용해 화합물 특성을 예측하는 딥러닝 기술을 활용한 'SCIQUICK-DT' 출시 등
  - 최근에도 라이프 인텔리전스 컨소시엄은 신약 개발 플랫폼 구축, 연구개발, 사업 참여 등을 활발히 하며 생명과학 분야의 발전을 도모

    * 소사이어티 5.0 활용 촉진 사업의 일환인 '후카쿠 기반 신약 개발 DX 플랫폼 구축' 사업 참여(`22.06), AI를 이용한 단백질 결정 구조 평가 기술 확립(`21.12), 화학 구조식으로 화합물의 특성을 예측하는 딥러닝 기술을 사용하는 'SCIQUICK-DT' 개발(`21.09) 등

- 이화학연구소 내 전산과학연구센터, 첨단지능프로젝트센터 등 AI를 활용해 신약을 개발하는 다수의 사업부 보유
  - (첨단지능프로젝트센터, AIP) `16년 4월 문부과학성의 지원 하에 설립되었으며 기술연구 그룹, 목표지향기술연구그룹, 사회적용을 위한 사회연구 그룹으로 구성
  - (전산과학연구센터, R-CCS) HPC·AI 기반 신약 개발 플랫폼 사업부 하에 분자 설계 인공지능 부서, AI 기반 신약 개발 협업 부서 등이 소속되어 있으며, 기술 간 통합을 통해 새로운 방법론 발굴 및 플랫폼 구축을 목적으로 함

■ (중국) 2020년 바이오 의료산업 전반에 AI를 활용할 것을 선언하고 AI 신약 플랫폼 구축 사업을 추진[32)]

- 국가발전개혁위원회는 제14차 5개년 계획(2021-2025)에서 IT를 활용한 신약 개발이 주요 개발 분야로 선정했으며, 바이오의약품에 AI를 접목하여 이중항체, 항체융합단백질, 항체결합약물 개발에 착수

31) RIKEN 홈페이지 참고
32) "글로벌 제약바이오 산업 핵심은 'AI'… 벤처 투자·지원 확대해야", 매일일보, https://www.m-i.kr/news/articleView.html?idxno=1034447, 2023.07

4.2 국내

■ 「제3차 제약바이오산업 육성·지원 5개년 종합계획」(범부처, `23.03)[33]

- 정부는 5년 주기로 제약바이오산업의 글로벌 중심국가로의 도약을 위해 전략적인 육성과 지원을 담은 종합계획을 제시
  - 특히 이번 계획에서는 AI·빅데이터 등 신약 개발 부문에서의 디지털 전환을 촉진하는 방향으로 연구개발을 강화하는 과제가 발표되었음
- AI 활용을 통한 신약 개발의 성공 가능성을 높이고 관련 전문인력을 양성하기 위한 세부과제를 제시
  - 인공지능을 활용하여 파이프라인 확대, 비용 절감 및 기간 단축 등 효과성을 개선하고 이러한 환경 변화에 따른 핵심인재를 양성하기 위한 세부과제 발표
  - (AI 신약 개발 관련 세부과제)

전략	내용	세부과제
AI·빅데이터 등 신약 개발의 디지털 전환 촉진	기술 로드맵 수립 및 성공사례 창출 지원	▪ 신약 개발 단계별 적용되는 AI 요소기술 정립 및 로드맵 수립(`23, 복지부/과기부) ▪ 공공 인공지능 플랫폼 고도화를 통한 가시적 성과 창출(`22~`26, 과기부) ▪ 제약기업의 기술수요와 AI기업의 기술공급 매칭 지원 및 성공사례 축적(`24~, 복지부)
	AI 신약 개발 플랫폼 개발로 신약 개발 가속화	▪ 단백질 구조 예측 및 항체 설계가 가능한 '(가칭)한국형 로제타폴드' 구축 추진(`24~, 복지부) ▪ 비임상·임상에서 활용 가능한 인공지능 신약 개발 플랫폼 개발 추진(`24~, 복지부/과기부)
	빅데이터 연합형 인공지능 플랫폼(FDD) 등 AI 활용 인프라 구축	▪ 민감 데이터의 효과적 활용을 위한 연합학습모델 기반 신약 개발 가속화 지원(`24~, 복지부/과기부)
제약바이오 산업 핵심인재 양성	AI 활용 신약 개발 전문가 양성	▪ 현장 수요 기반 AI 신약 개발 특화 교육과정 개발 및 향후 5년간 전문인력 1,650명 양성(`19~, 복지부) ▪ 산학 공동 AI 융합 프로젝트를 통해 향후 AI 융합인재 1,160명 양성(`22~`26, 과기부) ▪ 융합학과 개설·운영 및 현장 수요기반 프로젝트형 교육 개발·운영(`23~, 복지부)

*출처: 제약바이오산업 육성·지원 5개년 종합계획 참고, 2023.03

33) 「제약바이오산업 육성·지원 5개년 종합계획」, 범부처, 2023.03

■ 「디지털바이오 혁신전략」 (과기정통부, `22.12)[34]

• 세계 주요 산업으로 부상하는 바이오 분야에 첨단디지털 기술을 도입하여 기술혁신을 가속화하고 바이오 강국으로 도약하기 위한 혁신전략을 발표

- 바이오산업에 대한 주요국의 기술혁신 정책에 대응하여 우리나라의 바이오 기술경쟁력 및 자립도를 높이기 위한 생명공학 기술혁신 전략으로서 마련되었음
- `30년까지 세계 최고 대비 85%의 기술 수준과 2.5년의 기술격차를 목표로 하였으며, `23년 연구개발에 4천억 원을 지원하여 중장기적인 육성을 도모하고자 하였음

• 본 전략의 12대 핵심기술* 중 인공지능 신약 플랫폼, 첨단 신약이 포함됨

* ①유전자 편집·제어·복원 ②줄기세포 치료기술 ③인공지능 신약 플랫폼 ④인공 유사장기 ⑤첨단뇌과학 ⑥전자약 ⑦디지털치료제 ⑧바이오닉스 ⑨디지털그린 공장 ⑩마이크로바이옴 ⑪첨단 신약 ⑫병원체 극복기술

- 'Ⅰ.디지털바이오 신기술·신산업 창출'은 디지털 분석기술을 통한 유효물질 개발, 작용기작 분석 등 신약 개발 원천기술 확보를 위한 지원을 포함
- 'Ⅱ.디지털바이오 기반기술 확보'에서는 인공지능 기술을 활용한 신약 후보물질 발굴 플랫폼 기술 고도화 지원을 포함
- 이외에도 국가 바이오 데이터 스테이션(K-BDS) 구축, 바이오 연구 활성화를 위한 네트워크 구축, 인력 양성 등 바이오 혁신생태계를 조성하고 디지털 전환을 통한 바이오산업 활성화를 지원

<디지털바이오 혁신전략 추진전략>



*출처: 디지털바이오 혁신전략 보도자료 참고

34) 「디지털바이오 혁신전략」, 과기정통부, 2022.12

■ 보건복지부는 AI 기반 신약 개발 가속화를 위해 'AI신약 개발지원센터'를 개소(`19.03)[35]

- 인공지능을 활용해 신약 개발에 소요되는 시간과 비용을 단축하고 전문인력 양성 및 글로벌 협력을 통해 신약 개발을 가속화하기 위해 센터를 구축
  - 한국보건산업진흥원과 한국제약바이오협회는 2017년 12월 '인공지능 신약 개발 지원센터 추진단'을 발족하고 2018년 2월 업무협약을 체결한 후 'AI신약 개발지원센터'를 공동으로 설립하였음
  - `21년 6월 인공지능 신약 개발 교육플랫폼(LAIDD)을 오픈하여 현재 51개 과목을 운영 중이며, `22년 10월에는 인공지능 신약 개발 정보플랫폼(KAICD)을 구축

<AI신약 개발지원센터 사업 목표>



*출처: AI신약 개발지원센터 홈페이지 참고

- 산·학·연 연계지원을 통한 AI 신약 개발 혁신 도모, 전문인력 양성, 기술 및 인프라서비스 제공을 통한 성공사례 도출, 제약바이오산업의 디지털 전환을 지원하는 사업 수행
  - (인력 양성) 인공지능 신약 개발 교육플랫폼을 통한 온라인 교육과정 제공, 다양한 기관과의 협업을 통한 실무교육 및 프로젝트를 수행하는 협력-교육 사업을 진행하여 취업 연계
  - (연구개발 지원) 제약, 바이오, 공공기관, 병원 등 다양한 기관과 협업 연구 프로젝트* 진행, 연합학습기반 신약 개발(FDD) 플랫폼 구축 계획 중

    * 육종암 환자 Multi-Omics 데이터 기반 임베딩 모델 설계(`21.03~), 연합학습 기반 약물-표적 상호작용 예측 모델 설계(`21.04~`21.12), 약물 표적 상호작용 예측 모델 설계(`21.04~`21.11) 등
  - (기술 지원) 수요 기술 조사 및 발굴-기술 지원 파이프라인 기획-수요 기업별 기술 활용-개선의 사이클로 구성되는 기술 지원 체계 확립
  - (협업 지원) 제약사-AI 기업 간 협업을 위해 협력 지원, 기술 홍보, 기업 니즈 및 현 기술 수준 파악 등 AI 신약 개발 오픈이노베이션 서비스 제공

35) 인공지능(AI) 신약 개발 75억 투입…지원센터 개소, Dailymedi, https://www.dailymedi.com/news/news_view.print.php?wr_id=841145, 2019.03

05 AI 활용 신약 개발 관련 이슈

■ 국내 AI 신약 개발의 활성화를 위해서는 제약기업과 테크기업의 협업이 우선적인 사항임

- 글로벌 대형 제약사는 유망한 AI 기업과의 제휴를 통해 기술이전 및 공동연구를 진행하는 추세이며, 빅테크 기업이 동참하여 산업 생태계를 조성하고 있음
  - 글로벌 주요 기업의 AI를 활용한 신약 후보물질이 임상 2상을 성공하여 임상 3상에 진입하고 있는 반면 국내 AI 활용 신약개발은 걸음마 단계로[36], 주요국(미국, 유럽, 중국, 일본)에 비해 기술 수준이 낮고 신약개발에서의 AI 활용범위가 넓지 않은 상황
- 국내 헬스케어 산업과 AI 산업은 각각 상당한 역량을 보유하고 있으므로, 두 분야를 연계하는 플랫폼이나 연구를 통한 AI 신약 개발 산업 지원이 필요

■ AI 신약 개발의 활용 및 상용화를 위해서는 인력 확보 또한 주요 이슈가 되고 있음

- AI 신약 개발에 투자하는 주요국의 정책 중 빠지지 않는 것이 AI와 신약 개발 역량을 갖춘 융합형 인재 양성임
  - AI 신약 개발 관련 인력의 부족은 전 세계에서 동시다발적으로 발생하는 산업 내 주요 장애물로 부상하고 있어 이에 대한 대비가 필요한 상황
- 국내 AI 신약 개발 관련 주요 정책에서도 인력 양성은 플랫폼 구축, 계약학과 개설 등 다양한 방식으로 진행되고 있음
  - 관련 분야의 인력이 유입될 수 있도록 적극적인 홍보를 진행하고 취업 연계, 네트워크 형성 등의 지원을 확대하여 전문인력의 풀 확장 필요

■ 신약 개발의 정확도 및 효율성 제고를 위해서 기반 데이터를 확보하는 것이 관건

- AI는 다량의 데이터를 단시간에 처리할 수 있는 특성을 활용해, 화합물 라이브러리를 한 곳에 축적하여 후보물질을 발굴한다면 성공률을 제고할 수 있음
- 유럽은 머신러닝 기반 AI 모델인 'EU-MELLODDY'를 통해 연합모델을 구축하였음
  - 데이터를 한 곳에 결집하여 활용할 수 있도록 하되, 블록체인 기술과 다중작업 예측 머신러닝 알고리즘을 통해 각 제약사가 지적재산권을 보호할 수 있도록 설계
- AI신약 개발센터는 한국형 연합학습(Federated Learning) 기반 신약 개발 플랫폼인 'K-MELLODDY' 사업 추진을 통해 분산형 데이터를 중앙 플랫폼에 집적하여 공용 AI 모델을 개발하고 신약 개발 프로젝트에 활용 가능[37]

36) "국내 AI 신약 개발이 나아가야 할 방향은?", MEDICAL Observer, http://www.monews.co.kr/news/articleView.html?idxno=324618, 2023.07
37) 글로벌이슈파노라마 AI뉴노멀 시대의 도래와 신약개발, 한국제약바이오협회, 2023.07

- 보건복지부와 과학기술정보통신부가 공동으로 추진하는 'K-MELLODDY(K-Machine Learning Ledger Orchestration for Drug Discovery)'는 국내 AI 활용 신약 개발과 관련한 산학연이 참여하는 전방위적 협력사업으로, 효율적인 데이터 공유를 통해 데이터 협업 활성화를 도모[38)]
- 연합학습 기반 플랫폼으로서 데이터 유출 없이 안전하게 다기관 데이터를 공유할 수 있는 산학·민관 협력 체계를 구축하여 AI 기반 신약 개발의 신속화를 추진하고 선진국과의 격차를 해소하여 글로벌 경쟁력 확보 가능
- K-MELLODDY 사업은 분할 연합 학습(Spilt Federated Learning) 기술을 통해 성능과 보안을 강화하였고 AI 신약 개발 기술을 기반으로 한 산·학·연 협력 체계를 구축하였으며, 국가 차원의 개방형 플랫폼을 장기적으로 운영한다는 측면에서 EU의 MELLODDY 사업과의 차별점을 지님
- 당 사업은 정부의 바이오헬스 신시장 창출전략, 제3차 제약바이오산업 육성지원 5개년 종합계획, 첨단산업 글로벌 클러스터 육성방안 등에 반영되었으며, `24년부터 본격적으로 추진될 것으로 예상
- 제약바이오업계는 경쟁기업 간 데이터 협력을 가능케 하여 신약 개발 비용을 감소시키고 산업 내 AI 도입 확산을 통해 우리의 역량을 높일 수 있는 신약 개발 플랫폼에 대한 기대감을 나타내고 있음

<K-MELLODDY 사업 개요>

배경	신약 개발 현장과 공공에 축적된 데이터를 AI에 활용하고 있지 못하는 실정으로 5G, 6G, 엣지 컴퓨팅, 클라우드와 같은 분산 컴퓨팅 기술로 분산 데이터의 보호와 AI 데이터 활용이 가능한 연합학습은 정보보호와 AI 시대의 핵심 기술로 글로벌 시장에서 주목받고 있음
목적	물리적 데이터 공유 없이 연합학습 기반 다기관 데이터 안전 체계를 구축하고 다기관 데이터 활용·협력이 가능한 플랫폼을 기반으로 신속하고 효율적인 AI 신약 개발 방법론을 개발
기대효과	국가경쟁력을 높일 수 있는 획기적 AI 신약 개발 방법론을 확보

*출처: 팜데일리, https://pharm.edaily.co.kr/news/read?newsId=01266086635705024&mediaCodeNo=257, 2023.08

38) AI신약개발 앞당기는 K-멜로디 프로젝트! 글로벌 경쟁력 강화!, 한국제약바이오협회, 2023.07

06 고찰 및 시사점

■ 글로벌 제약사들은 신약발굴, 임상시험 등 신약 개발 전반에 AI를 적용해 성과를 창출하고 있는 상황

- 미국과 중국은 AI 신약 개발 내 주요국으로서, 정책 지원이나 개별 기업의 연구개발이 굉장히 활발하게 이루어지고 있음
- 다국적 거대 제약사들은 신약 개발의 효율성을 더하기 위해 일찍부터 AI를 활용하기 위한 투자를 진행해왔으며, 가시적인 성과가 도출되고 있음
- 반면 국내 AI 신약 개발은 AI 적용 분야가 후보물질 도출에 한정되어 있는 것으로 조사
  - 중·대형 제약사는 AI 기술을 보유하고 있는 기업과의 협약을 통해 공동연구를 진행하는 추세이며, 그 외 규모가 작고 영세한 기업들은 AI 활용이 여의치 않은 환경

■ 가시적인 성과를 창출하기 위한 기술개발 지원 및 성공사례 도출이 필요

- AI 신약 개발의 활성화를 위해서는 기술개발 및 기업 간 협업을 장려하는 지원 정책을 통해 성공사례 도출이 필요
  - 성공사례 도출을 통해 여타 기업 및 인력의 유입을 유도하여 활발한 산업 생태계 및 분위기를 조성할 수 있음
  - 개별 제약기업이 AI 기술을 도입하는 것은 재정적 부담이 크기 때문에 기술이전이나 공동연구를 통해 영세한 기업 또한 AI를 활용할 수 있도록 기회를 부여하여 산업의 전반적인 성장 도모

■ 현재 AI 활용 신약 개발의 관건은 '협업'이므로 개방형 협력을 통한 산업 성장을 위해 커뮤니티 및 네트워크 조성 필요

- AI를 활용한 신약 개발의 활용 분야는 더욱 확대될 것으로 전망되므로, 기업들이 네트워크를 통해 성과와 경험을 공유하여 성장의 발판을 마련할 수 있는 소통의 장을 만들고, 필요 시 협업할 수 있는 분위기 조성 필요
- 산업계 및 기관, 학계를 리스트업하여 전문가·네트워크를 형성하는 것이 우선이며, 구축 예정인 K-MELLODDY와의 연계 협력도 고려 필요

07 전문가 기고문

AI 활용 신약 개발과 전략적 발전방향

충남대학교 의과대학 의공학과 이동헌 교수

기존의 신약 개발 과정은 약 10년이 소요되고 높은 비용 대비 낮은 성공률을 보이지만, AI 기술의 도입으로 개인 맞춤 의학과 신약 개발에 혁신을 가져올 것으로 기대됨

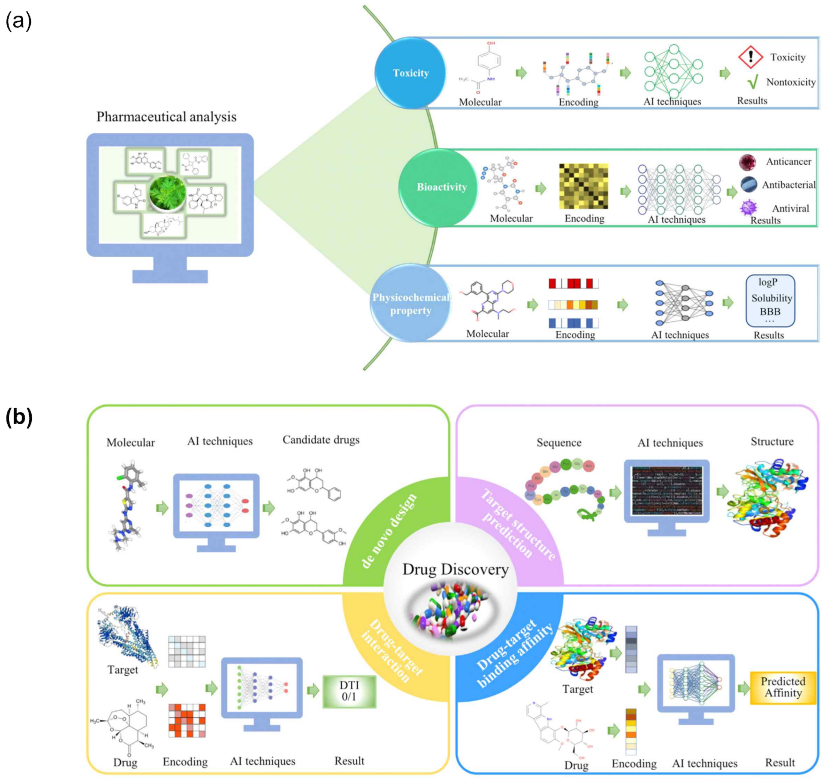
- 전통적인 신약 개발 과정은 10-12년의 기간이 소요되고 상위 12개 제약 회사의 한 약품당 평균 R&D 비용이 21억 6,800만 달러로 추정되지만, 성공률은 1/5,000~1/10,000으로 매우 낮은 고비용 과정임[1,2)]
- 비임상시험 이전까지의 단계는 새로운 질병과 관련된 표적을 찾은 후 소분자 라이브러리를 선별하고, 우수한 화합물을 식별하여 최적의 약 후보를 선정하는 과정이며 초기 선별된 10,000개의 분자 중 10개 정도 만이 임상시험 단계까지 진행될 수 있음. 한 화합물이 1상 임상시험에 진입할 확률은 10%가 되지 않고 이 비율은 10년 동안 증가하지 않았으며, 예측 정확도를 10% 향상시킬 수 있다면 신약 개발 비용을 크게 줄일 수 있음[2)]
- 최근 AI를 신약 개발의 후보물질 선정부터 임상시험까지 전 과정에 적용하는 사례들이 증가하고 있으며, 유전체(Genome)부터 대사체(Metabolome)까지 다양한 영역을 포함하고 있음.
- 예를 들어, DeepMind의 AlphaFold2는 단백질의 3차원 구조를 정확히 예측하는 AI를 발표했으며, 인체 내부의 많은 단백질 구조뿐만 아니라 다양한 생물학적 분자 형태를 예측하는 최신 버전을 발표하였음[3,4)] 또한 최근 AlphaMissense를 발표하여 유전자를 구성하는 단백질 아미노산 염기서열 배열이 바뀌면 일어나는 '과오돌연변이(missense mutation)'의 영향을 예측할 수 있게 되었으며, 이러한 구조 생물학의 진보는 개인 맞춤 의학과 신약 개발을 혁신할 것으로 기대됨[5)]

AI 기반 신약 개발은 공개 데이터베이스를 활용하고 유전체 데이터를 기반으로 약물 반응성을 예측하며, 신약 후보물질 선정, 단백질 구조 예측, 약물 독성 및 생물활성 예측, 임상시험 설계 최적화 등 전통적인 신약 개발 과정을 혁신하고 있음

- AI 기반의 신약 개발에 사용되는 대표적인 공개 데이터베이스는 ChEMBL, ChemDB, COCONUT, DGIdb, DrugBank, DTC, PubChem 등이 있음[6]. 이 때 여러 차원(0D-3D)의 기술자(descriptor) 및 표현식(SMILE, Molecular graph)을 사용하여 약물 분자의 본질적인 물리화학적 특성을 유지하면서 컴퓨터가 읽을 수 있는 형식으로 전환하여 사용함[7]
- AI를 이용하여 유전체 데이터를 분석함으로 약물반응성 예후를 예측할 수 있으며, 예를들어 면역항암제의 반응성을 예측하는데 활용되고 있음[8]. 면역항암제는 약물의 특성보다는 개개인의 면역 특성이 치료에 영향을 미치므로 단일세포 시퀀싱(single cell RNA sequencing, scRNAseq)을 이용하여 유전체 데이터를 해석하는 것이 필요함. 그러나 면역항암제는 효능은 좋지만 고가이므로, AI를 이용하여 어떤 사람에게 효능이 있는지 판단하는 것이 중요함[8]
- 또한 공간전사체(spatial transcriptomics) 정보를 활용하여 약물의 실제 반응 여부를 조직 내 분포를 통해 확인하거나, 종양의 미세환경 등을 유전자 발현 정보를 기반으로 면역 투과도와 같은 지표를 분석하여 확인할 수 있는 방법들을 개발할 수 있음[8]
- 마지막으로, 신약 개발 과정에 있어서 타켓 발굴 및 동반진단을 위한 예후예측 마커를 발굴함으로, 기존에 약 10년이 소요되었던 타켓 도출 과정을 1-2년 정도로 단축하는 것이 가능해짐. 단일세포 분석을 통해 전사체 분석에서 이전에는 확인할 수 없었던 각 세포 별 특징을 볼 수 있게 되었고, 이로인해 임상시험의 정확성이 크게 향상되었음. 임상 3상에서 성공한 약물의 경우 동반진단을 활용한 경우가 그렇지 않은 경우보다 2배 정도 성공률이 높다고 보고됨[9]
- AI를 이용하여 질병 관련 타켓 단백질을 효과적으로 찾아내어 검증할 수 있고 기존 약물의 재활성도 개선할 수 있으며[10,11], 히트 및 리드 물질을 발굴하는 데 활용되며 활성 화합물 스크리닝 과정의 효율성을 향상시키고 일반적인 도킹보다 뛰어난 예측 결과가 보고됨[12]
- 신약 후보물질로 선정된 화합물과 타켓 단백질의 구조는 열쇠와 자물쇠의 관계와 유사함. 후보물질을 발견해도 타켓 단백질과 그 활성 부위의 구조를 모르면 신약의 효능을 입증하기 어려우며, 최근 AlphaFold와 같은 AI 기술을 이용하여 단백질의 3차원 구조를 정확하게 파악할 수 있게 되어 단백질 변형 등 약물 설계에도 활용될 수 있음[3-5].

약품 분석(pharmaceutical analysis)은 의약품 원료의 식별, 결정, 양적 평가 및 정제 과정을 포함하며, AI 기술을 이용하여 약물 독성(drug toxicity) 예측, 약물 생물활성(drug bioactivity) 예측, 약물 물리화학적 특성(drug physicochemical property) 예측 등이 가능함 (그림 51a). 그밖에 AI 기술을 이용하면 신약 디자인(de novo drug design), 타켓 구조 (target structure) 예측, 약물 표적 상호작용(drug-target interaction), 약물-표적 결합 친화도(drug-target binding affinity) 예측 등도 수행할 수 있음[6] (아래 그림 b 참조)

<AI를 이용한 신약 개발 (a) AI를 이용한 약품 분석 (b) AI를 이용한 천연물 기반 신약 개발 (자료 재구성 [6])>



- 임상시험 단계에서 AI를 이용하여 적절한 임상 대상자를 선별하거나 임상시험 설계를 최적화함으로써, 분석 결과의 정확성을 높여 효율성과 신뢰성을 향상시킬 수 있음. 또한 신약이 상용화된 후 약물 부작용 및 관련 정보 분석 등 약물 모니터링 과정에서 AI를 활용하여 약물 감시 및 모니터링의 효율성을 향상시킬 수 있음[13]

국내 AI 기반 신약 개발은 초기 단계이며 지속적인 투자와 정책 지원이 필요하고, 생물학적 이해를 기반으로 대량의 고품질 데이터를 확보하는 것이 중요함

- 데이터 구축 관점에서, AI 기술은 학습 데이터의 질이 중요하며 이전에 축적된 대량의 데이터뿐만 아니라, 생체 내에서 효과적으로 작동하는 최종 약물을 개발하기 위해 생물학적 메카니즘을 이해하는 것을 기반으로 기초연구 결과들도 충분히 고려되어야 함[1]

- AI 기술을 활용한 신약 개발은 주로 화학적 모델링에 초점을 두어 발전해왔지만, 실제 약물의 적용 관점에서 약물은 매우 복잡한 생물학적 시스템에 의해 작용하므로 유한한 수의 매개변수로 정확하게 정의하기 어려워 효능과 안전성에 대한 불확실성이 높을 수밖에 없음[14,15]. 그러므로 생물학적 기초에 기반하여 어떤 변수가 의미 있고 중요한지 결정하고 이를 실험적으로 정의하는데 필요한 AI 기술개발이 충분히 연구되어야 함. 또한 현재까지 축적된 데이터의 한계를 넘어서 생체 내 안전성과 효능과 관련된 정보도 제공할 수 있는 데이터를 확보해야 AI 기술이 한 단계 더 발전할 수 있을 것임[1)]
- 예를 들어, 신약 개발에서 단백질 구조는 매우 중요한 역할을 하는데, AlphaFold2 및 AlphaMissense의 발표를 통해 기존의 생물학적 난제를 해결할 수 있었음. 앞으로는 더 많은 단백질 서열 데이터와 구조 정보가 축적되어야 하며, 이와 관련된 기술의 발전도 필요함[3-5)]
- 대량의 데이터를 생산하기 위해서는 많은 비용이 들므로 의료기관에서 데이터를 안정적으로 정제하고 구축할 수 있도록 'UK Biobank', 'All of Us'와 같은 한국형 '국가 통합 바이오 빅데이터 구축 사업' 이 정부 주도로 진행되어야 함

적합한 데이터의 가용성 측면에서, 사용 가능한 데이터가 제한적이거나 품질이 낮거나 일관성이 없는 경우에 AI의 정확성과 신뢰성에 영향을 줄 수 있음. 따라서 합성 데이터 생성 및 데이터 증강, 자기지도학습과 같은 AI 기법을 활용하여 학습 데이터의 양과 다양성을 확보할 필요가 있음[16)]

공정성과 편향의 측면에서, 사용된 데이터가 편향되거나 대표성을 갖지 않는 경우 결과 예측이 부정확하거나 불공평할 수 있으며, 이는 의료 서비스에 대한 불평등한 접근 및 특정 집단에 대해 불공평한 대우로 이어질 수 있음[16)]

- 이를 위해 '인공지능(AI) 의료기기 임상시험방법 설계 가이드라인(민원인 안내서)'에서 권장하는 대로 전향적 연구 및 다기관 연구를 수행하여 단일기관 데이터 사용으로 인한 편향을 최소화할 수 있음
- 또한 해석 가능한 인공지능(XAI) 방법을 활용하여 AI 알고리즘이 내린 예측을 해석 가능하고 투명하게 설명함으로써, 편향과 공정성에 대한 우려를 해소하고 예측 뒤에 숨겨진 메커니즘과 가정에 대한 더 나은 이해를 제공할 필요가 있음[16)]

개인정보 보안 측면에서, AI 알고리즘 개발을 위해 민감한 개인정보가 액세스되거나 오용될 가능성이 있으며, 이는 개인뿐만 아니라 병원 및 제약회사의 평판에 심각한 영향을 미칠 수 있음

- 의료기관의 데이터는 '보건의료데이터 활용 가이드라인'에서 권장하는 바에 따라 개인정보를 비식별화하고 데이터심의위원회의 승인을 받은 후에 접근하는 것이 필요함
- 또한, 핵심적인 신약 개발 데이터는 병원 및 제약사에서 보유하고 있는 민감한 데이터임. 따라서 정부 주도로 연합학습(Federated Learning) 기반의 신약 개발 플랫폼 'K-MELLODY'를 구축하고 활용할 필요가 있음. 유럽연합(EU)-멜로디(MELLODY, Machine Learning Orchestration for Drug Discovery) 프로젝트의 성공사례를 참고하여 한국형 플랫폼을 구축하고, 제약사들이 데이터를 활용하여 한국형 AI 모델을 개발해야 함

국내에서 AI를 활용한 신약 개발은 아직 초기 단계에 있으며 히트(Hit) 발굴과 후보물질 도출에 중점을 두고 진행되고 있는 반면, 다국적 제약사들은 AI를 신약 개발의 전 과정에서 활용하고 있음

- 신약 개발 과정에서 AI 기술은 표준적인 절차가 없으며, 각각의 경우에 상당한 수작업이 필요함. 임상시험에 진행될 화합물을 도출하기 위해서 올바른 투여량과 약동학(PK) 관련 정보, 그리고 효능 및 안전성을 달성해야 함[16)]
- 화합물을 선택하기 위한 예측 모델이 매우 중요한데, 모델이 질적으로 우수하더라도 임상시험에서 생체 내에서는 예상과 다른 결과를 낼 수 있기 때문에 아직까지 AI 기술 적용에 한계가 있음[1)]. 따라서 현재까지 투자비용 대비 결과물은 아직 나타나지 않았지만, 국내에서 활성화된 지 얼마 되지 않은 기술이므로 섣불리 판단하지 말고 지속적인 투자와 정책 지원이 필요함
- 또한 현재의 AI 기반 접근법은 전통적인 실험적 방법을 완전히 대체할 수 있는 것이 아니며, 인간 연구자의 전문지식과 경험이 여전히 중요함. AI를 전통적인 실험적 방법과 통합함으로써 약물 발견 과정을 최적화하고 새로운 약물의 개발을 가속화할 수 있는 잠재력이 있음[16)]

[참고문헌]

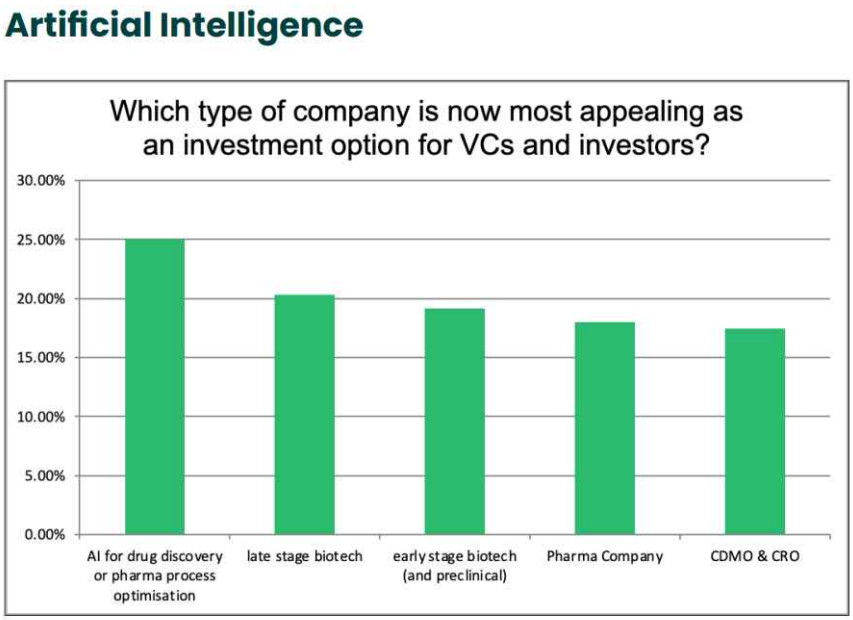
1. Jung, Myunghee, and Wonhyun Kwon. "Present status and future of AI-based drug discovery." *Journal of the Korea Institute of Information and Communication Engineering* 25.12 (2021): 1797-1808.
2. AI를 이용한 똑똑한 신약 개발, Deloitte Insights, 2019
3. Jumper, John, et al. "Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold." *Nature* 596.7873 (2021): 583-589.
4. Bryant, Patrick, Gabriele Pozzati, and Arne Elofsson. "Improved prediction of protein-protein interactions using AlphaFold2." *Nature communications* 13.1 (2022): 1265.
5. Cheng, Jun, et al. "Accurate proteome-wide missense variant effect prediction with AlphaMissense." *Science* 381.6664 (2023): eadg7492.
6. Chen, Wei, et al. "Artificial intelligence for drug discovery: Resources, methods, and applications." *Molecular Therapy-Nucleic Acids* (2023).
7. David, L., Thakkar, A., Mercado, R., and Engkvist, O. (2020). Molecular representations in AI-driven drug discovery: a review and practical guide. J. Cheminf. 12, 56.
8. 이시영(2022). 인공지능(AI) 기술을 활용한 유전체 분석 동향. BRIC View 2022-T23
9. 민미희 2011-2020 임상 개발 성공률과 기여 요인 분석, 한국바이오협회
10. T. Rodrigues and G. J. Bernardes, “Machine learning for target discovery in drug development,” Current Opinion in Chemical Biology, vol. 56, pp. 16-22, 2020.
11. D. Gao, Q. Chen, Y . Zeng, M. Jiang, and Y . Zhang, “Application of Machine Learning on Drug Target Discovery,” Current Drug Metabolism, 2020.
12. T. Rodrigues and G. J. Bernardes, “Machine learning for target discovery in drug development,” Current Opinion in Chemical Biology, vol. 56, pp. 16-22, 2020.
13. L. Patel, T. Shukla, X. Huang, D. Ussery, and S. Wang, “Machine Learning Methods in Drug Discovery,” Molecules, vol. 25, pp. 5277, 2020.
14. Bender, Andreas, and Isidro Cortés-Ciriano. "Artificial intelligence in drug discovery: what is realistic, what are illusions? Part 1: Ways to make an impact, and why we are not there yet." Drug discovery today 26.2 (2021): 511-524.
15. Bender, Andreas, and Isidro Cortes-Ciriano. "Artificial intelligence in drug discovery: what is realistic, what are illusions? Part 2: a discussion of chemical and biological data." Drug Discovery Today 26.4 (2021): 1040-1052.
16. Blanco-Gonzalez, Alexandre, et al. "The role of ai in drug discovery: challenges, opportunities, and strategies." *Pharmaceuticals* 16.6 (2023): 891.

신약 개발에서 인공지능 도입의 기술 활용의 전환

주식회사 에이인비 박은영 대표

신약 개발에서의 인공지능 활용의 전망[1)]

약물 개발을 위한 인공지능 기술개발에 대한 투자가 급속히 증가할 것으로 전망되며, 이에 따라 의약품 산업의 기업들이 비즈니스 전략을 대대적으로 전환하고 있다. 투자자들은 역사적으로 혁신적인 생명공학 기업을 가장 유망한 투자 옵션으로 선택해 왔고, 약물 발견을 위한 AI 기술 개발에 투자하는 기업들이 처음으로 가장 매력적인 투자 옵션으로 선정되었다.



<제약 분야의 기술별 투자 동향>

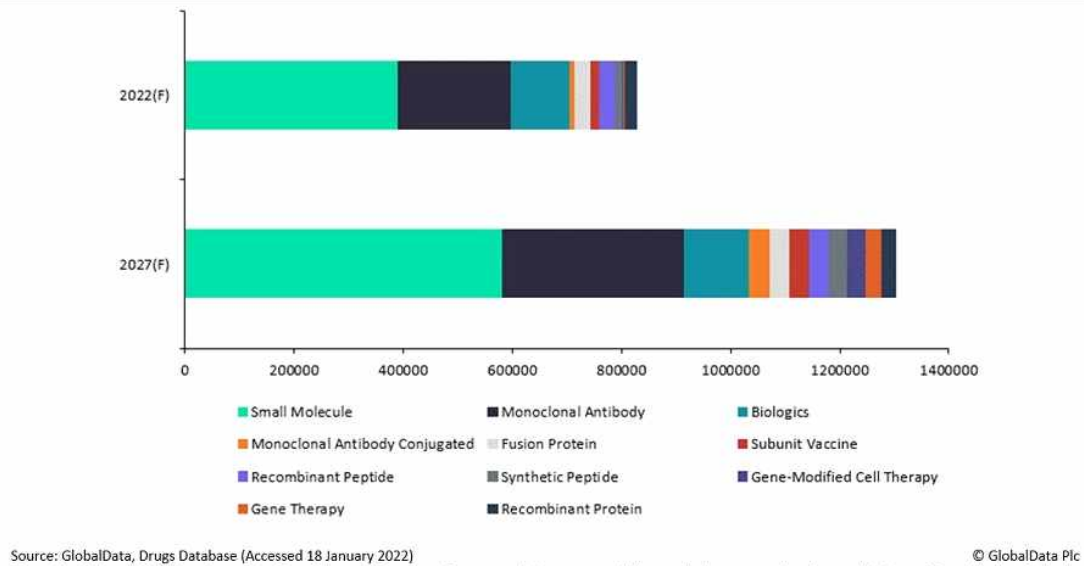
- 약 60%의 관련 기업 임원들은 2026년에 '일상적으로 사용될 기술'로 AI 기반 약물 개발 관련 기술을 선정하였으며, 42%는 2~5년 내에 'FDA 승인을 받은 AI로 개발된 약물'이 나올 것으로 전망하고 있다.

- Sanofi, Merck, Pfizer, GSK부터 Bayer, BMS, Lilly, AZ Jansen, 그리고 Novartis까지 대형 제약사들이 인공지능 기술 기업들과 파트너십을 맺고 있다. Moderna는 자체적으로 'AI에 집중'하고 있으며, 모건 스탠리는 10년 내에 AI에 대한 산업 지출이 연간 500억 달러를 초과할 것으로 전망하고 있다.
- 글로벌 제약사 임원들은 10년 후에는 '새로운 의약품의 50% 이상이 발견, 개발 또는 제조의 어떤 개발 부분에서든 AI를 사용할 것으로' 예측하고 있다.

1) CPHI Annual report, CPHI, 2023. 09

의약품 산업의 변화[2)]

최근 GlobalData 보고서 'Looking Ahead to 2022 – The Future of Pharma'에 따르면, 다음 5년 동안 생물학적 제제의 매출이 소분자의 매출을 크게 앞서며, 2027년까지 생물학적 제제의 매출이 소분자의 매출을 기준으로 1200억 달러 더 많을 것으로 예측되고 있다. 이는 제약산업에서 지속적으로 증가하고 있는 생물학적 제제의 우세와 지배력을 강조하며, 이 분야 전체가 생물학적 제제로의 이동을 강조하고 있다.



<2027년 바이오의약품의 매출 예상>

바이오의약품은 2027년까지 혁신의약품 판매의 55%를 차지할 것으로 예상되며, 현재 생물학적 제제의 매출은 Ono Pharmaceuticals의 옵디보루(니볼루맙), Regeneron Pharmaceuticals의 듀피젠트주(두필루맙), 그리고 Merck의 카트루다주(펨브롤리주맙)와 같은 단일 항체가 주로 기인하고 있으며, 이러한 제제들은 2027년에는 모든 생물학적 제제 매출의 46%를 차지할 것으로 예측되고 있다.

신규 의약품 허가에 바이오의약품 비중의 지속적인 증가와 생산시설이 바이오 의약품의 생산으로 전환되는 현황은 바이오 의약품의 지속적인 매출 성장을 뒷받침한다.

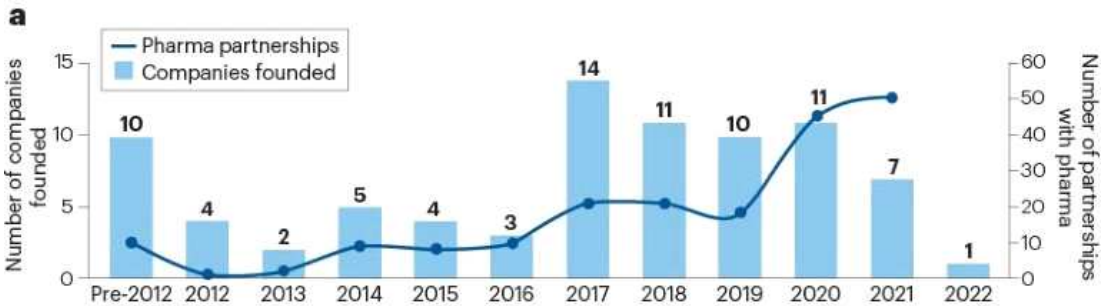
2) Future of Pharma – Looking Ahead to 2023, GlobalData report, 2023 Apr

바이오의약품 개발에서의 인공지능 기술도입 현황[3)]

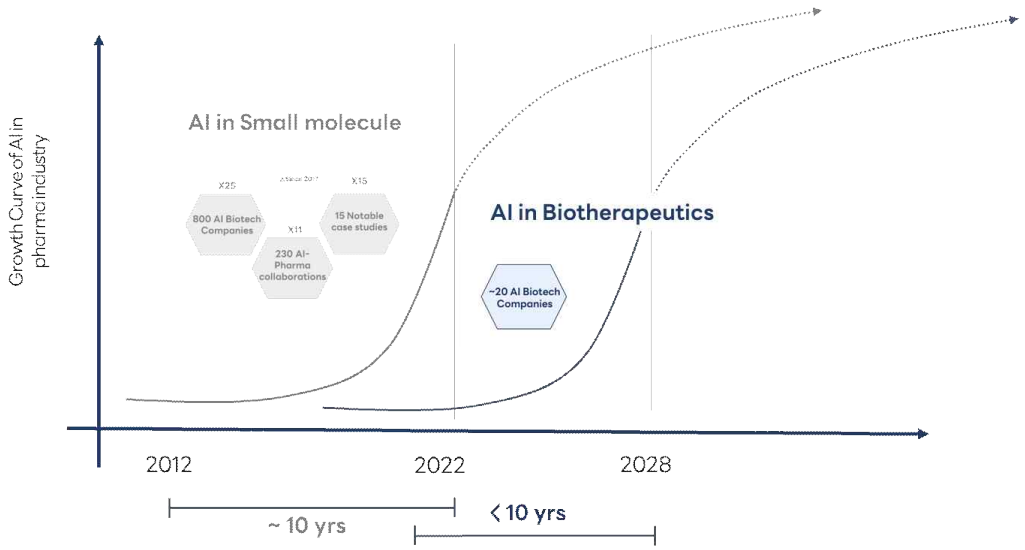
인공지능 (AI) 기술, 특히 머신러닝과 같은 기술들은 점점 증가하는 양의 데이터와 계산 능력에 힘입어 의약품 연구 및 개발(R&D)을 변화시키고 있다. 기존에는 소분자들은 약물 개발에 AI 기술이 응용되었으며, 소분자-타겟 상호작용 모델링, 선도 후보 최적화 및 안전성 예측 부분에 활용되고 있다.

그러나 AI 기술의 활용은 이제 항체, 유전 치료 및 RNA 기반 치료를 포함한 바이오의약품 개발에도 적용되고 있다. 이러한 치료법들은 미래의 상업적 잠재력의 이해를 동반하여 현재 바이오 제약산업의 중요한 부분을 차지하고 있다.

인공지능 기반 바이오의약품 개발 바이오텍은 82개 기업으로, 60% 이상의 기업은 최근 5년 내에 설립되었으며, 이는 인공지능 기술의 활용이 합성신약 개발 분야에서 바이오의약품 분야로 기술 개발의 변화가 이루어지고 있음을 시사한다.



<인공지능 기반 바이오의약품 기업의 설립 동향>



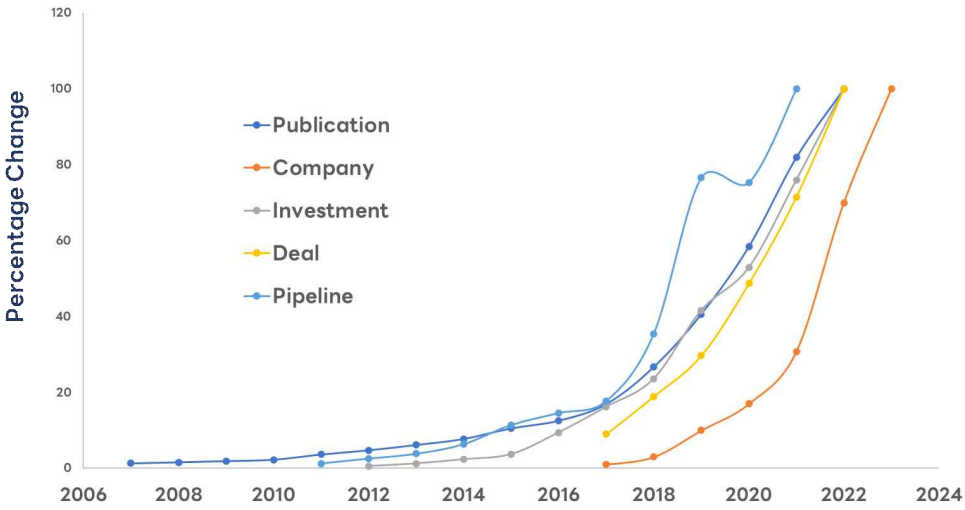
<인공지능 기반 신약 개발의 성장 예측>

3) Nagra NS, van der Veken L, Stanzl E, Champagne D, Devereson A, Macak M. The company landscape for artificial intelligence in large-molecule drug discovery. Nat Rev Drug Discov. 2023 Aug 29.

AI 기반으로 한 신약 개발의 국내 성장을 위한 전략적 발전 방안

글로벌 신약 개발 분야에서 인공지능 기술 활용한 합성신약개발 사업의 성공은 지난 약 10년 동안 27배의 투자 증가 (약 80조)를 기반으로 25배의 바이오 텍의 증가(약 800여개 사)의 성장을 이루어냈으며, 그 결과 글로벌 제약사들과 약 300건의 공동연구와 15개의 임상 파이프라인이라는[4] 다양한 성과를 창출하고 있다.

4) Jayatunga MKP, Xie W, Ruder L, Schulze U, Meier C. AI in small-molecule drug discovery: a coming wave? Nat Rev Drug Discov. 2022 Mar;21(3):175-176.



<인공지능 기반 신약 개발 연구 성장 동력의 변화[4)]>

5) pubmed publication 수치, GLObalData 참고, 재구성

- 국내에서도 과기정통부에서 2023년 6월에 '차세대 신약을 신속하게 설계하는 '항체설계 AI'를 포함하는 디지털바이오 7대 선도 프로젝트를 발표하였다. 기존 바이오연구와 산업이 가진 한계를 뛰어넘는 성공사례를 창출한다는 목표다. 이와 더불어 디지털바이오 성장기반을 조성하기 위해 인재 양성, 첨단장비, 디지털 연구플랫폼, 기업 성장 지원 방안들도 추진한다.

- 신약 개발 분야에서 인공지능을 성공적으로 활용하기 위해서는 통합된 연구 시스템, 즉 실험 검증이 결합된 인공지능 플랫폼을 기반으로 기술을 개발해야 한다.[3)] 개발된 인공지능 모델은 실험적인 검증을 거쳐야 하며, 이를 통해 모델의 성능을 현실적으로 확인하여 실제 응용 가능성을 높여나가야 한다.

- 뿐만 아니라, 융합과학이라는 산업 분야의 특수성을 이해하는 것이 중요하다. 융합과학이 성공적으로 발전하려면 두 전문 분야의 전문인력이 상호 유입되어야 한다. 인공지능과 생명과학을 결합한 성공적인 융합과학을 달성하기 위해서는 두 분야의 독특한 특성과 전문지식을 이해하며, 양방향으로 연구적인 소통을 기반으로 한 인재 양성과 교육이 필수적이다. 이러한 방향성은 융합과학의 성장과 성공을 위한 기반이 될 것이다.

※ 본 식의약 R&D 동향 심층분석보고서는 식품의약품안전평가원 용역연구 <식품·의약품 등 안전기술 환경조사·분석>의 일부로 수행되었습니다.

※ 본 식의약 R&D 동향 심층분석보고서는 주제에 대한 최근 동향에 관한 정보 제공을 목적으로 하며, 식품의약품안전평가원의 현안 과제와 관련된 대안을 제시하고자 하는 것은 아닙니다.

※ 본 식의약 R&D 동향 심층분석보고서는 특정 주제에 대해 최근 동향 정보와 관련 분야 전문가 의견을 담았으며, 원고는 본 보고서를 위한 용도로 작성되었습니다.

※ 식의약 R&D 동향 심층분석보고서는 '식품의약품안전평가원 홈페이지>사업소개>연구개발사업(R&D)>R&D 동향 및 정보>내부동향 및 정보'에서 확인하실 수 있습니다.

식의약 R&D
이슈 보고서

ISSUE REPORT

2023.11 통권 21호 AI 기반 신약 개발
발행일 2023년 11월
발행처 식품의약품안전평가원 기획조정과
www.nifds.go.kr

[공직자 부조리 및 공익신고안내] ※신고자 및 신고내용은 보호됩니다.
부조리 신고 : 식약처 홈페이지 "국민신문고 > 공직자 부조리 신고" 코너
공익 신고 : 식약처 홈페이지 "국민신문고 > 신고센터 > 부패 · 공익신고 상담" 코너