



융합  
**Weekly**  
**TIP**

Technology · Industry · Policy

**인공지능을 활용한 신약개발 연구동향**

박순영 | 융합연구정책센터



# 인공지능을 활용한 신약개발 연구동향

박순영 | 융합연구정책센터

# 01

## 선정배경

**(인공지능 기술의 발전)** 인공지능 기술을 통해 많은 양의 데이터를 처리할 수 있고, 보다 정확하고 효율적인 의사결정이 가능해짐\*\*에 따라 바이오, 로봇 등 타 분야와의 기술융합이 전망됨

\* 디지털 데이터 규모 증가: 4.4조 GB('13) → 44조 GB('20) (mdicalfutureist(2016))

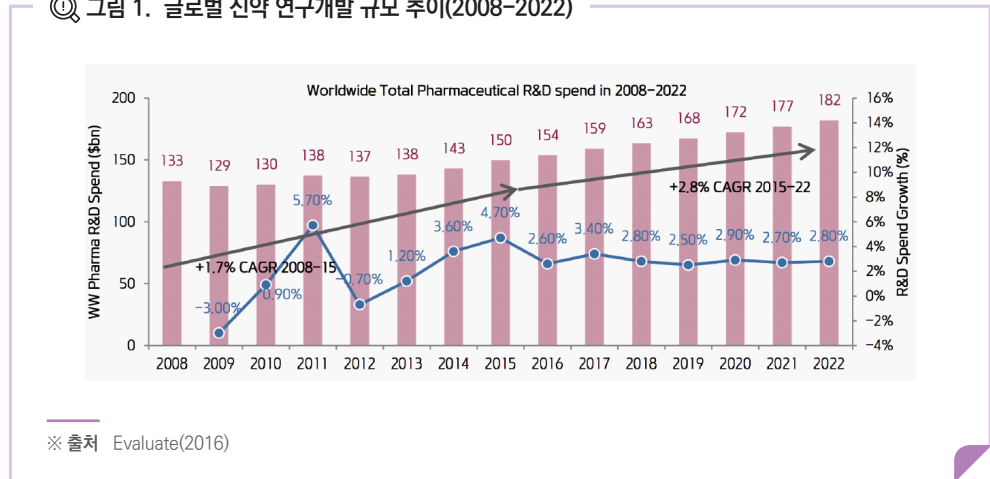
\*\* ① 빅데이터의 발전 : 광범위한 데이터를 탐색하고 저장할 수 있는 기술의 발전

② 컴퓨테이션 파워의 증대 : 이론상으로는 가능했던 알고리즘이 실제 동작

③ 기계학습 알고리즘의 발달 : 사람의 지도없이 스스로 유용한 정보를 구별하는 알고리즘 발전

**(신약 연구개발의 증가)** 글로벌 제약 업계의 신약개발 투자 규모는 꾸준히 증가하여 2015년 \$1,498억에서 연간평균 2.8% 증가해 2022년 \$1,820억에 이를 전망임

그림 1. 글로벌 신약 연구개발 규모 추이(2008-2022)



**(인공지능을 활용한 신약개발의 기대감 증가)** 인공지능은 전문가의 연구개발 프로세스를 최적화하고 개발을 가속화시켜, 초기 약물 후보군 발견에 필요한 시간과 비용을 최소화할 것으로 예상됨

# 02

## 신약개발의 특성

- 💡 신약개발은 대표적인 고위험·고수익 분야로서 매우 높은 불확실성을 지님
  - 장기간 투자에도 불구하고 기술 구현 가능성이 현저히 낮으며, 신약개발에 성공하더라도 시장의 성공 확률이 저조함
  - \* 보통 5,000~10,000여 개의 신약 후보 물질 중에서 9개만이 임상에 진입하고, 그 중에 하나의 신약만이 최종적으로 판매허가를 받아 시판됨
  - FDA 허가를 위해 소요되는 임상기간도 평균 4.6년('90 ~ '94년)에서 7.1년으로 증가('05 ~ '09)함
  - 미국의 제약사들은 지난 15년간 신약 발견을 위해 약 520조 원 이상을 투자했으며 이는 항공산업의 5배, 소프트웨어와 컴퓨터 산업의 2.5배에 이르는 수준임

🔍 그림 2. 신약 개발단계별 후보약물



※ 출처 생명공학정책센터(2017)

### ※ 신약개발의 특성

- (개별성) 모두에게 적합한 의약품은 존재하기 어려우며, 특정 집단이나 개인의 특성을 고려한 신약개발이 필요함
- (통합성) 복잡한 생명현상을 이해하기 위해 잘 구분된 모듈을 기반으로 하는 연구가 아닌 통합적인 관점에서 타 학문을 생물학으로 통합함
- (복합성) 생명현상을 다루기 때문에 다양한 사회적 가치나 이해관계와 밀접한 관련을 갖음

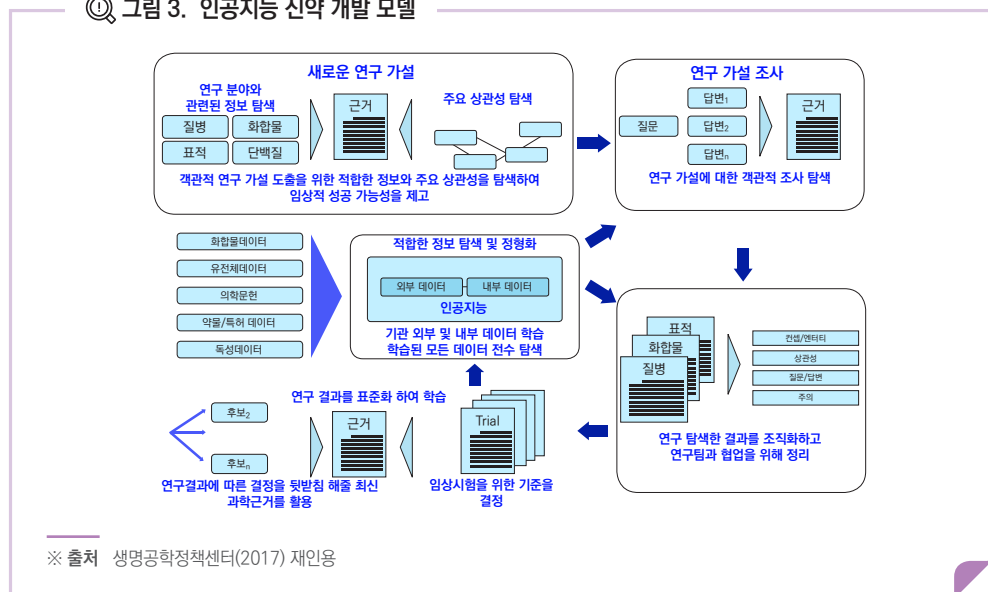


# 03

## 신약 개발 패러다임의 변화

- 💡 (인공지능 활용) 신약 개발을 위해 한 명의 연구자가 조사할 수 있는 자료는 한 해에 200~300여 건이나 인공지능은 100만 건 이상의 논문을 읽을 수 있는 동시에 400만 명 이상의 임상데이터 분석이 가능함
- 💡 (인공지능 신약개발 모델) 인공지능이 적합한 데이터를 탐색하고 새로운 연구가설을 수립할 수 있도록 근거를 제시하며, 분석결과를 조직화하고 연구팀에 공유하여 협업 능력을 높일 수 있도록 지원함
- 💡 (미래 전망) 소수의 연구원만으로 비용과 기간을 대폭 줄여 블록버스터 약물개발이 가능하며, 제약사가 약물을 개발하지 않고 라이선스 구매 및 판매에만 주력하는 등의 새로운 형태의 비즈니스 등장

📊 그림 3. 인공지능 신약 개발 모델



# 04

## 국외 동향

### 💡 글로벌 대형 제약사

- 인공지능 기업과 협력하여 신약 개발에 착수하기 시작하였으며 효과성 및 효율성을 높여 성공률과 수익성을 제고

▶ 표1. 글로벌 대형 제약사 활동 내용

회사명	인공지능(회사/제품)	중점 분야
안센	BenevolentAI/ BenevolentAI	임상단계 후보물질에 대한 평가 및 난치성 질환 타겟 신약 개발
화이자	IBM/Watson	신약탐색용 왓슨(Watson for Drug Discovery)을 보유한 암 관련 데이터 학습 및 분석에 활용 및 면역항암제 신약 개발
산텐	twoXAR/DUMA	녹내장 신약개발
테바	IBM/Watson	호흡기 및 중추 신경계 질환 분석, 만성질환 약물 복용 후 분석 (약 2억 명 상당의 부작용 사례, 추가 적응증 분석) 및 신약개발
머크	Atomwise/AtomNet	신약후보물질 탐색 ※인공지능을 활용하여 에블라에 효과 있는 신약 후보 2개발견
노바티스	INSILICOMEDICINE GEROSCOPE	신약후보물질 탐색

### 💡 일본

- 정부 산하 연구소인 이화학연구소와 교토대학이 협력하고 일본 문부과학성이 지원(약 1,100억 원)하는 프로젝트\* 진행
  - \* 100여 명의 과학자와 엔지니어들이 팀을 이루어 신약개발에 특화된 인공지능을 만드는 것이 목표
- 도쿄대학병원, 오사카 대학병원, 게이오병원 등 전국적으로 수십 개의 의료기관과 제약 및 헬스케어 분야 기업들이 참가하여 인공지능으로 연구 및 신약개발 착수



국내 동향

- 💡 매출 기준 상위 제약사를 중심으로 신약 연구개발 비중이 늘어나고 있으나, 글로벌 제약사에 비해 규모가 크지 않아 블록버스터급 신약개발 분야는 미진한 편
- 💡 국내에서도 신약개발 프로세스 혁신을 위한 인공지능 활용에 대해 관심이 높아지고 있음
  - (한국제약바이오협회) 인공지능 신약개발 지원센터 설립을 추진하여 국내 제약바이오기업이 활용할 수 있는 인공지능 시스템을 구축하고 신약개발에 소요되는 시간과 비용을 줄이고자 함
  - 신약개발용 인공지능을 개발하는 국내 기업들이 증가 중임

※ 스탠다임

- 인공지능을 신약개발에 적용하는 솔루션을 만드는 기업
- 약물 상호작용을 포함한 약물 구조의 데이터베이스에 적용하는 알고리즘을 개발 중
- 알고리즘을 이용하여 컴퓨터 시뮬레이션을 통해 실험적으로 검증이 가능한지 파악하고, 약물 후보들을 효과적으로 필터링하며, 피드백을 컴퓨터 시뮬레이션 모델에 반영해 재실험할 수 있도록 함
- 종양학 분야에서 크리스탈지노믹스와 협력해 검증 및 실험을 수행하고, 아주대 약대와는 파킨슨병을, 한국과학기술원과는 자폐증에 대한 동물실험을 통해 약물효능을 검증하고 있음
- 내부적으로는 비알콜성 지방간 및 미토콘드리아 이상으로 발생하는 질병에 대한 검증을 진행하고 있음

※ 파로스 IBT

- 신약 개발용 인공지능 플랫폼인 케미버스를 개발 중
- 현존하는 약물 관련 데이터베이스와 상업적으로 구매가 가능한 1천 200만 개의 화합물에 대한 정보, 200만 개의 표적 단백질의 약효 데이터, 2억 편의 논문 정보가 집약된 Pubmed 빅데이터를 학습하고 분석해주는 인공지능
- 케미버스로 단백질 구조를 예측하고 가상 탐색함으로써 유효물질 발굴 및 물질의 특성을 예측하고 설계하여 최적화 할 수 있도록 지원

## 06

## 시사점

- 💡 인공지능을 활용한 신약개발은 우리나라 제약바이오 기업이 글로벌 제약사와 규모나 기술적인 측면에서 큰 격차가 나는 국면을 전환할 수 있는 모멘텀이 될 수 있음
- 💡 국내 기업의 독자적인 기술력으로는 인공지능 플랫폼과 서비스가 등장하기가 어렵기 때문에, 국가와 민간이 공동으로 투자하고 운영하는 인공지능 신약 개발 인프라 구축이 필요함
- 💡 신약 탐색의 효율성을 높이기 위해 병원에 축적된 양질의 데이터를 활용할 수 있도록 통합된 형태의 보건의료 빅데이터 구축이 필수적임
- 💡 인공지능을 활용한 신약개발이 보편화 될 수 있으므로 신약의 안전성과 유효성을 예측하는 기술을 개발하고, 컴퓨터 시뮬레이션을 활용하는 연구를 확대해 역량을 강화할 필요 있음



## 참고자료

1. 김진한(2017), 신약개발 프로세스 혁신을 위한 AI 활용, 한국제약바이오협회정책보고서
2. 배영우(2017), 인공지능을 이용한 신약개발 동향 및 활용사례, 생명공학정책연구센터, BiolNpro
3. 배수인(2017), 4차 산업혁명 시대, 제약산업에서의 빅데이터 활용, 한국제약바이오협회정책보고서
4. 배영우(2017), 4차 산업혁명 시대, 인공지능을 활용한 신약개발, 한국제약바이오협회정책보고서
5. 이관용 외(2016), 의료 인공지능 현황 및 과제, 한국보건산업진흥원, 보건산업브리프
6. Evaluate(2016), World Preview 2016, Outlook to 2022





융합  
**Weekly TIP**  
Technology · Industry · Policy

