

안 내 문

본 연구보고서에 기재된 내용들은 연구책임자의 개인적 견해이며 과학기술정보통신부의 공식견해가 아님을 알려드립니다.

과학기술정보통신부 장관 임 혜 숙

제 출 문

과 학 기 술 정 보 통 신 부 장 관 귀 하

본 보고서를 “인공지능 등 차세대 기반기술 기반
신약 분야 신규사업 기획연구”의 최종보고서로 제출합니다.

2021 . 10 . 27 .

연구기관명 : 한국생명공학연구원

연구책임자 : 이규선

연 구 원 : 조성찬

연 구 원 : 김정훈

연 구 원 : 변상원

연 구 원 : 이경륜

연 구 원 : 김건호

연 구 원 : 송정민

연 구 원 : 김현수

※ 연구기관 및 연구책임자, 연구원은 실제 연구에 참여한 기관 및 자의 명의임.

요 약 문 (SUMMARY)

■ 사업 추진 개요

1. 사업 추진 배경 및 필요성

- (신약개발 소요기간 단축, 비용 절감 요구) 최근 진입장벽 극복을 위한 전략으로 인공지능·빅데이터를 활용하여 신약개발에 소요되는 시간과 비용을 단축하는 전략이 대두됨
- (신약개발 : 고위험·고수익 산업) 신약개발은 대표적인 고위험·고수익 산업 분야로, R&D에 소요되는 막대한 시간과 비용이 국내 제약사의 글로벌 진출에 진입장벽으로 작용함

<신약 개발단계별 후보약물>



*출처 : 과학기술정보통신부, 재구성

- (국내 정부의 AI 활용 바이오·의료분야 육성) ‘인공지능 국가전략(‘19. 12.)’에 따르면, 국내 정부는 AI 활용을 통해 바이오·의료 분야를 차세대 주력산업으로 중점 육성할 계획임
- 단계별 신약개발 AI 플랫폼 구축(~’21)을 통해 개발 기간을 획기적으로 단축함(15년→7~8년)

- 최적의 신약 물질 도출·검증을 위해 막대한 시간·비용 투자
- 구축된 연구데이터의 신약개발 활용 부족

→

- AI를 통해 연구시간·비용 절반 단축 및 새로운 신약 물질 발굴
- 데이터 체계적 수집-공유-활용 체계 구축

*출처 : 관계부처 합동, 인공지능 국가전략, 2019. 12.

- (국내 맞춤형 신약개발 기술 수준 70%, 기술격차 6년) 국내 맞춤형 신약개발 기술은 최고기술국(미국) 대비 기술 수준 70%, 기술격차 6년으로, 후발 그룹에 있음

<주요국 맞춤형 신약개발 기술수준 변화(2018~2020)>

국가	기술수준(%)			기술격차(년)			기술수준 그룹		
	2018	2020	증감(% p)	2018	2020	증감(% p)	2018	2020	증감
한국	70.0	70.0	0.0	5.5	6.0	0.5	후발	후발	-
중국	70.0	75.0	5.0	5.5	5.0	-0.5	추격	추격	-
일본	84.0	80.0	-4.0	3.0	3.0	0.0	추격	추격	-
EU	90.0	92.0	2.0	1.8	2.0	0.2	선도	선도	-
미국	100.0	100.0	0.0	0.0	0.0	0.0	최고	최고	-

*출처 : 한국과학기술기획평가원, 2020년 기술수준평가(생명·보건의료), 2021. 04.

- **(신약개발 패러다임 변화)** 빅데이터, AI 기술을 둘러싼 우려에도 불구하고, 향후 신약개발 과정은 데이터 중심으로 재편(Data-driven Drug discovery)될 것으로 예상됨
- 높은 R&D 비용으로 한계에 직면한 제약산업의 위기 타개를 위해서는 AI 기술 도입 및 데이터를 활용한 신약개발 혁신의 시도가 필요함
- **(인공지능 신약개발 필요)** 신약개발 관련 사전지식 데이터베이스를 통합한 빅데이터를 인공지능에 활용함으로써 개발 기간을 획기적으로 단축할 수 있음

<전통 신약개발과 인공지능 신약개발 기간 비교>



*출처 : 한국보건산업진흥원, 인공지능(AI)을 활용한 신약개발 국내·외 현황과 과제, 2020. 09.

AS-IS

- 전통적 신약개발에 드는 막대한 투자 대비 생산성 감소 상황
- 빅데이터·인공지능 등 기술적 진화로 바이오·의료·제약산업에서 활용 수요 급증 및 관련 스타트업 증가
- 대부분의 인공지능 신약개발 연구는 여전히 초기 단계로 잠재적 활용 분야 확대 기대



TO-BE

- 빅데이터 디스커버리 기반 미래형 인공지능 신약개발로, 비용과 기간의 획기적 절감 및 효율 극대화
- 신약개발 전주기*에 걸쳐 협력 연구를 통해 시너지 효과
*특히 후보물질 발굴단계에서 협력연구기관 간 인공지능 기반 1차, 2차 스크리닝 결과의 빠른 제공 및 검증을 통한 신약연구 가속화 촉진 및 성공률 제고

2. 사업 추진 목적

- (전략적 연구과제 도출) 구조기반의 인공지능 합성 신약 설계 등 국내외 인공지능 신약개발 기술의 동향을 고려하여, 선제적 구축이 필요한 플랫폼 기술*은 현장 수요를 반영한 전문가 협의체를 구성하여 Top-down으로 기획함
- (구축 플랫폼 활용으로 실질 성과 창출) 기구축 및 신규 구축 예정 플랫폼을 활용하여 가시적인 신약개발 성과가 도출될 수 있도록 연구개발을 지원함
- (신약개발 전방위 지원 전략 도출) 기존 사업 분석을 통해 공백 지원 분야를 발굴하여, 합성 신약과 바이오 신약을 구분하여 지원하는 등 신약개발 전방위 지원을 위한 목표 지향적 포트폴리오를 구성함
- (국가신약개발사업 연계) 우수 성과 도출 과제들은 국가신약개발사업을 통해 후속 지원을 받을 수 있도록 연계 전략을 마련함

■ 국내외 환경분석

1. 정책 동향

- 세계 주요국들은 4차 산업혁명에 성공적으로 대응하고 인공지능(AI) 주도권을 확보하기 위한 노력을 지속
 - 세계적으로 미국, 중국, 일본 등 선진국 중심의 주요국이 데이터와 인공지능이 가져올 변화에 주목하고, 인공지능 분야 원천기술 개발, 인재양성 및 교육, 규제개선 등 정책적 지원을 확대하는 추세
- 국내 인공지능 신약개발 관련 정책
 - (인공지능 기반 신약개발 플랫폼 구축) 신약개발 가속화를 위한 인공지능 기반 신약개발 지원체계 구축은 보건 의료 데이터·인공지능 혁신전략(2021~2025) ‘선도 활용플랫폼 고도화’ 부문의 핵심과제임

<인공지능 기반 맞춤형 신약개발 지원체계(안)>

목표	Emergency 대응	신약개발 가속화시스템	혁신신약개발
데이터 유형	국내·외 오픈데이터 (NIH, WHO 등)	Real World Data(유전체포함) (KCDC, NEMC, HIRA, MOHW, 의료기관 등)	신규창출데이터 + 화합물 라이브러리
세부내용	<ul style="list-style-type: none"> 감염병 초기 대응을 위한 대체의약품 마련 약물 재창출, 약물 효능성 평가 	<ul style="list-style-type: none"> 통합모델 개발을 위한 연합 학습(Federated learning) 적용 연구 RWD를 활용한 신약개발 가속화 환자 유전체 정보 분석 및 예후 예측 분석지원 	<ul style="list-style-type: none"> AI 기반 감염병 대응 의약품 개발 시스템 연구 First-in class 신약 창출 및 제약사 기술이전
특징	신속대응	상시 가동시스템	국가연구소 및 제약바이오사협력

*출처 : 보건복지부, 보건의료 데이터·인공지능 혁신전략, 2021. 06.

- 'AI 신약개발지원센터'를 허브로 산학연병*이 참여하는 한국형 데이터 기반 신약개발 가속화 프로젝트를 추진함('23)

2. 산업·시장 동향

□ 인공지능 기반 신약개발 패러다임

- (신약개발 R&D 생산성 향상) 국내외 제약사에서는 R&D 생산성 향상을 목적으로 인공지능(AI) 기술을 신약개발 분야에 적용하는데 많은 관심을 두고 있음
 - AI는 연구개발, 환자 모집, 연구 결과 정리 등 신약개발의 전 과정에서 제약사의 시간과 비용을 절감할 수 있음
- (신약개발 분야 인공지능(AI) 활용 영역 확장) 정보 수집 등 기초적인 단계에 우선 적용되었던 신약개발 분야에서의 AI는 최근 15개 비즈니스 영역으로 확장됨
 - 신약개발 과정 중 AI가 가장 각광 받은 분야는 문헌 '정보 수집'과 '후보물질 발굴' 분야였으나, 최근에는 임상 설계, 임상 환자 모집, 데이터 공개 등 신약개발 전 과정에서 AI를 적용한 비즈니스 모델들이 도입됨

<AI 신약개발의 비즈니스 모델>

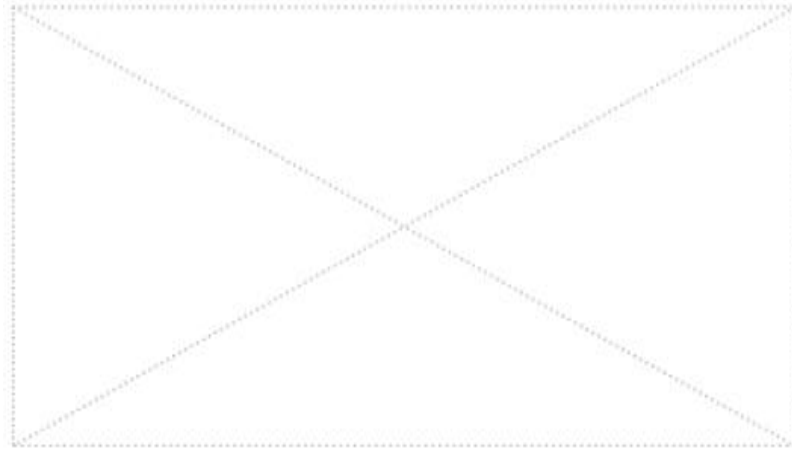
비즈니스 모델		예시
1	정보 수집 및 통합	논문, 특허 데이터 통합, 효율적인 검색기능 제공
2	질병기전 이해	표현형 등의 정보 기반으로 질병 기전 제시
3	바이오마커 발굴	질병 타겟 바이오 마커 추천
4	데이터와 모델 개발	데이터 기반으로 특정 조직의 모델 생성
5	약물재창출/적응증 확대	기존 의약품의 새로운 적응증 추천
6	새로운 후보물질 발굴	새로운 후보물질 발굴
7	후보물질 최적화/유효성 검증	후보물질 검증
8	약물설계	새로운 분자 생성
9	전임상 실험 설계	적절한 시약 등 실험 설계에 필요한 자원 추천
10	전임상 실험 수행	전임상 예측결과 제공
11	임상 설계	환자 기준, interventions 추천 등
12	임상 환자 모집	환자 모집 지원(환자 데이터에서 적절한 임상시험 제안)
13	임상 최적화	환자 모니터링 지원, 임상 성공을 위한 지원
14	데이터 공개	clinical writing, 연구 기록 등 효율적 관리 시스템
15	RWD 분석	의료, 약국 청구 데이터 분석

*출처 : Simon Smith, 230 Startups Using Artificial Intelligence in Drug Discovery, 2021. 02.

□ 세계 인공지능 활용 신약개발 시장

- (시장규모 및 동향) 세계 인공지능 활용 신약개발 시장은 2019년 473.4백만 달러에서 연평균 28.63% 성장하여 2027년 3,548.6백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨

<세계 인공지능 활용 신약개발 시장규모 현황 및 전망>



*출처 : Grand View Research, Inc., Artificial Intelligence in Drug Discovery Market Analysis and Segment Forecast to 2027, 2021. 재구성

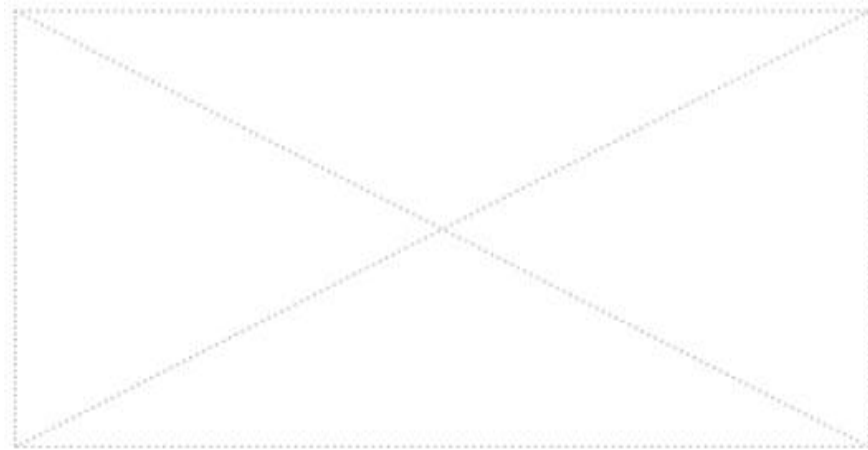
- (인공지능 활용 증가) 신약개발 관련 전체 비용 절감, R&D 생산성 향상 등을 위해 신약개발 분야의 인공지능(AI) 플랫폼 수요와 활용이 증가하고 있음
 - AI 플랫폼의 데이터 마이닝, 사용자 정의 기능과 같은 표준 프로세스를 수행하기 위한 다양한 옵션의 가용성으로 인해 약물 개발 프로세스에서 인공지능 활용이 증가하고 있음
- (환자 건강 데이터 대량 유입) 전 세계적으로 환자 건강과 관련된 디지털 데이터의 유입이 크게 증가함에 따라, 인공지능 기술을 이용한 데이터 관리 및 통합이 중요해짐
 - 매일 생성되는 의료정보의 양이 매우 방대하기 때문에, 의료 제공을 개선하기 위해 데이터를 캡처, 저장 및 분석하는 것이 중요함
- (의료비용 절감 필요) 인구 고령화에 따라 경제성장보다 의료비용이 빠르게 증가하면서 의료 지출 절감의 압력이 세계적으로 증가하고 있음
 - 의료 IT의 발전은 약물발견 및 임상 결과 개선으로 의료비용 절감의 기회를 제공하며, 이는 AI 기술에 대한 수요를 증가시킴
 - 의료산업의 많은 주요 업체들은 약물 개발 비용을 줄이기 위해 인공지능 기반 프로세스를 활용하고 있음
- (만성질환 유병률 증가) 만성질환의 유병률 증가는 질병의 초기 단계에 대한 이해와 진단의 필요성을 높인 주요 요인으로, 인공지능의 딥러닝 기술을 활용하면 과거 건강 데이터를 기반으로 질병을 쉽게 예측하고, 신약개발 프로세스를 단순화하는 데 도움이 됨
- (맞춤형 의료 수요 확대) 인공지능과 인간지능 데이터 분석의 결합은 맞춤형 의료 및 신약개발

접근에 대한 다양한 기회를 제공함

□ 국내 인공지능 활용 신약개발 시장

- (시장규모 및 동향) 국내 인공지능 활용 신약개발 시장은 2019년 6.8백만 달러에서 연평균 31.53% 성장하여 2027년 60.9백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨

<국내 인공지능 활용 신약개발 시장규모 현황 및 전망>



*출처 : Grand View Research, Inc., Artificial Intelligence in Drug Discovery Market Analysis and Segment Forecast to 2027, 2021. 재구성

- (공공·민간 투자 증가) 국내 정부는 향후 3년간 인공지능을 활용한 혁신 의약품 개발 지원을 위해 258억 원(USD 21.7백만 달러)을 지출할 것을 발표함('19. 06.)
- AI는 종전 신약후보물질 도출을 넘어 정보통합, 질병 기전 이해, 데이터·모델 생성, 약물 재창출, 후보 물질 검증, 임상디자인, 임상시험 최적화, 데이터 공개, 임상 환자 모집 등으로 활용범위를 빠르게 넓혀가고 있음

3. 기술 동향

- (신약 임상개발 및 사용에 AI 활용) 최근 신약 탐색뿐만 아니라 임상개발 및 허가·사용 등 광범위한 범위에서 빅데이터 및 인공지능 활용 등을 시도하고 있음
 - 신약후보물질 탐색 과정뿐만 아니라, 정보탐색, 전임상, 임상, 제도, 인허가, 사용, 신약개발 의사결정 등 여러 분야에서 다수의 인공지능 활용모델들을 시도하고 있음
- (신약개발 단계별 AI 및 데이터사이언스 적용) 신약개발의 다양한 단계에서 AI 및 데이터사이언스 기술을 적용함
- (신약후보물질 발굴에 AI 활용) 인공지능(AI)은 블록체인, 양자컴퓨터 등 신형, 보완적 기술과 결합하여 신약후보물질 발굴에 활용되고 있음

- (백신 및 치료제 개발에 AI 활용) 백신과 치료제 개발에 사용되는 바이러스 단백질 구조 분석, 유전자 분석 등 관련 데이터 분석에 AI 기술을 활용하여 임상 및 제품 개발에 소요되는 시간과 비용을 절감함

■ 주요 추진내용

1. 선행사업 추진현황

- ‘인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업’을 중심으로, 후보물질 발굴부터 약물 감시까지 신약개발 전주기를 아우르는 AI 플랫폼 구축 연구를 진행 중에 있음
 - 과학기술정보통신부, 보건복지부 주관으로 `19년부터 `21년까지 총 3년간 250억 규모로 현재 진행 중
 - 후보물질 발굴(4), 신약재창출(1), 스마트 약물감시(1), 운영지원(1)으로 구성

<인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업>

(단위 : 억 원)

연구 주제	선정 과제수	1단계		2단계		합계		
		1차년도		3차년도				
		연구기간	연구비	연구기간	연구비			
후보물질 발굴	4개	2019.6.1.~ 2020.2.29.	45	2020.3.1.~ 2020.12.31.	2021.1.1.~ 2021.12.31.	55.5	150.5	
신약 재창출	1개		11.25			12.5	13	36.75
스마트 약물감시	1개		11.25			12.5	13	36.75
플랫폼 운영지원	1개		7.5			8.3	8.5	24.3
합 계	7개	9개월	75	10개월	83.3	12개월	90	248.3

2. 본사업 추진내용

- (사업명) 인공지능 활용 혁신신약 발굴 사업
- (사업 목표) 인공지능 신약개발 플랫폼 고도화 및 활용 지원을 통한 가시적 신약개발 성과 창출
- (기간/규모) ‘22 ~‘26(5년) / 총 407억 원(국비 기준)
- (사업내용) 후보물질 발굴, 전임상시험, 스마트 약물 감시 등 신약개발 단계별 인공지능 플랫폼 개발 및 신약개발 적용

□ 분야별 추진내용

① 인공지능 활용 후보물질 발굴 (‘22년 27억원, 3개과제X12억원/년X9개월, 총4년)

- 선행사업에서 구축되었거나, 별도 연구팀에서 구축한 인공지능 플랫폼을 고도화하고 직접 활용하여 신약 타겟 및 후보물질 도출
 - 인공지능을 직접 활용하여 신약개발 성과 창출이 가능한 분야를 수요조사·간담회 등을 통해 도출하여 지원 분야 및 지원 규모 확정
 - ‘22년, ‘23년으로 2차에 걸쳐 각 차수별 3개 과제 지원하며, 2단계 진입 시 3개 과제 중 2개 과제만 선정하여 집중 지원(경쟁형 R&D)

○ 인공지능 연구자, 신약개발 전문가 및 제약사의 협력연구를 유도하고, 도출 성과의 후속 지원 방향 확보 추진

- 인공지능 모델을 활용하여 혁신신약을 개발함과 동시에, 연구결과는 인공지능 플랫폼 고도화에 사용되는 선순환 구조 구축

② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화 (‘22년 9억원, 6개X2억원/년X9개월, 총3년)

○ 연구자 수요(신물질 설계, SAR 기반 후보물질 최적화, 약동/약력 분석, 후보물질 유효성 검증 등)를 반영한 목표 지향적 신규 플랫폼 모듈 구축 및 검증

- 하향식(Top-Down) 과제와 상향식(Bottom-up) 과제 병행 지원

- ‘22~’24년 매년 6개의 신규 과제를 선정하고, 2단계 진입 시 과제의 50%만 선정해 집중 지원(경쟁형 R&D)

○ 구축 모델은 ‘인공지능 통합 포털 사이트’를 통해 API를 기탁하고 최소 3년간 해당 모델을 공공 목적으로 공개

- API 공개 계획에 따른 연구비 차등 부여, 활용에 따른 수익 모델 창출 등으로 적극적인 모델 공개 유도

③ 운영 지원 및 공공 플랫폼 운영 (‘22년 4억원, 1개, 총5년)

○ 마일스톤 기반 과제 진도관리, 네트워킹 등을 통한 가시적 성과 창출을 지원하고, 공공 포털 사이트 운영을 통한 인공지능 신약개발 생태계 조성

○ ‘22년 1개의 신규 과제를 선정하여, 총 5년을 지원하고 운영 지원, 검증 지원 및 공공 포털 사이트 운영을 위한 총괄 과제로 구성

<분야별 사업비 투자 계획>

(단위 : 백만 원)

구 분	’22	’23	’24	’25	’26	합계	
인공지능 활용 후보물질 발굴	2,700	6,300	7,200	7,200	3,600	27,000	
신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화	900	2,100	3,300	2,400	1,200	8,100	
운영·지원	R&D 지원	300	700	1,100	800	400	3,300
	포털 운영	100	100	100	100	100	500
합계	4,000	9,200	11,700	10,500	5,300	40,700	

3. 전문가위원회(기술수요조사)

□ 전문가 간담회 개최

- (목적) 인공지능 기반 신약개발 동향 분석 및 신규 R&D 세부(안) 도출을 위한 전문가 자문회의 개최
- (일시/장소) '21. 08. 23.(월) 14:00~16:00 / 화상회의(Webex)
- (참석) 과학기술정보통신부 생명기술과 조아람 사무관, 한국연구재단 신약단장, 신약개발지원센터, 생명공학정책연구센터, 신약개발 전문가 등 10명 내외

□ 주요 논의사항

- 인공지능 기반 신약개발의 필요성
- 인공지능 기반 신약개발 플랫폼 공공화 가능성 및 활용도 검토
- 인공지능 기반 신약개발 국가 R&D의 우선지원 분야 발굴

□ (전문가 신규 R&D 제안) 전문가위원회 및 기술수요조사를 통해 '인공지능 활용 혁신신약 발굴사업' 내 총 7개의 세부과제가 도출됨

- 인공지능 기반 신약개발의 추진 사업 제안
 - 특정타겟 (예, Kinase 등)에 대한 소스데이터 확보를 통한 AI 화합물 도출 사업 진행
 - 검증된 신약(FDA 승인 및 임상유효성이 확보된 화합물)을 이용한 AI 예측정확도 검증 필요
 - 희귀질환 및 비상업적 질환 (non-profit drug)의 치료제 발굴분야에 AI 신약개발 플랫폼의 적극 활용
 - AI 신약개발 플랫폼 개발과 실험적 검증 지원이 병행되는 two-track 연구개발사업 기획 필요
 - 신약 연구데이터 공유를 위한 컨소시엄 구성 및 국가 연구데이터 사업을 연계한 표준화된 데이터 확보
 - 유럽의 MELLODY 사례 벤치마킹 및 국내 산학연 보유의 ADME 자료 확보 및 활용
- 인공지능 기반 신약개발 플랫폼 공공화 가능성 및 활용도 검토
 - 공공의 문헌정보 활용 및 참여기업 데이터의 적극적인 공유 제안
 - 한국화합물은행의 화합물 정보 및 활용에 대한 자유도 부여

- 개별 연구주체에서 개발된 플랫폼의 licensing-in을 통한 공공플랫폼 운영
- 국가바이오데이터 스테이션 사업과의 연계를 통한 플랫폼의 지속적 공공운영 방안 마련
- 희귀질환 등 데이터 공공화가 용이한 질환에 대한 시범적인 운영 실시
- 기업 제공 데이터에 대한 IP 보호방안 수립 및 데이터 공여 기업에 대한 국책과제 인센티브 부여

<전문가 신규 R&D 제안 과제 리스트>

구분	제안 과제(명)
1	AI 기반 인산화 효소 저해제 선도물질 발굴 시스템 구축
2	단백질 서열 기반 신약 디자인 플랫폼
3	-
4	인공지능 기반 희귀질환 공공 연구 플랫폼 구축 및 선도/후보물질 발굴 사업
5	인공지능 기반 맞춤형 혁신 치료제 발굴
6	인공지능 학습 빅데이터 구축 사업
7	후보물질 도출에 필요한 ADMET 예측을 위한 10만 데이터 확보 과제 (ADMET : Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity)

<전문가 신규 R&D 제안 수요조사서>

제안자정보	이름	김남두	소속	보로노이바이오(주)
제안과제명	AI 기반 인산화 효소 저해제 선도물질 발굴 시스템 구축			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 기존 신약개발 과정은 유효 또는 선도물질이 확보될 경우, 분자설계 연구와 같은 이론적인 모델을 이용하여 약효를 최적화하여 후보물질을 도출하는 연구 과정으로 신약개발 연구를 수행하고 있음 ○ 신약 타겟에 대한 전임상 또는 임상 단계에 대한 선행 연구가 있는 경우에는, 대부분의 회사가 이미 알려진 화합물 정보를 이용하여 특허를 회피하는 전략으로 신약개발연구를 수행하고 있음 ○ 따라서, 다양한 알고리즘을 적용한 AI 기반 선도물질 생성 플랫폼을 신약개발에 적용할 경우 특허성이 확보된 골격을 다수 생성하여 이용하는 것이 가능 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 현재 국내에만 약 20여개 이상의 AI 기반 신약개발 벤처회사가 설립되어 운영 중 ○ 국내 AI기반 신약개발 벤처 회사 대부분이 공지된 화합물 데이터를 기반으로 학습하여 다양한 질환 치료제 개발에 집중하고 있음 ○ 그러나, 자체 구축한 인산화 효소 관련 데이터를 활용하여 다양한 질환 치료제를 개발하는 회사는 없음. 따라서 저분자 화합물 약물 표적의 30%를 차지하는 인산화 효소에 대한 AI 플랫폼을 구축할 경우 암을 비롯한 다양한 질환 			

	치료제에 적용을 할 수 있음
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ (신약개발 측면) 인산화 효소의 선택성을 구분할 수 있는 AI 플랫폼 구축 ○ (인공지능 측면) 다양한 신규 AI 알고리즘을 적용한 플랫폼 구축
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 신약개발 AI 플랫폼 구축을 위하여, 다양한 소스에서 데이터 확보 ○ 개별 인산화 효소에 대한 선택성 데이터 추가 확보 (Kinase profiling 데이터 등) ○ 다양한 AI 알고리즘을 이용한 화합물 생성 플랫폼 구축 ○ 신약개발 AI 플랫폼 검증을 위한 의약합성 연구 및 약효 검증 연구 수행
플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ AI 학습을 위한 데이터는 논문 및 특허 데이터를 확보하고, 개별기업이 참여할 경우 기업체 데이터를 추가 적용 가능한 AI 플랫폼 구축 ○ 개별 기업의 데이터는 해당 기업만 AI 학습이 가능하도록 플랫폼 구축

제안자정보	이름	김태형	소속	테라젠바이오
제안과제명	단백질 서열 기반 신약 디자인 플랫폼			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 기존 구조 기반 신약 디자인 플랫폼 다수 존재 (예: AtomNet, Standigm Insight™, (주)Hits사의 플랫폼 등) ○ 이들은 구조 기반으로 보다 정확한 예측 및 신약 물질을 제시하지만, 높은 예측률을 위해서는 구조에 대한 정보가 필요하다는 제약이 있음 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 최근 구글의 AlphaFold에 이어 RosettaFold, ColabFold 등 단백질 서열 기반으로 높은 구조 예측이 가능한 상황임 ○ 이에 이러한 사전 학습 모델을 기반으로 신약 물질을 보다 폭넓게 제시할 수 있는 플랫폼이 필요함 			
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 타겟 단백질을 억제할 수 있는 합성 가능한 신약 물질 제시 ○ 서열 기반 구조 예측 기술을 기반으로 타겟 단백질을 억제하는 신약 물질을 만들어내는 인공지능 기법 개발 			
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 기존 타겟 단백질에 대한 단백질 서열 기반 구조 예측 정확도 분석 ○ 기존 타겟 단백질에 대한 기존 알려진 약제에 의한 억제 효과 예측 정확도 분석 ○ 기존 타겟 단백질에 대한 기존에 알려지지 않은 약제에 의한 억제 효과 예측 및 이에 대한 실험 검증 			
플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 한국화학물은행 등재 약제 활용에 대한 자유도 부여 ○ 플랫폼은 공공화하되, 기술개발 기업 및 기관 소유 지적재산권에 대한 실시권 			

을 공공화 주체가 licensing-in하는 정책

제안자정보	이름	염민선	소속	KISTI
-------	----	-----	----	-------

제안과제명 -

제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ (AI) 선행사업의 경우 개발되어 공개된 인공지능 모델을 적용하거나, 공개된 인공지능 프로그램을 일부 수정하여 사용하였으나 신약 개발 분야 국가 경쟁력 확보를 위해서는 자체 인공지능 모델을 개발하여 산학연에 제공 필요 ○ (AI) 선행사업의 경우 virtual screening, ADMET 예측, 화합물 설계를 위해 인공지능을 주로 사용되었으나, 적용 범위를 확대하여 전임상 단계에 적용할 수 있는 연구개발 필요 ○ (데이터) 선행사업의 경우 주로 해외 공개 데이터와 소규모의 자체 데이터를 활용함으로써 인공지능 모델의 정확도 향상에 제약이 따름. 다양한 데이터 확보를 위한 노력 필요 <p>※ 본 사업에서 데이터의 중요성이 크나, 데이터 생산만을 위한 별도의 과제 구성은 사업의 취지에 맞지 않음</p> <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 민간에서는 원천기술개발보다는 개발된 AI 기술을 활용한 신약 후보물질 도출에 주력함에 따라 국가 R&D를 통한 원천기술개발 및 제공이 중요
------------	--

연구목표 (성과목표) -

연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ (AI) 1) 기존 AI 모델의 정밀도 향상, 2) AI 모델의 적용용 범위 확대(전임상 등) ○ (데이터) 다양한 자체 데이터 확보 ○ (플랫폼) 기능 고도화 필요
--------------------	--

플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 운영과제를 통한 플랫폼 공공화는 운영의 지속성을 보장하기 어려움에 따라 데이터 스테이션과 연계하는 것이 효율적
------------	--

제안자정보	이름	오경석	소속	일진SNT
-------	----	-----	----	-------

제안과제명 인공지능 기반 희귀질환 공공 연구 플랫폼 구축 및 선도/후보물질 발굴 사업

제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 선행사업에서 구축된 인공지능기반 신약개발 플랫폼의 적극 활용 ○ 전통적 신약개발 방식이 아닌 인공지능기반으로 차별화된 신약개발 방식 제안 및 검증 ○ 신약개발 과정에서 과연 인공지능 모델의 유용성/활용성에 대한 객관적인 검증 필요
------------	--

	<p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 실험기반 중심의 신약개발에서 인공지능 기반 신약개발로 전환을 위한 다양한 플랫폼 개발 및 이에 대한 적용 사례 도출 ○ 민간에서 관심을 크게 두고 있지 않는 희귀질환 혹은 상업적 관심이 적으나, 국가 차원에서 치료제가 필요한 질환들에 대해 기존과 다른 새로운 방식의 적용 검증 및 이를 통한 새로운 치료제 발굴하고, 국가 차원의 공공 신약개발사업을 운영
<p>연구목표 (성과목표)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ○ 희귀질환 및 비상업적 질환에 대한 선도/후보물질 발굴 ○ 선도/후보물질 발굴에 필요한 인공지능 플랫폼 구축 및 검증 ○ 희귀질환 치료제에 대한 신약개발 공공 연구 플랫폼 도출 (연구데이터, 인공지능 플랫폼, 선도/후보 물질)
<p>연구내용 및 추진방법 (자유기술)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ○ 희귀질환 질환 선정 및 인공지능 기반 선도/후보물질 발굴 Workflow 및 TPP 수립 (기존 실험 기반 방식과 차별화된 형식) ○ Workflow 및 TPP 에 따라 필요한 인공지능 기반 플랫폼 개발 및 활용 방안, 그리고 인공지능 기반 활용을 위한 실험적 지원 방안 수립 (화합물 합성, 약효/독성/약동력학 평가) ○ 설정한 Workflow 및 TPP 에 따른 연구 진행 및 진도 관리 (기존 실험 기반 방식과 차별화 및 인공지능 기반의 효율성 검증) ○ 선도/후보물질 발굴 목표와 별도로 이에 활용된 개별 인공지능 모델에 대한 별도 개발/검증 수행 ○ 인공지능 중심 신약개발 사업에 대한 차별화된 개념 정립과 실제 실현 가능성, 이를 통한 결과 창출이라는 큰 도전임, 특히나 선도/후보물질 발굴은 실험적 확인을 거쳐야 함으로 단순히 인공지능 그룹 외에 더 많은 실험 지원 그룹이 필요할 수 있음, 이에 대한 타 사업과 차별성 및 타당성이 설득되지 못한다면, 기존 실험 기반 신약개발 사업에 인공지능 플랫폼을 활용하는 수준과 다를 바 없음
<p>플랫폼 공공화 방안</p>	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 희귀질환의 경우 사유화보다는 공공화 관점이 크기 때문에 여러 데이터 확보에 용이할 수 있음 ○ 검증된 인공지능 플랫폼의 경우 활용 사례 공유를 통해 추후 후속 연구에 대한 지속적인 공공화가 가능함 ○ 기업의 경우 데이터 공유보다는 선도/후보물질 발굴을 위한 실험적 지원과 인공지능 모델의 검증/활용을 유도하고 향후 인공지능 모델을 직접 도입할 수 있도록 하는 것이 적합함

<p>제안자정보</p>	<p>이름</p>	<p>이 주 연</p>	<p>소속</p>	<p>한국화학연구원</p>
---------------------	------------------	---------------------	------------------	----------------

제안과제명	인공지능 기반 맞춤형 혁신 치료제 발굴			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ AI 기반 신약개발 연구는 30여년 전부터 다양한 메소드 개발과 활용된 방법으로 초기물질 발굴에 있어 효용성은 이미 입증되었음 ○ 신약재창출 또는 기초 연구가 많이 수행되어 데이터가 축적된 특정 타겟, 질환 이외에는 적용이나 성공사례 찾기 어려움 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 공공 데이터는 인터넷에서 쉽게 찾을 수 있을 만큼 정형화된 정보가 많으며, 오픈 소스도 많아 데이터 활용에 있어서 진입장벽이 낮아짐 ○ 그러나 희귀, 난치성, 감염병 치료제 개발 등 적은 환자수로 민간에서 개발 관심도가 낮거나 고가의 치료비가 요구되는 질환 분야에 도전적인 AI 적용 및 성공 사례 도출 필요 			
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ (신약개발 측면) 희귀, 난치성, 감염병 치료제 후보물질 발굴 및 기초연구 활성화 ○ (인공지능 측면) 딥러닝 적용 데이터가 부족한 경우 적용 가능한 방법론, 알고리즘 개발 			
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 정제된 연구데이터를 보유하고 있는 제약사들과 컨소시엄 구성 및 공동연구 추진 ○ IT 기업들의 하드웨어 및 인적자원을 활용할 수 있도록 공동연구 모색 ○ 국가지원 과제로 파생된 연구데이터는 IP를 위해 일정 기간동안 보호하되 이후에는 데이터를 공개하여 공공목적에 활용 ○ AI 활용을 위한 연구데이터가 부족한 타겟은 기초연구 활성화 병행 			
플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 산업체 데이터는 기업 자산으로 공공 목적을 위해 활용하는 경우 데이터 공유에 있어 descriptor, fingerprint등 IP를 보호할 수 있는 방안을 도입 ○ 연구데이터 기부시 docking, MD, FEP등 유료 소프트웨어 활용등 인센티브 제도 ○ 클라우드, GPU, CPU등 하드웨어 지원 방안 ○ 데이터 공여 기업에 대해서는 전임상, 임상등 국책 과제 참여에 있어 가산점 부여 ○ 발굴된 유효물질은 데이터 공여 기업에 최초 교섭권 부여 			

제안자정보	이름	최동규	소속	대구 신약센터
제안과제명	인공지능 학습 빅데이터 구축 사업			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 선행사업은 모든 총괄과제에서 공공데이터를 수집하는 관계로, 데이터 중복의 			

	<p>우려가 다수 존재</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 공공데이터의 경우 유사한 Molecular Entity로 구성되어 화학 공간(Chemical space)에 한계가 존재 ○ 기존에는 데이터 확보만을 위한 사업은 부재 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ `21년 하반기 오픈할 국가 바이오데이터 스테이션과 협력하여, 공백 데이터를 보충하고, 데이터 활용법 발굴 필요 ○ 시간, 비용 등 여건상 민간 및 연구자들 개별 구축이 어려움
<p>연구목표 (성과목표)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ○ (신약개발 측면) 공백 화학 공간의 화합물 생성으로 New Molecular Entity의 신약 가능성 초기 데이터 확보 ○ (인공지능 측면) 인공지능 기계 학습용 바이오 데이터 제공으로 모델 성능 고도화 기여
<p>연구내용 및 추진방법 (자유기술)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ○ 국가 바이오데이터 스테이션 보관 빅데이터 분석 ○ 사업 참여 연구자 수요기반의 신규 발굴 데이터 범위 정의 ○ 조직 화학을 통한 신규 화학공간 화합물 합성 및 분석 ○ 데이터 패키징 및 연구개발 과제 제공
<p>플랫폼 공공화 방안</p>	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 본 과제에서 생성된 데이터는 국가바이오데이터 스테이션에 일괄 기탁

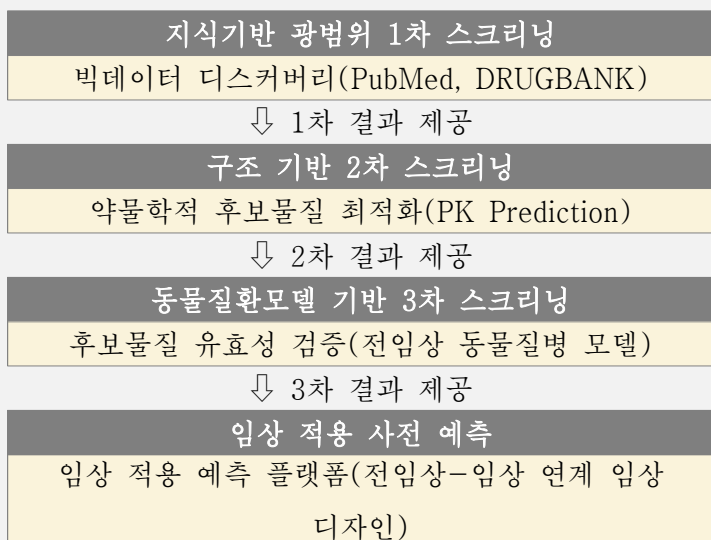
제안자정보	이름	황재성	소속	넷타겟
제안과제명	후보물질 도출에 필요한 ADMET 예측을 위한 10만 데이터 확보 과제 (ADMET : Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity)			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 문헌상의 일반적인 data 수집만이 아니라 잘 다듬어진 양질의 많은 data 확보 필요 ○ 히트(Hit)를 찾은 이후에 리드(Lead)로의 후보물질 도출을 위해서는 ADMET 최적화 과정이 필요 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Well-Curated 되어있는 대량의 data 확보는 민간에서 수행하기 어려움 <ul style="list-style-type: none"> - 인공지능 신약개발 수행 시 잘 다듬어진 data의 확보는 가장 중요한 것이라는 사실은 공지의 내용 ○ 10만 data는 인공지능이 performance를 낼 수 있는 최소의 숫자로 개인적으로 판단 			
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ (신약개발 측면) 실제 후보물질로 성공을 높이기 위한 ADMET 극복 ○ (인공지능 측면) 양질의 data 제공으로 인공지능 업체의 국제 경쟁력 확보 			
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 유럽에서 진행 중인 MELLODDY 현황 파악(실제 진행 내용) ○ 국내 제약사에서 확보하고 있는 ADMET 자료 확보 ○ Chemical space에서 ADMET 자료 빠져 있는 화합물의 실제 합성 및 ADMET 실험 ○ 실험결과 Database화 			
플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ data 공유한 제약사에 대해서는 모델 공유 및 활용 ○ 확보된 data로 현재까지 알려지지 않은 ADMET 실험된 화합물은 ADMET 예측 대회 개최로 각 회사의 실제 모델의 우수성 평가 및 국제적 경쟁력 확보 			

■ 사업 추진 체계

<사업 추진 체계>

[인공지능 기반 혁신 신약개발 가속화 플랫폼 구축]

운영지원	후보물질발굴	AI 모듈 고도화
인공지능 신약개발 생태계 조성	인공지능 기반 혁신 신약 후보물질 발굴	신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화
<ul style="list-style-type: none"> 마일스톤 기반 과제 관리 가시적 성과 창출 체계적 지원 	<ul style="list-style-type: none"> AI 플랫폼 활용 신약타겟발굴 및 후보물질 도출 우수 플랫폼 검증 및 고도화 	<ul style="list-style-type: none"> 수요기반 신규 AI 플랫폼 구축 목표지향적 AI 모듈 고도화



“임상시험 단계
조기 진입”

■ 기대효과

□ 기술적 기대효과

- 차별화된 차세대 신약개발 플랫폼 및 원천기술 확보를 통해 가시적인 신약개발 성과 창출
- 차세대 신약 기반 기술 확보를 통한 국가 신약개발 경쟁력 확보
- 신약개발 단계별 수행 주체 간 협력 연계를 통해 단계별 연구 결과의 신속한 검증 및 프로세스 가속화

□ 경제적 기대효과

- (원천기술 확보) 인공지능을 활용한 신약개발 지원 플랫폼 및 원천기술 확보를 통한 신약 부가가치 창출

- (신약개발 사업화를 통한 부가가치 창출) 확보된 인공지능 기반 기술은 국내 기업에 기술이전 하거나 공동연구를 통해 신약개발에 활용 시 높은 경제 효과를 기대

□ 사회적 기대효과

- (경제성장, 일자리 창출) 차세대 융합 신약 기반 바이오 경제성장 및 일자리 창출에 기여
 - 인공지능 및 융합 신약 기반 원천기술 확보를 통한 신약개발 패러다임 전환
 - 인공지능 기반 신약개발 프로세스 정립, 인공지능 및 융합 신약 신기술 실증 임상연구를 통한 디지털 바이오 헬스케어 산업 활성화, 차세대 신약개발 분야 전문인력 양성 및 일자리 창출
- (치료제 개발 대응체계 마련) 미래형 인공지능 기반 신약개발 전주기 가속화 플랫폼으로, 향후 발생할 신종 감염병 팬데믹의 신속한 치료제 개발 대응체계 마련
 - 신종 감염병 치료제 분야에 우선 적용하여 가속화 플랫폼의 조기 구축 및 공공적 효과 극대화

■ 인공지능 활용 혁신신약 발굴사업 추진전략

1. 비전·목표 및 방향 정립

비전 신약개발 전주기 활용 가능한 인공지능 신약개발 플랫폼 구축으로
질환 극복 토대 마련 및 국가 신약개발 경쟁력 제고

목표 인공지능 신약개발 플랫폼 고도화 및 활용 지원을 통한
가시적 신약개발 성과 창출

	인공지능 활용 후보물질 발굴	신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화	운영지원 및 공공 플랫폼 운영
전략 사업	선행사업을 통해 구축된, 혹은 그 밖의 연구팀에서 별도로 구축한 인공지능 플랫폼을 고도화·활용하여 신약 타겟 및 후보물질 도출	연구자 수요 기반 신규 플랫폼 모듈 구축·검증	마일스톤 기반 과제관리 및 구축된 플랫폼·모듈에 대한 블라인드 검증, 공공 플랫폼 운영·관리 등

사업기간	총 사업비(억원)						
	구분	사업 추진 기간					총사업비(백만원)
투입 규모 2022년 ~ 2026년 (5년)		'22	'23	'24	'25	'26	
	국비	4,000	9,200	11,700	10,500	5,300	40,700
	지방비	-	-	-	-	-	-
	민자	-	-	-	-	-	-
	합계	4,000	9,200	11,700	10,500	5,300	40,700

추진 로드맵	전략 사업 및 과제	사업 기간('22~'30)					사업비	운영비	총사업비(백만원)
		22	23	24	25	26			
	① 인공지능 활용 후보물질 발굴 (`22년 27억원, 3개과제X12억원/년X9개월, 총4년)						27,000	-	27,000
	② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화 (`22년 9억원, 6개X2억원/년X9개월, 총3년)						8,100	-	8,100
	③ 운영지원 및 공공 플랫폼 운영 (`22년 4억원, 1개, 총5년)						3,800	-	3,800

추진 내용 **┃ 인공지능 활용 혁신신약 발굴사업 ┃**

추진 전략	세부 추진 내용
-------	----------

인공지능 활용 후보물질 발굴	<ul style="list-style-type: none"> • 선행사업에서 구축되었거나, 별도 연구팀에서 구축한 인공지능 플랫폼을 고도화하고 직접 활용하여 신약 타겟 및 후보물질 도출 <ul style="list-style-type: none"> - 인공지능을 직접 활용하여 신약개발 성과 창출이 가능한 분야를 수요조사·간담회 등을 통해 도출하여 지원 분야 및 지원 규모 확정 - `22년, `23년으로 2차에 걸쳐 각 차수별 3개 과제 지원하며, 2단계 진입 시 3개 과제 중 2개 과제만 선정하여 집중 지원(경쟁형 R&D) • 인공지능 연구자, 신약개발전문가 및 제약사의 협력연구를 유도하고, 도출 성과의 후속 지원 방향 확보 추진 <ul style="list-style-type: none"> - 인공지능 모델을 활용하여 혁신신약을 개발함과 동시에, 연구 결과는 인공지능 플랫폼 고도화에 사용되는 선순환 구조 구축 <p>※ 지원과제는 AI 모델 구축 및 활용 방안, 신약개발 전문가 협업, API 제공 계획을 상세히 제시하여야 하며, 운영지원과제와 협력하여야 함</p>
신규 플랫폼 모델 구축 및 고도화	<ul style="list-style-type: none"> • 연구자 수요(신물질 설계, SAR 기반 후보물질 최적화, 약동/약력 분석, 후보물질 유효성 검증 등)를 반영한 목표 지향적 신규 플랫폼 모듈 구축 및 검증 <ul style="list-style-type: none"> - 하향식(Top-Down) 과제와 상향식(Bottom-up) 과제* 병행 지원 <p>*△하향식 : 수요·동향을 바탕으로 신규 개발이 필요한 플랫폼 도출 △상향식 : 연구자 의견에 기반한 자유 공모 과제</p> <ul style="list-style-type: none"> - `22~`24년 매년 6개의 신규 과제를 선정하고, 2단계 진입 시 과제의 50%만 선정해 집중 지원(경쟁형 R&D) • 구축 모델은 '인공지능 통합 포털 사이트'를 통해 API를 기탁하고 최소 3년간 해당 모델을 공공 목적으로 공개 <ul style="list-style-type: none"> - API 공개 계획에 따른 연구비 차등 부여, 활용에 따른 수익 모델 창출 등으로 적극적인 모델 공개 유도
운영지원 및 공공 플랫폼 운영	<ul style="list-style-type: none"> • 마일스톤 기반 과제 진도관리, 네트워킹 등을 통한 가시적 성과 창출을 지원하고, 공공 포털 사이트 운영을 통한 인공지능 신약개발 생태계 조성 • `22년 1개의 신규 과제를 선정하여, 총 5년을 지원하고 운영 지원, 검증 지원 및 공공 포털 사이트 운영을 위한 총괄 과제로 구성

2. 사업개요 및 구성

비전	<p>신약개발 전주기 활용 가능한 인공지능 신약개발 플랫폼 구축으로 질환 극복 토대 마련 및 국가 신약개발 경쟁력 제고</p>
----	--

목표	인공지능 신약개발 플랫폼 고도화 및 활용 지원을 통한 가시적 신약개발 성과 창출
-----------	---

전략 사업	① 인공지능 활용 후보물질 발굴	선행사업을 통해 구축된, 혹은 그 밖의 연구팀에서 별도로 구축한 인공지능 플랫폼을 고도화·활용하여 신약 타겟 및 후보물질 도출
	② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화	연구자 수요 기반 신규 플랫폼 모듈 구축·검증
	③ 운영지원 및 공공 플랫폼 운영	마일스톤 기반 과제관리 및 구축된 플랫폼·모듈에 대한 블라인드 검증, 공공 플랫폼 운영·관리 등

사업기간	총 사업비(백만원)
-------------	-------------------

투입 규모	2022년 ~ 2026년 (5년)	(년차별 사업비)								
		년차	국고	민자		합계	국고 (백만원, %)	민자		합계 (백만원, %)
				현금	현물			현금	현물	
		1차년	4,000	-	-	4,000		-	-	
		2차년	9,200	-	-	9,200		-	-	
3차년	11,700	-	-	11,700	40,700					
4차년	10,500	-	-	10,500	(100%)					
5차년	5,300	-	-	5,300		-		40,700		
		(과제별 사업비)								
		전략 사업	국비	민간		합계				
				현금	현물					
		① 인공지능 활용 후보물질 발굴	27,000	-	-	27,000				
		② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화	8,100	-	-	8,100				
		③ 운영지원 및 공공 플랫폼 운영	3,800	-	-	3,800				
		합계	40,700	-	-	40,700				

목 차

제1장 사업 추진 배경	1
제1절 추진 배경 및 필요성	1
1. 사업 추진 배경 및 필요성	1
2. 사업 추진 목적	8
제2장 국내외 환경 분석	11
제1절 정책 동향	11
1. 주요국 정책 동향	11
가. 미국	11
나. 유럽	17
다. 일본	23
라. 중국	26
2. 국내 정책 동향	30
제2절 산업·시장 동향	37
1. 의약품 산업	37
가. 의약품 산업 개요 및 특징	37
나. 세계 의약품 시장 규모	42
다. 국내 의약품 산업 현황	47
라. 인공지능 기반 신약개발 패러다임	50
2. 인공지능 활용 신약개발 시장	53
가. 세계시장	53
나. 국내시장	67

제3절 국내외 기술 동향	68
1. 기술개발 및 기업 동향	68
2. 특허 동향 분석	76
가. 특허 분석 개요	76
나. 특허 분석 기준	77
다. 정량분석(기술동향-통계관점 분석)	80
라. 정성분석	88
마. 분석소결	100
제3장 주요 추진내용	102
제1절 선행사업 추진현황	102
1. 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업	102
제2절 본사업 추진내용	115
1. 사업 개요 및 주요 추진내용	115
2. 선행사업과의 차별성	117
가. 선행사업 성과 및 현재 진행 현황	117
나. 선행사업의 한계 및 후속연계 필요성	119
다. 추가 인공지능 모듈 개발 필요성	120
라. 선행사업과의 차이점	121
3. 과제별 단가책정 근거	122
제3절 기술 수요조사	123
1. 기술수요조사 개요	123
가. 전문가 간담회 개최	123
나. 주요 논의사항	123
2. 전문가 신규 R&D 제안 분석	128
3. 기술수요분석 및 전문가 제안의 시사점	142

제4장 사업 추진체계	146
제1절 추진체계	146
제5장 기대효과	150
제6장 인공지능 활용 혁신신약 발굴사업 추진전략	153
제1절 비전·목표 및 방향 정립	153
제2절 사업 구성	155
1. 사업개요 및 구성	155
2. 사업기획 범위	157
가. (전략사업1) 인공지능 활용 후보물질 발굴	157
나. (전략사업2) 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화	157
다. (전략사업3) 운영지원 및 공공 플랫폼 운영	157
3. 소요예산	158
가. 총괄 소요예산	158

표 목 차

<표 I-1> 주요국 맞춤형 신약개발 기술수준 변화(2018~2020)	3
<표 I-2> 신약개발 주기별 인공지능 활용 모델	5
<표 I-3> 주요국 AI 활용 신약개발 프로젝트	6
<표 II-1> 미국 AI 이니셔티브 주요 내용	12
<표 II-2> 미국 국립보건원(NIH) AI 기반 의료 정책 지원 사업	14
<표 II-3> 미국 식품의약청(FDA) AI 기반 의료 정책 지원 사업	14
<표 II-4> EU AI 관련 주요 정책 흐름	18
<표 II-5> EU 데이터 전략 중 건강 부문 EC 권고사항(전문)	19
<표 II-6> EU의 '인공지능 백서'와 'EU 데일 전략' 주요 이슈	19
<표 II-7> AI Made in Germany 12대 전략 요약	20
<표 II-8> 일본 디지털 헬스 개혁 추진계획	24
<표 II-9> 중국 AI 육성정책 변화	26
<표 II-10> 차세대 AI 발전규획의 6대 중점 과제	28
<표 II-11> 인공지능 국가전략(2019. 12.)	30
<표 II-12> 산업 각 분야별 AI 활용 전면화 계획	31
<표 II-13> 보건의료 데이터·인공지능 혁신전략(2021~2025)	32
<표 II-14> 인공지능 기반 맞춤형 신약개발 지원체계(안)	33
<표 II-15> AI 신약개발 지원센터 개요	33
<표 II-16> AI 신약개발지원센터 전략체계도	35
<표 II-17> 의약품 분류	38
<표 II-18> 주요 국가의 연도별 의약품 산업의 R&D 투자비 추이(2014~2018)	39
<표 II-19> 글로벌 처방의약품 매출 상위 10대 제약기업	41
<표 II-20> 지역별·국가별 의약품 시장 현황 및 전망	42
<표 II-21> 국내 의약품 시장규모 추이	47
<표 II-22> 국내 바이오의약품 시장규모 추이	48
<표 II-23> 국내 의약품 관련 분야 기술수준 비교	49
<표 II-24> AI 신약개발의 비즈니스 모델	50
<표 II-25> AI 신약개발의 비즈니스 모델별 스타트업 현황	52

<표 II-26> 세계 인공지능 활용 신약개발 적용 분야별 시장규모 현황 및 전망	58
<표 II-27> 세계 인공지능 활용 신약개발 치료 영역별 시장규모 현황 및 전망	61
<표 II-28> 세계 인공지능 활용 신약개발 지역별 시장규모 현황 및 전망	65
<표 II-29> AI 기반 신약 및 백신 개발 분야 AI 활용사례	71
<표 II-30> 국내 주요 AI 활용 신약개발 기업 보유 기술	72
<표 II-31> 국내 주요 AI 기업의 개발 중 약물	73
<표 II-32> 국내 주요 AI 활용 신약개발 기업 협업사례	73
<표 II-33> AI 기반 바이오벤처사가 개발 중인 약물의 임상단계	74
<표 II-34> 특허 분석 범위	76
<표 II-35> 주요 키워드	77
<표 II-36> 주요 IPC	77
<표 II-37> 기술트리	78
<표 II-38> 검색식 및 검색결과	78
<표 II-39> 국가별 유효데이터 건수	79
<표 II-40> 주요출원국의 연도별 출원 동향	80
<표 II-41> 구간별 출원인과 출원건수	84
<표 II-42> 대상기술의 상위 출원인 동향	87
<표 II-43> 주요특허 리스트	88
<표 III-1> 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업	102
<표 III-2> 통합 플랫폼 구축 활용체계 추진 일정	108
<표 III-3> 통합 포털사이트 구성 및 제공 서비스	108
<표 III-4> 각 과제별 플랫폼 검증방안 개요	108
<표 III-5> 3차년도 상세 일정(과제별 플랫폼 검증)	109
<표 III-6> 데이터 표준화 관련 추진 일정	109
<표 III-7> 인공지능 신약개발 플랫폼 구축 및 연구개발 성과	109
<표 III-8> 2019년 선행사업 수행 연구주제별 주요 성과('21. 05. 진행 중)	112
<표 III-9> 선행사업 AI 시연행사 과제별 컨설팅 주요 의견('20. 07. 일부 발체)	113
<표 III-10> 분야별 사업비 투자 계획	116
<표 III-11> 선행사업(인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업) 성과 요약	118
<표 III-12> 선행사업 성과(모델/데이터/플랫폼) 추가개발 필요성	120
<표 III-13> 선행사업과 후속사업의 차이점	121

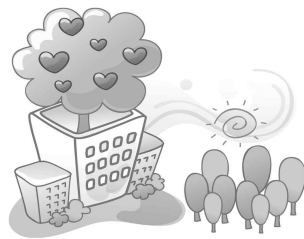
<표 III-14> 전문가 간담회 세부 일정	123
<표 III-15> 전문가 간담회 참석자 명단	124
<표 III-16> 전문가 간담회 주요 논의 내용	124
<표 III-17> 전문가 신규 R&D 제안 과제 리스트	136
<표 III-18> 전문가 신규 R&D 제안 수요조사서	136
<표 IV-1> 사업 추진체계	146
<표 VI-1> 전체 투자규모	158

그림 목 차

<그림 I-1> 신약 개발단계별 후보약물	1
<그림 I-2> 전통 신약개발과 인공지능 신약개발 기간 비교	4
<그림 I-3> 신약개발 단계별 인공지능 적용	5
<그림 II-1> 독일의 AI 활성화 목표 달성을 위한 주요 방법	20
<그림 II-2> 일본 AI 전략 2019 목표 및 정책 방향	23
<그림 II-3> 중국 차세대 AI 발전계획 비전 체계	27
<그림 II-4> 세계 의약품 산업의 R&D 투자비 추이와 전망	39
<그림 II-5> 글로벌 처방의약품 매출액 추이 및 전망(2012~2026년)	45
<그림 II-6> 2026년 상위 10대 치료영역별 시장점유율 및 성장률 전망	46
<그림 II-7> 세계 인공지능 활용 신약개발 시장규모 현황 및 전망	53
<그림 II-8> 세계 인공지능 활용 신약개발 시장 영역별 현황(2019)	54
<그림 II-9> 세계 인공지능 활용 신약개발 적용 분야별 시장 동향	57
<그림 II-10> 세계 인공지능 활용 신약개발 치료 영역별 시장 동향	59
<그림 II-11> 세계 인공지능 활용 신약개발 지역별 시장 동향	63
<그림 II-12> 국내 인공지능 활용 신약개발 시장규모 현황 및 전망	67
<그림 II-13> 특허분석 프로세스	76
<그림 II-14> 연도별/국가별 출원동향	79
<그림 II-15> 주요 시장국 출원동향	81
<그림 II-16> 주요 시장국 개별국의 연도별 출원동향	82
<그림 II-17> 국가별/출원인 국적별 출원동향	83
<그림 II-18> 국가별/연도별 내외국인 출원현황	83
<그림 II-19> 기술발전 추이도	84
<그림 II-20> 상위 20위 주요 출원인	85
<그림 II-21> 多 출원인 기업 및 점유율	86
<그림 III-1> 통합 포털 사이즈 갈무리	110

제1장

추진 배경 및 동향



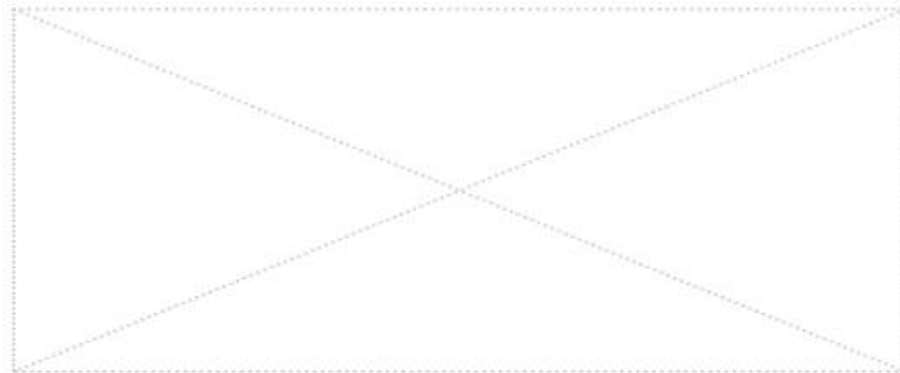
제1장 사업 추진 배경

제1절 추진 배경 및 필요성

1. 사업 추진 배경 및 필요성

- (신약개발 : 고위험·고수익 산업) 신약개발은 대표적인 고위험·고수익 산업 분야로, R&D에 소요되는 막대한 시간과 비용이 국내 제약사의 글로벌 진출에 진입장벽으로 작용함
- 글로벌 제약시장 규모는 2019년 1,250.4백만 달러 규모가 형성되었으며, 2020~2024년 연평균 3~6% 성장하여 2024년 1,570~1,600백만 달러 규모에 달할 것으로 전망*됨
 - *IQVIA Institute, IQVIA Market Prognosis, Sep 2019, 2019. 12.
 - 코로나19 팬데믹 상황에서 치료제, 백신 개발 이슈로 인해 의약품산업에 관심이 높아지며 시장성장이 더욱 촉진되고 있음
- 그러나 하나의 신약개발을 위해서는 평균 15년간 1조 원 이상이 소요되며, 1만여 개의 후보물질 중 1개(0.01%)만이 신약으로 출시되어 도전성이 매우 높은 분야임

<그림 I-1> 신약 개발단계별 후보약물



*출처 : 과학기술정보통신부, 재구성

□ (신약개발 소요기간 단축, 비용 절감 요구) 최근 진입장벽 극복을 위한 전략으로 인공지능·빅데이터를 활용하여 신약개발에 소요되는 시간과 비용을 단축하는 전략이 대두됨

○ 인공지능 학습에 사용되는 공공·민간 빅데이터 구축*, 딥러닝 등 인공지능 기술의 발전, 컴퓨팅 파워의 향상 등으로 관련 여건이 조성됨

*(공공데이터) 각종 논문, 특허데이터, 화합물의 구조 및 효능 관련 공개DB 등
(민간데이터) 기업 보유 실험·임상데이터, 병원 보유 의료데이터 등

○ 우리나라는 R&D를 통해 축적된 연구 데이터, 병원 진료 정보 등의 우수한 의료데이터를 다량 보유하고 있어, 축적된 데이터와 우수한 국내 정보통신기술(ICT)을 인공지능에 활용하면 국가 신약개발 역량이 한 단계 도약하는 기회가 될 것으로 기대됨

- 정부는 「바이오헬스산업 혁신전략(‘19. 05.)」을 통해 5대 빅데이터 플랫폼*을 구축할 계획임

*① 국가 바이오 빅데이터, ② 데이터 중심병원, ③ 신약 후보물질 빅데이터, ④ 바이오특허 빅데이터, ⑤ 공공기관 빅데이터

□ (국내 정부의 AI 활용 바이오·의료분야 육성) ‘인공지능 국가전략(‘19. 12.)’에 따르면, 국내 정부는 AI 활용을 통해 바이오·의료 분야를 차세대 주력산업으로 중점 육성할 계획임

○ 단계별 신약개발 AI 플랫폼 구축(~’21)을 통해 개발 기간을 획기적으로 단축함(15년→7~8년)

• 최적의 신약 물질 도출·검증을 위해 막대한 시간·비용 투자
• 구축된 연구데이터의 신약개발 활용 부족

→

• AI를 통해 연구시간·비용 절반 단축 및 새로운 신약 물질 발굴
• 데이터 체계적 수집-공유-활용 체계 구축

*출처 : 관계부처 합동, 인공지능 국가전략, 2019. 12.

○ 의료데이터 중심병원* 지원, 의료 AI 서비스·제품의 병원 현장 실증** 등 의료기관 중심의 데이터셋 구축 및 AI 개발 생태계를 조성함(‘20~)



*의료 연구역량을 보유한 병원을 지정, 의료 데이터 생산·활용 및 정보시스템 구축 등 지원 ('20. 5개)

**응급상황 대응, 의료 음성지원, 환자상담 등 다양한 의료서비스의 실증연구 지원

○ **임상검증용 표준데이터 마련 및 전문적 심사체계 구축(~'21)으로 AI 의료기기 품질제고 및 제품화 기간을 단축함(3년→1년)**

□ **(국내 맞춤형 신약개발 기술 수준 70%, 기술격차 6년) 국내 맞춤형 신약개발 기술은 최고기술국(미국) 대비 기술 수준 70%, 기술격차 6년으로, 후발 그룹에 있음**

<표 I-1> 주요국 맞춤형 신약개발 기술수준 변화(2018~2020)

국가	기술수준(%)			기술격차(년)			기술수준 그룹		
	2018	2020	증감(% p)	2018	2020	증감(% p)	2018	2020	증감
한국	70.0	70.0	0.0	5.5	6.0	0.5	후발	후발	-
중국	70.0	75.0	5.0	5.5	5.0	-0.5	추격	추격	-
일본	84.0	80.0	-4.0	3.0	3.0	0.0	추격	추격	-
EU	90.0	92.0	2.0	1.8	2.0	0.2	선도	선도	-
미국	100.0	100.0	0.0	0.0	0.0	0.0	최고	최고	-

*출처 : 한국과학기술기획평가원, 2020년 기술수준평가(생명·보건의료), 2021. 04.

○ **(신약개발 투자 필요) 現 국내 제약사들은 신약 기술 개발연구보다 제네릭 연구에 치우쳐져 있는 경향이 있음**

- 정부의 신약개발에 대한 의지와 우수한 국내의 연구진을 보유하고 있는 만큼, 장기적이고 막대한 투자를 바탕으로 다양한 우수성과를 도출하는 데 집중해야 함

□ **(신약개발 패러다임 변화) 빅데이터, AI 기술을 둘러싼 우려에도 불구하고, 향후 신약개발 과정은 데이터 중심으로 재편(Data-driven Drug discovery)될 것으로 예상됨**

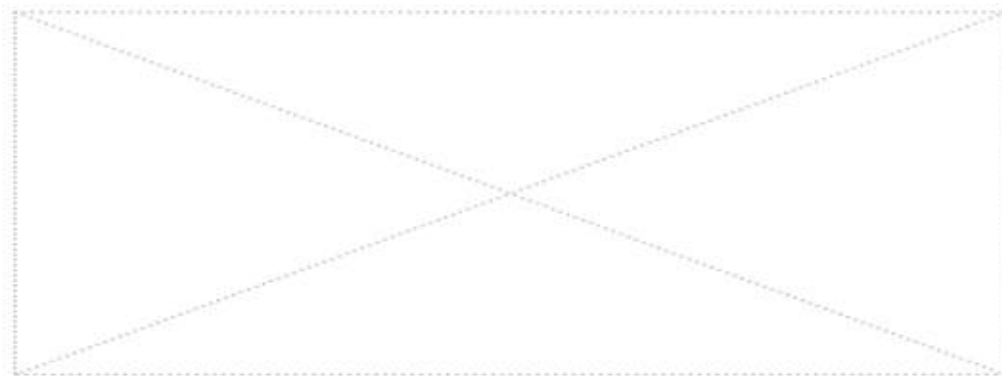
○ AI 기반 빅데이터 분석은 기존 신약개발과정(화합물 합성, 랩 실험, 임상시험 등)의 대체제는 아니나, 효율성 제고를 위한 효과적 수단이 됨

○ 높은 R&D 비용으로 한계에 직면한 제약산업의 위기 타개를 위해서는 AI 기

술 도입 및 데이터를 활용한 신약개발 혁신의 시도가 필요함

- (인공지능 신약개발 필요) 신약개발 관련 사전지식 데이터베이스를 통합한 빅데이터를 인공지능에 활용함으로써 개발 기간을 획기적으로 단축할 수 있음
 - (후보물질 도출 단계) 전통적인 방법으로 연구개발 시 신약개발 대상 질병을 정하고 관련 논문 400~500개를 필터링하여 후보물질을 탐색해야 하지만, 인공지능은 한 번에 100만 건 이상의 논문 탐색과 10^{10} 개의 화합물 탐색이 가능해 연구자 수십 명이 1~5년간 해야 할 일을 하루 만에 진행할 수 있음
 - (임상시험 단계) 인공지능이 화합물 구조의 정보와 생체 내 단백질의 결합능력을 계산하여 신약 후보 물질들을 먼저 제시할 수 있으며, 병원 진료 기록을 토대로 연구하고 있는 질병과 관련성이 높은 임상 대상 환자군을 찾을 수 있음
 - 또한, 유전체 변이와 약물의 상호작용을 예측해 임상 실험 디자인 설계 및 맞춤형 약물의 개발 단계에서의 시행착오를 현저하게 줄일 수 있음

<그림 I-2> 전통 신약개발과 인공지능 신약개발 기간 비교



*출처 : 한국보건산업진흥원, 인공지능(AI)을 활용한 신약개발 국내·외 현황과 과제, 2020. 09.



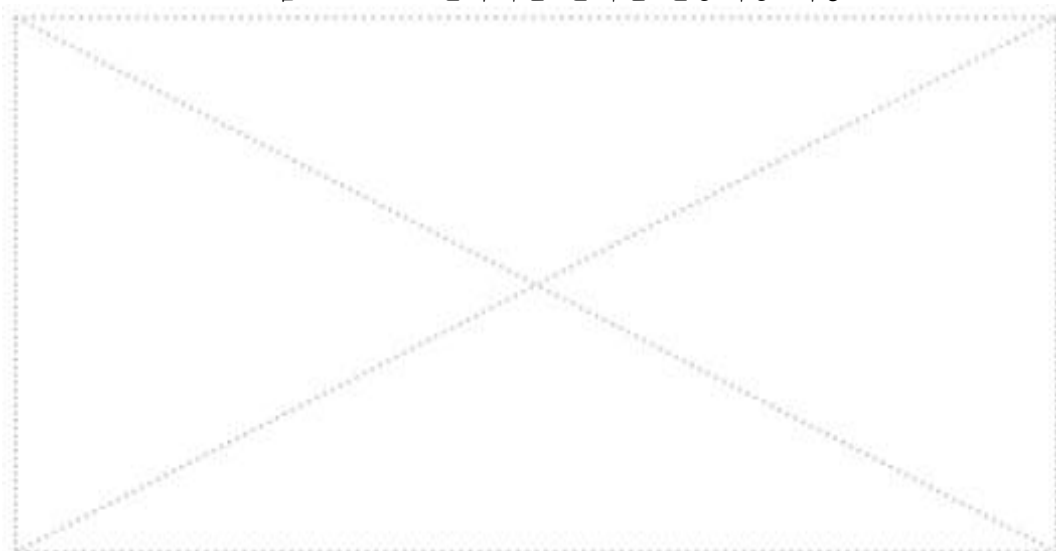
AS-IS	TO-BE
<ul style="list-style-type: none"> • 전통적 신약개발에 드는 막대한 투자 대비 생산성 감소 상황 • 빅데이터·인공지능 등 기술적 진화로 바이오·의료·제약산업에서 활용 수요 급증 및 관련 스타트업 증가 • 대부분의 인공지능 신약개발 연구는 여전히 초기 단계로 잠재적 활용 분야 확대 기대 	<ul style="list-style-type: none"> • 빅데이터 디스커버리 기반 미래형 인공지능 신약개발로, 비용과 기간의 획기적 절감 및 효율 극대화 • 신약개발 전주기*에 걸쳐 협력 연구를 통해 시너지 효과 <ul style="list-style-type: none"> *특히 후보물질 발굴단계에서 협력연구기관 간 인공지능 기반 1차, 2차 스크리닝 결과의 빠른 제공 및 검증을 통한 신약연구 가속화 촉진 및 성공률 제고

□ (신약개발 전주기에 활용 가능한 AI 기반 기술개발 필요) 빅데이터 약물 정보 및 분자 타겟의 결합예측을 통한 약물 설계(molecular docking)를 포함하여, 신약개발 전 분야* 활용 가능 기술 도출 및 원천기술 개발이 필요함

*혁신 타겟 발굴, 약물 합성, 생산 최적화, 약동력학 분석, 약효 예측, 약물 재창출 등

○ 인공지능은 신약개발 전 단계에서 활용이 가능한 모델이 제시되고 있으며, 전통적인 신약개발 및 약물 재창출 분야와 더불어, 데이터베이스와 오믹스 유래 빅데이터 분석 기술 등 신약개발을 위한 기반 원천기술로서의 개발도 가속화되고 있음

<그림 I-3> 신약개발 단계별 인공지능 적용



<표 I -2> 신약개발 주기별 인공지능 활용 모델

영역	주요 모델	내용
정보탐색단계	Aggregate & Synthesize Information (대규모 정보 수집 및 종합화)	<ul style="list-style-type: none"> - 수천 개의 데이터 소스로부터 수십억 개의 데이터를 검색하여 신약탐색의 통찰력 확보 - 논문, 임상시험보고서 등의 데이터에서 의미(context)를 추출해서 신약탐색 효율성 증대
	Repurpose Existing Drugs (기존 약물을 다른 질환에 이용)	<ul style="list-style-type: none"> - 기존 약물에 대한 반응이 좋은 환자군을 대상으로 새로운 적응증을 발견
후보물질단계	Design Drugs (약물 디자인)	<ul style="list-style-type: none"> - 단백질의 특성 등을 예측하여 새로운 의약품 개발 - 알려진 항체 등 기존 치료제의 효능을 뛰어넘게 최적화된 치료제를 개발
	Generate Novel Drug Candidate (새로운 신약후보 창출)	<ul style="list-style-type: none"> - 건강하거나 질병이 있는 환자들의 샘플을 분석하여 새로운 바이오마커를 찾거나 치료제를 개발 - 신약 개발의 속도를 높이고 성공률을 높임 - 신약 개발 비용을 감소시킴
	Validate Drug Candidate (신약 후보물질 검증)	<ul style="list-style-type: none"> - 신약 후보물질을 도출하는 시간을 단축함 - 부작용을 개선하도록 함
전임상단계	Design Preclinical Experiments (전임상 실험 설계)	<ul style="list-style-type: none"> - 항체나 기존에 알려진 자료들을 이용하여 실험설계에 시간, 비용, 불확실성을 줄임
	Predict Toxicology(독성예측)	<ul style="list-style-type: none"> - 기존 화학구조, 독성자료를 기반으로 새로운 물질의 독성 예측
	Run Preclinical Experiments(전임상 실험 수행)	<ul style="list-style-type: none"> - 어느 곳에서나 전임상 실험이 가능한 실험의 자동화 수행 - 전임상에 이용되는 세포들의 선택, 조작, 분석의 자동화 수행
임상시험단계	Design Clinical Trials (임상시험 설계)	<ul style="list-style-type: none"> - 임상실험을 용이하게 하도록 실험설계에 도움을 줌 - 다양한 데이터들을 환자들의 대표성을 보이는 컴퓨터 모델로 변환시킴 - 새로운 치료법에 혜택을 받을 수 있는 환자를 구분하게 함
	Recruit for Clinical Trials (임상시험 피험자 모집)	<ul style="list-style-type: none"> - 임상실험을 용이하게 함 - 환자들의 기록을 임상실험에 적합하도록 분석함 - 환자들의 기록과 유전적 분석을 통해 임상실험에 맞는 환자들을 매칭함
	Optimize Clinical Trials (임상시험 최적화)	<ul style="list-style-type: none"> - 임상실험을 용이하게 함 - 임상실험에 참여하는 환자들을 관리하여 환자 데이터를 분석하거나, 환자들의 임상 실험 참여를 높임
	Pharmacometrics (계량약리학)	<ul style="list-style-type: none"> - 임상시험을 수행하지 않고도 모델링과 시뮬레이션을 활용하여 약효와 독성을 평가
제조단계	Smart Pharmaceutical Factory (스마트제약공장)	<ul style="list-style-type: none"> - 제품생산 모든 공정과 작업과정을 스스로 제어 - QbD의 지능화 및 자동화(Smart QbD)



영역	주요 모델	내용
인허가 단계	Real-World Evidence based Regulatory Decision (인허가 의사결정)	- Real-World Evidence의 인공지능 해석을 통해 의약품 인허가 의사결정의 고도화
사용단계	AI based Pharmacovigilance (스마트 약물감시)	- 약물 사용, 부작용 감시 Pharmacovigilance 업무의 자동화 및 지능화
신약개발 의사결정	Go/No-go Decision (개발진행/중단 의사결정지원)	- 인공지능 기반 실시간 Pipeline Valuation을 통해 Go/No-go Decision 지원

□ (주요국 AI 활용 신약개발 활발) AI 기술이 발전함에 따라 세계 각국은 정부, 민간 구분 없이 AI 기술을 활용한 신약개발 노력을 지속하고 있음

<표 I-3> 주요국 AI 활용 신약개발 프로젝트

국가명	구분	개요
미국	정부-민간 협동	<ul style="list-style-type: none"> • 세계 최고 수준의 슈퍼컴퓨터, AI 기술을 보유한 출연연과 국립보건원(NIH)을 중심으로 제약사, 의료기관 등이 참여하는 신약개발(맞춤 항암제) AI 개발 'ATOM* 프로젝트' 추진(2017. 01~) *Accelerating Therapeutics for Opportunities in Medicine • 인공지능 관련 데이터 및 하드웨어 인프라를 제공하여 희귀질환 및 신약개발 지원, 환자의 이익을 위해 임상 전 약물발견 시간을 대폭 단축하는 것을 목표로 함
	민간	<ul style="list-style-type: none"> • 구글, 아마존, 마이크로소프트사 등 글로벌 IT사들의 신약개발 사업 활발함 - 구글은 2019년 9월 글로벌제약사 사노피(Sanofi)와 함께 AI 활용 신약개발을 위한 이노베이션 랩(Innovation lab)프로젝트 시작
영국	정부	<ul style="list-style-type: none"> • 영국 내의 50만명(2006~2010년 간) 규모의 유전체 데이터 및 환자 코호트 데이터를 무료로 제공함으로써 제약바이오 기업 및 벤처사들이 이를 신약개발에 활용할 수 있도록 함(UK Biobank) • MDC(Medicine Discovery Catapult)의 AI는 영국 정부 혁신 기관에서 자금을 지원하는 국가시설이며, 데이터, 전문지식, 실험실, 프로젝트 기반 교육, 네트워크에 대한 접근권을 제공함으로써 영국 중소기업들이 신약개발에 대한 새로운 접근법을 개발하고 산업화할 수 있도록 지원
중국	정부	<ul style="list-style-type: none"> • 세계에서 가장 큰 제약 바이오 시장을 빠르게 형성하고 있으며, 국가의 2030년 인공지능(AI) 글로벌리더화 비전과 맞물려 AI를 활용한 신약개발에 앞장서는 중임 • 세계에서 가장 많은 수의 AI 연구개발 센터를 보유하고 있으며, 정부는 AI 기술과 인재를 늘리는 프로그램을 만드는 중임 - 중국은 10억 명 이상의 시민으로부터 데이터를 원활하게 수집할 가능성이 있기 때문에 상당한 경쟁 우위를 점하고 있음
	민간	<ul style="list-style-type: none"> • '알리바바'와 같은 대기업에서 병원 및 검진센터 데이터를 활용하여 중국 내 제약바이오사 및 헬스케어 분야의 회사들에게 데이터 및 인공지능 인프라(하드웨어 등)를 제공하는 사업을 적극적으로 추진중 - 실제 임상 단계 진입한 약물 개발 중임

국가명	구분	개요
캐나다	정부	<ul style="list-style-type: none"> 정부산하 연구센터에서 인공지능기업 등과 연구를 수행하고 있으며, 스타트업 혹은 창업하고자 하는 이들에게 인공지능 기술을 가르치고, 프로젝트 기반의 교육을 통하여 나라에서 투자(AI toronto)함 <ul style="list-style-type: none"> - Atomwise, Cyclica, Deepgenomics 등 AI 신약개발 관련 20대 기업 중 3곳 육성 중임
일본	정부	<ul style="list-style-type: none"> 일본 최대 국책연구소인 이화학연구소(RIKEN)를 중심으로 학계, 제약사, IT업체 등이 참여하는 'LINC* 컨소시엄'을 구성하고 '일본형' 신약개발 AI 프로그램 개발 추진('17.4월~) <ul style="list-style-type: none"> *Life Intelligence Consortium 국가에서 데이터를 확보하고, IT 기업들이 인공지능 신약개발 플랫폼을 만들어서 제약사의 요구사항에 따라 IT 기업과 연계하여 인공지능 기반 신약개발을 함
유럽	정부-민간 협동	<ul style="list-style-type: none"> 'MELLODDY* 컨소시엄'은 신약개발을 목표로 전통적인 제약사들 간에 새로운 협력 모델을 보여줌 <ul style="list-style-type: none"> *Machine Learning Ledger Orchestration for Drug Discovery MELLODDY를 통해 보안과 프라이버시 보존의 필요성을 해소하는 동시에 예측 성능을 높이기 위한 충분한 정보 교환을 허용하는 정교한 플랫폼이 개발되고 있음 <ul style="list-style-type: none"> - 이 프로젝트에는 유럽 전역의 17개 파트너가 참여하며, 민관 협력체로서 IMI(Innovative Medicine Initiative)로부터 기금을 받음 프로젝트는 3년간 운영되며, 2022년 6월에 종료되며, 예상 예산은 약 2,500억원임
스위스	정부	<ul style="list-style-type: none"> Basel대학교에서 운영하는 Innovation & Industry Partnerships 사업단에서는 인공지능 기술 교육 및 기업육성, 제약바이오 및 헬스케어 산업을 위한 교육을 수행 중이며, 로슈, 노바티스 등 스위스 대형제약사들이 데이터 제공 및 투자로 인공지능 신약개발 관련 벤처사를 육성 지원함

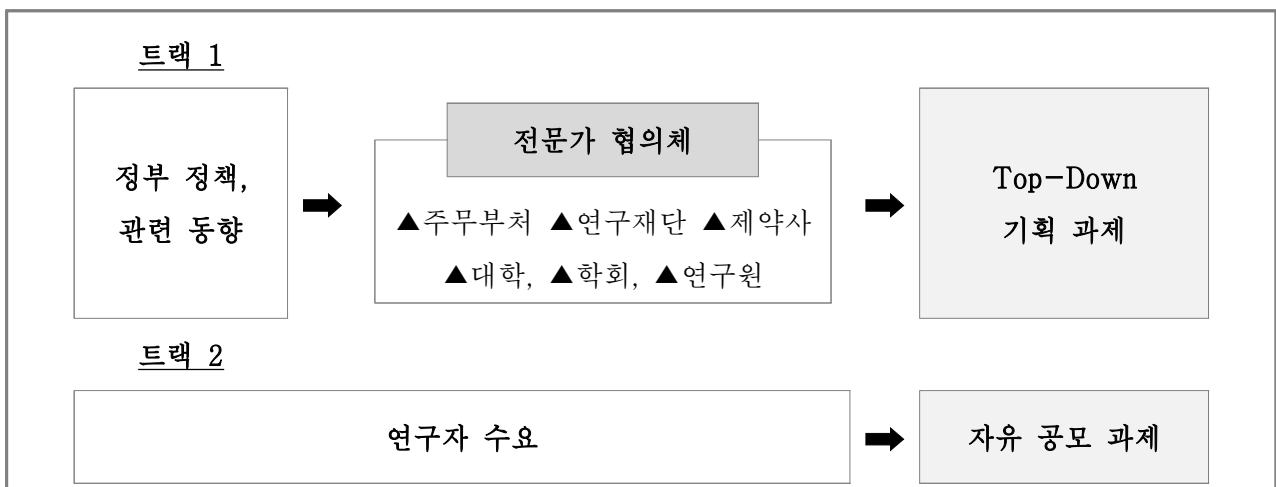
*출처 : Global Market Insight '17, 일본제약공업협회 '17, 영국 BBC뉴스 '20



2. 사업 추진 목적

- (전략적 연구과제 도출) 구조기반의 인공지능 합성 신약 설계 등 국내외 인공지능 신약개발 기술의 동향을 고려하여, 선제적 구축이 필요한 플랫폼 기술*은 현장 수요를 반영한 전문가 협의체를 구성하여 Top-down으로 기획함

* (예시) △딥러닝의 일종인 강화학습을 사용한 insilico Medicine社 의 GENTRL 같은 신규 저분자 화합물 구조 도출 모델, △약물 부작용 및 독성 예측 모델, △Off-target 분석 및 선택성 분석 모델 등



- 국내 제약사 협의체를 구성하여 현장 수요를 포함한 논의의 장을 마련하고 기획에 반영하여, 제약사 실제 참여를 유도함
- 전문가 및 관련 학회를 통해 기술 수요를 조사하고, 현장의 목소리를 반영한 신규사업을 기획함
- (구축 플랫폼 활용으로 실질 성과 창출) 기구축 및 신규 구축 예정 플랫폼을 활용하여 가시적인 신약개발 성과가 도출될 수 있도록 연구개발을 지원함
- 후보물질 발굴뿐 아니라 타겟 발굴, 임상 설계 및 결과 예측, 약물 부작용 예측 등 다양한 신약개발 분야에 활용될 수 있도록 수요조사 및 기획을 바탕으로 지원 분야를 도출함

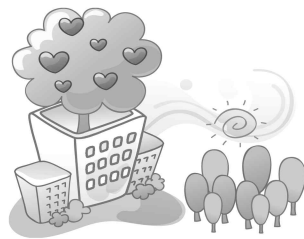
- AI 개발자, 신약연구자 및 제약사로 과제가 구성되도록 후보물질 발굴 과제의 RFP 상 명시하여, 플랫폼 고도화 및 신약개발에 제약사의 노하우, 데이터 및 인프라가 적극 활용되도록 추진할 계획임
 - 예측 결과를 실제 신약개발에 활용하고, 데이터는 플랫폼 고도화에 활용함
- 사업의 성과가 공공으로 활용될 수 있도록 구축 플랫폼의 지속적 운영 방안을 도출하여 적극적 지원이 필요함
- (신약개발 전방위 지원 전략 도출) 기존 사업 분석을 통해 공백 지원 분야를 발굴하여, 합성 신약과 바이오 신약을 구분하여 지원하는 등 신약 개발 전방위 지원을 위한 목표 지향적 포트폴리오를 구성함
- 지원 분야 세분화를 통하여, 합성·바이오신약 등 신약 분야* 및 신약개발 전반에 대한 연구 지원을 제시함
 - *세분화 분야는 기획 보고서 단계에서 수요조사를 통해 반영 예정
- (국가신약개발사업 연계) 우수 성과 도출 과제들은 국가신약개발사업을 통해 후속 지원을 받을 수 있도록 연계 전략을 마련함
- 구축 플랫폼은 국가 신약개발 참여자에게 적극 홍보하여 활용될 수 있도록 사업 간 협력체계를 구축하고자 함

- 인공지능을 활용하여 신약개발에 소요되는 시간과 비용을 단축하고, 국내 제약사의 글로벌 경쟁력을 강화
- 인공지능 신약개발 플랫폼 고도화 및 활용 지원을 통한 가시적 신약개발 성과를 창출
 - 신약개발 전문가, AI 전문가 및 제약사의 공동 연구를 통해 후보물질 개발 등 가시적 성과를 창출
- 사업 성과의 공공 활용 강화를 위해 플랫폼의 지속적 운영 방안을 도출



제2장

국내외 환경분석



제2장 국내외 환경 분석

제1절 정책 동향

- 세계 주요국들은 4차 산업혁명에 성공적으로 대응하고 인공지능(AI) 주도권을 확보하기 위한 노력을 지속
 - 세계적으로 미국, 중국, 일본 등 선진국 중심의 주요국이 데이터와 인공지능이 가져올 변화에 주목하고, 인공지능 분야 원천기술 개발, 인재양성 및 교육, 규제개선 등 정책적 지원을 확대하는 추세

1. 주요국 정책 동향

가. 미국

- (인공지능국가안보위원회(NSCAI)*, AI 주도권 확보를 위해 국가역량 총동원 촉구) 미국 인공지능국가안보위원회(NSCAI)는 미국 첨단산업에 대한 종합진단과 정책제언을 담은 최종보고서를 대통령과 의회에 제출함 ('21. 03.)

*National Security Commission on Artificial Intelligence, 「2019 국방수권법」에 의거하여 수립된 범정부 차원의 전략기획 15인의 미국 내 최정상급 인사로 구성

- NSCAI는 인공지능을 반도체, 바이오, 첨단 네트워크, 양자 컴퓨팅 등 첨단산업의 발전을 견인하는 핵심 범용기술(General Purpose Technology)로 평가하며, 압도적 기술확보에 대한 절대적 필요성을 강조함
- 現 추세가 지속될 경우 향후 10년 이내에 중국이 인공지능 분야에서 미국을 능가할 역량을 갖출 것으로 평가하고 경계하며, 미국이 추구해야 할 기술 패권을 인공지능을 포함한 8대 첨단산업 분야 전반의 주도권으로 정의함



- 해당 분야에서 중국의 역량 발전 속도를 둔화시키고 글로벌 시장에서의 영향력 확산 저지를 핵심 전략목표로 제시함

○ NSCAI는 중국과의 인공지능 경쟁에서 승리하기 위해 거버넌스, 인재, 지식재산, 반도체, 기술동맹 등의 측면에서 국가적 역량의 총동원을 촉구함

- ①대통령실 기반의 강력한 거버넌스 체계 확립, ②인재 양성 및 확보를 위해 총력 대응, ③지식재산 보호 강화, ④반도체산업 경쟁력 및 기술보호 조치 강화, ⑤기술 동맹으로 중국의 첨단산업 굴기를 저지 등의 노력을 촉구함
 - 특히, 비(非)국방 인공지능 R&D를 매년 2배 증액하여 2026년까지 320억 달러(약 35조 원)를 지원하고, 이 중 기술 산업화를 촉진하는데 초전을 두는 국립기술재단(NTF)이 200억 달러의 예산을 사용할 수 있도록 배정할 것을 제안함

□ 미국 AI 이니셔티브('19. 02.)

○ 대통령 행정명령 제13859호를 통해 제정되었으며, AI 연구 투자 증가, 연방 AI 컴퓨팅 및 데이터 리소스 활용, AI 기술 표준 수립, 미국의 AI 인력 구축, 국제 동맹국과의 협력 등의 핵심 노력을 제시함

<표 II-1> 미국 AI 이니셔티브 주요 내용

핵심 노력	주요 내용
AI 연구개발 투자	<ul style="list-style-type: none"> AI분야에서 미국이 강력함을 가질 수 있도록 연방정부는 연구개발 투자를 지속적으로 실시할 것임 연구개발 투자 확대를 통하여 AI 연구개발 생태계를 강화하고, 미국 국민들에게 이익이 전달 될 수 있도록 노력할 것임
AI 자료 공개	<ul style="list-style-type: none"> 미국의 연방데이터 및 컴퓨팅 자원을 공공 데이터법(Government Data Act)에 의거하여 AI 연구자 및 산업계 종사자들에게 공개할 예정임
AI 거버넌스 표준 설정	<ul style="list-style-type: none"> 다양한 종류의 기술 및 산업 분야에서 AI 시스템 개발에 대한 표준을 설정하여 AI와 관련된 신기술이 안전하고 신뢰받을 수 있는 방식으로 개발될 수 있도록 함 국가표준기술연구소(NIST)는 AI 시스템에 대한 AI 거버넌스 표준 개발을 위해 노력할 예정임
AI 인력양성	<ul style="list-style-type: none"> 미국인 근로자들이 AI 관련 기술을 습득할 수 있도록 하기 위하여 다양한 교육 프로그램을 개발할 예정임
국제적인 참여와 AI 기술 보호	<ul style="list-style-type: none"> AI 연구개발을 지원하고, AI 산업의 개발을 위하여 시장을 개방하는 동시에 미국의 가치와 이익에 부합하는 방식으로 기술이 개발될 수 있도록 국제환경을 조성할 것임 연방정부는 미국의 국가 및 경제안보 이익에 중요한 AI기술을 해외로부터 보호받을 수 있도록 다양한 보호조치를 마련할 예정임

*출처 : 백악관 홈페이지
(<https://www.whitehouse.gov/presidential-actions/executive-order-maintaining-american-leadership-artificial-intelligence/>)

○ 연구개발(R&D)과 인력에 대한 정부의 장기적·선제적 투자를 통해 민간의 자생적 경쟁력을 높이고, 인공지능(AI) 투자에 우선순위를 부여하고자 하는 정책임

○ (국가 AI 이니셔티브 기관 출범) 미국 백악관 산하 과학기술정책실(OSRP)은 국가 인공지능(AI) 이니셔티브 기관(National Artificial Intelligence Initiative Office)을 설립하여 향후 AI 분야에서 세계 선두주자 지위를 유지하기 위한 노력을 더욱 가속화 할 것이라고 발표함('21. 01.)

- 미국의 국가 AI 전략을 감독하고 구현하는 책임을 맡으며, 민간 부문, 학계 및 기타 이해 관계자들과 함께 AI 연구 및 정책 입안에서 연방 조정, 협력을 위한 중앙 허브 역할을 할 예정임

□ (보건복지부(HHS), 연방 데이터 활용을 통한 AI 서비스 개발 촉진) 미



국보건복지부(HHS)는 연구혁신벤처 조직(DRIVE)*을 통한 의료 혁신과 다양한 의료 분야에서의 AI 활용·확산 정책을 추진함

*바이오 기술 혁신기업의 제품 개발 촉진 투자 자금 조합 및 육성을 위한 엑셀러레이터 네트워크 조직(DRIVE, Division of Research, Innovation, and Ventures)

- 민관 파트너십을 통해 머신러닝 기반 질병 예방 알고리즘 개발 및 연방 데이터를 활용한 AI 기반 의료용 제품개발 등을 지원함
 - '18. 10월 이후 연방 데이터와 첨단 기술을 활용한 기술 경진대회 'Top Health Tech Spirit'을 개최함
- 의료분야 국립연구소와 국립보건원(NIH) 등을 중심으로 의료·바이오 메디컬 분야에 실험적으로 AI를 활용하는 서비스를 개발하고 있음
- 보건복지부 산하 사회보장의료혁신센터(CMMI)*는 美가정의협회(AAFP)**와 총상금 규모 165만 달러의 'AI 의료서비스 챌린지 프로그램'을 개최함('19. 03.)
 - 의료·요양 분야에서의 AI 활용 촉진과 의료서비스 개발 가속화에 중점을 두었으며, 대기업, 중소기업, 개인 등 다양한 아이디어를 가진 주체들이 참가함

- 참가 팀은 방대한 의료·요양 데이터셋을 분석하고 AI 기반 모델 및 프레임워크를 개발하여 병원 및 요양원 등의 입원 트렌드를 정확하게 예측함

□ (국립보건원(NIH), 의료데이터를 활용한 중장기 AI 연구 지원) 미국 국립보건원(NIH)은 바이오메디컬 연구 분야에서 방대한 의료데이터*를 활용한 AI 적용 가능성을 다양하게 연구하고 있음

*국립보건원(NIH)은 인간 미생물군집 프로젝트(Human Microbiome Project)를 통한 미생물 염기서열분석, 10년간 100만 명 이상의 건강을 추적하기 위한 프로젝트인 ‘All of Us Research Program’ 등을 통해 방대한 인간 유전자 및 의료 데이터셋을 확보

○ 의료 데이터 활용 가치를 극대화하기 위해 ‘AI 작업그룹*’을 편성하여 중장기 AI 의료 연구과제 대응을 추진함

*바이오메디컬 연구 첨단화를 목적으로 데이터·AI 및 머신러닝의 잠재성을 활용하기 위해 ‘19. 01월 발족

<표 II-2> 미국 국립보건원(NIH) AI 기반 의료 정책 지원 사업

구분	주요 내용
심전도 연구	• AI 기술을 활용하여 비규칙적인 심장 박동 추이를 파악함으로써 심전도 데이터의 정확성과 효율성 개선의 가능성을 확인(‘19. 01.)
의료 데이터의 AI 활용	• AI 작업그룹을 발족하여 기존 데이터의 최적 활용 방안을 탐색하고 바이오메디컬 연구와 의료 관행 개선에 AI의 잠재성을 이용하기 위한 연구 착수(‘18. 12.)

*출처 : 국립보건원(NIH), IITP 재구성

□ (식품의약청(FDA), AI 기반 의료 솔루션 기술개발 및 사업화 지원) 미국 식품의약청(FDA)은 임상 데이터 수집 강화, 스마트의료 기기용 SW 개발을 위한 연구개발, AI 관련 의료기업의 사업화를 위한 제도 개선 등을 추진함

<표 II-3> 미국 식품의약청(FDA) AI 기반 의료 정책 지원 사업



구분	주요 내용
R&D	<ul style="list-style-type: none"> 질병통제예방센터(CDC)와 공동으로 머신러닝과 자연어처리 연구를 통한 임상 데이터의 수집 강화를 위한 무료 도구 개발 심장마비 가능성을 예측할 수 있는 심전도 기기 등의 의료기기 스마트 소프트웨어를 개발하기 위한 제품 생애주기 기반 적응형 프레임워크 개발 착수('19. 04.)
사업화	<ul style="list-style-type: none"> 당뇨가 유발하는 안과 질환 탐지가 가능한 AI 기술 판매 최초 허가('18. 04.) 의료진들이 손목 골절을 보다 신속하게 탐지하기 위한 AI 기반 SW 판매 허가('18. 05.) Apple Watch Series 4 심전도 측정 솔루션 탑재 허가('18. 09.) 초고해상도 CT 스캐너용 인공지능 엔진 판매 허가('19. 06.)

*출처 : 식품의약청(FDA), IITP 재구성

□ (브레인 이니셔티브 등 인공지능 헬스케어 관련 대규모 투자 진행) '13년 백악관은 범정부 차원에서 인간의 뇌를 중심으로 체계적인 인공지능 기술 개발을 통해 원천기술 확보 및 상용화 연구의 적극적 추진을 위해 Brain Initiative를 추진함

○ 향후 10년간 30억 달러 규모의 투자가 이뤄질 예정이며, 산학연 협력 파트너십을 통해 기반기술·응용기술 개발 및 산업화를 동시에 진행함

○ '15년 1월 정밀의학 이니셔티브를 공식 발표하였으며 예산 규모는 2억 1,500만 달러('16)로 NCI(국립암연구소) 등 4개 기관이 프로그램을 주도함

- 암과 심장병 등 치명적 질환의 유전적 인과관계 규명에 초점을 맞추며 IBM, 구글, 애플 등 세계적인 IT 기업을 중심으로 인공지능 기반 헬스케어 플랫폼을 적극적으로 개발 및 구축하여 개인 맞춤형 의료서비스 제공에 노력함

□ 신약개발 AI 활용을 위한 정부(국립보건원(NIH), 식약청(FDA)) 정책 방향

○ 국립보건원(NIH)을 중심으로 항암제 후보물질 발굴 기간을 1년 이내로 단축하기 위한 'ATOM 컨소시엄*' 구성('17~'19)

*'Accelerating Therapeutics for Opportunities in Medicine'의 약자로, 글로벌 제약사(GSK),

대학(UCSF) 등이 참여

- 머신러닝, 시험방법 검증(Validation) 등의 방법을 통해 글로벌 제약사(GSK)에서 보관 중인 화합물질(Compounds) 데이터에 대한 탐색기간을 기존의 1년에서 수개월로 단축할 것으로 예상됨

○ FDA는 인공지능을 활용한 신약개발 및 관련 데이터의 관리에 대한 법령 및 관련 가이드라인을 준비하고 있음

- 21세기 치유법안(The 21st Century Cures Act, 2016. 12월 제정) 기반, 의약품 개발 관련 실제자료(RWD, RWE 또는 이와 유사 자료)에 대한 정책적 지원 근거 마련하고 2021년까지 관련 가이드라인을 발행할 예정임

○ NIH는 신약개발 연구 지원을 위해 빅데이터·인공지능 분석 플랫폼인 LINCS와 TCGA를 지원하고 있으며, NIH 산하 NCATS(국립 고등중개연구센터) 또한 빅데이터를 이용한 연구 지원을 계획하고 있음

- NCATS의 Bench-to-Clinic Repurposing Initiative('16.8)는 전임상연구 지원을 위해 컴퓨터 알고리즘을 이용, 빅데이터를 환자기록에서 추출하여 기존의 약물이나 생물학적 제제를 새로운 사용으로 변환하는 연구를 지원함
 - NCATS의 LINCS, TCGA, PubChem과 'Molecular Libraries and Imaging' 프로그램을 통하여 연구자들이 화합물 빅데이터 활용을 지원함



나. 유럽

- (디지털 단일시장(Digital Single Market)을 위한 디지털 전환 추진) EU는 ‘디지털 단일시장’이라는 큰 생태계 조성을 목표로 AI, 데이터, 로봇 등에 관한 포괄적 전략을 추진하고 있음
 - 범국가적 생태계 조성에 초점을 맞춰 AI, 로봇 등 기술 활용과 관련한 사회변화 대응 전략을 마련함
 - AI, 데이터 등 개별 기술에 초점을 맞추기보다는 디지털 단일시장 구축을 위한 방안 중의 하나로 정책을 추진하고 있음
 - 유럽집행위(EC)의 ‘정책(policy)’ 카테고리에서도 ‘Digital Single Market’이라는 분류하에 인공지능, 사이버보안, 데이터 개방 등에 관한 정책을 추진하고 있음
 - 디지털 단일시장을 위해 역내 데이터의 자유로운 흐름과 활용 촉진, 정부 규제와 민간 자율규제를 조화한 ‘공동규제’ 접근방식을 중시함
 - 일반정보보호규정(GDPR)을 근거로 ①적정성 결정에 근거한 경우, ②적정한 보호조치에 근거한 경우, ③정보주체의 강력하고 명확한 동의를 득한 경우에는 유럽 역외로의 데이터 이동을 부분적으로 허용함
 - (분산된 규제를 개혁하고 공동의 규제, 지침, 가이드라인 마련) ‘유럽 디지털 단일시장 전략(’15.5, EC)’에서는 통신, 데이터 등의 분야에서 EU 역내 공동 적용을 위한 포괄적 규제개선을 제안함
 - 또한 인공지능, 로봇 등이 인간 사회의 법률이나 도덕 기준에 따라 작동할 수 있도록 선제적으로 가이드라인을 마련함
 - 대규모 실업, 인권침해, 역내 정보보호 등 신기술이 인간에 미칠 영향과 급격한 사회변화에 대비한 정책적 대응도 적극 추진함

<표 II-4> EU AI 관련 주요 정책 흐름

'15. 05.	'18. 04.	'19. 04.	'20. 02.
디지털 단일시장 전략	유럽을 위한 AI	인간 중심의 AI에 대한 신뢰 구축	EU 인공지능 백서
EU 역내 디지털 장벽해소 및 디지털 시장 통합을 통한 성장 전략 제시	R&D, 교육, 윤리 등 EU의 중장기 AI 정책 방향 제시		1) AI 정책 프레임워크 - AI 활용 투자 강화 - AI 알고리즘 기반연구 발전 추구 2) AI 규제 프레임워크 - 인간중심, 공정성, 투명성을 강조 - 고위험 AI 시스템의 통제 가능성
	AI에 관한 협력 선언 AI 분야에서 EU 회원국의 역량 결집을 위한 선언		

*출처 : 한국정보화진흥원, EU 인공지능 백서와 데이터 전략, 2020. 05.

□ 유럽집행위(EC), ‘인공지능 백서*’, ‘데이터 전략**’ 발표(‘20. 02.)

*White Paper On AI-A European approach to excellence and trust(‘20. 02. 19.)

**A European strategy for data(‘20. 02. 19.)

○ (EU 인공지능 백서) 유럽 내 단일 AI 생태계를 조성을 위한 정책 및 규제 프레임워크를 제시함

- (정책 프레임워크) EU의 강점에 기반한 AI 개발 및 EU 경제와 공공 행정에서의 활용 활성화에 초점을 두고 있음
- (AI 규제 프레임워크) 인간중심, 공정성, 투명성 등 EU의 가치를 지키고 위험을 통제할 수 있어야 함을 요구함

○ (EU 데이터 전략) EU가 향후 5년간 데이터 경제를 선도하기 위한 역내 문제점 분석, 주요 정책 및 투자전략에 초점을 둠



- 개인정보보호, 소비자 보호, 경쟁 규정 등 EU의 가치와 권리를 바탕으로 데이터 공유, 접근 및 사용에 대한 규제 체계 수립의 필요성을 제시함
- (건강 부문 공통 유럽 데이터 공간) 건강은 EU가 데이터 혁명을 통해 의료 품질을 높이는 동시에 비용 절감을 가능하게 하는 영역으로, GDPR을 준수하는 방식으로 데이터 사용 및 결합이 필요함

<표 II-5> EU 데이터 전략 중 건강 부문 EC 권고사항(전문)

- 유럽 보건 데이터 공간에 대한 부문별 입법 또는 비법률적 조치를 개발하여 공통데이터 공간의 수평적 프레임워크를 보완한다.
 - 보건 데이터에 대한 시민의 접근과 데이터의 휴대성을 강화하고 국가 간 디지털 의료서비스 및 제품 제공에 대한 장벽을 해소하기 위한 조치를 취한다.
 - 보건 분야의 개인 데이터 처리를 위한 행동강령의 제40조에 따라 설립을 촉진하며, 이는 회원국의 개인 건강 데이터 사용과 건강 프로그램('20년~'23년)의 맥락에서 공동 조치 결과에 대한 지속적인 매핑에 기초한다.
- 유럽 보건 데이터 공간에 대한 데이터 인프라, 도구 및 컴퓨팅 용량을 배치하고, 보다 구체적으로 전자 의료 기록 교환 형식의 적용을 통한 국가 전자 의료 기록(EHR)의 개발 및 보건 데이터의 상호운용성을 지원한다.
 - '22년까지 eHealth Digital Service Infrastructure(eHDSI)에 참여하는 22개 회원국이 전자 환자기록 정보 및 원격 처방을 교환할 수 있도록 하고, 의료 영상, 임상실험 결과 및 퇴원 보고서의 eHDSI를 통해 국가 간 전자 의료 정보 교환을 시작하고 EU 참조의 가상 상담 모델과 레지스트리를 향상시킨다.

<표 II-6> EU의 '인공지능 백서'와 'EU 데일 전략' 주요 이슈

인공지능 백서	EU 데이터 전략
<p>유럽 내 단일 AI 생태계 조성을 위한 정책 및 규제 프레임워크 제시</p> <p>1) AI 정책 프레임워크</p> <ul style="list-style-type: none"> - EU의 강점 기반 AI 활용 투자 강화 - AI 알고리즘 기반연구 발전 추구 - EU 경제와 공공 행정에서 AI를 개발하고 적용 등 <p>2) AI 규제 프레임워크</p> <ul style="list-style-type: none"> - 인간중심, 공정성, 투명성을 강조 - 혁신에 제한은 없되 EU의 가치 존중 - 고위험 AI 시스템의 통제가능성 당부 	<p>데이터 애자일 경제(Data-agile Economy)의 선두에 서기 위한 정책 조치 및 투자 전략</p> <p>1) 데이터 접근·활용을 위한 거버넌스 프레임워크</p> <p>2) 데이터 투자, 데이터 호스팅·처리·활용 인프라 등 수요 자극 환경 제공</p> <p>3) 데이터 관련 개인의 역량 강화, 일반 데이터 활용능력 및 스킬에 투자, 중소기업 역량 강화</p> <p>4) 자금 지원 및 조치 보완해 전략적 경제 부문 및 공공 영역*에서 유럽의 공통 데이터 공간 개발 촉진</p> <p>*산업 제조, 환경, 모빌리티, 건강, 에너지, 재무, 공공행정, 스킬 데이터 공간 등</p>

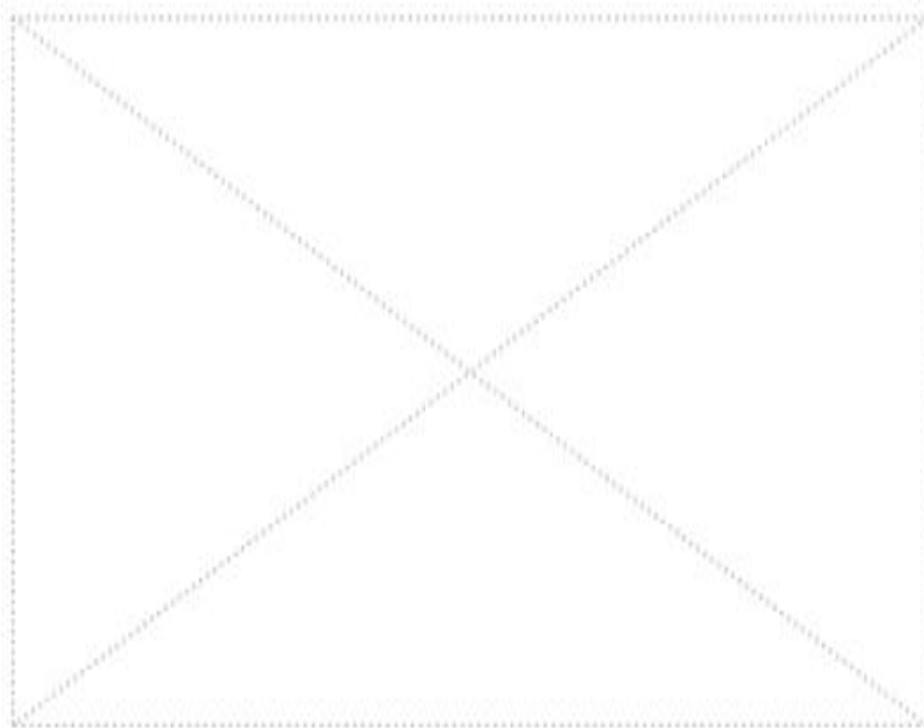
*출처 : 한국정보화진흥원, EU 인공지능 백서와 데이터 전략, 2020. 05.



□ 독일 연방정부 AI 전략('18. 11.)

- 독일 최초의 AI 전략 발표이며, 세계 최고의 AI 국가 건설을 목표로 '25년
까지 30억 유로를 투입할 예정임
- 유럽과 독일이 AI 개발과 적용 분야에서 글로벌 리더로 성장하기를 기대하며,
독일의 미래 경쟁력 확보를 목표로 함

<그림 II-1> 독일의 AI 활성화 목표 달성을 위한 주요 방법



*출처 : 한국지능정보사회진흥원, 독일 연방정부의 인공지능(AI) 전략 2020 업데이트, 2021. 05.

- 연방정부는 성공적인 AI 정책 지원을 위해 연구, 자금지원, 산업 활성화
등 12대 분야로 나누어 전략을 마련함

<표 II-7> AI Made in Germany 12대 전략 요약

분야	내용
연구강화	<ul style="list-style-type: none"> ● 혁신의 원동력이 되기 위한 독일과 유럽의 AI연구 강화 ● 국제적 경쟁력을 확보한 AI 생태계 구축
챌린지	<ul style="list-style-type: none"> ● AI 챌린지를 개최하여 혁신 아이디어를 창출하고 새로운 솔루션 개발, 그리고 애플리케이션 및 비즈니스 모델 개발 등 다양한 기회 창출
기업 역량 강화	<ul style="list-style-type: none"> ● 독일의 스타트업, 중소기업에서 대기업까지 AI 서비스 적용에 중점

분야	내용
스타트업 지원	<ul style="list-style-type: none"> 벤처 캐피탈에 대한 접근성 향상 등 AI 기반 비즈니스 모델 및 제품의 창업 동력 부흥을 위한 정책적 지원
노동시장 변화	<ul style="list-style-type: none"> 노동시장 변화에 따른 업무 재교육 등 다양한 조치 지원 높은 수준의 관측소(Observatory)를 통해 국내 및 국제적으로 AI의 이용을 촉진, 분석, 평가를 중점적으로 지원할 예정
인재양성 및 유치	<ul style="list-style-type: none"> 교육훈련 강화 및 고숙련 AI 전문가 영입 대학에 전문 교수직 신설 등
공공수요 및 정부서비스 혁신	<ul style="list-style-type: none"> 정부 행정에 AI를 선제적으로 적용하는 등 공공수요 창출 AI를 통한 정부 행정 서비스의 빠르고 효율적인 시스템 마련
데이터 활용, 데이터 촉진	<ul style="list-style-type: none"> AI분야 세계 최고 국가 건설을 위해 개인정보, 정보의 자기결정권의 위배 없이 고품질의 활용 가능한 데이터 양 증가
AI 오용과 법제도	<ul style="list-style-type: none"> AI 기반 결정, 서비스, 제품의 왜곡, 차별, 오용 등에 효율적인 보호가 가능하도록 법적 프레임워크 검토
표준	<ul style="list-style-type: none"> 국가 표준 기구 DIN/DKE를 통해 산업계와 협업하여 AI 개발·활용 관련 국내외 표준 수립을 지원
국내·외 네트워크	<ul style="list-style-type: none"> AI는 범용 기술로 국내, 국제적으로 과학, 경제, 행정 및 시민일상에 영향을 미치므로 정부는 국제협력, 양자 및 다자간 대화를 지속하여 네트워크를 강화할 예정
사회적 논의	<ul style="list-style-type: none"> AI 연구, 개발 및 응용을 세계 수준으로 향상시키기 위해서, 연방정부는 AI의 기회와 위험에 대한 사회적 대화 및 교육을 지속 추진

*출처 : 한국정보화진흥원, 인공지능(AI)을 선도하는 주요국의 핵심전략, 2018.

○ (헬스케어 분야) 건강 및 삶의 질을 위한 인터랙티브 기술 분야에 새롭게 재정 지원을 집중하여 건강 관리에서 디지털화 및 AI의 기회를 활용함

- 의료 정보학 이니셔티브에 4년간의 지원 단계를 추가하고, 개발된 솔루션과 사용 사례를 기타 건강 관리 기관에 배포함
- 디지털 보건 의료 발전 단계 허브를 구축해 대학병원에서 개발된 데이터 기반 디지털 의료의 접근방식을 광범위한 의료 분야에서 AI의 사용을 지원하면서 테스트를 진행함
- 팬데믹 상황에서 데이터 교환과 디지털 솔루션을 통해 의료 분야와 연구를 개선하고, 이와 동시에 개인정보보호를 진행함



- 의과 대학의 인프라를 개선 및 지원해 표준화되어 수집된 고품질의 보건 의료 관련 데이터를 AI 기반 보건 의료 연구에 신속하고 폭넓게 제공함
- 정부는 의약품 연구, 전염병 과정 모델링, 디지털 건강 관리를 위한 의료 기술 솔루션 등에서 AI의 사용을 지원함

□ 영국 AI Sector Deal('18. 04.)

- 영국 기업에너지산업전략부(BEIS*)는 인공지능(AI) 산업 분야 육성을 위한 정부-산업계의 주요 행동전략을 담은 합의문(Sector Deal)을 발표('18. 04.)

*Department for Business, Energy & Industrial Strategy(BEIS)

- 산업 생산성을 높이기 위해 인공지능(AI) 글로벌기업 유치, 인공지능(AI) 환경구축, 인력양성 등 분야별 정책을 제안함

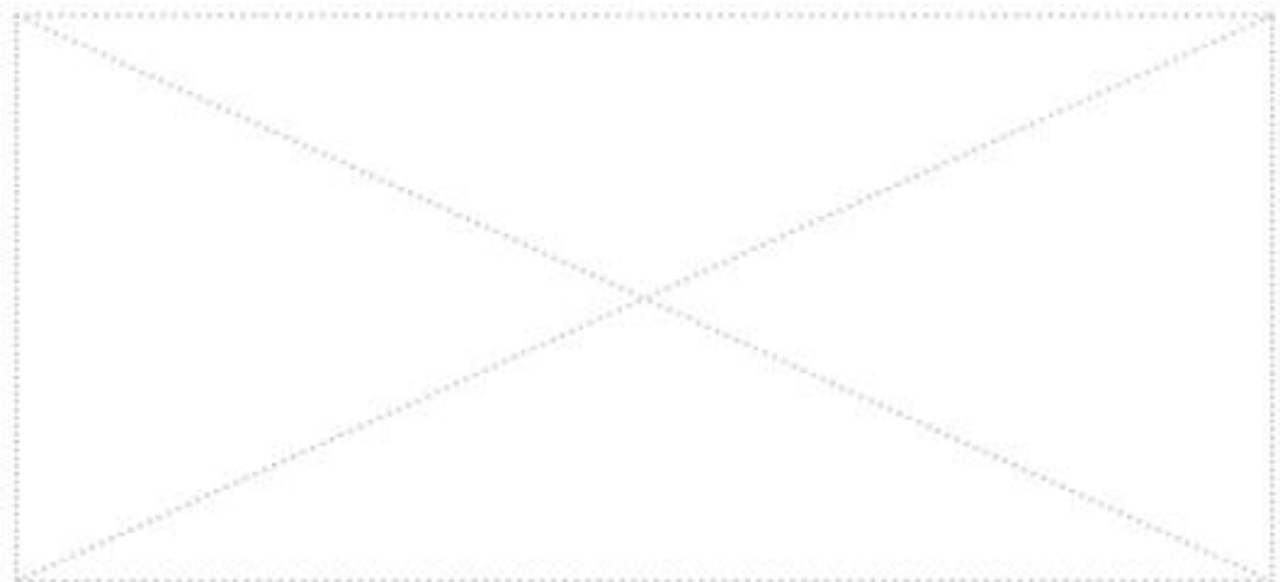
- 특히, 민간협력 기반으로 인공지능(AI) 인재양성과 산업 환경조성에 투자에 집중할 것을 밝히고, 인재육성을 위한 산업계의 지원 전략 및 AI 인력 다양성을 높이기 위한 노력을 제시함
 - 영국 전역의 우수 대학의 AI 분야 기업 지원 석사 프로그램을 개발하기 위해 대학과 협력
 - AI 분야 전문가 양성을 목표로 다양한 전공생이 참여하는 새로운 석사융합과정 평가를 위해 정부 및 대학과 협력
 - AI 관련 박사 과정 학생을 위해 EPSRC 박사 과정 센터를 통해 6천만 파운드(약 884억 원)의 자금을 지원할 예정
 - AI 분야 펠로우십(Turing Fellowship) 프로그램에 자금을 지원하여 영국 및 세계 최고의 연구자 유지 및 육성에 기여
 - 학생 대상 AI 분야 진로를 장려하기 위한 프로그램 운영
 - 'Sage'는 18세 이하 학생을 대상으로 AI 분야 진로를 장려하기 위해 고안된 프로그램으로 영국 전역에서 시범 운영되고 있으며, 'Sage FutureMakers Labs'를 통해 AI분야에서 요구되는 다양한 스킬을 교육
 - AI 위원회(AI council)와 협력하여 AI 분야 인력의 다양성을 제고하기 위한 노력을 강화

다. 일본

□ AI 전략 2019('19. 03.)

- AI 시대에 대응하는 인재 육성과 확보, AI를 활용한 산업경쟁력 강화, AI 기술체계 수립·운영을 위한 제도 정비, AI 관련 국제적 네트워크 구축 등을 목표로 함

<그림 II-2> 일본 AI 전략 2019 목표 및 정책 방향



*출처 : 일본 AI 전략 2019, 재구성

- 산업 활력 제고와 저성장·고령화 등 사회문제 해결을 위한 수단으로 인공지능(AI) 기술혁신을 가속화 하고 응용 인재 연 25만 명, 고급인재 연 2,000명과 최고급 인재 연 100명 양성을 핵심 목표로 함
- (인공지능 기술전략회의) 일본 정부는 AI 연구개발, 이노베이션 시책의 3성(문부과학성, 경제산업성, 총무성)을 연계한 컨트롤타워를 구축함
- 저성장 고령화 등 현안을 해결하기 위한 사회 혁신의 수단으로 인공지능 기술경쟁력 확보의 중요성을 강조하면서, 개방형 R&D 플랫폼인 인공지능 기술전략회의를 구축함



- AI 3대 R&D 기관인 NICT(정보통신연구기구), RIKEN(이화학연구소), AIST(산업기술종합연구소)의 R&D 및 인력양성, 스타트업 지원 등의 방안을 제시하고 있음
- 특히, AI를 비롯한 IT 인력의 부족이 심각하다고 판단하고, 1단계(~'20)에는 기업·교육기관·정부 간 긴밀한 협력을 통해 최고 수준의 AI 인력을 즉각 양성하고, 2~3 단계에는 다양한 분야에 AI가 활용될 수 있도록 하는 인력양성을 권고함

□ 디지털 헬스 개혁 추진계획('20. 11.)

- 일본은 데이터 헬스 개혁 실현을 목표로 '국민, 환자, 이용자' 맞춤형 사업 추진을 가속화하며, 개인정보보호와 보안 대책의 철저한 준비, 비용 대비 효과 측면에서 면밀한 검토를 추진하고 있음

<표 II-8> 일본 디지털 헬스 개혁 추진계획

① 게놈 의료 활용 추진	② 자신의 데이터를 일상생활 개선 등에 연결하는 PHR(Personal Health Record)의 추진
<ul style="list-style-type: none"> • 전 게놈 정보 등을 활용한 암 질병의 원인 규명, 새로운 진단 치료법 등의 개발, 개인에게 최적화한 환자 맞춤형 치료 제공 • AI를 활용한 보건의료 서비스의 고도화·현장 부담 경감 	<ul style="list-style-type: none"> • 국민이 건강·의료 정보를 스마트폰 등에서 열람 • 스스로 건강 관리나 질병 예방 등에 주도적 역할을 부여
↑	↑
[추진 역점]	[추진 역점]
<ul style="list-style-type: none"> • 전 게놈 해석에 따른 암, 난치병의 원인규명이나 진단, 치료방법 개발을 위한 실행계획 수립 • AI 활용 선행 사례의 착실한 개발 및 실험 	<ul style="list-style-type: none"> • 스스로 진단·검진 정보를 활용하기 위한 환경 정비 • PHR 추진을 위한 포괄적 검토
↑	↑
③ 의료·간호 현장의 정보 활용 추진	④ 데이터베이스의 효과적인 활용 추진
<ul style="list-style-type: none"> • 의료·간호 현장에서 환자 등의 과거 의료정보 등을 적절히 확인 • 질적으로 더 높은 서비스 제공이 가능 	<ul style="list-style-type: none"> • 보건의료와 관련된 빅데이터 활용 • 민간기업·연구자 대상 연구 활용, 환자 상태에 대응하는 치료 제공 등 다양한 주체에 이익을 제공
↑	↑
[추진 역점]	[추진 역점]
<ul style="list-style-type: none"> • 보건의료정보를 전국의 의료기관에서 확인 가능케 하는 방법 마련 및 운용 주체나 비용 부담의 현실화를 위한 검토 • 전자건강기록의 표준화 추진과 표준규격의 기본적 가이드라인 검토 	<ul style="list-style-type: none"> • NDB·간호 DB·DPC 데이터베이스의 연결 정도 향상과 연결 해석대상 데이터베이스 확충 • 개인 단위화된 피보험자번호를 활용하여 의료 분야 등의 정보 연결 방법을 검토

*출처 : 후생노동성, 데이터 헬스 개혁과 관해, 2020. 11.

□ (일본형 신약개발 AI 프로그램 개발 추진) 일본 최대 국책연구소인 이화학연구소(RIKEN)를 중심으로 학계, 제약사, IT업체 등이 참여하는 ‘LINC* 컨소시엄’을 구성하고 ‘일본형’ 신약개발 AI 프로그램 개발을 추진함(‘17. 04.)

*Life Intelligence Consortium

○ 이화학연구소 주도로 대학병원과 제약, 헬스케어 기업들이 암이나 치매 등의 대규모 치료 데이터를 분석함

- 도쿄대, 게이오대병원 등 전국 30여 개 의료기관과 제약 및 헬스케어 기업 10곳이



참여함

- 또한, 3년 내 인공지능이 개발한 신약 보급을 목표로 하는 산·학·연·관 협력 프로젝트로 제약업체, IT 기업, 이화학연구소, 교토대 등 100여 명의 개발자들이 팀을 이루어 신약개발을 위한 인공지능 공동개발에 착수함
 - 후보물질 탐색부터 신약 시판 후까지 신약개발 전 단계에 걸친 29여 개 AI 표준 모델의 구축 및 실용화를 3년 내 실현하며, 신약개발에 특화된 20여 개의 AI 프로그램을 개발하고 일본 내 제약업계에 공개할 방침임

라. 중국

- (AI 글로벌 1위 강국 도약을 위한 국가전략 산업 선정) 중국은 인공지능을 국가전략 산업으로 인식하여 정부 주도의 대규모 투자와 인력양성 추진, 인공지능 기술성과 상업적 활용을 적극 지원하고, 선도기업 기반 특화플랫폼을 육성하고 있음
- 중국 정부는 첨단산업 육성을 통해 경제구조를 업그레이드하기 위해 ‘중국제조 2025’, ‘인터넷 플러스’, ‘차세대 AI 발전규획’등 다양한 산업정책을 발표함
- 중국은 인공지능을 과학혁명과 산업 변혁을 이끌고 국제정치에 중대한 영향을 미치는 전략적 기술로 보고, ‘17년 7월 ‘차세대 AI 발전규획(新一代人工智能发展规划)’을 발표하며 2030년까지 AI 글로벌 1위 강국이 될 것을 선언함

<표 II-9> 중국 AI 육성정책 변화



시기	주관부처	정책 명칭	주요 내용
2015년 05월	국무원	중국제조 2025	• 10대 전략산업 육성을 위한 AI 기술 강조. AI와 제조업을 결합한 ICT기반 제조업 지향
2015년 07월	국무원	인터넷 플러스 행동추진 지도의견	• 경제혁신과 사회발전을 이끌어갈 수 있는 중점분야의 하나로 AI를 포함시킴, 인공지능을 전략산업으로 지정
2017년 07월	국무원	차세대 AI 발전계획	• AI 산업을 국가 산업으로 공식화하고 2030년까지 차세대 AI 3단계 전략 목표 및 6대 중점과제 제시
2017년 12월	과기부 등 15개부 처	차세대 AI 오픈 플랫폼 1차 기업 발표	• 바이두, 알리바바, 텐센트, 아이플라이텍 등 4개 기업
2017년 12월	공신부	차세대 AI산업 발전 3개년 행동계획(2018~2020)	• 2030년 중국 AI 선진국 목표 실현 및 정부 정책 방향의 3년 세부 행동지침
2018년 09월	과기부 등 15개부 처	차세대 AI 오픈 플랫폼 2차 기업 발표	• 안면인식 기업 센스타임 추가
2019년 08월	과기부	차세대 AI 혁신발전 시험부 건설 업무 의견	• 2023년까지 전국에 20개 내외의 AI 시범구 건설
2019년 09월	과기부 등 15개부 처	차세대 AI 오픈 플랫폼 3차 기업 발표	• 화웨이, 징둥, 샤오미, 메그비, 치후, 티에이엘, 이투커지, 하이크비전, 마이닝램프, 평안보험 등 10개사

*출처 : 한국산업기술진흥원(KIAT), 중국경영연구소, 중국산업경제정보망, 재구성.

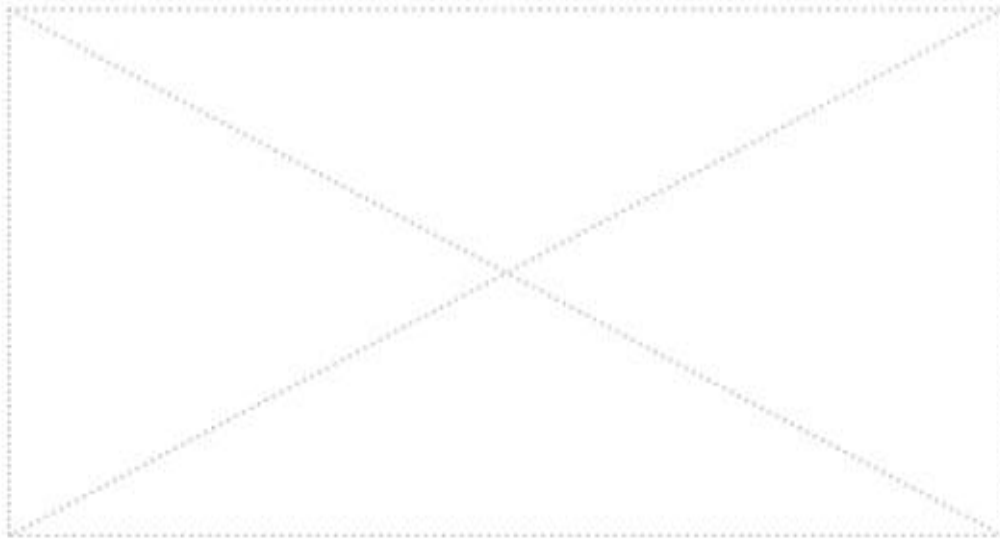
□ 차세대 AI 발전규획('17. 07.)

○ 중국 국무원은 '30년 세계 1위 AI 국가로 발돋움하는 등 'AI 굴기'를 위한 3단계 전략목표를 제시함

- ('20년) AI 핵심산업 규모 1,500억 위안, 관련 산업 규모 1조 위안 이상

- 다른 국가들에 대한 경쟁력을 유지하면서 AI 개발 여건을 최적화하고, 핵심 분야에서 초기 단계의 윤리, 정책, 규제 등을 위한 프레임워크를 마련함

<그림 II-3> 중국 차세대 AI 발전규획 비전 체계



*출처 : Huw Roberts et al, The Chinese approach to artificial intelligence: an analysis of policy, ethics, and regulation, AI & SOCIETY, 2020. 05.

- ('25년) AI 핵심산업 규모 4,000억 위안, 관련 산업 규모 5조 위안 이상
 - 일부 AI 부문에서 획기적 성과를 거두면서 세계 최고의 AI 기술국으로 도약하고, AI 관련 법·윤리의 기준을 정립 및 확장함
- ('30년) AI 핵심산업 규모 1조 위안, 관련 산업 규모 10조 위안 이상
 - 미국을 뛰어넘어 AI 이론, 기술, 응용 등 전 부문에 걸쳐 세계 1위 국가로 자리매김하며, 법, 표준 등을 정비해 새롭게 등장하는 과제에 대응함
- 과학기술, 경제, 사회, 안보, 인프라 등 국가 전반에 걸친 중점 과제를 선정함
 - 개방과 협력에 근거한 과학기술 혁신 시스템 구축을 통해 스마트 경제, 스마트 커뮤니티, 스마트 인프라 등을 건설하고, 민간 국방 분야에서의 성과가 민간에 활용될 수 있도록 임무를 설정함
 - 시장 주도의 자금지원 기구, AI 혁신기지, 글로벌 연계 확대 등 다양한 자원을 적재적소에 투입하는 한편, 법·규제, 표준, 지적권 등을 정비해 글로벌 환경에 대응함

<표 II-10> 차세대 AI 발전계획의 6대 중점 과제



중점 임무	세부과제
개방·협력형 AI 과학기술 혁신 시스템 구축	<ul style="list-style-type: none"> • 차세대 AI 기초이론 체계 구축 • 차세대 AI 핵심 범용기술 체계 수립 • AI 혁신 플랫폼 구축 계획 수립 • AI 고급인력 양성
최첨단·고효율의 스마트 경제 육성	<ul style="list-style-type: none"> • AI 신흥산업 발전 추진 • AI 산업 스마트화 추진 가속화 • 스마트 기업 발전 추진 • AI 혁신기지 조성
안전하고 편리한 스마트 커뮤니티 건설	<ul style="list-style-type: none"> • 편리하고 효율적인 스마트 서비스 발전 추진 • 사회관리의 스마트화 추진 • AI를 활용한 공공 안전 보장능력 제고 • 사회적 교류 촉진
AI 분야의 군민융합 및 국가안보 지원 강화	<ul style="list-style-type: none"> • 과학연구·고등교육기관·기업과 방산업체 간 소통 및 협력체계 수립 • 민간 분야에서 국방 AI 과학기술성과가 활용될 수 있도록 추진
안전, 고효율의 스마트 인프라 체계 구축	<ul style="list-style-type: none"> • 스마트화 정보 인프라 수립 • 네트워크 인프라를 최적화하고 5G 이동통신 연구개발 추진 • 사물인터넷 인프라 완비
차세대 AI 중대 프로젝트의 선도적 추진	<ul style="list-style-type: none"> • 중국 AI 발전 수요를 고려한 차세대 AI의 중대 과학기술 프로젝트 추진

*출처 : 国务院, 新一代人工智能发展规划, 2017.7

□ (차세대 AI 발전규획 후속조치) 차세대 AI 발전규획의 후속조치로 공업 정보화부, 과학기술부, 교육부 등 여러 부처에서 산업과 교육 분야의 행동 계획을 수립함

○ 중국 공업정보화부는 ‘차세대 AI 발전계획’을 기반으로 ‘17년 12월 세 부적인 행동지침과 육성방안을 담은 ‘차세대 AI 산업발전 3개년 행동계획(‘18~‘20)’을 발표함

- 2020년까지 ‘국제 경쟁 우위 형성’, ‘AI와 실제 경제의 통합’, ‘산업 개발 환경 최적화’를 위해 ①AI 적용 제품 대규모 개발, ②AI 전반의 핵심 인프라 기능 향상, ③지능형 제조 발전, ④AI 지원 시스템 구축을 달성하는 내용을 담음

○ 중국 과학기술부*는 AI 기술을 비롯한 핵심기술에 대한 연구개발(R&D)

을 적극 추진하고 과학기술 혁신을 위한 ‘2030 차세대 AI 핵심 프로젝트’
를 실시해 기초이론, 핵심기술, 기초 소프트웨어·하드웨어 등을 핵심으
로 하는 AI 과학기술 혁신 체계를 구축하는 데 주력하고 있음

*중국 과학기술부는 국가 차세대 AI 발전계획의 주무 부처로서, 관련 부처와 지방정부, 나아
가 사회 각계각층의 관련 발전계획을 수렴해 방향을 조정하는 역할을 담당함



2. 국내 정책 동향

□ 인공지능 국가전략(2019. 12.)

- 정부는 글로벌 AI 선도국과의 격차를 해소하여 AI 강국으로 도약할 수 있도록 우리 고유의 ‘인공지능 국가전략’을 마련함

<표 II-11> 인공지능 국가전략(2019. 12.)



IT 강국을 넘어 AI 강국으로! - AI for Everyone, AI of Everything -		
핵심전략 및 목표(2030)		
<p>AI 경쟁력 혁신</p> <p>①인프라 확충 ②전략적 기술개발 ③과감한 규제혁신 ④스타트업 육성</p> <p>“세계를 선도하는 인공지능 생태계 구축”</p>	<p>디지털경쟁력 세계3위 *現 10위, IMD</p>	<p>빅데이터 45,000종 개방 *現 1,500종</p> <p>AI 기술경쟁력 95% 달성 *現 82%(IITP, 美 대비)</p> <p>규제 여건 세계 5위 이내 *現 26위(IMD)</p>
<p>AI 활용 전면화</p> <p>⑤인재양성 국민교육 ⑥전 산업 AI 도입 ⑦디지털정부 대전환</p> <p>“인공지능을 가장 잘 활용하는 나라”</p>	<p>지능화 경제효과 최대 455조원 *맥킨지, KISDI</p>	<p>AI 기본소양 전국민 함양 *現 초중등 중심</p> <p>제조업 부가가치율 30% 달성 *現 25.5%(OECD)</p> <p>‘제조업 르네상스 전략’</p> <p>차세대 지능형정부 완성</p>
<p>AI와 조화·공존</p> <p>⑧포용적 일자리 안전망 구축 ⑨역기능 방지 및 AI윤리 마련</p> <p>“사람 중심의 인공지능 구현”</p>	<p>삶의 질 세계 10위 *現 30위(OECD)</p>	<p>삶의 만족도 순위 5위 이내 *現 31위(OECD)</p> <p>글로벌 수준 AI 윤리규범 확립</p> <p>사이버안전지수 세계3위 이내 *現 15위(ITU)</p>
<p><3대 분야> 생태계·활용·사람중심</p>	<p><9대 전략> ①인프라 확충 ~ ⑨AI윤리 마련</p>	<p><100대 과제> 범정부 100대 실행과제</p>

*출처 : 관계부처 합동, 인공지능 국가전략, 2019. 12.

- 글로벌 경기하강과 불확실성 증대 속에서 AI가 우리 경제 활력을 제고하고, 다양한 사회문제를 해결할 수 있는 유력한 방안으로 부상함
 - AI는 인지·학습 추론 기능 등을 통해 산업의 생산성 향상과 부가가치 창출에 기여하고, 범죄 대응·노인 돌봄·맞춤형 서비스 제공 등을 가능케 함
- AI 시대에 변혁의 당사자인 국민, AI 경쟁력 확보 주체인 기업, 미래

방향성을 제시할 학계 등 민간이 혁신을 주도하고, 정부는 이를 뒷받침하여 국가적 역량을 결집시켜 나갈 계획임

<표 II-12> 산업 각 분야별 AI 활용 전면화 계획

분야	주요내용
제조 및 산업 전반	<ul style="list-style-type: none"> • 제조 데이터센터 및 플랫폼 구축('20), AI 스마트공장 구축('22. 100개→'30. 2,000개) • 문제해결 산업 데이터플랫폼 구축·확산, 표준 산업AI 모듈 개발 • 자율차, 조선, 설계, 로봇, 가전, 세라믹, 소재 등에서 AI 융합제품 개발 및 상용화 • 중소기업, 소상공인 혁신 지원을 위해 스마트상점 개발 보급('20~) 등
바이오·의료	<ul style="list-style-type: none"> • 단계별 신약개발 AI 플랫폼 구축(~'21), 의료데이터 중심병원 지원 및 의료 AI 서비스·제품의 병원 현장 실증('20~) • AI 기반 의료기기 임상검증용 표본데이터 구축 및 전문심사체계 구축(~'21)
스마트시티·건설	<ul style="list-style-type: none"> • 스마트시티 내 AI 기반 개방형 데이터 허브 구축('20) • 스마트 건설기술 확보('20~), 스마트건설 지원센터 준공 및 확장('21~)
교통·물류	<ul style="list-style-type: none"> • 자율협력주행 기술개발('19~) 및 자율주행 대중교통 기술 개발('21~) • 항만자원(컨테이너, 작업자 등) 실시간 공유·분석 기술 확보(~'21)
에너지	<ul style="list-style-type: none"> • 에너지 공급·소비 데이터를 추적 및 활용하는 에너지 빅데이터 플랫폼 구축('20~), 태양광 지능형 발전 추진
네트워크	<ul style="list-style-type: none"> • 5G 코어 네트워크 자동화('20)를 통한 지능형 네트워크 개발 • AI를 접목하여 전파자원 활용 최적화('21~)
농수산	<ul style="list-style-type: none"> • 스마트팜 혁신밸리 조성(~'22, 4개소), 지능형 스마트팜 솔루션 개발(~'27) • 스마트양식 테스트베드(~'22, 6개소), 양식 전주기 AI 적용 '아쿠아팜 4.0' 추진('19~)
문화·예술	<ul style="list-style-type: none"> • 지능형 캐릭터 엔진 및 플랫폼(~'21) 및 AI 창작플랫폼 구현('20~) • AI를 활용한 예술작품 창작 및 공연·전시 지원(~'21)
환경	<ul style="list-style-type: none"> • 대기질 예보에 AI를 융합하여 고농도 미세먼지 예보 정확도 향상('19~'22) • AI 기반 지하수오염 감시 및 예측 시스템 구축('19~'22)
법무	<ul style="list-style-type: none"> • 효율적 수용관리를 위한 ICT 기반의 스마트 교도소 구축·운영('19~'28)
국방	<ul style="list-style-type: none"> • 지능형 플랫폼 구축('20)을 통해 핵심업무 지능화 및 전군 공통 AI 서비스 지원 • 국방 지능데이터 센터 구축('20~)을 통한 지휘체계 지원 지능 개발 가속화

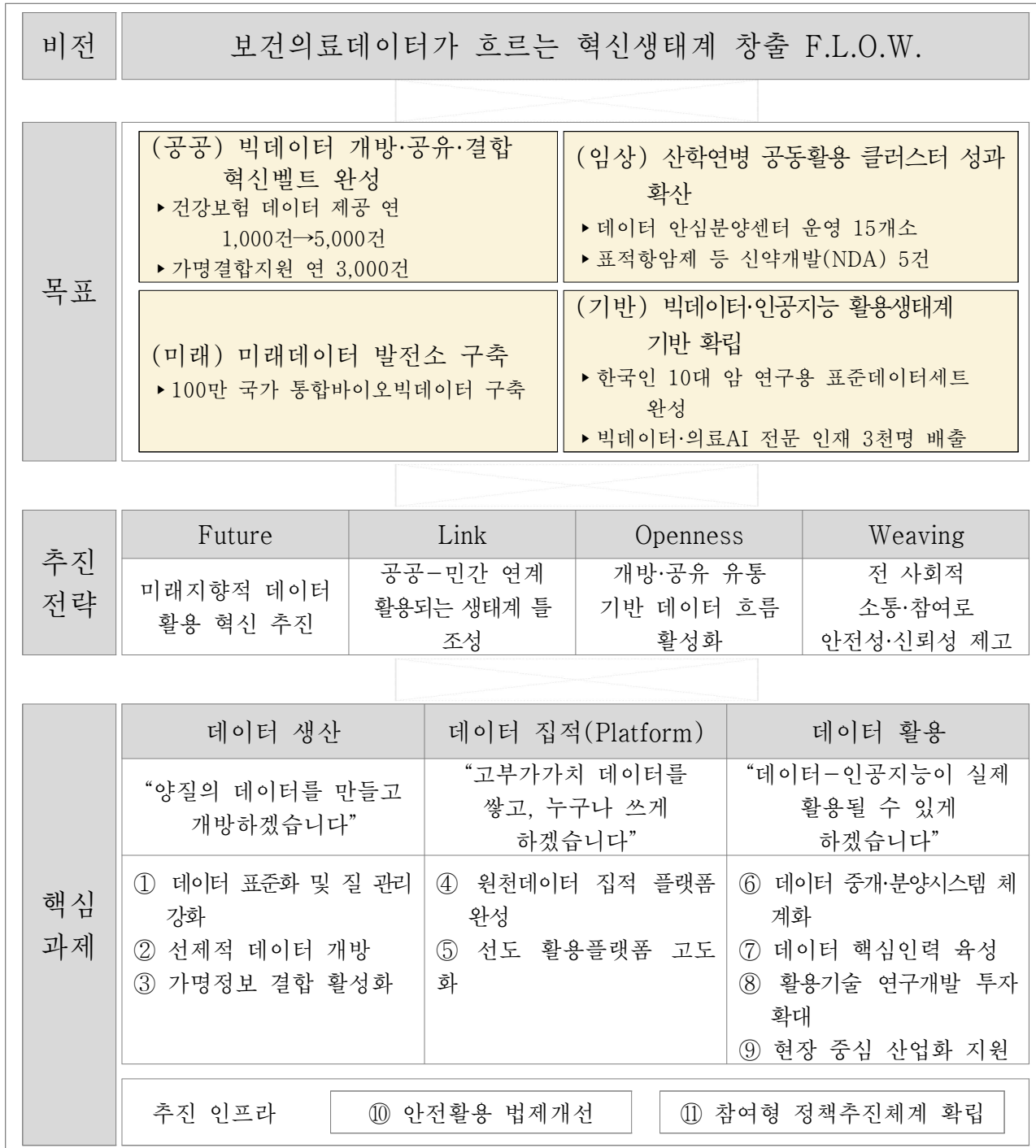
*출처 : 관계부처 합동, 인공지능 국가전략, 2019. 12.

□ 보건의료 데이터·인공지능 혁신전략(2021. 06.)

- 정부는 데이터 기반의 바이오헬스 경쟁력 확보와 미래의료 혁신을 본격 추진하기 위해, 데이터 생산, 집적, 활용의 전 주기에 걸친 3대 분야 9대 핵심과제를 추진하며, 보건의료 데이터의 안전한 활용 법제와 거버넌스 등 정책 기반을 강화할 계획임

<표 II-13> 보건의료 데이터·인공지능 혁신전략(2021~2025)





*출처 : 보건복지부, 보건의료 데이터·인공지능 혁신전략, 2021. 06.

○ (인공지능 기반 신약개발 플랫폼 구축) 신약개발 가속화를 위한 인공지능 기반 신약개발 지원체계 구축은 ‘선도 활용플랫폼 고도화’ 부분의 핵심과제임

<표 II-14> 인공지능 기반 맞춤형 신약개발 지원체계(안)

목표	Emergency 대응	신약개발 가속화시스템	혁신신약개발
데이터 유형	국내·외 오픈데이터 (NIH, WHO 등)	Real World Data(유전체포함) (KCDC, NEMC, HIRA, MOHW, 의료기관 등)	신규창출데이터 + 화합물 라이브러리
세부내용	<ul style="list-style-type: none"> 감염병 초기 대응을 위한 대체의약품 마련 약물 재창출, 약물 효능성 평가 	<ul style="list-style-type: none"> 통합모델 개발을 위한 연합 학습(Federated learning) 적용 연구 RWD를 활용한 신약개발 가속화 환자 유전체 정보 분석 및 예후 예측 분석지원 	<ul style="list-style-type: none"> AI 기반 감염병 대응 의약품 개발 시스템 연구 First-in class 신약 창출 및 제약사 기술이전
특징	신속대응	상시 가동시스템	국가연구소 및 제약바이오사협력

*출처 : 보건복지부, 보건의료 데이터·인공지능 혁신전략, 2021. 06.

- ‘AI 신약개발지원센터’를 허브로 산학연병*이 참여하는 한국형 데이터 기반 신약개발 가속화 프로젝트를 추진함(‘23)

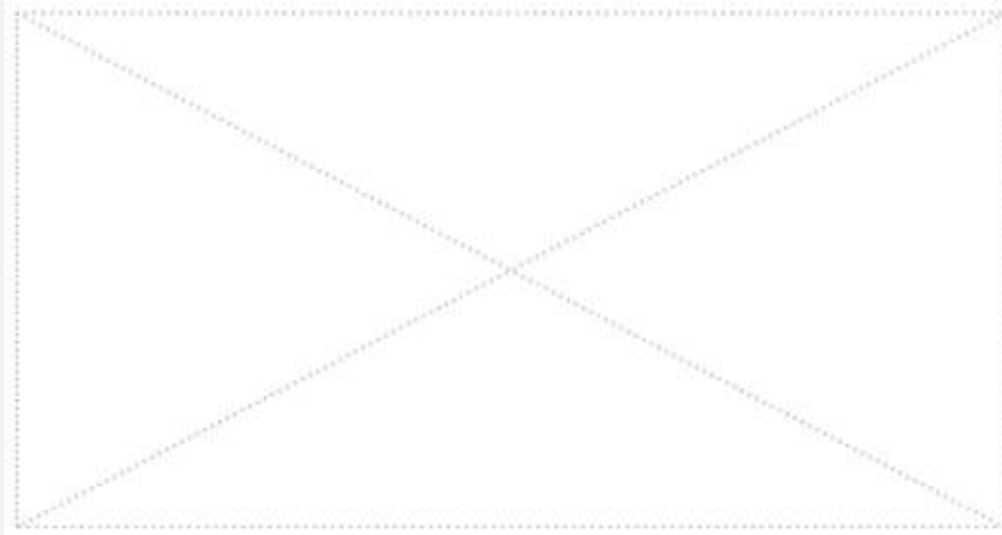
*의료데이터 중심병원, 연구중심병원, 제약바이오협회, 제약산업 특성화대학원 등 공동 컨소시엄 구축, 기존 신약개발사업과 연계한 중장기 연구개발 지원 사업화

<표 II-15> AI 신약개발 지원센터 개요

<p>■ 설립 목적</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ 인공지능 기술을 활용한 신약개발을 가속화하기 위하여 기술지원, 전문인력 교육, 조사연구, 글로벌 협력 등을 수행함으로써 제약산업의 국제경쟁력을 높이고 국민보건향상에 기여 <p>■ 연혁</p> <p>(2017. 12.) ‘인공지능신약개발지원센터 추진단’ 발족</p> <p>(2018. 02.) 한국제약바이오협회(KPBMA)와 한국보건산업진흥원(KHIDI) 간 업무협약(MOU) 체결</p> <p>(2019. 03.) ‘인공지능신약개발지원센터’ 개소</p> <p>■ 사업 방향</p> <ul style="list-style-type: none"> ▶ 인공지능을 활용한 혁신신약개발을 통하여 국가 미래 신성장산업 기반 마련 ▶ 인공지능 기반 의료기관 협력모델 구축을 통하여 차세대 의약품 개발 시스템 구축 ▶ 국내 제약바이오산업계의 신약개발패러다임 전환 <p>■ 주요사업 LEAD</p>



- ▶ (Linker) 산·학·연 연계지원을 통한 AI 신약개발 오픈이노베이션 활성화
- ▶ (Education) 전문인력 양성을 통한 AI 신약개발 생태계 강화
- ▶ (Accelerator) 기술 및 인프라서비스 제공을 통한 성공사례 도출
- ▶ (Data Agent) 데이터 중개를 통한 신약개발지원



▮ 정부의 제약바이오산업 육성 의지

구분	추진과제	세부 사업 내용
Linker	산·학·연 연계지원	<ul style="list-style-type: none"> • 「인공지능신약개발 플랫폼 구축사업」의 성과홍보 및 연구협력 네트워크 구성·운영 • 제약·바이오·IT 분야 협의체 구성 및 지원
Education	전문인력 양성	<ul style="list-style-type: none"> • 제약바이오 및 IT 현업종사자들을 대상으로 일반/전문교육 기획 및 수행 • 연구협력 단기프로젝트형 심화교육
Accelerator	데이터 및 AI 기술 활용	<ul style="list-style-type: none"> • 신·변종 바이러스 대응을 위한 인공지능 활용 신약개발 체계 연구 • 암환자 유전체 및 약물 반응정보를 활용하여 리얼월드 데이터 기반 인공지능 신약개발 사례 마련
Data agent	데이터중심병원 사업지원	<ul style="list-style-type: none"> • 수요조사 및 프로젝트 발굴 • 데이터활용 관련 지원업무

*출처 : 한국제약바이오협회 홈페이지(<https://www.kpbma.or.kr/>)

<표 II-16> AI 신약개발지원센터 전략체계도



*출처 : AI 신약개발지원센터

□ 인공지능 및 신약개발 분야 정부 중장기 전략

- 「2019년 정부연구개발 투자 방향 및 기준」(국가과학기술심의회, '18. 03.)
 - 혁신신약 개발을 위한 신규 타겟(Novel target) 발굴 검증 및 초기 파이프라인을 강화*하고, 신약개발 관련 공공수요 R&D** 지원을 확대
 - *수요기반 타겟발굴·검증, 선도·후보물질 도출 및 최적화 연구 등
 - **의약품 안전성·유효성 검증을 위한 규제과학, 희귀난치질환 치료제 임상연구 등
- 「제3차 생명공학육성기본계획」(생명공학종합정책심의회, '17. 09.)
 - 글로벌 블록버스터 신약 창출 및 미래 시장 타겟형 바이오의약품(유전자, 줄기세포, 단백질, 백신 등) 투자 강화로 국가경쟁력 확보
- 「4차 산업혁명 기반 헬스케어 발전전략」(4차산업혁명위원회, '18. 12.)
 - 주요과제로 '인공지능 활용 신약개발'을 추진하여 신약개발 R&D, 전문인력 양성, 연구데이터 수집·공유·활용 촉진 방안 마련
- 인공지능(AI) 국가전략 목표(범부처, '19. 12.): 2030년까지 국가 디지털경쟁력을 현 10위에서 세계 3위로 끌어올리고, 최대 455조 원의 경제효과 창출 목표 제시

□ 식약처, 빅데이터·인공지능 관련 의약품 또는 의료기기 허가·심사 기준 마련

- '빅데이터 및 인공지능 기술이 적용된 의료기기의 허가심사 가이드라인'('16. 12.), '빅데이터 및 인공지능 기술이 적용된 의료기기의 허가심사 가이드라인'(민원인 안내서)('17. 11.) 마련
 - 의료용 빅데이터와 인공지능(AI) 기술이 적용된 소프트웨어의 경계가 모호해짐에 따라 의료기기와 비(非)의료기기의 구분 기준을 명확하게 함으로써 관련 제품의 연구·개발에 있어 예측성을 높이고 관련 산업발전을 지원하기 위함

제2절 산업·시장 동향

- 신약개발 분야의 인공지능(AI) 활용 영역 확대로, 전 세계적으로 신약개발 R&D 생산성 향상을 위한 비즈니스 모델 확장 중
- 세계 인공지능 활용 신약개발 시장규모 ‘19년 473.4백만 달러→‘27년 3,548.6백만 달러 규모 달성 전망(CAGR 28.63%)
 - 환자 건강 데이터 대량 유입 및 맞춤형 의료 수요 확대가 시장성장을 촉진

1. 의약품 산업

가. 의약품 산업 개요 및 특징

- 의약품은 신약개발을 위한 연구개발에서부터 원료의약품 및 완제의약품 생산판매 등 전 과정을 포괄하는 산업임
- 의약품은 제조방식에 따라 **합성(화학)의약품**과 **바이오의약품**으로 구분됨
 - 합성의약품은 화학합성에 의해 제조하는 의약품으로서 일반적으로 복용하는 고혈압약, 진통제 등이 대부분 합성의약품에 속함
 - 바이오의약품은 생물공학 기술을 이용하여 사람이나 다른 생물체에서 유래된 것(단백질)을 원료 및 재료로 해서 만든 의약품으로서 백신, 인슐린, 항체 의약품 등이 있음
- 신약 여부에 따라서는 **오리지널 의약품**과 **복제 의약품**으로 분류됨
 - 합성의약품의 복제의약품을 제네릭(Generic), 바이오의약품의 복제의약품을 바이오시밀러(Biosimilar)라고 함
 - 한편 기존 허가된 오리지널 의약품의 효능을 개선하여 새롭게 허가·등록한 의약품을 합성의약품의 개량신약이라고 하며, 바이오의약품의 개량신약은 바이오베



터(Biobetter)라고 함

<표 II-17> 의약품 분류

분류	합성의약품	바이오의약품
신약 (오리지널 약품)	<ul style="list-style-type: none"> 합성 의약품 또는 합성 신약 	<ul style="list-style-type: none"> 바이오의약품 또는 바이오신약
복제 약품	<ul style="list-style-type: none"> 제네릭 : 오리지널 합성의약품과 주성분, 제형, 함량, 효능·효과 및 용량이 모두 동일 	<ul style="list-style-type: none"> 바이오시밀러(Biosimilar) : 오리지널 바이오의약품과 주성분, 제형, 함량, 효능·효과 및 용량이 유사
신약 개선	<ul style="list-style-type: none"> 개량신약 : 기존 허가된 오리지널 의약품을 물리화학적 특성, 제제 처방화 및 효능을 개선하여 새롭게 허가등록한 의약품 	<ul style="list-style-type: none"> 바이오베터(Biobetter)

*출처 : 보건산업진흥원, LGERI, Oncobiologics 등

○ 약제 형태에 따라 원료의약품과 완제의약품으로, 의사 처방 필요 여부에 따라 처방(전문)의약품과 일반의약품으로 분류하기도 함

- 완제의약품은 판매를 목적으로 제조한 제품이고, 원료의약품은 완제의약품 전 단계의 약효를 나타내는 핵심원료임
- 처방의약품(ETC, Ethical the Counter Drug)은 의사 처방이 있어야 구입 가능하고, 일반의약품(OTC, Over the Counter Drug)은 의사 처방 없이 약국이나 편의점에서 구입 가능함

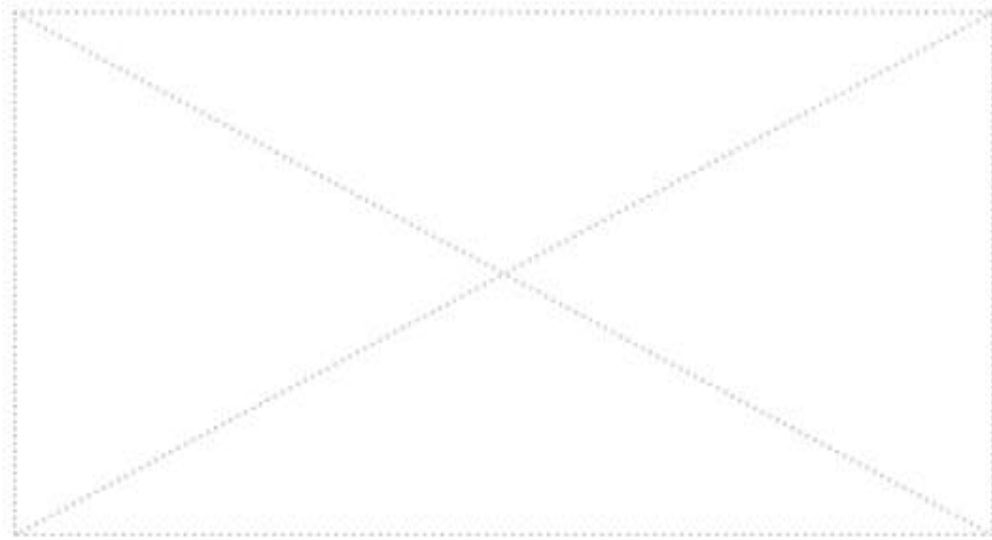
□ 의약품 산업은 기술집약적 산업으로서 타 산업 대비 R&D 투자비 비중이 매우 높음

○ 세계 의약품 시장의 R&D 투자비는 '12년 1,361억 달러에서 '19년 1,860억 원으로 연평균 4.6%로 증가한 데 이어, '26년까지는 연평균 3.2%로 증가하여 '26년 2,325억 달러에 이를 전망임('12~'26 CAGR : 3.92%)

○ R&D 투자비 증가세 둔화로 글로벌 처방의약품 매출액 중 R&D 투자비의 비중은 '19년 21%에서 '26년 약 17%로 감소할 전망이나 여전히 매우

높은 수준임

<그림 II-4> 세계 의약품 산업의 R&D 투자비 추이와 전망



*출처 : EvaluatePharma, World Preview 2020, Outlook to 2026, 한국제약바이오협회, 재구성

- 주요 국가별 의약품 산업의 R&D 투자비는 미국이 압도적인 1위를 유지하고 있으며, '18년 한국의 R&D 투자비는 미국의 약 2% 수준을 기록함

<표 II-18> 주요 국가의 연도별 의약품 산업의 R&D 투자비 추이(2014~2018)

연도	미국 (백만\$)	캐나다 (백만\$)	영국 (백만€)	독일 (백만€)	프랑스 (백만€)	스위스 (백만€)	이탈리아 (백만€)	호주 (백만\$)	일본 (십억 円)	한국 (억원)
'14	53,253.20	792.2	3,924	5,100	4,586	5,338	1,350	-	1,495.30	11,017
'15	58,819.40	869.1	4,165	5,400	4,451	6,525	1,415	463.0	1,457.70	12,618
'16	65,500.00	918.2	4,090	5,540	-	6,429	1,470	614.0	1,351.60	13,413
'17	71,400.00	870	4,320	6,190	-	6,105	1,530	667.0	1,465.30	13,221
'18	79,600.00	890	4,463	7,370	-	7,000	1,700	702.0	1,404.70	16,238

*출처 : EvaluatePharma, World Preview 2020, Outlook to 2026, 한국제약바이오협회, 재구성

- 글로벌 신약 개발 시 평균 1조~2조 원 상당의 개발 비용과 10~15년 정도의 장기간의 개발기간이 소요됨
- 신약개발은 크게 후보물질 탐색을 위한 기초 R&D 단계(약 5년), 인간에게 약물 투여 전 동물대상의 약물 효능 및 안정성을 평가하는 전임상



단계(약 3년), 연구 신약(Investigational New Drug, IND) 승인을 받은 후 임상시험 단계(6~7년)로 구분됨

- 이 중 임상 단계는 특히 전문역량 및 높은 비용이 요구되는 단계로 전체 신약개발 비용의 약 70%가 소요됨

○ 임상시험은 의약품 안전성과 유효성 증명을 위해 인간을 대상으로 실시하는 시험 또는 연구로서, 총4상(相, Phase)으로 구성됨

- 제I상(임상 1단계)에서는 대부분 소수의 건강한 성인을 대상으로 약물의 체내 흡수, 분포, 대사, 배설 등에 대한 자료를 수집하면서 안전성을 평가함(약 1~2년)
- 제II상(임상 2단계)에서는 100~300명 수준의 환자들을 대상으로 적정용량의 범위(최적의 투여량 등)와 용법을 평가함(약 2년)
- 제III상(임상 3단계)에서는 1,000~3,000명의 환자를 대상으로 약물 유효성과 안전성을 최종적으로 검증함(약 3년)
 - 임상 3상을 통과하면 보건당국에 NDA(New Drug Application, 신약승인 신청서)를 신청하여 약물 제조 및 판매허가를 받게 되며(약 1~2년), 판매허가를 득한 후에 대규모 상용화 단계로 진입
- 제IV상(임상 4단계)에서는 약물 시판 후 부작용을 추적하여 안전성을 제고하고, 추가적 연구를 시행함(수년간 모니터링)

○ 막대한 R&D 비용에도 불구하고, 신약개발 성공확률은 1/5,000 수준으로 매우 낮음

- 타 산업 대비 R&D 투자비 비중이 매우 높은 기술집약적 산업으로서, R&D 투자 상위기업 기준으로 매출액 대비 18% 수준*

*타 산업의 매출액 대비 R&D 비중: 전기&전자 기기 7.7%, 일반제조업 3.1%

- 기초 R&D 단계에서 5,000~10,000개 수준의 화합물(Compound) 중 전임상 단계로 250여 개, 임상 단계까지 5개, 최종 신약승인 허가를 득하고 상용화 단계에 도달하는 것은 1개 정도에 불과함
- 막대한 R&D 비용 회수를 위해서는 대규모 시장이 필요하여, 따라서 대부분의

경우 수출지향적인 산업구조를 가짐

- 대규모 장기투자가 필요한 의약품 시장의 특성상 후발 업체의 추격이 어려워
세계 상위권의 빅파마*(Big Pharma)들은 미국, 유럽의 선진기업들로 구성됨
*매출액이 연간 150억 달러 이상인 대형 제약사
- Roche는 ‘18년 1, 2위 기업인 Pfizer와 Novartis를 제치고 ‘19년 처방의약품 매출액 1위 기업에 등극함
 - 주요 성장동력인 바이오의약품 판매증가에 힘입어 1위 기업에 등극하였으며 향후 1위 자리를 유지할 전망이다
 - 최근 유전자치료제 전문기업 Spark Therapeutics와 섬유증 전문기업 Promedio 인수 등을 통해 포트폴리오 다각화를 추진하고 있음
- Johnson & Johnson은 ‘19년 2위를 기록하였으며, ‘26년경에도 2위 지위를 유지할 전망이다
 - 미국 FDA의 코로나19 백신에 대해 긴급사용 승인(‘21. 02.), 블록버스터 신약인 혈액암 치료제 Darzalex의 매출 성장이 기대됨(2026년 80억 달러의 매출 예상)
- 10대 제약사 중 ‘19~‘26년간 시장 점유율이 확대된 기업은 AbbVie, Bristol-Myers Squibb(BMS), AstraZeneca 3개사임
 - BMS는 Celgene 인수, AbbVie는 Allergan 인수(‘20. 05.) 등을 통해 포트폴리오를 확대함

<표 II-19> 글로벌 처방의약품 매출 상위 10대 제약기업



순위	기업명(국가)	매출액(단위 : 십억 달러)			순위 변경
		2019	2026	CAGR	
1	Roche(스위스)	48.2	61.0	3.4%	0
2	Johnson&Johnson(미국)	40.1	56.1	4.9%	3
3	Novartis(스위스)	46.1	54.8	2.5%	-1
4	Merck&Co(미국)	40.9	53.2	3.8%	0
5	AbbVie(미국)	32.4	52.7	7.2%	2
6	Pfizer(미국)	43.8	51.1	2.2%	-3
7	Bristol-Myers Squibb(미국)	25.2	44.7	8.6%	3
8	Sanofi(프랑스)	34.9	41.7	2.6%	-2
9	AstraZeneca(영국)	23.2	41.0	8.5%	2
10	GlaxoSmithKline(영국)	31.3	40.8	3.9%	-2
Total Top 10		366.1	497.1	4.5%	
Other		505.8	893.1	8.5%	
Total		871.8	1,390.3	6.9%	

*출처 : EvaluatePharma, World Preview 2020, Outlook to 2026, 한국제약바이오협회, 재구성

나. 세계 의약품 시장 규모

- 세계 의약품 시장은 고성장을 지속하고 있으며, 선진국 시장이 큰 비중을 차지하고 있으나 파머징(Pharmerging) 국가*가 빠르게 성장하며 시장 규모 순위가 점차 상승하고 있음

*제약을 뜻하는 'Pharma'와 신흥을 뜻하는 'Emerging'을 합친 신조어로, 중국을 비롯한 인도, 러시아, 브라질 등의 BRICs 국가와 태국, 이집트, 남아프리카공화국 등 제약산업의 신흥시장을 뜻하며, 전 세계 제약시장의 성장 주도

- 세계 의약품 시장규모는 '14~'19년 연평균 약 4.7%로 성장, '19년 1조 2,504억 달러를 기록하였으며, '20~'24년 연평균성장률은 3~6% 수준이 될 것으로 전망됨

- 국가별 시장규모는 미국이 압도적인 1위로 전체 시장의 약 41%를 차지하며, 그 뒤를 이어 중국, 일본, 독일, 프랑스, 이탈리아 순으로 10위권 국가들 대부분이 선진국으로 구성됨

- 2위 국가인 중국을 위시한 BRICs 국가들의 의약품 시장이 빠르게 성장, 순위 상승세에 있으며 '19년 기준 브라질 7위, 인도 11위, 러시아 13위를 기록함

- 한국(1.3%)은 '14년에 이어 '19년에도 12위의 시장규모 기록, '24년은 13위로 예상됨

<표 II-20> 지역별·국가별 의약품 시장 현황 및 전망

국가	2019 (십억 달러)	2014~2019 CAGR(%)	2024(십억 달러)	2020~2024 CAGR(%)
글로벌 전체	1,250.4	4.7%	1,570~1,600	3~6%
선진국	821.6	3.8%	985~1,015	2~5%
미국	510.3	4.3%	605~635	3~6%
일본	87	-0.2%	88~98	-3~0%
EU5개국	173.7	4.0%	210~240	3~6%
독일	52.1	4.9%	65~75	4~7%
프랑스	34.9	1.6%	38~42	0~3%
이탈리아	33.5	5.1%	41~45	3~6%
영국	28.7	4.5%	37~41	4~7%
스페인	24.5	4.0%	30~34	3~6%
캐나다	22.5	4.6%	26~30	4~7%
한국	16.1	7.3%	21~25	5~8%
호주	12.1	3.5%	13~17	3~6%
파머징 국가	357.7	7.0%	475~505	5~8%
중국	141.6	6.7%	165~195	5~8%
Tier 2	71.2	9.4%	90~120	7~10%
브라질	33.6	9.9%	45~49	6~9%
인도	22	9.5%	31~35	8~11%
러시아	15.6	8.4%	23~27	8~11%
Tier 3	145.1	6.2%	195~225	5~8%
그 외 국가	71	4.8%	85~95	2~5%

*출처 : IQVIA Market Prognosis 2019, 한국임상시험포털 K-CLIC 재인용

- '20년 의약품 시장은 코로나19 팬데믹의 영향으로 만성질환과 코로나19 치료제 수요가 증가했으나, 신약개발 지연과 글로벌 공급망의 변화는 시장 성장폭을 제한함
- '20년 헬스케어 산업*은 의료기기, 영상장비 부문의 시장규모는 축소된 반면, 체외진단 및 헬스케어 IT, 의약품 부문은 성장(Frost&Sulivan, Post-pandemic Global Healthcare Market Outlook 2020('20. 07.)

*의약품, 의료기기, 영상장비, 체외진단, 헬스케어 IT 등 5개 부문으로 구성

- 코로나19 영향으로 병원 방문환자가 급감함에 따라 의료기기, 영상장비



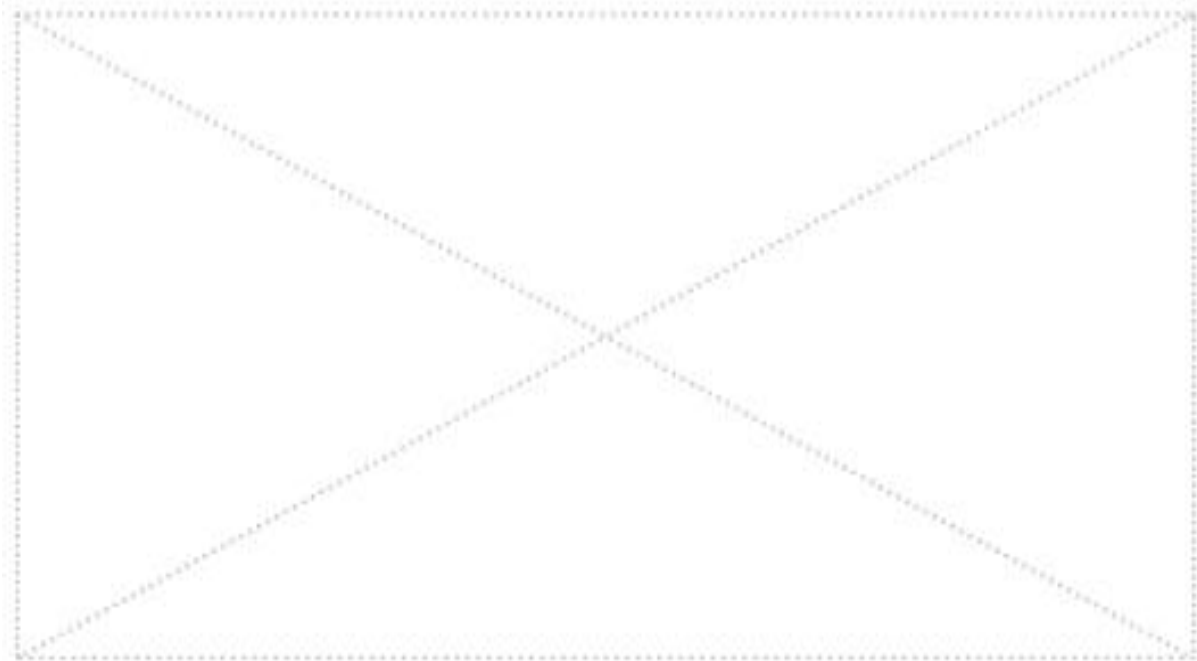
- 부문은 공급자 중심의 진단 분야 시장규모가 지속적으로 감소하며 타격을 받음
- 다만, 코로나19로 인해 정밀현장진단, 분자진단 등의 체외진단 부문은 4.0~5.3% 수준의 비교적 높은 성장률을 기록한 것으로 추정됨
 - 헬스케어 IT 부문 역시 원격 의료를 통한 의료서비스 혁신, 의료 IT 분석 및 상호 운영성 강화 등 '20년 7.1~7.9%의 높은 성장률 기록한 것으로 추정됨
- 의약품 부문은 코로나19 영향에 따른 글로벌 공급망의 취약성, 바이오의약품 시장의 일시적 침체 등이 시장에 부정적인 영향을 미침
- 바이오의약품은 병원에서 처방·치료가 필요한 처방의약품으로서 코로나19로 인한 병원 방문 감소에 따라 수요가 위축됨
 - 반면 합성의약품은 만성질환 치료제를 중심으로 한 수요가 지속되고 있음
- '20년 글로벌 의약품 시장규모는 합성의약품의 수요 지속 등에 힘입어 전년 대비 4%대로 성장하여 약 1조 3,250억 달러로 추정됨
- 제약사들은 코로나19로 인한 글로벌 공급망 변화와 임상시험 중단 등의 난관을 극복하기 위해 다각적인 대응책을 모색하고 있음
- 미국, 인도 등은 글로벌 공급체인 문제해결을 위한 리쇼어링 정책을 추진하고 있음
 - 한편 제약사들은 가격경쟁력, 유연성, 투명성을 강화한 공급망 디지털화와 AI를 통한 코로나19 치료제 및 플랫폼 개발에 주력하고 있음
- 글로벌 처방의약품 매출액은 '20년 9,040억 달러, 파머징 국가의 경제성장, 고령화 등으로 연평균 7.4%로 성장하여, '26년 1조 3,903억 달러 규모에 달할 것으로 전망됨
- 처방의약품 시장은 희귀의약품 시장의 급증과 혁신적 의약품 승인 등에

힘입어 지속성장이 기대됨

○ 처방의약품 시장은 '12~'19년 연평균성장률 2.7%에서 '20~'26년 7.4%의 높은 성장률을 보일 것으로 전망됨

- 동기간 합성의약품 복제약인 제네릭 시장의 연평균성장률은 2.6%에서 3.5%로 성장이 정체된 데 반해 희귀의약품의 연평균성장률은 9.1%에서 10.8%로 고성장을 지속하며 처방의약품 시장의 성장을 주도함
- 코로나19 팬데믹 영향으로 헬스케어 산업 전반에 단기적인 충격이 있었지만, 혁신적이고 효과적인 치료법에 대한 수요가 미래 산업성장을 견인할 것으로 기대됨

<그림 II-5> 글로벌 처방의약품 매출액 추이 및 전망(2012~2026년)



(단위 : 십억 달러)

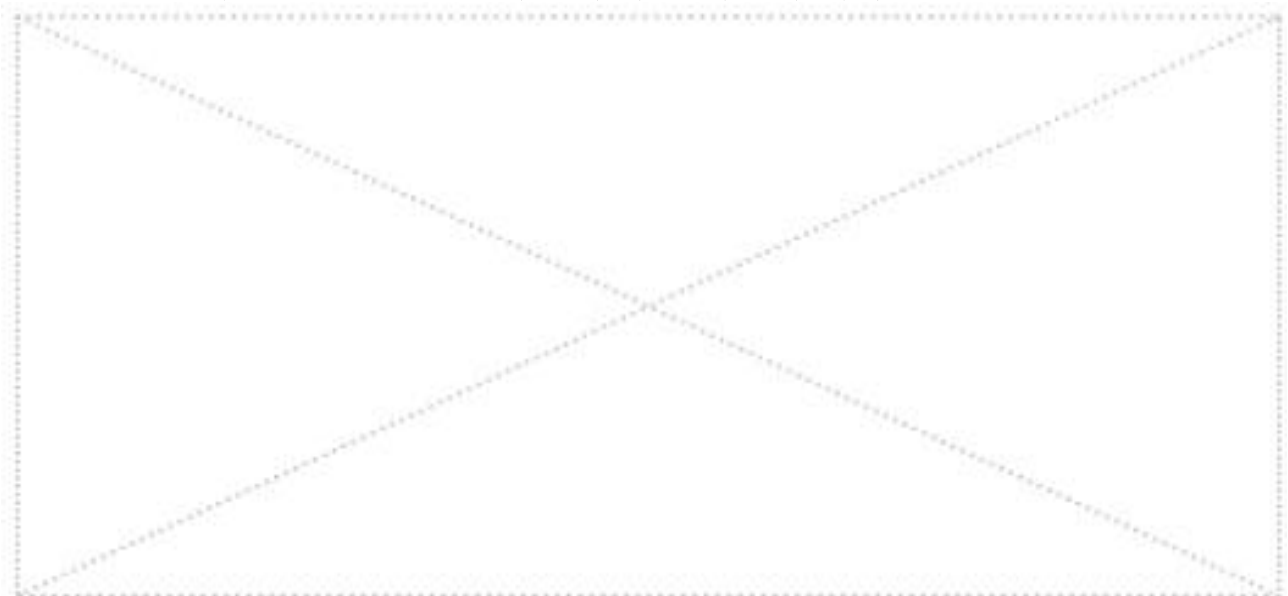
구분	'12	'13	'14	'15	'16	'17	'18	'19	'20	'21	'22	'23	'24	'25	'26
총매출	725	735	763	756	781	802	840	872	904	963	1,033	1,106	1,195	1,238	1,330
제네릭	66	69	75	78	80	82	80	79	82	85	88	91	94	97	101
희귀의약품	69	76	81	86	94	104	116	127	138	154	172	192	214	235	255



*출처 : EvaluatePharma, World Preview 2020, Outlook to 2026(2020.6), 생명공학정책연구센터, 재구성

- 치료영역별로는 항암제(Oncology) 부문이 가장 높은 시장 점유율과 성장률을 지속하여 면역항암제와 표적항암제가 향후 의약품 시장의 성장을 주도할 전망이다
- 항암제(Oncology) 부문은 2019년 매출 점유율이 16%, 2026년까지의 연평균 11.5%로 성장, 2026년 점유율이 21.7%로 확대될 전망
 - 2026년 Oncology 분야에서 면역항암제*와 표적항암제**(protein kinase inhibitors)의 매출이 66%를 차지할 것으로 예상
 - *면역항암제 : 인체 면역세포 활성을 통해 암세포 공격
 - **표적항암제 : 기존 항암제가 투여 후 정상 세포까지 공격하여 각종 부작용, 체력 저하를 동반하는 것과 달리 표적항암제는 암세포의 성장이나 생존과 관련한 단백질과 유전자만 공격하여 정상세포 손상이 비교적 적고, 항암 부작용도 감소
- 항암제 뒤를 이어 면역 억제제(Immunosuppressant)와 피부질환 치료제(Dermatologicals)는 연평균성장률 14.3%, 12.7%로 성장할 전망이다

<그림 II-6> 2026년 상위 10대 치료영역별 시장점유율 및 성장률 전망



*출처 : EvaluatePharma, World Preview 2020, Outlook to 2026(2020.6), 생명공학정책연구센터, 재구성

다. 국내 의약품 산업 현황

- 국내 의약품 시장은 ‘15~‘19년 연평균 7.1%로 성장, ‘19년 24.3조 원 규모를 기록함
 - 2000년대 초반 글로벌 블록버스터 의약품들의 특허 만료는 제네릭 의약품 중심의 국내 의약품 시장성장*의 발판이 된 동시에, 기술진입 장벽이 낮은 제네릭 의약품 부문에서의 경쟁과열을 초래함
 - *‘04~‘11년 국내 의약품 시장규모 연평균성장률 10.1%
- ‘12년 정부는 국내 제약산업 규제 강화를 위해 약가 인하정책을 시행하였으며, 이후 국내 의약품 시장 성장세가 둔화*함
 - *‘13~‘17년 국내 의약품 시장규모 연평균성장률 3.4%)
- 내수시장 부진 탈피를 위해 2010년대 들어 수출판로 확대, 특히 최근 바이오시밀러 수출 증가 등으로 수출액이 급증하여, ‘19년 6조 원 돌파. 다만 수출 규모 급증에도 불구하고 무역수지 적자가 지속됨
 - ‘15~‘19년 한국의 의약품 수출이 연평균 16.1%로 증가, ‘19년 6조 581억 원을 기록함
- 국내 제약기업은 글로벌 기업 대비 규모가 영세하고, 신약개발보다는 제네릭 위주의 사업을 영위해 온 결과 자금력 및 기술력의 열세가 지속됨

<표 II-21> 국내 의약품 시장규모 추이

(단위 : 억 원)

구분	2015	2016	2017	2018	2019	CAGR(‘15~‘19)
생산	169,696	188,061	203,580	211,054	223,132	7.1%
수출	33,348	36,209	46,025	51,431	60,581	16.1%
수입	56,016	65,404	63,077	71,552	80,549	9.5%
무역수지	△22,668	△29,195	△17,052	△20,121	△19,968	-
시장규모	192,364	217,256	220,632	231,175	243,100	6.0%

*주 : 1) 의약품 범위는 완제, 마약, 한외마약, 향정신성, 원료의약품(한약재 포함)



- 2) 시장규모는 생산-수출+수입
3) △은 적자표시
*출처 : 식품의약품안전처, e-의료정보 재인용

- ‘15~‘19년 한국의 바이오의약품 수출이 연평균 13.1%로 증가하였고, ‘19년 1조 4,968억 원을 기록하며 전체 의약품 수출액의 약 25%를 차지함
- 한국 바이오의약품 시장이 글로벌 시장에서 차지하는 비중은 ‘19년 매출액 기준 0.7%(IQVIA, ‘20)로, 세계 의약품 시장에서 차지하는 비중(1.3%)보다 낮게 나타남
- 바이오의약품 부문은 바이오시밀러를 중심으로 수출 증가세 지속되다가, ‘19년에는 감소함
- 유럽(독일, 영국) 및 미국 시장에서 한국의 바이오시밀러 제품이 오리지널 의약품을 대체하며 시장점유율이 점차 확대되고 있으며, 세계 최대 규모의 바이오의약품 위탁생산(CMO) 능력을 바탕으로 바이오의약품 및 백신 생산기지로서의 역할이 확대됨에 따라 ‘20년 이후 바이오의약품 수출액은 다시 큰 폭으로 증가함
- 다만 바이오의약품 수입액은 수출보다 더 큰 폭인 ‘15~‘19년 연평균 16.9%로 증가하여 수입 점유율이 ‘06년 29.7%에서 ‘15년 50.9%, ‘19년 60.0%로 지속 확대됨(식품의약품안전처)

<표 II-22> 국내 바이오의약품 시장규모 추이

(단위 : 억 원)

구분	2015	2016	2017	2018	2019	CAGR(‘15~‘19)
생산	17,209	20,079	26,015	26,113	25,377	10.2%
수출	9,156	12,346	15,471	17,161	14,968	13.1%
수입	8,353	10,576	11,784	13,356	15,592	16.9%
무역수지	803	1,770	13,356	3,804	△624	

구분	2015	2016	2017	2018	2019	CAGR('15~'19)
시장규모	16,406	18,308	22,327	22,308	26,001	12.2%
수입점유율	50.9%	57.8%	52.8%	59.9%	60.0%	
시장증가율	△17.3%	11.6%	21.95%	△0.1%	16.6%	
전체의약품 시장 중 비중	8.5%	8.4%	10.1%	9.6%	10.1%	

*주 : 1) 시장규모는 생산+수입-수출
2) 수입점유율 = 수입액/시장규모

3) 수출입 금액은 한국은행 경제통계시스템(ECOS) 연도별 평균환율(증가)을 적용해 원화로 환산한 금액

*출처 : 식품의약품안전처, 한국제약바이오협회 재인용

□ 국내 의약품 분야의 기술력 수준은 미국 대비 70~80% 수준이며, 전체 생명·보건의료 분야의 기술격차는 평균 3년 수준이나, 신약개발 부문에서는 6년으로 상당한 격차가 존재함

<표 II-23> 국내 의약품 관련 분야 기술수준 비교

분야	미국대비	한국		일본		중국	
		2018	2020	2018	2020	2018	2020
생명·보건의료 분야 전체	기술수준(%)	75.2%	77.9%	83.8%	81.6%	73.2%	78.0%
	기술격차(년)	3.5	3.1	2.2	2.4	3.7	3
맞춤형 신약 개발 기술	기술수준(%)	70.0%	70.0%	84.0%	80.0%	70.0%	75.0%
	기술격차(년)	5.5	6	3	3	5.5	5
유전자 치료기술	기술수준(%)	82.5%	80.0%	85.0%	80.0%	78.5%	75.0%
	기술격차(년)	3.5	3	3.3	2	4.3	3.5

*출처 : 한국과학기술기획평가원, 2020년 기술수준평가(생명·보건의료), 2021. 04., 재구성



라. 인공지능 기반 신약개발 패러다임

- (신약개발 R&D 생산성 향상) 국내외 제약사에서는 R&D 생산성 향상을 목적으로 인공지능(AI) 기술을 신약개발 분야에 적용하는데 많은 관심을 두고 있음
 - 1960년부터 의약품의 안전성, 유효성, 시험대상자 보호 등 본격적인 신약개발 규제들이 도입되면서 제약산업에서 R&D 생산성 감소 문제가 지속 제기되고 있음
 - AI는 연구개발, 환자 모집, 연구 결과 정리 등 신약개발의 전 과정에서 제약사의 시간과 비용을 절감할 수 있음
- (신약개발 분야 인공지능(AI) 활용 영역 확장) 정보 수집 등 기초적인 단계에 우선 적용되었던 신약개발 분야에서의 AI는 최근 15개 비즈니스 영역으로 확장됨
 - 신약개발 과정 중 AI가 가장 각광 받은 분야는 문헌 ‘정보 수집’과 ‘후보물질 발굴’ 분야임
 - 구조 활성 관계 또는 컴퓨터를 이용한 분자 약물 설계 기반의 후보물질 발굴 기술은 과거부터 활발히 연구되어 AI 적용이 최우선으로 고려됨
 - 최근에는 임상 설계, 임상 환자 모집, 데이터 공개 등 신약개발 전 과정에서 AI를 적용한 비즈니스 모델들이 도입됨

<표 II-24> AI 신약개발의 비즈니스 모델

비즈니스 모델		예시
1	정보 수집 및 통합	논문, 특허 데이터 통합, 효율적인 검색기능 제공
2	질병기전 이해	표현형 등의 정보 기반으로 질병 기전 제시
3	바이오마커 발굴	질병 타겟 바이오 마커 추천
4	데이터와 모델 개발	데이터 기반으로 특정 조직의 모델 생성
5	약물재창출/적응증 확대	기존 의약품의 새로운 적응증 추천
6	새로운 후보물질 발굴	새로운 후보물질 발굴

비즈니스 모델		예시
7	후보물질 최적화/유효성 검증	후보물질 검증
8	약물설계	새로운 분자 생성
9	전임상 실험 설계	적절한 시약 등 실험 설계에 필요한 자원 추천
10	전임상 실험 수행	전임상 예측결과 제공
11	임상 설계	환자 기준, interventions 추천 등
12	임상 환자 모집	환자 모집 지원(환자 데이터에서 적절한 임상시험 제안)
13	임상 최적화	환자 모니터링 지원, 임상 성공을 위한 지원
14	데이터 공개	clinical writing, 연구 기록 등 효율적 관리 시스템
15	RWD 분석	의료, 약국 청구 데이터 분석

*출처 : Simon Smith, 230 Startups Using Artificial Intelligence in Drug Discovery, 2021. 02.
KDB미래전략연구소 재구성

- (국내외 AI 신약개발 스타트업 증가) 전 세계에서 AI 신약개발 스타트업이 증가하는 가운데, 국내에서도 창업과 상장 및 투자가 이루어지며 많은 기업이 성장하고 있음
- 전 세계에 알려진 AI 신약개발 스타트업은 약 220여 개로 AI가 우선 적용되었던 정보 수집과 후보물질 발굴 분야에 집중되어 있음
- 국내에서도 신약개발 초기 단계의 역할을 수행하는 AI 신약개발 스타트업이 대부분이나, 해외 스타트업과 비교하여 비즈니스 모델이 단조로운 편임
 - 국내 스타트업은 유전자 분석 사업을 영위하던 기존 기업이 바이오마커 발굴 분야로 사업을 확장하거나, 처음부터 생물정보학 및 IT 기술 기반의 새로운 후보물질 발굴 또는 정보 수집 및 통합 모델로 창업하는 경우가 많음
- AI 신약개발 스타트업에 대한 투자가 '18년부터 큰 폭으로 증가하면서 많은 스타트업이 창업하고 일부는 상장하는 등 국내 기업들의 성장이 이어질 전망이다(KDB산업은행, '21. 06.)
 - '17년까지는 투자기업이 적고 총 투자 금액이 500억 원 미만이었던 반면, 이후에는 연 투자 금액이 '18년 422억 원, '19년 756억 원, '20년 1,355억 원으로 증가함
 - '21년 5월까지 투자금액은 1,003억 원으로 증가세가 유지되고 있으며, 신테카바이오 등 일부 기업은 상장한 상황임



<표 II-25> AI 신약개발의 비즈니스 모델별 스타트업 현황

비즈니스 모델		국내 스타트업	해외 스타트업
1	정보 수집 및 통합	메디아이플러스, 플랜잇파트너스, 지놈오피니언, 지놈인사이트	Amplion, Biorelate, BioSymetrics 등 35개
2	질병기전 이해	-	Aiforia, Cambridge Cancer Genomics, CytoReason 등 15개
3	바이오마커 발굴	아이크로진, 베르티스, 루닛, 디어젠, 마크로젠, 메디젠휴먼케어, 신테카바이오, 쓰리빌리언, 지니너스	Ariana Pharma, Bidesix, Biotrillion 등 11개
4	데이터와 모델 개발	심플렉스, 뉴로핏	Predictive Oncology, TARA biosystems
5	약물재창출/적응증 확대	온코크로스	Aurastem, Biovista, BioXcel Therapeutics 등 10개
6	새로운 후보물질 발굴	카이팜, 에임블, 스탠다임, 바오밥에이바이오, 넷타겟, 파로스아이바이오, 아론티어, 에이조스바이오, 닥터노아바이오텍	A2A Pharmaceuticals, Abalone Bio, AbCellera 등 79개
7	후보물질 최적화/유효성 검증	-	Accutar, Acellera, Coral Genomics 등 13개
8	약물설계	팜캐드	Ardigen, DeepMatter, Fetch Biosciences 등 14개
9	전임상 실험 설계	-	BenchSci, Desktop Genetics
10	전임상 실험 수행	-	Arctoris, Berkeley Lights, Emerald Cloud Lab, Strateos, Synthace
11	임상 설계	-	BullFrog AI, GNS Healthcare, Intelligencia 등 9개
12	임상 환자 모집	-	Antidote.me, Clinithink, Deel Lens 등 9개
13	임상 최적화	라인웍스	AiCure, Athelas, Biofourmis 등 14개
14	데이터 공개	엔트	Deep Intelligent Pharma, SciNote
15	RWD 분석	-	Aetion, Concerto HealthAI
계		28개사	222개사

*주 : 주사업 기준으로 비즈니스 모델 분류

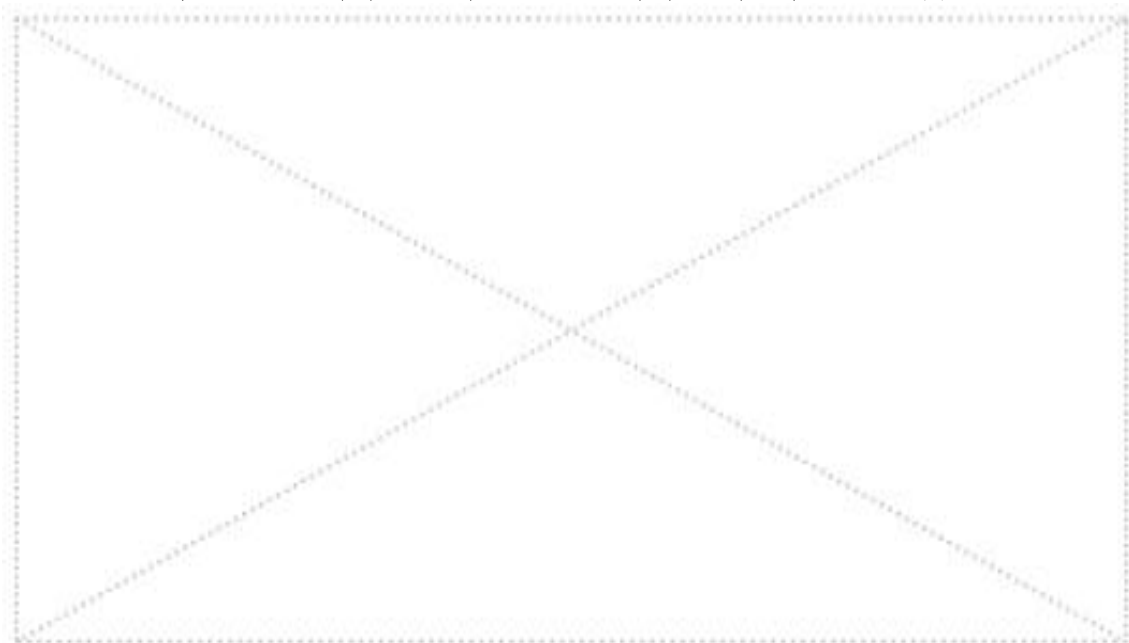
*출처 : Simon Smith(2021. 02.), 230 Startups Using Artificial Intelligence in Drug Discovery,
각사 보도자료 참고, 재구성

2. 인공지능 활용 신약개발 시장

가. 세계시장

- (시장규모 및 동향) 세계 인공지능 활용 신약개발 시장은 2019년 473.4백만 달러에서 연평균 28.63% 성장하여 2027년 3,548.6백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨

<그림 II-7> 세계 인공지능 활용 신약개발 시장규모 현황 및 전망

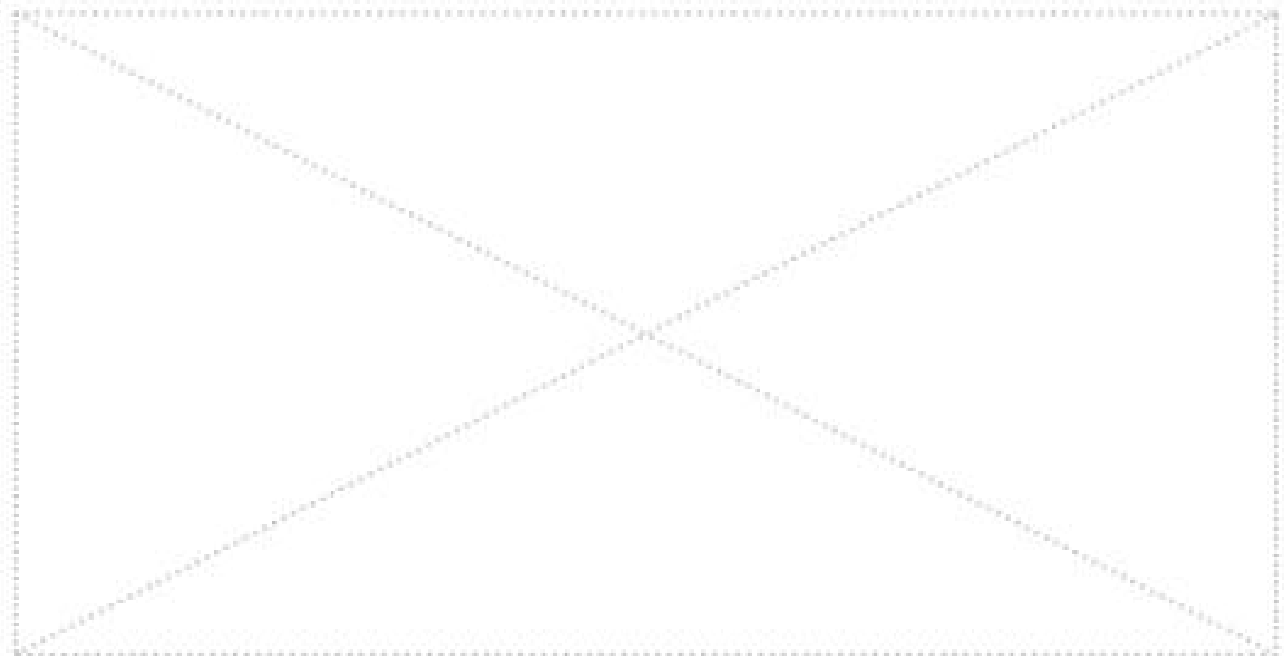


*출처 : Grand View Research. Inc., Artificial Intelligence in Drug Discovery Market Analysis and Segment Forecast to 2027, 2021. 재구성

- (인공지능 활용 증가) 신약 개발 관련 전체 비용 절감, R&D 생산성 향상 등을 위해 신약개발 분야의 인공지능(AI) 플랫폼 수요와 활용이 증가하고 있음
 - AI 플랫폼의 데이터 마이닝, 사용자 정의 기능과 같은 표준 프로세스를 수행하기 위한 다양한 옵션의 가용성으로 인해 약물 개발 프로세스에서 인공지능 활용이 증가하고 있음



<그림 II-8> 세계 인공지능 활용 신약개발 시장 영역별 현황(2019)



전체		473.4
지역	North America(북미)	281.2
	Europe(유럽)	90.9
	Asia Pacific(아시아태평양)	87.8
	Latin America(라틴아메리카)	8.8
	MEA(중동 및 아프리카)	4.7
치료 영역	Oncology(종양학)	125.4
	Neurodegenerative Disease(신경퇴행성 질환)	97.2
	Cardiovascular Disease(심혈관 질환)	84.8
	Metabolic Disease(대사성 질환)	93.4
	Infectious Disease(감염성 질환)	40.2
	Other(기타)	32.4
적용 분야	Drug Optimisation&Repurposing(약물 최적화 및 용도 변경)	257.7
	Preclinical Testing(전임상 테스트)	139.4
	Other(기타)	76.3

*출처 : WHO, U.S. CDC, FDA, NIH Journals, Investor Presentations, Primary Interviews, Grand View Research Analysis

- ‘약물 최적화 및 용도 변경’ 부문이 세계시장에서 54.4%(‘19년 기준)의 가장 큰 점유율을 차지하는데, AI 플랫폼은 신체에 대한 약물의 독성 영향을 식별하여 부작용 가능성을 줄이는 효과적인 방법을 제공함

- 또한, 기존 약물의 대체 응용 프로그램을 식별하는데 사용할 수 있어, 이는 제약 회사가 제품 포트폴리오를 다양화하고 약물의 사소한 변경을 통해 대체 요법을 생산하는 데 도움이 될 수 있음
 - 치료 영역을 기준으로, '종양학'이 세계시장에서 26.5%('19년 기준)의 가장 큰 점유율을 차지하는데, AI는 암의 조기발견에 중요한 역할을 하며, 개인 맞춤형 암 치료의 효과적인 대안이 됨
 - 유전자 돌연변이를 식별하도록 설계된 AI 플랫폼은 종양 전문의가 효과적인 개인화 치료법을 설계하는 데 도움이 되어, 인공지능 활용 신약개발 시장 성장을 촉진하는 주요 요인이 됨
 - 전염병 응용 분야는 예측 기간('19~'27) 동안 시장에서 31.4%의 높은 성장률로 확장될 것으로 예측되며, AI 플랫폼의 대량 샘플 데이터의 핵심 패턴 및 포인트 식별능력으로 향후 전염병에 대한 AI 기반 신약개발은 고속 성장할 것으로 전망됨
- (북미, 가장 높은 시장 점유율) 북미 지역은 세계 인공지능 활용 신약개발 시장에서 59.4%('19년 기준)의 가장 높은 시장 점유율을 차지함
- 미국에 거대 인공지능 활용 제약회사들이 많이 소재하고 있는 데서 기인함
- (아시아태평양, 가장 빠른 성장률) 아시아 태평양 지역은 세계 인공지능 활용 신약개발 시장에서 예측 기간('19~'27) 동안 32.1%의 가장 빠른 연평균성장률을 보일 것으로 전망됨
- 인도와 중국에서 신약개발을 위한 신기술 적용이 증가하고 있으며, 제약 역량 강화에 대한 관심이 높아지고 있음
- (주요업체) 세계 인공지능 활용 신약개발 시장 주요업체는 IBM Watson(미국), Exscientia(영국), GNS Healthcare(미국), Alphabet(DeepMind)(영국), Benevolent AI(영국), BioSymetrics(미국), Euretos(미국), Berg Health(미국), Atomwise(미국), Insitro(미국), Cyclica(캐나다) 등이 있음



□ 시장 성장요인

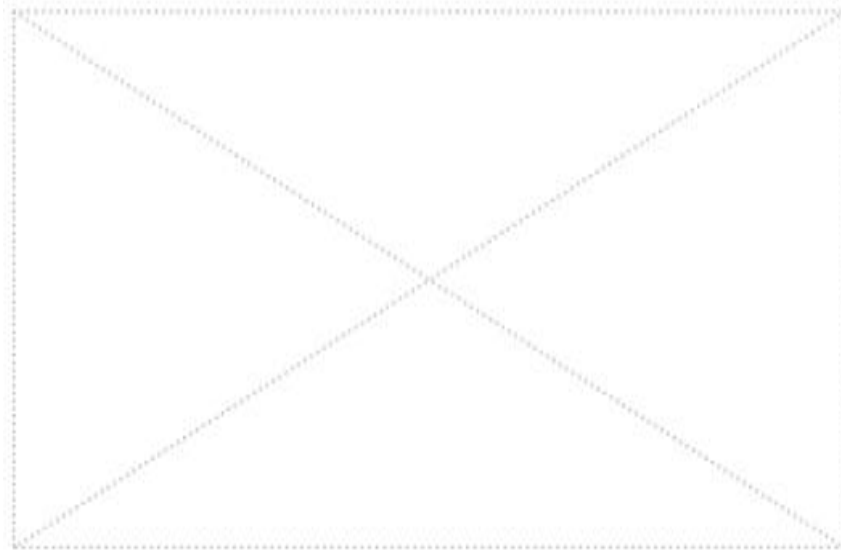
- (환자 건강 데이터 대량 유입) 전 세계적으로 환자 건강과 관련된 디지털 데이터의 유입이 크게 증가함에 따라, 인공지능 기술을 이용한 데이터 관리 및 통합이 중요해짐
 - 매일 생성되는 의료정보의 양이 매우 방대하기 때문에, 의료 제공을 개선하기 위해 데이터를 캡처, 저장 및 분석하는 것이 중요함
- (의료비용 절감 필요) 인구 고령화에 따라 경제성장보다 의료비용이 빠르게 증가하면서 의료 지출 절감의 압력이 세계적으로 증가하고 있음
 - 의료 IT의 발전은 약물발견 및 임상 결과 개선으로 의료비용 절감의 기회를 제공하며, 이는 AI 기술에 대한 수요를 증가시킴
 - 의료산업의 많은 주요 업체들은 약물 개발 비용을 줄이기 위해 인공지능 기반 프로세스를 활용하고 있음
- (만성질환 유병률 증가) 만성질환의 유병률 증가는 질병의 초기 단계에 대한 이해와 진단의 필요성을 높인 주요 요인으로, 인공지능의 딥러닝 기술을 활용하면 과거 건강 데이터를 기반으로 질병을 쉽게 예측하고, 신약개발 프로세스를 단순화하는 데 도움이 됨
- (맞춤형 의료 수요 확대) 인공지능과 인간지능 데이터 분석의 결합은 맞춤형 의료 및 신약개발 접근에 대한 다양한 기회를 제공함

□ 시장 저해요인

- (의료 전문성 부족) 인공지능 기술을 갖춘 의료 전문의가 부족하여, 의료의 질이 떨어질 수 있음
- (개발 도상국 선진인프라 부족) 의료비 절감으로 인해 의료 인프라가 충분히 개발되지 않은 일부 저개발국의 경우, 신약개발 과정에서의 인공지능 기술 활용이 제한될 수 있음

- (적용 분야별 시장 동향) 세계 인공지능 활용 신약개발 적용 분야별 시장 동향을 살펴보면, ‘약물 최적화 및 용도 변경’부문이 2019년 257.7백만 달러로 가장 큰 비중을 차지함
- 이는 제약회사의 치료범위 확장에 있어 인공지능 플랫폼의 채택이 증가한 데서 기인함

<그림 II-9> 세계 인공지능 활용 신약개발 적용 분야별 시장 동향



*출처 : WHO, U.S. CDC, FDA, NIH Journals, Investor Presentations, Primary Interviews, Grand View Research, 재구성

- (약물 최적화 및 용도 변경) 약물 최적화 및 용도 변경 부문은 2019년 257.7백만 달러에서 연평균 27.81% 증가하여 2027년 1,880.8백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨
 - 인공지능 플랫폼은 기존 의약품의 대체재를 식별하고, 기존 제품을 수정하여 대체재를 생산하며 제품 범위를 확장하는 데 도움이 됨
 - 또한, 인체에 대한 약물의 독성 영향을 감지하고 부작용을 낮추는 데 도움이 됨
 - AI 알고리즘의 사용 증가는 희귀 및 신형 질병에 대한 새로운 치료 옵션을 발견하는 비용 효율적인 방법이기 때문에, 약물 용도 변경에 유용할 수 있음
- (전임상 테스트) 전임상 테스트 부문은 2019년 139.4백만 달러에서 연



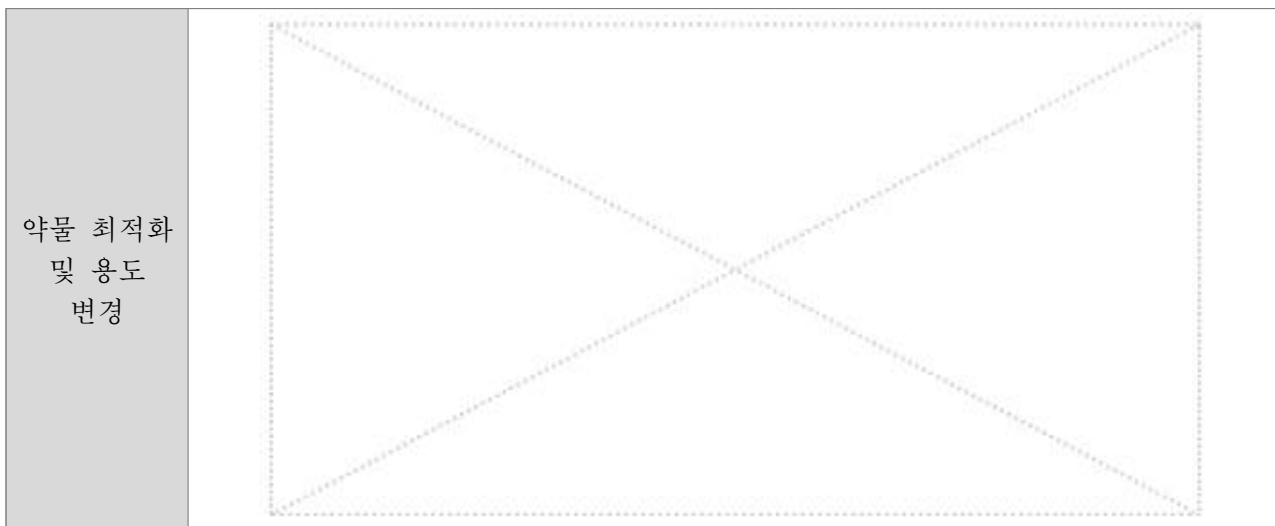
평균 27.44% 증가하여 2027년 993.6백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨

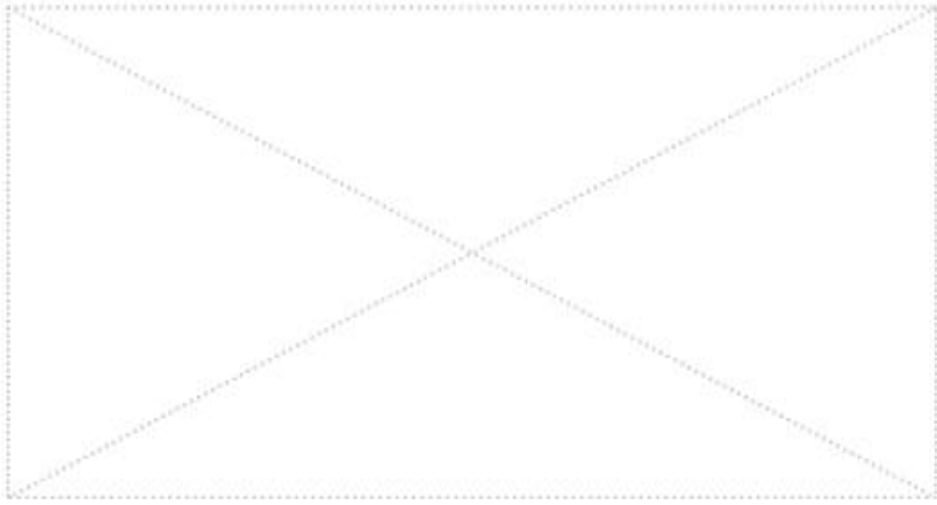
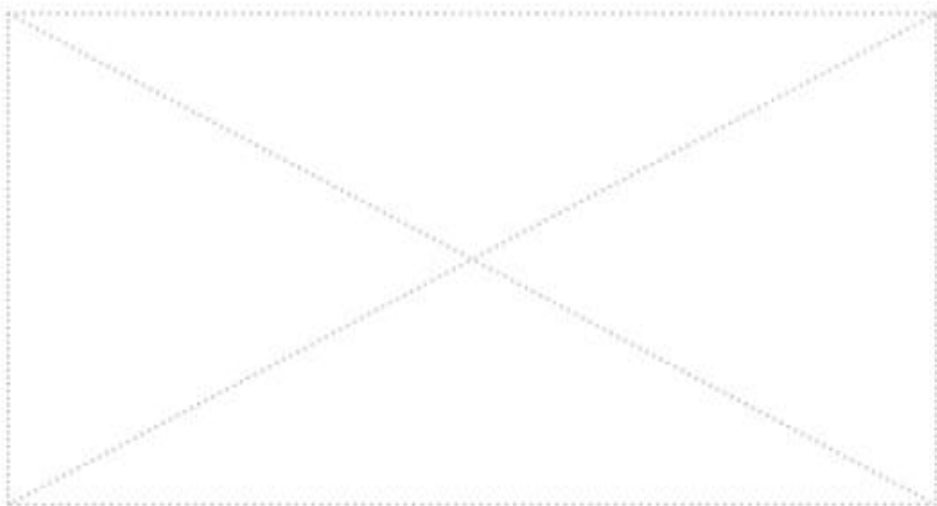
- AI 알고리즘 기반 모델은 동물 모델에 비해 인간의 생리적 반응을 정확하게 분석하는 데 도움이 되어, 간접비와 운영 비용을 줄이는 효과가 있어 전임상 테스트에서 활용이 증가하고 있음

○ (기타) 그 외 기타 부문은 2019년 76.3백만 달러에서 연평균 31.03% 증가하여 2027년 674.2백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨

- 기타 부문에는 출시 후 분석 및 약물 승인 프로세스에서의 인공지능 사용이 포함됨
- 약물 개발과 승인은 코로나19 팬데믹 상황에서 상당한 주목을 받고 있는데, 많은 기업들은 주요 제약사와의 제휴를 통해 단기간에 비용 효율적으로 약물을 개발하여 FDA 승인을 받는 것을 목표로 하고 있음

<표 II-26> 세계 인공지능 활용 신약개발 적용 분야별 시장규모 현황 및 전망



전임상 테스트	
기타	

*출처 : WHO, U.S. CDC, FDA, NIH Journals, Investor Presentations, Primary Interviews, Grand View Research, 재구성

- (치료 영역별 시장 동향) 세계 인공지능 활용 신약개발 치료 영역별 시장 동향을 살펴보면, ‘종양학’ 부문이 2019년 69.0백만 달러로 가장 큰 비중을 차지함

<그림 II-10> 세계 인공지능 활용 신약개발 치료 영역별 시장 동향



*출처 : WHO, U.S. CDC, FDA, NIH Journals, Investor Presentations, Primary Interviews, Grand View Research, 재구성

○ **(종양학)** 종양학 부문은 2019년 153.4백만 달러에서 **연평균 23.03%** 성장하여 **2027년 674.2백만 달러** 규모에 달할 것으로 전망됨

- 전 세계적으로 암 치료에 대한 부담은 지속적으로 증가하고 있음
 - WHO는 2018년에서 2040년 사이 전 세계 암 발병률이 63% 증가할 것으로 예상함
- AI 플랫폼은 과학자들이 암세포와의 약물 상호 작용을 식별하고, 약물 조작 및 투여량을 지원·연구하는데 도움이 되며, 신생 항원을 식별하고 화학요법 약물에 대한 내성을 예측하는 데 폭넓게 적용됨

○ **(신경퇴행성 질환)** 신경퇴행성 질환 부문은 2019년 97.2백만 달러에서 **연평균 29.36%** 성장하여 **2027년 780.7백만 달러** 규모에 달할 것으로 전망됨

- 파킨슨병, 알츠하이머병과 같은 질병은 진단이 어렵고 치료 옵션이 제한적인데, AI 플랫폼은 이를 이해하고, 더 나은 진단을 제공하며 치료법을 개발하는 데 도움이 됨
 - AI는 기존 약물의 용도를 변경하거나, 초기에 다른 질병 치료를 목표로 했다가 실패한 분자를 강조 표기하는데 사용할 수 있는 대량의 데이터를 읽고 분석할 수 있음

○ **(심혈관 질환)** 심혈관 질환 부문은 2019년 84.8백만 달러에서 **연평균**

29.52% 성장하여 2027년 688.4백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨

- 심혈관 질환은 사망의 주요 원인 중 하나임(전 세계 사망의 약 31%가 심혈관 질환에 의해 발생, WHO)
- 원인 인자가 매우 다양하여 진단 스펙트럼이 넓고 적절한 진단과 치료가 어려운 질병인데, AI는 의사와 과학자가 데이터 기반 임상 프로세스를 개발하고 더 나은 결과를 생성할 수 있도록 도움을 줄 수 있음

○ **(대사성 질환)** 대사성 질환 부문은 2019년 93.4백만 달러에서 **연평균 29.39% 성장하여 2027년 752.3백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨**

- 대사성 질환은 광범위하여 근본 원인을 구체적으로 식별하는 것이 쉽지 않고, 개인의 유전적 특성에 따라 유사한 장애가 전혀 다른 원인을 가질 수 있어 특정 치료법을 개발하는 것이 어려움
- 기업들은 대사 장애를 해결하기 위한 이중특이성 약물을 개발하는데 AI 플랫폼을 활용하고 있음
 - 표적 약물 쌍 또는 특정 약물 후보를 식별하거나, 당뇨병과 같은 특정 대사 질환의 발병을 예측하는데 주로 사용함

○ **(감염성 질환)** 종양학 부문은 2019년 40.2백만 달러에서 **연평균 30.87% 성장하여 2027년 354.9백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨**

- AI 머신러닝과 딥러닝 기술은 전염병의 발병을 예측하고 감수성 인구를 식별하며, 신규 약물 개발에 사용할 수 있음

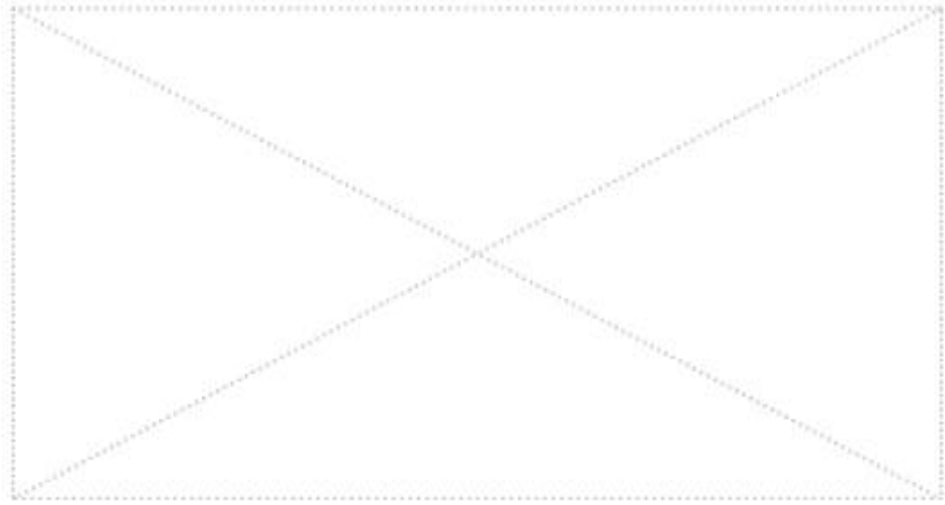
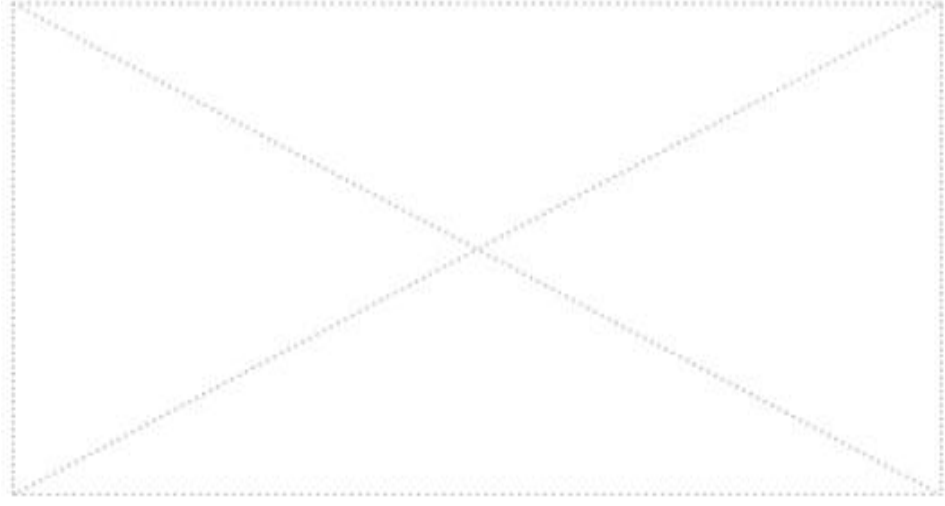
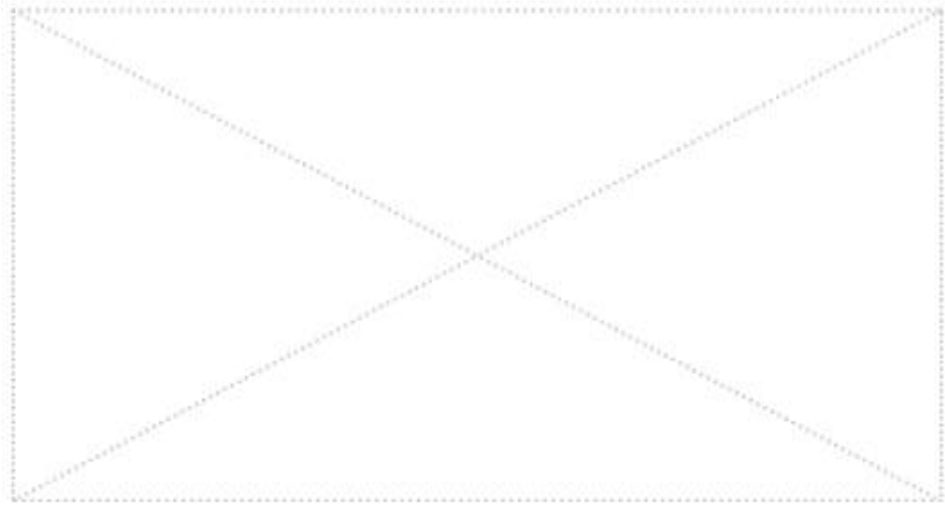
○ **(기타)** 기타 부문은 2019년 32.4백만 달러에서 **연평균 33.52% 성장하여 2027년 298.1백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨**

- 기타 부문에는 면역종양학, 위장병학 및 기타 치료 영역이 포함됨

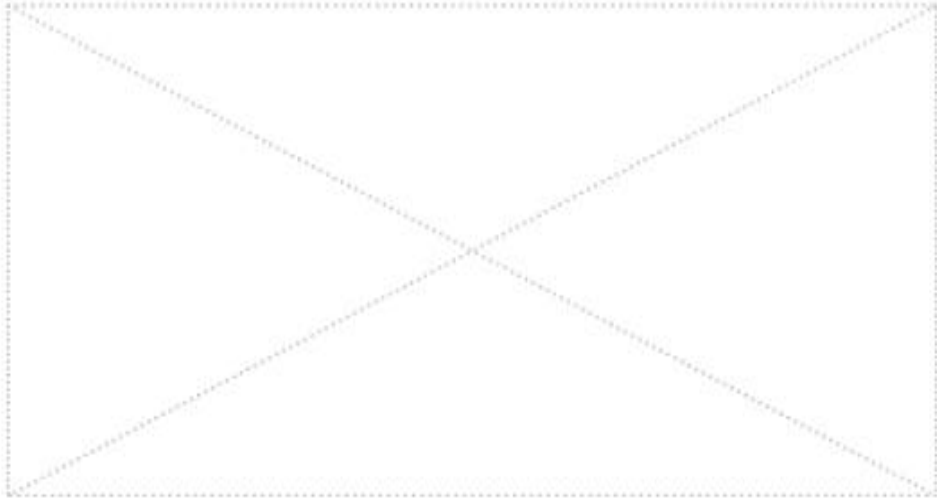
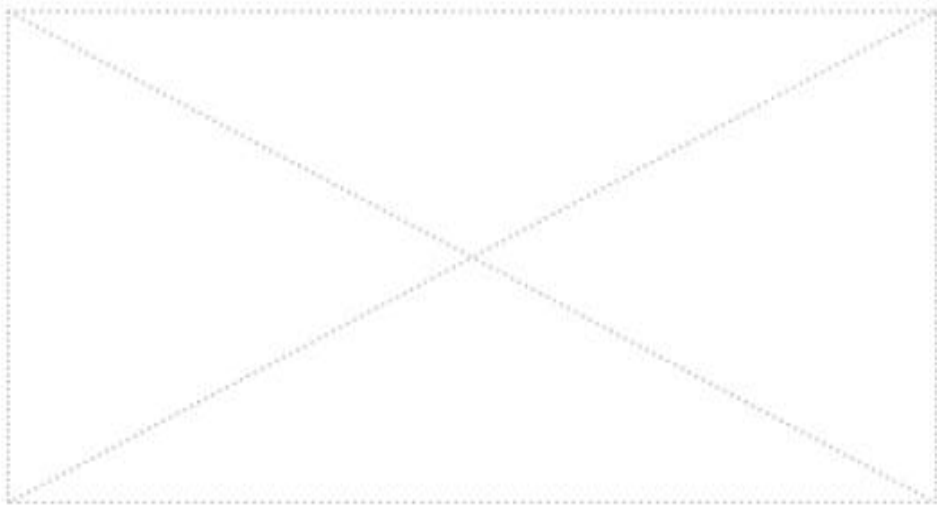
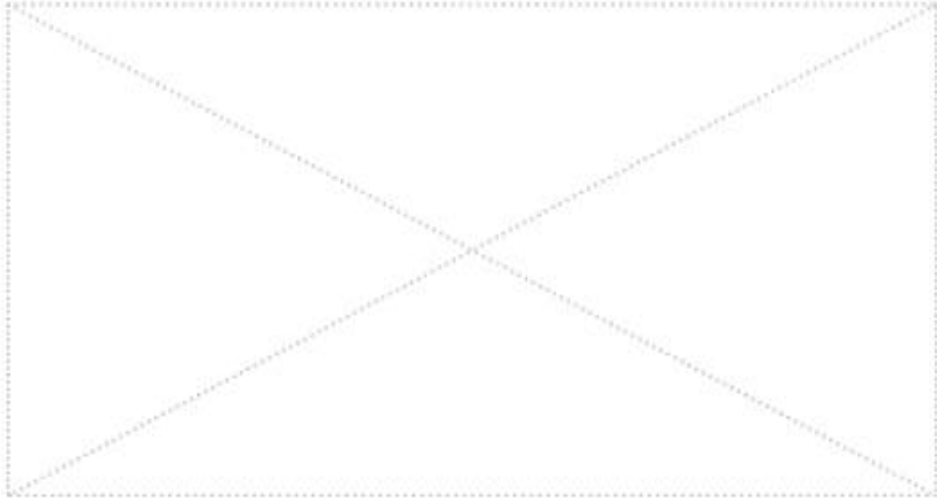
<표 II-27> 세계 인공지능 활용 신약개발 치료 영역별 시장규모 현황 및 전망

*출처 : WHO, U.S. CDC, FDA, NIH Journals, Investor Presentations, Primary Interviews, Grand View Research, 재구성



종양학	
신경퇴행성 질환	
심혈관 질환	



<p>대사성 질환</p>	
<p>감염성 질환</p>	
<p>기타</p>	

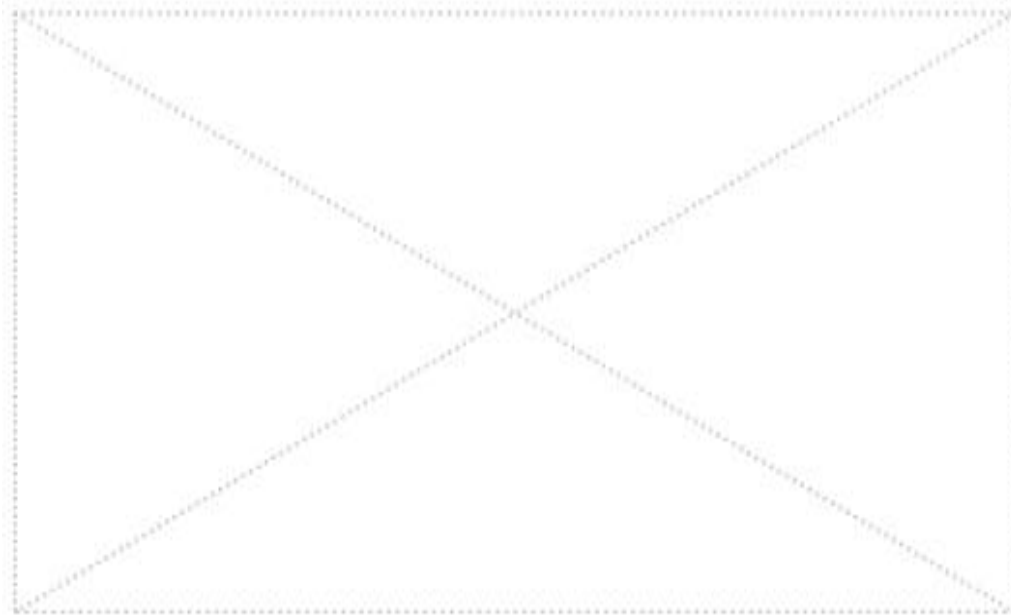
(세계 지역별 시장 동향) 세계 인공지능 활용 신약개발 지역별 시장 동향



을 살펴보면, ‘북미’ 지역이 2019년 281.2백만 달러로 가장 큰 비중 (59.4%)을 차지함

- 가장 빠르게 성장하는 지역으로는 ‘아시아 태평양’ 지역이 연평균 증가율 31.35%로 높은 성장률을 보이며 부상하고 있음

<그림 II-11> 세계 인공지능 활용 신약개발 지역별 시장 동향



*출처 : WHO, U.S. CDC, FDA, NIH Journals, Investor Presentations, Primary Interviews, Grand View Research, 재구성

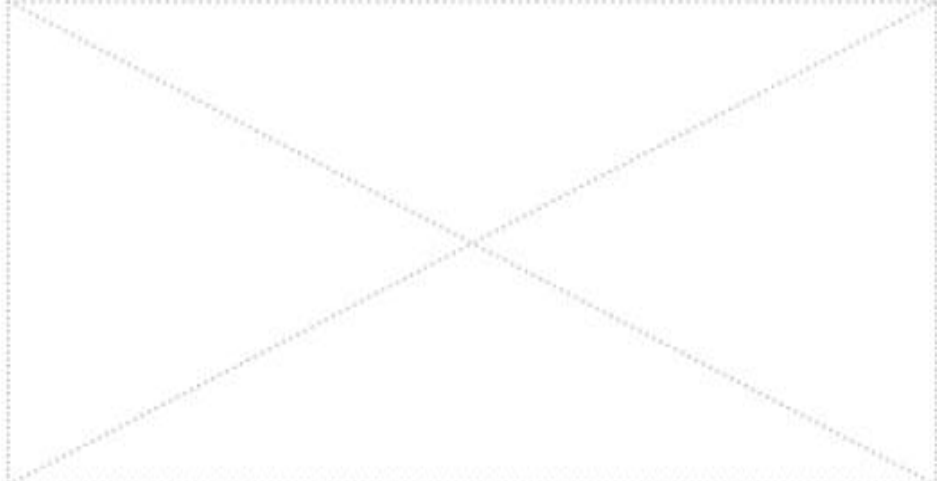
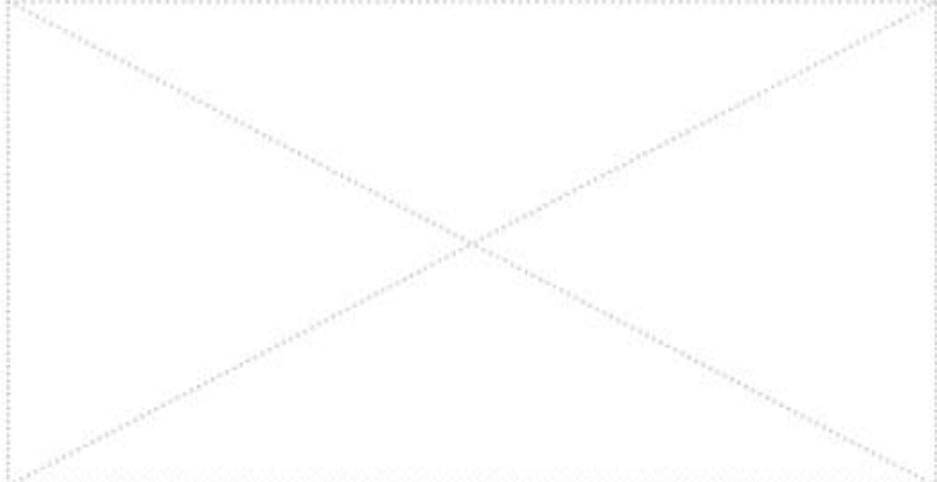
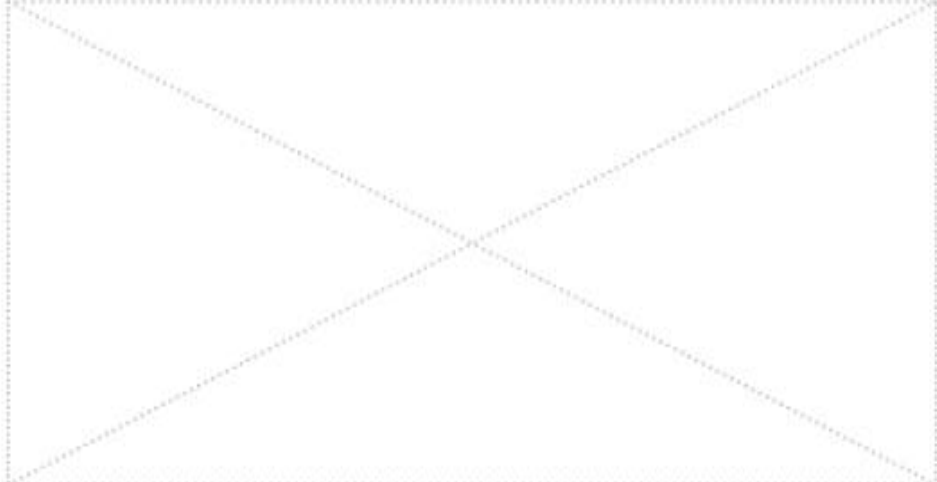
- (북미) 북미 지역은 2019년 281.2백만 달러에서 연평균 27.36% 성장하여 2027년 1,976.6백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨
 - 북미 지역의 강력한 경제성장과 시설이 완비된 병원, 연구센터, 대학 및 의료기기 제조업체의 존재가 신제품 개발을 촉진하는 요인임
 - 기술의 발전과 여러 정부 이니셔티브가 생명 과학 분야에서 디지털 플랫폼에 채택을 증가시키고 있음
- (유럽) 유럽 지역은 2019년 90.9백만 달러에서 연평균 27.9% 성장하여 2027년 672.5백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨
 - 유럽의 의료시스템은 만성질환 발병률 증가, 고령 인구 증가 등으로 인한 의료 시설에 대한 수요 증가로 과중한 부담을 안고 있음

- 의료분야에서 인공지능에 대한 투자 증가가 시장을 주도할 것으로 예상됨
 - 영국 정부는 AI에 3억 달러를 투자한다고 발표(2019. 10.)했으며, 이는 의료의 질을 개선하기 위해 공공 의료 시스템에서 활용될 것으로 예상됨
- (아시아 태평양) 아시아 태평양 지역은 2019년 87.8백만 달러에서 연평균 31.35% 성장하여 2027년 809.1백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨
 - 신약개발을 위한 IT 인프라 개선, AI 스타트업의 증가, 첨단 기술 채택의 점진적 증가, AI 기술에 대한 정부 이니셔티브 증가 등이 시장성장을 촉진하고 있음
- (라틴아메리카) 라틴아메리카 지역은 2019년 8.8백만 달러에서 연평균 27.41% 성장하여 2027년 63.2백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨
 - 새로운 기술을 채택하려는 정부의 준비로 의료분야에서 인공지능의 잠재적 시장 성장이 기대됨
 - 국제개발연구센터(IDRC)와 Oxford Insights에 따르면, 우루과이, 멕시코, 브라질 정부가 AI 도입 준비가 된 상위 50개국 중 하나로 선정됨
- (중동 및 아프리카) 중동 및 아프리카 지역은 2019년 4.7백만 달러에서 연평균 25.22% 성장하여 2027년 27.3백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨
 - 호흡기 질환, 심장 질환과 같은 만성질환의 유병률 증가, 노인 인구 증가에 따른 개선된 의료시설에 대한 수요가 증가하고 있음
 - UAE 정부는 통합 디지털 시스템을 사용하여 의료부문에 빠르고 효율적인 솔루션을 제공하고, 만성 및 위험한 질병의 영향을 최소화하는 UAE AI 전략을 시작함(2017. 10.)

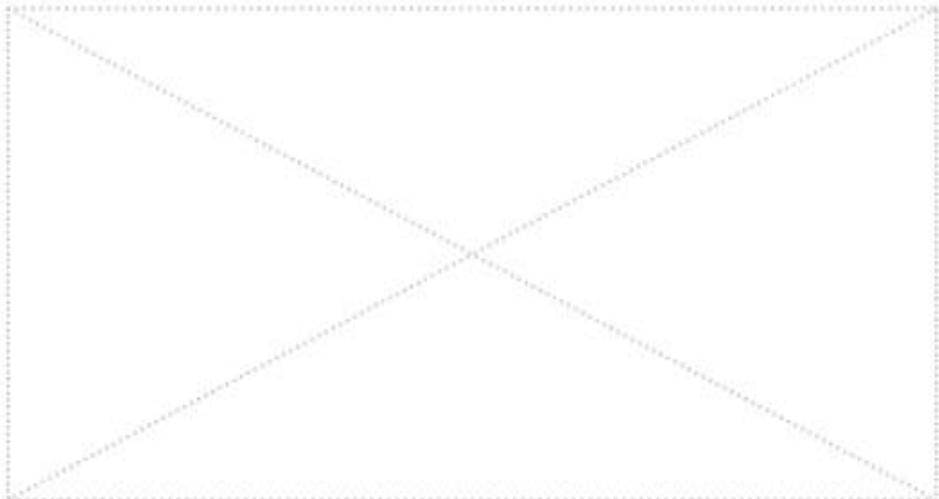
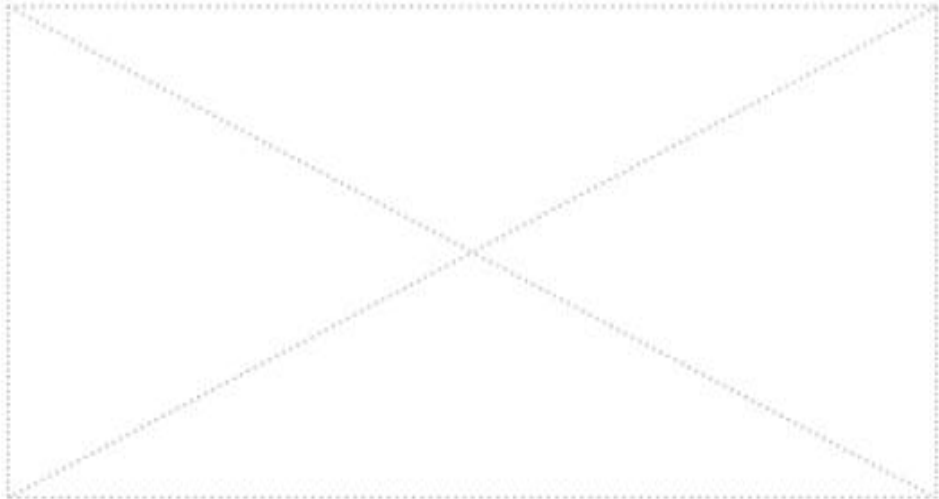
<표 II-28> 세계 인공지능 활용 신약개발 지역별 시장규모 현황 및 전망

*출처 : WHO, U.S. CDC, FDA, NIH Journals, Investor Presentations, Primary Interviews, Grand View Research, 재구성



북미	
유럽	
아시아 태평양	



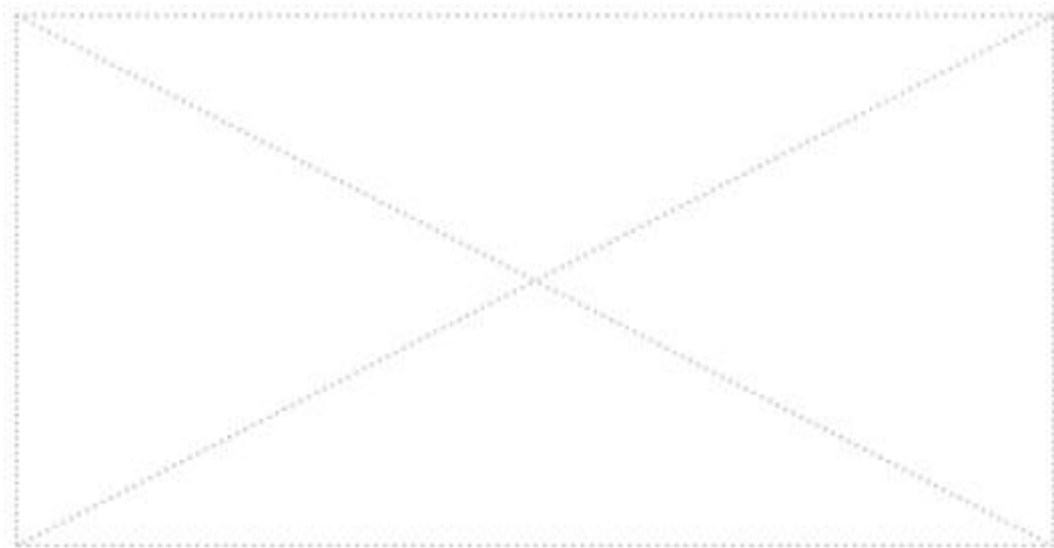
라틴아메리카	
중동 및 아프리카	



나. 국내시장

- (시장규모 및 동향) 국내 인공지능 활용 신약개발 시장은 2019년 6.8백만 달러에서 연평균 31.53% 성장하여 2027년 60.9백만 달러 규모에 달할 것으로 전망됨

<그림 II-12> 국내 인공지능 활용 신약개발 시장규모 현황 및 전망



*출처 : Grand View Research, Inc., Artificial Intelligence in Drug Discovery Market Analysis and Segment Forecast to 2027, 2021. 재구성

- (공공·민간 투자 증가) 국내 정부는 향후 3년간 인공지능을 활용한 혁신 의약품 개발 지원을 위해 258억 원(USD 21.7백만 달러)을 지출할 것을 발표함('19. 06.)
- 국내 AI는 종전 신약후보물질 도출을 넘어 정보통합, 질병 기전 이해, 데이터·모델 생성, 약물 재창출, 후보물질 검증, 임상디자인, 임상시험 최적화, 데이터 공개, 임상 환자 모집 등으로 활용범위를 빠르게 넓혀가고 있음
- 국내 제약 바이오 업계에 따르면, 한미사이언스와 유한양행, SK케미칼, 대웅제약, 보령제약, JW중외제약, 한독 등이 AI 플랫폼을 이용해 신약 개발을 진행하고 있는 주요 업체임

제3절 국내외 기술 동향

- 신약후보물질 탐색뿐 아니라 임상, 인허가 및 신약개발 의사결정 등 신약 개발 관련 다양한 분야에 인공지능 활용을 시도
- 국내 제약사들은 직접 개발보다 외부 AI 개발업체와의 사업연계를 선호
 - 자사 데이터 부족 및 경제적 부담을 극복
- 해외 제약사들은 코로나19 상황을 기회로, 인공지능을 활용한 약물 재창출을 통해 대안 약물을 제시 중

1. 기술개발 및 기업 동향

- (신약 임상개발 및 사용에 AI 활용) 최근 신약 탐색뿐만 아니라 임상개발 및 허가·사용 등 광범위한 범위에서 빅데이터 및 인공지능 활용 등을 시도하고 있음
- 신약후보물질 탐색 과정뿐만 아니라, 정보탐색, 전임상, 임상, 제도, 인허가, 사용, 신약개발 의사결정 등 여러 분야에서 다수의 인공지능 활용모델들을 시도하고 있음
 - 전임상 단계에서는 전임상실험 설계, 독성 예측, 전임상 시험 자동화 등에 활용되고 있음
 - 임상 단계에서는 임상시험 설계, 임상시험 피험자 모집, 임상시험 최적화, 계량약리학 분야 등에서 인공지능이 활용되고 있음
 - 신약 임상 단계에서 인공지능을 적용하는 분야는 임상시험 찾기, 임상시험 환자 모집, 복약이행 등에 활용되고 있음
 - 그 외 스마트제약공장과 같은 제조단계, Real-World Evidence 기반 FDA의 인허가 의사결정, 인공지능 기반 약물 감시(Pharmacovigilance), 신약개발 의사결정 등에 활용됨



- (신약개발 단계별 AI 및 데이터사이언스 적용) 신약개발의 다양한 단계에서 AI 및 데이터사이언스 기술을 적용하고 있음
 - (ADMET* 평가) 컴퓨팅 도구/AI를 활용한 ADMET 예측은 개발 비용을 절감하고 임상 단계로 나아갈 약물의 수도 줄일 수 있음
 - *Absorption(흡수), Distribution(분포), Metabolism(대사), Excretion(배설), Toxicity(독성)
 - (가상 스크리닝) 딥러닝 데이터 사이언스는 가상 스크리닝을 진화시켰으며, 구조 기반 가상 스크리닝(Structure-based virtual screening, SBVS)이 가장 일반적임
 - (Atomwise(미국)) Atomwise는 종양학 관련 100억 개의 분자를 AI 기반 가상 스크리닝하는 이니셔티브를 개시함
 - (단백질-단백질 상호 작용) 심층신뢰망 (Deep Belief Network)을 이용한 약물과 단백질 간의 타겟 및 오프타겟적 외 상호작용을 예측함
 - 단백질-리간드 도킹 예측을 위해 AI를 사용하여 알려진 약물의 패턴과 약물 표적과의 상호작용을 탐색하여 승인된 분자의 용도를 변경할 수도 있음
 - ※ (예) Deep Q-network (DQN) Docking 프로그램
 - (단백질 접힘 예측) 폴리펩타이드 시퀀스의 데이터셋을 활용한 AI 기반 3D 접힘 예측 알고리즘을 통해 분자 docking의 필수적인 단백질 접힘과 구조를 예측함
 - ※ (예) DeepMind의 AlphaFold
 - (De Novo 디자인) 자연어 분류(Recurrent Neural Network) 및 생성적 심층신경망 기술(generative Deep Neural Network)을 통해 de novo 약물 설계가 가능함
 - AI를 활용한 특정한 기대 결합(binding) 또는 모티브 기능을 가진 단백질의 분자를 설계함
- (신약후보물질 발굴에 AI 활용) 인공지능(AI)은 블록체인, 양자컴퓨터

등 신흥, 보완적 기술과 결합하여 신약후보물질 발굴에 활용되고 있음

○ (AI와 블록체인) 블록체인은 상업 기밀을 밝히지 않고 여러 제약 센터 또는 연구센터 간에 데이터를 안전하게 공유하기 위해 인공지능과 함께 점점 더 많이 사용되고 있음

○ (AI와 양자컴퓨팅) AI과 함께 분자 도킹을 예측하고 전통적인 계산 방법으로 설계하기 어려운 새로운 단백질/펩타이드를 설계하는 데 사용됨

○ (AI와 빅데이터) AI는 새로운 타겟과 선도물질을 발견하는 데 있어 모든 잠재력을 실현하기 위해 통합 다차원 데이터(RWE-유전형, 표현형, 약물 반응 프로파일)와 동기화하여 사용되고 있음

- AI는 대규모 의료 데이터 수집 분석에 주도적인 역할을 함

○ (AI와 Automation Chemistry) 인공지능으로 설계된 화합물을 자동화된 합성 화학과 결합하여 새로운 선도물질의 합성과 후보물질발굴을 가속화 할 수 있음

○ (AI와 대용량 스크리닝/이미징) 표현형을 변조하는 약물과 타겟을 식별하는 것을 목표로 하는 HCS(High Contents Screening) 데이터와 함께 AI를 활용함

- 이미지 기반 프로파일링 실험과 표현형 검사는 테스트되지 않은 세포 유형에 대한 약물 효과를 예측하고 약물과의 반응성을 예측할 수 있음

□ (백신 및 치료제 개발에 AI 활용) 백신과 치료제 개발에 사용되는 바이러스 단백질 구조 분석, 유전자 분석 등 관련 데이터 분석에 AI 기술을 활용하여 임상 및 제품 개발에 소요되는 시간과 비용을 절감함

○ AI는 바이러스성 단백질 구조를 파악해 백신 및 치료제 성분을 제안하고, 연구진들이 신속하게 선행연구를 스크리닝하는 것을 지원하는 등 백신과 치료제 개발에 AI 활용 시 상당한 시간과 비용 절감이 가능함



<표 II-29> AI 기반 신약 및 백신 개발 분야 AI 활용사례

구분	활용사례	
해외	미국 구글 딥마인드	• 의료용 AI ‘알파폴드(AlphaFold)’를 투입하여 치료법 개발하고, 수십년간의 기계학습 진보결과와 단백질 접힘에 대한 연구에 활용
	영국 엑시엔타	• 임상시험에 들어간 AI 설계 약품 분자를 발표, 알고리즘을 통해 분자구조 개발시간 단축(5년→1년)
	호주 플린더스 대학교	• AI, 첨단 제조 및 클라우드 컴퓨팅을 포함한 최신 기술을 활용하여 코로나19 백신 후보를 개발하고 테스트
국내	디어젠	• AI 분석을 통해 HIV치료제가 코로나19에도 효과가 있음을 규명
	아론티어	• 신약 후보물질 발굴을 위한 AI 플랫폼 구축
	신테카바이오	• 유전체 빅데이터 기반 AI 기술을 활용한 정밀의료 신약개발, 개인유전체맵플랫폼 기술(PMAP) 보유
	스탠다임	• 인공지능 기반 선도 물질 최적화(AI-based lead optimization) 플랫폼인 '스탠다임 베스트' 등 자체 개발 AI 기술을 바탕으로 항암, 비알콜성 지방간 등 파이프라인 개발

*출처 : 경기도경제과학진흥원, 바이오헬스케어 분야 AI 활용방안과 경기도 시사점, 2020. 12.

□ 국내 인공지능 활용 신약개발 주요 기업

○ 국내 인공지능 전문기업은 신약개발 관련 독자적인 데이터베이스와 기술을 이용하여 AI 플랫폼(솔루션)을 만들고, AI를 활용한 신약개발 연구를 수행하고 있음

- 기존 신약개발 방법에서 효율성(개발 기간 단축)을 높이고, 안전성을 확인하기 위한 제약사들의 관심이 증가하며 향후 더욱 활발해질 것으로 예측됨

○ 벤처기업 및 대학 등에서 인공지능 프로그램을 개발 중이며, 국내 제약사들은 자사 데이터 부족·경제적 부담 등으로 인해 직접 개발보다 외부 AI 개발업체와의 사업연계를 선호함

- 신약개발 과정에서 인공지능 기술을 적용하여 인공지능 전문기업과 제약사의 파트너십을 통해 의약품 개발 파이프라인 확대에 기여할 수 있음

- 국내 AI 기업으로는 스탠다임, 신테카바이오, 에이조스바이오 등에서 인공지능 플랫폼 개발 진행 중으로 관련 바이오벤처는 증가 추세이나, 국내 공공 DB 활용의 어려움* 및 제약사들의 도입 기피 등을 애로사항으로 제기됨
*데이터 소유권·개인정보 문제 등으로 인해 국내 공공 DB 활용이 어려워, 국내 벤처기업 임에도 주로 외국의 공공·민간DB를 활용
- 국내 제약사들은 자체보유 데이터가 부족하고 경제적 부담 등으로 도입 실적이 저조하나, 최근 대형제약사를 중심으로 인공지능 활용 착수*
*CJ헬스케어-신테카바이오 공동으로 면역항암제 개발 착수
동아에스티-아주대 공동으로 환자의 진료기록을 활용한 치료제 개발 착수

<표 II-30> 국내 주요 AI 활용 신약개발 기업 보유 기술

기업명	인공지능 플랫폼
닥터노아바이오텍	• ARK : 통합형 의약학 네트워크, 약물 유전체, 환자 유전체 DB를 이용하여 신규타겟 발굴, 단일약물(복합제) 구조예측 플랫폼
디어젠	• Dr.UG : 유전체 데이터 분석, 바이오마커 예측, 후보물질 발굴 및 최적화에 특화된 딥러닝 기술 기반 플랫폼
스탠다임	• Standigm Best : Drug discovery space를 탐색하여 원하는 특성을 만족시키는 새로운 화합물 생성 • Standigm Insight : 잠재 목표 예측을 통해 hidden indication을 발견함으로써 복합제 발굴
신테카바이오	• NEOscan™ : 암 유전체 분석과 AI 딥러닝 기술을 기반으로, 환자의 면역시스템을 활성화시켜 암을 치료할 수 있는 신생항원 펩타이드 예측 • GBLscan™ : 초기단계 임상시험에서 확보된 유전체 데이터를 사용하여 약효예측 바이오마커 발굴 • Deep-matcher™ : AI 기반 유효물질 도출과 최적화를 통한 선도물질 발굴, 2차 타겟과 오프타겟 분석, 약물저항 바이오마커의 개발
아론티어	• AD3 : 표적 단백질 구조 예측, 구조기반 약물 설계, AD3 데이터베이스 활용, 구조기반 상호 작용, 후보약물 도출
온코크로스	• ONCO AI Platform : 유전체, 약물 Input data를 Learning & Inference AI를 활용하여 후보물질 약물 도출
에이조스바이오	• AiMol : 가상의 압축 공간에서 약리활성 물질의 구조적 특징을 찾아 조합, 조합하는 과정에서 특정 효능을 가감할 수 있는 알고리즘 플랫폼
파로스아이비티	• Chmiverse : 약효정보 스크리닝용 화합물 데이터베이스로부터 필요한 화합물을 검색하고 분석/관리/구매 할 수 있는 AI 플랫폼

*출처 : 각사 홈페이지, 한국보건산업진흥원 재구성, 2020.



<표 II-31> 국내 주요 AI 기업의 개발 중 약물

기업명	인공지능 플랫폼	약물이름(치료제)	치료분야	임상단계
닥터노아바이오텍	ARK	KM-023	에이즈	임상3상 진행
디어젠	Dr.UG	Target Protein binder E3 ligase binder	대사질환 및 혈액암	임상 계획
스탠다임	Standigm Best Standigm Insight	NASH	항암, 비알코올성지방간	후보물질 도출
신테카바이오	Deep Marcher	STB-C017	항암	임상 계획
아론티어	AD3	FM101	비알코올성지방간염	임상2상 계획
온코크로스	ONCO AI	JPI-289	뇌졸중	임상2A상 진행
에이조스바이오	AiMoI	WM S1(project)	항암	임상1상 계획
파로스아이비티	Chemiverse	PHI-101	항암	전임상 완료

*출처 : 각사 홈페이지 및 언론 보도 자료, 한국보건산업진흥원 재구성, 2020.

<표 II-32> 국내 주요 AI 활용 신약개발 기업 협업사례

기업명	협업 기업	후보물질	협업 내용
닥터노아 바이오텍	휴온스	뇌 질환 치료제	• 뇌 질환 치료제 개발과 적응증 연구를 위해 MOU 체결(19.6.30)
	카이노스메드	에이즈 치료제	• 물질합성 및 최적화를 통해 신약후보물질 도출을 위한 카이노스메드와 MOU 체결(20.3.25)
디어젠	파노로스바이 오사이언스	비알코올성 간질환 치료제	• 대사질환 치료제 발굴 및 개발 공동연구 협약 체결(20.3)
스탠다임	한미약품	항암, 비알코올성지방간 치료제	• 항암, 비알코올성지방간 등 파이프라인 개발 및 후보물질 도출, 공동연구 계약 체결(20.1)
	SK케미칼	항암, 비알코올성지방간 치료제 등	• 인공지능(AI) 신약개발社 스탠다임과 공동 신약개발 계약 체결(19.11.18)
신테카 바이오	JW중외제약	항암, 통풍 치료제	• 인공지능(AI) 활용 신약후보물질 바이오마커 발굴 등의 공동연구 MOU 체결(18.5)
	CJ헬스케어	면역항암 치료제	• 딥러닝 기반 인공지능(AI) 활용 면역항암제 공동개발(17.12)
아론티어	퓨처메디신	면역항암제 치료제	• 면역항암제와 신약후보물질 개발 공동연구 진행

기업명	협업 기업	후보물질	협업 내용
			(20.1)
온코크로스	제일약품	뇌졸중 치료제	• 뇌졸중 신약 후보물질 'JPI-289'의 새로운 치료범위(적응증) 공동연구·개발 계약(20.1)
에이조스바이오	엠비디	희귀암치료제	• AI 플랫폼 이용 희귀암치료제 공동 개발 MOU 체결(19.10)
	웰마커바이오	표적항암제	• 바이오마커기반 표적항암제 공동개발 합의 (20.3) • 신약개발용 AI 플랫폼 기반 타깃 약물 발굴 및 최적화, 효능확인실험·신약개발 진행
인실리코코리아	경북대학교병원	노인성질환 치료제	• 빅데이터 인공지능 활용 공동연구 및 업무협약(MOU) 체결(17.1)
카이팜	한국파스퇴르연구소	-	• 차세대 시퀀싱(NGS) 기반 약물유도 전사체 표준 데이터베이스 구축(KMAP 프로젝트)을 위한 공동연구 협약 체결(19.8)
파로스아이비티	스텝모어	탈모 치료제	• 인공지능(AI) 기술을 활용한 탈모 치료 신약 개발을 위한 업무협약(MOU) 체결(20.6)

*출처 : 각사 홈페이지 및 언론 보도 자료, 한국보건산업진흥원 재구성, 2020.

□ 해외 인공지능 활용 신약개발 주요 기업

○ 코로나19 팬데믹 상황에서 베너블런트 AI, 길리어드 등 인공지능 신약개발 회사들이 인공지능을 활용한 약물 재창출 관련 발표를 함으로써 치료제가 없는 상황에서 대안 약물을 제시하고 있음

<표 II-33> AI 기반 바이오벤처사가 개발 중인 약물의 임상단계

기업명	약물이름	치료분야	적응증	임상단계
Acurastem	AS-1	Neurology	Amyotrophic lateral sclerosis and frontotemporal degeneration	Phase 3
Pharnext	PXT3003	Central nervous system	Charcot-Marie-Tooth disease type 1A adults	Phase 3
Sunovion/ PsychoGenics	SEP-36385 6	Neurology	Schizophrenia	Phase 3
AI Therapeutics	LAM-002	Oncology	B-cell non-Hodgkin lymphoma (monotherapy)	Phase 2
	LAM-001	Oncology	Lymphangiomyomatosis	Phase 2



기업명	약물이름	치료분야	적응증	임상단계
	LAM-004	Rare disease	Facial angiofibroma	Phase 2
	LAM-002	Oncology	B-cell non-Hodgkin lymphoma (atezolizumab combination)	Phase 2
	LAM-002	Oncology	B-cell non-Hodgkin lymphoma (atezolizumab combination)	Phase 2
Berg	BPM31510	Oncology	Squamous cell carcinoma	Phase 2
	BPM31510	Oncology	Pancreatic tumors	Phase 2
BioXcel Therapeutics	BXCL501	Neurology	Acute agitation in Alzheimer's disease or dementia	Phase 2
	BXCL501	Neurology	Acute agitation in schizophrenia or bipolar disorder	Phase 2
	BXCL701	Oncology	Neuroendocrine prostate cancer	Phase 2
	BXCL701	Oncology	Pancreatic cancer	Phase 2
Globavir	GBV006	Infections disease	Dengue infection	Phase 2
	GBV006	Infections disease	Chikungunya infection	Phase 2
Lantern Pharma/Eisai	LP-100	Oncology	Prostate and ovarian cancers	Phase 2
Pharnext	PXT864	Neurology	Alzheimer's disease	Phase 2
AI Therapeutics	LAM-003	Oncology	Acute myeloid leukemia	Phase 1
Berg	BPM31510	Oncology	Epidermolysis bullosa	Phase 1
	BPM31510	Oncology	Glioblastoma multiforma	Phase 1
	BPM31543	Oncology	Chemotherapy-induced alopecia	Phase 1
	BPM31510	Oncology	Solid tumors	Phase 1
BlackThorn Therapeutics	BTRX-335140	Neurology	Mood/anxiety disorders	Phase 1
Cotinga Pharmaceuticals	COTI-2	Oncology	HNSCC dose escalation	Phase 1
	COTI-2	Oncology	Advanced or recurrent gynecological malignancies	Phase 1
EvaxionBiotech	EVX-01	Oncology	Personalized cancer immunotherapy	Phase 1
Exscientia/Sumitomo Dainippon Pharma	DSP-1181	Neurology	Obsessive-compulsive disorder	Phase 1
Gritstone Oncology	GRANITE	Oncology	Solid tumors	Phase 1
	SLATE	Oncology	Solid tumors	Phase 1
LanternPharma/BioNumerik	LP-300	Oncology	Lung cancers	Phase 1

기업명	약물이름	치료분야	적응증	임상단계
PharosiBT	PHI-101	Oncology	Acute myelogenous leukemia	Phase 1
Recursion Pharmaceuticals	Undisclosed	Rare disease	Neurofibromatosis type 2	Phase 1
	Undisclosed	Rare disease	Cerebral cavernous malformation	Phase 1
Vaxine	AF03	Infectious disease	Influenza	Phase 1

*출처 : BenchSci Blog, 한국보건산업진흥원 재구성, 2020.

2. 특허 동향 분석

가. 특허 분석 개요

- 특허 분석을 위한 특허 검색 대상 국가는 한국, 일본, 미국, 유럽 등 특허를 대상으로 하며, 검색 DB는 웹스온(WipsOn, 특허검색서비스)을 사용함

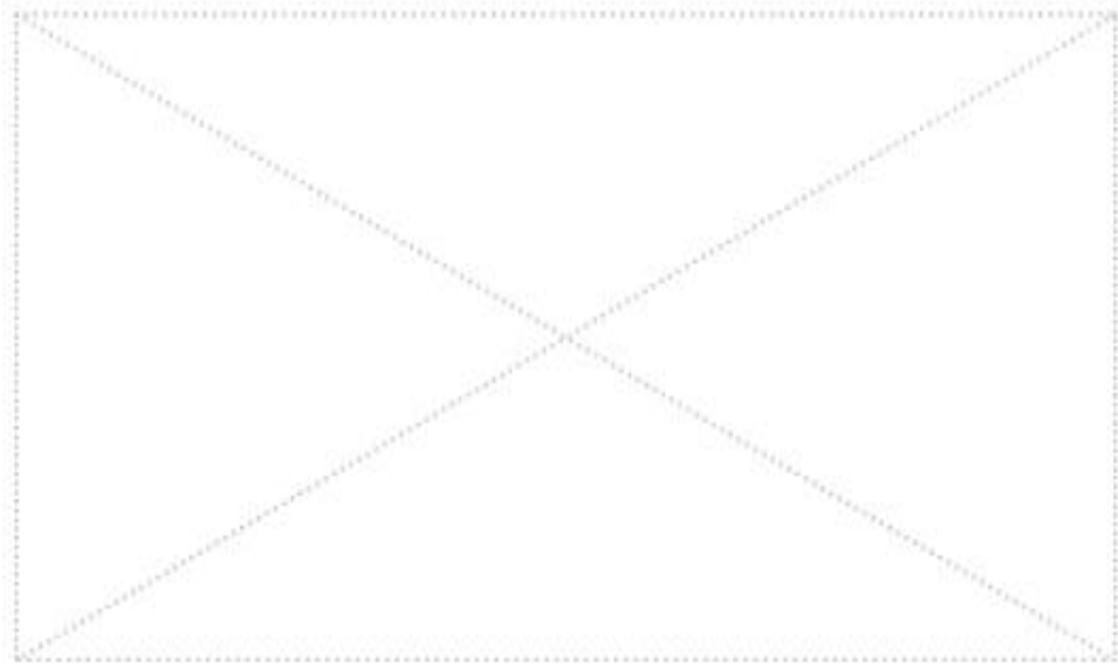
<표 II-34> 특허 분석 범위

국가	검색대상	사용 DB	검색조건	검색기간
한국	공개특허 및 등록특허	웹스온 (WipsOn)	발명의 명칭, 요약, 대표청구범위, 대표도	~2021. 09
일본				
미국				
유럽				
PCT				

- 특허 조사의 추진 절차는 다음과 같은 순으로 이루어지며 발명자와의 커뮤니케이션을 통해 일부 수정이 이루어질 수 있음

<그림 II-13> 특허분석 프로세스





나. 특허 분석 기준

(1) 주요 키워드

- 본 보고서에서는 인공지능을 기반으로 한 신약개발 기술들에 대한 정량 및 정성분석을 수행하고자 함
- 따라서 인공지능 기반 신약개발 플랫폼 관련 기술적 측면의 요소를 고려하여 주요 키워드를 인공지능, 신약, 개발 및 플랫폼으로 선별하여 도출함

<표 II-35> 주요 키워드

구분	키워드
인공지능	인공지능, 에이아이(AI), 빅데이터, 머신, 기계, 자가강화, 러닝학습, 딥러닝, 플랫폼
신약	신약, 제약, 약품, 약물, 제제, 의약, 약학, 치료, 약제, 메디슨, 드러그, 재창출, 리포지셔닝
개발	개발, 발굴, 선별, 스크리닝, 도출, 규명, 결정, 예상, 예측
플랫폼	원천, 원천기술, 확장, 파이프라인, 기반, 기반기술, 신규타겟

(2) 주요 IPC

- 상기와 같이 주요 키워드를 선별한 후 이를 바탕으로 주요키워드를 적용하여 주요 IPC 분류코드를 도출함

<표 II-36> 주요 IPC

분류 코드	내용
G06F	전기에 의한 디지털 데이터처리
G06F-019	특정의 용도에 특히 적합한 디지털 계산 또는 데이터 처리 장치 또는 방법
G16H-10	환자 관련의 의료 또는 건강관리 데이터의 취급 또는 처리에 특히 적합한 ICT
G16B-35	핵산, 단백질 또는 펩티드의 가상실험 조합 라이브러리에 특히 적합한 ICT

(3) 기술트리

- 각 키워드 및 관련 IPC 분류코드를 상기와 같이 도출한 후 본 보고서에서 분석하고자 하는 기술 분야를 기반으로 기술트리를 분류하였음

<표 II-37> 기술트리

	대분류	중분류
BT 분야	인공지능 및 신약개발 플랫폼	의약빅데이터 수집 및 구축
		인공지능 기반 의료인공지능
		약물유효성

(4) 검색식 및 검색결과(Raw-Data 현황)

<표 II-38> 검색식 및 검색결과



검색식

(인공지능* "인공 지능" 에이아이* 빅데이터*((머신* 기계* 자가* 자기* 강화*) adj (러닝* 런닝* 학습*)) 딥러닝* 딥러닝* "딥 러닝" "딥 러닝" AI ((artificial*) adj (intelligen*)) (big adj data) ((machin* deep* reinforc*) adj (learn*)) AND (신약* 제약* 약품* 약물* 제제* 의약* 약학* 치료* 약제* 메디슨* 드러그* medicin* medicat* pharmaceutic* drug* treat*) AND (플랫폼* 플랫폼* 서비스* 시스템* 재창출* 리포지션* 리포지셔닝* 후보* 전임상* 비임상* 약동력* 독성* 흡분대매*platform* service* system* reposition* re-position* candidate* preclinic* pre-clinic* nonclinic* non-clinic*pharmacokinet* pharmarco-kinet * toxico* ADME) AND (연구* 예측* 개발* 예상* 추정* 추측* 예견* 예측* 합성* 분석* 진단* research* expect* develop* estimat* anticipat* forecast* predict* synthesis* analysis* diagnos*)

국가별 검색결과(RAW DATA)

한국	일본	미국	유럽	PCT	총합
495	105	685	130	336	1,751

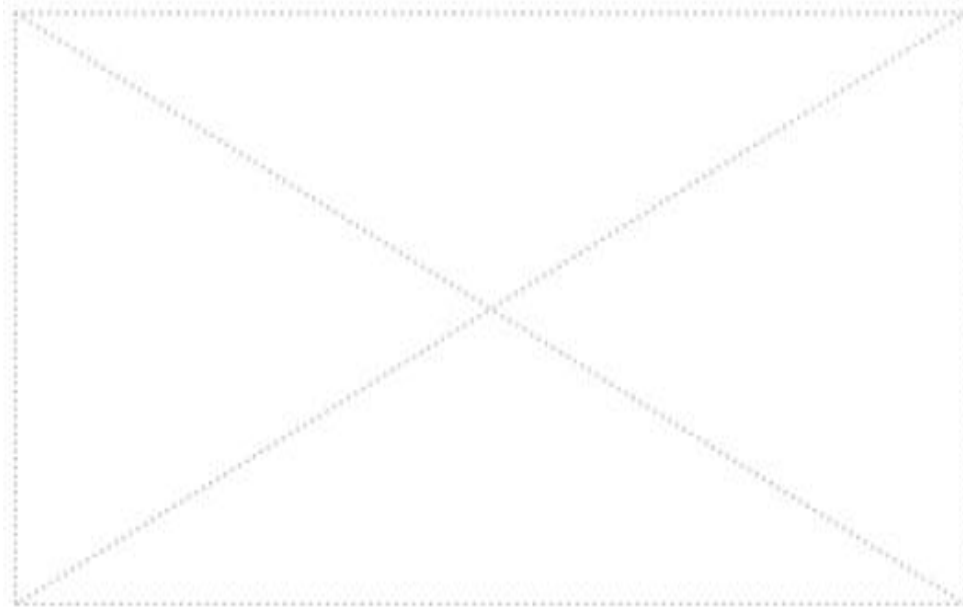
(5) 유효데이터 도출

- 발명의 명칭, 요약, 청구항 및 대표도를 기준으로 신약개발과 관련되지 않거나, 조성물, 단순 모니터링, 단순 분석 등 기술 관련도가 낮은 노이즈 건을 제거하여 국가별 유효데이터(KR/US/EU/JP/PCT)를 도출하고, 이를 기준으로 주요 시장국(KR/US/EU/JP) 정량 분석을 진행함

<표 II-39> 국가별 유효데이터 건수

대분류	유효데이터					
	한국	일본	미국	유럽	PCT	합계
인공지능 및 신약 개발 플랫폼	82	25	159	43	103	412

<그림 II-14> 연도별/국가별 출원동향



- 인공지능 기반 신약개발에 대한 유효특허를 선별한 결과, 미국(159건, 39%) 및 PCT(103건, 25%)에 가장 많은 특허들이 출원되었으며, 그 외 한국, 유럽, 일본 순으로 관련 특허출원이 있음
- 인공지능 기반 신약개발 관련 전체 특허는 1990년대부터 출원되기 시작하여, 2015년 이후부터 현재까지 관련 출원들의 건수가 큰 폭으로 증가하고 있는 경향을 보임

다. 정량분석(기술동향-통계관점 분석)

(1) 주요시장국 출원 동향 및 점유율

- 인공지능과 관련된 신약개발 기술의 연도별 특허동향을 살펴보면, 전체 관련 특허는 309건으로 1990년대부터 빅데이터를 바탕으로 한 헬스케어 등 거시적 관점에서의 관련 출원의 출원 활동이 시작되었으며 이후에도 꾸준히 증가 추세를 보임
- 특히 2015년 이후에는 인공지능 및 신약개발 플랫폼에 보다 밀접한 관련 기술의 출원량 증가하는 곡선을 그리고 있음. 2017년도에 출원량이 급상승하는 곡선을 보이며, 이는 한국과 미국의 출원 활동이 활발하게 나타



난 영향으로 사료됨

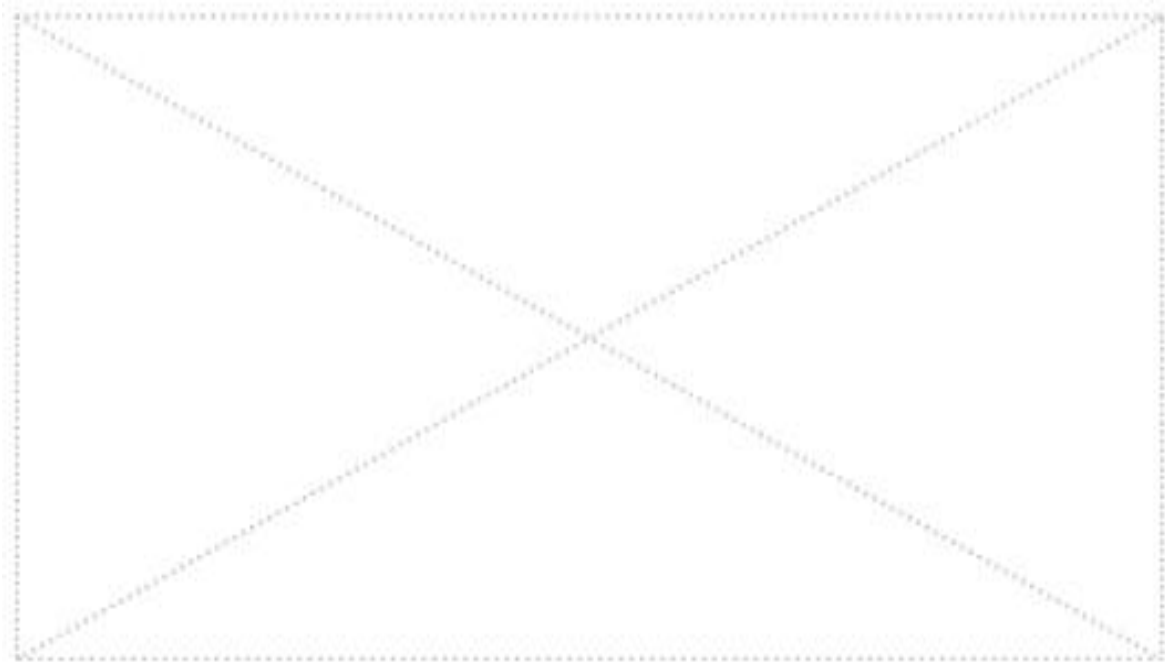
- 주요 시장국(KR, US, EP, JP) 출원 동향을 살펴보면, 미국 특허 출원(USPTO)이 가장 많았으며(51%), 그 외 주요 시장국의 출원 비율은 한국 출원(KIPO), 유럽 출원(EPO), 일본 출원(JPO)의 순서임
- 국가별 점유율을 살펴보면 미국 51%(159건), 한국 27%(82건), 유럽 14%(43건), 일본 8%(25건)로 조사됨
- 연도별로는, 2010년대 중반부터 출원이 증가하기 시작하여, ICT 기반 미래의료 분야에 대한 관심이 크게 증대된 2015년 이후에 관련 특허 출원의 건수가 큰 폭으로 증가하였음을 알 수 있음

<표 II-40> 주요출원국의 연도별 출원 동향

출원연도	KR	JP	US	EP	총합계
1993			1		1
1997		3	1		4
1999				2	2
2000			2		2
2001			1		1
2002				1	1
2003	1				1
2004			1		1
2005			1		1
2006			1		1
2007		1		3	4
2008			1		1
2009		1	1		2
2010				1	1
2011			1	1	2
2012			3		3
2013	4	4	3	5	16
2014			3		3
2015	8	8	2	8	26
2016	1	1	14	6	22
2017	8	3	19	4	34
2018	19	3	31	8	61

출원연도	KR	JP	US	EP	총합계
2019	30	1	35	1	67
2020	11		32	3	46
2021			6		6
총합계	82	25	159	43	309

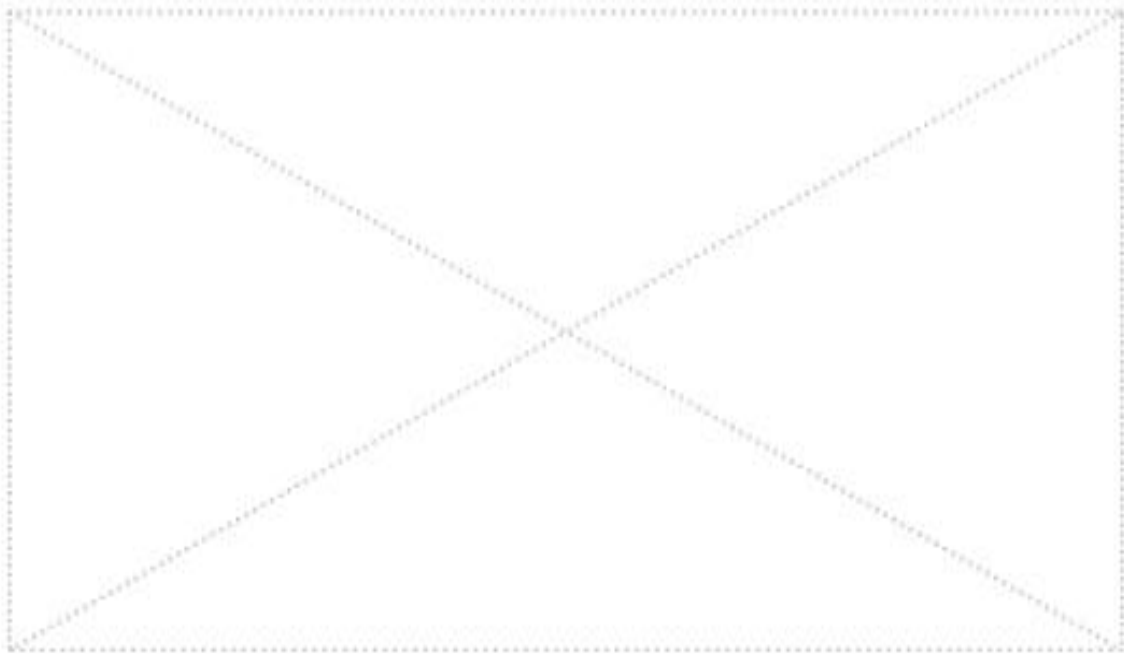
<그림 II-15> 주요 시장국 출원동향



□ 주요 시장국의 각 국가별 연도별 출원동향

<그림 II-16> 주요 시장국 개별국의 연도별 출원동향

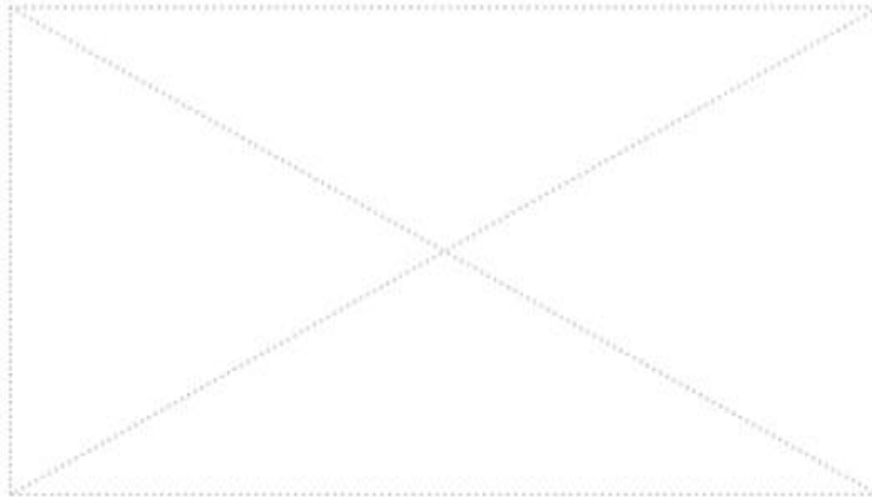




- 국가별 특허출원 동향을 살펴보면, 한국은 2003년도를 기준으로 출원 활동이 시작되었으며, 2016년도 이후 출원건수가 크게 증가하여 2019년 기준 30건의 특허가 출원되었으며 현재까지 꾸준히 활발한 출원 활동을 보임
 - (일본) 일본은 1997년도를 기준으로 관련 기술의 출원 활동이 시작되어, 인공지능을 기반으로 한 플랫폼 연구가 일찍 시작되었으나 이후 출원건수는 미미한 것으로 나타남
 - (미국) 미국은 1993년도를 기준으로 출원 활동이 시작되어, 2011년도 이후에도 꾸준한 출원을 보이며 특히 2015년 이후 출원건수가 증가하여 2019년도에 최다 건수를 나타내고 있음
 - 관련 기술에 대한 출원이 1993년에 시작된 점 및 현재까지도 개별국 중 최다 출원수를 보유한 점을 고려할 때, 미국이 전체시장을 주도하고 있는 것으로 분석됨
 - (유럽) 유럽은 1999년도를 기준으로 출원 활동이 시작되었으나 관련 출원수가 미국, 한국에서 크게 증가한 시기에도 미미한 것으로 분석되어 관련 기술에 대한 연구는 활발하지 않은 것으로 파악됨

□ 국가별/출원인 국적별 특허 동향

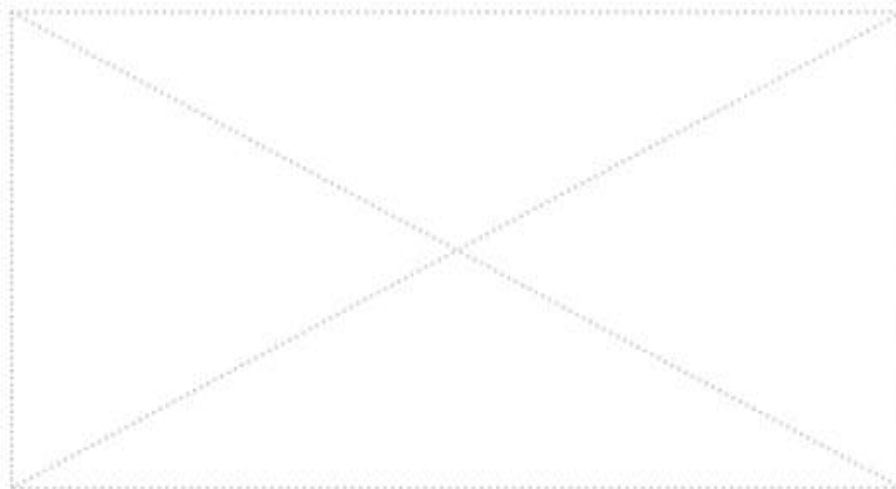
<그림 II-17> 국가별/출원인 국적별 출원동향



- 국가별/출원인 국적별 특허 동향을 살펴보면, 일본 및 유럽의 경우 외국인의 출원 비중이 각각 92%, 및 76%로 나타났으며 이 중 미국 국적의 출원인이 각각 76% 및 70%로, 미국 국적의 출원인들의 일본 및 유럽 시장의 관심도가 큰 것으로 나타남
 - 미국 및 한국의 경우 내국인 출원 비율이 각각 85% 및 82%로 나타나 인공지능을 이용한 신약개발 관련 특허에 대한 내수시장의 관심도가 큰 것으로 나타남

□ 국가별/연도별 내외국인 특허 동향

<그림 II-18> 국가별/연도별 내외국인 출원현황



- 미국과 한국의 경우 내국인의 특허출원이 관련 특허 출원을 주도하고

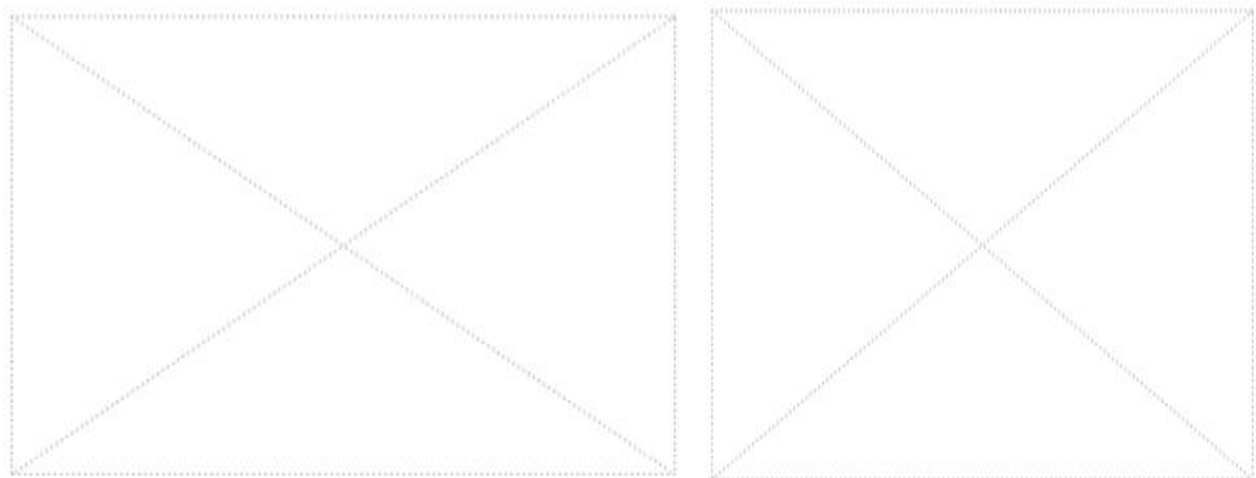


있고, 일본과 유럽의 경우 외국인의 특허출원이 주도하는 경향을 보임
- 일본의 경우 외국인의 특허출원이 크게 두드러지는 경향을 보임

(2) 기술발전도

- 1993년부터 2021년까지 총 21년을 4개 구간으로 나누어 각 구간의 출원인수와 출원건수를 토대로 분석한 결과, 인공지능을 활용한 신약개발 기술은 2016년부터 기술혁신의 주체(출원인)와 혁신의 성과(출원건수)가 급격하게 성장하는 것으로 판단되며 이러한 양상은 특히 시장을 주도하고 있는 것으로 분석된 미국과 한국에서 두드러지게 나타남

<그림 II-19> 기술발전 추이도



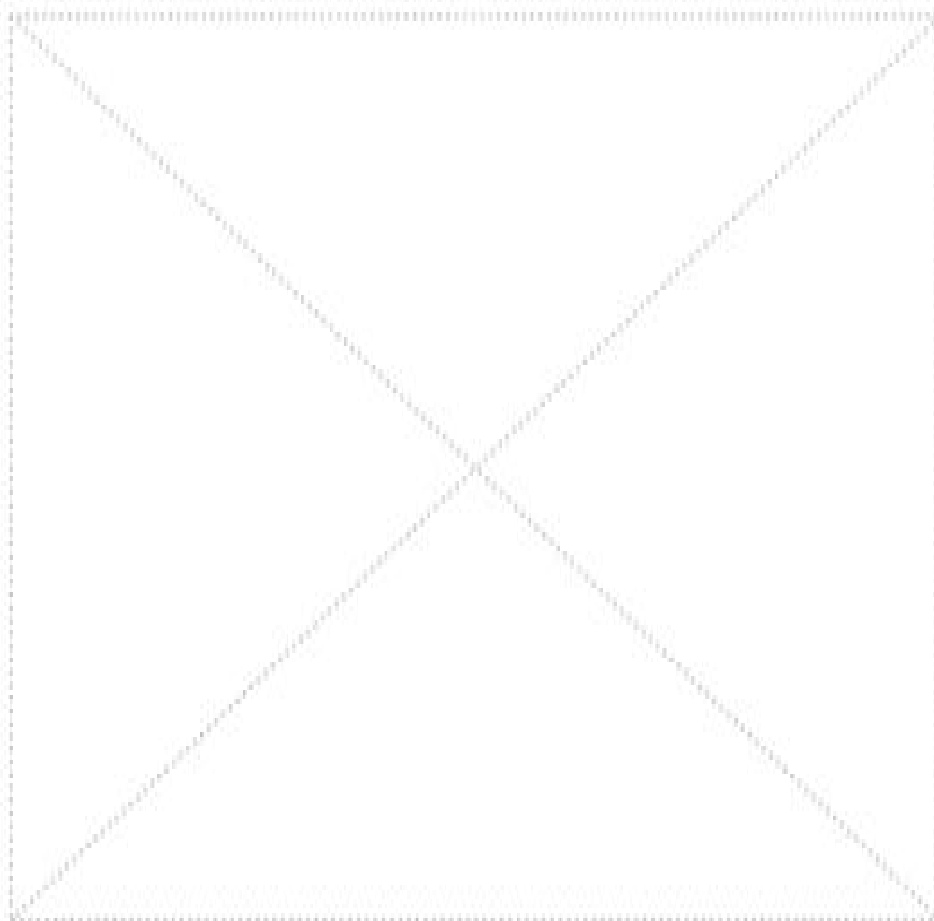
<표 II-41> 구간별 출원인과 출원건수

구분	출원인수	출원건수
1구간 (1993~2004)	10	10
2구간 (2005~2011)	11	11
3구간 (2012~2016)	59	59
4구간 (2017~2021)	228	228

(3) 주요 출원인 분포

- 대상기술의 상위 다 출원인은 IBM(INTERNATIONAL BUSINESS MASCHINES CORPORATION)(미국)(25건)(38%), NANTOMICS LLC(미국)(20건)(31%), HEARTFLOW INC(미국)(12건)(19%), (주)신테카바이오(한국)(9건)(12%)으로 조사됨

<그림 II-20> 상위 20위 주요 출원인



○ 출원인별 출원건수 중 상위 20위에 해당하는 출원인을 나타냄

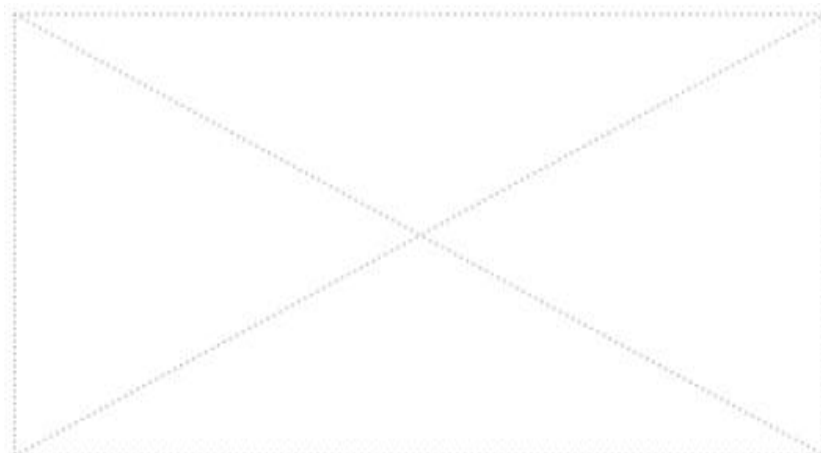
- 관련 특허 최다 출원인은 IBM(INTERNATIONAL BUSINESS MASCHINES CORPORATION)사로, 2006년 인공지능 기반 의료 솔루션개발에 착수하여 2015년 인공지능 기반 의료 소프트웨어를 론칭하는 등 해당 분야의 선두자로서 25건의 특허를 보유하여 최다 출원인에 해당됨
- 주요 출원인 분석 결과, 상위 다 출원인 중 1위에서 3위에 해당하는 주요 출원인의



- 국적이 미국으로 나타나 미국이 해당 분야의 시장을 주도하고 있음이 나타남
- 25건의 특허를 보유하여 최다 출원인에 해당하는 미국의 IBM(INTERNATIONAL BUSINESS MASCHINES CORPORATION)사는 소프트웨어, 프로그램 등을 전문분야로 하는 기업으로서 광범위한 데이터를 기반으로 하여 약물의 효과, 의학 정보를 제공하는 모델 등에 관한 기술을 다수 보유하고 있는 것으로 나타남
 - 최다출원인인 IBM사 외에도 NANTOMICS(20건), HEARTFLOW(12건), 신테카바이오(9건) 및 IRIS BIOTECHNOLOGIES(9건)도 다수의 출원을 보유하고 있음
 - 국내의 경우 대학 및 연구소기업의 출원이 두드러지는 경향을 보임
 - 이는 IBM사의 인공지능 기반 의료솔루션이 각 국가별 임상 양상의 차이를 반영하지 못했다는 점이 실패 요인으로 꼽힘에 따라, 우리나라 데이터를 반영하여 해당 문제를 해결하기 위함에 따른 것으로 파악됨
 - 국내 출원인인 (주)신테카바이오는 12건의 관련 특허를 출원하였으며, 본 기업은 유전체 빅데이터 기반 AI 기업으로서 AI 솔루션을 이용한 신약, 신약후보물질 발굴 및 개인 유전체 맵 기반 맞춤형의학 분석 플랫폼 등과 관련한 특허 확보를 위한 출원 활동을 활발히 하고 있는 것으로 분석됨
 - 또한 앞서 정리한 바와 같이 2015년 이후 AI 기반 신약개발 관련 특허수가 크게 증가한 것으로 보아 미공개 특허출원 존재 영역에도 다양한 신생기업들이 분포할 것으로 예상됨

<그림 II-21> 多 출원인 기업 및 점유율





<표 II-42> 대상기술의 상위 출원인 동향

출원인	KR	JP	US	EP	총합계
INTERNATIONAL BUSINESS MASCHINES CORPORATION			25		4
NANTOMICS LLC			20		2
HEARTFLOW INC			12		2
(주)신테카바이오	12				2



라. 정성분석

(1) 주요특허 리스트

□ 인공지능 신약개발 플랫폼과 관련하여 S등급으로 선별한 특허 및 상기 특허의 패밀리 권을 정리하여 하기와 같이 나타내었다.

<표 II-43> 주요특허 리스트

패밀리 No.	국가 코드	발명의 명칭	출원번호	출원일	등록번호	등록일	출원인
1	KR	인공지능모델기반 분자동역학 빅데이터를 활용한 신생항원 면역치료정보 제공 시스템 및 방법	10-2020-0030597	2020-03-12			(주)신테카바이오
	PC T	SYSTEM AND METHOD FOR PROVIDING NEOANTIGEN IMMUNOTHERAPY INFORMATION BY USING ARTIFICIAL-INTELLIGENCE-MODEL-BASED MOLECULAR DYNAMICS BIG DATA	PCT-KR2020-003464	2020-03-12			(주)신테카바이오
2	KR	이종 특성정보 병합 데이터 기반 인공지능 딥러닝 모델을 이용한 약물 적응증 및 반응 예측 시스템 및 방법	10-2017-0185040	2017-12-31	10-1953762	2019-02-25	(주)신테카바이오
	US	DRUG INDICATION AND RESPONSE PREDICTION SYSTEMS AND METHOD USING AI DEEP LEARNING BASED ON CONVERGENCE OF DIFFERENT CATEGORY DATA	16/198138	2018-11-21			(주)신테카바이오
3	KR	인간백혈구항원 하플로타입 기반 다중분류 인공지능 모델을 이용한 면역항암제 적응증 및 반응 예측 시스템 및 방법	10-2021-0027731	2021-03-02			(주)신테카바이오
4	US	SYSTEM AND METHOD FOR DRUG DELIVERY	15/034865	2014-11-07			IMPERIAL INNOVATIONS LIMITED
	EP	SYSTEM AND METHOD FOR DRUG DELIVERY	2014-802479	2014-11-07			IMPERIAL INNOVATIONS LIMITED
5	US	SYSTEMS AND METHODS FOR PATIENT-SPECIFIC IMAGING AND MODELING OF DRUG DELIVERY	15/267671	2016-09-16			HEARTFLOW INC
	EP	SYSTEMS AND METHODS FOR PATIENT-SPECIFIC IMAGING AND MODELING OF DRUG DELIVERY	2016-779220	2016-09-16			HEARTFLOW INC
	PC	SYSTEMS AND METHODS FOR	PCT-US2	2016-09-1			HEARTFLOW

인공지능 활용 혁신신약 발굴
사업

패밀리 No.	국가 코드	발명의 명칭	출원번호	출원일	등록번호	등록일	출원인
	T	PATIENT-SPECIFIC IMAGING AND MODELING OF DRUG DELIVERY	016-052301	6			INC
6	US	DATA PROCESSING SYSTEMS AND METHODS FOR REPURPOSING DRUGS	17/116995	2020-12-09			SANOFI
	PCT	DATA PROCESSING SYSTEMS AND METHODS FOR REPURPOSING DRUGS	PCT-US2020-064100	2020-12-09			SANOFI
7	US	Systems And Methods For Prioritizing The Selection Of Targeted Genes Associated With Diseases For Drug Discovery Based On Human Data	16/818412	2020-03-13			ACCENTURE GLOBAL SOLUTIONS LIMITED
8	PCT	A LABEL-FREE METHOD AND SYSTEM FOR MEASURING DRUG RESPONSE KINETICS OF THREE-DIMENSIONAL CELLULAR STRUCTURES	PCT-SG2018-050412	2018-08-14			AGENCY FOR SCIENCE, TECHNOLOGY RESEARCH
9	US	DRUG REPURPOSING BASED ON DEEP EMBEDDINGS OF GENE EXPRESSION PROFILES	16/160457	2018-10-15			BioAge Labs, Inc.
	EP	DRUG REPURPOSING BASED ON DEEP EMBEDDINGS OF GENE EXPRESSION PROFILES	2018-867005	2018-10-15			BioAge Labs, Inc.
	PCT	DRUG REPURPOSING BASED ON DEEP EMBEDDINGS OF GENE EXPRESSION PROFILES	PCT-US2018-055875	2018-10-15			BioAge Labs, Inc.
10	US	SYSTEMS AND METHODS FOR DRUG DESIGN AND DISCOVERY COMPRISING APPLICATIONS OF MACHINE LEARNING WITH DIFFERENTIAL GEOMETRIC MODELING	17/043551	2019-04-01			BOARD OF TRUSTEES OF MICHIGAN STATE UNIVERSITY
	US	SYSTEM AND METHODS FOR MACHINE LEARNING FOR DRUG DESIGN AND DISCOVERY	16/372239	2019-04-01			BOARD OF TRUSTEES OF MICHIGAN STATE UNIVERSITY
	PCT	SYSTEMS AND METHODS FOR DRUG DESIGN AND DISCOVERY COMPRISING APPLICATIONS OF MACHINE LEARNING WITH DIFFERENTIAL GEOMETRIC MODELING	PCT-US2019-025239	2019-04-01			BOARD OF TRUSTEES OF MICHIGAN STATE UNIVERSITY
11	JP	세포 요법, 신약 개발 및 진단법에서의 사용을 위한 줄기세포 및 그 유도체를 검증하기 위해 기계 학습 및/또는 신경망을 사용하는 것	2020-549687	2019-03-15			BOARD OF TRUSTEES OF MICHIGAN STATE UNIVERSITY



패밀리 No.	국가 코드	발명의 명칭	출원번호	출원일	등록번호	등록일	출원인
	PC T	USING MACHINE LEARNING AND/OR NEURAL NETWORKS TO VALIDATE STEM CELLS AND THEIR DERIVATIVES FOR USE IN CELL THERAPY, DRUG DISCOVERY, AND DIAGNOSTICS	PCT-US2019-022611	2019-03-15			BOARD OF TRUSTEES OF MICHIGAN STATE UNIVERSITY
	EP	USING MACHINE LEARNING AND/OR NEURAL NETWORKS TO VALIDATE STEM CELLS AND THEIR DERIVATIVES FOR USE IN CELL THERAPY, DRUG DISCOVERY, AND DIAGNOSTICS	2019-714930	2019-03-15			BOARD OF TRUSTEES OF MICHIGAN STATE UNIVERSITY
12	KR	유전자 연관 관계 통합 기반 신규 질병유전자 예측 장치 및 방법	10-2020-0027783	2020-03-05			한국과학기술원
13	KR	약물-표적 상호 작용 예측을 위한 방법	10-2018-0092793	2018-08-09			광주과학기술원
14	PC T	DRUG REPOSITIONING CANDIDATE RECOMMENDATION SYSTEM, AND COMPUTER PROGRAM STORED IN MEDIUM IN ORDER TO EXECUTE EACH FUNCTION OF SYSTEM	PCT-KR2020-004431	2020-03-31			한국과학기술정보연구원
	KR	신약 재창출 후보 추천 시스템 및 이 시스템의 각 기능을 실행시키기 위해 매체에 저장된 컴퓨터 프로그램	10-2019-0037940	2019-04-01	10-2035658	2019-10-17	한국과학기술정보연구원
15	KR	자가 학습을 통한 약물-단백질간 관계 예측을 위한 모델링 기법	10-2017-0011321	2017-01-24			광주과학기술원
16	KR	랜덤 포레스트 모델을 활용한 약물의 다중 표적 예측 방법	10-2018-0109415	2018-09-13			한국과학기술원 가톨릭대학교 산학협력단
17	KR	딥러닝 기반의 질환 위험 유전 변이 발굴 장치	10-2018-0065347	2018-06-07			한국과학기술원 한국 한의학 연구원
18	EP	METHODS, SYSTEMS, ALGORITHMYS AND MEANS FOR DESCRIBING THE POSSIBLE CONFORMATIONS OF ACTUAL AND THEORETICAL PROTEINS AND FOR EVALUATING ACTUAL AND THEORETICAL PROTEINS WITH RESPECT TO FOLDING, OVERALL SHAPE AND STRUCTURAL MOTIFS	2008-724912	2008-01-30			YANG, Jiaan
	PC T	METHODS, SYSTEMS, ALGORITHMYS AND MEANS FOR DESCRIBING THE POSSIBLE CONFORMATIONS OF ACTUAL AND THEORETICAL PROTEINS AND FOR EVALUATING ACTUAL AND THEORETICAL PROTEINS	PCT-US2008-001159	2008-01-30			YANG, Jiaan



인공지능 활용 혁신신약 발굴
사업

패밀리 No.	국가 코드	발명의 명칭	출원번호	출원일	등록번호	등록일	출원인
		WITH RESPECT TO FOLDING, OVERALL SHAPE AND STRUCTURAL MOTIFS					
19	US	SYSTEMS AND METHODS FOR ANALYSIS OF ALTERNATIVE SPLICING	16/952231	2020-11-19			Envisagenics, Inc.
	EP	SYSTEMS AND METHODS FOR ANALYSIS OF ALTERNATIVE SPLICING	2019-807274	2019-05-22			Envisagenics, Inc.
	PCT	SYSTEMS AND METHODS FOR ANALYSIS OF ALTERNATIVE SPLICING	PCT-US2019-033574	2019-05-22			Envisagenics, Inc.
20	US	Systems and Methods for Predicting Treatment-Regimen-Related Outcomes	16/543666	2019-08-19			Inform Genomics, Inc.
	US	Systems and Methods for Predicting Treatment-Regimen-Related Outcomes	15/953544	2018-04-16			Inform Genomics, Inc.
	US	Systems and Methods for Predicting Treatment-Regimen-Related Outcomes	15/939621	2018-03-29			Inform Genomics, Inc.
	EP	Systems and Methods for Predicting Treatment-Regimen-Related Outcomes	2016-852565	2016-09-29			Inform Genomics, Inc.
	PCT	Systems and Methods for Predicting Treatment-Regimen-Related Outcomes	PCT-US2016-054355	2016-09-29			Inform Genomics, Inc.
21	US	Methods and System for the Reconstruction of Drug Response and Disease Networks and Uses Thereof	16/749694	2020-01-22			THE REGENTS OF THE UNIVERSITY OF MICHIGAN
	PCT	Methods and System for the Reconstruction of Drug Response and Disease Networks and Uses Thereof	PCT-US2020-014536	2020-01-22			THE REGENTS OF THE UNIVERSITY OF MICHIGAN
22	JP	약물 유해 사상을 예측하기 위한 컴퓨터 구현 방법, 컴퓨터 프로그램 제품 및 처리 시스템	2016-188561	2016-09-27	6722076	2020-06-23	INTERNATIONAL BUSINESS MACHINES CORPORATION
	US	PREDICTION AND GENERATION OF HYPOTHESES ON RELEVANT DRUG TARGETS AND MECHANISMS FOR ADVERSE DRUG REACTIONS	15/671898	2017-08-08			INTERNATIONAL BUSINESS MACHINES CORPORATION
	PC	PREDICTION OF ADVERSE DRUG	PCT-IB20	2018-08-0			INTERNATIO



패밀리 No.	국가 코드	발명의 명칭	출원번호	출원일	등록번호	등록일	출원인
	T	REACTIONS	18-055836	3			NAL BUSINESS MACHINES CORPORATION
23	US	Evaluating Drug-Adverse Event Causality Based on an Integration of Heterogeneous Drug Safety Causality Models	16/178734	2018-11-02			INTERNATIONAL BUSINESS MACHINES CORPORATION
24	KR	신약 후보 물질 발굴을 위한 데이터 처리 장치 및 방법	10-2019-0147235	2019-11-17	10-2187586	2020-12-01	주식회사 메디리타
	KR	신약 후보 물질 도출을 위한 데이터 처리 방법	10-2019-0163398	2019-12-10	10-2181058	2020-11-13	주식회사 메디리타
	KR	신약 후보 물질 발굴을 위한 멀티오믹스 데이터 처리 장치 및 방법	10-2019-0147236	2019-11-17	10-2187594	2020-12-01	주식회사 메디리타
25	KR	신약 후보 물질의 발굴 시스템 및 그 방법	10-2019-0053667	2019-05-08			고려대학교 산학협력단
26	KR	신약 후보 물질의 발굴 시스템 및 그 방법	10-2019-0068118	2019-06-10			고려대학교 산학협력단
27	KR	신약 후보 물질의 출력 방법 및 장치	10-2020-0177206	2020-12-17			고려대학교 산학협력단
28	JP	약물의 특성화 및/또는 최적화에 적용되는 계산 모델화 및 시뮬레이션을 위한 방법 및 시스템	2021-501121	2019-03-26			INSILICOTRIALS TECHNOLOGIES
29	KR	신생항원 동정, 제조, 및 용도	10-2019-07036968	2018-06-08			그릿스톤 바이오, 인코포레이티드
30	KR	항원 데이터 예측 장치 및 그 동작 방법	10-2019-0177764	2019-12-30			한국과학기술정보연구원
	KR	신약 후보 물질 예측 장치 및 그 동작 방법	10-2019-0177806	2019-12-30			한국과학기술정보연구원
31	KR	약물-표적 단백질의 상호작용을 예측하는 방법 및 그 방법을 수행하는 장치	10-2019-0050716	2019-04-30			서울대학교 산학협력단
32	JP	약제 표적이 되는 단백질 상호 작용을 예측하는 방법 및 예측 시스템	2009-007697	2009-01-16			PHARMA DESIGN INC
33	US	Artificial Intelligence-Based Drug Adherence Management and Pharmacovigilance	17/174323	2021-02-11			doc.ai, Inc.
34	US	MACHINE LEARNING MODEL FOR SURFACING SUPPORTING EVIDENCE	16/742750	2020-01-14			Clover Health
35	US	Artificial intelligence engine architecture for generating candidate drugs	16/870611	2020-05-08	11049590	2021-06-29	Peptilogsics, Inc.
36	US	NETWORK-BASED DEEP LEARNING TECHNOLOGY FOR TARGET IDENTIFICATION AND	17/096712	2020-11-12			THE CLEVELAND CLINIC



인공지능 활용 혁신신약 발굴
사업

패밀리 No.	국가 코드	발명의 명칭	출원번호	출원일	등록번호	등록일	출원인
		DRUG REPURPOSING					FOUNDATION
37	US	DEEP LEARNING-BASED QUICK AND PRECISE HIGH-THROUGHPUT DRUG SCREENING SYSTEM	16/962313	2018-11-30			Shanghai Tongji Hospital
	PC T	DEEP LEARNING-BASED QUICK AND PRECISE HIGH-THROUGHPUT DRUG SCREENING SYSTEM	PCT-CN2018-118397	2018-11-30			SHANGHAI TONGJI HOSPITAL
38	US	Optimizing Successful Outcomes for Repurposing Existing Pharmaceutical Compounds	16/038346	2018-07-18			Richard Postrel
39	KR	심화 학습 기반의 약물-표적 단백질 간 상호작용 예측 시스템 및 그 방법	10-2018-0130090	2018-10-29			서울대학교산학협력단
40	KR	양상블-기반 연구 추천 시스템 및 방법	10-2019-7011738	2016-03-03			NANTOMICS LLC
	JP	양상블에 기반한 리서치 추천 시스템 및 방법	2018-112693	2018-06-13			NANTOMICS LLC
	JP	양상블에 기초한 리서치 추천 시스템 및 방법	2017-546211	2016-03-03			NANTOMICS LLC
	US	Ensemble-Based Research Recommendation Systems And Methods	15/555290	2016-03-03			NANTOMICS LLC
	EP	ENSEMBLE-BASED RESEARCH RECOMMENDATION SYSTEMS AND METHODS	2016-759516	2016-03-03			NANTOMICS LLC
	PC T	ENSEMBLE-BASED RESEARCH RECOMMENDATION SYSTEMS AND METHODS	PCT-US2016-020742	2016-03-03			NANTOMICS LLC
41	US	NETWORK MODELING FOR DRUG TOXICITY PREDICTION	15/197490	2016-06-29			Medeolinx, LLC
	US	NETWORK MODELING FOR DRUG TOXICITY PREDICTION	13/690176	2012-11-30			Medeolinx, LLC
	EP	Microarraysampling and networkmodelingfordrugtoxicityprediction	2012-195130	2012-11-30			Medeolinx, LLC
42	US	ARTIFICIAL INTELLIGENCE ANALYSIS OF RNA TRANSCRIPTOME FOR DRUG DISCOVERY	16/643511	2019-08-19			SF17 THERAPEUTICS, INC.
	PC T	ARTIFICIAL INTELLIGENCE ANALYSIS OF RNA TRANSCRIPTOME FOR DRUG DISCOVERY	PCT-US2019-047078	2019-08-19			SF17 THERAPEUTICS, INC.
43	US	QUANTITATIVE ASSESSMENT OF DRUG RECOMMENDATIONS	14/968140	2015-12-14			INTERNATIONAL BUSINESS MACHINES CORPORATION
44	US	Data platformforautomatedpharmaceuticalr	17/166435	2021-02-03	11080607	2021-08-03	Ro5 Inc.



패밀리 No.	국가 코드	발명의 명칭	출원번호	출원일	등록번호	등록일	출원인
		esearchusingknowledgegraph					
45	US	Method and system for artificial intelligence directed lead discovery through multi-domain agglomerative clustering	09/549746	2000-04-14	6625585	2003-09-23	Bioreason, Inc.
46	EP	IN VITRO METHOD FOR IDENTIFYING EFFICIENT THERAPEUTIC MOLECULES FOR TREATING PANCREATIC DUCTAL ADENOCARCINOMA	2020-305052	2020-01-23			Institut Jean Paoli & Irène Calmettes Ligue Nationale Contre le Cancer Institut National de la Santé et de la Recherche Médicale Université d'Aix Marseille Centre National de la Recherche Scientifique
47	KR	약물반응성, 유전자발현정보 및 복제수 변이를 이용한 기능하플로타이핑 방법 및 시스템	10-2018-0124550	2018-10-18	10-1984611	2019-05-27	(주)신테카바이오 대한민국 (식품의약품안전처장)
48	KR	신약 재창출 후보 선정 방법 및 시스템	10-2019-0141614	2019-11-07			울산대학교 산학협력단 재단법인 아산사회복지재단

□ 주요특허 분석 결과 S등급에 해당하는 인공지능 신약개발 플랫폼에 관련된 특허는 크게 후보물질 발굴/약물 구조 설계/약물 재창출과 관련된 특허로 구분되었음

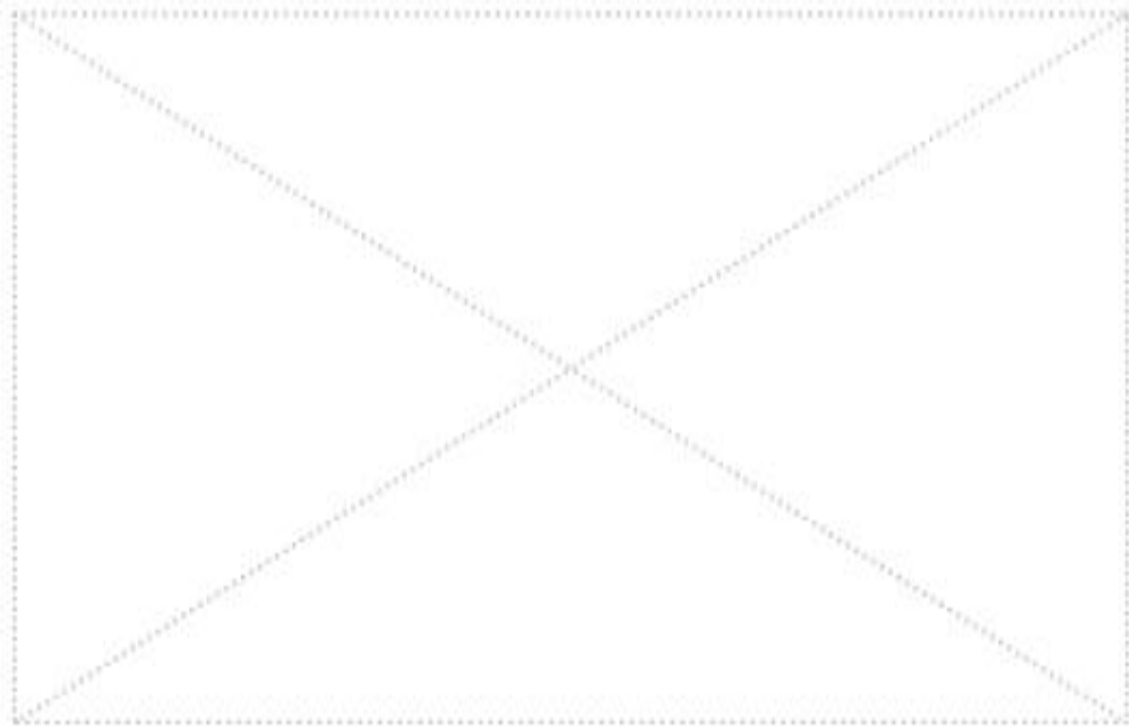
- S등급의 주요특허 중 후보물질 발굴/약물 구조 설계/약물 재창출과 관련된 특허를 관련 특허를 많이 보유하고 있는 최다출원인 여부를 함께 고려하여 핵심특허를 선별하여 파란색으로 표시하였으며 존속기간만료, 포기, 등록료 불납 등의 사유로 소멸된 특허는 붉은색으로 표시하여 나타내었음
- 25건의 관련 특허를 보유하여 최다출원인으로 선별된 IBM사를 포함하여 국내의 (주)신테카바이오 사의 특허를 포함하여 10건의 특허를 핵심특



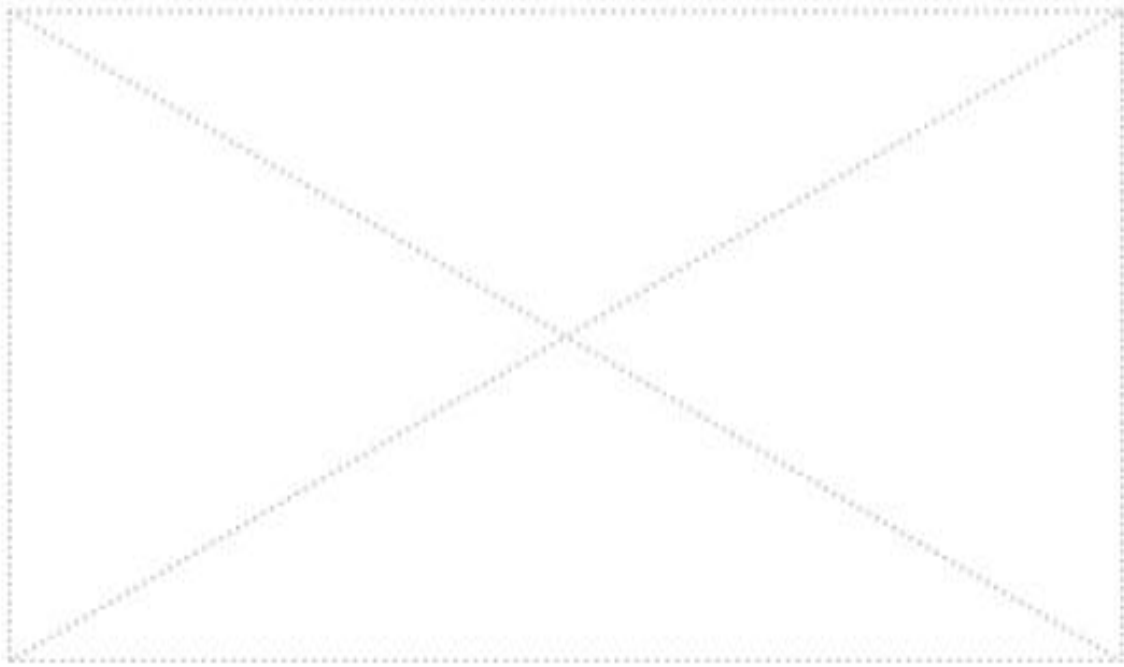
허로 선별하여 분석하였음

(2) 핵심특허 분석

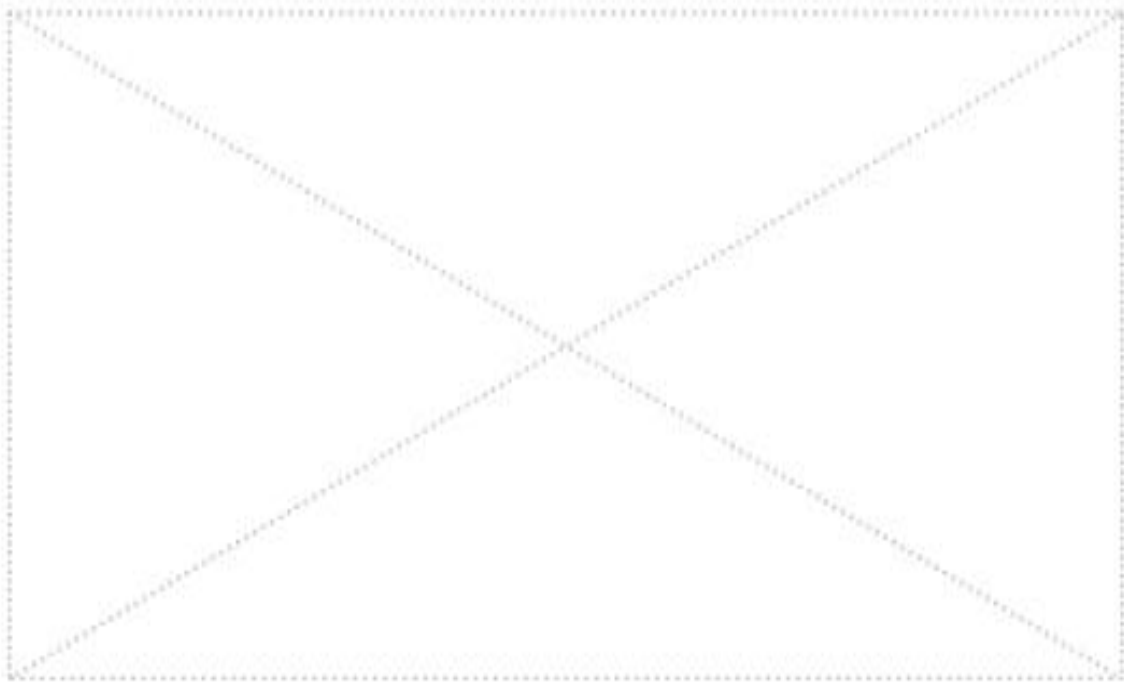
□ 핵심특허 (1)



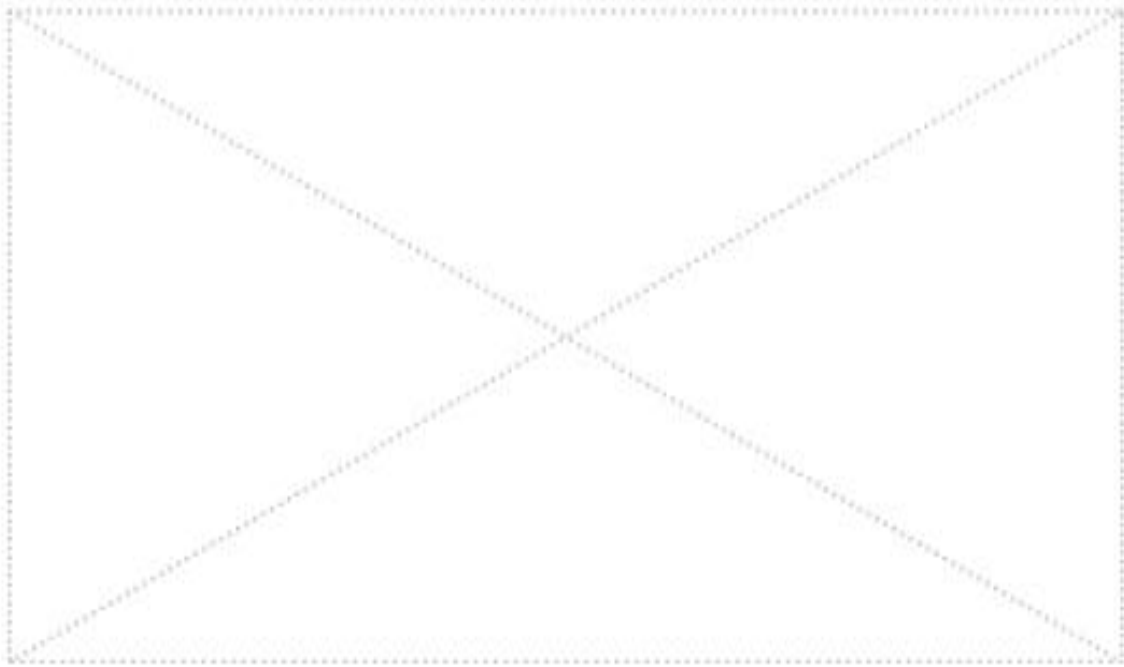
□ 핵심특허 (2)



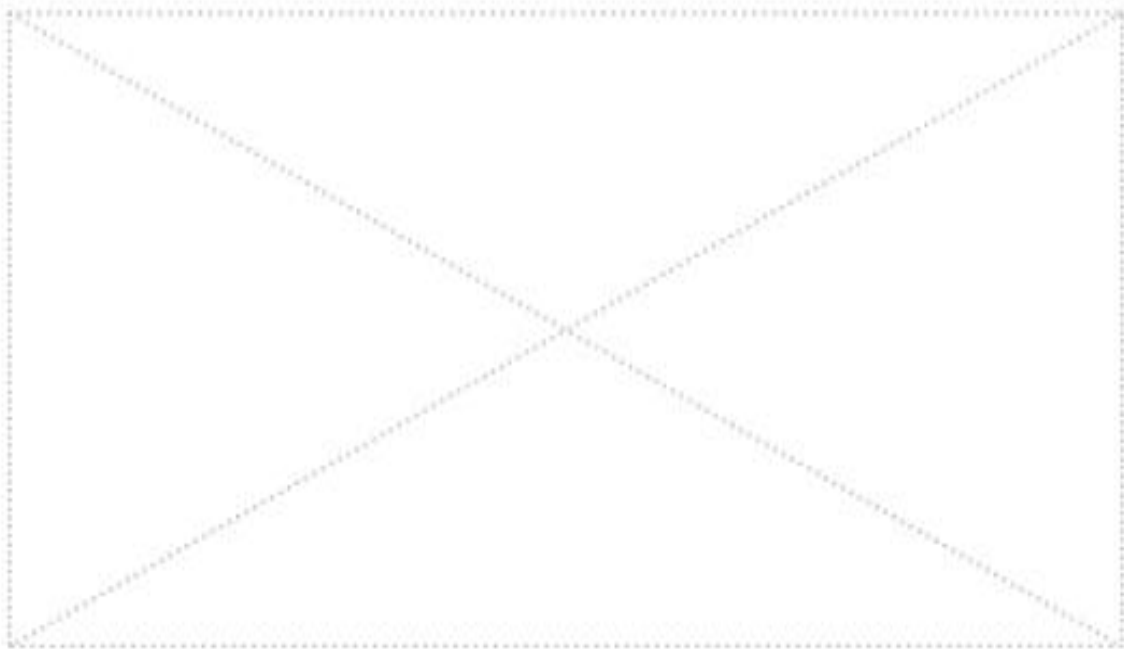
□ 핵심특허 (3)



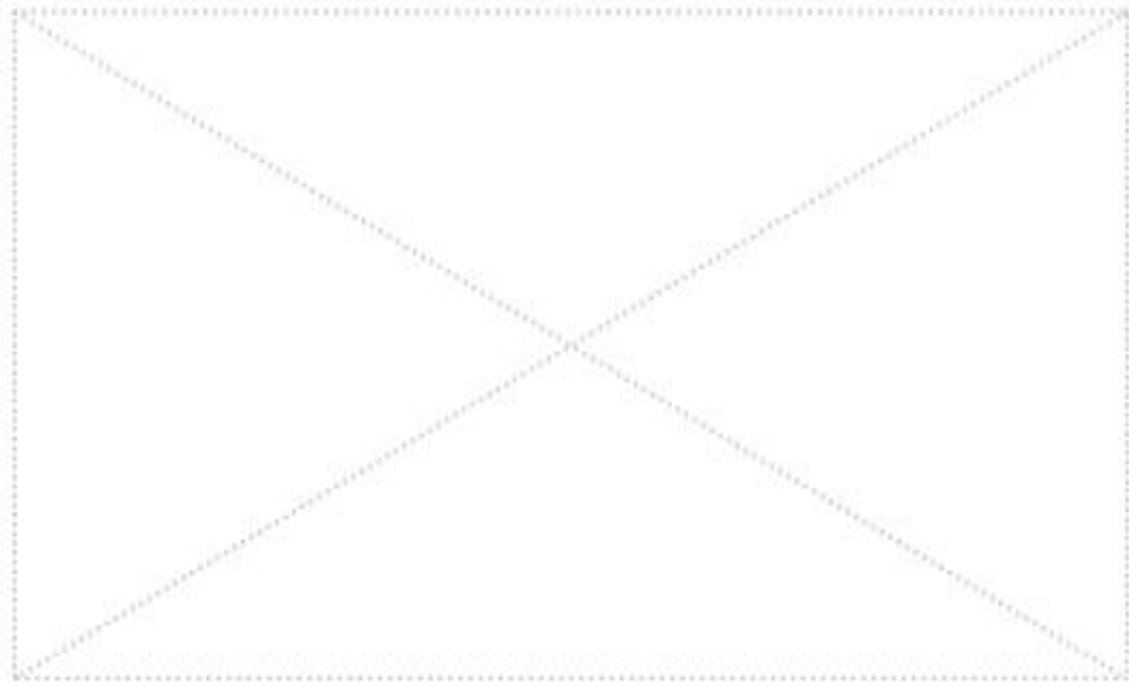
□ 핵심특허 (4)



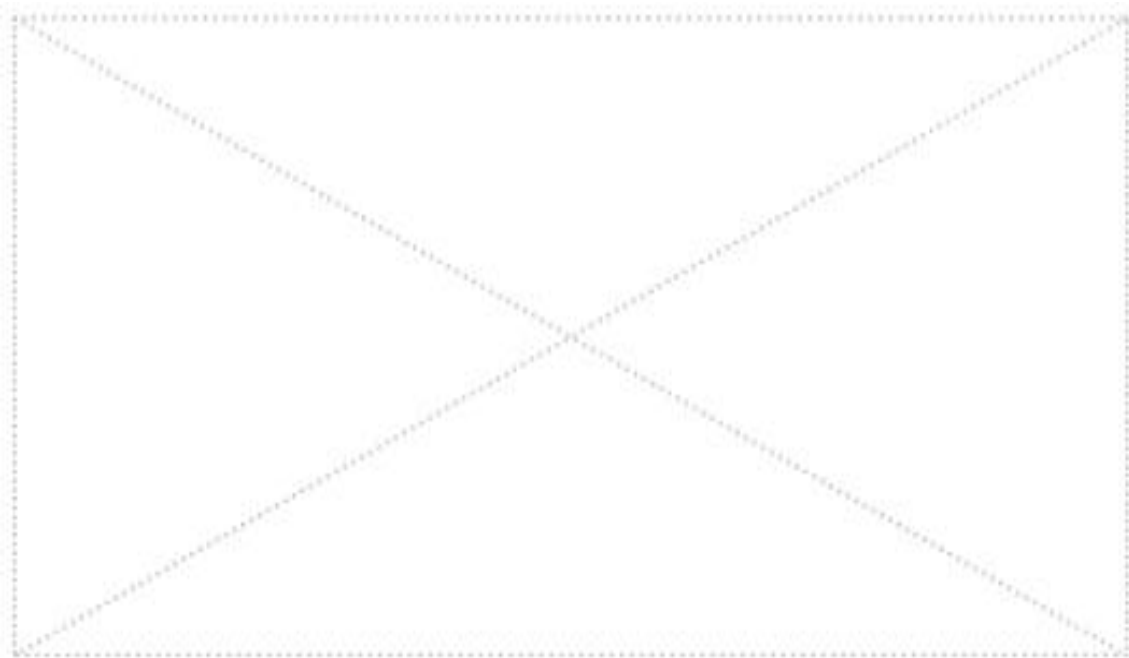
□ 핵심특허 (5)



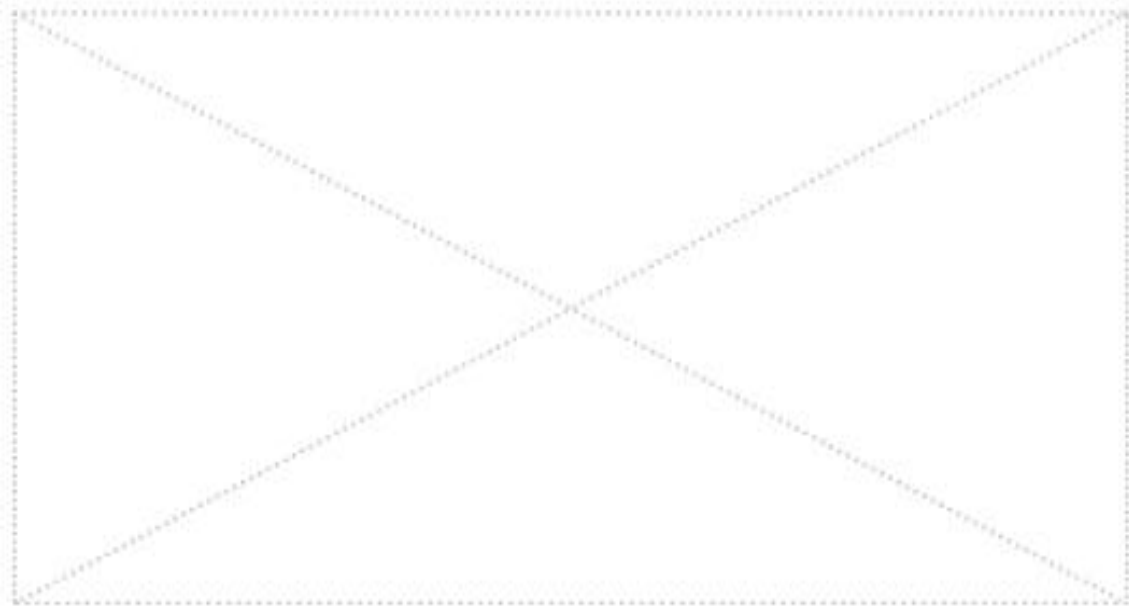
□ 핵심특허 (6)



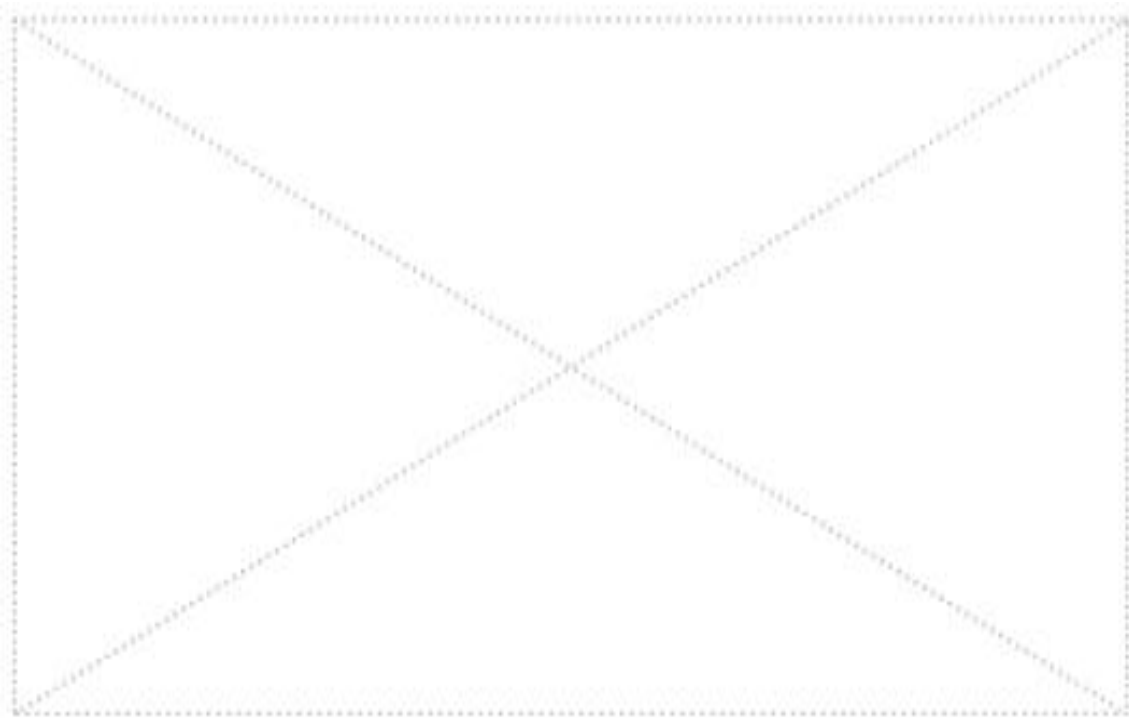
□ 핵심특허 (7)



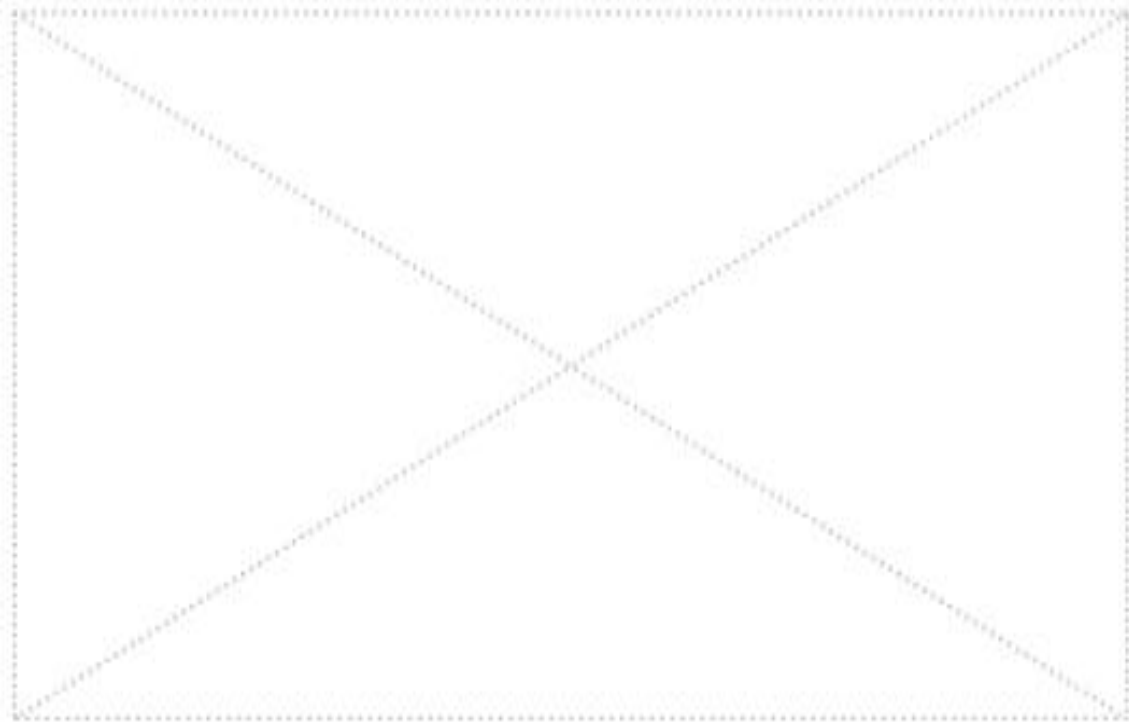
□ 핵심특허 (8)



□ 핵심특허 (9)



□ 핵심특허 (10)



- 핵심 특허 분석 결과 S등급에 대부분의 관련 특허가 유전체와 후보물질의 결합후보물질의 결합 정보에 기반한 후보물질발굴/약물 재창출과 관련된 특허로 분석되었음
 - IBM사의 경우 약물의 부작용에 기반한 정보를 이용하여 신약개발에 적용한다는 점에 특징이 있음
 - 또한 핵심특허 10건 중 국내 건은 4건에 해당하며, 4건 중 2건의 출원인이 각각 고려대학교 산학협력단, 서울대학교 산학협력단으로 국내의 인공지능 신약개발 플랫폼 기술은 주로 대학을 위주로 개발이 이루어지고 있는 것으로 파악되었음



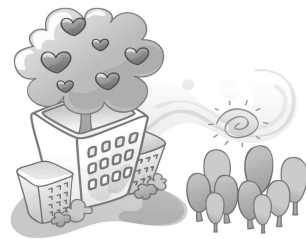
마. 분석소결

- (정량적 분석 결과) 인공지능 신약개발 플랫폼 관련 기술은 1990년대 특허출원이 시작되어 2017년 이후 보다 밀접한 기술의 출원량 급증
 - 주요시장국(KR, US, EP, JP)의 경우 미국, 한국, 유럽, 일본 순으로 관련 특허출원이 검색되었음
 - 주요출원인 분석 결과 최다출원인은 미국의 IBM사로 파악되었으며 한국의 경우 (주)신데카바이오가 9건으로 가장 많은 특허출원을 하였고 대학, 연구소 등의 출원이 다수인 것으로 파악되었음
- 인공지능 신약개발 플랫폼 관련 특허를 선별한 후 가장 밀접도가 높은 S 등급 특허출원 중 10건을 핵심특허로 분석한 결과, 대부분의 핵심특허가 유전체와 후보물질의 빅데이터 분석을 이용하여 신약개발에 적용하고자 하는 것으로 분석되었음



제3장

주요 추진내용



제3장 주요 추진내용

제1절 선행사업 추진현황

1. 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업

□ ‘인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업’을 중심으로, 후보물질 발굴부터 약물 감시까지 신약개발 전주기를 아우르는 AI 플랫폼 구축 연구를 진행 중에 있음

- 과학기술정보통신부, 보건복지부 주관으로 `19년부터 `21년까지 총 3년간 250억 규모로 현재 진행 중
- 후보물질 발굴(4), 신약재창출(1), 스마트 약물감시(1), 운영지원(1)으로 구성

<표 III-1> 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업

(단위 : 억 원)

연구 주제	선정 과제수	1단계				2단계		합계
		1차년도		2차년도		3차년도		
		연구기간	연구비	연구기간	연구비	연구기간	연구비	
후보물질 발굴	4개	2019.6.1.~ 2020.2.29.	45	2020.3.1.~ 2020.12.31.	50	2021.1.1.~ 2021.12.31.	55.5	150.5
신약 재창출	1개		11.2		12.5		13	36.75
스마트 약물감시	1개		11.2		12.5		13	36.75
플랫폼 운영지원	1개		7.5		8.3		8.5	24.3
합계	7개	9개월	75	10개월	83.3	12개월	90	248.3

○ 데이터 확보·표준화, 인공지능 플랫폼 개발, 예측 결과물의 검증 등의 연구를 수행하고 있음

- 공모 결과로 합성신약 분야만 집중적으로 지원되는 현황으로, 바이오 신약에 대한



지원이 미비한 실정임

- 플랫폼 구축 연구는 진행되고 있으나, AI를 활용한 후보물질의 개발 및 플랫폼 활용 방안에 대한 투자는 상대적으로 부족함

연구주제 **1** **신약후보물질 발굴을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축**

① 최종 목표

- 신약분야 국내외 연구 데이터를 활용한 신규 빅데이터/인공지능 기반 신약개발 플랫폼 구축 및 선도물질 발굴

② 주요 내용

- 인공지능 기반 신약개발 플랫폼 개발 및 검증, 빅데이터 기반 신약개발 플랫폼 구축을 통한 약물 디자인, 신약 선도물질 발굴 및 검증, 독성 예측 등 수행

③ 과제 구성

총괄과제명	수행기관	세부과제	
		세부	수행기관
[후보물질 1총괄] 인공지능 기반 신약 개발 통합 플랫폼 개발 및 신약 후보 물질 개발	주식회사 아론티어	1	주식회사 아론티어
		2	서울대학교
		3	울산대학교
		4	한국과학기술연구원
	플랫폼 정보	- 유전체 바이오 마커를 입력으로 약물 재창출과 MoA 분석 - 표적 정보를 입력받아 가능성 있는 후보 화합물 도출 - 단백질 구조와 후보 화합물 결합 정보 기반으로 신규 후보물질 디자인 - 단백질 구조와 후보 화합물 결합 정보 기반으로 가능성 있는 파생 화합물 디자인 - 단백질-화합물 결합 강도 예측 - 화합물 합성 가능성 예측 - 국내 제약사와 AD3 플랫폼을 이용한 후보 물질 발굴 1억원 규모 계약 진행	



총괄과제명	수행기관	세부과제	
		세부	수행기관
[후보물질 2총괄] 인공지능 기반 퇴행성 뇌질환 선도물질 탐색 플랫폼 개발	중앙대학교 약학대학	1	중앙대학교
		2	한국화학연구원
		3	주식회사 스탠다임
	플랫폼 정보	- (input) seed 화합물의 smiles ⇒ (output) 생성된 유사화합물 smiles / 독성 및 투과도 score - (input) 질병 query → (output) 질병에 관련된 타겟 리스트 및 질병과 타겟의 연결관계 - (input) 질병 관련 유전자 리스트 → (output) 질병 타겟 유전자 별 score	
[후보물질 3총괄] 항암신약 개발 혁신 인공지능 플랫폼 구축	대구경북첨단의료산업 진흥재단	1	대구경북첨단의료산업진흥재단 (위탁) 심플렉스 주식회사
		2	주식회사 메디코젬
		3	주식회사 유한양행
	플랫폼 정보	- (input) 화합물 구조 ⇒ (output) 암세포주에 대한 항암 활성 분석 / kinase 및 변이 저해 활성값 / GPCR 활성값 / 파마코포어 기반 타겟 단백질 활성값 - (input) 단백질-화합물 결합구조 ⇒ (output) 표적 단백질에 대한 저해 활성값 / 주요 신장 독성에 대한 독성·비독성 분류 / CYP450 저해값 예측	
[후보물질 4총괄] 빅데이터/인공지능 기반 신약개발 플랫폼 구축 및 신약 후보물질 도출	이화여자대학교 약학대학	1	이화여대
		2	주식회사 AITRICS
		3	한국과학기술정보연구원
	플랫폼 정보	- (input) SMILES (BBB, permeability, P-gp, hERG, HLM, MLM, RLM, CYP 5종, toxicity prediction, ligand-based prediction of inhibition activity) ⇒ (output) activity - (input) De-novo molecular design, scaffold-based molecular design ⇒ (output) 새로운 분자구조(SMILES) - (input) SMILES, Protein ID (Prediction of Drug-Target interaction) ⇒ (output) activity - (input) SMILES (SMILES 독성 motif 검출 모듈) ⇒ (output) toxicity - (input) SMILES (약물 반응경로 pathway 탐색 툴) ⇒ (output) interacting target과 연관된 pathway 발현량	

연구주
제

2

약물 재창출을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축

① 최종 목표

- 신규 인공지능 플랫폼 구축 및 약물 재창출(drug repositioning)

② 주요 내용

- 인공지능 기반 약물 재창출 플랫폼 구축
- AI를 이용한 약물 재창출 유효성을 입증하기 위해, 기존 약물에 대한 새로운 타겟 및 적응증 탐색·발굴

③ 과제 구성

총괄과제명	수행기관	세부과제	
		세부	수행기관
인공지능 기반 약물 재창출 플랫폼 구축 및 유효성 검증	한국과학기술원	1	한국과학기술원
		2	한국생명공학연구원
		3	한국생명공학연구원
	플랫폼 정보	- AI 모델 : 구조모델링, 약물-표적서열 기반 CNN 및 LSTM모델, GraphNN 모델, CapsuleNet 모델들의 개별 예측 엔진 및 조합 모델 엔진 (3년차에 암종별 예측 모델 개발 목표) - AI 훈련 데이터 : 약물 구조 descriptor, 결합표적 서열/구조, 약물 반응 전사체/표적활성/세포기전활성/부작용 - AI 훈련 결과 : 약물-표적 결합 예측 확률, 약물-효능 예측 확률	

연구주제 **3** 스마트 약물 감시를 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축

① 최종 목표

- 약물 부작용 빅데이터 구축 및 신규 인공지능 기반 스마트 약물 감시 시스템 확립

② 주요 내용

- 약물 부작용 발생 가능성 예측 모형 개발을 통한 약물 안전성 확보
- 의약품 안전정보 수집 및 탐지 기술개발, 약물 감시 지원 시스템 개발, 의약품 안전정보 종합분석 알고리즘 개발, 중증 이상 사례 검토 시스템 개발 등 포함

③ 과제 구성



총괄과제명	수행기관	세부과제	
		세부	수행기관
스마트 인공지능 기반 의료 현장 중심 항암제 약물 부작용 감시를 위한 공동데이터 활용 플랫폼 개발	서울아산병원	1	서울아산병원
		2	연세대학교
		3	주식회사 신테카바이오
	플랫폼 정보	- (input) EMR 기반 진단, 검사, 약물 ⇒ (output) 약물부작용 시점, 종류 예측 - (input) WES/RNAseq 유전자 데이터 + 임상 표현형 데이터 ⇒ (output) 바이오마커	

연구주제 4 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 운영·관리 과제

① 최종 목표

- 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 연구과제 지원, 운영 및 관리를 통한 정부 투자의 효율성 증진

② 주요 내용

- 1단계 (2019.06.~2020.12., 1.5년) : 연구과제 모니터링, 검증 프로세스 관리 및 효율적 운영 체계 정착, 통합 플랫폼 포털사이트 구축 및 운영, 플랫폼 시연 및 검증 등
- 2단계 (2021.01.~2021.12., 1년) : 성과 관리, 활용 및 홍보, 교육, 후보물질 평가를 통한 플랫폼 검증

③ 과제 구성



총괄과제명	수행기관	세부과제	
		세부	수행기관
인공지능 기반 신약개발 생태계 조성 및 활성화를 위한 과제 지원	대구경북첨단의료산업진흥재 단	1	대구경북첨단의료산업진흥재 단 (위탁)한국제약바이오협회
		2	오송첨단의료산업진흥재단
		3	심플렉스 주식회사
	플랫폼 정보	<ul style="list-style-type: none"> - 통합 포털사이트 운용 (www.kaidd.re.kr) : 한 번의 데이터 입력으로 6개 플랫폼 동시 구동 및 통합 결과 도출 - (input) 화합물 or 단백질 구조, 화합물-단백질 결합 구조 등 ⇒ (output) 타겟, 유효성, 안전성, 독성, 신규적응증, 임상 부작용 - (input) 화합물 구조, 단백질 구조, 화합물-단백질 결합 구조 ⇒ (output) 신규 구조 제안 	

□ 1단계(2019~2020) 운영·지원과제 수행성과

○ (통합 포털사이트 구축 및 운용) 인공지능 신약개발 플랫폼 통합 포털 사이트(www. kaidd.re.kr) 오픈('19. 11.) 및 고도화('20. 11.)*

*사업 소개 및 플랫폼 소개 페이지 등으로 구성(알파버전), '21년 상반기 6개 플랫폼 API 등을 탑재한 베타버전 오픈 예정

○ (데이터 표준화) 화합물 및 바이오 데이터 요소의 형식 및 값의 범위 등을 일정 기준에 맞추도록 데이터 표준화 수행

- 2단계 계획: 데이터 표준화(안) 도출('21.1Q) → 6개 플랫폼 데이터 수합('21.2Q) → DMP에 따른 데이터 기탁(KISTI) 및 통합 플랫폼 내 API 관리('21.3~4Q)

○ (시연 및 검증) 각 연구과제 플랫폼의 객관적 분석 및 고도화 지원

구분	주요 활동
플랫폼 시연 행사	<ul style="list-style-type: none"> - 인공지능 신약개발 플랫폼 시연 및 컨설팅(20.07.23.) - 컨설팅 의견서 플랫폼 과제, 부처, 전문기관에 제공(20.08.10.)
AI플랫폼 모델 검증 추진	<ul style="list-style-type: none"> - 플랫폼의 예측 정확도 확인을 위해 모델 특성에 따른 검증 추진 · 대구신약센터 제공 데이터를 활용한 검증 · 플랫폼 총괄 과제에서 제안하는 자체 검증



- (회의체 운영) 사업운영 방안, 6개 플랫폼 모델 통합, 시연 및 검증, 연구자 애로사항 해결 등 과제 수행 연구자 지원

회의체 종류	역 할	1년차 (2019)	2년차 (2020)
운영위원회	사업 운영 방안 설정	3회	10회 (운영위와 통합 운영)
기술소위원회	플랫폼 기술 현안 논의 및 해결	14회	
과제지원단	플랫폼 과제 지원 방안 도출	4회	13회
과제협의회	사업 설명, 애로사항 청취	1회	상시 수렴 (코로나19로 상시 운영)

- (제약사 자문단 운영) 인공지능 신약개발 전문가 자문단*을 구성하여 시연 및 검증 시 플랫폼 성능 향상 지원 컨설팅(2차년도 2회 운영)

*국내 상위 8개 제약회사 인공지능 및 신약개발 전문가 12명 구성

□ 2단계(2021) 운영·지원과제 추진계획

- (통합 플랫폼 구축) 유형별 사용자의 요구를 반영하여 활용도 높은 포털사이트 구축·운영

- 통합 포털사이트에서 6개 플랫폼의 API를 제공
- 포털사이트 사용 통계 및 설문 제공하여 사용자 편의성 향상

<표 III-2> 통합 플랫폼 구축 활용체계 추진 일정

추진업무	2021			
	1분기	2분기	3분기	4분기
API 접수 및 링크				
통합 포털 운영 체계 및 매뉴얼 마련				
베타 테스트 (Closed/Open)				
사용자 피드백 수렴 및 운영 성과 점검				
기술적 개선 방안 마련				
일반 공개				
사업 종료 후 포털 지속 운영 방안 마련				

<표 III-3> 통합 포털사이트 구성 및 제공 서비스



구분	기능
Contact 배너	· 회원 서비스로 가입 후 사용 가능
Platform 배너	· 6개 플랫폼 소개 페이지
Service 배너	· 플랫폼 접속 기능 : 플랫폼 링크 / COMBINE™ 매뉴얼 및 다운로드 · 필요 자료 제공 - 데이터표준화 가이드라인 - 예측 모델 관련 자료 및 기탁 DB 다운로드 - KAIDD 웹사이트 사용방법 및 API 이용 매뉴얼
추가 기능	· 캘린더 : 내부·외부·교육·행사 일정 확인 및 신청 · 모바일 반응형 구현 : 접속하는 기기 종류에 따라 화면 크기가 자동으로 변환

- (과제별 플랫폼 검증) 대구첨단의료산업진흥재단 신약센터(지원과제)가 보유 중인 미공개 데이터를 각 총괄 과제로 제공 및 플랫폼의 객관적 검증 추진

<표 III-4> 각 과제별 플랫폼 검증방안 개요

과제명	검증 방안
후보물질 발굴 (4개)	대구신약센터가 보유한 미공개 데이터를 각 플랫폼에 제공 후, 예측값을 실제 실험값과 비교
약물재창출 (1개)	국내 합성신약의 신규 적응증을 예측하고, 해당 신약을 소유한 제약사에 예측 데이터 제공하여 검증 진행
스마트약물감시(1개)	ASCO EMR 등 검증용 외부 임상 데이터 확보 추진

- 1단계 검증 결과('21. 01.~02.)를 바탕으로 플랫폼 고도화를 지원하고, 2단계 도출 예정인 신규 모델의 검증을 병행('21. 계속)
- 신약개발지원센터에 구축된 인프라 및 외부기관을 적극 활용하여 플랫폼에서 도출한 후보물질의 유효성 및 약물성 추가 검증 추진

<표 III-5> 3차년도 상세 일정(과제별 플랫폼 검증)



추진업무		2021년 (3차년도)			
		1분기	2분기	3분기	4분기
데이터	운영과제 검증용 데이터 제공 (2회차)				
	1차	검증 보고서 초안 공동 작성 및 결론 도출			
		검증 행사 및 제약사 자문단 컨설팅			
		컨설팅 결과 공유 및 고도화 추진			
	운영과제 검증용 데이터 추가 제공 (필요시)				
	2차	검증 보고서 공동 작성 및 결론 도출			
검증 행사 및 제약사 자문단 컨설팅					
컨설팅 결과 공유 및 고도화 추진					
후보물질 검증지원 (필요시)					

○ (데이터 표준화) 인공지능 신약개발 플랫폼에 최적화된 데이터 표준화(안) 마련

- DMP에 따라 6개 플랫폼별로 구축한 데이터* 접수 및 표준화 후 통합 포털사이트 탑재 및 연구데이터 관리 기관에 기탁

*화합물 구조 및 유효성 등 개별 과제에 개발 플랫폼에 따른 데이터 예정

<표 III-6> 데이터 표준화 관련 추진 일정

추진 일정	주요 사항
2020.12.	데이터 표준화(안) 최종안 완성
2021	(상반기) 데이터 표준안 실행을 위한 세부내용 협의 및 보완
	(상반기) “인공지능 신약개발 데이터 표준화 매뉴얼” 제작 및 활용

<표 III-7> 인공지능 신약개발 플랫폼 구축 및 연구개발 성과

신약후보물질 발굴을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	
1	(플랫폼) 유전체 기반 약물 재창출·MoA 분석, 표적 및 단백질-화합물 결합 기반 후보물질·유도체 설계, 단백질-화합물 결합강도 예측, 합성가능성 예측 모델 등 (성과) Y대병원 공동연구로 신규 당뇨 치료제 후보물질 발굴, 국내 제약사와 AI 활용 후보물질 발굴 연구 진행 (‘20.07~) 등
2	(플랫폼 구축) 화합물 구조 기반의 유도체 디자인, 질환 타겟 리스트 및 연결성 예측 모델, 독성 및 투과도 예측 모델, 질환 타겟 유전자 예측 모델 등 (성과) SK chemical, HK InnoN, 한미약품과 공동연구 진행 중, 모 제약회사와 공동연구 진행 (undisclosed)
3	(플랫폼 구축) 세포주 항암 활성 분석, kinase 및 GPCR 저해능 예측, 파마코포어 기반 타겟 활성, 신장 독성 예측, CYP450 저해값 예측 등

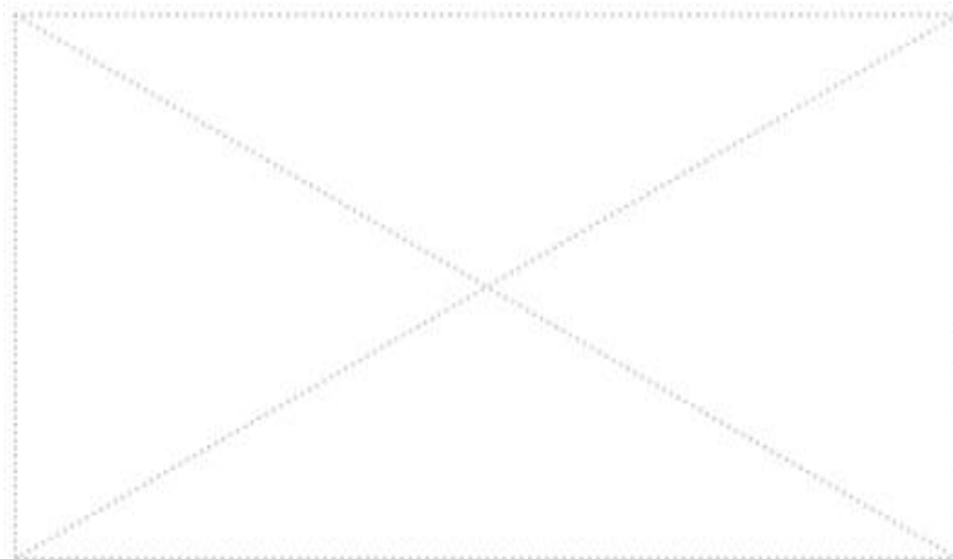


	(성과) 후보물질 발굴 완료 및 기술이전 논의 중
4	(플랫폼 구축) BBB, permeability, P-gp, hERG, HLM, MLM, RLM, CYP 5종, 독성, 타겟 저해능 예측 모델, 신규 약물 디자인 모델, 약물-타겟 결합 예측 등 (성과) 7개 기업과 공동연구 진행중, 논문 5건 출판(`20.06 기준)
약물 재창출을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	
5	(플랫폼 구축) 구조모델링, 약물-표적서열 기반 CNN 및 LSTM모델, GraphNN 모델, CapsuleNet 모델들의 개별 예측 엔진 및 조합 모델 엔진 구축, 약물 반응 전사체를 포함한 훈련 DB 확보 (성과) 암 예방 또는 치료용 약학 조성물 발굴, MOA 발굴 등
스마트 약물감시를 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	
6	(플랫폼 구축) EMR 기반의 약물 부작용 시점·종류 예측 모델, 유전자 및 임상 표현형 데이터 기반의 바이오 마커 예측 모델 (성과) 면역항암제 다기관 임상 진행, 약물 부작용 탐지기술 개발, 논문 2건 출판, 특허 1건 출원, 시작품 제작 4건 (`20.06 기준)
운영 지원	- (통합 포털 사이트) 구축 및 운용 - (데이터 표준화) 데이터 표준화(안) 도출 (`21.1Q), 2분기 데이터 수합 예정 - 인공지능 신약개발 플랫폼 시연 (`20.07) 및 총괄 6개 플랫폼 검증 진행 中

□ 구축 및 운영 진행 상황

- 도메인 확보 및 오픈 (www.kaidd.re.kr, `19.11), 1차 고도화 진행 (`20.11)

<그림 III-1> 통합 포털 사이트 갈무리



구분	기능
Platform 배너	· 6개 플랫폼 소개 페이지 (현재 고도화 중)
Service 배너	· 플랫폼 접속 기능 : 플랫폼 링크 / CEEK™ 매뉴얼 및 다운로드 · 자료 제공 (▲데이터표준화 가이드라인, ▲예측 모델 관련 자료, ▲기탁 DB 다운로드, ▲ 웹사이트 및 API 이용 매뉴얼)
Contact 배너	· 질의 응답 등 (회원 서비스)

- 現 6개 총괄 과제 API 접수 및 포털 링크 진행 중 (~ `21.06)
- 포털 베타버전 오픈 및 비공개 테스트 진행 예정 (`21.06)
- 공공 오픈 및 사용자 교육 예정 (`21.상)
- 디버깅 및 고도화 진행 (~`21.12)

○ 연구 종료 후 예상 성과 및 활용 계획

- 통합 포털사이트 구축
- 인공지능 신약개발 전문인력 양성
- 인공지능 플랫폼을 활용하여 개발 기간 단축 및 비용 절감
- 플랫폼을 통한 선도·후보물질 파이프라인 확보
- 혁신신약 개발 글로벌 경쟁력·생산성 제고

□ 선행사업과 본 사업의 차별성

○ (선행사업) 후보물질 발굴, 신약 재창출, 스마트 약물 감시 투자 분야의 연구과제(데이터 확보·표준화 인공지능 솔루션 개발, 예측 결과물의 실험적 검증)와 인공지능 활용 신약개발 플랫폼 구축 지원과제 지원

- 신규 타겟 및 선도물질(Lead compound) 도출
- 빅데이터 플랫폼, Application Programming Interface(API) 공공 서비스 제공

선행사업	연구주제명	선정 예정 과제 수	지원 규모	성과목표
------	-------	------------	-------	------

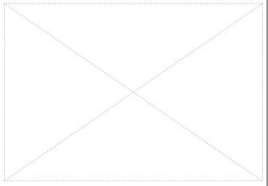
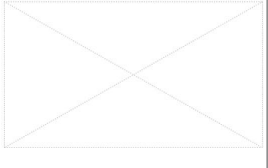


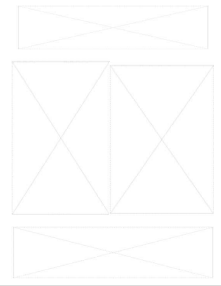
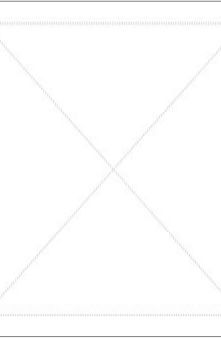
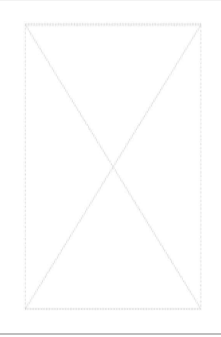
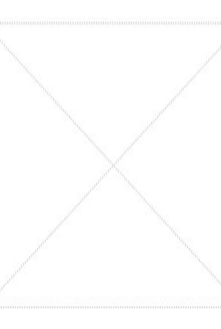
선행사업	연구주제명	선정 예정 과제 수	지원 규모	성과목표
후보물질 발굴	신약 후보물질 발굴을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	총괄과제 4개 내외	과제당 11.25억원 총 3년(2+1)	SCI 논문, 선도물질 도출 특허출원, API 공공서비스 제공
신약 재창출	약물 재창출을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	총괄과제 1개 내외	11.25억원 내외 총 3년(2+1)	SCI 논문, 5종 이상 신규 타겟 발굴 특허출원, API 공공서비스 제공
스마트 약물 감시	스마트 약물감시를 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	총괄과제 1개 내외	11.25억원 내외 총 3년(2+1)	SCI 논문, 특허출원, API 공공서비스 제공
인공지능 활용 신약개발 플랫폼 구축 지원	인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 운영·관리과제	총괄과제 1개 내외	7.5억원 내외 총 3년(2+1)	-

○ (본 사업) 인공지능 신약개발 플랫폼 고도화 및 활용 지원을 통한 가시적 신약개발 성과 창출

- 선행사업 우수 플랫폼 및 신규 플랫폼 활용 후보물질 도출
- 인공지능 모델을 직접 활용하여 빠르고, 효율적으로 신약개발의 가시적 성과가 창출되도록 지원
- 신약개발 전 단계에 활용 가능한 인공지능 모듈 및 바이오의약품에 적용 가능한 확장형 모듈 및 플랫폼 개발

<표 III-8> 2019년 선행사업 수행 연구주제별 주요 성과('21. 05. 진행 중)

<p>○ 인공지능 기반 신약 개발 통합 플랫폼 개발 및 신약 후보 물질 개발 : (아론티어) 후보물질 발굴</p> <ul style="list-style-type: none"> - 연세의료원과 AD3 플랫폼을 이용하여 새로운 당뇨 치료제 후보 물질 발굴 (약물 재창출). in-vivo 검증되었으며, 특허 출원 준비 중 - 국내 제약사와 AD3 플랫폼을 이용한 후보 물질 발굴 1억원 규모 계약 진행 	
<p>○ 인공지능 기반 퇴행성 뇌질환 선도물질 탐색 플랫폼 개발 : (중앙대학교) 후보물질 발굴</p> <ul style="list-style-type: none"> - 다수 제약회사와 공동연구 진행 中 (undisclosed) - 논문 4건 출판 / 특허 4건 출원 	

<p>○ 항암신약 개발 혁신 인공지능 플랫폼 구축 : (DGMIF) 후보물질 발굴</p> <ul style="list-style-type: none"> - 모델 구축, 대구-유한양행의 실험을 통한 검증을 함께 진행 - 신약개발 연구자를 통해 인공지능 기술 접목에 대한 니즈 파악하여 표적이나 기전이 명확한 후보물질 도출 	
<p>○ 빅데이터/인공지능 기반 신약개발 플랫폼 구축 및 신약 후보물질 도출 : (이화여자대학교) 후보물질 발굴</p> <ul style="list-style-type: none"> - 빅데이터/인공지능 기반 예측 모듈 개발 및 신약개발 플랫폼 구축 - 구축 중인 플랫폼을 활용하여 저해제 개발 연구에 응용 중 - 기업과 공동연구 : 7개 기업과 진행 중 - 논문 5건 발표 및 인력 배출, 인공지능 경진대회 입상 	
<p>○ 인공지능 기반 약물 재창출 플랫폼 구축 및 유효성 검증 : (KAIST) 약물재창출</p> <ul style="list-style-type: none"> - 구축 중인 예측 모델 활용하여 irinotecan 포함하는 암 예방 또는 치료용 약학 조성물 발굴 - AI모델 기반 항암 표적 약물 후보 선정 및 실험 검증을 통한 표적들의 구조 및 기전 발굴 - 논문 6건 출판 / 특허 1건 출원 	
<p>○ 스마트 인공지능 기반 의료 현장 중심 항암제 약물 부작용 감시를 위한 공동데이터 활용 플랫폼 개발 : (서울아산병원) 스마트약물감시 총괄</p> <ul style="list-style-type: none"> - 면역항암제 대상 다기관 임상연구 진행 - 다기관 후향적 자료 기반 약물부작용 시그널 탐지기 기술 개발 - 바이오마커 발굴 알고리즘 구축 - 논문 2건 출판 / 특허 1건 출원 / 시작품 제작 4건 	

<표 III-9> 선행사업 AI 시연행사 과제별 컨설팅 주요 의견('20. 07. 일부 발췌)

과제명 (기관명)	자문단 주요 의견
후보물질 (아론티어)	<ul style="list-style-type: none"> • 신약 타겟 발굴에서 선도 물질 도출까지 전체적인 과정을 AI모델로 진행하고, 실제 화합물의 시험 결과와의 비교를 통하여 신뢰성을 확보하고 검증 • 각 모델의 정확성 개선이 향후 제일 중요함
후보물질 (중앙대)	<ul style="list-style-type: none"> • 지식기반으로 타겟을 선정하는 스탠다임의 ASK는 활용도가 높을 것으로 예상됨



과제명 (기관명)	자문단 주요 의견
	<ul style="list-style-type: none"> - 지식기반 표적발굴 및 BBB투과, 간독성 및 심장독성 예측 모델 설명, 화합물의 구조 이미지를 통한 독성 예측 가능한 점 • 알려진 다른 타깃을 이용하여 AI프로그램 검증이 필요함
후보물질 (DGMIF)	<ul style="list-style-type: none"> • 표현형, 구조기반, 독성데이터를 7개의 AI모델로 제시하여 사용자가 선택적으로 사용 가능한 점 및 방대한 데이터의 비주얼화/ fragment 기준 화합물 구조 생성으로 합성 가능하고 특허성 확보가 가능함 • 유한양행 및 DGMIF의 지원을 통해 실험적(일부) 검증이 가능할 것으로 보이며, 이에 대한 추후 정량, 정성적 분석이 진행된다면 좋겠음
후보물질 (이화여대)	<ul style="list-style-type: none"> • 과제 목표에 가장 적합한 AI 플랫폼의 시연을 보여 줌 <ul style="list-style-type: none"> - 타깃 → ADME/독성 예측과 서버에서 API외에 코드의 공개를 통해 보안의 이슈를 해결한 점, 합성신약 선도물질 발굴에 필요한 다양한 모델, API 공개, 커뮤니티 등 공개형 플랫폼, 설명 등이 잘 구축되어있고 지속 고도화 진행 중임 • 신규로 예측되어 제공되는 화합물이 기존 알려진 화합물과 얼마나 떨어져 있는지 보여줄 필요성 있음
약물재창출 (KAIST)	<ul style="list-style-type: none"> • 기존 약물의 부작용, 기전, 구조 등의 복합적 데이터를 AI 이용하여 분석하고, 이를 기반으로 약물 재창출 및 약효 예측이 가능한 점 • 기 공개 약물이라, 실제 결과값과의 비교가 빠르게 가능할 것이라 생각됨 <ul style="list-style-type: none"> - 약물 재창출이란 검증의 범위에 대한 정의가 명확해야 하며, 기존 선도물질 발굴 수준과는 차별화 되어야 함
스마트약물감시 (아산병원)	<ul style="list-style-type: none"> • 계획한 목표, 일정에 대한 플랫폼 구축이 잘 진행되고 있음 <ul style="list-style-type: none"> - 특히 임상환자 기반의 양질의 임상 데이터 확보가 잘 되고 있음(걱정했던 부분) - 또한 feasibility test도 진행된 상태여서 향후 플랫폼 적용에 무리가 없어 보임 • 추후 다른 질환에도 적용할 수 있도록 지원 고려
운영과제 (DGMIF)	<ul style="list-style-type: none"> • AI 기반 신약개발 사업에 대한 시연/검증 계획하여 신뢰성 확보 / 쉽게 접근 가능한 사이트 오픈 • 아직까지 구체적인 데이터가 없어, 이후의 검증을 거친 이후 판단 필요 / 향후 제약사가 사용 위해 보안 관련 정책을 마련 필요 등



제2절 본사업 추진내용

1. 사업 개요 및 주요 추진내용

- (사업명) 인공지능 활용 혁신신약 발굴 사업
- (사업 목표) 인공지능 신약개발 플랫폼 고도화 및 활용 지원을 통한 가시적 신약개발 성과 창출
- (기간/규모) '22~'26(5년, 3+2) / 총 407억 원('22년 40억 원)
※ 현 반영 14.5억
- (사업내용) 인공지능 플랫폼을 고도화·활용하여 신약 타겟 및 후보물질을 도출함으로써 인공지능 활용 신약개발의 가시적 성과 창출
- 분야별 추진내용

1 인공지능 활용 후보물질 발굴 ('22년 27억 원, 3개 과제×12억 원/년×9개월, 총 4년)

- 선행사업에서 구축되었거나, 별도 연구팀에서 구축한 인공지능 플랫폼을 고도화하고 직접 활용하여 신약 타겟 및 후보물질 도출
 - 인공지능을 직접 활용하여 신약개발 성과 창출이 가능한 분야를 수요조사·간담회 등을 통해 도출하여 지원 분야 및 지원 규모 확정
 - '22년, '23년으로 2차에 걸쳐 각 차수별 3개 과제 지원하며, 2단계 진입 시 3개 과제 중 2개 과제만 선정하여 집중 지원(경쟁형 R&D)
- 인공지능 연구자, 신약개발 전문가 및 제약사의 협력연구를 유도하고, 도출 성과의 후속 지원 방향 확보 추진
 - 인공지능 모델을 활용하여 혁신신약을 개발함과 동시에, 연구결과는 인공지능 플랫폼 고도화에 사용되는 선순환 구조 구축
 - 지원과제는 AI 모델 구축 및 활용 방안, 신약개발 전문가 협업, API 제공 계획을 상세히



제시하여야 하며, 운영지원과제와 협력하여야 함

2 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화 (‘22년 9억 원, 6개 과제×2억 원/년×9개월, 총 3년)

- 연구자 수요(신물질 설계, SAR 기반 후보물질 최적화, 약동/약력 분석, 후보물질 유효성 검증 등)를 반영한 목표 지향적 신규 플랫폼 모듈 구축 및 검증
 - 하향식(Top-Down) 과제와 상향식(Bottom-up) 과제* 병행 지원
 - *△하향식 : 수요·동향을 바탕으로 신규 개발이 필요한 플랫폼 도출,
 - △상향식 : 연구자 의견에 기반한 자유 공모 과제
 - ‘22~‘24년 매년 6개의 신규 과제를 선정하고, 2단계 진입 시 과제의 50%만 선정해 집중 지원(경쟁형 R&D)
- 구축 모델은 ‘인공지능 통합 포털 사이트’를 통해 API를 기탁하고 최소 3년간 해당 모델을 공공 목적으로 공개
 - API 공개 계획에 따른 연구비 차등 부여, 활용에 따른 수익 모델 창출 등으로 적극적인 모델 공개 유도

3 운영 지원 및 공공 플랫폼 운영 (‘22년 4억 원, 1개 과제, 총 5년)

- 마일스톤 기반 과제 진도관리, 네트워킹 등을 통한 가시적 성과 창출을 지원하고, 공공 포털 사이트 운영을 통한 인공지능 신약개발 생태계 조성
- ‘22년 1개의 신규 과제를 선정하여, 총 5년을 지원하고 운영 지원, 검증 지원 및 공공 포털 사이트 운영을 위한 총괄 과제로 구성

<표 III-10> 분야별 사업비 투자 계획

(단위 : 백만 원)



구 분		'22	'23	'24	`25	`26	합계
인공지능 활용 후보물질 발굴		2,700	6,300	7,200	7,200	3,600	27,000
신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화		900	2,100	3,300	2,400	1,200	8,100
운영·지원	R&D 지원*	300	700	1,100	800	400	3,300
	포털 운영	100	100	100	100	100	500
합계		4,000	9,200	11,700	10,500	5,300	40,700

*R&D 지원 예산에는 CRO를 활용한 구축 모델 검증 비용이 포함됨

2. 선행사업과의 차별성

가. 선행사업 성과 및 현재 진행 현황

■ 각 세부과제에서 인공지능 신약개발 플랫폼 구축 완료

○ 구축된 인공지능 플랫폼을 활용하여 국내 제약사와 신약개발 공동연구를 수행하거나 직접 유효·선도물질 도출 후 기술이전 추진 중

□ (1세부) 후보화합물 도출 모델을 포함하는 신약개발 플랫폼 개발 완료

○ 31억 투자 유치 성공 및 국내 제약사와 AI플랫폼 활용 신약탐색 연구 중

□ (2세부) 퇴행성 뇌질환 선도물질 탐색 플랫폼 개발 완료

○ SK Chemical, HK InnoN, 한미약품 등과 공동연구 진행 중

□ (3세부) 항암 신약개발 플랫폼 구축 완료

○ AI를 활용한 항암 유효물질을 발굴하고 현재 기술이전 협상 중

□ (4세부) 항암, 항섬유화증 등 치료제 개발을 위한 빅데이터/AI 플랫폼 구축 완료(세계 인공지능 경진대회 입상 등 12건의 수상실적 보유)

○ 구축된 AI 플랫폼을 활용하여 7개 기업과 공동연구 진행 중

□ (5세부) AI 기반 약물 재창출 플랫폼 구축 완료

○ 구축 모델을 활용한 암 예방 또는 치료용 약학 조성물 발굴



□ (6세부) 약물 부작용 시그널 탐지기술 개발

○ 논문 2건, 특허 1건, 시제품 제작 4건 등의 성과 창출

□ (운영지원) 인공지능 신약개발 공공포털 사이트 구축 및 인공지능 활용을 위한 데이터 표준(안) 도출

<표 III-11> 선행사업(인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업) 성과 요약



사업명	인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업					
	대학	병원	대기업	중소/벤처	정출연	기타
산/학/연/병 사업 참여 현황	12	1	2	7	5	0
플랫폼 구축	예측모델 구축 완료 건수		26	예측모델 구축 진행 중 건수		2
논문	게재 (Published)		심사 중 (Under revision)		제출 (submitted)	
	80		3		3	
특허	등록		출원		기타(준비 중)	
	6		19		2	
인재 양성	총계		박사		석사	
	44		21		23	
수상	실적		상세내용			
	2건 (대표실적)		1. Kaggle(Google 자회사)주관, 세계 인공지능 경진대회 'Predicting Molecular Properties' 3위 입상 2. 과학공로대상(KOREA AWARDS)			
경연대회	1건 (Kaggle(Google 자회사)주관, 세계 인공지능 경진대회)					
공동연구	20개 국내·외 산/학/연/병 등 연구기관과의 다수 공동연구 수행 중 - SK케미칼, HK이노엔, 한미약품, 삼진제약, Panorama Research Inc, KRIBB, 서울아산병원, 신촌 세브란스병원, 국립암센터, 서울대병원, 삼성서울병원, UCSD 등					
후속과제	1건 (산업통산자원부, 바이오산업핵심기술개발사업)					
투자	신주발행 유상증자(636억원) 및 143억원 투자 유치					
고용창출	71명 신규 인력 고용창출					
매출증대	0.4억원					
기타	1. 창업 2건 2. Google Education/Course Grant 선정 3. 글로벌 AI 신약개발 연구센터 설립					

나. 선행사업의 한계 및 후속연계 필요성



■ 특정 질환에 대한 신약개발에 성공해도 추가적인 지원을 통해 차세대신약 (Best-in -Class/First-in-Class) 개발에 도전하는 것처럼, 인공지능 모델 또한 지속적인 연구를 통한 고도화가 필요함

□ (가시적 성과 창출 필요) 현재 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업(선행사업, '19~'21)을 통해 인공지능 활용 신약개발 R&D를 지원*하고 있으나, DB 구축과 인공지능 모델 개발에 집중하여 신약개발에 인공지능을 활용한 '가시적 성과(신약 후보물질)'를 얻기에는 부족함

*데이터 확보·표준화, 인공지능 플랫폼 개발, 예측 결과물의 검증 등의 연구를 수행 중

⇒ 이에 후속사업을 통해 인공지능 플랫폼 고도화·활용 지원을 통한 실질적·가시적 인공지능 활용 신약개발 성과(임상 진입이 가능한 후보물질) 창출이 필요함

□ (플랫폼 고도화 필요) 선행사업에서 구축된 인공지능 플랫폼에 지속적으로 생성되고 있는 신약개발 데이터를 추가하여 고도화에 활용하고, 공공활용 강화 및 기 구축 모델의 장단점 분석 및 개선을 통해 더욱 완성된 인공지능 플랫폼 개발이 가능함

⇒ 운영지원과제를 통해 구축된 인공지능 플랫폼의 공공활용을 활성화하고, 신약개발 각 단계에(혹은 전반에) 활용 가능한 확장형 인공지능 모듈의 선제적 확보를 통한 인공지능 기반 신약개발 플랫폼의 다양화 지원이 필요함

※ (선행사업) 공모를 통해 과제를 선정하여 연구주제가 합성신약에 치중되는 경향

(본 사업) 후보물질 도출, 신물질 설계, 후보물질 최적화, 약동·약력 분석, 독성예측 등 신약 개발 단계에 활용 가능한 인공지능 모듈을 연구자 수요 기반으로 개발지원하고 바이오의약품에 적용 가능한 확장형 모듈 개발까지 포함

<표 III-12> 선행사업 성과(모델/데이터/플랫폼) 추가개발 필요성



구분	현재 개발 현황	추가개발 및 고도화 필요성
AI모델	<ul style="list-style-type: none"> Docking 예측, 독성 예측, de novo 디자인을 위한 인공지능 모델 ⇒ 현재 인공지능 모델은 AI 신약개발 플랫폼의 필수기능을 구현하는 수준 	<ul style="list-style-type: none"> GENTRL 등 최신 기술 적용과 유전독성, PK, 바이오 신약 예측 등을 위한 인공지능 모델 개발
데이터	<ul style="list-style-type: none"> 공개 국내외 DB 데이터와 자체 일부 데이터를 확보·DB화하여 플랫폼에 탑재 	<ul style="list-style-type: none"> AI 성능 고도화를 위해서는 지속적 데이터 추가 필요 ※ 화합물, 단백질, 독성 데이터에 추가적으로 유전정보, 바이오 신약 등 데이터 추가 필요
플랫폼	<ul style="list-style-type: none"> 검색, 가시화, 가상 스크리닝, 독성 예측 및 de novo 약물 디자인 기능 등 플랫폼의 필수 기능 개발된 수준 	<ul style="list-style-type: none"> 현재 탑재된 공공플랫폼 기능의 고도화, 자동화, 사용자 맞춤형 기능 추가 필요

다. 추가 인공지능 모듈 개발 필요성

□ 관련 기술의 발전에 따라 신기술을 적용한 새로운 플랫폼 개발 필요

- 기존 AI 활용 신약개발의 범위(약효 예측, 독성 예측 등 실험실에서 수행하는 일련의 작업을 AI 대체)에서 더 나아가 타겟을 저해하는 새로운 약물의 구조를 직접 제안하는 등 혁신적 AI 신약개발 기술 도입 필요
- (예시) In silico Medicine이 자체 개발한 GENTRL 모델을 활용한 후보물질 도출법이 최근 각광받고 있으나, 선행사업에서는 약효 예측 및 독성 예측 등 기존 AI 활용 신약개발 범위 내에서 주로 연구가 수행되었음

□ 선행사업에서 지원하지 않았던 모델 추가 도입 지원 필요

- 신약개발은 하나의 신약이 시장에 나오기까지 여러 단계를 거쳐야 하며, 이에 따라 필요한 인공지능 모듈의 종류가 매우 다양
- 유전독성, PK(약동학), 바이오 신약 예측 분야 등 선행사업에서 구축되지 않은 인공지능 모듈의 개발 지원이 필요

라. 선행사업과의 차이점



- (가시적 성과 창출) 인공지능 플랫폼을 활용한 타겟 및 후보물질 발굴
 - 신약개발 전문가, AI 전문가, 제약사의 공동 연구를 통해 인공지능 활용 신약 개발의 가시적 성과 창출
 - AI 개발자, 신약연구자 및 제약사로 과제가 구성되도록 후보물질 발굴 과제의 RFP 상 명시하여, 제약사의 노하우, 데이터 및 인프라가 적극 활용 되도록 기획
- (공공활용 강화) 사업의 성과가 공공으로 활용될 수 있도록 구축 플랫폼의 지속적 운영 방안을 도출하여 적극적 지원
 - 인공지능 신약개발 플랫폼의 공공성 강화 및 안정적 활용체계 구축
 - “공공 인공지능 신약 포털사이트”를 활용한 환류를 위해 운영비 마련을 포함한 전반적 운영 체계를 구축하고, 공공성 강화를 위한 방안 강구
- (인공지능 플랫폼 구축·고도화) 신규 인공지능 플랫폼 구축 및 기존 플랫폼 고도화를 위한 R&D 확대
 - 중복성·경제성 등을 종합판단하여 전략적 신규 플랫폼 개발에 집중 투자하고 (Top-Down), 연구자 수요에 기반한 자유 공모 형식(Bottom-Up)도 병행
 - 플랫폼에서 예측한 물질의 검증 결과가 플랫폼 고도화에 재투입되는 선순환 구조를 통해 인공지능 플랫폼 고도화 병행 추진

<표 III-13> 선행사업과 후속사업의 차이점

구분	선행사업 (인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업)	후속사업 (인공지능 활용 혁신신약 발굴사업)
지원규모	'19~'21(3년), 총 250억	'22~'26(5년), 총 407억
사업목적	후보물질 발굴, 약물재창출, 스마트 약물감시 분야에 활용될 수 있는 인공지능 플랫폼 구축	인공지능 플랫폼을 신약개발에 직접 활용하여 가시적 성과(후보물질) 창출
수행부처	과기부·복지부 ※ 과기:복지=2:1, 사업관리는 한국연구재단이 수행	과기부 단독
내역구성	<ul style="list-style-type: none"> ○ 인공지능 플랫폼 구축 <ul style="list-style-type: none"> - 후보물질 발굴(4개과제), 약물재창출(1개), 스마트 약물감시(1개) 각 분야에 활용가능한 인공지능 플랫폼 구축 ○ 운영지원과제 <ul style="list-style-type: none"> - 과제 관리 및 공공 포털 구축(1개과제) 	<ul style="list-style-type: none"> ○ 인공지능 활용 후보물질 발굴(22년 3개과제) <ul style="list-style-type: none"> - 인공지능 플랫폼을 직접 활용하여 임상 진입이 가능한 후보물질 발굴 ○ 신규 플랫폼 모듈 구축(22년 6개과제) <ul style="list-style-type: none"> - 연구자 수요 기반 인공지능 모델 개발·검증 ○ 운영지원과제



		- 과제 관리 및 공공 포털 운영(1개과제)
--	--	--------------------------



3. 과제별 단가책정 근거

□ 인공지능 활용 후보물질 발굴 단가(12억원) 책정근거

세부 사업내용	수행 필요성/사유	세부내역(단가 X 물량)	예산 (백만원)
타겟검증 · 선도물질 확보	임상 오믹스 기반 질환 타겟 선정 및 유효성이 검증된 선도물질 확보	<ul style="list-style-type: none"> • 질환 타겟 선정 및 분자-화학구조 모델링 <u>50백만원</u> • 선도물질 합성 및 유효성 평가 <u>150백만원</u> 	200
AI플랫폼 고도화 · 운영	최적화/유효성/ADME AI플랫폼 고도화·운영	<ul style="list-style-type: none"> • AI 플랫폼 고도화 <u>100백만원</u> • 데이터 관리 서버 구축 및 운영(인건비 포함) <u>100백만원</u> 	200
AI 기반 후보물질 탐색	AI 분자-약물 모델링 기반 후보물질 탐색	<ul style="list-style-type: none"> • 유도체 설계 및 합성(50종 이상) <u>200백만원</u> • AI기반 약효 및 비임상 유효성 예측 <u>100백만원</u> 	300
비임상 유효성 교차검증	세포/동물실험 기반 비임상 유효성 및 기초독성 교차검증	<ul style="list-style-type: none"> • In vitro 세포실험 기반 AI 도출 후보물질 검증 <u>100백만원</u> • In vivo 동물실험 기반 AI 도출 후보물질 검증 <u>200백만원</u> 	300
비임상 ADME 교차검증	비임상 약물대사, 약동력, 안전성교차검증	<ul style="list-style-type: none"> • 비임상 ADME 약물평가 시험을 통한 비임상 교차검증이 완료된 후보물질 발굴 <u>200백만원</u> 	200
소계			1,200

- 일반적인 신약개발 과제와는 달리 AI연구자·신약연구자·제약사가 연구팀을 구성하여 후보물질 발굴과 함께 인공지능 플랫폼 고도화 수행
- 선행사업의 인공지능 플랫폼 구축 및 실증(선도물질 도출연구 포함) 과제 단가(15억원/년)를 바탕으로 책정되었음
- 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화 단가(2억원) 책정근거



세부 사업내용	수행 필요성/사유	세부내역(단가 X 물량)	예산 (백만원)
신규 AI 모듈 확보·운영	약물설계/최적화/유효성/ADME 분야 신규 AI 모듈 확보·운영	<ul style="list-style-type: none"> 신약개발 지원 AI 모듈 개발 <u>100</u>백만원 데이터 관리 서버 구축 및 운영(인건비 포함) <u>100</u>백만원 	200
소계			200



제3절 기술 수요조사

1. 기술수요조사 개요

가. 전문가 간담회 개최

- (목적) 인공지능 기반 신약개발 동향 분석 및 신규 R&D 세부(안) 도출을 위한 전문가 자문회의 개최
- (일시/장소) '21. 08. 23.(월) 14:00~16:00 / 화상회의(Webex)
- (참석) 과학기술정보통신부 생명기술과 조아람 사무관, 한국연구재단 신약단장, 신약개발지원센터, 생명공학정책연구센터, 신약개발 전문가 등 10명 내외

나. 주요 논의사항

- 인공지능 기반 신약개발의 필요성
 - AI 활용의 경제성, 성과 창출 가능성(국내외 동향 및 성공사례 공유)
- 인공지능 기반 신약개발 플랫폼 공공화 가능성 및 활용도 검토
- 인공지능 기반 신약개발 국가 R&D의 우선지원 분야 발굴
 - 선행사업 분석, 애로사항 반영 필요
 - 신규 R&D 세부사업(안) 제안

<표 III-14> 전문가 간담회 세부 일정

시 간	세 부 내 용	비 고
14:00~14:05(05')	• 회의 및 전문가 소개	
14:05~14:10(05')	• 인공지능기반 신약개발 사업 추진 경과	김상현 단장
14:10~14:15(05')	• 인공지능 신약개발 기획과제 주요내용	
14:15~15:25(70')	• 인공지능 기반 신약개발 주요이슈 논의	
15:25~15:30(05')	• 향후일정 공유 등 회의 마무리	



<표 III-15> 전문가 간담회 참석자 명단

성명	소속	직책
조아람	과기정통부 생명기술과	사무관
김상현	한구연구재단 신약단	단장
염민선	KISTI	센터장
이지영	대구첨복재단 신약개발지원센터	책임연구원
석차옥	서울대학교	교수
남호정	GIST	교수
고준수	아론티어	대표이사
황재성	넷타겟	상무이사
오경석	일신SNT	이사
이규선	한국생명공학연구원 바이오나노연구센터	센터장
최동규	대구첨복재단 신약개발지원센터	팀장
김현수	생명공학정책연구센터	팀장
설민	생명공학정책연구센터	연구원

<표 III-16> 전문가 간담회 주요 논의 내용

1. 연구과제 개요

- 인공지능 기반 신약개발 플랫폼 구축, 올해 1차 사업단 완료 후 후속연구를 위한 2차 사업단 과제가 현재 기재부 심의 중에 있음
- 선행사업의 경우, 선도물질도출이 성과목표였으며, 후속 사업은 후보물질도출 및 운영지원과제의 역할을 재정립하여 기획할 필요성이 있음

2. 연구과제 기획의도

- 신약개발 분야에서의 인공지능의 필요성과 선행사업의 성과 및 후속사업의 성과 차별성에 대한 논의 필요

3. 선행사업 성과

사업명	인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업					
	대학	병원	대기업	중소/벤처	정출연	기타
사업 참여 현황	12	1	2	7	5	0
플랫폼 구축	예측모델 구축 완료 건수		26	예측모델 구축 진행 중 건수		2
	논문		심사 중 (Under revision)		제출 (submitted)	
	게재 (Published)		80		3	
특허	등록		출원		기타(준비 중)	
	6		19		2	
인재 양성	총계		박사		석사	



	44	21	23
	실적	상세내용	
수상	2건 (대표실적)	1. Kaggle(Google 자회사)주관, 세계 인공지능 경진대회 'Predicting Molecular Properties' 3위 입상 2. 과학공로대상(KOREA AWARDS)	
경연대회	1건 (Kaggle(Google 자회사)주관, 세계 인공지능 경진대회)		
공동연구	20개 국내·외 산/학/연/병 등 연구기관과의 다수 공동연구 수행 중 - SK케미칼, HK이노엔, 한미약품, 삼진제약, Panorama Research Inc, KRIBB, 서울아산병원, 신촌 세브란스병원, 국립암센터, 서울대병원, 삼성서울병원, UCSD 등		
후속과제	1건 (산업통산자원부, 바이오산업핵심기술개발사업)		
투자	신주발행 유상증자(636억원) 및 143억원 투자 유치		
고용창출	71명 신규 인력 고용창출		
매출증대	0.4억원		
기타	1. 창업 2건 2. Google Education/Course Grant 선정 3. 글로벌 AI 신약개발 연구센터 설립		

4. 국내외 성공사례 공유

- (황재성 이사) 엑센시아(Exscientia)*는 9년 차 AI 신약개발 회사로 BMS와 AI 기반의 약물발굴 파트너십을 확장하며 다양한 질환 분야의 초기 약물발굴 기간 단축을 목표로 12억 달러 규모의 딜을 체결 (선수금 580억원)
*엑센시아는 AI 저분자화합물 발굴 플랫폼인 'Centaur Chemist'를 사용할 경우 전통적인 약물 발굴 방식에 비해 후보물질 발굴에 드는 시간을 1/4로 단축한다고 발표, BMS를 포함해 바이엘(Bayer), 사노피(Sanofi), 스미토모 다이닛폰(Sumitomo Dainippon), 로슈(Roche), GSK(GlaxoSmith Kline) 등의 글로벌 제약사들과 파트너십을 맺었으며, 에보텍(Evotec)과의 파트너십으로 발굴한 면역항암제 'EXS21546'은 현재 임상 1상 단계로 지난 4월 미국암학회(AACR)에서 전임상 결과를 발표 (21. 5 바이오스펙테이터)
- (최동규 팀장) 엑센시아, 후보물질 도출 1년, 아툼와이즈 에볼라 치료제 7천 개 약물 재배치 24시간, 베네볼런트 예측 코로나19 치료제 FDA 긴급사용승인, 인실리코메디신, 선도물질 도출 46일 등 AI 기반 신약의 가시적 성과 확대, 국내 신데카바이오/차바이오 공동 면역항암제 후보물질 20년 AACR에 발표, 국내 곧 1상 진입 예정

5. 국내 AI 신약개발 기업 현황

- (고준수 대표) 국내에서도 스타트업을 중심으로 바이오벤처와 특정 영역의 target에 대해 다양한 협업 진행 중이며, 신약 중개연구, 임상, 환자나 in vivo 모델에서 적용 가능한 선도/후보물질을 제시함
- (황재성 이사) 공동연구 협업 제의 증가 증으로, 데이터 집합, 데이터 활용을 위한 DB화 작업이 필요하며, 국내 특이적 질환에 대한 접근을 위한 인공지능의 활용 분야에 대한 정부 R&D 지원이 필요함
- (오경석 이사) 인공지능을 활용하는 스타트업에서는 효율성 이외의 기업 마다의 차별성이 중요하며, 후보물질 도출과정에서 항상 문제가 되던 부분을 인공지능이 해결할 수 있는지가 가장 큰 장점으로 부각될 것임



- 선행 과제에서 여러 모델이 잘 구축 및 활용되고 있으나, 다만, 후속으로 **실험적 실증이 필요함**
- 신약 분야에서의 **인공지능 플랫폼 공공화에 명확한 목적이 필요**하며 구글 딥마인드의 알파폴드가 최근 공개된 사례를 국내 기업들이 활용할 수 있는 AI 플랫폼의 공공화에 참조하면 좋을 것임
- 현재 AI 기반 신약개발에서 데이터 부족의 문제를 가지고 있지만, **동일한/제한된 데이터**를 보다 잘 **활용**할 수 있는 **모델 알고리즘의 개발이 우선될 필요**가 있음
- (석차욱 교수) 국내 **상황에 맞는 자체적인 인공지능 기반 신약개발의 생태계 구축 필요**성에 공감하며, 딥마인드의 알파폴드가 공개되면서 앞으로 **단백질의 구조 기반의 타겟 정보의 홍수**가 될 수 있음
 - 그러나, 단백질 구조와 약물 설계에서 이를 효율적으로 활용하기 위해서는 **druggable 데이터베이스의 별도 구축이 필요**하며, **알파폴드 활용과 국내에서 개발되는 플랫폼과 연계**를 위한 **R&D 지원이 필요**할 것임
- (남호정 교수) 2018 시범과제를 진행하고, 현행과제를 전체적으로 검토한 결과, 전반적인 과제의 성과목표가 뚜렷하지 않은 부분이 있음
 - 기초적인 R&D 육성과 제약산업의 전반적인 부스트업이 목표인지 명확하지 않음
 - 공개된 데이터를 가지고 알고리즘 개발하는 것이 목적에 맞는 것이나, 신약 분야의 데이터 공개에 대한 제한점은 분명히 있음
 - 최근 유럽연합에서는 각 기관에서 데이터를 '공개' 하지 않고 자체 local에 보유한 상태에서 AI 모델 학습에 포함하는 방법이 연합 학습 개념을 도입한 신약개발 플랫폼인 '멜로디(MELLODDY: Machine Learning Ledger Orchestration for Drug Discovery)*'에 약 220억 원을 지원함

*글로벌 신약개발 플랫폼 멜로디는 공동 데이터셋으로 인공지능(AI)을 학습하는 방식으로 신약개발을 위한 기술을 공유하기 위해 20년 6월, 암젠, 바이엘, GSK, 얀센, 노바티스 등을 포함한 세계 10대 제약회사와 유럽 주요 대학 및 바이오 스타트업 등이 참여해 설립한 머신러닝 기반 데이터 공유 플랫폼으로, 각 회사 독점 데이터가 아닌 공동 데이터셋에서 함께 AI를 훈련하며, 신약개발을 위한 기술을 공유함

 - 신약개발을 주도할 수 있는 규모 있는 국내 기업들의 AI에 관심을 어떻게 끌어 올 수 있는지 고민이 필요하며, 최근 기업들은 자체 팀/부서로 구성하는 추세로 판단됨
- (염민선 센터장) 생명연-kisti 중심 **국가 바이오빅데이터 구축, 시범 사업 및 예타 진행** 중이며, 목표는 **100만 명 유전체 임상 데이터 확보, 40만 명 이상의 레저시, 오믹스, 라이프 데이터 등을 확보 관리 예정**임
 - **국가 바이오연구데이터 스테이션 구축** 사업으로 국가 R&D에서 나오는 모든 **연구데이터 관리, 바이오분야(4조원/년) 데이터 수집, 축적, 품질관리**하여 산학연병의 연구자들에게 제공 예정이며, **신약 연구 데이터에도 확장**하여 관리 예정임

6. 선행사업에 대한 의견 및 애로사항

- (염민선 센터장) 선행사업의 성과의 경우, 본 사업의 지원을 통해서 나온 것이라기보다는 기존 노하우와 자원이 31개월의 선행사업의 성과로 포장된 것으로 인식할 수 있음
 - 특히, 과기부 사업으로 후보물질도출 목표가 타 부처와의 성과영역이 중복되어 성과목표 설정이 합리적인지 검토가 필요함
 - 사업이 진행이 된다면 우리만의 플랫폼과 모델을 구축하는 것이 핵심 목표가 되어야 하며, **국내 AI 기반 신약 개발의 생태계 육성**이 목표가 되어야 함. 또한, 기업의 특성상 노하



우 및 데이터 공유에 제한이 있어, 일부 병원, 연구자 주도적 진행은 기업의 핵심 역량을 집적하기는 아직 무리되며, 개별 연구자들이 잘 활용할 수 있는 플랫폼, 모델이 도출되는 것이 목표가 되는 것이 바람직함

- **(고준수 대표)** 인공지능 신약 플랫폼 선행과제로서 책임자로서의 성과목표가 선도/후보물질 도출이라는 과제의 목표점이 매우 난해함
 - 인공지능 기반 기술개발, 플랫폼화와 별도로 물질도출이 목표이면 이전/타 신약사업과의 차별성이 불분명하여, 후보물질 도출이라는 목표보다는 **데이터 및 플랫폼이 최종 성과 목표**로 제시되는 것이 바람직함
 - 공공데이터를 가지고 재생산하는 모델 데이터 셋을 고도화 하는 것이 목표로 설정되면 좋을 것 같으며, 플랫폼 공공화에 대해서는 인공지능 등을 포함한 AI 기술은 공공재라는 인식이 있으나, 인공지능 플랫폼은 기업 소유의 재산일 수 있으며, 기업이 활용 가능한 공공재를 제시하고, 기업의 참여를 통해 신약분야 공공재의 고도화로 방향을 잡는 것이 필요함
- **(김상현 단장)** 선행/후속 사업의 목표는 데이터 수집과 고도화 보다는 가시적 성과로서 제시되어야 하며, 데이터보다는 인공지능 모듈 또는 플랫폼이 주가 되어야 함
 - 또한, 본 사업은 소프트웨어 개발 사업이 아닌 신약개발 사업으로서 모듈, 플랫폼 등의 인공지능이 바이오/신약 분야에서 어떻게 기여하였는지가 검증되어야 하며, 그 예로 후보물질과 같은 가시적 성과가 필요함
 - 플랫폼의 공공성은 기업 입장에서 이해되나, 국책연구본부의 R&D에 RFP에 명기된 목표가 있으며, 기업/연구자가 개발 한 모든 결과를 공공화하라는 것이 아님
 - **검증 이후에도 활용도 재고 및 공공화에 대한 계획이 필요함**
- **(오경석 이사)** 선행사업 기획 시 논의의 중심이 인공지능 신약개발 사업의 목표가 인공지능 개발이 목표인지, 신약개발이 목표인지에 대해서 많은 논의가 있었으며, 잠정적으로 최종목표는 인공지능 모델을 만들어서 효율적인 신약개발을 하는 것으로 정리되었음. 따라서, 실험적으로 인공지능의 기여도를 검증하는 것은 필요함
 - 신약개발 과정의 데이터는 기업의 지적 재산으로 원칙적으로 공개가 안되어 선행과제 각 과제가 인공지능 플랫폼 개발보다는 데이터를 확보하는데 집중한 것으로 판단됨
 - 공공화의 목표를 위해서는 참여 기업에 어떻게 베니핏을 줄 것인지, 개별 회사가 수익을 어떻게 가져갈 수 있는 부분을 논의 하였으나, 액션 플랜이 광범위해서 목표 및 공공화에 대한 오해가 있었으며, 이러한 문제점은 선행과제뿐만 아니라, 후속과제에서도 동일하게 문제점으로 될 수 있음
 - 선행사업을 통해 개발되는 **플랫폼의 차별화와 지속적인 데이터 확보의 중요성**이 다시 한번 확인되었음
- **(이지영 박사)** 운영과제를 담당하는 신약개발지원센터에서 CRO를 통해 확보한 데이터를 충분히 공유한 이후에 각 과제의 플랫폼을 검증함(과제별 중복으로 보일 여지가 있음)
 - 데이터를 확보할 수 있는 과제가 본 선행사업 이전에 진행되지 못한 아쉬움이 있으며, 신약개발 플랫폼 구축사업을 수행하면서 데이터의 중요성을 더욱 체감함. 운영과제, 독립적 실증과제와 데이터 제공의 역할을 하는 과제도 필요하며, 검증된 데이터 셋의 산출이 중요함
 - 선행사업의 API 공개 예정이나, 공공화 이후의 관리 운영은 어떻게 해야 하는지, 특히, 공공화된 플랫폼의 원 개발팀, 운영관리/업그레이드 등의 유지 보수 관리에 대한 고민이 필요함
- **(최동규 팀장)** 운영지원 과제의 애로사항으로 6개 과제의 지원을 위한 데이터 셋의 제공 과정에서 각 과제의 차별적 요구가 충족되기 어려움이 있었음



7. 후속사업에 대한 제안

- **(최동규 팀장)** API 3년 기탁은 과제 진행 초기 구두 협의로 당초 RFP 상에서는 없었음. 후속사업의 RFP에서는 API 기탁 조건 명시화할 필요가 있음
- **(남호정 교수)** 데이터 과제, 인공지능 과제, 성능평가/실증과제가 따로 진행하고, 독립된 운영 지원 과제로 통합하는 것이 어떨지 제안함
- **(김상현 단장)** 후속사업의 당위성을 설득하기 위해 AI의 역할 및 기여에 대한 검증과 가시적 성과에 대한 목표설정은 국가 R&D에서는 필수적이며, 과제 RFP에 제시된 목표를 달성할 자신 있는 팀이 지원하는 것임
 - 특히, 후속 사업의 특성상, 선행사업보다 차별성이 있는 목표 제시가 필요하며, 합성화합물 신약 이외의 인공지능 활용 분야 등 제시가 되면 좋을 것임
- **(이지영 박사)** 후보물질 도출, 선도물질 도출용 인공지능이 따로 있지는 않음
- **(황재성 이사)** 알파폴드의 성공은 답을 알고 있는 10만 개 이상의 데이터가 모였기 때문이라고 생각함 신약개발에 있어서 하나의 타겟에 대한 10만 개의 데이터를 모으기 힘들지만 ADME쪽 데이터의 경우에는 10만 개의 데이터가 확보가 가능해 보여, 이런 부분에 후속 과제를 지원이 필요함
 - 선행과제에서 플랫폼은 어느정도 확보된 것으로 보고, CASP에서 알파폴드가 성공한 것처럼 후속 과제에는 활성 평가를 해 줄 수 있는 기관을 하나 제시된 타겟에 대한 AI 경연대회 등을 통해 우승자에게 메리트를 주는 방향도 좋을 것 같음
- **(오경석 이사)** 개발된 인공지능 모델을 신약개발에 적용할 때 (Validation 도 마찬가지로) 가장 시간/비용이 많이 들어가는 부분이 어디일 지 고민해 보시면 좋을 것임



2. 전문가 신규 R&D 제안 분석

□ 전문가위원회 및 기술수요조사를 통해 ‘인공지능 활용 혁신신약 발굴사업’ 내 총 7개의 세부과제가 도출됨

○ 인공지능 기반 신약개발의 추진 사업 제안

- 특정타겟 (예, Kinase 등)에 대한 소스데이터 확보를 통한 AI 화합물 도출 사업 진행
- 검증된 신약(FDA 승인 및 임상유효성이 확보된 화합물)을 이용한 AI 예측정확도 검증 필요
- 희귀질환 및 비상업적 질환 (non-profit drug)의 치료제 발굴분야에 AI 신약개발 플랫폼의 적극 활용
- AI 신약개발 플랫폼 개발과 실험적 검증 지원이 병행되는 two-track 연구개발사업 기획 필요
- 신약 연구데이터 공유를 위한 컨소시엄 구성 및 국가 연구데이터 사업을 연계한 표준화된 데이터 확보
- 유럽의 MELLODY 사례 벤치마킹 및 국내 산학연 보유의 ADME 자료 확보 및 활용

○ 인공지능 기반 신약개발 플랫폼 공공화 가능성 및 활용도 검토

- 공공의 문헌정보 활용 및 참여기업 데이터의 적극적인 공유 제안
- 한국화합물은행의 화합물 정보 및 활용에 대한 자유도 부여
- 개별 연구주체에서 개발된 플랫폼의 licensing-in을 통한 공공플랫폼 운영
- 국가바이오데이터 스테이션 사업과의 연계를 통한 플랫폼의 지속적 공공운영 방안 마련
- 희귀질환 등 데이터 공공화가 용이한 질환에 대한 시범적인 운영 실시

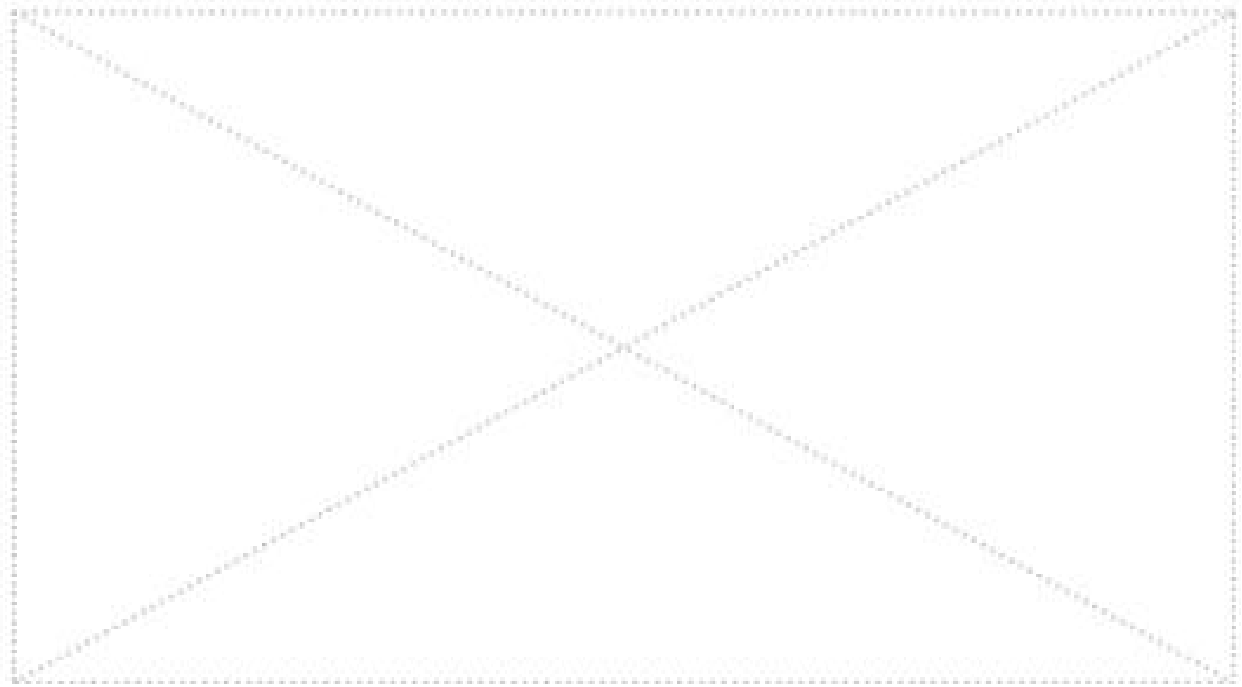


- 기업 제공 데이터에 대한 IP 보호방안 수립 및 데이터 공여 기업에 대한 국책과제 인센티브 부여
- 신약개발 유관 정부 출연기관 및 국책기관의 신약개발 데이터 등록 시범사업 운영 필요
- 신약 개발 분야의 AI 활용은 선택이 아닌 필수 사항으로 우리나라의 경우 제약 바이오기업들의 데이터 활용 경험이 부족
- 정부의 2020년 핵심정책과제인 ‘데이터·네트워크·인공지능(D.N.A)’의 인프라를 적극적으로 활용하고, 그 일환으로 국가바이오데이터 스테이션 사업의 연계 방안을 모색할 필요가 있음
- 보건복지부의 ‘인공지능 활용 신약개발 교육 및 홍보’ 사업을 통해 제약바이오산업계의 인력과 AI 기술분야 전문가를 대상으로 융합교육을 실시, 전문인력 양성을 추진 중
- 정부는 AI 허브 구축 계획에는 데이터·컴퓨팅 파워·알고리즘 등 AI 개발 핵심 인프라를 지원하는 ‘AI 오픈 이노베이션 허브’개념이 제시되고 있으나, 제약기업에서 이를 활용하기 위해서는 관련규정 및 가이드라인도 보완이 필요. 일례로, ‘포괄적 네거티브 규제 로드맵 수립’ 및 미래지향적 법제도 정립을 위해 범국가적으로 ‘AI 미래사회 대비 법제정비단’을 준비 중.
- 데이터 3법의 통과로 되면서 불필요한 중복 규제를 없애고 개인과 기업이 정보를 활용할 수 있는 토대가 마련되어 하위 법령 개정 및 규제 동향이 당초 취지에 맞게 적용되고 구체화될 수 있도록 민관 산학연병 등 지속적인 논의가 필요



참고

유럽 MELLODY 플랫폼 현황 및 이슈 검토



- 글로벌 제약기업 Amgen (독일), Astellas (네덜란드), Astrazeneca (스웨덴), Bayer (독일), Boehringer Ingelheim (독일), GSK (영국), Institut De Recherches Servier (프랑스), Jassen (벨기에), Merck (독일), Novartis (스위스)와 헝가리 부다페스트 대학, 벨기에 카톨릭 대학, AI 관련기업 Nvidia (스위스)가 참여하는 컨소시엄으로 19년 6월부터 21년 5월까지 운영
- 글로벌 신약개발 플랫폼 멜로디(MELLODDY:Machine Learning Ledger Orchestration for Drug Discovery)가 공동 데이터셋으로 인공지능(AI)을 학습하는 방식으로 신약개발을 위한 기술을 공유
- 유럽연합(EU)과 민간 제약산업 이니셔티브로 12만유로(약 220억원)의 운영기금으로 운영되었음.

- 신약개발은 선도물질 발굴부터 상용화까지 걸리는 시간은 최소 10년으로, 미국 제약협회 보고서에 따르면 평균 7년간 임상시험을 진행하는 데 드는 연구개발비는 약 26억달러(약 3조196억원)로 멜로디 공동설립자들은 본 컨소시엄의 연합학습이 신약개발의 과정을 가속화할 수 있다고 주장
- 엔비디아(Nvidia)는 멜로디 플랫폼 구축을 위한 computing 기술 공급업체로 합류하여, 신약개발에 쓰일 머신러닝 솔루션 구현을 위해 자사 그래픽카드를 제공하고, 의료 데이터 플랫폼 업체 오우킨은 멀티태스킹 연합학습을 위해 자사 프레임워크 오우킨 커넥트를 제공.
- 벨기에 뢰벤 가톨릭대학교는 약물 발견에 특화된 머신러닝 모델을 훈련하기 위해 스파스캠이라는 오픈 소스 라이브러리를 제공.
- 멜로디 플랫폼의 출범이후 신약개발 및 헬스케어 시스템 구축을 위한 세계 트렌드도 변화하고 있으며, 미국에서는 인텔은 자사 AI 기술과 NIH의 데이터를 결합해 뇌종양을 식별 시스템 개발, 펜실베이니아주립대는 페렐만의과대학과 공동으로 세계 29개 국제의료센터와 연합학습을 활용한 AI 헬스 시스템 양성 계획을 발표
- 이 프로젝트는 지식재산권(IP)을 보호하는 동시에, 다수의 제약 회사들의 데이터로 AI 모델을 교육하기 위해 클라우드 기반 NVIDIA GPU와 연합 학습으로 알려진 분산 접근 방식을 사용
- 제약회사들은 아마존웹서비스(AWS)에서 관리하는 엔비디아 v100 텐서 코어 GPU(NVIDIA v100 Tensor Core GPUs) 클러스터를 사용하여 기업이 보유한 데이터를 클라우드 클러스터에 공유하여 각각의 딥러닝 모델은 천만 개의 화학 화합물에 대한 데이터를 훈련



- 이러한 멜로디의 연합 학습(federated learning)으로 데이터 공유의 새로운 패러다임을 제시하였으며, 세계 최대 규모의 제약 데이터 세트를 공유하면서도 데이터를 보호할 수 있는 방법을 제시하는 것을 목표로 하고 있음.
- 멜로디의 연합 학습은 데이터를 단일 종합 서버에서 끌어 올 필요가 없는 분산 방식의 머신 러닝 기법으로 머신 러닝 모델은 각 기업에 저장된 데이터를 통해 학습하면서 각 제약 회사들이 소유한 데이터 세트가 자체 보안 인프라에 유지되도록 보장
- 다만, 제약 관련 데이터 세트는 다양한 화학 화합물과 그 속성들에 대한 이력정보로 구성되어 파트너사들은 MELLODDY 연합 연습 모델을 통해 특정 약제 화합물들에 대해 익명으로 요청하고, 프로젝트의 기관의 각 데이터 보관소로 전송돼 잠재적인 일치 항목들을 구별.
- MELLODDY 프로젝트는 블록체인 시스템을 채택해 협력 제약사들이 소유하고 있는 데이터 세트들에 대한 투명성과 통제권을 유지

■ 제약회사들은 데이터를 공유하는 것을 원하지 않으며, 협업으로 인해서 지적

재산권 침해 등의 문제와 경쟁업체에 시장 우위를 빼앗기는 상황에 대한 우려가 존재

■ 따라서, 데이터 공유의 장점을 최대화 할 수 있는 산학연병 컨소시엄 구성과 이에 따른 인센티브 및 이익 공유에 대한 심도 있는 논의가 필요



참고

국가 바이오데이터 스테이션 사업 및 연계방안

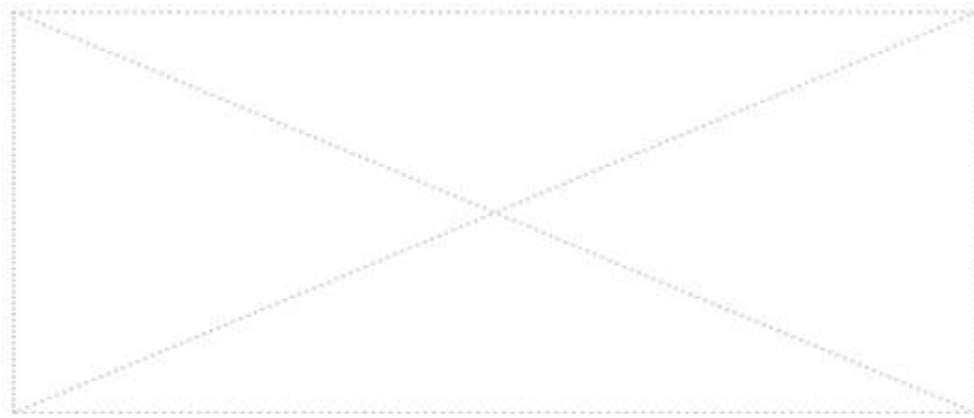
‘국가 바이오 데이터 스테이션 구축’개요

(국가 바이오 R&D 데이터 수집·관리·활용 환경 구축)

<KOBIC, '21년>

- (배경) 4차 산업혁명 시대로 진입함에 따라, 바이오 빅데이터는 R&D 혁신을 견인·촉진하는 핵심요소로 각광
 - 연구 데이터 수집 관련 법·제도적 기반은 旣마련되었으나 바이오 R&D 사업에서 생산되는 데이터가 관리 미흡으로 사장됨
 - * 3.84조원('20) 규모의 국내 바이오 R&D에서 다양한 데이터가 생산·활용되고 있으나, 대부분의 데이터가 사업단, 개인 연구자 등이 개별 보관
 - 부처·사업·연구자별 흩어져 있는 바이오 연구 데이터를 범부처가 협력하여 통합 수집·제공하기로 협의(생명연구자원 빅데이터 구축 전략-'20.7, 경제중대본)
- (사업) ‘국가 바이오 연구 데이터 스테이션 구축 및 운영’ 과제 수행
 - (기간) 계속 사업('21년~계속)
 - (총예산) '21년 264억(포스트게놈다부처사업 이관과제 42.29억 포함, '22년 이후 총예산은 KISTEP의 적정성재평가 이후 결정)
 - (사업 수행) 생명연 KOBIC(총괄 수행, 데이터 관리 및 활성화), KISTI 국가슈퍼컴퓨팅본부(데이터 활용 환경 구축) 협력 체계로 운영





1 범부처 바이오 연구 데이터 통합 수집 제공 체계 마련

- (체계) 부처·사업·연구자별 흩어져 있는 바이오 연구 데이터를 통합 수집·제공하는 ‘국가 바이오 데이터 스테이션’(이하, 데이터 스테이션) 조성
- (범위) 정부 바이오 R&D를 통해 생산·활용되는 모든 데이터*를 수집
 - * 생화학분석, 이미지(영상), 임상 및 전임상, 유전체, 분자구조, 표현형 정보, 화학반응 등
- (등록) 범부처 R&D 과제지원 통합 시스템과 연동한 데이터 등록 시스템을 구축하여 연구자들의 데이터 등록 편의성 제고
 - ※ 데이터 등록 연구자 대상 인센티브 제공 (결과평가에 반영, 데이터 활용 바우처 제공 등)



【데이터 생산·관리자별 역할(안)】



- (제도) ‘국가생명연구자원 수집·관리 표준지침*’을 제정해 R&D 사업을 관리하고, ‘바이오 연구 데이터 표준화 위원회’를 구성해 국가 표준 마련

* 부처별 사업 공고·협약평가 시, 준수해야 할 연구 데이터 관리 기준 제시

2 선진적 데이터 활용

- (영상 데이터) 바이오 R&D사업에서 생산되는 영상 연구 데이터를 데이터 스테이션 등에서 수집·제공하고, 안전·윤리적 활용을 위한 환경 제공
- (활용 인프라) 개인 저장공간(마이 랩 데이터), 데이터 분석 플랫폼 등 개발·지원 및 데이터 활용 기반 R&D 지원 등 확대
- (공유 강화) 논문 등 연구성과 발표 전 비공개인 데이터의 공유를 매개, 연구 데이터와 소재정보를 연계 제공 등 활용성 제고, 논문 투고용 데이터 저장소 역할 수행



□ 연계 방안

- 고품질 바이오 연구 데이터 제공 및 재사용률을 높이기 위해서는 기 생산된 데이터 확보가 중요
- 신약개발 분야 데이터 등록 연구자에 대한 인센티브 제공
 - * 예) 국가 바이오 데이터 스테이션을 통한 데이터 장기보존 공간제공, 데이터 분석 활용을 위한
 - 전산 인프라 제공 및 국책과제 가산점 제공
- 신약개발 관련 라이브데이터 공유, 데이터 분석서비스 및 데이터 분석 교육 및 워크숍을 통해 데이터 deposit 활성화
- 데이터 등록 표준, 등록 방법, 연계 방법, 실무담당자 지정 등에 대한 논의 후, 신약개발 관련 바이오 연구데이터 등록 SOP 수립
- 정부출연연을 포함한 신약개발 유관기관의 신약개발 데이터 등록 시범사업 운영

<표 III-17> 전문가 신규 R&D 제안 과제 리스트

구분	제안 과제(명)
1	AI 기반 인산화 효소 저해제 선도물질 발굴 시스템 구축
2	단백질 서열 기반 신약 디자인 플랫폼
3	-
4	인공지능 기반 희귀질환 공공 연구 플랫폼 구축 및 선도/후보물질 발굴 사업
5	인공지능 기반 맞춤형 혁신 치료제 발굴
6	인공지능 학습 빅데이터 구축 사업
7	후보물질 도출에 필요한 ADMET 예측을 위한 10만 데이터 확보 과제 (ADMET : Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity)

<표 III-18> 전문가 신규 R&D 제안 수요조사서



제안자정보	이름	김남두	소속	보로노이바이오(주)
제안과제명	AI 기반 인산화 효소 저해제 선도물질 발굴 시스템 구축			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 기존 신약개발 과정은 유효 또는 선도물질이 확보될 경우, 분자설계 연구와 같은 이론적인 모델을 이용하여 약효를 최적화하여 후보물질을 도출하는 연구 과정으로 신약개발 연구를 수행하고 있음 ○ 신약 타겟에 대한 전임상 또는 임상 단계에 대한 선행 연구가 있는 경우에는, 대부분의 회사가 이미 알려진 화합물 정보를 이용하여 특허를 회피하는 전략으로 신약개발연구를 수행하고 있음 ○ 따라서, 다양한 알고리즘을 적용한 AI 기반 선도물질 생성 플랫폼을 신약개발에 적용할 경우 특허성이 확보된 골격을 다수 생성하여 이용하는 것이 가능 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 현재 국내에만 약 20여개 이상의 AI 기반 신약개발 벤처회사가 설립되어 운영 중 ○ 국내 AI기반 신약개발 벤처 회사 대부분이 공지된 화합물 데이터를 기반으로 학습하여 다양한 질환 치료제 개발에 집중하고 있음 ○ 그러나, 자체 구축한 인산화 효소 관련 데이터를 활용하여 다양한 질환 치료제를 개발하는 회사는 없음. 따라서 저분자 화합물 약물 표적의 30%를 차지하는 인산화 효소에 대한 AI 플랫폼을 구축할 경우 암을 비롯한 다양한 질환 치료제에 적용을 할 수 있음 			
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ (신약개발 측면) 인산화 효소의 선택성을 구분할 수 있는 AI 플랫폼 구축 ○ (인공지능 측면) 다양한 신규 AI 알고리즘을 적용한 플랫폼 구축 			
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 신약개발 AI 플랫폼 구축을 위하여, 다양한 소스에서 데이터 확보 ○ 개별 인산화 효소에 대한 선택성 데이터 추가 확보 (Kinase profiling 데이터 등) ○ 다양한 AI 알고리즘을 이용한 화합물 생성 플랫폼 구축 ○ 신약개발 AI 플랫폼 검증을 위한 의약합성 연구 및 약효 검증 연구 수행 			
플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ AI 학습을 위한 데이터는 논문 및 특허 데이터를 확보하고, 개별기업이 참여할 경우 기업체 데이터를 추가 적용 가능한 AI 플랫폼 구축 ○ 개별 기업의 데이터는 해당 기업만 AI 학습이 가능하도록 플랫폼 구축 			



제안자정보	이름	김태형	소속	테라젠바이오
제안과제명	단백질 서열 기반 신약 디자인 플랫폼			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 기존 구조 기반 신약 디자인 플랫폼 다수 존재 (예: AtomNet, Standigm Insight™, (주)Hits사의 플랫폼 등) ○ 이들은 구조 기반으로 보다 정확한 예측 및 신약 물질을 제시하지만, 높은 예측률을 위해서는 구조에 대한 정보가 필요하다는 제약이 있음 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 최근 구글의 AlphaFold에 이어 RosettaFold, ColabFold 등 단백질 서열 기반으로 높은 구조 예측이 가능한 상황임 ○ 이에 이러한 사전 학습 모델을 기반으로 신약 물질을 보다 폭넓게 제시할 수 있는 플랫폼이 필요함 			
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 타겟 단백질을 억제할 수 있는 합성 가능한 신약 물질 제시 ○ 서열 기반 구조 예측 기술을 기반으로 타겟 단백질을 억제하는 신약 물질을 만들어내는 인공지능 기법 개발 			
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 기존 타겟 단백질에 대한 단백질 서열 기반 구조 예측 정확도 분석 ○ 기존 타겟 단백질에 대한 기존 알려진 약제에 의한 억제 효과 예측 정확도 분석 ○ 기존 타겟 단백질에 대한 기존에 알려지지 않은 약제에 의한 억제 효과 예측 및 이에 대한 실험 검증 			
플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 한국화학물은행 등재 약제 활용에 대한 자유도 부여 ○ 플랫폼은 공공화하되, 기술개발 기업 및 기관 소유 지적재산권에 대한 실시권을 공공화 주체가 licensing-in하는 정책 			

제안자정보	이름	염민선	소속	KISTI
제안과제명	-			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ (AI) 선행사업의 경우 개발되어 공개된 인공지능 모델을 적용하거나, 공개된 인공지능 프로그램을 일부 수정하여 사용하였으나 신약 개발 분야 국가 경쟁력 확보를 위해서는 자체 인공지능 모델을 개발하여 산학연에 제공 필요 ○ (AI) 선행사업의 경우 virtual screening, ADMET 예측, 화합물 설계를 위해 인공지능을 주로 사용되었으나, 적용 범위를 확대하여 전임상 단계에 적용할 수 있는 연구개발 필요 ○ (데이터) 선행사업의 경우 주로 해외 공개 데이터와 소규모의 자체 데이터를 활용함으로써 인공지능 모델의 정확도 향상에 제약이 따름. 다양한 데이터 확보를 위한 노력 필요 <p>※ 본 사업에서 데이터의 중요성이 크나, 데이터 생산만을 위한 별도의 과제 구성</p>			



	은 사업의 취지에 맞지 않음 (국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성) ○ 민간에서는 원천기술개발보다는 개발된 AI 기술을 활용한 신약 후보물질 도출에 주력함에 따라 국가 R&D를 통한 원천기술개발 및 제공이 중요
연구목표 (성과목표)	-
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	○ (AI) 1) 기존 AI 모델의 정밀도 향상, 2) AI 모델의 적용용 범위 확대(전임상 등) ○ (데이터) 다양한 자체 데이터 확보 ○ (플랫폼) 기능 고도화 필요
플랫폼 공공화 방안	(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등) ○ 운영과제를 통한 플랫폼 공공화는 운영의 지속성을 보장하기 어려움에 따라 데이터 스테이션과 연계하는 것이 효율적

제안자정보	이름	오경석	소속	일진SNT
제안과제명	인공지능 기반 희귀질환 공공 연구 플랫폼 구축 및 선도/후보물질 발굴 사업			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 선행사업에서 구축된 인공지능기반 신약개발 플랫폼의 적극 활용 ○ 전통적 신약개발 방식이 아닌 인공지능기반으로 차별화된 신약개발 방식 제안 및 검증 ○ 신약개발 과정에서 과연 인공지능 모델의 유용성/활용성에 대한 객관적인 검증 필요 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 실험기반 중심의 신약개발에서 인공지능 기반 신약개발로 전환을 위한 다양한 플랫폼 개발 및 이에 대한 적용 사례 도출 ○ 민간에서 관심을 크게 두고 있지 않는 희귀질환 혹은 상업적 관심이 적으나, 국가 차원에서 치료제가 필요한 질환들에 대해 기존과 다른 새로운 방식의 적용 검증 및 이를 통한 새로운 치료제 발굴하고, 국가 차원의 공공 신약개발사업을 운영 			
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 희귀질환 및 비상업적 질환에 대한 선도/후보물질 발굴 ○ 선도/후보물질 발굴에 필요한 인공지능 플랫폼 구축 및 검증 ○ 희귀질환 치료제에 대한 신약개발 공공 연구 플랫폼 도출 (연구데이터, 인공지능 플랫폼, 선도/후보 물질) 			
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 희귀질환 질환 선정 및 인공지능 기반 선도/후보물질 발굴 Workflow 및 TPP 수립 (기존 실험 기반 방식과 차별화된 형식) ○ Workflow 및 TPP 에 따라 필요한 인공지능 기반 플랫폼 개발 및 활용 방안, 그리고 인공지능 기반 활용을 위한 실험적 지원 방안 수립 (화합물 합성, 약효/독성/약동력학 평가) 			



	<ul style="list-style-type: none"> ○ 설정한 Workflow 및 TPP 에 따른 연구 진행 및 진도 관리 (기존 실험 기반 방식과 차별화 및 인공지능 기반의 효율성 검증) ○ 선도/후보물질 발굴 목표와 별도로 이에 활용된 개별 인공지능 모델에 대한 별도 개발/검증 수행 ○ 인공지능 중심 신약개발 사업에 대한 차별화된 개념 정립과 실제 실현 가능성, 이를 통한 결과 창출이라는 큰 도전임, 특히나 선도/후보물질 발굴은 실험적 확인을 거쳐야 함으로 단순히 인공지능 그룹 외에 더 많은 실험 지원 그룹이 필요할 수 있음, 이에 대한 타 사업과 차별성 및 타당성이 설득되지 못한다면, 기존 실험 기반 신약개발 사업에 인공지능 플랫폼을 활용하는 수준과 다를 바 없음
<p>플랫폼 공공화 방안</p>	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 희귀질환의 경우 사유화보다는 공공화 관점이 크기 때문에 여러 데이터 확보에 용이할 수 있음 ○ 검증된 인공지능 플랫폼의 경우 활용 사례 공유를 통해 추후 후속 연구에 대한 지속적인 공공화가 가능함 ○ 기업의 경우 데이터 공유보다는 선도/후보물질 발굴을 위한 실험적 지원과 인공지능 모델의 검증/활용을 유도하고 향후 인공지능 모델을 직접 도입할 수 있도록 하는 것이 적합함

제안자정보	이름	이 주 연	소속	한국화학연구원
제안과제명	인공지능 기반 맞춤형 혁신 치료제 발굴			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ AI 기반 신약개발 연구는 30여년 전부터 다양한 메소드 개발과 활용된 방법으로 초기물질 발굴에 있어 효율성은 이미 입증되었음 ○ 신약재창출 또는 기초 연구가 많이 수행되어 데이터가 축적된 특정 타겟, 질환 이외에는 적용이나 성공사례 찾기 어려움 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 공공 데이터는 인터넷에서 쉽게 찾을 수 있을 만큼 정형화된 정보가 많으며, 오픈 소스도 많아 데이터 활용에 있어서 진입장벽이 낮아짐 ○ 그러나 희귀, 난치성, 감염병 치료제 개발 등 적은 환자수로 민간에서 개발 관심도가 낮거나 고가의 치료비가 요구되는 질환 분야에 도전적인 AI 적용 및 성공 사례 도출 필요 			
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ (신약개발 측면) 희귀, 난치성, 감염병 치료제 후보물질 발굴 및 기초연구 활성화 ○ (인공지능 측면) 딥러닝 적용 데이터가 부족한 경우 적용 가능한 방법론, 알고리즘 개발 			
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 정제된 연구데이터를 보유하고 있는 제약사들과 컨소시엄 구성 및 공동연구 추진 ○ IT 기업들의 하드웨어 및 인적자원을 활용할 수 있도록 공동연구 모색 ○ 국가지원 과제로 파생된 연구데이터는 IP를 위해 일정 기간동안 보호하되 이 			



	<p>후에는 데이터를 공개하여 공공목적에 활용</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ AI 활용을 위한 연구데이터가 부족한 타겟은 기초연구 활성화 병행
플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 산업체 데이터는 기업 자산으로 공공 목적을 위해 활용하는 경우 데이터 공유에 있어 descriptor, fingerprint등 IP를 보호할 수 있는 방안을 도입 ○ 연구데이터 기부시 docking, MD, FEP등 유료 소프트웨어 활용등 인센티브 제도 ○ 클라우드, GPU, CPU등 하드웨어 지원 방안 ○ 데이터 공여 기업에 대해서는 전임상, 임상등 국책 과제 참여에 있어 가산점 부여 ○ 발굴된 유효물질은 데이터 공여 기업에 최초 교섭권 부여

제안자정보	이름	최동규	소속	대구 신약센터
제안과제명	인공지능 학습 빅데이터 구축 사업			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 선행사업은 모든 총괄과제에서 공공데이터를 수집하는 관계로, 데이터 중복의 우려가 다수 존재 ○ 공공데이터의 경우 유사한 Molecular Entity로 구성되어 화학 공간(Chemical space)에 한계가 존재 ○ 기존에는 데이터 확보만을 위한 사업은 부재 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ `21년 하반기 오픈할 국가 바이오데이터 스테이션과 협력하여, 공백 데이터를 보충하고, 데이터 활용법 발굴 필요 ○ 시간, 비용 등 여건상 민간 및 연구자들 개별 구축이 어려움 			
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ (신약개발 측면) 공백 화학 공간의 화합물 생성으로 New Molecular Entity의 신약 가능성 초기 데이터 확보 ○ (인공지능 측면) 인공지능 기계 학습용 바이오 데이터 제공으로 모델 성능 고도화 기여 			
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 국가 바이오데이터 스테이션 보관 빅데이터 분석 ○ 사업 참여 연구자 수요기반의 신규 발굴 데이터 범위 정의 ○ 조직 화학을 통한 신규 화학공간 화합물 합성 및 분석 ○ 데이터 패키징 및 연구개발 과제 제공 			
플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 본 과제에서 생성된 데이터는 국가바이오데이터 스테이션에 일괄 기탁 			



제안자정보	이름	황재성	소속	넷타겟
제안과제명	후보물질 도출에 필요한 ADMET 예측을 위한 10만 데이터 확보 과제 (ADMET : Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity)			
제안이유 및 필요성	<p>(선행사업 및 기존 신약개발 사업과의 차별성 포함)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 문헌상의 일반적인 data 수집만이 아니라 잘 다듬어진 양질의 많은 data 확보 필요 ○ 히트(Hit)를 찾은 이후에 리드(Lead)로의 후보물질 도출을 위해서는 ADMET 최적화 과정이 필요 <p>(국가 R&D 수행 필요성 및 민간에서 수행하는 인공지능 신약개발과의 차별성)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Well-Curated 되어있는 대량의 data 확보는 민간에서 수행하기 어려움 <ul style="list-style-type: none"> - 인공지능 신약개발 수행 시 잘 다듬어진 data의 확보는 가장 중요한 것이라는 사실은 공지의 내용 ○ 10만 data는 인공지능이 performance를 낼 수 있는 최소의 숫자로 개인적으로 판단 			
연구목표 (성과목표)	<ul style="list-style-type: none"> ○ (신약개발 측면) 실제 후보물질로 성공을 높이기 위한 ADMET 극복 ○ (인공지능 측면) 양질의 data 제공으로 인공지능 업체의 국제 경쟁력 확보 			
연구내용 및 추진방법 (자유기술)	<ul style="list-style-type: none"> ○ 유럽에서 진행 중인 MELLODDY 현황 파악(실제 진행 내용) ○ 국내 제약사에서 확보하고 있는 ADMET 자료 확보 ○ Chemical space에서 ADMET 자료 빠져 있는 화합물의 실제 합성 및 ADMET 실험 ○ 실험결과 Database화 			
플랫폼 공공화 방안	<p>(데이터 확보 및 플랫폼 공공화 방안, 기업참여 유도 방안 등)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ data 공유한 제약사에 대해서는 모델 공유 및 활용 ○ 확보된 data로 현재까지 알려지지 않은 ADMET 실험된 화합물은 ADMET 예측 대회 개최로 각 회사의 실제 모델의 우수성 평가 및 국제적 경쟁력 확보 			

3. 기술수요분석 및 전문가 제안의 시사점

- 인공지능 기반의 신약개발의 필요성은 다국적 제약기업을 필두로 글로벌 신약개발의 차세대 혁신 전략으로 부각되고 있으나, (1) AI 신약개발의 성과사례의 부재, (2) AI 기술기반의 민간 기업이 주도하는 분야, (3) AI 신약개발 플랫폼 구동을 위한 신약개발 과정의 유효한 빅데이터 확보 필요, (4) 국내 신약개발 역량 강화를 위한 공공 인프라 구축 등의 현안 등이 존재함. 또한, (5) 신약개발의 전체 과정에 활용이 가능한 다양한 플랫폼 및 모듈 확보를 통해 파이프라인 중심의 국가신약개발 과제와 연계에 대한 추가적인 검토가 필요
- 이러한 AI 신약개발 분야의 미충족 수요를 해결을 위한 국가 R&D로서의 지원 필요성이 존재함

(1) AI 신약개발의 성과사례의 부재

- AI 활용을 통한 후보물질 발굴 및 임상 진입 사례는 국내외에 다수 있으나, FDA 승인을 통한 신약개발 성공사례가 아직 없음
- 이를 위해 선행사업의 우수한 플랫폼 및 산학연 연구주체가 보유하고 있는 AI 신약개발 플랫폼을 활용 및 고도화하여 도출된 선도물질 및 후보물질의 실험적 검증 등을 통한 AI 신약개발의 실효성을 교차 검증하는 전략이 필요
- 또한 임상적 유효성이 검증된 물질 또는 FDA에 승인되어 현장에 도입된 신약 등을 활용하여 개발된 AI 플랫폼의 성능을 검증하기 위한 전략이 필요.



(2) AI 기술기반의 민간 기업이 주도하는 분야

- 국내외의 다수의 AI 신약개발 스타트업 및 중견기업들이 대형제약사와 협업을 통해 다양한 적용증에 임상 진입을 위한 후보물질 발굴이 활발하게 진행되고 있음
- 민간 기업 주도로 개발된 플랫폼의 경우, 데이터 및 플랫폼 노하우가 기업의 가치와 연계되어 공공적 개방 또는 활용에 제한이 있음
- AI 신약개발 플랫폼의 공공화를 위한 국가R&D 지원이 필요하며, 기업 참여 유도를 위한 인센티브 전략의 마련이 필요함

(3) AI 신약개발 플랫폼 구동을 위한 신약개발 과정의 유효한 빅데이터 확보 필요

- 선행사업 및 국내 AI 신약 개발 기업의 공통적인 애로사항으로 신약개발에 활용 가능한 데이터 확보 문제가 장애요인으로 작용
- 기업 보유의 데이터 공유를 위한 해외 사례 (MELLODY 등) 벤치마킹 전략과 BT-ICT 융합 국가 데이터 스테이션 사업과의 연계가 필요.
- 정부 출연기관의 화합물은행 및 바이오 데이터의 활용을 위한 표준화 작업 선행 또는 연계 필요

(4) 국내 신약개발 역량 강화를 위한 공공 인프라 구축

- 선행사업에서 기 구축된 AI 신약개발 플랫폼을 운영 유지하기 위해 API 를 우선적으로 확보하여 연계 할수 있는 운영지원 사업 지원 필요
- 선행사업의 성과 및 국내 산학연의 연구주체가 보유한 플랫폼의 고도화를 통해 실효성과 활용도가 높은 공공 AI 신약개발 플랫폼 서비스 시행



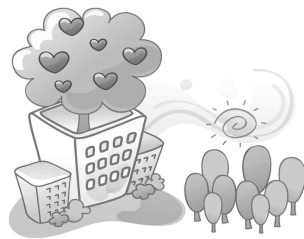
(5) 신약개발의 전체 과정에 활용이 가능한 다양한 플랫폼 및 모듈 확보

- 선행사업에서 시범적으로 개발된 선도물질 도출을 위한 약물가상탐색, 약물재배치, 임상최적화 설계 이외에 약동력 가상탐색, 독성예측, 신약물질의 물성 최적화, 신약 합성 및 대량생산 경로 최적화 등 다양한 모듈 및 플랫폼의 선제적 확보를 통해 국가 신약개발 역량 강화에 기여할 수 있음
- 또한, 신약개발 분야의 가치적성과로서의 후보물질 도출 및 임상 진입을 위한 연계를 위한 국가 R&D 지원이 필요함



제 4 장

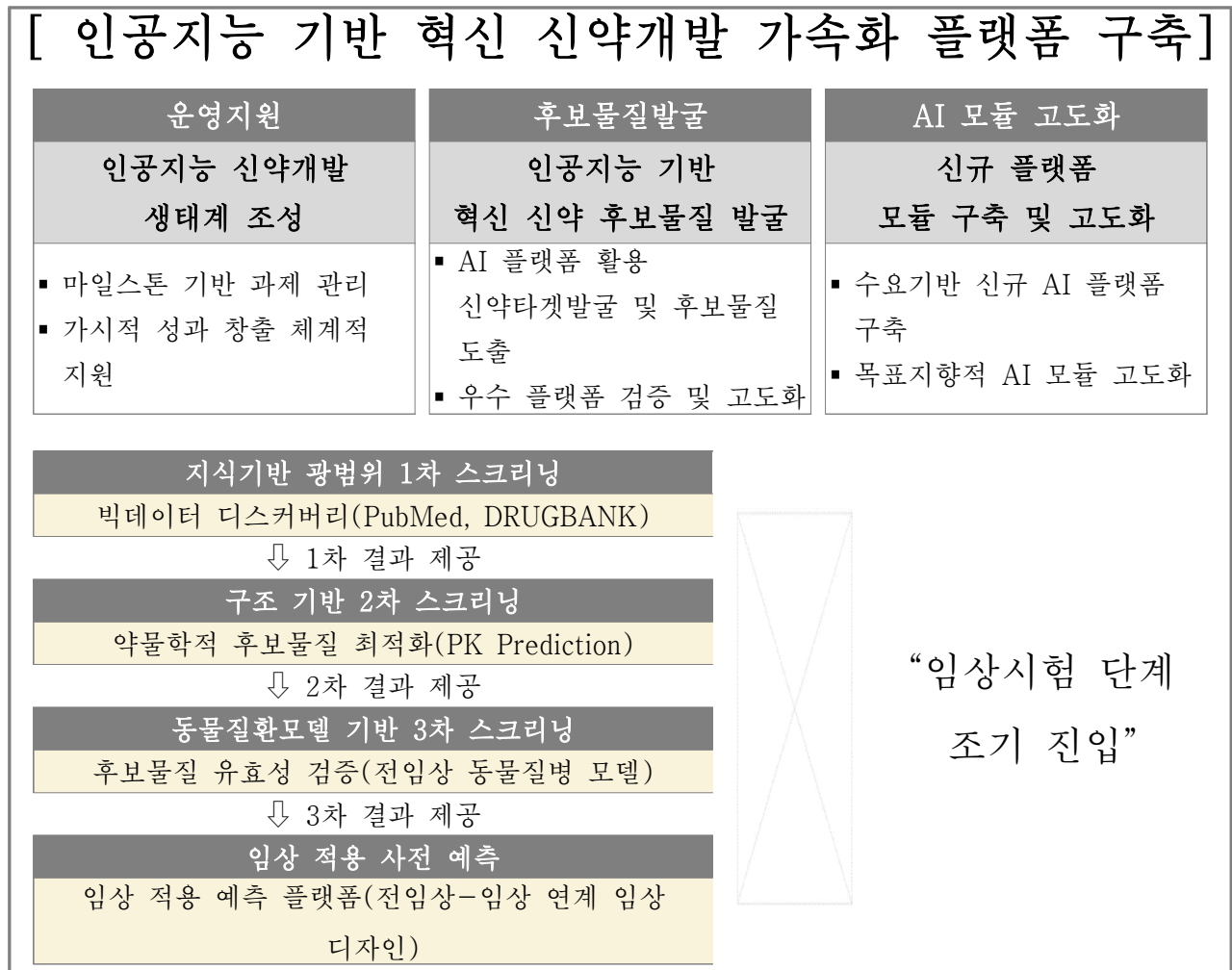
사업 추진 체계



제4장 사업 추진체계

제1절 추진체계

<표 IV-1> 사업 추진체계



□ 중점 추진과제

○ 인공지능 플랫폼을 활용한 가시적 성과 창출

- 신약개발 전문가*, AI 전문가 및 제약사의 공동연구를 통해 후보물질 개발 등 가시적 성과 창출
- *대구·오송 신약센터, 생공(연), 화학(연), 파스퇴르(연) 등
- 플랫폼에서 예측한 물질의 검증 결과가 플랫폼 고도화에 재투입되는 선순환 구조



및 제약사 인프라 활용 협업체계 구축으로 모델 고도화 병행 추진

- 외국의 경우, 순수 AI 기술로 후보물질을 발굴해 1년 만에 임상에 진입한 물질도 존재
- 1차 사업에서 지원받은 과제는 신약개발 과제에 참여토록 유도하여, 신약개발과 모델 고도화를 병행할 수 있도록 지원 추진
- 과제 선정 및 단계 평가 시 AI 활용 계획·성과를 제시하도록 하여, 적극적으로 AI 모델이 활용될 수 있도록 유도 및 관리
- 운영지원과제를 활용하여 제약사 협의체 구성 및 연구자 네트워크로 협력, 연계 강화 추진
- 정책 커뮤니티를 활용하여 AI 신약개발 정책 및 규제 개혁 안건 항시 도출

○ 신규 인공지능 플랫폼 구축 및 기존 플랫폼 고도화를 위한 R&D 확대

- 1차 사업에서 구축된 플랫폼과 전문가*의 의견을 바탕으로 중복성·필요성·경제성 등을 총체적으로 판단하여 Top-Down 방식으로 전략적 신규 플랫폼 개발 집중 투자하고, 연구자 수요에 기반한 자유 공모 형식도 병행

*신약개발 전문가(연구소 및 제약사), 대학 전문가 등으로 전문가 풀을 구성하고 분야별 인공지능 플랫폼 구축 전략 및 세부사업 마련

- 1차 사업에서 구축된 플랫폼 중 우수한 1~2개의 플랫폼을 지속적으로 지원*하여, 현장에서 활용될 수 있도록 지속적인 고도화를 지원해 기술 경쟁력을 확보할 수 있는 방안 강구

*1차 사업 구축 플랫폼 6개 과제를 대상으로 한 별도 과제 생성 또는 후속 사업 가산점 부여 등

- 운영지원 과제를 통해 과제 진행 단계에 따라 모델 예측력에 대한 실험 검증을 지원하여, 구축 모델의 성능·신뢰도 향상에 집중

○ 신약개발 전방위의 AI 플랫폼 개발 지원

- 임상 허들인 2상의 성공 가능성을 예측하는 등 신약개발 생산성 제고를 위한 모델 구축 추진
 - 합성·바이오 등 약물 종류뿐 아니라 개발, 평가 단계 등 신약개발의 모든 분야가 포함되도록 추진
- AI와 빅데이터를 접목한 미래 기술개발을 위한 원천기술 개발 집중



- 오픈소스 데이터(유전적 상관관계, 체세포 돌연변이 등), 이미지 데이터, 오믹스 데이터, 임상, 비임상 데이터 등 모든 종류의 데이터를 분석하고 활용하기 위한 기술로써, 데이터 수집이 아닌 실질적 활용 플랫폼 개발을 지원

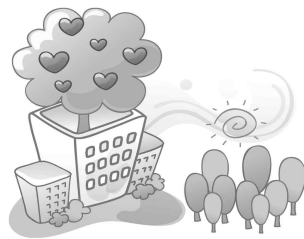
○ 운영지원과제의 역할 강화를 통해 인공지능 신약개발 플랫폼 공유 및 운영 체계 확보

- 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업에서 도출된 현안을 정리하고 해결방법을 도출해 신규사업 지원시스템 개선에 반영
 - 개발 플랫폼의 중복 이슈, 중복성 문제 및 운영 지원과제의 권한 등
- 실험검증 체계*를 구축하여, 플랫폼 구축 및 후보물질 발굴의 약효·약물 안전성과 인공지능 활용 성과 등을 과제 진행에 따라 지속적으로 모니터링하고 검증 지원
 - *국내 CRO 및 연구소 등 실험검증 기관을 세부로 참여시켜 직접 검증 지원
- 1차 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업의 기탁 데이터와 본 사업 생성 데이터를 통합·표준화하여, 본 사업을 포함한 국가 R&D 사업에서의 활용 및 향후 빅데이터 구축을 위한 기반 마련
- 인공지능 신약개발 플랫폼의 공공성 강화 및 안정적 활용체계 구축
 - '공공 인공지능 신약 포털사이트'를 활용한 환류를 위해 운영비 마련을 포함한 전반적 운영 체계를 구축하고, 공공성 강화를 위한 방안 강구
 - *공공 포털의 지속적 운영 및 유지 방안 추가 예정
- AI 적용 신약개발 원천기술의 지적재산권 확보를 통한 국가 신약개발 경쟁력 제고
 - AI 활용 신규 데이터베이스 구축 및 알고리즘 기술에 대한 특허 출원 및 등록을 통한 원천 기술 확보
- 운영 지원과제를 선 선정하여, 운영 과제의 관리 권한을 RFP 상에 명기하는 등 과제를 적극 운영할 수 있는 실현 방안 모색



제5장

기대효과



제5장 기대효과

□ 기술적 기대효과

- 차별화된 차세대 신약개발 플랫폼 및 원천기술 확보를 통해 가시적인 신약개발 성과 창출
- 선행사업에 이어 실제로 인공지능을 신약개발에 접목, 실질적 성과를 도출함으로써 인공지능 활용 신약개발의 효과·가능성 제시
- 차세대 신약 기반 기술 확보를 통한 국가 신약개발 경쟁력 확보
- 신약개발 단계별 수행 주체 간 협력 연계를 통해 단계별 연구 결과의 신속한 검증 및 프로세스 가속화
 - 신약개발 관련 연구가 다음 단계로 연계되지 못하거나 적절한 검증이 이뤄지지 못해 연구 결과가 사장되는 것을 방지
 - 각 연구기관의 장점을 최대한 살려 시너지 효과를 창출하고 전주기적 인공지능 적용을 통해 신개념 신약개발 프로세스 구축

□ 경제적 기대효과

- (원천기술 확보) 인공지능을 활용한 신약개발 지원 플랫폼 및 원천기술 확보를 통한 신약 부가가치 창출
 - 기존 글로벌 제약사가 주도하고 있는 신약 시장을 국내의 인공지능 및 IT 기술 기반의 신약 역량 강화를 통해 신약 원천기술의 신속한 확보를 통한 경제 효과 창출
- 신약개발 사업화를 통한 부가가치 창출
 - 확보된 인공지능 기반 기술은 국내 기업에 기술이전 하거나 공동연구를 통해 신약개발에 활용 시 높은 경제 효과를 기대



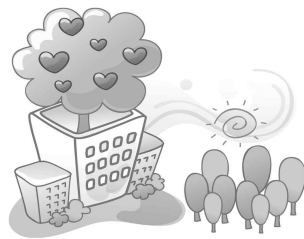
□ 사회적 기대효과

- (경제성장, 일자리 창출) 차세대 융합 신약 기반 바이오 경제성장 및 일자리 창출에 기여
 - 인공지능 및 융합 신약 기반 원천기술 확보를 통한 신약개발 패러다임 전환
 - 인공지능 기반 신약개발 프로세스 정립, 인공지능 및 융합 신약 신기술 실증 임상연구를 통한 디지털 바이오 헬스케어 산업 활성화, 차세대 신약개발 분야 전문인력 양성 및 일자리 창출
- (치료제 개발 대응체계 마련) 미래형 인공지능 기반 신약개발 전주기 가속화 플랫폼으로, 향후 발생할 신종 감염병 팬데믹의 신속한 치료제 개발 대응체계 마련
 - 신종 감염병 치료제 분야에 우선 적용하여 가속화 플랫폼의 조기 구축 및 공공적 효과 극대화



제6장

추진 전략



제6장 인공지능 활용 혁신신약 발굴사업 추진전략

제1절 비전·목표 및 방향 정립

비전	신약개발 전주기 활용 가능한 인공지능 신약개발 플랫폼 구축으로 질환 극복 토대 마련 및 국가 신약개발 경쟁력 제고							
목표	인공지능 신약개발 플랫폼 고도화 및 활용 지원을 통한 가시적 신약개발 성과 창출							
전략 사업	인공지능 활용 후보물질 발굴	신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화			운영지원 및 공공 플랫폼 운영			
	선행사업을 통해 구축된, 혹은 그 밖의 연구팀에서 별도로 구축한 인공지능 플랫폼을 고도화·활용하여 신약 타겟 및 후보물질 도출	연구자 수요 기반 신규 플랫폼 모듈 구축·검증			마일스톤 기반 과제관리 및 구축된 플랫폼·모듈에 대한 블라인드 검증, 공공 플랫폼 운영·관리 등			
투입 규모	사업기간	총 사업비(억원)						
	2022년 ~ 2026년 (5년)	구분	사업 추진 기간					총사업비(백만원)
			'22	'23	'24	'25	'26	
		국비	4,000	9,200	11,700	10,500	5,300	40,700
지방비		-	-	-	-	-	-	
민자	-	-	-	-	-	-		
합계	4,000	9,200	11,700	10,500	5,300	40,700		

인공지능 활용 혁신신약 발굴
사업

추진 로드맵	전략 사업 및 과제	사업 기간('22~'30)					사업비	운영비	총사업비 (백만원)
		22	23	24	25	26			
	① 인공지능 활용 후보물질 발굴						27,000	-	27,000
	(`22년 27억원, 3개과제X12억원/년X9개월, 총4년)								
	② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화						8,100	-	8,100
	(`22년 9억원, 6개X2억원/년X9개월, 총3년)								
	③ 운영지원 및 공공 플랫폼 운영						3,800	-	3,800
	(`22년 4억원, 1개, 총5년)								



추진
내용

인공지능 활용 혁신신약 발굴사업

추진 전략	세부 추진 내용
인공지능 활용 후보물질 발굴	<ul style="list-style-type: none"> • 선행사업에서 구축되었거나, 별도 연구팀에서 구축한 인공지능 플랫폼을 고도화하고 직접 활용하여 신약 타겟 및 후보물질 도출 <ul style="list-style-type: none"> - 인공지능을 직접 활용하여 신약개발 성과 창출이 가능한 분야를 수요조사·간담회 등을 통해 도출하여 지원 분야 및 지원 규모 확정 - `22년, `23년으로 2차에 걸쳐 각 차수별 3개 과제 지원하며, 2단계 진입 시 3개 과제 중 2개 과제만 선정하여 집중 지원(경쟁형 R&D) • 인공지능 연구자, 신약개발전문가 및 제약사의 협력연구를 유도하고, 도출 성과의 후속 지원 방향 확보 추진 <ul style="list-style-type: none"> - 인공지능 모델을 활용하여 혁신신약을 개발함과 동시에, 연구 결과는 인공지능 플랫폼 고도화에 사용되는 선순환 구조 구축 <p>※ 지원과제는 AI 모델 구축 및 활용 방안, 신약개발 전문가 협업, API 제공 계획을 상세히 제시하여야 하며, 운영지원과제와 협력하여야 함</p>
신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화	<ul style="list-style-type: none"> • 연구자 수요(신물질 설계, SAR 기반 후보물질 최적화, 약동/약력 분석, 후보물질 유효성 검증 등)를 반영한 목표 지향적 신규 플랫폼 모듈 구축 및 검증 <ul style="list-style-type: none"> - 하향식(Top-Down) 과제와 상향식(Bottom-up) 과제* 병행 지원 <p>*△하향식 : 수요·동향을 바탕으로 신규 개발이 필요한 플랫폼 도출 △상향식 : 연구자 의견에 기반한 자유 공모 과제</p> <ul style="list-style-type: none"> - `22~`24년 매년 6개의 신규 과제를 선정하고, 2단계 진입 시 과제의 50%만 선정해 집중 지원(경쟁형 R&D) • 구축 모델은 '인공지능 통합 포털 사이트'를 통해 API를 기탁하고 최소 3년간 해당 모델을 공공 목적으로 공개 <ul style="list-style-type: none"> - API 공개 계획에 따른 연구비 차등 부여, 활용에 따른 수익 모델 창출 등으로 적극적인 모델 공개 유도
운영지원 및 공공 플랫폼 운영	<ul style="list-style-type: none"> • 마일스톤 기반 과제 진도관리, 네트워킹 등을 통한 가시적 성과 창출을 지원하고, 공공 포털 사이트 운영을 통한 인공지능 신약개발 생태계 조성 • `22년 1개의 신규 과제를 선정하여, 총 5년을 지원하고 운영 지원, 검증 지원 및 공공 포털 사이트 운영을 위한 총괄 과제로 구성

제2절 사업 구성

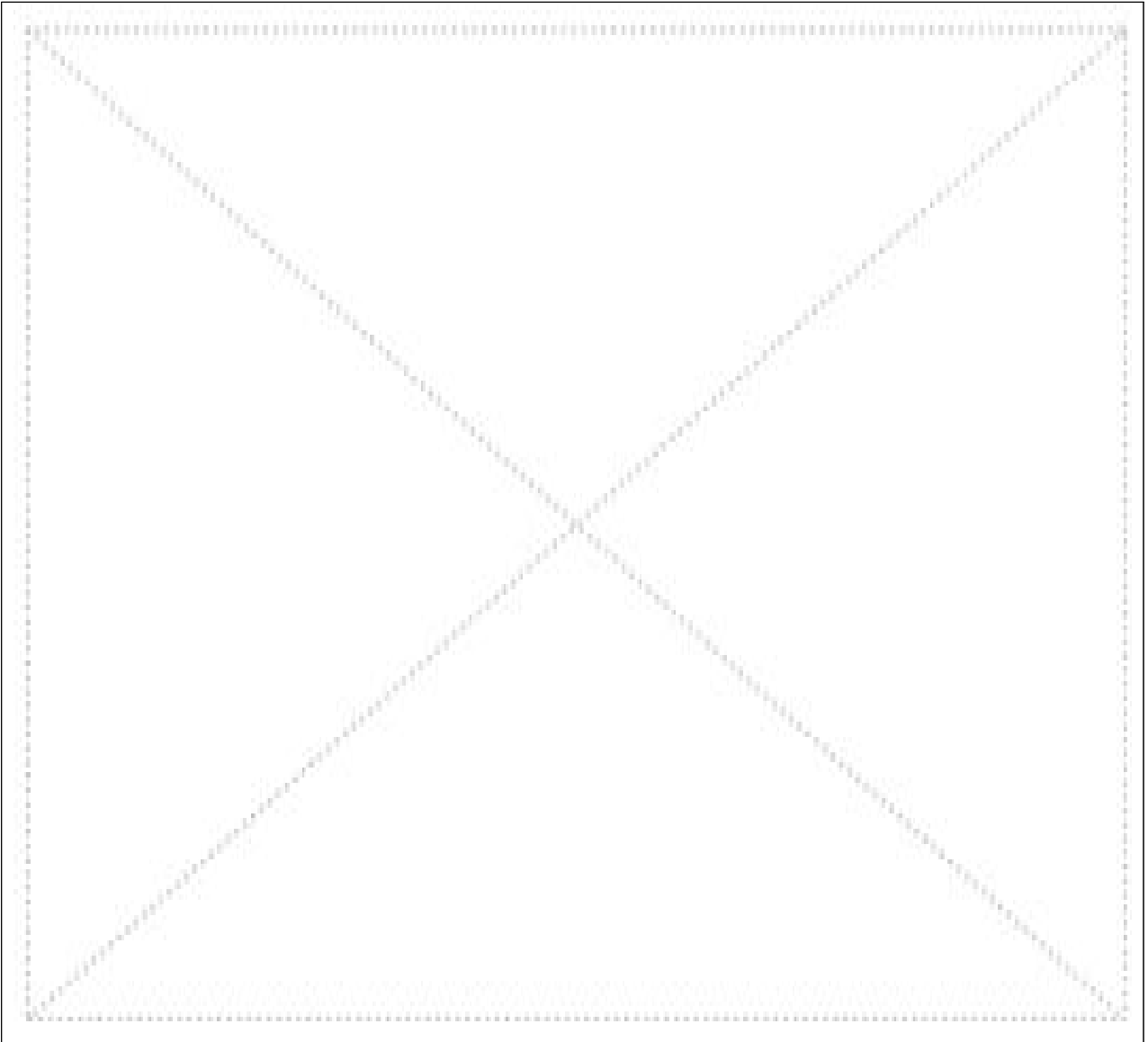
1. 사업개요 및 구성

비전	신약개발 전주기 활용 가능한 인공지능 신약개발 플랫폼 구축으로 질환 극복 토대 마련 및 국가 신약개발 경쟁력 제고	
목표	인공지능 신약개발 플랫폼 고도화 및 활용 지원을 통한 가시적 신약개발 성과 창출	
전략 사업	① 인공지능 활용 후보물질 발굴	선행사업을 통해 구축된, 혹은 그 밖의 연구팀에서 별도로 구축한 인공지능 플랫폼을 고도화·활용하여 신약 타겟 및 후보물질 도출
	② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화	연구자 수요 기반 신규 플랫폼 모듈 구축·검증
	③ 운영지원 및 공공 플랫폼 운영	마일스톤 기반 과제관리 및 구축된 플랫폼·모듈에 대한 블라인드 검증, 공공 플랫폼 운영·관리 등



사업기간		총 사업비(백만원)								
투입 규모	2022년 ~ 2026년 (5년)	(년차별 사업비)								
				민자			국고	민자		합계
		년차	국고	현금	현물	합계	(백만원, %)	현금	현물	(백만원, %)
		1차년	4,000	-	-	4,000				
		2차년	9,200	-	-	9,200				
		3차년	11,700	-	-	11,700	40,700	-	-	40,700
		4차년	10,500	-	-	10,500	(100%)	-		
		5차년	5,300	-	-	5,300				
		(과제별 사업비)								
				전략 사업	국비	민간		합계		
				현금	현물					
		① 인공지능 활용 후보물질 발굴	27,000	-	-	27,000				
		② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화	8,100	-	-	8,100				
		③ 운영지원 및 공공 플랫폼 운영	3,800	-	-	3,800				
		합계	40,700	-	-	40,700				





2. 사업기획 범위

가. (전략사업1) 인공지능 활용 후보물질 발굴

전략사업	① 인공지능 활용 후보물질 발굴					
사업기간	2022년 ~ 2026년					
사업목표	AI 모델 활용 신약개발 성과 창출 및 AI 모델 고도화 선순환 구조 구축					
소요예산 및 운영	2022	2023	2023	2025	2026	합계
국비(억원)	2,700	6,300	7,200	7,200	3,600	2,700
민자(억원)	-	-	-	-	-	-
소계	2,700	6,300	7,200	7,200	3,600	2,700

나. (전략사업2) 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화

전략사업	② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화					
사업기간	2022년 ~ 2026년					
사업목표	연구자 수요 반영 목표 지향적 신규 플랫폼 모듈 구축 및 검증					
소요예산 및 운영	2022	2023	2023	2025	2026	합계
국비(억원)	900	2,100	3,300	2,400	1,200	8,100
민자(억원)	-	-	-	-	-	-
소계	900	2,100	3,300	2,400	1,200	8,100

다. (전략사업3) 운영지원 및 공공 플랫폼 운영

전략사업	③ 운영지원 및 공공 플랫폼 운영					
사업기간	2022년 ~ 2026년					
사업목표	마일스톤 기반 과제 진도 관리, 산·학 연계 강화 등 인공지능 신약개발 생태계 조성					
소요예산 및 운영	2022	2023	2023	2025	2026	합계
국비(억원)	400	800	1,200	900	500	3,800
민자(억원)	-	-	-	-	-	-
소계	400	800	1,200	900	500	3,800



3. 소요예산

가. 총괄 소요예산

□ 본 사업은 '22년부터 '26년까지 총 5년간, 총 사업비 407억 원을 조성하여 운영

○ 총 407억 원 중 정부출연금 407억원(100.0%)으로 구성

<표 VI-1> 전체 투자규모

구분	연도별 사업비 투입 예산(백만 원)					
	2022	2023	2024	2025	2026	계
국고	4,000	9,200	11,700	10,500	5,300	40,700
민간자금	-	-	-	-	-	-
계	4,000	9,200	11,700	10,500	5,300	40,700

□ 전략과제별 소요예산 규모

전략사업	연차별 사업비(백만원)					총 사업비(백만원)		
	'22	'23	'24	'25	'26	국비	민자	합계
① 인공지능 활용 후보물질 발굴	2,700	6,300	7,200	7,200	3,600	2,700	-	2,700
소계	2,700	6,300	7,200	7,200	3,600	2,700	-	2,700
② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화	900	2,100	3,300	2,400	1,200	8,100	-	8,100
소계	900	2,100	3,300	2,400	1,200	8,100	-	8,100
③ 운영지원 및 공공 플랫폼 운영	400	800	1,200	900	500	3,800	-	3,800
소계	400	800	1,200	900	500	3,800	-	3,800
합계	4,000	9,200	11,700	10,500	5,300	40,700	-	40,700



첨부

AI 신약개발 R&D 연구사업 (안)

□ 추진배경

○ 사업 추진 배경

- 신약개발은 대표적인 고위험·고수익 산업 분야로, R&D에 소요되는 막대한 시간·비용이 국내 제약사의 글로벌 진출에 진입장벽
- 최근 진입장벽 극복을 위한 전략 중 하나로 인공지능·빅데이터를 활용하여 신약개발에 소요되는 시간과 비용을 단축하는 전략이 대두

○ 관련 추진계획 및 중장기 전략

- 「2019년 정부연구개발 투자방향 및 기준」(국가과학기술심의회, '18.3월) : 혁신신약 개발을 위한 신규 타겟(novel target) 발굴 검증 및 초기 파이프라인을 강화*하고, 신약개발 관련 공공수요 R&D** 지원 확대
 - * 수요기반 타겟발굴·검증, 선도·후보물질 도출 및 최적화 연구 등
 - ** 의약품 안전성·유효성 검증을 위한 규제과학, 희귀난치질환 치료제 임상연구 등
- 「제3차 생명공학육성기본계획」(생명공학종합정책심의회, '17.9월) : 글로벌 블록버스터 신약 창출 및 미래 시장 타겟형 바이오의약품(유전자, 줄기세포, 단백질, 백신 등) 투자 강화로 국가경쟁력 확보
- 「4차 산업혁명 기반 헬스케어 발전전략」(4차산업혁명위원회, '18.12월) : 주요 과제로 '인공지능 활용 신약개발'을 추진하여 신약개발 R&D, 전문인력 양성, 연구데이터 수집·공유·활용 촉진 방안 마련

□ 연구목표

- (최종목표) 인공지능 신약개발 플랫폼 고도화 및 활용 지원을 통한 가시적인 신약개발 성과 창출
 - 효율적인 후보물질 도출을 위한 인공지능 플랫폼 고도화 및 공공화
 - 신약개발 전체 단계에 활용 가능한 다양한 인공지능 플랫폼의 발굴 및 적용



□ 성과목표

- 성과 창출 및 성과 활용·확산 지표 및 목표치로 단계별 과학적 성과/기술적 성과/인프라 성과
 - (과학적 성과) : SCI 논문(인공지능 기술 또는 스마트 약물감시 관련)
 - (기술적 성과) : 신규 인공지능 기술을 이용한 결과물의 지식재산권 출원
 - (인프라 성과) : 신규 인공지능 플랫폼의 Application Programming Interface(API) 공공 서비스 제공 (운영·지원과제와 협력)

□ 연구기간 및 연구비

① 인공지능 활용 후보물질 발굴 (‘22년 27억원, 3개과제X12억원/년X9개월, 총4년)

- 인공지능 모델을 직접 활용하여 빠르고, 효율적으로 신약개발의 가시적 성과가 창출 되도록 지원
 - * 선행 사업에서 구축된 플랫폼 또는 상업 플랫폼에 관계없이 빠른 시일 내에 효율적으로 신약개발 성과 창출이 가능한 플랫폼 활용
- 인공지능 연구자, 신약개발 전문가 및 제약사의 협력연구를 유도하고, 도출 성과의 후속 지원 방향 확보 추진
- AI 모델을 활용한 신약개발 성과 창출을 평가 주안점으로 과제를 선정하여 AI 모델이 예측한 신약을 개발함과 동시에 연구 결과는 AI 모델 고도화에 사용되는 선순환 구조 구축
 - * 지원 과제는 AI 모델 구축 및 활용 방안, 신약개발전문가 협업, API 제공 계획을 상세히 제시하여야 하며, 마일스톤 기반의 신약개발 목표와 API 운영 계획 제시를 기반으로 운영 지원과제와 협력하여야 함
- 인공지능 플랫폼을 직접 활용하여 신약개발 성과 창출이 가능한 분야*를 연구·산업계 수요조사 및 간담회 등을 통해 도출하여 지원 분야 및 지원 규모 확정
 - * 타겟 발굴, 임상설계 및 결과 예측, 약물 부작용 예측
- ‘22년 및 ‘23년으로 2차에 나뉘어서 각 차수별 3개 과제 지원, 총 4년 (2+2)로



2단계로 나누어 지원하고 2단계 진입 시 2개 과제만 선정하여 집중 지원

② 신규 플랫폼 모듈 구축 및 고도화 (‘22년 9억원, 6개X2억원/년X9개월, 총3년)

- 연구자들의 수요(신물질 설계, SAR 기반 후보물질 최적화, 약동/약력(PK/PD) 분석, 후보물질 유효성 검증, 임상적용 예측 등)를 반영한 목표 지향적 신규 플랫폼 모듈 구축 및 검증
- 바이오 및 합성 신약등 분야 별로 나누어 지원하고, 각 분야별로 하향식 (Top-Down) 과제와 상향식(Bottom-up) 과제*를 동시에 지원 추진
 - * △하향식 : 수요 및 동향을 바탕으로 신규 개발이 필요한 플랫폼 도출, △상향식 : 연구자의견에 기반 한 자유 공모 과제 및 고도화 지원을 위한 선행 사업 구축 플랫폼
- 선행 사업에서 구축된 플랫폼의 지속 관리 및 고도화를 위해 우수한 과제는 본 사업과 연계하여 지원 검토)
- ‘22~‘24 매년 6개의 신규 과제 지원, 총 3년(2+1), 2단계로 나누어 지원하고, 2단계 진입시 50%만 선정해 집중 지원
- 구축 모델은 “인공지능 통합 포털 사이트”를 통해 API를 기탁하고 최소 3년간 해당 모델을 공공 목적으로 공개해야함.
 - * 기탁된 데이터의 활용 계획을 선 제시하여, 기탁에 따른 연구자 불안감 해소 추진
- API 공개 계획에 따라 연구비 차등을 주거나, 활용에 따른 수익 모델을 창출하여 적극적인 모델 공개 유도

③ 운영 지원 및 공공 플랫폼 운영 (‘22년 4억원, 1개, 총5년)

- 마일스톤 기반으로 과제 진도를 관리하고, 네트워킹 등 산·학 연계 강화를 통한 가시적 성과 창출 지원 및 공공 포털 사이트 운영을 통한 인공지능 신약개발 생태계 조성
- ‘22년 1개의 신규 과제를 선정하여, 총 5년을 지원하고 운영 지원, 검증 지원 및 공공 포털사이트 운영 위한 총괄 과제로 구성



- 연차별 연구 과제 수를 반영하여, 협력을 위한 세부 참여 기관은 유기적으로 구성 추진

