

## 인공지능 활용 신약개발 플랫폼 구축방안 수립

(Establish a plan to build a new drug development platform  
using artificial intelligence)

한국생명공학연구원

한국연구재단



# 제 출 문

한국연구재단 이사장 귀하

본 보고서를 “인공지능 활용 신약개발 플랫폼 구축방안 수립”의 최종보고서로 제출합니다.

2019. 4. 24.

연구기관명 : 한국생명공학연구원

연구책임자 : 김홍열센터장

연 구 원 : 문성훈실장

연 구 원 : 김현수

연 구 원 : 남연정

연 구 원 : 조윤정

연 구 원 : 이지현



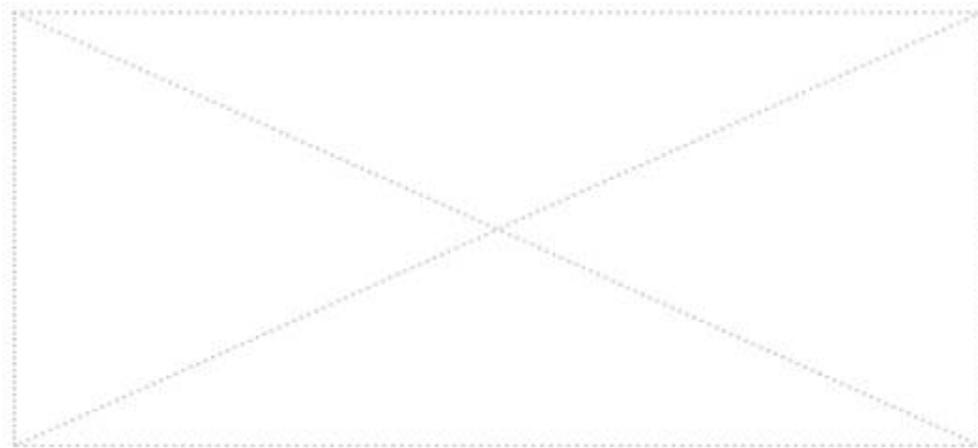


# 요약문

## 1. 추진배경

- 신약개발은 대표적인 고위험·고수익 산업 분야로, R&D에 소요되는 막대한 시간·비용이 국내 제약사의 글로벌 진출에 진입장벽으로 작용
  - 글로벌 의약품 시장은 연 1,200조원('15, IMS Health) 규모의 거대 시장\*으로, 블록버스터 신약은 연 1조 이상의 매출 창출\*\*
    - \* 글로벌 반도체(약 400조원), 자동차(약 600조원), 조선(약 100조원) 시장의 총합 이상
    - \*\* 글로벌 제약사 애브비가 개발한 관절염치료제 ‘휴미라’는 연매출 18조원(세계 1위)
  - 그러나, 하나의 신약개발을 위해서는 평균 15년간 1조원 이상이 소요되며, 1만여 개의 후보물질 중 1개(0.01%)만이 신약으로 출시

< 참고 : 신약개발 단계별 기간과 확률 >



- 국내 제약사는 규모가 영세\*하여 자체 신약개발에 한계\*\*가 있으며, 따라서 바이오시밀러·바이오의약품 개발 등 차별화된 전략 추진
  - \* 국내 의약품 시장은 약 21조원 규모('16)로 글로벌 시장의 1.7%이며(세계 11위), 국내 1위 제약사 매출액(유한양행)이 글로벌 1위(화이자)의 3%에 불과
  - \*\* 국내 출시 신약 29종 중 美 FDA 허가 신약은 2종(팩티브('03), 시백스트로('14))에 불과하며, 개발비용에 비해 연매출 저조(팩티브 : 3,000억 투자 → 연 20억 매출)

□ 최근 진입장벽 극복을 위한 전략 중 하나로 인공지능·빅데이터를 활용하여 신약개발에 소요되는 시간과 비용을 단축하는 전략이 대두

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

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

○ 신약개발에 활용되는 인공지능은 크게 자연어를 처리하는 언어 지능, 입력된 DB를 학습·가설을 제기하는 추론·지식표현으로 구분

※ ‘인공지능 R&D 전략’(’18.5, 과기정통부)의 5대 분류 참고

⇒ 인공지능은 신약개발 전 단계에 활용될 것으로 기대되며, 신약 개발 기간을 최대 절반(15년 → 7~8년)까지 축소할 것으로 기대

#### < 인공지능 활용 신약개발 예시 >

##### ◇ 후보물질 발굴 (언어 지능 + 추론·지식 표현)

- 의학문헌에 물질-질병 간 관계를 자연어처리(NLP)기술로 학습하여 특정 질환에 대한 후보물질 및 그 인체 내 작용 경로(가설)를 제시 (IBM Watson 등)

\* (예시) ‘대장암’이라는 대상 질환 입력 시 ‘화합물 B를 팔에 주사하면 대장 혈관에서 B가 단백질 A와 결합하여 대장암 축소’라는 가설 제시

##### ◇ 약물 구조 설계 (추론·지식 표현)

- 단백질, 화합물에 대한 3차원 구조 학습을 바탕으로 신약 표적(주로 단백질)에 적합한 최적의 화합물 조합(후보물질) 제시

\* (예시) 대장암을 유발하는 단백질 A의 ‘ㄷ’자 구조에 맞추기 위해 알려진 화합물 C, D를 결합한 ‘ㄱ’자 형태의 새로운 화합물 E를 제시

##### ◇ 약물 재창출 (언어 지능 + 추론·지식 표현)

- 제약사가 보유한 시판된 약물의 임상 데이터, 환자 복용 데이터를 자연어처리 기술로 학습하여 알려진 효능이 아닌 새로운 효능 발굴

\* (예시) 미국 Atomwise는 인공지능을 통해 8,000개의 에볼라 용이 아니던 약품들을 시뮬레이션해서 2개의 에볼라 바이러스 치료법을 발견

## < 참고 1. 신약개발 주기별 인공지능 활용 모델 >

영역	주요 모델	내용
정보탐색 단계	Aggregate & Synthesize Information (대규모 정보 수집 및 종합화)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 수천 개의 데이터 소스로부터 수십억 개의 데이터를 검색하여 신약탐색의 통찰력 확보</li> <li>- 논문, 임상시험보고서 등의 데이터에서 의미 (context)를 추출해서 신약탐색 효율성 증대</li> </ul>
	Repurpose Existing Drugs (기존 약물을 다른 질환에 이용)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 기존 약물에 대한 반응이 좋은 환자군을 대상으로 새로운 적응증을 발견</li> </ul>
후보물질 단계	Design Drugs (약물 디자인)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 단백질의 특성 등을 예측하여 새로운 의약품 개발</li> <li>- 알려진 항체 등 기존 치료제의 효능을 뛰어넘게 최적화된 치료제를 개발</li> </ul>
	Generate Novel Drug Candidate (새로운 신약후보 창출)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 건강하거나 질병이 있는 환자들의 샘플을 분석하여 새로운 바이오마커를 찾거나 치료제를 개발</li> <li>- 신약 개발의 속도를 높이고 성공률을 높임</li> <li>- 신약 개발 비용을 감소시킴</li> </ul>
	Validate Drug Candidate (신약 후보물질 검증)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 신약 후보물질을 도출하는 시간을 단축함</li> <li>- 부작용을 개선하도록 함</li> </ul>
전임상 단계	Design Preclinical Experiments(전임상 실험 설계)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 항체나 기존에 알려진 자료들을 이용하여 실험설계에 시간, 비용, 불확실성을 줄임</li> </ul>
	Predict Toxicology (독성예측)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 기존 화학구조, 독성자료를 기반으로 새로운 물질의 독성 예측</li> </ul>
	Run Preclinical Experiments(전임상 실험 수행)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 어느 곳에서도 전임상 실험이 가능한 실험의 자동화 수행</li> <li>- 전임상에 이용되는 세포들의 선택, 조작, 분석의 자동화 수행</li> </ul>
임상시험 단계	Design Clinical Trials (임상시험 설계)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 임상실험을 용이하게 하도록 실험설계에 도움을 줌</li> <li>- 다양한 데이터들을 환자들의 대표성을 보이는 컴퓨터 모델로 변환시킴</li> <li>- 새로운 치료법에 혜택을 받을 수 있는 환자를 구분하게 함</li> </ul>
	Recruit for Clinical Trials (임상시험 피험자 모집)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 임상실험을 용이하게 함</li> <li>- 환자들의 기록을 임상실험에 적합하도록 분석함</li> <li>- 환자들의 기록과 유전적 분석을 통해 임상실험에 맞는 환자들을 매칭함</li> </ul>
	Optimize Clinical Trials (임상시험 최적화)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 임상실험을 용이하게 함</li> <li>- 임상실험에 참여하는 환자들을 관리하여 환자 데이터를 분석하거나, 환자들의 임상 실험 참여를 높임</li> </ul>
	Pharmacometrics (계량약리학)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 임상실험을 수행하지 않고도 모델링과 시뮬레이션을 활용하여 약효와 독성을 평가</li> </ul>
제조단계	Smart Pharmaceutical Factory (스마트제약공장)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 제품생산 모든 공정과 작업과정을 스스로 제어</li> <li>- QbD의 지능화 및 자동화(Smart QbD)</li> </ul>
인허가 단계	Real-World Evidence based Regulatory Decision(인허가 의사결정)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Real-World Evidence의 인공지능 해석을 통해 의약품 인허가 의사결정의 고도화</li> </ul>
사용단계	AI based Pharmacovigilance (스마트 약물감시)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 약물 사용, 부작용 감시 Pharmacovigilance 업무의 자동화 및 지능화</li> </ul>
신약개발 의사결정	Go/No-go Decision (개발진행/중단 의사결정지원)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 인공지능 기반 실시간 Pipeline Valuation을 통해 Go/No-go Decision 지원</li> </ul>

## 2. 해외동향

- (전체) 인공지능 신약개발 산업 규모는 '24년까지 연평균 40%의 비약적인 성장을 통해 40억 달러에 이를 것으로 전망(Global Market Insight, '17)
  - '16년 7.5억 달러 규모의 AI 헬스케어 산업\*은 '24년 100억 달러(약 11조원) 규모에 이를 것으로 전망되며, 특히 신약개발 AI가 핵심 분야로 부상
    - \* 영상진단, 신약개발, 질병예측/위험분석, 원격모니터링, 의료기관 업무흐름 개선 등
- (미국) 민간 협동연구를 중심으로 활발한 연구 진행 중
  - (민간) IBM Watson('15년 출시) 등 10여개의 스타트업들이 글로벌 제약사와 협업 중으로, 주로 후보물질 발굴 및 신약 재창출에 주력

### < 해외 사례 : IBM Watson for Drug Discovery(WDD)>

- ◇ 왓슨의 독보적인 자연어 처리기술을 활용하여 신약 후보물질 탐색을 위한 'Watson for Drug Discovery(WDD)' 개발
- ◇ 자연어 처리, 인지추론, 머신러닝 등 3가지 핵심기능을 활용하여 3,000여만 건의 정형·비정형 데이터를 학습, 신약 후보물질 탐색 및 새로운 치료법 개발

- (정부) 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

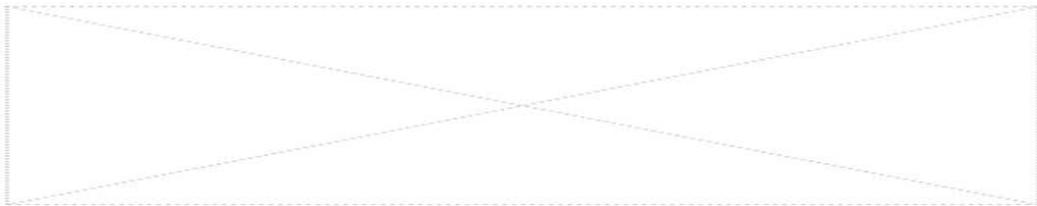
### □ (일본) 정부 주도의 일본형 민·관 협업모델 추진

- 이화학연구소(RIKEN)을 중심으로 신약개발 인공지능 개발을 위한 '라이프 인텔리전스 컨소시엄(LINC)' 출범('17.4월~)
- 3년간 20여개의 AI 프로그램 개발을 위해 정부가 100억엔을 투자하며, IT업체·제약사 등 90여개 기관 참여

## < 참고 2. 일본 라이프 인텔리전스 컨소시엄(LINC) >

- (개요) 4차 산업혁명 대응을 위한 ‘일본재흥전략’(‘15.3월, 16.4월)과 ‘AI 산업화 로드맵’(‘17.2월)의 일환으로 추진 중인 **정부 주도 신약개발 AI 개발 프로젝트**
  - 3년간 신약개발에 특화된 20여개의 AI 프로그램을 개발하고 일본 내 제약업계에 공개하며, 문부과학성과 후생노동성은 ’17년 25억엔 등 3년간 100억엔을 투자
- (목표) 바이오·제약 분야에 빅데이터 및 AI기술을 접목시켜 **관련 산업의 진흥과 국민의 건강 수명 연장 및 삶의 질 향상을 추구**
  - \* 일본제약공업협회는 AI 본격 도입시 1개 신약개발에 드는 시간과 비용이 각각 10년에서 3~4년, 1200억엔에서 600억엔으로 절반 이상 감소 예상
- (구성) AI를 개발하는 IT업계, 이를 활용하는 바이오·제약업계, 그리고 양자간 협력 촉매자로 연구기관 및 학계 등으로 구성
  - IT업체(후지쯔, NEC 등), 제약사(다케다, 시오노기 제약 등), 연구기관(이화학연구소, 교토대) 등 99여개 기관 참여 中 (’18.02 기준)

<LINC 참여기관 역할분담>



- (활용) 비경쟁영역(Pre-competitive Area)과 경쟁영역(Competitive Area)을 구분, 개발된 AI 표준모델의 소유권을 IT업체에 부여하여 **수익창출 보장**
  - (비경쟁영역) 개발 완료한 20여개의 AI 표준모델은 컨소시엄 참여기관에 한해 공유 및 활용 허용(컨소시엄 참여는 비용 부담이 없어 참여가 자유로움)
  - (경쟁영역) AI 개발 IT업체와 이를 활용하고자 하는 제약사 등이 B2B 계약을 체결하고 **제약사 내부 데이터**를 활용한 AI 분석 서비스 제공
- (기반 조성) 인공지능 활용 활성화를 위한 **의료빅데이터 규제 완화**(’18.5~)
  - 의료빅데이터의 활용 단계를 명확히 하고 그 활용을 위한 “**차세대 의료 기반법**” 신설 및 시행(2018년 5월~)
  - \* 1차 활용(일상 진료, 의료 제휴), 1.5차 활용(정보 분석에 의한 의료 개선), 2차 활용(제약기업 등 건강의료 관련 산업에 의한 활용) 등으로 구분

### 3. 국내 현황 및 시사점

- (가능성) 국내 기술력은 美中 대비 취약(기술격차 1.8년, '17)하나, 신약개발에 활용 가능한 공공 빅데이터\* 및 우수한 인력 보유
  - \* 국가연구개발사업을 통해 축적된 50여만 건의 화합물 데이터(연구데이터) 및 전국민 의료보험제도에 기반한 건강보험 데이터(의료데이터) 보유
- (민간) 벤처기업 및 대학 등에서 인공지능 프로그램을 개발 중이나, 국내 제약사들은 데이터 부족·경제적 부담 등으로 인해 도입 실적 저조
  - 스탠다임, 파미노젠 등 관련 벤처기업은 증가 추세이나, 국내 공공DB 활용의 어려움\* 및 제약사들의 도입 기피 등을 애로사항으로 제기
    - \* 데이터 소유권·개인정보 문제 등으로 인해 국내 공공DB 활용이 어려워, 국내 벤처기업임에도 주로 외국의 공공·민간DB를 활용
  - 국내 제약사들은 자체보유 데이터가 부족하고 경제적 부담 등으로 도입 실적이 저조하나, 최근 대형 제약사를 중심으로 인공지능 활용 착수
    - \* (주요 사례) CJ헬스케어-신테카바이오 공동으로 면역항암제 개발 착수, 동아에스티-아주대 공동으로 환자의 진료기록을 활용한 치료제 개발 착수
- (정부) 출연연, 국책사업단 등을 통해 인공지능 모델 개발 중\*이나 기업 활용 실적이 저조하며, 공공 DB 활용 지원 미흡
  - \* KISTI에서 외국DB등을 활용해 개발한 경험 있으며('12-'14), '전통천연물기반 유전자-동의보감사업'('12~'21, 1,200여 억원)에서 천연물 특화 인공지능 플랫폼 개발 중
  - 현재 화학(연)이 보유 중인 연구데이터는 소유권 이슈\*, 건보공단 등이 보유 중인 의료데이터는 개인정보보호 이슈로 인해 공유·활용 미흡
    - \* 각 연구데이터의 소유권은 기탁자가 보유하고 있으며, 기탁자의 동의 없이는 제3자 제공 불가 ⇒ 현재 화학(연)에서 관련 규정 개선 작업 중 (별도 법령 개정 불필요)
- (시사점) 벤처기업·대학과 제약사 간 협력 촉진을 위한 R&D 추진 및 공공DB의 공유·활용 강화 병행 필요

#### 4. 사업 추진체계도

비전	국가적 신약개발 역량 향상 및 국민 의료비 절감
목표	신약개발에 소요되는 시간·비용을 절반 이상 단축



[ 추진 전략 ]	
<R&D_ 후보물질 발굴>	화학물 구조, 독성 등 연구데이터 기반으로 타겟에 대응하는 후보물질 발굴
<R&D_ 약물 재창출>	인허가 데이터 및 적용 원리, 신규타겟 데이터 등을 기반으로 새로운 적응증을 제안하는 알고리즘 개발
<R&D_ 스마트 약물 감시>	의약품 생산·수입 실적 및 이상사례 보고 자료의 연계분석을 통해 의약품 감시·사전 예측 알고리즘 개발
<비R&D_ 운영·관리지원>	선정된 과제에 효율적으로 지원, 운영 관리

[ 추진 계획 ]	
각 분야별로 기업 중심의 컨소시엄을 구성하여 신약개발에 특화된 인공지능을 개발하고 효과를 입증하기 위한 연구추진	

## 6. 주요연구내용안

### ① (후보물질 발굴) 신약 후보물질 발굴을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축

- (최종목표) 신약분야 국내외 연구데이터를 활용한 신규 빅데이터/인공지능 기반 신약개발 플랫폼 구축 및 선도물질 발굴
- (주요연구내용) ▲인공지능 기반 신약개발 플랫폼 개발 및 검증, 빅데이터 기반 신약개발 플랫폼 구축, ▲약물 디자인, 신약 선도물질 발굴 및 검증, 독성 예측 등

### ② (약물 재창출) 약물 재창출을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축

- (최종목표) 신규 인공지능 플랫폼을 이용한 약물 재창출 (drug repositioning)
- (주요연구내용) ▲인공지능 기반 약물 재창출 플랫폼 구축, ▲인공지능을 이용한 약물 재창출(drug repositioning)의 유효성을 입증하기 위하여 기존 약물에 대한 새로운 타겟 및 적응증 탐색·발굴

### ③ (스마트 약물감시) 스마트 약물감시를 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축

- (최종목표) 약물 부작용 빅데이터 구축 및 신규 인공지능 기반 스마트 약물 감시 시스템 확립
- (주요연구내용) ▲부작용 발생 가능성 예측 모형 개발을 통한 약물 안전성 확보 ▲의약품 안전정보 수집 및 탐지 기술 개발, 공통데이터 모델을 활용한 약물감시 지원 시스템 개발 등

### ④ (운영지원) 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 운영·관리 과제

- (최종목표) 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 연구과제 지원, 운영 및 관리를 통한 정부 투자의 효율성 증진
- (주요연구내용) ▲효율적 과제 지원 및 성과 관리 체계 구축·운영 ▲웹기반 데이터 공유 및 공공화를 위한 시스템 구축·운영 등

## 7. 투자계획안

### □ 소요예산 규모

- 총 사업비 : 225억원
- 사업단계 : 3년(2+1) ※ '19년 75억원

<표> 연차별 투자계획

단위 : 억원

2019	2020	2021	합계
75	75	75	225

### □ 투자 주안점안

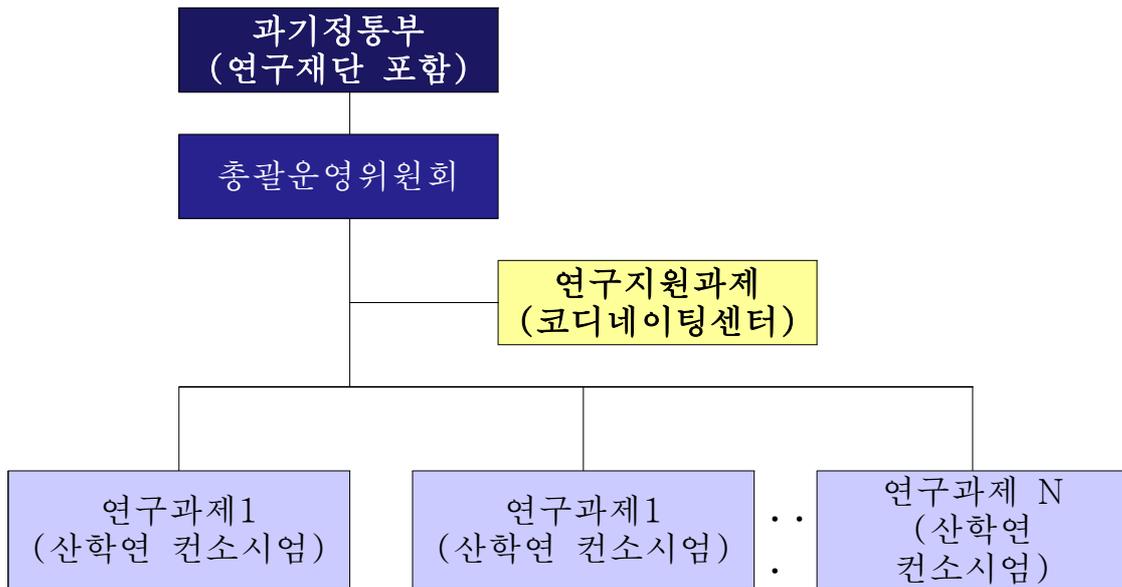
- (1단계('19~'20)) 연구기반 및 기초연구 역량 강화에 중점
- (2단계('21)) 기초·원천기술 개발 및 응용연구 연계, 유효성 검증 등 목적형 연구 활성화

<표> 과제별 투자계획

과제명	지원규모	2019	2020	2021	합계
신약 후보물질 발굴을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	4개 과제	1,125	1,125	1,125	3,375
		1,125	1,125	1,125	3,375
		1,125	1,125	1,125	3,375
		1,125	1,125	1,125	3,375
약물 재창출을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	1개 과제	1,125	1,125	1,125	3,375
스마트 약물감시를 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	1개 과제	1,125	1,125	1,125	3,375
지원과제	1개 과제	750	750	750	2,250
합계	-	7,500	7,500	7,500	22,500

## 8. 사업 추진체계

### (1) 구성 및 주요기능



- **(총괄운영위원회)** 부처 과장급 공무원 1명과 과제책임자(연구과제+지원과제) 7명 및 산학연병 전문가 4명 등 총 12명 내외로 구성
    - 사업 추진방향 조정, 과제 평가결과, 연차별 과제성과·계획 심의
    - 과제 진행사항 모니터링(분기별) 및 사업 추진 애로사항 해결지원
    - 사업 현안사항 논의 및 기타 주요사항 심의 등
  - **(연구지원과제)** 성과사업화 전문성을 갖추고 관련 커뮤니티를 대변할 수 있는 비영리기관으로 구성
    - **(행정지원)** 연구과제 진도관리(월별 Reporting 등) 및 추진위 지원, 연구과제 종료 후 성과 추적 관리\*, 사업 홍보
    - **(과제지원)** 과제성과 조기 창출 및 상용화촉진 등 비R&D 요소\*를 패키지 지원하고 기타 연구과제 애로사항 해소
- \* 경쟁 제품 등 시장분석·컨설팅 제공, 마케팅, 투자유치, 국내외 인허가 업무지원, 국내외 기타 규제사항 분석 및 해결방안 마련, 해외진출 지원 등
- **(성과확산)** AI·신약개발 관련 네트워크를 구축하고 사업도출성과 및 관련 역량 제고를 위한 커뮤니티와의 공유

## (2) 추진과제 관리

### □ 과제 선정

- (기본방향) 글로벌 수준에 근접한 기업이 참여하는 산·학·연·병 컨소시엄 그룹을 선정
  - 모든 과제는 연구데이터 관리계획 대상 과제이므로, 사업계획서 제출 시 DMP(Data Management Plan)서류를 필수적으로 제출하여야 함
  - ※ 연구책임자가 DMP에 명시한 시점, 장소, 기간, 포맷대로 연구수행 중 또는 연구종료 후 데이터를 공개 및 공유해야 함
- (평가항목) 심층적인 평가를 위해 1·2단계로 구분하여 실시

### □ 중간 평가

- (기본방향) 매년도 평가는 단계평가로 실시하여 계속지원 여부 및 지원규모 결정
- (평가항목) 사업목표와 전략을 고려하여 설정
  - 선정평가 항목을 보조지표로 설정하여 활용
  - 연구지원과제 주요 평가항목 중 하나로 연구과제 참여기관의 만족도 등을 포함

### □ 최종평가

- (기본방향) 당초 사업목표 및 기대효과를 토대로 연구성과의 질적 우수성을 평가하고 결과에 따라 인센티브와 제재조치 부여
  - 최종평가 시, 구축된 데이터베이스의 지속운영방안을 제시해야하며, 개발 내용에 대한 시스템 이용가이드도 작성 제출
  - 과제책임자는 과제의 대표적 연구성과 소개서를 작성·제출
- (평가항목) 과제의 점수 및 평가등급은 연구 목표 달성도(70%), 연구성과의 우수성 및 활용성(30%)을 검토하여 절대평가로 결정

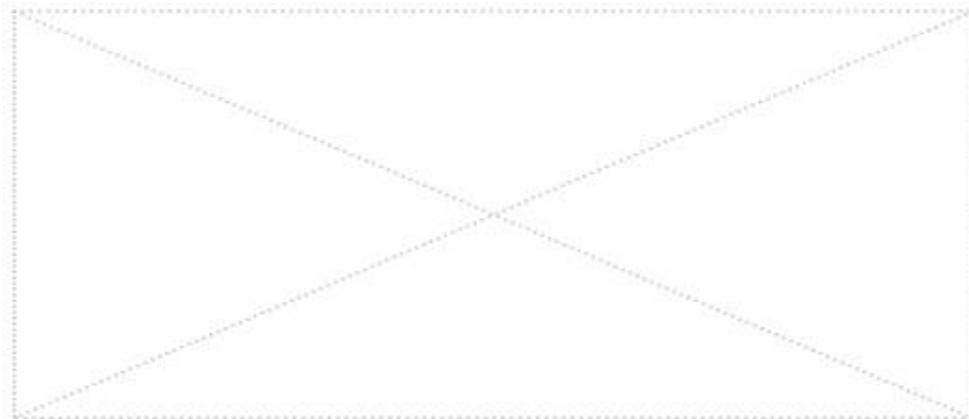
## 9. 기대효과

### □ 과학기술적 기대효과

- 후보물질 탐색 등을 포함한 기초연구부터 승인취득까지 13년이 소요된다고 가정하면, 13년에서 8.8년으로 33% 기간 단축
- 데이터 작성자와 사용자간의 1:N 공유관계를 형성할 수 있도록 데이터 풀을 확대하는 새로운 협력 유도
- 화합물 빅데이터 플랫폼 구축과 약물-표적 간 관계 그리고 약물작용 등을 예측하는 시스템을 이용하여 후보물질 탐색기간을 평균 5년 에서 1년으로 단축될 것으로 예상
- 임상시험의 경우, AI를 이용한 데이터의 문맥화 이해와 전체 임상시험 기간 중에 환자를 유지하는 기술을 통하여 임상시험을 수행하는 기간을 30% 단축

### □ 사회적 기대효과

- 신약개발에 소요되는 시간·비용 단축, 경제적 부가가치 창출, 산업 규모 확대 및 인력양성 등 일자리 창출
- 한국적 상황에서의 후발 추격자 입장을 반영하여 AI가 가져오는 R&D 비용은 1조에서 6천억 원으로 40% 절감이 가능



그림출처 : 후생노동성, KOTRA 해외시장뉴스, 재가공

## <Summary>

Business Necessity	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ New drug development is one of the most representative high-risk and high-return industries, and huge amount of time and cost spent on R&amp;D is the entry barrier for Korean pharmaceutical companies to make inroads into global markets.</li> <li>○ One of the latest strategies to overcome entry barriers is to use artificial intelligence to reduce the time and cost of developing new drugs.</li> </ul>
Business direction of propulsion	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ Selection of four areas to promote the development of new drugs based on artificial intelligence               <ul style="list-style-type: none"> <li>- Expert- Review, Based on demand surveys, the field of discovery of candidate materials, clinical trials, smart drug monitoring, and re-creation of drugs are selected as leading areas that need to be promoted first</li> </ul> </li> </ul>
Major Research details	<ul style="list-style-type: none"> <li>① Building an Artificial Intelligence-based Platform for Exploring New Drugs               <ul style="list-style-type: none"> <li>- Building new big data/artificial intelligence-based new drug development platform and discovering leading materials using research data from home and abroad in the new drug field</li> </ul> </li> <li>② Building artificial intelligence-based platforms for drug re-creation               <ul style="list-style-type: none"> <li>- Re-create Drugs Using New Artificial Intelligence Platform</li> </ul> </li> <li>③ Building an Artificial Intelligence-Based Platform for Smart Drug Monitoring               <ul style="list-style-type: none"> <li>- Build big data for adverse drug reactions and establish new artificial intelligence-based smart drug surveillance systems</li> </ul> </li> <li>④ AI New Drug Development Platform Establishment and Business Management Challenges               <ul style="list-style-type: none"> <li>- Increase efficiency of government investment by supporting research tasks, operating and managing new artificial intelligence drug development platforms</li> </ul> </li> </ul>
Business period and total cost of business	<p>Total 3 years ('19'21)/ KRW 22.5 billion</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- KRW 7.5 billion in '19</li> </ul>
Propulsion system	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ It operates the Codineting Center, a nonprofit organization that has expertise in performance business and can represent the relevant community, to provide administrative support, support tasks, and expand performance as its main tasks               <ul style="list-style-type: none"> <li>- The overall committee is organized to review project implementation direction, task evaluation results, and annual discrimination task performance and plan.</li> </ul> </li> </ul>
expectation effectiveness	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ Assuming it takes 13 years to obtain approval from basic research including exploration of candidate materials, it is possible to reduce the period from 13 years to 8.8 years</li> <li>○ Save time and money on new drugs, create economic value, expand industry size and create workforce</li> </ul>

## <Table of Contents>

<b>Chapter 1 Introduction</b> .....	1
Section 1 Background and Necessity .....	1
Section 2 Business Concepts and Scope .....	7
1. Business concept .....	7
2. Business scope .....	8
Section 3 Progress and System for Planning .....	10
1. Process for Planning and Implementation .....	10
2. System for Promoting Planning and Research .....	11
<b>Chapter 2 Analysis of Domestic and Foreign Environments</b> .....	12
Section 1 Domestic and Foreign Policy Sector .....	12
1. Foreign .....	12
2. Domestic .....	21
Section 2 Domestic and Foreign R&D sector .....	27
1. Foreign .....	27
2. Domestic .....	34
Section 3 Domestic and Foreign industrial trends .....	37
1. Foreign .....	37
2. Domestic .....	49
Section 4 Government Investment Analysis .....	62
Section 5 Thesis/patent analysis .....	65

1. Thesis analysis .....	65
2. Patent analysis .....	73
Section 6 Implications .....	92
<b>Chapter 3 Survey and Analysis for Business Design</b> ....	97
Section 1 Technical Demand Survey .....	97
Section 2 Technical Level Survey .....	112
<b>Chapter 4 Project Promotion Plan</b> .....	121
Section 1 Vision, goals and strategies .....	121
Section 2 Business details .....	122
Section 3 Investment plan .....	140
Section 4 Propulsion system .....	142
1. Summary .....	142
2. The Composition and Role of Research Assistance Projects	143
3. Management of promotion tasks	
(task selection, mid-term final evaluation) .....	144
4. Collaboration on detailed research tasks .....	148
<b>Chapter 5 Feasibility Analysis</b> .....	149
1. The timeliness of pushing ahead with a project .....	149
2. Government Assistance Necessity .....	154
3. Conformity with higher plan .....	157

4. Differentiation from existing business .....	159
<b>Chapter 6 Expectation Effectiveness .....</b>	<b>161</b>
Section 1 Scientific and technological expected effects	161
Section 2 Social expected effect .....	163
<b>Chapter 7 Follow-up Research Proposal .....</b>	<b>164</b>
Section 1 Korea's unique AI drug development	
direction .....	164
Section 2 The direction for universal diffusion after	
this project .....	166
Section 3 A key technology proposal using	
genome-based Big Data .....	167
Section 4 A plan to nurture specialist in	
AI drug development .....	172
<b>references .....</b>	<b>173</b>

## <목차>

제1장 서론 .....	1
제1절 배경 및 필요성 .....	1
제2절 사업개념 및 범위 .....	7
1. 사업개념 .....	7
2. 사업범위 .....	8
제3절 기획 추진경과 및 체계 .....	10
1. 기획 추진경과 .....	10
2. 기획연구 추진체계 .....	11
제2장 국내외 환경 분석 .....	12
제1절 국내외 정책분야 .....	12
1. 국외 .....	12
2. 국내 .....	21
제2절 국내외 연구개발(R&D) 분야 .....	27
1. 국외 .....	27
2. 국내 .....	34
제3절 국내외 산업동향 .....	37
1. 국외 .....	37
2. 국내 .....	49
제4절 정부투자분석 .....	62

제5절 논문/특허분석 .....	65
1. 논문 분석 .....	65
2. 특허분석 .....	73
제6절 시사점 .....	92
<b>제3장 사업설계를 위한 조사분석 .....</b>	<b>97</b>
제1절 기술수요조사 .....	97
제2절 기술수준조사 .....	112
<b>제4장 사업추진방안 .....</b>	<b>121</b>
제1절 비전, 목표 및 전략 .....	121
제2절 사업내용 .....	122
제3절 투자계획 .....	140
제4절 추진체계 .....	142
1. 개요 .....	142
2. 연구지원과제 구성 및 역할 .....	143
3. 추진과제 관리(과제선정, 중간·최종평가) .....	144
4. 세부 연구과제 연계·협력 .....	148
<b>제5장 타당성 분석 .....</b>	<b>149</b>
1. 사업추진 시의성 .....	149
2. 정부지원 필요성 .....	154
3. 상위계획과의 부합성 .....	157
4. 기존사업과의 차별성 .....	159

제6장 기대효과 .....	161
제1절 과학기술적 기대효과 .....	161
제2절 사회적 기대효과 .....	163
제7장 후속 연구제안 .....	164
제1절 한국 특유의 AI 신약개발 발전방향안 .....	164
제2절 본 사업 이후의 범용적 확산을 위한 방향안 .....	166
제3절 유전체 기반 빅데이터 활용 주요기술 제안 .....	167
제4절 AI 신약개발 관련 전문 인력 양성방안 .....	172
참고문헌 .....	173

## <표 목차>

<표 1> 주요 연구분야 .....	7
<표 2> 연구진 주요추진업무 .....	10
<표 3> 전문가 자문그룹 명단 .....	11
<표 4> 인공지능 기술이 적용된 의료기기 제품 사용허가 현황 .....	22
<표 5> 미국, 민간 협동연구 진행 내용 .....	27
<표 6> 애플 헬스킷-리서치킷-케어킷 기능(Josh Yoburn, MA, Phd blog) .....	31
<표 7> 국내 병원과 민간기업의 협동 연구 내용 .....	35
<표 8> 인공지능 헬스케어 서비스 주요 해외사례 .....	48
<표 9> 글로벌 제약사의 신약개발 인공지능 활용 주요 현황 .....	48
<표 10> 연도별 정부투자액 .....	62
<표 11> 부처별 정부투자액 .....	63
<표 12> 부처별 정부투자액 .....	64
<표 13> 부처별 정부투자액 .....	64
<표 14> 인공지능을 활용한 신약개발기술 논문검색을 위한 검색식 .....	65
<표 15> 인공지능을 활용한 신약개발기술 논문검색 결과 .....	65
<표 16> 인공지능 활용 신약개발 관련 최다 피인용 해외논문 리스트 .....	71
<표 17> 분석범위 .....	73
<표 18> 주요 키워드 .....	74
<표 19> 주요 IPC .....	74
<표 20> 검색식 및 검색결과 .....	75
<표 21> 전체 국가의 연도별 출원 동향 .....	76
<표 22> 구간별 출원인원과 출원건수 .....	79
<표 23> 대상기술의 상위 출원인 동향 .....	80
<표 24> 신약개발 인공지능 개발전략 사업 모델 유형 .....	94

<표 25> 인공지능 신약개발 설문지 설계 .....	98
<표 26> 제안된 기술개발 과제의 신약개발 주기별 구분 .....	104
<표 27> 수요 기술 제안의 영역 및 신약개발 단계별 분류 .....	109
<표 28> 분야별 수요 기술 제안 응답 수 .....	110
<표 29> 신약개발 세부 단계에 따른 수요 기술 제안의 특징 .....	111
<표 30> 기술확보전략에 따른 수요 기술 분류 .....	112
<표 31> 제안된 수요 기술의 연구기간 .....	113
<표 32> 제안된 수요 기술의 예상 연구비(총 연구비) .....	114
<표 33> 제안된 수요 기술의 예상 연구비(연평균 연구비) .....	114
<표 34> 연구팀 구성 전략 .....	115
<표 35> 연구과제 형태 .....	116
<표 36> 우선 순위 검토 대상 활용 모델 .....	116
<표 37> 우선 순위 검토 결과 .....	118
<표 38> 우선 순위 과제 후보 도출 .....	119
<표 39> 연차별 투자계획 .....	140
<표 40> 과제별 투자계획 .....	140
<표 41> 연구지원과제 세부내용 .....	143
<표 42> 글로벌 제약사와 신약개발 AI업체 협력사례 .....	149
<표 43> 신약개발 전과정 내 인공지능 활용 분야 .....	143
<표 44> 美日의 신약개발 인공지능 개발전략 사업 모델 .....	155
<표 45> 유사사업과의 비교 .....	160
<표 46> 커리큘럼안 .....	172

## <그림 목차>

<그림 1> 신약개발 단계별 기간과 확률 .....	2
<그림 2> 본 사업의 주요 사업범위 .....	9
<그림 3> 연구 추진체계도 .....	11
<그림 4> 미국, AI를 활용한 안전하고 효과적인 단축 방안 .....	12
<그림 5> 미국 식약청 식품 산업 규제 .....	13
<그림 6> 의료 빅데이터 활용 단계 .....	19
<그림 7> AI를 이용한 프로젝트 .....	19
<그림 8> 바이오-제약업계와 IT업계의 역할 .....	20
<그림 9> 글로벌 기업과 국내기업의 제약산업 규모 비교 .....	21
<그림 10> 현재 신약후보물질 개발 기간 .....	22
<그림 11> AI를 활용한 기업규모의 증가 .....	28
<그림 12> 헬스케어 내 인공지능 : 연간 자금 추이(2011~2015년) ....	30
<그림 13> 헬스케어분야에서의 인공지능 초기 영향 .....	30
<그림 14> LINC 참여기관 역할분담 .....	32
<그림 15> 신약개발 과정에 AI를 활용한 기대효과 .....	32
<그림 16> 유한양행과 신테카바이오의 공동개발 효과 .....	34
<그림 17> 서울아산병원의 의료사업 선진화를 위한 빅데이터 분석 ....	36
<그림 18> 글로벌 인공지능 신약개발 산업 규모 증가율 .....	37
<그림 19> 미국 AI 헬스케어 시장 규모 예측(2017~24) .....	40
<그림 20> 인공지능 연간 펀딩 규모 .....	43
<그림 21> 인공지능 헬스케어 시장 규모 전망 .....	44
<그림 22> 인공지능 기술관련 특허권 보유 기업리스트 .....	45
<그림 23> 국가별 인공지능 관련 특허 보유 기업 및 특허 수 .....	45
<그림 24> IBM 왓슨의 5개 전략 솔루션 .....	46
<그림 25> 글로벌 인공지능 헬스케어 주요 스타트업 .....	47

<그림 26> 국내 AI를 이용한 신약개발 컨퍼런스 행사 공고	50
<그림 27> 선도 프로젝트 추진체계	51
<그림 28> 주요 부처별 투자 비중('14~'18년)	62
<그림 29> 연구주체별 투자 비중('14~'18년)	63
<그림 30> 연구단계별 투자('14~'18년)	64
<그림 31> 인공지능 신약개발 관련 논문 연도별 발표현황(2008~2019)	66
<그림 32> 인공지능 활용 신약개발 관련 논문 게재 주요 저널	67
<그림 33> 인공지능 활용 신약개발 관련 논문 발표 주요 국가	68
<그림 34> 인공지능 활용 신약개발 관련 논문 발표 주요 연구기관	69
<그림 35> 인공지능 활용 신약개발 관련 논문 발표 주요 연구자	70
<그림 36> 특허분석 프로세스	73
<그림 37> 전체 국가의 연도별 출원동향	77
<그림 38> 국가별 연도별 출원 동향	78
<그림 39> 기술발전 추이도	78
<그림 40> 다 출원인 기업현황 및 점유율	79
<그림 41> 응답자의 소속 기관 근무 기간	99
<그림 42> 응답자의 전공분야	99
<그림 43> 응답자의 소속기관 유형	100
<그림 44> 응답자의 소속기관 기업유형	100
<그림 45> 신약개발 인공지능 기술의 중요도 및 활용도 인식 수준	101
<그림 46> 신약개발 인공지능 기술 개발의 영역별 중요도-활용도 분석 결과(IPA)	102
<그림 47> 빅데이터 + 인공지능 기반 약물 탐색	151
<그림 48> 신약개발 인공지능 기술의 중요도 및 활용도 인식 수준	153
<그림 49> 분야별 특성을 고려한 맞춤형 혁신성장동력 육성전략	156
<그림 50> 신약 개발 역량을 위한 R&D 강화 계획	158
<그림 51> 신약개발에 AI 활용이 가져오는 효과	163
<그림 52> 인공지능 신약 탐색 모델의 예시	165



# 제1장 서론

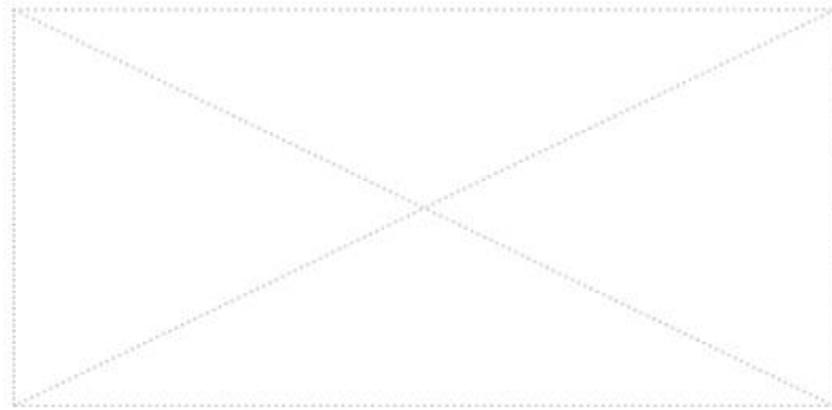
## 제1절 배경 및 필요성

### □ 4차 산업혁명의 전개

- 4차 산업혁명시대의 큰 특징은 초연결성, 초지능화, 대융합
  - 다보스 포럼의 보고서를 기점으로 수많은 미래학자와 연구기관들은 제4차 산업혁명과 미래사회 변화에 대한 전망들을 논의하기 시작
  - 독일, 미국, 일본 등의 주요 국가들은 미래변화에 선제적으로 대응하고 미래사회를 주도하기 위해 정부차원에서 다양한 전략과 정책을 수립하여 추진하고 있음
- 4차 산업혁명시대에는 Genomics, Proteomics 등의 발전과 더불어 인공지능, 빅데이터 분석 등 최신정보통신 기술과의 융합을 통해 제약·바이오 산업은 큰 변화가 이루어질 전망
  - 제약·바이오 산업의 가치사슬 과정에서 많은 변화들이 발생할 전망
  - 4차 산업혁명 관련분야 중 인공지능과 빅데이터라는 두 축을 중심으로 제약·바이오산업의 분야별 변화가 이루어지게 될 전망
  - 특히, 인공지능 기술은 신약 개발, 진단, 환자 데이터 관리 등에 주로 활용될 전망이며, 그 중 신약 개발 과정에 가장 큰 영향을 미칠 전망

### □ 신약개발은 대표적인 고위험·고수익 산업 분야로, R&D에 소요되는 막대한 시간·비용이 국내 제약사의 글로벌 진출에 진입장벽으로 작용

- 글로벌 의약품 시장은 연 1,200조원('15, IMS Health) 규모의 거대 시장\*으로, 블록버스터 신약은 연 1조 이상의 매출 창출\*\*
  - \* 글로벌 반도체(약 400조원), 자동차(약 600조원), 조선(약 100조원) 시장의 총합 이상
  - \*\* 글로벌 제약사 애브비가 개발한 관절염치료제 '휴미라'는 연매출 18조원(세계 1위)
- 그러나, 하나의 신약개발을 위해서는 평균 15년간 1조원 이상이 소요되며, 1만여 개의 후보물질 중 1개(0.01%)만이 신약으로 출시



<그림1> 신약개발 단계별 기간과 확률

- 국내 제약사는 규모가 영세\*하여 자체 신약개발에 한계\*\*가 있으며, 따라서 바이오시밀러·바이오의약품 개발 등 차별화된 전략 추진
  - \* 국내 의약품 시장은 약 21조원 규모('16)로 글로벌 시장의 1.7%이며(세계 11위), 국내 1위 제약사 매출액(유한양행)이 글로벌 1위(화이자)의 3%에 불과
  - \*\* 국내 출시 신약 29종 중 美 FDA 허가 신약은 2종 (팍티브 ('03), 시백스트로 ('14))에 불과하며, 개발비용에 비해 연매출 저조(팍티브 : 3,000억 투자 → 연 20억 매출)
- 신약개발에 소요되는 높은 비용과 시간적 한계로 인해 글로벌 신약개발은 정체단계이며 이를 돌파하기 위한 혁신이 필요
  - 제약사들은 신약개발 비용 부담과 실패 위험을 줄이기 위한 전략으로 '오픈 이노베이션(Open Innovation)'을 적극 추진
  - 특히 글로벌 제약사를 중심으로 신약개발 AI업체와 연구협력을 통해 신약 후보물질 확보에 주력
- 최근 진입장벽 극복을 위한 전략 중 하나로 인공지능·빅데이터를 활용하여 신약개발에 소요되는 시간과 비용을 단축하는 전략이 대두
  - 인공지능 학습에 사용되는 공공·민간 빅데이터 구축\*, 딥러닝 등 인공지능 기술의 발전, 컴퓨팅 파워의 향상 등으로 관련 여건 조성
    - \* (공공데이터) 각종 논문, 특허데이터, 화합물의 구조 및 효능 관련 공개DB 등
    - (민간데이터) 기업 보유 실험·임상데이터, 병원 보유 의료데이터 등
  - 신약개발에 활용되는 인공지능은 크게 자연어를 처리하는 언어 지능, 입력된 DB를 학습·가설을 제기하는 추론·지식표현으로 구분

※ '인공지능 R&D 전략'('18.5, 과기정통부)의 5대 분류 참고

⇒ 인공지능은 신약개발 전 단계에 활용될 것으로 기대되며, 신약개발 기간을 최대 절반(15년 → 7~8년)까지 축소할 것으로 기대

### < 인공지능 활용 신약개발 예시 >

#### ○ 후보물질 발굴 (언어 지능 + 추론·지식 표현)

- 의학문헌에 물질-질병 간 관계를 자연어처리(NLP)기술로 학습하여 특정 질환에 대한 후보물질 및 그 인체 내 작용 경로(가설)를 제시 (IBM Watson 등)
- ※ (예시) '대장암'이라는 대상 질환 입력 시 '화합물 B를 팔에 주사하면 대장 혈관에서 B가 단백질 A와 결합하여 대장암 축소'라는 가설 제시

#### ○ 약물 구조 설계 (추론·지식 표현)

- 단백질, 화합물에 대한 3차원 구조 학습을 바탕으로 신약 표적(주로 단백질)에 적합한 최적의 화합물 조합(후보물질) 제시
- ※ (예시) 대장암을 유발하는 단백질 A의 'ㄷ'자 구조에 맞추기 위해 알려진 화합물 C, D를 결합한 'ㄱ'자 형태의 새로운 화합물 E를 제시

#### ○ 약물 재창출 (언어 지능 + 추론·지식 표현)

- 제약사가 보유한 시판된 약물의 임상 데이터, 환자복용 데이터를 자연어처리 기술로 학습하여 알려진 효능이 아닌 새로운 효능 발굴
- ※ (예시) 미국 Atomwise는 인공지능을 통해 8,000개의 에볼라용이 아니던 약품들을 시뮬레이션해서 2개의 에볼라 바이러스 치료법을 발견

## □ 사업 추진의 필요성 분석

### ○ 제약 R&D 생산성 개선 필요성

- 제약 R&D의 비용 대비 효과가 매년 감소하고 있음. 2010년 10% 에서 2016년 4%(딜로이트 자료)
- 임상관련 디지털 데이터와 딥러닝 기술의 폭발적인 진전이 신약개발의 기간과 위험률을 극적으로 단축하고 있으며, 전세계 제약기업들이 이에 필사적으로 뛰어드는 점을 감안하면, 이에 대처할 기회의 창을 놓칠 경우, 전세계

제약기업들과의 경쟁에서 퇴출을 피할 수 없는 상황

- 우리나라의 다수의 신약개발 경험과 ICT 산업 역량이 결합된다면 인공지능 활용 신약 탐색분야는 우리나라의 우선순위 산업모델이 될 수 있음
  - 디지털 임상 데이터가 축적되고 있으며 축적된 데이터로부터 인공지능이 환자 리포트의 텍스트, MRI 등의 영상이미지, 유전자 등의 생리학적 측정 데이터들의 분석 및 자연어처리 기술의 발달로 사람을 능가하는 분석과 추론이 저렴한 가격에 신속하게 가능해짐
- 현재 선진국에서는 인공지능을 활용한 신약탐색이 괄목할 만한 성과를 내고 있음
- 미국 바이오기업 수노비온은 엑스사이엔티아와 협업을 통해, 평균 4.5년이 걸리는 물질후보 개발을 인공지능으로 단 1년에 끝냄
  - 시간당 3천만 개의 과학저널을 실시간으로 분석하는 자연어기술이 눈부시게 발달한 것에 기인함. 최근 논문에 의하면 Q&A 정확도가 94%까지 도달하고, 개체명인식(Name-entity recognition)에서도 사람 인식률인 97.6%에 근접한 93.4% F-measure를 획득함으로써 인간 수준의 문장을 이해하고 단어들 간의 관계를 인식하는 성능이 조만간 인간을 능가할 것으로 전망되고 있기 때문
  - 미국의 아툼와이즈의 경우 단백질과 분자로부터 백만 개의 분자를 하루 만에 스크리닝 가능한데, 2014년에 이 기술을 에볼라 바이러스 치료법에 적용함. 에볼라 질병에 1:1인공지능 시뮬레이션을 적용해 보는 인공지능 탐험으로 과거에 에볼라 치료용으로 의도하지 않았던 8000개의 약품들 중에서 2개의 치료제를 성공적으로 발굴함
- 최근에는 신약탐색 뿐 만 아니라 신약개발의 전 과정에서 대규모 데이터 및 인공지능 활용이 시도되고 있음
- 신약후보물질 탐색 과정 뿐 아니라, 정보탐색, 전임상, 임상, 제도, 인허가, 사용, 신약개발의사결정 등 여러 분야에서 다수의 인공지능

활용모델이 시도되고 있음

- 전임상 단계에서는 전임상 실험 설계, 독성 예측, 전임상 시험 자동화 등에 활용 시도
- 임상 단계에서는 임상시험 설계, 임상시험 피험자 모집, 임상시험 최적화, 계량약리학분야 등에서 인공지능의 활용이 시도되고 있음
- 그 외 스마트제약공장과 같은 제조단계, Real-World Evidence 기반 FDA의 인허가 의사결정, 인공지능 기반 약물감시(Pharmacovigilance), 신약개발 의사결정 등에 활용
- 2014년 발표된 ICH(국제약품규제조화위원회) M7 guideline은 의약품 불순물들의 잠재적인 발암 위험성을 제한하기 위한 돌연변이 원성 불순물들의 확인, 범주화 및 제어작업을 유전독성 예측 모델과 통계기반으로 해결할 것을 권고하고 있음. 향후 의약품의 규제 분야에서도 데이터 분석 및 인공지능 활용의 확대가 예상됨

○ 복지부 신규 R&D사업의 필요성 및 타당성 분석

- 인공지능 활용 신약 탐색분야는 제약기업이 개별적으로 추진하기에 부담이 있고, 양질 EMR 정보 활용한계에도 문제가 있어, 인공지능 신약탐색을 위한 지원센터, 빅데이터 활용 플랫폼 구축이 필요함
- 정부와 협력해 관련 기관이 보유하고 있는 환자 빅데이터 활용 방안도 논의되고 있음. 보건복지부와 질병관리본부, 건강보험심사평가원, 국민건강보험공단 등이 협의해 개인정보 보호를 전제로 이들 기관이 보유한 대규모 빅데이터 활용이 가능함
- 개별적으로 인공지능 시스템 도입이 어려운 국내 제약사, 신약개발 연구자 대상으로 인공지능 신약개발 시스템 공동 활용 지원을 한다면, 빠른 시일 내에 성과를 낼 것으로 예상됨
- 인공지능 분야에 대한 신규 R&D 사업은 제4차 산업혁명에 대비한 사회와 산업의 선제적인 변화를 추진하고 있는 현 정부의 정책방향 및 제약·바이오 분야를 중점 육성하고자 하는 제약산업육성 5개년 계획의 방향과 부합하는 정책 방향임

- 인공지능 분야에 대한 신규 R&D 사업은 개별 제약기업 또는 대학 등에서 추진하기에는 어려운 분야로 정부의 체계적 지원이 필요한 분야임

#### □ 향후 인공지능 관련 신약개발의 방향성

- 빅데이터, AI기술을 둘러싼 우려에도 불구하고, 향후 신약개발 과정은 데이터 중심으로 재편(Data-driven Drug discovery)될 것으로 예상
- AI 기반 빅데이터 분석은 기존 신약개발과정(화합물 합성, 랩 실험, 임상시험 등)의 대체제는 아니나, 효율성 제고를 위한 효과적 수단임
- 높은 R&D 비용으로 한계에 직면한 제약 산업의 위기 타개를 위해서는 AI기술 도입 및 데이터를 활용한 신약개발 혁신 시도 필요

## 제2절 사업개념 및 범위

### 1. 사업개념

- (개요) 신약개발에 특화된 인공지능을 개발하여 국가적 역량을 강화하고, 인공지능을 활용한 신약개발의 가능성을 입증하기 위한 R&D 지원 추진
- (목표) 글로벌 신약개발에 필요한 인공지능 플랫폼을 구축하여 신약개발에 소요되는 시간과 비용을 대폭 단축
- (규모/기간) '19~'21(3년, 2+1) / 225억원(연 75억), '19년 75억 원
  - R&D 과제당 11.25억원, 지원과제 7.5억으로 총 7개 과제로 구성
- (연구 분야) 인공지능 기반 신약개발 촉진을 위한 3대 선도분야 선정

<표1> 주요 연구분야

단계	활용 분야	선도 분야
후보물질	약물 디자인, 새로운 신약후보 창출, 신약 후보물질 검증	후보물질 발굴
전임상	전임상 실험 설계, 독성예측, 전임상 실험 수행	
제조· 인허가· 사용	스마트제약공장, 인허가 의사결정, 스마트 약물감시	스마트 약물감시
범주기	질병 메커니즘 이해, 약물 재창출, 대규모 정보 수집 및 종합화, 개발진행/중단 의사결정지원	약물 재창출

- (연구 내용) 연구 과제 및 지원 과제로 나누어 선정하고, 지원과제는 사업단 형태로 운영
- (연구 과제) 학습을 위한 데이터 확보·표준화 → 인공지능 솔루션 개발 → 예측 결과물의 실험적 검증 추진

\* 연구 과제 컨소시엄은 데이터 공급, 인공지능 솔루션 개발, 신약개발에 활용하는 주체로 구성되며, 제약사 단독연구, 제약사-벤처 협업연구 등 다양한 형태의 구성 기대

- (지원 과제) 수요자 중심의 컨설팅 그룹 운영, 주기적 성과점검, 연구과정에서 발생하는 데이터 관리, 연구 성과 활용·홍보 등 추진
- (성과 활용) 개발된 인공지능 플랫폼의 소유권은 각 과제 연구 책임자에게 부여하나, 플랫폼은 모두가 활용 가능하도록 API 공개
- 사업 종료 후에도 지속가능한 활용을 위해 벤처기업 혹은 대학이 소유권을 보유하도록 하여 향후 부가가치 창출 도모
- 본 사업을 통해 생산된 효능, 독성 등의 연구데이터는 데이터 허브에 기탁·등록 후 공개하며, 특히 보호를 위한 암호화 등 보안장치 마련

## 2. 사업의 범위

- 본 사업은 인공지능을 접목하여 국내 신약개발 경쟁력 제고에 우선이 되는 과제들을 도출하는 것으로 ①후보물질 발굴, ②약물 재창출, ③스마트 약물감시 등 인공지능 플랫폼을 개발하고 신약개발에 적용

### <후보물질 발굴>

- (추진배경) 후보물질 발굴단계는 시행착오가 많고 시간을 많이 소요
  - \* 후보물질 발굴을 위해 화합물 무작위 시험(Random Filtering)을 할 경우 많게는 몇 백만종의 화합물을 시험
  - 실험결과, 논문자료 등의 각종 데이터를 학습한 인공지능을 활용해 신약 개발 기간을 절약하거나, 새로운 조합의 약물 제안이 가능
- (추진내용) 화학물 구조, 독성, 약효, 결합 등 연구데이터를 기반으로 인공지능을 개발하여 제시하는 타겟에 대응하는 후보물질 도출
  - 인공지능이 도출한 후보물질은 연구자가 다시 검증하여 유효성 확인

### <약물 재창출>

- (추진배경) 단기간 내에 유효한 신제품을 도출하기 위해 기존 약물에 대한 새로운 적응증을 찾는 약물 재창출이 주요 방안으로 제시

※ (美) Atomwise(社)는 인공지능으로 시판 중인 7,000여개의 약 중에서 에블라 치료제가 될 2종을 단 하루 만에 발굴

- 안전성이 검증된 기존 약물을 활용하므로 개발기간 단축이 가능하나, 방대한 인허가·연구·의료정보 검색이 필요

○ (추진내용) 국내외 기존 약물 인·허가 데이터 및 적용 원리, 신규 타겟 데이터 등을 기반으로 새로운 적응증을 제안하는 알고리즘 개발

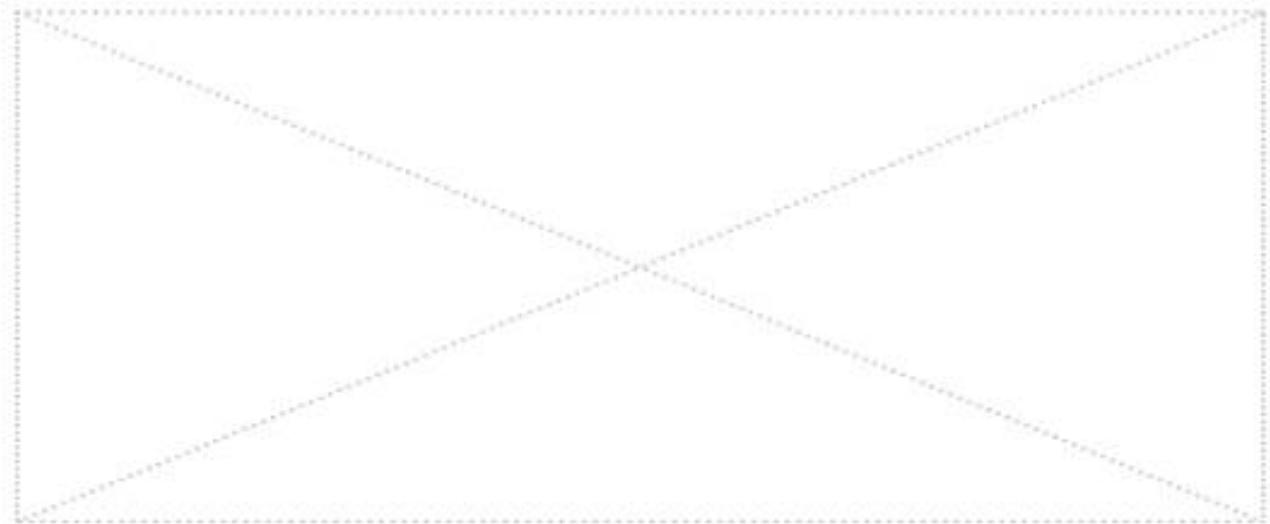
### <스마트 약물 감시>

○ (추진배경) 기존의 사후적·수동적 약물 감시체계의 한계가 지적되며 빅데이터 분석을 통한 예방적·능동적 감시체계의 필요성 대두

○ (추진내용) 의약품 생산·수입 실적 및 이상사례 보고자료\*의 연계·분석을 통해 의약품 감시·사전 예측 알고리즘 개발

\* 의약품안전관리원에 보고된 의약품부작용보고자료

- 중증 이상사례(사망·선천적 기형 등) 통합 DB 구축을 통한 관리로 이상사례 발생 전 다양한 요인들의 상관성을 이용하여 부작용 예측



<그림 2> 본 사업의 주요 사업범위

### 제3절 기획 추진경과 및 체계

#### 1. 기획 추진경과

##### <전문가 자문회의>

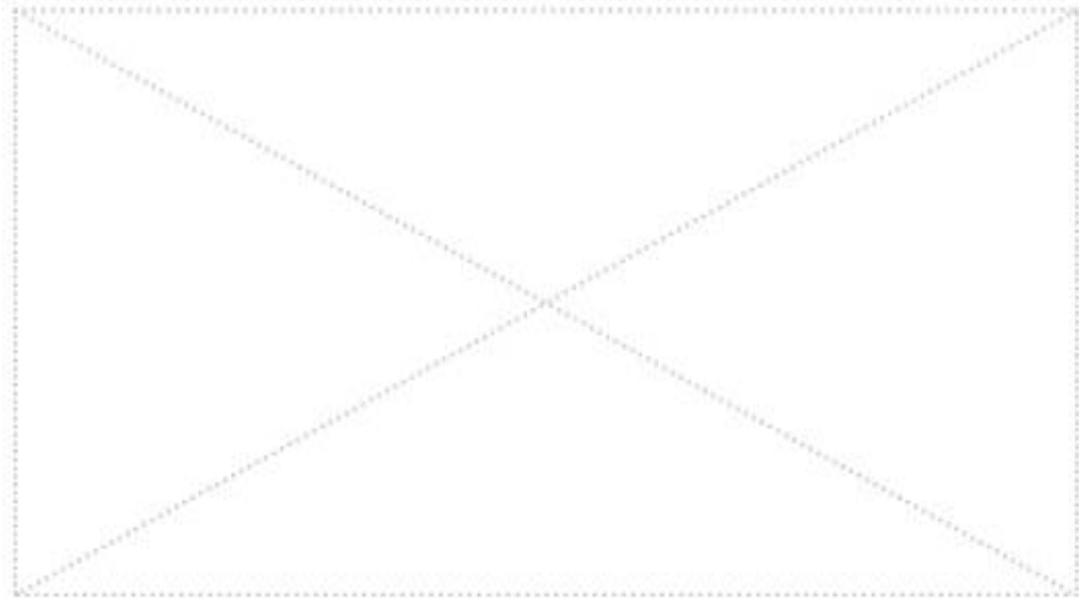
- 전문가 작업반 1차 회의 ('18. 5. 24.)
  - 사업 성과 지표와 측정방식 논의·검토 등
- 전문가 작업반 2차 회의 ('18. 6. 12.)
  - 헬스케어특위 상정 중간보고 계획안 최종 검토 등
- 전문가 작업반 3차 회의 ('18. 9. 13.)
  - 사업 비전, 성과목표 명확화 및 데이터 활용체계 논의 등
- 전문가 작업반 4차 회의 ('18. 10. 31.)
  - 데이터 기탁·공유·활용방안 및 전문인력 양성방안 논의 등

<표 2> 연구진 주요추진업무

구분	주요 추진내용	비고
'18.5~'18.10	사업기획방향 및 기존 사업과의 차별화 방안 논의 및 검토	
'18.11~'18.12	사업운영체계 및 국내외 동향 조사분석	
'18.12~'19.1	사업기획에 대한 주요기술 발굴 및 관련 연구 내용안 도출	
'19.2~'19.3	유전체기반 AI 신약개발 주요기술 발굴 및 인력양성방안 도출	

## 2. 기획연구 추진체계

□ 본 연구는 아래와 같은 연구추진체계로 수행



<그림 3> 연구 추진체계도

<표 3> 전문가 자문그룹 명단

성명	소속	직책
오경석	SK바이오팜 신약연구소	수석연구원
김태순	신테카바이오	사장
진병조	한국제약바이오협회	차장
신영근	충남대학교 약대	교수
이지영	대구경북첨단의료산업진흥재단 신약개발지원센터	팀장
이동현	한국화학연구원	선임연구원

## 제2장 국내외 환경 분석

### 제1절 국내외 정책분야

#### 1. 국외

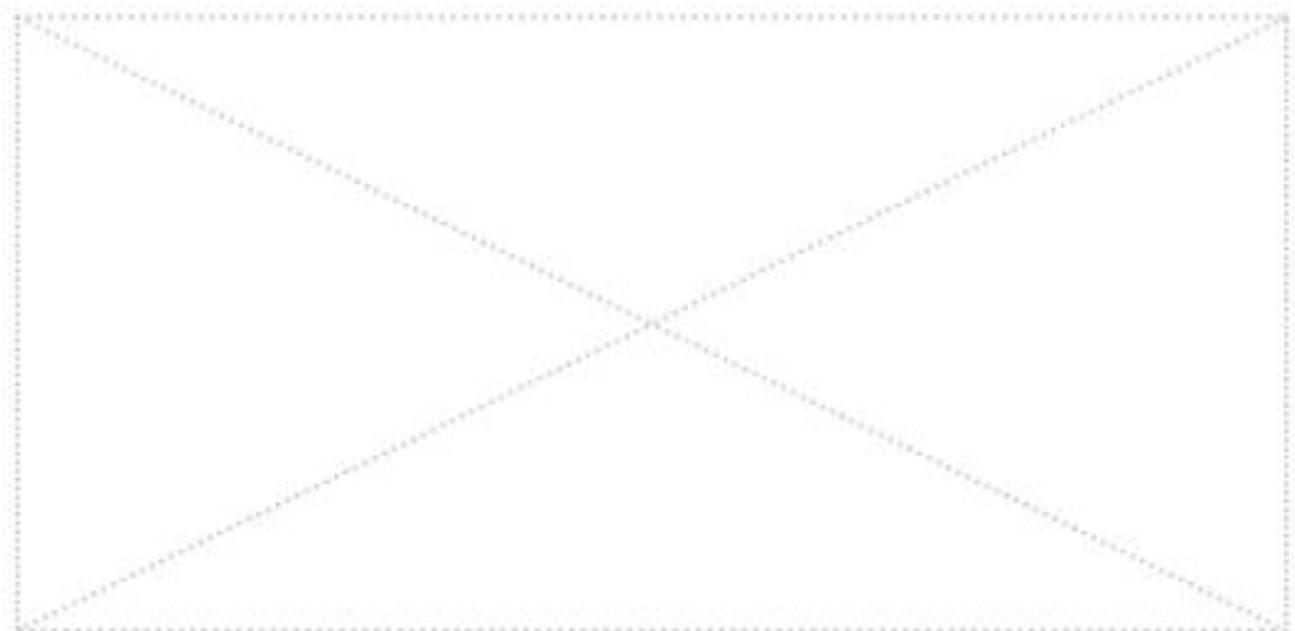
##### 가. 미국

#### □ 신약개발 AI활용을 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(출처 : Precision Medicines as an Accelerator for Next Generation Cognitive Supercomputing)

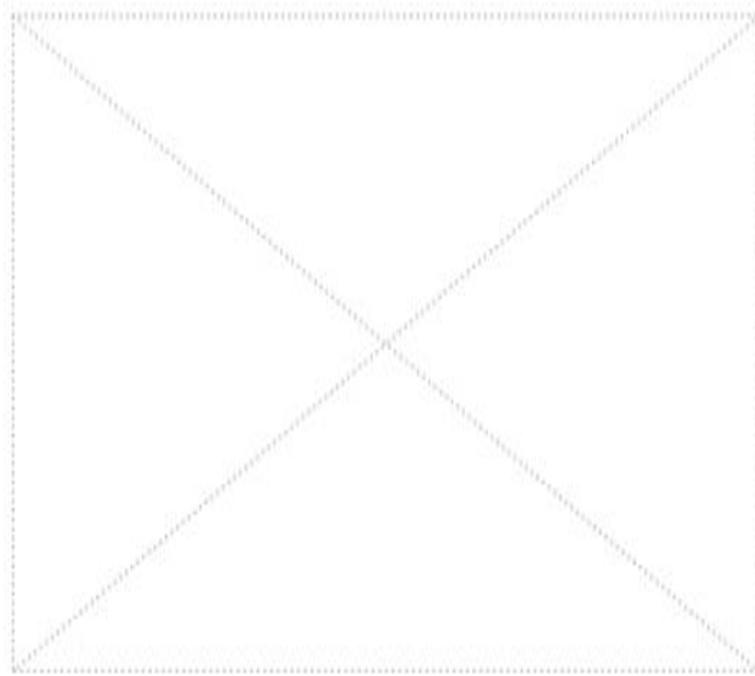
※ 머신러닝, 시험방법 검증(Validation) 등의 방법을 통해 글로벌 제약사(GSK)에서 보관 중인 화학물질(Compounds) 데이터에 대한 탐색기간을 기존의 1년에서 수개월로 단축할 것으로 예상



<그림 4> 미국, AI를 활용한 안전하고 효과적인 단축 방안

- FDA는 인공지능을 활용한 신약 개발 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 가이드라인 발행 예정
- ※ 의료기기 허가심사 관련 RWE(evidence)사용과 RWD(Data) 평가에 대한 가이드라인 발행(2017년 8월)



<그림 5> 미국 식약청 식품 산업 규제

<FDA, Real World Evidence, Data>

- ※ RWD(Real World Data, 실제임상자료) : 환자와 관련한 여러 종류의 데이터(환자 건강상태, 보건의료 기록 등)
- ※ RWE(Real World Evidence) : 의약품 등의 사용에 따른 실제데이터(RWD)를 수집하여 잠재적 위험성 또는 유효성 등을 분석한 임상증거(Clinical Evidence)
- ※ FDA, 실제 데이터 및 실제 유효성 자료를 의약품 시판 후 모니터링, 관련 정책 결정의 근거로 사용
- ※ 관련 전문가(정부, 임상)들은 상기의 자료를 가이드라인을 개발하거나 임상관련 제도의 적용에 있어 근거자료로 활용
- ※ 의약품 개발자(Developers)는 상기의 자료를 임상시험 설계(Design)에 활용하거나 혁신적(새로운) 치료방법 개발을 위한 관찰 연구에 활용

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

※ 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 지원

※ NCATS의 LINCS, TCGA, PubChem과 'Molecular Libraries and Imaging' 프로그램을 통하여 연구자들이 화합물 빅데이터 활용을 지원

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

※ 암과 심장병 등 치명적 질환의 유전적 인과관계 규명에 초점

#### □ 브레인 이니셔티브 등 인공지능 헬스케어 관련 대규모 투자를 진행

○ '13년 백악관은 범정부차원에서 인간의 뇌를 중심으로 체계적인 인공지능 기술개발을 통해 원천기술 확보 및 상용화 연구의 적극적 추진을 위해 Brain Initiative를 추진

※ 향후 10년간 30억달러 규모의 투자가 이뤄질 예정이며, 산학연 협력 파트너십을 통해 기반기술·응용기술 개발 및 산업화를 동시에 진행

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

※ 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 노력

## 나. 유럽

### □ 4차 산업혁명으로 도래한 ‘정밀의료 빅데이터’ 시대 대응 방안

○ 영국은 ‘17년까지 정밀의료 캐터펄트\*의 헤드쿼터를 캠브리지에 설립하며 6개 신규 지역센터를 개설하여 영국 전역에 정밀의료 산업 구축

\* 기술혁신을 추구하는 연구센터들의 네트워크로서 탁월한 연구성과를 시장으로 신속, 성공적으로 연계시키고 이를 통해 경제성장을 가속화하는 것이 목표이며, 캐터펄트 센터는 미래첨단 분야에 대한 산·학·연 공동연구 프로젝트 수

※ 영국의 생체시료보관은행인 바이오뱅크(UK Biobank)는 ‘06~’10년 동안 영국 전역 21곳에 설립되어 만성질환의 유전 및 환경요인 연구를 위해서 유전체와 임상정보 축적. ‘12년부터 바이오뱅크 정보 접근이 허용되어 연구자, 학술기관, 정부 기관 및 영리기관에서도 수집된 정보 사용가능

○ 인공지능의 의료정보 플랫폼 결합 및 유전체 분석을 기반으로 한 정밀의료 제공과 빅데이터 관리에 중점

– 인간 두뇌의 인지 형태 기반 지식처리를 위한 Human Brain Project를 EU 6대 미래 유망 기술 중 하나로 선정, 2013년부터 10년간 10억 유로 투자(출처: 인공지능 관련 기술과 정책동향, 2016, ETRI)

※ 6개 ICT 기술 중 ‘의료정보 플랫폼’ 기술 포함

– 유럽의 정부·민간 협업 대규모 신약개발 프로젝트인 IMI는 최근 IMI 2\*에서 ‘Big Data for Better Outcomes’ 프로그램을 통해 빅데이터 관리에 초점

\* IMI 1에 이은 IMI 2는 ‘적절한 시기에 적절한 환자를 위한 올바른 예방과 치료(The right prevention and treatment for the right patient at the right time)’ 슬로건 아래 ‘14년부터 향후 10년간 약 32억 유로를 투자할 계획

– 영국은 암, 감염질환 치료를 목적으로 10만명 유전체 분석 프로젝트에 3억 파운드를 투자(‘14-’17년)하는 ‘The 100,000 Genome Project’를 통해 정밀의료 연구개발 및 실용화를 위한 연구개발 투자 강화

※ ‘17년까지 정밀의료 캐터펄트의 헤드쿼터를 캠프리지에 설립하며 6개 신규 지역센터를 개설하여 영국전역에 정밀의료 산업 구축

## 다. 일본

### □ 신약개발 AI활용을 위한 정책 방향 추진

- 인공지능을 활용한 신약개발 추진을 위해 이화학연구소 주도로 대학병원과 제약·헬스케어 기업들이 암이나 치매 등의 대규모 치료 데이터 분석('17년 4월 시작, '20년 실용화 목표)
  - ※ 도쿄대·게이오대병원 등 전국 30여개 의료기관과 제약 및 헬스케어 기업 10곳이 참여
  - ※ 또한, 3년 후 인공지능이 개발한 신약 보급을 목표로 하는 산·학·연·관 협력 프로젝트로 제약업체, IT기업, 이화학 연구소, 교토대가 100여명의 개발자들이 팀을 이루어 신약개발을 위한 인공지능 공동개발에 착수
  - ※ 문부과학성은 '17년 예산 요구안에 25억엔(약 270억원)을 책정, 지원규모는 최종적으로 100억엔(약 1,030억원) 규모 전망
  
- '게놈의료\*실현추진협의회'를 구성하여 게놈의료 실용화 추진을 발표('15.7)하였으며 특히, 암과 치매, 희귀·난치질환 치료제 개발에 주력할 계획
  - \* 게놈의료 중 환자의 유전체 검사를 통해 부작용이 적고 효과가 좋은 약을 처방 또는 치료방법으로 진료하는 방안
  - ※ 도쿄대학, 이화학연구소, 국립국제의료연구센터 등이 운영하고 있는 3개 바이오뱅크에 축적되어 있는 유전자 정보를 취합, 연구에 활용하기 위해 건강한 사람도 포함하는 총 40만 명의 유전정보를 축적하고 있음
  - ※ 게놈의료 관련 사업은 후생노동성과 문부과학성에서 중점 추진할 계획이며 '16년 기준 후생노동성은 '게놈의료의 실용화를 위한 제도 추진'에 44억엔 (약 500억원), 문부과학성은 '게놈의료 실현 추진 플랫폼' 사업에 19억엔 (약 220억원) 확보

### □ 유전체 분석과 인공지능 적용 전략 등을 통한 맞춤형 의료 서비스 및 신약개발 효율성 제고에 초점

- '게놈의료실현추진협의회'를 구성하여 게놈의료 실용화 추진을 발표('15.7)하였으며 특히, 암과 치매, 희귀·난치질환 치료제 개발에 주력할 계획

- ※ 3개 바이오뱅크에 축적되어 있는 유전자 정보를 취합, 연구에 활용 예정
- ※ 게놈의료 관련 사업은 후생노동성과 문부과학성에서 중점 추진할 계획이며 '16년 기준 후생노동성은 '게놈의료의 실용화를 위한 제도 추진'에 44억엔 (약 500억원), 문부과학성은 '게놈의료 실현 추진 플랫폼' 사업에 19억엔 (약 220억원) 확보

- 세계 최첨단 건강입국을 위하여 일본재흥전략을 통해 IoT를 활용한 의료진단 서비스, 로봇, 센서를 활용한 간병서비스 등 다양한 의료산업 창출을 강조
- '15년 일본재흥전략의 후속조치로 '로봇신전략'을 발표, 로봇혁명 실현을 위해 3대 핵심전략을 선정하여 2020년까지 5년간 1,000억 엔을 투자하고, 로봇 도입확대를 위한 규제개혁 등의 계획을 마련
  - ※ 3대 핵심 전략 중 하나로 빅데이터, IT 융합, 네트워크, 인공지능을 구사하는 로봇으로 세계를 주도하는 '로봇혁명 전개·발전'을 발표

#### □ 정부 주도의 일본형 민·관 협업모델 추진

- 이화학연구소(RIKEN)을 중심으로 신약개발 인공지능 개발을 위한 '라이프 인텔리전스 컨소시엄(LINC)' 출범('17.4월~)
- 일본의 산·학·연·관 협력 컨소시엄 동향
  - 산·학·연·관 협력 컨소시엄으로 일본 이화학연구소 주도 하에 IT업계와 바이오·제약업계, 학·연계 등이 참여하는 협력 컨소시엄인 LINC 구성
  - 후보물질 탐색부터 신약 시판 후까지 신약개발 전 단계에 걸친 29여개 AI 표준 모델의 구축 및 실용화를 3년 내에 실현
  - LINC는 3년에 걸쳐 신약개발에 특화된 20여개의 AI 프로그램을 개발하고 일본 내 제약업계에 공개할 방침
  - 일본이 시급히 연구해야 할 6가지 AI 분야를 제시한 바 있으며 이중에 신약과 관련해서는 다음 3가지 분야를 강조하고 있음

- ※ 화상진단지원: 1회 수만장 촬영이 가능한 캡슐타입의 내시경 진단 및 학습
- ※ 진단.치료지원: 의학문헌을 학습시켜 전문의가 없는 지역에서 활용
- ※ 계층의료분야: 암.난치병 환자 진단에 활용 가능하도록 관련 유전자 동시 진단 가능한 유전자 패널 검사를 보험에 포함시키고 이를 AI로 해석하여 새로운 치료법 개발

○ 인공지능, 빅데이터 활용의 활성화를 위한 규제 완화

- 일본 의약품의료기기총합기구(PMDA)에서 의약품의 조건부(신속)허가 관련, 허가 전 임상데이터를 허가 후 실제 데이터(RWD)로 대체할 수 있음을 소개(2018년 4월)

**<조건부허가>(CEA, Conditional Early Approval)**

- ※ 국내외 신약의 허가를 단축시키기 위한 일환으로 일본(정부 및 민간업체)에서 최근 주도적으로 진행하고 있음
- ※ 사실상, 임상 2상 데이터를 토대로 조건부 허가를 진행한 후 3상 자료가 아닌 **허가 후 수집된 실제 환자 데이터(Real World Data)**를 통해 **최종허가 확정**(희귀의약품 허가방식과 비슷한 허가방식)
- ※ 일본 PMDA, JPMA는 국가별 허가조건 및 정책의 갭(Gap)분석을 통해 아시아 지역 내의 조건부허가(CEA) 조기 도입 방안을 모색하고 있음
- ※ PMDA(Pharmaceuticals and Medical Devices Agency) : 일본 내 의약품, 의료기기의 품질, 유효성, 안전성 등에 대한 임상시험~승인까지 심사하며, 의약품 시판 후 안전성에 대한 정보수집 및 분석, 제공업무 수행(식약처 식품의약품안전평가원과 유사)
- ※ JPMA(Japan Pharmaceutical Manufacturers Association) : 일본제약공업협회
- ※ APAC : Asia partnership conference of pharmaceutical Associations

- MID-NET(Medical Information Database-Network)

**Medical Information Database-Network**

- ※ 2009년부터 시작한 미하리 프로젝트(시판 후 약물역학연구의 활성화)에 이어, 2018년부터 일본내의 병원 데이터 연계 프로젝트 시작
- ※ 총 23개 병원, 4백만명의 환자에 대하여 보험청구자료, 랩데이터 결과 등을 연계하여 데이터베이스 구축

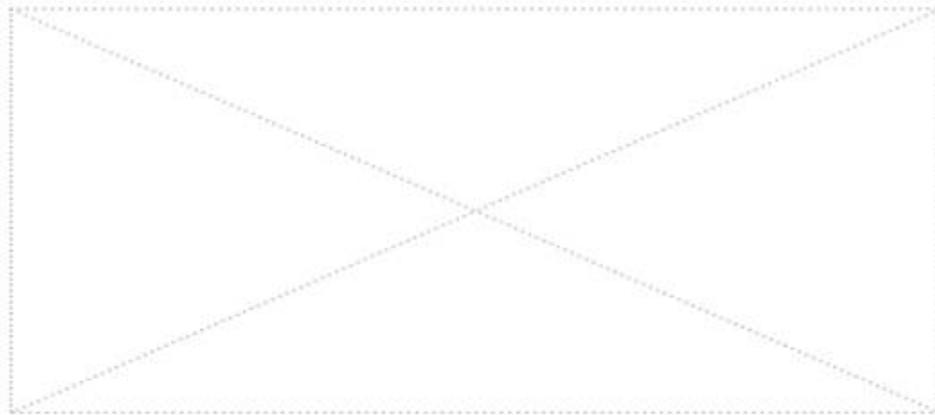
- 의료빅데이터의 활용 단계를 명확히 하고 그 활용을 위한 “차세대 의료기반법 신설 및 시행(2018년 5월~)



<그림 6> 의료 빅데이터 활용 단계

## < 참고. 일본 라이프 인텔리전스 컨소시엄(LINC) >

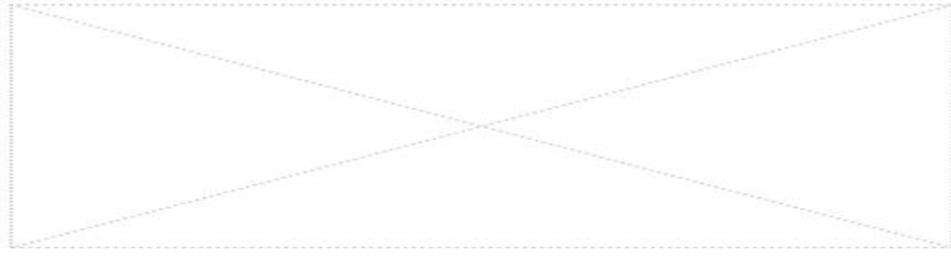
- (개요) 4차 산업혁명 대응을 위한 ‘일본재흥전략’(’15.3월, 16.4월)과 ‘AI 산업화 로드맵’(’17.2월)의 일환으로 추진 중인 정부 주도 신약개발 AI 개발 프로젝트
  - 3년간 신약개발에 특화된 20여개의 AI 프로그램을 개발하고 일본 내 제약업계에 공개하며, 문부과학성과 후생노동성은 ’17년 25억엔 등 3년간 100억엔을 투자



<그림 7> AI를 이용한 프로젝트

<출처 : 이투데이, 일본 제약·IT 50개사, 인공지능으로 공동 신약개발, 2016.11.16.>

- (목표) 바이오·제약 분야에 빅데이터 및 AI기술을 접목시켜 관련 산업의 진흥과 국민의 건강 수명 연장 및 삶의 질 향상을 추구
  - ※ 일본제약공업협회는 AI 본격 도입시 1개 신약개발에 드는 시간과 비용이 각각 10년에서 3~4년, 1200억엔에서 600억엔으로 절반 이상 감소 예상
- (구성) AI를 개발하는 IT업계, 이를 활용하는 바이오·제약업계, 그리고 양자간 협력 촉매자로 연구기관 및 학계 등으로 구성
  - IT업체(후지쯔, NEC 등), 제약사(다케다, 시오노기 제약 등), 연구기관(이화학연구소, 교토대) 등 99여개 기관 참여 中 (’18.02 기준)



<그림 8> 바이오-제약업계와 IT업계의 역할

- (활용) 비경쟁영역(Pre-competitive Area)과 경쟁영역(Competitive Area)을 구분, 개발된 AI 표준모델의 소유권을 IT업체에 부여하여 수익창출 보장
  - (비경쟁영역) 개발 완료한 20여개의 AI 표준모델은 컨소시엄 참여기관에 한해 공유 및 활용 허용(컨소시엄 참여는 비용 부담이 없어 참여가 자유로움)
  - (경쟁영역) AI 개발 IT업체와 이를 활용하고자 하는 제약사 등이 B2B 계약을 체결하고 제약사 내부 데이터를 활용한 AI 분석 서비스 제공
- (기반 조성) 인공지능 활용 활성화를 위한 의료빅데이터 규제 완화('18.5~)
  - 의료빅데이터의 활용 단계를 명확히 하고 그 활용을 위한 “차세대 의료기반법” 신설 및 시행(2018년 5월~)
    - ※ 1차 활용(일상 진료, 의료 제휴), 1.5차 활용(정보 분석에 의한 의료 개선), 2차 활용(제약기업 등 건강의료 관련 산업에 의한 활용) 등으로 구분

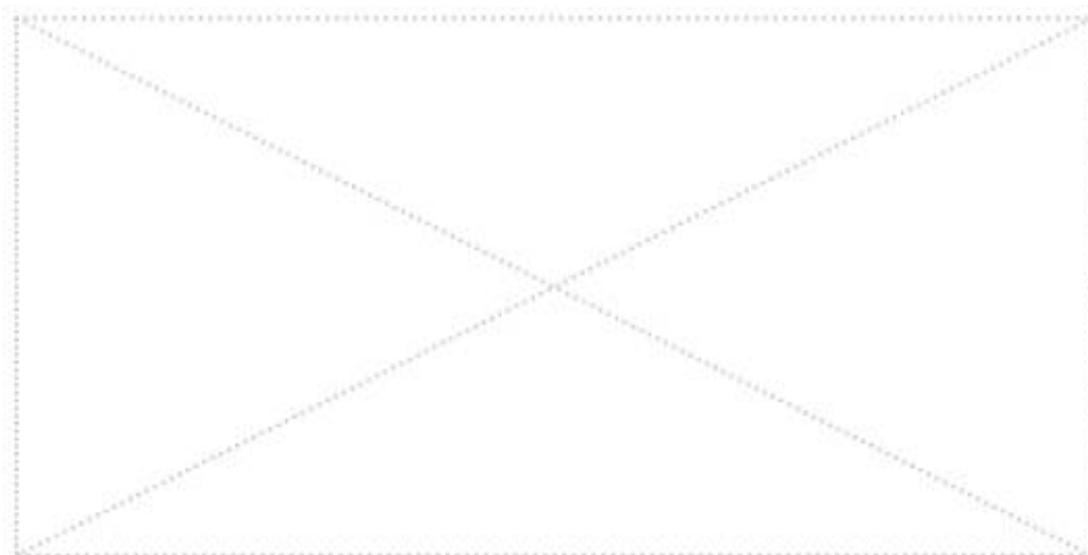
## 라. 중국

- 향후 15년간('16~'30) 정밀의학에 600억 위안(약 10.7조원) 투자계획을 발표('16.3)하였으며 특정 암 연구에 주력할 계획
  - ※ 현재 중국은 신약개발 역량은 미흡하나, 중국의학원·칭화대·푸단대 등을 중심으로 정밀의학센터를 설립하는 등 정밀의학을 위한 방대한 환자의 데이터와 유전체 분석기술을 보유

## 2. 국내

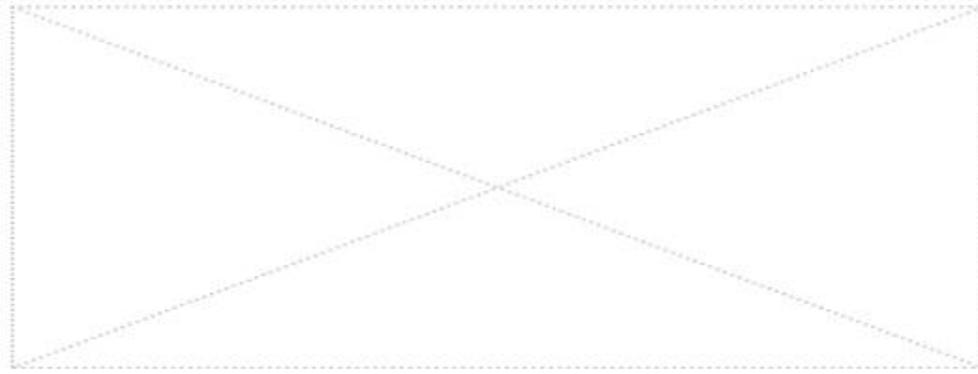
### □ 신약개발 AI활용을 위한 정부 정책 방향

- 과학기술정보통신부, ‘인공지능(AI)+빅데이터 활용 차세대 신약개발 플랫폼 구축’ 추진 발표(2018년 2월 5일)
  - 국내 제약사는 글로벌 제약사에 비해 매출액이 적으며, 연구개발(R&D) 투자 비용 규모가 작아 고부가가치(글로벌신약) 신약개발에 한계가 있음
    - ※ 글로벌 1위 제약사의 매출은 45조원이나, 국내 1위 제약사는 약1조 3천억원 수준이며, 연구개발 투자율은 글로벌 10대 제약사 의 21.5%에 비해 국내 상장 제약사는 7.5%로 매우 낮은 편
    - ※ 출처 : 제2차 제약산업 육성지원 5개년 종합계획, Evaluate Pharma World Preview 2016, 2015년 국내 제약기업 경영성과 분석 및 2016년 산업 전망(KHIDI Brief 2016)



<그림 9> 글로벌기업과 국내기업의 제약산업 규모 비교

- 우리나라의 바이오 산업 연구데이터, 병원 진료정보 등을 빅데이터化 하고, 인공지능(AI)을 활용하면 신약개발의 시간과 비용을 단축할 수 있을 것으로 예상
  - ※ 국가연구개발사업에서 생산된 화합물은 연구성과 관리·유통 제도에 따라 화학(연)이 관리하여 왔으며, 현재 50여만 건의 화합물 데이터베이스 축적



<그림 10> 현재 신약후보물질 개발 기간

- 이러한 기술을 활용하여 신약후보물질 개발 기간을 평균 5년에서 1년으로 단축할 계획임
- 식약처, 빅데이터 및 인공지능(AI) 기술 관련 의약품 또는 의료기기 허가·심사 기준 마련
  - ‘빅데이터 및 인공지능 기술이 적용된 의료기기의 허가심사 가이드라인’(2016년 12월), ‘빅데이터 및 인공지능 기술이 적용된 의료기기의 허가심사 가이드라인’(민원인 안내서)(2017년 11월) 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 산업 발전을 지원하기 위함

<표 4> 인공지능 기술이 적용된 의료기기 제품 사용허가 현황

연번	업체명	품목명(등급)	신청일	사용목적	비고
1	(주)뷰노	의료영상분석 장치소프트웨어 (2)	‘18.1.24.	Greulich-Pyle(GP) 방식의 골연령 모델을 기반으로 환자의 좌측 손 X-ray 영상에 대한 골연령을 분석하여 의료인이 환자의 골연령을 판단하는 것을 지원하기 위한 목적의 소프트웨어	허가 (‘18.5.16)
2	(주)제이엘케이인스펙션	의료영상진단 보조 소프트웨어(3)	‘18.5.2.	환자의 뇌 MR(Magnetic Resonance) 영상과 심방세동유무에 대한 자료를 바탕으로 뇌경색(허혈성 뇌졸중)의 유형을 자동으로 분석하여 의료진의 뇌경색 유형 분류를 진단하는데 지원하는 소프트웨어	허가 (‘18.8.14)
3	(주)루닛	의료영상검출 보조 소프트웨어(2)	‘18.5.29	흉부 단순촬영(X-ray) 영상에서 폐결절로 의심되는 이상부위를 검출하여 의료인의 진단을 지원하는 소프트웨어	허가 (‘18.8.14)

- 의약품 허가·심사 자료로 유전독성/발암성 유연물질에 대한 안전성 입증자료(독성예측 소프트웨어)를 제출하도록 관련 규정 개정 행정예고(2018년 9월)

※ 의약품 허가·심사 자료로 유전독성/발암성 유연물질 안전성 입증자료를 제출해야 하며, 기존 문헌에 대한 전반적인 탐색 및 분석, 컴퓨터 독성예측 자료(2종 이상)를 제출해야 함

- 기존의 독성예측 컴퓨터 모델은 '분자의 화학구조', '분자가 체내에서 반응하는 메커니즘', '동물실험 데이터', 'in vitro 연구'로 구성되어 있고, '미(未)검사 물질'의 경우, 기존의 구조적·생물학적으로 비슷한 화합물들과 비교함으로써 독성효과를 유추함

- 최근에는, 약 80만 건의 동물실험 결과에서 유래하는 약 1만 개 화합물에 대한 정보가 수록된 거대 데이터베이스\*를 구축하고, 교차참고(read-across)를 이용하여 새로운 화합물과 가장 가까운 기지(既知)의 화합물을 찾아내며 이미 알려진 화합물의 속성을 참고하여, 새로운 화합물의 독성 가능성을 평가함

※ 데이터베이스 : 유럽화학물질청(ECHA: European Chemicals Agency)이 2007년에 발표된 REACH 법(registration, evaluation, authorization and restriction of chemicals)에 의거하여 수집

※ 출처 : Machine Learning of Toxicological Big Data Enables Read-Across Structure Activity Relationships (RASAR) Outperforming Animal Test Reproducibility

○ 일본과 같이 산·학·연·관 협력 컨소시엄 구성을 통해 ‘한국형 신약개발 AI 프로그램’ 개발 지원 필요

- 국내 개별기업 단위의 AI업체와의 계약은 현실적으로 어려우므로, 정부 R&D 예산을 투입하여 공용 ‘신약개발 AI 표준 모델’을 개발하고 국내 제약사가 자유롭게 활용할 수 있도록 공개

※ IBM 왓슨 WDD 라이선스 구입에 1억~10억원이 필요하며(2년 사용), 후보물질을 직접 제안하는 타 AI업체와의 연구협력은 더 큰 비용 발생

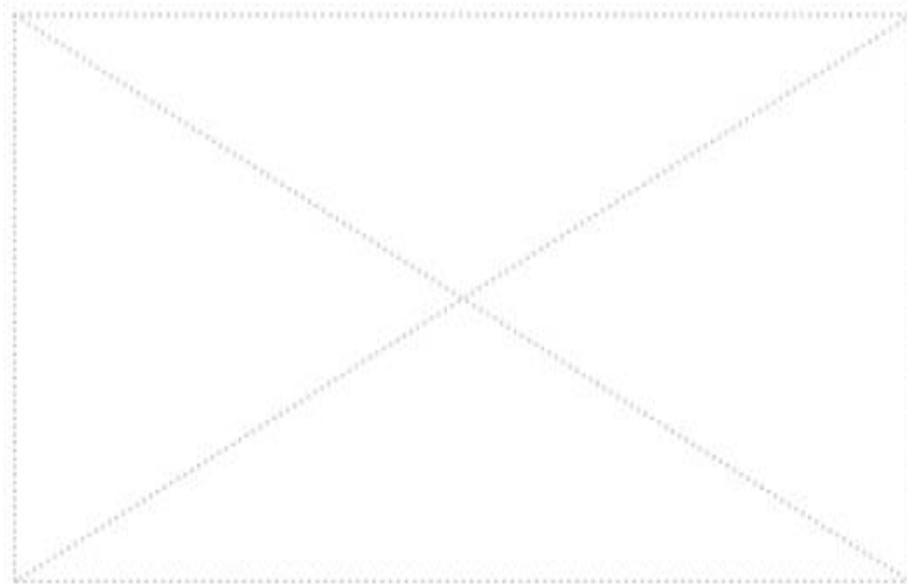
- 신약개발 AI는 바이오·제약분야 외에도 슈퍼컴퓨팅, AI 알고리즘 프로그래밍 등 다학제 분야 전문성을 필요로 하여, 다양한 출연연 및 대학, 연구기관의 참여 필요

- 제약사의 적극적인 참여와 내부 데이터 공여를 유인하는 인센티브 체계를 마련하여 분석·예측력이 뛰어난 AI 개발 추진

## <참고> 주요 국가별 정부정책 방향 및 주요사업 내용

### 1. 미국

- Center for Drug Evaluation and Research: 2017년 기준 46개 신약이 승인되었으며, 이는 신규 분자 entity (NMEs), 신규 약물 적용(NDAs), 신규 치료 바이오테크놀로지를 포함한 수치
- 미국립보건원(NIH, National Institutes of health)의 2017년 기준으로 262,418건의 임상 시험이 등록되었으며, 2018년 11월 12일 기준으로, 이미 전년도 대비 10.2% 초과하여 289,346건의 임상 시험이 등록
  - 이 중 신약/바이오 관련 임상 시험은 전체의 41.96%를 차지하고, 이러한 임상 시험의 증가 현상은 생명과학 시장에서 인공지능 솔루션에 대한 요구의 가장 큰 원천이 될 것임

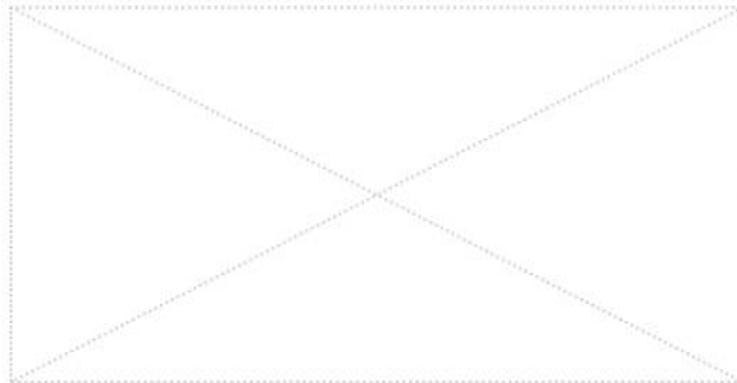


(2017 미국 임상 시험 분야별 구성 비율, 출처: Mordor Intelligence, 2018)

⇒ 미국에서는 신약 개발, 정밀 의학, 바이오테크놀로지 활용, 개인 맞춤형의학 분야에서의 인공지능 솔루션에 대한 높은 요구가 있음

## 2. 영국

- 최근의 브렉시트 상황 때문에 생명과학 분야 투자가 감소
- 이러한 영향은 제약 산업에서 두드러져서 임상 시험 건수의 감소로 이어짐. 영국 제약 산업 협회(ABPI, Association of the British Pharmaceutical Industry) 보고에 따르면, 제약 산업의 투자 감소로 2015년 이래 임상 시험 건수는 계속 감소하여 2017년에는 44% 감소를 나타냄



(최근 7년간 영국의 임상 시험 건수, 출처: Mordor Intelligence, 2018)

⇒ 영국 제약 산업 협회는 브렉시트 상황이 안정화되고 새로운 정책 환경이 조성되면 생명과학 분야는 다시 활기를 띠 것으로 예측

## 3. 독일

- 독일의 주요 제약 산업 협회인 Verband der Forschenden Pharmaunternehmen (VFA)에 따르면, 독일은 2017년 기준으로 미국 다음으로 임상 시험 건수가 많은 국가임
- 독일은 신약 개발과 바이오 분야의 인공지능 솔루션에 대해 유럽의 다른 국가들보다 높은 요구를 유지하고 있는 국가임
- 독일은 국가의 신약 개발을 촉진하기 위하여 경제 에너지 부처(the Federal Ministry of Economics and Energy)의 지원으로 NetPhaSol (Network for Pharma Solutions)을 2017년 5월에 설치함. NetPhaSol은 40개 기업과 연구소를 연결하는 곳

#### 4. 일본

- 일본을 신약 개발의 주역으로 만들겠다는 목표하에 효율이 높은 저비용 신약 개발 산업을 육성하기 위해 R&D 지원금을 책정
- 소프트뱅크社は IBM 社の 인공지능 Watson system을 일본에 소개하는 일본 제휴사이며, 2016년 8월, IBM Watson 헬스케어 플랫폼은 의사가 동일한 결과에 도달하기까지 2주가 걸리는 희귀한 백혈병 타입을 진단하는 데 10분 이하가 소요되었다고 보고
  - 이러한 성과는 클라우드 기반 인공지능 시스템을 통해 수백만건의 연구 논문을 분석한 덕분임
- 일본은 최대 국책연구소인 이화학연구소(RIKEN)를 중심으로 학계, 제약사, IT업체 등이 참여하는 '라이프 인텔리전스 컨소시엄'을 구성하고 '일본형' 신약개발 AI 프로그램 개발 추진('17.4월~)
  - '일본재흥전략(15.3월, 16.4월)과 'AI산업화 로드맵'(17.2월)일환으로 '일본형(Japanese -style)'신약개발 AI 개발 프로젝트\*
  - \* 3년간 신약개발에 특화된 20여개의 AI프로그램을 개발, 17년 예산으로 25억엔을 배정하고 3년간 100억엔 투자 예정

#### 5. 중국

- 중국은 자국 내 신약 개발 산업을 고도 기술 산업 육성의 매우 중요한 목표로 하고 있으며, 생명과학 혁신은 국가 재정의 측면에서는 국제 납세자 창출과도 이어지기 때문
- 중국의 2017년 정책 청사진에는 2030년까지 일명, 세계 제일 인공지능 혁신국을 이루기 위한 계획이 포함되어 있으며, 2030년까지 중국의 인공지능 산업은 150조원 규모 시장으로 예측
- 중국은 인공지능 분야에 막대한 투자를 하여, 여러 국가로부터의 인공지능 전문인력 유입이 이어지고 있고, 이는 제약 산업에도 영향을 주어 다수의 제약 기업들은 신약 개발에 투입할 인공지능 전문인력을 찾고 있음

## 제2절 국내외 연구개발(R&D) 분야

### 1. 국외

#### □ (미국) 민간 협동연구를 중심으로 활발한 연구 진행 중

- (민간) IBM Watson('15년 출시) 등 10여개의 스타트업들이 글로벌 제약사와 협업 중으로, 주로 후보물질 발굴 및 신약 재창출에 주력

#### < 해외 사례 : IBM Watson for Drug Discovery(WDD)>

- 왓슨의 독보적인 자연어 처리기술을 활용하여 신약 후보물질 탐색을 위한 'Watson for Drug Discovery(WDD)' 개발
- 자연어 처리, 인지추론, 머신러닝 등 3가지 핵심기능을 활용하여 3,000여만 건의 정형·비정형 데이터를 학습, 신약 후보물질 탐색 및 새로운 치료법 개발

- 주로 민간 차원에서 다국적 제약사들과 인공지능 관련 기술을 보유한 벤처기업들과의 협업으로 인공지능을 활용한 신약 개발이 이루어지고 있음

※ 신약개발에 특화된 AI 프로그램을 개발하여 제약사 등을 대상으로 지원 서비스를 제공하는 신약개발 AI 신산업군 형성

#### <표 5> 미국, 민간 협동연구 진행 내용

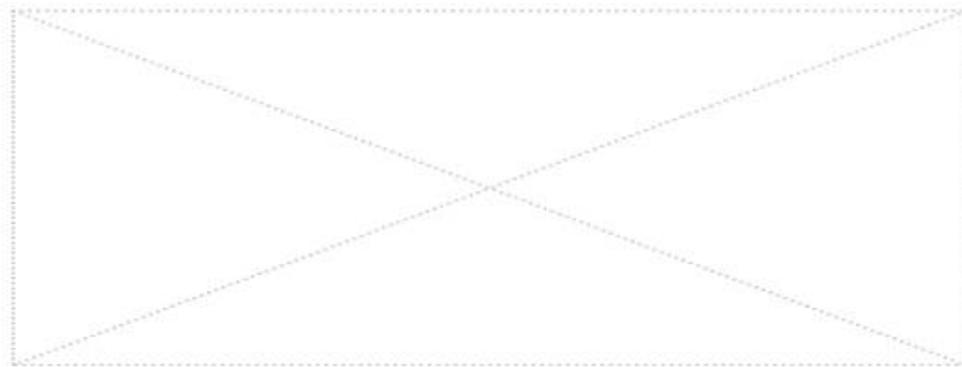
프로젝트명	수행기관 및 기간	주요내용
Watson DeepQA	IBM 2006~2011	- Factoid 형태의 복잡한 신뢰성 높은 빠른 응답 제시 - <a href="http://researchweb.watson.ibm.com/deepqa/">http://researchweb.watson.ibm.com/deepqa/</a>
Knowledge Graph	Google	- 위키피디아 콘텐츠 위주 5억 개의 객체에 대한 Knowledge Graph를 구축, 질의응답 서비스 제공 - <a href="http://www.google.com/insidesearch/features/search/knowledge.html">http://www.google.com/insidesearch/features/search/knowledge.html</a>
Wolfram Alpha	Wolfram Alpha 2009~현재	- Siri 서비스의 질의응답 부분 담당, 수식, 알고리즘, 모델을 적용하여 사용자 의도에 맞는 정답을 제시 - <a href="http://www.wolframalpha.com">http://www.wolframalpha.com</a>
Human Brain Project	EU 2013~2023	- 인간 뇌의 작동방식에 대한 정확한 이해, 활용을 통해 컴퓨팅 아키텍처, 신경과학, 의학 분야 등에 적용 예정 - EU 미래기술 주력 사업 프로그램의 6대 연구과제 선정 - <a href="http://www.humanbrainproject.eu">http://www.humanbrainproject.eu</a>

Google Brain Project	Google 2008~현재	- 9계층의 신경망, 10억개의 연결구조로 인간 인지방식의 자율학습 모델 연구 - 2만여개의 객체 카테고리를 인식하는데 15.8%의 정확도 - <a href="http://www.mpi-inf.mpg.de/yago-naga/yago">http://www.mpi-inf.mpg.de/yago-naga/yago</a>
AQUAINT Program	NIST* 2003~2008	- 다국어 기반의 Advanced QA 연구, 텍스트, 음성, 이미지, 비디오 지원 - <a href="http://www-nlpir.nist.gov/projects/aquaint">http://www-nlpir.nist.gov/projects/aquaint</a>

\* NIST(National Institute of Standards and Technology)

<출처 : 빅데이터 지식처리 인공지능 기술동향(한국전자통신연구원, 2014)>

- (글로벌 제약사 및 AI 벤처기업) 최근 2~3년간 글로벌 제약사를 대상으로 AI를 활용한 신약개발 지원서비스를 제공하는 ‘신약개발 AI 신생업체’ 대거 등장



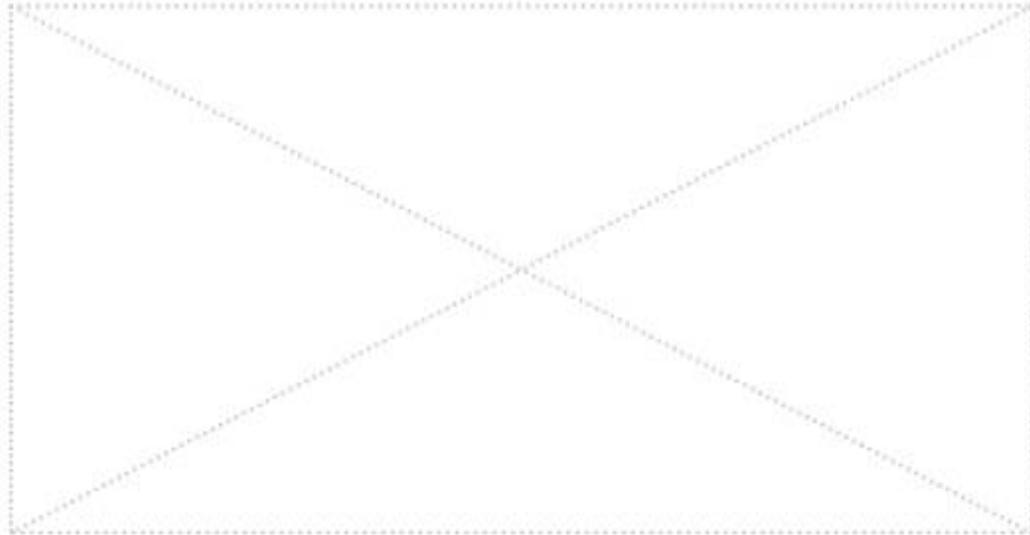
<그림 11> AI를 활용한 글로벌 기업의 증가

- 주로 신약개발에 드는 R&D 비용·시간 단축 및 오픈 이노베이션의 일환으로 추진
- 인공지능 신약개발 기술개발 동향
  - 신약개발 R&D 효율화를 위한 혁신기술로 AI 기술에 주목, AI를 활용한 신약개발 신생업체 및 신산업 등장
  - 글로벌 제약사(BigPharma)는 신약개발 AI업체와의 적극적 협력을 통해 후보물질 초기 탐색과정에 AI기술을 적극 도입
  - AI업체는 주로 자체 DB 및 고객사 DB 등을 분석하여 후보물질 및 기존 약물의 새로운 적응증을 발굴(drug repurposing)하여 고객사에 제안하는 형태로 운영

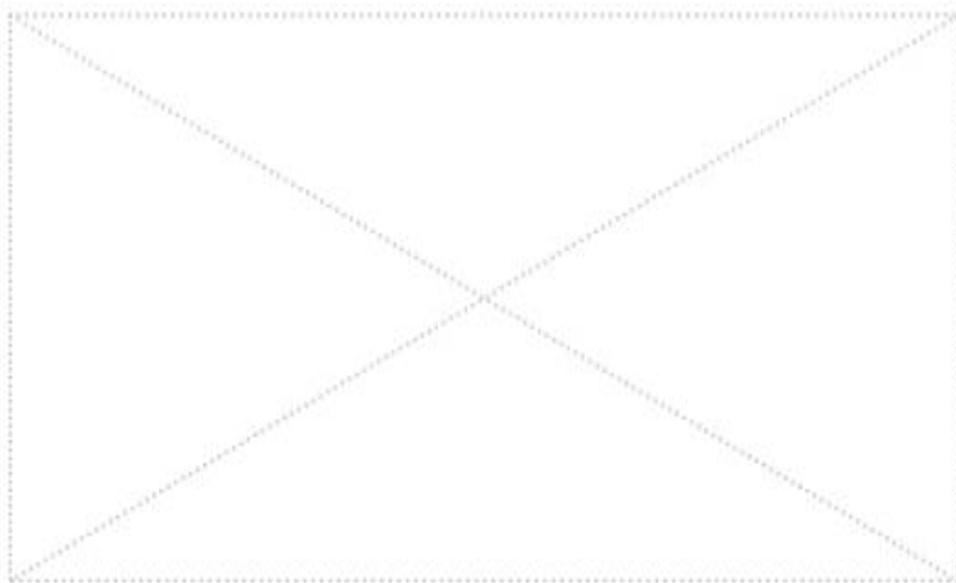
- 특히 자사 임상 데이터 및 임상 후보물질을 AI업체의 딥러닝 알고리즘을 분석하여 새로운 적응증을 발굴하는 ‘신약 재창출’ 모델이 제약사와 AI업체 간 주요 협력분야
  - 새로운 적응증 발굴 협력사례: 사노피 - Recursion('16.4월), 테바 - IBM 왓슨('16.10월), 얀센 - BenevolentAI('16.11월), 다케다 - Recursion('17.10월)

### <참고. 미국 실리콘밸리, 헬스케어에 인공지능(AI)적용>

- (개요) 실리콘밸리 헬스케어시장은 인공지능 기술로 한 단계 진화하고 있으며, 인공지능이 헬스케어와 결합하며 인간의 노화방지, 생명연장 관련 신산업 조성
  - 인공지능을 접목한 헬스케어(이하: AI 헬스케어) 세계시장 규모는 연평균 40% 이상 성장해 2021년에는 67억 달러를 상회할 것으로 전망되며, 인공지능 기술을 활용해 질병 진단부터 질병 예방과 관리 차원으로 영역 확장 그에 따른 개별서비스 부문(건강관리, 다이어트, 간편의료 진단 및 등) 시장도 확대됨
- (IT기업) 실리콘밸리 IT 기업은 AI 헬스케어시장 주도 확보를 위해 적극적인 연구 및 투자 진행 중
  - 전통적인 헬스케어 기업이 아닌 구글, 애플, 페이스북, IBM 등은 바이오테크 시장에서 새로운 플랫폼과 솔루션 개발을 통해 새로운 시장 선점을 노리는 중이며, 특히 빅데이터와 인공지능 딥러닝기술을 보유하고 있는, 앞으로 바이오 헬스케어 시장에서 경쟁력 확보에 유리
  - 2021년 전 세계 헬스케어 내 인공지능 시스템의 IBM의 시장 점유율이 45%로 관련 시장을 주도할 것으로 전망되나 구글, 애플 등 글로벌 기업들이 공격적으로 연구 및 투자를 진행 중으로, 향후 시장 주도권 확보를 위한 경쟁은 치열할 것으로 전망



<그림 12> 헬스케어 내 인공지능: 연간 자금 추이(2011~2015년)(CBInsight)



<그림 13> 헬스케어분야에서의 인공지능 초기 영향(Healthcareitnews.com)

- (미래전망) 바이오·제약 및 바이오 헬스케어 분야에 빅데이터 및 AI기술을 활용한 산업 구조 재편 예상
  - IBM의 대표적인 인지 컴퓨팅 '왓슨'은 빅데이터를 이용해 의학 정보를 학습해 암 진단의 정확성을 높임. 실제로 2014년 미국 종양학회에서 발표된 자료에 따르면, 전문의들과의 진단일치율이 대장암 98%, 직장암 96%, 자궁경부암 100% 등으로 높게 나타남.

- 구글 칼리코는 인간의 수명을 500세까지 연장시키는 프로젝트를 진행, 생명연장과 동시에 노화방지, 질병퇴치를 목적으로 함. 이미 보유한 100만 명 이상의 유전자데이터와 700만 개 이상의 가계도를 활용해 유전 패턴을 분석해 난치병 연구를 적극 추진 중
- 애플은 헬스킷-리서치킷-케어킷을 통해 다양한 앱 개발 환경 제공과 사용자 건강 데이터 수집에 중점을 두고 있음. 애플은 헬스킷을 기반으로 다양한 의료 데이터를 수집 관리하며, 이를 EMR(전자의무기록) 시스템과 연계해, 미국 내 대형병원으로 전송하는 것을 시작으로 헬스케어 시장에 다양한 접근을 시도함

<표 6> 애플 헬스킷-리서치킷-케어킷 기능(Josh Yoburn, MA, Phd blog)

<p>헬스킷</p> 	<p>개인의 건강 데이터 추적 및 관리 앱(활동, 수면, 영양, 마음 챙기기 데이터 체크 가능)</p>
<p>리서치킷</p> 	<p>의학 연구자들이 방대하고 의미있는 데이터를 수집할 수 있게 해주는 앱을 위한 소프트웨어</p>
<p>케어킷</p> 	<p>개인의 건강상태에 대한 이해도를 높이고, 이를 스스로 관리할 수 있게 해주는 앱을 위한 소프트웨어로, 개인의 건강관리 계획 기록 또는 투약 치료 관리 기능으로 개발 가능</p>

□ (일본) AI를 개발하는 IT업계, 이를 활용하는 바이오·제약업계, 그리고 양자 간 협력 촉매자로 연구기관 및 학계 등으로 구성

- \* 활동내용: ① 바이오·제약 application 산업 응용의 검증  
 ② 바이오·제약 application 산업 응용 prototype 구축  
 ③ 바이오·제약 기업과 IT기업의 산업 응용 인재 육성  
 ④ 회원의 커뮤니티 형성과 유지  
 ⑤ 기타 목적을 달성하기 위해 필요한 활동

○ IT업체(후지쯔, NEC 등), 제약사(다케다, 시오노기 제약 등), 연구기관(이화학연구소, 교토대) 등 99여개 기관 참여 中 (18.02.23 기준)

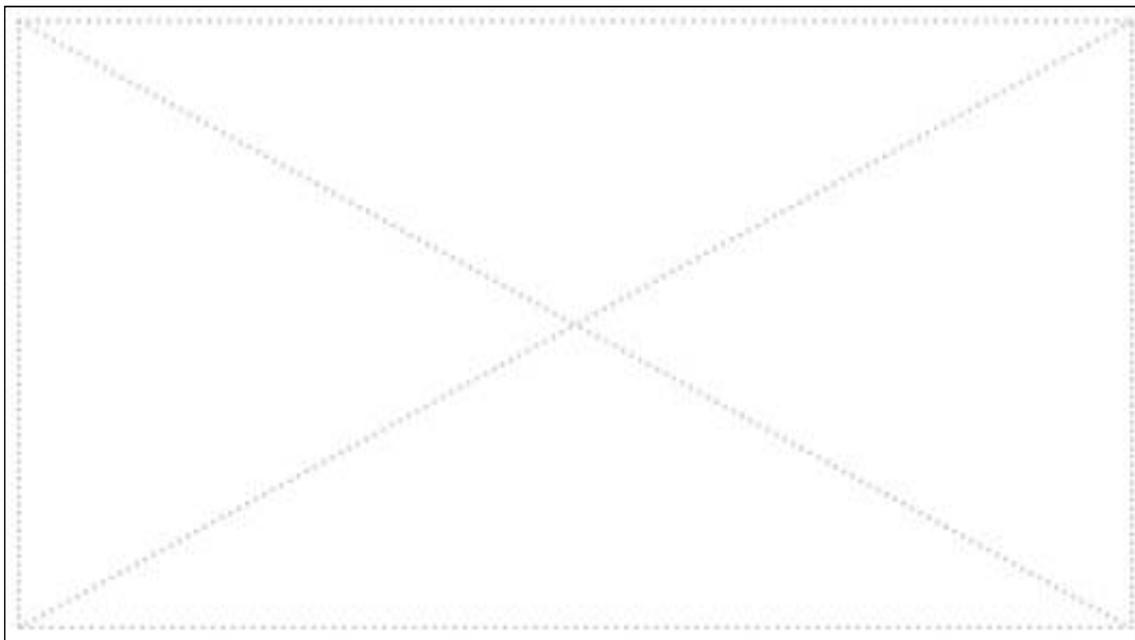
- 산·학·연 외에 일본제약협회 의약산업정책연구소 등도 참여

- 바이오·제약사가 AI 테마를 제안하고, 학계가 개입하여 응용할 기술과 IT 업계를 매칭하고, IT업체는 테마별 신약개발 AI 프로그램 개발을 담당하는 등 참여기관 종류별로 역할 분담



<그림 14> LINC 참여기관 역할분담

- 컨소시엄 참가는 무료인 반면 인력자원 투입을 참가요건으로 정하여, 99개 기관 550여명 이상의 연구진이 AI 프로그램 개발에 참여



<그림 15> 신약개발 과정에 AI를 활용한 기대효과

연구수행 기관	연구개발의 내용	연구개발성과의 활용현황
RIKEN (일본)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 신약개발 인공지능 개발을 위한 '라이프 인텔리전스 컨소시엄 (LINC)' 출범('17.4월~)</li> <li>- 3년간 20여개의 AI 프로그램 개발을 위해 정부가 100억 엔을 투자하며, IT업체·제약사 등 90여개 기관 참여</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 비경쟁영역(Pre-competitive Area)과 경쟁영역 (Competitive Area)을 구분, 개발된 AI 표준모델의 소유권을 IT업체에 부여하여 수익창출 보장</li> </ul>
국립보건원 (NIH, 미국)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 항암제 후보물질 발굴 기간을 1년 이내로 단축하기 위한 'ATOM 컨소시엄* 구성('17~'19)</li> <li>* 'Accelerating Therapeutics for Opportunities in Medicine'의 약자로, 글로벌 제약사(GSK), 대학(UCSF) 등이 참여</li> </ul>	-

※ (유형 구분) 미국, 일본, 우리나라 등에서 진행 중인 신약개발 인공지능 개발 사업 모델을 정리하면 크게 3가지 유형으로 구분 가능

① 개별기업 주도형 모델 : 다국적 제약기업이 인공지능에 특화된 벤처기업과 계약 또는 자회사를 통한 연구

- 미국/EU의 민간 중심 다국적기업 협업 모델  
(Merck와 AI기업 Atomwise의 협업 개발 등)

② 정보공급자 주도형 : 공공연구소 등 정보를 보유한 기관 중심으로 보유 정보의 활용을 활성화할 목적으로 AI플랫폼 개발 (Data Push)

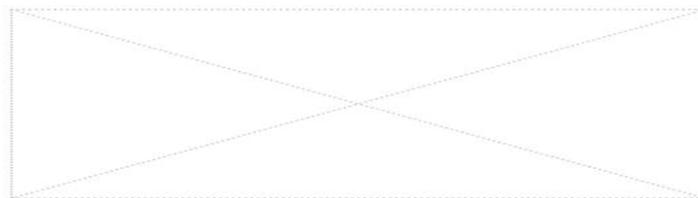
- 과기정통부 선도프로젝트(2018-2019)로 화학연 보유 정보 중심 AI 플랫폼 개발 등

③ 수요기반형 : 제약바이오기업, IT기업, 연구기관 컨소시엄으로 제약바이오기업의 신약개발 필요를 우선으로 하는 AI 모델 우선 개발 (Pharmaceutical Pull)

- 일본 LINC 모델: 기업이 제안한 수요 아이템 중 우선적으로 29개 AI 모델 개발 (일본후생노동성, 문부과학성) 등 사례

## 2. 국내

- (국내) 벤처기업 및 대학 등에서 인공지능 프로그램을 개발 중이며, 국내 제약사들은 자사 데이터 부족·경제적 부담 등으로 인해 직접 개발보다 외부 AI개발사와의 사업연계 선호
  - 스탠다임, 파미노젠 등 관련 벤처기업은 증가 추세이나, 국내 공공DB 활용의 어려움\* 및 제약사들의 도입 기피 등을 애로사항으로 제기
    - \* 데이터 소유권·개인정보 문제 등으로 인해 국내 공공DB 활용이 어려워, 국내 벤처기업임에도 주로 외국의 공공·민간DB를 활용
  - 국내 제약사들은 자체보유 데이터가 부족하고 경제적 부담 등으로 도입 실적이 저조하나, 최근 대형 제약사를 중심으로 인공지능 활용 착수
    - ※ (주요 사례) CJ헬스케어-신테카바이오 공동으로 면역항암제 개발 착수, 동아에스타이주대 공동으로 환자의 진료기록을 활용한 치료제 개발 착수
  - 현재 화학(연)이 보유 중인 연구데이터는 소유권 이슈\*, 건보공단 등이 보유 중인 의료데이터는 개인정보보호 이슈로 인해 공유·활용 미흡
    - \* 각 연구데이터의 소유권은 기탁자가 보유하고 있으며, 기탁자의 동의 없이는 제3자 제공 불가 ⇒ 현재 화학(연)에서 관련 규정 개선 작업 중 (별도 법령 개정 불필요)
  - AI벤처와 제약업체와의 상호 협력 및 공동연구 확산
    - 기업들이 개별적으로 추진하기에는 경제적인 부담으로 매출액 기준 상위 10개의 대부분 국내 제약사들은 아직 인공지능 도입은 이뤄지지 않았음. 일부 국내 벤처 기업과 공동 연구 진행 중
      - ※ (주요 사례) 유한양행과 신테카바이오가 유전체 빅데이터 기반 인공지능(AI) 플랫폼을 활용한 신약 공동개발 추진



<그림 16> 유한양행과 신테카바이오의 공동개발 효과

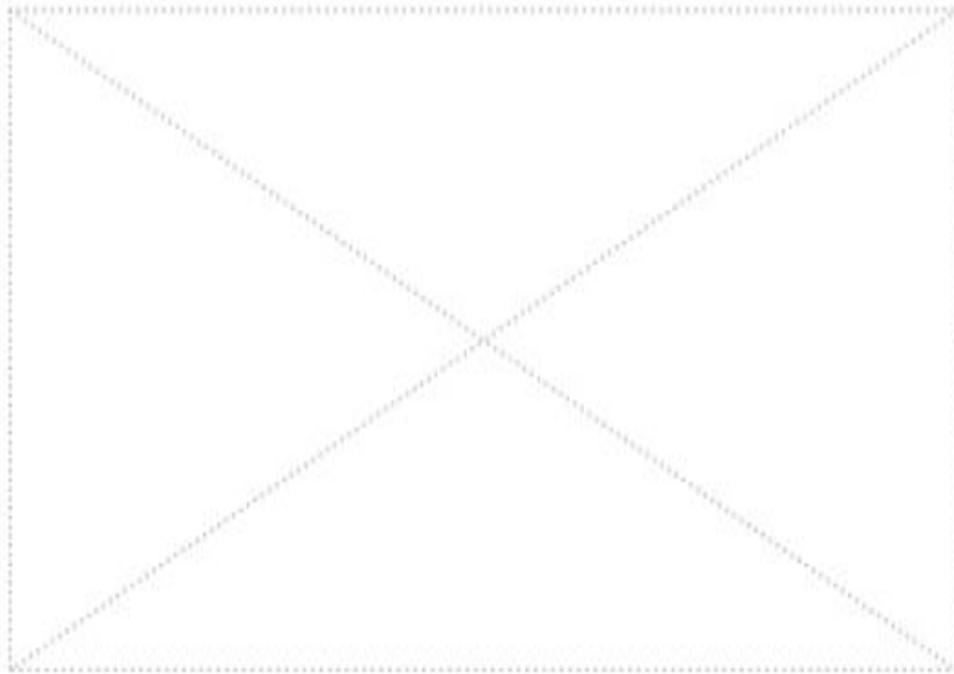
- (모여서 새롭게 TF) 연구데이터 빅데이터화를 위한 ‘모여서 새롭게 TF’ 중, 바이오 분야 연구데이터의 관리 및 활용 방안 전문가 회의 지원 ('17년 7월-10월)
  - (경과) TF 킥 오프('17년 7월 말) → 5회 전문가 회의(~'17년 10월 중순) → 장관 보고 회의('17년 10월 말)
  - (주요내용) 주요 바이오 분야별 연구데이터 기관을 지정하여 표준화된 데이터를 관리·활용하며, 원활한 데이터 수집을 위해 관련 사업과의 연계를 강화하는 방향으로 추진
- 병원은 스타트업과 더불어 AI 소프트웨어 기술개발에 나서고 있음
  - 과기정통부 ‘인공지능(AI)기반 정밀의료 솔루션’ 닥터 앤서(Dr.Answer) 개발 프로젝트
  - 서울아산병원이 컨트롤타워 역할, 동 사업에는 2018년부터 3년간 총 357억원 투입
  - 수도권 및 권역별 거점 병원 등 총 25개 의료기관과 뷰노·제이엘케이 인스펙션·카카오브레인 등 19개 ICT·소프트웨어 기업이 참여
  - 국민 체감형 AI의료 소프트웨어도 개발할 예정

<표 7> 국내 병원과 민간기업의 협동 연구 내용

분야	유전체	뇌연구	화합물	단백체
데이터 형태*	DNA 염기서열	MRI 등 영상데이터	화합물 화학 구조	단백체 서열·구조
전담기관	생명(연)	뇌연구원	화학(연)	생명(연)
활용분야	질병예측	질병진단	신약개발	신약개발
관련사업	포스트게놈 다부처 유전체사업	뇌과학 원천기술 개발사업	바이오·의료 기술개발사업	바이오·의료 기술개발사업

※ 데이터 수집 시 표준화된 데이터 원본 뿐 아니라, 이와 관련된 효능정보, 실험정보, 생물종 등의 연구정보(메타데이터) 필수 포함

- 서울아산병원은 인공지능(AI)과 빅데이터(Big data)를 활용하여 의료정보뿐만 아니라 행정, 재정, 법적 문제 및 서비스 등을 통합 관리하는 차세대 병원정보시스템(hospital information system·HIS) 개발 진행 중임



<그림 17> 서울아산병원의 의료사업 선진화를 위한 빅데이터 분석

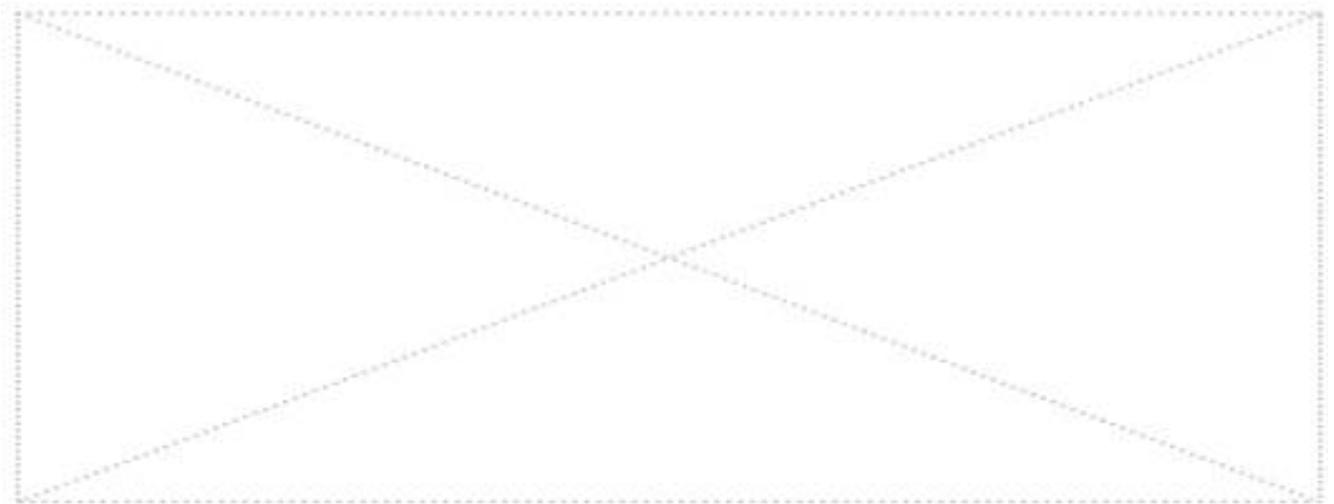
<출처 : 서울아산병원 헬스이노베이션빅데이터센터 홈페이지>

- (헬스케어특위) 인공지능을 활용한 신약개발 플랫폼 구축 전략 전문가 회의 지원('18년 4월-6월)
  - 1차 전문가 회의('18년 4월) → 2차 전문가 회의('18년 5월)
  - 1차 분과회의('18년 6월)

### 제3절 국내외 산업동향

#### 1. 국외

- 인공지능 신약개발 산업 규모는 '24년까지 연평균 40%의 비약적인 성장을 통해 40억 달러에 이를 것으로 전망(Global Market Insight, '17)
    - '16년 7.5억 달러 규모의 AI 헬스케어 산업\*은 '24년 100억 달러(약 11조원) 규모에 이를 것으로 전망되며, 특히 신약개발 AI가 핵심 분야로 부상
- \* 영상진단, 신약개발, 질병예측/위험분석, 원격모니터링, 의료기관 업무흐름 개선 등



<그림 18> 글로벌 인공지능 신약개발 산업 규모 증가율

<출처 : Global Artificial Intelligence in Lifesciences Market - Mordor Intelligence.pdf>

- (일본) 의료비 절감\*을 통한 국민 건강증진 기여 및 중국의 추격에 따른 일본 제약업계의 경쟁력 확보\*\* 달성
  - \* 후생노동성은 효율적 신약개발에 따른 약가 인하 등으로 일본 의료비를 절감할 것으로 기대(일본 의료비의 20%가 약값임)
  - \*\* 일본은 미국에 이어 두 번째 제약강국이나 최근 중국의 추격에 따른 경쟁우위 확보를 위한 새로운 혁신 시급
- 일본의 IT업체의 우수한 AI 기술력을 활용하여 신약개발 분야로 적극 진출시키고 신약개발 AI 신산업 토양 마련도 추구

- 4차 산업혁명 대응을 위한 ‘일본재흥전략’(‘15.3월, 16.4월)과 ‘AI 산업화 로드맵’(‘17.2월)의 일환으로 추진 중인 정부주도 ‘일본형 (Japanese-style)’ 신약개발 AI 개발 프로젝트
- 문부과학성과 후생노동성은 2017년 예산으로 25억 엔을 배정하고 3년에 걸쳐 100억 엔을 투자할 예정
- 신약개발에 특화된 AI 프로그램을 개발하여 제약사 등을 대상으로 지원서비스를 제공하는 신약개발 AI 신산업군 형성
  - 신약개발 AI 산업은 AI 기술과 헬스케어의 접목을 통해 창출된 신산업군으로 향후 비약적인 성장이 기대(Global Market Insight, 2017)
    - 2016년 현재 7.5억 달러 규모의 AI 헬스케어 산업은 2017~2024까지 연평균 40% 성장을 통해 100억 달러 규모에 이를 것으로 전망
      - ※ 의료영상 진단보조, 신약개발, 질병예측/위험분석, 원격모니터링, 의료기관 업무흐름개선, 치료계획 등 다양한 분야에 접목되어 새로운 산업군 형성
      - ※ 미국이 전체시장의 50% 차지하고 있으며 글로벌 AI개발 업체는 새로운 산업군에서의 주도권 확보를 위해 대규모 투자 진행 중

기업명	인공지능 헬스케어 투자현황
IBM 	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 2010년 헬스케어 부문에 1억 달러를 투자하면서 본격적으로 헬스케어 시장에 참여, 2015년 Watson 헬스 부문 런칭</li> <li>• 대표적인 헬스케어 데이터 분석회사 트루벤(Truven Health Analytics)를 26억 달러에 인수하면서 헬스 케어 부문에 40억 달러 이상 투자(2016.2.)</li> <li>• 이외 지속적으로 다양한 헬스케어 분야 스타트업을 인수: Phytel, Explory, Merge, Truven 인수를 통해 CT, MRI 등 300억 개의 헬스 데이터 및 이미지를 확보하고, 약 7500개의 병원과의 협력관계 구축</li> </ul>

기업명	인공지능 헬스케어 투자현황
<p>구글</p> 	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 2013년 15억 달러를 투자해 칼리코(Calico)를 설립, IT기술을 활용한 인간의 노화방지, 궁극적으로 생명 연장을 위한 연구를 시작</li> <li>• 2014년 구글 벤처스는 총투자금액 중 36%에 달하는 자금을 생명과학 분야에 투자(‘바이오테크, 천년을 늙지 않고 살 수 있다’-산업·상품-KOTRA 해외시장뉴스, 실리콘밸리 무역관 2015년 9월 작성)</li> <li>• 2015년에는 빌게이츠와 공동으로 유전자 가위(크리스퍼/Crispr) 기술을 활용하는 에디타스 메디슨 (Editas Medicine)에 투자(총 투자 금액이 1억2000만 달러에 달함)</li> <li>• 최근 칼리코는 바이오테크 기업인 C4 테라퓨틱스(Therapuetics)가 가진 기술력 활용을 위해 C4 테라퓨틱스와 5년 협력 계획을 밝힘</li> </ul>
<p>애플</p> 	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 2014년 본격적으로 헬스케어 시장에 진출하면서 디지털 헬스케어 플랫폼 구축을 위한 연구 및 투자를 시작</li> <li>• 2014년부터 2016년까지 매년 헬스키트(HealthKit), 리서치키트(ResearchKit), 케어키트(CareKit) 등 의학 플랫폼을 연달아 출시</li> <li>• 애플은 2016년 초 헬스케어 데이터 수집 전문 스타트업인 글림프스(Glimpse)를 인수함. 2016년 애플이 영국계 다국적 제약회사 글락소스미스클라인(GSK)과 파트너십을 체결해 헬스케어 부분에 대한 지속적인 투자를 하면서 헬스케어 시장에 다양한 시도를 하고 있음</li> </ul>
<p>페이스북</p> 	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 페이스북은 2014년 디지털 헬스케어 시장 진출을 선언하고 운동기록 관련 애플리케이션 무브스 (Moves)를 인수</li> <li>• 2016년 9월 마크 주커버그 부부는 6억 달러(약 6800억 원)를 투자해 쉐인 저커버그 바이오허브를 설립, 향후 10년간 30억 달러(약3조3432억 원)를 난치병 치료에 기부할 것을 밝힌 바 있음.</li> <li>• 향후 5년간 바이오허브는 인체세포지도 제작 및 난치병 퇴치 연구를 위해 미국 버클리 캘리포니아주립대, 샌프란시스코 캘리포니아주립대, 스탠퍼드대 소속 연구진 47명에게 총 5000만 달러(약 557억2000만 원)를 투자할 계획</li> </ul>

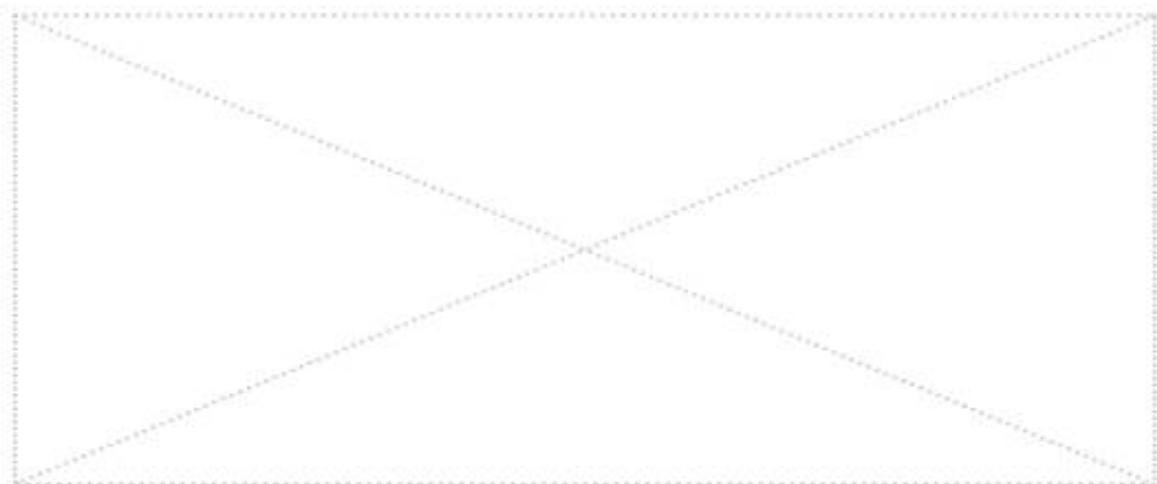
아마존



- 2014년 아마존의 CEO가 설립한 베저스 익스피디션스(Bezes Expeditions)는 암 치료제 개발 스타트업 쥬노 테라퓨틱스(Juno Therapeutics)에 투자하고, 성공적으로 상장하면서 의료산업에 적극적으로 진출
- 2016년 베저스 익스피디션스(Bezes Expeditions)는 노화 방지 치료법을 개발하고 있는 유니티 테크놀로지(Unity Technology)에 1억2700만 달러 투자
- 베저스 익스피디션스는 35개의 기업에 52회 투자를 했고, 그 중 3개 기업 상장 성공

- 특히, 신약개발 AI는 AI 의료영상 진단보조 분야를 제치고 AI 헬스케어 산업의 핵심분야로 부상할 것으로 예상

※ 2024년까지 신약개발 AI시장은 40억 달러(전체 AI시장 40%), AI영상 진단보조 분야는 25억 달러(전체 25%) 규모를 훨씬 크게 상회할 것으로 전망됨



<그림 19> 미국 AI 헬스케어 시장 규모 예측(2017~24)

## 인공지능을 이용한 신약개발 분야 벤처기업

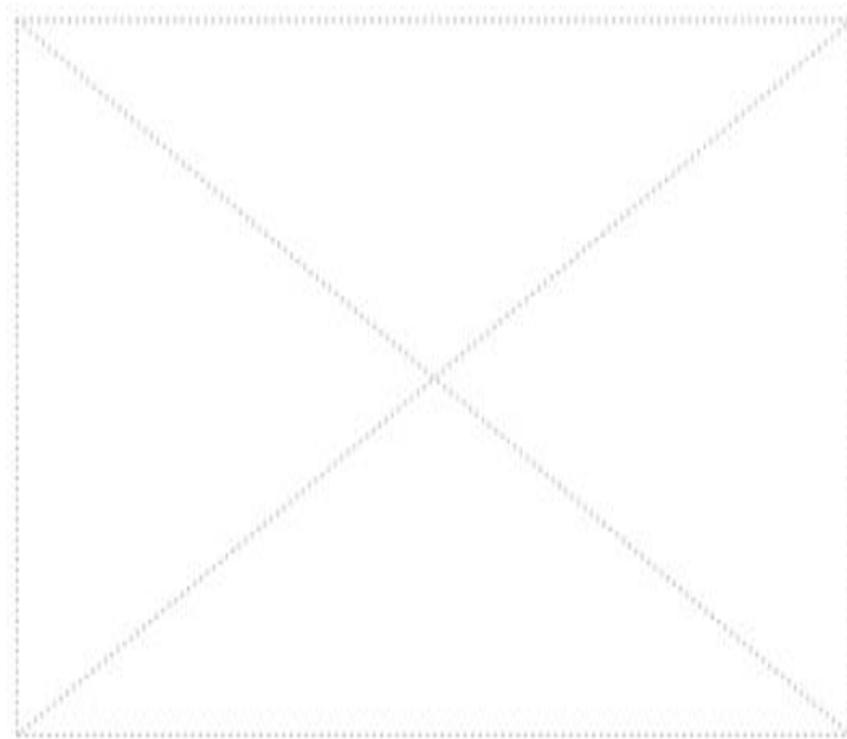
- (인실리코 메디슨) 미국 존스 홉킨스대학의 생물정보학 기업으로 AI 기반의 신약개발 위해 '16년 3월 파마.AI(Pharma.AI) 사업부를 신설
  - AI를 활용한 신약개발 프로세스를 도입, 대형 제약업체 및 연구기관과의 협업을 통해 암이나 노화관련 질병을 억제할 수 있는 신약후보물질 분자 구조를 생성하는 시스템을 활용한 신약 개발을 진행
- (아툼와이즈) ‘아툼넷(AtomNet)’이라는 스크리닝 시스템을 개발하여 하루 만에 에볼라에 효과가 있는 신약후보를 2개 발견
- (버그) 14조개에 이르는 암 관련 데이터를 AI로 분석, 새로운 항암제 개발
- (투사) 단백질의 상호작용과 진료 기록, 유전자 발현 등 생의학 빅데이터와 인공지능 알고리즘을 활용하여 신약을 개발
- (쥬버네슨스 AI) 인실리코 메디슨의 딥러닝 신약 발견 엔진을 이용하여 신약을 개발
- (메디데이터) GSK·사노피·로슈 다국적 제약사의 임상시험 솔루션을 제공하는 미국 기업으로 '16년 매출액은 4억 6388만 달러(약 5325억원)
- (IBM Watson) IBM Watson은 5개의 전략 인공지능 솔루션들
  - ① Watson For Oncology, ② Watson For Genomics, ③ Watson For Clinical Trial Matching ④ Watson For Drug Discovery, ⑤ Watson For Imaging Review을 구축하였으며 그 중에 Watson for Drug Discovery과 Watson for Clinical Trial Matching이 신약개발 지원에 이용 가능
  - 2015년 12월 Frost&Sullivan에서 발표한 Cognitive Computing and Artificial Intelligence Systems in Healthcare에 따르면 2021년 전세계 헬스케어 내 인공지능 시스템의 IBM 시장 점유율은 45%로 관련 시장을 주도할 것으로 전망

- IBM은 헬스케어분야 선도기업으로 입지를 다지고자 데이터 분석력 보강을 위한 자체 기술개발과 다양한 스타트업 기업을 인수
- ※ Watson for Drug Discovery 플랫폼은 약물 탐색을 지원하여 신약개발의 효율성을 제고 시키며 Watson for Clinical Trial Matching 플랫폼은 병원이 찾는 임상시험에 적합한 환자와 연결해주는 서비스를 제공하여 임상시험 효율성 증가

### 글로벌 제약사의 신약개발 인공지능 활용 주요 현황

- (존슨&존슨 계열사 안센) 영국 인공지능기업 베네볼런트AI (BenevolentAI)사와 독점적 라이선스 제휴계약 체결('16.11)
  - AI를 적용해 임상단계 후보물질들에 대한 평가 및 난치성 질환 타깃 신약 개발이 가능할 것으로 기대. 2017년 중반부터 임상 2상 시험 프로그램 착수 계획
- (화이자) IBM의 인공지능 왓슨 포 드러그 디스커버리를 이용해 면역 및 종양학 연구와 신약개발 추진
  - 왓슨은 앞으로 화이자가 보유한 암과 관련된 많은 양의 자료를 분석, 신약 발굴 및 병용요법 연구 등에 활용
- (테바) 호흡기 및 중추신경계 질환 분석 및 만성질환 약물 복용 후 분석 등 신약개발을 위해 IBM과 업무협약 체결
  - 테바의 제품을 복용하는 환자 중 약 2억명 상당의 복용 후 데이터를 모아 부작용 사례, 추가 적응증 확보를 통해 신약개발 진행할 예정

- 인공지능 분야의 시장규모는 펀딩규모가 늘어남에 따라 급속히 증가할 전망
  - 인공지능 펀딩은 2016년 6월 기준, 9억74백만 달러 (1조1천억) 규모이고, 펀딩규모는 앞으로 더 늘어날 전망으로 인공지능 분야 시장규모도 급속히 증가할 전망
  - 최근 주요 IT 기업들이 인공지능에 높은 관심을 보이고 있으며, 실제로 인공지능 자체 개발에 참여를 확대하여 시장에 적용 중

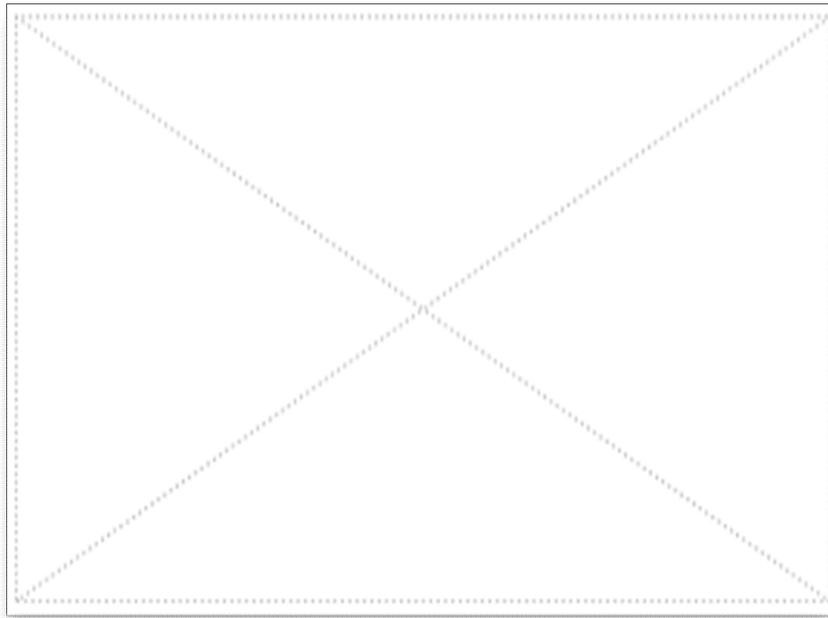


<그림 20> 인공지능 연간 펀딩 규모

(출처 :<https://www.raconteur.net/business/the-rise-of-artificial-intelligence-in-6-charts>)

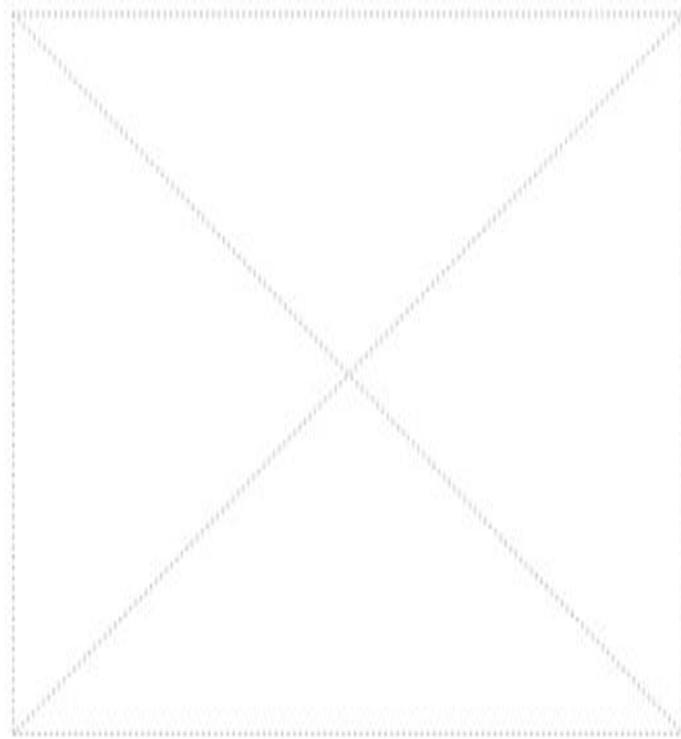
- 2015년 12월 Frost&Sullivan에서 발표한 Cognitive Computing and Artificial Intelligence Systems in Healthcare에 따르면 인공지능 헬스케어 시장은 연평균 40% 이상 고성장을 예상하며 IBM의 주도하에 구글, 마이크로소프트, 애플, 존슨앤존슨 등 글로벌 기업들은 인공지능을 적용한 헬스케어분야 R&D 적극 추진

※ 2015년 12월 Frost&Sullivan에서 발표한 Cognitive Computing and Artificial Intelligence Systems in Healthcare에 따르면 헬스케어 산업 내 인공지능 시스템 세계시장 규모는 2015년 8.1억 달러에서 2021년 약 67억달러로 대략 연평균 42%씩 성장할 것으로 전망



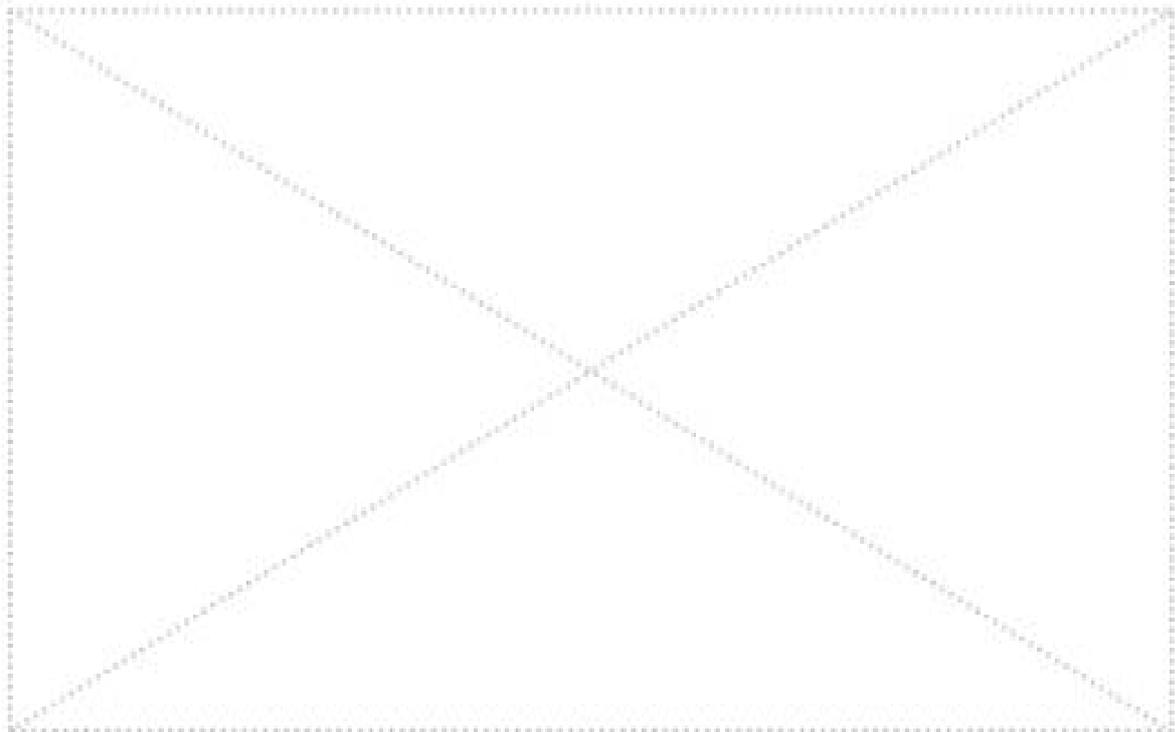
<그림 21> 인공지능 헬스케어 시장 규모 전망

- 인공지능 기술관련 특허는 일본이 가장 많이 가지고 있으며 전 세계적으로 현재 기업에서는 예측 분석 서비스를 가장 많이 활용
  - 후지쯔는 ‘15년 말, 인간 중심의 ‘AI 진라이‘라는 감각을 전달할 수 있는 딥러닝 기술을 개발하여 의학적 의사결정 등에 활용
  - 예측 분석 서비스가 기업에서 가장 많이 이용하는 서비스이며, ‘18년까지 기업의 62%가 인공지능 서비스를 상용화 할 계획이라고 전망 (Narrative Science)



**<그림 22> 인공지능 기술관련 특허권 보유 기업리스트**

(출처 :<https://www.raconteur.net/business/the-rise-of-artificial-intelligence-in-6-charts>)

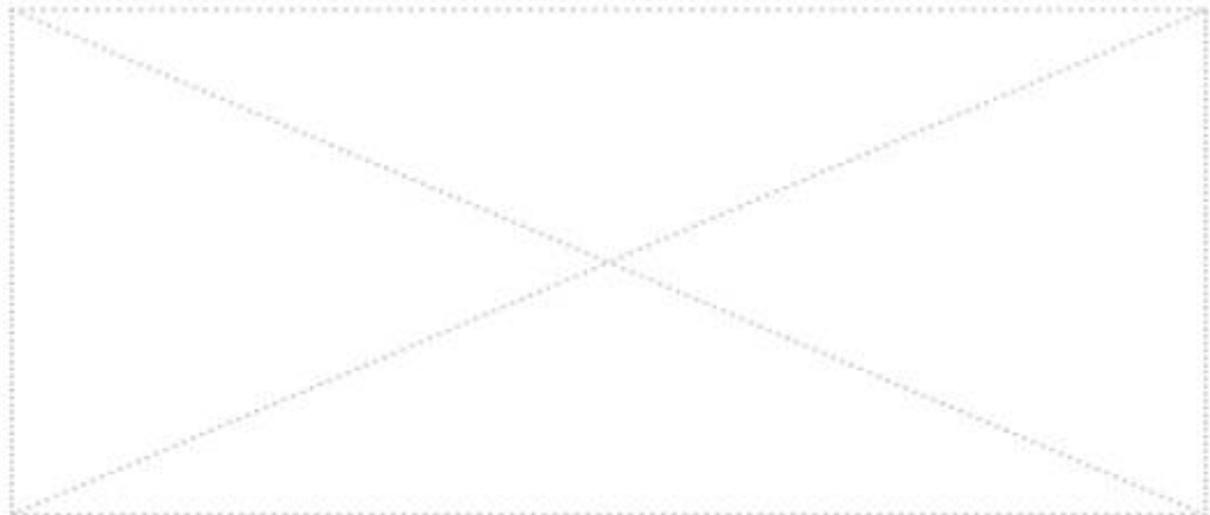


(상위 15개 기업 기준)

**<그림 23> 국가별 인공지능 관련 특허 보유 기업 및 특허 수**

(출처: 인공지능의 발전과 바이오헬스산업, 2017.6, 한국바이오협회)

- IBM, 구글, 애플이 전 세계 인공지능 헬스케어 시장을 주도
  - (IBM) 인공지능 기술경쟁력을 바탕으로 의료분야 유망 스마트업과의 인수합병 및 제휴를 확대함으로써 인공지능 헬스케어 시장에서의 글로벌 선도역량을 강화하고 있으며, 주요 시스템으로는 ▲Watson for Oncology, ▲Watson for Genomics, ▲Watson for Clinical Trial, ▲Watson for Drug Discovery, ▲Watson for Clinical Imaging review로 구성
    - ※ 유전자 분석 결과를 이용하여 유전체 변이를 찾는 등의 Watson의 인공지능 시스템을 통한 수작업 완화 (2주 작업→ 10분 축소)
    - ※ 가천대 길병원은 2016년부터 왓슨을 환자 치료에 활용하는 실험 실시, 대장암환자 118명을 대상으로 분석한 결과 왓슨이 추천한 치료법과 의료진이 생각한 치료법이 56%가량 비슷



<그림24> IBM 왓슨의 5개 전략 솔루션

[출처: 서울경제, 노든 IBM왓슨헬스 본부장 "암진단 넘어 신약·치료법 등 개발... 왓슨 의료생태계 더 견고해질 것" 2017.7.2]

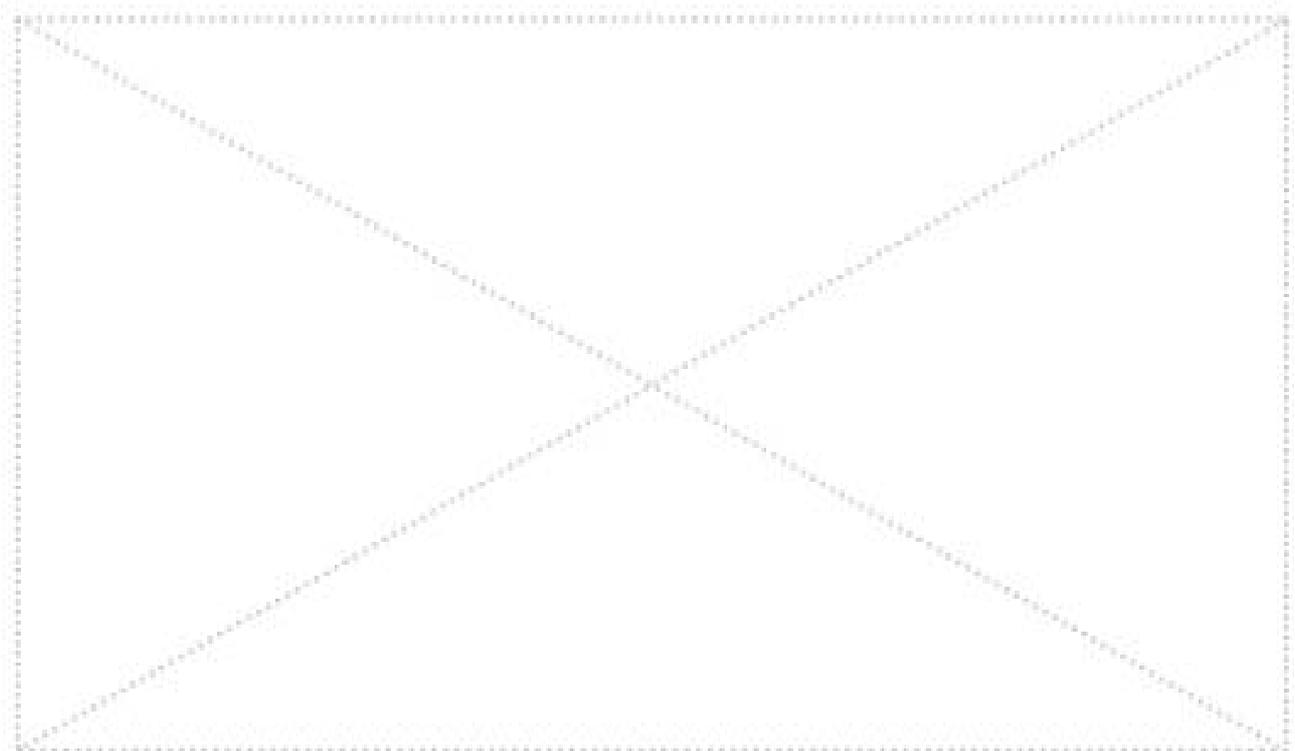
- (구글) 구글 벤처스, 구글 핏, 자회사 Verily 등을 중심으로 인공지능을 접목한 헬스케어 기술 및 서비스 개발에 역량을 집중
  - ※ 구글 벤처스를 통해 헬스케어 및 생명과학 분야에 투자 집중하고 있으며 구글 핏을 이용하여 헬스케어 플랫폼을 구축, 인공지능 기술과의 접목을 통해 실시간 건강관리 서비스를 확대할 예정
  - ※ Verily는 머신러닝과 컴퓨팅 알고리즘을 이용해 건강을 개선하고 암, 당뇨병, 심장병 등 주요 질환을 예방하고 관리하는 연구에 집중

- (애플) 애플 사용자를 대상으로 수집된 데이터를 바탕으로 의학연구, 개인 건강관리 및 질병 치료 관련 앱 개발을 촉진하며 향후 인공지능 기술과의 접목을 통해 혁신적인 신고부가가치 서비스 창출 예상

※ 헬스케어 플랫폼인 Healthkit, Researchkit, Carekit을 개발하였으며, 애플 제품 사용자를 대상으로 연구자의 임상 시험 및 개인의 건강관리에 활용

○ 인공지능 헬스케어 벤처기업은 활발하게 산업생태계를 구성

- ‘16년 8월 기준 “인공지능 헬스케어의 산업생태계와 발전방향”, ETRI Insight에 의하면, 11개 분야 92개 기업이 헬스케어 인공지능 벤처기업으로 구분되며, 스타트업에 대한 총 투자금액은 1,627억 달러
- 기업 수 기준으로 의료 영상 진단(22개), 예측 및 위험 관리(17개), 건강 관리 모니터링(9개) 등의 분야에서 활발하게 스타트업이 전개



<그림 25> 글로벌 인공지능 헬스케어 주요 스타트업

(출처:CB Insight)

<표 8> 인공지능 헬스케어 서비스 주요 해외사례

서비스 (기업, 나라)	활용 분야	적용기술	수요군
Molly (Sense.ly, 미국)	퇴원 후 집에서 지속적인 치료가 필요한 환자를 도와주는 인공지능 간호사 서비스	- 음성인식 기술	- 노인 - 만성 질환자
Ginger.io Soultion (Ginger.io, 미국)	우울증, 분노장애 등 환자의 스마트폰 활용 데이터 모니터링 통한 정신건강 관리 서비스	- 딥러닝 - 빅데이터	- 환자
CaféWel Concierge (Welltok, 미국)	IBM 왓슨의 인공지능 기술을 활용한 지능형 헬스서비스 제공	- 자연어 처리	- 환자 - 개인 이용자
Enlitic Solution (Enlitic, 미국)	딥러닝을 의료 데이터에 응용하여 질병을 판정하는 시스템	- 딥러닝	- 병원 (의사)
AiCure Solution (AiCure, 미국)	처방 받은 약을 제시간에 적정량을 복용할 수 있도록 관리 및 감독해 주는 서비스	- 머신러닝	- 환자
Personal Body Support (Softbank, 일본)	이용자의 생활 습관 조사 결과 및 신체 데이터를 바탕으로 스마트폰을 통해 맞춤형 생활습관 개선 메뉴를 제공하는 서비스	- IBM 왓슨 활용 - 머신러닝	- 개인 이용자
MedAWare Soultion (MedAWare, 이스라엘)	환자의 전자의무기록 분석을 통해 실시간 처방 오류의 사전적 방지 솔루션 제공	- 머신러닝 - 빅데이터	- 병원 (의사)

- 또한, 글로벌 제약사들은 신약개발을 위해 인공지능 회사와  
협력체결을 맺는 등의 오픈 이노베이션을 추진

<표 9> 글로벌 제약사의 신약개발 인공지능 활용 주요 현황

(출처:한국제약바이오협회)

제약사	인공지능 회사	활용분야
존슨앤존슨(얀센)	베네볼런트	후보물질 탐색
화이자	IBM Watson	면역항암제
테바	IBM Watson	약물 복용 후 분석 등
산텐	투사	녹내장 신약 개발
머크	아톰와이즈	후보물질 탐색
노바티스	인실리코 메디슨	후보물질 탐색

## 2. 국내

### □ 신약개발에 활용 가능한 바이오헬스 데이터\*의 효율적 관리를 위한 기준 및 기관의 부재

\* 국가연구개발사업을 통해 축적된 50여만 건의 화합물 데이터(연구데이터) 및 전국민 의료보험제도에 기반한 건강보험 데이터(의료데이터) 보유

- 출연연, 국책사업단 등을 통해 인공지능 모델 개발 중\*이나 기업 활용 실적이 저조하며, 공공 DB 활용 지원 미흡

\* KISTI에서 외국DB등을 활용해 개발한 경험 있으며('12-'14), '전통천연물기반 유전자-동의보감사업'('12~'21, 1,200여 억원)에서 천연물 특화 인공지능 플랫폼 개발 중

- 복지부, 보건 의료 빅데이터 플랫폼 시범사업 추진계획'관련 바이오헬스 산업계의 데이터 활용을 위한 지원 미흡

- 건강보험심사평가원의 원외 처방 약제 통계자료, 의약품 상위 성분 청구현황 등 데이터셋 관련 연구, 학술 및 통계 처리를 목적으로 한 외부 제공 사업 시행

- 인공지능(AI) + 빅데이터 활용 차세대 신약개발 플랫폼의 기반

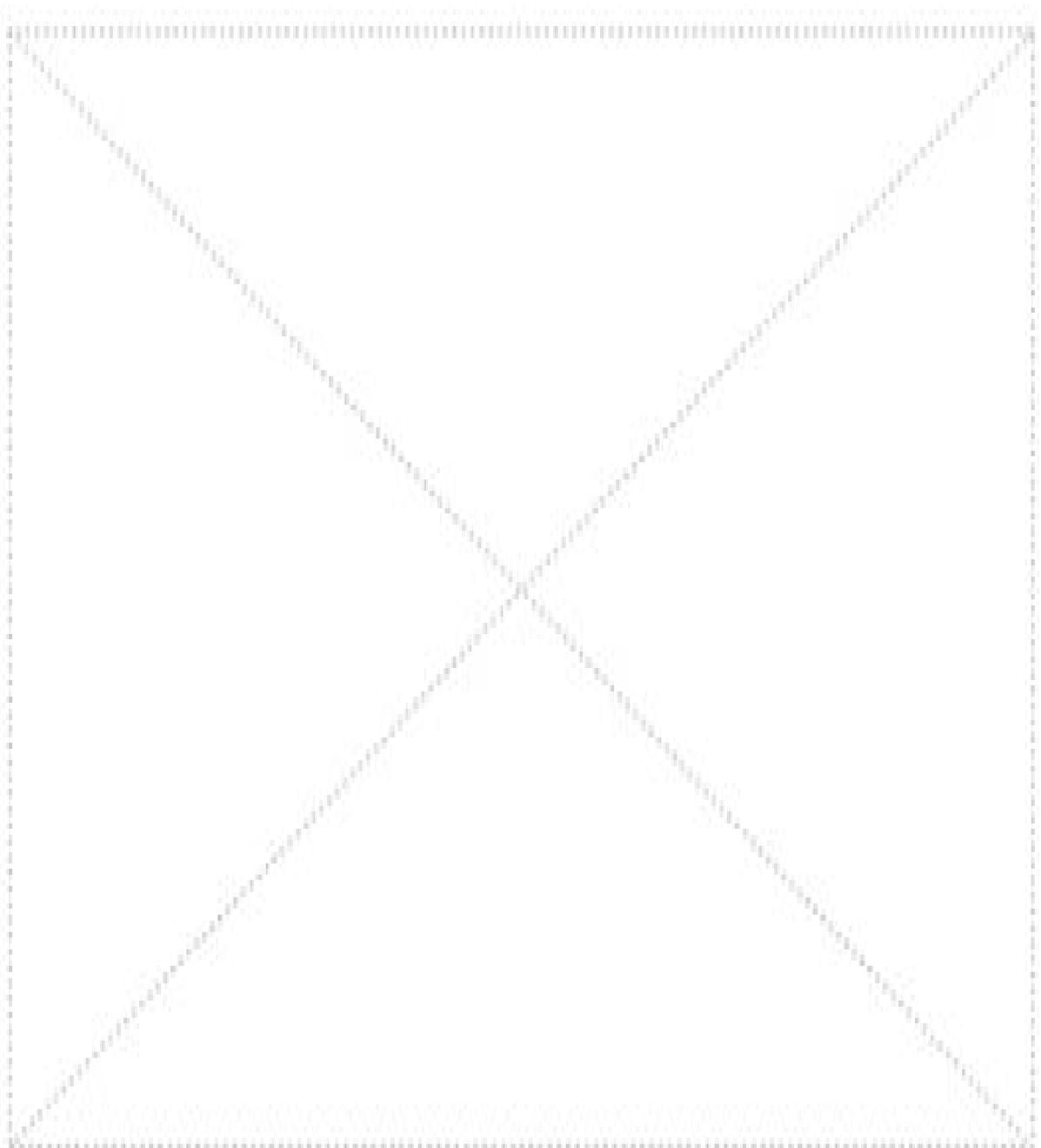
- 후보물질 발굴에 사용되는 연구데이터는 국가R&D사업을 통해 약 50여만 건이 축적되어 있음

- 한국제약바이오협회 주도로 신약 개발 인공지능 지원센터를 설립하기 위한 태스크포스 팀에 한미약품 등 국내 상위 제약업체(24개) 참여(2017년 11월)

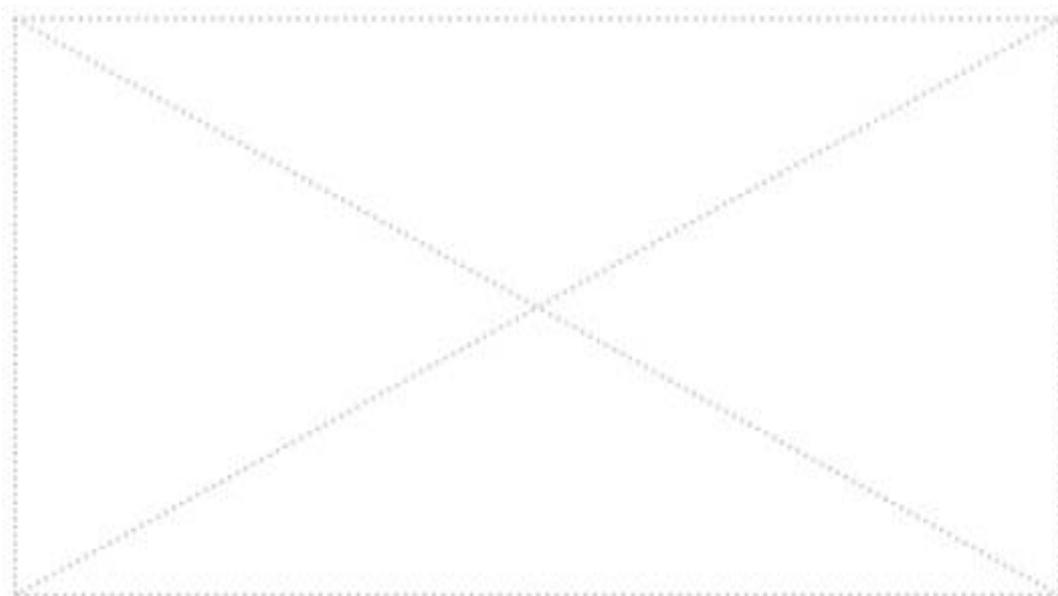
- AI를 연구한 전문가 영입, 인공지능 신약개발 지원센터 추진단 출범 후 인공지능 신약개발 세미나 개최 및 10개 제약바이오기업들과 함께 인공지능 신약개발 모델수립을 위한 인공지능 시나리오 테스트 과제 시행

- 행사명: AI Pharma Korea Conference 2018
- 주제: 신약개발에 도움을 주는 인공지능
- 일시: 2018년 10월 15일 09:00 - 17:00
- 장소: 서울 삼성동 COEX 2층 아셈블룸 컨퍼런스 홀
- 주최: 한국제약바이오협회, 한국보건산업진흥원
- 후원: 대통령직속 4차산업혁명위원회, 보건복지부, 과학기술정보통신부, 한국바이오협회, 한국신약개발연구조합, (사)한국인공지능협회, (주)경연전람
- 주관: 인공지능 신약개발 지원센터 추진단

**<그림 26> 국내 AI를 이용한 신약개발 컨퍼런스 행사 공고**



- 기술력은 美中 대비 취약(기술격차 1.8년, '17)하나, 선진국과의 기술격차 해소를 위한 정부 주도의 연구개발(R&D) 프로젝트 추진
  - 과기정통부 인공지능(AI) 차세대 신약개발 플랫폼 구축
    - 인공지능 신약개발을 위해 한국화학연구소 데이터베이스를 활용한 국가연구개발사업 시행
    - 벤처기업·대학과 제약사 간 협력 촉진을 위한 R&D 추진 및 공공DB의 공유·활용 강화 병행 필요
  - 과학기술정보통신부의 연구팀 선정
    - 이 사업은 작년 9월, 올해 1월에 각각 발표한 '바이오경제 혁신 전략 2025', '연구데이터의 체계적 공유·활용을 위한 연구데이터 공유·활용 전략'의 선도 프로젝트로 추진 중
  - '18년 화학(연)을 중심으로 인공지능 전문기업·연구소, 신약개발 연구자가 참여하는 사업 컨소시엄을 구성, 플랫폼 선도 프로젝트에 착수
    - 개발된 플랫폼은 인공지능(AI) 학습 및 연구자를 통한 검증 작업을 거쳐 연구자·기업이 자유롭게 사용할 수 있도록 2019년 중 공개할 계획



<그림 27> 선도 프로젝트 추진체계

○ 과학기술정보통신부의 연구팀 선정

- 이들이 개발한 플랫폼은 연구자, 기업이 자유롭게 사용할 수 있도록 '19년에 공개 예정
- 과기정통부는 본 사업이 성공적으로 추진될 경우 평균 5년이 소요되는 후보물질 개발기간을 최대 1년까지 단축할 것으로 기대하고 있음

○ 국내 인공지능을 이용한 신약개발 벤처 기업

① (스탠다임) 인공지능 기반 시스템생물학 전문 스타트업 기업으로 신약개발에 활용할 수 있는 머신러닝 기술을 개발하여 약물구조·단백질·세포·유전자 등 분석해 신약재창출

※ 바이오기업 크리스탈 지노믹스와 협업 추진('17.6)을 통해 암, 류마티스, 간 질환 등의 분야에서 신약 후보 발굴 및 개발

※ '16년 영국 제약사 아스트라제네카가 개최한 AI 신약 개발 경쟁 프로그램에서 70여개 참가팀 중 3위 차지

② (파미노젠) 화합구조물, 질환과 관련된 표적 단백질 등에 관한 빅데이터를 모아 자체 개발한 알고리즘을 이용하여 신약 후보물질을 발굴, 검증을 마친 후 기술이전을 하는 사업 모델

- 직접 후보물질 발굴을 수행하는 한편 각 대학 연구실과의 네트워킹을 통해 '후보물질 공급'의 한계를 극복

③ (파로스아이비티) 자체 개발한 인공지능 플랫폼 기술 '케미버스 (chemiverse)\*'를 바탕으로 다양한 기관과의 활발한 공동연구 뿐만 아니라 자체 신약 후보물질 개발을 파이프라인으로 진행

※ 케미버스 : 현존하는 약물 관련 데이터 베이스와 상업적 구매가 가능한 1천200만개의 화합물에 대한 정보, 200만개의 타겟 단백질의 약효 데이터, 2억 편의 논문 정보가 집약된 Pubmed 빅데이터를 기반으로 분석과 학습을 진행하는 인공지능 플랫폼 기술. 이를 통해 단백질 구조를 예측하고 가상 탐색함으로써 유효물질을 발굴하고 물성을 예측, 설계해 최적화를 진행

## <참고> 주요 국가별 민간기업 투자 현황 및 방향

### 1. 미국

#### □ IBM Corporation

- Watson for Drug Discovery (WDD)
  - WDD는 다양한 생명과학 지식 기반 하에 유전체, 약물, 질병과 여러 entity 간의 연관 관계를 보여줌
  - 특정 질환과 약물에 대한 정보를 찾는 연구자들에게 기존의 문헌 정보들을 찾아줄 뿐만 아니라 이들이 직접 테스트해 볼 수 있는 다양한 가설, 관련 정보도 제공함. 실제로 이 툴을 통해, 운동조절 이상에 관여되는 약물이 파킨슨병에도 효과가 있다는 사실이 확인됨 (Tom H.Johnston et al.,2018)
  - 적어도 10명의 과학자들이 14개월에 걸쳐 작업해야 15개 정도의 약물 후보물질을 찾아낼 수 있지만, Watson 기술을 이용하면 1개월 미만으로 가능했음 (Ying Chen et al., 2016)

#### □ NuMedii Inc.

- 헬스케어 분야에서 빅데이터, 인공지능, 시스템 생물학을 결합한 선구자적인 기업으로 2010년 설립 이래 맞춤 치료 요법 개발에 주력해 옴
- 스탠포드 대학의 Atul Butte's 연구실과 독점 계약을 통하여 수억 개의 생물학, 약물학, 임상 관련 빅데이터를 보유함. 이러한 데이터를 중심으로 네트워크 기반 알고리즘을 적용하여 신약 후보 및 바이오마커 개발 연구를 진행함
- 일반적으로 신약개발을 위한 임상은 10년과 50억달러의 비용이 소요되는데, 인공지능 신기술을 이용하면 10분의 1정도로 개발비용을 줄일 수 있다고 소개 (AI와 제약의 만남..”신약개발비용 10분의 1로 줄어든 것“,문화저널21(2018.10.15))

- R&D 관심 분야: 염증, 종양, 희귀 질환
- 기업 단계: 파트너십 기반 기술 개발
- SWOT 분석
  - 강점: AIDD (Artificial Intelligence for Drug Discovery) 개발 보유
  - 약점: 전략적 제휴에 의한 데이터 제공
  - 기회: 특정 질환 연구소 혹은 연구자들과의 기존 협력 관계는 다른 질환으로 확대 용이성 제공
  - 위협: 장기 투자 및 기존 데이터의 정형화 작업 필요

□ twoXAR Inc.

- 2014년 설립되어 인공지능 기반 신약 개발 기업으로 computational 플랫폼을 통해 신약 후보 물질 발굴, 전임상 연구 등을 지원함
- 빅데이터, 클라우드 컴퓨팅, 인공지능 기술이 전통적인 신약 개발 접근에 비해 빠르고, 경제적인 twoXAR의 플랫폼 개발을 가능케 함
- 소프트뱅크 벤처스를 비롯한 여러 기관의 지원을 받아, 80 여개 이상의 질환에 대한 약물 개발을 진행 중임
- R&D 관심 분야: 2형 당뇨, 간암, 류마티스성 관절염
- 기업 단계: 파트너십 기반 기술 개발
- SWOT 분석
  - 강점: 소프트뱅크 벤처스(1000만 달러 규모 Series A 투자 유치)를 비롯한 벤처 캐피탈리스트로부터의 투자 유치, 저명 헬스케어 연구 기관과 연구자와의 파트너십 및 협력
  - 약점: 시장의 경쟁 기업에 비해 신생기업, 현 시장의 기존 업체들이 진행하고 있는 협력 개발 결과가 예상에 못 미칠 가능성 존재, 높은 초기 투자금이 빠른 시기에 회수되지 못할 가능성 존재

- 기회: 인구가 급증함에 따라, 질병, 재난, 돌연변이 질환의 출현 등은 헬스케어 시장에 대한 관심도를 높아진 상황. 헬스케어 시장에서의 전문 인력 부족. 인공지능은 전문인력의 업무량 감소에 기여하여 시장의 기회 창출에 기여할 것으로 기대
- 위협: third-party로부터의 재정적 투자는 긍정적인 측면이 있으나, 투자자들의 궁극적 목적은 이윤이므로 소유권 등의 변화가 생길 가능성 존재. 상대적으로 신생 산업이므로 사업영역의 수직 및 수평 통합 모두에 민감하여 시장이 도전에 직면할 가능성 존재

□ Atomwise Inc.

- 2012년 설립되어 신약 후보와 농업 화합물 발굴을 돕는 인공지능 개발 업체로 세계 최초로 약물 구조 디자인을 위한 딥러닝 신경망인 AtomNet 개발함
- 화학자와 같은 역할을 수행하는 AtomNet은 강력한 딥러닝 알고리즘과 슈퍼컴퓨터를 활용하여 매일 수백만 개의 약물 가능 분자 분석을 지원함
- R&D 관심 분야: 1단계-질병 단백질 타겟 식별, 2단계-1단계 완성 후 타겟 단백질에 비독성 분자 전달 방법
- 기업 단계: 파트너쉽 기반 기술 개발
- SWOT 분석
  - 강점: 2017년 4500만 달러 규모 Series A 투자 유치 성공(총 5100만 달러 이상의 펀딩 성공). 머크(Merck) 社, 몬산토(Monsanto) 社를 비롯한 미국 내 상위 10개 제약사 중 4개사 고객 유치. 하버드, 듀크, 스탠포드, 베일러 의대를 비롯한 40개 이상의 주요 연구 대학과 협력
  - 약점: 고도의 전문성 보유 전문가 필요. 제품과 서비스의 시장 활용 테스트를 위해 제약 산업과 관련된 이해당사자들과 정보 교환 필요

- 기회: 가까운 미래에 새로운 치료법 개발이 시급한 질환 치료제 개발 가능성. 화학 관련 시장에 집중하고 있는 현재의 전략은 향후 의학 및 제약 산업 파트너 및 협력 관계로 확대 기회 증대
- 위협: Lead optimization은 전통적으로 제약 파이프라인에서 가장 고비용 단계로 높은 실패 가능성 존재. 현재 Atomwise의 비즈니스 전략은 제약 기업들이 수수료 비용 삭감을 시도하면 수직 통합되기 쉬운 형태로서, 시장 점유율 향상을 위해 파트너십 또는 수평적 통합을 해야 할 가능성 존재

#### □ Insilico medicine Inc.

- 2014년 설립된 Insilico Medicine社は 신약 개발을 위한 인공지능 솔루션, 바이오마커 개발, 노화 연구를 하는 기업임
- 딥러닝을 이용한 신약 개발 엔진, 개인 맞춤 헬스케어, 항노화제 개발을 진행 중임
- In silico 신약 개발을 위해 유전체학, 빅데이터 분석, 딥러닝을 결합함. 특히, 딥러닝 기술과 인공지능을 활용하여 화합물이 어떻게 세포에 작용하는지, 어떤 약물이 세포 치료에 사용 가능한지 어떤 부작용이 가능한지 등을 분석함
- 신약 개발 인공지능 플랫폼으로 Pharma.AI 솔루션 제공함. Pharma.AI는 바이오테크놀로지 기업, 제약사, 피부 관리 기업, 정부 기관 등에 머신 러닝 서비스 제공함
- R&D 관심 분야: 개인 맞춤 헬스케어, 항노화제
- 기업 단계: 파트너십 기반 기술 개발
- SWOT 분석
  - 강점: 차세대 인공지능 기술(예: 생성적 적대 신경망 (GAN: Generative Adversarial Networks), 강화 학습, 요구

- 특성 보유 분자 구조 생성) 활용에 있어 다수의 협력 관계 유지 Insilico는 NVIDIA 선정 세계 5대 인공지능 업체. 벨기에, 러시아, 영국 등 다국의 우수한 연구 개발 자원 보유
- 약점: 미국 내로 국한된 비즈니스 운영
  - 기회: 헬스케어 생태계 전반에 걸친 인공지능 활용을 통한 획기적인 변화. 시장 확장 및 비즈니스 성장 기회 확대
  - 위협: 관련 산업과 시장에 걸친 생산력, 품질, 브랜딩, 서비스, 가격에 근거한 경쟁하는 상황에서 인플레이션, 외환 시세, 원자재 시장 변동 등에 기인한 구입 가격 변동성

## 2. 영국

### □ AstraZenca PLC

- AstraZenca社は 1999년에 설립된 바이오의약품 기업으로 캠브리지에 본사를 두고 있으며, 글로벌하게 61,000명 이상의 직원을 보유하고, 2017년에 24조 7115억원(224억 6500만 달러) 이상의 매출을 기록한 기업임
- AstraZenca社は 인공지능 플랫폼, 약물 디자인, 임상 시험 등의 서비스를 제공함.
- AstraZenca社は 딥러닝, 빅데이터 등을 활용함
- AstraZenca社 제공 인공지능 플랫폼
  - DMTA (automated design make test analyze): 시험 가설 증대, 인간 플라즈마 단백질 결합 테스트 등을 포함한 반복 에세이(assay) 평가
  - Watcher: 임상 시험 관련 의사와 과학자를 지원하기 위해 설계된 인공지능 기반 결정 지원 시스템. 안전성 데이터 모니터링

## □ Benevolent AI

- 2013년 설립된 Benevolent AI社は 런던에 본사를 두고 있음
- Benevolent AI社は 인공지능을 신약 개발에 적용하고 있고, 개발 초기부터 마지막 임상 단계까지 지원할 능력이 있음
- Benevolent AI社の 인공지능 플랫폼은 근위축성 경화증(Amyotrophic lateral sclerosis), ALS) 혹은 운동 신경 질환에 적용할 가능성이 있음. Benevolent AI社の 인공지능 플랫폼은 다양한 ALS 과정과 연관된 경로 예측 등을 수행하여, 유방암 약으로부터 도출한 ALS 치료 후보는 증상 지연을 나타냄

## 3. 독일

### □ Innoplexus AG

- Innoplexus AG社は 2011년에 설립되어 독일 프랑크푸르트에 본사를 둔 기업임
- Innoplexus AG社は 제약과 생명과학 분야에 인공지능 기반 솔루션을 제공함
- Innoplexus AG社の iPlexus
  - 자연어 처리 기술 등 사용
  - 문헌, 임상 시험, 국제 회의 자료, 학위 논문, 특허 등을 포함한 다양한 데이터 소스에 걸친 자료 제공
  - 단백질, 약물, 질환, 유전자 등에 관한 정보 제공

## 4. 한국

### □ 스탠다임

- 삼성종합기술원 출신 박사 3명이 창업한 인공지능과 시스템생물학 기술을 결합해 신약개발 과정을 개선시키는 기술을 가진 기업
- 기존에 발굴된 약물 가운데 알려지지 않은 약효를 찾는 데 약물 상호 작용을 포함한 약물 구조 DB 알고리즘을 개발을 통해 인공지능을 활용
- 딥러닝(심층학습) 기술을 이용해 신약후보 물질을 추출
- 2018년 11월 5일부터 7일까지(현지 시각) 덴마크 코펜하겐에서 열리는 ‘제24회 국제 파트너링 콘퍼런스 바이오 유럽(이하 바이오 유럽)’에서 AI 기반 신약후보 선도물질 최적화 서비스인 ‘스탠다임 베스트(Standigm BEtter STructure)’를 선보임
- 2017년 6~8일 독일에서 개최된 ‘제 23회 국제 파트너링 콘퍼런스 바이오 유럽’에서 차세대 제약 및 바이오 테크놀로지 기업으로 선정
- 인공지능 기반 신약개발 서비스인 ‘헌터’(Hunter)와 ‘익스펜더’ (Expander)의 출시, 후보 물질의 실험 검증, 필터링, 피드백까지 시뮬레이션을 수행함
- 종양학 분야에서는 크리스탈지노믹스, 아주대 약대와는 파키슨병, 한국과학기술원가는 자폐증에 대한 동물실험을 통해 약물효능 검증을 하는 등 다수의 기관들과 신약 개발에 협력하고 있음
- 최근에는 ‘비알코올성 지방간’을 치료할 수 있는 신약을 개발해 전임상 시험 중
- 이 약은 이르면 올해 내로 특허 출원을 기대하고 있음

## □ 신테카바이오

- 유전체 빅데이터 기반의 AI 기술로 승인 받은 약물이나 신약 후보 물질 적응증을 새롭게 발견하는데 이용
- 바이오마커 발굴, 신약 후보 물질 도출 모델을 개발 중
- 자체 개발한 항암 효과 예측 모델로 유한양행, JW중외제약, CJ헬스케어와 면역항암제 개발을 시도. CJ헬스케어와는 유효물질 발굴까지는 완료 상태
- 씨디알스캔은 기존의 AI 회사들이 주로 사용하는 약물의 화학적 특성 이외에도 유전체 빅데이터를 결합하여 약물의 효과를 예측하는 딥러닝 모델로 후보 물질의 화학구조정보만 있으면, 몇 가지의 희귀 암을 제외한 대부분의 암 종에 대하여 항암효과의 여부 및 어떤 암 종에 가장 효과적인지 지를 예측

## □ 루닛

- AI 기반 의료영상 진단기업으로 세포 조직 사진, CT 촬영 결과 등을 보고 AI가 질병을 검진하는 기술을 확보
- 2017년 10월17일 의료영상처리학회(MICCAI)가 주최한 유방암 병리진단을 위한 종양확산정도를 예측하는 대회인 'TUPAC2016'에서 루닛은 3개 평가 분야에서 모두 1위를 기록
- 이 대회는 참가팀들에게 종양 관련 슬라이드 이미지를 담은 데이터셋을 준 뒤에 종양확산정도를 점수형태로 예측하여 가장 정확도가 높은 팀이 우승하는 방식
- 루닛은 총 세 개 미션에서 마이크로소프트 리서치 아시아, IBM리서치-취리히 등을 제치고 모두 1위를 차지
- 2017년 11월 AI 기반 실시간 의료영상 진단 소프트웨어 '루닛

인사이트'를 공개

- 사용자가 의료영상을 업로드하면 몇 초 내에 AI 진단 결과를 받아볼 수 있음
- 흉부 엑스레이 영상만으로 주요 폐 질환을 검출할 수 있으며, 정확도는 98% 수준
- 케이큐브벤처스, 소프트뱅크벤처스, 인터베스트 등에서 58억원의 투자금을 유치 2013년 설립된 루닛은 올해 CB인사이트가 선정한 'AI 100대 스타트업'에 한국 기업으로는 유일하게 이름을 올린 국내 AI 기업

#### □ 딥바이오

- 네이버와 KT 출신 소프트웨어 전문가들이 창업. 최근 국내 벤처캐피탈로부터 약 40억원을 투자 유치함
- 딥바이오는 2015년 10월 카이스트 전산학과 출신의 공학도인 김선우 대표가 설립했다. 인공지능 기술 중 하나인 딥러닝(Deep Learning)을 이용한 의료용 소프트웨어 제작을 전문으로 하는 스타트업이다. 현재는 인공지능 기술이 접목된 전립선 암 진단 솔루션 개발에 집중하고 있음
- 딥바이오가 개발하고 있는 솔루션은 조직검사 등 전립선 암 진단 과정을 획기적으로 줄여주는 장점이 있다. 전립선에서 추출한 조직의 현미경 사진을 AI 기술로 분석해 의사들이 더욱 손쉽게 암 진단을 내릴 수 있도록 돕는다. 병리학 의사가 눈으로 오랜 시간 관찰해 진단을 내렸던 기존의 방식과 비교해 효율성을 대폭 높임
- 2017년 7월, 광학기술이 들어간 분석장비를 개발 중인 지노바이오와 전립선암 진단에 특화된 인공지능 진단시스템을 개발하는 내용의 계약을 체결함

## 제4절 정부투자분석

### □ 개요

- 국내 AI·신약개발 관련 정부투자는 최근 5년간('14~'18) 약 215억으로, 연평균 141.4%로 지원 규모 확대
  - '18년도 정부투자는 전년도(39.5억원) 대비 267.2% 증가한 145억원

<표 10> 연도별 정부투자액

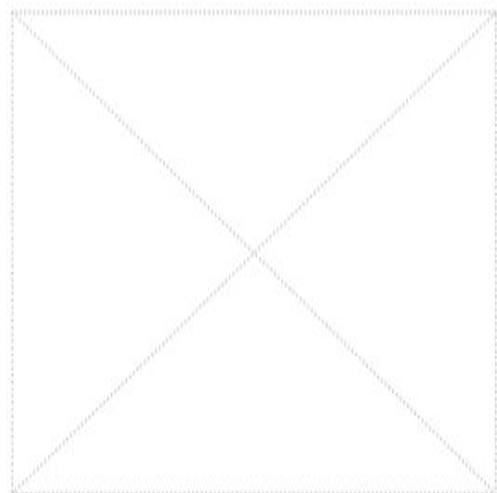
(단위 : 백만원)

구분	2014	2015	2016	2017	2018	합계
정부투자액	426.8	556.0	2102.7	3949.3	14502.1	21,536.9
전년대비 증가율		30.3%	278.2%	87.8%	267.2%	141.4% (연평균 성장률)

※ 분석기준 : NTIS에서 최근 5년간('14~'18) “신약 and 인공지능”과 관련된 세부과제들을 추출 후 대상과제를 분석

### □ 부처별 투자현황

- 최근 5년('14~'18년)동안 주요 부처별 투자현황은 과기정통부의 투자 비중이 가장 높은 상황
  - 정부 R&D 투자 총액(215.4억원)에서 과기정통부가 53%(114.3억원) 차지
  - 다음으로는 산업부(20%), 복지부(18%), 교육부(5%) 순
- ※ 산업부 : 43.7억원, 복지부 : 39.7억원, 교육부 : 10.7억원, 농식품부(농진청) : 4.0억원, 중소벤처부 : 2.7억원



<그림 28> 주요 부처별 투자 비중('14~'18년)

- 국내 부처별 투자규모 역시 최근 5년('14~'18년)간 과기정통부, 산업부, 복지부, 교육부, 농진청, 중소벤처부 순
- 과기정통부교육부는 규모에는 차이가 있으나 지속적으로 AI·신약개발에 대해 투자하고 있으며, 그 외 부처에서는 '16년 이후부터 투자를 시작

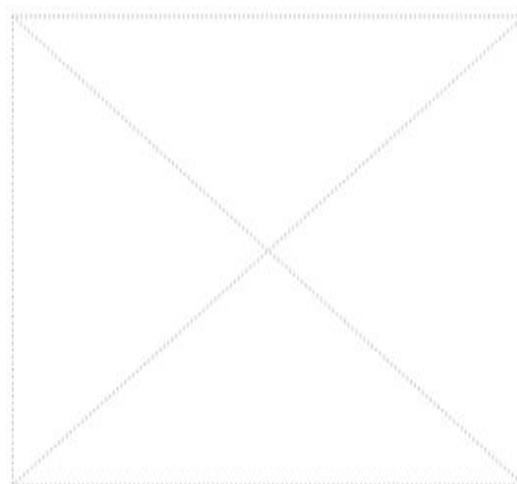
<표 11> 부처별 정부투자액

(단위 : 백만원)

부처명	2014	2015	2016	2017	2018	합계
과기정통부	305.0	455.0	201.7	1732.7	8738.9	11,433.3
교육부	121.7	101.0	101.0	201.8	552.5	1,078
산업부	0.0	0.0	1800.0	1100.0	1479.0	4,379
보건복지부	0.0	0.0	0.0	914.8	3055.7	3,970.5
중소벤처기업부	0.0	0.0	0.0	0.0	276.0	276
농진청	0.0	0.0	0.0	0.0	400.0	400
합계	426.7	556	2,102.7	3,949.3	14,502.1	21,536.8

□ 연구수행주체별 투자현황

- 최근 5년('14~'18년)동안 연구수행 주체별 투자현황은 대학(67.0%)이 가장 높은 비중을 차지
- 다음 순으로는 기타(병원)(14.7%), 출연연(10.6%), 기업(중소)(5.4%), 정부부처(복지부)(2.3%) 순으로 나타남



<그림 29> 연구주체별 투자 비중('14~'18년)

※ 기타에 해당하는 과제들은 병원들이 수행하고 있으며, 복지부도 수행하는 과제(1개)도 존재

- 연구수행 주체별 역시 최근 5년('14~'18년)간 대학, 기타(병원 등), 출연연, 기업(중소) 등의 순으로 투자규모가 높은 상황

- 특히, 18년도의 출연연의 투자(20억원)가 전년대비 1,684% 증가

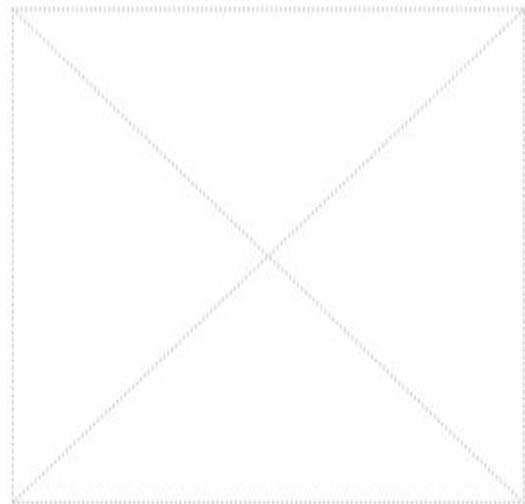
<표 12> 부처별 정부투자액

(단위 : 백만원)

연구수행주체	2014	2015	2016	2017	2018	합계
대학	426.8	406.0	2086.0	3657.0	7859.6	14,435.4
출연연	0.0	150.0	16.7	112.3	2003.5	2,282.5
기업(중소)	0.0	0.0	0.0	180.0	983.0	1,163
정부부처(복지부)	0.0	0.0	0.0	0.0	500.0	500
기타	0.0	0.0	0.0	0.0	3156.0	3,156
합계	426.8	556	2,102.7	3,949.3	14,502.1	21,536.9

□ 연구단계별 투자현황

- 최근 5년('14~'18년)동안 연구단계별 투자비중은 기초(42.3%)가 가장 높은 상황
  - 그 다음으로는 개발(32.0%), 응용(16.6%), 기타(9.1%) 순으로 차지
- ※ 기초 : 새로운 과학적 지식을 획득하기 위한 실험적 또는 이론적 연구  
응용 : 기초연구를 통해 얻어진 지식을 통해 새로운 과학적 지식을 얻기위한 독창적 연구  
개발 : 기초, 응용연구를 통해 얻어진 지식으로 새로운 장치를 만들거나, 실질적 개선을 위한 연구



<그림 30> 연구단계별 투자 ('14~'18년)

- 연구수행 단계별 역시 최근 5년('14~'18년)간 기초, 개발, 응용 등의 순으로 나타남
  - 특히, 18년도에는 전년대비 기초\* 등의 모든 분야에 투자규모가 증가
  - \* 기초 : 326%, 개발 : 180%, 응용:325%, 기타 : 246%

<표13> 부처별 정부투자액

(단위 : 백만원)

연구단계별	2014	2015	2016	2017	2018	합계
기초	426.8	556.0	302.7	1488.7	6338.9	9,113.1
개발	0	0	1800.0	1340.0	3751.4	6,891.4
응용	0	0	0	680.0	2888.5	3,568.5
기타	0	0	0	440.6	1523.3	1,963.9
합계	426.8	556	2,102.7	3,949.3	14,502.1	21,536.9

## 제5절 논문/특허분석

### 1. 논문 분석

#### 가. 개요

##### □ 검색식

<표 14> 인공지능을 활용한 신약개발기술 논문검색을 위한 검색식

검색식	
( "artificial intelligen*" OR "machine learn*" OR "naturallanguage" OR "deep learn*" OR "pattern recogni*" OR "cognitive comput*" OR "big data" OR "cloud comput*" OR "data mining" OR "neural network*" ) AND ( drug OR medicin* OR pharma* )	
논문검색 DB : Scopus	
검색기간	(게재일 기준) 2008년 1월 1일 ~ 2018년 12월 03일
검색범위	Title, Abstract, Keywords
문서형태	Article
<b>총 결과 : 12,143</b>	

##### □ 분석 방법

- 검색 DB는 ELSEVIER사의 Scopus를 이용, 유전자치료제 분야에 대한 키워드로 검색식을 설정하여 검색
- 검색식이 논문의 제목, 초록, 키워드 범위 내에서 일치하는 경우 검색이 되며, 문서 형태는 Article 내에서 검색되도록 설정
- 검색기간은 논문 게재일을 기준으로 최근 10년간인 2008년 1월 1일부터 2018년 11월 30일로 설정함
- 글로벌 논문은 국내 논문을 포함한 전체 논문을 의미하며, 국내논문은 전체 논문 중 Country를 “South korea”로 설정하여 검색된 논문\*을 의미
  - \* 이는 국내기관 소속의 저자가 참여한 논문을 포함

○ 검색결과에 대해서는 별도의 노이즈 제거과정 없이 수행하였음

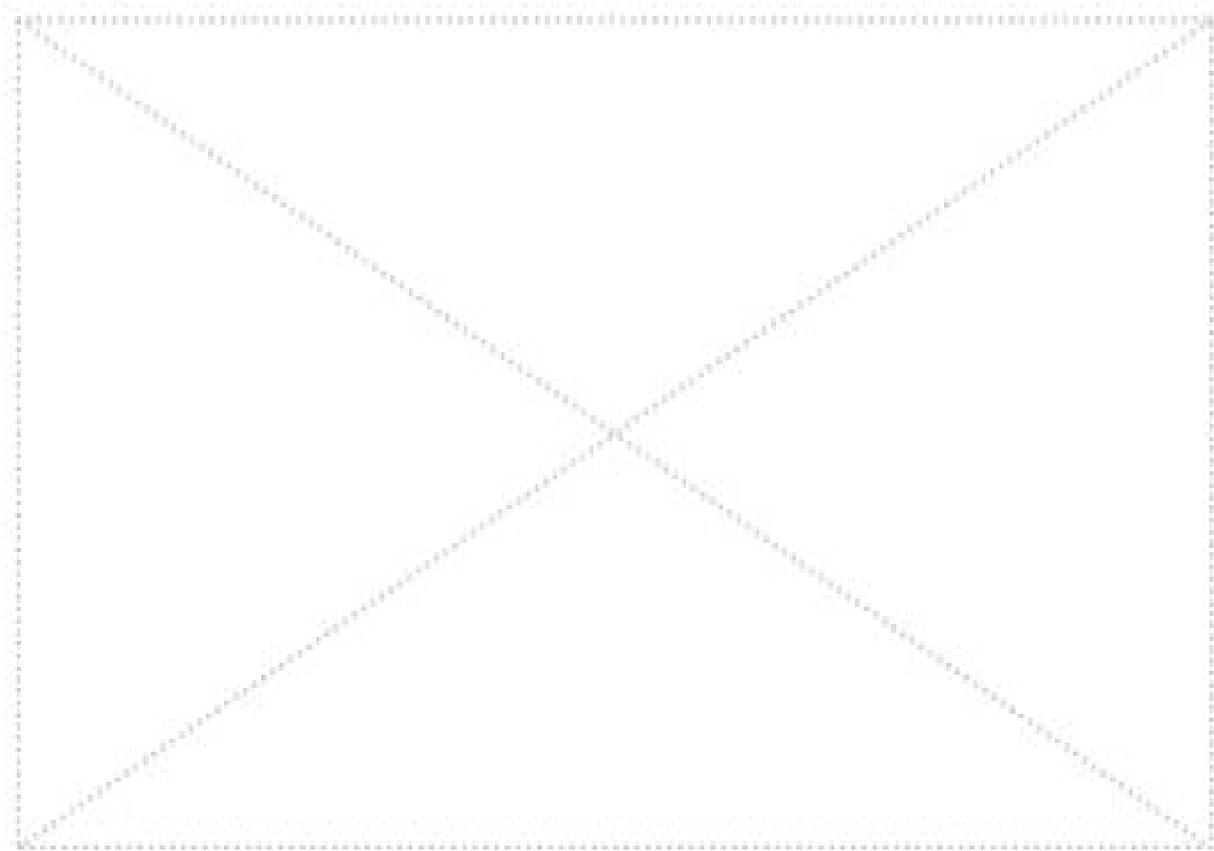
<표 15> 인공지능을 활용한 신약개발기술 논문검색 결과

해외 논문수	국내 논문수	합계
11,810	333	12,143

## 나. 글로벌 전체 논문분석

### □ 연도별 전체 논문수

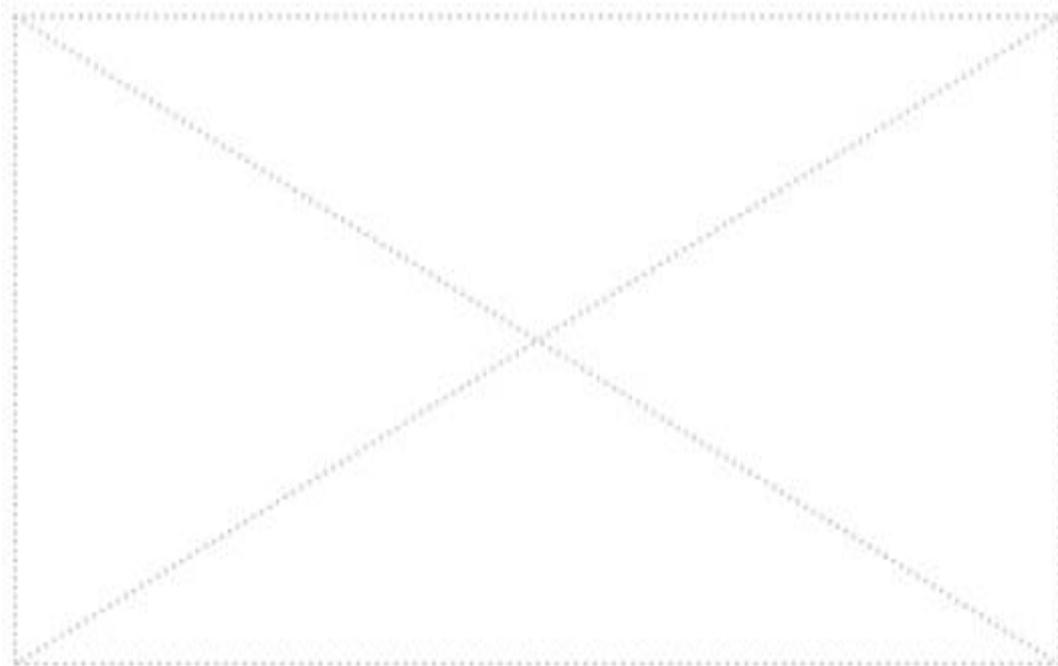
- 전 세계적으로 인공지능을 활용한 신약개발 분야와 관련된 논문은 검색 시작시기인 2008년 이후부터 꾸준히 발표되어 10년의 조사기간 동안 총 12,143편에 달하는 논문이 발표됨
  - 검색 시작시기인 2008년에는 500여 편의 논문이 발표됐으나 2013년 1,084편 발표 이후 2018년까지 평균 약 1,200건의 발표로 급격한 증가를 보이며 활발한 연구를 진행한 것으로 확인
- 최근 10년 간 3배에 가까운 논문이 게재되었으며, 2011년에 가장 큰 증가폭(36%)을 보임



<그림 31> 인공지능 활용 신약개발 관련 논문 연도별 발표현황(2008~2019)

## □ 주요 게재 저널

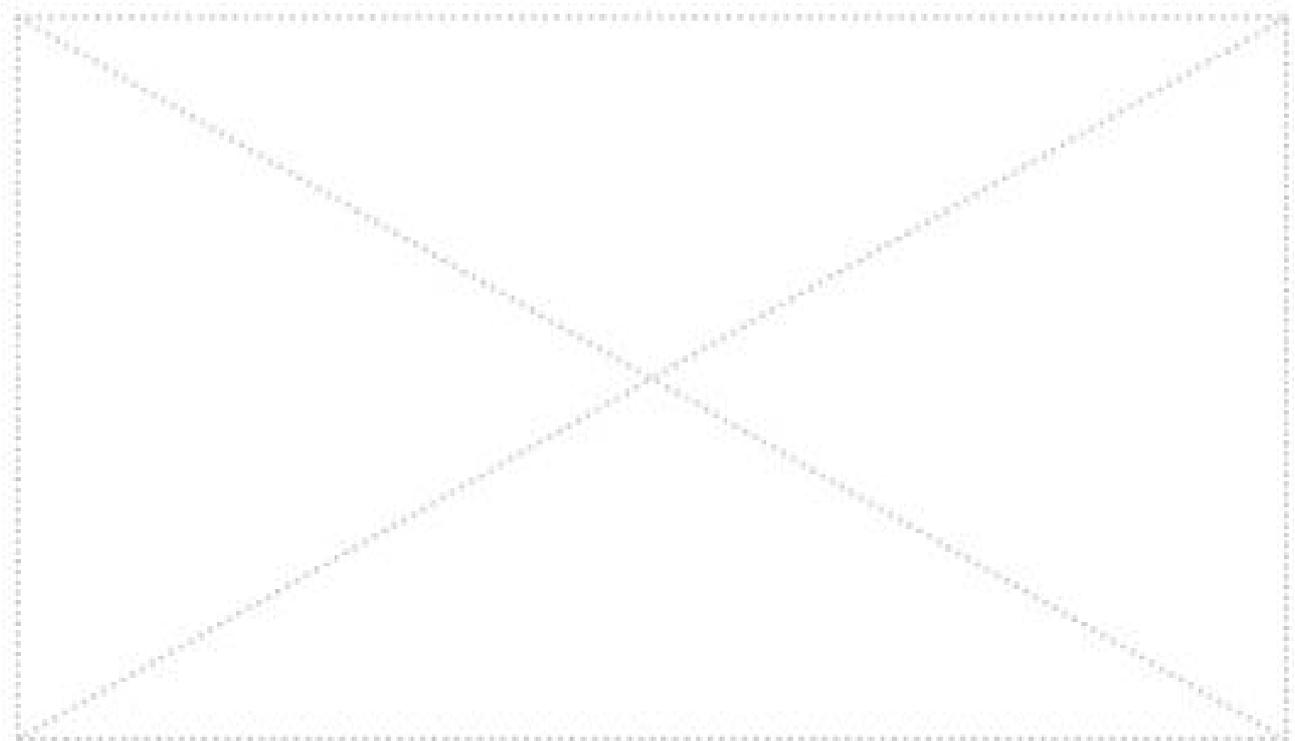
- 인공지능을 활용한 신약개발 관련 논문들은 의약학, 의학물리학, 의약 및 정보학 저널에 주요하게 발표되고 있음
  - Plos One에 495편으로 가장 많은 논문이 게재되었고 뒤이어 Medical Physics 241편, Journal Of Chemical Information And Modeling 238편, BMC Bioinformatics에 175편 등으로 발표
  - ※ 그 외 Journal of Biomedical Informatics 158편, Journal of Digital Imaging 155편 등으로 인포매틱스와 관련된 저널 중심으로 관련 논문이 활발하게 발표



<그림 32> 인공지능 활용 신약개발 관련 논문 게재 주요 저널

## □ 국가별 연구동향

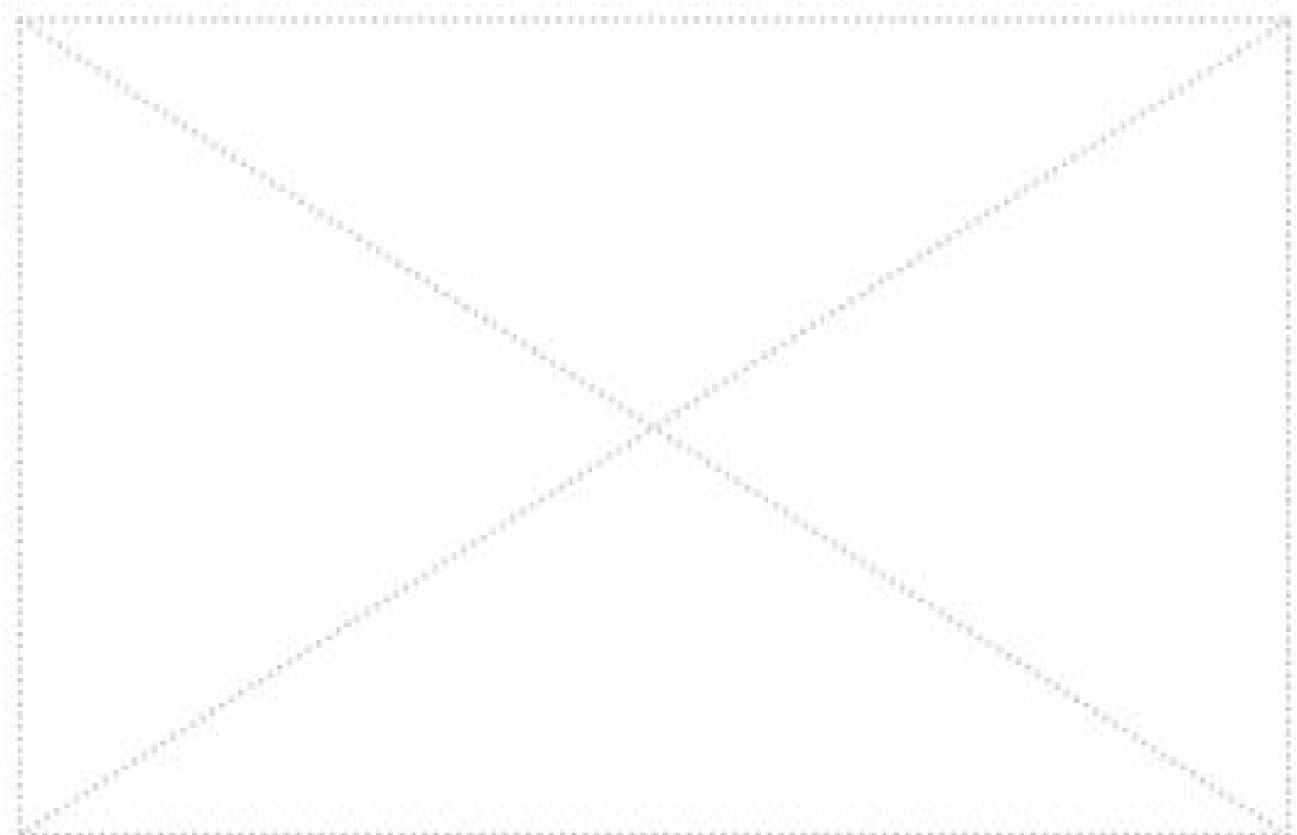
- 인공지능을 활용한 신약개발 관련 논문들은 미국을 필두로 중국, 영국 순으로 활발하게 발표하고 있음
  - 미국이 4,020건으로 독보적으로 많은 논문을 발표하였으며 뒤따라 중국이 2,095건을 발표하면서 글로벌 AI 활용 신약 개발 분야의 논문 성과에 상당한 분량을 차지하고 있음
  - 관련 논문 건수는 세계 13위 수준이며 영향력은 세계 평균에도 못 미친다는 진단으로 AI 개발 연구 경쟁에서 우리나라 성적이 양과 질 모두 저조한 것으로 나타남



<그림 33> 인공지능 활용 신약개발 관련 논문 발표 주요 국가

## □ 주요 연구기관

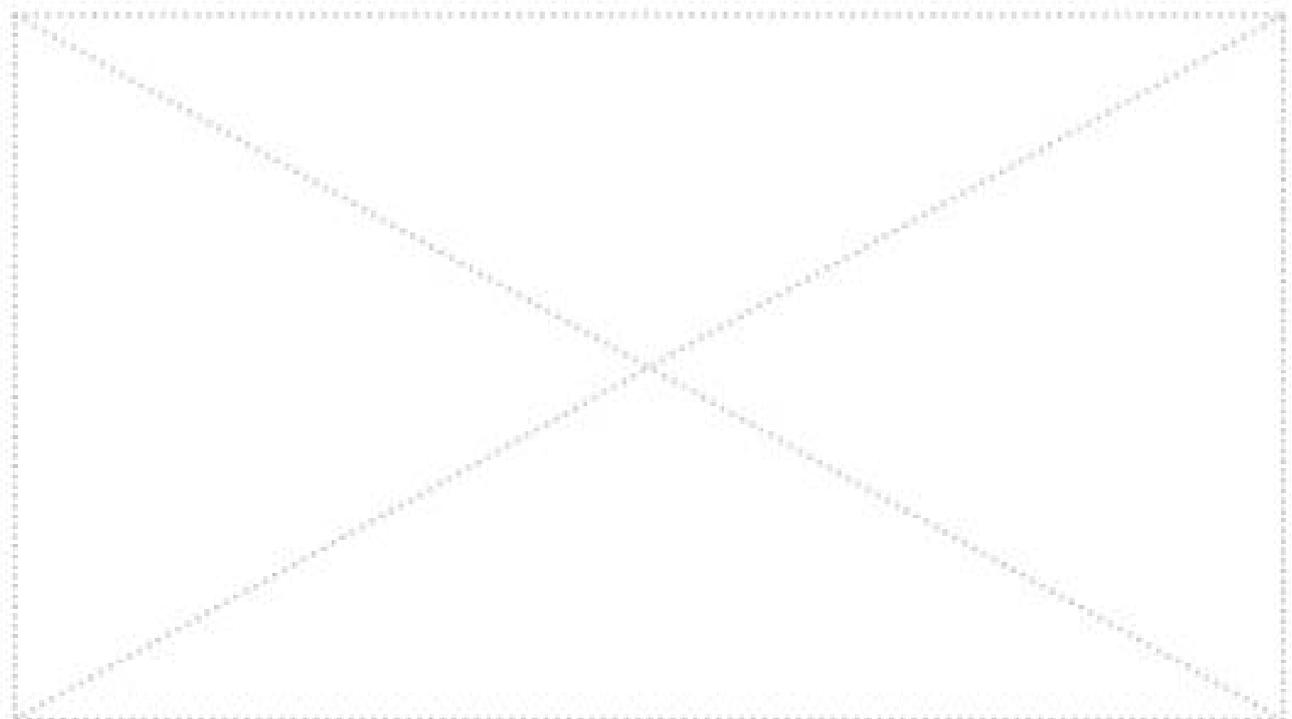
- 4차 산업혁명 시대를 맞아, 세계 각 국의 산·학·연·병·관에서 신약개발 분야 인공지능 활용 및 기술개발에 대한 연구가 활발히 진행되고 있음
- 연구기관별 인공지능 활용 신약개발 연구 순위는 하버드 의학대학원이 212건으로 가장 많은 논문을 발표했고 이어 중국과학원이 208건으로 2위를 차지했고, 중화인민공화국 교육부가 158건, 스탠포드 대학교가 151건, Inserm이 150건 순으로 나타남



<그림 34> 인공지능 활용 신약개발 관련 논문 발표 주요 연구기관

## □ 주요 연구자

- 전 세계적으로 인공지능을 활용한 신약개발 분야와 관련된 논문은 세계 각 국의 연구자들의 활발한 연구로 개인 최대 30편 이상의 논문을 발표함
  - 독일 본 대학의 Bajorath, J.이 37건으로 가장 많은 논문을 발표했고, 그 뒤를 이어 미국 Collaborations Pharmaceuticals, Inc.의 Ekins, S.가 34건, 스위스의 ETH Zurich의 Schneider, G.가 31건을 발표함
  - 국가별, 기관별 순위와 달리 독일의 Bajorath, J. 연구자가 최대 논문 수를 보였으나, 논문 건수 Top 15 내 미국인 5명, 중국인 2명으로 비슷한 경향성을 보임



<그림 35> 인공지능 활용 신약개발 관련 논문 발표 주요 연구자

<표 16> 인공지능 활용 신약개발 관련 최다 피인용 해외논문 리스트

번호	논문제목	저널명	발표 년도	피인용 회수
1	GREAT improves functional interpretation of cis-regulatory regions	Nature Biotechnology 28(5), pp. 495-501	2001	1176
2	Mass-spectrometry-based draft of the human proteome	Nature 509(7502), pp. 582-587	2014	816
3	Private traits and attributes are predictable from digital records of human behavior	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 110(15), pp. 5802-5805	2013	631
4	ARDB - Antibiotic resistance genes database	Nucleic Acids Research 37(SUPPL. 1), pp. D443-D447	2009	473
5	A side effect resource to capture phenotypic effects of drugs	Molecular Systems Biology 6,343	2010	459
6	antiSMASH 2.0--a versatile platform for genome mining of secondary metabolite producers	Nucleic acids research 41(Web Server issue), pp. W204-212	2013	451
7	Postlicensure safety surveillance for quadrivalent human papillomavirus recombinant vaccine	JAMA - Journal of the American Medical Association 302(7), pp. 750-757	2009	317
8	MRI-based attenuation correction for PET/MRI: A novel approach combining pattern recognition and atlas registration	Journal of Nuclear Medicine 49(11), pp. 1875-1883	2008	307
9	The human splicing code reveals new insights into the genetic determinants of disease	Science 347(6218),1254806	2015	302
10	Missing and spurious interactions and the reconstruction of complex networks	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	2009	299
11	Gene expression-based classification of non-small cell lung carcinomas and survival prediction	PLoS ONE 5(4),e10312	2010	293
12	Ultrasensitive mechanical crack-based sensor inspired by the spider sensory system	Nature 516(7530), pp. 222-226	2014	292
13	An atlas of genetic influences on human blood metabolites	Nature Genetics 46(6), pp. 543-550	2014	291

번호	논문제목	저널명	발표 년도	피인용 회수
14	A domain swap approach reveals a role of the plant wall-associated kinase 1(WAK1) as a receptor of oligogalacturonides	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 107(20), pp. 9452-9457	2010	279
15	Data-mining for sulfur and fluorine: An evaluation of pharmaceuticals to reveal opportunities for drug design and discovery	Journal of Medicinal Chemistry 57(7), pp. 2832-2842	2014	272
16	A new method for predicting the subcellular localization of eukaryotic proteins with both single and multiple sites: Euk-mPLOC 2.0	PLoS ONE 5(4), e9931	2010	251
17	PREDICT: A method for inferring novel drug indications with application to personalized medicine	Molecular Systems Biology 7, 496	2011	250
18	Levetiracetam suppresses neuronal network dysfunction and reverses synaptic and cognitive deficits in an Alzheimer's disease model	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 109(42), pp. E2895-E2903	2009	249
19	Classification of brain tumor type and grade using MRI texture and shape in a machine learning scheme	Magnetic Resonance in Medicine 62(6), pp. 1609-1618	2009	247
20	I-TASSER: Fully automated protein structure prediction in CASP8	Proteins: Structure, Function and Bioinformatics 77(SUPPL. 9), pp. 100-113	2009	245

※ 피인용 회수 조회일 : 2018. 12. 03 기준

## 2. 특허분석

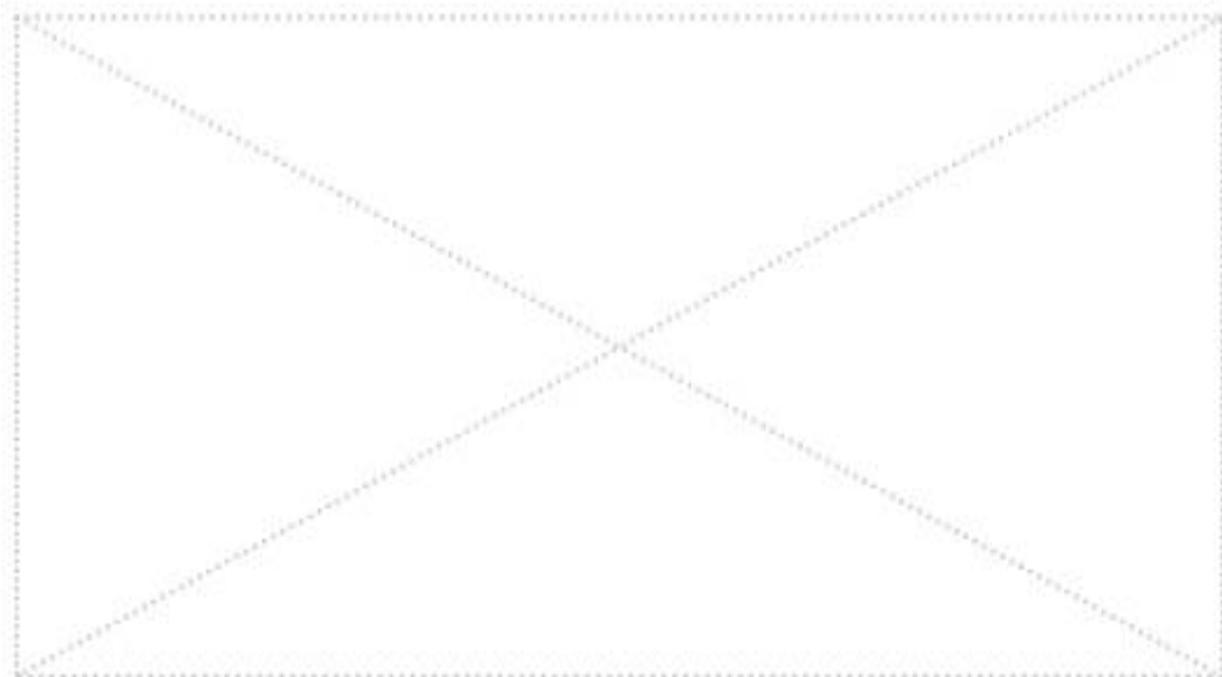
### 가. 분석범위 및 기준

- 특허분석을 위한 특허검색 대상 국가는 한국, 일본, 미국, 유럽 등 특허를 대상으로 하며, 검색 DB는 웹스-온을 사용함

<표 17> 분석범위

국가	검색대상	사용 DB	검색조건	검색기간
한국	공개특허 및 등록특허	웹스-온	발명의 명칭, 요약, 대표청구범위, 대표도	~2018. 12
일본				
미국				
유럽				

- 특허 조사의 추진 절차는 하단의 [그림]과 같은 순으로 이루어지며 발명자와의 커뮤니케이션을 통해 일부 수정이 이루어질 수 있음



<그림 36> 특허분석 프로세스

(1) 주요 키워드

□ 기술적인 측면 등의 요소를 고려하여 주요 키워드를 도출

<표 18> 주요 키워드

구분	키워드
인공지능	인공지능* "인공 지능" 에이아이* "ai" ((머신* 기계* 자가* 자기*) near (러닝* 런닝* 학습*)) 딥러닝* "딥 러닝" 데이터* 데이터* 데터* 대터* 정보* 자료* 인포* ((artificial*) near (intelligenc*)) ((machin* deep*) near (learn*)) data* info*
신약	제약* 약품* 신약* 약물* 제제* 의약* 약학* 치료제* 약제* 메디슨* 치료액* 드러그* medicin* pharma* drug*

(2) 주요 IPC

□ 주요키워드를 적용하여 주요 IPC를 도출함

<표 19> 주요 IPC

분류 코드	내용
G06F	전기에 의한 디지털 데이터처리
G06F-019	특정의 용도에 특히 적합한 디지털 계산 또는 데이터 처리 장치 또는 방법

(3) 검색식 및 검색결과(Raw-Data 현황)

<표 20> 검색식 및 검색결과

대분류	검색식		검색결과(Raw-Data)				
			한국	일본	미국	유럽	합계
인공지능을 활용한 신약 개발	국문	(인공지능* "인공 지능" 에이아이* "ai" ((머신* 기계* 자가* 자기*) near (러닝* 런닝* 학습*)) 딥러닝* "딥 러닝" 데이터* 데이터* 데터* 대터* 정보* 자료* 인포* ((artificial*) near (intelligenc*)) ((machin* deep*) near (learn*)) data* info*) and (제약* 약품* 신약* 약물* 제제* 의약* 약학* 치료제* 약제* 메디슨* 치료액* 드러그* medicin* pharma* drug*) and (예측* 개발* 예상* 추정* 추측* 예견* 유추* 추산* 합성* expect* develop* estimat* forecast* predict* synthesis*))	210	240			450
	영문	((artificial*) near (intelligenc*)) ((machin* deep*) near (learn*)) data* info*) and (medicin* pharma* drug*) and (expect* develop* estimat* forecast* predict* synthesis*))			76	147	

(4) 유효데이터 도출

- 유효데이터를 도출함에 있어서, 발명의 명칭, 요약, 청구항 및 대표도를 기준으로 기술 관련도가 낮은 노이즈 건을 제거하여 국가별 유효데이터 도출 후 유효데이터를 기준으로 정량분석 진행

대분류	유효데이터				
	한국	일본	미국	유럽	합계
인공지능을 활용한 신약 개발	18	7	29	3	57

## 나. 정량분석(특허기술동향-통계관점 분석)

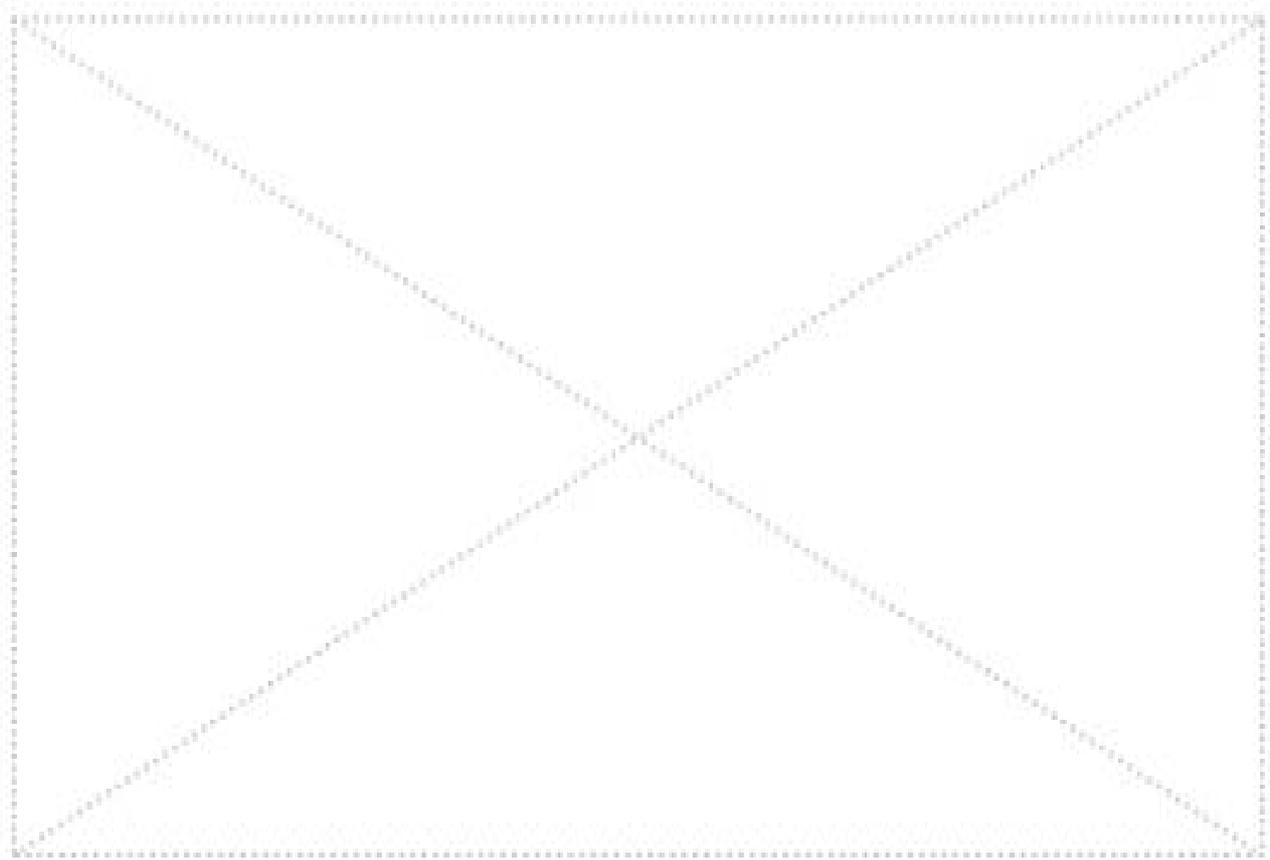
### □ 연도별 특허 동향

<표 21> 전체 국가의 연도별 출원 동향

출원연도	KR	JP	US	EP	총합계
2002			1		1
2003			3	1	4
2004	1		3		4
2005		1			1
2006		1	2		3
2007			2		2
2008	1	1	1	2	5
2009	1	1			2
2011		2	1		3
2013	1	1	2		4
2014	2		1		3
2015	1		4		5
2016	6		3		9
2017	4		3		7
2018	1		3		4
총합계	18	7	29	3	57

### □ 전체 국가의 연도별 출원 동향 및 점유율

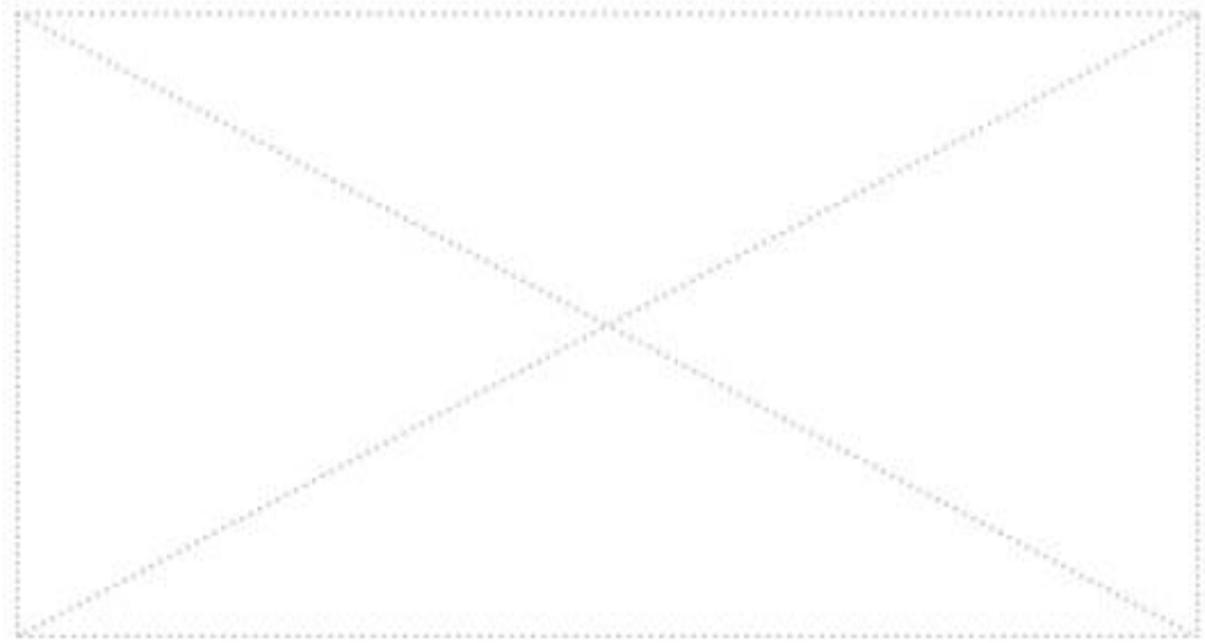
- 인공지능과 관련된 신약개발 기술의 연도별 특허동향을 살펴보면, 전체 관련특허는 57건으로, 2002년도를 기준으로 출원활동이 시작되어, 2014년 이후 출원량 증가하는 곡선을 그리고 있음. 2016년도에 출원량이 급상승하는 곡선을 보이며, 이는 한국의 출원활동이 활발하게 나타난 영향으로 사료됨
- 국가별 점유율을 살펴보면 미국 51%(29건), 한국 32%(18건), 일본 12%(7건), 유럽 5%(3건)로 조사됨



<그림 37> 전체 국가의 연도별 출원동향

□ 각 국가별 연도별 출원동향

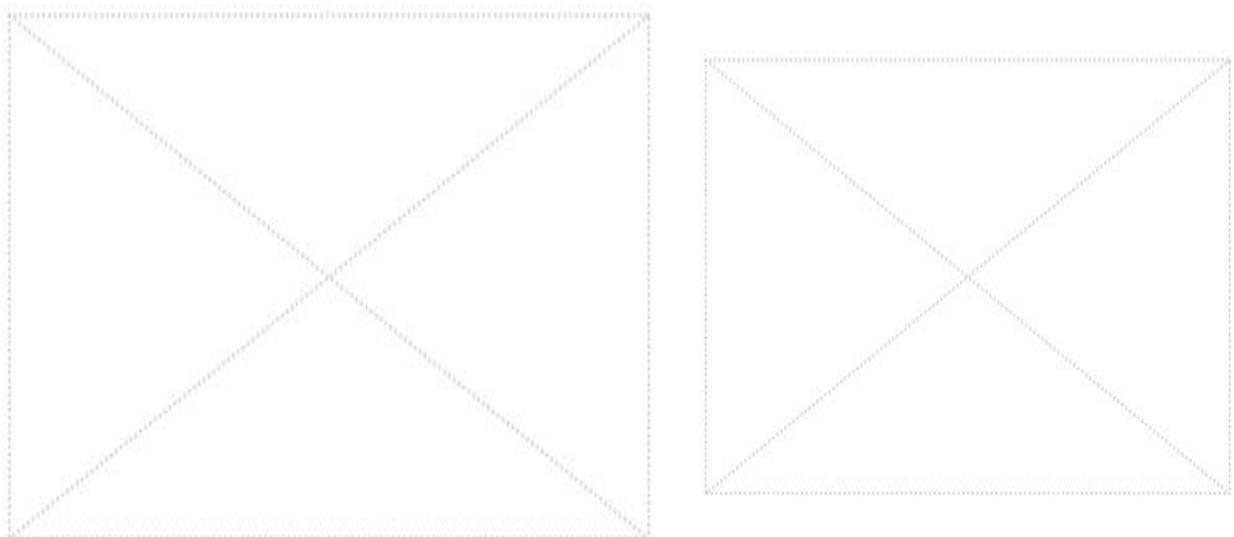
- 국가별 특허출원 동향을 살펴보면, 한국은 2002년도를 기준으로 출원 활동이 시작되었으며, 2016년도에 가장 활발한 출원활동을 보임
  - 일본은 2005년도를 기준으로 출원활동이 시작되어, 비슷한 건수의 출원량을 보이고 있다가, 2013년에 최다 건수를 나타낸 이후로 감소하는 추세를 보이고 있음
  - 미국은 2002년도를 기준으로 출원활동이 시작되어, 등락을 반복하는 그래프를 그리고 있음
  - 유럽은 2003년도를 기준으로 출원활동이 시작되어, 2008년도에 최다 건수를 나타내고 있음



<그림 38> 국가별 연도별 출원 동향

□ 기술발전도

- 2002년부터 2017년까지 총 16년을 4개 구간으로 나누어 각 구간의 출원인수와 출원건수를 토대로 분석한 결과, 인공지능을 활용한 신약개발 기술은 2010년부터 기술 혁신의 주체(출원인)와 혁신의 성과(출원건수)가 급격하게 성장하는 것으로 판단됨



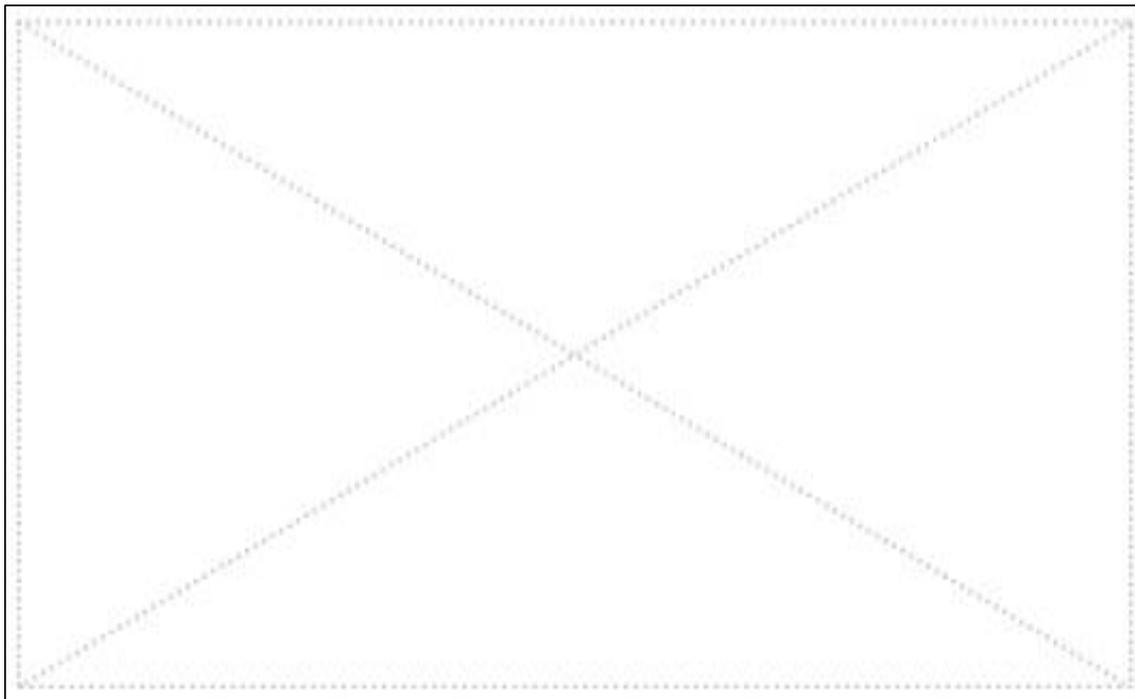
<그림 39> 기술발전 추이도

<표 22> 구간별 출원인원과 출원건수

	출원인수	출원건수
1구간 (2002~2005)	9	10
2구간 (2006~2009)	12	12
3구간 (2010~2013)	7	7
4구간 (2014~2017)	19	24

□ 전체 출원인 동향

- 대상기술의 상위 다 출원인은 한국과학기술원(한국)(4건)(33%), Transparency Life Science LLC(미국)(2건)(17%), SOLUTIA INC(미국)(2건)(17%), CIPHEROME Inc(미국)(2건)(17%), Conformia Software Inc(미국)(2건)(16%)으로 조사됨
- 주요 출원인 분석 결과, 상위 다 출원인 중 미국의 Transparency Life Science LLC, SOLUTIA INC, Conformia Software Inc사는 의약품 제조 및 개발에 관한 기술을 보유하고 있으며, 국내 출원인인 한국과학기술원은 약물 재창출 후보 예측에 대한 출원활동이 활발한 것으로 분석됨



<그림 40> 다 출원인 기업현황 및 점유율

<표 23> 대상기술의 상위 출원인 동향

출원인	KR	JP	US	EP	총합계
한국과학기술원	4				4
Transparency Life Science LLC			2		2
SOLUTIONIA INC			2		2
Cipherome Inc	2				2
Conformia Software Inc			2		2

#### 다. 기술 개발 동향 분석

##### (1) 주요특허 리스트

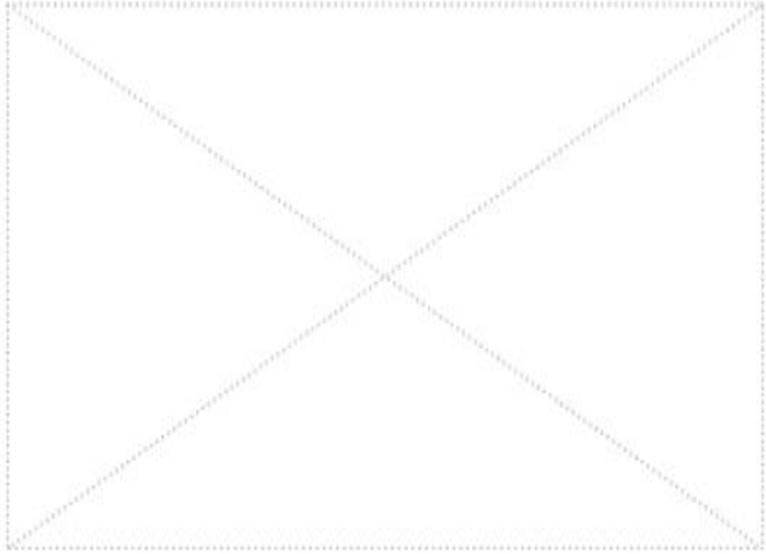
- 인공지능을 활용한 신약 개발 기술 중, 등록 특허 5건을 선별하여 심층분석을 진행함

순번	국가	발명의 명칭	출원번호 (출원일)	출원인	권리 상태
1	K R	약물 간의 상호 작용 예측 방법	10-2017- 0091627 (2017.07.1 9)	재단법인 전통천연 물기반 유전자동의 보감 사업단(한국 과학기술원)	등록
2		인체 대사 물질과의 유사 도 기반 약물 재창출 후보 예측 방법 및 그 시스템	10-2017- 0079165 (2017.06.2 2)	한국과학기술원	심사 중
3		생물학적 네트워크를 이용 한 신약 재창출 후보군 예 측 방법 및 장치	10-2016- 0073969 (2016.06.1 4)	재단법인 전통천연 물기반 유전자동의 보감 사업단(한국 과학기술원)	등록
4		약물 가상 탐색 방법과 집 중 탐색 라이브러리 구축 방법 및 이를 위한 시스템	10-2014- 0167253 (2014.11.2 7)	이화여자대학교 산학협력단	등록
5		전자의무기록과 약물/질 환 네트워크 정보 기반의 신 약 재창출 후보 예측 방법	10-2013- 0077255 (2013.07.0 2)	아주대학교 산학협력단	등록

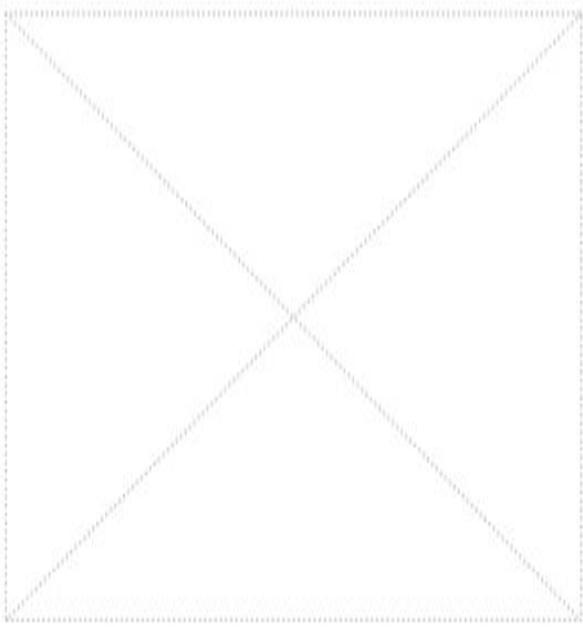
## (2) 주요특허 심층분석

### □ 주요특허 (1)

순번	1	출원번호 (출원일)	10-2017-0091 627 (2017.07.19)	우선권번호 (우선일)	-
공개번호 (공개일)	-	등록번호 (등록일)	10-1837712 (2018.03.06)	권리상대	등록
출원인	재단법인 전통천연물기반 유전자동의보감 사업단   한국과학기술원				
발명의 명칭	약물 간의 상호 작용 예측 방법				
개 요					
기술요약	<p>본 발명은 컴퓨터를 이용한 시스템에 구비된 복수의 수단을 이용해 시스템 상에서 약물 간의 상호 작용을 예측하는 방법으로서, 제1 수단이, 복수의 표적 간의 연결 관계를 정의한 분자 네트워크 상에 약물을 작용시키면, 네트워크 신호 전파 알고리즘에 의해 약물의 효과가 복수의 표적 간에 전파되어 각 표적에 대한 약물의 효과 값이 산출되는 제1 단계와, 제2 수단이, 복수의 표현형을 각각 유발하는 복수의 표적에 대한 약물의 효과 값을 합하여, 복수의 표현형에 대한 제1 약물 효능 전파 값을 산출하는 제2 단계와, 제3 수단이, 제1 약물 효능 전파 값을 분자 네트워크의 특성을 기초로 정규화하여, 복수의 표현형 중 약물이 발현되는 표현형을 확인할 수 있는 지표인 제1 약물 표현형 벡터를 추론하는 제3 단계를 포함하는 <b>약물 간의 상호 작용 예측 방법</b>을 제공한다.</p> <p>또한, 제4 수단이, 검증 정보를 기초로 복수의 표현형 중 약물이 발현되는 표현형을 확인할 수 있는 지표인 제2 약물 표현형 벡터를 생성하는 제4 단계와, 제5 수단이 제1 약물 표현형 벡터 및 제2 약물 표현형 벡터를 조합하여 제3 약물 표현형 벡터를 생성하는 제5 단계와, 제6 수단이 복수의 표현형 간 연결 관계를 정의한 표현형 네트워크 상에서 제3 약물 표현형 벡터를 복수의 표현형에 대응시키는 제6 단계와, 제7 수단이, 질의 약물 쌍의 제3 약물 표현형 벡터와, 표현형 네트워크 상에서 복수의 표현형 간 연결 차수를 기초로 질의 약물 쌍의 표현형 별 상호 작용 값을 산출하는 제7 단계와, 제8 수단이 표현형 별 상호 작용 값을 합산하여 약물 상호 작용 가능 값을 산출하는 제8 단계와 제9 수단이 약물 상호 작용 가능 값을 표준화하여 약물 상호 작용 값을 산출하는 제9 단계를 더 포함하는 약물 간의 상호 작용 예측 방법을 제공한다.</p>				
패밀리 특허					
없 음					

대표도	
대표 청구항	
【청구항 1】	
<ul style="list-style-type: none"> <li>· 컴퓨터를 이용한 시스템에 구비된 복수의 수단을 이용해 상기 시스템 상에서 약물 간의 상호 작용을 예측하는 방법으로서,</li> <li>· 제1 수단이, 복수의 표적 간의 연결 관계를 정의한 분자 네트워크 상에 상기 약물을 작용시키면, 네트워크 신호 전파 알고리즘에 의해 상기 약물의 효과가 상기 복수의 표적 간에 전파되어 상기 각 표적에 대한 상기 약물의 효과 값이 산출되는 제1 단계;</li> <li>· 제2 수단이, 복수의 표현형을 각각 유발하는 상기 복수의 표적에 대한 상기 약물의 효과 값을 합하여, 상기 복수의 표현형에 대한 제1 약물 효능 전파 값을 산출하는 제2 단계; 및</li> <li>· 제3 수단이, 상기 제1 약물 효능 전파 값을 상기 분자 네트워크의 특성을 기초로 정규화하여, 상기 복수의 표현형 중 상기 약물이 발현되는 표현형을 확인할 수 있는 지표인 제1 약물 표현형 벡터를 추론하는 제3 단계를 포함하고,</li> <li>· 상기 약물 간의 상호 작용 예측 방법은 상기 제1 약물 표현형 벡터를 기초로 상기 약물 간의 상호 작용을 예측하는</li> <li>· 약물 간의 상호 작용 예측 방법.</li> </ul>	
검토 의견	
<ul style="list-style-type: none"> <li>· 본 발명은 기존 검증된 정보를 통해 알려진 약물 표현형 벡터와, 추론을 통해 찾은 약물 표현형 벡터를 조합하여 개별 약물의 효능을 예측하고, 이를 기반으로 약물 간의 상호 작용을 예측함으로써, 보다 정확한 약물 간의 상호 작용을 예측할 수 있는 약물 간의 상호 작용 예측 방법을 제공함</li> </ul>	

□ 주요특허 (2)

순번	2	출원번호 (출원일)	10-2017-007916 5 (2017.06.22)	우선권번호 (우선일)	-
공개번호 (공개일)	10-2019-0 000166 (201 9.01.02)	등록번호 (등록일)	-	권리상태	심사중
출원인	한국과학기술원				
발명의 명칭	인체 대사 물질과의 유사도 기반 약물 재창출 후보 예측 방법 및 그 시스템				
개 요					
기술요약	<p><u>약물 재창출 후보 예측 방법 및 그 시스템</u>이 제공된다. 이 방법은 적어도 하나의 프로세서에 의해 동작하는 시스템이 약물 재창출 후보를 예측하는 방법으로서, 질병 발생과 연관된 질병 연관 단백질 정보, 단백질과 화합물의 상호작용 정보 및 인체 대사물질 정보를 수집하는 단계, 수집한 정보에 기초하여 질병 연관 단백질과 인체 대사물질 간의 상호작용 관계 정보를 추출하는 단계, 화학적 구조의 유사성에 따라 이미 알려진 약물 별로 각각의 약물과 화학적 구조가 유사한 인체 대사물질을 매칭하는 단계, 상기 약물 별로 매칭된 인체 대사물질을 상기 상호작용 관계 정보에 기초하여 상기 질병 연관 단백질로 치환하는 단계, 그리고 상기 화학적 구조의 유사성이 임계 조건을 충족하는 약물 및 질병 연관 단백질을 추출하여, 상기 추출한 약물을 상기 추출한 단백질의 연관 질병의 약물 재창출 후보로 예측하는 단계를 포함한다.</p>				
패밀리 특허					
없 음					
대표도					

**대표청구항**

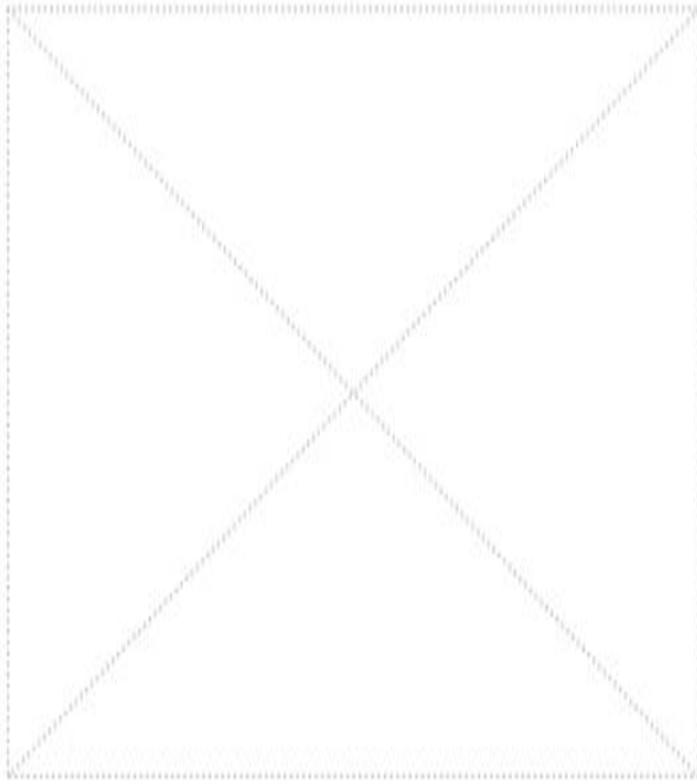
**【청구항 1】**

- 적어도 하나의 프로세서에 의해 동작하는 시스템이 약물 재창출 후보를 예측하는 방법으로서,
- 질병 발생과 연관된 질병 연관 단백질 정보, 단백질과 화합물의 상호작용 정보 및 인체 대사물질 정보를 수집하는 단계,
- 수집한 정보에 기초하여 질병 연관 단백질과 인체 대사물질 간의 상호작용 관계 정보를 추출하는 단계,
- 화학적 구조의 유사성에 따라 이미 알려진 약물 별로 각각의 약물과 화학적 구조가 유사한 인체 대사물질을 매칭하는 단계,
- 상기 약물 별로 매칭된 인체 대사물질을 상기 상호작용 관계 정보에 기초하여 상기 질병 연관 단백질로 치환하는 단계, 그리고
- 상기 화학적 구조의 유사성이 임계 조건을 충족하는 약물 및 질병 연관 단백질을 추출하여, 상기 추출한 약물을 상기 추출한 단백질의 연관 질병의 약물 재창출 후보로 예측하는 단계를 포함하는 약물 재창출 후보 예측 방법.

**검토 의견**

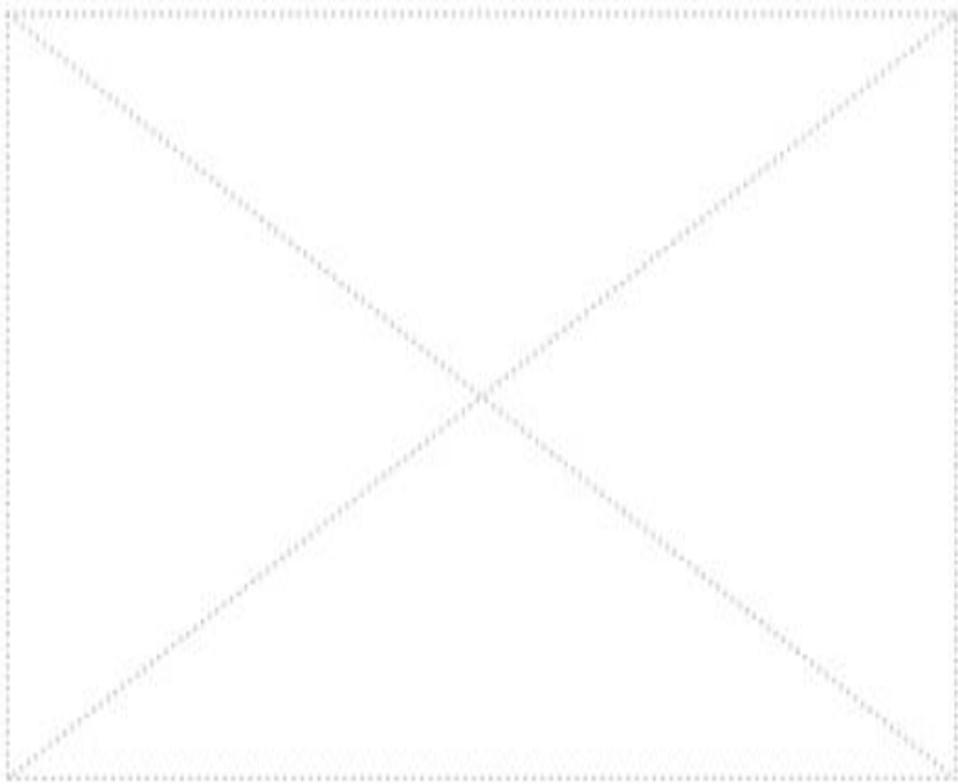
- 본 발명은 질병 연관 인체 대사 물질과 이미 알려진 약물 간의 화학적 구조 유사성을 기반으로, 질병 연관 생체 표적 단백질과 약물의 상호작용 관계를 추론함으로써, 기존 약물 중에서 약물 재창출이 될 수 있는 약물 후보를 예측할 수 있음

□ 주요특허 (3)

순번	3	출원번호 (출원일)	10-2016-00739 69 (2016.06.14)	우선권번호 (우선일)	-
공개번호 (공개일)	10-2017-0 141317 (201 7.12.26)	등록번호 (등록일)	10-1878924 (2018.07.10)	권리상태	등록
출원인	재단법인 전통천연물기반 유전자동의보감 사업단   한국과학기술원				
발명의 명칭	생물학적 네트워크를 이용한 신약 재창출 후보군 예측 방법 및 장치				
<b>개 요</b>					
기술요약	<p>본 발명의 일 실시예에 따른 신약 재창출 방법은 복수 개의 유전자 정보를 포함하는 생물학적 네트워크를 이용한 신약 재창출 방법에 관한 것으로서, 상기 생물학적 네트워크에 검증하고자 하는 약물의 정보를 입력하는 단계; 상기 생물학적 네트워크 상에서 상기 약물의 작용 유전자 및 목표 질병과 관련된 질병 유전자 사이의 최단 경로를 추출하는 단계; 공개된 유전체 데이터를 이용하여 상기 작용 유전자의 질병에서의 변화 상태를 측정하는 단계; 상기 작용 유전자, 상기 최단 경로상에 배열된 적어도 하나의 중간 유전자 및 상기 질병 유전자의 상기 약물의 전달에 따른 활성/억제 여부를 파악하는 단계; 및 상기 최단 경로 및 상기 활성/억제 여부에 기초하여 상기 약물 및 상기 목표 질병 유전자와의 상관 관계를 수치화하여 스코어를 산출하는 단계를 포함한다.</p>				
<b>패밀리 특허</b>					
없음					
대표도					

대표청구항
<b>【청구항 1】</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>· 복수 개의 유전자 정보를 포함하는 방향성 있는 생물학적 네트워크를 이용한 신약 재창출 후보군 예측 방법에 있어서,</li> <li>· (a) 입력부가 상기 생물학적 네트워크에 검증하고자 하는 약물의 정보 및 상기 약물의 작용 유전자를 입력받는 단계;</li> <li>· (b-1) 최단 경로 추출부가 저장부에 저장된 상기 생물학적 네트워크 상에서 상기 약물의 작용 유전자 및 목표 질병과 관련된 질병 유전자 사이를 연결할 수 있는 경로를 추출하는 단계;</li> <li>· (b-2) 상기 최단 경로 추출부가 상기 경로 상에 배열된 적어도 하나의 중간 유전자의 개수에 기초하여 상기 작용 유전자 및 상기 질병 유전자 사이의 최단 경로를 추출하는 단계;</li> <li>· (c) 질병 유전자 상태 추출부가 공개된 유전체 데이터를 이용하여 상기 질병 유전자의 질병에서의 변화 상태를 측정하는 단계;</li> <li>· (d) 활성/억제 판단부가 상기 작용 유전자, 상기 최단 경로상에 배열된 적어도 하나의 중간 유전자 및 상기 질병 유전자의 상기 약물의 전달에 따른 활성/억제 여부를 파악하는 단계; 및</li> <li>· (e) 산출부가 상기 최단 경로 상에 배열된 중간 유전자의 개수와, 상기 작용 유전자, 중간 유전자 및 질병 유전자 중 상기 약물의 전달에 따라 억제 반응이 이루어지는 유전자의 개수에 기초하여 상기 약물 및 상기 질병 유전자와의 관계를 나타내는 스코어를 산출하는 단계; 및</li> <li>· (f) 상기 산출부가 상기 산출된 스코어 중 가장 높은 스코어를 갖는 약물을 관련 질병의 신약 후보로 선정하는 단계를 포함하는 생물학적 네트워크를 이용한 신약 재창출 후보군 예측 방법.</li> </ul>
<b>검토 의견</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>· 본 발명은 약물로부터 질병까지의 네트워크 상의 단순 연결성 뿐만 아니라 방향성 및 활성/억제 작용을 모두 고려하여 약물의 해당 질병에 대한 재창출 후보를 예측할 수 있음</li> </ul>

□ 주요특허 (4)

순번	4	출원번호 (출원일)	10-2014-0167253 (2014.11.27)	우선권번호 (우선일)	-
공개번호 (공개일)	10-2016-0 064291 (2016.06.08)	등록번호 (등록일)	10-1684742 (2016.12.02)	권리상태	등록
출원인	이화여자대학교 산학협력단				
발명의 명칭	약물 가상 탐색 방법과 집중 탐색 라이브러리 구축 방법 및 이를 위한 시스템				
개 요					
기술요약	본 발명은 타겟 단백질이나 화합물의 구조 혹은 구조적 특성 정보를 사용하지 않고, 다수의 약물 스크리닝 데이터로부터 추출한 다양한 생물학적 활성에 기반한, <b>예측 정확성이 높은 약물 가상 탐색 방법</b> , 집중 탐색 라이브러리 구축 방법 및 이를 위한 시스템에 관한 것이다.				
패밀리 특허					
					
대표도					

## 대표 청구항

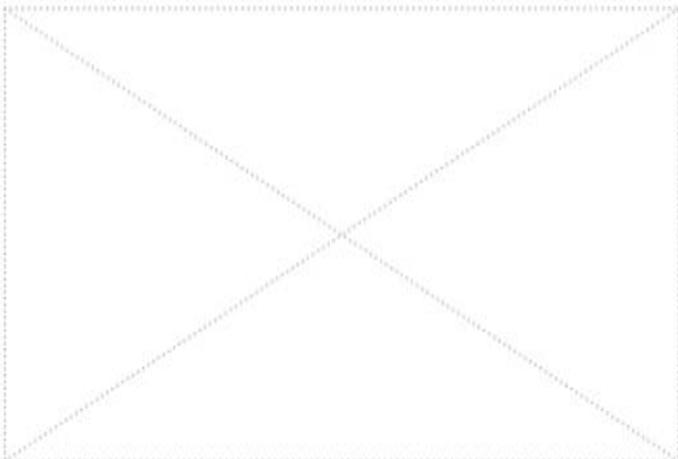
### 【청구항 1】

- (a) 식별 모듈이, 입력 모듈을 통해 입력된 화합물 세트에서 화합물을 지칭하는 부분을 추출하여 식별자(ID; identifier)\*를 식별하는 단계;
- (b) 바이오어세이 선택 모듈이 바이오어세이(bioassay) 데이터베이스에서 임의의 바이오어세이 데이터\*\*를 추출하는 단계;
- (c) 상기 바이오어세이 선택 모듈이, 화합물마다 미리 설정되어 있는 활성도 점수(hit compound score)를 기준으로, 상기 추출된 바이오어세이 데이터에 포함된 다수의 화합물 세트들 각각의 활성 여부를 확인하여 오즈(odds)\*\*\*를 연산하는 단계;
- (d) 상기 바이오어세이 선택 모듈이, 상기 (c) 단계에서 연산된 오즈가 미리 설정된 기준 이상인 경우 상기 바이오어세이 데이터를 유의한 검정실험(hit enrichment bioassay)의 데이터로서 선택하는 단계;
- (e) 농축\*\*\*\*점수 연산 모듈이, 상기 선택된 바이오어세이 데이터에 포함된 다수의 화합물 세트들 중에 상기 식별자가 포함된 화합물 세트들을 선택하는 단계;
- (f) 상기 농축점수 연산 모듈이, 상기 (e) 단계에서 선택된 화합물 세트들과 상기 (c) 단계에서 확인된 활성 여부를 이용하여 각각의 농축점수(ES; enrichment score)를 연산하는 단계; 및
- (g) 출력 모듈이, 상기 (f) 단계에서 연산된 농축점수(ES)들의 합이 미리 설정된 기준값 이상인 경우, 상기 바이오어세이 데이터를 가상 유사 화합물을 포함하는 데이터로서 출력하는 단계를 포함

### 검토 의견

- 종래 기술은 구조 기반 신약 탐색 방법으로, 해당 수용체 구조가 필요로 하였으나, 본 발명은 다수의 약물 스크리닝 데이터로부터 추출한 다양한 생물학적 활성을 기반으로 가상 탐색을 수행함으로써, 예측의 정확성이 높을 뿐만 아니라, 기존에 활성이 알려진 화합물과는 전혀 다른 골격의 화합물을 탐색할 수 있는 약물 가상 탐색 방법을 제공함

□ 주요특허 (5)

순번	5	출원번호 (출원일)	10-2013-00772 55 (2013.07.02)	우선권번호 (우선일)	-
공개번호 (공개일)	-	등록번호 (등록일)	10-1450784 (2014.10.07)	권리상태	등록
출원인	아주대학교산학협력단				
발명의 명칭	전자의무기록과 약물/질환 네트워크 정보 기반의 신약 재창출 후보 예측 방법				
<b>개 요</b>					
기술요약	<p>본 발명은 전자의무기록과 약물/질환 네트워크 정보 기반의 신약 재창출 후보 예측 방법에 관한 것으로, 보다 상세하게는 컴퓨터로 관독 가능한 기록 매체를 포함하는 신약 재창출 후보 예측 시스템을 이용하여 <u>전자의무기록과 약물/질환 네트워크 정보 기반의 신약 재창출 후보를 예측하는 방법</u>에 있어서, a) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 약물 적응증 정보에 기초하여 약물-질환의 이분 네트워크를 구성하는 단계와; b) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 임상정보(EMR 또는 clinical physiomic)와 유전체 정보(genomic signatures)에 기초하여 약물 및 질환의 검체 정보를 추출하는 단계; c) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 약물-약물/질환-질환 유사도 매트릭스를 임상정보에 따라 구성하는 단계; d) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 유사도 매트릭스에 따라 임상 정보 기반의 약물-질환 엣지(edge) 점수(<math>P_c</math>)를 계산하는 단계; e) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 임상정보(EMR 또는 clinical physiomic)와 유전체 정보(genomic signatures)에 기초하여 약물 및 질환의 유전자 연관 정보를 추출하는 단계; f) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 약물-약물/질환-질환 유사도 매트릭스를 유전체 정보에 따라 구성하는 단계; g) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 유사도 매트릭스에 따라 유전체 정보 기반의 약물-질환 엣지(edge) 점수(<math>P_g</math>)를 계산하는 단계; h) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 상기 <math>P_c</math>와 <math>P_g</math>를 사용하여 엣지(edge)의 최종 예측 점수 <math>f(e_{ij})</math>를 계산하는 단계; 및 i) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 상기 <math>f(e_{ij})</math>를 기준값(cut-off)에 따라 참/거짓(True/False) 라벨값을 결정하는 단계를 포함한다.</p>				
<b>패밀리 특허</b>					
없 음					
대표도					

## 주요 청구항

### 【청구항 1】

- 컴퓨터로 판독 가능한 기록 매체를 포함하는 신약 재창출 후보 예측 시스템을 이용하여 전자의무기록과 약물/질환 네트워크 정보 기반의 신약 재창출 후보를 예측하는 방법에 있어서,
- a) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 약물 적응증 정보에 기초하여 약물-질병의 이분 네트워크를 구성하는 단계와;
- b) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 임상정보(EMR 또는 clinical physiomic)와 유전체 정보(genomic signatures)에 기초하여 약물 및 질환의 검체 정보를 추출하는 단계;
- c) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 약물-약물/질병-질병 유사도 매트릭스를 임상정보에 따라 구성하는 단계;
- d) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 유사도 매트릭스에 따라 임상 정보 기반의 약물-질환 엣지(edge) 점수( $P_c$ )를 계산하는 단계;
- e) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 임상정보(EMR 또는 clinical physiomic)와 유전체 정보(genomic signatures)에 기초하여 약물 및 질환의 유전자 연관 정보를 추출하는 단계;
- f) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 약물-약물/질병-질병 유사도 매트릭스를 유전체 정보에 따라 구성하는 단계;
- g) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 유사도 매트릭스에 따라 유전체 정보 기반의 약물-질환 엣지(edge) 점수( $P_g$ )를 계산하는 단계;
- h) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 상기  $P_c$ 와  $P_g$ 를 사용하여 엣지(edge)의 최종 예측 점수  $f(e_{ij})$ 를 계산하는 단계; 및
- i) 상기 신약 재창출 예측 시스템이 상기  $f(e_{ij})$ 를 기준값(cut-off)에 따라 참/거짓(True/False) 라벨값을 결정하는 단계를 포함하는 전자의무기록과 약물/질환 네트워크 정보 기반의 신약 재창출 후보 예측 방법.

### 검토 의견

- 본 발명은 대규모 EMR(의료정보시스템) 데이터에 포함된 환자의 검체 수치와 공개되어 있는 약물/질환 관련 다양한 유전체 정보를 활용하여, 시판 약물의 적응증\* 정보를 약물-질환의 이분 그래프로 구성하고, 다양한 임상 및 오믹스\*\* 유전체 정보를 활용하여 질환-질환 및 약물-약물의 유사도 측정을 통하여 약물의 신규 적응증을 예측함으로써, 신약 재창출 후보 예측이 가능함

\* 적응증 : 어떠한 약제나 수술 따위에 의하여 치료 효과가 기대되는 병이나 증상

\*\* 오믹스 : 개별 유전자, 전사물, 단백질, 대사물 연구에 대비되는 총체적인 개념의 데이터 세트를 바탕으로 하는 생물학 분야

## 라. 분석 소결

### □ 정량분석(특허기술동향-통계관점 분석)

- 본 기술은 2010년부터 기술 혁신의 주체(출원인)와 혁신의 성과(출원 건수)가 급격하게 성장하는 것으로 판단됨
- 연도별 특허 출원현황 분석결과, 인공지능을 활용한 신약개발 관련 기술은 미국에서 가장 먼저 이루어진 것으로 분석됨, 이후 유럽, 한국, 일본 순으로 출원활동이 시작되고 있으며, 등락을 반복하다가 최근에는 꾸준한 활동을 보이고 있음
- 국가별 점유율을 살펴보면 미국의 점유율이 51%로 가장 많고, 그 뒤로 한국 32%, 일본 12%, 유럽이 5%가 점유하는 것으로 분석됨
- 주요 출원인 분석 결과, 인공지능을 활용한 신약개발 관련 기술은 미국기업에서 많은 연구개발하고 있는 것으로 나타남. 또한, 대부분의 다 출원인들은 미국, 한국에서 특허 출원을 하고 있음

### □ 기술 개발 동향 분석

- 국내에서 인공지능을 활용한 신약개발 기술은, 주로 대학과 연구원 위주로 기술개발이 이루어지고 있는 것으로 조사됨
- 기술 개발 동향 분석 결과, 대부분 빅데이터 분석을 통해 신규 효능 또는 부작용을 예측함으로써 신약 개발이 이루어지는 것으로 조사됨

## 제6절 시사점

### <동향 분석>

- 신약개발 R&D 효율화를 위한 혁신기술로 AI 기술에 주목, AI를 활용한 신약개발 신생업체 및 신산업 등장
  - 최근 2~3년간 글로벌 제약사를 대상으로 AI를 활용한 신약개발 지원서비스를 제공하는 '신약개발 AI' 신생업체 대거 등장
  - AI업체는 주로 자체 DB 및 고객사 DB 등을 분석하여 후보물질 및 기존 약물의 새로운 적응증을 발굴(drug repositioning)하여 고객사에 제안하는 형태로 운영
  - 활용하는 AI기술에 따라 자연어처리 업체(IBM 왓슨, BenevolentAI) 및 구조기반 가상 스크리닝 업체(Atomwise, twoXAR 등)로 분류
- 글로벌 제약사(BigPharma)는 신약개발 AI업체와의 적극적 협력을 통해 후보물질 초기 탐색과정에 AI기술을 적극 도입
  - 주로 신약개발에 드는 R&D 비용·시간 단축 및 오픈 이노베이션의 일환으로 추진
  - 특히, 자사 임상 데이터 및 임상 후보물질을 AI업체의 딥러닝 알고리즘을 분석하여 새로운 적응증을 발굴하는 '신약 재창출' 모델이 제약사와 AI업체간 주요 협력분야
    - 새로운 적응증 발굴 협력사례: 사노피 - Recursion('16.4월), 테바 - IBM 왓슨('16.10월), 얀센 - BenevolentAI('16.11월), 다케다 - Recursion('17.10월)
- 산·학·연·관 협력 컨소시엄으로 일본 이화학연구소 주도 하에 IT업계와 바이오·제약업계, 학·연계 등이 참여하는 협력 컨소시엄인 LINC 구성

- 문부과학성과 후생노동성은 '17년 예산으로 25억엔을 배정하고 3년에 걸쳐 100억엔을 투자할 예정임
- 후보물질 탐색부터 신약 시판 후까지 신약개발 전 단계에 걸친 29여개 AI 표준 모델의 구축 및 실용화를 3년 내에 실현
- 일본과 같이 산·학·연·관 협력 컨소시엄 구성을 통해 '한국형 신약개발 AI 프로그램' 개발 지원 필요
  - 국내 개별기업 단위의 AI업체와의 계약은 현실적으로 어려우므로, 정부 R&D 예산을 투입하여 공용 '신약개발 AI 표준 모델'을 개발하고 국내 제약사가 자유롭게 활용할 수 있도록 공개
    - IBM 왓슨 WDD 라이선스 구입에 1억~10억원이 필요하며(2년 사용), 후보물질을 직접 제안하는 타 AI업체와의 연구협력은 더 큰 비용 발생
  - 신약개발 AI는 바이오·제약분야 외에도 슈퍼컴퓨팅, AI 알고리즘 프로그래밍 등 다학제 분야 전문성을 필요로 하여, 다양한 출연연 및 대학, 연구기관의 참여 필요
  - 제약사의 적극적인 참여와 내부 데이터 공여를 유인하는 인센티브 체계를 마련하여 분석·예측력이 뛰어난 AI 개발 추진

#### <과기정통부 사업모델안>

- (유형 구분) 미국, 일본, 우리나라 등에서 진행 중인 신약개발 인공지능 개발 사업 모델을 정리하면 크게 3가지 유형으로 구분 할 수 있음
  - ① 개별 기업주도형 모델 : 다국적 제약기업이 인공지능에 특화된 벤처기업과 계약 또는 자회사를 통한 연구
    - 미국/EU의 민간 중심 다국적기업 협업 모델 (Merck와 AI기업 Atomwise와 협업 개발 등)

- ② 정보공급자 주도형 : 공공연구소 등 정보를 보유한 기관 중심으로 보유 정보의 활용을 활성화할 목적으로 AI플랫폼 개발 (Data Push)
- 과기정통부 선도프로젝트 (2018-2019))로 화학연 보유 정보 중심 AI플랫폼 개발 등 사례
- ③ 수요기반형 : 제약바이오기업, IT기업, 연구기관 컨소시움으로 제약바이오기업의 신약개발 필요를 우선으로 하는 AI 모델 우선 개발 (Pharmaceutical Pull)
- 일본 LINC 모델: 기업이 제안한 수요 아이템 중 우선적으로 29개 AI 모델 개발 (일본 후생노동성, 문부과학성) 등 사례

<표 24> 신약개발 인공지능 개발전략 사업 모델 유형

유형	개별기업 주도형	정보공급자 주도형	수요기반형
내용	<p>다국적 제약기업이 인공지능에 특화된 벤처기업과 계약 또는 자회사를 통한 연구</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- AI기업이 업종별로 특화</li> <li>- 제약과 IT 협업/교류 경험 풍부</li> </ul>	<p>공공연구소 보유 정보 활용 목적으로 AI플랫폼 개발 (Data Push)</p>	<p>제약바이오기업, IT기업, 연구기관 컨소시움으로 제약바이오기업의 신약개발 필요를 우선으로 하는 AI 모델 우선 개발 (Pharmaceutical Pull)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 제약바이오: 테마 제안 및 연구 리드</li> <li>- 학계: 제약회사와 IT 기술/업체 매칭</li> <li>- IT기업: 솔루션 개발 담당</li> </ul>
예시	<p>미국/EU의 민간 중심 다국적기업 협업 모델 (Merck와 AI기업 Atomwise와 협업 개발 등)</p>	<p>과기정통부 선도프로젝트 (2018-2019)) * 화학연 보유 정보 중심 AI플랫폼 개발</p>	<p>일본 LINC 모델: 기업이 제안한 수요 아이템 중 우선적으로 29개 AI 모델 개발 (일본 후생노동성, 문부과학성)</p>
Input (투입 정보)	<p>다국적 제약기업, AI 벤처기업 보유 정보 등</p>	<p>공공기관 보유 정보 중심</p>	<p>기업보유정보, 컨소시움 참여기관 보유 정보, open data 등 활용</p>

Output (결과물 활용)	주도한 다국적 제약기업의 독점적 활용	다수 연구자에게 개방	컨소시엄 참여기업 우선 활용, 추후 비컨소시엄기관으로 확산
장점	거대 R&D 투자금과 빅파마들의 많은 데이터들이 활용되기 때문에 의뢰자(다국적 제약사)에 최적화 되어 결과를 얻을 수 있음	접근이 쉽고 경제적임	수요자 기반 컨소시엄으로 결과물이 빠른 시일내에 도출될 수 있음
단점	소요 비용이 큼 정보와 확산은 기대할 수 없음	data, 정보와 알고리즘, 결과물들의 공개로 인하여 수요자 (산업계등)에게 매력적이지 않을 수 있음	컨소시엄에 참여하는 기업들이 private data를 제한하여 제공할 수 있음

□ (모델 제안) 신약개발 과정에서 실제 적용가능한 AI 표준 모델 개발 및 확산을 통해 국내 신약개발의 효율과 생산성 제고

- 국내 기업의 수요를 바탕으로 한 수요기반형 사업모델로 기존 사업과 차별화
- 국내 제약바이오기업의 수요가 높은 분야에서 실제 활용 가능한 인공지능 개발 중점
  - 광범위한 수요조사, 기업 대상 설문조사 및 심포지움, 자문회의 등을 통한 산업계 인식 제고를 통해 산업계의 수요가 높은 분야를 중점적으로 발굴
- 실제 신약개발과정의 효율성이 향상될 수 있는 인공지능 개발 목표

- 개발된 인공지능이 기존 방식에 비해서 신약개발과정의 시간, 비용, 성공률을 어느 정도 향상시키는지(KSF)에 대한 연구 포함
  - 국내 제약회사, 임상병원 등 신약개발의 주체들의 다양한 수요를 반영하기 위해서 각 회사/기관의 주력 분야 및 역량 수준에 적합한 맞춤형 기술 개발을 추구하되 활용을 극대화하기 위해 표준 모델을 지향
- 기존 사업 및 타부처 추진 사업과의 차별화
- 기존 전통적인 신약개발 사업과 차별화된 인공지능 개발을 활용한 신약개발과 신약개발에 필요한 인공지능 기술 개발 사업으로 차별화된 방향 설정
  - 인공지능 기술과 신약개발 기술의 융합을 위해 제약회사, 인공지능 전문회사의 효율적인 역할 분담 강조
- 데이터 확보 및 기술개발 실현 가능성
- 단기적으로 기술개발이 실현될 수 있도록 활용 가능한 데이터 확보 및 연계에 집중
  - 데이터 연계 활용을 지원하기 위한 지원 기능 마련

## 제3장 사업설계를 위한 조사분석

### 제1절 기술수요조사 (사전연구자료<sup>1)</sup> 활용)

#### □ 제약 기업 관계자 설문 조사의 필요성과 수행 방법

- 인공지능 기술의 가장 큰 수요자는 실제로 신약을 제품화하는 제약기업이므로 신약개발 현장에서 인식하고 있는 인공지능 기술의 중요성과 필요성을 파악할 필요가 있음
  - 향후 수요자 중심의 신약개발 인공지능 기술개발 사업이 추진될 경우 국내 제약기업의 인공지능 기술 수요가 사업 방향성 결정에 중요한 의사 결정 지표가 될 것임
  - 다국적 제약회사와 선진국과는 다른 국내의 특징적인 수요를 파악하면 한국형 인공지능 신약개발 기술 개발에 필요한 차별적인 요소를 발굴할 수 있음
- 국내 제약회사 연구개발 실무자를 대상으로 한 수요조사를 실시
  - 인공지능 신약개발 심포지엄(2018년 3월 7일, 한국제약바이오협회) 개최 시 참석한 국내 제약기업의 연구개발 실무자들을 대상으로 현장에서 지면으로 설문조사를 수행하여 설문조사 응답률 제고
  - 총 144명 세미나 참석자 중 95명의 설문 응답을 받았으며, 66%의 응답률은 인공지능 신약개발에 대한 국내 기업의 높은 관심도를 반영함
  - 설문지의 구성은 응답자의 특성 4개 문항, 신약개발 인공지능 기술의 중요도-활용도(IPA, importance-performance analysis) 분석을 위한 17개 문항, 기술 활용과 의견 반영을 위한 2개 문항으로 구성됨
  - 각 문항에 대한 응답 결과는 Microsoft Excel의 분석 도구와 직접 작성한 파이썬(python) 스크립트를 이용하여 분석함

1) 한국형 신약개발 인공지능 개발사업 신규기획, 성균관대학교, 2018

<표 25> 인공지능 신약개발 설문지 설계

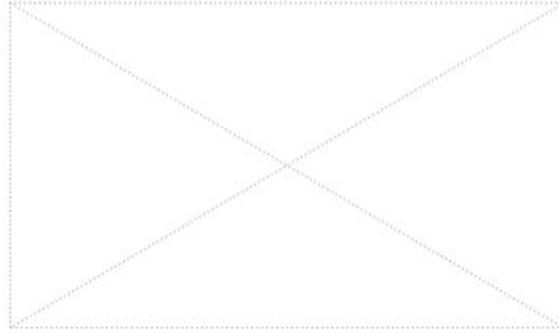
구분	문항 내용	세부 문항 수
응답자의 일반 특성	회의명(기관명), 직위, 근무기간	1
	전공 분야	1
	회사 종목	1
	기업 유형	1
신약개발 인공지능 기술의 중요도-활용도 분석	약물 디자인	1
	새로운 신약후보 창출	1
	신약후보물질 검증	1
	전임상 실험설계	1
	독성 예측	1
	전임상 실험수행	1
	임상시험 설계	1
	임상시험 피험자 모집	1
	임상시험 최적화	1
	계량 약리학	1
	스마트 제약공장	1
	인허가 의사결정	1
	스마트 약물감시	1
	기존약물을 다른 질환에 이용	1
	대규모 정보수집 및 종합화	1
	개발진행/중단 의사결정지원	1
기타	1	
기술활용과 의견반영*	인공지능 활용사항	1
	정부 및 공공기관 역할	1

\* 주관식 문항으로 구성

## □ 설문 조사 분석 결과

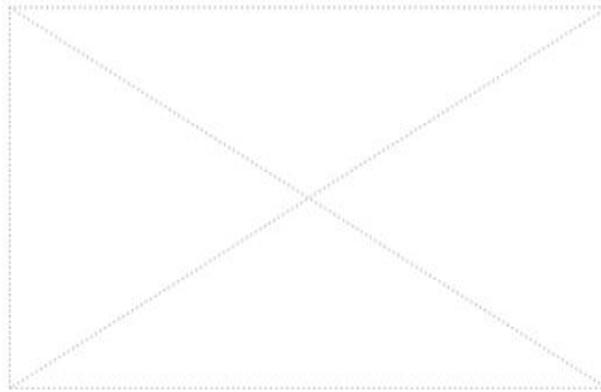
### ○ 응답자의 일반 특성 및 의견

- 응답자 중 5년 이하 근무자가 전체의 58%를 차지함
- 동일 기관(회사)에서 3인 이상 참석한 경우도 많음
- 실무 등 젊은 계층의 응답 의견이 주로 반영됨
- 나이와 경력을 고려한 기관 내 의사결정 계층의 의견반영 필요



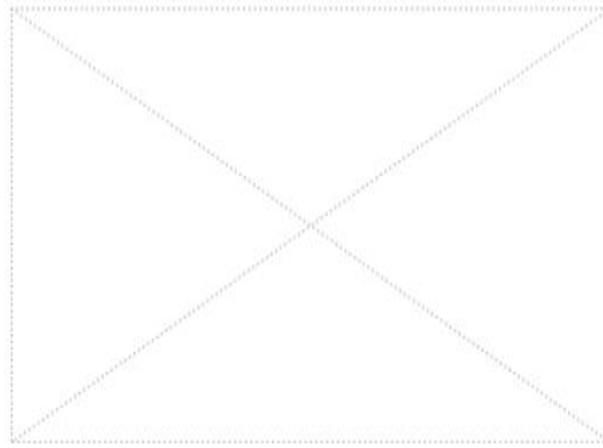
<그림 41> 응답자의 소속 기관 근무 기간

- 응답자의 전공분야는 의약학이 33%, 생명과학이 30%로 가장 높은 비율을 나타냄
- 인공지능과 기술 개발에 직접적인 관련이 있는 공학 분야의 추가적인 의견 반영 필요함



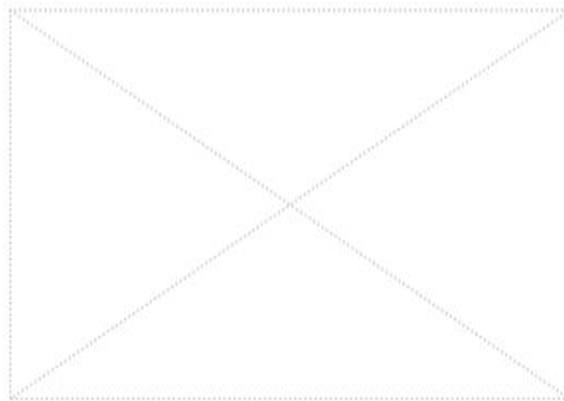
<그림 42> 응답자의 전공분야

- 응답자의 소속 기업은 제약기업과 벤처를 포함한 기업이 전체의 60%로 가장 높은 비중을 차지하였으며, 공공기관 및 정부 연구소가 14%, 대학이 11%의 비중을 나타냄
- 타기관이나 단체에 비하여 신약개발 인공지능 기술에 대하여 관련 기업의 관심도가 높음
- 차후 인공지능 관련 기술의 수요가 높을 것으로 예상되는 병원과 공공 기관에 대한 의견 반영이 필요함



<그림 43> 응답자의 소속기관 유형

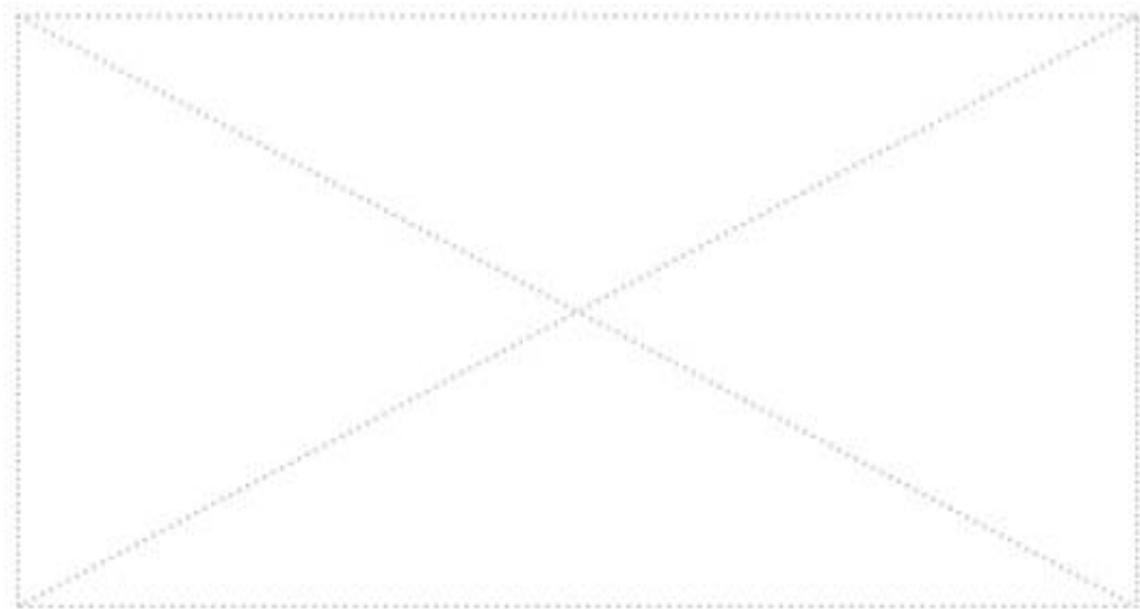
- 응답자의 소속기관 기업 유형은 대기업 25%, 중소기업 25%로 나타남
  - 신약개발 인공지능 기술 개발은 중견기업 이상으로 체계적인 시스템을 갖춘 기업에서 더 높은 관심도를 보였음
  - 벤처 등 소규모 기업에서 활용할 수 있는 인공지능 기술 개발과 지원을 통하여 신약개발 단계에서 인공지능 기술을 적극적으로 활용할 수 있는 저변을 확충할 필요가 있음



<그림 44> 응답자의 소속기관 기업유형

- 신약개발 인공지능 기술의 인식 정도 분석(중요도-활용도 분석)
  - 전체 7점 만점 기준으로 중요도는 평균 5.59이고, 활용도는 평균 4.39를 나타냄
  - 신약개발의 전 단계에서 인공지능의 중요도는 높은 것으로 인식하고 있음

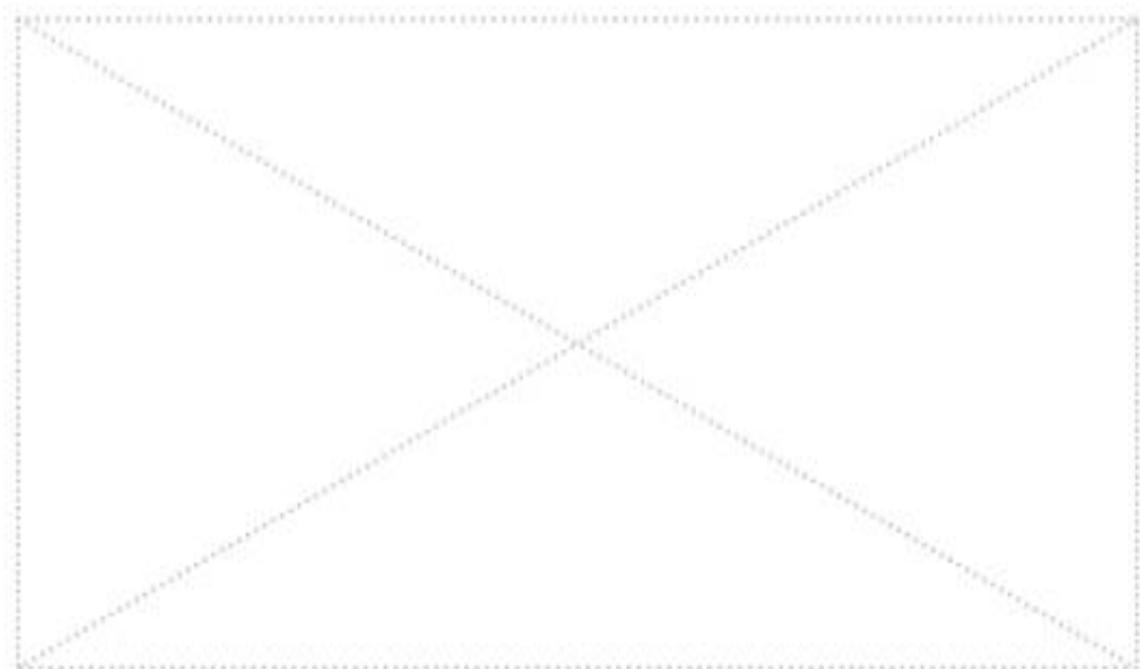
- 응답자들은 높은 중요도에 비하여 현재 인공지능의 활용도나 활용 여건은 상대적으로 낮은 것으로 판단하고 있음
- 평균에 비하여 상대적으로 낮은 중요도와 활용도를 보이는 분야는 응답자들이 해당 분야에 대한 정보나 인식 부족으로 기인한 것으로 보이며, 해당 분야의 인공지능 활용 기술 사례의 전파 등을 통한 활용 가능성을 충분히 인식할 경우 중요도가 상승할 것으로 전망됨



<그림 45> 신약개발 인공지능 기술의 중요도 및 활용도 인식 수준

- 영역별 중요도-활용도 분석결과 집중영역과 과잉영역은 없는 것으로 나타났으며, 7개의 유지영역과 10개의 저순위 영역이 존재함
  - 유지 영역 : 16(대규모 정보수집 및 종합화), 1(약물 디자인), 2(새로운 신약후보 창출), 3(신약후보물질 검증), 15(기존약물을 다른 질환에 이용), 5(독성 예측), 18(기타)
  - 저순위 영역 : 4(전임상 실험설계), 6(전임상 실험수행), 7(임상시험 설계), 8(임상시험 피험자 모집), 9(임상시험 최적화), 10(계량 약리학), 11(스마트 제약공장), 12(인허가 의사결정), 13(스마트 약물감시), 17(개발진행/중단 의사결정지원)

- 중요도와 활용도 평균을 고려하며 전반적으로 인공지능 활용에 대한 중요도는 높게 인식하고 있으나 상대적으로 활용도는 낮은 경향을 보임
- 각 유지영역과 저순위 영역도 중요도와 활용도의 평균에서 큰 차이를 보이지는 않음
- 후보 물질 발굴과 독성 평가의 신약개발 전단계와 임상시험, 제조, 인허가 등의 신약개발 후단계의 모든 분야에서 응답자들이 중요성을 높게 보고 있으며, 이에 대한 현재 활용도는 낮은 것으로 판단하고 있음
- 신약개발 전 주기를 포함하는 인공지능 기술 개발의 지원 방안이 필요함



**<그림 46> 신약개발 인공지능 기술 개발의 영역별  
중요도-활용도 분석 결과(IPA)**

- 신약개발 인공지능 기술 활용과 공공 지원에 대한 의견
  - 응답자의 소속 기관에서 인공지능 활용 신약개발을 위하여 수행하고 있거나 대비하고 있는 사항에 대한 물음에 대하여 대부분의 응답자가 관련 자료를 수집 중이거나 관망중이라고 응답함

- 일부 기업의 경우 자체 DB 구축과 알고리즘 연구를 수행하고 있으나 활용 데이터의 규모나 질적인 면에서 매우 제한적이라고 응답
- 신약개발 기업들이 자체적으로 인공지능 기술 개발과 적용에는 부담을 느끼고 있으나 효율이 입증된 알고리즘과 플랫폼은 적극적으로 활용할 의사가 있는 것으로 전망됨
- 인공지능 활용 신약개발을 위한 정부 및 공공기관의 역할에 대한 물음에 대하여 많은 응답자들이 공공데이터의 표준화에 대한 의견을 피력하였으며, 가이드라인 제공 등 관련 제도 개선 등에 대한 의견도 제시함
  - 인공지능 기술을 신약개발 현장에서 활용하기 위하여 극복해야 할 가장 큰 장벽으로 공공데이터의 정비와 통합이 제시되었으며, 이와 관련한 환자 데이터 활용을 위한 제도 정비도 필요한 사항으로 제시됨
  - 신약 개발에 인공 지능이 빠른 시간에 활용되기 위해서는 플랫폼 등의 기술 개발과 더불어 국가 주도의 활용 데이터의 정제와 표준화 작업이 필수적이며, 향후 성공적인 신약 개발 분야의 인공지능 기술개발 지원을 위하여 필수적으로 고려되어야 함

## □ 신약개발 인공지능 기술개발 수요조사

- 신약개발 인공지능 기술개발 수요 조사 개요
  - 신약개발 분야 인공지능 활용 및 기술개발에 대한 산·학·연·병원 전문가의 수요를 반영해 유망 제품 및 서비스 기술개발 수요를 발굴하고 신규 사업의 중점 과제와 지원 방안을 수립할 목적으로 정밀 수요 조사를 실시함
  - 신약개발 분야 인공지능 활용 및 기술개발 분야 분류이며, 그 외 관련된 기술 분야를 포함
  - 신약개발 분야 인공지능 활용 및 기술개발 R&D 사업에 관심이 있는 산, 학, 연, 병 전문가들에게 제안을 받음

- 수요조사 기간은 2018년 2월부터 3월까지 2차례 실시함  
(1차 2018.2.8(목) ~ 2018.2.28.(수) 18:00, 2차 2018.3.2(금) ~ 2018.3.14(수) 18:00)
- 신약개발 분야 전단계에서 총 44개의 제안 과제가 접수됨

<표 26> 제안된 기술개발 과제의 신약개발 주기별 구분

번호	기술개발 분야	제안과제명	소속
1	Design Drugs (약물 디자인)	국제 임상데이터와 데이터 마이닝을 이용한 polypharmacology 기반 약물 부작용 제어 및 다중 타깃 발굴을 통한 내성 극복 약물 개발	대학
		신약 개발 관련 정보 분석을 통한 효율적인 신약 타깃 발굴	제약회사
		딥러닝을 이용한 신약 표적 단백질 구조 예측법 개발	제약회사
		인공지능 & 빅(Big)데이터를 이용한 신약 후보 물질의 예측 및 기존약물의 새로운 기능 탐색	공공 연구소
		단백질 3D로부터 최적화된 약물을 설계하여 최적의 hit 화합물 조기도출	제약회사
		인공지능을 활용한 약효를 보이는 신규 타깃 발굴	제약회사
		인공지능을 이용한 신규 타깃에 대한 새로운 약물 설계 플랫폼 확립	제약회사
		신약연구초기단계인 후보물질도출 및 최적화 과정을 위한 AI플랫폼 개발 (FASTDISCOVERY)	제약회사
		세포사 예측 인공지능 기반 항암제 설계기술 개발	대학
2	Generate Novel Drug Candidate (새로운 신약 후보창출)	AI를 활용한 저분자 화합물 신약개발 다양한 모듈 개발 및 이를 이용한 신규 항암제 후보물질 도출	대학
		빅데이터와 인공지능을 활용한 신약후보물질 발굴 시스템 개발	IT기업
		새로운 제2형 당뇨병 치료제로서 LMPTP 저해제 개발(인공지능을 활용한 LMPTP 저해제의 hit 도출 및 최적화)	제약회사
		인공지능 기술을 활용한 biologics drug 개발 전주기 지원시스템 구축	대학
		비만 및 당뇨병 치료제의 혁신타깃 발굴을 위한 인공지능 플랫폼 개발	병원
		신약 개발 초기 단계에서 lead compound 발견을 위한 AI 활용	제약회사

3	Validate Drug Candidate (신약 후보물질 검증)	In silico 타깃 fishing과 de novo 약물 디자인 및 머신러닝 기반 약물 최적화 및 검증	대학
		빅데이터와 머신러닝을 이용한 ADME/Tox 예측 모델 구축과 약물 최적화 및 검증	대학
		AI를 활용한 질환 타깃 발굴과 신약 후보물질 검증 연구	제약회사
		인공지능과 3D holotomographic 현미경을 이용한 새로운 항생 물질 개발	병원
		A Large Scale Feature Engineering & Selection and Development of a Graph Database to Better Understand Compound-Compound, Compound-Target, and Compound-Disease Relationships	IT기업
4	Design Preclinical Experiments (전임상 실험설계)	전임상 bigdata 구축 및 AI알고리즘 개발	공공 연구소
5	Predict Toxicology (독성예측)	신약 후보물질 발굴에서의 독성예측을 통한 개발 효율성 증대	제약회사
		전임상 지원을 위한 딥러닝 기반 독성 예측 플랫폼 개발	공공 연구소
6	Run Preclinical Experiments (전임상 실험수행)	Biologics drug 신약개발을 위한 한국인에서의 생리학적 기반 약물동태/동력 모델 개발	대학
7	Design Clinical Trials (임상시험 설계)	인공지능 활용 임상시험 프로세스 적용 기술개발	제약회사
		인공지능 기반 Risk Based Monitoring 시스템을 통한 임상시험 효율 및 성공률 재고	IT기업
8	Recruit for Clinical Trials (임상시험 피험자 모집)	신약의 특성과 적합한 환자 발굴을 위한 AI프로세스와 enrollment 방법 개선	IT기업
		임상시험 피험자선택 인공지능 프로그램 개발	대학
		스마트 임상시험 지원 플랫폼으로 챗봇을 이용한 임상/생동성시험 대상자 모집(enrollment) 및 인공지능(AI) 개발 기반 구축	IT기업

9	Optimize Clinical Trials (임상시험 최적화)		
10	Pharmacometrics (계량 약리학)		
11	Smart Pharmaceutical Factory (스마트 제약공장)	의약품 불순물 위해성 평가를 위한 in silico 평가기준설정	대학
12	Real-World Evidence based Regulatory Decision (인허가 의사결정)		
13	AI based Pharmacovigilance (스마트 약물감시)	접수된 부작용 사례 빅데이터를 분석하여 기존 약물의 개선 방향 제시 및 틈새 신약에 대한 unmet needs 발굴	IT기업
		부작용보고, 건강보험자료, RFID 기록 및 의무기록 자료를 활용한 마약류 오남용 현황과 사망 관련성	대학
14	Understand Mechanisms of Disease (질병 메커니즘 이해)	Networkanalysis를 이용한 biologics drug의 systems pharmacology 데이터베이스 구축	대학
15	Repurpose Existing Drugs	Forward and Reverse In Silico Chemogenomics Approaches to Target Validation, Lead Identification, Lead Optimization, and Drug Repurposing	IT기업

	(기존 약물을 다른 질환에 이용)	유전체, 약물구조, 약물의 상호 작용 및 약물 반응 데이터들의 관계를 활용한 인공지능 기반 신약 및 약물 재창출, 복합제 타깃선정 및 검증 플랫폼 개발	제약회사
		인공지능을 활용하여 일반의약품 사용 정보를 수집 종합하여, 소비자들에게 정확한 의약품 정보를 제공하고 기존 약물들이 다른 질환에 이용되는 현황을 파악하여 신규 질환 치료에 활용 가능성 또한 확인할 수 있는 스마트 약물 프로그램의 개발	제약회사
		Drug repositioning을 통한 신약후보물질 도출	제약회사
		Repurposing an Oncology Drug and Related Compounds, Identified Using AI and Data-driven Decision Support System, to Treat Alzheimer's Disease	IT기업
		유전체 기반 약물 타깃 스크리닝 시스템을 이용한 기존 승인 약물들의 신규 Off-타깃 발굴을 통한 의약재창출 연구	제약회사
16	Aggregate & Synthesize Information (대규모 정보수집 및 종합화)	대규모 정보 기반 대사질환 신약타깃 선발 인공지능 알고리즘 개발	대학
		임상자료와 지식이 연계된 인공지능의 개발을 통한 신약 후보군 탐색	제약회사
		대사질환 관련 임상의 주도의 비임상 표현형이 검증된 후보 유전자 발굴 및 임상유전체 정보를 바탕으로 한 후보 유전자의 임상적 의의 규명	대학
17	Go/No-go Decision (개발진행/중단의사결정지원)	약국 내 의약품 매출의 빅데이터 분석을 통한 맞춤형 제품 주문 및 마케팅	IT기업
18	기타	새로운 약물(물질)발견이 가능하고 임상 1상 종료까지의 기간을 단축시켜 줄 인공지능 개발(개발단계 1~9까지 모두 포함)	제약회사

□ 신약개발 인공지능 기술개발 수요 조사 분석 결과

○ 수요 기술 제안의 일반 특성 및 의견

- 총 44개의 수요 기술제안 중 제약사에서 17개, 대학에서 15개의 과제를 제안하였고, AI 관련 기업에서 8개의 과제를 제안하여 고른 분포를 보임
- 동일 기관(회사)에서 중복 제안한 경우도 있음
- 연구 개발 등 실무 계층의 과제가 주로 제시됨
- 기업과 대학의 내 의사 결정 계층의 의견 반영이 필요함

<표 27> 수요 기술 제안의 영역 및 신약개발 단계별 분류

구분	개수 (개)	개발단계 분류* (개)	
제약사	16	단계 1 단계 2 단계 3 단계 5 단계 7 단계 15 단계 16 단계 18	6 2 1 1 1 4 1 1
AI관련 기업	9	단계 2 단계 3 단계 7 단계 8 단계 13 단계 15 단계 17	1 1 1 2 1 2 1
대학	13	단계 1 단계 2 단계 3 단계 6 단계 8 단계 11 단계 13 단계 14 단계 16	2 2 2 1 1 1 1 1 2
기타 (공공연구소/병원)	5	단계 1 단계 2 단계 3 단계 4 단계 5	1(공공연구소) 1(병원) 1(병원) 1(공공연구소) 1(공공연구소)
합계	44		44

\* 복수선택 있음

○ 분야별 수요 기술 제안의 특징

- 제안된 수요 기술들은 신약개발 효율성을 위한 연구에 23개, 인공 지능 기술 개발 연구에 8개가 각각 포함되어 있음
- 인공 지능 기술 자체의 개발에 비하여 인공 지능 기술을 신약 개발 전단계의 세부 영역에 적용하여 활용하는 연구에 대한 제안이 더 많음
- 신약개발 분야의 수요자 입장에서는 인공지능 기술을 방법론적으로 연구 및 개발하는 것 보다는 구축된 플랫폼을 효율적으로 활용하고자 하는 의도가 큰 것으로 파악됨

<표 28> 분야별 수요 기술 제안 응답 수

구분	응답자 수 (명)	기타
1	23	
2	8	
3	8	- 유전체 기반 기술을 이용한 신약 개발 효율 향상 연구 - 기존 약물을 다른 질환에 이용 방법 PoC 확립
복수응답	3	- 1,2 동시선택
무응답	2	

- 1: 인공지능 기술을 활용한 신약개발 효율성 향상 연구  
 2: 신약개발 효율 제고를 위한 인공지능 기술 개발 연구  
 3: 기타

○ 신약개발 세부 단계에 따른 수요 기술 제안의 특징

- 제안된 수요 기술들을 신약개발의 세부 단계별로 분류할 때, 약물 디자인 분야가 9건의 기술 제안으로 가장 높은 비율을 나타냄
- 약물 디자인과 재목적 단계에 많은 기술 제안이 있었으나, 임상 시험 설계 및 최적화 등 물질 발굴 이후 단계가 기술개발단계 분류에서 상대적으로 더 세분화 되어 있으므로 제안된 수요 기술은 신약개발의 전 단계에 걸쳐 고루 분포하는 것으로 파악됨

- 신약 후보물질 발굴 이후 단계는 인공지능 활용 기술 성공 사례의 인지 등을 통하여 제안 수요가 높아질 수 있을 것으로 전망됨

<표 29> 신약개발 세부 단계에 따른 수요 기술 제안의 특징

기술개발단계분류	응답자 수 (명)	비중 (%)
Design Drug (약물디자인)	9	20
Repurpose Existing Drugs (기존 약물을 다른 질환에 이용)	6	14
Generate Novel Drug Candidate (새로운 신약후보 창출)	5	14
Validate Drug Candidate (신약 후보물질 검증)	5	11
Recruit for Clinical Trials (임상시험 피험자 모집)	3	7
Aggregate & Synthesize Information (대규모 정보 수집 및 종합화)	3	7
Predict Toxicology (독성예측)	2	5
AI based Pharmacovigilance (스마트 약물감시)	2	5
Design Clinical Trials (임상시험 설계)	2	5
Design Preclinical Experiments (전임상 실험 설계)	2	5
Run Preclinical Experiments (전임상 실험 수행)	1	2
Optimize Clinical Trials (임상시험 최적화)	1	2
Go/No-go Decision (개발진행/중단 의사결정지원)	1	2
Understand Mechanism of Disease (질병 메카니즘의 이해)	1	2
기타	1	2
합계	44	100

## 제2절 기술수준조사 (사전연구자료 활용)

### □ 기술개발 수준 및 기술확보 전략

- 제안된 수요 기술들은 기술개발 수준으로 분류할 때, 국내의 경우 대부분 1단계에 해당하고, 국외의 경우 2단계에서 3단계 사이에 분포하는 것으로 나타남
  - 제안된 기술이 완전히 개발되면 3단계에서 5단계까지 분포할 것으로 전망됨
  - 수요기술 제안자들은 자체개발을 통한 기술확보전략을 선호하였으며, 국제협력과 도입을 통한 기술확보전략도 전체 제안 기술 중 44%를 차지하였음
  - 기술확보전략에서 다수의 복수응답이 존재하며, 이는 기관의 규모와 조직의 특성에 따라서 자체개발과 외부 협력을 병행할 수 있음을 시사함

<표 30> 기술확보전략에 따른 수요 기술 분류

전략	응답자 수 (명)	비중 (%)	관련 개발단계 분류/응답자 특성
자체개발	25	56	제약사 6(복수응답 있음) AI기업 8(복수응답 있음, 3과 중복응답 있음) 대학 7 기타법인 4(3과 중복응답 있음)
국제협력	9	20	제약사 3 대학 6 (복수응답, 3과 중복응답 있음)
도입	11	24	제약사 8 (복수응답, 2와 중복응답 있음) AI기업 1 (1과 중복응답) 기타법인 1 (1과 중복응답)
합계	35	100	

※ 그 외에 국가지원, 국내 협력 등이 있음

□ 수요 기술 개발에 필요한 연구기간

- 제안된 수요 기술들은 48%가 5년 이상의 연구기간이 필요하며, 3년 이하의 연구기간이 필요하다는 응답은 41%를 차지하였음
  - 대학의 경우 5년 이상의 중장기 과제를 선호하며, 제약회사들은 평균 4년, AI 기업은 주로 2년 이내의 연구 기간을 선호함
  - 기업의 경우 빠른 적용과 활용이 목적이며, 대학은 상대적으로 안정적인 연구 개발을 선호하는 경향이 연구기간에 반영된 것으로 파악됨

<표 31> 제안된 수요 기술의 연구기간

연구기간 (년)	응답자 수 (명)	비중 (%)	응답자 특성
2	8	18	AI관련 기업들은 2~4년으로 2년이 다수
3	10	23	제약사들은 2~5년으로 평균 4년
4	1	2	
5	21	48	대학들의 예상 연구기간은 대부분 5년
합계	40	100	

※ 미응답자 있음

□ 수요 기술 개발에 필요한 연구비

- 제안된 수요 기술 개발에 필요한 예상 연구비는 세부 제안 기술별로 다양함
  - 응답자별로 총 연구비 규모가 다르며, 응답자가 복수 응답한 경우 세부 과제의 내용에 관계없이 총 연구비 규모가 유사한 경향을 나타냄
  - 수요 기술 개발에 필요한 총 연구비는 평균 17억원이며, 최소 1억 5천만원에서 최대 50억원까지 다양한 규모로 제안됨
  - 연평균 연구비는 5억원 규모가 28%로 가장 높은 비중을 차지하였으며, 2억과 10억 규모도 각각 14%의 비중을 나타냄

- 기술 단계별로 기술 활용과 기술 개발 등 세부 과제의 목표가 다양하므로 예상 연구비도 다양한 규모로 전망됨

<표 32> 제안된 수요 기술의 예상 연구비(총 연구비)

연구비(억원)	응답자 수(명)	비중(%)
1.5	2	6
2	1	3
3	2	6
5	3	9
6	1	3
10	8	24
12	1	3
15	3	9
20	3	9
25	3	9
30	3	9
40	1	3
50	3	9
합계	34	102

※ 연구기간 고려하지 않음

<표 33> 제안된 수요 기술의 예상 연구비(연평균 연구비)

연구비(억원)	응답자 수(명)	비중(%)
0.5	2	6
1	3	9
1.5	1	3
2.5	2	6
2	4	12
3	1	3
3.33	1	3
4	4	12
5	9	26
6	1	3
10	6	18
합계	34	101

※ 연평균 연구비 = 총연구비/연구기간

□ 과제참여 구성방안

- 제안된 수요 기술 개발을 위하여 제약기업과 대학이 연구주관으로 연구팀을 구성 및 운영하는 것을 선호함
  - 신약개발 인공지능 기술 개발과 동시에 신약개발 현장에서 활용하기를 희망하는 의중이 반영된 것으로 파악됨
  - 임상데이터 등 공공 데이터 활용에 대한 중요도를 고려하여 병원이 주도하는 연구팀 구성 전략도 제시됨

<표 34> 연구팀 구성 전략

구분	과제참여 구성안	응답자 수 (명)	응답자 분석
연구주관	제약사 등	18	주로 제약측 수요조사 응답자들이 선택
	AI관련 기업	9	
	대학	14	주로 대학측 수요조사 응답자들이 선택
	공공기관	2	
	병원	8	주로 대학측 수요조사 응답자들이 선택
연구참여	연구주관외의 팀들이 대부분 포함		

※ 미응답자, 복수 응답자 있음

□ 연구과제 형태

- 제안된 수요 기술 개발 지원을 위한 연구과제는 협동 과제 형태가 59.5%로 가장 선호됨
  - 대학은 주로 협동과제 형태의 연구과제를 선호하고, 제약기업의 경우 사업단을 구성하거나 단독으로 진행하는 연구과제를 상대적으로 선호함
  - 협동과제 형태는 일부 제약기업이나 AI 기업도 연구과제 추진 전략으로 희망하고 있으므로, 연구과제 추진형태는 각 수요기술 제안 기관들이 특별한 제약을 두지 않는 것으로 파악됨

<표 35> 연구과제 형태

구분	전략	응답자 수 (명)	비중 (%)	관련 개발단계 분류 /응답자 특성
1	단독	7	16.7	제약업체 비중 높음
2	협동	25	59.5	대학(가장 선택 비중 높음), AI 기업, 제약업체 고르게 응답
3	사업단	10	23.8	제약업체 비중 높음
합계		42	100	

※ 미응답자 있음

□ 우선 순위 검토 대상 활용 모델

○ 해외 및 국내 활용 모델 조사를 통해 도출된 17개 분야를 후보로 함

<표 36> 우선 순위 검토 대상 활용 모델

구분	번호	활용 모델
후보물질주기	1	Design Drugs (약물 디자인)
	2	Generate Novel Drug Candidate (새로운 신약후보 창출)
	3	Validate Drug Candidate (신약 후보물질 검증)
전임상주기	4	Design Preclinical Experiments (전임상 실험 설계)
	5	Predict Toxicology (독성예측)
	6	Run Preclinical Experiments (전임상 실험 수행)
임상시험주기	7	Design Clinical Trials (임상시험 설계)
	8	Recruit for Clinical Trials (임상시험 피험자 모집)
	9	Optimize Clinical Trials (임상시험 최적화)
	10	Pharmacometrics (계량약리학)
제조주기	11	Smart Pharmaceutical Factory (스마트제약공장)

인허가 주기	12	Real-World Evidence based Regulatory Decision (인허가 의사결정)
사용주기	13	AI based Pharmacovigilance (스마트 약물감시)
범주기	14	Understand Mechanisms of Disease (질병 메커니즘 이해)
	15	Repurpose Existing Drugs (기존 약물을 다른 질환에 이용)
	16	Aggregate & Synthesize Information (대규모 정보 수집 및 종합화)
	17	Go/No-go Decision (개발진행/중단 의사결정지원)

□ 우선 순위 검토 기준

○ 기술개발 중요성

- AI 활용 모델 개발 및 확산으로 신약개발 과정 효율성 제고가 가능한가?

○ 국내 기업의 수요

- 충분한 수요가 있는가?

○ 중복성/차별성/부처간 역할분담

- 타부처 사업, 기존 사업과 중복성이 없으며 차별성이 있는가?

○ 개발 가능성

- 개발 성공 가능성이 있는가?

□ 우선 순위 검토

- 17개 후보 과제에 대한 연구수요조사결과, 기업대상 설문조사, 전문가 자문의견, 관련부처 추진사업 동향, 해외 추진 과제 테마 등의 자료를 활용하여 우선 순위 검토

<표 37> 우선 순위 검토 결과

구분	번호	활용 모델	검토 지표			
			기술개발 중요성	국내 기업의 수요	중복성/ 차별성/ 부처간역 할분담	개발 가능성
후 보 물 질 주 기	1	Design Drugs (약물 디자인)	◎	◎	×	◎
	2	Generate Novel Drug Candidate (새로운 신약후보 창출)	◎	◎	×	◎
	3	Validate Drug Candidate (신약 후보물질 검증)	◎	◎	×	◎
전 임 상 주 기	4	Design Preclinical Experiments (전임상 실험 설계)	◎	△	◎	○
	5	Predict Toxicology (독성예측)	◎	○	◎	◎
	6	Run Preclinical Experiments (전임상 실험 수행)	◎	○	◎	△
임 상 시 험 주 기	7	Design Clinical Trials (임상시험 설계)	◎	○	◎	◎
	8	Recruit for Clinical Trials (임상시험 피험자 모집)	◎	○	◎	◎
	9	Optimize Clinical Trials (임상시험 최적화)	○	△	◎	◎
	10	Pharmacometrics (계량약리학)	○	△	◎	◎
제 조 주 기	11	Smart Pharmaceutical Factory (스마트제약공장)	○	△	○	△
인 허 가 주 기	12	Real-World Evidence based Regulatory Decision (인허가 의사결정)	○	△	○	△
사 용 주 기	13	AI based Pharmacovigilance (스마트 약물감시)	○	○	◎	◎
범 주 기	14	Understand Mechanisms of Disease (질병 메커니즘 이해)	○	△	○	△
	15	Repurpose Existing Drugs (기존 약물을 다른 질환에 이용)	◎	◎	◎	◎
	16	Aggregate & Synthesize Information (대규모 정보 수집 및 종합화)	◎	◎	△	○
	17	Go/No-go Decision (개발진행/중단 의사결정지원)	◎	△	○	○

◎ 매우 적합(4점), ○ 상당히 적합(3점), △ 다소 적합(2점),  
× 복지부 수행보다 다른 부처 적합(1점)

□ 우선 순위 검토

- 우선 순위 검토 내용을 바탕으로 종합적인 검토 결과 총 9개 후보과제를 도출함
- 9개 후보과제는 과제 수행의 시급성을 고려하여 1,2,3 차 추진 과제로 3개 그룹으로 나눔

<표 38> 우선 순위 과제 후보 도출

단계	번호	번호	점수
1차 추진 과제	15	Repurpose Existing Drugs (기존 약물을 다른 질환에 이용)	16점
	5	Predict Toxicology (독성예측)	15점
	8	Recruit for Clinical Trials (임상시험 피험자 모집)	15점
	13	AI based Pharmacovigilance (스마트 약물감시)	14점
2차 추진 과제	10	Pharmacometrics (계량약리학)	13점
	6	Run Preclinical Experiments (전임상 실험 수행)	13점
	9	Optimize Clinical Trials (임상시험 최적화)	13점
	16	Aggregate & Synthesize Information (대규모 정보 수집 및 종합화)	13점
	17	Go/No-go Decision (개발진행/중단 의사결정지원)	13점

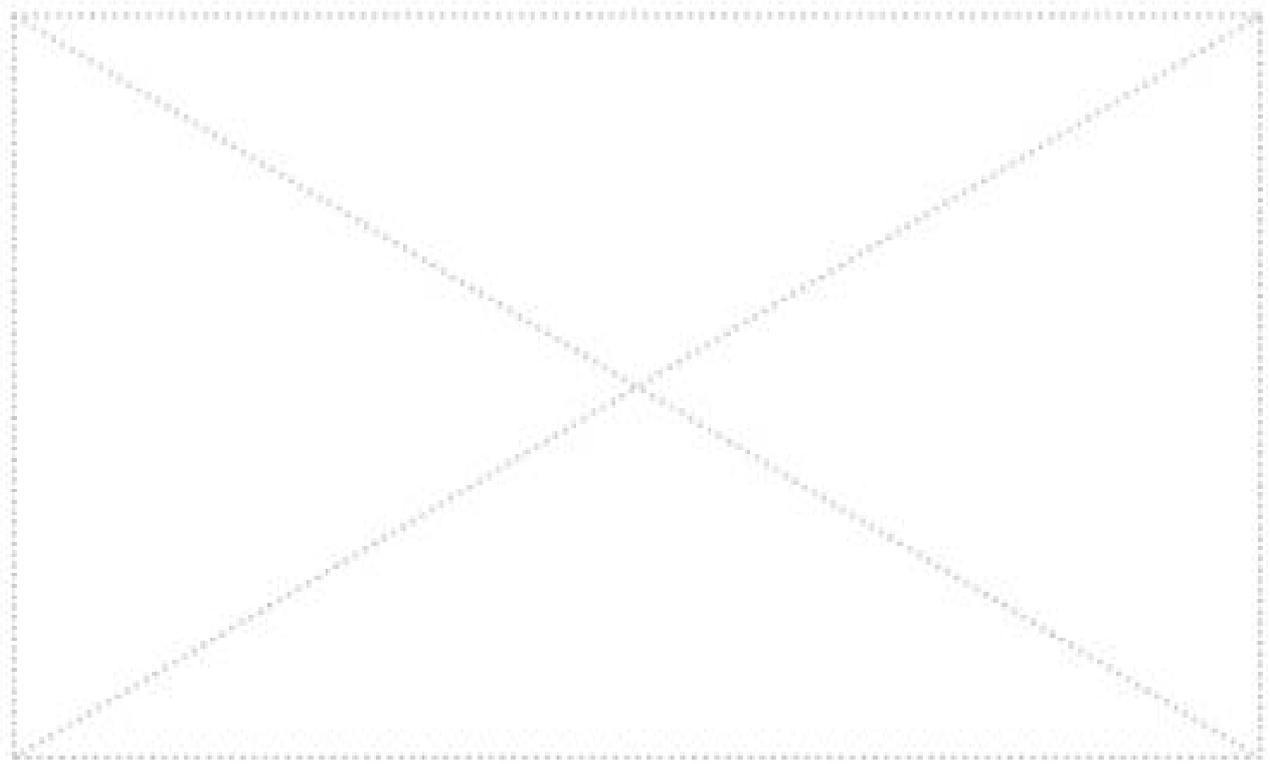
□ 선도분야 선정 (최종)

- 우선순위 검토분야(표 38) 내에서 유사 분야 통합하여 4개 선도 분야 확정

단계	활용 분야	선도 분야
후보물질	<u>약물 디자인, 새로운 신약후보 창출, 신약 후보물질 검증</u>	후보물질 발굴
전임상	전임상 실험 설계, <u>독성예측</u> , 전임상 실험 수행	
임상시험	<u>임상시험 설계, 임상시험 피험자 모집</u> , 임상시험 최적화, 계량약리학	임상시험
제조· 인허가 ·사용	스마트제약공장, 인허가 의사결정, <u>스마트 약물감시</u>	스마트 약물감시
범주기	질병 메커니즘 이해, <u>약물 재창출, 대규모 정보 수집 및 종합화</u> , 개발진행/중단 의사결정지원	약물 재창출

※ 임상시험은 복지부 고유업역으로 본 기획대상에서 제외

<참고> 핵심분야 발굴 절차



## 제4장 사업추진방안

### 제1절 비전, 목표 및 전략

비전

국가적 신약개발 역량 향상 및 국민 의료비 절감

목표

신약개발에 소요되는 시간·비용을 절반 이상 단축



#### [ 추진 전략 ]

<R&D\_ 후보물질 발굴> 화학물 구조, 독성 등 연구데이터 기반으로 타겟에 대응하는 후보물질 발굴

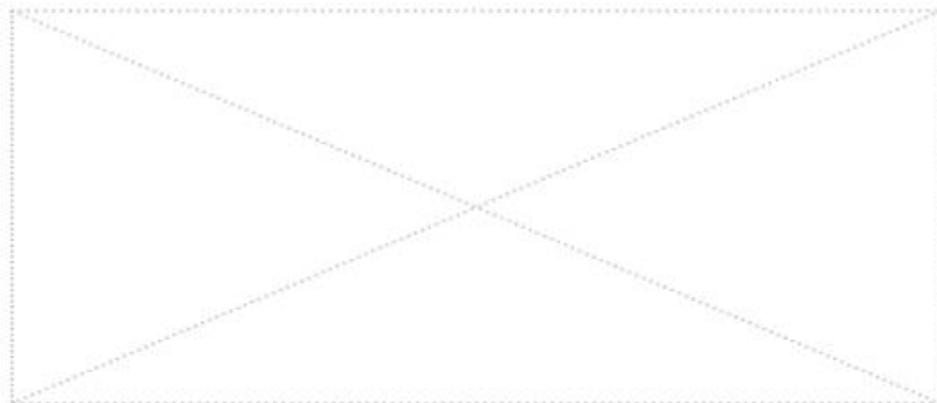
<R&D\_ 약물 재창출> 인허가 데이터 및 적용 원리, 신규타겟 데이터 등을 기반으로 새로운 적응증을 제안하는 알고리즘 개발

<R&D\_ 스마트 약물 감시> 의약품 생산·수입 실적 및 이상사례 보고 자료의 연계분석을 통해 의약품 감시·사전 예측 알고리즘 개발

<비R&D\_ 운영·관리지원> 선정된 과제에 효율적으로 지원, 운영 관리

#### [ 추진 계획 ]

각 분야별로 기업 중심의 컨소시엄을 구성하여 신약개발에 특화된 인공지능을 개발하고 효과를 입증하기 위한 연구추진



## 제2절 사업내용

### 1. (후보물질 발굴) 신약 후보물질 발굴을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축

#### □ 최종목표

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

#### □ 주요 연구내용

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

#### □ 성과목표

구분	1단계	2단계
과학적성과	▶SCI 논문(인공지능 기술 또는 인공지능 활용 신약개발 관련)	▶SCI 논문(인공지능 기술 또는 인공지능 활용 신약개발 관련), 인공지능 기반 신규 선도물질 도출
기술적성과	▶선도물질 탐색용 인공지능 기술 개발, 지식재산권 출원	▶신규 인공지능 기술을 이용한 결과물의 지식재산권 출원(선도물질, 알고리즘 등)
인프라성과	▶신규 인공지능 신약개발 플랫폼의 실용화 방안(운영·관리과제와 협력하여 제시)	▶빅데이터 플랫폼, Application Programming Interface(API) 공공 서비스 제공

#### □ 주안점

- 본 연구과제는 인공지능 기반 신약개발의 국내 인프라 구축을 최종 목표로 하며, 선도물질 발굴 및 검증을 통해 플랫폼 구축 여부를 확인하고자 함

## □ 특기사항

- 1단계 1차년도 연구기간은 9개월이고, 총괄과제 형식으로 제안하며 총괄과제 책임자는 세부과제 책임자를 겸함 (세부과제 수는 3개 이상)
  - 과제 구성 시 기업이 필수적으로 총괄 또는 세부 책임자로 참여해야 하며, 선정 평가 시 참여 기업의 인공지능 구축 역량을 평가함
- 단계 평가 시 과제의 검증을 위해 개발 중인 인공지능을 시연해야 하며, 운영·관리 과제에서 제공된 화합물 등을 활용해야 함
- 최종 평가 시, API 지속 운영 방안을 제시하여야 함 (자체 또는 운영·관리 과제 운영 등)
- 최종 평가 시, API 공공 서비스 제공 실적은 유저 등록 수, 각 유저별 서비스 사용 건수 증빙 등을 정량적으로 제시해야 함
- 선정된 과제는 마일스톤 관리를 위한 자료제출(연구성과물 등) 요구에 응할 의무가 있으며, 별도 선정될 「인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 운영·관리 과제」와 협력하여야 함
- 연구 수행 시 데이터 표준화를 수행 후, 운영·관리 과제의 데이터 베이스 구축에 협력하여야 함
- 본 연구과제에 선정된 연구 기관은 연구기간 동안 본 사업 선정 과제(연구주제 전체)간 상호 연구 협력을 권고함
- 본 연구주제 연구책임자(총괄)은 참여율 50% 이상을 필수로 함

## <후보물질 관련 세부연구안>

### □ 인공지능 기반 독성예측 기술개발

과제명	○ 인공지능 기반 독성예측 기술개발
최종목표	○ 국내외 독성 데이터베이스로부터 인공지능 기반의 유효 물질 독성 예측 모델 개발 - 의약품의 인허가 기준을 충족하기 위한 유효 물질의 독성을 빠르게 예측할 수 있는 모델을 개발하고 이를 실제 제약 회사들이 활용할 수 있는 플랫폼 개발
주요 연구내용	○ 기존 독성 데이터베이스의 데이터 모델링을 통한 가공 정제 ○ 국내외 전임상단계에 이용 가능한 독성 예측 모델 확보 및 구현 ○ 딥러닝 기술을 활용하여 전임상 가이드라인에서 요구되는 독성 예측 모델 개발 ○ 기 개발된 딥러닝 기반 독성 예측 모델 사용을 위한 사용자 친화적 플랫폼 개발
활용데이터 베이스	○ 식약처 독성정보제공시스템(Tox-Info) ○ 보건의료빅데이터 개방시스템(HIRA) ○ Toxnet ○ MedWatch
정성적/정량적 성과지표	○ 인공지능신약개발 컨소시엄 기업의 활용도 평가기준 충족 ○ 기존 독성예측프로그램 대비 효율성 30% 이상 증가(기준 물질에 대한 독성 예측 정확도)
정부지원 필요성	○ 전임상시험 비용 및 시간의 증가로 인한 대체시험법의 요구가 증가하고 있으며 여러 방법중 in silico 기반 독성 예측 기술은 사용자 이용편의성이 높아 기술 개발이 필요함 ○ in silico 독성 예측 기술은 국내 기술 개발이 미미하며 국외 개발 수준도 일부 독성 예측만이 가능함 ○ 제약기업에서 사용하는 독성 예측 기술은 기존 의약품의 적응증 확대 기술 개발이 주류를 이루며 신규 의약품 평가 방법에 대한 인공지능 기술은 미비한 상태임 ○ 제약기업 등 신약개발 현장에서는 인공지능 기술을 활용한 독성 예측 시스템을 자체 개발하기 보다는 검증된 플랫폼에 대한 수요가 높으므로, 공공기관이 주도한 독성 예측 시스템을 선도 적으로 개발하여 보급할 필요가 있음
특기사항	○ 개발 내용에 대하여 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함 ○ 계약기간 종료 후에도 결과물에 관련해서 후속조치를 요구할 수 있음 ○ 과제실시부서와 적극적인 업무 협력·협조를 하여야 함

□ 인공지능 기반 Kinase 의약품 독성예측 시스템

과제명	○ 인공지능 기반 Kinase 의약품 독성예측 시스템
최종목표	○ 최신 Kinase 의약품 안전 정보를 검색·수집하고 의미있는 독성정보를 선별하는 인공지능 기반의 안전정보 시스템 개발 - 전 Kinase 허가 의약품에 대한 안전 정보를 지속적으로 발굴하고 최신화하기 위한 국내외 정보 자동 수집·탐지 독성예측 기술 개발
주요 연구내용	○ Kinase 약물의 Family Selectivity 프로파일 정보 및 설치류, 비설치류 독성용량들에 대한 데이터 베이스를 구축하여 신약 후보물질의 독성용량을 예측하는 시스템 개발 ○ Kinase의약품의 Family Selectivity 프로파일 데이터베이스 구축 ○ Kinase의약품의 설치류, 비설치류 PK 및 독성용량 데이터베이스 구축 ○ Kinase의약품의 임상에서의 Human PK에서 노출 및 독성 데이터베이스 구축 ○ Kinase의약품의 구조기반 고차원 심장독성 예측시스템 개발 ○ Kinase 신약후보물질의 Family Selectivity 프로파일 및 독성정보를 Human 임상용량 예측시스템 구축
활용데이터 베이스	○ 건강보험심사평가원의 보건 의료빅데이터개방시스템 ( <a href="https://www.hira.or.kr">https://www.hira.or.kr</a> ), ○ FDA ( <a href="https://www.fda.gov/Drugs/default.htm">https://www.fda.gov/Drugs/default.htm</a> ) ○ DM(Common Data Model)
정성적/정량적 성과지표	○ 인공지능신약개발 컨소시엄 기업의 활용도 평가기준 충족 ○ 기존 독성예측프로그램 대비 효율성 30% 이상 증가(기준 물질에 대한 독성 예측 정확도)
정부지원 필요성	○ 표적항암제를 포함한 다양한 질환의 Kinase의약품에 대한 국내 제약사 및 바이오벤처에서의 임상개발이 증가함에 따라 국내외 Kinase 의약품 안전정보를 포괄적으로 수집하여 Kinase 안전성 정보 제공 및 예측에 관한 시스템 필요 ○ 한국이 강점을 가진 인공지능 기술을 융합한 수요자 활용도가 높은 정보 제공 및 예측 시스템 개발 필요
특기사항	○ 개발 내용에 대하여 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함 ○ 계약기간 종료 후에도 결과물에 관련해서 후속조치를 요구할 수 있음 ○ 과제실시부서와 적극적인 업무 협력·협조를 하여야 함

□ 다중 의료정보 기반 타겟과 화합물 연관 지식 네트워크 구축

과제명	○ 다중 의료정보 기반 타겟과 화합물 연관 지식 네트워크 구축
최종목표	○ 약물의 구조, 질환, 의료데이터, 유전체 간의 관계 학습 및 추론에 의한 인공지능 기반 데이터 시각화, 분석 프로토콜 및 타당성 평가 기술 구축
주요 연구내용	○ 다중 의료정보 수집/정제 및 데이터 시각화 연구 ○ 알려진 생물학적 타겟과 후보 화합물간의 관계 학습 ○ 학습모델을 기반으로 생물학적 타겟 추론 및 바이오마커 기반 치료제 후보 물질 예측 ○ 발굴된 타겟 및 적응증에 대한 결과 해석이 가능한 시각화 모듈 개발
활용데이터 베이스	○ 내부/상용 데이터 - 내부 약물 구조 및 부작용 DB - 내부 타겟 물질 및 유전자관련 DB - CHEMDNER corpus: 84,000 화합물질에 대한 전문가 주석본 이용하여 엔티티 관계 활용 등 ○ 외부/공공 데이터 - 2800만 MEDLINE 요약 (5600 개의 저널): 문헌연구에 기반 제공 - 1700만 과학저널 기사: 문헌 연구에 기반 제공
정성적/정량적 성과지표	○ 정성적 지표: 인공지능신약개발 컨소시엄기업의 활용도 평가기준 충족 ○ 정량적 지표: 결합 친화성 발견 및 분자설계 플랫폼 개발에서 기존 딥러닝 AUC 측정치보다 10% 이상 우위를 점하고, 질병과 분자구조로 부터의 관련 스코어링에 의한 리드 DB의 유효성 지표 목표 달성
정부지원 필요성	○ 딥러닝 처리를 위한 고성능 인공지능 클라우드 인프라 사용비용에 대한 예산 지원필요 ○ 제약 기업의 인공지능 수요에 따른 인공지능 신약 개발 기초 데이터 및 API 제공 필요 ○ 1차년도 정량 성과지표에 논문, 특허 이외의 성과지표 제시 인정필요 ○ 알려진 공공 데이터를 기반한 데이터 연관 그래프 생성 모듈 및 학습 모델제공 ○ 후보물질을 개발한 결과물의 경우 참여 정도와 데이터의 중요도와 소유권에 따라 협의
특기사항	○ 개발 내용에 대하여 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함 ○ 계약기간 종료 후에도 결과물에 관련해서 후속조치를 요구할 수 있음 ○ 과제실시부서와 적극적인 업무 협력·협조를 하여야 함

□ 인공지능 기반 신생물물질(NBE)의 약물동태/약물동력 모델 개발

과제명	○ 인공지능 기반 신생물물질(NBE)의 약물동태/약물동력 모델 개발
최종목표	○ 신약 개발 시 전임상 및 한국인에서의 임상시험 결과를 예측할 수 있는 생리학적 기반 약물동태/동력 모델의 개발
주요 연구내용	○ 국내외 임상 및 생리 정보 데이터베이스의 정제 및 가공 ○ 체내 주요 기관의 혈류량과 간 내 대사능, 체내 receptor의 분포 등 약물 동태/동력에 영향을 줄 수 있는 주요 인자들을 파라미터화 ○ 신생물물질 투여 후 특이적인 체내 동태/동력을 반영하기 위한 정보 수집 및 적용 ○ 제약회사에서 바이오 신약 개발 시 전임상 데이터를 이용해 임상에서의 결과를 예측할 수 있는 생리학적 기반 약물동태/동력 모델을 개발
활용데이터 베이스	○ 보건의료빅데이터 개방시스템(HIRA) ○ PubMed ○ OHDSI-OMOP
정성적/정량적 성과지표	○ 인공지능신약개발 컨소시엄 기업의 활용도 평가기준 충족 ○ 기존 약물동태/동력 프로그램 대비 효율성 30% 이상 증가(기존 물질 대비 신규 파라미터 도출 시간)
정부지원 필요성	○ 제약업계에서 사용할 수 있는 생리학적 기반 약물동태/동력 모델은 인구학적, 생리학적 정보와 특이점 및 신생물물질의 특징이 고려되어 있지 않음 ○ 인공지능 기반 약물동태/동력 모델은 구축 시 필요로 하는 생리학적 데이터가 매우 방대하며, 체계적으로 정제 및 가공된 데이터가 필수적이므로 공공 기관 주도로 데이터 수집 및 관리가 필요함 ○ 생리학적 기반 약물동태/동력 모델을 개발은 전임상부터 임상까지 포괄적인 분야이므로 공공 주도의 사업 추진이 적합함
특기사항	○ 개발 내용에 대하여 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함 ○ 계약기간 종료 후에도 결과물에 관하여서 후속조치를 요구할 수 있음 ○ 과제실시부서와 적극적인 업무 협력·협조를 하여야 함

## 2. (약물 재창출) 약물 재창출을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축

### □ 최종목표

- 신규 인공지능 플랫폼을 이용한 약물 재창출 (drug repositioning)

### □ 주요 연구내용

- 인공지능 기반 약물 재창출 플랫폼 구축
- 인공지능을 이용한 약물 재창출(drug repositioning)의 유효성을 입증하기 위하여 기존 약물에 대한 새로운 타겟 및 적응증 탐색·발굴

### □ 성과목표

구분	1단계	2단계
과학적성과	▶SCI 논문(인공지능 기술 또는 인공지능 활용 약물 재창출 관련)	▶SCI 논문(인공지능 기술 또는 인공지능 활용 약물 재창출 관련), 5종 이상 인공지능 기반 신규 타겟 발굴 및 검증
기술적성과	▶약물 재창출용 인공지능 기술 개발	▶신규 인공지능 기술을 이용한 결과물의 지식재산권 출원
인프라성과	▶신규 인공지능 신약개발 플랫폼의 실용화 방안(운영·관리과제와 협력하여 제시)	▶인공지능 기반 약물 재창출 플랫폼 확보, Application Programming Interface(API) 공공 서비스 제공

### □ 주안점

- 본 연구과제는 임상정보 및 공공 약물 빅데이터를 이용한 인공지능 기반 약물 재창출 인프라를 구축하는 것을 최종 목표로 하며, 이를 이용하여 기존 승인 약물의 새로운 타겟과 적응증 발굴을 목적으로 함

## □ 특기사항

- 1단계 1차년도 연구기간은 9개월이고, 총괄과제 형식으로 제안하며 총괄과제 책임자는 세부과제 책임자를 겸함 (세부과제 수는 3개 이상)
- 목표 달성을 위해 기업의 참여 방안(주관, 공동, 위탁 등)을 필수적으로 제시해야 함
- 단계 평가 시 과제의 검증을 위해 개발 중인 인공지능을 시연해야 하며, 운영·관리 과제에서 제공된 화합물 등을 활용해야 함
- 최종 평가 시, API 지속 운영 방안을 제시하여야 함(자체 또는 운영·관리 과제 운영 등)
- 최종 평가 시, API 공공 서비스 제공 실적은 유저 등록 수, 각 유저별 서비스 사용 건수 증빙 등을 정량적으로 제시해야 함
- 선정된 과제는 마일스톤 관리를 위한 자료제출(연구성과물 등) 요구에 응할 의무가 있으며, 별도 선정될 「인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 운영·관리 과제」와 협력하여야 함
- 연구 수행 시 데이터 표준화를 수행 후, 운영·관리 과제의 데이터 베이스 구축에 협력하여야 함
- 본 연구과제에 선정된 연구 기관은 연구기간 동안 본 사업 선정 과제(연구주제 전체)간 상호 연구 협력을 권고함
- 본 연구주제 연구책임자(총괄)은 참여율 50% 이상을 필수로 함

## □ 기존 플랫폼 사업(과제)과의 차이점

- 약물 재창출은 언어 지능과 추론 및 지식 표현이 핵심 요소로서, 제약사가 보유하고 시판된 약물의 임상 데이터, 환자 복용 데이터를 자연어처리 기술을 통해 학습하여 알려진 효능이 아닌 새로운 효능을 발굴 계획

## <약물 재창출 관련 세부연구안>

### □ 인공지능 기반 약물 재목적 시스템 개발

과제명	○ 인공지능 기반 약물 재목적 시스템 개발
최종목표	○ 인공지능을 이용한 약물재목적(drug repurposing)이 가능한 플랫폼 개발 - 인공지능을 이용한 약물재목적(drug repurposing)의 유효성을 입증하기 위하여 특정 질환이나 약물에 대하여 새로운 타겟 및 적응증 탐색 및 발굴
주요 연구내용	○ 국내외에서 활용 가능한 임상정보 및 물질 데이터베이스의 정제 및 가공 ○ 인공지능을 활용하기 위한 데이터 표현 모듈(data representation module) 개발 ○ 약물과 관련한 데이터 네트워크 분석이 가능한 인공지능 활용 소프트웨어 개발 ○ 발굴된 타겟 및 적응증에 대한 결과 해석이 가능한 시각화 모듈 개발
활용데이터 베이스	○ 보건의료빅데이터 개방시스템(HIRA) ○ Drugs@FDA ○ repoDB
정성적/정량적 성과지표	○ 정성적 지표: 인공지능신약개발 컨소시엄 기업의 활용도 평가 기준 충족 ○ 정량적 지표: 기존 약물재목적 프로그램 대비 효율성 30% 이상 증가(기존 의약품 개수 대비 신규 적응증 발굴 개수)
정부지원 필요성	○ 인공지능 신약개발의 저변을 확대하기 위하여 시판 약물에 대하여 다양한 임상 정보를 확보할 수 있는 공공 데이터베이스를 활용하여 단시간에 유효한 제품화가 가능한 약물 재목적화 성과를 도출하고 평가할 필요가 있음 ○ 인공지능을 활용한 약물 재목적화 등의 신약개발은 파편화된 많은 데이터를 효율적으로 집약하고 정제하는 것이 필수적이며, 빠른 진행을 위하여 국책 기관 등에서 공적 주도로 지원할 필요가 있음 ○ 인공지능을 활용한 약물 재목적화로 국내 환자에 대한 맞춤형 치료제의 개발이 단시간에 가능한 한국형 신약개발 플랫폼을 제시할 필요가 있음
특기사항	○ 개발 내용에 대하여 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함 ○ 계약기간 종료 후에도 결과물에 관련해서 후속조치를 요구할 수 있음 ○ 과제실시부서와 적극적인 업무 협력·협조를 하여야 함

### 3. (스마트 약물감시) 스마트 약물감시를 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축

#### □ 최종목표

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

#### □ 주요 연구내용

- 조기에 약물부작용 발생 정보를 파악하여 시기적으로 빠른 결정을 내릴 수 있도록 부작용으로 인한 피해 확산 방지 및 부작용 발생 가능성 예측 모형 개발을 통한 약물 안전성 확보
- 의약품 안전정보 수집 및 탐지 기술 개발, 공통데이터 모델을 활용한 약물감시 지원 시스템 개발, 의약품 안전 정보 종합분석 알고리즘 개발, 중증 이상사례 검토 시스템 개발 등을 포함

#### □ 성과목표

구분	1단계	2단계
과학적성과	▶SCI 논문(인공지능 기술 또는 스마트 약물감시 관련)	▶SCI 논문(인공지능 기술 또는 스마트 약물감시 관련)
기술적성과	▶신규 인공지능 기술을 이용한 결과물의 지식재산권 출원	▶신규 인공지능 기술을 이용한 결과물의 지식재산권 출원
인프라성과	▶신규 인공지능 플랫폼의 실용화 방안 (운영지원과제와 협력하여 제시)	▶빅데이터 플랫폼, Application Programming Interface(API) 공공 서비스 제공

#### □ 주안점

- 본 연구과제에서는 약물감시 지원 시스템 등의 연구개발을 통해 약물감시분야의 경쟁력 확보, 안전한 약물사용을 통한 국민건강향상을 목표로 함
- 목표 달성을 위해 약물감시용 병원 및 공공기관의 빅데이터 표준화를 수행해야 함

## □ 특기사항

- 1단계의 1차년도 연구기간은 9개월이고, 총괄과제 형식으로 제안하며 총괄과제 책임자는 세부과제 책임자를 겸함 (세부과제 수는 3개 이상)
- 목표 달성을 위해 의료기관과 산업계, 연구계에서 공동으로 참여하여야 함
- 최종 평가 시, 구축된 데이터베이스의 지속 운영 방안을 제시하여야 함(자체 또는 운영·관리 과제 운영 등)
- 개발 내용에 대해 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함
- 선정된 과제는 마일스톤 관리를 위한 자료제출(연구성과물 등) 요구에 응할 의무가 있으며, 별도 선정될 「인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 운영·관리 과제」와 협력하여야 함
- 연구 수행 시 데이터 표준화를 수행 후, 운영·관리 과제의 데이터베이스 구축에 협력하여야 함
- 본 연구과제에 선정된 연구 기관은 연구기간 동안 본 사업 선정 과제(연구주제 전체)간 상호 연구 협력을 권고함
- 본 연구주제 연구책임자(총괄)은 참여율 50% 이상을 필수로 함

## □ 기존 플랫폼 사업(과제)과의 차이점

- 의약품 안전 정보 플랫폼 구축을 위해 국내외 허가사항 등 최신정보 자동검색 기술과 정보의 유형 및 권고/근거 수준 등에 따른 자동 분류화, 우선순위화를 위한 기술개발이 특징

## <스마트 약물감시 관련 세부연구안>

### □ 인공지능 기반 약물감시 체계 개발 과제

과제명	○ 인공지능 기반 약물감시 체계 개발 과제
최종목표	○ 상시적으로 변화하는 최신 의약품 안전 정보를 검색·수집하고 의미있는 정보를 선별하는 인공지능 기반의 안전정보 탐지 기기 개발 - 전 허가 의약품에 대한 안전 정보를 지속적으로 발굴하고 최신화하기 위한 국내외 정보 자동수집·탐지 기술 개발
주요 연구내용	○ 안전성 이슈의 조기발견을 위한 국외정부, 국제기구의 사이트를 통한 안전정보 자동 검색기술 개발 ○ 국외 의약품뉴스 자동 검색 및 이슈별 분류화 기능 개발 ○ 의약품 안전 정보 개발을 위한 국내 허가사항 등 최신 정보 자동 검색 기술 개발 ○ 의약품 안전 정보 개발을 위한 미국 유럽 등 국외허가사항 등 최신 정보 자동 검색 기술 개발 ○ 정보의 유형 및 권고/근거수준 등에 따른 분류화 및 우선 순위화 기술 개발 ○ 수집자료의 데이터 베이스화 및 이력관리 기술 개발
활용데이터 베이스	○ KAERS ○ 보건의료빅데이터개방시스템 (HIRA)
정성적/정량적 성과지표	○ 정성적 지표: 인공지능신약개발 컨소시엄 기업의 활용도 평가기준 충족 ○ 정량적 지표: 기존 약물재목적 프로그램 대비 효율성 30% 이상 증가(기존 의약품 개수 대비 신규 적응증 발굴 개수)
정부지원 필요성	○ 의약품 안전에 대한 사회적 관심과 요구가 증가함에 따라, 방대하게 확장해가는 국내외 의약품 안전정보를 포괄적으로 수집하는 국가적 정보수집 체계 마련 필요 ○ 급변하는 의약품 안전정보 동향을 상시적으로 감지하여, 국내 의료현장 및 환자에게 신속히 정보를 알리고, 적절한 대처 방안 수립을 위한 지원 ○ 한국이 강점을 가진 인공지능 기술을 융합한 국제적 약물감시 선도
특기사항	○ 개발 내용에 대하여 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함 ○ 계약기간 종료 후에도 결과물에 관련해서 후속조치를 요구할 수 있음 ○ 과제실시부서와 적극적인 업무 협력·협조를 하여야 함

□ 공통데이터모델을 활용한 약물감시 지원 시스템 개발

<p><b>과제명</b></p>	<p>○ 공통데이터모델을 활용한 약물감시 지원 시스템 개발</p>
<p><b>최종목표</b></p>	<p>○ 조기에 약물부작용 발생에 대한 정보를 파악하여 시기적으로 빠른 결정을 내릴 수 있도록 하여 부작용으로 인한 피해 확산 방지 및 부작용 발생 가능성 예측 모형 개발을 통한 약물 안전성확보(TRL 7, 8, 9단계)</p> <p>- 약물감시분야에서 국제적 우위를 차지하고, 국민의 안전한 약물사용을 통한 건강향상을 위한 기술개발</p>
<p><b>주요 연구내용</b></p>	<p>○ 개인정보 유출없이 연계분석을 위한 분산형 네트워크 형성을 위해 의료기관별 CDM* 기구축이 필수 조건</p> <p>* CDM(Common Data Model) : 각 의료기관에서 보유하고 있는 자료의 반출없이 분석 결과 값을 연계하여 통합분석이 가능하도록 지원하는 분석 모델</p> <p>○ 근거수준 높은 안전정보 생산을 위한 의료기관의 협조를 구할 수 있고, 보안을 갖춘 자료 연계 플랫폼 구축</p> <p>○ 약물감시 지원 시스템 개발</p> <p>- 자발적 부작용 보고자료의 실마리정보를 바탕으로 실제 환자 데이터 상에서 관련 정보를 수집·분석할 수 있는 솔루션 개발</p> <p>- 신약 등을 복용하는 환자의 데이터를 AI로 모아 부작용 사례 조기 탐지 시스템 개발</p> <p>- 중대한 부작용이 알려진 약물과 유사한 구조를 가지는 약물, 다양한 요인들과의 상관성을 이용하여 부작용 예측 모델 개발</p>
<p><b>활용데이터 베이스</b></p>	<p>○ KAERS</p> <p>○ 보건의료빅데이터개방시스템 (HIRA)</p>
<p><b>정부지원 필요성</b></p>	<p>○ 잘 갖춰진 전국민보험자료와 함께 병원 자료의 CDM 구축을 통한 약물감시체계 확립은 국제적 우위를 차지할 수 있는 분야로 반드시 필요</p> <p>○ 4차 산업혁명 시대에 국민이 필요로 하는 맞춤형 정보를 제공하여 안전한 의약품 사용을 통한 국민 건강 향상에 이바지할 수 있는 혁신 기술</p> <p>○ 인공지능을 통해 나온 결과에 대한 통합적 분석 및 해석에 대한 신산업/신규고용 창출 기대</p>
<p><b>특기사항</b></p>	<p>○ 원천기술인 CDM을 활용하여 약물감시분야에 활용할 수 있도록 성능 향상 및 표준화를 시키는 단계로 실제 본격적인 활용이 가능함</p>

□ 의약품 안전 정보 종합분석 알고리즘 개발

과제명	○ 의약품 안전 정보 종합분석 알고리즘 개발
최종목표	○ 4차 산업혁명에 대응할 수 있는 머신러닝 기반의 의약품 안전 관리 적용 - 의약품 생산,수입실적(식약처 보유), 의약품 이상사례 보고자료(의약품안전원 보유)를 연계한 의약품 이상사례 분석 알고리즘 개발
주요 연구내용	○ 의약품 생산,수입실적 및 이상사례 보고자료에서 자료를 추출하여 데이터베이스 구축 ○ 의약품 생산,수입실적과 이상사례 보고자료를 연계한 종합분석 알고리즘 개발 - 의약품 생산,수입실적 및 이상사례 보고현황 모니터링 - 의약품 생산,수입량 대비 이상 보고패턴을 감지 - 이상 보고패턴을 보이는 의약품에 대한 실마리분석 알고리즘 - 머신러닝 기반 기존 보고패턴을 토대로 미래 이상사례 보고패턴을 예측분석 - 분석자료를 토대로 의사결정을 지원할 수 있는 시스템 개발
활용데이터 베이스	○ KAERS ○ 보건의료빅데이터개방시스템 (HIRA)
정부지원 필요성	○ 국내 의약품 시장의 지속적인 성장으로 의약품 안전관리 강화 필요 ○ 의약품 사용량을 연계한 이상사례 보고자료 통합분석 체계 마련 필요 ○ 의약품의 생산,수입량 대비 안전성 정보의 보고패턴을 감지하여, 신속한 안전조치 방안 수립 ○ 의약품 관련 위해정보, 생산정보 등을 IT 기술과 접목하여 의약품 안전정보 서비스 환경 조성
특기사항	○ 개발 내용에 대하여 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함 ○ 계약기간 종료 후에도 결과물에 관련해서 후속조치를 요구할 수 있음 ○ 과제실시부서와 적극적인 업무 협력·협조를 하여야 함

□ 중증 이상사례 검토 시스템 개발

<p><b>과제명</b></p>	<p>○ 중증 이상사례 검토 시스템 개발</p>
<p><b>최종목표</b></p>	<p>○ 우리나라 자발적 부작용 보고(KAERS)를 통해 접수된 사망 또는 선천적 기형 부작용에 대한 통합 DB 구축 및 관리시스템 개발을 통해 보다 효율적으로 중대한 의약품 이상사례 관리 및 시의적절한 대응 도모</p>
<p><b>주요 연구내용</b></p>	<p>○ KAERS 보고 건 중 사망 또는 선천적 기형 보고에 대해 월별 검색 페이지 생성          - 현재 검토 진행상황 및 검토결과 확인 셀 생성</p> <p>○ 사망 또는 선천적 기형 보고에 대한 검색 및 1차, 2차, 최종검토결과 입력, 이전보고 검토결과 내역 조회          - 보고건 요약 내용, 이전 검토결과, 검토결과 입력 페이지 생성          - 성별, 나이, 의약품, 이상사례, 상세내역 등 보고건 요약 출력          - 추적보고의 경우, 이전보고건의 안전원관리번호 나열 및 클릭 시 해당 보고건 최종검토결과 조회          - ‘관련성 있음’으로 검토된 건 공문 송부 시 송부여부와 송부일자 기록          - 이전 보고건의 공문송부여부 조회          - 신속검토대상의 경우, 신속검토결과 및 내역 입력칸 생성          - 월별 검토 시, 검토단계별 검토결과 및 내역 입력칸 생성          - 조합검토 내역 입력칸 생성</p> <p>○ 약물-이상사례 조합 별 검토내역 조회          - 약물-이상사례 조합 검색 페이지 생성          - 검색조건과 일치하는 조합의 누적된 검토결과 출력, 확인 기능 추가</p>
<p><b>활용데이터 베이스</b></p>	<p>○ KAERS          ○ 보건의료빅데이터개방시스템 (HIRA)</p>
<p><b>정부지원 필요성</b></p>	<p>○ 중대한 이상사례 검토 알고리즘 개정으로 인한 새로운 업무 추가          ○ 최초.추적보고 보고건수 증가로 인한 업무량 증대 예상          ○ 평가결과 불일치 문제 예방</p>
<p><b>특기사항</b></p>	<p>○ 개발 내용에 대하여 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함          ○ 계약기간 종료 후에도 결과물에 관련해서 후속조치를 요구할 수 있음          ○ 과제실시부서와 적극적인 업무 협력.협조를 하여야 함</p>

#### 4. (운영지원) 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 운영·관리 과제

##### □ 최종목표

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

##### □ 주요 연구내용

- 효율적 과제 지원 및 성과 관리 체계 구축·운영
  - 연구과제 관리 전담 조직 구성 및 지속적인 지원이 가능한 거버넌스 구축
  - 연구과제 참여자 협의체 상시 운영 및 지원 등
- 웹기반 데이터 공유 및 공공화를 위한 시스템 구축·운영
  - 연구과제간 데이터 표준화, 데이터 관리 및 연계 지원
  - 신약개발용 인공지능 공공 포털사이트 구축·운영 등
- 교육, 홍보 및 네트워킹 지원
  - 인공지능 신약개발 관련 IT·BT 융합 전문인력 양성을 위한 교육 프로그램 개발 및 운영
  - 워크숍 개최 등 네트워킹 지원

##### □ 성과목표

▶조직 구성 및 성과 관리 전담 전문가 확보	▶표준화된 통합 데이터베이스 구축
▶연구과제 참여자 협의체 월 1회 이상 개최	▶연구과제 컨설팅 지원 실적
▶연구과제별 인공지능 모듈 성능 시연 및 검증 방안 제시 및 실행	▶IT·BT 융합 전문인력 양성을 위한 교육 프로그램 연 2회 이상 수행

## □ 특기사항

- 연구기간은 3년(2+1)이며, 1단계 1차년도 연구기간은 9개월임
- RFP 상의 “연구내용 및 범위” 전부를 포함하여 총괄과제 형식으로 제안하며 총괄과제 책임자는 세부과제 책임자를 겸함 (세부과제 수는 2개 이상)
- 주관기관은 제반 여건을 두루 갖춘 비영리 기관이어야 함
  - 주관기관의 책임자를 총괄과제 책임자로 하는 것을 원칙으로 함
- 2019년 선정 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 연구과제를 모두 지원, 운영·관리해야 함
- 주관기관은 연구과제 지원, 운영 및 관리 내용이 구체적으로 명시된 기관장 명의 지원 협약서를 제출해야 함
- 「인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업」에서 개발한 인공지능 신약개발 플랫폼의 통합 운영 및 실용화 방안을 제시하여야 함
- 포털 사이트의 지속적 운영 방안을 제시하여야 함
- 개발 내용에 대해 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함
- 인문·사회·경제 분야 전문가의 컨설팅 그룹 참여 권장
  - ※ 연구결과 생길 수 있는 윤리적·법적·사회적 영향, 연구성과의 시장가치, 고용창출효과 등 경제·사회적 영향에 대한 고려

## <지원과제 관련 세부연구안>

### □ 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 운영·관리과제

<b>과제명</b>	○ 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 운영·관리과제
<b>최종목표</b>	○ 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 연구과제 모니터링, 검증 프로세스 관리 및 효율적 운영 체계 정착 ○ 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 성과 관리, 활용 및 홍보
<b>주요 연구내용</b>	○ 효율적 과제 지원 및 성과 관리 체계 구축·운영 - 연구과제 관리 전담 조직 구성 및 지속적인 지원이 가능한 거버넌스 구축 - 연구과제 참여자 협의체 상시 운영 및 지원 - 컨설팅 그룹 운영을 통한 연구과제별 현장 중심 수요 파악 및 지원 - 연구과제별 인공지능 모듈 성능 시연 및 검증 방안(암맹평가 등) 제시 - 연구과제별 주기적 성과 관리 ○ 웹기반 데이터 공유 및 공공화를 위한 시스템 구축·운영 - 연구과제간 데이터 표준화, 데이터 관리 및 연계 지원 - 신약개발용 인공지능 공공 포털사이트 구축·운영 ·포털사이트는 본 사업을 통해 개발된 공개 가능한 인공지능 신약개발 플랫폼을 포함 운영 ○ 교육, 홍보 및 네트워킹 지원 - 인공지능 신약개발 관련 IT·BT 융합 전문인력 양성을 위한 교육 프로그램 개발 및 운영 - 워크숍 개최 등 네트워킹 지원 - 연구 성과 홍보
<b>정성적/정량적 성과지표</b>	○ 조직 구성 및 성과 관리 전담 전문가 확보 ○ 연구과제 참여자 협의체 월 1회 이상 개최 ○ 연구과제별 인공지능 모듈 성능 시연 및 검증 방안 제시 및 실행 ○ 표준화된 통합 데이터베이스 구축 ○ 연구과제 컨설팅 지원 실적 ○ IT·BT 융합 전문인력 양성을 위한 교육 프로그램 연 2회 이상 수행 ○ 연 1회 이상 워크숍 등 네트워킹 및 홍보 실적 ○ 신약개발용 인공지능 공공 포털 사이트 구축 및 해당 분야 활용 실적
<b>특기사항</b>	○ 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 연구과제를 모두 지원, 운영·관리해야 함

### 제3절 투자계획

#### □ 소요예산 규모

- 총 사업비 : 225억원
- 사업단계 : 3년(2+1) ※ '19년 75억원

<표 39> 연차별 투자계획

단위 : 억원

2019	2020	2021	합계
75	75	75	225

#### □ 투자 주안점안

- (1단계('19~'20)) 연구기반 및 기초연구 역량 강화에 중점
- (2단계('21)) 기초·원천기술 개발 및 응용연구 연계, 유효성 검증 등 목적형 연구 활성화

<표 40> 과제별 투자계획

과제명	지원규모	2019	2020	2021	합계
신약 후보물질 발굴을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	4개 과제	1,125	1,125	1,125	3,375
		1,125	1,125	1,125	3,375
		1,125	1,125	1,125	3,375
		1,125	1,125	1,125	3,375
약물 재창출을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	1개 과제	1,125	1,125	1,125	3,375
스마트 약물감시를 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	1개 과제	1,125	1,125	1,125	3,375
지원과제	1개 과제	750	750	750	2,250
합계	-	7,500	7,500	7,500	22,500

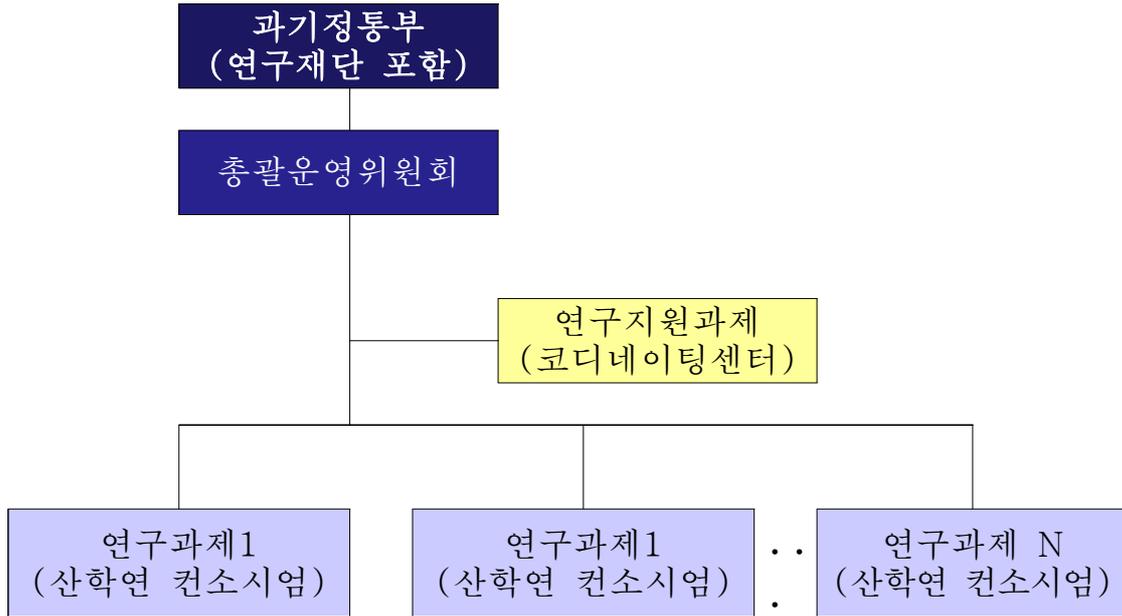
<참고> 과제별 세부 예산안

과제명	세부내용	주요 연구내용안	금액('19년 기준)
신약 후보물질 발굴을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	인공지능기반 신약플랫폼 개발 및 검증	정보간 네트워크 구축 및 패턴 분석연구	375백만원
		비정형 데이터 수집 방법론 수립	375백만원
		통합데이터 시각화 디자인	375백만원
	신약 선도물질 발굴 및 검증	다중 의료정보 수집/ 정제 및 데이터 시각화 연구	375백만원
		알려진 생물학적 타겟과 후보간 관계학습	375백만원
		생물학적 타겟 추론 및 바이오마커 기반 치료후보물질 예측	375백만원
	AI 기반 독성 예측기술개발	기존 독성 데이터베이스 모델링을 통한 가공 정제	562.5백만원
		국내외 전임상 단계에 이용가능한 독성 예측모델 개발	562.5백만원
	AI 기반 독성 예측시스템 개발	프로파일 정보 및 설비류 등 독성 용량에 대한 데이터 구축	562.5백만원
		신약후보물질에 대한 독성정보 예측시스템 개발	562.5백만원
약물 재창출을 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	약물재창출 플랫폼 구축	임상정보 및 물질 데이터베이스 정제, 가공	375백만원
		데이터 표현 모듈 개발	375백만원
		데이터 네트워크 분석이 가능한 소프트웨어 개발	375백만원
스마트 약물감시를 위한 인공지능 기반 플랫폼 구축	스마트약물 감지시스템 개발	국내외정보 사이트를 통한 안전정보 자동검색기술 개발	375백만원
		국내 허가사항 등 최신정보 자동 검색기술 개발	375백만원
		수집자료 데이터 베이스화 및 이력 관리 기술 개발	375백만원
지원과제	운영관리과제	성과관리 체계 구축 및 운영	250백만원
		웹기반의 데이터 공유 및 공공화를 위한 시스템 개발	250백만원
		교육, 홍보 및 네트워킹 지원	250백만원

## 제4절 추진체계

### 1. 개요

#### □ 구성 및 주요기능



- **(총괄운영위원회)** 부처 과장급 공무원 1명과 과제책임자(연구과제+지원과제) 7명 및 산학연병 전문가 4명 등 총 12명 내외로 구성
  - 사업 추진방향 조정, 과제 평가결과, 연차별 과제성과계획 심의
  - 과제 진행사항 모니터링(분기별) 및 사업 추진 애로사항 해결지원
  - 사업 현안사항 논의 및 기타 주요사항 심의 등
- **(연구지원과제)** 성과사업화 전문성을 갖추고 관련 커뮤니티를 대변할 수 있는 비영리기관으로 구성
  - **(행정지원)** 연구과제 진도관리(월별 Reporting 등) 및 추진위 지원, 연구과제 종료 후 성과 추적 관리\*, 사업 홍보
  - **(과제지원)** 과제성과 조기 창출 및 상용화촉진 등 비R&D 요소\*를 패키지 지원하고 기타 연구과제 애로사항 해소
  - \* 경쟁 제품 등 시장분석·컨설팅 제공, 마케팅, 투자유치, 국내외 인허가 업무지원, 국내외 기타 규제사항 분석 및 해결방안 마련, 해외진출 지원 등
  - **(성과확산)** AI·신약개발 관련 네트워크를 구축하고 사업도출성과 및 관련 역량 제고를 위한 커뮤니티와의 공유

## 2. 연구지원과제 구성 및 역할

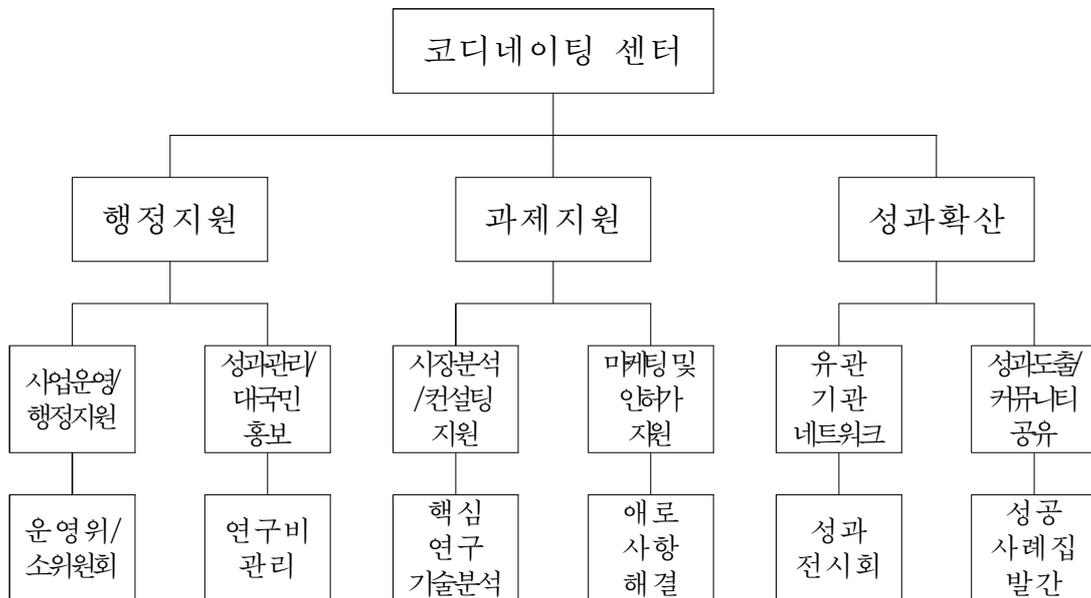
### □ 추진 필요성

- 추진 연구과제에 대한 수요자 중심의 컨설팅 그룹운영, 주기적 성과점검, 연구과정에서의 발생하는 데이터 관리, 연구성과 활용·홍보 추진 등을 위한 전주기적 토달패키지 지원이 필요

### □ 추진운영

- 당해연도 총 연구비의 10% 내외 예산으로 관련분야 비영리기관이 주관

### □ 운영체계 및 지원내용안



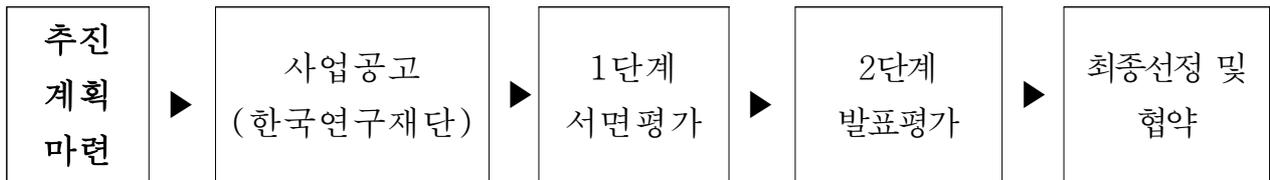
<표 41> 연구과제 지원 세부내용

구분	지원내용	지원 세부내용
행정지원	사업운영 및 행정지원	·사무국 구성 ·운영위 및 기타 실무위 운영
	성과관리 및 홍보	·분기별/연간 과제종료 후 성과관리 ·소식지발간 및 미디어 등 홍보
	연구비 관리	·회계법인활용한 연구비관리
과제지원	시장분석 및 컨설팅지원	·연구과제의 핵심연구기술 분석 ·후발 과제의 컨설팅 및 기술지원
	마케팅 및 인허가 지원	·국제적 투자동향 분석 및 전략지원 ·임상/인허가 성공요인 분석지원
	애로사항 해결	·국내외 규제개선방안 수집 및 분석 ·투자전략 및 경쟁비즈니스모델 분석
성과확산	유관기관 네트워크	·국내 네트워크 구축으로 성과교류 ·분기별 성과교류회 및 포럼 개최
	성과도출 및 커뮤니티 공유	·AI, 신약개발관련 성공사례 분석 ·성과플랫폼 공유방안 마련 및 확산

### 3. 추진과제 관리

◆ 한국연구재단의 과제 관리 전문성을 바탕으로 추진계획 및 연차별 시행계획에 따라 공정하고 엄격한 성과지향형 관리 추진

#### 가. 과제 선정



- (기본방향) 글로벌 수준에 근접한 기업이 참여하는 산·학·연·병 컨소시엄 그룹을 선정
  - 모든 과제는 연구데이터 관리계획 대상 과제이므로, 사업계획서 제출 시 DMP(Data Management Plan)서류를 필수적으로 제출하여야 함
  - ※ 연구책임자가 DMP에 명시한 시점, 장소, 기간, 포맷대로 연구수행 중 또는 연구종료 후 데이터를 공개 및 공유해야 함
- (평가항목) 심층적인 평가를 위해 1·2단계로 구분하여 실시
  - (1단계 서면평가) 기업 적합성(자격)과 사업 목적과의 부합성을 중심으로 평가하고 기술역량 및 사업역량을 사전 검토
  - (2단계 발표평가) 1단계 서면평가 결과를 토대로 사업계획서 검토 및 발표 등 심층 평가를 거쳐 지원 대상과제를 선정
    - ※ 2단계 평가대상자는 기술 및 사업역량을 중심으로 구체화·체계화하고 컨소시엄 구성, 세부전략 등을 상술

#### □ 평가위원 구성

- 과기정통부에서 추천받아 평가 pool을 구성한 후, 연구관리 전문기관의 평가위원 구성절차를 통해 최종 평가위원 확정
  - 단, 사업 특성을 잘 이해하는 산·학·연·병 전문가 및 국내외 투자 전문가, 변리사 등으로 구성 필요

□ 평가항목 및 배점

○ 연구과제

평가항목	세부항목	배점
연구계획 (35)	연구과제의 창의성 및 혁신성 - 사회적(산업적) 수요 적합성	20
	연구계획의 타당성 - 공고사항(공고문, 연구주제)과의 부합성 - 연구목표의 명확성 - 연구내용 및 추진체계의 적절성	15
연구역량 (25)	연구책임자 및 공동연구자의 연구경력 및 연구업적	25
성과활용 (40)	원천기술 확보가능성 및 기대효과 - 원천기술 확보계획의 구체성과 타당성 - 연구결과의 활용가치 수준, 과학계·국민·산업계에 미치는 파급효과	20
	성과창출전략의 적절성 - 지재권 확보 전략, 기술이전 및 사업화 관련 로드맵 제시 등	20
<b>합계</b>		<b>100</b>

○ 지원과제

평가 항목	세부항목	배점
운영·관리 계획 (50)	운영·관리 계획의 창의성 및 혁신성 - 사회적(산업적) 수요 적합성 - 혁신적 결과물 창출 가능성, 서비스 구현 가능성 등	25
	운영·관리 계획의 타당성 - RFP와의 부합성 및 지원 목표의 명확성 - 운영·관리 내용 및 추진체계의 적절성	25
운영·관리 과제 관리역량 (20)	책임자의 운영·관리 과제 관리 경력 및 실적 등	20
성과활용 (30)	운영·관리 결과의 수월성 및 기대효과 - 운영·관리 결과의 활용가치 수준, 과학계·국민·산업계에 미치는 파급효과	10
	성과창출전략의 적절성 - 플랫폼 지속 운영 및 범용적 활용 방안 등	20
<b>합계</b>		<b>100</b>

## 나. 중간평가 및 최종평가

### □ 중간평가

- (기본방향) 매년도 평가는 단계평가로 실시하여 계속지원 여부 및 지원규모 결정
- (평가항목) 사업목표와 전략을 고려하여 설정
  - 선정평가 항목을 보조지표로 설정하여 활용
  - 연구지원과제 주요 평가항목 중 하나로 연구과제 참여기관의 만족도 등을 포함

<중간평가 항목 및 평가표(예시)>

점검항목	세부항목
연구개발실적	목표 달성도
	연구수행 방법의 적절성
	연구결과의 우수성
	연구성과의 질적 우수성
연구개발계획	연구개발 목표의 타당성
	연구수행 방법의 적절성
	성과목표 관리의 적절성 및 기대성과 수준

- (평가절차) 수시점검 결과 및 분기보고서를 토대로 발표평가 실시
  - 연구지원과제는 글로벌 기술성평가 기관 등을 통한 연구과제별 글로벌 기술성 평가를 연 1회 이상 실시하여 중간평가 시 참고자료로 제출
  - 평가위원회 구성 시 사업의 연속성을 고려하여 기존 기획자문위원회 및 선정평가위원회 중 일부위원을 포함

### □ 최종평가

- (기본방향) 당초 사업목표 및 기대효과를 토대로 연구성과의 질적 우수성을 평가하고 결과에 따라 인센티브와 제재조치 부여

- 최종평가 시, 구축된 데이터베이스의 지속운영방안을 제시해야하며, 개발 내용에 대한 시스템 이용가이드도 작성 제출
- 과제책임자는 과제의 대표적 연구성과 소개서를 작성·제출
- (평가항목) 과제의 점수 및 평가등급은 연구 목표 달성도(70%), 연구성과의 우수성 및 활용성(30%)을 검토하여 절대평가로 결정

**<최종평가 항목 및 평가표(예시)>**

평가항목	세부항목	배점
연구 목표 달성도 (70점)	당초 계획된 최종 연구목표 달성 여부 - 선정평가 시 제시한 연구목표 달성 여부 - 연구주제안내서에서 요구한 목표 달성 여부	70
연구성과의 우수성 및 활용성 (30점)	연구성과의 질적 우수성 - 연구성과의 질적 우수성 여부 - 연구성과물의 실제 활용성 여부 - 총괄과 세부과제간의 (연계)우수성과 적절성 및 연구수행 성실성	30
<b>합계</b>		<b>100</b>

**< 최종평가 등급 부여 기준 >**

평가형식	S(최우수)	A(우수)	B(보통)	C(미흡)	D(매우미흡)
절대평가 (점수구간)	90이상	90미만~80이상	80미만~60이상	60미만~50초과	50이하

- (후속조치) 계속지원이 필요한 우수과제는 타 사업과의 연계 및 후속지원 검토

평가 등급	후속조치 내용
S (최우수)	▶ 연구책임자가 해당평가를 실시한 중앙행정기관의 장에게 새로운 연구과제 신청 시 <b>최종평가 후 2년간</b> 선정평가 점수의 <b>5% 이내 가점 부여</b> ▶ 우수결과물에 대한 실용화 지원 등 후속대책 마련 가능 ▶ 범부처 및 과기정통부 우수성과 사례 후보군에 포함
A(우수)	▶ 범부처 및 과기정통부 우수성과 사례 후보군에 포함
B(보통)	▶ 별도 후속조치 없음
C(하위)	▶ 연구책임자가 해당평가를 실시한 중앙행정기관의 장에게 새로운 연구과제 신청 시, <b>최종평가 후 2년간</b> 선정평가 점수의 <b>3% 이내 감점</b> 부여 가능
D (최하위)	▶ 연구책임자가 해당평가를 실시한 중앙행정기관의 장에게 새로운 연구과제 신청 시, <b>최종평가 후 2년간</b> 선정평가 점수의 <b>5% 이내 감점</b> 부여 가능 ▶ 연구개발결과가 극히 불량하여 실패과제로 결정된 경우 <b>3년 참여제한</b> 가능 - 단 연구개발을 성실하게 수행한 사실이 인정되는 경우 감면 가능

#### 4. 세부 연구과제 연계·협력

##### □ 세부 연구과제 성과가 상호 연계·활용될 수 있도록 연구지원과제 (코디네이팅센터) 중심의 공동 기획 및 지원

- 분기별 실무 회의(세부 연구과제 책임자 참여)를 통하여 세부 연구과제별 성과를 공유하고, 우선 해결되어야 할 과제나 연구수요에 대한 코디네이팅센터의 지원계획 등을 공유
- 코디네이팅센터 중심으로 연차별 시행계획을 마련하고, 신규과제 선정 분야 및 제안서 마련 등 기획과정에서 전문가들이 공동으로 참여하는 오픈 기획 추진
- 공동 협력과제를 적극 발굴하여 칸막이 없는 성과 교류 및 활용이 가능하도록 협력연구 활성화
  - ※ 기 수행 세부연구책임자가 기존의 성과를 바탕으로 신규과제에 공동 참여할 수 있도록 권장하거나, 우선 지원 등의 방안 활용
- 코디네이팅센터 중심으로 국제협력 협의체를 구축, 국제 컨소시엄에 국가 대표로 참여하고, 한국이 주도하는 새로운 국제 컨소시엄 마련을 위한 구체적인 협력 아젠더 발굴 등에 기술개발 분야별 국제적 연구역량을 고려한 협력·대응방안 공동 마련

##### □ AI, 신약개발 플랫폼 구축 및 활용을 위한 협력

- AI, 신약개발 플랫폼 구축사업은 신약개발에 소요되는 막대한 시간과 비용을 혁신하는데 중요한 플랫폼으로서의 가치가 매우 높음
- 이로 인해, 개발되는 API는 참여사업별 및 기관 간 필수적으로 공유되어야 하며 특히, 사업단 체제 하에서 통합 관리 및 활용
  - 연구자 친화적으로 접근할 수 있도록 통합관리 시스템을 조기에 마련하고 지속적인 고도화 운영 지원

## 제5장 타당성 분석

### 1. 사업추진 시의성

인공지능(Artificial Intelligence, AI)은 신약개발 전 단계에 활용되어, 신약개발 기간을 최대 절반(15년 → 7~8년)까지 단축할 수 있을 것으로 기대

□ 대표적인 고부가가치 산업인 제약산업의 비용대비 효과가 감소\*함에 따라 제약산업의 생산성을 개선할 수 있는 혁신이 필요한 시점

\* 제약 R&D의 비용대비 효과(딜로이트) : ('10)10% → ('16)4%

○ 제약사들은 신약개발 비용 부담과 실패 위험을 줄이기 위한 전략으로 오픈 이노베이션(Open Innovation)을 적극 추진

○ 인공지능은 신약개발에 소요되는 비용과 시간을 획기적으로 감축할 수 있는 혁신기술로 주목

— 임상관련 디지털 데이터와 딥러닝 기술의 폭발적인 진전이 신약개발의 기간과 위험률을 극적으로 단축

○ 특히, 다국적 제약사들은 인공지능 관련 기술을 보유한 벤처기업들과의 협업으로 인공지능을 활용한 신약 개발 중

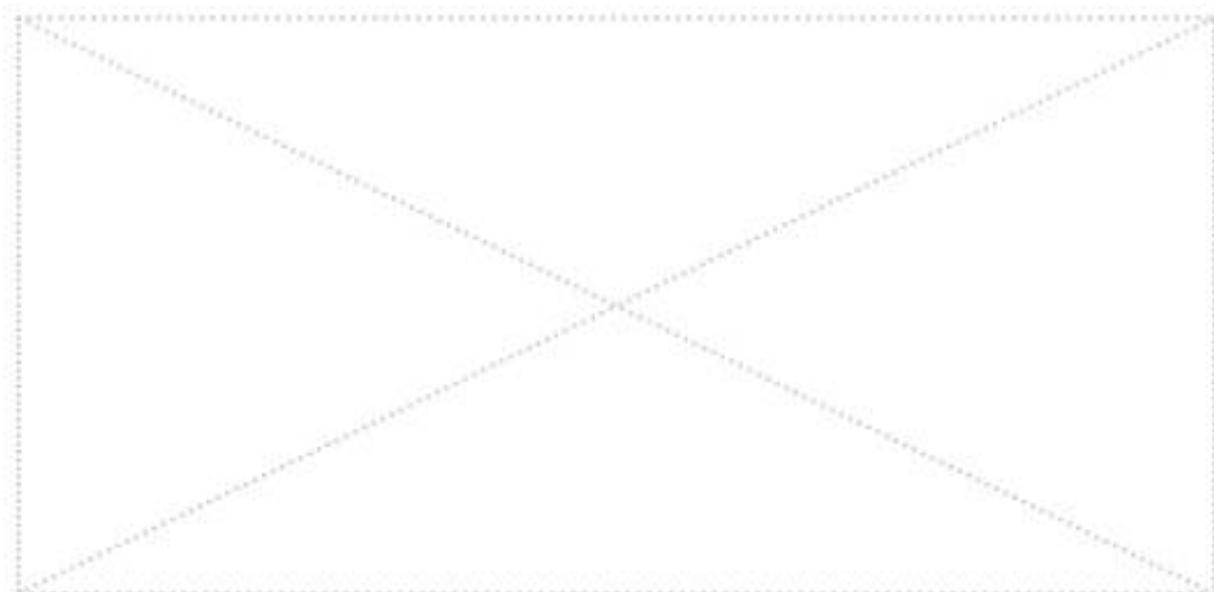
<표 42> 글로벌 제약사와 신약개발 AI업체 협력사례

국가	제약사	협력 AI업체	협력분야
미국	아스트라 제네카	Berg	파킨슨병 및 신경장애 관련 신약 개발 협력('17.8월)
	엘러간	Numedii	건선 치료를 위한 신약개발 협력('15.9월)
	GSK	Insilico Medicine	새로운 바이오마커·후보물질 발굴 협력('17.8월)

	머크	Atomwise	후보물질 발굴 협력('15, 연구내용 비공개)
	화이자	IBM Watson	항암제 개발을 위해 화이자 임상자료를 분석하고 객관적인 가설 수립을 지원하기로 계약 체결('16.12월)
스위스	노바티스	Insilico Medicine	약성 흑색종 연구 협력
	제네테크	GNS Healthcare	암 관련 기존 치료법의 효능에 영향을 치는 요인 연구 협력('17.6월)
프랑스	사노피	Recursion	유전질환 후보물질의 용도변경을 위해 업무 제휴('16.4월)
		Exscientia	당뇨 및 심혈관 질환의 새로운 약물 설계 및 화학 합성을 위해 280만달러 계약체결('17.5월)
이스라엘	테바	IBM Watson	호흡기 및 중추신경계 질환 분석과 만성질환 약물복용 후 데이터 분석을 통한 새로운 적응증 개발 협약 체결('16.10월)
유럽	얀센	Benevolent AI	난치성 질환 타겟 임상단계 후보물질 및 특허의 새로운 적응증 개발 추진('16.11월)
일본	아스텔라스	NuMedii	비공개 화합물에 대한 새로운 적응증발굴을 위해 협력 체결('16.1월)
	산텐	twoXAR	녹내장 신약 후보물질 발굴을 위한 업무 협력 체결('17.2월)
	다케다	Numerate	암·위장·중추신경계 장애 관련 소분자 치료법 개발 및 임상단계 후보물질 제안을 위한 연구협력 체결('17.6월)
		Recursion	희귀질환 신약개발*을 위한 연구협력 체결('17.10월) * 다케다가 보유 중인 250개의 후보물질의 새로운 적응증 탐색

- 아직 인공지능을 활용한 신약이 미국 FDA의 승인을 받은 사례는 없으나 FDA는 인공지능을 활용한 신약 개발과 관련된 가이드라인 준비 중

- 주요 선진국에서는 인공지능을 활용한 신약탐색이 괄목할 만한 성과를 내기 시작
  - 미국 바이오기업 수노비온은 엑스사이엔티아와 협업을 통해, 평균 4.5년이 걸리는 후보물질 개발을 인공지능으로 1년만에 종료
    - 시간당 3천만 개의 과학저널을 실시간으로 분석하는 자연어기술이 눈부시게 발달한 것에 기인
      - \* 최근 논문에 의하면 Q&A 정확도가 94%까지 도달하고, 개체명인식(Name-entity recognition)에서도 사람 인식률인 97.6% 에 근접한 93.4% F-measure를 획득함으로써 인간 수준의 문장을 이해하고 단어들 간의 관계를 인식하는 성능이 조만간 인간을 능가할 것으로 전망
  - 미국의 아툼와이즈의 경우 백만 개의 분자를 하루 만에 스크리닝 가능한 기술을 에볼라 바이러스 치료법에 적용('14)
    - 에볼라 질병에 1:1 인공지능 시뮬레이션을 적용해 보는 인공지능 탐험으로 과거에 에볼라 치료용으로 의도하지 않았던 8,000개의 약품들 중에서 1개의 치료제를 성공적으로 발굴



<그림 47> 빅데이터 + 인공지능 기반 약물 탐색

출처 : 제9회 신약포럼 발제자료

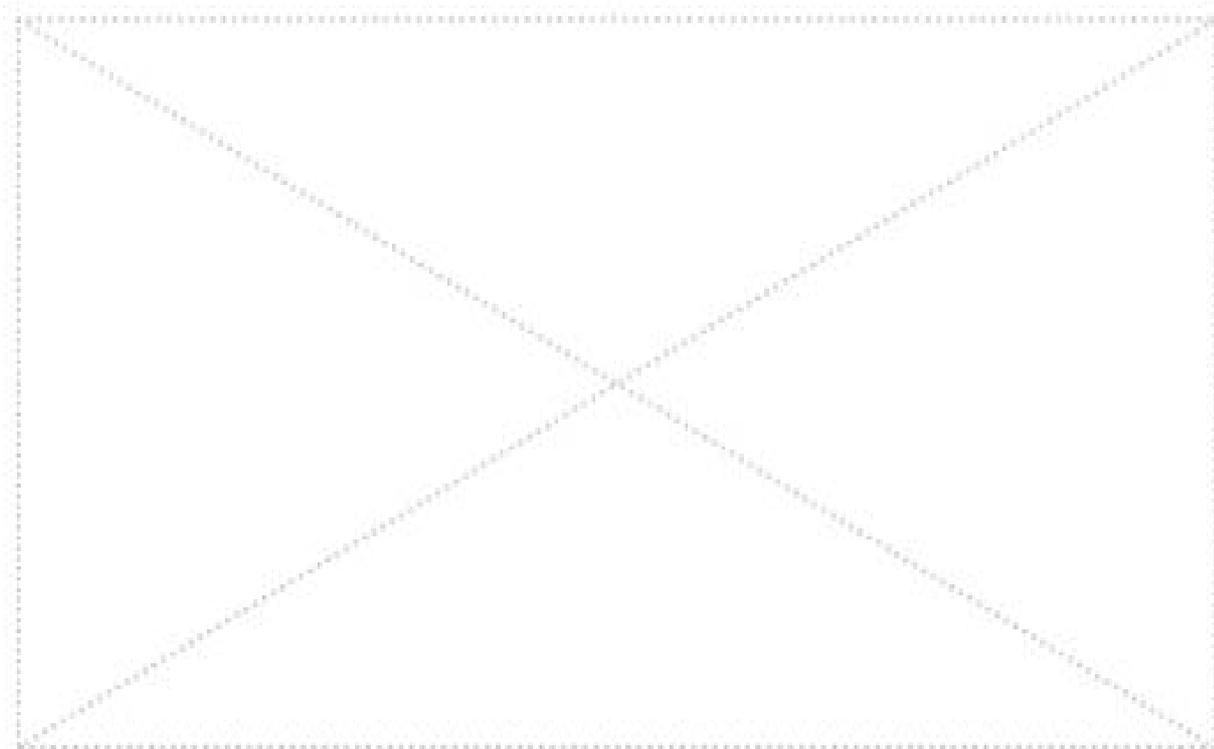
□ 최근에는 신약탐색 뿐 만 아니라 신약개발의 전 과정에서 대규모 데이터 및 인공지능 활용이 시도

○ 신약후보물질 탐색 과정 뿐 아니라, 정보탐색, 전임상, 임상, 제도, 인허가, 사용, 신약개발의사결정 등 여러 분야에서 다수의 인공지능 활용모델이 시도

<표 43> 신약개발 전과정 내 인공지능 활용 분야

신약개발단계	활용분야	기대효과
정보탐색단계	대규모 정보 수집 및 종합화	신규 타겟(New drug target) 발굴 가속화
	기존 약물을 다른 질환에 이용	신약재창출(drug repurposing) 효율 제고
후보물질단계	약물 디자인(Design Drugs)	유효 및 선도 물질(Hit & Lead compounds) 발굴 가속화
	새로운 신약후보 창출	후보 물질(Drug candidates) 발굴 가속화
	신약 후보물질 검증	약물 선별(Drug screening) 효율성 제고
전임상단계	전임상 실험 설계	전임상단계 진입 의사결정 효율성 제고
	독성예측	
	전임상 실험 수행	전임상 결과 분석 정확도 증대
임상시험단계	임상시험 설계	임상단계 진입 의사결정 효율성 제고
	임상시험 피험자 모집	임상 결과 분석 정확도 증대
	임상시험 최적화	
	계량약리학(Pharmacometrics)	
제조단계	스마트제약공장	맞춤형 제조 공정 개발 제고
인허가단계	인허가 의사결정	인허가 의사결정 효율성 증대
사용단계	인공지능기반 약물감시 (Pharmacovigilance)	복약순응도 제고 및 맞춤형 복약지도 가속화
신약개발 의사결정	개발진행/중단 의사결정지원 (Go/No-go Decision)	신약개발 투입 자원의 효율성과 유효성 증대

- 국내 제약회사 R&D 실무자를 대상으로 한 설문 결과 신약개발 인공지능 기술개발에 대한 수요도 높은 것으로 조사
  - 신약개발의 전 단계에서 인공지능의 중요도는 높은 것으로 인식되고 있으나, 높은 중요도에 비해 활용도나 활용여건은 다소 낮은 것으로 분석



<그림 48> 신약개발 인공지능 기술의 중요도 및 활용도 인식 수준

- 향후 신약개발 과정은 데이터 중심으로 재편될 것으로 예상됨에 따라 이에 대한 선제적 대응 필요
  - 인공지능을 활용한 신약개발은 기존 과정(화합물 합성, 랩 실험, 임상시험 등)의 대체제는 아니나, 효율성 제고를 위한 효과적 수단
  - 높은 R&D 비용으로 한계에 직면한 제약산업의 혁신을 위해서는 인공지능 기술 도입 및 데이터 활용이 필요

## 2. 정부지원의 필요성

- 다국적 제약사에 비해 규모가 영세한 우리나라의 제약기업이 개별적으로 인공지능을 신약개발에 도입하기에는 다소 부담
  - 인공지능을 활용한 신약개발은 아직 성공사례가 없는 만큼 기업이 적극적으로 투자하기에는 리스크 큰 분야로 초기에는 정부의 체계적 지원이 필요
    - 정부가 마중물 역할을 하며 성공사례 또는 성공가능성을 보여준다면 기업이 적극적으로 사업에 뛰어들 수 있을 것으로 기대
  - 국내 개별기업 단위의 AI업체와의 계약은 현실적으로 어려우므로, 정부 R&D 예산을 투입 하여 공용 ‘신약개발 AI 표준 모델’을 개발하고 국내 제약사가 자유롭게 활용할 수 있도록 공개할 필요
    - 개별적으로 인공지능 시스템 도입이 어려운 국내 제약사, 신약개발연구자 대상으로 인공지능 신약개발 시스템 공동 활용 지원을 한다면, 빠른 시일 내에 성과를 낼 수 있을 것으로 예상
- 산·학·연·관 컨소시엄을 통해 한국형 신약개발 인공지능 프로그램 개발 지원이 필요
  - 미국은 다국적 제약기업이 인공지능에 특화된 벤처기업과 계약 또는 자회사를 통해 자체적으로 연구개발
    - \* 예) Merck와 AI기업 Atowise의 협업 개발 등
  - 일본은 정부가 주도하여 인공지능을 활용한 신약개발을 위한 산학 연관 협력 사업 추진 중
    - 시급히 연구해야 할 6가지 AI 분야를 제시한 바 있으며 이중 신약과 관련해서 화상진단 지원, 치료 지원, 계놈의료분야를 강조
    - 4차 산업혁명 대응을 위한 ‘일본재흥전략’(15년 3월, 16년 4월)과 ‘AI 산업화 로드맵’(17년 2월)의 일환으로 추진 중인

정부 주도 ‘일본형(Japanese-style)’ 신약개발 AI 개발 프로젝트를 추진 중

\* 이 중 LINC는 이화학연구소 주도 하에 IT업계 와 바이오·제약업계, 학·연계 등이 참여하는 협력 컨소시엄으로, 3년에 걸쳐 신약개발 에 특화된 20여개의 AI 프로그램을 개발하고 일본 내 제약업계에 공개할 방침

<표 44> 美日의 신약개발 인공지능 개발전략 사업 모델

구분	미국 (개별기업 주도형)	일본 (수요기반형)
내용	<p>다국적 제약기업이 인공지능에 특화된 벤처기업과 계약 또는 자회사를 통한 연구</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- AI기업이 업종별로 특화</li> <li>- 제약과 IT 협업/교류 경험 풍부</li> </ul>	<p>제약바이오기업, IT기업, 연구기관 컨소시엄으로 제약바이오기업의 신약개발 필요를 우선으로 하는 AI 모델 우선 개발 (Pharmaceutical Pull)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 제약바이오 : 테마 제안 및 연구 리드</li> <li>- 학계 : 제약회사와 IT 기술/업체 매칭</li> <li>- IT기업 : 솔루션 개발 담당</li> </ul>
예시	<p>미국/EU의 민간 중심 다국적기업 협업 모델 (Merck와 AI기업 Atomwise와 협업 개발 등)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 일본 LINC 모델: 기업이 제안한 수요 아이템 중 우선적으로 29개 AI 모델 개발 (일본 후생노동성, 문부과학성)</li> <li>- 보건복지부/과학기술부 2019년 신규사업(인공지능 신약개발 플랫폼 구축) 모델</li> </ul>
Input (투입 정보)	<p>다국적 제약기업, AI 벤처기업 보유 정보 등</p>	<p>기업보유정보, 컨소시엄 참여기관 보유 정보, open data 등 활용</p>
Output (결과물 활용)	<p>주도한 다국적 제약기업의 독점적 활용</p>	<p>컨소시엄 참여기업 우선 활용 추후 비컨소시엄 기관으로 확산</p>
장점	<p>거대 R&amp;D 투자금과 빅과마들의 많은 데이터들이 활용되기 때문에 의뢰자(다국적 제약사)에 최적화 되어 결과를 얻을 수 있음</p>	<p>수요자 기반 컨소시엄으로 결과물이 빠른 시일 내에 도출될 수 있음</p>
단점	<p>소요 비용이 큼 정보와 확산은 기대할 수 없음</p>	<p>컨소시엄에 참여하는 기업들이 private data를 제한하여 제공할 수 있음</p>

- 우리나라의 경우, 매출액 기준 상위 10개의 대부분 국내 제약사들은 아직 인공지능 도입은 이뤄지지 않았고, 일부 국내 벤처 기업\*과 공동 연구 진행 중인 실정

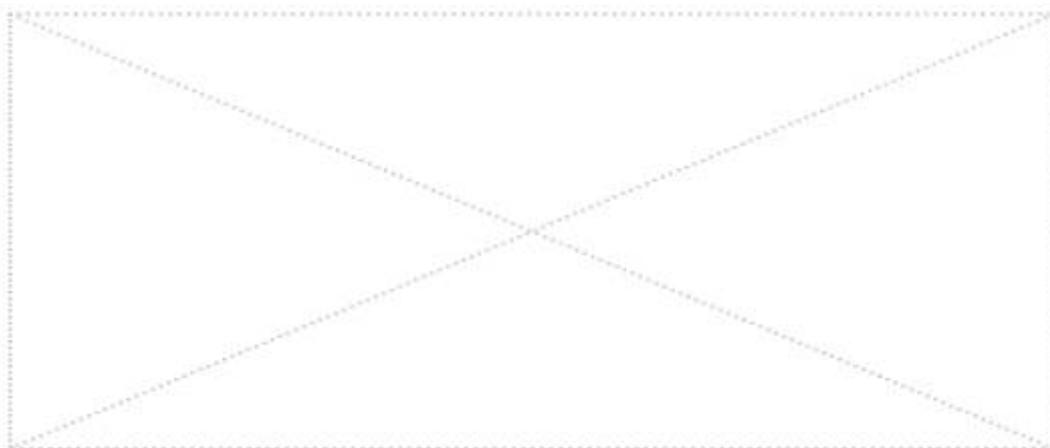
\* 최근 스탠다임, 신테카바이오, 루닛, 뷰노, 파로스 IBT 등 인공지능 스타트업들이 등장

- 우리나라의 제약산업의 규모를 고려하여 미국의 개별기업 주도형 보다는 일본의 수요기반형 사업모델을 벤치마킹이 효율적으로 판단
  - 국내 기업의 수요를 바탕으로 한 수요기반형 사업모델을 활용
  - AI 표준 모델 개발 및 확산을 통해 국내 신약개발의 효율과 생산성을 제고

- 각 기관이 보유하고 있는 환자 빅데이터를 활용하기 위해서는 정부의 적극적인 지원이 필수

- 질병관리본부, 건강보험심사평가원, 국민건강보험공단 등이 협의해 개인정보 보호를 전제로 이들 기관이 보유한 대규모 빅데이터 활용이 필요

- 제4차 과학기술기본계획에서도 신약과 인공지능 두 분야 모두를 정부 R&D 중점투자 분야로 선정



<그림 49> 분야별 특성을 고려한 맞춤형 혁신 성장동력 육성전략

출처 : 제4차 과학기술기본계획(2018~2022)

### 3. 상위계획과의 부합성

□ 제4차 과학기술기본계획(2018~2022)에서 선정한 120개 중점과학기술에 인공지능과 신약이 모두 포함

○ 11개 대분류, 43개 중분류에서 120개 중점과학기술 도출

대분류	중분류	중점과학기술
생명·보건의료	신약	맞춤형 신약 개발 기술 지능형 약물 전달 최적화 기술
ICT·SW	빅데이터·인공지능	지능형 빅데이터 분석 및 활용 기술 초고속·대용량 데이터 플랫폼 기술 다중 인공지능 공통 플랫폼 기술

출처 : 제4차 과학기술기본계획(2018~2022)

□ 국가과학기술자문회의, 4차산업혁명위원회 등 주요 회의체를 통해 인공지능을 활용한 신약개발의 필요성 지속 제기

※ 4차 산업혁명 대응계획('17.11, 4차위), 연구데이터 공유·활용 전략('17.12, 국과심), 혁신성장동력 추진계획('17.12, 국과심), 헬스케어특별위원회('18.1~ , 4차위) 등

○ 특히 헬스케어특별위원회의 6대 선도프로젝트 중 하나로 선정되어('18.2), 설문·수요조사\* 실시 및 우선순위 검토 완료

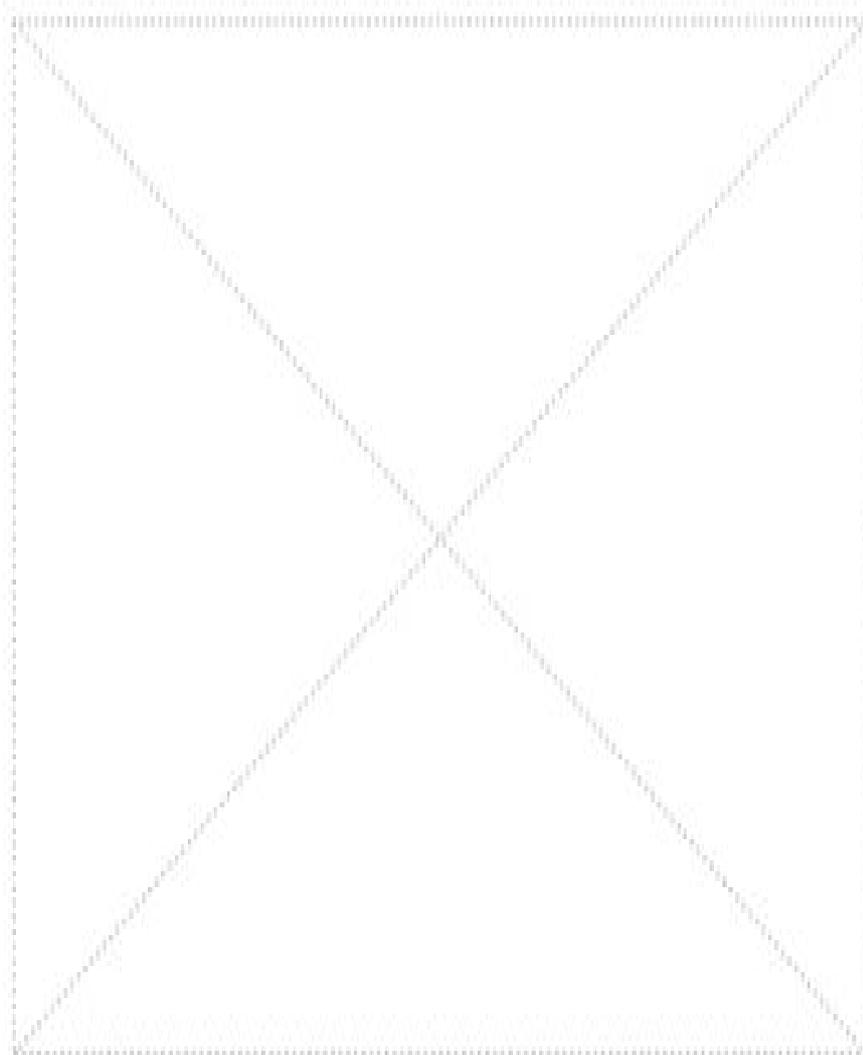
\* 제약사 실무자 대상 설문조사('18.3)를 통해 96개의 응답을 접수하였으며, 산·학·연 대상 수요조사('18.2~3)를 통해 17개의 활용 분야를 대상으로 총 44개 과제를 접수

주요 논의 경과	주요 논의 내용
헬스케어특위 2차회의 ('18.2.8)	핵심프로젝트로 선정
1차 분과회의 개최 ('18.2.23)	프로젝트 방향에 대한 공감대 형성
설문조사·수요조사 ('18.2~3)	설문조사 96건, 수요조사 44건 접수
1차 작업반 회의 개최 (4.24)	우선순위 적절성, 과제 기간·규모 검토
2차 작업반 회의 개최 (5.24)	성과목표, 데이터 관리 방안 등 검토

□ 제약 관련 주요 계획에서도 인공지능을 활용한 신약 R&D 지원 계획 발표

○ 제2차 제약산업 육성·지원 5개년 종합계획(2018~2022)

- ‘신약 개발 역량 제고를 위한 R&D 강화’의 실천과제로 ‘인공지능을 활용한 신약 R&D’ 선정



<그림 50> 신약 개발 역량을 위한 R&D 강화 계획

○ 혁신 성장을 위한 사람 중심의 4차 산업혁명 대응계획

- 스마트 의료 산업 창출을 위해 인공지능 기반의 개인 맞춤형 정밀진단·치료 구현('20~), 신약 개발주기·비용 단축(후보물질 '15, 85개→'22, 129개)을 목표로 제시

#### 4. 기존 사업과의 차별성

- 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업은 기존 유사사업과의 차별화된 신약개발 단계별 인공지능 플랫폼을 개발하고 신약개발에 적용하는 사업
  - 본 사업은 신약개발과 관련하여 후보물질 발굴, 신약 재창출, 스마트 약물감시 등에 대한 데이터 확보와 표준화, 인공지능 솔루션 개발과 예측 결과물의 실험적 검증 추진 등을 포함
  - 과기정통부에서 본 사업과 유사한 사업들은 ‘인공지능 바이오로봇의료 융합기술개발사업’과 ‘혁신신약 파이프라인 발굴사업’으로 본 사업의 목표와 수행방법 등에 확연한 차이가 존재
    - (인공지능바이오로봇의료융합기술개발) 바이오 신산업·의료기기 산업 육성을 위한 인공지능, 로봇 융합 의료기기 전주기 기술개발 지원을 관련 주요부처 간 협업으로 추진
      - 원천연구→제품화→임상 및 인허가 등 의료기기 개발 전주기를 과기정통부산업부복지부식약처 등 관계부처 협업을 통해 원스톱으로 지원
    - (혁신신약 파이프라인 발굴) 대학·연구소 등을 대상으로 신약개발 초기단계를 지원하여 항암제, 당뇨치료제 등 기업에 기술이전이 가능한 유망 후보물질 발굴
  - 또한, 복지부에서 본 사업과 유사한 사업들은 ‘인공지능 정보의학’으로 본 사업의 목표와 수행방법 등에 확연한 차이가 존재
    - (인공지능정보의학) 국내 의료환경에 맞는 인공지능 의료기기 개발 기술 확보 및 기술적 성숙도가 높은 영상판독보조시스템 개발을 통해 성공모델 창출
      - AI(딥러닝) 훈련용 데이터(영상, 음성)셋 구축, 연구개발 지원용 오픈데이터 플랫폼 구축, 임상적용 시범사업 지원

<표 45> 유사사업과의 비교

사업명	인공지능바이오 로봇의료융합기술 개발사업	혁신신약 파이프라인발굴	인공지능 정보의학	인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업
추진부처	과기정통부, 복지부, 산업부	과기정통부	보건복지부	과기정통부
총연구기간	'18~'22	'19~'22	'18~'23	'19~'21(안)
총 예산	420억원	450억원	35.7억원('19)	225억원(안)
최종목표	인공지능, 로봇 기술 등 4차 산업혁명 핵심 기술을 의료 산업에 융합한 신개념 의료 융합기술을 부처 협업으로 전주기 지원	국민건강 이슈에 선제적으로 대응 하고 의료현장의 수요를 반영, 헬스케어·의료기 기 등 차세대의 료기술개발	국내 의료환경에 맞는 인공지능 의료기기 개발 기술 확보 및 기술적 성숙도가 높은 영상관독보 조시스템 개발을 통해 성공모델 창출	글로벌 신약 개발에 필요한 인공지능 플랫폼을 구축 하여 신약개발에 소요되는 시간과 비용을 대폭 단축
사업내용	4차 산업혁명 대비 범부처 협력을 통해 지능형 인체 삽입형 의료기기, 스마트 진단/치 료 통합솔루션, AI기반 로봇 융합 의료기기 등 중점투자 기술분야에 대한 핵심기술 개발 지속 지원	글로벌 수준의 혁신신약 개발을 위한 후보물질 파이프라인 발굴  특히, 치료법이 개발되지 않은 분야에 대한 혁 신 신 약 (First-in-Class 신약) 후보물질 도출을 지원해 국내기업의 글로벌 시장진입 가능성 제고	AI(딥러닝) 훈련용 데이터 (영상, 음성)셋 구축, 연구개발 지원용 오픈 데이터 플랫폼 구축, 임상적용 시범사업 지원	후보물질 발굴, 스마트 약물감시 등 신약개발 단계별 인공지능 플랫폼을 개발 하고 신약개발에 적용

## 제6장 기대효과

### 제1절 과학기술적 기대효과

□ 후보물질 탐색 등을 포함한 기초연구부터 승인취득까지 13년이 소요된다고 가정하면, 13년에서 8.8년으로 33% 기간 단축

○ 데이터 작성자와 사용자간의 1:N 공유관계를 형성할 수 있도록 데이터 풀을 확대하는 새로운 협력 유도

○ 연구범위 확장 가능성 및 연구자원 활용기대 강화연구의 영향력과 가시성 증가와 연구원에게 연구 결과물로서의 신용제공

○ 신약개발 과정에서의 AI 활용을 통한 기대효과는 정량적인 산정에 어려움이 있으나 한국보다 7년 정도 선행한 일본의 LINC 사업에서 나타난 활용 기대효과와 최근 과기정통부 인공지능(AI) 차세대 신약개발 플랫폼 구축 과제에서 나타난 기대효과를 감안한다면 국내 신약 R&D 비용에 대하여 아래와 같은 효과를 예상할 수 있음

- 기초연구단계의 경우, IBM 왓슨의 경우 2500만개의 MEDLINE 요약, 백만 개 이상의 의학저널 기사, 4백 50만 개의 특허 정보가 지속적으로 갱신되어 축적되는 것으로 되어있음. 오타와대학에 의하면 최초의 과학논문이 발간 된 1665년 이후 5000만개 논문을 능가했으며 일 년에 250만개 저널이 생산됨. 반면 연구자 평균 일 년에 200~300 개의 과학 논문을 읽는 것으로 알려져 있음. 베네볼런트 AI의 경우, 수백만 개의 과학연구 논문으로부터 수조개의 문장과 단락을 찾아내어, 100개의 잠재적 가설을 수립하고, 5개 가설로 수렴하여 루게릭(ALS)의 잠재적 치료법을 일주일 만에 두 개 발견함

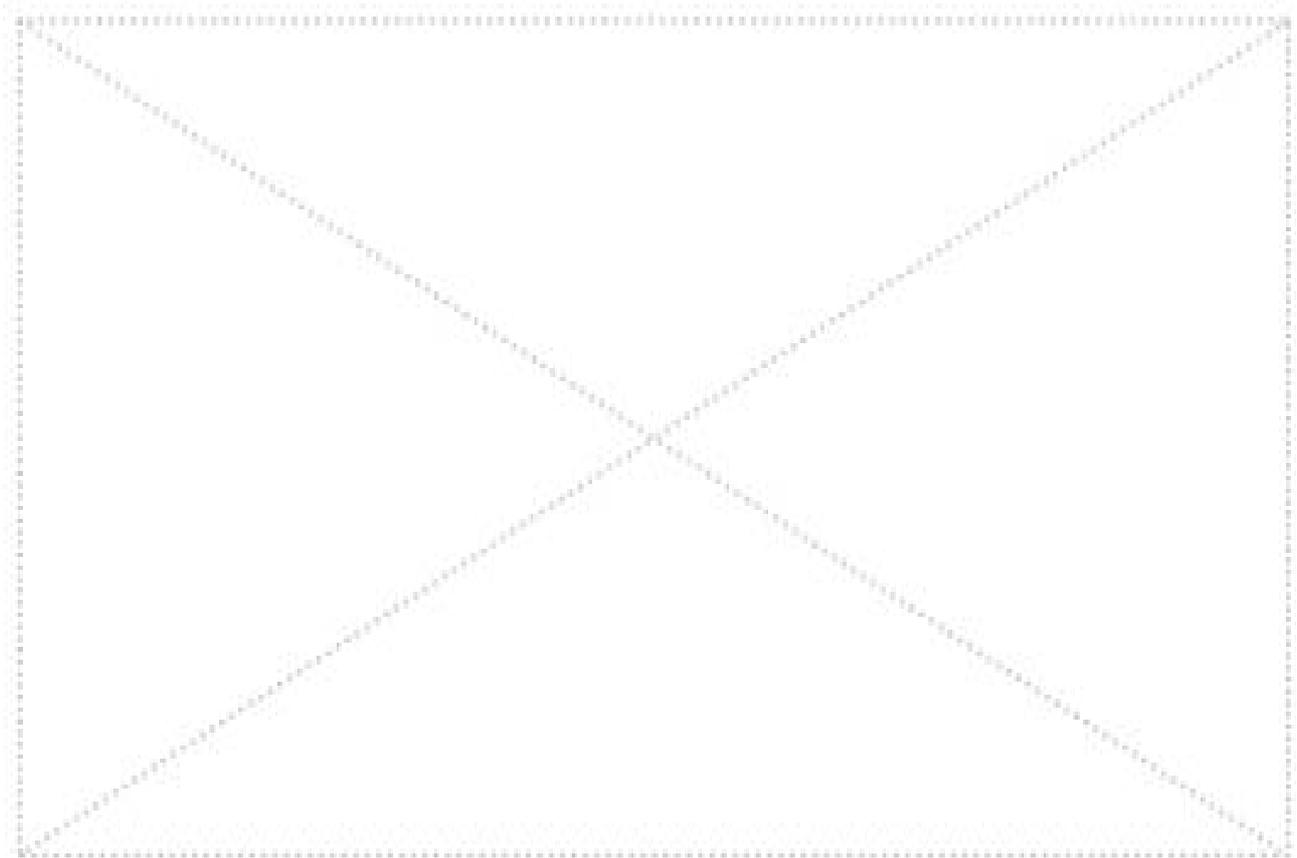
- 특히 최근 과기정통부 인공지능(AI) 차세대 신약개발 플랫폼구축과제 진용이 갖추어지면서 화합물 빅데이터 플랫폼

구축과 약물-표적 간 관계 그리고 약물작용 등을 예측하는 시스템을 이용하여 후보물질 탐색기간을 평균 5년에서 1년으로 단축될 것으로 예상하여 이를 기초연구(탐색) 단계에 반영할 수 있음

- 약물 발견의 경우, AI는 대용량의 데이터를 처리해서 다량의 미묘하고 복잡한 동향을 판별하는데 인간보다 훨씬 효과적. GSK와 미 국립 암 연구소가 관장하는 ATOM 컨소시엄의 경우, AI를 활용하여 질병에 대한 신약 개발 기간을 통상 4~5년 걸리는 것을 1년 이하로 줄이는 것을 목표로 하고 있음
- 임상시험의 경우, AI를 이용한 데이터의 문맥화 이해와 전체 임상시험 기간 중에 환자를 유지하는 기술을 통하여 임상시험을 수행하는 기간을 30% 단축할 수 있는 것으로 예상되고 있음. (Medium, How Artificial Intelligence is transforming the drug development process, Mar 16, 2018)

## 제2절 사회적 기대효과

- 신약개발에 소요되는 시간·비용 단축, 경제적 부가가치 창출, 산업 규모 확대 및 인력양성 등 일자리 창출 등
  - 과제를 통해 수립된 계획 및 방향을 토대로 신약개발 플랫폼을 구축
    - 통상 신약개발에 평균 3조원의 R&D 비용 그리고 10~15년의 기간이 소요 (Forbes,2013)
    - 한국 신약R&D 프로젝트 1개에 13년 동안 1조의 신약R&D 비용이 소요된다고 가정하고 일본 LINC와 과기부 AI 차세대 신약개발 플랫폼 구축 과제의 기대효과와 견주어 적용해 봄
    - 한국적 상황에서의 후발 추격자 입장을 반영하여 아래그림과 같이 AI가 가져오는 R&D 비용은 1조에서 6천억 원으로 40% 절감이 가능



그림출처 : 후생노동성, KOTRA해외시장뉴스, 재가공

<그림 51> 신약개발에 AI 활용이 가져오는 효과

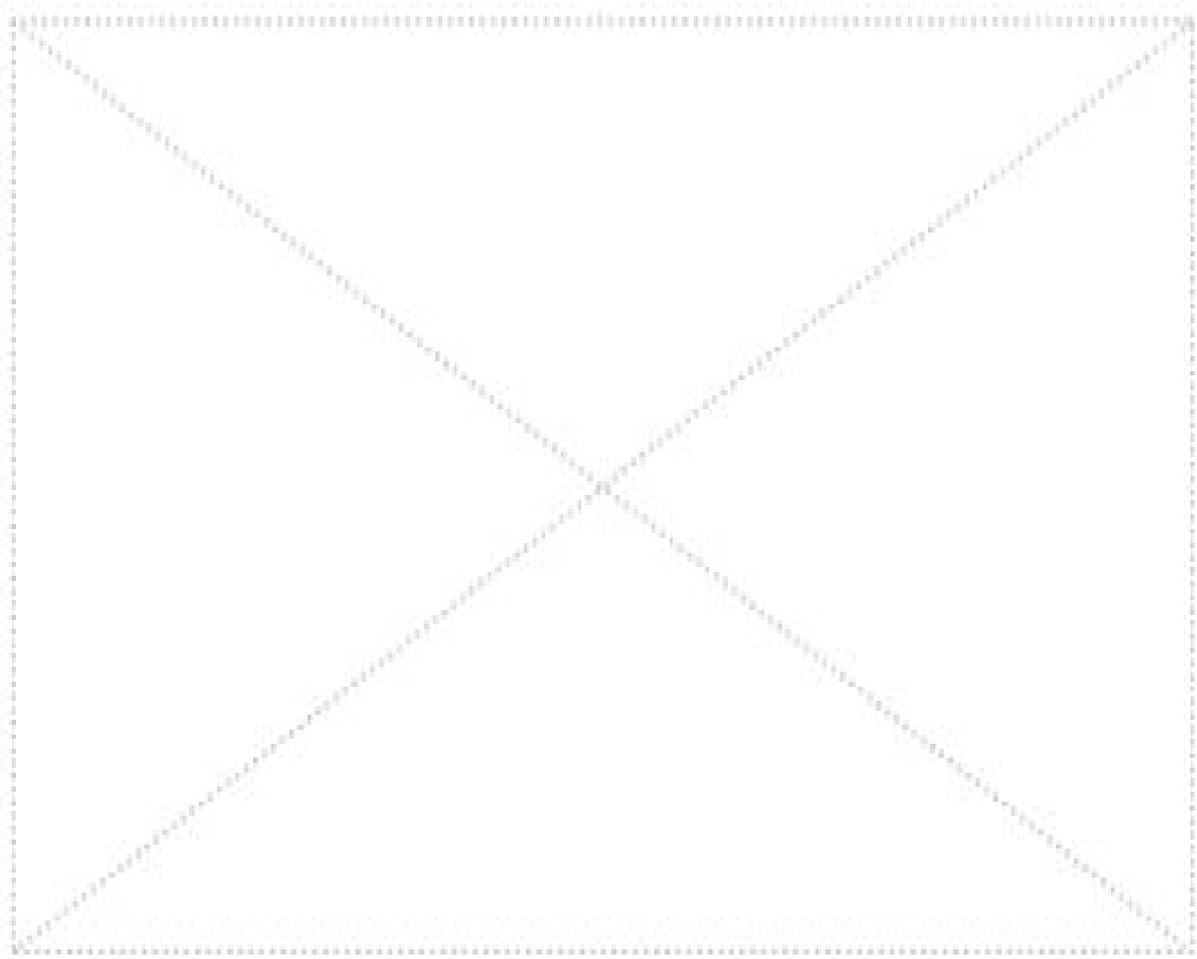
## 제7장 후속 연구제안

### 제1절 한국 특유의 AI 신약개발 발전방향안

- 신약을 개발하는데 10년 이상의 오랜 기간이 걸리는 점에서 개방형 혁신으로 연구개발을 확장해 접근하는 방향은 신약의 성공률을 높이는 방법이며, 전통 제약사들이 실적회사에서 신약회사로 변화하는데 큰 도움이 되고 있음
  - ⇒ 글로벌 빅파마가 후보물질 발견단계에서도 라이선스 아웃 계약을 체결하는 것은 우리나라 제약바이오 기업이 더욱 유연성을 가지고 초기 단계에서도 가치를 인정받을 수 있는 길이 열려있다는 점을 시사
- 신약개발 초기 단계에 집중해도 사업성과를 낼 수 있다는 측면에서 빅데이터와 다양한 전문지식이 필요한 신약탐색 단계에 주목할 필요가 있어 보임<sup>2)</sup>
  - 신약탐색에는 수많은 문헌과 보고서, 논문, 생물학 정보 빅데이터를 다루고 분석해내야 하며, 데이터가 이미 규모면에서 사람이 다룰 수 있는 수준을 넘어선 지는 이미 오래전 일임<sup>3)</sup>
- 인공지능·빅데이터 활용은 정보탐색, 약물설계 단계부터 약 시판 후 사후추적 단계에 이르기까지 다양하게 활용 가능하며, 특히 전문가의 연구개발 프로세스를 최적화하고 개발을 가속화시켜 초기 약물 후보군 발견에 필요한 시간과 비용을 최소화할 것으로 예상됨
- 따라서, 인공지능이 적합한 데이터를 탐색하고 새로운 연구가설을 수립할 수 있도록 근거를 제시하며, 분석결과를 조직화하고 연구팀에 공유하여 협업 능력을 높일 수 있는 인공지능 기반 신약개발 모델 구축이 필요한 시점임

2) 배영우, "신약개발의 패러다임 변화", 메디포뉴스(2018.12.06)

3) 디지털 데이터는 지속적으로 증가중이며, 2020년에는 73일마다 2배씩 증가할 것으로 예측됨(Densen P, 2011)



<그림 52> 인공지능 신약탐색 모델의 예시

## 제2절 본 사업 이후의 범용적 확산을 위한 방향안

### □ 개발된 결과의 보호, 공유, 활용

- 인공지능 플랫폼의 소유권은 각 과제 연구책임자에게 부과하나, 플랫폼은 모두 활용 가능하도록 API 공개
- 플랫폼 구축을 통한 약물과 단백질 등의 디지털데이터의 데이터베이스 API를 통하여 사용자들에게 허용되도록 고려하고 이외의 개별기업 등이 보유한 데이터는 보호받을 수 있도록 하여 오픈이노베이션을 통한 알고리즘과 데이터의 공유는 촉진
- 사업 종료 후에도 지속가능한 활용을 위해 벤처기업 혹은 대학이 소유권을 보유하도록 하여 향후 부가가치 창출 도모
- 본 사업을 통해 생산된 효능, 독성 등의 연구데이터는 데이터 허브에 기탁·등록 후 공개하 며, 특히 보호를 위한 암호화 등 보안장치 마련

### □ 인공지능 신약개발 전문 인력 양성에 활용

- 인공지능 플랫폼을 관리·활용하고, 관련 빅데이터를 수집·관리할 수 있는 IT+BT 융합형 신약개발 전문 인력 양성계획 수립에 활용
- AI를 활용한 신약개발은 BT와 IT 기술의 전반적 이해, 신약개발 전문용어 및 개념 습득 등 해당 분야에 특화된 전문인력 필요

### □ 공공데이터 공유, 활용 촉진 등의 제도 개선 활용

- 인공지능 신약개발에 활용되는 연구데이터, 의료데이터 등 공공데이터의 표준화·체계화를 통한 공유·활용 촉진
- 현재 화학(연)이 보유한 화합물 정보(연구데이터)는 암호화·표준화 작업을 통해 공개를 추진(현재 150개 타켓, 110만 종 데이터 공개 가능)하고 특허가 공개되지 않은 화합물은 암호화하여 기탁자의 지적 재산을 보호하는 제도를 확립할 것을 제안

### 제3절 유전체 기반 빅데이터 활용 주요기술 제언

본 기획연구는 화합물 데이터베이스를 기초로 하는 인공지능 신약개발 플랫폼 개발사업으로 향후 유전체정보 등을 활용한 과제들을 아래와 같이 추가 제안

#### ① 타겟과 물질간 인공지능 훈련, 분석, 시각화 알고리즘 개발

<b>과제명</b>	○ 타겟과 물질간 인공지능 훈련, 분석, 시각화 알고리즘 개발			
<b>최종목표</b>	○ 약물의 구조, 질환, 의료데이터, 유전체 간의 관계 학습 및 추론에 의한 인공지능 기반 데이터 시각화, 분석 프로토콜 및 타당성 평가 기술 구축			
<b>주요 연구내용</b>	○ 다중 의료정보 수집/정제 및 데이터 시각화 연구 ○ 알려진 생물학적 타겟과 후보 화합물간의 관계 학습 ○ 학습모델을 기반으로 생물학적 타겟 추론 및 바이오마커기반 치료제 후보 물질 예측 ○ 발굴된 타겟 및 적응증에 대한 결과 해석이 가능한 시각화 모듈 개발			
	<b>구분</b>	<b>2019</b>	<b>2020</b>	<b>2019</b>
	<b>연도별 연구목표</b>	인공지능을 위한 다중 의료정보 DB와 기술 기반 플랫폼 구축	결합친화성발견플랫폼 워킹모델	결합친화성발견플랫폼 제품
	<b>연도별 주요연구 내용</b>	국내외 물질 및 임상 데이터베이스 정제 및 가공  인공지능을 활용하기 위한 클라우드 환경 인프라 스트럭처, 컨볼루션 RNN, GAN, 강화학습등 딥러닝 기술 기반, 분자설계, 시각화모사등 기반기술 플랫폼 구축	소규모DB 기반 결합도 예측  소규모 데이터 개체명 인식기술  결합 친화성 발견 플랫폼에서 도출된 후보 물질들로부터 생성적 적대신경망을 통해 분자구조체 생성  딥러닝의 구조적 확률모델을 통한 개체별 연관지식 그래프 구현	대규모 DB 최적화  수천가지 질 분자와 수백가지의 질병과 구조에 대한 문헌, 논문, 특허 및 임상 정보 등으로부터 분자구조에 대한 평점, 그리고 전사(pathway)에 대한 평점등을 유효성 부작용, 세 포단위별 특성, 분자결합도, 점수 및 엔터티 반영 하여 일정한 점수 이상의 후보들을 파이프라인개발
	<b>연도별 주요 성과물</b>	다중 의료정보 DB 딥러닝 개발을 시작할 수 있는 기반플랫폼	결합 친화성 발견 플랫폼 워킹모델	결합 친화성 발견 플랫폼 시제품 성능평가
<b>TRL</b>	3단계	4단계	5~6단계	
<b>활용 데이터베이스</b>	○ 내부/상용 데이터 : - 내부 약물 구조 및 부작용 DB			

	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 내부 타겟 물질 및 유전자관련 DB</li> <li>- CHEMDNER corpus: 84,000 화학물질에 대한 전문가 주석본 이용하여 엔티티 관계 활용</li> <li>- 4백만 특허 데이터 (5개 주요 문헌들로부터): 부작용, 상용화 제약여부 활용</li> <li>- 내부 질병 및 약물 관련 오믹스 DB</li> <li>○ 외부/공공 데이터 :</li> <li>- 2800만 MEDLINE 요약 (5600 개의 저널): 문헌 연구에 기반 제공</li> <li>- 1700만 과학저널 기사: 문헌 연구에 기반 제공</li> <li>- opentargets 의 20,000+ 의 타겟 정보: 물질, 타겟, 질환간의 관계규명에 필요</li> <li>- 1.7M ChEMBL 화학구조 DB: 후보물질 및 잠재신 약 분자설계에 기반 데이터</li> <li>- Genomics in Drug Sensitivity in Cancer (GDSC): 유전체 정보 DB</li> <li>- COSMIC cell line project (CCLP): CELL Line DB</li> </ul>
<p style="text-align: center;"><b>정성적/정량적 성과지표</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 정성적 지표: 인공지능신약개발 컨소시엄 기업의 활용도 평가 기준 충족</li> <li>○ 정량적 지표: 결합 친화성 발견 및 분자설계 플랫폼 개발에 서 기존 딥러닝 AUC 측정치보다 10% 이상 우위를 점하고, 질병과 분자구조로 부터의 관련 스코어링에 의한 리드 DB 의 유효성 지표목표 달성</li> </ul>

## ② 특정 질환 치료를 위한 환자 유전체정보 중심 맞춤 치료제 예측 기술

<p><b>과제명</b></p>	<p>○ 특정 질환 치료를 위한 환자 유전체정보 중심 맞춤 치료제 예측 기술</p>
<p><b>최종목표</b></p>	<p>○ 다중 의료데이터 (유전체 데이터, 임상 데이터 및 청구데이터 등) 통합에 의한 인공지능 기반 환자 유전체정보 중심 수요 분석 및 맞춤 치료제 후보 물질 발굴</p>
<p><b>주요 연구내용</b></p>	<p>○ 다중 의료정보 수집·통합 분석 플랫폼 구축 및 신규 치료제 개발 수요 예측</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 임상 및 유전체 정보를 아우르는 다중 의료정보의 수집 및 국건영(심평원 혹은 국민건강 보험공단 데이터) 데이터와의 연계</li> <li>- 다중 의료데이터 기반 질병, 약물, 유전체 정보 간 네트워크 구축 및 처방 패턴 분석과 신규치료제 수요 예측</li> <li>- 질환 특이 비정형 데이터 수집 방법론 수립</li> <li>- 통합 데이터 시각화 및 분석 플랫폼 개발을 통한 치료제 개발 수요 예측</li> </ul> <p>○ 환자 바이오마커 기반 맞춤 치료제 예측 기술 개발 및 신규 치료제 후보 물질 제시</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 다중 의료정보 및 공개 빅데이터를 이용한 인공지능 기반 환자 맞춤 치료제 예측 기술 선행 개발 및 성능 평가</li> <li>- 의료정보 통합 분석으로 도출된 신규 치료제 수요층에 대한 치료제 후보 물질 예측</li> <li>- 예측된 후보 물질에 대한 실험 검증을 통해 예측 기술의 타당성 평가</li> </ul>
<p><b>활용 데이터베이스</b></p>	<p>○ 임상정보, 건강보험심사평가원</p> <p>○ 국내외 공개 의료 및 연구 빅데이터</p> <p>○ 공공·민간 보건의료 빅데이터 플랫폼 연계 지원</p> <p>○ 보건복지부 정밀의료 사업단 협력 연구</p>
<p><b>특이사항</b></p>	<p>○ 3개 이상의 의료기관 연계, 3개 이상 대학 연구실 연계, 3개 이상의 기업 연계</p> <p>○ 클라우드 기반 분석 플랫폼 및 인공지능 알고리즘 개발</p>

### ③ 다중 데이터분석을 통한 질환 연관물질 설계 및 평가

과제명	○ 다중 데이터분석을 통한 질환 연관물질 설계 및 평가
최종목표	○ 다중 의료데이터(화합물, 유전체, 임상 및 청구데이터 등) 통합에 의한 인공지능 기반 결합 파트너 도출 및 구조분석을 통한 유사한 물질 발굴
주요 연구내용	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 다중 의료정보 수집, 통합 분석 플랫폼 구축 및 신규 치료제 개발에 대한 수요 예측             <ul style="list-style-type: none"> <li>- 국건영 데이터를 포함한 다중 의료 빅 데이터의 수집과 분석(성별, 나이, 유병률, 치료율 등)을 통한 수요 예측</li> <li>- 연구대상 질환의 특이 비정형 데이터 수집 방법론 수립</li> <li>- 임상 데이터 기반 질병, 약물, 유전체 및 오믹스 데이터의 품질 파악 및 디지털화</li> <li>- 임상데이터 중심의 분석을 통한 연구대상 선정(대상 질환 군 내 독특한 아형 선정)</li> <li>- 대상 질환의 병태기전 및 임상데이터를 포함한 다중 데이터 분석을 통한 질환 연관물질(biomarker) 발굴 및 시각화</li> </ul> </li> <li>○ 발굴된 biomarker의 검증             <ul style="list-style-type: none"> <li>- 빅 데이터를 활용한 관련성 검색(논문, Disease DB, Omics DB 등을 활용)</li> <li>- in vitro/ in vivo 실험을 통한 증명(validation)</li> <li>- 검증을 위한 임상 샘플에서의 재 분석(기존 약제 반응성 등을 포함)</li> </ul> </li> <li>○ 관계학습을 통한 biomarker 기반 후보 화합물(약물)의 설계 및 선정             <ul style="list-style-type: none"> <li>- 빅데이터 분석을 통한 biomarker binding partner 도출</li> <li>- 도출된 binding partner의 PDB를 통한 구조 분석</li> <li>- Babel tool 등을 이용하여 biomarker binding partner와 유사한 chemical 추출</li> <li>- chemical과 유사한 ligand 검색</li> <li>- Disease DB에서의 관련성 정보 추출</li> <li>- 추출된 chemical 및 ligand 구조를 기반으로 program을 활용한 후보 약물 설계(Hit 발굴)</li> </ul> </li> <li>○ 설계된 약물의 기초 평가             <ul style="list-style-type: none"> <li>- Autodock program을 통한 binding model 추출 및 amber simulation 통한 energy 비교 및 분석</li> <li>- AI 프로그램을 통한 평가(물성, 독성 등)</li> <li>- 실험을 통한 평가(물성, 효능, 독성 등)</li> </ul> </li> <li>○ biomarker 기반 설계약물의 특허전략 수립             <ul style="list-style-type: none"> <li>- 개발 기간을 고려한 단계별 portfolio(권리범위 및 방어 전략)</li> </ul> </li> </ul>
활용 데이터베이스	심평원 자료, Disease DB, Omics DB, PDB list 등
특이사항	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 산/학/의료기관 중 의료기관을 포함한 최소 2개 이상 기관 연계</li> <li>○ 클라우드 기반 분석 플랫폼 인프라 사용 비용 포함</li> </ul>

4 멀티스케일 지식 네트워크 구성과 인공지능 Go/No-Go 탐색

<p><b>과제명</b></p>	<p>○ 멀티스케일 지식 네트워크 구성과 인공지능 Go/No-Go 탐색</p>
<p><b>최종목표</b></p>	<p>○ 통합된 물질-세포-조직-기관-전신(whole-body)의 멀티스케일 네트워크를 활용한 신약 후보탐색</p>
<p><b>주요 연구내용</b></p>	<p>○ 양질의 국내외 공공 빅데이터 데이터베이스 발굴을 통한 신약 개발 정보 탐색 인공지능 기술 개발</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 국내외 공공 오믹스(genomics, proteomics, metabolomics) 및 지식 데이터베이스(신약 개발 파이프라인, 임상 결과, 화합물 구조와 부작용 등 포함한 기존 약물 정보) 빅데이터 데이터베이스 발굴</li> <li>- 데이터베이스의 텍스트 및 이미지 정보 활용을 위한 텍스트 기반 자연어처리 기술과 심층신경망 기술 개발</li> </ul> <p>○ 지식 네트워크(knowledge network) 기반 빅데이터 정제 기술 개발</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 사용자 입력 적응증, 타겟, 혹은 화합물에 관련된 오믹스 데이터와 지식 기반 정보 정제 기술개발</li> <li>- 정제된 오믹스 데이터와 지식 기반 정보를 통합한 지식 네트워크 구성 알고리즘 개발</li> </ul> <p>○ 신약의 효과와 안전성 예측을 위한 멀티스케일 네트워크 기반 인공지능 기술 개발</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 적용 적응증과 관련된 지식 네트워크를 기반으로 분자 수준, 세포 수준, 조직 수준, 기관 수준, whole-body 수준의 네트워크가 포함된 멀티스케일 네트워크 구성</li> <li>- 멀티스케일 네트워크의 학습을 통해 사용자가 입력한 적응증 및 타겟에 대한 후보 화합물 추출</li> </ul>
<p><b>활용 데이터베이스</b></p>	<p>○ 과제활용 DB: 유전체 관련 DB, 질병과 약물 관련한 Omics DB, 신체대사 및 생체신호 전달체DB, 질병과 연관된 Therapeutic target 정보 DB</p>
<p><b>특이사항</b></p>	<p>○ 개발 내용에 대하여 시스템 이용 가이드를 작성하여야 함</p> <p>○ 계약기간 종료 후에도 결과물에 관련해서 후속조치를 요구할 수 있음</p> <p>○ 과제실시부서와 적극적인 업무 협력.협조를 하여야 함</p>

#### 제4절 AI 신약개발 관련 전문 인력 양성방안

융합연구의 핵심 요소는 IT, BT 지식을 갖춘 인공지능 신약개발 전문인력으로, 인력 양성을 위한 커리큘럼 개발·운영 지원 등에 대해 제안

□ 다양한 보건의료 빅데이터를 수집·관리·활용하기 위하여, AI플랫폼 운용 및 결과 분석할 수 있는 전문인력 필요

- AI를 활용한 신약개발은 BT와 IT 기술의 전반적 이해, 신약개발 전문용어 및 개념 습득 등 해당 분야에 특화된 전문인력 필요

분야	교육내용 예시
BT	약리학·약제학, 독성학, 화학 및 분석학, 의약품 제조 및 시험관련 개발(research)·검증(Validation), 의약품 특허(Patent) 등
IT	인공지능 플랫폼 개발, 통계학 빅데이터 및 보건사회학 연산처리, 인공지능 플랫폼 운영을 위한 하드웨어 등

- 특히, 제약사 內 AI 플랫폼 구축 이후 내부 데이터 활용한 직접 연구 (후보물질 탐색 등)를 수행할 제약사 내부인력 전문화 교육 필요

- 제약업계 AI 및 빅데이터 관련 전문인력 공급(양성)을 위해 중장기 인력양성체계 마련\* 및 관련 교육 커리큘럼 개발 선행되어야 함

\* 산업전망 분석, 인력수요 예측, 교육 실태조사를 토대로 국내·외 기술 선도기업, 전문기관의 재직자 교육(전문화) 과정 신설, 특성화 대학원 설립 등

#### <표 46> 커리큘럼안

AI, 신약개발 관련 교육커리큘럼안	
1. 응용SW 엔지니어링	11. 바이오 전문가를 위한 Linux 실전
2. DB 엔지니어링	12. Python 프로그래밍 및 바이오 빅데이터 알고리즘
3. 빅데이터 어플리케이션 개발	13. R 중급 통계학 및 바이오 빅데이터 자료 처리론
4. 빅데이터 처리 개발	14. 데이터 베이스 이론 및 의료정보 시스템
5. 바이오 빅데이터 활용과 분석	15. 웹기반 응용 프로그래밍 실습
6. 빅데이터 분석을 위한 AI 프로젝트	16. Public NGS Data and Analysis Platforms
7. 4차 산업혁명 트렌드 특강	17. 바이오 빅데이터와 임상의료 빅데이터
8. 기업 탐방 특강	18. Python 고급 및 텐서플로우와 딥러닝
9. 마인드셋 특강	19. NGS 고급분석 및 파이프라인 구축
10. 멘토링 특강	20. 임상 유전체 정보 분석과 해석

## <참고문헌>

- 4차산업혁명위원회, 「헬스케어 발전전략」, '18
- BioIN, 인공지능 신약개발 플랫폼 구축사업 '18
- KOTRA 「실리콘밸리, 헬스케어에 AI(인공지능)을 더하다」
- Machine Learning of Toxicological Big Data Enables Read-Across Structure Activity Relationships (RASAR) Outperforming Animal Test Reproducibility」 <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/30007363>
- Mordor Intelligence, 「글로벌 인공지능 신약개발 산업 규모 증가율」 Global Artificial Intelligence in Lifesciences Market - Mordor Intelligence.pdf
- RACONTEUR, 「인공지능 기술관련 특허권 보유 기업리스트(Top Holders Of Artificial Intelligence Patents)」 <https://www.raconteur.net/business/the-rise-of-artificial-intelligence-in-6-charts>
- RACONTEUR, 「인공지능 연간 펀딩규모(Artificial Intelligence Annual Funding)」 <https://www.raconteur.net/business/the-rise-of-artificial-intelligence-in-6-charts>
- ResearchGate 「Precision Medicines as an Accelerator for Next Generation Cognitive Supercomputing」
- Volum 35/Nature Biotechnology, 「글로벌 제약사와 신약개발 AI업체 협력사례」, '17. July
- 과학기술정보통신부, 「인공지능 R&D 전략」, '18. 6
- 과학기술정보통신부, 「연구데이터 활용한 바이오 선도 프로젝트 추진 방안」, '18
- 과학기술정보통신부, 「주요국 인공지능 정책 동향 분석」, '18

- 국가과학기술심의회, 제4차 과학기술기본계획(2018~2022), '18. 2
- 노든 IBM왓슨헬스 본부장 "암진단 넘어 신약·치료법 등 개발... 왓슨 의료생태계 더 견고해질 것" 서울경제, 2017. 7. 2.
- 미국 보건복지부(U.S. Department of Health and Human Services) 「FDA, Real World Evidence, Data」
- 보건복지부, 제2차 제약산업 육성·지원 5개년 종합계획(2018~2022)
- 산업혁명위원회, 「헬스케어 6대 프로젝트 추진현황보고」, '18
- 서울아산병원 헬스이노베이션 빅데이터센터 홈페이지 「서울아산병원의 의료사업 선진화를 위한 빅데이터 분석」
- 성균관대학교, 한국형 신약개발 인공지능 개발사업 신규기획, '18
- 이투데이, 일본 제약IT 50개사, 인공지능으로 공동 신약개발, '16.11.16.
- 정보통신기술진흥센터, 「일본의 인공지능(AI)정책 동향과 실행전략」, '17
- 펀딩 상위 인공지능 신약개발 룩 바이오테크 및 스타트업 (CB Insights AI Industry Series. Aug 2018)
- 정보통신기술진흥센터, 「일본의 인공지능(AI)정책 동향과 실행전략」, '17
- 제9회 서울국제신약포럼, 발제자료, '17, 6
- 펀딩 상위 인공지능 신약개발 룩 바이오테크 및 스타트업 (CB Insights AI Industry Series. Aug 2018)
- 한국바이오협회, 인공지능의 발전과 바이오헬스산업, '17. 6
- 한국보건산업진흥원, 「제2차 제약산업 육성지원 5개년 종합계획」, Evaluate Pharma World Preview 2016, 2015년 국내 제약기업 경영성과 분석 및 2016년 산업 전망 '16

- 한국전자통신연구원, 빅데이터 지식처리 인공지능 기술동향, 2014
- 한국지식재산연구원, 「특허청, 인공지능 융합 의료기술 특허출원 동향 발표」 '18
- 후생노동성, 「신약개발에 AI 활용이 가져오는 효과」 KOTRA해외 시장뉴스

주 의

1. 이 보고서는 한국연구재단에서 위탁받아 수행한 연구보고서입니다.
2. 본 연구보고서에 기재된 내용들은 연구책임자의 개인적 견해이며 한국연구재단의 공식견해가 아님을 알려드립니다.
3. 국가과학기술 기밀유지에 필요한 내용은 대외적으로 발표 또는 공개하여서는 아니 됩니다.