

혁신정책

AI를 활용한 혁신 신약개발의 동향 및 정책 시사점

KISTEP 전략기술정책센터 윤희정



AI를 활용한 혁신 신약개발의 동향 및 정책 시사점

(2025.3.24, 전략기술정책센터 윤희정 연구위원)

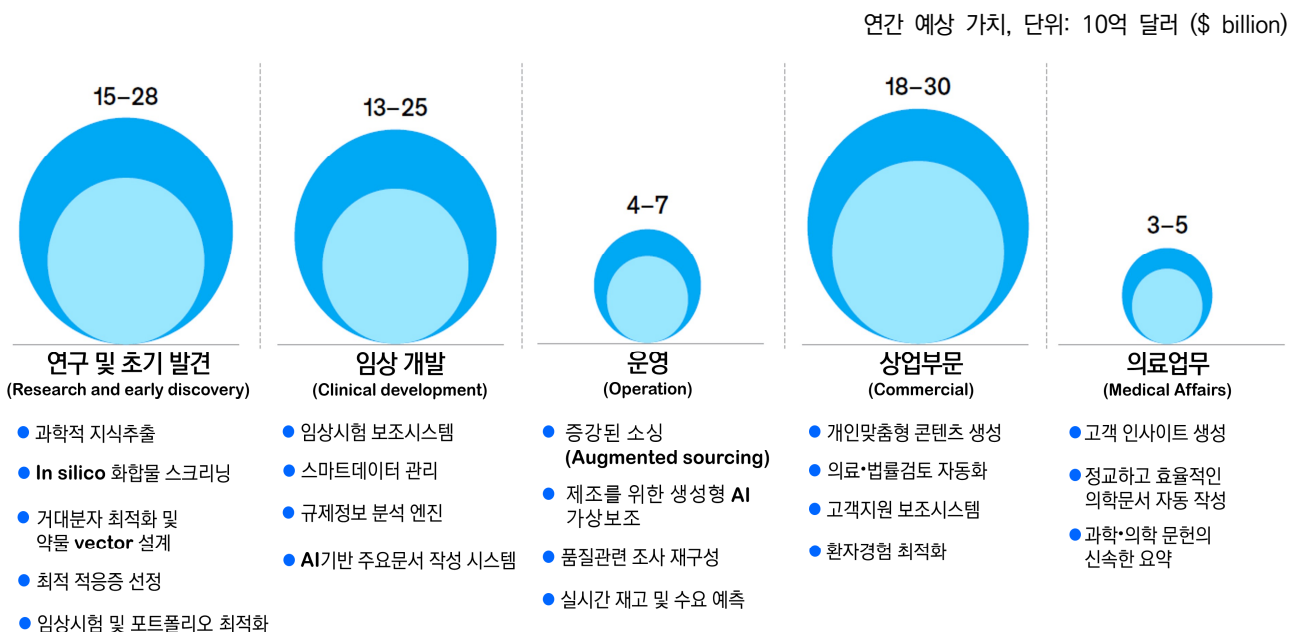
1 개요

- 인공지능은 신약개발에 대한 접근방식을 근본적으로 변화시키며 신약개발 가속화, 효율적 임상시험, 환자 맞춤형 치료법 제공, 신속한 규제승인 등 혁신을 주도하고 있음
 - 높은 성공률의 최적화된 제약개발 달성을 위한 후보물질 발굴을 위해서는 단백질 3차원 구조를 예측하고 설계하는 인공지능 접목이 필수적인 시대가 도래
 - ※ 2012년 딥러닝 기반의 'AlexNet'이 개발되면서 의료, 화학, 바이오 분야에 적용을 시작으로 2016년부터 AI 신약개발 스타트업 등장. 구글 딥마인드의 2018년 AlphaFold의 발표 이후 AI 기반 신약개발의 산업 영역에 급속도로 확장됨
- 현재 제약·바이오 업계는 고가치 자산에 대한 특허권 대거 만료*, 임상시험의 성공률 감소와 다수의 후보물질 파이프라인 보유에 따른 개발비용 증가로 인한 수익성이 악화되고 있음
 - * 알레르기 치료제 졸레어와 골다공증 치료제 프롤리아(25년 예정), 면역항암제 키트루다와 항암제 오피디보 및 자궁경부암 백신 가다실(28년), 다발성골수종 치료제 잘렉스(29년) 등
- 이에 제약·바이오 분야 R&D 생산성 개선의 필요성이 높아지고 있으며 이를 돌파하기 위해서는 AI를 활용한 혁신 신약개발이 주요 해결책이 될 수 있을 것
 - ※ 생성형 AI를 접목한 제약개발 기술을 통해 연간 600억 달러에서 1,100억 달러 수준의 가치 창출 기대(MGI, '24.1.)
- 인공지능 및 디지털 기술을 활용한 표적발견의 최적화는 AI기반 약물발견 적용, 초기단계 R&D 데이터 활용*, 신규 치료분야 및 모달리티 모색 등의 효율성을 대폭 증가시킬 것으로 기대
 - * 초기 단계 양질의 후보물질 양 증가, 조기에 안정성 및 효능을 파악해 진행/중단 의사결정 가능, 임상시험 참가자의 디지털 트윈으로 대조군 시뮬레이션 가능
- 본 고에서는 인공지능을 활용한 신약개발의 특징과 주요 산업 현황 및 관련 정책을 살펴보고 국내 제약·바이오의 경쟁력 확보를 위한 정책 제언을 다루고자 함

2 인공지능의 적용 범위

- 제약·바이오 분야에서의 인공지능은 신약개발, 임상시험, 제조, 상용화, 시판 등 전반적인 과정에서 활용 가능하며, 인공지능을 활용한 결과 예측, 프로세스 최적화, 연구시간 단축 등은 신약 출시를 위한 시간·비용의 효과적인 절감이 기대됨
- (신약개발 가속화) AI 기반 알고리즘은 분자의 생물학적 활동을 예측하고 잠재적 약물 표적을 빠르게 식별하여 후보물질 탐색 가속화를 통해 유망한 신약후보 물질 도입을 효율화함
- (임상시험 최적화) 과거 임상시험 데이터를 분석하여 새로운 임상시험에 적합한 환자 집단을 식별함으로써 성공 가능성을 높이며, 실시간 환자 모니터링으로 진행 상황 추적 및 조정 가능
 - ※ 임상시험 시작 시간을 15~20% 단축 가능하며, 기업은 AI와 실제 데이터를 활용하여 임상시험 종료 지점을 최적화함으로써 임상시험 기간을 15~30%까지 단축 가능 (McKinsey&Company, 2024)
- (비용·시간 절감) AI 결과 예측, 프로세스 최적화, 연구개발 효율화는 신약 출시 시간 및 비용을 크게 줄일 수 있으며, 치료 접근성을 높일 뿐 아니라 제약·바이오 업계의 전반적 효율성 향상 도모
- (맞춤형 의학 설계) 유전 정보부터 치료 반응에 이르기까지 방대한 양의 환자 데이터를 분석함으로써 개인 고유의 유전적 구성에 적합한 개인별 맞춤화된 치료 계획 설계 가능
- (약물 전달 시스템 개선) 인공지능은 신체의 특정 부위에 약물을 보다 정확하게 전달할 수 있는 나노 기술 기반의 운반체와 같은 혁신적인 약물 전달 시스템의 개발에도 중요한 역할

[그림 1] 생성형 AI가 미치는 제약·생명과학 분야의 기대가치 및 영향



※ 원자료 : Generative AI in the pharmaceutical industry: Moving from hype to reality (McKinsey&Company, 2024)

3 국내·외 주요기업 현황 분석

□ 해외의 빅테크 기업들은 인공지능, 클라우드 컴퓨팅, 데이터 분석 기술을 활용하여 신약개발에 직접 참여하는 경향이 강하며, 글로벌 빅파마는 빅테크 기업과 오픈이노베이션 등의 전략을 통해 생성형 AI 신약개발 플랫폼 사업을 확장 중

○ 대표적으로 엔비디아 생성형 AI 플랫폼인 '바이오네모(BioNeMo)'에 리커전파마슈티컬스의 AI 모델을 통합하였으며, 이를 통해 신약개발 파운드리 사업까지 협업의 범위를 확장함

※ 엔비디아의 DGX SuperPOD 기반의 바이오하이브-2(BioHive-2) AI 슈퍼컴퓨터를 통해 리커전은 주당 200만 건 이상의 실험을 수행하며 AI 모델의 학습 능력과 예측 정밀도를 향상시킴

〈표 1〉 글로벌 빅테크-빅파마의 AI 기반 신약개발 현황

기업		연구내용 및 특징
글로벌 빅테크	제약회사/빅테크	
'오픈AI' (OpenAI)	사노피(Sanofi)	• 바이오테크 기업 포메이션바이오(Formation Bio)와 파트너십 체결('24.5.) - AI 기반 SW를 구축하고, 신약개발 수명 주기 전반에 걸친 맞춤형 솔루션 발명
	모더나(Moderna)	• 모더나-오픈AI 파트너십 구축('24.4.) - 오픈AI의 API를 기반으로 내부적으로 구축된 mChat이라는 자체 챗GPT를 도입하며 협업('23.~) 후, 확대하여 임상연구, 법무, 마케팅 등에 AI 활용
	일라이 릴리(Eli Lilly)	• 오픈AI와 협력하여 항생제 내성(AMR)을 극복하기 위한 새로운 항균제 개발을 시작('23.6.)
'메타'(Meta)	• AI 기반 단백질 구조 예측 모델인 ESMFold 개발 (구글의 AlphaFold와 경쟁) ※ 제약회사와의 직접적 협업 사례는 밝혀진 바 없음	
'아마존'(Amazon)	엔비디아(NVIDIA)	• 신약개발 생성형 AI 플랫폼인 바이오네모(BioNeMo)를 AWS에서 제공
	화이자(Pfizer)	• AWS를 활용한 AI 플랫폼 '복스(VOX)'를 활용하여 19개 신약개발 추진중
'구글' 딥마인드(DeepMind)	• 단백질 구조 예측하고 만들어내는 'AlphaFold' 최초 공개('18.12.) 이후 'AlphaFold3'를 공개('24.5.) • 알파프로티오(AlphaProtio)와 신약 후보 물질 발굴('24.11.) ※ 2010년 설립 이후 '14년 구글에 인수되면서 의료, 신약 개발, 과학 연구 등 다양한 분야로 AI 응용 범위를 확장중	
'구글' 아이소모픽 랩스 (Isomorphic Labs)	• 구글 딥마인드의 창립자/CEO가 설립('21.)한 AI 신약 자회사로 알파폴드(AlphaFold)를 활용하여 신약개발 과정을 기존 5~10년에서 10배 단축을 목표로 함 ※ AI가 설계한 최초의 의약품 임상시험 예정(~'25.)이며, 중앙, 심혈관 질환, 신경 퇴행성 질환 등 주요 질병 분야를 다룸	
	일라이 릴리(Eli Lilly)	• 구글과 협력하여 여러 표적에 대한 저분자 치료제를 개발할 계획
	노바티스(Novartis)	• 구글과 협력하여 3개의 표적에 대한 저분자 치료제를 발굴 중
'엔비디아' 바이오네모 (BioNeMo)	리커전 파마슈티컬스 (Recursion Pharmaceuticals)	• 엔비디아가 '23년 5,000만 달러(약 726억 원)를 투자한 AI 신약개발 선두 • 뇌혈관 기형(CCM) 치료제 후보물질인 REC-994 임상 2상* 결과 공개('25.2.) * 고용량(400mg)을 투약한 환자의 증상(뇌 병변)이 50% 감소했음을 발표. 임상 3상까지 마무리되면 신약 출시가 가능할 것으로 예견
	암젠(Amgen)	• 엔비디아와 글로벌 제약사인 암젠(Amgen)이 협력하여 신약 연구를 위한 슈퍼컴퓨터 '프레이아(Freyja)'를 개발 중
	제넨텍(Genentech)	• 로슈(Roche) 자회사로 엔비디아와 다년간 전략적 연구 협력을 발표('23.11) ※ 제넨텍의 생성형 AI 모델과 알고리즘을 엔비디아의 AI 슈퍼컴퓨팅 플랫폼인 DGX 클라우드에 최적화하여 신약 발견과 개발을 가속화 추진

※ 출처: 기업정보 및 언론보도 저자 재정리

□ 국내 빅테크 기업은 직접적인 신약개발보다는 의료데이터 분석, 건강관리 서비스 개발을 우선 추진하고 있으며, 제약·바이오 기업 역시 관련 기업 투자 등 간접적 접근방법이 강세

○ 네이버는 2019년도 대웅제약과 의료빅데이터 기업 ‘다나아데이터’를 합작 설립하였으나 현재는 건강검진 데이터 활용을 위한 서비스*를 제공하는 형태로 참여하고 있으며, 국내 바이오벤처**와 AI 기반의 바이오 빅데이터 및 문서 인텔리전스 기능 공동연구 수행 중

* KMI의 건강검진 데이터 활용 및 네이버의 하이퍼클로바X를 기반으로 개발한 건강코치 서비스 ‘에스크미(asKMI)’

** 퇴행성 뇌질환, 면역항암제 및 희귀질환 치료제를 개발하는 바이오텍(퍼스트바이오)와 시플랫폼 연구개발 MOU체결(‘24.9.)

○ 카카오브레인은 스타트업 갤럭스*와 공동으로 AI 기반 신약 설계 플랫폼 개발 및 단백질 구조예측 프레임워크인 솔벤트(Solvent)를 연구개발 시도 후, 현재는 AI 기반 흥부 엑스레이 판독 기술에 집중

* 서울대 화학과 석차욱 교수가 창업한 스타트업으로 계산화학을 이용한 단백질 구조설계 개발 중

○ 삼성의 경우 삼성물산, 삼성바이로직스, 삼성바이오에피스가 공동으로 2,400억 원을 출자하여 조성한 ‘라이프사이언스 펀드’*를 통해 단백질 신약을 설계하는 AI 플랫폼을 보유한 미국 제너레이트 바이오메디슨에 투자하였으며, 이는 AI 기반 신약개발 분야로는 첫 사례

* 유전자치료제(재규어진테라피), 센다바이오사이언스(나노입자약물전달체), 아라리스바이오텍(차세대 항체-약물 접합체), 에임드바이오(바이오의약품), 라투스바이오(유전자치료제), 제너레이트바이오메디슨(생성형ML기반 단백질 바이오신약), C2N다이어그노스틱스(치매진단 바이오마커) 등 총 8개 기업에 투자 (‘25.3월 기준)

□ 다만, 최근 세계적으로 AI 신약개발 플랫폼 기술 고도화 경쟁이 본격화되면서 국내 대기업 및 제약·바이오 기업도 바이오테크, IT 기업 등과 함께 AI 신약개발에 속도를 내는 추세

○ LG AI연구원은 서울대 백민경 교수*팀과 협력하여 단백질 다중 상태 구조예측 AI 개발 연구를 통해 인체 내 다양한 상태로 존재하는 단백질 구조 예측을 통한 신약개발 원천기술 확보를 주요 신사업으로 추진한다고 밝힘(‘25.2.)

* 2024년 노벨 화학상을 수상한 데이비드 베이커(David Baker) 美 워싱턴대 교수와 함께 AI를 활용한 ‘로제타폴드(RoseTTAFold)’를 개발하여 단백질 구조 분석의 정확도를 크게 향상시켜 신약개발 속도를 단축하는데 기여함

- 미국 잭슨랩(Jackson Laboratory)의 유전체 데이터와 자체개발 생성형 AI ‘엑사원(EXAONE)’을 결합한 질병 예측 및 신약·치료제 개발에 활용할 수 있는 AI 모델 공동 개발도 추진 중

○ 주요 특징으로는 협업의 형태보다는 자체 AI 신약개발 플랫폼을 별도로 구축하여 독자적 AI 신약 개발 파이프라인을 보유하는 경향이 강함

- 임상시험 계획 또는 임상에 진입한 단백질 치료제도 다수 있으나 가시적 성과로 이어지고 있지 못한 상황

※ (협업 사례) 아이젠사이언스-한미약품, 온코크로스-제일약품/대웅/JW중외/보령

※ (독자 플랫폼 사례) 닥터노아바이오텍-아크(ARK), 온코크로스-랩터AI(PTOR AI), 파로스아이바이오-케미버스(Chemiverse), JW중외-제이웨이브, SK바이오팜-허블플러스(HUBLE Plus), 대웅제약-데이지(DAISI) 등

4 결론 및 시사점

- 미국은 인공지능 혁신 정책 기조에 힘입어 빅테크·빅파마 주도의 인공지능 기반 신약개발이 활발히 이루어지고 있으며, 우리도 국내 시장에 맞는 데이터·AI와 바이오 분야의 연구간 융합 방안 모색을 통해 AI 기반 신약개발 촉진 필요
 - 미국은 병원·제약사 등 당사자 간 계약을 통해 원격진료, AI 신약개발 등에 의료데이터 활용이 가능하며, 영리 기업에도 데이터 개방이 가능
 - FDA 의약품평가연구센터는 제약사의 AI 관련 활동을 단일 AI 위원회로 일원화하여 통합 관리·감독 체제로 개편('24.8.)한 바 있으며, 의약품 개발을 위해 사용되는 AI에 관한 첫 가이드라인* 발표('25.1.)
 - * 약물의 안정성 또는 유효성, 품질에 대한 규제의사 결정을 지원하는 정보 또는 데이터 생성 시 AI 활용 방안에 대한 권장사항 제시
- 인공지능의 신약개발 분야의 잠재력에도 불구하고 국내 제약·바이오 업계의 AI 도입을 통한 구체적 성과는 영세한 규모로 추진되거나 도전하는 초기 단계임
 - 제약·바이오 분야 데이터는 사일로화(Silo Effect)되거나, 구조화되지 않는 등 AI 활용도를 저해하는 요인이 잠재되어 있으며, 개인정보 문제 및 AI 알고리즘 관련한 윤리적 이슈 등 현실적 어려움 존재
 - 신약개발은 임상시험부터 환자 기록에 이르기까지 방대한 데이터가 생성되는 산업인 만큼, AI를 신약개발에 적용하기 위해서는 일관성과 정확성이 담보된 접근 가능한 데이터 표준화 필요
 - '연구기관-의료서비스 제공자-규제기관' 전반에 걸쳐 데이터 형식·용어·지표 표준화는 AI 모델 적용 시 불일치나 오류 없이 정보처리·분석이 가능하도록 하여 AI 응용 프로그램의 효율성과 신뢰성 확보가 핵심
 - 따라서 분자구조, 임상실험, 환자데이터와 같은 데이터 아키텍처 구축이 필요하며, 내·외부 데이터셋 활용이 가능한 인프라 구축을 선행해야 함
- 우리도 국가 경쟁력을 높일 수 있는 획기적 인공지능 신약개발을 확보하기 위한 'AI 신약개발 K-멜로디프로젝트*', 국가통합바이오빅데이터구축사업** 등 추진 중이며, 국내 바이오제약 산업의 R&D와 인공지능 기술 융합 촉진 전략을 마련하고 있음
 - * 연합학습 모델 기반의 신약개발 가속화 프로젝트로 연합학습 플랫폼 구축, 신약개발 데이터 활용 및 품질관리, 연합학습 플랫폼 활용 활성화 등 포함 (총 사업비 348억 원, '24~'28년, 과기정통부·복지부)
 - ** 국민 100만 명의 임상정보, 유전체 등 오믹스 데이터, 공공 데이터, 개인 보유 건강 정보 등을 통합해 정밀의료 연구자원 구축을 목표로 추진 (총 사업비 6,065.8억 원, '24~'28년, 과기정통부·산업부·복지부·질병청)
- 이러한 데이터 집적 및 플랫폼 구축을 위한 정부 차원의 적극적 노력은 바람직하나, 아직 현장에서는 의료데이터 활용 시 당면하는 규제에 대한 어려움 토로

- AI 기반 신약개발을 위한 정부 주도의 민첩한 규제 프레임워크 운영, 데이터 표준화 및 전문인재 육성 등 기반 지원을 강화하고, 기추진 중인 K-멜로디프로젝트를 비롯한 관련 투자 확대를 통해 개별 보유 신약 데이터의 공유 플랫폼을 효과적으로 구축하여 실제 제약·바이오 산업계로의 파급력 도출이 필요함
- 또한, 제약·바이오 기업별 자체 AI 신약개발 플랫폼을 보유하여 소규모로 분절화되어 추진되는 국내 AI 신약개발의 현주소를 다시 진단하고, 글로벌 빅테크·빅파마의 치열한 신약개발 경쟁체제를 뚫고 파급력 있는 국내 AI 신약개발 성공을 위한 전략적 파트너십 확대 지원책 마련 필요
- 예를 들어, 정부 주도의 데이터 협업 사업 추진 시 국내 주요 플랫폼 기업의 적극적 참여를 위한 세제 지원 방안 등 기업 친화적인 유인책을 통해 국가적 차원의 결집 유도

참고문헌

- McKinsey&Company, “Generative AI in the pharmaceutical industry: Moving from hype to reality”, 2024.1.
- 딜로이트인사이트, “글로벌 제약바이오 기업 신약개발 수익성 동향”, 2024.8.
- 삼정KPMG, “2025년 국내 주요 산업 전망”, 2024.12.
- 국가생명공학정책연구센터, “트럼프 2기 행정부의 바이오 정책 전망”, 2025.3.
- 머니투데이, “제약업계 대세 된 ‘AI 신약’ 美EU 덩치 키우는데, 한국은?” (2024.12.)
- 매일경제, “한국 바이오 데이터는 신기루”...규제에 등돌리는 빅파마”, 2025.3.17.
- 메디게이트, “美 FDA, 신약 개발에 사용되는 AI 첫 지침 발표”, 2025.1.8.
- 뉴스토마토, “AI 신약개발 플랫폼 고도화 드라이브”, 2025.2.13.
- BIOTIMES, “‘AI 신약’ 탄생 임박... 국내 개발 현황은?”, 2025.2.11.
- 뉴시스, “삼성 라이프사이언스펀드 “AI 보유 美 바이오텍에 투자””, 2024.12.18.
- 시타임즈, “네이버클라우드-KMI-다나아데이터, 건강검진 결과안내 AI 서비스 출시”, 2024.9.23.
- 헬스조선, “바이오 투자 보폭 넓히는 삼성...”, 2025.3.15.
- 한국경제, ““특허 만료 도래한다”...판 커지는 바이오시밀러”, 2024.11.25.

[KISTEP 브리프 발간 현황]

발간호 (발행일)	제목	저자 및 소속	비고
164 (25.01.09.)	글로벌 주요기관 전망 2025년 유망기술 트렌드 및 시사점	최창택 (KISTEP)	혁신정책
165 (25.01.13.)	민·군 레이다 응용기술	김상준·문성훈 (KISTEP)	기술동향
166 (25.01.14.)	R&D분야 온실가스감축인자 예·결산제도 현황 및 시사점	김아람·여준석 (KISTEP)	혁신정책
- (25.01.14.)	KISTEP Think 2025, 10대 과학기술혁신정책 아젠다	황지호·이경재·최대승 김다은·박서안 (KISTEP)	이슈페이퍼 (제372호)
167 (25.01.20.)	트럼프 2기 행정부의 기후변화-에너지 분야 정책변화 전망 및 시사점	홍정석(KISTEP) 이영준(한국원자력연구원)	혁신정책
168 (25.02.12.)	글로벌 AI 패러다임 변화와 대응 전략 - 트럼프 정부의 AI 정책 전환과 중국 딥시크의 부상을 중심으로 -	주경원 (KISTEP)	혁신정책
169 (25.02.13.)	EU 폰테어라이엔 2기 집행위원회의 혁신정책 추진 방향 및 시사점 : 경쟁력 나침반 이니셔티브의 주요 내용	송창현 (KISTEP)	혁신정책
- (25.02.17.)	국내 공학 분야 외국인 박사 졸업자 현황 분석 및 시사점	이정재·이현경·서현정 (KISTEP)	이슈페이퍼 (제373호)
170 (25.02.19.)	3대 게임체인저 분야 기술수준 심층분석 ① - 반도체 강국으로 재도약을 위한 미래 이슈 -	정의진·신동평 (KISTEP)	미래예측
171 (25.02.28.)	트럼프 2기 행정부 미국 우주 정책의 전망과 시사점	이재민·문태석·강현규 (KISTEP)	혁신정책
172 (25.03.05.)	일본 연구중심대학 추진 현황 및 시사점 - 국제탁월연구대학을 중심으로 -	김태윤·이원홍 (KISTEP)	혁신정책
- (25.03.07.)	출연연 탄소중립 분야 연구 성과 현황 및 시사점	신우영·박창대·정민우 (KISTEP)	이슈페이퍼 (제374호)
173 (25.03.24.)	AI를 활용한 혁신 신약개발의 동향 및 정책 시사점	윤희정 (KISTEP)	혁신정책