

한림원탁토론회 :

AI 프런티어 시리즈

제 7 회

「AI x 신약개발」 : 구조예측에서 임상까지, 혁신의 경계를 넘다

일시 | 2025년 11월 21일(금), 10:00

장소 | 더플라자 4층 오키드홀

주최 | 한국과학기술한림원

한국차세대과학기술한림원



제7회 「AI x 신약개발」: 구조예측에서 임상까지, 혁신의 경계를 넘다



Program

시간	프로그램	
10:00~10:05 (5분)	핵심 의제 박영년 연세대학교 의과대학 교수	
10:05~11:20 (75분) 국내 15분 국외 20분	주제발표	
	발제자	[발제1] 구조 기반 AI의 보편성과 확장 잠재력: 무(無)에서 약물 분자를 정밀하게 설계하다 석차욱 서울대학교 화학부 교수 / 갤럭시(주) 대표이사
		[발제2] AlphaGenome을 활용한 신약표적 발굴 및 정밀의료 백인화 경희대학교 약학과 교수
		[발제3] AI 기반 항체 신약 개발 조경현 뉴욕대학교 컴퓨터과학과 교수
		[발제4] Generative AI를 활용한 신약 설계(최초 임상 2상 사례) Alex Zhavoronkov Insilico Medicine CEO
	지정토론	
11:20~11:50 (각 7분)	좌 장	백인화 경희대학교 약학과 교수
	토론자	AI모델 학습과 검증 데이터의 중요성 김화중 한국제약바이오협회 K-MELLODDY 사업단 단장
		성공적인 개발로의 전제 신현진 목암생명과학연구소 소장
		AI와 규제과학의 미래 정지원 식품의약품안전처 의료제품연구부 부장
		AI x BT 투자 이재훈 국가바이오위원회 바이오기술혁신국 국장
11:50~12:20	자유토론 및 질의응답	
12:20	폐 회	

제7회 「AI x 신약개발」: 구조예측에서 임상까지, 혁신의 경계를 넘다



참여자 주요 약력

핵심 의제



박영년 연세대학교 의과대학 병리학교실 교수
한국과학기술한림원 의학학부장
WHO Classification of Tumours, editor and responsible author
Liver Cancer. Associate editor

주제발표



**주제발표 1_ 구조 기반 AI의 보편성과 확장 잠재력:
무(無)에서 약물 분자를 정밀하게 설계하다**

석차옥 서울대학교 화학부 교수 / 갤럭시(주) 대표이사
국가AI전략위원회 과학 및 인재분과 위원장
한국과학AI포럼 대표의장
前 한국바이오디자인학회 초대회장



주제발표 2_ AlphaGenome을 활용한 신약표적 발굴 및 정밀의료

백인화 경희대학교 약학대학 교수
前 Rockefeller University 박사후연구원
前 Jane Coffin Childs 펠로우
前 하버드대학교 Albert J. Ryan 펠로우



주제발표 3_ AI 기반 항체 신약 개발

조경현 뉴욕대학교 컴퓨터과학과 교수
Genentech. Executive Director of Frontier Research
한국공학한림원 일반회원
CIFAR Learning in Brain and Machine Fellow



주제발표 4_ Generative AI를 활용한 신약 설계(최초 임상 2상 사례)

Alex Zhavoronkov Insilico Medicine CEO&CBO

Co-Chair of Annual Aging Research and Drug Discovery Meeting
Adjunct professor of artificial intelligence at the Buck Institute
for Research on Aging
Editorial Board Member of Aging-US

지정토론



좌 장_백인화 경희대학교 약학대학 교수

前 Rockefeller University 박사후연구원

前 Jane Coffin Childs 펠로우

前 하버드대학교 Albert J. Ryan 펠로우



토론자 1_김화중 한국제약바이오협회 K-MELLODDY 사업단 단장

前 한국제약바이오협회 AI신약융합연구원장

前 KAIST IT융합연구소 겸직교수

前 강원대학교 컴퓨터공학과 교수

[주요 키워드] AI모델 학습과 검증 데이터의 중요성



토론자 2_신현진 목암생명과학연구소 소장

前 목암생명과학연구소 부소장

前 Takeda Pharmaceuticals, Principal Scientist

前 Dana-Farber Cancer Institute/Harvard University,
Post-doctoral Research Fellow

[주요 키워드] 성공적인 개발로의 전제



토론자 3_정지원 식품의약품안전처 의료제품연구부 부장

前 식품의약품안전처 유전자재조합의약품과장, 사전상담과장 등
헬스캐나다 BGTD clinical evaluator, WHO IVB/NSB Scientist

[주요 키워드] AI와 규제과학의 미래



토론자 4_이재흔 국가바이오위원회 바이오기술혁신국 국장

前 과학기술정보통신부 기획재정담당관

前 과학기술정보통신부 과학기술정책과장

前 국제과학비즈니스벨트 추진단장

[주요 키워드] AI x BT 투자

제7회 「AI x 신약개발」: 구조예측에서 임상까지, 혁신의 경계를 넘다



Contents

주제발표 1	구조 기반 AI의 보편성과 확장 잠재력: 무(無)에서 약물 분자를 정밀하게 설계하다 1
	석차옥 서울대학교 화학부 교수 / 갤럭시(주) 대표이사
주제발표 2	AlphaGenome을 활용한 신약표적 발굴 및 정밀의료 13
	백인화 경희대학교 약학과 교수
주제발표 3	AI 기반 항체 신약 개발 23
	조경현 뉴욕대학교 컴퓨터과학과 교수
주제발표 4	Generative AI를 활용한 신약 설계(최초 임상 2상 사례) 43
	Alex Zhavoronkov Insilico Medicine CEO

토론

AI모델 학습과 검증 데이터의 중요성	김화종 한국제약바이오협회 K-MELLODDY 사업단 단장 49
성공적인 개발로의 전제	신현진 목암생명과학연구소 소장 50
AI와 규제과학의 미래	정지원 식품의약품안전처 의료제품연구부 부장 51
AI x BT 투자	이재훈 국가바이오위원회 바이오기술혁신국 국장 52

주제발표 1

구조 기반 AI의 보편성과 확장 잠재력: 무(無)에서 약물 분자를 정밀하게 설계하다

석차욱 서울대학교 화학부 교수 / 갤럭시(주) 대표이사



한림원탁토론회 :
AI 프런티어 시리즈

「AI x 신약개발」:
구조예측에서 임상까지,
혁신의 경계를 넘다

구조 기반 AI의 보편성과 확장 잠재력:

무(無)에서 약물 분자를 정밀하게 설계하다

석 차 옥

서울대학교 화학부 교수/ 갤럭시(주) 대표이사

2025.11.21

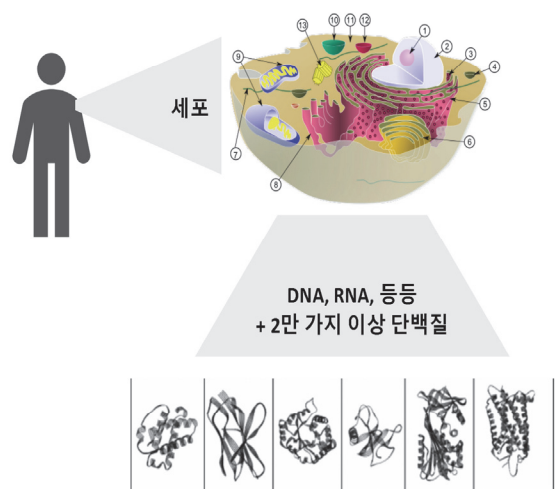
1

생명체는 정교한 분자 기계

기계: 단단한 부품, 인간이 조립



생명: 유연한 부품 (분자), 스스로 조립



단백질 분자의 자기 조립

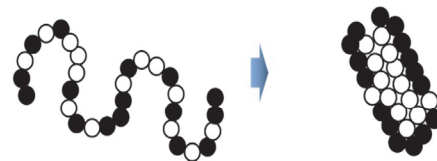
단백질: 20가지 아미노산 블록이 특별한 순서로 연결된 긴 사슬



구조 형성의 원리
=> 분자계의 자연법칙

- 친수성 아미노산
- 소수성 아미노산

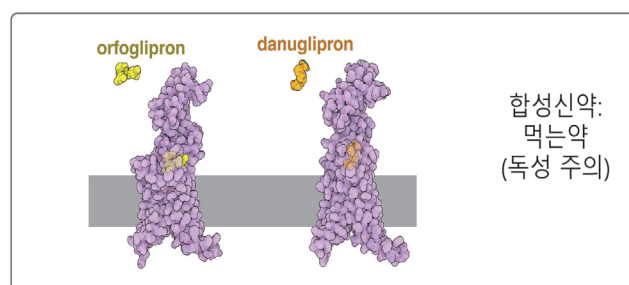
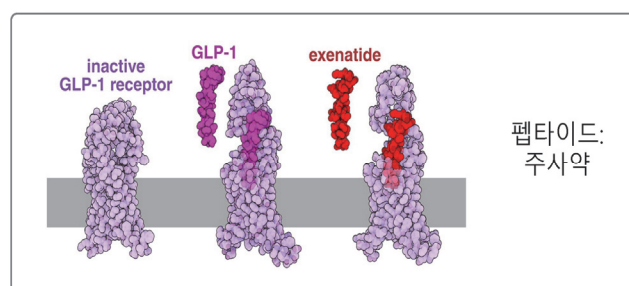
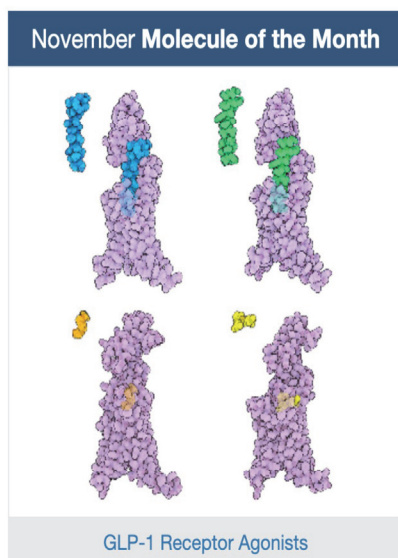
예) 2차원, 2가지 블록 연결



단백질 분자의 구조와 기능, 그리고 신약

[단백질 구조 데이터베이스]
<https://www.rcsb.org/>

생체분자 구조 규명 방법: 3개 노벨상
주요 생체분자 구조-기능 관계 규명: >10개 노벨상



단백질 분자의 구조와 기능을 이해하고 예측하는 방법?

2013

18~19C 고전역학 열역학
20C 양자역학 통계역학
(이론/계산 물리화학)

→ **분자 역학 모델**

분자 움직임의 **디테일(요동)** 시뮬레이션
복잡한 분자에 대해 **부정확한 계산**

Nobel Prize in Chemistry 2013





© Nobel Media AB. Photo: A. Mahmoud
Martin Karplus
Prize share: 1/3

© Nobel Media AB. Photo: A. Mahmoud
Michael Levitt
Prize share: 1/3

© Nobel Media AB. Photo: A. Mahmoud
Arieh Warshel
Prize share: 1/3

2024

20~21C 분자생물학 구조생물학 생물정보학
CASP 대회

→ **분자 AI 모델**

핵심 (구조/기능) 데이터로부터 **정확한 계산**
데이터에 제한

Nobel Prize in Chemistry 2024



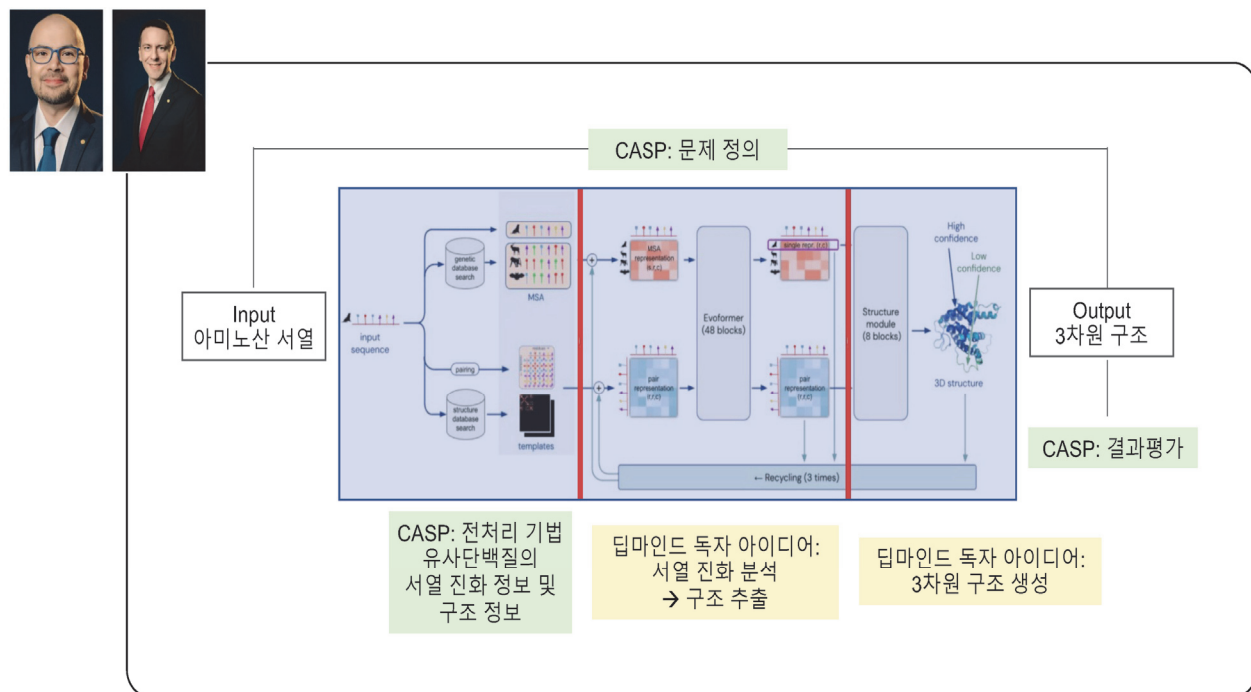


© Nobel Prize Outreach. Photo: Clément Morin
David Baker
Prize share: 1/2

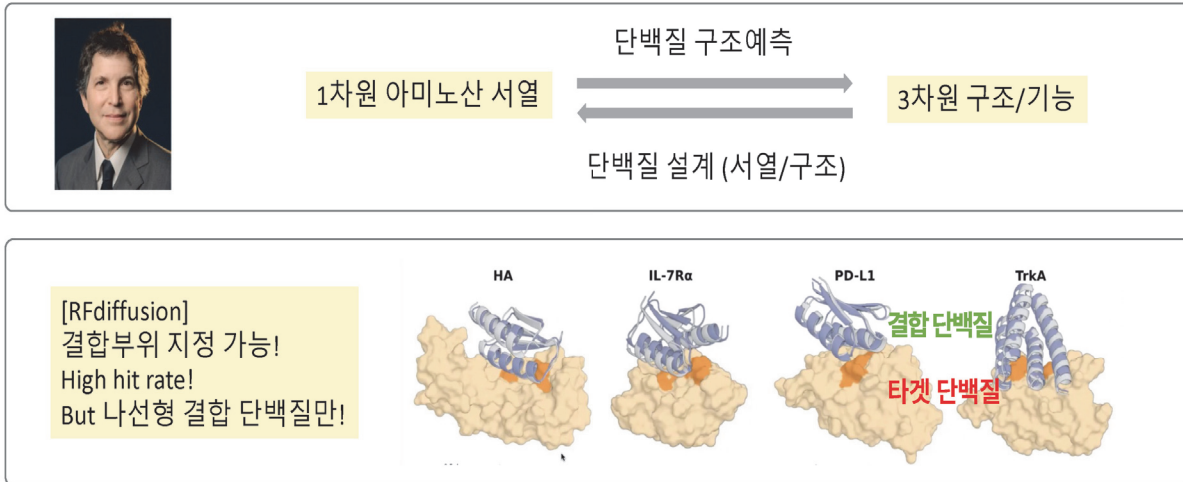
© Nobel Prize Outreach. Photo: Clément Morin
Demis Hassabis
Prize share: 1/4

© Nobel Prize Outreach. Photo: Clément Morin
John Jumper
Prize share: 1/4

알파폴드1 (2018) << 알파폴드2 (2020) < 알파폴드3 (2024)



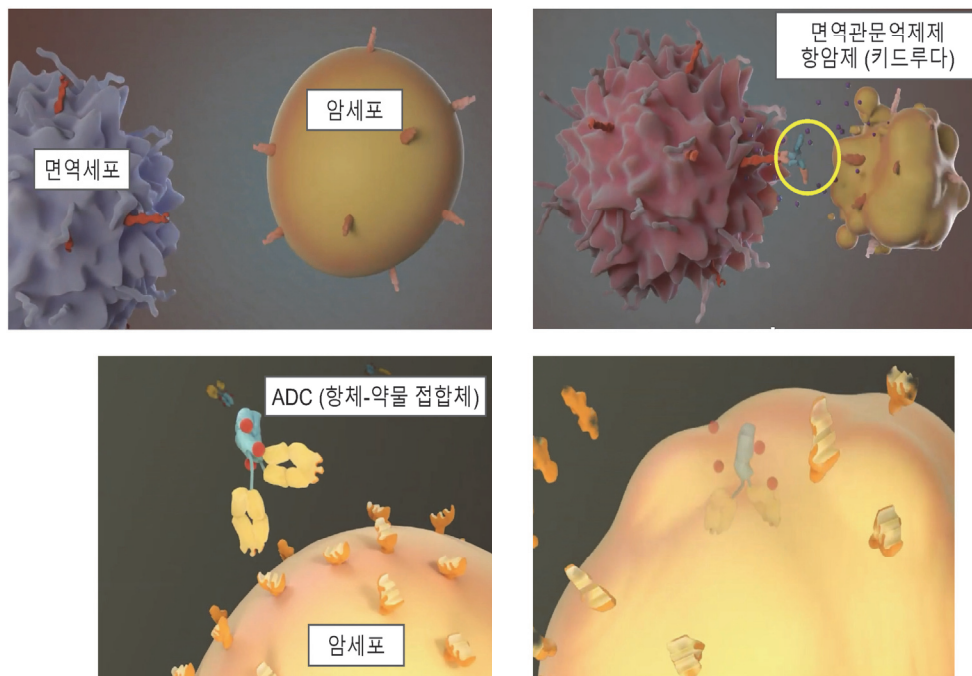
단백질 설계 (ROSETTA디자인→ RFdiffusion, 2023)



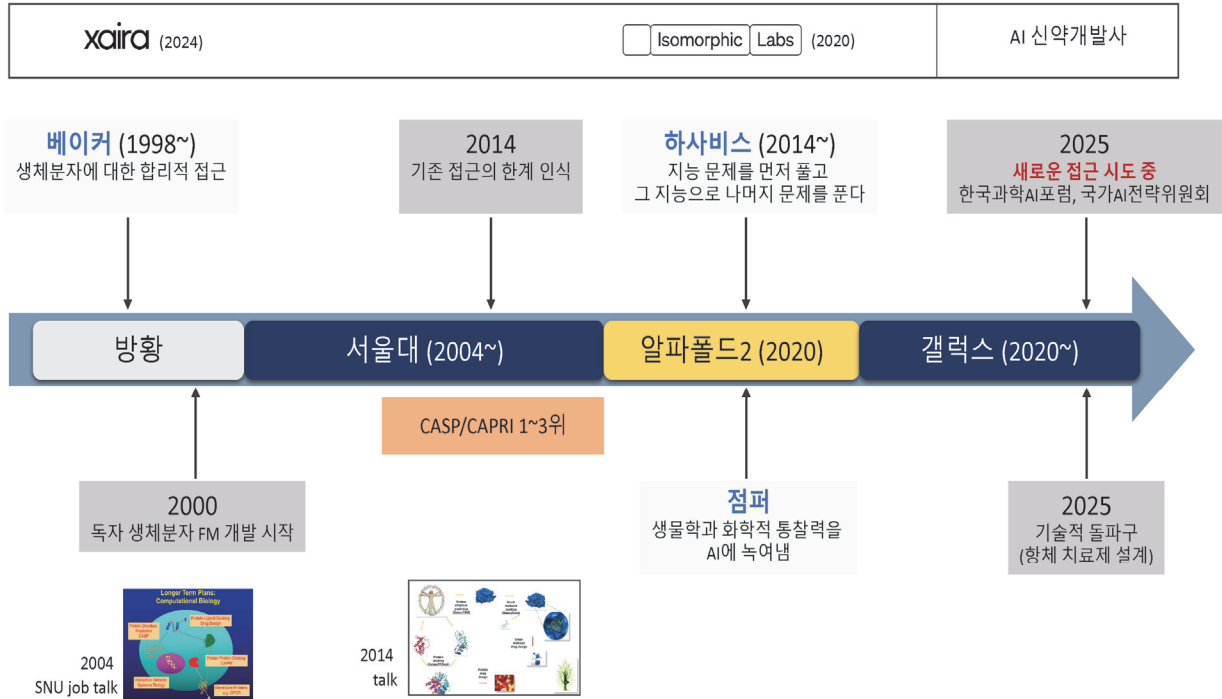
항체 단백질 설계의 어려움: 불규칙한 고리 구조, 직접적 서열/구조 데이터는 부족 (단백질 구조의 원리는?)
RFantibody (2024~) vs GaluxDesign (2024~)

항체 기반 단백질 의약품의 예

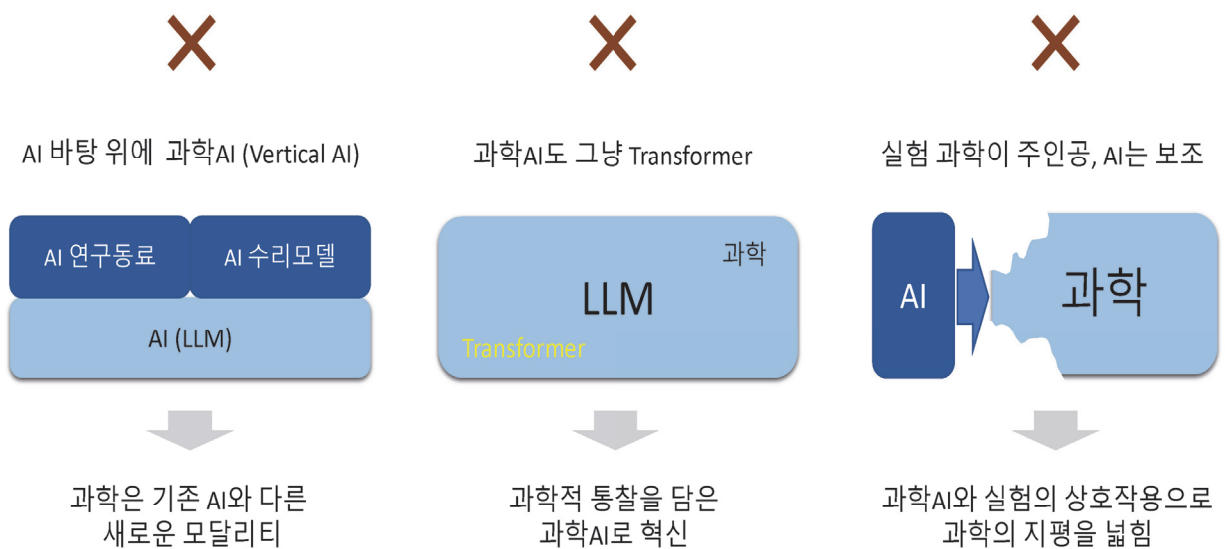
기존 항체 치료제 발굴 방법: 많은 실험적 스크리닝



알파폴드2 & My career



과학AI의 혁신은 어디서 나오는가?



Hassabis' vision for bio-molecular AI & Future of antibody drugs

Small-molecule Drugs

Dec 12, 2024

ENDPOINTS in FOCUS

Inside Isomorphic Labs: Demis Hassabis' lab-free vision for biotech's AI future

Andrew Dunn
Senior Biopharma Correspondent

LONDON — Demis Hassabis has no interest in a laboratory.

"I won't name names of other AI biotechs — you know them very well — but I feel like they always talk about, 'We just need more data,' and 'We don't have enough data,'" Hassabis said. "It feels like a bit of a crutch. Like, make your algorithms better, your models better. You do have enough data — if you were innovative enough on your algorithm side."

Large-molecule Drugs: Antibody

the PHARMACEUTICAL JOURNAL

Monthly edition

News

CPD & Learning

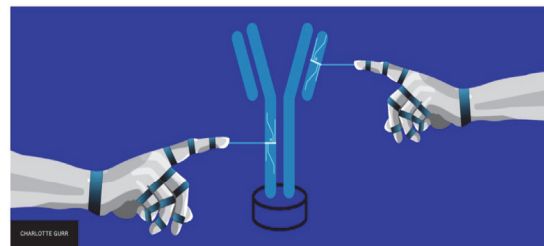
Research

PI Jobs

Log in

Subscribe

Home / Feature



Drug discovery and development

21 August 2025

By Rachel Brazil

Designed by AI: the future of antibody drugs

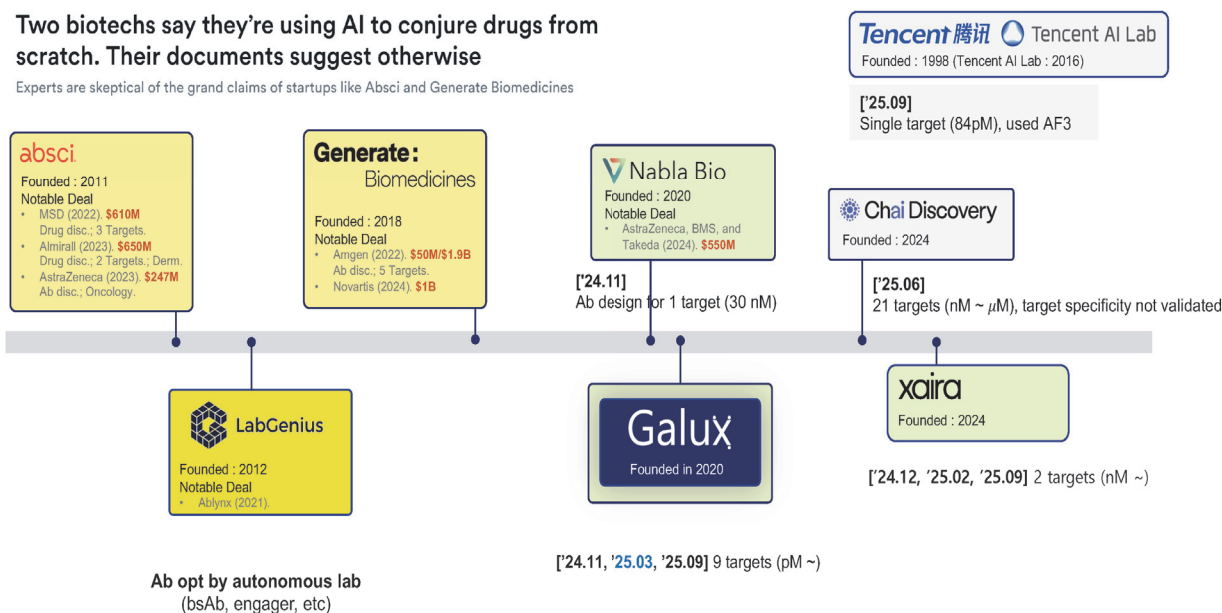
Artificial intelligence is enabling the next generation of antibody drugs — and helping to 'drug the undruggable'. Meet the start-ups that are designing these treatments from scratch.

Global Leader Groups in AI-based Antibody Discovery

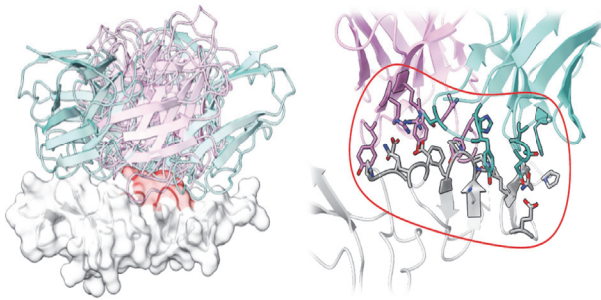
STAT+ SPECIAL REPORT

Two biotechs say they're using AI to conjure drugs from scratch. Their documents suggest otherwise

Experts are skeptical of the grand claims of startups like Absci and Generate Biomedicines



갤럭시 디자인 + 검증 플랫폼



STEP 1: DE NOVO DESIGN

- Designs **novel antibody**.
- **Immunogenicity** module (T-SCAPE) integrated.
- Uses **clinically validated frameworks**.

STEP 2: AI-DESIGNED LIBRARY

- scFv yeast library, 10^6 diversity.

STEP 3: WET-LAB VALIDATION

- Screen for desired binders.

최근: 50개 서열 설계 -> 10% hit rate
(7 of 8 epitopes)

INTERNAL R&D TARGETS

PLATFORM POC	NOVEL EPITOPES	EMERGING
PD-L1 HER2 EGFR (S468R)	FZD7 ALK7 IL-11	CLDN6 ACVR2A/2B CD98hc

사례 1: PD-L1 결합력, 물성 검증 (단번에 상용 항체 수준 달성)

Antibody Index	Titer (mg/L)	Affinity		Thermal Stability		Mono-mericity (%)	Poly-reactivity (PSR)	Cell Based Assay	
		ELISA EC ₅₀ (pM)	BLI K _d (pM)	Fab (°C)	Fc (°C)			Cell Binding Assay (Raji cell, EC ₅₀) (ng/mL)	Reporter Assay (Blockade assay, IC ₅₀) (ng/mL)
Atezolizumab	84	168	12.8	64.4	85.4	96.7	None	170	700
GX-aPDL1-2	295	41.5	28.3	72.2	85.4	93.3	None	96	555
GX-aPDL1-3	448	106	9.0	76.1	84.6	93.5	None	130	723

GaluxDesign does not explicitly optimize for developability. However, training on high-quality structural dataset may bias designs toward well-folded, stable protein structures.

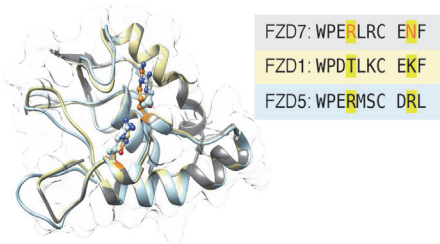
- Novel Binding Pose
- Designed-Experimental iRMSD = 1.1 Å



사례 2 FZD7 (신규 결합부위, 서브타입 구별)

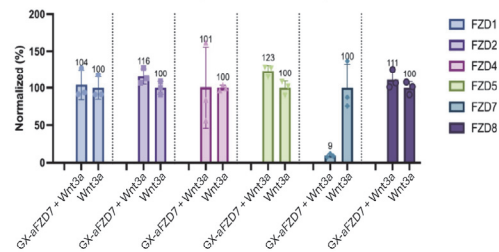
Novel Epitope

No reported binders targeting this epitope. Definitive prove that GaluxDesign is truly capable of generating novel binders.



FZD7-Specific Inhibition of Wnt Signaling Confirmed

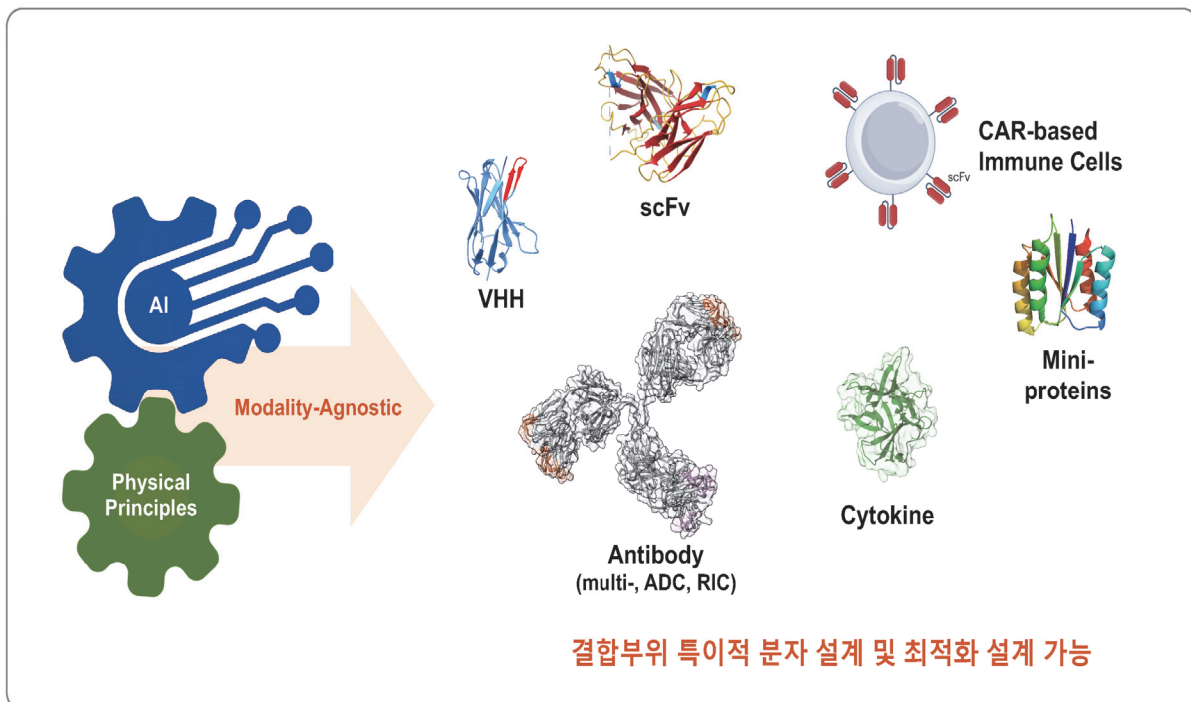
TOPflash (Wnt3a, batch #1 0911)



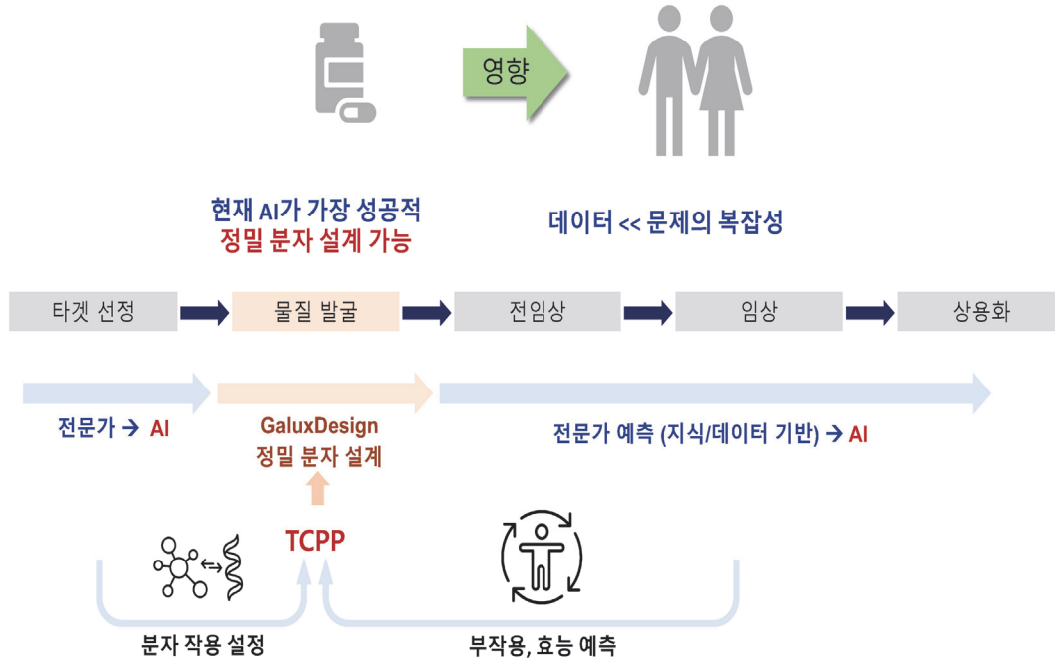
FZD7-Selective Binding Confirmed

Designed Abs selectively bind FZD7, distinguishing it from other homologous FZD family members based on just two amino acid difference.

구조 (원리) 기반 디자인: 질환/단백질 종류에 구애 받지 않는 설계 플랫폼



AI 신약개발의 현재와 미래



주제발표 2

AlphaGenome을 활용한 신약표적 발굴 및 정밀의료

백인화 경희대학교 약학과 교수



한림원탁토론회 :

AI 프런티어 시리즈

「AI x 신약개발」:
구조예측에서 임상까지,
혁신의 경계를 넘다

AlphaGenome을 활용한 신약표적 발굴 및 정밀의료

백인화
경희대학교 약학과 조교수

2025. 11. 21 (금)

Human genome

DNA sequence
(3.1 billion bases)



Human genome

GENE or protein-coding regions (1.5%)

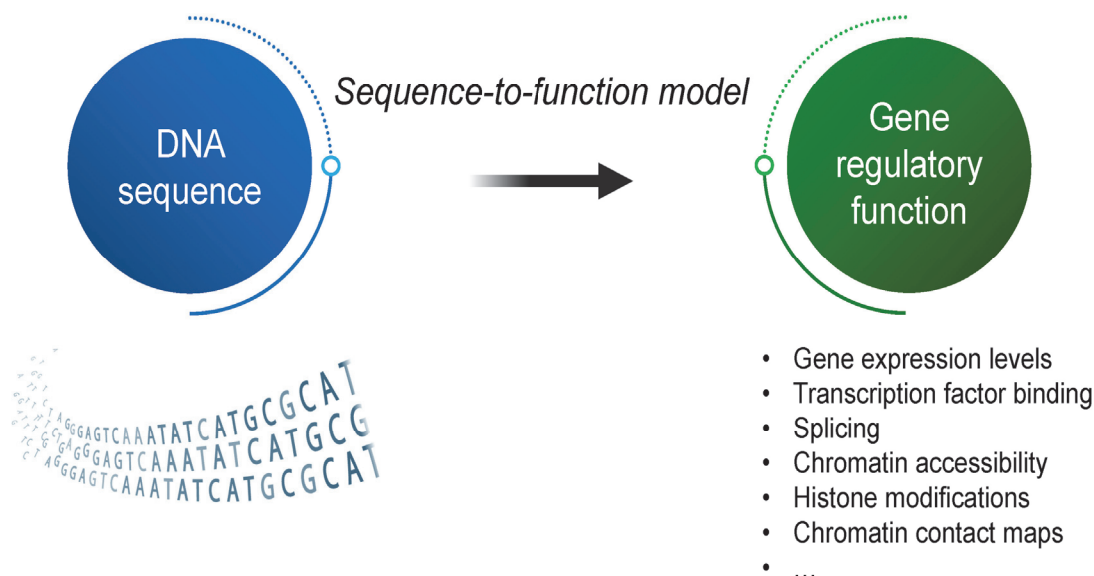
+

Non-coding regions (98.5%)

Interpreting the vast non-coding regions has been a major challenge.

DNA sequence to function models

Predicting gene regulatory activity from non-coding DNA sequence

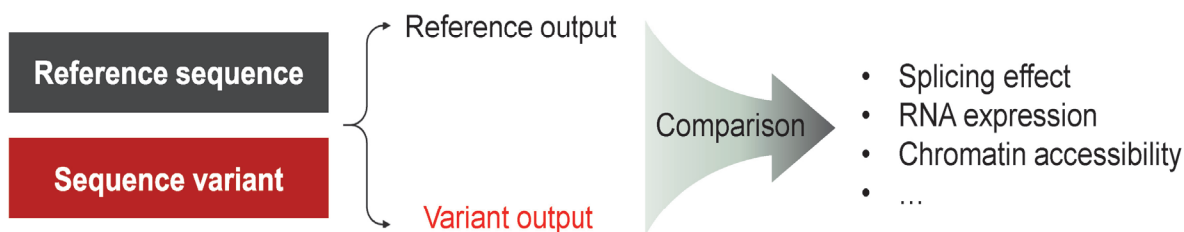


(image: created with BioRender.com)

Effects of sequence variants on gene regulatory activity

Predicting sequence variant effects on gene regulatory activity

Is the sequence variant disease-associated or pathogenic (causal)?

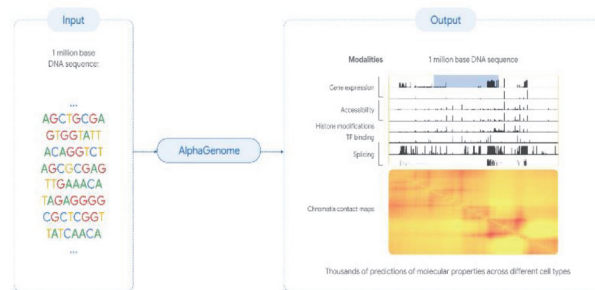


AlphaGenome

June 25, 2025 Science

AlphaGenome: AI for better understanding the genome

Ziga Avsec and Natasha Latysheva



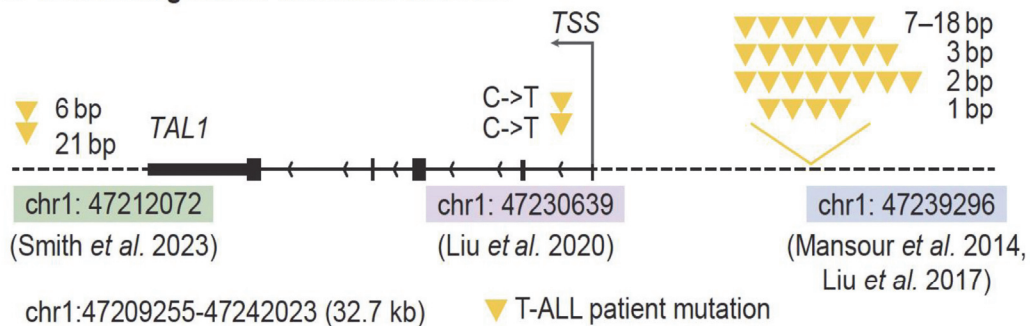
- Deciphering functions of non-coding regions at the molecular level
- Predicting effects of sequence variants
- Multi-modal, long genomic context (1 Mb), high predictive resolution (1 bp)

<https://deepmind.google/blog/alphagenome-ai-for-better-understanding-the-genome/>

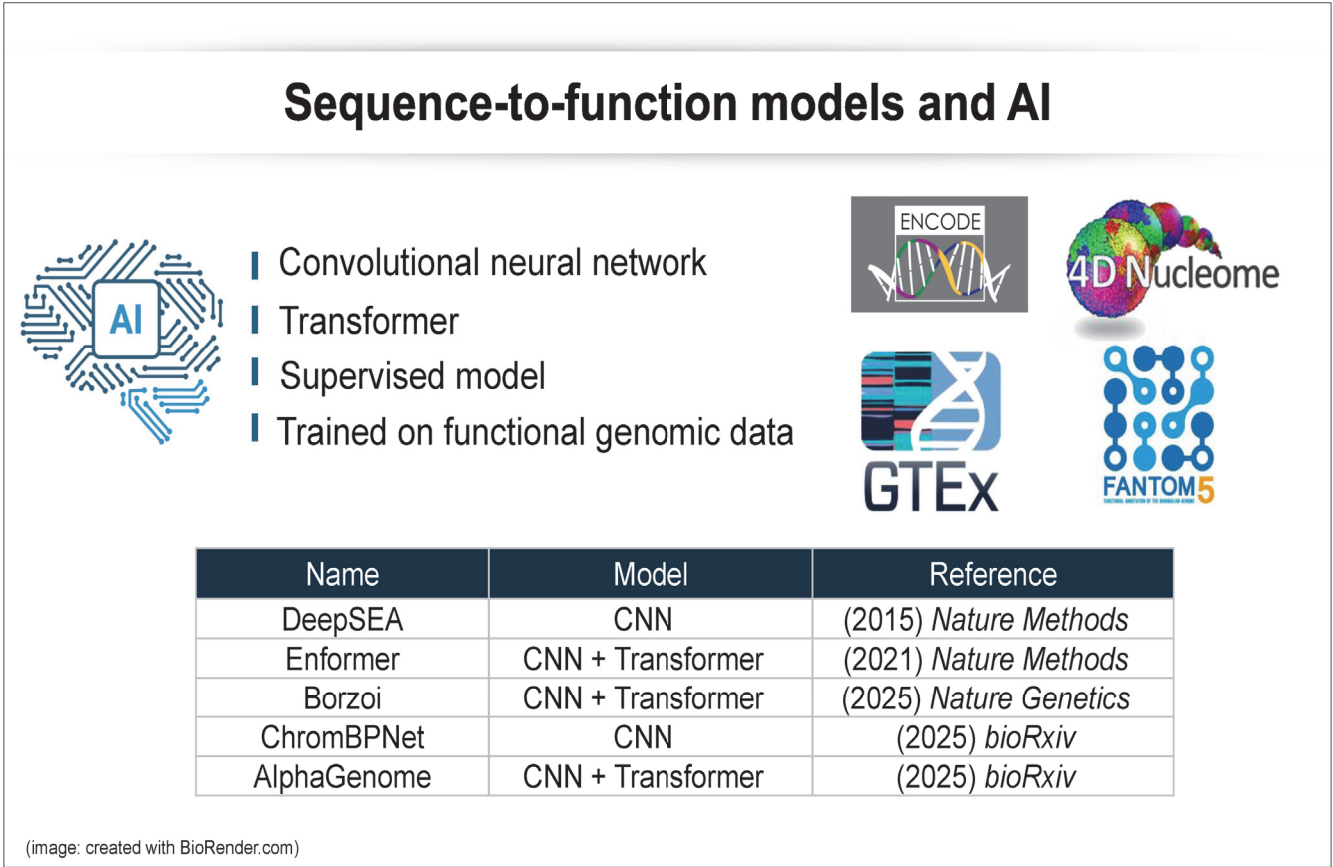
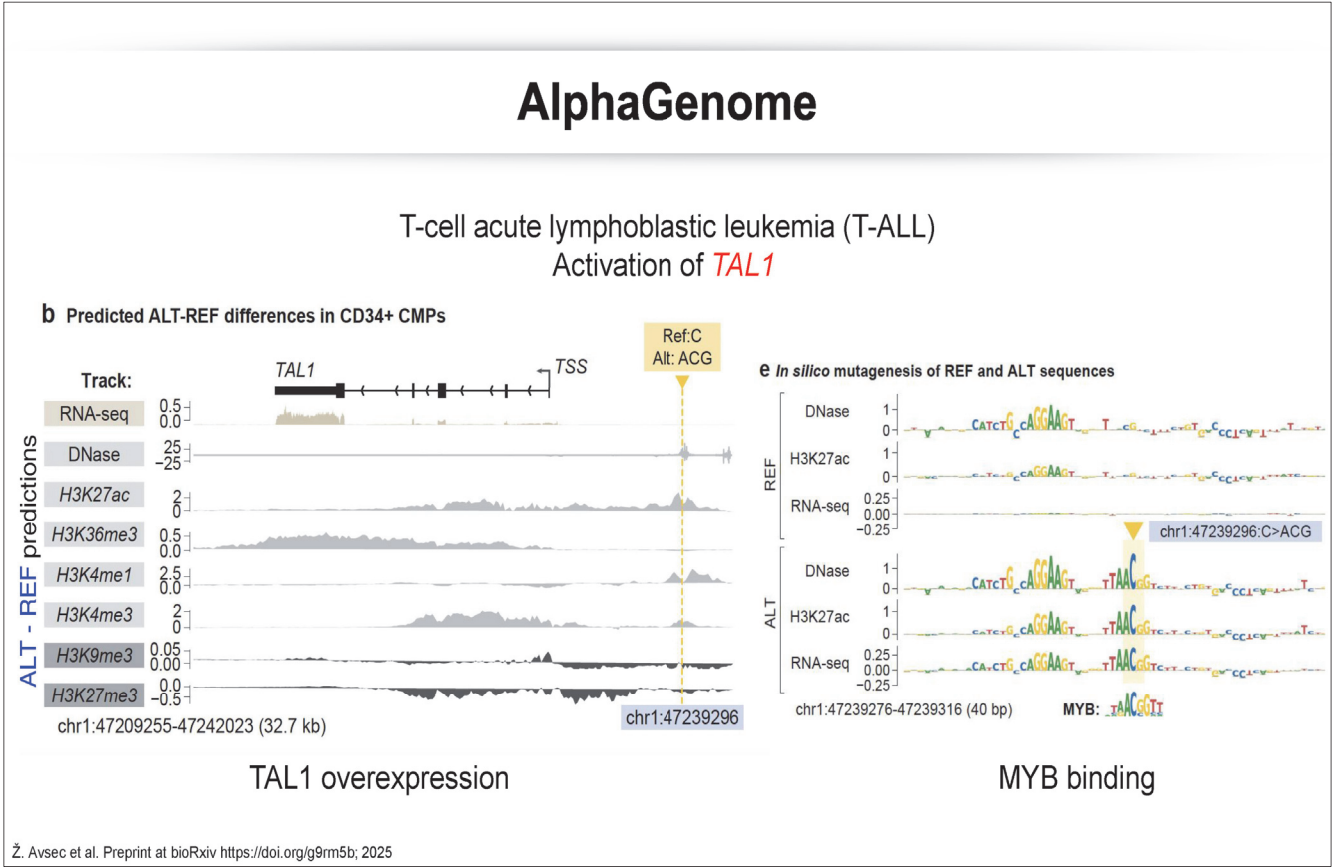
AlphaGenome

T-cell acute lymphoblastic leukemia (T-ALL)
Activation of *TAL1*

a Non-coding cancer mutations in T-ALL



Ž. Avsec et al. Preprint at bioRxiv <https://doi.org/g9rm5b>; 2025



AlphaGenome and drug discovery

Control Patient



Genetic variants (including SNPs, SVs) statistically associated with specific traits or disease

- Which **genetic variant** causes disease?
 - Diagnosis
 - Therapeutic target
- How does the **pathogenic variant** cause disease?
 - Therapeutic target

Sequence-to-function models
(ex. AlphaGenome)

- Prioritization of **potential functional variants**
- Prediction of the **functional impact** of genetic variants

Limitations of sequence-to-function models

Not perfect

- predicting transcription factor binding and histone modifications
- capturing cell type- or tissue-specific gene expression
- predicting "trait"-altering variants (functional variants)

Restricted to genetic diseases

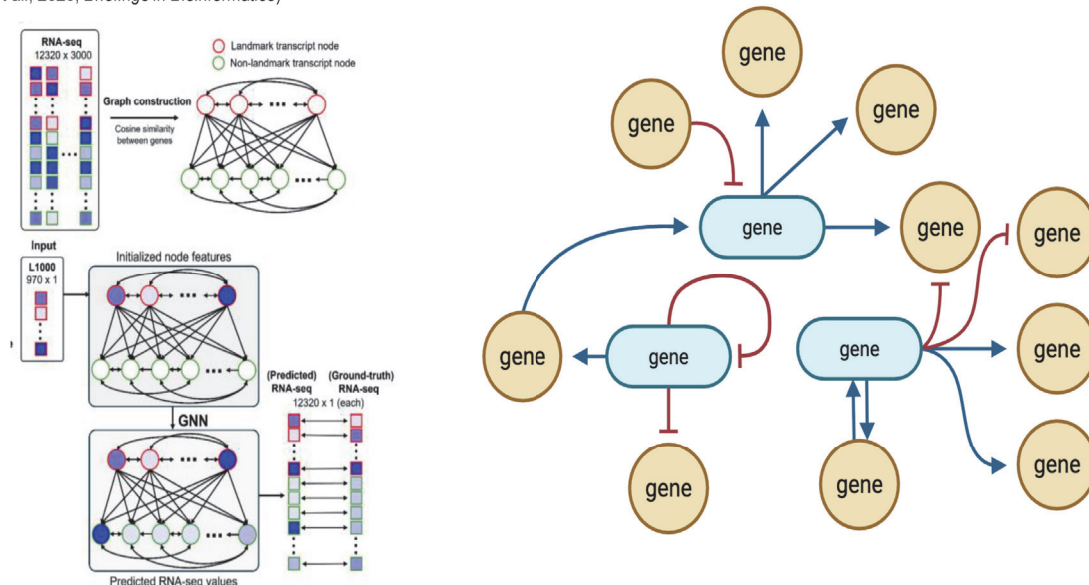
Not designed for individual genome prediction

Not for causal prediction

Causality inference and AI

RNA expression inference using graph neural network

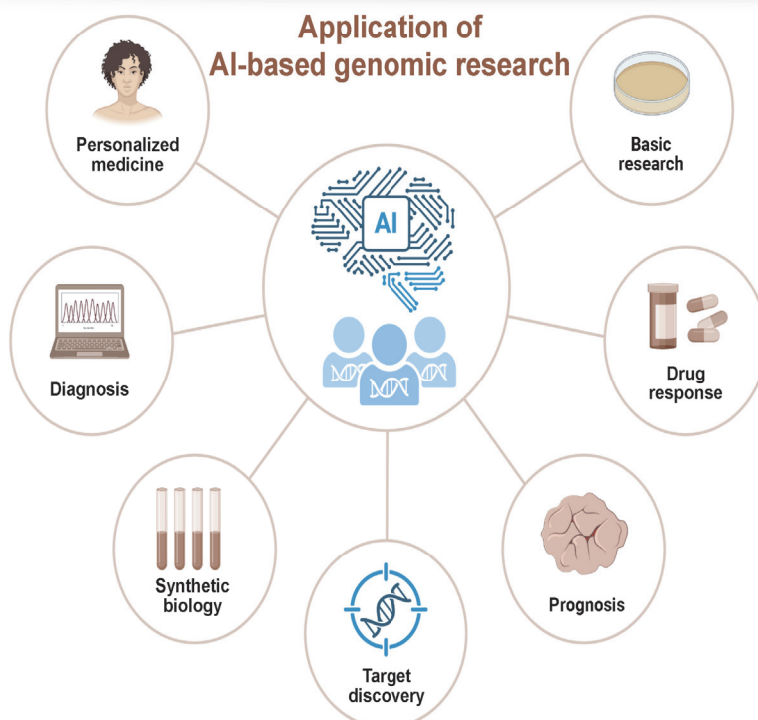
(Kim et al., 2025, *Briefings in Bioinformatics*)



(image: created with BioRender.com)

AI + Genome in biomedical field

Application of AI-based genomic research



(image: created with BioRender.com)

Thank you for your attention!

주제발표 3

AI 기반 항체 신약 개발

조경현 뉴욕대학교 컴퓨터과학과 교수



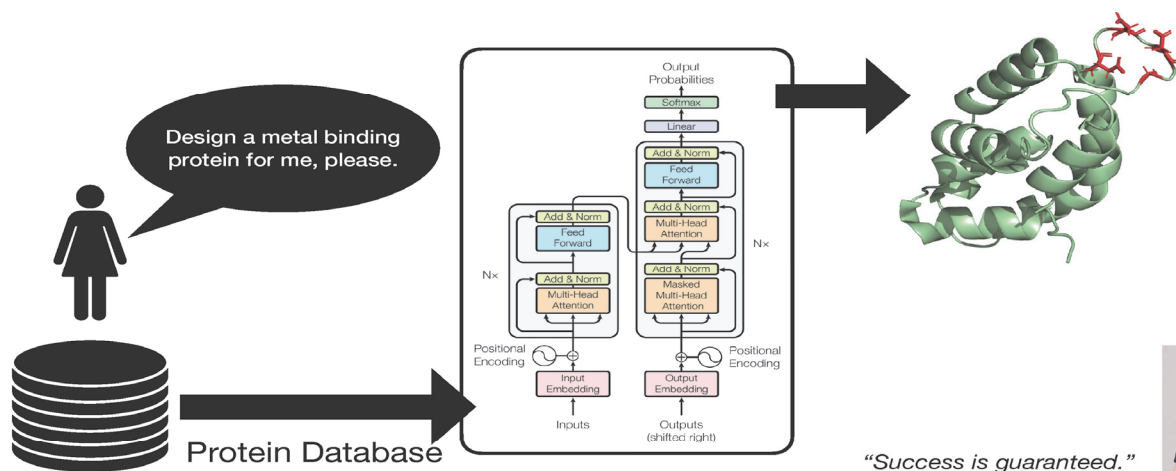


Prescient Design's Lab-in-the-Loop Therapeutic Antibody Design

Kyunghyun Cho on behalf of Prescient Design, Genentech and Roche
New York University and Genentech

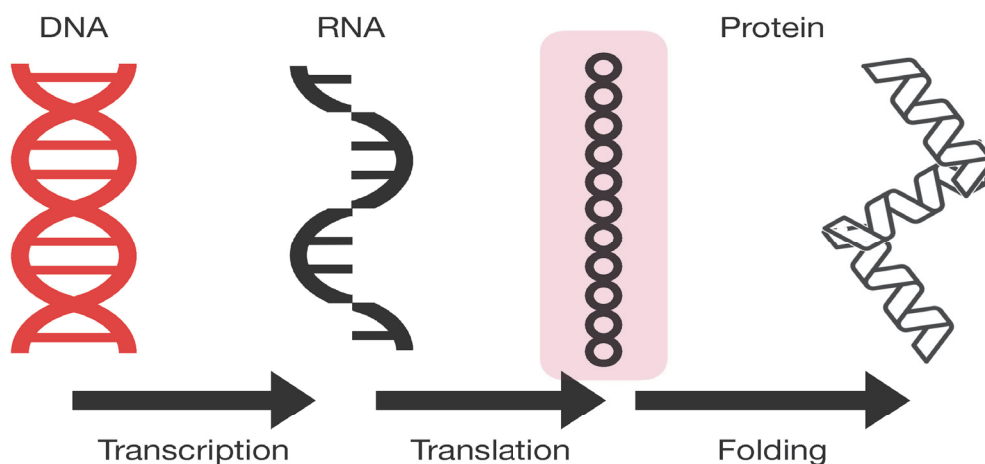


AI for Protein Design



A protein as as a sequence

Structures inform functions, but sequences encode structures

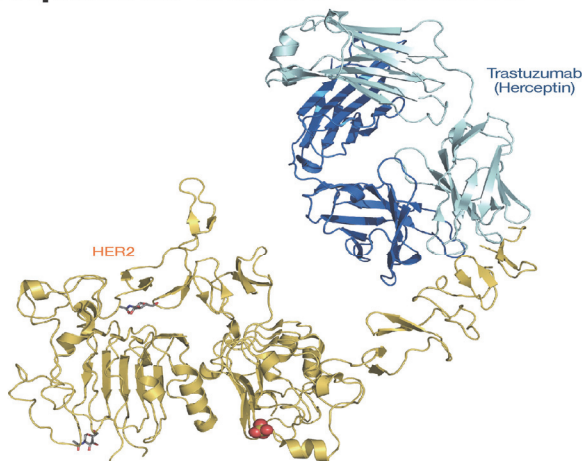


A protein as as a sequence

Structures inform functions, but sequences encode structures



- **Proteins interact with each other** as well as other molecules to perform biological functions.
- We can design a protein to interact with particular target molecules to artificially induce functions.



Protein Design as Sequence Optimization

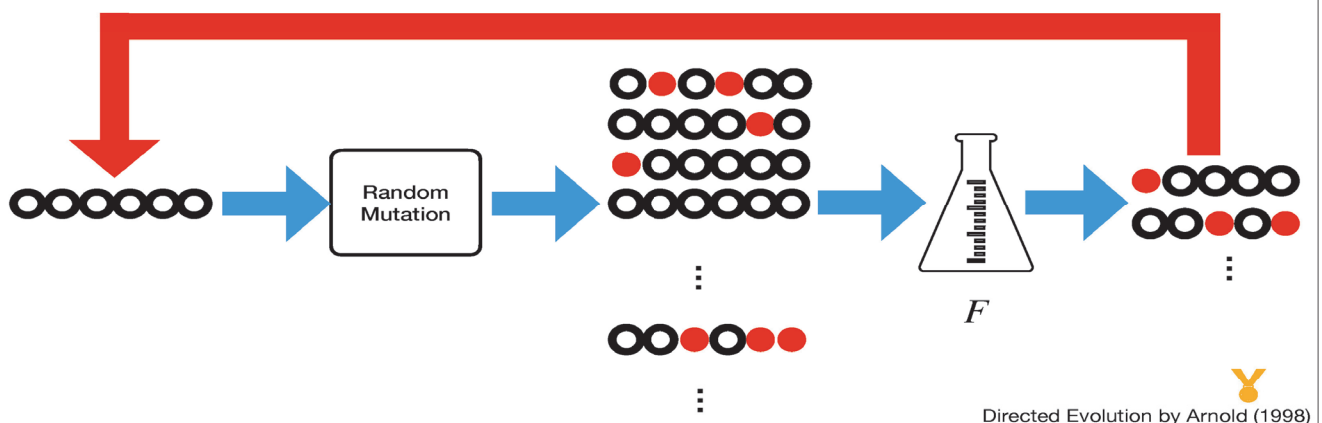
- Perhaps, protein design is nothing but

$$\max_{S \in \mathcal{A} \times \dots \times \mathcal{A}} F(S)$$

- $\mathcal{A}$: a set of proteinogenic amino acids.
- S : a protein sequence of 10s - 1000s amino acids.
- $F : \mathcal{A} \times \dots \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$: a target property of a protein S .

Protein Design as Sequence Optimization

Directed Evolution



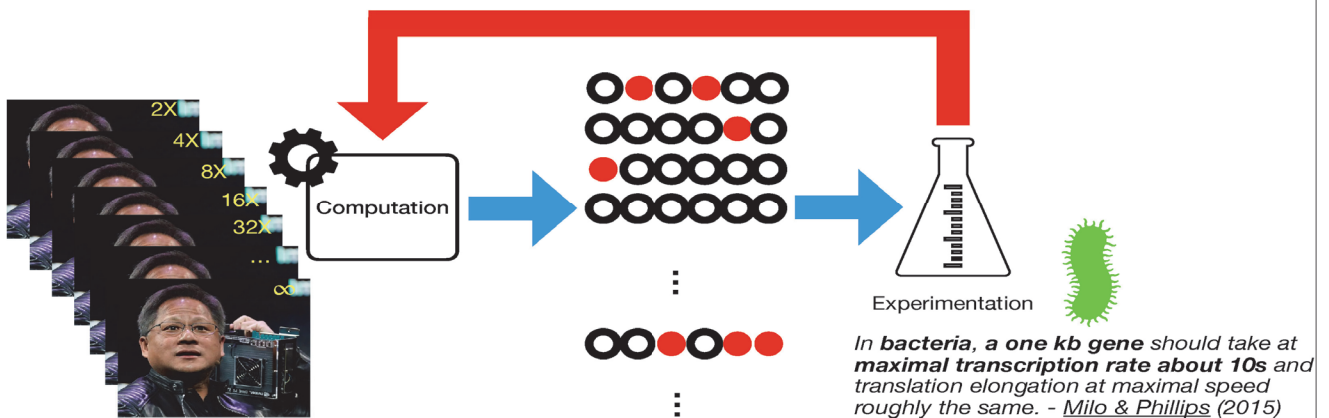
Challenges in AI for protein design

1. Computation and experimentation work at two different rates.
2. There are multiple, often-competing objectives.
3. Desirable proteins are often few and far apart.

Computation vs. Biology

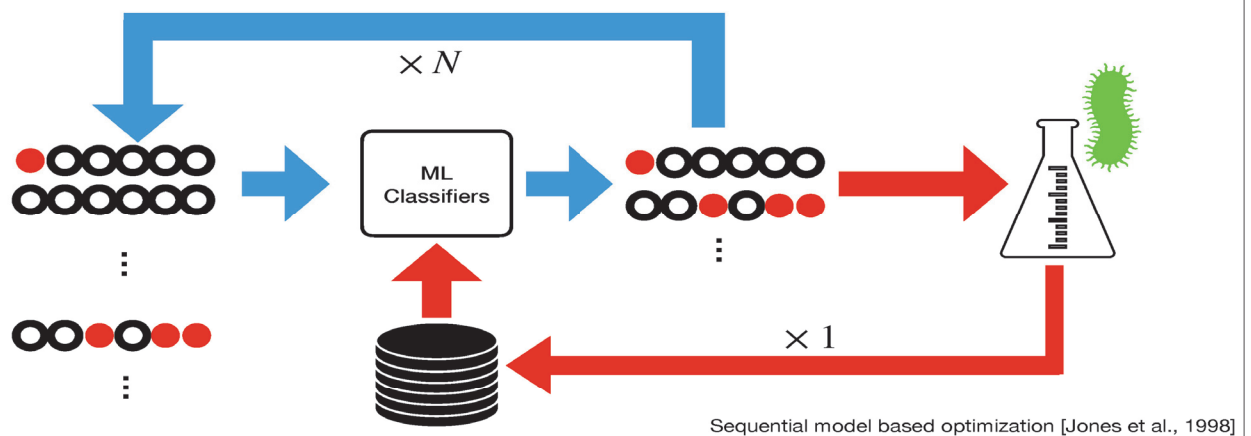
Two Processes in Protein Design

Computation and experimentation



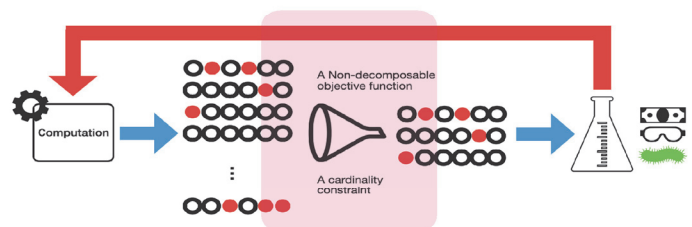
Overcoming the difference

With machine learning surrogate functions



The Interface between Computation and Biology

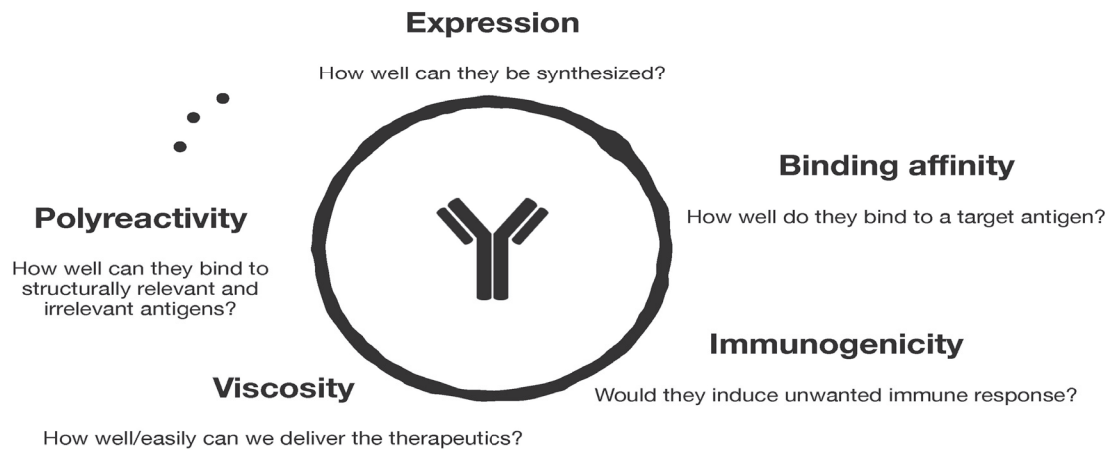
- Blackbox optimization is the interface b/w fast computation and slow biology.
- The gap between them is extremely high. We must work on improving;
 1. The throughput of experimentation, and
 2. Trade-off between sample complexity and accuracy.



Multi-objective optimization

What should be the objective?

Many competing properties

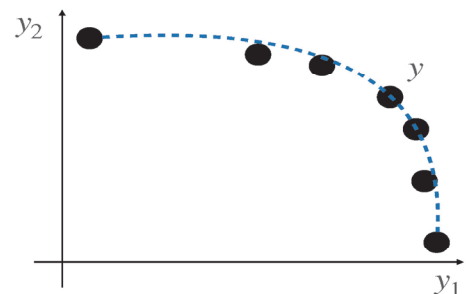


What should be the objective?

Many competing properties

$$\text{Find } \mathcal{P} = \left\{ S \in \mathcal{A} \times \cdots \times \mathcal{A} \mid \{S' \in \mathcal{A} \times \cdots \times \mathcal{A} \mid S' \succ S\} = \emptyset \right\}$$

- $S' \succ S$ if $F_k(S') > F_k(S)$ for all $k = 1, \dots, K$.
- $F_k(S) \in \mathbb{R}$: the k -th objective function.
- Because, we **do not know the right balance** among these properties early on.

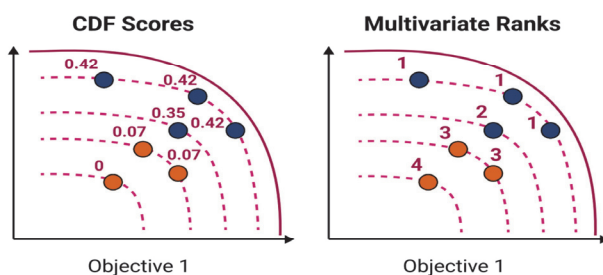


A Ranking-based Acquisition Function

BOtied: Bayesian optimization with tied multivariate ranks

- We can use CDF for measuring the quality of a given frontier;

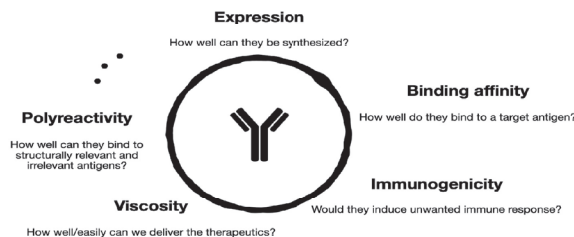
$$I(A) = \max_{y \in A} F(y)$$



[Park & Tagasovska et al., 2024 ICML]

More Issues Remain ...

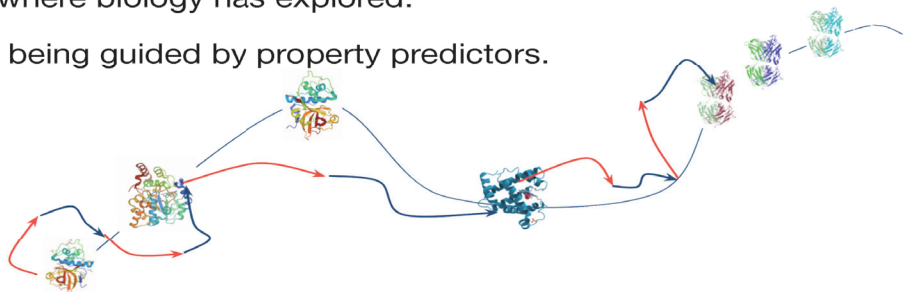
- The existence of multiple objectives poses many challenges:
 - Known dependencies among the properties [Park et al., 2023]
 - Some properties are too costly to measure; the imbalance in the availabilities of properties.



Desirable proteins are few and far apart

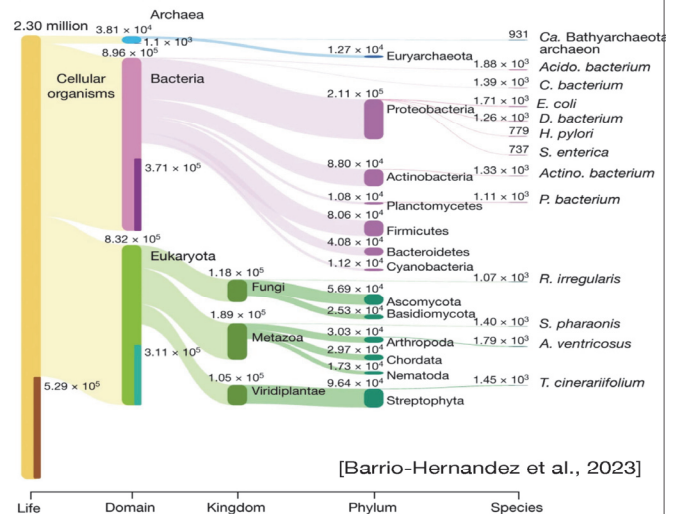
The Space of Proteins is Very Large

- All possible (biologically relevant) proteins of length $L \approx O(22^L)$
- Finding a needle in a haystack: we must narrow down the search space.
 1. We explore near where biology has explored.
 2. We explore while being guided by property predictors.



Evolution informs us in search

- Millions and billions of sequenced proteins from nature.
- BFD has 2B+ protein sequences.
- UniProt has more than 200M+ protein sequences.
- These are footprints of evolution exploring the space of proteins.



Adaptive Immune Response

Real-time evolution in our bodies

- Exposure to antigens shapes the composition and proportion of an adaptive immune repertoire of each individual. 
- OAS (observed antibody space; Olsen et al., 2021) contains 1.5B+ unpaired chain sequences and 121K+ paired chain sequences.

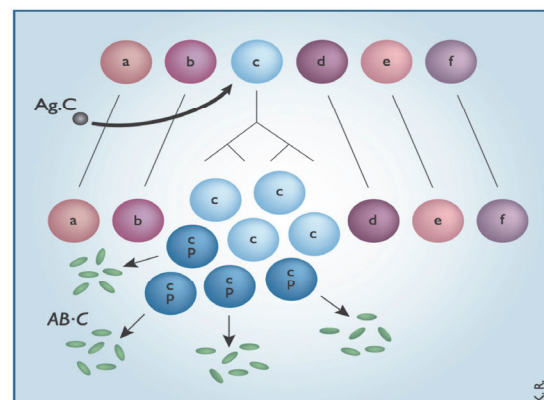
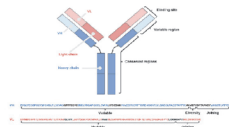
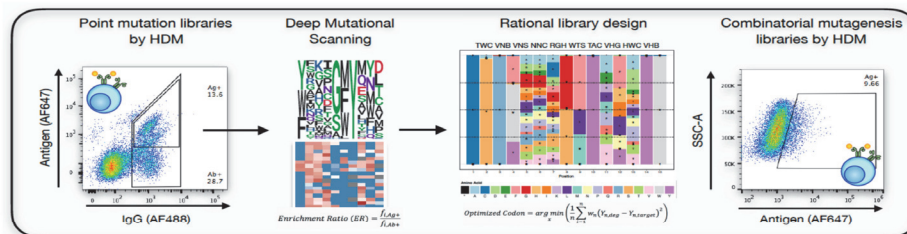


Figure 1. Burnet's illustration of the CST. Redrawn from F. M. Burnet's *The Clonal Selection Theory of Acquired Immunity*, p. 59, Figure 7 (1959), with permission from Cambridge University Press.

[Silverstein, 2002]

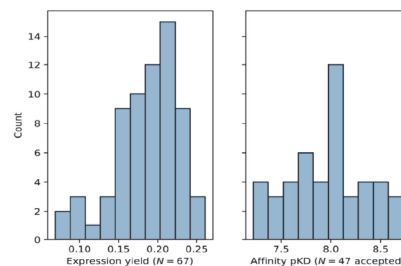
Antibody design by walk jump sampling

- Frey et al. [2024] have presented this work at ICLR'24. 🟡
- Discrete WJS is trained on a small number of binding antibodies ($\approx 10k$) produced from trastuzumab using CRISPR-Cas9 [Mason et al., 2021].



Antibody design by walk jump sampling

- When CDR H3 was redesigned (up to 10 mutations) ...
 - 70% binding rate: close to transtuzumab.
 - Almost all sequences were unique.
- This was done with $\approx 1,000$ samples.
 - Much smaller than 22^{10} seq's.

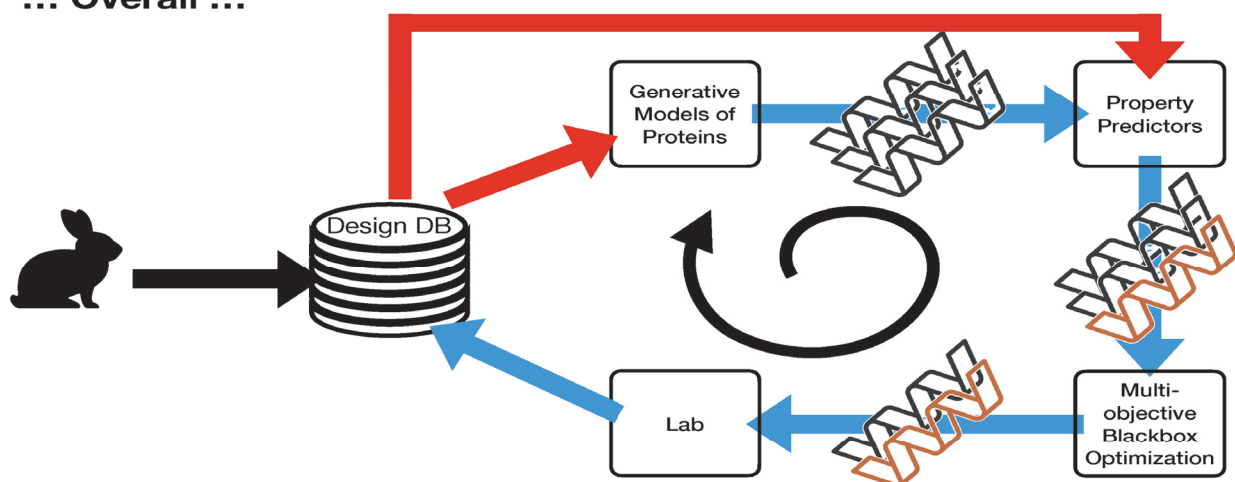


The Space of Proteins is Very Large

- Combinatorial optimization is by definition difficult; curse of dimensionality!
- We must get help from everywhere we can;
 - Evolution and adaptive immune response.
 - Property predictors' ability to capture correlations.
 - Iterative collection of more data: lab-in-the-loop design!

Putting them all together ...

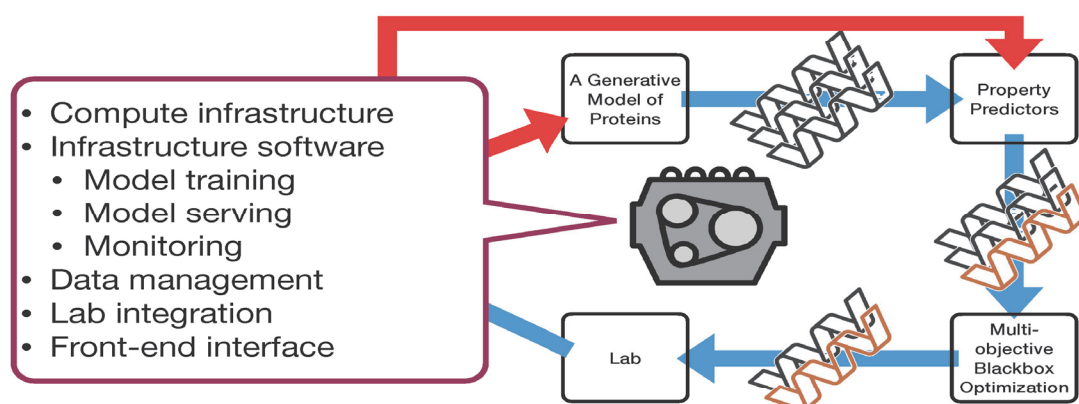
... Overall ...



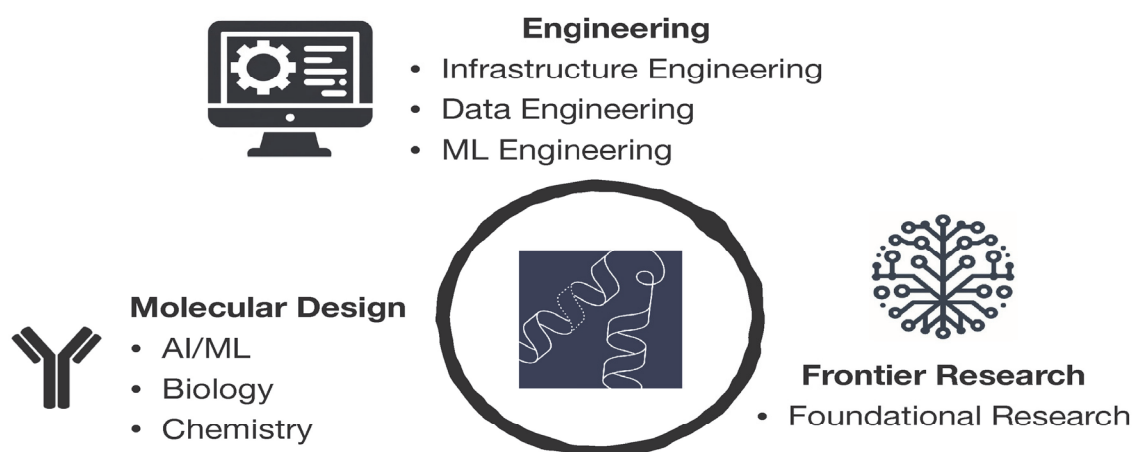
Does it actually work?

What drives lab-in-the-loop design?

Software and hardware engineering



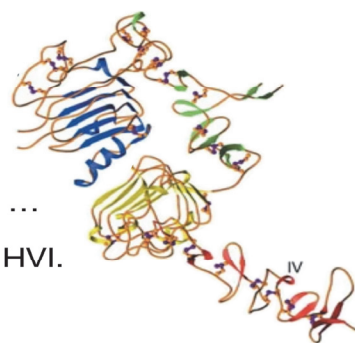
Prescient Design: An Engineering-First Drug-Discovery Team



Antibody Design at Prescient Design

The initial development phase

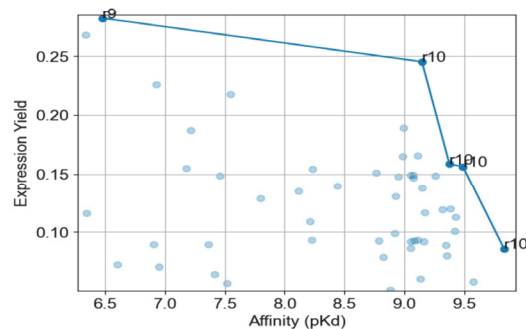
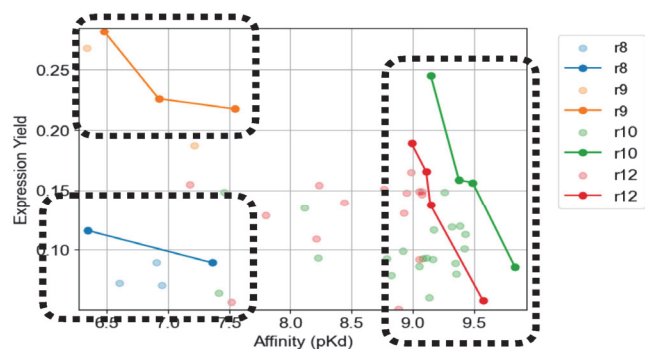
- More than 15 target antigens.
- Many methods for design proposal: WJS, Lambo, ...
- Global selection of sequences at each round with HVI.
- 12+ loops over the 2+ years for both development as well as design



[Cho et al., 2003]

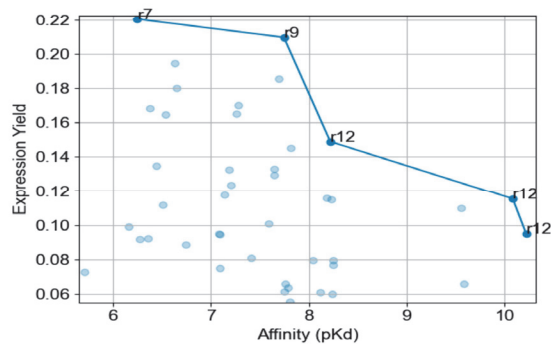
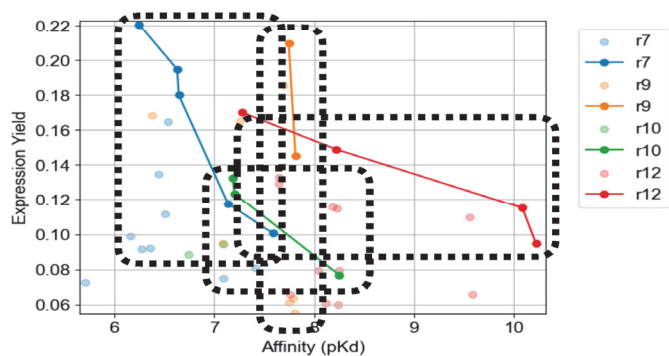
Target A

LamBO over 4 loops



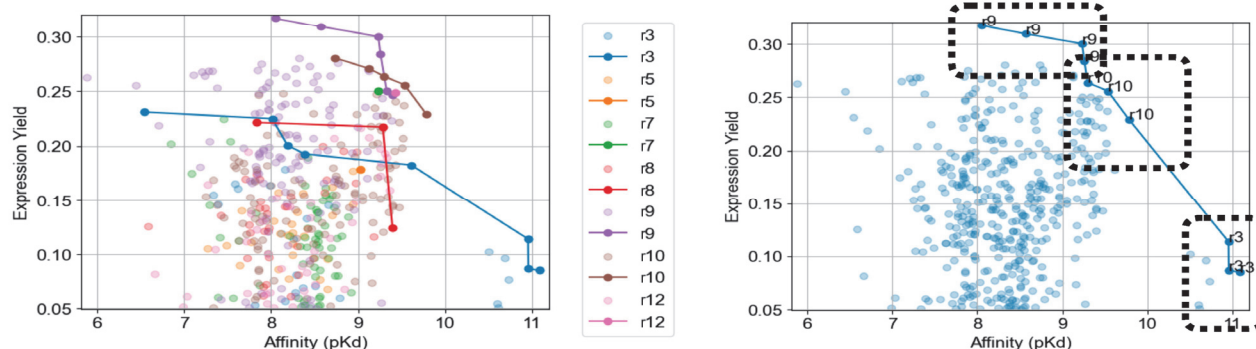
Target B

Lambo



Target C

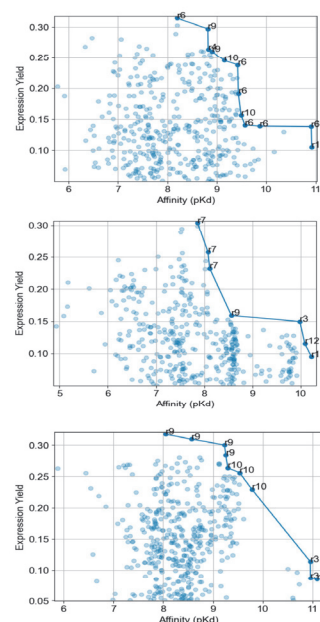
All methods



Yes, we can design antibodies

Hit-to-lead generation & lead optimization

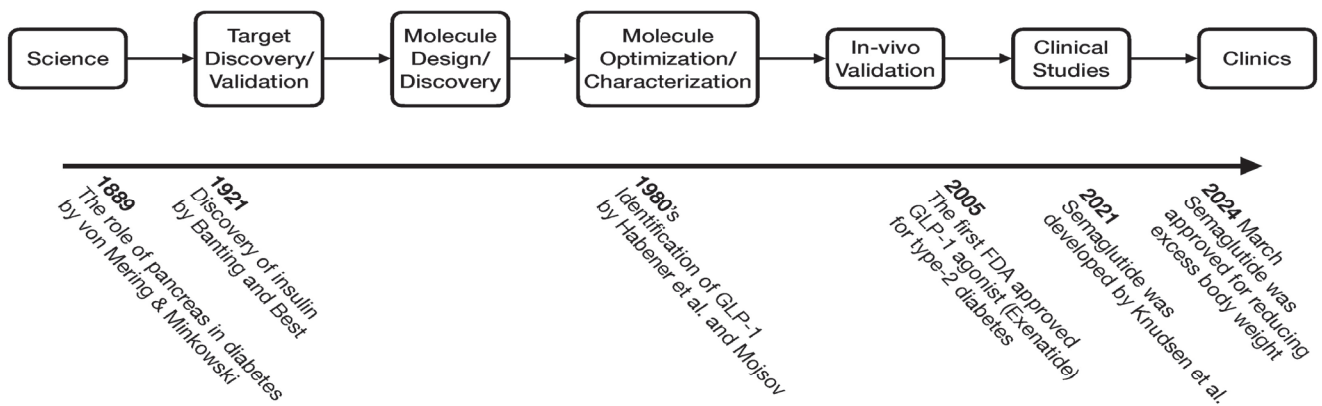
- Prescient Design's LITL has been and continue to be tested against a growing number of target antigens.
- Prescient Design's LITL works with a flexible number of ML algorithms as well as first-principle-based filters.
- Prescient Design's LITL explores the Pareto frontier of multiple objectives over multiple rounds.
- But, it is too early still ...



Drug Discovery

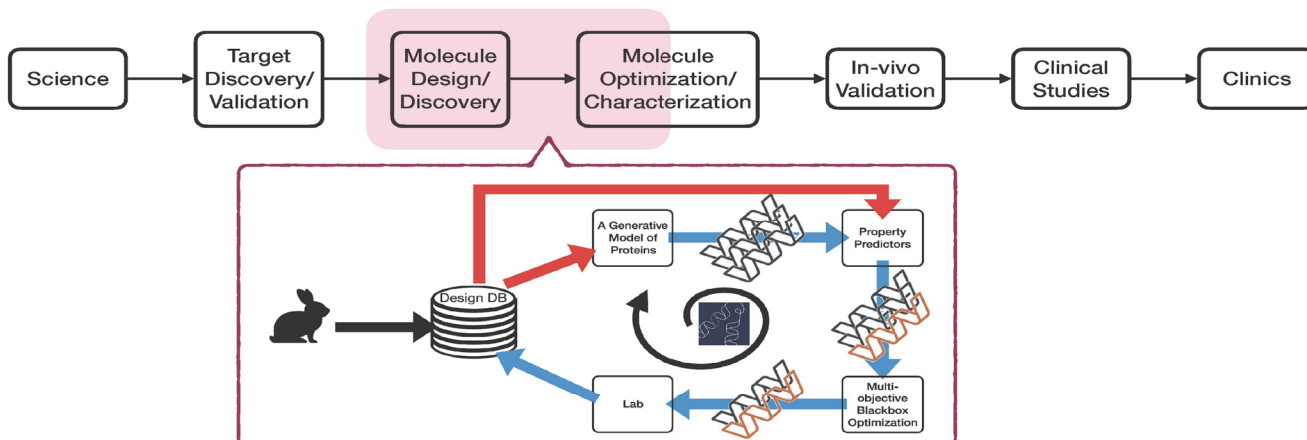
How close are we to AI-driven drug discovery?

Drug discovery

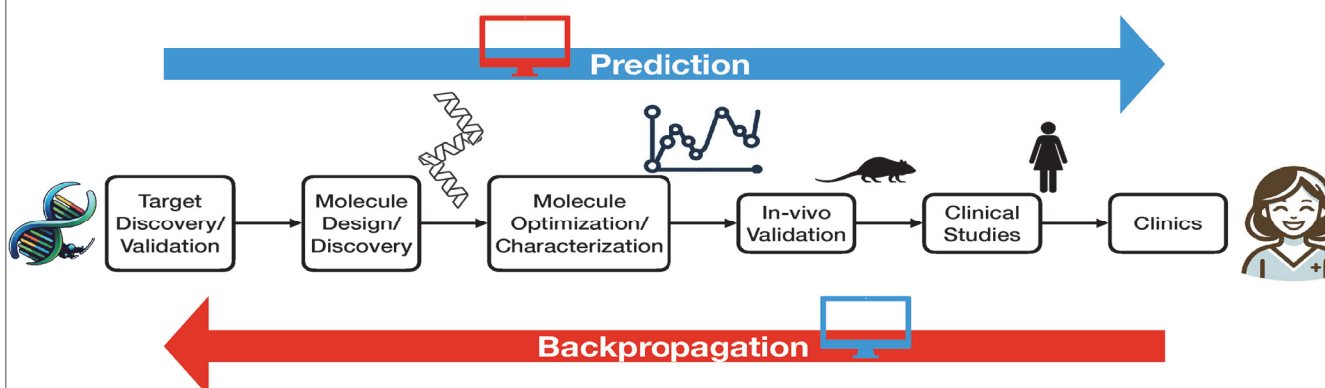


How close are we to AI-driven drug discovery?

Drug discovery: very far!



The true goal of AI for drug discovery



주제발표 4

Generative AI를 활용한 신약 설계(최초 임상 2상 사례)

Alex Zhavoronkov Insilico Medicine CEO



참여자의 요청으로 발표 자료는 책자에 담지 않았으며,
해당 발표 내용은 다음 QR 코드를 통해 확인하실 수 있습니다.



토론

「AI x 신약개발」: 구조예측에서 임상까지, 혁신의 경계를 넘다

AI모델 학습과
검증데이터의 중요성

성공적인 개발로의 전제

AI와 규제과학의 미래

AI x BT 투자

김화중 한국제약바이오협회 K-MELLODDY 사업단 단장

신현진 목암생명과학연구소 소장

정지원 식품의약품안전처 의료제품연구부 부장

이재흔 국가바이오위원회 바이오기술혁신국 국장



토 론 1

AI모델 학습과 검증 데이터의 중요성

김화종 한국제약바이오협회 K-MELLODDY 사업단 단장

AI의 역할 확대

신약개발 전 과정에 AI가 적용되어 신약개발의 시간과 비용을 줄이고 성공 가능성이 큰 신약 후보물질을 찾을 확률을 높일 것으로 기대하고 있다.

데이터 확보의 어려움

AI의 성능을 높이려면 학습 및 검증 데이터의 다양성이 중요하나 신약개발에 필요한 실험 데이터는 바이오 데이터 스페이스 전체 크기에 비하여 범위가 매우 제한적이다.

누구나 사용할 수 있는 공개 데이터 외에, 타 기관이 보유한 실세계 (real world) 데이터를 학습 또는 검증에 활용하는 것은 매우 어렵다.

* 데이터의 두 가지 유형

1) 연구 데이터

AI 모델을 개발할 때 사용할 수 있는 공개된 데이터 또는 자체 구축한 내부 데이터

2) 실세계 데이터

세포실험, 동물실험, 유전체, 약물 반응, 치료 데이터 등 신약개발에 중요하나 공개 및 활용이 어려운 데이터

* 바이오 AI 성공 전략

1) 연구 데이터 확보

공개 데이터는 누구나 접근 가능하여 차별성이 없고, 자체 데이터는 양이 적어 AI 모델 성능개선에 한계가 있다. lab in the loop 등을 사용하여 AI 모델 개선을 위한 맞춤형 데이터 생성 전략이 필요하다.

2) 실세계 데이터 활용

여러 기관이 보유한 실세계 데이터를 안전하게 AI모델 학습 및 검증에 사용할 수 있는 연합학습 등 기술 확산 및 제도 개선이 필요하다.

토 론 2

성공적인 개발로의 전제

신현진 목암생명과학연구소 소장

AI는 신약개발의 전 과정, 구조예측에서 임상 단계에 이르기까지, 을 혁신적으로 변화시키고 있다. 그러나 이러한 혁신이 ‘성공적’이라 평가되기 위해서는 단순히 AI 기술을 적용하는 데 그치지 않고, 실제로 우리의 일이 **더욱 좋든지(better), 더욱 빠르든지(faster), 더욱 저렴하든지(cheaper)** 해야 한다. 결국 성공의 핵심은 이러한 성과를 실현할 수 있을 만큼의 임계량(threshold)을 확보하고, 이를 넘어설 수 있느냐에 달려 있다. 이 임계량에 도달하기 위해서는 네 가지 전제 조건에 대한 장기 투자가 필요하다. 이 네 가지는 바로 재료(materials), 사람(people), 토양(environment), 마지막으로 전략(strategy)이다.

첫째, 재료는 AI 신약개발의 기반이 되는 데이터와 컴퓨팅 인프라이다. 신뢰할 수 있는 대규모 데이터의 확보와 이를 처리할 고성능 연산 환경은 연구개발의 재현성과 효율성을 결정짓는 핵심 요소이다. 데이터 품질 관리, 접근성 개선, 클라우드 및 슈퍼컴퓨팅 자원의 안정적 확보가 필수적이다.

둘째, 사람은 AI 신약개발의 추진력을 결정하는 요인이다. AI, 생명과학/약학, 고성능 컴퓨팅(HPC)을 연결할 수 있는 융합형 전문인력이 필요하며, 이를 지원하는 데이터 엔지니어, 시스템 관리자, 자동화 기술자 등 서포팅 인력 자원도 중요하다. 단기적 교육 프로그램을 넘어, 지속 가능한 협업 생태계와 장기적 경력 경로를 구축해야 한다.

셋째, 토양은 불확실성과 위험이 큰 신약개발 분야에서 도전을 가능하게 하는 환경을 의미한다. 연구자와 기업이 새로운 접근을 시도할 수 있도록 하는 명확한 물질적·비물질적 보상 시스템, 장기적 투자, 그리고 인력 투입의 유연성이 필요하다.

넷째, 전략은 신약개발의 모든 과정이 유기적으로 연결되어 있다는 인식에서 출발해야 한다. 즉, 개별 단계의 속도를 높이는 것에 그치지 않고, 전체 개발 흐름을 가속화한다는 관점에서 관련 AI 기술과 산업을 설계하는 것이 바람직하다. 예를 들어, 전임상과 임상을 연결하는 가교 역할을 하는 중개연구를 어떻게 AI로 활성화할 수 있을까 하는 질문은 이러한 전략적 접근을 구체화하는 데 유용한 출발점이 될 수 있다.

토론 3

AI와 규제과학의 미래

정지원 식품의약품안전처 의료제품연구부 부장

식품의약품안전처(이하 식약처)가 전망하는 규제과학의 미래는 인공지능(AI)이 가져올 혁신적 변화에 초점을 맞춘다. 첨단 바이오의약품, 개인 맞춤형 치료제, 디지털 의료기기 등 규제의 대상 제품군이 빠르게 다양해지면서 기존의 획일적 규제 체계만으로는 충분한 대응이 어려워지고 있다. 이러한 복잡성을 해결하기 위해 AI는 필수적인 도구로 부상하고 있으며, 방대한 데이터의 효율적 관리, 위험 예측의 고도화, 규제 의사결정의 속도·투명성 향상, 공공정보 서비스 강화와 같은 중요한 역할을 할 것으로 기대하고 있다.

유럽 등은 AI Act와 같은 신설 규정을 바탕으로 윤리적이고 신뢰할 수 있는 AI 거버넌스 체계를 구축해 가고 있으며, 한국 역시 이러한 흐름에 발맞추고 있다. 식약처는 '25년 2월부터 「디지털의료제품법」을 시행하고 있다. 디지털의료제품이란 디지털의료기기·융합의약품·의료건강지원기기 등을 포함하고 있음에 따라 식약처도 다양한 디지털 의료제품들의 개발 시 필요한 평가 모델이나 심사 가이드라인을 발표하고 있다. 또한 식약처 업무혁신을 위해 규제 데이터 디지털 플랫폼을 구축했고, 의료용 마약류 사용모니터링 시스템, AI 심사관, 시판 후 안전관리 시범사업 등 여러 AI 기반 프로젝트를 추진 중이다.

의료제품 규제 및 안전관리를 위한 AI 활용은 국제 파트너들과의 협력이 필수적이다. 올해 9월 대한민국에서 개최된 AIRIS2025에 참석한 20개 이상의 규제당국들은 AI 규제기준의 조화, 상호 신뢰 구축, 글로벌 안전망 형성의 필요성에 대한 합의문을 발표하며 지속적인 국제협력만이 앞으로 올 AI미래를 다같이 준비할 수 있음을 천명하였다.

결론적으로 식약처는 AI에 기반한 규제과학을 통해 국민의 안전을 강화하면서도 보건의료 분야의 혁신적 제품 개발을 지원하는 전략을 지속적으로 추진코자 하며 국민들의 많은 기대와 성원을 부탁드립니다.

토 론 4

AI x BT 투자

이재훈 국가바이오위원회 바이오기술혁신국 국장

1. 왜 지금 AI 바이오인가

- 국내 바이오산업은 빠른 속도(연평균 10%, '19~'23년)로 성장 중이나, **장기간 대규모 투자***가 필요한 특성상 **성장 여력에 한계**
 - * 신약개발: (소요기간) 10~15년, (비용) 3천억원~1조원, (성공확률) 1만분의 1
 - **우리 기업은 중견·벤처 중심, 국제분업 질서 속에서 선도적 위치에 있지 못함**
 - ※ 국내 바이오 R&D 총 투자규모는 11.7조 원(정부 5.2조, 민간 6.2조, '22년기준)으로 글로벌 제약사 7개사 중 1개사의 R&D 규모(약 13조~21조 원)에도 못 미침
- 최근 급성장 중인 AI는 바이오 산업의 **판도를 바꿀 혁신 변수**
 - 바이오는 방대한 데이터와 인간의 싸움으로, AI를 활용한 데이터 처리는 **신약개발 기간의 획기적 단축*** 등이 가능
 - * 신약개발 기간 단축(15년→7), 비용 감소(2~3조원→0.6) (한국보건산업진흥원)
- 최근 AI가 신약개발 전단계에 활용되는 등 AI 바이오 시대는 이미 시작
 - 선도국에서는 이미 다양한 AI 바이오 에이전트가 등장
 - ※ 구글 : 알파폴드2(단백질 구조예측 AI)를 개발해 35만개 이상 단백질(인간단백질의 98.5% 포함 등)의 3차원 구조를 정확히 예측('21, Nature)
 - 우리도 바이오 연구에 AI 활용이 확산 중이나, 여러 제약으로 어려움
 - ※ 바이오데이터베이스(특히 병원에서 잠자는 의료데이터) 취약, 컴퓨팅인프라 부족, 개인정보 보호 및 생명윤리 규제

2. 대한민국 AI 바이오의 기본 방향 (제안)

- AI 바이오 의료·연구데이터 플랫폼 구축

- ※ 바이오 연구의료 데이터 통합 연계, 클라우드 기반 활용 플랫폼 구축, AI 바이오 파운데이션 및 에이전트 개발, 바이오 전용 인프라(GPU, 양자컴 등) 등

- R&D ~ 임상·인허가·사업화 풀스택 지원, 과감한 규제특례

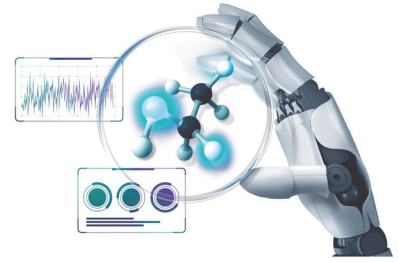
- ※ 규제자유특구 등과 연계한 의료데이터 활용 제약 해소, 자율실험실 및 실증인프라, 인내 자본 조달, 인허가 기간 단축 등

- 앵커·벤처기업 주축으로 산·학·연·병 연합 생태계 형성

- 지역 바이오 클러스터를 AI 바이오 혁신거점으로 탈바꿈

- ※ 국가바이오위원회 중심으로 중앙정부-지방정부의 협력 체계 구축

한림원탁토론회는...



한림원탁토론회는 국가 과학기술의 장기적인 비전과 발전전략을 세우고, 동시에 과학기술 현안문제에 대한 해결방안을 모색하기 위한 목적으로 개최되고 있는 한림원의 대표적인 정책토론 행사입니다.

지난 1996년 처음 개최된 이래 지금까지 200회 이상에 걸쳐 초·중등 과학교육, 문·이과 통합문제, 국가발전에 미치는 기초과학 등 과학기술분야의 기본문제는 물론 정부출연연구소의 발전방안, 광우병의 진실, 방사능, 안전 방제 등 국민생활에 직접 영향을 미치는 문제에 이르기까지 광범위한 주제를 다루고 있습니다.

한림원은 과학기술 선진화에 걸림돌이 되는 각종 현안문제 중 중요도와 시급성에 따라 주제를 선정하고, 과학기술 유관기관의 최고책임자들을 발제자로 초빙하여, 한림원 석학들을 비롯해 산·학·연·정의 전문가들이 심도 깊게 토론을 진행하고 있습니다.

토론결과는 책자로 발간, 정부, 국회와 관련기관에 배포함으로써 정책 개선방안을 제시하고 정책 입안자료를 제공하여 여론 형성에 기여하도록 힘쓰고 있습니다.

한림원탁토론회 개최실적(2022년~2025년)

회차	일 자	주 제	발제자
194	2022. 1. 25.	거대한 생태계, 마이크로바이옴 연구의 미래	이세훈, 이주훈, 이성근
195	2022. 2. 14.	양자컴퓨터의 전망과 도전: 우리는 무엇을 준비해야 할까?	이진형, 김도현
196	2022. 3. 10.	오미크론, 기존 바이러스와 무엇이 다르고 어떻게 대응할 것인가?	김남중, 김재경
197	2022. 4. 29.	과학기술 주도 성장: 무엇을 해야 할 것인가?	송재용, 김원준
198	2022. 6. 2.	더 이상 자연재난은 없다: 자연-기술 복합재난에 대한 이해와 대비	홍성욱, 이호영, 이강근, 고상백
199	2022. 6. 17.	K-푸드의 가치와 비전	권대영, 채수완
200	2022. 6. 29.	벤자민 버튼의 시간, 노화의 비밀을 넘어 역노화에 도전	이승재, 강찬희
201	2022. 9. 26.	신약개발의 새로운 패러다임	김성훈, 최 선, 김규원
202	2022. 9. 29.	우리는 왜, 어떻게 우주로 가야 하는가?	문홍규, 이창진
203	2022. 10. 12.	공학과 헬스케어의 만남 - AI가 여는 100세 건강	황 희, 백점기
204	2022. 10. 21.	과학기술과 사회 정의	박범순, 정상조, 류석영, 김승섭
205	2022. 11. 18.	지속 가능한 성장과 가치 혁신을 위한 수학의 역할	박태성, 백민경, 황형주
206	2022. 12. 1.	에너지와 기후변화 위기 극복을 위한 기초과학의 역할	유석재, 하경자, 윤의준
207	2023. 3. 15.	한국 여성과학자의 노벨상 수상은 요원한가?	김소영, 김정선
208	2023. 3. 22.	기정학(技政學) 시대의 새로운 과학기술혁신정책 방향	이승주, 이 근, 권석준

회차	일 자	주 제	발제자
209	2023. 4. 13.	우리 식량 무엇이 문제인가?	곽상수, 이상열
210	2023. 5. 24.	대체 단백질 식품과 배양육의 현재와 미래	서진호, 배호재
211	2023. 6. 14.	영재교육의 내일을 생각한다	권길현, 이덕환, 이혜정
212	2023. 7. 6.	후쿠시마 오염수 처리 후 방류의 국내 영향	정용훈, 서경석, 강건욱
213	2023. 7. 12.	인구절벽 시대, 과학기술인재 확보를 위한 답을 찾아서	오현환, 엄미정
214	2023. 8. 17.	과학·영재·자사고 교장이 이야기하는 바람직한 학생 선발과 교육	허우석, 오성환, 김명환
215	2023. 10. 27.	과학기술을 통한 삶의 질 향상 시리즈 (Ⅰ) 국민 삶의 질 향상을 위한 과학기술정책의 대전환	정선양, 박상철
216	2023. 11. 9.	과학기술을 통한 삶의 질 향상 시리즈 (Ⅱ) 삶의 질 향상을 위한 데이터 기반 식단 및 의학	박용순, 정해영
217	2023. 12. 5.	과학기술을 통한 삶의 질 향상 시리즈 (Ⅲ) 삶의 질 향상을 위한 퍼스널 모빌리티	공경철, 한소원
218	2023. 12. 19.	새로운 의로서비스 혁명: 디지털 치료제	서영준, 배민철
219	2024. 1. 31.	노쇠와 근감소증	원장원, 권기선, 고홍섭
220	2024. 3. 13.	필수의료 해결을 위한 제도적 방안	박민수, 김성근, 홍윤철
221	2024. 3. 19.	코로나보다 더 큰 위협이 올 수 있다, 어떻게 할까?	송대섭, 신의철
222	2024. 3. 20.	퍼스트 무버(First Mover)로의 필수 요소 - 과학네트워킹	김형하, 이상엽, 조희용
223	2024. 5. 10.	시민, 과학자가 되다	홍성욱, 박창범, 김 준
224	2024. 5. 29.	GMO, 지속가능성을 위한 전략	하상도, 김해영

회차	일 자	주 제	발제자
225	2024. 6. 21.	전략기술시리즈 (Ⅰ) K-반도체 위기 극복을 위한 국제 협력 전략	정은승
226	2024. 8. 21.	조류인플루엔자의 위험: 팬데믹의 전조인가?	윤철희, 김우주, 송대섭
227	2024. 8. 28.	전략기술시리즈 (Ⅱ) AI로 과학하기: 새로운 패러다임	문용재, 백민경, 서재민
228	2024. 11. 18.	전략기술시리즈 (Ⅲ) K-방산의 완성: 첨단 항공기 엔진 독자 개발	심현석, 이홍철, 김재환
229	2024. 12. 3.	과학기술 정책은 얼마나 과학적인가?	이정동, 이성주
230	2024. 12. 17.	전략기술시리즈 (Ⅳ) 첨단 바이오, 난치병 치료의 게임 체인저	최강열, 신영기, 천병년
231	2024. 12. 20.	뉴럴링크: 뇌와 세상의 소통	임창환, 정재승
232	2024. 12. 24.	전략기술시리즈 (Ⅴ) 식탁 위 숨겨진 건강 비밀: 마이크로바이옴이 열어가는 미래	이주훈, 김상범, 방예지
233	2025. 2. 25.	연구성과의 가치, 어떻게 평가할 것인가?	이학연
234	2025. 4. 29.	한국 AI의 미래 시리즈(Ⅰ) AI 3대 강국을 향한 우리의 전략	이경우, 김진형
235	2025. 5. 9.	흥미로운 양자정보기술 ±20년	이승우, 안재욱, 김기환, 배준우, 이수준, 김윤호, 최정운
236	2025. 5. 15.	한국 AI의 미래 시리즈(Ⅱ) 국가 AI 특화 인재 육성과 확보방안	이상원, 신진우
237	2025. 5. 29.	한국 AI의 미래 시리즈(Ⅲ) AI+X 대전환의 양면성: 혁신, 도전, 한계	이상근, 박준기
238	2025. 7. 9.	동물실험 없는 미래, 정말 가능할까?	박준원, 임경민
239	2025. 9. 10.	AI 프런티어 시리즈(Ⅰ) 「AI x STEM 교육」: 교실에서 시작되는 미래 인재	유연주, 차대길, 권가진
240	2025. 9. 18.	AI 프런티어 시리즈(Ⅱ) 「AI x K-방산」: AI로 국방의 혁신을 이룬다	곽기호, 서영우

회차	일 자	주 제	발제자
241	2025. 9. 29.	AI 프런티어 시리즈(III) 「AI x Physics」: 양자, 물질, 우주를 다시 쓰다	박경덕, 이인호, 홍성욱
242	2025. 9. 29.	AI 프런티어 시리즈(IV) 「AI x 신소재」: 미래 산업소재의 혁신 설계	최윤석, 한승우, 신정호
243	2025. 11. 11.	우리나라 과학기술 여성 리더십, 도전과 기회	조연주, 신용현
244	2025. 11. 13.	「AI x 농생명」: AX 융합형 지속 가능 농생명 혁신	최도일, 김상오, 성제경
245	2025. 11. 18.	「AI x BCI」: 뇌와 인공지능의 미래 연결	정천기, 양성구, 안종현, 김철, 한재호