연세대학교
YONSEI UNIVERSITY

AI 기반 3차원 신약 설계 및 약물 반응 예측 기술

연세대학교 첨단컴퓨팅학부
박상현 교수



기술 개요

- 단백질·리간드의 3차원 구조와 유전자 데이터를 활용하여 **물리 지식 기반 생성형 AI와 그래프 신경망**을 통해 신약 후보물질을 설계하고 결합 친화도 및 약물 반응성을 예측하는 인공지능 신약개발 기술
- **파마코포어 기반 3차원 분자 생성과 물리화학적 결합 특성 분석, 유전자 데이터 증강**을 통해 신약 후보물질 발굴 효율을 높이고, 가상 스크리닝과 정밀의료 등 다양한 바이오 분야에 활용 가능

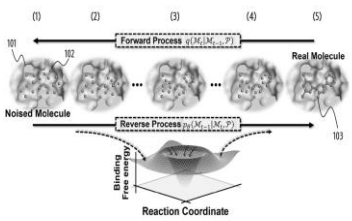
기술 개발 배경

- 기존 신약개발 과정은 방대한 후보물질의 탐색과 실험적 검증으로 인해 **많은 시간과 비용이 소요**되는 한계가 있음
- 기존 AI 기반 분자 설계 기술은 **3차원 원자 간 상호작용과 물리화학적 특성 반영이 부족**하여 결합력 예측 및 구조 최적화에 제약이 있음
- 또한 유전자 데이터의 부족과 복잡한 상호작용으로 인해 **정밀한 약물 반응성 예측과 효율적인 후보물질 설계 기술**이 요구됨

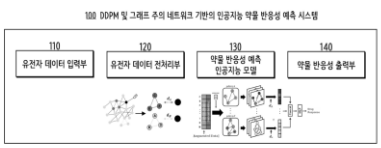
기술 차별성

- **SE(3)-불변성과 물리 지식 기반 그래프 신경망**을 활용하여 분자의 회전·이동에도 일관된 단백질-리간드 결합 친화도 예측 가능
- **파마코포어 기반 확산 생성모델**로 핵심 결합 특성을 유지하면서 단백질 결합 포켓에 적합한 3차원 후보 분자 생성 가능
- **물리 지식 기반 확산 모델과 SE(3)-등변 신경망**으로 결합 자유 에너지를 최소화하는 방향의 분자 구조 최적화 가능
- **DDPM 기반 유전자 데이터 증강과 그래프 주의 네트워크**를 통해 부족한 학습데이터를 보완하고 약물 반응성 예측 지원 가능

3차원 신약분자 생성

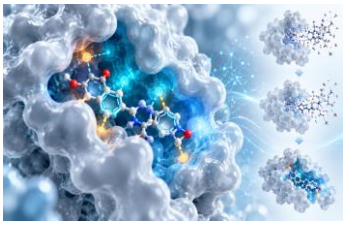


약물 반응성 예측 구조



연세대학교 첨단컴퓨팅학부
박상현 교수

기술 활용 분야





1 AI 신약개발 및 후보물질 발굴

- 단백질 결합 포켓 기반 3차원 후보분자 생성 및 결합 친화도 평가

2 정밀의료 및 약물 반응성 분석

- 유전자 발현 데이터 기반 항암제 반응성 예측 및 맞춤형 치료 연구

시장 동향 / 개발 현황

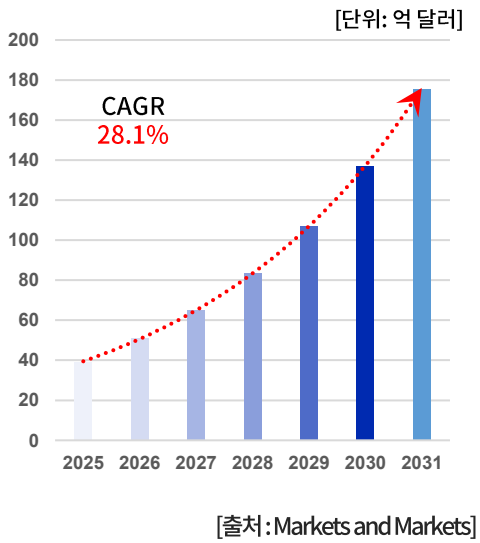
1 글로벌 AI 신약개발 시장 전망

- 글로벌 AI 신약개발 시장의 규모는 2025년 39억 2,000만 달러에서, 연평균 성장률 28.1%로 성장하여 2031년에는 175억 6,000만 달러에 달할 것으로 전망됨
- 신약개발의 비용 절감과 연구 효율성 향상을 위한 생성형 AI 기반 분자 설계 및 약물 반응 예측 기술의 활용이 확대될 것으로 전망됨

2 관련 산업 및 응용 사례

- AI 기반 신약 후보물질 발굴 및 정밀의료 연구 제약·바이오 분야에서 3차원 후보분자 생성과 가상 스크리닝을 통한 신약 후보물질 발굴 및 유전자 특성 기반 약물 반응성 예측에 활용 가능

글로벌 AI 신약개발 시장 전망



[출처 : Markets and Markets]

지식재산권 현황

No.	특허명	출원번호	등록번호
1	DDPM 및 그래프 주의 네트워크 기반의 인공지능 약물 반응성 예측 시스템 및 그 예측 방법	KR 10-2024-0152457 (2024-10-31)	-
2	SE(3)-불변성 및 물리 지식 기반 네트워크 모델을 이용한 단백질-리간드 결합 친화도 예측 시스템, 방법 및 프로그램	KR 10-2024-0152463 (2024-10-31)	-
3	신약 후보 물질 도출을 위한 물리 지식 기반 3차원 분자 생성 방법 및 시스템	KR 10-2024-0152439 (2024-10-31)	-
4	신약 후보 물질 도출을 위한 파마코포어(Pharmacophore) 기반의 3차원 분자 생성 방법 및 시스템	KR 10-2024-0152415 (2024-10-31)	-

문의처
연세대학교 산학협력단
양지혜 팀장
Tel. 02-2123-5138
E-mail. jh.yan@yonsei.ac.kr

문석재 박사
Tel. 02-2123-5172
E-mail. seokjae@yonsei.ac.kr

㈜시공아이피씨 이지용 주임연구원
Tel. 02-6453-8873
E-mail. jyyi@sigong-ip.com