

의학 발견을 위한 강력한 양자 AI 모델 공개

(2025.05.21., 양자정보연구지원센터)

- 소르본 대학과 Qubit Pharmaceuticals이 공동 개발한 세계 최고 수준의 양자 AI 모델
 - Qubit Pharmaceuticals과 소르본 대학은 약물 후보 물질을 신속하고 저렴하게 탐색할 수 있는 세계 최고 수준의 양자 AI 모델 FeNNix-Bio1을 공개함
 - 이 모델은 분자의 거동을 전례없는 정밀도와 속도로 시뮬레이션할 수 있어 실험실 실험을 대체하며 신약 개발 비용과 시간을 획기적으로 단축할 수 있음
 - 실제 실험과 유사한 수준의 정확도를 통해 수많은 후보 물질을 가상 공간에서 빠르게 검증하고 실패시킬 수 있음
 - FeNNix-Bio1은 GENCI, EuroHPC, Argonne의 초고성능 컴퓨팅 자원을 활용해 수백만 개의 분자 시뮬레이션을 기반으로 구축된 기초 모델임
 - 물리화학적 법칙을 학습하며, 분자의 상호작용과 반응성을 정확하게 예측할 수 있음
 - 기존 시뮬레이션 SW가 불가능했던 화학 결합 생성 및 파괴까지도 모델링 가능하여 Paxlovid, Ibrutinib 같은 공유 결합형 약물 설계 가능
 - 물리적으로 정확하면서도 확장성과 효율성을 갖춘 모델로, 화학-양자 AI 융합의 새로운 지평을 열
 - AlphaFold를 넘어서는 혁신
 - 구글 딥마인드의 AlphaFold가 단백질 구조 예측을 혁신했다면, FeNNix-Bio1은 단백질 구조의 시간에 따른 동적 변화 및 약물과의 상호작용까지 예측 가능함
 - 이는 정적 구조 예측을 넘어 약물 설계 전반을 지원할 수 있는 결정적 장점임

- AI를 통해 새로운 타겟 구조 예측부터 약물 발견까지 완전한 바이오-화학 시뮬레이션 체계를 제공함
- 화학 반응 예측, 이온/소분자 행동 예측, 수용액 내 반응 정밀 시뮬레이션 등 고난이도 분자 모델링 분야에서 기존 모델을 압도하는 성과를 보임
 - LLM이 아닌 화학/물리 전용 신경망 기반으로, 정확도는 높이고 학습비용은 낮춤 - 표준 GPU에서 몇 시간 내 학습 가능
 - 기존 AI 모델 대비 수십 배 효율적이고 수천 배 빠름
 - 화학 공간은 무한하며, 약물-표적 조합이 수조 개에 달하는 만큼, 이 모델은 탐색의 속도와 깊이를 근본적으로 변화시킴
- 현재 7개 약물 개발 프로그램 진행 중이며, 유방암, 염증성 질환 등의 분야에 집중
 - 의약 분야 외에, 산업용 효소 설계, 해수 담수화용 멤브레인 최적화, 차세대 배터리 개발, 친환경 화학 등 다양한 산업 응용 가능
 - 물리 법칙에 기반한 범용 모델로, 분자 조합을 바꾸는 것만으로 어떤 시스템도 시뮬레이션 가능
 - 향후 양자 컴퓨팅과의 융합을 통해 양자 AI가 실제 데이터 생성 기반까지 확장 가능
- FeNNix-Bio1은 단순한 속도 향상을 넘어, 보다 창의적이고 혁신적인 신약 설계를 가능케 함
 - AI, HPC, 양자 기술의 융합을 통해 생물학/화학의 전산화 자동화 시대가 현실화됨
 - 2035년 이후 가능할 것으로 예상되던 양자 데이터 기반 분자 시뮬레이션을 앞당겨 구현함
 - FeNNix-Bio1은 약물 설계, 검증, 확장 전 과정에 걸쳐 패러다임의 전환을 일으키고 있음

(원문)

1. <https://thequantuminsider.com/2025/05/20/sorbonne-university-and-qubit-pharmaceuticals-unveil-powerful-quantum-ai-model-for-medical-discovery/>