

# 양자머신러닝, 신약 개발을 위한 실용적 도구로 부상

(2026.02.18. 양자정보연구지원센터)

## □ 양자 머신러닝, 신약 개발을 위한 실용적 도구로 부상

- 양자 머신러닝(QML)이 이론 단계를 넘어 신약 개발 파이프라인 내 특정 병목 구간에서 실용적 보조 도구로 활용되기 시작했음을 분석한 연구임
  - QML은 고전적 인공지능을 대체하기보다는, 향후 10년간 하이브리드(고전-양자) 워크플로우 내에서 분자 복잡성을 보완적으로 처리하는 특화 계층으로 제시됨
  - 분자 모델링, 최적화, 생성 설계 등에서 양자 알고리즘이 잠재적 가속 효과를 제공할 수 있음을 검토함
- QML의 개념 및 기술적 구조
  - QML은 양자컴퓨팅과 머신러닝 원리를 결합한 알고리즘군으로, 주로 변분 양자 알고리즘(Variational Quantum Algorithms)을 기반으로 함
  - 양자 프로세서가 매개변수화된 회로를 통해 양자 상태를 준비·측정하고, 고전 컴퓨터가 해당 매개변수를 최적화하는 하이브리드 구조를 채택함
  - 데이터는 수치 벡터가 아닌 양자 상태로 인코딩되며, 중첩(superposition)과 얽힘(entanglement)을 활용해 복잡한 분자 상호작용을 동시에 탐색 가능
  - 분자 시스템은 본질적으로 양자역학적 특성을 가지므로, QML은 전자 상호작용·결합 형성·구조 변화 등을 보다 직접적으로 모델링하려는 시도임

○ 신약 개발 파이프라인 내 적용 영역

- (분자 표현 및 특성 예측) 양자 커널 방법 및 양자 분류기를 통해 활성·비활성 화합물 구분, 결합 친화도 예측 등 수행 가능
- 복잡한 화학적 특성을 양자 상태로 변환함으로써 고전 모델이 구분하기 어려운 화합물 군을 분리할 잠재성 제시
- (최적화 문제) 신약 개발은 방대한 설계 공간에서 분자 구조·도킹 자세·반응 경로 등을 반복적으로 최적화하는 과정임
- 양자 근사 최적화 알고리즘(QAOA 등)은 이를 에너지 최소화 문제로 정식화하여 복잡한 해 공간을 효율적으로 탐색 가능성 제시
- (생성적 분자 설계) 양자 생성 모델(예: 양자 GAN)은 광범위한 화학 공간에서 후보 분자를 샘플링하는 데 활용 가능
- 효능, 안정성, 합성 가능성 등 다중 제약 조건을 동시에 만족하는 후보 물질 탐색에 적합한 구조로 평가됨
- (차원 축소 및 노이즈 제거) 양자 오토인코더를 활용해 고차원 분자 데이터를 압축·정제함으로써 데이터 부족 환경에서 학습 성능 개선 가능성 제시

○ 초기 실증 사례

- 대규모 상용 적용 단계는 아니며, 개념 검증(Proof-of-Concept) 중심의 실험 결과가 보고됨
- 변분 양자 고유값 해법을 통해 소형 분자의 바닥상태 에너지 추정 성공, 소규모 양자화학 계산 재현 가능성 확인
- 축소된 화학 데이터셋에서 양자 분류기·커널 기법이 고전적 방법과 유사하거나 일부 조건에서 우수한 분리 성능을 보임
- 양자 GAN 기반 분자 생성은 탐색적 단계이나, 복잡 분포 샘플링 가능성 시사
- 연구진은 이를 단기적 우위 증명이 아닌 “기술적 실현 가능성의 지표”로 평가함

- 한계 및 위험 요인
  - **하드웨어 제약:** 제한된 큐비트 수와 결맞음 시간으로 인해 모델 규모와 깊이가 제한됨
  - **데이터 인코딩 비용:** 분자 정보를 양자 상태로 효율적으로 변환하는 과정이 복잡하며, 이 비용이 잠재적 속도 이점을 상쇄할 수 있음
  - **학습 불안정성:** 회로 규모가 커질수록 최적화 지형이 평탄해지는 ‘배런 플래토(barren plateau)’ 문제 존재
  - 보편적 양자 우위는 불확실하며, 상당 기간 고전 AI가 더 실용적일 가능성 존재
  
- 오류 정정 및 큐비트 품질 향상이 핵심 전제 조건
  - 노이즈와 제한된 회로 깊이를 고려한 알고리즘 설계 필요
  - 전면적 양자 파이프라인보다는, 기존 신약 개발 플랫폼 내 특정 연산을 양자 서브루틴으로 삽입하는 방식이 단기적으로 가장 현실적 전략으로 제시됨
  
- QML은 단기적으로 고전 AI를 대체하기보다는, 분자 복잡성이 급증하는 특정 구간에서 보완적 계산 계층으로 기능할 가능성이 큼
  - 하드웨어 성숙과 알고리즘 개선이 병행될 경우, 신약 개발의 모델링·최적화·생성 설계 분야에서 점진적 통합이 이루어질 것으로 전망됨

(원문)

1. <https://thequantuminsider.com/2026/01/21/quantum-machine-learning-is-emerging-as-a-practical-tool-for-drug-discovery/>