

AI Strategy Planning

# AI로 진화하는 신약개발 패러다임 변화: SDL(Self-Driving Lab.)

글 | SK AX, 에너지/바이오사업본부 이진우 본부장  
SK AX, 에너지/바이오사업본부 김봉준 전문위원



01 ·  
Intro

02 ·  
SDL(Self-Driving Lab.)

03 ·  
기술적 도입 방향  
- 계층적 제어 아키텍처

04 ·  
도입 시 고려사항

# Executive Summary

## Intro

- 신약발굴(Drug Discovery), 특히 타겟 발굴과 Hit 발굴에 Agentic AI의 파괴적 영향력이 집중되고 있으며 이는 심각한 불균형을 시사한다.
- AI를 통해 수천 개의 후보 물질이 단 시간에 생성될 수 있게 되었지만 이를 실제 물리적 실험을 통해 검증하는 것은 현재의 실험실 용량을 초과하기 때문이다.
- 따라서 검증 단계에서의 병목을 해결할 수 있는 접근 방식으로 SDL을 살펴보고자 한다.

## SDL(Self-Driving Lab.)

- SDL은 사람의 개입을 최소화하고 24/7 자동화된 장비와 로봇으로 운영되는 Dark Lab에 AI가 실험 설계·판단·최적화를 수행하는 Decision Loop를 결합한 것을 의미한다.
- 주요 사례 중에 AstraZeneca iLab은 AI 그룹과 실제 합성을 담당하는 로봇 하드웨어를 유기적으로 결합하여 수개월이 걸리던 사이클을 획기적으로 단축하고 있다.

## 기술적 도입 방향 – 계층적 제어 아키텍처

- AI기반 실험설계(Intelligence Layer)–로봇실험 실행(Execution Layer)–실험결과 분석(Analysis Layer)로 3개 계층 레이어를 통해 Decision Loop를 구성하게 된다.
- AI가 도출한 타겟을 합성하기 위해 Retrosynthesis를 필요로 하며 먼저 실험실에서 프로토콜이라고 불리는 실험계획을 수립하고 실행을 위한 장비와 AI간의 이기종 언어의 연결 과정이 필수적이다.
- 이는 단순 실행이 아닌 실험실에서의 도메인 지식이 반영된 Work Flow가 실행과 분석 단계에서 핵심적인 사항이 되기 때문이다.

## 도입 시 고려사항

- SDL 도입에 대하여 1) 이기종 장비와 AI 모델의 통합 서비스 제공, 2) 데이터 온톨로지 및 보안이 강화된 AI 실험실 구축, 3) Human-in-the-Loop을 위한 사전 정의를 고려해야 한다.
- 또한 본 고에서는 제약/바이오 산업 외에도 정밀화학·첨단소재 등 Small Molecule 기반 산업에서도 핵심 기술로 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

# 01 Intro

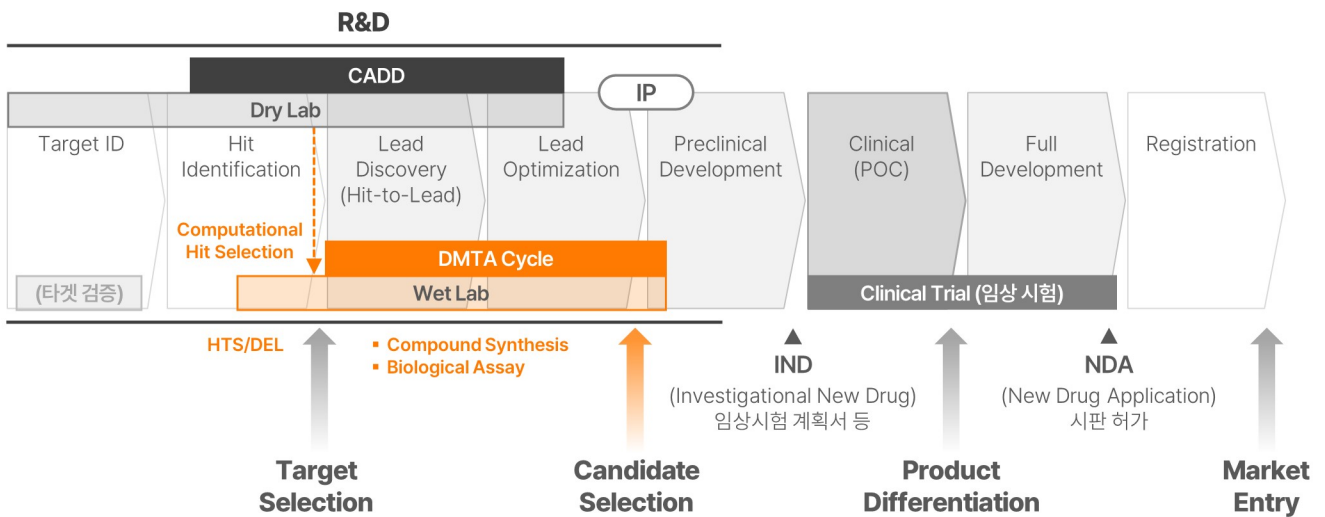
전통적인 제약/바이오 산업의 연구개발(R&D)은 초고속 스크리닝, 유전체학의 기술적 발전에도 불구하고 현재 이른바 '이룸의 법칙(Eroom's Law)'이라 불리는 R&D 생산성 저하 문제에 직면해 있다. 이는 무어의 법칙(Moore's Law)과 반대로 기술이 발전함에도 불구하고 신약 개발 비용은 9년마다 2배씩 증가하고 효율성은 떨어지는 현상을 의미한다<sup>[1]</sup>. UniProt 데이터베이스에 따르면 약 4,900~5,000 개의 단백질이 인간 질병과 실험적으로 연관되어 있지만, 현재 FDA 승인 약물의 타겟이 되는 것은 600~800개에 불과한 실정이다<sup>[2]</sup>.

이는 연구자의 직관과 수동적인 실험, 그리고 선형적인 프로세스에 의존해온 것에 기인하고 있는데 최근 등장한 AI(Agentic AI)는 과거 컴퓨터 시뮬레이션과 연구원이 5~6년 걸리던 후보물질 발굴(Discovery)을 단 몇 개월 만에 가능하게 하는 등 물질을 기획하고 찾아내는 속도는 점차 해결해 나가는 추세이다.

## 1.1 Agentic AI의 등장

가장 큰 파괴적 영향력은 신약발굴(Drug Discovery), 특히 초기 신약 탐색 과정에 해당하는 타겟 발굴과 Hit 발굴에 집중되어 있는데 생물정보학(Bioinformatics)과 계산 화학(Computational Chemistry)이라는 이름으로 컴퓨터를 적극적으로 쓰던 분야이며 상대적으로 데이터가 잘 정비되어 있기 때문에 볼 수 있다. 이는 IT 빅테크(NVIDIA, Google 등)에서 가장 관심이 있는 구조로 이들의 관점에서는 "신약 탐색"은 컴퓨터 과학의 문제로 치환하기가 좋기 때문이다.

[그림 1] 신약개발 과정



## 1.2 R&D Bottleneck

그러나 AI 투자의 약 95%가 "초기 신약 탐색"에 집중되어 있다는 점은 심각한 불균형을 시사한다<sup>[3]</sup>. AI 활용이 고도화됨에 따라 수천 개의 고품질 후보 물질이 단 몇 시간 만에 생성될 수 있게 되었지만, 이를 실제 Drug Candidate으로 연결하기 위해서는 결국 Wet Lab 기반의 물리적 실험 검증이 필수적이다. 문제는 이러한 검증 과정이 여전히 사람 중심의 실험 속도와 실험실 처리 용량에 의해 제한된다는 점이다.

숙련된 화학자 한 사람이 하루에 수행할 수 있는 화학 반응 수는 평균 2~4건으로 제한적인데 반해 AI가 생성한 방대한 양의 인실리코(in-silico) 후보 물질은 현재의 실험실 용량을 훨씬 초과하고 있다.

결과적으로 AI에 의한 탐색 속도가 아무리 빨라지더라도 인간의 물리적 검증 속도가 이를 뒷받침하지 못한다면 전체 신약개발 프로세스의 병목 현상은 더욱 심화될 수밖에 없다<sup>[4]</sup>. 따라서 단순히 과학적 발견의 속도를 높이는 것을 넘어 검증 단계에서의 병목을 해결할 수 있는 새로운 접근 방식에 대해 본 고에서 살펴보고자 한다.

## 02 SDL(Self-Driving Lab.)

### 2.1 SDL 개념과 필요성

위에서 언급한 R&D Bottleneck을 극복하기 위해서는 실험실 검증 과정 자체를 단순 자동화가 아닌 AI와 로보틱스가 결합된 자율적인 구조로 재설계해야 한다<sup>[3]</sup>.

SDL은 사람의 개입을 최소화하고 24/7 자동화된 장비와 로봇으로 운영되는 Dark Lab에 AI가 실험 설계·판단·최적화를 수행하는 Decision Loop를 결합한 것을 의미하는데 이는 단순히 정해진 작업을 반복하는 '자동화 실험실'을 넘어 실험 결과로부터 스스로 학습하여 다음 실험을 결정하는 '지능형 루프'를 갖추고 있다는 점에서 차별화된다<sup>[5]</sup>.

- **Human-free:**  
연구자 개입 없이 24/7, 자동화를 통한 인적 오류 최소화 및 재현성 향상
- **Closed-loop:**  
AI가 실험을 설계하고 로봇이 실행하며 결과로 스스로 최적화
- **Data-native:**  
모든 조건·결과가 학습 데이터로 축적

SDL의 필요성은 신약 개발이 직면한 비용 및 시간의 압박과 직결된다. 신약 개발 비용의 60~70%가 집중된 개발 단계에서 80%의 임상이 제때 완료되지 못하는 현실을 고려할 때, 물리적 실험 속도를 혁신적으로 높이는 것은 기업의 생존과 직결된 문제이다<sup>[4]</sup>.

### 2.2 주요 도입 사례

최근 AWS가 AI design + CRO구조를 가진 Bio Discovery 플랫폼(26년 4월)을 출시했지만 이는 아마존 제공 모델을 활용하거나 In-house model을 업로드하는 방식이며 CRO는 지정된 협력업체 활용 등 Lock-in 구조이므로 항체 설계 전문으로 개발되어 Small Molecule Drug와 Fit이 맞지 않는다. 가장 중요한 것은 수십 년간 축적된 실험/임상 데이터의 유출 가능성인데 이 때문에 글로벌 빅파마들은 이미 SDL을 R&D의 핵심 경쟁력으로 삼고 다양한 형태로 운영하고 있다.

특히 아스트라제네카의 iLab은 '무엇을 만들지'와 '어떻게 만들지'를 결정하는 분자 AI 그룹과 실제 합성을 담당하는 로봇 하드웨어를 유기적으로 결합하여, 전통적으로 수개월이 걸리던 사이클을 획기적으로 단축하고 있다<sup>[6]</sup>. 사노피의 Solutron 시스템은 반복적인 수동 작업을 디지털 및 로봇틱스 플랫폼으로 이전하여 과학자들이 자동화할 수 없는 혁신적인 연구에 집중할 수 있도록 지원한다<sup>[7]</sup>.

**[표 1] 글로벌 제약사 주요 도입 사례**

기업명	주요 도입 사례	주요 성과 및 특징
Astra Zeneca	iLab	DMTA(Design-Make-Test-Analyze) 사이트 전체 자동화 목표, nano SAR 기술을 통한 리드 화합물 최적화 기간 50% 단축 <sup>[6]</sup>
Sanofi	Solutron & Solvify	AI 예측(Solvify)과 로봇 팔 실험(Solutron)의 결합으로 수천 건의 용해도 실험 자동화 및 모델 자가 연마(Self-sharpening) <sup>[7]</sup>
GSK	AI 통합 자율 실험실	클라우드 AI와 로봇 시스템을 연동하여 스크리닝 일정을 50% 이상 단축하고 실험 안전성 향상 <sup>[8]</sup>
Pfizer	Telescope Innovations 협력	화학 연구, 첨단 공정 분석 기술(PAT), 로봇 자동화를 통합하여 신약 개발 타임라인을 단축하고 비용을 절감하는 것을 목표 <sup>[9]</sup>
JW 중외제약	AI 로봇 실험실	시약 조제, 합성, 정제, 분석의 전 과정을 로봇이 24시간 무인으로 수행 기존 방식 대비 실험 효율은 5배, 데이터 수집 능력은 40배 향상 <sup>[10]</sup>

## 03 기술적 도입 방향 – 계층적 제어 아키텍처

### 3.1 SDL을 위한 Decision Loop

SDL의 아키텍처는 고도의 인지 작업과 실시간 물리적 제어를 분리하는 계층적 구조를 특징으로 한다<sup>[11]</sup>. 일반적으로 AI기반 실험설계(Intelligence Layer)-로봇실험 실행(Execution Layer)-실험결과 분석(Analysis Layer)로 3개 계층 레이어를 통해 Decision Loop를 구성하게 된다.

**더 많은 내용을 보시려면**

**파일 다운받기**

**버튼을 눌러주세요**