

2024년 노벨물리화학상: 인공신경망과 단백질구조혁신

허수미 | 전남대학교 고분자융합소재공학부 (E-mail: shur@jnu.ac.kr)

2024년 노벨 물리화학상과 화학상은 생물학적·물리학적 복잡계의 이해와 설계를 가능케 한 계산기술과 인공지능의 도약을 기념하였으며, 컴퓨터를 활용한 연구의 변혁적 가능성을 보여주었다. 이러한 추세는 고분자 과학을 포함한 모든 과학 분야에서 계산과학과 인공지능의 중요성이 계속 증가할 것임을 시사한다. 앞으로 고분자 과학 분야에서도 이러한 기술들이 구조-기능 관계의 예측과 설계 나아가 인공지능 기반 물질 탐색에 지평을 넓히며, 핵심적인 역할을 수행할 것으로 전망된다.

지난해 노벨 물리화학상은 “인공신경망을 이용한 기계학습을 가능하게 하는 기초적 발견과 발명”을 이룬 John J. Hopfield(Princeton University)와 Geoffrey E. Hinton(University of Toronto)에게 수여되었다. Hopfield 교수는 1982년 통계물리학의 스핀 모델에서 영감을 얻어 불완전한 패턴을 복원하는 연관 기억 모델인 ‘Hopfield Network’를 최초로 제안하였다. 이 모델은 시스템의 안정 상태를 에너지 최소화 원리로 설명하며, 복잡한 시스템에서 나타나는 집단적 현상이 어떻게 계산 능력을 부여할 수 있는지를 보여주었다. Hinton 교수는 이를 확장하여 데이터의 통계적 분포를 학습하는 확률적 신경망인 Boltzmann Machine(1983~1985년)을 개발하였고, 1986년에는 다층 신경망 훈련의 표준 방법이 된 역전파(backpropagation) 알고리즘을 공동 개발함으로써 오늘날 심층 학습(deep learning) 기술의 기초를 마련하였다. 이들의 연구는 오늘날 인공지능과 머신러닝 혁명의 핵심 원리가 되었다.

한편, 2024년 노벨 화학상은 “계산적 단백질 설계 그리고 단백질 구조 예측”에 대한 업적으로 David Baker(University of Washington), Demis Hassabis

(Google DeepMind), John Jumper(Google DeepMind)에게 공동 수여되었다. 이들의 연구는 생명과학 분야의 오랜 난제였던 단백질 구조 예측 문제를 해결하고, 전혀 새로운 단백질을 설계할 수 있는 능력을 개발했다.

Baker 교수는 Rosetta 프로그램을 통해 단백질 구조 예측과 설계를 모두 가능하게 했다. 특히 2003년 발표한 Top7은 자연에 존재하지 않는 완전히 새로운 단백질 구조를 설계한 혁신적 사례다. Rosetta는 단편 조립 방식을 사용하여 구조를 예측하고, 에너지 최적화를 통해 설계를 수행한다. 이후 베이커 연구팀은 의약품 설계, 효소 설계, 나노소재 개발 등 다양한 응용 분야에서 성과를 거두었다.

한편 DeepMind사의 Hassabis와 Jumper 박사는 AlphaFold를 개발하여, 아미노산 서열만으로 단백질의 3차원 구조를 예측하는 ‘단백질 접힘 문제’를 혁신적으로 해결했다. AlphaFold2는 합성곱 신경망(CNN, Convolutional Neural Network) 구조를 넘어, Transformer 아키텍처를 도입한 Evoformer와 Structure 모듈을 활용하여 구조 예측의 정확도를 실험 수준(GDT 점수 90%)으로 끌어올렸다. AlphaFold2의 개발은 단백질 구조 데이터베이스를 획기적으로 확장시켰다. 현재 UniProt 데이터베이스에 있는 2억 개 이상의 단백질 서열에 대한 구조가 예측되어 공개되었으며, 이는 실험적으로 결정된 구조의 수천 배에 해당한다. 이러한 방대한 구조 정보는 생화학 및 생물학 연구에 혁명적인 영향을 미치고 있다.

기계학습과 인공신경망 기술은 고분자 재료의 구조-물성 관계 예측, 고분자 합성 경로 최적화, 새로운 기능성 고분자 재료 설계 등 고분자 과학 분야에서 활용이 시도되고 있다. 다성분 고분자 및 복합재의 물성 예측, 고분자 가공 공정 최적화 등에서도 인공신경망 기반 모델링 도움을 받게 되면, 그 개발 기간과 비용을 크게 단축할 수 있으리라 기대된다.

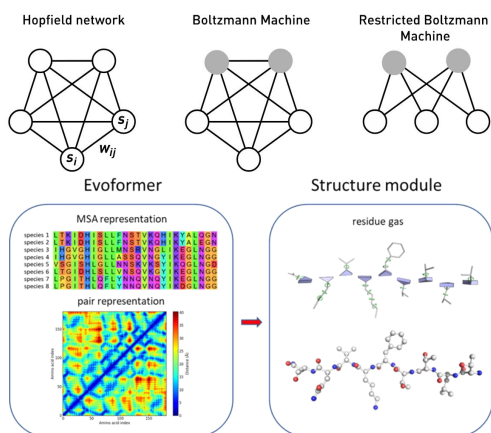


그림 1. (위) 홉필드 네트워크와 볼츠만 머신의 구조 개념도. (아래) AlphaFold2의 Evoformer와 Structure 모듈 구조도.

본 수상에 대한 자세한 내용은 노벨상 홈페이지(<https://www.nobelprize.org/>)에서 확인 가능하다. 관심 있는 독자들은 AlphaFold 데이터베이스(<https://alphafold.ebi.ac.uk/>)와 Rosetta Commons(<https://www.rosettacommons.org/>)를 통해 관련 도구들을 직접 활용해 볼 수 있다.