

글로벌 나노기술 주요국의 나노정보학(NanoInformatics) 현황 및 시사점

신광민, 배성훈, 윤진선, 김준현

2015. 12.

머 리 말

나노기술은 다학제적 기술로서 미래 혁신을 위한 기술로 여겨지고 있으며, 미국과 유럽연합 등 주요 선진국들은 나노기술을 미래 혁신을 위한 기술로 설정하고 연구개발과 혁신을 통해 국가 경쟁력을 확보하고 사회적 문제를 해결하려는 노력을 경쟁적으로 추진하고 있습니다. 지난 15여 년 동안, 세계 주요국은 나노기술과 관련하여 막대한 예산을 투자해왔으나, 이에 반해 상용화 성과는 미흡한 것으로 파악되고 있습니다. 이를 극복하기 위해 다양한 단계에서 효율적인 기술 혁신의 파이프라인을 구축하기 위해 노력하고 있으며 특히 나노기술 연구개발 등으로 생산된 결과(정보)를 효율적으로 수집, 분석하고 이를 활용하기 위한 나노기술 관련 정보학(나노인포메틱스(Nanoinformatics), 이하 나노정보학)을 중점 추진하고 있습니다.

우리나라도 나노기술을 통한 창조경제 실현, 일자리 창출 등 국가적 과제를 해결하고, 국민행복시대를 만들기 위해 다양한 변화를 시도하고 있으며 나노기술과 관련된 정보를 효율적으로 활용하기 위해 계산나노과학, 모델링, 전산모사 등을 추진하겠다고 밝혔습니다. 최근의 글로벌 현황을 반영하고, 보다 효율적으로 정책적 투자를 추진하기 위해서는 미국, 유럽연합 등 주요 나노 선도국의 현황 파악이 매우 중요합니다.

본보고서는 미국과 유럽연합 등 나노기술 주요국의 나노정보학과 관련한 최근의 현황 및 시사점을 분석하여 제시하고 있으며, 동 내용이 정부 정책 당국자 및 산·학·연의 나노기술개발 관계자들에게 도움이 되기를 기대합니다.

국가나노기술정책센터

소장 김재진

요 약

- 미국과 유럽등 주요국은 나노기술의 잠재력을 예상하고 일자리 창출, 고부가가치 산업경쟁력 강화를 위해 적극적으로 투자하고 있음
 - 특히 파급효과가 다양한 분야에서 나타나기 때문에 최근에는 나노기술 관련 정보를 효율적으로 사용하기 위한 나노정보학(나노인포메틱스, NanoInformatics)에 대한 관심 증가
- 미국은 나노기술핵심전략(NSI)에서 나노기술 지식인프라(NKI)를 중요분야로 선정하고 막대한 예산을 투자하여 연구개발 중인 나노기술 관련 다양한 정보들을 수집하여 효율적으로 보관, 분석, 사용할 수 있는 모델 생성, 모의실험, 재현성 있는 나노기술 지식 인프라(나노정보학) 구성 추진
 - 유관부처의 국가나노기술계획(NNI)의 부처협력을 지원하고 나노기술의 상용화 적극 지원
- 유럽연합도 ACTION-GRID 프로그램 등을 통해 의용생체 정보학, 그리드 컴퓨팅 및 나노정보학을 연계하여 분자 모델링과 전산모사를 통해 이미 추진하고 있는 '가상생리인간(VPH)' 프로그램을 지원하여 나노정보학 분야 신설 및 발전 추진
 - 나노정보학 분야의 다섯 가지의 거대도전과제(Grand Challenge)를 제안하고 다양한 분야, 경제·사회·문화적 영향을 예상
- 결론적으로 한국의 나노정보학 발전을 위해 1) 목적 지향적 나노정보 인프라 구축, 2) 정보 저장, 분석, 처리 등 나노정보학 인프라 구축, 3) 이해당사자 그룹을 통해 지원 커뮤니티 형성, 4) 지속가능한 나노정보학 기술 개발(모델링, 전산모사 등), 5) 기존 프로그램과의 연계 및 발전 제안
 - 나노기술 관련 자료들을 효율적으로 수집·분석하여 활용하기 위한 일련의 작업은 기술 혁신 파이프라인에서 나노기술 연구개발 결과의 상용화를 촉진할 것이며, 다학제적 응용분야에서 혁신을 도출할 것

차 례

I. 서론, 글로벌 나노기술 현황 및 정보학의 중요성	1
II. 주요국의 나노기술 정보학 관련 현황	3
가. 미국	3
나. 유럽연합	7
III. 분석 및 시사점	13
IV. 맺음말	15
참고문헌	16
[붙임] NTIS NT분야 전산모사 및 모델링 과제 현황	17
[부록]	
1. 미국 NNI NKI 백서	20
2. 유럽연합 ACTION-GRID 백서	31

표차례

<표 1> 나노기술 지식인프라 중점추진계획의 추진분야 관련 지원 현황	4
<표 2> 나노기술 지식인프라의 네가지 추진분야 관련 각부처별 참여가능 분야	7
<표 3> 나노입자와 소재를 이용한 나노의학기술 응용분야	8
<표 4> 나노기술 지식 인프라의 4가지 추진분야 관련 현황 및 추후 필요사항 (연구개발, 장비, 가능한 위험성 등) 도출	12

그림차례

[그림 1] 나노기술 지식인프라(NKI)의 개요	4
[그림 2] 유럽연합 ACTION-GRID 5대 거대 도전과제(Grand Challenge)의 연속성	10

서론, 글로벌 나노기술 현황 및 나노정보학 (나노인포매틱스, NanoInformatics)의 중요성

나노기술은 나노미터 수준에서 일어나는 특이한 물리화학적 현상을 측정, 분석하고 이를 제어하여 새로운 특성을 만들어내는 기술이다. 나노기술은 단일 분야의 개발만으로는 경쟁력 있는 기술 개발이 불가능하고, 다양한 분야에 응용될 수 있기 때문에 다(多)학제적 특성을 나타내며 기존에는 불가능하던 것들을 가능하게 하는 미래혁신을 위한 기술(KET, Key Enabling Technology)로 주목받고 있다.

미국과 유럽등 주요국은 나노기술의 잠재력을 예상하고 일자리 창출, 고부가가치 산업경쟁력 강화를 위해 적극적으로 투자하고 있다. 특히 파급효과가 다양한 분야에서 나타나기 때문에 최근에는 나노기술 관련 정보를 효율적으로 사용하기 위한 나노정보학(나노인포매틱스, NanoInformatics)에 대한 관심이 증가하고 있다.

미국 나노기술핵심전략(NSI)의 나노기술 지식인프라(NKI)에서 정의한 나노정보학(나노인포매틱스, NanoInformatics)는 나노기술 관련 정보의 수집, 검증, 저장, 공유 및 적용 모델을 분석하는 메커니즘 관련 개발 과학 및 이행 그리고 효과적인 이행 메커니즘이다. 나노정보학은 나노기술 관련 연구, 개발 및 응용 프로그램의 모든 측면에 영향을 미치는 통합적 학문이다. 개선된 나노정보학 인프라는 실험 데이터의 재현성과 분포를 개선할 뿐만 아니라 정보와 애플리케이션에 데이터를 변환하기 위한 도구와 모델의 개발 및 검증을 촉진하여 나노기술 능력의 지속 가능성을 확보한다.

유럽연합 ACTION-GRID 백서에서 정의한 나노정보학(나노인포매틱스, NanoInformatics)는 나노입자의 구조와 물리화학적 특성은 물론 생물학적 환경과의 상호 작용 및 응용 관련 정보를 분석하고 처리하기 위한 정보 기술을 사용을 의미한다. 정보학, 나노기술, 의학과 기 확립된 생물학, 화학, 물리 등의 분야의 교차에 새롭게 출현한 정보학 영역으로 볼 수 있다.

이와 관련하여, 미래창조과학부는 이러한 정보학을 기반으로 하는 계산나노과학을 통해 7대 나노기술 산업화 전략을 추진하겠다고 하였다.

※ 7대 나노기술 산업화 전략

원자분자 수준의 제어가 이루어지는 나노기술은 공정 중의 관찰이 불가능하고 실험적 분석이 제한적이므로 계산나노과학*의 보편적 활용을 통해 제품개발 기간비용을 절감할 수 있도록 개방형 가상실험 공간을 제공한다.

- 정보기술과 모델링 기술을 융합한 멀티스케일 시뮬레이션 및 정보학 기술을 통해 나노 공정과 나노 시스템을 설계·예측·최적화 하는 기술

특히 전 세계적으로 경쟁적으로 나노기술에 투자하고 나노기술 및 관련 연구개발 결과 등 다양한 정보들이 생산 가공되면서 이러한 정보들을 모아서 분석하고 재가공하여 활용하자는 의견 및 활동들이 증가하였으며, 미국 유럽 등 나노기술 주요국은 정보학 관련 다양한 프로그램을 구성 운영하고 있다.

본 보고서에서는 미국 나노기술핵심전략(NSI, Nanotechnology Signature Initiative) 중 나노기술 지식인프라(NKI, Nanotechnology Knowledge Infrastructure)에서 발간한 백서와 유럽연합이 ACTION-GRID 프로그램을 통해서 수립한 나노정보학 관련 자료들에 대해 알아보고 분석하여 향후 나노정보학 및 관련 분야 발전을 지원하기 위한 국가정책의 나아갈 방향을 제시하고자 한다.

II

주요국의 나노 정보학 관련 현황

전 세계에서 가장 많은 예산을 연구개발에 투자하고 국가단위의 나노기술 관련 프로그램을 운영하고 있는 미국과 유럽연합은 2000년대 후반부터 공식적으로 나노정보학 관련 활동들을 시작해 왔으며 세부내용은 아래와 같다.

가. 미국

막대한 예산을 투자하여 연구개발 중인 나노기술 관련 다양한 정보들을 수집하여 효율적으로 보관, 분석, 사용할 수 있는 모델 생성, 모의실험, 재현성 있는 나노기술 지식 인프라(나노정보학)를 통해 부처협력을 지원하고 나노기술의 상용화 적극 지원

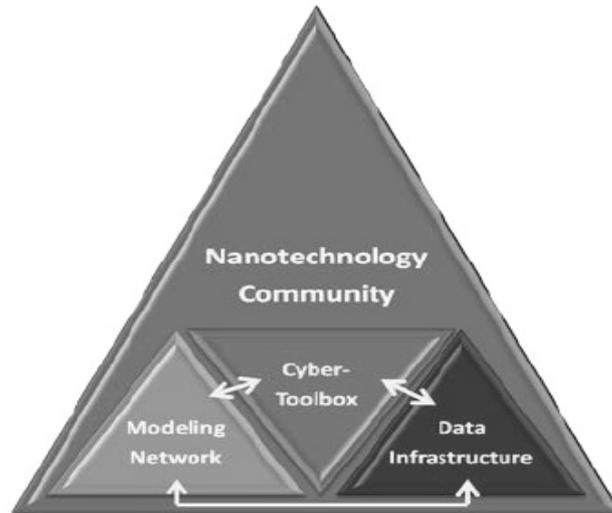
미국은 다양한 이해당사자(산학연 전문가 등)이 참여하는 국가나노생산네트워크(NNN, National NanoManufacturing Network)를 통해서 2007년 처음으로 '나노정보학 전략 워크숍(Workshop on NanoInformatics Strategies)'을 미국 과학재단 및 나노생산센터(Center for Hierarchical Manufacturing)의 지원으로 개최하였다. 워크숍을 통해 나노정보학 관련 수요, 도전과제 및 우선순위 등이 도출되었으며 나노기술 관련 정보 생산 현황, 정보 처리(표준화 등) 및 타 분야(바이오 정보학 등)와의 연계를 통해 나노기술 연구개발 및 교육 관련 전략을 방향성을 설정하였다.

이러한 활동들은 소규모로 진행되다가, 2013년 미국 국가나노기술계획(NNI, National Nanotechnology Initiative)에서 나노기술 핵심전략(NSI, Nanotechnology Signature Initiative)의 주요 분야 중 하나로 나노기술 지식 인프라(NKI, Nanotechnology Knowledge Infrastructure)를 출범하면서 나노정보학 관련 통합 프로그램이 추진되었다. 백악관 산하 국가과학기술위원회(NSTC, National Science and Technology Council)의 나노과학기술소분과(NSET, Nanoscale Science, Engineering and technology)에서는 2012년 3월 나노기술 지식기반 인프라(NKI) 관련하여 백서를 발간하였으며 요약 내용은 다음과 같다.

나노기술 지식 인프라는 지속가능한 디자인의 경쟁력을 확보하기 위해서는 나노기술 발견과 혁신을 가속하는 커뮤니티 기반 솔루션 중심 지식 인프라의 필요성을 언급하고 국가나노기술계획(NNI) 구성 유관기관들의 협력과 범부처 개발을 통해 지식기반 인프라의 네 가지 추진(Thrust) 분

야에서 다음의 목표를 달성을 예상하였다.

추진분야 1은 나노과학, 공학, 기술에서 산학연 전문가 연계 강화에서 NKI의 역할 명시하고 있다. 따라서 모델 및 데이터(추진분야 2), 사이버 도구(추진분야 3), 및 디지털 데이터 및 정보 인프라(추진분야 4)에서 발생하는 결과의 개발, 유지, 활용을 위한 차세대 작업그룹의 교육과 훈련에 집중하고 있다. 아래 표는 나노기술 지식인프라 중점추진계획의 추력부분을 지원하고 있는 기초지원 자료를 나타낸다.



[그림 1] 나노기술 지식인프라(NKI)의 개요

추진분야 2는 실험 데이터 모델 및 모델링 결과를 공유하여 초기 모델링 협력, 평가, 업적 검토 등을 장려하고 있다. 이것은 추진분야 1에서 언급한 산학연 전문가 네트워크에서 데이터 및 정보 교환을 통해 이론가, 모델 전문가 및 연구자들의 관계를 강화할 것이다. 추진분야 2를 통해 생성되어 확정된 신규모델은 추진분야 3의 가상 도구 박스를 통해 다양한 커뮤니티에서 활용하게 될 것이다. 또한 추진분야 3에서 생성된 데이터는 추진분야 4에서 언급한 디지털 자료 및 정보 인프라와 연계될 것이다.

<표 1> 나노기술 지식인프라 중점추진계획의 추진분야 관련 지원 현황

Description of NNI-Supported Resource	
caNanoLab	Cancer Nanotechnology Laboratory Portal of NIH/National Cancer Institute; cabig.nci.nih.gov/tools/caNanoLab .
Extreme Science and Engineering Discovery Environment project (XSEDE; follow-on to Teragrid)	NSF-supported advanced digital network of 16 supercomputers and high-end visualization/data analysis resources; www.xsede.org .
InterNano	NSF-supported nanomanufacturing resource run by the National Nanomanufacturing Network; www.internano.org/ .

Description of NNI-Supported Resource	
Nano-Hub	NSF-supported online simulation resources operated by the Network for Computational Nanotechnology; nanohub.org/.
Nanomaterial-Biological Interactions Knowledgebase	The Nanomaterial-Biological Interactions Knowledgebase, hosted at Oregon State University and supported by EPA, NSF, DOD/Air Force, and NIH; nbi.oregonstate.edu/.
Nanomaterials Registry	Web-based registry project in development by RTI International and three NIH institutes-NCI, NIEHS, and NIBIB-for biomedical and environmental applications of nanomaterials, www.nanomaterialregistry.org
Nanoparticle Information Library	A NIOSH tool to help organize and share information on nanotechnology and occupational health; nanoparticlelibrary.net.
Toxcast	EPA Program to define and evaluate predictive toxicity signatures of over 10,000 chemicals; www.epa.gov/ncct/toxcast/.

추진분야 1

과학자, 엔지니어, 전문기술인등을 포함한 다양한 공동 커뮤니티를 통해 국가적 도전과제 해결을 위한 나노기술 연구 개발 및 상용화를 지원

○ **예상결과**

- 나노기술 기반의 미국 산업을 구축·유지하기 위한 통합되고 고도로 숙련 나노정보학(NanoInformatics) 커뮤니티 형성
- 미래 나노기술에 대한 지능적 기반을 유지하기 위해 차세대 모델링 네트워크의 교육 및 훈련

추진분야 2

기초 실험 연구, 모델링, 상용화 개발의 효율적인 연계를 통한 다학제 및 지능적 협력의 즉각적인 모델링 네트워크

○ **예상결과**

- 거대도전과제(Grand Challenges)에서부터 본질적인 국제 및 사회 문제 해결에 이르기 까지 다양한 나노기술 관련 문제들에 대처하기 위한 모델 및 모의실험 라이브러리 구축을 위한 전문가들의 강력한 기술 네트워크
- 다양한 수준에서의 나노소재 관련 개선된 구조 모델 :
 - 1) 원자, 분자, 입자 수준에서 상호작용을 고려한 세부 모델,

- 2) 나노소재의 다분화, 형태 및 변형관련 모델,
- 3) 세포, 조직, 기관, 생물 및 생태계에서 나노소재의 영향을 모의 실험할 수 있는 미립자 정보 연계 모델
- 공개되지 않았지만 모델 확정을 위해 정상적이고 중요한 기술 관련 데이터에 대한 광범위한 접근
- 초기, 더 세부적, 빈번하고 건설적인 검토에 의한 유사한 품질의 모델 개발 시간 단축
- 유익한 특성을 최대화하고 잠재적 위험을 감소화하는 지속가능한 재료 설계를 위한 충분한 신뢰성 및 타당성의 모델 개발
- 나노 커뮤니티 이외에 다양한 커뮤니티와 이해당사자들이 쉽게 접근할 수 있는 모델
- 새로운 실험과 모델 개발에 있어서 긍정적/부정적 결과를 통해 데이터 격차를 파악하고 모델링 활동을 통해 변화하는 개요

추진분야 3

지속 가능한 사이버 도구 상자를 통해 나노소재 디자인을 위한 모델과 지식의 효율적인 응용

○ 예상결과

- 나노소재의 특성, 거동, 생물계 및 생태계 영향 등을 이해하는 공동 개발 검증 모델의 나노기술 사이버 도구상자
- 나노기술 관련 실험의 계획, 실행 및 결과 분석을 촉진하는 이론, 계산, 통계 및 시각화 도구를 포함하는 사이버 도구상자
- 사용자 접속가능성을 개선하기 위해 현존하는 다학제적 도구상자의 구성요소를 연결하는 국가나노기술조정위원회(NNCO)에 의해서 관리되는 NNI의 중요 접속지점
- 가상도구상자와 나노기술 지식 인프라(NKI)를 연결하여 나노과학·기술을 통합하는 지능적인 프레임 구성과 추력 1에서 언급된 차세대 워크포스 개발을 지원하는 교육 기회

추진분야 4

강력한 디지털 나노기술 데이터 및 정보 인프라를 통해 다학제적 응용분야와 관련된 효율적 데이터 공유, 협력 및 혁신 지원

○ 예상결과

- 상호운용 시스템의 전략적 개발을 통해 데이터 저장, 효율적 관리, 조직구성, 평가, 보급 및 협력의 컴퓨터 모델

- 전주기 데이터 관리를 포함하는 데이터베이스의 효율적 활용을 촉진하기 위해 데이터 관리 및 사용을 위한 기준과 절차
- 컴퓨터 정보 데이터 패턴 인식, 데이터 시각화 및 다변량 구조 특성 관계를 포함하는 안정적이고 효율적인 데이터 분석 툴의 확대
- 강력한 검증 절차 및 기준 데이터 표준 개발
- 데이터, 모델 수집, 공유 및 파일보관 등에 대한 과학자들의 변화하는 요구를 평가하고 충족하는 메커니즘

또한 나노기술 지식 인프라(NKI)는 유관 부처들 이외에 산학연 및 비영리단체 등 다양한 이해당사자들이 참여하는 행사를 통해 더 많은 수요에 대응하는 유연한 인프라를 구성하고자 한다. 이러한 목표 달성을 위해 나노기술 지식 인프라의 네가지 추진분야 관련 각 부처별 참여 가능 분야를 표 2와 같이 설정하여 국가나노기술계획(NNI) 구성원(부처)의 책임과 의무에 대해 나타내었다.

〈표 2〉 나노기술 지식인프라의 네가지 추진분야 관련 각부처별 참여가능 분야

Thrust Area	CPSC	DOD	DOE	EPA	FDA	NASA	NIH	NIOSH	NIST	NSF	OSHA
1. Diverse Community Development	•	•	•	•	•	•	•	•		•	•
2. Modeling Network	•	•	•			•	•	•	•	•	
3. Validated Cyber-Toolbox		•	•			•	•	•		•	
4. Data and Information Infrastructure	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•

게다가 나노기술 지식인프라(NKI)는 나노미터 수준 및 마이크로 초 이하의 영역에서 일어나는 특정 현상을 예측하는 모델링, 모의 실험 및 데이터베이스의 첨단 개발과 정보 처리 발전을 목표로 하기 때문에 재료게놈계획(MGI, Materials Genome Initiative)과의 연계를 통해 결과를 극대화할 수 있다.

나. 유럽연합

의용생체 정보학, 그리드 컴퓨팅 및 나노정보학을 연계하여 분자 모델링과 전산모사를 통해 이미 추진하고 있는 ‘가상생리인간(VPH)’ 프로그램을 지원하여 나노정보학 분야 신설 및 발전 추진,

유럽연합은 Action-Grid 프로그램을 통해 2008년부터 나노정보학 관련 연구를 지원하였다. 프로그램은 의용생체 정보학(Biomedical Informatics), 그리그 컴퓨팅(GRID Computing) 및 나노정보학(NanoInformatics)을 포함하고 있으며, Action-Grid 백서를 통해 유럽연합 집행위원회(EC)가 지원하는 가상생리인간(VHM, Virtual Physiological Human)의 프레임워크를 지원하는 것을 목표로 하였다.

기존에 개발된 가상생리인간을 통해 생리학적 시뮬레이션 결과는 도출되었지만 현재까지 초기 단계이기 때문에 임상적 의미의 기초 및 응용연구를 위해서는 의용생체 정보학, 나노의약 및 나노정보학과의 연계가 필수적이다. 특히 백서에서는 나노정보학을 나노입자의 구조 및 물리화학적 특성정보와 생물학적 환경과의 상호작용 및 응용에 대한 자료를 분석하고 처리하는 정보기술의 사용을 의미한다고 정의하였다.

나노정보학은 기존의 생물학, 화학 및 물리학과 정보학, 나노기술, 의학 등을 연결하는 미래 유망 분야로서 기존 의용생체 정보학이 DNA와 RNA의 정보를 분석하는데 집중하였다면 나노 정보학은 나노, 및 바이오 기술응용과 관련하여 입자와 소재의 특성을 분석하고 원자수준에서 전산모사를 실시하는 것이다. 다양한 종류의 나노입자와 소재들이 연구실에서 사용되고 있으며, 이를 이용한 제품들도 계속해서 시장에 출시되고 있다. 각각의 나노입자와 소재는 고유한 물리화학적 특성을 지니고 있으며 이러한 특성을 이용한 연구들이 진행 중이다. 더 나아가 나노입자와 소재를 이용한 다양한 나노의학기술이 개발되고 있으며 현재까지 알려진 나노의학의 응용분야는 다음과 같다.

〈표 3〉 나노입자와 소재를 이용한 나노의학기술 응용분야

나노의학 적용 사례	
스마트 센서	신체 기능 확인, 질병 상태 진단, 차세대 의료도구 제어 등
분자 이미징 도구	질병의 조기 진단
생체이식 가능한 소재 및 기구	시력 및 청력 회복 등을 위한 섬유 이식 및 대체
나노로봇	개별 세포 수술, 생리학적 기능 증대 등의 진단과 치료를 동시에 진행하는 기기
생체내 조직으로의 표적 약물 전달	나노입자를 이용한 종양으로의 약물전달 능력 향상 등
생체내 조직의 선택적 치료	종양 조직 괴사를 위한 나노셀의 플라즈몬 공명 흡수 이용
기존/신규 약물의 용해도 증대	나노입자와 시스템을 이용한 세포내 약물 전달
유전자 확인	금 나노입자를 이용한 유전자 샘플의 순서 확인
유전자 전달	유전자 치료를 위한 DNA의 세포내 이동
치료/진단	나노입자를 이용하여 진단과 치료를 동시에 진행하는 약리 유전자학
나노모터	뉴런과 근육 치료를 위한 마이크로 기계들과의 하이브리드 촉진

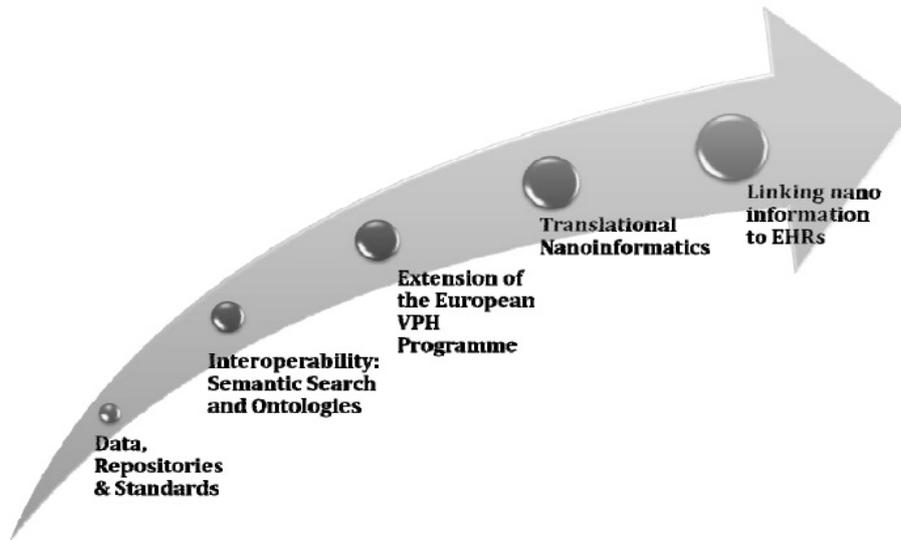
이렇듯 나노의약(나노기술)은 많은 잠재적 장점을 나타내고 있지만, 공공보건의 관점에서 나노의약 분야는 다음과 같은 분야를 신경 써서 고려해야 한다.

- 1) 생물학과 인공 나노구조물의 상호작용
- 2) 나노입자의 생물학적 분포와 저하
- 3) 체외 및 체내 실험결과의 연관성
- 4) 나노기술의 윤리적 및 사회적 측면
- 5) 위험 평가와 규제
- 6) 작업장 관련 사고와 질병의 방지
- 7) 나노입자의 잠재적인 독성, 다음 분야는 이 중요 문제의 확장
- 8) 의용생체 연구 및 응용 관련 전방위적인 나노기술 관련 대상 감시 시스템 확립

나노소재(입자)의 의용생체과학 관련 실험수준에서 기초적인 물리-화학 특성 연구가 광범위하게 추진되었다. 나노기술은 나노소재의 합성에서부터 물리적 특성연구, 체외/체내 특성 평가, 및 임상 응용에 이르기 까지 매우 긴 개발 체계가 필요하기 때문에 정보의 통합은 사회적 요구에 대처하기 위한 중심 이슈이다. 결과를 생산하기 위해선 다양한 종류의 실험 결과들을 취합하고 이를 예측하는 것이 필요하다. 따라서 분자 모델링과 전산모사는 다양한 범위에서 상호작용을 탐색하는데 매우 중요하다. 이러한 전산모사를 통해 나노입자와 나노 수준 시스템의 기초적인 물리화학적 특성 연구가 가능하며, 결과들은 가상생리인간 프로그램과 직접적으로 연계되어 있다. 과학적 측면에서 백서는 의용생체 정보학과 매우 밀접하게 연관된 나노정보학 분야의 다섯 가지의 거대도전과제(Grand Challenge)를 제안하고 있다. 이러한 다섯 가지 거대도전과제는 해당분야 향후 아젠다의 범위를 한정할 수 있을 것이다.

※ 유럽연합 Action-Grid 백서에서 제안한 5가지 거대 도전과제

- 1) 정보와 지식의 저장과 관리: 새로운 바이오-나노 저장소 및 관련분야 신규 표준 개발
- 2) 나노존재학 및 의미적 정보처리 상호운용: 나노관련 자료와 정보를 통합하는 신규 인프라 및 시스템 개발
- 3) 유럽 가상생리인간(VPH) 영역 확대: 나노물질의 체내 거동과 같은 나노수준에서 모델링과 시뮬레이션(이러한 의미에서 나노수준에서 관련정보를 추가하는 것은 유전자형(Genotype) 이해에 대한 새로운 통찰력을 제공하고 표현형(phenotype) 특성에 대한 새로운 기반과 설명을 제공
- 4) 나노수준의 기초적인 과학연구와 미래의 임상 응용을 연결하는 중개 나노정보학이라고 분류할 수 있는 새로운 분야의 탄생
- 5) 기존 전자보건기록을 확장하여 나노관련 정보를 취합하여 진단, 치료 및 나노물질의 잠재적인 독성 영향을 분석



[그림 2] 유럽연합 ACTION-GRID 5대 거대 도전과제(Grand Challenge)의 연속성

또한 제안한 거대 도전과제들 중에는 달성하기 어려운 목표도 존재하기 때문에 기존에 추진했던 프로그램 결과 현황을 파악하고 향후 필요한 사항을 우선순위, 위험성, 추진 방법에 따라 아래 5가지 분야에서 정리함으로써 실효성 있는 계획을 추진하였다. 각각의 세부사항은 표 2와 같다.

1. 새로운 나노의학과 재생의학 분야에 기존 생체의공 정보학 기술을 적용하기 위한 연구
 - 가) 나노의약 연구에 필요한 고성능 인프라 개발
 - 나) 나노입자의 임상실험을 위한 특성분석, 재생의학 방법 등 나노의학 데이터베이스 및 저장
 - 다) 나노의약 분야 나노입자 특성분석 및 실험 등을 위한 표준 정의
 - 라) 기존 의용생체 정보학을 확장하여 나노의학과 재생의학 관련 존재론 개발
 - 마) 나노입자를 이용한 이미징 기술 개발
2. 나노의학을 촉진하기 위한 생체의공 정보학의 신규 분야 연구
 - 가) 나노입자와 생물계의 상호작용 등 다양한 정보의 처리
 - 나) 생물체 내에서 나노입자의 거동 등 영향의 모델링 및 전산모사
 - 다) 의사결정 지원시스템 및 임상적 지침 등 나노관련 전자기록 모델
3. 윤리적, 법적, 및 사회적 차원 관련 정보학 연구
 - 가) 나노의학 및 재생의학 관련 표준, 법, 지식재산권, 경제적 지속가능성 등 규제 관련
4. 교육 및 훈련
 - 가) 의용 생체 정보학과 나노정보학 교육과정 및 전통의학과 나노의학의 접목
5. 국제 협력
 - 가) 나노정보학 관련 기존 연구 및 신규 연구(아젠다, 표준 등)의 추진을 위한 국제협력

백서는 신규 모델링과 전산모사를 통해 나노의학과 관련된 정보학의 개발을 제시하였다. 이러한 신규 분야의 개발은 다양한 분야에서 경제·사회·문화적 영향을 끼칠 것이며 몇 가지 본보기를 제안하였다.

산업적으로는 나노의학관련 다양한 신산업창출, 및 신규 정보학 기반 기업 산업화 지원 등

경제적으로는 경제성장, 고부가가치 산업 발전 및 신규 일자리 창출

국제적으로는 공동연구 추진을 통한 상호협력 극대화

정치적으로는 나노기술 관련 다양한 신규 프로그램 개발

정보학으로는 신규 나노정보학 분야 탐색 및 발견

사회적으로는 나노기술의 안전성 및 윤리/법/사회적 이슈 대응

교육적으로는 나노정보학 관련 신규 프로그램 개발 및 작업반 신설

〈표 4〉 나노기술 지식 인프라의 4가지 추진분야 관련 현황 및 추후 필요사항(연구개발, 장비, 가능한 위험성 등) 도출

Table 2 - Priorities in R&D, Research Instruments, possible risks and instruments

Perspective		Research topic	Priority	Risk	Research instrument ¹
Application of existing BMI techniques and methods in NanoMedicine and Regenerative medicine		Creating new infrastructures to facilitate high performance requirements in nanomedicine research (e.g., cloud computing, Web 2.0 for collaborative research, Grid, etc)	HIGH	LOW	IP
		Adaptation of databases and repositories of resources for Nanomedicine, including biobanks, creating new repositories for nanomaterials characterization and regenerative medicine methods and platforms for clinical trials involving nanoparticles	HIGH	MEDIUM	NoE
Regenerative medicine		Definition of Minimum information standards for nanoparticle characterization and experiments and publication of results in nanomedicine	MEDIUM	LOW	STREP
		Creating ontologies in the areas of Nanomedicine and regenerative medicine —from scratch or expanding existing BMI ontologies	HIGH	MEDIUM	NoE
New requirements for BMI to facilitate Nanomedicine		Development of new imaging methods based on the use of nanoparticles. Adaptation of DICOM to include nanoimages	MEDIUM	MEDIUM	STREP
		Information processing in complex heterogeneous biological systems (EHR for mosaic genomes, interactions between nanoparticles, alerting systems), including the annotation of nanoparticles and their effects on biological systems (biomarkers and pathways)	MEDIUM	MEDIUM	IP
IT for ethical, legal and social issues		Modeling and simulation of “in vivo” effects —including adverse— of nanoparticles in living beings, expanding the VPH scope	HIGH	MEDIUM	IP
		New models of EHRs to include nano-related information, including Decision Support Systems and clinical guidelines —e.g., for risk management and nanotoxicity issues— in the context of Nanomedicine and regenerative medicine	MEDIUM	MEDIUM	IP
Education		Regulatory aspects (standards, legislation on Nanomedicine and regenerative medicine, intellectual property, issues related to open data and source tools, quality control and ecological and economical sustainability)	HIGH	LOW	CSA
		Incorporation of: a) Nanoinformatics in the Biomedical informatics curriculum and b) Nanomedicine in the traditional medical education	MEDIUM	MEDIUM	CSA
International cooperation		Establishment of global initiatives for developing new research agendas and standards as well as exchanging data, methods and informatics resources in the Nanoinformatics area	HIGH	LOW	CSA

¹ **Research Instrument:** IP = Integrated Project, STREP = Specific Targeted REsearch Project, CSA = Cooperation and Support Action; NoE = Network of Excellence

III

분석 및 시사점

1) 목적 지향적 나노정보 인프라 구축

미국은 나노기술 지식 인프라의 지속가능한 경쟁력 확보를 위해 네가지 단계별 중점 분야에서 목표 설정 및 정책적으로 지원. 유럽연합은 기존에 개발한 가상생리인간(VPH)의 프로그램을 지원하는 나노정보학을 포함하는 분자 모델링과 전산모사 프로그램을 추진.

- 이는 단순한 연구의 관점이 아니라, 실제 나노정보학 체계 구성 및 발전을 통해 달성할 수 있는 목표를 설정하고 이를 정책적으로 추진

2) 정보 저장, 분석, 처리 등 나노정보학 인프라 구축

1)에서 설정한 목적 지향적 목표 추진과 관련된 정보자료의 현황을 파악하고 이를 효과적으로 연계해야 정보 자료의 활용성을 극대화 가능. 다만 다양한 정보들을 취합하는 것과 이것을 가공하여 분석하는 것은 각각 별개의 문제로 설정한 목표에 근접하기 위해서는 상향식(Bottom-up) 및 하향식(Top-down) 형태의 접근이 필요

- 기존에 산재되어 있는 다양한 관련 자료들을 효과적으로 취합하여 활용할 수 있도록 시스템을 구성하는 것이 나노정보학 추진을 위한 기반.

3) 이해당사자 그룹을 통해 지원 커뮤니티 형성

나노기술 관련 정보는 다양한 분야에서 응용활용이 가능하기 때문에 정보를 효율적으로 활용하기 위해서는 정보의 수집과 분산이 원활하게 진행되어야 함.

- 정보 수집과 분석, 그리고 확산 단계에서 관련된 이해당사자 그룹의 지원 필요.

4) 지속가능한 나노정보학 기술 개발(모델링, 전산모사 등)

각 단계별 시스템의 모듈화를 통해 타 분야로의 확장성 증대. 이를 효율적으로 활용하기 위한 인적 자원 양성. 취합된 정보의 효율성을 극대화하기 위한 모델링 및 전산모사 연구개발, 데이터 검증 및 기준데이터 표준의 개발 등.

- 나노기술 관련정보를 취합 분석 확산하는 일련의 체계 확립을 통해 강력한 나노정보학 관련 인프라(네트워크) 수립 필요

5) 기존 프로그램과의 연계 및 발전

나노기술 관련정보의 취합과 분석 등과 관련된 기존 프로그램들과의 연계를 통해 나노기술 관련 정보 종류와 대상을 확대하고 활용성을 증대

- 다학제적 응용분야에서 데이터 공유, 협력 및 혁신을 지원

IV

맺음말

미국과 유럽연합 등 주요국들은 나노기술과 같은 첨단기술의 중요성을 선지적으로 파악하고 막대한 예산을 투자하여 연구개발 및 혁신을 추진하고 있으며 이러한 결과도 생산된 관련 자료들을 효율적으로 수집·분석하여 활용하기 위한 일련의 작업들에 정책적으로 지원하고 있다. 이러한 활동들은 기술 혁신 파이프라인에서 나노기술 연구개발 결과의 활용을 촉진할 것이며 다학제적 응용 분야에서 혁신을 도출해 낼 것이다.

한국은 상대적으로 적은 예산을 선택과 집중하여 나노기술 관련 논문 및 특허 순위가 괄목할만한 성과를 나타내었지만, 여전히 나노기술 상용화 성과는 저조하며 후발 주자들에게 쫓기고 있는 상황이다. 교육부와 미래창조과학부를 중심으로 모델링과 전산모사 관련 연구개발에 투자(붙임 1 2011-2014 NTIS 과제 리스트 참조)하고 있지만, 나노정보학을 효율적으로 추진할 대형과제(사업)은 부재한 상황이다. 나노기술 관련 효율적인 혁신을 추진하기 위해서는

- 단기적으로는 연구개발 사업의 결과로 생산된 나노기술 관련 정보를 효율적으로 수집 분석하여 활용하는 체계적인 시스템 구축이 필요
- 중장기적으로는 관련 이해당사자 모임 형성 및 정보의 저장, 활용 등을 효과적으로 추진할 수 있는 인프라 구축 및 지속가능한 나노정보학 기술 개발(전산모사, 모델링 등)이 필요할 것이다.

이러한 체계적인 활동들을 통해 목적성 있는 나노정보학 관련 시스템(인프라, 인력 등)을 구축하고 이를 효율적으로 활용할 수 있도록 정책적인 지원이 필요하다.

참고문헌

1. 미국 나노기술핵심전략(NSI)의 나노기술 지식인프라(NKI):
<http://www.nano.gov/NKIPortal>
2. 나노기술핵심전략 나노기술 지식인프라 백서
<http://www.nano.gov/node/825>
3. 유럽연합 ACTION-GRID 프로그램:
<https://ec.europa.eu/digital-agenda/en/news/action-grid-white-paper-linking-biomedical-informatics-grid-computing-and-nanomedicine>
4. 유럽연합 ACTION-GRID 백서
<http://action-grid.eu/index.php?url=whitepapernano>
5. 나노기술 7대 산업화 전략
<http://www.msip.go.kr/web/msipContents/contentsView.do?cateId=mssw311&artId=1261501>

붙임

〈2011-2014 NTIS의 NT분야 전산(모사) 및 모델링 과제 현황〉

번호	부처	사업명	과제명(연도)	비고
1	교육부	BK21 플러스	미시적 스케일에서의 광반응 자가변형 구조체 전산모사	전산(모사)
2	교육부	일반연구자지원	tight-binding 분자 동역학 전산모사를 통한 새로운 탄소 나노 소재의 연구	전산(모사)
3	교육부	일반연구자지원	고품질 대면적 그래핀 성장과 원자/분자/이온의 흡착 및 응집 거동에 대한 전산모사 연구	전산(모사)
4	교육부	일반연구자지원	비정상결정립성장의 phase-field 전산모사	전산(모사)
5	교육부	일반연구자지원	외부 유동장하에 있는 벌크 및 계면시스템내 복잡한 분자형태구조를 가진 고분자 물질의 비평형 다중스케일 모델링과 전산모사	전산(모사)
6	교육부	일반연구자지원	외부 유동장하에 있는 비선형 고분자 시스템의 최첨단 다중스케일 전산모사	전산(모사)
7	교육부	일반연구자지원	초발수표면의 젖음특성에 대한 전산모사 및 이론 연구	전산(모사)
8	교육부	일반연구자지원	탄소나노전극을 이용한 DNA 단분자감지 메커니즘의 원자수준 전산모사 연구	전산(모사)
9	교육부	일반연구자지원	하이브리드 탄소나노재료 설계를 위한 멀티스케일 전산모사 기술의 개발 및 응용	전산(모사)
10	교육부	일반연구자지원	멀티스케일 전산모사를 이용한 고분자 자기조립 나노구조 예측	전산(모사)
11	교육부	일반연구자지원	고유전율 HfO2 원자층 증착기구 전산모사	전산(모사)
12	교육부	일반연구자지원	나노소재 및 프로세스 전산모사 연구	전산(모사)
13	교육부	일반연구자지원	소자 응용을 위한 금속-유기물 계면의 전산모사 연구	전산(모사)
14	미래부	글로벌프론티어	Active인터페이스 전산모사	전산(모사)
15	미래부	글로벌프론티어	Hard인터페이스 전산모사	전산(모사)
16	미래부	나노소재기술개발	대용량 전산모사를 통한 나노입자의 촉매 반응성 최적화 기법 개발	전산(모사)
17	미래부	나노소재기술개발	대용량 전산모사를 통한 나노입자의 촉매 반응성 최적화 기법 개발	전산(모사)
18	미래부	대학중심핵융합	전산모사를 이용한 자기 핵융합 플라즈마와 레이저의 상호작용 연구	전산(모사)
19	미래부	신진연구자지원	기능성 나노물질 성장 동역학에 대한 전산모사 연구	전산(모사)
20	미래부	신진연구자지원	기하학적 제한을 갖는 고분자 시스템의 멀티스케일 전산모사 기법 개발 및 이의 응용	전산(모사)
21	미래부	중견연구자지원	나노스케일에서의 물질과 구조에 대한 양자 전산모사와 설계	전산(모사)
22	미래부	중견연구자지원	유기 발광소자와 유기 나노구조체에 대한 멀티스케일 전산모사 연구	전산(모사)
23	미래부	첨단융합기술개발	능동형 위상 제어 광원 및 렌즈의 전산모사 연구	전산(모사)
24	미래부	KIST운영비	니켈촉매와 이산화탄소, 메탄을 이용한 그래핀 생성에 대한 다차원 전산모사 연구	전산(모사)
25	미래부	선도연구센터지원	자기조립 소재 및 공정에 대한 다차원 전산모사 연구	전산(모사)

번호	부처	사업명	과제명(연도)	비고
26	미래부	일반연구자지원	이온성 액정의 물성과 전자소재 응용에 대한 이론 및 전산모사 연구	전산(모사)
27	교육부	이공학학술연구	도핑된 TiO ₂ 나노입자 기반 광촉매에 관한 이론적 모델링	모델링
28	교육부	일반연구자지원	분자모델링과 고분자 이론을 적용하여, 고분자 기반 약물 전달체의 프로틴 흡착, 지질막 작용 및 약물 방출 메커니즘 규명 연구	모델링
29	교육부	일반연구자지원	수학적 모델링을 통한 기능성 등급 물질(FGM) 및 복합물질로 구성된 multi-scale 구조물에 대한 열탄성 특성들의 분석과 활용	모델링
30	교육부	일반연구자지원	정/역공학기반 3차원 기능성 복합재의 모델링 및 레이저 응용 적층 제조 연구	모델링
31	교육부	일반연구자지원	탄소복합체의 저장 능력에 관한 분자모델링	모델링
32	교육부	중견연구자지원	신 모델링 기법에 의한 미세 조직 및 물성예측 기술 개발	모델링
33	미래부	국가간 협력기반 조성(비ODA)	나노기술용 2차원 반데르발스 소재의 원자수준 모델링	모델링
34	미래부	국가간 협력기반 조성(비ODA)	새로운 건설재료로서 고유동성 섬유보강 시멘트 복합재료 개발: 실험 및 모델링	모델링
35	미래부	국가간 협력기반 조성(비ODA)	생태모델링과 예측을 위한 시멘틱(semantic)데이터 통합	모델링
36	미래부	국제연구인력교류	복잡계에 대한 분자 모델링 개발 및 활용	모델링
37	미래부	신진연구자지원	2차 비선형 광학 측정 및 Maxwell-Wagner 모델링을 통한 전하 주입형 유기 반도체 소자 전하수송 연구	모델링
38	미래부	신진연구자지원	분자모델링 기법을 통하여, 고분자 결합이 덴드리머의 구조, 물성 및 지질막 상호작용에 미치는 영향 연구	모델링
39	미래부	신진연구자지원	유기 태양전지 광활성층 나노모폴로지/전하수송모사 위한 다단계 분자모델링	모델링
40	미래부	첨단융합기술개발	복잡계에 대한 분자모델링 개발 및 활용	모델링
41	미래부	첨단융합기술개발	화합물 반도체 기반 테라헤르츠 에미터의 모델링 및 특성분석	모델링
42	지경부	산업기술국제협력	표면처리된 나노입자의 독성 모델링 거동연구	모델링
43	지경부	산업소재원천기술 개발	분자모델링을 이용한 π 계 광전자 소재설계 및 적용	모델링

부록

〈부록 1〉

미국 NNI NKI 백서

〈부록 2〉

유럽연합 ACTION-GRID 백서
총괄요약(Executive Summary)

부록 1

미국 NNI NKI 백서

NNI 서명 이니셔티브 : 나노 기술의 지식 인프라 2012년 5월 14일

국가 과학기술위원회 기술분과 나노 스케일 과학, 공학, 기술 세부분과
나노기술 핵심추진계획(NSI)

나노기술 지식 인프라 : 지속 가능한 디자인의 국가 리더십 활성화

협력기관 : CPSC, DOD, DOE, EPA, FDA, NASA, NIH, NIOSH NIST, NSF, OSHA

국가적 요구에 대응

나노기술은 나노 수준에서의 현상과 인공 나노재료, 구조 및 제품의 새로운 학제적 지식을 생성하고 적용함으로써 글로벌 과제를 해결한다. 이 새로운 지식의 기초가 되는 데이터는 지식의 광범위한 과학적인 근간에 통합하기 위해 광대하고, 연결되어 있지 않고 도전적이다. 다양한 나노 수준의 과학, 공학, 기술의 커뮤니티와 미국 국가나노기술계획(NNI)의 연방부처는 나노기술의 지속 가능한 개발에 중요한 요소로 여겨지고 있다. 이것은 새로운 지식의 배경확인을 가속화하고 효과적인 데이터 활용을 가능하게 하는 기존 NNI 구성 연방부처를 조정하는 이유이다.

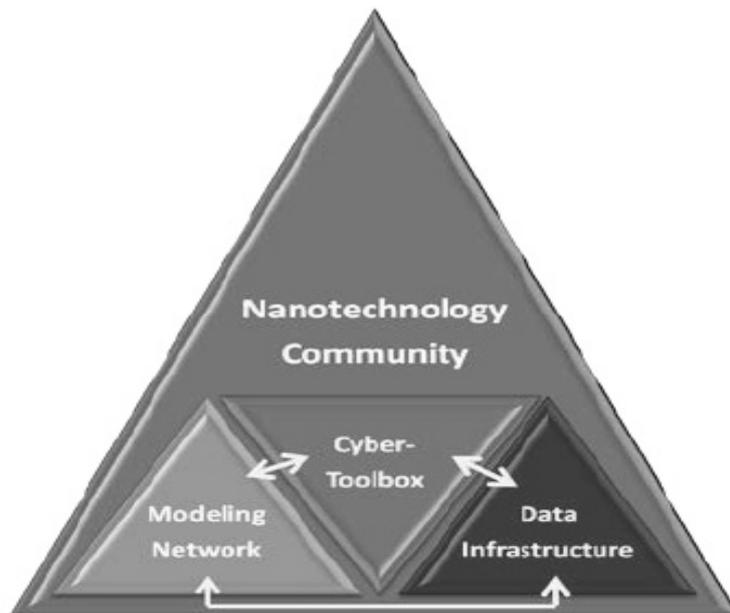
나노정보학은 나노기술 관련 정보의 수집, 검증, 저장, 공유 및 적용 모델을 분석하는 메커니즘 관련 개발 과학 및 이행 그리고 효과적인 이행 메커니즘이다. 나노정보학은 나노기술 관련 연구, 개발 및 응용 프로그램의 모든 측면에 영향을 미치는 통합적 학문이다. 개선된 나노정보학 인프라는 실험 데이터의 재현성과 분포를 개선할 뿐만 아니라 정보와 애플리케이션에 데이터를 변환하기 위한 도구와 모델의 개발 및 검증을 촉진하여 나노기술 능력의 지속 가능성을 확보한다.

나노정보학에 초점을 맞춘 국가 정책적 추진은 합리적인 나노재료 및 제품 디자인, 연구의 우선순위 도출 및 제품의 전주기 위험 평가는 물론 다음의 다양한 분야에 걸쳐서 응용될 수 있다. (에너지, 환경, 보건, 안전; 의학; 전자소자; 교통; 그리고 국가 안보 등) 이러한 관점에서 본 백서의 내용은 관련 연방 부처에서 추진 중인 재료유전자계획(Materials Genome's Initiative)에서도 활

용 가능하다. 본 계획은 커뮤니티 기반, 해결 방안 중심의 나노기술 발견과 혁신을 촉진하는 지식 인프라를 제공한다. 이러한 예상결과는 NNI 관련 부처의 협력 및 상호의존 개발에 의해 다음의 중점 추진과제 영역을 달성함으로써 가능해진다.

1. 국가 과제에 대응하기 위한 연구개발 및 나노기술의 응용 프로그램을 지원하기 위해, 과학자, 엔지니어, 기술자 등 다양한 분야의 전문가들 공동 커뮤니티
2. 기초 연구, 모델링, 응용 프로그램 개발과 이를 효율적으로 연계하기 위한 다학제 협업의 민첩한 모델링 네트워크
3. 나노소재 디자인 모델과 지식의 효과적인 적용을 위한 지속가능한 사이버 도구 상자
4. 강력한 디지털 나노기술 데이터 및 분야와 응용 프로그램 간의 효과적인 데이터 공유, 협업 및 혁신을 지원하는 정보 인프라

이러한 네가지 추진분야에 의해 나노기술의 지식 인프라 (NKI) 서명 이니셔티브는 21 세기의 나노 스케일 과학 및 공학을 위한 아키텍처를 만들기 위해 기존 및 신흥 자원, 프로그램 및 기술을 활용 확장한다. 구체적으로는 몇 가지 NNI 기관이 지원하는 데이터베이스 포털 및 나노 재료에 관한 데이터를 포함하는 리소스는 인프라의 기반을 제공하며, 표 1에서 강조되었다. WikiGenes의 생명 과학의 상호 작용과 같은 기술의 현대 디지털 기술, ArXiv의 디지털 물리 과학 라이브러리, 및 과학적인 논의를 위한 Twitter와 블로그의 사용은 지식재산권과 원작자를 존중하며 과학적 정보교환을 강화하고 촉진할 가능성을 입증하였다.



[그림 1] 나노기술 지식인프라(NKI)의 개요

NNI의 전략 계획과 NNI의 환경보건안전 전략에 따라 NNI 관련 부처와 이해당사자들의 연구수요를 지원하는 기술, 응용 프로그램 및 시스템이 강력한 모델링과 데이터의 정보 인프라를 포함한 기존의 모델링, 시뮬레이션, 데이터의 노력이 추진될 것이다. NNI는 혁신에 미국의 강점을 살린 신제품 개발에 대한 연구에서의 시간을 단축하고 사이버 도구 상자 및 데이터 인프라, 그리고 공업 나노 재료의 지속 가능한 디자인에서 미국의 리더십을 유지하기 위해 공동 모델링의 기본적인 상호 연결된 요소의 주위에 나노 스케일 과학, 공학, 기술 커뮤니티를 조정한다.

기술 프로그램

상기설명과 그림 1에서 나타난 것처럼 NNI는 상승적으로 만든 나노 기술을 추진하는 것을 돕는데 필요한 도구를 활용하는 4개의 추진분야 커뮤니티를 개발한다. 추진분야 1은 나노 스케일 과학, 공학, 기술 발전을 위해 학계, 정부, 산업계 전체에서 연구를 강화하고 연결하는 NNI 중요한 역할을 설명한다. 또한 개발, 유지 보수 및 추진분야 2(모델 및 데이터), 추진분야 3(검증 도구의 사이버 도구 상자) 및 추진분야 4(디지털 데이터 정보 인프라)를 위한 차세대 인력의 교육과 훈련에 초점을 맞추고 있다.

<표 1> 나노기술의 지식 인프라의 서명 이니셔티브에서 식별된 추진분야와 관련된 기초 자원 지원

Description of NNI-Supported Resource	
caNanoLab	Cancer Nanotechnology Laboratory Portal of NIH/National Cancer Institute; cabig.nci.nih.gov/tools/caNanoLab .
Extreme Science and Engineering Discovery Environment project (XSEDE; follow-on to Teragrid)	NSF-supported advanced digital network of 16 supercomputers and high-end visualization/data analysis resources; www.xsede.org .
InterNano	NSF-supported nanomanufacturing resource run by the National Nanomanufacturing Network; www.internano.org/ .
Nano-Hub	NSF-supported online simulation resources operated by the Network for Computational Nanotechnology; nanohub.org/ .
Nanomaterial-Biological Interactions Knowledgebase	The Nanomaterial-Biological Interactions Knowledgebase, hosted at Oregon State University and supported by EPA, NSF, DOD/Air Force, and NIH; nbi.oregonstate.edu/ .
Nanomaterials Registry	Web-based registry project in development by RTI International and three NIH institutes-NCI, NIEHS, and NIBIB-for biomedical and environmental applications of nanomaterials, www.nanomaterialregistry.org
Nanoparticle Information Library	A NIOSH tool to help organize and share information on nanotechnology and occupational health; nanoparticlelibrary.net .
Toxcast	EPA Program to define and evaluate predictive toxicity signatures of over 10,000 chemicals; www.epa.gov/ncct/toxcast/ .

추진분야 2는 실험 데이터 모델, 모델링 결과의 공유에 의한 신속하고 조기 모델링 협업, 평가, 동료 평가를 장려하는 것을 목표로 한다. 이것은 추진분야 1에서 정의된 광의의 나노기술 커뮤니티 개발을 지원하는 데이터와 정보의 교환을 통해 이론가 모델러, 그리고 실험들 사이의 중요한 관계를 촉진할 것이다. 추진분야 2에서 만들어진 신규 모델이 컴퓨터 도구를 통해 확인되면 추진분야 3에서 언급된 다양한 커뮤니티에서 활용가능한 사이버 툴박스과 연동될 것이다. 또한 추진분야 3에서 생산된 데이터는 추진분야 4에서 언급된 디지털 데이터 및 정보 인프라와 연계될 예정이다. 이러한 모델을 만들고, 전산모사로 확인하고, 재현성의 데이터를 생산하는 전체적인 과정은 과학적 진보가 정보디자인 과정을 통해 책임있게 제품화하는 것을 지원할 것이다.

NKI의 추진사항의 기술적 세부 사항과 기존 부처의 노력의 영향은 아래에 기술되어있다. 표 1에서 강조된 기존 NNI 기관의 프로그램 이외에 기관의 역할과 공헌은 8 페이지에서 논의되고 있다.

추진분야 1

국가과제에 대응하기 위한 연구개발 및 나노기술의 응용 프로그램을 지원하기 위해, 과학자, 엔지니어, 기술자의 다양한 공동 커뮤니티 구축

고도로 숙련 된 노동력은 미국의 나노 기술의 연구, 개발 및 응용에 필수적이다. 이러한 커뮤니티는 정책과 프로그램을 개발하기위한 시간을 필요로 한다. 커뮤니티는 미국의 나노 기술 경쟁력의 근간이 되고 있다. 그들은 (a) 실험연구자, 계산과학자 및 과학 이론가로 구성되며, (b) 국가의 과제를 해결하기 위한 엔지니어 및 과학 연구자, 및 (c) 품질 제어, 첨단 테스트, 위기와 기회 분석, 나노기술을 실제 응용하기 위한 훈련된 기술 재료 합성 전문가 등이다. NKI는 아래와 같은 활동을 통해 커뮤니티를 육성한다.

- 디지털 네트워크와 네트워크 이벤트를 홍보하여 나노정보학 커뮤니티의 의사소통 메커니즘 강화
- 지식, 방법 및 기술의 급속한 진보에 대응하기 위해 효율적으로 필요한 기술 수준과 인력을 양성하는 교육 도구 및 과정 개발 촉진
- 프론티어 나노 스케일 과학 및 공학의 문제를 정의하기 위해 과학자와 엔지니어의 상승적 상호 작용을 지원하는 국가적 도전과제 해결을 위한 전략 인프라 개발
- 경제적, 지리학적 또는 불이익, 과소 커뮤니티를 지원하기 위한 교육 기회 제공과 경력 장벽 최소화
- 학생 및 일반 대중을 위한 교육 행사를 통해 미국에서 나노기술 관련 영향 및 공동체 의식 창출

추진분야1에 대한 예상 결과는 다음과 같다.

- 나노기술 기반의 미국 산업을 구축·유지하기 위한 통합되고 고도로 숙련 나노정보학(NanoInformatics) 커뮤니티 형성
- 미래 나노기술에 대한 지능적 기반을 유지하기 위해 차세대 모델링 네트워크의 교육 및 훈련

추진분야 2

기초 실험 연구, 모델링, 상용화 개발의 효율적인 연계를 통한 다학제 및 지능적 협력의 즉각적인 모델링 네트워크

모델링은 나노재료의 개념을 이해하고 실험에서 얻은 경험적 지식을 연계하는 필수적인 메커니즘이다. 예를 들어 신뢰할 수 있는 컴퓨팅 모델은 나노물질의 위험 평가 및 관리를 통해 궁극적으로 원하는 신규 특성을 갖는 새로운 나노 수준 소재의 예측과 설계를 가능하게 한다. 이러한 모델은 또한 나노 스케일 물질의 생물학적 시스템 및 현상의 이해를 확장하는 새로운 개념의 개발에 중요한 역할을 하고 있다. 모델과 실제 실험 결과가 신속하게 네트워크상에서 공유되기 때문에 지적 인프라의 중요한 요소는 기초연구와 응용개발을 효율적으로 연계한다. 비판적인 단기간의 나노기술 모델링은 다음과 같은 요구사항을 포함한다.

- 1차 원칙 개념과 연결 이론, 전산모사 및 실험결과를 결합하여 나노재료 및 현상에 대한 지식 확장의 길이와 시간의 다양한 스케일을 만들어내는 모델
- 특정 실제 문제와 관련되고 적절한 생물학적 또는 물리적 시스템에서 실험적으로 검증한 모델
- 신규 데이터 출현 및 이론적 개념 발견에 따라 공유, 결합, 및 새로운 실험 모델을 결합하는 동적 메커니즘

기술 협력을 위한 향상된 모델링 네트워크를 개발하여 과학적인 도메인간의 의문을 해결하는 것이 가능하다. 보다 효율적인 개념, 디자인, 제품 개발, 생산 사이의 간격을 채우고 특정적인 위험을 최소화하면서 인간의 나노 재료의 이익과 환경을 극대화하기 위한 효과적인 조치를 취한다. 기술 제휴는 본질적으로 다학제적이고 학제간 파급효과가 크며, 차세대 나노 모델을 담당할 젊은 연구자의 교육을 촉진하는 것이다. 추진분야 2에 대한 예상 결과는 다음과 같다.

- 거대도전과제(Grand Challenges)에서부터 본질적인 국제 및 사회 문제 해결에 이르기 까지 다양한 나노기술 관련 문제들에 대처하기 위한 모델 및 모의실험 라이브러리 구축을 위한 전문가들의 강력한 기술 네트워크
- 다양한 수준에서의 나노소재 관련 개선된 구조 모델 :
 - 1) 원자, 분자, 입자 수준에서 상호작용을 고려한 세부 모델,

- 2) 나노소재의 다분화, 형태 및 변형관련 모델,
 - 3) 세포, 조직, 기관, 생물 및 생태계에서 나노소재의 영향을 모의 실험할 수 있는 미립자 정보 연계 모델
- 공개되지 않았지만 모델 확정을 위해 정상적이고 중요한 기술 관련 데이터에 대한 광범위한 접근
 - 초기, 더 세부적, 빈번하고 건설적인 검토에 의한 유사한 품질의 모델 개발 시간 단축
 - 유익한 특성을 최대화하고 잠재적 위험을 감소화하는 지속가능한 재료 설계를 위한 충분한 신뢰성 및 타당성의 모델 개발
 - 나노 커뮤니티 이외에 다양한 커뮤니티와 이해당사자들이 쉽게 접근할 수 있는 모델
 - 새로운 실험과 모델 개발에 있어서 긍정적/부정적 결과를 통해 데이터 격차를 파악하고 모델링 활동을 통해 변화하는 개요

추진분야 3

지속 가능한 사이버 도구 상자를 통해 나노소재 디자인을 위한 모델과 지식의 효율적인 응용

실험 분석 및 나노 재료의 이해를 쉽게 하는 계산 도구 제품군은 나노기술 지식 인프라에 필수적이다. 사용 가능한 도구에 대한 단일 액세스 지점을 설치하는 것은 다양한 나노기술 관련 과학도메인에서 나노소재이 활용과 지식 상호 교류를 촉진한다. 도구 상자의 중앙 구성 요소는 나노 재료의 특성과 행동의 안정적인 강력한 시뮬레이션을 가능하게하기 위해, 계산상의 효율적인 소프트웨어 도구이다. 시뮬레이션은 물리적, 생물학적, 또는 엔지니어링 문제를 해결하기 위한 모델을 이용하는 잘 설계된 수치 알고리즘에 기반 컴퓨터 명령 프로세스이다.

과학을 촉진하는데 정확하고 예측적이며 유용한 나노기술 모델의 활용을 통해 다양한 커뮤니티에서 활용 가능한 신규 소프트웨어 개발이 지속적으로 추진가능하다. 데이터 마이닝 소프트웨어는 분명하지 않거나 현재의 이론적 틀에 표시하기 어려운 재료 특성과 현상 간의 상관관계의 발견을 가능하게 한다. 기초가 되는 시뮬레이션 모델을 실행하는 소프트웨어는 분석과 실험 결과의 해석, 나노 스케일 현상의 예측 및 나노 재료 및 시스템의 지속 가능한 설계 및 제어 할 수 있다. 다른 시스템의 소스 코드를 컴파일하면 성능에 영향을 미칠 수 있기 때문에 소프트웨어는 특정 컴퓨터 아키텍처에서 검증해야한다. 소프트웨어는 본보기 결과를 재현하는 데 필요한 유효성의 범위에 대한 구체적인 정보와 대표적인 실행시 파라미터와 파일 및 기타 관련 정보를 포함해야한다.

이론학자들과 실제 연구자들사이의 다학제적 협력을 통해 검증된 사이버 도구상자는 제품 수명주기 관점에서 접근성이 높고 전산모사가 잘 유지되어 신규소재 디자인 및 개발을 지원할 수 있다. 추진분야 3에 대한 예상 결과는 다음과 같다.

- 나노소재의 특성, 거동, 생물계 및 생태계 영향 등을 이해하는 공동 개발 검증 모델의 나노기술 사이버 도구상자
- 나노기술 관련 실험의 계획, 실행 및 결과 분석을 촉진하는 이론, 계산, 통계 및 시각화 도구를 포함하는 사이버 도구상자
- 사용자 접속가능성을 개선하기 위해 현존하는 다학제적 도구상자의 구성요소를 연결하는 국가나노기술조정위원회(NNCO)에 의해서 관리되는 NNI의 중요 접속지점
- 가상도구상자와 나노기술 지식 인프라(NKI)를 연결하여 나노과학·기술을 통합하는 지능적인 프레임 구성과 추력 1에서 언급된 차세대 워크포스 개발을 지원하는 교육 기회

추진분야 4

강력한 디지털 나노기술 데이터 및 정보 인프라를 통해 다학제적 응용분야와 관련된 효율적 데이터 공유, 협력 및 혁신 지원

나노기술 커뮤니티는 나노 물질의 설계, 합성, 특성, 현상 및 분산 종합 데이터베이스에서 생물학적 및 환경에 미치는 영향 검증 실험 및 모델링 데이터와 정보를 통합하고 포괄적인 디지털 데이터 인프라에 대한 즉각적인 필요성을 가지고 있다. 개방형 소스 및 액세스의 실천 자유롭게 사용 가능한 소프트웨어, 검색 기능, 데이터 전송, 보관을 위한 일반적인 형식은 포괄적인 인프라의 데이터 세트를 구성하는 첫 출발점을 제공한다. 과학자들은 자신의 데이터에 대한 액세스를 저장 및 관리를 계속 하겠지만, 이러한 개방형 데이터 인프라를 통해 개별 데이터베이스를 개선하고 데이터베이스 간에 의미 있는 분석이 가능하다. 표준화 된 어휘와 매핑된 온톨로지는 개방적인 온라인 대화를 통해 나노기술의 연구 커뮤니티에 포함되는 여러 분야를 중개 과학적 담론에 대한 공유 용어를 제공한다.

나노기술의 데이터와 정보 인프라의 개발은 나노소재 설계, 합성, 및 표준화 된 형식과 어휘를 사용하여 기존 및 신흥 데이터와 정보를 공유하기위한 프레임 워크를 제공한다. 더 신뢰할 수 있는 데이터와 광범위한 연구 커뮤니티에 대한 액세스를 제공하며, 모든 분야에서 과학적인 담론 발전 및 혁신을 강화하고 가속한다. 추진분야 4에 대한 예상 결과는 다음과 같다.

- 상호운용 시스템의 전략적 개발을 통해 데이터 저장, 효율적 관리, 조직구성, 평가, 보급 및 협력의 컴퓨터 모델
- 전주기 데이터 관리를 포함하는 데이터베이스의 효율적 활용을 촉진하기 위해 데이터 관리 및 사용을 위한 기준과 절차
- 컴퓨터 정보 데이터 패턴 인식, 데이터 시각화 및 다변량 구조 특성 관계를 포함하는 안정적인이고 효율적인 데이터 분석 툴의 확대

- 강력한 검증 절차 및 기준 데이터 표준 개발
- 데이터, 모델 수집, 공유 및 파일보관 등에 대한 과학자들의 변화하는 요구를 평가하고 충족하는 메커니즘

부처(기관)의 역할과 기여

재료 과학, 화학, 생물학, 공학, 고급 측정 및 특성 평가 과학을 포함한 여러 다양한 전문 분야에 걸쳐 문제를 해결하는 협조 부처 간의 노력이 긴요하게 요구되는 나노 기술의 지식 기반을 확립한다. NNI는 나노 스케일 과학, 공학, 기술의 속도를 가속하는 데 필요한 인프라를 만드는 데 이러한 빅 데이터 연구 개발 이니셔티브 [11]에서 강조되고 있는 같은 연방 정부 기관 기존 및 신흥 노력을 활용하고 있다. 개별 기관과 이해 관계자가 지원하는 데이터베이스는 각 데이터 전문가를 통해 세분화 정리된다. 그러나 NNI 웹 사이트의 중앙 액세스 포인트는 더 광범위한 커뮤니티에서 쉽게 액세스 할 수 있도록 데이터를 저장, 관리, 분석, 및 공유할 수 있다.

NNI 큰 커뮤니티의 요구를 충족하기에 충분한 유연성을 제공 인프라를 생성하기 위해 일부 연방 정부 기관 뿐만 아니라 산업계, 학계, 비영리 조직이 참여를 계속하고 있다. 이러한 지속적인 활동은 기존의 상호 작용 예시를 만들고 NNI의 노력을 위해 가능한 접근 및 기회를 제공한다. :

- NIOSH는 "좋은 위험 관리 실무(Good Risk Management Practice)관련 Wiki 기반 GoodNanoGuide 개발과 이행관련 주요 NNI 기관이나 외부의 이해당사자들과 협력하고 있으며, 2013 년 NIOSH는 GoodNanoGuide [12]과 nanoinformatics에서의 활동을 통합하는 것을 계획하고 있다.
- NSF는 모든 자격 취득자에게 나노 스케일 제조, 합성, 특성 분석 및 모델링, 설계, 계산 및 교육 실습을 할 수 있는 오픈 실습 환경의 광범위한 지원을 제공하는 국립 나노기술 인프라 네트워크(NNIN) 설립
- NIST의 확대 나노안전(EHS) 프로그램은 공업 나노재료와 나노재료 공학 기반 제품의 제조사 및 표준물질 측정 프로토콜 및 예측 모델 개발에 지속적인 작업을 다른 NNI 기관, 특히 NIOSH, OSHA CPSC 및 EPA와. 주요 나노 스케일의 EHS 대학센터와 지원하고 있다.

표 2는 아래에 설명 키 NNI 추력 영역 및 정부 기관의 개요에 각각 기대되는 기관의 공헌의 영역을 보여준다.

각 참여기관의 세부 추진분야와 관련된 구체적인 전문 지식과 관점은 다음과 같다.

CPSC : CPSC는 나노물질 노출의 잠재적인 영향을 평가하는 데이터의 수집과 해석의 위험 모델링 접근 방식과 전문성에 대한 지원

- DOD : 나노재료의 신규 특성, 잠재적인 용도, 인간의 건강과 환경에 미치는 영향 및 중요한 측면을 조사하는 연구에 전체 DOD의 과학자들이 적극적으로 참여하고 있다. 이러한 조사는 데이터를 생성하기 위한 실험실 작업, 데이터 격차를 채우기 위해 모델링 도구의 개발과 응용, 및 데이터베이스, 출판물 및 보다 광범위한 과학적인 집단과 이들의 결과를 사용하고 공유하기 위한 소프트웨어 플랫폼의 개발을 포함한다.
- DOE : NSI 이니셔티브는 DOE의 고급 컴퓨팅 (SciDAC) 프로그램을 통해 계산 재료와 화학 네트워크 (CMCSN)과 과학적 발견과 관련하여 구축된다. 에너지 기술에 관련된 많은 연구 분야에서의 진보는 현재 사용 가능한 재료 및 화학 공정에 의해 제한되며, 기본적으로 나노 스케일을 포함한 다양한 길이와 시간 스케일 전체의 예측 이론 및 모델링 기능에 독립적이다. DOE는 기존 산학연 연구커뮤니티 및 국립연구소는 물론 5가지 나노 스케일 과학 연구 센터 사업을 지원한다.
- EPA : EPA는 실험적인 시험 및 특성 데이터를 보거나, 표준화된 관계형 데이터베이스 및 모델 속성 및 개발되고 공유되는 나노물질의 생물 활성 링크가 포함된 결과의 공유를 지원한다.
- FDA : FDA는 공동 데이터베이스, 포털 및 나노재료의 데이터를 포함하는 리소스는 FDA에 안전성과 유효성 평가를 위한 나노기술 기반의 제품과 모델의 특성화에 공표 조사 결과를 공유하고, 생물학적 시스템에서 나노 물질의 거동을 연구를 통해 인간의 건강에 미치는 영향을 조사한다.
- NASA : NASA는 미래의 행성 탐사와 지구/우주 과학 차세대 개발을 위해 내부 및 산업계와 학계 모두에서 R & D 활동을 지원하는 환경 친화적인 항공기 등 효과적인 나노기술을 실증하고 있다. 이러한 노력은 응용 프로그램을 위한 새로운 재료 및 장치를 개발하기 위한 실험적인 활동의 조합과 데이터 수집, 모델링, 시뮬레이션이 포함된다. NASA는 NSI에서 멀티 스케일 모델링과 데이터베이스 도구의 개발을 지원하고 검증하기 위해 실험 데이터를 제공하며 지원한다.
- NIH : NIH는 모델링의 인프라를 통해 실험 데이터에 대한 모델 검증 및 모델링 도구를 개발하고 나노재료의 데이터를 공유하기 위한 나노재료(MIAN), 온톨로지, 그리고 다양한 커뮤니티의 노력에 의해 개발된 표준에 대한 최소한의 정보를 사용하여 나노기술 분야를 선도한다.
- NIH는 또한 데이터베이스 및 저장용 등록 및 나노재료와 그 특성 평가에 필요한 프로토콜의 인덱스 정보를 구축하여 나노의학 데이터의 공유 및 활용하기 위한 표준을 정의한다. NIH는 또한 우주 생물학적 조직 및 시간 스케일 전체 예측뿐만 아니라 산업 나노 물질에 대한 노출의 독성학적 영향에 대한 데이터와 예측 모델을 검증 멀티 스케일 모델 개발을 지원한다.

NIOSH : NIOSH는 작업장에서의 기존 및 신규 나노기술 관련 나노입자 정보 라이브러리, 나노정보학 도구 및 실제 데이터를 지원한다. 작업장에서 노출에 대한 데이터, 나노물질의 분류에 노출의 독성 효과의 실험적 증거와 모델링, 컨트롤의 유효성에 관한 지식과 데이터, 그리고 지속 가능한 나노 기술을 지원하기 위한 도구 및 지침 및 노출 한계를 권장한다.

NIST : NIST는 측정 및 데이터 정보 과학의 오랜 노하우를 활용한다. NSI을 지원하는 NIST 활동은 소재의 발견과 최적화를 위한 안정적인 컴퓨터 모델링 및 시뮬레이션을 가능하게 하는 기준 데이터 및 데이터 관리 인프라의 개발에 초점을 맞추고 있는 고급 소재가 포함된다. 이러한 활동은 DOE와 NSF에 포함 된 소프트웨어와 실험 도구의 설계, 위의 다른 기관의 노력에 따라 조정된다.

NSF : NSF는 NSI는 사이버 대응의 발견과 혁신에 투자하고 이러한 혁신을 지속할 수 있는 소프트웨어 기반으로 21 세기 프로그램에 대한 사이버 인프라의 프레임 워크 내에서 지원한다. NSF 프로그램도 나노 스케일 물질과 공정을 위한 특정 데이터베이스를 통해 NKI에 기여하고 있다. 다른 스케일에서의 특성 및 행동 관련 모델에 대한 변혁의 생각, 나노물질의 발견과 생산을 촉진하기 위해 나노기술의 사이버 도구의 개발과 이용을 지원하기 위한 계산 및 통계 기법의 연장; 기본적인 이론과 모델링의 진보, 소프트웨어 예제의 결과를 재현하는 데 필요한 파라미터와 파일 및 기타 관련 정보를 포함하고 특정 컴퓨터 아키텍처에 최적화. 차세대 과학 패브릭 사이버 도구 상자를 통합하는 차세대 모델링 커뮤니티의 훈련을 포함한다.

OSHA : OSHA는 나노재료의 다양한 카테고리에 노출 생물학적 및 독성학적 데이터 수집과 해석의 영역에서 전문성과 지원을 제공한다.

소재 계층 이니셔티브(MGI)와의 연계

소재 계층 이니셔티브 (MGI)는 국내 첨단 재료의 발견과 전개를 가속하는 다중 이해 관계자의 노력이다. NKI와 MGI위한 시너지 영역은 NKI의 모든 4 개의 중점 추진분야에 있으며 특히 커뮤니티 구축 프로토콜과 데이터의 모범 사례가 포함되어 있다. MGI와 NKI의 연계는 상호 호혜적 이익을 가져올 것이다. 따라서 NNI 및 MGI 모두에 직접 기여하는 NSI는 최초로 영향을 미치는 설명된 NKI 활동이며 관련 연방 부처의 구현을 위한 노력이 포함된다.

NKI는 모델링, 시뮬레이션 도구 및 나노 미터의 길이 스케일에서의 서브 마이크로 영역의 특정 현상의 예측을 가능하게 하는 데이터베이스 개발 및 큐레이터를 전진시키는 것을 의도하고 있다. MGI의 범위는 넓게 나노 스케일 뿐만 아니라 재료의 고유한 특성을 포함한 길이 스케일과 기간의 범위에서 재료 정보를 다루고 있다. 효과적으로 공간적, 시간적 스펙트럼을 채우는 활동은 설계에

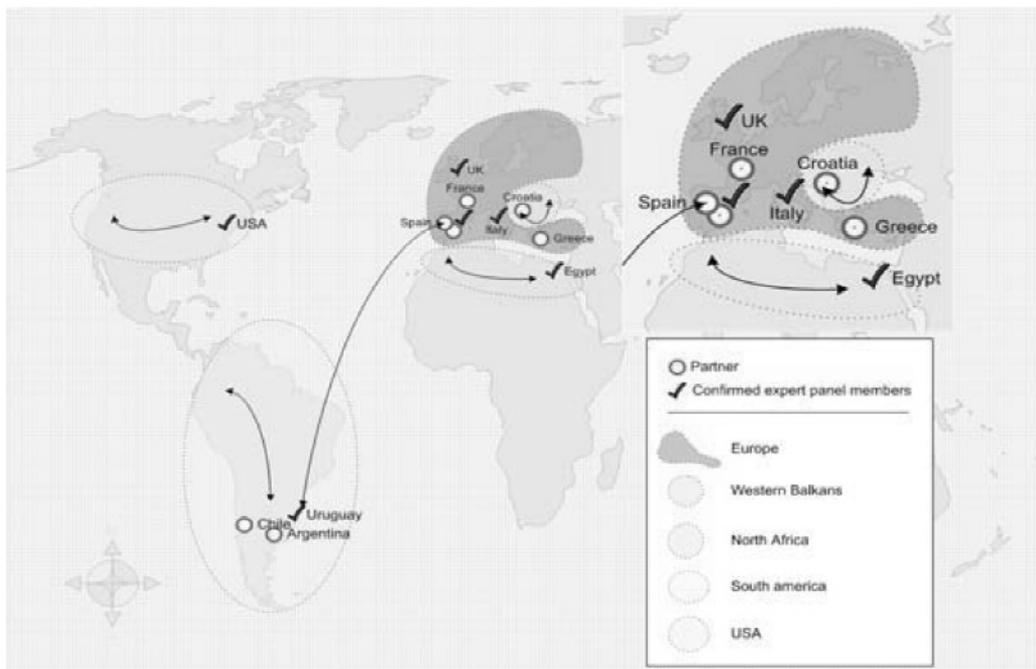
의한 재료 생산을 촉진하는 이론과 실험전문가를 연결하는 데이터 포맷의 표준화 등 다른 MGI 관련 노력의시 확대 개발하기 위해 학제간의 의사 소통을 촉진한다. 마찬가지로 다른 MGI 활동을 통해 개발된 기술, 프로토콜 및 표준은 나노물질의 평가를 위해 활용될 수 있다. NNI와 MGI 사이의 연계 수정은 광범위한 지식의 보급을 가져올 것이며 NNI의 노력에 의해 촉진 될 수 있다. 지속적인 부처간 조정을 통해 생성된 통합 인프라는 미국의 경쟁력을 확보하기 위해 길이와 시간 스케일을 횡단하고 혁신 파이프라인을 통해 재료 개발을 지원한다.

부록 2

유럽연합 ACTION-GRID 백서 총괄요약(Executive Summary)

도입 및 이유

ACTION-Grid는 2008년부터 2010년까지 유럽연합 집행위원회(EC)가 지원한 자금지원(SA)이며, ACTION-Grid는 7개의 파트너[UPM(코디네이터, 스페인), ISCI(스페인), FORTH(그리스), UTalca(칠레), HIBA(아르헨티나), HealthGrid(프랑스)과 UniZg(크로아티아)]로 구성되어 있다.



[Figure 1] Geographical distribution of the ACTION-Grid partners and experts

ACTION-Grid는 생체의공 정보학(Biomedical Informatics), 그리드 컴퓨팅(Grid Computing) 및 나노정보학(Nanoinformatics)을 포함한 유럽연합 최초의 구상(계획)이다. 이러한 관점에서 ACTION-Grid 백서는 주요 과학적 목적 중 하나로 나노정보학의 새로운 분야를 분석하여, 일반적으로는 유럽연합 집행위원회와 과학 커뮤니티가 사용할 수 있는 향후 연구 계획을 위한 과학적 근거를 제공, 보다 자세하게는 유럽연합 집행위원회가 지원하는 가상생리인간(Virtual Physiological Human, VPH)의 프레임워크를 지원하는 것이다.

VPH는 이미 모델링 및 생리적 과정의 시뮬레이션 분야에서 상당한 성과를 도출했지만 생체의 공정보학(BioMedical Informatics)과의 상호작용은 비교적 진행되지 않았다. 또한 나노의학(Nanomedicine)과 나노정보학(Nanoinformatics)은 명확한 임상적 의미의 기초 및 응용연구를 위한 새로운 과학적인 과제를 만들고 이러한 범위를 확대할 수 있다.

이와 관련하여 백서는 주로 2종류의 독자의 대상으로 한다. a) 나노정보학(Nanoinformatics)의 특성을 배워서 의공정보학(BMI), 임상 의학, 나노기술 또는 의공학 연구에 새로운 방향을 설정하려고 하는 연구자 및 b) 유럽연합집행위원회의 과학 참사관 등 정책 입안자 및 관리자를 대상으로 한다.

나노정보학은 나노입자의 구조 및 물리화학적 특성 정보와 생물학적 환경과의 상호작용 및 응용에 대한 자료를 분석하고 처리하는 정보 기술의 사용을 의미한다. 이것은 정보학을 포함하는 거대한 과학/기술적 관점의 영역이다.

과학적인 관점에서 백서는 생체의공정보학과 밀접하게 연관되어 있는 5가지 거대한 도전분야를 제안한다. 다섯 가지 거대한 도전분야는

- 1) 정보와 지식의 저장과 관리: 새로운 바이오-나노 저장소 및 관련분야 신규 표준 개발
- 2) 나노존재학 및 의미적 정보처리 상호운용: 나노관련 자료와 정보를 통합하는 신규 인프라 및 시스템 개발
- 3) 유럽 가상생리인간(VPH) 영역 확대: 나노물질의 체내 거동과 같은 나노수준에서 모델링과 시뮬레이션(이러한 의미에서 나노수준에서 관련정보를 추가하는 것은 유전자형(Genotype) 이해에 대한 새로운 통찰력을 제공하고 표현형(phenotype) 특성에 대한 새로운 기반과 설명을 제공할 수 있습니다. 이러한 측면에서 로드맵은 나노입자와 생물학적 표적의 상호반응과 잠재적 독성, 다양한 진단/치료 용도와와의 관계를 포함하는 대형 설명서(카탈로그)로 발전 가능성이 있는 나노형(Nanotype)의 개념을 제안
- 4) 나노수준의 기초적인 과학연구와 미래의 임상 응용을 연결하는 중개 나노정보학이라고 분류할 수 있는 새로운 분야의 탄생
- 5) 기존 전자보건기록을 확장하여 나노관련 정보를 취합하여 진단, 치료 및 나노물질의 잠재적인 독성 영향을 분석

이러한 5 가지 거대한 과학적 도전은 야심찬 과학적 성질 때문에 단기/중기적으로 달성하기 어려울 수 있다. 우리는 이와 관련된 특정 행동이나 기회를 제안하여 유럽연합 집행위원회 등이 관리적 관점에서 보다 실현가능성이 있는 이슈들에 대해서 집중해 주길 바란다. 마지막으로 이 백서를 통해 우리는 미래를 위해 학술, 경제, 과학 및 산업 기대와 관련, 유럽의 연구개발 추진방향성과 기회를 알아보고 이와 관련된 새로운 과학연구 방향을 제안하는 것을 목표로 하였다.

방법론

방법론은 크게 두 가지 단계로 1 단계는 문헌 정보 검색과 분석을 바탕으로 일반적인 접근 방식을 기반이며, 2 단계는 최종 백서로 이어질 다른 버전의 생산으로 구성되었다. 첫 번째 단계에서는 이러한 연구 분야에 대한 빈공간과 과제를 파악하기 위해, 유럽, 라틴 아메리카, 북아프리카의 의용생체정보학(BMI), 나노정보학 및 현재 GRID 관련 계획 정보 관련 ACTION-GRID 간의 취합을 목표로 하였다. 이 단계에서는 정보 검색 방법은 관심 주제에 대한 과학 문헌의 내용을 확인하고 분석하는 것이다. 따라서 이 단계를 통해 컨소시엄이 개발한 정보 검색 및 관리를 위한 정보학 도구를 사용이 촉진되었다.

기회의 영역이 다음 문서화하고 우선순위를 붙인 관련 연구 테마로 확인되었다. 동시에 관심 있는 유럽, 라틴 아메리카, 북 아프리카 등의 그리드 / 나노 / 의용생체 정보학 분야에서 활약 관련 전문가 그룹을 결정하는 것을 돕기 위해 컨소시엄을 통해 조사가 추진되었다. 전문가 의견과 서적의 정보가 결합되어 예비 관심분야 목록이 조사 결과로 도출되었다. 두 번째 단계에서는 액션 그리드 멤버 회의 중 나노정보학 및 잠재적인 연구 도전과제의 특징적인 성격이 강조되었다. 그 후, 백서 초안이 출시되고 반복적으로 컨소시엄에 의해 개정 및 개선되었다. 내용에 대한 최종합의에 도달 한 후에는 문서가 공개 피드백을 얻을 수 AMIA처럼, 메일과 포럼을 통해 발표되었다. 이러한 모든 과정을 통해 나노정보학 관련 ACTION-GRID 백서가 완성되었다.

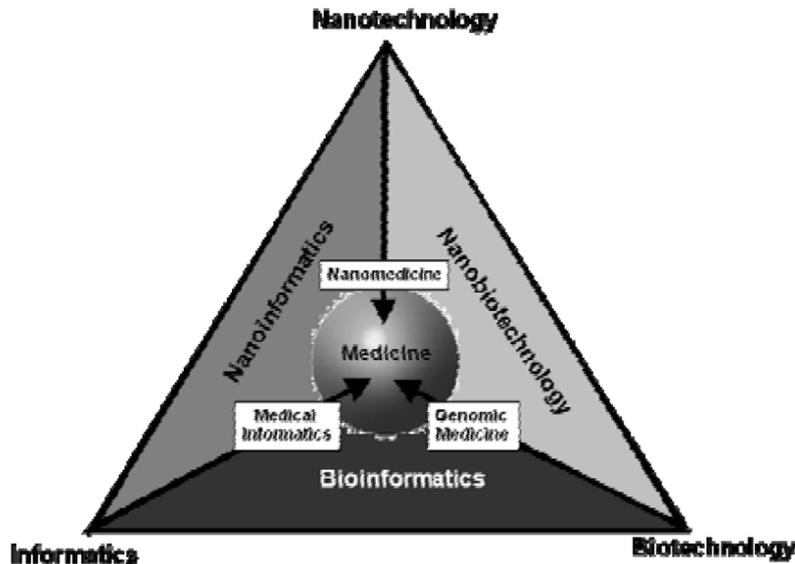
나노정보학의 컨셉과 정의

Nanoinformatics은 나노 입자의 구조와 물리화학적 특성은 물론 생물학적 환경과의 상호 작용 및 응용 관련 정보를 분석하고 처리하기위한 정보 기술을 사용을 의미한다. 그림 2는 관련 분야의 예시 중 중 일부를 나타낸다.

Nanoinformatics은 정보학, 나노기술, 의학과 기 확립된 생물학, 화학, 물리 등의 분야의 교차에 새롭게 출현한 정보학 영역으로 볼 수 있다. 나노정보학 관련 공식적인 첫 번째 첫 번째 대규모 회의는 미국 과학재단(NSF)의 지원을 받아 2007 년에 버지니아에서 개최되었다. 2008년 유럽 연합 집행위원회는 나노정보학과 의용생체정보학 및 ACTION-GRID를 연결하는 최초의 사업을 시작했다. 나노약품의 연구 개발을 촉진하기 위해 이러한 계획 등이 나노정보학 지원을 위해 등장했다.

우리는 나노입자와 나노소재의 구조와 물리화학적 성질을 조직, 해석, 및 예측하는 새로운 시대가 열리고 있음을 알고 있다. 수준 높은 컨셉트, 통찰력, 그리고 설계 제안을 개발하기 위해 일반적으로 컴퓨터 기술과 정보 과학 및 분자 전산모사가 바이오 나노기술 및 나노정보학 연구와 관련된 주요 방법론으로 떠오르고 있다. 바이오 정보학은 DNA와 RNA의 배열데이터 분석과 관련하여 적용되고 있는 반면, 나노정보학은 원자수준에서 나노 및 생명 공학에 응용할 수 있는 입자 및 재

료의 특성화 모델과 원자 수준에서 전산모사에 적용되고 있다. 이것은 특히 그 특별한 정보 요구에 대한 훌륭한 과학 기술의 전망을 제공한다.



[Figure 2] Links between Nanoinformatics and other disciplines

나노입자와 나노소재

lipoparticles, 풀러렌, 탄소나노튜브, 양자점, 상자성 나노입자, 나노셀, Nanosomes 및 덴드리머와 같이 의학분야에 응용할 수 있는 다양한 나노입자들이 있다. 백서는 다양한 나노입자에 대한 정의와 가능한 응용 분야가 포함되어 있다. 각각의 나노입자는 물리화학적 특성 및 치료 목적으로 사용되는 생물학적 성질을 가지고 있다.

나노의학

다수의 현재 응용분야가 있음에도 불구하고 나노 스케일 장치 및 입자의 생물학적 효과는 완전히 이해되지 못하고 있다. 따라서 해당 연구는 아직 초기 단계이다. 특히 그 부피, 모양, 입체 형상, 유연성, 정전 특성 및 순도 등의 나노 입자의 물리 화학적 성질은 다른 시스템, 조직, 기관, 세포, 세포 소기관 및 분자 환경에서 생물학적 상호 작용에 강한 영향을 미칠 수 있다. 따라서 나노입자는 발생하는 다양한 생물학적 환경과의 상호 작용을 용이하게 하고 결합된 새로운 나노 스케일의 특성에 따라 특정 의료의 목표를 달성하도록 설계 할 수 있어야 한다. 나노입자는 일반적으로 구조에서 다분산성이며, 부분 집단 구조가 다른 효과를 유발할 가능성이 있기 때문에, 세부 구조에 따른 나노입자의 유효성 감도는 장점과 단점을 모두 가지고 있다. 불충분한 특성 분석과 나노재료 구조 제어는 나노입자의 응용과 나노입자 제재의 개발에 큰 걸림돌이 되어왔고, 앞으로도 계속 영향을 줄 것

이다. 이것은 나노입자의 잠재적인 독성과 시술 영향 등 중요한 이슈에 대한 이해를 필요로 하며 나노입자와 나노기기 등의 응용에 중요한 의미를 시사하고 있다. 효과적이고 효율적으로 이러한 모든 데이터를 관리하기 위해서는 관련 정보를 파악하고, 결과 정보와 나노입자 구조와 생물학적 환경에서 영향을 모아서 모델링하는 신규 컴퓨터 기술을 개발하여 구조/활성 연관성과 임상적 결과를 도출하여야 한다. 임상 응용과 관련하여 이미 몇 가지 나노입자와 나노장치가 FDA에 의해 승인되거나 고급 임상시험 중이다. 나노 약품의 응용분야는 표 1에서 강조 표시된다.

〈Table 1〉 Applications of Nanomedicine

Examples of applications in nanomedicine	
Smart sensors	Monitoring bodily function, diagnosing disease states, or controlling intelligent devices located in hospitals or at home - such as nanowire systems for diagnosis using a single drop of blood
New methods for molecular imaging	Early detection of diseases
Implantable materials and devices	For tissue repair and replacement and for therapies such as restoring vision and hearing functions
Nanorobots	Devices that combine diagnostic and therapeutic features, such as individual cell surgery in vivo or improvement of natural physiological function
Targeted drug delivery to diseased tissues	Using nanoparticles to take advantage of the enhanced permeability and retention (EPR) effect due to the leaky vasculature and decreased lymphatic drainage in tumors
Selective treatment of diseased tissues	Using plasmon resonance absorption of nanoshells to kill cancerous tissues
Overcoming solubility Limitations of new and existing drugs	Nanoparticles and nanosystems designed for drug delivery within cells
Gene identification	Detecting the presence of a sequence in a genetic sample using gold nanoparticles
Gene delivery	Transporting DNA into cells for gene therapy
Theragnostics	Already introduced in pharmacogenomics, it associates both a diagnostic and a new therapy. In nanomedicine it can integrate diagnosis and therapy into a single procedure involving nanoparticles
Nanomotors	Efficient conversion of chemical energy into mechanical work and potential for self-assembly into larger structures will facilitate hybrid micromachines, artificial and natural, for repairing neurons or muscles

재생의학

재생 의학을 위한 나노입자의 연구는 유전 물질, 생체 분자 및 뼈 형성 단백질에 대한 포착 및 전달 시스템의 개발 등에서 추진되고 있다. 전달 시스템에서 나노기술은 조직재생을 위한 중심요소이며, 성장인자 및 DNA와 같은 특정 치료의 효율을 높일 수 있다. 조직 공학에 초점을 맞춘 나

나노기술은 2 개의 주요 전략으로 발전하여 왔다. 첫 번째 전략은 나노소재를 이용하여 3차원 스케폴드의 보강 또는 증진 개발이며, 제 2의 전략은 이환되거나 손상된 조직 틈새의 줄기 세포에 신호를 보내는 것이다.

공공 보건

나노약품이 제공할 수 있는 다양한 장점에도 불구하고, 다음과 같은 문제 때문에 공공 보건을 위한 나노기술을 유의해야 한다

- 1) 생물학과 인공 나노구조물의 상호작용
- 2) 나노입자의 생물학적 분포와 저하
- 3) 체외 및 체내 실험결과의 연관성
- 4) 나노기술의 윤리적 및 사회적 측면
- 5) 위험 평가와 규제
- 6) 작업장 관련 사고와 질병의 방지
- 7) 나노입자의 잠재적인 독성, 다음 분야는 이 중요 문제의 확장
- 8) 의용생체 연구 및 응용 관련 전방위적인 나노기술 관련 대상 감시 시스템 확립

나노독성: 나노입자의 2차 영향

나노정보학에서 독성은 매우 중요한 역할을 할 것이다. 이미 배아 제브라 피쉬를 이용하여 NIOSH, ONAMI에서 개발한 독성 스크리닝 등의 데이터베이스가 존재한다. 연구자들은 신체의 변화를 예측하기 위해 전산화 된 의료 기록에서 실제 환자의 데이터와 그들을 연결하는 독성 프로세스를 모델링하고 시뮬레이션 하여 나노정보학을 사용할 것이다. 첨단 컴퓨터 기술을 통해 나노입상 진료에 필요한 나노입자 신약 개발 시간을 단축 할 수 있으며, 이러한 방법은 가상 실험기술의 다양한 사용으로 향상될 수 있다. 이와 관련되어 여전히 대규모로 새로운 치료 옵션을 연구하고 개발하기위한 적절한 수단이 부족하다. 연구의 대부분은 (i) 나노입자의 개수, 특성 분석, 및 구분하는 것, ii) 나노입자를 준비하고 조제하는 방법의 정의, iii) 나노입자 관련 표준의 개발, iv) 나노입자의 안전성 및 유효성 관련 특성 분석 및 모니터링 방법 개발에 관련되어 있다. 나노물질의 생물학적 반응의 이해는 미래의 약물 전달 응용과 관련되어 안전한 나노재료를 개발하고 적용하기 위해 필요하다.

이처럼 유럽의 VPH 프로그램의 확장을 위한 특정 나노입자에 대한 인간의 영향을 시뮬레이션 하는 것에 대한 필요성이 강조되었다. 기초 연구 질문은 : "제조된 나노 물질의 특별한 특성을 연구하기 위해 얼마나 위험 평가 방식이 어떻게 진행되어야 하는가로 다음의 문제들에 대한 해답이

취합되어서 종합적으로 정리되어야 한다. 나노의료 응용을 위해 분석되어야 하는 나노재료의 특성은 무엇입니까? 나노약품 독성, 노출, 환경 운명과 수송에 이용할 수 있는 데이터의 종류는 무엇입니까? 데이터 격차는 어디에 있습니까? 나노의학 응용과 관련하여 나노재료의 독성과 특성 분석은 기여하고 있습니까? 특정 전달 메커니즘은 나노 약품의 독성에 영향을 줍니까? 정보학 기법과 도구를 사용하여 이러한 프로세스를 모델링하고 시뮬레이션 하는 방법은? 이러한 관점에서 이전의 문헌에 주석을 붙이는 것은 모델의 적절성 파악, 자료의 불충분으로부터 부적절한 결론 도출, 부적절한 특성 분석이 추진되었는지 알아보는 것이 필요하다. 적절한 온톨로지와 함께 텍스트 마이닝 기술의 사용은 문헌에서 나노독성학 정보를 추출하고 그것을 임상 치료 시험을 위해 사용할 수 있도록 도와준다.

의용생체 정보학과 나노의학

지난 10 년간 의용생체정보학은 「번역 생물 정보학」의 영역에서는 포스트 게놈 시대에 관련한 새로운 과학적인 문제를 해결하고 있다. 이것은 개별 환자의 진단, 치료 및 관리에 대한 새로운 접근 방식을 개발을 위해 "-omics"분야에서 특정 바이오 마커와 새로운 발견을 적용함으로써 게놈 및 개인 맞춤 의료 -의 인스턴스의 새로운 맥락에서 임상 응용에 대한 기초 생물 의학 연구를 변환하는 것을 목표로 한다. 이런 맥락에서 나노정보학의 문제와 직접 연관된 의용생체 정보학의 측면을 고려 할 수 있다. 나노약품 관련 구조화 된 정보는 첨단 연구를 위해 필수적이며, 따라서 통제 어휘와 온톨로지가 핵심이 도전하는 정의와 표상의 문제를 제시한다. 새로운 텍소노미와 온톨로지는 나노약품 텍소노미와 나노입자 온톨로지 등에서 개발되었고, 암 나노 기술 분야에서 도메인 온톨로지와 통제 어휘를 개발하기위한 제안이 이루어지고 있다.

광범위한 노력이 실험적인 수준에서 생물 의학 과학의 잠재적인 용도를 갖는 나노 입자의 기본 물리 화학적 성질을 특성화하기 위해 추진되고 있다. 나노기술은 시험관 및 생체의 특징으로 하고 임상 응용에 물리적 특성 평가 나노 재료의 합성에서 긴 개발 파이프 라인을 포함하기 때문에, 정보 통합이 사회의 요구에 대처하기 위한 중요이슈이다. 결과를 생산하기 위해선 다양한 종류의 실험 결과들을 취합하고 이를 예측하는 것이 필요하다. 따라서 분자 모델링과 전산모시는 다양한 범위에서 상호작용을 탐색하는데 매우 중요하다. 이러한 전산모사를 통해 나노입자와 나노 수준 시스템의 기초적인 물리화학적 특성 연구가 가능하며, 결과들은 가상생리인간 프로그램과 직접적으로 연계되어 있다. 과학적 측면에서 백서는 의용생체 정보학과 매우 밀접하게 연관된 나노정보학 분야의 다섯 가지의 거대도전과제(Grand Challenge)를 제안하고 있다. 이러한 다섯 가지 거대도전과제는 해당분야 향후 아젠다의 범위를 한정할 수 있을 것이다.

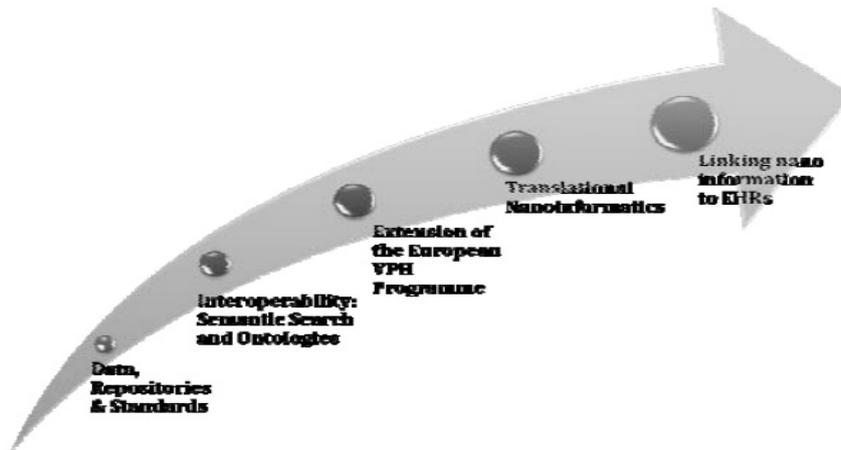


Figure 3 - Nanoinformatics Grand Challenges

Grand Challenges

1) 정보와 지식의 저장과 관리: 새로운 바이오-나노 저장소 및 관련분야 신규 표준 개발
 나노정보학 인프라 : 공공 및 민간 데이터 중 집계할 수 있는 수집, 분류 및 사용할 수 있는 데이터를 저장 하려면 층상 액세스 제어 전용 / 공용 데이터베이스 페더 레이 티드 시스템이 필요. 예를 미국 cananolab과 유럽의 유사한 글로벌 데이터 공유를 위한 웹 나노포털 구축, 그룹 연계 및 정보의 교류 모델을 확립, 양방향 커뮤니케이션을 위한 플랫폼으로 포럼의 구현 및 유지 관리, 사용 케이스의 저장소 / 데이터베이스를 구축. 예를 들면, 나노 입자 기반의 치료에서 특정 나노입자와 그 보조 효과의 사용을 포함. 효과적으로 수집하고 저장하려면 나노재료 및 나노 화합물의 반응이나 독성은 매우 중요한 화두. 게놈 데이터를 위한 어레이 익스프레스스의 데이터의 재사용을 촉진하는 나노 데이터 업로드 및 공유 실험과 데이터베이스를 위한 플랫폼 개발. 유럽수준의 나노 임상 시험과 연구 관련 정보를 생산하기 위해 미국 내 관련 활동과 연계

2) 나노존재학 및 의미적 정보처리 상호운용: 나노관련 자료와 정보를 통합하는 신규 인프라 및 시스템 개발

특정 나노 인프라를 통해 액세스하고 검색 할 수 나노 관련 정보 도구의 풀을 생성. 확립 된 Web 표준을 사용하여 서비스 지향 아키텍처를 기반으로 Web 서비스 사용.

신속한 교환과 데이터 및 기타 자원의 공유를 용이하게 하는 다른 nanoportals과의 통신. 나노 정보학 분야에서 상호 운용성 확장 규격. BMI 분야의 연구 과제 (이러기보다 생물 의학 자원)의 분류법 개발. 개선된 분류는 실제 물리적, 화학적, 임상 독성 또는에 따라 새로운 계층 / 분류법을 만드는 데 도움이 될 수 있는 미래의 nanoperiodic 테이블 연결 성분 구조를 기반으로 나노 입자 분류에 대한 제안과 그 속성이 아니라 구조 모티브. 이러한 멀티 스케일 모델링 분야의 연구를 지

원하는 인체의 나노 입자와 세포 간의 상호 작용을 시뮬레이션 같은 복잡한 계산 작업을 수행하기 위한 클라우드 컴퓨팅 서비스나 슈퍼 컴퓨터의 사용. 인체에 위치한 나노센서 및 나노장치 사이의 통신을 포함하는 상호 운용성 문제. 나노 입자 / 나노 기술 연구의보고 / 출판 결과의 기준을 확립하기 위해,

- 3) 유럽 가상생리인간(VPH) 영역 확대: 나노물질의 체내 거동과 같은 나노수준에서 모델링과 시뮬레이션(이러한 의미에서 나노수준에서 관련정보를 추가하는 것은 유전자형(Genotype) 이해에 대한 새로운 통찰력을 제공하고 표현형(phenotype) 특성에 대한 새로운 기반과 설명을 제공

유럽에서는 VPH 컨텍스트의 노력은 대부분 임상 응용에 연관되어 있지만, 미국에서 같은 노력은 주로 기초 과학의 맥락에서 이루어지고 있다. 그러나 두 가지 접근법은 상호 보완적이다. 이러한 국제적인 상황은 일반적인 과학적인 목표를 향해 노력하고 연구 프로그램과 데이터를 교환하는 지식과 정보 자원을 결합하는 공동의 노력을 촉진해야한다. 이것은 나노 관련 모델링 및 시뮬레이션을 위한 인프라 등이 포함될 수 있다. BMI의 연구자들은 재사용 및 나노 약품에 적용 할 수 있는 모델 및 시뮬레이션 툴을 만들었다. 예를 들어, 시각화 분야에서 분자 구조의 3-D 표현과 VPH 프로그램뿐만 아니라, 인간의 유전자형과 표현형을 연결하는 데이터 모델과 도구를 수집하기 위해 많은 노력이 이루어지고 있다. 이것은 예를 들어, 나노입자의 효과를 예측하거나 생명과 신체 구성 요소의 일부 기본적인 메커니즘을 설명하기 위해 사용할 수 있는 원자 구조의 증가를 의미하는 확장 된 'nanotype "으로 이어질 수 있다. 이러한 nanotype은 다른 진단 및 치료 용도에 나노 입자 및 생물학적 표적 이러한 상호 작용 가능성 nanotoxicities과의 관계의 큰 카탈로그를 포함 할 수 있다. 지식 기반의 강력한 도구는 "가상 실험" "생체"연구 전에 효과 반응과 신규 화합물 또는 물질의 독성을 시뮬레이션하기 위해 개발 할 수 있다. 시뮬레이션은 다른 레벨 뿐만 아니라 나노 수준에서의 상호 작용이 상호 작용을 고려해야한다. 시뮬레이션 도구를 통해 결과 예측이 실험 이전에 추진될 수 있다. 마지막으로, 인간과 나노입자의 효과를 평가하기 위해서는 이론적인 상호 작용의 연구가 새로운 / 가상 가능한 나노 입자의 효과를 예측하기 위해 필요하다.

- 4) 나노수준의 기초적인 과학연구와 미래의 임상 응용을 연결하는 중개 나노정보학이라고 분류할 수 있는 새로운 분야의 탄생

나노정보학은 의용생체정보학과 연속성을 가지고 있지만 새로운 통찰력은 데이터와 지식 나노 수준에서의 통합뿐만 아니라 기초 연구를 위해 필요하다. 이것은 환자를 위한 새로운 생물 의학, 아마도 임상 절차에 적용 할 수 있다. 나노재료의 성질과 많은 나노 입자의 미지의 효과는 의미와 존재론적 분석 전에 대처해야한다

도전적인 주제는 의료 영상이다. 나노 약품에 대한 중요한 문제는 특정 기관, 기능, 세포 유형을

대상으로 하는 새로운 조영제를 만드는 것이다. 이 분야의 연구는 예를 들면, 수송자, 자성 나노입자, 동공 바이러스, 또는 외부의 MRI, 레이저, 방사선 치료로 CT 스캔 또는 초음파와의 조합 등을 포함한다. 주요 기술적 과제는 a) 루틴과 생물학적 시료 중의 바이오 마커의 정확한 분석 b) 정교한 알고리즘 분석을 위한 통합 데이터 및 다중 분석, 또는 c) 3차원 체외 현미경 또는 체내 분자 이미징과 같은 분석 이미지 기술의 통합을 포함한다. 여전히 의용생체 정보학 등의 영역에서 생물 의학 정보의 통일 이론이 부족하다. 비트와 컨텍스트 수준에서 정보의 측정 비트에서 분석은 기본적인 영역에서 새로운 통찰력과 연구로 이어질 수 있다.

5) 기존 전자보건기록을 확장하여 나노관련 정보를 취합하여 진단, 치료 및 나노물질의 잠재적인 독성 영향을 분석

가장 명확한 과제 중 하나는 환자의 전자기록정보에 나노 약품 관련 데이터를 연결하는 방법이다. SNOMED 또는 HL7 과 같이 전자기록정보를 교환하기 위해 새로운 표준(나노 관련 정보 용어 및 절차 등)은 데이터를 저장하거나 임상 어휘와 용어를 증대시키기 위해 필요하다. 나노 입자의 사용과 관련하여 환자의 안전과 가능한 보조 효과와 관련된 질문을 해결해야한다. 생물 의학 및 생물 정보학 자원의 이전 재고가 재사용 된 나노 수준으로 확장 할 수 있다. 추출 된 정보를 사용하여 nanotype과 같은 나노입자의 카탈로그를 구축하는 것은 임상 시험에서 나노 장치 사용 의학 연구를 가능하게 한다. 나노 관련 정보의 대규모 데이터베이스의 생성은 전자보건기록을 구축하기 위한 새로운 접근 방식을 통해 보완 할 수 있다. 그것은 많은 연구자들이 공동의 노력이 필요하다. 새로운 나노재료를 이용한 새로운 진단 및 치료 방법은 현재 대부분이 "오믹스" 기반인 개인 맞춤 의학의 진보를 이끌어 낼 수 있다. 나노 정보를 포함 EHR의 새로운 모델은 의사 결정과 환자 관리를 위한 임상 지침에 대한 시스템 및 보조 비평 등 의료 전문가에 의해 사용하기 위해 개발되어야한다.

Key issues for Research and EC Programmes

이전 절에서는 제안한 5가지 거대 도전과제는, 과학적 측면에서 일부의 경우 중단기 기간 동안 달성하기 어렵다. 따라서 표 2에서는 몇 가지 특정 액션과 기회를 제시하고 있다. 각 제안사항은 매우 밀접하게 연계되어 있으나 분명 위기 관련 하여 최선의 동향을 기반으로 하는 진보를 목적으로 하고 있다. 특히 관리의 관점에서. 이 표에서는 5 개의 과제가 고려되고 있다.

1. 새로운 나노의학과 재생의학 분야에 기존 생체의공 정보학 기술을 적용하기 위한 연구
 - 가) 나노의약 연구에 필요한 고성능 인프라 개발
 - 나) 나노입자의 임상실험을 위한 특성분석, 재생의학 방법 등 나노의학 데이터베이스 및 저장

- 다) 나노의약 분야 나노입자 특성분석 및 실험 등을 위한 표준 정의
 - 라) 기존 의용생체 정보학을 확장하여 나노의학과 재생의학 관련 존재론 개발
 - 마) 나노입자를 이용한 이미징 기술 개발
2. 나노의학을 촉진하기 위한 생체의공 정보학의 신규 분야 연구
- 가) 나노입자와 생물계의 상호작용 등 다양한 정보의 처리
 - 나) 생물체 내에서 나노입자의 거동 등 영향의 모델링 및 전산모사
 - 다) 의사결정 지원시스템 및 임상적 지침 등 나노관련 전자기록 모델
3. 윤리적, 법적, 및 사회적 차원 관련 정보학 연구
- 가) 나노의학 및 재생의학 관련 표준, 법, 지식재산권, 경제적 지속가능성 등 규제 관련
4. 교육 및 훈련
- 가) 의용 생체 정보학과 나노정보학 교육과정 및 전통의학과 나노의학의 접목
5. 국제 협력
- 가) 나노정보학 관련 기존 연구 및 신규 연구(아젠다, 표준 등)의 추진을 위한 국제협력

Table 2 - Priorities in R&D, Research Instruments, possible risks and instruments

Perspective	Research topic	Priority	Risk	Research instrument ¹
Application of existing BMI techniques and methods in NanoMedicine and Regenerative medicine	Creating new infrastructures to facilitate high performance requirements in nanomedicine research (e.g., cloud computing, Web 2.0 for collaborative research, Grid, etc)	HIGH	LOW	IP
	Adaptation of databases and repositories of resources for Nanomedicine, including biobanks, creating new repositories for nanomaterials characterization and regenerative medicine methods and platforms for clinical trials involving nanoparticles	HIGH	MEDIUM	NoE
	Definition of Minimum information standards for nanoparticle characterization and experiments and publication of results in nanomedicine	MEDIUM	LOW	STREP
	Creating ontologies in the areas of Nanomedicine and regenerative medicine —from scratch or expanding existing BMI ontologies	HIGH	MEDIUM	NoE
New requirements for BMI to facilitate Nanomedicine	Development of new imaging methods based on the use of nanoparticles. Adaptation of DICOM to include nanoimages	MEDIUM	MEDIUM	STREP
	Information processing in complex heterogeneous biological systems (EHR for mosaic genomes, interactions between nanoparticles, alerting systems), including the annotation of nanoparticles and their effects on biological systems (biomarkers and pathways)	MEDIUM	MEDIUM	IP
	Modeling and simulation of “in vivo” effects —including adverse— of nanoparticles in living beings, expanding the VPH scope	HIGH	MEDIUM	IP
IT for ethical, legal and social issues	New models of EHRs to include nano-related information, including Decision Support Systems and clinical guidelines —e.g., for risk management and nanotoxicity issues— in the context of Nanomedicine and regenerative medicine	MEDIUM	MEDIUM	IP
	Regulatory aspects (standards, legislation on Nanomedicine and regenerative medicine, intellectual property, issues related to open data and source tools, quality control and ecological and economical sustainability)	HIGH	LOW	CSA
Education	Incorporation of: a) Nanoinformatics in the Biomedical informatics curriculum and b) Nanomedicine in the traditional medical education	MEDIUM	MEDIUM	CSA
International cooperation	Establishment of global initiatives for developing new research agendas and standards as well as exchanging data, methods and informatics resources in the Nanoinformatics area	HIGH	LOW	CSA

¹ **Research Instrument:** IP = Integrated Project, STREP = Specific Targeted REsearch Project, CSA = Cooperation and Support Action; NoE = Network of Excellence

결론

백서는 신규 모델링과 전산모사를 통해 나노의학과 관련된 정보학의 개발을 제시하였다. 이러한 신규 분야의 개발은 다양한 분야에서 경제·사회·문화적 영향을 끼칠 것이며 몇 가지 본보기를 제안하였다.

- 산업적으로는 나노의학관련 다양한 신산업창출, 및 신규 정보학 기반 기업 산업화 지원 등
- 경제적으로는 경제성장, 고부가가치 산업 발전 및 신규 일자리 창출
- 국제적으로는 공동연구 추진을 통한 상호협력 극대화
- 정치적으로는 나노기술 관련 다양한 신규 프로그램 개발
- 정보학으로는 신규 나노정보학 분야 탐색 및 발견
- 사회적으로는 나노기술의 안전성 및 윤리/법/사회적 이슈 대응
- 교육적으로는 나노정보학 관련 신규 프로그램 개발 및 작업반 신설

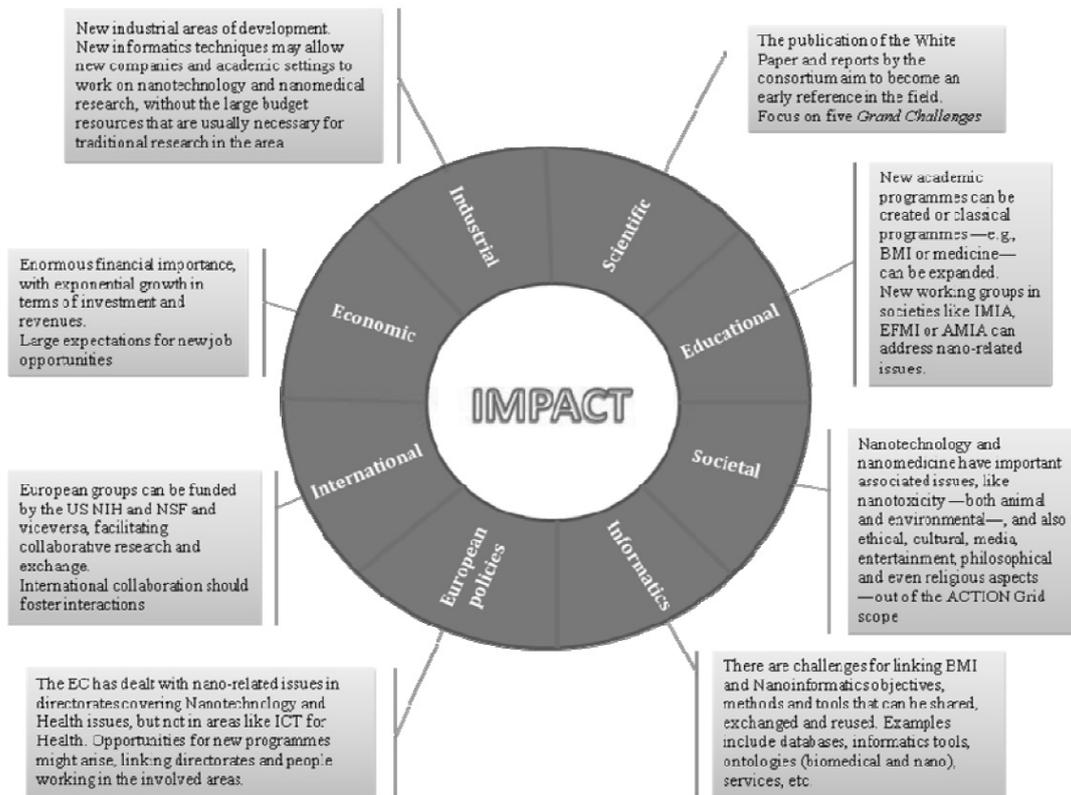


Figure 4 – Impact of Nanoinformatics at the European and international level