(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2012 년 12 월 27 일 (27.12.2012)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2012/177108 A3

(51) 국제특허분류:
*G06F 19/00* (2011.01) *G06N 3/12* (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2012/007999

(22) 국제출원일: 2012 년 10 월 4 일 (04.10.2012)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

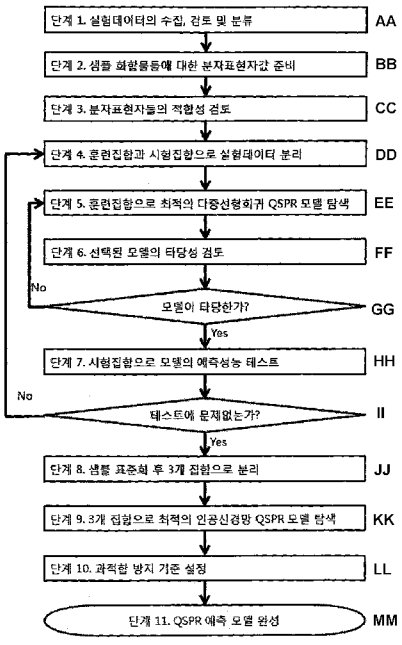
(30) 우선권정보:
10-2011-0100795 2011 년 10 월 4 일 (04.10.2011) KR
10-2011-0100796 2011 년 10 월 4 일 (04.10.2011) KR
10-2011-0100797 2011 년 10 월 4 일 (04.10.2011) KR
10-2011-0100798 2011 년 10 월 4 일 (04.10.2011) KR
10-2011-0100799 2011 년 10 월 4 일 (04.10.2011) KR
10-2011-0100800 2011 년 10 월 4 일 (04.10.2011) KR
10-2011-0101061 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101062 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101063 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101064 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101065 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101066 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101067 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101068 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101468 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101469 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101471 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101472 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101473 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101474 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0101475 2011 년 10 월 5 일 (05.10.2011) KR
10-2011-0102042 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102043 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102044 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102045 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102046 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102047 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102048 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102049 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102050 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102073 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102074 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102075 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102077 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102078 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102079 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102080 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102081 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102082 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0102083 2011 년 10 월 6 일 (06.10.2011) KR
10-2011-0110691 2011 년 10 월 27 일 (27.10.2011) KR

(71) 출원인: 주식회사 켐에쎈 (CHEMESSEN, INC.) [KR/KR]; 153-789 서울특별시 금천구 가산디지털 1 로

[다음 쪽 계속]

(54) Title: MODEL, METHOD AND SYSTEM FOR PREDICTING, PROCESSING AND SERVICING ONLINE PHYSICO-CHEMICAL AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF PURE COMPOUND

(54) 발명의 명칭 : 순수한 화합물의 물리화학적 및 열역학적 성질을 예측, 프로세스 및 온라인 서비스하는 모델, 방법 및 시스템




AA ... Step 1. Collect, review, and classify test data
BB ... Step 2. Prepare molecular descriptor values for sample compound
CC ... Step 3. Examine validity of molecular descriptors
DD ... Step 4. Divide test data into training set and test set
EE ... Step 5. Search for optimal multiple linear regression QSPR model using training set
FF ... Step 6. Review validity of selected model
GG ... Is model valid?
HH ... Step 7. Test ability of model to predict using test set
II ... Passed test?
JJ ... Step 8. Standardize sample, and then divide same into 3 sets
KK ... Step 9. Search for optimal artificial neural network QSPR model using 3 sets
LL ... Step 10. Establish criteria to prevent overfitting
MM ... Step 11. Complete QSPR prediction model

(57) **Abstract**: The present invention relates to a mathematical model and method for predicting with high accuracy the physicochemical and thermodynamic properties of a pure compound comprising five or less elements among hydrogen (H), carbon (C), nitrogen (N), oxygen (O) and sulfur (S), and molecules, except hydrogen, having 25 or less atoms, and to a model, a method, and a system for automatically processing and servicing online a mass quantity of molecules. The present invention provides a model, a method and a system for predicting reliable values for physicochemical and thermodynamic properties of a countless number of organic compounds for which test values are not known, and which meet the conditions, and thus reduce the expense and time required for testing, thereby contributing to raising productivity and facilitating research and development activities of related industries.

(57) 요약서:

[다음 쪽 계속]

WO 2012/177108 A3

196 에이스테크노타워 11 층 1106 (가산동), Seoul (KR).

(72) **발명자**: **성애리 (SUNG, Ae-ri)**; 462-800 경기도 성남시 수정구 희망로 466 번길 23-13 단대빌라 103 호 (단대동), Gyeonggi-do (KR). **권오형 (KWON, O Hyung)**; 120-824 서울특별시 서대문구 증가로 26 길 18 (북가좌동), Seoul (KR). **권윤경 (KWON, Yunkyung)**; 404-754 인천광역시 서구 가정 3 동 한신그랜드힐빌리지 39 동 106 호, Incheon (KR). **김양수 (KIM, Yangsoo)**; 150-799 서울특별시 영등포구 양산로 177, 108 동 1401 호 (영등포동 7 가, 경남아너스빌), Seoul (KR). **전정재 (JEON, Jeong Jae)**; 480-050 경기도 의정부시 충의로 57 번길 7-20, 3 층 (용현동), Gyeonggi-do (KR). **정원천 (JUNG, Won-Chon)**; 157-922 서울특별시 강서구 화곡로 15 길 23-2, 503 호 (화곡동), Seoul (KR). **조준혁 (CHO, Junhyuk)**; 121-824 서울특별시 마포구 방울내로 31 휴먼빌 101 동 408 호 (망원동), Seoul (KR). **박태윤 (PARK, Tae -Yun)**; 136-771 서울특별시 성북구 정릉로 305, 106 동 1404 호 (정릉동, 경남아파트), Seoul (KR).

(74) **대리인**: **이명택 (LEE, Myoung-Teak)**; 420-857 경기도 부천시 원미구 춘의동 203-1 조강빌딩 3 층 모든국제특허법률사무소, Gyeonggi-do (KR).

(81) **지정국** (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) **지정국** (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

**공개**:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

— 청구범위 보정 기한 만료 전의 공개이며, 보정서를 접수하는 경우 그에 관하여 별도 공개함 (규칙 48.2(h))

— 출원인의 청구에 따라, 조약 제 21 조(2)(a) 규정의 기한 만료 전 공개함

(88) **국제조사보고서 공개일**: 2013 년 4 월 11 일

본 발명은 수소 (H), 탄소 (C), 질소 (N), 산소 (O), 황 (S) 등 5 가지 이내의 원소로 구성되고 수소를 제외한 원자의 개수가 25 개 이하인 분자로 이루어진 순수한 유기화합물의 물리화학적 및 열역학적 물성을 높은 정확도로 예측하는 수학적 모델 및 방법과 대량의 분자를 자동 프로세스하고 온라인 서비스하는 모델, 방법 및 시스템에 관한 것이다. 본 발명은 실험값이 알려지지 않은 수많은 상기 조건의 유기화합물에 대해서도 신뢰할만한 물리화학적 및 열역학적 성질의 값을 예측할 수 있는 모델 및 방법, 시스템을 제공함으로써 실험에 드는 비용과 시간을 절약하게 해주어, 관련 산업계의 생산성 향상 및 연구개발 활동을 용이하게 하는데 기여한다.

# INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
**PCT/KR2012/007999**

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

***G06F 19/00(2011.01)i, G06N 3/12(2006.01)i***

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G06F 19/00; G06F 15/16; G06F 17/50; G06F 17/30; G06F 9/455; G06F 17/40

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above
Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: chemical*, compound*, molecular*, chemical*, chemical*)+(prediction*, simul*, simul*, model*, guess*, simulat*, model*)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages | Relevant to claim No. |
|---|---|---|
| A | KR 10-2009-0092017 A (KONKUK UNIVERSITY INDUSTRIAL COOPERATION CORP) 31 August 2009<br>Claim 1 and figures 1-3 | 1-28 |
| A | KR 10-2003-0005461 A (INFOCHEMS INC.) 23 January 2003<br>Abstract and claims 1-2 | 1-28 |
| A | KR 10-2010-0042453 A (LG CHEM. LTD.) 26 April 2010<br>Abstract and claims 1-3 | 1-28 |
| A | KR 10-2009-0083763 A (LG CHEM. LTD.) 04 August 2009<br>Abstract and claims 1-2 | 1-28 |

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

| Date of the actual completion of the international search | Date of mailing of the international search report |
|---|---|
| 08 FEBRUARY 2013 (08.02.2013) | **13 FEBRUARY 2013 (13.02.2013)** |
| Name and mailing address of the ISA/KR<br>Korean Intellectual Property Office<br>Government Complex-Daejeon, 139 Seonsa-ro, Daejeon 302-701, Republic of Korea<br>Facsimile No. 82-42-472-7140 | Authorized officer<br><br>Telephone No. |

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 2009)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
**PCT/KR2012/007999**

| Patent document cited in search report | Publication date | Patent family member | Publication date |
|---|---|---|---|
| KR 10-2009-0092017 A | 31.08.2009 | NONE | |
| KR 10-2003-0005461 A | 23.01.2003 | NONE | |
| KR 10-2010-0042453 A | 26.04.2010 | NONE | |
| KR 10-2009-0083763 A | 04.08.2009 | NONE | |

# 국 제 조 사 보 고 서

국제출원번호
**PCT/KR2012/007999**

**A.** 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

***G06F 19/00(2011.01)i, G06N 3/12(2006.01)i***

**B.** 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
G06F 19/00; G06F 15/16; G06F 17/50; G06F 17/30; G06F 9/455; G06F 17/40

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌
한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))
eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드:화학*, 화합*, 분자*, 케미컬*, 케미칼*)+(예측*, 시뮬*, 시물*, 모델*, 추측*, simulat*, model*)

**C.** 관련 문헌

| 카테고리* | 인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재 | 관련 청구항 |
|---|---|---|
| A | KR 10-2009-0092017 A (건국대학교 산학협력단) 2009.08.31<br>청구항 1항 및 도면 1-3 | 1-28 |
| A | KR 10-2003-0005461 A (인포켐스(주)) 2003.01.23<br>요약 및 청구항 제1-2항 | 1-28 |
| A | KR 10-2010-0042453 A (주식회사 엘지화학) 2010.04.26<br>요약 및 청구항 제1-3항 | 1-28 |
| A | KR 10-2009-0083763 A (주식회사 엘지화학) 2009.08.04<br>요약 및 청구항 제1-2항 | 1-28 |

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

"A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

"E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

"L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

"O" 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

"P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

"T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

"X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

"Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

"&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

| 국제조사의 실제 완료일 | 국제조사보고서 발송일 |
|---|---|
| 2013년 02월 08일 (08.02.2013) | **2013년 02월 13일 (13.02.2013)** |


ISA/KR의 명칭 및 우편주소
대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)
팩스 번호 82-42-472-7140

심사관
이수철
전화번호 82-42-481-8120

국 제 조 사 보 고 서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
**PCT/KR2012/007999**

| 국제조사보고서에서 인용된 특허문헌 | 공개일 | 대응특허문헌 | 공개일 |
|---|---|---|---|
| KR 10-2009-0092017 A | 2009.08.31 | 없음 | |
| KR 10-2003-0005461 A | 2003.01.23 | 없음 | |
| KR 10-2010-0042453 A | 2010.04.26 | 없음 | |
| KR 10-2009-0083763 A | 2009.08.04 | 없음 | |