

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2016년 6월 2일 (02.06.2016)



(10) 국제공개번호
WO 2016/085262 A3

- (51) 국제특허분류:
G01N 33/15 (2006.01) G06F 19/00 (2011.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2015/012753
- (22) 국제출원일: 2015년 11월 26일 (26.11.2015)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2014-0167253 2014년 11월 27일 (27.11.2014) KR
- (71) 출원인: 이화여자대학교 산학협력단 (EWha UNIVERSITY - INDUSTRY COLLABORATION FOUNDATION) [KR/KR]; 03760 서울시 서대문구 이화여대길 52, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 김완규 (KIM, Wan Kyu); 05501 서울시 송파구 올림픽로 99, 109동 1801호, Seoul (KR). 권예지 (KWON, Yea Jee); 03499 서울시 은평구 증산로 285, 101동 1107호, Seoul (KR). 이해승 (LEE, Hae Seung); 03779 서울시 서대문구 신촌로 109, 915호, Seoul (KR).
- (74) 대리인: 손민 (SON, Min); 06302 서울시 강남구 양재천로 163 6층 한일국제특허사무소, Seoul (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, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, 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, SA, 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, ST, 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, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

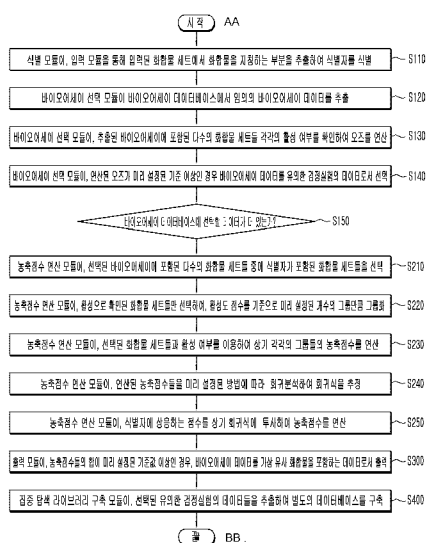
공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(88) 국제조사보고서 공개일: 2016년 7월 14일

(54) Title: VIRTUAL DRUG SCREENING METHOD, INTENSIVE SCREENING LIBRARY CONSTRUCTING METHOD, AND SYSTEM THEREFOR

(54) 발명의 명칭: 약물 가상 탐색 방법과 집중 탐색 라이브러리 구축 방법 및 이를 위한 시스템



S110 ... Extract portion referring to compound from compound set input through input module to identify identifier, by identification module

S120 ... Extract any bioassay data from bioassay database, by bioassay selection module

S130 ... Check activity or inactivity of each of multiple compound sets included in extracted bioassay to calculate oz, by bioassay selection module

S140 ... Select bioassay data as significant assay test data if the calculated oz is equal to or greater than predetermined reference, by bioassay selection module

S150 ... Are there any more data to be selected from bioassay database?

S210 ... Select compound sets including identifier out of multiple compound sets included in selected bioassay, by enrichment score calculation module

S220 ... Select only compound sets confirmed as being active to group compound sets into predetermined number of groups according to the activity score, by enrichment score calculation module

S230 ... Calculate enrichment score of each of the groups using selected compound sets and activity or inactivity thereof, by enrichment score calculation module

S240 ... Perform regression analysis on calculated enrichment scores according to predetermined method to estimate regression equation, by enrichment score calculation module

S250 ... Project score corresponding to identifier onto regression equation to calculate enrichment score, by enrichment score calculation module

S300 ... Output bioassay data as data including virtual analogue compound if sum of enrichment scores is equal to or greater than predetermined reference value, by output module

S400 ... Extract selected significant assay test data to construct separate database, by intensive screening library construction module

AA ... Start

BB ... End

(57) Abstract: The present invention relates to: a virtual drug screening method with high accuracy of prediction, on the basis of various biological activities extracted from multiple drug screening data, without using structures or structural attribute information of target proteins or compounds; an intensive screening library constructing method; and a system therefor.

(57) 요약서: 본 발명은 타겟 단백질이나 화합물의 구조 혹은 구조적 특성 정보를 사용하지 않고, 다수의 약물 스크리닝 데이터로부터 추출한 다양한 생물학적 활성에 기반한, 예측 정확성이 높은 약물 가상 탐색 방법, 집중 탐색 라이브러리 구축 방법 및 이를 위한 시스템에 관한 것이다.

WO 2016/085262 A3

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2015/012753**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER****G01N 33/15(2006.01)i, G06F 19/00(2011.01)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)

G01N 33/15; C40B 30/02; G06F 17/50; G01N 33/00; G01N 19/00; G06F 17/30; G06F 19/00

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: bioassay, drug, screening, screening, virtual

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	RYU, Han Na, Analyses of Compound Set Using Structural Scaffold and Target Information, Graduate School of Ewha Womans University, Master's Thesis, June 2014 See pages 1-67.	1-20
A	PU, Minya et al., Analysis of High throughput Screening Assays Using Cluster Enrichment, Statistics in Medicine, 2012, vol. 31, no. 30, pages 4175-4189 See abstract; and inner pages 1-14.	1-20
A	WO 03-038672 A1 (SUMITOMO PHARMACEUTICALS COMPANY, LIMITED et al.) 08 May 2003 See pages 1-16; claims 1-8; and figures 1-7.	1-20
A	KR 10-2010-0047677 A (UNIVERSITY OF ULSAN FOUNDATION FOR INDUSTRY COOPERATION) 10 May 2010 See paragraphs [0018]-[0095]; claims 1-5; and figures 1-7.	1-20
A	US 7416524 B1 (LOBANOV, Victor S. et al.) 26 August 2008 See column 2, line 28-column 30, line 24; claims 1-17; and figures 1-22D.	1-20



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

"I" 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

20 APRIL 2016 (20.04.2016)

Date of mailing of the international search report

22 APRIL 2016 (22.04.2016)

Name and mailing address of the ISA/KR

Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,
Republic of Korea

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2015/012753

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
WO 03-038672 A1	08/05/2003	JP 4377691 B2	02/12/2009
KR 10-2010-0047677 A	10/05/2010	KR 10-1128606 B1	26/03/2012
US 7416524 B1	26/08/2008	AU 3762600 A	27/08/2001
		WO 01-61575 A1	23/08/2001

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) G01N 33/15(2006.01)i, G06F 19/00(2011.01)i																				
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) G01N 33/15; C40B 30/02; G06F 17/50; G01N 33/00; G01N 19/00; G06F 17/30; G06F 19/00 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: 바이오어세이, 약물, 탐색, 스크리닝, 가상																				
C. 관련 문헌 <table border="1"> <thead> <tr> <th>카테고리*</th> <th>인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재</th> <th>관련 청구항</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A</td> <td>류한나, Analyses of compound set using structural scaffold and target information, 이화여자대학교 대학원, 석사학위 논문, 2014.06 페이지 1-67 참조.</td> <td>1-20</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>PU, MINYA 등, Analysis of high throughput screening assays using cluster enrichment, Statistics in Medicine, 2012년, 31권 30호, 페이지 4175-4189 요약; 및 내부 페이지 1-14 참조.</td> <td>1-20</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>WO 03-038672 A1 (SUMITOMO PHARMACEUTICALS COMPANY, LIMITED 등) 2003.05.08 페이지 1-16; 청구항 1-8항; 및 도면 1-7 참조.</td> <td>1-20</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>KR 10-2010-0047677 A (울산대학교 산학협력단) 2010.05.10 단락 [0018]-[0095]; 청구항 1-5항; 및 도면 1-7 참조.</td> <td>1-20</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>US 7416524 B1 (LOBANOV, VICTOR S. 등) 2008.08.26 컬럼 2, 라인 28-컬럼 30, 라인 24; 청구항 1-17항; 및 도면 1-22D 참조.</td> <td>1-20</td> </tr> </tbody> </table>			카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항	A	류한나, Analyses of compound set using structural scaffold and target information, 이화여자대학교 대학원, 석사학위 논문, 2014.06 페이지 1-67 참조.	1-20	A	PU, MINYA 등, Analysis of high throughput screening assays using cluster enrichment, Statistics in Medicine, 2012년, 31권 30호, 페이지 4175-4189 요약; 및 내부 페이지 1-14 참조.	1-20	A	WO 03-038672 A1 (SUMITOMO PHARMACEUTICALS COMPANY, LIMITED 등) 2003.05.08 페이지 1-16; 청구항 1-8항; 및 도면 1-7 참조.	1-20	A	KR 10-2010-0047677 A (울산대학교 산학협력단) 2010.05.10 단락 [0018]-[0095]; 청구항 1-5항; 및 도면 1-7 참조.	1-20	A	US 7416524 B1 (LOBANOV, VICTOR S. 등) 2008.08.26 컬럼 2, 라인 28-컬럼 30, 라인 24; 청구항 1-17항; 및 도면 1-22D 참조.	1-20
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항																		
A	류한나, Analyses of compound set using structural scaffold and target information, 이화여자대학교 대학원, 석사학위 논문, 2014.06 페이지 1-67 참조.	1-20																		
A	PU, MINYA 등, Analysis of high throughput screening assays using cluster enrichment, Statistics in Medicine, 2012년, 31권 30호, 페이지 4175-4189 요약; 및 내부 페이지 1-14 참조.	1-20																		
A	WO 03-038672 A1 (SUMITOMO PHARMACEUTICALS COMPANY, LIMITED 등) 2003.05.08 페이지 1-16; 청구항 1-8항; 및 도면 1-7 참조.	1-20																		
A	KR 10-2010-0047677 A (울산대학교 산학협력단) 2010.05.10 단락 [0018]-[0095]; 청구항 1-5항; 및 도면 1-7 참조.	1-20																		
A	US 7416524 B1 (LOBANOV, VICTOR S. 등) 2008.08.26 컬럼 2, 라인 28-컬럼 30, 라인 24; 청구항 1-17항; 및 도면 1-22D 참조.	1-20																		
☐ 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 신구성 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 2016년 04월 20일 (20.04.2016)		국제조사보고서 발송일 2016년 04월 22일 (22.04.2016)																		
ISA/KR의 명칭 및 우편주소  대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578		심사관 김기호 전화번호 +82-42-481-8691 																		

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호

PCT/KR2015/012753

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
WO 03-038672 A1	2003/05/08	JP 4377691 B2	2009/12/02
KR 10-2010-0047677 A	2010/05/10	KR 10-1128606 B1	2012/03/26
US 7416524 B1	2008/08/26	AU 3762600 A	2001/08/27
		WO 01-61575 A1	2001/08/23