

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
29. Januar 2004 (29.01.2004)

PCT

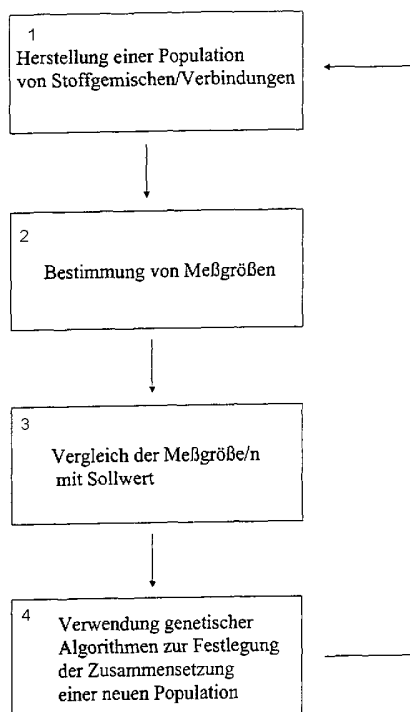
(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2004/010347 A3

- (51) Internationale Patentklassifikation⁷: **G06F 17/18**, 17/50, 19/00
- (21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2003/007895
- (22) Internationales Anmeldedatum:
18. Juli 2003 (18.07.2003)
- (25) Einreichungssprache: Deutsch
- (26) Veröffentlichungssprache: Deutsch
- (30) Angaben zur Priorität:
102 33 022.0 20. Juli 2002 (20.07.2002) DE
- (71) Anmelder und
(72) Erfinder: **ZINN, Peter** [DE/DE]; Pastoratweg 19, 58300 Wetter/Ruhr (DE).
- (74) Anwalt: **SCHNEIDERS & BEHRENDT**; Huestrasse 23, 44787 Bochum (DE).
- (81) Bestimmungsstaaten (*national*): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

(54) Title: METHOD AND INSTALLATION FOR SOLVING PROBLEMS OF ADAPTIVE CHEMISTRY

(54) Bezeichnung: VERFAHREN UND ANLAGE ZUR LÖSUNG VON AUFGABEN DER ADAPTIVEN CHEMIE



1. PRODUCING A POPULATION OF SUBSTANCE MIXTURES/COMPOUNDS
2. DETERMINING MEASURABLE VARIABLES
3. COMPARING THE MEASURABLE VARIABLES WITH THE DESIRED VALUE
4. USING GENETIC ALGORITHMS TO DETERMINE THE COMPOSITION OF A NEW POPULATION

(57) Abstract: The invention relates to a method and an installation for the adaptive analysis or synthesis of compounds and substance mixtures in the field of chemistry. According to the invention, random initial populations are produced and examined using measuring devices. The results so obtained are compared with a target and a fitness value is determined as a measure for the correspondence with the target. Genetic algorithms are used on the basis of said fitness values for determining the composition of the population of the next generation. This method is repeated throughout as many generations as required until the determined fitness values show for at least one individual of the population a sufficiently high correspondence with the target. The inventive adaptive chemistry can be used in the field of finding product formulations or for finding new compounds with desired properties.

(57) Zusammenfassung: Die Erfindung betrifft ein Verfahren und eine Anlage zur adaptiven Analyse oder Synthese von Verbindungen und Stoffgemischen im Bereich der Chemie. Hierbei werden zunächst zufällige Ausgangspopulationen hergestellt, und mit Hilfe von Messgeräten untersucht. Die dabei erhaltenen Ergebnisse werden mit einer Zielvorgabe verglichen, wobei ein Fitnesswert als Mass für die Übereinstimmung mit der Zielvorgabe ermittelt wird. Auf Basis dieser Fitnesswerte werden genetische Algorithmen verwendet, um die Zusammensetzung der Population der nächsten Generation festzulegen. Dieses Verfahren wird über so viele Generationen wiederholt, bis die ermittelten Fitnesswerte zumindest für ein Individuum der Population eine hinreichend grosse Übereinstimmung mit der

Zielvorgabe zeigen. Die erfindungsgemässe

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

WO 2004/010347 A3



(84) **Bestimmungsstaaten** (*regional*): ARIPO Patent (GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches Patent (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches Patent (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI Patent (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht

— vor Ablauf der für Änderungen der Ansprüche geltenden Frist; Veröffentlichung wird wiederholt, falls Änderungen eintreffen

(88) **Veröffentlichungsdatum des internationalen**

Recherchenberichts:

28. Oktober 2004

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No

PC., EP 03/07895

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

IPC 7 G06F17/18 G06F17/50 G06F19/00

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)

IPC 7 G06F

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

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

EP0-Internal, INSPEC, PAJ, WPI Data, IBM-TDB, COMPENDEX, MEDLINE, BIOSIS

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category °	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
------------	--	-----------------------

X	FURUYA T ET AL: "Evolutionary programming for mix design" COMPUT. ELECTRON. AGRIC. (NETHERLANDS), COMPUTERS AND ELECTRONICS IN AGRICULTURE, AUG. 1997, ELSEVIER, NETHERLANDS, vol. 18, no. 2-3, 1997, pages 129-135, XP002293025 ISSN: 0168-1699 page 129, line 11 - page 131, line 29 page 131, line 32 - page 134, line 6 ----- -/--	1-21
---	---	------

☒ Further documents are listed in the continuation of box C.

☒ Patent family members are listed in 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 document 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

18 August 2004

Date of mailing of the international search report

15/09/2004

Name and mailing address of the ISA

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
 NL - 2280 HV Rijswijk
 Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
 Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Barba, M

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No

PCT/JP 03/07895

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 96/24033 A (KANSAI PAINT CO LTD ; MIZUTANI EIJI (JP); TAKAGI HIDEYUKI (JP); MATSUS) 8 August 1996 (1996-08-08) page 4, line 1 - page 12, line 7 page 13, line 23 - page 18, line 11 page 19, line 22 - page 20, line 3 page 21, line 1 - page 23, line 4 page 26, line 17 - page 32, line 7 -----	1-21
X	WO 95/01606 A (DAYLIGHT CHEM INF SYST INC) 12 January 1995 (1995-01-12) page 4, line 21 - page 6, line 11 page 9, line 14 - page 25, line 20 -----	1-21
X	R.D. BROWN ET AL: "Designing Combinatorial Library Mixtures Using Genetic Algorithm" JOURNAL OF MEDICAL CHEMISTRY, vol. 40, 1997, pages 2304-2313, XP002293026 AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, USA page 2306, left-hand column, line 36 - page 2308, right-hand column, line 28 page 2304, left-hand column, line 42 - page 2306, left-hand column, line 19 -----	1-21
X	GILLET V J ET AL: "Combinatorial library design using a multiobjective genetic algorithm" J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. (USA), JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES, MARCH-APRIL 2002, ACS, USA, vol. 42, no. 2, 31 January 2002 (2002-01-31), pages 375-385, XP002293027 ISSN: 0095-2338 page 382, left-hand column, line 1 - line 25 page 380, right-hand column, line 21 - page 381, right-hand column, line 4 page 379, left-hand column, line 5 - line 28 page 378, left-hand column, line 16 - right-hand column, line 39 page 375, left-hand column, line 12 - page 377, right-hand column, line 32 ----- -/--	1-21

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No

PCT/EP 03/07895

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	LIU D X ET AL: "NEW APPROACH TO DESIGN VIRTUAL COMBINATORIAL LIBRARY WITH GENETIC ALGORITHM BASED ON 3D GRID PROPERTY" JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES, AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, COLOMBUS, OHIO, US, vol. 38, no. 2, 1998, pages 233-242, XP000914732 ISSN: 0095-2338 page 234, left-hand column, line 40 - page 237, right-hand column, line 34 page 233, right-hand column, line 26 - page 234, left-hand column, line 20 -----	1-21
X	US 6 081 796 A (TAKAGI HIDEYUKI ET AL) 27 June 2000 (2000-06-27) column 10, line 22 - column 13, line 4 column 5, line 55 - column 9, line 2 column 2, line 8 - column 5, line 10 -----	1-21
X	BROWN R D ET AL: "COMBINATORIAL LIBRARY DESIGN FOR DIVERSITY, COST EFFICIENCY, AND DRUG-LIKE CHARACTER" JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS AND MODELLING, ELSEVIER SCIENCE, NEW YORK, NY, US, vol. 18, no. 4/5, August 2000 (2000-08), pages 427-437, XP001065430 ISSN: 1093-3263 page 430, right-hand column, line 25 - page 432, left-hand column, line 15 page 429, left-hand column, line 23 - page 430, left-hand column, line 9 -----	1-21

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP 03/07895

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 9624033	A	08-08-1996	WO 9624033 A1	08-08-1996
			JP 10513290 T	15-12-1998
			US 6081796 A	27-06-2000
WO 9501606	A	12-01-1995	US 5434796 A	18-07-1995
			AT 192863 T	15-05-2000
			CA 2166397 A1	12-01-1995
			DE 69424427 D1	15-06-2000
			DE 69424427 T2	19-10-2000
			DK 708943 T3	02-10-2000
			EP 0708943 A1	01-05-1996
			ES 2146653 T3	16-08-2000
			JP 8512159 T	17-12-1996
			WO 9501606 A1	12-01-1995
US 6081796	A	27-06-2000	WO 9624033 A1	08-08-1996
			JP 10513290 T	15-12-1998

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP 03/07895

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES

IPK 7 G06F17/18 G06F17/50 G06F19/00

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

IPK 7 G06F

Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal, INSPEC, PAJ, WPI Data, IBM-TDB, COMPENDEX, MEDLINE, BIOSIS

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie°	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	FURUYA T ET AL: "Evolutionary programming for mix design" COMPUT. ELECTRON. AGRIC. (NETHERLANDS), COMPUTERS AND ELECTRONICS IN AGRICULTURE, AUG. 1997, ELSEVIER, NETHERLANDS, Bd. 18, Nr. 2-3, 1997, Seiten 129-135, XP002293025 ISSN: 0168-1699 Seite 129, Zeile 11 - Seite 131, Zeile 29 Seite 131, Zeile 32 - Seite 134, Zeile 6 ----- -/--	1-21



Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen



Siehe Anhang Patentfamilie

° Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :

- *A* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist
- *E* älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist
- *L* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)
- *O* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht
- *P* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist

T Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist

X Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden

Y Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist

Z Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche

18. August 2004

Absendedatum des internationalen Recherchenberichts

15/09/2004

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde

Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

Barba, M

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie°	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	WO 96/24033 A (KANSAI PAINT CO LTD ; MIZUTANI EIJI (JP); TAKAGI HIDEYUKI (JP); MATSUS) 8. August 1996 (1996-08-08) Seite 4, Zeile 1 - Seite 12, Zeile 7 Seite 13, Zeile 23 - Seite 18, Zeile 11 Seite 19, Zeile 22 - Seite 20, Zeile 3 Seite 21, Zeile 1 - Seite 23, Zeile 4 Seite 26, Zeile 17 - Seite 32, Zeile 7 -----	1-21
X	WO 95/01606 A (DAYLIGHT CHEM INF SYST INC) 12. Januar 1995 (1995-01-12) Seite 4, Zeile 21 - Seite 6, Zeile 11 Seite 9, Zeile 14 - Seite 25, Zeile 20 -----	1-21
X	R.D. BROWN ET AL: "Designing Combinatorial Library Mixtures Using Genetic Algorithm" JOURNAL OF MEDICAL CHEMISTRY, Bd. 40, 1997, Seiten 2304-2313, XP002293026 AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, USA Seite 2306, linke Spalte, Zeile 36 - Seite 2308, rechte Spalte, Zeile 28 Seite 2304, linke Spalte, Zeile 42 - Seite 2306, linke Spalte, Zeile 19 -----	1-21
X	GILLET V J ET AL: "Combinatorial library design using a multiobjective genetic algorithm" J. CHEM. INF. COMPUT. SCI. (USA), JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES, MARCH-APRIL 2002, ACS, USA, Bd. 42, Nr. 2, 31. Januar 2002 (2002-01-31), Seiten 375-385, XP002293027 ISSN: 0095-2338 Seite 382, linke Spalte, Zeile 1 - Zeile 25 Seite 380, rechte Spalte, Zeile 21 - Seite 381, rechte Spalte, Zeile 4 Seite 379, linke Spalte, Zeile 5 - Zeile 28 Seite 378, linke Spalte, Zeile 16 - rechte Spalte, Zeile 39 Seite 375, linke Spalte, Zeile 12 - Seite 377, rechte Spalte, Zeile 32 ----- -/--	1-21

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie°	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	LIU D X ET AL: "NEW APPROACH TO DESIGN VIRTUAL COMBINATORIAL LIBRARY WITH GENETIC ALGORITHM BASED ON 3D GRID PROPERTY" JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES, AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, COLOMBUS, OHIO, US, Bd. 38, Nr. 2, 1998, Seiten 233-242, XP000914732 ISSN: 0095-2338 Seite 234, linke Spalte, Zeile 40 - Seite 237, rechte Spalte, Zeile 34 Seite 233, rechte Spalte, Zeile 26 - Seite 234, linke Spalte, Zeile 20	1-21
X	US 6 081 796 A (TAKAGI HIDEYUKI ET AL) 27. Juni 2000 (2000-06-27) Spalte 10, Zeile 22 - Spalte 13, Zeile 4 Spalte 5, Zeile 55 - Spalte 9, Zeile 2 Spalte 2, Zeile 8 - Spalte 5, Zeile 10	1-21
X	BROWN R D ET AL: "COMBINATORIAL LIBRARY DESIGN FOR DIVERSITY, COST EFFICIENCY, AND DRUG-LIKE CHARACTER" JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS AND MODELLING, ELSEVIER SCIENCE, NEW YORK, NY, US, Bd. 18, Nr. 4/5, August 2000 (2000-08), Seiten 427-437, XP001065430 ISSN: 1093-3263 Seite 430, rechte Spalte, Zeile 25 - Seite 432, linke Spalte, Zeile 15 Seite 429, linke Spalte, Zeile 23 - Seite 430, linke Spalte, Zeile 9	1-21

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichung, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP 03/07895

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument		Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 9624033	A	08-08-1996	WO 9624033 A1	08-08-1996
			JP 10513290 T	15-12-1998
			US 6081796 A	27-06-2000
WO 9501606	A	12-01-1995	US 5434796 A	18-07-1995
			AT 192863 T	15-05-2000
			CA 2166397 A1	12-01-1995
			DE 69424427 D1	15-06-2000
			DE 69424427 T2	19-10-2000
			DK 708943 T3	02-10-2000
			EP 0708943 A1	01-05-1996
			ES 2146653 T3	16-08-2000
			JP 8512159 T	17-12-1996
			WO 9501606 A1	12-01-1995
US 6081796	A	27-06-2000	WO 9624033 A1	08-08-1996
			JP 10513290 T	15-12-1998