



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2025-0032632
(43) 공개일자 2025년03월07일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G16C 20/70 (2019.01) G16C 20/40 (2019.01)
G16C 20/50 (2019.01)
(52) CPC특허분류
G16C 20/70 (2019.02)
G16C 20/40 (2019.02)
(21) 출원번호 10-2023-0115710
(22) 출원일자 2023년08월31일
심사청구일자 2023년08월31일

(71) 출원인
고려대학교 산학협력단
서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 (안암동5가)
(72) 발명자
이성환
서울특별시 강남구 언주로30길 13 (대림아크로빌, 대림아크로텔) B-2902
박준형
경기도 과천시 장군마을4길 9-12 (주암동 양지빌리지) 103호
박범철
인천광역시 미추홀구 주안로 226 (주안동) 127동 2102호
(74) 대리인
특허법인위솔

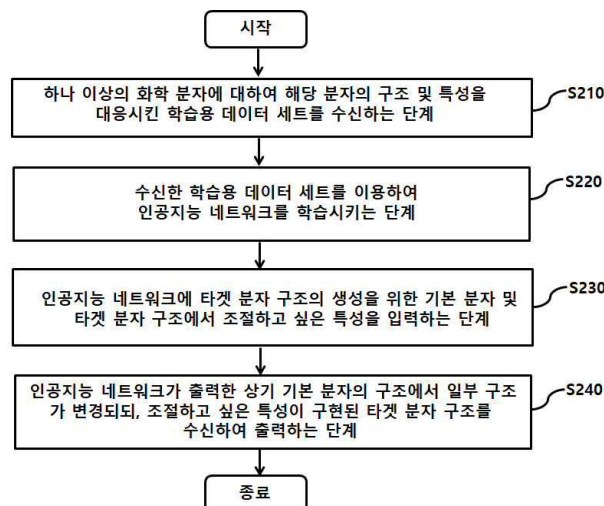
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 유효한 분자 구조를 생성하는 방법 및 이를 위한 장치

(57) 요약

본 발명의 일 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법은 (a) 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하는 제1 단계, (b) 상기 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계, (c) 상기 인공지능 네트워크에 상기 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 상기 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하는 제3 단계 및 (d) 상기 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되, 상기 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하는 제4 단계를 포함하며, 상기 제1 단계에서 학습용 데이터 세트가 포함하는 하나 이상의 화학 분자의 구조는, 줄 표기법인 SMILES(Simplified Molecular-Input Line-Entry System)로 나타낸 구조를 포함한다.

대표도 - 도2



(52) CPC특허분류

G16C 20/50 (2019.02)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711193973
과제번호	2019-0-00079-005
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	정보통신기획평가원
연구사업명	정보통신방송혁신인재양성
연구과제명	인공지능대학원지원(고려대학교)
기 여 율	1/1
과제수행기관명	고려대학교산학협력단
연구기간	2023.01.01 ~ 2023.12.31

명세서

청구범위

청구항 1

프로세서 및 메모리를 포함하는 장치가 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법에 있어서,

(a) 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하는 제1 단계;

(b) 상기 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계;

(c) 상기 인공지능 네트워크에 상기 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 상기 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하는 제3 단계; 및

(d) 상기 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되되, 상기 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하는 제4 단계;

를 포함하며,

상기 제1 단계에서 학습용 데이터 세트가 포함하는 하나 이상의 화학 분자의 구조는,

줄 표기법인 SMILES(Simplified Molecular-Input Line-Entry System)로 나타낸 구조를 포함하는,

방법.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 제1 단계에서 학습용 데이터 세트가 포함하는 하나 이상의 화학 분자의 대한 특성은,

물성, 약물 유사성(Quantitative Estimate of Drug-likeness, QED) 및 합성 가능성 점수(Synthetic Accessibility Score, SAS) 중 어느 하나 이상을 포함하는,

방법.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 제2 단계는,

상기 인공지능 네트워크가 상기 학습용 데이터 세트가 포함하는 SMILES로 나타낸 임의의 화학 분자를 수신하여 특징(Feature)을 추출하고, 상기 추출한 특징으로부터 SMILES로 나타낸 화학 분자를 생성하는 제2-1 단계;

상기 제2-1 단계에서 생성한 화학 분자를 커팅(Cutting)하여 모든 부분 분자가 유효한지 판단하는 제2-2 단계; 및

상기 제2-2 단계의 판단 결과, 상기 모든 부분 분자가 유효하다면 상기 인공지능 네트워크의 파라미터를 업데이트하고, 상기 파라미터를 저장한 후, 학습시키는 제2-3 단계;

를 포함하는 방법.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 제2-2 단계에서 화학 분자의 커팅은,

커팅 규칙에 의하며,

상기 커팅 규칙은,

상기 화학 분자를 C(탄소)를 기준으로 자르는 제1 규칙;

C(탄소)를 기준으로 좌측 또는 우측에 원자가 존재하는 경우, 존재하는 원자와 각각 결합시켜 부분 분자를 생성하는 제2 규칙; 및

C(탄소)를 기준으로 좌측 및 우측에 존재하는 원자 모두를 결합시켜 부분 분자를 생성하는 제3 규칙;

을 포함하는 방법.

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 커팅 규칙은,

상기 제2 규칙 및 제3 규칙 중 어느 하나 이상에서 결합 후 남은 C(탄소)의 결합에 H(수소) 원자를 결합시켜 부분 분자를 생성하는 제4 규칙;

을 더 포함하는 방법.

청구항 6

제3항에 있어서,

상기 제2-2 단계에서 모든 부분 분자가 유효한지의 판단은,

상기 모든 부분 분자를 RDKit에 입력하여 판단하는,

방법.

청구항 7

제3항에 있어서,

상기 제2-2 단계의 판단 결과, 상기 모든 부분 분자가 유효하지 않다면, 상기 인공지능 네트워크의 파라미터를 업데이트하지 않고, 기 저장된 파라미터를 재사용하는 제2-4 단계;

를 더 포함하는 방법.

청구항 8

제3항에 있어서,

상기 제2-3 단계에서 파라미터의 업데이트는,

상기 제2-1 단계에서 수신한 임의의 화학 분자와 생성한 화학 분자가 최대한으로 유사해지되, 상기 생성한 화학 분자를 커팅하여 생성한 모든 부분 분자가 유효한 분자에 해당하여 상기 생성한 화학 분자가 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조를 갖는 방향으로 이루어지는,

방법.

청구항 9

하나 이상의 프로세서;

네트워크 인터페이스;

상기 프로세서에 의해 수행되는 컴퓨터 프로그램을 로드(Load)하는 메모리; 및

대용량 네트워크 데이터 및 상기 컴퓨터 프로그램을 저장하는 스토리지를 포함하되,

상기 컴퓨터 프로그램은 상기 하나 이상의 프로세서에 의해,

(A) 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하는 제

1 단계;

(B) 상기 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계;

(C) 상기 인공지능 네트워크에 상기 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 상기 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하는 제3 단계; 및

(D) 상기 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되되, 상기 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하는 제4 단계;

를 포함하며,

상기 제1 단계에서 학습용 데이터 세트가 포함하는 하나 이상의 화학 분자의 구조는,

줄 표기법인 SMILES(Simplified Molecular-Input Line-Entry System)로 나타낸 구조를 포함하는,

실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치.

청구항 10

컴퓨팅 장치와 결합하여,

(AA) 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하는 제1 단계;

(BB) 상기 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계;

(CC) 상기 인공지능 네트워크에 상기 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 상기 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하는 제3 단계; 및

(DD) 상기 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되되, 상기 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하는 제4 단계;

를 실행하며,

상기 제1 단계에서 학습용 데이터 세트가 포함하는 하나 이상의 화학 분자의 구조는,

줄 표기법인 SMILES(Simplified Molecular-Input Line-Entry System)로 나타낸 구조를 포함하는,

컴퓨터로 판독 가능한 매체에 저장된 컴퓨터 프로그램.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유효한 분자 구조를 생성하는 방법 및 이를 위한 장치에 관한 것이다. 보다 자세하게는 인공지능 기술을 도입하여 원하는 특성을 갖되, 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조를 효과적으로 생성할 수 있는 방법 및 이를 위한 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 원하는 특성을 갖는 신약이나 신소재 등과 같은 새로운 물질을 찾아내는 것은 여러 산업 분야의 주요 과제이며, 이러한 물질은 분자들로 구성되어 있고, 분자는 원자들로 구성되어 있는바, 어떠한 원자들이 어떠한 구조로 연결되어 분자를 형성하느냐에 따라 해당 물질의 특성이 결정되기 때문에 분자 구조의 설계는 상기 과제 해결을 위해 매우 중요한 작업에 해당한다.

[0003] 종래에는 21세기 전후로 컴퓨터가 보급되기 시작하면서 효과적인 분자 구조의 설계를 위해 Avogadro 등과 같은 분자 모델링 시뮬레이션 툴이 개발되었으나, 하드웨어 제약에 따른 탐색 속도 문제와 기존에 존재하던 분자 구조와 그 특성에 대한 라이브러리 탐색을 통해 분자를 모델링하기 때문에 새로운 분자를 탐색하는데 한계가 존재하고, 분자의 이산적 특성 때문에 야기되는 불가피한 휴리스틱(Heuristics) 방법론과 같은 문제 등으로 인해 크게 발전하지 못하였다.

[0004] 한편, 최근에는 종래 기술의 문제점을 해결하기 위해 인공지능 기술이 적용된 생성 모델을 분자 구조 설계에 도

입하는 시도가 계속되고 있으나, 분자를 구성하는 원자들의 결합은 에너지 법칙을 포함한 일련의 화학적 규칙 내에서 정의되기 때문에 기존 데이터만을 이용하여 학습된 인공지능 알고리즘이 이를 인지하지 못하여 생성 모델에 의해 생성된 분자 구조가 실제 환경에서는 존재할 수 없는 유효하지 않은 분자 구조가 되며, 다양한 분자 구조를 생성하지 못하기에 원하는 특성을 갖는 분자 구조를 생성하는데 어려움을 겪는다는 문제점이 존재한다.

[0005] 본 발명은 이와 같은 문제점들을 해결하기 위해 분자 구조의 설계에 인공지능 기술을 도입하되, 원하는 특성을 갖는 다양한 분자 구조를 실제 환경에서 존재하는 유효한 분자 구조만으로 생성할 수 있는 새롭고 진보적인 기술에 관한 것이다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허공보 제 10-2022-0051940호(2022.04.27)

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명이 해결하고자 하는 기술적 과제는 인공지능 기술 기반의 딥러닝 생성 모델이 분자 구조를 생성함에 있어 실제 환경에서 존재하는 유효한 분자 구조만을 생성할 수 있는 유효한 분자 구조를 생성하는 방법 및 이를 위한 장치를 제공하는 것이다.

[0008] 본 발명이 해결하고자 하는 또 다른 기술적 과제는 원하는 특성을 갖는 분자 구조를 다양하게 생성할 수 있는 유효한 분자 구조를 생성하는 방법 및 이를 위한 장치를 제공하는 것이다.

[0009] 본 발명의 기술적 과제들은 이상에서 언급한 기술적 과제들로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 기술적 과제들은 아래의 기재로부터 통상의 기술자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제의 해결 수단

[0010] 상기 기술적 과제를 달성하기 위한 본 발명의 일 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법은 (a) 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하는 제1 단계, (b) 상기 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계, (c) 상기 인공지능 네트워크에 상기 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 상기 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하는 제3 단계 및 (d) 상기 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되되, 상기 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하는 제4 단계를 포함하며, 상기 제1 단계에서 학습용 데이터 세트가 포함하는 하나 이상의 화학 분자의 구조는, 줄 표기법인 SMILES(Simplified Molecular-Input Line-Entry System)로 나타낸 구조를 포함한다.

[0011] 일 실시 예에 따르면, 상기 제1 단계에서 학습용 데이터 세트가 포함하는 하나 이상의 화학 분자의 대한 특성은, 물성, 약물 유사성(Quantitative Estimate of Drug-likeness, QED) 및 합성 가능성 점수(Synthetic Accessibility Score, SAS) 중 어느 하나 이상을 포함할 수 있다.

[0012] 일 실시 예에 따르면, 상기 제2 단계는, 상기 인공지능 네트워크가 상기 학습용 데이터 세트가 포함하는 SMILES로 나타낸 임의의 화학 분자를 수신하여 특징(Feature)을 추출하고, 상기 추출한 특징으로부터 SMILES로 나타낸 화학 분자를 생성하는 제2-1 단계, 상기 제2-1 단계에서 생성한 화학 분자를 커팅(Cutting)하여 모든 부분 분자가 유효한지 판단하는 제2-2 단계 및 상기 제2-2 단계의 판단 결과, 상기 모든 부분 분자가 유효하다면 상기 인공지능 네트워크의 파라미터를 업데이트하고, 상기 파라미터를 저장한 후, 학습시키는 제2-3 단계를 포함할 수 있다.

[0013] 일 실시 예에 따르면, 상기 제2-2 단계에서 화학 분자의 커팅은, 커팅 규칙에 의하며, 상기 커팅 규칙은, 상기 화학 분자를 C(탄소)를 기준으로 자르는 제1 규칙, C(탄소)를 기준으로 좌측 또는 우측에 원자가 존재하는 경우, 존재하는 원자와 각각 결합시켜 부분 분자를 생성하는 제2 규칙 및 C(탄소)를 기준으로 좌측 및 우측에 존재하는 원자 모두를 결합시켜 부분 분자를 생성하는 제3 규칙을 포함할 수 있다.

- [0014] 일 실시 예에 따르면, 상기 커팅 규칙은, 상기 제2 규칙 및 제3 규칙 중 어느 하나 이상에서 결합 후 남은 C(탄소)의 결합에 H(수소) 원자를 결합시켜 부분 분자를 생성하는 제4 규칙을 더 포함할 수 있다.
- [0015] 일 실시 예에 따르면, 상기 제2-2 단계에서 모든 부분 분자가 유효한지의 판단은, 상기 모든 부분 분자를 RDKit에 입력하여 판단할 수 있다.
- [0016] 일 실시 예에 따르면, 상기 제2-2 단계의 판단 결과, 상기 모든 부분 분자가 유효하지 않다면, 상기 인공지능 네트워크의 파라미터를 업데이트하지 않고, 기 저장된 파라미터를 재사용하는 제2-4 단계를 더 포함할 수 있다.
- [0017] 일 실시 예에 따르면, 상기 제2-3 단계에서 파라미터의 업데이트는, 상기 제2-1 단계에서 수신한 임의의 화학 분자와 생성한 화학 분자가 최대한으로 유사해지되, 상기 생성한 화학 분자를 커팅하여 생성한 모든 부분 분자가 유효한 분자에 해당하여 상기 생성한 화학 분자가 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조를 갖는 방향으로 이루어질 수 있다.
- [0018] 상기 기술적 과제를 달성하기 위한 본 발명의 또 다른 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치는 하나 이상의 프로세서, 네트워크 인터페이스, 상기 프로세서에 의해 수행되는 컴퓨터 프로그램을 로드(Load)하는 메모리 및 대용량 네트워크 데이터 및 상기 컴퓨터 프로그램을 저장하는 스토리지를 포함하되, 상기 컴퓨터 프로그램은 상기 하나 이상의 프로세서에 의해, (A) 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하는 제1 단계, (B) 상기 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계, (C) 상기 인공지능 네트워크에 상기 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 상기 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하는 제3 단계 및 (D) 상기 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되되, 상기 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하는 제4 단계를 포함하며, 상기 제1 단계에서 학습용 데이터 세트가 포함하는 하나 이상의 화학 분자의 구조는, 줄 표기법인 SMILES(Simplified Molecular-Input Line-Entry System)로 나타낸 구조를 포함한다.
- [0019] 상기 기술적 과제를 달성하기 위한 본 발명의 또 다른 실시 예에 따른 매체에 저장된 컴퓨터 프로그램은 컴퓨팅 장치와 결합하여, (AA) 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하는 제1 단계, (BB) 상기 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계, (CC) 상기 인공지능 네트워크에 상기 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 상기 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하는 제3 단계 및 (DD) 상기 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되되, 상기 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하는 제4 단계를 실행하며, 상기 제1 단계에서 학습용 데이터 세트가 포함하는 하나 이상의 화학 분자의 구조는, 줄 표기법인 SMILES(Simplified Molecular-Input Line-Entry System)로 나타낸 구조를 포함한다.

발명의 효과

- [0020] 상기와 같은 본 발명에 따르면, 인공지능 네트워크가 생성한 화학 분자를 부분 분자로 커팅하고, 모든 부분 분자의 유효성이 검증된 경우에만 인공지능 네트워크를 학습시키는데, 실제 환경에서 존재하는 유효한 분자 구조만을 생성할 수 있다는 효과가 있다.
- [0021] 또한, 실제 환경에서 존재하는 유효한 분자 구조만을 생성할 수 있기에 실험을 통해 소비하게 되는 많은 자원과 시간을 아낄 수 있어 효율적이라는 효과가 있다.
- [0022] 또한, 타겟 분자 구조에서 구현하고자 하는 다양한 특성을 조절하여 이에 부합하는 분자 구조의 생성이 가능하므로 다양한 기술 분야에서 널리 활용될 수 있다는 효과가 있다.
- [0023] 본 발명의 효과들은 이상에서 언급한 효과들로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 효과들은 아래의 기재로부터 통상의 기술자에게 명확하게 이해 될 수 있을 것이다.

도면의 간단한 설명

- [0024] 도 1은 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치가 포함하는 전체 구성을 예시적으로 도시한 도면이다.
- 도 2는 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법의 대표적인 단계를 나타낸 순서도이다.

도 3은 유기 화합물인 C₁₄H₈O₈S₂를 SMILE로 나타낸 구조를 예시적으로 도시한 도면이다.

도 4는 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법에 있어서, 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계를 구체화한 순서도이다.

도 5는 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계 중, VAE에서 이루어지는 제2-1 단계를 시각적인 과정으로 도시한 도면이다.

도 6은 분자식이 CH₃NCO인 메틸 아이소사이아네이트(Methyl isocyanate)를 SMILES로 나타낸 모습이다.

도 7은 도 6에 제2 규칙을 적용하여 생성한 부분 분자를 예시적으로 도시한 도면이다.

도 8은 도 6에 제3 규칙을 적용하여 생성한 부분 분자를 예시적으로 도시한 도면이다.

도 9는 제2-1 단계의 생성물을 부분 분자로 커팅하여 유효성을 검증하는 모습을 시각적인 과정으로 도시한 도면이다.

도 10은 유효성 검증을 통해 인공지능 네트워크의 파라미터를 업데이트하는 모습을 시각적인 과정으로 도시한 도면이다.

도 11은 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법의 성능 평가 결과이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0025] 본 발명의 목적과 기술적 구성 및 그에 따른 작용 효과에 관한 자세한 사항은 본 발명의 명세서에 첨부된 도면에 의거한 이하의 상세한 설명에 의해 보다 명확하게 이해될 것이다. 첨부된 도면을 참조하여 본 발명에 따른 실시 예를 상세하게 설명한다.
- [0026] 본 명세서에서 개시되는 실시 예들은 본 발명의 범위를 한정하는 것으로 해석되거나 이용되지 않아야 할 것이다. 이 분야의 통상의 기술자에게 본 명세서의 실시 예를 포함한 설명은 다양한 응용을 갖는다는 것이 당연하다. 따라서, 본 발명의 상세한 설명에 기재된 임의의 실시 예들은 본 발명을 보다 잘 설명하기 위한 예시적인 것이며 본 발명의 범위가 실시 예들로 한정되는 것을 의도하지 않는다.
- [0027] 도면에 표시되고 아래에 설명되는 기능 블록들은 가능한 구현의 예들일 뿐이다. 다른 구현들에서는 상세한 설명의 사상 및 범위를 벗어나지 않는 범위에서 다른 기능 블록들이 사용될 수 있다. 또한, 본 발명의 하나 이상의 기능 블록이 개별 블록들로 표시되지만, 본 발명의 기능 블록들 중 하나 이상은 동일 기능을 실행하는 다양한 하드웨어 및 소프트웨어 구성들의 조합일 수 있다.
- [0028] 또한, 어떤 구성요소들을 포함한다는 표현은 "개방형"의 표현으로서 해당 구성요소들이 존재하는 것을 단순히 지칭할 뿐이며, 추가적인 구성요소들을 배제하는 것으로 이해되어서는 안 된다.
- [0029] 나아가 어떤 구성요소가 다른 구성요소에 "연결되어" 있다거나 "접속되어" 있다고 언급될 때에는, 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결 또는 접속되어 있을 수도 있지만, 중간에 다른 구성요소가 존재할 수도 있다고 이해되어야 한다.
- [0030] 이하에서는 도면들을 참조하여 본 발명의 세부적인 실시 예들에 대해 살펴보도록 한다.
- [0031] 도 1은 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100)가 포함하는 전체 구성을 예시적으로 도시한 도면이다.
- [0032] 그러나 이는 본 발명의 목적을 달성하기 위한 바람직한 실시 예일 뿐이며, 필요에 따라 일부 구성이 추가되거나 삭제될 수 있고, 어느 한 구성이 수행하는 역할을 다른 구성이 함께 수행할 수도 있음은 물론이다.
- [0033] 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100)는 프로세서(10), 네트워크 인터페이스(20), 메모리(30), 스토리지(40) 및 이들을 연결하는 데이터 버스(50)를 포함할 수 있으며, 기타 본 발명의 목적을 달성함에 있어 요구되는 부가적인 구성들을 더 포함할 수 있음은 물론이라 할 것이다.
- [0034] 프로세서(10)는 각 구성의 전반적인 동작을 제어한다. 프로세서(10)는 CPU(Central Processing Unit), MPU(Micro Processor Unit), MCU(Micro Controller Unit) 또는 본 발명이 속하는 기술 분야에서 널리 알려져

있는 형태의 인공지능 프로세서 중 어느 하나일 수 있다. 아울러, 프로세서(10)는 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법을 수행하기 위한 적어도 하나의 애플리케이션 또는 프로그램에 대한 연산을 수행할 수 있는바, 이를 위해 프로세서(10)에는 소정의 구조를 나타내는 딥러닝 모델을 포함할 수 있으나, 이에 대해서는 후술하도록 한다.

[0035] 네트워크 인터페이스(20)는 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100)의 유무선 인터넷 통신을 지원하며, 그 밖의 공지의 통신 방식을 지원할 수도 있다. 따라서 네트워크 인터페이스(20)는 그에 따른 통신 모듈을 포함하여 구성될 수 있다.

[0036] 메모리(30)는 각종 정보, 명령 및/또는 정보를 저장하며, 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법을 수행하기 위해 스토리지(40)로부터 하나 이상의 컴퓨터 프로그램(41)을 로드할 수 있다. 도 1에서는 메모리(30)의 하나로 RAM을 도시하였으나 이와 더불어 다양한 저장 매체를 메모리(30)로 이용할 수 있음은 물론이다.

[0037] 스토리지(40)는 하나 이상의 컴퓨터 프로그램(41) 및 대용량 네트워크 정보(42)를 비임시적으로 저장할 수 있다. 이러한 스토리지(40)는 ROM(Read Only Memory), EPROM(Erasable Programmable ROM), EEPROM(Electrically Erasable Programmable ROM), 플래시 메모리 등과 같은 비휘발성 메모리, 하드 디스크(HDD), 보조 저장 매체(SSD), 착탈형 디스크, 또는 본 발명이 속하는 기술 분야에서 널리 알려져 있는 임의의 형태의 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록 매체 중 어느 하나일 수 있다.

[0038] 컴퓨터 프로그램(41)은 메모리(30)에 로드되어, 하나 이상의 프로세서(10)에 의해, (A) 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하는 제1 단계, (B) 상기 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계, (C) 상기 인공지능 네트워크에 상기 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 상기 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하는 제3 단계 및 (D) 상기 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되되, 상기 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하는 제4 단계를 실행할 수 있다.

[0039] 이상 간단하게 언급한 컴퓨터 프로그램(41)이 수행하는 오퍼레이션은 컴퓨터 프로그램(41)의 일 기능으로 볼 수 있으며, 보다 자세한 설명은 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법에 대한 설명에서 후술하도록 한다.

[0040] 데이터 버스(50)는 이상 설명한 프로세서(10), 네트워크 인터페이스(20), 메모리(30) 및 스토리지(40) 사이의 명령 및/또는 정보의 이동 경로가 된다.

[0041] 이상 간단하게 설명한 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100)는 독립된 디바이스의 형태, 예를 들어 전자 기기나 서버(클라우드 포함)의 형태일 수 있으며, 여기서 전자 기기는 한 장소에 고정 설치되어 사용하는 데스크톱 PC, 서버 디바이스 등과 같은 기기 뿐만 아니라, 스마트폰, 태블릿 PC, 노트북 PC, PDA, PMP 등과 같이 휴대가 용이한 포터블 기기 등이라도 무방한바, 프로세서(10)에 해당하는 CPU 등이 설치되고 네트워크 기능만 보유하고 있는 전자 기기라면 어떠한 것이라도 무방하다 할 것이다.

[0042] 이하, 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100)가 독립된 디바이스인 전자 기기 형태 중, "서버"의 형태임을 전제로 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조를 생성하고자 하는 사용자의 사용자 단말(미도시)에 설치된 전용 어플리케이션을 통해 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법을 제공하는 과정에 대하여 도 2 내지 도 11을 참조하여 설명하도록 한다.

[0043] 도 2는 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법의 대표적인 단계를 나타낸 순서도이다.

[0044] 그러나 이는 본 발명의 목적을 달성함에 있어서 바람직한 실시 예일 뿐이며, 필요에 따라 일부 단계가 추가 또는 삭제될 수 있음은 물론이고, 어느 한 단계가 다른 단계에 포함되어 수행될 수도 있다.

[0045] 한편, 각 단계는 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100)를 통해 이루어지는 것을 전제로 하며, 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100)가 "서버"의 형태임을 전제로 하였기 때문에 사용자 단말(미도시)에 설치된 전용 어플리케이션을 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한

분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100)와 동일한 의미로 볼 것이고, 설명의 편의를 위해 이들 모두를 "장치(100)"로 명명하도록 한다.

- [0046] 우선, 장치(100)가 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하며(S210), 이를 제1 단계라 한다.
- [0047] 여기서 학습용 데이터 세트는 생성하고자 하는 타겟 분자 구조가 적용될 기술 분야에 따라 그 종류가 상이해질 수 있는바, 예를 들어, 본 발명을 신약 개발에 활용할 경우 공개 데이터셋(Set)인 ZINC, QM9 등이 학습용 데이터 세트가 될 수 있다.
- [0048] 보다 구체적으로, 학습용 데이터 세트는 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성이 대응되어 있는 데이터 세트인바, 여기서 화학 분자의 구조는 줄 표기법인 SMILES(Simplified Molecular-Input Line-Entry System)로 나타낸 구조를 포함할 수 있으며, 도 3에 유기 화합물인 C₁₄H₈O₈S₂를 SMILE로 나타낸 구조를 예시적으로 도시해 놓았다.
- [0049] 한편, 해당 화학 분자의 특성은 다양한 것이 해당될 수 있는바, 해당 화학 분자의 다양한 물성, 약물 유사성(Quantitative Estimate of Drug-likeness, QED) 및 합성 가능성 점수(Synthetic Accessibility Score, SAS) 중 어느 하나 이상을 포함할 수 있으며, 기타 본 발명을 적용할 기술 분야에 따라 다양한 특성을 유연하게 대응시킬 수 있을 것이다.
- [0050] 이상 설명한 바와 같은 학습용 데이터 세트는 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 데이터 세트이면 학습용 데이터 세트의 조건을 만족하기는 하나, 최대한으로 다양한 화학 분자에 대하여 해당 화학 분자들의 구조와 다양한 특성을 대응시킨 대규모 데이터 세트를 학습용 데이터 세트로 구축하여 이를 수신하는 것이 후술할 인공지능 네트워크의 학습 효율성 향상의 측면에서 바람직하다 할 것이다.
- [0051] 학습용 데이터 세트를 수신했다면, 장치(100)가 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키며(S220), 이를 제2 단계라 한다.
- [0052] 여기서 인공지능 네트워크는 다양한 구조의 네트워크를 이용할 수 있으나, 인코더(Encoder)와 디코더(Decoder)를 포함하는 VAE(Variational Autoencoder)를 기본 네트워크 구조로 이용하는 것이 바람직하며, 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법은 VAE의 학습 과정에서 독자적인 특이성을 보유하고 있다. 이하 설명하도록 한다.
- [0053] 도 4는 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법에 있어서, 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계를 구체화한 순서도이다.
- [0054] 그러나 이는 본 발명의 목적을 달성함에 있어서 바람직한 실시 예일 뿐이며, 필요에 따라 일부 단계가 추가 또는 삭제될 수 있음은 물론이고, 어느 한 단계가 다른 단계에 포함되어 수행될 수도 있다.
- [0055] 우선, 인공지능 네트워크가 학습용 데이터 세트가 포함하는 SMILES로 나타낸 임의의 화학 분자를 수신하여 특징(Feature)을 추출하고, 추출한 특징으로부터 SMILES로 나타낸 화학 분자를 생성하며(S220-1), 이를 제2-1 단계라 한다.
- [0056] 이와 같은 제2-1 단계는 인공지능 네트워크가 인코더와 디코더를 포함하는 VAE라 하였기에 입력 데이터를 저차원 잠재 공간(Latent Space) 표현(특징)으로 변환하고, 잠재 공간 표현(특징)으로부터 원래의 입력 데이터를 재구성하는 단계에 해당하며, 이를 도 5에 예시적으로 도시해 놓았다.
- [0057] 한편, 디코더가 잠재 공간 표현(특징)으로부터 원래의 입력 데이터를 재구성한다 할지라도 입력 데이터와 100% 동일한 데이터로 재구성할 수는 없을 것이며, 입력 데이터와 최대한 유사해지는 방향으로 재구성하게 될 것인바, 재구성한 데이터 중, 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조만으로 이루어진 데이터가 타겟 분자 구조인 것이다. 이를 위해 생성한 화학 분자의 유효성 검증이 필요하며, 이는 제2-2 단계에 관한 것이다.
- [0058] 추출한 특징으로부터 SMILES로 나타낸 화학 분자를 생성했다면, 생성한 화학 분자를 커팅(Cutting)하여 모든 부분 분자가 유효한지 판단하며(S220-2), 이를 제2-2 단계라 한다.
- [0059] 여기서 화학 분자의 커팅은 새로운 분자 구조를 생성하기 위한 학습 및 분자의 다양성을 훼손하지 않고, 유효한 분자만을 학습하기 위해 규정한 커팅 규칙에 의하며, 커팅 규칙은 화학 분자를 C(탄소)를 기준으로 자르는 제1 규칙, C(탄소)를 기준으로 좌측 또는 우측에 원자가 존재하는 경우, 존재하는 원자와 각각 결합시켜 부분 분자를 생성하는 제2 규칙 및 C(탄소)를 기준으로 좌측 및 우측에 존재하는 원자 모두를 결합시켜 부분 분자를 생성

하는 제3 규칙을 포함할 수 있다.

- [0060] 도 6은 분자식이 CH3NCO인 메틸 아이소사이아네이트(Methyl isocyanate)를 SMILES로 나타낸 모습이다.
- [0061] 도 6을 참조하면, 가장 좌측에 수소 원자와 결합한 C(탄소) 하나와(이하, 제1 탄소 원자라 한다), 질소 및 산소 원자와 결합한 우측의 C(탄소, 이하 제2 탄소 원자라 한다), 총 두 개의 C(탄소)가 포함되어 있음을 확인할 수 있으며, 제1 규칙을 이용하여 두 개의 C(탄소)를 기준으로 분자를 자를 수 있다.
- [0062] 또한, 제2 규칙에 따라 제1 탄소 원자는 좌측의 수소 원자와 결합하여 부분 분자를 생성하며, 우측에 질소 원자와 결합하여 또 다른 부분 분자를 생성할 수 있고, 제2 탄소 원자 역시 좌측의 질소 원자와 결합하여 부분 분자를 생성하며, 우측에 산소 원자와 결합하여 또 다른 부분 분자를 생성할 수 있는바, 이를 도 7에 색상으로 구별하여 예시적으로 도시해 놓았다.
- [0063] 더 나아가, 제3 규칙에 따라 제1 탄소 원자는 좌측의 수소 원자, 우측의 질소 원자와 결합하여 이들 모두를 포함하는 부분 분자를 생성하며, 제2 탄소 원자는 좌측의 질소 원자, 우측의 산소 원자와 결합하여 이들 모두를 포함하는 부분 분자를 생성할 수 있는바, 이를 도 8에 점선으로 구별하여 예시적으로 도시해 놓았다.
- [0064] 한편, 이상과 같은 커팅 규칙은 제2 규칙 및 제3 규칙 중 어느 하나 이상에서 결합 후 남은 C(탄소)의 결합에 H(수소) 원자를 결합시켜 부분 분자를 생성하는 제4 규칙을 더 포함할 수 있을 것이다.
- [0065] 제2-1 단계에서 생성한 화학 분자를 커팅 규칙에 따라 커팅하여 생성한 부분 분자의 유효성 판단은 생성한 모든 부분 분자를 RDKit에 입력하여 판단하게 되며, 이를 도 9에 예시적으로 도시해 놓았다.
- [0066] 여기서 RDKit은 제약 및 화학 연구 산업에서 널리 사용되는 오픈 소스 화학 정보학 및 기계 학습 툴킷으로서, 부분 분자가 아닌 전체 분자를 RDKit에 입력할 시, 데이터베이스에 없는 새로운 분자에 대해서는 유효한지 여부에 대한 판단을 내릴 수 없다. 따라서 새로운 분자를 유망한 분자로 학습할 수도 있고, 유효하지 않은 분자로 학습할 수도 있으며, 전자의 경우, 실제 유효하지 않은 분자인데 유망한 분자로 판단을 하여 학습한다면 모델은 유효하지 않은 분자를 생성하는 파라미터를 학습하게 되어 유효하지 않은 분자를 생성한다는 문제가 생긴다. 후자의 경우, 유망한 분자인데 유효하지 않은 분자로 학습을 하게 된다면 유망한 분자를 학습할 수 있는 파라미터를 업데이트 하지 못한다는 문제가 생긴다. 따라서 이러한 문제를 최소화 하기 위해 분자를 부분 분자 단위로 쪼개어 유효성을 판단하는 것이다.
- [0067] 다시 도 4에 대한 설명으로 돌아가도록 한다.
- [0068] 모든 부분 분자가 유효한지 판단하여 판단 결과 모든 부분 분자가 유효하다면, 장치(100)가 인공지능 네트워크의 파라미터를 업데이트하고, 해당 파라미터를 저장한 후, 학습시키며(S220-3), 이를 제2-3 단계라 한다.
- [0069] 한편, 제2-2 단계의 판단 결과, 모든 부분 분자가 유효하지 않다면, 즉 적어도 하나 이상의 부분 분자가 유효하지 않다면, 인공지능 네트워크의 파라미터를 업데이트하지 않고, 기 저장된 파라미터를 재사용하며(S220-4), 이를 제2-4 단계라 한다.
- [0070] 제2-1 단계에서 생성한 화학 분자를 커팅하여 생성한 모든 부분 분자가 유효하다면, 이들을 결합하여 생성한 화학 분자 역시 유효하다고 볼 수 있으므로 인공지능 네트워크의 파라미터, 보다 구체적으로 해당 화학 분자(제2-1 단계에서 생성한 화학 분자)를 생성하는 과정에서의 인코더 - 잠재 공간(Latent Space) - 디코더의 파라미터를 최종적으로 업데이트하고, 이를 학습시키는 것인바, 이를 통해 인공지능 네트워크는 유효한 분자 구조를 생성하는 경우에 대해서만 학습을 수행하게 되고, 결과적으로 해당 인공지능 네트워크가 생성하게 되는 분자 구조는 모두 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조가 될 수 있는 것이며, 이를 도 10에 예시적으로 도시해 놓았다.
- [0071] 한편, 그에 따라 제2-3 단계에서 파라미터의 업데이트는 제2-1 단계에서 수신한 임의의 화학 분자와 생성한 화학 분자가 최대한으로 유사해지되, 생성한 화학 분자를 커팅하여 생성한 모든 부분 분자가 유효한 분자에 해당하여 생성한 화학 분자가 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조를 갖는 방향으로 이루어지는 것이라 할 것이다.
- [0072] 더 나아가, 분자 구조가 연속하게 학습된 잠재 공간(Latene Space)이므로 경사 하강법(Gradient Descent)을 이용한 최적화 및 학습이 가능하다. 따라서 특정 분자가 표현되는 Latent Space상에서 해당 분자의 특성을 나타내도록 MLP(Multi Layer Perceptron)를 통해 최적화 및 학습을 진행할 수 있을 것이며, 이 과정의 손실 함수와 VAE 손실 함수를 더한 값을 최종 손실 함수로 두고 학습 및 최적화를 진행할 수 있을 것이다.

- [0073] 이상 설명한 제1 단계 및 제2 단계가 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 단계에 대한 설명에 해당하며, 후술할 제3 단계 및 제4 단계가 이를 이용하여 실제 타겟 분자 구조를 생성하는 단계에 해당하는바, 다시 도 2에 대한 설명으로 돌아가도록 한다.
- [0074] 인공지능 네트워크를 학습시켰다면, 장치(100)가 인공지능 네트워크에 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하며(S230), 이를 제3 단계라 한다.
- [0075] 여기서 기본 분자는 타겟 분자 구조의 생성을 위한 입력 데이터에 해당하며, 타겟 분자와 유사하거나 기본이 되는 분자일 수 있다. 예를 들어, 타이레놀에서 일부 특성을 조절한 신약을 생성하기 위해 타이레놀을 기본 분자로 입력하는 것이다.
- [0076] 한편, 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성은 본 발명을 적용할 기술 분야에 따라 상이할 것이나, 신약 개발 분야를 예로 한다면 독성, 용해도, 약물 유사성 등을 들 수 있을 것이나, 이에 반드시 한정하는 것은 아니라 할 것이다.
- [0077] 마지막으로, 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되되, 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하며(S240), 이를 제4 단계라 한다.
- [0078] 앞서 제2 단계에 대한 설명에서 학습시킨 인공지능 네트워크는 수신한 임의의 화학 분자와 생성한 화학 분자가 최대한으로 유사해지는 방향으로 파라미터를 업데이트한다고 했던바, 제4 단계에서 인공지능 네트워크가 출력하는 분자 구조는 입력 받은 기본 분자 구조에서 일부 구조가 변경된 구조일 것이며, 기본 분자에 해당하는 잠재 공간 상의 Latent Vector를 추출하고, 조절하고자 하는 특성을 나타내는 Latent Vector의 수치를 조절하여 타겟 분자 구조를 생성해 출력할 수 있을 것이다.
- [0079] 지금까지 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법에 대하여 설명하였다. 본 발명에 따르면, 인공지능 네트워크가 생성한 화학 분자를 부분 분자로 커팅하고, 모든 부분 분자의 유효성이 검증된 경우에만 인공지능 네트워크를 학습시키는데, 실제 환경에서 존재하는 유효한 분자 구조만을 생성할 수 있다. 또한, 실제 환경에서 존재하는 유효한 분자 구조만을 생성할 수 있기에 실험을 통해 소비하게 되는 많은 자원과 시간을 아낄 수 있어 효율적이다. 또한, 타겟 분자 구조에서 구현하고자 하는 다양한 특성을 조절하여 이에 부합하는 분자 구조의 생성이 가능하므로 다양한 기술 분야에서 널리 활용될 수 있다.
- [0080] 도 11은 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법의 성능 평가 결과이다. 성능 평가에 있어서 SMILES로 나타낸 실제 분자 구조가 아니라 이미지를 이용하여 평가를 실시하였으며, 입력한 원본 이미지(기본 분자에 대응됨)에 대하여 표정(미소), 머리색, 나이라는 특성을 조절하여 생성한 결과 이미지를 함께 첨부한바, 생성이 매우 효과적으로 이루어지고 있음을 확인할 수 있다.
- [0081] 마지막으로, 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100)와 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법은 본 발명의 제3 실시 예에 따른 컴퓨터로 판독 가능한 매체에 저장된 컴퓨터 프로그램으로 구현할 수도 있는바, 이 경우 컴퓨팅 장치와 결합하여 (AA) 하나 이상의 화학 분자에 대하여 해당 분자의 구조 및 특성을 대응시킨 학습용 데이터 세트를 수신하는 제1 단계, (BB) 상기 수신한 학습용 데이터 세트를 이용하여 인공지능 네트워크를 학습시키는 제2 단계, (CC) 상기 인공지능 네트워크에 상기 타겟 분자 구조의 생성을 위한 기본 분자 및 상기 타겟 분자 구조에서 조절하고 싶은 특성을 입력하는 제3 단계 및 (DD) 상기 인공지능 네트워크가 출력한 상기 기본 분자의 구조에서 일부 구조가 변경되되, 상기 조절하고 싶은 특성이 구현된 타겟 분자 구조를 수신하여 출력하는 제4 단계를 실행할 수 있을 것이며, 중복 서술을 위해 자세히 기재하지는 않았지만 본 발명의 제1 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치(100) 및 본 발명의 제2 실시 예에 따른 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 방법에 적용된 모든 기술적 특징은 본 발명의 제3 실시 예에 따른 컴퓨터로 판독 가능한 매체에 저장된 컴퓨터 프로그램에 모두 동일하게 적용될 수 있음은 물론이라 할 것이다.
- [0082] 이상 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 실시 예들을 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시 예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

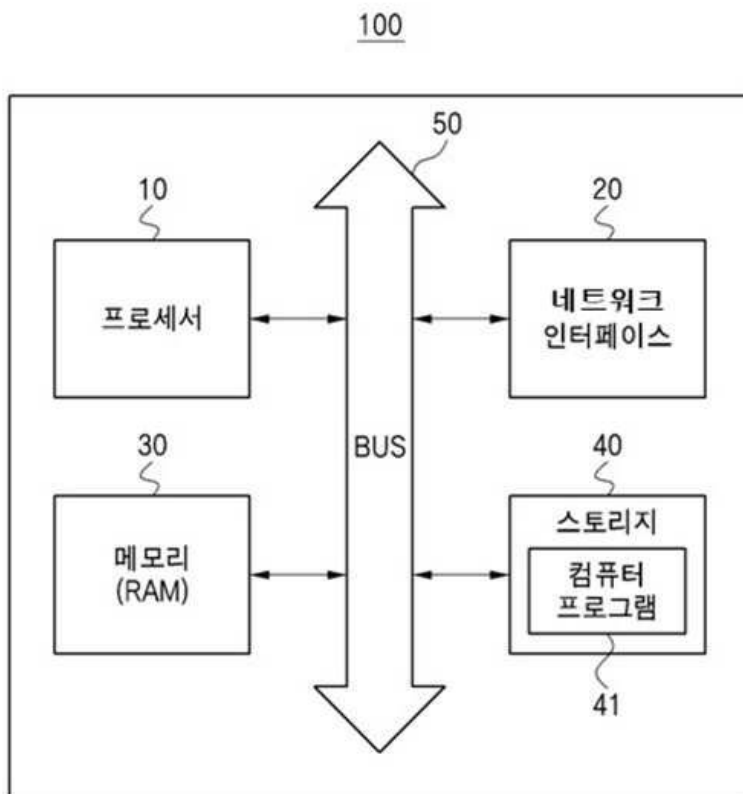
부호의 설명

[0083]

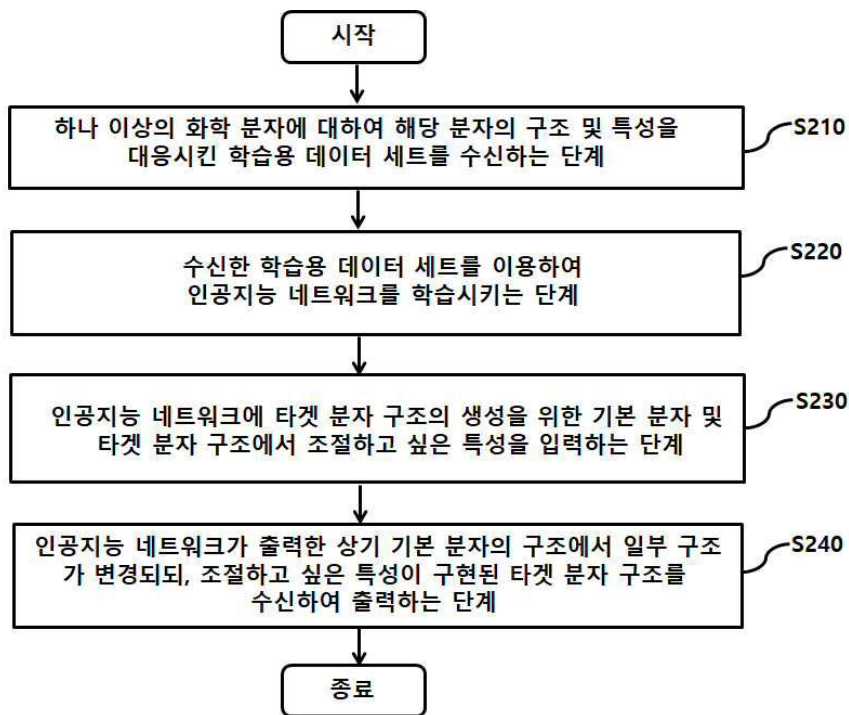
- 10: 프로세서
- 20: 네트워크 인터페이스
- 30: 메모리
- 40: 스토리지
- 41: 컴퓨터 프로그램
- 50: 정보 버스
- 100: 실질적으로 존재 가능한 유효한 분자 구조인 타겟 분자 구조를 생성하는 장치

도면

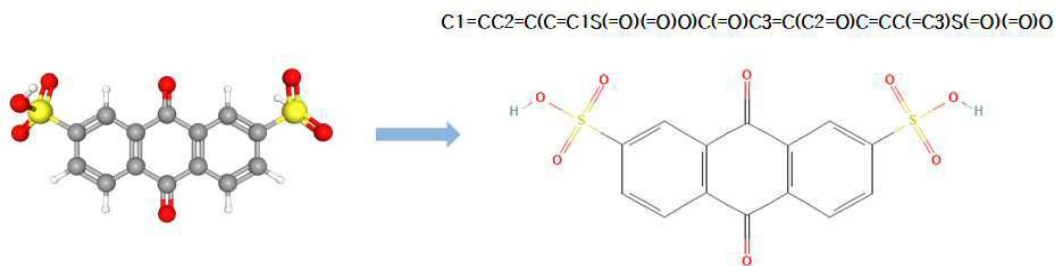
도면1



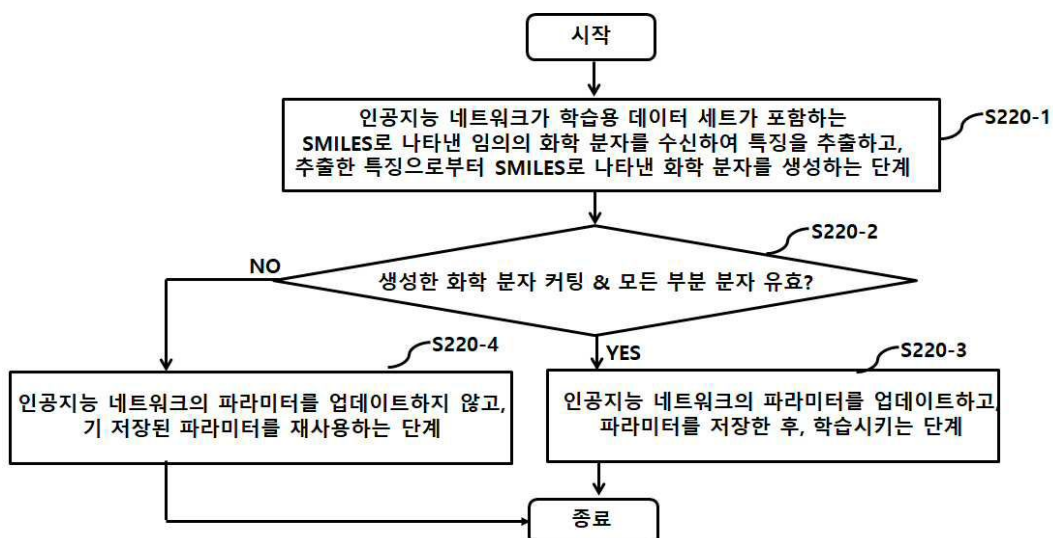
도면2



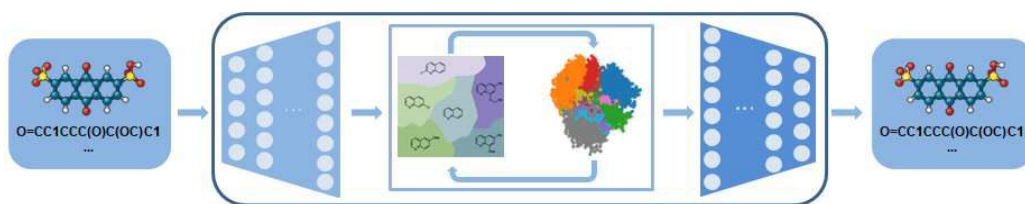
도면3



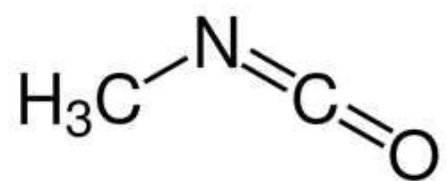
도면4



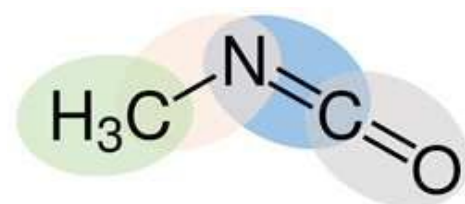
도면5



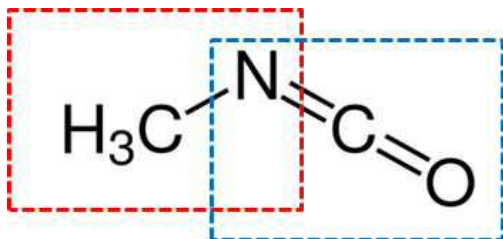
도면6



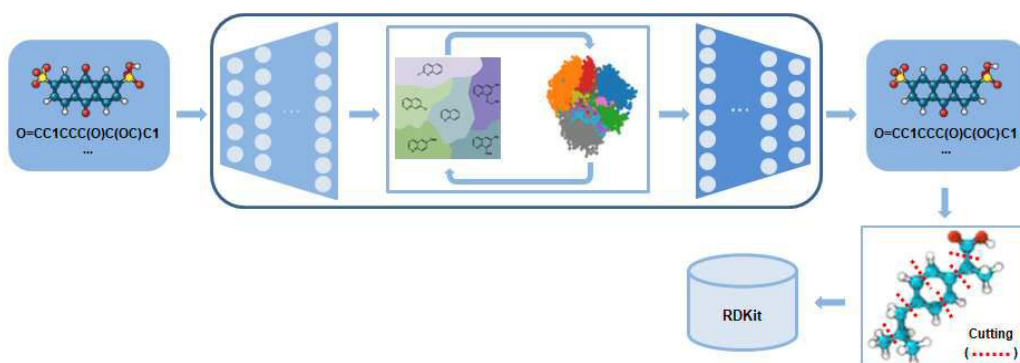
도면7



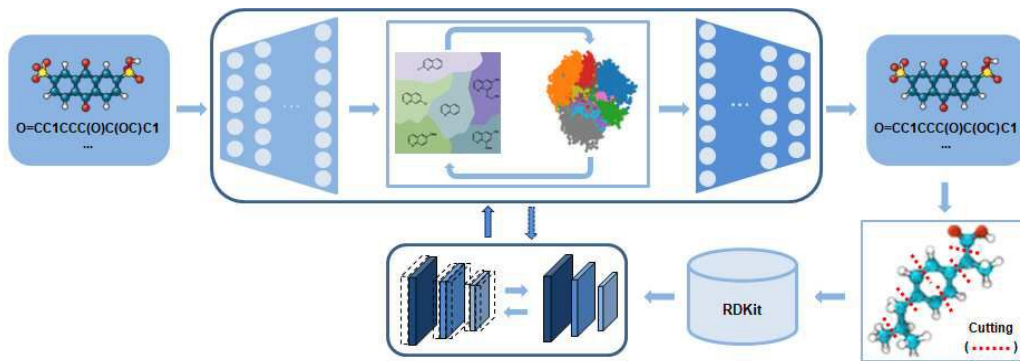
도면8



도면9



도면10



도면11

