



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0021585
(43) 공개일자 2024년02월19일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

G16H 70/40 (2018.01) G16H 50/20 (2018.01)

G16H 50/70 (2018.01) G16H 70/60 (2018.01)

(52) CPC특허분류

G16H 70/40 (2021.08)

G16H 50/20 (2018.01)

(21) 출원번호 10-2022-0100088

(22) 출원일자 2022년08월10일

심사청구일자 2022년08월10일

(71) 출원인

충남대학교산학협력단

대전광역시 유성구 대학로 99 (궁동, 충남대학교)

(72) 발명자

정우진

서울특별시 마포구 백범로 239(신공덕동, 신공덕
e편한세상) 103동 103호

이현정

대전광역시 중구 대종로 713(중촌동,
금호아파트), 1동 904호

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인 공간

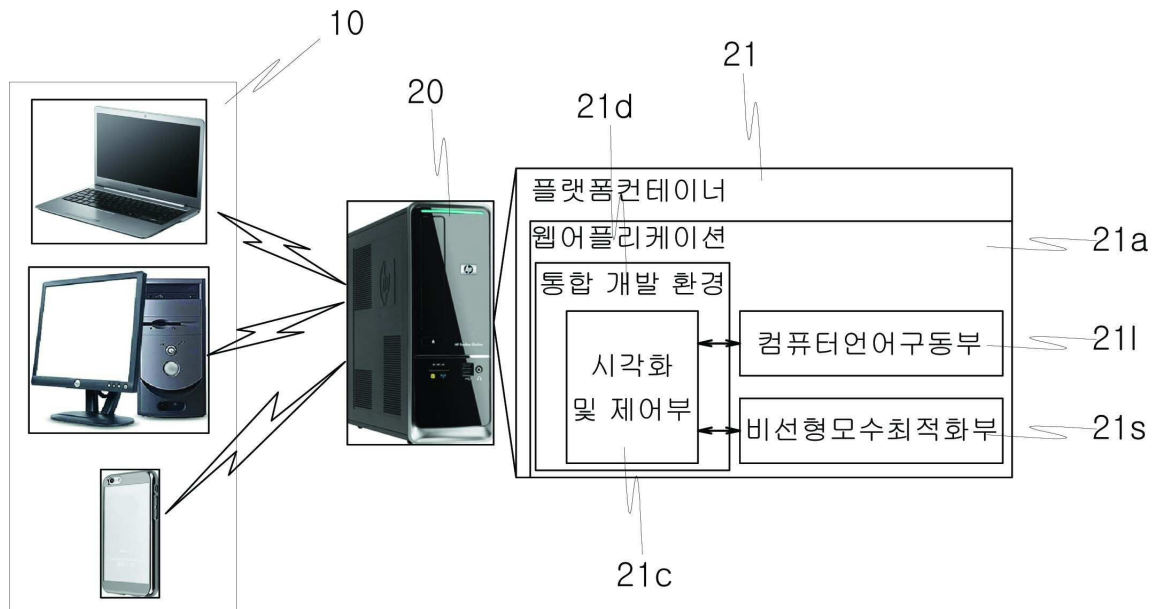
전체 청구항 수 : 총 5 항

(54) 발명의 명칭 약동력학 연구를 위한 R언어와 도커를 활용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템

(57) 요약

본 발명은 물질의 약리학적 정보 제공을 위한 플랫폼에 관한 것으로 상세하게는 약물개발 단계 중 약물의 약동학 또는 약력학 성질 규명 연구에 필요한 정보를 제공할 수 있는 R언어와 도커 및 비선형 모수 최적화 시스템에 관한 것임. 특히 수리적 작업을 수행하기에 적합한 계량 약리(Pharmacometrics) 기술을 활용할 수 있게 하되, 높은 컴퓨터 성능을 요구하는 계량 약리 연구에서 효율적으로 컴퓨터 자원을 활용할 수 있도록 모수최적화 연구에 필요한 소프트웨어를 취합하고 통합개발 환경 하 즉각적으로 호출 가능하게 하여 약동력학 연구의 작업속도를 증진할 수 있으며 모니터링을 담당하는 시각화 및 제어를 통하여 실시간으로 연구의 진척을 파악할 수 있게 하고 협업과 원격업무를 지원할 수 있는 형태의 컨테이너 기반 통합형 비선형 모수 최적화 시스템에 관한 것이다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

G16H 50/70 (2018.01)

G16H 70/60 (2021.08)

(72) 발명자

윤휘열

대전광역시 유성구 죽동로 321(죽동, 금성백조예미지), 104동 2103호

채정우

대전광역시 유성구 봉명로 94(봉명동, 도안신도시 7단지예미지백조의호수), 701동 1302호

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711125954
과제번호	2022-0-01441-001
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	정보통신기획평가원
연구사업명	인공지능융합선도프로젝트
연구과제명	인공지능융합연구센터지원(충남대학교)
기 여 율	1/1
과제수행기관명	충남대학교산학협력단
연구기간	2020.04.01 ~ 2022.12.31

명세서

청구범위

청구항 1

접속한 다수의 사용자단말기(10)에 계량 약리 연구 또는 약동력학 연구에 필요한 소프트웨어를 제공하는 플랫폼 컨테이너(21)가 포함된 관리서버(20)을 이용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템에 있어서,

관리서버는,

단말기로부터 웹 어플리케이션과 관련된 호스팅을 하는 단계;

호스팅 요청에 응답하여 도커(Docker) 이미지를 생성하는 단계;

상기 도커 이미지를 이용하여 컨테이너와 각각의 단말기 간의 작업환경을 구현할 수 있는 단계;

상기 웹 어플리케이션 환경이 구현되는 단계;

컴퓨터 언어를 구동하는 단계;

비선형 모수 최적화를 하는 단계;

시각화 및 제어하는 단계;

통합 개발 환경을 구현하는 단계;를 포함하는 것을 특징으로 하는 약동력학 연구를 위한 R언어와 도커를 활용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 플랫폼 컨테이너(21)는 웹어플리케이션(21a)을 포함하고,

상기 웹어플리케이션(21a)은, 통합개발환경부(21e), 컴퓨터언어구동부(211), 비선형모수최적화부(21s)를 포함하는 것을 특징으로 하는 약동력학 연구를 위한 R언어 및 도커를 활용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 통합개발환경부(21e)에는, 시각화 및 제어부(21c)를 더 포함하고, 시각화 및 제어부(21c)는 컴퓨터언어구동부(211)와 비선형모수최적화부(21s)에 병렬적으로 연결되는 것을 특징으로 하는 약동력학 연구를 위한 R언어 및 도커를 활용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 도커 이미지는 운영체제(operation system)인 리눅스(Linux)에 필요 소프트웨어들을 설치할 수 있도록 플랫폼 컨테이너 내에 가상환경을 형성하는 것을 특징으로 하는 약동력학 연구를 위한 R언어 및 도커를 활용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템.

청구항 5

제3항에 있어서,

상기 시각화 및 제어부는 통합개발환경부의 운영체제와 연결되어 있는 터미널(terminal)에 명령을 내림에 의해 컴퓨터언어구동부 및 모수최적화부를 위한 부분과 상호작용하는 것을 특징으로 하는 약동력학 연구를 위한 R언어와 도커를 활용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템.

발명의 설명

기술 분야

- [0001] 본 발명은 약물 개발 단계 중 중 약리적 정보 제공을 위한 플랫폼에 관한 것으로 상세하게는 약물의 약동학 또는 약력학 성질 규명에 필요한 정보를 제공할 수 있는 R언어와 도커 및 비선형 모수최적화 소프트웨어를 통합한 컨테이너 기반 시스템에 관한 것이다.
- [0002] 특히 본 발명은 수리적 작업을 수행하기에 적합한 계량약리(Pharmacometrics) 기술을 활용할 수 있게 하되, 높은 컴퓨터 성능을 요구하는 계량약리 연구에서 효율적으로 컴퓨터 자원을 활용할 수 있도록 모수최적화 연구에 필요한 소프트웨어를 취합하고 이를 통합개발 환경하에 즉각적으로 호출 가능하게 하여 약동력학 연구의 작업속도를 증진할 수 있으며 모니터링을 담당하는 시각화 및 제어부를 통하여 실시간으로 연구의 진척을 파악할 수 있게 한 컨테이너 기반 통합형 비선형 모수 최적화 시스템에 관한 것이다.

배경 기술

- [0003] 약리학은 생체 내 약을 주입했을 때 약에 일어나는 현상을 연구하는 분야로, 약의 생체 내 분해 경로 등, 약이 투입되었을 때부터 생체 내에 없어질 때까지 일어나는 반응을 연구하는 분야이다.
- [0004] 이러한 약리학은 약물개발에 있어서 다양한 소프트웨어가 응용되고 있다. 약물개발 단계 중 약물의 약동/약력학 성질 규명을 위한 모수 최적화 연구에는 다수의 소프트웨어를 동시에 구동할 필요가 있으며, 업무 흐름과 결과 처리 방식이 프로토콜화 되지 않아 컴퓨터 자원과 인력이 비효율적으로 사용되고 있다.
- [0005] 한국등록특허 제10-2146602호(2020.08.13.등록; 이하 '선행문헌1' 이라 함)는 도커를 이용한 컨테이너 기반 딥러닝 개발 플랫폼 제공 방법 및 장치를 제시하였다. 상기 선행문헌1은 객체로부터 딥러닝과 관련된 서비스 요청을 수신하는 단계와, 상기 서비스 요청에 응답하여 도커(Docker) 이미지를 생성하는 단계와, 상기 도커 이미지에 기초하여 딥러닝 서버 상에 가상화된 클라우드 컴퓨팅 환경을 생성하는 단계를 포함한다. 이러한 선행문헌1은 도커를 이용하는 플랫폼인 것은 유사하지만 딥러닝을 위한 플랫폼으로 약물 개발에 관련한 최적화 작업에 필요한 포맷은 부족하다.
- [0006] 한국등록특허 제10-1987664호(2019.06.04.등록; 이하 '선행문헌2'이라 함)는 클라우드 플랫폼에서 복수의 클러스터 및 어플리케이션을 모니터링하는 방법을 제시하였다. 상기 선행문헌2는 복수의 컨테이너 클러스터 및 클러스터에 운영되고 있는 서비스 어플리케이션을 통합적으로 감시할 수 있어 관리가 용이하게 이루어지게 한다. 이러한 선행문헌2는 클라우드 플랫폼 시스템이 다양한 인프라에 컨테이너 기반 어플리케이션이 동작할 수 있는 점에서 유사하지만 관리 감독 수단으로서 어플리케이션의 관찰만 하는 한계가 있다.
- [0007] 이와같이 종래에는 도커를 이용하여 딥러닝 플랫폼에 적용한 시스템에 제공되었으나, 이를 약물개발 분야에 적용한 시스템이 없었다. 특히 약물개발 분야에 적용하기 위해서는 모수 최적화하는 작업이 필요하지만 이를 수행하기 위한 포맷을 갖는 시스템이 제공되지 않아 약물 개발시간이 오래 걸리는 단점이 있다.
- [0008] 따라서, 도커 기술을 약물 개방분야에 적용하되 약물 개발시간을 단축시킬 수 있는 개선된 시스템의 필요성이 대두되었다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0009] (특허문헌 0001) 한국등록특허 제10-2146602호(2020.08.13.등록) : 도커를 이용한 컨테이너 기반 딥러닝 개발 플랫폼 제공 방법 및 장치
- (특허문헌 0002) 한국등록특허 제10-1987664호(2019.06.04.등록) : 클라우드 플랫폼에서 복수의 클러스터 및 어플리케이션을 모니터링하는 방법

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0010] 본 발명은 상기와 같은 종래기술의 문제점을 해결하기 위해 개발된 것으로,
- [0011] 약물물 개발 단계에서 다양한 형태의 협업과 원격업무를 보다 쉽게 지원함에 따라 약물연구에 소요되는 시간과 인력을 줄일 수 있는 R언어와 도커 및 비선형 모수최적화 소프트웨어를 통합한 컨테이너 기반 시스템의 제공을 목표로 한다.
- [0012] 특히 본 발명은 약물개발 단계 중 약물의 약동/약력학 성질 규명 연구를 위한 정보 제공시스템을 클라우드 기반의 컨테이너에 비선형 모수 최적화를 위한 소프트웨어들을 통합하여 웹 어플리케이션으로 구축함에 따라 약물의 연구에 소요되는 시간과 인력을 줄일 수 있는 시스템의 제공을 목적으로 한다.
- [0013] 또한 본 발명은 약동/약력학 규명 연구를 과정 간 연계 작업을 생략할 수 있게 하고, 웹 어플리케이션 호스팅을 통해 다량의 컴퓨터 연산이 필요한 부분을 분산화하며, 비선형 모수 최적화 결과를 시각화 및 제어 하여 단말기 종류에 국한되지 않고 즉시 활용할 수 있는 사용자 친화적인 작업환경을 구현하여 연구 환경 세팅에 소요되는 부차적 시간 낭비를 줄일 수 있는 시스템 구축방법의 제공을 목표로 한다.

과제의 해결 수단

- [0014] 상기와 같은 목적을 해결하기 위하여 본 발명은,
- [0015] 접속한 다수의 사용자단말기에 계량 약리 연구 또는 약동력학 연구에 필요한 소프트웨어를 제공하는 플랫폼 컨테이너가 포함된 관리서버를 이용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템에 있어서, 관리서버는, 단말기로부터 웹 어플리케이션과 관련된 호스팅을 하는 단계; 호스팅 요청에 응답하여 도커 이미지를 생성하는 단계; 상기 도커 이미지를 이용하여 컨테이너와 각각의 단말기 간의 작업환경을 구현할 수 있는 단계; 상기 웹 어플리케이션 환경이 구현되는 단계; 컴퓨터 언어를 구동하는 단계; 비선형 모수 최적화를 하는 단계; 시각화 및 제어하는 단계; 통합 개발 환경을 구현하는 단계;를 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [0016] 상기 플랫폼 컨테이너는 웹어플리케이션을 포함하고, 상기 웹어플리케이션은, 통합개발환경부, 컴퓨터언어구동부, 비선형모수최적화부를 포함하는 것이 바람직하다.
- [0017] 상기 통합개발환경부는 시각화 및 제어부를 포함하는 것이 바람직하다.
- [0018] 상기 도커 이미지는 운영체제(operation system)인 리눅스에 필요 소프트웨어들을 설치할 수 있도록 플랫폼 컨테이너 내에 가상환경을 형성하는 것이 바람직하다.
- [0019] 상기 시각화 및 제어부는 통합개발환경부의 운영체제와 연결되어있는 터미널에 명령을 내림에 의해 컴퓨터언어구동부 및 모수최적화부를 위한 부분과 상호작용하는 것이 바람직하다.

발명의 효과

- [0020] 본 발명에 따른 약동력학 연구를 위한 R언어와 도커를 활용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템은,
- [0021] 접근성을 증대시켜 연구에 소요될 수 있는 시간을 최소화하고 계량 약리 연구에 필요한 정보를 시각화하여 즉각 제공할 수 있고, 다른 소프트웨어와 연계하여 통합 제어가 될 수 있음에 따라 연구의 효율성을 증대시키는 효과가 있다.

도면의 간단한 설명

- [0022] 도 1은 본 발명에 따른 약동력학 연구를 위한 R언어와 도커를 활용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템 구축방법 구현을 위한 시스템 구성도

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0023] 본 발명은 다양한 변경을 가하여 실시할 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고, 상세한 설명을 통해 설명하고자 한다. 그러나 이는 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.
- [0024] 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.

- [0025] 본 발명은 접근성을 증대시켜 연구에 소요될 수 있는 시간을 최소화하고 계량 약리 연구에 필요한 정보를 시각화하여 즉각 제공할 수 있고, 다른 소프트웨어와 연계하여 통합 제어가 될 수 있음에 따라 연구의 효율성을 높일 수 있다.
- [0026] 본 발명에 따른 약동력학 연구를 위한 R언어와 도커를 활용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템은 도 1에 도시한 바와 같이,
- [0027] 접속한 다수의 사용자단말기(10)에 계량 약리 연구 또는 약동력학 연구에 필요한 소프트웨어를 제공하는 플랫폼 컨테이너(21)가 포함된 관리서버(20)를 이용한 컨테이너 기반 비선형 모수 최적화 시스템에 있어서, 관리서버는, 단말기로부터 웹 어플리케이션과 관련된 호스팅을 하는 단계; 호스팅 요청에 응답하여 도커(Docker) 이미지를 생성하는 단계; 상기 도커 이미지를 이용하여 컨테이너와 각각의 단말기 간의 작업환경을 구현할 수 있는 단계; 상기 웹 어플리케이션 환경이 구현되는 단계; 컴퓨터 언어를 구동하는 단계; 비선형 모수 최적화를 하는 단계; 시각화 및 제어하는 단계; 통합 개발 환경을 구현하는 단계;를 포함한다.
- [0028] 상기 호스팅을 하는 단계는 상기 플랫폼 컨테이너(21)를 구비한 관리서버가 대형 통신업체나 전문회사로부터 제공되는 웹서버를 이용하여 호스팅하는 단계이다.
- [0029] 상기 이미지 생성 단계는 호스팅 서비스를 제공하는 회사의 요청에 도커 이미지를 입력하는 단계로, 컨테이너를 실행하기 위한 정보를 포함하고, 관리서버에서 요청된 서비스에 응답하여 도커 이미지를 출력한다.
- [0030] 상기 단말기 간 작업환경 구현 단계는 관리서버로부터 딥러닝과 관련된 서비스 요청을 수신하고, 도커를 통해서 요청된 서비스에 적합한 가상화된 클라우드 컴퓨팅 환경을 생성한다.
- [0031] 상기 웹 어플리케이션 환경 구현 단계는 웹상에서 약리 정보를 효과적으로 구현한 후 있게 하는 단계로, 도커 이미지에 기초하여 가상화된 클라우드 컴퓨팅 환경을 생성하며, 본 발명이 목적으로 하는 정확하고 신속한 약리 정보를 제공할 수 있도록 웹 애플리케이션 환경을 제작 및 수정한다.
- [0032] 상기 컴퓨터 언어를 구동하는 단계는 컴퓨터가 어떤 문제를 해결하는 데 그 일의 처리방법과 순서를 지시해 주는 언어인 컴퓨터 언어를 구동시키는 단계로, 다양한 개발 언어 및 개발 환경을 제공할 수 있다.
- [0033] 상기 비선형 모수 최적화 단계는 R언어 및 모수최적화 소프트웨어를 활용하여 비선형 형태의 함수로 표현되는 약동력학 문제들을 최적화한다. 즉, 약리학적 연구를 위한 수리적 작업 수행시 필요한 비선형 모수최적화 프로그램들을 취합해 웹어플리케이션 내에 구비하게 함으로써 즉각적인 호출이 가능하게 하여 작업속도를 증진시킬 수 있게 하는 것이다.
- [0034] 시각화 및 제어하는 단계는 모니터링을 담당하는 시각화 및 제어를 통하여 실시간으로 연구의 진척을 파악할 수 있게 한다.
- [0035] 통합 개발 환경을 구현하는 단계는 관리서버를 구성하는 시스템의 기종이나 운영 체제의 종류에 관계없이 웹 브라우저를 통해 접속된 사용자들이 원활하게 접속할 수 있게 환경을 설정한다.
- [0036] 상기 플랫폼 컨테이너(21)는 상기한 바와 같이 웹을 통해 약리정보를 제공하기 위한 시스템을 구성하는 것으로, 상기 각 단계를 수행하기 위해 웹어플리케이션(21a)을 포함하고, 상기 웹어플리케이션(21a)은, 통합개발환경부(21e), 컴퓨터언어구동부(211), 비선형모수최적화부(21s)를 포함한다.
- [0037] 상기 통합개발환경부(21e)는 시각화 및 제어부(21c)를 포함한다.
- [0038] 상기한 바와 같이 상기 도커 이미지는 운영체제(operation system)인 리눅스(Linux)에 필요 소프트웨어들을 설치할 수 있도록 플랫폼 컨테이너 내에 가상환경을 형성한다.
- [0039] 상기 시각화 및 제어부는 통합개발환경부의 운영체제와 연결되어 있는 터미널(terminal)에 명령을 내상기한 바와 같이 이루어지는 시스템의 구축에서, 연구자는 각자의 단말기(10)에서 서버 호스팅하기 위하여 도커(Docker) 이미지를 등록하고, 웹 어플리케이션(21a)에 접속하여 해당 컨테이너(21) 내부에 접속하여, 통합개발환경부(21e) 위에 시각화 및 제어부(21c)를 탑재하여 통합개발환경부와 병렬적으로 컴퓨터언어구동부(211) 및 비선형모수최적화부(21s)와 소통할 수 있다.
- [0040] 시각화 및 제어부는 통합개발환경부에서 제공하는 통합개발환경에서의 작업을 대신 수행하여 컴퓨터언어부 및 비선형모수최적화부의 구동을 제어할 수 있으며, 최적화 연산에 할당된 컴퓨터 자원, 진행도를 모니터링 할 수 있다.

- [0041] 최종적으로 연구자에게 시각화된 결과를 제공한 후 연구자가 상기한 프로세스를 반복하여 최적화 연구를 수행한다.
- [0042] 상기의 사용자단말기(10)는 컴퓨터에 국한되지 않고, 웹페이지에 접속가능한 모든 기기가 될 수 있다.
- [0043] 상기 플랫폼 컨테이너(21)는 어플리케이션이 실행될 수 있는 가상의 운영 시스템을 의미 할 수 있고, 웹어플리케이션부에서 제공하는 웹 어플리케이션은 R 언어 및 개발 환경을 제공할 수 있으며, htmltools, reactable, rstudioapi, shiny, xpose, ggplot2 등을 포함할 수 있다.
- [0044] 통합개발환경부(21d)는 R언어에서 대표적으로 사용되는 R studio를 포함하고, 시각화 및 제어부(21c)는 Shiny 프로그램을 포함할 수 있으며, 컴퓨터언어구동부(211)는 PsN(Perl speaks NONMEM), R 등을 포함할 수 있다.
- [0045] 비선형모수최적화부(21s)는 NONMEM 등을 포함할 수 있다.

부호의 설명

- [0046] 10: 사용자단말기
- 20: 관리서버
- 21: 플랫폼 컨테이너
- 21a: 웹어플리케이션부
- 21d: 통합개발환경부
- 21s: 비선형모수최적화부
- 21c: 시각화 및 제어부
- 211: 컴퓨터언어구동부

도면

도면1

