

BIO ECONOMY REPORT

March 2021. Issue 25

AI를 활용한 drug discovery 및 특허전략

AI를 활용한 drug discovery 및 특허전략

이혜리 정진국제특허법률사무소
변리사
김태순 신테카바이오, CEO

제1장. 개요

1. 인공지능이란

- ‘인공지능’(AI)은 컴퓨터가 인간의 지능 활동을 모방할 수 있도록 하는 것을 말함. 즉, 인간의 지능이 할 수 있는 사고·학습·모방·자기 계발 등을 컴퓨터가 할 수 있도록 연구하는 컴퓨터공학 및 정보기술 분야임
- 초기 인공지능에 대한 연구는 인공지능이라는 개념이 없는 이론적인 분야였기에 다양한 분야의 학자가 연구해왔음. “인공지능” 용어는 1956년에 처음 등장하였지만, 현재 인공지능의 세부적인 부분으로 분류되는 딥 러닝의 기원이 되는 인공지능경망에 대한 기초이론은 1943년도에 논문으로 발표된 바 있음
- 다만 이후, 세간의 과도한 기대와 부진한 기술적 성과 때문에 1970년대 말, 1980년대 말 등 두세 번의 부침을 거듭해 왔음
- 그러나, 2010년 대에 들어서 인공지능 기술은 다양한 기술의 기반의 발전, 핵심 알고리즘의 혁신, 컴퓨터 기능의 고도화, 및 저가화, 데이터 대량 지원 등을 기반으로 기존 인식을 뒤엎고 약진할 수 있었음
- 특히 자연어 처리와 컴퓨터 비전, 음성 인식 및 자율주행 분야에서 질적으로 엄청난 도약을 이뤄내었으며, 이를 기반으로, 자율주행차부터 의료진단, 첨단제조에 이르기까지, 기술과 비즈니스 분야에서 점점 더 많은 중요한 발전을 이끌고 있음

2. 인공지능과 신약개발

- drug discovery 연구의 핵심 목표는 신체에 유익하게 작용하는 약물을 식별해 내는 것에 있음
- 질병에 관련된 표적 분자 (일반적으로 단백질)에 특이적으로 결합하는 활성을 갖는 다양한 형태의 약물 (핵산, 단백질, 화합물) 분자를 찾아내기 위하여 연구자들은 전통적으로 분자 라이브러리의 대형 스크린을 수행하여 약물이 될 가능성이 있는 분자를 식별하며, 그 뒤 수많은 테스트를 거쳐 유망한 화합물로 개발함

- 최근에는 보다 합리적인 구조 기반 약물 설계 접근법이 점점 보편화되고 있으며, 이러한 접근법에 의하는 경우 초기 스크리닝 단계를 생략하거나 간소화 할 수 있음. 그러나, 여전히 하지만 여전히 수많은 화합물을 설계, 합성 및 평가하여 잠재적인 신약을 도출해야 함
- 어떤 구조 또는 서열이 원하는 생물학적 효과를 나타내는 효과적인 약물이 되는데 필요한 특성을 모두 가질지는 미지의 영역이기 때문에 유망한 화합물을 약물 후보로 정제하는 과정은 비용과 시간이 많이 소요됨. 최근 수치에 따르면다. 최신 수치에 따르면 현재 신약 출시 비용은 평균 26 억 달러에 해당함
- 또한 신약 후보가 in vitro 및 in vivo 테스트에서 잠재력을 보여 주더라도 임상 시험으로 발전하면 여전히 실패할 가능성이 존재함. 약물 후보자의 10 % 미만이 1 상 시험 후 시장에 출시함
- 이를 고려할 때 전문가들이 신약 발견을 가속화하고 비용을 절감하는 방법으로써 AI 시스템의 탁월한 데이터 처리 잠재력을 선택하는 것은 당연한 수순일 수 있음
- 시장 조사 기관인 Bekryl에 따르면 AI는 2028 년까지 신약 개발 프로세스를 위해 700 억 달러 이상의 비용을 절감 할 수 있는 잠재력을 가지고 있다고 보고됨
- 인공지능을 활용한 신약개발은 다음과 같은 이점을 보유하고 있음
 - 잠재적인 화합물의 특성이 예측 가능함. 즉, 원하는 특성을 가진 화합물만 합성에 선택되므로 효과가 없는 화합물에 대한 작업을 방지하는 바, 시간과 비용을 절약 할 수 있음
 - '발명된' 분자가 성공에 필요한 모든 속성을 가질 것으로 예상되는 완전히 새로운 화합물에 대한 아이디어를 생성하여 효과적인 신약의 발견을 크게 가속화 할 수 있음
 - 수천 개의 조직학 이미지 분석과 같은 반복적인 작업의 필요성을 줄여 실험실에서 시간 및 비용의 절감을 도출함

3. 소결

- 이에, 본 보고서에서는 인공지능 또는 가상실험을 이용한 약물 개발과 관련된 기술의 개발 동향을 특허 동향을 통하여 살펴보도록 함
- 또한, 인공지능 및 가상실험 데이터와 관련한 특허 요건을 확인하고, 국가별로의 심사 태도를 확인하여, 향후 인공지능을 활용한 신약개발의 특허 데이터 구성 전략을 구축하는데에 기초자료로 활용하고자 함

제2장. 인공지능 신약개발 특허동향

1. 동향분석 개요

- 인공지능 기반 신약개발기술에 대하여, 특허 기반 기술동향을 알아보고 국가별 추이를 파악하여 국내 기술수준을 알아보고자 함
- 또한, 연도별 출원 추이와 이를 기반으로 최근 기술개발 동향을 파악하고자 함

1) 키워드 및 검색식 구성

- 인공지능 신약기술에 대하여, 크게 인공지능 및 치료제로 구분하고 각 요소별 핵심키워드 및 키워드 확장을 진행하였으며, 하기 키워드를 바탕으로 '인공지능 AND 약 AND 개발'로 구성하여 검색을 진행함 (표 3)
- 인공지능은, 딥러닝, 알고리즘, 컴퓨터, 빅데이터 및 신경망과 같은 기술 세부요소를 포함하도록 구성함
- 주요 5개국 및 PCT 대상으로 현재까지 공개·등록된 특허의 서지, 요약, 독립항을 대상으로 검색하였으며, 그 결과 3,882건의 특허가 도출됨

[표 1] 검색범위 및 검색식

자료 구분	검색 DB	검색구간	검색범위
공개·등록특허	KEYWERT	1970.01~2020.12	서지, 요약, 독립항
라파스			

(가상* 버츄얼* 버추얼* 인공지능 (인공 a/1 지능) 기계학습 (기계 a/1 학습) 딥러닝 (딥 a/1 러닝) ((네트워크 신경망) a/1 (모델) (network a/1 model) 알고리즘 알고리즘 빅데이터 빅데이터 (빅 a/1 (데이터 데이터) 인실리코 (인 a/1 실리코) "AI" virtual (artificial a/1 intelligen*) ((machine deep) a/1 learning*) algorithm* insilico (in a/1 silico) 컴퓨터 컴퓨터 computer*) AND ((약 신약 드러그 치료제 (치료* 약학* 약제*) a/1 (물질 조성물) drug medicin* (pharmaceut* treat* therap* medical) a/1 (composit* agent* material* substanc* compound* molecule*)) N/3 (개발 발굴 선별 스크리닝 도출 규명 결정 예상 예측 develop* identifi* select* dock* deriv* discover* determin* predic*)) not (진단 diagnosis)

2) 검색결과 및 유효특허 선별

- 유효 특허로서, 약물의 3차구조 결정·예측기술, 가상의 약물 결합 분석 기술 및 타깃 선별 기술, 물질의 3차 구조 예측 기술, 약물 반응 예측기술 등을 선별함
- 이 외 인공지능을 기반으로 한 의약품의 분류, 성분의 분석, 패키징, 분배기술과 같은 제조·운송 기술, 환자의 진료 및 약물 처방, 생체신호 반응 기반 약물 투여 조절기술과 같은 의료진단·처방기술, 기타 의약품 데이터 누적 기술외 관련도가 전혀 없는 기술을 노이즈로 제외하였으며, 그 결과 유효특허로 877건이 도출됨 (표2)

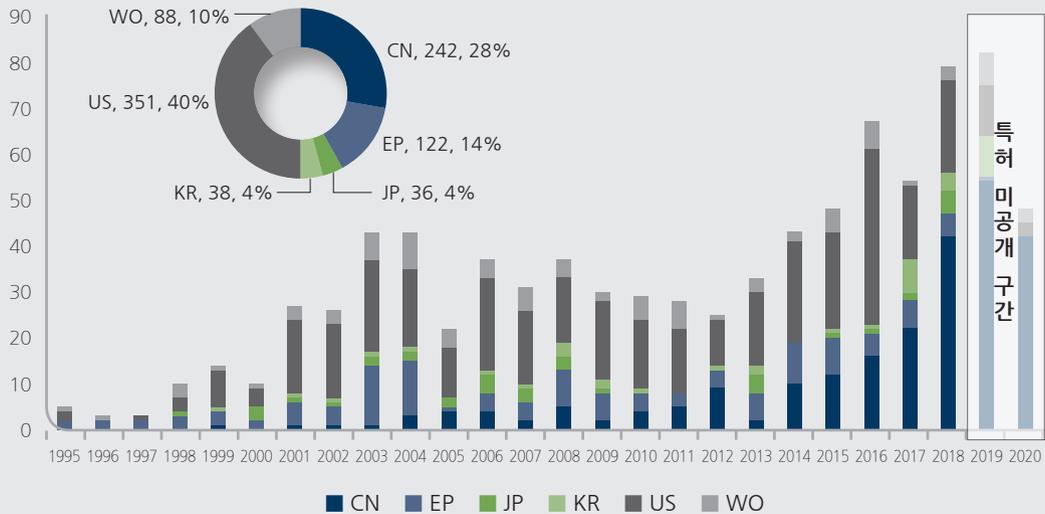
[표 2] 검색결과 및 유효특허 선별

구분	전체	한국	일본	미국	유럽	중국	PCT
RAW	3,882	85	154	1,556	364	1,401	322
유효특허 선별결과	897	38	36	352	122	242	88

2. 특허기술 Landscape

1) 전체 특허 기술동향 추이

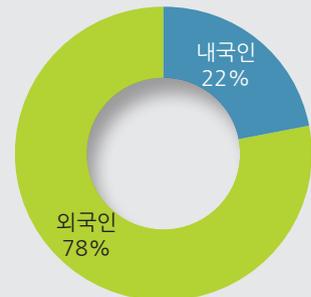
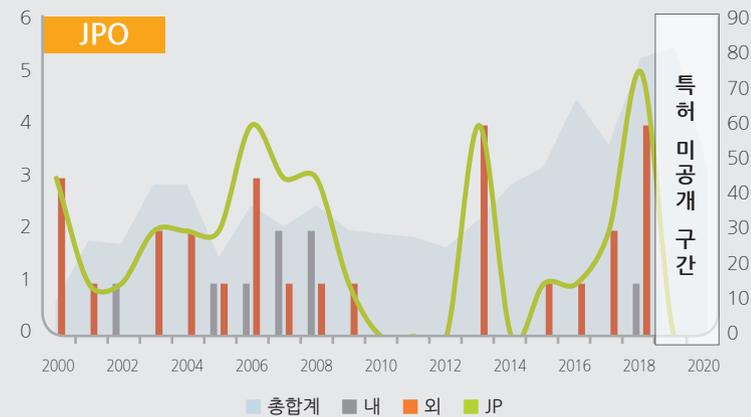
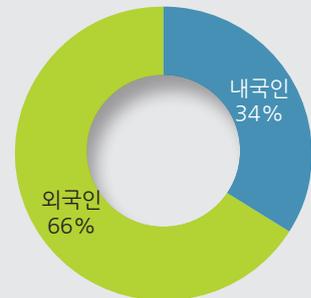
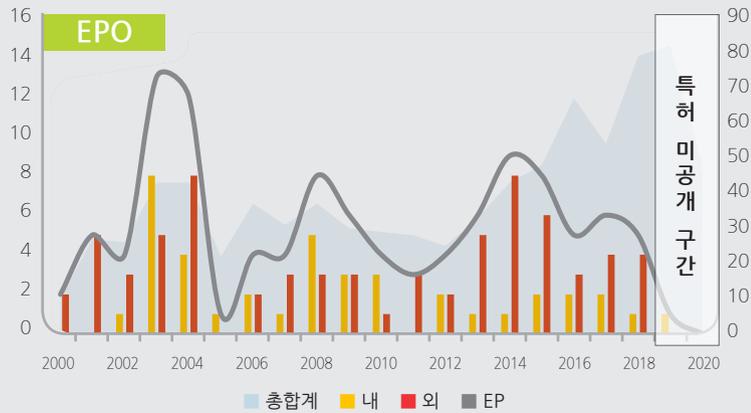
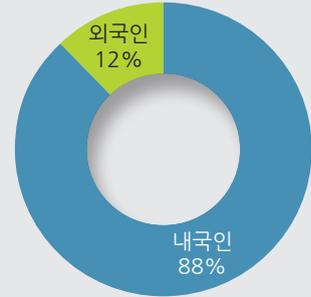
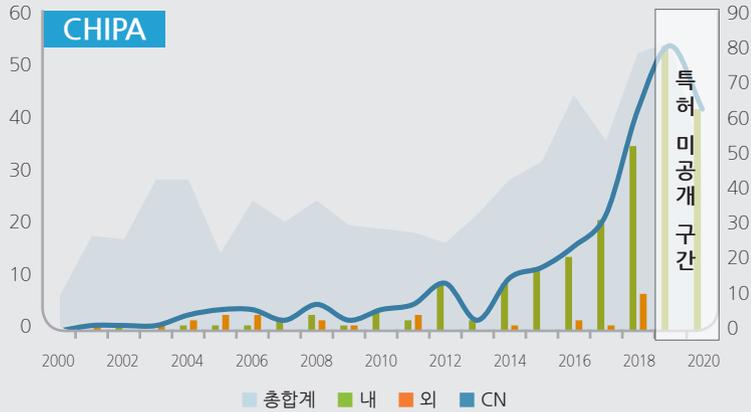
[그림 1] 전체 특허 연도별 동향



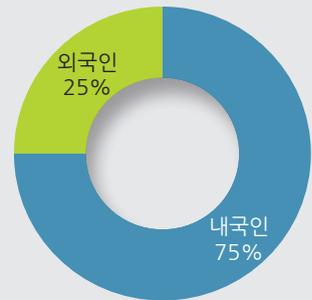
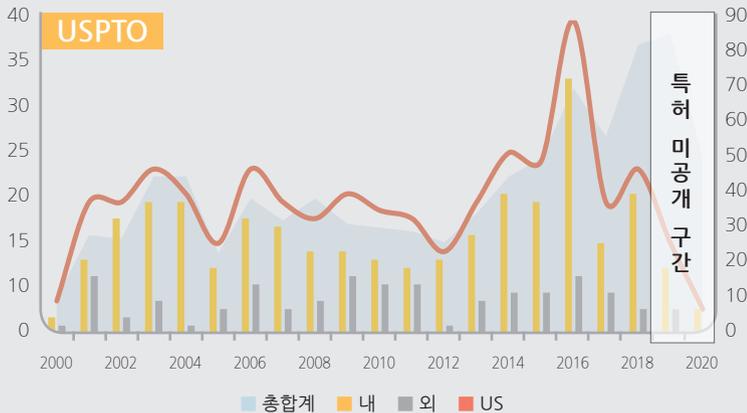
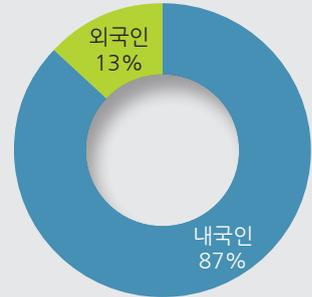
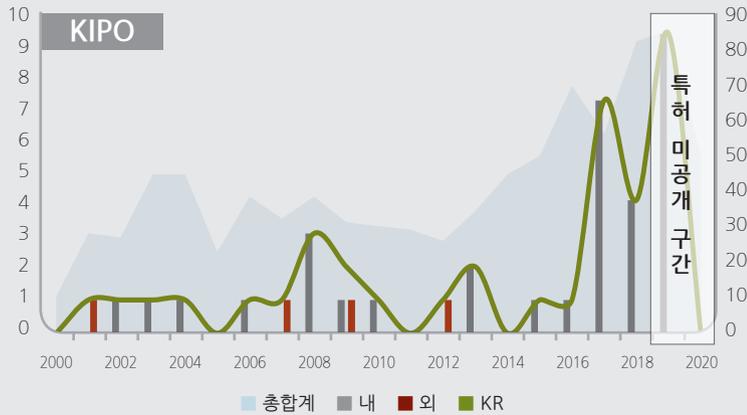
- 전체 877건 중 351건(40%)이 미국 출원 건으로 가장 높은 비중을 차지함
 - 다음으로 중국 242건(28%), 유럽 122건(14%), 한국 38건(4%), 일본 36건(4%)순
- 1995년 최초출원이 시작되었으며, 최근 10년 동안 꾸준한 상승세를 나타냄
 - 2001년에서 2003년, 2013년에서 2018년 급격한 상승구간이 존재하며, 연도별로는 초창기(1994~2010) 미국 및 유럽을 중심으로 견인되던 양상이, 2013을 기점으로 중국출원이 급격히 증가하며 전체동향을 견인하고 있음

2) 국가별 출원동향 분석

[그림 2] 국가별 연도별 동향 및 내외국인 추이 (최근 30년)



[그림 2] 국가별 연도별 동향 및 내외국인 추이 (최근 30년) _ 계속

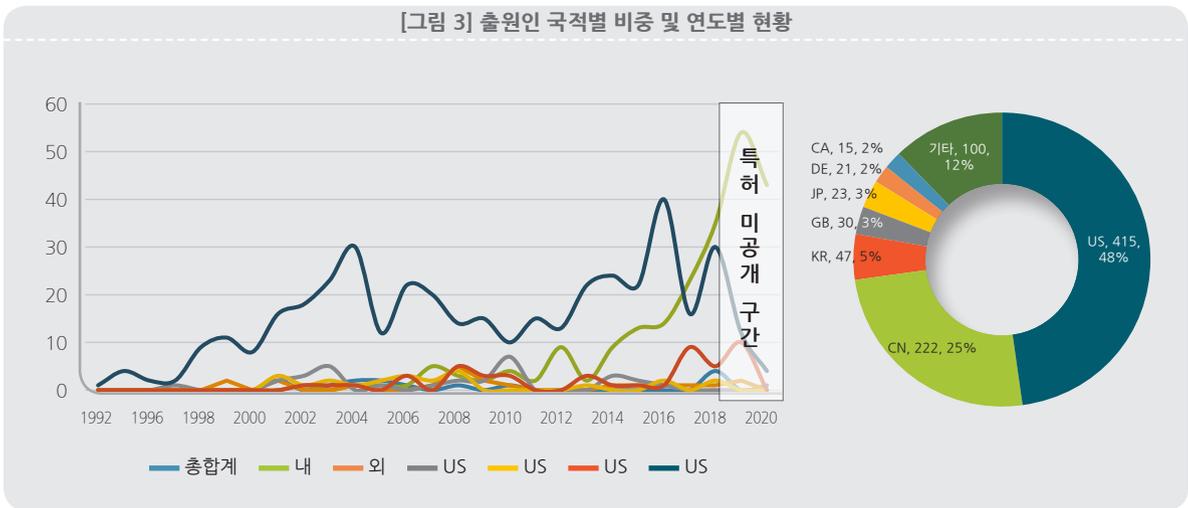


- (중국) 전체 242건의 특허를 출원하였으며, 그 중 내국인 비중이 88%로 대부분 자국민에 의한 출원이 이루어지고 있음. 최근까지 꾸준한 상승세를 이어가고 있으며 특히 2013년을 기점을 급격한 상승이 두드러지게 나타남
 - 2000년대 초 외국인 활동비중이 높은 반면, 최근 내국인을 중심으로 출원이 활발하게 일어나고 있음
- (유럽) 전체 122건의 특허를 출원하였으며, 그 중 외국인 비중이 66%로 주요 5개국 중 외국인 출원비중이 높은 편임. 과거 대비 저조한 출원건수와 2014년을 기점으로 감추세를 나타냄
 - 초창기 내·외국인 출원 비중이 유사하게 나타난 반면, 2010년 이후 외국인 주도로 출원활동이 이루어지고 있음

- (일본) 전체 36건으로 주요 5개국 중 가장 낮은 출원 건수를 나타내며, 외국인 비중이 78%로 높게 분석됨. 연도별로 3건 내외의 저조한 출원 건수를 보임
- (한국) 전체 38건으로 일본 다음으로 낮은 출원 건수를 보이나, 2017년을 기점으로 급격한 상승이 두드러지게 나타나며, 최근까지 상승세를 나타냄
- 내국인 비중이 87%로, 중국 다음으로 높은 비중을 차지하는 것으로 분석됨
- (미국) 전체 351건의 특허를 출원하였으며, 2016년 급격한 상승구간이 두드러지게 나타나며 이를 번복점으로 감소세에 들어선 것으로 나타남. 내국인 비중이 75%로 비교적 높은편에 해당함

3) 출원인 국적별 동향

[그림 3] 출원인 국적별 비중 및 연도별 현황



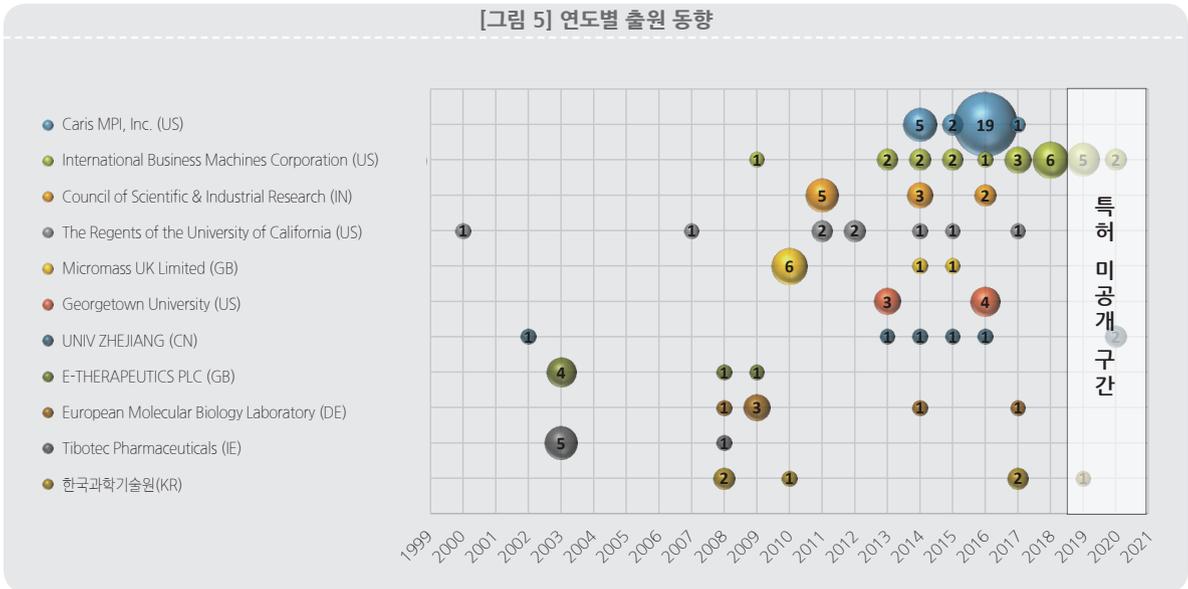
- 출원인 국적별 비중을 살펴보면, 415건 (48%)이 미국으로 가장 높은 비중을 차지하며, 다음으로 중국 222건(25%), 한국 47건 (5%)순으로 전체 동향과 유사하게 나타남
- 연도별 추이 또한 마찬가지로, 2013년 이후 중국국적 출원인의 출원빈도가 가파르게 증가하며, 미국의 경우 전체동향과 유사한 패턴을 나타내며 2013년을 기점으로 감소추세를 나타냄
- 국내의 경우 2016년 이후 국내국적 출원인의 출원건수가 증가하는 양상을 보임
- 유럽에서는 영국의 출원 비중이 가장 높게 나타나며 미국, 중국, 한국대비 상대적으로 저조한 출원건수를 나타냄

4) 출원건수 기준 상위 다출원인 분석



- 출원건수 기준 상위 10개기관 도출결과, Caris MPI, Inc.(미국)이 27건으로 가장 많은 출원을 진행한 것으로 분석됨
 - 다음으로, International Business Machines Corporation (미국) 24건, Synteca bio(KR) 18건, Council of Scientific & Industrial Research (인도) 10건, The Regents of the University of California (미국) 9건, Micromass UK Limited (영국) 8건, UNIV ZHEJIANG (중국) 및 Georgetown University (미국) 7건 순으로 나타남
- 국내에서는 Synteca Bio가 18건으로 가장 많은 출원을 진행한 것으로 분석됨
- 국가별 출원비중을 보면, 자국내 출원을 중점적으로 진행하고 있는 것으로 나타남, The Regents of the University of California의 경우 대학기관임에도 불구하고 국가별 고른 출원양상을 나타냄
- 상위 다출원인 국적을 살펴보면, 11개 기관 중 3개 기관이 미국, 4개 기관이 유럽, 인도, 중국 1곳, 한국이 2곳으로 서구권 소속 기관을 중심으로 다출원인이 형성됨
- 기관 특성을 살펴보면 6개 기관이 학계 또는 공공연에 해당하였으며, 6개 기관이 산업계에 해당함
- 국내 기업으로는 메디리타, 신테카바이오에서 최근 인공지능을 활용한 신약 발굴 및 반응 예측기술 등에 대한 출원을 진행한 것으로 확인됨

[그림 5] 연도별 출원 동향



- International Business Machines Corporation, UNIV ZHEJIANG, 한국과학기술원의 경우 최근까지 출원활동을 보임. 최근 출원된 주요 기술내용은 다음과 같음
 - (International Business Machines Corporation) 신경 네트워크 모델을 기반으로 한 약물 발굴기술, 컴퓨터 시스템 및 데이터를 활용한 약물 발굴 및 재창출 (repositioning) 기술
 - (UNIV ZHEJIANG) 생물학적 활성 실험결과와 컴퓨터 가상 분석을 융합한 약물 디자인, 가상 스크리닝 기술
 - (한국과학기술원) 가상환경(in silico)에서 대상 화합물의 타깃 물질 저해여부 분석하는 단계를 포함하는 디스토니아 치료제 후보물질 스크리닝 기술, 컴퓨터 프로그램을 활용한 인체 내 다수의 표적물질에 대한 약물의 결합을 예측하는 기술
- E-THERAPEUTICS PLC, Tibotec Pharmaceuticals의 경우 2010년 이후 출원활동이 전무한 것으로 나타났으며, 현재 동향은 다음과 같음
 - (E-THERAPEUTICS PLC) 런던 증권거래소에 상장되어있으며, 현재까지 기업 영위중에 있음. 시스템 생물학을 기반으로 단백질 간 상호작용, 약물반응 예측기술을 보유
 - (Tibotec Pharmaceuticals) 빅데이터 분석, 알고리즘, 딥러닝 기반 HIV 치료제 및 진단기술을 개발하던 회사로서, 2002년 존슨앤존슨 인수, 현재 Janssen Diagnosis 내 조직으로 운영 중에 있음

5) 기타 출원인 주요 기술내용

- (Cris MPI, Inc.) 2016년 집중적인 출원활동을 나타내며, 2017년 이후 출원활동 나타내지 않음. 주요 기술내용은 분자 프로파일링을 기반으로 치료제를 식별하는 리포트 생성 기술로써, 환자의 핵산 서열분석 결과를 바탕으로 표적 분자에 대한 결합 가능한 치료제를 선별하고 제시하는 기술에 해당
- (Council of Scientific & Industrial Research) 가상 고처리량 스크리닝(virtual high throughput screening)을 위한 NMR 화학 이동(chemical shift)기반 binary fingerprint 분석법
- (The Regents of the University of California) 베이즈 네트워크(Bayesian network) 기반의 생물학적 네트워크를 구축하여 약물 타깃 발굴하는 기술 등
- (Micromass UK Limited) mass spectrometers 제조, 판매회사에 해당. 2010년 집중된 출원양상을 보이며, 2015년 이후 출원건 나타내지 않음. 주요 출원기술은 항암제의 단면을 평가하기 위한 알고리즘을 이용하여 사전 결정된 항암제들 사이 항암 활성의 차이와 분자구조의 차이의 상관관계를 제공하는 기술에 해당함
- (Georgetown University) Sivanesan Dakshanamurthy, 약물-타깃간 상호작용을 예측하는 기술로써, 컴퓨터 가상 시뮬레이션을 이용 분자구조, 화학적 특성, 밀루화학적 기능 등을 기반을 하여 상호작용을 예측하고 약물 재창출 정보를 제공하는 기술. Salim Shah, 3차 구조기반 타깃에 결합하는 물질 발굴 기술 출원
- (UNIV ZHEJIANG) 컴퓨터 기반 약물 디자인, 구조기반 가상 스크리닝을 통한 lead 물질 발굴 기술 등
- (European Molecular Biology Laboratory) X-ray crystallography 기반 구조결정 및 타깃 억제가능한 화합물 디자인 및 스크리닝 기술
- 이 외, 국내 산업계 출원인으로는 메디리타가 4건으로 가장 많은 출원을 진행한 것으로 나타났으며, 2019년 신약 후보물질 발굴을 위한 데이터 처리 방법에 대한 출원을 진행함
- 다음으로 신테카바이오에서 2017년 AI 딥러닝 기술을 통한 약물 적응증 및 반응 예측 시스템에 대한 출원을 진행한 것으로 나타남

3. 소결

- 2012년을 기점으로 최근까지 상승세를 이어가고 있으며, 미국 출원건수가 가장 높은 비중을 차지함
- 다만, 연도별 추이를 살펴보면, 초창기 미국 및 유럽을 중심으로 형성된 출원이 중국으로 이동되어 최근 상승동향을 견인해가고 있음
- 국가별로는, 중국 및 한국에서 최근 상승세가 일어나며 두 국가 모두 내국인 비중이 높은 국가로 자국내 출원인에 의한 상승동향으로 판단
- 출원인 국적별 동향을 살펴보면, 국가별 동향과 마찬가지로 미국, 중국 순으로 높은 비중을 차지하며, 연도별로는 과거 미국 국적 출원인을 중심으로 활발히 일어나던 출원이 점차 감소하고 중국 국적 출원인에 의한 출원건수가 급증하는 양상을 나타내며, 과거 미국 및 유럽을 중심으로 이루어지던 개발이 중국으로 이동되고 있음을 시사함
- 다만, 인공지능 기반 신약개발 기술기업으로 주로 언급되는 benevolentAI, Exscientia 등의 기업은 도출되지 않았는데, 플랫폼 자체보다는 물질특허로써 출원을 다수 진행한 것으로 확인됨
- 따라서, 미국 및 유럽에서 나타는 감소 양상은 기술성숙 및 창출된 약물 등의 권리화로 감소하였으며, 이후 후발주자(한국, 중국)의 플랫폼 기술 개발에 따른 출원 건수 증가양상을 보이는 것으로 판단됨

제3장. 인공지능을 활용한 신약 개발시 고려할 특허 요건

1. 개요

- 우리나라 특허법은 특허 취득의 대상이 되는 발명을 ‘자연법칙을 이용한 기술적 사상의 창작’으로 정의하고 있음. 즉, 특허법상 발명이란 “기술” 자체가 아닌 “기술적 사상”이며, “창작”에 해당하여야 함
- 다만, 이러한 정의는 생명분야는 살아 있는 생물체를 발명의 대상으로 하고 있으며, 실험데이터로 증명이 필요함에 따라 지적재산권 분야에서 다른 기술분야와 동일하게 특허법을 적용하기에 적지 않은 논란이 따랐고 그 가운데에서 첨단기술의 발명을 보호하기 위한 논리의 개발 또한 활발하게 진행되어 왔음
- 즉, 살아 있는 생물체를 특허 대상에 포함시킬 수 있는 것인지 청구하고 있는 생물체 또는 그로부터 분리된 물질을 발명으로 볼 것인지 발견으로 볼 것인지, 실험데이터가 반드시 필요한지에 대한 논쟁이 오랜 기간 제기되어 왔음
- 현재까지도 이 분야는 특허성 판단을 위한 심사실무나 청구범위의 해석 침해 여부 판단 등 지식재산권의 취득부터 권리화 이후까지의 모든 단계에서 다른 기술과 일반화시키기 어려운 특수성을 보이고 있음
- 또한, 이러한 논의는 AI를 활용한 약물개발에서 더욱 가속화될 것으로 예상됨
- 이에 따라, 우리나라를 포함한 주요국의 생명분야 특허의 실시예 구성요건 및 AI를 활용한 가상 데이터의 취급과 관련한 규정 또는 심사례를 살펴보도록 함

2. 한국

1) 법규정

- 한국 특허법 제 42조에서는 특허출원서에 대한 요건을 규정하고 있으며, 해당 조항에서는 발명의 설명 기재 요건 및 특허청구범위 기재 요건에 대하여 다음과 같이 규정하고 있음

- ③ 제2항에 따른 발명의 설명은 다음 각 호의 요건을 모두 충족하여야 한다.
1. 그 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 사람이 그 발명을 쉽게 실시할 수 있도록 명확하고 상세하게 적을 것
 2. 그 발명의 배경이 되는 기술을 적을 것
- ④ 제2항에 따른 청구범위에는 보호받으려는 사항을 적은 항(이하 "청구항"이라 한다)이 하나 이상 있어야 하며, 그 청구항은 다음 각 호의 요건을 모두 충족하여야 한다.
1. 발명의 설명에 의하여 뒷받침될 것
 2. 발명이 명확하고 간결하게 적혀 있을 것

2) AI를 이용한 가상 데이터 관련 규정

- 화학분야의 물질발명의 경우, 쉽게 실시할 수 있기 위해서는 발명의 설명에 특정의 출발물질, 온도, 압력, 유입 및 유출량 등 그 물질발명을 제조하는 데 필요한 구체적인 반응조건과 그 조건하에서 직접 실시한 결과를 실시예로 기재하는 것이 필요함
- 심사기준에서는 “컴퓨터 상에서 가상실험으로(in silico) 개발된 물질(의약 등)의 경우에도 동일한 기준이 적용된다”고 규정하고 있음
- 즉, 가상실험에 의하여 개발된 물질도 출발물질, 온도, 등 그 물질발명을 제조하는 데 필요한 구체적인 반응조건과 결과를 실시예로 기술해야 함을 정확히 명시하고 있음
- 또한, 화학물질의 용도발명은 발명의 설명에 발명의 효과를 기재하여야만 발명이 완성되었다고 볼 수 있는 동시에 명세서 기재요건을 충족하였다고 볼 수 있음
- 특히, 의약의 용도발명에 있어서는 그 출원 전에 명세서에 기재된 약리효과를 나타내는 약리기전이 명확히 밝혀져 있는 등 특별한 사정이 있지 않은 이상, 해당 발명에 관계된 물질에 그와 같은 약리효과가 있다는 것을 약리데이터 등이 나타난 시험예로 기재하거나 또는 이에 대신할 수 있을 정도로 구체적으로 기재하여야 함
- 이러한 기재요건은, 즉 AI 또는 in silico를 통한 가상 데이터만으로는 발명의 설명 및 특허청구범위 요건을 만족하기 어려우며, 실질적인 화학물질의 합성 및 의약의 용도를 확인하기 위한 구체적인 데이터가 필요하다는 것을 의미함

3. 미국

1) 법규정

- 미국에서 상세한 설명과 관련하여 명세서의 기재 요건을 규정하는 미국 특허법 제 112조 제(a) 항은 특허발명의 명세서에 기재되어야 할 사항에 대하여 다음과 같이 규정하고 있음

“명세서는 발명에 대한 설명 (a written description of the invention)과 발명이 속하는 분야 또는 가장 연관된 분야의 통상의 기술자로 하여금 발명을 재현하여 실시하여 만들어 사용할 수 있도록 완전, 명백하고 간결한 용어로 그 발명의 제작과 사용에 관한 방법과 공정을 포함해야 하며, 발명자 또는 공동 발명자가 고안한 그 발명을 실현하기 위한 최선의 실시예(best mode)를 제시하여야 한다.

- 상기 조문상 명백하지 않으나, 기술 공개를 위한 상세한 설명의 기재요건으로 미국 특허법이 정한 요건은 1) 발명에 대한 설명 (Written Description Requirement), 2) 발명의 실시가능 (Enablement Requirement), 3) 최선의 실시예 (Best Mode)의 세가지로 볼 수 있음

2) 발명 실시가능성 관련 특허 실무

- 발명의 실시가능성과 관련하여 미국의 특허 실무에서는 실험을 필요로 할 시 해당 실험이 “과도”한지를 판단 근거로 함. 법원은 “보호하려는 발명이 실시 가능하여 해당 분야 통상의 기술자로 하여금 과도한 실험 없이 제조 및 사용할 수 있을 것”으로 해석하고 있음
- 과도한 실험의 여부를 판단시 In re Wands, 858 F.2D 7431 판결에서 CAFC는 과도한 실험의 판단을 다음과 같은 8가지 요소를 판단해야 한다고 기준을 정립하였음
 - 청구항의 범위 (the breadth of the claims),
 - 발명의 성질 (the nature of the invention),
 - 선행기술의 상황 (the state of the prior art),
 - 통상 기술자의 수준 (the level of one of ordinary skill),
 - 기술의 예측곤란성 수준 (the level of predictability in the art),
 - 발명자가 제공한 지침의 양 (the amount of direction provided by the inventor)
 - 실제로 작동하는 실시예의 존재 (the existence of working examples), 및
 - 개시 내용에 의한 발명을 제조 혹은 사용하기에 필요한 실험의 양 (the quantity of experimentation needed to make or use the invention based on the content of the disclosure)
- 미국 특허는 "새롭고 유용한 프로세스, 기계, 제조 또는 물질의 구성 또는 그에 대한 새롭고 유용한 개선을 발명하거나 발견하는 사람은 누구나 특허를 획득할 수 있음"을 규정하고 있음

3) 발명 유용성 (utility)

- 미국 특허 규정에는 "새롭고 유용한 프로세스, 기계, 제조 또는 물질의 구성 또는 그에 대한 새롭고 유용한 개선을 발명하거나 발견하는 사람은 누구나 특허를 획득할 수 있다."라는 요건을 포함하고 있음
- 또한, 특허 명세서에는 발명에 대한 설명과 그것을 만들고 사용하는 방법과 과정이 포함되어있어 당업자가 발명을 만들고 사용할 수 있어야한다. 이 두 가지 요구 사항이 미국의 'Utility 요건'을 구성함. 이 두 부분으로 구성된 요건이 충족 되려면 특허권자는 유용성에 대한 구체적이고 실질적이며 신뢰할 수 있는 증거를 제공해야 함
- 구체적이고 실질적인 유용성을 갖는 것으로 간주되는 약학적 제제의 의학적 용도와 관련된 발명의 경우, 본 발명이 특별한 용도를 가지고 있음을 입증할 필요가 있으며, 약학적 제제가 질병의 치료에 사용할 가능성이 있다고 언급하는 것만으로는 효용 요건을 충족하기에 충분하지 않음

4) AI를 이용한 가상 데이터 관련 태도

- 약학적 제제가 청구된 의학적 용도를 달성 할 수 있음을 증명하는 데이터가 전혀 포함되지 않은 특허 명세서에는 구체적이거나 실질적인 유용성을 갖는 것으로 간주되지 않으나, 과도한 양의 데이터가 포함될 필요는 없음
- 따라서, 약학적 활성제가 청구된 활성을 가지고 있고 질병 또는 상태를 치료하는 데 사용될 수 있음을 보여주기에 충분하면 유용성을 입증하기에 충분할 것으로 예상됨
- 다만, 신뢰할 수 있는 유용성은 당해 분야의 숙련자가 약학적 제제가 실제로 청구된 생물학적 활성을 나타낸다는 것을 인식할 경우에만 확립될 것임
- 그러나 생체 내 데이터는 필수적인 것은 아니며 시험관 내 테스트 결과를 제공함으로써 신뢰할 수 있는 유용성을 확립 할 수 있습니다. 예를 들어, 활성 화합물의 약리학적 활성을 보여주는 시험관 내 결과는 충분할 것이며, 규제 승인에 필요한 많은 양의 데이터는 유용성을 입증하는 데 필요하지 않습니다 [8]. 스템 생물학을 기반으로 단백질 간 상호작용, 약물반응 예측기술을 보유

4. 유럽

1) 법규정

- 유럽 특허법 제83조에서 “유럽 특허출원은 반드시 충분하고 완전하게 발명을 공개하여 통상의 기술자가 해당 발명을 실시할 수 있도록 하여야 한다”로 규정하고 있음
- 특허 특허심사지침(2014) F 부분 제 3장에서 제83조에 대한 상세한 규정을 부고 있음
- “명세서는 반드시 해당 발명을 실시할 수 있는 적어도 하나의 방식에 대한 상세한 설명을 하여야 한다. 명세서는 통상의 기술자에 있어서 잘 알려진 부수적 특징 (well-known ancillary features)에 대해 기재할 필요가 없으나 발명을 실시하기에 필수적인 특징은 반드시 충분한 공개를 하여 통상의 기술자가 해당 발명을 실시할 수 있도록 하여야 한다. 구체적인 실시예 외에 명세서는 반드시 충분한 정보를 더 개시하여 통상의 기술자가 보통기술상식 (common general knowledge)을 이용하여 보호하려는 전부 범위 내에서 과도한 (undue burden) 및 창조적 기능 (inventive skill) 없어도 발명을 실시할 수 있도록 하여야 한다”로 규정하고 있음

2) AI를 이용한 가상 데이터 관련 태도

- 발명의 상세한 설명이 알려진 단백질과의 상동성을 기반으로 '데이터 마이닝'에 의해 발견된 단백질에 관한 발명은 아미노산 서열 상동성에 대한 증거만 제공하는 경우 상세한 설명 요건을 만족하지 못한 것으로 본 바 있음 (HUMAN GENOME SCIENCES, INC v ELI LILLY & CO)

- 즉, 명세서는 발명이 청구항의 전체 범위에 걸쳐 수행 될 수 있도록 충분하여야 하며, 명세서는 발명이 과도한 부담 없이 수행 될 수 있도록 충분해야 하는 바, 데이터 마이닝을 통한 가상 데이터만으로는 명세서 기술에 충분하지 못한 태도를 나타내고 있음

5. 일본

1) 법규정

- 일본 특허법 제36조 제4항 제1호에서 “하나의 상세한 명세서는 반드시 발명에 대하여 정확하고 완전하게 설명을 하여 통상의 기술자가 해당 발명을 실시할 수 있도록 할 것”으로 규정하고 있으며, 일본 특허심사지침에서 이를 추가 규정하고 있음
- 일본 특허심사지침 제2부분 제1장 제1절 실시 가능요건에서 실시 가능한 청구하려는 발명이 실시가능 해야 함을 말하는 것임. 따라서 명세서는 발명에 대해 정확하고 완전하게 설명을 하여 통상의 기술자가 청구범위에서 보호하려는 발명에 대해 실시할 수 있도록 하여야 함
- 일본 특허실무에서 심사관을 청구하려는 발명의 카테고리 식별에 의하여 발명의 실시 가능 요건의 충족 여부를 판단함. 이 중 물질 발명의 실시 가능 요건의 경우, 발명의 실시 가능이라 함은 해당 물질을 제조 및 사용하는 것을 말함. 따라서 물질 방법은 통상의 기술자로 하여금 물질을 제조 및 사용할 수 있도록 충분히 개시를 하여야 함

2) AI를 이용한 가상 데이터 관련 태도

- 일본은 심사기준에서 화학 물질에 관한 기술 분야와 같이 일반적으로 물건의 구조와 명칭에서 그 물건을 어떻게 만들고 어떻게 사용 하는지를 이해하는 것이 비교적 어려운 기술 분야에 속하는 발명의 경우, 당업자가 그 발명을 실시 할 수 있도록 발명의 상세한 설명을 기재하기 위해서는 일반적으로 하나 이상의 대표적인 실시예가 필요하다. 또한 용도 발명 (예 : 제약)에서는 일반적으로 용도를 뒷받침하는 실시예가 필요한 태도를 나타내고 있음
- 이에 따라, 화합물 및 약학의 용도발명 등의 경우 하나 이상의 실질적 실시예가 필요함을 원칙으로 하고 있음을 할 수 있는 바, 가상 데이터만으로 해당 요건이 만족된다고 보기 어려울 것으로 예상됨

제 4장 결론

1. 데이터 필요 정도의 검토

- AI를 활용한 가상 데이터 또는 in silico 데이터는 특정 구조 또는 서열의 물질이 효소 또는 수용체 등에 결합할지 여부에 대한 예측일 뿐이며, 따라서, '실제'데이터가 없는 경우, 당업자는 발명이 청구하고자 하는 대상이 명세서에 명시된 효과를 달성 할 것인지 확인하기 위한 실험을 수행해야함
 - 예를 들어, 특정 질병을 치료하기 위한 화합물을 스크리닝하기 위하여, 명세서 내에 in silico 스크리닝에 의해 확인된 화합물 만을 기술함으로써 해당 화합물의 용도에 대한 권리범위의 출원은 이러한 화합물이 실제로 표적 효소 또는 수용체의 작용제 또는 길항제 역할을 할 수 있음을 입증하지 못함
 - 유효한 특허권리범위는 출원인이 화합물이 실제로 약리학적으로 작동한다는 것을 증명 한 경우, 즉 in vivo / 또는 in vitro 에서 생물학적으로 활성을 나타내는 경우에 한하여 획득할 수 있다고 해석하는 것이 현행되는 국내 및 해외의 심사 기준 및 판례의 태도를 미루어 보아 타당함
 - 생물학적 효능을 뒷받침하는 데이터의 부족은 발명이 당업자가 발명을 만들거나 사용할 수 있을 만큼 충분히 상세하게 기술되지 않았거나, 유용성이 부족함을 의미할 수 있으며, 이는 특허청구범위 및 발명의 상세한 설명의 기재불비 또는 실시불가능으로 판단받을 수 있음
- 또한, 이러한 요건은 거절이유 뿐 아니라 특허무효사유에 해당할 수 있음

2. 이용가능한 제도

1) 가출원제도

- AI 및 in silico 에 따른 예상 약물 후보군이 도출되는 경우 해당 데이터를 기반으로 가출원제도를 이용할 수 있음
- 미국의 가출원 (provisional application)은 가출원시 형식의 제약이 없는 명세서를 제출한 후 1년 이내에 정규출원으로 전환하면 우선 출원일을 인정받을 수 있음. 특허출원일을 빠르게 확보하기 위해 미국의 가출원 제도를 이용해 특허를 먼저 출원한 후, 이를 기초로 조약 우선권을 주장해 PCT 특허출원하는 전략을 이용할 수 있음
- 국내의 경우 가출원제도를 별도로 이용하고 있지 않으나, 국내우선권주장출원 제도를 활용하여 가출원 제도를 이용할 수 있음. 또한, 국내의 경우 특허청구범위 유예 제도 및 임시 명세서 제출 등의 제도를 운영하여 연구개발 후 논문, 연구노트 등을 그대로 제출

하여 특허출원일을 빠르게 확보 가능할 수 있도록 하고 있음

- 가출원 제도 또는 국내우선권주장출원 제도를 활용하여 예상 약물 후보군을 출원함으로써 우선일을 선점하고 1년 내에 데이터를 보강하여 정식출원을 진행하는 방식을 다양한 출원인이 이용하고 있으며, 이는 AI 및 in silico 에 따른 데이터를 보강하는 방식으로 적합할 것으로 예상됨

2) 심사단계에서의 데이터 제시

- 대부분의 국가는 명세서 내에 데이터를 추가하거나, 수정하는 보정은 보정의 범위를 벗어나는 것으로 규정하고 있음. 국내의 경우 보정의 범위는 최초출원된 명세서 내에 기재된 사항으로 제한되어 있음
- 다만, 대부분의 국가는 심사 단계에서 특허의 진보성 및 신규성을 주장하기 위하여 추가의 데이터를 의견서 등에 제시하는 것이 가능함
- 이에, 출원시 제출이 제시하지 못하였던 데이터를 심사단계에서 제시함으로써 부족하였던 데이터를 특허성 판단에 활용할 수 있음

3) Continuation In Part application

- 일부 계속출원 (Continuation In Part, CIP)는 미국 특허법상의 제도로, 이미 진행된 출원을 기반으로, 이미 출원한 내용의 일부 또는 전부와 함께 종래 명세서에 기술하지 않은 내용을 추가하는 출원을 의미함
- 종래 출원시 기술된 내용 이외의 데이터, 청구범위, 내용을 추가하고자 한다면, 이러한 일부 계속출원을 이용하는 것이 가능함. 일부 계속 출원에 새로운 기술 내용이 포함되므로 원출원(최초출원)의 출원일을 우선일로 유지 할 수는 없음. 그러나, 일부 계속 출원은 원출원의 기술 내용에 새로 개발된 기술 내용을 추가하여 발명의 연속성을 유지하는 장점이 존재함

〈참고문헌〉

1. 보건산업브리프 Vol. 314 “인공지능(AI)을 활용한 신약개발 국내·외 현황과 과제” 2020. 9. 18
2. Kit-Kay Mak et al. “Artificial intelligence in drug development: present status and future prospects” 2019. 3 (<https://doi.org/10.1016/j.drudis.2018.11.014>)
3. 한국특허전략개발원 포스트 코로나 대비 기술 확보를 위한 AI-BI를 활용한 약물 재창출 기술 특허 분석 2020.08
4. Jacqueline Satchell et al. "Experimental evidence to support a patent application: are in silico data enough?: 2011.08.01. (<https://doi.org/10.4155/fmc.11.70>)



March 2021. Issue 25

Writer

이혜리 정진국제특허법률사무소, 변리사

Reviewer

김태순 신테크바이오, CEO

BIO ECONOMY REPORT

발행 : 2021년 04월 | 발행인 : 고한승 | 발행처 : 한국바이오협회 한국바이오경제연구센터
13488 경기도 성남시 분당구 대왕판교로 700 (삼평동, 코리아바이오파크) C동 1층, www.koreabio.or.kr

* 관련 문의 : 한국바이오협회 한국바이오경제연구센터 e-mail : Koreabio1@koreabio.org



한국바이오경제연구센터
KOREA BIO-ECONOMY RESEARCH CENTER

Innovating Data Into Strategy & Business



9 772508 682002 12
ISSN 2508-6820