

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 1 部門第 1 区分

【発行日】令和 3 年 7 月 29 日 (2021.7.29)

【公開番号】特開 2019-10095 (P2019-10095A)

【公開日】平成 31 年 1 月 24 日 (2019.1.24)

【年通号数】公開・登録公報 2019-003

【出願番号】特願 2018-122565 (P2018-122565)

【国際特許分類】

C 1 2 M 1/34 (2006.01)

G 0 6 N 20/00 (2019.01)

【F I】

C 1 2 M 1/34

G 0 6 N 99/00 1 5 3

【手続補正書】

【提出日】令和 3 年 6 月 17 日 (2021.6.17)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

対象化合物の構造に基づいて、前記対象化合物の活性を予測する予測装置であって、
前記対象化合物の構造モデルに対して相対的に複数の方向から画像を生成する生成部と

、
学習モデルを用いて前記生成部が生成した前記複数の画像から前記対象化合物の活性を
予測する予測部と、を備え、

前記予測部は、少なくとも、機械学習を行う学習モデルであって、前記複数の画像を入力とする学習モデルを用いる予測装置。

【請求項 2】

前記学習モデルは、深層学習を行う学習モデルを用いる請求項 1 に記載の予測装置。

【請求項 3】

前記生成部は、仮想カメラを、前記構造モデルに対して少なくとも 1 つの軸を中心に相
対的に回転させながら前記構造モデルを撮像する請求項 1 または 2 に記載の予測装置。

【請求項 4】

前記構造モデルでは、前記対象化合物の原子の色は、当該原子の種類に応じて異なる請
求項 1 ～ 3 の何れか一項に記載の予測装置。

【請求項 5】

対象化合物の構造に基づいて、前記対象化合物の活性を予測する予測方法であって、
コンピュータが、前記対象化合物の構造モデルに対して相対的に複数の方向から画像を
生成する生成ステップと、

コンピュータが、学習モデルを用いて前記生成ステップにおいて生成された前記複数の画
像から前記対象化合物の活性を予測する予測ステップと、を包含し、

前記予測ステップは、少なくとも、機械学習を行う学習モデルであって、前記複数の画
像を入力とする学習モデルを用いるステップを包含する予測方法。

【請求項 6】

請求項 1 ～ 4 の何れか一項に記載の予測装置としてコンピュータを機能させるための予
測プログラムであって、上記生成部および上記予測部としてコンピュータを機能させるた

めの予測プログラム。

【請求項 7】

学習モデルの入力データを生成する学習モデル入力データ生成装置であって、

前記学習モデルは、対象化合物の構造モデルに対して相対的に複数の方向からの画像を
入力とし、当該対象化合物の活性の予測情報を出力とする学習モデルであり、

前記対象化合物の構造モデルに対して相対的に複数の方向から画像を生成する生成部を
備える学習モデル入力データ生成装置。

【請求項 8】

請求項 7 に記載の学習モデル入力データ生成装置としてコンピュータを機能させるための学習モデル入力データ生成プログラムであって、上記生成部としてコンピュータを機能させるための学習モデル入力データ生成プログラム。

【請求項 9】

対象化合物の構造に基づいて、前記対象化合物の活性を予測する予測装置であって、

前記対象化合物の構造モデルに対して複数の方向からの画像を入力し、深層学習を行っ
て特徴ベクトルを出力する第 1 の学習モデルと、

前記特徴ベクトルを入力し、前記対象化合物の活性の予測情報を出力する第 2 の学習モ
デルとを、組み合わせること、

を備えている、予測装置。