

【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 6 部門第 3 区分  
 【発行日】平成 18 年 12 月 7 日 (2006.12.7)

【公開番号】特開 2004-158008 (P2004-158008A)  
 【公開日】平成 16 年 6 月 3 日 (2004.6.3)  
 【年通号数】公開・登録公報 2004-021  
 【出願番号】特願 2003-366753 (P2003-366753)  
 【国際特許分類】

**G 0 6 F 17/50 (2006.01)**

【F I】

G 0 6 F 17/50 6 3 8

【手続補正書】

【提出日】平成 18 年 10 月 23 日 (2006.10.23)

【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】

所望の特性セットに最も密接にマッチする材料を設計する方法であって、  
 ユーザから少なくとも 1 つの入力パラメータを取得し ( 1 0 , 2 0 , 3 0 , 4 0 , 5 0 , 6 0 ) 、  
 グローバル・データリポジトリから少なくとも 1 つの事前マッチングが存在する実験的  
 試行の実際の特性値を引き出し ( 7 0 ) 、  
 事前マッチングが存在する実験的試行の各々が所望の特性値セットにどれ位良好にマッ  
 チするかを判断し ( 8 0 , 9 0 , 1 1 0 ) 、  
 その結果をユーザに出力する ( 1 2 0 ) 、  
 ことを含む方法。

【請求項 2】

前記判断する段階が、  
 事前マッチングが存在する実験的試行の各々の特性値にそれぞれスコア付けして、スコ  
 アをもつ特性値を生成し ( 9 0 ) 、  
 前記事前マッチングが存在する実験的試行の各々に対する全体的マッチスコアを計算す  
 る ( 1 1 0 ) 、  
 ことを含む、請求項 1 記載の方法。

【請求項 3】

前記全体的マッチスコアを計算することが、  
 各特性に対する重み付け値を考慮に入れることによって、前記スコアをもつ特性値の各  
 々に重み付けして、重み付けされスコアをもつ特性値を生成し、  
 前記重み付けされスコアをもつ特性値の各々を互いに乗算し、  
 前記乗算された数を 1 / ( 全ての優先度の和 ) まで増加させる、  
 ことを含む、請求項 2 記載の方法。

【請求項 4】

結果をユーザに出力する前に、前記事前マッチングが存在する実験的試行を、それらの  
 全体的マッチスコアによってそれぞれソートすること ( 1 2 0 ) を更に含む、請求項 2 記  
 載の方法。

【請求項 5】

前記事前マッチングが存在する実験的試行は、それらの各々の全体的マッチスコアに基づいて降順にソートされる、請求項 4 記載の方法。

【請求項 6】

既存のどの実験的試行よりも所望の特性セットにより密接にマッチする少なくとも 1 つの新材料を予測する ( 1 5 0 ) 段階を更に含む、請求項 1 記載の方法。

【請求項 7】

新材料の各々の特性値にそれぞれスコア付けして、スコアをもつ特性値を生成し、新材料の各々の全体的マッチスコアを計算する ( 1 5 0 ) 段階を更に含む、請求項 6 記載の方法。

【請求項 8】

前記全体的マッチスコアを計算することが、各特性の重み付け値を考慮に入れることによって、前記スコアをもつ特性値の各々に重み付けして、重み付けされスコアをもつ特性値を生成し、

前記重み付けされスコアをもつ特性値の各々を互いに乗算し、

前記乗算された数を  $1 / (\text{全ての優先度の和})$  まで増加させる、  
ことを含む、請求項 7 記載の方法。

【請求項 9】

組み合わせられた結果をユーザに出力する前に、前記事前マッチングが存在する実験的試行と新材料を、それらの各々の全体的マッチスコアによってソートする段階を更に含む、請求項 7 記載の方法。

【請求項 10】

所望の特性セットに最も密接にマッチする材料を設計するためのシステムであって、

ユーザから少なくとも 1 つの入力パラメータを取得するための手段と、

グローバル・データリポジトリから少なくとも 1 つの事前マッチングが存在する実験的試行の実際の特性値を引き出すための手段と、

前記事前マッチングが存在する実験的試行の各々が所望の特性値セットにどれ位良好にマッチするかを判断するために動作可能な材料選択アルゴリズムと、

結果をユーザに出力するための手段と、

を備える、システム。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0004

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0004】

場合によっては、既存の実験的試行は、所望の特性に最も良くマッチしない場合があり、最良の適合をもたらす新材料を創造 / 設計することが必要となる。しかしながら、既存のシステム及び方法では、追加試験なしで所望の特性の良好な適合が得られるような新材料を創造 / 設計することは容易ではない。

【特許文献 1】米国特許第 5 5 5 5 4 0 6 号明細書

【特許文献 2】米国特許第 5 9 7 4 2 4 6 号明細書