

【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】令和6年7月23日(2024.7.23)

【国際公開番号】WO2022/034913

【出願番号】特願2022-542877(P2022-542877)

【国際特許分類】

G 0 6 N 5/02(2023.01)

G 0 6 N 5/04(2023.01)

G 0 6 N 20/00(2019.01)

G 1 6 C 20/70(2019.01)

G 1 6 C 20/40(2019.01)

10

【F I】

G 0 6 N 5/02

G 0 6 N 5/04

G 0 6 N 20/00

G 1 6 C 20/70

G 1 6 C 20/40

【手続補正書】

20

【提出日】令和6年7月11日(2024.7.11)

【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】

1又は複数のメモリと、

1又は複数のプロセッサを備え、

前記1又は複数のプロセッサは、

潜在表現及び生成モデルを用いて、ノードの情報及びエッジの情報を含む木の情報を生成し、

前記木の情報から、グラフを生成し、

前記木の情報は、前記ノードの接続情報を含む、

推定装置。

30

【請求項2】

前記グラフは、分子構造のグラフである、

請求項1に記載の推定装置。

【請求項3】

40

前記ノードは、

前記分子構造のグラフにおける分岐点を示す原子を表すシングルトンノード、

非環状の原子のノードのうちシングルトン以外のノードを表すボンドノード、

環状の原子構造を表すリングノード、

のいずれか1つを含み、

前記ノードの接続は、

シングルトンノードとボンドノード、

ボンドノードとボンドノード、

ボンドノードとリングノード、

リングノードとリングノード、

50

のいずれか1つを含む、
請求項2に記載の推定装置。

【請求項4】

前記ノードの接続情報は、前記ノードの接続の種類がリングノードとリングノードであって、これらのリングノード同士が双方のリングノードに属するボンドを共有して接続する場合における、接続するボンドの方向の情報を含む、
請求項3に記載の推定装置。

【請求項5】

前記1又は複数のプロセッサは、
ノードの情報とエッジの情報を有する第2木の情報を含む第2潜在表現から、前記潜在表現を生成する、
請求項1から請求項4のいずれかに記載の推定装置。 10

【請求項6】

前記1又は複数のプロセッサは、
乱数値を用いて前記潜在表現を生成する、
請求項1から請求項4のいずれかに記載の推定装置。

【請求項7】

前記1又は複数のプロセッサは、
複数の潜在表現から複数の木の情報を並行して生成する、
請求項1から請求項6のいずれかに記載の推定装置。 20

【請求項8】

前記ノードの接続情報は、前記エッジが接続する前記ノードの接続位置の情報及び前記ノードの接続方向の情報を含む、
請求項1から請求項7のいずれかに記載の推定装置。

【請求項9】

前記潜在表現は、潜在変数を含む、
請求項1から請求項8のいずれかに記載の推定装置。

【請求項10】

前記生成モデルは、自己回帰する構成を有するニューラルネットワークである、
請求項1から請求項9のいずれかに記載の推定装置。 30

【請求項11】

前記1又は複数のプロセッサは、
前記ニューラルネットワークを用いて自己回帰的に前記木の情報を生成する、
請求項10に記載の推定装置。

【請求項12】

前記1又は複数のプロセッサは、
前記ニューラルネットワークに、前記潜在表現及び生成された前記ノードの情報を入力する、
請求項11に記載の推定装置。

【請求項13】 40

1又は複数のメモリと、
1又は複数のプロセッサと、を備え、
前記1又は複数のプロセッサは、

第1グラフから、第1ノードの情報及び第1エッジの情報を含む第1木の情報を取得し、

前記第1木の情報及び第1モデルを用いて、潜在表現を生成し、

前記潜在表現及び第2モデルを用いて、第2ノードの情報及び第2エッジの情報を含む第2木の情報を生成し、

少なくとも、前記第1グラフと前記第2木の情報に対応する第2グラフとの比較結果、又は、前記第1木の情報と前記第2木の情報との比較結果のいずれかに基づいて、少な 50

くとも、前記第1モデルのパラメータ、又は、前記第2モデルのパラメータのいずれかを更新する、
訓練装置。

【請求項14】

前記第1木の情報は、前記第1ノードの接続情報を含む、
請求項13に記載の訓練装置。

【請求項15】

前記第1ノードの接続情報は、前記第1エッジが接続する前記第1ノードの接続位置の情報及び前記第1ノードの接続方向の情報を含む、
請求項14に記載の訓練装置。

10

【請求項16】

前記第2モデルは、自己回帰する構成を有するニューラルネットワークである、
請求項13から請求項15のいずれかに記載の訓練装置。

【請求項17】

前記第1ノードの接続情報は、前記第1ノードの接続の種類がリングノードとリングノードであって、これらのリングノード同士が双方のリングノードに属するボンドを共有して接続する場合における、接続するボンドの方向の情報を含む、
請求項14又は請求項15に記載の訓練装置。

【請求項18】

1又は複数のプロセッサが、
潜在表現及び生成モデルを用いて、ノードの情報及びエッジの情報を含む木の情報を生成し、

20

前記木の情報から、グラフを生成し、
前記木の情報は、前記ノードの接続情報を含む、
推定方法。

【請求項19】

前記ノードの接続情報は、前記エッジが接続する前記ノードの接続位置の情報及び前記ノードの接続方向の情報を含む、
請求項18に記載の推定方法。

【請求項20】

1又は複数のプロセッサが、
第1グラフから、第1ノードの情報及び第1エッジの情報を含む第1木の情報を取得し、

30

前記第1木の情報及び第1モデルを用いて潜在表現を生成し、

前記潜在表現及び第2モデルを用いて、第2ノードの情報及び第2エッジの情報を含む第2木の情報を生成し、

少なくとも、前記第1グラフと前記第2木の情報とに対応する第2グラフとの比較結果、又は、前記第1木の情報と前記第2木の情報との比較結果のいずれかに基づいて、少なくとも、前記第1モデルのパラメータ、又は、前記第2モデルのパラメータのいずれかを更新する、

40

モデル生成方法。

50