

【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4月23日(2024.4.23)

【国際公開番号】WO2023/008450

【出願番号】特願2023-538572(P2023-538572)

【国際特許分類】

G 1 6 C 2 0 / 8 0 (2 0 1 9 . 0 1)

【 F I 】

G 1 6 C 2 0 / 8 0

10

【手続補正書】

【提出日】令和6年1月12日(2024.1.12)

【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】

20

複数の化合物を比較するための比較指標として特性評価値を表示させるための第1情報を取得し、

前記第1情報に基づいて、前記複数の化合物のそれぞれの前記特性評価値を取得し、前記複数の化合物のそれぞれの構成に対応する位置に、当該化合物の前記特性評価値を示すマップを生成し、

前記マップを含む第1画像を生成して表示部へ出力し、

前記第1情報に変更されると、変更された前記第1情報にしたがって前記マップを変更し、変更された前記マップを含む第2画像を生成して前記表示部へ出力する、

情報表示方法。

【請求項2】

30

前記第1情報は、色相、彩度および明度のうちの少なくとも1つを前記特性評価値の色属性として示す第1色彩情報を含み、

前記マップの生成では、

前記複数の化合物のそれぞれの前記特性評価値を、前記第1色彩情報によって示される前記色属性を有する色で示す前記マップを生成し、

前記第1情報の変更では、

前記第1色彩情報によって示される前記色属性が変更される、

請求項1に記載の情報表示方法。

【請求項3】

40

前記第1情報は、化合物の構成を表現するために用いられる複数の変数と、前記複数の変数のそれぞれについて、当該変数がとり得る値または元素を示す複数の選択枝データとを示す探索範囲情報を含み、

前記特性評価値の取得では、

前記複数の変数のそれぞれに対して前記複数の選択枝データから1つの選択枝データを選択することによって得られる選択枝データの組み合わせごとに、当該組み合わせに対応する構成を有する化合物の特性評価値を取得する、

請求項1に記載の情報表示方法。

【請求項4】

前記第1情報は、前記特性評価値の算出方法を示す算出方法情報を含み、

前記特性評価値の取得では、

50

前記組み合わせごとに、当該組み合わせに対応する構成を有する化合物の特性評価値を、前記算出方法情報によって示される前記算出方法にしたがった所定のアルゴリズムを用いて算出し、

前記第 1 情報の変更では、

前記算出方法情報によって示される前記算出方法が変更される、

請求項 3 に記載の情報表示方法。

【請求項 5】

前記特性評価値の取得では、

前記算出方法にしたがった前記所定のアルゴリズムを用いることによって、前記組み合わせごとに、当該組み合わせに対応する構成を有する化合物に対して予測される特性の値の予測分布を算出し、前記予測分布に基づいて当該化合物の特性評価値を算出する、

10

請求項 4 に記載の情報表示方法。

【請求項 6】

前記第 1 情報の変更では、

前記探索範囲情報によって示される、前記複数の変数のうちの少なくとも 1 つの変数のそれぞれが取り得る前記複数の選択肢データが変更される、

請求項 3 に記載の情報表示方法。

【請求項 7】

前記第 1 情報は、1 つ以上の特性の種別を示す第 1 表示対象情報を含み、

前記特性評価値の取得では、

前記複数の化合物のそれぞれについて、前記第 1 表示対象情報によって示される前記 1 つ以上の特性の種別の各々に対する前記特性評価値を取得し、

20

前記第 1 情報の変更では、

前記第 1 表示対象情報によって示される前記 1 つ以上の特性の種別が変更される、

請求項 3 に記載の情報表示方法。

【請求項 8】

前記第 1 情報は、前記特性評価値の表示範囲を示す表示範囲情報を含み、

前記マップの生成では、

前記表示範囲情報によって示される前記特性評価値の表示範囲を、予め定められた色または色の濃淡度のスケール範囲に対応付け、前記複数の化合物のそれぞれの特性評価値を、前記スケール範囲内における当該特性評価値に応じた色または色の濃淡度によって示す前記マップを生成し、

30

前記第 1 情報の変更では、

前記表示範囲情報によって示される前記表示範囲が変更される、

請求項 3 に記載の情報表示方法。

【請求項 9】

前記マップは、第 1 座標軸および第 2 座標軸のそれぞれに沿ってマトリクス状に配列された複数の画像要素マップを含み、

前記複数の画像要素マップのそれぞれは、第 3 座標軸および第 4 座標軸を有し、

前記マップの生成では、

40

前記第 1 座標軸、前記第 2 座標軸、前記第 3 座標軸、および前記第 4 座標軸を、前記複数の変数のうちの第 1 変数、第 2 変数、第 3 変数、および第 4 変数にそれぞれ対応付け、前記複数の化合物のそれぞれについて、

前記複数の画像要素マップのうち、当該化合物の構成を表現するために用いられる前記第 1 変数および前記第 2 変数の各々の値に関連付けられている画像要素マップを特定し、

特定された前記画像要素マップ上における、当該化合物の構成を表現するために用いられる前記第 3 変数および前記第 4 変数の各々の値によって示される位置に、当該化合物の特性評価値をマッピングする、

請求項 6 に記載の情報表示方法。

【請求項 10】

50

前記第 1 情報の変更において、
前記探索範囲情報によって示される前記複数の選択肢データの数が増加または減少されると、
前記マップの変更では、
前記マップに含まれる画像要素マップの数を増加または減少させる、
請求項 9 に記載の情報表示方法。

【請求項 1 1】

前記第 1 情報は、表示される前記画像要素マップの配列形態を示すマップ配列情報を含み、

前記第 1 情報の変更において、
表示される前記画像要素マップの位置が選択されることによって、前記マップ配列情報が変更されると、

前記マップの変更では、
生成された前記マップを、変更された前記マップ配列情報によって示される配列形態にしたがって配置された少なくとも 1 つの前記画像要素マップを含むマップに変更する、
請求項 9 に記載の情報表示方法。

【請求項 1 2】

前記特性評価値の取得では、
評価器データベースに格納されている、化合物の特性値を評価するための少なくとも 1 つの評価器から、前記複数の化合物のそれぞれの前記特性評価値を取得する、
請求項 1 に記載の情報表示方法。

【請求項 1 3】

前記情報表示方法では、さらに、
化合物の特性実験値を表示するための第 2 情報を取得し、
前記マップの生成では、さらに、
前記第 2 情報に基づいて、実験済みの 1 つ以上の化合物のそれぞれについて、当該化合物の前記特性実験値を取得し、当該化合物の構成に対応する前記マップ上の位置に当該化合物の前記特性実験値を重畳する、
請求項 1 に記載の情報表示方法。

【請求項 1 4】

前記情報表示方法では、さらに、
前記第 2 情報が変更されると、前記マップに重畳されている 1 つ以上の前記特性実験値の表示態様に変更された前記マップを含む第 3 画像を、前記表示部に出力する、
請求項 1 3 に記載の情報表示方法。

【請求項 1 5】

前記第 2 情報は、色相、彩度および明度のうちの少なくとも 1 つを前記特性実験値の色属性として示す第 2 色彩情報を含み、
前記マップの生成では、
前記実験済みの 1 つ以上の化合物のそれぞれの前記特性実験値が、前記第 2 色彩情報によって示される前記色属性を有する色で重畳された前記マップを生成し、
前記第 2 情報の変更では、
前記第 2 色彩情報によって示される前記色属性が変更される、
請求項 1 4 に記載の情報表示方法。

【請求項 1 6】

前記第 2 情報は、1 つ以上の特性の種別を示す第 2 表示対象情報を含み、
前記マップの生成では、
前記実験済みの 1 つ以上の化合物のそれぞれについて、前記第 2 表示対象情報によって示される前記 1 つ以上の特性の種別の各々に対する前記特性実験値を取得し、前記 1 つ以上の特性の種別の各々に対する前記特性実験値に応じた形態のマークを前記マップに重畳し、

10

20

30

40

50

前記第 2 情報の変更では、

前記第 2 表示対象情報によって示される前記 1 つ以上の特性の種別が変更される、
請求項 1 4 に記載の情報表示方法。

【請求項 1 7】

前記第 2 情報は、閾値に基づく前記特性実験値の表示条件を示す表示条件情報を含み、
前記マップの生成では、

前記実験済みの 1 つ以上の化合物のそれぞれの前記特性実験値のうち、前記表示条件情報によって示される前記表示条件を満たす特性実験値と、前記表示条件を満たしていない特性実験値とを互いに異なる態様で前記マップに重畳し、

前記第 2 情報の変更では、

前記閾値を大きく、または小さくすることによって前記表示条件情報によって示される前記表示条件が変更される、

請求項 1 4 に記載の情報表示方法。

【請求項 1 8】

前記第 1 画像の生成では、

前記第 1 画像が生成された時点を示す付随情報を前記第 1 画像に関連付け、前記付随情報が関連付けられた前記第 1 画像を保存画像として記録媒体に格納し、

前記第 2 画像の生成では、

前記第 2 画像が生成された時点を示す付随情報を前記第 2 画像に関連付け、前記付随情報が関連付けられた前記第 2 画像を保存画像として前記記録媒体に格納し、

前記情報表示方法では、さらに、

第 1 時点を示す時点情報を取得し、

前記時点情報によって示される前記第 1 時点に対応する前記付随情報に関連付けられている保存画像を、第 4 画像として前記記録媒体から読み出して前記表示部に出力し、

前記時点情報によって示される前記第 1 時点が第 2 時点に変更されると、前記第 2 時点に対応する前記付随情報に関連付けられている保存画像を、第 5 画像として前記記録媒体から読み出し、前記第 4 画像の代わりに前記第 5 画像を前記表示部に出力する、

請求項 1 4 に記載の情報表示方法。

【請求項 1 9】

前記情報表示方法では、さらに、

前記第 1 画像、前記第 2 画像または前記第 3 画像である第 6 画像に含まれる前記マップ上における、前記特性評価値または前記特性実験値の位置を示す位置情報を取得し、

前記位置情報によって示される位置に対応する化合物の組成式に関する組成式データを取得し、前記組成式データを示す組成画像を前記マップに重畳することによって、前記第 6 画像を第 7 画像に変更する、

請求項 1 4 ~ 1 8 の何れか 1 項に記載の情報表示方法。

【請求項 2 0】

複数の化合物を比較するための比較指標として特性評価値を表示させるための、それぞれ変更可能な複数の情報グループからなる第 1 情報を取得し、

前記複数の化合物のそれぞれの構成に対応する位置に、当該化合物の前記特性評価値を示すマップを取得し、

前記複数の情報グループのそれぞれの優先度に基づいて生成される、前記マップを含む画像を出力する、

情報表示方法。

【請求項 2 1】

前記画像の出力では、

前記複数の情報グループのそれぞれについて、当該情報グループの変更による前記マップの変化の度合いを、当該情報グループの前記優先度として用いて、前記画像を生成する、

請求項 2 0 に記載の情報表示方法。

10

20

30

40

50

【請求項 2 2】

複数の化合物を比較するための比較指標として特性評価値を表示するための第 1 情報を取得する表示方法取得部と、

前記第 1 情報に基づいて、前記複数の化合物のそれぞれの前記特性評価値を取得し、前記複数の化合物のそれぞれの構成に対応する位置に、当該化合物の前記特性評価値を示すマップを生成し、前記マップを含む第 1 画像を生成して表示部へ出力する画像処理部とを備え、

前記画像処理部は、

前記表示方法取得部によって前記第 1 情報が変更されると、前記第 1 画像と異なる第 2 画像を生成して前記表示部へ出力する、

情報表示装置。

10

【請求項 2 3】

複数の化合物を比較するための比較指標として特性評価値を表示するための第 1 情報を取得し、

前記第 1 情報に基づいて、前記複数の化合物のそれぞれの前記特性評価値を取得し、前記複数の化合物のそれぞれの構成に対応する位置に、当該化合物の前記特性評価値を示すマップを生成し、

前記マップを含む第 1 画像を生成し、表示部へ出力し、

前記第 1 情報が変更されると、前記第 1 画像と異なる第 2 画像を生成し、前記表示部へ出力することを、コンピュータに実行させる、

プログラム。

20

【請求項 2 4】

複数の化合物を比較するための比較指標として特性評価値を表示させるための、それぞれ変更可能な複数の情報グループからなる第 1 情報を取得し、

前記複数の化合物のそれぞれの構成に対応する位置に、当該化合物の前記特性評価値を示すマップを取得し、

前記複数の情報グループのそれぞれの優先度に基づいて生成される、前記マップを含む第 1 画像を出力することを、コンピュータに実行させる、

プログラム。

30

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 3 0

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 1 3 0】

画像処理部 1 3 4 は、図 7 D に示すように、マップ Ma において、条件を満たしていない特性予測値が示されている領域 r 4 (図 7 D の例ではストライプの領域) に対して、予め定められている色、または予め定められている濃淡度の色を付けてもよい。その色は、黒色であってもよい。または、画像処理部 1 3 4 は、その領域 r 4 に対して、予め定められているパターンのハッチングをかけてもよい。つまり、画像処理部 1 3 4 は、その領域 r 4 に対してストライプのパターンを重畳してもよい。上述の条件は、例えば、特性予測値が下限値以上であるという条件である。下限値は、図 7 D の例では、2 . 4 5 [e V] である。

40

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 2 5 9

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 2 5 9】

そこで、本変形例における画像処理部 2 3 4 は、実験値取得部 2 3 2 によって取得され

50

た化合物の組成式と、画像マップ M b 上の各位置に対応する組成式とをそれぞれベクトルで表す。実験値取得部 2 3 2 によって取得された組成式のベクトルは、以下、第 1 ベクトルと呼ばれ、画像マップ M b 上の各位置に対応する組成式のベクトルは、以下、第 2 ベクトルと呼ばれる。なお、これらのベクトルは、例えば 8 つの変数 (M 3 , M 3 ' , M 4 , M 4 ' , a , b , x , y) によって定義される。画像処理部 2 3 4 は、第 1 ベクトルと、画像マップ M b 上の各位置の第 2 ベクトルとの差分のノルムを、距離として算出する。なお、その距離は、上述のように規格化された距離であってもよい。そして、画像処理部 2 3 4 は、図 2 4 A に示すように、算出された複数の距離のうち、最短の距離に対応する画像マップ M b 上の位置 1 7 0 0 に、その実験値取得部 2 3 2 によって取得された化合物の特性実験値を重畳する。なお、位置 1 7 0 0 は、画像マップ M b に含まれる 1 つの画像要素マップ M a 上の位置である。

10

【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 5 2 1

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 5 2 1】

なお、非可視化変数の最大値および最小値を示す数値範囲データは、表示システム 6 0 0 が有するデータベースに予め保存されていてもよい。例えば、数値範囲データは、評価表示データベース 6 4 0 に保存されている探索範囲情報 d 1 4 に予め含まれていてもよい。あるいは、材料の合成を行う合成装置、または材料の計測を行う計測装置である外部装置に、その数値範囲データが保存されている場合には、特性表示装置 6 3 0 は、その数値範囲データを外部装置から取得してもよい。例えば、特性表示装置 6 3 0 は、外部装置と接続され、その外部装置と通信することによって、外部装置から数値範囲データを取得する。これにより、例えば、図 5 8 A および図 5 8 B に示す焼成温度または焼成時間である非可視化変数に対して、ユーザが最小を選択した場合には、特性表示装置 6 3 0 は、数値範囲データに示される最小値を自動的に非可視化変数に代入または設定することができる。同様に、焼成温度または焼成時間である非可視化変数に対して、ユーザが最大を選択した場合には、特性表示装置 6 3 0 は、数値範囲データに示される最大値を自動的に非可視化変数に代入または設定することができる。これにより、外部装置などに依存して自動的に、その最大値または最小値をユーザに提示することができる。

20

30

【手続補正 5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 5 9 0

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 5 9 0】

このような図 6 5 に示す第 1 画像が表示部 1 4 0 に表示されるときには、画像処理部 6 3 4 は、図 6 4 に示す例と同様に、複数の非可視化変数のそれぞれの優先度を算出する。優先度の算出には、上述の分散値の平均、あるいは差分絶対値和の総和が用いられてもよい。また、画像処理部 6 3 4 は、画像マップ M b に重畳される 1 以上の実験点に基づいて、複数の非可視化変数のそれぞれの優先度を算出してもよい。

40

【手続補正 6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 6 0 3

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 6 0 3】

また、図 6 3 および図 6 6 に示すフローチャートでは、第 1 情報 d 1 0 に含まれる各グループの優先度が算出される前に、ステップ S 2 1 1 で取得されたデフォルトの第 1 情報

50

d 1 0に基づいて特性評価値がステップ S 2 1 3で取得される。しかし、各グループの優先度が算出された後に、その優先度に基づく特性評価値が取得されてもよい。例えば、ステップ S 2 1 3では、評価値取得部 6 3 2は、ステップ S 2 1 1で取得された第1情報 d 1 0のうちの算出方法情報 d 1 2を用いる場合、その算出方法情報 d 1 2に含まれる複数の設定項目のそれぞれの優先度を算出する。次に、評価値取得部 6 3 2は、最も優先度の高い設定項目の選択肢が選択されるように、その算出方法情報 d 1 2を変更する。そして、評価値取得部 6 3 2は、その変更された算出方法情報 d 1 2にしたがって、複数の化合物のそれぞれの特性評価値を取得する。このよう場合でも、ステップ S 2 1 5では、画像処理部 6 3 4は、図 6 4に示す第1画像を表示部 1 4 0に表示してもよい。

【手続補正 7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 7 2 0

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 7 2 0】

また、係数 c には、上述の第2値が代入される場合がある。第2値は、画像マップ M b 上の各位置において、その位置に示される特性評価値が最良値となる条件を満たす値である。この場合、ユーザは、画像マップ M b のうち、変数 $(a, b, x, y) = (0.2, 0.1, 0.6, 0.3)$ の位置に示されている特性評価値を、マウスの操作によって選択する。その結果、画像処理部 9 3 4は、図 7 9の (b) に示すように、組成画像 f 1 2を画像マップ M b に重畳する。この組成画像 f 1 2によって示される組成式には、係数 c として「3 . 1」が含まれている。つまり、組成画像 f 1 2は、組成式「 $Li_{1.0}Al_{0.08}Ga_{0.12}Ti_{0.77}Zr_{0.33}O_c$ 」を有する複数の化合物のうち、最良値である特性評価値が得られる化合物の組成式には、第2値である「3 . 1」が係数 c として含まれていることを示している。さらに、ユーザは、画像マップ M b のうち、別の位置に示されている特性評価値、例えば変数 $(a, b, x, y) = (0.2, 0.1, 0.6, 0.2)$ の位置に示されている特性評価値を、マウスの操作によって選択する。その結果、画像処理部 9 3 4は、図 7 9の (c) に示すように、組成画像 f 1 3を画像マップ M b に重畳する。この組成画像 f 1 3によって示される組成式には、係数 c として「2 . 7」が含まれている。つまり、組成画像 f 1 3は、組成式「 $Li_{1.0}Al_{0.08}Ga_{0.12}Ti_{0.88}Zr_{0.22}O_c$ 」を有する複数の化合物のうち、最良値である特性評価値が得られる化合物の組成式には、第2値である「2 . 7」が係数 c として含まれていることを示している。このように、係数 c に第2値が代入される場合には、画像マップ M b 上において選択される位置に応じて異なる第2値が、組成画像に表示される。

【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 7 2 8

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 7 2 8】

例えば、第7画像は、組成式「 $Li_{2-3a-4b}(Al_{1-x}Ga_x)_a(Ti_{1-y}Zr_y)_{1+b}O_3$ 」を有する化合物の画像マップ M b を含む。この画像マップ M b の生成には、3つのプロセス変数、すなわち、焼成方法を示す変数 P a と、焼成時間を示す変数 P b と、焼成温度を示す変数 P c とが、非可視化変数として用いられている。ここで、ユーザは、画像マップ M b のうち、変数 $(a, b, x, y) = (0.2, 0.1, 0.6, 0.3)$ の位置に示されている特性評価値を、マウスの操作によって選択する。その結果、画像処理部 9 3 4は、図 8 0に示すように、組成画像 f 1 6を画像マップ M b に重畳する。組成画像 f 1 6は、そのマウスによって選択された特性評価値を有する化合物の組成式だけでなく、その特性評価値の算出に用いられた変数 P a、P b、P c のそれぞれの選択肢データを示す。例えば、「焼成方法 P a = ポールミル」、「焼成時間 P b = 1

10

20

30

40

50

時間」、「焼成温度 P_c = 100」などが、組成画像 f 1 6 によって示される。

10

20

30

40

50