

【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 4 年 11 月 15 日(2022.11.15)

【公開番号】特開 2021-174401(P2021-174401A)

【公開日】令和 3 年 11 月 1 日(2021.11.1)

【年通号数】公開・登録公報 2021-053

【出願番号】特願 2020-79790(P2020-79790)

【国際特許分類】

G 1 6 C 20/70(2019.01)

G 0 6 N 20/00(2019.01)

10

【F I】

G 1 6 C 20/70

G 0 6 N 20/00

【手続補正書】

【提出日】令和 4 年 11 月 7 日(2022.11.7)

【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

20

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

化合物構造表現を生成するシステムであって、

1 以上のプロセッサと、

1 以上の記憶装置と、を含み、

前記 1 以上の記憶装置は、構造モデルと、構造物性関係モデルと、1 以上の既知物質の化合物構造表現と、1 種以上の物性値それぞれの 1 以上の目標値と、を格納し、

前記構造モデルは、

化合物構造表現を実数ベクトルに変換する、第 1 エンコーダと、

前記第 1 エンコーダにより変換された前記実数ベクトルから前記化合物構造表現を推定する、第 1 デコーダと、を含み、

前記構造物性関係モデルは、

前記第 1 エンコーダにより生成された前記実数ベクトルと前記 1 種以上の物性値の目標値を含む目標値ベクトルとを構成要素として含む入力ベクトルを、実数ベクトルに変換する、第 2 エンコーダと、

前記第 2 エンコーダにより生成された前記実数ベクトルから前記入力ベクトルを推定する第 2 デコーダと、を含み、

前記 1 以上のプロセッサは、前記 1 以上の既知物質の化合物構造表現及び前記 1 種以上の物性値それぞれの 1 以上の目標値に基づき、前記構造モデルの前記第 1 エンコーダを使用して、1 以上の構造発生ベクトルを生成し、

40

前記 1 以上の構造発生ベクトルのそれぞれは、一つの既知物質の化合物構造表現の前記第 1 エンコーダにより生成された実数ベクトルと、前記 1 種以上の物性値それぞれの目標値を含む目標値ベクトルとを、構成要素として含み、

前記 1 以上のプロセッサは、

前記 1 以上の構造発生ベクトルの各構造発生ベクトルを、前記構造物性関係モデルに入力し、

前記構造物性関係モデルの前記第 2 デコーダの出力から、化合物構造表現に対応する実数ベクトルを抽出し、

50

前記抽出した実数ベクトルを前記構造モデルの前記第 1 デコーダに入力して、新たな化合物構造表現を生成する、システム。

【請求項 2】

請求項 1 に記載のシステムであって、

前記 1 以上の記憶装置は、

前記 1 種以上の物性値の測定値と関連づけられた第 1 化合物構造表現群を格納し、

前記 1 以上のプロセッサは、前記第 1 化合物構造表現群によって、前記構造モデルの学習を行い、

前記 1 種以上の物性値の測定値及び前記構造モデルによる前記第 1 化合物構造表現群の変換結果を使用して、前記構造物性関係モデルの学習を行う、システム。

10

【請求項 3】

請求項 1 に記載のシステムであって、

前記 1 以上の記憶装置は、

前記 1 種以上の物性値の測定値と関連づけられた第 1 化合物構造表現群と、

前記 1 種以上の物性値の測定値と関連付けのない第 2 化合物構造表現群と、を格納し、

前記 1 以上のプロセッサは、前記第 1 化合物構造表現群及び前記第 2 化合物構造表現群を使用して、前記構造モデルの学習を行い、

前記 1 種以上の物性値の測定値及び前記第 1 エンコーダによる前記第 1 化合物構造表現群の変換結果を使用して、前記構造物性関係モデルの学習を行う、システム。

20

【請求項 4】

請求項 1 に記載のシステムであって、

前記 1 以上の記憶装置は、前記 1 種以上の物性値それぞれの 1 以上の目標値に加えて、他の 1 種以上の物性値それぞれの 1 以上の目標値を含み、

前記構造物性関係モデルは、複数のオートエンコーダを含み、

前記複数のオートエンコーダの第 1 オートエンコーダは、前記第 2 エンコーダ及び前記第 2 デコーダで構成され、

前記複数のオートエンコーダにおいて、前記第 1 オートエンコーダ以外の各エンコーダは、他の一つのオートエンコーダのエンコーダとデコーダとの間に挟まれており、

前記第 1 オートエンコーダ以外の各オートエンコーダの入力は、前記他の一つのオートエンコーダのデコーダからの実数ベクトルと、前記他の 1 種以上の物性値から選択された 1 種以上の物性値それぞれの目標値を含む目標値ベクトルと、を構成要素として含む、システム。

30

【請求項 5】

請求項 4 に記載のシステムであって、

前記複数のオートエンコーダの間において、入力される目標値の物性値の種類は異なり、

前記複数のオートエンコーダそれぞれに入力される目標値の数は 1 である、システム。

【請求項 6】

請求項 4 に記載のシステムであって、

前記複数のオートエンコーダの間において、入力される目標値の物性値の種類は異なり、

40

前記複数のオートエンコーダは、入力される目標値の数が異なるオートエンコーダを含む、システム。

【請求項 7】

請求項 4 に記載のシステムであって、

前記 1 以上の記憶装置は、前記構造物性関係モデルの学習データを格納し、

前記 1 以上のプロセッサは、前記学習データを使用して、前記構造物性関係モデルの学習を行い、

前記学習データは、前記複数のオートエンコーダのそれぞれの学習に使用される複数のグループで構成され、

50

前記複数のグループの各グループは、複数の化合物構造表現のそれぞれを、1以上の所定の物性値種類の測定値と関連付け、

前記複数のグループの二つのグループの間において、物性値種類数が多いグループは、物性値種類数が少ないグループの全ての物性値種類及び全ての化合物構造表現を含み、前記物性値種類数が多いグループは、前記構造物性関係モデルにおけるより内側のオートエンコーダの学習に使用される、システム。

【請求項8】

請求項4に記載のシステムであって、

前記複数のオートエンコーダにおいて、より外側のオートエンコーダの学習データ量が、より内側のオートエンコーダの学習データ量より多い、システム。

10

【請求項9】

請求項1に記載のシステムであって、

前記1以上のプロセッサは、

前記構造モデル及び前記構造物性関係モデルを含むネットワーク構造を表示し、

前記ネットワーク構造に対するユーザ入力に応じて前記ネットワーク構造を修正する、システム。

【請求項10】

システムが化合物構造表現を生成する方法であって、

前記システムは、

1以上のプロセッサと、

20

1以上の記憶装置と、を含み、

前記1以上の記憶装置は、構造モデルと、構造物性関係モデルと、1以上の既知物質の化合物構造表現と、1種以上の物性値それぞれの1以上の目標値と、を格納し、

前記構造モデルは、

化合物構造表現を実数ベクトルに変換する、第1エンコーダと、

前記第1エンコーダにより変換された前記実数ベクトルから前記化合物構造表現を推定する、第1デコーダと、を含み、

前記構造物性関係モデルは、

前記第1エンコーダにより生成された前記実数ベクトルと前記1種以上の物性値の目標値を含む目標値ベクトルとを構成要素として含む入力ベクトルを、実数ベクトルに変換する、第2エンコーダと、

30

前記第2エンコーダにより生成された前記実数ベクトルから前記入力ベクトルを推定する第2デコーダと、を含み、

前記方法は、前記1以上のプロセッサが、前記1以上の既知物質の化合物構造表現及び前記1種以上の物性値それぞれの1以上の目標値に基づき、前記構造モデルの前記第1エンコーダを使用して、1以上の構造発生ベクトルを生成する、ことを含み、

前記1以上の構造発生ベクトルのそれぞれは、一つの既知物質の化合物構造表現の前記第1エンコーダにより生成された実数ベクトルと、前記1種以上の物性値それぞれの目標値を含む目標値ベクトルとを、構成要素として含み、

前記方法は、前記1以上のプロセッサが、

40

前記1以上の構造発生ベクトルの各構造発生ベクトルを、前記構造物性関係モデルに入力し、

前記構造物性関係モデルの前記第2デコーダの出力から、化合物構造表現に対応する実数ベクトルを抽出し、

前記抽出した実数ベクトルを前記構造モデルの前記第1デコーダに入力して、新たな化合物構造表現を生成する、ことを含む、方法。

50