

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2021年3月11日(11.03.2021)



(10) 国際公開番号

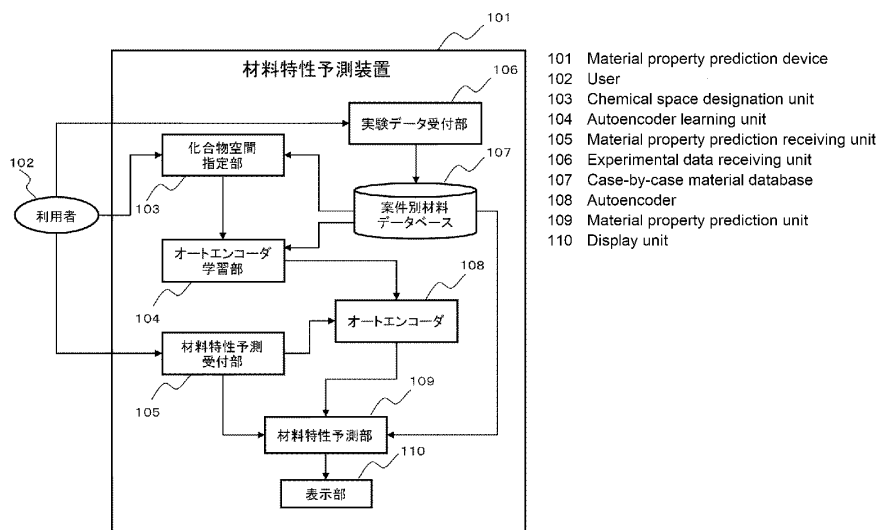
WO 2021/044846 A1

- (51) 国際特許分類:
G06Q 50/00 (2012.01) G06N 20/00 (2019.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2020/031263
- (22) 国際出願日: 2020年8月19日(19.08.2020)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2019-160261 2019年9月3日(03.09.2019) JP
- (71) 出願人: 株式会社日立製作所(HITACHI, LTD.)
[JP/JP]; 〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 金澤 拓也 (KANAZAWA Takuya);
〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内 Tokyo (JP). 浅原 彰規(ASAHARA Akinori); 〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内 Tokyo (JP). 林 貴之(HAYASHI Takayuki); 〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内 Tokyo (JP). 森田 秀和(MORITA Hidekazu); 〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内 Tokyo (JP).
- (74) 代理人: 青稜特許業務法人(SEIRYO I.P.C.);
〒1040032 東京都中央区八丁堀二丁目24番2号 Tokyo (JP).

(54) Title: MATERIAL PROPERTY PREDICTION DEVICE AND MATERIAL PROPERTY PREDICTION METHOD

(54) 発明の名称: 材料特性予測装置および材料特性予測方法

図1



(57) Abstract: The present invention efficiently generates effective compound feature quantities reflecting expert knowledge, and thereby accurately predicts physical properties of an unknown compound. A device for predicting a material property using a case-by-case material database storing a plurality of case databases. The case databases include a plurality of records that record structural information about material structures in association with material properties about properties of materials. This device is characterized in including: a chemical space designation unit that receives a design-

[続葉有]

WO 2021/044846 A1

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告(条約第21条(3))

nation of at least one case database; an autoencoder learning unit that generates an autoencoder for converting structural information corresponding to the case database received by the chemical space designation unit to multi-variables; and a material property prediction unit that predicts material properties using the multi-variables converted by the autoencoder generated by the autoencoder learning unit.

(57) 要約: 専門家の知見を反映した効果的な化合物特徴量を効率的に生成し、それによって未知の化合物の有する物性を精度よく予測する。案件データベースを複数格納した案件別材料データベースを用いて、材料特性の予測を行うための装置である。案件データベースは、材料の構造に関する構造情報および材料の特性に関する材料特性を関連付けて記録したレコードを複数含む。この装置は、少なくとも一つの案件データベースの指定を受け付ける、化合物空間指定部と、化合物空間指定部の受付けた案件データベースに対応する構造情報を多変量に変換するオートエンコーダを生成するオートエンコーダ学習部と、オートエンコーダ学習部の生成したオートエンコーダが変換した多変量を用いて材料特性を予測する材料特性予測部と、を持つことを特徴とする。