

AI 特許紹介(76)
AI 特許を学ぶ！究める！
～GNoME 特許～

2025 年 5 月 9 日
河野特許事務所
所長弁理士 河野英仁

「AI 特許紹介」シリーズは、注目すべき AI 特許のポイントを紹介します。熾烈な競争となっている第 4 次産業革命下では AI 技術がキーとなり、この AI 技術・ソリューションを特許として適切に権利化しておくことが重要であることは言うまでもありません。

AI 技術は Google, Microsoft, Amazon を始めとした IT プラットフォーマ、研究機関及び大学から毎週のように新たな手法が提案されており、また AI 技術を活用した新たなソリューションも次々とリリースされています。

本稿では米国先進 IT 企業を中心に、これらの企業から出願された AI 特許に記載された AI テクノロジー・ソリューションのポイントをわかりやすく解説致します。

1.概要

特許出願人 Google

出願日 2024 年 3 月 1 日

公開日 2024 年 9 月 12 日

公開番号 WO2024186650

発明の名称 グラフニューラルネットワークを用いた新素材の発見

858 特許は、候補材料に対応するグラフデータを処理するグラフニューラルネットワークを用いて、新素材を発見する GNoME 技術に関する。

2.特許内容の説明

図 1 は材料発見システム 100 を示し、図 2 はグラフニューラルネットワークを示す。

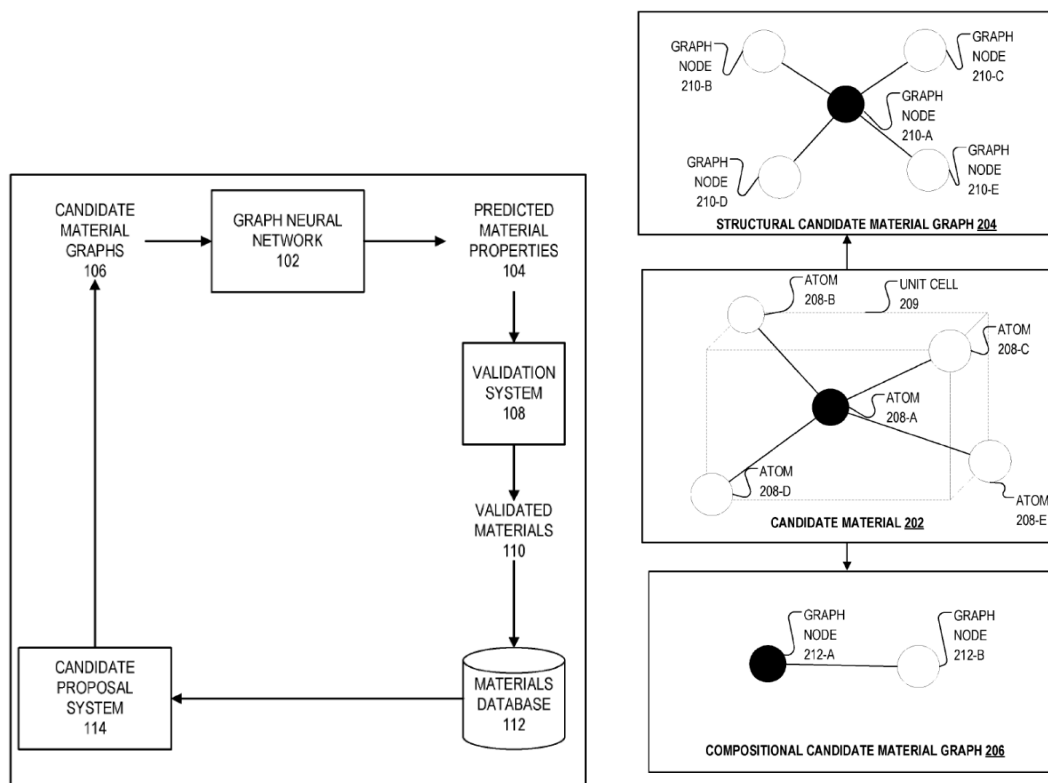


FIG. 2

グラフニューラルネットワーク 102 は、候補材料を特徴付けるデータを含む候補材料グラフ 106 を処理し、候補材料の予測材料特性 104 を生成する。候補材料グラフ 106 は、候補材料のさまざまな特性を表す。たとえば、候補材料グラフ 106 は、候補材料の単位セル内の候補材料の原子の位置を指定するデータを含めることで候補材料を表す構造候補材料グラフである。別の例として、候補材料グラフ 106 は、候補材料の化学組成を指定するデータを含めることで候補材料を表す組成候補材料グラフであり、候補材料内の要素間の平均的な相互作用を特徴付けるデータを含めることで候補材料を表す。

材料発見システム 100 には、候補材料の予測された材料特性 106 を検証できる検証システム 108 が含まれている。検証システム 108 は、さまざまな方法のいずれかを使用して予測された材料特性 106 を検証できる。たとえば、検証システム 108 は、候補材料の高忠実度計算シミュレーションを実行することによって、予測された材料特性を計算的に検証できる。

候補材料の物理的相互作用を直接モデル化する操作を使用して候補材料のシミュレーションを実行するのではなく（たとえば、第一原理シミュレーション内で実行される操作）、グラフニューラルネットワーク 102 は、機械学習操作に基づいて候補材料の予測を生成できる。特に、グラフニューラルネットワーク 102 は、材料を表す入力グラフ

内の各ノードとエッジを同時に処理できる。したがって、グラフニューラルネットワーク 102 は、連続計算を使用して候補材料の物理的相互作用を直接モデル化するシミュレーションとは対照的に、並列化された機械学習操作を使用して候補材料の予測を生成できる。

検証システム 108 が、特定の候補材料が選択基準を満たしていると判断すると、材料検出システム 100 は、特定の候補材料を特徴付けるデータを材料データベース 112 に追加する。一般に、材料検出システム 100 は、システム 100 によって識別された検証済み材料 110 をすべて含めるように材料データベース 112 を更新する。

図 2 の候補材料 202 は、異なる元素の原子で構成されており、また、異なる元素の原子を含む。候補材料 202 は、例えば、結晶材料、多結晶材料、非晶質材料、無機材料、有機材料、無機成分と有機成分の両方を含むハイブリッド材料などである。候補材料 202 の材料特性は、非常に多数の原子（たとえば、実行可能なシミュレーションが不可能な数の原子）の挙動を特徴付ける。候補材料 202 の材料特性は、比較的少数の原子を含むプロトタイプ構成に基づいて決定できる。たとえば、原子 208-A から 208-E の配置は、候補材料 202 の原子のプロトタイプ構成である。

候補材料 202 は、候補材料 202 の単位セル 209 の周期的な複製であり、候補材料 202 のプロトタイプ構成は、単位セル 209 内のプロトタイプ構成の原子の構成（位置、向き、化学元素など）を指定することによって決定できる。たとえば、候補材料 202 のプロトタイプ構成は、単位セル 209 内の原子 208-A から 208-E の位置、向き、化学元素などを指定することによって決定できる。

候補材料 202 のプロトタイプ構成は、候補材料 202 の原子間の相互作用を特徴付ける統計を指定することによっても決定できる。たとえば、候補材料 202 のプロトタイプ構成は、候補材料 202 の化学組成、候補材料 202 内の各元素の原子の半径密度関数、候補材料 202 内の各元素の原子の角度密度関数などを指定することによって決定できる。

システムは、候補材料 202 の特性を表す候補材料グラフを生成する。候補材料グラフには、候補材料 202 のさまざまな特性を特徴付けることができるグラフノードとグラフエッジが含まれる。たとえば、グラフノードには、候補材料 202 のさまざまな特性（たとえば、個々の原子の位置、個々の原子の要素など）を特徴付けるそれぞれのノード埋め込みが含まれる。別の例として、グラフエッジには、候補材料 202 のさまざまな特性（たとえば、個々の原子結合の距離、異なる要素の原子間の原子結合の統計など）を

特徴付けるそれぞれのエッジ埋め込みが含まれる。各グラフエッジは、2つのグラフノードを接続し、たとえば、グラフエッジのノードによって表される原子、要素などの関係の特徴付ける。

システムは、適切に構成されたグラフニューラルネットワーク（例えば、図1のグラフニューラルネットワーク 102）を使用して構造候補材料グラフ 204 または組成材料グラフ 206 を処理し、候補材料 202 の材料特性（例えば、エネルギー、原子間力など）を予測する。

3.クレーム

650 特許のクレーム 1 は以下の通りである。

1. 方法において、

候補材料のセットを定義するデータを取得し、

候補材料セット内の各候補材料のそれぞれの予測エネルギーを生成し、各候補材料について以下を含み、

候補材料をグラフとして表すグラフデータを生成し、

候補材料の予測エネルギーを定義するネットワーク出力を生成するために、候補材料を表すグラフデータを含むネットワーク入力を、グラフニューラルネットワークを使用して処理し、

候補材料の予測エネルギーに基づいて計算シミュレーションを通じて検証する候補材料セットの適切なサブセットを選択し、

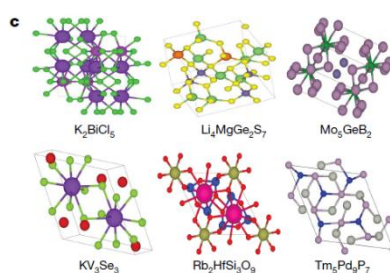
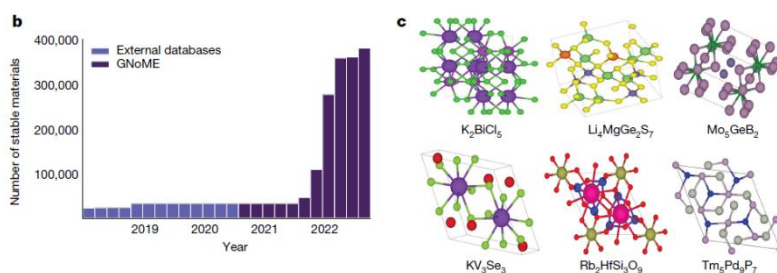
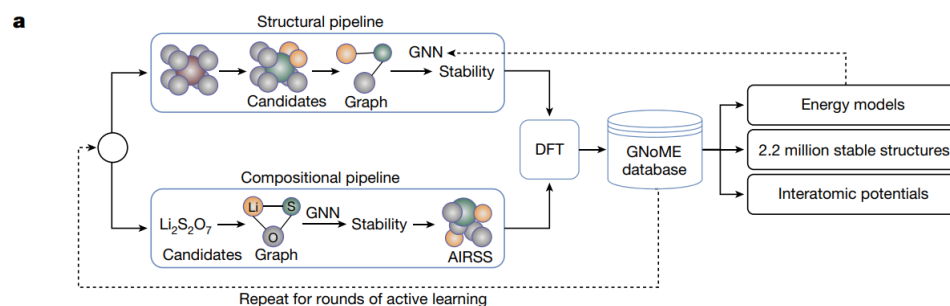
計算シミュレーションによる検証のために選択された各候補材料について、候補材料の計算シミュレーションを実行することによって、候補材料のシミュレートされたエネルギーを生成する。

4. 本特許に関連する論文

本特許に関する論文 “Scaling deep learning for materials discovery”¹が、Google の Amil Merchant 氏らにより Nature に公表されている。

下記図 a には、グラフニューラルネットワークを用いた材料特性予測パイプラインが示されている。

¹ Amil Merchant, et al. “Scaling deep learning for materials discovery”
<https://www.nature.com/articles/s41586-023-06735-9>



上記図 b は、GNoME によって可能になった探索により 381,000 個の新しい安定物質が発見されたことを示すグラフである。これは、以前の研究と比べてほぼ 1 桁多い数である。

736 個の構造が独立して実験的に検証され、そのうち 6 つの例が図 c に示されている。

以上

著者紹介

河野英仁

河野特許事務所、所長弁理士。立命館大学情報システム学博士前期課程修了、米国フランクリンピアースローセンター知的財産権法修士修了、中国清華大学法学院知的財産夏季セミナー修了、MIT(マサチューセッツ工科大学)コンピュータ科学・AI 研究所 AI コース、生成 AI ビジネスコース修了。

[AI 特許コンサルティング](#)、[医療 AI 特許コンサルティング](#)の他、米国・中国特許の権利化・侵害訴訟を専門としている。著書に「世界のソフトウェア特許(共著)」、「FinTech 特許入門」、「[AI/IoT 特許入門 3](#)」、「[ブロックチェーン 3.0](#)(共著)」がある。