

AI 特許紹介(81)
AI 特許を学ぶ！究める！
～拡散モデルを用いた材料生成～

2025 年 10 月 10 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 9 月 27 日

公開日 2025 年 4 月 3 日

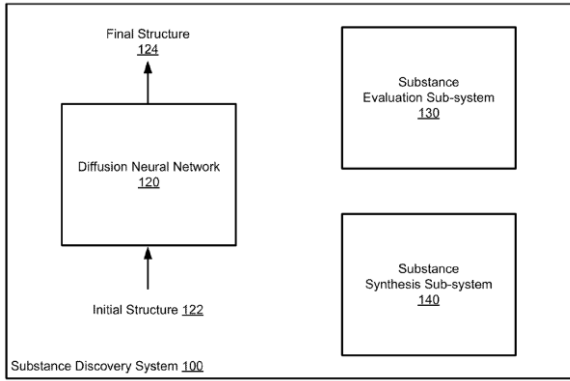
公開番号 WO2025072762

発明の名称 拡散モデルを用いた物質の構造予測

762 特許は、生成 AI の一種である拡散モデルを用いて、物質の初期構造から、逆拡散プロセスを繰り返し実行することにより、物質の最終構造を生成する物質構造生成 AI 技術に関する。

2.特許内容の説明

図 1 は、物質発見システム 100 の一例を示す。



物質発見システム 100 は、物質の最終構造を予測できる拡散ニューラルネットワーク 120 を含む。拡散ニューラルネットワーク 120 は、様々な物質の構造を予測する。例えば、拡散ニューラルネットワーク 120 は、以下の目的関数を最小化することに基づいて、トレーニング物質構造の集合を用いてトレーニングされている。

$$\mathcal{L}_{\text{MSE}} = \|\epsilon - \epsilon_{\theta}(\sqrt{1 - \beta_t}x + \sqrt{\beta_t}\epsilon, t)\|^2$$

これは、ランダムにサンプリングされたガウスノイズ $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, 1d)$ と、物質 x の構造にランダムにサンプリングされたガウスノイズ ϵ を追加することによって生成された物質 x の構造のノイズ破損バージョンを処理することにより拡散ニューラルネットワーク 120 によって生成されたノイズ推定値 ϵ_{θ} との差を測定する。

ここで、 $\beta_t \in \mathbb{R}$ は、たとえば、 $t \in [1, T]$ からランダムにサンプリングされた、選択された時間ステップ t のノイズレベルである。

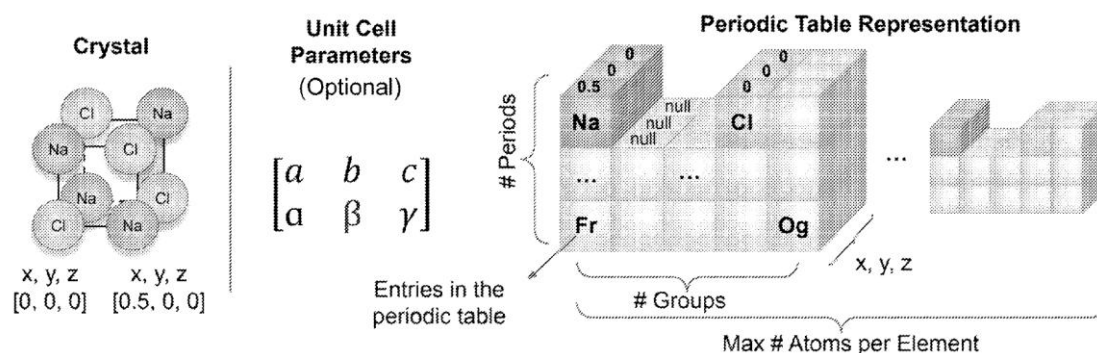
物質の構造を予測するために、物質発見システム 100 は、物質の構造を初期化し、物質の初期構造 122 を生成する。そして、拡散ニューラルネットワーク 120 を用いて、物質の初期構造 122 を複数の更新反復にわたって更新する逆拡散プロセスを実行することにより、物質の最終構造 124 を生成する。

拡散ニューラルネットワーク 120 は条件付き拡散モデルとして構成することができ、逆拡散プロセスは条件付き逆拡散プロセスとすることができる。すなわち、物質発見システム 100 は、逆拡散プロセスの開始前に調整入力を取得し、その後、逆拡散プロセス中のガイダンスとして調整入力を使用する。これらの実施形態では、物質発見システム 100 によって生成される最終構造 124 は、調整入力によって誘導される。

初期構造 122 または最終構造 124 は、物質の複数の成分のうち少なくとも 1 つについて、それぞれの位置がヌル位置であることを定義することができる。成分をヌル位置に割り当てることにより、初期構造 122 または最終構造 124 は、その成分が物質から

除外されていることを示す。図 2 は、構造化データ形式の例 200 である。

200



構造化データ形式は周期表に基づいている。結晶物質を表現するために、構造化データ形式は、物質の複数の成分それぞれについて、周期表の化学元素に各成分をマッピングする 1 つ以上のパラメータを格納する。例えば、構造化データ形式は、周期表の対応する化学元素にマッピングされる構造化データ形式のエントリにおける各原子の x 、 y 、 z 座標の位置を定義する位置パラメータを格納することで、結晶物質の単位格子内の原子を表現することができる。例えば、図の左側では、結晶物質中の化学元素ナトリウム (Na) に対応する右下の原子が $[0.5, 0, 0]$ に位置していることを示している。物質中に原子が存在しないことを示すために、特別な x 、 y 、 z 座標を用いてヌル位置を定義することができる。例えば、物質に含まれない原子は、 $x=y=z=-1$ 、 $x=y=z=\infty$ などの特別な位置を定義する位置パラメータを持つことができる。

物質発見システム 100 は、物質評価サブシステム 130 を含む。物質評価サブシステム 130 は、最終構造 124 を有する物質の様々なメトリクスのいずれかを決定することにより、最終構造 124 を有する物質を評価する。

物質発見システム 100 は、物質合成サブシステム 140 を含む。物質合成サブシステム 140 は、実験的検証のために、最終構造 124 を有する物質を物理的に合成することができる。物理的に合成されたインスタンスに対して物理試験を実行し、インスタンスの 1 つ以上の特性を決定する。

例えば、物質発見システム 100 は、拡散ニューラルネットワーク 120 を用いて、多

数の物質（例えば、少なくとも 100 万個、200 万個、またはそれ以上の物質）の最終構造を生成し、その後、物質合成サブシステム 140 を用いて、物質評価サブシステム 130 によって決定されたメトリクスが特定の基準（例えば、特定の範囲内の形成エネルギーを有する、特定の安定性閾値を達成するなど）を満たす、より少数の物質（例えば、2000 個以下、1000 個以下、またはそれ以下の物質）を物理的に合成する。物質評価サブシステム 130 によって決定されたメトリクスを用いて物理的合成のための物質をスクリーニングすることにより、物質発見システム 100 は、新規物質をより効率的に合成および検証する。

3.クレーム

762 特許のクレーム 1 は以下の通りである。

1. コンピュータにより実行される方法において。

物質の複数の成分のそれぞれについて、各初期位置を定義する物質の初期構造を生成し、

前記物質の初期構造の更新に基づいて、前記物質の複数の成分のそれぞれについて、各最終位置を定義する前記物質の最終構造を生成し、

前記物質の初期構造を更新することは、複数の更新反復のそれぞれにおいて、以下の処理を含み、

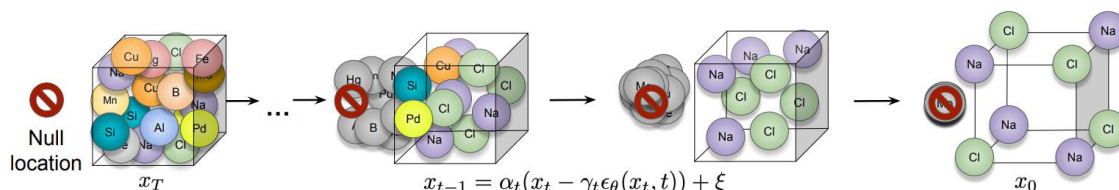
前記更新反復のための 1 つ以上の拡散出力を生成するために、それぞれが前記更新反復の時点における前記物質の現在の構造を含む、前記更新反復のための 1 つ以上の拡散入力を、拡散ニューラルネットワークを用いて処理し、

前記更新反復のための 1 つ以上の拡散出力を用いて前記物質の現在の構造を更新する。

4. 本特許に関連する論文

本特許に関する論文 “Scalable Diffusion for Materials Generation”¹が、Google の Sherry Yang 氏らにより公表されている。下記図は、拡散ニューラルネットワークを用いた物質の最終構造生成の流れを示す説明図である。

¹ Sherry Yang, et al. “Scalable Diffusion for Materials Generation”
arXiv:2311.09235v2 [cs.LG] 3 Jun 2024



物質は結晶物質であり、構成要素には原子が含まれる。時間 $t = T$ から $t = 0$ までの間に、物質 x_T の初期構造から物質 x_0 の最終構造を生成するための無条件逆拡散処理の実行を示している。

Test Set	CDVAE	Test Set	CDVAE	Test Set	CDVAE	Test Set	UniMat	Test Set	UniMat	Test Set	UniMat

上記図は、CDVAE (Xie et al., 2021) (左) と UniMat (右：本論文手法) によって生成された素材を MP-20 で学習させ、同じ構成のテストセット素材と比較した定性評価を示している。UniMat によって生成された素材は、一般的にテストセットとの整合性が高い。

Ba2TbIrO6	CsCeSe2	ErBi2ClO4	KI10	KTmTe2	KGdSe2	MgBr10	Rb2TcF6	Sm2Cl2O2	Sr2BrN

上記図は本論文の物質発見システムを使用して発見された 10 個の物質の例を示す。

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、中国清华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。