

技術コラム 知財編

# マテリアルインフォマティクス

2024年12月11日

パナソニックグループ 知的財産部門

本資料における情報等の内容の正確性、有用性、および確実性に関して、保証または確約する（明示・黙示を問わず）ものではありません。また、本資料における情報等のご利用等により、万が一直接または間接的に損失および損害が発生したとしても、パナソニックグループ、およびその関係会社は一切の責任を負いません。

# 特許動向調査

## 調査サマリ

マテリアルインフォマティクスの日本出願について特許動向を調査しました。

### 【出願件数推移】

- 出願件数は 2017 年までは減少傾向だが、2018 年以降は増加傾向。コロナ感染症の影響を受けたと推測される 2020 年は一時的に減少するも、翌年には再び増加しているため、マテリアルインフォマティクスに関する需要は続いていると思料

### 【トピック】

- トピックの占有率によると、「電極構造と検出システム」、「モデル解析と最適化」、「導電層と透明フィルム」の占有率が高く、マテリアルインフォマティクス分野出願の中心領域だと思料
- 「電極構造と検出システム」と「導電層と透明フィルム」の占有率は減少しているが、「モデル解析と最適化」は増加しているため、引き続き注目度が高い領域であると思料
- 「画像表示とデータ管理」の増加率が特に高いことから近年最も注目されている領域と思料

## 調査前提

下記要領にて調査を実施致しました。

### ■ 対象文献

- マテリアルインフォマティクスに関する日本特許

### ■ 対象期間

- 2012 年～2021 年（10 年間）※直近 22～23 年出願は未公開を含むため範囲外

### ■ 調査ツール

- Patent SQUARE（検索日：2024/7/26）

### ■ 分析内容

- 出願件数推移 | 当該分野の出願状況を把握
- トピックモデルによる占有率

### ■ 検索式 ※分類定義表は本紙末尾に掲載

G16C?+ ( (G06F?+G06N?+G06Q?) \* [?素材?+?材料?+?物質?+?マテリアル?]) + [?マテリアル?\*?インフォマティクス?]W3

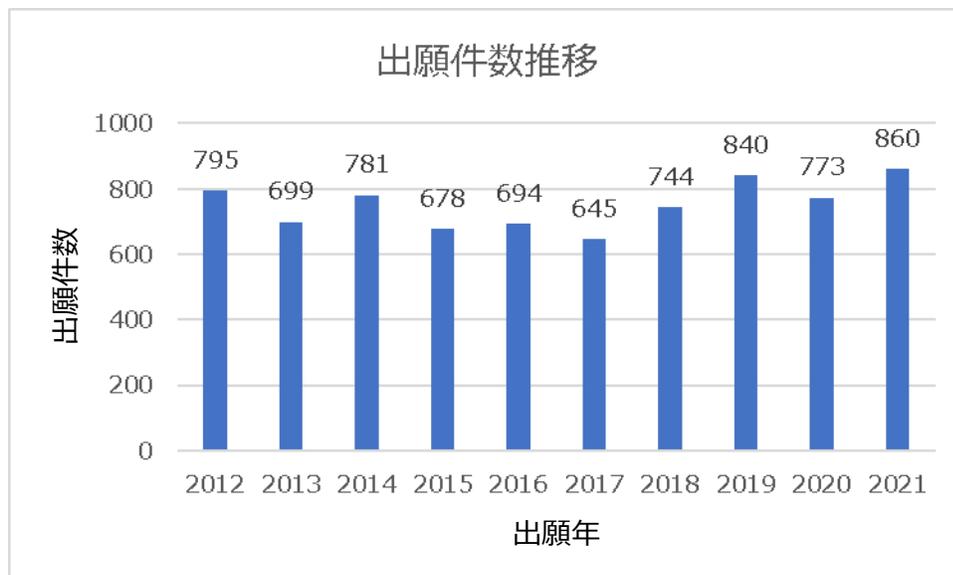
※[]内の下線部は検索対象を「名称 + 要約 + 請求項」に限定

■ ※[]内は全文が検索対象

※W3 は、語順指定なく 3 文字以内に前後のいずれかの語順を含めることを指す

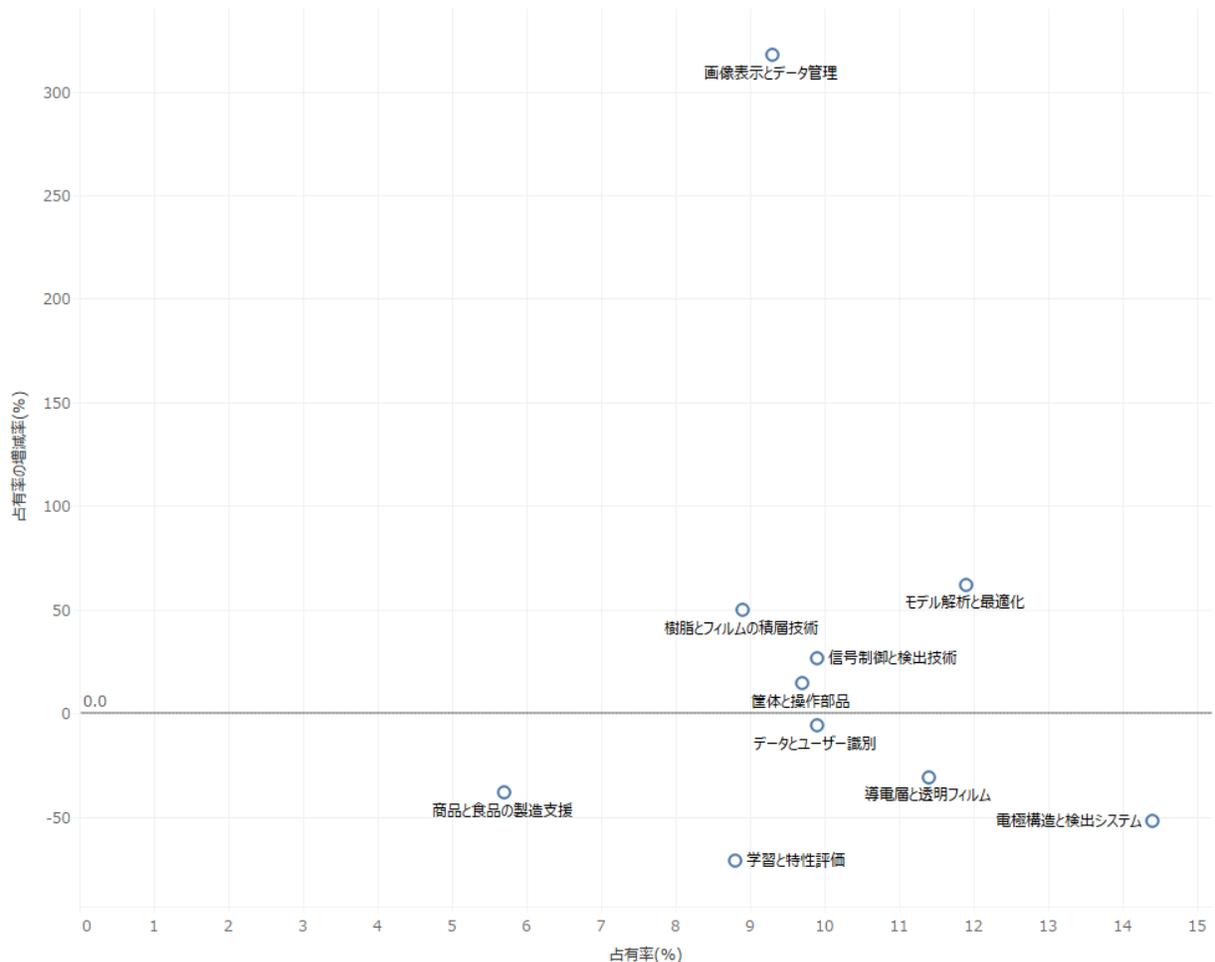
## 出願件数の推移

出願件数の推移を見ると、2017年までは減少傾向でした。2018年以降2019年までは増加傾向に変わりましたが、2020年に一時的に減少し、2021年には再び増加しています。2020年の減少はコロナ感染症の影響を受け、企業活動の停滞や研究開発の遅延、経済的不確実性から新規プロジェクトや投資を抑制した可能性があります。ただし、2021年の出願件数は2019年とほぼ同じ水準に戻ったため、マテリアルインフォマティクスに関する需要は継続していると考えられます。



## トピックの占有率

トピックモデルにより抽出したトピックを占有率の変化に着目して分析しました。横軸は、2012年から2021年の出願の占有率を表しています。縦軸は、2012年から2017年の6年間の占有率と、2018年から2021年の4年間の占有率を比較し、その変化（増減率）を表しています。出願件数の推移を表す棒グラフにて、2017年までは減少傾向だったが以降は増加傾向に変わっているため比較対象としています。右方向は占有率が高いことを示し、上方向は近年の増加率が高いことを示します。



トピックの占有率のマップによると、「電極構造と検出システム」、「モデル解析と最適化」、「導電層と透明フィルム」の占有率が高く、マテリアルインフォマティクス分野出願の中心領域だと思われます。一方で、「電極構造と検出システム」と「導電層と透明フィルム」の増減率が減少しているのに対して、「モデル解析と最適化」は増加しているため、引き続き注目度が高い領域であると考えられます。「画像表示とデータ管理」の増減率が約300%と特に高いことから近年最も注目されている領域であると考えられます。

## 《トピックモデルとは》

特許群から各特許文書に含まれるトピック（話題）を推定し、特許群中のトピックの占有率とその変化から、近年の注目領域を把握します。トピックの推定にはトピックモデルを利用します。トピックモデルは、文書中の単語とその頻度から文書中のトピックを推定する確率モデルです。特許文書にトピックモデルを適用することにより、特許文書に含まれるトピックで特許を機械的に分類することができます。

# パナソニックの保有する技術

マテリアルインフォマティクスに関連する特許の一部を紹介します。

## 事例 1：合成可能な未知の組成式を判断

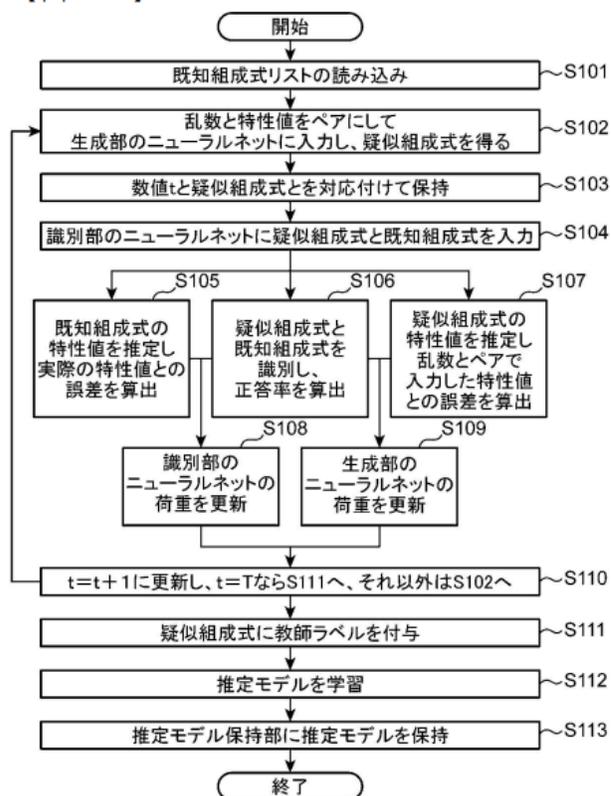
書誌情報	
発明の名称	材料情報出力方法、材料情報出力装置、材料情報出力システム、及びプログラム
特許番号	特許第 <a href="#">7122699</a> 号 ※左記リンクより欧州特許庁の当該特許の説明頁に遷移します
出願日	2018年8月23日

近年、人工知能技術を用いて新規材料の候補を材料研究者に提示する研究が盛んに行われています。

例えば、先行文献である特許文献 1（特許第 5946045 号）には、問い合わせ蛋白質と任意の化合物とのペアが合成可能か否かを判定する技術が記載されています。

しかしながら、上記特許文献 1 では、実際には合成可能なペアの組成式であるにも拘わらず、合成できないと判定されるケースが起こり得るため、更なる改善が必要です。本特許は、実際には合成可能な未知の組成式が合成不可能と判断されることを防止する技術を提供することを目的とします。

【図 10】



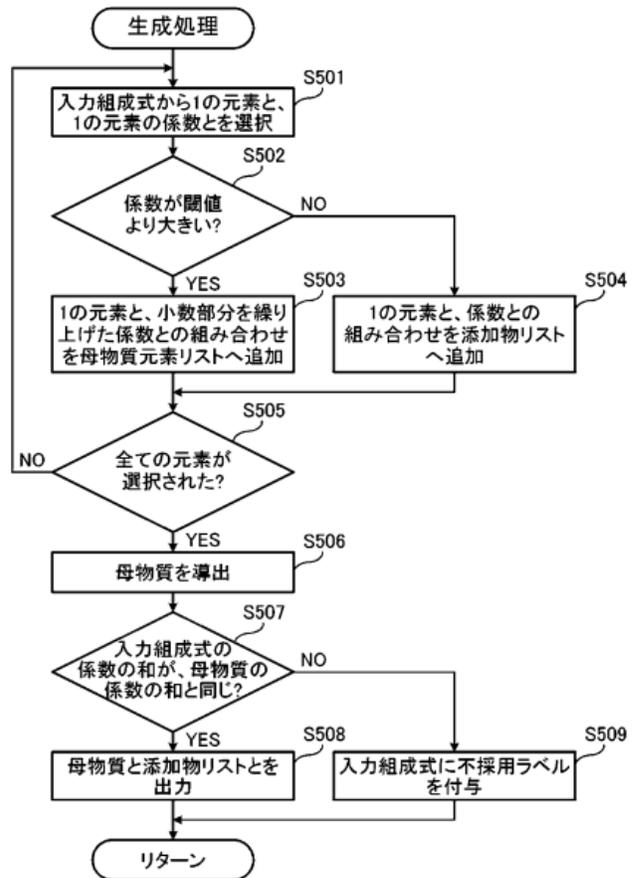
## 事例 2 : 材料特性値の予測性能を向上

書誌情報	
発明の名称	材料記述子生成方法、材料記述子生成装置、材料記述子生成プログラム、予測モデル構築方法、予測モデル構築装置及び予測モデル構築プログラム
特許番号	特許第 <a href="#">7398679</a> 号 ※左記リンクより欧州特許庁の当該特許の説明頁に遷移します
出願日（優先日）	2019年7月22日（2018年8月8日）

従来、材料特性は、第一原理計算などのシミュレーションシステムによって予測することが可能である。このシミュレーションシステムでは、物理計算を詳細に行うことで材料の特性を予測するが、計算に数時間～数カ月を要する場合がある。これに対し、近年、材料の基本的な情報を入力とし、特性値を出力として機械学習又は論理モデル式の構築を行うことで、材料の特性値の予測を簡易かつ高速に行う方法が注目されている。

本特許は、材料の特性値の予測性能を向上させる技術を提供するものである。

【図 2 1】



【ご参考：検索用特許分類定義表】

《FI：ファイルインデックス》

分類	定義
G16C	計算化学；ケモインフォマティクス；計算材料科学[2019.01]
G06F	電氣的デジタルデータ処理(特定の計算モデルに基づくコンピュータ・システムG06N)
G06N	特定の計算モデルに基づく計算装置
G06Q	管理目的，商用目的，金融目的，経営目的または監督目的に特に適合した情報通信技術[ICT]；他に分類されない，管理目的，商用目的，金融目的，経営目的または監督目的に特に適合したシステムまたは方法[2006.01]