(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
2023年3月9日(09.03.2023)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2023/032809 A1

(51) 国際特許分類:
G16C 20/70 (2019.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2022/032048

(22) 国際出願日： 2022年8月25日(25.08.2022)

(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 2021-140833 2021年8月31日(31.08.2021) JP

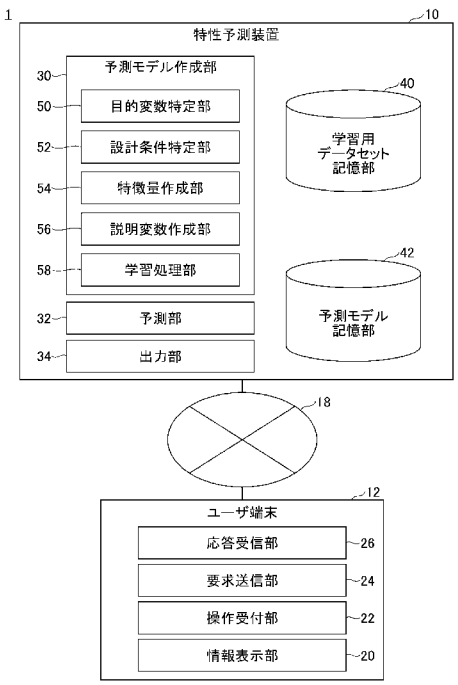
(71) 出願人: 株式会社レゾナック (**RESONAC CORPORATION**) [JP/JP]; 〒1058518 東京都港区芝大門１丁目１３番９号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 角田 皓亮 (**KAKUDA, Kohsuke**); 〒1058518 東京都港区芝大門１丁目１３番９号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 南 拓也 (**MINAMI, Takuya**); 〒1058518 東京都港区芝大門１丁目１３番９号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 青沼 直登(**AONUMA, Naoto**); 〒1058518 東京都港区芝大門１丁目１３番９号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 竹本 真平(**TAKEMOTO, Shimpei**); 〒1058518 東京都港区芝大門１丁目１３番９号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 高 仁子(**TAKASHI, Hiroko**); 〒1058518 東京都港区芝大門１丁目１３番９号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 奥野 好成(**OKUNO, Yoshishige**); 〒1058518 東京都港区芝大門１丁目１３番９号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP).

(54) **Title:** PROPERTY PREDICTION DEVICE, PROPERTY PREDICTION METHOD, AND PROGRAM

(54) 発明の名称： 特性予測装置、特性予測方法、及びプログラム

[図3]



10 Property prediction device
12 User terminal
20 Information display unit
22 Operation receiving unit
24 Request transmitting unit
26 Response receiving unit
30 Prediction model creating unit
32 Prediction unit
34 Output unit
40 Learning data set storage unit
42 Prediction model storage unit
50 Objective variable specifying unit
52 Design condition specifying unit
54 Feature creating unit
56 Explanatory variable creating unit
58 Learning processing unit

(57) **Abstract:** A property prediction device for predicting a property of a composite material composed of a plurality of raw material classes, the property prediction device comprising: a prediction model creating unit that uses a learning data set for a composite material comprising a first raw material class of material species and a second raw material class of material species to create a prediction model that has machine-learned the correspondence relationship between a property of the composite material, which is an objective variable, and a compounded quantity of the first raw material

WO 2023/032809 A1

[続葉有]

(74) 代理人：伊東 忠重，外(ITOH, Tadashige et al.)；〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目１番１号 丸の内 ＭＹ ＰＬＡＺＡ （明治安田生命ビル） １６階 Tokyo (JP).

(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, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, 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)）

class of material species and a weighted feature of the second raw material class of material species, which are explanatory variables; and a prediction unit by which a compounded quantity of the first raw material class of material species and a weighted feature of the second raw material class of material species that have been created from prediction data for the composite material for which the property is to be predicted are input to the prediction model as explanatory variables to predict the property of the composite material corresponding to the prediction data.

(57) 要約：複数の原料分類から構成される複合材料の特性を予測する特性予測装置であって、第１の原料分類の材料種及び第２の原料分類の材料種を含んだ構成である複合材料の学習用データセットを用いて、目的変数である複合材料の特性と、説明変数である第１の原料分類の材料種の配合量及び第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量と、の対応関係を機械学習した予測モデルを作成する予測モデル作成部と、特性を予測する複合材料の予測用データから作成した第１の原料分類の材料種の配合量及び第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量を説明変数として予測モデルに入力して、予測用データに対応する複合材料の特性を予測する予測部と、を有する。

明　細　書

発明の名称 ： 特性予測装置、特性予測方法、及びプログラム

技術分野

[0001]　本開示は、特性予測装置、特性予測方法、及びプログラムに関する。

背景技術

[0002]　近年、樹脂複合材料などの複合材料の特性予測は、コンピュータを用いた機械学習により行うことができるようになった。

[0003]　特許文献１には、組成データおよび特性データを含む学習データを用いて、目標特性データを入力したことに応じて推奨組成データを出力するモデルの学習処理を実行し、そのモデルに目標特性を入力することで、目標特性の感光性樹脂組成物を生成するための組成を出力する方法が記載されている。

[0004]　例えば特許文献１において、組成データで示される組成は、感光性樹脂組成物を生成し得る原材料の有無であってもよいし、原材料に含まれる化合物（例えば一般名で示される原材料に含まれる具体的な化合物の名称または構造式）であってもよいし、原材料に含まれる化合物の含有割合であってもよい、ことが記載されている。

[0005]　また、特許文献２には、ポリマーの物性の実験値と、ポリマーの部分構造の数密度とを用いて、物性値を予測する回帰モデルを構築し、その回帰モデルを用いて、入力したポリマー構造に対応する物性値を予測する方法が記載されている。

先行技術文献

特許文献

[0006] 特許文献1：特開２０２０－７７３４６号広報

特許文献2：特許第６６３３８２０号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0007]　複数の原料分類から構成される複合材料の特性を予測する特性予測装置で

は、例えば添加剤などの特定の原料分類の新しい原料を探索する場合など、特定の原料分類が複合材料の特性に与える影響を精度良く予測する技術が求められるようになった。

[0008] 本開示は、複数の原料分類から構成される複合材料の特性に特定の原料分類が与える影響を精度良く予測できる特性予測装置、特性予測方法、及びプログラムを提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0009] 本開示は、以下に示す構成を備える。

[0010] ［１］ 複数の原料分類から構成される複合材料の特性を予測する特性予測装置であって、

第１の原料分類の材料種及び第２の原料分類の材料種を含んだ構成である複合材料の学習用データセットを用いて、目的変数である前記複合材料の特性と、説明変数である前記第１の原料分類の材料種の配合量及び第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量と、の対応関係を機械学習した予測モデルを作成する予測モデル作成部と、

特性を予測する複合材料の予測用データから作成した前記第１の原料分類の材料種の配合量及び前記第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量を説明変数として前記予測モデルに入力して、前記予測用データに対応する前記複合材料の特性を予測する予測部と、

を有する特性予測装置。

[0011] ［２］ 前記説明変数は、前記第１の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料の配合量の情報と、前記第２の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料のそれぞれの特徴量及び前記原料の配合量の積である前記重み付け特徴量の情報と、を含むこと

を特徴とする［１］記載の特性予測装置。

[0012] ［３］ 前記予測モデル作成部は、前記複合材料を構成する複数の原料分類のうち、最適化のために探索する原料の原料分類を前記第２の原料分類とし、前記探索する原料の原料分類以外を前記第１の原料分類とすること

を特徴とする［１］又は［２］記載の特性予測装置。

[0013] ［４］ 前記予測部は、最適化する前記第２の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料の組み合わせの探索と、前記組み合わせに含まれる１つ以上の原料の配合量の変更と、を行いながら前記複合材料の特性を予測し、予測した前記特性が前記予測用データに対応する前記複合材料の目標特性に近似している、前記原料の組み合わせ、及び前記組み合わせに含まれる１つ以上の原料の配合量を特定すること

を特徴とする［３］記載の特性予測装置。

[0014] ［５］ 前記予測モデル作成部は、

前記学習用データセットから目的変数として前記複合材料の特性を特定する目的変数特定部と、

前記学習用データセットから前記複合材料の設計条件を特定する設計条件特定部と、

前記設計条件から前記第２の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料ごとに特徴量を作成する特徴量作成部と、

前記第１の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料の配合量、及び前記第２の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料のそれぞれの前記重み付け特徴量を説明変数として作成する説明変数作成部と、

前記目的変数及び前記説明変数の対応関係を機械学習して予測モデルを作成する学習処理部と、

を有する［１］乃至［４］の何れか一項に記載の特性予測装置。

[0015] ［６］ 前記複合材料は、前記第１の原料分類の材料種である主原料と、前記主原料に比べて配合量が小さい前記第２の原料分類の材料種である添加剤と、を含む樹脂複合材料であること

を特徴とする［１］乃至［５］の何れか一項に記載の特性予測装置。

[0016] ［７］ 前記原料分類は、モノマー、オリゴマー、ポリマー、フィラー、触媒、重合開始剤、重合禁止剤、架橋剤、又は硬化剤である、

［１］乃至［６］の何れか一項に記載の特性予測装置。

[0017] ［８］ 前記特徴量は、分子の構造的特徴を数値化した情報、又は分子の化学的特徴を数値化した情報である

［１］乃至［７］の何れか一項に記載の特性予測装置。

[0018] ［９］ 前記特徴量は、前記第２の原料分類の材料種の銘柄又は型番を「０」と「１」とで表すダミー変数で記述した情報である

［１］乃至［７］の何れか一項に記載の特性予測装置。

[0019] ［１０］ コンピュータが、複数の原料分類から構成される複合材料の特性を予測する特性予測方法であって、

第１の原料分類の材料種及び第２の原料分類の材料種を含んだ構成である複合材料の学習用データセットを用いて、目的変数である前記複合材料の特性と、説明変数である前記第１の原料分類の材料種の配合量及び第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量と、の対応関係を機械学習した予測モデルを作成するステップと、

特性を予測する複合材料の予測用データから作成した前記第１の原料分類の材料種の配合量及び前記第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量を説明変数として前記予測モデルに入力して、前記予測用データに対応する前記複合材料の特性を予測するステップと、

を含む特性予測方法。

[0020] ［１１］ 複数の原料分類から構成される複合材料の特性を予測するコンピュータに、

第１の原料分類の材料種及び第２の原料分類の材料種を含んだ構成である複合材料の学習用データセットを用いて、目的変数である前記複合材料の特性と、説明変数である前記第１の原料分類の材料種の配合量及び第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量と、の対応関係を機械学習した予測モデルを作成するステップ、

特性を予測する複合材料の予測用データから作成した前記第１の原料分類の材料種の配合量及び前記第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量を説明変数として前記予測モデルに入力して、前記予測用データに対応する前記複

合材料の特性を予測するステップ、

を実行させるためのプログラム。

発明の効果

[0021] 本開示によれば、複数の原料分類から構成される複合材料の特性に特定の原料分類が与える影響を精度良く予測できる。

図面の簡単な説明

[0022] [図1]本実施形態に係る情報処理システムの一例の構成図である。

[図2]本実施形態に係るコンピュータの一例のハードウェア構成図である。

[図3]本実施形態に係る情報処理システムの一例の機能構成図である。

[図4]樹脂複合材料の設計条件の一例の構成図である。

[図5A]樹脂複合材料の重み付け特徴量の一例の構成図である。

[図5B]樹脂複合材料の重み付け特徴量の一例の構成図である。

[図5C]樹脂複合材料の重み付け特徴量の一例の構成図である。

[図6A]樹脂複合材料の主原料の配合量と、添加剤の重み付け特徴量との一例の構成図である。

[図6B]樹脂複合材料の主原料の配合量と、添加剤の重み付け特徴量との一例の構成図である。

[図6C]樹脂複合材料の主原料の配合量と、添加剤の重み付け特徴量との一例の構成図である。

[図7]本実施形態に係る情報処理システムの特性予測方法の概要を示した一例の説明図である。

[図8]設計条件の一例の構成図である。

[図9A]添加剤の重み付け特徴量を作成する処理の一例の説明図である。

[図9B]添加剤の重み付け特徴量を作成する処理の一例の説明図である。

[図10]作成した説明変数の一例の説明図である。

[図11]本実施形態に係る情報処理システムの学習段階の処理の一例のフローチャートである。

[図12]探索する材料を選択する画面の一例のイメージ図である。

[図13]説明変数の一例の構成図である。

[図14]本実施形態に係る情報処理システムの予測段階の処理の一例のフローチャートである。

発明を実施するための形態

[0023] 次に、本発明の実施形態について詳細に説明する。なお、本発明は以下の実施形態に限定されるものではない。本実施形態では、複数の原料分類から構成される複合材料の一例として、樹脂複合材料について説明する。複数の原料分類は、モノマー、オリゴマー、ポリマー、フィラー、触媒、重合開始剤、重合禁止剤、架橋剤、及び硬化剤などである。モノマー、オリゴマー、及びポリマーは、主原料の一例である。フィラー、触媒、重合開始剤、重合禁止剤、架橋剤、及び硬化剤は、添加剤の一例である。

[0024] ［第１の実施形態］

＜システム構成＞

図１は、本実施形態に係る情報処理システムの一例の構成図である。図１の情報処理システム１は、特性予測装置１０、及びユーザ端末１２を有している。特性予測装置１０及びユーザ端末１２はローカルエリアネットワーク（ＬＡＮ）又はインターネットなどの通信ネットワーク１８を介してデータ通信可能に接続されている。

[0025] ユーザ端末１２はユーザが操作するＰＣ、タブレット端末、スマートフォンなどの情報処理端末である。ユーザ端末１２は、複数の原料分類から構成される樹脂複合材料の特性の予測に必要な情報の入力をユーザから受け付け、特性予測装置１０に樹脂複合材料の特性を予測させる。また、ユーザ端末１２は特性予測装置１０が予測した樹脂複合材料の特性などの情報を受信し、例えば表示装置に表示してユーザに確認させる。

[0026] 特性予測装置１０は樹脂複合材料の特性を予測するＰＣ、ワークステーションなどの情報処理装置である。特性予測装置１０は学習用データセットを用いて後述するように機械学習することで予測モデルを作成する。特性予測装置１０はユーザ端末１２から樹脂複合材料の特性の予測に必要な情報を受

信すると、予測モデルを用いて樹脂複合材料の特性を予測する。特性予測装置１０は予測した樹脂複合材料の特性などの情報をユーザ端末１２に送信する。

[0027] なお、図１の情報処理システム１は一例であって、用途や目的に応じて様々なシステム構成例があることは言うまでもない。例えば特性予測装置１０は複数台のコンピュータにより実現してもよいし、クラウドコンピューティングのサービスとして実現するようにしてもよい。また、図１の情報処理システム１はスタンドアローンのコンピュータにより実現してもよい。

[0028] ＜ハードウェア構成＞

図１の特性予測装置１０及びユーザ端末１２は、例えば図２に示すハードウェア構成のコンピュータ５００により実現する。

[0029] 図２は、本実施形態に係るコンピュータの一例のハードウェア構成図である。図２のコンピュータ５００は、入力装置５０１、表示装置５０２、外部Ｉ／Ｆ５０３、ＲＡＭ５０４、ＲＯＭ５０５、ＣＰＵ５０６、通信Ｉ／Ｆ５０７、及びＨＤＤ５０８などを備えており、それぞれがバスＢで相互に接続されている。なお、入力装置５０１及び表示装置５０２は接続して利用する形態であってもよい。

[0030] 入力装置５０１は、ユーザが各種信号を入力するのに用いるタッチパネル、操作キーやボタン、キーボードやマウスなどである。表示装置５０２は、画面を表示する液晶や有機ＥＬなどのディスプレイ、音声や音などの音データを出力するスピーカ等で構成されている。通信Ｉ／Ｆ５０７はコンピュータ５００がデータ通信を行うためのインタフェースである。

[0031] また、ＨＤＤ５０８は、プログラムやデータを格納している不揮発性の記憶装置の一例である。格納されるプログラムやデータには、コンピュータ５００全体を制御する基本ソフトウェアであるＯＳ、及びＯＳ上において各種機能を提供するアプリケーションなどがある。なお、コンピュータ５００はＨＤＤ５０８に替えて、記憶媒体としてフラッシュメモリを用いるドライブ装置（例えばソリッドステートドライブ：ＳＳＤなど）を利用するものであ

ってもよい。

[0032] 外部Ｉ／Ｆ５０３は、外部装置とのインタフェースである。外部装置には、記録媒体５０３ａなどがある。これにより、コンピュータ５００は外部Ｉ／Ｆ５０３を介して記録媒体５０３ａの読み取り及び／又は書き込みを行うことができる。記録媒体５０３ａにはフレキシブルディスク、ＣＤ、ＤＶＤ、ＳＤメモリカード、ＵＳＢメモリなどがある。

[0033] ＲＯＭ５０５は、電源を切ってもプログラムやデータを保持することができる不揮発性の半導体メモリ（記憶装置）の一例である。ＲＯＭ５０５にはコンピュータ５００の起動時に実行されるＢＩＯＳ、ＯＳ設定、及びネットワーク設定などのプログラムやデータが格納されている。ＲＡＭ５０４はプログラムやデータを一時保持する揮発性の半導体メモリ（記憶装置）の一例である。

[0034] ＣＰＵ５０６は、ＲＯＭ５０５やＨＤＤ５０８などの記憶装置からプログラムやデータをＲＡＭ５０４上に読み出し、処理を実行することで、コンピュータ５００全体の制御や機能を実現する演算装置である。本実施形態に係るコンピュータ５００は、プログラムを実行することで後述するような特性予測装置１０及びユーザ端末１２の各種機能を実現できる。プログラムは、プログラムが格納された記録媒体５０３ａから外部Ｉ／Ｆ５０３を介して読み取り、実行されてもよい。

[0035] ＜機能構成＞

本実施形態に係る情報処理システム１の構成について説明する。図３は本実施形態に係る情報処理システムの一例の機能構成図である。なお、図３の構成図は、本実施形態の説明に不要な部分について適宜省略している。

[0036] 図３に示した情報処理システム１の特性予測装置１０は、予測モデル作成部３０、予測部３２、出力部３４、学習用データセット記憶部４０、及び予測モデル記憶部４２を有する構成である。また、ユーザ端末１２は、情報表示部２０、操作受付部２２、要求送信部２４、及び応答受信部２６を有する構成である。

[0037] ユーザ端末１２の情報表示部２０は、ユーザに確認させる情報を表示装置５０２に表示する。操作受付部２２は、樹脂複合材料の特性の予測に必要な情報の入力などの各種操作をユーザから受け付ける。要求送信部２４は樹脂複合材料の特性の予測などの処理の要求を特性予測装置１０に送信する。また、応答受信部２６は要求送信部２４が送信した樹脂複合材料の特性の予測などの処理の要求に対する応答を受信する。

[0038] 特性予測装置１０の学習用データセット記憶部４０は、後述するような樹脂複合材料の学習用データセットを記憶する。予測モデル作成部３０は、学習用データセット記憶部４０が記憶している学習用データセットを用いた後述の機械学習により、予測モデルを作成する。予測モデル記憶部４２は、作成された予測モデルを記憶する。

[0039] 予測部３２は、ユーザ端末１２から受信した樹脂複合材料の特性の予測に必要な情報である後述の予測用データと、予測モデル記憶部４２に記憶されている予測モデルとを後述のように用いて、予測用データに対応する樹脂複合材料の特性を予測する。出力部３４は予測部３２が予測した樹脂複合材料の特性を、ユーザ端末１２からの樹脂複合材料の特性の予測の要求に対する応答として送信する。

[0040] 図３の予測モデル作成部３０は、目的変数特定部５０、設計条件特定部５２、特徴量作成部５４、説明変数作成部５６、及び学習処理部５８を有する構成である。目的変数特定部５０は、学習用データセット記憶部４０が記憶している学習用データセットから目的変数として樹脂複合材料の特性を特定する。設計条件特定部５２は、学習用データセット記憶部４０が記憶している学習用データセットから樹脂複合材料の設計条件を特定する。

[0041] 特徴量作成部５４は、樹脂複合材料の設計条件から、添加剤の情報を特定して、添加剤の特徴量を作成する。なお、特徴量は、分子の構造的特徴を数値化した情報、又は分子の化学的特徴を数値化した情報である。添加剤の特徴量としては、添加剤の銘柄や型番などを「０」と「１」とで表すダミー変数で記述して特徴量としてもよい。

[0042] 分子の構造的特徴を数値化する手法の一例としては、Ｅｘｔｅｎｄｅｄ Ｃｉｒｃｕｌａｒ ＦｉｎｇｅｒＰｒｉｎｔｓ（以下、ＥＣＦＰという）がある。ＥＣＦＰは、全ての部分構造の種類と個数とを抽出し、ベクトル（列：種類、値：個数）として表現することで分子の構造的特徴を数値化する。なお、部分構造はＳｉｍｐｌｉｆｉｅｄ Ｍｏｌｅｃｕｌａｒ Ｉｎｐｕｔ Ｌｉｎｅ Ｅｎｔｒｙ Ｓｙｓｔｅｍ（以下、ＳＭＩＬＥＳという）記法などの表記方法で表すことができる。ＥＣＦＰでは例えば既存のライブラリにＳＭＩＬＥＳ記法で表した添加剤の情報を入力することで、分子の構造的特徴を計算することができる。また、分子の構造的特徴を数値化する手法の他の例としては、グラフ畳み込みニューラルネットワークがある。グラフ畳み込みニューラルネットワークでは例えば既存のライブラリにＳＭＩＬＥＳ記法で表した添加剤の情報を入力することで、分子の構造的特徴を計算することができる。

[0043] また、例えば分子の化学的特徴を数値化する手法の一例としては、分子の物性情報を抽出し、ベクトル（列：物性情報、値：数値）として表現することで、分子の化学的特徴を数値化する。分子の化学的特徴を数値化する手法では、例えば既存のライブラリにＳＭＩＬＥＳ記法で表した添加剤の情報を入力することで、分子の化学的特徴を計算することができる。分子の物性情報は、例えば分子量、価電子数、部分電荷、アミノ基数、ヒドロキシ基数などである。また、分子の物性情報は、ＨＯＭＯ、ＬＵＭＯ、電荷、屈折率、又は振動数などの量子化学計算ソフトで計算できる物性値、融点、粘度、又は比表面積などの実験で測定可能な物性値、であってもよい。

[0044] 説明変数作成部５６は、樹脂複合材料の設計条件から、主原料の情報を特定して、主原料ごとに配合量を特定する。また、説明変数作成部５６は、特徴量作成部５４が作成した添加剤の特徴量ごとに、その添加剤の配合量との積を、計算する。添加剤の特徴量と配合量との積は、重み付け特徴量の一例である。説明変数作成部５６は、主原料ごとの配合量と、添加剤の重み付け特徴量とを結合して説明変数を作成する。

[0045] また、学習処理部５８は、目的変数及び説明変数の対応関係を機械学習することで予測モデルを作成する。学習処理部５８は、作成した予測モデルを予測モデル記憶部４２に記憶させる。

[0046] 予測部３２は、ユーザ端末１２から受信した樹脂複合材料の特性の予測に必要な情報である後述の予測用データから樹脂複合材料の設計条件を特定する。また、予測部３２は説明変数作成部５６と同様に、特定した樹脂複合材料の設計条件から説明変数を作成し、その説明変数を予測モデルに入力することで、予測用データに対応する樹脂複合材料の特性を予測する。

[0047] そして、出力部３４は、予測部３２が予測した予測用データに対応する樹脂複合材料の特性を、ユーザ端末１２からの樹脂複合材料の特性の予測の要求に対する応答として送信する。なお、図３の構成図は一例である。本実施形態に係る情報処理システム１の構成は様々考えることができる。

[0048] ＜樹脂複合材料の特性を予測する方法についての検討＞

複数の原料分類から構成される樹脂複合材料の特性は、例えば主原料及び添加剤の名称と、その有無から、樹脂複合材料の特性の予測を行うことができる。図４は、樹脂複合材料の設計条件の一例の構成図である。図４に示すように、設計条件は、樹脂複合材料の材料種に含まれる「樹脂１」「樹脂２」「樹脂３」「触媒１」及び「添加物１」などの原料ごとに配合量が設定されている。図４の設計条件の「添加剤α」～「添加剤ε」は未学習の添加剤であるものとする。主原料及び添加剤の名称と、その有無を、物理化学的な特性を直接的には示さない情報、例えば、主原料及び添加剤の銘柄や型番などを「０」と「１」とで表すダミー変数で記述して用いてもよい。

[0049] 図４の設計条件の場合は「添加物１」以外の設計条件が同じであるため、添加剤の名称を「添加物α」～「添加物ε」に変更しても、予測値に差が表れにくく、添加剤が樹脂複合材料の特性に与える影響を精度良く予測できない。

[0050] また、複数の原料分類から構成される樹脂複合材料の特性は、主原料及び添加剤の重み付け特徴量から、樹脂複合材料の特性の予測を行うことができ

る。図５Ａ～図５Ｃは、樹脂複合材料の重み付け特徴量の一例の構成図である。重み付け特徴量は、主原料及び添加剤の特徴量のそれぞれに配合量（又は配合比率）で重みを付けた情報である。配合比率の全体（１００％）は、配合される原料の総量である。樹脂複合材料の特徴量は全ての原料の重み付け特徴量の総和により計算される。

[0051] 図５Ａ～図５Ｃの例では、主原料（Ａ）と比較して添加剤（Ｚ）の配合量が小さく、重み付け特徴量も主原料（Ａ）と比較して添加剤（Ｚ）が小さくなる。このように、添加剤（Ｚ）の重み付け特徴量は主原料（Ａ）の重み付け特徴量と比較して小さいため、主原料（Ａ）及び添加剤（Ｚ）の部分構造の一部が共通している場合に、添加剤（Ｚ）の重み付け特徴量の変化が埋もれてしまう。したがって、添加剤（Ｚ）の重み付け特徴量の変化が樹脂複合材料の特徴量に反映されにくく、添加剤（Ｚ）が樹脂複合材料の特性に与える影響を精度良く予測できない。

[0052] そこで、本実施形態では、複数の原料分類から構成される樹脂複合材料の特性を、主原料の配合量と、添加剤の重み付け特徴量から予測する。図６Ａ～図６Ｃは、樹脂複合材料の主原料の配合量と、添加剤の重み付け特徴量との一例の構成図である。図６Ａ～図６Ｃの例では、主原料の特徴量を使用せず、配合量を使用する。

[0053] したがって、図６Ａ～図６Ｃの例では主原料（Ａ）及び添加剤（Ｚ）の部分構造の一部が共通している場合であっても、添加剤（Ｚ）の重み付け特徴量の変化が主原料（Ａ）の重み付け特徴量に埋もれてしまうことがない。したがって、添加剤（Ｚ）の重み付け特徴量の変化が樹脂複合材料の特徴量に反映されやすく、添加剤（Ｚ）が樹脂複合材料の特性に与える影響を精度良く予測できる。

[0054] ＜処理＞

以下、本実施形態に係る情報処理システム１が、複数の原料分類から構成される樹脂複合材料の特性を予測する処理の詳細について説明する。

[0055] 図７は、本実施形態に係る情報処理システムの特性予測方法の概要を示し

た一例の説明図である。図７では主原料である原料分類ＡのＮ種類の原料の名称を変数にする列（Ｎ次元）と、添加剤である原料分類Ｚの重み付け特徴量の列（W次元）とを結合して、複数の原料分類から構成される樹脂複合材料の特性を予測するための説明変数を作成する例を示している。

[0056] 図７は、原料分類（Ｚ）の添加剤を探索する場合の説明変数の例である。図７は原料分類Ａの主原料を探索しない場合の説明変数と考えることもできる。図７は主原料である原料分類ＡのＮ種類の原料の配合量と、添加物である原料分類ＺのW種類の重み付け特徴量（各特徴量の値×配合量）と、から作成した説明変数を表している。配合量はモル比率を使用して表すことができ、重量比率を使用して表してもよい。

[0057] 本実施形態では図７に示したように作成した説明変数を利用し、目的変数である樹脂複合材料の特性と図７に示したような説明変数との対応関係を、学習用データセットを用いて機械学習することにより、樹脂複合材料の特性を予測できる予測モデルを作成する。

[0058] 図８は、設計条件の一例の構成図である。図８の例では、主原料であるＮ種類の原料の配合量と、添加剤である「原料Ｏ」～「原料Ｔ」の配合量と、を情報として含む設計条件の一例である。主原料については、以下の式（１）に示すように配合量が説明変数の要素となる。

[0059] [数1]

$$x_{i,j}：\text{配合量} \quad \cdots(1)$$

$$i \quad ：\text{実験番号}$$
$$j \quad ：\text{原料の番号、} 1 \leq j \leq \mathrm{N}$$

[0060] 添加剤については、以下の式（２）に示すように算出する重み付け特徴量が説明変数の要素となる。

[0061]

[数2]

$$x_{i,w} = \sum_{j} 配合量_{i,j} \times 特徴量_{j,w} \quad \cdots(2)$$

i ：実験番号
j ：原料の番号、$0 \leq j \leq T$
w ：特徴量の番号、$1 \leq w \leq W$

[0062] 図９Ａ及び図９Ｂは、添加剤の重み付け特徴量を作成する処理の一例の説明図である。図９Ａに示すように特徴量は、ｊ（添加剤の種類）×ｗ（特徴量の種類）の行列により実験番号ｉごとに表すことができる。添加剤である「原料Ｏ」～「原料Ｔ」の図８に示した配合量と図９Ａに示した「特徴量１」～「特徴量W」とに基づき、式（２）により重み付け特徴量を図９Ｂのように算出できる。

[0063] 例えば図９Ｂは実験番号「１」の「実験１」の設計条件から添加剤の重み付け特徴量を算出した例である。図９Ｂの例では「特徴量１」～「特徴量W」の重み付け特徴量を算出している。図９Ｂの「実験１の特徴量１」は図８の「実験１」の「原料Ｏ」～「原料Ｔ」の配合量「０．１」～「０．５」と、図９Ａの「原料Ｏ」～「原料Ｔ」の特徴量「３」～「１」との積である重み付け特徴量の総和により算出される。

[0064] また、図９Ｂの「実験１の特徴量２」～「実験１の特徴量W」も「実験１の特徴量１」と同様に算出する。なお、図示は省略しているが、図８の実験番号「２」以降の設計条件についても実験番号「１」の設計条件と同様に添加剤の重み付け特徴量を算出する。

[0065] 上記した主原料（Ｎ次元）の配合量の列と、添加剤の重み付け特徴量（W次元）の列とを結合することで、図１０に示すような説明変数を作成できる。図１０は、作成した説明変数の一例の説明図である。図１０に示すように説明変数の次元数はＮ＋W次元となる。

[0066] 図１１は本実施形態に係る情報処理システムの学習段階の処理の一例のフ

ローチャートである。ステップＳ１０において、特性予測装置１０の予測モデル作成部３０は、学習用データセットの設定を受け付ける。ステップＳ１０の学習用データセットの設定は、学習用データセット記憶部４０が記憶している１つ以上の学習用データセットから選択して設定してもよい。また、ステップＳ１０の学習用データセットの設定は、ユーザから設定を受け付けた１つの学習用データセットを学習用データセット記憶部４０に記憶する処理であってもよい。

[0067] ステップＳ１２において、予測モデル作成部３０の目的変数特定部５０はステップＳ１０で設定を受け付けた学習用データセットから予測対象となる特性（目的変数）の列を特定する。また、設計条件特定部５２は、ステップＳ１０で設定を受け付けた学習用データセットから例えば図８に示したような設計条件（説明変数）の列を特定する。

[0068] ステップＳ１４において、説明変数作成部５６はステップＳ１２で特定した設計条件の列から、主原料の列を特定する。また、特徴量作成部５４はステップＳ１２で特定した設計条件の列から、添加剤の列を特定する。ステップＳ１６において、特徴量作成部５４はステップＳ１４で特定した添加剤の列に対して例えば図９Ａに示したような特徴量を作成する。

[0069] ステップＳ１８において、説明変数作成部５６はステップＳ１６で特徴量作成部５４が作成した図９Ａのような添加剤の特徴量と、図８に示したような添加剤の配合量との積から、図９Ｂに示したような添加剤の重み付け特徴量を算出する。

[0070] ステップＳ２０において、説明変数作成部５６はステップＳ１４で特定した主原料の配合量の列と、ステップＳ１８で算出した添加剤の重み付け特徴量の列と、を結合して図１０に示したような説明変数を作成する。

[0071] ステップＳ２２において、学習処理部５８は、ステップＳ１２で特定した目的変数とステップＳ２０で作成した説明変数との対応関係を機械学習し、予測モデルを作成する。作成した予測モデルは予測モデル記憶部４２に記憶される。

[0072] なお、上記では添加剤を探索する例を説明したが、例えば図１２に示すような画面１０００から探索する原料の選択を可能としてもよい。図１２は探索する材料を選択する画面の一例のイメージ図である。

[0073] 図１２の画面１０００は、複数の原料分類から構成される樹脂複合材料から探索したい原料分類を、最適化したい原料の分類として選択するＧＵＩ（グラフィカルユーザインタフェース）を示している。ユーザは画面１０００に表示されたアルコール原料、インシアネート原料、架橋剤、硬化剤、及び触媒などの原料分類から、最適化したい原料分類を選択する。例えば図１２では最適化したい原料分類として「硬化剤」が選択された例を示している。図１２の状態で「予測」ボタンが押下されると、特性予測装置１０の予測モデル作成部３０は、図１１のフローチャートの手順に従い、例えば図１３に示すような説明変数を作成できる。

[0074] 図１３は説明変数の一例の構成図である。図１３の説明変数は、図１２の画面１０００において最適化したい原料分類として選択された「硬化剤」の重み付け特徴量と、最適化したい原料分類として選択されなかった原料分類の配合量と、を結合して作成される。図１３に示すように、本実施形態に係る情報処理システム１は、最適化したい原料分類として選択されなかった原料を配合量で表した要素と、最適化したい原料分類として選択された原料を重み付け特徴量で表した要素と、を結合した説明変数を作成し、機械学習に利用できる。

[0075] 本実施形態では最適化したい原料分類が添加剤である例を説明したが、図１２の画面１０００に示すように最適化したい原料分類が主原料であってもよい。例えば図１２の画面１０００において「インシアネート原料」が最適化したい原料分類として選択された場合には「インシアネート原料」の重み付け特徴量と、アルコール原料、架橋剤、硬化剤、及び触媒の配合量と、を結合した説明変数が作成される。また、図１２の画面１０００では最適化したい原料の分類を１つ選択する例を示したが、複数選択可能であってもよい。

[0076] 図１４は本実施形態に係る情報処理システムの予測段階の処理の一例のフローチャートである。ステップＳ３０において、特性予測装置１０の予測部３２は、予測用データの設定を受け付ける。ステップＳ３２において、予測部３２はステップＳ３０で設定を受け付けた予測用データから例えば図８に示したような設計条件の列を特定する。

[0077] ステップＳ３４において、予測部３２はステップＳ３２で特定した設計条件の列から主原料の列と添加剤の列とを特定する。ステップＳ３６において、予測部３２はステップＳ３４で特定した添加剤の列に対して例えば図９Ａに示したような特徴量を作成する。

[0078] ステップＳ３８において、予測部３２はステップＳ３６で作成された図９Ａのような添加剤の特徴量と、図８に示したような添加剤の配合量との積から、図９Ｂに示したような添加剤の重み付け特徴量を算出する。

[0079] ステップＳ４０において、予測部３２はステップＳ３４で特定した主原料の配合量の列と、ステップＳ３８で算出した添加剤の重み付け特徴量の列と、を結合して図１０に示したような説明変数を作成する。ステップＳ４２において、予測部３２はステップＳ４０で作成した説明変数を、予測モデルに入力することで、予測用データに対応する樹脂複合材料の特性を予測する。

[0080] 図１４のフローチャートの処理は、予測した樹脂複合材料の特性が、樹脂複合材料の目標特性を達成するか、設定した計算回数（例えば１万回）を終えるまで、添加物の原料の組み合わせの探索と、その組み合わせに含まれる原料の配合量の変更と、を行いながら繰り返される。予測部３２は、添加物の原料の組み合わせと、その組み合わせに含まれる原料の配合量とを網羅探索点として、樹脂複合材料の特性を予測する。

[0081] 網羅探索点は、例えば所定の範囲でランダムまたは所定の刻み幅で、組み合わせに含まれる原料の配合量を生成することにより、生成できる。予測した樹脂複合材料の特性が目標特性に近似する網羅探索点により、予測部３２は、樹脂複合材料の目標特性に近似する添加物の原料の組み合わせと、その組み合わせに含まれる原料の配合量とを特定できる。

[0082] ［他の実施形態］

本実施形態に係る特性予測装置１０が予測した樹脂複合材料の特性は、例えば複数の原料分類から構成される複合材料の配合設計装置又は配合設計支援装置、その配合設計装置又は配合設計支援装置を実現するプログラムなどに適用できる。また、本実施形態に係る特性予測装置１０は、予測した特性が目標とする特性に近い設計条件を、樹脂複合材料の製造装置に供給することで、製造装置に樹脂複合材料を生成させてもよい。

[0083] 以上、本実施形態に係る情報処理システム１によれば、複数の原料分類から構成される複合材料について、特定の原料分類の原料から重み付け特徴量を計算し、他の原料分類の原料の配合量と結合して説明変数を作成することで、他の原料分類の影響を軽減し、特定の原料分類が複合材料の特性に与える影響を精度良く予測できる。

[0084] 例えば本実施形態に係る情報処理システム１によれば、主原料に比べて配合量が小さい添加剤（添加物）の分子構造を変更したときの複合材料の特性の変化を精度良く予測することが可能となる。また、所望の特性を満足するために使用すべき添加剤のスクリーニングなどが可能となる。本実施形態に係る情報処理システム１は、添加剤と主原料との部分構造の一部が共通している場合に、特に有効である。

[0085] 以上、本実施形態について説明したが、特許請求の範囲の趣旨及び範囲から逸脱することなく、形態や詳細の多様な変更が可能なことが理解されるであろう。以上、本発明を実施例に基づいて説明したが、本発明は上記実施例に限定されるものではなく、特許請求の範囲に記載の範囲内で様々な変形が可能である。本願は、日本特許庁に２０２１年８月３１日に出願された基礎出願２０２１－１４０８３３号の優先権を主張するものであり、その全内容を参照によりここに援用する。

符号の説明

[0086] １ 情報処理システム

１０ 特性予測装置

１２　ユーザ端末

１８　通信ネットワーク

２０　情報表示部

２２　操作受付部

２４　要求送信部

２６　応答受信部

３０　予測モデル作成部

３２　予測部

３４　出力部

４０　学習用データセット記憶部

４２　予測モデル記憶部

５０　目的変数特定部

５２　設計条件特定部

５４　特徴量作成部

５６　説明変数作成部

５８　学習処理部

請求の範囲

[請求項1] 複数の原料分類から構成される複合材料の特性を予測する特性予測装置であって、

第１の原料分類の材料種及び第２の原料分類の材料種を含んだ構成である複合材料の学習用データセットを用いて、目的変数である前記複合材料の特性と、説明変数である前記第１の原料分類の材料種の配合量及び第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量と、の対応関係を機械学習した予測モデルを作成する予測モデル作成部と、

特性を予測する複合材料の予測用データから作成した前記第１の原料分類の材料種の配合量及び前記第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量を説明変数として前記予測モデルに入力して、前記予測用データに対応する前記複合材料の特性を予測する予測部と、

を有する特性予測装置。

[請求項2] 前記説明変数は、前記第１の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料の配合量の情報と、前記第２の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料のそれぞれの特徴量及び前記原料の配合量の積である前記重み付け特徴量の情報と、を含むこと

を特徴とする請求項１記載の特性予測装置。

[請求項3] 前記予測モデル作成部は、前記複合材料を構成する複数の原料分類のうち、最適化のために探索する原料の原料分類を前記第２の原料分類とし、前記探索する原料の原料分類以外を前記第１の原料分類とすること

を特徴とする請求項１又は２記載の特性予測装置。

[請求項4] 前記予測部は、最適化する前記第２の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料の組み合わせの探索と、前記組み合わせに含まれる１つ以上の原料の配合量の変更と、を行いながら前記複合材料の特性を予測し、予測した前記特性が前記予測用データに対応する前記複合材料の目標特性に近似している、前記原料の組み合わせ、及び前記組み

合わせに含まれる１つ以上の原料の配合量を特定すること
を特徴とする請求項３記載の特性予測装置。

[請求項5] 前記予測モデル作成部は、
前記学習用データセットから目的変数として前記複合材料の特性を特定する目的変数特定部と、
前記学習用データセットから前記複合材料の設計条件を特定する設計条件特定部と、
前記設計条件から前記第２の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料ごとに特徴量を作成する特徴量作成部と、
前記第１の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料の配合量、及び前記第２の原料分類の材料種に含まれる１つ以上の原料のそれぞれの前記重み付け特徴量を説明変数として作成する説明変数作成部と、
前記目的変数及び前記説明変数の対応関係を機械学習して予測モデルを作成する学習処理部と、
を有する請求項１乃至４の何れか一項に記載の特性予測装置。

[請求項6] 前記複合材料は、前記第１の原料分類の材料種である主原料と、前記主原料に比べて配合量が小さい前記第２の原料分類の材料種である添加剤と、を含む樹脂複合材料であること
を特徴とする請求項１乃至５の何れか一項に記載の特性予測装置。

[請求項7] 前記原料分類は、モノマー、オリゴマー、ポリマー、フィラー、触媒、重合開始剤、重合禁止剤、架橋剤、又は硬化剤である、
請求項１乃至６の何れか一項に記載の特性予測装置。

[請求項8] 前記特徴量は、分子の構造的特徴を数値化した情報、又は分子の化学的特徴を数値化した情報である
請求項１乃至７の何れか一項に記載の特性予測装置。

[請求項9] 前記特徴量は、前記第２の原料分類の材料種の銘柄又は型番を「０」と「１」とで表すダミー変数で記述した情報である

請求項１乃至７の何れか一項に記載の特性予測装置。

[請求項10] コンピュータが、複数の原料分類から構成される複合材料の特性を予測する特性予測方法であって、

第１の原料分類の材料種及び第２の原料分類の材料種を含んだ構成である複合材料の学習用データセットを用いて、目的変数である前記複合材料の特性と、説明変数である前記第１の原料分類の材料種の配合量及び第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量と、の対応関係を機械学習した予測モデルを作成するステップと、

特性を予測する複合材料の予測用データから作成した前記第１の原料分類の材料種の配合量及び前記第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量を説明変数として前記予測モデルに入力して、前記予測用データに対応する前記複合材料の特性を予測するステップと、

を含む特性予測方法。

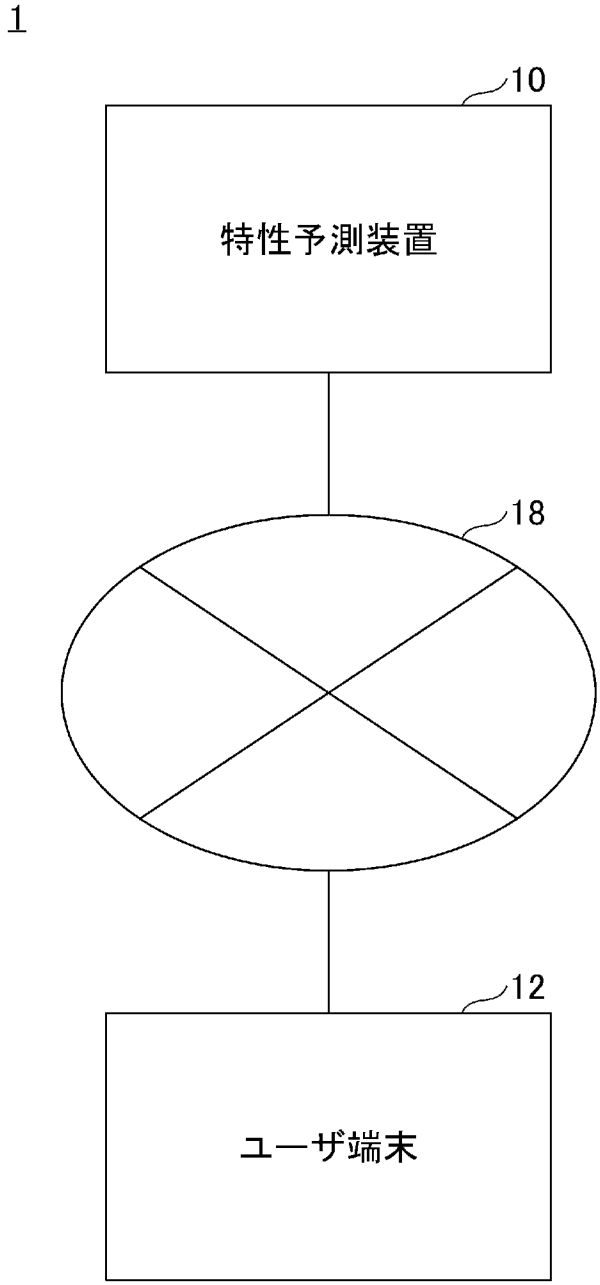
[請求項11] 複数の原料分類から構成される複合材料の特性を予測するコンピュータに、

第１の原料分類の材料種及び第２の原料分類の材料種を含んだ構成である複合材料の学習用データセットを用いて、目的変数である前記複合材料の特性と、説明変数である前記第１の原料分類の材料種の配合量及び第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量と、の対応関係を機械学習した予測モデルを作成するステップ、

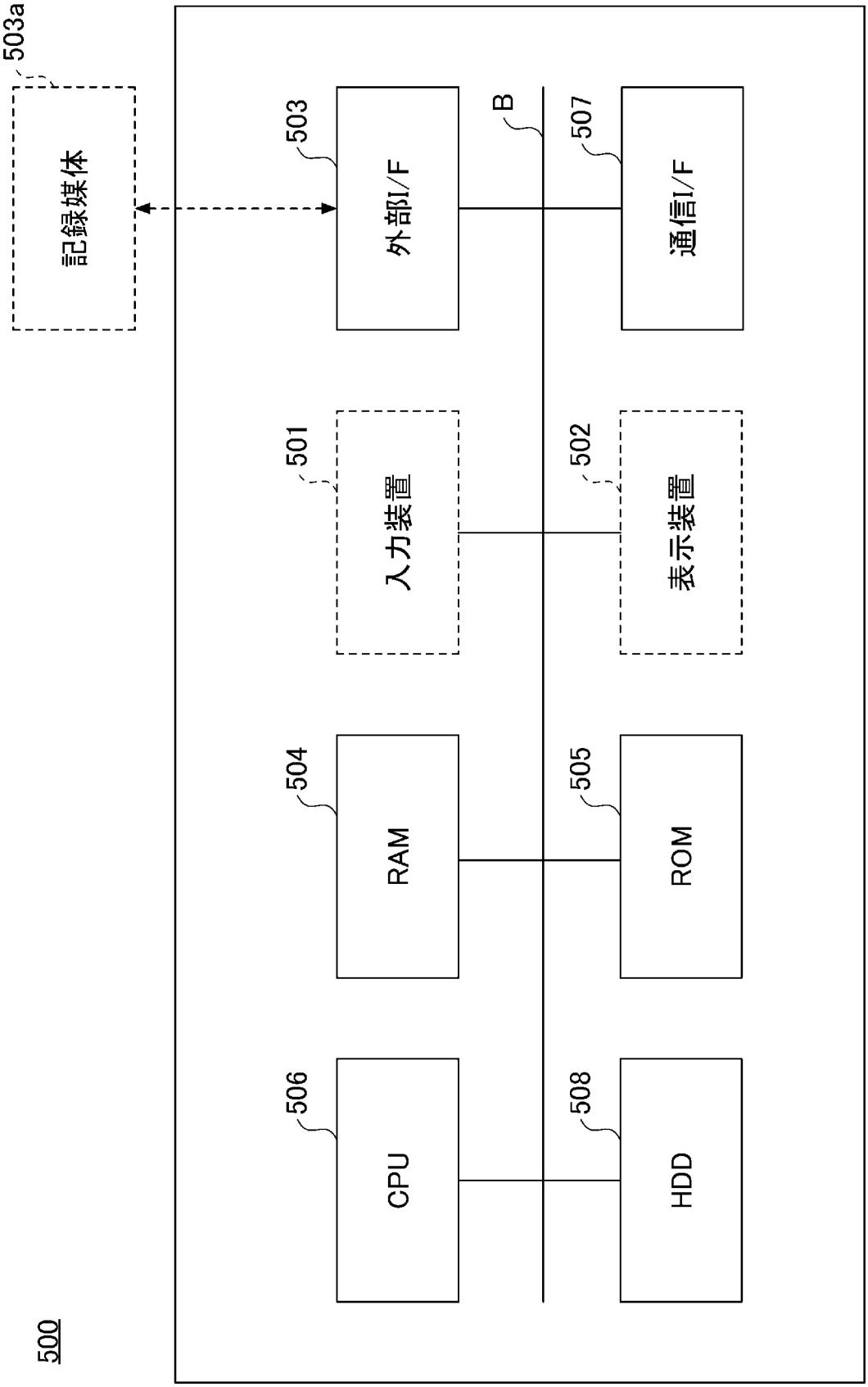
特性を予測する複合材料の予測用データから作成した前記第１の原料分類の材料種の配合量及び前記第２の原料分類の材料種の重み付け特徴量を説明変数として前記予測モデルに入力して、前記予測用データに対応する前記複合材料の特性を予測するステップ、

を実行させるためのプログラム。

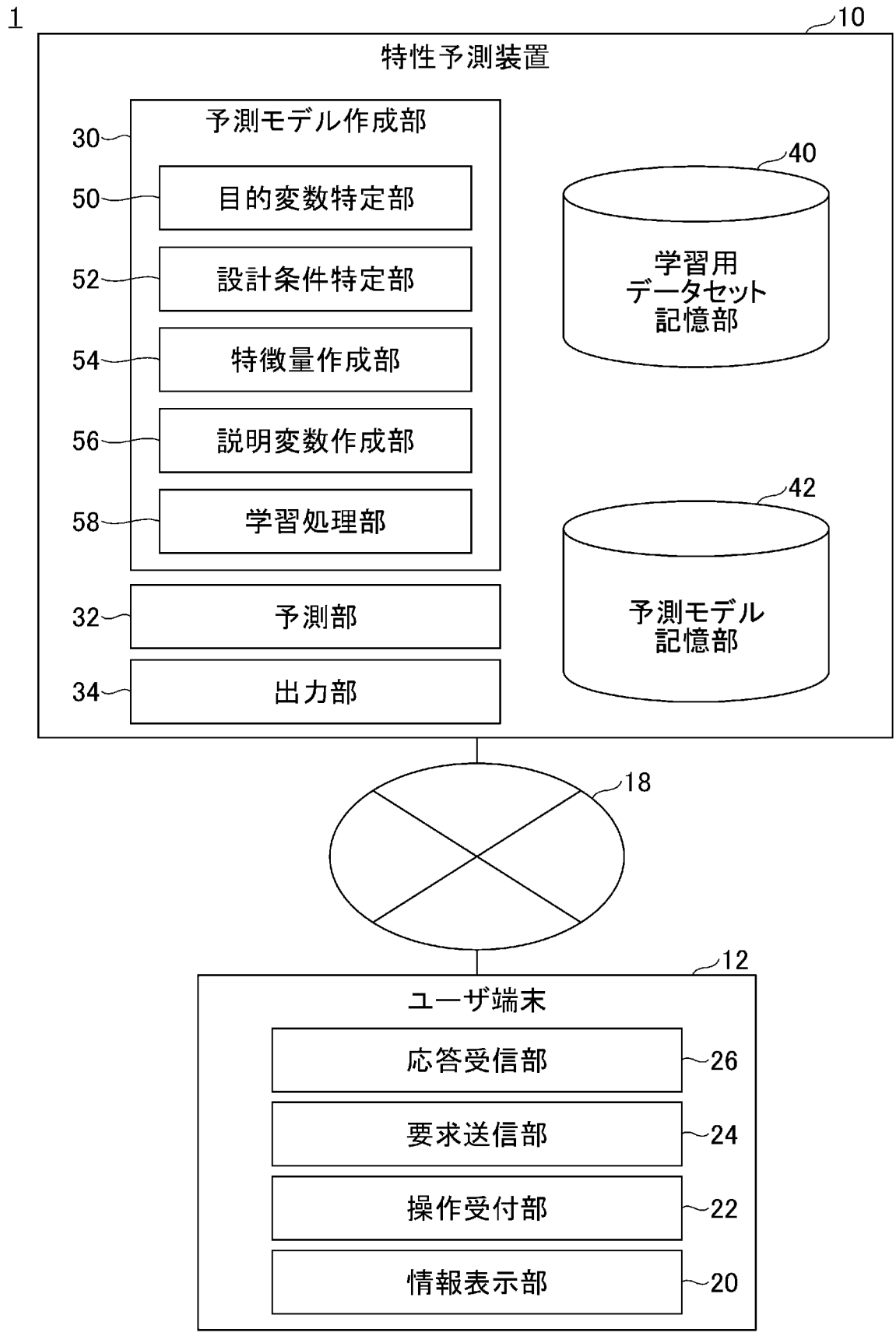
[図1]



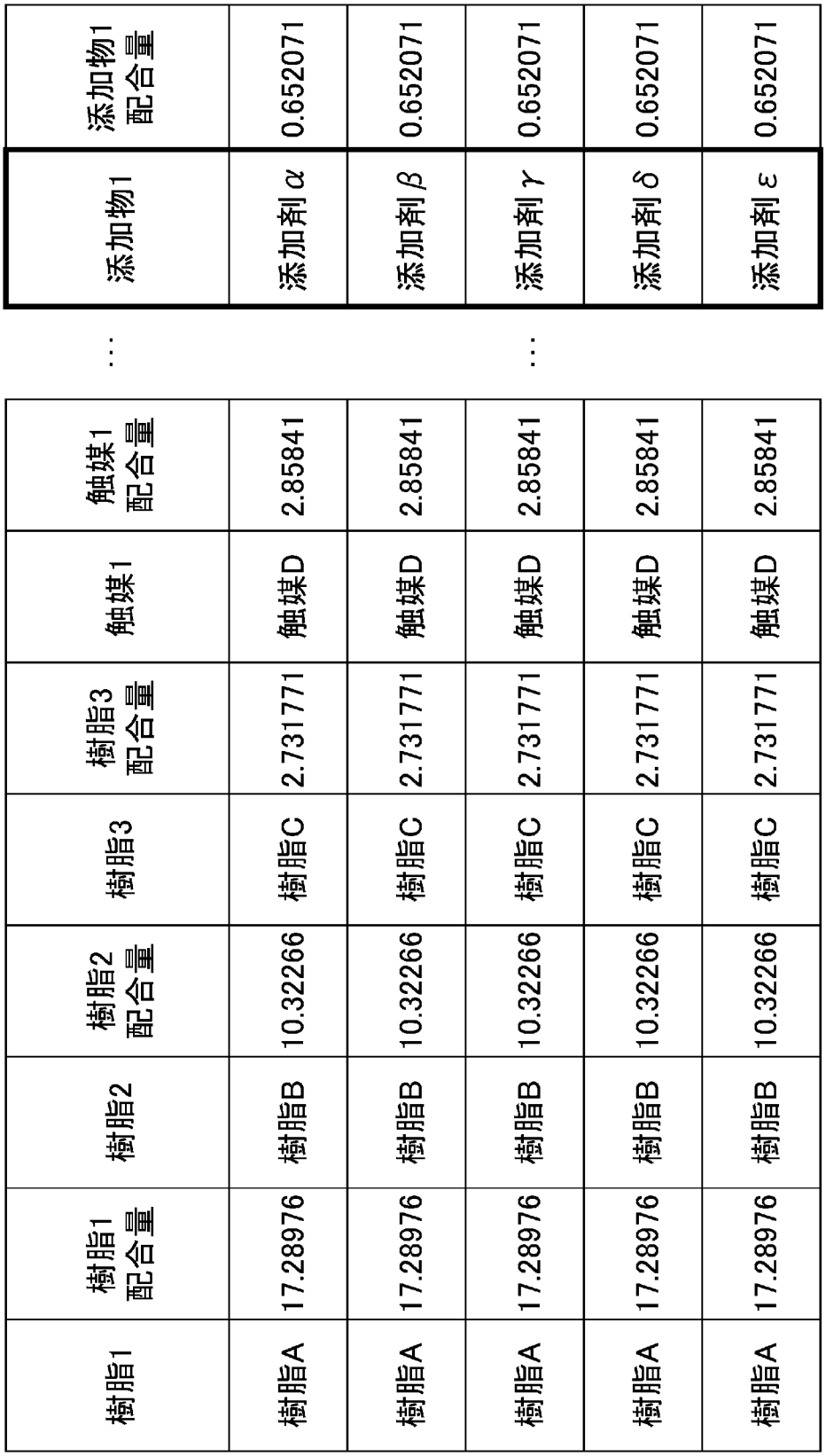
[図2]


503a
記録媒体
503
外部I/F
B
507
通信I/F
501
入力装置
502
表示装置
504
RAM
505
ROM
506
CPU
508
HDD
500

[図3]


1
10
特性予測装置
予測モデル作成部
30
50
目的変数特定部
52
設計条件特定部
54
特徴量作成部
56
説明変数作成部
58
学習処理部
32
予測部
34
出力部
40
学習用
データセット
記憶部
42
予測モデル
記憶部
18
12
ユーザ端末
応答受信部
26
要求送信部
24
操作受付部
22
情報表示部
20

[図4]



樹脂1	樹脂1 配合量	樹脂2	樹脂2 配合量	樹脂3	樹脂3 配合量	触媒1	触媒1 配合量	…	添加物1	添加物1 配合量
樹脂A	17.28976	樹脂B	10.32266	樹脂C	2.731771	触媒D	2.85841	…	添加剤 α	0.652071
樹脂A	17.28976	樹脂B	10.32266	樹脂C	2.731771	触媒D	2.85841	…	添加剤 β	0.652071
樹脂A	17.28976	樹脂B	10.32266	樹脂C	2.731771	触媒D	2.85841	…	添加剤 γ	0.652071
樹脂A	17.28976	樹脂B	10.32266	樹脂C	2.731771	触媒D	2.85841	…	添加剤 δ	0.652071
樹脂A	17.28976	樹脂B	10.32266	樹脂C	2.731771	触媒D	2.85841	…	添加剤 ε	0.652071

[図5A]

○ 主原料(A)の重み付け特徴量

特徴量1	・・・	特徴量W
0.1	・・・	0.5

[図5B]

○ 添加剤(Z)の重み付け特徴量

特徴量1	・・・	特徴量W
0.004	・・・	0.003

＊微量添加のため重みづけ特徴量の数値が小さい

[図5C]

○ 樹脂複合材料の特徴量(主原料+添加剤)

特徴量1	・・・	特徴量W
0.104	・・・	0.503

[図6A]

○ 主原料(A)の重み付け特徴量

特徴量1	・・・	特徴量W
0.1	・・・	0.5

＊主原料は特徴量を使用せず、配合量(例. 0.5)を使用

[図6B]

○ 添加剤(Z)の重み付け特徴量

特徴量1	・・・	特徴量W
0.004	・・・	0.003

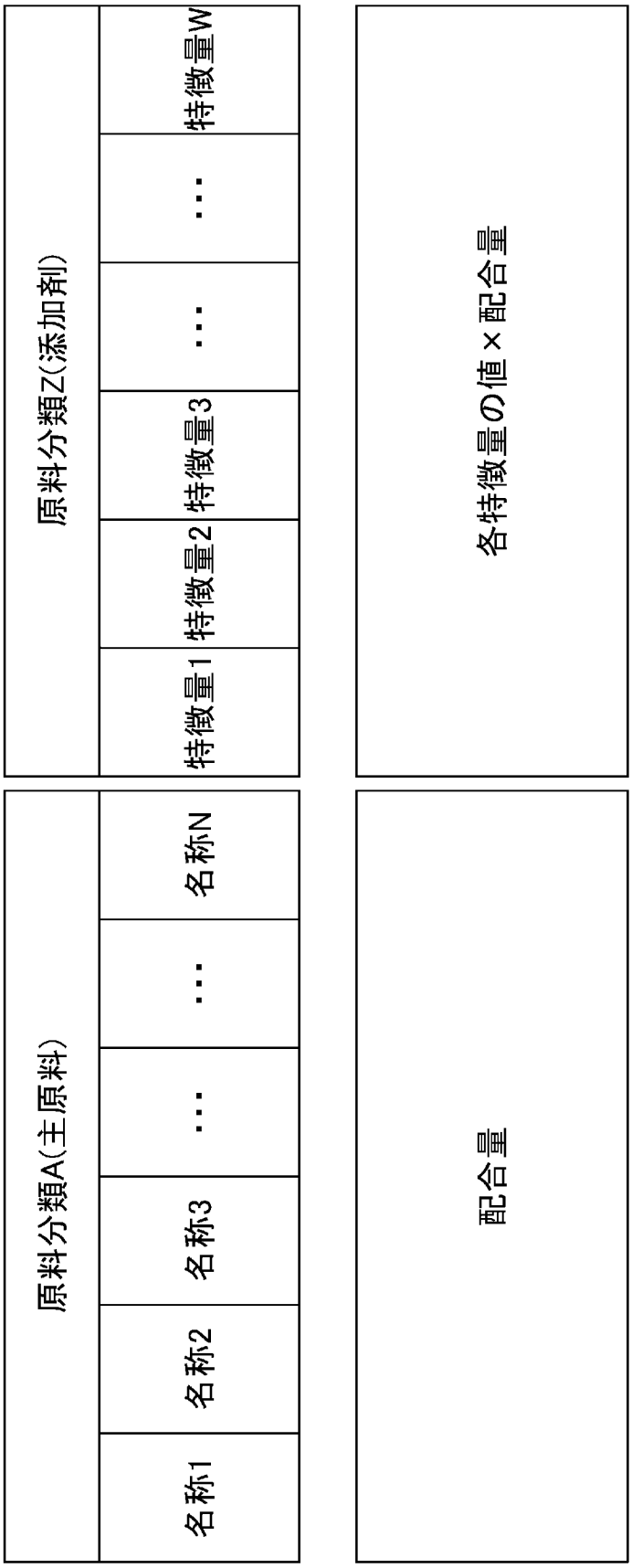
＊微量添加のため重みづけ特徴量の数値が小さい

[図6C]

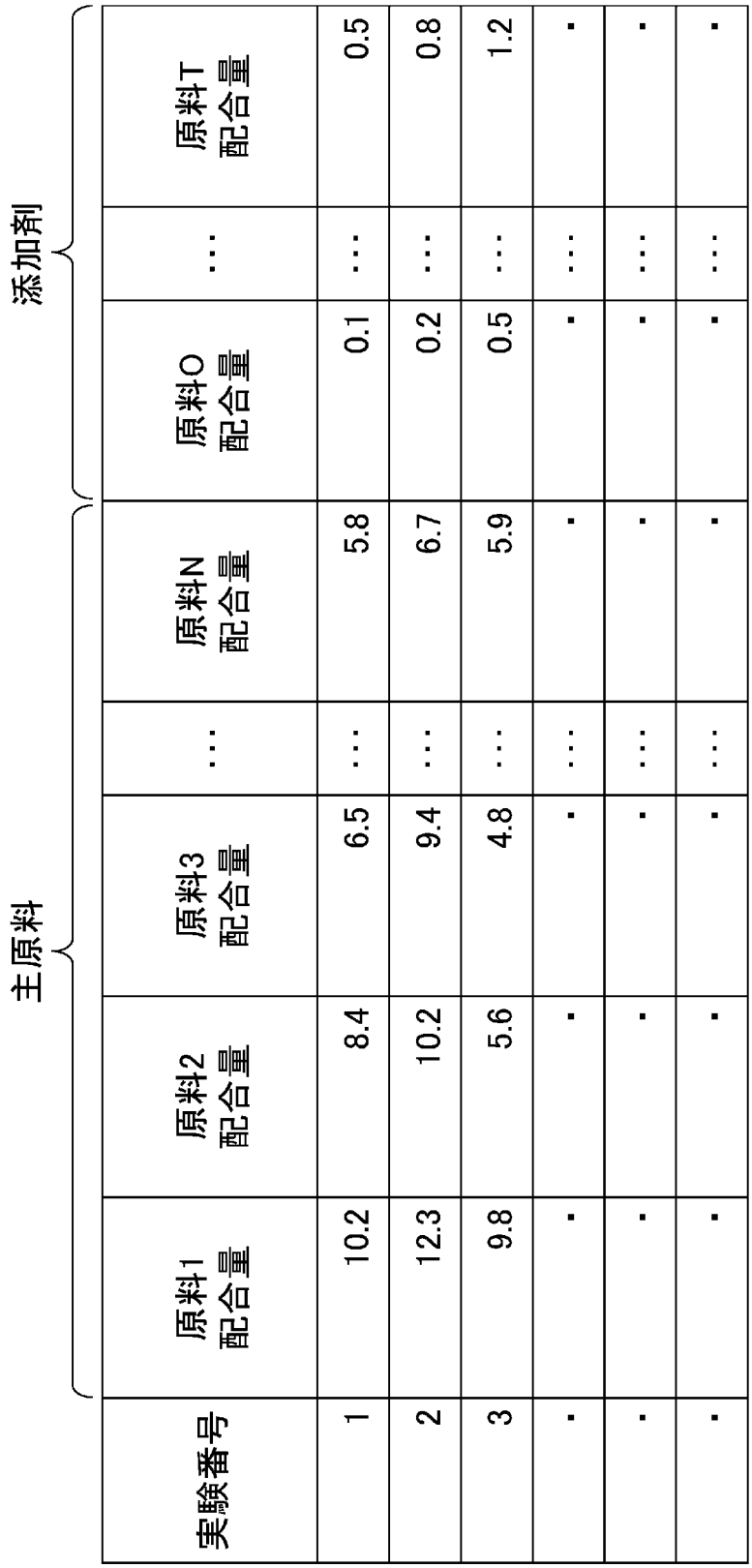
○ 樹脂複合材料の特徴量

主原料の配合量	添加剤の特徴量1	・・・	添加剤の特徴量W
0.5	0.004	・・・	0.003

[図7]


原料分類A(主原料)
名称1
名称2
名称3
・・・
名称N
配合量
原料分類Z(添加剤)
特徴量1
特徴量2
特徴量3
・・・
特徴量W
各特徴量の値×配合量

[図8]



	実験番号	主原料						添加剤		
		原料1 配合量	原料2 配合量	原料3 配合量	…	原料N 配合量	原料O 配合量	…	原料T 配合量
	1	10.2	8.4	6.5	…	5.8	0.1	…	0.5
	2	12.3	10.2	9.4	…	6.7	0.2	…	0.8
	3	9.8	5.6	4.8	…	5.9	0.5	…	1.2
	▪	▪	▪	▪	…	▪	▪	…	▪
	▪	▪	▪	▪	…	▪	▪	…	▪
	▪	▪	▪	▪	…	▪	▪	…	▪

[図9A]

$$特徴量_{j,w} = \begin{array}{c} \\ 原料O \\ \vdots \\ 原料T \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} 特徴量1 & 特徴量2 & 特徴量3 & \cdots & 特徴量W \end{array} \\ \begin{bmatrix} 3 & 4 & 5 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \cdots \\ 1 & 2 & 6 & \cdots & 7 \end{bmatrix} \end{array}$$

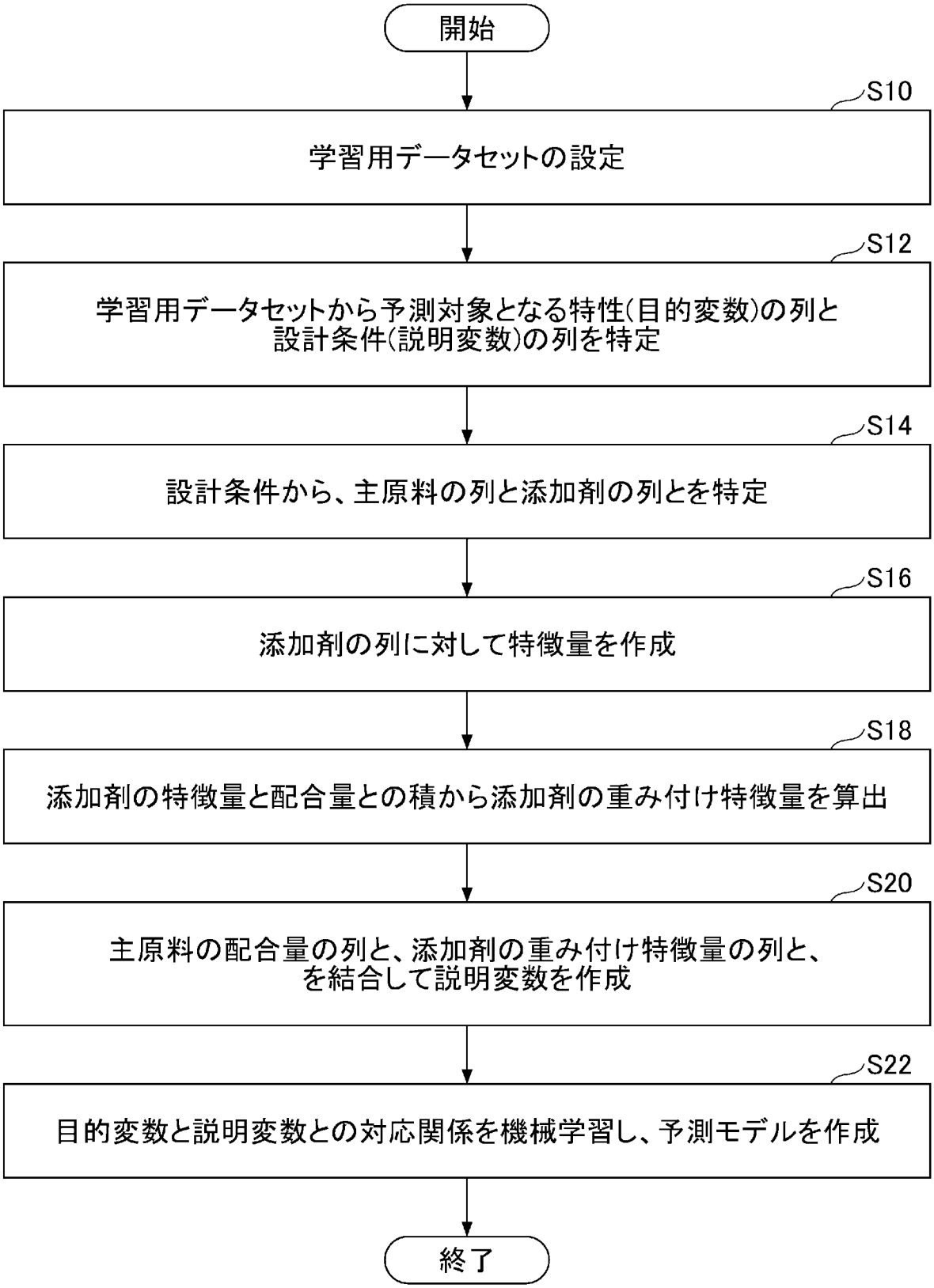
[図9B]

実験1の特徴量1 = $0.1 \times 3 + \cdots + 0.5 \times 1$
実験1の特徴量2 = $0.1 \times 4 + \cdots + 0.5 \times 2$
実験1の特徴量3 = $0.1 \times 5 + \cdots + 0.5 \times 6$
・・・
実験1の特徴量W = $0.1 \times 0 + \cdots + 0.5 \times 7$

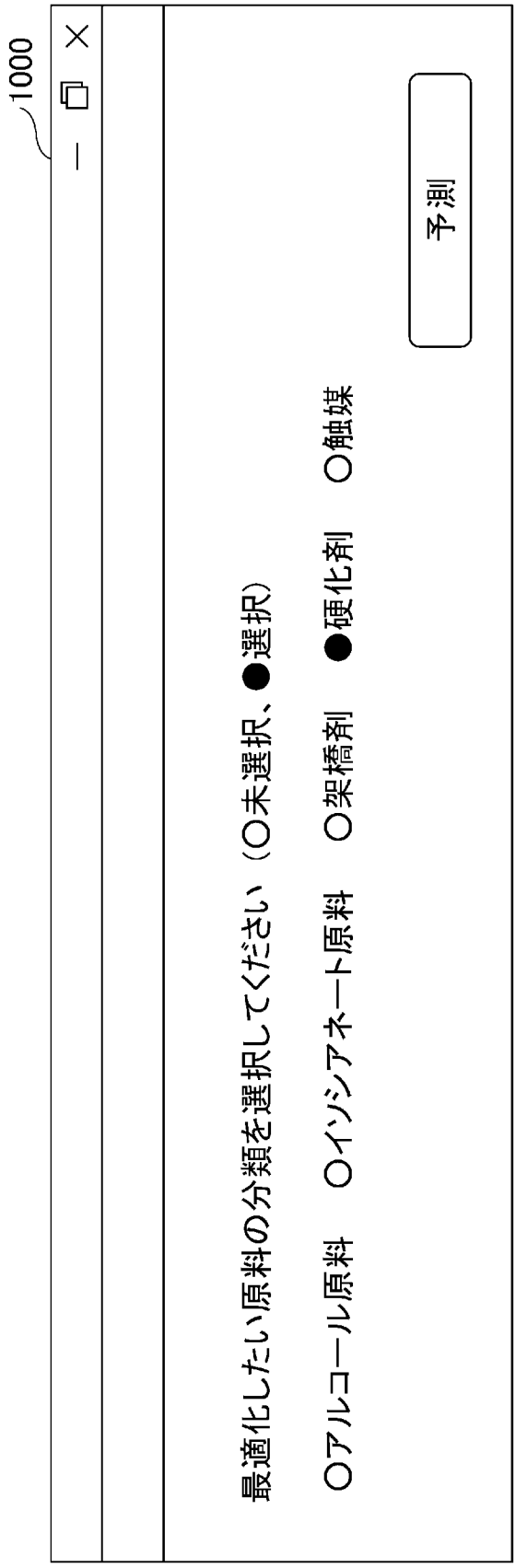
[図10]


主原料(N次元)
添加剤の重み付け特徴量(W次元)
実験番号
原料1配合量
原料2配合量
原料3配合量
…
原料N配合量
特徴量1
特徴量2
特徴量3
…
特徴量W
1 10.2 8.4 6.5 … 5.8 1.2 2.1 5.1 … 5.9
2 12.3 10.2 9.4 … 6.7 2.1 1.1 3.7 … 9.8
3 9.8 5.6 4.8 … 5.9 3.6 6.7 2.7 … 7.6
説明変数の次元数は$N+W$次元

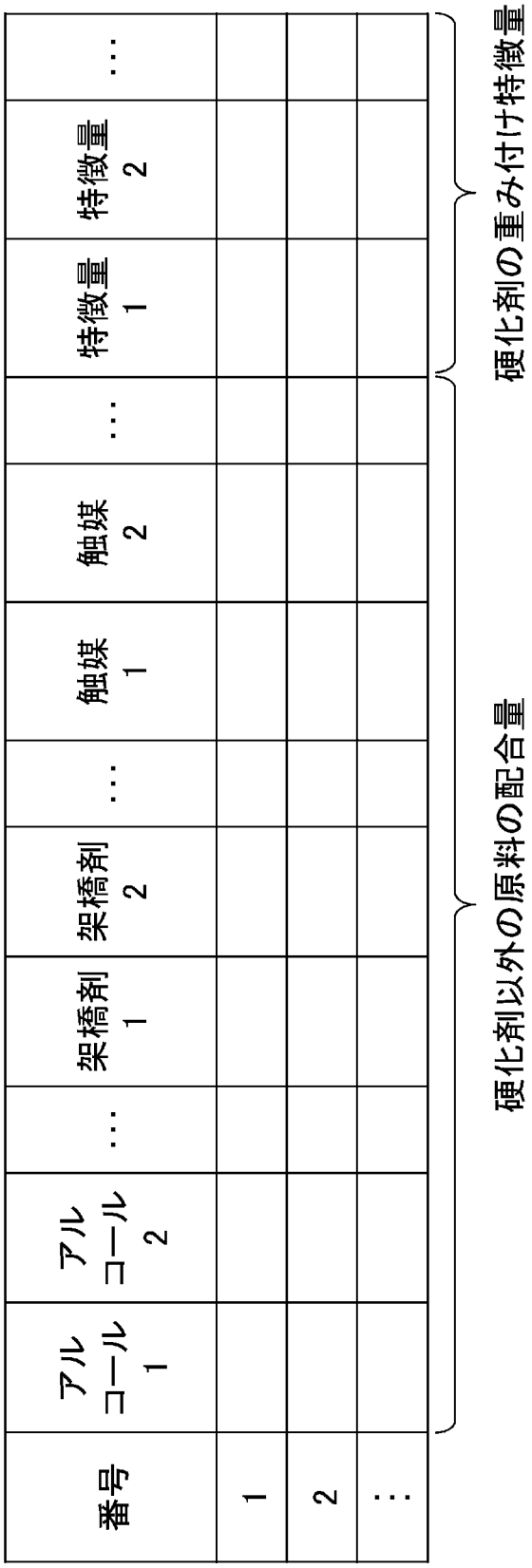
[図11]


開始
S10
学習用データセットの設定
S12
学習用データセットから予測対象となる特性(目的変数)の列と
設計条件(説明変数)の列を特定
S14
設計条件から、主原料の列と添加剤の列とを特定
S16
添加剤の列に対して特徴量を作成
S18
添加剤の特徴量と配合量との積から添加剤の重み付け特徴量を算出
S20
主原料の配合量の列と、添加剤の重み付け特徴量の列と、
を結合して説明変数を作成
S22
目的変数と説明変数との対応関係を機械学習し、予測モデルを作成
終了

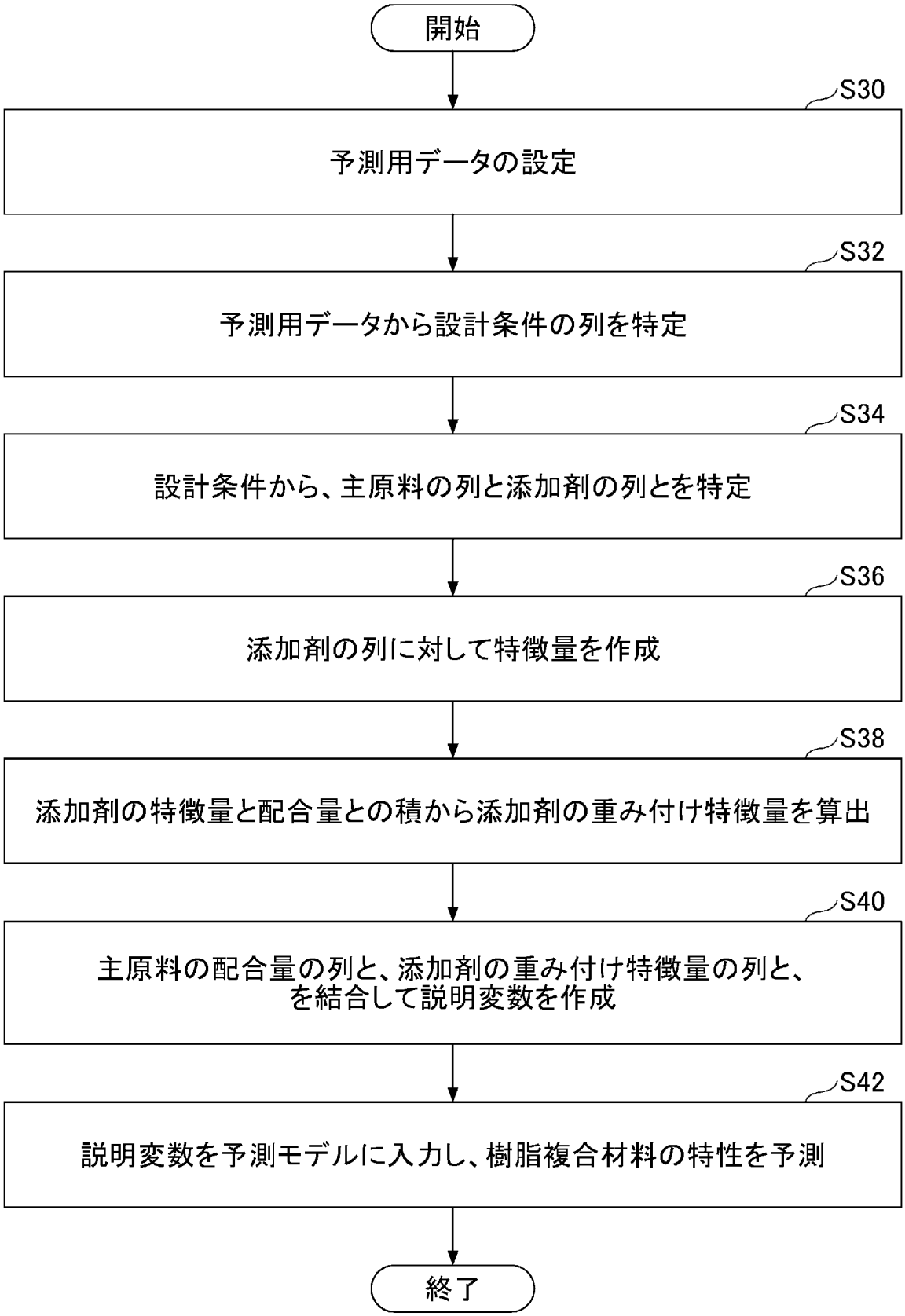
[図12]


1000
最適化したい原料の分類を選択してください（○未選択、●選択）
○アルコール原料 ○イソシアネート原料 ●架橋剤 ●硬化剤 ○触媒
予測

[図13]


番号
アルコール1
アルコール2
…
架橋剤1
架橋剤2
…
触媒1
触媒2
…
特徴量1
特徴量2
…
1
2
⋮
硬化剤以外の原料の配合量
硬化剤の重み付け特徴量

[図14]


開始
S30
予測用データの設定
S32
予測用データから設計条件の列を特定
S34
設計条件から、主原料の列と添加剤の列とを特定
S36
添加剤の列に対して特徴量を作成
S38
添加剤の特徴量と配合量との積から添加剤の重み付け特徴量を算出
S40
主原料の配合量の列と、添加剤の重み付け特徴量の列と、
を結合して説明変数を作成
S42
説明変数を予測モデルに入力し、樹脂複合材料の特性を予測
終了

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2022/032048

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G16C 20/70(2019.01)i
FI: G16C20/70

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G16C20/70

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022
Registered utility model specifications of Japan 1996-2022
Published registered utility model applications of Japan 1994-2022

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2021/079985 A1 (KONICA MINOLTA INC) 29 April 2021 (2021-04-29) paragraphs [0015]-[0088]	1-3, 5-11
Y		4
Y	JP 2020-77346 A (ASAHI KASEI CORP) 21 May 2020 (2020-05-21) paragraphs [0046]-[0055]	4

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☑ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
28 October 2022	**08 November 2022**
Name and mailing address of the ISA/JP **Japan Patent Office (ISA/JP)** **3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915** **Japan**	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2022/032048

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO 2021/079985 A1	29 April 2021	(Family: none)	
JP 2020-77346 A	21 May 2020	CN 111310911 A paragraphs [0072]-[0085]	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2022/032048

A.　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

G16C 20/70(2019.01)i
FI: G16C20/70

B.　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

G16C20/70

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０２２年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２２年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２２年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

C.　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	WO 2021/079985 A1 (コニカミノルタ株式会社) 29.04.2021 (2021-04-29) [0015]-[0088]	1-3, 5-11
Y		4
Y	JP 2020-77346 A (旭化成株式会社) 21.05.2020 (2020-05-21) [0046]-[0055]	4

☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☑ パテントファミリーに関する別紙を参照。

*　引用文献のカテゴリー
“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
“&” 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
28.10.2022	08.11.2022

名称及びあて先
日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

権限のある職員（特許庁審査官）
山内　裕史 5R 4064
電話番号 03-3581-1101 内線 3562

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
PCT/JP2022/032048

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO 2021/079985 A1	29.04.2021	（ファミリーなし）	
JP 2020-77346 A	21.05.2020	CN 111310911 A [0072]-[0085]	