

(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  
2022年11月24日(24.11.2022)



(10) 国際公開番号  
WO 2022/244563 A1

(51) 国際特許分類:  
G06N 3/04 (2006.01) G06N 20/00 (2019.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2022/017833

(22) 国際出願日: 2022年4月14日(14.04.2022)

(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 2021-083921 2021年5月18日(18.05.2021) JP

(71) 出願人: 昭和電工株式会社 (SHOWA DENKO K.K.) [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, Kosuke); 〒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). 藤森 貴大 (FUJIMORI, Takahiro); 〒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). 李海仁 (LEE, Haein); 〒1058518 東

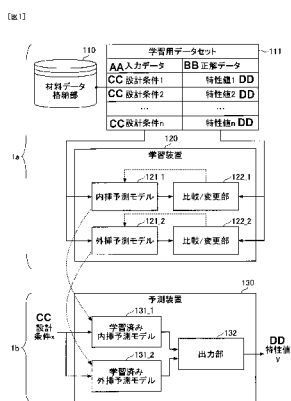
京都港区芝大門1丁目13番9号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 竹本 真平 (TAKEMOTO, Shimpei); 〒1058518 東京都港区芝大門1丁目13番9号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 南拓也 (MINAMI, Takuya); 〒1058518 東京都港区芝大門1丁目13番9号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 奥野 好成 (OKUNO, Yoshishige); 〒1058518 東京都港区芝大門1丁目13番9号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 伊東 忠重, 外 (ITO, Tadashige et al.); 〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目1番1号 丸の内 M Y P L A Z A (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, 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, JM, JO, JP, KE, KG, KH,

(54) Title: PREDICTION DEVICE, LEARNING DEVICE, PREDICTION METHOD, LEARNING METHOD, PREDICTION PROGRAM, AND LEARNING PROGRAM

(54) 発明の名称: 予測装置、学習装置、予測方法、学習方法、予測プログラム及び学習プログラム



- 110 Material data storage unit
111 Learning data set
120 Learning device
121\_1 Interpolation prediction model
121\_2 Extrapolation prediction model
122\_1, 122\_2 Comparison/modification unit
130 Prediction device
131\_1 Trained interpolation prediction model
131\_2 Trained extrapolation prediction model
132 Output unit
AA Input data
BB Correct answer data
CC Design condition
DD Characteristic value

(57) Abstract: The present invention improves the prediction accuracy of a prediction device that uses a trained model. This prediction device includes: a first trained model and a second trained model to each of which is inputted input data to be predicted, and which thereby respectively output first output data and second output data; and an output unit which acquires the first and second output data, and outputs prediction data by calculating a weighted average value or by taking a weighted majority. The first trained model is configured so as to have higher prediction accuracy for input data of an interpolation area than the second trained model, and the second trained model is configured so as to have higher prediction accuracy for input data of an extrapolation area than the first trained model.

(57) 要約: 学習済みのモデルを用いた予測装置において予測精度を向上させる。予測装置は、予測対象の入力データが入力されることで、第1の出力データ及び第2の出力データをそれぞれ出力する第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルと、前記第1及び第2の出力データを取得し、加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることで予測データを出力する出力部と、を有し、前記第1の学習済みモデルは、内挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第2の学習済みモデルよりも高くなるように構成され、前記第2の学習済みモデルは、外挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第1の学習済みモデルよりも高くなるように構成されている。



WO 2022/244563 A1

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))

## 明 細 書

発明の名称：

予測装置、学習装置、予測方法、学習方法、予測プログラム及び学習プログラム

### 技術分野

[0001] 本開示は、予測装置、学習装置、予測方法、学習方法、予測プログラム及び学習プログラムに関する。

### 背景技術

[0002] 従来より、材料の設計は、材料開発者の経験に基づく試作を繰り返すことにより行われてきた。一方で、材料の設計において、学習モデルを適用する試みがなされている。例えば、試作時の設計条件と、試作した材料の評価結果（材料の特性値等）とを収集し、学習用データセットとしてモデルの学習を行うことで、新たな設計条件のもとで試作する材料の特性値を事前に予測することが可能になる。

### 先行技術文献

#### 特許文献

[0003] 特許文献1：特開2006-309709号公報  
特許文献2：特開2019-28949号公報

### 発明の概要

#### 発明が解決しようとする課題

[0004] しかしながら、一般に、学習済みのモデルは、内挿領域の入力データに対して一定程度の予測精度が得られる一方で、外挿領域の入力データに対しては、十分な予測精度が得られにくい。

[0005] 本開示は、学習済みのモデルを用いた予測装置において予測精度を向上させることを目的としている。

#### 課題を解決するための手段

- [0006] 本開示の第1の態様に係る予測装置は、  
予測対象の入力データが入力されることで、第1の出力データ及び第2の出力データをそれぞれ出力する第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルと、  
前記第1及び第2の出力データを取得し、加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることで予測データを出力する出力部と、を有し、  
前記第1の学習済みモデルは、内挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第2の学習済みモデルよりも高くなるように構成され、前記第2の学習済みモデルは、外挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第1の学習済みモデルよりも高くなるように構成されている。
- [0007] 本開示の第2の態様は、第1の態様に記載の予測装置であって、  
前記出力部は、予め定められた重みのもとで、前記加重平均値を算出する、または、前記加重多数決をとる。
- [0008] 本開示の第3の態様は、第2の態様に記載の予測装置であって、  
前記予め定められた重みは、  
検証用データセットの入力データが入力された場合に前記出力部より複数種類の重みのもとでそれぞれ出力される予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて決定される。
- [0009] 本開示の第4の態様は、第2の態様に記載の予測装置であって、  
前記第1の学習済みモデル、前記第2の学習済みモデル及び前記予め定められた重みは、  
複数種類の第1の学習済みモデル及び複数種類の第2の学習済みモデルそれぞれに対して、検証用データセットの入力データが入力された場合に前記出力部より複数種類の重みのもとでそれぞれ出力される予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて決定される。
- [0010] 本開示の第5の態様は、第4の態様に記載の予測装置であって、

前記複数種類の第1の学習済みモデルは、互いに異なるハイパーパラメータが設定され、及び／または、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われており、

前記複数種類の第2の学習済みモデルは、互いに異なるハイパーパラメータが設定され、及び／または、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われている。

[0011] 本開示の第6の態様は、第1の態様に記載の予測装置であって、  
前記予測対象の入力データが内挿領域の入力データであるか、外挿領域の入力データであるかを判別する判別部を更に有し、  
前記出力部は、前記判別部による判別結果に応じた重みのもとで、前記加重平均値を算出する、または、前記加重多数決をとる。

[0012] 本開示の第7の態様は、第1の態様に記載の予測装置であって、  
前記予測対象の入力データの外挿性の強さを評価する判別部を更に有し、  
前記出力部は、前記判別部による評価結果に応じた重みのもとで、前記加重平均値を算出する、または、前記加重多数決をとる。

[0013] 本開示の第8の態様は、第7の態様に記載の予測装置であって、  
前記判別部は、  
ランダムフォレスト予測の不確実性による評価手法、ベイズ推定の不確実性による評価手法、カーネル密度推定による評価手法、距離による評価手法のうちのいずれか1つまたは複数を用いることで、前記予測対象の入力データの外挿性の強さを評価する。

[0014] 本開示の第9の態様は、第6の態様に記載の予測装置であって、  
前記判別結果に応じた重みは、内挿領域用の重みと、外挿領域用の重みとを含み、  
前記内挿領域用の重みは、  
検証用データセットの内挿領域の入力データが入力された場合に前記出力部より複数種類の重みのもとでそれぞれ出力される予測データと、前記検証用データセットの内挿領域の入力データに対応する正解データとの間の誤差

に基づいて決定され、

前記外挿領域用の重みは、

検証用データセットの外挿領域の入力データが入力された場合に前記出力部より複数種類の重みのもとでそれぞれ出力される予測データと、前記検証用データセットの外挿領域の入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて決定される。

[0015] 本開示の第10の態様は、第1の態様に記載の予測装置であって、

前記第1の学習済みモデルは、決定木、ランダムフォレスト、勾配ブースティング、バギング、アダブースト、k近傍法、ニューラルネットワークのうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われており、

前記第2の学習済みモデルは、ガウス過程、カーネルリッジ、サポートベクターマシン、線形、部分最小二乗、ラッソ、線形リッジ、エラスティックネット、ベイジアンリッジ、ニューラルネットワークのうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われている。

[0016] 本開示の第11の態様に係る学習装置は、

検証用データセットの入力データが入力されることで、第1の出力データ及び第2の出力データをそれぞれ出力する第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルと、

前記第1及び第2の出力データを取得し、複数種類の重みのもとで加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることでそれぞれの予測データを出力する出力部と、

出力されたそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、前記複数種類の重みのうちのいずれかの重みを決定する決定部とを有する。

[0017] 本開示の第12の態様は、第11の態様に記載の学習装置であって、

前記決定部は、

前記検証用データセットの内挿領域の入力データを入力することで前記出力部より出力されるそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの内

挿領域の入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、内挿領域用の重みを決定し、

前記検証用データセットの外挿領域の入力データを入力することで前記出力部より出力されるそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの外挿領域の入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、外挿領域用の重みを決定する。

[0018] 本開示の第13の態様は、第11の態様に記載の学習装置であって、前記出力部は、

複数種類の第1の学習済みモデル及び複数種類の第2の学習済みモデルに対して、前記検証用データセットの入力データを入力することで、前記複数種類の第1及び第2の学習済みモデルよりそれぞれ出力される第1及び第2の出力データを取得し、前記複数種類の重みのもとで加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることでそれぞれの予測データを出力し、前記決定部は、

出力されたそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、

前記複数種類の第1の学習済みモデルのうちのいずれかの第1の学習済みモデルを決定し、

前記複数種類の第2の学習済みモデルのうちのいずれかの第2の学習済みモデルを決定し、

前記複数種類の重みのうちのいずれかの重みを決定する。

[0019] 本開示の第14の態様は、第13の態様に記載の学習装置であって、

前記複数種類の第1の学習済みモデルは、互いに異なるハイパーパラメータが設定され、及び／または、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われており、

前記複数種類の第2の学習済みモデルは、互いに異なるハイパーパラメータが設定され、及び／または、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われている。

- [0020] 本開示の第15の態様は、第11の態様に記載の学習装置であって、  
前記第1の学習済みモデルは、内挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第2の学習済みモデルよりも高くなるように構成され、前記第2の学習済みモデルは、外挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第1の学習済みモデルよりも高くなるように構成されている。
- [0021] 本開示の第16の態様は、第15の態様に記載の学習装置であって、  
前記第1の学習済みモデルは、決定木、ランダムフォレスト、勾配ブースティング、バギング、アダブースト、k近傍法、ニューラルネットワークのうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われており、  
前記第2の学習済みモデルは、ガウス過程、カーネルリッジ、サポートベクターマシン、線形、部分最小二乗、ラッソ、線形リッジ、エラスティックネット、ベイジアンリッジ、ニューラルネットワークのうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われている。
- [0022] 本開示の第17の態様に係る予測方法は、  
予測対象の入力データが入力されることで、第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルがそれぞれ第1の出力データ及び第2の出力データを出力する工程と、  
前記第1及び第2の出力データを取得し、加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることで予測データを出力する工程と、を有し、  
前記第1の学習済みモデルは、内挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第2の学習済みモデルよりも高くなるように構成され、前記第2の学習済みモデルは、外挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第1の学習済みモデルよりも高くなるように構成されている。
- [0023] 本開示の第18の態様に係る学習方法は、  
検証用データセットの入力データが入力されることで、第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルがそれぞれ第1の出力データ及び第2の出力データを出力する工程と、  
前記第1及び第2の出力データを取得し、複数種類の重みのもとで加重平

均値を算出することで、または、加重多数決をとることでそれぞれの予測データを出力する工程と、

出力されたそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、前記複数種類の重みのうちのいずれかの重みを決定する工程とを有する。

[0024] 本開示の第19の態様に係る予測プログラムは、

予測対象の入力データが入力されることで、第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルがそれぞれ第1の出力データ及び第2の出力データを出力する工程と、

前記第1及び第2の出力データを取得し、加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることで予測データを出力する工程と、をコンピュータに実行させるための予測プログラムであり、

前記第1の学習済みモデルは、内挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第2の学習済みモデルよりも高くなるように構成され、前記第2の学習済みモデルは、外挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第1の学習済みモデルよりも高くなるように構成されている。

[0025] 本開示の第20の態様に係る学習プログラムは、

検証用データセットの入力データが入力されることで、第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルがそれぞれ第1の出力データ及び第2の出力データを出力する工程と、

前記第1及び第2の出力データを取得し、複数種類の重みのもとで加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることでそれぞれの予測データを出力する工程と、

出力されたそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、前記複数種類の重みのうちのいずれかの重みを決定する工程とをコンピュータに実行させる。

## 発明の効果

[0026] 本開示によれば、学習済みのモデルを用いた予測装置において、予測精度

を向上させることができる。

### 図面の簡単な説明

[0027] [図1]図1は、学習フェーズにおける学習装置及び予測フェーズにおける予測装置の機能構成の一例を示す第1の図である。

[図2]図2は、学習装置及び予測装置のハードウェア構成の一例を示す図である。

[図3]図3は、学習処理及び予測処理の流れを示す第1のフローチャートである。

[図4]図4は、学習フェーズにおける学習装置及び予測フェーズにおける予測装置の機能構成の一例を示す第2の図である。

[図5]図5は、学習処理及び予測処理の流れを示す第2のフローチャートである。

[図6]図6は、最適化フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第1の図である。

[図7]図7は、最適化フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第2の図である。

[図8]図8は、学習処理及び予測処理の流れを示す第3のフローチャートである。

[図9]図9は、最適化処理の流れを示す第1のフローチャートである。

[図10]図10は、学習フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第3の図である。

[図11]図11は、最適化フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第3の図である。

[図12]図12は、学習処理及び予測処理の流れを示す第4のフローチャートである。

[図13]図13は、最適化処理の流れを示す第2のフローチャートである。

[図14]図14は、学習フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第4の図である。

[図15]図15は、最適化フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第4の図である。

[図16]図16は、学習処理及び予測処理の流れを示す第5のフローチャートである。

[図17]図17は、最適化処理の流れを示す第3のフローチャートである。

[図18]図18は、予測精度の一例を示す図である。

### 発明を実施するための形態

[0028] 以下、各実施形態について添付の図面を参照しながら説明する。なお、本明細書及び図面において、実質的に同一の機能構成を有する構成要素については、同一の符号を付することにより重複した説明を省略する。

[0029] [第1の実施形態]

#### <学習装置及び予測装置の機能構成>

はじめに、第1の実施形態に係る学習装置及び予測装置の機能構成について説明する。第1の実施形態に係る学習装置は、試作時の設計条件と、試作した材料の特性値とを含む学習用データセットを用いて学習を行う学習装置を例に説明する。また、第1の実施形態に係る予測装置は、新たな設計条件のもとで試作する材料の特性値を予測する予測装置を例に説明する。

[0030] ただし、第1の実施形態に係る学習装置及び予測装置は、上記用途に限定されず、材料の設計以外に用いられてもよい。

[0031] 図1は、学習フェーズにおける学習装置及び予測フェーズにおける予測装置の機能構成の一例を示す第1の図である。学習装置120には、学習プログラムがインストールされており、当該プログラムが実行されることで、学習装置120は、

- ・内挿予測モデル121\_\_1、
- ・比較/変更部122\_\_1、
- ・外挿予測モデル121\_\_2、
- ・比較/変更部122\_\_2、

として機能する(図1の1a参照)。

- [0032] 学習装置120は、材料データ格納部110に格納された学習用データセット111を用いて、内挿予測モデル121\_\_1、外挿予測モデル121\_\_2の学習を行い、学習済み内挿予測モデル131\_\_1及び学習済み外挿予測モデル131\_\_2を生成する。
- [0033] 図1の1aに示すように、学習用データセット111には、情報の項目として、“入力データ”と“正解データ”とが含まれる。なお、図1の1aの例は、“入力データ”として、「設計条件1」～「設計条件n」が格納され、“正解データ”として、「特性値1」～「特性値n」が格納された場合を示している。
- [0034] 内挿予測モデル121\_\_1は、内挿領域の入力データに対する予測精度が、学習済み外挿予測モデル131\_\_2よりも高い学習済み内挿予測モデル131\_\_1が生成されるように構成された、学習前のモデルである。
- [0035] 内挿予測モデル121\_\_1は、学習用データセット111の“入力データ”に格納された「設計条件1」～「設計条件n」が入力されることで、出力データを出力する。
- [0036] 比較/変更部122\_\_1は、内挿予測モデル121\_\_1から出力された出力データと、学習用データセット111の“正解データ”に格納されている「特性値1」～「特性値n」との誤差に応じて、内挿予測モデル121\_\_1のモデルパラメータを更新する。
- [0037] これにより、学習装置120は、学習済み内挿予測モデル131\_\_1（第1の学習済みモデル）を生成する。また、学習装置120は、生成した学習済み内挿予測モデル131\_\_1（第2の学習済みモデル）を予測装置130に適用する。
- [0038] なお、学習装置120が学習を行う内挿予測モデル121\_\_1は、学習手法として、“決定木、ランダムフォレスト、勾配ブースティング、バギング、アダブースト、k近傍法、ニューラルネットワーク”、  
のうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われるモデル

であるとする。つまり、学習装置120では、内挿予測モデル121\_\_1として、内挿領域の入力データに適した学習手法のもとで学習が行われるモデルが用いられるものとする。

[0039] また、学習装置120が内挿予測モデル121\_\_1の学習を行うにあたり、内挿予測モデル121\_\_1のハイパーパラメータには、内挿領域の入力データに適した値（内挿予測モデル用のハイパーパラメータ）が設定されるものとする。

[0040] 一方、外挿予測モデル121\_\_2は、外挿領域の入力データに対する予測精度が、学習済み内挿予測モデル131\_\_1よりも高い学習済み外挿予測モデル131\_\_2が生成されるように構成された、学習前のモデルである。

[0041] 外挿予測モデル121\_\_2は、学習用データセット111の”入力データ”に格納された「設計条件1」～「設計条件n」が入力されることで、出力データを出力する。

[0042] 比較／変更部122\_\_2は、外挿予測モデル121\_\_2から出力された出力データと、学習用データセット111の”正解データ”に格納されている「特性値1」～「特性値n」との誤差に応じて、外挿予測モデル121\_\_2のモデルパラメータを更新する。

[0043] これにより、学習装置120は、学習済み外挿予測モデル131\_\_2を生成する。また、学習装置120は、生成した学習済み外挿予測モデル131\_\_2を予測装置130に適用する。

[0044] なお、学習装置120が学習を行う外挿予測モデル121\_\_2は、学習手法として、

”ガウス過程、カーネルリッジ、サポートベクターマシン、線形、部分最小二乗、ラッソ、線形リッジ、エラスティックネット、ベイジアンリッジ、ニューラルネットワーク”、

のうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われるモデルであるとする。つまり、学習装置120では、外挿予測モデル121\_\_2として、外挿領域の入力データに適した学習手法のもとで学習が行われるモデ

ルが用いられるものとする。

[0045] また、学習装置120が外挿予測モデル121\_\_2の学習を行うにあたり、外挿予測モデル121\_\_2のハイパーパラメータには、外挿領域の入力データに適した値（外挿予測モデル用のハイパーパラメータ）が設定されるものとする。

[0046] 一方、予測装置130には、予測プログラムがインストールされており、当該プログラムが実行されることで、予測装置130は、

- ・学習済み内挿予測モデル131\_\_1、
- ・学習済み外挿予測モデル131\_\_2、
- ・出力部132、

として機能する（図1の1b参照）。

[0047] 学習済み内挿予測モデル131\_\_1は、学習装置120が、学習用データセット111を用いて内挿予測モデル121\_\_1の学習を行うことで生成される。学習済み内挿予測モデル131\_\_1は、予測対象の入力データ（設計条件x）が入力されることで、第1の特性値（第1の出力データ）を予測し、出力部132に出力する。

[0048] 学習済み外挿予測モデル131\_\_2は、学習装置120が、学習用データセット111を用いて外挿予測モデル121\_\_2の学習を行うことで生成される。学習済み外挿予測モデル131\_\_2は、設計条件xが入力されることで、第2の特性値（第2の出力データ）を予測し、出力部132に出力する。

[0049] 出力部132は、学習済み内挿予測モデル131\_\_1により予測された第1の特性値と、学習済み外挿予測モデル131\_\_2により予測された第2の特性値とに基づいて、設計条件xに対する特性値yを決定し、予測データとして出力する。

[0050] なお、出力部132では、第1の特性値と第2の特性値との加重平均値を算出することで、特性値yを決定する。あるいは、出力部132では、第1の特性値と第2の特性値との間で加重多数決をとることで、特性値yを決定

する。

[0051] なお、本実施形態において、出力部 132 が加重平均値を算出する際に用いる重み、または、加重多数決をとる際に用いる重みは、予め最適化されているものとする。

[0052] 例えば、設計条件  $x$  が連続値である場合、出力部 132 は、第 1 の特性値と第 2 の特性値の平均値を算出する（つまり、第 1 の特性値の重み = 0.5、第 2 の特性値の重み = 0.5 を用いるものとする）。あるいは、出力部 132 は、第 1 の特性値と第 2 の特性値の加重平均値を算出する（例えば、第 1 の特性値の重み = 0.2、第 2 の特性値の重み = 0.8 を用いるものとする）。

[0053] また、設計条件  $x$  が離散値である場合、出力部 132 は、第 1 の特性値と第 2 の特性値の多数決をとる（つまり、第 1 の特性値の重み = 0.5、第 2 の特性値の重み = 0.5 を用いるものとする）。あるいは、出力部 132 は、第 1 の特性値と第 2 の特性値の加重多数決をとる（例えば、第 1 の特性値の重み = 0.2、第 2 の特性値の重み = 0.8 を用いるものとする）。

[0054] このように、予測装置 130 は、内挿領域の入力データに適した学習済み内挿予測モデルと、外挿領域の入力データに適した学習済み外挿予測モデルとを用いて、最適化された重みのもとで予測データを出力する。

[0055] これにより、予測装置 130 によれば、内挿領域の入力データに対して一定程度の予測精度を得ることができるとともに、外挿領域の入力データに対しても、十分な予測精度を得ることができるようになる。つまり、本実施形態によれば、学習済み予測モデルを用いた予測装置において予測精度を向上させることができる。

[0056] <学習装置及び予測装置のハードウェア構成>

次に、学習装置 120 及び予測装置 130 のハードウェア構成について説明する。なお、学習装置 120 及び予測装置 130 は、同様のハードウェア構成を有するため、ここでは、図 2 を用いて、学習装置 120 及び予測装置 130 のハードウェア構成をまとめて説明する。

- [0057] 図2は、学習装置及び予測装置のハードウェア構成の一例を示す図である。図2に示すように、学習装置120及び予測装置130は、プロセッサ201、メモリ202、補助記憶装置203、I/F (Interface) 装置204、通信装置205、ドライブ装置206を有する。なお、学習装置120及び予測装置130の各ハードウェアは、バス207を介して相互に接続されている。
- [0058] プロセッサ201は、CPU (Central Processing Unit)、GPU (Graphics Processing Unit) 等の各種演算デバイスを有する。プロセッサ201は、各種プログラム（例えば、学習プログラム、予測プログラム等）をメモリ202上に読み出して実行する。
- [0059] メモリ202は、ROM (Read Only Memory)、RAM (Random Access Memory) 等の主記憶デバイスを有する。プロセッサ201とメモリ202とは、いわゆるコンピュータを形成し、プロセッサ201が、メモリ202上に読み出した各種プログラムを実行することで、当該コンピュータは各種機能を実現する。
- [0060] 補助記憶装置203は、各種プログラムや、各種プログラムがプロセッサ201によって実行される際に用いられる各種データを格納する。
- [0061] I/F装置204は、不図示の外部装置と接続する接続デバイスである。通信装置205は、ネットワークを介して外部装置（例えば、材料データ格納部110）と通信するための通信デバイスである。
- [0062] ドライブ装置206は記録媒体210をセットするためのデバイスである。ここでいう記録媒体210には、CD-ROM、フレキシブルディスク、光磁気ディスク等のように情報を光学的、電気的あるいは磁氣的に記録する媒体が含まれる。また、記録媒体210には、ROM、フラッシュメモリ等のように情報を電気的に記録する半導体メモリ等が含まれていてもよい。
- [0063] なお、補助記憶装置203にインストールされる各種プログラムは、例えば、配布された記録媒体210がドライブ装置206にセットされ、該記録媒体210に記録された各種プログラムがドライブ装置206により読み出

されることでインストールされる。あるいは、補助記憶装置203にインストールされる各種プログラムは、通信装置205を介してネットワークからダウンロードされることで、インストールされてもよい。

[0064] <学習処理及び予測処理の流れ>

次に、学習処理及び予測処理の流れについて説明する。図3は、学習処理及び予測処理の流れを示す第1のフローチャートである。

[0065] ステップS301において、学習装置120は、学習用データセット111を取得する。

[0066] ステップS302において、学習装置120は、取得した学習用データセット111を用いて、内挿予測モデル121\_\_1及び外挿予測モデル121\_\_2の学習を行い、学習済み内挿予測モデル131\_\_1及び学習済み外挿予測モデル131\_\_2を生成する。

[0067] ステップS303において、予測装置130は、予測対象の入力データ（設計条件x）を、学習済み内挿予測モデル131\_\_1及び学習済み外挿予測モデル131\_\_2に入力する。

[0068] ステップS304において、予測装置130は、学習済み内挿予測モデル131\_\_1及び学習済み外挿予測モデル131\_\_2によりそれぞれ予測された第1の特性値及び第2の特性値を取得する。

[0069] ステップS305において、予測装置130は、取得した第1の特性値及び第2の特性値の加重平均値を算出する、あるいは、加重多数決をとり、特性値を決定する。

[0070] ステップS306において、予測装置130は、決定した特性値を、予測対象の入力データ（設計条件x）に対する予測データとして、出力する。

[0071] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第1の実施形態に係る予測装置130は、  
・内挿領域の入力データに適した学習済み内挿予測モデルと、外挿領域の入力データに適した学習済み外挿予測モデルとを有する。

・最適化された重みのもとで、学習済み内挿予測モデルにより予測された第1の特性値と、学習済み外挿予測モデルにより予測された第2の特性値との加重平均値を算出することで、あるいは、加重多数決をとることで、予測データを出力する。

[0072] これにより、第1の実施形態に係る予測装置130によれば、内挿領域の入力データに対して一定程度の予測精度を得ることができるとともに、外挿領域の入力データに対しても、十分な予測精度を得ることができるようになる。つまり、第1の実施形態によれば、学習済み予測モデルを用いた予測装置において予測精度を向上させることができる。

[0073] [第2の実施形態]

上記第1の実施形態では、加重平均値を算出する際に用いる重み、または、加重多数決をとる際に用いる重みが、予め最適化されているものとして説明した。これに対して、第2の実施形態では、加重平均値を算出する際に用いる重み、または、加重多数決をとる際に用いる重みが、予測対象の入力データごとに予め最適化されており、予測装置では、予測対象の入力データに応じて異なる重みを切り替えて用いるものとする。以下、第2の実施形態について、上記第1の実施形態との相違点を中心に説明する。

[0074] <予測装置の機能構成>

はじめに、第2の実施形態に係る予測装置の機能構成について図4を用いて説明する。図4は、学習フェーズにおける学習装置及び予測フェーズにおける予測装置の機能構成の一例を示す第2の図である。図1との相違点は、図4の場合、予測装置400の機能構成が内挿／外挿判別部410を有する点である（図4の4b参照）。

[0075] 内挿／外挿判別部410は、予測対象の入力データ（設計条件x）が内挿領域の入力データであるか、外挿領域の入力データであるかを判別する。また、内挿／外挿判別部410は、判別した結果に応じた重み（内挿領域用の重み、外挿領域用の重み）を、出力部132に設定する。

[0076] 内挿／外挿判別部410では、例えば、予測対象の入力データ（設計条件

x) が内挿領域の入力データであると判別した場合、内挿領域用の重みとして、第1の特性値の重み=0.8、第2の特性値の重み=0.2を出力部132に設定する。あるいは、内挿/外挿判別部410では、例えば、内挿領域用の重みとして、第1の特性値の重み=1.0、第2の特性値の重み=0.0を出力部132に設定してもよい。

[0077] また、内挿/外挿判別部410では、例えば、予測対象の入力データ（設計条件x）が外挿領域の入力データであると判別した場合、外挿領域用の重みとして、第1の特性値の重み=0.3、第2の特性値の重み=0.7を出力部132に設定する。あるいは、内挿/外挿判別部410では、例えば、外挿領域用の重みとして、第1の特性値の重み=0.0、第2の特性値の重み=1.0を出力部132に設定してもよい。

[0078] なお、出力部132に設定する重み（内挿領域用の重み、外挿領域用の重み）は任意である。また、内挿/外挿判別部410による入力データの判別方法も任意である。

[0079] 例えば、内挿/外挿判別部410は、学習用データセット111を用いて、1クラスサポートベクターマシンを学習しておき、学習済みの1クラスサポートベクターマシンに、予測対象の入力データを入力することで判別してもよい。この場合、内挿/外挿判別部410では、予測対象の入力データが外れ値であると判定された場合、当該予測対象の入力データが、外挿領域の入力データであると判別する。また、内挿/外挿判別部410では、予測対象の入力データが外れ値であると判定されなかった場合、当該予測対象の入力データが、内挿領域の入力データであると判別する。

[0080] あるいは、内挿/外挿判別部410は、局所外れ値因子法を用いて、学習用データセット111から内挿領域を予め規定しておくことで、予測対象の入力データが、内挿領域の入力データであるか否かを判別するようにしてもよい。

[0081] あるいは、内挿/外挿判別部410は、混合ガウスモデルを用いて、学習用データセット111から内挿領域を予め規定しておくことで、予測対象の

入力データが、内挿領域の入力データであるか否かを判別するようにしてもよい。

[0082] あるいは、内挿／外挿判別部410は、アイソレーションフォレストを用いて、学習用データセット111から内挿領域を予め規定しておくことで、予測対象の入力データが、内挿領域の入力データであるか否かを判別するようにしてもよい。

[0083] <学習処理及び予測処理の流れ>

次に、学習処理及び予測処理の流れについて説明する。図5は、学習処理及び予測処理の流れを示す第2のフローチャートである。図3を用いて説明した第1のフローチャートとの相違点は、ステップS501である。

[0084] ステップS501において、予測装置400は、予測対象の入力データ（設計条件x）が内挿領域の入力データであるか、外挿領域の入力データであるかを判別する。また、予測装置400は、判別した結果に応じた重み（内挿領域用の重み、外挿領域用の重み）を設定する。

[0085] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第2の実施形態に係る予測装置400は、上記第1の実施形態に係る予測装置130の機能に加えて、

- ・ 予測対象の入力データが、内挿領域の入力データであるか、外挿領域の入力データであるかを判別し、判別結果に応じた重み（内挿領域用の重み、外挿領域用の重み）を設定する機能を有する。

- ・ 第1の特性値と第2の特性値との加重平均値を算出し、あるいは、加重多数決をとり、予測データを出力する際、判別結果に応じた重みを用いる機能を有する。

[0086] これにより、第2の実施形態に係る予測装置130によれば、内挿領域の入力データに対して一定程度の予測精度を得ることができるとともに、外挿領域の入力データに対しても、十分な予測精度を得ることができるようになる。つまり、第2の実施形態によれば、学習済み予測モデルを用いた予測装置において予測精度を向上させることができる。

[0087] [第3の実施形態]

上記第2の実施形態では、予測対象の入力データが、内挿領域の入力データであるか、外挿領域の入力データであるかを判別し、判別した結果に応じた重み（内挿領域用の重み、外挿領域用の重み）を用いて予測データを出力するものとして説明した。

[0088] これに対して、第3の実施形態では、予測対象の入力データの外挿性の強さ（連続値）を評価し、評価結果に応じた重みのもとで予測データを出力する。以下、第3の実施形態について、上記第2の実施形態との相違点を中心に説明する。

[0089] <予測装置の機能構成>

第3の実施形態に係る予測装置400では、図4の内挿／外挿判別部410が、予測対象の入力データが内挿領域の入力データであるか、外挿領域の入力データであるかを判別することに代えて、予測対象の入力データの外挿性の強さを評価する。また、第3の実施形態に係る予測装置400では、図4の内挿／外挿判別部410が、判別結果に応じた重み（内挿領域用の重み、外挿領域用の重み）を設定することに代えて、評価結果に応じた重みを、出力部132に設定する。

[0090] 具体的には、第3の実施形態に係る予測装置400の場合、内挿／外挿判別部410は、例えば、予測対象の入力データ（設計条件x）の外挿性の強さに基づいて、重みを連続的に変化させる。重みを連続的に変化させるとは、（第1の特性値の重み=1.0、第2の特性値の重み=0.0）から、（第1の特性値の重み=0.0、第2の特性値の重み=1.0）までの間を、評価結果に応じて、例えば、0.1刻みで連続的に変化させることを指す。

[0091] なお、内挿／外挿判別部410による入力データの外挿性の強さの評価手法は任意である。一例としてカーネル密度推定による評価手法が挙げられる。具体的には、内挿／外挿判別部410は、はじめに、学習用データセット111を用いて、カーネル密度推定モデルを構築し、学習用データセット111に含まれる入力データの密度を推定する。続いて、内挿／外挿判別部4

10では、構築したカーネル密度推定モデルを用いて、予測対象の入力データ（設計条件 $x$ ）の密度を推定する。そして、内挿／外挿判別部410では、学習用データセット111に含まれる入力データの密度と、予測対象の入力データ（設計条件 $x$ ）の密度とを比較することにより、予測対象の入力データ（設計条件 $x$ ）に対する外挿性の強さを評価する。

[0092] あるいは、他の一例として、距離による評価手法が挙げられる。具体的には、内挿／外挿判別部410では、はじめに、学習用データセット111に含まれる入力データのうち、予測対象の入力データ（設計条件 $x$ ）との距離が近い $\alpha$ 個の入力データを抽出する。なお、ここでいう $\alpha$ は、学習用データセット111に含まれる入力データの数によって決められる値である。続いて、内挿／外挿判別部410では、抽出した $\alpha$ 個の入力データと、予測対象の入力データ（設計条件 $x$ ）との距離の平均値を算出する。そして、内挿／外挿判別部410では、算出した距離の平均値から外挿性の強さを評価する。

[0093] あるいは、他の一例として、ランダムフォレスト予測の不確実性による評価手法が挙げられる。具体的には、内挿／外挿判別部410では、はじめに、学習用データセット111を用いて、ランダムフォレストによる予測モデルを構築し、予測対象の入力データ（設計条件 $x$ ）を入力した場合の、各ツリーの推定値の分布の標準偏差を算出する。そして、内挿／外挿判別部410では、算出した標準偏差から外挿性の強さを評価する。

[0094] あるいは、他の一例として、ベイズ推定の不確実性による評価手法が挙げられる。具体的には、内挿／外挿判別部410では、学習用データセット111を用いて、変分ベイズ法、マルコフ連鎖モンテカルロ法を適用したベイジアンニューラルネットワークや、ノンパラメトリックベイズであるガウス過程による予測モデルを構築する。続いて、内挿／外挿判別部410では、構築したベイジアンニューラルネットワークまたはガウス過程による予測モデルに、予測対象の入力データ（設計条件 $x$ ）を入力した場合の推定値の分布の標準偏差を算出する。そして、内挿／外挿判別部410では、算出した

標準偏差から外挿性の強さを評価する。

[0095] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第3の実施形態に係る予測装置400は、上記第1の実施形態に係る予測装置130の機能に加えて、

- ・ 予測対象の入力データの外挿性の強さを評価し、評価結果に応じた重みを設定する機能を有する。

- ・ 第1の特性値と第2の特性値との加重平均値を算出し、あるいは、加重多数決をとり、予測データを出力する際、評価結果に応じた重みを用いる機能を有する。

[0096] これにより、第3の実施形態に係る予測装置400によれば、内挿領域の入力データに対して一定程度の予測精度を得ることができるとともに、外挿領域の入力データに対しても、十分な予測精度を得ることができるようになる。つまり、第3の実施形態によれば、学習済み予測モデルを用いた予測装置の予測精度を向上させることができる。

[0097] [第4の実施形態]

上記第1及び第2の実施形態では、予測装置130、400が予測処理を行うにあたり、出力部132に、予め最適化された重み（または、予測対象の入力データの判別結果または評価結果に応じた、予め最適化された重み）が設定されるものとして説明した。これに対して、第4の実施形態では、出力部132に設定される重みを最適化する方法について説明する。

[0098] <最適化フェーズにおける学習装置の機能構成その1>

はじめに、予測装置130の出力部132（図1）に設定される重みを最適化する最適化フェーズにおける学習装置の機能構成について説明する。図6は、最適化フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第1の図である。図6に示すように、最適化フェーズにおける学習装置620は、

- ・ 学習済み内挿予測モデル131\_\_1、
- ・ 学習済み外挿予測モデル131\_\_2、
- ・ 出力部621、

- ・ 重み変更部 622、
  - ・ 誤差算出部 623、
  - ・ 決定部 624、
- として機能する。

[0099] 学習装置 620 は、材料データ格納部 110 に格納された検証用データセット 610 を用いて、予測装置 130 の出力部 132 に設定される重みを最適化する。

[0100] 図 6 に示すように、検証用データセット 610 には、情報の項目として、“入力データ”と“正解データ”とが含まれる。図 6 の例は、“入力データ”として、「設計条件  $n+1$ 」～「設計条件  $n+m$ 」が格納され、“正解データ”として、「特性値  $n+1$ 」～「特性値  $n+m$ 」が格納された場合を示している。このように、学習装置 620 では、重みを最適化する際、内挿予測モデル 121\_\_1 及び外挿予測モデル 121\_\_2 の学習を行う際に用いた学習用データセット 111 とは異なる検証用データセット 610 を用いる。

[0101] 学習済み内挿予測モデル 131\_\_1 及び学習済み外挿予測モデル 131\_\_2 は、上記第 1 の実施形態において図 1 を用いて説明した、学習済み内挿予測モデル 131\_\_1 及び学習済み外挿予測モデル 131\_\_2 と同じである。

[0102] ただし、第 4 の実施形態の場合、学習済み内挿予測モデル 131\_\_1 及び学習済み外挿予測モデル 131\_\_2 には、検証用データセット 610 の“入力データ”に格納された「設計条件  $n+1$ 」～「設計条件  $n+m$ 」が順次入力される。これにより、学習済み内挿予測モデル 131\_\_1 及び学習済み外挿予測モデル 131\_\_2 では、第 1 の特性値及び第 2 の特性値を順次予測する。

[0103] 出力部 621 は、重み変更部 622 により変更された重みのもと、第 1 の特性値と第 2 の特性値とに基づいて、予測データを順次出力する。出力部 621 では、例えば、「設計条件  $n+1$ 」が学習済み内挿予測モデル 131\_\_1 及び学習済み外挿予測モデル 131\_\_2 に入力されることで予測される第 1 の特性値及び第 2 の特性値に対して、複数種類の重みのもとで、複数の予測データを順次出力する。同様に、出力部 621 では、「設計条件  $n+2$ 」

が学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 及び学習済み外挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 2 に入力されることで予測される第 1 の特性値及び第 2 の特性値に対して、複数種類の重みのもとで、複数の予測データを順次出力する。

[0104] 重み変更部 6 2 2 は、出力部 6 2 1 が予測データを順次出力する際に用いる重みを設定する。重み変更部 6 2 2 では、（第 1 の特性値の重み = 1. 0、第 2 の特性値の重み = 0. 0）から（第 1 の特性値の重み = 0. 0、第 2 の特性値の重み = 1. 0）までの間を、例えば、0. 1 刻みで変更しながら、複数種類の重みを設定する。

[0105] 誤差算出部 6 2 3 は、出力部 6 2 1 より順次出力された複数の予測データと、検証用データセット 6 1 0 の”正解データ”に格納された「特性値  $n + 1$ 」～「特性値  $n + m$ 」のうちのいずれかとの誤差を算出し、決定部 6 2 4 に出力する。

[0106] 決定部 6 2 4 は、算出された誤差が格納されたテーブル 6 3 0 を参照することで、最適な重みを決定する。

[0107] なお、図 6 において、テーブル 6 3 0 は、誤差算出部 6 2 3 により算出された誤差の一覧を示したものである。テーブル 6 3 0 において、

・重み A = （第 1 の特性値の重み = 1. 0、第 2 の特性値の重み = 0. 0）

、

・重み B = （第 1 の特性値の重み = 0. 9、第 2 の特性値の重み = 0. 1）

、

・重み C = （第 1 の特性値の重み = 0. 8、第 2 の特性値の重み = 0. 2）

、

...

である。

[0108] また、テーブル 6 3 0 において、

・誤差  $A\_n + 1$  は、設計条件  $n + 1$  が入力されることで取得された第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、重み A のもとで出力部 6 2 1 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n + 1$  との誤差を指す。

・誤差  $B_{n+1}$  は、設計条件  $n+1$  が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重み  $B$  のもとで出力部 621 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+1$  との誤差を指す。

・誤差  $C_{n+1}$  は、設計条件  $n+1$  が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重み  $C$  のもとで出力部 621 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+1$  との誤差を指す。

...

・誤差  $A_{n+2}$  は、設計条件  $n+2$  が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重み  $A$  のもとで出力部 621 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+2$  との誤差を指す。

・誤差  $B_{n+2}$  は、設計条件  $n+2$  が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重み  $B$  のもとで出力部 621 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+2$  との誤差を指す。

・誤差  $C_{n+2}$  は、設計条件  $n+2$  が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重み  $C$  のもとで出力部 621 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+2$  との誤差を指す。

...

・誤差  $A_{n+m}$  は、設計条件  $n+m$  が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重み  $A$  のもとで出力部 621 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+m$  との誤差を指す。

・誤差  $B_{n+m}$  は、設計条件  $n+m$  が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重み  $B$  のもとで出力部 621 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+m$  との誤差を指す。

・誤差  $C_{n+m}$  は、設計条件  $n+m$  が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重み  $C$  のもとで出力部 621 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+m$  との誤差を指す。

[0109] また、テーブル 820 において、

・誤差指標  $A$  は、誤差  $A_{n+1} \sim$  誤差  $A_{n+m}$  の統計値（例えば、平均値

)、

・誤差指標 B は、誤差  $B_{n+1}$  ~ 誤差  $B_{n+m}$  の統計値（例えば、平均値

)、

・誤差指標 C は、誤差  $C_{n+1}$  ~ 誤差  $C_{n+m}$  の統計値（例えば、平均値

)、

を指す。

[0110] 決定部 624 は、例えば、誤差指標 A、誤差指標 B、誤差指標 C、・・・の中から、最小値を特定し、対応する重みを、最適な重みとして決定する。また、決定部 624 は、決定した重みを、予測装置 130 の出力部 132 に設定する。

[0111] これにより、予測装置 130 では、最適化された重みのもとで、予測処理を行うことができる。

[0112] <最適化フェーズにおける学習装置の機能構成その 2>

次に、予測装置 400 の出力部 132（図 4）に、予測対象の入力データの判別結果に応じて設定される重みを最適化する最適化フェーズにおける学習装置の機能構成について説明する。図 7 は、最適化フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第 2 の図である。図 6 に示した学習装置 620 の機能構成との相違点は、学習装置 710 の決定部 711 の機能が、学習装置 620 の決定部 624 の機能とは異なる点である。

[0113] 決定部 711 は、図 7 のテーブル 720 を参照することで、内挿領域用の最適な重みと、外挿領域用の最適な重みとを決定する。

[0114] なお、テーブル 720 において、ハッチングが付された誤差（例えば、誤差  $A_{n+2}$ 、誤差  $B_{n+2}$ 、誤差  $C_{n+2}$ 、・・・）は、外挿領域の入力データに対応する誤差を示している。

[0115] ただし、検証用データセット 610 の入力データ（設計条件  $n+1$ 、 $n+2$ 、・・・ $n+m$ ）が、内挿領域の入力データであるか外挿領域の入力データかは、例えば、内挿／外挿判別部 410 により、予め判別されているものとする。なお、ここでいう内挿／外挿判別部 410 は、図 4 の内挿／外挿判

別部410と同じである。

[0116] また、テーブル720において、

・誤差指標A1は、誤差A<sub>n+1</sub>～誤差A<sub>n+m</sub>のうち、内挿領域の入力データに対応する誤差（ハッチングが付されていない誤差（例えば、誤差A<sub>n+1</sub>、A<sub>n+m</sub>））の統計値（例えば、平均値）、

・誤差指標A2は、誤差A<sub>n+1</sub>～誤差A<sub>n+m</sub>のうち、外挿領域の入力データに対応する誤差（ハッチングが付されている誤差（例えば、誤差A<sub>n+2</sub>））の統計値（例えば、平均値）、

・誤差指標B1は、誤差B<sub>n+1</sub>～誤差B<sub>n+m</sub>のうち、内挿領域の入力データに対応する誤差（ハッチングが付されていない誤差（例えば、誤差B<sub>n+1</sub>、B<sub>n+m</sub>））の統計値（例えば、平均値）、

・誤差指標B2は、誤差B<sub>n+1</sub>～誤差B<sub>n+m</sub>のうち、外挿領域の入力データに対応する誤差（ハッチングが付されている誤差（例えば、誤差B<sub>n+2</sub>））の統計値（例えば、平均値）、

・誤差指標C1は、誤差C<sub>n+1</sub>～誤差C<sub>n+m</sub>のうち、内挿領域の入力データに対応する誤差（ハッチングが付されていない誤差（例えば、誤差C<sub>n+1</sub>、C<sub>n+m</sub>））の統計値（例えば、平均値）、

・誤差指標C2は、誤差C<sub>n+1</sub>～誤差C<sub>n+m</sub>のうち、外挿領域の入力データに対応する誤差（ハッチングが付されている誤差（例えば、誤差C<sub>n+2</sub>））の統計値（例えば、平均値）、

を指す。

[0117] したがって、決定部711は、誤差指標A1、誤差指標B1、誤差指標C1、・・・の中から、最小値を特定し、対応する重みを、内挿領域用の最適な重みとして決定する。また、決定部711は、決定した内挿領域用の最適な重みが、予測装置400の出力部132に設定されるよう、予測装置400に通知する。

[0118] 同様に、決定部711は、誤差指標A2、誤差指標B2、誤差指標C2、・・・の中から、最小値を特定し、対応する重みを、外挿領域用の最適な重

みとして決定する。また、決定部 7 1 1 は、決定した外挿領域用の最適な重みが、予測装置 4 0 0 の出力部 1 3 2 に設定されるよう、予測装置 4 0 0 に通知する。

[0119] <学習処理及び予測処理の流れ>

次に、学習処理及び予測処理の流れについて説明する。図 8 は、学習処理及び予測処理の流れを示す第 3 のフローチャートである。図 1 を用いて説明した第 1 のフローチャートとの相違点は、ステップ S 8 0 1 である。

[0120] ステップ S 8 0 1 において、学習装置 1 2 0 は、予測装置 1 3 0 の出力部 1 3 2（または予測装置 4 0 0 の出力部 1 3 2）に設定される重み（または予測対象の入力データごとの重み）を最適化する最適化処理を実行する。なお、最適化処理（ステップ S 8 0 1）の詳細は、以下で説明する。

[0121] <最適化処理の流れ>

図 9 は、最適化処理の流れを示す第 1 のフローチャートである。ステップ S 9 0 1 において、学習装置 1 2 0 は、検証用データセットを取得する。

[0122] ステップ S 9 0 2 において、学習装置 1 2 0 は、複数種類の重みのうち、デフォルトの重みを設定する。

[0123] ステップ S 9 0 3 において、学習装置 1 2 0 は、検証用データセットの入力データを、学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルにそれぞれ入力することで、第 1 の特性値及び第 2 の特性値を取得する。

[0124] ステップ S 9 0 4 において、学習装置 1 2 0 は、取得した第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、設定した重みのもとで予測データを出力する。また、学習装置 1 2 0 は、予測データと、検証用データセットの対応する正解データとの誤差を算出する。

[0125] ステップ S 9 0 5 において、学習装置 1 2 0 は、複数種類の全ての重みを設定したか否かを判定する。ステップ S 9 0 5 において、設定していない重みがあると判定した場合には（ステップ S 9 0 5 において N O の場合には）、ステップ S 9 0 6 に進む。

[0126] ステップ S 9 0 6 において、学習装置 1 2 0 は、設定していない次の重み

を設定し、ステップS904に戻る。

[0127] 一方、ステップS905において、全ての重みを設定したと判定した場合には（ステップS905においてYESの場合には）、ステップS907に進む。

[0128] ステップS907において、学習装置120は、検証用データセットの全ての入力データを、学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルにそれぞれ入力したか否かを判定する。ステップS907において、入力していない入力データがあると判定した場合には（ステップS907においてNOの場合には）、ステップS908に進む。

[0129] ステップS908において、学習装置120は、検証用データセットの次の入力データを処理対象とし、ステップS903に戻る。

[0130] 一方、ステップS907において、全ての入力データを入力したと判定した場合には（ステップS907においてYESの場合には）、ステップS909に進む。

[0131] ステップS909において、学習装置120は、設定した重みごと（あるいは、設定した重みごと、かつ、内挿／外挿ごと）に誤差指標を算出する。また、学習装置120は、算出した誤差指標が最小となる重みを、最適な重み（あるいは、内挿領域用の最適な重み、外挿領域用の最適な重み）として決定する。

[0132] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第4の実施形態に係る学習装置620、710は、

- ・内挿領域の入力データに適した学習済み内挿予測モデルと、外挿領域の入力データに適した学習済み外挿予測モデルとを有する。

- ・検証用データセットの入力データを、学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルにそれぞれ入力し、第1の特性値及び第2の特性値を予測する。

- ・予測した第1の特性値と第2の特性値とに基づいて、複数種類の重みのも

とで予測データをそれぞれ出力し、正解データとの誤差を算出することで、それぞれの重みに対する誤差指標を算出する。

・最小の誤差指標（あるいは内挿領域の入力データ／外挿領域の入力データごとに最小の誤差指標）に対応する重みを特定し、最適な重み（あるいは、内挿領域用の最適な重み、外挿領域用の最適な重み）として決定する。

[0133] これにより、第4の実施形態に係る予測装置400によれば、内挿領域の入力データに対して一定程度の予測精度を得ることができるとともに、外挿領域の入力データに対しても、十分な予測精度を得ることができるようになる。つまり、第4の実施形態によれば、学習済み予測モデルを用いた予測装置において予測精度を向上させることができる。

[0134] [第5の実施形態]

上記第4の実施形態では、特定のハイパーパラメータを設定して学習が行われた学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルを用いて、重みを最適化する場合について説明した。

[0135] これに対して、第5の実施形態では、重みを最適化する際、あわせてハイパーパラメータを最適化する場合について説明する。以下、第5の実施形態について、上記第1及び第4の実施形態との相違点を中心に説明する。

[0136] <学習フェーズにおける学習装置の機能構成>

はじめに、第5の実施形態に係る学習装置の学習フェーズにおける機能構成について説明する。図10は、学習フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第3の図である。図1の1aを用いて説明した機能構成との相違点は、学習装置1000の場合、ハイパーパラメータ変更部1010を有する点である。

[0137] ハイパーパラメータ変更部1010は、内挿予測モデル121\_\_1に設定する内挿予測モデル用のハイパーパラメータを変更する。また、ハイパーパラメータ変更部1010は、外挿予測モデル121\_\_2に設定する外挿予測モデル用のハイパーパラメータを変更する。

[0138] これにより、学習装置1000では、ハイパーパラメータが変更されるご

とに、学習用データセット111を用いて、内挿予測モデル121\_\_1及び外挿予測モデル121\_\_2の学習を行う。この結果、学習装置1000では、複数の学習済み内挿予測モデルと、複数の学習済み外挿予測モデルとを生成する。

[0139] <最適化フェーズにおける学習装置の機能構成>

次に、第5の実施形態に係る学習装置の最適化フェーズにおける機能構成について説明する。図11は、最適化フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第3の図である。図11に示すように、最適化フェーズにおいて、学習装置1100は、

- ・学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_1、131\_\_1\_\_2、131\_\_1\_\_3、・・・、
- ・学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_1、131\_\_2\_\_2、131\_\_2\_\_3、・・・、
- ・出力部621、
- ・重み変更部622、
- ・誤差算出部623、
- ・決定部1101、

として機能する。

[0140] 学習装置1100は、材料データ格納部110に格納された検証用データセット610を用いて、予測装置130に適用される学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルを最適化するとともに、出力部132に設定される重みを最適化する。

[0141] 学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_1、131\_\_1\_\_2、131\_\_1\_\_3、・・・は、学習フェーズにおいて、ハイパーパラメータが変更されるごとに、学習用データセット111を用いて学習が行われることで生成された複数の学習済み内挿予測モデルである。

[0142] 学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_1、131\_\_2\_\_2、131\_\_2\_\_3、・・・は、学習フェーズにおいて、ハイパーパラメータが変更されるご

とに、学習用データセット 1 1 1 を用いて学習が行われることで生成された複数の学習済み外挿予測モデルである。

[0143] 学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 1、1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 2、1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 3、・・・及び学習済み外挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 2 \_\_ 1、1 3 1 \_\_ 2 \_\_ 2、1 3 1 \_\_ 2 \_\_ 3、・・・には、検証用データセット 6 1 0 の入力データが順次入力される。また、学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 1、1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 2、1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 3、・・・及び学習済み外挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 2 \_\_ 1、1 3 1 \_\_ 2 \_\_ 2、1 3 1 \_\_ 2 \_\_ 3、・・・では、それぞれ、複数の第 1 の特性値及び第 2 の特性値を順次予測する。

[0144] 出力部 6 2 1 は、重み変更部 6 2 2 により変更された重みのもと、第 1 の特性値と第 2 の特性値とに基づいて、予測データを出力する。出力部 6 2 1 では、例えば、「設計条件  $n + 1$ 」が学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 1 及び学習済み外挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 2 \_\_ 1 に入力されることで予測される第 1 及び第 2 の特性値に対して、複数種類の重みのもとで、複数の予測データを順次出力する。同様に、出力部 6 2 1 では、「設計条件  $n + 2$ 」が学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 2 及び学習済み外挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 2 \_\_ 2 に入力されることで予測される第 1 及び第 2 の特性値に対して、複数種類の重みのもとで、複数の予測データを順次出力する。

[0145] 重み変更部 6 2 2 は、出力部 6 2 1 が予測データを順次出力する際に用いる重みを設定する。重み変更部 6 2 2 では、（第 1 の特性値の重み = 1. 0、第 2 の特性値の重み = 0. 0）から（第 1 の特性値の重み = 0. 0、第 2 の特性値の重み = 1. 0）までの間を、例えば、0. 1 刻みで変更しながら、複数種類の重みを設定する。

[0146] 誤差算出部 6 2 3 は、出力部 6 2 1 より順次出力された複数の予測データと、検証用データセット 6 1 0 の”正解データ”に格納された「特性値  $n + 1$ 」～「特性値  $n + m$ 」のうちのいずれかとの誤差を算出し、決定部 1 1 0 1 に出力する。

[0147] 決定部 1 1 0 1 は、算出された誤差が格納されたテーブル 1 1 1 1、1 1

1 2、1 1 1 3、・・・を参照することで、最適なハイパーパラメータ及び最適な重みを決定する。

- [0148] なお、図 1 1 において、テーブル 1 1 1 1 は、誤差算出部 6 2 3 により算出された誤差の一覧を示したものである。テーブル 1 1 1 1 において、
- ・ハイパーパラメータ 1 は、学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 1 に設定された内挿予測モデル用のハイパーパラメータと、学習済み外挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 2 \_\_ 1 に設定された外挿予測モデル用のハイパーパラメータとの組み合わせ、
- を指す。また、テーブル 1 1 1 2 において、
- ・ハイパーパラメータ 2 は、学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 2 に設定された内挿予測モデル用のハイパーパラメータと、学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 2 に設定された外挿予測モデル用のハイパーパラメータとの組み合わせ、
- を指す。また、テーブル 1 1 1 3 において、
- ・ハイパーパラメータ 3 は、学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 3 に設定された内挿予測モデル用のハイパーパラメータと、学習済み内挿予測モデル 1 3 1 \_\_ 1 \_\_ 3 に設定された外挿予測モデル用のハイパーパラメータとの組み合わせ、
- を指す。

- [0149] また、テーブル 1 1 1 1 において、
- ・重み A = (第 1 の特性値の重み = 1. 0、第 2 の特性値の重み = 0. 0)
  - 、
  - ・重み B = (第 1 の特性値の重み = 0. 9、第 2 の特性値の重み = 0. 1)
  - 、
  - ・重み C = (第 1 の特性値の重み = 0. 8、第 2 の特性値の重み = 0. 2)
  - 、
  - ・・・
- である。

[0150] また、テーブル 1 1 1 1 において、

・誤差  $A_{n+1}$  は、設計条件  $n+1$  が入力されることで取得された第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、重み A のもとで出力部 6 2 1 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+1$  との誤差を指す。

・誤差  $B_{n+1}$  は、設計条件  $n+1$  が入力されることで取得された第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、重み B のもとで出力部 6 2 1 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+1$  との誤差を指す。

・誤差  $C_{n+1}$  は、設計条件  $n+1$  が入力されることで取得された第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、重み C のもとで出力部 6 2 1 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+1$  との誤差を指す。

...

・誤差  $A_{n+2}$  は、設計条件  $n+2$  が入力されることで取得された第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、重み A のもとで出力部 6 2 1 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+2$  との誤差を指す。

・誤差  $B_{n+2}$  は、設計条件  $n+2$  が入力されることで取得された第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、重み B のもとで出力部 6 2 1 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+2$  との誤差を指す。

・誤差  $C_{n+2}$  は、設計条件  $n+2$  が入力されることで取得された第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、重み C のもとで出力部 6 2 1 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+2$  との誤差を指す。

...

・誤差  $A_{n+m}$  は、設計条件  $n+m$  が入力されることで取得された第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、重み A のもとで出力部 6 2 1 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+m$  との誤差を指す。

・誤差  $B_{n+m}$  は、設計条件  $n+m$  が入力されることで取得された第 1 の特性値及び第 2 の特性値に基づいて、重み B のもとで出力部 6 2 1 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n+m$  との誤差を指す。

・誤差  $C_{n+m}$  は、設計条件  $n+m$  が入力されることで取得された第 1 の

特性値及び第2の特性値に基づいて、重みCのもとで出力部621により出力された予測データと、正解データである特性値 $n+m$ との誤差を指す。

[0151] また、テーブル1111において、

- ・ 誤差指標Aは、誤差 $A_{n+1}$ ～誤差 $A_{n+m}$ の統計値（例えば、平均値））、
  - ・ 誤差指標Bは、誤差 $B_{n+1}$ ～誤差 $B_{n+m}$ の統計値（例えば、平均値））、
  - ・ 誤差指標Cは、誤差 $C_{n+1}$ ～誤差 $C_{n+m}$ の統計値（例えば、平均値））、
- を指す。

[0152] 決定部1101は、例えば、ハイパーパラメータ1、2、3、・・・それぞれにおいて、誤差指標A、誤差指標B、誤差指標C、・・・の中から、最小値を特定する。また、決定部1101は、各ハイパーパラメータにおいて特定された最小値の中から（つまり、テーブル1111において特定された最小値、テーブル1112において特定された最小値、・・・の中から）最小値を特定する。

[0153] また、決定部1101は、特定した最小値に対応するハイパーパラメータ及び重みを、最適なハイパーパラメータ及び最適な重みとして決定する。更に、決定部1101は、決定したハイパーパラメータが指す組み合わせをそれぞれ設定して学習が行われることで生成された、最適な学習済み内挿予測モデル及び最適な学習済み外挿予測モデルと、決定した最適な重みとを、予測装置130に通知する。

[0154] これにより、予測装置130では、最適化された学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデル、最適化された重みのもとで、予測処理を行うことができる。

[0155] <学習処理及び予測処理の流れ>

次に、学習処理及び予測処理の流れについて説明する。図12は、学習処理及び予測処理の流れを示す第4のフローチャートである。図1を用いて説

明した第1のフローチャートとの相違点は、ステップS1201、S1202～S1204である。

- [0156] ステップS1201において、学習装置1000は、内挿予測モデル用の複数のハイパーパラメータのうち、デフォルトのハイパーパラメータを内挿予測モデルに設定する。また、学習装置1000は、外挿予測モデル用の複数のハイパーパラメータのうち、デフォルトのハイパーパラメータを外挿予測モデルに設定する。
- [0157] ステップS1202において、学習装置1000は、内挿予測モデル用の複数のハイパーパラメータ全てを、内挿予測モデル121\_1に設定して学習を行ったか否かを判定する。また、学習装置1000は、外挿予測モデル用の複数のハイパーパラメータ全てを、外挿予測モデル121\_2に設定して学習を行ったか否かを判定する。
- [0158] ステップS1202において、設定していないハイパーパラメータがあると判定した場合には（ステップS1202においてNOの場合には）、ステップS1203に進む。
- [0159] ステップS1203において、学習装置1000は、内挿予測モデル用の次のハイパーパラメータを内挿予測モデルに設定し、かつ、外挿予測モデル用の次のハイパーパラメータを外挿予測モデルに設定し、ステップS301に戻る。
- [0160] 一方、ステップS1202において、全てのハイパーパラメータを設定したと判定した場合には（ステップS1202においてYESの場合には）、ステップS1204に進む。
- [0161] ステップS1204において、学習装置1100は、ハイパーパラメータ及び重みを最適化する最適化処理を実行する。なお、ハイパーパラメータ及び重みを最適化する最適化処理（ステップS1204）の詳細は、以下で説明する。
- [0162] <最適化処理の流れ>

図13は、最適化処理の流れを示す第2のフローチャートである。図9に

示した最適化処理との相違点は、ステップS 1 3 0 1、S 1 3 0 2～S 1 3 0 4である。

[0163] ステップS 1 3 0 1において、学習装置1 1 0 0は、学習フェーズにおいて生成された複数の学習済み内挿予測モデル及び複数の学習済み外挿予測モデルの中から、デフォルトの学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルの組み合わせを設定する。

[0164] ステップS 1 3 0 2において、学習装置1 1 0 0は、学習フェーズにおいて生成された複数の学習済み内挿予測モデル及び複数の学習済み外挿予測モデルの全ての組み合わせについて、ステップS 9 0 2～S 9 0 8の処理を実行したか否かを判定する。

[0165] ステップS 1 3 0 2において、ステップS 9 0 2～S 9 0 8の処理を実行していない学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルの組み合わせがあると判定した場合には（ステップS 1 3 0 2においてNOの場合には）、ステップS 1 3 0 3に進む。

[0166] ステップS 1 3 0 3において、学習装置1 1 0 0は、次の学習済み内挿予測モデル及び次の学習済み外挿予測モデルの組み合わせを設定して、ステップS 9 0 2に戻る。

[0167] 一方、ステップS 1 3 0 2において、全ての組み合わせについて、ステップS 9 0 2～S 9 0 8の処理を実行したと判定した場合には（ステップS 1 3 0 2においてYESの場合には）、ステップS 1 3 0 4に進む。

[0168] ステップS 1 3 0 4において、学習装置1 1 0 0は、誤差指標に基づき、最適なハイパーパラメータの組み合わせ及び最適な重みを決定する。

[0169] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第5の実施形態に係る学習装置1 0 0 0、1 1 0 0は、

- ・内挿予測モデル用の複数のハイパーパラメータをそれぞれ設定し、内挿予測モデルの学習を行うことで、複数の学習済み内挿予測モデルを生成する。
- ・外挿予測モデル用の複数のハイパーパラメータをそれぞれ設定し、外挿予

測モデルの学習を行うことで、複数の学習済み外挿予測モデルを生成する。

- ・ 検証用データセットの入力データを、複数の学習済み内挿予測モデル及び複数の学習済み外挿予測モデルの全ての組み合わせにそれぞれに入力し、第1の特性値及び第2の特性値を予測する。

- ・ 予測した第1の特性値と第2の特性値とに基づいて、複数種類の重みのもとで予測データをそれぞれ出力し、正解データとの誤差を算出することで、ハイパーパラメータの組み合わせごとに、複数種類の重みそれぞれに対する誤差指標を算出する。

- ・ 最小の誤差指標に対応する、ハイパーパラメータの組み合わせ及び重みを決定し、最適な学習済み内挿予測モデル及び最適な学習済み外挿予測モデルを予測装置に通知するとともに、最適な重みを予測装置に通知する。

[0170] これにより、第5の実施形態に係る予測装置130によれば、内挿領域の入力データに対して一定程度の予測精度を得ることができるとともに、外挿領域の入力データに対しても、十分な予測精度を得ることができるようになる。つまり、第5の本実施形態によれば、学習済み予測モデルを用いた予測装置において予測精度を向上させることができる。

[0171] [第6の実施形態]

上記第5の実施形態では、内挿予測モデル及び外挿予測モデルが、それぞれ、特定の学習手法のもとで学習が行われることを前提として、ハイパーパラメータ及び重みを最適化する場合について説明した。これに対して、第6の実施形態では、内挿予測モデル及び外挿予測モデルにおいて用いられる学習手法と、設定されるハイパーパラメータと、重みとを最適化する場合について説明する。

[0172] <学習フェーズにおける学習装置の機能構成>

はじめに、第6の実施形態に係る学習装置の学習フェーズにおける機能構成について説明する。図14は、学習フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第4の図である。図10を用いて説明した機能構成との相違点は、学習装置1400の場合、

- ・互いに異なる学習手法のもとで学習が行われる複数の内挿予測モデル 1 2 1\_\_1\_\_1、1 2 1\_\_1\_\_2、1 2 1\_\_1\_\_3、・・・と、
  - ・互いに異なる学習手法のもとで学習が行われる複数の外挿予測モデル 1 2 1\_\_2\_\_1、1 2 1\_\_2\_\_2、1 2 1\_\_2\_\_3、・・・と、
- を有する点である。

[0173] 学習装置 1400 では、ハイパーパラメータが変更されるごとに、学習用データセット 111 を用いて、内挿予測モデル 1 2 1\_\_1\_\_1 及び外挿予測モデル 1 2 1\_\_2\_\_1 の学習を行う。これにより、学習装置 1400 では、内挿予測モデル 1 2 1\_\_1\_\_1 及び外挿予測モデル 1 2 1\_\_2\_\_1 から、複数の学習済み内挿予測モデル及び複数の学習済み内挿予測モデルを生成する。

[0174] 続いて、学習装置 1400 では、ハイパーパラメータが変更されるごとに、学習用データセット 111 を用いて、内挿予測モデル 1 2 1\_\_1\_\_2 及び外挿予測モデル 1 2 1\_\_2\_\_2 の学習を行う。これにより、学習装置 1400 では、内挿予測モデル 1 2 1\_\_1\_\_2 及び外挿予測モデル 1 2 1\_\_2\_\_2 から、複数の学習済み内挿予測モデル及び複数の学習済み内挿予測モデルを生成する。

[0175] 続いて、学習装置 1400 では、ハイパーパラメータが変更されるごとに、学習用データセット 111 を用いて、内挿予測モデル 1 2 1\_\_1\_\_3 及び外挿予測モデル 1 2 1\_\_2\_\_3 の学習を行う。これにより、学習装置 1400 では、内挿予測モデル 1 2 1\_\_1\_\_3 及び外挿予測モデル 1 2 1\_\_2\_\_3 から、複数の学習済み内挿予測モデル及び複数の学習済み内挿予測モデルを生成する。

[0176] なお、図 14 では、説明の簡略化のため、学習手法の異なる内挿予測モデル及び学習手法の異なる外挿予測モデルを 3 つずつ示したが、学習手法の異なる内挿予測モデルの数及び学習手法の異なる外挿予測モデルの数は、3 つに限定されない。

[0177] <最適化フェーズにおける学習装置の機能構成>

次に、第6の実施形態に係る学習装置の最適化フェーズにおける機能構成について説明する。図15は、最適化フェーズにおける学習装置の機能構成の一例を示す第4の図である。図15に示すように、最適化フェーズにおいて、学習装置1500は、

- ・学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_1、131\_\_1\_\_2、131\_\_1\_\_3、・・・、
- ・学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_1、131\_\_2\_\_2、131\_\_2\_\_3、・・・、
- ・出力部621、
- ・重み変更部622、
- ・誤差算出部623、
- ・決定部1501、

として機能する。

[0178] 学習装置1500は、材料データ格納部110に格納された検証用データセット610を用いて、予測装置130に適用される学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルを最適化するとともに、出力部132に設定される重みを最適化する。

[0179] 学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_1～131\_\_1\_\_3は、学習フェーズにおいて、内挿予測モデル用のハイパーパラメータが変更されるごとに、内挿予測モデル121\_\_1\_\_1の学習が行われることで生成された複数の学習済み内挿予測モデルである。

[0180] また、学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_4～131\_\_1\_\_6は、学習フェーズにおいて、内挿予測モデル用のハイパーパラメータが変更されるごとに、内挿予測モデル121\_\_1\_\_2の学習が行われることで生成された複数の学習済み内挿予測モデルである。

[0181] また、学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_7～131\_\_1\_\_9は、学習フェーズにおいて、内挿予測モデル用のハイパーパラメータが変更されるごとに、内挿予測モデル121\_\_1\_\_3の学習が行われることで生成された複

数の学習済み内挿予測モデルである。

[0182] 一方、学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_1～131\_\_2\_\_3は、学習フェーズにおいて、外挿予測モデル用のハイパーパラメータが変更されるごとに、外挿予測モデル121\_\_2\_\_1の学習が行われることで生成された複数の学習済み外挿予測モデルである。

[0183] また、学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_4～131\_\_2\_\_6は、学習フェーズにおいて、外挿予測モデル用のハイパーパラメータが変更されるごとに、外挿予測モデル121\_\_2\_\_2の学習が行われることで生成された複数の学習済み外挿予測モデルである。

[0184] また、学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_7～131\_\_2\_\_9は、学習フェーズにおいて、外挿予測モデル用のハイパーパラメータが変更されるごとに、外挿予測モデル121\_\_2\_\_3の学習が行われることで生成された複数の学習済み外挿予測モデルである。

[0185] 学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_1等及び学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_1等には、それぞれ、検証用データセット610の入力データが順次入力される。これにより、学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_1等及び学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_1等では、それぞれ、複数の第1の特性値及び第2の特性値を順次予測する。

[0186] 出力部621～誤差算出部623は、図11の出力部621～誤差算出部623と同様であるため、ここでは説明を省略する。

[0187] 決定部1501は、テーブル1511～1519を参照することで、最適な学習手法、最適なハイパーパラメータ、最適な重みを決定する。

[0188] なお、図15において、テーブル1511～1519は、誤差算出部623により算出された誤差の一覧を示したものである。テーブル1511～1519において、

・学習手法1は、内挿予測モデル121\_\_1\_\_1の学習を行った際の学習手法と、外挿予測モデル121\_\_2\_\_1の学習を行った際の学習手法との組み合わせ、

・学習手法2は、内挿予測モデル121\_\_1\_\_2の学習を行った際の学習手法と、外挿予測モデル121\_\_2\_\_2の学習を行った際の学習手法との組み合わせ、

・学習手法3は、内挿予測モデル121\_\_1\_\_3の学習を行った際の学習手法と、外挿予測モデル121\_\_2\_\_3の学習を行った際の学習手法との組み合わせ、

を指す。

[0189] また、テーブル1511、1512、1513において、

・ハイパーパラメータ1は、学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_1に設定された内挿予測モデル用のハイパーパラメータと、学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_1に設定された外挿予測モデル用のハイパーパラメータとの組み合わせ、

・ハイパーパラメータ2は、学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_2に設定された内挿予測モデル用のハイパーパラメータと、学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_2に設定された外挿予測モデル用のハイパーパラメータとの組み合わせ、

・ハイパーパラメータ3は、学習済み内挿予測モデル131\_\_1\_\_3に設定された内挿予測モデル用のハイパーパラメータと、学習済み外挿予測モデル131\_\_2\_\_3に設定された外挿予測モデル用のハイパーパラメータとの組み合わせ、

を指す。

[0190] また、テーブル1511において、

・重みA = (第1の特性値の重み = 1.0、第2の特性値の重み = 0.0)

、

・重みB = (第1の特性値の重み = 0.9、第2の特性値の重み = 0.1)

、

・重みC = (第1の特性値の重み = 0.8、第2の特性値の重み = 0.2)

、

...

である。

[0191] また、テーブル1511において、

・誤差A<sub>n+1</sub>は、設計条件n+1が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重みAのもとで出力部621により出力された予測データと、正解データである特性値n+1との誤差を指す。

・誤差B<sub>n+1</sub>は、設計条件n+1が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重みBのもとで出力部621により出力された予測データと、正解データである特性値n+1との誤差を指す。

・誤差C<sub>n+1</sub>は、設計条件n+1が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重みCのもとで出力部621により出力された予測データと、正解データである特性値n+1との誤差を指す。

...

・誤差A<sub>n+2</sub>は、設計条件n+2が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重みAのもとで出力部621により出力された予測データと、正解データである特性値n+2との誤差を指す。

・誤差B<sub>n+2</sub>は、設計条件n+2が入力されることで取得された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重みBのもとで出力部621により出力された予測データと、正解データである特性値n+2との誤差を指す。

・誤差C<sub>n+2</sub>は、設計条件n+2が入力されることで予測された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重みCのもとで出力部621により出力された予測データと、正解データである特性値n+2との誤差を指す。

...

・誤差A<sub>n+m</sub>は、設計条件n+mが入力されることで予測された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重みAのもとで出力部621により出力された予測データと、正解データである特性値n+mとの誤差を指す。

・誤差B<sub>n+m</sub>は、設計条件n+mが入力されることで予測された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重みBのもとで出力部621により出

力された予測データと、正解データである特性値  $n + m$  との誤差を指す。

・誤差  $C_{n+m}$  は、設計条件  $n + m$  が入力されることで予測された第1の特性値及び第2の特性値に基づいて、重み  $C$  のもとで出力部 621 により出力された予測データと、正解データである特性値  $n + m$  との誤差を指す。

[0192] また、テーブル 1511 において、

・誤差指標 A は、誤差  $A_{n+1} \sim$  誤差  $A_{n+m}$  の統計値（例えば、平均値））、

・誤差指標 B は、誤差  $B_{n+1} \sim$  誤差  $B_{n+m}$  の統計値（例えば、平均値））、

・誤差指標 C は、誤差  $C_{n+1} \sim$  誤差  $C_{n+m}$  の統計値（例えば、平均値））、

を指す。

[0193] 決定部 1501 は、例えば、学習手法 1、2、3、ハイパーパラメータ 1、2、3 において、誤差指標 A、誤差指標 B、誤差指標 C、・・・の中から、最小値を特定する。また、決定部 1501 は、各学習手法、各ハイパーパラメータにおいてそれぞれ特定された最小値の中から、更に最小値を特定する。これにより、決定部 1501 は、対応する学習手法、対応するハイパーパラメータ及び対応する重みを、最適な学習手法、最適なハイパーパラメータ及び最適な重みとして決定する。

[0194] また、決定部 1501 は、決定した学習手法が指す組み合わせのもとで、決定したハイパーパラメータが指す組み合わせを設定して学習が行われることで生成された学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルを、予測装置 130 に通知する。また、決定部 1501 は、決定した重みを、予測装置 130 に通知する。

[0195] これにより、予測装置 130 では、最適化された学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデル、最適化された重みのもとで、予測処理を行うことができる。

[0196] <学習処理及び予測処理の流れ>

次に、学習処理及び予測処理の流れについて説明する。図16は、学習処理及び予測処理の流れを示す第5のフローチャートである。図12を用いて説明した第4のフローチャートとの相違点は、ステップS1601、S1602～S1604である。

- [0197] ステップS1601において、学習装置1400は、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われる複数の内挿予測モデルのうち、デフォルトの学習手法のもとで学習が行われる内挿予測モデルを設定する。また、学習装置1500は、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われる複数の外挿予測モデルのうち、デフォルトの学習手法のもとで学習が行われる外挿予測モデルを設定する。
- [0198] ステップS1602において、学習装置1400は、予め用意された複数の学習手法全てのもとで内挿予測モデルの学習を行い、学習済み内挿予測モデルを生成したか否かを判定する。また、学習装置1400は、予め用意された複数の学習手法全てのもとで外挿予測モデルの学習を行い、学習済み外挿予測モデルを生成したか否かを判定する。
- [0199] ステップS1602において、学習を行っていない学習手法があると判定した場合には（ステップS1602においてNOの場合には）、ステップS1603に進む。
- [0200] ステップS1603において、学習装置1400は、次の学習手法のもとで学習が行われる内挿予測モデルまたは次の学習手法のもとで学習が行われる外挿予測モデルを設定し、ステップS1201に戻る。
- [0201] 一方、ステップS1602において、予め用意された全ての学習手法のもとで学習を行ったと判定した場合には（ステップS1602においてYES）の場合には、ステップS1604に進む。
- [0202] ステップS1604において、学習装置1500は、学習手法、ハイパーパラメータ及び重みを最適化する最適化処理を実行する。なお、学習手法、ハイパーパラメータ及び重みを最適化する最適化処理（ステップS1604）の詳細は、以下で説明する。

[0203] <最適化処理の流れ>

図17は、最適化処理の流れを示す第3のフローチャートである。図13に示した最適化処理との相違点は、ステップS1701である。

[0204] ステップS1701において、学習装置1500は、誤差指標に基づき、最適な学習手法の組み合わせ、最適なハイパーパラメータの組み合わせ及び最適な重みを決定する。

[0205] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第6の実施形態に係る学習装置1500は、

- ・異なる学習手法のもとで学習が行われる複数の内挿予測モデルについて、内挿予測モデル用の複数のハイパーパラメータをそれぞれ設定して学習を行うことで、複数の学習済み内挿予測モデルを生成する。
- ・異なる学習手法のもとで学習が行われる複数の外挿予測モデルについて、外挿予測モデル用の複数のハイパーパラメータをそれぞれ設定して学習を行うことで、複数の学習済み外挿予測モデルを生成する。
- ・検証用データセットの入力データを、複数の学習済み内挿予測モデル及び複数の学習済み外挿予測モデルの全ての組み合わせにそれぞれ入力し、第1の特性値及び第2の特性値を予測する。
- ・予測した第1の特性値と第2の特性値とに基づいて、複数種類の重みのもとで予測データをそれぞれ出力し、正解データとの誤差を算出する。これにより、学習手法の組み合わせ、ハイパーパラメータの組み合わせごとに、複数種類の重みそれぞれに対する誤差指標を算出する。
- ・最小の誤差指標に対応する、学習手法の組み合わせ、ハイパーパラメータの組み合わせ及び重みを決定し、最適な学習済み内挿予測モデル及び学習済み外挿予測モデルを予測装置に通知するとともに、最適な重みを予測装置に通知する。

[0206] これにより、第6の実施形態に係る予測装置130によれば、内挿領域の入力データに対して一定程度の予測精度を得ることができるとともに、外挿

領域の入力データに対しても、十分な予測精度を得ることができるようになる。つまり、第6の実施形態によれば、学習済み予測モデルを用いた予測装置の予測精度を向上させることができる。

[0207] [実施例]

続いて、上記各実施形態のうち、第4の実施形態について、具体的な実施例を説明する。なお、実施例の説明に際して、材料データ格納部110には、例えば、ALOGPS (<http://www.vcc lab.org/lab/a logps/>) で公開されている1311分子に対する溶解度データセットが格納されているものとする。

[0208] 当該溶解度データセットを用いて学習処理及び予測処理を行う場合、第2の実施形態によれば、例えば、以下の手順により処理が行われる。

[0209] (1) 手順1

溶解度データセットにSMILES形式で記載されている分子構造を、RDKitのrdkit.Chem.Descriptorsを用いて187次元の特徴ベクトルに変換する。

[0210] (2) 手順2

187次元の特徴ベクトルに変換された溶解度データセットを、56.25%/18.75%/25%の割合で、学習用データセット/検証用データセット/予測用データセットに、ランダムに分割する。

[0211] (3) 手順3

学習用データセットを用いて、内挿予測モデルであるscikit-learnのランダムフォレスト回帰モデルの学習を行う。また、学習用データセットを用いて、外挿予測モデルであるガウス過程回帰モデルの学習を行う。

[0212] (4) 手順4

手順3で学習した学習済みのランダムフォレスト回帰モデルを、内挿/外挿判別部410として用い、検証用データセットの各入力データを入力することで、各予測値の標準偏差を算出する。そして、算出した標準偏差が0.

6未満の場合、対応する入力データは、内挿領域の入力データであると判別する。また、算出した標準偏差が0.6以上の場合、対応する入力データは、外挿領域の入力データであると判別する。なお、閾値=0.6は、各予測値の標準偏差の中央値である。

[0213] (5) 手順5-1

検証用データセットの各入力データのうち、内挿領域の入力データを、学習済み内挿予測モデル（学習済みのランダムフォレスト回帰モデル）に入力し、第1の特性値を予測する。また、検証用データセットの各入力データのうち、内挿領域の入力データを、学習済み外挿予測モデル（学習済みのガウス過程回帰モデル）に入力し、第2の特性値を予測する。予測した第1の特性値及び第2の特性値と、検証用データセットの正解データとを対比することで、「第1の特性値の重み：第2の特性値の重み」を最適化する。その結果、本実施例では、内挿領域の入力データに対する重みとして、第1の特性値の重み：第2の特性値の重み=0.55：0.45が得られた。

[0214] (6) 手順5-2

検証用データセットの各入力データのうち、外挿領域の入力データを、学習済み内挿予測モデル（学習済みのランダムフォレスト回帰モデル）に入力し、第1の特性値を予測する。また、検証用データセットの各入力データのうち、外挿領域の入力データを、学習済み外挿予測モデル（学習済みのガウス過程回帰モデル）に入力し、第2の特性値を予測する。予測した第1の特性値及び第2の特性値と、検証用データセットの正解データとを対比することで、「第1の特性値の重み：第2の特性値の重み」を最適化する。その結果、本実施例では、外挿領域の入力データに対する重みとして、第1の特性値の重み：第2の特性値の重み=0.40：0.60が得られた。

[0215] (7) 手順6

予測用データセットの各入力データについて、上記手順4と同様の処理を行い、内挿領域の入力データであるか、外挿領域の入力データであるかを判別する。

## [0216] (8) 手順7

予測用データセットの各入力データを、学習済み内挿予測モデル（学習済みのランダムフォレスト回帰モデル）に入力し、第1の特性値を予測する。また、予測用データセットに含まれる各入力データを、学習済み外挿予測モデル（学習済みのガウス過程回帰モデル）に入力し、第2の特性値を予測する。予測した第1の特性値及び第2の特性値に対して、手順6における判別結果に応じた重みのもとで、予測データを出力する。例えば、内挿領域の入力データであると判別された場合には、第1の特性値の重み：第2の特性値の重み＝0.55：0.45とする加重平均値を、予測データとして出力する。また、外挿領域の入力データであると判別された場合には、第1の特性値の重み：第2の特性値の重み＝0.40：0.60とする加重平均値を、予測データとして出力する。

## [0217] (9) 手順8

予測用データセットの各入力データについて算出した予測データの予測精度を、相関係数の二乗によって定義される $R^2$ によって評価する。その際、予測用データセットの各入力データを、全て、学習済み内挿予測モデル（学習済みのランダムフォレスト回帰モデル）に入力した場合の予測データの予測精度と比較する（比較例1）。更に、予測用データセットの各入力データを、全て、学習済み外挿予測モデル（学習済みのガウス過程回帰モデル）に入力した場合の予測データの予測精度と比較する（比較例2）。

[0218] 図18は、予測精度の一例を示す図である。図18に示すように、内挿領域の入力データを入力した場合も、外挿領域の入力データを入力した場合も、本実施例の予測精度の方が、比較例1及び比較例2の予測精度よりも高くなっていることがわかる。

[0219] このように、最適な重みに基づく加重平均値を算出することで、ランダムフォレスト回帰モデルによる予測誤差と、ガウス過程回帰モデルによる予測誤差とを相殺させることができる。

[0220] [その他の実施形態]

上記各実施形態において、学習装置と予測装置とは別体の装置として説明した。しかしながら、学習装置と予測装置とは一体の装置により構成されてもよい。また、上記第3乃至第6の実施形態において、学習フェーズにおける学習装置と最適化フェーズにおける学習装置とは別体の装置として説明した。しかしながら、学習フェーズにおける学習装置と最適化フェーズにおける学習装置とは一体の装置により構成されてもよい。

[0221] また、上記第6の実施形態では、学習手法の具体例について言及しなかった。しかしながら、内挿予測モデルの学習を行う際に用いられる学習手法は、例えば、決定木、ランダムフォレスト、勾配ブースティング、バギング、アダブーストのような、決定木系のアンサンブル手法であることが好ましい。決定木系のアンサンブル手法は、過学習しやすい傾向があり、内挿領域の入力データに対して、高い予測精度を実現することができるからである。

[0222] あるいは、内挿予測モデルの学習を行う際に用いられる学習手法は、学習用データセットに強く影響されるk近傍法であってもよい。

[0223] あるいは、内挿予測モデルの学習を行う際に用いられる学習手法は、ニューラルネットワークであってもよい。特に、中間層が2層以上のニューラルネットワークを使用すると、過学習しやすい傾向があり、内挿領域の入力データに対して、高い予測精度を実現することができるからである。

[0224] 一方、外挿予測モデルの学習を行う際に用いられる学習手法は、例えば、ガウス過程であることが好ましい。ガウス過程は過学習しにくい傾向があり、外挿領域の入力データに対して、比較的高い予測精度を実現することができるからである。

[0225] あるいは、外挿予測モデルの学習を行う際に用いられる学習手法は、ガウス過程のほか、カーネルリッジ、サポートベクターマシンといったカーネル系の学習手法であることが好ましい。カーネル系の学習手法は、カーネル関数を適切に設定することで、外挿領域の入力データに対して高い予測精度を実現することができるからである。

[0226] あるいは、外挿予測モデルの学習を行う際に用いられる学習手法は、線形

、部分最小二乗、ラッソ、線形リッジ、エラスティックネット、ベイジアンリッジのような線形の学習手法であってもよい。線形の学習手法は、外挿領域での材料特性が線形の挙動を示すと予想されるケースや、学習用データセットの入力データに対して前処理を行うなどして、材料特性の挙動を線形化できるケースにおいて有効だからである。

[0227] あるいは、外挿予測モデルの学習を行う際に用いられる学習手法は、ニューラルネットワークであってもよい。特に、中間層が2層以下のニューラルネットワークを使用すると、過学習しにくい傾向があり、更に、活性化関数を適切に設定することで、外挿領域の入力データに対して高い予測精度を実現することができるからである。

[0228] また、上記各実施形態では、予測装置により出力された予測データの利用方法について言及しなかったが、予測データは、例えば、対象材料を製造する際の設計条件を決定するのに用いることができる。また、決定した設計条件のもとで材料製造装置により材料が製造された場合にあっては、製造された材料の特性値を測定することで、決定した設計条件と測定した特性値とを、新たに学習用データセットに加えることができる。更に、当該学習用データセットを用いて内挿予測モデルまたは外挿予測モデルの再学習を行うように構成すれば、予測モデルの開発サイクルを回すことができる。

[0229] なお、上記実施形態に挙げた構成等に、その他の要素との組み合わせ等、ここで示した構成に本発明が限定されるものではない。これらの点に関しては、本発明の趣旨を逸脱しない範囲で変更することが可能であり、その応用形態に応じて適切に定めることができる。

[0230] 本出願は、2021年5月18日に出願された日本国特許出願第2021-083921号に基づきその優先権を主張するものであり、同日本国特許出願の全内容を参照することにより本願に援用する。

## 符号の説明

[0231] 111 : 学習用データセット  
120 : 学習装置

1 2 1 __ 1	: 内挿予測モデル
1 2 1 __ 2	: 外挿予測モデル
1 3 0	: 予測装置
1 3 1 __ 1	: 学習済み内挿予測モデル
1 3 1 __ 2	: 学習済み外挿予測モデル
1 3 2	: 出力部
4 0 0	: 予測装置
4 1 0	: 内挿／外挿判別部
6 1 0	: 検証用データセット
6 2 0	: 学習装置
6 2 1	: 出力部
6 2 2	: 重み変更部
6 2 3	: 誤差算出部
6 2 4	: 決定部
7 1 0	: 学習装置
7 1 1	: 決定部
1 0 0 0	: 学習装置
1 0 1 0	: ハイパーパラメータ変更部
1 1 0 0	: 学習装置
1 1 0 1	: 決定部
1 4 0 0	: 学習装置
1 5 0 0	: 学習装置
1 5 0 1	: 決定部

## 請求の範囲

[請求項1] 予測対象の入力データが入力されることで、第1の出力データ及び第2の出力データをそれぞれ出力する第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルと、

前記第1及び第2の出力データを取得し、加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることで予測データを出力する出力部と、を有し、

前記第1の学習済みモデルは、内挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第2の学習済みモデルよりも高くなるように構成され、前記第2の学習済みモデルは、外挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第1の学習済みモデルよりも高くなるように構成されている、予測装置。

[請求項2] 前記出力部は、予め定められた重みのもとで、前記加重平均値を算出する、または、前記加重多数決をとる、請求項1に記載の予測装置。

[請求項3] 前記予め定められた重みは、

検証用データセットの入力データが入力された場合に前記出力部より複数種類の重みのもとでそれぞれ出力される予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて決定される、請求項2に記載の予測装置。

[請求項4] 前記第1の学習済みモデル、前記第2の学習済みモデル及び前記予め定められた重みは、

複数種類の第1の学習済みモデル及び複数種類の第2の学習済みモデルそれぞれに対して、検証用データセットの入力データが入力された場合に前記出力部より複数種類の重みのもとでそれぞれ出力される予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて決定される、請求項2に記載の予測装置。

[請求項5] 前記複数種類の第1の学習済みモデルは、互いに異なるハイパーパラメータが設定され、及び／または、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われており、

前記複数種類の第2の学習済みモデルは、互いに異なるハイパーパラメータが設定され、及び／または、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われている、請求項4に記載の予測装置。

[請求項6] 前記予測対象の入力データが内挿領域の入力データであるか、外挿領域の入力データであるかを判別する判別部を更に有し、

前記出力部は、前記判別部による判別結果に応じた重みのもとで、前記加重平均値を算出する、または、前記加重多数決をとる、請求項1に記載の予測装置。

[請求項7] 前記予測対象の入力データの外挿性の強さを評価する判別部を更に有し、

前記出力部は、前記判別部による評価結果に応じた重みのもとで、前記加重平均値を算出する、または、前記加重多数決をとる、請求項1に記載の予測装置。

[請求項8] 前記判別部は、

ランダムフォレスト予測の不確実性による評価手法、ベイズ推定の不確実性による評価手法、カーネル密度推定による評価手法、距離による評価手法のうちのいずれか1つまたは複数を用いることで、前記予測対象の入力データの外挿性の強さを評価する、請求項7に記載の予測装置。

[請求項9] 前記判別結果に応じた重みは、内挿領域用の重みと、外挿領域用の重みとを含み、

前記内挿領域用の重みは、

検証用データセットの内挿領域の入力データが入力された場合に前記出力部より複数種類の重みのもとでそれぞれ出力される予測データと、前記検証用データセットの内挿領域の入力データに対応する正解

データとの間の誤差に基づいて決定され、

前記外挿領域用の重みは、

検証用データセットの外挿領域の入力データが入力された場合に前記出力部より複数種類の重みのもとでそれぞれ出力される予測データと、前記検証用データセットの外挿領域の入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて決定される、請求項6に記載の予測装置。

[請求項10]

前記第1の学習済みモデルは、決定木、ランダムフォレスト、勾配ブースティング、バギング、アダブースト、k近傍法、ニューラルネットワークのうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われており、

前記第2の学習済みモデルは、ガウス過程、カーネルリッジ、サポートベクターマシン、線形、部分最小二乗、ラッソ、線形リッジ、エラスティックネット、ベイジアンリッジ、ニューラルネットワークのうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われている、請求項1に記載の予測装置。

[請求項11]

検証用データセットの入力データが入力されることで、第1の出力データ及び第2の出力データをそれぞれ出力する第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルと、

前記第1及び第2の出力データを取得し、複数種類の重みのもとで加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることでそれぞれの予測データを出力する出力部と、

出力されたそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、前記複数種類の重みのうちのいずれかの重みを決定する決定部と

を有する学習装置。

[請求項12]

前記決定部は、

前記検証用データセットの内挿領域の入力データを入力することで

前記出力部より出力されるそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの内挿領域の入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、内挿領域用の重みを決定し、

前記検証用データセットの外挿領域の入力データを入力することで前記出力部より出力されるそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの外挿領域の入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、外挿領域用の重みを決定する、請求項 1 1 に記載の学習装置。

[請求項13]

前記出力部は、

複数種類の第 1 の学習済みモデル及び複数種類の第 2 の学習済みモデルに対して、前記検証用データセットの入力データを入力することで、前記複数種類の第 1 及び第 2 の学習済みモデルよりそれぞれ出力される第 1 及び第 2 の出力データを取得し、前記複数種類の重みのもとで加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることでそれぞれの予測データを出力し、

前記決定部は、

出力されたそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、

前記複数種類の第 1 の学習済みモデルのうちのいずれかの第 1 の学習済みモデルを決定し、

前記複数種類の第 2 の学習済みモデルのうちのいずれかの第 2 の学習済みモデルを決定し、

前記複数種類の重みのうちのいずれかの重みを決定する、

請求項 1 1 に記載の学習装置。

[請求項14]

前記複数種類の第 1 の学習済みモデルは、互いに異なるハイパーパラメータが設定され、及び／または、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われており、

前記複数種類の第 2 の学習済みモデルは、互いに異なるハイパーパ

ラメータが設定され、及び／または、互いに異なる学習手法のもとで学習が行われている、請求項13に記載の学習装置。

[請求項15] 前記第1の学習済みモデルは、内挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第2の学習済みモデルよりも高くなるように構成され、前記第2の学習済みモデルは、外挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第1の学習済みモデルよりも高くなるように構成されている、請求項11に記載の学習装置。

[請求項16] 前記第1の学習済みモデルは、決定木、ランダムフォレスト、勾配ブースティング、バギング、アダブースト、k近傍法、ニューラルネットワークのうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われており、

前記第2の学習済みモデルは、ガウス過程、カーネルリッジ、サポートベクターマシン、線形、部分最小二乗、ラッソ、線形リッジ、エラスティックネット、ベイジアンリッジ、ニューラルネットワークのうちのいずれか1つまたは複数の学習手法のもとで学習が行われている、請求項15に記載の学習装置。

[請求項17] 予測対象の入力データが入力されることで、第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルがそれぞれ第1の出力データ及び第2の出力データを出力する工程と、

前記第1及び第2の出力データを取得し、加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることで予測データを出力する工程と、を有し、

前記第1の学習済みモデルは、内挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第2の学習済みモデルよりも高くなるように構成され、前記第2の学習済みモデルは、外挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第1の学習済みモデルよりも高くなるように構成されている、予測方法。

[請求項18] 検証用データセットの入力データが入力されることで、第1の学習

済みモデル及び第2の学習済みモデルがそれぞれ第1の出力データ及び第2の出力データを出力する工程と、

前記第1及び第2の出力データを取得し、複数種類の重みのもとで加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることでそれぞれの予測データを出力する工程と、

出力されたそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、前記複数種類の重みのうちのいずれかの重みを決定する工程と

を有する学習方法。

[請求項19]

予測対象の入力データが入力されることで、第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルがそれぞれ第1の出力データ及び第2の出力データを出力する工程と、

前記第1及び第2の出力データを取得し、加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることで予測データを出力する工程と、をコンピュータに実行させるための予測プログラムであり、

前記第1の学習済みモデルは、内挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第2の学習済みモデルよりも高くなるように構成され、前記第2の学習済みモデルは、外挿領域の入力データに対する予測精度が、前記第1の学習済みモデルよりも高くなるように構成されている、予測プログラム。

[請求項20]

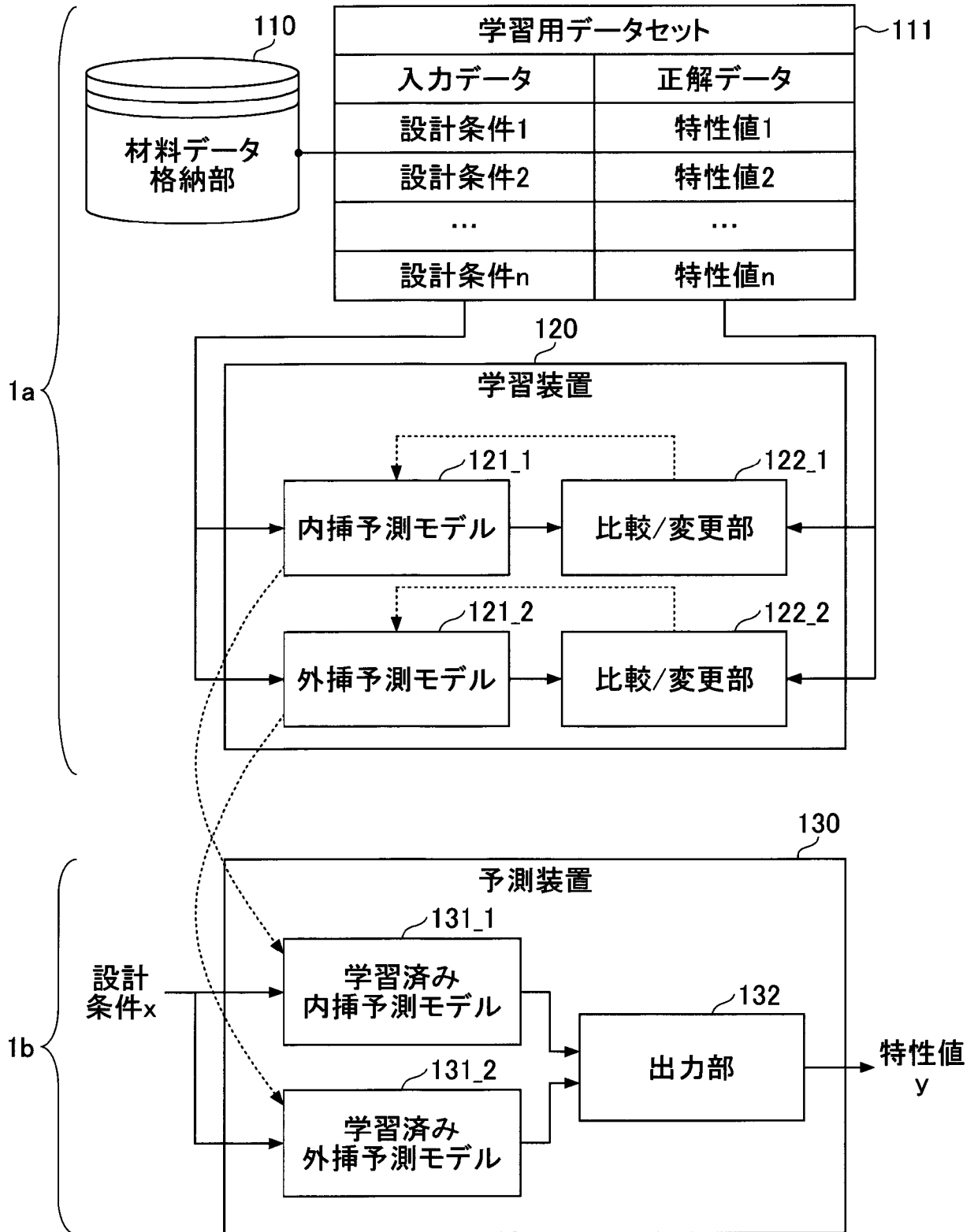
検証用データセットの入力データが入力されることで、第1の学習済みモデル及び第2の学習済みモデルがそれぞれ第1の出力データ及び第2の出力データを出力する工程と、

前記第1及び第2の出力データを取得し、複数種類の重みのもとで加重平均値を算出することで、または、加重多数決をとることでそれぞれの予測データを出力する工程と、

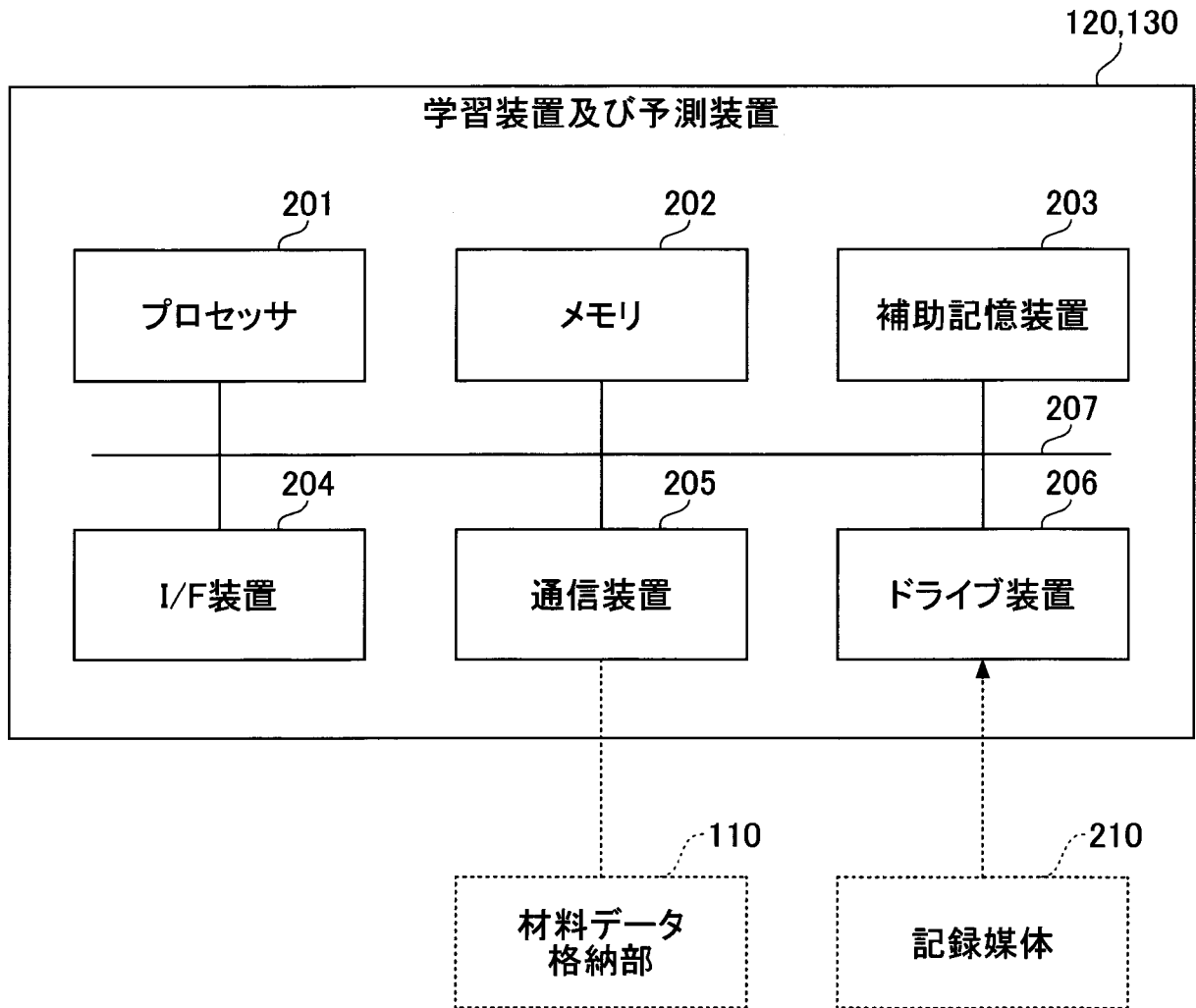
出力されたそれぞれの予測データと、前記検証用データセットの入力データに対応する正解データとの間の誤差に基づいて、前記複数種

類の重みのうちのいずれかの重みを決定する工程と  
をコンピュータに実行させるための学習プログラム。

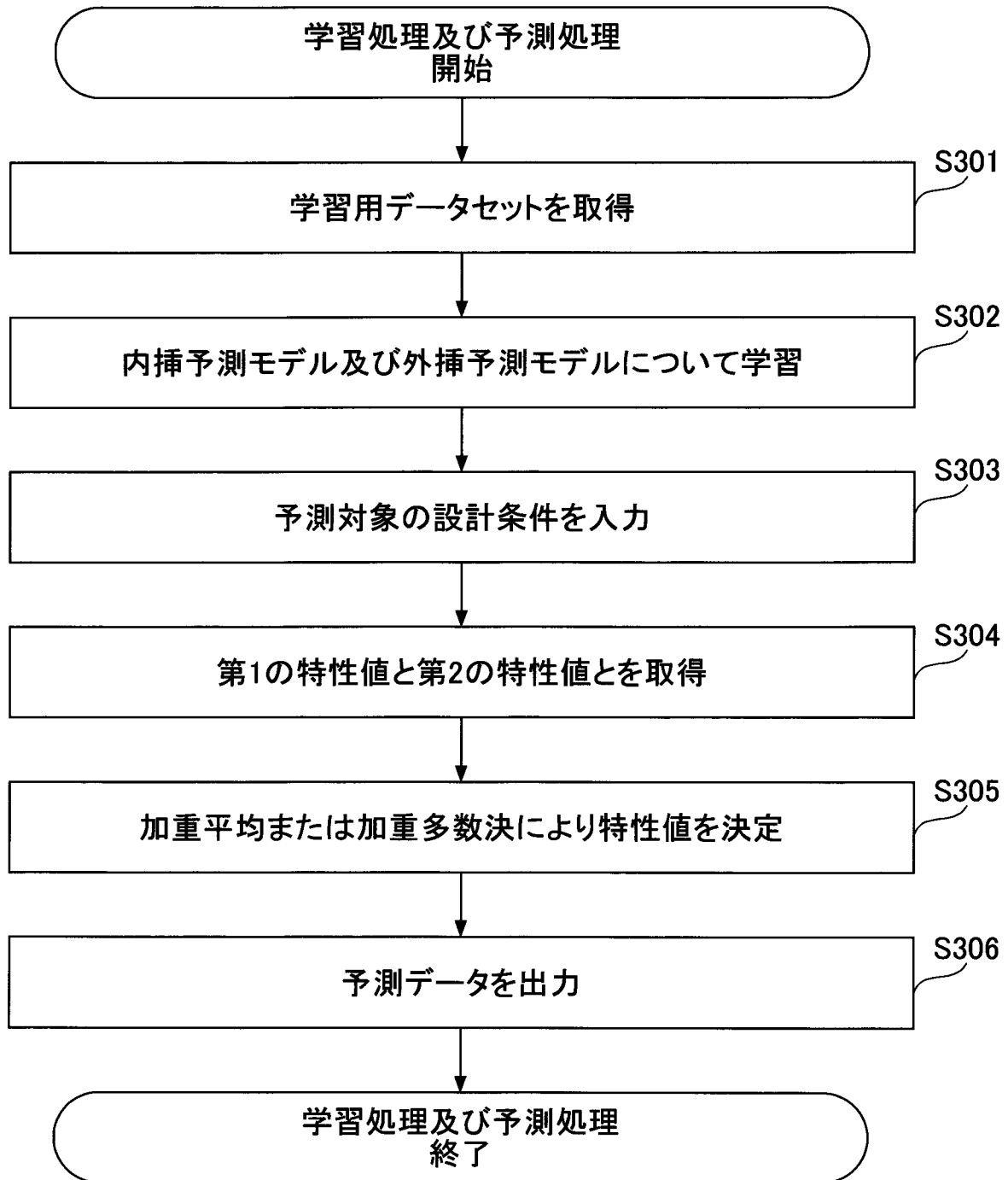
[図1]



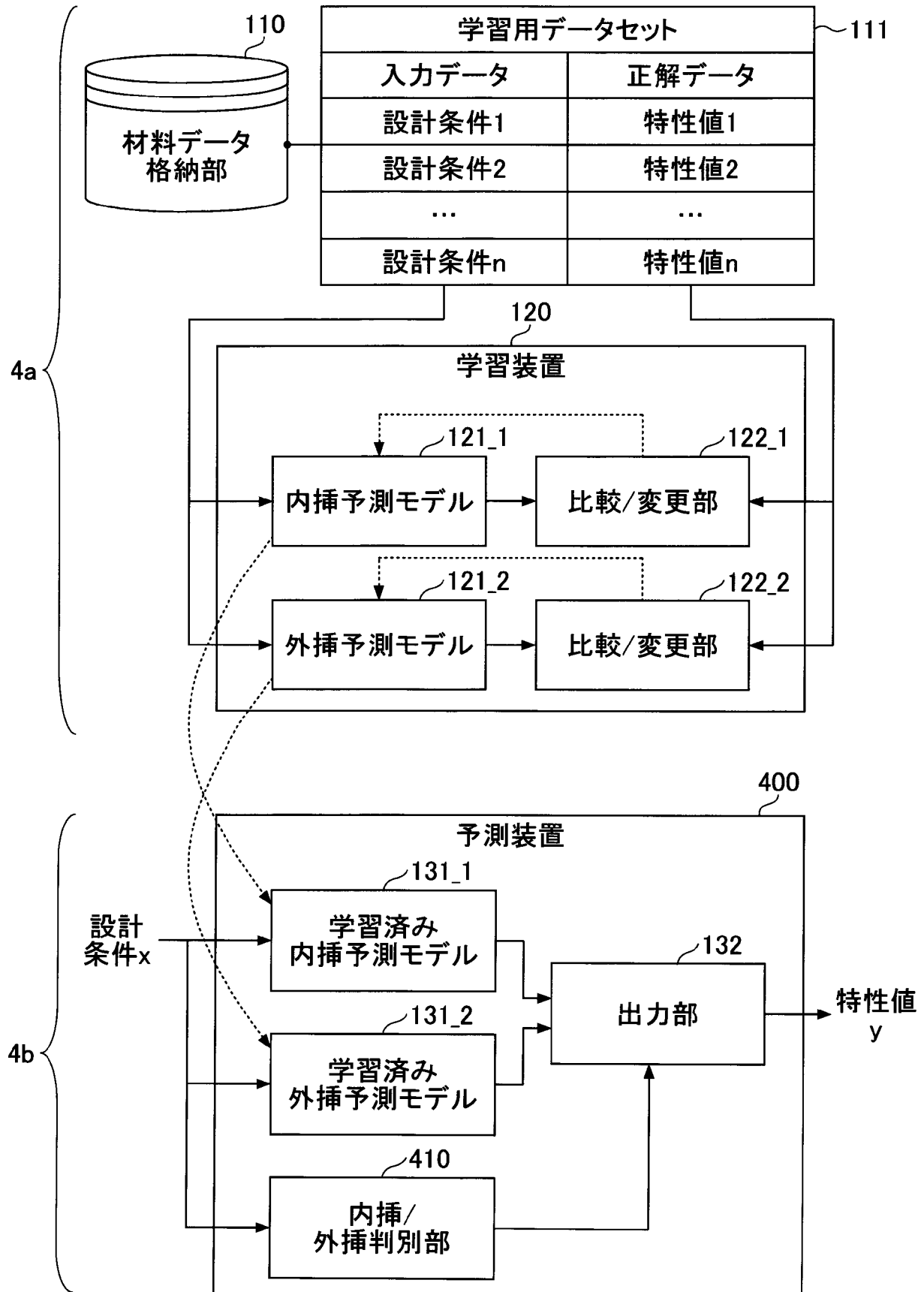
[図2]



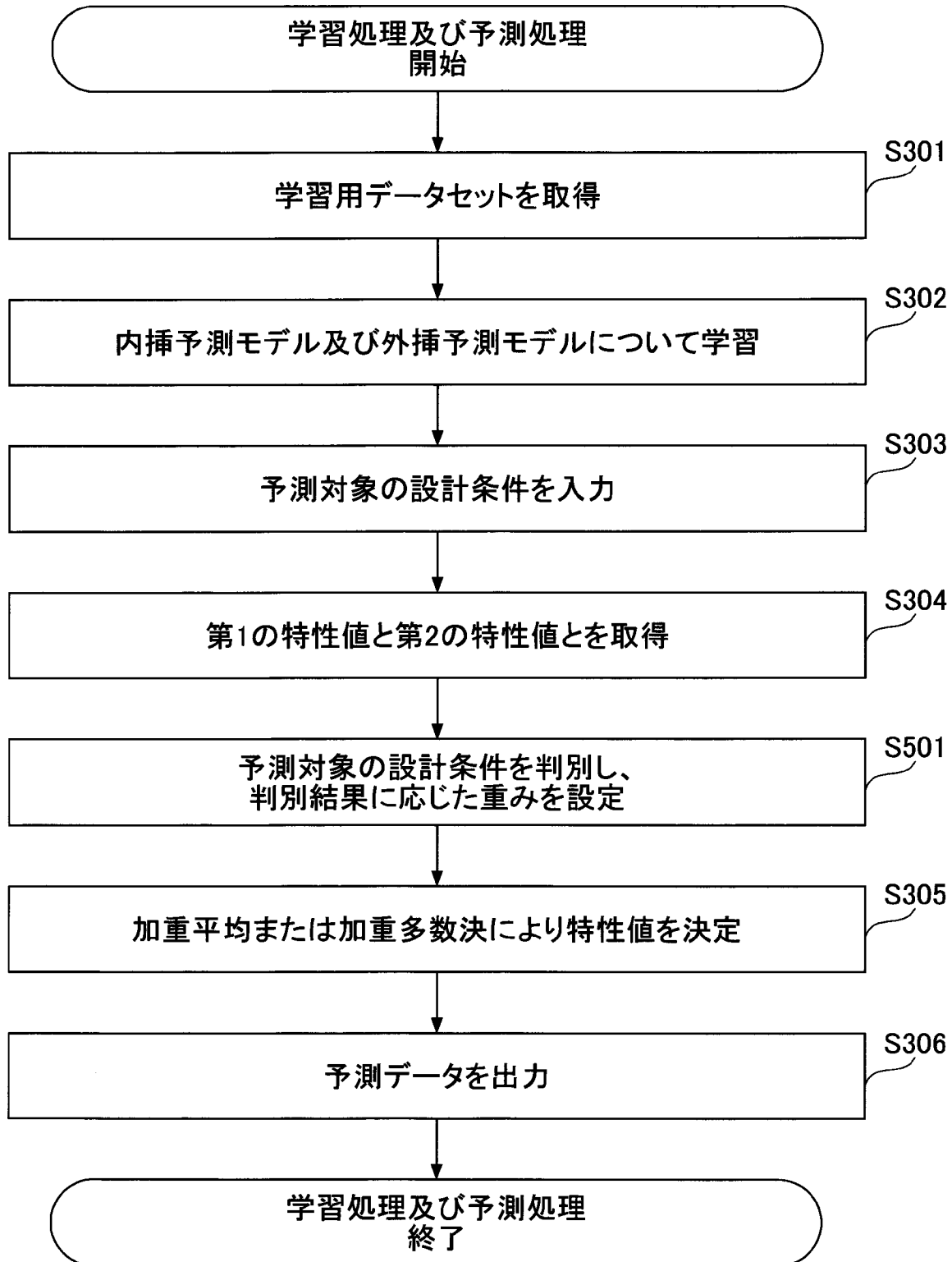
[図3]



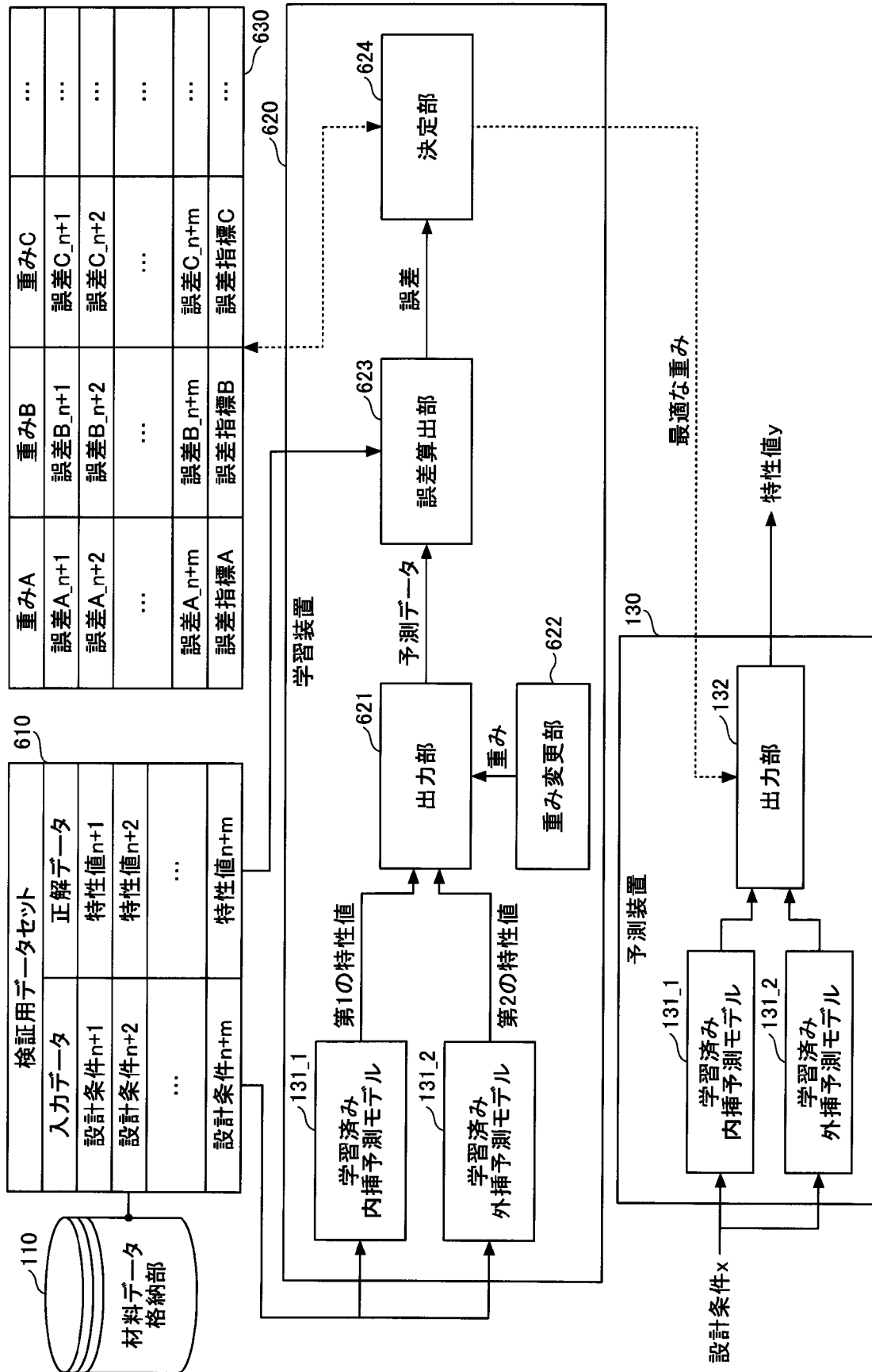
[図4]



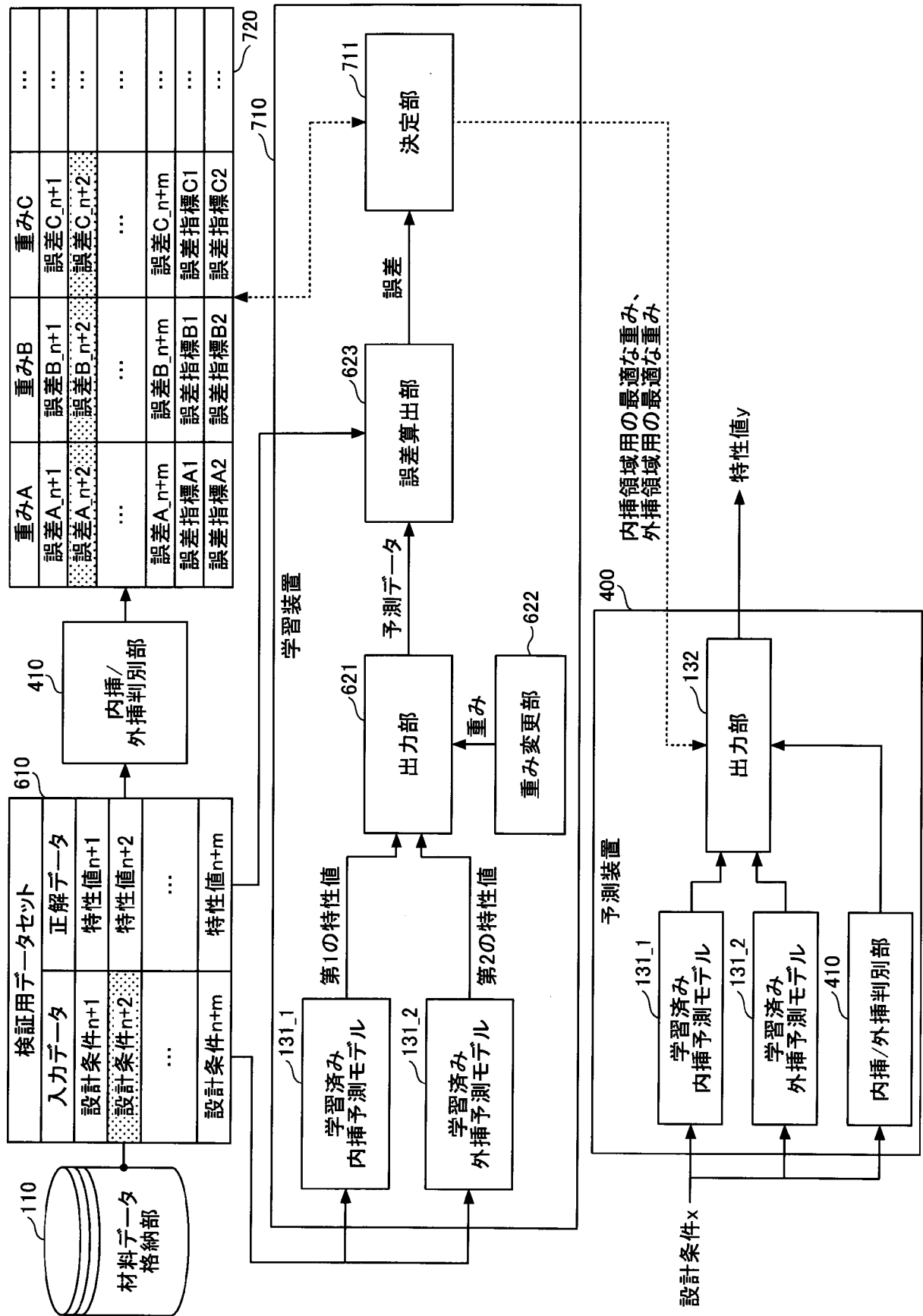
[図5]



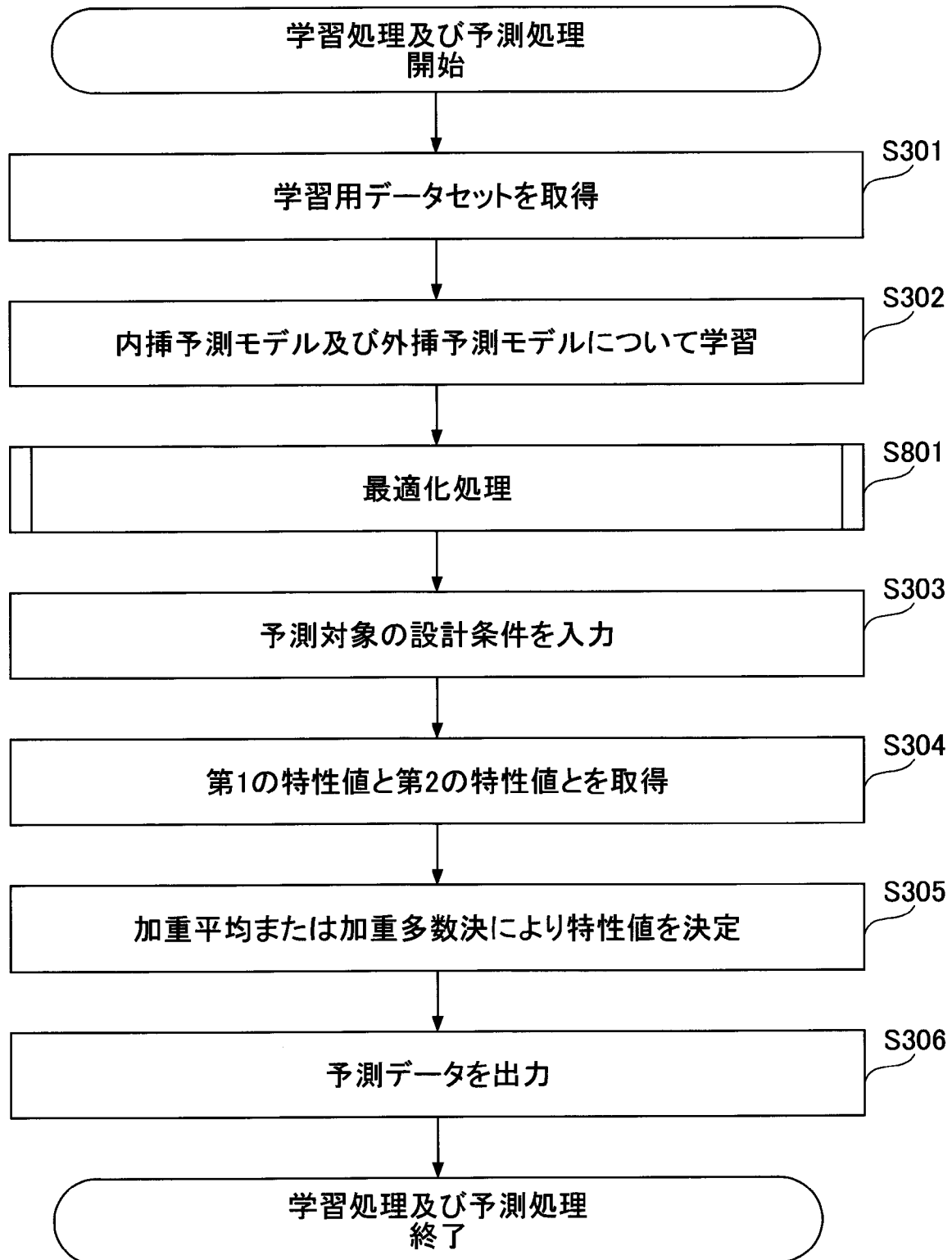
[図6]



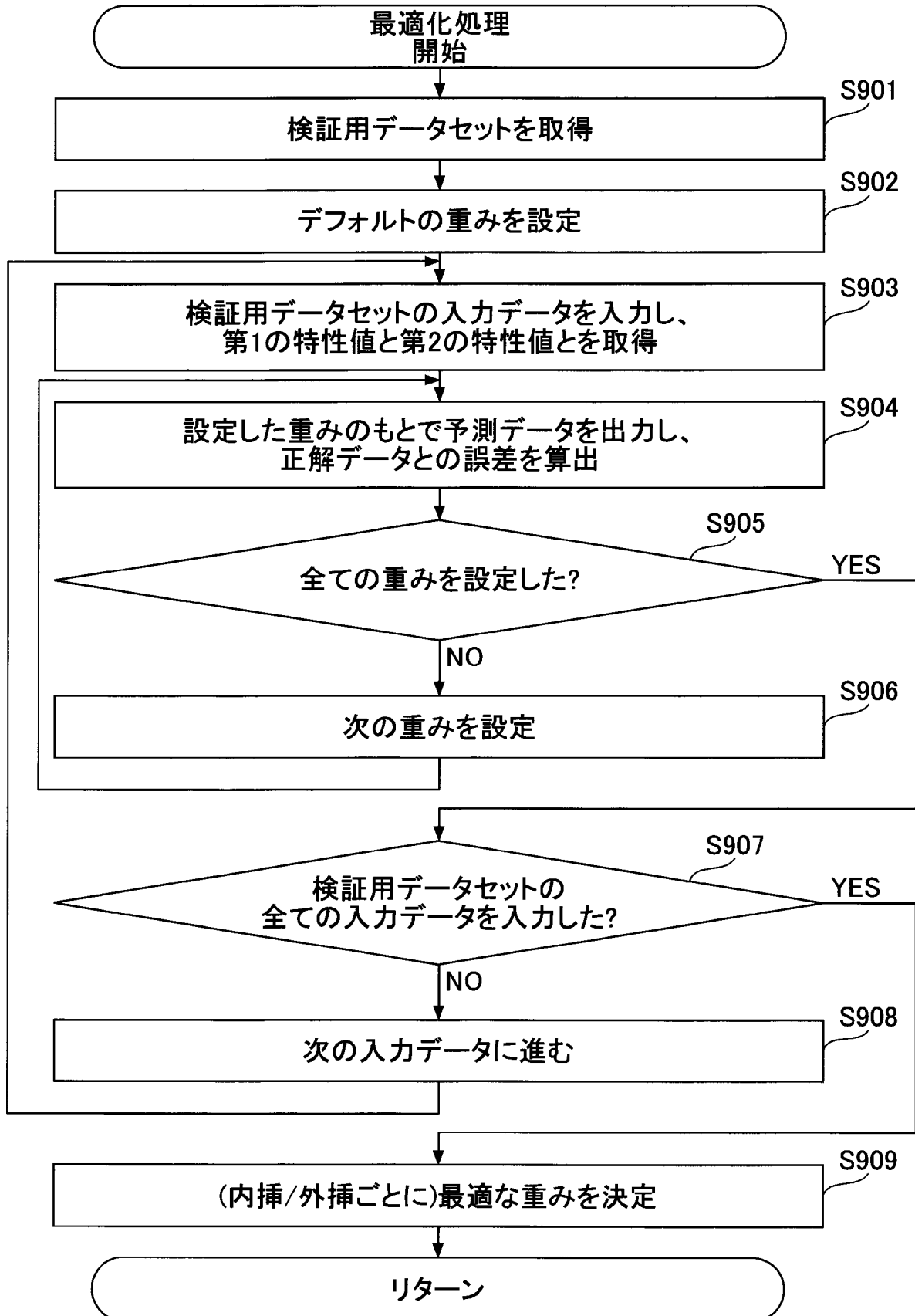
[図7]



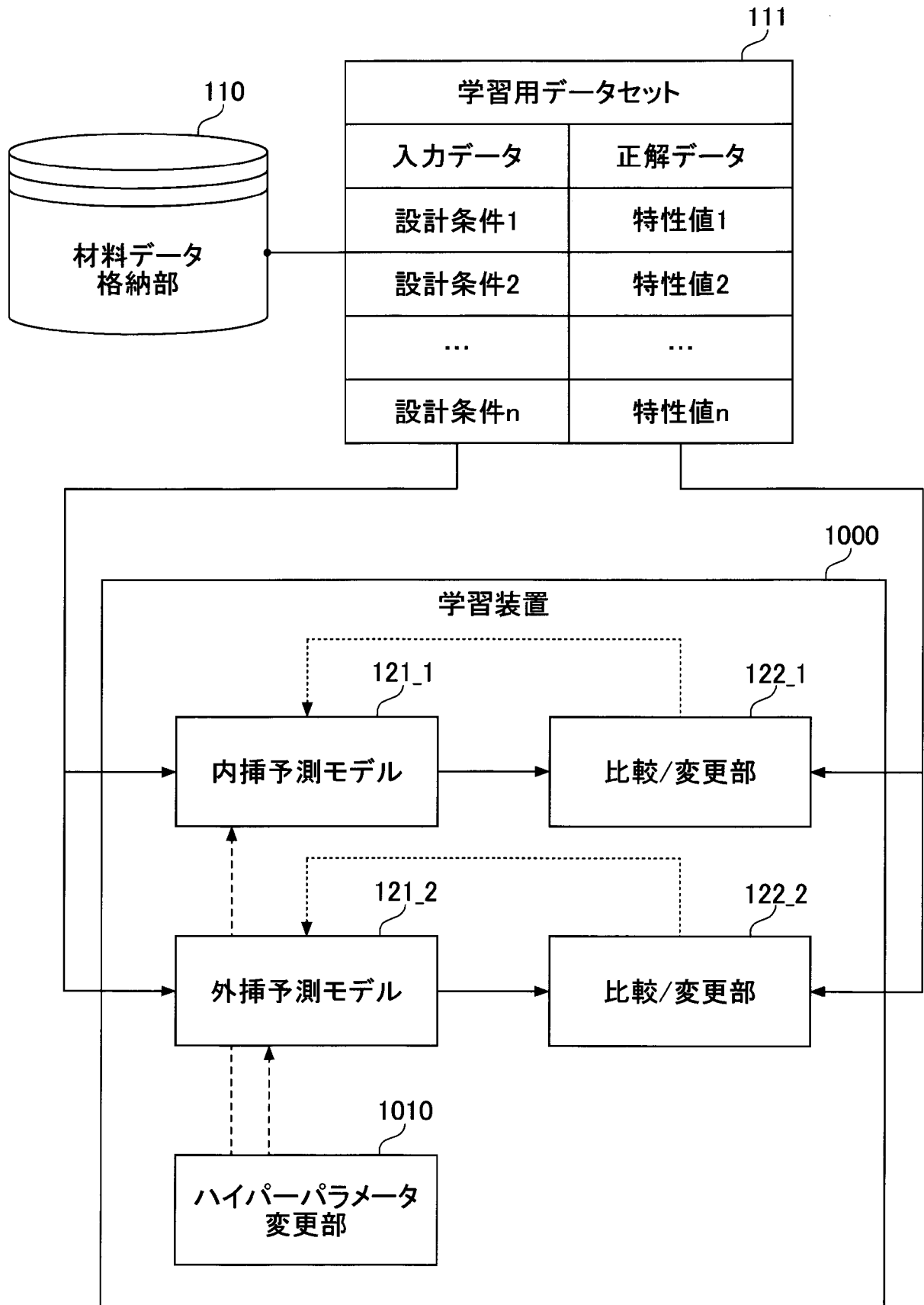
[図8]



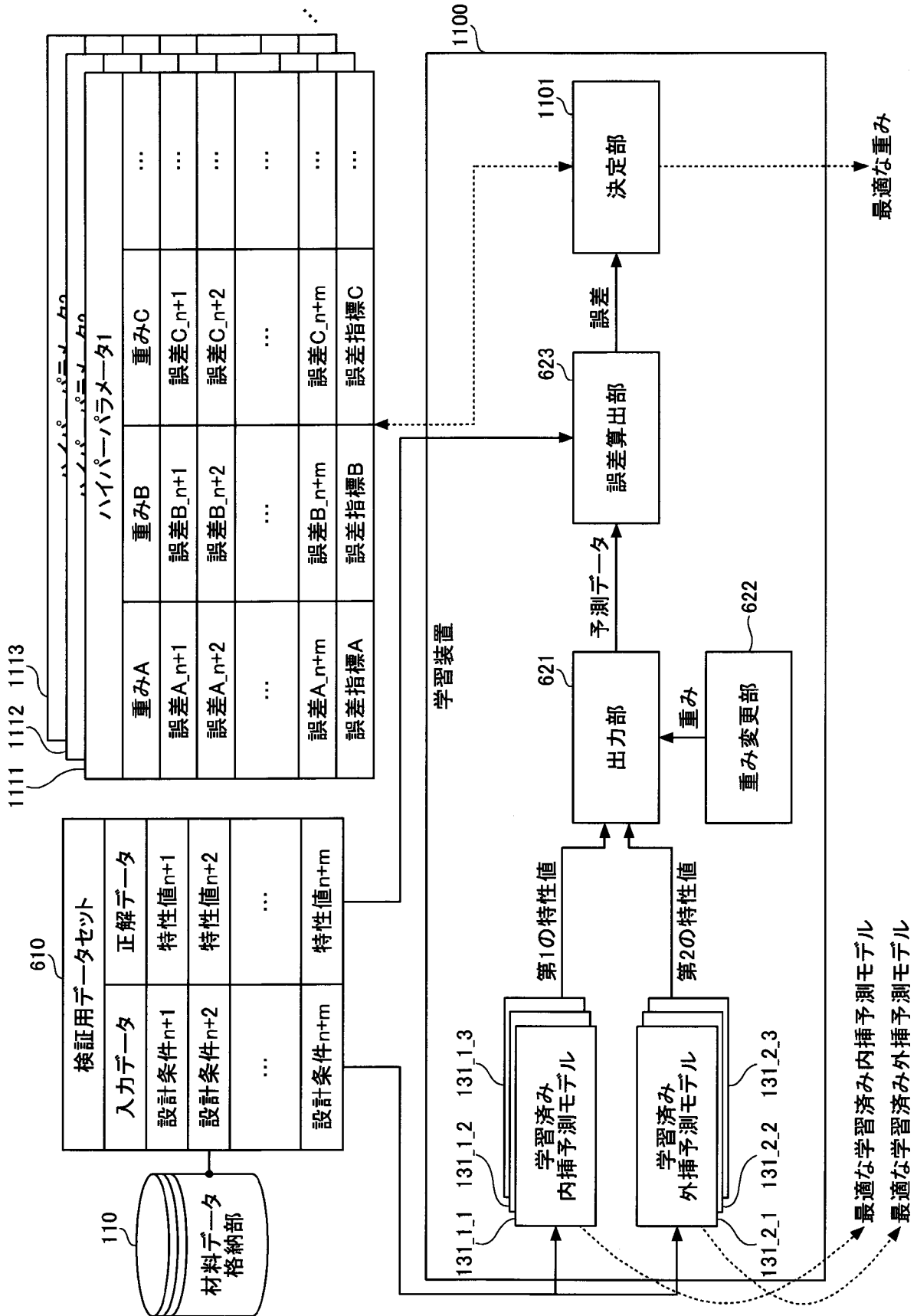
[図9]



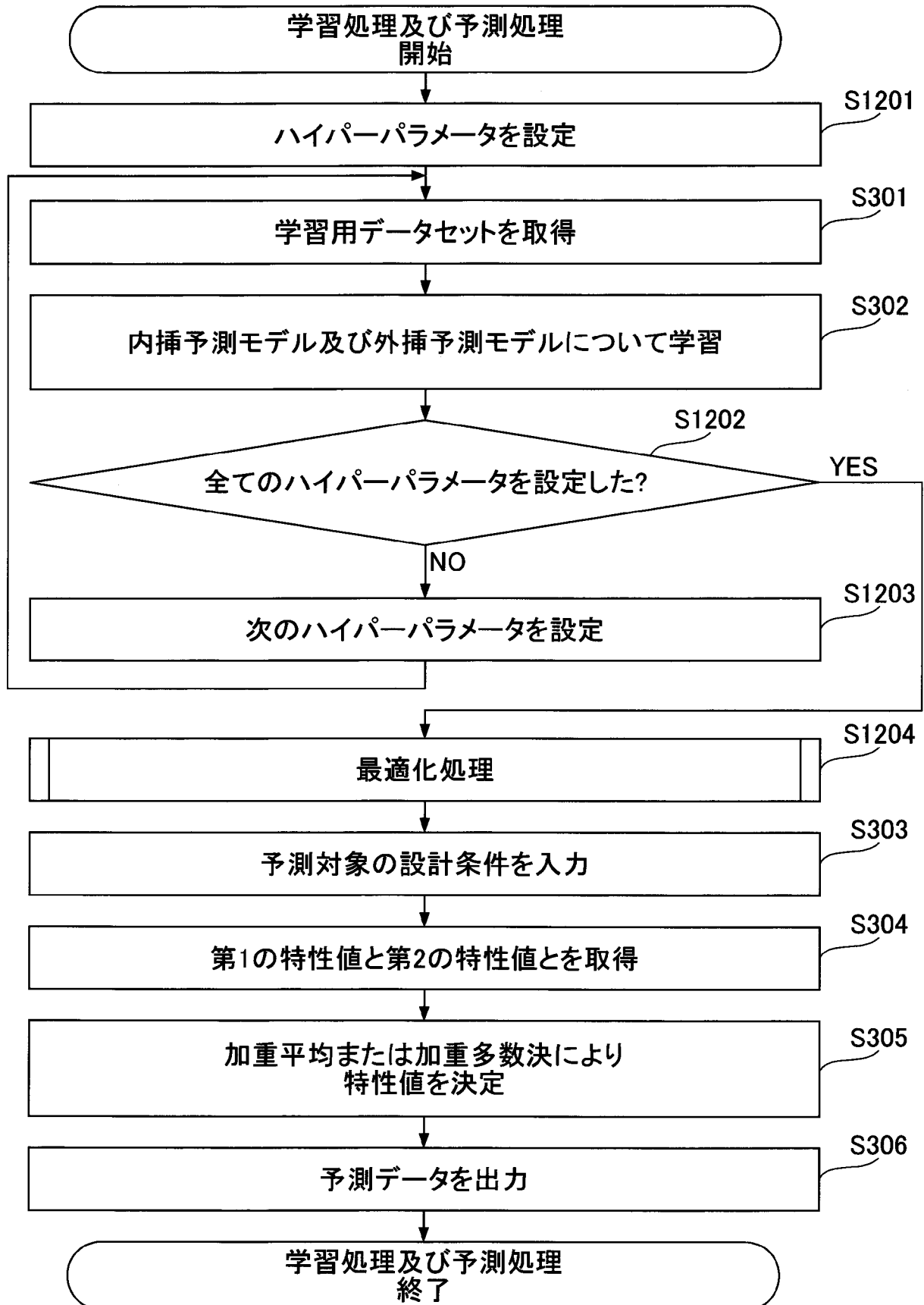
[図10]



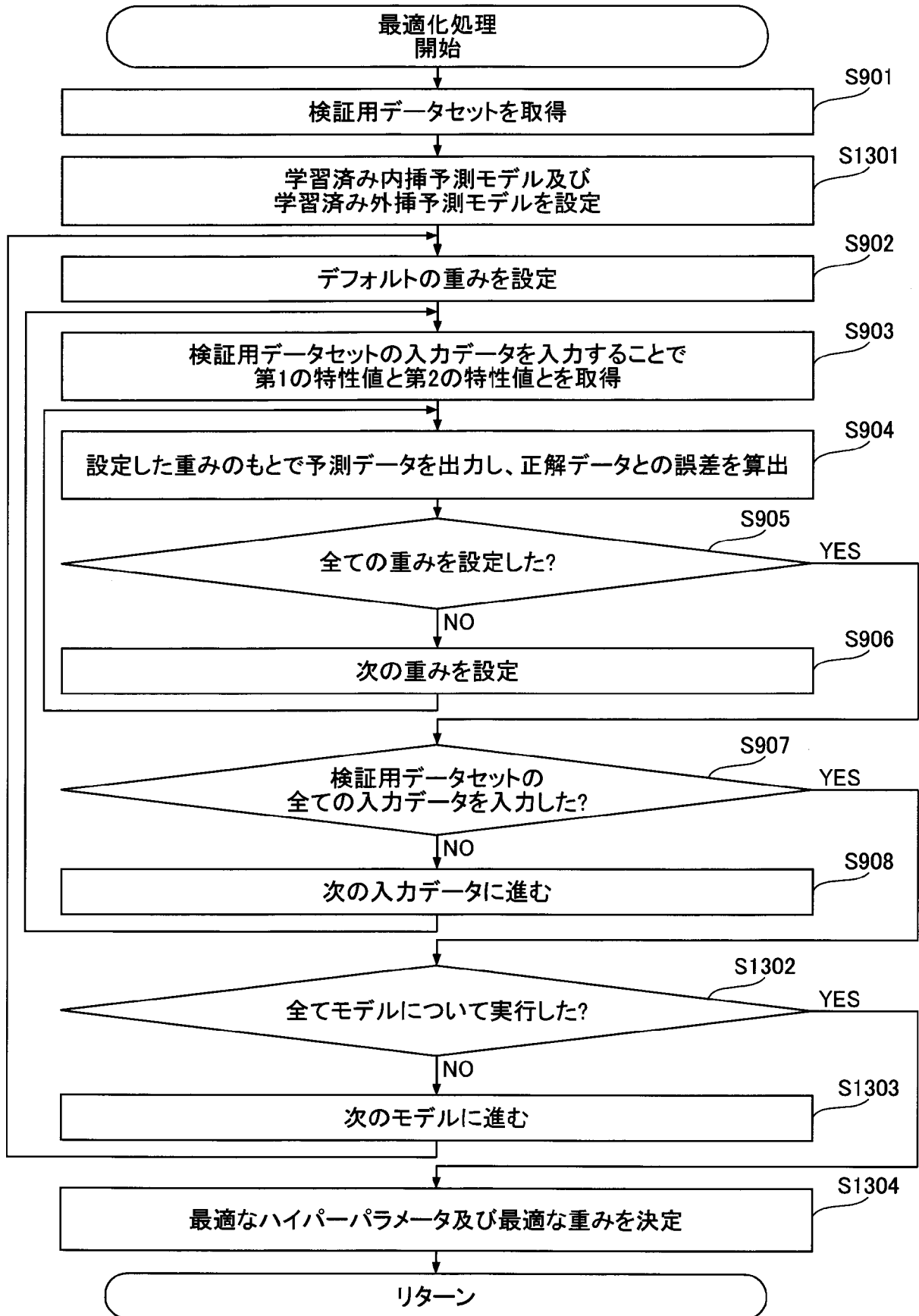
[図11]



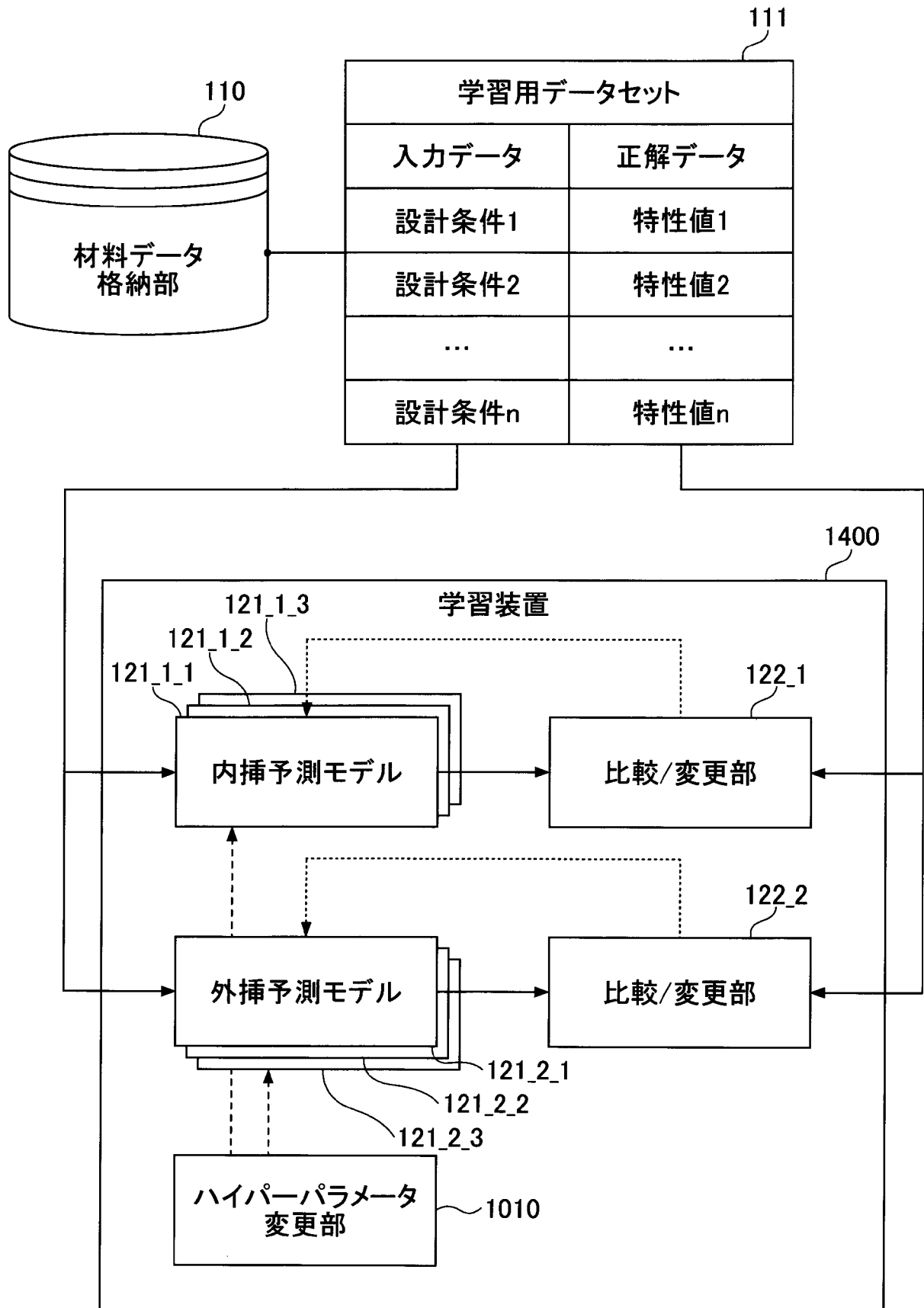
[図12]



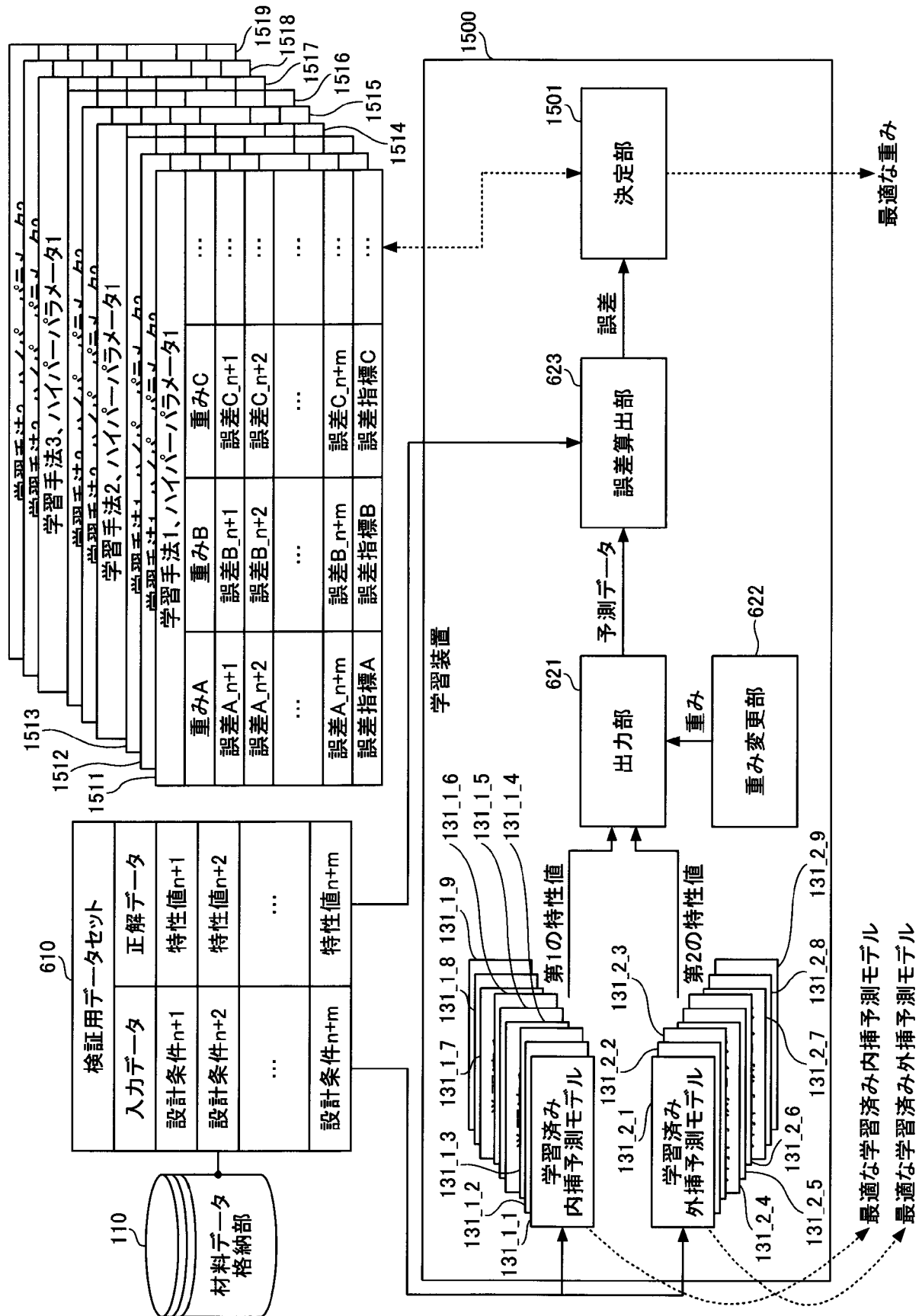
[図13]



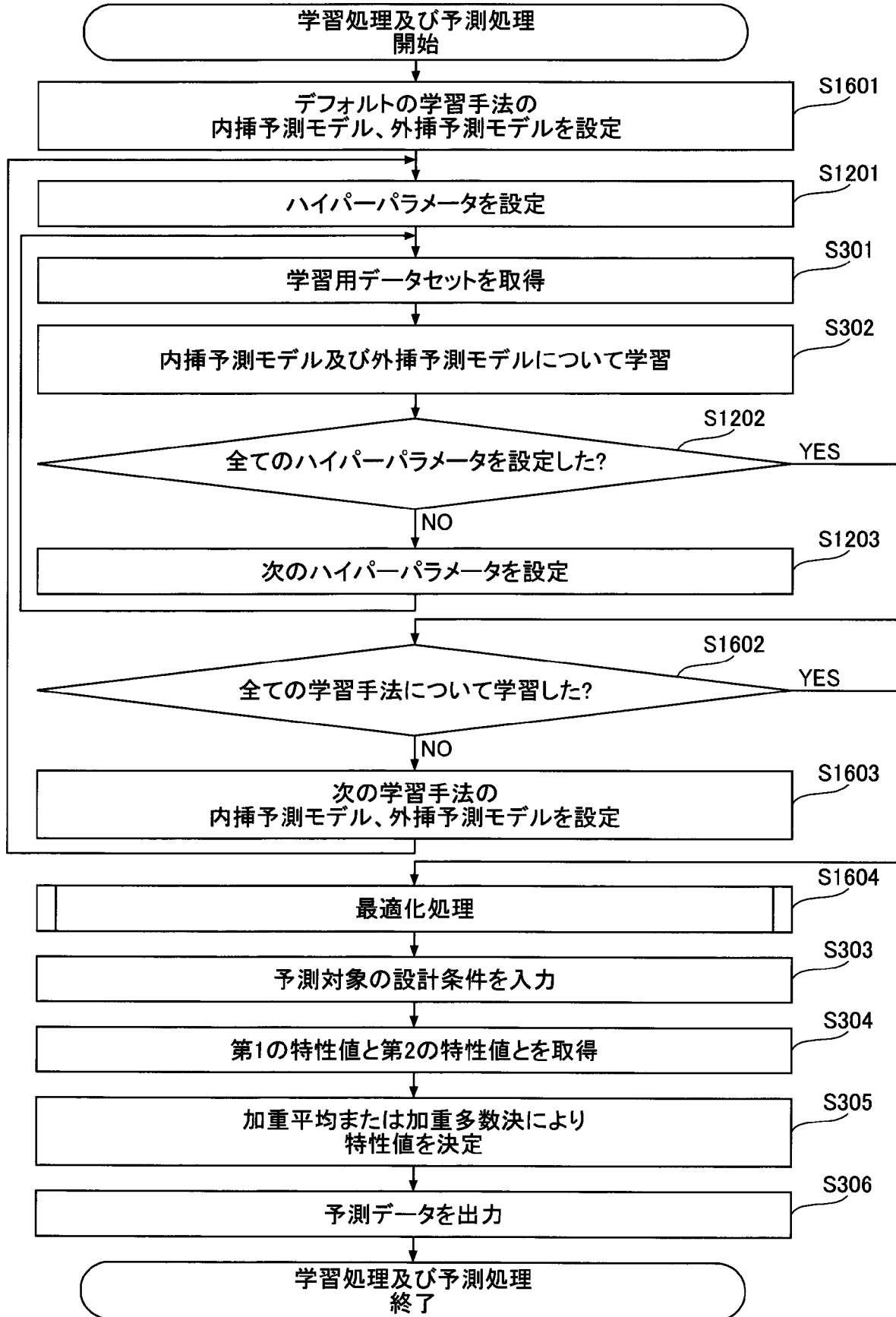
[図14]



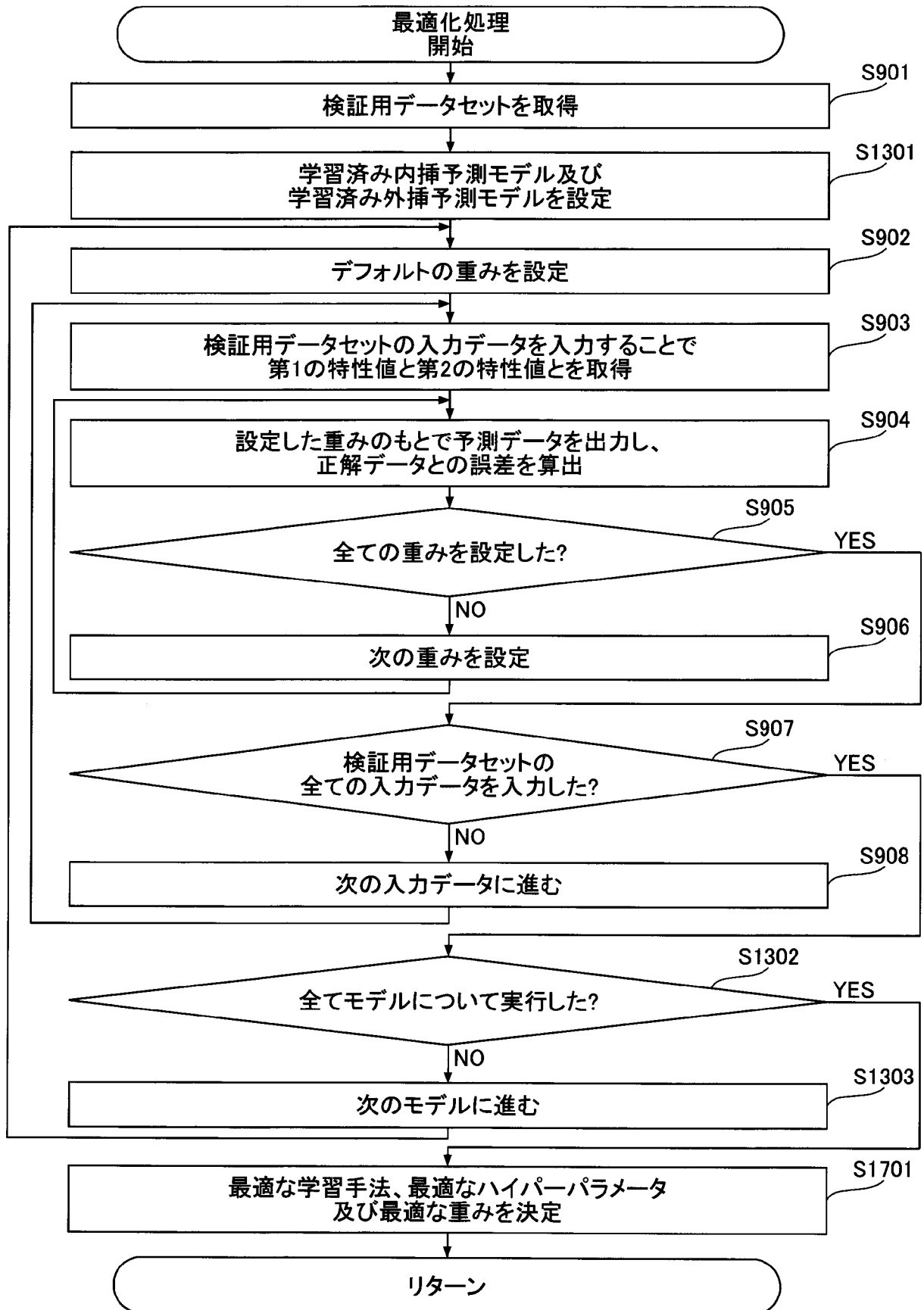
[図15]



[図16]



[図17]



[図18]

	手法	内挿領域での 予測精度	外挿領域での 予測精度
実施例	ランダムフォレスト回帰 とガウス過程回帰の 加重平均	$R^2=0.95$	$R^2=0.89$
比較例1	ランダムフォレスト回帰	$R^2=0.94$	$R^2=0.81$
比較例2	ガウス過程回帰	$R^2=0.92$	$R^2=0.83$

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/017833

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b>		
<i>G06N 3/04</i> (2006.01)i; <i>G06N 20/00</i> (2019.01)i FI: G06N20/00; G06N3/04 154		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
<b>B. FIELDS SEARCHED</b>		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) G06N3/04; G06N20/00		
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)		
<b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	POLIKAR, R. Ensemble based systems in decision making. IEEE Circuits and Systems Magazine. 06 September 2006, vol. 6, no. 3, Third Quarter 2006, pp. 21-45, [retrieved on 14 June 2022], Retrieved from the Internet: <URL: <a href="https://ieeexplore.ieee.org/document/1688199">https://ieeexplore.ieee.org/document/1688199</a> >, <DOI: 10.1109/MCAS.2006.1688199> pp. 24-37	1-5, 10, 11, 13-20
A	US 2020/0349434 A1 (GE PRECISION HEALTHCARE LLC) 05 November 2020 (2020-11-05) paragraphs [0049], [0050]	6-9, 12
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> 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 <b>14 June 2022</b>		Date of mailing of the international search report <b>28 June 2022</b>
Name and mailing address of the ISA/JP <b>Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan</b>		Authorized officer  Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
**Information on patent family members**

International application No.

**PCT/JP2022/017833**

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
US 2020/0349434 A1	05 November 2020	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G06N 3/04(2006.01)i; G06N 20/00(2019.01)i FI: G06N20/00; G06N3/04 154		
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）） G06N3/04; G06N20/00 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	POLIKAR, R., Ensemble Based Systems in Decision Making, IEEE Circuits and Systems Magazine, 2006.09.06, Vol. 6, No. 3, Third Quarter 2006, pp. 21-45, [retrieved on 2022-06-14], Retrieved from the Internet: <URL: https://ieeexplore.ieee.org/document/1688199>, <DOI: 10.1109/MCAS.2006.1688199> pp. 24-37	1-5, 10, 11, 13-20
A	US 2020/0349434 A1 (GE PRECISION HEALTHCARE LLC) 05.11.2020 (2020-11-05) paras. [0049], [0050]	6-9, 12
<input type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> 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、一般的な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 14.06.2022	国際調査報告の発送日 28.06.2022	
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） 金木 陽一 5B 4876 電話番号 03-3581-1101 内線 3545	

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/JP2022/017833

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
US 2020/0349434 A1	05.11.2020	(ファミリーなし)	