(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
2024年2月1日(01.02.2024)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2024/024596 A1

(51) 国際特許分類:
G16C 60/00 (2019.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2023/026453

(22) 国際出願日： 2023年7月19日(19.07.2023)

(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 2022-119644 2022年7月27日(27.07.2022) JP

(71) 出願人: 株式会社レゾナック (**RESONAC CORPORATION**) [JP/JP]; 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目９番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 李 海仁(**LEE, Haein**); 〒1058518 東京都港区芝大門一丁目１３番９号 株式会社レゾナック内 Tokyo (JP). 竹本 真平(**TAKEMOTO, Shimpei**); 〒1058518 東京都港区芝大門一丁目１３番９号 株式会社レゾナック内 Tokyo (JP). 奥野 好成(**OKUNO, Yoshishige**); 〒1058518 東京都港区芝大門一丁目１３番９号 株式会社レゾナック内 Tokyo (JP).

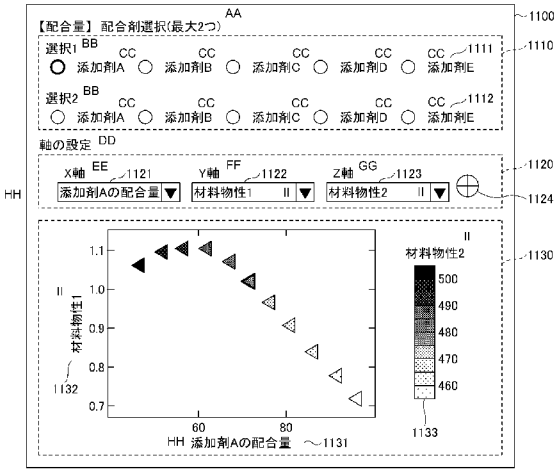
(74) 代理人: 伊東 忠重, 外(**ITOH, Tadashige** et al.); 〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目１番１号 丸の内 ＭＹ ＰＬＡＺＡ （明治安田生命ビル） １６階 Tokyo (JP).

(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,

(54) **Title:** CHARACTERISTICS PREDICTION DEVICE, CHARACTERISTICS 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13]



AA [Compound amount] Select compounding agent (maximum: 2)
BB Selection
CC Additive
DD Setting axes
EE X-axis
FF Y-axis
GG Z-axis
HH Compound amount of additive A
II Material property

(57) **Abstract:** The present invention visualizes the relationship between a design condition and a characteristics prediction value of an objective substance to facilitate easy understanding thereof. The present invention includes: a reference design determination unit configured to determine a reference design condition representing a design condition for an objective substance to be produced using two or more materials; a peripheral design generation unit configured to generate a plurality of peripheral design conditions in which any one of design values is varied from that of the reference design condition;

WO 2024/024596 A1

［続葉有］

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, MG, MK, MN, MU, 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, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, 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, ME, 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)）

a characteristics prediction unit configured to predict two or more characteristic values of each of the peripheral design conditions; and a visualization unit configured to arrange symbols corresponding to the peripheral design conditions, on a plane with a design value and a first characteristic value as axes, by means of color representation corresponding to a second characteristic value.

(57) 要約：目的物質の設計条件と特性予測値との関係を容易に把握できるように可視化する。２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定するように構成されている基準設計決定部と、基準設計条件に対して、１の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成するように構成されている周辺設計生成部と、周辺設計条件それぞれにおける２以上の特性値を予測するように構成されている特性予測部と、設計値と第１の特性値とを軸とする平面に、第２の特性値に応じた色表現で、周辺設計条件に対応するシンボルを配置するように構成されている可視化部と、を備える。

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]　従来、材料開発は技術者の経験や勘等に基づいて行われてきた。近年、機械学習等を活用して材料開発を効率化する技術が利用されている。

[0003]　例えば、特許文献１には、複数の素材で構成された組成物の物性を予測し、組成物に含まれる特定素材の特徴量と物性の予測値とを関連付けて表示する発明が開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：特開２０２２－１２８９６２号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0005]　しかしながら、従来技術では、複数の特徴量又は複数の物性値の変化傾向を把握することは困難である、という課題がある。例えば、特許文献１に開示されている発明では、複数の特徴量又は複数の物性値の変化傾向を把握するためには、特徴量と物性値との関係を表した座標系を複数表示して比較する必要がある。

[0006]　本開示は、上記のような技術的課題に鑑みて、目的物質の設計値と特性値との関係を容易に把握できるように可視化することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0007]　本開示は、以下に示す構成を備える。

[0008]　［１］　２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定するように構成されている基準設計決定部と、

前記基準設計条件に対して、１の設計値を変動させた複数の周辺設計条件

を生成するように構成されている周辺設計生成部と、

前記周辺設計条件それぞれにおける２以上の特性値を予測するように構成されている特性予測部と、

前記設計値と第１の前記特性値とを軸とする平面に、第２の前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置するように構成されている可視化部と、

を備える特性予測装置。

[0009] ［２］ ２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定するように構成されている基準設計決定部と、

前記基準設計条件に対して、２の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成するように構成されている周辺設計生成部と、

前記周辺設計条件それぞれにおける１以上の特性値を予測するように構成されている特性予測部と、

第１の前記設計値と第２の前記設計値とを軸とする平面に、前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置するように構成されている可視化部と、

を備える特性予測装置。

[0010] ［３］ 上記［２］に記載の特性予測装置であって、

前記特性予測部は、２以上の前記特性値を予測するように構成されており、

前記可視化部は、前記特性値それぞれに応じた色表現で表された領域が結合したシンボルを、前記周辺設計条件に対応する座標に配置するように構成されている、

特性予測装置。

[0011] ［４］ 上記［３］に記載の特性予測装置であって、

前記シンボルは、各領域が同一形状で形成され、点対称に配置されている、

特性予測装置。

[0012] ［５］ 上記［１］から［４］のいずれかに記載の特性予測装置であって、

前記基準設計決定部は、前記可視化部により表示された前記シンボルから選択された前記シンボルに対応する前記周辺設計条件を前記基準設計条件として決定するように構成されており、

前記可視化部は、前記基準設計条件が新たに選択されたとき、当該基準設計条件に基づいて生成された前記周辺設計条件に対応する前記シンボルを前記平面に再配置するように構成されている、

特性予測装置。

[0013] ［６］ 上記［１］から［４］のいずれかに記載の特性予測装置であって、

前記基準設計決定部は、前記可視化部により表示された前記シンボルに対応する前記周辺設計条件を編集することで前記基準設計条件を決定するように構成されており、

前記可視化部は、前記基準設計条件が新たに選択されたとき、当該基準設計条件に基づいて生成された前記周辺設計条件に対応する前記シンボルを前記平面に再配置するように構成されている、

特性予測装置。

[0014] ［７］ 上記［１］から［６］のいずれかに記載の特性予測装置であって、

前記周辺設計生成部は、前記設計値を所定の上限値と所定の下限値の範囲かつ所定の幅で変動させることで、前記周辺設計条件を生成するように構成されている、

特性予測装置。

[0015] ［８］ 上記［１］から［７］のいずれかに記載の特性予測装置であって、

前記特性予測部は、前記設計値を説明変数とし、前記特性値を目的変数とする機械学習モデルを用いて、前記特性値を予測するように構成されている

、

特性予測装置。

[0016] ［９］ コンピュータが、

２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定する手順と、

前記基準設計条件に対して、１の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する手順と、

前記周辺設計条件それぞれにおける２以上の特性値を予測する手順と、

前記設計値と第１の前記特性値とを軸とする平面に、第２の前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置する手順と、

を実行する特性予測方法。

[0017] ［１０］ コンピュータが、

２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定する手順と、

前記基準設計条件に対して、２の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する手順と、

前記周辺設計条件それぞれにおける１以上の特性値を予測する手順と、

第１の前記設計値と第２の前記設計値とを軸とする平面に、前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置する手順と、

を実行する特性予測方法。

[0018] ［１１］ コンピュータに、

２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定する手順と、

前記基準設計条件に対して、１の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する手順と、

前記周辺設計条件それぞれにおける２以上の特性値を予測する手順と、

前記設計値と第１の前記特性値とを軸とする平面に、第２の前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置する手順と、

を実行させるためのプログラム。

[0019] ［１２］ コンピュータに、

２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定する手順と、

前記基準設計条件に対して、２の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する手順と、

前記周辺設計条件それぞれにおける１以上の特性値を予測する手順と、

第１の前記設計値と第２の前記設計値とを軸とする平面に、前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置する手順と、

を実行させるためのプログラム。

発明の効果

[0020] 本開示の一態様によれば、目的物質の設計値と特性値との関係を容易に把握することができる。

図面の簡単な説明

[0021] [図1]図１は、設計支援システムの全体構成の一例を示すブロック図である。

[図2]図２は、コンピュータのハードウェア構成の一例を示すブロック図である。

[図3]図３は、設計支援システムの機能構成の一例を示すブロック図である。

[図4]図４は、特性予測方法の処理手順の一例を示すフローチャートである。

[図5]図５は、参照設計データの一例を示す図である。

[図6]図６は、参照設計入力画面の一例を示す図である。

[図7]図７は、周辺設計生成処理の手順の一例を示すフローチャートである。

[図8]図８は、周辺設計条件の第１の例を示す図である。

[図9]図９は、周辺設計条件の第２の例を示す図である。

[図10]図１０は、特性予測結果の第１の例を示す図である。

[図11]図１１は、特性予測結果の第２の例を示す図である。

[図12]図１２は、特性予測結果の第３の例を示す図である。

[図13]図１３は、特性予測画面の第１の例を示す図である。

[図14]図１４は、特性予測画面の第２の例を示す図である。

[図15]図１５は、特性予測画面の第３の例を示す図である。

[図16]図１６（Ａ）は、２つの予測値を表示するシンボルの一例を示す図である。図１６（Ｂ）は、２つの予測値を表示するシンボルの一例を示す図である。図１６（Ｃ）は、３つの予測値を表示するシンボルの一例を示す図である。図１６（Ｄ）は、４つの予測値を表示するシンボルの一例を示す図である。

[図17]図１７は、特性予測結果の第４の例を示す図である。

[図18]図１８は、基準設計編集画面の一例を示す図である。

発明を実施するための形態

[0022] 以下、本発明の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、本明細書および図面において、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。

[0023] ［実施形態］

従来、材料開発は技術者の経験や勘等に基づいて行われてきた。近年、機械学習等を活用して材料開発を効率化する技術が利用されている。一方、機械学習による予測結果から材料又は配合を選定する際に、最終的な判断は専門の技術者が行う必要がある。そのため、機械学習の予測結果について、その材料又は配合が選定された理由を示す情報も必要となる。

[0024] 機械学習モデルによる予測結果を説明するために、説明可能な人工知能（XAI; Explainable Artificial Intelligence）が提案されている。XAI技術としては、例えば、SHAP（Shapley Additive Explanations）やLIME（Local Interpretable Model-agnostic Explainations）等が挙げられる。しかしながら、従来技術では、ユーザがXAI技術で出力される情報を理解するには時間を要する。また、操作できない説明変数が含まれている場合、それらの情報を活用することは困難である。

[0025] 本開示の一実施形態は、複数の物質を用いて製造される物質の設計を支援する設計支援システムである。以下、設計対象とする物質を「目的物質」と

呼び、目的物質の製造に用いられる物質を「材料物質」と呼ぶ。

[0026] 本実施形態における目的物質の一例は、樹脂又は合金等である。本実施形態における材料物質の一例は、モノマー、ポリマー又は添加剤等である。目的物質及び材料物質はこれらに限定されず、複数の物質を用いて製造される物質であれば、どのようなものであっても適用可能である。

[0027] 本実施形態における設計支援システムは、目的物質の設計条件（以下、「基準設計条件」とも呼ぶ）のうち１以上の設計値を変動させた複数の設計条件（以下、「周辺設計条件」とも呼ぶ）を生成し、変動させた設計値と、各周辺設計条件において予測された１以上の特性値との関係を表示する。目的物質の設計条件は、各材料物資の配合量、分子量及び物性値（例えば、ポリマー重合度及びガラス転移点等）、並びに製造条件（例えば、処理温度及び処理時間等）等を含む。

[0028] 特に、本実施形態における設計支援システムは、複数の設計値を変動させた場合、又は複数の特性値を予測した場合であっても、設計値と特性値との関係を表示することができる。したがって、本実施形態における設計支援システムによれば、設計値を変動させることによる特性値の変化傾向を容易に把握することができる。

[0029] 例えば、本実施形態における設計支援システムは、基準設計条件のうち２つの設計値を変動させた周辺設計条件について１つの特性値を予測した場合、変動させた設計値を軸とする平面に、特性値に応じた色表現で表されたシンボルをプロットする。したがって、本実施形態における設計支援システムによれば、複数の設計値を変動させた場合であっても、特性値の変化傾向を容易に把握することができる。

[0030] また、例えば、本実施形態における設計支援システムは、基準設計条件のうち１つの設計値を変動させた周辺設計条件について２つの特性値を予測した場合、変動させた設計値と第１の特性値とを軸とする平面に、第２の特性値に応じた色表現で表されたシンボルをプロットする。したがって、本実施形態における設計支援システムによれば、複数の特性値を予測した場合であ

っても、特性値の変化傾向を容易に把握することができる。

[0031] さらに、例えば、本実施形態における設計支援システムは、基準設計条件のうち２つの設計値を変動させた周辺設計条件について２つの特性値を予測した場合、変動させた２つの設計値を軸とする平面に、各特性値に応じた色表現で表された領域が結合したシンボルをプロットする。したがって、本実施形態における設計支援システムによれば、複数の設計値を変動させた設計条件について複数の特性値を予測した場合であっても、特性値の変化傾向を容易に把握することができる。

[0032] 本実施形態における設計支援システムは、表示された予測結果に基づいて新たな基準設計条件を決定し、新たな基準設計条件に対して１以上の設計値を変動させた周辺設計条件について１以上の特性値を予測することができる。したがって、本実施形態における設計支援システムによれば、良好な予測結果を得られた設計条件を基準設計条件としてさらに良好な予測結果を得られる周辺設計条件を繰り返し探索することができる。そのため、本実施形態における設計支援システムによれば、効率的に目的物質の設計条件を決定することができる。

[0033] ＜設計支援システムの全体構成＞

本実施形態における設計支援システムの全体構成を、図１を参照しながら説明する。図１は、本実施形態における設計支援システムの全体構成の一例を示すブロック図である。

[0034] 図１に示されているように、本実施形態における設計支援システム１は、特性予測装置１０及びユーザ端末２０を含む。特性予測装置１０及びユーザ端末２０は、ＬＡＮ（Local Area Network）又はインターネット等の通信ネットワークＮ１を介してデータ通信可能に接続されている。

[0035] 特性予測装置１０は、ユーザ端末２０からの要求に応じて、目的物質の設計値と特性値との関係を可視化するパーソナルコンピュータ、ワークステーション、サーバ等の情報処理装置である。特性予測装置１０は、ユーザ端末２０から設計対象とする目的物質に関する基本設計条件を受信する。特性予

測装置１０は、基本設計条件に基づいて生成した周辺設計条件における特性値を予測し、目的物質の設計値と特性値との関係を可視化するための情報（以下、「可視化情報」とも呼ぶ）をユーザ端末２０に送信する。

[0036] ユーザ端末２０は、ユーザが操作するパーソナルコンピュータ、タブレット端末、スマートフォン等の情報処理端末である。ユーザ端末２０は、ユーザの操作に応じて、設計対象とする目的物質の設計条件を、特性予測装置１０に送信する。ユーザ端末２０は、特性予測装置１０から受信した可視化情報に基づいて、目的物質の設計値と特性値との関係をユーザに対して表示する。

[0037] なお、図１に示した設計支援システム１の全体構成は一例であって、用途や目的に応じて様々なシステム構成例があり得る。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してもよい。また、例えば、設計支援システム１は、特性予測装置１０及びユーザ端末２０がそれぞれ備えるべき機能を兼ね備えたスタンドアローンの情報処理装置により実現してもよい。

[0038] ＜設計支援システムのハードウェア構成＞

本実施形態における設計支援システム１のハードウェア構成を、図２を参照しながら説明する。

[0039] ≪コンピュータのハードウェア構成≫

本実施形態における特性予測装置１０及びユーザ端末２０は、例えばコンピュータにより実現される。図２は、本実施形態におけるコンピュータ５００のハードウェア構成の一例を示すブロック図である。

[0040] 図２に示されているように、コンピュータ５００は、ＣＰＵ（Central Processing Unit）５０１、ＲＯＭ（Read Only Memory）５０２、ＲＡＭ（Random Access Memory）５０３、ＨＤＤ（Hard Disk Drive）５０４、入力装置５０５、表示装置５０６、通信Ｉ／Ｆ（Interface）５０７及び外部Ｉ／Ｆ５０８を有する。ＣＰＵ５０１、ＲＯＭ５０２及びＲＡＭ５０３は、いわゆるコンピュータを形成する。コンピュータ５００の各ハードウェアは、バスライ

ン５０９を介して相互に接続されている。なお、入力装置５０５及び表示装置５０６は外部Ｉ／Ｆ５０８に接続して利用する形態であってもよい。

[0041] ＣＰＵ５０１は、ＲＯＭ５０２又はＨＤＤ５０４等の記憶装置からプログラムやデータをＲＡＭ５０３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。

[0042] ＲＯＭ５０２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。ＲＯＭ５０２は、ＨＤＤ５０４にインストールされている各種プログラムをＣＰＵ５０１が実行するために必要な各種プログラム、データ等を格納する主記憶装置として機能する。具体的には、ＲＯＭ５０２には、コンピュータ５００の起動時に実行されるＢＩＯＳ（Basic Input/Output System）、ＥＦＩ（Extensible Firmware Interface）等のブートプログラムや、ＯＳ（Operating System）設定、ネットワーク設定等のデータが格納されている。

[0043] ＲＡＭ５０３は、電源を切るとプログラムやデータが消去される揮発性の半導体メモリ（記憶装置）の一例である。ＲＡＭ５０３は、例えば、ＤＲＡＭ（Dynamic Random Access Memory）やＳＲＡＭ（Static Random Access Memory）等である。ＲＡＭ５０３は、ＨＤＤ５０４にインストールされている各種プログラムがＣＰＵ５０１によって実行される際に展開される作業領域を提供する。

[0044] ＨＤＤ５０４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。ＨＤＤ５０４に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等がある。なお、コンピュータ５００はＨＤＤ５０４に替えて、記憶媒体としてフラッシュメモリを用いる記憶装置（例えばＳＳＤ：Solid State Drive等）を利用するものであってもよい。

[0045] 入力装置５０５は、ユーザが各種信号を入力するため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、音声等の音データを入力する

マイクロホン等である。

[0046] 表示装置５０６は、画面を表示する液晶や有機ＥＬ（Electro-Luminescence）等のディスプレイ、音声等の音データを出力するスピーカ等で構成されている。

[0047] 通信Ｉ／Ｆ５０７は、通信ネットワークに接続し、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。

[0048] 外部Ｉ／Ｆ５０８は、外部装置とのインタフェースである。外部装置には、ドライブ装置５１０等がある。

[0049] ドライブ装置５１０は、記録媒体５１１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５１１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、電気的あるいは磁気的に記録する媒体が含まれる。また、記録媒体５１１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。これにより、コンピュータ５００は外部Ｉ／Ｆ５０８を介して記録媒体５１１の読み取り及び／又は書き込みを行うことができる。

[0050] なお、ＨＤＤ５０４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５１１が外部Ｉ／Ｆ５０８に接続されたドライブ装置５１０にセットされ、記録媒体５１１に記録された各種プログラムがドライブ装置５１０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、ＨＤＤ５０４にインストールされる各種プログラムは、通信Ｉ／Ｆ５０７を介して、通信ネットワークとは異なる他のネットワークよりダウンロードされることでインストールされてもよい。

[0051] ＜設計支援システムの機能構成＞

本実施形態における設計支援システムの機能構成を、図３を参照しながら説明する。図３は本実施形態における設計支援システム１の機能構成の一例を示すブロック図である。

[0052] ≪特性予測装置の機能構成≫

図３に示されているように、本実施形態における特性予測装置１０は、モ

デル記憶部１００、基準設計決定部１０１、周辺設計生成部１０２、特性予測部１０３及び可視化部１０４を備える。

[0053] 基準設計決定部１０１、周辺設計生成部１０２、特性予測部１０３及び可視化部１０４は、図２に示されているＨＤＤ５０４からＲＡＭ５０３上に展開されたプログラムがＣＰＵ５０１に実行させる処理によって実現される。モデル記憶部１００は、図２に示されているＨＤＤ５０４によって実現される。

[0054] モデル記憶部１００には、学習済みの特性予測モデルが記憶されている。特性予測モデルは、目的物質の設計条件における各設計値を説明変数とし、目的物質の特性値を目的変数とする機械学習モデルである。機械学習モデルの一例は、回帰モデルである。機械学習モデルの構造は、例えば、ランダムフォレスト又はディープニューラルネットワーク等である。

[0055] 基準設計決定部１０１は、ユーザの操作に応じて選択された設計条件をユーザ端末２０から受信する。基準設計決定部１０１は、受信した設計条件を基準設計条件として決定する。

[0056] 周辺設計生成部１０２は、基準設計条件に対して１以上の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する。周辺設計生成部１０２は、予め設計値毎に設定されている変動条件に従って、基準設計条件の設計値を変動させることで、周辺設計条件を生成する。変動条件は、ユーザの操作に応じて任意に設定可能としてもよい。

[0057] 特性予測部１０３は、各周辺設計条件について、１以上の特性値を予測する。特性予測部１０３は、モデル記憶部１００に記憶されている学習済みの特性予測モデルに、周辺設計条件の設計値を入力することで、１以上の特性値を計算する。

[0058] 可視化部１０４は、目的物質の設計値と特性値との関係を可視化するための可視化情報を生成する。可視化部１０４は、生成した可視化情報をユーザ端末２０に送信する。可視化部１０４は、設計値又は特性値を軸とする平面に、特性値に応じた色表現で表されたシンボルを配置することで、設計値と

特性値との関係を可視化する。本実施形態において、平面の軸に表す設計値又は特性値、及び色表現で表す特性値は、任意に選択することができる。

[0059] ≪ユーザ端末２０の機能構成≫

図３に示されているように、本実施形態におけるユーザ端末２０は、参照設計入力部２０１、基準設計入力部２０２及び結果表示部２０３を備える。

[0060] 参照設計入力部２０１、基準設計入力部２０２及び結果表示部２０３は、図２に示されているＨＤＤ５０４からＲＡＭ５０３上に展開されたプログラムがＣＰＵ５０１に実行させる処理によって実現される。

[0061] 参照設計入力部２０１は、ユーザの操作に応じて、参照設計データの入力を受け付ける。参照設計データは、基準設計条件の候補とする参照設計条件を表すデータである。参照設計データに含まれる参照設計条件は、１つであってもよいし、複数であってもよい。参照設計入力部２０１は、受け付けた参照設計データを表示装置５０６に表示する。

[0062] 基準設計入力部２０２は、ユーザの操作に応じて、基準設計条件の選択を受け付ける。基準設計入力部２０２は、初めて基準設計条件を選択するときには、参照設計入力部２０１が受け付けた参照設計データから基準設計条件を選択する。基準設計入力部２０２は、２回目以降に基準設計条件を選択するときには、結果表示部２０３が表示する予測結果に含まれる周辺設計条件から基準設計条件を選択する。

[0063] 結果表示部２０３は、特性予測装置１０から可視化情報を受信する。結果表示部２０３は、受信した可視化情報に基づいて、周辺設計条件における設計値と特性値との関係を表示装置５０６に表示する。

[0064] ＜設計支援システムの処理手順＞

本実施形態における設計支援システム１が実行する特性予測方法の処理手順を、図４から図１７を参照しながら説明する。図４は、本実施形態における特性予測方法の処理手順の一例を示すフローチャートである。

[0065] ステップＳ１において、ユーザ端末２０が備える参照設計入力部２０１は、ユーザの操作に応じて、参照設計データの入力を受け付ける。次に、参照

設計入力部２０１は、受け付けた参照設計データを表示装置５０６に表示する。

[0066] 図５は、参照設計データの一例を示す図である。図５に示されているように、参照設計データは、目的物質の設計条件を表す参照設計条件を複数含む。図５の例では、目的物質を製造するために用いられる材料物質の配合量を設計条件として用いている。

[0067] 参照設計データの入力及び表示は、表示装置５０６に表示される参照設計入力画面において行われる。参照設計入力画面は、参照設計データの入力を受け付け、参照設計データに含まれる参照設計条件を表示するための画面である。

[0068] ≪参照設計入力画面≫

本実施形態における参照設計入力画面について、図６を参照しながら説明する。図６は、本実施形態における参照設計入力画面の一例を示す図である。

[0069] 図６に示されているように、本実施形態における参照設計入力画面１０００は、ファイル入力欄１０１０、ファイル参照ボタン１０１１、確定ボタン１０１２、クリアボタン１０１３及び参照設計条件表示欄１０２０を含む。

[0070] ユーザは、ファイル入力欄１０１０に参照設計データをドラッグアンドドロップすることで、参照設計データを入力することができる。ユーザは、ファイル参照ボタン１０１１を押下し、表示されたファイル選択画面で参照設計データを選択することで、参照設計データを入力してもよい。

[0071] ユーザにより参照設計データが入力されると、参照設計データに含まれる参照設計データの内容が、参照設計条件表示欄１０２０に選択可能に表示される。図６に示した参照設計入力画面１０００では、参照設計条件表示欄１０２０に参照設計条件がテーブル形式で表示され、各参照設計条件には選択欄１０２１が表示されている。

[0072] ユーザによりいずれかの参照設計条件に対応する選択欄１０２１が選択され、確定ボタン１０１２が押下されると、選択欄１０２１において選択され

ている参照設計条件が基準設計条件として選択される。ユーザによりクリアボタン１０１３が押下されると、参照設計条件表示欄１０２０に表示された参照設計条件が消去される。

[0073] 図４に戻って説明する。ステップＳ２において、ユーザ端末２０が備える基準設計入力部２０２は、ユーザの操作に応じて、基準設計条件の選択を受け付ける。基準設計入力部２０２は、選択された基準設計条件を特性予測装置１０に送信する。

[0074] 特性予測装置１０では、基準設計決定部１０１が、基準設計条件をユーザ端末２０から受信する。基準設計決定部１０１は、受信した基準設計条件を周辺設計生成部１０２に送る。

[0075] ステップＳ３において、特性予測装置１０が備える周辺設計生成部１０２は、基準設計条件を基準設計決定部１０１から受け取る。次に、周辺設計生成部１０２は、ユーザの操作に応じて、変動対象とする１以上の設計値及び予測対象とする１以上の特性値の選択を受け付ける。設計値及び特性値の選択は、表示装置５０６に表示される特性予測画面において行われる。

[0076] ステップＳ４において、特性予測装置１０が備える周辺設計生成部１０２は、基準設計条件に対して、変動対象とする１以上の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する。周辺設計生成部１０２は、生成した複数の周辺設計条件を特性予測部１０３に送る。

[0077] ≪周辺設計生成処理≫

本実施形態における周辺設計生成処理（図４のステップＳ４）について、図７を参照しながら詳細に説明する。図７は、本実施形態における周辺設計生成処理の手順の一例を示すフローチャートである。

[0078] ステップＳ４－１において、周辺設計生成部１０２は、設計条件の各設計値に対する変動条件を決定する。変動条件は、予め設計値毎に設定されていてもよいし、ユーザの操作に応じて任意に設定されてもよい。本実施形態における変動条件は、上限値、下限値及び変動幅等である。すなわち、変動条件は、変動対象とする設計値を、所定の下限値以上かつ所定の上限値以下の

範囲において、所定の変動幅単位で変動させることを表している。

[0079] ステップＳ４－２において、周辺設計生成部１０２は、変動対象として選択された１以上の設計値から変動させる設計値（以下、「変動設計値」とも呼ぶ）を選択する。変動対象とする設計値から変動設計値を選択する基準は任意である。例えば、設計値の名称、変動対象として選択された順番等、どのようなものでもよい。

[0080] ステップＳ４－３において、周辺設計生成部１０２は、基準設計条件に対して、変動設計値を変動条件に従って変動させることで、周辺設計条件を生成する。このとき、変動設計値以外の設計値は固定される。すなわち、基準設計条件とは変動設計値のみが異なる複数の周辺設計条件が生成される。

[0081] 周辺設計生成部１０２は、すでに生成された周辺設計条件があれば、生成済みの周辺設計条件それぞれに対しても、変動設計値を変動条件に従って変動させることで、周辺設計条件を生成する。

[0082] 図８は、基準設計条件に対して１の設計値を変動させた周辺設計条件の一例を示す図である。図８の例は、図５に示した参照設計条件（Ｎｏ．１）が基準設計条件として選択され、設計値の一例である「添加剤Ａの配合量」が変動設計値として選択された例である。図８に示されているように、複数の周辺設計条件（Ｎｏ．１－１～１－５）は、基準設計条件（Ｎｏ．１）に対して、添加剤Ａの配合量のみが変動し、他の設計値は固定されている。

[0083] 図７に戻って説明する。ステップＳ４－４において、周辺設計生成部１０２は、変動対象として選択された設計値のうち、変動設計値として選択されていない（言い替えると、周辺設計条件を生成していない）設計値があるか否かを判定する。変動設計値として選択されていない設計値がある場合（ＹＥＳ）、周辺設計生成部１０２は、ステップＳ４－２に処理を戻す。すべての設計値を変動設計値として選択済みである場合（ＮＯ）、周辺設計生成部１０２は、ステップＳ４－５に処理を進める。

[0084] 再度実行されるステップＳ４－２では、周辺設計生成部１０２は、変動対象として選択された設計値のうち、変動設計値として選択されていない設計

値から、新たな変動設計値を選択する。その後、選択された新たな変動設計値に対して、ステップＳ４－３からステップＳ４－４が再度実行される。

[0085] 図９は、基準設計条件に対して、２の設計値を変動させた周辺設計条件の一例を示す図である。図９の例は、図５に示した参照設計条件（Ｎｏ．１）が基準設計条件として選択され、設計値の一例である「添加剤Ａの配合量」及び「添加剤Ｂの配合量」が変動設計値として選択された例である。図９に示されているように、複数の周辺設計条件（Ｎｏ．１－１－１～１－３－５）は、基準設計条件（Ｎｏ．１）に対して、添加剤Ａの配合量のみが変動した周辺設計条件（Ｎｏ．１－１－１～１－１－５）、添加剤Ｂの配合量のみが変動した周辺設計条件（Ｎｏ．１－２－１～１－２－５）、又は添加剤Ａの配合量及び添加剤Ｂの配合量が変動した周辺設計条件（Ｎｏ．１－３－１～１－３－５）を含む。

[0086] 図７に戻って説明する。ステップＳ４－５において、周辺設計生成部１０２は、ステップＳ４－３において生成された周辺設計条件を特性予測部１０３に送る。なお、ステップＳ４－３が複数回実行された場合、各回で生成された周辺設計条件すべてを特性予測部１０３に送る。

[0087] 図４に戻って説明する。ステップＳ５において、特性予測装置１０が備える特性予測部１０３は、複数の周辺設計条件を周辺設計生成部１０２から受け取る。次に、特性予測部１０３は、モデル記憶部１００から学習済みの特性予測モデルを読み出す。

[0088] 続いて、特性予測部１０３は、各周辺設計条件について、予測対象とする１以上の特性値を予測する。特性予測部１０３は、各周辺設計条件の設計値を、学習済みの特性予測モデルに入力することで、１以上の特性値を計算する。そして、特性予測部１０３は、予測結果を可視化部１０４に送る。予測結果は、周辺設計条件と当該周辺設計条件において予測された特性値とを含む。

[0089] 図１０は、図８に示した各周辺設計条件における２の特性値を予測した予測結果の一例を示す図である。図１０に示されているように、各周辺設計条

件（Ｎｏ．１－１～１－５）について、特性値の一例である「材料物性１」及び「材料物性２」が予測されている。

[0090] 図１１は、図９に示した各周辺設計条件における１の特性値を予測した予測結果の一例を示す図である。図１１に示されているように、各周辺設計条件（Ｎｏ．１－１－１～１－３－５）について、特性値の一例である「材料物性１」が予測されている。

[0091] 図１２は、図９に示した各周辺設計条件における２の特性値を予測した予測結果の一例を示す図である。図１２に示されているように、各周辺設計条件（Ｎｏ．１－１－１～１－３－５）について、特性値の一例である「材料物性１」及び「材料物性２」が予測されている。

[0092] 図４に戻って説明する。ステップＳ６において、特性予測装置１０が備える可視化部１０４は、予測結果を特性予測部１０３から受け取る。次に、可視化部１０４は、目的物質の設計値と特性値との関係を可視化するための可視化情報を生成する。続いて、可視化部１０４は、可視化情報をユーザ端末２０に送信する。

[0093] ユーザ端末２０では、結果表示部２０３が、可視化情報を特性予測装置１０から受信する。結果表示部２０３は、可視化情報に基づいて、目的物質の設計値と特性値との関係を可視化する。具体的には、結果表示部２０３は、表示装置５０６に表示される特性予測画面に、目的物質の設計値と特性値との関係を表示する。

[0094] ≪特性予測画面の第１の例≫

図１３は、本実施形態における特性予測画面の第１の例を示す図である。特性予測画面の第１の例は、基準設計条件に対して、１の設計値を変動させた周辺設計条件における２の特性値を予測したときの特性予測画面である。

[0095] 図１３に示されているように、第１の例における特性予測画面１１００は、設計値選択欄１１１０、軸設定欄１１２０及びグラフ表示欄１１３０を有する。

[0096] 設計値選択欄１１１０は、第１の選択欄１１１１及び第２の選択欄１１１

２を有する。第１の選択欄１１１１及び第２の選択欄１１１２には、設計条件のうち変動可能な設計値が選択可能に表示される。本実施形態における特性予測画面では、第１の選択欄１１１１及び第２の選択欄１１１２は、各設計値の一覧がラジオボタンで排他的に選択可能に表示される。第１の選択欄１１１１及び第２の選択欄１１１２は、例えば、変動可能な設計値を選択肢とするドロップダウンリスト又はリストボックス等で表示されてもよい。

[0097] 軸設定欄１１２０は、Ｘ軸設定欄１１２１、Ｙ軸設定欄１１２２、Ｚ軸設定欄１１２３及び軸追加ボタン１１２４を有する。Ｘ軸設定欄１１２１には、設計値選択欄１１１０で選択された設計値が選択可能に表示される。Ｙ軸設定欄１１２２には、設計値選択欄１１１０で選択された設計値又は予測可能な特性値が選択可能に表示される。Ｚ軸設定欄１１２３には、予測可能な特性値が選択可能に表示される。ユーザが軸追加ボタン１１２４を押下すると、Ｚ軸設定欄１１２３が追加される。

[0098] 本実施形態における特性予測画面では、Ｘ軸設定欄１１２１、Ｙ軸設定欄１１２２及びＺ軸設定欄１１２３は、選択された設計値又は予測可能な特性値がドロップダウンリストで選択可能に表示される。Ｘ軸設定欄１１２１、Ｙ軸設定欄１１２２及びＺ軸設定欄１１２３は、例えば、選択された設計値又は予測可能な特性値を選択肢とするリストボックス等で表示されてもよい。

[0099] 図１３に示されているように、特性予測画面の第１の例は、１の設計値を変動させた周辺設計条件において、２の特性値を予測した場合の表示例である。図１３の例では、Ｘ軸は設計値の一例である「添加剤Ａの配合量」であり、Ｙ軸は第１の特性値の一例である「材料物性１」であり、Ｚ軸は第２の特性値の一例である「材料物性２」である。

[0100] グラフ表示欄１１３０は、Ｘ軸１１３１及びＹ軸１１３２を有する平面と、カラーバーで表されるＺ軸１１３３とを有する。グラフ表示欄１１３０には、各周辺設計条件に関する予測結果に対応するシンボルが、Ｘ軸１１３１及びＹ軸１１３２に対応する座標に、Ｚ軸１１３３の値に対応する色表現で

配置される。

[0101] Ｚ軸の値を表す色表現は、カラーでもよいし、グレースケールでもよいし、二値で表現されたパターンでもよい。シンボルをカラーで表す場合、色相、明度及び彩度の少なくとも１つを特性値に応じて変化させればよい。例えば、色相環において１８０度乖離した２つの色を特性値の最小値及び最大値に対応させ、予測された特性値に応じた角度の色相で各シンボルを表現してもよい。シンボルをグレースケールで表す場合、輝度を特性値に応じて変化させればよい。例えば、輝度の最小値（０）及び最大値（２５５）を特性値の最小値及び最大値に対応させ、予測された特性値に応じた輝度で各シンボルを表現すればよい。

[0102] グラフ表示欄１１３０では、基準設計条件と周辺設計条件とが区別可能に表示される。本実施形態における特性予測画面では、ＸＹ平面に配置される各シンボルのうち、基準設計条件に対応するシンボルは、外周が太線で表示されている。基準設計条件と周辺設計条件との区別の方法は、これに限定されず、シンボルの色の違い、形状の違い、大きさの違い等、ユーザが視認可能な方法であれば、どのような方法でもよい。

[0103] 特性予測画面の第１の例では、変動させる設計値が１つであるため、各周辺設計条件における予測結果に対応するシンボルが、ＸＹ平面上で折れ線グラフを描くように配置される。ユーザは、各シンボルの座標及び色表現を俯瞰することで、設計値を変動させたことによる２の特性値の変化傾向を把握することができる。

[0104] ≪特性予測画面の第２の例≫

図１４は、本実施形態における特性予測画面の第２の例を示す図である。特性予測画面の第２の例は、基準設計条件に対して、２の設計値を変動させた周辺設計条件における１の特性値を予測したときの特性予測画面である。

[0105] 図１４に示されているように、特性予測画面の第２の例は、２の設計値を変動させた周辺設計条件において、１の特性値を予測した場合の表示例である。図１４の例では、Ｘ軸１１３１は第１の設計値の一例である「添加剤Ａ

の配合量」であり、Ｙ軸１１３２は第２の設計値の一例である「添加剤Ｂの配合量」であり、Ｚ軸１１３３は特性値の一例である「材料物性１」である。

[0106] 特性予測画面の第２の例では、変動させる設計値が２つであるため、各周辺設計条件における予測結果に対応するシンボルが、ＸＹ平面全体に配置される。ユーザは、各シンボルの座標及び色表現を俯瞰することで、２の設計値の組み合わせに対する１の特性値の変化傾向を把握することができる。

[0107] ≪特性予測画面の第３の例≫

図１５は、本実施形態における特性予測画面の第３の例を示す図である。特性予測画面の第３の例は、基準設計条件に対して、２の設計値を変動させた周辺設計条件における２の特性値を予測したときの特性予測画面である。

[0108] 図１５に示されているように、特性予測画面の第３の例は、２の設計値を変動させた周辺設計条件において、２の特性値を予測した場合の表示例である。図１５の例では、Ｘ軸１１３１は第１の設計値の一例である「添加剤Ａの配合量」であり、Ｙ軸１１３２は第２の設計値の一例である「添加剤Ｂの配合量」であり、Ｚ１軸１１３３－１は第１の特性値の一例である「材料物性１」であり、Ｚ２軸１１３３－２は第２の特性値の一例である「材料物性２」である。

[0109] なお、Ｚ２軸は、軸追加ボタン１１２４を押下することで表示される。このとき、第１の例及び第２の例におけるＺ軸は、Ｚ１軸となる。３以上の特性値を予測するときには、さらに軸追加ボタン１１２４を押下することで、Ｚ３軸、Ｚ４軸…を追加すればよい。

[0110] 特性予測画面の第３の例では、変動させる設計値が２つであるため、各周辺設計条件における予測結果に対応するシンボルが、ＸＹ平面全体に配置される。各シンボルは、Ｚ１軸に対応する色表現で表された領域と、Ｚ２軸に対応する色表現で表された領域とが結合した図形で構成される。３以上の特性値を予測するときには、各特性値に対応する色表現で表された領域が結合したシンボルをＸＹ平面に配置すればよい。ユーザは、各シンボルの座標及

びシンボルを構成する各領域の色表現を俯瞰することで、２の設計値の組み合わせに対する２の特性値の変化傾向を把握することができる。

[0111] 図１６は、第３の例におけるシンボルの一例を示す図である。第３の例におけるシンボルは、特性値それぞれに応じた色表現で表された領域が結合したシンボルである。第３の例におけるシンボルは、各領域が同一形状で形成され、点対称に配置されていると好適である。

[0112] 図１６（Ａ）～（Ｂ）は、２つの予測値を表示するシンボルの一例である。図１６（Ａ）に示したシンボルは、各領域が三角形で形成され、左右に向かい合わせて配置されている。図１６（Ｂ）に示したシンボルは、各領域が四角形（台形）で形成され、左右に向かい合わせて配置されている。

[0113] 図１６（Ｃ）は、３つの予測値を表示するシンボルの一例である。図１６（Ｃ）に示したシンボルは、各領域が三角形で形成され、隣り合う三角形との中心線のなす角が１２０°となるように配置されている。図１６（Ｄ）は、４つの予測値を表示するシンボルの一例である。図１６（Ｄ）に示したシンボルは、各領域が三角形で形成され、上下左右に組み合わせて配置されている。

[0114] 第３の例におけるシンボルは、図１６に示した例に限定されない。第３の例におけるシンボルは、各特性値に対応する領域の色及び形状のバランスが容易に把握できる形態で表されていればよい。

[0115] 図４に戻って説明する。ステップＳ７において、特性予測装置１０が備える可視化部１０４は、ユーザによる探索が終了したか否かを判定する。探索が終了した場合（ＹＥＳ）、可視化部１０４は、特性予測方法を終了する。探索が終了していない場合（ＮＯ）、可視化部１０４は、ステップＳ２に処理を戻す。

[0116] 探索が終了したか否かの判定は、可視化部１０４が表示する予測結果に対するユーザの操作があったか否かにより行う。ユーザが予測結果に対して新たな基準設計条件を選択する操作を行った場合、可視化部１０４は、探索が終了していないと判定する。ユーザが予測結果に対して新たな基準設計条件

を選択する操作を行わない場合、可視化部１０４は、探索が終了したと判定する。

[0117] 再度実行されるステップＳ２では、基準設計決定部１０１が、ユーザの操作に応じて、新たな基準設計条件を決定する。その後、決定された新たな基準設計条件に対して、ステップＳ３からステップＳ７が再度実行される。

[0118] 図１７は、予測結果から新たな基準設計条件を選択し、新たな基準設計条件に基づいて２の特性値を予測した予測結果の一例を示す図である。図１７の例は、予測結果から周辺設計条件（Ｎｏ．１－２３）が新たな基準設計条件として選択され、設計値の一例である「添加剤Ｃの配合量」が変動設計値として選択された例である。図１７に示されているように、複数の周辺設計条件（Ｎｏ．１－２３－１～１－２３－５）は、基準設計条件（Ｎｏ．１－２３）に対して、添加剤Ｃの配合量のみが変動し、他の設計値は固定されている。また、各周辺設計条件（Ｎｏ．１－２３－１～１－２３－５）について、特性値の一例である「材料物性１」及び「材料物性２」が予測されている。

[0119] ［変形例］

実施形態における設計支援システム１では、予測結果に含まれる周辺設計条件から新たな基準設計条件を選択する構成を説明した。変形例における設計支援システム１では、予測結果に含まれる周辺設計条件の各設計値を編集することで新たな基準設計条件を選択する構成を説明する。

[0120] 本変形例における設計支援システム１では、周辺設計条件の各設計値を編集するための設計条件編集画面をユーザ端末２０の表示装置５０６に表示する。設計条件編集画面は、編集対象とする周辺設計条件を特定して表示される。例えば、特性予測画面１１００のグラフ表示欄１１３０に表示される各シンボルを選択することで、当該シンボルに対応する周辺設計条件の各設計値を編集するための設計条件編集画面が表示される。

[0121] ≪設計条件編集画面≫

本変形例における設計条件編集画面について、図１８を参照しながら説明

する。図１８は、本変形例における設計条件編集画面の一例を示す図である。

[0122] 図１８に示されているように、本変形例における設計条件編集画面１２００は、設計条件編集欄１２１０、確定ボタン１２１１及びキャンセルボタン１２１２を有する。設計条件編集欄１２１０には、編集対象とする周辺設計条件の各設計値が、編集可能な形態で表示される。本変形例における設計条件編集画面では、周辺設計条件の各設計値が表形式で表示され、各設計値を直接編集可能に表示される。

[0123] ユーザが設計条件編集欄１２１０において、いずれかの設計値を編集すると、確定ボタン１２１１が押下可能となる。ユーザが確定ボタン１２１１を押下すると、基準設計入力部２０２が、設計条件編集欄１２１０で編集された周辺設計条件を、新たな基本設計条件として受け付ける。ユーザがキャンセルボタン１２１２を押下すると、結果表示部２０３が、設計条件編集画面１２００を閉じる。

[0124] 新たな基準設計条件が選択された後の処理は、上記の実施形態における設計支援システム１と同様である。すなわち、新たな基準設計条件に対して１以上の設計値を変動させた周辺設計条件が生成され、各周辺設計条件と各周辺設計条件について予測された１以上の特性値とを含む予測結果が特性予測画面１１００に表示される。

[0125] ＜実施形態の効果＞

本実施形態における設計支援システムは、基準設計条件のうち２つの設計値を変動させた複数の周辺設計条件について１つの特性値を予測した場合、変動させた設計値を軸とする平面に、予測値に応じた色表現で表されたシンボルをプロットする。したがって、本実施形態における設計支援システムによれば、複数の設計値を変動させた場合であっても、特性値の変化傾向を容易に把握することができる。

[0126] 本実施形態における設計支援システムは、基準設計条件のうち１つの設計値を変動させた複数の周辺設計条件について２つの特性値を予測した場合、

変動させた設計値と一方の特性値とを軸とする平面に、他方の特性値に応じた色表現で表されたシンボルをプロットする。したがって、本実施形態における設計支援システムによれば、複数の特性値を予測した場合であっても、特性値の変化傾向を容易に把握することができる。

[0127] 本実施形態における設計支援システムは、基準設計条件のうち２つの設計値を変動させた複数の周辺設計条件について２つの特性値を予測した場合、変動させた２つの設計値を軸とする平面に、各特性値に応じた色表現で表された領域が結合したシンボルをプロットする。したがって、本実施形態における設計支援システムによれば、複数の設計値を変動させた設計条件について複数の特性値を予測した場合であっても、特性値の変化傾向を容易に把握することができる。

[0128] 本実施形態における設計支援システムは、表示された予測結果から所望の設計条件を選択し、選択された設計条件を新たな基準設計条件として、所望の設計値を変動させた周辺設計条件について所望の特性値を予測した予測結果を再表示することができる。したがって、本実施形態における設計支援システムによれば、良好な予測結果を得られた設計条件の周辺設計条件を繰り返し探索することができ、効率的に目的物質の設計条件を決定することができる。

[0129] ［補足］

上記で説明した実施形態の各機能は、一又は複数の処理回路によって実現することが可能である。ここで、本明細書における「処理回路」とは、電子回路により実装されるプロセッサのようにソフトウェアによって各機能を実行するようプログラミングされたプロセッサや、上記で説明した各機能を実行するよう設計されたＡＳＩＣ（Application Specific Integrated Circuit）、ＤＳＰ（Digital Signal Processor）、ＦＰＧＡ（Field Programmable Gate Array）や従来の回路モジュール等の機器を含むものとする。

[0130] 以上、本発明の実施の形態について詳述したが、本発明はこれらの実施形態に限定されるものではなく、特許請求の範囲に記載された本発明の要旨の

範囲内において、種々の変形又は変更が可能である。

[0131] 本願は、日本国特許庁に２０２２年７月２７日に出願された日本国特許出願２０２２－１１９６４４号の優先権を主張するものであり、そ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

[0132] １　設計支援システム

１０　特性予測装置

１０１　基準設計決定部

１０２　周辺設計生成部

１０３　特性予測部

１０４　可視化部

２０　ユーザ端末

２０１　参照設計入力部

２０２　基準設計入力部

２０３　結果表示部

請求の範囲

[請求項1] ２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定するように構成されている基準設計決定部と、

前記基準設計条件に対して、１の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成するように構成されている周辺設計生成部と、

前記周辺設計条件それぞれにおける２以上の特性値を予測するように構成されている特性予測部と、

前記設計値と第１の前記特性値とを軸とする平面に、第２の前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置するように構成されている可視化部と、

を備える特性予測装置。

[請求項2] ２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定するように構成されている基準設計決定部と、

前記基準設計条件に対して、２の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成するように構成されている周辺設計生成部と、

前記周辺設計条件それぞれにおける１以上の特性値を予測するように構成されている特性予測部と、

第１の前記設計値と第２の前記設計値とを軸とする平面に、前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置するように構成されている可視化部と、

を備える特性予測装置。

[請求項3] 請求項２に記載の特性予測装置であって、

前記特性予測部は、２以上の前記特性値を予測するように構成されており、

前記可視化部は、前記特性値それぞれに応じた色表現で表された領域が結合したシンボルを、前記周辺設計条件に対応する座標に配置す

るように構成されている、

特性予測装置。

[請求項4] 請求項３に記載の特性予測装置であって、

前記シンボルは、各領域が同一形状で形成され、点対称に配置されている、

特性予測装置。

[請求項5] 請求項１から４のいずれかに記載の特性予測装置であって、

前記基準設計決定部は、前記可視化部により表示された前記シンボルから選択された前記シンボルに対応する前記周辺設計条件を前記基準設計条件として決定するように構成されており、

前記可視化部は、前記基準設計条件が新たに選択されたとき、当該基準設計条件に基づいて生成された前記周辺設計条件に対応する前記シンボルを前記平面に再配置するように構成されている、

特性予測装置。

[請求項6] 請求項１から４のいずれかに記載の特性予測装置であって、

前記基準設計決定部は、前記可視化部により表示された前記シンボルに対応する前記周辺設計条件を編集することで前記基準設計条件を決定するように構成されており、

前記可視化部は、前記基準設計条件が新たに選択されたとき、当該基準設計条件に基づいて生成された前記周辺設計条件に対応する前記シンボルを前記平面に再配置するように構成されている、

特性予測装置。

[請求項7] 請求項１から６のいずれかに記載の特性予測装置であって、

前記周辺設計生成部は、前記設計値を所定の上限値と所定の下限値の範囲かつ所定の変動幅で変動させることで、前記周辺設計条件を生成するように構成されている、

特性予測装置。

[請求項8] 請求項１から７のいずれかに記載の特性予測装置であって、

前記特性予測部は、前記設計値を説明変数とし、前記特性値を目的変数とする機械学習モデルを用いて、前記特性値を予測するように構成されている、

特性予測装置。

[請求項9] コンピュータが、

２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定する手順と、

前記基準設計条件に対して、１の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する手順と、

前記周辺設計条件それぞれにおける２以上の特性値を予測する手順と、

前記設計値と第１の前記特性値とを軸とする平面に、第２の前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置する手順と、

を実行する特性予測方法。

[請求項10] コンピュータが、

２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定する手順と、

前記基準設計条件に対して、２の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する手順と、

前記周辺設計条件それぞれにおける１以上の特性値を予測する手順と、

第１の前記設計値と第２の前記設計値とを軸とする平面に、前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置する手順と、

を実行する特性予測方法。

[請求項11] コンピュータに、

２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を

表す基準設計条件を決定する手順と、

前記基準設計条件に対して、１の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する手順と、

前記周辺設計条件それぞれにおける２以上の特性値を予測する手順と、

前記設計値と第１の前記特性値とを軸とする平面に、第２の前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置する手順と、

を実行させるためのプログラム。

[請求項12] コンピュータに、

２以上の材料物質を用いて製造される目的物質における設計条件を表す基準設計条件を決定する手順と、

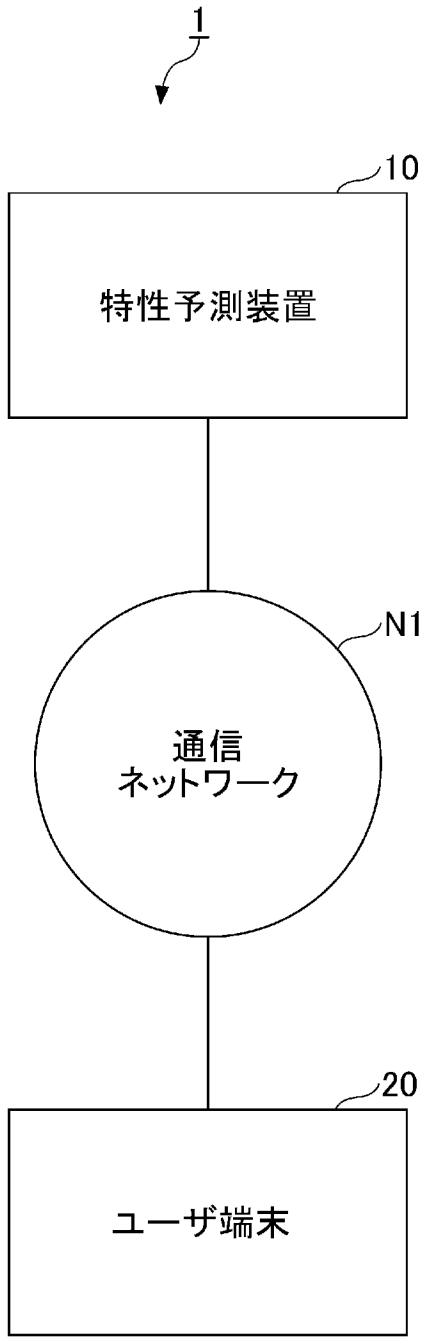
前記基準設計条件に対して、２の設計値を変動させた複数の周辺設計条件を生成する手順と、

前記周辺設計条件それぞれにおける１以上の特性値を予測する手順と、

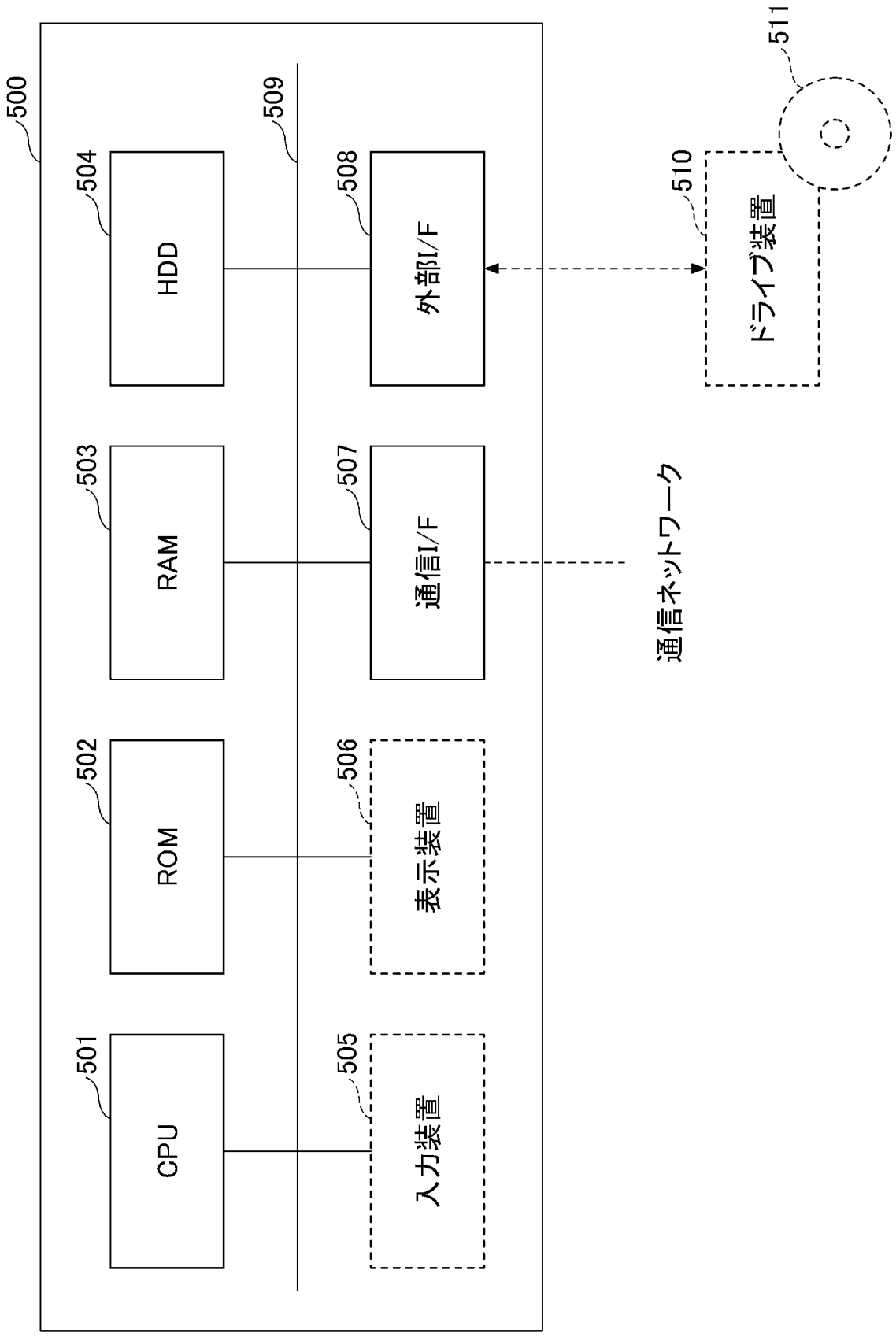
第１の前記設計値と第２の前記設計値とを軸とする平面に、前記特性値に応じた色表現で、前記周辺設計条件に対応するシンボルを配置する手順と、

を実行させるためのプログラム。

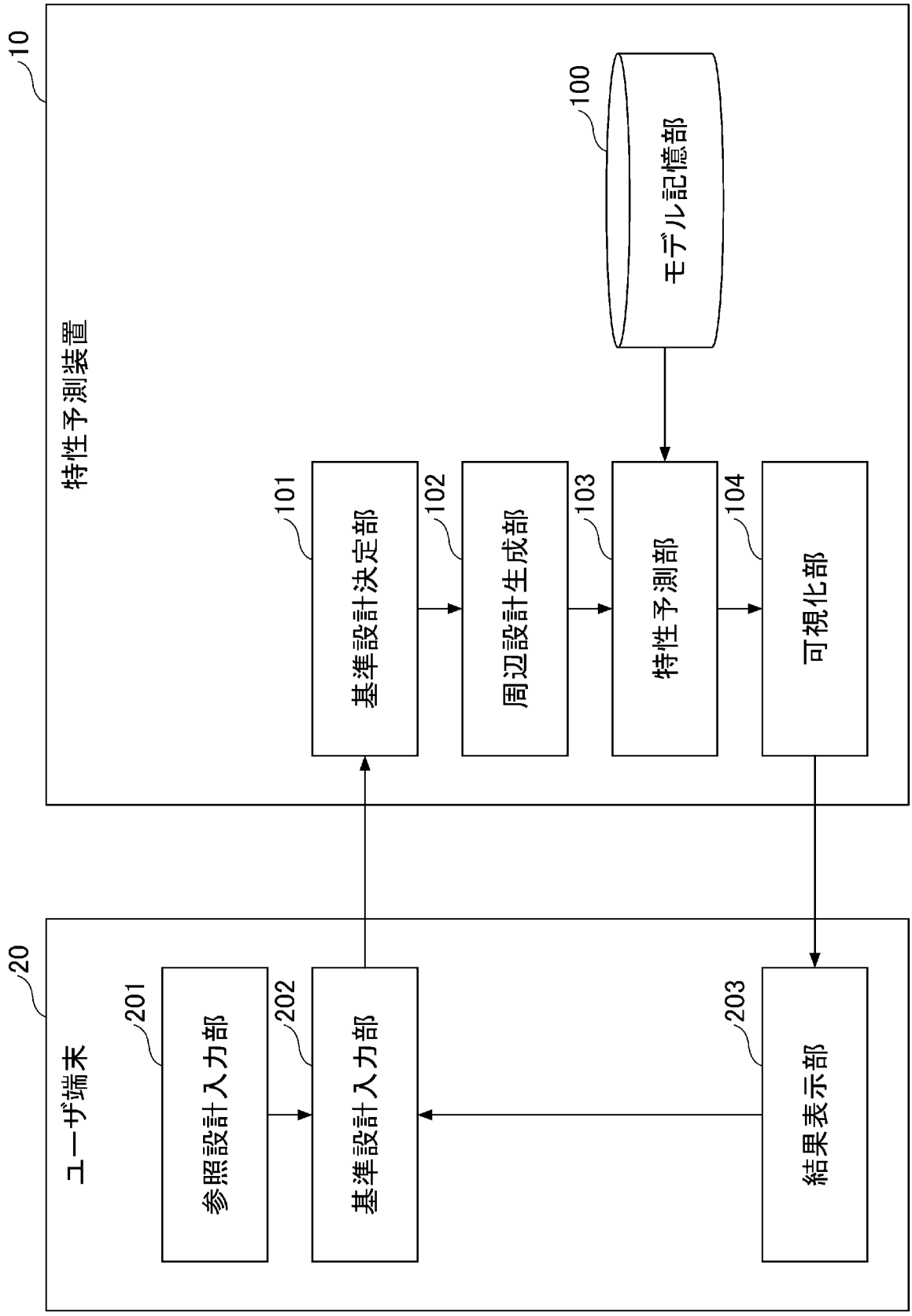
[図1]



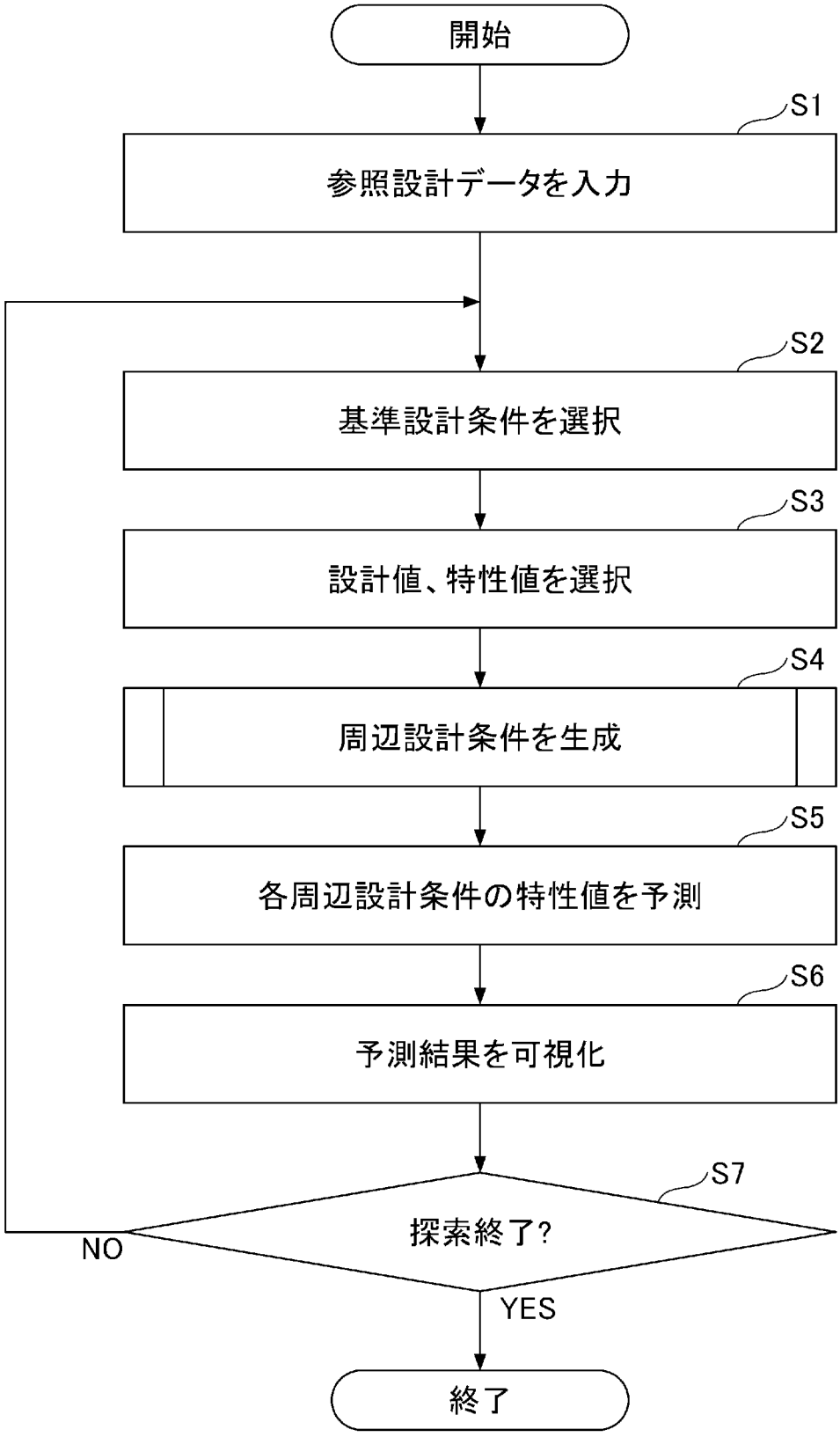
[図2]


500
501
CPU
502
ROM
503
RAM
504
HDD
505
入力装置
506
表示装置
507
通信I/F
508
外部I/F
509
510
ドライブ装置
511
通信ネットワーク

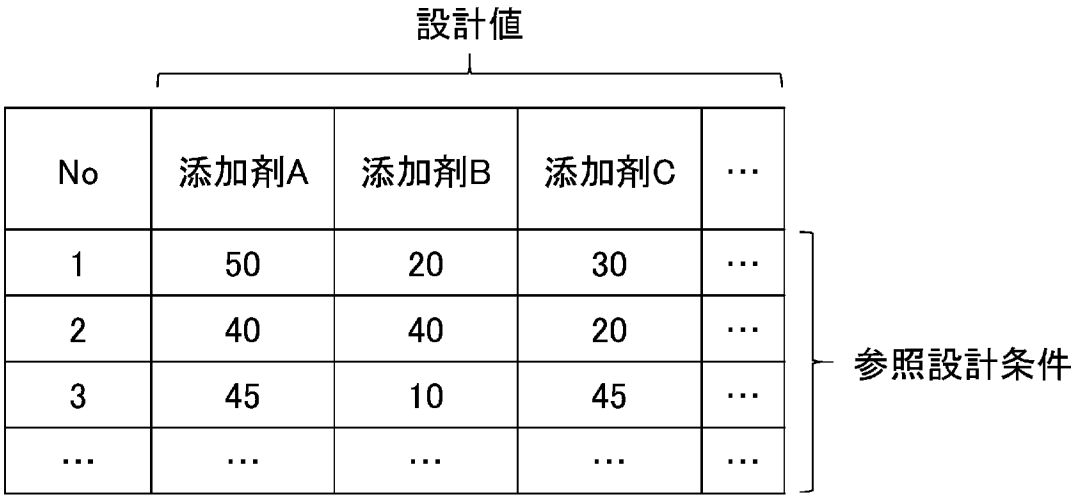
[図3]


10
特性予測装置
100
モデル記憶部
101
基準設計決定部
102
周辺設計生成部
103
特性予測部
104
可視化部
20
ユーザ端末
201
参照設計入力部
202
基準設計入力部
203
結果表示部

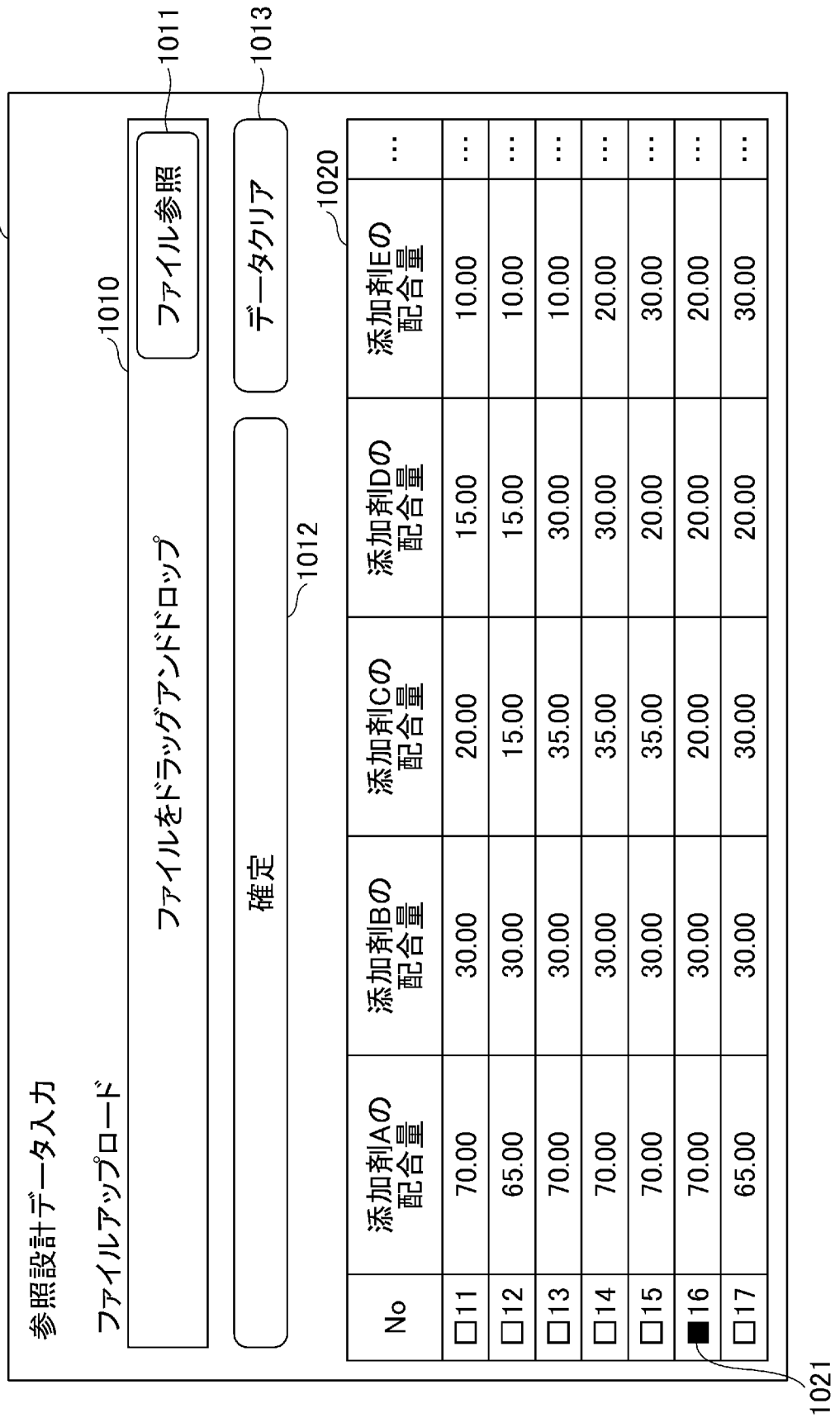
[図4]


開始
S1
参照設計データを入力
S2
基準設計条件を選択
S3
設計値、特性値を選択
S4
周辺設計条件を生成
S5
各周辺設計条件の特性値を予測
S6
予測結果を可視化
S7
探索終了?
NO
YES
終了

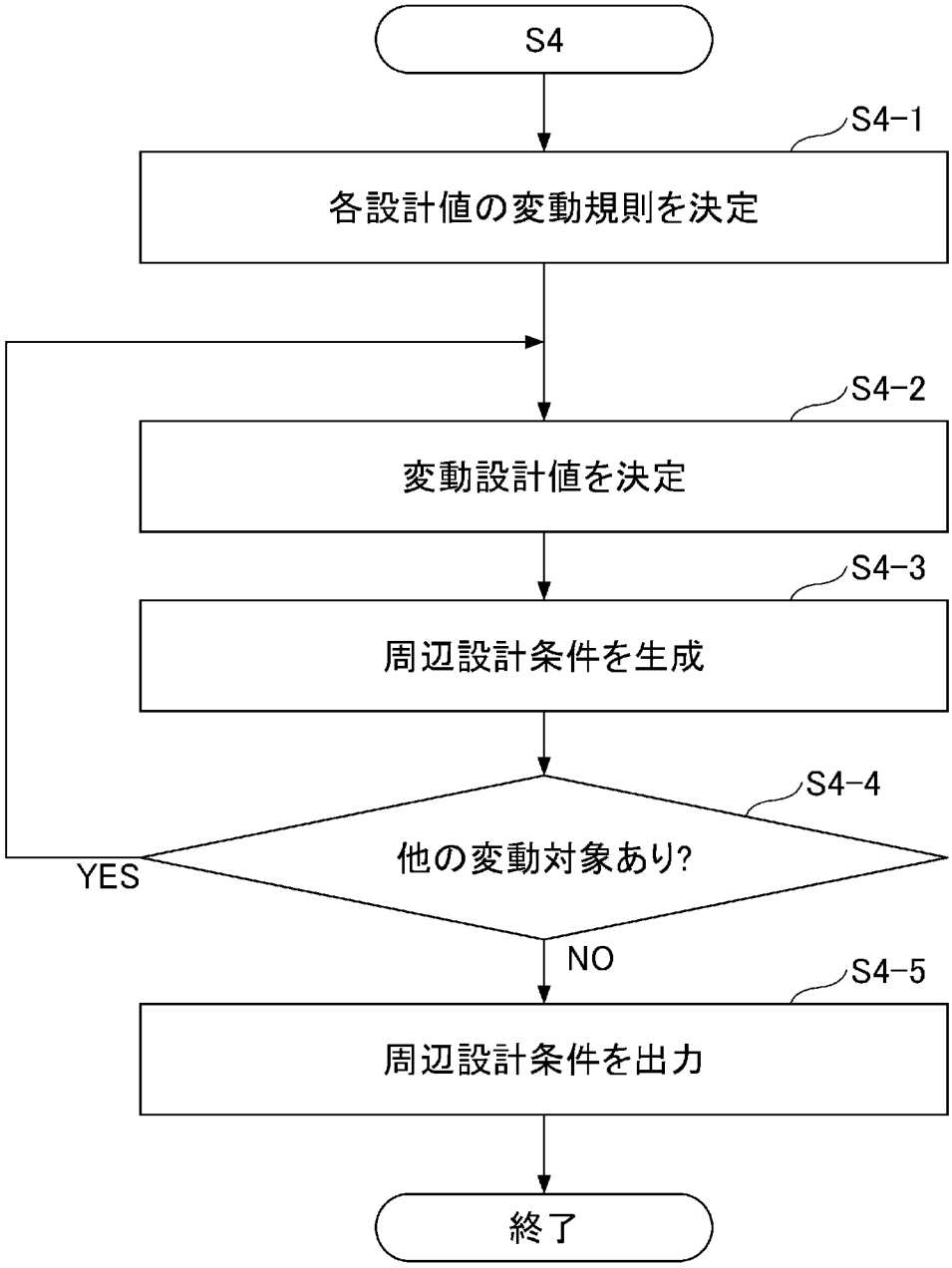
[図5]



[図6]


1000
参照設計データ入力
ファイルアップロード
ファイルをドラッグアンドドロップ
1010
ファイル参照
1011
確定
1012
データクリア
1013
1020
No
添加剤Aの配合量
添加剤Bの配合量
添加剤Cの配合量
添加剤Dの配合量
添加剤Eの配合量
□11 70.00 30.00 20.00 15.00 10.00 …
□12 65.00 30.00 15.00 15.00 10.00 …
□13 70.00 30.00 35.00 30.00 10.00 …
□14 70.00 30.00 35.00 30.00 20.00 …
□15 70.00 30.00 35.00 20.00 30.00 …
■16 70.00 30.00 20.00 20.00 20.00 …
□17 65.00 30.00 30.00 20.00 30.00 …
1021

[図7]


S4
S4-1
各設計値の変動規則を決定
S4-2
変動設計値を決定
S4-3
周辺設計条件を生成
S4-4
他の変動対象あり?
YES
NO
S4-5
周辺設計条件を出力
終了

[図8]

設計値

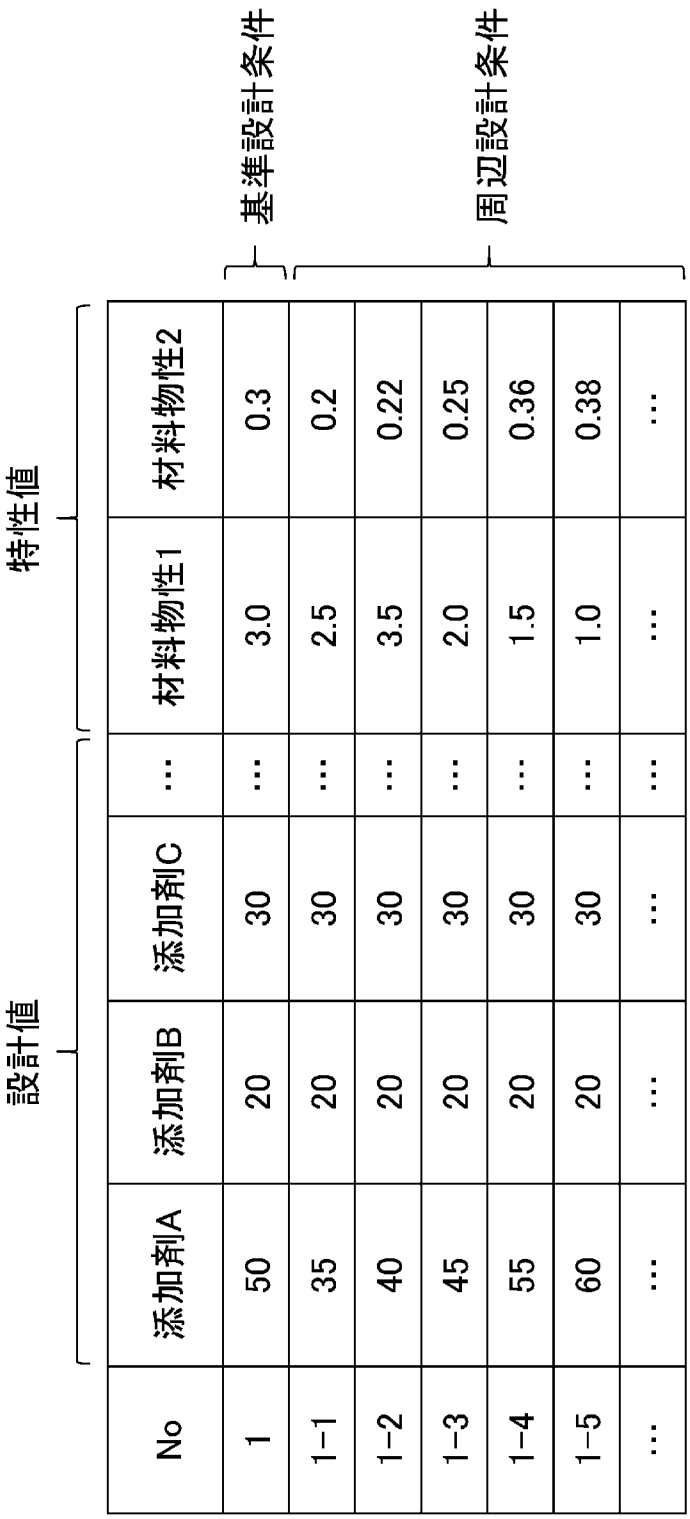
No	添加剤A	添加剤B	添加剤C	…	
1	50	20	30	…	基準設計条件
1−1	35	20	30	…	周辺設計条件
1−2	40	20	30	…	
1−3	45	20	30	…	
1−4	55	20	30	…	
1−5	60	20	30	…	
…	…	…	…	…	

[図9]

設計値

No	添加剤A	添加剤B	添加剤C	…	
1	50	20	30	…	基準設計条件
1-1-1	35	20	30	…	周辺設計条件
1-1-2	40	20	30	…	
1-1-3	45	20	30	…	
1-1-4	55	20	30	…	
1-1-5	60	20	30	…	
1-2-1	50	16	30	…	
1-2-2	50	18	30	…	
1-2-3	50	22	30	…	
1-2-4	50	24	30	…	
1-2-5	50	26	30	…	
1-3-1	35	16	30	…	
1-3-2	35	18	30	…	
1-3-3	35	22	30	…	
1-3-4	35	24	30	…	
1-3-5	35	26	30	…	
…	…	…	…	…	

[図10]

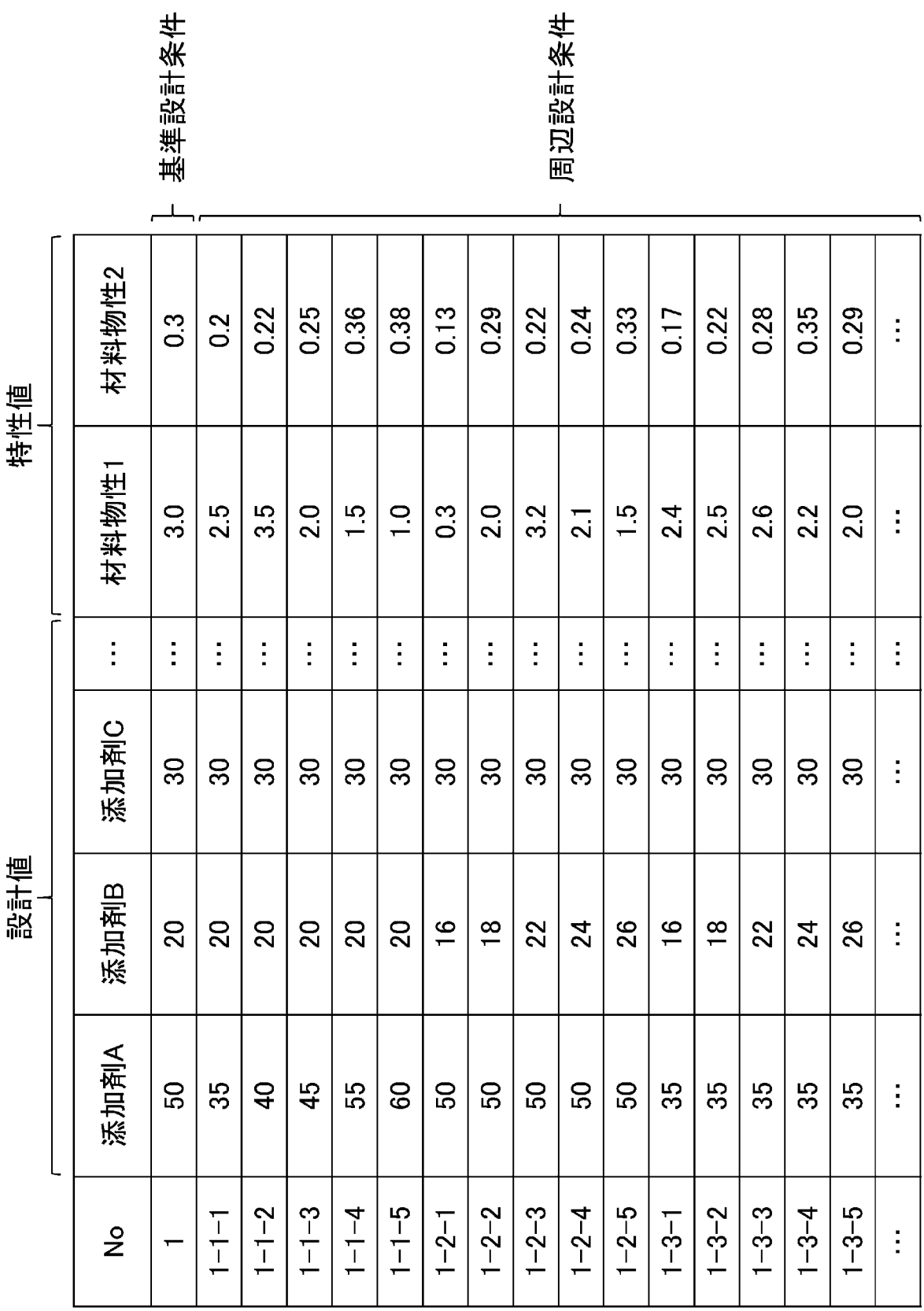


No	添加剤A	添加剤B	添加剤C	…	材料物性1	材料物性2
1	50	20	30	…	3.0	0.3
1-1	35	20	30	…	2.5	0.2
1-2	40	20	30	…	3.5	0.22
1-3	45	20	30	…	2.0	0.25
1-4	55	20	30	…	1.5	0.36
1-5	60	20	30	…	1.0	0.38
…	…	…	…	…	…	…

[図11]

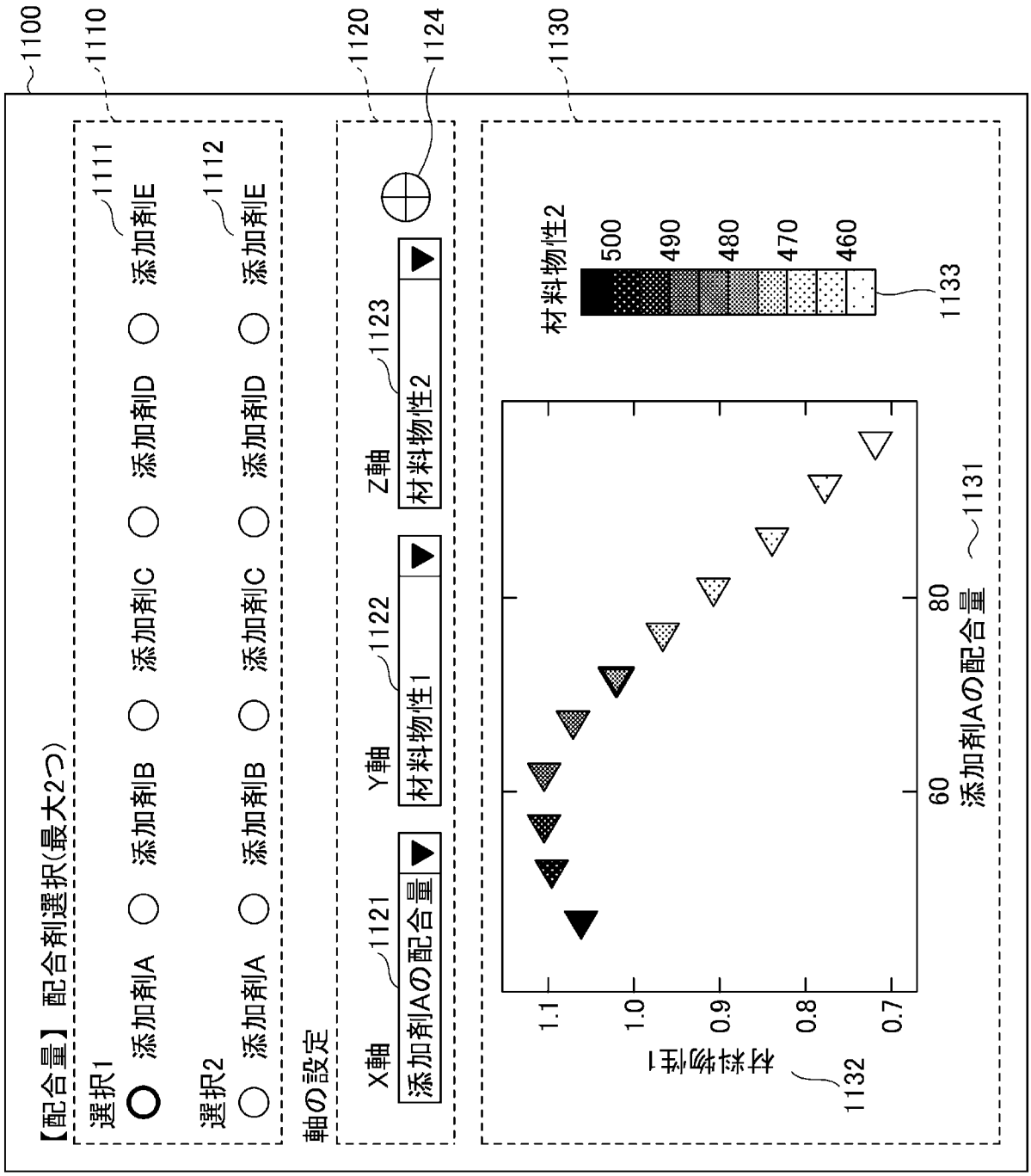
	設計値				特性値	
No	添加剤A	添加剤B	添加剤C	…	材料物性1	
1	50	20	30	…	3.0	基準設計条件
1-1-1	35	20	30	…	2.5	周辺設計条件
1-1-2	40	20	30	…	3.5	
1-1-3	45	20	30	…	2.0	
1-1-4	55	20	30	…	1.5	
1-1-5	60	20	30	…	1.0	
1-2-1	50	16	30	…	3.0	
1-2-2	50	18	30	…	2.5	
1-2-3	50	22	30	…	3.5	
1-2-4	50	24	30	…	2.0	
1-2-5	50	26	30	…	1.5	
1-3-1	35	16	30	…	2.4	
1-3-2	35	18	30	…	2.5	
1-3-3	35	22	30	…	2.6	
1-3-4	35	24	30	…	2.2	
1-3-5	35	26	30	…	2.0	
…	…	…	…	…	…	

[図12]

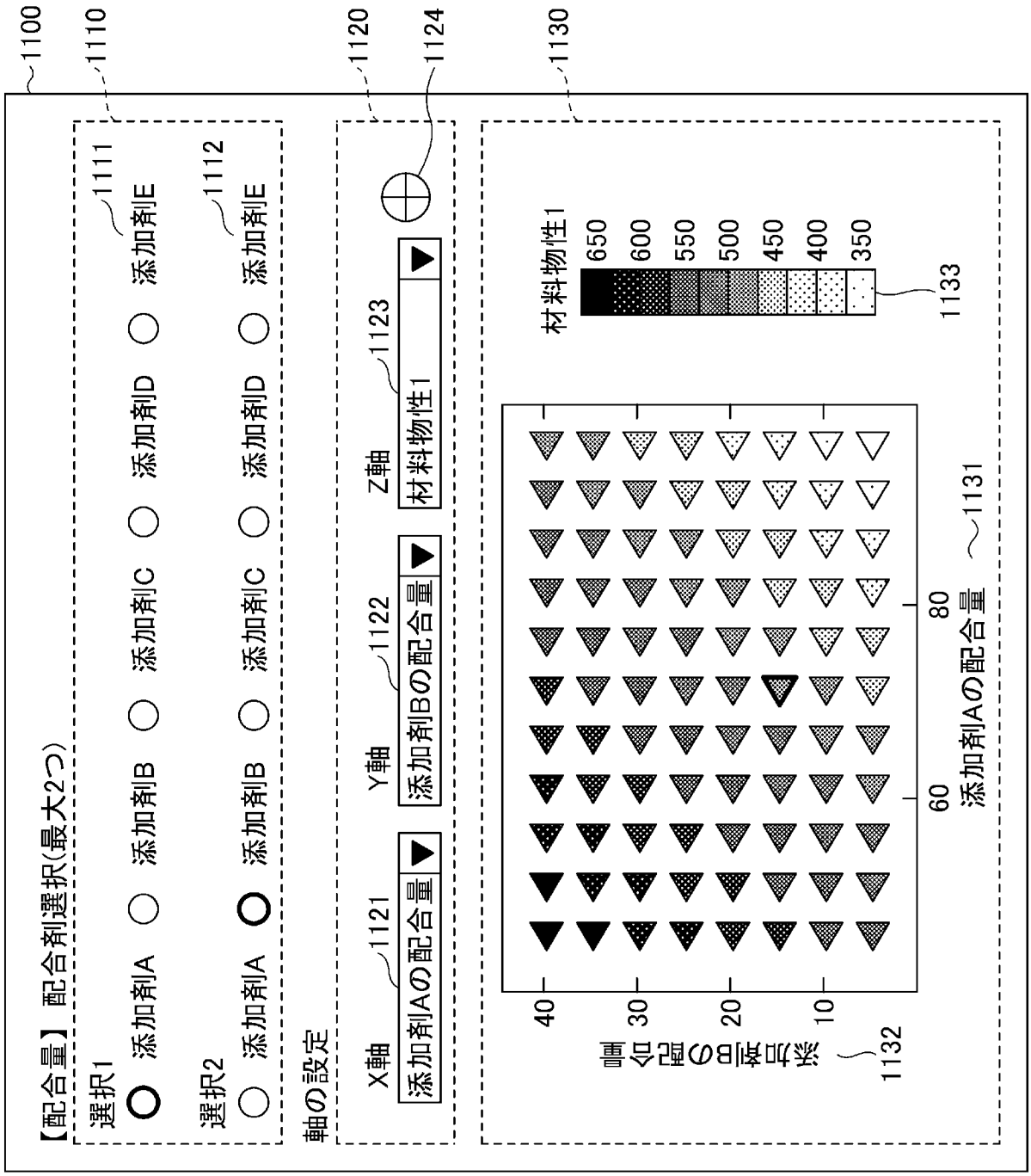


No	添加剤A	添加剤B	添加剤C	…	材料物性1	材料物性2
1	50	20	30	…	3.0	0.3
1-1-1	35	20	30	…	2.5	0.2
1-1-2	40	20	30	…	3.5	0.22
1-1-3	45	20	30	…	2.0	0.25
1-1-4	55	20	30	…	1.5	0.36
1-1-5	60	20	30	…	1.0	0.38
1-2-1	50	16	30	…	0.3	0.13
1-2-2	50	18	30	…	2.0	0.29
1-2-3	50	22	30	…	3.2	0.22
1-2-4	50	24	30	…	2.1	0.24
1-2-5	50	26	30	…	1.5	0.33
1-3-1	35	16	30	…	2.4	0.17
1-3-2	35	18	30	…	2.5	0.22
1-3-3	35	22	30	…	2.6	0.28
1-3-4	35	24	30	…	2.2	0.35
1-3-5	35	26	30	…	2.0	0.29
…	…	…	…	…	…	…

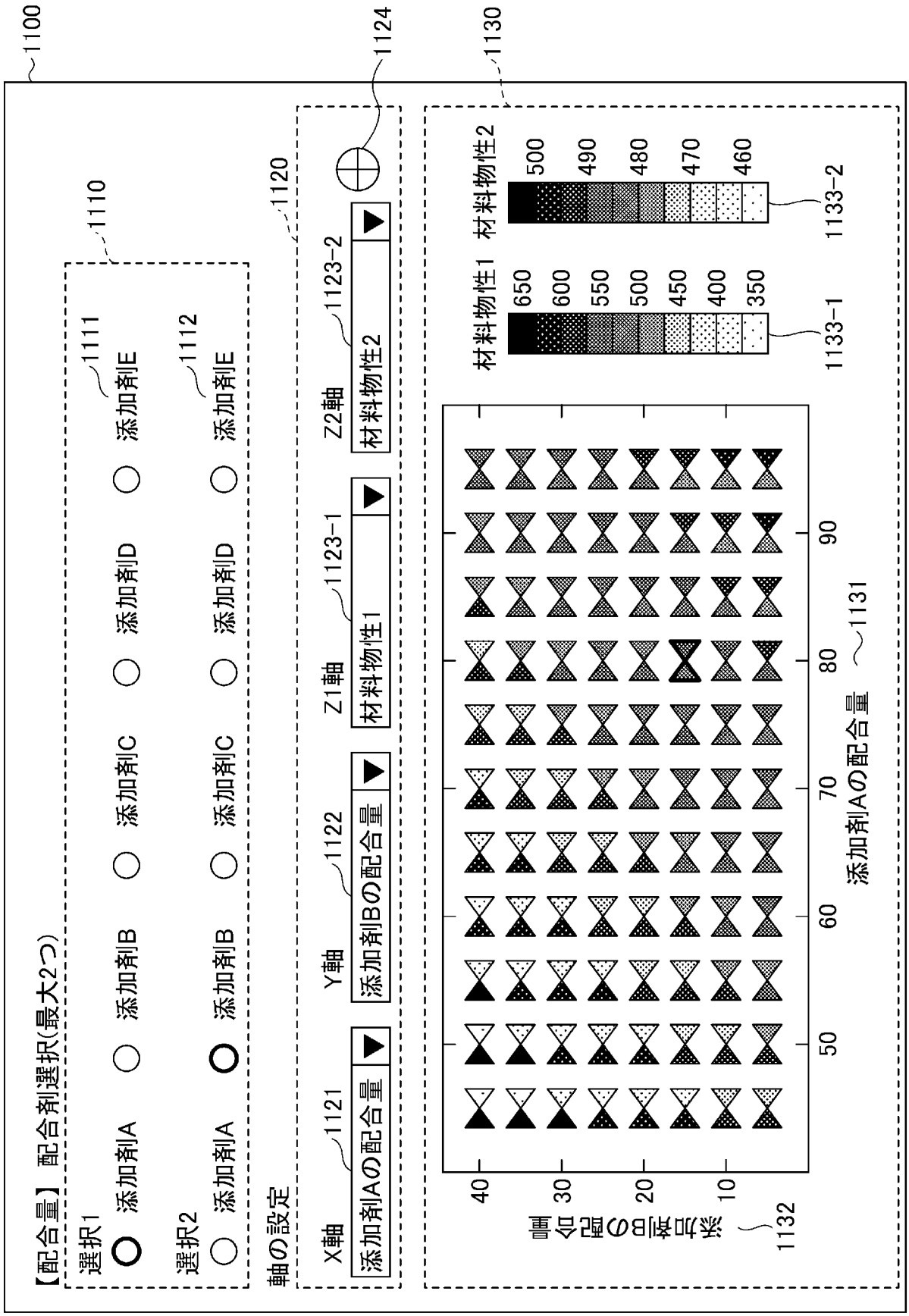
[図13]


1100
1110
【配合量】配合剤選択(最大2つ)
選択1
添加剤A
添加剤B
添加剤C
添加剤D
添加剤E
1111
選択2
添加剤A
添加剤B
添加剤C
添加剤D
添加剤E
1112
軸の設定
1120
X軸
添加剤Aの配合量
1121
Y軸
材料物性1
1122
Z軸
材料物性2
1123
1124
1130
材料物性2
500
490
480
470
460
1133
材料物性1
1.1
1.0
0.9
0.8
0.7
1132
60
80
添加剤Aの配合量
1131

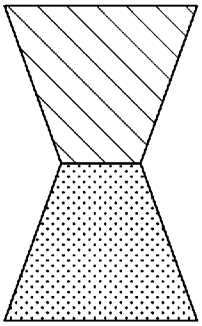
[図14]


1100
1110
1111
1112
1120
1124
1130
【配合量】配合剤選択(最大2つ)
選択1
添加剤A
添加剤B
添加剤C
添加剤D
添加剤E
選択2
添加剤A
添加剤B
添加剤C
添加剤D
添加剤E
軸の設定
X軸
1121
添加剤Aの配合量
Y軸
1122
添加剤Bの配合量
Z軸
1123
材料物性1
材料物性1
650
600
550
500
450
400
350
1133
40
30
20
10
1132
添加剤Bの配合量
60
80
1131
添加剤Aの配合量

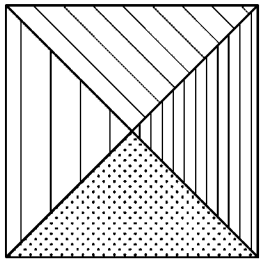
[図15]


1100
【配合量】配合剤選択(最大2つ)
1110
選択1
添加剤A
添加剤B
添加剤C
添加剤D
1111
添加剤E
選択2
添加剤A
添加剤B
添加剤C
添加剤D
1112
添加剤E
1120
軸の設定
X軸
1121
添加剤Aの配合量
Y軸
1122
添加剤Bの配合量
Z1軸
1123-1
材料物性1
Z2軸
1123-2
材料物性2
1124
1130
材料物性1
650
600
550
500
450
400
350
1133-1
材料物性2
500
490
480
470
460
1133-2
40
30
20
10
1132
添加剤Bの配合量
50
60
70
80
90
1131
添加剤Aの配合量

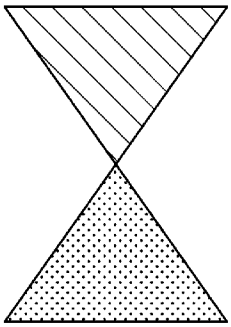
[図16]



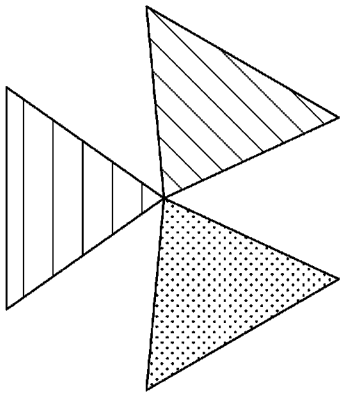
(B)



(D)

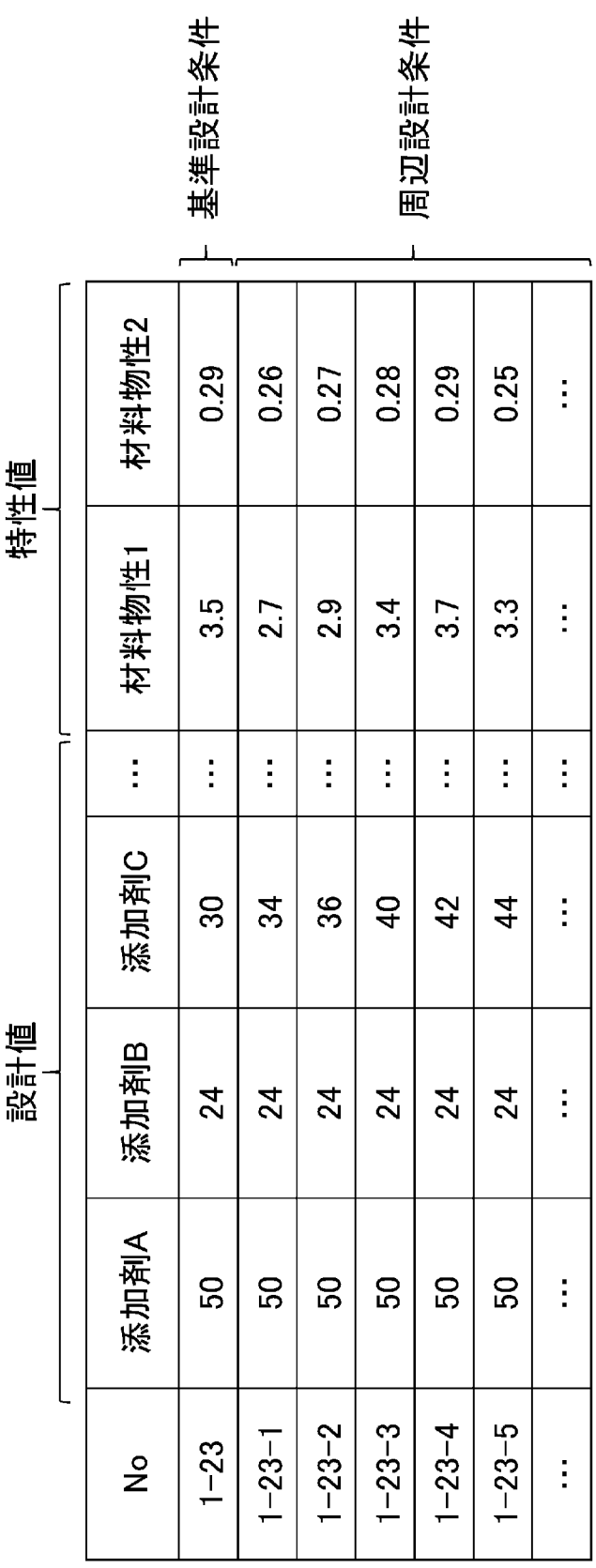


(A)



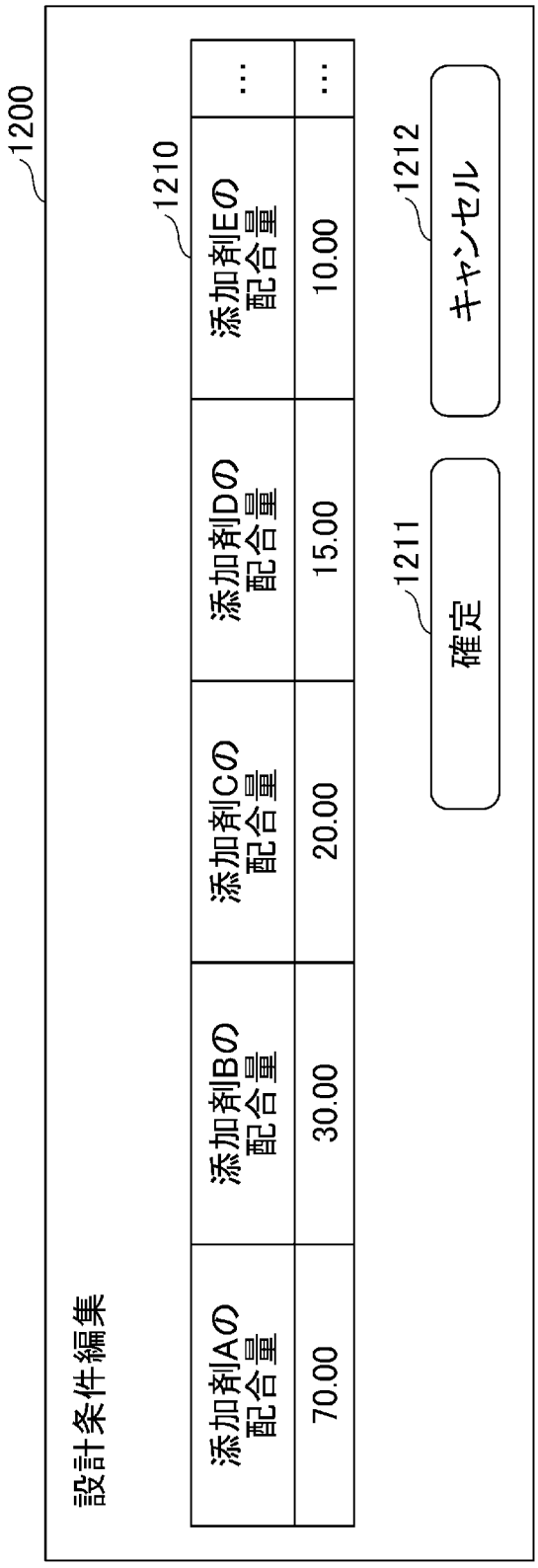
(C)

[図17]



No	添加剤A	添加剤B	添加剤C	…	材料物性1	材料物性2
1-23	50	24	30	…	3.5	0.29
1-23-1	50	24	34	…	2.7	0.26
1-23-2	50	24	36	…	2.9	0.27
1-23-3	50	24	40	…	3.4	0.28
1-23-4	50	24	42	…	3.7	0.29
1-23-5	50	24	44	…	3.3	0.25
…	…	…	…	…	…	…

[図18]


1200
設計条件編集
1210
添加剤Aの配合量
添加剤Bの配合量
添加剤Cの配合量
添加剤Dの配合量
添加剤Eの配合量
...
70.00
30.00
20.00
15.00
10.00
...
1211
確定
1212
キャンセル

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2023/026453

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G16C 60/00(2019.01)i
FI: G16C60/00

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)

G16C10/00 - 99/00

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 1971-2023
Registered utility model specifications of Japan 1996-2023
Published registered utility model applications of Japan 1994-2023

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.
A	JP 2022-082064 A (FUJITSU LTD) 01 June 2022 (2022-06-01) entire text, all drawings	1-12
A	US 2021/0097211 A1 (COVESTRO LLC) 01 April 2021 (2021-04-01) entire text, all drawings	1-12
A	WO 2020/100310 A1 (WAKABAYASHI, Yoshinori) 22 May 2020 (2020-05-22) entire text, all drawings	1-12

☐ 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
09 August 2023	**22 August 2023**
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/JP2023/026453

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 2022-082064 A	01 June 2022	US 2022/0164685 A1 entire text, all drawings EP 4002376 A1 CN 114520029 A	
US 2021/0097211 A1	01 April 2021	WO 2019/199651 A1 entire text, all drawings CN 112204558 A	
WO 2020/100310 A1	22 May 2020	(Family: none)	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2023/026453

A.　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

G16C 60/00(2019.01)i
FI: G16C60/00

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））

G16C10/00 - 99/00

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	１９７１－２０２３年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２３年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２３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
A	JP 2022-082064 A (富士通株式会社) 01.06.2022 (2022-06-01) 全文、全図	1-12
A	US 2021/0097211 A1 (COVESTRO LLC) 01.04.2021 (2021-04-01) 全文、全図	1-12
A	WO 2020/100310 A1 (若林　良徳) 22.05.2020 (2020-05-22) 全文、全図	1-12

☐ 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
09.08.2023	22.08.2023

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）
岡北　有平 5L 4677
電話番号 03-3581-1101 内線 3502

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/JP2023/026453

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2022-082064 A	01.06.2022	US 2022/0164685 A1 全文、全図 EP 4002376 A1 CN 114520029 A	
US 2021/0097211 A1	01.04.2021	WO 2019/199651 A1 全文、全図 CN 112204558 A	
WO 2020/100310 A1	22.05.2020	（ファミリーなし）	