

(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12月12日(12.12.2024)

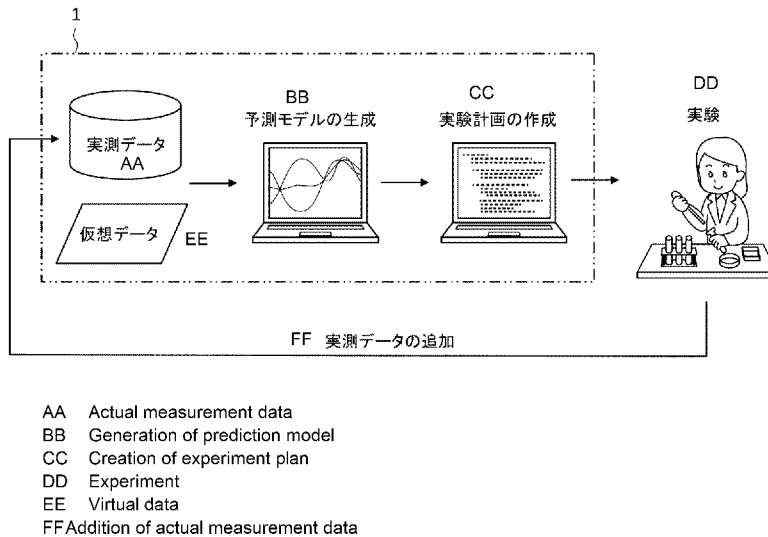


(10) 国際公開番号
WO 2024/252995 A1

- (51) 国際特許分類:
G16C 60/00 (2019.01) *G16C 20/70* (2019.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2024/019633
- (22) 国際出願日: 2024年5月29日(29.05.2024)
- (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 2023-093364 2023年6月6日(06.06.2023) JP
- (71) 出願人: 大日本印刷株式会社 (DAI NIPPON PRINTING CO., LTD.) [JP/JP]; 〒1628001 東京都新宿区市谷加賀町一丁目1番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 村山 雄亮 (MURAYAMA Yusuke); 〒1628001 東京都新宿区市谷加賀町一丁目1番1号 大日本印刷株式会社内 Tokyo (JP).
- (74) 代理人: 宮嶋 学, 外(MIYAJIMA Manabu et al.); 〒1000005 東京都千代田区丸の内1丁目6番6号 日本生命丸の内ビル 協和特許法律事務所 Tokyo (JP).
- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY,

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

(54) 発明の名称: 物性予測装置、物性予測方法、及び物性予測プログラム



(57) Abstract: This physical property prediction device comprises: an actual measurement data acquisition unit that acquires actual measurement data including a first manufacturing condition for a sample and an actual measurement value obtained by actually measuring a physical property of the sample, which has been manufactured on the basis of the first manufacturing condition; a virtual data acquisition unit that acquires virtual data including a second manufacturing

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))

condition for the sample and a virtual value obtained by virtualizing a physical property of the sample that corresponds to the second manufacturing condition; and a model generation unit that generates a prediction model for the physical property on the basis of the actual measurement data acquired by the actual measurement data acquisition unit and the virtual data acquired by the virtual data acquisition unit, the prediction model having a first uncertainty for the physical property with respect to the actual measurement data and having a second uncertainty for the physical property with respect to the virtual data, and the second uncertainty for the physical property being greater than the first uncertainty for the physical property.

(57) 要約：物性予測装置は、試料の第1の製造条件と、前記第1の製造条件に基づいて製造された前記試料の物性を実測した実測値と、を含む実測データを取得する実測データ取得部と、前記試料の第2の製造条件と、前記第2の製造条件に対応する前記試料の物性を仮想した仮想値と、を含む仮想データを取得する仮想データ取得部と、前記実測データ取得部により取得された前記実測データと、前記仮想データ取得部により取得された前記仮想データとに基づいて、前記実測データに対して前記物性の第1の不確かさを有し、前記仮想データに対して前記物性の第1の不確かさよりも大きい前記物性の第2の不確かさを有するような前記物性の予測モデルを生成するモデル生成部と、を備える。

明 細 書

発明の名称：

物性予測装置、物性予測方法、及び物性予測プログラム

技術分野

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

背景技術

[0002] 近年、機械学習などの情報科学の技術を活用して材料開発の効率化を図る、マテリアルズ・インフォマティクスと呼ばれる技術分野が注目されている。マテリアルズ・インフォマティクスにおいては、所望の物性を有する材料を製造するために、原材料の配合比やプロセス条件に関する多数のパラメータの、適切な組み合わせを見出すことが求められる。パラメータの数が多い場合、パラメータの組み合わせが膨大となる。パラメータの組み合わせが膨大になると、網羅的に材料を試作することが困難となる。網羅的に材料を試作することが困難である場合は、試作された一定数の材料の物性を測定し、測定により得られた実測データに基づいて物性の予測モデルを構築する方法が取られる。予測モデルを用いることで、材料の試作数が限られていても最適なパラメータの探索を図ることができる。

[0003] 予測モデルを構築するために、教師ありの機械学習手法が用いられることがある。教師ありの機械学習手法では、実測データの数が不十分である場合や、パラメータと物性との関係が複雑である場合は、高精度の予測モデルを構築することが困難となる。実測データの数が不十分である場合や、パラメータと物性との関係が複雑である場合にも高精度の予測モデルを構築するため、ベイズ最適化などの逐次的実験計画の手法が用いられる。ベイズ最適化では、予測モデルの構築に、ベイズ推定が用いられる。ベイズ推定とは、ベイズ確率の考え方にに基づき、観測された事象から、推定したい事柄を、確率的な意味で推論することである。ベイズ確率とは、知識の状態を表す合理的

な期待値、あるいは、個人的な信念の定量化、として解釈された確率である。ベイズ推定では、物性の予測値に加えて、予測値の不確かさが算出される。不確かさが算出されることで、物性が特定の値となる確率及び物性の期待値などを算出できる。ベイズ推定によれば、限られた実測データに基づいて最適なパラメータを求めることができる。すなわち、ベイズ推定によれば、限られた実測データに基づいて材料の次の試作の実験計画を立てることができる。材料の次の試作と、試作された材料の物性の測定と、測定結果の実測データへの追加と、によって、予測モデルが更新される。ベイズ最適化では、前述した試作、物性の測定、及び予測モデルの更新からなる一連のサイクルを繰り返す。一連のサイクルの繰り返しによって、所望の物性値が得られるまでの試作回数の最小化を図ることができる。

[0004] しかしながら、実測データが少数又は未取得の場合は、ベイズ最適化における初期の予測モデルを構築することが困難となる。初期の予測モデルを構築することが困難となることで、逐次的な実験計画を立てることが困難となる。具体的には、予測モデルの構築に必要な実測データの数は、通常は5～10程度である。パラメータ数が多ければ、予測モデルの構築に必要な実測データの数は更に増える場合がある。しかし、材料の試作及び物性の測定に要する金銭コスト及び時間コストが大きい場合や、開発予算及び開発期間が限られている場合は、実施可能な試作の回数が少数に限られる。試作の回数が少数に限られることで、実測データの数が不十分となり、初期の予測モデルの構築及びベイズ最適化の適用が困難となる。

[0005] WO 2021 / 200281 A 1 には、実測データに機械学習を適用して逐次的な実験計画を行う技術が開示されている。WO 2020 / 188971 A 1 には、量子化学計算などのシミュレーションによってパラメータに対応する物性値を求めることで、物性値を事前学習する技術が開示されている。

[0006] しかしながら、初期段階において一定数の実測データが用意されていない場合、WO 2021 / 200281 A 1 が開示された技術を実施することは

困難である。特に、試作の回数及び物性の測定の回数が少数に限られている場合は、初期の予測モデルの作成に必要な数の実測データを得ること自体が困難である。

[0007] また、WO 2020/188971 A1に開示された技術は、シミュレーションの手法が確立している一部の分野に限って実施できる。すなわち、WO 2020/188971 A1に開示された技術は、シミュレーションの適用が困難な多くの分野では実施が困難である。

発明の開示

[0008] 本開示は、以上の点を考慮してなされたものであり、所望の物性を有する材料を適切かつ効率的に開発できる物性予測装置、物性予測方法、及び物性予測プログラムを提供することを目的とする。

[0009] 本開示による物性予測装置は、

試料の第1の製造条件と、前記第1の製造条件に基づいて製造された前記試料の物性を実測した実測値と、を含む実測データを取得する実測データ取得部と、

前記試料の第2の製造条件と、前記第2の製造条件に対応する前記試料の物性を仮想した仮想値と、を含む仮想データを取得する仮想データ取得部と、

前記実測データ取得部により取得された前記実測データと、前記仮想データ取得部により取得された前記仮想データとに基づいて、前記実測データに対して前記物性の第1の不確かさを有し、前記仮想データに対して前記物性の第1の不確かさよりも大きい前記物性の第2の不確かさを有するような前記物性の予測モデルを生成するモデル生成部と、

を備える。

[0010] 本開示による物性予測装置において、前記仮想データ取得部は、前記第2の製造条件に含まれる複数のパラメータのうちの少なくとも1つのパラメータの値が極端に小さい又は大きい場合に予測される前記試料の物性値を、前記仮想値として取得してもよい。

- [0011] 本開示による物性予測装置において、前記仮想データ取得部は、原材料またはプロセスが前記試料に類似する物質の物性値を、前記仮想値として取得してもよい。
- [0012] 本開示による物性予測装置において、前記物性の第1の不確かさは0であってもよい。
- [0013] 本開示による物性予測装置において、前記実測データ及び前記仮想データを入力するための入力画面を生成する入力画面生成部を更に備え、
前記実測データ取得部は、前記入力画面生成部により生成された前記入力画面に入力された前記実測データを取得し、
前記仮想データ取得部は、前記入力画面生成部により生成された前記入力画面に入力された前記仮想データを取得してもよい。
- [0014] 本開示による物性予測装置において、前記入力画面生成部により生成された前記入力画面をユーザの端末装置に送信し、前記入力画面に入力された前記実測データ及び前記仮想データを前記端末装置から受信する通信部を更に備え、
前記実測データ取得部は、前記通信部により受信された前記実測データを取得し、
前記仮想データ取得部は、前記通信部により受信された前記仮想データを取得してもよい。
- [0015] 本開示による物性予測装置において、前記仮想データを補完する仮想データ補完部を更に備え、
前記仮想データ取得部は、前記仮想データ補完部により補完された前記仮想データを取得してもよい。
- [0016] 本開示による物性予測装置において、前記仮想データ補完部は、前記第2の製造条件に含まれる複数のパラメータのうちの極端に小さい又は大きい値を有する一部のパラメータと、前記一部のパラメータに基づいて予測される前記仮想値と、が前記入力画面に入力されたときに、前記複数のパラメータのうちの前記一部のパラメータ以外のパラメータの値を算出することで、前

記仮想データの前記第2の製造条件を補完してもよい。

[0017] 本開示による物性予測装置において、前記物性の第1の不確かさ及び前記物性の第2の不確かさを設定する不確かさ設定部を更に備え、

前記モデル生成部は、前記不確かさ設定部により設定された前記物性の第1の不確かさ及び前記物性の第2の不確かさに更に基づいて前記予測モデルを生成してもよい。

[0018] 本開示による物性予測装置において、前記物性の第1の不確かさ及び前記物性の第2の不確かさを設定するための設定画面を生成する設定画面生成部を更に備え、

前記不確かさ設定部は、前記設定画面生成部により生成された前記設定画面に対する入力操作に応じて、前記物性の第1の不確かさ及び前記物性の第2の不確かさを設定してもよい。

[0019] 本開示による物性予測装置において、前記モデル生成部は、ベイズ推定を用いて前記予測モデルを生成し、前記第1の不確かさは、第1の分散であり、前記第2の不確かさは、前記第1の分散よりも大きい第2の分散であってもよい。

[0020] 本開示による物性予測装置において、前記モデル生成部は、次式にしたがって前記予測モデルを生成してもよい。

[数1]

$$\theta_i = \sum_{j=1}^d \alpha_j \phi_j(\mathbf{x}_i) + \epsilon_i$$

[数2]

$$p\left(\{\alpha_j\}_{j=1}^d \mid \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\theta_i\}_{i=1}^n\right) = \frac{p\left(\{\theta_i\}_{i=1}^n \mid \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\alpha_j\}_{j=1}^d\right) p\left(\{\alpha_j\}_{j=1}^d\right)}{\int p\left(\{\theta_i\}_{i=1}^n \mid \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\alpha_j\}_{j=1}^d\right) p\left(\{\alpha_j\}_{j=1}^d\right) d\alpha_1 \cdots d\alpha_d}$$

$$= \frac{\left(\prod_{i=1}^n p\left(\theta_i \mid \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d\right)\right) \cdot p\left(\{\alpha_j\}_{j=1}^d\right)}{\int \left(\prod_{i=1}^n p\left(\theta_i \mid \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d\right)\right) \cdot p\left(\{\alpha_j\}_{j=1}^d\right) d\alpha_1 \cdots d\alpha_d}$$

但し、

 θ_i ：実測データおよび仮想データのうち、 i 番目のデータにおける物性 $\mathbf{x}_i$ ：実測データおよび仮想データのうち、 i 番目のデータにおける製造条件 $\phi_j(\cdot)$ ：基底関数 ε_i ：実測データおよび仮想データのうち、 i 番目のデータにおける物性の誤差 α_j ：予測モデルのパラメータ $p\left(\{\alpha_j\}_{j=1}^d\right)$ ：事前分布 $p\left(\{\alpha_j\}_{j=1}^d \mid \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\theta_i\}_{i=1}^n\right)$ ：事後分布 $p\left(\theta_i \mid \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d\right)$ ： i 番目のデータに対する尤度であって、 $p\left(\theta_i \mid \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d\right) = N(\theta_i \mid \sum_{j=1}^d \alpha_j \phi_j(\mathbf{x}_i), \sigma^2)$ と等価の値 σ^2 ：実測データおよび仮想データのうち、 i 番目のデータにおける物性の誤差の分散 $\int p\left(\{\theta_i\}_{i=1}^n \mid \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\alpha_j\}_{j=1}^d\right) p\left(\{\alpha_j\}_{j=1}^d\right) d\alpha_1 \cdots d\alpha_d$ ：周辺尤度

[0021] 本開示による物性予測装置において、前記モデル生成部で生成された前記予測モデルに基づいて前記試料の第3の製造条件を算出する製造条件算出部を更に備えてもよい。

[0022] 本開示による物性予測装置において、前記第3の製造条件は、前記予測モデル中の前記物性の不確かさが最大になるときの製造条件及び前記予測モデル中の前記物性の不確かさが最小になるときの製造条件の少なくとも1つを含んでもよい。

[0023] 本開示による物性予測装置において、前記実測データ取得部は、前記製造条件算出部により算出された前記第3の製造条件と、前記第3の製造条件に基づいて製造された前記試料の物性を実測した第2の実測値と、を含む第2の実測データを更に取得し、

前記モデル生成部は、前記実測データ取得部により取得された前記第2の実測データに基づいて前記予測モデルを更新してもよい。

[0024] 本開示による物性予測装置において、前記モデル生成部は、前記第2の実測値が設定された最適値である場合には、前記予測モデルを更新しなくてもよい。

[0025] 本開示による物性予測方法は、

試料の第1の製造条件と、前記第1の製造条件に基づいて製造された前記試料の物性を実測した実測値と、を含む実測データを取得する工程と、

前記試料の第2の製造条件と、前記第2の製造条件に対応する前記試料の物性を仮想した仮想値と、を含む仮想データを取得する工程と、

前記取得された実測データ及び仮想データに基づいて、前記実測データに対して前記物性の第1の不確かさを有し、前記仮想データに対して前記物性の第1の不確かさよりも大きい前記物性の第2の不確かさを有するような前記物性の予測モデルを生成する工程と、

を備える。

[0026] 本開示による物性予測プログラムは、

コンピュータに、

試料の第1の製造条件と、前記第1の製造条件に基づいて製造された前記試料の物性を実測した実測値と、を含む実測データを取得する手順、

前記試料の第2の製造条件と、前記第2の製造条件に対応する前記試料の物性を仮想した仮想値と、を含む仮想データを取得する手順、及び

前記取得された実測データ及び仮想データに基づいて、前記実測データに対して前記物性の第1の不確かさを有し、前記仮想データに対して前記物性の第1の不確かさよりも大きい前記物性の第2の不確かさを有するような前記物性の予測モデルを生成する手順

を実行させる。

[0027] 本開示によれば、所望の物性を有する材料を適切かつ効率的に開発できる。

図面の簡単な説明

[0028] [図1]図1は、第1の実施形態による物性予測装置を示す模式図である。

[図2]図2は、第1の実施形態による物性予測装置を示すブロック図である。

[図3]図3は、第1の実施形態による物性予測装置の動作例を示すフローチャートである。

[図4]図4は、第1の実施形態による物性予測装置の動作例において、入力画面の一例を示す図である。

[図5]図5は、第1の実施形態による物性予測装置の動作例において、予測モデルの一例を示す図である。

[図6]図6は、第1の実施形態による物性予測装置の動作例において、予測モデルの他の一例を示す図である。

[図7]図7は、第1の実施形態による物性予測装置の動作例において、予測モデルに基づく第3の製造条件の算出の一例を示す図である。

[図8]図8は、第2の実施形態による物性予測装置を示すブロック図である。

[図9]図9は、第2の実施形態による物性予測装置の動作例を示すフローチャートである。

[図10]図10は、第2の実施形態による物性予測装置の動作例において、入力画面の一例を示す図である。

[図11]図11は、第3の実施形態による物性予測装置を示すブロック図である。

[図12]図12は、第3の実施形態による物性予測装置の動作例を示すフローチャートである。

[図13]図13は、第3の実施形態による物性予測装置の動作例において、入力画面の一例を示す図である。

[図14]図14は、第4の実施形態による物性予測装置を示すブロック図である。

発明を実施するための形態

[0029] 以下、図面を参照して本開示の実施形態について説明する。実施形態で参

照する図面において、同一部分または同様な機能を有する部分には同一の符号または類似の符号を付し、繰り返しの説明は省略する場合がある。

[0030] [第1の実施形態]

先ず、図1～図7を参照して、第1の実施形態による物性予測装置について説明する。図1は、第1の実施形態による物性予測装置1を示す概念図である。

[0031] 図1に示すように、第1の実施形態による物性予測装置1は、実測データと予測データとに基づいて試料の予測モデルを生成する。実測データとは、試料の第1の製造条件と、実測値とを含むデータである。試料は、例えば、複数の原材料に基づいて製造される材料である。第1の製造条件は、例えば、材料の原材料の配合比や、温度等のプロセス条件などである。実測値とは、第1の製造条件に基づいて実際に製造された試料の物性を実際に測定した値である。試料の物性は、例えば、導電率及び誘電率などである。予測データとは、試料の第2の製造条件と、仮想値とを含むデータである。第2の製造条件は、第1の製造条件と異なる製造条件である。第2の製造条件は、試料を実際に製造したときの製造条件ではなく、仮想された製造条件である。仮想値とは、第2の製造条件に対応する試料の物性を仮想した値である。予測モデルとは、試料の製造条件に基づいて予測された試料の物性を示す情報である。言い換えれば、予測モデルは、試料の製造条件と物性との対応関係を示す情報である。

[0032] また、物性予測装置1は、生成された予測モデルに基づいて試料の新たな実験計画を作成する。作成された新たな実験計画にしたがって、新たな試料が試作される。試作された新たな試料に対して、物性値を実測する実験が行われる。実験によって得られた実測データは、物性予測装置1に追加される。物性予測装置1は、追加によって更新された実測データと、仮想データとに基づいて、予測モデルを更新する。

[0033] 前述のように、物性予測装置1は、実測データ及び仮想データに基づく予測モデルの生成と、実験計画の作成と、実測データの追加と、の繰り返しに

よって、実験計画を最適化する。

- [0034] 図2は、第1の実施形態による物性予測装置1を示すブロック図である。より具体的には、図2に示すように、物性予測装置1は、制御部2と、入力インタフェース3と、表示部4と、記憶部5とを備える。制御部2と、入力インタフェース3と、表示部4と、記憶部5とは、バス6を介して通信可能に接続されている。
- [0035] 入力インタフェース3は、ユーザから各種の指示及び情報の入力操作を受け付ける。入力インタフェース3は、ユーザから受け付けた入力操作を電気信号に変換する。入力インタフェース3は、電気信号に変換された入力操作を制御部2に出力する。入力インタフェース3は、例えば、マウス、キーボード、タッチパッド、タッチパネル、トラックボール、スイッチボタン、及びマイクロホン等であってもよい。
- [0036] 表示部4は、制御部2から送信された画像データに応じた画像を表示する。表示部4は、例えば、液晶モニタ、CRT（Cathode Ray Tube）モニタ、及び、タッチパネル等であってもよい。表示部4は、スピーカを備えていてもよい。
- [0037] 記憶部5は、種々の情報を記憶する非一過性の記憶装置である。記憶部5は、例えば、HDD（Hard Disk Drive）、光ディスク、磁気ディスク、光磁気ディスク、CD（Compact Disc）、DVD（Digital Versatile Disc）及び半導体メモリ等であってもよい。記憶部5は、例えば、物性予測装置1が実行する物性予測プログラムと、物性予測プログラムの実行に用いられる各種のデータとを記憶する。
- [0038] 制御部2は、入力インタフェース3を用いたユーザの入力操作に応じて、物性予測装置1の動作を制御する。制御部2は、実測データ取得部21と、仮想データ取得部22と、モデル生成部23と、入力画面生成部24と、製造条件算出部25とを備える。
- [0039] 制御部2の各構成部21～25のそれぞれに対応する機能は、コンピュータによって実行可能な物性予測プログラムの形態で記憶部5に記録されてい

る。制御部 2 は、例えば、プロセッサである。制御部 2 を構成するプロセッサは、記憶部 5 から物性予測プログラムを読み出して実行することで、読み出された物性予測プログラムに対応する構成部 2 1 ~ 2 5 の機能を実行する。記憶部 5 に物性予測プログラムを保存する代わりに、プロセッサの回路内に物性予測プログラムを直接組み込んでもよい。物性予測プログラムを直接組み込む場合、プロセッサは、回路内に組み込まれた物性予測プログラムを実行することで、各構成部 2 1 ~ 2 5 に対応する機能を実行する。物性予測プログラムは、ネットワークを通じて物性予測装置 1 がサーバからダウンロードしたプログラムであってもよい。或いは、物性予測プログラムは、可搬型の記憶媒体から物性予測装置 1 に取り込まれたプログラムであってもよい。制御部 2 は、単一のプロセッサで構成されてもよい。制御部 2 は、複数のプロセッサの組み合わせで構成されてもよい。プロセッサは、例えば、CPU (Central Processing Unit)、GPU (Graphics Processing Unit)、特定用途向け集積回路 (Application Specific Integrated Circuit: ASIC)、及びプログラマブル論理デバイス等であってもよい。プログラマブル論理デバイスは、SPLD (Simple Programmable Logic Device)、CPLD (Complex Programmable Logic Device)、又はFPGA (Field Programmable Gate Array) であってもよい。

[0040] 実測データ取得部 2 1 は、試料の第 1 の製造条件と、第 1 の製造条件に基づいて製造された試料の物性を実測した実測値と、を含む実測データを取得する。

[0041] 仮想データ取得部 2 2 は、試料の第 2 の製造条件と、第 2 の製造条件に対応する試料の物性を仮想した仮想値と、を含む仮想データを取得する。

[0042] 仮想データ取得部 2 2 は、第 2 の製造条件に含まれる複数のパラメータのうちの一部のパラメータの値が極端に小さい又は大きい場合に予測される試

料の物性値を、仮想値として取得してもよい。

[0043] パラメータの値が極端に小さい場合とは、パラメータの値が、予め決められたパラメータの探索領域の下限の値である場合又は下限を下回る値である場合である。パラメータの値が極端に大きい場合とは、パラメータの値が、予め決められたパラメータの探索領域の上限の値である場合又は上限を上回る値である場合である。

[0044] 仮想データ取得部 22 は、一部のパラメータの値が極端に小さい又は大きい場合に予測される物性値の代わりに、原材料又はプロセスが試料に類似する物質の物性値を、仮想値として取得してもよい。

[0045] モデル生成部 23 は、実測データ取得部 21 により取得された実測データと、仮想データ取得部 22 により取得された仮想データとに基づいて、物性の予測モデルを生成する。予測モデルは、予測される物性を確率で示した確率的予測モデルであってもよい。モデル生成部 23 は、実測データに対して物性の第 1 の不確かさを有し、仮想データに対して物性の第 1 の不確かさよりも大きい物性の第 2 の不確かさを有するような、予測モデルを生成する。物性の第 1 の不確かさは、例えば、0 である。

[0046] 入力画面生成部 24 は、実測データ及び仮想データを入力するための入力画面を生成する。入力画面生成部 24 は、生成された入力画面を表示部 4 に表示する。実測データ取得部 21 は、入力画面生成部 24 により生成された入力画面に入力された、実測データを取得する。より具体的には、実測データ取得部 21 は、表示部 4 に表示された入力画面に対して入力インタフェース 3 を用いて入力された、実測データを取得する。仮想データ取得部 22 は、入力画面生成部 24 により生成された入力画面に入力された、仮想データを取得する。より具体的には、仮想データ取得部 22 は、表示部 4 に表示された入力画面に対して入力インタフェース 3 を用いて入力された、仮想データを取得する。

[0047] 製造条件算出部 25 は、モデル生成部 23 により生成された予測モデルに基づいて試料の第 3 の製造条件を算出する。

[0048] 第3の製造条件は、予測モデル中の物性の不確かさが最大になるときの製造条件及び予測モデル中の物性の不確かさが最小になるときの製造条件の少なくとも1つを含んでもよい。

[0049] 実測データ取得部21は、製造条件算出部25により算出された第3の製造条件と、第3の製造条件に基づいて製造された試料の物性を実測した第2の実測値と、を含む第2の実測データを更に取得する。

[0050] モデル生成部23は、実測データ取得部21により取得された第2の実測データに基づいて予測モデルを更新する。モデル生成部23は、第2の実測値が設定された最適値である場合には、予測モデルを更新しない。

[0051] モデル生成部23は、ベイズ推定を用いて予測モデルすなわち確率的予測モデルを生成してもよい。第1の不確かさは、第1の分散であり、第2の不確かさは、第1の分散よりも大きい第2の分散であってもよい。

[0052] ベイズ推定を用いて予測モデルを生成する場合、モデル生成部23は、次式にしたがって予測モデルを生成してもよい。

[0053] [数3]

$$\theta_i = \sum_{j=1}^d \alpha_j \phi_j(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i \quad (1)$$

[0054] [数4]

$$\begin{aligned} p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d | \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\theta_i\}_{i=1}^n) &= \frac{p(\{\theta_i\}_{i=1}^n | \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\alpha_j\}_{j=1}^d) p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d)}{\int p(\{\theta_i\}_{i=1}^n | \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\alpha_j\}_{j=1}^d) p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d) d\alpha_1 \cdots d\alpha_d} \\ &= \frac{(\prod_{i=1}^n p(\theta_i | \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d)) \cdot p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d)}{\int (\prod_{i=1}^n p(\theta_i | \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d)) \cdot p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d) d\alpha_1 \cdots d\alpha_d} \quad (2) \end{aligned}$$

[0055]

但し、数式（１）及び数式（２）において、 θ_i は、実測データおよび仮想データのうち、 i 番目のデータにおける物性である。 x_i は、実測データおよび仮想データのうち、 i 番目のデータにおける製造条件である。 $\phi_j(\cdot)$ は、基底関数である。 ε_i は、実測データおよび仮想データのうち、 i 番目のデータにおける物性の誤差である。 α_j は、予測モデルのパラメータである。 $p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d)$ は、事前分布である。 $p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d | \{x_i\}_{i=1}^n, \{\theta_i\}_{i=1}^n)$ は、事後分布である。 $p(\theta_i | x_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d)$ は、 i 番目のデータに対する尤度であって、 $p(\theta_i | x_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d) = N(\theta_i | \sum_{j=1}^d \alpha_j \phi_j(x_i), \sigma_i^2)$ と等価の値である。 σ_i^2 は、実測データおよび仮想データのうち、 i 番目のデータにおける物性の誤差の分散である。 $\int p(\{y_i\}_{i=1}^n | \{x_i\}_{i=1}^n, \{\alpha_j\}_{j=1}^d) p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d) d\alpha_1 \cdots d\alpha_d$ は、周辺尤度である。

[0056] 数式（１）及び（２）にしたがった予測モデルの生成において、モデル生成部２３は、実測データに対応する尤度の分散 σ^2 を小さく設定し、仮想データに対応する尤度の分散 σ^2 を大きく設定する。モデル生成部２３は、実測データに対応する尤度の分散 σ^2 を０に設定してもよい。

[0057] モデル生成部２３は、物性 θ の値が滑らかに変化する場合に高い確率密度を有するように事前分布 $p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d)$ を設定してもよい。

[0058] [動作例]

次に、以上の構成を有する物性予測装置１の動作例について説明する。図３は、第１の実施形態による物性予測装置１の動作例を示すフローチャートである。まず、図３の前提として、ユーザは仮想データを作成する。ユーザは、経験に基づく予測によって仮想データを作成してもよい。例えば、第２の製造条件に含まれる複数のパラメータのそれぞれが極端に小さい又は大きい値であるときに、経験に基づいて試料の物性値が予測される場合がある。経験に基づいて試料の物性値が予測される場合、ユーザは、極端に小さい又は大きい値をとる複数のパラメータを第２の製造条件として使用し、予測される試料の物性値を仮想値として使用して、仮想データを作成する。或いは、ユーザは、原材料又はプロセスが試料に類似する物質の既知の物性値を用いて、仮想データを作成してもよい。物質の既知の物性値を用いる場合、ユーザは、当該物質のプロセスを第２の製造条件として使用し、当該物質の既

知の物性値を仮想値として使用して、仮想データを作成する。

[0059] また、ユーザは、実測データを作成する。具体的には、ユーザは、第1の製造条件に基づいて製造された試料の物性を測定することで実測値を取得する。そして、ユーザは、第1の製造条件と実測値とを対応付けることで実測データを作成する。実測データの作成において、ユーザは、第1の製造条件を構成する複数のパラメータの値の組み合わせを1～5通り程度設定してもよい。そして、ユーザは、設定されたパラメータの値の組み合わせにしたがって試作された試料の物性を実測することで、実測データを作成してもよい。複数のパラメータの値の組み合わせを設定する場合、ユーザは、所定の範囲内で第1の製造条件の複数のパラメータの値をランダムに設定してもよい。或いは、ユーザは、ラテン方格サンプリング等の所定の範囲内で均一にパラメータの値を選択する方法を用いて、第1の製造条件の複数のパラメータの値を設定してもよい。

[0060] 仮想データ及び実測データが作成された後、入力インタフェース3を用いたユーザの入力操作に応じて、入力画面生成部24は、入力画面を生成する。そして、入力画面生成部24は、生成された入力画面を表示部4に表示する（ステップS1）。

[0061] 図4は、第1の実施形態による物性予測装置1の動作例において、入力画面SCの一例を示す図である。図4に示される例において、入力画面SCは、第1の製造条件の一例である第1パラメータ～第5パラメータを入力する入力欄F1を有する。また、入力画面SCは、実測値及び仮想値の一例である第1物性及び第2物性を入力する入力欄F2を有する。また、入力画面SCは、データの種別、すなわち、仮想データ及び実測データの何れかを入力する入力欄F3を有する。入力欄F1～F3にデータを入力したうえで実行ボタンBを押すと、入力欄F1～F3に入力されたデータが確定される。

[0062] 表示部4に入力画面が表示された後、図3に示すように、ユーザは、入力インタフェース3を用いた入力操作により、表示部4に表示された入力画面に仮想データを入力する（ステップS2）。

- [0063] 仮想データを入力した後、ユーザは、入力インタフェース3を用いた入力操作により、表示部4に表示された入力画面に実測データを入力する（ステップS3）。ステップS2とステップS3とは前後が入れ替わってもよい。
- [0064] 仮想データ及び実測データが入力された後、モデル生成部23は、入力された仮想データ及び実測データに基づいて予測モデルを生成する（ステップS4）。図3に示される例において、モデル生成部23は、上述した数式（1）及び数式（2）にしたがったベイズ推定を用いて予測モデルを生成する。予測モデルを生成するとき、モデル生成部23は、実測データに対応する尤度の分散 σ^2 を0に設定する。また、モデル生成部23は、仮想データに対応する尤度の分散 σ^2 を0よりも大きい値に設定する。また、モデル生成部23は、物性 θ の値が滑らかに変化する場合に高い確率密度を有するように事前分布 $p(A)$ を設定する。
- [0065] モデル生成部23は、生成された予測モデルを表示部4に表示してもよい。
- [0066] 図5は、第1の実施形態による物性予測装置1の動作例において、予測モデルの一例を示す図である。図6は、第1の実施形態による物性予測装置1の動作例において、予測モデルの他の一例を示す図である。モデル生成部23は、例えば、図5及び図6に示される予測モデルを生成する。図5及び図6の横軸は、第1の製造条件の一例であるパラメータ x である。図5及び図6の縦軸は、物性値 θ である。図5及び図6における実線のグラフは、パラメータ x に対応する物性 θ の平均値を示す。実測データ及び仮想データは、平均値を示す実線のグラフ上に位置する。図5及び図6における2つの破線のグラフは、物性 θ の不確かさを示すグラフである。具体的には、図5及び図6における2つの破線のグラフは、物性 θ の確率分布である正規分布における50%信頼区間の上限及び下限をそれぞれ示す。一例として、図5には、 $x=0.4$ のときの正規分布 G が、平均値を示す実線のグラフ及び不確かさを示す破線のグラフに対応付けて示されている。正規分布 G 内のハッチングが施された領域は、 $x=0.4$ のときの50%信頼区間に対応する。

[0067] 図5及び図6から分かるように、実測データの付近では、不確かさが0になっている。不確かさが0になっているのは、モデル生成部23によって実測データに対応する尤度の分散 σ^2 が0に設定されたことによる。一方、仮想データの付近では、不確かさが大きくなっている。不確かさが大きくなっているのは、モデル生成部23によって仮想データに対応する尤度の分散 σ^2 が0よりも大きい設定されたことによる。

[0068] 予測モデルが生成された後、図3に示すように、実験計画の作成が行われる（ステップS5）。実験計画の作成において、まず、製造条件算出部25は、モデル生成部23により生成された予測モデルに基づいて試料の第3の製造条件を算出する。図7は、第1の実施形態による物性予測装置1の動作例において、予測モデルに基づく第3の製造条件の算出の一例を示す図である。図7に示される例において、製造条件算出部25は、予測モデル中の物性の不確かさが最大になるときの製造条件と、予測モデル中の物性の不確かさが最小になるときの製造条件とを、第3の製造条件として算出する。より具体的には、製造条件算出部25は、物性 θ の不確かさが最大となるときのパラメータ x の値 x_1 と、物性 θ の不確かさが最小となるときのパラメータ x の値 x_2 とを、第3の製造条件として算出する。ここで、物性の不確かさが最大となる場合は、確率は低いが非常に良好な物性が得られる可能性がある。また、物性の不確かさが最小となる場合は、良好な物性が得られる確率が高い。したがって、物性 θ の不確かさが最大となるときのパラメータ x の値 x_1 と最小となるときのパラメータ x の値 x_2 とを第3の製造条件とすることで、所望の物性が得られるまでに要する試料の試作回数を低減できる。次いで、実験計画の作成において、ユーザは、算出された第3の製造条件を用いて試料を製造するための具体的な計画を作成する。

[0069] 実験計画が作成された後、図3に示すように、ユーザは、実験を実施する（ステップS6）。実験の実施において、まず、ユーザは、実験計画すなわち第3の製造条件にしたがって試料を製造する。試料の製造は、図示しない製造装置を用いて行われる。試料が製造された後、ユーザは、製造された試

料の物性を測定する。試料の物性の測定は、物性に応じた図示しない測定器を用いて行われる。

[0070] 実験の結果、所望の物性が得られた場合（ステップS7：Yes）、処理を終了する。一方、実験の結果、所望の物性が得られなかった場合（ステップS7：No）であって、追加実験が可能である場合（ステップS8：Yes）、ユーザは、実験により得られた実測データを入力画面に入力する（ステップS3）。実験により得られた実測データの入力にともなって、モデル生成部23は、予測モデルを更新する（ステップS4）。

[0071] 以上述べたように、第1の実施形態では、実測データ取得部21が、試料の第1の製造条件と、第1の製造条件に基づいて製造された試料の物性を実測した実測値と、を含む実測データを取得する。また、仮想データ取得部22は、試料の第2の製造条件と、第2の製造条件に対応する試料の物性を仮想した仮想値と、を含む仮想データを取得する。また、モデル生成部23は、実測データ取得部21により取得された実測データと、仮想データ取得部22により取得された仮想データとに基づいて、物性の予測モデルを生成する。具体的には、モデル生成部23は、実測データに対して物性の第1の不確かさを有し、仮想データに対して物性の第1の不確かさよりも大きい物性の第2の不確かさを有するような、予測モデルを生成する。

[0072] したがって、実測データが少数又は未取得の場合においても、材料開発における経験や勘といった暗黙知を反映した仮想データを有効活用して、適切に逐次的な実験計画を作成できる。また、実施可能な実験回数が限られており、初期の予測モデルの構築に必要な数の試作及び測定が困難である場合にも、所望の物性を有する材料を開発できる。また、十分に多くの実験回数を実施できる場合にも、実測データで表現されない暗黙知を活用することにより、所望の物性が得られるまでの試作回数を減らすことができる。したがって、第1の実施形態によれば、所望の物性を有する材料を適切かつ効率的に開発できる。

[0073] また、第1の実施形態では、仮想データ取得部22が、第2の製造条件に

含まれる複数のパラメータのうちの一部のパラメータが極端に小さい又は大きい値である場合に予測される試料の物性値を、仮想値として取得してもよい。

[0074] したがって、予測モデルの生成に有用な仮想データを簡便な手法で取得できる。

[0075] また、第1の実施形態では、仮想データ取得部22が、原材料またはプロセスが試料に類似する物質の物性値を、仮想値として取得してもよい。

[0076] したがって、予測モデルの生成に有用な仮想データを簡便な手法で取得できる。

[0077] また、第1の実施形態では、物性の第1の不確かさが0である。

[0078] したがって、最適な製造条件を簡便に探索可能な予測モデルを生成できる。

[0079] また、第1の実施形態では、物性予測装置1が、実測データ及び仮想データを入力するための入力画面を生成する入力画面生成部24を更に備える。また、実測データ取得部21は、入力画面生成部24により生成された入力画面に入力された、実測データを取得する。また、仮想データ取得部22は、入力画面生成部24により生成された入力画面に入力された、仮想データを取得する。

[0080] したがって、ユーザの意思を反映した予測モデルを算出できる。

[0081] また、第1の実施形態では、モデル生成部23が、数式(1)及び数式(2)にしたがったベイズ推定を用いて予測モデルを生成する。すなわち、モデル生成部23は、実測データに対して第1の分散を有し、仮想データに対して第1の分散よりも大きい第2の分散を有するような、予測モデルを生成する。

[0082] したがって、最適な製造条件を高精度に探索可能な予測モデルを生成できる。

[0083] また、第1の実施形態では、製造条件算出部25が、モデル生成部23で生成された予測モデルに基づいて試料の第3の製造条件を算出する。

- [0084] したがって、予測モデルに基づいて最適な製造条件を探索できる。
- [0085] また、第 1 の実施形態では、第 3 の製造条件が、予測モデル中の物性の不確かさが最大になるときの製造条件及び予測モデル中の前記物性の不確かさが最小になるときの製造条件の少なくとも 1 つを含む。
- [0086] したがって、所望の物性が得られるまでの試料の試作回数を低減することができ、所望の物性を有する材料を効率的に開発できる。
- [0087] また、第 1 の実施形態では、実測データ取得部 2 1 が、製造条件算出部 2 5 により算出された第 3 の製造条件と、第 3 の製造条件に基づいて製造された試料の物性を実測した第 2 の実測値と、を含む第 2 の実測データを更に取り得する。また、モデル生成部 2 3 は、実測データ取得部 2 1 により取得された第 2 の実測データに基づいて予測モデルを更新する。
- [0088] したがって、実験計画を最適化できるので、所望の物性を有する材料を適切に開発できる。
- [0089] また、第 1 の実施形態では、モデル生成部 2 3 が、第 2 の実測値が設定された最適値である場合には、予測モデルを更新しない。
- [0090] したがって、試料の試作回数を低減できる。
- [0091] [第 2 の実施形態]
- 次に、設定された不確かさに基づいて予測モデルを生成する第 2 の実施形態について、第 1 の実施形態との差異を中心に説明する。図 8 は、第 2 の実施形態による物性予測装置 1 を示すブロック図である。
- [0092] 図 8 に示すように、第 2 の実施形態による物性予測装置 1 の制御部 2 は、第 1 の実施形態の構成に加えて、更に、不確かさ設定部 2 6 と、設定画面生成部 2 7 とを備える。
- [0093] 不確かさ設定部 2 6 は、物性の第 1 の不確かさと、物性の第 2 の不確かさを設定する。モデル生成部 2 3 は、不確かさ設定部 2 6 により設定された物性の第 1 の不確かさ及び物性の第 2 の不確かさに更に基づいて予測モデルを生成する。
- [0094] 設定画面生成部 2 7 は、物性の第 1 の不確かさ及び物性の第 2 の不確かさ

を設定するための設定画面を生成する。設定画面生成部 27 は、生成された設定画面を表示部 4 に表示する。不確かさ設定部 26 は、設定画面生成部 27 により生成された設定画面に対する入力操作に応じて、物性の第 1 の不確かさと、物性の第 2 の不確かさとを設定する。より具体的には、不確かさ設定部 26 は、表示部 4 に表示された設定画面に対する入力インタフェース 3 を用いた入力操作に応じて、物性の第 1 の不確かさと、物性の第 2 の不確かさとを設定する。設定画面生成部 27 は、入力画面生成部 24 により表示される入力画面と同時に、設定画面を表示してもよい。或いは、設定画面生成部 27 は、入力画面生成部 24 により表示される入力画面と異なるタイミングで、設定画面を表示してもよい。

[0095] 図 9 は、第 2 の実施形態による物性予測装置 1 の動作例を示すフローチャートである。図 9 に示すように、第 2 の実施形態において、設定画面生成部 27 は、入力画面生成部 24 により表示される入力画面と同時に、設定画面を表示する（ステップ S 11）。

[0096] 図 10 は、第 2 の実施形態による物性予測装置の動作例において、入力画面 SC の一例を示す図である。図 10 に示される例において、設定画面生成部 27 は、入力画面 SC 上に設定画面 SC 2 を表示する。設定画面 SC 2 は、実測データの重みと仮想データの重みとの比率を入力可能なスライダーバー S を有する。スライダーバー S をスライドさせて実測データの重みと仮想データの重みとの比率を入力することで、入力された比率に対応する第 1 の不確かさ及び第 2 の不確かさを設定できる。

[0097] 図 9 に示すように、第 2 の実施形態において、不確かさ設定部 26 は、設定画面に対する入力操作に応じて、第 1 の不確かさと、第 2 の不確かさとを設定する（ステップ S 9）。

[0098] モデル生成部 23 は、入力された仮想データ及び実測データと、設定された第 1 の不確かさ及び第 2 の不確かさと、に基づいて予測モデルを生成する（ステップ S 4）。

[0099] 以上述べたように、第 2 の実施形態では、不確かさ設定部 26 が、物性の

第 1 の不確かさと、物性の第 2 の不確かさとを設定する。また、モデル生成部 2 3 は、不確かさ設定部 2 6 により設定された物性の第 1 の不確かさ及び物性の第 2 の不確かさに更に基づいて、予測モデルを生成する。

[0100] したがって、ユーザの意思を反映した予測モデルを算出できるので、製造条件の探索の自由度を向上させることができる。

[0101] また、第 2 の実施形態では、設定画面生成部 2 7 が、物性の第 1 の不確かさ及び物性の第 2 の不確かさを設定するための設定画面を生成する。また、不確かさ設定部 2 6 は、設定画面生成部 2 7 により生成された設定画面に対する入力操作に応じて、物性の第 1 の不確かさ及び物性の第 2 の不確かさを設定する。

[0102] したがって、設定画面を用いて第 1 の不確かさ及び第 2 の不確かさを簡単に設定できる。

[0103] [第 3 の実施形態]

次に、仮想データを補完する第 3 の実施形態について、第 1 の実施形態との差異を中心に説明する。図 1 1 は、第 3 の実施形態による物性予測装置 1 を示すブロック図である。

[0104] 図 1 1 に示すように、第 3 の実施形態による物性予測装置 1 の制御部 2 は、第 1 の実施形態の構成に加えて、更に、仮想データ補完部 2 8 を備える。

[0105] 仮想データ補完部 2 8 は、仮想データを補完する。仮想データ補完部 2 8 は、入力画面に入力された仮想データが完全なデータではなく一部のデータが欠落している場合に、欠落したデータを補うことで仮想データを補完する。

[0106] 仮想データ取得部 2 2 は、仮想データ補完部 2 8 により補完された仮想データを取得する。

[0107] 仮想データ補完部 2 8 は、第 2 の製造条件に含まれる複数のパラメータのうちの極端に小さい又は大きい値を有する一部のパラメータと、一部のパラメータに基づいて予測される仮想値と、が入力画面に入力されたときに、仮想データを補完してもよい。具体的には、仮想データ補完部 2 8 は、複数の

パラメータのうちの一部のパラメータ以外のパラメータの値を算出することで、仮想データの第2の製造条件を補完してもよい。

[0108] 図12は、第3の実施形態による物性予測装置1の動作例を示すフローチャートである。図13は、第3の実施形態による物性予測装置1の動作例において、入力画面の一例を示す図である。

[0109] 図12に示すように、第3の実施形態において、仮想データ補完部28は、入力画面に入力された仮想データが完全なデータではない場合に、仮想データを補完する（ステップS10）。

[0110] 例えば、第2の製造条件に含まれる m 個のパラメータ $x_1, x_2, \dots, x_m$ のうち、1つのパラメータ x_1 の値が極端に小さい又は大きい値 x_1^* であるときに、ユーザの暗黙知によって試料の物性値が θ^* であると予測できることがある。物性値が θ^* であると予測できる場合、ユーザは、入力画面に、パラメータ x_1 の値として x_1^* を入力し、物性値として θ^* を入力し、 x_1 以外のパラメータの値は入力しない。図13に示される例において、入力画面SCには、第1パラメータの値として極端に小さい0が入力されている。また、入力画面SCには、第1物性及び第2物性として0.0がそれぞれ入力されている。また、入力画面SCにおいて、第1パラメータ以外のパラメータの値は未確定すなわち***に設定されている。

[0111] x_1 以外のパラメータの値が入力されない場合、仮想データは不完全となる。仮想データが不完全となる場合、仮想データ補完部28は、 x_1 以外のパラメータ $x_2, \dots, x_m$ の値を算出して追加することで、仮想データを補完する。例えば、仮想データ補完部28は、予め決められたパラメータ $x_2, \dots, x_m$ のそれぞれの探索領域を、 k 水準に分割する。そして、仮想データ補完部28は、 k 水準に分割された各分割領域のそれぞれから選択された値を組み合わせ、 k^{m-1} 通りのパラメータ $x_2, \dots, x_m$ の値を算出する。 k 水準を用いた算出方法に代えて、仮想データ補完部28は、 $m-1$ 次元の一様乱数を発生させることによってパラメータ $x_2, \dots, x_m$ の値を算出してもよい。

[0112] また、第2の製造条件に含まれる m 個のパラメータ $x_1, x_2, \dots, x_m$ のう

ち、2個以上 $m-1$ 個以下のパラメータの値が極端に小さい又は大きい値であるときに、ユーザの暗黙知によって試料の物性値を予測できることがある。物性値を予測できる場合、ユーザは、入力画面に2個以上 $m-1$ 個以下のパラメータの値を入力し、予測される物性値を入力し、2個以上 $m-1$ 個以下のパラメータ以外のパラメータは入力しない。図13に示される例において、入力画面SCには、第3パラメータの値として極端に大きい100が入力されている。また、入力画面SCには、第4パラメータの値として極端に大きい100が入力されている。また、入力画面SCには、第1物性として100.0が入力されている。また、入力画面SCには、第2物性として133.3が入力されている。また、入力画面SCにおいて、第3、第4パラメータ以外のパラメータの値は未確定に設定されている。

[0113] 2個以上 $m-1$ 個以下のパラメータ以外のパラメータの値が入力されない場合、仮想データは不完全となる。仮想データが不完全となる場合、仮想データ補完部28は、例えば、2個以上 $m-1$ 個以下のパラメータ以外のパラメータのそれぞれの探索領域を k 水準に分割する。そして、仮想データ補完部28は、 k 水準に分割された各分割領域のそれぞれから選択された値を組み合わせたパラメータの値を算出する。

[0114] 試料に類似する物質の実測データが参考になる場合、ユーザは、入力画面に、当該物質の実測データを仮想データとして入力してもよい。

[0115] 入力画面に完全な仮想データが入力された場合、仮想データ補完部28は、仮想データを補完しない。

[0116] 以上述べたように、第3の実施形態では、仮想データ補完部28が、仮想データを補完する。また、仮想データ取得部22は、仮想データ補完部28により補完された仮想データを取得する。

[0117] したがって、仮想データを効率的に生成できる。

[0118] また、第3の実施形態では、仮想データ補完部28が、第2の製造条件に含まれる複数のパラメータのうちの極端に小さい又は大きい値を有する一部のパラメータと、一部のパラメータに基づいて予測される仮想値と、が前記

入力画面に入力されたときに、複数のパラメータのうちの一部のパラメータ以外のパラメータの値を算出することで、仮想データの第2の製造条件を補完する。

[0119] したがって、仮想データを効率的に補完できる。

[0120] [第4の実施形態]

次に、ユーザの端末装置に入力画面を提供する第4の実施形態について、第1の実施形態との差異を中心に説明する。図14は、第4の実施形態による物性予測装置1を示すブロック図である。

[0121] 図1では、入力インターフェース3及び表示部4が物性予測装置1に備えられている例について説明した。図1の例に対して、図14に示される例において、入力インターフェース3及び表示部4は、ユーザの端末装置9に備えられている。物性予測装置1と端末装置9とは、ネットワーク8を介して通信可能に接続される。

[0122] 物性予測装置1は、通信部7を備える。通信部7は、ネットワーク8を経由して端末装置9と通信するためのインターフェースである。例えば、通信部7は、ネットワークカード及びネットワークアダプタ等であってもよい。通信部7は、入力画面生成部24により生成された入力画面を端末装置9に送信する。通信部7は、入力画面に入力された実測データ及び仮想データを端末装置9から受信する。

[0123] 実測データ取得部21は、通信部7により受信された実測データを取得する。仮想データ取得部22は、通信部7により受信された仮想データを取得する。

[0124] モデル生成部23は、通信部7を介して、モデル生成部23により生成された予測モデルを端末装置9に送信してもよい。端末装置9に送信された予測モデルは、端末装置9の表示部4に表示されてもよい。

[0125] 製造条件算出部25は、通信部7を介して、製造条件算出部25により算出された製造条件を端末装置9に送信してもよい。端末装置9に送信された製造条件は、端末装置9の表示部4に表示されてもよい。

[0126] 第4の実施形態によれば、端末装置9を使用するユーザが、物性予測装置1すなわちサーバから提供される入力画面を通じて、最適な製造条件を探索できる。

[0127] 本開示のいくつかの実施形態を説明したが、各実施形態は、例として提示したものであり、開示の範囲を限定することは意図していない。各実施形態は、他の様々な形態で実施されることが可能であり、本開示の要旨を逸脱しない範囲で、種々の省略、置き換え、変更を行うことができる。各実施形態や各実施形態の変形は、本開示の範囲や要旨に含まれると同様に、特許請求の範囲に記載された本開示と本開示の均等の範囲に含まれるものである。

請求の範囲

- [請求項1] 試料の第1の製造条件と、前記第1の製造条件に基づいて製造された前記試料の物性を実測した実測値と、を含む実測データを取得する実測データ取得部と、
- 前記試料の第2の製造条件と、前記第2の製造条件に対応する前記試料の物性を仮想した仮想値と、を含む仮想データを取得する仮想データ取得部と、
- 前記実測データ取得部により取得された前記実測データと、前記仮想データ取得部により取得された前記仮想データとに基づいて、前記実測データに対して前記物性の第1の不確かさを有し、前記仮想データに対して前記物性の第1の不確かさよりも大きい前記物性の第2の不確かさを有するような前記物性の予測モデルを生成するモデル生成部と、
- を備える物性予測装置。
- [請求項2] 前記仮想データ取得部は、前記第2の製造条件に含まれる複数のパラメータのうちの少なくとも1つのパラメータの値が極端に小さい又は大きい場合に予測される前記試料の物性値を、前記仮想値として取得する、請求項1に記載の物性予測装置。
- [請求項3] 前記仮想データ取得部は、原材料又はプロセスが前記試料に類似する物質の物性値を、前記仮想値として取得する、請求項1に記載の物性予測装置。
- [請求項4] 前記物性の第1の不確かさは0である、請求項1に記載の物性予測装置。
- [請求項5] 前記実測データ及び前記仮想データを入力するための入力画面を生成する入力画面生成部を更に備え、
- 前記実測データ取得部は、前記入力画面生成部により生成された前記入力画面に入力された前記実測データを取得し、
- 前記仮想データ取得部は、前記入力画面生成部により生成された前

記入入力画面に入力された前記仮想データを取得する、請求項 1 に記載の物性予測装置。

[請求項6] 前記入力画面生成部により生成された前記入力画面をユーザの端末装置に送信し、前記入力画面に入力された前記実測データ及び前記仮想データを前記端末装置から受信する通信部を更に備え、

前記実測データ取得部は、前記通信部により受信された前記実測データを取得し、

前記仮想データ取得部は、前記通信部により受信された前記仮想データを取得する、請求項 5 に記載の物性予測装置。

[請求項7] 前記仮想データを補完する仮想データ補完部を更に備え、

前記仮想データ取得部は、前記仮想データ補完部により補完された前記仮想データを取得する、請求項 5 に記載の物性予測装置。

[請求項8] 前記仮想データ補完部は、前記第 2 の製造条件に含まれる複数のパラメータのうちの極端に小さい又は大きい値を有する一部のパラメータと、前記一部のパラメータに基づいて予測される前記仮想値と、が前記入力画面に入力されたときに、前記複数のパラメータのうちの前記一部のパラメータ以外のパラメータの値を算出することで、前記仮想データの前記第 2 の製造条件を補完する、請求項 7 に記載の物性予測装置。

[請求項9] 前記物性の第 1 の不確かさ及び前記物性の第 2 の不確かさを設定する不確かさ設定部を更に備え、

前記モデル生成部は、前記不確かさ設定部により設定された前記物性の第 1 の不確かさ及び前記物性の第 2 の不確かさに更に基づいて前記予測モデルを生成する、請求項 1 に記載の物性予測装置。

[請求項10] 前記物性の第 1 の不確かさ及び前記物性の第 2 の不確かさを設定するための設定画面を生成する設定画面生成部を更に備え、

前記不確かさ設定部は、前記設定画面生成部により生成された前記設定画面に対する入力操作に応じて、前記物性の第 1 の不確かさ及び

前記物性の第2の不確かさを設定する、請求項9に記載の物性予測装置。

[請求項11] 前記モデル生成部は、ベイズ推定を用いて前記予測モデルを生成し、前記第1の不確かさは、第1の分散であり、前記第2の不確かさは、前記第1の分散よりも大きい第2の分散である、請求項1に記載の物性予測装置。

[請求項12] 前記モデル生成部は、次式にしたがって前記予測モデルを生成する、請求項11に記載の物性予測装置。

[数1]

$$\theta_i = \sum_{j=1}^d \alpha_j \phi_j(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i$$

[数2]

$$p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d | \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\theta_i\}_{i=1}^n) = \frac{p(\{\theta_i\}_{i=1}^n | \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\alpha_j\}_{j=1}^d) p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d)}{\int p(\{\theta_i\}_{i=1}^n | \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\alpha_j\}_{j=1}^d) p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d) d\alpha_1 \cdots d\alpha_d}$$

$$= \frac{(\prod_{i=1}^n p(\theta_i | \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d)) \cdot p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d)}{\int (\prod_{i=1}^n p(\theta_i | \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d)) \cdot p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d) d\alpha_1 \cdots d\alpha_d}$$

但し、

θ_i ：実測データおよび仮想データのうち、i番目のデータにおける物性

$\mathbf{x}_i$ ：実測データおよび仮想データのうち、i番目のデータにおける製造条件

$\phi_j(\cdot)$ ：基底関数

ε_i ：実測データおよび仮想データのうち、i番目のデータにおける物性の誤差

α_j ：予測モデルのパラメータ

$p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d)$ ：事前分布

$p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d | \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\theta_i\}_{i=1}^n)$ ：事後分布

$p(\theta_i | \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d)$ ：i番目のデータに対する尤度であって、

$p(\theta_i | \mathbf{x}_i, \{\alpha_j\}_{j=1}^d) = N(\theta_i | \sum_{j=1}^d \alpha_j \phi_j(\mathbf{x}_i), \sigma_i^2)$ と等価の値

σ_i^2 ：実測データおよび仮想データのうち、i番目のデータにおける物性の誤差の分散

$\int p(\{\theta_i\}_{i=1}^n | \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{\alpha_j\}_{j=1}^d) p(\{\alpha_j\}_{j=1}^d) d\alpha_1 \cdots d\alpha_d$ ：周辺尤度

[請求項13] 前記モデル生成部により生成された前記予測モデルに基づいて前記試料の第3の製造条件を算出する製造条件算出部を更に備える、請求

項 1 乃至 1 2 のいずれか 1 項に記載の物性予測装置。

[請求項14] 前記第 3 の製造条件は、前記予測モデル中の前記物性の不確かさが最大になるときの製造条件及び前記予測モデル中の前記物性の不確かさが最小になるときの製造条件の少なくとも 1 つを含む、請求項 1 3 に記載の物性予測装置。

[請求項15] 前記実測データ取得部は、前記製造条件算出部により算出された前記第 3 の製造条件と、前記第 3 の製造条件に基づいて製造された前記試料の物性を実測した第 2 の実測値と、を含む第 2 の実測データを更に取得し、

前記モデル生成部は、前記実測データ取得部により取得された前記第 2 の実測データに基づいて前記予測モデルを更新する、請求項 1 3 に記載の物性予測装置。

[請求項16] 前記モデル生成部は、前記第 2 の実測値が設定された最適値である場合には、前記予測モデルを更新しない、請求項 1 5 に記載の物性予測装置。

[請求項17] 試料の第 1 の製造条件と、前記第 1 の製造条件に基づいて製造された前記試料の物性を実測した実測値と、を含む実測データを取得する工程と、

前記試料の第 2 の製造条件と、前記第 2 の製造条件に対応する前記試料の物性を仮想した仮想値と、を含む仮想データを取得する工程と、

前記取得された実測データ及び仮想データに基づいて、前記実測データに対して前記物性の第 1 の不確かさを有し、前記仮想データに対して前記物性の第 1 の不確かさよりも大きい前記物性の第 2 の不確かさを有するような前記物性の予測モデルを生成する工程と、

を備える物性予測方法。

[請求項18] コンピュータに、

試料の第 1 の製造条件と、前記第 1 の製造条件に基づいて製造され

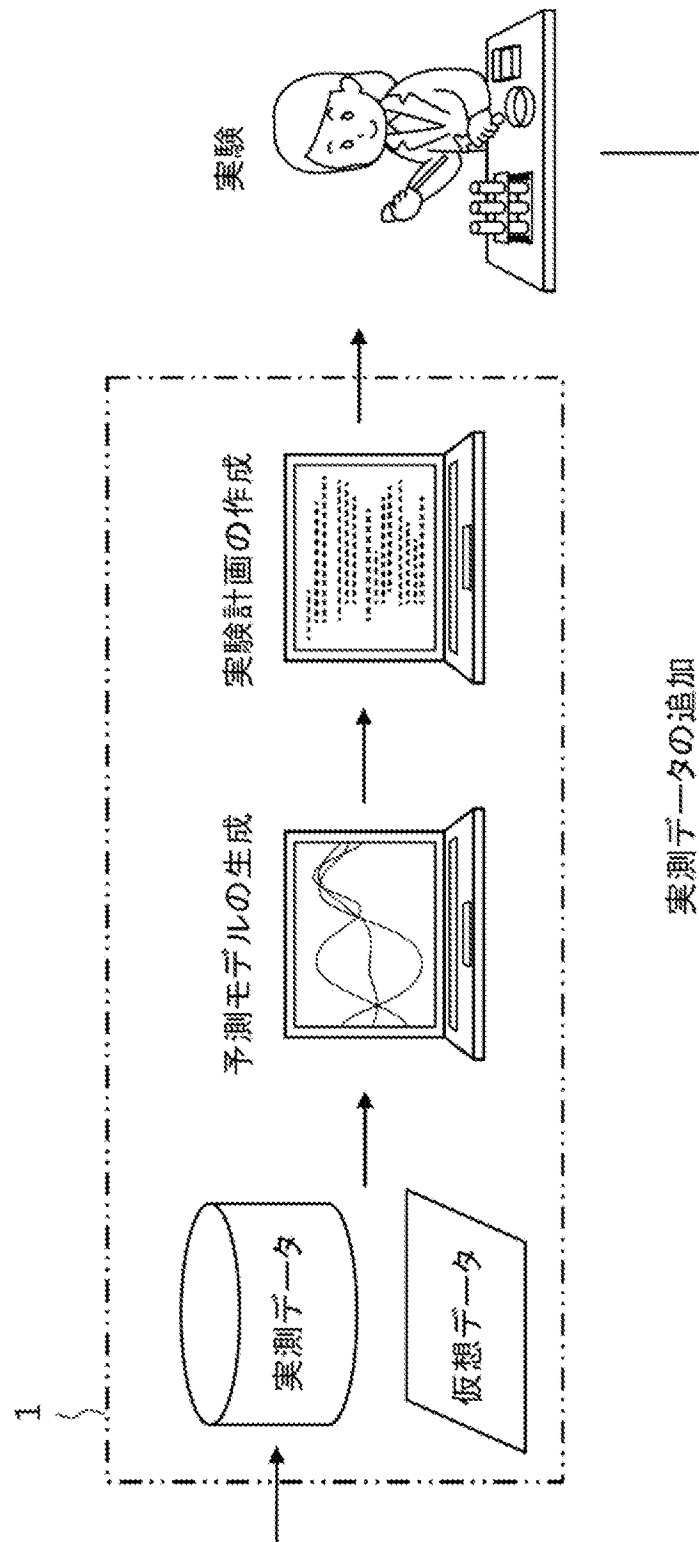
た前記試料の物性を実測した実測値と、を含む実測データを取得する手順、

前記試料の第2の製造条件と、前記第2の製造条件に対応する前記試料の物性を仮想した仮想値と、を含む仮想データを取得する手順、及び

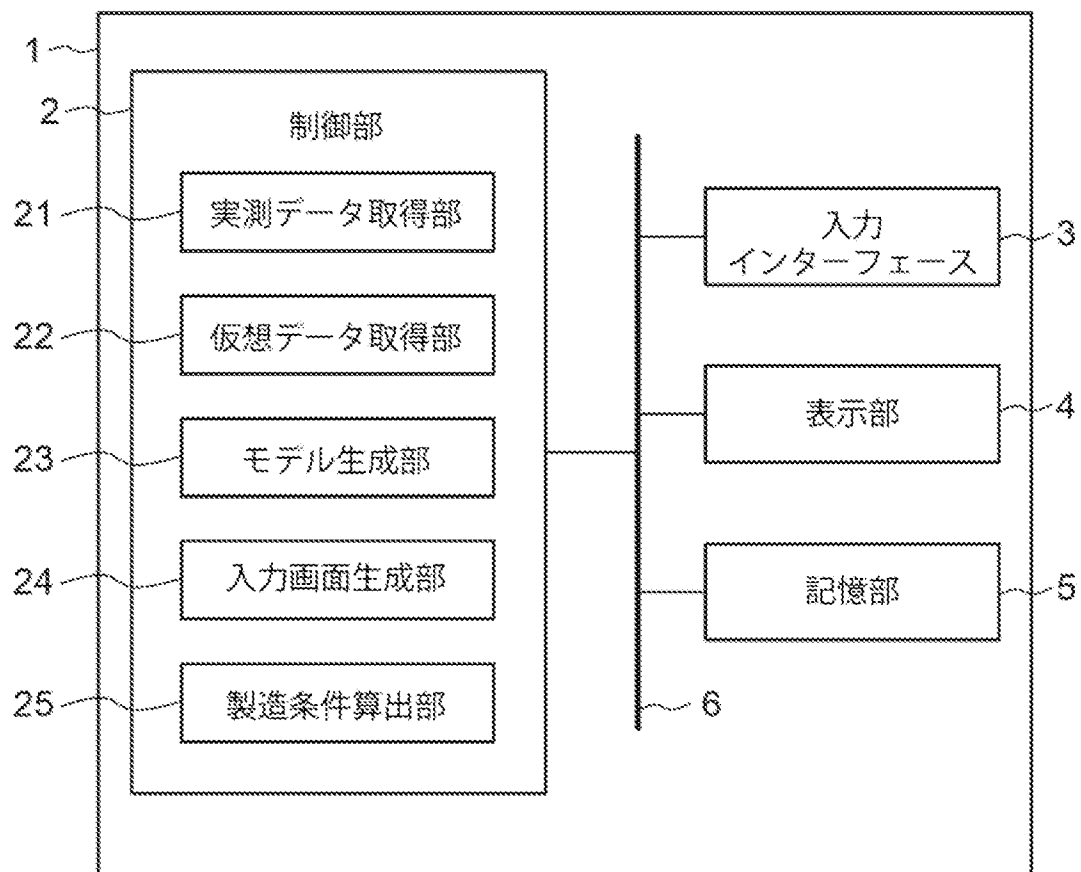
前記取得された実測データ及び仮想データに基づいて、前記実測データに対して前記物性の第1の不確かさを有し、前記仮想データに対して前記物性の第1の不確かさよりも大きい前記物性の第2の不確かさを有するような前記物性の予測モデルを生成する手順

を実行させるための物性予測プログラム。

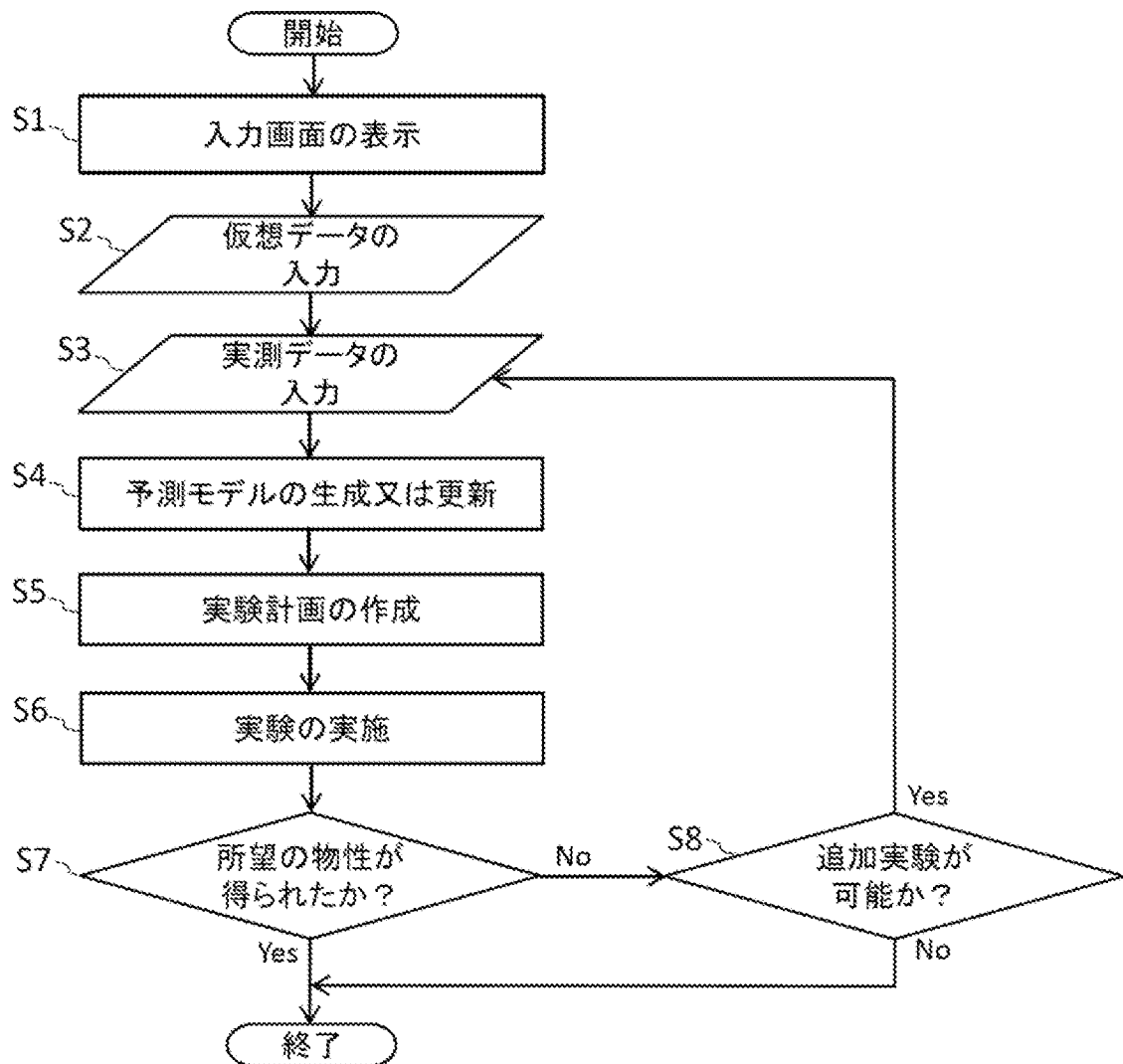
[図1]



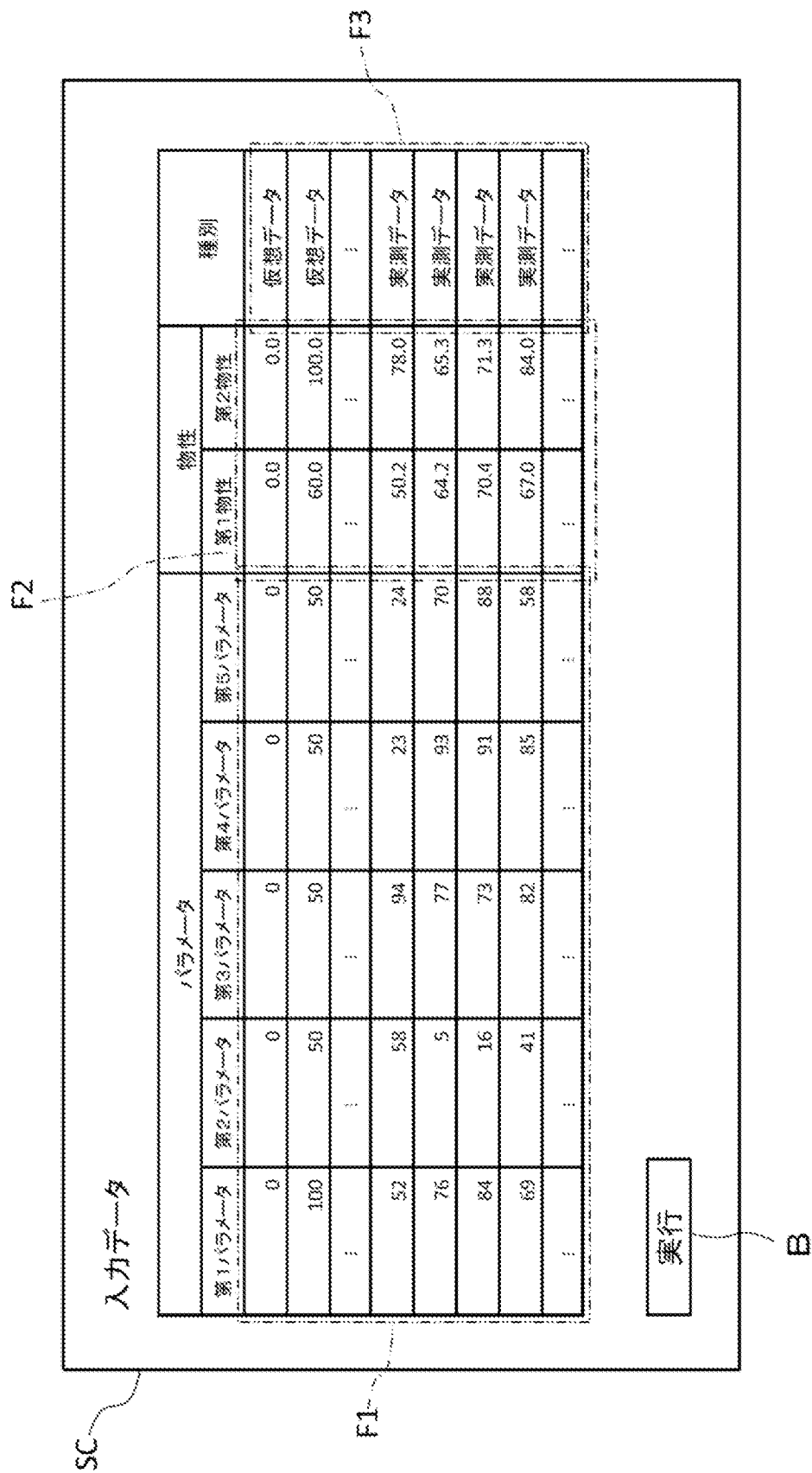
[図2]



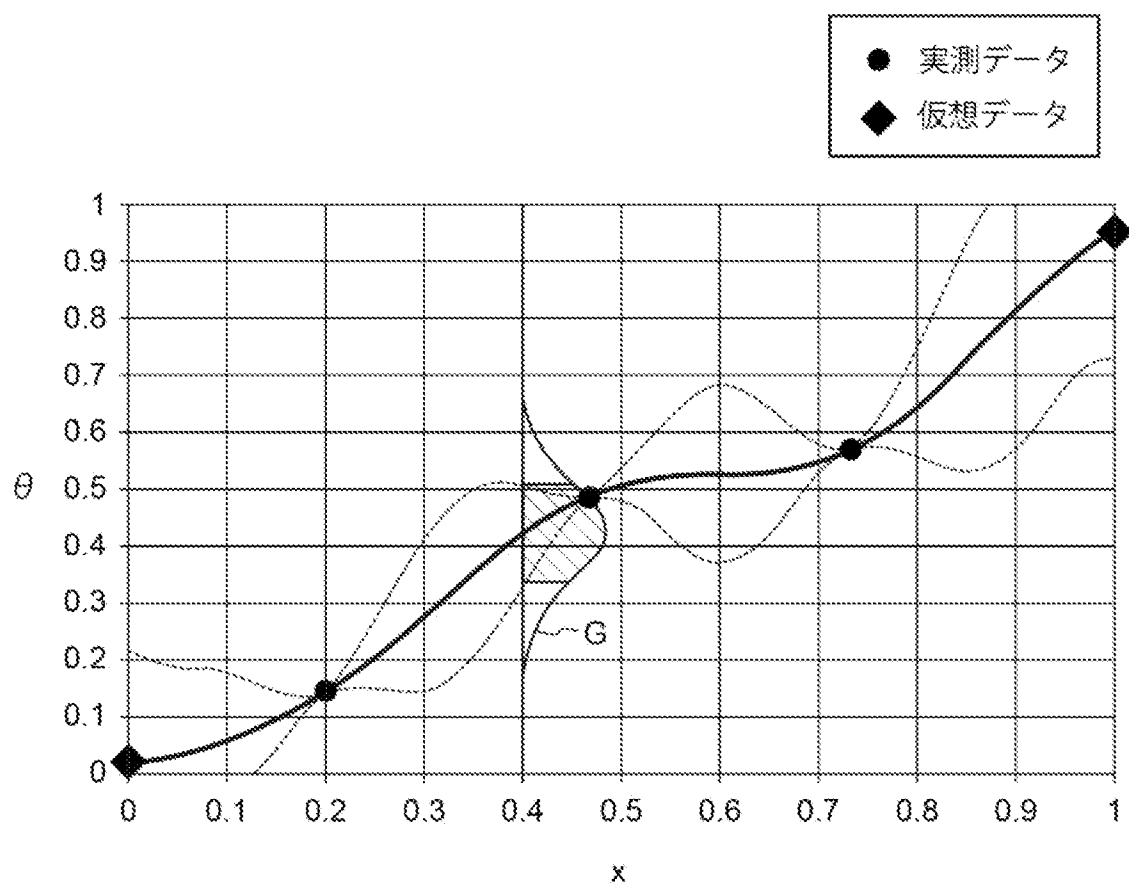
[図3]



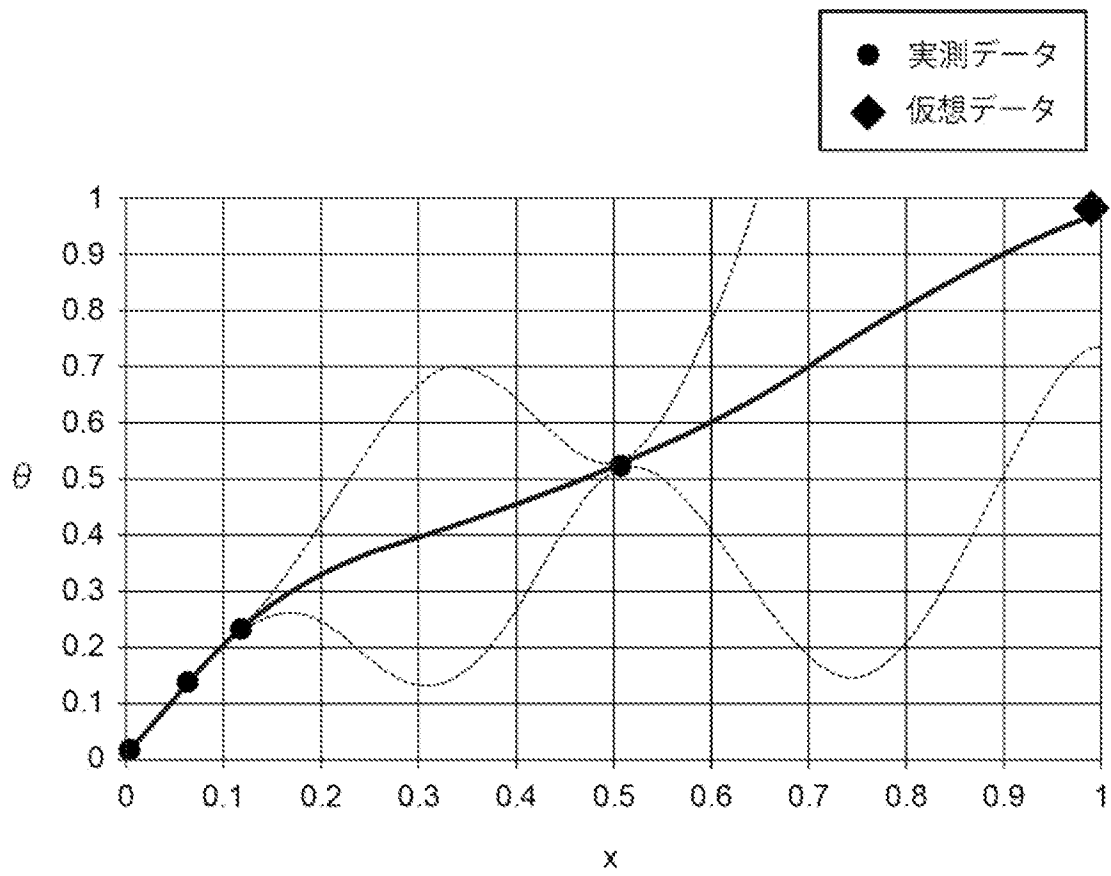
[図4]



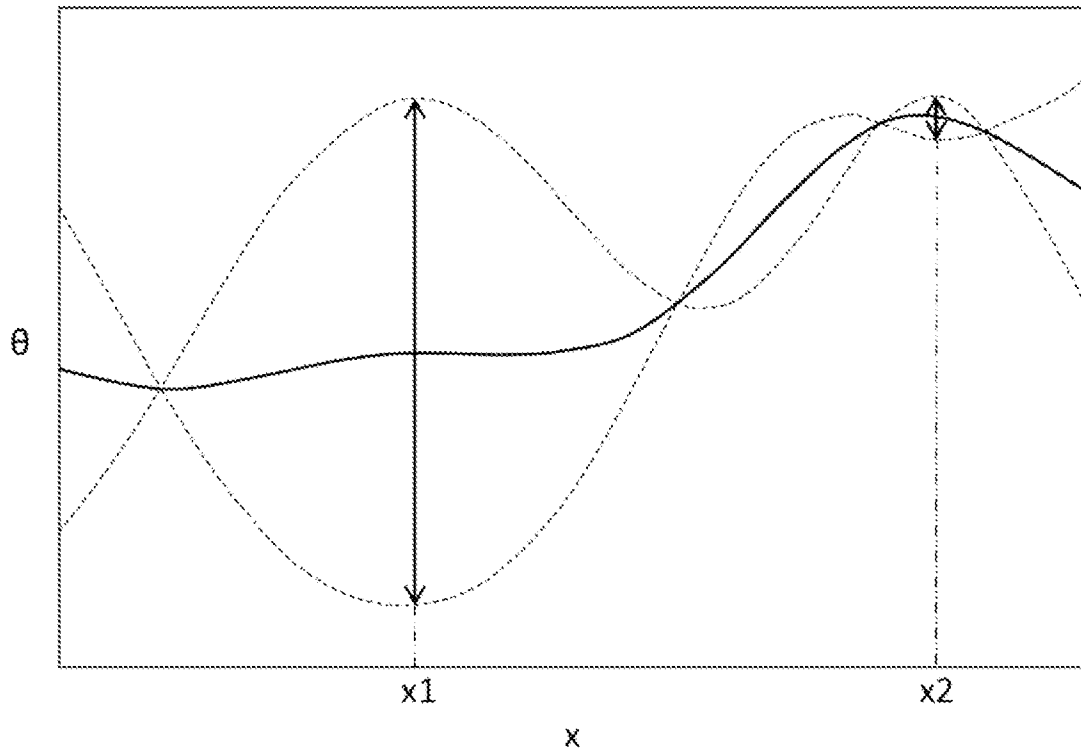
[図5]



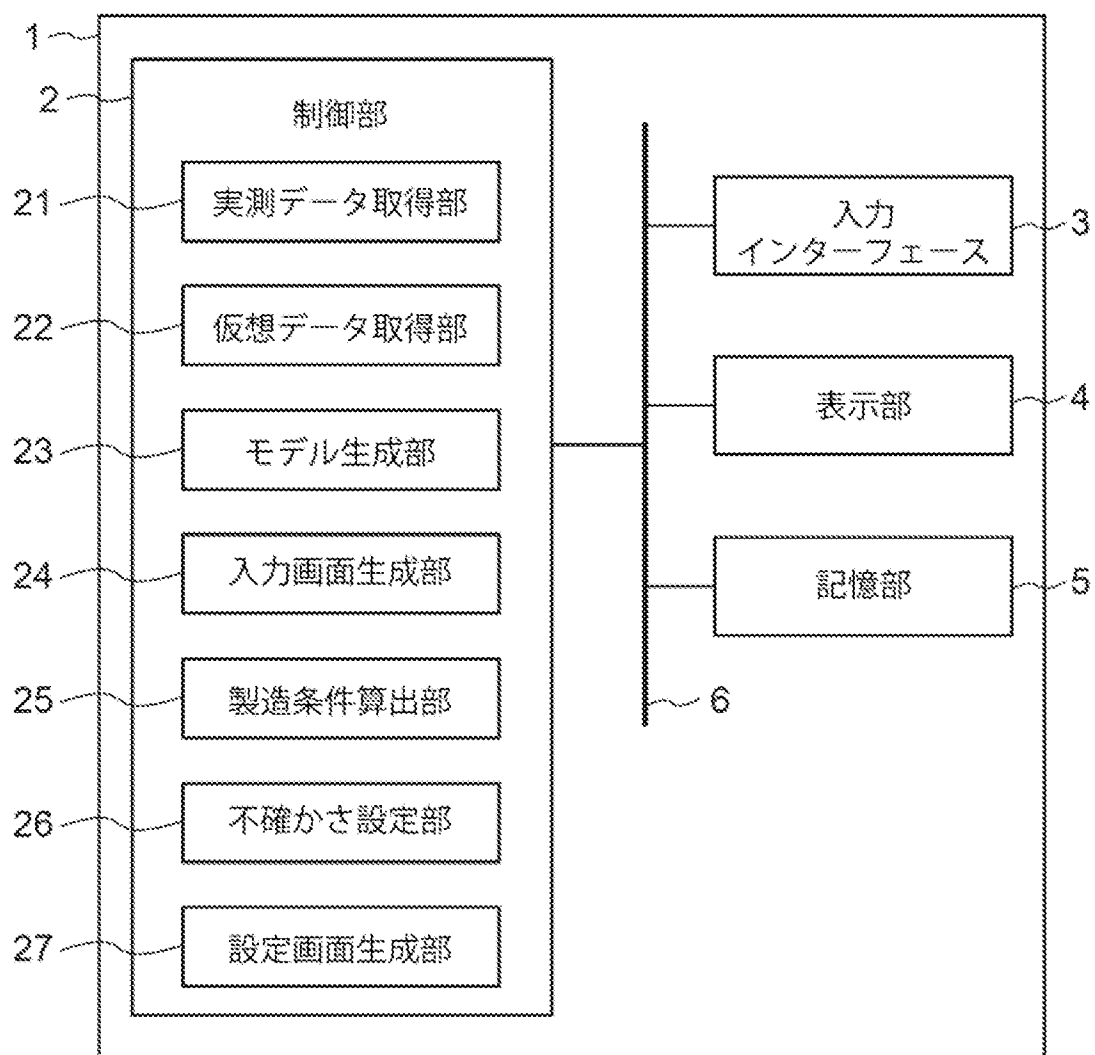
[図6]



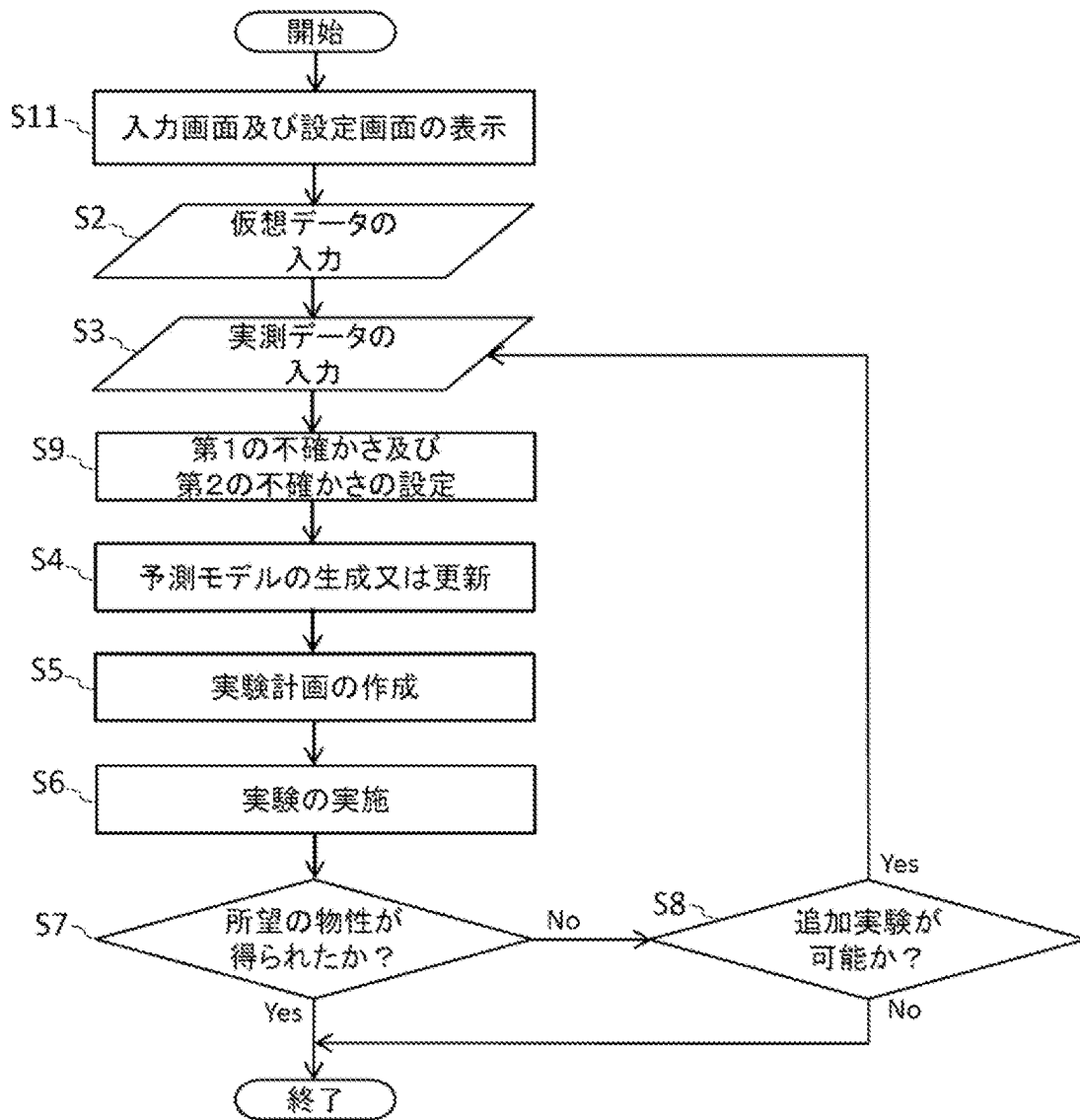
[図7]



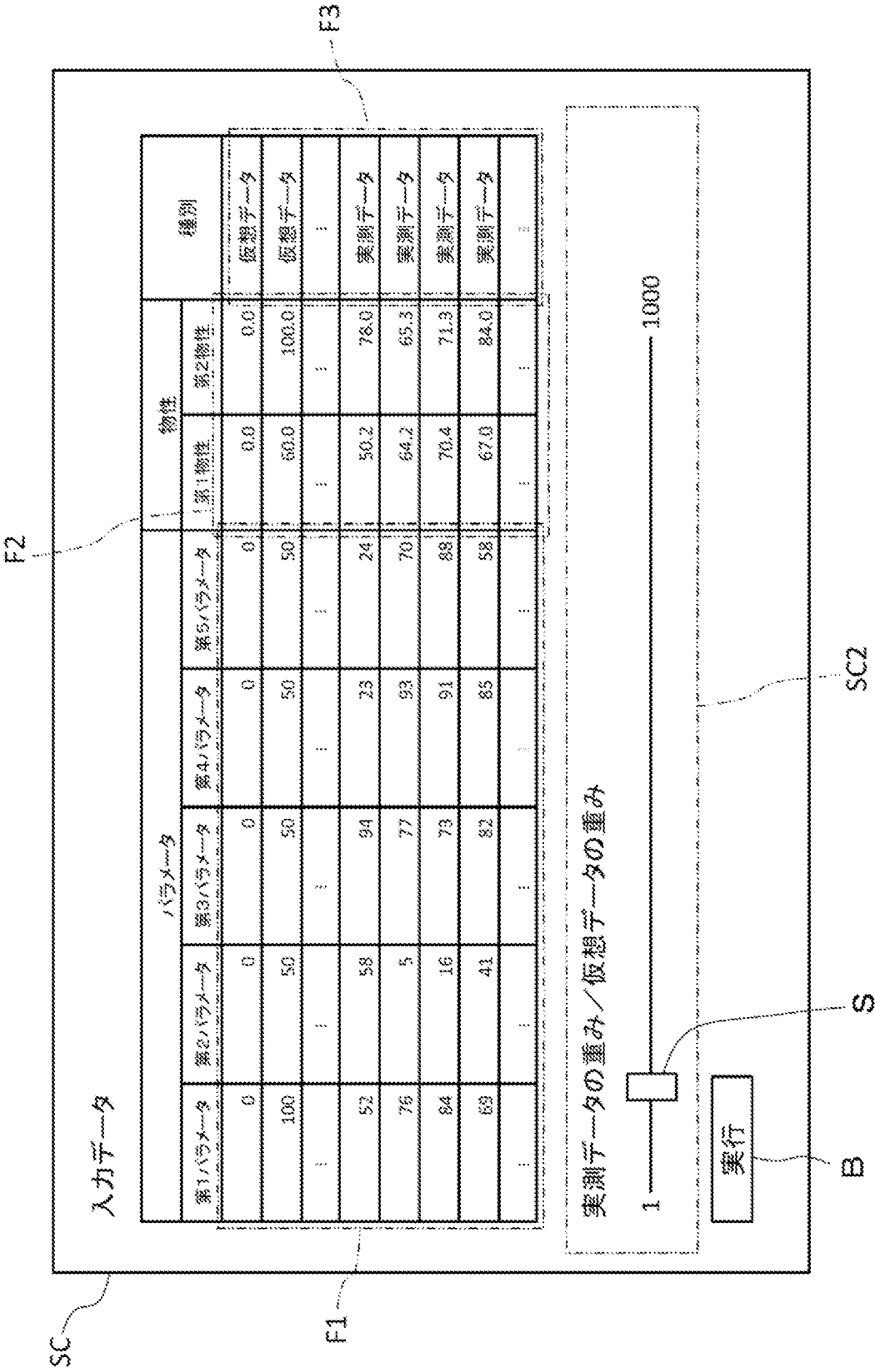
[図8]



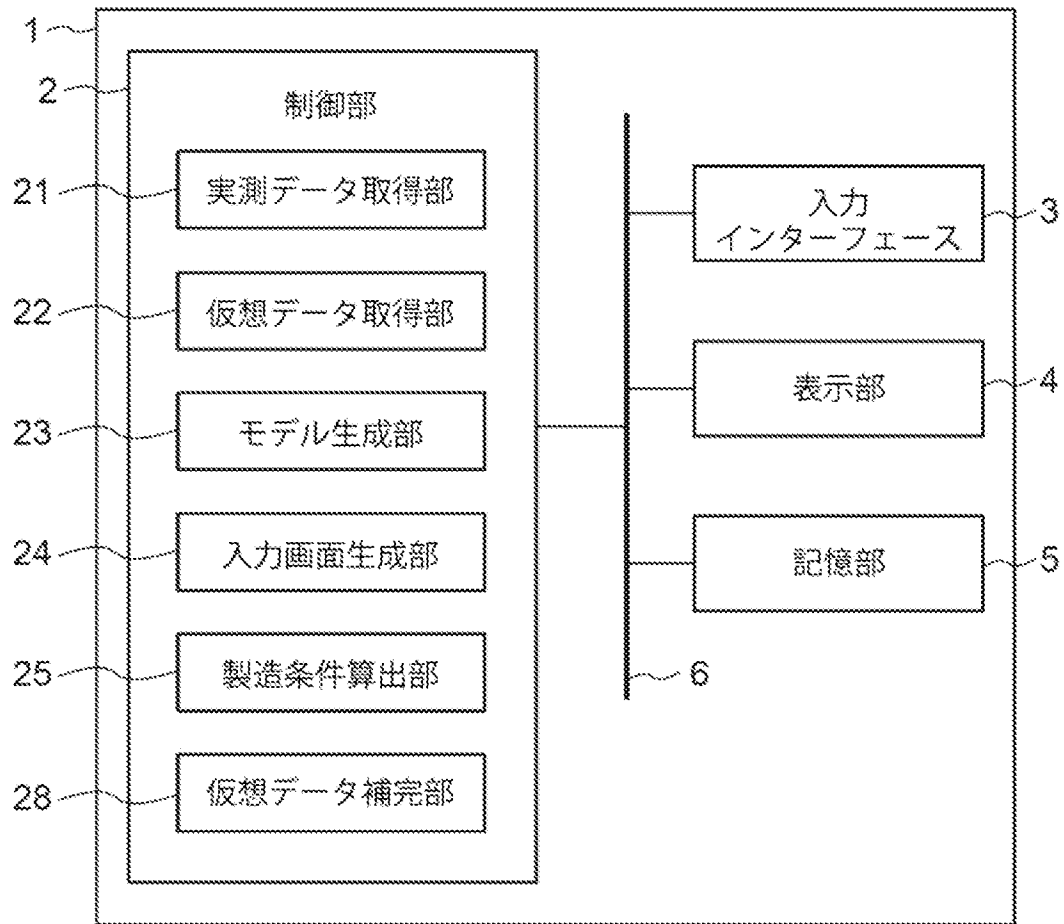
[図9]



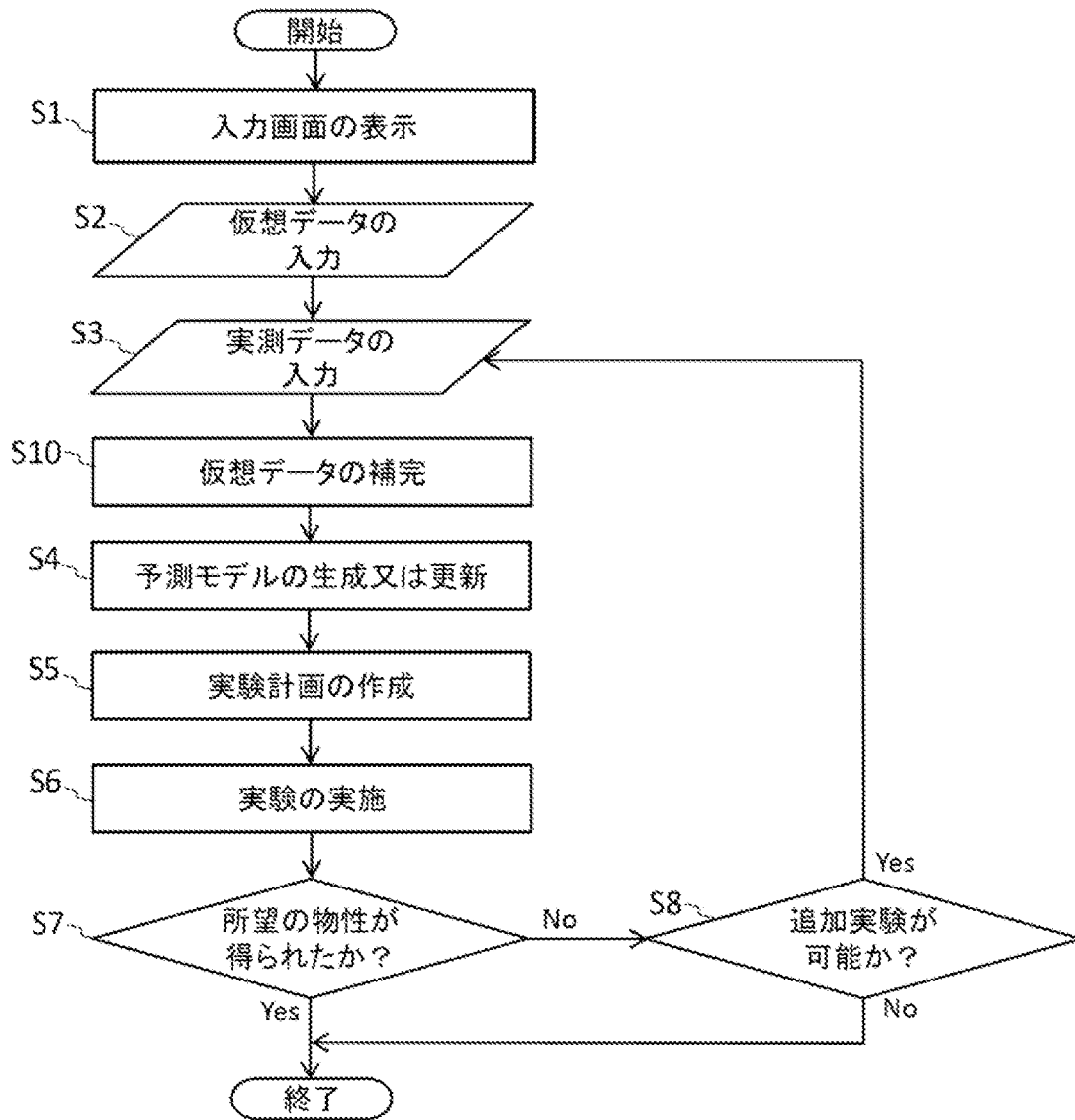
[図10]



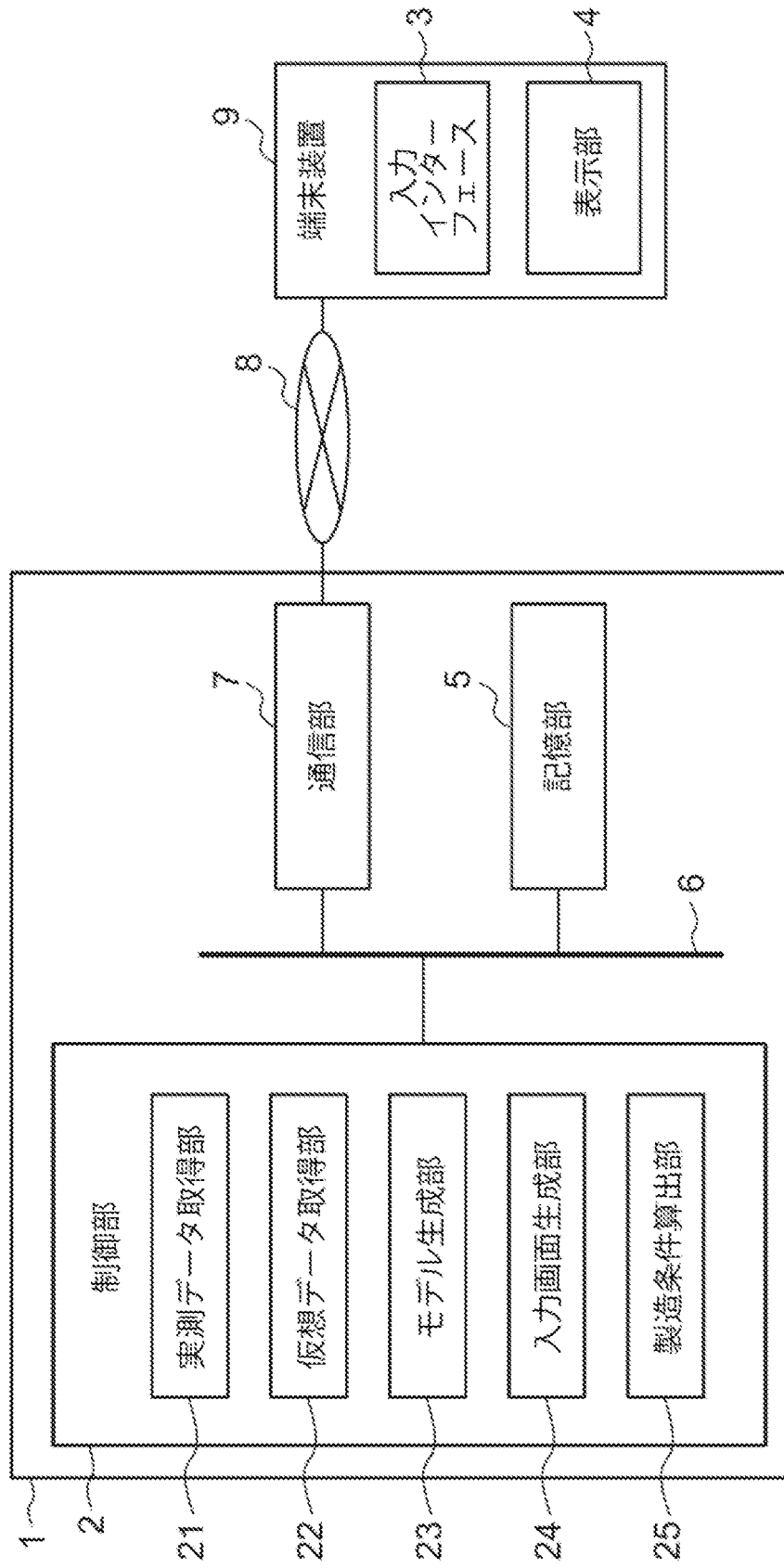
[図11]



[図12]



[図14]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/019633

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>G16C 60/00</i> (2019.01)i; <i>G16C 20/70</i> (2019.01)i FI: G16C60/00; G16C20/70 According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) G06Q10/00-99/00; G16C10/00-99/00; G16Z99/00 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 1971-2024 Registered utility model specifications of Japan 1996-2024 Published registered utility model applications of Japan 1994-2024 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 2022-65466 A (NIKON CORPORATION) 27 April 2022 (2022-04-27) paragraphs [0009]-[0014], [0020]-[0029], [0043], [0066]-[0068], [0092]	1-18
A	JP 2022-14618 A (HITACHI, LTD.) 20 January 2022 (2022-01-20) paragraphs [0019], [0033]-[0034], [0037], [0047]	1-18
A	JP 2022-82064 A (FUJITSU LIMITED) 01 June 2022 (2022-06-01) paragraphs [0012]-[0014], [0017], [0022]-[0025], [0056], [0069]	1-18
A	US 7729965 B1 (FANNIE, Mae) 01 June 2010 (2010-06-01) column 2, line 37 to column 4, line 3, column 4, lines 19-57, column 5, lines 33-41	1-18
☐ 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 “D” document cited by the applicant in the international application “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 05 August 2024		Date of mailing of the international search report 13 August 2024
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/JP2024/019633

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP	2022-65466	A	27 April 2022	(Family: none)	
JP	2022-14618	A	20 January 2022	(Family: none)	
JP	2022-82064	A	01 June 2022	US 2022/0164685 A1 paragraphs [0034]-[0037], [0043], [0053]-[0057], [0128], [0153]	
				EP 4002376 A1	
				CN 114520029 A	
US	7729965	B1	01 June 2010	(Family: none)	

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; G16C 20/70(2019.01)i

FI: G16C60/00; G16C20/70

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））

G06Q10/00-99/00; G16C10/00-99/00; G16Z99/00

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

1971-2024年

日本国実用新案登録公報

1996-2024年

日本国登録実用新案公報

1994-2024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 2022-65466 A（株式会社ニコン） 27.04.2022（2022-04-27） 段落[0009]-[0014], [0020]-[0029], [0043], [0066]-[0068], [0092]	1-18
A	JP 2022-14618 A（株式会社日立製作所） 20.01.2022（2022-01-20） 段落[0019], [0033]-[0034], [0037], [0047]	1-18
A	JP 2022-82064 A（富士通株式会社） 01.06.2022（2022-06-01） 段落[0012]-[0014], [0017], [0022]-[0025], [0056], [0069]	1-18
A	US 7729965 B1（FANNIE Mae） 01.06.2010（2010-06-01） 第2列第37-第4列第3行, 第4列第19-57行, 第5列第33-41行	1-18

☐ 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

“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献

“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

05.08.2024

国際調査報告の発送日

13.08.2024

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）

渡邊 加寿磨 5R 5875

電話番号 03-3581-1101 内線 3560

様式 PCT/ISA/210（第2ページ）（2022年7月）

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/JP2024/019633

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP	2022-65466	A	27.04.2022	(ファミリーなし)	
JP	2022-14618	A	20.01.2022	(ファミリーなし)	
JP	2022-82064	A	01.06.2022	US 2022/0164685 A1 段落[0034]-[0037], [0043], [0053]-[0057], [0128], [0153] EP 4002376 A1 CN 114520029 A	
US	7729965	B1	01.06.2010	(ファミリーなし)	