

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7339923号
(P7339923)

(45)発行日 令和5年9月6日(2023.9.6)

(24)登録日 令和5年8月29日(2023.8.29)

(51)国際特許分類

G 06 F	30/10 (2020.01)	F I	G 06 F	30/10
G 06 F	30/20 (2020.01)		G 06 F	30/20
G 06 F	30/27 (2020.01)		G 06 F	30/27

請求項の数 10 (全15頁)

(21)出願番号	特願2020-79791(P2020-79791)
(22)出願日	令和2年4月28日(2020.4.28)
(65)公開番号	特開2021-174402(P2021-174402)
	A)
(43)公開日	令和3年11月1日(2021.11.1)
審査請求日	令和4年11月14日(2022.11.14)

(73)特許権者	000005108
	株式会社日立製作所
	東京都千代田区丸の内一丁目6番6号
(74)代理人	110001678
	藤央弁理士法人
(72)発明者	金澤 拓也
	東京都千代田区丸の内一丁目6番6号
	株式会社日立製作所内
(72)発明者	淺原 彰規
	東京都千代田区丸の内一丁目6番6号
	株式会社日立製作所内
(72)発明者	森田 秀和
	東京都千代田区丸の内一丁目6番6号
	株式会社日立製作所内
審査官	合田 幸裕

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 材料の特性値を推定するシステム

(57)【特許請求の範囲】**【請求項1】**

材料の特性値を推定するシステムであって、

1以上のプロセッサと、

1以上の記憶装置と、を含み、

前記1以上の記憶装置は、材料特性推定モデルを格納し、

前記材料特性推定モデルは、

材料の記述子から、前記材料のシミュレーション結果の特性値を推定する、シミュレーション推定モデルと、

前記シミュレーション推定モデルの推定結果及び前記材料の記述子から、前記材料の特性値を推定する、材料特性値推定モデルと、を含み、

前記1以上のプロセッサは、

第1材料の記述子を前記シミュレーション推定モデルに入力して、前記第1材料の特性値の第1シミュレーション推定結果を取得し、

前記第1シミュレーション推定結果と前記第1材料の記述子とを前記材料特性値推定モデルに入力して、前記第1材料の特性推定値を取得する、システム。

【請求項2】

請求項1に記載のシステムであって、

前記1以上の記憶装置は、

シミュレーションにより材料の特性値を推定するシミュレータと、

10

20

特性値の測定値と関連付けられた実験済み材料を示す実験済み材料データベースと、を格納し、

前記 1 以上のプロセッサは、

前記実験済み材料データベースから測定値を取得し、

前記取得した測定値の材料のシミュレーションを前記シミュレータにより実行して、シミュレーション結果を取得し、

前記取得した測定値及び前記シミュレーション結果を使用して、前記材料特性推定モデルの学習を行う、システム。

【請求項 3】

請求項 2 に記載のシステムであって、

10

前記 1 以上の記憶装置は、未実験材料を示す未実験材料データベースを格納し、

前記 1 以上のプロセッサは、前記実験済み材料データベース及び前記未実験材料データベースに格納されている材料の間の類似度に基づいて、前記シミュレーション推定モデル及び前記材料特性値推定モデルの学習データに含めるデータを前記実験済み材料データベース及び前記未実験材料データベースから選択する、システム。

【請求項 4】

請求項 2 に記載のシステムであって、

前記材料特性推定モデルの学習において、前記取得した測定値の材料の記述子と前記シミュレーション結果とが、前記材料特性値推定モデルに入力される、システム。

【請求項 5】

20

請求項 1 に記載のシステムであって、

前記 1 以上のプロセッサは、前記第 1 材料の情報と、前記第 1 材料の材料特性値推定モデルによる特性推定値とを、モニタに出力する、システム。

【請求項 6】

システムが実行する方法であって、

前記システムは、

1 以上のプロセッサと、

1以上の記憶装置と、を含み、

前記 1 以上の記憶装置は、材料特性推定モデルを格納し、

前記材料特性推定モデルは、

材料の記述子から、前記材料のシミュレーション結果の特性値を推定する、シミュレーション推定モデルと、

前記シミュレーション推定モデルの推定結果及び前記材料の記述子から、前記材料の特性値を推定する、材料特性値推定モデルと、を含み、

前記方法は、

前記 1 以上のプロセッサが、第 1 材料の記述子を前記シミュレーション推定モデルに入力して、前記第 1 材料の特性値の第 1 シミュレーション推定結果を取得し、

前記 1 以上のプロセッサが、前記第 1 シミュレーション推定結果と前記第 1 材料の記述子とを前記材料特性値推定モデルに入力して、前記第 1 材料の特性推定値を取得する、ことを含む方法。

30

【請求項 7】

請求項 6 に記載の方法であって、

前記 1 以上の記憶装置は、

シミュレーションにより材料の特性値を推定するシミュレータと、

特性値の測定値と関連付けられた実験済み材料を示す実験済み材料データベースと、を格納し、

前記方法は

前記 1 以上のプロセッサが、前記実験済み材料データベースから測定値を取得し、

前記 1 以上のプロセッサが、前記取得した測定値の材料のシミュレーションを前記シミュレータにより実行して、シミュレーション結果を取得し、

40

50

前記 1 以上のプロセッサが、前記取得した測定値及び前記シミュレーション結果を使用して、前記材料特性推定モデルの学習を行う、ことを含む方法。

【請求項 8】

請求項 7 に記載の方法であって、

前記 1 以上の記憶装置は、未実験材料を示す未実験材料データベースを格納し、

前記方法は、前記 1 以上のプロセッサが、前記実験済み材料データベース及び前記未実験材料データベースに格納されている材料の間の類似度に基づいて、前記シミュレーション推定モデル及び前記材料特性値推定モデルの学習データに含めるデータを前記実験済み材料データベース及び前記未実験材料データベースから選択する、ことを含む方法。

【請求項 9】

10

請求項 7 に記載の方法であって、

前記材料特性推定モデルの学習において、前記取得した測定値の材料の記述子と前記シミュレーション結果とが、前記材料特性値推定モデルに入力される、方法。

【請求項 10】

請求項 6 に記載の方法であって、

前記 1 以上のプロセッサが、前記第 1 材料の情報と、前記第 1 材料の材料特性値推定モデルによる特性推定値とを、モニタに出力する、ことを含む方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

20

本発明は、材料の特性値を推定するシステムに関する。

【背景技術】

【0002】

実験による材料の特性の評価方法と異なる方法として、数値シミュレーションによる材料特性評価が行われている。材料の数値シミュレーションは、物理法則に基づきシミュレータを構成し、材料の記述子を数値シミュレータに入力することで、材料特性値をシミュレーション結果として得る。また、マテリアルインフォマティクスは、材料の特徴と特性値との間の応答関係のみ考慮する機械学習モデルを使用して、材料の特性値を推定し、実験・数値シミュレーションの対象を選択する。これにより、それらの回数を最適化することを可能とする。

【0003】

30

このような状況において、非特許文献 1 は、材料の数値シミュレーション結果を機械学習の学習データに用いることにより、機械学習モデルによって材料特性推定を行う技術を開示している。そのほか、特許文献 1 は、画像データから 3 D モデルを作成し、そのモデルの物理シミュレーションを行って新規の学習画像データを大量生成することにより、機械学習モデルの汎化性能を上げる技術を開示している。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【文献】特開 2017 - 182129 号公報

40

【非特許文献】

【0005】

【文献】G. R. Schleuder et al., "From DFT to machine learning: recent approaches to materials science - a review", J. Phys.: Mater. 2 (2019) 032001

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

材料の数値シミュレーション、特に密度汎関数法等の第一原理計算による数値シミュレーションは、推定対象である材料特性値の良い近似値を与えることができる。しかし、数値シミュレーションの計算コストは極めて高く、数値シミュレーションを実行することが

50

できる材料種類の数は限定される。従って、数値シミュレーションを機械学習モデルにより代替し、より少ない計算コストで材料特性値を高精度に推定できる技術が望まれる。

【課題を解決するための手段】

【0007】

本発明の一態様は、材料の特性値を推定するシステムであって、1以上のプロセッサと
1以上の記憶装置と、を含む。前記1以上の記憶装置は、材料特性推定モデルを格納する。
前記材料特性推定モデルは、材料の記述子から、前記材料のシミュレーション結果の
特性値を推定する、シミュレーション推定モデルと、前記シミュレーション推定モデルの
推定結果及び前記材料の記述子から、前記材料の特性値を推定する、材料特性値推定モ
デルと、を含む。前記1以上のプロセッサは、第1材料の記述子を前記シミュレーション推
定モデルに入力して、前記第1材料の特性値の第1シミュレーション推定結果を取得し、
前記第1シミュレーション推定結果と前記第1材料の記述子とを前記材料特性値推定モ
デルに入力して、前記第1材料の特性推定値を取得する。

10

【発明の効果】

【0008】

本発明の一態様によれば、機械学習モデルによって材料特性値を高精度かつ効率的に推定できる。

【図面の簡単な説明】

【0009】

【図1】本明細書の実施例に係る、数値シミュレータを代替可能な材料特性推定モデルを
模式的に示す。

20

【図2】本明細書の実施例に係る材料特性推定装置の論理構成例を模式的に示す。

【図3】材料特性推定装置のハードウェア構成例を示す。

【図4】実験済み材料データベースの構成例を示す。

【図5】未実験材料データベースの構成例を示す。未

【図6】記述子計算部が出力する記述子リストの構成例を示す。

【図7】材料特性推定装置の全体的な処理の例のフローチャートを示す。

【図8】2次元空間における材料の分布を模式的に示す。

【図9】シミュレーション推定モデルの学習の詳細のフローチャートを示す。

【図10】材料特性値推定モデルの学習の詳細のフローチャートを示す。

30

【図11】材料特性推定結果表示部がモニタにおいて表示する材料特性推定結果の画像例
を示す。

【発明を実施するための形態】

【0010】

以下においては、便宜上その必要があるときは、複数のセクションまたは実施例に分割して説明するが、特に明示した場合を除き、それらは互いに無関係なものではなく、一方は他方の一部または全部の変形例、詳細、補足説明等の関係にある。また、以下において、要素の数等（個数、数値、量、範囲等を含む）に言及する場合、特に明示した場合及び原理的に明らかに特定の数に限定される場合等を除き、その特定の数に限定されるものではなく、特定の数以上でも以下でもよい。

40

【0011】

本システムは、物理的な計算機システム（一つ以上の物理的な計算機）でもよいし、クラウド基盤のような計算リソース群（複数の計算リソース）上に構築されたシステムでもよい。計算機システムあるいは計算リソース群は、1以上のインターフェース装置（例えば通信装置及び入出力装置を含む）、1以上の記憶装置（例えば、メモリ（主記憶）及び補助記憶装置を含む）、及び、1以上のプロセッサを含む。

【0012】

プログラムがプロセッサによって実行されることで機能が実現される場合、定められた処理が、適宜に記憶装置及び/またはインターフェース装置等を用いながら行われるため、機能はプロセッサの少なくとも一部とされてもよい。機能を主語として説明された処理は

50

、プロセッサあるいはそのプロセッサを有するシステムが行う処理としてもよい。プログラムは、プログラムソースからインストールされてもよい。プログラムソースは、例えば、プログラム配布計算機または計算機が読み取り可能な記憶媒体（例えば計算機読み取り可能な非一過性記憶媒体）であってもよい。各機能の説明は一例であり、複数の機能が一つの機能にまとめられたり、一つの機能が複数の機能に分割されたりしてもよい。

【0013】

[概略]

以下において、材料特性値を効率的かつ高精度に推定することができる技術を開示する。本明細書の実施例は、材料特性の数値シミュレータを、機械学習モデル（材料特性推定モデル）により代替可能とする。図1は、本明細書の実施例における、数値シミュレータ11を代替可能な材料特性推定モデル20を模式的に示す。10

【0014】

数値シミュレータ11は、入力された材料の化学構造式12から、当該材料の所定の特性値のシミュレーション結果13を出力する。図1の例において、数値シミュレータ11は化学構造式を入力として受け付け、1種類の材料特性値を出力するが、他の例において、数値シミュレータ11は化学構造式の記述子を入力として受け付けてもよく、複数種類の材料特性値を出力してもよい。

【0015】

材料特性推定モデル20は、数値シミュレータ11のシミュレーション結果を推定するシミュレーション推定モデル21と、材料特性値推定モデル25と、を含む。シミュレーション推定モデル21は、材料の記述子22（ベクトル）を入力として受け付け、数値シミュレータ11のシミュレーション結果（材料特性値）を推定する。記述子は、材料の特徴を多変量で表現するベクトルである。20

【0016】

記述子は、複数の要素（特徴量）で構成されており、各要素が対応する特徴、例えば、分子量や元素混合比を表す。図1の例においてシミュレーション推定モデル21は、1種類の材料特性値を出力するが、数値シミュレータ11のシミュレーション結果が含む複数種類の材料特性値を出力してもよい。シミュレーション推定モデル21は、数値シミュレータ11のシミュレーション結果13とシミュレーション推定モデル21の推定結果23との間の誤差により最適化（訓練）される。30

【0017】

材料特性値推定モデル25は、シミュレーション推定モデル21が推定する材料特性値と同一の1又は複数種類の材料特性値を推定する。図1の例において、材料特性値推定モデル25は、特定の1種類の材料特性値を推定する。

【0018】

材料特性値推定モデル25は、上記材料の記述子24と材料特性推定モデル20のシミュレーション結果推定値23とを結合したベクトル26を入力として受け取る。記述子24は、シミュレーション推定モデル21に入力される記述子22と同一又は異なっていてもよい。ベクトル26は、材料の記述子22を拡張した記述子である。材料特性値推定モデル25は、拡張記述子26から、所定の材料特性値を推定し、その材料特性推定値27を出力する。材料特性推定値27が、材料特性推定モデル20による材料特性の推定値である。40

【0019】

上述のように、数値シミュレータ11のシミュレーション結果を推定するシミュレーション推定モデル21の推定結果及び材料の記述子に基づき、材料特性値推定モデル25は、当該材料の特性値を推定する。これにより、シミュレータより効率的に演算を行うことができる機械学習モデルにより、材料特性値を高精度に推定できる。

【0020】

なお、シミュレーション推定モデル21及び材料特性値推定モデル25それぞれが利用する回帰アルゴリズムは任意であり、これらのアルゴリズムは同一でも異なっていてもよ50

い。例えば、ランダムフォレスト、サポートベクタマシン、ガウス過程回帰、ニューラルネットワークを含む様々な回帰アルゴリズムから、任意のアルゴリズムを選択できる。材料特性推定モデル 20 は、有機無機化合物及び無機化合物のいずれにも適用可能である。記述子は化学式、つまり、構造式及び組成式のいずれからも生成することができる。以下において、本明細書の実施例のより具体的な構成を説明する。

【実施例 1】

【0021】

図 2 は、本明細書の実施例に係る材料特性推定装置の論理構成例を模式的に示す。材料特性推定装置 100 は、実験済み材料データベース 102、未実験材料データベース 103、及びシミュレーション結果データベース 110 を格納している。

10

【0022】

材料特性推定装置 100 は、記述子計算部 104、シミュレーション実行対象選択部 105、材料特性値推定モデル学習部 106、シミュレーション実行部 107、シミュレーション推定部 108、シミュレーション推定モデル学習部 109、材料特性値推定部 111、及び材料特性推定結果表示部 112 を格納している。これらは、プログラムであり、材料特性推定装置 100 の 1 以上のプロセッサは、これらプログラムを実行することで、それぞれに対応する機能部として動作することができる。なお、材料特性推定装置 100 の任意の機能は任意のプログラムに実装できる。

【0023】

記述子計算部 104 は、化学式から所定の方法によって記述子を生成する。記述子は、化学式が示す材料の特徴を表す。記述子は、複数の要素（特微量）で構成されたベクトルで表される。各要素が対応する特徴、例えば、分子量や元素混合比を表す。以下においては、化学構造式で表される有機化合物材料を、推定対象材料の例として説明する。本明細書の実施例は、例えば組成式で表される無機化合物材料にも適用可能である。

20

【0024】

シミュレーション実行対象選択部 105 は、材料特性推定モデル 20 の学習（訓練）のための学習データを生成するため、数値シミュレータ 11 によりシミュレーションを実行する材料を選択する。シミュレーション実行部 107 は、数値シミュレータ 11 によるシミュレーションを実行する。

30

【0025】

シミュレーション推定モデル学習部 109 は、シミュレーション結果を推定するシミュレーション推定モデル 21 の学習（訓練）を行う。シミュレーション推定部 108 は、学習済みのシミュレーション推定モデル 21 によって、材料特性のシミュレーション結果推定値を算出する。

【0026】

材料特性値推定モデル学習部 106 は、材料特性値を推定する材料特性値推定モデル 25 の学習（訓練）を行う。材料特性値推定部 111 は、学習済みの材料特性値推定モデル 25 によって、材料特性値の推定値を算出する。材料特性推定結果表示部 112 は、材料特性値推定部 111 による材料特性推定結果を、ユーザに提示する。

40

【0027】

実験済み材料データベース 102 は、様々な材料の所定材料特性値の実験結果を格納している。未実験材料データベース 103 は、材料特性値の実験が未実行の材料のデータを格納する。シミュレーション結果データベース 110 は、数値シミュレータ 11 によるシミュレーション結果を格納する。

【0028】

図 3 は、材料特性推定装置 100 のハードウェア構成例を示す。材料特性推定装置 100 は計算機構成を有し、演算性能を有するプロセッサ 151 と、プロセッサ 151 が実行するプログラム及びデータを格納する揮発性一時記憶領域を与える D R A M 152 と、を含む。材料特性推定装置 100 は、さらに、他の装置とデータ通信をおこなう通信装置 153 と、H D D (H a r d D i s k D r i v e) やフラッシュメモリなどを利用した永

50

続的な情報記憶領域を与える補助記憶装置 154 と、を含む。

【0029】

例えば、補助記憶装置 154 は、記述子計算部 104、シミュレーション実行対象選択部 105、材料特性値推定モデル学習部 106、シミュレーション実行部 107、シミュレーション推定部 108、シミュレーション推定モデル学習部 109、材料特性値推定部 111、及び材料特性推定結果表示部 112 等のプログラムを格納する。

【0030】

補助記憶装置 154 は、さらに、実験済み材料データベース 102、未実験材料データベース 103、及びシミュレーション結果データベース 110 等の各種データを格納する。プロセッサ 151 が実行するプログラム及び処理対象のデータは、補助記憶装置 154 から D R A M 152 にロードされる。10

【0031】

また、材料特性推定装置 100 は、ユーザからの操作を受け付ける入力装置 155 と、各プロセスでの出力結果をユーザに提示するモニタ 156（出力装置の例）と、を含む。なお、材料特性推定装置 100 の機能は、複数の装置に分かれて実装されてもよい。このように、材料特性推定装置 100 は、1 以上の記憶装置及び 1 以上のプロセッサを含む。

【0032】

図 4 は、実験済み材料データベース 102 の構成例を示す。実験済み材料データベース 102 は、材料と材料の特性値の実験結果とを関連付ける。具体的には、実験済み材料データベース 102 は、番号カラム 301、構造式（S M I L E S）カラム 302、及び材料特性測定値カラム 303 を含む。20

【0033】

番号カラム 301 は、実験済み材料データベース 102 においてレコードそれぞれを識別する。構造式（S M I L E S）カラム 302 は、材料の化学構造式を示す。図 4 の例において、化学構造式は、S M I L E S (Simplified Molecular Input Line Entry System) 記法に従って表現されている。記述子を生成することができる、化学構造式の任意の表現形式を使用することができる。材料特性測定値カラム 303 は、化学構造式それぞれの所定の特性値の実験結果を示す。

【0034】

図 5 は、未実験材料データベース 103 の構成例を示す。未実験材料データベース 103 は、材料特性値の実験が行われていない材料の化学構造式を格納する。未実験材料データベース 103 から選択された材料の特性値が、材料特性推定モデル 20 により推定される。30

【0035】

図 5 に示す例において、未実験材料データベース 103 は、番号カラム 401、及び構造式（S M I L E S）カラム 402 を含む。番号カラム 401 は、未実験材料データベース 103 においてレコードそれぞれを識別する。構造式（S M I L E S）カラム 402 は、材料の化学構造式の S M I L E S 表現を示す。

【0036】

図 6 は、記述子計算部 104 が出力する記述子リスト 500 の構成例を示す。記述子計算部 104 は、実験済み材料データベース 102 又は未実験材料データベース 103 から取得した S M I L E S 表現の化学構造式から記述子を生成し、記述子リスト 500 を生成する。40

【0037】

記述子リスト 500 は、番号カラム 501 と記述子要素それぞれのカラムを含む。図 6 の例においては、記述子は 1000 の記述要素で構成され、四つの記述子要素のカラムが、例として、符号 502 ~ 505 で指示されている。番号カラム 501 の値は、記述子リストを生成した化学構造式を取得したデータベースにおける番号カラムの値に対応する。

【0038】

図 7 は、材料特性推定装置 100 の全体的な処理の例のフローチャートを示す。ステッ50

プ S 1 0 1において、記述子計算部 1 0 4は、実験済み材料データベース 1 0 2と未実験材料データベース 1 0 3から材料の化学構造式を取得し、各材料の記述子を計算する。記述子計算部 1 0 4は、実験済み材料データベース 1 0 2及び未実験材料データベース 1 0 3それぞれの記述子リストを生成する。

【 0 0 3 9 】

ステップ S 1 0 2において、シミュレーション実行対象選択部 1 0 5は、記述子計算部 1 0 4から二つのデータベース 1 0 2、1 0 3それぞれの材料の記述子を受け取り、それら記述子に基づいてシミュレーションを実行する材料の選択を行う。シミュレーション結果は、材料特性推定モデル 2 0の学習に使用される。

【 0 0 4 0 】

数値シミュレーションは多くの計算リソースを必要とする。材料特性推定モデル 2 0の効率的かつ効果的な学習の観点から、数値シミュレータ 1 1によりシミュレーションを実行する材料を選択することが重要である。

【 0 0 4 1 】

シミュレーション推定モデル 2 1の学習の観点において、定性的に異なった多様な種類の材料のシミュレーション結果を用意することで、シミュレーション推定モデル 2 1の汎化性を向上することができる（要請 1）。材料特性値推定モデル 2 5の学習のためには、実験済み材料に対して数値シミュレーションを実行する必要がある（要請 2）。

【 0 0 4 2 】

シミュレーション実行対象選択部 1 0 5は、上記要請 1及び要請 2を満たすように、数値シミュレーション候補の優先順位を決定し、上位の材料をシミュレーション対象として選択する。

【 0 0 4 3 】

要請 1の観点から、シミュレーション実行対象選択部 1 0 5は、材料間の類似度に基づき、シミュレーション実行対象を決定する。材料間の類似度は、例えば、記述子又は記述子から得られるベクトル間の距離から計算することができる。

【 0 0 4 4 】

例えば、シミュレーション実行対象選択部 1 0 5は、候補材料の記述子の次元を削減し、低次元の空間において材料の分布を分析する。次元削減のため、例えば、t - S N E (t - distributed Stochastic Neighbor Embedding)のような、次元削減アルゴリズムを使用することができる。記述子の所定要素を抽出して低次元空間を構成してもよい。次元削減によりその後の計算量が削減される。

【 0 0 4 5 】

図 8は、2次元空間における材料の分布を模式的に示す。円は未実験材料を示し、星は実験済み材料を示す。シミュレーション実行対象選択部 1 0 5は、材料空間において、類似度による材料のクラスタリングを行う。各クラスタは類似する材料で構成されている。図 8の例において、三つのクラスタ 6 0 1～6 0 3が構成されている。

【 0 0 4 6 】

上記要請 1を満たすには、偏ったクラスタから多くの材料を選択するのではなく、異なるクラスタから不偏的に材料を選択することが好ましい。また、上記要請 2を満たすため、実験済み材料を優先的に選択することが好ましい。

【 0 0 4 7 】

従って、シミュレーション実行対象選択部 1 0 5は、例えば、以下の優先順位に従って、シミュレーション実行対象の材料を選択する。（1）実験済みであって、かつクラスタ中心に近い材料、（2）実験済み材料が全く含まれていないクラスタ内の材料、（3）未実験であって、クラスタ中心に近い材料、（4）上記条件から外れる実験済み材料、（5）上記条件から外れる未実験材料。

【 0 0 4 8 】

シミュレーション実行対象選択部 1 0 5は、例えば、上記条件（1）から（5）の順に、条件を満たす材料を探索する。クラスタ中心に近い材料は、例えば、クラスタ中心から

10

20

30

40

50

所定距離内の材料である。例えば、見つけた材料の総数又は実験済み材料の数が所定数に達すると、シミュレーション実行対象選択部 105 は、探索を終了する。このように、見つけられた材料が、シミュレーション実行対象と決定され、材料リストに含められる。

【0049】

図 7 に戻って、ステップ S103において、シミュレーション実行部 107 は、シミュレーション実行対象選択部 105 から材料リストを受け取り、その材料リストの材料のシミュレーションを実行して材料特性値を算出する。材料リストは、例えば、データベース識別子、データベース内の番号、及び記述子を示してもよい。

【0050】

シミュレーション実行部 107 は、材料リストが示す材料の化学構造式を実験済み材料データベース 102 及び未実験材料データベース 103 から取得し、それらのシミュレーションを実行する。シミュレーションに記述子が必要な場合、シミュレーション実行部 107 は、記述子計算部 104 に記述子の計算を要求する。

10

【0051】

ステップ S104において、シミュレーション実行部 107 は、シミュレーション結果データベース 110 に、シミュレーション結果を格納する。シミュレーション結果データベース 110 は、例えば、番号カラム、構造式 (S M I L E S) カラム、及び材料特性値のシミュレーション結果のカラムを含む。番号カラムは、例えば、シミュレーション結果データベース 110 内のレコードを識別する。シミュレーション結果データベース 110 は、材料の実験結果の有無を示してもよい。

20

【0052】

ステップ S105において、シミュレーション推定モデル学習部 109 は、記述子からシミュレーション結果を推定するシミュレーション推定モデル 21 の学習を行う。図 9 は、シミュレーション推定モデル 21 の学習 (S105) の詳細のフローチャートを示す。

【0053】

ステップ S201において、シミュレーション推定モデル学習部 109 は、シミュレーション結果データベース 110 からシミュレーション結果を取得する。ステップ S202において、シミュレーション推定モデル学習部 109 は記述子計算部 104 から計算された記述子を受け取る。具体的には、シミュレーション推定モデル学習部 109 は、シミュレーションの化学構造式を記述子計算部 104 に渡し、それらの記述子を取得する。

30

【0054】

ステップ S203において、シミュレーション推定モデル学習部 109 は、取得した記述子と、シミュレーション結果が示す材料特性値とにより、シミュレーション推定モデルの学習を行う。シミュレーション推定モデル学習部 109 は、シミュレーション推定モデル 21 の初期構成の情報を予め保持しており、その情報に従って、シミュレーション推定モデルを構成する。シミュレーション推定モデル 21 として、任意の種類の機械学習モデルが利用できる。

【0055】

シミュレーション推定モデル学習部 109 は、シミュレーション推定モデル 21 に記述子を順次入力し、出力されたシミュレーション結果推定値 (材料特性値) を取得する。シミュレーション推定モデル学習部 109 は、シミュレーション結果推定値と上記取得したシミュレーション結果の材料特性値との誤差に基づき、シミュレーション推定モデル 21 のパラメータを更新することで、シミュレーション推定モデル 21 を最適化する。最後に、ステップ S204において、シミュレーション推定モデル学習部 109 は、学習済みシミュレーション推定モデル 21 をシミュレーション推定部 108 に渡す。

40

【0056】

図 7 に戻って、ステップ S106において、シミュレーション推定部 108 は、シミュレーション推定モデル学習部 109 から学習済みシミュレーション推定モデル 21 を受け取る。

【0057】

50

シミュレーション推定部 108 は、さらに、記述子計算部 104 からシミュレーション未実行の材料の記述子を受け取る。具体的には、シミュレーション推定部 108 は、未実験材料データベース 103 に格納され、シミュレーション結果データベース 110 に格納されていない材料の化学構造式を選択して、記述子計算部 104 に記述子の計算を依頼する。

【0058】

さらに、シミュレーション推定部 108 は、記述子計算部 104 から取得した記述子を順次学習済みシミュレーション推定モデル 21 に入力して、シミュレーション結果の推定値を算出する。

【0059】

次に、ステップ S107において、材料特性値推定モデル学習部 106 は、材料特性値推定モデル 25 の学習を行う。図 10 は、材料特性値推定モデル 25 の学習 (S107) の詳細のフローチャートを示す。

10

【0060】

ステップ S301において、材料特性値推定モデル学習部 106 は、シミュレーション結果データベース 110 から、実験済み材料のシミュレーション結果を取得する。材料特性値推定モデル学習部 106 は、例えば、実験済み材料データベース 102 を参照することで、実験済み材料を同定できる。シミュレーション結果データベース 110 が、実験の有無を示してもよい。

【0061】

ステップ S302において、材料特性値推定モデル学習部 106 は、記述子計算部 104 から計算された記述子を受け取る。具体的には、材料特性値推定モデル学習部 106 は、ステップ S301 で取得したシミュレーション結果の化学構造式を記述子計算部 104 に渡し、それらの記述子を取得する。

20

【0062】

ステップ S303において、材料特性値推定モデル学習部 106 は、実験済み材料データベース 102 から、材料特性値の実験結果を取得する。具体的には、材料特性値推定モデル学習部 106 は、ステップ S301 で取得したシミュレーション結果の材料特性値を実験済み材料データベース 102 から取得する。

【0063】

ステップ S304において、材料特性値推定モデル学習部 106 は、取得したシミュレーション結果、取得した記述子、及び材料特性値の実験結果により、材料特性値推定モデル 25 の学習を行う。シミュレーション推定モデル学習部 109 は、材料特性値推定モデル 25 の初期構成の情報を予め保持しており、その情報に従って、材料特性値推定モデル 25 を構成する。材料特性値推定モデル 25 として、任意の種類の機械学習モデルが利用できる。

30

【0064】

材料特性値推定モデル学習部 106 は、材料特性値推定モデル 25 に記述子と材料特性値のシミュレーション結果とを結合した拡張記述子（ベクトル）を順次入力し、出力された材料特性推定値を取得する。材料特性値推定モデル学習部 106 は、材料特性推定値と上記取得した実験結果の材料特性値との誤差に基づき、材料特性値推定モデル 25 のパラメータを更新することで、材料特性値推定モデル 25 を最適化する。最後に、ステップ S304において、材料特性値推定モデル学習部 106 は、学習済み材料特性値推定モデル 25 を材料特性値推定部 111 に渡す。

40

【0065】

上述のように、材料特性値推定モデル 25 の学習は、数値シミュレータによるシミュレーション結果を使用する。これにより、より適切な材料特性値推定モデル 25 を構成できる。他の例において、材料特性値推定モデル 25 の学習は、学習済みシミュレーション推定モデル 21 の推定結果を使用してもよい。

【0066】

50

図 7 に戻って、ステップ S 108において、材料特性値推定部 111は、学習済みの材料特性値推定モデル 25によって、未実験材料の材料特性値の推定値を算出する。具体的には、材料特性値推定部 111は、学習済みの材料特性値推定モデル 25を、材料特性値推定モデル学習部 106から受け取る。

【0067】

材料特性値推定部 111は、記述子計算部 104から未実験材料の記述子を受け取る。例えば、材料特性値推定部 111は、未実験材料データベース 103から化学構造式を取得して、それらと共に記述子の生成を記述子計算部 104に要求する。

【0068】

材料特性値推定部 111は、シミュレーション推定部 108から、ステップ S 106で算出された未実験材料のシミュレーション結果推定値を受け取る。材料特性値推定部 111は、シミュレーション結果データベース 110から、未実験材料のシミュレーション結果を取得する。

【0069】

材料特性値推定部 111は、記述子とシミュレーション結果推定値（材料特性値）又はシミュレーション結果（材料特性値）を結合して、材料特性値推定モデル 25に入力する。材料特性値推定モデル 25は、入力された記述子が表す未実験材料の特性値の推定値を算出する。

【0070】

最後に、ステップ S 109において、材料特性推定結果表示部 112は、材料特性値推定部 111から、未実験材料の化学構造式と材料特性推定結果とを受け取る。材料特性推定結果表示部 112は、化学構造式と材料特性推定結果とをユーザに提示する。

【0071】

図 11は、材料特性推定結果表示部 112がモニタ 156において表示する材料特性推定結果の画像例を示す。図 11の例において、画像は、選択された材料の化学構造式と、それらに対応する材料特性値の推定値とを示す。ユーザは、表示された化学構造式及び材料特性値を参考に、実際に実験又はシミュレーションを実行する化学構造式を決定することができる。保存ボタンにより推定結果が保存される。

【0072】

なお、本発明は上記した実施例に限定されるものではなく、様々な変形例が含まれる。例えば、上記した実施例は本発明を分かりやすく説明するために詳細に説明したものであり、必ずしも説明したすべての構成を備えるものに限定されるものではない。また、ある実施例の構成の一部を他の実施例の構成に置き換えることが可能であり、また、ある実施例の構成に他の実施例の構成を加えることも可能である。また、各実施例の構成の一部について、他の構成の追加・削除・置換をすることが可能である。

【0073】

また、上記の各構成・機能・処理部等は、それらの一部又は全部を、例えば集積回路で設計する等によりハードウェアで実現してもよい。また、上記の各構成、機能等は、プロセッサがそれぞれの機能を実現するプログラムを解釈し、実行することによりソフトウェアで実現してもよい。各機能を実現するプログラム、テーブル、ファイル等の情報は、メモリや、ハードディスク、SSD (Solid State Drive) 等の記録装置、または、I Cカード、SDカード等の記録媒体に置くことができる。

【0074】

また、制御線や情報線は説明上必要と考えられるものを示しており、製品上必ずしもすべての制御線や情報線を示しているとは限らない。実際には殆どすべての構成が相互に接続されていると考えてもよい。

【符号の説明】

【0075】

20 材料特性推定モデル、21 シミュレーション推定モデル、25 材料特性値推定モデル、100 材料特性推定装置、102 実験済み材料データベース、103 未実験材

10

20

30

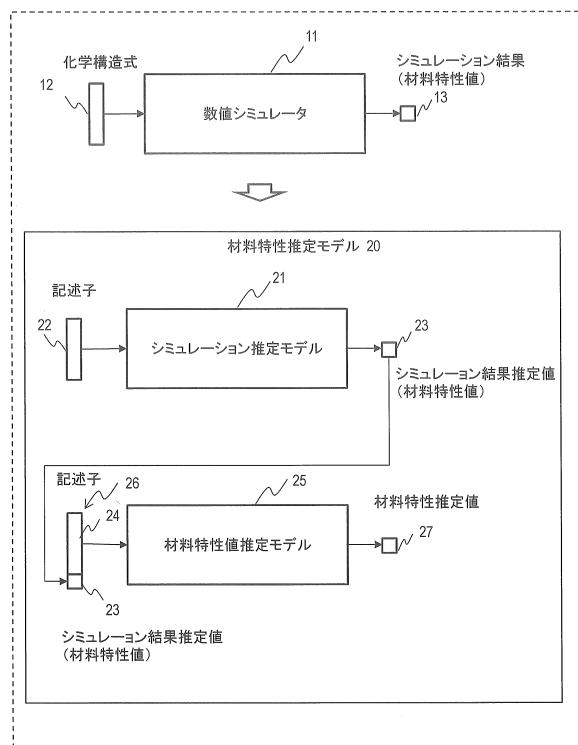
40

50

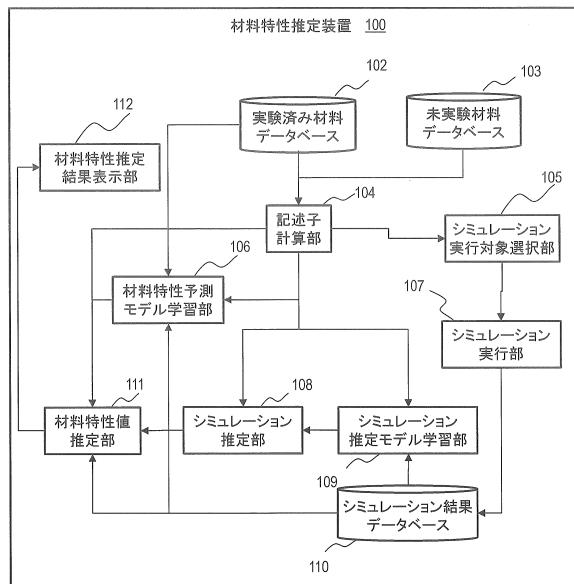
料データベース、104 記述子計算部、105 シミュレーション実行対象選択部、106 材料特性値推定モデル学習部、107 シミュレーション実行部、108 シミュレーション推定部、109 シミュレーション推定モデル学習部、110 シミュレーション結果データベース、111 材料特性値推定部、112 材料特性推定結果表示部

【図面】

【図1】



【図2】

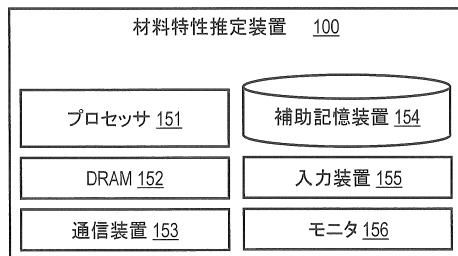


10

20

30

【図3】



【図4】

実験済み材料データベース

番号	構造式(SMILES)	材料特性測定値
1	CO[Si](C)(OC)N1CCCCC1	15.372
2	CCN(CC)[Si](C)(OC)OC	25.097
3	O=C1C=CC(=O)C=C1	10.406
:	:	:

40

50

【図 5】

番号	構造式(SMILES)
1	C1C=CC2C1C3CC2=C3
2	CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C
3	CC(C)(C)c1cc(C)cc(c1O)C(C)(C)C
:	:

未実験材料データベース

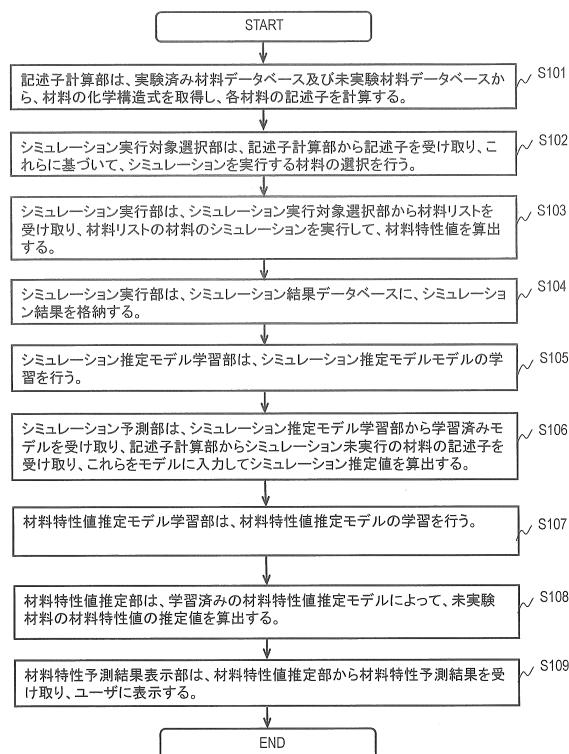
【図 6】

番号	記述子要素1	記述子要素2	記述子要素3	...	記述子要素1000
1	15.372	-6.534	6.478	...	153.248
2	25.097	-5.409	12.036	...	78.501
3	10.406	-8.241	10.114	...	92.664
:	:	:	:	:	:

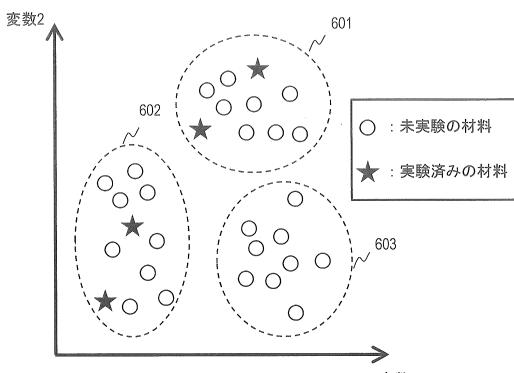
記述子計算部からの記述子リスト

10

【図 7】



【図 8】



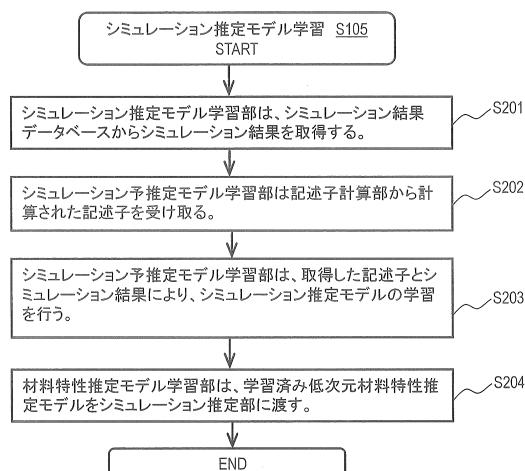
20

30

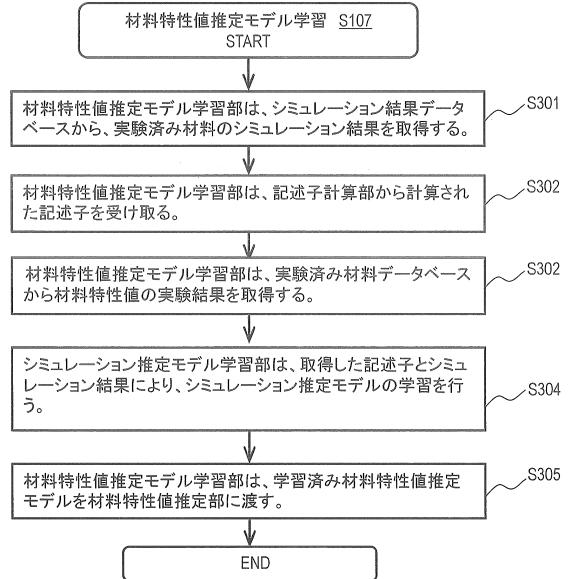
40

50

【図 9】



【図 10】



10

20

【図 11】

材料特性推定結果

番号	構造式(SMILES)	材料特性推定値
1	C1C=CC2C1C3CC2C=C3	25.412
2	COCC1=CC=C(C=C1)O	24.037
3	O=C1C=CC(=O)C=C1	23.891
:	:	:

保存 終了

30

40

50

フロントページの続き

- (56)参考文献
- 国際公開第2020/031671 (WO, A1)
国際公開第2020/075573 (WO, A1)
国際公開第2019/060268 (WO, A1)
国際公開第2018/098588 (WO, A1)
森川幸治, 無機材料へのマテリアルズインフォマティクスの取組みと課題, 人工知能, 日本, 一般社団法人人工知能学会, 2019年05月01日, 第34巻, 第3号, pages 364-369, DOI: https://doi.org/10.11517/jjsai.34.3_364
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)
- G 06 F 30 / 10
G 06 F 30 / 20
G 06 F 30 / 27
I E E E X p l o r e
J S T P l u s (J D r e a m I I I)