

(19) 日本国特許庁(JP)

## (12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2004-158008

(P2004-158008A)

(43) 公開日 平成16年6月3日(2004.6.3)

(51) Int.C1.<sup>7</sup>

G06F 17/50

F 1

G06F 17/50 638

テーマコード(参考)

5 B 04 G

審査請求 未請求 請求項の数 70 O L 外国語出願 (全 27 頁)

(21) 出願番号 特願2003-366753 (P2003-366753)  
 (22) 出願日 平成15年10月28日 (2003.10.28)  
 (31) 優先権主張番号 10/281,658  
 (32) 優先日 平成14年10月28日 (2002.10.28)  
 (33) 優先権主張国 米国(US)

(71) 出願人 390041542  
 ゼネラル・エレクトリック・カンパニー  
 GENERAL ELECTRIC CO  
 MPANY  
 アメリカ合衆国、ニューヨーク州、スケネ  
 クタディ、リバーロード、1番  
 100093908  
 弁理士 松本 研一  
 (74) 代理人 100105588  
 弁理士 小倉 博  
 (74) 代理人 100106541  
 弁理士 伊藤 信和

最終頁に続く

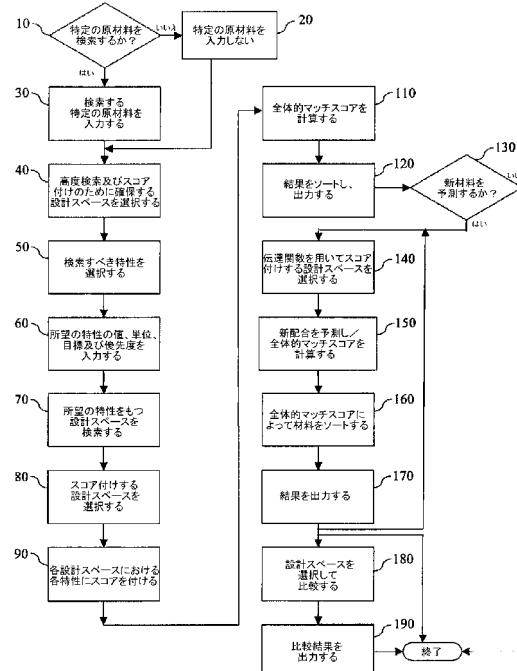
(54) 【発明の名称】所望の特性セットに最も良くマッチする新材料を設計するシステム及び方法

## (57) 【要約】

【課題】 既存の実験的試行又は新しく創造された材料のいずれが所望の特性セットに最も良くマッチするかを迅速に特定して、製品開発時間を最小にできるようにするための材料創造システム及び方法の提供。

【解決手段】 ユーザは、材料に望む特性、それらの特性の許容値、各特性に対する目標及び各特性に対する優先度を入力する。実験的試行のデータベースから事前マッチングが存在する実験的試行を検索する。次いで、4つの望ましさ関数のうちの1つを利用して、既存の実験的試行の各々の各特性に対するスコアをもつ特性値を計算する。次に、各特性に付与された優先度の値を考慮してスコアをもつ特性値に重み付けする。次に、ユーザが最も良くマッチする既存の実験的試行を容易に特定できるように、その結果をその全体的マッチスコアに基づいて降順にソートし、ユーザに出力する。これに加えて、所望の特性に良好に適合したものを創造できるように、新材料を予測し、スコア付けし、重み付けし、ソートしてもよい。

【選択図】 図1



**【特許請求の範囲】****【請求項 1】**

所望の特性セットに最も密接にマッチする材料を設計する方法であって、  
ユーザから少なくとも 1 つの入力パラメータを取得し、  
グローバル・データリポジトリから少なくとも 1 つの事前マッチングが存在する実験的  
試行の実際の特性値を引き出し、  
事前マッチングが存在する実験的試行の各々が所望の特性値セットにどれ位良好にマッ  
チするかを判断し、  
その結果をユーザに出力する、  
ことを含む方法。

10

**【請求項 2】**

前記判断する段階が、  
事前マッチングが存在する実験的試行の各々の特性値にそれぞれスコア付けして、スコ  
アをもつ特性値を生成し、  
前記事前マッチングが存在する実験的試行の各々に対する全体的マッチスコアを計算す  
る、  
ことを含む、請求項 1 記載の方法。

**【請求項 3】**

前記全体的マッチスコアを計算することが、  
各特性に対する重み付け値を考慮に入れることによって、前記スコアをもつ特性値の各  
々に重み付けして、重み付けされスコアをもつ特性値を生成し、  
前記重み付けされスコアをもつ特性値の各々を互いに乗算し、  
前記乗算された数を 1 / ( 全ての優先度の和 ) まで増加させる、  
ことを含む、請求項 2 記載の方法。

**【請求項 4】**

結果をユーザに出力する前に、前記事前マッチングが存在する実験的試行を、それらの  
全体的マッチスコアによってそれぞれソートすることを更に含む、請求項 2 記載の方法。

**【請求項 5】**

前記事前マッチングが存在する実験的試行は、それらの各々の全体的マッチスコアに基  
づいて降順にソートされる、請求項 4 記載の方法。

30

**【請求項 6】**

既存のどの実験的試行よりも所望の特性セットにより密接にマッチする少なくとも 1 つ  
の新材料を予測する段階を更に含む、請求項 1 記載の方法。

**【請求項 7】**

新材料の各々の特性値にそれぞれスコア付けして、スコアをもつ特性値を生成し、新材  
料の各々の全体的マッチスコアを計算する段階を更に含む、請求項 6 記載の方法。

**【請求項 8】**

前記全体的マッチスコアを計算することが、各特性の重み付け値を考慮に入れることに  
よって、前記スコアをもつ特性値の各々に重み付けして、重み付けされスコアをもつ特性  
値を生成し、

40

前記重み付けされスコアをもつ特性値の各々を互いに乗算し、

前記乗算された数を 1 / ( 全ての優先度の和 ) まで増加させる、  
ことを含む、請求項 7 記載の方法。

**【請求項 9】**

組み合わされた結果をユーザに出力する前に、前記事前マッチングが存在する実験的試  
行と新材料を、それらの各々の全体的マッチスコアによってソートする段階を更に含む、  
請求項 7 記載の方法。

**【請求項 10】**

前記予測する段階は、既存のどの実験的試行よりも所望の特性セットにより密接にマッ  
チする新材料を予測するために伝達関数を適用することを含む、請求項 6 記載の方法。

50

**【請求項 1 1】**

前記少なくとも1つの入力パラメータは、検索する特定の原材料、高度検索のために確保される設計スペース、スコア付けのために確保される設計スペース、検索される特性、検索される特性の各々の単位、検索される特性の各々の特性許容値、検索される特性の各々の目標、及び検索される特性の各々の優先度の値、の少なくとも1つを含む、請求項1記載の方法。

**【請求項 1 2】**

前記検索される特性の各々の目標は、特性値を最大化すること、特性値を最小化すること、前記特性値の目標ポイント値をヒットすること、及び前記特性値を許容特性値の所与の範囲内に維持すること、の少なくとも1つを含む、請求項1 1記載の方法。

10

**【請求項 1 3】**

前記検索される特性の各々の優先度の値は、高、中、及び低の少なくとも1つを含む、請求項1 1記載の方法。

**【請求項 1 4】**

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を最大化し、且つ前記実際の特性値が最小許容特性値より小さい場合には、前記スコアをもつ特性値はゼロ(0)である、請求項2記載の方法。

**【請求項 1 5】**

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を最大化し、且つ前記実際の特性値が最大許容特性値より大きい場合には、前記スコアをもつ特性値は1である、請求項2記載の方法。

20

**【請求項 1 6】**

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を最大化し、前記実際の特性値が最小許容特性値より少なくとも大きく、前記実際の特性値が最大許容特性値より少なくとも小さい場合には、前記スコアをもつ特性値は、望ましさ関数、すなわち、

**【数1】**

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{APV}-\text{MIN}}{\text{MAX}-\text{MIN}} \right]^x$$

30

(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、及びx = 重み付け値である。)を用いて計算することができる、請求項2記載の方法。

**【請求項 1 7】**

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を最小化し、且つ前記実際の特性値が最大許容特性値より大きい場合には、前記スコアをもつ特性値はゼロ(0)である、請求項2記載の方法。

**【請求項 1 8】**

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を最小化し、且つ前記実際の特性値が最小許容特性値より小さい場合には、前記スコアをもつ特性値は1である、請求項2記載の方法。

40

**【請求項 1 9】**

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を最小化し、前記実際の特性値が最大許容特性値より少なくとも大きく、前記実際の特性値が最小許容特性値より少なくとも小さい場合には、前記スコアをもつ特性値は、望ましさ関数、すなわち、

**【数2】**

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{MAX}-\text{APV}}{\text{MAX}-\text{MIN}} \right]^x$$

50

(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、及びx = 重み付け値である。)を用いて計算することができる、請求項2記載の方法。

【請求項20】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値の目標ポイント値をヒットし、

APV DPV及びAPV MAX

である場合には、前記スコアをもつ特性値は、望ましさ関数、すなわち、

【数3】

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{MAX}-\text{APV}}{\text{MAX}-\text{DPV}} \right]^x$$

10

(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、DPV = ユーザによって指定された所望の特性値、及びx = 重み付け値である。)を用いて計算することができる、請求項2記載の方法。

【請求項21】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値の目標ポイント値をヒットし、且つ前記実際の特性値が最大許容特性値より大きい場合には、前記スコアをもつ特性値はゼロ(0)である、請求項2記載の方法。

【請求項22】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値の目標ポイント値をヒットし、

APV DPV及びAPV MIN

である場合には、前記スコアをもつ特性値は、望ましさ関数、すなわち、

【数4】

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{APV}-\text{MIN}}{\text{DPV}-\text{MIN}} \right]^x$$

20

(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、DPV = ユーザによって指定された所望の特性値、及びx = 重み付け値である。)を用いて計算することができる、請求項2記載の方法。

30

【請求項23】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値の目標ポイント値をヒットし、且つ前記実際の特性値が最小許容特性値より小さい場合には、前記スコアをもつ特性値はゼロ(0)である、請求項2記載の方法。

【請求項24】

ユーザから得られた少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を許容特性値の所与の範囲内に維持し、MIN APV MAXである(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値である場合には、スコア付き特性値は1である。)、請求項2記載の方法。

40

【請求項25】

ユーザから得られた少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を許容特性値の所与の範囲内に維持し、APV > MAX又はAPV < MIN(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値である。)である場合には、スコア付き特性値はゼロ(0)である、請求項2記載の方法。

【請求項26】

特性に対して高い優先度が存在する場合には、該特性には優先度の値5が付与され、特性に対して中程度の優先度が存在する場合には、該特性には優先度の値3が付与され、特性に対して低い優先度が存在する場合には、該特性には優先度の値1が付与される、請求項13記載の方法。

50

## 【請求項 27】

前記全体的マッチスコアは、次式、すなわち、

## 【数 5】

$$\text{全体的マッチスコア} = \left[ \prod_{i=1}^n (\text{スコア}_i)^{\text{優先度}_i} \right]^{1/\sum_{i=1}^n \text{優先度}_i}$$

を用いて計算される、請求項 2 記載の方法。

## 【請求項 28】

前記事前マッチング実験的試行の各々は、エンジニアリング・サーモプラスチックを含む、請求項 1 記載の方法。 10

## 【請求項 29】

前記エンジニアリング・サーモプラスチックは、ポリエチレンテレフタレート (P E T)、ポリブチレンテレフタレート (P B T)、ポリエチレンナフタレート (P E N)、液晶ポリエステル (L C P) 等のようなポリエステルや、ポリエチレン (P E)、ポリプロピレン (P P)、ポリブチレン等のポリオレフィンや、スチレン系樹脂、ポリオキシメチレン (P O M)、ポリアミド (P A)、ポリカーボネート (P C)、メタクリル酸ポリメチレン (P M M A)、ポリ塩化ビニル (P V C)、ポリフェニレンスルフィド (P P S)、ポリフェニレンエーテル (P P E)、ポリイミド (P I)、ポリアミドイミド (P A I)、ポリエーテルイミド (P E I)、ポリスルホン (P S U)、ポリエーテルスルホン (P E S)、ポリケトン (P K)、ポリエーテルケトン (P E K)、ポリエーテルエーテルケトン (P E E K)、ポリアリレート (P A R)、ポリエーテルニトリル (P E N)、フェノール樹脂 (ノボラック系)、フェノキシ樹脂、フルオロカーボン樹脂、ポリスチレン系の熱可塑性エラストマー、ポリオレフィン系の熱可塑性エラストマー、ポリウレタン系の熱可塑性エラストマー、ポリエステル系の熱可塑性エラストマー、ポリアミド系の熱可塑性エラストマー、ポリブタジエン系の熱可塑性エラストマー、ポリイソブレン系の熱可塑性エラストマー、フッ素系の熱可塑性エラストマー、の少なくとも 1 つを含む、請求項 28 記載の方法。 20

## 【請求項 30】

前記エンジニアリング・サーモプラスチックは、スチレン系樹脂、ポリカーボネート樹脂、ポリフェニレンエーテル樹脂、ポリアミド樹脂、ポリエステル樹脂、ポリフェニレンスルフィド樹脂、液晶樹脂、及びフェノール系樹脂、の少なくとも 1 つを含む、請求項 28 記載の方法。 30

## 【請求項 31】

所望の特性セットに最も密接にマッチする材料を設計するためのシステムであって、ユーザから少なくとも 1 つの入力パラメータを取得するための手段と、

グローバル・データリポジトリから少なくとも 1 つの事前マッチングが存在する実験的試行の実際の特性値を引き出すための手段と、

前記事前マッチングが存在する実験的試行の各々が所望の特性値セットにどれ位良好にマッチするかを判断するために動作可能な材料選択アルゴリズムと、

結果をユーザに出力するための手段と、  
を備える、システム。

## 【請求項 32】

前記材料選択アルゴリズムは更に、事前マッチングが存在する実験的試行の各々の特性値にそれぞれスコア付けして、スコアをもつ特性値を生成し、

事前マッチングが存在する実験的試行の各々に対する全体的マッチスコアを計算する、ために動作可能である、請求項 31 記載のシステム。

## 【請求項 33】

前記材料選択アルゴリズムは更に、結果をユーザに出力する前に、前記事前マッチングが存在する実験的試行を、それらの各々の全体的マッチスコアによってソートするために

40

30

10

20

50

動作可能である、請求項 3 2 記載のシステム。

【請求項 3 4】

前記事前マッチングが存在する実験的試行は、それらの各々の全体的マッチスコアに基づいて降順にソートされる、請求項 3 3 記載のシステム。

【請求項 3 5】

既存のどの実験的試行よりも所望の特性セットにより密接にマッチする少なくとも 1 つの新材料を予測するために動作可能な材料予測アルゴリズムを更に含む、請求項 3 1 記載のシステム。

【請求項 3 6】

前記材料選択アルゴリズムは更に、新材料の各々の特性値にそれぞれスコア付けして、スコアをもつ特性値を生成し、新材料の各々の全体的マッチスコアを計算するために動作可能である、請求項 3 2 記載のシステム。 10

【請求項 3 7】

前記材料選択アルゴリズムは更に、組み合わされた結果をユーザに出力する前に、前記事前マッチングが存在する実験的試行と新材料を、それらの各々の全体的マッチスコアによってソートするために動作可能である、請求項 3 6 記載のシステム。

【請求項 3 8】

前記予測する段階は、既存のどの実験的試行よりも所望の特性セットにより密接にマッチする新材料を予測するために、伝達関数を適用することを含む、請求項 3 5 記載の方法。 20

【請求項 3 9】

前記少なくとも 1 つの入力パラメータは、検索する特定の原材料、高度検索のために確保される設計スペース、スコア付けのために確保される設計スペース、検索される特性、検索される特性の各々の単位、検索される特性の各々の特性許容値、検索される特性の各々の目標、及び検索される特性の各々の優先度の値、の少なくとも 1 つを含む、請求項 3 1 記載のシステム。

【請求項 4 0】

前記検索される特性の各々の目標は、特性値を最大化すること、特性値を最小化すること、前記特性値の目標ポイント値をヒットすること、及び前記特性値を許容特性値の所与の範囲内に維持すること、の少なくとも 1 つを含む、請求項 3 9 記載のシステム。 30

【請求項 4 1】

前記検索される特性の各々の優先度の値は、高、中、及び低の少なくとも 1 つからなる、請求項 3 9 記載のシステム。

【請求項 4 2】

ユーザから取得された少なくとも 1 つの入力パラメータが前記特性値を最大化し、且つ前記実際の特性値が最小許容特性値より小さい場合には、前記スコアをもつ特性値はゼロ(0)である、請求項 3 2 記載のシステム。

【請求項 4 3】

ユーザから取得された少なくとも 1 つの入力パラメータが前記特性値を最大化し、且つ前記実際の特性値が最大許容特性値より大きい場合には、前記スコアをもつ特性値は 1 である、請求項 3 2 記載のシステム。 40

【請求項 4 4】

ユーザから取得された少なくとも 1 つの入力パラメータが前記特性値を最大化し、前記実際の特性値が最小許容特性値より少なくとも大きく、前記実際の特性値が最大許容特性値より少なくとも小さい場合には、前記スコアをもつ特性値は、望ましさ関数、すなわち、

【数 6】

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{APV-MIN}}{\text{MAX-MIN}} \right]^x$$

(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、及びx = 重み付け値である。)を用いて計算することができる、請求項32記載のシステム。

【請求項45】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を最小化し、且つ前記実際の特性値が最大許容特性値より大きい場合には、前記スコアをもつ特性値はゼロ(0)である、請求項32記載のシステム。

【請求項46】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を最小化し、且つ前記実際の特性値が最小許容特性値より小さい場合には、前記スコアをもつ特性値は1である、請求項32記載のシステム。

【請求項47】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値を最小化し、前記実際の特性値が最大許容特性値より少なくとも大きく、前記実際の特性値が最小許容特性値より少なくとも小さい場合には、前記スコアをもつ特性値は、望ましさ関数、すなわち、

【数7】

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{MAX}-\text{APV}}{\text{MAX}-\text{MIN}} \right]^x$$

10

20

(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、及びx = 重み付け値である。)を用いて計算することができる、請求項32記載のシステム。

【請求項48】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値の目標ポイント値をヒットし、

APV DPV 及び APV MAX

である場合には、前記スコアをもつ特性値は、望ましさ関数、すなわち、

【数8】

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{MAX}-\text{APV}}{\text{MAX}-\text{DPV}} \right]^x$$

30

(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、DPV = ユーザによって指定された所望の特性値、及びx = 重み付け値である。)を用いて計算することができる、請求項32記載のシステム。

【請求項49】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値の目標ポイント値をヒットし、且つ前記実際の特性値が最大許容特性値より大きい場合には、前記スコアをもつ特性値はゼロ(0)である、請求項32記載のシステム。

【請求項50】

ユーザから取得された少なくとも1つの入力パラメータが前記特性値の目標ポイント値をヒットし、

APV DPV 及び APV MIN

である場合には、前記スコアをもつ特性値は、望ましさ関数、すなわち、

【数9】

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{APV}-\text{MIN}}{\text{DPV}-\text{MIN}} \right]^x$$

40

40

(ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、DPV = ユーザによって指定された所望の特性値、及びx = 重み付

50

け値である。) を用いて計算することができる、請求項 3 2 記載のシステム。

【請求項 5 1】

ユーザから取得された少なくとも 1 つの入力パラメータが前記特性値の目標ポイント値をヒットし、且つ前記実際の特性値が最小許容特性値より小さい場合には、前記スコアをもつ特性値はゼロ (0) である、請求項 3 2 記載のシステム。

【請求項 5 2】

ユーザから得られた少なくとも 1 つの入力パラメータが前記特性値を許容特性値の所与の範囲内に維持し、MIN APV MAX である (ただし、APV = 実際の特性値、MAX = 最大許容特性値、MIN = 最小許容特性値である。) 場合には、スコア付き特性値は 1 である、請求項 3 2 記載のシステム。

10

【請求項 5 3】

ユーザから得られた少なくとも 1 つの入力パラメータが前記特性値を許容特性値の所与の範囲内に維持し、

APV > MAX 又は APV < MIN である (ただし、APV = 実際の特性値、MAX = 最大許容特性値、MIN = 最小許容特性値である。) 場合には、スコア付き特性値はゼロ (0) である、請求項 3 2 記載のシステム。

【請求項 5 4】

特性に対して高い優先度が存在する場合には、該特性には優先度の値 5 が付与され、特性に対して中程度の優先度が存在する場合には、該特性には優先度の値 3 が付与され、特性に対して低い優先度が存在する場合には、該特性には優先度の値 1 が付与される、請求項 4 1 記載のシステム。

20

【請求項 5 5】

前記全体的マッチスコアは、次式、すなわち、

【数 1 0】

$$\text{全体的マッチスコア} = \left[ \prod_{i=1}^n (\text{スコア}_i)^{\text{優先度}_i} \right]^{1/\sum_{i=1}^n \text{優先度}_i}$$

を用いて計算される、請求項 3 2 記載のシステム。

【請求項 5 6】

前記事前マッチング実験的試行の各々は、エンジニアリング・サーモプラスチックを含む、請求項 3 1 記載のシステム。

30

【請求項 5 7】

前記エンジニアリング・サーモプラスチックは、ポリエチレンテレフタレート (PET)、ポリブチレンテレフタレート (PBT)、ポリエチレンナフタレート (PEN)、液晶ポリエステル (LCP) 等のようなポリエステルや、ポリエチレン (PE)、ポリプロピレン (PP)、ポリブチレン等のポリオレフィンや、スチレン系樹脂、ポリオキシメチレン (POM)、ポリアミド (PA)、ポリカーボネート (PC)、メタクリル酸ポリメチレン (PMMA)、ポリ塩化ビニル (PVC)、ポリフェニレンスルフィド (PPS)、ポリフェニレンエーテル (PPE)、ポリイミド (PI)、ポリアミドイミド (PAI)、ポリエーテルイミド (PEI)、ポリスルホン (PSU)、ポリエーテルスルホン (PES)、ポリケトン (PK)、ポリエーテルケトン (PEK)、ポリエーテルエーテルケトン (PEEK)、ポリアリレート (PAR)、ポリエーテルニトリル (PEN)、フェノール樹脂 (ノボラック系)、フェノキシ樹脂、フルオロカーボン樹脂、ポリスチレン系の熱可塑性エラストマー、ポリオレフィン系の熱可塑性エラストマー、ポリウレタン系の熱可塑性エラストマー、ポリエステル系の熱可塑性エラストマー、ポリアミド系の熱可塑性エラストマー、ポリブタジエン系の熱可塑性エラストマー、ポリイソブレン系の熱可塑性エラストマー、フッ素系の熱可塑性エラストマー、の少なくとも 1 つを含む、請求項 5 6 記載のシステム。

40

【請求項 5 8】

50

前記エンジニアリング・サーモプラスチックは、スチレン系樹脂、ポリカーボネート樹脂、ポリフェニレンエーテル樹脂、ポリアミド樹脂、ポリエステル樹脂、ポリフェニレンスルフィド樹脂、液晶樹脂、フェノール系樹脂、の少なくとも1つを含む、請求項5・6記載のシステム。

【請求項5・9】

ユーザから少なくとも1つの入力パラメータを取得し、  
グローバル・データリポジトリから少なくとも1つの事前マッチングが存在する実験的試行の実際の特性値を引き出し、

前記事前マッチングが存在する実験的試行の各々が、所望の特性値セットにどれ位良好にマッチするかを判断し、

その結果をユーザに出力し、

その結果を用いて、ユーザからの少なくとも1つの入力パラメータに最も合致する製品を設計する、

ことからなる方法によって作成された製品。

【請求項6・0】

前記判断する段階が、  
前記事前マッチングが存在する実験的試行の各々の特性値にそれぞれスコア付けして、スコアをもつ特性値を生成し、

前記事前マッチングが存在する実験的試行の各々の全体的マッチスコアを計算する、ことを含む、請求項5・9記載の製品。

【請求項6・1】

前記全体的マッチスコアを計算することが、  
各特性の重み付け値を考慮に入れることによって、前記スコアをもつ特性値の各々に重み付けして、重み付けされスコアをもつ特性値を生成し、

前記重み付けされスコアをもつ特性値の各々を互いに乗算し、

前記乗算された数を1/（全ての優先度の和）まで増加させる、  
ことを含む、請求項6・0記載の製品。

【請求項6・2】

結果をユーザに出力する前に、前記事前マッチングが存在する実験的試行を、それらの各々の全体的マッチスコアによってソートする、請求項6・0記載の製品。

【請求項6・3】

前記事前マッチングが存在する実験的試行は、それらの各々の全体的マッチスコアに基づいて降順にソートされる、請求項6・2記載の製品。

【請求項6・4】

既存のどの実験的試行よりも所望の特性セットにより密接にマッチする少なくとも1つの新材料を予測する段階を更に含む、請求項5・9記載の製品。

【請求項6・5】

新材料の各々の特性値にそれぞれスコア付けして、スコアをもつ特性値を生成し、新材料の各々の全体的マッチスコアを計算する段階を更に含む、請求項6・4記載の製品。

【請求項6・6】

前記全体的マッチスコアを計算することが、各特性の重み付け値を考慮に入れることによって、前記スコアをもつ特性値の各々に重み付けして、重み付けされスコアをもつ特性値を生成し、

前記重み付けされスコアをもつ特性値の各々を互いに乗算し、

前記乗算された数を1/（全ての優先度の和）まで増加させる、  
ことを含む、請求項6・5記載の製品。

【請求項6・7】

組み合わされた結果をユーザに出力する前に、前記事前マッチングが存在する実験的試行と新材料を、それらの各々の全体的マッチスコアによってソートする段階を更に含む、請求項6・5記載の製品。

10

20

30

40

50

**【請求項 6 8】**

前記予測する段階は、既存のどの実験的試行よりも所望の特性セットにより密接にマッチする新材料を予測するために、伝達関数を適用することを含む、請求項 6 4 記載の製品。

**【請求項 6 9】**

前記製品は、実験用エンジニアリング・サーモプラスチック材料、開発用エンジニアリング・サーモプラスチック材料、市販用エンジニアリング・サーモプラスチック材料、の少なくとも 1 つからなる、請求項 5 9 記載の製品。

**【請求項 7 0】**

前記製品は、ポリエチレンテレフタレート (P E T)、ポリブチレンテレフタレート (P B T)、ポリエチレンナフタレート (P E N)、液晶ポリエステル (L C P) 等のよう 10 なポリエステルや、ポリエチレン (P E)、ポリプロピレン (P P)、ポリブチレン等のポリオレフィンや、スチレン系樹脂、ポリオキシメチレン (P O M)、ポリアミド (P A)、ポリカーボネート (P C)、メタクリル酸ポリメチレン (P M M A)、ポリ塩化ビニル (P V C)、ポリフェニレンスルフィド (P P S)、ポリフェニレンエーテル (P P E)、ポリイミド (P I)、ポリアミドイミド (P A I)、ポリエーテルイミド (P E I)、ポリスルホン (P S U)、ポリエーテルスルホン (P E S)、ポリケトン (P K)、ポリエーテルケトン (P E K)、ポリエーテルエーテルケトン (P E E K)、ポリアリレート (P A R)、ポリエーテルニトリル (P E N)、フェノール樹脂 (ノボラック系)、フェノキシ樹脂、フルオロカーボン樹脂、ポリスチレン系の熱可塑性エラストマー、ポリオレフィン系の熱可塑性エラストマー、ポリウレタン系の熱可塑性エラストマー、ポリエス 20 テル系の熱可塑性エラストマー、ポリアミド系の熱可塑性エラストマー、ポリブタジエン系の熱可塑性エラストマー、ポリイソブレン系の熱可塑性エラストマー、フッ素系の熱可塑性エラストマー、の少なくとも 1 つを含む、請求項 5 9 記載の製品。

**【発明の詳細な説明】****【技術分野】****【0 0 0 1】**

本発明は、一般に特性セットにマッチする新材料を設計するためのシステム及び方法に関する。より具体的には、本発明は、所望の特性セットに最も良くマッチする新材料を迅速に創造 / 設計して、製品開発時間を短縮できるようにする材料創造システム及び方法に関する。

**【背景技術】****【0 0 0 2】**

新製品が設計されるときには、ある特性を有する材料が望まれるが、どの成分セットみ合わせがこうした特性に最適な材料を生み出すのかは容易には明らかにならない場合が多い。従って、こうした材料をもたらすことになる最良の成分セットみ合わせ及び / 又は加工条件を見つけるために実験が必要となる。こうした実験は、時間がかかり費用もかかる試みであり、これにより、多くの場合、実験は不適当で実行不可能なものになる。

**【0 0 0 3】**

所望の特性を持つ材料を設計するための現在のシステム及び方法は、主に設計スペースと呼ばれる統計的に設計された実験セットを利用する。設計スペースは、一般的には、共通の成分セットを中心として設計された実験を意味し、独立 (又は操作) 変数として以下のもの、すなわち、成分の相対的比率、該成分の品質パラメータ、及び加工パラメータを含み、従属 (又は応答) 変数として働く最終的な材料特性をもつ。設計スペースにおける実験的試行の各々は、独立変数と、出力として実測された従属変数との組み合わせを表す。設計スペースは多くの実験的試行を有すことになり、その一部は一意的なものであり、一部は固有の実験誤差を評価可能にするために再現される。現在の設計スペースの多くは、原作者である製品開発者のコンピュータ上に単一のファイルとして存在するので、他の製品開発者にとって検索可能ではなく、又は役に立たない。製品開発者が、新材料の所望の特性にほぼ近似した特性をもつ複数の設計スペースへのアクセスを有する場合でさえも

10

20

30

40

50

、誰かがこれらの設計スペース全体をソートし、どの実験的試行が所望の特性に最も密接にマッチするかを判断しなければならない。多くの場合、これは技術者の頭の中で実行され、即ち、この判断は、直観、知識、及び経験、又は他の非科学的な手段に基づくものとなる。従って、所望の特性に全体的に最も良くマッチする新材料を見つけるために、追加の試験又は実験が必要とされることになる。これは、設計スペース内の実験的試行が、1つ又はそれ以上の所望の特性値に極めて密接にマッチするが、他の所望の特性値には全く密接にマッチしない場合があるという事実によって更に複雑になる。従って、適切なツール及びシステムがない状態では、リスト内のどの実験的試行が所望の特性に全体的に最も良くマッチするかを見分けることが困難な場合が多い。

## 【0004】

10

場合によっては、既存の実験的試行は、所望の特性に最も良くマッチしない場合があり、最良の適合をもたらす新材料を創造／設計することが必要となる。しかしながら、既存のシステム及び方法では、追加試験なしで所望の特性の良好な適合が得られるような新材料を創造／設計することは容易ではない。

## 【発明の開示】

## 【発明が解決しようとする課題】

## 【0005】

20

このように、現在のところ所望の特性に全体的に最も良くマッチする新材料を創造する迅速且つ容易な方法はない。従って、いずれの既存の実験的試行又は新しく創造される材料が、所望の特性に全体的に最も密接にマッチするかを迅速に特定できるようにし、これにより製品の開発サイクル時間を大幅に短縮できるようにするシステム及び方法に対する必要性がある。更に、ユーザが特定の設計スペースだけ（すなわち、ポリカーボネートのような特定の原材料を含むこうした設計スペースだけ）を検索できるようにする、こうしたシステム及び方法に対する必要性もある。更に、コンピュータを用いて自動化されることになるこうしたシステム及び方法に対する必要性もある。更に、インターネットを介してユーザにアクセス可能となるようなこうしたシステム及び方法に対する別の必要性もある。また、どの実験的試行が所望の特性に全体的に最も良くマッチするかを計算する場合に、全ての所望の特性をまとめて考慮に入れるようなこうしたシステム及び方法に対する必要性もある。望ましさ関数を利用して、既存の実験的試行が個々の所望の特性値の各々にどの程度良好にマッチするかに応じて既存の実験的試行にスコア付けするようなこうしたシステム及び方法に対する更に別の必要性もある。また、実験的試行の個々のスコアがいずれもゼロでない場合には、実験的試行の全体的マッチスコアのみを与えるようなこうしたシステム及び方法に対する必要性もある。更に、実験的試行の全体的マッチスコアを計算しているときに、低い優先度を有する特性よりも高い優先度を有する特性の方に、より大きな重み付けを付与できるようにするこうしたシステム及び方法に対する必要性もある。モデル（伝達関数とも呼ばれる）を利用して、既存の実験的試行よりも所望の特性に良好にマッチする新材料を予測するようなこうしたシステム及び方法に対する更に別の必要性もある。更に、既存の実験的試行であるか又は新材料であるかに関係なく、所望の特性に最も良くマッチする材料をユーザが容易に特定できるように、この計算された全体的マッチスコアに応じて降順に材料をランク付けできるようにするこうしたシステム及び方法に対する必要性もある。最後に、無効データがシステムに入らないように、新しい設計スペースを注意深く且つ慎重に計画、設計、及び創造できるようにするこうしたシステム及び方法に対する必要性がある。

30

## 【課題を解決するための手段】

## 【0006】

40

従って、既存のシステム及び方法の上記の欠点は、本発明の実施形態によって克服される。本発明は、既存のどの実験的試行が、又は新しく創造されるどの材料が所望の特性セットに対して全体的に最も密接にマッチするかを迅速に特定できるようにし、これにより新製品の開発サイクル時間を大幅に短縮することを可能にする材料創造システム及び方法に関する。本発明の実施形態は、コンピュータを利用して、実験的試行のデータベース（

50

ここでは該データベースは幾つかの異なる設計スペースを含むことができる)を自動的に検索し、該データベース内の既存のどの実験的試行が所望の特性セットに全体的に最も良くマッチするかを計算するシステム及び方法を含む。ここで用いられる「設計スペース」は、構造化された形式で共通の独立変数に基づいて互いにグループ化された過去の実験データの集合体を意味する。各設計スペースは、幾つかの実験的試行からなる(すなわち、各結果は、試験された1つの特定の配合である)。実施形態において、既存の実験的試行からよりも新材料からの方が、より適切に所望の特性にマッチすることができる場合には、コンピュータを用いて、新しい(すなわち、理論上の)材料又は配合物を生成することができる。モデル(すなわち、伝達関数)を利用して、こうした新材料/配合物を予測することができる。この実施形態はまた、ユーザが、選択された設計スペースのみ(すなわち、ポリカーボネートのような特定の原材料を含む設計スペースのみ)を検索することを選択できるようにする。幾つかの実施形態において、本発明のシステム及び方法は、パソコン用コンピュータを介して及び/又はインターネットを介してユーザにアクセス可能とすることができる。本発明のシステム及び方法の実施形態は、どの実験的試行又は新材料が所望の特性セットに全体的に最も良くマッチするかを計算するときに、所望の特性の全てをまとめて考慮に入れることができる。本発明の実施形態において、こうしたシステム及び方法は、既存の実験的試行及び/又は新材料が個々の所望の特性値の各々にどのように上手くマッチするかに応じてスコア付けするために、望ましさ関数(Derringer及びSui ch、「Simultaneous Optimization of Several Response Variables」、Journal of Quality Technology、第12巻、1980年、p 214-219)を利用することができる。幾つかの実施形態は、実験的試行の個々の特性スコアのいずれもゼロでない場合には、実験的試行の全体的マッチスコアのみを与える。更に、実験的試行か又は新材料の全体的マッチスコアが計算されるときに、低い優先度をもつ特性より高い優先度をもつ特性の方に、より大きな重み付けを与えることができる。本発明のシステム及び方法の実施形態は、材料の計算された全体的マッチスコアに応じて降順に該材料をランク付けできるようにし、これによりユーザが所望の特性に最も良くマッチする材料を容易に特定することができる。実施形態はまた、最も良くマッチする材料が、既存の実験的試行であるのか又は新しい(すなわち、理論上の)材料であるのかを特定する。最後に、本発明のシステム及び方法の実施形態は、無効データがシステムに入らないように、新しい設計スペースを注意深く且つ慎重に計画し設計し創造するようにする。

#### 【0007】

新製品を設計するときには、多くの場合、ある特性を持つ材料が望まれる。これに向けて注意深く計画された設計スペースが創造され、その結果既存の実験材料/配合物を検索することができ、既存の実験材料/配合物から新材料/配合物を補間し及び創造することができ、したがって所望の特性セットに最も良くマッチする材料/配合を特定できるようにされる。ここで用いられる「材料」及び「配合物」とは、同じことを意味するものとして互換性をもって用いられる。本発明のシステム及び方法の実施形態は、ユーザが、検索することを望む原材料の類別を選択できるようにする。例えば、ユーザは、例えばポリカーボネートといった或る原材料を含む設計スペースを検索することだけを望むことができる。ユーザはまた、ユーザが材料に望む種々の特性及び特性値を入力し又は選択することができる。例えば、ユーザは、材料に望む特性を選択可能である。ユーザはまた、特性値を最大化すること、特性値を最小化すること、特性値の目標ポイント値をヒットすること、又は特性値を所与の許容値範囲内に維持すること、というような、ユーザが特性値に対して何をすることを望むかを選択可能とすることができる。実施形態においては、ユーザはまた、高、中又は低といった所望の特性の各々に対する優先度を選択可能とすることができます。

#### 【0008】

検索されることになる設計スペース、及び/又は特性及び所望の特性変数、及び/又は各特性に対する優先度が選択されると、最も密接にマッチする実験的試行又は新材料の検

10

20

30

40

50

索を始めることができる。一実施形態においては、第1段階は、実験的試行のデータベースを検索して、どの設計スペースがユーザによって選択された原材料を含んでいるかを見つけることを含む。次に、これらの設計スペースのどれを高度検索及びスコア付けのために確保するかを選択する機会をユーザに与えることができる。他の実施形態は、ユーザが材料にどの特性を望むかをユーザが選択することから始めることができる。

【0009】

次に、ユーザは、所望の実際の特性値、特性の単位、各特性に対する目標は何か（すなわち、特性値を最大化すること、特性値を最小化すること、特性値の目標ポイント値をヒットすること、又は特性値を所与の許容値範囲内に維持すること）、及び各特性に対する優先度／重要性はどれ位か（すなわち、高、中、低）を入力することができる。その後、実験的試行のデータベース（すなわち、設計スペース）を検索して、どの設計スペースが所望の特性を持つ実験的試行を含むかを見つけることができる。実施形態においては、設計スペース内の実験的試行が1つの特性に適合しない場合には、その実験的試行はスコア付けされない。更に、設計スペース内の実験的試行のいずれも1つ又はそれ以上の所望の特性の要求事項に適合しない場合には、その設計スペース全体をブロックすることもできる（すなわち、その設計スペース内のどれもスコア付けされない）。次に、ユーザは、どの設計スペースにスコア付けさせることを望むかを選択することができる。次に、各特性値のスコアを計算し、各実験的試行の全体的マッチスコアを計算し、実験的試行が所望の特性にどれ位良好にマッチするかを示すことができる。次に、各設計スペースにおける最も高い全体的マッチスコアと、各設計スペースにおける最も低い個々の特性スコアを有する特性とをユーザに表示することができる。次に、ユーザは、伝達関数を用いてどの設計スペースがスコアをもつことを望むかを選択し、それにより予測配合（すなわち、既存の実験的試行よりも所望の特性に良好にマッチすることができる新材料）を創造することができる。次に、本発明は、伝達関数によるスコア付けを実行し、その結果をユーザに出力する。この出力は、設計スペース内に存在する実際の実験的試行、並びに所望の特性に理論上マッチする新しく創造され又は予測された材料の全体的マッチスコアから構成されてもよい。実施形態においては、ユーザは、一度に1つずつ設計スペースを選択して伝達関数によってスコア付けをし、次いで結果として得られた様々なスコアをもつ設計スペースを比較する機会が与えられてもよい。ユーザへの出力の全てにおいて、その全体的マッチスコアに基づいて降順に材料をソートする（それらが実験的試行であるか又は新材料であるかに関係なく）ことができ、それによりどの材料が所望の特性の全てに最も良くマッチするかをユーザが容易に特定することができるようとする。

【0010】

一実施形態においては、各特性値のスコアを計算するのに望ましさ関数が用いられる。これらの望ましさ関数は、所望の特性値と既存の実験的試行の実際の特定値との間の類似度を決める。ユーザが所望の特性の各々に対してどのような目標を選択するかに応じて、本発明に用いられる4つの異なる望ましさ関数がある。例えば、ユーザが特性値を最大化することを望む場合には、1つの望ましさ関数を利用して、その特性値に対するスコアを計算する。ユーザが特性値を最小化することを望む場合には、第2の望ましさ関数を利用して、その特性値に対するスコアを計算する。ユーザが特性値の目標ポイント値をヒットすることを望む場合には、第3の望ましさ関数を利用して、その特性値に対するスコアを計算する。最後に、ユーザが特性値を所与の許容値範囲内に維持することを望む場合には、第4の望ましさ関数を利用して、その特性値に対するスコアを計算する。

【0011】

実施形態においては、その特性に対して選択された優先度を考慮に入れるために、各スコアに重み付けすることができる。例えば、特性に対して高い優先度が選択された場合には、低い優先度を有する特性より高い値をその特性に付与することができ、これにより、全体的マッチスコアが計算されたときに、これらの優先度が考慮に入れられる。

【0012】

実施形態においては、全体的マッチスコアは、全ての特性値をまとめて考慮に入れるこ

10

20

30

40

50

とができる。上述の計算は、コンピュータが自動的に実行してもよいし、又は手動で実行してもよい。更に、ユーザが所望の特性及び許容特性値を選択すると、設計スペースのデータベースが自動的に検索され、該設計スペース内の最も良くマッチする実験的試行が探し出されるか、又は新しく創造され良好にマッチする材料が自動的に設計されるように、システム及び方法を設計することもできる。

#### 【0013】

本発明は、既存の材料創造システム及び方法のあらゆる利点を有するが、必要とされる実験及び研究時間が少なく、これにより、製品開発サイクル時間が短縮され、新製品をより迅速に市場に出すことができるようになる。

#### 【0014】

本発明の一実施形態は、既存の実験的試行を選択するか又は所望の特性セットに最も密接にマッチする新材料を創造するための方法を含む。この方法は、ユーザから少なくとも1つの入力パラメータを取得し、グローバル・データリポジトリから少なくとも1つの事前マッチングが存在する実験的試行の実際の特性値を引き出し、事前マッチングが存在する実験的試行の各々が所望の特性値セットにどれ位良好にマッチするかを判断し、その結果をユーザに出力することを含むことができる。この判断する段階は更に、事前マッチングが存在する実験的試行の各々の特性値にそれぞれスコアを付けて、スコアをもつ特性値を生成し、事前マッチングが存在する実験的試行の各々に対する全体的マッチスコアを計算することを含むことができる。全体的マッチスコアを計算することは、各特性に対する重み付け値を考慮に入れることによって、スコアをもつ特性値の各々に重み付けして、重み付けされスコアをもつ特性値を生成し、重み付けされスコアをもつ特性値の各々を互いに乗算し、乗算された数を  $1 / ($  全ての優先度の和  $)$  まで増加させることを含むことができる。この方法はまた、結果をユーザに出力する前に、事前マッチングが存在する実験的試行を、それらの全体的マッチスコアによってそれぞれソートすることを含むことができる。更に、この方法は、既存のどの実験的試行よりも所望の特性セットにより密接にマッチする少なくとも1つの新材料を予測することを含むことができる。事前マッチングが存在する実験的試行と併せて新材料をスコア付けしソートして、この組み合わされた結果をユーザに出力できるようにしてもよい。次いで、これらの結果に基づいて、ユーザによって指定された特性及び特性値に最も良くマッチする新製品又は材料を創造することができる。

#### 【0015】

本発明の別の実施形態は、既存の実験的試行を選択するか又は所望の特性セットに最も密接にマッチする新材料を創造するためのシステムを含む。このシステムは、ユーザから少なくとも1つの入力パラメータを取得するための手段と、グローバル・データリポジトリから少なくとも1つの事前マッチングが存在する実験的試行の実際の特性値を引き出すための手段と、事前マッチングが存在する実験的試行の各々が所望の特性値セットにどれ位良好にマッチするかを判断するために動作可能な材料選択アルゴリズムと、結果をユーザに出力するための手段とを含むことができる。この材料選択アルゴリズムは更に、事前マッチングが存在する実験的試行の各々の特性値にそれぞれスコアを付けて、スコアをもつ特性値を生成し、事前マッチングが存在する実験的試行の各々に対する全体的マッチスコアを計算するために動作可能であってもよい。この材料選択アルゴリズムはまた、結果をユーザに出力する前に、事前マッチングが存在する実験的試行を、それらの各々の全体的マッチスコアによってソートするために動作可能であってもよい。これに加えて、このシステムは、既存のどの実験的試行よりも所望の特性セットにより密接にマッチする少なくとも1つの新材料を予測するために動作可能な材料予測アルゴリズムを含むこともできる。このシステムはまた、事前マッチングが存在する実験的試行と併せて新材料をスコア付けしソートして、この組み合わされた結果をユーザに出力できるようにする手段を含んでもよい。次いで、これらの結果に基づいて、ユーザによって指定された特性及び特性値に最も良くマッチする新製品又は材料を創造することができる。

#### 【発明を実施するための最良の形態】

10

20

30

40

50

## 【0016】

本発明の別の特徴、様態、及び利点は、当業者であれば、本発明の幾つかの好適な形態を例示する添付の図面を参照して以下の説明を読むことで更に容易に理解できるであろう。図面中、同じ参照番号は、図面全体を通して同じ部品を表している。

## 【0017】

ここで、本発明のシステム及び方法を、本発明の種々の図面及びグラフを参照して以下に説明する。

## 【0018】

本発明の理解を助けるために、図1から図6に示す本発明の幾つかの好ましい実施形態を参照し、特定の用語を用いてこれを説明する。本明細書で用いられる専門用語は、説明のためのものであり非限定的である。本明細書に開示される特定の構造的及び機能的な詳細は、限定的に解釈されるべきではなく、単に本発明を様々に実施することを当業者に教示するための特許請求の範囲の根拠となる代表的な基本原理として解釈されるべきものである。当業者であれば普通に思い付くであろう、本明細書で示された材料創造システム及び方法のどのような修正又は変形、及び本明細書に例示される本発明の原理の別の用途は、本発明の精神に含まれるものとして考えられる。

## 【0019】

本発明は、既存のどの実験的試行又は新しく創造されたどの材料が、全体的に所望の特性セットに最も密接にマッチするかを迅速に特定することを可能にし、これにより新製品の開発時間を短縮することができる材料創造システム及び方法を含む。一実施形態において、材料創造方法は、図1に示す複数の段階を含む。最初にユーザは、10において、例えばポリカーボネートといった特定の原材料を検索することを望むか否かを決定することができ、30においてユーザが検索することを望む特定の原材料を入力することができる。20において、ユーザが特定の原材料を検索することを望まない場合には、ユーザは特定の原材料を入力する必要はない。次いで本発明は、これらのユーザ指定の原材料を含む設計スペースのリストを表示することができる。次に、40において、ユーザは、高度な検索及びスコア付けのためにどの設計スペースの確保を望むかを選択することができる。次いで、50において、ユーザは、所望の特性を入力することができる。60において、ユーザはまた、所望の特性値、特性の単位、各特性に対する目標は何であるか（すなわち、特性値を最大化すること、特性値を最小化すること、特性値の目標ポイント値をヒットすること、又は特性値を所与の許容値範囲内に維持すること）、及び各特性に対する優先度がどれ位であるか（すなわち、高、中、低）、を入力することができる。これらの特性は、機械的特性、熱的特性、耐衝撃性、又は他の所望の特性若しくは材料を含むことができる。こうした特性は、1つ又はそれ以上の次の非限定的特性、すなわち、曲げ弾性率、曲げ強さ、引張伸び（歪）、引張弾性率、引張強さ、結晶化温度、264 psi (1.8 MPa)におけるHDT、66 psi (0.45 MPa)におけるHDT、300°C / 1.2 kgにおける溶融流量、266°C / 10 kgにおける溶融粘度、266°C / 5 kgにおける溶融粘度、250°C / 5 kgにおける溶融体積率、265°C / 10 kgにおける溶融体積率、265°C / 2.16 kgにおける溶融体積率、265°C / 5 kgにおける溶融体積率、Vicat B / 120、23°Cでノッチ有りのときのノッチ付アイソット衝撃、23°Cでノッチ無しのときのノッチ付アイソット衝撃、23°CにおけるDynamup衝撃の合計エネルギー、-20°Cでノッチ有りのときのアイソット衝撃、-25°Cでノッチ有りのときのアイソット衝撃、-30°Cでノッチ有りのときのアイソット衝撃、-40°Cでノッチ有りのときのアイソット衝撃、0°Cでノッチ有りのときのアイソット衝撃、23°Cでノッチ有りのときのアイソット衝撃、23°Cでノッチ無しのときのアイソット衝撃、絶縁耐力、1.6 mmにおけるフレームアウト時間（10回の燃焼の平均）、光沢、曇り度、成形収縮-流れ、成形収縮-x流れ、1.6 mmにおけるPFTP、比重、黄色度、充填剤/纖維、耐衝撃性改良剤、PBT、難燃剤、他のポリエステル、PC、光安定剤及び他の安定剤を含んでもよい。ユーザが材料にどの特性を望むかを決めると、ユーザは次に、その特性に対する所望の値又は許容値を入力

10

20

30

40

50

し、更に、各特性に対してどの単位（すなわち、SI単位又は米国／英国単位）が望ましいかを選択する。例えば、ユーザは、特性値を最大化すること、特性値を最小化すること、特性値の目標ポイント値をヒットすること、又は特性値を所与の許容値範囲内に維持することを所望しもよい。ユーザはまた、各特性に付与された優先度を入力することもできる。この優先度は、高、中、及び低を含むことができる。

【0020】

次に、最も良くマッチする実験的試行又は新材料の検索を始めることができる。この実施形態においては、本発明は70において、所望の特性を有する設計スペースについて、グローバル・データリポジトリ、即ち設計スペースのデータベースを検索し、その結果をユーザに表示する。このグローバル・データリポジトリは、地球上の1つの地域からのデータを含むだけでなく、世界中からの実験的試行のデータを含むことができる。例えば、本発明の実施形態は、北米、ヨーロッパ、アジア等で入手可能な実験的試行のデータを含み、その全てを1つの検索可能なグローバル・データリポジトリに結合する。設計スペースに含まれる情報が、信頼できるものであり、且つ一般大衆には公開されないものとすることができる。該設計スペースは、承認された製品設計者だけが検索可能であることが好ましい。次に、80において、ユーザは、どの設計スペースにスコア付けさせることを望むかを選択することができる。

【0021】

本発明の実施形態において、バックグラウンド計算を実行することができる。ユーザは、このバックグラウンド計算が行われていることに気付く場合もあれば、気付かない場合もある。例えば、実験的試行の特性値はグローバル・データリポジトリからSI単位で引き出されるが、ユーザが単位を英国単位又は米国単位で表示することを望む場合には、本発明の実施形態は、これらをユーザに表示する前に、引き出した単位を適切な所望の単位に変換することができる。また、ある位置で所与の特性を計測するのに用いられる試験方法を、別の位置における同じ特性を計測するのに用いられる試験方法に正規化できるように、必要に応じてデータを正規化することができる。また、他のバックグラウンド計算を実行することができる。例えば、ユーザは特定の試験方法の結果を要求するが、この試験が行われずにデータベースに入力されておらず、このとき類似の試験が行われていた場合には、この類似の試験の実際の結果から所望の結果を計算することができる場合もある。

【0022】

この実施形態において、本発明は、実験的試行が1つの特性でさえもデータが不足している場合には、実験的試行にスコアを付けない。

【0023】

90において、ユーザがどの設計スペースにスコア付けさせたいかを選択すると、各実験的試行の各特性値に対するスコアを計算することができる。一実施形態において、スコアを4つの考えられる望ましさ関数の1つによって計算する。ユーザが特性値を最大化することを望む場合（すなわち、目標が特性値を最大化することである場合）には、この特性値に対するスコアは第1の望ましさ関数、すなわち下の表を用いて計算することができる。

【0024】

【表1】

実際の特性値(APV)が以下の場合	以下の望ましさ関数を使用
APV<MIN	スコア=0
APV>MAX	スコア=1
その他	スコア= $\left[ \frac{APV-MIN}{MAX-MIN} \right]^x$

【0025】

ただし、APV=実際の特性値、MAX=ユーザ指定最大許容特性値、MIN=ユーザ指

10

20

30

40

50

定最小許容特性値、及び $x$  = 重み付け値である。重み付け値 ( $x$ ) は、望ましさ関数の形を変えるのに用いられる。重み付け値は、一般的に約 0.1 から約 1.0 までの範囲にわたる。重み付け値 1 は、MAX と MIN との間の線形のスコアを与える、これは一般的に用いられる重み付け値である。1 より小さい重み付け値が、目標にあまり重きを置かないのに対し、1 より大きい重み付け値は、目標に強く重きを置くものである。重み付け値が 1 である場合の、この望ましさ関数のグラフが図 2 に示される。

## 【0026】

ユーザが特性値を最小化することを望む場合 (すなわち、目標が特性値を最小化することである場合) には、この特性値のスコアを第 2 の望ましさ関数、すなわち下表を用いて計算することができる。

## 【0027】

【表 2】

実際の特性値 (APV) が以下の場合	以下の望ましさ関数を使用
APV > MAX	スコア = 0
APV < MIN	スコア = 1
その他	スコア = $\left[ \frac{\text{MAX}-\text{APV}}{\text{MAX}-\text{MIN}} \right]^x$

## 【0028】

ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、及び $x$  = 重み付け値である。重み付け値 1 が一般的に用いられる。重み付け値が 1 である場合の、この望ましさ関数のグラフが図 3 に示される。

## 【0029】

ユーザが特性値の目標ポイント値をヒットすることを望む場合 (すなわち、目標が特性値の目標ポイント値をヒットすることである場合) には、この特性値のスコアを第 3 の望ましさ関数、すなわち下表を用いて計算することができる。

## 【0030】

【表 3】

実際の特性値 (APV) が以下の場合	以下の望ましさ関数を使用
APV $\geq$ DPV 及び APV $\leq$ MAX	スコア = $\left[ \frac{\text{MAX}-\text{APV}}{\text{MAX}-\text{DPV}} \right]^x$
APV > MAX	スコア = 0
APV $\leq$ DPV 及び APV $\geq$ MIN	スコア = $\left[ \frac{\text{APV}-\text{MIN}}{\text{DPV}-\text{MIN}} \right]^x$
APV < MIN	スコア = 0

## 【0031】

ただし、APV = 実際の特性値、MAX = ユーザ指定最大許容特性値、MIN = ユーザ指定最小許容特性値、DPV = ユーザによって指定された所望の特性値、及び $x$  = 重み付け値である。重み付け値 1 が一般的に用いられる。重み付け値が 1 である場合の、この望ましさ関数のグラフが図 4 に示される。

## 【0032】

最後に、ユーザが特性値を所与の許容特性値の範囲内に維持することを望む場合 (すなわち、目標が特性値を所与の許容特性値の範囲内に維持することである場合) には、この特性値のスコアを第 4 の望ましさ関数、すなわち下表を用いて計算することができる。

## 【0033】

【表4】

実際の特性値(APV)が以下の場合	以下の望ましさ関数を使用
MIN≤APV≤MAX	スコア=1
その他	スコア=0

## 【0034】

ただし、APV = 実際の特性値、MAX = 最大許容特性値、及びMIN = 最小許容特性値である。この区分線形の望ましさ関数のグラフが図5に示される。

## 【0035】

各特性値のスコアが計算されると、全体のスコアを計算することができる。この全体のスコアは、各特性の相対的優先度を考慮に入れることができる。例えば、この実施形態においては、特性に高い優先度が与えられる場合には、その特性に優先度5の値が付与され、特性に中程度の優先度が与えられる場合には、その特性に優先度3の値が付与され、特性に低い優先度が与えられる場合には、その特性に優先度1の値が付与される。110において、次式の通り、最初に個々のスコアの各々をその優先度まで増加させて、各優先度に対する重み付けスコアを生成し、次いで各特性に対するこれらの重み付けスコアを互いに乗算し、この乗算した数を、次式のように、1/(全ての優先度の和)まで増加させることによって、全体的マッチスコアを計算することができる。

## 【0036】

## 【数1】

$$\text{全体的マッチスコア} = \left[ \prod_{i=1}^n \left( \text{スコア}_i \right)^{\text{優先度}_i} \right]^{1/\sum_{i=1}^n \text{優先度}_i}$$

## 【0037】

次に120において、既存の実験的試行をこの全体的マッチスコアの降順にソートすることができる。最後に、120において、設計スペース内の最も良くマッチする実験的試行のリストをユーザに出力することができ、ユーザが最も良くマッチする実験的試行を容易に特定することができるようこれが出力リストの最上位に載るようにされる。

## 【0038】

その後、この実施形態においては、130において新材料を予測する機会をユーザに与えることができる。ユーザは、140において、設計スペースがある場合には、伝達関数を用いてどの設計スペースにスコア付けすることを望むかを選択することができ、これにより150において、できる限り良好にマッチする新しい材料を創造/予測することができる。次いで、150においてこれらの予測した材料に対する全体的マッチスコアを計算することができ、160において、その全体的マッチスコアによって設計スペース内の全ての材料(既存のもの及び予測したもの両方)をソートすることができ、170において、結果をユーザに出力することができる。この実施形態においては、伝達関数を用いて一度に1つだけ設計スペースをスコア付けすることができるが、伝達関数を用いて幾つかの設計スペースに同時にスコアを付けることができるよう実施形態を設計することができる。伝達関数を用いて全ての所望の設計スペースをスコア付けすると、180において、様々な設計スペースを選択して比較する機会をユーザに与えることができる。次に、190において、比較した結果をユーザに出力することができる。

## 【0039】

ここで、これらの計算を更に明らかにするために、上述の材料についての計算の全てが示されている下表を参照する。最初に、所望の特性として、引張強さ、23°Cでノッチ有りでのノッチ付アイゾット衝撃、264psi(1.8MPa)におけるHDT、及び分子量を選択した。次に、これらの各特性に対して望ましい単位、これらの各特性に対する目標値、これらの各特性に対する目標、及びこれらの各特性に対する優先度を下表の通り選択した。

10

20

30

40

50

【0040】

【表5】

望まれる特性	目標	優先度の値
40MPa < 引張強さ < 47Mpa	最大化すること	高(5)
ノッチ付アイソット衝撃 = 13kJ/m <sup>2</sup> (MIN=11kJ/m <sup>2</sup> , MAX=15kJ/m <sup>2</sup> )	目標値を探すこと	低(1)
80°C < HDT < 92°C	最小化すること	中(3)
24000g/mole < 分子量 < 26000g/mole	範囲内にすること	中(3)

【0041】

10

この実施形態の場合には、選択された単位は S I 単位であった。この特定の材料に対する設計スペースのデータベースからの引張強さの実際の値は 46 MPa であった。前述のように、この特性に対するスコアを(重み付け 1 を用いて)以下のように計算する。

【0042】

【数2】

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{APV}-\text{MIN}}{\text{MAX}-\text{MIN}} \right]^x = \left[ \frac{46-40}{47-40} \right]^1 = 0.8571$$

【0043】

20

この特定の実験的試行に対する設計スペースのデータベースからのノッチ付アイソット衝撃の実際の値は 13.2 kJ / m<sup>2</sup> であった。この特性に対するスコアを以下のように計算することができる。

【0044】

【数3】

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{MAX}-\text{APV}}{\text{MAX}-\text{DPV}} \right]^x = \left[ \frac{15-13.2}{15-13} \right]^1 = 0.9$$

【0045】

30

この特定の実験的試行に対する設計スペースのデータベースからの HDT の実際の値は 90.3 °C であった。この特性に対するスコアを以下のように計算することができる。

【0046】

【数4】

$$\text{スコア} = \left[ \frac{\text{MAX}-\text{APV}}{\text{MAX}-\text{MIN}} \right]^x = \left[ \frac{92-90.3}{92-80} \right]^1 = 0.1417$$

【0047】

40

最後に、この特定の実験的試行に対する設計スペースのデータベースからの分子量の実際の値は 25000 g / g mole であった。この特性に対するスコアは 1 である。

【0048】

40

次に、この実験的試行に対する全体的マッチスコアを以下のように計算することができる。

【0049】

## 【数5】

$$\text{全体的マッチスコア} = \left[ \prod_{i=1}^n (\text{スコア}_i)^{\text{優先度}_i} \right]^{1/\sum_{i=1}^n \text{優先度}_i}$$

$$\text{全体的マッチスコア} = \left[ (.8571^5)(0.9^1)(0.1417^3)(1^3) \right]^{1/(5+1+3+3)} = 0.001184^{1/12} = 0.5703$$

## 【0050】

全体的マッチスコアは、材料がどれくらい良好に所望の特性値に適合するかを評価する。各材料は、所望の特性にマッチする程度に応じて、0から1.0までの範囲にわたる全体的マッチスコアを有することになる。1.0の全体的マッチスコアとは、材料が完全に全ての所望の特性にマッチすることを意味し、0.0の全体的マッチスコアとは、材料が全く所望の特性にマッチしていないことを意味する。

## 【0051】

この実施形態において、各設計スペース内の実験的試行にスコアを付け、ソートし、ユーザに出力すると、伝達関数を用いてどの設計スペースにスコア付けさせることを望むかを選択する機会をユーザに与えることができ、該ユーザは予測配合物（すなわち、既存の実験的試行よりも所望の特性により良好にマッチすることができる新材料）を創造することができる。伝達関数が適用される前に、まず予測した新材料のメッシュを生成することができる。このメッシュは、実際は、制約付き最適化問題の解法である。この制約付き最適化問題を解くことができる1つの例示的な非制限的方法を説明する。当業者であれば、この問題に対する他の解法も存在することが理解されるであろう。最初に、n成分を有する場合、ユーザの所望の数の歩進(x)を用いて、全てのn成分を中核としてメッシュを作ることができる。例えば、ユーザが、ファクタとして3つの構成要素をもつ設計スペースを有し、特定の構成要素（すなわち、A）が材料の約10%から40%までを構成し、3歩進を望む場合には、メッシュは、該材料における様々なAの量（すなわち、10%のA、20%のA、30%のA及び40%のA）を示すために作られる。このメッシュによって創造される可能性のある新材料の総数は、 $(x+1)^n = 4^3$ 、すなわち、64の可能性のある新材料となる。この実施形態において、ユーザは3から7までの歩進を選択することができるが、他の歩進数を選択できるように実施形態を設計することもできる。次に、可能性のある新材料の各々におけるn成分を合計し、100より少ない合計を有する全ての組み合わせを無視する。合計が100に等しい全ての組み合わせは、各成分がその所望の範囲内に収まっている限りは、可能性のある新材料として維持される。100を上回る合計を有する全ての組み合わせについて、この合計から100を引いて、次に個々の各成分から一つずつこの少ない方の数を引いて、結果として得られた組み合わせが各成分の所望の範囲内に収まっているか否かを確認する。

## 【0052】

次に、このメッシュの生成を更に明らかにするために、このメッシュのサブセットについて説明する。例えば、材料が約10%から40%までの成分Aと、約20%から50%までの成分Bと、約10%から70%までの成分Cとを有することを望むとユーザが決めたと仮定する。これらの成分の合計は、100%に等しくなければならない。

## 【0053】

10

20

30

40

【表6】

新材料番号	A	B	C	合計	処置
1	10	20	30	60	無視
2	10	30	10	50	無視
3	40	30	50	120	20を引く
3A	20	30	50	100	現状維持
3B	40	10	50	N/A	無視
3C	40	30	30	100	現状維持
4	30	40	70	140	40を引く
4A	-10	40	70	N/A	無視
4B	30	0	70	100	無視
4C	30	40	30	100	現状維持
5	10	40	50	100	現状維持

10

20

## 【0054】

可能性のある新材料1番及び2番の両方は、成分の合計が100よりも小さいので無視する。

## 【0055】

新材料3番は、成分の合計が100よりも大きいので修正する。一つずつ各成分から20を引き（すなわち、新材料3A、3B及び3C）、それでも該成分が所望の範囲内に収まっているか否かを確認する。新材料3Aは、各成分がその所望の範囲内に収まり、該成分の合計が100に等しいので、可能性のある新材料として維持される。新材料3Bは、成分Bの割合が所望の範囲である20%から50%までを下回っているので無視される。新材料3Cは、各成分がその所望の範囲内に収まっており、該成分の合計が100に等しいので、可能性のある新材料として維持される。

30

## 【0056】

新材料4番もまた、成分の合計が100よりも大きいので修正される。一つずつ各成分から40を引き（すなわち、新材料4A、4B及び4C）、それでも該成分が所望の範囲内に収まっているか否かを確認する。新材料4Aは、成分Aの割合が所望の範囲である10%から40%までを下回っているので無視される。新材料4Bは、成分Bの割合が所望の範囲である20%から50%までを下回っているので無視される。新材料4Cは、各成分がその所望の範囲内に収まっており、該成分の合計が100に等しいので可能性のある新材料として維持される。

40

## 【0057】

新材料5は、各成分がその所望の範囲内に収まっており、該成分の合計が100に等しいので、可能性のある新材料として維持される。

## 【0058】

次に、全ての組み合わせをチェックして、重複がないことを確認する。可能性のある新材料のこのメッシュを生成すると、伝達係数を適用して特性値を予測することができる。本発明において適用される伝達関数は一般に、限定では無いが、成分の相対的比率、加工パラメータ及び原材料の品質パラメータのような独立変数に特性を関連付ける多項式モデルを含む。成分の割合又は比率において総計の制限がある場合には、シェフェの多項式モデル（Cornell, J., 「EXPERIMENTS WITH MIXTURES」、John Wiley & Sons、ニューヨーク州、1990年）と呼ばれる特

50

別な多項式形式を一般的に用いる。伝達関数はまた、経験的モデルではなく物理的モデルとすることができる。これに加えて、伝達関数は、特性の平均値のためばかりではなく、内外配列アプローチ (Myers, R. H. 及び Montgomery, D. C., 「RESPONSE SURFACE METHODOLOGY」, John Wiley & Sons, ニューヨーク州, 1995年) による誤差の伝播及び / 又は標準偏差の直接計算のような技術を用いた特性の標準偏差のためにも展開することができる。これらの伝達関数が、既存の実験的試行間のスペースのデータを補間して、既存の実験的試行よりも全体的に所望の特性に良好にマッチすることができる新材料を設計 / 創造する。この特定の実施形態において、伝達関数を用いて一度に1つだけ設計スペースにスコアを付けることができるが、伝達関数を用いて同時に多数の設計スペースに全てスコアを付けることができるよう他の実施形態を設計することもできる。これらの新配合 / 材料が予測されると、上記の既存の実験的試行について説明したのと同様に、これらの各材料に対する全体的マッチスコアを計算することができる。次に、このそれぞれの全体的マッチスコアによって材料をソートすることができ、結果をユーザに出力することができる。これらの結果は、好ましくは既存の実験的試行並びに、予測し、これに従ってソートした材料のデータを含み、ユーザが、既存の実験的試行又は新しく予測した材料のいずれが所望の特性セットに最も良くマッチするかを容易に特定することができる。次に、必要に応じて、ユーザは設計スペースを選択して比較することができる。例えば、この実施形態において伝達関数を用いて一度に1つだけ設計スペースにスコア付けすることができるので、ユーザは、伝達関数を用いて各設計スペースにスコアを付け、次いでその後にスコア付けされた設計スペースの全ての結果を比較することができる。

10

20

30

40

#### 【0059】

本発明の実施形態はまた、無効データがシステムに入らないように、新しい設計スペースを注意深く且つ慎重に計画し、設計し、及び創造できるようにする方法を含む。この方法は、新しい設計スペースに対する実験の構成、試験の推奨、モデルの創造、及び結果の解釈に関するガイドラインを提案することを含むことができる。

#### 【0060】

本発明の実施形態はまた、材料創造システムを含む。一実施形態において、材料創造システムは、図6に示すように3層アーキテクチャを含む。この実施形態における3つの階層は、ユーザ階層200と、ネットワーク階層210と、データベース階層220とを含む。この実施形態におけるユーザ階層によって、ユーザが様々な入力パラメータを入力又は選択することが可能になる。これらの様々な入力パラメータの幾つかの非制限的実施例は、ユーザが検索することを望む特定の原材料のいずれか、ユーザが高度検索のために確保することを望むこれらの特定の原材料を含む1つ又はそれ以上の設計スペース、ユーザがスコア付けのために確保することを望む1つ又はそれ以上の設計スペース、ユーザが検索することを望む1つ又はそれ以上の特性、検索する各特性に対する許容特性値がどれ位であるか、検索する各特性に対する目標は何か、及び / 又は検索する各特性に対する優先度を含む。このユーザ階層は、Java Server Pages (登録商標) (JSP) 技術及び / 又は JavaScript 等による適切な方法のいずれかで実施される材料検索インターフェース層を含むことができる。この実施形態においては、ネットワーク階層が、材料検索を実行する実際のアプリケーションのホストとして機能する (すなわち、ネットワーク階層が、材料検索エンジンとしての機能を果たす)。ネットワーク階層は、ユーザの入力を受け入れ、次いでデータベース層全体にわたって検索 / データの問い合わせを実行する。次に、ユーザ階層を介してこの検索結果をユーザに戻すことができる。この機能は、ウェブ・サーバ、Java Servlet、及び / 又はJava Data Base Connectivity (JDBC (登録商標)) 技術等を用いることによる適切な方法のいずれかで達成することができる。

#### 【0061】

本発明の実施形態は、例えばプラスチック、ガラス、セラミック及び / 又は金属等のようなどのような種類の材料をも含むグローバル・データリポジトリを検索するものである

50

。他の実施形態は、エンジニアリングサーモプラスチックから構成される様々な設計スペースを含むグローバル・データリポジトリを検索するものである。これらの設計スペース内に含まれる実験的試行は、一般的に実験用の材料であるが、商業的に入手可能な材料を含むこともできる。これらのサーモプラスチックは、例えばポリエチレンテレフタレート( P E T )、ポリブチレンテレフタレート( P B T )、ポリエチレンナフタレート( P E N )、液晶ポリエステル( L C P )等のようなポリエステルや、ポリエチレン( P E )、ポリプロピレン( P P )、ポリブチレン等のポリオレフィンや、スチレン系樹脂等、又はポリオキシメチレン( P O M )、ポリアミド( P A )、ポリカーボネート( P C )、メタクリル酸ポリメチレン( P M M A )、ポリ塩化ビニル( P V C )、ポリフェニレンスルフィド( P P S )、ポリフェニレンエーテル( P P E )、ポリイミド( P I )、ポリアミドイミド( P A I )、ポリエーテルイミド( P E I )、ポリスルホン( P S U )、ポリエーテルスルホン( P E S )、ポリケトン( P K )、ポリエーテルケトン( P E K )、ポリエーテルエーテルケトン( P E E K )、ポリアリレート( P A R )、ポリエーテルニトリル( P E N )、フェノール樹脂( ノボラック系又は同様のもの )、フェノキシ樹脂、フルオロカーボン樹脂、又は更にポリスチレン系、ポリオレフィン系、ポリウレタン系、ポリエステル系、ポリアミド系、ポリブタジエン系、ポリイソブレン系、フッ素系又はそれに類する系の熱可塑性エラストマー、或いはこれらの物質のいずれかのコポリマー又は変成物、或いはこれらの物質の 2 つ又はそれ以上のブレンド樹脂若しくはそれに類するものを含むことができる。更に好ましくは、これらのサーモプラスチックは、スチレン系樹脂と、ポリカーボネート樹脂と、ポリフェニレンエーテル樹脂と、ポリアミド樹脂と、ポリエステル樹脂と、ポリフェニレンスルフィド樹脂と、液晶樹脂と、フェノール系樹脂とを含む。本発明におけるサーモプラスチックは更に、ガラス、タルク、マイカ、クレー、又はこれらの組み合わせといった補強剤、単独で又は相乗剤と共に用いる難燃剤、ドリップ抑制剤、及び / 又は、安定剤、顔料、着色料、加工助剤、酸化防止剤等のような多種多様な他の添加剤、これらの 1 つ又はそれ以上を含むことができる。

10

20

30

#### 【 0 0 6 2 】

上述のように、本発明のシステム及び方法により、ユーザは、所望の性能基準に密接にマッチする既存の実験的試行又は新材料を、迅速且つ容易にそれぞれ特定又は創造 / 予測することが可能になる。有利なことに、これらのシステム及び方法が、新製品の開発時間を大幅に短縮することができ、従来よりも新製品を迅速に市場に出すことができるようになる。

#### 【 0 0 6 3 】

本発明の種々の実施形態は、本発明が対処する種々のニーズを実現するように説明されている。このような実施形態は、本発明の種々の実施形態の単なる例示であることを理解されたい。当業者には、本発明の精神及び範囲から逸脱することなく多数の変更例及び変形例を理解できる筈である。従って、本発明は、請求の範囲及びその均等物の範囲内に含まれる全ての適切な変更例及び変形例をカバーするものである。

#### 【 図面の簡単な説明 】

#### 【 0 0 6 4 】

【 図 1 】本発明の一実施形態において実行される、材料特性の引き出しと全体的マッチスコアの計算を示すフロー チャート。

40

【 図 2 】ユーザが特性値を最大化することを望む場合に適用される、目標への線形的なアプローチが想定されている望ましさ関数を示すグラフ。

【 図 3 】ユーザが特性値を最小化することを望む場合に適用される、目標への線形的なアプローチが想定されている望ましさ関数を示すグラフ。

【 図 4 】ユーザが特性値の目標ポイント値をヒットすることを望む場合に適用される、目標への線形的なアプローチが想定されている望ましさメンバーシップ関数を示すグラフ。

【 図 5 】ユーザが特性値を所与の許容値範囲内に維持することを望む場合に適用される望ましさ関数を示すグラフ。

【 図 6 】所望の特性セットに最も良くマッチする既存の実験的試行を選択するため、又は

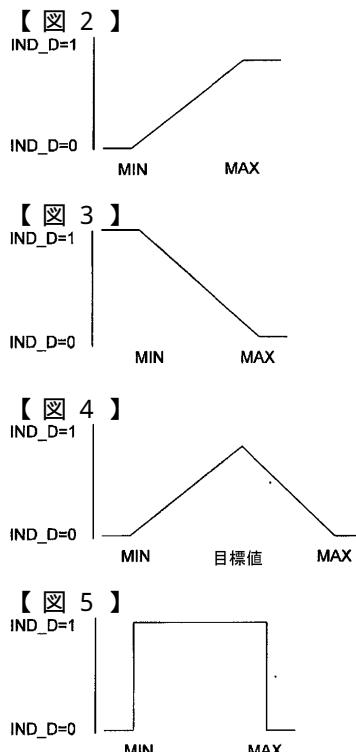
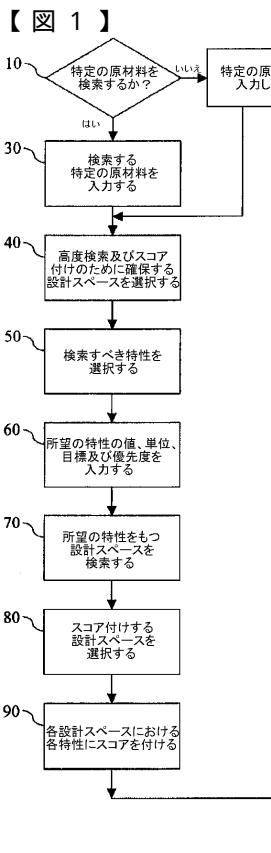
50

所望の特性セットに最も良くマッチする新材料を創造するためのシステムの一実施形態の3層アーキテクチャを示す概略図。

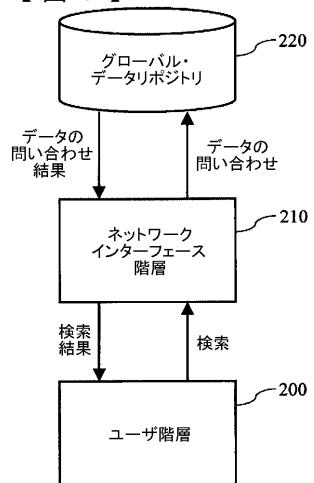
【符号の説明】

【0065】

- 10 特定の原材料を検索するか?  
 20 特定の原材料を入力しない  
 30 検索する特定の原材料を入力する  
 40 高度検索及びスコア付けのために確保する設計スペースを選択する  
 50 検索する特性を選択する  
 60 所望の特性の値、単位、目標及び優先度を入力する  
 70 所望の特性をもつ設計スペースを検索する  
 80 スコア付けする設計スペースを選択する  
 90 各設計スペースにおける各特性にスコアを付ける  
 110 全体的マッチスコアを計算する  
 120 結果をソートし、出力する  
 130 新材料を予測するか?  
 140 伝達関数を用いてスコア付けする設計スペースを選択する  
 150 新配合を予測し／全体的マッチスコアを計算する  
 160 全体的マッチスコアによって材料をソートする  
 170 結果を出力する  
 180 比較する設計スペースを選択する  
 190 比較結果を出力する
- 10  
20



【図6】



## フロントページの続き

(72)発明者 ネチプ・ドガナクソイ

アメリカ合衆国、ニューヨーク州、クリフトン・パーク、ロンドン・スクエア・ドライブ、409番

(72)発明者 マーサ・エム・ガードナー

アメリカ合衆国、ニューヨーク州、ニスカユナ、バッキンガム・ドライブ、4031番

(72)発明者 サンジェイ・ミシュラ

アメリカ合衆国、インディアナ州、エバンスビル、フェイス・ウェイ、211番

(72)発明者 ヴィノード・アムラディ

インド、バンガロール・560・017、エアポート・ロード、ビルダーズ・アパートメンツ、ブロック・2、ビー21番

(72)発明者 ダグマティ・ダヤカラ・レディ

インド、バンガロール・560・032、アールティー・ナガル、8ティーエイチ・メイン・エイチエムティー・レイアウト、ナンバー102、シー／オー・ジーエス・ラーガバ・ラジュ(番地なし)

(72)発明者 ブージャ・サイーニ

インド、ウッタランチャル・248・001、デラドゥーン、チュクワラ、367番

Fターム(参考) 5B046 AA00 CA06 KA05

【外國語明細書】

2004158008000001.pdf