

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7644872号
(P7644872)

(45)発行日 令和7年3月12日(2025.3.12)

(24)登録日 令和7年3月4日(2025.3.4)

(51)国際特許分類 F I
G 0 6 N 20/00 (2019.01) G 0 6 N 20/00
G 0 6 F 18/40 (2023.01) G 0 6 F 18/40

請求項の数 11 (全17頁)

(21)出願番号	特願2024-503339(P2024-503339)	(73)特許権者	501387839 株式会社日立ハイテク 東京都港区虎ノ門一丁目17番1号
(86)(22)出願日	令和5年2月20日(2023.2.20)	(74)代理人	110000350 ポレール弁理士法人
(86)国際出願番号	PCT/JP2023/005944	(72)発明者	中山 丈嗣 日本国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
(87)国際公開番号	WO2024/176288	(72)発明者	大森 健史 日本国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
(87)国際公開日	令和6年8月29日(2024.8.29)	審査官	福西 章人
審査請求日	令和6年1月18日(2024.1.18)		

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 モデル生成システムおよびモデル生成方法

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

ターゲットモデルを生成するモデル生成システムであって、
ソースモデルを格納するソースモデルデータベースと、
前記ソースモデルデータベースから検索されたソースモデルを用いて前記ターゲットモデルを生成するモデル生成部と、を有し、

前記モデル生成部は、

前記ターゲットモデルの出力をその出力として含む第1のソースモデル、及び前記ターゲットモデルの入力をその入力として含む第2のソースモデルを検索するデータベース検索部と、

前記第1のソースモデルの入力と前記第2のソースモデルの出力との対応付けが可能である場合に前記第1のソースモデルの当該入力と前記第2のソースモデルの当該出力とを結合する結合判断部とを備え、

前記ソースモデルデータベースに格納されるソースモデルとして、学習済みの機械学習モデルを含み、

前記結合判断部は、前記第1のソースモデルの入力の項目名と前記第2のソースモデルの出力の項目名とが一致する場合、前記第1のソースモデルの入力の項目名と前記第2のソースモデルの出力の項目名とが類義語である場合、前記第1のソースモデルの入力の項目名と前記第2のソースモデルの出力の項目名との間に結合履歴がある場合、または前記第1のソースモデルの入力の単位の次元情報と前記第2のソースモデルの出力の単位の次元

情報とが類似していると判定される場合に対応付けが可能であると判断するモデル生成システム。

【請求項 2】

請求項 1 において、

前記モデル生成部はモデル決定部を備え、

前記モデル決定部は、前記ターゲットモデルの入力を示す入力ノード、前記第 1 のソースモデル及び前記第 2 のソースモデルを示すモデル結合図を G U I 画面に表示し、

前記モデル結合図は、前記ターゲットモデルの入力ノードと対応する前記第 1 のソースモデルまたは前記第 2 のソースモデルの入力を示す入力ノードとをエッジで接続し、前記第 2 のソースモデルの出力を示す出力ノードと対応する前記第 1 のソースモデルの入力を示す入力ノードとをエッジで接続しており、

前記モデル決定部は、前記 G U I 画面において、前記モデル結合図のエッジによる接続が修正された場合に、修正された接続に応じて、前記ターゲットモデルの入力と前記第 1 のソースモデルあるいは前記第 2 のソースモデルの入力との結合、または前記第 2 のソースモデルの出力と前記第 1 のソースモデルの入力との結合を修正するモデル生成システム。

10

【請求項 3】

請求項 1 において、

前記ソースモデルデータベースに格納されるソースモデルとして、方程式または等号成立条件を有する不等式を含み、

前記方程式または前記不等式を表すソースモデルは、当該方程式または当該不等式の 1 つのパラメータを出力とし、他のパラメータを入力として定義されているモデル生成システム。

20

【請求項 4】

請求項 1 において、

前記ソースモデルデータベースに格納されるソースモデルとして、不等式を含み、

前記不等式を表すソースモデルは、当該不等式を満たすか満たさないかを示すブール値を出力とし、すべてのパラメータを入力として定義されているモデル生成システム。

【請求項 5】

ターゲットモデルを生成するモデル生成システムであって、

ソースモデルを格納するソースモデルデータベースと、

前記ソースモデルデータベースから検索されたソースモデルから前記ターゲットモデルを生成するモデル生成部と、

機械学習を行う機械学習部と、を有し、

前記モデル生成部は、前記ターゲットモデルの出力をその出力として含む第 1 のソースモデル、及び前記ターゲットモデルの入力をその入力として含む第 2 のソースモデルを検索するデータベース検索部と、結合判断部と、モデル決定部とを備え、

30

前記モデル決定部は、前記ターゲットモデルの入力を示す入力ノード、前記データベース検索部で検索された、前記第 1 のソースモデル及び前記第 2 のソースモデルを含む 1 以上の検索ソースモデルを含み、対応する入力ノード同士またはある検索ソースモデルの出力ノードと対応する他の検索ソースモデルの入力ノードとをエッジで接続したモデル結合図を G U I 画面に表示し、

40

前記モデル結合図は、前記ターゲットモデルの入力ノードと対応する前記第 1 のソースモデルまたは前記第 2 のソースモデルの入力を示す入力ノードとをエッジで接続し、前記第 2 のソースモデルの出力を示す出力ノードと対応する前記第 1 のソースモデルの入力を示す入力ノードとをエッジで接続しており、

前記結合判断部は、前記他の検索ソースモデルの入力と前記ある検索ソースモデルの出力との対応付けが可能である場合に前記他の検索ソースモデルの当該入力と前記ある検索ソースモデルの当該出力とを結合し、

前記結合判断部は、前記ある検索ソースモデルの入力の項目名と前記他の検索ソースモデルの出力の項目名とが一致する場合、前記ある検索ソースモデルの入力の項目名と前記他

50

の検索ソースモデルの出力の項目名とが類義語である場合、前記ある検索ソースモデルの入力の項目名と前記他の検索ソースモデルの出力の項目名との間に結合履歴がある場合、または前記ある検索ソースモデルの入力の単位の次元情報と前記他の検索ソースモデルの出力の単位の次元情報とが類似していると判定される場合に対応付けが可能であると判断し、

前記モデル決定部は、前記 G U I 画面において、前記モデル結合図のエッジによる接続が修正された場合に、修正された接続に応じて、前記ターゲットモデルの入力と前記第 1 のソースモデルあるいは前記第 2 のソースモデルの入力との結合、または前記第 2 のソースモデルの出力と前記第 1 のソースモデルの入力との結合を修正し、

前記モデル決定部は、前記 G U I 画面において未学習モデルを追加するよう、前記モデル結合図の接続が修正された場合に、修正された接続に応じて、前記ターゲットモデルの入力、前記検索ソースモデル、及び前記未学習モデルの結合を修正した結合モデルを決定し、

10

前記機械学習部は、前記ターゲットモデルの入力及び出力に対応する学習データを用いて、前記結合モデルのトレーニングを行うモデル生成システム。

【請求項 6】

ターゲットモデルを生成するモデル生成システムであって、

ソースモデルを格納するソースモデルデータベースと、

前記ソースモデルデータベースから検索されたソースモデルから前記ターゲットモデルを生成するモデル生成部と、

20

機械学習を行う機械学習部と、を有し、

前記モデル生成部は、前記ターゲットモデルの出力をその出力として含む第 1 のソースモデル、及び前記ターゲットモデルの入力をその入力として含む第 2 のソースモデルを検索するデータベース検索部と、モデル決定部とを備え、

前記モデル決定部は、前記ターゲットモデルの入力を示す入力ノード、前記データベース検索部で検索された 1 以上の検索ソースモデルを含み、対応する入力ノード同士またはある検索ソースモデルの出力ノードと対応する他の検索ソースモデルの入力ノードとをエッジで接続したモデル結合図を G U I 画面に表示し、

前記モデル決定部は、前記 G U I 画面において未学習モデルを追加するよう、前記モデル結合図の接続が修正された場合に、修正された接続に応じて、前記ターゲットモデルの入力、前記検索ソースモデル、及び前記未学習モデルの結合を修正した結合モデルを決定し、前記機械学習部は、前記ターゲットモデルの入力及び出力に対応する学習データを用いて、前記結合モデルのトレーニングを行い、

30

前記機械学習部は、前記ターゲットモデルの入力を入力とし、前記ターゲットモデルの出力を出力とする機械学習モデルである標準モデルを設定し、前記学習データを用いて前記標準モデルのトレーニングを行い、

前記モデル決定部は、前記結合モデルと前記標準モデルのいずれかを前記ターゲットモデルとして選択するモデル生成システム。

【請求項 7】

請求項 5 または 6 において、

40

前記機械学習部は、前記結合モデルのトレーニングにおいて、前記結合モデルに含まれる前記検索ソースモデルの学習率を 0 に設定するモデル生成システム。

【請求項 8】

請求項 5 または 6 において、

前記ソースモデルデータベースに格納されるソースモデルとして、方程式または等号成立条件を有する不等式を含み、

前記方程式または前記不等式を表すソースモデルは、当該方程式または当該不等式の 1 つのパラメータを出力とし、他のパラメータを入力として定義されているモデル生成システム。

【請求項 9】

50

請求項 5 または 6 において、

前記ソースモデルデータベースに格納されるソースモデルとして、不等式を含み、

前記不等式を表すソースモデルは、当該不等式を満たすか満たさないかを示すブール値を出力とし、すべてのパラメータを入力として定義されているモデル生成システム。

【請求項 10】

モデル生成システムを用いてターゲットモデルを生成するモデル生成方法であって、

前記モデル生成システムは、ソースモデルを格納するソースモデルデータベースと、前記ソースモデルデータベースから検索されたソースモデルを用いて前記ターゲットモデルを生成するモデル生成部と、を有し、

前記モデル生成部は、

前記ターゲットモデルの出力をその出力として含む第 1 のソースモデル、及び前記ターゲットモデルの入力をその入力として含む第 2 のソースモデルを検索し、

前記第 1 のソースモデルの入力と前記第 2 のソースモデルの出力との対応付けが可能である場合に前記第 1 のソースモデルの当該入力と前記第 2 のソースモデルの当該出力とを結合し、

前記ソースモデルデータベースに格納されるソースモデルとして、学習済みの機械学習モデルを含み、

前記モデル生成部は、前記第 1 のソースモデルの入力の項目名と前記第 2 のソースモデルの出力の項目名とが一致する場合、前記第 1 のソースモデルの入力の項目名と前記第 2 のソースモデルの出力の項目名とが類義語である場合、前記第 1 のソースモデルの入力の項目名と前記第 2 のソースモデルの出力の項目名との間に結合履歴がある場合、または前記第 1 のソースモデルの入力の単位の次元情報と前記第 2 のソースモデルの出力の単位の次元情報とが類似していると判定される場合に対応付けが可能であると判断するモデル生成方法。

【請求項 11】

請求項 10 において、

前記モデル生成部は、

前記ターゲットモデルの入力を示す入力ノード、前記第 1 のソースモデル及び前記第 2 のソースモデルを示すモデル結合図を G U I 画面に表示し、前記モデル結合図は、前記ターゲットモデルの入力ノードと対応する前記第 1 のソースモデルまたは前記第 2 のソースモデルの入力を示す入力ノードとをエッジで接続し、前記第 2 のソースモデルの出力を示す出力ノードと対応する前記第 1 のソースモデルの入力を示す入力ノードとをエッジで接続しており、

前記 G U I 画面において、前記モデル結合図のエッジによる接続が修正された場合に、修正された接続に応じて、前記ターゲットモデルの入力と前記第 1 のソースモデルあるいは前記第 2 のソースモデルの入力との結合、または前記第 2 のソースモデルの出力と前記第 1 のソースモデルの入力との結合を修正するモデル生成方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、モデル生成システムおよびモデル生成方法に関する。

【背景技術】

【0002】

近年の情報処理技術の進展に伴い、様々な分野において機械学習技術の利用が進んでいる。機械学習とは、大量のデータまたはあるルール等の経験により学習モデル（単に「モデル」とも呼ぶ）を構築し、その学習モデルを用いて何らかのタスクを実行する手法・技術である。

【0003】

一般に機械学習では、学習に用いるデータ（「学習データ」あるいは「訓練データ」と呼ぶ）の量が多いほど高い精度の学習済モデルを実現可能である。逆に、データが少ない

10

20

30

40

50

場合には十分な精度の学習済モデルを構築することは困難である。そのため、学習モデルを構築する際、学習データが多く得られた場合には十分な精度の学習済モデルが得られるが、学習データが少ない場合には不十分な精度の学習済モデルしか得られない、ということが起こる。

【0004】

機械学習技術分野において少ないデータで高精度なモデルを得るための手法として、転移学習がある。転移学習とは、他の学習データを用いて作成した学習済モデルを利用（転移）することで、学習データが少ない場合に於いても十分な精度を達成しようとする技術の総称である。転移学習では、既存の学習済モデルをそのまま再利用したり、学習済モデルを初期値として再学習（「ファインチューニング」など）したり、学習済モデルを部分モデル（ソースモデル）としてターゲットモデルの一部として組み込み新たなモデルを構築する等の方法で精度の高いモデルを得る試みが行われる。例えば、特許文献1においては、転移学習に用いる学習済モデルの選択方法を開示する。

10

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【文献】特開2021-182329号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

転移学習手法を用いれば、大規模で複雑なモデル構築を行う際などに過去に作成した学習済モデルを用いることでモデル構築に掛かるデータセットの用意や計算コストを削減することが期待される。

20

【0007】

一方で、製造技術の高度化や機械学習技術のコモディティ化に伴い、様々な学習済モデルが構築されている。そこで、本発明者らは、ニューラルネットワーク（NN）などのブラックボックスモデルに代表される学習済モデルを複数結合して、1つのモデルに集約して所望の学習済モデルを生成することを検討した。これにより、モデル開発において開発効率（学習に掛かる計算量や時間）を確保しつつ、予測精度の高いモデルを得ることができるようになる。さらに、このように学習済モデルを結合した学習モデルをトレーニング（転移学習）することにより、さらに予測精度を高めることができる。

30

【0008】

本発明の目的は、特に転移学習手法を用いる新たなモデル開発において、過去の類似する学習済モデル、部分的なモデル、既知の物理方程式などを見落とすことなく、効率的に活用して学習モデルを生成することを可能にすることである。

【課題を解決するための手段】

【0009】

本発明の一実施の態様であるモデル生成システムは、ターゲットモデルを生成するモデル生成システムであって、ソースモデルを格納するソースモデルデータベースと、ソースモデルデータベースから検索されたソースモデルを用いてターゲットモデルを生成するモデル生成部と、を有し、

40

モデル生成部は、ターゲットモデルの出力をその出力として含む第1のソースモデル、及びターゲットモデルの入力をその入力として含む第2のソースモデルを検索するデータベース検索部と、第1のソースモデルの入力と第2のソースモデルの出力との対応付けが可能である場合に第1のソースモデルの当該入力と第2のソースモデルの当該出力とを結合する結合判断部とを備え、

ソースモデルデータベースに格納されるソースモデルとして、学習済の機械学習モデルを含み、結合判断部は、第1のソースモデルの入力の項目名と第2のソースモデルの出力の項目名とが一致する場合、第1のソースモデルの入力の項目名と第2のソースモデルの出力の項目名とが類義語である場合、第1のソースモデルの入力の項目名と第2のソース

50

モデルの出力の項目名との間に結合履歴がある場合、または第1のソースモデルの入力の単位の次元情報と第2のソースモデルの出力の単位の次元情報とが類似していると判定される場合に対応付けが可能であると判断する。

【発明の効果】

【0010】

モデル生成に掛かる学習コスト（データ収集コスト、計算コスト）を削減する。その他の課題と新規な特徴は、本明細書の記述および添付図面から明らかになるであろう。

【図面の簡単な説明】

【0011】

【図1】モデル生成システムの基本構成を説明するための図である。

10

【図2】機械学習モデルが予測する処理装置の処理の例である。

【図3】実施例1において生成されるモデルの例である。

【図4】情報処理装置のハードウェア構成例である。

【図5】実施例1において、ストレージ装置に記憶されているプログラムとデータの例である。

【図6】実施例1において、モデル生成システムによりモデルを生成する処理を表すフローチャートである。

【図7】実施例2において生成されるモデルの例である。

【図8】実施例2において、ストレージ装置に記憶されているプログラムとデータの例である。

20

【図9】実施例2において、モデル生成システムによりモデルを生成する処理を表すフローチャートである。

【図10】実施例3において生成されるモデルの例である。

【図11】実施例3において、ストレージ装置に記憶されているプログラムとデータの例である。

【発明を実施するための形態】

【0012】

以下、本発明の実施例を、図面を用いて説明する。ただし、本発明は以下に示す実施の形態の記載内容に限定して解釈されるものではない。本発明の思想ないし趣旨から逸脱しない範囲で、その具体的構成を変更し得ることは当業者であれば容易に理解される。また、本明細書における図面等において示す各構成の位置、大きさ、及び形状等は、発明の理解を容易にするため、実際の位置、大きさ、及び形状等を表していない場合がある。したがって、本発明は、図面等に関示された位置、大きさ、及び形状等に限定されない。

30

【0013】

図1を用いて本実施例のモデル生成システム10の基本構成を説明する。モデル生成システム10は、モデル生成部11とソースモデルデータベース12とを有する。

【0014】

ソースモデルデータベース12は、ターゲットモデル構築に利用するためのソースモデルを格納する。データベース12に格納されるソースモデルには、学習（トレーニング）済の機械学習モデル（以下、学習済モデルという）や方程式・不等式が含まれる。機械学習モデルの形式は限定されず、ニューラルネットワーク（NN）、勾配ブースティング木、線形回帰、カーネルリッジ法等の機械学習モデルが含まれる。また、方程式・不等式は、現象を説明する方程式・不等式であればよく、例えば、ニュートンの運動方程式（ $F = ma$ ）やラングミュアの吸着等温式（ $K = N / N(1 -)p$ ）等の様々な方程式や、チェビシェフの不等式、クラウジウスの不等式等の様々な不等式が含まれる。また、ユーザーが定義した方程式や不等式であってもよい。ただし、ソースモデルデータベース12に格納される方程式は、目的変数の値が一意に確定されるよう、方程式の1つのパラメータを出力Y（目的変数）とし、残りのパラメータは全て入力X（説明変数または定数）として扱う。どのパラメータを出力Yとするかはユーザーが任意に決定することができる。また、ソースモデルデータベース12に格納される不等式は、その不等式の全てのパラメー

40

50

タを入力Xとして扱い、不等式を満たすか満たさないかの1または0の情報（ブール値）を出力Yとして取り扱うことができる。不等式が等号成立条件を有する場合には方程式と同等に取り扱う、すなわち1つのパラメータを出力Yとして取り扱うことも可能である。

【0015】

モデル生成部11は、ソースモデルデータベース12に格納された学習済モデルや方程式・不等式の結合を行う。ソースモデルは入力Xと出力Yをそれぞれ1つ以上有しており、モデル生成部11では、異なるソースモデルの入力Xと出力Yの項目名を確認し、項目名同士の対応付けが可能な場合に入力Xと出力Yとを結合する。

【0016】

図1には、ソースモデルデータベース12に学習済モデル15～17が格納されている例を示している。モデル生成部11は、例えば、学習済モデル15の出力 $y_{1,1}$ が学習済モデル16の入力 $x_{2,1}$ と一致しているので、出力 $y_{1,1}$ と入力 $x_{2,1}$ とを結合する。また、モデル生成部11は、例えば、学習済モデル15の出力 $y_{1,1}$ と学習済モデル17の入力 $x_{3,1}$ とは対応付けができないので、出力 $y_{1,1}$ と入力 $x_{3,1}$ とを結合しない。モデル生成部11において項目名同士の対応付けが可能な場合とは、項目名同士が一致する場合や、項目名同士に何らかの対応関係が認められる場合を含む。具体的な結合可否の判定方法については後述する。

10

【0017】

なお、モデル生成部11による結合のルールとして、ソースモデルの1つの出力Yから複数の他のソースモデルの入力Xと結合することができるのに対し、ソースモデルの1つの入力Xは他のソースモデルの1つの出力Yとしか結合することはできないものとする。また、基本的に、複数のソースモデルの入出力をループする結合はできないものとする。

20

【実施例1】

【0018】

実施例1では、処理装置の処理結果を予測する機械学習モデルを、実際に処理装置を稼働させて取得したデータによりトレーニングした第1の学習済モデルと、処理装置中で生じている物理現象をコンピューターソフトウェアでシミュレーションして得られた結果をトレーニングした第2の学習済モデルとを用い、本実施例のモデル生成システムを用いて1つのモデルを構築する例を示す。

【0019】

図2に示すように、原材料21を処理装置22に投入することで生成物23を得る。ここで、生成物23の状態は処理装置22に対して制御コンピューター24からどのような処理条件設定を行ったかに依存する。そこで、処理装置22に設定可能な処理条件を網羅的に振って実際に処理装置22で原材料21を処理し、それぞれの処理条件においてどのような生成物23が得られたかについての学習データを大量に取得し、機械学習モデル（例えば、ニューラルネットワークモデル）のトレーニングを行うことによって、処理条件から生成物状態を一定の精度で予測する学習済モデルを得られる。

30

【0020】

しかし、処理装置22が原材料21を処理にするのに通常長い時間を要することから、新たな学習データを大量に得るためには長い時間が必要となる。そこで、本実施例のモデル生成システムでは、過去に得られた知見やシミュレーション技術を活用し、新たな学習データを得ずとも生成物状態を予測することが可能な機械学習モデルを得る方法について説明する。

40

【0021】

例えば、図3に示すように、ユーザーは処理装置22の独立した処理条件である「ガス圧力」、「コイル電流」、「電力」、「元素比率」、「電圧」という5つの制御パラメータを入力Xとし、生成物23の「生成物状態」を出力Yとするターゲットモデル33の構築を意図しているとする。また、ソースモデルデータベース12には第1のソースモデル31と第2のソースモデル32とが格納されていたとする。第1のソースモデル31は、処理装置22における「イオン流量」に加え、「電力」、「元素比率」、「電圧」の3つの

50

制御パラメータを網羅的に振って処理装置 2 2 に原材料 2 1 を処理させて得られた生成物 2 3 の生成物状態を学習データとしてトレーニングを行った学習済モデルである。処理装置 2 2 に計測器を設置することで装置内のイオン流量を測定することができる。過去の実験等を通じて、「イオン流量」、「電力」、「元素比率」、「電圧」の 4 つのパラメータを入力 X とし、「生成物状態」を出力 Y とする第 1 のソースモデル 3 1 が構築され、ソースモデルデータベース 1 2 に格納されていたものとする。第 2 のソースモデル 3 2 は、処理装置 2 2 の処理室内における物理現象について物理シミュレーション技術を用いて構築され、ソースモデルデータベース 1 2 に格納されていたものとする。第 2 のソースモデル 3 2 は、「ガス圧力」、「コイル電流」、「電力」、「元素比率」の 4 つの制御パラメータを入力 X とし、「イオン流量」を出力 Y とする学習済モデルである。一般に、シミュレーションに必要な計算時間は、実際に処理装置 2 2 で原材料 2 1 を処理するのに要する時間と比較して非常に短く、学習データの取得に係るコストを小さくできる。

10

【 0 0 2 2 】

このように、物理シミュレーションが可能であれば、学習データは短時間で多量に準備することが可能であるため、例えば、深層学習などの機械学習を用いて高精度な学習済モデルを生成することが可能である。大量の学習データによってトレーニングされているため、このような学習済モデルは、出力 Y (第 2 のソースモデル 3 2 の場合は「イオン流量」) を高い精度で予測することが期待される。

【 0 0 2 3 】

モデル生成システム 1 0 は、第 1 のソースモデル 3 1 と第 2 のソースモデル 3 2 を結合することにより、所望のターゲットモデル 3 3 を得る。

20

【 0 0 2 4 】

モデル生成システム 1 0 は、図 4 に示すようなプロセッサ (CPU) 4 1、メモリ 4 2、ストレージ装置 4 3、入力装置 4 4、出力装置 4 5、通信装置 4 6、バス 4 7 を主要な構成として含む情報処理装置 4 0 により実現される。プロセッサ 4 1 は、メモリ 4 2 にロードされたプログラムに従って処理を実行することによって、所定の機能を提供する機能部 (機能ブロック) として機能する。ストレージ装置 4 3 は、機能部として機能させるプログラムの他、機能部で使用するデータを格納する。ストレージ装置 4 3 には、例えば HDD (Hard Disk Drive) や SSD (Solid State Drive) のような不揮発性記憶媒体が用いられる。入力装置 4 4 は、キーボード、ポインティングデバイスなどであり、出力装置 4 5 はディスプレイなどである。通信装置 4 6 は、ネットワークを介して他の情報処理装置と通信を可能にする。これらはバス 4 7 により互いに通信可能に接続されている。

30

【 0 0 2 5 】

なお、モデル生成システム 1 0 は、1 台の情報処理装置で実現する必要はなく、複数台の情報処理装置で実現してもよい。また、モデル生成システム 1 0 の一部、あるいはすべての機能をクラウド上のアプリケーションとして実現してもよい。

【 0 0 2 6 】

図 5 にストレージ装置 4 3 に記憶されているプログラムとデータを示す。モデル生成プログラム 5 1 は、メモリ 4 2 にロードされ、プロセッサ 4 1 によって実行されることにより、プロセッサ 4 1 をモデル生成部 1 1 として機能させる。なお、モデル生成プログラム 5 1 は、サブプログラムとしてデータベース (DB) 検索プログラム 5 2、結合判断プログラム 5 3、モデル決定プログラム 5 4 を含む。これらのサブプログラムも、メモリ 4 2 にロードされ、プロセッサ 4 1 によって実行されることにより、プロセッサ 4 1 を DB 検索部、結合判断部及びモデル決定部として機能させる。また、モデル生成システムが使用するソースモデルデータベース 1 2 もストレージ装置 4 3 に記憶されている。

40

【 0 0 2 7 】

モデル生成システム 1 0 を用いて、ターゲットモデル 3 3 を生成する処理を表すフローチャートを図 6 に示す。まず、ユーザーは作成したいターゲットモデルの入力項目名と出力項目名を設定する (S 0 1)。図 3 の例では、モデル 3 3 の入力 X となる 5 つの制御パラメータ (「ガス圧力」等) の名称及び出力 X となるパラメータ (「生成物状態」) が設

50

定される。

【0028】

続いて、DB検索部は、設定された入力項目名と等しい入力項目名を有するソースモデル及び、設定された出力項目名と等しい出力項目名を有するソースモデルをソースモデルデータベース12から検索する(S02)。候補が複数ある場合は選択肢をユーザーへ提示して選択するようにしてもよいし、または、更新時期の新しいモデルをシステムが選択するようにしてもよい。図3の例では、「ガス圧力」等を入力項目名に有し、「イオン流量」を出力項目名に有する第2のソースモデル32と「イオン流量」、「電力」等を入力項目名に有し、「生成物状態」を出力項目名に有する第1のソースモデル31とが検索されたものとする。

10

【0029】

続いて、結合判断部は、ソースモデルの入出力名同士を結合させる(S03)。ここでは、単純な例として、入出力名同士が一致している場合に結合する例を示す。図3の例では、第2のソースモデル32の出力項目名「イオン流量」が第1のソースモデル31の入力項目名「イオン流量」と一致しているため、これらを結合する。

【0030】

続いて、モデル決定部は、結合されたソースモデルを出力装置45に表示する(S04)。このとき、例えば、図3の一点鎖線枠内に示されるようなモデル結合情報を含めたモデル結合図35として出力装置45に表示する。モデル結合図35では、ソースモデルを示すボックスのそれぞれ左側に入力Xを示す入力ノード、右側に出力量Yを示す出力ノードが表示されている。さらに、ターゲットモデルの入力Xを示す入力ノード(処理条件)がソースモデルのさらに左側に示され、ターゲットモデルの入力ノードと対応するソースモデルの入力ノードとの結合、及びソースモデルの対応付けられたノード同士の結合はエッジによって表示されている。このように、表示画面において、入力ノードが相対的に左側、出力ノードが相対的に右側に位置するレイアウトをもつGUIとして画面表示することで、ソースモデル間に不適切な結合(例えば、ループ接続など)がなされていないか、確認することが容易になる。

20

【0031】

ユーザーはGUI画面に表示されたモデル結合図35を確認し(S05)、修正を要する場合には、モデル結合図35のエッジをGUI画面上で手動修正することにより、ターゲットモデルの入力ノードとソースモデル、またはソースモデル同士の結合を修正する(S06)。修正を要する場合とは、例えば、結合されたノード同士が、ユーザーのドメイン知識から不適切と判断できる場合を含む。その後、完成したターゲットモデル33をソースモデルデータベース12に保存する(S07)。

30

【0032】

このように作成したモデル33は、学習済モデルのみを用いて作成されており、必ずしも追加学習を必要としないものの、学習データ(ここでは、ターゲットモデル33の5つの制御パラメータについての処理条件と当該処理条件下における生成物状態とのデータセット)が少量でも得られていれば、学習データを用いて追加のトレーニング(追加学習という)を行うことが推奨される。元々の学習済モデルの重みを初期値とし、少量の学習データを用いて追加学習によって重みの更新を行うことはファインチューニングと呼ばれる。一般に、適切なファインチューニングを行うことで、より高精度な学習モデルとなる可能性が高まることが知られている。ファインチューニングを行う際、それぞれのモデルの学習率等のハイパーパラメータはユーザーにて適宜設定するとよい。

40

【実施例2】

【0033】

実施例2では、学習済モデルや方程式、不等式のみならず、未学習の機械学習モデルをソースモデルとして活用する。実施例2のモデル生成システム10も、図4に示すような情報処理装置40により実現される。図8にストレージ装置43に記憶されているプログラムとデータを示す。実施例1(図5)もにおいて格納されていたプログラム、データに加

50

え、機械学習を行うための機械学習プログラム 8 1 が格納されている。機械学習プログラム 8 1 は、メモリ 4 2 にロードされ、プロセッサ 4 1 によって実行されることにより、プロセッサ 4 1 を機械学習部として機能させる。なお、機械学習プログラム 8 1 は、サブプログラムとしてモデル設定プログラム 8 2、学習（トレーニング）プログラム 8 3 を含む。これらのサブプログラムも、メモリ 4 2 にロードされ、プロセッサ 4 1 によって実行されることにより、プロセッサ 4 1 をモデル設定部、学習部として機能させる。

【 0 0 3 4 】

図 7 の例は、実施例 1 で作成したモデル 3 3 に対して、更なる精度向上を図るため、入力 X（制御パラメータ）を増やしたターゲットモデル 7 0 を作成するものであり、ソースモデルとして未学習の機械学習モデルを利用する。具体的には、ターゲットモデル 7 0 の入力 X は、モデル 3 3 の入力 X に対して「周波数」、「Duty 比」の 2 つの制御パラメータを追加したものである。

10

【 0 0 3 5 】

モデル生成システム 1 0 を用いて、ターゲットモデル 7 0 を生成する処理を表すフローチャートを図 9 に示す。図 6 と同じ処理については同じ符号を付して重複する説明は省略し、相違点を中心に説明する。まず、ユーザーは作成したいターゲットモデルの入力項目名と出力項目名を設定する（S 0 1）。図 7 の例では、ターゲットモデル 7 0 の入力 X となる 7 つの制御パラメータ（「ガス圧力」等）の名称及び出力 X となるパラメータ（「生成物状態」）が設定される。

【 0 0 3 6 】

20

続いて、ユーザーはモデルの学習（トレーニング）に使用する学習データを指定する（S 1 1）。本事例は回帰問題であるから、ターゲットモデル 7 0 の入力 X となる 7 つの制御パラメータを網羅的に振って、処理装置 2 2 に原材料 2 1 を処理させて得られた生成物 2 3 の生成物状態を学習データとする。7 つの制御パラメータと生成物状態との組み合わせである学習データは例えば csv ファイルの形式で与えられる。その後、手順 S 0 2 と手順 S 1 3 とが並列に実施される。

【 0 0 3 7 】

手順 S 0 2 では、DB 検索部がソースモデルデータベース 1 2 の検索を行い、モデル 3 3 が検索されたものとする。手順 S 0 3 では、結合判断部による、ソースモデルの入出力名の結合が行われる。この例では、ソースモデルデータベース 1 2 から検索されたモデルは 1 つであるが、2 つ以上のモデルが検索された場合には実施例 1 と同様の処理が行われる。

30

【 0 0 3 8 】

続いて、モデル決定部は、結合されたソースモデルを出力装置 4 5 に表示する（S 0 4）。実施例 2 でも、図 7 の一点鎖線枠内に示されるようなモデル結合情報を含めたモデル結合図 7 5 が出力装置 4 5 に表示されるが、この時点で出力装置 4 5 に表示されるのは検索されたソースモデル 3 3 のみであり、「周波数」ノード、「Duty 比」ノードはどこにも接続されていない。

【 0 0 3 9 】

ユーザーは GUI 画面に表示されたモデル結合図 7 5 を確認し（S 0 5）、未接続の処理条件が存在するため、モデル結合図 7 5 を GUI 画面上で手動修正する（S 0 6）。ここでは 2 つの未学習モデル 7 1、7 2 を追加し、所望のターゲットモデル 7 0 にあわせてソースモデル同士を結合する。なお、未学習モデルの追加、結合方法は、図 7 の例には限られない。

40

【 0 0 4 0 】

続いて、機械学習部は、手順 S 1 1 で指定した学習データを用いて、ソースモデル 3 3 及び未学習モデル 7 1、7 2 の結合であるモデル（「結合モデル」という）の学習を実行する（S 1 2）。

【 0 0 4 1 】

モデル設定部は、ユーザーに対して、GUI 画面上で追加した未学習モデル 7 1、7 2

50

について、入出力の定義やハイパーパラメータの設定を行わせる。例えば、未学習モデルとしてニューラルネットワーク（NN）モデルを用いる場合、層数やノード数を含む様々なハイパーパラメータは、ユーザーが直接、詳細設定を行うことも可能であり、またはベイズ最適化を行うプログラムによって自動で決定することも可能である。また、ベイズ最適化を行う場合には、最適化を行う範囲の詳細設定も可能である。

【0042】

学習部は、結合モデルを学習データにより学習させる。結合モデルの学習（トレーニング）にあたっては、例えば、ソースモデル33の精度がある程度高いことが判明している、あるいは手順S11で指定した学習データの量が少ない場合等には、ソースモデル33の学習率を0とし、手順S12での学習においてはソースモデル33内部の重み付けを更新しないことが推奨される。このような場合には、ユーザーは、GUI画面上で該当するソースモデルの右上に表示されるロックアイコン73をオンとする。学習部は、結合モデルの学習において、ソースモデル33のロックアイコン73がオンとされている場合には、その重み付けの更新を行わない。この状態を「ソース固定モード」と呼ぶ。

10

【0043】

なお、これに対して、ロックアイコン73がオフとされている場合には、学習部は結合モデルのトレーニングにおいてソースモデル33の重み付けを含めて更新を行う。この状態を「ファインチューニングモード」と呼び、例えば、実施例1で説明した追加学習はファインチューニングモードで実施される。

【0044】

一方、機械学習部は、所望の7つの制御パラメータを入力Xとし、「生成物状態」を出力Yとするモデル（「標準モデル」という）を構築する（S13）。モデル設定部は、標準モデルの入出力を定義するとともに、ユーザーに対して標準モデルについてハイパーパラメータの設定を行わせ、学習部は、標準モデルを学習データにより学習させる。

20

【0045】

なお、学習データを用いたモデルの学習（手順S12, S13）には、データの量や情報処理装置（コンピュータ）のスペックによっては数時間～数日の時間が掛かることもある。

【0046】

標準モデル及び結合モデルの学習が完了したら、モデル決定部は、これら2つのモデルについて、学習部が学習データの一部を用いてモデルの学習中に行ったクロスバリデーション（CV）結果を比較する（S14）。モデル決定部は、CV値を以て、どちらのモデルがより高い精度の予測を可能とするモデルが判定し、より高い精度を有すると判定されたモデルをターゲットモデル70として選択し、ソースモデルデータベース12に保存する（S07）。

30

【実施例3】

【0047】

実施例3は、更に多くの処理条件を入力Xとして含むモデルを構築する例であり、ソースモデルデータベース12に格納されている物理方程式を活用する例を説明する。また、項目名が完全に一致しないノード同士の結合方法についても説明する。実施例3のモデル生成システム10も、図4に示すような情報処理装置40により実現される。図11にストレージ装置43に記憶されているプログラムとデータを示す。実施例2（図8）もにおいて格納されていたプログラム、データに加え、同義語辞書112、ノード結合履歴113が格納されている。また、結合判断プログラム53は、サブプログラムとしてテキストマイニングプログラム111を含む。テキストマイニングプログラム111も、メモリ42にロードされ、プロセッサ41によって実行されることにより、プロセッサ41をテキストマイニング部として機能させる。

40

【0048】

図10の例は、更なる精度向上を図るため、実施例2で作成するモデルよりもさらに入力X（制御パラメータ）を増やしたモデルを作成するものであり、ソースモデルとして未

50

学習の機械学習モデル及び物理方程式を利用する。具体的には、実施例3で作成するモデルの入力Xは、モデル70の入力Xに対して「温度」、「処理時間」の2つの制御パラメータを追加したものである。

【0049】

この2つの制御パラメータは、ユーザーのドメイン知識に基づき追加されたものとする。例えば、処理時間が長くなればなるほど、生成物状態に対して時間に比例した何かしらの影響を与えると想定される。さらに、処理中に生じていると想定される化学反応の反応速度が分かれば、反応速度と処理時間との積が生成物状態に対して大きな影響を与えると推定できる。

【0050】

モデル生成システム10を用いてモデルを生成する処理は、図9に示したフローチャートと同様である。特徴点を中心に説明する。まず、ユーザーは作成したいターゲットモデルの入力項目名と出力項目名を設定する(S01)。図10の例では、所望のターゲットモデルの入力Xとなる9つの制御パラメータ(「ガス圧力」等)の名称及び出力Xとなるパラメータ(「生成物状態」)が設定される。続く手順S02では、DB検索部がソースモデルデータベース12の検索を行い、第1のソースモデル31及び第2のソースモデル32が検索され、手順S03では、結合判断部が第1のソースモデル31と第2のソースモデル32とを結合し、手順S04では、モデル決定部が結合されたソースモデルを出力装置45に表示する。実施例3でも、図10の一点鎖線枠内に示されるようなモデル結合情報を含めたモデル結合図105が出力装置45に表示されるが、この時点で出力装置45

【0051】

ユーザーはGUI画面に表示されたモデル結合図105を確認し(S05)、未接続の処理条件が存在するため、モデル結合図105をGUI画面上で手動修正する(S06)。まず、実施例2と同様に、2つの未学習モデル103, 104を追加し、所望のターゲットモデルにあわせてソースモデル同士を結合する。この段階では、「温度」ノード、「処理時間」ノードは未接続のままである。

【0052】

上述のように、ユーザーは生成物状態を予測するモデルを構築するにあたり、その処理装置22に関するドメイン知識から、処理条件の1つである「処理時間」と処理中の化学反応の「反応速度」の概念を利用したいと考えた。そこで図10における最終段の未学習モデル104の入力項目に「反応速度」と「処理時間」という2つのパラメータを手動固定する。「処理時間」はターゲットモデルの入力Xであるパラメータの一つであるが、「反応速度」はターゲットモデルの入力ノードでも、出力ノードでもない中間ノードである。

【0053】

この時点で、未接続ノードとして「温度」ノードと「反応速度」ノードとが残っていることから、ユーザーはソースモデルデータベース12にこれらの項目名称を有するソースモデルの検索を行う。これにより、物理方程式であるアレニウスの式(反応速度 $k = A e^{-E/RT}$)がソースモデル候補としてGUI画面上に表示される。アレニウスの式は、「反応速度」、「温度」、「濃度」、「活性化エネルギー(活性化E)」のパラメータ間の相関を表す一般的な関係式(公式)である。方程式をソースモデルとして利用する場合には、出力Yにはいずれか一つのパラメータを割り当て、他のパラメータを入力Xとして割り当てる必要がある。そこで、アレニウスの式に基づくソースモデル101は、「反応速度」を出力Yとし、「温度」、「濃度」、「活性化E」を入力Xとするソースモデルとする。その結果、結合判断部は、ソースモデル101の入力Xのうち「温度」ノードを処理条件である「温度」ノードに、ソースモデル101の出力Yである「反応速度」ノードを未学習モデル104の「反応速度」が割り当てられた入力ノードに結合する。これにより、ソースモデル101の入力Xのうち「濃度」ノード、「活性化E」ノードが未接続として残る。

10

20

30

40

50

【 0 0 5 4 】

ソースモデルの全ての入力ノードは何かしらのノードと接続されていなくてはならないため、結合判断部はテキストマイニングプログラム 1 1 1 を起動する。テキストマイニング部は、同義語辞書 1 1 2 またはノード結合履歴 1 1 3 を検索し、「濃度」と「活性化 E」に関する探索を自動的に実行する。例えば、ノード結合履歴 1 1 3 に、過去に「圧力が高い程気体分子の衝突頻度が高くなり実質的に化学反応に関係する局所的な分子濃度が高まる」というドメイン知識に基づき「濃度」ノードと「圧力」ノードとが手動で結合された履歴が残されていたとする。結合判断部は、テキストマイニング部が検索した上記情報に基づき、「濃度」ノードと「ガス圧力」ノードとを結合する。一方、ソースモデル 1 0 1 の「活性化 E」ノードについては結合判断部による自動結合がなされなかったため、定数ノード 1 0 2 を設定し、定数ノード 1 0 2 から定数をソースモデル 1 0 1 に入力させることでソースモデル間の結合修正を終了とする。

10

【 0 0 5 5 】

ここでは、結合先の検索に同義語辞書 1 1 2、ノード結合履歴 1 1 3 を検索する例を示したが、各ノードに割り振られる単位の次元情報を用いて結合先を推測する方法も有用である。例えば、圧力 (Pa) であれば S I 単位系を用いて $m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$ のように表現できることを利用して、単位間の類似、非類似を評価することが可能である。さらに、ユーザーがあらかじめノードの結合を許可する項目名同士を格納した項目対応付けテーブルを備えるようにしてもよい。

【 0 0 5 6 】

また、結合先の検索のみならず、このようにノード名称の類似や結合履歴まで含めてソースモデルデータベース 1 2 の検索を行う (手順 S 0 2) ことも可能である。この場合には、多数のソースモデルが検索されることになるため、例えば、対応する変数の数を基準として優先順位を付してユーザーに提示することが望ましい。

20

【 0 0 5 7 】

以上、モデル生成システムの複数の実施例について説明した。上記実施例に開示されている複数の構成要素を、組み合わせに矛盾が生じない限り、適宜組み合わせることができる。さらに、上記実施例に示される全構成要素からいくつかの構成要素を削除することもできる。

【 符号の説明 】

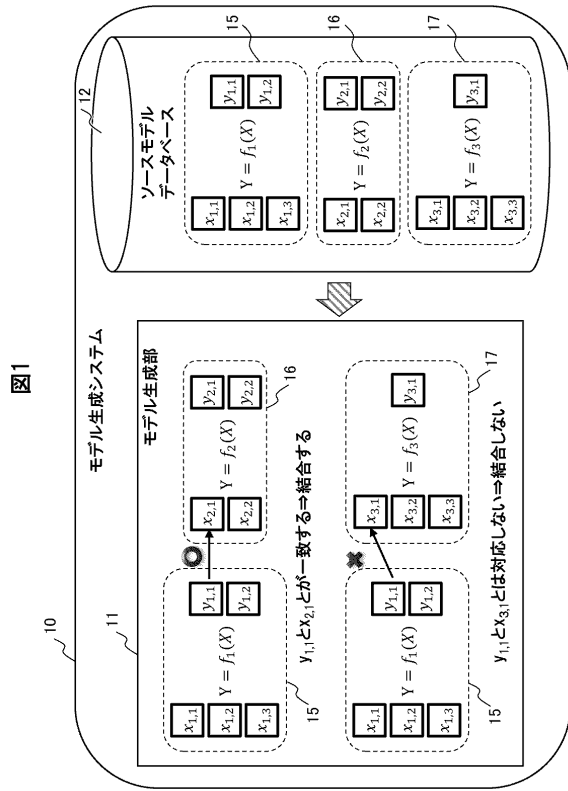
30

【 0 0 5 8 】

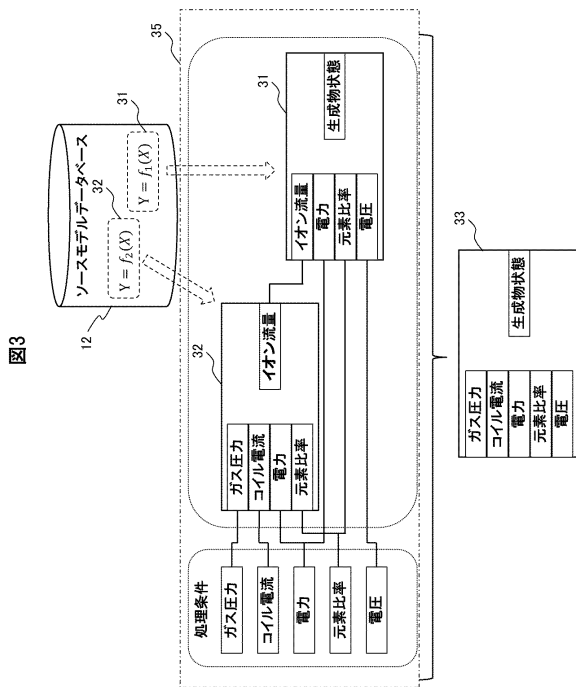
1 0 : モデル生成システム、1 1 : モデル生成部、1 2 : ソースモデルデータベース、1 5 ~ 1 7 : 学習済モデル、2 1 : 原材料、2 2 : 処理装置、2 3 : 生成物、2 4 : 制御コンピュータ、3 1 : 第 1 のソースモデル、3 2 : 第 2 のソースモデル、3 3 : モデル、3 5 : モデル結合図、4 0 : 情報処理装置、4 1 : プロセッサ (CPU)、4 2 : メモリ、4 3 : ストレージ装置、4 4 : 入力装置、4 5 : 出力装置、4 6 : 通信装置、4 7 : バス、5 1 : モデル生成プログラム、5 2 : データベース検索プログラム、5 3 : 結合判断プログラム、5 4 : モデル決定プログラム、7 0 : モデル、7 1 , 7 2 : 未学習モデル、7 3 : ロックアイコン、7 5 : モデル結合図、8 1 : 機械学習プログラム、8 2 : モデル設定プログラム、8 3 : 学習プログラム、1 0 1 : ソースモデル、1 0 2 : 定数ノード、1 0 3 , 1 0 4 : 未学習モデル、1 0 5 : モデル結合図、1 1 1 : テキストマイニングプログラム、1 1 2 : 同義語辞書、1 1 3 : ノード結合履歴。

40

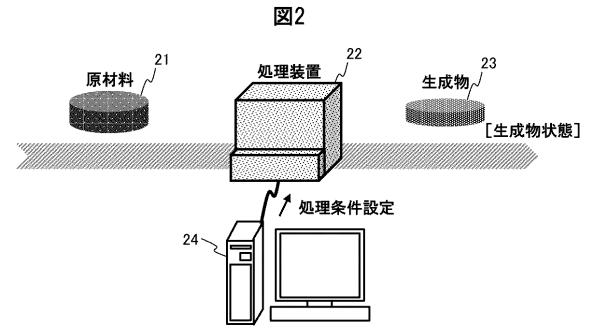
【図面】
【図 1】



【図 3】



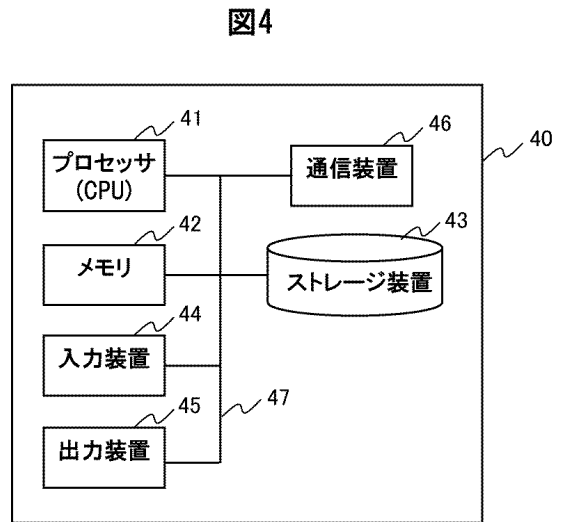
【図 2】



10

20

【図 4】

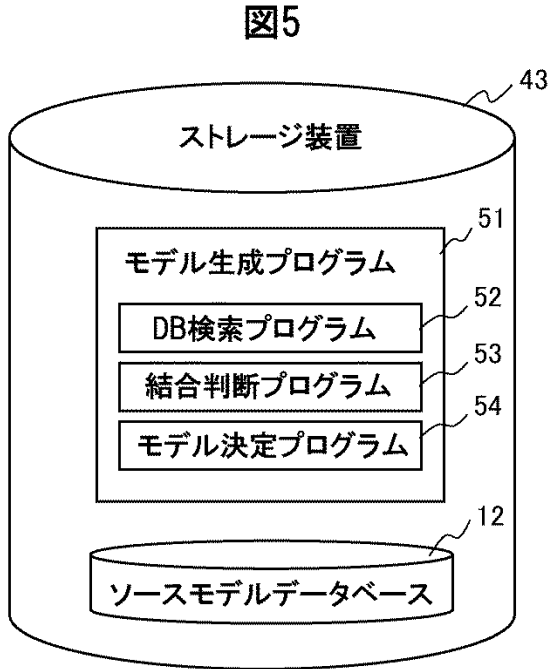


30

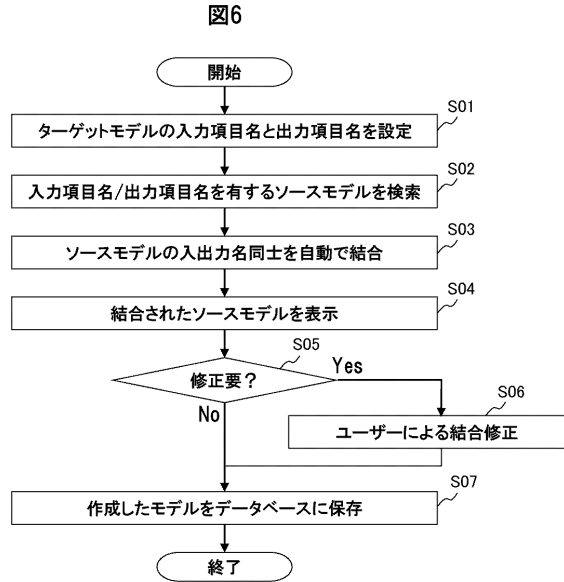
40

50

【 図 5 】



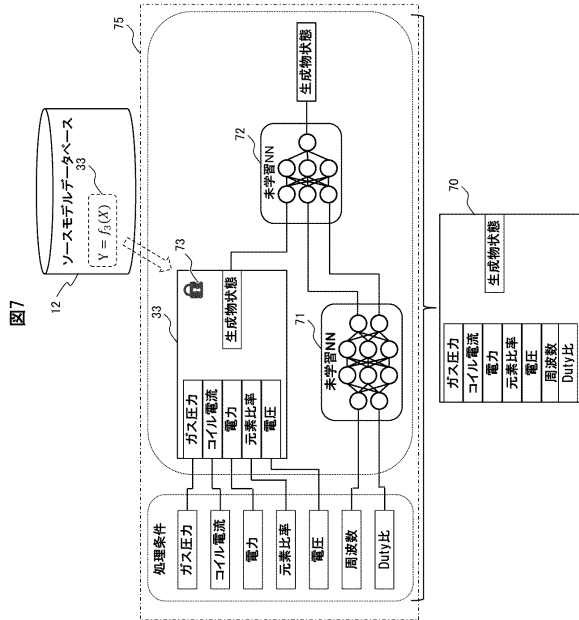
【 図 6 】



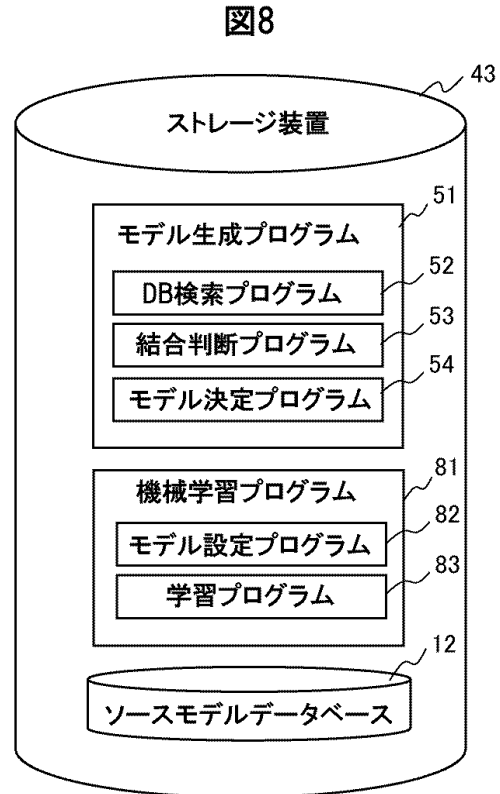
10

20

【 図 7 】



【 図 8 】

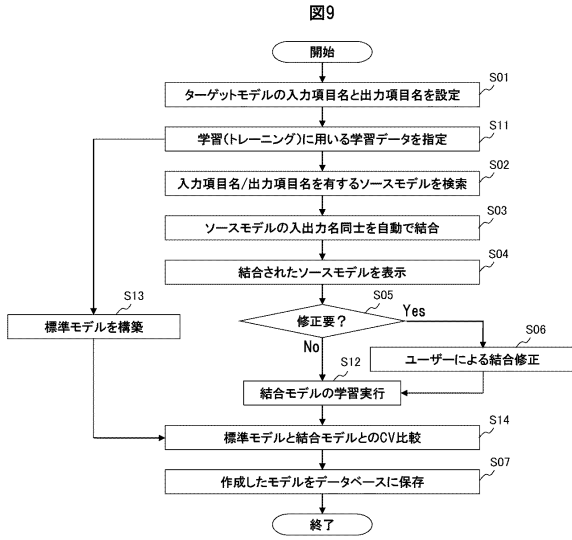


30

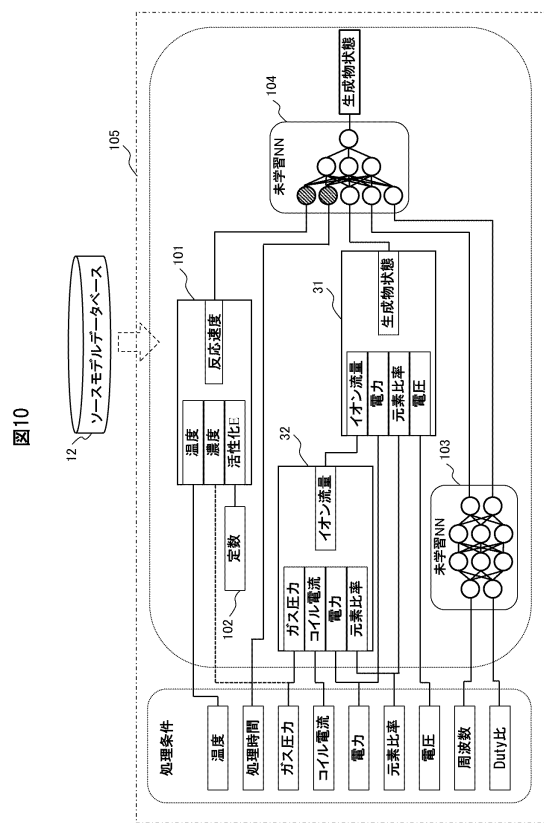
40

50

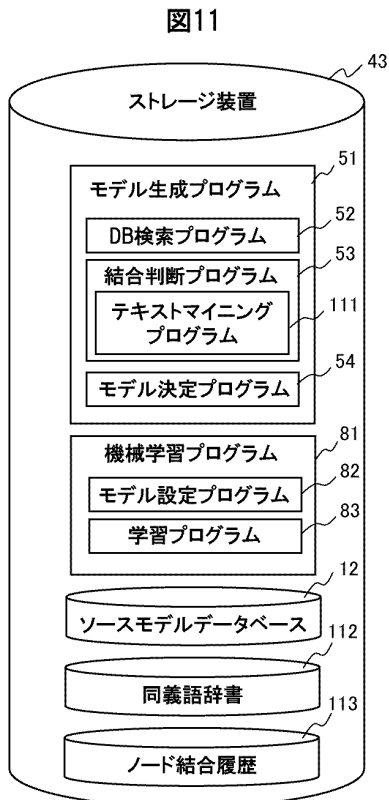
【 図 9 】



【 図 10 】



【 図 11 】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

- (56)参考文献 特開 2020 - 101860 (JP, A)
米国特許第 10453165 (US, B1)
国際公開第 2022 / 185437 (WO, A1)
国際公開第 2022 / 161624 (WO, A1)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)
G06N 3 / 00 - 99 / 00
G06F 18 / 00 - 18 / 40