

(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
2022年1月6日(06.01.2022)



(10) 国際公開番号

WO 2022/004883 A1

(51) 国際特許分類:
G16C 20/10 (2019.01)

[JP/JP]; 〒1008162 東京都千代田区大手町一丁目1番2号 Tokyo (JP).

(21) 国際出願番号: PCT/JP2021/025167

(22) 国際出願日: 2021年7月2日(02.07.2021)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

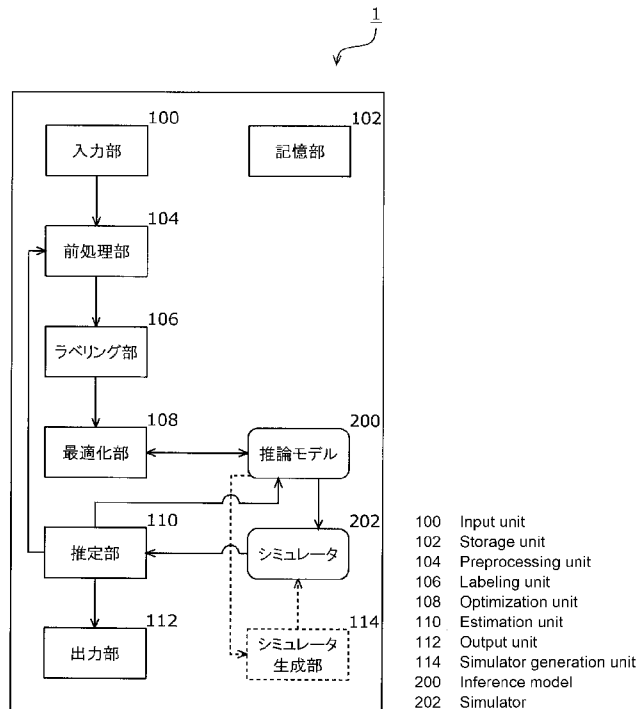
(30) 優先権データ:
特願 2020-115880 2020年7月3日(03.07.2020) JP

(71) 出願人: 株式会社 Preferred Networks (PREFERRED NETWORKS, INC.) [JP/JP]; 〒1000004 東京都千代田区大手町1丁目6番1号 大手町ビル Tokyo (JP). ENEOS 株式会社 (ENEOS CORPORATION)

(72) 発明者: 澤田 亮人 (SAWADA Ryoto); 〒1000004 東京都千代田区大手町1丁目6番1号 大手町ビル 株式会社 Preferred Networks 内 Tokyo (JP). 南昌樹 (MINAMI Masaki); 〒1008162 東京都千代田区大手町一丁目1番2号 ENEOS 株式会社内 Tokyo (JP). 尾野 秀樹 (ONO Hideki); 〒1008162 東京都千代田区大手町一丁目1番2号 ENEOS 株式会社内 Tokyo (JP). 工藤 孝夫 (KUDO Takao); 〒1008162 東京都千代田区大手町一丁目1番2号 ENEOS 株式会社内 Tokyo (JP). 浅野 裕介 (ASANO Yusuke); 〒1008162 東京都千代田区大手町一丁目1番2号 ENEOS 株式会社内 Tokyo (JP). 入口 広紀 (IRIGUCHI Hiroki);

(54) Title: ESTIMATION DEVICE, TRAINING DEVICE, ESTIMATION METHOD, TRAINING METHOD, AND METHOD FOR OBTAINING REACTION PRODUCT

(54) 発明の名称: 推定装置、訓練装置、推定方法、訓練方法及び反応生成物を得る方法



(57) Abstract: [Problem] To perform high-precision yield prediction. [Solution] An estimation device comprises one or multiple memories, and one or multiple processors. The one or multiple processors classify inputted reaction formulas, input the classified results into an inference model, and acquire response speed parameters outputted from the inference model.

〒1008162 東京都千代田区大手町一丁目 1 番 2
号 E N E O S 株式会社内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 中村 行孝, 外 (NAKAMURA Yukitaka
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, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO,
DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT,
HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, KE, KG, KH,
KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY,
MA, MD, ME, MG, MK, MN, 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, GH, GM, KE, LR, LS,
MW, MZ, NA, RW, 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, 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))

(57) 要約: [課題] 高精度な収率予想を行う。[解決手段] 推定装置は、1又は複数のメモリと、1又は複
数のプロセッサと、を備える。前記1又は複数のプロセッサは、入力された反応式を分類し、前記分類し
た結果を推論モデルに入力し、前記推論モデルの出力した反応速度パラメータを取得する。

明 細 書

発明の名称：

推定装置、訓練装置、推定方法、訓練方法及び反応生成物を得る方法

技術分野

[0001] 本開示は、推定装置、訓練装置、推定方法、訓練方法及び反応生成物を得る方法に関する。

背景技術

[0002] 樹脂に代表される有機材料は、合成の過程で多様かつ複雑な中間状態を遷移する。このため、材料の収率を制御することが困難である。材料の収率を予測する方法として、化学反応について反応速度をパラメータとした確率モデルで表現する反応速度論が知られている。反応速度論の反応速度を実験結果に一致するようにフィッティングすることで、収率の予測を試みる技術が開発されている。

[0003] しかしながら、この手法は、データのフィッティングを行う必要があることから、多数の実験結果が必要となる。有機材料の反応経路は、多種多様に及ぶため、例えば、ポリマーであれば、重合経路の数はモノマーに比較して指数関数的に増える。この結果、反応速度論を用いたフィッティングは、単一のモノマーの重合等、反応経路が少ない系に限られている。ポリマーにおいては多くの場合、重合経路の数が実験データの数を上回り、フィッティングをするための十分な数のデータを取得すること、そして、フィッティングをすることが困難である。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：特開2009-301379号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0005] 本開示は、収率予想を行う推定装置、訓練装置、推定方法、訓練方法及び

反応生成物を得る方法を実現する。

課題を解決するための手段

[0006] 一実施形態によれば、推定装置は、1又は複数のメモリと、1又は複数のプロセッサと、を備える。前記1又は複数のプロセッサは、入力された反応式を分類し、前記分類した結果を推論モデルに入力し、前記推論モデルの出力した反応速度パラメータを取得する。

図面の簡単な説明

[0007] [図1]一実施形態に係る推定装置を模式的に示すブロック図。

[図2]一実施形態に係る推定装置の最適化処理の一例を示すフローチャート。

[図3]一実施形態に係る推定装置の推論処理の一例を示すフローチャート。

[図4]一実施形態に係る装置の実装例を示す図。

発明を実施するための形態

[0008] 以下、図面を参照して本発明の実施形態について説明する。図面及び実施形態の説明は一例として示すものであり、本発明を限定するものではない。

[0009] 図1は、一実施形態に係る推定装置の一例を模式的に示すブロック図である。本実施形態の推定装置1は、入力部100と、記憶部102と、前処理部104と、ラベリング部106と、最適化部108と、推定部110と、出力部112と、を備える。推定装置は、例えば、推論モデル200の出力に基づいてポリマーの合成に用いる反応物の割合を推定して、材料合成を行う反応物の割合等を出力する。以下、反応物を入力する、といった記載の場合、反応物の化学構造式、反応物を示すグラフ、等の反応物に関するデータを入力するものとする。

[0010] 入力部100は、推定装置1の入力を受け付ける。例えば、推定装置1の推論モデル200による推定精度を上げるために最適化を実行する場合には、教師データとなる実験データが入力部100を介して推定装置1に入力される。また、特定の生成物を合成するための材料、材料の比率、収率等のデータを取得した場合には、当該特定の生成物をはじめとする目的となる物質、材料の候補となる物質等のデータが入力部100を介して推定装置1に入力される。

[0011] 記憶部102は、推定装置1の処理に必要となるデータ等を格納する。記憶部1

02は、例えば、入力部100を介して入力されたデータが格納されてもよい。処理中においては、記憶部102は、他の構成要素との間で格納してあるデータを適切に入出力する。

[0012] 他の構成要素について、ソフトウェアによる情報処理がハードウェア資源を用いて具体的に実現される場合には、当該情報処理に必要となるプログラム等のデータが格納されてもよい。また、推論モデル200、シミュレータ202の各種パラメータが記憶部102に記憶されてもよい。これらのデータは、推定装置1に備えられる処理回路により、必要に応じて適切に利用される。また、シミュレータ202は、ブラックボックスであってもよく、この場合、このシミュレータ202を起動するプログラム等が記憶部102に格納されていてもよい。

[0013] 前処理部104は、前処理を実行する。前処理部104は、記憶部102に格納されている実験データ、又は、入力部100から取得された実験データを集約し、その結果を列挙する。列挙する実験データは、例えば、物質同士を化学反応させる場合の結合に関するデータである。一例として、前処理部104は、反応物Aと反応物Bを反応させると、生成物（反応生成物）ABが生成される、反応物Aと反応物Bが反応すると生成物ABBが生成される、といったデータを列挙する。

[0014] 列挙されるデータは、単純反応のみならず、複合反応を含むものであってもよい。この場合、前処理部104は、複合反応の中間状態、例えば、どのような中間体が生成されるか、といった遷移状態も列挙する。前処理部104は、複合反応を、単純反応の連続とした素反応を列挙してもよい。また、別の例として、前処理部104は、複合反応の中間状態を省略した最終的な反応物と生成物の列挙をしてもよい。

[0015] すなわち、前処理部104は、反応物と、生成物の組み合わせのデータを列挙する。例えば、樹脂の生成をする場合、生成する樹脂の成分同士がどのように結合するか、どのような中間状態を遷移するかは、一般的に公開されているデータベース等を参照することにより取得することが可能である。また、ユーザがすでに実際に実験を行ったデータとして得ている知見データを、前

処理部104により列挙してもよい。さらには、前処理部104は、一般的に知られている合成についてのモデル等を用いてシミュレーション等によるデータを取得してもよい。

- [0016] ラベリング部106は、前処理部104が列挙したデータについて反応速度に基づいたラベルの付与（ラベリング）を行う。ラベリング部106は、前処理部104が列挙した各データについて、反応速度に基づいたラベリングを実行する。ラベリング部106は、反応物同士の結合において、結合箇所に基づいた反応速度のラベリングを実行する。すなわち、ラベリング部106は、反応式において、結合箇所の周辺の原子又はモノマーに基づいて、分類し、ラベリングを行う。
- [0017] 反応物の結合は、一般的にその結合箇所が決まっていることが多い。そこで、ラベリング部106は、反応物同士の結合箇所の周辺の原子に基づいてラベリングを行う。例えば、フェノールのベンゼン環に結合しているOHのオルト位において他の反応物と結合する場合には、このOHのオルト位に基づいてラベリングを行う。
- [0018] より詳しくは、OHのオルト位において、当該他の結合物のNH₂のオルト位で結合する場合にラベルを付与する。そして、他の組み合わせにおいて、OHのオルト位、NH₂のオルト位で結合する場合には、同じラベルを付与する。
- [0019] このように、結合する箇所、又は、結合する箇所の周辺箇所の原子、又は、モノマーの状態等に基づいて、ラベリング部106は、反応式のラベリングを行う。別の例として、水溶液中においてフェノールのOHと他の反応物のNH₂の部分が結合する場合には、上記とは別のラベルを付与する。
- [0020] 上記のように、ラベリング部106は、反応物の化学的に結合する部分と、その周辺の原子に基づいてラベリングを行い、複数の反応式において適切に異なるラベルを付与する。言い換えると、ラベリング部106は、反応式において、反応物の結合箇所とその周辺の原子に基づいて、反応速度に関するカテゴリ分けを実行する。
- [0021] 反応速度は、それぞれの結合に対して、ユニークに存在するはずである。

本実施形態においては、ラベリング部106は、同じカテゴリに分類された反応物の反応パラメータが同じであるという制約を加える。このような制約を与えることにより、反応速度パラメータの数を削減することができる。

[0022] この制約は、上述の通り、反応（結合）が起こる箇所の周辺の原子により決定される。例えば、反応物Aと反応物Bが結合する場合と、反応物Aと反応物Cが結合する場合を考える。この2つの結合において、反応物B及び反応物Cの反応物Aとの結合箇所、及び、その周辺の原子が同じであれば、同じ反応速度パラメータを有すると判断する。

[0023] また、例えば、結合箇所の周辺の原子が少し異なるが、同等とみなせるような場合にも同じ反応速度パラメータを有すると仮定してもよい。この仮定は、例えば、結合する原子からの距離、又は、結合箇所からの分子グラフ上の距離に制約を与えることで得られる。また例えば、反応への寄与が小さい原子、基を無視することができる。

[0024] 例えば、結合する原子からの所定距離、又は、結合箇所からの分子グラフ上の所定距離にある原子に着目する。具体的には、分子グラフ上において結合する原子からの距離がn以下である原子を周辺の原子として考慮する。nは、反応速度パラメータの数を効果的に削減するために2又は3とすることが好ましいが、これに限られるものではなく、4以上の数であってもよい。

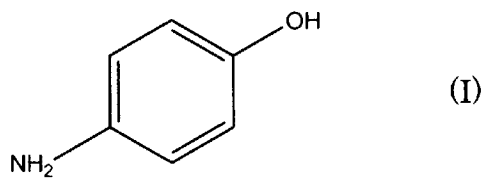
[0025] その一例として、ベンゾオキサジン化合物の反応に関し、あるベンゼン環に結合した水酸基と、別のベンゼン環に結合したアミノ基とが、結合箇所となる反応を仮定する。例えば、反応物Aであるp-アミノフェノール（化学式(I)）と、反応物Bであるp-トルイジン（化学式(II)）において、反応物Aの水酸基と、反応物Bのアミノ基が反応するとする。この場合、反応物Bの結合箇所に対するパラ位は炭素原子である。

[0026] 同様に反応物Aの水酸基と反応物Cのアミノ基が反応するとする。このとき、反応物Cとの結合箇所に対するパラ位が炭素原子であるため、結合箇所の周辺の原子が反応物Bと同じであるとみて、ラベリングすることができる。

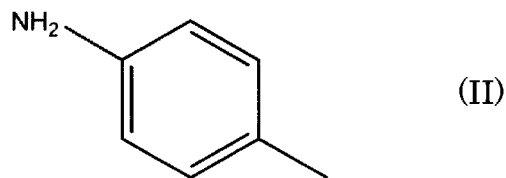
[0027] 一方、反応物Dが3-エチルアニリン（化学式(IV)）であれば、反応物Aとの

結合箇所に対してパラ位ではなくメタ位が炭素原子となる。このため、結合箇所の周辺の原子が反応物Bと異なる。しかし、このような結合箇所の周辺の原子が異なるものについても、必要に応じて、また場合により、同じ反応速度パラメータを有すると仮定する、またはそのようにラベリングすることができる。

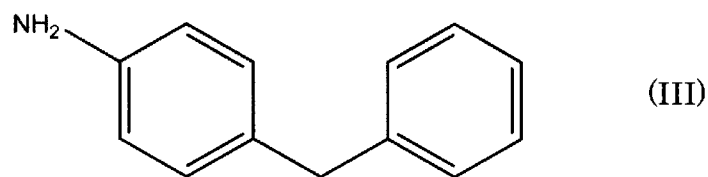
[化1]



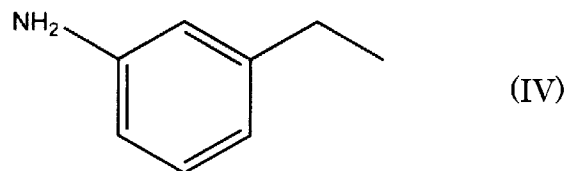
[化2]



[化3]

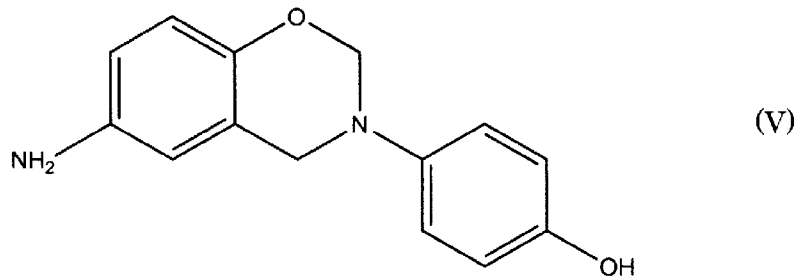


[化4]



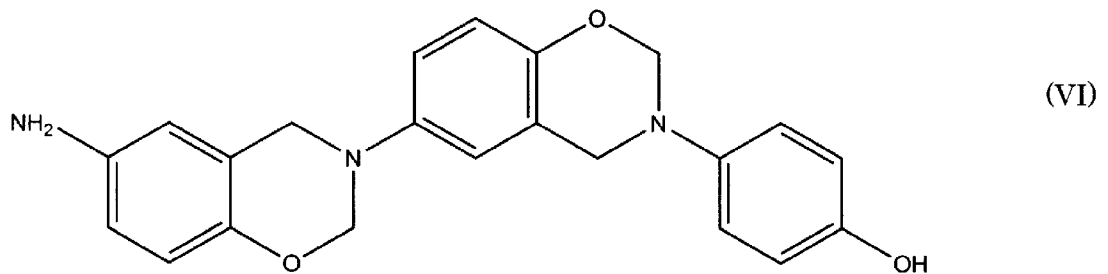
[0028] さらに、以下に示す化学式を用いて、同じ反応速度とラベリングする例について説明する。例えば、化学式(V)に示す反応物のOH基と、化学式(I)に示す反応物のNH₂基が結合する場合を考える。

[化5]



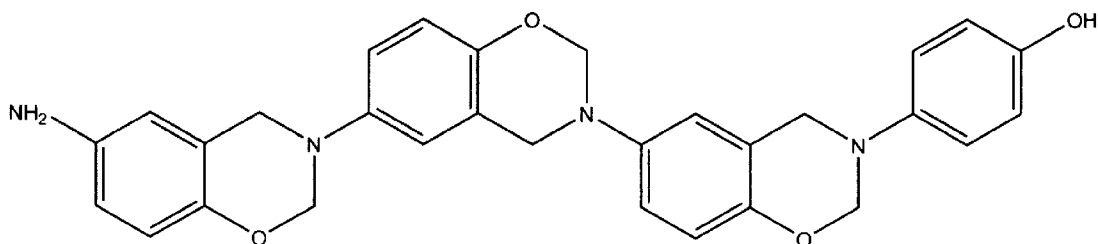
[0029] 結合部に隣接している基をグラフ距離2まで列挙すると、 NH_2 側は、ベンゼン環とOH基とつながっており、OH側は、ベンゼン環とベンゾ基につながっている。これらが結合すると、化学式(VI)に示す生成物となる。

[化6]



[0030] さらに、この化学式(VI)に示す化学式を反応物とし、この反応物のOH基と、化学式(I)示す反応物の NH_2 基が結合するとする。この場合も同様に、結合部に隣接している基をグラフ距離2まで列挙すると、 NH_2 側は、ベンゼン環とOH基とつながっており、OH側は、ベンゼン環とベンゾ基につながっている。これらが結合すると化学式(VII)に示す生成物となるが、この場合、上記に示した反応と、結合部に隣接する原子が同じであるので、同じ反応速度を有するとしてラベリングを行う。

[化7]



(VII)

[0031] 反応物同士がどこで結合するかは、一般的な手法、又は、一般的に知られている組み合わせで判断してもよい。この場合、ラベリング部106は、例えば、公知の組み合わせのデータベースを参照したり、公知のモデルを用いて反応箇所を判断したりしてもよい。一般的に反応速度に関するパラメータは、多数存在するが、このようにラベリングに依存させることにより、そのパラメータを少なくすることが可能となる。また、上記のように結合箇所の抽出を公知の手法を用い、又は、公知の組み合わせを用いることにより、反応速度に関連するパラメータを少なくすることができ、かつ、物理化学的に意味のあるパラメータとしてラベルの取得をすることが可能となる。

[0032] このように、ラベリング部106は、物理化学的な制約に基づいて反応式を列挙し、物理化学的な制約に基づいて反応速度パラメータを列挙した反応式に割り振る。推論モデル200の最適化を行う場合には、ラベリング部106は、実験データに対してラベリングをすることにより、物理化学的な制約に基づいた反応式のカテゴライズ（分類）を実行する。ある生成物を得たい場合には、反応物の候補に対して、ラベリング部106がラベル付けを行ってもよいし、同等の方法を用いて、推定部110がラベリングを行ってもよい。

[0033] 最適化部108は、ラベリング部106が付与したラベルに基づいて実際の反応速度を最適化により設定する。より具体的には、化学反応を再現するシミュレータ202の入力を推論する推論モデル200を最適化する。ラベリング部106は、反応速度パラメータのカテゴリ分けをするものの、実際の反応速度がどの

ような速度であるかを算出、推定等しない。そこで、最適化部108は、ラベリング部106が付与した反応物のラベルについて、あらかじめ取得している実験データに基づいてフィッティングを行う。

[0034] 最適化部108は、例えば、ラベリングされた反応物について、同じラベリングがされている反応物の反応速度にフィッティングするように推論モデル200を最適化する。推論モデル200は、このように、反応速度に関するラベリングされたデータから、実際の実験データに基づいた反応速度にフィッティングするように、モデルパラメータが定義され、最適化される。

[0035] 例えば、推論モデル200は、ラベルが入力されると、反応速度パラメータを出力するニューラルネットワークである。この推論モデル200は、例えば、TP E (Tree-Structured Parzen Estimator) により最適化部108により最適化されてもよいし、その他のブラックボックス最適化により最適化されてもよい。

[0036] 推定部110は、推論モデル200が出力する反応速度パラメータから、実際の反応速度を算出するシミュレータ202により、反応速度を算出する。例えば、目的とする生成物に対する候補となる反応物の組み合わせに対して、推定部110は、この反応物の組み合わせのラベル付けされたデータを推論モデル200に入力し、反応速度パラメータを取得する。そして、反応速度パラメータをシミュレータ202に入力して、反応速度、反応時間、又は、生成物の生成量等の結果を取得する。

[0037] 推定部110は、新しい材料の組み合わせ、新しい材料の組成に対して、ラベリング部106と同様にラベルを付与して、推論モデル200に入力する。そして、推定部110は、推論モデル200から出力された結果である反応速度パラメータをシミュレータ202へと入力する。推定部110は、シミュレータ202から出力に基づいて、例えば、望ましい生成物がどの程度生成されるかを取得する。

[0038] 望ましい結果が得られた場合には、推定部110は、出力部112を介して結果を出力する。ここで、出力とは、推定装置1の外部へと出力することをいうが、記憶部102へ格納することをも含む。望ましくない結果が得られた場合には

、当該結果を実験データとして追加して、再び解析を行ってもよい。望ましくない結果とは、例えば、望ましい生成物が得られるとシミュレートされた場合に、実際に化学反応を実験し、実験結果に対して推論結果の精度が悪かったり、想定外の反応をしたりする結果が得られた場合をいう。

[0039] シミュレータ202は、最適化部108の出力する反応速度パラメータに基づいてあらかじめ用意されているものであってもよい。別の例として、最適化部108がブラックボックス最適化により最適化した推論モデル200の出力する反応速度パラメータに基づいて、シミュレータ生成部114がシミュレータ202を生成するものであってもよい。

[0040] シミュレータ生成部114は、実験データに基づいて、推論モデル200に入力するラベル情報から反応速度、又は、合成時間を取得する反応シミュレータ（シミュレータ202）を生成する。このシミュレータ202の生成は、推論モデル200の出力する反応速度パラメータに基づいて、例えば、合成時間が実験データに合うように物理化学的な制約に基づいて生成される。

[0041] シミュレータ202の生成は、一般的に知られている手法により生成されるものであってもよい。シミュレータ202は、推論モデル200に入力するデータと、シミュレータ202から出力される値との組み合わせが、実験データと合致するものであればよい。ここで、合致とは、厳密に解が一致することには限られず、例えば、有意な誤差がない（誤差の分散が所定値を下回る）程度に同等であればよい。

[0042] 推定部110は、シミュレータ202の出力に基づいて、反応生成物に関する情報を出力する。この出力は、例えば、複数の反応物の混合割合であってもよい。

[0043] 例えば、推定部110は、推論モデル200が出力した反応速度パラメータを用いてシミュレータ202により反応速度を算出する。この算出過程において、推定部110は、反応物同士の組み合わせの割合を変えつつシミュレータ202に入力してもよい。そして、推定部110は、シミュレート結果から、例えば、収率、生成時間等の結果を出力してもよい。また、推定部110は、生成物の生成量

が多い（収率が高い）、生成物の生成時間が短い、等の評価を含む結果を出力してもよい。

[0044] また、別の例として、ユーザが反応物と、その割合を入力してもよい。この場合、当該反応物の入力された割合の組み合わせにおいて、どのような生成物が、どのような時間でどれだけできるかを、推論モデル200により推論された反応速度パラメータに基づいてシミュレータ202から出力してもよい。

[0045] 図2は、本実施形態に係る推定装置1の反応速度パラメータの推論モデル200の最適化の処理の一例を示すフローチャートである。

[0046] 推定装置1は、入力部100を介して実験データを取得する（S100）。

[0047] 次に、ラベリング部106は、反応式を列挙する（S102）。

[0048] 次に、ラベリング部106は、列挙した反応式について、ラベリングをすることにより反応速度を振り分ける（S104）。このラベリングは、上述したように、例えば、結合部の原子に基づいて実行される。

[0049] 次に、最適化部108は、ラベリングされた反応式について、適切な反応速度パラメータが取得されるように、推論モデル200を最適化する（S106）。この最適化は、上述したように、ブラックボックス最適化により実行される。ここで、実験結果にフィッティングするように、反応速度パラメータが設定される。

[0050] 最適化部108は、所定の条件に基づいて、最適化が終了したか否かを判断する（S108）。この判断は、例えば、損失が所定条件を満たした、演算の繰り返し回数が所定回数となった、等の一般的なブラックボックス最適化の判断に基づいて行う。

[0051] モデル生成が終了したと判断される場合（S108：YES）、モデルに関するパラメータ等を適切に出力して終了する。モデル生成が終了していないと判断される場合（S108：NO）、S102から、又は、S104からの処理を繰り返す。

[0052] モデルの最適化の精度の判断には、例えば、シミュレータ202を用いてもよい。すなわち、シミュレータ202に、推論モデル200の出力結果を入力して、望ましい程度に実験結果と合致しているか否かを判断する。この場合、S108

の処理において、シミュレータ生成部114は、推論モデル200から取得される反応速度パラメータに基づいて反応シミュレータ（シミュレータ202）を生成する。そして、この生成されたシミュレータ202の出力結果に基づいて、モデル生成が終了したか否かを判断してもよい。

[0053] このように、推論モデル200は、最適化される。すなわち、最適化部108の処理により、本開示における推定装置1は、推論モデル200を訓練する、訓練装置としても動作することができる。上述したように、推定装置1は、材料合成の推定をする一方で訓練を重ねることができる。一方で、訓練装置として動作する場合には、訓練装置は、推論モデル200のパラメータに適切な初期値を設定した上で、訓練データに基づいて、推論モデル200の訓練、最適化を実行することができる。

[0054] 図3は、本実施形態に係る推定装置1の材料合成の生成、すなわち、推論処理の一例を示すフローチャートである。

[0055] 推定装置1は、入力部100を介して化合物のデータを取得する（S200）。

[0056] 次に、推定部110は、反応物の化学式をラベリングする（S202）。このラベリングは、ラベリング部106により実行されてもよい。

[0057] 次に、推定部110は、訓練済みの推論モデル200を用いて、反応速度パラメータを取得する（S204）。

[0058] 次に、推定部110は、シミュレータ202に反応速度パラメータを入力し、望ましい結果が生成され、推論を終了するか否かを判断する（S208）。望ましい結果が得られているか否かは、上述したとおりの方法で判断する。

[0059] 望ましい結果が得られた場合（S208：YES）、合成を終了する。望ましい結果が得られていない場合には、最適化部108により、推論モデル200を推論された結果と、すでに得られている実験データと、に基づいて再最適化する（S210）。

[0060] そして、S202からの処理を繰り返す。また、この場合、S200からの処理を繰り返してもよく、すなわち、新しい反応物の化学式を入力から繰り返してもよい。

[0061] 以上のように、本実施形態によれば、結合の周辺で類似する組成を有する反応物に対して同じラベル付けをすることにより、当該ラベルに対する反応速度パラメータをモデルにより推論し、推論結果を入力とするシミュレータを用いて所望の生成物が生成されるか否かを判断することが可能となる。この結果、推定装置1は、上述したように、化合物の生成について、反応物の混合割合、生成物の生成量、生成物の生成時間等の結果を出力する。ユーザは、この出力結果に基づいて実験を行ってもよいし、さらなる最適化を実行してもよい。また、この出力結果に基づいて、ユーザは反応生成物を得ることができる。

[0062] 本実施形態のように、結合部の周辺における原子、モノマー等に対して物理化学的な制約を有するラベル付けをすることにより、本来であれば反応物の組み合わせの数だけ必要である実験結果の数を少なくすることが可能となる。この実験結果の必要数の削減は、反応シミュレータの入力を取得するための推論モデルを、ブラックボックス最適化を用いて最適化することにより実現することが可能である。ブラックボックス最適化を行うことにより、少数の実験結果からでも適切な反応速度パラメータを取得することが可能となり、実験結果に合致する反応速度のフィッティングを実現することができる。

[0063] ブラックボックス最適化は、多次元の最適化を実行できるものであればよい。例えば、上述したTPEを用いてもよい。このTPEによるブラックボックス最適化は、Optuna（登録商標）を用いて実行することができる。もちろん、この最適化には、その他のアプリケーション、プログラムを用いてもよい。化学合成は、物理化学的な制約の下、パラメータを少し変化させた場合の挙動を取得することが困難である。すなわち、損失に対する勾配を取得したり、近似したりすることが現実的ではない。このため、本実施形態のようなブラックボックス最適化をすることにより、精度の向上を図ることができる。

[0064] また、上記においては、一例として、ラベリング部106は、ラベリングには、周辺の原子として結合部に隣接する原子を用いるとしたが、これには限ら

れない。ラベリング部106は、例えば、反応物の立体構造において結合部から所定半径内に入る原子に基づいて、ラベリングを行ってもよい。

[0065] (変形例)

上記では、反応速度パラメータをシミュレータ202に入力して、収率等を算出したが、これには限られない。例えば、シミュレータ202の入力として、温度、圧力等の反応に関する環境に関するデータをも入力できるものとしてもよい。例えば、Cantera (<https://cantera.org/>) は温度、圧力、とその時間変化、および反応炉の形状を加味したシミュレータを提供している。上記のようにラベル付けした反応速度をCanteraに適用することで、これらの環境を加味した収率の最適化を行うことができる。この場合、上述したのと同様に、反応物の比率等に加えて、温度、圧力等の環境に関するパラメータの最適値を、推定部110が推定してもよい。

[0066] さらに、温度、圧力等の環境に関するパラメータの他、触媒を考慮に入れてもよい。シミュレータ202は、このような環境パラメータ、触媒等の情報の入力を受け付け、この情報を含んだ入力に基づいて反応のシミュレートを実行してもよい。

[0067] 上記では、シミュレータ202は、一度設定された環境等を変更しないものとしたが、これに限られない。例えば、推定部110は、シミュレータ202を用いて、途中からある反応物、触媒を追加したり、途中から温度等の環境パラメータを変化させたり、といった、反応速度の変化をさせるような状態の変化をシミュレートしてもよい。推定装置1は、このような種々のシミュレートをした結果を出力してもよい。

[0068] さらには、推論モデル200の出力が、このような環境パラメータ、状態変化に関するパラメータ等を含んだものとしてもよい。これは、ブラックボックス最適化を行うことにより実現可能である。

[0069] 例えば、推定部110は、推論モデル200に、反応物の化学式の組み合わせを入力すると、上記の環境パラメータ、状態変化等を含んだパラメータが出力され、この出力をシミュレータ202の入力としてもよい。シミュレータ202は

、この入力に対して、生成物の収率等のデータをシミュレータ202が出力してもよい。

[0070] 推論モデル200は、教師データとして適切なものがあれば、上記のようなデータを出力することが可能である。例えば、温度等の環境パラメータを含んだ実験データ、触媒のある状態とない状態における実験データ、途中から新たに反応物を追加する実験データ等があれば、これらに対応するパラメータを出力することが可能となる。この場合においても、前述の実施形態で説明したように、反応物に対するラベル付けを行うことにより、少ないデータでもより広範囲の反応物に対して探索をすることができる。

[0071] 以上のように、本実施形態によれば、実験結果が少数である場合にも、反応速度論を用いて実験結果を再現できるような反応モデルを作成し、所望の材料の収率をこの反応モデル内で最適化することにより、非経験的な材料合成レシピを取得することが可能となる。これは、最適化すべきパラメータの数（反応速度に関するパラメータ等）を効率的に削減することも可能であると言い換えることもできる。この結果、収率の制御をした材料合成を実現できるモデルを最適化し、このモデルにより所望の収率を有する構成を実現することができる。

[0072] これは、上述したように、化学反応を反応近傍の原子によりカテゴリ分けすることにより、多様な反応速度係数を有する反応モデルを、少数の速度係数を有する反応モデルに変換することにより実現される。この反応モデルにより、少数の実験データであっても、高精度な収率予測を行うことが可能となる。本実施形態に係る推定装置によれば、例えば、反応の経路が多岐に亘る一方で反応の経路に対して少数の実験データしか取得できていないような重合反応についても、収率を予測することが可能となる。例えば実施形態中に示したベンゾオキサジン化合物の合成反応に適用することも可能である。

[0073] 上記の全ての訓練済モデルは、例えば、説明したように訓練した上で、さらに、一般的な手法により蒸留されたモデルを含む概念であってもよい。

[0074] 前述した実施形態における各装置（推定装置1）の一部又は全部は、ハード

ウェアで構成されていてもよいし、CPU (Central Processing Unit)、又はGPU (Graphics Processing Unit) 等が実行するソフトウェア (プログラム) の情報処理で構成されてもよい。ソフトウェアの情報処理で構成される場合には、前述した実施形態における各装置の少なくとも一部の機能を実現するソフトウェアを、フレキシブルディスク、CD-ROM (Compact Disc-Read Only Memory) 又はUSB (Universal Serial Bus) メモリ等の非一時的な記憶媒体 (非一時的なコンピュータ可読媒体) に収納し、コンピュータに読み込ませることにより、ソフトウェアの情報処理を実行してもよい。また、通信ネットワークを介して当該ソフトウェアがダウンロードされてもよい。さらに、ソフトウェアがASIC (Application Specific Integrated Circuit) 又はFPGA (Field Programmable Gate Array) 等の回路に実装されることにより、情報処理がハードウェアにより実行されてもよい。

[0075] ソフトウェアを収納する記憶媒体の種類は限定されるものではない。記憶媒体は、磁気ディスク、又は光ディスク等の着脱可能なものに限定されず、ハードディスク、又はメモリ等の固定型の記憶媒体であってもよい。また、記憶媒体は、コンピュータ内部に備えられてもよいし、コンピュータ外部に備えられてもよい。

[0076] 図4は、前述した実施形態における各装置 (推定装置1) のハードウェア構成の一例を示すブロック図である。各装置は、一例として、プロセッサ71と、主記憶装置72 (メモリ) と、補助記憶装置73 (メモリ) と、ネットワークインタフェース74と、デバイスインタフェース75と、を備え、これらがバス76を介して接続されたコンピュータ7として実現されてもよい。

[0077] 図4のコンピュータ7は、各構成要素を一つ備えているが、同じ構成要素を複数備えていてもよい。また、図4では、1台のコンピュータ7が示されているが、ソフトウェアが複数台のコンピュータにインストールされて、当該複数台のコンピュータそれぞれがソフトウェアの同一の又は異なる一部の処理を実行してもよい。この場合、コンピュータそれぞれがネットワークインタフェース74等を介して通信して処理を実行する分散コンピューティングの形態

であってもよい。つまり、前述した実施形態における各装置（推定装置1）は、7又は複数の記憶装置に記憶された命令を7台又は複数台のコンピュータが実行することで機能を実現するシステムとして構成されてもよい。また、端末から送信された情報をクラウド上に設けられた1台又は複数台のコンピュータで処理し、この処理結果を端末に送信するような構成であってもよい。

[0078] 前述した実施形態における各装置（推定装置1）の各種演算は、1又は複数のプロセッサを用いて、又は、ネットワークを介した複数台のコンピュータを用いて、並列処理で実行されてもよい。また、各種演算が、プロセッサ内に複数ある演算コアに振り分けられて、並列処理で実行されてもよい。また、本開示の処理、手段等の一部又は全部は、ネットワークを介してコンピュータ7と通信可能なクラウド上に設けられたプロセッサ及び記憶装置の少なくとも一方により実行されてもよい。このように、前述した実施形態における各装置は、1台又は複数台のコンピュータによる並列コンピューティングの形態であってもよい。

[0079] プロセッサ71は、コンピュータの制御装置及び演算装置を含む電子回路（処理回路、Processing circuit、Processing circuitry、CPU、GPU、FPGA又はASIC等）であってもよい。また、プロセッサ71は、専用の処理回路を含む半導体装置等であってもよい。プロセッサ71は、電子論理素子を用いた電子回路に限定されるものではなく、光論理素子を用いた光回路により実現されてもよい。また、プロセッサ71は、量子コンピューティングに基づく演算機能を含むものであってもよい。

[0080] プロセッサ71は、コンピュータ7の内部構成の各装置等から入力されたデータやソフトウェア（プログラム）に基づいて演算処理を行い、演算結果や制御信号を各装置等に出力することができる。プロセッサ71は、コンピュータ7のOS（Operating System）や、アプリケーション等を実行することにより、コンピュータ7を構成する各構成要素を制御してもよい。

[0081] 前述した実施形態における各装置（推定装置1（訓練装置を含む、以下同じ））は、1又は複数のプロセッサ71により実現されてもよい。ここで、プロセ

ッサ71は、1チップ上に配置された1又は複数の電子回路を指してもよいし、2つ以上のチップあるいは2つ以上のデバイス上に配置された1又は複数の電子回路を指してもよい。複数の電子回路を用いる場合、各電子回路は有線又は無線により通信してもよい。

[0082] 主記憶装置72は、プロセッサ71が実行する命令及び各種データ等を記憶する記憶装置であり、主記憶装置72に記憶された情報がプロセッサ71により読み出される。補助記憶装置73は、主記憶装置72以外の記憶装置である。なお、これらの記憶装置は、電子情報を格納可能な任意の電子部品を意味するものとし、半導体のメモリでもよい。半導体のメモリは、揮発性メモリ、不揮発性メモリのいずれでもよい。前述した実施形態における各装置（推定装置1）において各種データを保存するための記憶装置は、主記憶装置72又は補助記憶装置73により実現されてもよく、プロセッサ71に内蔵される内蔵メモリにより実現されてもよい。例えば、前述した実施形態における記憶部102は、主記憶装置72又は補助記憶装置73により実現されてもよい。

[0083] 記憶装置（メモリ）1つに対して、複数のプロセッサが接続（結合）されてもよいし、単数のプロセッサが接続されてもよい。プロセッサ1つに対して、複数の記憶装置（メモリ）が接続（結合）されてもよい。前述した実施形態における各装置（推定装置1）が、少なくとも1つの記憶装置（メモリ）とこの少なくとも1つの記憶装置（メモリ）に接続（結合）される複数のプロセッサで構成される場合、複数のプロセッサのうち少なくとも1つのプロセッサが、少なくとも1つの記憶装置（メモリ）に接続（結合）される構成を含んでもよい。また、複数台のコンピュータに含まれる記憶装置（メモリ）とプロセッサによって、この構成が実現されてもよい。さらに、記憶装置（メモリ）がプロセッサと一体になっている構成（例えば、L1キャッシュ、L2キャッシュを含むキャッシュメモリ）を含んでもよい。

[0084] ネットワークインタフェース74は、無線又は有線により、通信ネットワーク8に接続するためのインタフェースである。ネットワークインタフェース74は、既存の通信規格に適合したもの等、適切なインタフェースを用いればよ

い。ネットワークインタフェース74により、通信ネットワーク8を介して接続された外部装置9Aと情報のやり取りが行われてもよい。なお、通信ネットワーク8は、WAN (Wide Area Network)、LAN (Local Area Network)、PAN (Personal Area Network) 等のいずれか、又は、それらの組み合わせであってよく、コンピュータ7と外部装置9Aとの間で情報のやりとりが行われるものであればよい。WANの一例としてインターネット等があり、LANの一例としてIEEE802.11やイーサネット（登録商標）等があり、PANの一例としてBluetooth（登録商標）やNFC (Near Field Communication) 等がある。

[0085] デバイスインタフェース75は、外部装置9Bと直接接続するUSB等のインタフェースである。

[0086] 外部装置9Aは、コンピュータ7とネットワークを介して接続されている装置である。外部装置9Bは、コンピュータ7と直接接続されている装置である。

[0087] 外部装置9A又は外部装置9Bは、一例として、入力装置であってもよい。入力装置は、例えば、カメラ、マイクロフォン、モーションキャプチャ、各種センサ等、キーボード、マウス、又は、タッチパネル等のデバイスであり、取得した情報をコンピュータ7に与える。また、パーソナルコンピュータ、タブレット端末、又は、スマートフォン等の入力部とメモリとプロセッサを備えるデバイスであってもよい。

[0088] また、外部装置9A又は外部装置9Bは、一例として、出力装置でもよい。出力装置は、例えば、LCD (Liquid Crystal Display)、CRT (Cathode Ray Tube)、PDP (Plasma Display Panel)、又は、有機EL (Electro Luminescence) パネル等の表示装置であってもよいし、音声等を出力するスピーカ等であってもよい。また、パーソナルコンピュータ、タブレット端末、又は、スマートフォン等の出力部とメモリとプロセッサを備えるデバイスであってもよい。

[0089] また、外部装置9A又は外部装置9Bは、記憶装置（メモリ）であってもよい。例えば、外部装置9Aは、ネットワークストレージ等であってもよく、外部装置9Bは、HDD等のストレージであってもよい。

- [0090] また、外部装置9A又は外部装置9Bは、前述した実施形態における各装置（推定装置1）の構成要素の一部の機能を有する装置でもよい。つまり、コンピュータ7は、外部装置9A又は外部装置9Bの処理結果の一部又は全部を送信又は受信してもよい。
- [0091] 本明細書（請求項を含む）において、「a、b及びcの少なくとも1つ（一方）」又は「a、b又はcの少なくとも1つ（一方）」の表現（同様な表現を含む）が用いられる場合は、a、b、c、a-b、a-c、b-c、又は、a-b-cのいずれかを含む。また、a-a、a-b-b、a-a-b-b-c-c等のように、いずれかの要素について複数のインスタンスを含んでもよい。さらに、a-b-c-dのようにdを有する等、列挙された要素（a、b及びc）以外の他の要素を加えることも含む。
- [0092] 本明細書（請求項を含む）において、「データを入力として／データに基づいて／に従って／に応じて」等の表現（同様な表現を含む）が用いられる場合は、特に断りがない場合、各種データそのものを入力として用いる場合や、各種データに何らかの処理を行ったもの（例えば、ノイズ加算したもの、正規化したもの、各種データの中間表現等）を入力として用いる場合を含む。また「データに基づいて／に従って／に応じて」何らかの結果が得られる旨が記載されている場合、当該データのみに基づいて当該結果が得られる場合を含むとともに、当該データ以外の他のデータ、要因、条件、及び／又は状態等にも影響を受けて当該結果が得られる場合をも含み得る。また、「データを出力する」旨が記載されている場合、特に断りがない場合、各種データそのものを出力として用いる場合や、各種データに何らかの処理を行ったもの（例えば、ノイズ加算したもの、正規化したもの、各種データの中間表現等）を出力とする場合も含む。
- [0093] 本明細書（請求項を含む）において、「接続される（connected）」及び「結合される（coupled）」との用語が用いられる場合は、直接的な接続／結合、間接的な接続／結合、電氣的（electrically）な接続／結合、通信的（communicatively）な接続／結合、機能的（operatively）な接続／結合、物理的（physically）な接続／結合等のいずれをも含む非限定的な用語として意図

される。当該用語は、当該用語が用いられた文脈に応じて適宜解釈されるべきであるが、意図的に或いは当然に排除されるのではない接続／結合形態は、当該用語に含まれるものとして非限定的に解釈されるべきである。

[0094] 本明細書（請求項を含む）において、「AがBするよう構成される（A configured to B）」との表現が用いられる場合は、要素Aの物理的構造が、動作Bを実行可能な構成を有するとともに、要素Aの恒常的（permanent）又は一時的（temporary）な設定（setting/configuration）が、動作Bを実際に実行するように設定（configured/set）されていることを含んでよい。例えば、要素Aが汎用プロセッサである場合、当該プロセッサが動作Bを実行可能なハードウェア構成を有するとともに、恒常的（permanent）又は一時的（temporary）なプログラム（命令）の設定により、動作Bを実際に実行するように設定（configured）されていればよい。また、要素Aが専用プロセッサ又は専用演算回路等である場合、制御用命令及びデータが実際に付属しているか否かとは無関係に、当該プロセッサの回路的構造が動作Bを実際に実行するように構築（implemented）されていればよい。

[0095] 本明細書（請求項を含む）において、含有又は所有を意味する用語（例えば、「含む（comprising/including）」及び有する「（having）等）」が用いられる場合は、当該用語の目的語により示される対象物以外の物を含有又は所有する場合を含む、open-endedな用語として意図される。これらの含有又は所有を意味する用語の目的語が数量を指定しない又は単数を示唆する表現（a又はanを冠詞とする表現）である場合は、当該表現は特定の数に限定されないものとして解釈されるべきである。

[0096] 本明細書（請求項を含む）において、ある箇所において「1つ又は複数（one or more）」又は「少なくとも1つ（at least one）」等の表現が用いられ、他の箇所において数量を指定しない又は単数を示唆する表現（a又はanを冠詞とする表現）が用いられているとしても、後者の表現が「1つ」を意味することを意図しない。一般に、数量を指定しない又は単数を示唆する表現（a又はanを冠詞とする表現）は、必ずしも特定の数に限定されないものとして解

釈されるべきである。

[0097] 本明細書において、ある実施例の有する特定の構成について特定の効果 (advantage/result) が得られる旨が記載されている場合、別段の理由がない限り、当該構成を有する他の1つ又は複数の実施例についても当該効果が得られると理解されるべきである。但し当該効果の有無は、一般に種々の要因、条件、及び／又は状態等に依存し、当該構成により必ず当該効果が得られるものではないと理解されるべきである。当該効果は、種々の要因、条件、及び／又は状態等が満たされたときに実施例に記載の当該構成により得られるものに過ぎず、当該構成又は類似の構成を規定したクレームに係る発明において、当該効果が必ずしも得られるものではない。

[0098] 本明細書（請求項を含む）において、「最大化 (maximize)」等の用語が用いられる場合は、グローバルな最大値を求めること、グローバルな最大値の近似値を求めること、ローカルな最大値を求めること、及びローカルな最大値の近似値を求めることを含み、当該用語が用いられた文脈に応じて適宜解釈されるべきである。また、これら最大値の近似値を確率的又はヒューリスティックに求めることを含む。同様に、「最小化 (minimize)」等の用語が用いられる場合は、グローバルな最小値を求めること、グローバルな最小値の近似値を求めること、ローカルな最小値を求めること、及びローカルな最小値の近似値を求めることを含み、当該用語が用いられた文脈に応じて適宜解釈されるべきである。また、これら最小値の近似値を確率的又はヒューリスティックに求めることを含む。同様に、「最適化 (optimize)」等の用語が用いられる場合は、グローバルな最適値を求めること、グローバルな最適値の近似値を求めること、ローカルな最適値を求めること、及びローカルな最適値の近似値を求めることを含み、当該用語が用いられた文脈に応じて適宜解釈されるべきである。また、これら最適値の近似値を確率的又はヒューリスティックに求めることを含む。

[0099] 本明細書（請求項を含む）において、複数のハードウェアが所定の処理を行う場合、各ハードウェアが協働して所定の処理を行ってもよいし、一部の

ハードウェアが所定の処理の全てを行ってもよい。また、一部のハードウェアが所定の処理の一部を行い、別のハードウェアが所定の処理の残りを行ってもよい。本明細書（請求項を含む）において、「1又は複数のハードウェアが第1の処理を行い、前記1又は複数のハードウェアが第2の処理を行う」等の表現が用いられている場合、第1の処理を行うハードウェアと第2の処理を行うハードウェアは同じものであってもよいし、異なるものであってもよい。つまり、第1の処理を行うハードウェア及び第2の処理を行うハードウェアが、前記1又は複数のハードウェアに含まれていればよい。なお、ハードウェアは、電子回路、又は、電子回路を含む装置等を含んでもよい。

[0100] 以上、本開示の実施形態について詳述したが、本開示は上記した個々の実施形態に限定されるものではない。特許請求の範囲に規定された内容及びその均等物から導き出される本発明の概念的な思想と趣旨を逸脱しない範囲において種々の追加、変更、置き換え及び部分的削除等が可能である。例えば、前述した全ての実施形態において、数値又は数式を説明に用いている場合は、一例として示したものであり、これらに限られるものではない。また、実施形態における各動作の順序は、一例として示したものであり、これらに限られるものではない。

符号の説明

[0101] 1：推定装置、

100：入力部、102：記憶部、104：前処理部、106：ラベリング部、108：最適化部、110：推定部、112：出力部、

200：推論モデル

請求の範囲

- [請求項1] 1又は複数のメモリと、
1又は複数のプロセッサと、を備え、
前記1又は複数のプロセッサは、
入力された反応式を分類し、
前記分類した結果を推論モデルに入力し、
前記推論モデルの出力した反応速度パラメータを取得する、
推定装置。
- [請求項2] 前記1又は複数のプロセッサは、
前記反応式に含まれる反応物が結合する位置と当該位置の周辺の原子と、に基づいて、前記分類をする、
請求項1に記載の推定装置。
- [請求項3] 前記推論モデルの入力がラベリングされた反応物又は反応式である、
請求項1又は2に記載の推定装置。
- [請求項4] 前記推論モデルは、ブラックボックス最適化の手法により最適化されたモデルである、
請求項1から請求項3のいずれかに記載の推定装置。
- [請求項5] 前記推論モデルは、TPE (Tree-structured Parzen Estimator) に基づいて最適化されたモデルである、
請求項4に記載の推定装置。
- [請求項6] 前記1又は複数のプロセッサは、さらに、
前記反応速度パラメータをシミュレータに入力し、
前記反応式により合成される反応生成物に関する情報を出力する、
請求項1から請求項5のいずれかに記載の推定装置。
- [請求項7] 前記1又は複数のプロセッサは、
前記反応生成物に関する情報として、反応物の混合割合、生成物の収率、生成物の合成時間、のうち少なくとも1つを出力する、

請求項6に記載の推定装置。

[請求項8]

前記1又は複数のプロセッサは、

前記生成物に関する情報として、さらに、反応の環境パラメータを出力する、

請求項7に記載の推定装置。

[請求項9]

前記環境パラメータは、温度、又は、湿度のうち少なくとも1つを含む、

請求項8に記載の推定装置。

[請求項10]

前記1又は複数のプロセッサは、

前記推論モデルから出力された結果に基づいて、前記推論モデルを訓練する、

請求項1から請求項9のいずれかに記載の推定装置。

[請求項11]

1又は複数のメモリと、

1又は複数のプロセッサと、を備え、

前記1又は複数のプロセッサは、

反応式を取得し、

前記反応式を分類し、

前記分類から、推論モデルに基づいて反応速度パラメータを取得し、

前記反応速度パラメータをシミュレータに入力し、

前記シミュレータの出力に基づいて、前記推論モデルを最適化する、

訓練装置。

[請求項12]

1又は複数のプロセッサにより、

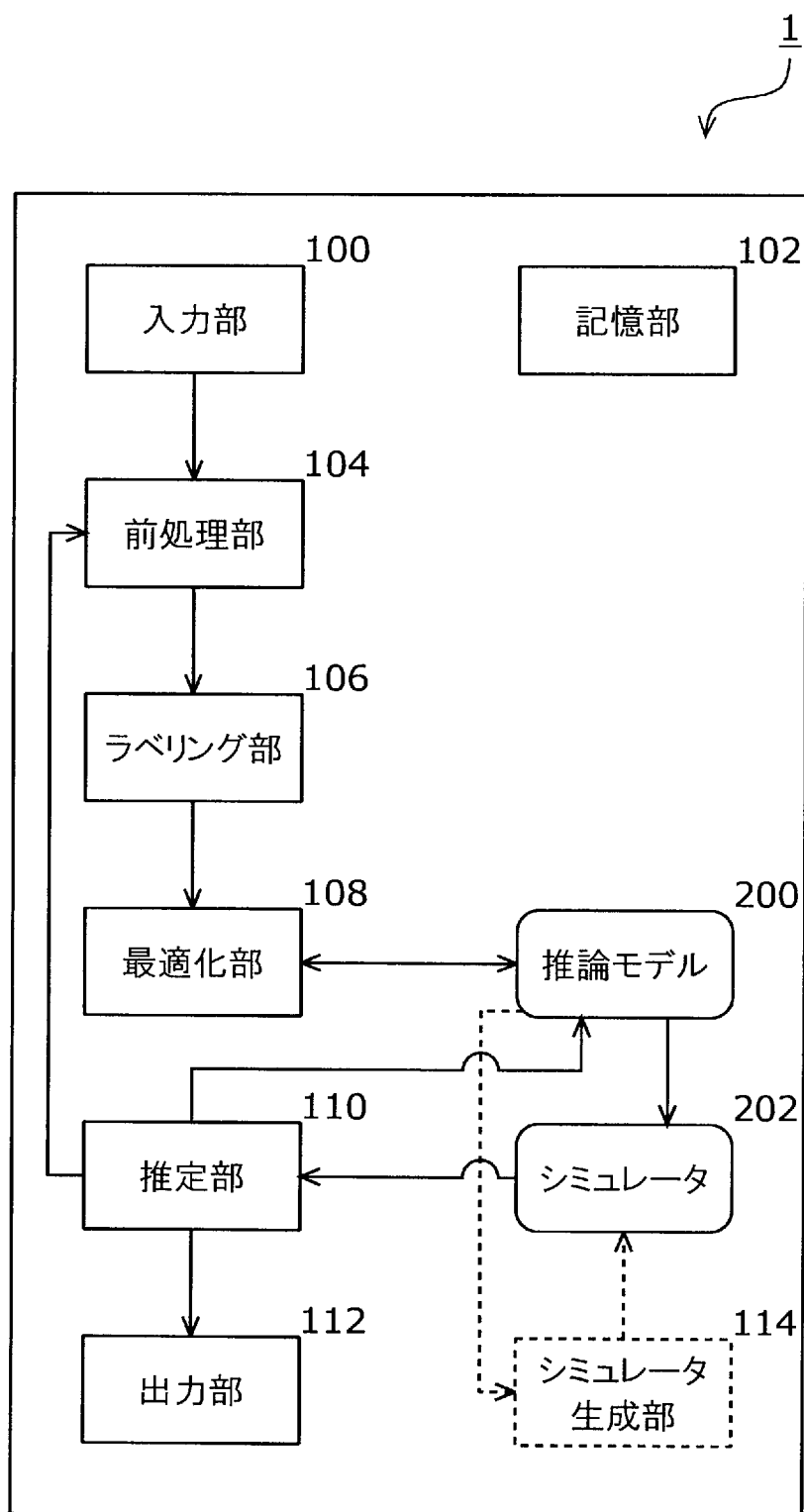
入力された反応式を分類し、

前記分類した結果を推論モデルに入力し、

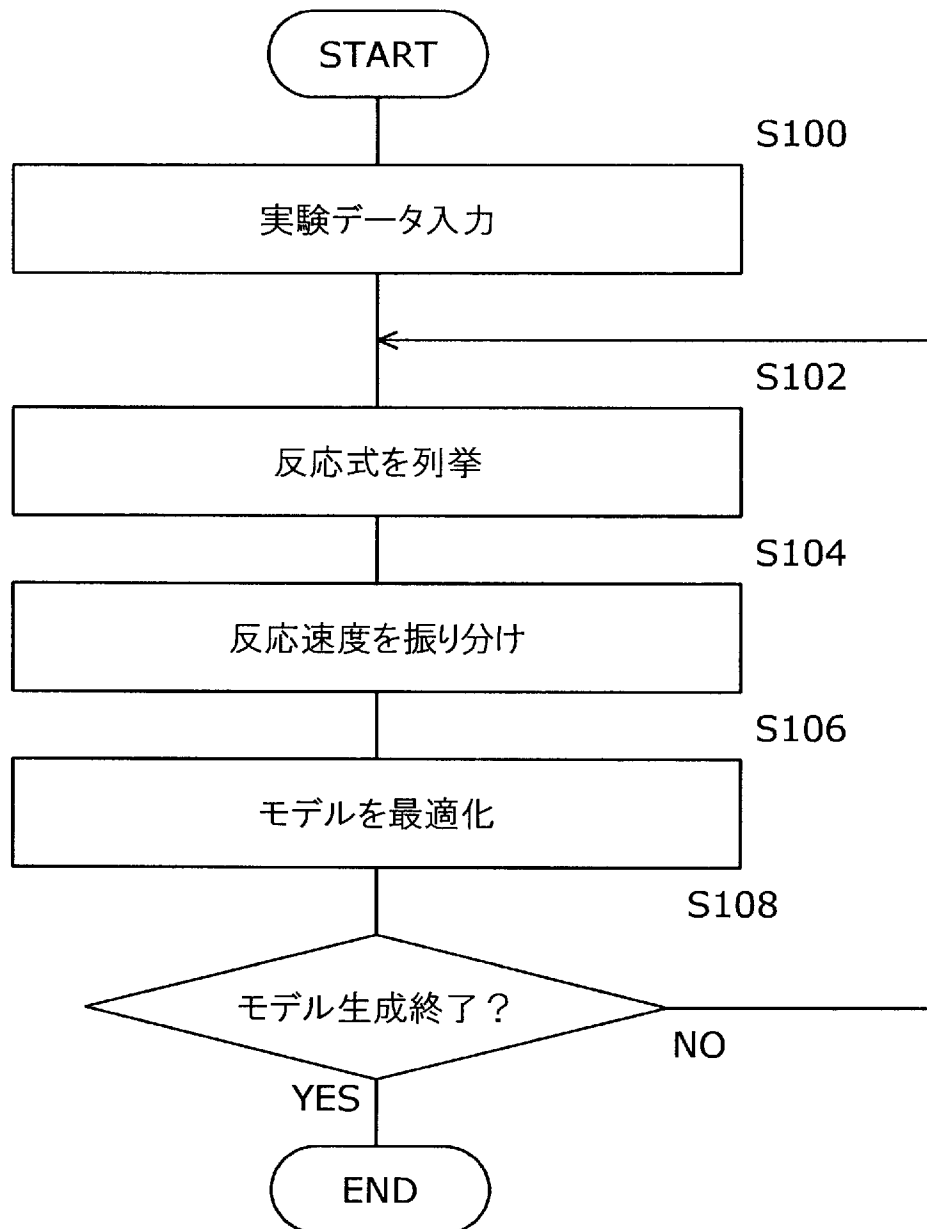
前記推論モデルの出力した反応速度パラメータを取得する、推定方法。

- [請求項13] 1又は複数のプロセッサは、
 反応式を取得し、
 前記反応式に分類をし、
 前記分類から、推論モデルに基づいて反応速度パラメータを取得し、
 前記反応速度パラメータをシミュレータに入力し、
 前記シミュレータの出力に基づいて、前記推論モデルを最適化する、
 訓練方法。
- [請求項14] 1又は複数のプロセッサにより、
 入力された反応物から、反応式を取得し、
 前記反応式に分類し、
 前記分類した結果を推論モデルに入力し、
 前記推論モデルの出力した反応速度パラメータを取得し、
 前記反応速度パラメータをシミュレータに入力し、
 前記シミュレータから出力された結果に基づいて、反応生成物に関する情報を出力し
 前記反応生成物に関する情報に基づいて反応生成物を生成する、
 反応生成物を得る方法。

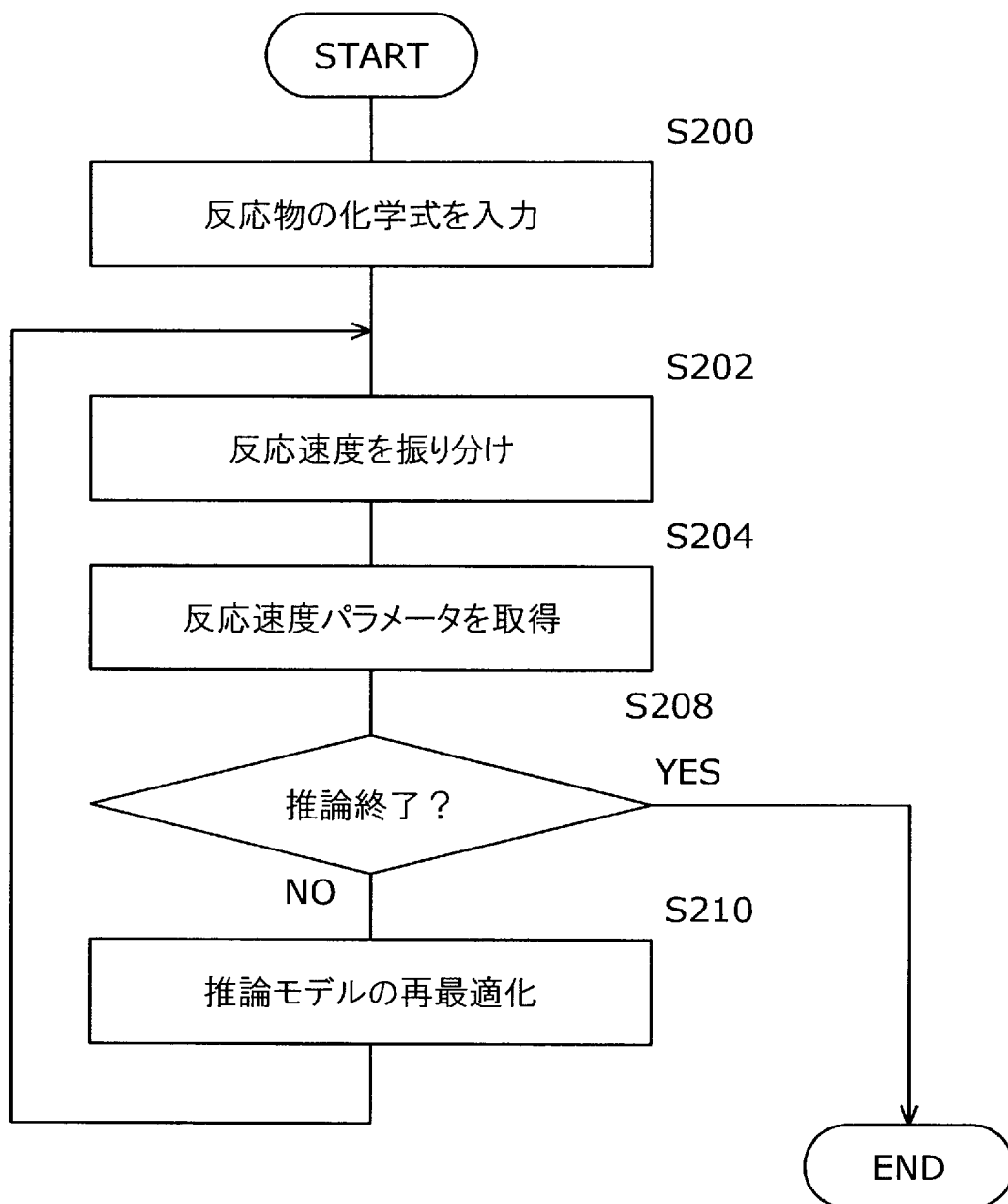
[図1]



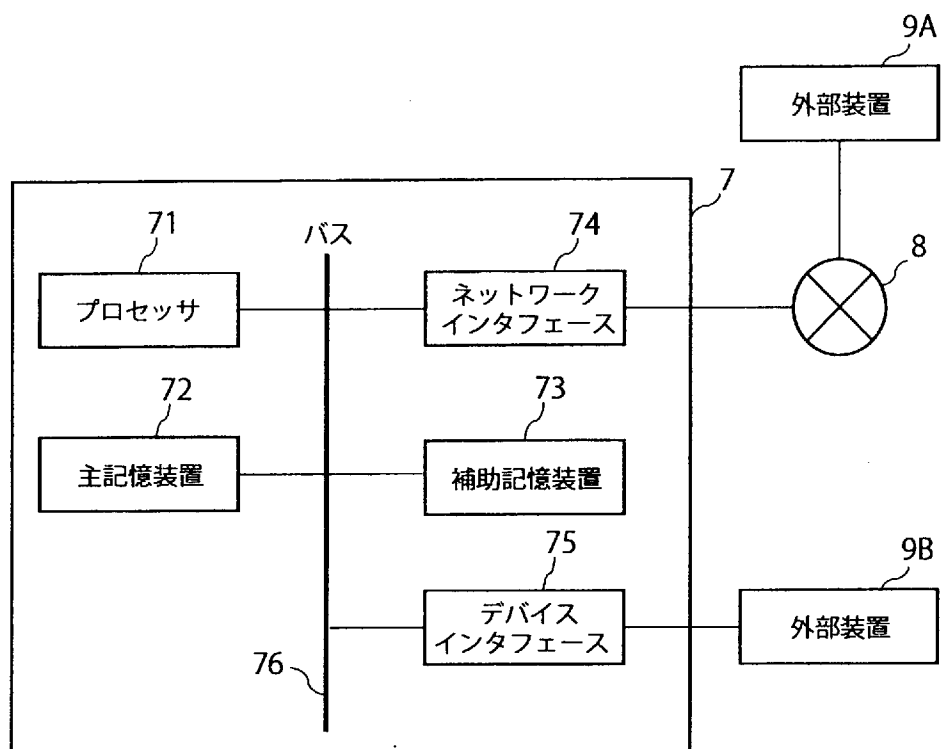
[図2]



[図3]



[図4]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2021/025167

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G16C 20/10 (2019.01) i

FI: G16C20/10

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)

G16C20/10

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	1971-2021
Registered utility model specifications of Japan	1996-2021
Published registered utility model applications of Japan	1994-2021

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.
X Y	JP 2006-131880 A (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 25 May 2006 (2006-05-25) claims 1-6, paragraphs [0033]-[0159]	1-7, 10-14 8, 9
Y	JP 2012-172222 A (NIPPON STEEL CORP.) 10 September 2012 (2012-09-10) paragraph [0047]	8, 9

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	"I" 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
27 August 2021 (27.08.2021)

Date of mailing of the international search report
07 September 2021 (07.09.2021)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
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/JP2021/025167

Patent Documents referred in the Report	Publication Date	Patent Family	Publication Date
JP 2006-131880 A	25 May 2006	(Family: none)	
JP 2012-172222 A	10 Sep. 2012	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G16C 20/10(2019.01)i FI: G16C20/10														
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）） G16C20/10 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 <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922 - 1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971 - 2021年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996 - 2021年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994 - 2021年</td> </tr> </table> 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）			日本国実用新案公報	1922 - 1996年	日本国公開実用新案公報	1971 - 2021年	日本国実用新案登録公報	1996 - 2021年	日本国登録実用新案公報	1994 - 2021年				
日本国実用新案公報	1922 - 1996年													
日本国公開実用新案公報	1971 - 2021年													
日本国実用新案登録公報	1996 - 2021年													
日本国登録実用新案公報	1994 - 2021年													
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												
X	JP 2006-131880 A（住友化学株式会社）25.05.2006（2006 - 05 - 25） [請求項1]-[請求項6]，[0033]-[0159]	1-7，10-14												
Y		8，9												
Y	JP 2012-172222 A（新日本製鐵株式会社）10.09.2012（2012 - 09 - 10） [0047]	8，9												
☐ 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。														
<table border="0"> <tr> <td>* 引用文献のカテゴリー</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“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</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“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）</td> <td>“&” 同一パテントファミリー文献</td> </tr> <tr> <td>“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</td> <td></td> </tr> <tr> <td>“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</td> <td></td> </tr> </table>			* 引用文献のカテゴリー	“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	“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの	“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	“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	“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	“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）	“&” 同一パテントファミリー文献	“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	
* 引用文献のカテゴリー	“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													
“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの	“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													
“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	“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													
“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）	“&” 同一パテントファミリー文献													
“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														
国際調査を完了した日 27.08.2021	国際調査報告の発送日 07.09.2021													
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） 山内 裕史 5L 4064 電話番号 03-3581-1101 内線 3562													

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/JP2021/025167

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP	2006-131880	A	25.05.2006	(ファミリーなし)	
JP	2012-172222	A	10.09.2012	(ファミリーなし)	